توسعه و ارزیابی مدل جانشین عصبی فیزیک آگاه برای انتخاب نقاط کار با لحاظ قیود حرارتی در سیکل هیبریدی ۲۲۰ کیلوواتی SOFC–GT

قاسم عرب[۱،*]

۱- استادیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه آزاد اسلامی واحد یادگار امام خمینی (ره) شهرری، تهران، ایران.
تهران، صندوق پستی ۱۸۱۵۱۶۳۱۱۱، gh.arab@iau.ac.ir

چکیده

سیکل هیبریدی پیل سوختی اکسید جامد–توربین گاز (SOFC–GT) به دلیل برهم‌کنش‌های الکتروشیمیایی و حرارتی، نیازمند ارزیابی نقاط کار تحت قیود بهره‌برداری است. در این پژوهش، مدل جانشین عصبی فیزیک‌آگاهی برای سیکل تحت‌فشار ۲۲۰ کیلوواتی زیمنس–وستینگهاوس توسعه یافت. مدل صفربُعدی و حالت پایای EES در نقطه طراحی، توان خالص ۲۲۲/۰۴ کیلووات و راندمان الکتریکی ۵۱/۴۷ درصد را بازتولید کرد. در مدل جانشین، توان خالص، راندمان و چگالی جریان از روابط صریح فیزیکی بازسازی شدند. ارزیابی مستقل در ۳۲۰ سناریوی EES و پنج نمای حرارتی، به RMSE تجمیعی تقریبی ۰/۴۴۹ کیلووات برای توان خالص و ۰/۷۴۳ درجه سلسیوس برای بیشینه دمای پشته منجر شد. با استفاده از حاشیه حرارتی تجربی ۲/۳۳۳ درجه سلسیوس، ۱۵۵ سناریو به‌صورت مشروط پذیرفته و ۱۶۵ سناریو به EES ارجاع شدند؛ هیچ‌یک از ۸۰ سناریوی ناقض حد دما پذیرفته نشد. بهینه‌سازی در نه سناریوی حرارتی، ۷۲ نقطه غیرمغلوب شناسایی کرد و ارزیابی ۱۲ نامزد منتخب در ۱۴ شرایط حرارتی، شامل ۱۶۸ اجرای EES ، برقراری معیارهای فیزیکی عمومی را نشان داد. چارچوب پیشنهادی برای غربالگری و انتخاب نقاط کار مبتنی بر شبیه‌سازی مناسب است، اما اعتبارسنجی تجربی و تضمین ایمنی عملیاتی را فراهم نمی‌کند.

واژگان کلیدی: مدل جانشین عصبی فیزیک‌آگاه؛ سیکل هیبریدی SOFC–GT؛ کمی‌سازی عدم‌قطعیت؛ غربالگری حرارتی؛ بهینه‌سازی سناریومحور.

ویرایشگری شده

Development and Evaluation of a Physics-Embedded Neural Surrogate for Thermally Constrained Operating-Point Selection in a 220 kW SOFC–Gas Turbine Hybrid System

Ghasem Arab [1,*]

1- Assistant Professor, Department of Mechanical Engineering, Yadegar-e-Imam Khomeini (RAH) Shahre Rey Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran
* P.O.B. 1815163111, Tehran, Iran, gh.arab@iau.ac.ir

Abstract

A physics-embedded neural surrogate is developed for thermally constrained operating-point assessment of a pressurized 220 kW solid oxide fuel cell–gas turbine (SOFC–GT) hybrid cycle. A zero-dimensional, steady-state Engineering Equation Solver (EES) model reproduced a design-point net power of 222.04 kW and electrical efficiency of 51.47%. Neural networks predict selected independent quantities, while net power, electrical efficiency, and current density are reconstructed using explicit physical relations. Independent EES testing covers 320 scenarios at five thermal exponents. The approximate pooled root mean square errors are 0.449 kW for net power and 0.743 °C for maximum stack temperature. With a fixed empirical temperature margin of 2.333 °C, 155 scenarios were conditionally accepted and 165 referred to EES; none of the 80 temperature-limit violations was accepted. Scenario-based optimization under nine thermal settings identified 72 non-dominated operating points. Twelve selected candidates were evaluated across 14 thermal conditions, resulting in 168 physically feasible EES calculations. The findings support numerical operating-point assessment and conservative screening relative to the EES reference but do not establish experimental validation or guaranteed operational safety.

Keywords: Physics-embedded neural surrogate; SOFC–GT hybrid system; Predictive uncertainty; Thermal screening; Scenario-based optimization.

ویرایش اولیه شده

۱. مقدمه

پیل‌های سوختی اکسید جامد (SOFC) به دلیل راندمان الکتروشیمیایی بالا، انعطاف‌پذیری سوخت و دمای مناسب گاز خروجی، گزینه‌ای جذاب برای تولید توان کم آلاینده‌اند. اتصال SOFC به توربین گاز (GT) امکان بازیافت گرمای خروجی و افزایش راندمان را فراهم می‌کند. سامانه ۲۲۰ کیلوواتی زیمنس–وستینگهاوس یکی از نمونه‌های مرجع این فناوری است و در مطالعات طراحی، بار جزئی و کنترل بررسی شده است [۱–۵]. با این حال، رفتار سیکل SOFC–GT به علت کوپلینگ متغیرهای الکتروشیمیایی، حرارتی و توربوماشینی غیرخطی است و تغییر بار، دمای محیط، ضرایب مصرف سوخت و اکسیژن، نسبت فشار، عملکرد بازیاب و اتلاف حرارتی می‌تواند توان، راندمان و حاشیه حرارتی پشته را هم زمان تغییر دهد. بنابراین، استفاده مکرر از مدل‌های تفصیلی برای جست وجوی گسترده فضای عملیاتی و ارزیابی سریع نقاط کار، پرهزینه است. مطالعات پیشین نیز حساسیت عملکرد این سیکل‌ها به نسبت فشار، دمای کاری، بازیافت حرارت و ضریب مصرف سوخت را نشان داده‌اند [۶–۸].

هدف از این پژوهش، توسعه و ارزیابی یک مدل جانشین عصبی فیزیک آگاه مبتنی بر شبیه‌سازی برای تحلیل عملکرد و انتخاب نقاط کار با لحاظ قیود حرارتی در سیکل هیبریدی ۲۲۰ کیلوواتی SOFC–GT است. نوآوری کار شامل تولید بانک داده چندمتغیره از نرم افزار حل معادلات مهندسی (Engineering Equation Solver; EES)، بازسازی توان خالص، راندمان و چگالی جریان با روابط صریح فیزیکی، کمی‌سازی عدم قطعیت با تجمیع شبکه‌های عصبی و کنترل دامنه ورودی‌های مدل و بهینه‌سازی استوار با استفاده از گاردبندهای حرارتی و ارزیابی مستقل عددی نقاط کار است.

پیکربندی مرجع بر اساس سیکل هیبریدی تحت فشار ۲۲۰ کیلوواتی زیمنس–وستینگهاوس است که مبنای توسعه مدل این پژوهش قرار گرفته و نمای کلی آن در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱. پیکربندی مرجع سیکل هیبریدی تحت فشار ۲۲۰ کیلوواتی زیمنس–وستینگهاوس به عنوان مبنای توسعه مدل این پژوهش.

Figure 1. Reference configuration of the 220 kW Siemens–Westinghouse pressurized hybrid cycle used as the basis of the present study.

مدل حاضر یک مدل جانشین تصمیم‌یار مبتنی بر شبیه‌سازی حالت پایاست و برای تحلیل عملکرد و غربالگری عددی نقاط کار، بدون اتصال به داده‌های برخط سامانه واقعی، به کار گرفته می‌شود.

۲. مروری بر پژوهش‌های پیشین و شکاف تحقیقاتی

پژوهش‌های مربوط به سیکل‌های هیبریدی SOFC–GT طیف گسترده‌ای از مدل‌سازی ترمودینامیکی و تحلیل عملکرد تا بررسی رفتار بار جزئی، کنترل و بهینه‌سازی شرایط بهره‌برداری را در بر می‌گیرند. در این سامانه‌ها، عملکرد الکتروشیمیایی پشته با فرایندهای تراکم، انبساط و بازیافت حرارت ارتباط مستقیم دارد و تغییر شرایط عملیاتی می‌تواند به صورت هم زمان بر توان تولیدی، راندمان و توزیع دما تأثیر بگذارد. مطالعات مبتنی بر مدل‌های ترمودینامیکی، شناخت این برهم کنش‌ها و بررسی تأثیر پارامترهایی مانند نسبت فشار، ضرایب مصرف سوخت و اکسیژن، بازچرخش آند و عملکرد بازیاب را بر مشخصه‌های سیکل فراهم کرده‌اند.

در کنار مدل‌سازی ترمودینامیکی، گسترش روش‌های محاسباتی و یادگیری ماشین زمینه توسعه مدل‌های داده محور برای پیش‌بینی سریع عملکرد و بهینه‌سازی سامانه‌های انرژی را فراهم کرده است. در مطالعات جدیدتر، ترکیب مدل‌های فیزیکی با روش‌های یادگیری ماشین، استفاده از روابط حاکم در ساختار مدل‌های جانشین و کمی‌سازی عدم قطعیت پیش‌بینی مورد توجه قرار گرفته است. همچنین، توسعه دوقلوهای دیجیتال و مدل‌های محاسباتی فیزیک آگاه، زمینه‌های تازه‌ای برای پایش، تحلیل عملکرد و مدیریت شرایط بهره‌برداری سامانه‌های انرژی ایجاد کرده است. در ادامه، پیشینه پژوهش در سه محور مدل‌سازی و عملکرد سیکل‌های هیبریدی SOFC–GT، مدل‌های داده محور و یادگیری ماشین و مدل‌های جانشین فیزیک آگاه، دوقلوهای دیجیتال و عدم قطعیت مرور می‌شود.

۲-۱. مدل‌سازی و عملکرد سیکل‌های هیبریدی SOFC–GT

مطالعات کلاسیک SOFC–GT بر مدل‌سازی ترمودینامیکی نمونه زیمنس–وستینگهاوس، رفتار بار جزئی، پویایی و کنترل تمرکز دارند [۱–۵ و ۹–۱۱]. این مطالعات بازیاب، نسبت فشار، بازچرخش آند و قیود حرارتی پشته را از عوامل اصلی مؤثر بر راندمان و پایداری عملکرد معرفی کرده‌اند. یانگ و همکاران [۴] با بررسی سه راهبرد کنترل بار جزئی شامل تغییر دبی سوخت، تغییر سرعت دورانی توربین و کنترل پره‌های راهنمای ورودی، نشان دادند که کنترل سرعت دورانی از نظر عملکرد بار جزئی برتری دارد؛ درحالی که تنظیم پره‌های راهنما می‌تواند برای توربین‌هایی که امکان تغییر سرعت دورانی ندارند، گزینه مناسبی باشد. بارلی و همکاران [۵] نیز با توسعه یک مدل حالت پایای صفربعدی نشان دادند که مدیریت مناسب بخش بازیافت حرارت می‌تواند راندمان الکتریکی کل سامانه را حتی با کاهش بار توربین گاز تا حدود ۴۵ درصد، تقریباً ثابت نگه دارد. بررسی رفتار دینامیکی همین سامانه نشان داد که اینرسی حرارتی مبدل‌ها نقش تعیین کننده‌ای در پاسخ گذرای سیکل دارد؛ به طوری که برای تغییرات بار توربین گاز به میزان ۱۴/۵ و ۲۱/۵ کیلووات، تأخیر کلی پاسخ سامانه در محدوده ۴۵۰۰ تا ۵۵۰۰ ثانیه گزارش شده است [۱۱]. مطالعات ترمودینامیکی - اقتصادی، اگزرژی و جذب CO_2 نیز اثر هم زمان نسبت فشار، مصرف سوخت، دمای الکتروشیمیایی و بازیافت حرارت را بر عملکرد و هزینه بررسی کرده‌اند [۶–۸]. اسماعیلی و همکاران [۱۲] با بررسی و بهینه‌سازی طرح مولد بخار بازیاب حرارت در یک سیکل ترکیبی، نقش طراحی بخش بازیافت حرارت و افت فشار آن را در عملکرد توربین گاز مطالعه کردند. نتایج این پژوهش اهمیت هماهنگی اجزای حرارتی و توربوماشینی را در بهبود عملکرد سیکل نشان می‌دهد.

