

**AKIŞ KANALI İÇERİSİNDEKİ ENGELLEYİCİ BLOKLARIN
PROTON AKTARAN MEMBRAN YAKIT HÜCRESİ
KARAKTERİSTİKLERİNE ETKİSİ**

Hülya ÖZTOPRAK

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
MAKİNE MÜHENDİSLİĞİ**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

TEMMUZ 2007

ANKARA

Hülya ÖZTOPRAK tarafından hazırlanan AKIŞ KANALI İÇERİSİNDEKİ ENGELLEYİCİ BLOKLARIN PROTON AKTARAN MEMBRAN YAKIT HÜCRESİ KARAKTERİSTİKLERİNE ETKİSİ adlı bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Yrd. Doç. Dr. Atilla BIYIKOĞLU
Tez Yöneticisi

Bu çalışma, jürimiz tarafından oy birliği ile Makine Mühendisliği Anabilim Dalında Yüksek Lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan : Prof. Dr. Mecit SİVRİOĞLU

Üye : Doç. Dr. İrfan AR

Üye : Yrd. Doç. Dr. Atilla BIYIKOĞLU

Tarih : 19/07/2007

Bu tez, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tez yazım kurallarına uygundur.

TEZ BİLDİRİMİ

Tez içindeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edilerek sunulduğunu, ayrıca tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada orijinal olmayan her türlü kaynağa eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

Hülya ÖZTOPRAK

**AKIŞ KANALI İÇERİSİNDEKİ ENGELLEYİCİ BLOKLARIN
PROTON AKTARAN MEMBRAN YAKIT HÜCRESİ
KARAKTERİSTİKLERİNE ETKİSİ
(Yüksek Lisans Tezi)**

Hülya ÖZTOPRAK

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

Temmuz 2007

ÖZET

Bu tez, gaz akış kanallarına engelleyici bloklar yerleştirilmiş tek hücreden oluşan proton aktaran membran (PEMFC) yakıt hücresinin içerisinde gerçekleşen aktarım olaylarının, Fluent PEMFC modülü kullanılarak simülasyonunu ve simülasyon sonuçlarının literatürdeki verilerle karşılaştırılmasını içermektedir. PEMFC anot ve katot tarafı için dört tabaka; akım toplayıcı tabaka, gaz kanalı, gaz difüzyon tabakası ve katalizör tabaka ve anot ile katot arasında bulunan membran dahil dokuz tabakadan oluşmaktadır. Simulasyon sonuçları - basınç, H_2 , O_2 ve H_2O tür mol kesirleri, elektrik potansiyeli, akım yoğunluğu ve hız – yakıt hücresi kanal geometrisinin giriş, orta ve çıkış kesitlerinde 2-Boyutlu olarak sunulmuştur. İncelenen her bir durum için kutuplaşma eğrileri oluşturulmuş ve parametrelerin kutuplaşma eğrileri üzerine olan etkileri analiz edilmiştir. Bunun yanı sıra, modelin geçerliliğini ispatlamak amacıyla altı durum için kutuplaşma eğrileri oluşturulmuş; sayısal ve deneysel sonuçlarla karşılaştırılmıştır.

Bilim Kodu : 914.1.038
Anahtar Kelimeler : PEM yakıt hücreleri, engelleyici blok, kutuplaşma eğrileri
Sayfa Adedi : 242
Tez Yöneticisi : Yrd. Doç. Dr. Atilla BIYIKOĞLU

**THE EFFECT OF BAFFLE BLOCKS IN FLOW CHANNEL TO PROTON
EXCHANGE MEMBRANE FUEL CELL CHARACTERISTICS**

(M.Sc. Thesis)

Hülya ÖZTOPRAK

**GAZI UNIVERSITY
INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY**

July 2007

ABSTRACT

This thesis covers the simulation and the comparison of the simulation data in the literature of single-cell proton exchange membrane fuel cell (PEMFC) with baffle-blocked flow field designs using Fluent PEMFC module. The PEMFC is made up of nine layers which consist four layers for the anode and cathode sides; current collector, gas channel gas diffusion layer and catalyst layer, and the membrane between the anode and cathode. Simulation results are presented at the inlet, middle and exit sections of the PEMFC for the parameters of pressure, molar fractions of species; H_2 , O_2 and H_2O , electrical potential, current density and velocity. Polarization curves are formed for each cases investigated and the effects of parameters on the polarization curves are analysed. Besides, polarization curves are constructed and compared with the numerical and experimental results for six cases to validate the model.

Science Code	: 914.1.038
Key Words	: PEM fuel cells, baffle block, polarization curves
Page number	: 242
Adviser	:Asst. Prof. Dr. Atilla BIYIKOĞLU

TEŞEKKÜR

Temiz enerji elde etme yöntemlerinden biri olan yakıt hücreleri üzerinde çalışmama vesile olan ve bu tezin her safhasında gerekli yönlendirme ve tavsiyelerde bulunan sayın danışmanım Yrd. Doç. Dr. Atilla BIYIKOĞLU'na, çalışmalarımda destek olan sevgili arkadaşım Ceren Özge ALPAT'a, maddi ve manevi destekleriyle beni hiçbir zaman yalnız bırakmayan sevgili eşim ve aileme, ayrıca yardımcı olan bütün dostlarıma teşekkürü bir borç bilirim.

Bu çalışma, Gazi Üniversitesi Temiz Enerji Araştırma Merkezi (TEMENAR)'nin katkılarıyla temin edilen FLUENT 6.2 CFD kodu ve PEMFC modülü kullanılarak gerçekleştirilmiştir.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	iv
ABSTRACT	v
TEŞEKKÜR.....	vi
İÇİNDEKİLER	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ.....	x
ŞEKİLLERİN LİSTESİ	xii
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	xvii
1. GİRİŞ	1
2. LİTERATÜR ARAŞTIRMASI	7
3. MODEL TANIM VE KABULLER	16
3.1. Yakıt Hücresinin Fiziksel Modeli	16
4. MATEMATİKSEL MODEL	22
4.1. Kabuller	22
4.2. Korunum Eşitlikleri	22
4.2.1. Kütle korunum eşitliği	23
4.2.2. Momentum korunum eşitlikleri	24
4.2.3. Enerji denklemi.....	24
4.3. PEMFC Modelinde Kullanılan Kabuller ve Korunum Eşitlikleri.....	29
4.3.1. Gaz kanalları	29
4.3.2. Gaz difüzyon tabakaları	30
4.3.3. Membran.....	30

Sayfa

4.3.4. Katalizör tabakalar	31
4.3.5. Akım toplayıcı plakalar	32
4.4. Genel Korunum Eşitliği	32
5. ÇÖZÜM TEKNİĞİ	35
5.1. Ayrık (Segregated) Çözüm Metodu	35
5.2. Eşitliklerin Ayrıklaştırılması	36
5.3. Basınç-Hız Eşleşmesi	36
5.4. Ağ Yapısı	37
5.5. Sınır Şartları	39
5.5.1. “Kütlesel debi giriş” (Mass flow inlet) sınır şartı	39
5.5.2. “Basınç tanımlı çıkış” (Pressure outlet) sınır şartı	40
5.5.3. “Duvar” (Wall) sınır şartı	40
5.5.4. “Gözenekli tabaka geçiş” (Porous jump) sınır şartı	41
5.6. PEMFC Modelinde Kullanılan Sınır Şartları	42
6. SONUÇLAR	46
6.1. Sonuçların Eleman Sayısından Bağımsızlığının Test Edilmesi	47
6.2. Yakınsama Kriteri	48
6.3. Blok Yüksekliğinin Tayini	50
6.4. Niceliklerin Hücre İçindeki Dağılımları	62
6.4.1. İç ve dış yüzeylerdeki niceliklerin 2-B dağılımlarının 3-B PEMFC geometrisi üzerinde gösterimi	62
6.4.2. Giriş, orta ve çıkış yüzeylerindeki dağılımların karşılaştırılması	72
6.5. Kutuplaşma Eğrileri	93

Sayfa

7. LİTERATÜRDEKİ VERİLERLE KARŞILAŞTIRMA.....	101
7.1. Deneysel Verilerle Karşılaştırma.....	101
7.2. Engeleyici Boklar Kullanılarak Yapılan Sayısal Çalışma ile Karşılaştırma.....	104
7.3. Sayısal Çalışma ile Karşılaştırma.....	107
8. SONUÇLARIN DEĞERLENDİRİLMESİ.....	111
KAYNAKLAR.....	115
EKLER.....	120
EK-1 Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması.....	121
EK-2 Fluent paket programı PEMFC modülü tanıtımı.....	146
EK-3 PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı.....	156
EK-4 Kutuplaşma eğrilerinin oluşturulması	183
EK-5 Teorik açık devre voltajının hesabı	185
EK-6 Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi.....	192
EK-7 Aktivasyon kayıpları hesabı	236
ÖZGEÇMİŞ	242

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 3.1. PEM yakıt hücresinin tasarım parametreleri.....	18
Çizelge 3.2. Modelde kullanılan elektrokimyasal parametreler.....	20
Çizelge 3.3. PEM yakıt hücresine ait bileşenlerin geometrik bilgileri	20
Çizelge 3.4. PEMFC katmanlarının fiziksel özellikleri	21
Çizelge 4.1. Genelleştirilmiş korunum eşitliğindeki terimler	32
Çizelge 4.2. Katalizör tabaka – tür kaynak teriminin anot ve katota göre aldığı formlar.....	33
Çizelge 4.3. PEM yakıt hücresi tabakalarında çözülen eşitlikler ve kaynak terimleri	34
Çizelge 5.1. Farklı sıklıktaki hexagonal tip ağ yapıları için PEMFC katmanlarındaki eleman sayıları dağılımı	38
Çizelge 5.2. PEM Yakıt hücresi anot tabakalarında çözülen eşitlikler ve sınır şartları terimleri.....	43
Çizelge 5.3. PEM Yakıt hücresi katot tabakalarında çözülen eşitlikler ve sınır şartları terimleri	44
Çizelge 5.4. PEMFC modelinde tanımlı yüzeyler ve sınır şartları	45
Çizelge 6.1. İncelenen durumlara ait işletim parametreleri [27].....	46
Çizelge 6.2. Jang ve ark.'nın sayısal çalışma durumlarına karşılık gelen ve PEMFC modülünde girilmesi gereken veriler [27]	46
Çizelge 6.3. 1,86 GHz Pentium 4 bilgisayar kullanılarak elde edilen sayısal çözüm bilgileri	47
Çizelge 6.4. Farklı eleman sayılarında ortalama akım yoğunluğu değerleri ve çözüm süreleri	48
Çizelge 6.5. 9 Durumun (D) kutuplaşma eğrilerinin oluşturulmasında kullanılan 9 noktaya (N) karşılık gelen iterasyon sayıları ve hesap süresi dağılımı	61

Çizelge	Sayfa
Çizelge 7.1. Deneysel çalışma durumlarına ait veriler [10].....	101
Çizelge 7.2. Deneysel çalışma durumlarına karşılık gelen ve PEMFC modülünde girilmesi gereken veriler [10].....	102
Çizelge 7.3. Sayısal çalışma durumlarına ait veriler [27].....	104
Çizelge 7.4. Sayısal çalışma durumlarına karşılık gelen ve PEMFC modülünde girilmesi gereken veriler [27].....	105

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 3.1. PEM yakıt hücresinin şematik görünümü.....	16
Şekil 3.2. Fluent-Gambit modülü ile oluşturulan PEM yakıt hücresinin görünümü; a) Ön görünüm, b) Kanalların izometrik görünümü, c) Tüm hücrenin montaj öncesi görünümü.....	17
Şekil 3.3. Modeli oluşturan PEM yakıt hücresinin geometrik planı	19
Şekil 5.1. Ayırık çözüm metodunun adımları	35
Şekil 5.2. Hexagonal eleman yapısı	37
Şekil 5.3. PEM yakıt hücresinin hexagonal elemanlardan oluşan ağ yapısı	39
Şekil 5.4. Sınır şartları (a) Gaz giriş ($z = 0$ mm) yüzeyi, (b) Gaz çıkış ($z = 70$ mm) yüzeyi	42
Şekil 6.1. Geçit oranının katot gaz kanalı üzerinde gösterimi	50
Şekil 6.2. Blok yüksekliğinin belirlenmesi için oluşturulan kutuplaşma eğrileri	51
Şekil 6.3. Blok sayısının belirlenmesi için oluşturulan kutuplaşma eğrileri	52
Şekil 6.4. Durum-1 çözümüne ait yakınsama grafiği.....	53
Şekil 6.5. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-1 çözümüne ait yakınsama grafiği	54
Şekil 6.6. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-2 çözümüne ait yakınsama grafiği	55
Şekil 6.7. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-3 çözümüne ait yakınsama grafiği	56
Şekil 6.8. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-4 çözümüne ait yakınsama grafiği	56
Şekil 6.9. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-5 çözümüne ait yakınsama grafiği	57

Şekil	Sayfa
Şekil 6.10. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-6 çözümüne ait yakınsama grafiği	58
Şekil 6.11. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-7 çözümüne ait yakınsama grafiği	58
Şekil 6.12 Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-8 çözümüne ait yakınsama grafiği	59
Şekil 6.13. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-9 çözümüne ait yakınsama grafiği	60
Şekil 6.14. PEMFC iç ve dış yüzeylerindeki basınç dağılımı (Pa) a) ($x = 0, x = 0,003, z = 0, z = 0,014, z = 0,028, z = 0,042, z = 0,056, z = 0,07$) b) PEMFC gaz kanalları iç yüzeyinde ($x = 0,0015$)	63
Şekil 6.15. PEMFC iç ve dış yüzeylerindeki sıcaklık dağılımı (K) a) ($x = 0, x = 0,003, z = 0, z = 0,014, z = 0,028, z = 0,042, z = 0,056, z = 0,07$) b) PEMFC gaz kanalları iç yüzeyinde ($x = 0,0015$).....	64
Şekil 6.16. PEMFC iç ve dış yüzeylerindeki hız dağılımı (m/s) a) ($x = 0, x = 0,003, z = 0, z = 0,014, z = 0,028, z = 0,042, z = 0,056, z = 0,07$) b) PEMFC gaz kanalları iç yüzeyinde ($x = 0,0015$).....	65
Şekil 6.17. PEMFC iç ve dış yüzeylerindeki H_2 dağılımı (Mol kesri) a) ($x = 0, x = 0,003, z = 0, z = 0,014, z = 0,028, z = 0,042, z = 0,056, z = 0,07$) b) PEMFC gaz kanalları iç yüzeyinde ($x = 0,0015$).....	66
Şekil 6.18. PEMFC iç ve dış yüzeylerindeki O_2 dağılımı (Mol kesri) a) ($x = 0, x = 0,003, z = 0, z = 0,014, z = 0,028, z = 0,042, z = 0,056, z = 0,07$) b) PEMFC gaz kanalları iç yüzeyinde ($x = 0,0015$).....	67
Şekil 6.19 PEMFC iç ve dış yüzeylerindeki H_2O dağılımı (Mol kesri) a) ($x = 0, x = 0,003, z = 0, z = 0,014, z = 0,028, z = 0,042, z = 0,056, z = 0,07$) b) PEMFC gaz kanalları iç yüzeyinde ($x = 0,0015$).....	68

Şekil	Sayfa
Şekil 6.20. PEMFC iç ve dış yüzeylerindeki yoğunluk dağılımı (kg/m^3) a) ($x = 0, x = 0,003, z = 0, z = 0,014, z = 0,028, z = 0,042, z = 0,056, z = 0,07$) b) PEMFC gaz kanalları iç yüzeyinde ($x = 0,0015$).....	69
Şekil 6.21. PEMFC iç ve dış yüzeylerindeki elektrik potansiyeli dağılımı (V) a) ($x = 0, x = 0,003, z = 0, z = 0,014, z = 0,028, z = 0,042, z = 0,056, z = 0,07$) b) PEMFC gaz kanalları iç yüzeyinde ($x = 0,0015$).....	70
Şekil 6.22. PEMFC iç ve dış yüzeylerindeki aşırı potansiyel dağılımı (V) a) ($x = 0, x = 0,003, z = 0, z = 0,014, z = 0,028, z = 0,042, z = 0,056, z = 0,07$) b) PEMFC gaz kanalları iç yüzeyinde ($x = 0,0015$).....	71
Şekil 6.23. PEMFC iç ve dış yüzeylerindeki akım yoğunluğu şiddeti dağılımı (A/m^2) a) ($x = 0, x = 0,003, z = 0, z = 0,014, z = 0,028, z = 0,042, z = 0,056, z = 0,07$) b) PEMFC gaz kanalları iç yüzeyinde ($x = 0,0015$).....	72
Şekil 6.24. PEMFC (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki basınç dağılımı (Pa)	73
Şekil 6.25. PEMFC (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki basıncın istatistiksel dağılımı (Pa)	74
Şekil 6.26. PEMFC (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki yoğunluk (kg/m^3).....	75
Şekil 6.27. PEMFC (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki yoğunluğun istatistiksel dağılımı (kg/m^3)	76
Şekil 6.28. PEMFC (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki sıcaklık dağılımı (K).....	77
Şekil 6.29. PEMFC (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki sıcaklığın istatistiksel dağılımı (K).....	78
Şekil 6.30. PEMFC (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki H_2 dağılımı (Mol kesri).....	79
Şekil 6.31. PEMFC (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki H_2 istatistiksel dağılımı (Mol kesri).....	80

Şekil	Sayfa
Şekil 6.32. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki H_2O dağılımı (Mol kesri).....	81
Şekil 6.33. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki H_2O istatistiksel dağılımı (Mol kesri).....	83
Şekil 6.34. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki O_2 dağılımı (Mol kesri).....	84
Şekil 6.35. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki O_2 istatistiksel dağılımı (Mol kesri).....	85
Şekil 6.36. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki akım yoğunluğu şiddeti dağılımı (A/m^2).....	86
Şekil 6.37. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki akım yoğunluğu şiddetinin istatistiksel dağılımı (A/m^2)	87
Şekil 6.38. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki aşırı potansiyel dağılımı (V).....	88
Şekil 6.39. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki aşırı potansiyelin istatistiksel dağılımı (V).....	90
Şekil 6.40. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki hız dağılımı (m/s).....	91
Şekil 6.41. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki hızın istatistiksel dağılımı (m/s).....	92
Şekil 6.42. $V = 1,75$ m/s hızında farklı nem değerleri için; $\phi = 1$ (D1), $\phi = 0.6$ (D2), $\phi = 0.2$ (D3) elde edilen kutuplaşma eğrileri.....	94
Şekil 6.43. $V = 0,7 \times 1,75$ m/s hızında farklı nem değerleri için; $\phi = 1$ (D4), $\phi = 0.6$ (D6), $\phi = 0.2$ (D8) elde edilen kutuplaşma eğrileri.....	94
Şekil 6.44. $V = 0,2 \times 1,75$ m/s hızında farklı nem değerleri için; $\phi = 1$ (D5), $\phi = 0.6$ (D7), $\phi = 0.2$ (D9) elde edilen kutuplaşma eğrileri.....	96
Şekil 6.45. $\phi = 1$ nem değerinde, farklı hız değerleri için $V = 1,75$ m/s (D1), $V = 0,7 \times 1,75$ m/s (D4), $V = 0,2 \times 1,75$ m/s (D5) elde edilen kutuplaşma eğrileri.....	97

Şekil	Sayfa
Şekil 6.46. $\phi = 0.6$ nem değerinde, farklı hız değerleri için $V = 1,75$ m/s (D2), $V = 0,7 \times 1,75$ m/s (D6), $V = 0,2 \times 1,75$ m/s (D7) elde edilen kutuplaşma eğrileri.....	99
Şekil 6.47. $\phi = 0.2$ nem değerinde, farklı hız değerleri için $V = 1,75$ m/s (D3), $V = 0,7 \times 1,75$ m/s (D8), $V = 0,2 \times 1,75$ m/s (D9) elde edilen kutuplaşma eğrileri.....	100
Şekil 7.1. Farklı basınçlarda elde edilen deneysel sonuçlar [10], 9 kanallı hücre sonuçları ve tek kanallı hücre için (GID1, GID2, GID3) kutuplaşma eğrilerinin karşılaştırılması.....	103
Şekil 7.2. Farklı basınçlarda elde edilen deneysel sonuçlar [10], 9 kanallı hücre sonuçları ve tek kanallı hücre için (GID1, GID2, GID3) kutuplaşma eğrilerinin karşılaştırılması.....	104
Şekil 7.3. Farklı nemlerde elde edilen edilen sayısal [27] ve modeli oluşturulan PEMFC ait sayısal (KD1, KD2, KD3) hücrenin anot kısmına ait kutuplaşma eğrilerinin karşılaştırılması.....	106
Şekil 7.4. Farklı nemlerde elde edilen sayısal [27] ve modeli oluşturulan PEMFC ait sayısal (KD1, KD2, KD3) hücrenin katot kısmına ait kutuplaşma eğrilerinin karşılaştırılması.....	107
Şekil 7.5. Farklı basınçlarda elde edilen 9 kanallı hücreye ait sayısal sonuçlar ve modeli oluşturulan tek kanallı hücre için (GID1, GID2, GID3) kutuplaşma eğrilerinin karşılaştırılması.....	108
Şekil 7.6. Farklı sıcaklıklarda elde edilen 9 kanallı hücreye ait sayısal sonuçlar ve modeli oluşturulan tek kanallı hücre için (GIID1, GIID2, GIID3) kutuplaşma eğrilerinin karşılaştırılması.....	110

SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılmış bazı simgeler ve kısaltmalar, açıklamaları ile birlikte aşağıda sunulmuştur.

Simgeler	Açıklama
c_p	Özgöl ısı $Jkg^{-1}K^{-1}$
D	Difüzyon katsayısı m^2s^{-1}
E	Hücre voltajı V
E_0	Hücre açılış voltajı V
e	Coloumb sabiti $1.602 \times 10^{-19} C$
F	Faraday sabiti $96487 Cmol^{-1}$
ΔG	Gibbs free enerji değişimi, $\frac{kcal}{mol}$
i	Akım yoğunluğu Am^{-2}
J	Transfer akım yoğunluğu Am^{-3}
k	Isı iletkenliği $Wm^{-1}K^{-1}$
k_h	Gözenekli tabaka permabilitesi m^2
p	Basınç Pa
R	Evrensel gaz sabiti, $8314 Jkmol^{-1}K^{-1}$
S_k	Kütle kaynak terimi $molm^{-3}s^{-1}$
S_T	Isı kaynak terimi Wm^{-3}
T	Sıcaklık, K
u	Hız vektörü ms^{-1}
X	Mol kesri
ε	Porosite
ρ	Yoğunluk, kgm^{-3}
σ	İyonik iletkenlik, $[ohm - m]^{-1}$
μ	Viskozite $kgm^{-1}s^{-1}$

Kısaltmalar**Açıklama*****a***

Anot

eff

Etkinlik

ort

Ortalama

c

Katot

ct

Katalizör tabaka

m

Membran

ref

Referans

CB

Eşleşmiş sınır şartı

CC

Akım toplayıcı

CL

Katalizör tabaka

D

Durum

GDL

Gaz difüzyon tabakası

M

Membran

MEA

Membran elektrot birlikteliği

MFI

Kütleli debi giriş sınır şartı

N

Nokta

NS

Kayma sınır şartı

PEM

Proton aktaran membran

PEMFC

Proton aktaran membran yakıt hücresi

PJ

Gözenekli ortam sınır şartı

PO

Basınç tanımlı çıkış sınır şartı

SF

Tanımlı akı sınır şartı

SŞ

Sınır şartı

SV

Tanımlı değer

UDF

Kullanıcı tanımlı fonksiyonlar

W

Duvar sınır şartı

ZDF

Sıfır difüzyon akı

B

Engelleyici blok sayısı

 λ

Geçit oranı

CFCD

Hesaplamalı yakıt hücresi dinamiği

Kısaltmalar**Açıklama****CFD**

Hesaplamalı akışkanlar dinamiği

GMRES

Genelleştirilmiş minimal artık alt-programı

TDMA

Üçlü bant matris algoritması

HFR

Yüksek frekans direnci

1. GİRİŞ

Enerji verimlerinin yüksek olması, çevre kirliliğine sebebiyet vermemeleri, ve az gürültülü olmalarından dolayı yakıt hücreleri; hareketli, durgun ve taşınabilir güçler için 21. yüzyılın enerji dönüşüm makineleri olarak önemli yere sahiptir. Son 10 yılda bu konuda çok büyük ilerlemeler olmuştur. Sanayide çeşitli merkezler yakıt hücresi dizaynı ve mühendisliğinde, daha iyi performans, dayanıklılığın geliştirilmesi, maliyetin düşürülmesi için ciddi yatırımlar yapmaktadırlar. Bu merkezler, yakıt hücrelerinin farklı boyutlarında gerçekleşen elektrokimyasal süreçler ve çeşitli transportların optimizasyonu, kontrolü, anlaşılması ve tanımlanması için çalışmaları sonuçlandırmışlardır [1].

Yakıt hücresi teknolojisi; malzeme bilimi, arayüzey bilimi, transport olayları ve elektrokimyasal reaksiyonlardan oluşan bir bütündür. Bir yakıt hücresindeki elektrokimyasal reaksiyon ve transport olaylarının karmaşıklığı, zaman ve boyuttan bağımsız hesaplama gerekliliği nedeniyle yakıt hücresi modellenmesi ve simülasyonu, hesaplamalı yakıt hücresi dinamiğinde (CFCD) paralel sistematik bir yapı gerektirir. CFCD, yakıt hücresi dinamiklerinin incelenmesinde, elektronlar ve iyonların transportu ve elektrokimyasal kinetiklerle çok boyutlu transport olaylarını birleştirmektedir. CFCD; fizikokimyasal model geliştirme, ileri nümerik algoritma, materyallerin karakterize edilmesi ve geçerli modeli kapsayan bir model olarak tasavvur edilmiştir.

Detaylı veriler kullanarak modelin geçerliliğini ispatlama gereksinimi son birkaç yılda giderek artmıştır [30,3]. Çünkü, global Akım-Volt eğrisi kapsamlı CFCD modellerini geçerli kılmak için çok yetersizdi. Bu yetersizlik bir deney ile ispatlanmıştır [45]. Bu deneyde üç boyutlu PEMFC modeli, 80 C sıcaklığındaki bir yakıt hücresinde anot/katot giriş bağıl nemi %42-%0 ve anot/ katot stokiometrisi 3/2 olan 18 mikrometre Gore-Select membran kullanan tek kanallı bir yakıt hücresi için uygulanmıştır. Hücre voltajı 0.75 olan bir yakıt hücresi için aynı model kullanılarak iki durum simüle edilmiştir. Birinci durumda, her iki katalizör tabakadaki iyonik direnç dahil edilmiştir ve oksijen indirgenme reaksiyonunun

kinetik sabiti Pt yüklemesinden değerlendirilmiştir. Bu durumda, hücre voltajı 0.75 olduğunda ortalama akım yoğunluğu $0,24 \text{ A/cm}^2$ olarak elde edilmiştir. İkinci durumda katalizör tabakaların iyonik dirençleri ihmal edilmiş ve kinetik sabit %23'e düşürülmüştür. İkinci durumda sadece iki parametre değiştirildiğinde, birinci durumdakiyle aynı ortalama akım yoğunluğu elde edilmiştir. Birinci durumda ohmik polarizasyonun hakim olmasıyla giriş şartlarının kuru olduğu durumda lokal akım yoğunluğunda önemsiz bir yükselme gözlenmiştir. İkinci durumda, küçük ohmik kayıplarla konsantrasyon polarizasyonu hakim olmuştur. Sonuç olarak, ikinci durumda stokiyometrik etkilerden dolayı oksijen konsantrasyonunun düştüğü görülmektedir.

Adveksiyon – difüzyon eşitliği bir kaynak terimi ile birlikte genelde CFD algoritmalarıyla çözülebilir. Patankar sayısal akışkanlar dinamiği ve ısı transferi için mükemmel bir tanımlama yapmıştır [28]. Oran ve Boris kimyasal reaksiyonlarla birlikte difüzyon - konveksiyon problemlerinin sayısal çözümlerini geliştirmişlerdir [52]. Yakıt hücrelerinde akış alanı çözümü için, görünüm oranının 100 mertebesinde upwind metodunun uygulanabilir ve çok etkili olduğu ispatlanmıştır [28].

Yakıt hücreleri ve elektro kimyasal sistemlerin modellenmesindeki sayısal tek problem, elektronik ve elektrolit fazlardaki potansiyeller arasında güçlü bağ oluşmasıdır. İki eşitlik potansiyel reaksiyon akımı vasıtasıyla birbirine bağlıdır. Tekrar eden algoritmalar etkinliği sağlamak ve çözümü yakınsamak için gereklidir. Bu ayrıklaştırılmış cebirsel eşitlikleri çözmek için eş zamanlı olarak Newton metodunu kullanmak en etkin teknik olarak görülmektedir. Ancak, direkt çözüm iki ve üç boyutlu problemlerden meydana gelen Jakobiye matrisler için etkili değildir.

Son zamanlarda Wu, birleştirilmiş güçlü iki potansiyel eşitliği çözmek için modern nümerik algoritmaları sunmuştur [29]. Genelleştirilmiş minimal alt yordam (GMRES) olarak bilinen Krylov iterasyon çözücüsü, direkt çözücünün (Gauss eliminasyon) yerine geniş, simetrik olmayan Jakobiye sistemin çözüm etkinliğini düzeltmek için kullanılmıştır. Newton iterasyonu için başlangıç tahminleri nonlinear Gauss – Seidel metodu kullanılarak elde edilmiştir. GMRES çözücüsü, TDMA

tabanlı multigrid algoritma ve Gauss-Seidel bloğu ile birlikte, koşullandırılmıştır. Ticari CFD kodlarının iskeletindeki ardışık çözüm metotları standarttır ve kullanıcı tanımlı aktarım eşitliklerini çözmeyi gerektirirler.

Endüstriyel ölçekli yakıt hücrelerinin simülasyonu için büyük ağ yapısı oluşturulması ve hesaplama değişikliklerine ihtiyaç duyulmuştur. Anot ve katot kısımlarında gaz difüzyon tabakaları ve ortada membran olan tipik geometri dikkate alınmıştır.

Deneysel inceleme sadece yakıt hücresinin temel dinamiklerinin anlaşılmasını geliştirmeye yardımcı değildir, aynı zamanda CFCD model geçerliliği için temel veri sağlamaktadır. Bu iki gereksinimin neden olduğu inceleme gayretleri, endüstriyi direk ilgilendiren çeşitli karmaşık konfigürasyonlar gerektiren deneylerden ziyade, eş zamanlı ve lokal ölçümlere doğru yönelmiştir.

Bir proton aktaran membran yakıt hücresinde akım, türler ve membran direnci dağılımlarının miktarının belirlenmesi, çözüm yolunun anlaşılması; su yönetimi, CO zehirlenmesi, akış bölgesi dizaynının etkisi ve CFCD modellerinin geçerli kılınması için değerli verilerin sağlaması kadar kritik olduğu Wang tarafından sunulmuştur [30,31]. Bir hidrojen PEMFC'deki akım dağılımını ölçmek için, Brown ve Cleghorn bir bölümlendirilmiş akım kollektörü, anot katalizör tabakası ve anot GDL devresi yaklaşımını kullanmışlardır[32,33]. Bu yaklaşım düzenli bilginin kalitesi ve kullanımının kolaylığını düzeltmek için Bender ve ark. tarafından rötuşlandı [34]. Weiser ve ark. akım kolektörü tabakası içine yerleştirilmiş bir manyetik kapalı devre düzeni kullanan bir teknik geliştirmiş ve yakıt basıncının lokal akım yoğunluğunu şiddetlice etkileyebileceğini göstermiştir [35]. Stumper ve ark. bir hidrojen PEMFC'nin akım yoğunluğu dağılımının belirlenmesi için üç metot ispatlamıştır [36]. Birinci olarak, kısmi membran tekniği, bölgesel akım yoğunluğu davranışını belirlemek için hem farklı alanların birleştirilmesini hem de MEA segmanlarının kısmi katalizasyonunu içermektedir. İkinci olarak, alt hücre tekniği, istenen bölgenin performansını ölçmek için, katot ve kataliz edilmiş anodun belirli bölgelerinin elektriksel olarak izole edilmesini içermektedir. Pasif akım harita tekniğinde, MEA

yüzeyine dik olan dirençler dizini, akış alanı ile plaka arasına yerleştirilmişlerdir. Voltaj sensörleri, her direnç boyunca potansiyel düşüyü belirler ve Ohm kanunu ile akış plakası içerisindeki akım dağılımı tespit edilir. Akım dağılımının belirlenmesinde kullanılan her metodun avantajları olmasına karşın gerçek bir yakıt hücre işletim karakteristiği elde edebilmek için segmanlara ayrılmamış bir MEA kullanılması gereklidir. Tüm modellerin segmanlara ayrılmamış MEA için geliştirildiğine dikkat edilmelidir.

Geleneksel MEA kullanımı ve iyi çözünmeye ilave olarak işletim şartlarındaki ani değişikliklerden kaynaklanan zamana bağlı etkileri belirleme yeteneği gereklidir. Stumper'e ait segmanlanmamış pasif akım harita tekniği, zamana bağlı ölçümlere müsaade eder ve iyi uzaysal çözümlere sahiptir, fakat yüksek hassasiyetli ve gömülü direnç dizinleri gerektirmektedir [36]. Manyetik elektrik kapalı devre metodu, Weiser, aynı MEA ve akış alanı ile zamana bağlı ölçümlere izin verir, fakat uygulaması diğer metotlara göre daha zordur ve yakıt hücre yığınlarına uygulanamaz [30]. Mench ve Wang, PEMFC ve DMFC üzerinde gerçekleştirilen akım dağılım deneyleri için gelişmiş bir teknik uyguladılar [37,38]. Mench ve Wang'dan bağımsız olarak Noponen ve ark. benzer bir teknik geliştirip uygulamışlardır [39,40].

Segmanlı hücrenin kullanımında karşılaşılan genel problem, segmanlanmamış tek hücreden beklenen aynı seviyede akım yoğunluğu üretme yeteneğinin olmayışıdır. Segmanlanmamış hücre iyi tasarlanıp üretilmemiş ve bir araya getirilememiş ise, segmanlanmamış akış alanının olduğu plaka ile GDL arasında çok yüksek elektrik temas direnci oluşur ve bu da performansın azalmasına sebebiyet verir. Sonuç olarak, ölçülen akım dağılımı, hücre içerisindeki su ve reaktanların dağılımından daha çok temas direnç dağılımını yansıtmaktadır. Segmanlanmamış hücre tekniği kullanarak doğru akım dağılımı verileri elde edebilmek için temas direncinin minimuma indirilmesi gereklidir. Bu alanın gelecekteki amacı otomotiv işletim şartlarını (80 °C sıcaklık, 1 A/cm² ortalama akım yoğunluğu ve 0.6 V) temsil eden akım dağılımı verileri üretmektir. Bu amaca ulaşıldığında, segmanlanmamış hücre tekniği, yakıt hücrelerinin araştırma ve geliştirme faaliyetlerinde standart bir teşhis aracı olarak kullanılabilir.

Bölgesel AC empedans ve akım dağılımları, segmanlanmış katot akım toplayıcı plakasına sahip tek kanal üzerinde Brett ve ark. tarafından ölçülmüştür [41]. Bu deneysel hücrede, MEA oluşturmak için karbon kağıt ile Nafyon 112 kullanılmıştır. Kuru katot ve tam nemlendirilmiş anot kullanılmasına rağmen, iki potansiyel değeri arasında veya kanal boyunca membran dirençleri arasında büyük bir değişim gözlenmemiştir. Bu deneyler, farklı hücre potansiyelleri için yüksek frekans direnci (HFR) dağılımlarında çok fazla bir değişimin olmadığını göstermiştir [45]. Bununla birlikte, katot gazlarının sebep olduğu membran kuruması sonucu, katot girişine yakın kısımlarda yüksek HFR gözlenmektedir. Membran iletkenliği su içeriğine bağlı olduğu için PEMFC'lerde su ve reaktan dağılımları çok önemlidir. Birkaç araştırmacı, gaz fazı su buharının yoğunlaşması ve yakıt hücresinde oluşan suyu dikkate alarak toplam su dengesi üzerinde çalışmışlardır [42,43]. Bununla birlikte anot ve katot gaz kanalı içerisindeki çeşitli konumlarda, su buharı dağılımının belirlenmesi gereklidir. Mench ve ark., su dağılımı ölçümleri için gaz kromatografisi kullanımına öncülük etmektedir [44]. Zaman çözümü 2 dakika ve gaz kanallarındaki örnek alma kanallarının yerleşimi ile sınırlı olan uzaysal çözümlemeye sahip çalışan bir yakıt hücresinin anot ve katot kısmındaki su dağılımının doğrudan haritasını çıkarmak için gaz kromatografi tekniği kullanılabilir. Segmanlı yakıt hücreleri kullanarak yüksek frekans empedans dağılımları, türler ve akımı eş zamanlı olarak ölçen bir cihaz en ileri yeteneğe sahiptir [45].

Mench ve ark., membran sıcaklığını ölçebilmek için, çalışan bir PEM yakıt hücresinin çok katmanlı membranı içerisine mikrosıl-çift gömerek bir teknik geliştirmişlerdir [46].

Bu mikrosıl-çiftler sızmaya ve bölünmeye neden olmadan oluşan membranın iki ince tabakası içerisine gömülebilirler. Sıcaklık dağılımı ölçümleri için tek membranın içerisine 10 ısı-çift dizini yerleştirilebilir. Onun üzerinde termokupullar basit bir membranın sıcaklık dağılımı ölçümüne yardımcı olabilir.

Çok karmaşık CFCD simülasyonları, birçok ayrıntıyı tahmin etme kapasitesine sahip olmalarına karşın, hücre global kutuplaşma eğrisine bağlı model geçerliliğinin güncellenmesi gerçekleştirilir

Geçen beş yıl zarfında PEMFC modellemedeki hızlı ilerlemelerin önceden tahmin edilen önemli yenilikleri meydana getirmiş olduğu açıktır. Günümüzün bilgisayar güçleriyle tamamen üç boyutlu, elektro kimyasal-transport-ısılaşmış, ve gerçeğe uygun büyük ölçekli simülasyonlar mümkündür. PEMFC modellemedeki gelecek araştırmaların ana odağı, sıvı su transferi üzerine ve su taşma olayı üzerine olacaktır. Sıvı su taşma oluşumunun temel fiziksel süreci hakkında daha öğrenilecek çok şey vardır. İlerlemiş teşhisler, -optik teşhis ve 3-B nötron tomografisi ile ayrıntılı dağılım ölçümleri, sıvı su taşmasının nasıl oluştuğunun ve kontrol faktörlerinin neler olduğunun anlaşılmasında gereklidir. Taşma prosesinin oluşumu fiziksel olarak anlaşıldığında, araştırmalar, GDL yüzeyi ve kanal duvarları ile kuvvetli ilişkileri olan kompleks iki fazlı akış prosesinin simüle edilmesi ve modellenmesi üzerine yönelecektir.

2. LİTERATÜR ARAŞTIRMASI

Literatürde yakıt hücresi modellerinin birçok tipi yer almaktadır. Bazı hallerde modeller su yönetimi ve akış gibi özel olayları incelemeyi hedefler. Diğer durumlarda modeller mümkün olduğunca geniş kapsamlı olarak hücre içindeki tüm ilgili aktarım mekanizmalarını tanımlar. Genellikle modeller iki sınıftan birine ait olarak kategorize edilebilir; parçalı hücre modelleri veya tam hücre modelleri. Parçalı hücre modelleri yalnızca membran veya gaz difüzyon tabakası gibi yakıt hücresi modellerini içerir. Tam hücre modelleri yakıt hücresinin neredeyse tüm bileşenlerini içerir. Dezavantaj olarak, beraberinde, artan hesaplama süresi ve karışıklığı getirmektedir.

Yakıt hücresini doğru bir şekilde simüle etmek için kesin fiziksel özelliklere ihtiyaç duyulmaktadır. Bu özellikler, akım yoğunluğu değişimleri ve birim hacim için Katalizör yüzey alanı gibi kinetik değişkenleri, geçirgenlik gibi yapısal bilgiyi ve iyonik iletkenlik ve su difüzyonu gibi polimer özellikleri içerir.

C.Y. Soong ve ark. çalışmalarında, kanal içine yerleştirilen enine engelleyici bloklarla kısmen bloklanmış yakıt kanalının geometrisini oluşturmuşlardır. Engelleyici blok sayısı ve çeşitli aralık oranları ile blokaj sonucu, yakıt akışı Reynolds sayısı ve reaktan gaz taşıyan difüzyon tabakanın gözenekliliği ve kanal uzunluğu boyunca olan basınç dağılımını incelemişlerdir. İki boyutlu modelin gözenekli duvar kanalındaki bir yüzü ile engel tabakası dikkate alınmıştır. İlk olarak boşluklu bölgedeki niteliksel doğal akışı incelemekle yaklaşık olarak bir çözüm yapılmış ve sonra yarı hücre modelindeki reaktan gaz geçişinde çalışılan barometreler için yapılan nümerik simülasyonlar uygulanmıştır. Bu çalışmada sonucunda düşük gaz difüzyon tabakasının gözenekliliğiyle birleşmiş düşük gaz oranının, yüksek akış rezistansı nedeniyle çok düşük basınç kayıpları meydana getirdiği görülmüştür [25].

X. Liu ve ark. çalışmalarında, izotermal, kararlı hal, 3 boyutlu proton aktaran membranı (PEM) geliştirmişlerdir [6]. Hesaplanan etki alanı, anot gaz akış kanalının

sahip olduđu membran elektrolit birlikteliđi (MEA) ve katot gaz akış kanalının sahip olduđu ilgili alan içindeki katalizör tabakanın basitleştirilmemiş hacmini içermektedir. Geniş kapsamlı 3 boyutlu süreklilik denklemi, momentum denklemleri ve özel korunum denklemi, gaz kanalı ve elektrot çiftinde türlerin aktarımını, gaz karışımının akışını tanımlamak için kullanılmıştır. Bu model Ticianelli' nin deneysel bilgisi ile önceden oluşturulan modelin karşılaştırılmasını sağlamaktadır [47]. Sonuçlar oksijen toplanması, yerel akım yoğunluğu ve farklı akım yoğunluklarındaki katot aktivasyonu olarak tanımlanan karakteristiklerinin detaylı bilgisini vermektedir.

E. Carcadea ve ark. çalışmalarında, 3 boyutlu, kararlı, tek fazlı model PEM yakıt hücresindeki elektrik üretimi ve kütle transferi çalışmasını geliştirmişlerdir. PEM yakıt hücresi tabakalarında kullanılan tek boyutlu korunum denklemi ve yönetici denklemler sayısal olarak çözülmüştür. Geliştirilen elektrokimya kinetiğini ve düzensiz geometrideki çok boyutlu tür geçişini içeren ve gözenekli tabakayı içeren model, yakıt hücresini anlamakta kullanılır ve gerçek hücre performansını göstermektedir [13].

P. W. Li ve ark. çalışmalarında, 3 boyutlu sayısal ısı, kütle aktarımını ve kompleks akış kanallı küçültülmüş PEM yakıt hücresinin benzerini yapmışlardır. Bu sayısal hesap sonlu hacim metoduna dayanır. Akış ve kütle aktarımının yönetici denklemi eş zamanlı çözüm ve elektrokimyasal reaksiyon ile birleştirilir. Bu çalışmada nemlendirilmiş olan gazın yakıt hücresinin performansına etkisini araştırmışlardır [26].

M. Coppo ve ark. çalışmalarında, PEM yakıt hücresindeki operasyon sıcaklığının etkisini incelemişlerdir. Bu yeni model gaz akış kanalındaki gaz akımı ve su oluşumunun etkisinden dolayı GDL yüzeyinden yer değiştiren sıvı su dağılımı ve yönetiminin geliştirilmesinde kullanılmaktadır. Hücre performansının sıcaklığa bağlı parametrelerdeki değişmesinin sonucuna çalışılan modelin kullanılması mümkün kılan ve operasyon sıcaklıklarının geniş alanı üzerindeki artan hücre performansının en iyi hassasiyetini gösteren, deneysel ölçümlerin polarizasyon eğrisine karşı bu tanımlanan hücre geçerlidir. GDL hücresinin içerisindeki sıvı su transferi ile GDL

yüzeyinden sıvı suyun yer değiştirmesinden bulunan çalışmanın önemli bir sonucu sıcaklık değişiminin hücre performansında etkin rol oynamaktadır [24].

H.C. Liu ve ark. çalışmalarında, reaktan gaz transferi ve PEMFC' nin gittikçe daralan akış kanalının dizaynının performansını incelemişlerdir. Akıntı istikameti boyunca kanal derinliğindeki azalma, daralan kanaldaki yakıt gazındaki azalma elektrokimyasal reaksiyonu artan gaz difüzyon tabakasındaki zorlanmayı çok hızlandırarak, hücre performansını artırmaktadır. Sayısal sonuçlar daralan yakıt hücresindeki hücre performansını yükselbildiğini göstermektedir. Bu yükselme düşük voltajda daha çok belli olmaktadır. Bu sonuçlar aynı zamanda sıvı suyun hücre performansına genel etkisi ve düşük voltajın anlamlı hale gelmesini açıklamaktadır [23].

J. H. Jang ve ark. çalışmalarında, enine engelleyici bloklı akış bölgesi şeklinde dizayn edilmiş PEM yakıt hücresinin hücre performansı ve gaz aktarımında girişte reaktan yakıtın neminin etkisini çalışmışlardır. Katot ve anot tarafındaki reaktan gazların girişteki nemliliğinin etkisinin -su yönetim probleminden ileri gelir- hücre performansında önemli olduğu düşünülmektedir. Ek olarak, engelleyici sayısının artırılmasının taşınım olaylarındaki etkisini çalışmışlardır. Engelleyicilerin varlığında akım kanallarından daha fazla gaz gaz difüzyon tabakası ve katalizör tabakaya geçerek kimyasal reaksiyonları artırması blokaj etkisinden ileri gelmekte ve PEMFC sisteminin performansını artırmaktadır. Reaktan gaz aktarımında su oluşumunun etkisi nümerik modelde hesaba katılır. Tahminler, reaktan gazın yerel aktarımının, yerel akım yoğunluğu değişimi ve hücre performansının engelleyicilerin varlığında yükseldiğini göstermektedir. Düşük ve yüksek voltajlarda girişteki bağıl nem etkisinin farklılığı için fiziksel yorum yapılmıştır. Sonuçlar, düşük voltaj şartlarında, sıvı su etkisinin önemli olduğunu göstermiş ve modellemede kabul edilmiştir. Hücre performansının yüksek giriş bağıl nem oranında, akım yoğunluğu yükselmesini sınırlandırılmasıyla kütle aktarım kayıplarının geciktirilmesiyle yükseltilebilir olduğu kanaatine varmışlardır [27].

S. Dutta ve ark. çalışmalarında, düz kanallı PEM yakıt hücresi membranında bütünleştirilmiş akış ve akım yoğunluğu modeli geliştirilerek, iki boyutta akım yoğunluğu dağılımını tahmin ederek PEM yakıt hücresinde üç boyutlu akış modellemenin gerekli olduğunu tartışmışlardır. Geometrik modelde anot ve katot bölgelerinde difüzyon tabakalar bulunur ve nümerik model ana akım kanallarında ve difüzyon tabakalarında primer akışla ilgili değişkenleri çözer. Kontrol hacim yaklaşımı kullanılmış ve ticari akış çözümleyicilerinde aktarım eşitlikleri için kaynak terimleri içeriklerini kolaylaştırmak için gösterilmiştir. Tahminler difüzyon tabakası hücreye dahil edilip difüzyon tabakası olmadığı durumla karşılaştırıldığında daha düşük ve uniform akım yoğunluğu oluştuğunu göstermiştir. Sonuçlar, membran kalınlığının ve hücre voltajının; akım yoğunluğu ve su aktarımı net oranının eksenel dağılımında anlamlı etkisi olduğunu göstermiştir. Anot ve katot arasındaki su transferinin tahmini difüzyon ve elektroozmozun hassas dengesini ve kanal boyunca akım dağılımındaki etkilerini göstermiştir [8].

Liu ve ark. çalışmalarında; İki boyutlu düz kanallı PEM yakıt hücresindeki membranda akım yoğunluğu dağılımının tahmini için, bütünleştirilmiş akış ve akım yoğunluğu geliştirmişler ve PEM yakıt hücresinde, üç boyutlu akış modellemesine duyulan ihtiyacı tartışmışlardır. Geometrik model, anot ve katot tarafında difüzyon tabakalarını içermektedir. Eşitliklerin ayrıklaştırılmasında kontrol hacmi yaklaşımı kullanılmıştır. Transport eşitliklerinde kullanılan kaynak terimleri, paket programlarda kullanılan forma indirgenmiştir. Difüzyon tabakalarının olmadığı durum ile olduğu durum karşılaştırıldığında; difüzyon tabakası olan durumda, sonuçlar daha düşük ve daha uniform akım yoğunluğu meydana geldiğini göstermiştir. Sonuçlar, akım yoğunluğu ve su transferinin eksenel dağılımında, membran kalınlığının ve hücre voltajının önemli etkisi olduğunu göstermiştir [6].

Günümüzde kullanılan standart elektrolit malzemesi DuPont tarafından 1960'ların ortasında uzay uygulamaları için üretilen teflon kökenli bir malzeme olan Nafyondur. En fazla kullanılan tipi, Nafion 115 ve 117' dir (Ballard, 1990). Nafion membranlar tamamen florlanmış polimerlerdir ve çok yüksek kimyasal ve ısı kararlılığına sahiptirler. PEM yakıt hücresi çok ince ve geçirgen yaprak şeklinde polimer

elektrolit membran ile çalışır. Bu membran küçük ve hafiftir. Aynı zamanda, düşük sıcaklıklarda yaklaşık olarak 80°C de çalışır. Diğer elektrotlar yaklaşık 1000°C yüksek sıcaklıklar gerektirirler.

DuPont'un florlu elektrolitleri, öncekilere göre, ömür konusunda büyük ilerleme göstermiş ve işletimde 50.000 saatten fazla kullanılabilmiştir. Ancak, membranların kuruma problemi nedeniyle, bu alandaki gelişmeler yavaş olmaktadır. İşletim koşullarında, membranı nemli tutmak en önemli problemdir.

Yakıt hücre sistemi, elektrolit türüne bağlı olarak, yaklaşık % 40-60 verime sahiptir. Yüksek verime ek olarak, yakıt pilleri sabit sıcaklıkta işletilmektedirler ve elektrokimyasal reaksiyonlar sonucu çıkan ısı kojenerasyon uygulamalarında kullanılabilir. Bu durumda toplam verim % 80'e kadar artırılabilir.

Sukkee Um, C.-Y. Wang ve K. S. Chen çalışmalarında, PEM yakıt hücresini simüle etmek için çok yönlü bir model geliştirmişlerdir. Bu model, aynı zamanda, elektrokimyasal hareket, akım dağılımı, hidrodinamik kuvvet ve çok bileşenli aktarımları içermektedir. Akım kanalları, gaz difüzyon elektrotları, katalizör tabakaları ve membran bölgeleri için geçerli olan eşitlikler geliştirilmiştir. Sonlu hacim tabanlı akışkanlar dinamiği tekniği kullanarak sayısal çözümler elde edilmiştir. Sayısal modelin literatürdeki deneysel sonuçlarla kabul edilebilir yakınlıkta sonuçlar verdiği gözlenmiştir. Sonuç olarak, model, anot beslemesinde hidrojen çözelti etkisinin bulunması için uygulanmıştır. Hidrojen çözeltisi koşulları altındaki tahmin edilen polarizasyon eğrileri, literatürde yer alan deney sonuçları ile iyi uyum göstermiştir [7].

Detaylı iki boyutlu elektrokimyasal ve akış simülasyonu sonucu elde edilen bulgular şunlardır: Yakıt akışı içerisinde, hidrojen çözeltisinin bulunması durumunda, hidrojen reaksiyon yüzeyinde tükenir ve aşamalı olarak anot kütle taşınım polarizasyonuna neden olur. Bundan dolayı, daha düşük bir akış yoğunluğu, yakıt akışından reaksiyon bölgesine doğru hidrojen aktarımı ile sınırlanır.

Dutta ve ark. ise bir PEM yakıt hücresinin kanalları arasındaki kütle akımını tahmin edebilmek için serpantin şeklindeki kanalları olan bir model geliştirmişlerdir. Üç boyutlu Navier-Stokes eşitliklerini çözmüşlerdir. Test sonuçları göstermiştir ki, anot ve katot kanalları içerisindeki akım dağılımı, membran üzerindeki kütle tüketimini önemli ölçüde etkilemiştir. Su aktarımı kontrol altında tutulmuştur. Bununla birlikte komple basınç düşümünün, düzenli doğrusal akış kanalı için beklenenden daha düşük olduğu gözlenmiştir [8].

Sivertsen ve Djilali çalışmalarında, PEM yakıt hücreleri için, karşılaştırmalı sabit sıcaklıkta olmayan 3-B sayısal bir model geliştirmiş ve bu modeli Fluent paket programı kullanarak çözmüşlerdir. Model konvektif ve difüzyf transferler için hesaplama yapmaktadır ve türlerin konsantrasyonlarının tahminine izin vermektedir. Katot ve anotta, elektrokimyasal reaksiyonla birlikte ısı üretimi gerçekleşmiştir. Model, elektrotlarda ve membranda, elektrik ve iyonik potansiyeller için çözüm yapmaktadır. Bölgesel akım yoğunluğu dağılımının daha hassas bir şekilde tahmin edilmesini mümkün kılan lokal aktivasyon aşırı potansiyel dağılımı yeniden çözülmüştür. Maksimum akım yoğunlukları tahmin edilmiştir. Parametrik analiz sonucunda, toplam akım yoğunluğu ve polarizasyon değerinde değişim oluşturmada sadece asimetri parametresinin değiştirilerek farklı dağılımların elde edilebileceği görülmüştür [9].

Wang ve ark. ise değişik çalışma parametrelerinin PEM yakıt hücresi performansı üzerine etkisini, katot tarafında hava ve anot tarafında saf hidrojen kullanarak, deneysel olarak araştırmışlardır. Deneyler, değişik yakıt hücresi çalışma sıcaklıkları, farklı katot ve anot nemlendirme sıcaklıkları, farklı çalışma basınçları ve bu parametrelerin değişik kombinasyonlarıyla yapılmış ve değişik çalışma parametrelerinin PEM yakıt hücresi performansı üzerindeki etkisi, polarizasyon eğrileri halinde gösterilmiştir. Mümkün olan parametrelerin etki mekanizmaları ve birbirleriyle bağlantıları tartışılmış ve modelleme sonuçları, bu çalışmadaki deneysel datalarla karşılaştırılmıştır. Karşılaştırma, deneysel data ve modelleme sonuçlarının uyum içinde olduğunu göstermiştir [10].

PEMFC simülasyonu için üç boyutlu, iki fazlı CFD modeli Li ve ark. tarafından geliştirilmiş ve FLUENT'e adapte edilmiştir [11]. Bu makalede, kullanılan modelin sayısal performansı, hesaplama zamanı ve paralel verim cinsinden, serpantin kanalları olan nispeten daha büyük-ölçekli bir yakıt hücresi (50 cm^2)'nin hesabı ile karşılaştırılmıştır. Yakınsama grafiği ve paralel performans verileri, FLUENT PEMFC modelinin sayısal olarak sağlıklı ve verimli olduğunu göstermektedir. Sayısal performansa ilave olarak, modelin fiziksel geçerliliği, Mench ve ark. tarafından yapılan çalışmada elde edilen kutuplaşma eğrileri ve bölgesel akım yoğunluğu dağılımlarının deneysel verileri ile karşılaştırma yapılarak test edilmiştir [4]. Bu verilerle yapılan karşılaştırmalar, genel kutuplaşma eğrileri ile iyi uyum göstermiştir. Deneylerde gözlenen bölgesel kutuplaşma eğrilerindeki uyum, niceliksel olarak doğru sonuçlar elde edildiğini göstermektedir. Bundan başka, hesaplamalar, hidrojenin anot elektrokimyasal reaksiyonunda tüketilmesine rağmen, hem hidrojen kütle kesri hem de molar konsantrasyonun anot akış kanalı boyunca artabildiğini göstermektedir. Bunun oluşum sebebi, osmotik sürüklenme ile suyun anottan katoda doğru, hidrojenin tüketim hızından daha hızlı taşınmasıdır.

Klasik ve yönlendirmesiz (interdigitated) akış alanlarına sahip PEM yakıt hücrelerinde akışkan akışını, türlerin transportunu ve elektrokimyasal reaksiyonu incelemek için, Hu ve ark.'na ait üç boyutlu, kararlı-durum matematiksel modeli kullanılmıştır; akışın, türlerin ve akım dağılımlarının çok boyutlu karakteristikleri, hacim kontrol sonlu ayrıklaştırma tekniği ile hesaplanmıştır [12]. Oksijen akışının konvektif ve difüzyon bileşenlerinin mutlak değerinin niceliksel olarak karşılaştırılmasından sonra, yönlendirmesiz (interdigitated) akış alanı tasarımı için zorlanmış konveksiyon transport mekanizmasının hakim olduğu elde edilmiştir. Bununla birlikte, klasik akış alanı tasarımı için difüzyon transportu baskındır. Bu iki farklı dizaynın basınç kaybı ve performansı hesaplanmış ve karşılaştırılmıştır; Sonuçlar göstermiştir ki; yönlendirmesiz (interdigitated) akış alanı tasarımı, kütle transport kabiliyetindeki avantajından dolayı daha iyi performansa, bununla birlikte, akışın elektrodun tamamı boyunca olmasından dolayı daha fazla basınç kaybına sahiptir. Sonuç olarak, literatürdeki deneysel sonuçlar ve tahmin edilen kutuplaşma eğrileri oluşturulan sayısal modeli değerlendirmek için karşılaştırılmıştır.

Carcadea ve ark., FLUENT CFD yazılımını kullanarak üç boyutlu, kararlı-durum, tek-fazlı bir PEM yakıt hücresi modeli geliştirmişlerdir. Tipik PEMFC çalışma şartları altında, su yönetimi ve elektrik alanını kapsayan, elektrokimyasal kinetik, çok boyutlu akışkan akışı ve türlerin aktarımının eşlik ettiği yakıt hücresine özgü alt modeller geliştirilmiştir. Sunulan iki test durumu için, hem hücre boyunca reaktan dağılımları hem de hücre potansiyeli ile su oluşumu için makul tahminler elde edilmiştir. Bu modelin yeteneklerinin geliştirilmesi ve geçerliliğinin ispatlanması yönünde çalışmalar yapılmaktadır [13].

Düz akış kanallı dizayna sahip PEM yakıt hücresinin karakterizasyonu Hakenjos ve ark. tarafından gerçekleştirilmiştir. Farklı hava debilerinde, akım dağılım ölçümleri, sayısal simülasyon sonuçlarıyla karşılaştırılmıştır. Ölçülen ve simüle edilen akım dağılımlarının uyumu ile sayısal modelin geçerliliği ispatlanmıştır. Test hücresi, kararlı-durum şartlarında çalıştırılmıştır ve gaz debileri ile hücre sıcaklıkları kontrol edilmiştir. Nümerik simülasyon, FLUENT CFD yazılımı tabanlı PEMFC modeli kullanılarak gerçekleştirilmiştir. FLUENT-PEMFC modeli, gaz fazındaki kütle aktarımı, ısı transferi, elektrik potansiyel alanı ve elektrokimyasal reaksiyonu hesaba katmakta ve akım yoğunluğu, reaktan konsantrasyonları ve sıcaklık gibi benzer değişkenlerin 3-boyutlu dağılımlarının elde edilmesini sağlamaktadır [14].

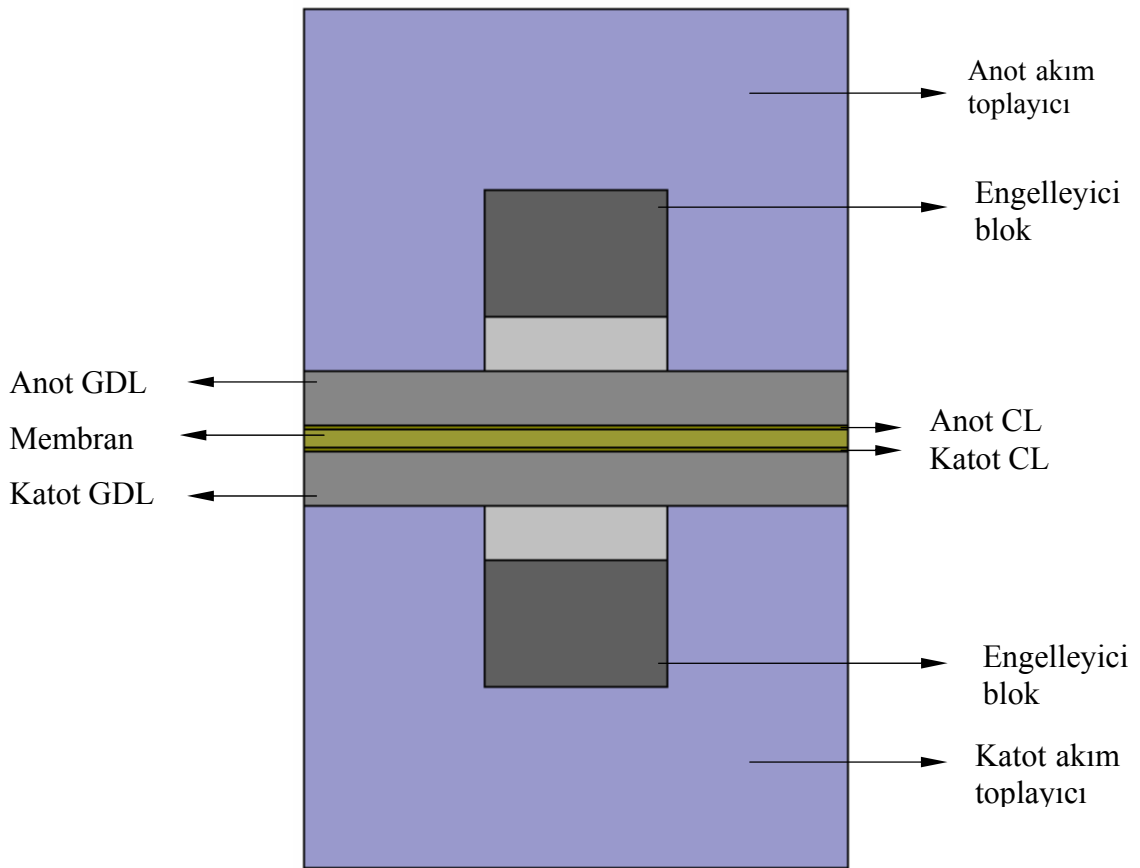
PEMFC hücresi içerisindeki gaz bileşiminin değişimi ile akım ve sıcaklık dağılımlarının anlaşılması, akış kanallarının bulunduğu plaka ve membran-elektrot kompleksi gibi hücre bileşenlerinin tasarımında çok önemlidir. Seksenbir bölümden oluşan özel tasarlanmış bir tek hücre kullanılarak, hücre içerisindeki akım dağılımı Yoon ve ark. tarafından deneysel olarak ölçülmüştür [15]. Her bölüm, komşu bölümlerden elektronik olarak yalıtılmış durumdadır. İlgili bölümlere bağlanan Hall etki sensörleri kullanılarak, akım dağılımı ölçülmüştür. Bu tek hücre belli bölmelere ayrılmış ve bu bölmeler içerisinde ölçülen bölgesel akım dağılımlarından yola çıkılarak, taşma (flooding) ve besleme gazı stokiometrisindeki değişimin etkileri, elektrokimyasal reaksiyon hızı açısından irdelenmiştir.

Hücre sıcaklığı, doymuş ve kuru şartlardaki anot akış sıcaklığı, doymuş ve kuru şartlardaki katot akış sıcaklığı ve reaktanların basıncını içeren 6-işletim değişkeninin değerleri ile oynanarak, bir tek hücre PEMFC'nin davranış karakteristiği ile ilgili, Santarelli ve Torchio'nun gerçekleştirdiği deneysel çalışma sonucunda elde edilen bilgiler bir makalede sunulmuş ve tartışılmıştır [16]. Deneylerde kullanılan yakıt hücresi, 25 cm² alana sahip Nafyon 115 membran kullanılan bir tek hücre PEMFC'dir. Beklendiği gibi, yüksek hücre sıcaklığı, membranın iletkenliğini ve hücre davranışını geliştirerek dönüşüm akım yoğunluğunu artırmıştır. Reaktan doyma sıcaklığındaki artış, özellikle, düşük ve orta yüklerde, aynı zamanda daha iyi bir performans sağlamıştır. Aksine, düşük hücre sıcaklığı durumunda, elektrot taşmasını önlemek için, yüksek yüklerde, su giriş kütle akışını azaltmak iyi olur. Reaktan işletim basıncındaki bir artış ile, güç eğrisinin maksimumu, yüksek akım yoğunluklarına doğru kayar. Bu olay, sınırlayıcı akım yoğunluğunun karşılık gelen kayması ile ilişkilendirilebilir. Nemlendirme ve işletim basıncının bileşik etkisi gözlenmiştir; işletim basıncındaki artış, reaktanlar kuru iken büyük bir gelişim arzetmemiştir, aksine, sadece anotta kısmi nemlendirme yapıldığında gelişme ile sonuçlanmıştır. Basınç artışının sebep olduğu en iyi gelişmeler, hem anot hem de katot gazları nemlendirildiğinde gözlenmiştir. Sonuç olarak, aynı işletim şartlarındaki başka testler ele alınmış ve bu testlerle karşılaştırma yapılmıştır.

3. MODELİN TANITIMI VE KABULLER

3.1. Yakıt Hücresinin Fiziksel Modeli

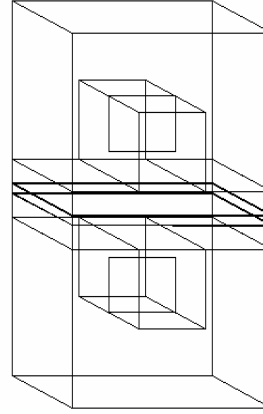
Bu çalışmada kullanılan PEM yakıt hücresi; membran, anot ve katot katalizör tabakalar, anot ve katot gaz difüzyon tabakaları, anot ve katot gaz kanalları, anot ve katot gaz kanallarına yerleştirilmiş engelleyici plakalar ve iki adet çift kutuplu akım toplayıcı plakadan ibarettir. PEM yakıt hücresinin şematik görünümü Şekil 3.1’de sunulmuştur.



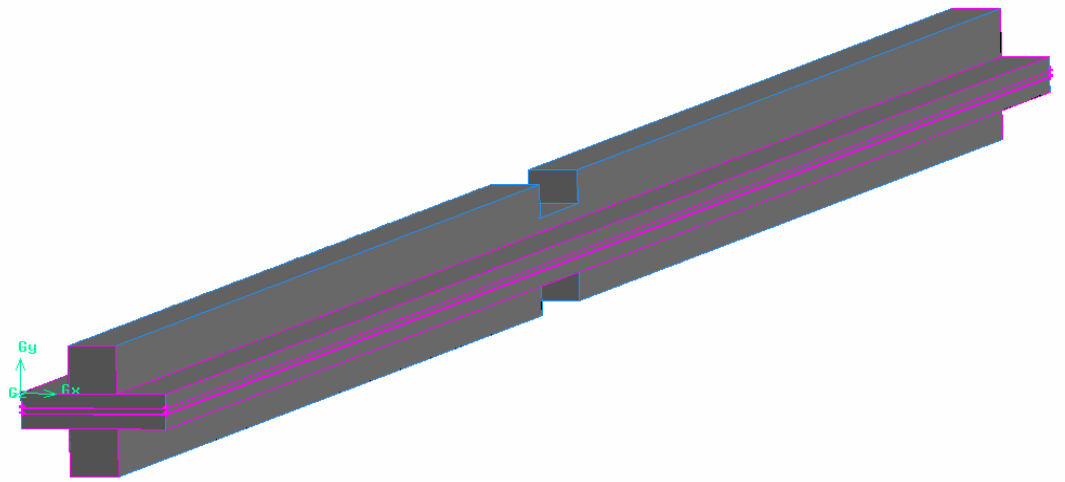
Şekil 3.1. PEM yakıt hücresinin şematik görünümü

Modeli oluşturulacak olan PEM yakıt hücresinin, anot ve katot tarafında birer adet olmak üzere toplam 2 adet engelleyici blok yerleştirilmiş dikdörtgen kesitli gaz kanalı mevcuttur. Membran, katalizör ve gaz difüzyon tabakalarından oluşan membran elektrot birlikteliği (MEA)’nin aktif yüzey alanı $0,21 \text{ cm}^2$ ’dir.

PEM yakıt hücresinin fiziksel geometrisi, bir bilgisayar destekli tasarım (CAD) ve ağ yapılandırma programı olan Fluent – Gambit modülü kullanılarak oluşturulmuştur. Gambit’te oluşturulan PEM yakıt hücresinin ön ve izometrik görünüşleri, ayrıca montaj öncesi görünüşü Şekil 3.2’de sunulmuştur. PEMFC geometrisinin Gambit’te oluşturulması ve ağ yapılanması ile ilgili detaylar EK-1’de anlatılmıştır.

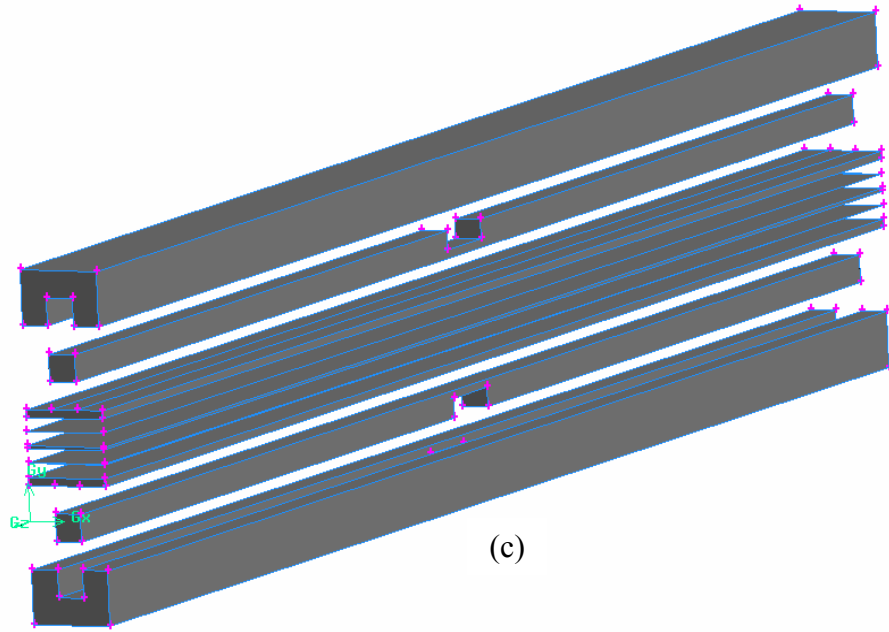


(a)



(b)

Şekil 3.2. Fluent-Gambit modülü ile oluşturulan PEM yakıt hücresinin görünümü
a) Ön görünüm, b) Kanalların izometrik görünümü, c) Tüm hücrenin montaj öncesi görünümü

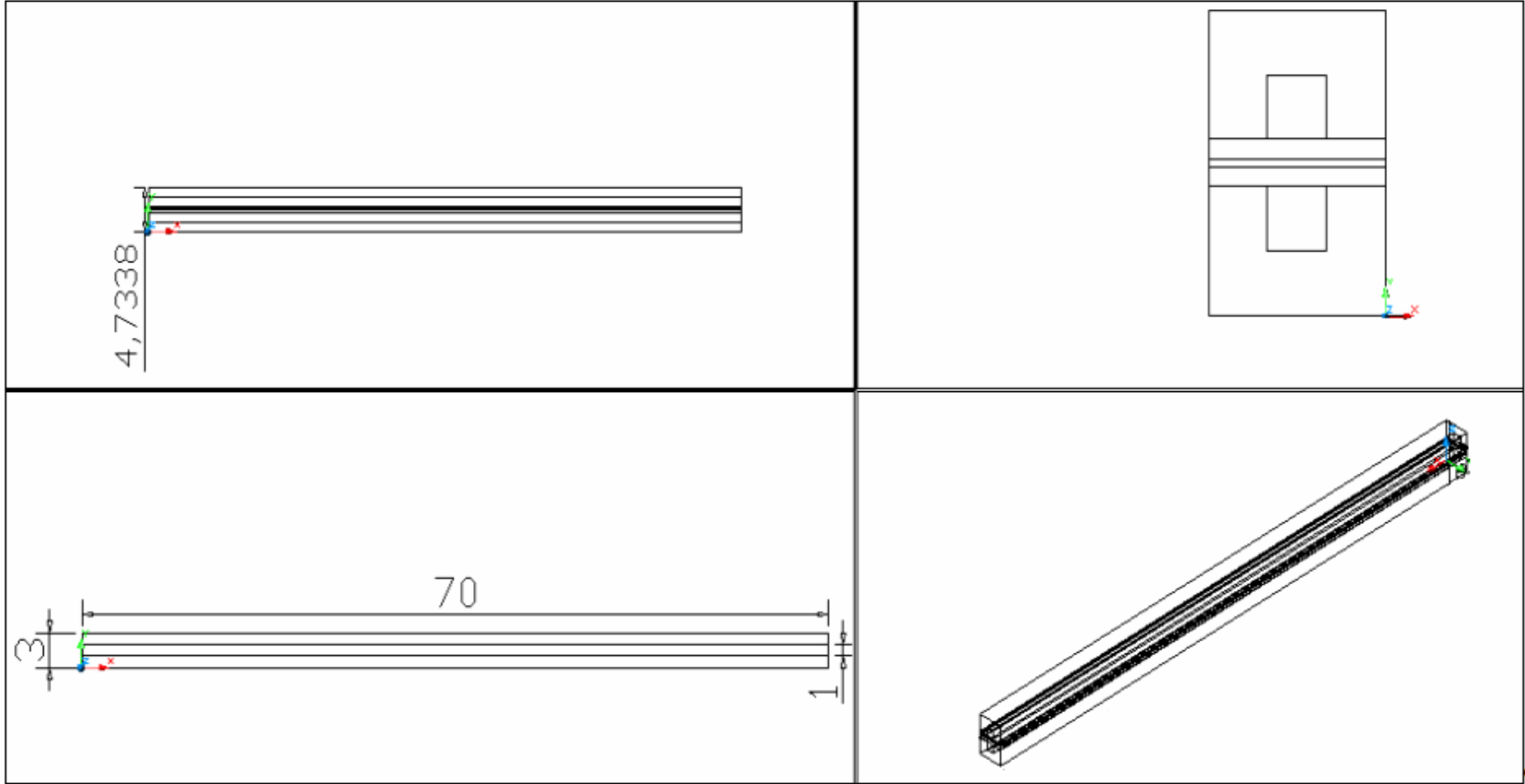


Şekil 3.2. (Devam) Fluent-Gambit modülü ile oluşturulan PEM yakıt hücresinin görünümü a) Ön görünüm, b) Kanalların izometrik görünümü, c) Tüm hücrenin montaj öncesi görünümü

Bunun yanı sıra, PEMFC geometrisine ait boyutlar Çizelge 3.1’de ise liste olarak Şekil 3.3’te ise plan şeklinde sunulmuştur.

Çizelge 3.1. PEM yakıt hücresinin tasarım parametreleri [10]

Tasarım Parametreleri	Değer
Kanal Uzunluğu, mm	70
Kanal Kalınlığı, mm	1
Kanal Genişliği, mm	1
Akım Toplayıcı Plaka Kalınlığı, mm	2
Difüzyon Tabaka Kalınlığı, mm	0,3
Katalizör Tabaka Kalınlığı, μm	12,9
Membran Kalınlığı, mm	0,108
Toplam PEMFC Kalınlığı, mm	4,7338
Toplam Hücre Genişliği, mm	3
Engelleyici Blok Kalınlığı, mm	3
Engelleyici Blok Yüksekliği, mm	0,7



Şekil 3.3. Modeli oluşturulan PEM yakıt hücresinin geometrik planı

PEMFC modeline ait elektrokimyasal özellikler Fluent programında girildiği şekliyle Çizelge 3.2’de sunulmuştur.

Çizelge 3.2. Modelde kullanılan elektrokimyasal parametreler

Elektrokimyasal Parametreler	Değerler
Anot Referans Akım Yoğunluğu [18]	$1,0 \times 10^9 \text{ A} \cdot \text{m}^{-3}$
Anot Referans Mol Konsantrasyonu [10]	$0,546 \text{ kmol} \cdot \text{m}^{-3}$
Anot Konsantrasyon Üssü [9]	0,25
Anot Dönüşüm Katsayısı [9]	1,5
Katot Referans Akım Yoğunluğu [18]	$20000 \text{ A} \cdot \text{m}^{-3}$
Katot Referans Mol Konsantrasyonu [10]	$0,00339 \text{ kmol} \cdot \text{m}^{-3}$
Katot Konsantrasyon Üssü [9]	0,5
Katot Dönüşüm Katsayısı [9]	2
Açık Devre Voltajı	1,18 V
Hidrojen Referans Diffüzivitesi [18]	$7,33 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
Oksijen Referans Diffüzivitesi [18]	$2,13 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
Su Referans Diffüzivitesi [18]	$7,33 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
Diğer Türlerin Referans Diffüzivitesi [18]	$4,90 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$

PEMFC geometrisine ait detaylı bilgiler Çizelge 3.3’te sunulmuştur.

Çizelge 3.3. PEM yakıt hücresine ait bileşenlerin geometrik bilgileri

Bileşen	X – uzunluğu (mm)	Y - uzunluğu (mm)	Z - uzunluğu (mm)
Anot akım toplayıcı plaka	3	2	70
Katot akım toplayıcı plaka	3	2	70
Anot gaz kanalı	1	1	70
Katot gaz kanalı	1	1	70
Anot gaz difüzyon tabaka	3	0,3	70
Katot gaz difüzyon tabaka	3	0,3	70
Anot katalizör tabaka	3	0,0129	70
Katot katalizör tabaka	3	0,0129	70
Membran	3	0,108	70
Engelleyici blok	1	0,7	3

Bu modelde kullanılan PEM yakıt hücresini oluşturan katmanlar ve özellikleri;

1. Katot akım toplayıcı plaka
2. Katot gaz kanalı
3. Katot gaz difüzyon tabakası
4. Katot katalizör tabakası
5. Membran
6. Anot katalizör tabakası
7. Anot gaz difüzyon tabakası
8. Anot gaz kanalı
9. Anot akım toplayıcı plaka

Çizelge 3.4’de görüldüğü üzere, PEM yakıt hücresindeki düşük çalışma sıcaklıkları nedeni ile anot ve katottaki elektrokimyasal reaksiyonları arttırmak için katalizör tabakalar platin, çift kutuplu plakalar ise yüksek elektriksel iletkenlikleri sebebiyle grafit olarak seçilmişlerdir. Gaz difüzyon tabakalarının malzemesi, Toray TGP-H-060 seçilmiştir. Katalizör tabakalar ise grafit ve platin malzemelerinin bileşiminden oluşan özelliklere sahiptir. Membran olarak Nafyon özellikleri alınmıştır.

Çizelge 3.4. PEMFC katmanlarının fiziksel özellikleri

Fiziksel Özellik	CC	GDL	CL	M
Yoğunluk (kgm^{-1})	2100 [14]	450 [14]	1240 [14]	2000 [14]
Özgül ısı ($Jkg^{-1}m^{-1}$)	1100 [14]	730 [14]	0,225 [14]	500 [14]
Isıl iletkenlik ($Wm^{-1}K^{-1}$)	20 [14]	20 [14]	0,24 [14]	70 [14]
Elektrik iletkenliği ($Ohmm$) ⁻¹	10^4 [14]	1250 [14]	1250 [14]	-
Gözeneklilik	-	0,4 [14]	0,4 [27]	-
Viskoz direnç (m^{-2})	-	$1,2 \times 10^{-12}$ [7]	$1,2 \times 10^{-12}$ [7]	-
Geçirgenlik (m^2)	-	$1,76 \times 10^{-11}$	-	$1,8 \times 10^{-18}$
Eşdeğer ağırlık ($kg\ mol^{-1}$)	-	-	-	1,1 [14]
Proton iletkenlik katsayısı	-	-	-	3 [9]

4. MATEMATİKSEL MODEL

Bu çalışmada, fiziksel modeli oluşturulan PEM yakıt hücresi içerisinde meydana gelen transport olaylarının matematiksel modeli, FLUENT ve PEMFC modülünde mevcut bulunan eşitlikler kullanılarak oluşturulmuştur. Bu yüzden, bu bölümde FLUENT'in çözdüğü eşitliklerden bahsedilecektir.

4.1. Kabuller

Bu çalışmada, hücre modeli geliştirilirken aşağıdaki genel kabuller göz önünde tutulmuştur:

1. Gaz akışı kararlı-durumda incelenecektir.
2. Bütün elektro kimyasal reaksiyonlarda, su, tek fazlı, yani, gaz fazında kabul edilmektedir.
3. Katalizör tabakalar sadece akım geçiren yüzeyler oldukları ve hesaplamalarda ihmal edilebilecek kadar ince oldukları için katalizör tabakaların ve membranın tek bir tabaka gibi hareket edecekleri kabul edilmiştir.
4. Membran su ile tamamen doyurulmuştur ve homojen bir yapıya sahiptir.
5. Gazlar, gaz yayıcı ve katalizör tabakalar boyunca yalnızca difüzyon yoluyla aktarılır.
6. Reaksiyona giren türler ideal gaz özelliği göstermektedir.
7. Difüzyon tabakalarındaki ve akım toplayıcı tabakalarda ohmic kayıplar ihmal edilmiştir.

4.2. Korunum Eşitlikleri

Bu kısımda, öncelikle FLUENT programının çözdüğü korunum eşitlikleri tanıtılacaktır. FLUENT'in çözdüğü korunum eşitlikleri genel formda verildikten sonra bu modelde kullanılan kabuller sıralanmıştır. Daha sonra, PEMFC modelinin katmanları ayrı ayrı ele alınarak, yapılan kabuller ve bu kabuller ışığında eşitliklerin aldığı formlar verilmiştir.

FLUENT kütle ve momentum korunum eşitliklerini tüm akışlar için çözmektedir. Isı transferi içeren akışlar için bu eşitliklere ilaveten enerji korunum eşitliği çözülür. Tür karışımını veya reaksiyonlarını içeren akışlar için tür korunum eşitliği çözülür. Eğer ön-karışimsız yanma modeli kullanılırsa, karışım kesri korunum eşitliği ve karışım kesrinin varyansı çözülür. Akış türbülanslı olduğu zaman ise ilave transport eşitlikleri çözülür.

FLUENT – PEMFC modülü kullanılarak PEM yakıt hücresinin modellenmesi sırasında, iki elektrik potansiyel alan çözülür. İlk elektrik potansiyel alanı membranda ve katalizör tabakalarda, diğeri ise katalizör tabakalarında, difüzyon tabakalarında ve akım toplayıcıda çözülür. Gözenekli katalizör bölgesindeki yüzey reaksiyonları çözülür ve reaksiyon difüzyon dengesi hesaplanan değere uygulanır. Hücre voltajındaki akım yoğunluğu hesaplanır. Alternatif olarak, hücre voltajında ortalama akım yoğunluğu değeri de hesaplanabilir. Bu çalışmada, sabit koordinat sisteminde, kütle, momentum, enerji, tür ve faz potansiyel korunum eşitlikleri çözülecektir [19].

