

**DÜZ KANALLI PROTON AKTARAN MEMBRAN YAKIT
HÜCRESİNİN SAYISAL ÇÖZÜMÜ**

Ceren Özge ALPAT

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
MAKİNE MÜHENDİSLİĞİ**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**MAYIS 2007
ANKARA**

Ceren Özge ALPAT tarafından hazırlanan DÜZ KANALLI PROTON AKTARAN MEMBRAN YAKIT HÜCRESİNİN SAYISAL ÇÖZÜMÜ 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 : Prof. Dr. Ö.Ercan ATAER

Üye : Prof. Dr. Şenol BAŞKAYA

Üye : Doç. Dr. İrfan AR

Üye : Yrd. Doç. Dr. Atilla BIYIKOĞLU

Tarih : 24/05/2007

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.

Ceren Özge ALPAT

DÜZ KANALLI PROTON AKTARAN MEMBRAN YAKIT HÜCRESİNİN SAYISAL ÇÖZÜMÜ

(Yüksek Lisans Tezi)

Ceren Özge ALPAT

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

Mayıs 2007

ÖZET

Bu tez, düz kanallı tek hücreden oluşan bir proton aktaran membran (PEMFC) yakıt hücresi içerisinde gerçekleşen transport olaylarının Fluent PEMFC modülü kullanılarak simülasyonunu ve simülasyon sonuçlarının literatürdeki verilerle karşılaştırılmasını içermektedir. PEMFC anot ve katot tarafı için; akım toplayıcı tabaka, gaz kanalı, gaz difüzyon tabakası, katalizör tabaka ve membran dahil dokuz tabakadan oluşmaktadır. Simülasyon sonuçları - basınç, H_2 , O_2 ve H_2O tür mol kesirleri, elektrik potansiyeli 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 için altı durum için kutuplaşma eğrisi oluşturulmuş ve deneysel sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Karşılaştırma yapılan durumlar için kutuplaşma eğrileri elde edilmiştir.

Bilim Kodu : 914.1.038
Anahtar Kelimeler : PEMFC modeli, sayısal simülasyon, kutuplaşma eğrileri
Sayfa Adedi : 201
Tez Yöneticisi : Yrd. Doç. Dr. Atilla BIYIKOĞLU

NUMERICAL SOLUTION OF A PROTON EXCHANGE MEMBRANE FUEL CELL WITH STRAIGHT CHANNELS

(M.Sc. Thesis)

Ceren Özge ALPAT

**GAZI UNIVERSITY
INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY**

May 2007

ABSTRACT

The thesis covers simulation of transport phenomena in a single-cell proton exchange membrane fuel cell (PEMFC) with straight channels using Fluent PEMFC module and comparison of simulation results with the data on literature. The PEMFC is made up of nine layers, namely, current collector, gas channel, gas diffusion layer for the sides of anode and cathode including membrane. Simulation results – pressure, mole fractions of the species; H_2 , O_2 and H_2O , electrical potential and velocity - are presented in 2-D at the cross sections of inlet, mid-way and outlet positions. Polarization curves are formed for each cases investigated and the effects of parameters on the polarization curves are analysed. Besides, polarisation curves of six cases are constructed and compared with the experimental results to validate the model.

Science Code	:914.1.038
Key Words	:PEMFC model, numerical simulation, polarization curves
Page number	:201
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 ve bu çalışmayı yapmak adına gerekli zamanı ayırabilmem için işyerimden izin alma konusunda hiçbir sıkıntı yaşatmadıklarından dolayı değerli yöneticilerim ve mesai arkadaşlarıma, ayrıca zorluk yaşadığım dönemlerde manevi destekleriyle beni hiç yalnız bırakmayan ailem ve yakın arkadaşlarıma 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
RESİMLERİN LİSTESİ	.xvi
SİMGELER VE KISALTMALAR	.xvii
1. GİRİŞ	1
2. LİTERATÜR ARAŞTIRMASI	6
3. MODEL TANIMI VE KABULLER	13
3.1. Yakıt Hücresinin Fiziksel Modeli	13
4. MATEMATİKSEL MODEL	19
4.1. Kabuller.....	19
4.2. Korunum Eşitlikleri	19
4.2.1. Kütle korunum eşitliği	20
4.2.2. Momentum korunum eşitlikleri	21
4.2.3. Enerji denklemi.....	21
4.3. PEMFC Modelinde Kullanılan Kabuller ve Korunum Eşitlikleri	26
4.3.1. Gaz kanalları.....	26
4.3.2. Gaz difüzyon tabakaları	27

	Sayfa
4.3.3. Membran	27
4.3.4. Katalizör tabakalar	28
4.3.5. Akım toplayıcı plakalar	29
4.4. Genel Korunum Eşitliği	29
5. ÇÖZÜM TEKNİĞİ	32
5.1. Ayrık (Segregated) Çözüm Metodu	32
5.2. Eşitliklerin Ayrıklaştırılması	33
5.3. Basınç-Hız Eşleşmesi	33
5.4. Ağ Yapısı	34
5.5. Sınır Şartları	36
5.5.1. “Kütleli debi girişi” (Mass flow inlet) sınır şartı	36
5.5.2. “Basınç tanımlı çıkış” (Pressure outlet) sınır şartı	37
5.5.3. “Duvar” (Wall) sınır şartı	37
5.5.4. “Gözenekli tabaka geçiş” (Porous jump) sınır şartı	38
5.6. PEMFC Modelinde Kullanılan Sınır Şartları	39
6. SONUÇLAR	43
6.1. Sonuçların Eleman Sayısından Bağımsızlığının Test Edilmesi	44
6.2. Yakınsama Kriteri	45
6.3. Niceliklerin Hücre İçindeki Dağılımları	58
6.3.1. İç ve dış yüzeylerdeki niceliklerin 2-B dağılımlarının 3-B PEMFC geometrisi üzerinde gösterimi	58
6.3.2. Giriş, orta ve çıkış yüzeylerindeki dağılımların karşılaştırılması	65
6.4. Kutuplaşma Eğrileri	86

Sayfa

7. DENEYSEL VERİLERLE KARŞILAŞTIRMA	92
8. SONUÇLARIN DEĞERLENDİRİLMESİ.....	96
KAYNAKLAR.....	98
EKLER.....	104
EK-1 Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması	105
EK-2 Fluent paket programı PEMFC modülü tanıtımı.....	120
EK-3 PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı	130
EK-4 Kutuplaşma eğrilerinin oluşturulması	157
EK-5 Teorik açık devre voltajının hesabı	159
EK-6 Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi	166
EK-7 Aktivasyon kayıpları hesabı.....	183
EK-8 Program raporları	193
9.ÖZGEÇMİŞ.....	201

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 3.1. PEM yakıt hücresinin tasarım parametreleri	15
Çizelge 3.2. Modelde kullanılan elektrokimyasal parametreler	17
Çizelge 3.3. PEM yakıt hücresine ait bileşenlerin geometrik bilgileri	17
Çizelge 3.4. PEMFC katmanlarının fiziksel özellikleri	18
Çizelge 4.1. Genelleştirilmiş korunum eşitliğindeki terimler	29
Çizelge 4.2. Katalizör tabaka – tür kaynak teriminin anot ve katoda göre aldığı formlar	30
Çizelge 4.3. PEM yakıt hücresi tabakalarında çözülen eşitlikler ve kaynak terimleri	31
Çizelge 5.1. Farklı sıklıktaki hexagonal tip ağ yapıları için PEMFC katmanlarındaki eleman sayıları dağılımı	35
Çizelge 5.2. PEM Yakıt hücresi anot tabakalarında çözülen eşitlikler ve sınır şartları terimleri	40
Çizelge 5.3. PEM Yakıt hücresi katot tabakalarında çözülen eşitlikler ve sınır şartları terimleri	41
Çizelge 5.4. PEMFC modelinde tanımlı yüzeyler ve sınır şartları	42
Çizelge 6.1. İncelenen durumlara ait işletim parametreleri	43
Çizelge 6.2. 1,73 GHz Pentium 4 bilgisayar kullanılarak elde edilen sayısal çözüm bilgileri	44
Çizelge 6.3. Farklı eleman sayılarında ortalama akım yoğunluğu değerleri ve çözüm süreleri	44
Çizelge 6.4. 12 Durumun (D) kutuplaşma eğrilerinin oluşturulmasında kullanılan 7 noktaya (N) karşılık gelen iterasyon sayıları ve hesap süresi dağılımı	57
Çizelge 7.1. Wang ve ark. [49]’nin deneysel çalışma durumlarına ait veriler	92

Çizelge**Sayfa**

Çizelge 7.2. Wang ve ark. [49]'nin deneysel çalışma durumlarına karşılık gelen ve PEMFC modülünde girilmesi gereken veriler.....	93
---	----

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 3.1. PEM yakıt hücresinin şematik görünümü	13
Şekil 3.2. Akım toplayıcı plakalar üzerindeki gaz kanallarının yerleşim düzeni ve akış alanı	14
Şekil 3.3. Fluent-Gambit modülü ile oluşturulan PEM yakıt hücresinin görünümü a) Ön görünüm, b) Kanalların ve kanal hariç izometrik görünümü	15
Şekil 3.4. Modeli oluşturan PEM yakıt hücresinin geometrik planı	16
Şekil 5.1. Ayırık çözüm metodunun adımları	32
Şekil 5.2. Hexagonal eleman yapısı.....	34
Şekil 5.3. PEM yakıt hücresinin hexagonal elemanlardan oluşan ağ yapısı.....	36
Şekil 5.4. Sınır şartları (a) Gaz giriş ($z = 0$ mm) yüzeyi, (b) Gaz çıkış ($z = 70$ mm) yüzeyi	39
Şekil 6.1. Durum-1 çözümüne ait yakınsama grafiği	47
Şekil 6.2. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-1 çözümüne ait yakınsama grafiği	48
Şekil 6.3. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-2 çözümüne ait yakınsama grafiği	48
Şekil 6.4. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-3 çözümüne ait yakınsama grafiği	49
Şekil 6.5. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-4 çözümüne ait yakınsama grafiği	50
Şekil 6.6. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-5 çözümüne ait yakınsama grafiği	51
Şekil 6.7. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-6 çözümüne ait yakınsama grafiği	52