۲-۲. مدل‌های داده محور و یادگیری ماشین برای SOFC

در مدل‌های داده محور، شبکه‌های عصبی مصنوعی (Artificial Neural Networks; ANN) ابتدا برای تقریب ولتاژ و توان SOFC به کار رفتند [۱۳ و ۱۴] و سپس کاربرد آن‌ها به پیش‌بینی سریع و بهینه‌سازی گسترش یافت [۱۵ و ۱۶]. سوبوتیچ و همکاران [۱۵] با استفاده از داده‌های مدل چندفیزیکی و آزمایشگاهی، شبکه‌های عصبی را برای پیش‌بینی منحنی‌های پلاریزاسیون و طیف امپدانس الکتروشیمیایی توسعه دادند. نتایج آن‌ها نشان داد که شبکه‌هایی با یک تا سه لایه پنهان و تعداد محدودی نورون می‌توانند رفتار الکتروشیمیایی را با دقت مناسبی پیش‌بینی کنند؛ هرچند اختلاف پیش‌بینی در چگالی جریان‌های کمتر از ۲۰ میلی آمپر بر سانتی متر مربع بیشتر بود. موتر و همکاران [۱۶] نیز با ترکیب تنظیم خودکار معماری شبکه عصبی، اعتبارسنجی متقاطع و الگوریتم ژنتیک، یک چارچوب پیش‌بینی و بهینه‌سازی توسعه دادند که سرعت محاسبات آن بیش از سه مرتبه بزرگی نسبت به مدل چندفیزیکی مرجع افزایش یافت.

مقایسه شبکه‌های عصبی مصنوعی، جنگل تصادفی (Random Forest; RF) و تقویت گرادیانی حدی (Extreme Gradient Boosting; XGBoost) نیز قابلیت روش‌های یادگیری ماشین را نشان داده است. بلویف و همکاران [۱۷] با مقایسه این روش‌ها برای پیش‌بینی ولتاژ SOFC گزارش کردند که مدل XGBoost به ضریب تعیین ۰/۹۹۷ و میانگین مربعات خطای ۰/۹۹۴ دست یافته است. در مطالعه‌ای دیگر، مجاور [۱۸] با استفاده از روش‌های رگرسیونی مبتنی بر یادگیری ماشین، عملکرد و آلایندگی یک سامانه ترکیبی مبتنی بر فرایند ترموشیمیایی و پیل سوختی با الکترولیت هدایت پروتونی را بررسی کرد. شرایط بهینه در چگالی جریان ۵۷۹۸ آمپر بر متر مربع، دمای ۸۰۰ درجه سلسیوس و ضریب مصرف سوخت ۰/۸ گزارش شد. همچنین، در چگالی جریان‌های کمتر از ۳۵۰۰ آمپر بر متر مربع، انتشار CO_2 در محدوده ۵۰۰ تا ۸۰۰ کیلوگرم بر مگاوات ساعت قرار داشت. مطالعات جدیدتر نیز کاربرد یادگیری ماشین را به پیش‌بینی رفتار گذرا، کنترل و پایش سلامت پیل‌های سوختی اکسید جامد گسترش داده‌اند [۱۹ و ۲۰]. در سامانه‌های هیدروژنی مرتبط نیز ویراکون و اسدی [۲۱] مدل‌سازی دوقلوی دیجیتال را برای یک سامانه یکپارچه شامل الکترولایزر غشای تبادل آنیون و پیل سوختی غشای تبادل پروتون بررسی کردند. این نتایج ظرفیت روش‌های داده محور را برای تقریب سریع رفتار غیرخطی سامانه و شناسایی شرایط مناسب بهره‌برداری نشان می‌دهند.

۲-۳. مدل‌های جانشین فیزیک آگاه، دوقلوهای دیجیتال و عدم قطعیت

ادبیات جدید دوقلوی دیجیتال به سمت ادغام مدل‌های فیزیکی، داده‌های عملکردی و روش‌های یادگیری ماشین حرکت کرده است. گوئو و همکاران [۲۲] با مدل‌سازی هوشمند یک سامانه هیبریدی فتوولتائیک-SOFC، شناسایی پارامترهای مدل الکتروشیمیایی پیل سوختی و مشخصه‌های الکتریکی سامانه فتوولتائیک را به عنوان بخش‌هایی از چارچوب مدل‌سازی دیجیتال بررسی کردند. تستاسکا و همکاران [۲۳] نیز با استفاده از داده‌های آزمایشگاهی یک مولد هم زمان برق و حرارت مبتنی بر SOFC، عملکرد چند روش یادگیری ماشین را برای پیش‌بینی راندمان الکتریکی مقایسه کردند. در این مطالعه، روش جنگل تصادفی عملکرد مناسبی داشت و ضریب تعیین بیش از ۰/۹۸ و میانگین مربعات خطای ۰/۱۴ برای پیش‌بینی راندمان الکتریکی گزارش شد. کاربرد دوقلوهای دیجیتال در فرایند توسعه سامانه‌های هیبریدی SOFC–GT نیز بررسی شده است [۲۴].

در کنار این مطالعات، روش‌های یادگیری ماشین فیزیک آگاه با واردکردن دانش فیزیکی به فرایند یادگیری، امکان ترکیب انعطاف‌پذیری مدل‌های داده محور با ساختار روابط حاکم را فراهم کرده‌اند. شبکه‌های عصبی فیزیک آگاه (Physics-Informed Neural Networks; PINN) یکی از این رویکردها هستند که در آن‌ها باقیمانده معادلات حاکم می‌تواند در تابع هزینه آموزش وارد شود [۲۵–۲۷]. در مقابل، در مدل‌های جانشین با روابط صریح فیزیکی، بخشی از خروجی‌ها مستقیماً از روابط بقای جرم و انرژی یا معادلات فیزیکی محاسبه می‌شوند. هر دو رویکرد در توسعه مدل‌های محاسباتی سازگار با دانش فیزیکی کاربرد دارند.

ویرایش شده

پژوهش‌های جدیدتر، کاربرد این روش‌ها را در پیش‌بینی وضعیت سلامت و تشخیص عیب پیل سوختی گسترش داده‌اند. صالحی و همکاران [۲۸] با توسعه یک شبکه گرافی زمانی فیزیک آگاه و استفاده هم زمان از داده‌های ولتاژ و امپدانس الکتروشیمیایی، خطای پیش‌بینی وضعیت سلامت را در مقایسه با مدل مرجع فاقد اطلاعات امپدانس، ۳۷ درصد کاهش دادند. در این پژوهش، مقدار RMSE برابر ۰/۰۸۵ و ضریب تعیین ۰/۹۴ گزارش شد. همچنین، کریستوفر و همکاران [۲۹] در مطالعه رفتار حرارتی دینامیکی پشته‌های SOFC، دقت ۹۳/۴ درصدی را برای تشخیص عیوبی مانند نشتی، ترک و لایه لایه شدن گزارش کردند. مرورهای جدید نیز بر گسترش کاربرد مدل‌های فیزیکی و داده محور در طراحی و ارزیابی عملکرد پیل سوختی تأکید دارند [۳۰].

برای کاربردهای پیش‌بینی و تصمیم‌یار، ارزیابی عدم‌قطعیت و قابلیت اعتماد خروجی مدل اهمیت ویژه‌ای دارد. تجمیع شبکه‌های عصبی عمیق با استفاده از چند مدل آموزش‌دیده، امکان بررسی پراکندگی پیش‌بینی‌ها را فراهم می‌کند [۳۱]. در رویکردهای آماری دیگر، پیش‌بینی همدیس می‌تواند تحت فرض‌های مشخص و با بهره‌گیری از داده‌های کالیبراسیون، بازه‌هایی با سطح پوشش آماری تعریف‌شده ایجاد کند [۳۲ و ۳۳]. در پژوهش حاضر، عدم‌قطعیت پیش‌بینی با بررسی اختلاف خروجی شبکه‌ها، خطاهای خارج از گروه آموزشی و کنترل دامنه ورودی‌ها ارزیابی می‌شود. برای غربالگری حرارتی نیز یک حاشیه تجربی ثابت همراه با ارجاع نقاط حساس به مدل ترمودینامیکی مرجع به کار می‌رود؛ ازاین‌رو، چارچوب حاضر از کالیبراسیون همدیس استفاده نمی‌کند و برای حاشیه حرارتی آن تضمین رسمی پوشش آماری در نظر گرفته نمی‌شود. ترکیب مدل‌سازی ترمودینامیکی، شبکه‌های عصبی با روابط صریح فیزیکی و غربالگری حرارتی، مبنایی برای ارزیابی و انتخاب نقاط کار سیکل‌های هیبریدی SOFC–GT فراهم می‌کند. بر این اساس، پژوهش حاضر بر توسعه و ارزیابی یک مدل جانشین عصبی فیزیک‌آگاه مبتنی بر شبیه‌سازی برای تحلیل عملکرد، غربالگری حرارتی و انتخاب نقاط کار سیکل هیبریدی ۲۲۰ کیلوواتی SOFC–GT تمرکز دارد.

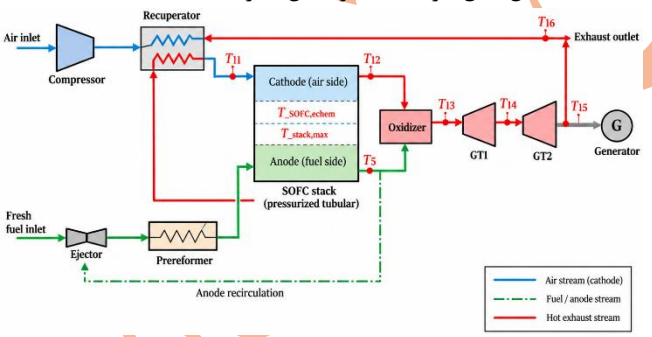
۳. توصیف سامانه و روش تحقیق

سامانه مرجع شامل کمپرسور، بازیاب، پشته لوله‌ای SOFC تحت فشار، مسیر بازچرخش آند و اجکتور، پیش اصلاح گر، اکسیدایزر، دو توربین و ژنراتور است. سوخت تازه با جریان بازچرخشی آند مخلوط شده و پس از اصلاح اولیه وارد پشته می‌شود؛ هوای فشرده پس از پیش گرمایش در بازیاب به کاتد می‌رسد و گازهای خروجی آند و کاتد پس از اکسیداسیون، توربین‌ها و سپس بازیاب را تغذیه می‌کنند. برای تحلیل حرارتی، T_5 دمای خروجی آند، T_{11} و T_{12} به ترتیب دماهای ورودی و خروجی کاتد، T_{13} دمای خروجی اکسیدایزر و ورودی توربین اول، T_{14} و T_{15} دماهای خروجی توربین‌های اول و دوم و T_{16} دمای گاز خروجی از بازیاب را نشان می‌دهند. همچنین، دمای ناحیه الکتروشیمیایی $T_{SOFC,echem}$ و بیشینه دمای پشته $T_{Stack,max}$ برای بررسی قیود حرارتی محاسبه شدند.

در گام نخست، مدل حالت پایای صفر بُعدی سیکل ۲۲۰ کیلوواتی در EES توسعه یافت. زیرمدل‌های کمپرسور، بازیاب، پیش اصلاح گر، اجکتور و بازچرخش آند، پشته، اکسیدایزر و توربین‌ها با موازنه‌های جرم و انرژی، تعادل واکنش‌های اصلاح بخار متان و تبدیل آب-گاز، روابط الکتروشیمیایی و قیود حرارتی به صورت یکپارچه حل شدند. پس از بازتولید نقطه طراحی و کنترل بستارهای فیزیکی، دامنه متغیرهای عملیاتی تعیین شد و نمونه‌ها با روش نمونه برداری لاتین فوق مکعب بهینه (Optimized Latin Hypercube Sampling; OLHS) تولید شدند تا فضای هفت‌بعدی متغیرهای عملیاتی اولیه با تعداد محدودی اجرای EES پوشش داده شود. نمای حرارتی در مرحله توسعه مدل جانشین به‌عنوان ورودی هشتم به مدل افزوده شد. نقاط غیرهمگرا یا ناقض قیود فیزیکی به صورت جداگانه شناسایی و ثبت شدند.

در گام دوم، یک پرسپترون چندلایه (Multilayer Perceptron; MLP) کاملاً داده محور به عنوان مدل پایه آموزش داده شد. در مدل جانشین عصبی فیزیک آگاه، کمیت‌های مستقل توسط شبکه‌های عصبی پیش‌بینی شده و کمیت‌های وابسته، شامل توان خالص، راندمان الکتریکی و چگالی جریان، با استفاده از روابط صریح فیزیکی بازسازی می‌شوند. عدم قطعیت پیش‌بینی با تجمیع شبکه‌های عصبی برآورد شد و اثر تغییرات پارامترهای حرارتی نیز به صورت جداگانه بررسی گردید. همچنین، قرارگرفتن نقاط جدید در دامنه ورودی‌های مدل کنترل شد. سپس مدل در بهینه‌سازی سناریومحور به کار رفت و نقاط منتخب، تحت شرایط مختلف اتلاف حرارتی و رفتار دمایی پشته، با حل مدل مرجع EES ارزیابی شدند.

شماتیک سیکل مدل‌سازی شده در شکل ۲ ارائه شده است.



شکل ۲. شماتیک سیکل هیبریدی SOFC–GT و محل دماهای شاخص مورد استفاده در تحلیل حرارتی.

Figure 2. Schematic of the SOFC–GT hybrid cycle and the locations of the key temperatures used in the thermal analysis.