4.2.1. Kütle korunum eşitliği

Kütle korunum eşitliği yada başka bir deyişle süreklilik eşitliği aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = S_m \quad (4.1)$$

Eş. 4.1, kütle korunum eşitliğinin genel şeklidir ve hem sıkıştırılabilir hem de sıkıştırılamaz akışlar için geçerlidir. Kaynak terimi, S_m sıvı damlacıklarının buharlaşması gibi benzer olaylar sonucu ikinci fazdan yayılarak sürekli faza ilave olan kütleyi ve herhangi bir kullanıcı tabanlı kaynağı temsil etmektedir.

4.2.2. Momentum korunum eşitlikleri

Sabit koordinat sistemi için momentumun korunumu Eş. 4.2 ile gösterilmektedir.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\bar{\bar{\tau}}) + \rho \vec{g} + \vec{S}_u \quad (4.2)$$

Burada P statik basıncı, $\bar{\bar{\tau}}$ gerilme tensörünü, $\rho \vec{g}$ ile $\vec{S}_u$ ise gövdesel yerçekimi kuvveti ile gövdesel dış kuvveti göstermektedir. $\vec{S}_u$ aynı zamanda gözenekli ortamlar ve kullanıcı tabanlı kaynaklar gibi benzer diğer model-bağılantılı kaynak terimleri içermektedir.

Gerilme tensörü $\bar{\bar{\tau}}$ ile ifade edilmektedir.

$$\bar{\bar{\tau}} = \mu \left[(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} \bar{\bar{I}} \right] \quad (4.3)$$

Burada μ , moleküler viskozite, $\bar{\bar{I}}$ ise birim tensörü temsil etmektedirler. Eş. 4.3'ün sağ tarafındaki ikinci terim, hacim genişlemesinin etkisini göstermektedir. Bu çalışmada, momentum eşitliği Darcy eşitliği kullanılarak gözenekli ortamlar için düzenlenmiştir.

4.2.3. Enerji denklemi

FLUENT, enerji eşitliğini aşağıdaki formda çözmektedir:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla \cdot [\vec{v}(\rho E + p)] = \nabla \cdot \left(k_{eff} \nabla T - \sum_j h_j \vec{J}_j + (\bar{\bar{\tau}}_{eff} \cdot \vec{v}) \right) + S_h \quad (4.4)$$

Bu eşitlikte geçen k_{eff} , etkin iletkenliktir ve $k_{eff} = k + k_t$ ile tanımlanır. k_t ise türbülans ısı iletkenliğidir ve kullanılan türbülans modeline göre tanımlanır. $\vec{J}_j$, j türünün difüzyon akısı olarak tanımlanır. Eş 4.4'ün sağ tarafındaki ilk üç terim, sırasıyla, iletim, tür difüzyonu ve viskoz yutum ile enerji transferini temsil etmektedirler. S_h terimi, kimyasal reaksiyon dahil herhangi bir hacimsel ısı kaynağını temsil etmektedir.

Eş 4.4 'te geçen toplam enerji, E ile ifade edilmektedir.

$$E = h - \frac{p}{\rho} + \frac{v^2}{2} \quad (4.5)$$

İdeal gazlar için özgül entalpi h ile gösterilir.

$$h = \sum_j Y_j h_j \quad (4.6)$$

Sıkıştırılmaz akış için özgül entalpi aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır:

$$h = \sum_j Y_j h_j + \frac{p}{\rho} \quad (4.7)$$

Eş 4.6 ve Eş 4.7'de geçen Y_j terimi j türünün kütle kesridir ve j türünün özgül entalpisi, h_j Eş.4.8'de gösterildiği gibi ifade edilmektedir.

$$h_j = \int_{T_{ref}}^T c_{p,j} dT \quad (4.8)$$

Burada geçen T_{ref} , referans sıcaklıktır ve değeri 298,15 K alınır. Bu çalışmada, kanallardaki akış sürekli ve laminar kabul edilmiştir.

Eş 4.4, genellikle, sıkıştırılmaz akışlarda ihmal edilen basınç işi ile kinetik enerji terimini içermektedir. Bu yüzden, sıkıştırılmaz akış çözülürken, “ayrık çözücü” (“segregated solver”) default olarak basınç işi ile kinetik enerjiyi içermez. Bu terimler, ilave edilmek istenirse, `define/models/energy?` Text komutu kullanılarak aktif hale getirilir. “eşleşmiş çözücüler” (“Coupled solvers”)’den biri kullanılarak veya sıkıştırılabilir akış modellenirken, basınç işi ile kinetik enerji terimleri her zaman dikkate alınır.

Eş 4.4, akış içerisindeki viskoz kesme sonucu oluşan ısı enerjisi tanımlayan viskoz yutum terimlerini içermektedir. “ayrık çözücü” kullanıldığında, viskoz ısıtma genellikle ihmal edilebilir mertebede olduğu için FLUENT’in default enerji eşitliği formu bu iki terimi içermez. Brinkman sayısı, Br 1’e yaklaşırken veya geçince, viskoz ısıtma önemli olmaktadır. Brinkman sayısı aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$Br = \frac{\mu U_e^2}{k \Delta T} \quad (4.9)$$

ΔT , sistem içerisindeki sıcaklık farkını temsil etmektedir.

Çözülecek problem, viskoz yutum terimlerini içermesi gerekli ise, “ayrık çözücü” kullanılır ve “Viscous Model Panel” içerisindeki “Viscous heating” seçeneği kullanılarak terimler aktif hale getirilir. Eğer, sıkıştırılabilir akış modeli tanımlanmış ise, FLUENT otomatik olarak, viskoz yutumunu aktif hale getirmez. Enerji eşitliği çözülürken, “eşleşmiş çözücüler”den biri kullanıldığında, viskoz yutum terimleri daima dikkate alınır.

Eş 4.4, tür difüzyonu ile entalpi transportunun etkisini içermektedir. “ayrık çözücü” kullanıldığında, $\nabla \cdot \left(\sum_j h_j \vec{J}_j \right)$ terimi, default olarak Eş 4.4’e ilave edilir. Eğer bu terim dahil edilmek istenmiyorsa, “Species model panel” menüsündeki “Diffusion

energy source” seçeneği kapatılmalıdır. “Eşleşmiş çözücü”lerden biri kullanıldığında, bu terim daima enerji eşitliğine dahil edilir.

Eş 4.4’teki S_h , enerji kaynak terimi, kimyasal reaksiyonla ilgili enerji kaynağını içermektedir.

$$S_{h,rxn} = - \sum_j \frac{h_j^0}{M_j} R_j \quad (4.10)$$

Burada, h_j^0 , j türünün oluşum entalpisi, R_j ise j türünün hacimsel üretim hızıdır.

Bu çalışmada, akışkan akışının olduğu kanallarda herhangi bir reaksiyonun gerçekleşmediği kabul edilmektedir. Dolayısıyla, gaz kanallarında kaynak teriminin etkisi dikkate alınmamıştır. Modelin çözümü “ayrık çözücü” kullanılarak gerçekleştirilmiştir.

Katı bölgelerde, FLUENT tarafından kullanılan enerji transport eşitliği aşağıdaki formdadır:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (\vec{v} \rho h) = \nabla \cdot (k \nabla T) + S_h \quad (4.11)$$

Bu eşitlikte geçen ρ , yoğunluk, $h = \int_{T_{ref}}^T c_p dT$, duyulur entalpi, k iletkenlik, T sıcaklık, S_h hacimsel ısı kaynağı olarak tanımlanmaktadır. Eş 4.11’in sol tarafındaki ikinci terim, katıların dönel ve öteleme hareketi ile ilgili konvektif enerji transferini göstermektedir. Hız alanı, katı bölgenin hareketinden hesaplanır. Eş 4.11’in sağ tarafındaki terimler ise, sırasıyla, iletimle ilgili ısı akısı ve katı içerisindeki hacimsel ısı kaynaklarını göstermektedir.

Bu çalışmada, elektro-kimyasal reaksiyonların katalizör tabakasında gerçekleştiği kabul edilmiştir. Bu yüzden, reaksiyonlar sonucu açığa çıkan enerji, katalizör tabakası enerji eşitliğinde kaynak terimine dahil edilmiştir.

Girişlerdeki net enerji transportu, hem konveksiyon hem de difüzyon bileşenlerinden oluşmaktadır. Giriş sıcaklığının tanımlanması ile konveksiyon bileşeni sabitlenir. Bununla birlikte, difüzyon bileşeni, hesaplanan sıcaklık gradyanına bağlıdır. Bu yüzden, difüzyon bileşeni, dolayısıyla net giriş transportu uygun şekilde tanımlanmamış olur

Bazı durumlarda, giriş sıcaklığından daha çok, net giriş enerji transportunun tanımlanması gerekebilir. “Ayrık çözücü” kullanılarak, giriş enerji difüzyonu devre dışı bırakılır ve net giriş enerji transportu tanımlanabilir. FLUENT default olarak, girişlerde difüzyon enerji akısını içermektedir. Giriş difüzyonunu iptal etmek için, *define/models/energy* komutunun kullanılması yeterlidir.

Gaz kanallarında ve difüzyon tabakasında; hız, sıcaklık ve tür yoğunluk değerlerinin hesaplanabilmesi için kütle korunumu, momentum ve enerji eşitlikleri çözülür. Momentum eşitlikleri, gözenekli ortamlar için Darcy kanunu kullanılarak hesaplanır. Çift yönlü kütle difüzyon eşitlikleri, gözenekli malzeme kullanılması sebebi ile Buruggmann sabiti kullanılarak düzeltilmiştir.

Katalizör tabakada meydana gelen reaksiyonların heterojen olduğu kabul edilir. Bu sebeple hidrojen ve oksijen oranları hesaplanırken, türlerin yüzeydeki değerleri kabul edilebilir. Reaksiyonlar katalizör tabakalarda yüzey reaksiyonu olarak değerlendirilir ve herhangi bir türün difüzyon ile azalmasının madde girişi ile dengelendiği kabul edilir. FLUENT PEM modülü ohmic ısı, suyun oluşumu esnasında açığa çıkan ısı, elektriksel iş ve suyun hal değişimi esnasında açığa çıkan ısıyı hesaplamak için EK-3’de verilen eşitlikleri kullanır. Elektrokimyasal eşitliklerin hesaplanması, hidrojenin oksitlenme oranına ve oksijen miktarındaki azalma temeline dayanılarak yapılır. PEMFC modelinde, kimyasal eşitliklerin iki katalizör tabakanın membran tarafındaki yüzeylerinde ve membranın bu yüzeylere bakan taraflarında olduğu, reaksiyonun da

heterojenliği varsayılarak çözüm elde edilir. Reaksiyonun oluşumunu sağlayan etken kuvvet ise membran yüzeyi ve katalizör katı tabakaları arasında oluşan potansiyel farktır.

PEMFC modeli, katalizör tabakalardaki akım transferini hesaplarken varsayılan eşitlik olarak Butler-Volmer fonksiyonunu kullanır. Harekete sebep olan kuvvet ise yüzeylerde var olan ve aktivasyon kaybı olarak da adlandırılan potansiyel farktır. Anot ve katot arasında oluşan potansiyel fark dış devre voltajı olarak adlandırılır.

4.3. PEMFC Modelinde Kullanılan Kabuller ve Korunum Eşitlikleri

Bu kısımda, her katmada oluşan transport olayları irdelendikten sonra matematiksel modelde kullanılan kabuller PEMFC katmanları için ayrı ayrı ele alınmış ve çözülen eşitliklerin yapısı tablo olarak sunulmuştur.

4.3.1. Gaz kanalları

Toplam iki adet düzgün doğrusal hava kanallarının bir tanesi anot, bir tanesi katot tarafında bulunmaktadır. Hava kanalları, akım toplayıcı ve gaz difüzyon tabakaları arasında yer almaktadırlar.

Gaz kanalları, plakalar içerisindeki akış yollarıdır. Hidrojen ve oksijen gazının katalizör yüzeyi üzerinde eşit olarak dağılmasını sağlarlar. Yakıt ve oksitleyici, gaz kanallarından gözenekli difüzyon tabakalara ve sonunda katalizör tabakalara doğru bir yol izlerler.

Aşağıdaki varsayımlar çözüm yapılan modelde gaz kanalları için düşünülmüştür.

1. Kararlı hal
2. Gaz kanallarındaki eğrilikler ihmal edilmiştir ve anot katot üzerindeki akış bölgesi düz kanal olarak modellenmiştir.
3. Gaz akışı laminer ve sıkıştırılmazdır ve viskozite sabittir.

4.3.2. Gaz difüzyon tabakaları

Gaz difüzyon tabakaları katalizör tabaka içerisindeki reaksiyon bölgelerine yakıt ve oksitleyici taşımaktadırlar. Yüksek elektrik iletkenliğine sahip olan karbon liflerden oluşmaktadırlar. Anot gaz difüzyon tabakası, anot katalizör tabakadan plakaya elektronları iletir. Katot gaz difüzyon tabakası ise elektronları plakadan katot katalizör tabakaya iletir. Gaz difüzyon tabakalarında tür transferi, elektrik potansiyeli ve katot tarafı için su transferi eşitlikleri uygulanmaktadır.

Aşağıdaki varsayımlar çözüm yapılan modelde gaz difüzyon tabakaları için düşünülmüştür.

1. Kararlı hal
2. İzotropik ve homojen olup gaz kanalı içerisine doğru bir uzama eğilimi göstermez
3. Viskozite sabittir.

Üç boyutlu olan bu çalışmada yapılan kabuller sonucunda gözenekli ortamlar için momentum korunumu eşitlikleri Darcy eşitliklerine dönüşmektedir.

4.3.3. Membran

Polimer membran protonlara göre seçicilik göstermektedir. Membrandan geçen proton vasıtası ile katotta oksijenin indirgenmesi gerçekleşmiş olur. Sadece üç nicelik membran içine taşınır. Protonlar, su ve enerji. Yapılan çalışmalarda membranın tam doygun olduğu zaman yüksek iyonik iletkenliğe ulaştığı görülmektedir. Membranın kalınlığı volt-amper karakteristiğini etkileyen en önemli faktörler arasındadır.

Aşağıdaki varsayımlar çözüm yapılan model de membran için düşünülmüştür.

1. Kararlı hal

2. Membran boyunca, uygulanan basınç farkından oluşan su taşınımı hesaba katılamamıştır.

4.3.4. Katalizör tabakalar

Katalizlenmiş olan karbon parçacıklar (platin parçacıklar) gaz difüzyon tabakaları ve membran arasındaki ara yüze yerleştirilir. Elektrokimyasal reaksiyonlar sadece platin parçacıklar yüzeyinde gerçekleşir. Katalizör tabakanın aktif yüzey alanı kendi etkinliğinin ölçüsüdür. Yakıt ve oksitleyiciyi ayırır, çoğunlukla gazlara geçirgen değildir. Katalizör tabakaları, türleri, elektrokimyasal reaksiyona girmeden önce suda çözer. Tüm elektrokimyasal reaksiyonların gerçekleşebilmeleri için, öncelikle, reaktiflerin özel bir enerji seviyesine yükseltilmeleri gerektiğinden dolayı hidrojen ve oksijen, oda sıcaklığında karıştırıldıklarında kendiliğinden tepkimeye girmezler. Bu enerji seviyesi reaksiyon aktivasyon enerjisi olarak adlandırılır. Aktivasyon enerjisi, bir reaksiyonun gerçekleşebilmesi için gerekli olan enerjidir. Yani, reaksiyonun başlayabilmesi için, reaktanları enerji bariyerinin üzerine çıkarmak için gerekli olan enerjidir. Aktivasyon enerjisindeki değişim, Gibbs free enerji değişimi $\Delta G \left[\frac{kcal}{mole} \right]$

olarak tanımlanır. ΔG , sabit sıcaklık (T) ve basınçta (p) gerçekleşen bir elektrokimyasal reaksiyondan, iş olarak elde edilebilecek maksimum elektrik enerjisini tanımlar. Katalizör kullanımı sonucunda reaksiyonun aktivasyon enerji seviyesi azalır ve bu koşul altında elektrokimyasal reaksiyon daha düşük sıcaklıklarda gerçekleşebilir ve daha fazla verim elde edilir. Katalizör tabakalarda tür transferi, elektrik potansiyeli ve proton potansiyeli eşitlikleri uygulanmaktadır.

Aşağıdaki varsayımlar çözüm yapılan modelde katalizör tabakalar için düşünülmüştür.

1. Kararlı hal
2. Katalizör tabakalar homojen ve izotropiktir
3. Gaz akışı laminar ve sıkıştırılmazdır .

4. Viskozitesi sabittir

4.3.5. Akım toplayıcı plakalar

Akım toplayıcı plakalar elektrik ve ısı iletkenliği iyi olan grafitten meydana gelmektedir. Yakıt hücresinde, anot akım toplayıcı ve katot akım toplayıcı olmak üzere iki adet akım toplayıcı yüzey bulunmaktadır. Sadece enerji ve elektrik akımı akım toplayıcı plakalar içerisinde transport edilir.

4.4. Genel Korunum Eşitliği

Süreklilik, momentum, enerji, tür, faz potansiyeli, vb. kararlı-durum korunum eşitlikleri, kartezyen koordinatlarda genel formda yazılacak olursa:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \phi) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) + S_\phi \quad (4.12)$$

ile ifade edilebilir. Burada ϕ bağımlı değişken, Γ_ϕ etkin difüzyon katsayısı ve S_ϕ ise birim hacimdeki ϕ değişkeni için kaynak terimini temsil etmektedir. Çizelge 4.1'de Γ_ϕ ve S_ϕ değerlerinin korunum eşitliklerine göre aldığı formlar sunulmuştur.

Çizelge 4.1. Genelleştirilmiş korunum eşitliğindeki terimler

Eşitlik	ϕ	Γ_ϕ	S_ϕ
Süreklilik	1	0	0
Momentum	u_i	μ_{eff}	S_u
Enerji	h	μ_{eff}/σ_h	S_h
Tür	m_k	μ_{eff}/σ_k	S_k

Genelleştirilmiş korunum eşitliğindeki kaynak terimlerinin PEMFC katmanlarına göre aldığı formlar ise Çizelge 4.3’de sunulmuştur.

Çizelge 4.3’de sunulan katalizör tabakadaki türler ve potansiyel için kaynak terimlerinin anot ve katot kısımlarında aldığı formlar Çizelge 4.2’de açıklanmıştır.

Çizelge 4.2. Katalizör tabaka - tür kaynak teriminin anot ve katota göre aldığı formlar

Katmanlar	Anot Katalizör Tabaka	Katot Katalizör Tabaka
Tür Kaynak Terimi S_k	$S_{H_2} = -\frac{M_{w,H_2}}{2F} R_{an}$	$S_{O_2} = -\frac{M_{w,O_2}}{4F} R_{cat}$
	$S_{H_2O} = 0$	$S_{H_2O} = \frac{M_{w,H_2O}}{2F} R_{cat}$
Akım Yoğunluğu $R \text{ (Am}^{-3}\text{)}$	$R_{an} = j_{an}^{ref} \left(\frac{[H_2]}{[H_2]_{ref}} \right)^{\gamma_{an}} \left(e^{\alpha_{an} F \eta_{an} / RT} \right)$	$R_{cat} = j_{cat}^{ref} \left(\frac{[O_2]}{[O_2]_{ref}} \right)^{\gamma_{cat}} \left(e^{-\alpha_{cat} F \eta_{cat} / RT} \right)$

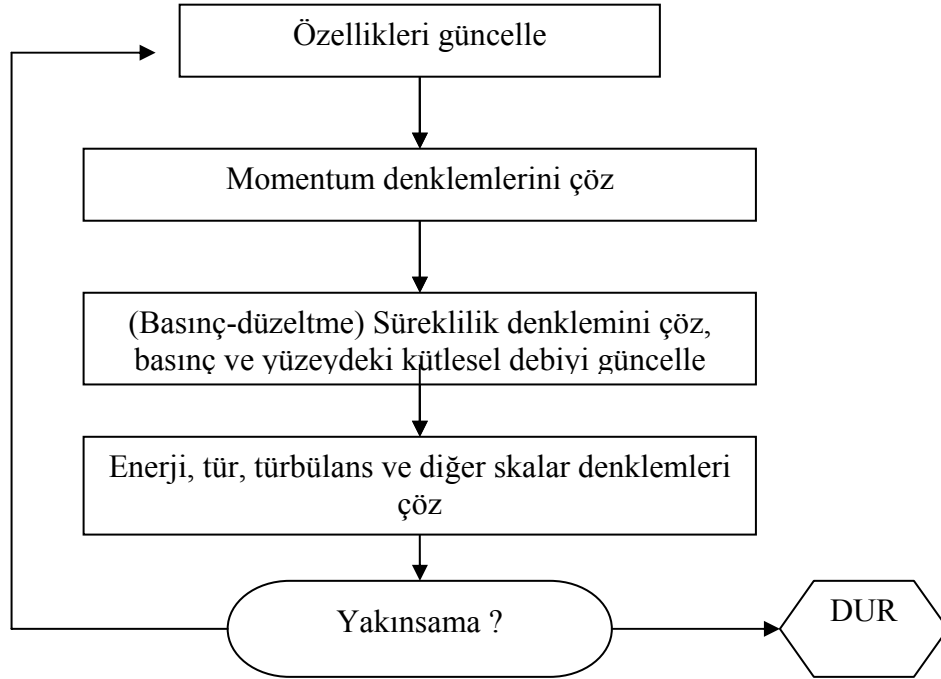
Çizelge 4.3. PEM Yakıt hücresi tabakalarında çözülen eşitlikler ve kaynak terimleri

Nicelik	Korunum Eşitlikleri	Kaynak terimleri				
		Akım Toplayıcı	Gaz Kanalları	Gaz Difüzyon Tabaka	Katalizör	Membran
Kütle	$\nabla(\rho \vec{u}) = S_m$	$S_m = 0$	$S_m = 0$	$S_m = 0$	$S_m = 0$	$S_m = 0$
Momentum	$\frac{1}{\varepsilon^2} \nabla(\rho \vec{u} \vec{u}) = -\nabla p + \nabla \tau + S_u$	$S_u = 0$	$S_u = 0$	$S_u = -\frac{\mu}{K} \varepsilon^2 \vec{u}$	$S_u = -\frac{\mu}{K} \varepsilon^2 \vec{u}$	$S_u = -\frac{\mu}{K} \varepsilon^2 \vec{u}$
Tür	$\nabla(\vec{u} C_k) = \nabla(D_k^{eff} \nabla C_k) + S_k$	$S_k = 0$	$S_k = 0$	$S_k = 0$	$S_k = -\frac{M_{w,k}}{nF} R_{an}, k = H_2$ $S_k = -\frac{M_{w,k}}{nF} R_{cat}, k = O_2, H_2O$	$S_k = 0$
Katı Faz Potansiyeli	$\nabla \cdot (\sigma_{sol} \nabla \phi_{sol}) + S_{\phi,sol} = 0$	$S_{\phi,sol} = 0$	$S_{\phi,sol} = 0$	$S_{\phi,sol} = 0$	$S_{\phi,sol} = -R_{an}$ $S_{\phi,sol} = R_{cat}$	$S_{\phi,sol} = 0$
Membran Potansiyeli	$\nabla \cdot (\sigma_{mem} \nabla \phi_{mem}) + S_{\phi,mem} = 0$	$S_{\phi,mem} = 0$	$S_{\phi,mem} = 0$	$S_{\phi,mem} = 0$	$S_{\phi,mem} = R_{an}$ $S_{\phi,mem} = -R_{cat}$	$S_{\phi,mem} = 0$
Enerji	$\nabla(\vec{u} \rho h) = \nabla(k^{eff} \nabla T) + S_h$	$S_h = 0$	$S_h = 0$	$S_h = 0$	$S_h = I^2 R_{ohm} + h_{reaction} + \eta R_{an,cat} + h_{phase}$	$S_h = 0$

5. ÇÖZÜM TEKNİĞİ

5.1. Ayırık (Segregated) Çözüm Metodu

Ayrık çözücü, FLUENT'in kullandığı çözüm algoritmasıdır. Bu yaklaşım kullanılarak, yönetici eşitlikler, birbirinden ayırık, ardışık olarak çözülürler. Yönetici eşitlikler non-lineer (ve birbirine bağlı-eşleşmiş) oldukları için, yakınsak çözüm elde edilmeden önce, çözüm çevriminin birkaç iterasyonu gerçekleştirilmelidir. Her iterasyon Şekil 5.1'de gösterilen adımlardan oluşmaktadır.



Şekil 5.1. Ayırık çözüm metodunun adımları

Ayrık çözüm metodunun adımları aşağıdaki gibi gerçekleşmektedir.

1. Mevcut çözüme göre akışkan özellikleri güncellenir. (Hesap yeni başladıysa, başlangıç değerlerine göre elde edilen çözümün değerleri kullanılarak güncelleme yapılır.)

2. u , v ve w momentum eşitliklerinin herbiri, hız alanını güncellemek için, mevcut basınç ve yüzeydeki kütle akılarının değerleri kullanılarak çözülür.
3. İkinci adımda elde edilen hızlar, bölgesel olarak süreklilik eşitliğini sağlamayabileceği için, süreklilik ve lineerleştirilmiş momentum eşitliklerinden basınç düzeltmesi için “Poisson-type” bir eşitlik elde edilir. Bu basınç düzeltme eşitliği, daha sonra, basınç ve hız alanlarına ve yüzeydeki kütle akılarına, süreklilik eşitliğini sağlayacak şekilde gerekli düzeltmeleri vererek çözülür.
4. Daha önce güncellenen diğer değişkenlerin değerleri kullanılarak, türbülans, enerji, türler ve radyasyon gibi skalar nicelikler için eşitlikler çözülür.
5. Fazlararası ilişkilendirme yapıldığında, uygun sürekli faz eşitlikleri içerisindeki kaynak terimleri, ayrık faz izdüşüm hesabı yapılarak güncellenebilir.
6. Eşitliklerin yakınsama kontrolü yapılır.

Bu adımlar, yakınsama kriteri sağlanana kadar devam eder.

5.2. Eşitliklerin Ayrıklaştırılması

FLUENT, yönetici eşitlikleri, sayısal olarak çözülebilen cebirsel eşitliklere dönüştürmek için kontrol-hacim-tabanlı bir teknik kullanmaktadır. Bu kontrol hacim tekniği, bir kontrol-hacim temeli üzerinde, her bir niceliğin sakınımı sağlayan ayrık eşitliklere ulaşarak, her kontrol hacmi etrafında yönetici eşitlikleri integre etmekten ibarettir.

Bu çalışmada, eşitliklerin ayrıklaştırılmasında Implicit, birinci dereceden ayrıklaştırma tekniği kullanılmıştır. STANDART Basınç ve Laminer akış için çözüm yapılmıştır. Sonuçların yakınsaması için relaksasyon parametreleri, momentum ve basınç için 0,3 olarak belirlenmiştir.

5.3. Basınç-Hız Eşleşmesi

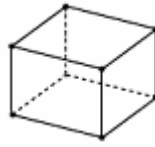
FLUENT, dört farklı basınç-hız eşleşme seçeneği sunmaktadır: SIMPLE, SIMPLEC, PISO, ve (zamana bağlı akışlar için, non-iteratif zaman ilerletme planı (NITA)) kesri

adım (FSM). Bu çalışmada ise SIMPLE algoritması kullanılmıştır. SIMPLE algoritması, kütle korunumunu hızlandırmak ve basınç alanını elde etmek için basınç düzeltmeleri ile hız arasında bir bağıntı kullanır. Eğer momentum eşitliği, tahmin edilen basınç alanı kullanılarak çözülürse, sonuç yüzey akısı, süreklilik eşitliğini sağlamaz. Sonuç olarak, düzeltilmiş yüzey akısının süreklilik eşitliğini sağlaması için, yüzey akısına bir düzeltme eklenir. SIMPLE algoritması, hücre içerisinde basınç düzeltmesi için ayrıklaştırılmış eşitlik elde etmek için, akı düzeltme eşitliklerini ayrıklaştırılmış süreklilik eşitliği içerisine yerleştirir. Basınç düzeltme eşitliği, cebirsel çoklu-ağ (AMG) metodu kullanılarak çözülebilir. Çözüm elde edilince, hücre basıncı ve yüzey akısı düzeltilir. Böylece, düzeltilmiş yüzey akısı, her iterasyon süresince, ayrıklaştırılmış süreklilik eşitliğini sağlar.

Bu çalışmada, ayrıklaştırılmış eşitliklerin çözüm algoritması olarak SIMPLE çözüm algoritması kullanılmıştır.

5.4. Ağ Yapısı

PEM yakıt hücre geometrisinin yükseklik / uzunluk oranının çok küçük olması nedeni ile hexagonal ve tetrahedral ağ yapıları seçimi yapılmıştır (Şekil 5.2).



Şekil 5.2. Hexagonal eleman yapısı

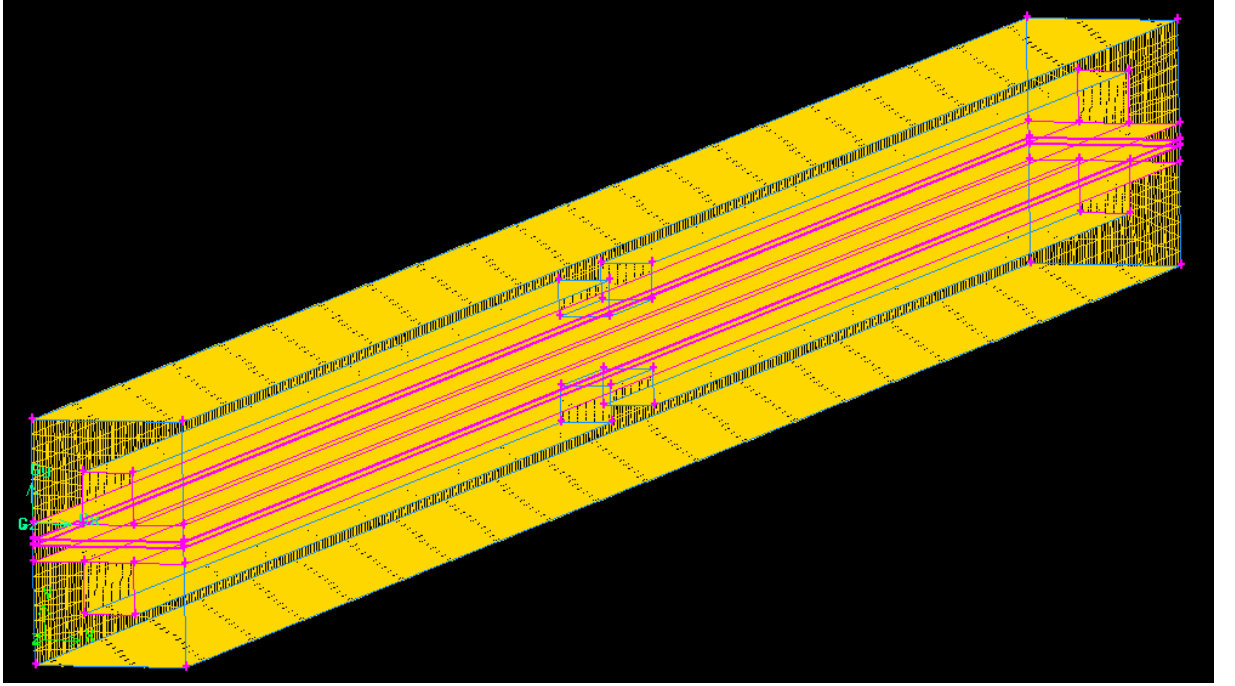
Düğüm sayısının belirlenebilmesi için; çözümlerin düğüm sayısından etkilenmeyeceği koşul elde edilmeye çalışılmıştır. Bunun için değişik sayıda düğümüne sahip geometriler oluşturulmuş ve çözümler elde edilmiştir. Sonuçların düğüm sayısından bağımsız olmaya başladığı durum gözlenerek minimum çalışma düğüm sayısı belirlenmiştir. Tüm çözümler minimum düğüm sayısı kullanılarak yapılmıştır.

Beş farklı sıklık ölçüsü ve buna karşılık gelen düğüm sayıları için ağ yapı oluşturulmuştur. Çizelge 5.1’de farklı sıklıktaki hexagonal tip ağ yapıları için PEMFC katmanlarındaki eleman sayılarının dağılımı görülmektedir.

Çizelge 5.1. Farklı sıklıktaki hexagonal tip ağ yapıları için PEMFC katmanlarındaki eleman sayıları dağılımı

PEMFC Bileşenleri	Gambit’te Kullanılan Sıklık Ölçüleri				
	0,15	0,2	0,4	0,5	0,6
Akım Toplayıcı	209216	87500	12600	5600	3276
Gaz Kanalı	45766	17500	3150	1120	936
Gaz Difüzyon Tabakası	39228	10500	3150	1680	1404
Katalizör Tabaka	19614	10500	3150	1680	1404
Membran	9807	5250	1575	840	702
Toplam Hücre	323631	131250	18900	10920	7722

Şekil 5.3’de Gambit programı kullanılarak oluşturulan PEMFC geometrisine ait hexagonal elemanlardan oluşan ağ yapısı görülmektedir.



Şekil 5.3. PEM yakıt hücresinin hexagonal elemanlardan oluşan ağ yapısı

5.5. Sınır Şartları

Bu kısımda, bu çalışmada kullanılan PEMFC modeline ait FLUENT programında mevcut bulunan sınır şartları ile ilgili genel bilgiler verildikten sonra modele ait sınır şartları tablo halinde sunulmuştur.

5.5.1. “Kütleli debi giriş” (Mass flow inlet) sınır şartı

“Kütleli debi giriş” sınır şartı, girişte kütle debisini veya kütle akı dağılımını tanımlamak için kullanılabilir. Kütle debisinin tanımlanması, toplam basıncın iç bölgelerdeki çözümle etkileşimli olarak değişmesine müsaade etmektedir. Bu durum, kütle akısı değişirken toplam basıncın sabit tutulduğu “basınç tanımlı giriş” (pressure inlet) sınır şartının tam tersidir.

“Kütleli debi giriş” sınır şartı, girişteki akımın toplam basıncı yerine kütleli debisini tanımlamanın daha önemli olduğu durumlarda kullanılır.

1. Giriş toplam basıncının ayarlanması, yakınsamada yavaşlamaya sebep olabilir. Hem “basınç tanımlı giriş” hem de “kütlesel debi giriş” sınır şartı vermek mümkün ise, “basınç tanımlı giriş” sınır şartının verilmesi daha iyi olur.
2. Yoğunluk sabit olduğu zaman, “hız tanımlı giriş” (velocity inlet) sınır şartı kütle akısını sabitleştireceği için, sıkıştırılamaz akışlarda “kütlesel akış giriş” sınır şartını kullanmak gerekli değildir.
3. Mass flow inlet sınır şartı anot ve katotta bulunan gaz kanallarının, gaz giriş bölgeleri için uygulanmaktadır.

Bu çalışmada, anot ve katot kısmında bulunan gaz kanallarının girişinde “külesel akış giriş” sınır şartı kullanılmıştır.

5.5.2. “Basınç tanımlı çıkış” (Pressure Outlet) sınır şartı

“Basınç tanımlı çıkış” sınır şartları, çıkış sınırındaki statik (cihaz) basıncının tanımlanmasını gerektirmektedir. Tanımlanan statik basınç değeri, akış sadece ses-altı olduğu zaman kullanılır. Eğer akış bölgesel olarak ses-üstü ise, tanımlı basınç kullanılmaz; basınç, iç bölgelerdeki akıştan ekstrapolasyon yolu ile hesap edilerek bulunur.

Çözüm işlemi süresince, “basınç tanımlı çıkış” sınırında, akış tersi yönünde, “ters-akış” şartlarının olduğu durumlar tanımlanır. Hız sıfır olsa bile bu sınır şartı kullanılabilir.

Bu çalışmada, anot ve katot kısmında bulunan gaz kanallarının çıkışında “basınç tanımlı çıkış” sınır şartı kullanılmıştır.

5.5.3. “Duvar” (Wall) sınır şartı

Akışkan ve katı bölgeleri sınırlandırmak için “duvar” sınır şartı kullanılmaktadır. Viskoz akışlarda, duvarlarda, default olarak, “kaymasız sınır şartı” (no-slip boundary condition) kullanılmıştır. Bununla birlikte, kesmeyi tanımlayarak “kayma” sınır şartı

veya duvar sınırının ötelenme veya dönel hareketi çinsinden teğetsel hız bileşeni tanımlanabilir.

Enerji eşitlikleri için akışkan ve katı bölge sınırında sıcaklık tanımlamak gerekmektedir.

Bu çalışmada, “duvar” sınır şartı, anot ve katotta bulunan hava kanallarının akım toplayıcı tabakalar ile temas eden yüzeyleri ve yakıt hücresinin dış hava ile temas eden tüm dış yüzeyleri için tanımlanmıştır.

5.5.4. “Gözenekli tabaka geçiş” (Porous jump) sınır şartı

“Gözenekli tabaka geçiş” sınır şartı, hız veya basınç düşüş karakteristikleri bilinen ince bir membranı modellemek için kullanılır. Gözenekli tabaka geçiş sınır şartı hücreler için gözenekli ortam modelinin basitleştirilmiş 1-B şeklidir. Hem daha güçlü hem de daha iyi yakınsama özelliği sebebiyle, bu basitleştirilmiş 1-B modelin tüm gözenekli ortam modeli yerine kullanılması, mümkün olduğu durumlarda tercih edilmelidir.

Bu ince gözenekli ortam, Darcy kanunu ve ilave atalet kaybı teriminin bileşimi olarak tanımlanan basınç değişimleri üzerinde belli bir kalınlığa sahiptir.

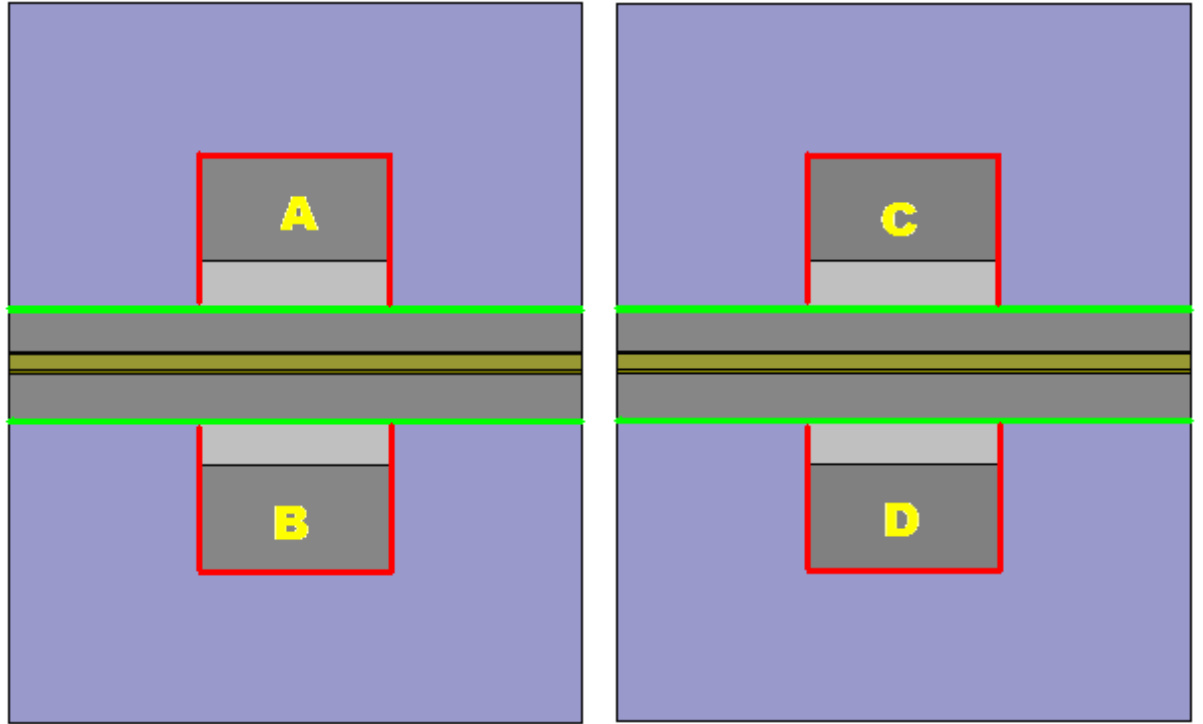
$$\Delta P = -\left(\frac{\mu}{\alpha}v + C_2 \frac{1}{2}\rho v^2\right)\Delta m \quad (5.1)$$

Burada; μ , Laminer akış viskozitesi, α , Ortamın gözenekliliği, C_2 , Basınç değişim katsayısı, v , Gözenekli yüzeye dik hız, Δ_m ise gözenekli ortam kalınlığını göstermektedir.

Bu çalışmada, “gözenekli tabaka geçiş” sınır şartı membran-katalizör tabakası ve gaz difüzyon tabakası- gaz kanalı tabakaları arasında tanımlanmıştır.

5.6. PEMFC Modelinde Kullanılan Sınır Şartları

Fluent programı kullanılarak PEM yakıt hücresi geometrisine verilen sınır şartları Şekil 5.4’de görülmektedir.



	Duvar sınır şartı
	GDL-Gözenekli tabaka geçiş sınır şartı
A	AGC- Kütlesel debi giriş sınır şartı
B	CGC- Kütlesel debi giriş sınır şartı
C	AGC- Basınç tanımlı çıkış sınır şartı
D	CGC- Basınç tanımlı çıkış sınır şartı

Şekil 5.4. Gaz giriş ($z = 0$ mm) yüzeyi ve gaz çıkış ($z = 70$ mm) yüzeyi sınır şartları

Çizelge 5.2. PEM Yakıt hücresi anot tabakalarında çözülen eşitlikler ve sınır şartları terimleri

Nicelik	Korunum denklemleri	Tabakalar				
		ACC	AGC	AGDL	Anot Katalizör	Membran
Kütle	$\nabla(\rho \vec{u}) = S_m$	ZDF - ZDF ZDF - ZDF ZDF - ZDF	ZDF - ZDF PJ - ZDF MFI - SV=0	ZDF - ZDF PJ - TD ZDF - ZDF	ZDF - ZDF TD - PJ ZDF - ZDF	ZDF - ZDF PJ - PJ ZDF - ZDF
Momentum	$\frac{1}{\varepsilon^2} \nabla(\rho \vec{u} \vec{u}) = -\nabla p + \nabla \tau + S_u$	NS - NS NS - NS NS - NS	NS - NS PJ - NS MFI - PO (P=0)	NS - NS PJ - TD NS - NS	NS - NS TD - PJ NS - NS	NS - NS PJ - PJ NS - NS
Tür	$\nabla(\vec{u} C_k) = \nabla(D_k^{eff} \nabla C_k) + S_k$	ZDF - ZDF ZDF - ZDF ZDF - ZDF	ZDF - ZDF PJ - ZDF MFI - SV=0	ZDF - ZDF PJ - TD ZDF - ZDF	ZDF - ZDF TD - PJ ZDF - ZDF	ZDF - ZDF PJ - PJ ZDF - ZDF
Katı faz Potansiyeli	$\nabla \cdot (\sigma_{sol} \nabla \phi_{sol}) + S_{\phi, sol} = 0$	CB; CB CB; SV=0 CB; CB	CB; CB PJ - SF=0 SF=0 - SF=0	SF=0 - SF=0 PJ - TD SF=0 - SF=0	SF=0 - SF=0 TD - PJ SF=0 - SF=0	SF=0 - SF=0 PJ - PJ SF=0 - SF=0
Membran Potansiyeli	$\nabla \cdot (\sigma_{mem} \nabla \phi_{mem}) + S_{\phi, mem} = 0$	CB; CB CB; SF=0 CB; CB	CB; CB PJ - SF=0 SF=0 - SF=0	SF=0 - SF=0 PJ - TD SF=0 - SF=0	SF=0 - SF=0 TD - PJ SF=0 - SF=0	SF=0 - SF=0 PJ - PJ SF=0 - SF=0
Enerji	$\nabla(\vec{u} \rho h) = \nabla(k^{eff} \nabla T) + S_h$	HF=0; HF=0 CB; T=353 K HF=0; HF=0	CB; CB PJ - HF=0 T=353 K - T=300	HF=0 – HF=0 PJ - TD HF=0 - HF=0	HF=0 - HF=0 TD - PJ HF=0 - HF=0	HF=0 - HF=0 PJ - PJ HF=0 - HF=0
Su İçeriği		SF=0; SF=0 CB-SF=0 SF=0 - SF=0	CB; CB PJ - SF=0 SF=0 - SF=0	SF=0 - SF=0 PJ - TD SF=0 - SF=0	SF=0 - SF=0 TD - PJ SF=0 - SF=0	SF=0 - SF=0 PJ - PJ SF=0 - SF=0

Çizelge 5.3. PEM Yakıt hücresi katot tabakalarında çözülen eşitlikler ve sınır şartları terimleri

Nicelik	Korunum denklemleri	Tabakalar				
		CCC	CGC	CGDL	Katot Katalizör	Membran
Kütle	$\nabla(\rho \vec{u}) = S_m$	ZDF - ZDF ZDF - ZDF ZDF - ZDF	ZDF - ZDF PJ - ZDF MFI - SV=0	ZDF - ZDF PJ - TD ZDF - ZDF	ZDF - ZDF TD - PJ ZDF - ZDF	ZDF - ZDF PJ - PJ ZDF - ZDF
Momentum	$\frac{1}{\varepsilon^2} \nabla(\rho \vec{u} \vec{u}) = -\nabla p + \nabla \tau + S_u$	NS - NS NS - NS NS - NS	NS - NS PJ - NS MFI - PO (P=0)	NS - NS PJ - TD NS - NS	NS - NS TD - PJ NS - NS	NS - NS PJ - PJ NS - NS
Tür	$\nabla(\vec{u} C_k) = \nabla(D_k^{eff} \nabla C_k) + S_k$	ZDF - ZDF ZDF - ZDF ZDF - ZDF	ZDF - ZDF PJ - ZDF MFI - SV=0	ZDF - ZDF PJ - TD ZDF - ZDF	ZDF - ZDF TD - PJ ZDF - ZDF	ZDF - ZDF PJ - PJ ZDF - ZDF
Katı faz Potansiyeli	$\nabla \cdot (\sigma_{sol} \nabla \phi_{sol}) + S_{\phi, sol} = 0$	CB; CB SV=V _{hücre} ; CB CB; CB	CB; CB PJ - SF=0 SF=0 - SF=0	SF=0 - SF=0 PJ - TD SF=0 - SF=0	SF=0 - SF=0 TD - PJ SF=0 - SF=0	SF=0 - SF=0 PJ - PJ SF=0 - SF=0
Membran Potansiyeli	$\nabla \cdot (\sigma_{mem} \nabla \phi_{mem}) + S_{\phi, mem} = 0$	CB; CB SF=0; CB CB; CB	CB; CB PJ - SF=0 SF=0 - SF=0	SF=0 - SF=0 PJ - TD SF=0 - SF=0	SF=0 - SF=0 TD - PJ SF=0 - SF=0	SF=0 - SF=0 PJ - PJ SF=0 - SF=0
Enerji	$\nabla(\vec{u} \rho h) = \nabla(k^{eff} \nabla T) + S_h$	HF=0; HF=0 T=353 K; CB HF=0; HF=0	CB; CB PJ - HF=0 T=353 K - T=300	HF=0 - HF=0 PJ - TD HF=0 - HF=0	HF=0 - HF=0 TD - PJ HF=0 - HF=0	HF=0 - HF=0 PJ - PJ HF=0 - HF=0
Su İçeriği		SF=0; SF=0 SF=0; CB SF=0; SF=0	CB; CB PJ - SF=0 SF=0 - SF=0	SF=0 - SF=0 PJ - TD SF=0 - SF=0	SF=0 - SF=0 TD - PJ SF=0 - SF=0	SF=0 - SF=0 PJ - PJ SF=0 - SF=0

PEMFC modelinde tanımlı yüzeyler ve sınır şartları Çizelge 5.4’de listelenmiştir.

Çizelge 5.4. PEMFC modelinde tanımlı yüzeyler ve sınır şartları

Kütleli Debi Giriş	Basınç Tanımlı Çıkış	Gözenekli Tabaka Geçiş	Duvar		Default-İç
agc_i cgc_i	agc_o cgc_o	cdl1 cdl2 cdl3 adl1 adl2 adl3 membrane_u membrane_b	acc_uw ccc_bw wall.2 wall.3 wall.4 wall.5 wall.10 wall.11 wall.12 wall.13 wall.21 wall.22 wall.23 wall.24 wall.28	wall.29 wall.30 wall.31 wall.32 wall.33 wall.34 wall.35 wall.38 wall.39 wall.40 wall.41 wall.42 wall.43 wall.44 wall.45	default-interior:064 default-interior:063 default-interior:062 default-interior:061 default-interior:060 default-interior:059 default-interior:058 default-interior:057 default-interior:056 default-interior:055 default-interior:053 default-interior:001 default-interior

6. SONUÇLAR

Bu çalışmada, FLUENT-PEMFC modülü kullanılarak modeli oluşturulan PEM yakıt hücresinde 9 farklı durum için çözüm elde edilmiştir (Çizelge 6.1). Çözümler 18900 düğüm sayısı kullanılarak elde edilmiştir.

Çizelge 6.1. İncelenen durumlara ait işletim parametreleri [27]

Durum No	Basınç <i>Atm</i>	Sıcaklık [T] K	Bağıl Nem [ϕ] %	Hız (V) m/s
1	1	353	1	1,75
2	1	353	0,6	1,75
3	1	353	0,2	1,75
4	1	353	1	$0,7 \times 1,75$
5	1	353	1	$0,2 \times 1,75$
6	1	353	0,6	$0,7 \times 1,75$
7	1	353	0,6	$0,2 \times 1,75$
8	1	353	0,2	$0,7 \times 1,75$
9	1	353	0,2	$0,2 \times 1,75$

Çözümlerde kullanılmak üzere Çizelge 6.1'deki durumlara ait kütleli debi ve kütle kesri hesapları yapılmış olup Çizelge 6.2'de gösterilmiştir. Ayrıca incelenen durumlar için giriş ve çıkış şartlarının belirlenmesi Ek-6'da anlatılmıştır.

Çizelge 6.2. Jang ve ark.'nın sayısal çalışma durumlarına karşılık gelen ve PEMFC modülünde girilmesi gereken veriler [27]

Durum No	Basınç <i>Atm</i>	Kütleli Debi [$kg s^{-1}$]		Kütle Kesri			
		Anot	Katot	Anot		Katot	
				Hidrojen	Su	Oksijen	Su
1	1	$3,0979 \times 10^{-6}$	$1,5771 \times 10^{-6}$	0,113	0,887	0,1494	0,3561
2	1	$8,7565 \times 10^{-6}$	$1,2641 \times 10^{-6}$	0,2229	0,7771	0,1864	0,1966
3	1	$9,6832 \times 10^{-6}$	$1,0812 \times 10^{-6}$	0,5203	0,4797	0,2180	0,0607
4	1	$2,1685 \times 10^{-6}$	$1,1040 \times 10^{-6}$	0,113	0,887	0,1494	0,3561
5	1	$6,1958 \times 10^{-7}$	$1,1040 \times 10^{-6}$	0,113	0,887	0,1494	0,3561
6	1	$6,1295 \times 10^{-6}$	$8,8488 \times 10^{-7}$	0,2229	0,7771	0,1864	0,1966
7	1	$1,7519 \times 10^{-6}$	$2,5282 \times 10^{-7}$	0,2229	0,7771	0,1864	0,1966
8	1	$6,7782 \times 10^{-6}$	$7,5684 \times 10^{-7}$	0,5203	0,4797	0,2180	0,0607
9	1	$1,9366 \times 10^{-6}$	$2,1624 \times 10^{-7}$	0,5203	0,4797	0,2180	0,0607

Sayısal çözümde eşitliklerin ayrıklaştırılmasında Implicit, birinci dereceden ayrıklaştırma tekniği kullanılmıştır. Ayrıklaştırılmış eşitliklerin çözüm algoritması olarak SIMPLE çözüm algoritması kullanılmıştır.

STANDART Basınç ve Laminer akış için çözüm yapılmıştır. Sonuçların yakınsaması için relaksasyon parametreleri, momentum ve basınç için 0,3 olarak belirlenmiştir.

Çizelge 6.3’de 1,86 GHz Pentium 4 bilgisayar kullanılarak elde edilen sayısal çözüm bilgileri görülmektedir.

Çizelge 6.3. 1,86 GHz Pentium 4 bilgisayar kullanılarak elde edilen sayısal çözüm bilgileri

Çözüm Bilgileri	Değerler
Toplam eleman sayısı	18 900
Kullanılan ram/Mevcut ram	590/760 MB
Toplam iterasyon sayısı	400
Ortalama bir iterasyon süresi	4 sn
Toplam iterasyon süresi	3 720 sn (62 dk)
Polarizasyon eğrisi (7 nokta) için gereken süre	434 dk

6.1. Sonuçların Eleman Sayısından Bağımsızlığının Test Edilmesi

Problem geometrisine ait görünüm oranı (yükseklik/uzunluk oranı)’nın çok küçük (Çizelge 3.1) olması, ağ yapının hatasız bir şekilde oluşturulabilmesi için gerekli olan minimum eleman sayısına alt sınır getirmiştir. Tasarım parametrelerine bağlı olarak PEMFC geometrisinin minimum eleman sayısı, Gambit programında sıklık ölçüsü 0,6 alınarak 7722 (Çizelge 5.1) olarak elde edilmiştir. Sonuçların eleman sayısından bağımsızlığını test etmek amacıyla, bu eleman sayısına ilaveten dört farklı durum için sonuçlar elde edilmiştir (Çizelge 6.4).

Çizelge 6.4. Farklı eleman sayılarında ortalama akım yoğunluğu değerleri¹ ve çözüm süreleri

Toplam eleman sayısı	Akım yoğunluğu (Acm^{-2})	Akım yoğunluğu değişimi (%)	Çözüm süresi (dk)
7 722	0,103897	-	4
10 920	0,104735	0,80	6
18 900	0,104156	0,56	10
131 250	0,104131	0,03	84
323 631	0,109293	4,72	242

¹ Çözümler Durum-1 parametreleri kullanılarak elde edilmiştir

Çizelge 6.4 incelendiğinde, birbirini takip eden sonuçlardaki % değişim miktarının en az olduğu durum, yani 18900 elemanın kullanıldığı ağ yapısının (Çizelge 5.1) sonuçlardan etkilenmediği kabul edilebilir.

6.2. Yakınsama Kriteri

Yakınsama birkaç faktör tarafından engellenebilir. Hücre sayısının fazla olması, aşırı düşük “under-relaxation factors” ve karmaşık akış yapısına sahip geometriler yakınsamayı engelleyen ana sebeplerdir. Bazen, yakınsak çözüme ulaşıp ulaşılmadığını belirlemek zor olur.

Yakınsamanın olup olmadığına karar vermek için evrensel bir ölçüt olmamakla birlikte, hem “kalıntı” (residual) seviyelerini sınavarak hem de niceliklerin değişimini monitörden izleyerek yakınsamanın olup olmadığına karar vermek geçerli bir yoldur. Birçok problem için, FLUENT’te mevcut yakınsama kriterinin kullanılması yeterlidir. Bu kriter, ölçekli “kalıntılar”ın enerji eşitliği hariç tüm eşitlikler için 10^{-3} mertebesine, enerji ve P-1 eşitlikleri için 10^{-6} mertebesine düşmesini gerektirmektedir. Bu kriterin uygun olmayabileceği durumlar aşağıdaki gibi listelenebilir.

1. Akış alanı için iyi başlangıç tahminleri yapılırsa, başlangıçta süreklilik eşitliği için elde edilen küçük değerli “kalıntı”lar, çok büyük “kalıntı”lara sebep olabilir. Bu

durumda, ölçeklendirilmeyen “kalıntı”yı sınamak ve makul bir ölçek ile karşılaştırmak faydalı olur.

2. Türbülans nicelikleri gibi bazı eşitlikler için kötü başlangıç tahminleri büyük ölçekli faktörlere sebep olabilir. Bu tip durumlarda, ölçekli “kalıntılar” azalmaya başlar, non-linear kaynaklar geliştikçe büyür, ve sonuç olarak azalır. Bu yüzden, yakınsamanın olup olmadığına karar verebilmek için sadece “kalıntı” değerine bakılmamalı, aynı zamanda davranışı da izlenmelidir. Çözümün yakınsadığı hükmüne varmadan önce, birkaç iterasyon için, örneğin 50 veya daha fazla, “kalıntılar”ın azalmaya devam ettiğinden emin olunmalıdır.

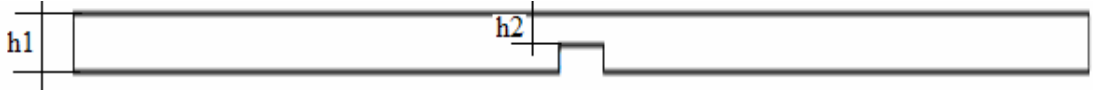
Yakınsamanın olup olmadığına karar vermede kullanılan bir diğer yaklaşım ise, ölçeklenmemiş “kalıntılar”ın büyüklüğünde 3 mertebeli bir düşüşün olması şartıdır. Bu maksatla, FLUENT “kalıntılar”ı normalize etmiştir. Bu yaklaşımda, yakınsama kriteri, normalize edilen ölçeksiz artıkların 10^{-3} mertebesine düşmesi ile tanımlanır. Bununla birlikte, birçok durum için, bu şart uygun olmayabilir.

1. Çok iyi başlangıç değer tahminleri verilirse, “kalıntılar”ın büyüklüğü 3 mertebe düşmeyebilir.
2. Hesaplamanın başlangıcında, sıfır değere sahip non-linear kaynak terimleri yönetici eşitlikde mevcut ve hesaplama süresince non-linear terimler yavaş yavaş gelişmeye başlar ise, “kalıntılar”ın büyüklüğü 3 mertebe düşmeyebilir.
3. Eğer incelenen değişken tüm çözüm bölgesinde yaklaşık sıfır değere sahip ise, “kalıntılar”ın büyüklüğü 3 mertebe düşmeyebilir.

Yukarıda bahsedilen durumlarda, çözümün yakınsayıp yakınsamadığına karar vermeden önce, integrali alınan nicelikleri monitörden izlemek mantıklı olur. “Kalıntılar”ın uygun bir ölçeğe kıyasla küçük olup olmadığı açısından normalize edilmemiş ve ölçeklenmemiş “kalıntılar”ı test etmek de faydalı olabilir. Aksine, eğer başlangıç tahmini çok kötü olursa, “kalıntılar”daki 3 mertebe düşüş, yakınsamayı temin edemeyecek kadar, başlangıç “kalıntılar” büyük değere sahip olmasına neden olur.

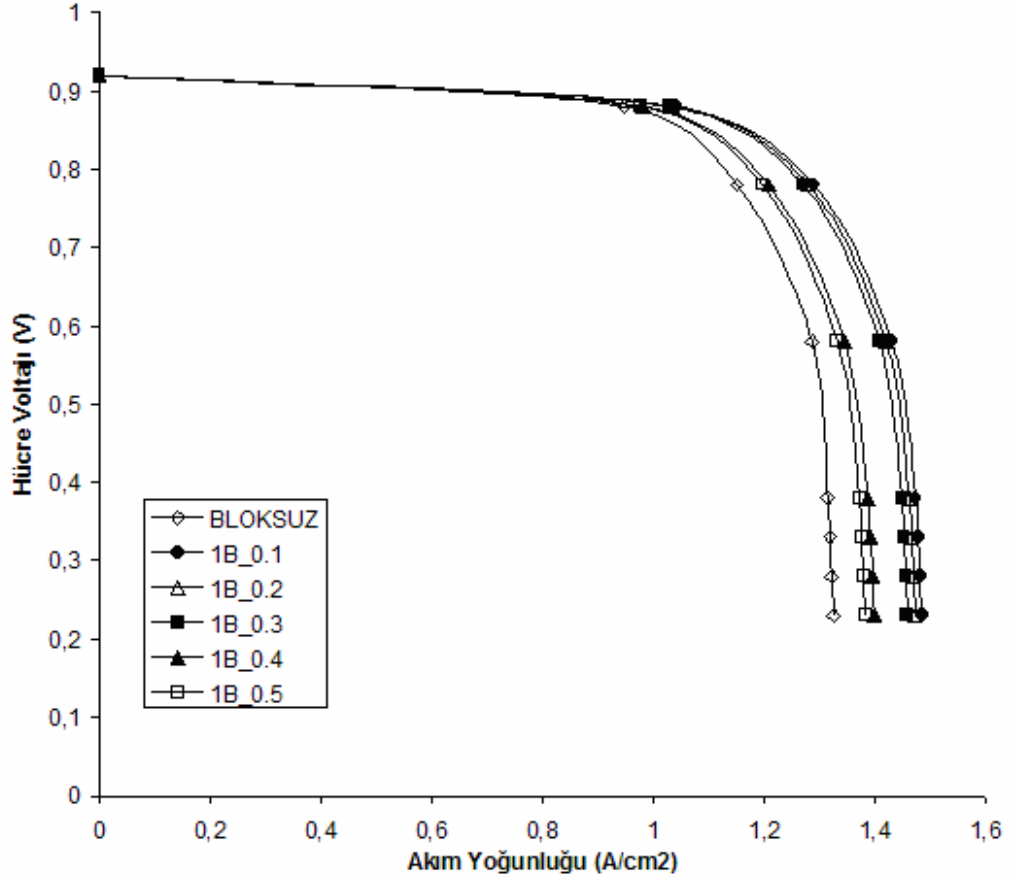
6.3. Blok Yüksekliğinin Tayini

Bu çalışmada blok yüksekliğini belirlemek için bloksuz ve bir bloklu geometrinin 5 farklı blok yüksekliği durumu için Durum-1 parametreleri kullanılarak çözüm yapılmış ve çözüme ait kutuplaşma eğrileri oluşturulmuştur. Blok yüksekliği ile kanal yüksekliği arasındaki farkın kanal yüksekliğine oranı geçit oranı ($\lambda = \frac{h_2}{h_1}$) olarak tanımlanmış ve Şekil 6.1’de gösterilmiştir.



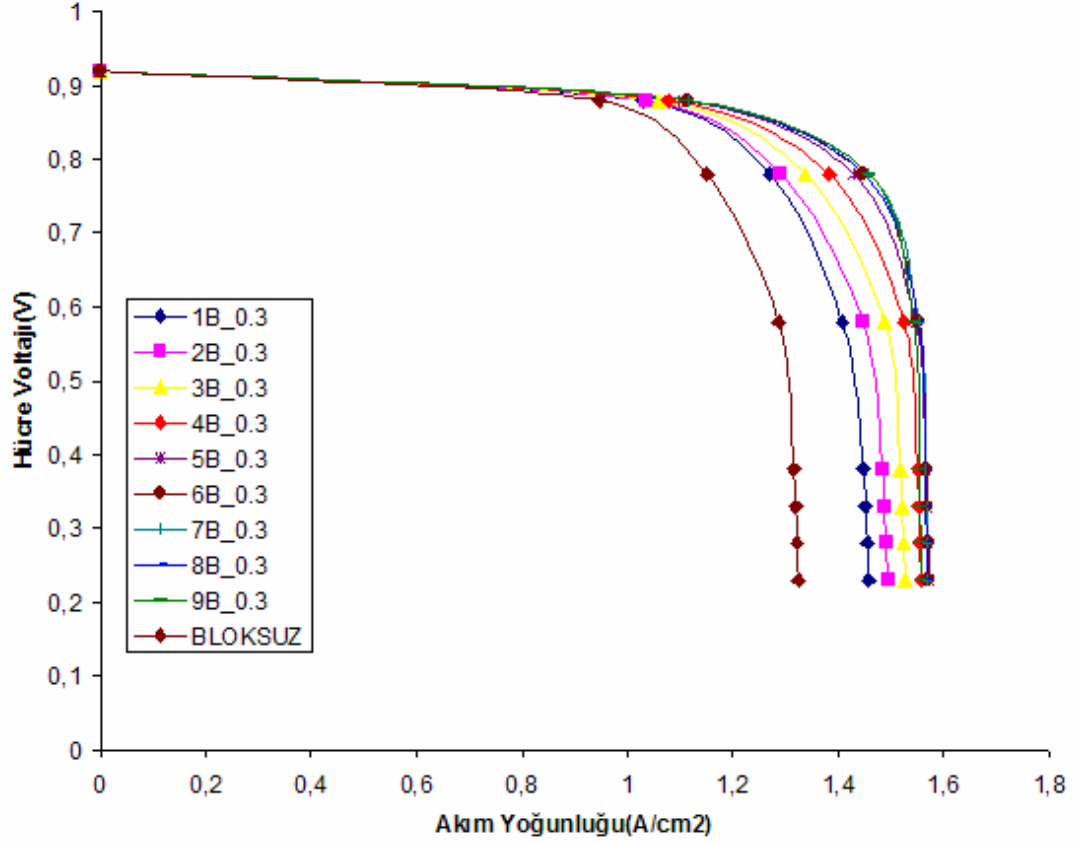
Şekil 6.1. Geçit oranının şekil üzerinde gösterimi

Geçit oranı $\lambda=0,1$; $\lambda=0,2$; $\lambda=0,3$; $\lambda=0,4$ ve $\lambda=0,5$ olmak üzere beş farklı geçit oranı kullanılmıştır. Blok yüksekliğinin belirlenmesi için yapılan çözüme ait hücre voltajı – akım yoğunluğu grafiği Şekil 6.2’de görülmektedir. Şekil 6.2’de de görüldüğü gibi en yüksek akım yoğunluğu değeri geçit oranı $\lambda=0,1$ olan durum için elde edilmiş olup en düşük akım yoğunluğu değeri ise bloksuz hücrede elde edilmiştir. En yüksek akım yoğunluğu değerinin geçit oranı $\lambda=0,1$ olan hücrede elde edilmiş olmasına rağmen blok sayısı (B) artırıldığında $\lambda=0,1$ durumu için çözümler yakınsamamıştır. Bunun üzerine $\lambda=0,2$ olan durum için çözüm yapılması denenmiştir. Ancak en sağlıklı sonuçlar geçit oranı $\lambda=0,3$ olan durum için elde edilebildiğinden çözümler $\lambda=0,3$ kullanılarak yapılmıştır.



Şekil 6.2 Blok yüksekliğinin belirlenmesi için oluşturulan kutuplaşma eğrileri

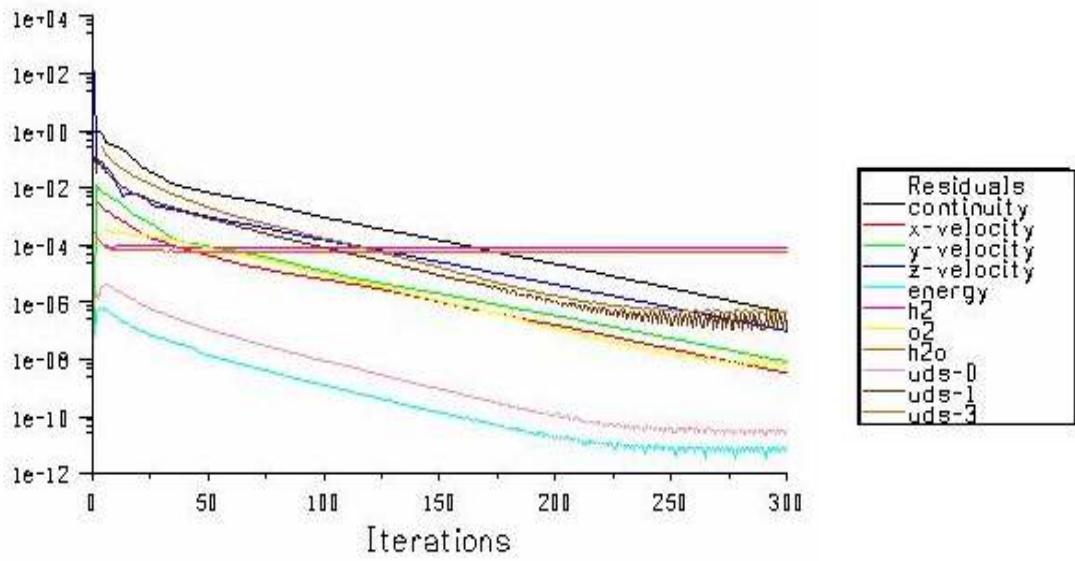
Blok yüksekliği (geçit aralığı $\lambda = 0,3$ olan durum) ile 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9 blok kullanılarak Durum-1 için çözüm yapılmıştır. Blok sayısı (B) 1 ile 9 arasında değişen dokuz durum için hücre voltajı – akım yoğunluğu grafiği oluşturulmuş olup söz konusu grafik Şekil 6.3’de görülmektedir. Şekil 6.3’de görüldüğü gibi en düşük akım yoğunluğu bir bloklü hücrede elde edilmiştir. Blok sayısı artırıldıkça blok sayısı B=4 olan hücreye kadar en düşük hücre voltajında akım yoğunluğu artarak devam etmiştir. Ancak blok sayısı 5, 6, 7, 8 ve 9 olduğu durumlarda hücre voltajı azalmasına rağmen akım yoğunluğu 1,58 A/cm² değerinin üzerine çıkamamıştır. Yani blok sayısı B=4’ten sonra akım yoğunluğunda kayda değer bir artış gözlenmemiştir. Bundan dolayı blok sayısı B=4 olarak belirlenmiş ve çözümler 4 bloklü hücre için gerçekleştirilmiştir.



Şekil 6.3 Blok sayısının belirlenmesi için oluşturulan kutuplaşma eğrileri

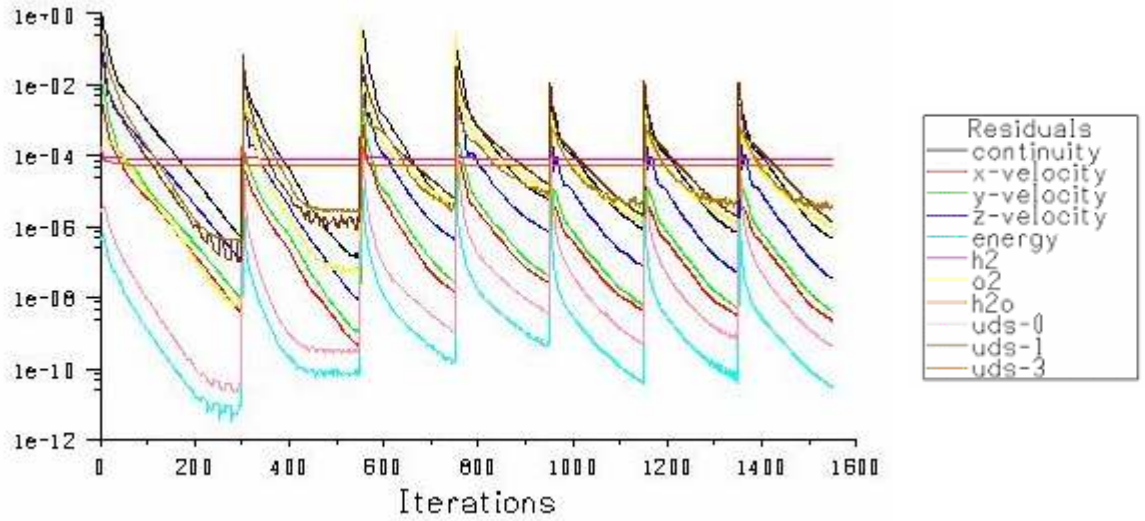
Bu çalışmada, 9 farklı durum için çözüm gerçekleştirilmiştir (Çizelge 6.2). Durum-1 için elde edilen yakınsama grafiği Şekil 6.4'te görülmektedir. Süreklilik eşitliği, momentum eşitliği (y ve z hızları), enerji eşitliği ve O₂, H₂O, UDS-0, UDS-1, UDS-3 değişkenlerine ait yakınsama kriterindeki kalıntılar teriminin iterasyon sayısına göre değişimi 10⁻⁶'nın altına; momentum eşitliği (x hızı) ve H₂ değişkenlerine ait yakınsama kriterindeki kalıntılar teriminin iterasyon sayısına göre değişimi 10⁻⁴'ün altına düşmüştür.

Yakıt hücresinin karakteristiğini yansıtmaları açısından her bir durum için kutuplaşma eğrileri oluşturulmuştur. Kutuplaşma eğrilerinin oluşturulması hakkında ayrıntılı bilgiler EK-4'te verilmiştir.



Şekil 6.4 Durum-1 çözümüne ait yakınsama grafiği

Şekil 6.5'te ise Durum-1 için kutuplaşma eğrisinin elde ediminde oluşan yakınsama grafiği görülmektedir. Kutuplaşma eğrisi 7 farklı aşırı-potansiyel değerine karşılık gelen hücre potansiyeli değerinin sınır şartı olarak verilerek ardışık çözümlerin elde edilmesiyle oluşturulmuştur. Her bir hücre potansiyeli değeri için elde edilen çözümlerin yakınsama durumu Şekil 6.5'te görülmektedir. Buna göre, 1. hücre potansiyel değeri 300 iterasyonda 10^{-6} değerinin altına, 2. hücre potansiyel değeri 250 iterasyonda 10^{-6} değerinin altına, 3 - 7. hücre potansiyel değerleri için elde edilen çözümler 200 iterasyonda 10^{-4} değerinin altına düşmüştür. 7 aşırı-potansiyel değeri için çözümlerin ardışık olarak yürütülmesi, yakınsak çözümün yaklaşık 550 iterasyon önce sonuçlanmasını sağlamıştır.

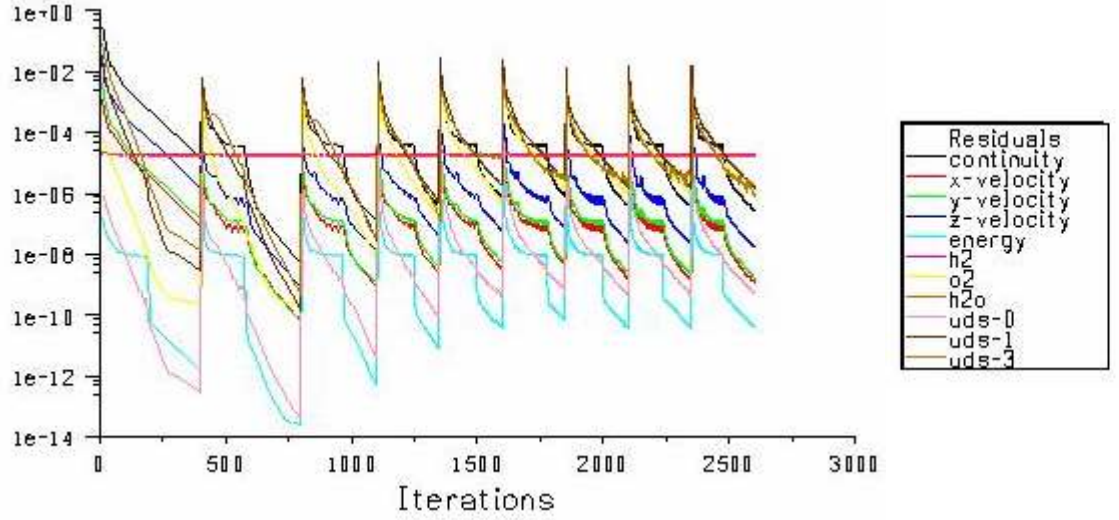


Şekil 6.5. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-1 çözümüne ait yakınsama grafiği

Niceliklerin kalıntı değerlerinin davranışı incelendiğinde, azalan bir seyir takip ettiği Şekil 6.4 ve Şekil 6.5'te gözlenmektedir. Bu aşamada çözümlerin yakınsadığı söylenebilir.

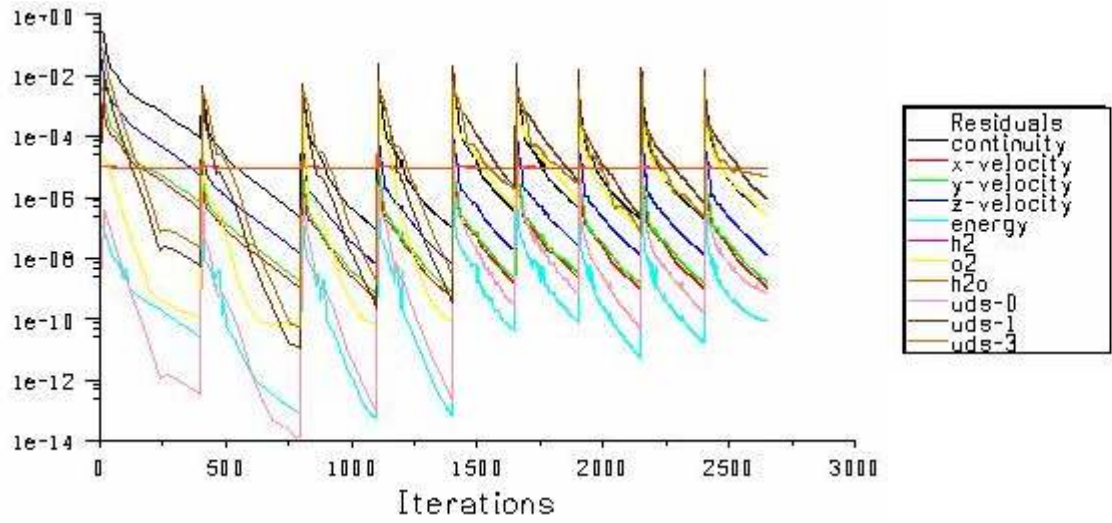
Kutuplaşma eğrilerinin oluşturulması amacıyla 9 Durum için ardışık çözümler yapılmıştır ve elde edilen yakınsama grafikleri Şekil 6.5-13.'de sunulmuştur.

Şekil 6.6'te, Durum 2 için elde edilen kalıntıların yakınsama grafiğinde görüldüğü üzere, H_2 ve x-hızı kalıntıları tüm çözümler için 10^{-4} 'ten düşük değerde olup ilk çözüm için tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-4} 'ten düşük değerde, 2 – 4 arası çözümler için H_2 ve x-hızı hariç tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-6} 'dan düşük değerde, 5- 9 arası çözümlerde ise H_2 ve x-hızı hariç tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-4} 'den düşük değeredir. Bu çözümler elde edilirken enerji denklemi kalıntısının 10^{-6} 'dan düşük olmasına dikkat edilmiştir. İlk iki çözüm 400 iterasyonda, 3. çözüm 300 iterasyonda, takip eden 6 çözüm ise 250 iterasyonda yakınsamıştır.

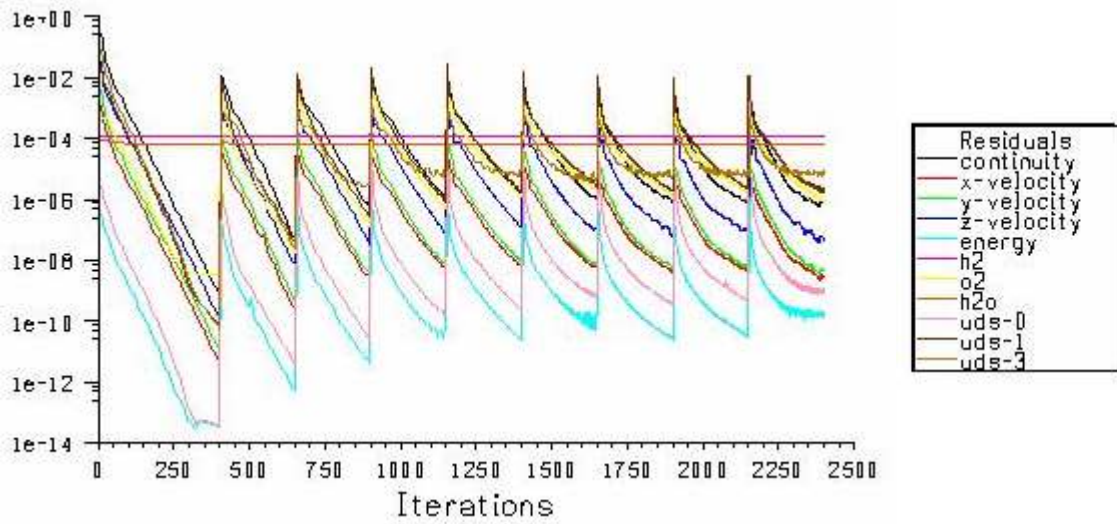


Şekil 6.6. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-2 çözümüne ait yakınsama grafiği

Şekil 6.7’de, Durum-3 için elde edilen kalıntıların yakınsama grafiğinde görüldüğü üzere, H_2 ve x-hızı kalıntıları tüm çözümler için 10^{-4} ’ten düşük değerde olup ilk çözüm için tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-4} ’den düşük değerde, 2-4 arası çözümlerde H_2 ve x-hızı hariç tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-6} ’dan düşük değerde, 5-9 arası çözümlerde ise tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-4} ’den düşük değerdedir. Bu çözümler elde edilirken enerji denklemi kalıntısının 10^{-6} ’dan düşük olmasına dikkat edilmiştir. İlk iki çözüm 400 iterasyonda, 2. ve 3. çözüm 300, ardışık 6 çözüm ise 250 iterasyonda yakınsamıştır. Toplam 2650 iterasyonda 9 çözüm yakınsamıştır.



Şekil 6.7. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-3 çözümüne ait yakınsama grafiği

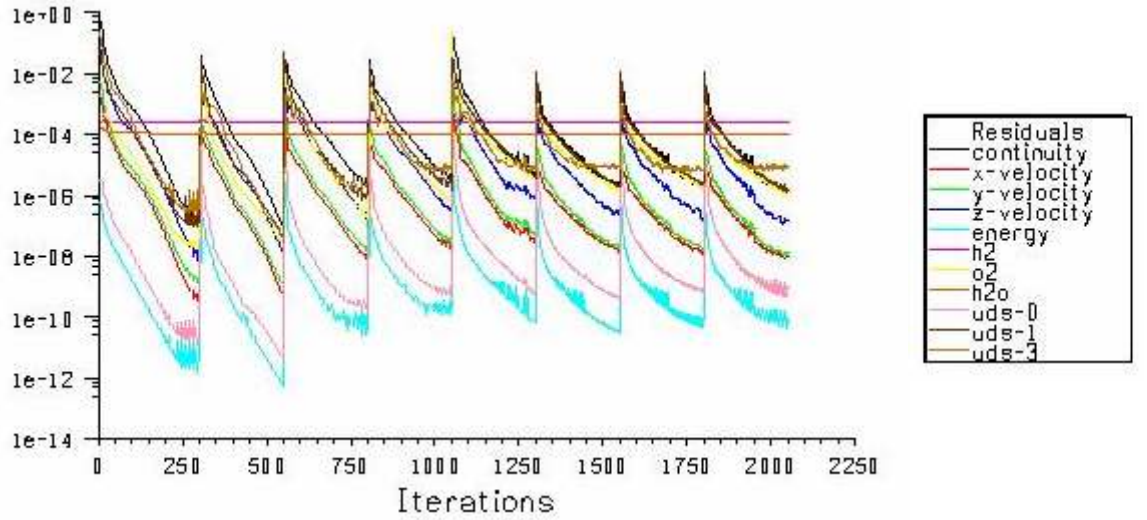


Şekil 6.8. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-4 çözümüne ait yakınsama grafiği

Şekil 6.8’de, Durum-4 için elde edilen kalıntıların yakınsama grafiğinde görüldüğü üzere, H_2 ve x-hızı kalıntıları tüm çözümler için 10^{-4} ’ten düşük değerde olup ilk çözüm için H_2 ve x-hızı hariç tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-8} ’den düşük değerde, 2.

çözüm için H_2 ve x-hızı hariç tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-6} 'dan düşük değerde, 3-9 arası çözümlerde ise tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-4} 'ten düşük değeredir. Bu çözümler elde edilirken enerji denklemi kalıntısının 10^{-6} 'dan düşük olmasına dikkat edilmiştir. İlk çözüm 400 iterasyonda, 2-9 arası çözümler ise 250, iterasyonda yakınsamıştır. Toplam 2400 iterasyonda 9 çözüm yakınsamıştır.