Şekil	Sayfa
Şekil 6.8. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-7 çözümüne ait yakınsama grafiği	52
Şekil 6.9. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-8 çözümüne ait yakınsama grafiği	53
Şekil 6.10. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-9 çözümüne ait yakınsama grafiği	53
Şekil 6.11. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-10 çözümüne ait yakınsama grafiği	54
Şekil 6.12. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-11 çözümüne ait yakınsama grafiği	54
Şekil 6.13. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-12 çözümüne ait yakınsama grafiği	55
Şekil 6.14. PEMFC dış yüzeylerindeki ($x = 0$, $x = 0,19$, $z = 0$, $z = 0,07$), ve iç yüzeylerindeki ($z = 0,0175$, $z = 0,035$, $z = 0,0525$) basınç dağılımı (Pa).....	58
Şekil 6.15. PEMFC dış yüzeylerindeki ($x = 0$, $x = 0,19$, $z = 0$, $z = 0,07$), ve iç yüzeylerindeki ($z = 0,0175$, $z = 0,035$, $z = 0,0525$) sıcaklık dağılımı (K).....	59
Şekil 6.16. PEMFC dış yüzeylerindeki ($z = 0$, $z = 0,07$), ve iç yüzeylerdeki ($z = 0,0175$, $z = 0,035$, $z = 0,0525$) hız dağılımı (m/s).....	60
Şekil 6.17. PEMFC dış yüzeylerindeki ($x = 0$, $x = 0,19$, $z = 0$, $z = 0,07$), ve iç yüzeylerindeki ($z = 0,0175$, $z = 0,035$, $z = 0,0525$) H_2 dağılımı (Mol kesri)	60
Şekil 6.18. PEMFC dış yüzeylerindeki ($x = 0$, $x = 0,19$, $z = 0$, $z = 0,07$), ve iç yüzeylerindeki ($z = 0,0175$, $z = 0,035$, $z = 0,0525$) O_2 dağılımı (Mol kesri)	61
Şekil 6.19. PEMFC dış yüzeylerindeki ($x = 0$, $x = 0,19$, $z = 0$, $z = 0,07$), ve iç yüzeylerindeki ($z = 0,0175$, $z = 0,035$, $z = 0,0525$) $H_2 O$ dağılımı (Mol kesri).....	62
Şekil 6.20. PEMFC dış yüzeylerindeki ($x = 0$, $x = 0,19$, $z = 0$, $z = 0,07$), ve iç yüzeylerindeki ($z = 0,0175$, $z = 0,035$, $z = 0,0525$) yoğunluk dağılımı (kg/m^3).....	63

Şekil	Sayfa
Şekil 6.21. PEMFC dış yüzeylerindeki ($x = 0$, $x = 0,19$, $z = 0$, $z = 0,07$), ve iç yüzeylerindeki ($z = 0,0175$, $z = 0,035$, $z = 0,0525$) elektrik potansiyeli dağılımı (V)	63
Şekil 6.22. PEMFC dış yüzeylerindeki ($x = 0$, $x = 0,19$, $z = 0$, $z = 0,07$), ve iç yüzeylerindeki ($z = 0,0175$, $z = 0,035$, $z = 0,0525$) aşırı potansiyel dağılımı (V)	64
Şekil 6.23. PEMFC dış yüzeylerindeki ($x = 0$, $x = 0,19$, $z = 0$, $z = 0,07$), ve iç yüzeylerindeki ($z = 0,0175$, $z = 0,035$, $z = 0,0525$) akım yoğunluğu şiddeti dağılımı (A/m^2)	65
Şekil 6.24. PEMFC (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki basınç dağılımı (Pa)	66
Şekil 6.25. PEMFC (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki basıncın istatistiksel dağılımı (Pa)	67
Şekil 6.26. PEMFC (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki yoğunluk (kg/m^3)	68
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)	69
Şekil 6.28. PEMFC (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki sıcaklık dağılımı (K)	70
Şekil 6.29. PEMFC (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki sıcaklığın istatistiksel dağılımı (K)	71
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)	72
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)	73
Şekil 6.32. PEMFC (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki $H_2 O$ dağılımı (Mol kesri)	74
Şekil 6.33. PEMFC (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki $H_2 O$ istatistiksel dağılımı (Mol kesri)	76

Şekil	Sayfa
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).....	77
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)	78
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).....	79
Şekil 6.37. PEMFC dış yüzeylerindeki ($x = 0$, $x = 0,19$, $z = 0$, $z=0,07$), yüzeylerindeki akım yoğunluğu şiddetinin istatistiksel dağılımı (A/ m^2).....	80
Şekil 6.38. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki aşırı potansiyel dağılımı (A/ m^2).....	81
Şekil 6.39. PEMFC dış yüzeylerindeki ($x = 0$, $x = 0,19$, $z = 0$, $z=0,07$), yüzeylerindeki aşırı potansiyelin istatistiksel dağılımı (V)	83
Şekil 6.40. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki hız dağılımı (m/ s).....	84
Şekil 6.41. PEMFC dış yüzeylerindeki ($x = 0$, $x = 0,19$, $z = 0$, $z=0,07$), yüzeylerindeki hızın istatistiksel dağılımı (m/s)	85
Şekil 6.42. Farklı basınç değerleri için; $P=1,5$ atm (D1), $P=2$ atm (D2), $P=3$ atm (D3) elde edilen kutuplaşma eğrileri	86
Şekil 6.43. Anot kütle debisinin farklı değerleri için; (D1), (D4), (D5) elde edilen kutuplaşma eğrileri	87
Şekil 6.44. Katot kütle debisinin farklı değerleri için; (D1), (D6), (D7) elde edilen kutuplaşma eğrileri	88
Şekil 6.45. Hidrojen kütle kesrinin farklı değerleri için; (D1), (D8), (D10) elde edilen kutuplaşma eğrileri	89
Şekil 6.46. Katot kısmındaki su için belirlenen üç farklı kütle kesri değeri için; (D1), (D8), (D9) elde edilen kutuplaşma eğrileri	90
Şekil 7.1. Farklı basınçlarda elde edilen deneysel [49] ve sayısal (GID1, GID2, GID3) kutuplaşma eğrilerinin karşılaştırılması.....	94
Şekil 7.2.Farklı sıcaklıklarda elde edilen deneysel [49] ve sayısal (GIID1, GIID2, GIID3) kutuplaşma eğrilerinin karşılaştırılması.....	95

RESİMLERİN LİSTESİ

Resim	Sayfa
Resim 1.1. Yakıt hücresi	2

SİMGELER VE KISALTMALAR

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

Simgeler	Açıklama
c_p	Özgül 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 $96487 C kmol^{-1}$
ΔG	Gibbs free enerji değişimi, $kcal mol^{-1}$
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
<i>a</i>	Anot
<i>eff</i>	Etkinlik
<i>ort</i>	Ortalama
<i>c</i>	Katot
<i>ct</i>	Katalizör tabaka
<i>m</i>	Membran
<i>ref</i>	Referans
C	Katot
CB	Eşleşmiş sınır şartı
CC	Akım toplayıcı
CL	Katalizör tabaka
D	Durum
GC	Gaz kanalı
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
ND	Tanımlı değil
UDF	Kullanıcı tanımlı fonksiyonlar
W	Duvar sınır şartı
ZDF	Sıfır difüzyon akı

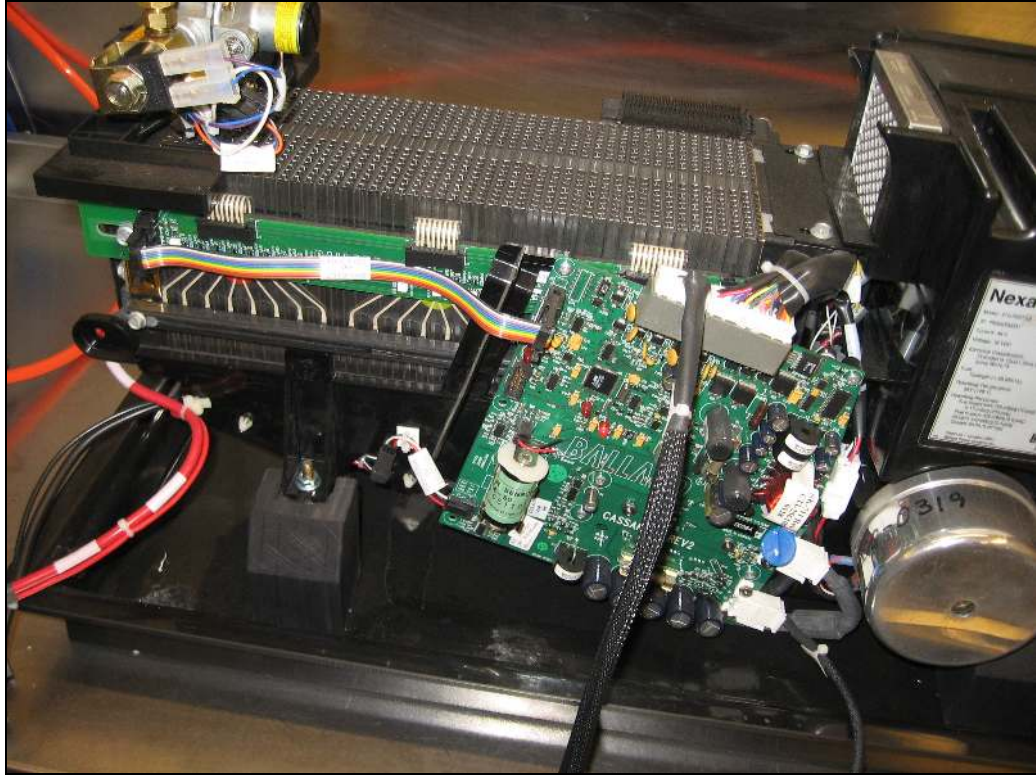
1. GİRİŞ

Enerji ihtiyacının artmasına karşın, çevresel kaygıların öne çıkması ve petrol rezervlerinin azalması yeni ürünlerin, endüstriyel ürünlere dönüştürülmesini hızlandırmaktadır.