جزئیات مدل و مراحل محاسبات در ادامه ارائه می‌شود.

۳-۱. فرضیات اصلی مدل

- مدل از نوع حالت پایا و صفر بُعدی است و خواص جریان در خروجی هر مؤلفه یکنواخت فرض می‌شوند. گازها ایده آل در نظر گرفته شده‌اند و خواص ترمودینامیکی گونه‌ها با استفاده از روابط Shomate محاسبه می‌شوند.
- واکنش‌های اصلاح بخار متان و تبدیل آب–گاز در تعادل ترمودینامیکی

فرض شده‌اند. بازچرخش آند نیز بر اساس موازنه‌های جرم و انرژی و قیود فشار اجکتور مدل شده است.

- افت فشار نسبی بازیاب، SOFC و اکسیدایزر به ترتیب ۰/۰۲، ۰/۰۳ و ۰/۰۱ در نظر گرفته شد. اتلاف حرارتی پشته با استفاده از رسانایی حرارتی معادل UA، حاصل ضرب ضریب کلی انتقال حرارت U در سطح مؤثر انتقال حرارت A، مدل شد. مقدار مبنای این پارامتر در نقطه طراحی برابر $UA_{design} = 0.0479\ kW/K$ در نظر گرفته شد و اثر تغییرات آن در تحلیل حساسیت بررسی گردید. قیود بهره‌برداری مدل شامل بیشینه دمای پشته $T_{stack,max} \le 1000\ °C$ و چگالی جریان $j \le 4000\ A/m^2$ است.

۳-۲. روابط ترمودینامیکی حاکم

مدل ترمودینامیکی سیکل بر اساس معادلات بقای جرم و انرژی، تعادل شیمیایی، روابط الکتروشیمیایی پیل سوختی و مشخصه‌های عملکردی توربوماشین‌ها توسعه یافت. موازنه جریان و انرژی هر مؤلفه به‌ترتیب مطابق روابط (۱) و (۲) اعمال شد و تغییرات انرژی جنبشی و پتانسیل ناچیز فرض گردید. در رابطه (۱)، m_dot دبی جرمی برحسب kg/s است. در رابطه (۲)، n_dot دبی مولی برحسب kmol/s، h آنتالپی مولی برحسب kJ/kmol و Q_dot و W_dot به‌ترتیب نرخ انتقال حرارت و توان برحسب kW هستند. خواص ترمودینامیکی مخلوطها با استفاده از کسر مولی گونه‌ها و روابط Shomate محاسبه شدند [۳۴].

$$\sum \dot{m}_{in} = \sum \dot{m}_{out} \qquad (1)$$

$$\sum \dot{n}_{in} \bar{h} + \dot{Q} - \dot{W} = \sum \dot{n}_{out} \bar{h} \qquad (2)$$

در مسیر سوخت، واکنش اصلاح بخار متان و واکنش تبدیل آب–گاز به‌ترتیب با روابط (۳) و (۴) بیان می‌شوند. ثابت‌های تعادل از انرژی آزاد گیبس استاندارد محاسبه و همراه با موازنه‌های اتمی حل شدند. برای جلوگیری از دبی‌های منفی و بهبود همگرایی دستگاه معادلات غیرخطی، از متغیرهای بدون‌بُعد و کراندار استفاده شد.

$$CH_4 + H_2O \; f \quad CO + 3H_2 \qquad (3)$$

$$CO + H_2O \; f \quad CO_2 + H_2 \qquad (4)$$

جریان الکتریکی پشته مطابق رابطه (۵) از قانون فاراده و مصرف معادل هیدروژن محاسبه شد. در این رابطه، F ثابت فاراده و $n_{H2,electro}$ دبی مولی هیدروژن مصرف‌شده در واکنش الکتروشیمیایی است. پتانسیل تعادلی سلول بر اساس معادله نرنست و فشارهای جزئی مؤثر مطابق رابطه (۶) تعیین شد [۳۵]. در این رابطه، E_0 پتانسیل استاندارد سلول است و فشارهای جزئی در عبارت لگاریتمی به‌صورت نسبت‌های بدون‌بُعد استفاده می‌شوند.

$$I_{stack} = 2\,F\,\dot{n}_{H_2,electro} \times 10^3 \qquad (5)$$

$$E_{Nernst} = E_0 + \frac{R\,T}{2F} \ln\left[\frac{p_{H_2}\, p_{O_2}^{1/2}}{p_{H_2O}}\right] \qquad (6)$$

افت‌های ولتاژ فعال‌سازی، غلظتی و اهمی به‌ترتیب مطابق روابط (۷)، (۸) و (۹) محاسبه شدند. در این روابط، alpha ضریب انتقال بار بدون‌بُعد، j_0 چگالی جریان تبادلی، j_{lim} چگالی جریان محدودکننده و R_{eff} مقاومت ویژه مؤثر سلول است. واحد چگالی جریان A/m^2 و واحد R_{eff} برابر $ohm.m^2$ است. ولتاژ واقعی سلول نیز مطابق رابطه (۱۰) از کسر مجموع افت‌های ولتاژ از پتانسیل نرنست به‌دست آمد.

$$\eta_{act} = \frac{R\,T}{\alpha\,n\,F} \ln\left(\frac{j}{j_0}\right) \qquad (7)$$

$$\eta_{conc} = -\frac{R\,T}{n\,F} \ln\left(1 - \frac{j}{j_{lim}}\right) \qquad (8)$$

$$\eta_{ohm} = j\,R_{eff} \qquad (9)$$

$$V_{cell} = E_{Nernst} - \eta_{act} - \eta_{conc} - \eta_{ohm} \qquad (10)$$

توان DC و AC پشته از ولتاژ، جریان و راندمان اینورتر محاسبه شد. در نقطه طراحی، ۱۱۵۲ سلول، سطح مؤثر ۹۵/۸۷ مترمربع، چگالی جریان حدود ۳۶۷۸ آمپر بر مترمربع و ولتاژ سلول ۰/۵۳۸۳ ولت بود.

برای مدل‌سازی کمپرسور، توربین مولد گاز و توربین آزاد، راندمان‌های ایزنتروپیک به‌ترتیب ۷۸، ۸۲ و ۸۰ درصد در نظر گرفته شد. راندمان مکانیکی محورها ۹۷ درصد، راندمان ژنراتور ۹۲ درصد و اثربخشی طراحی بازیاب ۰/۷۵۳۶ فرض شد.

برای توصیف رفتار حرارتی خارج از نقطه طراحی، نرخ گرمای مؤثر الکتروشیمیایی از تفاضل گرمای تولیدشده در فرایند الکتروشیمیایی و اتلاف حرارتی ماژول محاسبه شد. نسبت این مقدار به گرمای مؤثر متناظر در نقطه طراحی، مطابق رابطه (۱۱)، برای تعیین ضریب مقیاس‌بندی دما به کار رفت. در این رابطه، f_T ضریب مقیاس‌بندی حرارتی و β_T نمای حرارتی بدون‌بُعد است. مقدار β_T برابر ۰/۵۰ نمای حرارتی مبنای مدل محسوب می‌شود. برای بهبود پایداری حل غیرخطی، نسبت حرارتی در پیاده‌سازی عددی به‌صورت هموار و مثبت‌ساز محاسبه شد. رابطه مقیاس‌بندی حرارتی به‌عنوان یک تقریب مهندسی برای توصیف رفتار خارج از طراحی استفاده شده است. دمای خروجی آند مطابق رابطه (۱۲) از دمای پیش‌اصلاح‌گر و افزایش دمای طراحی آند، $DeltaT_{anode,des}$، تعیین شد. بیشینه دمای پشته نیز مطابق رابطه (۱۳) از دمای ناحیه الکتروشیمیایی و دمای خروجی آند محاسبه گردید. در شرایط طراحی، روابط حرارتی دماهایی در حدود ۸۰۰، ۹۰۰ و ۱۰۰۰ درجه سلسیوس را به‌ترتیب برای خروجی آند، ناحیه الکتروشیمیایی و بیشینه دمای پشته به دست می‌دهند. مقدار دقیق بیشینه دمای پشته از حل مدل EES استخراج شده و در جدول ۳ گزارش شده است. اثر تغییرات β_T و ضریب اتلاف حرارتی در تحلیل حساسیت بررسی شد.

$$f_T = \left(\frac{\dot{Q}_{echem} - \dot{Q}_{loss}}{\dot{Q}_{echem,des} - \dot{Q}_{loss,des}}\right)^{\beta_T} \qquad (11)$$

$$T_5 = T_{reformer} + \Delta T_{anode,des}\; f_T \qquad (12)$$

$$T_{stack,max} = 2\,T_{echem} - T_5 \qquad (13)$$

۳-۳. ورودی‌ها، دامنه نمونه‌برداری و معیارهای پذیرش

هفت متغیر عملیاتی شامل ضریب بار، دمای محیط، ضریب مصرف سوخت،

ضریب مصرف اکسیژن، نسبت فشار کمپرسور، ضریب عملکرد بازیاب و ضریب اتلاف حرارتی ماژول بر اساس اثرگذاری بر عملکرد سیکل و قابلیت تنظیم یا اندازه‌گیری انتخاب شدند. نمای مقیاس‌بندی حرارتی β_T نیز برای توصیف تغییرات رفتار حرارتی پشته در شرایط خارج از طراحی در بازه ۰/۴۰ تا ۰/۶۰ در نظر گرفته شد. بنابراین، مدل جانشین نهایی دارای هشت متغیر ورودی است. دامنه هر متغیر در جدول ۱ ارائه شده است و مقدار $\beta_T=0.50$ به‌عنوان نمای حرارتی مبنا در مدل ترمودینامیکی و مدل جانشین لحاظ می‌شود.

جدول ۱. ورودی‌های مدل جانشین عصبی فیزیک‌آگاه و دامنه نمونه‌برداری.

Table 1. Inputs of the physics-embedded neural surrogate and sampling ranges.

Variable	Model name	Range	Unit
Load factor	Load_factor	0.80–1.00	–
Ambient temperature	T0_input	5–40	°C
Fuel utilization	U_fuel_input	0.78–0.88	–
Oxygen utilization	O2_utilization_input	0.21–0.28	–
Compressor pressure ratio	PR_air_input	2.70–3.30	–
Recuperator effectiveness factor	Recup_effectiveness factor	0.90–1.05	–
Module heat-loss factor	UA_loss_factor	0.85–1.15	–
Thermal exponent	Thermal_exp_input	0.40–0.60	–

پذیرش هر نمونه مستلزم همگرایی مدل EES، برقراری موازنه‌های جرم، انرژی و الکتروشیمی، مثبت‌بودن دبی گونه‌ها، اختلاف دمای حداقل بازیاب (pinch)، امکان‌پذیری اجکتور و رعایت قیود حرارتی و چگالی جریان بود. نقاط غیرمجاز از رگرسیون عملکرد کنار گذاشته شدند، اما برای ارزیابی مرز امکان‌پذیری به‌صورت جداگانه بررسی شدند. معیارهای فیزیکی و عددی پذیرش برای هر نمونه EES در جدول ۲ ارائه شده‌اند.

جدول ۲. معیارهای فیزیکی و عددی پذیرش هر نمونه EES.

Table 2. Physical and numerical acceptance criteria for each EES sample.

Check group	Acceptance criterion
Current and oxygen margins	Current_margin > 0 and Oxidizer_O2_margin > 0
Thermal constraints	T_stack,max ≤ 1000 °C; T12, T13, T10, anode and electrochemical margins > 0
Recuperator	Recuperator_min_pinch > 0
Species positivity	Species_flow_min > 0
Shaft and energy balances	|Shaft_balance|, |Stack_balance| and |Recuperator_balance| < 10^{-3}
Chemistry balance	Chemistry_balance_max < 10^{-5}

پس از غربالگری مقدماتی ۱۵ نقطه‌ای، ۳۰۰ نمونه به روش OLHS تولید شد [۳۶] و ترتیب حل با استفاده از نزدیک‌ترین همسایه در فضای ورودی نرمال‌شده تنظیم گردید تا احتمال شکست همگرایی کاهش یابد. از این مجموعه، ۲۹۲ نقطه مجاز و هشت نقطه به‌دلیل عبور بیشینه دمای پشته از حد ۱۰۰۰ درجه سلسیوس غیرمجاز بودند. برای مقایسه اولیه مدل‌ها، ۲۱۰ نمونه به آموزش، ۴۵ نمونه به اعتبارسنجی و ۴۵ نمونه به آزمون اختصاص یافت. مجموعه آموزش شامل شش نقطه غیرمجاز و مجموعه آزمون شامل دو نقطه غیرمجاز بود. به همین دلیل، ارزیابی عملکرد مدل نزدیک مرز حرارتی بر مجموعه مستقل گسترده‌تری نیز انجام شد.