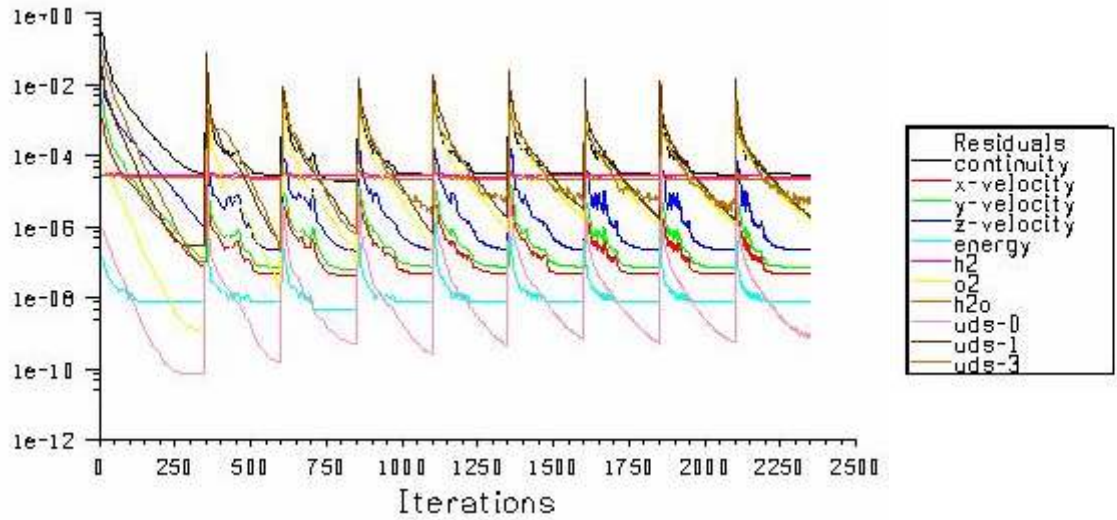
Şekil 6.9'da Durum-5 için elde edilen kalıntıların yakınsama grafiğinde görüldüğü üzere, H_2 ve x-hızı kalıntıları tüm çözümler için 10^{-4} 'ten düşük değerde olup ilk çözüm için H_2 ve x-hızı hariç tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-8} 'den düşük değerde, 2. çözüm için H_2 ve x-hızı hariç tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-6} 'dan düşük değerde, 3-9 arası çözümlerde ise H_2 ve x-hızı hariç tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-4} 'ten düşük değeredir. Bu çözümler elde edilirken enerji denklemi kalıntısının 10^{-6} 'dan düşük olmasına dikkat edilmiştir. İlk çözüm 300 iterasyonda, ardışık 8 çözüm ise 250 iterasyonda yakınsamıştır. Toplam 2050 iterasyonda 9 çözüm yakınsamıştır.



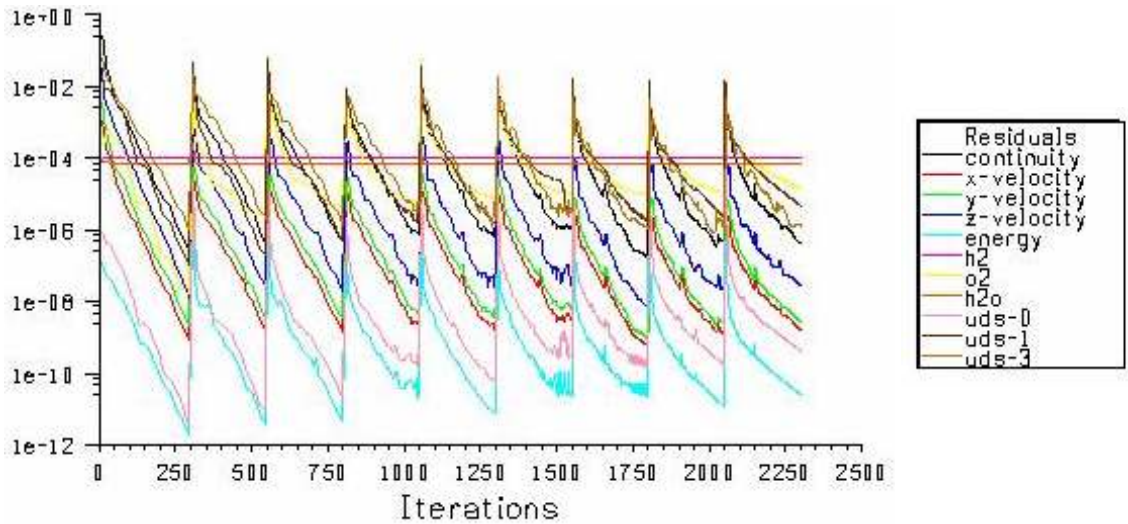
Şekil 6.9. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-5 çözümüne ait yakınsama grafiği

Şekil 6.10'da Durum-6 için elde edilen kalıntıların yakınsama grafiğinde görüldüğü üzere, H_2 ve x-hızı kalıntıları tüm çözümler için 10^{-4} 'ten düşük değerde olup ilk iki çözüm için H_2 ve x-hızı hariç tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-6} 'dan düşük değerde, ardışık çözümlerde ise tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-4} 'ten düşük değeredir. Bu

çözümler elde edilirken enerji denklemi kalıntısının 10^{-6} 'dan düşük olmasına dikkat edilmiştir. İlk çözüm 350 iterasyonda, diğer çözümler ise 250 iterasyonda yakınsamıştır. Toplam 2350 iterasyonda tüm çözümler yakınsamıştır.



Şekil 6.10. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-6 çözümüne ait yakınsama grafiği

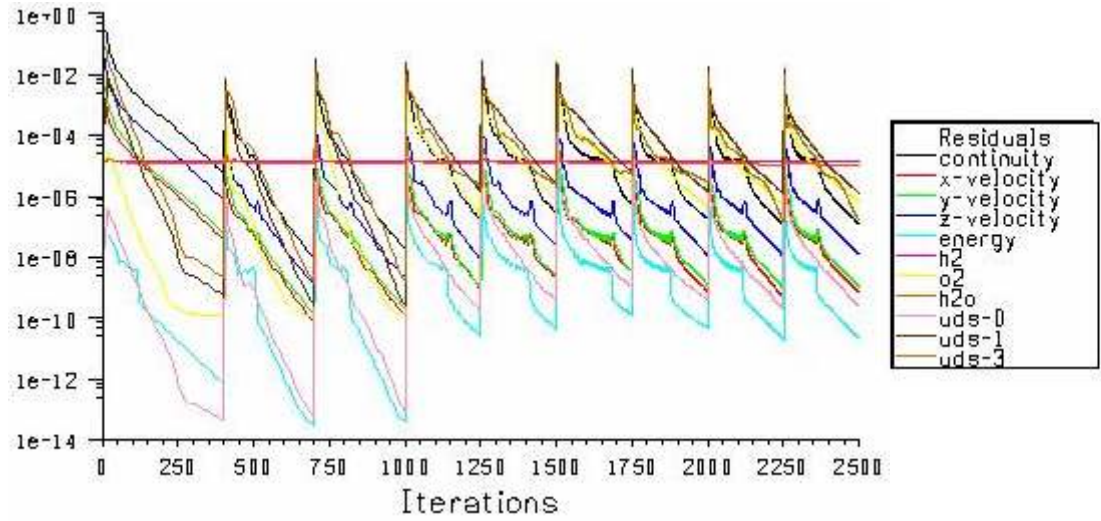


Şekil 6.11. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-7 çözümüne ait yakınsama grafiği

Şekil 6.11’da, Durum-7 için elde edilen kalıntıların yakınsama grafiğinde görüldüğü üzere, tüm çözümler için tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-4} ’den düşük değerdedir. Bu

çözümler elde edilirken enerji denklemi kalıntısının 10^{-6} 'dan düşük olmasına dikkat edilmiştir. İlk çözüm 300 iterasyonda, diğer çözümler ise 250 iterasyonda yakınsamıştır. Toplam 2300 iterasyonda tüm çözümler yakınsamıştır.

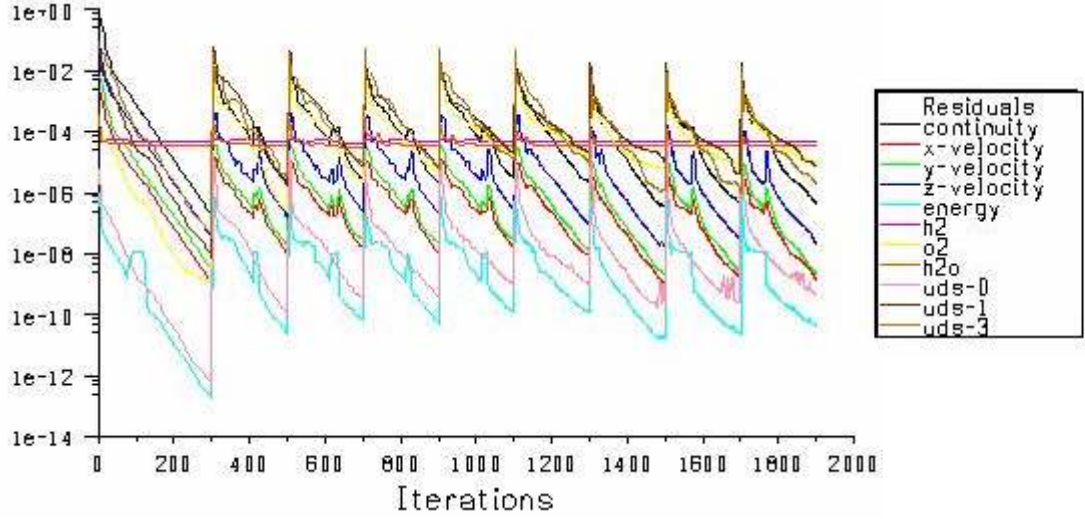
Şekil 6.12'de, Durum-8 için elde edilen kalıntıların yakınsama grafiğinde görüldüğü üzere, H_2 ve x-hızı kalıntıları tüm çözümler için 10^{-4} 'ten düşük değerde olup ilk çözüm için tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-4} 'den düşük değerde, 2. ve 3. çözümlerde H_2 ve x-hızı hariç tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-6} 'dan düşük değerde, 4-9 arası çözümler için ise tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-4} 'den düşük değerdedir. Bu çözümler elde edilirken enerji denklemi kalıntısının 10^{-6} 'dan düşük olmasına dikkat edilmiştir. İlk çözüm 400 iterasyonda, 2. ve 3. çözüm 300 iterasyonda, 4-9 arası çözümler ise 250 iterasyonda yakınsamıştır. Toplam 2600 iterasyonda 9 çözüm yakınsamıştır.



Şekil 6.12. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-8 çözümüne ait yakınsama grafiği

Şekil 6.13'de, Durum-9 için elde edilen kalıntıların yakınsama grafiğinde görüldüğü üzere, H_2 ve x-hızı kalıntıları tüm çözümler için 10^{-4} 'ten düşük değerde olup ilk çözüm için H_2 ve x-hızı hariç tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-6} 'dan düşük değerde, diğer çözümler için ise tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-4} 'den düşük değerdedir. Bu çözümler elde edilirken enerji denklemi kalıntısının 10^{-6} 'dan düşük olmasına dikkat

edilmiştir. İlk çözüm 300 iterasyonda, 2-9 arası çözümler 200 iterasyonda yakınsamıştır. Toplam 1900 iterasyonda 9 çözüm yakınsamıştır.



Şekil 6.13. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-9 çözümüne ait yakınsama grafiği

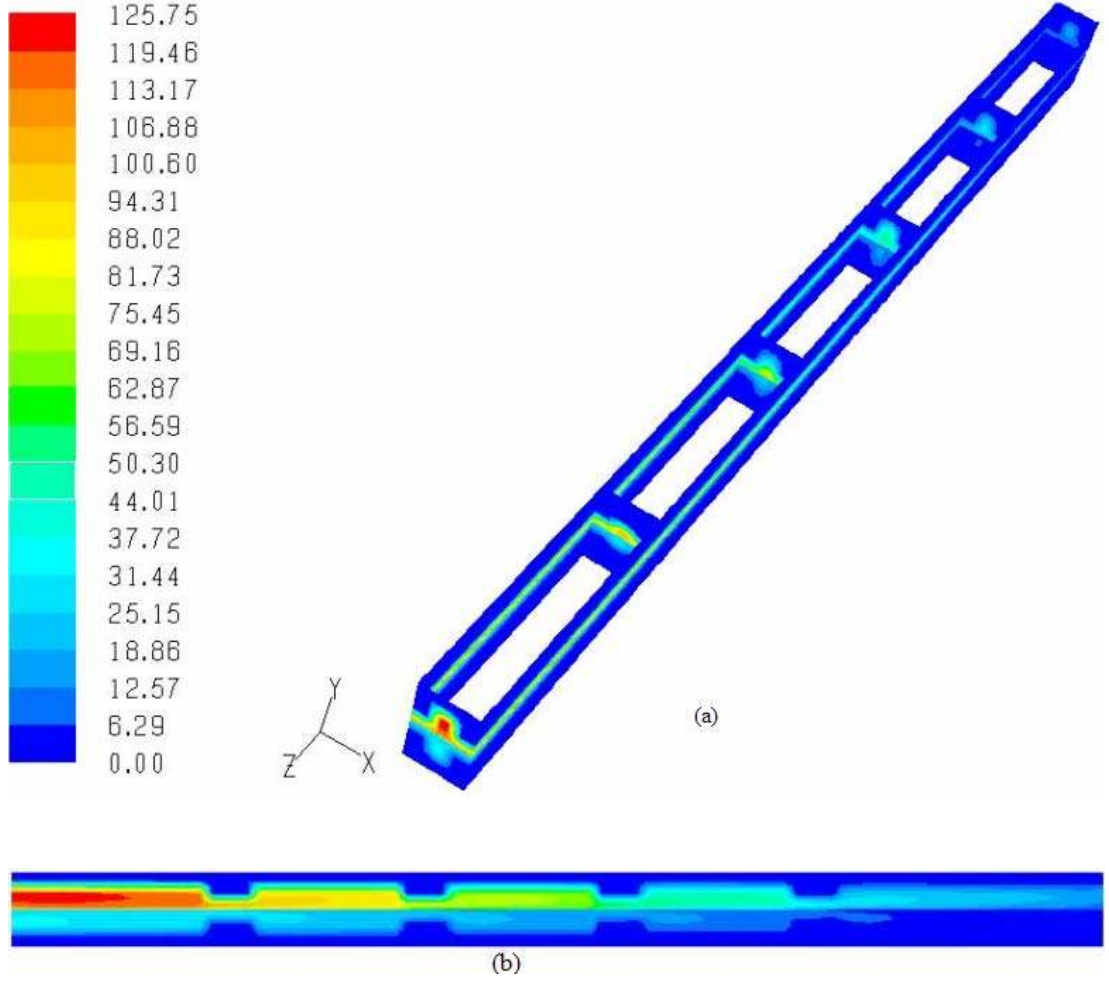
Çizelge 6.5’de 9 Durumun kutuplaşma eğrilerinin oluşturulmasında kullanılan noktalara karşılık gelen iterasyon sayıları ve hesap süresi dağılımı görülmektedir. Bağıl nem $\phi = 1$ (D1) değerinden $\phi = 0.6$ (D2) değerine düşürüldüğünde, toplam iterasyon sayısında %40’lık bir artış olduğu gözlenmektedir. Bağıl nem $\phi = 0.6$ (D2) değerinden $\phi = 0.2$ (D3) değerine düşürüldüğünde, toplam iterasyon sayısında %2’lik bir artış olduğu gözlenmektedir. Anot ve katot gazlarının giriş hızları $V = 1,75$ m/s (D1) değerinden $V = 0,7 \times 1,75$ m/s (D4) değerine düşürüldüğünde, toplam iterasyon sayısında %35’lik bir artış olduğu gözlenmektedir. Anot ve katot gazlarının giriş hızları $V = 0,7 \times 1,75$ m/s (D4) değerinden $V = 0,2 \times 1,75$ m/s (D5) değerine düşürüldüğünde, toplam iterasyon sayısında %4’lük bir azalma olduğu gözlenmektedir. Anot ve katot gazlarının giriş hızları $V = 0,7 \times 1,75$ m/s olduğu durumda bağıl nem $\phi = 1$ (D4) değerinden $\phi = 0.6$ (D6) değerine düşürüldüğünde, toplam iterasyon sayısında %3’lük bir azalma olduğu gözlenmektedir. Anot ve katot gazlarının giriş hızları $V = 0,2 \times 1,75$ m/s olduğu durumda bağıl nem $\phi = 1$ (D5) değerinden $\phi = 0.6$ (D7) değerine düşürüldüğünde, toplam iterasyon sayısında

6.4. Niceliklerin Hücre İçindeki Dağılımları

Bu kısımda, modeli kurulan PEM yakıt hücresi için Durum-1 parametreleri kullanılarak 4 bloklu ve 0.3 geçit oranına sahip hücre için elde edilen sonuçlar analiz edilmiştir. Bu amaç doğrultusunda, FLUENT'te oluşturulan 2-B grafikler, niceliklerin değişimi izlenebilecek şekilde 3-B PEMFC geometri üzerinde, a) dış yüzeylerde ($x = 0$, $x = 0,003$, $z = 0$, $z = 0,07$) ve iç yüzeylerde ($z = 0,014$, $z = 0,028$, $z = 0,042$, $z = 0,056$) b) PEMFC gaz kanalları iç yüzeylerinde ($x = 0,0015$) alınmış ve bölüm 6.4.1'de sunulmuşlardır. Bölüm 6.4.2'de ise, (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki niceliklerin 2-B dağılımları sunulmuştur.

6.4.1. İç ve dış yüzeylerdeki niceliklerin 2-B dağılımlarının 3-B PEMFC geometrisi üzerinde gösterimi

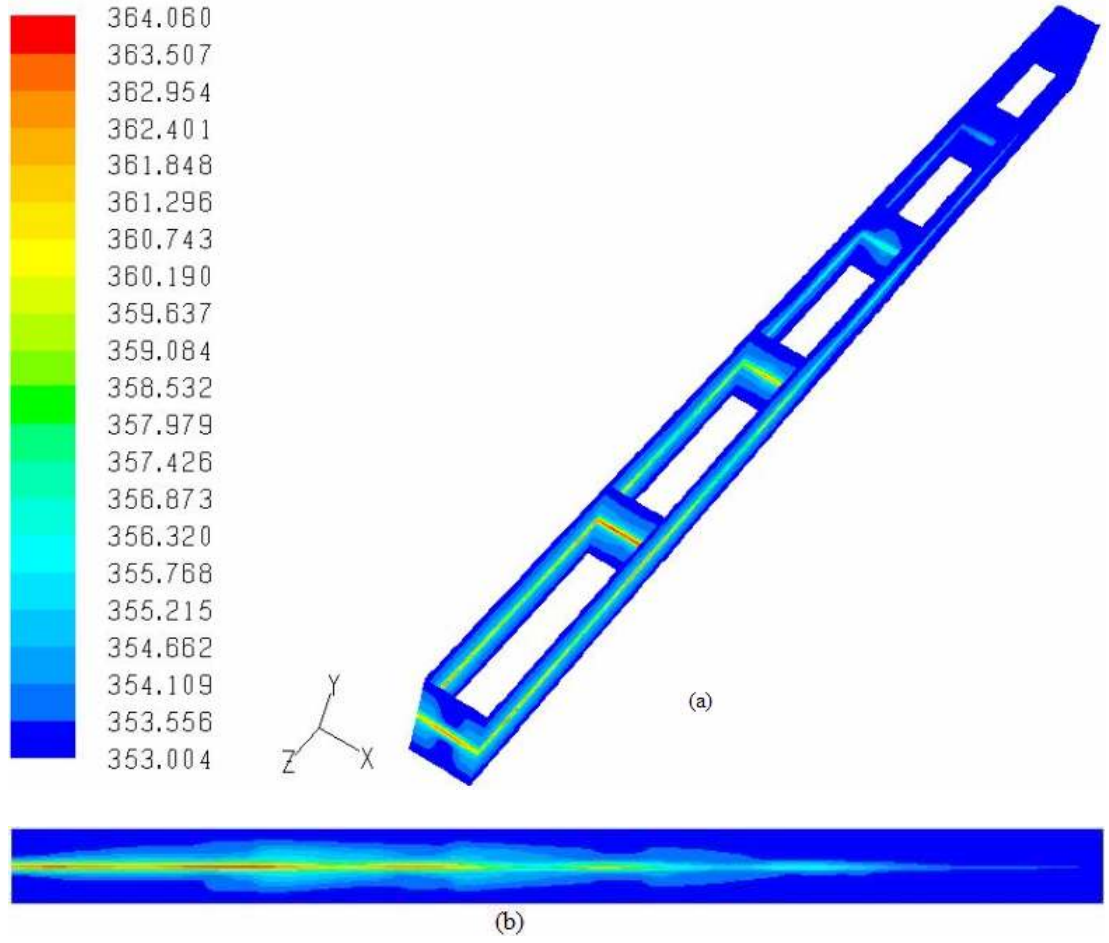
Şekil 6.14.a'da 3-B PEMFC geometrisi üzerinde seçilen yüzeylerdeki basınç dağılımları görülmektedir. Giriş kesitinde ($z = 0$) anot kısmında 1 atm basınç sınır şartı kullanılmasına rağmen engelleyicilerin kullanılmasından dolayı basınç 1 atm'den biraz yüksek gözlenmektedir. Çıkışa doğru gidildikçe atmosferik basınca ulaşılmaktadır. Şekil 6.14.b'de 3-B PEMFC geometrisi üzerinde seçilen gaz kanallarının iç yüzeylerindeki basınç dağılımları görülmektedir. Giriş kısmında basınç farkı oluşmakta, engelleyici blokların hizasında basınç düşmekte ve bloktan hemen sonra tekrar artmakta olduğu görülmektedir. Çıkışa doğru gidildikçe atmosferik basınca ulaşılmaktadır. Dolayısıyla, elde edilen dağılımlar modelin çözümünde tanımlanan sınır şartları ile uyum göstermektedir.



Şekil 6.14. PEMFC iç ve dış yüzeylerindeki basınç dağılımı (Pa)

- a) ($x=0$, $x=0,003$, $z=0$, $z=0,014$, $z=0,028$, $z=0,042$, $z=0,056$, $z=0,07$)
 b) PEMFC gaz kanalları iç yüzeyinde ($x=0,0015$)

Şekil 6.15.a'da 3-B PEMFC geometrisi üzerinde seçilen yüzeylerdeki sıcaklık dağılımları görülmektedir. Çözüm bölgesinin orta kısmında –membran, gaz difüzyon tabakaları ve katalizör tabakalar- giriş ($z=0$) kısmından orta kısmına ($z=0,035$) kadar sıcaklık 360 K civarında, çıkışa ($z=0,07$) doğru gittikçe sıcaklık 353 K civarında seyretmektedir. Şekil 6.15.b'de dikkat edilecek olursa engelleyici blokların bulunduğu bölgelerde sıcaklık farkı artmaktadır. PEMFC boyutları ve PEMFC bileşenlerinin termo-fiziksel özellikleri dikkate alındığında sıcaklığın kararlı durumda hücre içerisinde çok fazla değişmemesi beklenen bir olaydır.



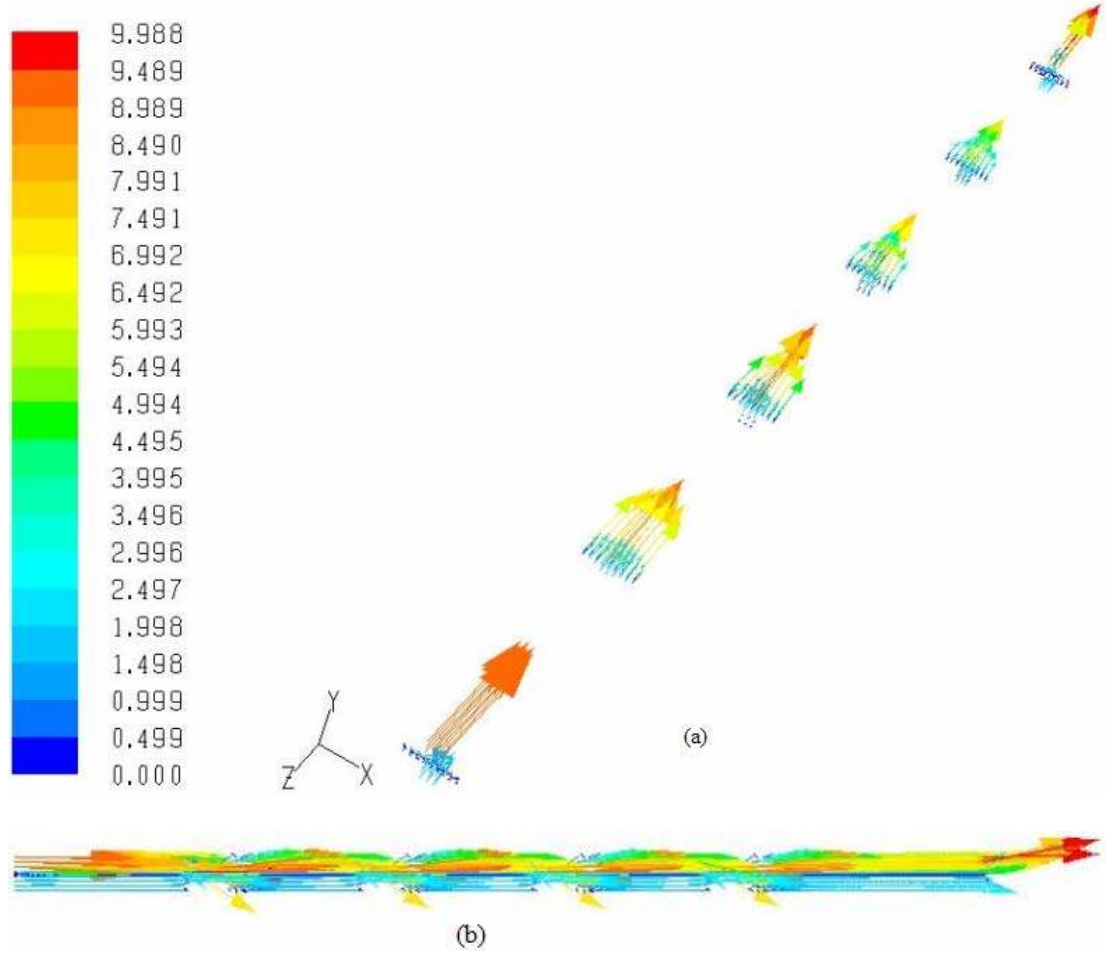
Şekil 6.15. PEMFC iç ve dış yüzeylerindeki sıcaklık dağılımı (K)

a) ($x=0$, $x=0,003$, $z=0$, $z=0,014$, $z=0,028$, $z=0,042$, $z=0,056$, $z=0,07$)

b) PEMFC gaz kanalları iç yüzeyinde ($x=0,0015$)

Şekil 6.16.a'da 3-B PEMFC geometrisi üzerinde seçilen yüzeylerdeki hız vektörlerinin yönleri ve büyüklüklerinin dağılımları görülmektedir. Hız vektörleri, doğal olarak, sadece gaz akış kanalları kesitinde gözlemlenmektedir. PEMFC modelinde akış kanalları girişine "kütleli debi giriş" sınır şartı verilmiştir. Anot gaz akış kanallarının giriş kısmında "kütleli debi giriş" sınır şartı değeri $3,0979 \times 10^{-6}$ kg/s ve katot gaz akış kanallarının giriş kısmında "kütleli debi giriş" sınır şartı değeri $1,5771 \times 10^{-6}$ kg/s olarak tanımlanmıştır. PEMFC modelinin çözümü incelendiğinde anot gaz akış kanalındaki hızın katot gaz akış kanalındaki hızdan daha yüksek olduğu görülmektedir. Şekil 6.16.b'de ise anot ve katot kısmı gaz akış kanalları boyunca hız dağılımı görülmektedir. Hız dağılımı incelendiğinde engelleyici blokların olduğu kısımlarda hızın arttığı gözlenmektedir. Kanal kesit

geometrisi dikkate alındığında bu sonuçların sınır şartlarıyla uyum gösterdiği söylenebilir.

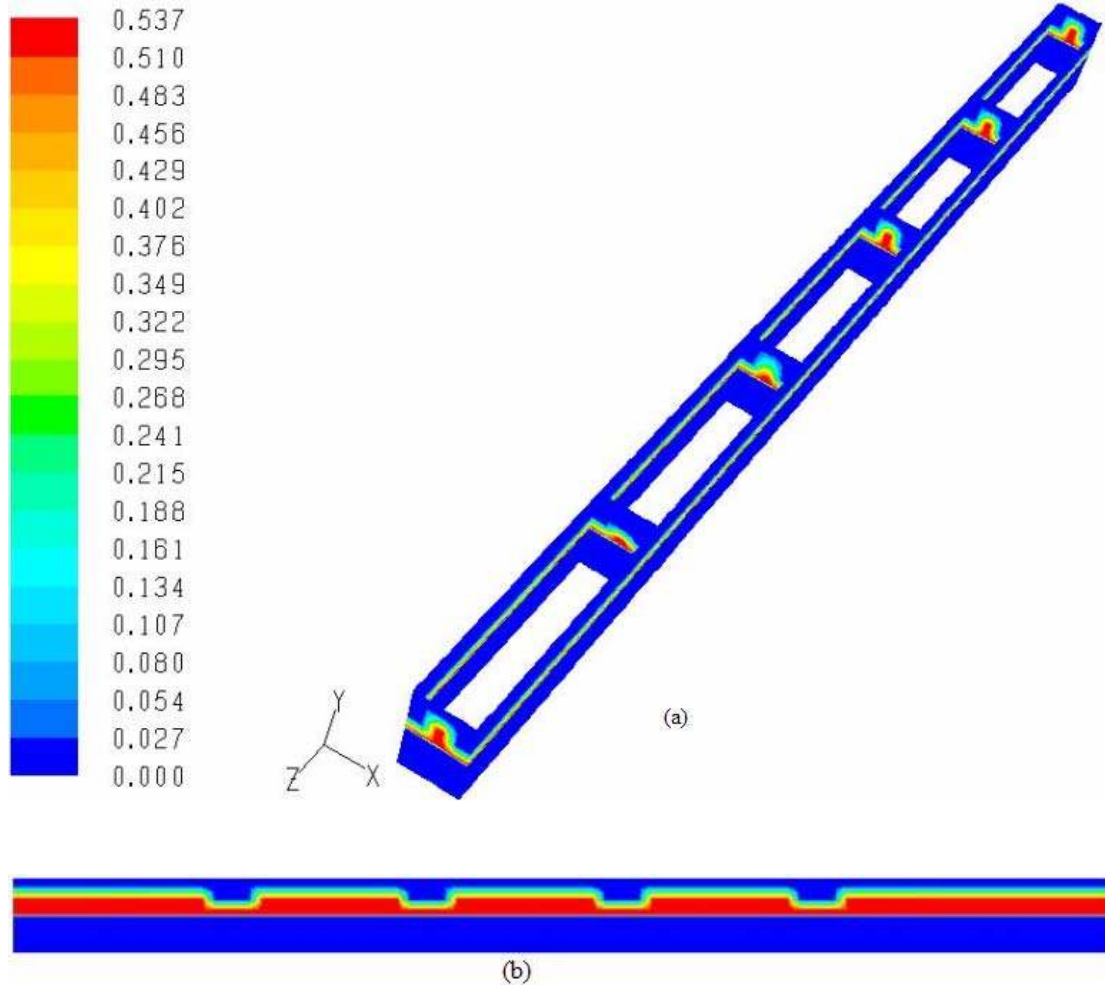


Şekil 6.16. PEMFC iç ve dış yüzeylerindeki hız dağılımı (m/s)

a) ($x=0$, $x=0,003$, $z=0$, $z=0,014$, $z=0,028$, $z=0,042$, $z=0,056$, $z=0,07$)

b) PEMFC gaz kanalları iç yüzeyinde ($x=0,0015$)

Şekil 6.17.a ve b’de 3-B PEMFC geometrisi üzerinde seçilen yüzeylerdeki hidrojen mol kesri dağılımları görülmektedir. PEMFC modelinin çözümü incelendiğinde anot kısmında hidrojen mol kesrinin yoğun olduğu görülmektedir ve beklenen bir olaydır.

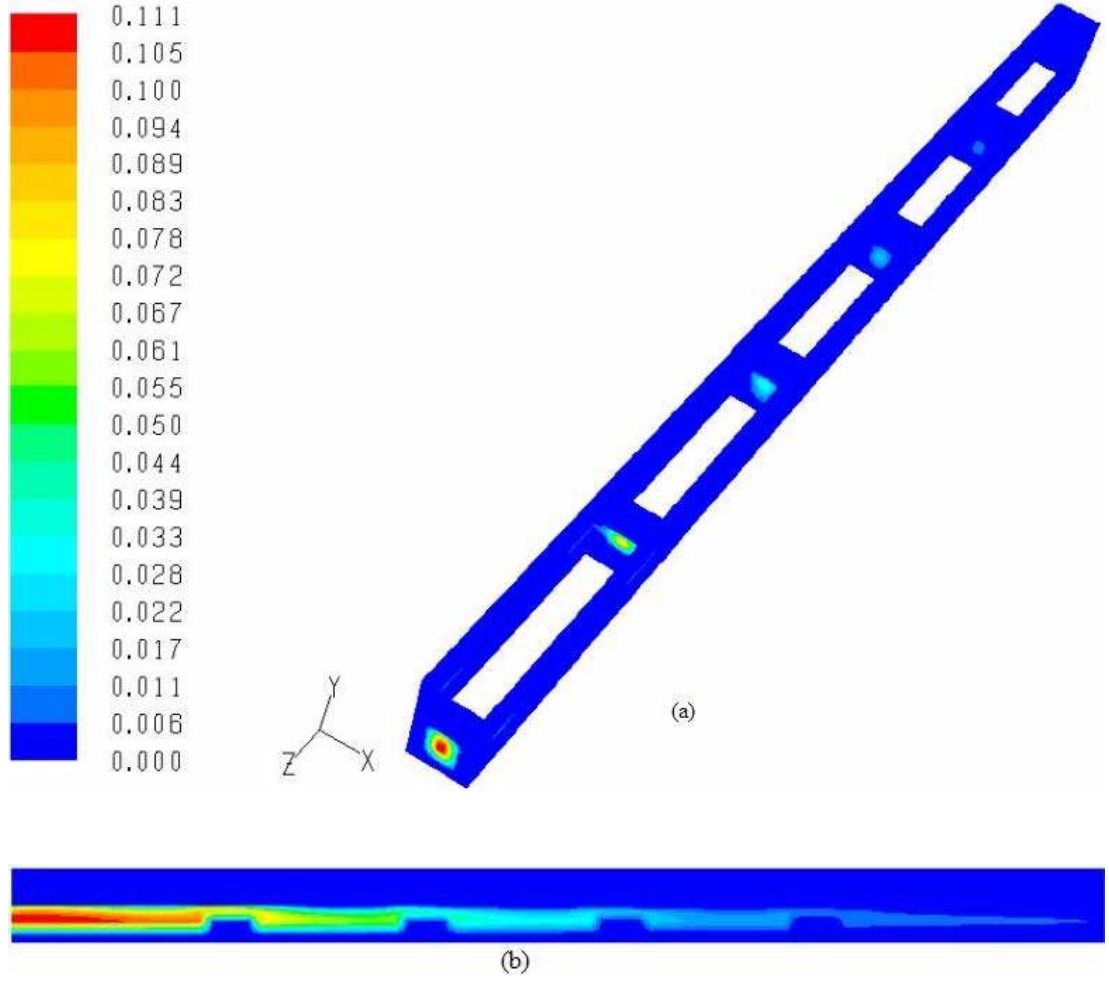


Şekil 6.17. PEMFC iç ve dış yüzeylerindeki H_2 dağılımı (Mol kesri)

a) ($x=0$, $x=0,003$, $z=0$, $z=0,014$, $z=0,028$, $z=0,042$, $z=0,056$, $z=0,07$)

b) PEMFC gaz kanalları iç yüzeyinde ($x=0,0015$)

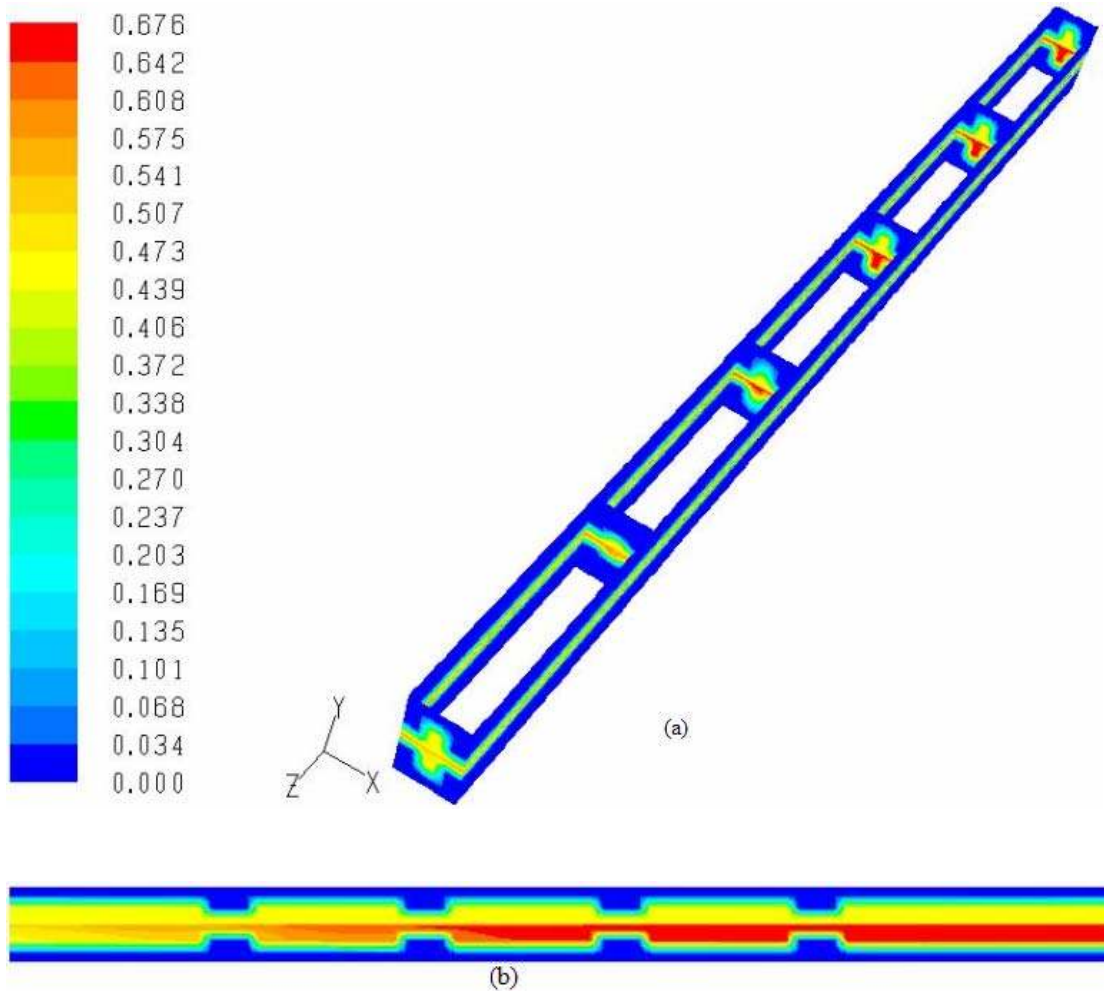
Şekil 6.18.a ve b’de 3-B PEMFC geometrisi üzerinde seçilen yüzeylerdeki oksijen mol kesri dağılımları görülmektedir. PEMFC modeli giriş kesitinin ($z=0$) katot kısmında oksijen kütle kesri 0,1494 olarak tanımlanmıştır. PEMFC modelinin çözümü incelendiğinde katot girişinde mol kesrinin girişte tanımlanan değerle uyumlu olduğu gözlenmektedir.



Şekil 6.18. PEMFC iç ve dış yüzeylerindeki O_2 dağılımı (Mol kesri)

- a) ($x=0$, $x=0,003$, $z=0$, $z=0,014$, $z=0,028$, $z=0,042$, $z=0,056$, $z=0,07$)
 b) PEMFC gaz kanalları iç yüzeyinde ($x=0,0015$)

Şekil 6.19.a ve b’de 3-B PEMFC geometrisi üzerinde seçilen yüzeylerdeki su buharı mol kesri dağılımları görülmektedir. PEMFC modeli giriş kesitinin ($z=0$) anot kısmında su buharı kütle kesri 0,887 olarak tanımlanmıştır. PEMFC modeli giriş kesitinin ($z=0$) katot kısmında su buharı kütle kesri 0,3561 olarak tanımlanmıştır. PEMFC modelinin çözümü incelendiğinde anot ve katot girişlerinde mol kesrinin modelde tanımlanan değerle uyumlu olduğu gözlenmektedir.

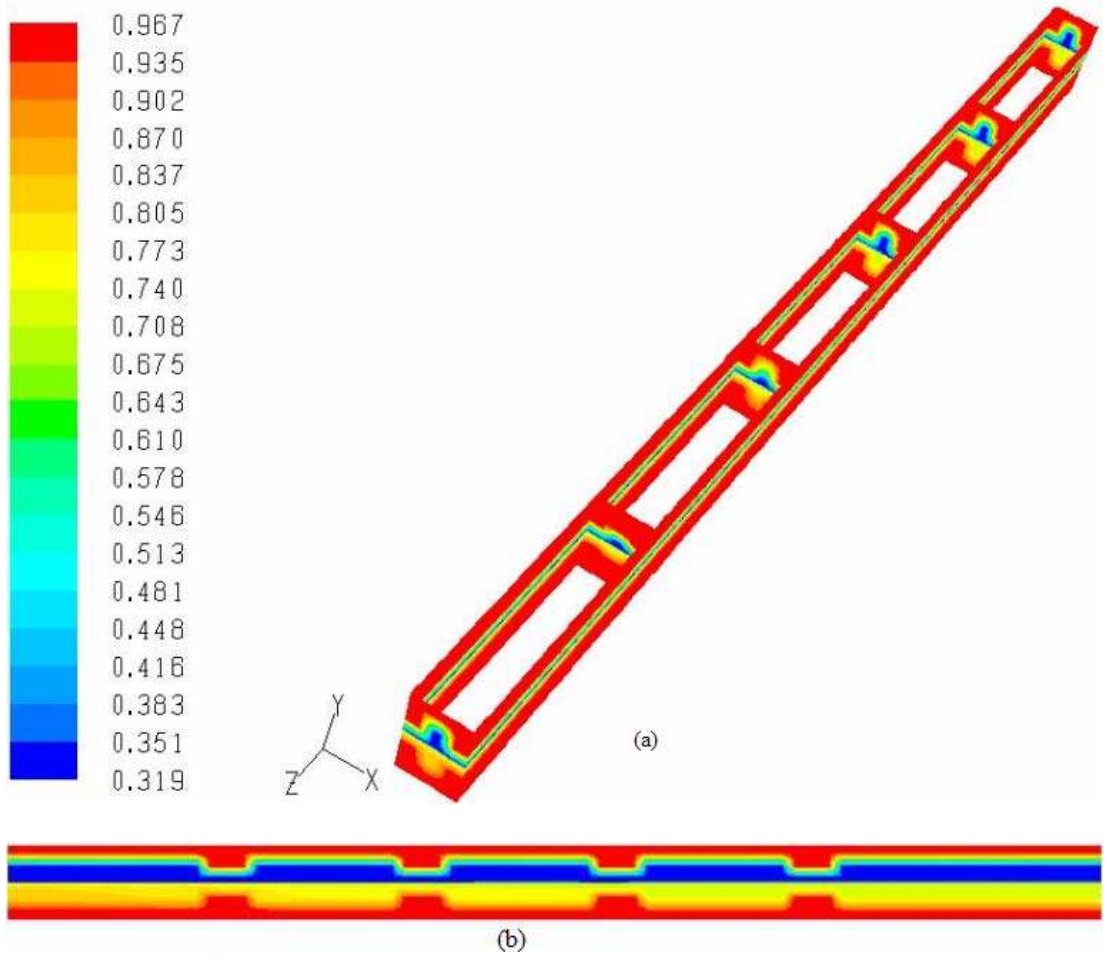


Şekil 6.19. PEMFC iç ve dış yüzeylerindeki H₂O dağılımı (Mol kesri)

a) ($x=0$, $x=0,003$, $z=0$, $z=0,014$, $z=0,028$, $z=0,042$, $z=0,056$, $z=0,07$)

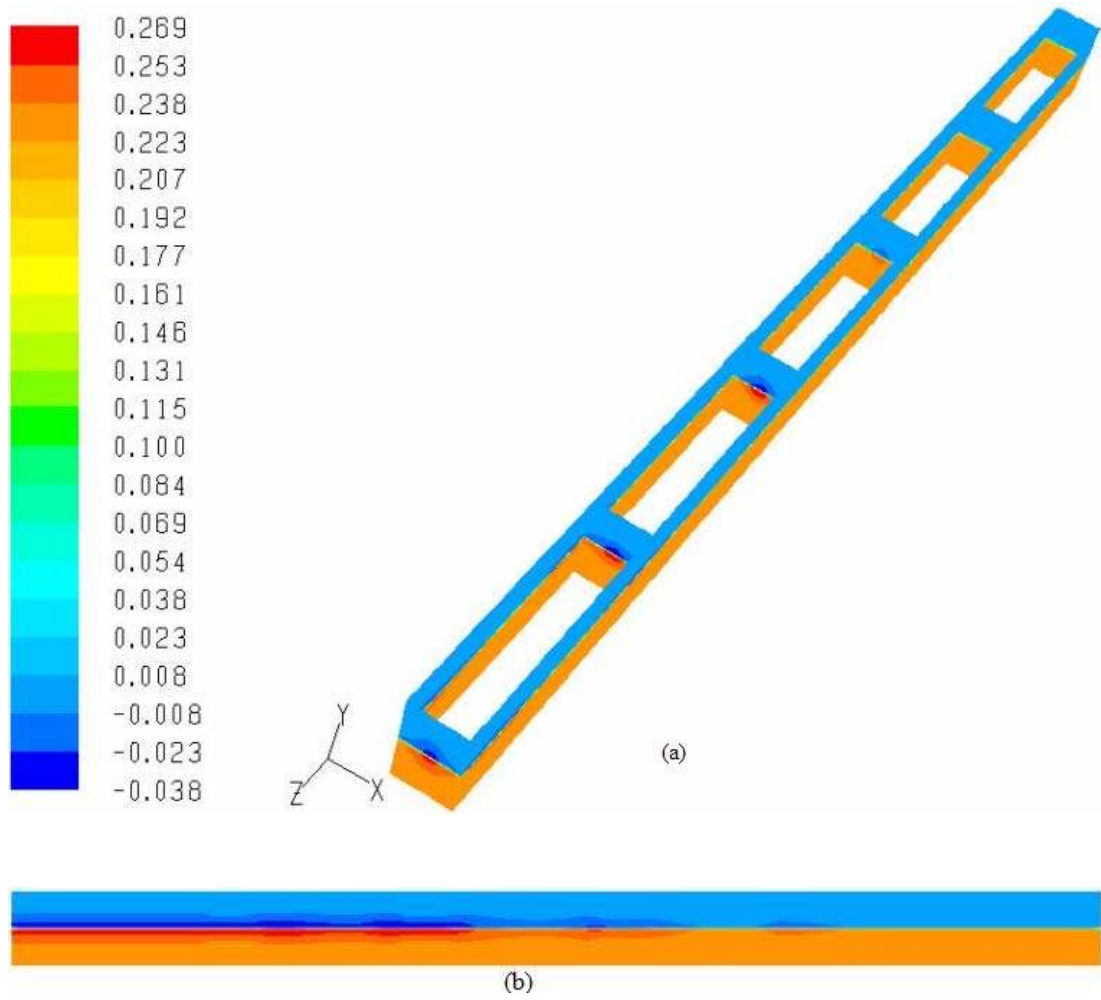
b) PEMFC gaz kanalları iç yüzeyinde ($x=0,0015$)

Şekil 6.20.a ve b’de 3-B PEMFC geometrisi üzerinde seçilen yüzeylerdeki yoğunluk dağılımları görülmektedir. Hücre boyunca kesitlerdeki yoğunluk dağılımının tür dağılımları ile benzer bir değişim gösterdiği gözlenmektedir.



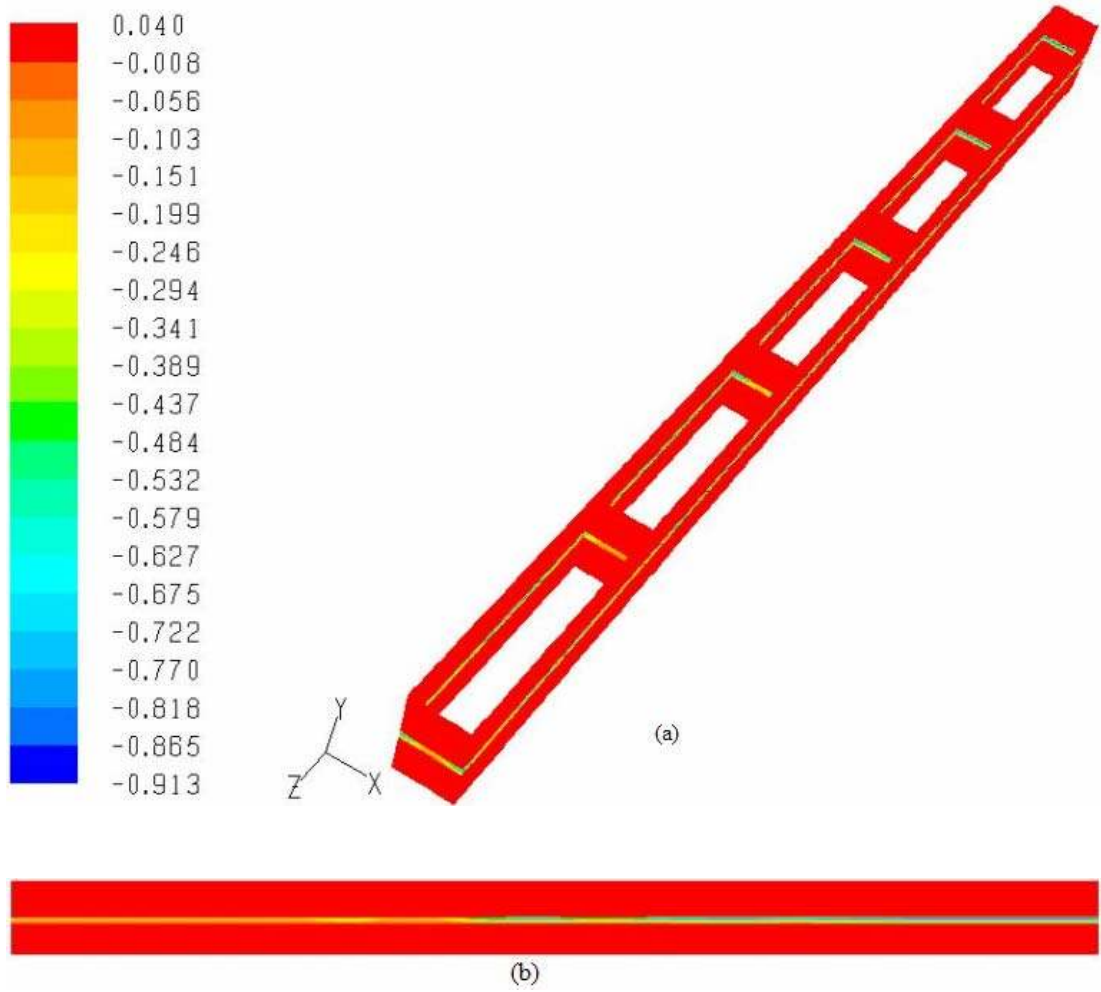
Şekil 6.20. PEMFC iç ve dış yüzeylerindeki yoğunluk dağılımı (kg/m^3)
 a) ($x=0, x=0,003, z=0, z=0,014, z=0,028, z=0,042, z=0,056, z=0,07$)
 b) PEMFC gaz kanalları iç yüzeyinde ($x=0,0015$)

Şekil 6.21.a ve b’de 3-B PEMFC geometrisi üzerinde seçilen yüzeylerdeki elektrik potansiyeli dağılımı görülmektedir. PEMFC modelinde, anot akım toplayıcının üst yüzeyine sınır şartı olarak hücre voltajı için “0” değeri ve katot akım toplayıcının alt yüzeyine sınır şartı olarak hücre voltajı için belirlenen hücre voltaj değeri tanımlanmıştır. PEMFC modelinin çözümü incelendiğinde anot ve katot kısımlarında modelde tanımlanan değerlerle uyumun olduğu gözlenmektedir.



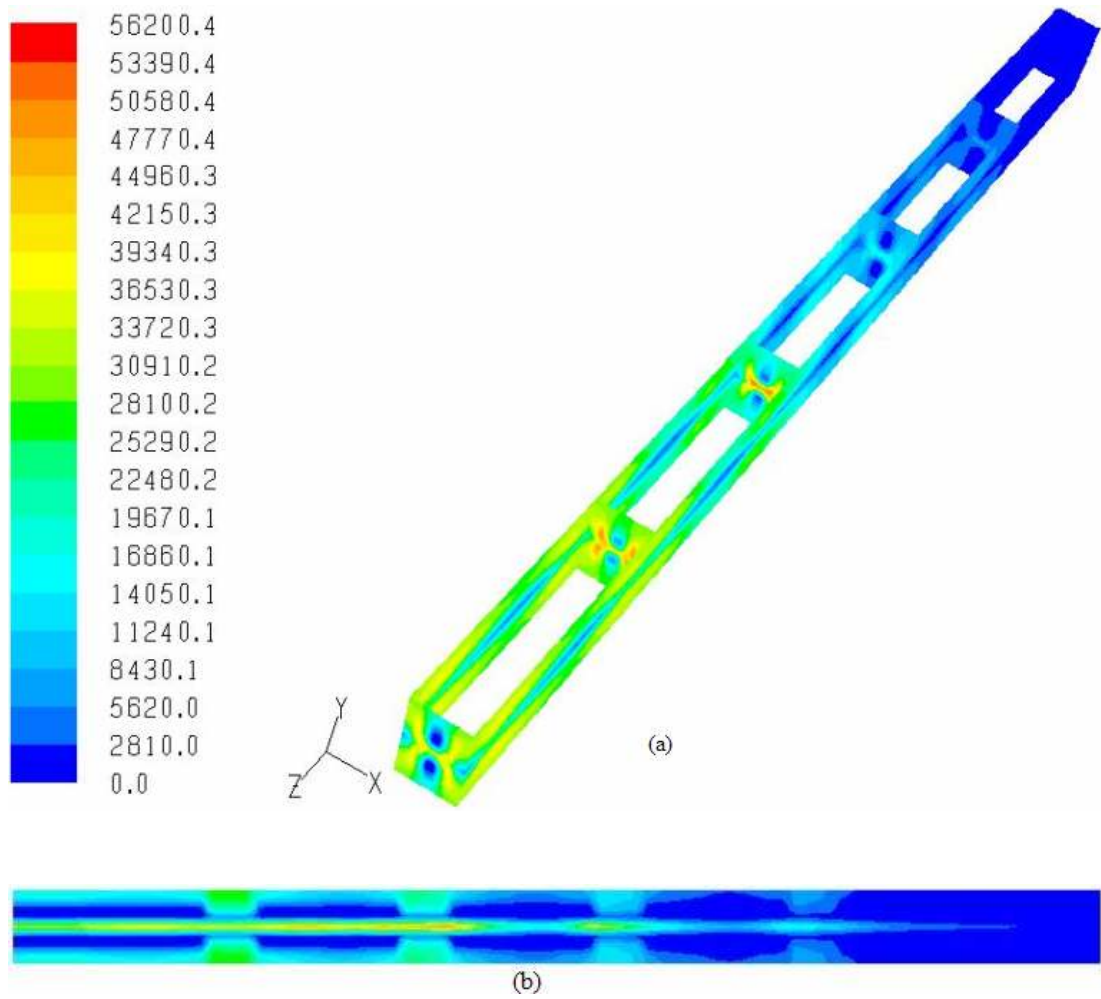
Şekil 6.21. PEMFC iç ve dış yüzeylerindeki elektrik potansiyeli dağılımı (V)
 a) ($x=0$, $x=0,003$, $z=0$, $z=0,014$, $z=0,028$, $z=0,042$, $z=0,056$, $z=0,07$)
 b) PEMFC gaz kanalları iç yüzeyinde ($x=0,0015$)

Şekil 6.22.a ve b’de 3-B PEMFC geometrisi üzerinde seçilen yüzeylerdeki aşırı potansiyel dağılımı görülmektedir. PEMFC modelinin çözümü incelendiğinde, anot ve katot akım toplayıcılar ve gaz kanallarında aşırı potansiyelin mevcut olmadığı, sadece membran, katalizör ve gaz difüzyon tabakalarında eksi değerlerde dağılım gösterdiği görülmektedir.



Şekil 6.22. PEMFC iç ve dış yüzeylerindeki aşırı potansiyel dağılımı (V)
 a) ($x=0$, $x=0,003$, $z=0$, $z=0,014$, $z=0,028$, $z=0,042$, $z=0,056$, $z=0,07$)
 b) PEMFC gaz kanalları iç yüzeyinde ($x=0,0015$)

Şekil 6.23.a ve b’de 3-B PEMFC geometrisi üzerinde seçilen yüzeylerdeki akım yoğunluğu dağılımı görülmektedir. PEMFC modelinde, sınır şartı olarak anot ve katot akım toplayıcılara verilen hücre voltaj değerleri Şekil 6.23’de görülen akım yoğunluğu dağılımını üretmiştir.



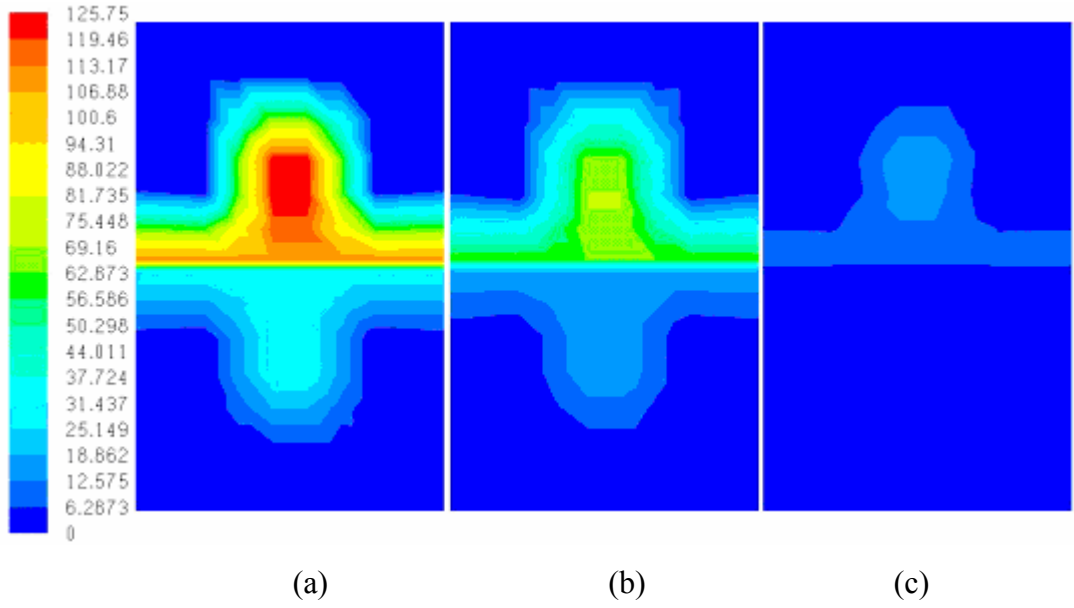
Şekil 6.23. PEMFC iç ve dış yüzeylerindeki akım yoğunluğu şiddeti dağılımı (A/m^2)
 a) ($x=0$, $x=0,003$, $z=0$, $z=0,014$, $z=0,028$, $z=0,042$, $z=0,056$, $z=0,07$)
 b) PEMFC gaz kanalları iç yüzeyinde ($x=0,0015$)

PEMFC modelinin çözümü incelendiğinde, hücre çıkışına doğru gidildikçe anot ve katot kısımlarında elde edilen akım yoğunluğu değerlerinin azaldığı gözlenmektedir.

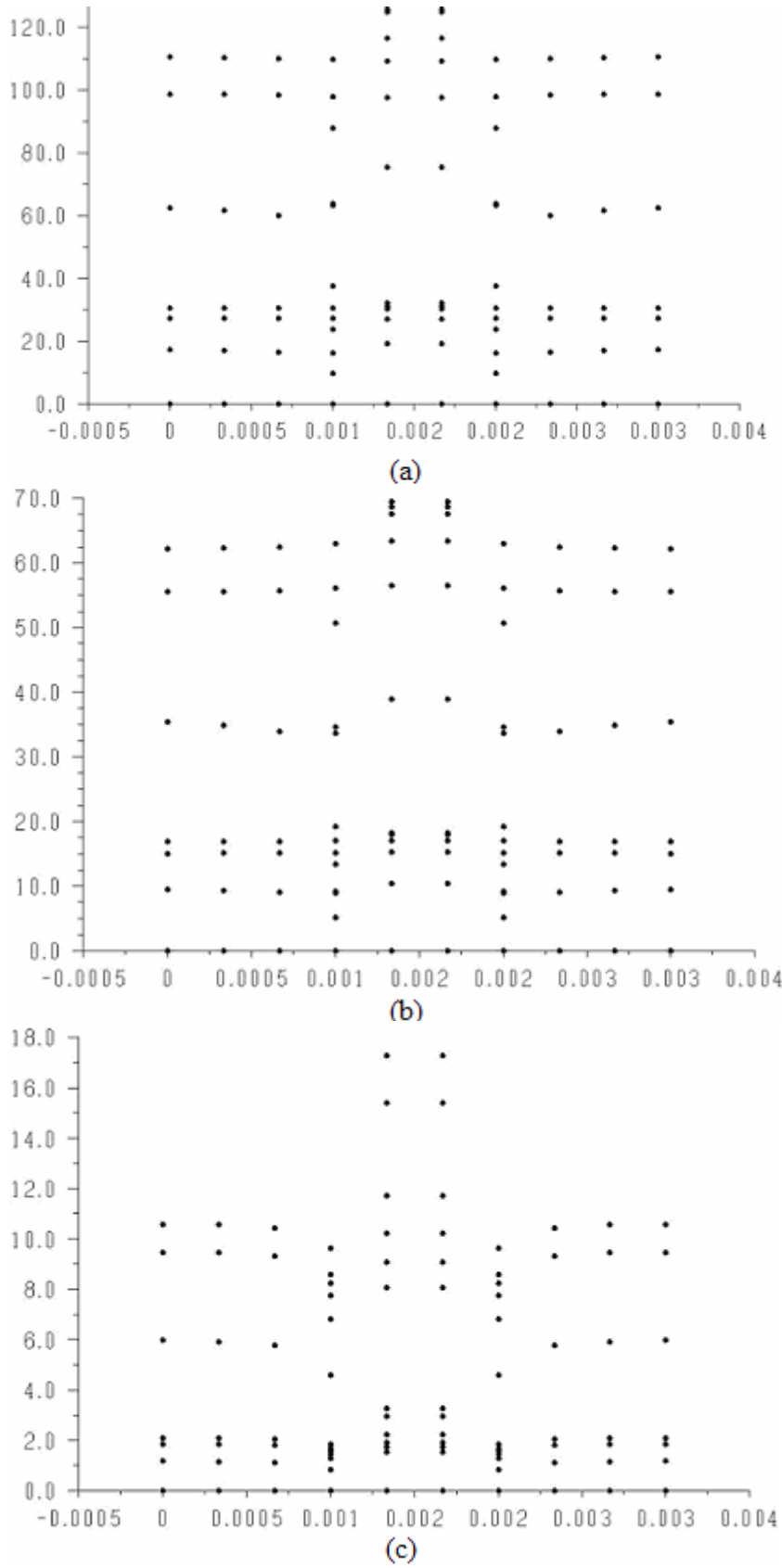
6.4.2. Giriş, orta ve çıkış yüzeylerindeki dağılımların karşılaştırılması

Bu kısımda, (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki niceliklerin 2-B dağılımları karşılaştırmalı olarak sunulmuştur.

Şekil 6.24’de, PEMFC modelinin çözümünden elde edilen giriş, orta ve çıkış kesitlerindeki basınç dağılımı sunulmaktadır. Giriş kesitinde basınç 100 Pa civarında gözlenirken orta kesitte 70 Pa civarında ve çıkış kesitinde “0” Pa değerine ulaştığı gözlenmektedir. Hücre kanallarının çıkışta atmosfere açık olduğu düşünülürse bu sonucun makul olduğu söylenebilir. Kanal dışındaki katı kısımlarda ise “0” Paskal gözlenmektedir.

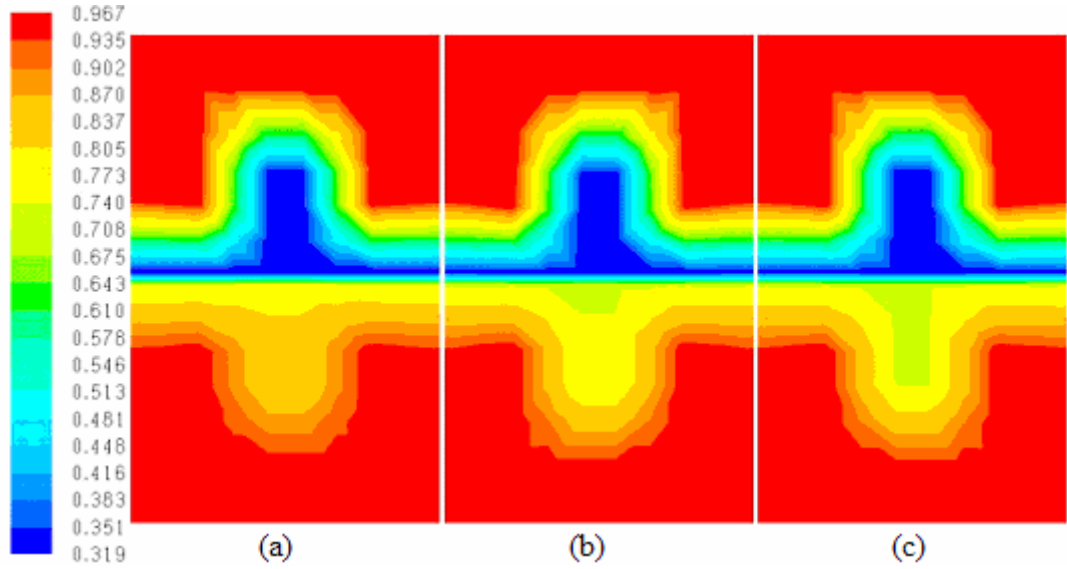


Şekil 6.24. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki basınç dağılımı (Pa)



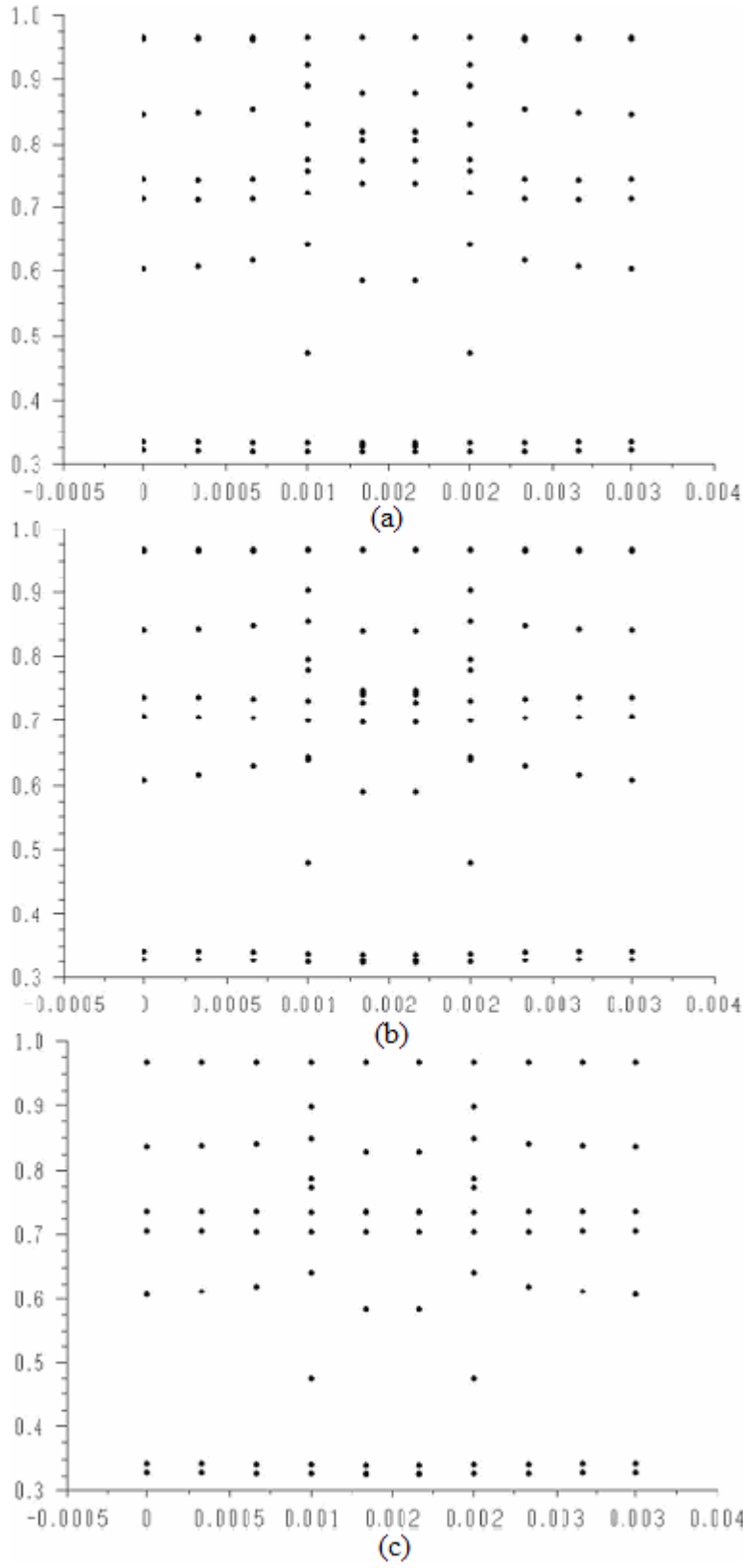
Şekil 6.25. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki basıncın istatistiksel dağılımı (Pa)

Şekil 6.25’de, PEMFC modelinin (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki basınç değerlerinin istatistiksel dağılımı Paskal cinsinden sunulmuştur. Bu grafiğe göre, yakıt hücresinin giriş kesitinde oluşan basınç dağılımının genel olarak 6 farklı (18 - 285 - 32 - 63 - 100 - 110) basınç değeri vardır. Orta kesitteki basınç dağılımının değerleri 8 - 18 Pa, 35 Pa ile 55 - 62 Pa arasında değişmektedir. Çıkış kesitindeki basınç dağılımının değerleri 0,48 Pa ile “0” Pa arasında değişmektedir. Basınç değerlerinin çoğu “0” Pa ile 11 Pa arasında kümelenmiştir.



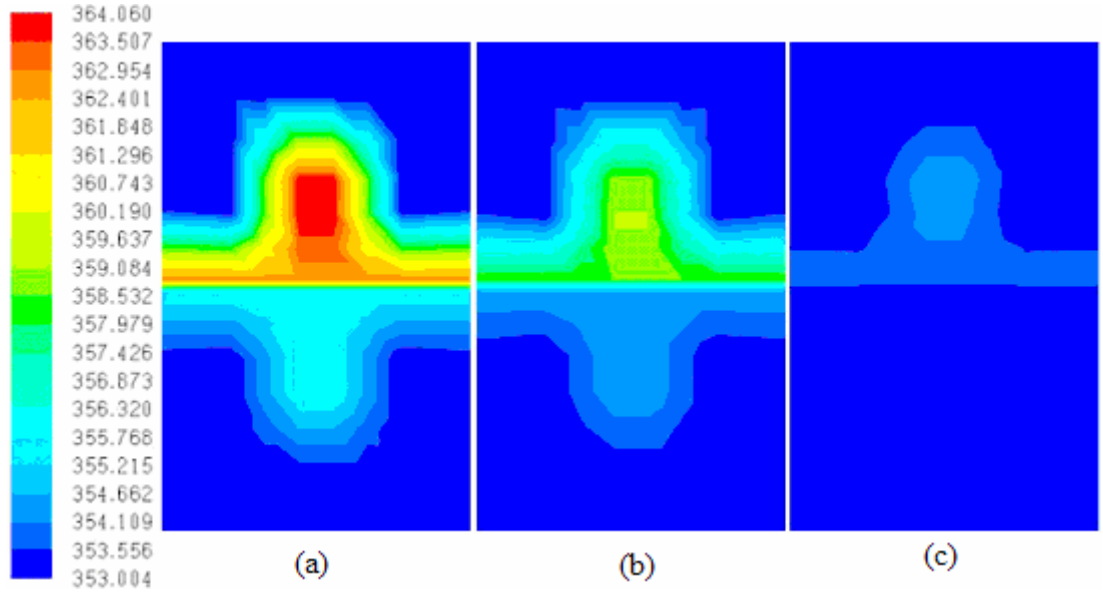
Şekil 6.26. PEMFC (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki yoğunluk (kg/m^3)

Şekil 6.26’da, PEMFC modelinin (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki yoğunluk dağılımı izlenmektedir. Türlerin hücre boyunca olan dağılımına benzer bir dağılım elde edilmiştir.



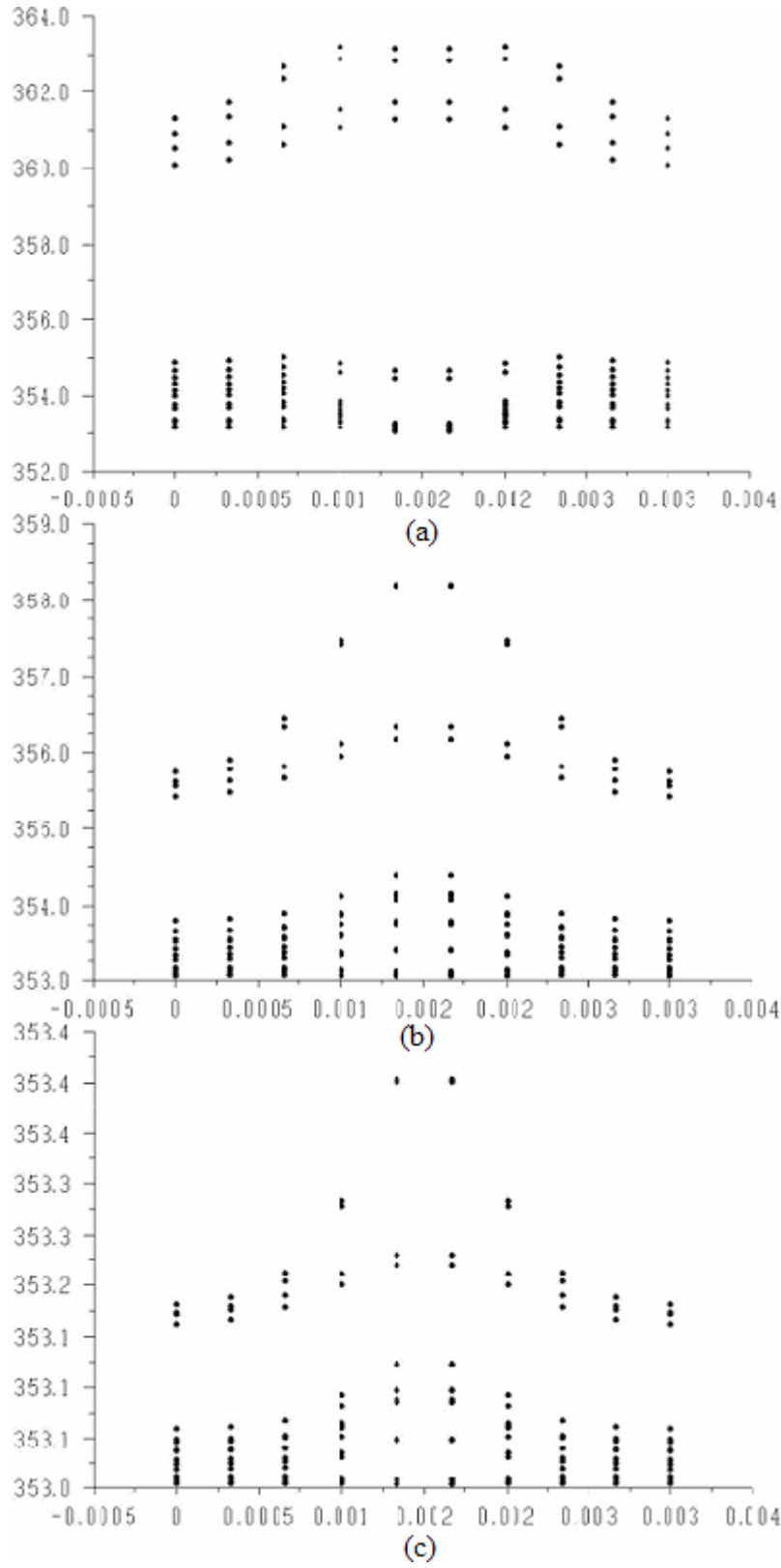
Şekil 6.27. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki yoğunluğun istatistiksel dağılımı (kg/m^3)

Şekil 6.27’de, PEMFC (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki istatistiksel yoğunluk dağılımları görülmektedir. Bu grafiğe göre, yakıt hücresinin giriş kesitinde oluşan yoğunluk dağılımının değerleri 0,32 ile 0,95 arasında değişmektedir. Genel olarak 7 farklı (0,32 - 0,33 - 0,6 - 0,72 - 0,75 - 0,85 - 0,98) yoğunluk değeri gözlenmiştir. Orta kesitteki yoğunluk dağılımının değerleri 0,98 ile 0,32 arasında değişmektedir. 0,6 değeri ile 0,85 değeri arasında kümelenmeler oluşmuştur. Çıkış kesitindeki yoğunluk dağılımının değerleri 0,98 ile 0,32 arasında değişmektedir. Giriş kesitindeki dağılıma benzer bir dağılım gözlenmektedir.



Şekil 6.28. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki sıcaklık dağılımı (K)

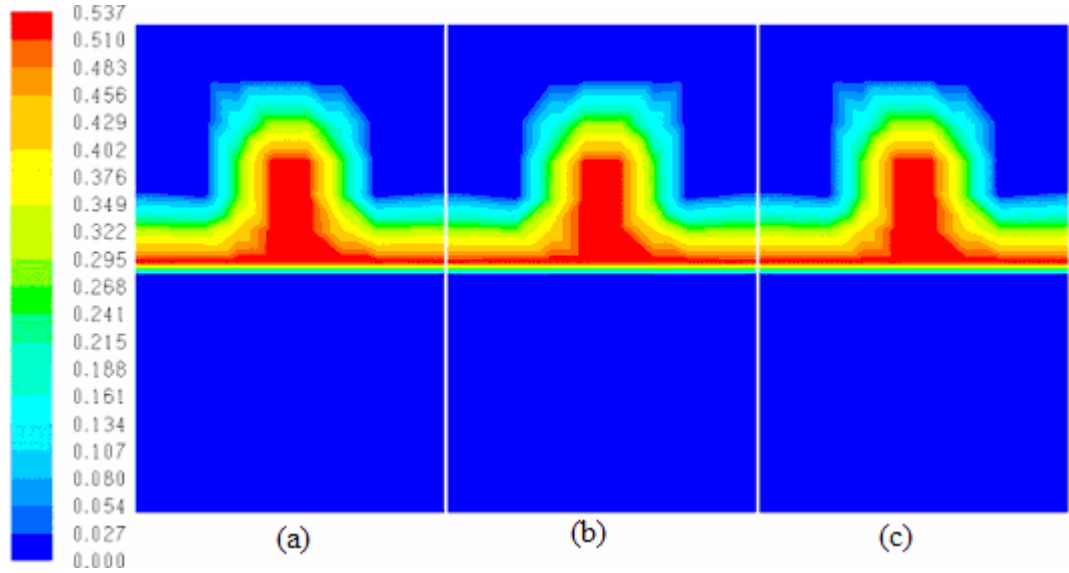
Şekil 6.28’de PEMFC modelinin (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki sıcaklık (K) dağılımları gözlenmektedir. Tüm kesitlerde akım toplayıcı ve gaz kanallarında sıcaklığın 353,004 K değerinde olduğu, membran, katalizör ve gaz difüzyon tabakalarında ise sıcaklığın en fazla 364,06 K değerine ulaştığı gözlenmektedir.



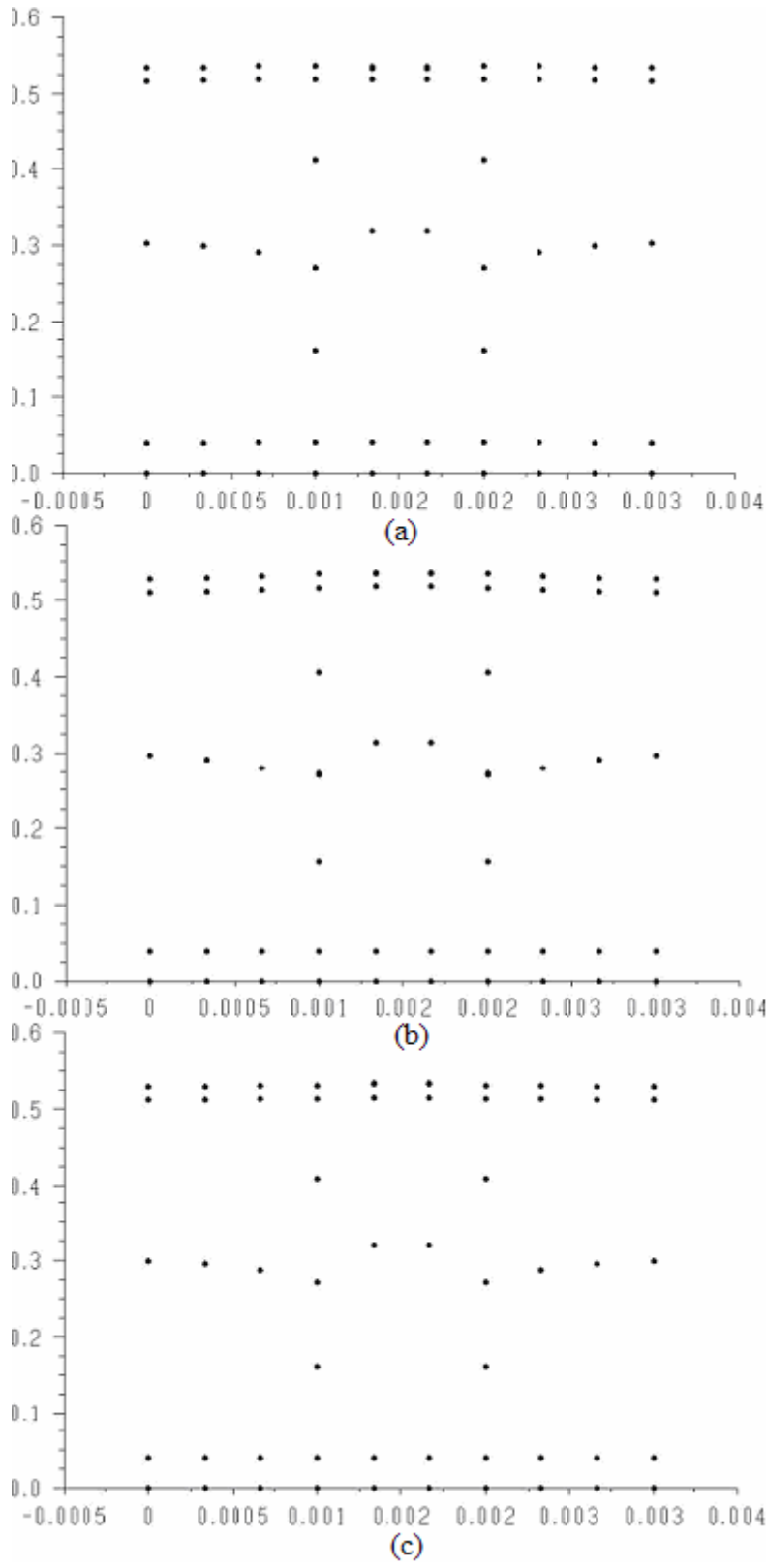
Şekil 6.29. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki sıcaklığın istatistiksel dağılımı (K)

Şekil 6.29'da, PEMFC modelinin çözümünden elde edilen (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki istatistiksel sıcaklık dağılımı (K) görülmektedir. Giriş kesitinde, sıcaklık değerleri 353,00 ile 363,5 K arasında değişmektedir. 353 – 355 K sıcaklıkları arasında ve 360 – 363,5 K arasındaki sıcaklıklarda kümelenme oluşmuştur. Orta kesitte, sıcaklık değerleri 353,00 ile 358,5 K arasında değişmektedir. 353 – 353,2 K sıcaklıkları arasında ve 355,2 – 356,5 K sıcaklıklarında kümelenme oluşmuştur. Çıkış kesitinde ise, sıcaklık değerleri 353,00 ile 353,4 arasında değişmektedir. 353 – 353,15 K sıcaklıkları arasında ve 353,1 – 353,25 arasındaki sıcaklıklarda kümelenme oluşmuştur.