Elektrik, ısı ve mekanik enerji üretiminde kullanılan hidrokarbon bileşiklerinin (petrol, doğalgaz vb) yanması sırasında ortaya çıkan ve sera etkisi endişe verici gaz olan karbondioksit atıklarının azaltılması dünyanın en büyük sorunları arasındadır. Bu azaltılma iki şekilde yapılabilir; ya faydalı enerji dönüştürücüleri daha verimli hale getirilir yada fosil yakıt türlerinin enerji üretiminde kullanımı azaltılır. İkinci seçenek için de iki çözüm vardır: Hidrojen ve biyo-yakıt.

Geleceğin enerji taşıyıcısı hidrojeni elektriğe mükemmel dönüştürme kapasitesi ile yakıt pilleri, hidrojen teknolojisinde çok önemli yer edinmiştir. Başlangıçta maliyetin ikinci planda olduğu sınırlı uygulamaları olan bu tip piller, artık ısı ve elektrik üretiminde kullanılan düzenekler olmaya başlamışlardır. Bunun da ötesinde, elektrik araçlarına güç sağlamada parlak bir gelecek vaat etmektedirler.

Yakıt hücreleri, yakıt enerjisini bir yanma prosesine başvurmadan doğrudan akıma çeviren elektro-kimyasal düzeneklerdir. Yakıt hücresinde kimyasal olarak depolanan enerji elektro-kimyasal bir prosesle elektrik akımına çevrilir. Yakıtın kimyasal enerjisi, ideal bir elektro kimyasal hücrenin içerisinde yakıtın oksitlenmesiyle, ısı akısı yerine elektron akısı formunu alır. Geleneksel enerji elde etme yöntemi olarak, kimyasal yanma sonucu elde edilen ısı enerjisinin, bir türbin yardımıyla mekanik enerjiye çevrilmesi ve son olarak da bir dinamo ile mekanik enerjinin elektriğe dönüştürülmesi yöntemi kullanılmaktadır. Buna karşıt olarak, yakıt hücrelerinin temeli, yanma prosesi olmadan yakıt ve oksitleyici moleküllerinin elektro-kimyasal kombinasyonuna dayanır ki; bu da, geleneksel yanma sonucu oluşan kirliliği oluşturmaz.



Resim 1.1. Yakıt hücresi

Resim 1.1’de Ballard firmasına ait Nexa-basic modeli 1,2 kW gücünde bir Proton Aktaran Membran (PEM) yakıt hücre kümesi görülmektedir. Resim 1.1’de görüldüğü üzere elektronik kontrol ünitesi kullanılarak PEM yakıt hücre kümesinin verimi %50’lere kadar yükseltilebilmiştir. Günümüzdeki PEMFC araştırma çalışmaları hücre performansını artırıp maliyeti düşürmek üzerine yoğunlaşmıştır. Bu amaca yönelik olarak, hücre membranlarının geliştirilmesi, yakıt akımındaki karbon-monoksit gazının giderilmesi ve elektrot tasarımının iyileştirilmesi üzerine çalışmalar yapılmaktadır. Bunun yanısıra sistem gereklerini sağlamak üzere sistemin bütününe basitleştirilmesi için de çalışmalar yapılmaktadır. Bu çalışmalar arasında membranın ortam basıncında sıfır-nemli işletimi ve yakıtın doğrudan kullanımını sayılabilir.

PEM Yakıt Hücrelerinin Bugünkü Durumu [1]

Yüksek verim, düşük emisyon, düşük işletim sıcaklığı ve düşük gürültü seviyeleri ile PEM yakıt hücreleri, ulaşım sektörü için en cazip alternatif güç kaynağı olarak düşünülmektedir. Geçen yüzyılda, PEMFC teknolojisinde çok önemli gelişmeler kaydedilmiştir; membran elektrot birlikteliği (MEA) teknolojisindeki ilerlemeler ve platin katalizör kaplama miktarının azaltılması bunlardan bazılarıdır. 1990'ların ortalarına kadar PEMFC üzerine yapılan araştırmaların derlemeleri Prater [2] ile Gottesfeld ve Zawodzinski [3] tarafından sunulmuştur. Yeni ilerlemeler Vielstich vd [4] ve Bıyıkoglu [5]'nin güncel derlemelerinde rapor edilmiştir. Son 5 yıl içerisinde, karmaşık fiziksel yapı ve az sınırlayıcı kabuller kullanan sayısal modellerin gelişimi üzerine daha çok çaba sarfedilmiştir. PEMFC modellemesinde gelinen nokta, sayısal akışkanlar dinamiği (CFD) tekniği kullanarak transport denlemler setinin tamamını (kütle, momentum, tür, enerji ve şarj korunum) çözme yönündedir. PEMFC modelleme ve bilgisayar simülasyon çalışmaları Bernardi ve Verbrugge [6,7] ile Springer [8, 9]'nin öncülüğünde başlamıştır ve bu modeller bir boyutludur. Fuller ve Newman [10], Nguyen ve White [11], ve Yi ve Nguyen [12,13] birbirlerini takiben, akış yörüngesi boyunca bileşim değişikliklerini dikkate alan sanki-iki-boyutlu modeller geliştirdiler. Bu tip modeller küçük hücreler için kullanışlı olmasına rağmen, özellikle fazla yakıt ve düşük nem gerektiren durumlarda büyük ölçekli yakıt hücrelerine uygulanabilirliği sınırlıdır. Bununla birlikte Bernardi ve Verbrugge [6,7] ile Springer ve ark. [8,9]'ne ait 1-B modeller, çok-boyutlu ve fiziksel olarak daha karmaşık modellerin kurulmasına temel teşkil etmişlerdir. Sanki-iki-boyutlu modeller, Fuller ve Newman [10], Nguyen ve White [11] tarafından geliştirilmiş ve daha sonra Yi ve Nguyen [12,13] PEMFC'lerde yüksek performans elde edilebilmesi için su ve ısı yönetiminin rolünün önemli olduğunu göstermişlerdir. Gaz difüzyon tabakaları (GDL) boyunca anisotropi ve inhomojenitenin kütle transportu üzerine etkileri sayısal olarak araştırılmıştır [14, 15].

Gurau ve ark. [16] bir PEMFC içerisindeki transport olaylarını 2-B olarak modellemişlerdir. Bu çalışma, reaktan ve su dağılımı gibi, bir yakıt hücresinin iç şartlarının anlaşılmasında çok-boyutlu modelin kullanımını örneklemektedir.

Farklı bir geliştirme çalışmasında, Yi ve Nguyen [12,13], yönlendirilmemiş akış alanına sahip bir PEMFC'nin hava katotundaki hidrodinamik ve çok-tür transportunu açıklayan 2-B bir model formüle etmişlerdir. CFD kullanımı ile PEMFC modellenmesi kavramı kısa bir süre sonra önerilmiştir [17-20]. Eşleşmiş elektro-kimyasal ve transport proseslerinin 2-B simülasyonları, bir CFD kodu kullanılarak çözülmüştür [17] ve aynı modelin 3-B versiyonu oluşturulmuştur [18, 21]. Bu çalışmalardan bağımsız olarak, Dutta ve ark. [19], bir ticari CFD paket programı olan Fluent'i kullanarak PEMFC'nin 3-B simülasyonunu gerçekleştirmişlerdir. Takip eden çalışma, Dutta ve ark. [20] ve Lee ve ark. [22] tarafından sunulmuştur. Dutta ve ark. [19, 20] ve Lee ve ark. [22]'nin modelinde, MEA hesap bölgesine dahil edilmeyerek kalınlıksız bir arayüz olarak basitleştirilmiştir. Nguyen ve White [11]'in ilk çalışmasında olduğu gibi, membrana dik yönde su transportu ve ohmik potansiyel düşüşü, basitleştirilmiş lineer ilişki kullanılarak ele alınmıştır. Zhou ve Liu [23] kendi yazılımlarını, Berning ve ark. [24] ticari paket CFX yazılımını, Mazumder ve Cole [25] ticari paket CFD-ACE+ yazılımını kullanarak genel-amaçlı 3-B CFD modellerini çözmüşlerdir. Son zamanlarda, kullanıcı tanımlı kodlar geliştirilerek hem STAR-CD hem de Fluent paket programları, büyük-ölçekli yakıt hücre modellemesine uygulanmaktadır [26-32]. Bir PEMFC içerisindeki iki-fazlı akış ve transport olaylarının modellemesine yönelik çalışmalar yapılmaktadır. Bir PEMFC içerisinde sıvı su oluşumunu ele almak için iki tip model mevcuttur. En basit yaklaşım, gaz ve sıvının tek bir akışkan karışımı olarak düşünüldüğü ve böylece aynı hız alanına sahip olan tek-faz modeli. Bunun yanı sıra, arayüzeyssel çeki etkisi tamamen ihmal edilmiştir. Bu durumda, su buharını sıvı sudan ayırmadan bir tek Eşitliği çözerek, suyun toplam miktarı elde edilebilir. Toplam su konsantrasyon alanı elde edildiğinde, gaz fazında super-doyma kabulü ile su konsantrasyonunun doyma seviyesinin üzerine çıkmasına izin verilebilir [8, 17, 21]. Buna alternatif olarak, su konsantrasyonu gaz doyma seviyesinde alınabilir ve işlem sonrası sıvı su şeklindeki fazla su dikkate alınabilir [19, 20, 22]. Sıvı su transportu ile ilgili daha kesin bir yaklaşım, farklı hızlarda dolaşan iki fazın bulunduğu gerçek iki-faz modelidir. Aynı zamanda, arayüzeyssel çeki etkisi ve GDL nemlenebilirliği, PEMFC'nin başarılı bir şekilde işletimi için gereklidir ve dikkate alınmıştır. Wang ve ark. [33], Nguyen ve ark. [34-36], You ve Liu [37], Mazumder ve Cole [38], Berning ve Djilali [39] ve