برای سنجش اثر اعمال روابط فیزیکی، یک شبکه عصبی داده‌محور با معماری ۷–۳۲–۳۲–۹ به‌عنوان مدل پایه آموزش داده شد. در مدل جانشین فیزیک‌آگاه، کمیت‌های مستقل توسط شبکه پیش‌بینی شده و خروجی‌های وابسته با روابط صریح فیزیکی بازسازی می‌شوند. توان خالص از جمع توان متناوب پشته و توربین مطابق رابطه (۱۴)، راندمان الکتریکی از نسبت توان خالص به نرخ انرژی ورودی سوخت مطابق رابطه (۱۵) و چگالی جریان از ضریب بار و ضریب مصرف سوخت مطابق رابطه (۱۶) محاسبه شدند. در این روابط، $Q_{fuel,LHV}$ نرخ انرژی سوخت بر مبنای ارزش حرارتی پایین سوخت (Lower Heating Value; LHV) برحسب kW و K_j ضریب تبدیل چگالی جریان برحسب A/m^2 است که از شرایط نقطه طراحی و از رابطه $K_j = j_{cell,des} / \left(Load_{des} U_{fuel,des}\right)$ تعیین می‌شود.

$$W_{net} = W_{SOFC,AC} + W_{GT,AC} \quad (14)$$

$$\eta_{net} = \frac{W_{net}}{Q_{fuel,LHV}} \quad (15)$$

$$j_{cell} = K_j \times Load \times U_{fuel} \quad (16)$$

در ساختار نهایی، شاخه حرارتی شامل سه شبکه با معماری ۸–۳۲–۳۲–۱ و شاخه جدید پیش‌بینی توان شامل سه شبکه با معماری ۸–۴۰–۴۰–۲ است. پیش‌بینی توان همچنین با دو شبکه حفظ‌شده از مدل پیشین با معماری ۸–۳۲–۳۲–۵ ترکیب شد. تابع فعال‌سازی شبکه‌ها tanh بوده و نرمال‌سازی داده‌ها تنها بر اساس مجموعه آموزش انجام شد. آموزش شاخه‌های حرارتی و توان با بهینه‌ساز Adam، نرخ یادگیری به‌ترتیب ۰/۰۰۳ و ۰/۰۰۲۵، حداکثر ۹۰۰ و ۷۵۰ دوره و معیار توقف زودهنگام با شکیبایی ۱۰۰ دوره انجام گرفت. برای پیش‌بینی هر مؤلفه توان، خروجی شبکه‌های مدل پیشین و شاخه جدید توان با ضرایب وزنی ثابت ترکیب شدند. ضرایب ترکیب برای مدل پیشین و شاخه جدید به‌ترتیب ۰/۶۵۴۸ و ۰/۳۴۵۲ بودند که بر اساس پیش‌بینی‌های خارج از گروه آموزشی تعیین و پیش از آزمون مستقل تثبیت شدند. روابط فیزیکی بازسازی توان، راندمان، دما و اتلاف حرارتی پس از خروجی شبکه اعمال می‌شوند.

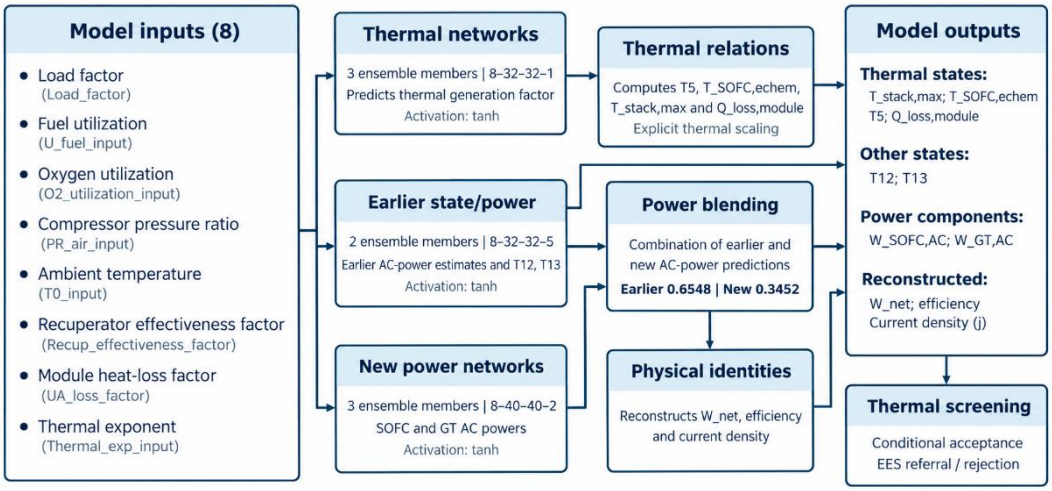
در مرحله پیش‌بینی، ابتدا خروجی‌های مستقل محاسبه و سپس خروجی‌های وابسته از روابط حاکم بازسازی می‌شوند. این ساختار با تحمیل روابط صریح فیزیکی، بستار کمیت‌های وابسته را برقرار می‌سازد. معماری مدل و تفکیک خروجی‌های پیش‌بینی‌شده و بازسازی‌شده در شکل ۳ نشان داده شده است.

برای ارزیابی مدل، داده‌ها بر اساس نقاط کار به مجموعه‌های آموزش، اعتبارسنجی و آزمون تفکیک شدند تا سناریوهای مربوط به یک نقطه کاری در دو مجموعه متفاوت قرار نگیرند. برای بررسی دقت پیش‌بینی، از میانگین قدرمطلق خطا (MAE)، جذر میانگین مربعات خطا (RMSE)، جذر میانگین مربعات خطای نرمال‌شده (NRMSE) و ضریب تعیین (R^2) استفاده شد. باقیمانده‌های بستار توان و روابط حرارتی نیز برای بررسی سازگاری فیزیکی ارزیابی شدند. مقدار NRMSE هر خروجی مطابق رابطه (۱۷)، از تقسیم RMSE آن بر دامنه تغییرات همان خروجی در مجموعه آموزش محاسبه شد.

$$NRMSE_k = \frac{RMSE_k}{y_{k,max} - y_{k,min}} \quad (17)$$

عدم‌قطعیت پیش‌بینی با تجمیع شبکه‌ها و بررسی اختلاف پیش‌بینی‌ها ارزیابی شد. همچنین، یک حاشیه محافظه‌کارانه دمایی برابر ۲/۳۳۳ درجه سلسیوس، بر اساس خطاهای پیش‌بینی خارج از گروه آموزشی، برای غربالگری نقاط کار تعیین گردید. در این روش، نقاطی که دمای پیش‌بینی‌شده همراه با حاشیه خطا کمتر از حد ۱۰۰۰ درجه سلسیوس بود، با رعایت شرط دمای خروجی کاتد و دامنه ورودی‌ها به‌صورت مشروط پذیرفته شدند؛ در مقابل، نقاط نزدیک مرز یا خارج از دامنه بررسی، برای حل مستقیم به EES ارجاع داده شدند. برای افزایش محافظه‌کاری غربالگری، حد دمای خروجی کاتد در مدل جانشین برابر ۳۵۵ درجه سلسیوس در نظر گرفته شد که ۵ درجه بالاتر از حد مرجع ۳۵۰ درجه سلسیوس در مدل EES است.

برای سنجش عملکرد مدل در شرایط حرارتی مختلف، مجموعه آزمون مستقلی شامل ۳۲۰ سناریوی EES در پنج مقدار نمای حرارتی β_T برابر ۰/۴۰، ۰/۴۵، ۰/۵۰، ۰/۵۵ و ۰/۶۰ تشکیل شد. در هر نمای حرارتی، ۶۴ سناریو مورد ارزیابی قرار گرفتند. نقاط کاری آزمون از داده‌های مورد استفاده برای آموزش و تنظیم شبکه‌ها مستقل بودند و وزن‌های مدل جانشین و معیار غربالگری حرارتی در طول ارزیابی ثابت نگه داشته شدند. عملکرد پیش‌بینی و غربالگری مدل در بخش نتایج گزارش می‌شود.



شکل ۳. معماری مدل جانشین عصبی فیزیک‌آگاه و بازسازی خروجی‌های وابسته از روابط فیزیکی.

Figure 3. Architecture of the physics-embedded neural surrogate and reconstruction of dependent outputs using physical relations.

بهینه‌سازی سناریومحور با چهار متغیر تصمیم شامل ضریب بار، ضریب مصرف سوخت، ضریب مصرف اکسیژن و نسبت فشار کمپرسور انجام شد. برای جستجوی فضای عملیاتی، ۳۲۰۷۶۸ نقطه کاندید با روش نمونه‌برداری لاتین فوق‌مکعب و بذر تصادفی ثابت ۲۰۲۶۱۰۱۷ تولید شد. شرایط جستجو شامل نه ترکیب حرارتی حاصل از سه ضریب اتلاف حرارتی ۰/۸۵، ۱/۰۰ و ۱/۱۵ و سه نمای حرارتی ۰/۴۰، ۰/۵۰ و ۰/۶۰ بود. دمای محیط برابر ۱۵ درجه سلسیوس و ضریب عملکرد بازیاب برابر یک در نظر گرفته شد. پس از غربالگری و شناسایی جبهه پارتو، چهار راهبرد بیشینه توان، بیشینه راندمان، نقطه متوازن و کمینه‌سازی دمای پشته بررسی شدند. برای ارزیابی نامزدهای منتخب، چهار نامزد اصلی و همسایه‌های آن‌ها از نظر ضریب بار، شامل ۱۲ نقطه کاری، در ۱۴ ترکیب حرارتی با مدل EES محاسبه شدند. این ترکیب‌ها شامل نه وضعیت حرارتی جستجوی بهینه‌سازی و پنج وضعیت حرارتی میانی بودند و مجموعاً ۱۶۸ اجرای EESرا تشکیل دادند. مراحل روش تحقیق در شکل ۴ نشان داده شده است.

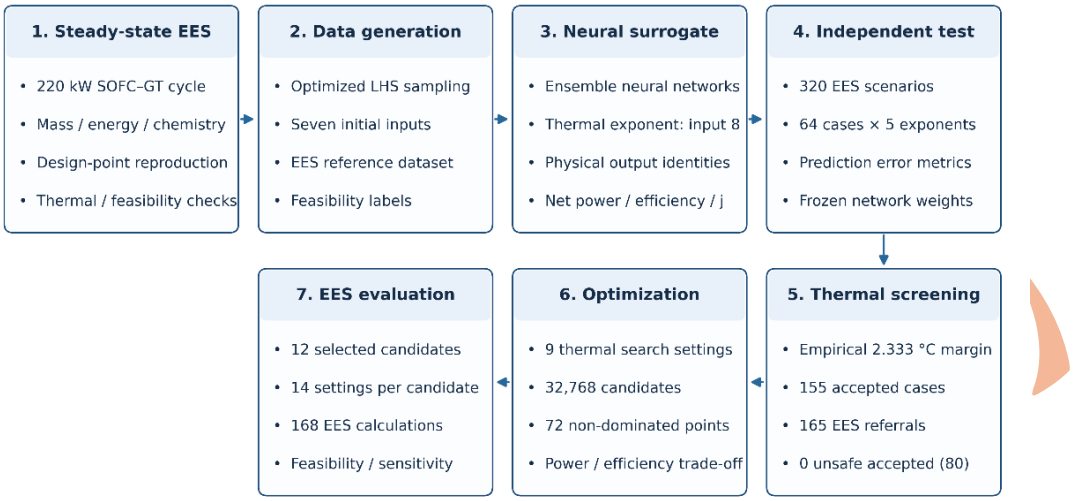
۴. نتایج و بحث

در این بخش، نتایج مدل‌سازی ترمودینامیکی و ارزیابی مدل جانشین عصبی فیزیک‌آگاه برای سیکل هیبریدی ۲۲۰ کیلوواتی SOFC–GT ارائه می‌شود. ابتدا عملکرد مدل EES در نقطه طراحی و سازگاری موازنه‌های فیزیکی بررسی می‌شود. سپس دقت پیش‌بینی مدل جانشین، رفتار آن در شرایط خارج از طراحی، عدم‌قطعیت پیش‌بینی و توانایی غربالگری نقاط کار نزدیک مرز حرارتی ارزیابی می‌گردد. در ادامه، نتایج بهینه‌سازی سناریومحور و عملکرد نقاط منتخب تحت تغییرات پارامترهای حرارتی بررسی می‌شود.