Şekil 6.30'da, PEMFC modeli çözümünden elde edilen (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki molar hidrojen dağılımı görülmektedir. Model anot kısmında hidrojen dağılımı yoğun olarak görülmektedir. Katot tarafında ve anot akım toplayıcıda hidrojen bulunmadığı doğal olarak gözlenmiştir.

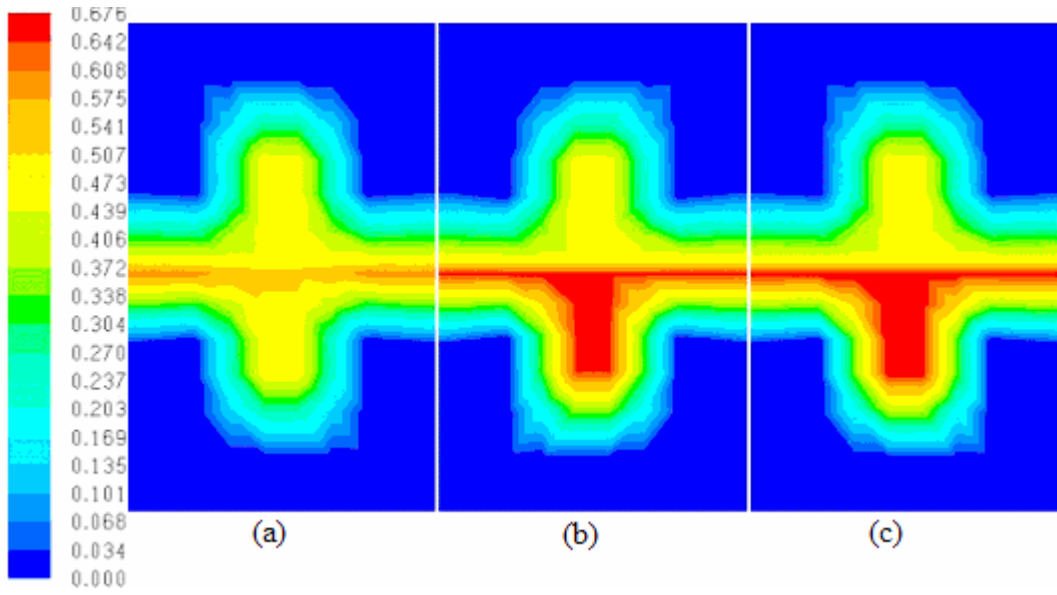


Şekil 6.30. PEMFC (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki H_2 dağılımı (Mol kesri)



Şekil 6.31. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki H_2 istatistiksel dağılımı (Mol kesri)

Şekil 6.31’de, PEMFC modelinin çözümünden elde edilen (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki istatistiksel molar hidrojen dağılımı görülmektedir. Giriş kesitinde 0,6 ile 0,00 değerleri arasında bir değişim gözlenmektedir. 4 farklı (0,025 - 0,3 - 0,5 - 0,53) molar hidrojen değeri gözlenmiştir. Orta kesitte, 0,53 ile 0,024 değerleri arasında bir değişim gözlenmektedir. 4 farklı (0,025 - 0,3 - 0,5 - 0,53) molar hidrojen değeri gözlenmiştir. Çıkış kesitinde, 0,53 ile 0,05 değerleri arasında bir değişim gözlenmektedir.

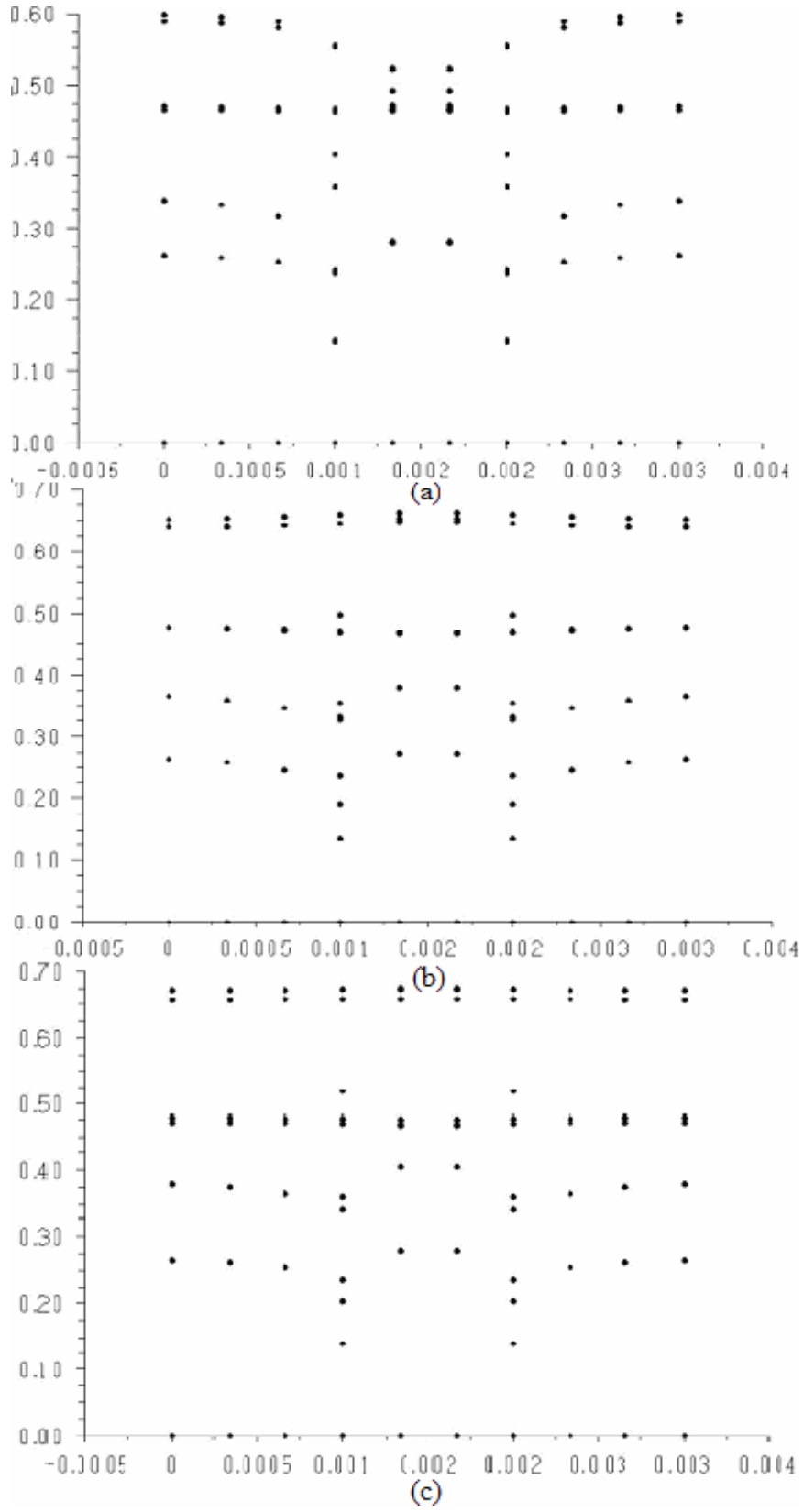


Şekil 6.32. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki H_2O dağılımı (Mol kesri)

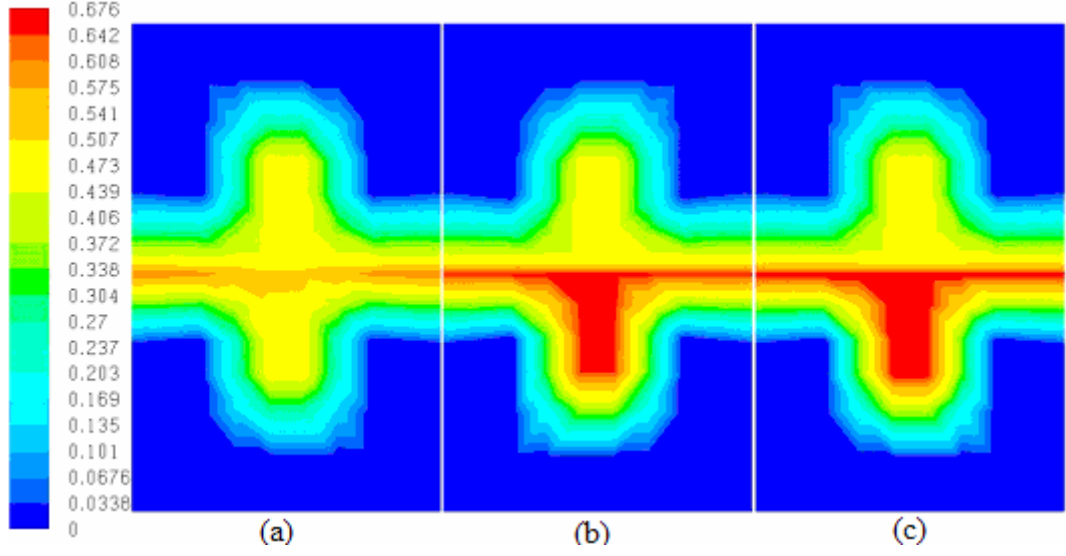
Şekil 6.32’de, PEMFC modelinin çözümünden elde edilen (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki molar su buharı dağılımı görülmektedir. Modelde, anot tarafı girişinde su buharı kütle kesri, 0,887, katot tarafı girişinde su buharı kütle kesri 0,3561 olarak tanımlanmıştır. Model çözümü incelendiğinde, anot giriş kesitinde, molar su buharı değeri 0,507, katot giriş kesitinde ise molar su buharı değeri, 0,507 civarında seyretmektedir. Orta kesitte, anot kısmında molar su buharı 0,507 değerinde ve kanallara yayılmış vaziyettedir. Katot kısmında ise molar su buharı 0,642 değerinde ve kanallara yayılmış vaziyettedir. Çıkış kesitinde, anot kısmında molar su buharı maksimum 0,338 değerinde ve kanal kesitinden akım toplayıcılara doğru gidildikçe azalarak değişen bir dağılım göstermektedir. Katot

kısımında, molar su buharı maksimum 0,676 değerinde ve kanal kesitinden akım toplayıcılara doğru gidildikçe azalarak değişen bir dağılım göstermektedir.

Şekil 6.33’de, PEMFC modelinin çözümünden elde edilen (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki istatistiksel molar su buharı dağılımı görülmektedir. Giriş kesitinde 0,25 ile 0,60 değerleri arasında bir değişim gözlenmektedir. 4 farklı (0,25; 0,35; 0,48; 0,60) molar su buharı değeri gözlenmiştir. Su buharı molar değerlerinin çoğu 0,60 ile 0,25 değerleri arasında kümelenmişlerdir. Orta kesitte, 0,125 ile 0,65 değerleri arasında bir değişim gözlenmektedir. 5 farklı (0,25; 0,38; 0,48; 0,63; 0,65) molar su buharı değeri gözlenmiştir. Su buharı molar değerlerinde çoğunlukla, 0,25 ve 0,48 arasındaki değerlerde kümelenme gözlenmiştir. Çıkış kesitinde, 0,25 ile 0,65 değerleri arasında bir değişim gözlenmektedir. 6 farklı (0,00; 0,25; 0,38; 0,48; 0,65; 0,68) molar su buharı değeri gözlenmiştir. Su buharı molar değerlerinde, 0,25 – 0,48 değerleri arasında ve 0,65 – 0,68 değerleri arasında kümelenme gözlenmiştir.



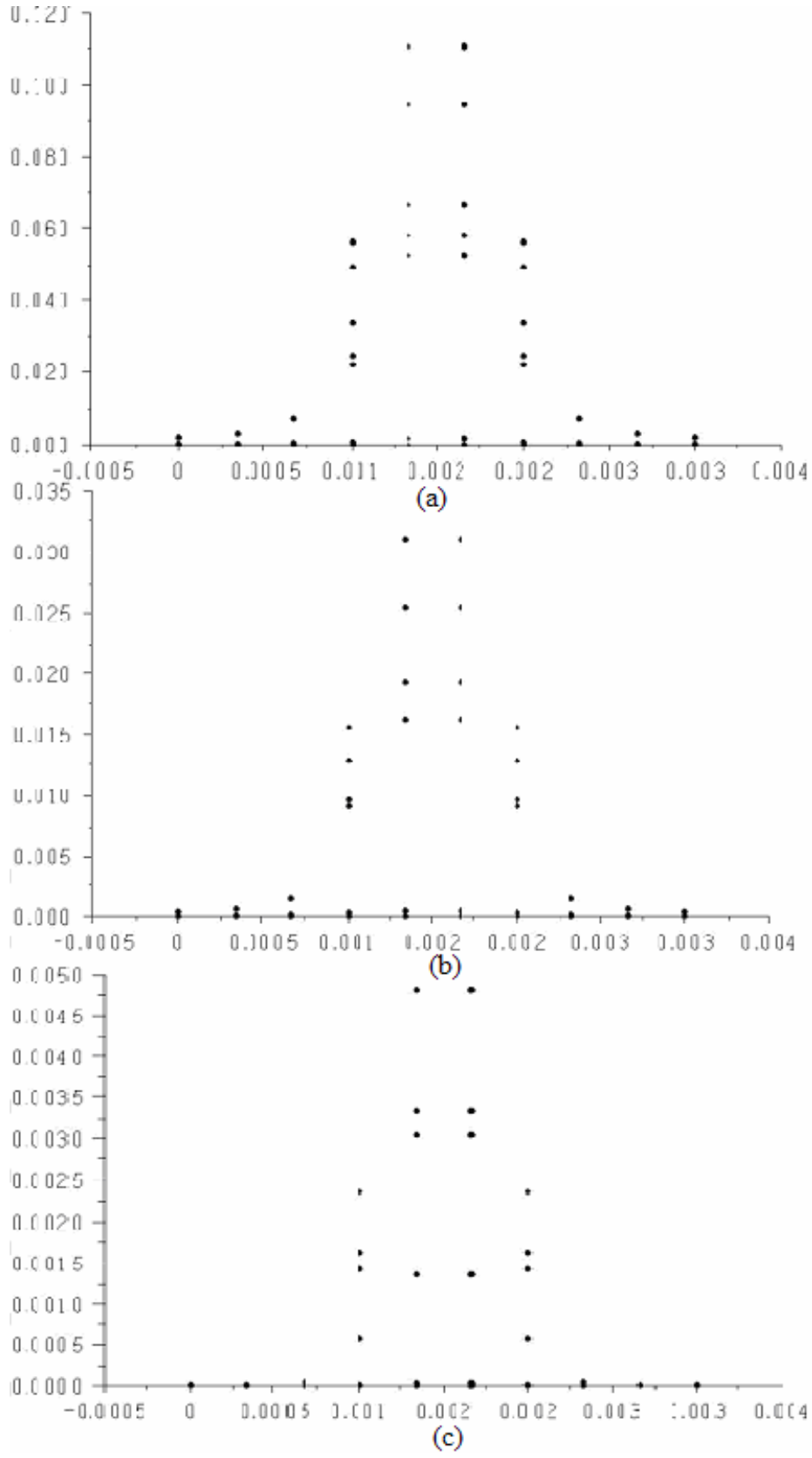
Şekil 6.33. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki H_2O istatistiksel dağılımı (Mol kesri)



Şekil 6.34. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki O_2 dağılımı (Mol kesri)

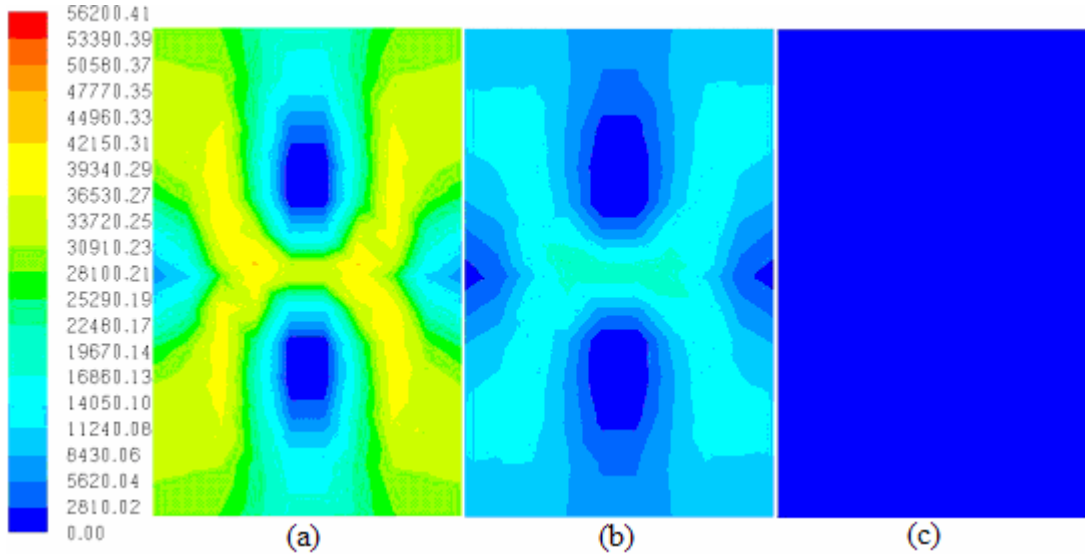
Şekil 6.34’de, PEMFC modelinin çözümünden elde edilen, (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki molar oksijen dağılımı görülmektedir. Modelde, katot tarafı girişinde oksijen kütle kesri 0,1494, anot tarafı girişinde su buharı kütle kesri 0.887 olarak tanımlanmıştır. Model çözümünde, giriş kesitinin anot tarafında bulunan su buharından dolayı, molar oksijen kesri 0,473 olarak gözlenmektedir. Orta kesitte, katot tarafında molar oksijen miktarının 0,676 değerine ulaştığı ve tüm kanala yayıldığı gözlenmektedir. Anot tarafındaki değer değişmemekle birlikte, kanal kesitine yayıldığı gözlenmiştir.

Şekil 6.35’de, PEMFC modelinin çözümünden elde edilen (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki istatistiksel molar oksijen dağılımı görülmektedir. Giriş kesitinde 0,11 ile 0,00 değerleri arasında bir değişim gözlenmektedir. Orta kesitte, 0,325 ile 0,00 değerleri arasında bir değişim gözlenmektedir. Çıkış kesitinde, 0,0475 ile 0,00 değerleri arasında bir değişim gözlenmektedir.

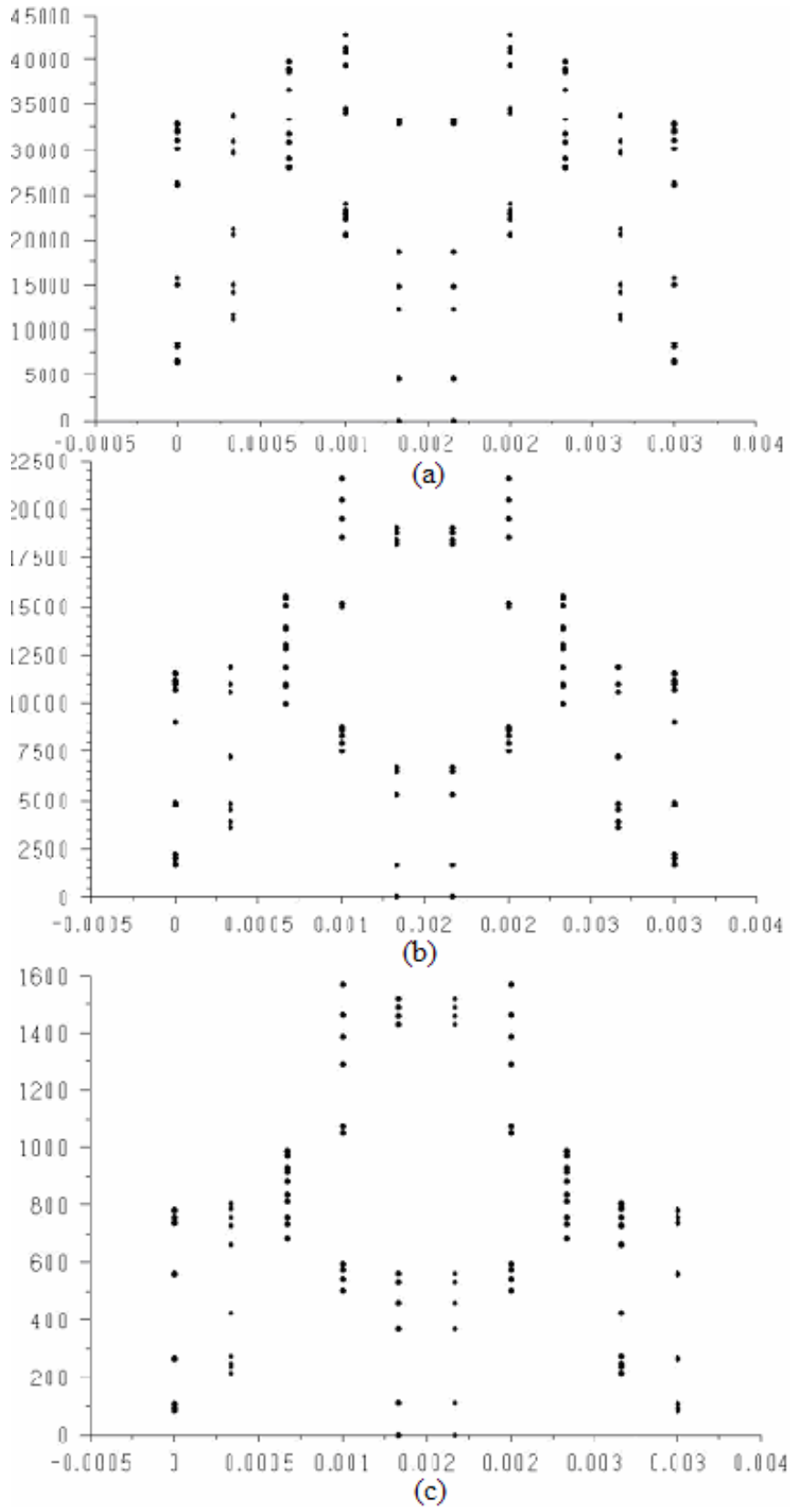


Şekil 6.35. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki O_2 istatistiksel dağılımı (Mol kesri)

Şekil 6.36'de, PEMFC model çözümünden elde edilen (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki akım yoğunluğu şiddeti dağılımı görülmektedir. Giriş kesitinde, membran, katalizör, gaz difüzyon tabakaları ile akım toplayıcının gaz difüzyon tabakaları ile temas eden ayaklarında $39340,29 \text{ A/m}^2$ civarında bir akım yoğunluğu olduğu gözlenmiştir. Orta kesite doğru gidildikçe, akım yoğunluğunun $14050,1 \text{ A/m}^2$ değerine düştüğü ve akım toplayıcının ayaklarına tamamen yayıldığı gözlenmektedir. Çıkış kesitinde ise, akım toplayıcı ayaklarında 0 değerindedir.

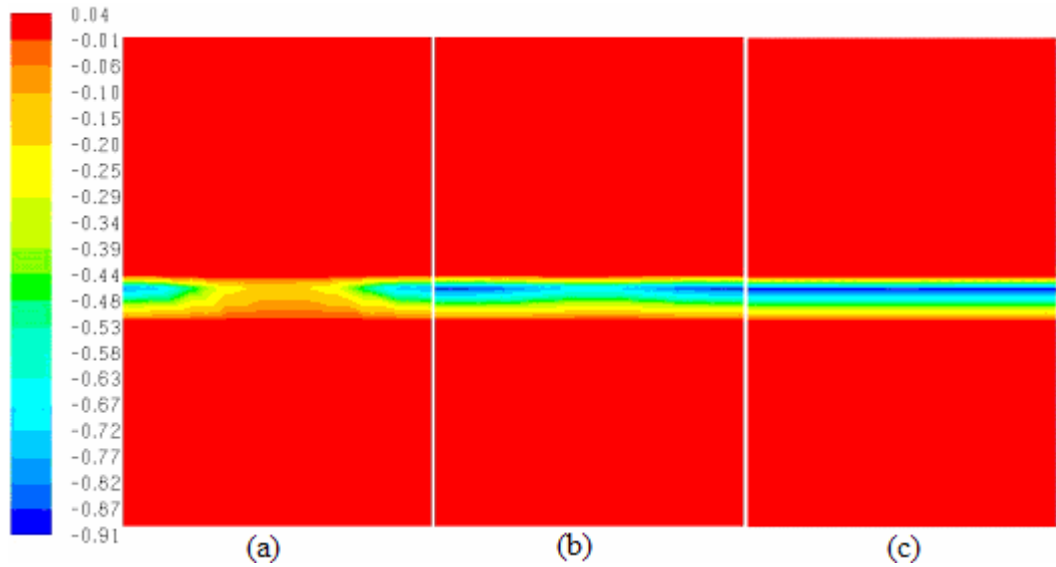


Şekil 6.36. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki akım yoğunluğu şiddeti dağılımı (A/m^2)



Şekil 6.37. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki akım yoğunluğu şiddetinin istatistiksel dağılımı (A/m^2)

Şekil 6.37’de, PEMFC modeli çözümünden elde edilen (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki istatistiksel akım yoğunluğu şiddeti dağılımı görülmektedir. Giriş kesitinde 42500 ile 0,00 değerleri arasında bir değişim gözlenmektedir. Çok farklı akım yoğunluğu değeri gözlenmiştir. Akım yoğunluğu değerlerinin, 42500 ve 0,00 arasında dağılmış bir şekilde kümелendiği gözlenmektedir. Orta kesitte, 21500 ile 0,00 değerleri arasında bir değişim gözlenmektedir. Akım yoğunluğu değerlerinin 0,00 ile 21500 arasında kümелendiği gözlenmiştir. Çıkış kesitinde, 1600 ile 0,00 değerleri arasında bir değişim gözlenmektedir. Akım yoğunluğu değerlerinin 1600 ile 0,00 değerleri arasında kümelenmiş olduğu gözlenmiştir

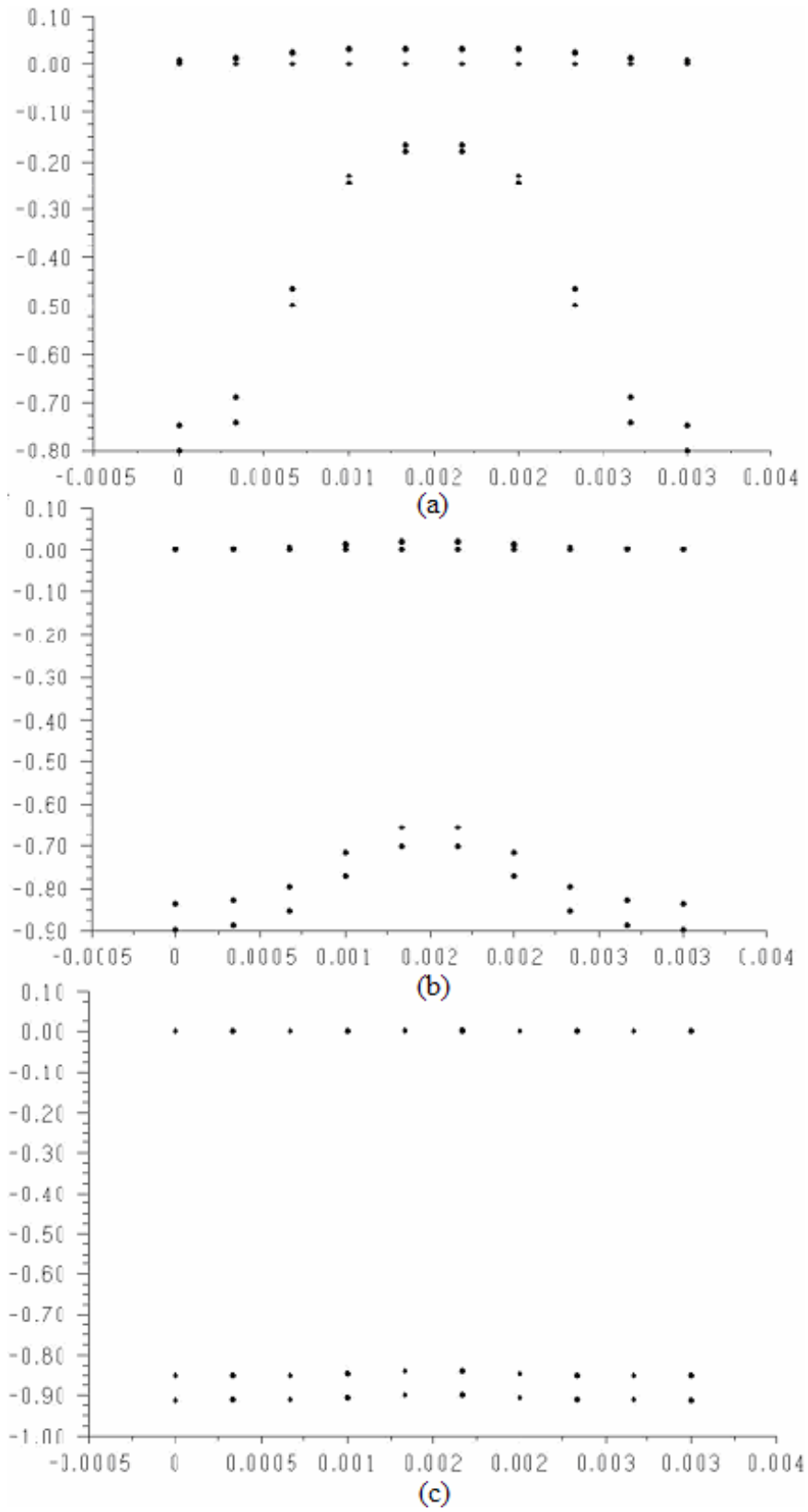


Şekil 6.38. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki aşırı potansiyel dağılımı (V)

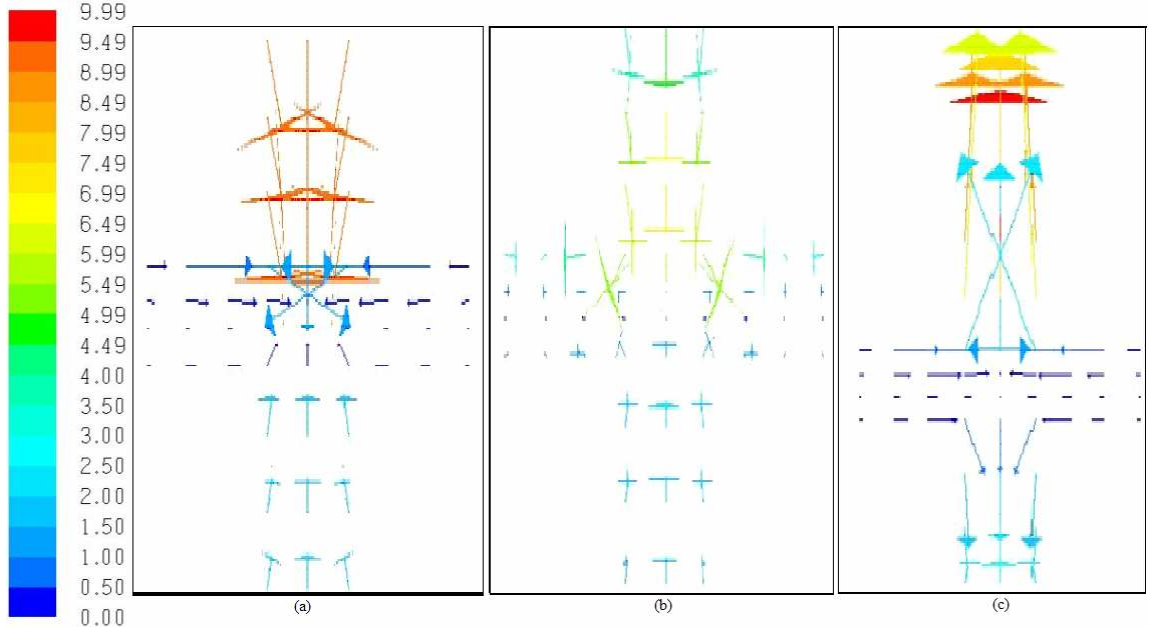
Şekil 6.38’de, PEMFC (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki aşırı-potansiyel dağılımı görülmektedir. Giriş, orta ve çıkış kesitlerinde, anot, katot ve gaz kanallarında aşırı-potansiyel değeri sıfırdır. Sadece membran, katalizör ve gaz difüzyon tabakalarında -0,91 ile 0,04 değerleri arasında bir dağılım gözlenmektedir.

Şekil 6.39’da, PEMFC modelinin çözümünden elde edilen (a) giriş, $z= 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki istatistiksel aşırı-potansiyel dağılımı

görülmektedir. Giriş kesitinde -0,80 ile 0,00 değerleri arasında bir değişim gözlenmektedir. Orta kesitte, -0,90 ile 0,00 değerleri arasında bir değişim gözlenmektedir. Çıkış kesitinde, -0.91 ile 0,00 değerleri arasında bir değişim gözlenmektedir.

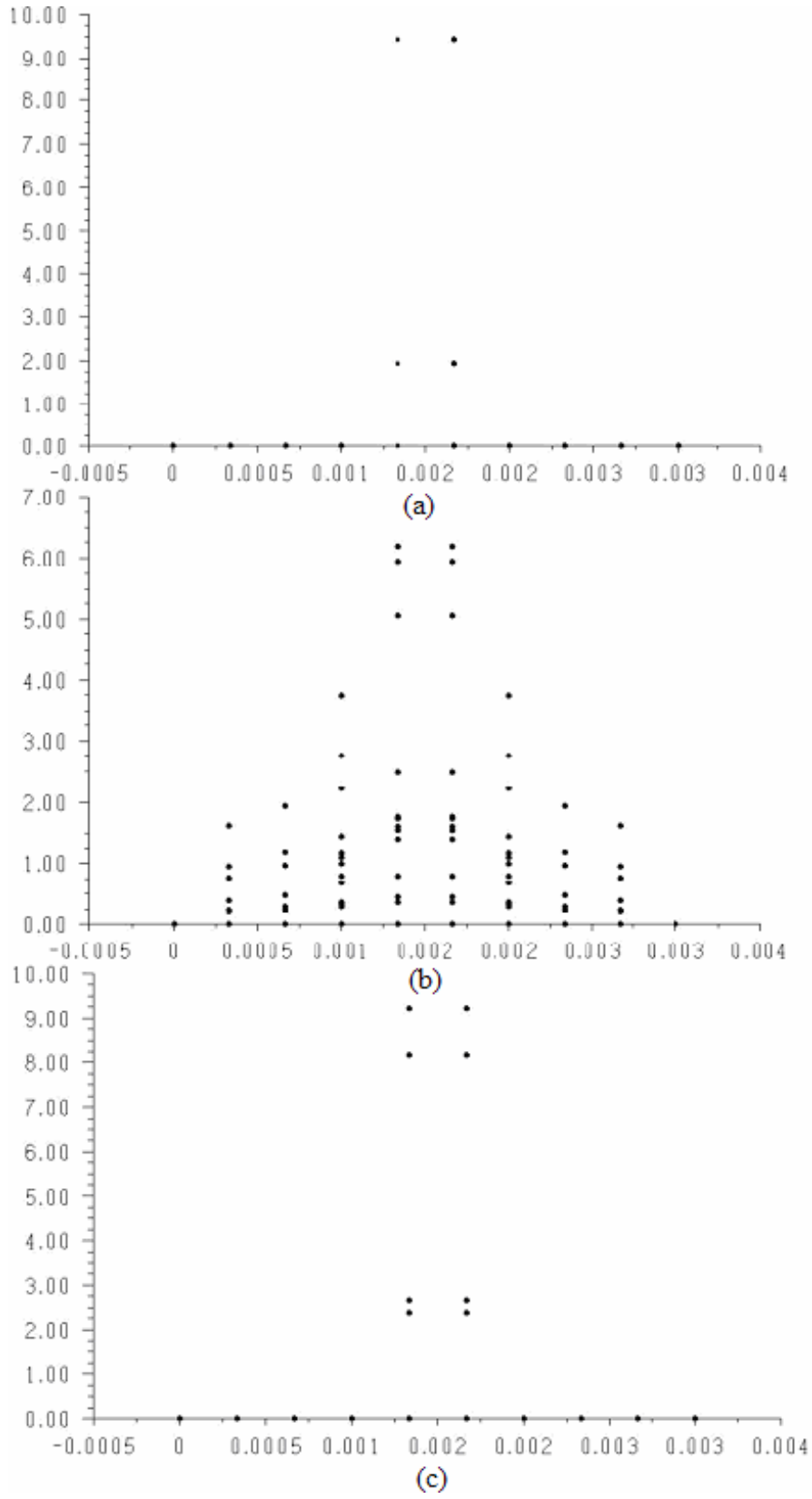


Şekil 6.39. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki aşırı potansiyelin istatistiksel dağılımı (V)



Şekil 6.40. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki hız dağılımı (m/s)

Şekil 6.40’da, PEMFC modelinin çözümünden elde edilen (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki hız dağılımı (m/s) görülmektedir. Hız vektörleri, doğal olarak, sadece gaz akış kanalları kesitinde gözlemlenmektedir. PEMFC modelinde akış kanalları girişine “kütlesel debi giriş” sınır şartı verilmiştir. Anot gaz akış kanallarının giriş kısmında “kütlesel debi giriş” sınır şartı değeri $3,0979 \times 10^{-6}$ kg/s ve katot gaz akış kanallarının giriş kısmında “kütlesel debi giriş” sınır şartı değeri $1,5771 \times 10^{-6}$ kg/s olarak tanımlanmıştır. PEMFC modelinin çözümü incelendiğinde anot gaz akış kanalındaki hızın katot gaz akış kanalındaki hızdan daha yüksek olduğu görülmektedir. Kanal kesit geometrisi dikkate alındığında bu sonuçların sınır şartlarıyla uyum gösterdiği söylenebilir.

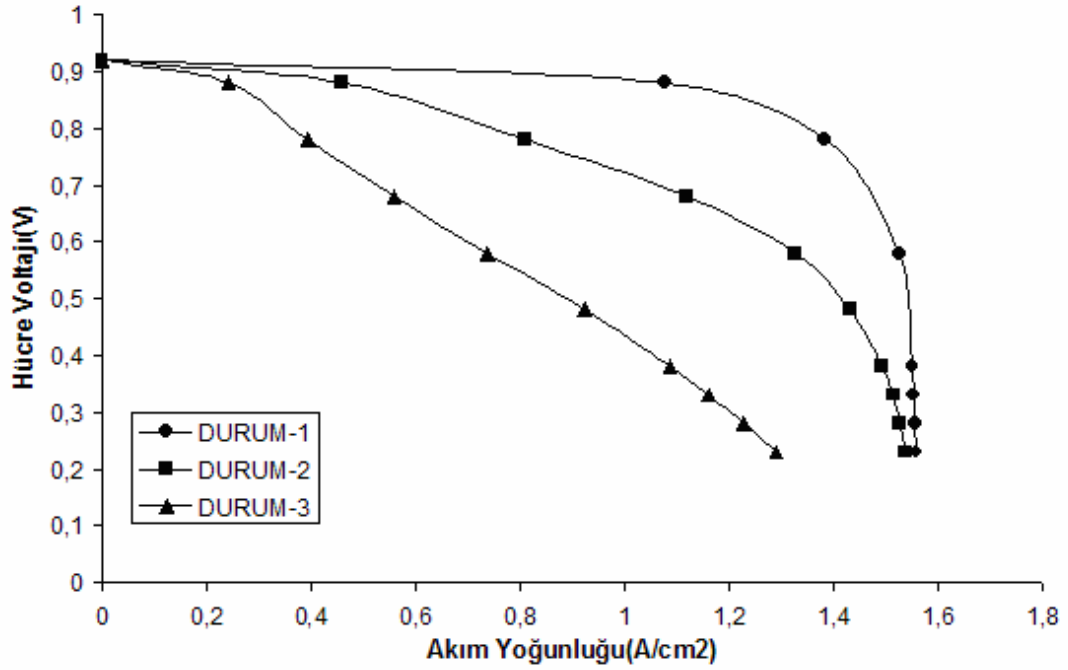


Şekil 6.41. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0.035$ ve (c) çıkış, $z=0.07$ yüzeylerindeki hızın istatistiksel dağılımı (m/s)

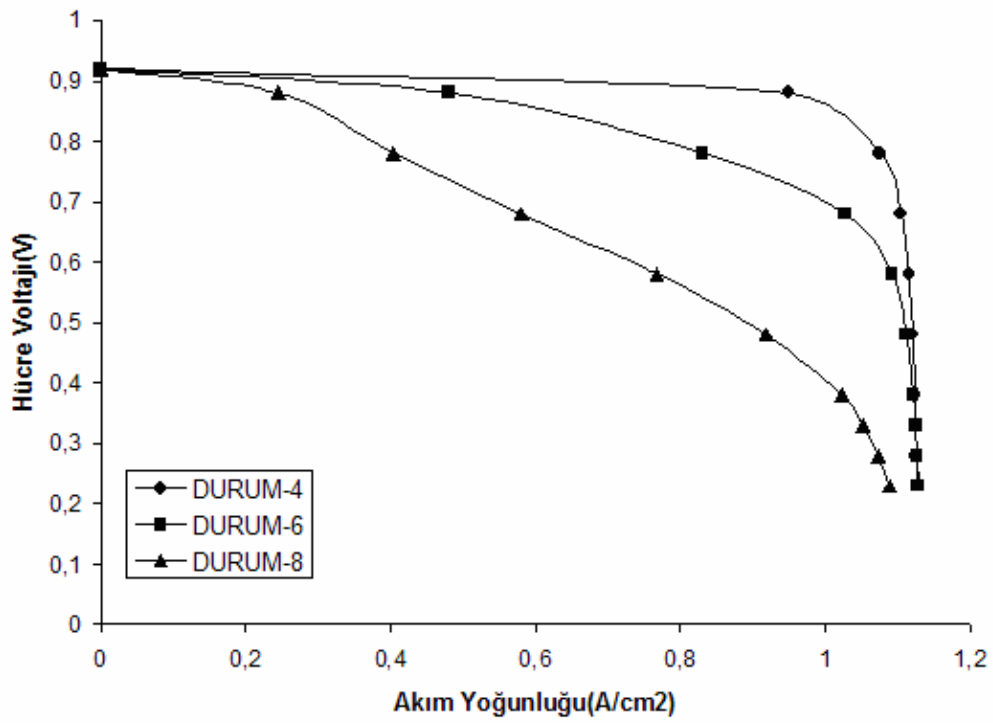
6.5. Kutuplaşma Eğrileri

Kutuplaşma eğrilerinin oluşturulmasında izlenen yol ayrıntılı olarak EK-4’de anlatılmıştır. Bu kısımda gaz akış kanallarında geçit oranı 0,3 olan 4 adet engelleyici blok konularak elde edilen çözümlere ait sonuçlar sunulacaktır.

Şekil 6.42’de, bağıl nem değişiminin akım yoğunluğu üzerine etkisi görülmektedir. Anot ve katot kısmı gazlarının giriş hızı her üç durum için $V = 1,75$ m/s olarak giriş sınır şartı tanımlanmıştır. Bağıl nemin $\phi = 1$ (D1) değerinden $\phi = 0.6$ (D2) değerine düşürülmesi ile akım yoğunluğunun maksimum değerlerinde % 1,3 bir azalma gözlenmiştir. Hücre potansiyelinin artması ile D1 ve D2 akım yoğunluğu değerleri arasındaki fark azalmaktadır. Bağıl nem $\phi = 0.6$ (D2) değerinden $\phi = 0.2$ (D3) değerine düşürülünce, akım yoğunluğunun maksimum değerlerinde % 19,2 bir azalma gözlenmiştir. Hücre potansiyelinin 0,23-0,78 V değerleri arasında, D2 ve D3 akım yoğunluğu değerleri arasındaki fark artmakta, 0,78 - 0,92 V değerleri arasında azalmaktadır. Akım yoğunluğu değeri sıfır olduğu zaman, hücre voltajının açık devre potansiyeline eşit olması beklenir. Ancak, aktivasyon kayıpları bu değer beklenenden daha düşük çıkmasına sebebiyet vermektedir. Aktivasyon kayıpları ve hesabı ile ilgili ayrıntılı bilgi EK-7’de verilmiştir. Nem değişiminin açık devre potansiyeline ve aktivasyon kaybına bir etkisi olmadığı görülmüştür. Aktivasyon kaybı da dikkate alınarak yapılan hesaplamalar sonucunda Şekil 6.42’de görüldüğü üzere açık devre potansiyeli 0,92 olarak hesaplanmıştır.

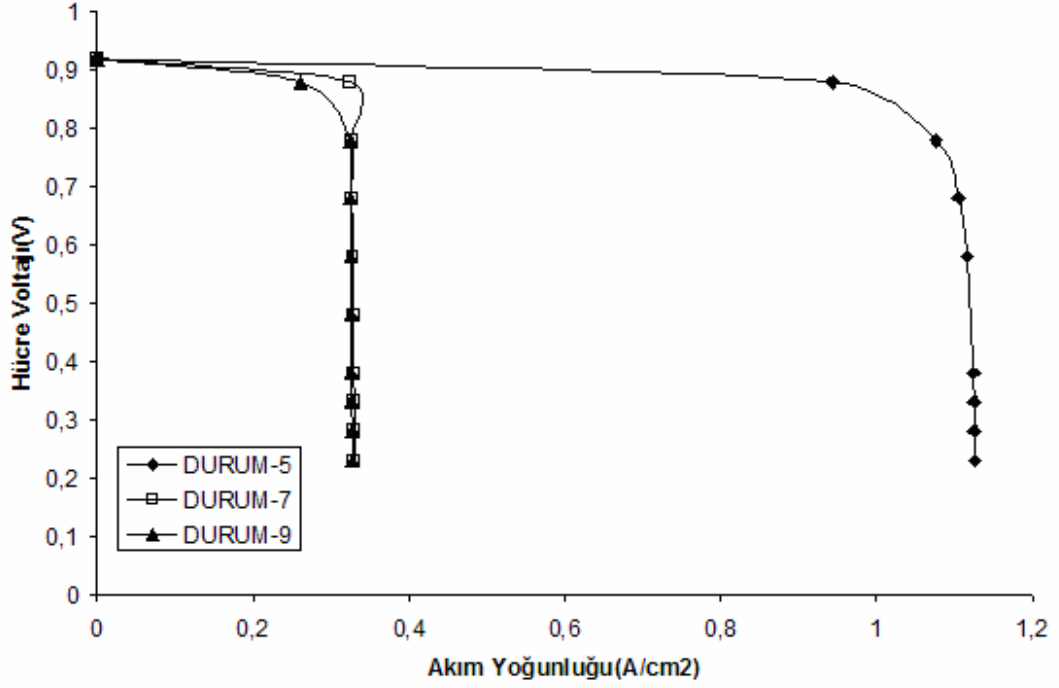


Şekil 6.42. $V = 1,75$ m/s hızında farklı nem değerleri için; $\phi = 1$ (D1), $\phi = 0.6$ (D2), $\phi = 0.2$ (D3) elde edilen kutuplaşma eğrileri



Şekil 6.43. $V = 0,7 \times 1,75$ m/s hızında farklı nem değerleri için; $\phi = 1$ (D4), $\phi = 0.6$ (D6), $\phi = 0.2$ (D8) elde edilen kutuplaşma eğrileri

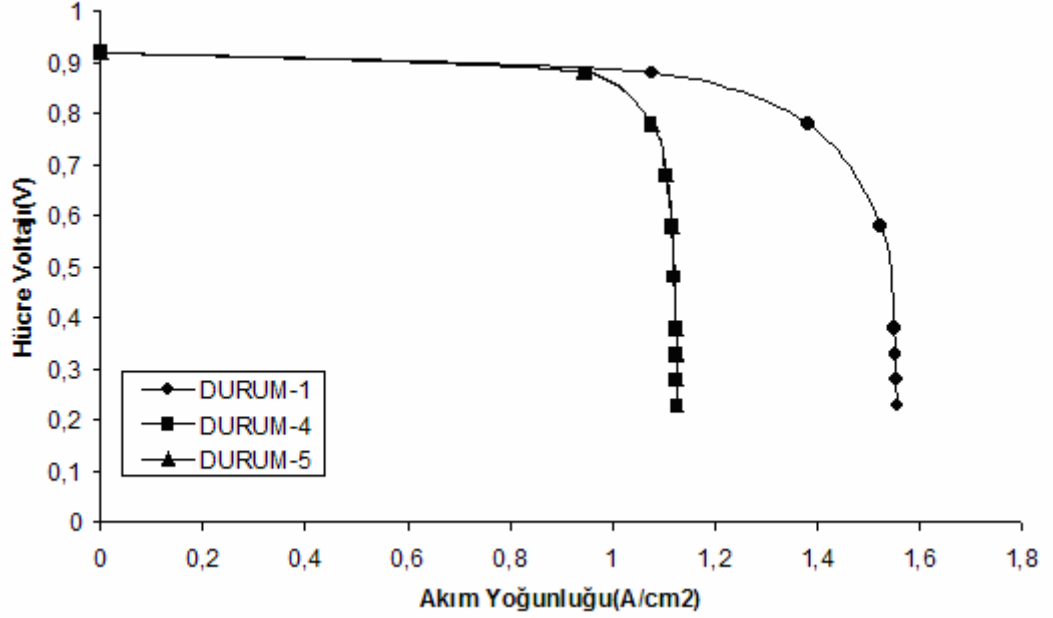
Şekil 6.43’de, bağıl nem değişiminin akım yoğunluğu üzerine etkisi görülmektedir. Anot ve katot kısmı gazlarının giriş hızı her üç durum için $V = 0,7 \times 1,75$ m/s olarak giriş sınır şartı tanımlanmıştır. Bağıl nemin $\phi = 1$ (D4) değerinden $\phi = 0.6$ (D6) değerine düşürülmesi ile akım yoğunluğunun maksimum değerlerinde bir değişiklik gözlenmemiştir. Hücre potansiyelinin artması ile D4 ve D6 akım yoğunluğu değerleri arasındaki fark azalmaktadır. 0,38; 0,33; 0,28; 0,23 değerlerinde her iki durum için akım yoğunluğu değerlerinin hemen hemen aynı olduğu söylenebilir. Bağıl nem $\phi = 0.6$ (D6) değerinden $\phi = 0.2$ (D8) değerine düşürülünce, akım yoğunluğunun maksimum değerlerinde % 3,6 bir azalma gözlenmiştir. Hücre potansiyelinin 0,58-0,92 V değerleri arasında, D6 ve D8 akım yoğunluğu değerleri arasındaki fark artmakta, 0,23 - 0,58 V değerleri arasında azalmaktadır. Akım yoğunluğu değeri sıfır olduğu zaman, hücre voltajının açık devre potansiyeline eşit olması beklenir. Ancak, aktivasyon kayıpları bu değerin beklenenden daha düşük çıkmasına sebebiyet vermektedir. Nem değişiminin açık devre potansiyeline ve aktivasyon kaybına bir etkisi olmadığı görülmüştür. Aktivasyon kaybı da dikkate alınarak yapılan hesaplamalar sonucunda Şekil 6.43’de görüldüğü üzere açık devre potansiyeli 0,92 olarak hesaplanmıştır.



Şekil 6.44. $V = 0,2 \times 1,75$ m/s hızında farklı nem değerleri için; $\phi = 1$ (D5), $\phi = 0.6$ (D7), $\phi = 0.2$ (D9) elde edilen kutuplaşma eğrileri

Şekil 6.44'de, bağıl nem değişiminin akım yoğunluğu üzerine etkisi görülmektedir. Anot ve katot kısmı gazlarının giriş hızı her üç durum için $V = 0,2 \times 1,75$ m/s olarak giriş sınır şartı tanımlanmıştır. Bağıl nemin $\phi = 1$ (D5) değerinden $\phi = 0.6$ (D7) değerine düşürülmesi ile akım yoğunluğunun maksimum değerlerinde % 244 bir artış gözlenmiştir. Hücre potansiyelinin artması ile D5 ve D7 akım yoğunluğu değerleri arasındaki fark azalmaktadır. Hücre potansiyelinin 0,88-0,92 V değerleri arasında, D5 ve D7 akım yoğunluğu değerleri arasındaki fark azalmakta, 0,23 - 0,88 V değerleri arasında artmaktadır. Bağıl nemin $\phi = 0.6$ (D7) değerinden $\phi = 0.2$ (D9) değerine düşürülmesi ile akım yoğunluğunun maksimum değerlerinde bir değişiklik gözlenmemiştir. 0,78 - 0,23 arasındaki değerlerde her iki durum için akım yoğunluğu değerlerinin hemen hemen aynı olduğu söylenebilir. Akım yoğunluğu değeri sıfır olduğu zaman, hücre voltajının açık devre potansiyeline eşit olması beklenir. Ancak, aktivasyon kayıpları bu değer beklenenden daha düşük çıkmasına sebebiyet vermektedir. Nem değişiminin açık devre potansiyeline ve aktivasyon kaybına bir etkisi olmadığı görülmüştür. Aktivasyon kaybı da dikkate alınarak

yapılan hesaplamalar sonucunda Şekil 6.44'de görüldüğü üzere açık devre potansiyeli 0,92 olarak hesaplanmıştır.

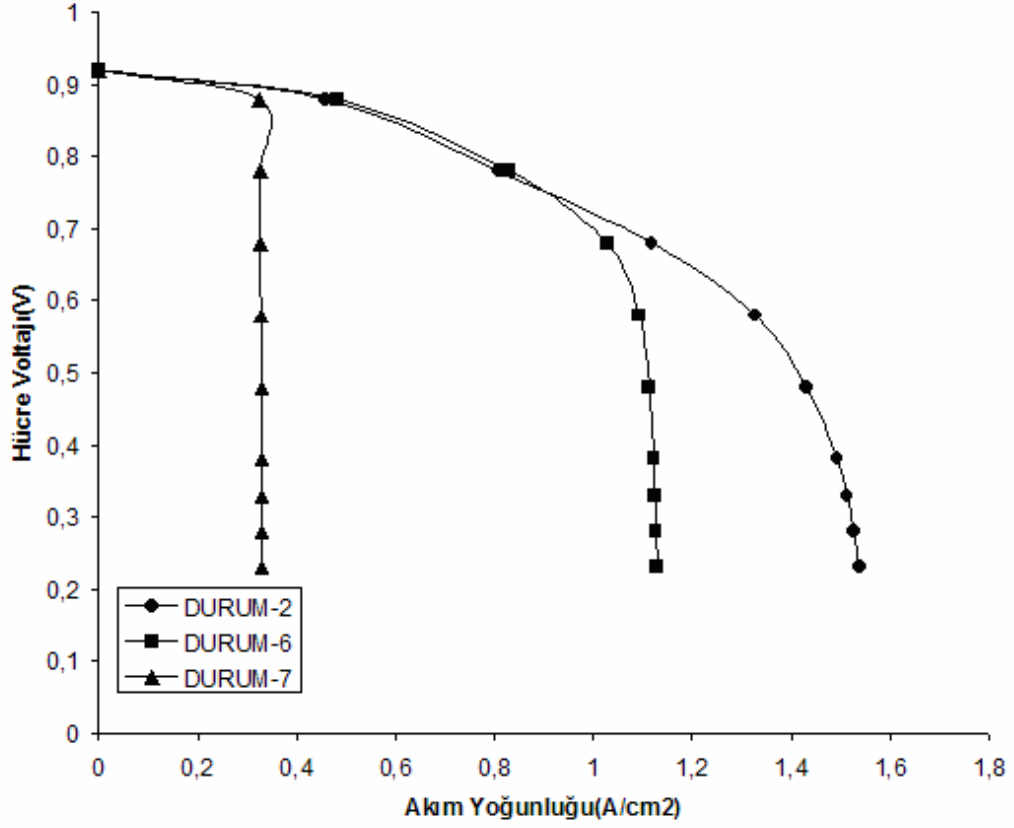


Şekil 6.45. $\phi = 1$ nem değerinde, farklı hız değerleri için $V = 1,75$ m/s (D1), $V = 0,7 \times 1,75$ m/s (D4), $V = 0,2 \times 1,75$ m/s (D5) elde edilen kutuplaşma eğrileri

Şekil 6.45'de, gazların akış kanallarına giriş hızları değişiminin akım yoğunluğu üzerine etkisi görülmektedir. Anot ve katot kısmı gazlarının giriş nem değeri her üç durum için $\phi = 1$ olarak giriş sınır şartı tanımlanmıştır. Giriş hızının $V = 1,75$ m/s (D1) değerinden $V = 0,7 \times 1,75$ m/s (D4) değerine düşürülmesi ile akım yoğunluğunun maksimum değerlerinde % 23,4 bir azalma gözlenmiştir. Hücre potansiyelinin artması ile D1 ve D4 akım yoğunluğu değerleri arasındaki fark azalmaktadır. Hücre potansiyelinin 0,88-0,92 V değerleri arasında, D1 ve D4 akım yoğunluğu değerleri arasındaki fark azalmakta, 0,23 - 0,88 V değerleri arasında artmaktadır. Giriş hızının $V = 0,7 \times 1,75$ m/s (D4) değerinden $V = 0,2 \times 1,75$ m/s (D5) değerine düşürülmesi ile akım yoğunluğunun maksimum değerlerinde bir değişiklik gözlenmemiştir. Her iki durum için akım yoğunluğu değerlerinin hemen hemen aynı olduğu söylenebilir. Akım yoğunluğu değeri sıfır olduğu zaman, hücre voltajının

açık devre potansiyeline eşit olması beklenir. Ancak, aktivasyon kayıpları bu değerin beklenenden daha düşük çıkmasına sebebiyet vermektedir. Nem değişiminin açık devre potansiyeline ve aktivasyon kaybına bir etkisi olmadığı görülmüştür. Aktivasyon kaybı da dikkate alınarak yapılan hesaplamalar sonucunda Şekil 6.45’de görüldüğü üzere açık devre potansiyeli 0,92 olarak hesaplanmıştır.

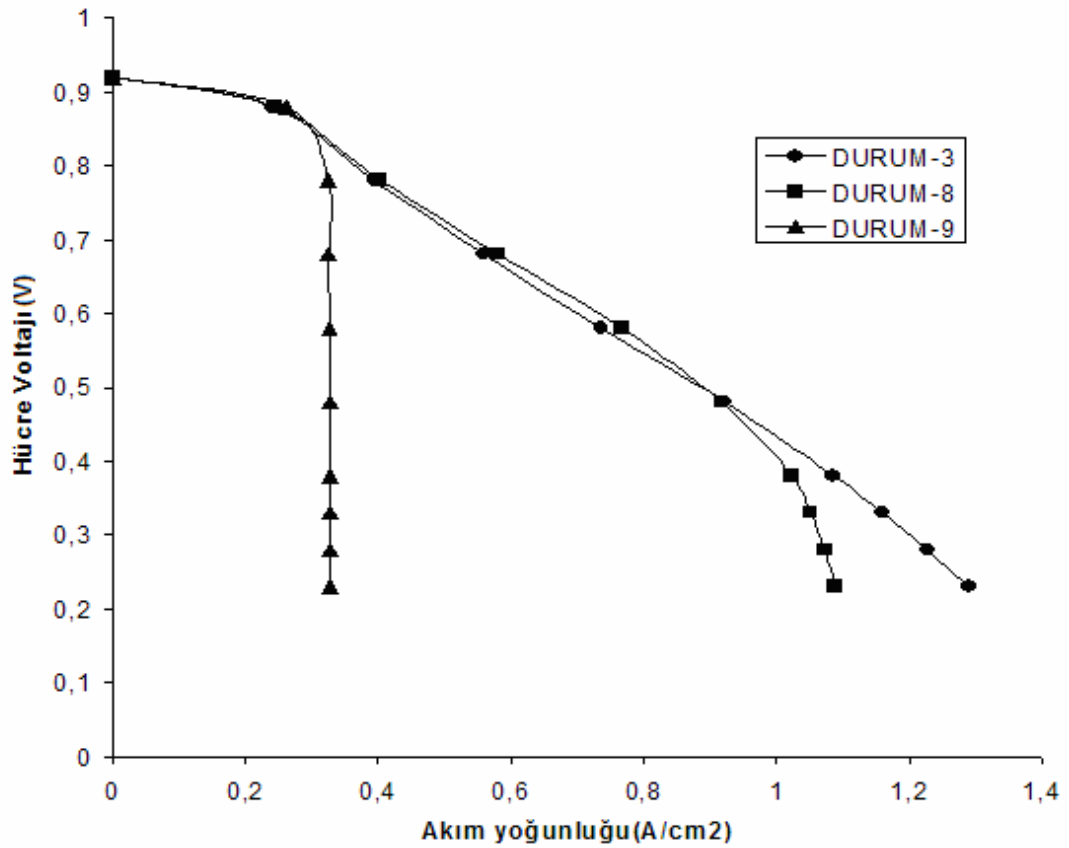
Şekil 6.46’da, gazların akış kanallarına giriş hızları değişiminin akım yoğunluğu üzerine etkisi görülmektedir. Anot ve katot kısmı gazlarının giriş nem değeri her üç durum için $\phi = 0.6$ olarak giriş sınır şartı tanımlanmıştır. Giriş hızının $V = 1,75$ m/s (D2) değerinden $V = 0,7 \times 1,75$ m/s (D6) değerine düşürülmesi ile akım yoğunluğunun maksimum değerlerinde % 36,3 bir azalma gözlenmiştir. Hücre potansiyelinin artması ile D2 ve D6 akım yoğunluğu değerleri arasındaki fark azalmaktadır. Hücre potansiyelinin 0,68-0,92 V değerleri arasında, D2 ve D6 akım yoğunluğu değerleri arasındaki fark azalmakta, 0,23 - 0,68 V değerleri arasında artmaktadır. Giriş hızının $V = 0,7 \times 1,75$ m/s (D6) değerinden $V = 0,2 \times 1,75$ m/s (D7) değerine düşürülmesi ile akım yoğunluğunun maksimum değerlerinde % 242,3 bir azalma gözlenmiştir. Hücre potansiyelinin artması ile D6 ve D7 akım yoğunluğu değerleri arasındaki fark azalmaktadır. Hücre potansiyelinin 0,88 - 0,92 V değerleri arasında, D6 ve D7 akım yoğunluğu değerleri arasındaki fark azalmakta, 0,23 - 0,88 V değerleri arasında artmaktadır. Akım yoğunluğu değeri sıfır olduğu zaman, hücre voltajının açık devre potansiyeline eşit olması beklenir. Ancak, aktivasyon kayıpları bu değerin beklenenden daha düşük çıkmasına sebebiyet vermektedir. Aktivasyon kayıpları ve hesabı ile ilgili ayrıntılı bilgi EK-7’de verilmiştir. Nem değişiminin açık devre potansiyeline ve aktivasyon kaybına bir etkisi olmadığı görülmüştür. Aktivasyon kaybı da dikkate alınarak yapılan hesaplamalar sonucunda Şekil 6.46’da görüldüğü üzere açık devre potansiyeli 0,92 olarak hesaplanmıştır.



Şekil 6.46. $\phi = 0.6$ nem değerinde, farklı hız değerleri için $V = 1,75$ m/s (D2), $V = 0,7 \times 1,75$ m/s (D6), $V = 0,2 \times 1,75$ m/s (D7) elde edilen kutuplaşma eğrileri

Şekil 6.47'de, gazların akış kanallarına giriş hızları değişiminin akım yoğunluğu üzerine etkisi görülmektedir. Anot ve katot kısmı gazlarının giriş nem değeri her üç durum için $\phi = 0.2$ olarak giriş sınır şartı tanımlanmıştır. Giriş hızının $V = 1,75$ m/s (D3) değerinden $V = 0,7 \times 1,75$ m/s (D8) değerine düşürülmesi ile akım yoğunluğunun maksimum değerlerinde % 18,5 bir azalma gözlenmiştir. Hücre potansiyelinin artması ile D3 ve D8 akım yoğunluğu değerleri arasındaki fark azalmaktadır. Hücre potansiyelinin 0,38-0,92 V değerleri arasında, D3 ve D8 akım yoğunluğu değerleri arasındaki fark azalmakta, 0,23 - 0,38 V değerleri arasında artmaktadır. Giriş hızının $V = 0,7 \times 1,75$ m/s (D8) değerinden $V = 0,2 \times 1,75$ m/s (D9) değerine düşürülmesi ile akım yoğunluğunun maksimum değerlerinde % 232,5 bir azalma gözlenmiştir. Hücre potansiyelinin artması ile D8 ve D9 akım yoğunluğu

değerleri arasındaki fark azalmaktadır. Hücre potansiyelinin 0,78-0,92 V değerleri arasında, D8 ve D9 akım yoğunluğu değerleri arasındaki fark azalmakta, 0,23 - 0,78 V değerleri arasında artmaktadır. Akım yoğunluğu değeri sıfır olduğu zaman, hücre voltajının açık devre potansiyeline eşit olması beklenir. Ancak, aktivasyon kayıpları bu değerin beklenenden daha düşük çıkmasına sebebiyet vermektedir. Nem değişiminin açık devre potansiyeline ve aktivasyon kaybına bir etkisi olmadığı görülmüştür. Aktivasyon kaybı da dikkate alınarak yapılan hesaplamalar sonucunda Şekil 6.47’de görüldüğü üzere açık devre potansiyeli 0,92 olarak hesaplanmıştır.



Şekil 6.47. $\phi = 0.2$ nem değerinde, farklı hız değerleri için $V = 1,75$ m/s (D3), $V = 0,7 \times 1,75$ m/s (D8), $V = 0,2 \times 1,75$ m/s (D9) elde edilen kutuplaşma eğrileri

7. LİTERATÜRDEKİ VERİLERLE KARŞILAŞTIRMA

7.1. Deneysel Verilerle Karşılaştırma

Bu bölümde Wang ve ark.'na ait deneysel çalışma sonuçları ile karşılaştırma yapılmıştır. Karşılaştırma yapılırken tek kanallı hücre geometrisi oluşturulmuş ve 6 değişik durum için karşılaştırma yapılmıştır Bu durumlar iki grupta toplanabilir. İlk grupta sıcaklığın sabit tutulup basıncın kutuplaşma eğrisi üzerine olan etkisi incelenmiştir. İkinci grupta ise basınç sabit tutulup sıcaklığın kutuplaşma eğrisi üzerine olan etkisi incelenmiştir. Durumlara ait deneysel çalışmada belirtilen şartlar Çizelge 7.1.'de sunulmuştur [10].

Çizelge 7.1. Deneysel çalışma durumlarına ait veriler¹[10]

Grup	Durum	Anot ve katot giriş basıncı $P_i [Atm]$	Hücre sıcaklığı $T [^{\circ}C]$	Anot hacimsel debisi $\dot{V}_{an}$ $[S - cm^3 dk^{-1}]$	Katot hacimsel debisi $\dot{V}_{cat}$ $[S - cm^3 dk^{-1}]$
I	1	1	70	1200	2100
	2	2,36	70		
	3	3,72	70		
II	1	3	50		
	2	3	60		
	3	3	70		

¹ Hacimsel debiler standart şartlarda verilmiştir.

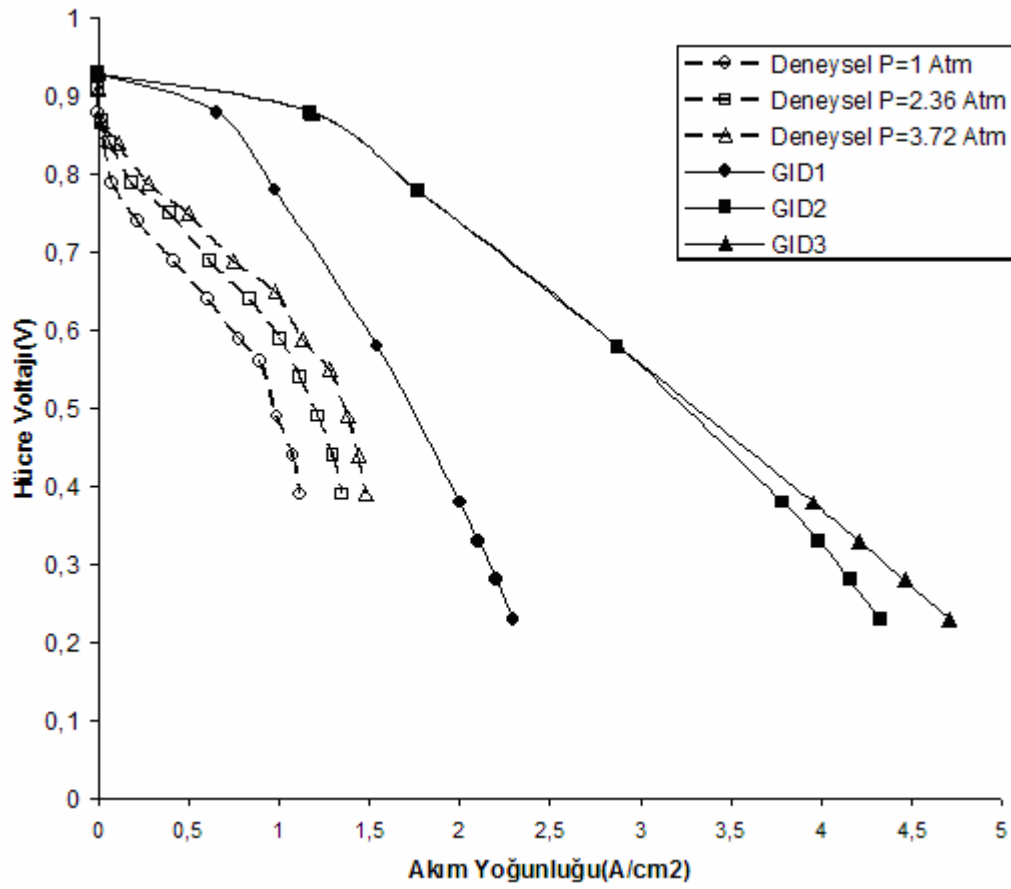
Her iki guruba ait durumlardaki, PEMFC modülünde girilmesi gereken sınır şartlarının belirlenmesinde izlenen yol EK-6'da sunulmuştur. Deneysel çalışma

durumlarına karşılık gelen ve FLUENT'te girilmesi gereken parametreler hesaplanmış ve Çizelge 7.2'de sunulmuştur.

Çizelge 7.2. Deneysel çalışma durumlarına karşılık gelen ve PEMFC modülünde girilmesi gereken veriler [10]

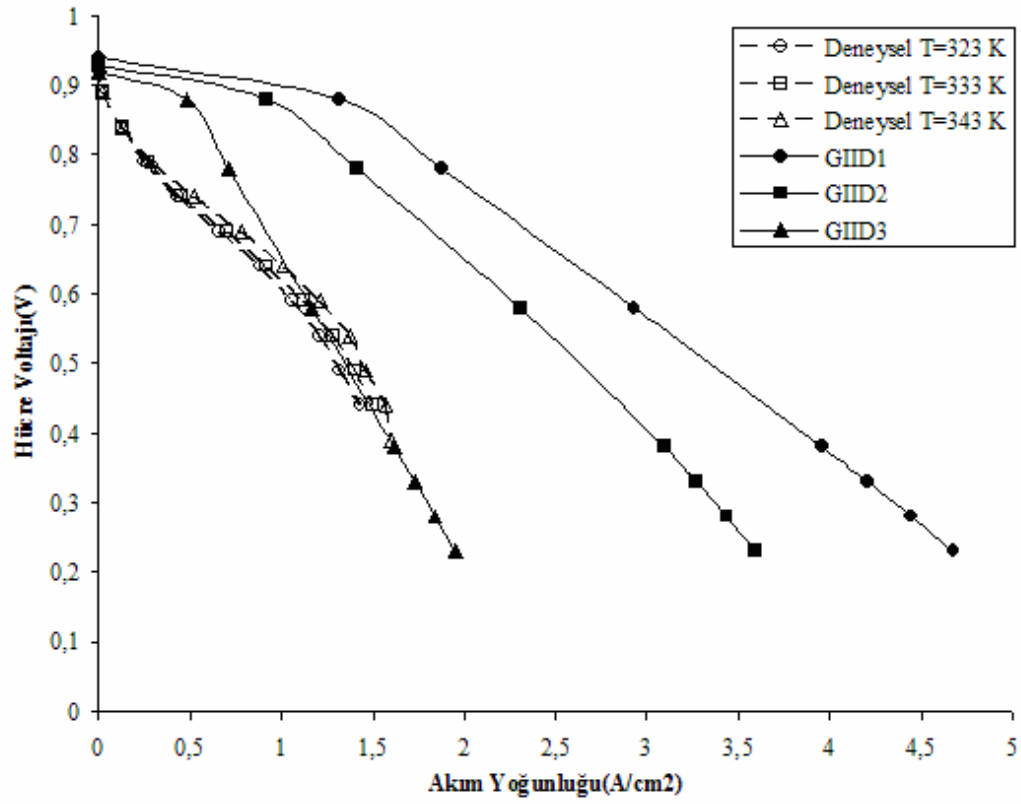
G	D	P_i [Atm]	T [°C]	$\dot{m}_{an}$ [kgs ⁻¹] 10 ⁻⁵	$\dot{m}_{cat}$ [kgs ⁻¹] 10 ⁻⁵	Anot kütle kesri		Katot kütle kesri		
						y_{H_2}	y_{H_2O}	y_{O_2}	y_{H_2O}	y_{N_2}
I	1	1	70	0,5398	3,2940	0,2010	0,7989	0,2125	0,0826	0,7004
	2	2,36	70	0,2914	3,4236	0,4273	0,5727	0,2123	0,0853	0,6983
	3	3,72	70	0,2372	3,4883	0,5537	0,4463	0,2197	0,0531	0,7228
II	1	3	50	0,2598	3,4613	0,4946	0,5054	0,2166	0,0037	0,7128
	2	3	60	0,2598	3,4613	0,4946	0,5054	0,2166	0,0037	0,7128
	3	3	70	0,2598	3,4613	0,4946	0,5054	0,2166	0,0037	0,7128

Şekil 7.1.'de basınç değişiminin kutuplaşma eğrilerine etkisi incelenmiştir. Şekil 7.1.'den görüleceği üzere, farklı basınçlarda elde edilen deneysel sonuçlar ile modeli oluşturulan tek kanallı PEMFC yakıt hücresinin sayısal sonuçlar arasında oldukça büyük farklılıklar gözlenmektedir. Bu farklılıkların önemli sebebi vardır: Deneysel sonuçların elde edildiği makalede [10], deneylerde kullanılan yakıt hücresinin katmanlarına ait yoğunluk, özgül ısı, ısı iletkenlik ve elektriksel iletkenlik değerleri verilmemiştir. Bu yüzden, sayısal çalışmada seçilen malzeme özellikleri deneysel çalışmada kullanılanlardan farklı olabilir. İkinci olarak, sayısal çalışmada sıvı fazda su oluşumunun etkisi dikkate alınmamıştır. Bu ise sayısal çalışmada akım yoğunluklarının fazla hesaplanmasına yol açmıştır.



Şekil 7.1. Farklı basınçlarda elde edilen deneysel sonuçlar [10] ile modeli oluşturulan tek kanallı hücre için (GID1, GID2, GID3) kutuplaşma eğrilerinin karşılaştırılması

Şekil 7.2.'de, sıcaklık değişiminin kutuplaşma eğrilerine etkisi incelenmiştir. Şekil 7.2.'den görüleceği üzere, farklı sıcaklıklarda elde edilen deneysel çalışma sonuçları ile modeli oluşturulan tek kanallı PEMFC modelinin sayısal sonuçları arasında farklılıklar gözlenmektedir. Bu farklılıkların olası iki önemli sebebi vardır: Deneysel sonuçların elde edildiği makalede [10] deneylerde kullanılan yakıt hücresinin katmanlarına ait yoğunluk, özgül ısı, ısıl iletkenlik ve elektriksel iletkenlik değerleri verilmemiştir. Bu yüzden, sayısal çalışmada seçilen malzeme özellikleri deneysel çalışmada kullanılanlardan farklı olabilir. İkinci olarak, sayısal çalışmada sıvı fazda su oluşumunun etkisi dikkate alınmamıştır. Bu ise sayısal çalışmada akım yoğunluklarının fazla hesaplanmasına yol açmıştır.



Şekil 7.2. Farklı basınçlarda elde edilen deneysel sonuçlar [10] ile modeli oluşturulan tek kanallı hücre için (GIID1, GIID2, GIID3) kutuplaşma eğrilerinin karşılaştırılması

7.2. Engeleyici Bloklar Kullanılarak Yapılan Sayısal Çalışma ile Karşılaştırma

Bu bölümde Jang ve ark.'na ait sayısal çalışmadaki 3 değişik durum için karşılaştırma yapılmıştır [27]. Bu durumlar Çizelge 7.3.'de verilmiştir.

Çizelge 7.3. Sayısal çalışma durumlarına ait veriler [27]

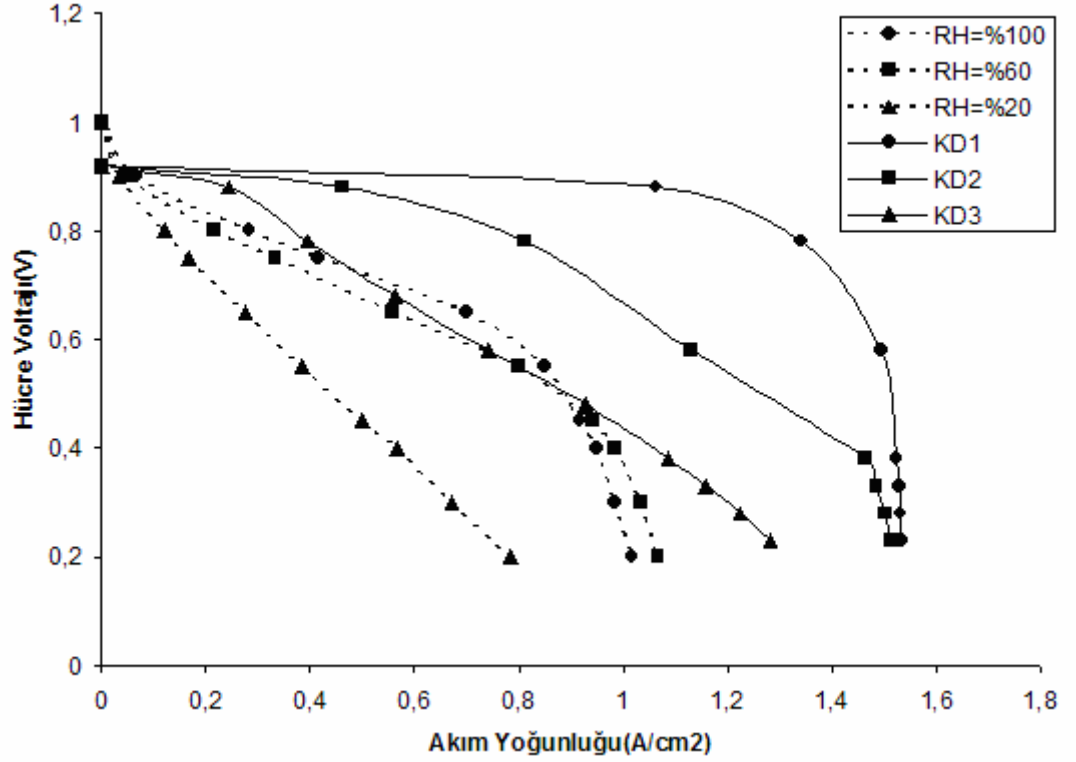
Durum No	Basınç <i>Atm</i>	Sıcaklık [T] K	Bağıl Nem [ϕ] %	Hız (V) m/s
1	1	353	1	1,75
2	1	353	0,6	1,75
3	1	353	0,2	1,75

Çizelge 7.3.'de verilen durumlar için gaz kanallarında 0,3 geçit oranına sahip üçer adet engelleyici blok konularak oluşturulan modele ait çözümler yapılmış ve bağıl nemin kutuplaşma eğrileri üzerindeki etkisi incelenmiştir. Bu çözümlerin sonuçlarında anot akım toplayıcı ve katot akım toplayıcı kısmında akım yoğunluğu değerleri hesaplanmış ve kutuplaşma eğrileri oluşturulmuştur. Elde edilen sonuçlar sayısal çalışma yapılmış olan makale ile karşılaştırılmıştır [27]. Durumlara ait sayısal çalışmada belirtilen şartlar Çizelge 7.4.'de sunulmuştur.