Pasaogullari ve Wang [29,40]'ın çalışması bu kategori içerisinde değerlendirilebilir. PEMFC modellerinin farklı bir sınıflaması, hacimsel-ortalamalı (makro-homojen) modeller veya gözenek-seviyeli modeller olarak yapılabilir. Makroskopik modeller, bölgesel arayüzel denge kabulü kullanırlar; gözenek seviyesinde elektriksel, kimyasal, ve ısı dengeyi. Bölgesel arayüzel dengenin geçerlilik koşulları çok dikkatli tanımlanmıştır [41]. Yukarıda atıf yapılan tüm modeller, bazılarında teorik uyumsuzluk olabmesine rağmen, makroskopik modellerdir. Nguyen ve ark. [34-36], Mazumder ve Cole [25] ve Berning ve Djilali [24]'e ait iki-fazlı modellerde, su yoğunlaşma/buharlaşma hızı, gaz fazındaki su buharının bölgesel dengesizlik şartına göre ifade edilmiştir. Fakat bu tür bir değerlendirme, fiziksel önemi olmayan sayısal bir aldatmacadan başka birşey değildir. Bu çalışmalardaki tüm simülasyon sonuçları sanal olarak bölgesel kimyasal denge şartına denk gelmiştir. Bundan başka, gözenek seviyesindeki hız ve tür konsantrasyonundaki bölgesel dalgalanmaların etkileşiminden kaynaklanan ve bir denge makroskopik modelin göstergesi olan saçılma etkisi, su buharı transport eşitliğine yansıtılmamıştır. Gözenekli malzemelerin kurutulması [42, 43], zenginleştirilmiş petrol geri-kazanımı için buhar püskürtülmesi, ve yeraltı-suyu kirlenmesi ve temizlenmesi [44] gibi ilgili problemler için faz değişimini dikkate alan farklı bir yaklaşım kullanılmıştır.

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 duyulur. Bu özellikler, akım yoğunluğu değişimleri ve birim hacim için Katalizör yüzey alanı gibi kinetik değişkenleri, geçirgenlik gibi yapısal bilgiyi ve iyonik iletkenlik ve su difüzitesi gibi polimer özellikleri içerir.

Liu ve ark. [45] 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.

Günümüzde kullanılan standart elektrolit malzemesi DuPont tarafından 1960'ların ortasında uzay uygulamaları için üretilen teflon kökenli bir malzeme olan Nafyondur. PEMFC membranı olarak en fazla kullanılan tipi, Nafion 115 ve 117' dir (Ballard,

1990). Nafion membranlar tamamen florlanmış polimerlerdir ve çok yüksek kimyasal ve ısı kararlılığına sahiptirler.

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, membranın 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 [46] 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. 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. [47] 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.

Sivertsen ve Djilali [48] çalışmalarında, PEM yakıt hücreleri için, karşılaştırmalı sabit sıcaklıkta olmayan 3-B sayısal bir model geliştirmiş ve bu modeli Fluent paket programı kullanarak çözümleridir. Model konvektif ve difüzyif 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.

Wang ve ark.[49] 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 datalar ve modelleme sonuçlarının uyum içinde olduğunu göstermiştir.

PEMFC simülasyonu için üç boyutlu, iki fazlı CFD modeli Li vd [50] tarafından geliştirilmiş ve FLUENT'e adapte edilmiştir. 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. [31] tarafından yapılan çalışmada elde edilen kutuplaşma eğrileri ve bölgesel akım yoğunluğu dağılımlarının deneysel verileri ile karşılaştırma yapılarak test edilmiştir. 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. Bunun yanı sıra, türlerin molar konsantrasyonları ile kütle kesri arasındaki bağıntıyı veren bir analitik türetim sunulmuştur.

Klasik ve yönlendirmesiz (interdigitated) akış alanlarına sahip PEM yakıt hücrelerinde akışkan akışını, türlerin transportunu ve elektrokimyasal reaksiyonu incelemek için, Hu ve ark. [51]'e ait üç boyutlu, kararlı-durum matematiksel modeli kullanılmıştır; akışın, türlerin ve akım dağılımlarının çok boyutlu karakteristikleri, hacim kontrol sonlu ayrıklaştırma tekniği ile hesaplanmıştır. 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. [52], 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.

Düz akış kanallı dizayna sahip PEM yakıt hücresinin karakterizasyonu Hakenjos ve ark. [53] 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.

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. [54] tarafından deneysel olarak ölçülmüştür. 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 stokiyometrisindeki 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 [55]'nin gerçekleştirdiği deneysel çalışma sonucunda elde edilen bilgiler bir makalede sunulmuş ve tartışılmıştır. 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.

Su ve ark. [56], tek bir hücreden oluşan PEMFC'nin performansını araştırmak için bir seri deney gerçekleştirmişlerdir. Sıcaklık, basınç ve giriş yakıt / oksitleyici debisi dahil, farklı işletim şartlarının hücre performansı üzerine etkileri tartışılmıştır. Bu parametrelerin hücre performansı ile güç çıkışına olumlu etkilerinin olduğu test sonuçları ile desteklenmiştir. Sıcaklık-debi etkileşiminin etkisi, hücre nemi ile ilgilidir ve hücre performansı için önemlidir. Bir PEMFC için kuruma problemi, yüksek hücre sıcaklığı ve debisinde gerçekleştirilen deneylerde ortaya çıkmıştır. Mevcut deneysel sonuçlar hücre performansını ve kuru yakıt/oksitleyici akış şartları altındaki hücre işletim etkilerini araştırmak için faydalı bilgi sağlayabilir.

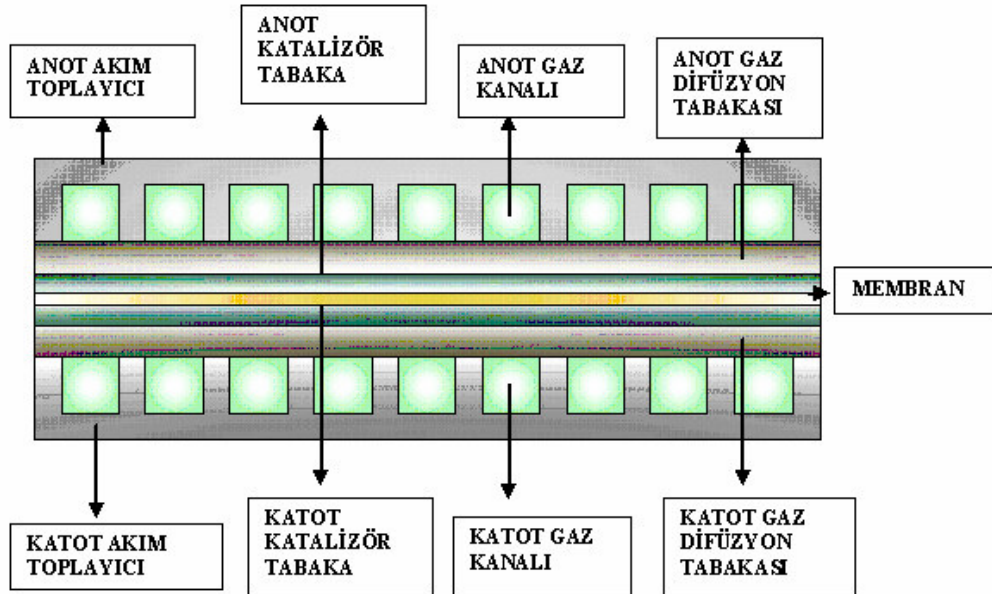
Ju ve Wang [57], 3-Boyutlu, elektrokimyasal transport eşleşmiş (coupled) modeli, 50 cm² alanlı bir PEM yakıt hücresine uygulamış ve deneysel akım dağılım verilerini

kullanarak modelin geçerliliğini ispatlamışlardır. Hesaplama zamanı ve milyonlarca düğüm noktaları içeren büyük-ölçekli hesaplamaları yapabilmek için paralel hesaplama tekniği devreye sokulmuştur. Simülasyon sonuçları analiz edilmiş ve 2-katot stokiyometri oranı için, tam nemlendirme şartları altındaki mevcut deneysel akım dağılım verileri kullanılarak geçerliliği ispatlanmıştır. Simülasyon sonuçları ile deneysel verilerin karşılaştırılması, ortalama kutuplaşma eğrilerinin mükemmel bir uyum sağlamasına rağmen, akım dağılımında bir uyum eksikliği olduğunu göstermektedir. Nümerik simülasyonlar, akım dağılım deneylerinde gözlemlenen virgül-şeklindeki bölgesel kutuplaşma eğrilerini doğru olarak yakalamıştır.