۴-۱. بازتولید نقطه طراحی و کیفیت مدل ترمودینامیکی

مدل EES در نقطه طراحی، توان خالص ۲۲۲/۰۴ کیلووات و راندمان الکتریکی ۵۱/۴۷ درصد را بازتولید کرد. این مقادیر به‌ترتیب ۲/۰۴ کیلووات و ۰/۴۷ واحد درصد بالاتر از مقادیر مبنای ۲۲۰ کیلووات و ۵۱ درصد هستند. باقیمانده موازنه‌های جرم، عناصر شیمیایی، انرژی و توان در محدوده خطای عددی حل قرار داشت و بستار توان خالص از مجموع توان پشته و توربین برقرار بود. نتایج منتخب نقطه طراحی در جدول ۳ ارائه شده‌اند. مطابق جدول ۳، سهم پشته SOFC و توربین گاز از توان خالص تولیدی به‌ترتیب حدود ۸۱/۲ و ۱۸/۸ درصد است که نقش اصلی پشته در تولید توان و سهم بازیافت انرژی حرارتی در توربین را نشان می‌دهد. چگالی جریان ۳۶۷۷/۶ آمپر بر مترمربع با حاشیه ۳۲۲/۴ آمپر بر مترمربع نسبت

به حد تعیین‌شده ۴۰۰۰ آمپر بر مترمربع همراه است. بیشینه دمای پشته در نقطه طراحی برابر ۱۰۰۰/۰۳۱۵ درجه سلسیوس محاسبه شد که ۰/۰۳۱۵ درجه سلسیوس از حد سخت ۱۰۰۰ درجه سلسیوس بیشتر است. بنابراین، نقطه طراحی در پژوهش حاضر به‌عنوان مرجع بازتولید عملکرد ترمودینامیکی سامانه استفاده شده است و تحت معیار سخت حرارتی، در مجموعه نقاط عملیاتی مجاز قرار نمی‌گیرد. قید بیشینه دمای پشته در غربالگری و بهینه‌سازی نقاط کار بدون افزایش حد مجاز اعمال شده است.



شکل ۴. روند مدل‌سازیEES ، توسعه مدل جانشین عصبی، ارزیابی مستقل، غربالگری حرارتی، بهینه‌سازی سناریومحور و ارزیابی نقاط منتخب با EES .

Figure 4. Workflow of EES modeling, neural surrogate development, independent evaluation, thermal screening, scenario-based optimization, and EES assessment of selected operating points.

جدول ۳. نتایج منتخب نقطه طراحی مدل EES.

Table 3. Selected design-point results of the EES model.

Parameter	Value	Unit
SOFC AC power	180.31	kW
Gas-turbine AC power	41.72	kW
Net AC power	222.04	kW
Net electrical efficiency (LHV)	51.47	%
Air mass flow rate	0.5142	kg/s
Fuel mass flow rate	0.008621	kg/s
Cell voltage	0.5383	V
Current density	3677.6	A/m²
Maximum stack temperature	1000.0315	°C
Turbine inlet temperature	800.10	°C
Current density margin	322.4	A/m²

Note1: The design point reproduces the reference-system performance but is not thermally feasible under the strict 1000 °C stack-temperature limit.
Note2: Component powers are displayed with rounded precision; net power and closure calculations use unrounded EES outputs.

تطابق توان و راندمان با مقادیر مبنا، همراه با برقراری موازنه‌های فیزیکی، سازگاری عددی مدل ترمودینامیکی را در نقطه طراحی نشان می‌دهد. با این‌حال، ارزیابی رفتار حرارتی خارج از طراحی به روابط مقیاس‌بندی دما و پارامترهای اتلاف حرارت وابسته است؛ از این رو، اثر تغییرات ضریب اتلاف حرارتی و نمای حرارتی در تحلیل سناریوهای عملیاتی بررسی شده است.

۴-۲. مقایسه مدل پایه و مدل فیزیک‌آگاه

برای بررسی تأثیر اعمال روابط صریح فیزیکی، عملکرد مدل پایه داده‌محور و مدل جانشین فیزیک‌آگاه بر مجموعه آزمون مشترک اولیه مقایسه شد. مدل پایه با معماری ۷–۳۲–۳۲–۹ تمامی خروجی‌ها را به‌صورت مستقل پیش‌بینی می‌کرد، درحالی‌که مدل فیزیک‌آگاه با معماری ۷–۳۲–۳۲–۶، سه خروجی وابسته شامل توان خالص، راندمان الکتریکی و چگالی جریان را از روابط فیزیکی بازسازی می‌کرد. مطابق جدول ۴، میانگین NRMSE مدل پایه ۰/۱۸ درصد و مدل فیزیک‌آگاه ۰/۵۰۹ درصد بود. همچنین، RMSE توان خالص به‌ترتیب ۰/۰۶۴۵ و ۰/۱۵۱ کیلووات و RMSE بیشینه دمای پشته ۰/۰۹۹ و ۰/۵۳۳ درجه سلسیوس به‌دست آمد.

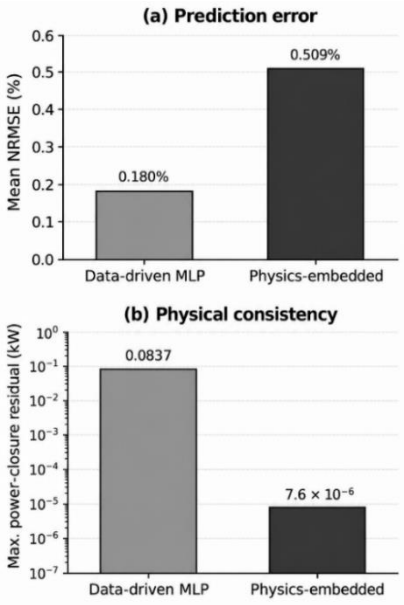
جدول ۴. عملکرد آماری و سازگاری فیزیکی دو ساختار مدل جانشین در مجموعه آزمون مقایسه معماری.

Table 4. Statistical performance and physical consistency of the two surrogate architectures on the comparison test set.

Metric	Data-driven MLP	Physics-embedded MLP
Architecture	7–32–32–9	7–32–32–6
Mean NRMSE (%)	0.180	0.509
Mean R^2	0.999919	0.999307
Power RMSE (kW)	0.0645	0.151
Stack-temperature RMSE (°C)	0.099	0.533
Max. power-closure residual (kW)	0.0837	7.6×10^{-6}

با وجود خطای آماری کمتر مدل پایه داده‌محور، استفاده از روابط صریح فیزیکی در ساختار مدل جانشین، بیشینه باقیمانده بستار توان را در مجموعه مقایسه ساختارهای شبکه از ۰/۰۸۳۷ به حدود $7.6*10^{-6}$ کیلووات کاهش داد. این کاهش نشان‌دهنده برقراری سازگاری ساختاری میان توان خالص و مؤلفه‌های توان پشته و توربین است، هرچند لزوماً به معنای کاهش خطای پیش‌بینی تمامی خروجی‌ها نیست. مقدار بستار توان در مجموعه ارزیابی نامزدهای بهینه‌سازی نیز به‌صورت مستقل محاسبه شد و در ۱۰۸ خروجی ثبت‌شده مربوط به نه سناریوی حرارتی جستجو، بیشینه قدرمطلق باقیمانده حدود $1.0*10^{-5}$ کیلووات به دست آمد. تفاوت این دو مقدار به مجموعه‌های ارزیابی و دقت ثبت خروجی‌ها مربوط است و تعریف

فیزیکی بستار توان در هر دو یکسان است. شکل ۵ مقایسه میانگین NRMSE و بیشینه باقیمانده بستار توان دو ساختار شبکه را نشان می‌دهد و برتری مدل فیزیک‌آگاه از نظر سازگاری ساختاری، در کنار خطای آماری بیشتر آن در مجموعه مقایسه معماری، قابل مشاهده است.



شکل ۵. مقایسه خطای پیش‌بینی و باقیمانده بستار توان مدل پایه داده‌محور و مدل فیزیک‌آگاه در مجموعه آزمون مقایسه معماری.

Figure 5. Comparison of prediction error and power-closure residual between the data-driven baseline and physics-embedded models on the architecture-comparison test set.

دقت مدل نهایی هشت‌ورودی در یک مجموعه آزمون مستقل و تحت تغییرات نمای حرارتی، در بند ۴-۶ به‌صورت تفکیکی بررسی شده است.

۴-۳. ارزیابی عدم قطعیت و قابلیت تشخیص مرز حرارتی

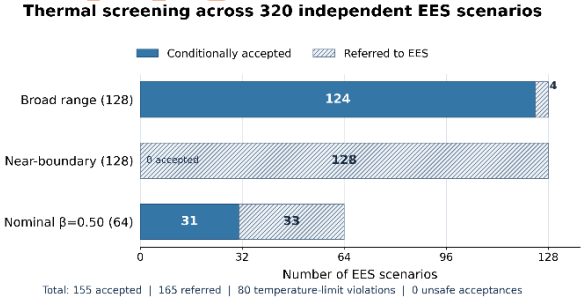
برای غربالگری حرارتی نقاط کار، خطای پیش‌بینی دمای بیشینه پشته و پراکندگی خروجی شبکه‌های عصبی مورد بررسی قرار گرفت. بر این اساس، حاشیه تجربی ثابت ۲/۳۳۳ درجه سلسیوس برای ارزیابی محافظه‌کارانه نقاط کار تعریف شد. پذیرش مشروط هر نقطه مستلزم برقراری رابطه $T_{stack,max,pred} + 2.333 \leq 1000$ °C، شرط $T12_{pred} \geq 355$ °C و قرارداشتن متغیرهای ورودی در دامنه تعریف‌شده مدل بود. نقاطی که این شرایط را برآورده نمی‌کردند، برای بررسی مستقیم به مدل EES ارجاع داده شدند. حاشیه مورد استفاده یک معیار تجربی غربالگری است و نباید معادل بازه پیش‌بینی همدیس یا تضمین ایمنی عملیاتی تلقی شود. قابلیت غربالگری مدل در ۳۲۰ سناریوی مستقل و در پنج نمای حرارتی بررسی شد. این مجموعه شامل ۲۵۶ سناریو در چهار نمای حرارتی ۰/۴۰، ۰/۴۵، ۰/۵۵ و ۰/۶۰ و ۶۴ سناریو در نمای مبنای ۰/۵۰ بود. در مجموعه چهار نمای حرارتی، ۱۲۸ سناریو برای پوشش گسترده فضای عملیاتی و ۱۲۸ سناریو با تمرکز بر نزدیکی مرز حرارتی انتخاب شدند. در نمای مبنا نیز ۶۴ نقطه کاری مستقل مورد ارزیابی قرار گرفت. داده‌های این مجموعه‌ها در تنظیم مجدد وزن‌های شبکه یا مقدار حاشیه حرارتی به کار نرفتند.

در مجموع ۳۲۰ سناریوی مستقل، ۸۰ مورد از حد ۱۰۰۰ درجه سلسیوس برای بیشینه دمای پشته تجاوز کردند. با اعمال حاشیه حرارتی ۲/۳۳۳ درجه سلسیوس، ۱۵۵ سناریو به‌صورت مشروط پذیرفته شدند و ۱۶۵ سناریو به EES ارجاع یافتند. در هیچ‌یک از موارد ناقض حد حرارتی، پذیرش نادرست مشاهده نشد. جذر میانگین مربعات خطای تجمیعی توان خالص و بیشینه دمای پشته، بر اساس RMSE های گزارش‌شده برای زیرمجموعه‌ها، به‌ترتیب حدود ۰/۴۴۹ کیلووات و ۰/۷۴۳درجه سلسیوس برآورد شد. این نتایج بیانگر توافق عددی مدل جانشین با مدل مرجع EES و عملکرد غربالگری در دامنه سناریوهای بررسی‌شده هستند؛ بااین‌حال، تعمیم آن‌ها به تمام شرایط بهره‌برداری یا تضمین رسمی ایمنی حرارتی امکان‌پذیر نیست. در زیرمجموعه ۲۵۶ سناریویی مربوط به چهار نمای حرارتی غیرمبنا، حاشیه ۲/۳۳۳ درجه سلسیوس در ۲۵۳ مورد، معادل ۹۸/۸۳ درصد، قدرمطلق خطای پیش‌بینی بیشینه دمای پشته را پوشش داد. این درصد صرفاً پوشش تجربی همان زیرمجموعه است و به معنای سطح پوشش تضمین‌شده برای کل فضای عملیاتی نیست. نتایج تفکیکی آزمون مستقل در جدول ۵ و شکل ۶ ارائه شده‌اند. نتایج جدول ۵ و شکل ۶ نشان می‌دهند که غربالگری محافظه‌کارانه، نقاط دور از مرز حرارتی را به‌صورت مشروط می‌پذیرد و موارد حساس را برای ارزیابی مستقیم به EESارجاع می‌دهد.

جدول ۵. نتایج ارزیابی مستقل و غربالگری نقاط کار بر اساس قید بیشینه دمای پشته.

Table 5. Independent evaluation and operating-point screening results based on the maximum stack-temperature constraint.