Çizelge 7.4. Sayısal çalışma durumlarına karşılık gelen ve PEMFC modülünde girilmesi gereken veriler [27]

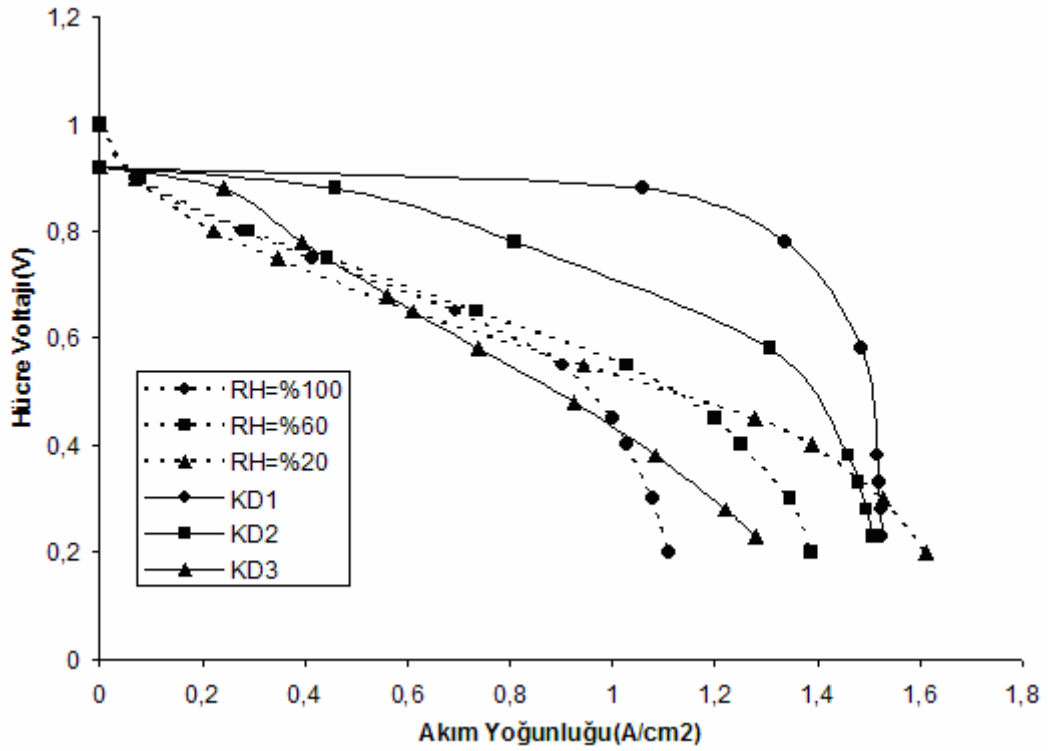
D	Basınç <i>Atm</i>	Kütleli Debi [$kg s^{-1}$]		Kütle Kesri			
		Anot	Katot	Anot		Katot	
				Hidrojen	Su	Oksijen	Su
1	1	$3,0979 \times 10^{-6}$	$1,5771 \times 10^{-6}$	0,113	0,887	0,1494	0,3561
2	1	$8,7565 \times 10^{-6}$	$1,2641 \times 10^{-6}$	0,2229	0,7771	0,1864	0,1966
3	1	$9,6832 \times 10^{-6}$	$1,0812 \times 10^{-6}$	0,5203	0,4797	0,2180	0,0607

Şekil 7.3'de bağıl nem değişiminin kutuplaşma eğrilerine etkisi incelenmiştir. Şekil 7.3'den görüleceği üzere, farklı nemlerde elde edilen sayısal sonuçlar ile modeli oluşturulan PEMFC yakıt hücresinin sayısal sonuçları arasında oldukça büyük farklılıklar gözlenmektedir. Bu farklılıkların olası iki önemli sebebi vardır: Sayısal sonuçların elde edildiği makalede [27], modeli oluşturulan yakıt hücresinin katmanlarına ait yoğunluk, özgül ısı, ısıl iletkenlik ve elektriksel iletkenlik değerleri verilmemiştir. Bu yüzden, sayısal çalışmada seçilen malzeme özellikleri makaledeki sayısal çalışmada kullanılanlardan farklı olabilir. İkinci olarak, makalede kanallara yerleştirilen engelleyici blokların yükseklikleri verilmemiştir. Bu yüzden, sayısal çalışmada seçilen engelleyici blok yüksekliği ve buna bağlı olarak geçit aralığı değerleri makaledeki sayısal çalışmada kullanılanlardan farklı olabilir. Bu ise sayısal çalışmada akım yoğunluklarının fazla hesaplanmasına yol açmıştır.



Şekil 7.3. Farklı nemlerde elde edilen edilen sayısal [27] ve modeli oluşturulan PEMFC ait sayısal (KD1, KD2, KD3) hücrenin anot kısmına ait kutuplaşma eğrilerinin karşılaştırılması

Şekil 7.4’de bağıl nem değişiminin kutuplaşma eğrilerine etkisi incelenmiştir. Şekil 7.4’den görüleceği üzere, farklı nemlerde elde edilen sayısal sonuçlar ile modeli oluşturulan PEMFC yakıt hücresinin sayısal sonuçları arasında oldukça büyük farklılıklar gözlenmektedir. Bu farklılıkların olası iki önemli sebebi vardır: Sayısal sonuçların elde edildiği makalede [27], modeli oluşturulan yakıt hücresinin katmanlarına ait yoğunluk, özgül ısı, ısıl iletkenlik ve elektriksel iletkenlik değerleri verilmemiştir. Bu yüzden, sayısal çalışmada seçilen malzeme özellikleri makaledeki sayısal çalışmada kullanılanlardan farklı olabilir. İkinci olarak, makalede kanallara yerleştirilen engelleyici blokların yükseklikleri verilmemiştir. Bu yüzden, sayısal çalışmada seçilen engelleyici blok yüksekliği ve buna bağlı olarak geçit aralığı değerleri makaledeki sayısal çalışmada kullanılanlardan farklı olabilir. Bu ise sayısal çalışmada akım yoğunluklarının fazla hesaplanmasına yol açmıştır.

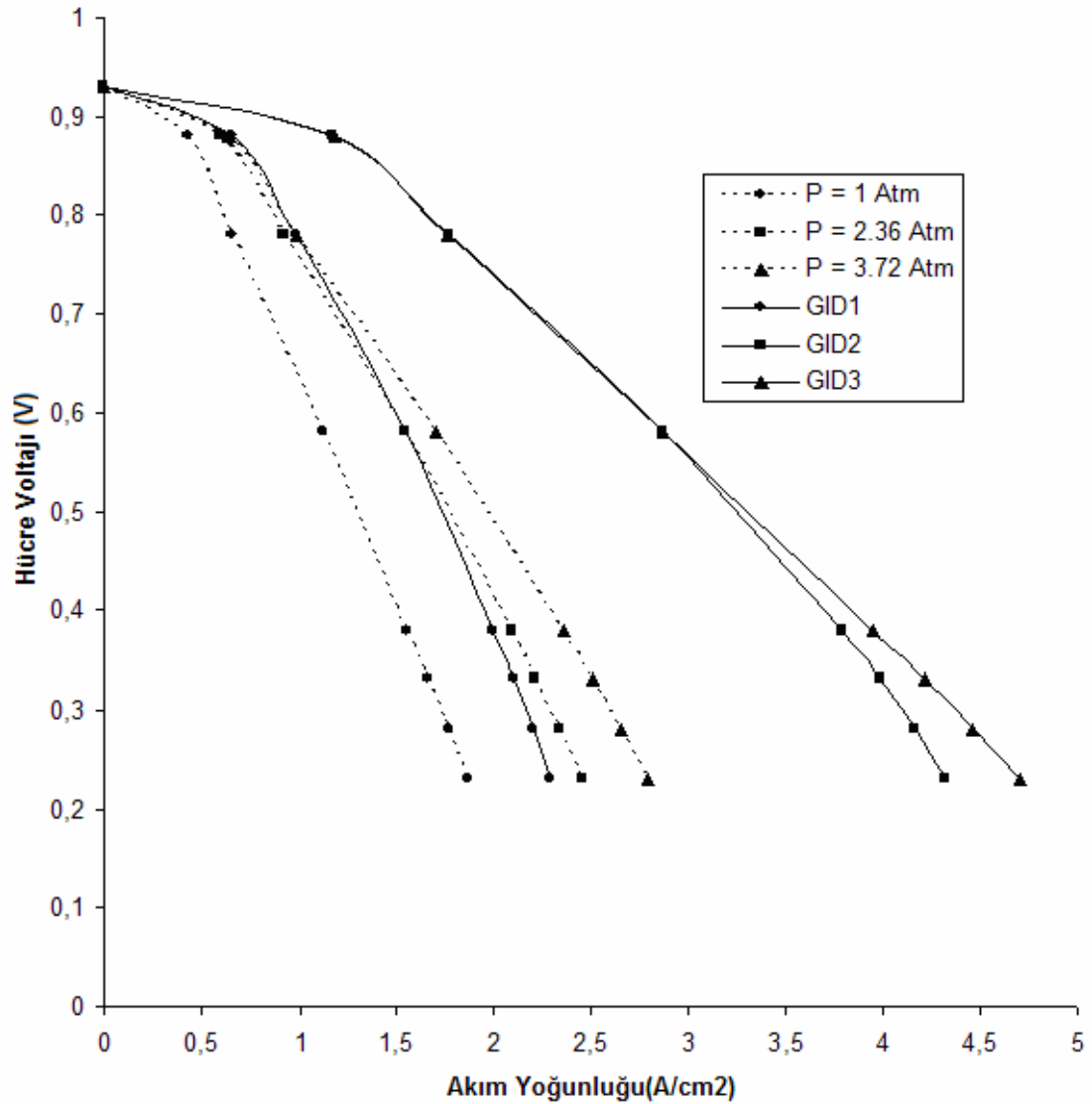


Şekil 7.4. Farklı nemlerde elde edilen edilen sayısal [27] ve modeli oluşturulan PEMFC ait sayısal (KD1, KD2, KD3) hücrenin katot kısmına ait kutuplaşma eğrilerinin karşılaştırılması

7.3. Sayısal Çalışma ile Karşılaştırma

Bu bölümde Wang ve ark.'na ait deneysel çalışma parametreleri (Çizelge 7.1) kullanılarak daha önce yapılan sayısal çalışma sonuçları ile karşılaştırma yapılmıştır [10]. Alpat, 9 kanallı tüm hücre modeli oluşturmuş ve Çizelge 7.2'deki 6 durum için çözüm yapmıştır [56]. Sayısal çalışma sonuçlarıyla karşılaştırma yapılırken tek kanallı hücre geometrisi oluşturulmuş ve 6 durum için aynı parametreler kullanılmıştır (Çizelge 7.2). Bu durumlar iki grupta toplanabilir. İlk grupta sıcaklığın sabit tutulup basıncın kutuplaşma eğrisi üzerine olan etkisi incelenmiştir. İkinci grupta ise basınç sabit tutulup sıcaklığın kutuplaşma eğrisi üzerine olan etkisi incelenmiştir.

İlk grupta basınç değişiminin kutuplaşma eğrilerine etkisi incelenmiştir (Şekil 7.5).

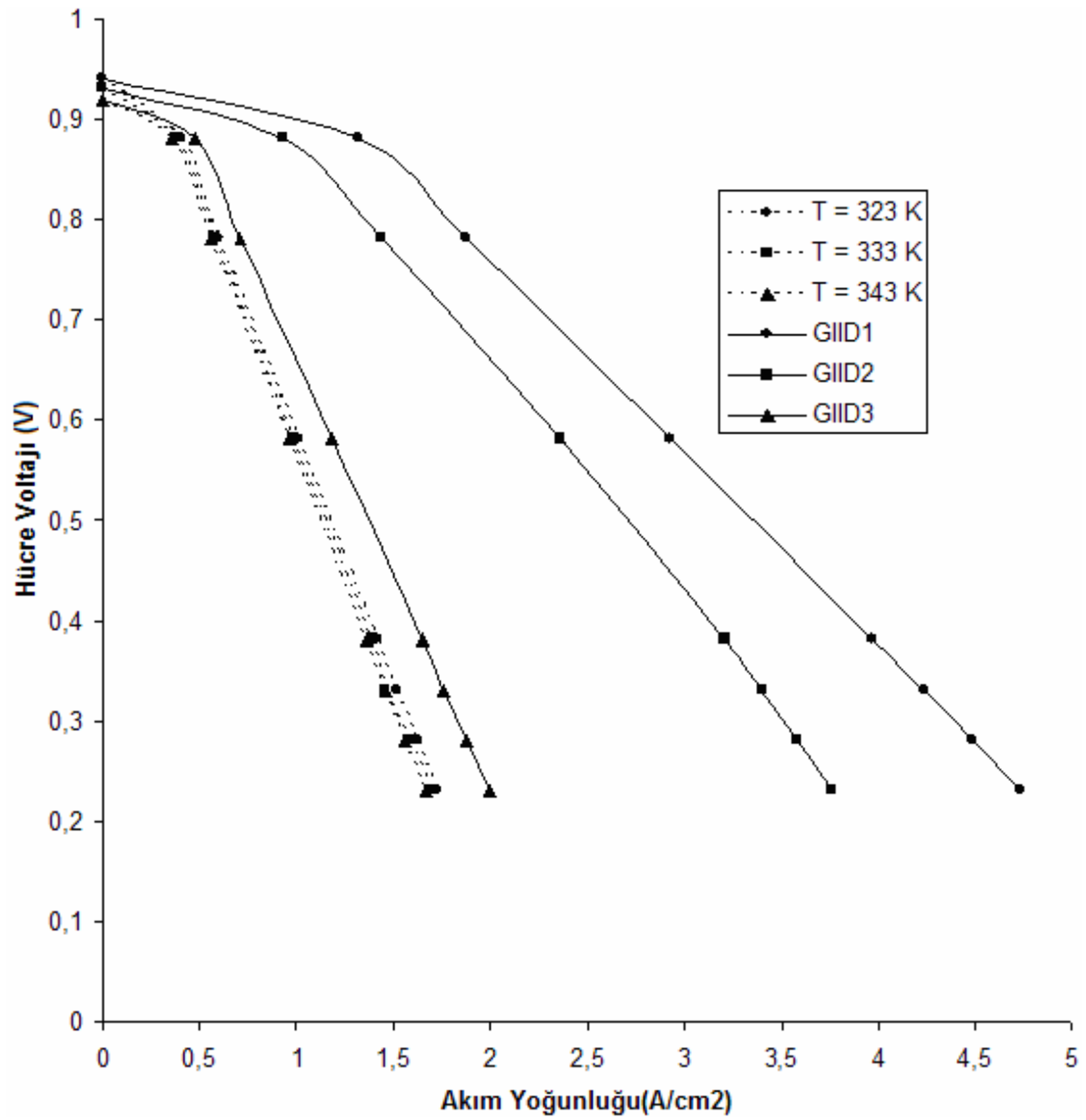


Şekil 7.5. Farklı basınçlarda elde edilen 9 kanallı hücreye ait sayısal sonuçlar ve modeli oluşturulan tek kanallı hücre için (GID1, GID2, GID3) kutuplaşma eğrilerinin karşılaştırılması

Şekil 7.5’den görüleceği üzere, farklı basınçlarda elde edilen, 9 kanallı hücreye ait sayısal sonuçlar ile modeli oluşturulan tek kanallı PEMFC yakıt hücresinin sayısal sonuçları arasında oldukça büyük farklılıklar gözlenmektedir. Modeli oluşturulan hücre sonuçlarına bakılırsa akım yoğunluğunun 9 kanallı hücre akım yoğunluğundan daha yüksek çıktığı görülmektedir. 1 Atm basınçta modeli oluşturulan hücrenin akım yoğunluğu $2,5 \text{ A/cm}^2$ olarak elde edilirken, 9 kanallı hücrenin akım yoğunluğu 2 A/cm^2 olarak elde edilmiştir. 2,36 Atm basınçta modeli oluşturulan hücrenin akım yoğunluğu $4,5 \text{ A/cm}^2$ olarak elde edilirken, 9 kanallı hücrenin akım yoğunluğu $2,5$

A/cm^2 olarak elde edilmiştir. 3,72 Atm basınçta modeli oluşturulan hücrenin akım yoğunluğu $5 A/cm^2$ olarak elde edilirken, 9 kanallı hücrenin akım yoğunluğu $3 A/cm^2$ olarak elde edilmiştir. Sonuç olarak basınç artırıldığında elde edilen akım yoğunluğu da artmaktadır. Aynı zamanda basınç artırıldıkça karşılaştırma yapılan hücreye ait akım yoğunluğu değerleri ile modeli oluşturulan hücreye ait akım yoğunluğu değerleri arasındaki farkın da yükseldiği gözlenmektedir. Bu farklılıkların en önemli sebebi; kullanılan modellerin geometrileri birbirinden farklı olduğundan, 9 kanallı hücreye ait sayısal çalışma ile modeli oluşturulan tek kanallı hücreye ait çalışmadaki aktif membran alanlarının birbirinden farklı olması olabilir.

Şekil 7.6'da, sıcaklık değişiminin kutuplaşma eğrilerine etkisi incelenmiştir. Şekil 7.6'dan görüleceği üzere, farklı sıcaklıklarda elde edilen 9 kanallı hücreye ait sayısal çalışma sonuçları ile modeli oluşturulan tek kanallı PEMFC modelinin sayısal sonuçları arasında farklılıklar gözlenmektedir. Modeli oluşturulan hücre sonuçlarına bakılırsa akım yoğunluğunun 9 kanallı hücre akım yoğunluğundan daha yüksek çıktığı görülmektedir. 323 K sıcaklıkta modeli oluşturulan hücrenin akım yoğunluğu değeri $5 A/cm^2$ olarak elde edilirken, 9 kanallı hücrenin akım yoğunluğu $2 A/cm^2$ olarak elde edilmiştir. 333 K sıcaklıkta modeli oluşturulan hücrenin akım yoğunluğu $4 A/cm^2$ olarak elde edilirken, 9 kanallı hücrenin akım yoğunluğu $2 A/cm^2$ civarında elde edilmiştir. 343 K sıcaklıkta modeli oluşturulan hücrenin akım yoğunluğu değeri $2,25 A/cm^2$ civarında elde edilirken, 9 kanallı hücrenin akım yoğunluğu $1,75 A/cm^2$ civarında elde edilmiştir. Sonuç olarak sıcaklık artırıldığında elde edilen akım yoğunluğu değerleri azalmaktadır. Aynı zamanda sıcaklık artırıldıkça karşılaştırma yapılan hücreye ait akım yoğunluğu değerleri ile modeli oluşturulan hücreye ait akım yoğunluğu değerleri arasındaki farkın da azaldığı gözlenmektedir. Bu farklılıkların en önemli sebebi; kullanılan modellerin geometrileri birbirinden farklı olduğundan, 9 kanallı hücreye ait sayısal çalışma ile modeli oluşturulan tek kanallı hücreye ait çalışmadaki aktif membran alanlarının birbirinden farklı olması olabilir.



Şekil 7.6. Farklı sıcaklıklarda elde edilen 9 kanallı hücreye ait sayısal sonuçlar ve modeli oluşturulan tek kanallı hücre için (GIID1, GIID2, GIID3) kutuplaşma eğrilerinin karşılaştırılması

8. SONUÇLARIN DEĞERLENDİRİLMESİ

Bu çalışmada, FLUENT-PEMFC modülü kullanılarak modeli oluşturulan PEM yakıt hücresinde 9 farklı durum için çözüm elde edilmiştir (Çizelge 6.1). Çözümler 18900 elemandan oluşan ağ yapısı kullanılarak elde edilmiştir.

Çözümlerde kullanılan yakınsama kriteri, niceliklerin kalıntılar teriminin 10^{-4} değerinden küçük olması ve enerji denklemi için kalıntılar teriminin 10^{-6} değerinden küçük olmasıdır.

Blok yüksekliğinin belirlenmesi için yapılan çözümler sonucu oluşturulan kutuplaşma eğrileri incelendiğinde (Şekil 6.2), bloksuz hücrede en düşük akım yoğunluğu değeri elde edilirken geçit oranı en düşük ($\lambda = 0,1$) engelleyici blok konularak yapılan çözümde en yüksek akım yoğunluğu değerlerinin elde edildiği görülmüştür.

Bu şartlar altında elde edilen kutuplaşma eğrileri incelendiğinde (Şekil 6.3), hücre içerisine engelleyici bloklar konulması ile hücre performansının arttığı gözlenmiştir. Ancak belli bir sayıdan sonra engelleyici blok sayısını artırmanın hücre performansında çok önemli bir değişikliğe sebep olmadığı gözlenmiştir. Engelleyici blok sayısı dörtten yüksek olması durumunda düşük hücre voltajı değerlerinde hemen hemen aynı akım yoğunluğu değerleri elde edilmiştir (Şekil 6.3). Örneğin 0,25 V hücre voltajı değerinde bloksuz kanal kullanılarak $1,32 \text{ A/cm}^2$ akım yoğunluğu elde edilirken 1 bloklu kanalda $1,48 \text{ A/cm}^2$, 2 bloklu kanalda $1,50 \text{ A/cm}^2$, 3 bloklu kanalda $1,52 \text{ A/cm}^2$, 4-9 bloklu kanallarda $1,55 \text{ A/cm}^2$ değerinde akım yoğunlukları elde edilmiştir.

Bu şartlar altında elde edilen kutuplaşma eğrileri incelendiğinde, bağıl nemin etkisinin çok büyük olduğu gözlenmiştir. Gazların kanala yüksek nemli giriş yaptığı duruma göre daha düşük nemli giriş yaptığı durumda akım yoğunluğunun azaldığı yani hücre performansının azaldığı gözlenmiştir (Şekil 6.44). Bağıl nem % 100 değerinden (D5) % 60 değerine (D7) düşürüldüğünde akım yoğunluğunda % 70

azalma gözlenmiştir. Bağlı nem % 20 değerine (D9) düşürüldüğünde ise, hücre voltajının 0,78 V ile 0,92 V değerleri arasında akım yoğunluğunda farklılık gözlenmekle birlikte diğer hücre voltajı değerlerinde akım yoğunluğu 0,33 A/cm² değerinde sabit kalmaktadır.

Aynı zamanda bağlı nem $\phi = 1$ olduğu durumda gazların kanala giriş hızı $V = 1,75$ m/s değerinden (D1) $V = 0,7 \times 1,75$ m/s değerine (D4) düşürüldüğünde akım yoğunluğunun % 27,67 oranında azaldığı gözlenmiştir (Şekil 6.45). Gaz giriş hızı $V = 0,2 \times 1,75$ m/s değerine (D5) düşürüldüğünde tüm hücre voltajlarında (D4) ile aynı akım yoğunluğu değerleri elde edilmiştir.

Anot ve katot kısmı gazlarının giriş nem değeri $\phi = 0.6$ olarak giriş sınır şartı tanımlandığında giriş hızının $V = 1,75$ m/s (D2) değerinden $V = 0,7 \times 1,75$ m/s (D6) değerine düşürülmesi ile akım yoğunluğunun maksimum değerlerinde % 36,3 bir azalma gözlenmiştir. Giriş hızının $V = 0,7 \times 1,75$ m/s (D6) değerinden $V = 0,2 \times 1,75$ m/s (D7) değerine düşürülmesi ile akım yoğunluğunun maksimum değerlerinde % 242,3 bir azalma gözlenmiştir (Şekil 6.46).

Anot ve katot kısmı gazlarının giriş nem değeri $\phi = 0.2$ olarak giriş sınır şartı tanımlandığında giriş hızının $V = 1,75$ m/s (D3) değerinden $V = 0,7 \times 1,75$ m/s (D8) değerine düşürülmesi ile akım yoğunluğunun maksimum değerlerinde % 18,5 bir azalma gözlenmiştir. Giriş hızının $V = 0,7 \times 1,75$ m/s (D8) değerinden $V = 0,2 \times 1,75$ m/s (D9) değerine düşürülmesi ile akım yoğunluğunun maksimum değerlerinde % 232,5 bir azalma gözlenmiştir (Şekil 6.47).

Model sonuçları deneysel sonuçlarla [10] karşılaştırıldığında oldukça büyük farklılıklar gözlenmiştir (Şekil 7.1, 7.2). Oluşturulan modelde akım yoğunluğu değerleri deneysel sonuçlardan daha yüksek elde edilmiştir. Farklı basınçlar kullanılarak yapılan çözüm sonuçları ile deneysel sonuçlar karşılaştırıldığında akım yoğunluğu değerleri arasında % 67'lik bir farklılık gözlenmiştir (Şekil 7.1). Farklı sıcaklıklar kullanılarak yapılan çözüm sonuçları ile deneysel sonuçlar

karşılaştırıldığında akım yoğunluğu değerleri arasında ortalama % 58’lik bir farklılık gözlenmiştir (Şekil 7.2). Bu farklılıkların olası iki önemli sebebi vardır: Deneysel sonuçların elde edildiği makalede, deneylerde kullanılan yakıt hücresinin katmanlarına ait yoğunluk, özgül ısı, ısıl iletkenlik ve elektriksel iletkenlik değerleri verilmemiştir. Bu yüzden, sayısal çalışmada seçilen malzeme özellikleri deneysel çalışmada kullanılanlardan farklı olabilir. İkinci olarak, sayısal çalışmada sıvı fazda su oluşumunun etkisi dikkate alınmamıştır. Bu ise sayısal çalışmada akım yoğunluklarının fazla hesaplanmasına yol açmıştır.

Model sonuçları sayısal sonuçlarla [27] karşılaştırıldığında (Şekil 7.3, 7.4) farklı nemlerde elde edilen sayısal sonuçlar ile modeli oluşturulan PEMFC yakıt hücresinin sayısal sonuçları arasında oldukça büyük farklılıklar gözlenmiştir. Hücrenin anot kısmı için farklı nemlerde elde edilen sayısal sonuçlar ile modeli oluşturulan PEMFC yakıt hücresinin sonuçları karşılaştırıldığında akım yoğunluğu değerleri arasında % 37’lik bir farklılık gözlenmiştir (Şekil 7.3). Hücrenin katot kısmı için farklı nemlerde elde edilen sayısal sonuçlar ile modeli oluşturulan PEMFC yakıt hücresinin sonuçları karşılaştırıldığında akım yoğunluğu değerleri arasında % 23’lük bir farklılık gözlenmiştir (Şekil 7.4). Bu farklılıkların olası iki önemli sebebi vardır: Sayısal sonuçların elde edildiği makalede [27], modeli oluşturulan yakıt hücresinin katmanlarına ait yoğunluk, özgül ısı, ısıl iletkenlik ve elektriksel iletkenlik değerleri verilmemiştir. Bu yüzden, sayısal çalışmada seçilen malzeme özellikleri makaledeki sayısal çalışmada kullanılanlardan farklı olabilir. İkinci olarak, makalede kanallara yerleştirilen engelleyici blokların yükseklikleri verilmemiştir. Bu yüzden, sayısal çalışmada seçilen engelleyici blok yüksekliği ve buna bağlı olarak geçit oranı değerleri makaledeki sayısal çalışmada kullanılanlardan farklı olabilir. Bu ise sayısal çalışmada akım yoğunluklarının fazla hesaplanmasına yol açmıştır.

Oluşturulan model sonuçları sayısal sonuçlarla karşılaştırıldığında, farklı basınçlarda elde edilen, 9 kanallı hücreye ait sayısal sonuçlar ile modeli oluşturulan tek kanallı PEMFC yakıt hücresinin sayısal sonuçları arasında oldukça büyük farklılıklar gözlenmektedir [56]. 1 Atm basınçta modeli oluşturulan hücrenin akım yoğunluğu değerleri 9 kanallı hücrenin akım yoğunluğu değerlerinden % 16,7 daha fazla elde

edilmişken; 2,36 Atm basınçta % 40,9; 3,72 Atm basınçta ise % 40 daha fazla akım yoğunluğu değerleri elde edilmiştir (Şekil 7.5). Aynı zamanda, farklı sıcaklıklar kullanılarak yapılan çözümlerde de, modeli oluşturulan tek kanallı PEMFC yakıt hücresinin akım yoğunluğu değerleri 9 kanallı hücreye ait akım yoğunluğu değerlerinden daha yüksek elde edilmiştir. 323 K sıcaklıkta modeli oluşturulan hücrenin akım yoğunluğu değerleri 9 kanallı hücrenin akım yoğunluğu değerlerinden % 64 daha fazla elde edilmişken; 333 K sıcaklıkta % 53,9; 343 K sıcaklıkta ise % 19 daha fazla akım yoğunluğu değerleri elde edilmiştir (Şekil 7.6). Bu farklılıkların en önemli sebebi; kullanılan modellerin geometrileri birbirinden farklı olduğundan, 9 kanallı hücreye ait sayısal çalışma ile modeli oluşturulan tek kanallı hücreye ait çalışmadaki aktif membran alanlarının birbirinden farklı olması olabilir.

Sonuç olarak, makalelerdeki [27,10] deneysel ve sayısal çalışmalarda veri eksiklikleri, karşılaştırmanın güvenilirliğini azaltmaktadır. Bu modelin geçerliliğinin ispatlanabilmesi için, tüm verilerin mevcut olduğu sayısal veya deneysel bir çalışma gerçekleştirildikten veya literatürden temin edildikten sonra model ile karşılaştırılması yapılmalıdır. Ayrıca sıvı su oluşumunun dikkate alınması zorunludur.

KAYNAKLAR

1. Wang, C. Y., "Fundamental Models for Fuel Cell Engineering" , *Chem. Rev.*, 104 : 4727-4766 (2004).
2. Ju, H., Meng, H., Wang, C. Y., "A single-phase, non-isothermal model for PEM fuel cells" , *Int. J. Heat Mass Transfer*, 48 (7) : 1303-1315 (2005).
3. Ju, H., Wang, C. Y., "Experimental validation of a PEM fuel cell model by current distribution data" , *J. Electrochem. Soc.*, 151 (11) : A1954-A1960 (2004).
4. Meng, H., Wang, C. Y., "Electron Transport in PEFCs" , *J. Electrochem. Soc.*, 151(3) : A358-A367 (2004).
5. Meng, H., Wang, C. Y., "Large-scale simulation of polymer electrolyte fuel cells by parallel computin" , *Chem. Eng. Sci.*, 59 (16) : 3331-3343 (2004).
6. Liu, X., Tao, W., Li, Z., Yaling, He., "Three-dimensional transport model of PEM fuel cell with straight flow channels" , *Journal of Power Sources*, 158 : 25-35 (2006).
7. Um, S., Wang, C. Y. and Chen, K. S., "Computational Fluid Dynamics Modeling of Proton Exchange Membrane Fuel Cells" , *Journal of The Electrochemical Society*, 147 (12) : 4485-4493 (2000).
8. Dutta, S., Shimpalee, S. and Van Zee, J. W., "Three-dimensional numerical simulation of straight channel PEM fuel cells" , *Journal of Applied Electrochemistry*, 30 : 135-146 (2000).
9. Sivertsen, B.R., Djilali, N., "CFD-based modelling of proton exchange membrane fuel cells" , *Journal of Power Sources*, 141 : 65-78 (2005).
10. Wang, L., Husar, A., Zhou, T., Liu, H., "A parametric study of PEM fuel cell performances" , *International Journal of Hydrogen Energy*, 28 : 1263-1272 (2003).
11. Li, S., Cao, J., Wangard, W. and Becker, U., "Modeling PEMFC with FLUENT: Numerical Performance and validations with experimental data" , Proceedings of FUEL CELL 3rd International Conference on Fuel Cell Science, *Engineering and Technology*, Ypsilanti, Michigan (2005).
12. Hu, G., Fan, J., Chen, S., Liu, Y., Cen, K., "Three-dimensional numerical analysis of proton exchange membrane fuel cells (PEMFCs) with conventional and interdigitated flow fields" , *Journal of Power Sources*, 136 : 1-9 (2004).

13. Carcadea, E., Ene, H., Ingham, D.B., Lazar, R., Ma, L., Pourkashanian, M., Stefanescu, I., “Numerical Simulation of Mass and Charge Transfer for a PEM Fuel Cell” , *Proceedings International Hydrogen Energy Congress and Exhibition IHEC*, 13 (2005).
14. Hakenjos, A., Tüber, K., Schumacher ,J.O. and Hebling, C., “Characterising PEM Fuel Cell Performance Using a Current Distribution Measurement in Comparison with a CFD Model” , *Fuel Cells*, 4 : 185-189 (2004).
15. Yoon,Y.G., Lee, W.Y., Yang, T.H., Park, G.G. and Kim, C.S.,“Current distribution in a single cell of PEMFC” , *Journal of Power Sources*, 118 : 193-199 (2003).
16. Santarelli, M.G., Torchio, M.F., “Experimental analysis of the effects of the operating variables on the performance of a single PEMFC” , *Energy Conversion and Managemen*, 48 : 40–51 (2007).
17. Ju, H. and Wang, C.Y., “Experimental Validation of a PEM Fuel Cell Model by Current Distribution Data” , *Journal of The Electrochemical Society*, 151 (11) : A1954-A1960 (2004).
18. Pasaogullari, U., Wang, C.Y., “Computational Fluid Dynamics Modeling of Proton Exchange Membrane Fuel Cells using Fluent” , *Fluent Student Contest Winner*, Fluent User Group Meeting, Manchester, NH, 35 (2002).
19. Fluent 6.2 UDF Manual, Fluent Inc. (2003).
20. Balmer R., “Thermodynamics, 1st ed.” , *West*, St Paul, 195 (1990).
21. Keenan J.H. and Kaye J. “Gas Tables”, Wiley & Sons, New York. (1948).
22. Van Wylen G.J. and Sonntag R.E., “Fundamentals of Classical Thermodynamics”, 3rd ed. , *Wiley & Sons*, New York, 688, (1986).
23. Liu, H.C., Yan, W.M., Soong, C.Y., Chen Falin and Chu, H.S., “Reactant gas transport and cell performance of proton exchange membrane fuel cells with tapered flow field design” , *Journal of Power Sources*, 158 : 78-87 (2005).
24. Coppo, M., Siegel, N.P., and von Spakovsky, M.R., “On the influence of temperature on PEM fuel cell operation” , *Journal of Power Sources*, 159 (1) : 560-569 (2005).
25. Soong, C.Y., Yan, W.M., Tseng, C.Y., Liu, H.C., Chen Falin and Chu, H.S., “Analysis of reactant gas transport in a PEM fuel cell with partially blocked fuel flow channels” , *Journal of Power Sources*, 143 : 36-47 (2005).

26. Li, P.W., Schaefer, L., Wang, Q.M., Zhang, T., and Chyu, M.K., "Multi gas transportation and electrochemical performance of a polymer electrolyte fuel cell with complex flow channels" , ***Journal of Power Sources***, 115 : 90-100 (2005).
27. Jang, J.H., Yan, W.M., Li, H.Y., and Chou, Y.C., "Humidity of reactant fuel on the cell performance of PEM fuel cell with baffle-blocked flow field designs" , ***Journal of Power Sources***, 159 (1) : 468-477 (2006).
28. Patankar, S.V., "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow" , ***Hemisphere Publishing Corp.***, New York, 98 (1980).
29. Wu, J.; Srinivasan, V.; Xu, J.; Wang, C. Y. ***J. Electrochem. Soc.***, 149: A1342, (2002).
30. Wang, C. Y., ***Int. J. Transport Phenom.***, 3 : 131 (2001).
31. Wang, C. Y. Vielstich, W., Gasteiger, H. A., Lamm, A., "In Handbook of Fuel Cells" , ***Eds. John Wiley and Sons Ltd.***, England, 3 : 337 (2003).
32. Brown, C. J., Pletcher, D., Walsh, F. C., Hammond, J. K., Robinson, D., "Local mass transport effects in the FM01 laboratory electrolyser", ***J. Applied Electrochemistry***, 22 : 613 (1992).
33. Cleghorn, S.J.C., Derouin, C.R., Wilson, M.S., Gottesfeld S., "A printed circuit board approach to measuring current distribution in a fuel cell" ***J. Applied Electrochemistry***, 28 : 663-672 (1998).
34. Bender, G, Wilson, M.S., Zawodzinski, T.A., "Further refinements in the segmented cell approach to diagnosing performance in polymer electrolyte fuel cells" ***J. Power Sources***, 123 (2) : 163-171 (2003).
35. Wieser, Ch., Helmbold, A., Gu lzow, E., "A new technique for two-dimensional current distribution measurements in electrochemical cells", ***J. Applied Electrochemistry***, 30 (7) : 803-807 (2000).
36. Stumper, J., Campell, S., Wilkinson, D., Johnson, M., Davis, M., "In-situ Methods for the Determination of CurrentDistributions in PEM Fuel Cells," ***Electrochim. Acta***, 43 : 3773 (1998).
37. Mench, M. M., Wang, C. Y., "An in-situ method for the determination of current distribution in PEM fuel cells applied to a direct methanol fuel cell", ***J. Electrochem. Soc.***, 150 : A79-A85 (2003).
38. Mench, M. M., Wang, C. Y., Ishikawa, M., "In-situ current distribution measurements in polymer electrolyte fuel cells", ***J. Electrochem. Soc.***, 150 : A1052-A1059 (2003).

39. Noponen, M., Mennola, T., Mikkola, M., Hottinen, T., Lund, P., "Measurement of current distribution in a free-breathing PEMFC". *J. Power Sources*, 106 : 304-312 (2002).
40. Noponen, M., Hottinen, T., Mennola, T., Mikkola, M., Lund, P., "Determination of mass diffusion overpotential distribution with flow pulse method from current distribution measurements in a PEMFC", *J. Appl. Electrochem*, 32 : 1081-1089 (2002).
41. Brett, D., Atkins, S., Brandon, N. P., Vesovic, V., Vasileiadis, N., "Kucernaka, Channel of a Solid Polymer Fuel Cell", *A. Electrochem. Solid-State Lett*, 6 : A63 (2003).
42. Ren, X., Gottesfeld, S., "Electro-osmotic Drag of Water in Poly (perfluorosulfonic acid) Membranes", *J. Electrochem. Soc.*, 148 : A87 (2001).
43. Lee, W. K., Van Zee, J. W., Shimpalee, S., Dutta, S. *Proc. ASME Heat Transfer Div.*, 1 : 339 (1999).
44. Mench, M. M., Dong, Q. L., Wang, C. Y., "In-situ water distribution measurements in a polymer electrolyte fuel cell", *J. Power Sources*, 124 : 90-98 (2003).
45. Yang, X. G., Burke, N., Wang, C. Y., Tajiri, K., Shinohara, K., "Simultaneous measurement of current and species distributions in a polymer electrolyte fuel cell", *J. Electrochem. Soc.*, 225 -232 (2003).
46. Mench, M. M., Burford, D., Davis, T., "In Proceedings of the 2003 International Mechanical Engineering Congress and Exposition", *Washington, D.C., ASME*, (2003).
47. E.A. Ticianelli, J.G. Berry, S. Srinivasan, "Dependence of performance of solid polymer electrolyte fuel cells with low platinum loading on morphologic characteristics of the electrodes", *J. Electroanal. Chem.*, 251 : 275-295 (1988).
48. Bellows, R. J., Lim, M. Y., Arif, M., Thompson, A. K., Jacobson, D., "Neutron imaging technique for in situ measurement of water transport gradients within in polymer electrolyte fuel cells", *J. Electrochem. Soc.*, 146 : 1099-1103 (1999).
49. Geiger, A. B., Tsukada, A., Lehmann, E., Vontobel, P., Wokaun, A., Scherer, G. G., "In situ Investigation of the Two-phase Flow Patterns in Flow Fields of Polymer Electrolyte Fuel Cells by Neutron Radiography and Locally

- Resolved Current Measurements”, *Fuel Cell Seminar, Palm Springs, USA*, 2 : 92 (2002).
50. Tuber, K., Pocza, D., Hebling, C., “Visualization of water buildup in the cathode of a transparent PEM fuel cell”, *J. Power Sources*, 124 (2) : 403 (2003).
 51. Yang, X. G., Zhang, F. Y., Lubawy, A., Wang, C. Y., “Visualization of Liquid Water Transport in a PEFC”, *Electrochem. Solid-State Lett.*, 7 : A408 (2004).
 52. Oran, E. S., Boris, J. P., “Numerical Simulation of Reactive Flow”, *Cambridge University Pres*, Cambridge, 2nd ed., 408 (2001).
 53. Ju, H., Wang, C. Y., Cleghorn, S. J., Beuscher, U., “Nonisothermal Modeling of Polymer Electrolyte Fuel Cells”, *J. Electrochem. Soc.*, 152 : A1645 (2005).
 54. Siegel, N.P., “Development and Validation of a Computational Model for a Proton Exchange Membrane Fuel Cell”, PhD Thesis, *the Faculty of Virginia Polytechnic Institute and State University*, Virginia, (2003).
 55. Larminie J. and Dicks A., “Fuel Cell Systems Explained,” 2nd ed., *John Wiley and Sons*, 2003, England, 400 (2003).
 56. Alpat, C., “Düz Kanallı Proton Aktaran Membran Yakıt Hücresinin Sayısal Çözümü”, Yüksek Lisans Tezi, *Gazi Üniv., Fen Bilimleri Ens.*, Ankara, 92-95 (2007).

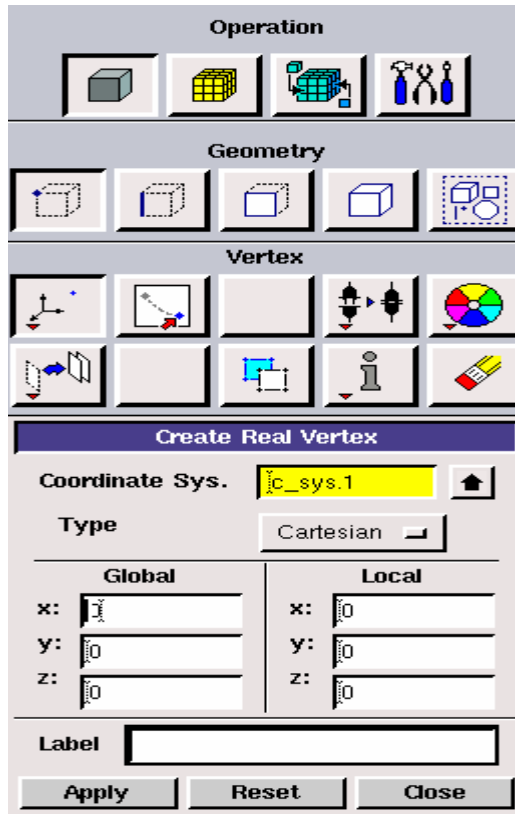
EKLER

EK-1. Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması

GAMBIT İLE PROBLEMİN ÜÇ BOYUTLU GEOMETRİSİNİN ÇİZİLMESİ

Operation → Geometry → Vertex → Create Real Vertex

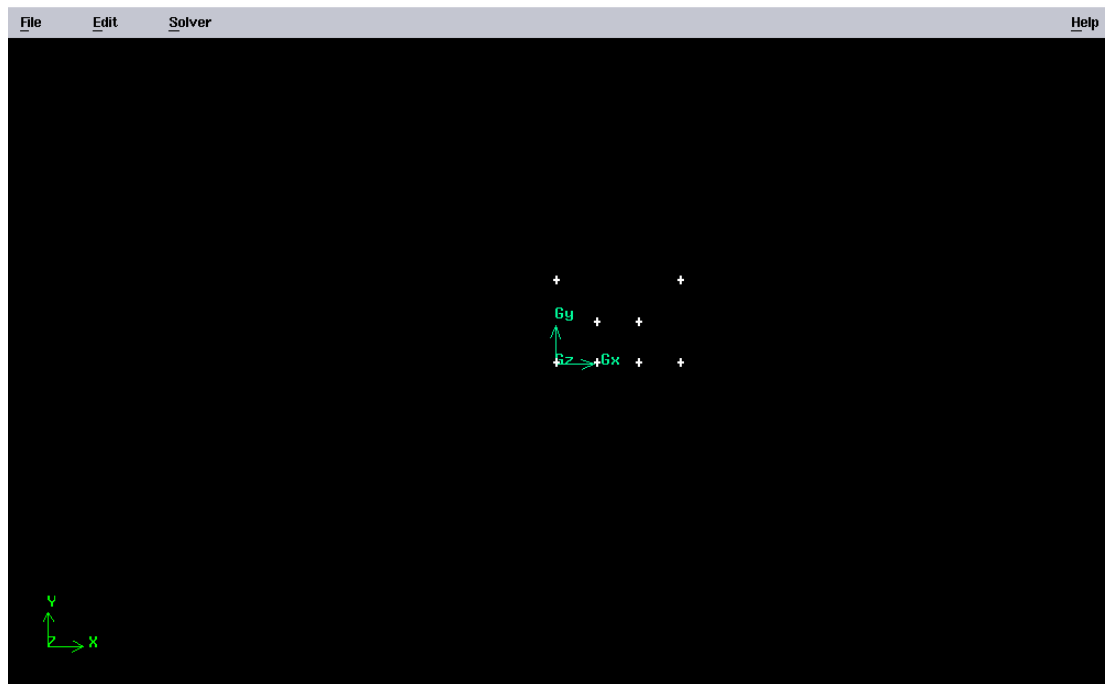
Operation menüsü altından geometri butonu, geometri menüsünden ise Vertex butonu seçilir. Şekil 1.1’de gösterilmiş olan Create Vertex butonu ile koordinatlar girilerek koordinat sisteminin istenilen yerlerinde noktalar oluşturulur. Değerler global kısımda yer alan bölümlere yazılır. İlk nokta $(x,y,z) = (0,0,0)$ noktasında yaratılır. Daha sonra diğer noktaların koordinatları sırası ile girilerek geometri noktalar halinde oluşturulur. Noktaların koordinatları geometrimizin fiziksel boyutlarına göre verilmektedir. Noktaların oluşturulma sıralaması ise tamamen tercih doğrultusunda yapılmaktadır.



Şekil 1.1. Koordinat sisteminde nokta oluşturulması

EK-1. (Devam) Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması

$A-(x,y,z) = (0,0,0)$	Apply
$B-(x,y,z) = (1,0,0)$	Apply
$C-(x,y,z) = (2,0,0)$	Apply
$D-(x,y,z) = (3,0,0)$	Apply
$E-(x,y,z) = (3,2,0)$	Apply
$F-(x,y,z) = (0,2,0)$	Apply
$G-(x,y,z) = (1,1,0)$	Apply
$H-(x,y,z) = (2,1,0)$	Apply

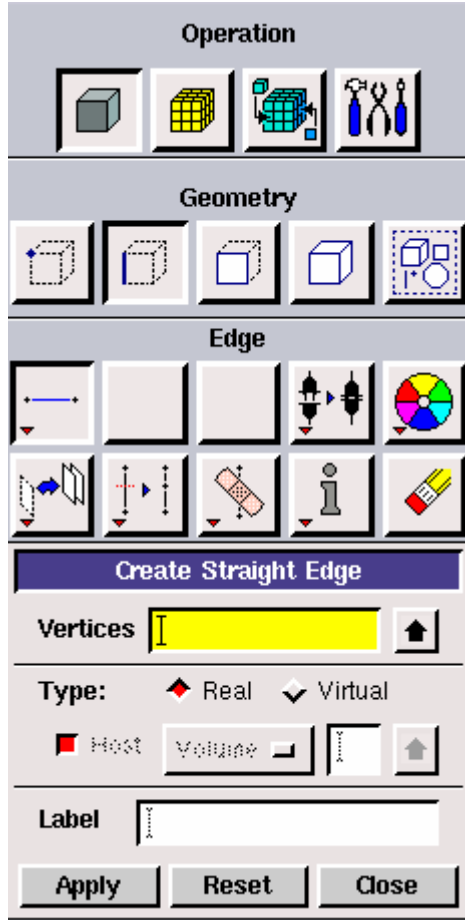


Şekil 1.2. Koordinat sisteminde oluşturulan noktalar

Operation → Geometry → Create Edge → Create Straight Edge

Bu komut ile koordinat sisteminde oluşturulan noktalar seçilerek kenarlar çizilir. Şekil 1.3’de gösterilmiş olan “Label” alanına oluşturulan kenarın ismi yazılması daha sonra yapılacak işlemlerde ve sınır şartlarının verilmesinde kolaylık sağlar.

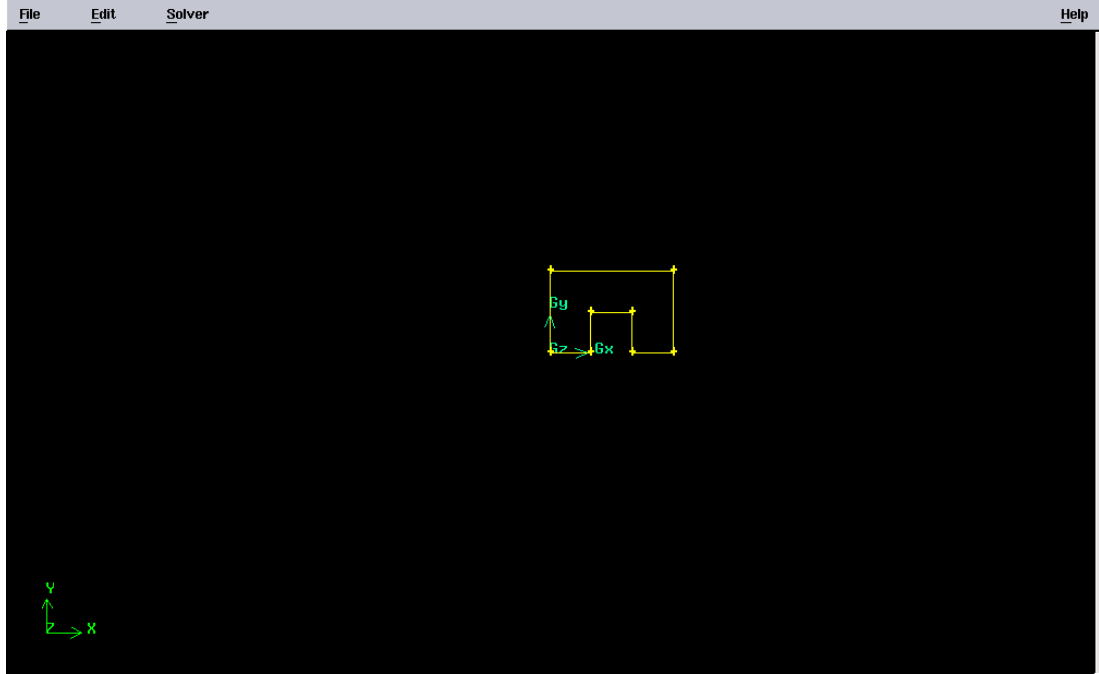
EK-1. (Devam) Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması



Şekil 1.3. Noktaların birleştirilmesi ile çizgilerin oluşturulması

Oluşturduğumuz noktalar sırası ile seçilir ve apply butonuna basılarak kenarlar oluşturulur. Şekil 1.4’de oluşturduğumuz noktaların birleştirilmesi ile oluşturulan kenarlar görülmektedir.

EK-1. (Devam) Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması

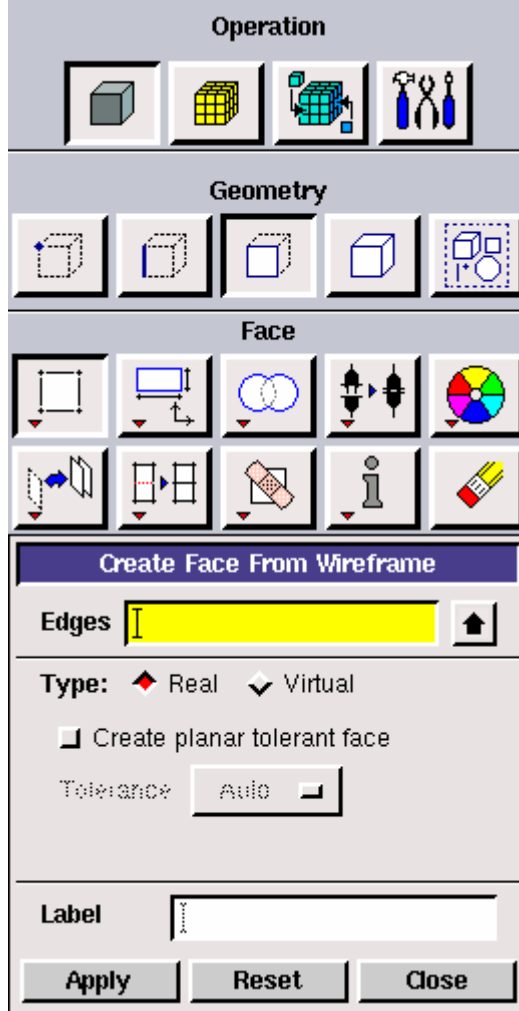


Şekil 1.4 Noktaların birleştirilmesi ile oluşturulan kenarlar

Operation → Geometry → Create Face → Create Face From Wireframe

Form Face butonu kullanılarak oluşturduğumuz bu çizgiler ile yüzeyler oluşturulur. Edge kısmına yüzey oluşturmak istediğimiz kenarlar seçilerek girilir. Açılan pencerede (Şekil 1.5) “Type” butonu “real” seçilerek yüzeyin gerçek olması sağlanmaktadır. Label kısmına ise oluşturulacak olan yüzeyin ismi yazılabilir.

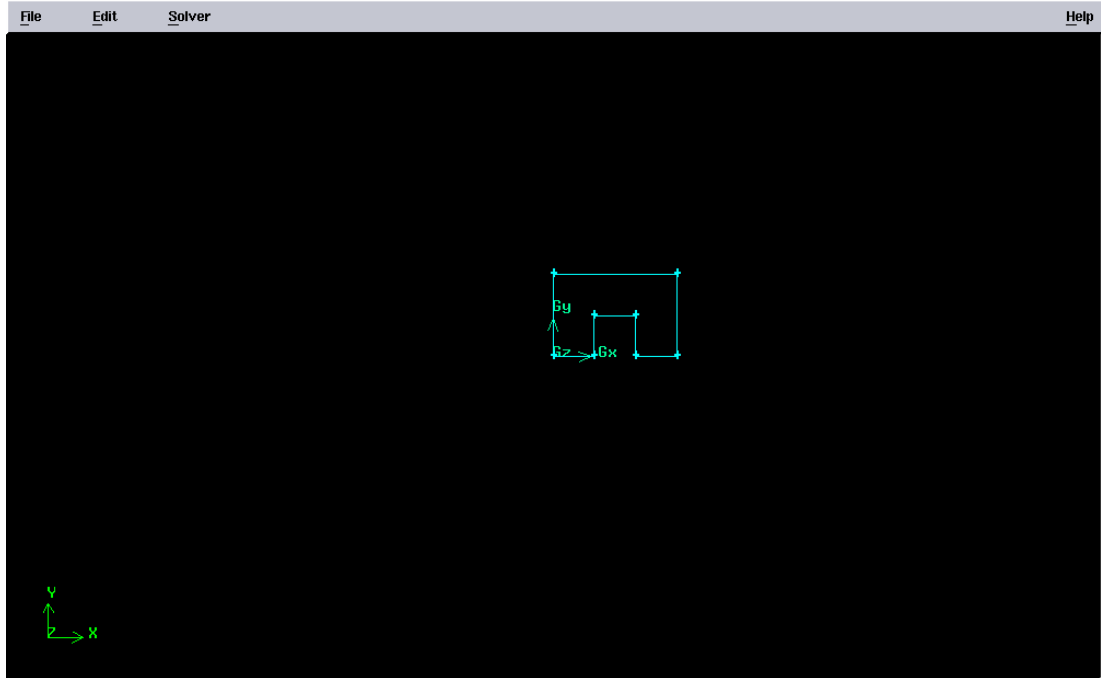
EK-1. (Devam) Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması



Şekil 1.5. Çizgilerin birleştirilmesi ile yüzeylerin oluşturulması

Şekil 1.5’de gösterilmiş olan ekrandan Edges kısmı açılarak tüm kenarlar seçildikten sonra apply butonuna basılarak istediğimiz yüzeyi oluştururuz. Şekil 1.6’da görüldüğü gibi seçmiş olduğumuz kenarlar, yüzey halini aldıktan sonra sarı renkten mavi renge dönüşmektedirler.

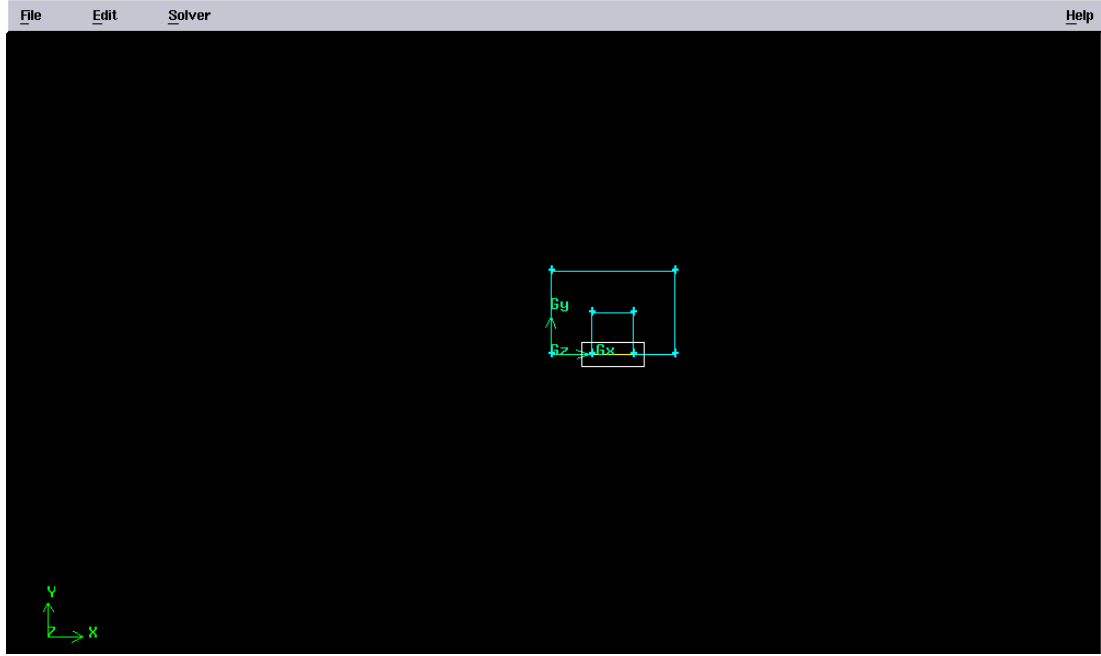
EK-1. (Devam) Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması



Şekil 1.6. Çizgilerin birleştirilmesi ile oluşturulan yüzey

Şekil 1.6'da gösterilmiş olan yüzey, anot akım toplayıcı plakanın ön yüzeyidir. Mesh işlemi ve sınır şartları belirleme esnasında sorun çıkmaması için yüzeyler büyük dikkatle oluşturulmalıdır. Çakışan tüm yüzeyler, tek bir yüzeyden oluşmalıdır. Akım toplayıcı plakanın yüzeylerinden faydalanarak, gaz kanalı Şekil 1.7'de gösterildiği gibi oluşturulmaktadır.

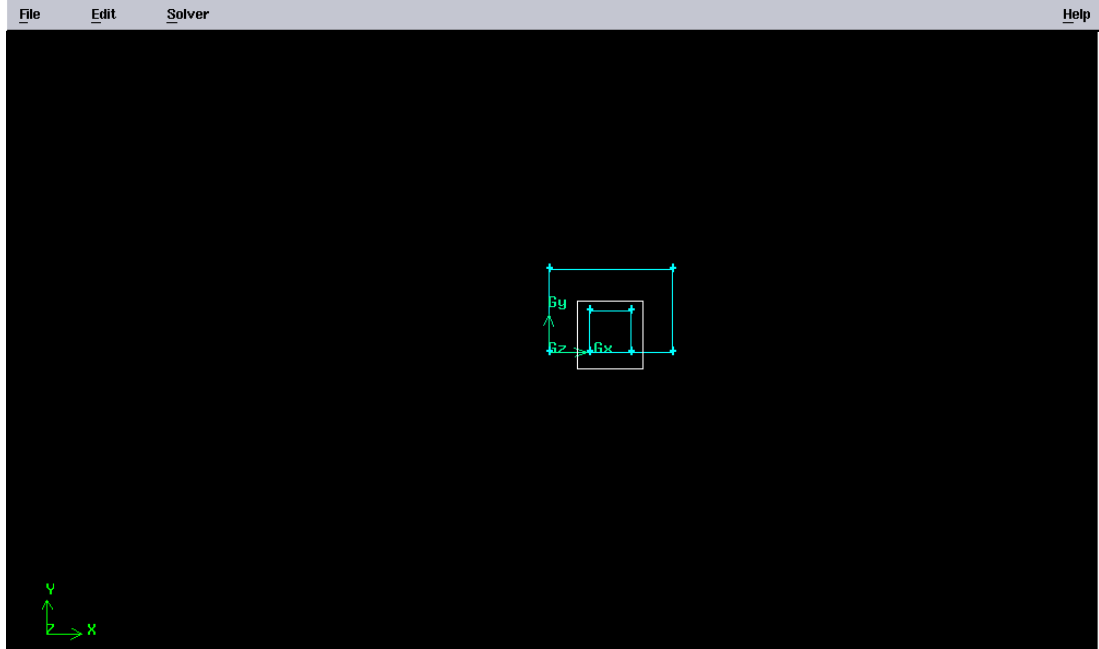
EK-1. (Devam) Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması



Şekil 1.7. Anot hava kanalının oluşturulması

Şekil 1.7’de görüldüğü gibi, anot akım toplayıcıya ait noktalar kullanılarak hava kanalının kenarları oluşturulur. Renk farklılıkları, çizimlerin karıştırılmamasında büyük kolaylık sağlamaktadır. Gaz kanalının alt kenar oluşturulduktan sonra, Şekil 1.8’de gösterildiği gibi, anot akım toplayıcıya ait üç kenar ve yeni oluşturulan diğer kenar seçilerek anot hava kanalının ön yüzeyi oluşturulur.

EK-1. (Devam) Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması

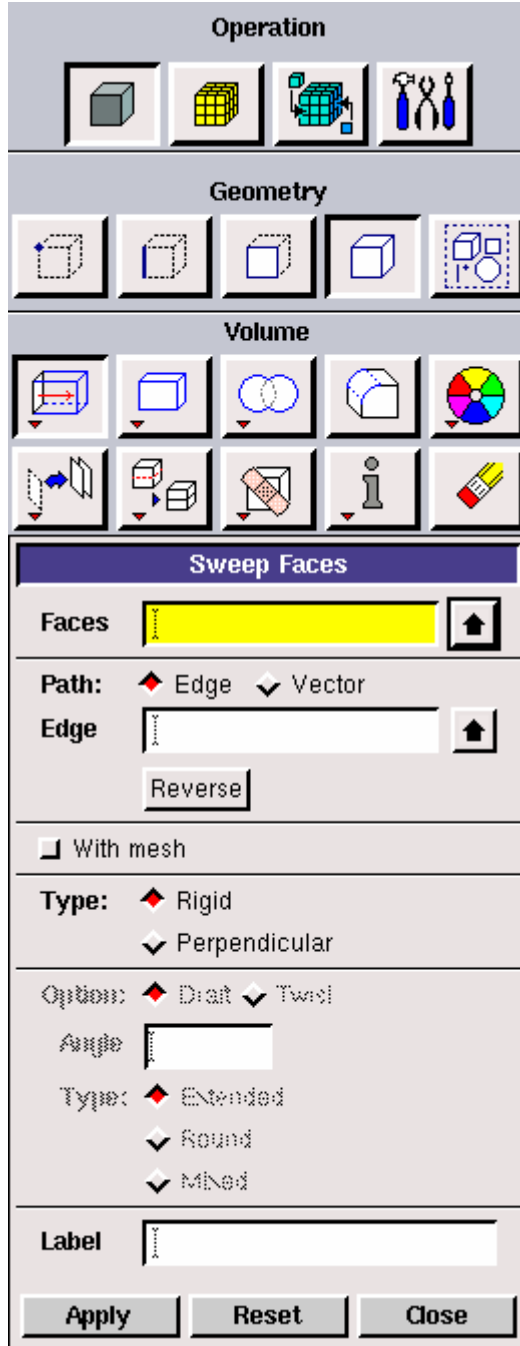


Şekil 1.8. Anot gaz kanalına ait ön yüzeyin oluşturulması

Operation → Geometry → Volume → Sweep Faces

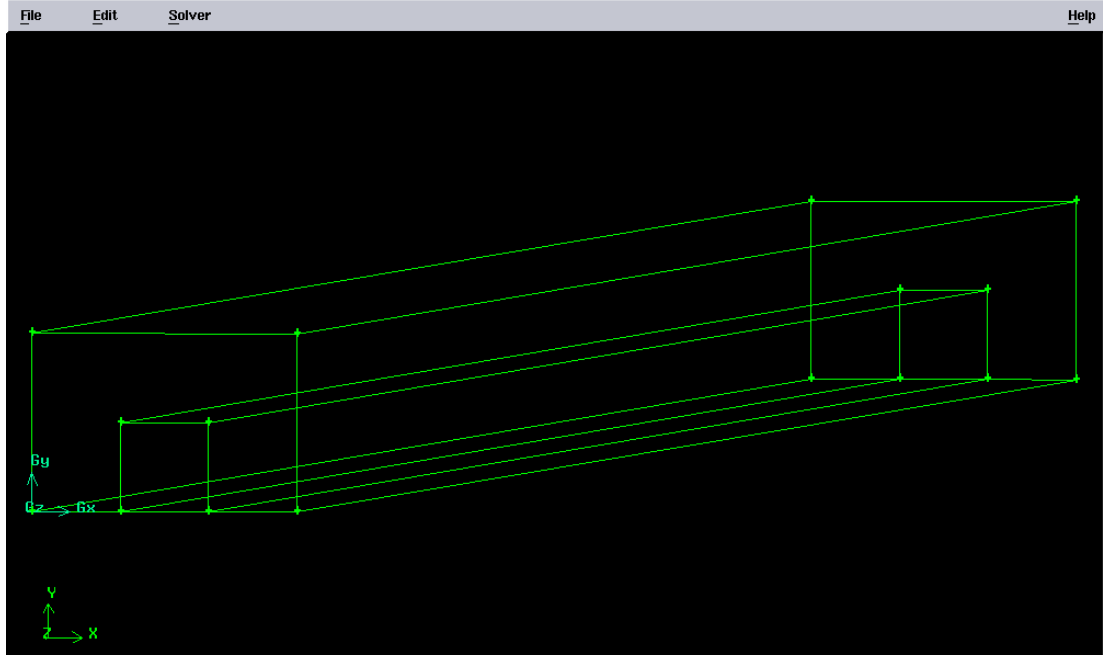
İki boyutlu oluşturulan, anot akım toplayıcı ve anot hava kanalına ait ön yüzeyler Sweep Faces komutu kullanılarak üç boyutlu hale dönüştürülür. Şekil 1.9'da açılan pencereden tüm yüzeyler seçilerek Vector butonu aktif hale getirilir. Define kısmından z eksenini seçilir ve Magnitude kısmına, yakıt hücresinin z yönündeki ölçüsü ($z = 70$) yazılarak, apply butonuna basılır. Şekil 1.10'da görüldüğü gibi iki boyutlu yüzeyimiz, üç boyutlu bir hal alarak, rengi maviden yeşile dönüşmüştür.

EK-1. (Devam) Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması



Şekil 1.9. İki boyutlu yüzeyden hacim oluşturulması

EK-1. (Devam) Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması

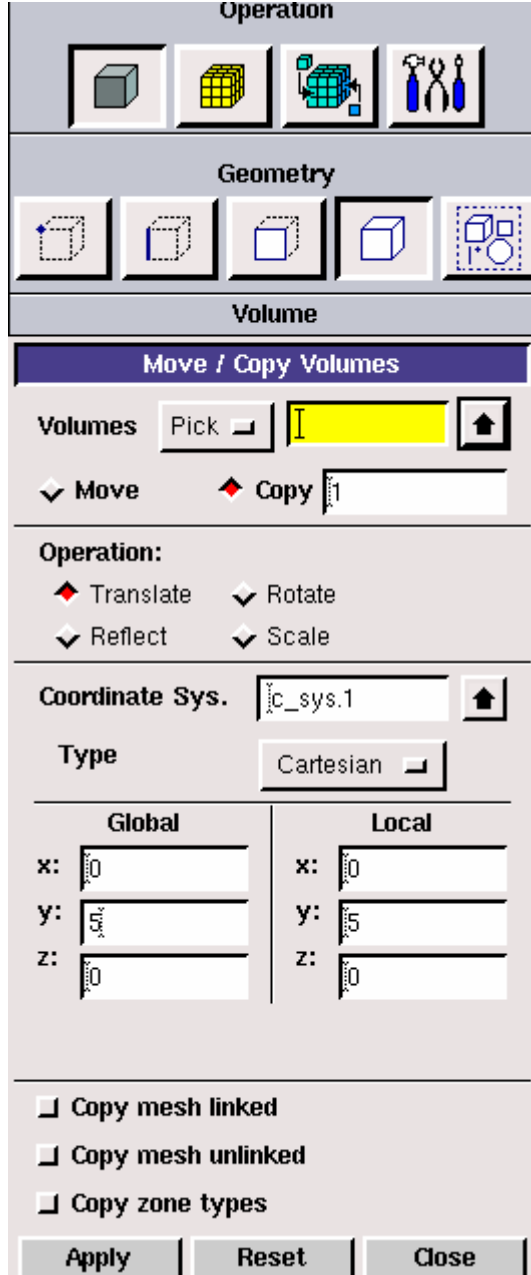


Şekil 1.10. Anot akım toplayıcı ve gaz kanalının üç boyutlu görünümü

Operation → Geometry → Volume → Move / Copy Volumes

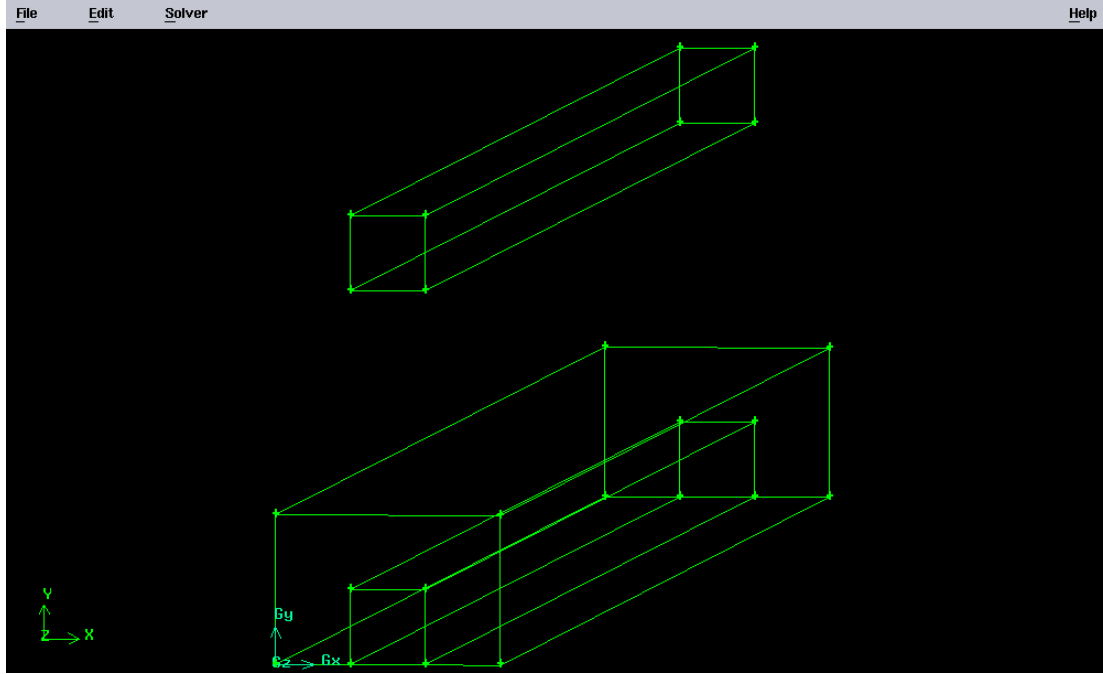
Üç boyutlu oluşturulan hacimden Şekil 1.11’de açılan pencereden anot gaz kanalı seçilerek herhangi bir noktaya kopyalanır. Böylece Şekil 1.12’de görüldüğü gibi üçüncü bir hacim oluşturulmuş olur.

EK-1. (Devam) Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması



Şekil 1.11. Üç boyutlu hacimden hacim kopyalanması

EK-1. (Devam) Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluřturulması

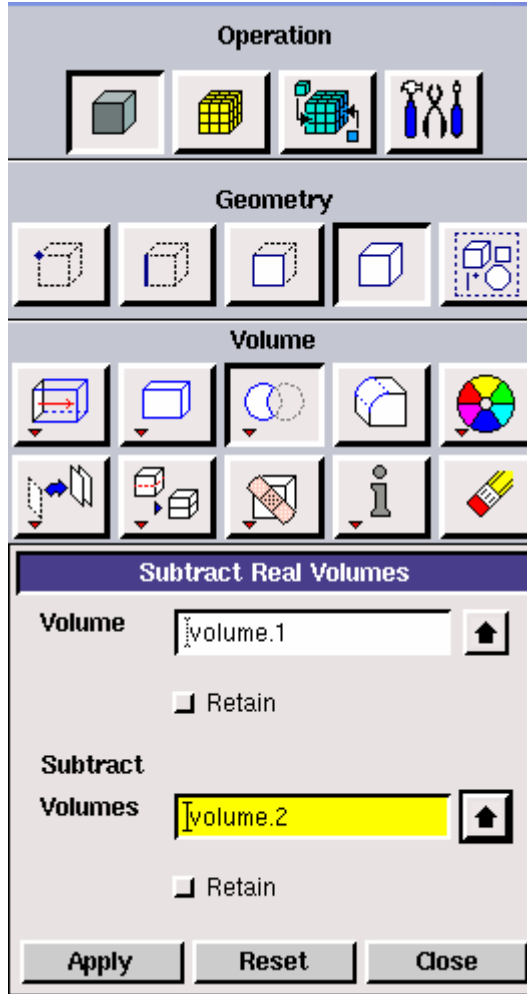


řekil 1.12. Anot akım toplayıcı, gaz kanalı ve yeni hacmin üç boyutlu görünümü

Operation → Geometry → Volume → Subtract Real Volumes

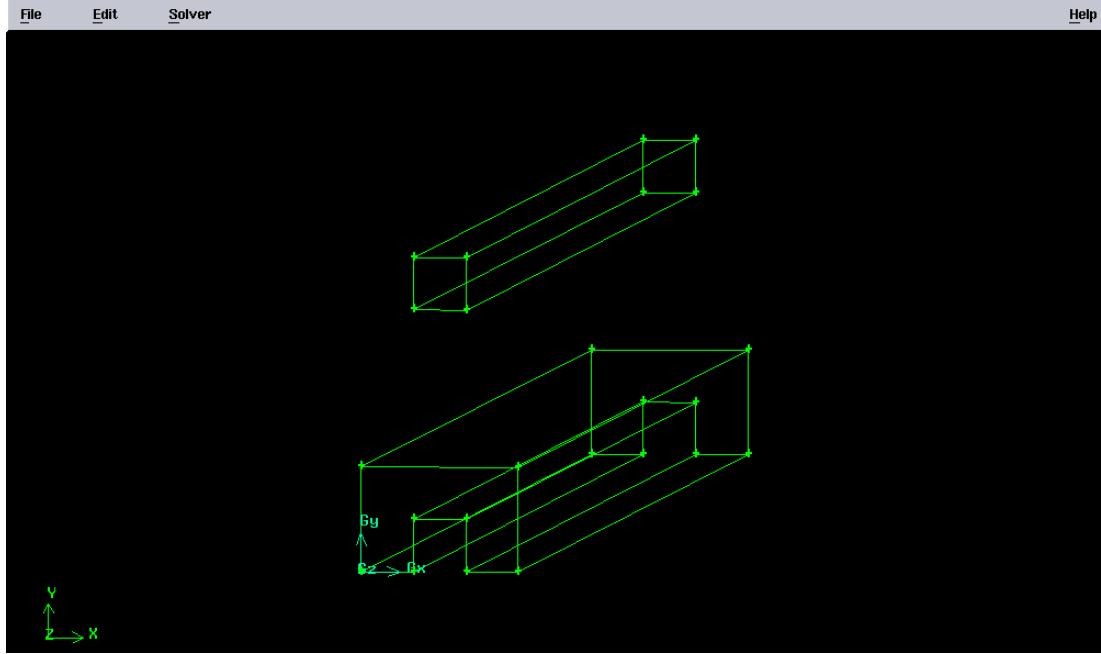
řekil 1.13'te açılan pencereden anot akım toplayıcı ve anot gaz kanalı sırasıyla seçilerek akım toplayıcının içinden gaz kanalı çıkarılır. Bu işlem sonrasında ekranımızda řekil 1.14'te görülen iki hacim kalır.

EK-1. (Devam) Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması



Şekil 1.13. Üç boyutlu hacimden hacim çıkarılması

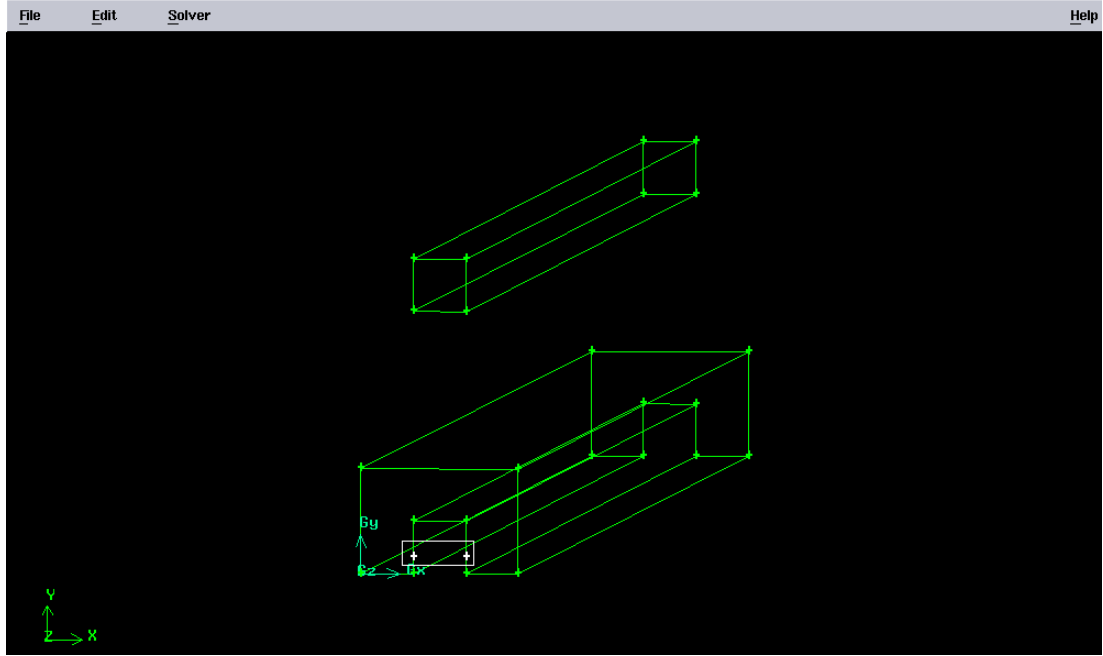
EK-1. (Devam) Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması



Şekil 1.14. Anot akım toplayıcı ve yeni hacmin üç boyutlu görünümü

Üç boyutlu anot akım toplayıcı ve anot gaz kanalı oluşturulduktan sonra engelleyici plakalara ait noktaları oluşturmak için anot gaz kanalının ön yüzeyinde Şekil 1.15'te görüldüğü gibi $A-(x,y,z) = (1,0.3,0)$ ve $B-(x,y,z) = (2,0.3,0)$ noktaları oluşturulur.

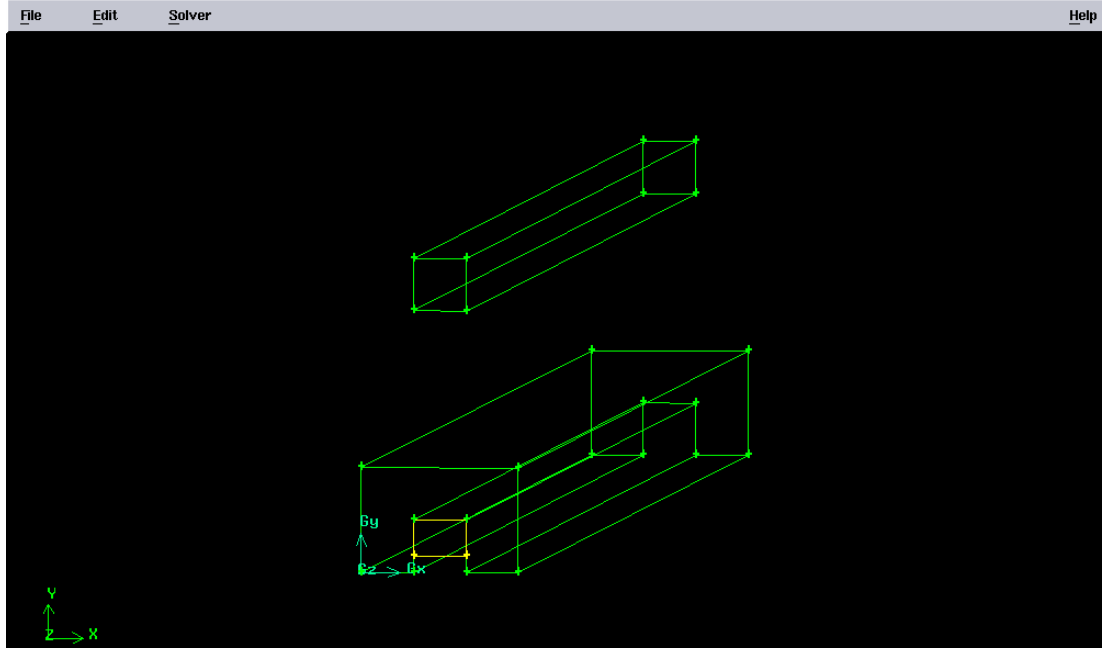
EK-1. (Devam) Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması



Şekil 1.15. Engelleyici plakaya ait noktaların oluşturulması

Oluşturulan yeni iki nokta ve anot akım toplayıcıya ait diğer iki nokta seçilerek engelleyici plakanın kenarları Şekil 1.16'da görüldüğü gibi oluşturulur. Bu işlem esnasında anot akım toplayıcıya ait olan noktalar seçilirken ön taraftaki iki noktanın seçilmesine özellikle dikkat edilmelidir.

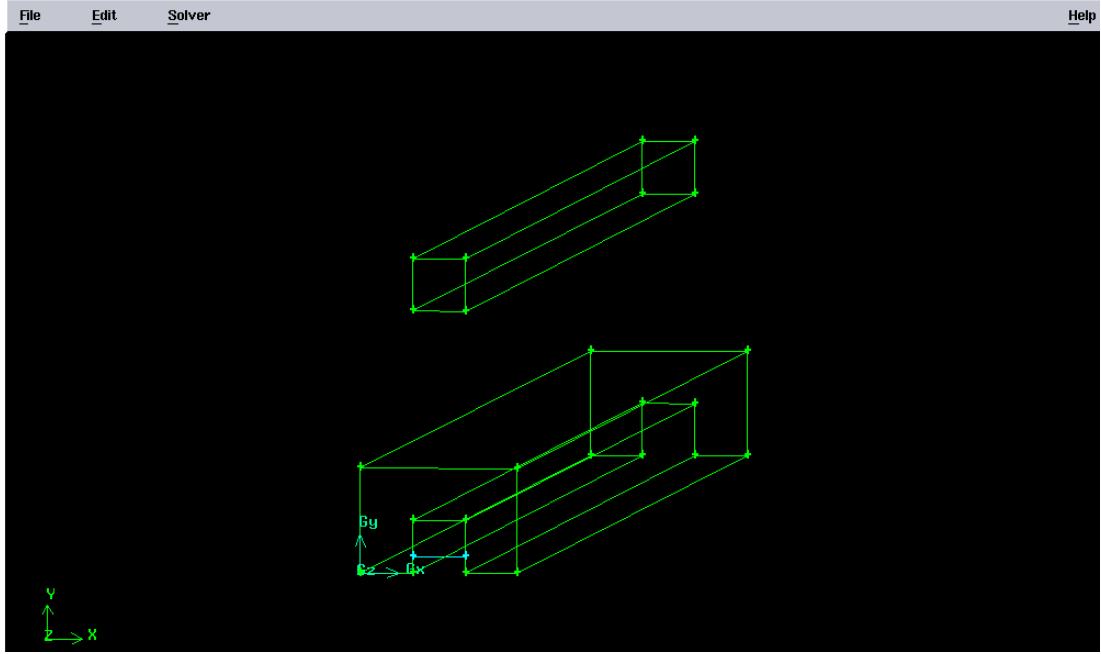
EK-1. (Devam) Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması



Şekil 1.16 Engelleyici plakaya ait kenarların oluşturulması

Şekil 1.5'te gösterilmiş olan ekrandan Edges kısmı açılarak engelleyici plakaya ait tüm kenarlar seçildikten sonra apply butonuna basılarak istediğimiz yüzeyi oluştururuz. Şekil 1.17'de görüldüğü gibi seçmiş olduğumuz kenarlar, yüzey halini aldıktan sonra sarı renkten mavi renge dönüşmektedirler.