3. MODELİN TANITIMI VE KABULLER

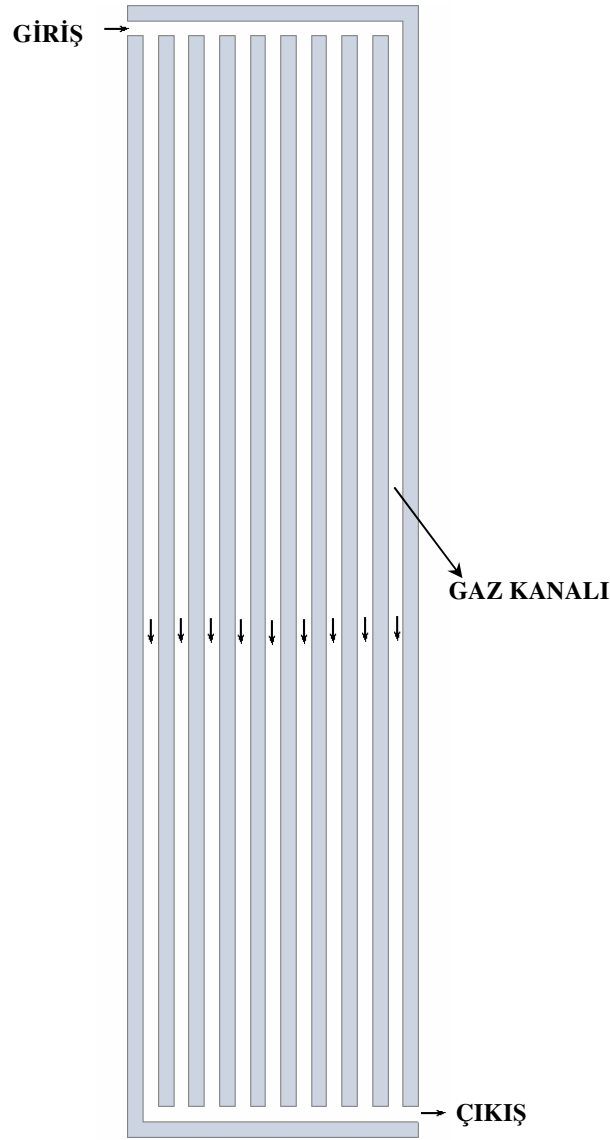
3.1. Yakıt Hücresinin Fiziksel Modeli

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



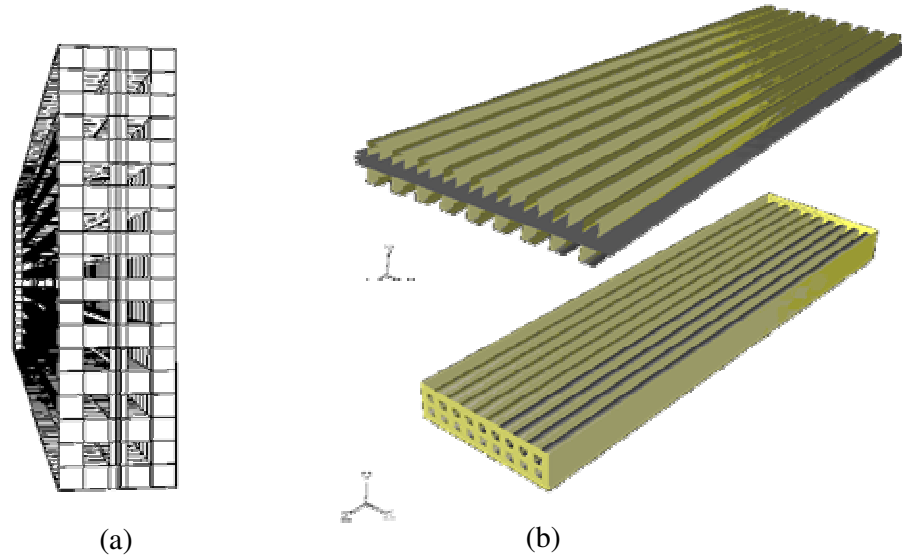
Şekil 3.1. PEM yakıt hücresinin şematik görünümü

Modeli oluşturulacak olan PEM yakıt hücresinin, anot ve katot tarafında dokuz adet olmak üzere toplam 18 adet düz gaz kanalı mevcuttur. Kanalların hücre içerisindeki düzeni Şekil 3.2’de görülmektedir. Membran, katalizör ve gaz difüzyon tabakalarından oluşan membran elektrot birlikteliği (MEA)’nin aktif yüzey alanı $13,3 \text{ cm}^2$ ’dir.



Şekil 3.2. Akım toplayıcı plakalar üzerindeki gaz kanallarının yerleşim düzeni ve akış alanı

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 görüntüleri Şekil 3.3'de sunulmuştur. PEMFC geometrisinin Gambit'te oluşturulması ve ağ yapılanması ile ilgili detaylar EK-1'de anlatılmıştır.

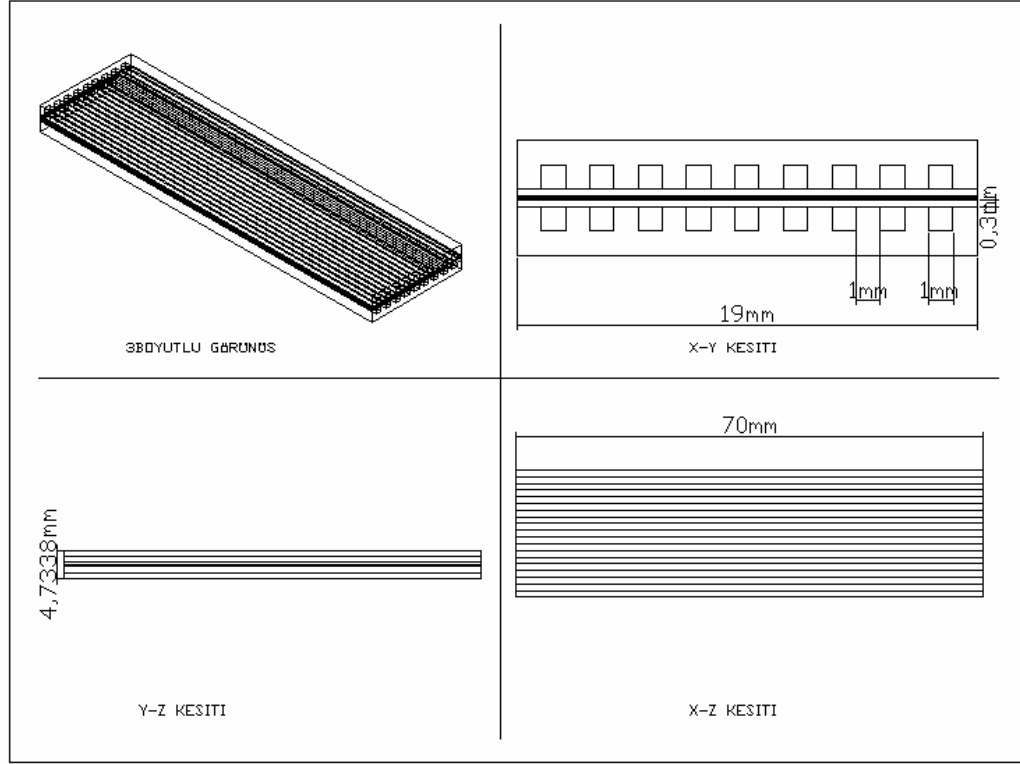


Şekil 3.3. Fluent-Gambit modülü ile oluşturulan PEM yakıt hücresinin görünümü
a) Ön görünüm, b) Kanalların ve kanal hariç hücrenin izometrik görünümü

Bunun yanı sıra, PEMFC geometrisine ait boyutlar Çizelge 3.1’de ise liste olarak Şekil 3.4’te ise plan şeklinde sunulmuştur.

Çizelge 3.1. PEM yakıt hücresinin tasarım parametreleri [49]

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	4,734



Şekil 3.4. 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 [58]	$1,0 \times 10^9 \text{ A} \cdot \text{m}^{-3}$
Anot Referans Mol Konsantrasyonu [49]	$0,546 \text{ kmol} \cdot \text{m}^{-3}$
Anot Konsantrasyon Üssü [48]	0,25
Anot Dönüşüm Katsayısı [48]	1,5
Katot Referans Akım Yoğunluğu [58]	$20000 \text{ A} \cdot \text{m}^{-3}$
Katot Referans Mol Konsantrasyonu [49]	$0,00339 \text{ kmol} \cdot \text{m}^{-3}$
Katot Konsantrasyon Üssü [48]	0,5
Katot Dönüşüm Katsayısı [48]	2
Açık Devre Voltajı	1,18 V
Hidrojen Referans Diffüzivitesi [58]	$7,33 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
Oksijen Referans Diffüzivitesi [58]	$2,13 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
Su Referans Diffüzivitesi [58]	$7,33 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
Diğer Türlerin Referans Diffüzivitesi [58]	$4,90 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$

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	19	2	70
Katot akım toplayıcı plaka	19	2	70
Anot gaz kanalı	1	1	70
Katot gaz kanalı	1	1	70
Anot gaz difüzyon tabaka	19	0,3	70
Katot gaz difüzyon tabaka	19	0,3	70
Anot katalizör tabaka	19	0,0129	70
Katot katalizör tabaka	19	0,0129	70
Membran	19	0,108	70

Bu modelde kullanılan PEM yakıt hücresini oluşturan katmanlar ve özellikleri;

1. Katot akım toplayıcı plaka
2. Katot gaz kanalları
3. Katot gaz difüzyon tabakası

4. Katot katalizör tabakası
5. Membran
6. Anot katalizör tabakası
7. Anot gaz difüzyon tabakası
8. Anot gaz kanalları
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 [53]	450 [53]	1240 [53]	2000 [53]
Özgül ısı ($Jkg^{-1}m^{-1}$)	1100 [53]	730 [53]	0,225 [53]	500 [53]
Isıl iletkenlik ($Wm^{-1}K^{-1}$)	20 [53]	20 [53]	0,24 [53]	70 [53]
Elektrik iletkenliği ($Ohmm$) ⁻¹	10^4 [53]	1250 [53]	1250 [53]	-
Gözeneklilik	-	0,4 [53]	0,28 [45]	-
Viskoz direnç (m^{-2})	-	$1,2 \times 10^{-12}$ [46]	$1,2 \times 10^{-12}$ [46]	-
Geçirgenlik (m^2)	-	$1,76 \times 10^{-11}$	-	$1,8 \times 10^{-18}$
Eşdeğer ağırlık ($kg\ mol^{-1}$)	-	-	-	1,1 [53]
Proton iletkenlik katsayısı	-	-	-	3 [48]

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 [59]

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 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. Bu çalışmada, sabit koordinat sisteminde, kütle, momentum, enerji, tür ve faz potansiyel korunum eşitlikleri çözülecektir.

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.