Test subset	Number of scenarios	Temperature-limit violations	Conditionally accepted	Referred to EES	Temperature RMSE (°C)
Broad operating range	128	0	124	4	0.707
Near thermal boundary	128	64	0	128	0.811
Nominal thermal exponent (β_T=0.50)	64	16	31	33	0.667
Total	320	80	155	165	≈0.743

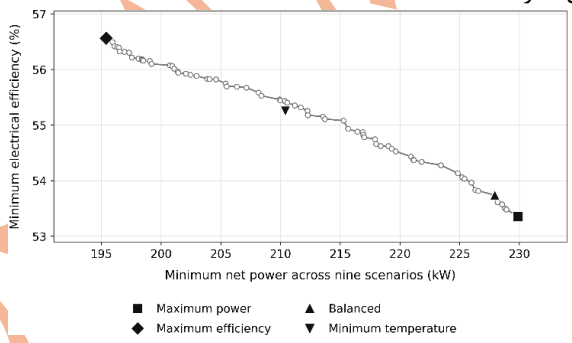


شکل ۶. نتایج پذیرش مشروط نقاط کار و ارجاع به EES در سه زیرمجموعه آزمون مستقل شامل ۳۲۰ سناریو.

Figure 6. Conditional acceptance and EES referral across three independent-test subsets (320 scenarios).

۴-۴. نتایج بهینه‌سازی استوار در سناریوهای حرارتی

بهینه‌سازی چندهدفه سیکل در نه سناریوی حرارتی، جبهه‌ای از نقاط غیرمغلوب میان توان خالص و راندمان الکتریکی ایجاد کرد. از میان ۳۰/۰۸۸ نقطه پذیرفته‌شده در غربالگری مدل جانشین، ۷۲ نقطه بر اساس کمینه توان و راندمان در شرایط حرارتی جستجو، غیرمغلوب شناسایی شدند. افزایش توان در بارهای بالاتر عموماً با کاهش راندمان و حاشیه حرارتی پشته همراه بود؛ در مقابل، نقاط دارای راندمان بالاتر در بارهای پایین‌تر قرار گرفتند. چهار راهبرد بیشینه‌سازی توان، بیشینه‌سازی راندمان، انتخاب نقطه متوازن و کمینه‌سازی بیشینه دمای پشته بررسی شدند. در راهبرد کمینه‌سازی دمای پشته، شرط حداقل توان ۲۱۰ کیلووات برای انتخاب نقطه عملیاتی نهایی اعمال شد. عملکرد نقاط منتخب علاوه بر نه شرایط حرارتی جستجو، در پنج شرایط میانی نیز با مدل EES ارزیابی شد. جبهه پارتوی به‌دست‌آمده از نه سناریوی جستجو و چهار نقطه منتخب در شکل ۷ ارائه شده‌اند.



شکل ۷. جبهه پارتوی توان–راندمان و چهار نامزد اولیه راهبردهای بهینه‌سازی بر اساس مدل جانشین در نه سناریوی حرارتی.

Figure 7. Surrogate-based power–efficiency Pareto front and four initial strategy candidates across nine thermal scenarios.

نتایج چهار نامزد اولیه راهبردهای بهینه‌سازی در جدول ۶ ارائه شده‌اند. کمینه توان خالص، کمینه راندمان الکتریکی و بیشینه دمای پشته از میان ۱۴ شرایط حرارتی بررسی‌شده استخراج شده‌اند و الزاماً به یک سناریوی یکسان تعلق ندارند. مقادیر حدی در پنج شرایط حرارتی میانی نسبت به نه شرایط حرارتی جستجوی بهینه‌سازی تغییر نکردند.

جدول ۶. متغیرهای عملیاتی و عملکرد چهار نامزد اولیه راهبردهای بهینه‌سازی بر اساس محاسبات EES در ۱۴ شرایط حرارتی.

Table 6. Operating variables and EES-evaluated performance of four initial strategy candidates across 14 thermal conditions.

Parameter	Maximum power	Maximum efficiency	Balanced	Minimum stack temperature
Load factor	0.9988	0.8008	0.9832	0.8828
Fuel utilization	0.7832	0.7920	0.7824	0.7814
Oxygen utilization	0.2790	0.2797	0.2793	0.2762
Pressure ratio	3.1724	3.2442	3.2943	3.0651
Minimum net power (kW)	229.926	193.512	227.861	209.344
Minimum efficiency (%)	53.366	56.021	53.726	54.975
Maximum stack temperature (°C)	979.453	938.106	975.506	953.314

نتایج جدول ۶ نشان می‌دهند که نقطه بیشینه توان دارای کمینه توان خالص ۲۲۹/۹۲۶ کیلووات و کمینه راندمان الکتریکی ۵۳/۳۶۶ درصد است. نقطه بیشینه راندمان نیز کمینه راندمان ۵۶/۰۲۱ درصد و کمینه توان ۱۹۳/۵۱۲ کیلووات را فراهم می‌کند. در نقطه متوازن، کمینه توان ۲۲۷/۸۶۱ کیلووات، کمینه راندمان ۵۳/۷۲۶ درصد و بیشینه دمای پشته ۹۷۵/۵۰۶ درجه سلسیوس به دست آمد. ارزیابی این نقاط در ۱۴ شرایط حرارتی نشان داد که پنج ترکیب میانی، مقادیر بدترین حالت توان، راندمان و دمای پشته را نسبت به شرایط حرارتی مبنای جستجو تغییر نمی‌دهند. این نتایج بیانگر مصالحه میان شاخص‌های عملکردی و پایداری مقادیر حدی در مجموعه شرایط بررسی‌شده است.

در راهبرد کمینه‌سازی دمای پشته، نقطه منتخب اولیه با بیشینه دمای ۹۵۳/۳۱۴ درجه سلسیوس، کمینه توان ۲۰۹/۳۴۴ کیلووات داشت و شرط حداقل توان ۲۱۰ کیلووات را برآورده نکرد. بررسی همسایگی این نقطه با افزایش ضریب بار از ۰/۸۸۲۸ به ۰/۸۸۷۸، کمینه توان را به ۲۱۰/۲۹۱ کیلووات رساند؛ در حالی که بیشینه دمای پشته ۹۵۴/۳۹۹ درجه سلسیوس و کمینه راندمان ۵۴/۹۱۳ درصد بود. بنابراین، نقطه اخیر از میان نامزدهای بررسی‌شده برای راهبرد کاهش دما انتخاب شد.

عملکرد چهار راهبرد اصلی و همسایه‌های آن‌ها در ۱۲ نقطه کاری و ۱۴ شرایط حرارتی، شامل ۱۶۸ اجرای EES ، ارزیابی شد. نتایج تفصیلی بررسی قیود و خطای مدل جانشین در بخش ۴-۵ ارائه می‌شود.

۴-۵. ارزیابی مدل جانشین در نقاط منتخب بهینه‌سازی

برای ارزیابی عملکرد مدل جانشین در نقاط منتخب بهینه‌سازی، چهار نقطه اصلی و همسایه‌های آن‌ها با تغییر ضریب بار به میزان ۰/۰۰۵ ± بررسی شدند. این مجموعه شامل ۱۲ نقطه کاری است که هر یک در ۱۴ شرایط حرارتی با مدل EES محاسبه شدند. شرایط حرارتی شامل نه ترکیب مورد استفاده در جستجوی بهینه‌سازی و پنج ترکیب میانی ضریب اتلاف حرارتی ماژول و نمای حرارتی بود. در مجموع، ۱۶۸ اجرای مستقیم EES برای بررسی عملکرد و قیود فیزیکی انجام شد. وزن‌های مدل جانشین و معیار غربالگری حرارتی در تمام ارزیابی‌ها ثابت بودند.

تمامی ۱۶۸ سناریوی بررسی‌شده معیارهای فیزیکی عمومی ارزیابی‌شده در EES را برآورده کردند. در ۱۰۸ سناریوی متناظر با نه ترکیب حرارتی جستجو، بیشینه دمای پشته ۹۷۹/۷۳۵ درجه سلسیوس و کمینه دمای خروجی کاتد ۴۲۲/۳۴۳ درجه سلسیوس بود. همچنین RMSE توان خالص، راندمان الکتریکی و بیشینه دمای پشته به‌ترتیب ۰/۸۹۶ کیلووات، ۰/۲۳۷ واحد درصد و ۱/۲۸۹ درجه سلسیوس به دست آمد. در ۶۰ سناریوی متناظر با پنج شرایط میانی، بیشینه دمای پشته ۹۷۴/۷۹۰ درجه سلسیوس و بیشینه قدرمطلق خطای پیش‌بینی آن ۲/۱۵۳ درجه سلسیوس بود. بررسی تمام ۱۴ شرایط حرارتی نشان داد که مقادیر حدی توان، راندمان و بیشینه دمای پشته برای ۱۲ نامزد منتخب در مقایسه با نه شرایط حرارتی جستجو تغییر نکردند. نتایج ارزیابی در جدول ۷ خلاصه شده‌اند.

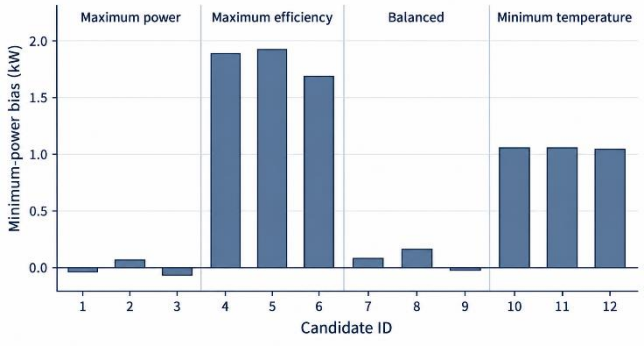
جدول ۷. دقت پیش‌بینی و سازگاری فیزیکی مدل جانشین در ۱۰۸ اجرای EESمربوط به نه سناریوی حرارتی جستجو.

Table 7. Surrogate accuracy and physical consistency across 108 optimization-grid EES scenarios.

Metric	Result
EES physically feasible scenarios	108/108
Net-power RMSE (kW)	0.896
Electrical-efficiency RMSE (percentage points)	0.237
RMSE of Maximum stack-temperature (°C)	1.289
Maximum absolute stack-temperature error (°C)	3.705
Temperature errors exceeding the 2.333 °C margin	13/108
Maximum EES stack temperature (°C)	979.735
Minimum EES cathode-outlet temperature (°C)	422.343
Maximum absolute net-power closure residual (kW)	$\approx 1.0\times10^{-5}$

Note: The table reports accuracy metrics for the 108 optimization-grid scenarios. The remaining 60 intermediate-condition EES scenarios were physically feasible, with a maximum stack temperature of 974.790 °C and a maximum absolute stack-temperature prediction error of 2.153 °C.

اختلاف کمینه توان خالص پیش‌بینی‌شده مدل جانشین و مقادیر محاسبه‌شده با EES برای ۱۲ نامزد منتخب در شکل ۸ نشان داده شده است. بیشترین اختلاف مثبت توان برابر ۱/۹۱۶ کیلووات در یکی از نامزدهای راهبرد بیشینه راندمان مشاهده شد. همچنین، در نقطه مرکزی این راهبرد، کمینه راندمان پیش‌بینی‌شده حدود ۰/۵۴۵ واحد درصد از مقدار محاسبه‌شده با EES بیشتر بود. یکی از توضیحات محتمل برای این بیش‌برآورد، انتخاب نقاط حدی بر اساس خروجی مدل جانشین است؛ زیرا در فرایند بهینه‌سازی ممکن است نقاطی انتخاب شوند که خطای پیش‌بینی آن‌ها به‌صورت خوش‌بینانه بر مقدار تابع هدف تأثیر گذاشته باشد. بااین‌حال، داده‌های موجود برای اثبات وجود یک سوگیری سیستماتیک در تمام فضای عملیاتی کافی نیستند. بنابراین، ارزیابی مستقیم عملکرد و قیود فیزیکی نامزدهای نهایی با مدلEES ، پیش از تصمیم‌گیری عملیاتی، ضروری است.



شکل ۸. اختلاف کمینه توان خالص پیش‌بینی‌شده مدل جانشین و محاسبه‌شده با EES برای ۱۲ نقطه منتخب بهینه‌سازی.

Figure 8. Difference between surrogate-predicted and EES-calculated minimum net power for 12 optimization-selected operating points.

حاشیه تجربی ثابت ۲/۳۳۳ درجه سلسیوس برای غربالگری نقاط کار مورد استفاده قرار گرفت. در ارزیابی ۱۰۸ سناریوی شبکه جستجو، قدرمطلق خطای پیش‌بینی بیشینه دمای پشته در ۱۳ مورد از این حاشیه فراتر رفت و بیشینه خطای مشاهده‌شده برابر ۳/۷۰۵ درجه سلسیوس بود. در مقابل، در ۶۰ سناریوی حرارتی میانی، بیشینه قدرمطلق خطا به ۲/۱۵۳ درجه سلسیوس رسید و هیچ خطایی از حاشیه ۲/۳۳۳ درجه سلسیوس تجاوز نکرد. بنابراین، در کل ۱۶۸ سناریوی ارزیابی نامزدهای منتخب، بیشینه خطای مشاهده‌شده ۳/۷۰۵ درجه سلسیوس بود. برای بررسی حساسیت غربالگری نسبت به مقدار حاشیه حرارتی، مقدار ۳/۸ درجه سلسیوس نیز ارزیابی شد. این مقدار تمام خطاهای مشاهده‌شده در مجموعه ۱۶۸ سناریویی را پوشش داد. استفاده از حاشیه بزرگ‌تر در مجموعه آزمون مستقل ۳۲۰ سناریویی، تعداد پذیرش‌های مشروط را از ۱۵۵ به ۱۵۲ کاهش داد. ازاین‌رو، مقدار ۳/۸ درجه سلسیوس می‌تواند برای غربالگری محافظه‌کارانه‌تر در تصمیم‌های حساس در نظر گرفته شود؛ بااین‌حال، این حاشیه همچنان یک مقدار تجربی است و تضمین آماری یا ایمنی بهره‌برداری در شرایط ارزیابی‌نشده محسوب نمی‌شود.