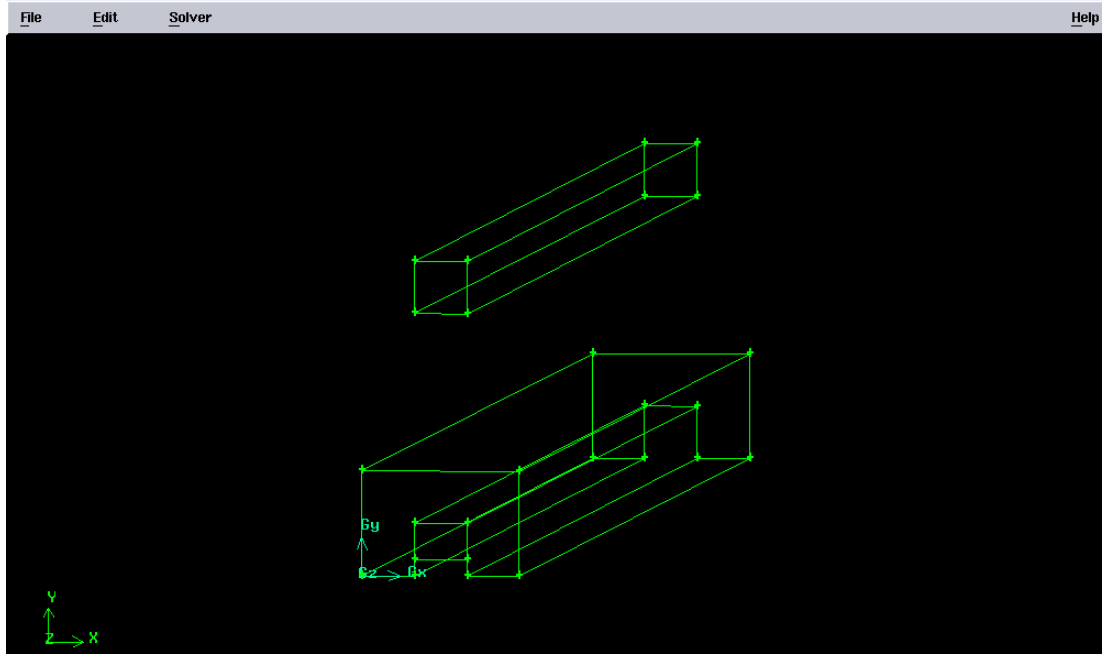
EK-1. (Devam) Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması



Şekil 1.17. Engelleyici plakaya ait yüzeyin oluşturulması

İki boyutlu oluşturulan, engelleyici plakaya ait ön yüzey Sweep Faces komutu kullanılarak üç boyutlu hale dönüştürülür. Şekil 1.9'da açılan pencereden engelleyici plakaya ait ön yüzeyler seçilerek Vector butonu aktif hale getirilir. Define kısmından z eksenini seçilir ve Magnitude kısmına, engelleyici plakanın z yönündeki ölçüsü ($z=3$) yazılarak, apply butonuna basılır. Şekil 1.18'de görüldüğü gibi engelleyici plakaya ait iki boyutlu yüzey, üç boyutlu bir hal alarak, rengi maviden yeşile dönüşmüştür.

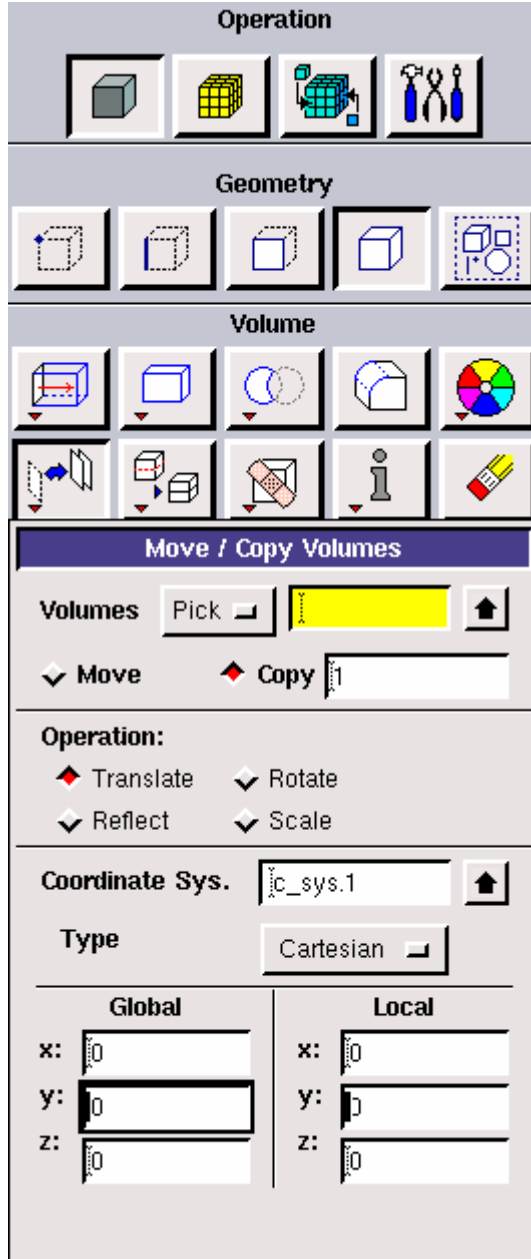
EK-1. (Devam) Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması



Şekil 1.18. Engelleyici plakaya ait hacmin oluşturulması

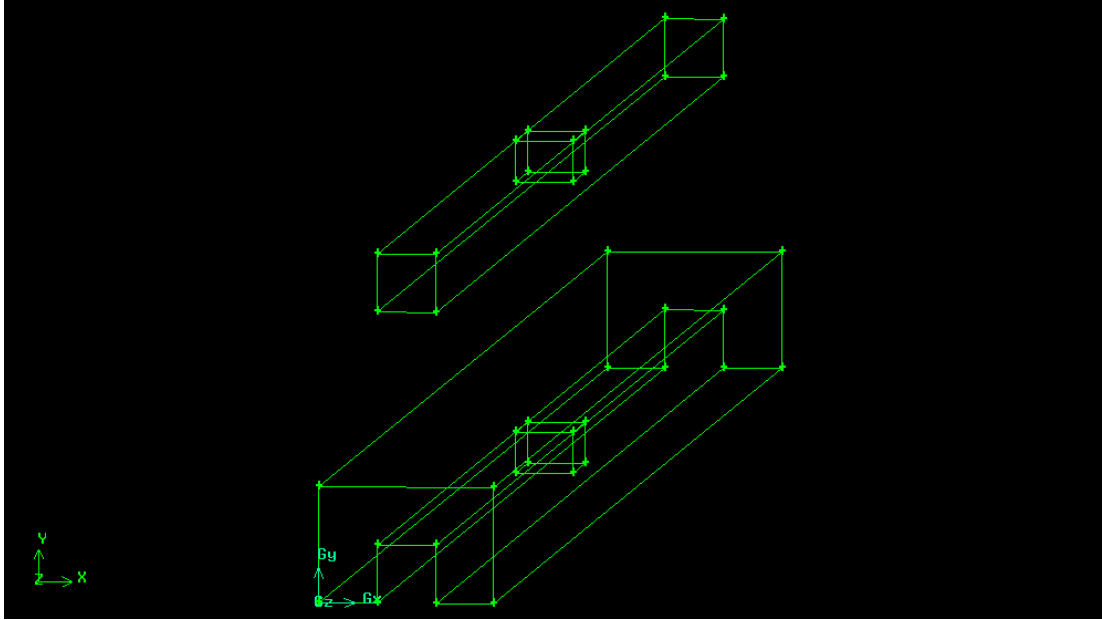
Engelleyici plaka oluşturulduktan sonra Şekil 1.19’da gösterilen ekrandan Copy / Translate butonu aktif hale getirildikten sonra, engelleyici plakalar için oluşturulan hacim seçilerek z ekseninde 33.5 birim uzaklığa ve y ekseninde gaz kanalı içine Şekil 1.20’de görüldüğü gibi kopyalanır.

EK-1. (Devam) Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması



Şekil 1.19. Hacim kopyalanması veya taşınması

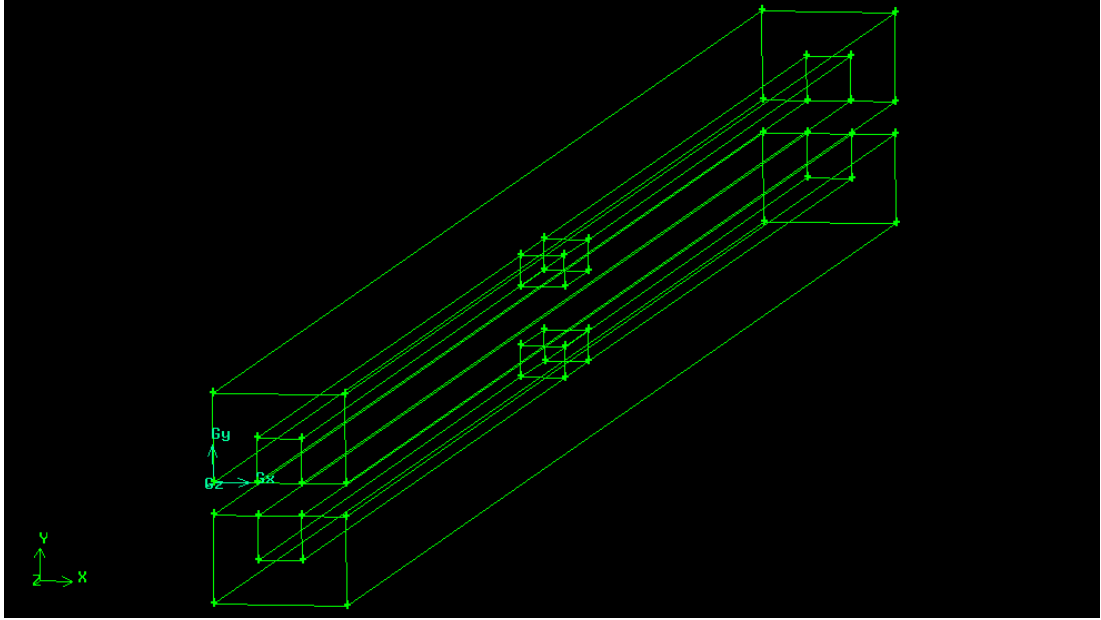
EK-1. (Devam) Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması



Şekil 1.20. Engelleyici plakaların anot akım toplayıcı içine yerleştirilmesi

Üç boyutlu anot akım toplayıcı anot gaz kanalı ve engelleyici plaka oluşturulduktan sonra Copy / Rotate butonu aktif hale getirildikten sonra, oluşturulan hacimler seçilerek y ekseninde 0,7338 birim uzaklığa, 180 derece döndürülerek kopyalanır ve katot akım toplayıcı ile katot gaz kanalı Şekil 1.21’de görüldüğü gibi oluşturulur.

EK-1. (Devam) Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması

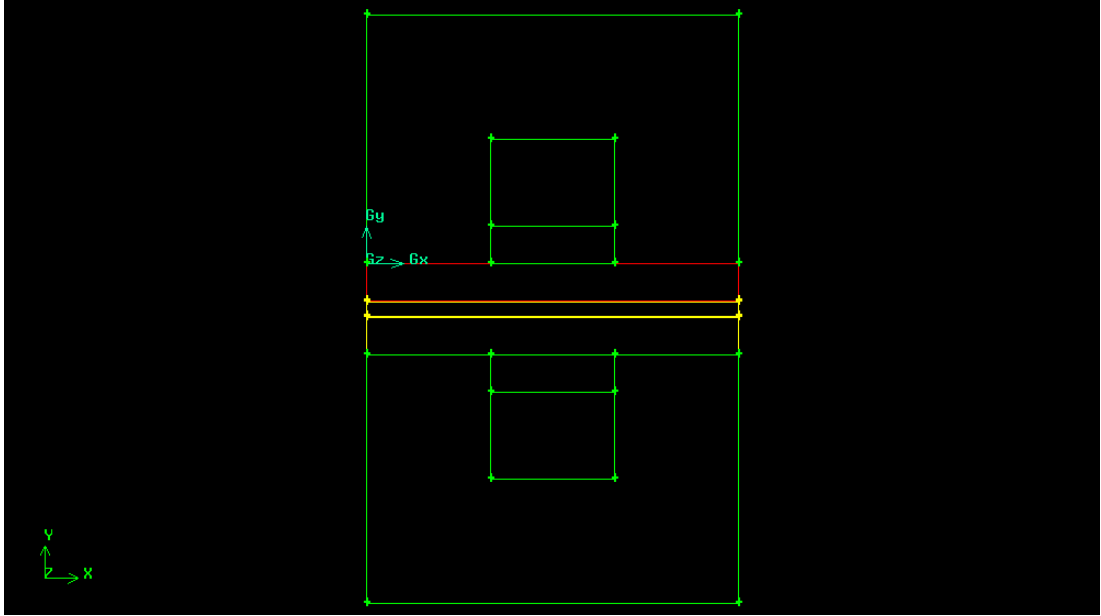


Şekil 1.21. Katot akım toplayıcı ve katot gaz kanalının oluşturulması

Anot ve katot akım toplayıcı, anot ve katot gaz kanalları oluşturulduktan sonra ara hacimler, yani anot ve katot gaz difüzyon tabakaları, katalizör tabakalar ve membran oluşturulur. En önemli nokta yüzeylerin ortak kullanılmasıdır.

Vertex → Create Real Vertex komutu ile kopyalama yapılarak ara hacimlerin ön yüzeyleri oluşturulur. Şekil 1.22’de anot gaz difüzyon tabakanın ön yüzeyinin oluşturulması detaylı olarak gösterilmiştir.

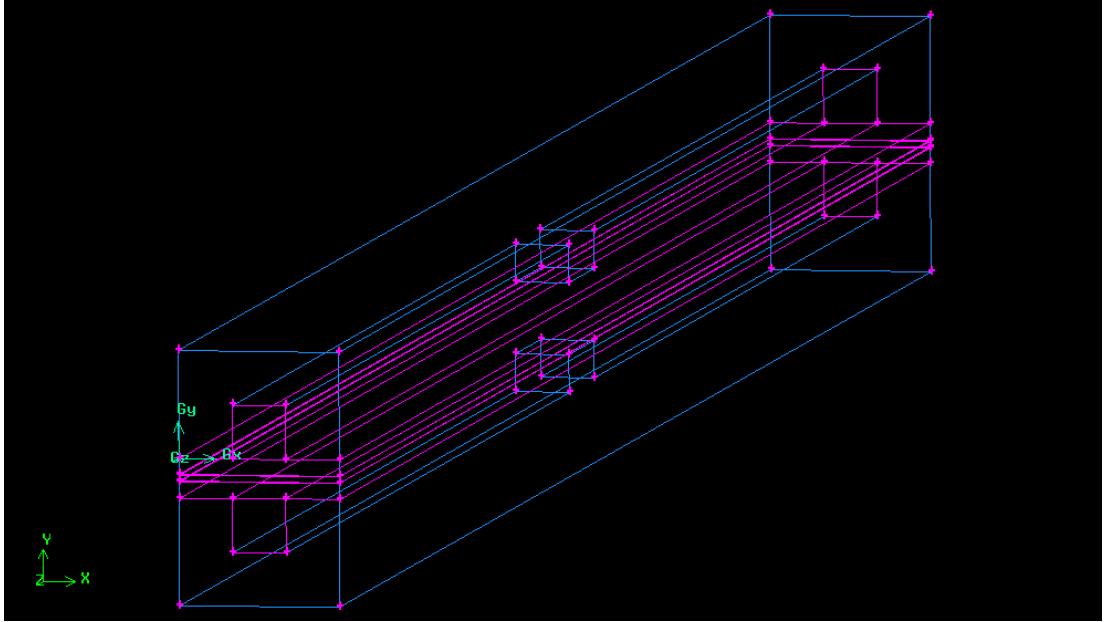
EK-1. (Devam) Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması



Şekil 1.22. Anot gaz difüzyon tabakanın ön yüzeyinin oluşturulması

Şekil 1.22’de gösterilen kırmızı ile renklendirilmiş kenarların birleşimi ile gaz difüzyon tabakanın ön yüzeyi oluşturulmaktadır. Katot gaz difüzyon tabakası ve diğer hacimler için bu ayrıntıya dikkat edilmelidir. Diğer yüzeyler de oluşturulduktan sonra Sweep Faces komutu kullanılarak Şekil 1.23’te gösterildiği gibi geometrimiz üç boyutlu hale dönüştürülür.

EK-1. (Devam) Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması



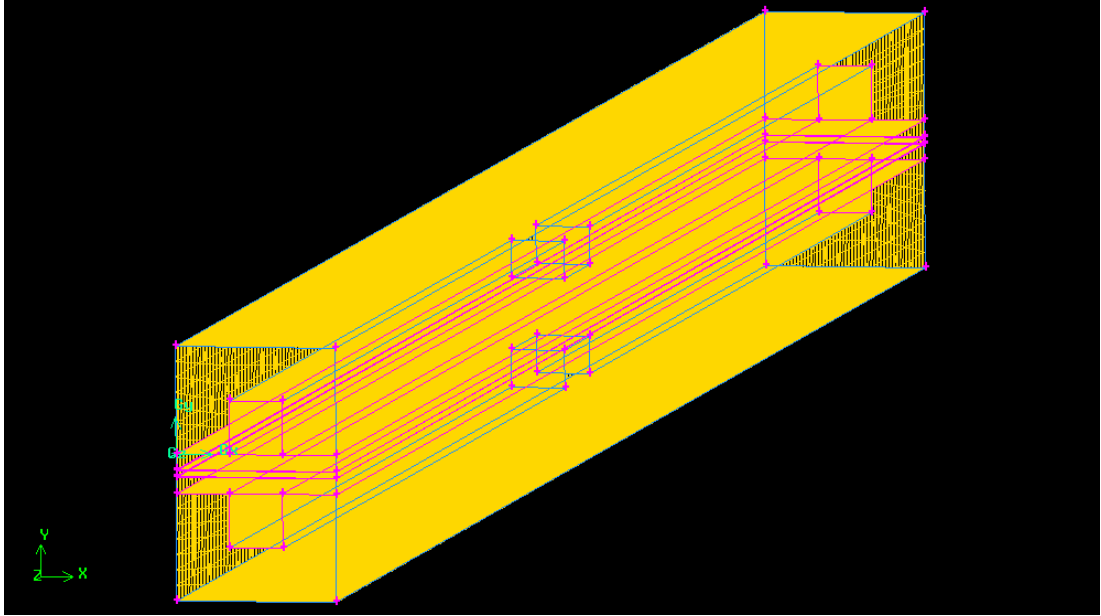
Şekil 1.23. Yakıt hücresinin üç boyutlu görünümü

Bu işlemten sonra geometrinin kenarları, yüzeyleri ve hacimleri küçük parçalara ayrılmalı ve “mesh” işlemi yapılmalıdır.

Operation → Mesh → Edge → Mesh Edges

Bölüm sayısı artırılarak çözümün bölüm sayısından bağımsız olarak aynı kaldığı nokta tespit edilir ve bu noktadan sonra daha fazla bölme yapılmaz. Tüm hacimler seçilir ve Scheme bölümünde bulunan Elements Hex olarak değiştirilir. Spacing bölümünde yer alan Interval Size kısmına istenilen değer girilir. Apply butonuna basılarak mesh işlemi başlatılmış olur. Şekil 1.24’te geometrimizin mesh atılmış hali görülmektedir.

EK-1. (Devam) Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması



Şekil 1.24. Yakıt hücresinin bölümlere ayrılmış durumu

Operation → Zones → Specify Boundary Types

Operasyon panelinde “Specify Boundary Types” penceresi açılır. Seçilen yüzey “Edges”’in bitişiğindeki sarı kutuda ve “Edges” kutusu altındaki “Label/Type” listesinde gözükmemektedir. Her sınır için tek tek koşul yazılır ve “name” bölümüne yüzeyin adı yazılır. Geometrinin ön yüzünde bulunan gaz kanalları ayrı ayrı seçilerek Mass Flow İnlet olarak ayarlanır. Name olarak kısaltmalar veya farklı isimler kullanmak mümkündür. Gaz kanallarının çıkışları ise Type bölümünde Pressure Outlet olarak ayarlanarak yüzeylerin sınır şartları belirlenmiş olur. Geometrinin dış yüzeyleri ayrı ayrı seçilerek Wall olarak tanımlanır. Adlandırma sadece anodun üstü ile katodun altı için yapılır. Gaz kanallarının anodun ve katodun içinde kalan yüzeyleri Wall olarak tanımlanır. Difüzyon tabakaların, gaz kanallarına, anoda ve katoda bitişik tüm yüzeyleri Porous Jump olarak tanımlanır. Çizelge 1.1’de hacimlere verilen isimler ve kısaltmalar gösterilmiştir.

EK-1. (Devam) Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması

Çizelge 1.1. Hacimlere verilen isimler

acc	Anot Akım Toplayıcı Tabaka
ccc	Katot Akım Toplayıcı Tabaka
adl	Anot Difüzyon Tabaka
cdl	Katot Difüzyon Tabaka
acl	Anot Katalizör Tabaka
ccl	Katot Katalizör Tabaka
agc	Anot Gaz Kanalı
cgc	Katot Gaz Kanalı
membrane	Membran

Operation → Zones → Specify Continuum Types

Zone menüsündeki Specify Continuum Types bölümünden Anot gaz kanalı seçilerek anot gaz kanalı , katot gaz kanalı seçilerek katot gaz kanalı olarak ve diğer bütün hacimler ayrı ayrı seçilerek anot, katot ve membrane diye adlandırılır. Çözüm olarak kullanılacak geometri böylece tamamlanmış olur. File menüsünden Export ve Mesh seçilerek geometri kaydedilir. Geometrinin kayıt işlemini mesh olarak yaptıktan sonra geometrimiz Fluent tarafından tanınacak formatta oluşmuştur.

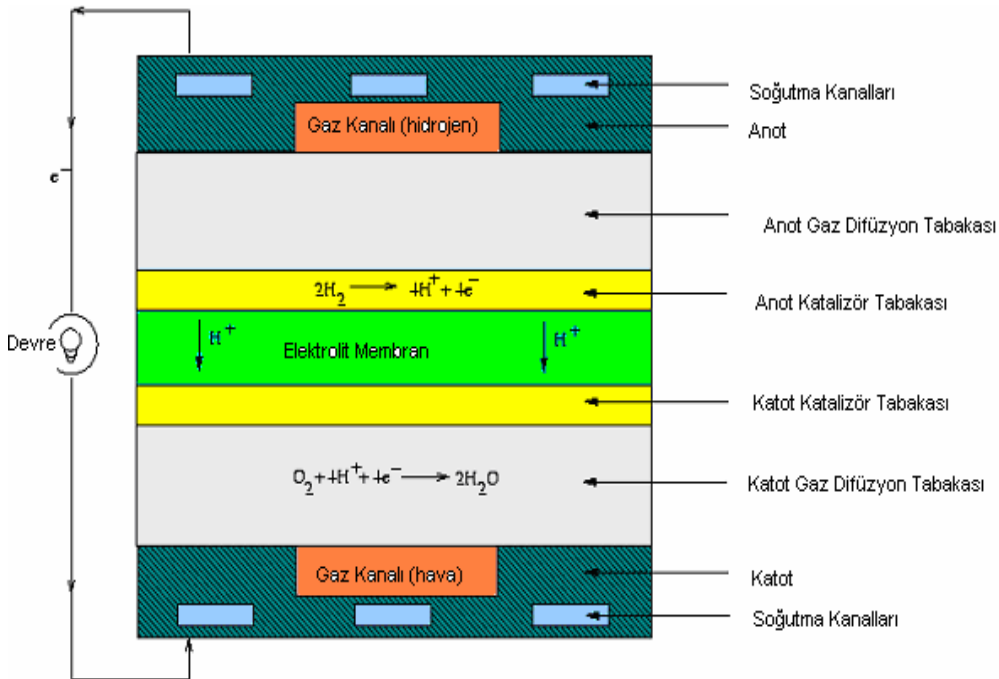
EK-2. Fluent paket programı PEMFC modülü tanıtımı

FLUENT PAKET PROGRAMI PEMFC MODÜLÜ TANITIMI

Bu bölüm Fluent programı kullanılarak PEM yakıt hücresinin modellemesi hakkında bilgi sunmaktadır.

2.1. Giriş

PEM yakıt hücresi modülü standart Fluent lisanslı yazılımına ek yazılım modülü olarak hazırlanmıştır. PEMFC modülünün kullanılabilmesi için özel lisans gerekmektedir. Yakıt hücresi, yakıtın kimyasal enerjisini elektriksel enerjiye çeviren enerji çevrim cihazıdır. PEM yakıt hücresi şeması Şekil 2.1’de gösterilmektedir.



Şekil 2.1. PEM yakıt hücresinin şematik gösterimi

Yakıt hücresinde hidrojen akışı anottadır. Hidrojen gözenekli gaz difüzyon tabakasından geçer ve katalizör tabakaya doğru yayılır.

EK-2. (Devam) Fluent paket programı PEMFC modülü tanıtımı

Burada hidrojen iyonlara ve elektronlara ayrışır. Hidrojen iyonları buradan merkezdeki membrana dağılırlar, elektron akışı ise gaz difüzyon tabakalarından akım toplayıcıya ve ilâştirilen elektrik devresine doğrudur. Elektronlar akım toplayıcı ve gaz difüzyon tabakası boyunca katot kısmından giriş yaparlar. Katot katalizör tabakasındaki elektronlar, hidrojen iyonları ve oksijen birleşerek su oluşturlar.

Fluent programı kullanılarak PEM yakıt hücresinin modellenmesi sırasında, iki elektrik potansiyel alan çözülür. İlk elektrik potansiyel alanı zarda ve katalizör tabakalarda, diğeri ise katalizör tabakalarında, difüzyon tabakalarında ve akım toplayıcıda çözülür. Gözenekli katalizör bölgesindeki yüzey reaksiyonları çözülür ve reaksiyon difüzyon dengesi hesaplanan değere uygulanır. Hücre voltajındaki akım yoğunluğu hesaplanır. Alternatif olarak, hücre voltajında ortalama akım yoğunluğu değeri de hesaplanabilir.

2.2. Elektrokimyasal Modelleme

Elektrokimyasal işlemler, hidrojen oksidasyonu ve oksijen redüksiyonunu içermektedir. Fluent PEM modelinde, bu elektrokimyasal işlemler heterojen reaksiyonlar olarak ele alınır. Bu reaksiyonlar membranın her iki tarafındaki katalizör yüzeyleri üzerinde gerçekleşir. Bu reaksiyonlar sonucu oluşan tahrik kuvveti yüzey gerilimidir, ve katının faz potansiyeli ve elektrolit/membranın faz potansiyeli arasındaki farktır. Bununla birlikte, PEM modeli için iki potansiyel eşitlik çözülür. Eş. 2.1 katı iletken malzeme boyunca elektron aktarımını yönetir. Eş. 2.2 hidrojen atomunun iyonik aktarımını gösterir.

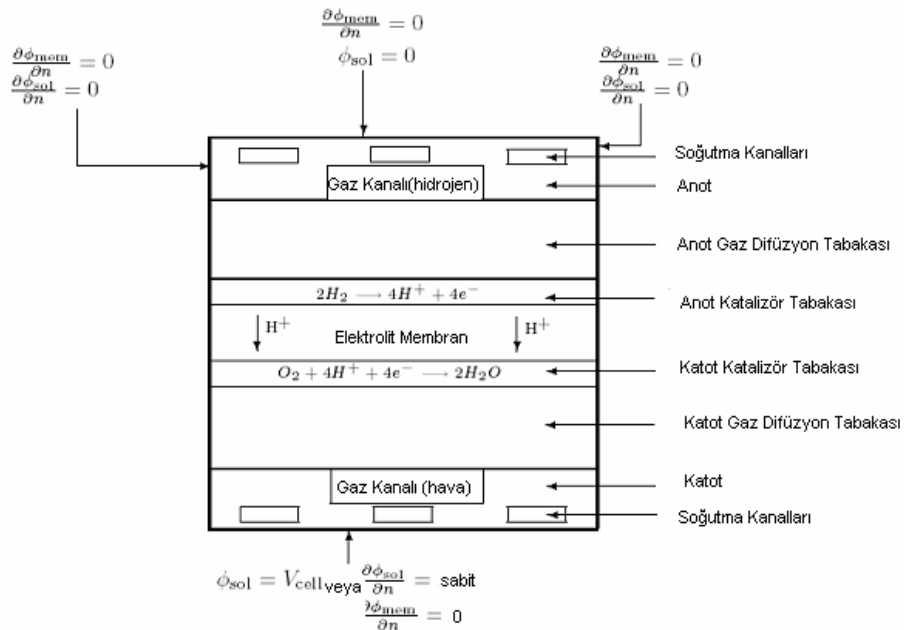
$$\nabla \cdot (\sigma_{sol} \nabla \phi_{sol}) + R_{sol} = 0 \quad (2.1)$$

$$\nabla \cdot (\sigma_{mem} \nabla \phi_{mem}) + R_{mem} = 0 \quad (2.2)$$

EK-2. (Devam) Fluent paket programı PEMFC modülü tanıtımı

Bu eşitliklerde geçen, elektriksel iletkenlik, σ [1/ohm-m], elektrik potansiyeli, ϕ [Volt] ve hacimsel akım transferi, R [A/m³] olarak tanımlanmışlardır.

Şekil 2.2’de faz potansiyeli sınır şartları verilmiştir. İki tip dış sınır vardır. Bunlardan biri elektrik akımı ile geçen ve elektrik akımı olmadan ilerleyen sınırlamadır. Hiçbir dış sınır boyunca yakıt hücresinden iyonik akım olarak ayrılma olmaz, membran faz potansiyeli için sıfır akış koşulu vardır, bütün dış sınırlar ϕ_{mem} olarak kabul edilir. Katı faz potansiyeli için; ϕ_{sol} , anot ve katot kısmının üstünde dış sınır şartıdır, bunlar, dış elektrik devresiyle temas eder ve yakıt hücresinde üretilmiş akım, yalnızca bu sınırlar boyunca geçerler. Diğer bütün dış sınırlarda ϕ_{sol} için sıfır akış sınır şartı mevcuttur. Dış temas sınırlarında, ϕ_{sol} için sabit değerde düzenleme önerilmektedir (potansiyostatik sınır koşulu). Anot kısmı sıfır olarak ayarlanırsa, katot kısmında değer pozitif olarak düzenlenir. Sabit bir akış belirtmek (katot kısmında) galvanostatik sınır koşulunu tanımlamaktır.



Şekil 2.2. Faz potansiyeli sınır şartları

EK-2. (Devam) Fluent paket programı PEMFC modülü tanıtımı

Transfer edilen akım ve kaynak terimleri Eş. 2.1 ve Eş. 2.2’de, sıfırdan farklı olarak katalizör tabakalarında hesaplanmıştır.

- Katı faz için; anot kısmında $R_{sol} = -R_{an} (< 0)$
katot kısmında $R_{sol} = +R_{cat} (> 0)$
- Membran fazı için; anot kısmında $R_{mem} = +R_{an} (> 0)$
katot kısmında $R_{mem} = -R_{cat} (< 0)$

Eş. 2.1 ve Eş. 2.2’deki kaynak terimleri, R_{an} ve R_{cat} , akım yoğunluğu transferi (A/m^3) olarak isimlendirilir ve aşağıdaki genel tanımlama ile verilirler.

$$R_{an} = j_{an}^{ref} \left(\frac{[H_2]}{[H_2]_{ref}} \right)^{\gamma_{an}} \left(e^{\alpha_{an} F \eta_{an} / RT} - e^{-\alpha_{cat} F \eta_{an} / RT} \right) \quad (2.3)$$

$$R_{cat} = j_{cat}^{ref} \left(\frac{[O_2]}{[O_2]_{ref}} \right)^{\gamma_{cat}} \left(-e^{+\alpha_{an} F \eta_{cat} / RT} + e^{-\alpha_{cat} F \eta_{cat} / RT} \right) \quad (2.4)$$

Bu eşitliklerde geçen, volumetrik akım yoğunluğu değişimi, j^{ref} [A/m^3], yerel konsantrasyon bileşeni, referans değeri, [$kgmol/m^3$], konsantrasyon bağlı γ (boyutsuz), transfer katsayısı, α (boyutsuz) ve Faraday sabiti, F ($= 9,65 \times 10^7$ C/kgmol) olarak tanımlanmıştır.

Yukarıdaki eşitlik Butler-Volmer fonksiyonunun genel formülasyonudur.

Basitleştirilmiş Tafel formülasyonu aşağıdaki gibidir:

$$R_{an} = j_{an}^{ref} \left(\frac{[H_2]}{[H_2]_{ref}} \right)^{\gamma_{an}} \left(e^{\alpha_{an} F \eta_{an} / RT} \right) \quad (2.5)$$

EK-2. (Devam) Fluent paket programı PEMFC modülü tanıtımı

$$R_{cat} = j_{cat}^{ref} \left(\frac{[O_2]}{[O_2]_{ref}} \right)^{\gamma_{cat}} \left(e^{-\alpha_{cat} F \eta_{cat} / RT} \right) \quad (2.6)$$

FLUENT PEMFC modelinde katalizör tabakasındaki akım aktarım miktarını hesaplamak için Butler-Volmer fonksiyonu kullanılmıştır. Aktivasyon kaybı olarak da adlandırılan bölgesel yüzey aşırı potansiyeli, η , elektrik potansiyelinin hesaplanmasında yönlendirici kuvvet olarak karşımıza çıkar. Genellikle katı ve membran potansiyeli arasındaki fark yüzey aşırı potansiyeline eşittir.

$$\eta_{an} = \phi_{sol} - \phi_{mem} \quad (2.7)$$

$$\eta_{cat} = \phi_{sol} - \phi_{mem} - V_{oc} \quad (2.8)$$

2.3. Akım ve Kütlenin Korunumu

Aşağıda sırasıyla anot ve katot reaksiyonları verilmektedir.



Türler için hacimsel kaynak terimleri $[W/m^3]$:

$$S_{H_2} = -\frac{M_{w,H_2}}{2F} R_{an} \quad (2.11)$$

$$S_{O_2} = -\frac{M_{w,O_2}}{4F} R_{cat} \quad (2.12)$$

EK-2. (Devam) Fluent paket programı PEMFC modülü tanıtımı

$$S_{H_2O} = \frac{M_{w,H_2O}}{2F} R_{cat} \quad (2.13)$$

FLUENT PEMFC modelinde, enerji eşitliği içerisinde, suyun oluşum ısısı, elektrik işi ve suyun erime sıcaklığı için ohmik ısıtma ek hacimsel kaynaklardır.

$$S_h = I^2 R_{ohm} + h_{reaction} + \eta R_{an,cat} + h_{phase} \quad (2.14)$$

Katalizör tabakada elektrokimyasal reaksiyonlar heterojen reaksiyonlar olarak dikkate alınır, ve bu reaksiyonlar katalizör yüzey üzerindeki gözenekli tabakada gerçekleşir. Bununla birlikte, hidrojen ve oksijen konsantrasyonlarının hesaplanmasında, Eş. 2.3 ve Eş. 2.6 kullanılabilir. Reaksiyonları ele aldığımızda, yüzey reaksiyonları olarak her iki katalizör tabakada gerçekleştiği ve herhangi bir reaksiyon türünün farz edilen difüzyon akısının üretim oranıyla dengede olduğu görülür.

$$\frac{\rho D_i}{\delta} (y_{i,surf} - y_{i,cent}) r = \frac{M_{w,i}}{nF} R_{an,cat} \quad (2.15)$$

Bu Eşitliklerde geçen, kütle difüzyon katsayısı, D_i (m^2/s), katalizör tabakasının yüzey alanındaki özgül reaksiyonlar veya yüzey hacim oranı, R ($1/m$), reaksiyon yüzeyindeki türün kütle fraksiyonu, $y_{i,surf}$ hücre merkezindeki türün kütle fraksiyonu, $y_{i,cent}$, reaksiyon yüzeyi ile hücre merkezi arasındaki mesafe, δ (m) olarak tanımlanmıştır.

Eş. 2.5'in sol tarafı yüzey reaksiyonlarındaki difüzyon akışı ve sağ tarafı ise kütle kesri değerini vermektedir.

EK-2. (Devam) Fluent paket programı PEMFC modülü tanıtımı

2.4. Sıvı Su Oluşumu, Taşınımı ve Etkileri

PEM yakıt hücresinde, yüksek akım yoğunluğunda, göreceli olarak düşük sıcaklık altında ($< 100^{\circ}\text{C}$), su buharı sıvı suya yoğunlaştırılabilir. Özellikle sıvı suyun varlığı membranda su oranını artırır ve bu da, gaz difüzyon tabakasından difüzyon oranını ve etkin yüzey alanı reaksiyonlarını azaltır ve hücre performansını düşürür. FLUENT’te, sıvı suyun oluşumu ve aktarımının modellenmesi doymuş model kullanımına dayanır [61], [62]. Bu yaklaşımla, sıvı su oluşumu ve aktarımı, sıvı suyun hacim kesri veya suyun doymunluğu aşağıdaki eşitliklerle yönetilir.

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho_1 s)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho_1 \vec{V}_1 s \right) = r_w \quad (2.16)$$

$$r_w = c_r \max \left(\left[(1-s) \frac{P_{wv} - P_{sat}}{RT} M_{w,H_2O} \right], [-s\rho_1] \right) \quad (2.17)$$

$-r_w$ terimi membrana uygulanmaz. Yoğunlaşma oranı sabiti c_r ’ye bağlantılıdır, ve $c_r = 100\text{s}^{-1}$ ‘dir. Farz edilen sıvı hızı, V_1 , gaz kanalı içindeki gaz hızıyla eşdeğerdir. Yüksek derecede-rezistanslı gözenekli bölgenin içinde, kılcal difüzyon teriminin kullanımı Eş. 2.4’de taşınım terimiyle yer değiştirmemize izin verir.

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho_1 s)}{\partial t} + \nabla \cdot \left[\rho_1 \frac{Ks^3}{\mu_1} \frac{dp_c}{ds} \nabla s \right] = r_w \quad (2.18)$$

Islak faza bağlı olarak, kılcal basınç, s ’nin fonksiyonu olarak hesaplanır.

(Leverette fonksiyonu).

EK-2. (Devam) Fluent paket programı PEMFC modülü tanıtımı

$$p_c = \begin{cases} \frac{\sigma \cos \theta_c}{\left(\frac{K}{\varepsilon}\right)^{0.5}} (1.417(1-s) - 2.12(1-s)^2 + 1.263(1-s)^3) & \theta_c < 90^\circ \end{cases} \quad (2.19)$$

$$p_c = \begin{cases} \frac{\sigma \cos \theta_c}{\left(\frac{K}{\varepsilon}\right)^{0.5}} (1.417s - 2.12s^2 + 1.263s^3) & \theta_c > 90^\circ \end{cases} \quad (2.20)$$

Eş. 2.20’de, ε , porozite, σ , yüzey gerilimi (N/m²), θ_c , temas açısı ve K gözenekliliği temsil etmektedir.

2.5. Özellikler

Gaz fazındaki türlerin difüzivitesi aşağıdaki eşitlik ile bulunabilir:

$$D_i = \varepsilon^{1.5} (1-s)^{r_s} D_i^0 \left(\frac{p_0}{p}\right)^{\gamma_p} \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\gamma_t} \quad (2.21)$$

Burada, D_i^0 , referans sıcaklık (T_0) ve basınçtaki (P_0) kütle difüzivitesini temsil etmektedir. Bu eşitlikte geçen referans değerler ve üstel katsayılar Çizelge 2.1’de verilmiştir.

Çizelge 3.1. Referans değerler ve üstel katsayılar

P_0	101325 N/m ²
T_0	300 K
γ_p	1
γ_t	1,5
r_s	2,5

EK-2. (Devam) Fluent paket programı PEMFC modülü tanıtımı

Yakıt hücresinin elektrolit membranı gözenekli bir akışkan bölgesi olarak modellenir. Membran elektriksel iletkenliği, su difüzivitesi ve ozmotik sürüklenme katsayısı gibi özellikler, su içeriğinin fonksiyonu olarak değişir. Problemin fiziği, membranın çeşitli özellikleri, model oluşturulurken seçilir.

Ancak, kendi formülasyonunuzu ve datanızı kullanıcı tabanlı fonksiyonlarla birleştirerek düzenleyebilir ve pem_user.c isminde bir dosya oluşturarak kendi kodunuzu oluşturabilirsiniz.

Membran fazı elektrik iletkenliği aşağıdaki gibidir:

$$\sigma_{mem} = \beta \varepsilon (0.514\lambda - 0.326)^w e^{1268 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T} \right)} \quad (2.22)$$

Burada, λ , su içeriğidir. İki model sabiti, β ve ω FLUENT' te genellikle tanıtılır. Eş. 2.22'nin orijinal korelasyonu [63] nolu referanstan alınmıştır. $\beta=1$ ve $\omega=1$ olarak alınır.

Osmotik sürüklenme katsayısı:

$$\alpha_d = 2.5 \frac{\lambda}{22} \quad (2.23)$$

Geri difüzyon akışı hesaplaması aşağıdaki gibidir:

$$J_w^{diff} = - \frac{\rho_m}{M_m} M_{h20} D_l \nabla \lambda \quad (2.24)$$

olarak tanımlanmışlardır. Burada ρ_m ve M_m sırasıyla yoğunluk ve kuru membranın eşdeğer ağırlığıdır.

EK-2. (Devam) Fluent paket programı PEMFC modülü tanıtımı

Membran su difüzivitesi:

$$D_l = f(\lambda) e^{2416 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T} \right)} \quad (2.25)$$

ile hesaplanır. Membran su içeriği hesaplamalarında aşağıdaki Springer korelasyonları kullanılır:

$$\begin{aligned} \lambda &= 0.043 + 17.18a - 39.85a^2 + 36a^3 \quad (a < 1) \\ \lambda &= 14 + 1.4(a - 1) \quad (a > 1) \end{aligned} \quad (2.26)$$

Burada , α , su aktivitesi olarak tanımlanmaktadır.

$$a = \frac{P_{wv}}{P_{sat}} + 2s \quad (2.27)$$

Su buharı basıncı, buhar mol kesri ve kısmi basınca bağlı olarak hesaplanır.

$$P_{wv} = \chi_{H_2O} P \quad (2.28)$$

Doyma basıncı atm biriminde aşağıdaki ampirik bağıntı kullanılarak hesaplanır.

$$\begin{aligned} \log_{10} P_{sat} &= -2.1794 + 0.02953(T - 273.17) - 9.1837 \times 10^{-5} (T - 273.17)^2 + \\ &\quad + 1.4454 \times 10^{-7} (T - 273.17)^3 + 1.4454 \times 10^{-7} (T - 273.17)^3 \end{aligned} \quad (2.29)$$

EK-3. PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı

PEM YAKIT HÜCRESİ MODELİNİN KULLANIMI

PEM yakıt hücresi problem çözümleri için ayarlar ve çözüm prosedürü detaylarıyla bu bölümde tanımlanmıştır.

3.1. Giriş

FLUENT PEM yakıt hücresi modeli çeşitli kullanıcı tanımlı fonksiyonlardan ve bir grafiksel kullanıcı ara yüzünden oluşmuştur. Potansiyel alan kullanıcı tanımlı skalaları olarak çözümlenmiştir. Sıvı su doygunluğu, s , ve su içeriği, λ , kullanıcı tanımlı skalaları olarak ayrıca çözümlenmiştir. Elektrokimyasal reaksiyonlar, katalizörde meydana gelerek çeşitli kaynak terimleri tarafından, diğer model parametreleri ise kullanıcı ara yüzeyi boyunca yürütülürken modellenirler. PEMFC model FLUENT'te olduğu gibi paralel kullanılabilir.

3.2. PEM Yakıt Hücresi Modeli İçin Geometrik Tanımlama

Gerçekte yakıt hücresi farklı fiziksel bölgelerin birleşimidir ve anot akış kanalı; anot gaz difüzyon tabakası; anot katalizör tabakası; membran; katot katalizör tabakası; katot gaz difüzyon tabakası ve katot akış kanalının ağ yapısının oluşturulması gerekmektedir.

Yakıt hücresindeki ağ yapısı oluşturulduktan sonra anot akım kolektörü; katot akım kolektörü ve soğutucu kanal bölgelerinin tanımlanması gerekmektedir.

3.3. PEM Yakıt Hücresi Modelinin Kurulumu

PEM yakıt hücresi modeli standart FLUENT lisanslı programının bir ek yazılımıdır. PEMFC modeli ile özel lisans kullanılması gerekmektedir. Bu modül, standart

EK-3. (Devam) PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı

FLUENT programının yüklenmesinden sonra addons/fuellcells2.2 çağrılarak yüklenir.

PEMFC model hesaplamaların gerçekleştirilmesinden önce yüklenmesi ve aktive edilmesi gereken bir kullanıcı tanımlı fonksiyonlar (UDF) kütüphanesi ve bir kılavuz kütüphanesinden oluşur.

3.4. PEM Yakıt Hücresi Modülünün Yüklenmesi

PEM yakıt hücresi modülü FLUENT'in içine kullanıcı texti arayüzüne yüklenir (TUI). Bu modül yalnızca geçerli FLUENT dosyası ayarlanması veya okunması ile yüklenebilir.

Yüklemeye kumanda eden ek yazılım modülü:

define----models-----addon-module

FLUENT ek yazılım modülleri şunlardır:

- MHD model
- Fiber model
- PEM yakıt hücresi modeli
- SOFC yakıt hücresi modeli
- Popülasyon denge modeli

3 numaralı modülün girilmesi ile PEMFC model seçilir. Yükleme sürecinde grafiksel ve text kullanıcı ara yüzeyi içeren bir şema kütüphanesi ve kullanıcı tanımlı fonksiyonları kapsayan bir UDF kütüphane FLUENT'in içine yüklenir.

EK-3. (Devam) PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı

3.5. PEM Yakıt Hücresi Modülü Ayarları

FLUENT PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı sırasıyla aşağıdaki şekildedir:

- FLUENT çalıştırılması
- Case dosyası okutulması
- Grid ölçeği ayarlanması
- Yakıt hücresi parametrelerinin tanımlaması için PEM model paneli kullanılır
- Materyal özellikleri tanımlanması
- İşletme koşullarının ayarlanması
- Sınır koşullarının ayarlanması
- Hesaplamalara başlanması
- Case ve data dosyalarının kaydedilmesi
- Sonuçların alınması

PEM paneli parametre girdilerini ve sınır koşullarını mükemmel şekilde basitleştirmektedir, fakat sınır koşulları ara yüzeyinin yerini değiştirmez. Buna rağmen iyi bir plandır, kuruluma PEM model paneli ile birlikte başlanır ve sınır koşulları adımları sırasıyla bitirilir.

3.6. PEM Yakıt Hücresi Modelleme

PEM yakıt hücresi model parametrelerini ve ilgili bölgelerin özelliklerini tanımlamak için `define-----models-----PEMFC` komutu kullanılır.

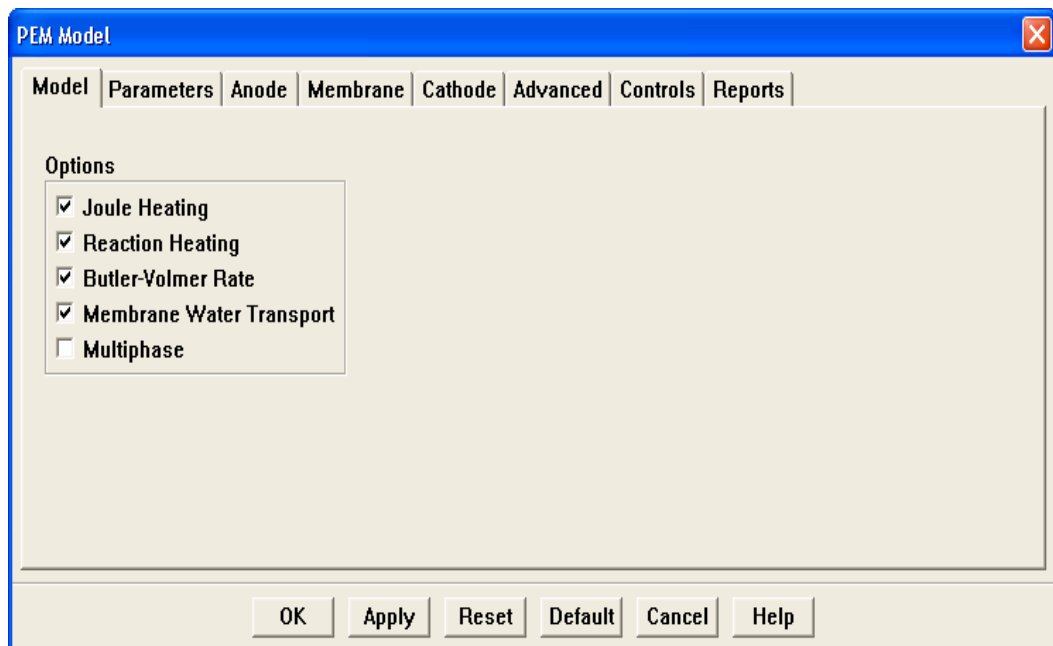
Burada, akım kolektörü, gaz difüzyon tabakaları, katalizör tabakaları, ve membran için ilgili alanları tanımlayabilirsiniz. Aşağıdaki girdileri PEM model panelini kullanarak belirtebilirsiniz. Opsiyonel girdiler aşağıdaki şekildedir:

EK-3. (Devam) PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı

- Tekil faz veya çoğul faz PEM modelinden herhangi birini sağlamak.
- PEM model için tahsis edilen seçenekleri ayarlamak(isteğe bağlı).
- PEM model için çeşitli parametreleri ayarlamak.
- Anot kısmında tahsis edilen alanı seçmek ve özelliklerini belirtmek.
- Membranın özelliklerini belirtmek ve tahsis edilen alanı seçmek.
- Katot kısmında tahsis edilen alanı seçmek ve özelliklerini belirtmek.
- İleri özellikler için girdi sağlamak, öz dirençlerin teması, soğutucu kanal özellikleri veya yığın yönetimi ayarları gibi (isteğe bağlı).
- Çözüm kontrollerini ayarlamak, under-relaxation faktörü gibi (isteğe bağlı).
- Raporlar için girdi sağlamak (isteğe bağlı).

3.6.1. PEM model seçeneklerini belirleme

PEM model panelinin model askısı bir PEM yakıt hücresi problemi çözdüğümüz zaman çeşitli seçenekleri açmamızı veya kapamamızı sağlar.



Şekil 3.1. PEM model panelin model askısı

EK-3. (Devam) PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı

PEM model panelinin model askısı içeriğinde çeşitli PEM model seçenekleri elde edilebilir:

- Joule heating seçeneği ohmik ısıtma hesaplarını içerir. Bu seçenek I^2R terimini enerji kaynağı teriminde içerir.
- Reaction heating seçeneği kimyasal reaksiyonlar tarafından oluşturulan ısı üretimini hesaplar. Bu seçenek enerji kaynak teriminin içinde $h_{reaksiyon}$ terimini içerir
- Membrane water transport seçeneği membrandan su transferi hesabı için kullanılır.
- Multiphase seçeneği çoklu faz hesaplamalarında kullanılır. Bu seçenek eğer yakıt hücresinin gaz difüzyon tabakasında sıvı aktarımı tahmini varsa kullanılır. Yaklaşık olarak bütün seçenekler varsayılan olarak açılmıştır. Varsayılan değerleri problemin çözümüne bağlı olarak değiştirebilirsiniz. Mesela kimyasal reaksiyonlardan dolayı üretilen ısı ile ilgilenmiyorsanız, Reaction heating seçeneğini kapatabilirsiniz.

3.6.2. PEM model parametrelerini belirleme

PEM modelinde elektrokimyasal parametreleri belirtmek için bu paneli kullanabilirsiniz.

EK-3. (Devam) PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı

PEM Model

Model Parameters Anode Membrane Cathode Advanced Controls Reports

Electrochemistry

Anode	Cathode
Ref. Current Density [A/m ³] 1.5e+09	Ref. Current Density [A/m ³] 4000000
Ref. Concentration [kmol/m ³] 1	Ref. Concentration [kmol/m ³] 1
Concentration Exponent 0.5	Concentration Exponent 1
Exchange Coefficient 2	Exchange Coefficient 2

Open-Circuit Voltage [V] 0.95

Reference Diffusivity

h2 [m ² /s] 3e-05
o2 [m ² /s] 3e-05
h2o [m ² /s] 3e-05
Other Species [m ² /s] 3e-05

OK Apply Reset Default Cancel Help

Şekil 3.2. PEM model panelin parametre çizelgesi

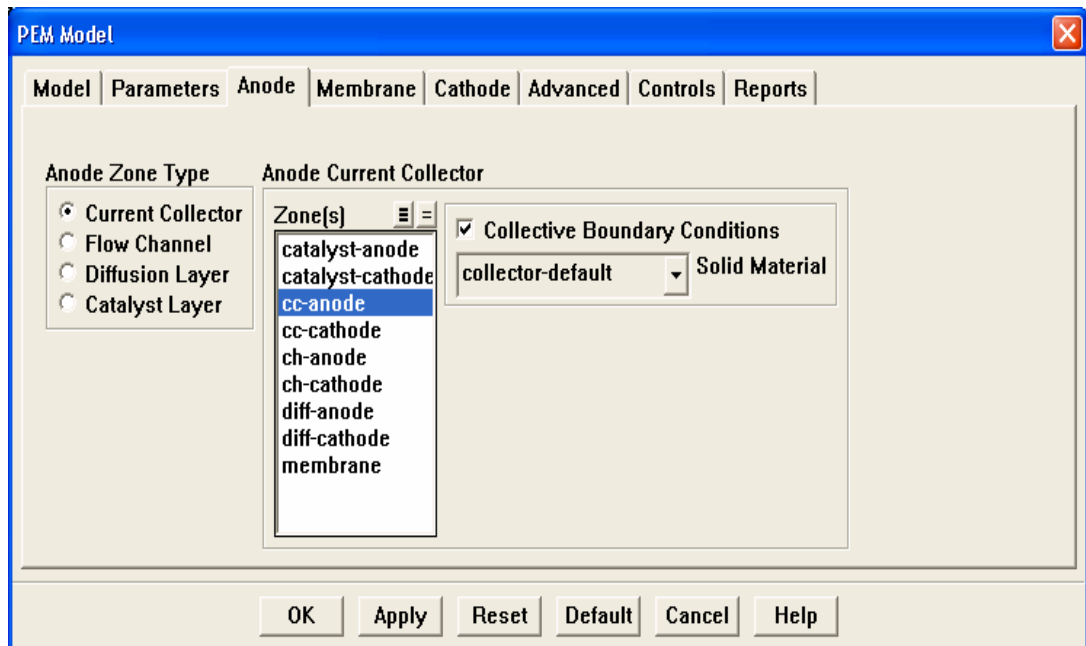
PEM model panelde elektrokimya altında çeşitli parametreler vardır. Anot ve katodun her ikisi için, varsayılan değerleri değiştirebilir veya aşağıdaki parametreleri ayarlayabilirsiniz.

- Ref. current density j_{an}^{ref} ve j_{cat}^{ref}
- Ref. concentration referans konsantrasyon benzeri olmalı ($[H_2]_{ref}$ ve $[O_2]_{ref}$) 1 kgmol/m³ ün ünitesi ile birlikte.
- Concentration exponent γ 'ya benzer şekilde
- Exchange coefficient α 'ya benzer şekilde.
- Open-circuit voltage V_{oc} 'ye benzer şekilde.
- Reference diffusivities D_i 'ye benzer .
- Saturation exponent for pore blockage r_s 'ye benzer şekilde, PEM hesaplamalarında çoklu faz için.

EK-3. (Devam) PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı

3.6.3. Anot özelliklerinin belirtilmesi

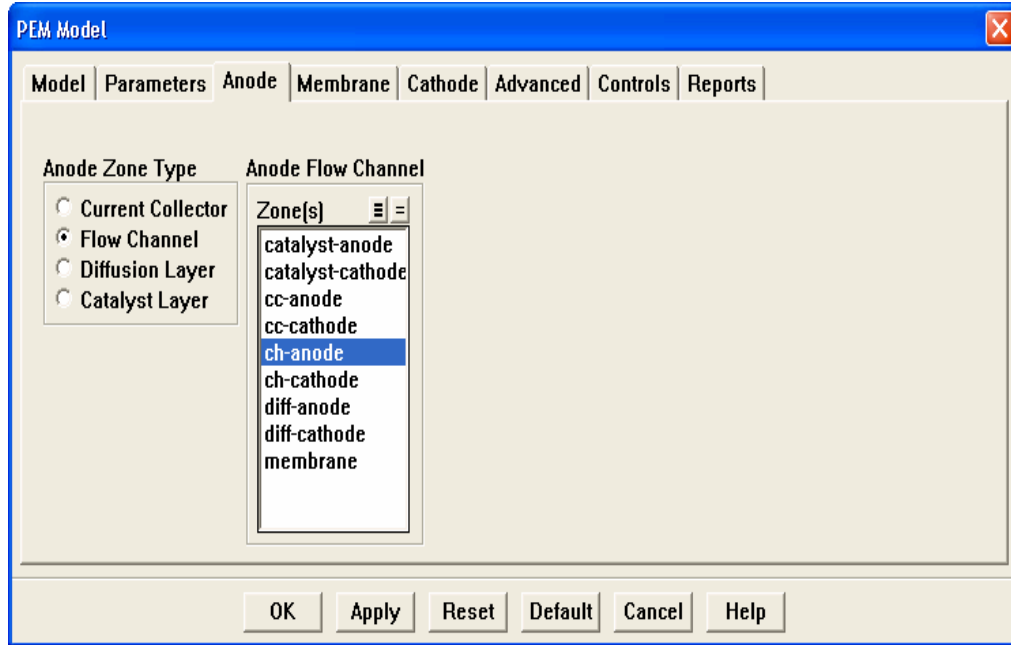
Akış kanalı, difüzyon tabakası ve PEM yakıt hücresinin anot kısmı için katalizör tabakası alanlarını belirtmede ve akım kolektörünün özelliklerinde PEM model panelin anot çizelgesini kullanabilirsiniz.



Şekil 3.3. Seçilen akım kolektörü ile birlikte PEM model panelinin anot çizelgesi.

- PEM model panelde anode seçilir.
- Anode zone type altında current collector seçilir.
- Zone listesinden ilgili alan seçilir. Bir yakıt hücresi yığını modelliyorsanız, bir grup olarak bir özel tipin bütün bölgelerini toplamalısınız.
- İlgili drop-down listesinden bir solid material seçilir. Katı materyal ihtiyaca göre materials paneli kullanılarak düzenabilir. electrical conductivity için, materials panelinden yalnızca bir sabit değer seçebilirsiniz. Katı elektriksel iletkenliği değeri katı alanında katı faz potansiyelinin difüzivitesidir.

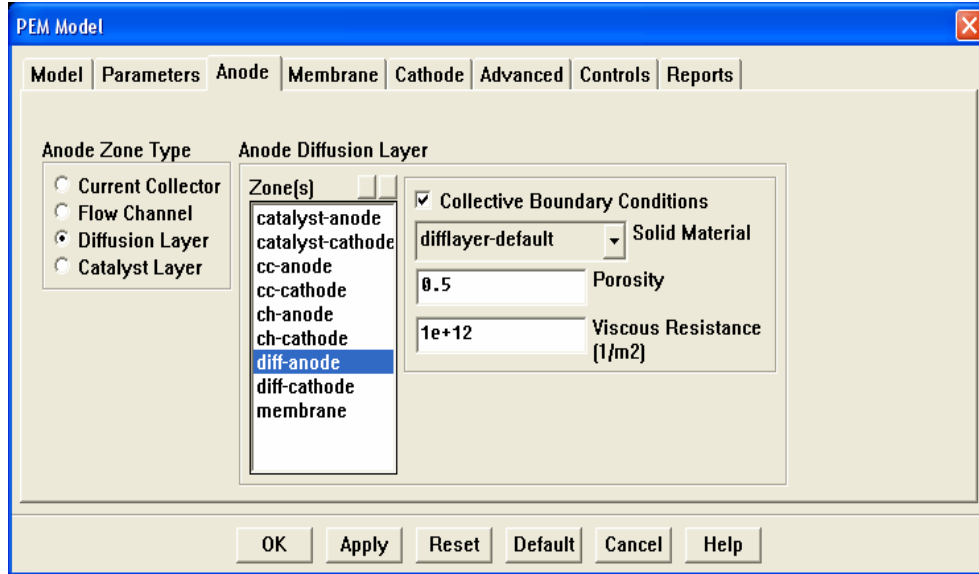
EK-3. (Devam) PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı



Şekil 3.4. Seçilen akış kanalı ile birlikte PEM model panelin anot çizelgesi

- PEM model panelinin Anode çizelgesi seçilir.
- Anode zone type altında flow channel seçilir.
- Zone listesinden uygun bir alan seçilir.

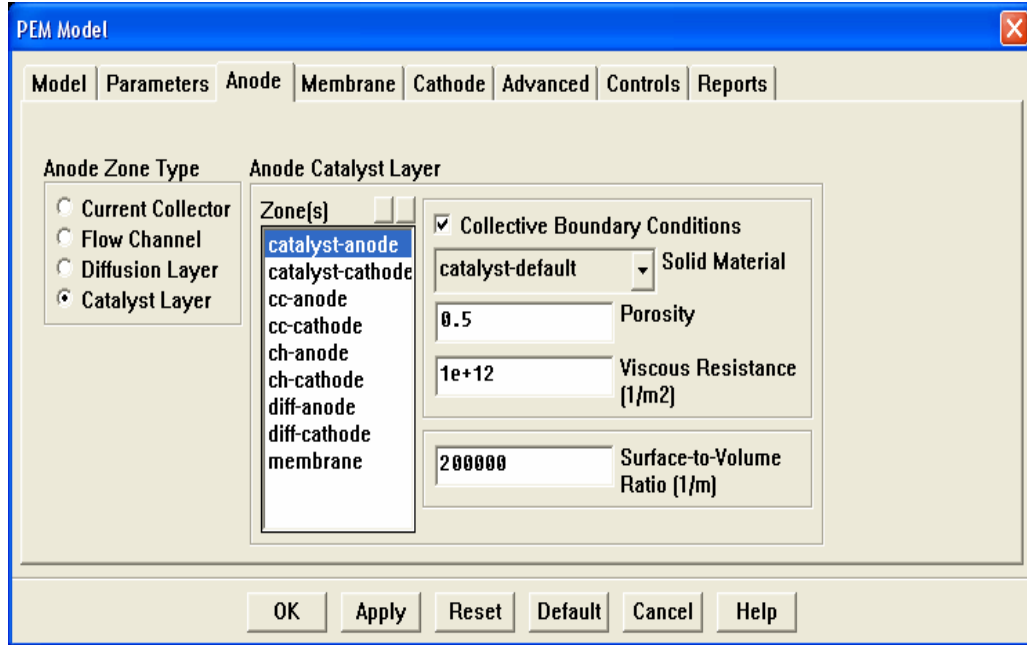
EK-3. (Devam) PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı



Şekil 3.5. Seçilen difüzyon tabakasıyla birlikte PEM model panelin anot çizelgesi

- PEM model panelinde anode çizelgesi seçilir.
- Anode zone type altında diffusion layer seçilir.
- Zone listesinden ilgili bir alan seçilir. Eğer bir yakıt hücresi yığını modelliyorsanız, bir grup olarak bir özel tipin bütün bölgelerini toplamalısınız.
- İlgili drop-down listesinden bir katı materyal seçilir. Katı materyal materials panelinden seçilebilir veya ihtiyaca göre düzenlenmiş olabilir. Katı elektriksel iletkenliği değeri katı alanında katı faz potansiyelinin difüzyon hızıdır.
- Porosity için bir değer belirtilir.
- Viscous resistance için bir değer belirtilir.
- Çoklu evre PEM hesaplamaları için Contact Angle için bir değer belirtilir.

EK-3. (Devam) PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı



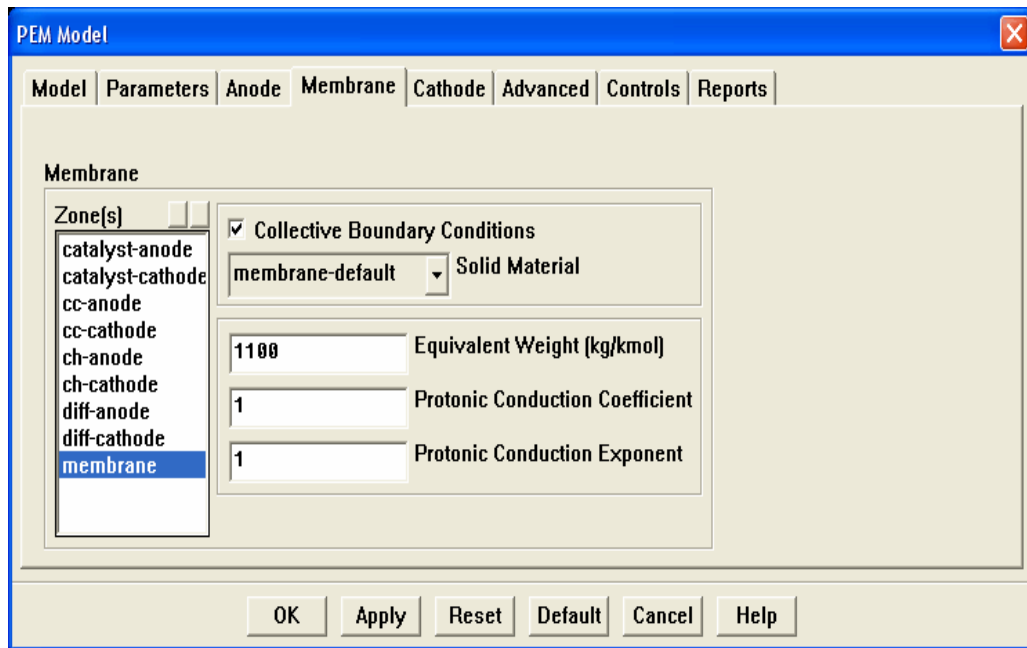
Şekil 3.6. Seçilen katalizör tabakasıyla birlikte PEM model panelin anot çizelgesi

- PEM Model panelinde anode çizelgesi seçilir.
- Anode zone type altında catalyst layer seçilir.
- Zone listesinden ilgili bir alan seçilir. Eğer bir yakıt hücresi yığını modelliyorsanız, bir grup olarak bir özel tipin bütün bölgelerini toplamalısınız.
- İlgili drop-down listesinden bir katı materyal seçilir. Katı materyal materials panelinden seçilebilir veya ihtiyaca göre düzenlenmiş olabilir. Electrical conductivity için, materials panelinden yalnızca bir sabit değer seçebilirsiniz. Katı elektriksel iletkenliği değeri katı alanında katı faz potansiyelinin difüzivitesidir.
- Porosity için bir değer belirtilir.
- Viscous Resistance için bir değer belirtilir.
- Surface-to-volume ratio için bir değer belirtin. Bu katalizör ortamın özgül yüzey alanıdır.
- Çoklu evre PEM hesaplamaları için contact angle için bir değer belirtin.

EK-3. (Devam) PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı

Anot akım kolektörünün her durumu için, difüzyon tabakası ve katalizör tabakası, katı materyal atarsınız ve/veya poroziteyi ve viskoz rezistansı ayarlayabilirsiniz. Bu ayarlamalar bir dış sınır ayarını temsil eder. collective boundary condition seçeneği açılmasıyla birlikte(varsayılan ayarlar), bu sınır koşulu alan listesindeki tüm seçilen alanlara uygulanır. Eğer her alan için sınır koşulunu tek tek ayarlamak istiyorsanız ilgili boundary conditions panelini kullanın, collective boundary collection seçeneğini kapatmanız gerekmektedir.

3.6.4. Membran özelliklerinin belirtilmesi



Şekil 3.7. PEM model panelin membran çizelgesi.

- Zone listesinden uygun bir alan seçilir. Eğer bir yakıt hücresi yığını modelliyorsanız, bir grup olarak bütün membran bölgelerini toplamalısınız.
- İlgili drop-down listesinden bir katı materyal seçilir. Katı materyal ihtiyaca göre düzenlenmiş veya materials panelinden seçilmiş olabilir.
- Equivalent weight için bir değer belirtilir.

EK-3. (Devam) PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı

- Protonic conduction coefficient için bir değer belirtin. Bu membran fazı elektrik iletkenliği hesaplamasında kullanılır.
- Protonic conduction exponent için bir değer seçilir.

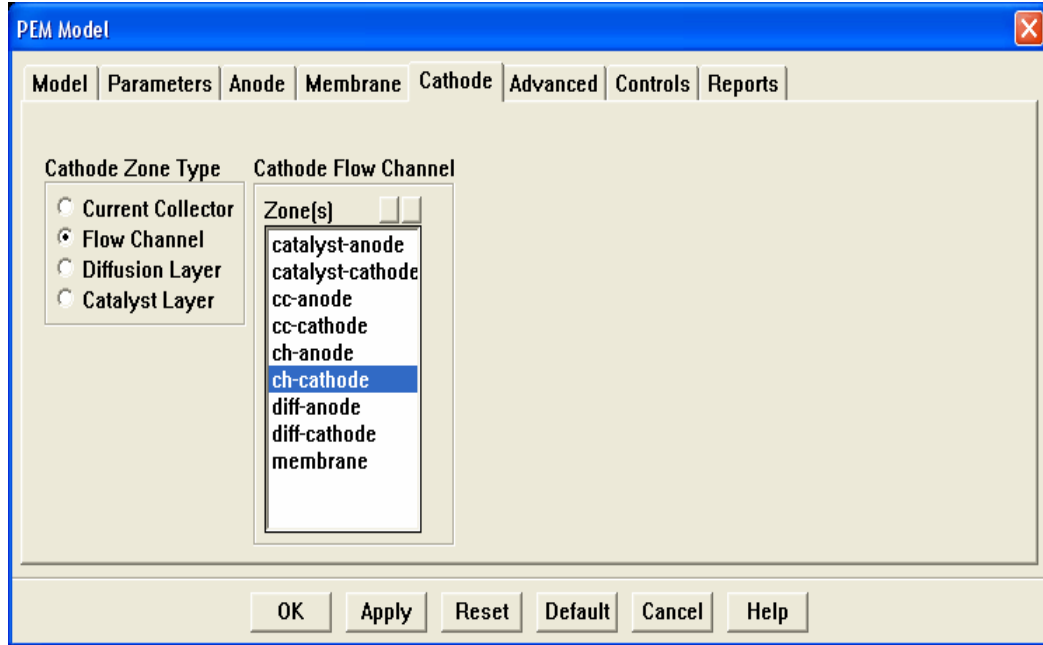
Membrana bir katı materyal atadığınız zaman, bir sınır koşulu ayarlamış olursunuz. Collective boundary collection seçeneğinin açılmasıyla birlikte(varsayılan ayarlar), bu sınır koşulu alan listesinden seçilen bütün ayarlara uygulanır. Eğer her alan için sınır koşulunu tek tek ayarlamak istiyorsanız ilgili boundary conditions panelini kullanın, collective boundary collection seçeneğini kapatmanız gerekmektedir.

3.6.5. Katot özelliklerinin belirtilmesi

Alanları belirtmek ve akım kolektörünün özellikleri, akış kanalı, difüzyon tabakası ve PEM yakıt hücresi katot kısmının katalizör tabakası için PEM model panelin katot çizelgesini kullanabilirsiniz.

- PEM model panelinde cathode çizelgesi seçilir.
- Cathode zone type altında current collector seçilir.
- Zone listesinden ilgili bir alan seçilir. Eğer bir yakıt hücresi yığını modelliyorsanız, bir grup olarak bir özel tipin bütün bölgelerini toplamalısınız.
- İlgili drop-down listesinden bir katı materyal seçilir. Katı materyal materials panelinden seçilebilir veya ihtiyaca göre düzenlenmiş olabilir. Electrical conductivity için, materials panelinden yalnızca bir sabit değer seçebilirsiniz. Katı elektriksel iletkenliği değeri katı alanında katı faz potansiyelinin difüzivitesidir.

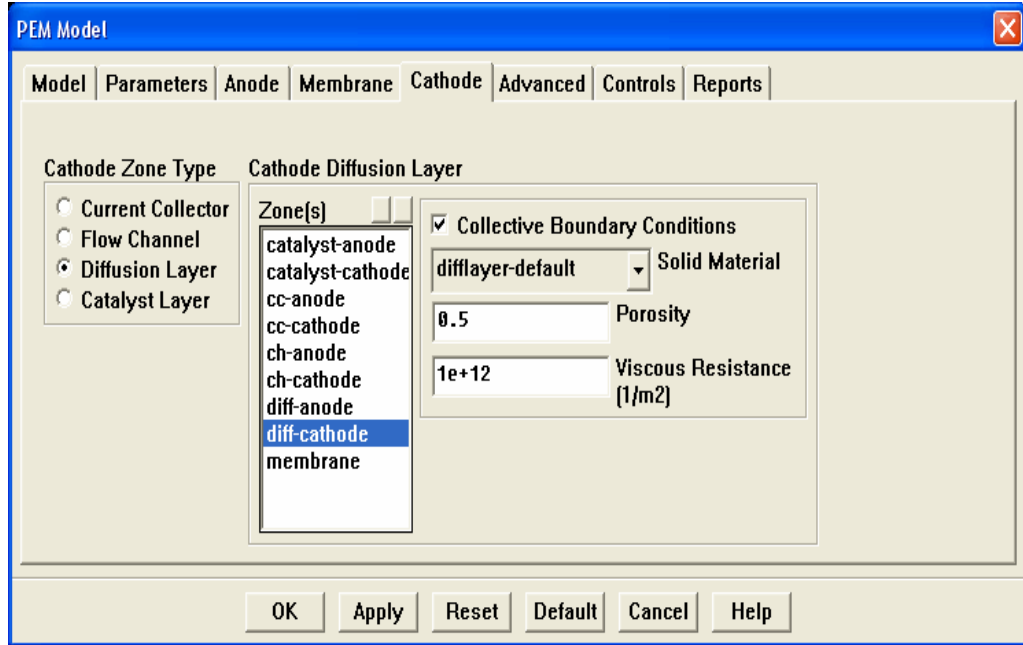
EK-3. (Devam) PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı



Şekil 3.8. Seçilen akış kanalı ile birlikte PEM modelin katot çizelgesi.

- PEM model panelinde cathode çizelgesi seçilir.
- Cathode zone type altında flow channel seçilir.
- Zone listesinden ilgili bir alan seçilir. Eğer bir yakıt hücresi yığını modelliyorsanız, bir grup olarak bir özel tipin bütün bölgelerini toplamalısınız.

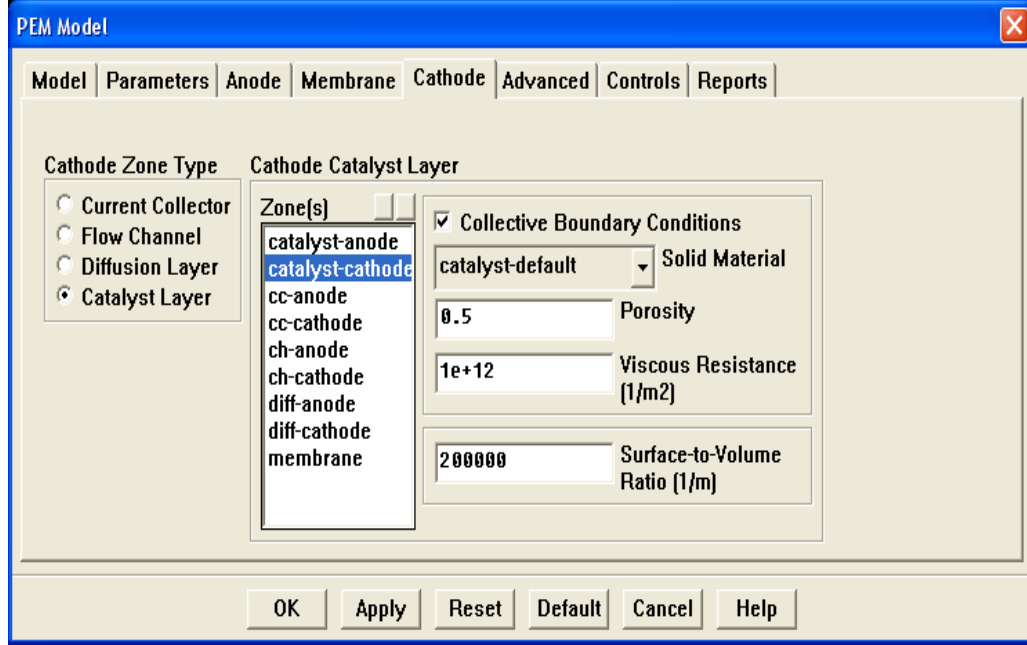
EK-3. (Devam) PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı



Şekil 3.9. Seçilen difüzyon tabakasıyla birlikte PEM model panelin katot çizelgesi

- PEM model panelinde cathode çizelgesi seçilir.
- Cathode zone type altında diffusion layer seçilir
- Zone listesinden ilgili bir alan seçilir. Eğer bir yakıt hücresi yığını modelliyorsanız, bir grup olarak bir özel tipin bütün bölgelerini toplamalısınız.
- İlgili drop-down listesinden bir katı materyal seçilir. Katı materyal materials panelinden seçilebilir veya ihtiyaca göre düzenlenmiş olabilir. Katı elektriksel iletkenliği değeri katı alanında katı faz potansiyelinin difüzivitesidir.
- Porosity için bir değer belirtilir.
- Viscous Resistance için bir değer belirtilir.
- Çoklu faz PEM hesaplamaları için contact angle için bir değer belirtilir.

EK-3. (Devam) PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı



Şekil 3.10. Seçilen katalizör tabakasıyla birlikte PEM model panelin katot çizelgesi.

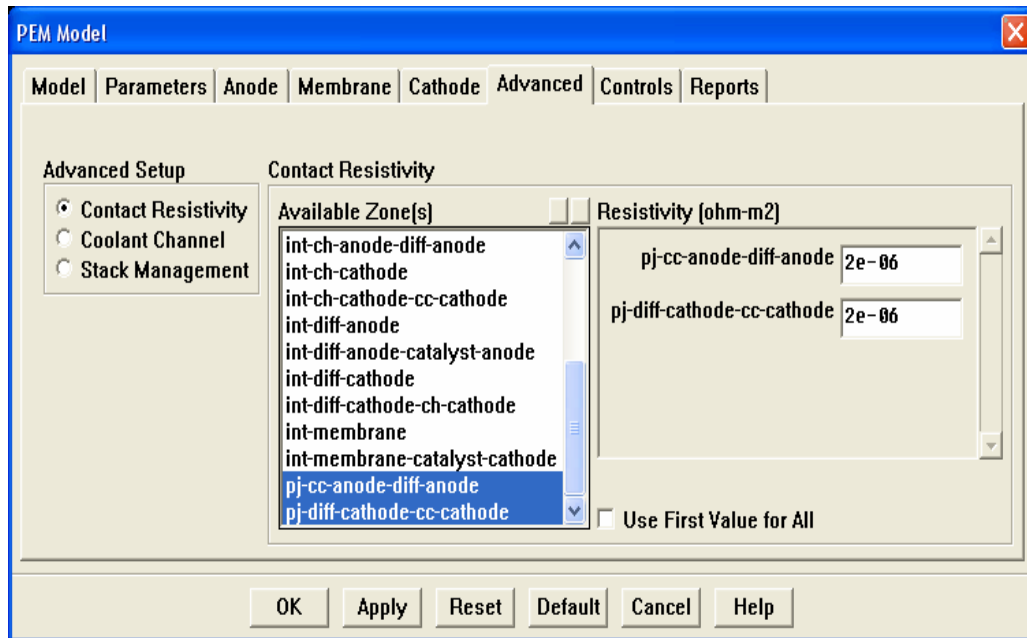
- PEM model panelinde cathode çizelgesi seçilir.
- Cathode zone type altında catalyst layer seçilir
- Zone listesinden ilgili bir alan seçilir. Eğer bir yakıt hücresi yığını modelliyorsanız, bir grup olarak bir özel tipin bütün bölgelerini toplamalısınız.
- İlgili drop-down listesinden bir katı materyal seçilir. Katı materyal materials panelinden seçilebilir veya ihtiyaca göre düzenlenmiş olabilir. Katı elektriksel iletkenliği değeri katı alanında katı faz potansiyelinin difüzyon hızıdır.
- Porosity için bir değer belirtilir.
- Viscous resistance için bir değer belirtilir.
- Surface-to-volume ratio için bir değer belirtilir. Bu katalizör ortamın özgül yüzey alanıdır.
- Çoklu faz PEM hesaplamaları için contact angle için bir değer belirtilir.

EK-3. (Devam) PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı

Katot akım kolektörünün her durumu için, difüzyon tabakası ve katalizör tabakası, katı materyal atarsınız ve/veya poroziteyi ve viskoz rezistansı ayarlayabilirsiniz. Bu ayarlamalar bir dış sınır şartını temsil eder. collective boundary condition seçeneği açılmasıyla birlikte(varsayılan ayarlar), bu sınır koşulu alan listesindeki tüm seçilen alanlara uygulanır. Eğer her alan için sınır koşulunu tek tek ayarlamak istiyorsanız ilgili boundary conditions panelini kullanın, collective boundary collection seçeneğini kapatmanız gerekmektedir.

3.6.6. PEM yakıt hücresi için ileri özelliklerin ayarlanması

Geometride herhangi materyal arabirimi için dirençlilik teması belirtmek için PEM model panelin ileri çizelgesini kullanabilirsiniz. Soğutma kanalları için parametreleri ayarlayın ve yakıt hücresinin yığın yönetimi için yakıt yığın ünitesini tanımlayın.

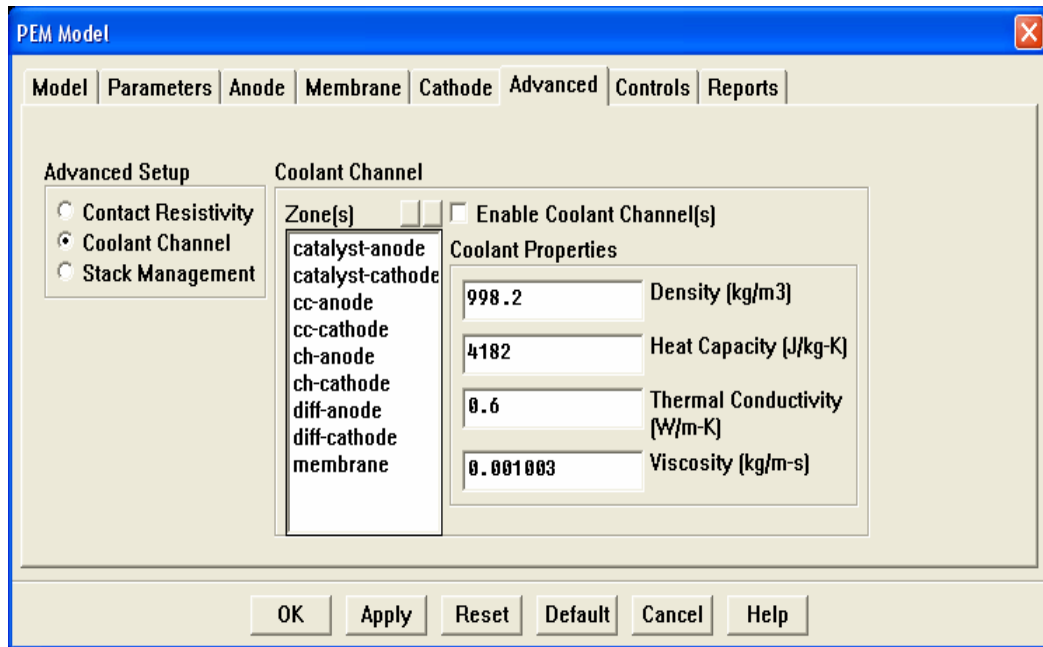


Şekil 3.11. Temas dirençliliği için PEM model panelinin ileri çizelgesi.