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

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 gradyenine 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 onsekiz adet düzgün doğrusal hava kanallarının dokuz tanesi anot, dokuz 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 laminar 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 $R (Am^{-3})$	$R_{an} = j_{an}^{ref} \left(\frac{[H_2]}{[H_2]_{ref}} \right)^{\gamma_{an}} \left(e^{\alpha_{an} F \eta_{an} / RT} \right)$	$R_{cat} = j_{cat}^{ref} \left(\frac{[O_2]}{[O_2]_{ref}} \right)^{\gamma_{cat}} \left(e^{-\alpha_{cat} F \eta_{cat} / RT} \right)$

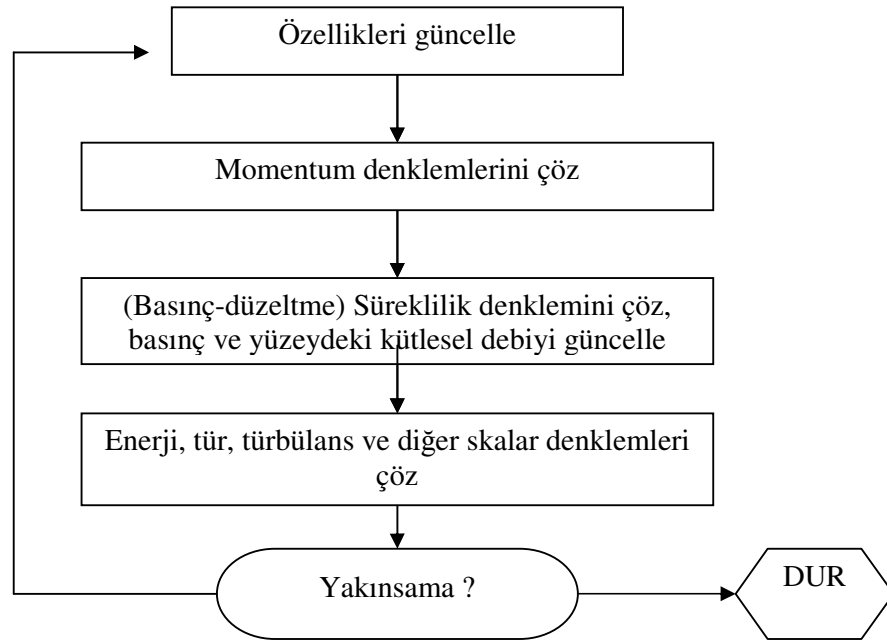
Çizelge 4.3. PEM Yakıt hücresi tabakalarında çözölen eşitlikler ve kaynak terimleri

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	$\nabla(\vec{u} C_k) = \nabla(D_k^{eff} \nabla C_k) + S_k$	$S_k = 0$	$S_k = 0$	$S_k = 0$	$S_k = -\frac{M_{w,k}}{nF} R_{an}, \quad k = H_2$ $S_k = -\frac{M_{w,k}}{nF} R_{cat}, \quad k = O_2, H_2O$	$S_k = 0$
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. Ayrık (Segregated) Çözüm Metodu

Ayrık çözücü, FLUENT'in kullandığı çözüm algoritmasıdır. Bu yaklaşım kullanılarak, yönetici eşitlikler, birbirinden ayrık, 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. Ayrık 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

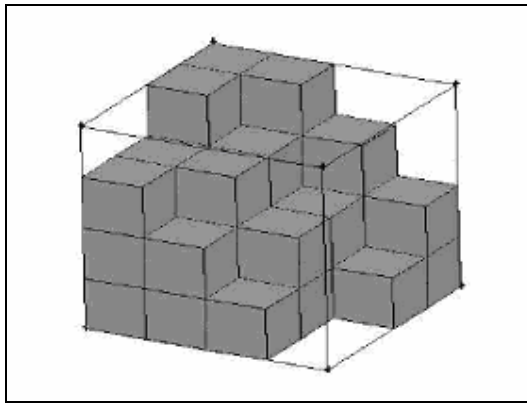
FLUENT, dört farklı basınç-hız eşleşme seçeneği sunmaktadır: SIMPLE, SIMPLEC, PISO, ve (zamana bağlı akışlar için, non-iteratif zaman ilerletme planı (NITA)) kesri

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 düzeltilmesi 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 ve bilgisayar kapasitesindeki yetersizlikler nedeni ile hexagonal ağ yapısı seçimini zorunlu kılmıştır (Şekil 5.2).



Şekil 5.2. Hexagonal eleman yapısı

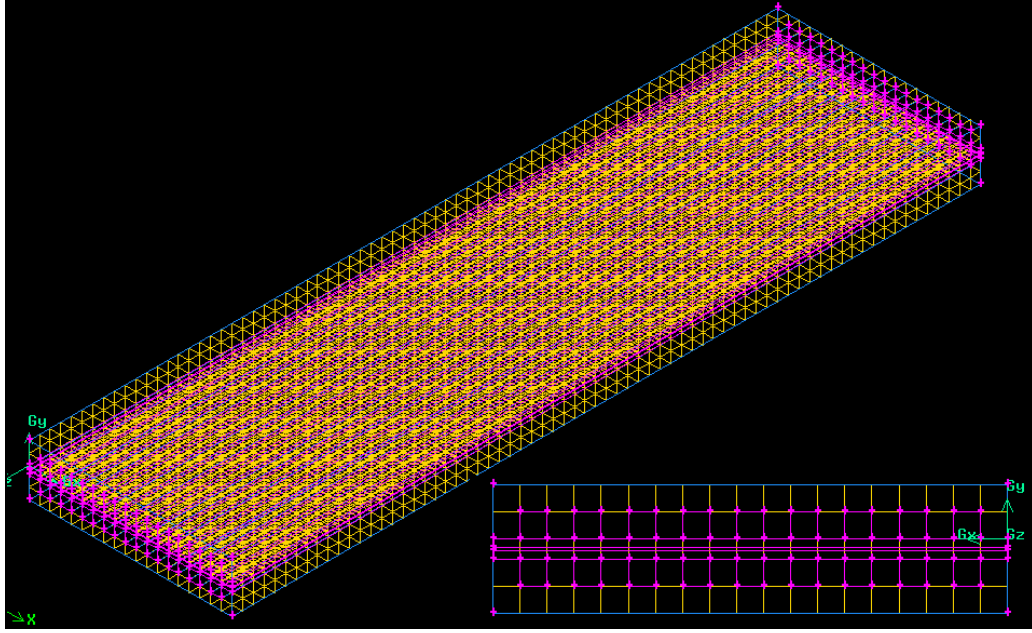
Düğüm sayısının belirlenebilmesi için; çözümlerin düğüm sayısından etkilenmeyeceği koşul elde edilmeye çalışılmıştır. Bunun için değişik sayıda düğüme sahip geometriler oluşturulmuş ve çözümler elde edilmiştir. Sonuçların düğüm sayısından bağımsız olmaya başladığı durum gözlenerek minimum çalışma düğüm 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				
	0,25	0,4	0,5	0,6	1
Akım Toplayıcı	129920	35700	16240	9126	2030
Gaz Kanalı	4480	1575	560	468	70
Gaz Difüzyon Tabakası	21280	9975	5320	4446	1330
Katalizör Tabaka	21280	9975	5320	4446	1330
Membran	21280	9975	5320	4446	1330
Toplam Hücre	446880	149625	69160	48906	11970

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 “basıncı 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 “kütleli 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 “kütleli 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 tümünün girişinde “kütleli 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 tümünün 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 şeklindedir. 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.

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

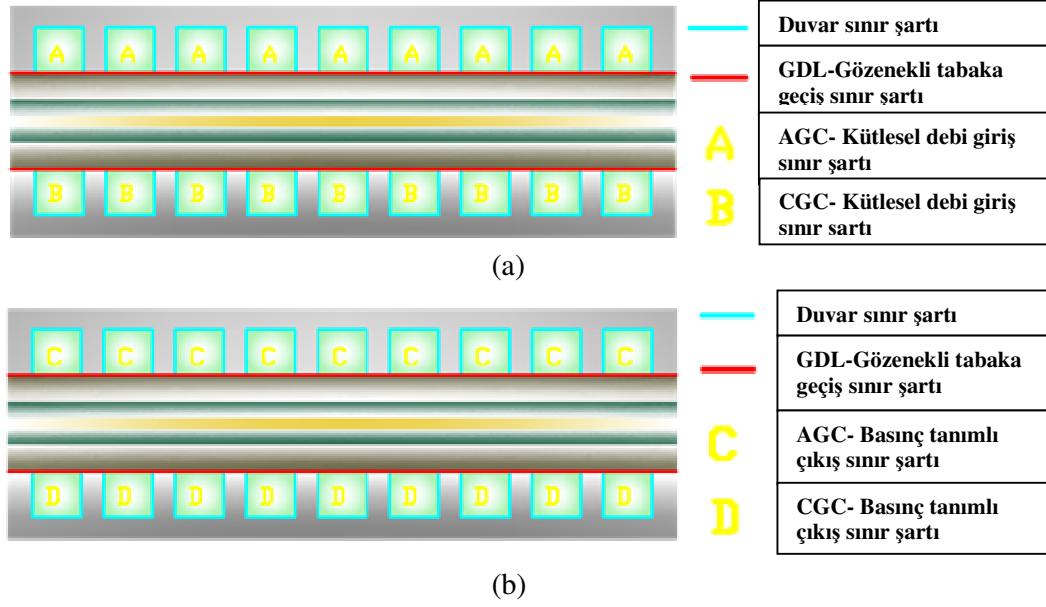
Burada; μ , Laminer akış viskozitesi, α , Ortamın gözenekliliği, C_2 , Basınç değişim katsayısı, v , Gözenekli yüzeye dik hız, Δ_m ise gözenekli ortam kalınlığını göstermektedir.

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.