۴-۶. ارزیابی نهایی مدل در مجموعه آزمون مستقل

دقت پیش‌بینی مدل جانشین در مجموعه مستقل ۳۲۰ سناریویی، شامل پنج مقدار نمای حرارتی β_T شامل ۰/۴۰، ۰/۴۵، ۰/۵۰، ۰/۵۵ و ۰/۶۰، به‌صورت تفکیکی ارزیابی شد. وزن‌های شبکه در این مرحله ثابت بودند و شاخص‌های خطا برای هر نمای حرارتی در جدول ۸ گزارش شده‌اند. RMSE توان خالص در پنج نمای حرارتی بین ۰/۲۷۶ تا ۰/۶۲۵ کیلووات و RMSE بیشینه دمای پشته بین ۰/۶۳۱ تا ۰/۸۹۳ درجه سلسیوس تغییر کرد. در نمای حرارتی مبنا، β_T=0.50، مقادیر RMSE توان خالص و بیشینه دمای پشته به‌ترتیب ۰/۲۷۶ کیلووات و ۰/۶۶۷ درجه سلسیوس به دست آمدند. در هر یک از پنج نمای حرارتی، ۱۶ سناریو از حد دمای مجاز پشته تجاوز کردند؛ بنابراین، در مجموعه ۳۲۰ سناریویی، ۸۰ مورد ناقض حد حرارتی شناسایی شد .تجمیعی توان خالص و بیشینه دمای پشته بر اساسRMSE های زیرمجموعه‌ها، به‌ترتیب حدود ۰/۴۴۹ کیلووات و ۰/۷۴۳ درجه سلسیوس برآورد شد.

جدول ۸. دقت پیش‌بینی مدل جانشین در پنج نمای حرارتی و ۳۲۰ سناریوی مستقل EES .

Table 8. Surrogate prediction accuracy across five thermal exponents in 320 independent EES scenarios.

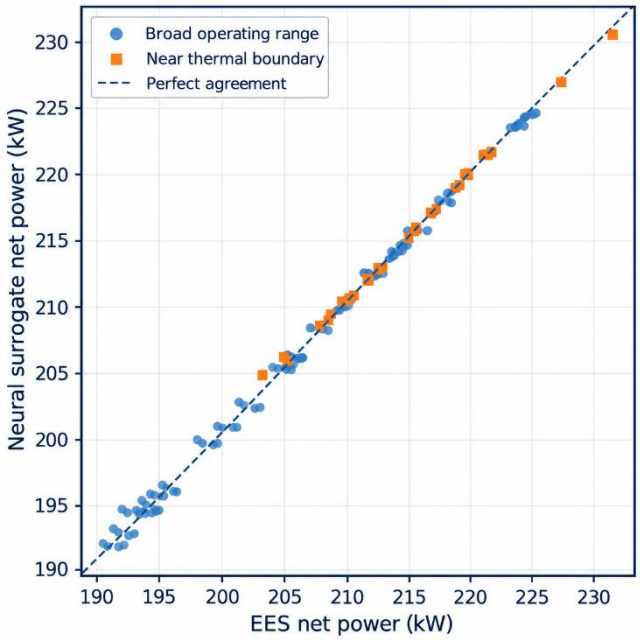
Thermal exponent (β_T)	Number of scenarios	Power RMSE (kW)	Stack-temperature RMSE (°C)	Temperature-limit violations
0.40	64	0.625	0.734	16
0.45	64	0.375	0.631	16
0.50	64	0.276	0.667	16
0.55	64	0.363	0.762	16
0.60	64	0.519	0.893	16
Total	320	≈0.449	≈0.743	80

Note: Total RMSE values are approximate pooled estimates calculated from the rounded subgroup RMSE values.

ارزیابی عملکرد غربالگری حرارتی با حاشیه ثابت ۲/۳۳۳ درجه سلسیوس نشان داد که از مجموع ۳۲۰ سناریو، ۱۵۵ مورد به‌صورت مشروط پذیرفته شدند و ۱۶۵ مورد برای ارزیابی مستقیم به EES ارجاع یافتند. تمامی ۸۰ سناریوی ناقض حد دمای پشته در گروه ارجاع قرار گرفتند و هیچ پذیرش نادرستی نسبت به این قید مشاهده نشد. با افزایش حاشیه به ۳/۸ درجه

سلسیوس، تعداد پذیرش‌های مشروط به ۱۵۲ کاهش یافت و غربالگری محافظه‌کارانه‌تر شد. این نتایج بیانگر عملکرد روش در مجموعه آزمون عددی مورد بررسی است و تضمین رعایت قید حرارتی در تمام شرایط ممکن را فراهم نمی‌کند.

مقایسه توان خالص و راندمان الکتریکی پیش‌بینی‌شده با مقادیر EES به‌ترتیب در شکل‌های ۹ و ۱۰ نشان داده شده است. تمرکز نقاط در نزدیکی خط برابری، بیانگر توافق مناسب پیش‌بینی‌های مدل جانشین با نتایج ترمودینامیکی است.



شکل ۹. مقایسه توان خالص پیش‌بینی‌شده مدل جانشین و محاسبه‌شده با EES در زیرمجموعه ۲۵۶ سناریویی آزمون مستقل.

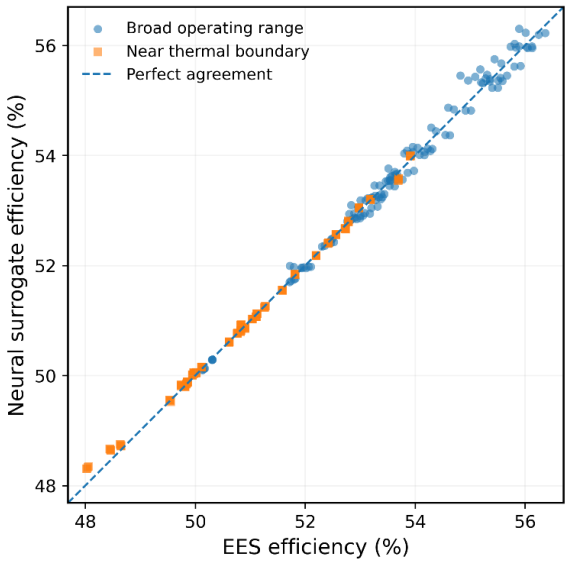
Figure 9. Comparison of surrogate-predicted and EES-calculated net power in the 256-scenario independent-test subset.

برای بررسی تفصیلی کیفیت پیش‌بینی، شاخص‌های آماری مدل جانشین در زیرمجموعه ۲۵۶ سناریویی شامل چهار نمای حرارتی غیرمبنا محاسبه شدند. در این زیرمجموعه، RMSE توان خالص برابر ۰/۴۸۳ کیلووات، RMSE راندمان الکتریکی برابر ۰/۱۲۷ واحد درصد و RMSE بیشینه دمای پشته برابر ۰/۷۶۱ درجه سلسیوس بود. شاخص‌های MAE، RMSE، R^2 و بیشینه قدرمطلق خطا در جدول ۹ گزارش شده‌اند.

جدول ۹. شاخص‌های تفصیلی دقت مدل جانشین در زیرمجموعه ۲۵۶ سناریویی شامل چهار نمای حرارتی غیرمبنا.

Table 9. Detailed surrogate accuracy metrics for the 256-scenario subset at four non-nominal thermal exponents.

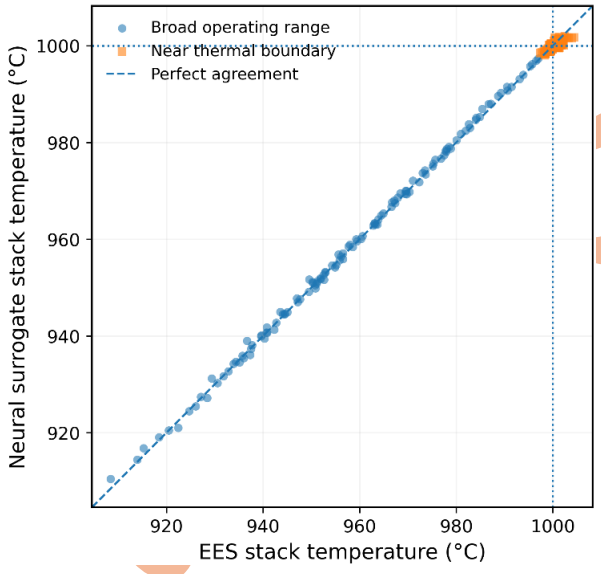
Output	MAE	RMSE	R^2	Maximum absolute error
Net power (kW)	0.343	0.483	0.99715	2.207
Net electrical efficiency (percentage points)	0.088	0.127	0.99595	0.630
Maximum stack temperature (°C)	0.577	0.761	0.99910	2.651



شکل ۱۰. مقایسه راندمان الکتریکی پیش‌بینی‌شده مدل جانشین و محاسبه‌شده با EES در زیرمجموعه ۲۵۶ سناریویی آزمون مستقل.

Figure 10. Comparison of surrogate-predicted and EES-calculated electrical efficiency in the 256-scenario independent-test subset.

مقایسه بیشینه دمای پشته در شکل ۱۱ نشان می‌دهد که پیش‌بینی‌های مدل در گستره دمایی بررسی‌شده با مقادیر EES تطابق مناسبی دارند. بااین‌حال، در نزدیکی حد حرارتی ۱۰۰۰ درجه سلسیوس، خطاهای کوچک پیش‌بینی نیز می‌توانند بر طبقه‌بندی نقاط مجاز و غیرمجاز اثر بگذارند.



شکل ۱۱. مقایسه بیشینه دمای پشته پیش‌بینی‌شده مدل جانشین و محاسبه‌شده با EES در زیرمجموعه ۲۵۶ سناریویی آزمون مستقل.

Figure 11. Comparison of surrogate-predicted and EES-calculated maximum stack temperature in the 256-scenario independent-test subset.

برای بررسی تغییرپذیری شاخص‌های خطا در زیرمجموعه ۲۵۶ سناریویی، بازنمونه‌گیری گروهی بر اساس ۶۴ نقطه کاری انجام شد. بازه صدکی ۹۵ درصد RMSE برای توان خالص بین ۰/۴۰۰ تا ۰/۵۶۹ کیلووات و برای بیشینه دمای پشته بین ۰/۶۲۴ تا ۰/۸۹۷ درجه سلسیوس به دست آمد. این بازه‌ها تغییرپذیری آماری خطای مدل نسبت به نمونه‌های عددی مورد

بررسی را نشان می‌دهند و نباید معادل بازه‌های تضمین‌شده پیش‌بینی یا اعتبارسنجی تجربی سامانه واقعی تلقی شوند.

۵. نتیجه‌گیری

در این پژوهش، یک مدل جانشین عصبی فیزیک‌آگاه مبتنی بر مدل ترمودینامیکی صفربُعدی و حالت پایای EES برای پیش‌بینی عملکرد و انتخاب نقاط کار سیکل هیبریدی ۲۲۰ کیلوواتی SOFC–GT تحت قیود حرارتی توسعه یافت. چارچوب پیشنهادی با ترکیب شبکه‌های عصبی، بازسازی خروجی‌های وابسته از روابط فیزیکی و غربالگری محافظه‌کارانه، امکان بررسی مصالحه میان توان خالص، راندمان الکتریکی و بیشینه دمای پشته را فراهم می‌کند. مهم‌ترین نتایج پژوهش عبارت‌اند از:

۱- مدل EES در نقطه طراحی، توان خالص ۲۲۲/۰۴ کیلووات و راندمان الکتریکی ۵۱/۴۷ درصد را بازتولید کرد. بیشینه دمای پشته برابر ۱۰۰۰/۰۳۱۵ درجه سلسیوس بود؛ ازاین‌رو، نقطه طراحی به‌عنوان مرجع بازتولید عملکرد گزارش شده و تحت قید سخت ۱۰۰۰ درجه سلسیوس مجاز محسوب نمی‌شود.

۲- اعمال روابط صریح فیزیکی برای بازسازی توان خالص، راندمان و چگالی جریان، بیشینه باقیمانده بستار توان را در مقایسه ساختارهای شبکه از ۰/۰۸۳۷ به حدود $7.6*10^{-6}$ کیلووات کاهش داد و سازگاری ساختاری خروجی‌های وابسته را بهبود بخشید.