- PEM model panelinde Advanced çizelgesi seçilir.

EK-3. (Devam) PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı

- Advanced Setup altında Contact Resistivity seçilir.
- Available Zone listesinden ilgili arabirimin herhangi bir numarasını seçin. Bu bölgeler yüzey bölgeleri üzerinde elektrik potansiyeli içine atlama yaparak kusurlu iletme sebep olurlar.
- Her belirtilen bölge için resistivity için bir değer belirtin.
- Girdileri basitleştirmek, hepsi için ilk değeri kullanma seçeneğinin açılmasıyla diğer hepsi için seçilen ilk alanın dirençlilik değerini seçebilirsiniz.

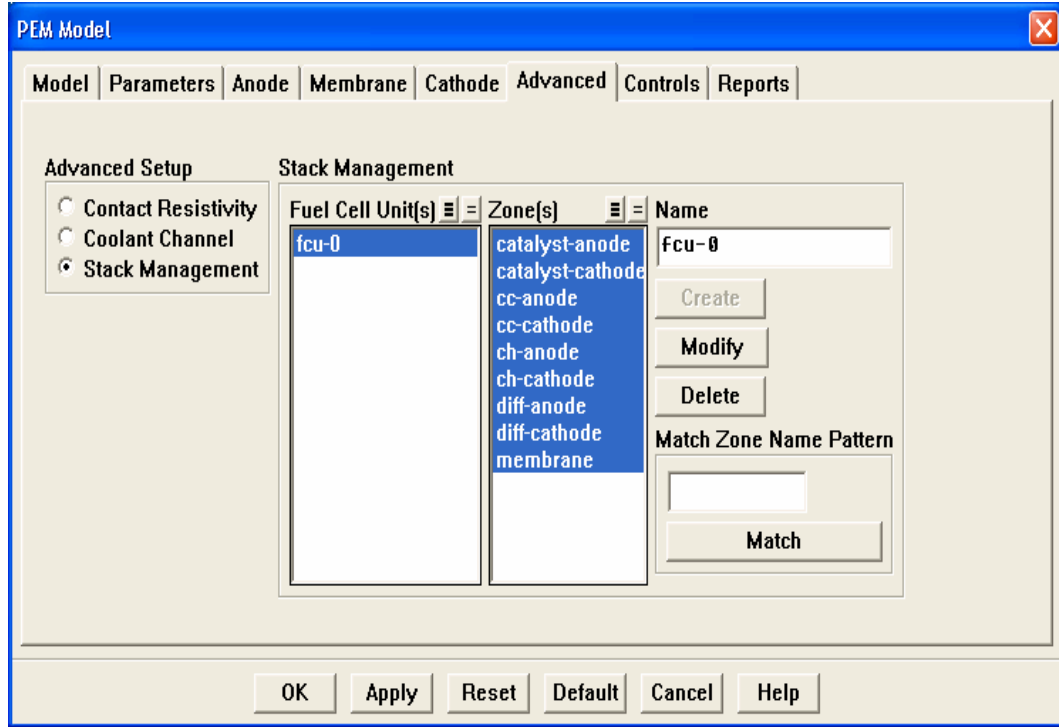


Şekil 3.12. Soğutucu kanal için PEM modelin advanced çizelgesi.

- PEM model panelinde advanced çizelgesi seçilir.
- Advanced setup altında coolant channel seçilir.
- Zone listesinden ilgili alanların herhangi bir numarasını seçilir.
- Density için bir değer belirtilir.
- Heat capacity için bir değer belirtilir.
- Thermal conductivity için bir değer belirtilir.
- Viscosity için bir değer belirtilir.

EK-3. (Devam) PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı

- Soğutucu kanalı hesaplamalara dahil etmek, enable coolant channel seçeneğinin açılmasıyla olur.



Şekil 3.13. Yığın yönetimi için PEM model panelin advanced çizelgesi.

FLUENT PEM yakıt hücresi modelleme, yakıt hücrelerini tek tek olduğu gibi, yığın olarak modellememize de izin verir. PEM model panelin advanced çizelgesinde, yığındaki her yakıt hücresi için yakıt hücresi ünitelerini tanımlayabilirsiniz. Bir yakıt hücresi yığını tek bir yakıt hücresinin bütün alanlarından oluşur. Eğer yalnızca tek bir yakıt hücresi modelliyorsanız, PEM model panelin advanced çizelgesindeki yığın yönetimi için hiçbir ayarlamaya ihtiyaç duymayacaksınız.

- PEM model panelinde advanced çizelgesi seçilir.
- Advanced setup altında stack management seçilir.
- Yığın halinde bir yakıt hücresi bir yakıt hücresinin bütün alanlarından oluştuğundan dolayı, zone listesinden ilgili alanlar seçilir.

EK-3. (Devam) PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı

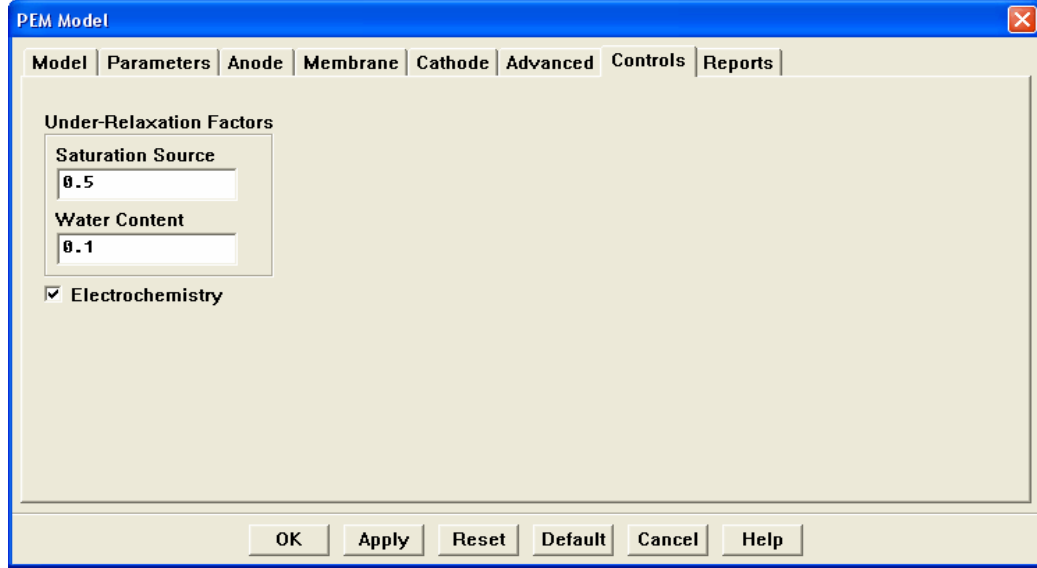
- Create butonuna tıklayarak yeni bir yakıt hücresi ünitesi oluşturulur. Yeni yakıt hücresi ünitesi varsayılan bir isimle birlikte fuel cell unit'in altında listelenmiş olur.
- Yakıt hücresi listesinde seçilmiş olan bir yakıt hücresi ünitesini kaldırabilir veya delete butonunu kullanarak silebilirsiniz.

Eğer modeliniz bir çok alan ismi içeriyorsa, match zone name pattern seçeneğini kullanabilirsiniz. Kendi alanlarınızın isimlerinde arama yapmak için, belirlenmiş örnek isimler ile birlikte match butonuna tıklayarak isim seçebilir veya seçilmiş olanları bırakabilirsiniz ve text alanında örnek tipini belirleyebilirsiniz. Ek karakterleri kullanarak eşleştirebilirsiniz. Örneğin wall komutunu belirttiyseniz, wall ile başlayan bütün isimler otomatik olarak seçilecektir(wall-1, wall-top gibi). Zaten seçilmişlerse, seçilenler kaldırılmış olacaktır. Eğer wall seçeneğini belirttiyseniz, bütün yüzeylerde wall'dan oluşan bir tek karakter seçilmiş olacaktır (veya seçilenler kaldırılacaktır).

3.6.7. Çözüm kontrollerinin belirtilmesi

Çözüm sürecini etkilemek için PEM model panelinin controls çizelgesini kullanabilirsiniz.

EK-3. (Devam) PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı



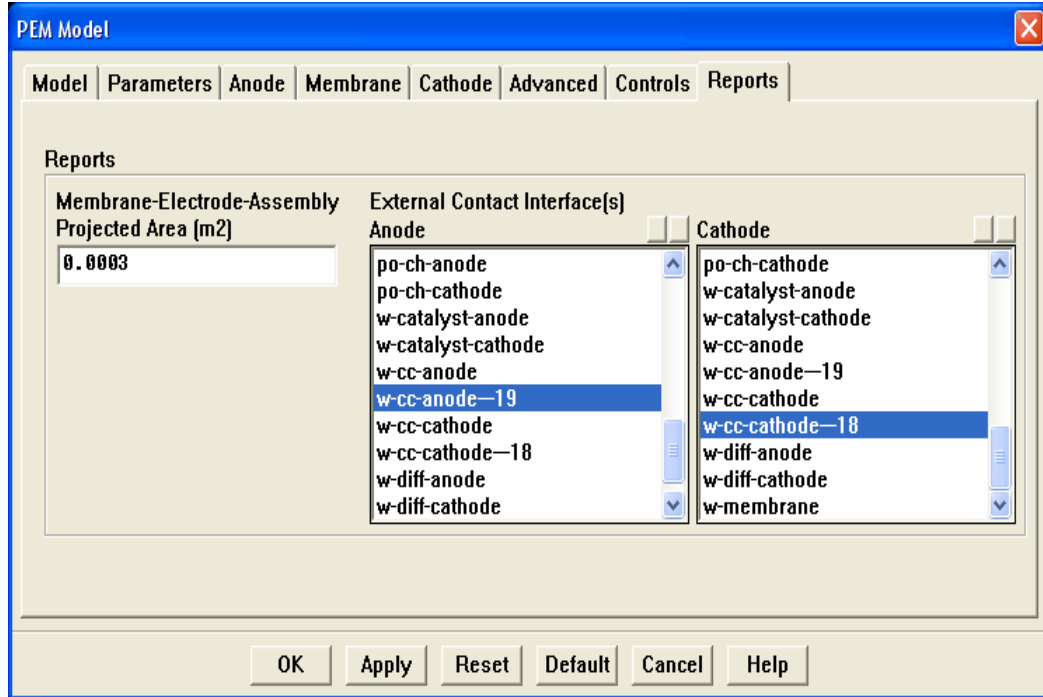
Şekil 3.14. PEM model panelin kontrol çizelgesi.

Water content değerini değiştirerek under-relaxation faktörü için varsayılan değerleri değiştirebilirsiniz. Eğer yakıt hücresinin başından sonuna yalnızca temel akışla ilgileniyorsanız, PEM yakıt hücresi modelinin çoğu etkisini bastırmak amacı ile electrochemistry seçeneğini kapatabilirsiniz. PEM yakıt hücresi modelin tüm etkilerini kapatmak için, ayrıca PEM model panelin model çizelgesinde membrane water transport ve multiphase seçeneklerini de kapatmanız gerekmektedir.

3.6.8. Çözümü rapor etme

İlgili yakıt hücresine data rapor etmede parametrelerin kurulması yararlı olacaktır PEM model panelin reports çizelgesini kullanabilirsiniz.

EK-3. (Devam) PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı



Şekil 3.15. PEM model panelin raporlar çizelgesi.

Membrane-electrode-assembly projected area alanı membran elektrolit topluluğunun alanını gerektirir ve yalnızca ortalama akım yoğunluğu hesaplamalarında kullanılmaktadır. Membranın topluluk oluşumu katalizör tabakaları ve membranlardır. Öne sürülen alanın değeri projected surface areas panelinden hesaplanabilir.

Reports-----Projected Areas.....

External contact interface alanları anot ve katot için dış bağlantı yüzeyleri gibi davranan ön bölgeler gerektirir. Bu girdiler hücresel voltajı rapor etmede kullanılır. Potansiyostatik sınır koşulu için, bu sağlanan değerler arasındaki farklılıktır, fakat galvanostatik sınır koşulu için, hücresel voltaj çözümünün bir parçasıdır.

EK-3. (Devam) PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı

3.7. Akım Kollektörlerinin Modellenmesi

FLUENT'in önceki versiyonlarında, user-defined scalar eşitlikleri yalnızca akışkan bölgesinde çözülebiliyordu. Bu kısıtlama kaldırılmıştır.

Sonuç olarak, PEMFC modülü akım kolektörünü katı olarak modellemeye izin veriyor, akışkan bölgelerde olduğu gibi. Akım kolektörünün katı olarak kullanımının bir avantajı olarak, eşitlik türlerinin yakınsaması, akım kolektörünün içindeki çarpık ağlar tarafından imkan dahilinde engellenmemiştir. Eğer akışkan bölgeleri katı akım kolektörleri modellemede kullanılmışsa, FLUENT otomatik olarak hızını sıfıra ayarlar ve bu bölgeye türlerin taşınmasını keser. Eğer katı bölgeler kullanılmışsa, bununla birlikte, ihtiyacınız olan bu katı bölgelerdeki elektrik potansiyelinin çözümünü aktif hale getirmektir(UDS-0) (detaylar için ayrıca fluent kullanım kılavuzuna bakınız).

3.8. PEM Yakıt Hücresi Sınır Koşulları

Probleminizin özelliklerine dayanarak PEM yakıt hücresi simülasyonu için aşağıdaki sınır koşullarının tanımlanmasına ihtiyaç duyulur:

- Anot Girişi
 - Kütle akış oranı
 - Sıcaklık
 - Yön özellik metodu
 - Kütle kesirleri(örneğin; H_2 ve H_2O)
 - Eğer soğutucu kanalları seçiliyorsa soğutucu sıfıra ayarlanmış olmalıdır.
 - UDS-2 (su doygunluğu) sıfıra ayarlanmış olmalıdır.
- Katot girişi

EK-3. (Devam) PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı

- Kütle akış oranı
- Sıcaklık
- Yön özellik metodu
- Kütle kesirleri (örneğin; O₂, H₂O ve N₂)
- Eğer soğutucu kanalları seçiliyorsa soğutucu sıfıra ayarlanmış olmalıdır.
- UDS-2 (su doygunluğu) sıfıra ayarlanmış olmalıdır.

- Soğutucu girişi
 - Kütle akış oranı
 - Sıcaklık
 - Yön özellik metodu
 - Soğutucu kütle kesri 1' e ayarlanmalıdır.
 - UDS-2 (su doygunluğu) sıfıra' a ayarlanmalıdır.

- Basınç çıkışı

- Uç anot
 - Sıcaklık (veya biliniyorsa akış)
 - UDS-0 (elektrik potansiyeli) toprak voltajına ayarlanmalıdır

- Uç katot
 - Sıcaklık (veya biliniyorsa akış)
 - UDS-0 (elektrik potansiyeli) katodun voltajına ayarlanmalıdır (eğer çözüm sabit voltajda ise), veya UDS-0 (elektrik potansiyeli) akış A/m² de akım yoğunluğuna ayarlanmalıdır.

EK-3. (Devam) PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı

3.9. Pem Yakıt Hücresi Modeli İçin Çözüm Yönergeleri

Potansiyostatik sınır koşulu için, başlangıç durumuna getirdikten sonra, hücresel voltaj için kararlı hal çözümleri açık-devre voltajını kapatarak kolaylıkla hesaplanır. Aynısı galvanostatik sınır koşulu ve düşük elektrik akımı için de söylenebilir. Hücresel voltajı azaltarak veya ortalama elektrik akımını yükselterek, sabit çözümleri hesaplayabilirsiniz. Yakınsama problemlerinde, tavsiye edilen multigrid çevrimini F-cycle ile birlikte BCGSTAB (bi-conjugate gradient stabilized method)'a değiştirmek, türler ve potansiyel iki eşitlik için stabilizasyon metodu olarak seçilir.

Ayrıca, başlangıç durumuna getirdikten sonra ilk birkaç (yaklaşık olarak 5-10) iterasyon için PEM model panelinde Reaction Heating ve Joule Heating seçeneklerini kapatmak yararlı olabilir. Bu iki elektrik potansiyelini başlangıç durumu değerlerinden daha çok fiziksel değerlere ayarlamaya, uç nokta elektrokimyasal reaksiyonların olasılıklarından kaçınma ve çözümde elektrik akımını aksine döndürmeye de izin verir.

3.9.1. PEM yakıt hücresi model çözümünde son işlemler

Standart FLUENT kullanımı ile, user-defined skalaları ve user-defined hafızası ile son işlemleri gerçekleştirebilirsiniz.

EK-3. (Devam) PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı

Çizelge 3.1. Kullanıcı tanımlı skalalar

UDS 0	Elektrik Potansiyeli (katı faz potansiyeli) (Volt)
UDS 1	İyonik Potansiyel (membran faz potansiyeli) (Volt)
UDS 2	Suyun Doygunluğu (sıvı doygunluğu)
UDS 3	Su İçeriği

Çizelge 3.2. Kullanıcı tanımlı hafıza yerleşimi

UDM 0	X Akım Akış Yoğunluğu (A/m^2)
UDM 1	Y Akım Akış Yoğunluğu (A/m^2)
UDM 2	Z Akım Akış Yoğunluğu (A/m^2)
UDM 3	Akım Akış Yoğunluğu Şiddeti (A/m^2)
UDM 4	Ohmik Isı Kaynağı (W/m^3)
UDM 5	Reaksiyon Isı Kaynağı (W/m^3)
UDM 6	Aşırı Gerilim (Volt)
UDM 7	Faz Değişim Kaynağı (kg/m^3-s)
UDM 8	Ozmotik Sürüklenme Katsayısı
UDM 9	Sıvı Su Aktivitesi
UDM 10	Membran Su İçeriği
UDM 11	İyonik İletkenlik ($1/ohm-m$)
UDM 12	Geri Difüzyon Kütle Kaynağı (kg/m^3-s)
UDM 13	Akım Transferi (A/m^3)
UDM 14	Ozmotik Sürüklenme Kaynağı (kg/m^3-s)

EK-3. (Devam) PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı

Bu listeye execute on demand panelini açmakla ve function kısmından ulaşabilirsiniz.

Define..... User-Define..... Execute On Demand...

Execute on demand'a erişim için list_pemfc_udf fonksiyonu çağrılır. Alternatif olarak, PEM yakıt hücresi durumunu ilk yüklediğiniz zaman veya text kullanıcı arabiriminde list_pemfc_udf tiplemesini yaparak ve açılan pencerede görebilirsiniz.

3.9.2. Kullanıcı tanımlı fonksiyonlar

Kendi formülasyonunuzu direk olarak birleştirebilir ve pem_user.c kod dosyasını kullanarak membran yakıt hücresinin özellikleri için kendi verilerinizi girebilirsiniz.

Aşağıdaki listeleme pem_user.c kod dosyasının içeriğini tanımlar:

- real heat_apportionment_factor(cell_t c, Thread *t): Kimyasal reaksiyonda su oluşumu esnasında ısı olarak açığa çıkan enerji kesri. Bu fonksiyon bize reaksiyonun maksimal elde edilebilir enerji kesrini verir.
- real Get_P_sat(real T): Sıcaklığın bir fonksiyonu olarak doymuş su buharı basıncının değere dönüşümü.
- real Water_Activity(real P, real T, cell_t c, Thread *t): Su aktivitesinin değere dönüşümü .
- real Water_Content (real act): Membran katalizör arayüzeyinde membran su içeriğinin değere dönüşümü.
- real Osmotic_Drag_Coefficient(real P, real T, cell_t c, Thread *t): Ozmotik sürüklenme katsayısının değere dönüşümü.
- real Membrane_Conductivity(real lam, cell_t c, Thread *t): Membranın iyonik iletkenliğinin değere dönüşümü.

EK-3. (Devam) PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı

- `real Water_Content_Diffusivity(real lam, real T, real mem_mol_density, cell_t c, Thread *t)`: Membrandaki su içeriği geçirgenliğinin değere dönüşümü.
- `real Gas_Diffusivity(cell_t c, Thread *t, int j_spe)`: Gaz difüzyon tabakaları, katalizör tabakalar ve kanallardaki gaz türü geçirgenliğinin değere dönüşümü.
- `real Saturation_Diffusivity(real sat, real cos_theta, real porosity, cell_t c, Thread *t)`: Doygun sıvı geçirgenliğinin değere dönüşümü.

Aşağıdaki terimleri içerir:

$$\rho_l \frac{Ks3}{\mu_l} \frac{dp_c}{ds} \quad (3.30)$$

- `real Anode_AV_Ratio(cell_t c, Thread *t)`: Anot katalizör tabakası için yüzeyin hacme oranının değere dönüşümü.
- `real Cathode_AV_Ratio(cell_t c, Thread *t)`: Katot katalizör tabakası için yüzeyin hacme oranının değere dönüşümü.
- `real Anode_J_TransCoef(cell_t c, Thread *t)`: anotun referans akım yoğunluğu reaksiyonunun değere dönüşümü.
- `real Cathode_J_TransCoef(cell_t c, Thread *t)`: katotun referans akım yoğunluğu reaksiyonunun değere dönüşümü.
- `real Open_Cell_Voltage(cell_t c, Thread *t)`: açık-devre voltajının değere dönüşümü.
- `void Set_UDS_Names(char uds[n_uds_required][STRING_SIZE])`: UDS'nin yeniden adlandırılması.

EK-4. Kutuplaşma eğrilerinin oluşturulması

KUTUPLAŞMA EĞRİLERİNİN OLUŞTURULMASI [54]

Bu çalışmada, toplam hücre aşırı-potansiyeli, teorik açık devre voltajı ile hücre voltajı arasındaki fark, tanımlanmıştır. Tanımlanan bu voltaja karşılık gelen hücre tarafından üretilen akım ve akım dağılımı model tarafından hesaplanmıştır. Kutuplaşma eğrisi oluşturmak için, toplam hücre aşırı-potansiyeli, adım adım artırılmıştır. Yakınsak çözüme ulaşabilmek için, aşırı-potansiyeldeki her adım artışı, toplam 500 iterasyon gerektirmektedir. Adımlar arasında çözüm sonuçları kaydedildikten sonra bir sonraki adımın çözümüne geçilerek kutuplaşma eğrisi oluşturmak için gerekli tüm adımlar tamamlanana kadar çözüme devam edilmiştir. Bunun sebebi, yakınsak çözüme ulaşmak için gereken iterasyon sayısını, dolayısıyla çözüm süresini azaltmaktır.

Bir kutuplaşma eğrisi oluşturmak için toplam 9 adım kullanılmıştır. Her adım, belli bir toplam hücre aşırı-potansiyel değerine, başka bir deyişle, toplam aşırı potansiyel tanımını dikkate alırsak, belli bir hücre voltajına karşılık gelmektedir. Her adımda kullanılan toplam aşırı-potansiyel ile hücre voltaj değerleri Çizelge 4.1’de listelenmiştir.

Çizelge 4.1. Kutuplaşma eğrisi oluşturmak için kullanılan voltaj adımları

Toplam Aşırı-potansiyel [V]	Hücre Voltajı [V] ¹
0,3	0,88
0,4	0,78
0,6	0,58
0,8	0,38
0,85	0,33
0,9	0,28
0,95	0,23

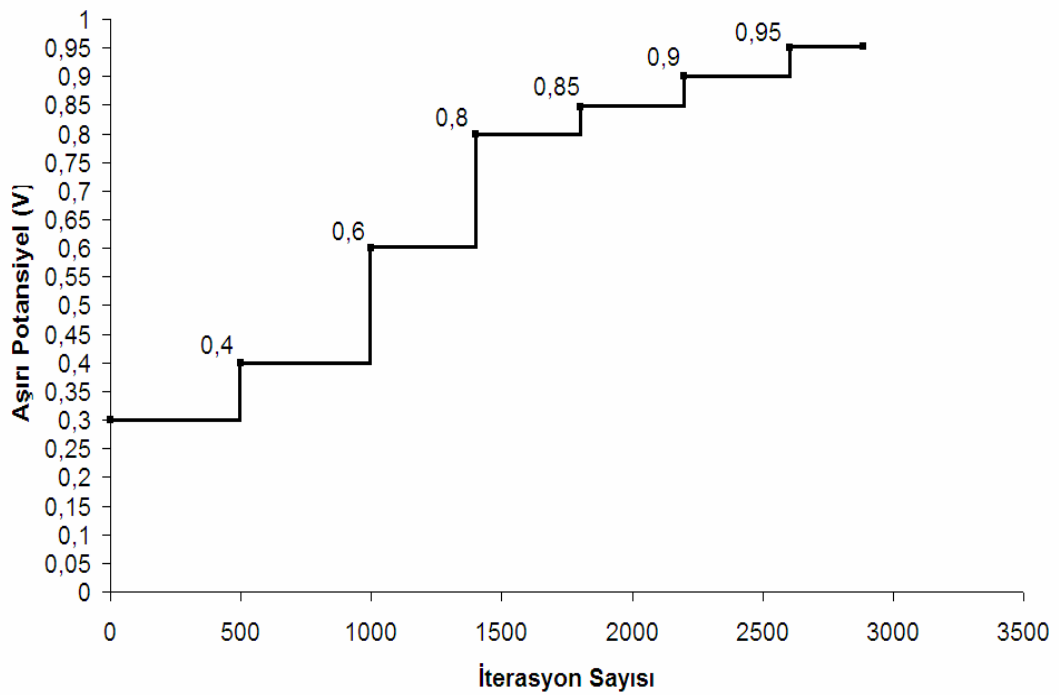
¹ Teorik açık devre voltajının 1,18 V olduğu temel şartlar için hücre voltajı hesaplanmıştır. İşletim şartları değişikçe teorik açık devre voltajı yeniden hesaplanmıştır.

Teorik açık devre voltajının hesabı ile ilgili ayrıntılar EK-5’te sunulmuştur.

EK-4. (Devam) Kutuplaşma eğrilerinin oluşturulması

Her biri 500 iterasyon gerektiren 9 adımda tüm kutuplaşma eğrisini oluşturmak için, PEMFC modeli toplam 3500 iterasyon için koşulmalıdır. Analiz süresince, aşırı-potansiyel, hiperbolik relaksasyon fonksiyonuna benzer bir basamak fonksiyonu kullanılarak değiştirilmiştir.

Aşırı potansiyel basamak fonksiyona göre artırılarak kutuplaşma eğrileri oluşturulmuştur. Aşırı potansiyelin iterasyon sayısına göre değişimi Şekil 4.1’de sunulmuştur. Bir kutuplaşma eğrisini oluşturulmasında, 3000 iterasyondan sonra çözüm yakınsamıştır.



Şekil 4.1. Kutuplaşma eğrisinin oluşturulmasında kullanılan basamak fonksiyonun iterasyon sayısına göre değişimi

EK-5 Teorik açık devre voltajının hesabı

TEORİK AÇIK DEVRE VOLTAJININ HESABI

Kimyasal reaksiyonlarda, referans enerji seviyesi 25°C standart sıcaklık ve 0,1 MPa basınçtaki saf elementler için tanımlanmaktadır. Bu kabul kullanıldığında, Gibbs serbest enerjisi yerine Gibbs sebest oluşum enerjisi terimi kullanılmaktadır. Benzer şekilde entalpi yerine oluşum entalpisi kullanılır. Standart sıcaklık ve basıçta çalışan bir hidrojen yakıt hücresi için girenlerin Gibbs serbest oluşum enerjisi sıfırdır. Bir yakıt hücresindeki mekanik potansiyel enerji ise Gibbs serbest oluşum enerjisindeki değişime, yani; salınan enerjiye eşittir. Bu değişim, ürünlerin Gibbs sebest oluşum enerjisi ile reaktanların Gibbs serbest oluşum enerjisi arasındaki farka eşittir.

$$\Delta G_f = \sum_{\text{ürünler}} G - \sum_{\text{reaktanlar}} G \quad (5.1)$$

Hidrojen/oksijen yakıt hücresi için temel reaksiyonu aşağıdaki gibidir:



$$\Delta \bar{g}_f = (\bar{g}_f)_{H_2O} - (\bar{g}_f)_{H_2} - \frac{1}{2}(\bar{g}_f)_{O_2} \quad (5.3)$$

Gibbs serbest oluşum enerjisi sıcaklık ve durum ile değişmektedir. Temel hidrojen yakıt hücre reaksiyonu için $\Delta \bar{g}_f$ değerleri Çizelge 5.1’de verilmiştir.

EK-5 (Devam) Teorik açık devre voltajının hesabı

Çizelge 5.1. $H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow H_2O$ reaksiyonu için $\Delta\bar{g}_f$ değerleri

Ürünlerdeki suyun Fazı	Sıcaklık	$\Delta\bar{g}_f$
Sıvı	25	-237,2
Sıvı	50	-231,9
Sıvı	60	-230,3
Sıvı	70	-228,6
Sıvı	80	-228,2
Gaz	80	-226,1
Gaz	100	-225,2
Gaz	200	-220,4
Gaz	400	-210,3
Gaz	600	-199,6
Gaz	800	-188,6
Gaz	1000	-177,4

Negatif değerler enerjinin salındığı anlamına gelmektedir. Eğer yakıt hücresi içerisinde kayıplar yoksa (tersinir proses) Gibbs serbest enerjisinin tamamı elektriksel enerjiye dönüşür. Bir yakıt hücresinin tersinir açık devre volajı, bu prensip kullanılarak hesaplanacaktır.

Çizelge 5.1'deki $H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow H_2O$ reaksiyonu için verilen Gibbs serbest oluşum fonksiyonu değişimi, $\Delta\bar{g}_f$ aşağıdaki metod kullanılarak hesaplanmıştır:

Bir sistem için Gibbs fonksiyonu, entropy ve entalpi cinsinden,

$$G = H - TS \quad (5.4)$$

Olarak ifade edilir. Benzer şekilde molar Gibbs oluşum enerjisi, molar oluşum entalpisi, ve molar entropi, aşağıdaki eşitliklerle ilişkilendirilir:

$$\bar{g}_f = \bar{h}_f - T\bar{s} \quad (5.5)$$

EK-5 (Devam) Teorik açık devre voltajının hesabı

Bir yakıt hücresinde, sıcaklığın sabit olduğu durumda, enerjideki değişim miktarı önemlidir.

$$\Delta \bar{g}_f = \Delta \bar{h}_f - T \Delta \bar{s} \quad (5.6)$$

$\Delta \bar{h}_f$ değeri, ürünlerin $\bar{h}_f$ değeri ile reaktanların $\bar{h}_f$ değeri arasındaki farktır. Bu bilgiler ışığında $H_2 + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow H_2O$ reaksiyonu için:

$$\Delta \bar{h}_f = (\bar{h}_f)_{H_2O} - (\bar{h}_f)_{H_2} - \frac{1}{2} (\bar{h}_f)_{O_2} \quad (5.7)$$

yazılabilir. Benzer şekilde, $\Delta \bar{s}$ değeri, ürünlerin $\bar{s}$ değeri ile reaktanların $\bar{s}$ değeri arasındaki farktır ve $H_2 + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow H_2O$ reaksiyonu için Eş. 5.8'de gösterilmiştir.

$$\Delta \bar{s} = (\bar{s})_{H_2O} - (\bar{s})_{H_2} - \frac{1}{2} (\bar{s})_{O_2} \quad (5.8)$$

$\bar{h}_f$ ve $\bar{s}$ değerleri, aşağıda verilen eşitliklere dayanarak, sıcaklıkla değişmektedir. Bu standart denklemler, termodinamik teorisi kullanılarak elde edilmişlerdir ve bu denklemlerin ispatı, mühendislik termodinamiği üzerine yazılmış kitapların çoğunda bulunabilir [20].

T sıcaklığındaki molar oluşum entalpisi Eş.5.9'da belirtildiği gibi hesaplanır:

$$\bar{h}_T = \bar{h}_{298.15} + \int_{298.15}^T \bar{c}_p dT \quad (5.9)$$

EK-5 (Devam) Teorik açık devre voltajının hesabı

$$\bar{s}_T = \bar{s}_{298.15} + \int_{298.15}^T \frac{1}{T} \bar{c}_p dT \quad (5.10)$$

molar entropi ise Eş. 5.10 ile hesaplanır. 298,15 K sıcaklıktaki molar entropi ve formasyon entalpi değerleri, termodinamik tablolardan elde edilebilir [21]. Standart basınçtaki ve sıcaklıktaki molar entalpi ve entropi değerleri Çizelge 5.2’de sunulmuştur. Eş. 5.9 ve Eş. 5.10 kullanabilmek için sabit basınç molar ısı kapasitesi değerlerini, $\bar{c}_p$ bilmemiz gerekmektedir. Belli bir sıcaklık aralığında, $\bar{c}_p$ değerleri sabit değildir. Bununla birlikte, $\bar{c}_p$ için ampirik denklemler elde edilebilir ve birçok termodinamik kitaplarında ampirik denklemler verilmiştir [22]. Aşağıda verilen denklemler 300 – 3500 K sıcaklık aralığında % 0.6 hassasiyete sahiptirler:

$$\bar{c}_{p,H_2O} = 143.05 - 183.54 \theta^{0.25} + 82.751 \theta^{0.5} - 3.6989 \theta \quad (5.11)$$

$$\bar{c}_{p,H_2O} = 143.05 - 183.54 \theta^{0.25} + 82.751 \theta^{0.5} - 3.6989 \theta \quad (5.12)$$

$$\bar{c}_{p,O_2} = 37.432 + 0.020102 \theta^{1.5} - 178.57 \theta^{-1.5} + 236.88 \theta^{-2} \quad (5.13)$$

Bu denklemlerde geçen $\theta = T/100$ olup $T[K]$ Kelvin biriminde girildiğinde $\bar{c}_p$ değeri $[kJ/kmol K]$ biriminde elde edilir. Sabit basınç molar ısı kapasitesi için yukarıda verilen ampirik denklemler, Eş. 5.9 ve Eş. 5.10’a yerleştirilir, integrali alındıktan sonra verilen sıcaklıkta, molar oluşum entalpisi ve molar entropi için hesaplama yapılır. Bu hesaplamalar, su buharı, hidrojen ve oksijen gazları için ayrı yapılır ve hesaplanan değerler, Eş. 5.7 ve Eş.5.8’de yerine konularak $\Delta \bar{h}_f$ ve $\Delta \bar{s}$ değerleri hesaplanır. Son olarak, elde edilen $\Delta \bar{h}_f$ ve $\Delta \bar{s}$ değerleri Eş.5.6’da yerine konularak molar Gibbs oluşum enerjisindeki değişim, $\Delta \bar{g}_f$ hesaplanır. Örnek $\Delta \bar{g}_f$ değerleri Çizelge 5.2’de sunulmuştur.

EK-5 (Devam) Teorik açık devre voltajının hesabı

Çizelge 5.2. Hidrojen Yakıt hücresi için standart durumdaki oluşum entalpisi ve entropi değerleri

Türler	$\bar{h}_f [kJ \text{ kmol}^{-1}]$	$\bar{s} [kJ \text{ kmol}^{-1} \text{ K}^{-1}]$
H ₂ O (sıvı)	-285,838	70.05
H ₂ O (buhar)	-241,827	188,83
H ₂	0	130,59
O ₂	0	205,14

Çizelge 5.3. $H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow H_2O$ reaksiyonu için oluşum entalpisi, entropi ve oluşum Gibbs fonksiyonu değişimi için örnek değerler

Sıcaklık $T [^{\circ}C]$	$\Delta \bar{h}_f [kJ \text{ mol}^{-1}]$	$\Delta \bar{s} [kJ \text{ mol}^{-1} \text{ K}^{-1}]$	$\Delta \bar{g}_f [kJ \text{ mol}^{-1}]$
50	-286,1	-0,1675	-231,9
60	-286,2	-0,1678	-230,3
70	-286,3	-0,1681	-228,6
100	-242,6	-0,0466	-225,2
300	-244,5	-0,0507	-215,4
500	-246,2	-0,0533	-205,0
700	-247,6	-0,0549	-194,2
900	-248,8	-0,0561	-183,1

EK-5 (Devam) Teorik açık devre voltajının hesabı

Sıvı su durumunda, $\bar{h}_f$ ve $\bar{s}$ için Çizelge 5.3'den alınan standart değerler 25°C sıcaklık için kullanılır. 80°C sıcaklıktaki $\bar{h}_f$ ve $\bar{s}$ değerlerini bulmak için, $\bar{c}_p$ değeri sabit kabul edilir ve Eş.5.9 ve Eş.5.10 kullanılarak bulunur.

Hidrojen yakıt hücresinde, her üretilen su molekülü ve kullanılan hidrojen molekülü için dış devreden 2 elektron geçmektedir. Kullanılan bir mol hidrojen için 2N elektron açık devreden geçer. Burada N Avagadro sayısıdır. Eğer bir elektron üzerindeki şarjı -e ile gösterecek olursak, devreden geçen şarj, $-2Ne = -2F$ Coulombs olarak bulunur. Burada F Faraday sabitidir veya bir mol elektron üzerindeki şarj olarak ifade edilir. Eğer yakıt hücresinin voltajı E ile gösterilirse, devre üzerinden bu şarjın hareketi ile yapılan elektriksel iş = Şarj x Voltaj = $-2FE$ Joule olur.

Eğer sistem tersinir ise (kayıpsız), elektriksel iş, salınan Gibbs serbest enerjisine, $\Delta\bar{g}_f$ eşit olacaktır;

$$E = \frac{-\Delta\bar{g}_f}{2F} \quad (5.14)$$

Bu temel eşitlik, hidrojen yakıt hücresinin tersinir açık devre voltajını veya başka bir deyişle elektromotiv kuvveti (EMF) vermektedir.

Bu çalışmada, yakıt hücresinin 80°C sıcaklıkta çalıştığı kabul edilebilir. Dolayısıyla, ürünlerdeki su, sıvı fazda oluşur ve $\Delta\bar{g}_f = -228,2$ kJ alınarak teorik açık devre voltajı $E = 1,18$ V olarak hesaplanır.

Çizelge 5.4'de hücre sıcaklığı ile açık devre voltajının değişimi görülmektedir. Sıcaklık düştükçe açık devre voltajının değeri artmaktadır.

EK-5 (Devam) Teorik açık devre voltajının hesabı

Çizelge 5.4. Hücre sıcaklığı ile açık devre voltajının değişimi

$T_{Hücre} [^{\circ}C]$	OCV [V]
50	1.2021
60	1.1934
70	1.1847
80	1.1826

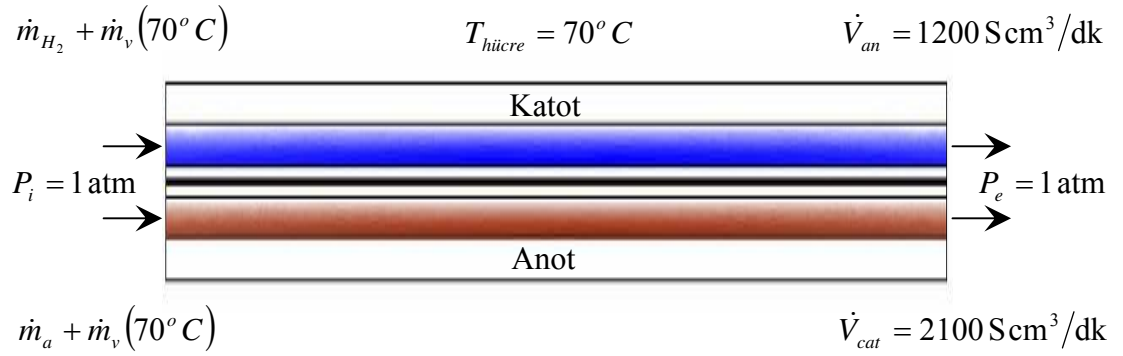
Çizelge 5.5. Hücre nem değeri ile açık devre voltajının değişimi

$\phi_{Hücre}$	OCV [V]
$\phi = 1$	1.2021
$\phi = 0.6$	1.1934
$\phi = 0.2$	1.1847

EK-6 Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

KARŞILAŞTIRMA DURUMLARI İÇİN GİRİŞ-ÇIKIŞ ŞARTLARININ BELİRLENMESİ

Grup I – Durum 1



Şekil 6.1. Grup I – Durum 1 sınır şartları

Anot tarafı giriş (Hidrojen + Su buharı)

$\dot{V} = 1200 \text{ S} \cdot \text{cm}^3 \text{dk}^{-1}$ Standart durumdaki hacimsel debinin m-s cinsinden değeri $\dot{V} = 2 \times 10^{-5} \text{ S} \cdot \text{m}^3 \text{s}^{-1}$ olarak hesaplanır. Nemlendirme sıcaklığına ($T=70^\circ \text{C}$) karşılık gelen doymuş buharın kısmi basıncı doymuş su-buharı tablolarından $P_{v,sat} = 31,19$ kPa olarak bulunur. Anot tarafında beslenen havanın su buharına doymuş olduğu kabulü yapılarak bağıl nem değeri, $\phi = 1$ alınır.

Katot girişindeki su buharının kısmi basıncı:

$$P_v = \phi P_{v,sat} \quad (6.1)$$

Eş. 6.1 kullanılarak katot girişindeki su buharının kısmi basıncı, $P_v = 31,19$ kPa olarak bulunur.

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Su buharının kısmi basıncı hesaplandıktan sonra, anot tarafı girişinde H_2 ve H_2O buharı (v) karışımı için nem oranı tanımlanır. Bu tanım ve su buharı ile hidrojen için ideal gaz eşitlikleri kullanılarak:

$$W = \frac{P_v V / R_v T}{P_{H_2} V / R_{H_2} T} \quad (6.2)$$

Eş.6.2’de sadeleştirmeler yapıldıktan sonra, nem oranı için Eş.6.3 elde edilir.

$$W = \frac{R_{H_2}}{R_v} \frac{P_v}{P_{H_2}} \quad (6.3)$$

$$P_{H_2} = P - P_v \quad (6.4)$$

Hidrojenin kısmi basıncı, su buharı basıncı cinsinden Eş.6.4’de gösterildiği gibi ifade edilebilir. Hidrojen ve su buharı için gaz sabitleri nem oranı eşitliğine yerleştirildikten sonra, nem oranı su buharı basıncı cinsinden;

$$W = 8,936 \frac{P_v}{P - P_v} \quad (6.5)$$

olarak elde edilir. Anot girişindeki su buhar basıncı ve toplam basınç değerleri için nem oranı, $W = 3,9739 \text{ kg}_v/\text{kg}_{H_2}$ olarak hesaplanır. Kütle korunumu özgül hacim cinsinden aşağıdaki gibi ifade edilir:

$$\frac{1}{v_{H_2}} + \frac{1}{v_v} = \frac{1}{v_{an}} \quad (6.6)$$

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

1 Atm basınç ve 70°C sıcaklıkta hidrojen ve su buharını ideal gaz olarak kabul edebiliriz. Bu durumda, su buharı ve hidrojenin özgül hacimleri, doymuş buhar tabloları kullanılarak hesaplanırsa, $v_v = 5,0420 \text{ m}^3/\text{kg}$ ve $v_{H_2} = 13,9760 \text{ m}^3/\text{kg}$ olarak bulunur. Daha sonra, anot girişindeki gazların toplam özgül hacmi, özgül hacim cinsinden kütle korunum eşitliği kullanılarak, $v_{an} = 3,7052 \text{ m}^3/\text{kg}$ olarak hesaplanır. Anot girişindeki gazların toplam kütleli debisi, $\dot{m}_{an} = \dot{V}/v_{an}$ eşitliği kullanılarak, toplam hacimsel debi ve anot girişindeki gazların toplam özgül hacmi eşitlikte yerine konularak, $\dot{m}_{an} = 0,5398 \times 10^{-5} \text{ kg/s}$ olarak hesaplanır.

$$\dot{m}_{an} = \dot{m}_{H_2} + \dot{m}_v \quad (6.7)$$

$$W = \dot{m}_v / \dot{m}_{H_2} \quad (6.8)$$

Eş.6.7 ile Eş.6.8 birleştirilerek, anot girişindeki hidrojenin kütleli debisi için Eş.6.9 elde edilir.

$$\dot{m}_{H_2} = \dot{m}_{an} / (1 + W) \quad (6.9)$$

$$\dot{m}_v = \dot{m}_{an} - \dot{m}_{H_2} \quad (6.10)$$

$$y_{H_2} = \dot{m}_{H_2} / \dot{m}_{an} \quad (6.11)$$

$$y_v = \dot{m}_v / \dot{m}_{an} \quad (6.12)$$

Eş.6.9'dan faydalanarak, anot girişindeki hidrojenin kütleli debisi, $\dot{m}_{H_2} = 0,1085 \times 10^{-5} \text{ kg/s}$ olarak elde edilir.

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Kütle korunum eşitliklerinden, anot girişindeki su buharının kütleli debisi, Eş.6.10 kullanılarak, $\dot{m}_v = 0,4313 \times 10^{-5} \text{ kg/s}$ olarak hesaplanır. Anot girişindeki nemli yakıt karışımını oluşturan H_2 ve H_2O bileşenlerinin kütle kesirleri, Eş.6.11 ve Eş.6.12 kullanılarak $y_{\text{H}_2} = 0,2010$ ve $y_v = 0,7989$ olarak hesaplanır.

Katot tarafı giriş (Hava + Su buharı)

$\dot{V} = 2100 \text{ S} \cdot \text{cm}^3 \text{ dk}^{-1}$ Standart durumdaki hacimsel debinin m-s cinsinden değeri $\dot{V} = 3,5 \times 10^{-5} \text{ S} \cdot \text{m}^3 \text{ s}^{-1}$ olarak hesaplanır. Nemli hava için deniz seviyesi şartlarında hazırlanmış psikiyometrik diyagramda, nemlendirme sıcaklığına (kuru termometre sıcaklığı, $T=70^\circ\text{C}$) karşılık gelen doyma eğrisi üzerindeki noktanın nem oranı $W = 0,09 \text{ kg}_v/\text{kg}_a$ olarak okunur. Yine, psikiyometrik diyagramda, 70°C kuru termometre sıcaklığına karşılık gelen doyma eğrisi üzerindeki noktanın özgül hacmi $v_a = 1,158 \text{ m}^3/\text{kg}_a$ olarak okunur. Katot girişindeki kuru havanın kütleli debisi, toplam hacimsel debi ve kütleli debi ile hacimsel debi arasındaki bağıntı, $\dot{m}_a = \dot{V}/v_a$ kullanılarak $\dot{m}_a = 3,0220 \times 10^{-5} \text{ kg}_a/\text{s}$ olarak hesaplanır. Nem oranı tanımı, $\dot{m}_v = W \dot{m}_a$ kullanılarak katot girişindeki su buharının kütleli debisi, $\dot{m}_v = 0,2719 \times 10^{-5} \text{ kg}_v/\text{s}$ olarak hesaplanır. Bu noktadan sonra hava bileşimindeki O_2 ve N_2 mol miktarları kullanılarak katot girişindeki gerçek O_2 ve N_2 molar debiler hesaplanacaktır. Katot girişindeki su buhar ve kuru hava molar debileri;

$$\dot{N}_v = \dot{m}_v / MW_v \quad (6.13)$$

$$\dot{N}_a = \dot{m}_a / MW_a \quad (6.14)$$

Eş.6.13 ve Eş.6.14 kullanılarak $\dot{N}_v = 0,0151 \times 10^{-5} \text{ kmol/s}$ ve $\dot{N}_a = 0,1043 \times 10^{-5} \text{ kmol/s}$ olarak hesaplanır. Havanın 1 mol O_2 ve 3,76 mol N_2

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

içerdiği kabul edilirse, katot girişindeki O_2 ve N_2 bileşenlerinin gerçek molar debileri orantı kurularak $\dot{N}_{O_2} = 0,0219 \times 10^{-5}$ kmol/s ve $\dot{N}_{N_2} = 0,0824 \times 10^{-5}$ kmol/s olarak hesaplanır. Molar debiden tekrar kütleli debiye geçmek için Eş.6.15 ve Eş.6.16 kullanılarak $\dot{m}_{O_2} = 0,7008 \text{ kg}_{O_2}/\text{s}$ ve $\dot{m}_{N_2} = 2,3072 \text{ kg}_{N_2}/\text{s}$ olarak hesaplanır.

$$\dot{m}_{O_2} = \dot{N}_{O_2} MW_{O_2} \quad (6.15)$$

$$\dot{m}_{N_2} = \dot{N}_{N_2} MW_{N_2} \quad (6.16)$$

$$\dot{m}_{cat} = \dot{m}_a + \dot{m}_v \quad (6.17)$$

Katot kısmındaki toplam kütleli debi, Eş.6.17 kullanılarak $\dot{m}_{cat} = 3,2939 \times 10^{-5} \text{ kg/s}$ olarak hesaplanır. Katot girişindeki nemli hava karışımını oluşturan O_2 , N_2 ve H_2O bileşenlerinin kütle kesirleri, Eş.(6.18-20), kullanılarak $y_{O_2} = 0,2125$, $y_{N_2} = 0,7004$ ve $y_v = 0,0826$ olarak hesaplanır.

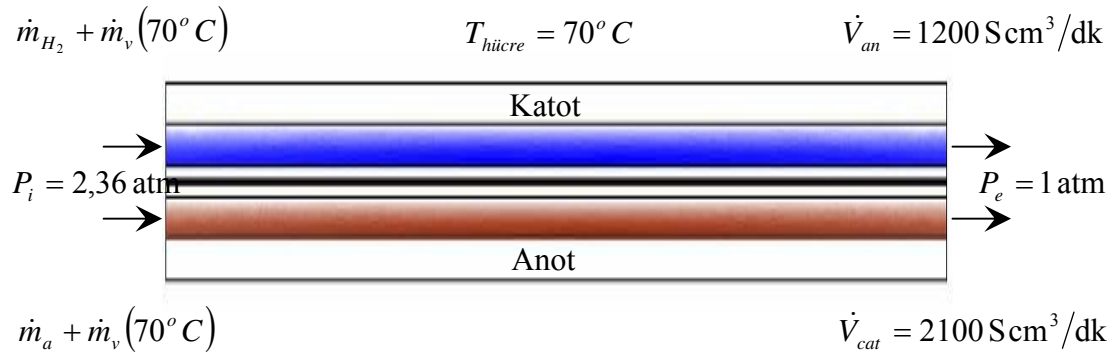
$$y_{O_2} = \dot{m}_{O_2} / \dot{m}_{cat} \quad (6.18)$$

$$y_{N_2} = \dot{m}_{N_2} / \dot{m}_{cat} \quad (6.19)$$

$$y_v = \dot{m}_v / \dot{m}_{cat} \quad (6.20)$$

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Grup I – Durum 2



Şekil 6.2. Grup I – Durum 2 sınır şartları

Anot tarafı giriş (Hidrojen + Su buharı)

$\dot{V} = 1200 \text{ S} \cdot \text{cm}^3 \text{dk}^{-1}$ Standart durumdaki hacimsel debinin m-s cinsinden değeri $\dot{V} = 2 \times 10^{-5} \text{ S} \cdot \text{m}^3 \text{s}^{-1}$ olarak hesaplanır. Standart durumdan giriş basıncı olan 2,36 atmosfer değerine karşılık gelen hacimsel debiyi bulmak için ideal gaz eşitliğinden orantı kurularak Eş.6.21 elde edilir.

$$\dot{V} = (P_{st}/P) \dot{V}_{st} \quad (6.21)$$

Eş. 6.21 kullanılarak 2,36 atm basınçtaki hacimsel debi $\dot{V} = 0,8475 \times 10^{-5} \text{ m}^3 \text{s}^{-1}$ olarak hesaplanır. Nemlendirme sıcaklığına ($T=70^\circ \text{C}$) karşılık gelen doymuş buharın kısmi basıncı doymuş su-buharı tablolarından $P_{v,sat} = 31,19 \text{ kPa}$ olarak bulunur. Anot tarafında beslenen havanın su buharına doymuş olduğu kabulü yapılarak bağıl nem değeri, $\phi = 1$ alınır ve Eş.6.1 kullanılarak katot girişindeki su buharının kısmi basıncı, $P_v = 31,19 \text{ kPa}$ olarak bulunur. Su buharının kısmi basıncı hesaplandıktan sonra, anot tarafı girişinde H_2 ve H_2O buharı (v) karışımı için nem oranı Eş.6.8'de olduğu gibi tanımlanır.

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Bu tanım ve su buharı ile hidrojen için ideal gaz eşitlikleri kullanılarak, Eş.6.2 elde edilir. Eş.6.2’de sadeleştirmeler yapıldıktan sonra, nem oranı için Eş.6.3 elde edilir. Hidrojen ve su buharı için gaz sabitleri nem oranı eşitliğine yerleştirildikten sonra, nem oranı su buharı basıncı cinsinden, Eş.6.5’de görüldüğü gibidir. Anot girişindeki su buhar basıncı ve toplam basınç değerleri için nem oranı, $W = 1,3404 \text{ kg}_v/\text{kg}_{H_2}$ olarak hesaplanır. 2,36 Atm basınç ve 70°C sıcaklıkta hidrojen ve su buharını, sıkıştırma faktörü, Z , 1’e çok yakın olduğu için ideal gaz olarak kabul edebiliriz. Bu durumda, su buharı ve hidrojenin özgül hacimleri, Eş.6.22 ve Eş.6.23 kullanılarak hesaplanırsa, $v_v = 5,0776 \text{ m}^3/\text{kg}$ ve $v_{H_2} = 6,8059 \text{ m}^3/\text{kg}$ olarak hesaplanır.

$$v_v = R_v T / P_v \quad (6.22)$$

$$v_{H_2} = R_{H_2} T / P_{H_2} \quad (6.23)$$

Hidrojenin kısmi basıncı, $P_{H_2} = 207,94 \text{ kPa}$ olarak hesaplanır. Daha sonra, anot girişindeki gazların toplam özgül hacmi, özgül hacim cinsinden kütle korunum eşitliği kullanılarak, $v_{an} = 2,9080 \text{ m}^3/\text{kg}$ olarak hesaplanır. Anot girişindeki gazların toplam kütleli debisi, $\dot{m}_{an} = \dot{V} / v_{an}$ eşitliği kullanılarak, toplam hacimsel debi ve anot girişindeki gazların toplam özgül hacmi formülde yerine konularak, $\dot{m}_{an} = 0,2914 \times 10^{-5} \text{ kg/s}$ olarak hesaplanır.

Eş.6.9’den faydalanarak, anot girişindeki hidrojenin kütleli debisi, $\dot{m}_{H_2} = 0,1245 \times 10^{-5} \text{ kg/s}$ olarak elde edilir. Kütle korunum denkleminde, anot girişindeki su buharının kütleli debisi, Eş.6.10 kullanılarak, $\dot{m}_v = 0,1669 \times 10^{-5} \text{ kg/s}$ olarak hesaplanır.

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Anot girişindeki nemli yakıt karışımını oluşturan H_2 ve H_2O bileşenlerinin kütle kesirleri, Eş.6.11 ve Eş.6.12 kullanılarak $y_{H_2} = 0,4273$ ve $y_v = 0,5727$ olarak hesaplanır.

Katot tarafı giriş (Hava + Su buharı)

$\dot{V} = 2100 \text{ S} \cdot \text{cm}^3 dk^{-1}$ Standart durumdaki hacimsel debinin m-s cinsinden değeri $\dot{V} = 3.5 \times 10^{-5} \text{ S} \cdot \text{m}^3 s^{-1}$ olarak hesaplanır. Standart durumdan giriş basıncı olan 2,36 atmosfer değerine karşılık gelen hacimsel debiyi bulmak için ideal gaz eşitliklerinden 2,36 atm basınçtaki hacimsel debi $\dot{V} = 1,4831 \times 10^{-5} \text{ m}^3 s^{-1}$ olarak hesaplanır. Nemlendirme sıcaklığına ($T=70^\circ \text{C}$) karşılık gelen doymuş buharın kısmi basıncı doymuş su-buharı tablolarından $P_{v,sat} = 31,19 \text{ kPa}$ olarak bulunur. Katot tarafında beslenen havanın su buharına doymuş olduğu kabulü yapılarak bağıl nem değeri, $\phi = 1$ alınır ve Eş.6.1 kullanılarak katot girişindeki su buharının kısmi basıncı, $P_v = 31,19 \text{ kPa}$ olarak bulunur. Su buharının kısmi basıncı hesaplandıktan sonra, Eş.6.24 kullanılarak nem oranı $W = 0,0933 \text{ kg}_v / \text{kg}_a$ olarak elde edilir.

$$W = 0.622 P_v / (P - P_v) \quad (6.24)$$

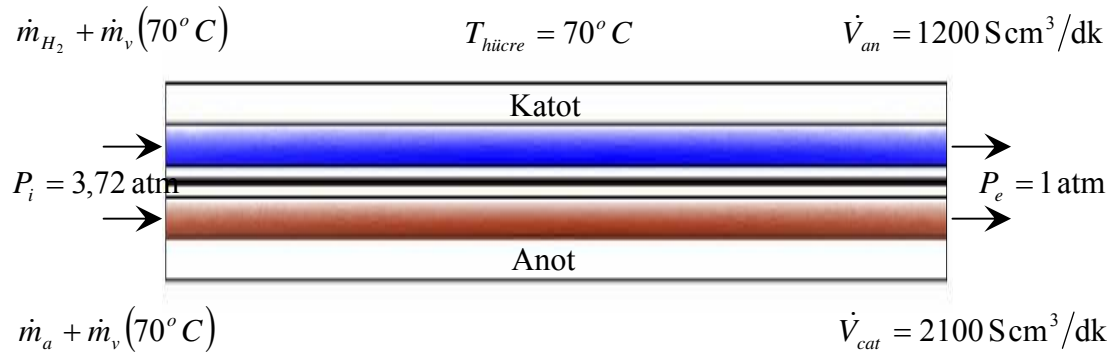
Katot girişindeki kuru havanın kısmi basıncı, Eş.6.4 kullanılarak $P_a = 207,94 \text{ kPa}$ olarak bulunur. Özgül hacim tanımından, $v_a = V/m_a$ ve ideal gaz eşitliğinden faydalanarak özgül hacim için $v_a = R_a T / P_a$ eşitliği bulunur. Bu eşitlik kullanılarak kuru havanın özgül hacmi, $v_a = 0,4736 \text{ m}^3 / \text{kg}_a$ olarak hesaplanır. Katot girişindeki kuru havanın kütleli debisi, toplam hacimsel debi ve kütleli debi ile hacimsel debi arasındaki bağıntı, $\dot{m}_a = \dot{V} / v_a$ kullanılarak $\dot{m}_a = 3,1314 \times 10^{-5} \text{ kg}_a / \text{s}$ olarak hesaplanır. Nem oranı tanımı, Eş.6.8 kullanılarak katot girişindeki su buharının kütleli debisi, $\dot{m}_v = 0,2921 \times 10^{-5} \text{ kg}_v / \text{s}$ olarak hesaplanır.

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Bu noktadan sonra hava bileşimindeki O_2 ve N_2 mol miktarları kullanılarak katot girişindeki gerçek O_2 ve N_2 molar debiler hesaplanacaktır. Katot girişindeki su buhar ve kuru hava molar debileri, Eş.6.13 ve Eş.6.14 kullanılarak $\dot{N}_v = 0,0162 \times 10^{-5} \text{ kmol/s}$ ve $\dot{N}_a = 0,1081 \times 10^{-5} \text{ kmol/s}$ olarak hesaplanır. Havanın 1 mol O_2 ve 3.76 mol N_2 içerdiği kabul edilirse, katot girişindeki O_2 ve N_2 bileşenlerinin gerçek molar debileri, orantı kurularak $\dot{N}_{O_2} = 0,0227 \times 10^{-5} \text{ kmol/s}$ ve $\dot{N}_{N_2} = 0,0854 \times 10^{-5} \text{ kmol/s}$ olarak hesaplanır. Molar debiden tekrar kütleli debiye geçmek için Eş.6.13 ve Eş.6.15 kullanılarak $\dot{m}_{O_2} = 0,7267 \text{ kg}_{O_2}/\text{s}$ ve $\dot{m}_{N_2} = 2,3906 \text{ kg}_{N_2}/\text{s}$ olarak hesaplanır. Katot kısmındaki toplam kütleli debi, Eş.6.17 kullanılarak $\dot{m}_{cat} = 3,4236 \times 10^{-5} \text{ kg/s}$ olarak hesaplanır. Katot girişindeki nemli hava karışımını oluşturan O_2 , N_2 ve H_2O bileşenlerinin kütle kesirleri, Eş.(6.18-20) kullanılarak, $y_{O_2} = 0,2123$, $y_{N_2} = 0,6983$ ve $y_v = 0,0853$ olarak hesaplanır.

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Grup I – Durum 3



Şekil 6.3. Grup I – Durum 3 sınır şartları

Anot tarafı giriş (Hidrojen + Su buharı)

$\dot{V} = 1200 \text{ S} \cdot \text{cm}^3 \text{ dk}^{-1}$ Standart durumdaki hacimsel debinin m-s cinsinden değeri $\dot{V} = 2 \times 10^{-5} \text{ S} \cdot \text{m}^3 \text{ s}^{-1}$ olarak hesaplanır. Standart durumdan giriş basıncı olan 3,72 atmosfer değerine karşılık gelen hacimsel debiyi bulmak için ideal gaz eşitliği kullanılır. İdeal gaz eşitliğinden 3,72 Atm basınçtaki hacimsel debi $\dot{V} = 0,5376 \times 10^{-5} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ olarak hesaplanır. Nemlendirme sıcaklığına ($T=70^\circ \text{C}$) karşılık gelen doymuş buharın kısmi basıncı doymuş su-buharı tablolarından $P_{v,sat} = 31,19 \text{ kPa}$ olarak bulunur. Anot tarafında beslenen havanın su buharına doymuş olduğu kabulü yapılarak bağıl nem değeri, $\phi = 1$ alınır ve Eş.6.1 kullanılarak katot girişindeki su buharının kısmi basıncı, $P_v = 31,19 \text{ kPa}$ olarak bulunur. Su buharının kısmi basıncı hesaplandıktan sonra, anot tarafı girişinde H_2 ve H_2O buharı (v) karışımı için nem oranı Eş.6.8 kullanılarak hesaplanır. Bu tanım ve su buharı ile hidrojen için ideal gaz denklemleri kullanılarak, Eş.6.2 kullanılır. Anot girişindeki su buhar basıncı ve toplam basınç değerleri için nem oranı, $W = 0,8061 \text{ kg}_v / \text{kg}_{\text{H}_2}$ olarak hesaplanır.

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

3,72 Atm basınç ve 70°C sıcaklıkta hidrojen ve su buharını, sıkıştırma faktörü, Z , 1'e çok yakın olduğu için ideal gaz olarak kabul edebiliriz. Bu durumda, su buharı ve hidrojenin özgül hacimleri $v_v = 5,0776 \text{ m}^3/\text{kg}$ ve $v_{H_2} = 4,0933 \text{ m}^3/\text{kg}$ olarak hesaplanır. Hidrojenin kısmi basıncı, Eş.6.4 kullanılarak $P_{H_2} = 345,74 \text{ kPa}$ olarak hesaplanır. Daha sonra, anot girişindeki gazların toplam özgül hacmi, özgül hacim cinsinden kütle korunum denklemi kullanılarak, $v_{an} = 2,2663 \text{ m}^3/\text{kg}$ olarak hesaplanır. Anot girişindeki gazların toplam kütleli debisi, $\dot{m}_{an} = \dot{V}/v_{an}$ eşitliği kullanılarak, toplam hacimsel debi ve anot girişindeki gazların toplam özgül hacmi formülde yerine konularak, $\dot{m}_{an} = 0,2372 \times 10^{-5} \text{ kg/s}$ olarak hesaplanır.

Eş.6.9'dan faydalanarak, anot girişindeki hidrojenin kütleli debisi, $\dot{m}_{H_2} = 0,1314 \times 10^{-5} \text{ kg/s}$ olarak elde edilir. Eş.6.10 kullanılarak $\dot{m}_v = 0,1059 \times 10^{-5} \text{ kg/s}$ olarak hesaplanır. Anot girişindeki nemli yakıt karışımını oluşturan H_2 ve H_2O bileşenlerinin kütle kesirleri, $y_{H_2} = 0,5537$ ve $y_v = 0,4463$ olarak hesaplanır.

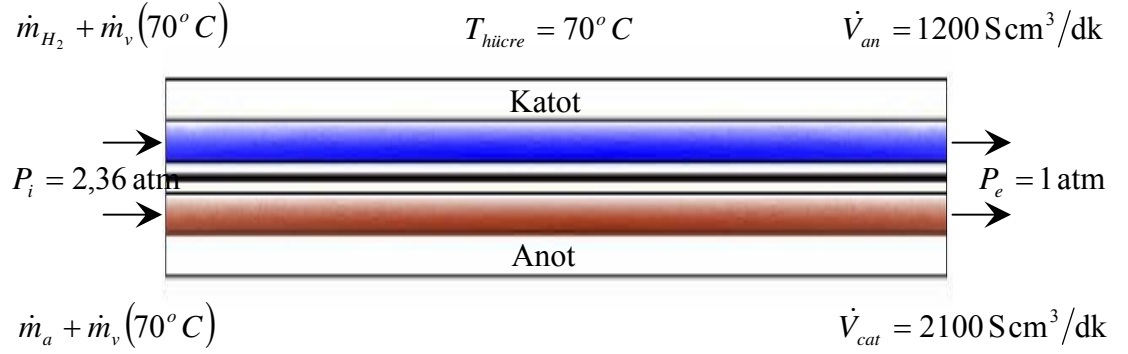
Katot tarafı giriş (Hava + Su buharı)

$\dot{V} = 2100 \text{ S} \cdot \text{cm}^3 \text{dk}^{-1}$ Standart durumdaki hacimsel debinin m-s cinsinden değeri $\dot{V} = 3,5 \times 10^{-5} \text{ S} \cdot \text{m}^3 \text{s}^{-1}$ olarak hesaplanır. Standart durumdan giriş basıncı olan 3,72 atmosfer değerine karşılık gelen hacimsel debiyi bulmak için ideal gaz denkleminde orantı kurularak 3,72 Atm basınçtaki hacimsel debi $\dot{V} = 0,9409 \times 10^{-5} \text{ m}^3 \text{s}^{-1}$ olarak hesaplanır. Nemlendirme sıcaklığına ($T=70^\circ\text{C}$) karşılık gelen doymuş buharın kısmi basıncı doymuş su-buharı tablolarından 31,19 kPa olarak bulunur. Katot tarafında beslenen havanın su buharına doymuş olduğu kabulü yapılarak bağıl nem değeri, $\phi = 1$ alınır.

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Eş.6.1 kullanılarak katot girişindeki su buharının kısmi basıncı, $P_v = 31,19$ kPa olarak bulunur. Su buharının kısmi basıncı hesaplandıktan sonra, nem oranı $W = 0,0561$ kg_v/kg_a olarak elde edilir. Katot girişindeki kuru havanın kısmi basıncı, $P_a = 345,74$ kPa olarak bulunur. Kuru havanın özgül hacmi, $v_a = 0,2849$ m³/kg_a olarak hesaplanır. Katot girişindeki kuru havanın kütleli debisi, toplam hacimsel debi ve kütleli debi ile hacimsel debi arasındaki bağıntı, kullanılarak $\dot{m}_a = 3,3030 \times 10^{-5}$ kg_a/s olarak hesaplanır. Nem oranı tanımı, $\dot{m}_v = W \dot{m}_a$ kullanılarak katot girişindeki su buharının kütleli debisi, $\dot{m}_v = 0,1853 \times 10^{-5}$ kg_v/s olarak hesaplanır. Bu noktadan sonra hava bileşimindeki O₂ ve N₂ mol miktarları kullanılarak katot girişindeki gerçek O₂ ve N₂ molar debiler hesaplanacaktır. Katot girişindeki su buhar ve kuru hava molar debileri, $\dot{N}_v = 0,0103 \times 10^{-5}$ kmol/s ve $\dot{N}_a = 0,1140 \times 10^{-5}$ kmol/s olarak hesaplanır. Havanın 1 mol O₂ ve 3,76 mol N₂ içerdiği kabul edilirse, katot girişindeki O₂ ve N₂ bileşenlerinin gerçek molar debileri, orantı kurularak $\dot{N}_{O_2} = 0,0240 \times 10^{-5}$ kmol/s ve $\dot{N}_{N_2} = 0,0901 \times 10^{-5}$ kmol/s olarak hesaplanır. Molar debiden tekrar kütleli debiye dönüştürülerek $\dot{m}_{O_2} = 0,7664 \times 10^{-5}$ kg_{O₂}/s ve $\dot{m}_{N_2} = 2,5217 \times 10^{-5}$ kg_{N₂}/s olarak hesaplanır. Katot kısmındaki toplam kütleli debi, $\dot{m}_{cat} = 3,4883 \times 10^{-5}$ kg/s olarak hesaplanır. Katot girişindeki nemli hava karışımını oluşturan O₂, N₂ ve H₂O bileşenlerinin kütle kesirleri, $y_{O_2} = 0,2197$, $y_{N_2} = 0,7228$ ve $y_v = 0,0531$ olarak hesaplanır.

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Grup II – Durum 1

Şekil 6.4. Grup II – Durum 1 sınır şartları

Anot tarafı giriş (Hidrojen + Su buharı)

$\dot{V} = 1200 \text{ S} \cdot \text{cm}^3 \text{dk}^{-1}$ Standart durumdaki hacimsel debinin m-s cinsinden değeri $\dot{V} = 2 \times 10^{-5} \text{ S} \cdot \text{m}^3 \text{s}^{-1}$ olarak hesaplanır. Bu eşitlik kullanılarak 3 Atm basınçtaki hacimsel debi $\dot{V} = 0,6666 \times 10^{-5} \text{ S} \cdot \text{m}^3 \text{s}^{-1}$ olarak bulunur. Nemlendirme sıcaklığına ($T=70^\circ \text{C}$) karşılık gelen doymuş buharın kısmi basıncı doymuş su-buharı tablolarından $P_{v,sat} = 31,19 \text{ kPa}$ olarak bulunur. Anot tarafında beslenen havanın su buharına doymuş olduğu kabulü yapılarak bağıl nem değeri, $\phi = 1$ alınır ve Eş.6.1 kullanılarak katot girişindeki su buharının kısmi basıncı, $P_v = 31,19 \text{ kPa}$ olarak bulunur. Su buharının kısmi basıncı hesaplandıktan sonra, anot tarafı girişinde H_2 ve H_2O buharı (v) karışımı için nem oranı Eş.6.8'deki gibi tanımlanır. Bu tanım ve su buharı ile hidrojen için ideal gaz denklemleri kullanılarak, Eş.6.2 elde edilir. Bu denklemden sadeleştirmeler yapıldıktan sonra, nem oranı için Eş.6.3 elde edilir. Hidrojenin kısmi basıncı, su buharı basıncı cinsinden Eş.6.4 olarak ifade edilebilir. Hidrojen ve su buharı için gaz sabitleri nem oranı eşitliğine yerleştirildikten sonra, nem oranı su buharı basıncı cinsinden, Eş.6.5 olarak elde edilir.

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Anot girişindeki su buhar basıncı ve toplam basınç değerleri için nem oranı, $W = 1,0217 \text{ kg}_v/\text{kg}_{H_2}$ olarak hesaplanır. 3 Atm basınç ve 70°C sıcaklıkta hidrojen ve su buharını ideal gaz olarak kabul edebiliriz. Bu durumda, su buharı ve hidrojenin özgül hacimleri, $v_v = 5,0776 \text{ m}^3/\text{kg}$ ve $v_{H_2} = 5,1880 \text{ m}^3/\text{kg}$ olarak hesaplanır. Daha sonra, anot girişindeki gazların toplam özgül hacmi, özgül hacim cinsinden kütle korunum denklemi kullanılarak, $v_{an} = 2,5661 \text{ m}^3/\text{kg}$ olarak hesaplanır. Anot girişindeki gazların toplam kütleli debisi, $\dot{m}_{an} = \dot{V}/v_{an}$ eşitliği kullanılarak, toplam hacimsel debi ve anot girişindeki gazların toplam özgül hacmi formülde yerine konularak, $\dot{m}_{an} = 0,2598 \times 10^{-5} \text{ kg/s}$ olarak hesaplanır.

Kütle korunum eşitliği, Eş.6.7 ile nem oranı, Eş.6.8 tanımları birleştirilerek, anot girişindeki hidrojenin kütleli debisi için Eş.6.9 eşitliği elde edilir. Bu eşitlikten faydalanarak, anot girişindeki hidrojenin kütleli debisi, $\dot{m}_{H_2} = 0,1285 \text{ kg/s}$ olarak elde edilir. Kütle korunum denkleminde, anot girişindeki su buharının kütleli debisi, $\dot{m}_v = \dot{m}_{an} - \dot{m}_{H_2}$ eşitliği kullanılarak, $\dot{m}_v = 0,1313 \text{ kg/s}$ olarak hesaplanır. Anot girişindeki nemli yakıt karışımını oluşturan H_2 ve H_2O bileşenlerinin kütle kesirleri, $y_{H_2} = 0,4946$ ve $y_v = 0,5054$ olarak hesaplanır.

Katot tarafı giriş (Hava + Su buharı)

$\dot{V} = 2100 \text{ S} \cdot \text{cm}^3 dk^{-1}$ Standart durumdaki hacimsel debinin m-s cinsinden değeri $\dot{V} = 3,5 \times 10^{-5} \text{ S} \cdot \text{m}^3 s^{-1}$ olarak hesaplanır. Standart durumdan giriş basıncı olan 3 atmosfer değerine karşılık gelen hacimsel debiyi bulmak için ideal gaz denkleminde orantı kurularak $\dot{V} = (P_{st}/P)\dot{V}_{st}$ eşitliği elde edilir. Bu eşitlik kullanılarak 3 atm basınçtaki hacimsel debi $\dot{V} = 1,1666 \times 10^{-5} \text{ S} \cdot \text{m}^3 s^{-1}$ olarak bulunur. Nemlendirme sıcaklığına ($T=70^\circ\text{C}$) karşılık gelen doymuş buharın kısmi basıncı doymuş su-buharı tablolarından $P_{v,sat} = 31,19 \text{ kPa}$ olarak bulunur.

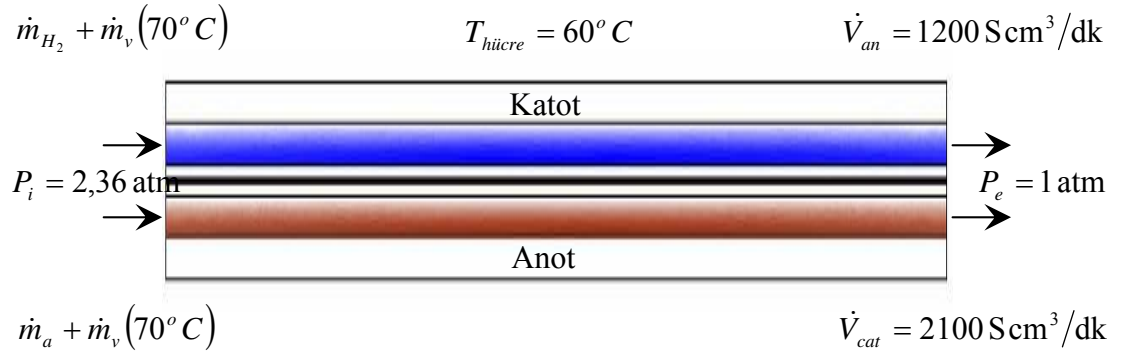
EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Katot tarafında beslenen havanın su buharına doymuş olduğu kabulü yapılarak bağıl nem değeri, $\phi = 1$ alınır ve $P_v = \phi P_{v,sat}$ formülü kullanılarak katot girişindeki su buharının kısmi basıncı, $P_v = 31,19$ kPa olarak bulunur. Su buharının kısmi basıncı hesaplandıktan sonra, $W = 0,622 P_v / (P - P_v)$ formülü kullanılarak nem oranı $W = 0,07122$ kg_v/kg_a olarak elde edilir. Kuru havanın kısmi basıncı, $P_a = P - P_v$ formülü kullanılarak $P_a = 272,79$ kPa olarak bulunur. Özgül hacim tanımından, $v_a = V/m_a$ ve ideal gaz denkleminde faydalanan özgül hacim için $v_a = R_a T / P_a$ formülü bulunur. Bu formül kullanılarak kuru havanın özgül hacmi, $v_a = 0,3610$ m³/kg_a olarak hesaplanır. Katot girişindeki kuru havanın kütleli debisi, toplam hacimsel debi ve kütleli debi ile hacimsel debi arasındaki bağıntı, $\dot{m}_a = \dot{V} / v_a$ kullanılarak $\dot{m}_a = 3,2315 \times 10^{-5}$ kg_a/s olarak hesaplanır. Nem oranı tanımı, $\dot{m}_v = W \dot{m}_a$ kullanılarak katot girişindeki su buharının kütleli debisi, $\dot{m}_v = 0,2298 \times 10^{-5}$ kg_v/s olarak hesaplanır. Bu noktadan sonra hava bileşimindeki O₂ ve N₂ mol miktarları kullanılarak katot girişindeki gerçek O₂ ve N₂ molar debiler hesaplanacaktır. Katot girişindeki su buhar ve kuru hava molar debileri, $\dot{N}_v = \dot{m}_v / MW_v$ ve $\dot{N}_a = \dot{m}_a / MW_a$ formülleri kullanılarak $\dot{N}_v = 0,0127 \times 10^{-5}$ kmol/s ve $\dot{N}_a = 0,1116 \times 10^{-5}$ kmol/s olarak hesaplanır. Havanın 1 mol O₂ ve 3.76 mol N₂ içerdiği kabul edilirse, katot girişindeki O₂ ve N₂ bileşenlerinin gerçek molar debileri, orantı kurularak $\dot{N}_{O_2} = 0,0234 \times 10^{-5}$ kmol/s ve $\dot{N}_{N_2} = 0,0881 \times 10^{-5}$ kmol/s olarak hesaplanır. Nolar debiden tekrar kütleli debiye geçmek için $\dot{m}_{O_2} = \dot{N}_{O_2} MW_{O_2}$ ve $\dot{m}_{N_2} = \dot{N}_{N_2} MW_{N_2}$ formülleri kullanılarak $\dot{m}_{O_2} = 0,7498$ kg_{O₂}/s ve $\dot{m}_{N_2} = 2,4674$ kg_{N₂}/s olarak hesaplanır. Katot kısmındaki toplam kütleli debi, $\dot{m}_{cat} = \dot{m}_a + \dot{m}_v$ formülü kullanılarak $\dot{m}_{cat} = 3,4613 \times 10^{-5}$ kg/s olarak hesaplanır.

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Katot girişindeki nemli hava karışımını oluşturan O_2 , N_2 ve H_2O bileşenlerinin kütle kesirleri, $y_{O_2} = \dot{m}_{O_2} / \dot{m}_{cat}$, $y_{N_2} = \dot{m}_{N_2} / \dot{m}_{cat}$ ve $y_v = \dot{m}_v / \dot{m}_{cat}$ eşitlikleri kullanılarak, $y_{O_2} = 0,2166$, $y_{N_2} = 0,7128$ ve $y_v = 0,0037$ olarak hesaplanır.

Grup II – Durum 2



Şekil 6.5. Grup II – Durum 2 sınır şartları

Anot tarafı giriş (Hidrojen + Su buharı)

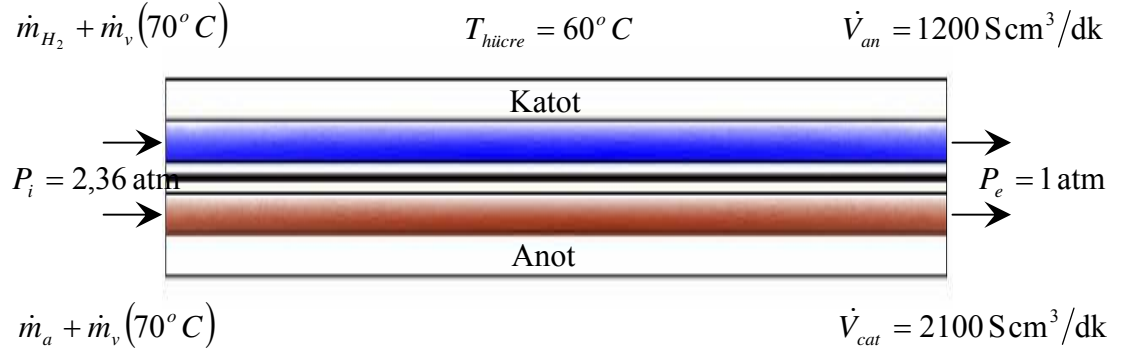
Grup II- Durum 1'den farkı sadece hücre sıcaklığının değişmiş olmasıdır. Hücre sıcaklığındaki değişim hücre girişindeki kütle kesirlerini ve toplam kütleli debi miktarını etkilemez. Dolayısıyla, GII-D1 değerlerinin aynısı alınır. Yani; $y_{H_2} = 0,4946$, $y_v = 0,5054$ ve $\dot{m}_{an} = 0,2598 \times 10^{-5} \text{ kg/s}$.

Katot tarafı giriş (Hava + Su buharı)

Gurup II- Durum 1'den farkı sadece hücre sıcaklığının değişmiş olmasıdır. Hücre sıcaklığındaki değişim hücre girişindeki kütle kesirlerini ve toplam kütleli debi miktarını etkilemez. Dolayısıyla, GII-D1 değerlerinin aynısı alınır. Yani; $y_{O_2} = 0,2166$, $y_{N_2} = 0,7128$, $y_v = 0,0037$ ve $\dot{m}_{cat} = 3,4613 \times 10^{-5} \text{ kg/s}$

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Grup II – Durum 3



Şekil 6.6. Grup II – Durum 3 sınır şartları

Anot tarafı giriş (Hidrojen + Su buharı)

Gurup II- Durum 1’den farkı sadece hücre sıcaklığının değişmiş olmasıdır. Hücre sıcaklığındaki değişim hücre girişindeki kütle kesirlerini ve toplam kütleli debi miktarını etkilemez. Dolayısıyla, GII-D1 değerlerinin aynısı alınır. Yani; $y_{H_2} = 0,4946$, $y_v = 0,5054$ ve $\dot{m}_{an} = 0,2598 \times 10^{-5} \text{ kg/s}$.