Şekil 5.4. Sınır şartları

(a) Gaz giriş ($z = 0$ mm) yüzeyi, (b) Gaz çıkış ($z = 70$ mm) yüzeyi

Çizelge 5.2. PEM Yakıt hücresi anot tabakalarında çözölen 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 - ND ZDF - ZDF	ZDF - ZDF ND - 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 - ND NS - NS	NS - NS ND - 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 - ND ZDF - ZDF	ZDF - ZDF ND - 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 - ND SF=0 - SF=0	SF=0 - SF=0 ND - 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 - ND SF=0 - SF=0	SF=0 - SF=0 ND - 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 - ND HF=0 - HF=0	HF=0 - HF=0 ND - PJ HF=0 - HF=0	HF=0 - HF=0 PJ - PJ HF=0 - HF=0

Çizelge 5.3. PEM Yakıt hücresi katot tabakalarında çözölen 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 - ND ZDF - ZDF	ZDF - ZDF ND - 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 - ND NS - NS	NS - NS ND - 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 - ND ZDF - ZDF	ZDF - ZDF ND - 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 - ND SF=0 - SF=0	SF=0 - SF=0 ND - 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 - ND SF=0 - SF=0	SF=0 - SF=0 ND - 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 - ND HF=0 - HF=0	HF=0 - HF=0 ND - PJ HF=0 - HF=0	HF=0 - HF=0 PJ - PJ HF=0 - HF=0

PEMFC modelinde tanımlı yüzeyler ve sınır şartları Çizelge 5.4’de listelenmiştir. PEMFC çözümü için tanımlanan sınır şartları, EK-7’de Fluent programından alınan raporlar halinde belirtilmiştir.

Çizelge 5.4. PEMFC modelinde tanımlı yüzeyler ve sınır şartları

Kütleli Debi Giriş	Basınç Tanımlı Çıkış	Gözenekli Tabaka Geçiş	Duvar		Default-İç
kg1	kc1	porous_jump.73	wall.37	wall.117	default-interior:176
kg2	kc2	porous_jump.74	wall.38	wall.118	default-interior:175
kg3	kc3	porous_jump.75	wall.39	wall.119	default-interior:174
kg4	kc4	porous_jump.76	wall.40	wall.120	default-interior:173
kg5	kc5	porous_jump.77	wall.41	wall.121	default-interior:172
kg6	kc6	porous_jump.78	wall.42	wall.122	default-interior:171
kg7	kc7	porous_jump.79	wall.43	wall.123	default-interior:170
kg8	kc8	porous_jump.80	wall.44	wall.124	default-interior:169
kg9	kc9	porous_jump.81	katotaltduvar	wall.64-shadow	default-interior:168
ag1	ac9	porous_jump.82	anotustduvar	wall.63-shadow	default-interior:167
ag2	ac8	porous_jump.83	wall.47	wall.62-shadow	default-interior:166
ag3	ac7	porous_jump.84	wall.48	wall.61-shadow	default-interior:165
ag4	ac6	porous_jump.85	wall.49	wall.60-shadow	default-interior:164
ag5	ac5	porous_jump.86	wall.50	wall.59-shadow	default-interior:163
ag6	ac1	porous_jump.87	wall.51	wall.58-shadow	default-interior:162
ag7	ac2	porous_jump.89	wall.52	wall.57-shadow	default-interior:161
ag8	ac3	porous_jump.90	wall.53	wall.56-shadow	default-interior:160
ag9	ac4	porous_jump.91	wall.54	wall.55-shadow	default-interior:159
		porous_jump.92	wall.55	wall.54-shadow	default-interior:158
		porous_jump.93	wall.56	wall.53-shadow	default-interior:157
		porous_jump.94	wall.57	wall.52-shadow	default-interior:156
		porous_jump.95	wall.58	wall.51-shadow	default-interior:155
		porous_jump.96	wall.59	wall.50-shadow	default-interior:154
		porous_jump.97	wall.60	wall.49-shadow	default-interior:153
		porous_jump.98	wall.61	wall.48-shadow	default-interior:151
		porous_jump.99	wall.62	wall.47-shadow	default-interior:001
		porous_jump.100	wall.63		default-interior
		porous_jump.101	wall.64		
		porous_jump.102	wall.65		
		porous_jump.103	wall.66		
		porous_jump.104	wall.67		
		porous_jump.105	wall.68		
		porous_jump.106	wall.69		
		porous_jump.107	wall.70		
		porous_jump.108	wall.71		
		porous_jump.109	wall.72		
		porous_jump.110	wall.113		
		porous_jump.111	wall.114		
		mema	wall.115		
		memu	wall.116		

6. SONUÇLAR

Bu çalışmada, FLUENT-PEMFC modülü kullanılarak modeli oluşturulan PEM yakıt hücresinde 12 farklı durum için çözüm elde edilmiştir (Çizelge 6.1). FLUENT-PEMFC modülünün kullanımı ile ilgili ayrıntılar EK-2’de verilmiştir. Çözümler 0,5 sıklıktaki ağ yapısı kullanılarak elde edilmiştir.

Çizelge 6.1. İncelenen durumlara ait işletim parametreleri

Durum No	Basınç <i>Atm</i>	Kütlesel Debi $[kgs^{-1}]$		Kütle Kesri			
		Anot	Katot	Anot		Katot	
				Hidrojen	Su	Oksijen	Su
1	1,5	10^{-7}	10^{-6}	0,95	0,05	0,23	0,01
2	2	10^{-7}	10^{-6}	0,95	0,05	0,23	0,01
3	3	10^{-7}	10^{-6}	0,95	0,05	0,23	0,01
4	1,5	10^{-6}	10^{-6}	0,95	0,05	0,23	0,01
5	1,5	10^{-5}	10^{-6}	0,95	0,05	0,23	0,01
6	1,5	10^{-7}	10^{-4}	0,95	0,05	0,23	0,01
7	1,5	10^{-7}	10^{-3}	0,95	0,05	0,23	0,01
8	1,5	10^{-7}	10^{-6}	0,90	0,10	0,23	0,01
9	1,5	10^{-7}	10^{-6}	0,60	0,40	0,23	0,01
10	1,5	10^{-7}	10^{-6}	0,38	0,62	0,23	0,01
11	1,5	10^{-7}	10^{-6}	0,95	0,05	0,21	0,10
12	1,5	10^{-7}	10^{-6}	0,95	0,05	0,25	0,20

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 6.2’de 1,73 GHz Pentium 4 bilgisayar kullanılarak elde edilen sayısal çözüm bilgileri görülmektedir.

Çizelge 6.2. 1,73 GHz Pentium 4 bilgisayar kullanılarak elde edilen sayısal çözüm bilgileri

Çözüm Bilgileri	Değerler
Toplam eleman sayısı	69160
Kullanılan ram/Mevcut ram	590/760MB
Toplam iterasyon sayısı	500
Ortalama bir iterasyon süresi	4sn
Toplam iterasyon süresi	2495sn (42 dk)
Polarizasyon eğrisi (7 nokta) için gereken süre	237 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 1 alınarak 11970 (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 6.3)

Çizelge 6.3. Farklı eleman sayılarında ortalama akım yoğunluğu değerleri¹ ve çözüm süreleri

Toplam eleman sayısı	Akım yoğunluğu (Acm^{-2})	Akım yoğunluğu değişimi (%)	Çözüm süresi (dk)
11970	81,13918	-	10
48906	82,34035	1,4	33
69160	83,06287	0,88	41
149625	83,25338	0,23	88
446880	83,61678	0,44	1139

¹ Çözümler Durum-1 parametreleri kullanılarak elde edilmiştir

Çizelge 6.3 incelendiğinde, birbirini takip eden sonuçlardaki % değişim miktarının %1'in altına düştüğü ilk durum, yani 69160 elemanın kullanıldığı 0,5 sıklıktaki 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

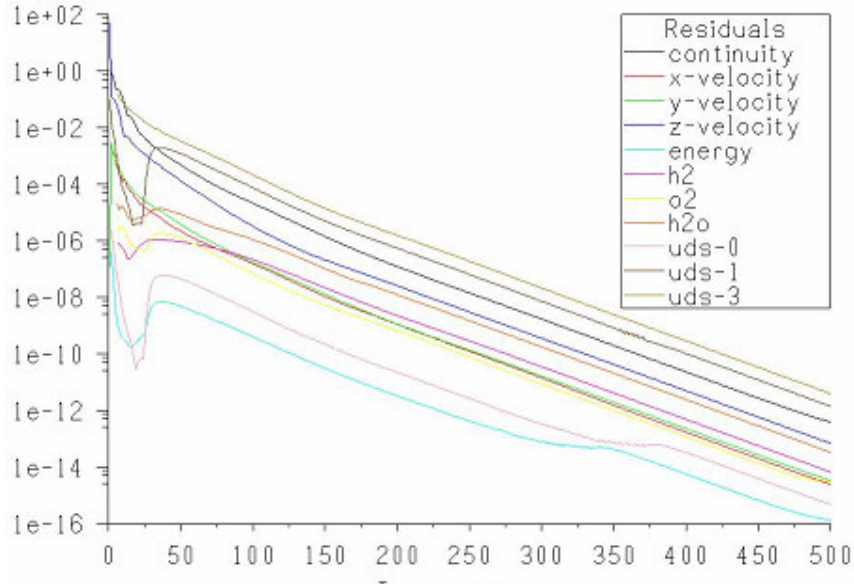
kriteri, normalize edilen ölçeksiz artıkların 10^{-3} mertebesine düşmesi ile tanımlanır. Bununla birlikte, birçok durum için, bu şart uygun olmayabilir.

1. Çok iyi başlangıç değer tahminleri verilirse, “kalıntılar”ın büyüklüğü 3 mertebe düşmeyebilir.
2. Hesaplamanın başlangıcında, sıfır değere sahip non-lineer kaynak terimleri yönetici eşitlikde mevcut ve hesaplama süresince non-lineer 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.