۳- آزمون مستقل مدل جانشین در پنج نمای حرارتی، شامل ۳۲۰ سناریوی EES ، به RMSE تجمیعی تقریبی ۰/۴۴۹ کیلووات برای توان خالص و ۰/۷۴۳ درجه سلسیوس برای بیشینه دمای پشته منجر شد. از ۸۰ سناریوی ناقض حد حرارتی، هیچ موردی به‌اشتباه پذیرفته نشد. غربالگری با حاشیه ۲/۳۳۳ درجه سلسیوس، ۱۵۵ سناریو را به‌صورت مشروط پذیرفت و ۱۶۵ سناریو را برای بررسی مستقیم به EES ارجاع داد.

۴- بهینه‌سازی سناریومحور با ارزیابی ۳۲۷۶۸ نقطه کاندید در نه سناریوی حرارتی، ۷۲ نقطه غیرمغلوب را شناسایی کرد. ارزیابی ۱۲ نامزد منتخب در ۱۴ شرایط حرارتی و ۱۶۸ اجرای مستقیم EES نشان داد که تمام حالات بررسی‌شده معیارهای فیزیکی عمومی را برآورده می‌کنند و شرایط حرارتی میانی مقادیر بدترین عملکرد نامزدها را تغییر نمی‌دهند.

۵- در ارزیابی نامزدهای منتخب، خطای پیش‌بینی دمای پشته در ۱۳ مورد از ۱۰۸ سناریوی شبکه جستجو از حاشیه ۲/۳۳۳ درجه سلسیوس فراتر رفت و بیشینه خطا به ۳/۷۰۵ درجه سلسیوس رسید. حاشیه ۳/۸ درجه سلسیوس تمام خطاهای مشاهده‌شده در مجموعه ۱۶۸ سناریویی را پوشش داد و می‌تواند به‌عنوان گزینه‌ای محافظه‌کارانه‌تر در تصمیم‌های حساس به کار رود. همچنین، بیش‌برآورد راندمان در برخی نامزدهای حدی، ضرورت ارزیابی مستقیم نقاط انتخابی با مدل EES را نشان داد.

تمام ارزیابی‌های دقت و اعتبارسنجی گزارش‌شده در پژوهش حاضر در مقایسه با یک مدل ترمودینامیکی صفربُعدی و حالت پایای EES انجام شده‌اند و هیچ اعتبارسنجی مستقیم با داده‌های تجربی سامانه واقعی صورت نگرفته است. بنابراین، مدل توسعه‌یافته یک ابزار جانشین مبتنی بر شبیه‌سازی برای پشتیبانی از تصمیم‌گیری است و تضمین ایمنی عملیاتی، بهینگی سراسری یا اعتبار عملکرد در تمام شرایط پیوسته بهره‌برداری را فراهم نمی‌کند. کاربرد بلادرنگ آن مستلزم اعتبارسنجی تجربی، بررسی رفتار گذرا، ارزیابی تغییرات عملکرد اجزا در طول زمان و توسعه روش‌های قابل اتکاتر کمی‌سازی عدم‌قطعیت خواهد بود.

تعارض منافع

نویسندگان اعلام می‌کنند که هیچ‌گونه تعارض منافع مالی یا غیرمالی مرتبط با پژوهش حاضر ندارند.

حمایت مالی

این پژوهش بدون دریافت حمایت مالی اختصاصی از نهادهای دولتی، تجاری یا غیرانتفاعی انجام شده است.

دسترسی به داده و کد

مدل EES، بانک داده، مدل‌های آموزش دیده و فایل‌های اعتبارسنجی در آرشیو پروژه نگهداری می‌شوند و در صورت درخواست علمی موجه و با رعایت حقوق مالکیت فکری قابل ارائه‌اند.

منابع

1. Chan, S.H., Ho, H.K. and Tian, Y., 2003. Multi-level modeling of SOFC–gas turbine hybrid system. *International Journal of Hydrogen Energy*, *28*(8), pp.889–900. https://doi.org/10.1016/S0360-3199(02)00160-X
2. Azizi, M.A. and Brouwer, J., 2018. Progress in solid oxide fuel cell–gas turbine hybrid power systems: System design and analysis, transient operation, controls and optimization. *Applied Energy*, *215*, pp.237–289. https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2018.01.098
3. Kumar, P. and Singh, O., 2022. A review of solid oxide fuel cell based hybrid cycles. *International Journal of Energy Research*, *46*(7), pp.8560–8589. https://doi.org/10.1002/er.7766
4. Yang, J.S., Sohn, J.L. and Ro, S.T., 2007. Performance characteristics of a solid oxide fuel cell/gas turbine hybrid system with various part-load control modes. *Journal of Power Sources*, *166*(1), pp.155–164. https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2006.12.091
5. Barelli, L., Bidini, G. and Ottaviano, A., 2012. Part load operation of SOFC/GT hybrid systems: Stationary analysis. *International Journal of Hydrogen Energy*, *37*(21), pp.16140–16150. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2012.08.015
6. Arab, G. and Ghadamian, H., 2013. Thermo economic modeling and parametric analysis of a PSOFC/GT hybrid cycle. *Iranian Journal of Chemistry and Chemical Engineering*, *32*(4), pp.93–103.
7. Arab, G., Ghadamian, H. and Abbasi, S., 2014. Thermo-economic modeling of an atmospheric SOFC/CHP cycle: An exergy based approach. *Mechanics & Industry*, *15*(2), pp.113–121. https://doi.org/10.1051/meca/2014005
8. Ghadamian, H., Arab, G., Khalaji Assadi, M., Roshandel, R. and Farzaneh, H., 2014. Thermodynamic assessment of a hybrid SOFC/GT cycle considering oxy-anode combustion CO_2 capture technology. *Indian Journal of Scientific Research*, *3*(1), pp.148–172.
9. Calise, F., Dentice d'Accadia, M., Vanoli, L. and von Spakovsky, M.R., 2007. Full load synthesis/design optimization of a hybrid SOFC–GT power plant. *Energy*,

power generation system. *Energies*, *16*(6), Article 2806. https://doi.org/10.3390/en16062806
23. Testasecca, T., Picciotto Maniscalco, M., Brunaccini, G., Airò Farulla, G., Ciulla, G., Beccali, M. and Ferraro, M., 2024. Toward a digital twin of a solid oxide fuel cell microcogenerator: Data-driven modelling. *Energies*, *17*(16), Article 4140. https://doi.org/10.3390/en17164140
24. Sprengel, M., 2022. Leveraging digital twins in the development of a novel solid oxide fuel cell/gas turbine hybrid system. In *Proceedings of the Clearwater Clean Energy Conference 2022*, Clearwater, Florida, USA, 1–4 August 2022, pp.130–137. Coal Technologies Associates. https://doi.org/10.52202/066314-0028
25. Yang, S., Kim, H., Hong, Y., Yee, K., Maulik, R. and Kang, N., 2024. Data-driven physics-informed neural networks: A digital twin perspective. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, *429*, Article 117075. https://doi.org/10.1016/j.cma.2024.117075
26. Karniadakis, G.E., Kevrekidis, I.G., Lu, L., Perdikaris, P., Wang, S. and Yang, L., 2021. Physics-informed machine learning. *Nature Reviews Physics*, *3*, pp.422–440. https://doi.org/10.1038/s42254-021-00314-5
27. Raissi, M., Perdikaris, P. and Karniadakis, G.E., 2019. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, *378*, pp.686–707. https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045
28. Salehi, Z., Salahi, A., Fakouri Hasanabadi, M., Hanifi, A.R., Smith, D.J., Koch, C.R. and Shahbakhti, M., 2026. State-of-health forecasting of solid oxide fuel cells using physics-informed temporal graph convolutional network. *Journal of Power Sources*, *665*, Article 239050. https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2025.239050
29. Christopher, G.G., Olalekan, O.R., Maeva, M.N.H., Hassan, B. and Ayegba, S., 2026. Artificial intelligence-driven digital twin for fault detection in solid oxide fuel cell stacks under dynamic thermal cycling. *Journal of Power Sources*, *677*, Article 239948. https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2026.239948
30. Bedi, U., 2026. Recent advances in fuel cell design and modeling: A comprehensive review. *Next Energy*, *11*, Article 100517. https://doi.org/10.1016/j.nxener.2026.100517
31. Lakshminarayanan, B., Pritzel, A. and Blundell, C., 2017. Simple and scalable predictive uncertainty estimation using deep ensembles. *Advances in Neural Information Processing Systems*, *30*.
32. Romano, Y., Patterson, E. and Candès, E.J., 2019. Conformalized quantile regression. *Advances in Neural Information Processing Systems*, *32*.
33. Angelopoulos, A.N. and Bates, S., 2021. A gentle introduction to conformal prediction and distribution-free uncertainty quantification. *arXiv Preprint*, arXiv:2107.07511.
34. Chase, M.W., Jr., 1998. *NIST-JANAF thermochemical tables*. 4th ed., *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, Monograph No. 9, American Institute of Physics.
35. Larminie, J. and Dicks, A., 2003. *Fuel cell systems explained*. 2nd ed., John Wiley & Sons, Chichester, UK.
36. McKay, M.D., Beckman, R.J. and Conover, W.J., 1979. A comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code. *Technometrics*, *21*(2), pp.239–245. https://doi.org/10.1080/00401706.1979.10489755

32(4), pp.446–458. https://doi.org/10.1016/j.energy.2006.06.016
10. Bao, C., Shi, Y., Li, C., Cai, N. and Su, Q., 2010. Multi-level simulation platform of SOFC–GT hybrid generation system. *International Journal of Hydrogen Energy*, *35*(7), pp.2894–2899. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2009.05.047
11. Barelli, L., Bidini, G. and Ottaviano, A., 2013. Part load operation of a SOFC/GT hybrid system: Dynamic analysis. *Applied Energy*, *110*, pp.173–189. https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2013.04.011
12. Esmaeili, A., Ziabasharhagh, M., Shakib, S.E. and Amidpour, M., 2014. Enhancement of gas turbine power in a combined cycle based on optimized design of a heat recovery steam generator. *Sharif Journal of Mechanical Engineering (SJME)*, *30*(2), pp.15–20. [In Persian]. https://www.magiran.com/paper/1412259
13. Milewski, J. and Świrski, K., 2009. Modelling the SOFC behaviours by artificial neural network. *International Journal of Hydrogen Energy*, *34*(13), pp.5546–5553. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2009.04.068
14. Chaichana, K., Patcharavorachot, Y., Chutichai, B., Saebea, D., Assabumrungrat, S. and Arpornwichanop, A., 2012. Neural network hybrid model of a direct internal reforming solid oxide fuel cell. *International Journal of Hydrogen Energy*, *37*(3), pp.2498–2508. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2011.10.051
15. Subotić, V., Eibl, M. and Hochenauer, C., 2021. Artificial intelligence for time-efficient prediction and optimization of solid oxide fuel cell performances. *Energy Conversion and Management*, *230*, Article 113764. https://doi.org/10.1016/j.enconman.2020.113764
16. Mütter, F., Berger, C., Königshofer, B., Höber, M., Hochenauer, C. and Subotić, V., 2023. Artificial intelligence for solid oxide fuel cells: Combining automated high accuracy artificial neural network model generation and genetic algorithm for time-efficient performance prediction and optimization. *Energy Conversion and Management*, *291*, Article 117263. https://doi.org/10.1016/j.enconman.2023.117263
17. Beloev, H.I., Saitov, S.R., Filimonova, A.A., Chichirova, N.D., Mayorov, E.S., Babikov, O.E. and Iliev, I.K., 2025. Solid oxide fuel cell voltage prediction by a data-driven approach. *Energies*, *18*(9), Article 2174. https://doi.org/10.3390/en18092174
18. Mojaver, P., 2025. Performance and emission analysis of an energy system based on a thermochemical process and a proton-conducting electrolyte fuel cell. *Sharif Journal of Mechanical Engineering (SJME)*, *41*(2), pp.127–135. [In Persian]. https://doi.org/10.24200/j40.2025.67629.1751
19. Sarwa, B., Możdzierz, M. and Brus, G., 2025. Artificial intelligence-based modeling of solid oxide fuel cells for improved transient prediction and control optimization. *Journal of Power Sources*, *658*, Article 238281. https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2025.238281
20. Ambrosino, A., Bove, G., Sorrentino, M. and Postiglione, F., 2025. The development of a model-based methodology to implement a fused health indicator for a solid oxide fuel cell. *Energies*, *18*(18), Article 4822. https://doi.org/10.3390/en18184822
21. Weerakoon, A.H.S. and Assadi, M., 2025. Experimental assessment and digital twin modeling of integrated AEM electrolyzer–PEM fuel cell–BESS for smart hydrogen energy applications. *Energies*, *18*(23), Article 6318. https://doi.org/10.3390/en18236318
22. Guo, Z., Ye, Z., Ni, P., Cao, C., Wei, X., Zhao, J. and He, X., 2023. Intelligent digital twin modelling for hybrid PV-SOFC