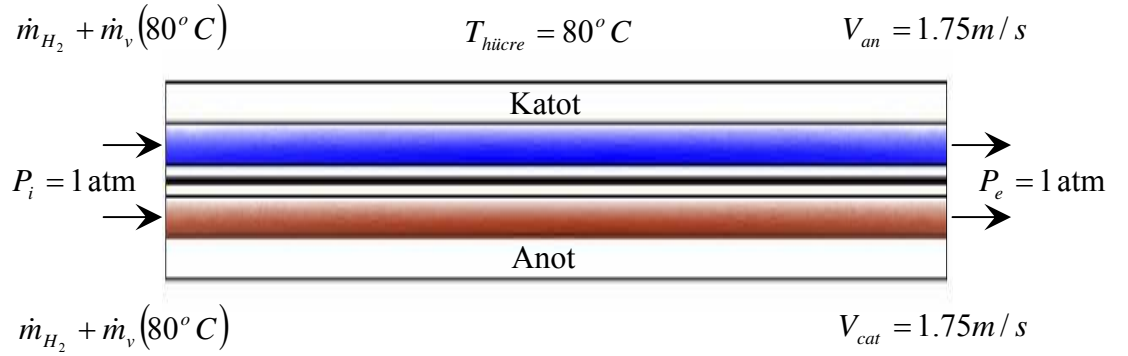
Katot tarafı giriş (Hava + Su buharı)

Grup II- Durum 1’den farkı sadece hücre sıcaklığının değişmiş olmasıdır. Hücre sıcaklığındaki değişim hücre girişindeki kütle kesirlerini ve toplam kütleli debi miktarını etkilemez. Dolayısıyla, GII-D1 değerlerinin aynısı alınır. Yani; $y_{O_2} = 0,2166$, $y_{N_2} = 0,7128$, $y_v = 0,0037$ ve $\dot{m}_{cat} = 3,4613 \times 10^{-5} \text{ kg/s}$

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

DÖRT BLOKLU HÜCREYE AİT İNCELEME DURUMLARI İÇİN GİRİŞ-ÇIKIŞ ŞARTLARININ BELİRLENMESİ

Durum 1



Şekil 6.1. Durum 1 sınır şartları

Anot tarafı giriş (Hidrojen + Su buharı)

Nemlendirme sıcaklığına ($T=80^\circ\text{C}$) karşılık gelen doymuş buharın kısmi basıncı doymuş su-buharı tablolarından $P_{v,sat}=47,39\text{ kPa}$ olarak bulunur. Anot tarafında beslenen havanın bağıl nem değeri, $\phi = 1$ alınır.

Katot girişindeki su buharının kısmi basıncı:

Eş. 6.1 kullanılarak katot girişindeki su buharının kısmi basıncı, $P_v = 47,39\text{ kPa}$ olarak bulunur.

Anot girişindeki su buhar basıncı ve toplam basınç değerleri için nem oranı, $W = 7,8516\text{ kg}_v/\text{kg}_{H_2}$ olarak hesaplanır.

1 Atm basınç ve 80°C sıcaklıkta hidrojen ve su buharını ideal gaz olarak kabul edebiliriz. Bu durumda, su buharı ve hidrojenin özgül hacimleri, doymuş buhar

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

tabloları kullanılarak hesaplanırsa, $v_v = 3,407 \text{ m}^3/\text{kg}$ ve $v_{H_2} = 28,917 \text{ m}^3/\text{kg}$ olarak bulunur. Daha sonra, anot girişindeki gazların toplam özgül hacmi, özgül hacim

cinsinden kütle korunum eşitliği kullanılarak, $v_{an} = 3,7052 \text{ m}^3/\text{kg}$ olarak hesaplanır.

Anot girişindeki gazların toplam kütleli debisi, $\dot{m}_{an} = \dot{V}/v_{an}$ eşitliği kullanılarak,

toplam hacimsel debi ve anot girişindeki gazların toplam özgül hacmi eşitlikte yerine konularak, $\dot{m}_{an} = 3,0979 \times 10^{-6} \text{ kg/s}$ olarak hesaplanır.

Eş.6.9'dan faydalanarak, anot girişindeki hidrojenin kütleli debisi, $\dot{m}_{H_2} = 3,4998 \times 10^{-7} \text{ kg/s}$ olarak elde edilir.

Kütle korunum eşitliklerinden, anot girişindeki su buharının kütleli debisi, Eş.6.10 kullanılarak, $\dot{m}_v = 2,7479 \times 10^{-6} \text{ kg/s}$ olarak hesaplanır. Anot girişindeki nemli yakıt karışımını oluşturan H_2 ve H_2O bileşenlerinin kütle kesirleri, Eş.6.11 ve Eş.6.12 kullanılarak $y_{H_2} = 0,113$ ve $y_v = 0,887$ olarak hesaplanır.

Katot tarafı giriş (Hava + Su buharı)

Nemli hava için deniz seviyesi şartlarında hazırlanmış psikrometrik diyagramda, nemlendirme sıcaklığına (kuru termometre sıcaklığı, $T=80^\circ\text{C}$) karşılık gelen doyma eğrisi üzerindeki noktanın nem oranı $W = 0,55295 \text{ kg}_v/\text{kg}_a$ olarak okunur. Yine, psikrometrik diyagramda, 80°C kuru termometre sıcaklığına karşılık gelen doyma eğrisi üzerindeki noktanın özgül hacmi $v_a = 1,0005 \text{ m}^3/\text{kg}_a$ olarak okunur. Katot girişindeki kuru havanın kütleli debisi, toplam hacimsel debi ve kütleli debi ile hacimsel debi arasındaki bağıntı, $\dot{m}_a = \dot{V}/v_a$ kullanılarak $\dot{m}_a = 1,0156 \times 10^{-6} \text{ kg}_a/\text{s}$ olarak hesaplanır. Nem oranı tanımı, $\dot{m}_v = W \dot{m}_a$ kullanılarak katot girişindeki su

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

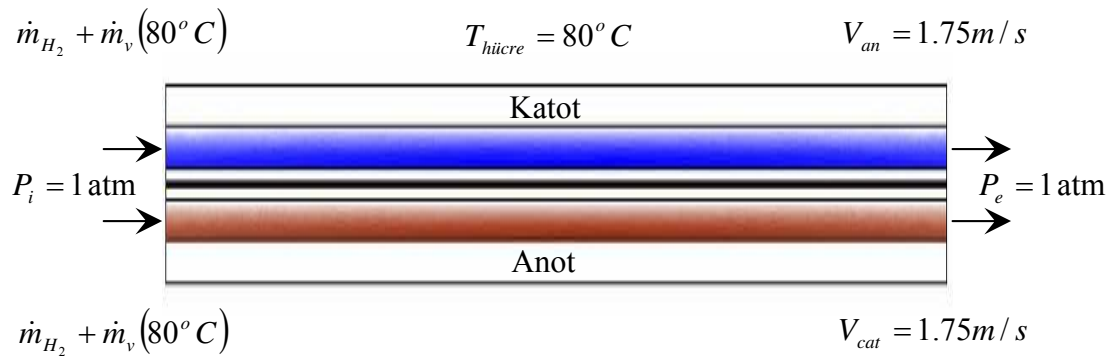
buharının kütleli debisi, $\dot{m}_v = 5,6158 \times 10^{-7} \text{ kg}_v/\text{s}$ olarak hesaplanır. Bu noktadan sonra hava bileşimindeki O_2 ve N_2 mol miktarları kullanılarak katot girişindeki

gerçek O_2 ve N_2 molar debiler hesaplanacaktır. Katot girişindeki su buhar ve kuru hava molar debileri;

Eş.6.13 ve Eş.6.14 kullanılarak $\dot{N}_v = 3,1199 \times 10^{-8} \text{ kmol/s}$ ve $\dot{N}_a = 3,5056 \times 10^{-8} \text{ kmol/s}$ olarak hesaplanır. Havanın 1 mol O_2 ve 3,76 mol N_2 içerdiği kabul edilirse, katot girişindeki O_2 ve N_2 bileşenlerinin gerçek molar debileri orantı kurularak $\dot{N}_{\text{O}_2} = 7,3649 \times 10^{-9} \text{ kmol/s}$ ve $\dot{N}_{\text{N}_2} = 2,7692 \times 10^{-8} \text{ kmol/s}$ olarak hesaplanır. Molar debiden tekrar kütleli debiye geçmek için Eş.6.15 ve Eş.6.16 kullanılarak $\dot{m}_{\text{O}_2} = 2,3567 \times 10^{-7} \text{ kg}_{\text{O}_2}/\text{s}$ ve $\dot{m}_{\text{N}_2} = 7,7573 \times 10^{-7} \text{ kg}_{\text{N}_2}/\text{s}$ olarak hesaplanır.

Katot kısmındaki toplam kütleli debi, Eş.6.17 kullanılarak $\dot{m}_{cat} = 1,5771 \times 10^{-6} \text{ kg/s}$ olarak hesaplanır. Katot girişindeki nemli hava karışımını oluşturan O_2 , N_2 ve H_2O bileşenlerinin kütle kesirleri, Eş.(6.18-20), kullanılarak $y_{\text{O}_2} = 0,1494$, $y_{\text{N}_2} = 0,4919$ ve $y_v = 0,3561$ olarak hesaplanır.

Durum 2



EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Durum 2 sınır şartları

Anot tarafı giriş (Hidrojen + Su buharı)

Nemlendirme sıcaklığına ($T=80\text{ }^{\circ}\text{C}$) karşılık gelen doymuş buharın kısmi basıncı doymuş su-buharı tablolarından $P_{v,sat}=47,39\text{ kPa}$ olarak bulunur. Anot tarafında beslenen havanın bağıl nem değeri, $\phi=0.6$ alınır ve Eş.6.1 kullanılarak katot girişindeki su buharının kısmi basıncı, $P_v=47,39\text{ kPa}$ olarak bulunur. Su buharının kısmi basıncı hesaplandıktan sonra, anot tarafı girişinde H_2 ve H_2O buharı (v) karışımı için nem oranı Eş.6.8’de olduğu gibi tanımlanır.

Bu tanım ve su buharı ile hidrojen için ideal gaz eşitlikleri kullanılarak, Eş.6.2 elde edilir. Eş.6.2’de sadeleştirmeler yapıldıktan sonra, nem oranı için Eş.6.3 elde edilir. Hidrojen ve su buharı için gaz sabitleri nem oranı eşitliğine yerleştirildikten sonra, nem oranı su buharı basıncı cinsinden, Eş.6.5’de görüldüğü gibidir. Anot girişindeki su buhar basıncı ve toplam basınç değerleri için nem oranı, $W=3,48584\text{ kg}_v/\text{kg}_{\text{H}_2}$ olarak hesaplanır. 1 Atm basınç ve 80°C sıcaklıkta hidrojen ve su buharını, sıkıştırma faktörü, Z , 1’e çok yakın olduğu için ideal gaz olarak kabul edebiliriz. Bu durumda, su buharı ve hidrojenin özgül hacimleri, Eş.6.22 ve Eş.6.23 kullanılarak hesaplanırsa, $v_v=18,39\text{ m}^3/\text{kg}$ ve $v_{\text{H}_2}=16,22\text{ m}^3/\text{kg}$ olarak hesaplanır.

Daha sonra, anot girişindeki gazların toplam özgül hacmi, özgül hacim cinsinden kütle korunum eşitliği kullanılarak, $v_{an}=0,116\text{ m}^3/\text{kg}$ olarak hesaplanır. Anot girişindeki gazların toplam kütleli debisi, $\dot{m}_{an}=\dot{V}/v_{an}$ eşitliği kullanılarak, toplam hacimsel debi ve anot girişindeki gazların toplam özgül hacmi formülde yerine konularak, $\dot{m}_{an}=8,7565\times 10^{-6}\text{ kg/s}$ olarak hesaplanır.

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Eş.6.9'dan faydalananarak, anot girişindeki hidrojenin kütleli debisi, $\dot{m}_{H_2} = 0,1245 \times 10^{-5} \text{ kg/s}$ olarak elde edilir. Kütle korunum denkleminde, anot girişindeki su buharının kütleli debisi, Eş.6.10 kullanılarak, $\dot{m}_v = 1,952 \times 10^{-6} \text{ kg/s}$ olarak hesaplanır.

Anot girişindeki nemli yakıt karışımını oluşturan H_2 ve H_2O bileşenlerinin kütle kesirleri, Eş.6.11 ve Eş.6.12 kullanılarak $y_{H_2} = 0,2229$ ve $y_v = 0,7771$ olarak hesaplanır.

Katot tarafı giriş (Hava + Su buharı)

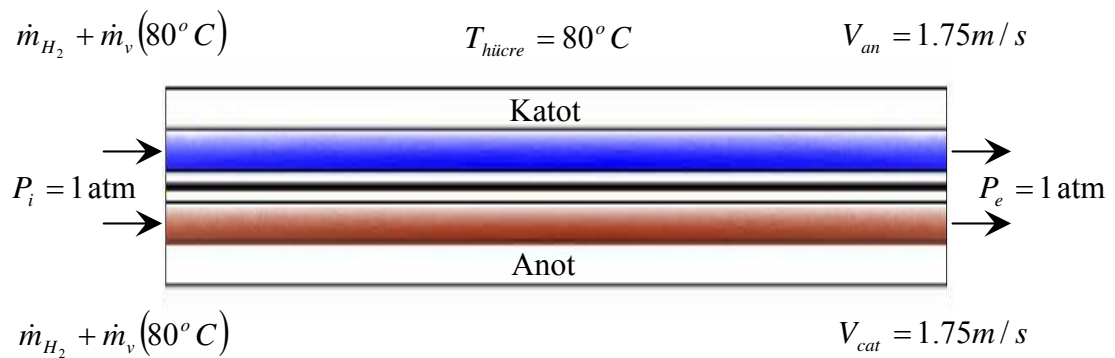
Nemlendirme sıcaklığına ($T=80^\circ\text{C}$) karşılık gelen doymuş buharın kısmi basıncı doymuş su-buharı tablolarından $P_{v,sat} = 47,39 \text{ kPa}$ olarak bulunur. Katot tarafında beslenen havanın bağıl nem değeri, $\phi = 0.6$ alınır ve Eş.6.1 kullanılarak katot girişindeki su buharının kısmi basıncı, $P_v = 47,39 \text{ kPa}$ olarak bulunur. Su buharının kısmi basıncı hesaplandıktan sonra, Eş.6.24 kullanılarak nem oranı $W = 0,2447 \text{ kg}_v/\text{kg}_a$ olarak elde edilir.

Özgül hacim tanımından, $v_a = V/\dot{m}_a$ ve ideal gaz eşitliğinden faydalananarak özgül hacim için $v_a = R_a T/P_a$ eşitliği bulunur. Bu eşitlik kullanılarak kuru havanın özgül hacmi, $v_a = 0,4736 \text{ m}^3/\text{kg}_a$ olarak hesaplanır. Katot girişindeki kuru havanın kütleli debisi, toplam hacimsel debi ve kütleli debi ile hacimsel debi arasındaki bağıntı, $\dot{m}_a = \dot{V}/v_a$ kullanılarak $\dot{m}_a = 1,0156 \times 10^{-6} \text{ kg}_a/\text{s}$ olarak hesaplanır. Nem oranı tanımı, Eş.6.8 kullanılarak katot girişindeki su buharının kütleli debisi, $\dot{m}_v = 2,4851 \times 10^{-7} \text{ kg}_v/\text{s}$ olarak hesaplanır.

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Bu noktadan sonra hava bileşimindeki O_2 ve N_2 mol miktarları kullanılarak katot girişindeki gerçek O_2 ve N_2 molar debiler hesaplanacaktır. Katot girişindeki su buhar ve kuru hava molar debileri, Eş.6.13 ve Eş.6.14 kullanılarak $\dot{N}_v = 1,3806 \times 10^{-8}$ kmol/s ve $\dot{N}_a = 3,5056 \times 10^{-8}$ kmol/s olarak hesaplanır. Havanın 1 mol O_2 ve 3.76 mol N_2 içerdiği kabul edilirse, katot girişindeki O_2 ve N_2 bileşenlerinin gerçek molar debileri, orantı kurularak $\dot{N}_{O_2} = 7,3649 \times 10^{-9}$ kmol/s ve $\dot{N}_{N_2} = 2,7692 \times 10^{-8}$ kmol/s olarak hesaplanır. Molar debiden tekrar kütleli debiye geçmek için Eş.6.13 ve Eş.6.15 kullanılarak $\dot{m}_{O_2} = 2,3567 \times 10^{-7}$ kg $_{O_2}$ /s ve $\dot{m}_{N_2} = 7,7537 \times 10^{-7}$ kg $_{N_2}$ /s olarak hesaplanır. Katot kısmındaki toplam kütleli debi, Eş.6.17 kullanılarak $\dot{m}_{cat} = 1,2641 \times 10^{-6}$ kg/s olarak hesaplanır. Katot girişindeki nemli hava karışımını oluşturan O_2 , N_2 ve H_2O bileşenlerinin kütle kesirleri, Eş.(6.18-20) kullanılarak, $y_{O_2} = 0,1864$, $y_{N_2} = 0,6134$ ve $y_v = 0,1966$ olarak hesaplanır.

Durum 3



EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Durum 3 sınır şartları

Anot tarafı giriş (Hidrojen + Su buharı)

Nemlendirme sıcaklığına ($T=80\text{ }^{\circ}\text{C}$) karşılık gelen doymuş buharın kısmi basıncı doymuş su-buharı tablolarından $P_{v,sat}=47,39\text{ kPa}$ olarak bulunur. Anot tarafında beslenen havanın bağıl nem değeri, $\phi=0.2$ alınır ve Eş.6.1 kullanılarak katot girişindeki su buharının kısmi basıncı, $P_v=47,39\text{ kPa}$ olarak bulunur. Su buharının kısmi basıncı hesaplandıktan sonra, anot tarafı girişinde H_2 ve H_2O buharı (v) karışımı için nem oranı Eş.6.8’de olduğu gibi tanımlanır.

Bu tanım ve su buharı ile hidrojen için ideal gaz eşitlikleri kullanılarak, Eş.6.2 elde edilir. Eş.6.2’de sadeleştirmeler yapıldıktan sonra, nem oranı için Eş.6.3 elde edilir. Hidrojen ve su buharı için gaz sabitleri nem oranı eşitliğine yerleştirildikten sonra, nem oranı su buharı basıncı cinsinden, Eş.6.5’de görüldüğü gibidir. Anot girişindeki su buhar basıncı ve toplam basınç değerleri için nem oranı, $W=0,92213\text{ kg}_v/\text{kg}_{\text{H}_2}$ olarak hesaplanır. 1 Atm basınç ve 80°C sıcaklıkta hidrojen ve su buharını, sıkıştırma faktörü, Z , 1’e çok yakın olduğu için ideal gaz olarak kabul edebiliriz. Bu durumda, su buharı ve hidrojenin özgül hacimleri, Eş.6.22 ve Eş.6.23 kullanılarak hesaplanırsa, $v_v=28,794\text{ m}^3/\text{kg}$ ve $v_{\text{H}_2}=14,255\text{ m}^3/\text{kg}$ olarak hesaplanır.

Daha sonra, anot girişindeki gazların toplam özgül hacmi, özgül hacim cinsinden kütle korunum eşitliği kullanılarak, $v_{an}=0,1049\text{ m}^3/\text{kg}$ olarak hesaplanır. Anot girişindeki gazların toplam kütleli debisi, $\dot{m}_{an}=\dot{V}/v_{an}$ eşitliği kullanılarak, toplam hacimsel debi ve anot girişindeki gazların toplam özgül hacmi formülde yerine konularak, $\dot{m}_{an}=9,6832\times 10^{-6}\text{ kg/s}$ olarak hesaplanır.

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Eş.6.9'dan faydalanarak, anot girişindeki hidrojenin kütleli debisi, $\dot{m}_{H_2} = 5,0377 \times 10^{-6} \text{ kg/s}$ olarak elde edilir. Kütle korunum denkleminde, anot girişindeki su buharının kütleli debisi, Eş.6.10 kullanılarak, $\dot{m}_v = 4,6454 \times 10^{-6} \text{ kg/s}$ olarak hesaplanır.

Anot girişindeki nemli yakıt karışımını oluşturan H_2 ve H_2O bileşenlerinin kütle kesirleri, Eş.6.11 ve Eş.6.12 kullanılarak $y_{H_2} = 0,5203$ ve $y_v = 0,4797$ olarak hesaplanır.

Katot tarafı giriş (Hava + Su buharı)

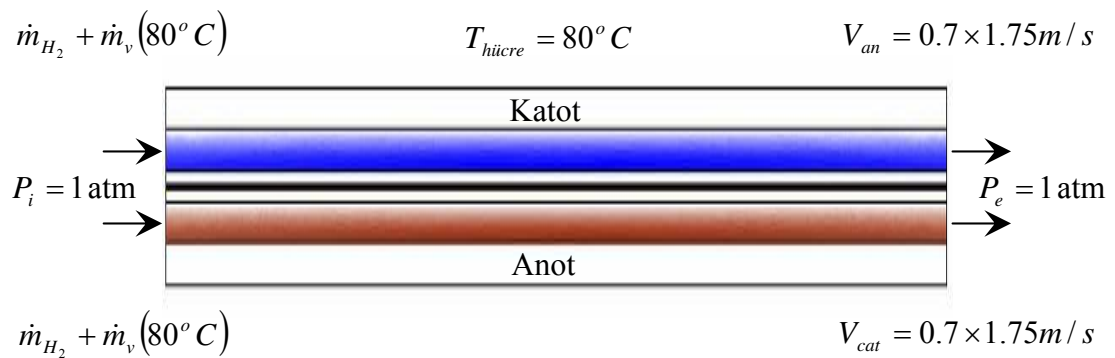
Nemlendirme sıcaklığına ($T=80^\circ\text{C}$) karşılık gelen doymuş buharın kısmi basıncı doymuş su-buharı tablolarından $P_{v,sat} = 47,39 \text{ kPa}$ olarak bulunur. Katot tarafında beslenen havanın bağıl nem değeri, $\phi = 0.2$ alınır ve Eş.6.1 kullanılarak katot girişindeki su buharının kısmi basıncı, $P_v = 47,39 \text{ kPa}$ olarak bulunur. Su buharının kısmi basıncı hesaplandıktan sonra, Eş.6.24 kullanılarak nem oranı $W = 0,55295 \text{ kg}_v/\text{kg}_a$ olarak elde edilir.

Özgül hacim tanımından, $v_a = V/\dot{m}_a$ ve ideal gaz eşitliğinden faydalanarak özgül hacim için $v_a = R_a T/P_a$ eşitliği bulunur. Bu eşitlik kullanılarak kuru havanın özgül hacmi, $v_a = 1,0005 \text{ m}^3/\text{kg}_a$ olarak hesaplanır. Katot girişindeki kuru havanın kütleli debisi, toplam hacimsel debi ve kütleli debi ile hacimsel debi arasındaki bağıntı, $\dot{m}_a = \dot{V}/v_a$ kullanılarak $\dot{m}_a = 1,0156 \times 10^{-6} \text{ kg}_a/\text{s}$ olarak hesaplanır. Nem oranı tanımı, Eş.6.8 kullanılarak katot girişindeki su buharının kütleli debisi, $\dot{m}_v = 6,5608 \times 10^{-8} \text{ kg}_v/\text{s}$ olarak hesaplanır.

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Bu noktadan sonra hava bileşimindeki O_2 ve N_2 mol miktarları kullanılarak katot girişindeki gerçek O_2 ve N_2 molar debiler hesaplanacaktır. Katot girişindeki su buhar ve kuru hava molar debileri, Eş.6.13 ve Eş.6.14 kullanılarak $\dot{N}_v = 3,6449 \times 10^{-9}$ kmol/s ve $\dot{N}_a = 3,5056 \times 10^{-8}$ kmol/s olarak hesaplanır. Havanın 1 mol O_2 ve 3.76 mol N_2 içerdiği kabul edilirse, katot girişindeki O_2 ve N_2 bileşenlerinin gerçek molar debileri, orantı kurularak $\dot{N}_{O_2} = 7,3649 \times 10^{-9}$ kmol/s ve $\dot{N}_{N_2} = 2,7692 \times 10^{-8}$ kmol/s olarak hesaplanır. Molar debiden tekrar kütleli debiye geçmek için Eş.6.13 ve Eş.6.15 kullanılarak $\dot{m}_{O_2} = 2,3567 \times 10^{-7}$ kg $_{O_2}$ /s ve $\dot{m}_{N_2} = 7,7537 \times 10^{-7}$ kg $_{N_2}$ /s olarak hesaplanır. Katot kısmındaki toplam kütleli debi, Eş.6.17 kullanılarak $\dot{m}_{cat} = 1,0812 \times 10^{-6}$ kg/s olarak hesaplanır. Katot girişindeki nemli hava karışımını oluşturan O_2 , N_2 ve H_2O bileşenlerinin kütle kesirleri, Eş.(6.18-20) kullanılarak, $y_{O_2} = 0,218$, $y_{N_2} = 0,7171$ ve $y_v = 0,0607$ olarak hesaplanır.

Durum 4



EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Durum 4 sınır şartları

Anot tarafı giriş (Hidrojen + Su buharı)

Nemlendirme sıcaklığına ($T=80\text{ }^{\circ}\text{C}$) karşılık gelen doymuş buharın kısmi basıncı doymuş su-buharı tablolarından $P_{v,sat}=47,39\text{ kPa}$ olarak bulunur. Anot tarafında beslenen havanın bağıl nem değeri, $\phi=1$ alınır ve Eş.6.1 kullanılarak katot girişindeki su buharının kısmi basıncı, $P_v=47,39\text{ kPa}$ olarak bulunur. Su buharının kısmi basıncı hesaplandıktan sonra, anot tarafı girişinde H_2 ve H_2O buharı (v) karışımı için nem oranı Eş.6.8’de olduğu gibi tanımlanır.

Bu tanım ve su buharı ile hidrojen için ideal gaz eşitlikleri kullanılarak, Eş.6.2 elde edilir. Eş.6.2’de sadeleştirmeler yapıldıktan sonra, nem oranı için Eş.6.3 elde edilir. Hidrojen ve su buharı için gaz sabitleri nem oranı eşitliğine yerleştirildikten sonra, nem oranı su buharı basıncı cinsinden, Eş.6.5’de görüldüğü gibidir. Anot girişindeki su buhar basıncı ve toplam basınç değerleri için nem oranı, $W=7,8516\text{ kg}_v/\text{kg}_{\text{H}_2}$ olarak hesaplanır. 1 Atm basınç ve 80°C sıcaklıkta hidrojen ve su buharını, sıkıştırma faktörü, Z , 1’e çok yakın olduğu için ideal gaz olarak kabul edebiliriz. Bu durumda, su buharı ve hidrojenin özgül hacimleri, Eş.6.22 ve Eş.6.23 kullanılarak hesaplanırsa, $v_v=28,794\text{ m}^3/\text{kg}$ ve $v_{\text{H}_2}=14,255\text{ m}^3/\text{kg}$ olarak hesaplanır.

Daha sonra, anot girişindeki gazların toplam özgül hacmi, özgül hacim cinsinden kütle korunum eşitliği kullanılarak, $v_{an}=0,328\text{ m}^3/\text{kg}$ olarak hesaplanır. Anot girişindeki gazların toplam kütleli debisi, $\dot{m}_{an}=\dot{V}/v_{an}$ eşitliği kullanılarak, toplam hacimsel debi ve anot girişindeki gazların toplam özgül hacmi formülde yerine konularak, $\dot{m}_{an}=2,1685\times 10^{-6}\text{ kg/s}$ olarak hesaplanır.

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Eş.6.9'dan faydalanarak, anot girişindeki hidrojenin kütleli debisi, $\dot{m}_{H_2} = 2,4498 \times 10^{-7} \text{ kg/s}$ olarak elde edilir. Kütle korunum denkleminde, anot girişindeki su buharının kütleli debisi, Eş.6.10 kullanılarak, $\dot{m}_v = 1,9235 \times 10^{-6} \text{ kg/s}$ olarak hesaplanır.

Anot girişindeki nemli yakıt karışımını oluşturan H_2 ve H_2O bileşenlerinin kütle kesirleri, Eş.6.11 ve Eş.6.12 kullanılarak $y_{H_2} = 0,113$ ve $y_v = 0,887$ olarak hesaplanır.

Katot tarafı giriş (Hava + Su buharı)

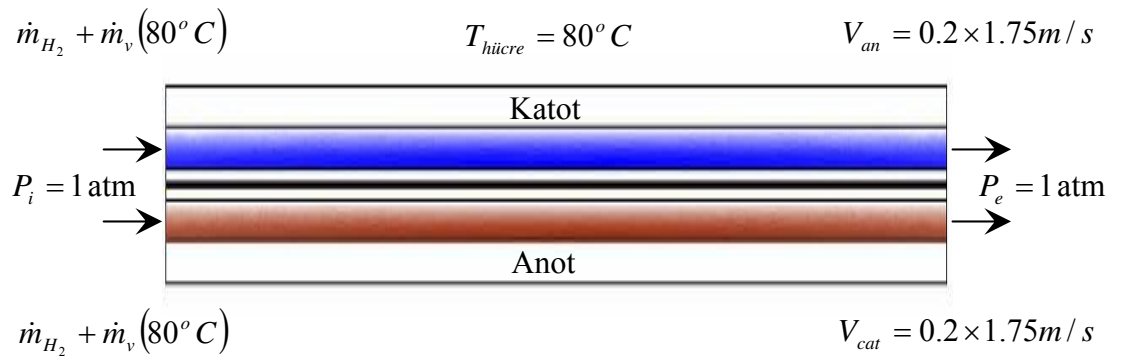
Nemlendirme sıcaklığına ($T=80^\circ\text{C}$) karşılık gelen doymuş buharın kısmi basıncı doymuş su-buharı tablolarından $P_{v,sat} = 47,39 \text{ kPa}$ olarak bulunur. Katot tarafında beslenen havanın bağıl nem değeri, $\phi = 1$ alınır ve Eş.6.1 kullanılarak katot girişindeki su buharının kısmi basıncı, $P_v = 47,39 \text{ kPa}$ olarak bulunur. Su buharının kısmi basıncı hesaplandıktan sonra, Eş.6.24 kullanılarak nem oranı $W = 0,55295 \text{ kg}_v/\text{kg}_a$ olarak elde edilir.

Özgül hacim tanımından, $v_a = V/\dot{m}_a$ ve ideal gaz eşitliğinden faydalanarak özgül hacim için $v_a = R_a T/P_a$ eşitliği bulunur. Bu eşitlik kullanılarak kuru havanın özgül hacmi, $v_a = 1,0005 \text{ m}^3/\text{kg}_a$ olarak hesaplanır. Katot girişindeki kuru havanın kütleli debisi, toplam hacimsel debi ve kütleli debi ile hacimsel debi arasındaki bağıntı, $\dot{m}_a = \dot{V}/v_a$ kullanılarak $\dot{m}_a = 7,1092 \times 10^{-7} \text{ kg}_a/\text{s}$ olarak hesaplanır. Nem oranı tanımı, Eş.6.8 kullanılarak katot girişindeki su buharının kütleli debisi, $\dot{m}_v = 3,9310 \times 10^{-7} \text{ kg}_v/\text{s}$ olarak hesaplanır.

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Bu noktadan sonra hava bileşimindeki O_2 ve N_2 mol miktarları kullanılarak katot girişindeki gerçek O_2 ve N_2 molar debiler hesaplanacaktır. Katot girişindeki su buhar ve kuru hava molar debileri, Eş.6.13 ve Eş.6.14 kullanılarak $\dot{N}_v = 2,1839 \times 10^{-8}$ kmol/s ve $\dot{N}_a = 3,5056 \times 10^{-8}$ kmol/s olarak hesaplanır. Havanın 1 mol O_2 ve 3.76 mol N_2 içerdiği kabul edilirse, katot girişindeki O_2 ve N_2 bileşenlerinin gerçek molar debileri, orantı kurularak $\dot{N}_{O_2} = 5,1554 \times 10^{-9}$ kmol/s ve $\dot{N}_{N_2} = 1,9384 \times 10^{-8}$ kmol/s olarak hesaplanır. Molar debiden tekrar kütleli debiye geçmek için Eş.6.13 ve Eş.6.15 kullanılarak $\dot{m}_{O_2} = 1,6496 \times 10^{-7}$ kg $_{O_2}$ /s ve $\dot{m}_{N_2} = 5,42765 \times 10^{-7}$ kg $_{N_2}$ /s olarak hesaplanır. Katot kısmındaki toplam kütleli debi, Eş.6.17 kullanılarak $\dot{m}_{cat} = 1,1040 \times 10^{-6}$ kg/s olarak hesaplanır. Katot girişindeki nemli hava karışımını oluşturan O_2 , N_2 ve H_2O bileşenlerinin kütle kesirleri, Eş.(6.18-20) kullanılarak, $y_{O_2} = 0,1494$, $y_{N_2} = 0,4916$ ve $y_v = 0,3561$ olarak hesaplanır.

Durum 5



EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Durum 5 sınır şartları

Anot tarafı giriş (Hidrojen + Su buharı)

Nemlendirme sıcaklığına ($T=80\text{ }^{\circ}\text{C}$) karşılık gelen doymuş buharın kısmi basıncı doymuş su-buharı tablolarından $P_{v,sat}=47,39\text{ kPa}$ olarak bulunur. Anot tarafında beslenen havanın bağıl nem değeri, $\phi=1$ alınır ve Eş.6.1 kullanılarak katot girişindeki su buharının kısmi basıncı, $P_v=47,39\text{ kPa}$ olarak bulunur. Su buharının kısmi basıncı hesaplandıktan sonra, anot tarafı girişinde H_2 ve H_2O buharı (v) karışımı için nem oranı Eş.6.8’de olduğu gibi tanımlanır.

Bu tanım ve su buharı ile hidrojen için ideal gaz eşitlikleri kullanılarak, Eş.6.2 elde edilir. Eş.6.2’de sadeleştirmeler yapıldıktan sonra, nem oranı için Eş.6.3 elde edilir. Hidrojen ve su buharı için gaz sabitleri nem oranı eşitliğine yerleştirildikten sonra, nem oranı su buharı basıncı cinsinden, Eş.6.5’de görüldüğü gibidir. Anot girişindeki su buhar basıncı ve toplam basınç değerleri için nem oranı, $W=7,8516\text{ kg}_v/\text{kg}_{\text{H}_2}$ olarak hesaplanır. 1 Atm basınç ve 80°C sıcaklıkta hidrojen ve su buharını, sıkıştırma faktörü, Z , 1’e çok yakın olduğu için ideal gaz olarak kabul edebiliriz. Bu durumda, su buharı ve hidrojenin özgül hacimleri, Eş.6.22 ve Eş.6.23 kullanılarak hesaplanırsa, $v_v=3,4070\text{ m}^3/\text{kg}$ ve $v_{\text{H}_2}=28,917\text{ m}^3/\text{kg}$ olarak hesaplanır.

Daha sonra, anot girişindeki gazların toplam özgül hacmi, özgül hacim cinsinden kütle korunum eşitliği kullanılarak, $v_{an}=0,328\text{ m}^3/\text{kg}$ olarak hesaplanır. Anot girişindeki gazların toplam kütleli debisi, $\dot{m}_{an}=\dot{V}/v_{an}$ eşitliği kullanılarak, toplam hacimsel debi ve anot girişindeki gazların toplam özgül hacmi formülde yerine konularak, $\dot{m}_{an}=6,1958\times 10^{-7}\text{ kg/s}$ olarak hesaplanır.

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Eş.6.9'dan faydalanarak, anot girişindeki hidrojenin kütleli debisi, $\dot{m}_{H_2} = 6,9996 \times 10^{-8} \text{ kg/s}$ olarak elde edilir. Kütle korunum denkleminde, anot girişindeki su buharının kütleli debisi, Eş.6.10 kullanılarak, $\dot{m}_v = 5,4958 \times 10^{-7} \text{ kg/s}$ olarak hesaplanır.

Anot girişindeki nemli yakıt karışımını oluşturan H_2 ve H_2O bileşenlerinin kütle kesirleri, Eş.6.11 ve Eş.6.12 kullanılarak $y_{H_2} = 0,113$ ve $y_v = 0,887$ olarak hesaplanır.

Katot tarafı giriş (Hava + Su buharı)

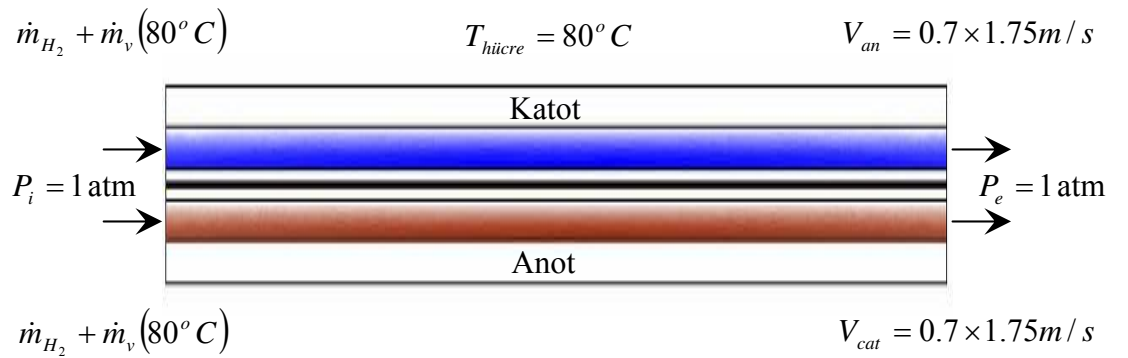
Nemlendirme sıcaklığına ($T=80^\circ\text{C}$) karşılık gelen doymuş buharın kısmi basıncı doymuş su-buharı tablolarından $P_{v,sat} = 47,39 \text{ kPa}$ olarak bulunur. Katot tarafında beslenen havanın bağıl nem değeri, $\phi = 1$ alınır ve Eş.6.1 kullanılarak katot girişindeki su buharının kısmi basıncı, $P_v = 47,39 \text{ kPa}$ olarak bulunur. Su buharının kısmi basıncı hesaplandıktan sonra, Eş.6.24 kullanılarak nem oranı $W = 0,55295 \text{ kg}_v/\text{kg}_a$ olarak elde edilir.

Özgül hacim tanımından, $v_a = V/\dot{m}_a$ ve ideal gaz eşitliğinden faydalanarak özgül hacim için $v_a = R_a T/P_a$ eşitliği bulunur. Bu eşitlik kullanılarak kuru havanın özgül hacmi, $v_a = 1,0005 \text{ m}^3/\text{kg}_a$ olarak hesaplanır. Katot girişindeki kuru havanın kütleli debisi, toplam hacimsel debi ve kütleli debi ile hacimsel debi arasındaki bağıntı, $\dot{m}_a = \dot{V}/v_a$ kullanılarak $\dot{m}_a = 2,0312 \times 10^{-7} \text{ kg}_a/\text{s}$ olarak hesaplanır. Nem oranı tanımı, Eş.6.8 kullanılarak katot girişindeki su buharının kütleli debisi, $\dot{m}_v = 1,1231 \times 10^{-7} \text{ kg}_v/\text{s}$ olarak hesaplanır.

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Bu noktadan sonra hava bileşimindeki O_2 ve N_2 mol miktarları kullanılarak katot girişindeki gerçek O_2 ve N_2 molar debiler hesaplanacaktır. Katot girişindeki su buhar ve kuru hava molar debileri, Eş.6.13 ve Eş.6.14 kullanılarak $\dot{N}_v = 6,2362 \times 10^{-9} \text{ kmol/s}$ ve $\dot{N}_a = 7,0113 \times 10^{-9} \text{ kmol/s}$ olarak hesaplanır. Havanın 1 mol O_2 ve 3.76 mol N_2 içerdiği kabul edilirse, katot girişindeki O_2 ve N_2 bileşenlerinin gerçek molar debileri, orantı kurularak $\dot{N}_{O_2} = 1,4729 \times 10^{-9} \text{ kmol/s}$ ve $\dot{N}_{N_2} = 5,5384 \times 10^{-9} \text{ kmol/s}$ olarak hesaplanır. Molar debiden tekrar kütleli debiye geçmek için Eş.6.13 ve Eş.6.15 kullanılarak $\dot{m}_{O_2} = 4,7132 \times 10^{-8} \text{ kg}_{O_2}/s$ ve $\dot{m}_{N_2} = 1,5507 \times 10^{-7} \text{ kg}_{N_2}/s$ olarak hesaplanır. Katot kısmındaki toplam kütleli debi, Eş.6.17 kullanılarak $\dot{m}_{cat} = 3,1543 \times 10^{-7} \text{ kg/s}$ olarak hesaplanır. Katot girişindeki nemli hava karışımını oluşturan O_2 , N_2 ve H_2O bileşenlerinin kütle kesirleri, Eş.(6.18-20) kullanılarak, $y_{O_2} = 0,1494$, $y_{N_2} = 0,4916$ ve $y_v = 0,3561$ olarak hesaplanır.

Durum 6



EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Durum 6 sınır şartları

Anot tarafı giriş (Hidrojen + Su buharı)

Nemlendirme sıcaklığına ($T=80\text{ }^{\circ}\text{C}$) karşılık gelen doymuş buharın kısmi basıncı doymuş su-buharı tablolarından $P_{v,sat}=47,39\text{ kPa}$ olarak bulunur. Anot tarafında beslenen havanın bağıl nem değeri, $\phi=0.6$ alınır ve Eş.6.1 kullanılarak katot girişindeki su buharının kısmi basıncı, $P_v=47,39\text{ kPa}$ olarak bulunur. Su buharının kısmi basıncı hesaplandıktan sonra, anot tarafı girişinde H_2 ve H_2O buharı (v) karışımı için nem oranı Eş.6.8’de olduğu gibi tanımlanır.

Bu tanım ve su buharı ile hidrojen için ideal gaz eşitlikleri kullanılarak, Eş.6.2 elde edilir. Eş.6.2’de sadeleştirmeler yapıldıktan sonra, nem oranı için Eş.6.3 elde edilir. Hidrojen ve su buharı için gaz sabitleri nem oranı eşitliğine yerleştirildikten sonra, nem oranı su buharı basıncı cinsinden, Eş.6.5’de görüldüğü gibidir. Anot girişindeki su buhar basıncı ve toplam basınç değerleri için nem oranı, $W=3,48584\text{ kg}_v/\text{kg}_{\text{H}_2}$ olarak hesaplanır. 1 Atm basınç ve 80°C sıcaklıkta hidrojen ve su buharını, sıkıştırma faktörü, Z , 1’e çok yakın olduğu için ideal gaz olarak kabul edebiliriz. Bu durumda, su buharı ve hidrojenin özgül hacimleri, Eş.6.22 ve Eş.6.23 kullanılarak hesaplanırsa, $v_v=18,39\text{ m}^3/\text{kg}$ ve $v_{\text{H}_2}=16,22\text{ m}^3/\text{kg}$ olarak hesaplanır.

Daha sonra, anot girişindeki gazların toplam özgül hacmi, özgül hacim cinsinden kütle korunum eşitliği kullanılarak, $v_{an}=0,116\text{ m}^3/\text{kg}$ olarak hesaplanır. Anot girişindeki gazların toplam kütleli debisi, $\dot{m}_{an}=\dot{V}/v_{an}$ eşitliği kullanılarak, toplam hacimsel debi ve anot girişindeki gazların toplam özgül hacmi formülde yerine konularak, $\dot{m}_{an}=6,1295\times 10^{-6}\text{ kg/s}$ olarak hesaplanır.

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Eş.6.9'dan faydalanarak, anot girişindeki hidrojenin kütleli debisi, $\dot{m}_{H_2} = 1,366 \times 10^{-6} \text{ kg/s}$ olarak elde edilir. Kütle korunum denkleminde, anot girişindeki su buharının kütleli debisi, Eş.6.10 kullanılarak, $\dot{m}_v = 4,763 \times 10^{-6} \text{ kg/s}$ olarak hesaplanır.

Anot girişindeki nemli yakıt karışımını oluşturan H_2 ve H_2O bileşenlerinin kütle kesirleri, Eş.6.11 ve Eş.6.12 kullanılarak $y_{H_2} = 0,2229$ ve $y_v = 0,7771$ olarak hesaplanır.

Katot tarafı giriş (Hava + Su buharı)

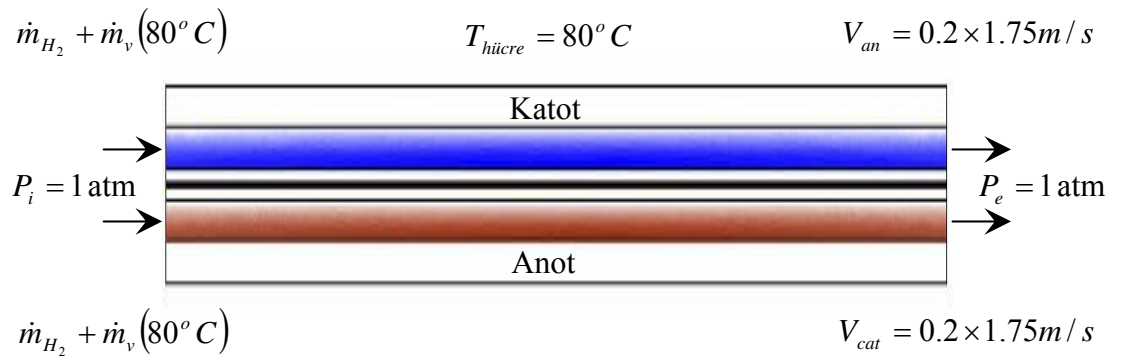
Nemlendirme sıcaklığına ($T=80^\circ\text{C}$) karşılık gelen doymuş buharın kısmi basıncı doymuş su-buharı tablolarından $P_{v,sat} = 47,39 \text{ kPa}$ olarak bulunur. Katot tarafında beslenen havanın bağıl nem değeri, $\phi = 0.6$ alınır ve Eş.6.1 kullanılarak katot girişindeki su buharının kısmi basıncı, $P_v = 47,39 \text{ kPa}$ olarak bulunur. Su buharının kısmi basıncı hesaplandıktan sonra, Eş.6.24 kullanılarak nem oranı $W = 0,2447 \text{ kg}_v/\text{kg}_a$ olarak elde edilir.

Özgül hacim tanımından, $v_a = V/\dot{m}_a$ ve ideal gaz eşitliğinden faydalanarak özgül hacim için $v_a = R_a T/P_a$ eşitliği bulunur. Bu eşitlik kullanılarak kuru havanın özgül hacmi, $v_a = 1,0005 \text{ m}^3/\text{kg}_a$ olarak hesaplanır. Katot girişindeki kuru havanın kütleli debisi, toplam hacimsel debi ve kütleli debi ile hacimsel debi arasındaki bağıntı, $\dot{m}_a = \dot{V}/v_a$ kullanılarak $\dot{m}_a = 7,1092 \times 10^{-7} \text{ kg}_a/\text{s}$ olarak hesaplanır. Nem oranı tanımı, Eş.6.8 kullanılarak katot girişindeki su buharının kütleli debisi, $\dot{m}_v = 1,7396 \times 10^{-7} \text{ kg}_v/\text{s}$ olarak hesaplanır.

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Bu noktadan sonra hava bileşimindeki O_2 ve N_2 mol miktarları kullanılarak katot girişindeki gerçek O_2 ve N_2 molar debiler hesaplanacaktır. Katot girişindeki su buhar ve kuru hava molar debileri, Eş.6.13 ve Eş.6.14 kullanılarak $\dot{N}_v = 9,6645 \times 10^{-9}$ kmol/s ve $\dot{N}_a = 2,4539 \times 10^{-8}$ kmol/s olarak hesaplanır. Havanın 1 mol O_2 ve 3.76 mol N_2 içerdiği kabul edilirse, katot girişindeki O_2 ve N_2 bileşenlerinin gerçek molar debileri, orantı kurularak $\dot{N}_{O_2} = 5,1554 \times 10^{-9}$ kmol/s ve $\dot{N}_{N_2} = 1,9384 \times 10^{-8}$ kmol/s olarak hesaplanır. Molar debiden tekrar kütleli debiye geçmek için Eş.6.13 ve Eş.6.15 kullanılarak $\dot{m}_{O_2} = 1,6496 \times 10^{-7}$ kg $_{O_2}$ /s ve $\dot{m}_{N_2} = 5,42765 \times 10^{-7}$ kg $_{N_2}$ /s olarak hesaplanır. Katot kısmındaki toplam kütleli debi, Eş.6.17 kullanılarak $\dot{m}_{cat} = 8,8488 \times 10^{-7}$ kg/s olarak hesaplanır. Katot girişindeki nemli hava karışımını oluşturan O_2 , N_2 ve H_2O bileşenlerinin kütle kesirleri, Eş.(6.18-20) kullanılarak, $y_{O_2} = 0,1864$, $y_{N_2} = 0,6134$ ve $y_v = 0,1966$ olarak hesaplanır.

Durum 7



EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Durum 7 sınır şartları

Anot tarafı giriş (Hidrojen + Su buharı)

Nemlendirme sıcaklığına ($T=80\text{ }^{\circ}\text{C}$) karşılık gelen doymuş buharın kısmi basıncı doymuş su-buharı tablolarından $P_{v,sat}=47,39\text{ kPa}$ olarak bulunur. Anot tarafında beslenen havanın bağıl nem değeri, $\phi=0.6$ alınır ve Eş.6.1 kullanılarak katot girişindeki su buharının kısmi basıncı, $P_v=47,39\text{ kPa}$ olarak bulunur. Su buharının kısmi basıncı hesaplandıktan sonra, anot tarafı girişinde H_2 ve H_2O buharı (v) karışımı için nem oranı Eş.6.8’de olduğu gibi tanımlanır.

Bu tanım ve su buharı ile hidrojen için ideal gaz eşitlikleri kullanılarak, Eş.6.2 elde edilir. Eş.6.2’de sadeleştirmeler yapıldıktan sonra, nem oranı için Eş.6.3 elde edilir. Hidrojen ve su buharı için gaz sabitleri nem oranı eşitliğine yerleştirildikten sonra, nem oranı su buharı basıncı cinsinden, Eş.6.5’de görüldüğü gibidir. Anot girişindeki su buhar basıncı ve toplam basınç değerleri için nem oranı, $W=3,48584\text{ kg}_v/\text{kg}_{\text{H}_2}$ olarak hesaplanır. 1 Atm basınç ve 80°C sıcaklıkta hidrojen ve su buharını, sıkıştırma faktörü, Z , 1’e çok yakın olduğu için ideal gaz olarak kabul edebiliriz. Bu durumda, su buharı ve hidrojenin özgül hacimleri, Eş.6.22 ve Eş.6.23 kullanılarak hesaplanırsa, $v_v=18,39\text{ m}^3/\text{kg}$ ve $v_{\text{H}_2}=16,22\text{ m}^3/\text{kg}$ olarak hesaplanır.

Daha sonra, anot girişindeki gazların toplam özgül hacmi, özgül hacim cinsinden kütle korunum eşitliği kullanılarak, $v_{an}=0,116\text{ m}^3/\text{kg}$ olarak hesaplanır. Anot girişindeki gazların toplam kütledebisi, $\dot{m}_{an}=\dot{V}/v_{an}$ eşitliği kullanılarak, toplam hacimsel debi ve anot girişindeki gazların toplam özgül hacmi formülde yerine konularak, $\dot{m}_{an}=1,7519\times 10^{-6}\text{ kg/s}$ olarak hesaplanır.

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Eş.6.9'dan faydalanarak, anot girişindeki hidrojenin kütleli debisi, $\dot{m}_{H_2} = 3,9054 \times 10^{-7} \text{ kg/s}$ olarak elde edilir. Kütle korunum denkleminde, anot girişindeki su buharının kütleli debisi, Eş.6.10 kullanılarak, $\dot{m}_v = 1,3613 \times 10^{-6} \text{ kg/s}$ olarak hesaplanır.

Anot girişindeki nemli yakıt karışımını oluşturan H_2 ve H_2O bileşenlerinin kütle kesirleri, Eş.6.11 ve Eş.6.12 kullanılarak $y_{H_2} = 0,2229$ ve $y_v = 0,7771$ olarak hesaplanır.

Katot tarafı giriş (Hava + Su buharı)

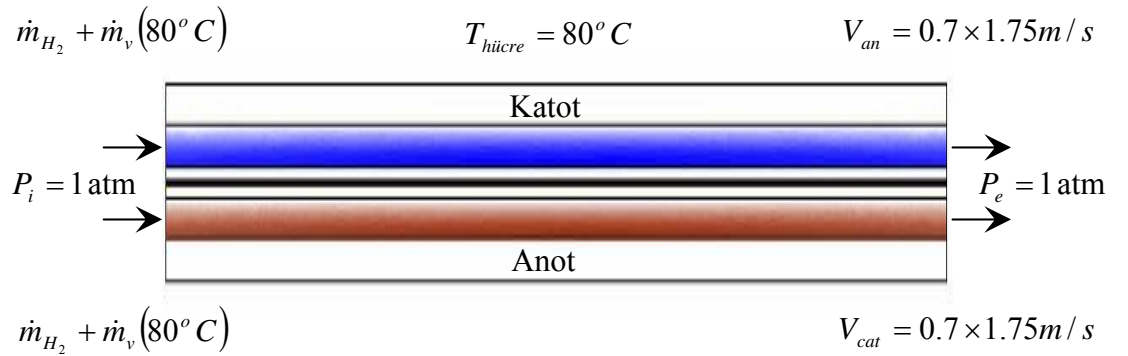
Nemlendirme sıcaklığına ($T=80^\circ\text{C}$) karşılık gelen doymuş buharın kısmi basıncı doymuş su-buharı tablolarından $P_{v,sat} = 47,39 \text{ kPa}$ olarak bulunur. Katot tarafında beslenen havanın bağıl nem değeri, $\phi = 0.6$ alınır ve Eş.6.1 kullanılarak katot girişindeki su buharının kısmi basıncı, $P_v = 47,39 \text{ kPa}$ olarak bulunur. Su buharının kısmi basıncı hesaplandıktan sonra, Eş.6.24 kullanılarak nem oranı $W = 0,2447 \text{ kg}_v/\text{kg}_a$ olarak elde edilir.

Özgül hacim tanımından, $v_a = V/\dot{m}_a$ ve ideal gaz eşitliğinden faydalanarak özgül hacim için $v_a = R_a T/P_a$ eşitliği bulunur. Bu eşitlik kullanılarak kuru havanın özgül hacmi, $v_a = 1,0005 \text{ m}^3/\text{kg}_a$ olarak hesaplanır. Katot girişindeki kuru havanın kütleli debisi, toplam hacimsel debi ve kütleli debi ile hacimsel debi arasındaki bağıntı, $\dot{m}_a = \dot{V}/v_a$ kullanılarak $\dot{m}_a = 2,0312 \times 10^{-7} \text{ kg}_a/\text{s}$ olarak hesaplanır. Nem oranı tanımı, Eş.6.8 kullanılarak katot girişindeki su buharının kütleli debisi, $\dot{m}_v = 4,9703 \times 10^{-8} \text{ kg}_v/\text{s}$ olarak hesaplanır.

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Bu noktadan sonra hava bileşimindeki O_2 ve N_2 mol miktarları kullanılarak katot girişindeki gerçek O_2 ve N_2 molar debiler hesaplanacaktır. Katot girişindeki su buhar ve kuru hava molar debileri, Eş.6.13 ve Eş.6.14 kullanılarak $\dot{N}_v = 2,7613 \times 10^{-9}$ kmol/s ve $\dot{N}_a = 7,0113 \times 10^{-9}$ kmol/s olarak hesaplanır. Havanın 1 mol O_2 ve 3.76 mol N_2 içerdiği kabul edilirse, katot girişindeki O_2 ve N_2 bileşenlerinin gerçek molar debileri, orantı kurularak $\dot{N}_{O_2} = 1,4729 \times 10^{-9}$ kmol/s ve $\dot{N}_{N_2} = 5,5384 \times 10^{-9}$ kmol/s olarak hesaplanır. Molar debiden tekrar kütleli debiye geçmek için Eş.6.13 ve Eş.6.15 kullanılarak $\dot{m}_{O_2} = 4,7132 \times 10^{-8}$ kg $_{O_2}$ /s ve $\dot{m}_{N_2} = 1,5507 \times 10^{-7}$ kg $_{N_2}$ /s olarak hesaplanır. Katot kısmındaki toplam kütleli debi, Eş.6.17 kullanılarak $\dot{m}_{cat} = 2,5282 \times 10^{-7}$ kg/s olarak hesaplanır. Katot girişindeki nemli hava karışımını oluşturan O_2 , N_2 ve H_2O bileşenlerinin kütle kesirleri, Eş.(6.18-20) kullanılarak, $y_{O_2} = 0,1864$, $y_{N_2} = 0,6134$ ve $y_v = 0,1966$ olarak hesaplanır.

Durum 8



EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Durum 8 sınır şartları

Anot tarafı giriş (Hidrojen + Su buharı)

Standart durumdan giriş basıncı olan atmosfer değerine karşılık gelen hacimsel debiyi bulmak için ideal gaz eşitliğinden orantı kurularak Eş.6.21 elde edilir.

Nemlendirme sıcaklığına ($T=80\text{ }^{\circ}\text{C}$) karşılık gelen doymuş buharın kısmi basıncı doymuş su-buharı tablolarından $P_{v,sat}=47,39\text{ kPa}$ olarak bulunur. Anot tarafında beslenen havanın bağıl nem değeri, $\phi=0.2$ alınır ve Eş.6.1 kullanılarak katot girişindeki su buharının kısmi basıncı, $P_v=47,39\text{ kPa}$ olarak bulunur. Su buharının kısmi basıncı hesaplandıktan sonra, anot tarafı girişinde H_2 ve H_2O buharı (v) karışımı için nem oranı Eş.6.8'de olduğu gibi tanımlanır.

Bu tanım ve su buharı ile hidrojen için ideal gaz eşitlikleri kullanılarak, Eş.6.2 elde edilir. Eş.6.2'de sadeleştirmeler yapıldıktan sonra, nem oranı için Eş.6.3 elde edilir. Hidrojen ve su buharı için gaz sabitleri nem oranı eşitliğine yerleştirildikten sonra, nem oranı su buharı basıncı cinsinden, Eş.6.5'de görüldüğü gibidir. Anot girişindeki su buhar basıncı ve toplam basınç değerleri için nem oranı, $W=0,92213\text{ kg}_v/\text{kg}_{\text{H}_2}$ olarak hesaplanır. 1 Atm basınç ve 80°C sıcaklıkta hidrojen ve su buharını, sıkıştırma faktörü, Z , 1'e çok yakın olduğu için ideal gaz olarak kabul edebiliriz. Bu durumda, su buharı ve hidrojenin özgül hacimleri, Eş.6.22 ve Eş.6.23 kullanılarak hesaplanırsa, $v_v=28,754\text{ m}^3/\text{kg}$ ve $v_{\text{H}_2}=14,255\text{ m}^3/\text{kg}$ olarak hesaplanır.

Daha sonra, anot girişindeki gazların toplam özgül hacmi, özgül hacim cinsinden kütle korunum eşitliği kullanılarak, $v_{an}=0,1049\text{ m}^3/\text{kg}$ olarak hesaplanır. Anot girişindeki gazların toplam kütledebisi, $\dot{m}_{an}=\dot{V}/v_{an}$ eşitliği kullanılarak, toplam

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

hacimsel debi ve anot girişindeki gazların toplam özgül hacmi formülde yerine konularak, $\dot{m}_{an} = 6,7782 \times 10^{-6} \text{ kg/s}$ olarak hesaplanır.

Eş.6.9'dan faydalanarak, anot girişindeki hidrojenin kütleli debisi, $\dot{m}_{H_2} = 3,5264 \times 10^{-6} \text{ kg/s}$ olarak elde edilir. Kütle korunum denkleminde, anot girişindeki su buharının kütleli debisi, Eş.6.10 kullanılarak, $\dot{m}_v = 3,2517 \times 10^{-6} \text{ kg/s}$ olarak hesaplanır.

Anot girişindeki nemli yakıt karışımını oluşturan H_2 ve H_2O bileşenlerinin kütle kesirleri, Eş.6.11 ve Eş.6.12 kullanılarak $y_{H_2} = 0,5203$ ve $y_v = 0,4797$ olarak hesaplanır.

Katot tarafı giriş (Hava + Su buharı)

Nemlendirme sıcaklığına ($T=80 \text{ }^\circ\text{C}$) karşılık gelen doymuş buharın kısmi basıncı doymuş su-buharı tablolarından $P_{v,sat} = 47,39 \text{ kPa}$ olarak bulunur. Katot tarafında beslenen havanın bağıl nem değeri, $\phi = 0.2$ alınır ve Eş.6.1 kullanılarak katot girişindeki su buharının kısmi basıncı, $P_v = 47,39 \text{ kPa}$ olarak bulunur. Su buharının kısmi basıncı hesaplandıktan sonra, Eş.6.24 kullanılarak nem oranı $W = 0,0646 \text{ kg}_v/\text{kg}_a$ olarak elde edilir.

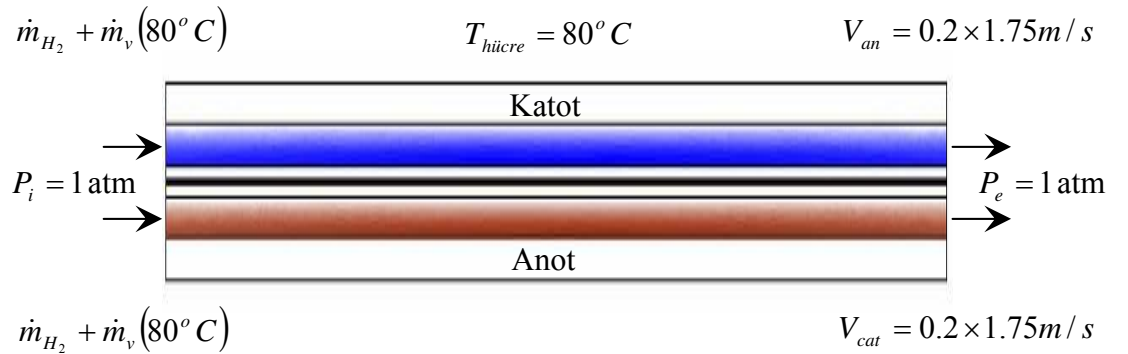
Özgül hacim tanımından, $v_a = V/\dot{m}_a$ ve ideal gaz eşitliğinden faydalanarak özgül hacim için $v_a = R_a T/P_a$ eşitliği bulunur. Bu eşitlik kullanılarak kuru havanın özgül hacmi, $v_a = 1,0005 \text{ m}^3/\text{kg}_a$ olarak hesaplanır. Katot girişindeki kuru havanın kütleli debisi, toplam hacimsel debi ve kütleli debi ile hacimsel debi arasındaki bağıntı, $\dot{m}_a = \dot{V}/v_a$ kullanılarak $\dot{m}_a = 7,1092 \times 10^{-7} \text{ kg}_a/\text{s}$ olarak hesaplanır. Nem oranı

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

tanımı, Eş.6.8 kullanılarak katot girişindeki su buharının kütleli debisi, $\dot{m}_v = 4,5925 \times 10^{-8} \text{ kg}_v/\text{s}$ olarak hesaplanır.

Bu noktadan sonra hava bileşimindeki O_2 ve N_2 mol miktarları kullanılarak katot girişindeki gerçek O_2 ve N_2 molar debileri hesaplanacaktır. Katot girişindeki su buhar ve kuru hava molar debileri, Eş.6.13 ve Eş.6.14 kullanılarak $\dot{N}_v = 2,5514 \times 10^{-9} \text{ kmol/s}$ ve $\dot{N}_a = 2,4539 \times 10^{-8} \text{ kmol/s}$ olarak hesaplanır. Havanın 1 mol O_2 ve 3.76 mol N_2 içerdiği kabul edilirse, katot girişindeki O_2 ve N_2 bileşenlerinin gerçek molar debileri, orantı kurularak $\dot{N}_{\text{O}_2} = 5,1554 \times 10^{-9} \text{ kmol/s}$ ve $\dot{N}_{\text{N}_2} = 1,9384 \times 10^{-8} \text{ kmol/s}$ olarak hesaplanır. Molar debiden tekrar kütleli debiye geçmek için Eş.6.13 ve Eş.6.15 kullanılarak $\dot{m}_{\text{O}_2} = 1,6497 \times 10^{-7} \text{ kg}_{\text{O}_2}/\text{s}$ ve $\dot{m}_{\text{N}_2} = 5,4276 \times 10^{-7} \text{ kg}_{\text{N}_2}/\text{s}$ olarak hesaplanır. Katot kısmındaki toplam kütleli debi, Eş.6.17 kullanılarak $\dot{m}_{\text{cat}} = 7,5684 \times 10^{-7} \text{ kg/s}$ olarak hesaplanır. Katot girişindeki nemli hava karışımını oluşturan O_2 , N_2 ve H_2O bileşenlerinin kütle kesirleri, Eş.(6.18-20) kullanılarak, $y_{\text{O}_2} = 0,2180$, $y_{\text{N}_2} = 0,7171$ ve $y_v = 0,0607$ olarak hesaplanır.

Durum 9



EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Durum 9 sınır şartları

Anot tarafı giriş (Hidrojen + Su buharı)

Nemlendirme sıcaklığına ($T=80\text{ }^{\circ}\text{C}$) karşılık gelen doymuş buharın kısmi basıncı doymuş su-buharı tablolarından $P_{v,sat}=47,39\text{ kPa}$ olarak bulunur. Anot tarafında beslenen havanın bağıl nem değeri, $\phi=0.2$ alınır ve Eş.6.1 kullanılarak katot girişindeki su buharının kısmi basıncı, $P_v=47,39\text{ kPa}$ olarak bulunur. Su buharının kısmi basıncı hesaplandıktan sonra, anot tarafı girişinde H_2 ve H_2O buharı (v) karışımı için nem oranı Eş.6.8’de olduğu gibi tanımlanır.

Bu tanım ve su buharı ile hidrojen için ideal gaz eşitlikleri kullanılarak, Eş.6.2 elde edilir. Eş.6.2’de sadeleştirmeler yapıldıktan sonra, nem oranı için Eş.6.3 elde edilir. Hidrojen ve su buharı için gaz sabitleri nem oranı eşitliğine yerleştirildikten sonra, nem oranı su buharı basıncı cinsinden, Eş.6.5’de görüldüğü gibidir. Anot girişindeki su buhar basıncı ve toplam basınç değerleri için nem oranı, $W=0,92213\text{ kg}_v/\text{kg}_{\text{H}_2}$ olarak hesaplanır. 1 Atm basınç ve 80°C sıcaklıkta hidrojen ve su buharını, sıkıştırma faktörü, Z , 1’e çok yakın olduğu için ideal gaz olarak kabul edebiliriz. Bu durumda, su buharı ve hidrojenin özgül hacimleri, Eş.6.22 ve Eş.6.23 kullanılarak hesaplanırsa, $v_v=28,754\text{ m}^3/\text{kg}$ ve $v_{\text{H}_2}=14,255\text{ m}^3/\text{kg}$ olarak hesaplanır.

Daha sonra, anot girişindeki gazların toplam özgül hacmi, özgül hacim cinsinden kütle korunum eşitliği kullanılarak, $v_{an}=0,1049\text{ m}^3/\text{kg}$ olarak hesaplanır. Anot girişindeki gazların toplam kütleli debisi, $\dot{m}_{an}=\dot{V}/v_{an}$ eşitliği kullanılarak, toplam hacimsel debi ve anot girişindeki gazların toplam özgül hacmi formülde yerine konularak, $\dot{m}_{an}=1,9366\times 10^{-6}\text{ kg/s}$ olarak hesaplanır.

EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Eş.6.9'dan faydalanarak, anot girişindeki hidrojenin kütleli debisi, $\dot{m}_{H_2} = 1,00755264 \times 10^{-6} \text{ kg/s}$ olarak elde edilir. Kütle korunum denkleminde, anot girişindeki su buharının kütleli debisi, Eş.6.10 kullanılarak, $\dot{m}_v = 9,2907 \times 10^{-7} \text{ kg/s}$ olarak hesaplanır.

Anot girişindeki nemli yakıt karışımını oluşturan H_2 ve H_2O bileşenlerinin kütle kesirleri, Eş.6.11 ve Eş.6.12 kullanılarak $y_{H_2} = 0,5203$ ve $y_v = 0,4797$ olarak hesaplanır.

Katot tarafı giriş (Hava + Su buharı)

Nemlendirme sıcaklığına ($T=80^\circ\text{C}$) karşılık gelen doymuş buharın kısmi basıncı doymuş su-buharı tablolarından $P_{v,sat} = 47,39 \text{ kPa}$ olarak bulunur. Katot tarafında beslenen havanın bağıl nem değeri, $\phi = 0.2$ alınır ve Eş.6.1 kullanılarak katot girişindeki su buharının kısmi basıncı, $P_v = 47,39 \text{ kPa}$ olarak bulunur. Su buharının kısmi basıncı hesaplandıktan sonra, Eş.6.24 kullanılarak nem oranı $W = 0,0646 \text{ kg}_v/\text{kg}_a$ olarak elde edilir.

Özgül hacim tanımından, $v_a = V/\dot{m}_a$ ve ideal gaz eşitliğinden faydalanarak özgül hacim için $v_a = R_a T/P_a$ eşitliği bulunur. Bu eşitlik kullanılarak kuru havanın özgül hacmi, $v_a = 1,0005 \text{ m}^3/\text{kg}_a$ olarak hesaplanır. Katot girişindeki kuru havanın kütleli debisi, toplam hacimsel debi ve kütleli debi ile hacimsel debi arasındaki bağıntı, $\dot{m}_a = \dot{V}/v_a$ kullanılarak $\dot{m}_a = 2,0312 \times 10^{-7} \text{ kg}_a/\text{s}$ olarak hesaplanır. Nem oranı tanımı, Eş.6.8 kullanılarak katot girişindeki su buharının kütleli debisi, $\dot{m}_v = 1,3121 \times 10^{-8} \text{ kg}_v/\text{s}$ olarak hesaplanır.

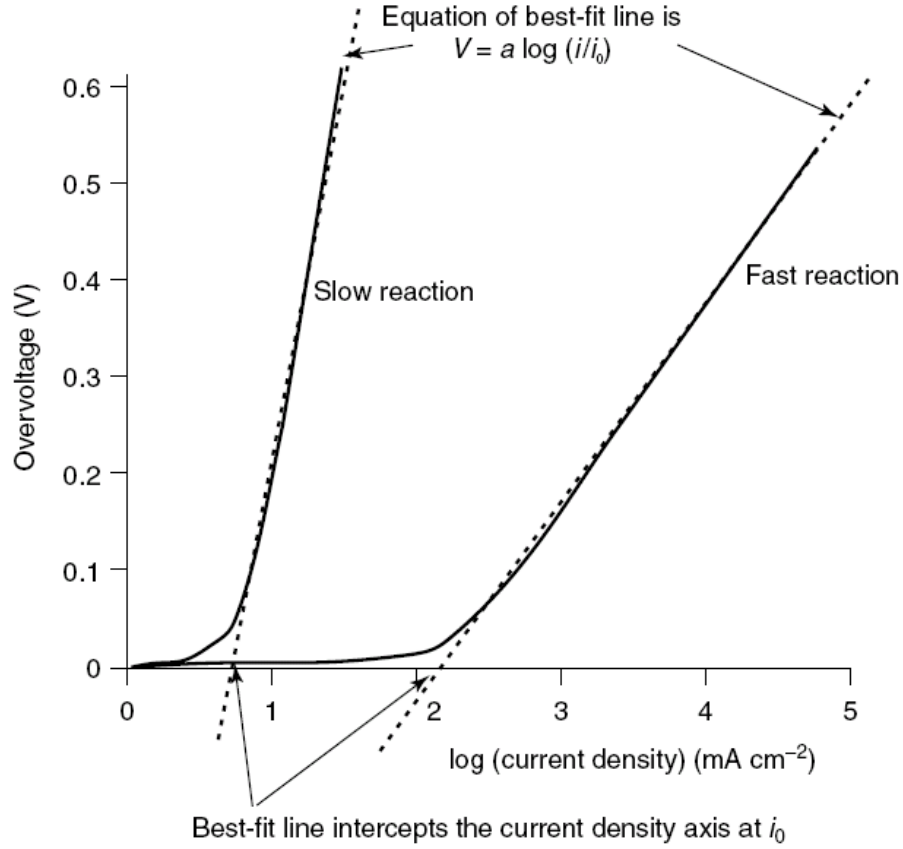
EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

Bu noktadan sonra hava bileşimindeki O_2 ve N_2 mol miktarları kullanılarak katot girişindeki gerçek O_2 ve N_2 molar debiler hesaplanacaktır. Katot girişindeki su buhar ve kuru hava molar debileri, Eş.6.13 ve Eş.6.14 kullanılarak $\dot{N}_v = 7,2897 \times 10^{-10}$ kmol/s ve $\dot{N}_a = 7,0113 \times 10^{-9}$ kmol/s olarak hesaplanır. Havanın 1 mol O_2 ve 3.76 mol N_2 içerdiği kabul edilirse, katot girişindeki O_2 ve N_2 bileşenlerinin gerçek molar debileri, orantı kurularak $\dot{N}_{O_2} = 1,4729 \times 10^{-9}$ kmol/s ve $\dot{N}_{N_2} = 5,5384 \times 10^{-9}$ kmol/s olarak hesaplanır. Molar debiden tekrar kütleli debiye geçmek için Eş.6.13 ve Eş.6.15 kullanılarak $\dot{m}_{O_2} = 4,7132 \times 10^{-8}$ kg $_{O_2}$ /s ve $\dot{m}_{N_2} = 1,5507 \times 10^{-7}$ kg $_{N_2}$ /s olarak hesaplanır. Katot kısmındaki toplam kütleli debi, Eş.6.17 kullanılarak $\dot{m}_{cat} = 2,1624 \times 10^{-7}$ kg/s olarak hesaplanır. Katot girişindeki nemli hava karışımını oluşturan O_2 , N_2 ve H_2O bileşenlerinin kütle kesirleri, Eş.(6.18-20) kullanılarak, $y_{O_2} = 0,2180$, $y_{N_2} = 0,7171$ ve $y_v = 0,0607$ olarak hesaplanır.

EK-7 Aktivasyon kayıpları hesabı

AKTİVASYON KAYIPLARI [55]Tafel Denklemi

Tafel, 1905 yılında gerçekleştirdiği deneylerin sonucunda, bir elektrodun yüzeyindeki aşırı-voltajın, elektrokimyasal reaksiyonların ilerleme şekline benzer bir değişim gösterdiğini gözlemlemiştir. Bu değişim, Şekil 7.1’de görülmektedir.



Şekil 7.1. Yavaş ve hızlı elektrokimyasal reaksiyonlar için Tafel eğrileri

EK-7 (Devam) Aktivasyon kayıpları hesabı

Tafel eğrileri incelendiğinde, logaritmik akım yoğunluğuna karşı aşırı-voltaj değişiminin, noktaların çoğu için doğrusal olduğu görülmektedir. Tafel eğrilerini veren genel denklem aşağıdaki gibi ifade edilmektedir:

$$\Delta V_{act} = a \log \left(\frac{i}{i_o} \right) \quad (7.1)$$

Bu denklem, doğal logaritma cinsinden yazılacak olursa,

$$\Delta V_{act} = A \ln \left(\frac{i}{i_o} \right) \quad (7.2)$$

Elde edilir. Bu denklemde geçen i_o referans veya değişim akım yoğunluğu olarak tanımlanır ve aşırı-voltajın sıfırdan değişmeye başladığı akım yoğunluğu olarak düşünülebilir. Tafel denkleminin $i > i_o$ durumunda geçerli olduğuna dikkat edilmelidir.

Tafel denklemi, deneysel sonuçlardan elde edilmesine rağmen, teorik dayanağı mevcuttur. İki elektronlu bir hidrojen yakıt hücresi için Eş. 7.2'deki A sabiti:

$$A = \frac{RT}{2\alpha F} \quad (7.3)$$

olarak tanımlanabilir. Bu denklemde geçen α sabiti, şarj transfer katsayısı olarak adlandırılır ve elektrokimyasal reaksiyonun hızını değiştirerek elde edilen elektrik enerjisine oranıdır. Şarj transfer katsayısının değeri, elektrodun yapıldığı malzeme ve oluşan reaksiyona bağlıdır ve 0 ile 1,0 arasında değişir. Hidrojen elektrodunda kullanılan malzemelerin çoğu için bu değer yaklaşık 0,5 civarındadır. Oksijen

EK-7 (Devam) Aktivasyon kayıpları hesabı

elektrodunda, şarj transfer katsayısının aldığı değerler 0,1 ile 0,5 arasında değişmektedir.

Eş.7.3’de görüldüğü üzere A katsayısı sıcaklıkla doğru orantılı olarak değişmektedir. Sıcaklıktaki artış, dolayısıyla aşırı-voltajın artmasına sebebiyet verir. Aslında bu, çok nadir olan bir durumdur; sıcaklığın etkisiyle değişim akım yoğunluğu i_o değerindeki

artış, A’da herhangi bir artışa sebep olmaz. Değişim akım yoğunluğu, i_o değerinin açıklanması şu şekilde yapılabilir;

Bir PEM’e ait oksijen elektrodundaki reaksiyon,



ile verilir. Sıfır akım yoğunluğunda, elektrotta herhangi bir aktivite olmadığını ve bu reaksiyonun gerçekleşmediğini düşünebiliriz. Aslında, reaksiyon her zaman oluşmakta ve buna ilaveten, ters reaksiyon da aynı hızda oluşmaktadır. Bu ileri-geri reaksiyonlar arasında bir denge vardır. Dolayısıyla, hem membrana hem de membrandan sürekli olarak elektron akışı olur. Bu akım yoğunluğu “değişim” (exchange) akım yoğunluğudur. Eğer, değişim akım yoğunluğu yüksek ise, elektrodun yüzeyi daha fazla aktif olur ve belli bir doğrultudaki bir akım akmaya daha çok meyillidir. Değişim akım yoğunluğu, i_o , bir yakıt hücresi elektrodunun performansını kontrol etmede çok önemlidir. Değişim akım yoğunluğu değerini mümkün olduğu kadar yüksek tutmak çok önemlidir. Tafel denklemi yeniden düzenlenerek, akım yoğunluğu, aktivasyon kaybı cinsinden şu şekilde ifade edilir,

$$i = i_o \exp\left(\frac{2\alpha F \Delta V_{act}}{RT}\right) \quad (7.5)$$

EK-7 (Devam) Aktivasyon kayıpları hesabı

Bu denklem, Buttlar-Volmer denklemi olarak adlandırılır ve Tafel denkleminin alternatif olarak sık sık kullanılır.

Şimdi, bir yakıt hücresinin elektrodu üzerinde, kayıp olarak sadece aktivasyon aşırı-voltajının olduğunu farzedelim. Bu durumda hücre voltajı aşağıdaki denklem ile verilir,

$$V = E - A \ln \left(\frac{i}{i_o} \right) \quad (7.6)$$

Bu eşitlikte E, Eş.3.1 ile verilen tersinir açık devre voltajı (OCV)'dır. Değişim akım yoğunluğu ne kadar düşük olursa, voltaj düşüşü de o kadar yüksek olur. Çalışan bir yakıt hücresi ya da yarım hücre içerisinde referans elektrotlar kullanarak, her bir elektrotta oluşan aşırı voltajı ölçmek mümkündür. Çizelge 7.1'de çeşitli metaller için 25°C sıcaklıktaki düzgün pürüzsüz bir hidrojen elektrodu için ölçülen değerler verilmiştir.

Çizelge 7.1. Çeşitli metaller için 25°C sıcaklıktaki düzgün pürüzsüz bir hidrojen elektrodu için ölçülen değerler

Metal	i_o (A cm ⁻²)
Pb	2.5×10^{-13}
Zn	3×10^{-11}
Ag	4×10^{-7}
Ni	6×10^{-6}
Pt	5×10^{-4}
Pd	4×10^{-3}

Hidrojen anodu ile karşılaştırıldığında, oksijen elektrodu (katot) için ölçülen değişim akım yoğunluğu değerlerinin aralığı, hem daha geniş hem de 10^5 kat daha düşüktür. Elektrot pürüzlülüğü akım yoğunluğunda önemli bir rol oynamaktadır.

EK-7 (Devam) Aktivasyon kayıpları hesabı

Genellikle, hidrojen yakıt hücrelerinde, anot aşırı voltajı, katot aşırı-voltajı ile karşılaştırıldığında ihmal edilir. Düşük sıcaklıkta, ortam basıncında hava ile çalışan hidrojen beslemeli bir yakıt hücresi için, değişim akım yoğunluğu değeri, katot tarafında $0,1 \text{ mA cm}^{-2}$ ve anot tarafında 200 mA cm^{-2} civarındadır.

Sonuç olarak, A katsayısının değeri fazla değişmemektedir En çok değişim gösteren ve etkili olan değişim akım yoğunluğudur.

Aktivasyon aşırı-voltajının azaltılması

Aktivasyon aşırı-voltajını azaltmada en önemli faktör değişim akım yoğunluğudur. Özellikle, katot değişim akım yoğunluğu artırılarak yakıt hücre performansı artırılır. Katot değişim akım yoğunluğunu artırmanın yolları şunlardır:

- Hücre sıcaklığının artırılması
- Etkin katalizör kullanımı
- Elektrot pürüzlülüğünün artırılması
- Reaktan konsantrasyonunun artırılması
- Basıncın artırılması

Değişim akım yoğunluğunun artırılması, hücre voltajının ve dolayısıyla açık devre voltajının (OCV) artmasına sebep olur.

Sonuç olarak, düşük ve orta sıcaklıkta çalışan yakıt hücrelerinde, aktivasyon aşırı-voltajı özellikle katot tarafında etkin bir şekilde oluşur, en önemli tersinmezlik kaynağıdır ve voltaj düşüşüne sebep olur. Hidrojenden farklı yakıt kullanan yakıt hücrelerinde, her iki elektrottaki aktivasyon aşırı-voltajı da önemlidir. Yüksek sıcaklık ve basınçta, aktivasyon aşırı-voltajı daha az önemlidir.

EK-7 (Devam) Aktivasyon kayıpları hesabı

Her iki elektrotta veya sadece katotta voltaj düşüşü önemli olursa, voltaj düşüşünün ölçüsü, akım yoğunluğu ile orantılıdır;

$$\Delta V_{act} = A \ln\left(\frac{i}{b}\right) \quad (7.7)$$

Burada, A ve b, elektrot ve hücre şartlarına bağlı sabitlerdir. Bu denklem $i > b$ kısıtı altında geçerlidir.

Yakıt Ters-akışı ve iç elektrik akımları

Yakıt hücresinin membranı (elektrolit), iyon iletim özellikleri nedeniyle seçilmesine rağmen, her zaman çok ufak miktarlarda elektron iletimini de destekleyebilecektir. Bu durum, yarı-iletkenlerdeki taşıyıcı iletimine benzemektedir. Yakıt hücresi uygulamasında, anottan katoda doğru elektrolit içerisinden bir miktar yakıtın difüz etmesi, çok önemlidir. Katoda difüz eden bu yakıt, katalizörde, oksijenle doğrudan reaksiyona girerek hücreden elektrik akımı üretilmesini engeller. Elektrolit içerisinden geçerek katot tarafına göç eden bu ufak miktardaki atık yakıt, yakıt ters-akışı olarak adlandırılır. Yakıt ters-akışı ve iç elektrik akımları, birbirlerine benzerdirler. Bir hidrojen molekülünün, anottan, reaksiyonun gerçekleştiği ve iki elektronun harcanmasıyla sonuçlanan, katot kısmına olan ters-akışı, dış elektrik akımından daha çok, anottan katoda iç kısımdan iki elektronun geçmesine benzer bir sonuç doğurur.

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : ÖZTOPRAK, Hülya
 Uyuğu : T.C.
 Doğum tarihi ve yeri : 19.02.1979 Ankara
 Medeni hali : Evli
 e-mail : hoyilmaz@meb.gov.tr

Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet tarihi
Yüksek Lisans	Gazi Üniversitesi / Makine Mühendisliği	2007
Lisans	Cumhuriyet Üniversitesi / Makine Mühendisliği	2004
Lise	Cebeci Atatürk Anadolu Sağlık Meslek Lisesi / Hemşirelik Bölümü	1998

Yabancı Dil

İngilizce

İş Deneyimi

Yıl	Yer	Görev
2005-	Eğitim Teknolojileri Genel Müdürlüğü	Mühendis
2004-2005	Sivas İl Milli Eğitim Müdürlüğü	Mühendis

Hobiler

Kitap okumak, müzik dinlemek, spor yapmak.