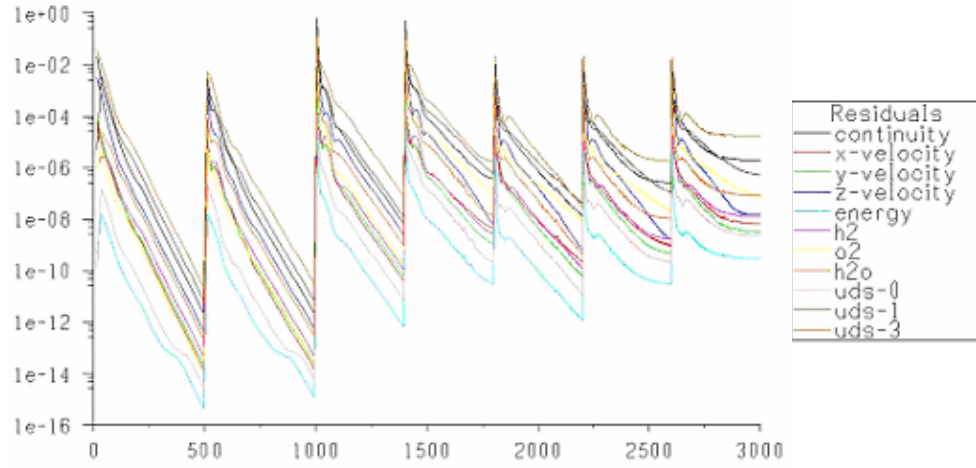
Bu çalışmada, 12 farklı durum için çözüm gerçekleştirilmiştir. Durum-1 için elde edilen yakınsama grafiği Şekil 6.1’de görülmektedir. Süreklilik eşitliği, momentum eşitliği (x, y ve z hızları), enerji eşitliği ve H_2 , O_2 , H_2O , UDS-0, UDS-1, UDS-3 değişkenlerine ait yakınsama kriterindeki kalıntılar teriminin iterasyon sayısına göre değişimi 10^{-10} ’un altına düşmüştür.

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



Şekil 6.1 Durum-1 çözümüne ait yakınsama grafiği

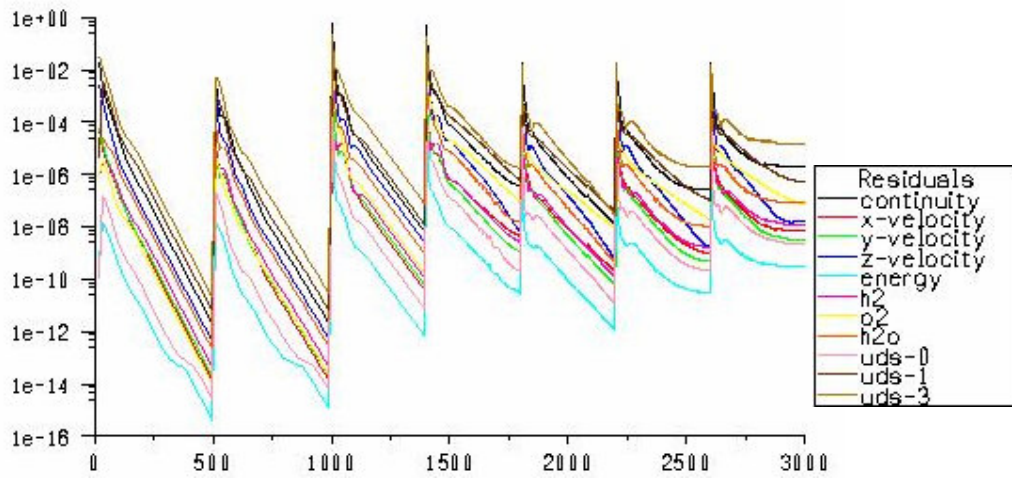
Şekil 6.2’de ise Durum-1 için kutuplaşma eğrisinin elde ediminde oluşan yakınsama grafiği görülmektedir. Kutuplaşma eğrisi 7 farklı aşırı-potansiyel değerine karşılık gelen hücre potansiyeli değerinin sınır şartı olarak verilerek ardışık çözümlerin elde edilmesiyle oluşturulmuştur. Her bir hücre potansiyeli değeri için elde edilen çözümlerin yakınsama durumu Şekil 6.2’de görülmektedir. Buna göre, 1. ve 2. hücre potansiyel değeri 500 iterasyonda 10^{-10} değerinin altına, 3 - 5. hücre potansiyel değerleri için elde edilen çözümler 400 iterasyonda 10^{-6} , 6. ve 7. hücre potansiyel değerleri için elde edilen çözümler 400 iterasyonda 10^{-4} değerinin altına düşmüştür. 7 aşırı-potansiyel değeri için çözümlerin ardışık olarak yürütülmesi, yakınsak çözümün yaklaşık 500 iterasyon önce sonuçlanmasını sağlamıştır.



Şekil 6.2. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-1 çözümüne ait yakınsama grafiği

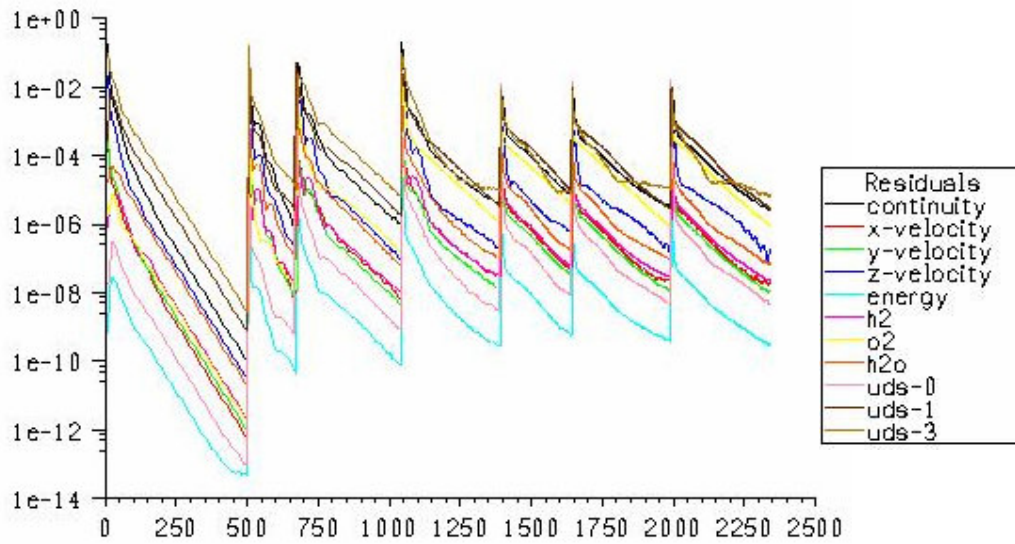
Niceliklerin kalıntı değerlerinin davranışı incelendiğinde, azalan bir seyir takip ettiği Şekil 6.1 ve Şekil 6.2’de gözlenmektedir. Bu aşamada çözümlerin yakınsadığı söylenebilir.

Kutuplaşma eğrilerinin oluşturulması amacıyla 12 Durum için 7 ardışık çözüm yapılmıştır.



Şekil 6.3. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-2 çözümüne ait yakınsama grafiği

Şekil 6.3’de, Durum 2 için elde edilen kalıntıların yakınsama grafiğinde görüldüğü üzere, ardışık ilk 2 çözüm için tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-10} , dan düşük değerde, 3-7 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 500 iterasyonda, takip eden 5 çözüm ise 400 iterasyonda yakınsamıştır.

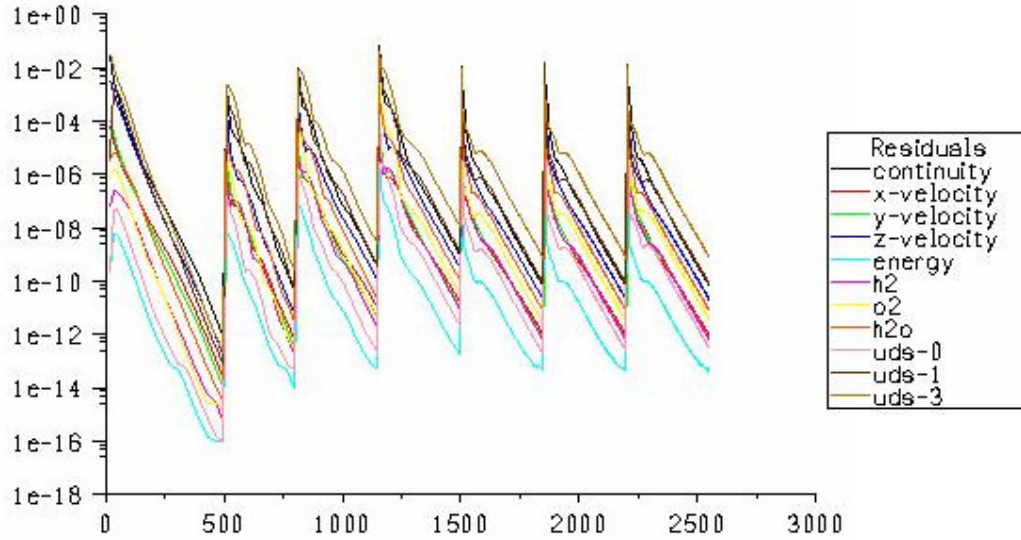


Şekil 6.4. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-3 çözümüne ait yakınsama grafiği

Şekil 6.4’te, Durum-3 için elde edilen kalıntıların yakınsama grafiğinde görüldüğü üzere, ilk çözüm için tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-8} , den düşük değerde, 2-7 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 çözüm 500 iterasyonda, 2. çözüm 200, 3. çözüm 350, 4. çözüm 350, 5. çözüm 250, 6. ve 7. çözümler 350 iterasyonda yakınsamıştır. Toplam 2350 iterasyonda 7 çözüm yakınsamıştır.

Şekil 6.5’te, Durum-4 için elde edilen kalıntıların yakınsama grafiğinde görüldüğü üzere, ilk çözüm için tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-11} , den düşük değerde, 2-7 arası çözümlerde ise tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-8} , den düşük değerdedir. Bu çözümler

elde edilirken enerji denklemi kalıntısının 10^{-6} 'dan düşük olmasına dikkat edilmiştir. İlk çözüm 500 iterasyonda, 2. çözüm 300, 3-7 arası çözümlerde 350, iterasyonda yakınsamıştır. Toplam 2550 iterasyonda 7 Çözüm yakınsamıştır.

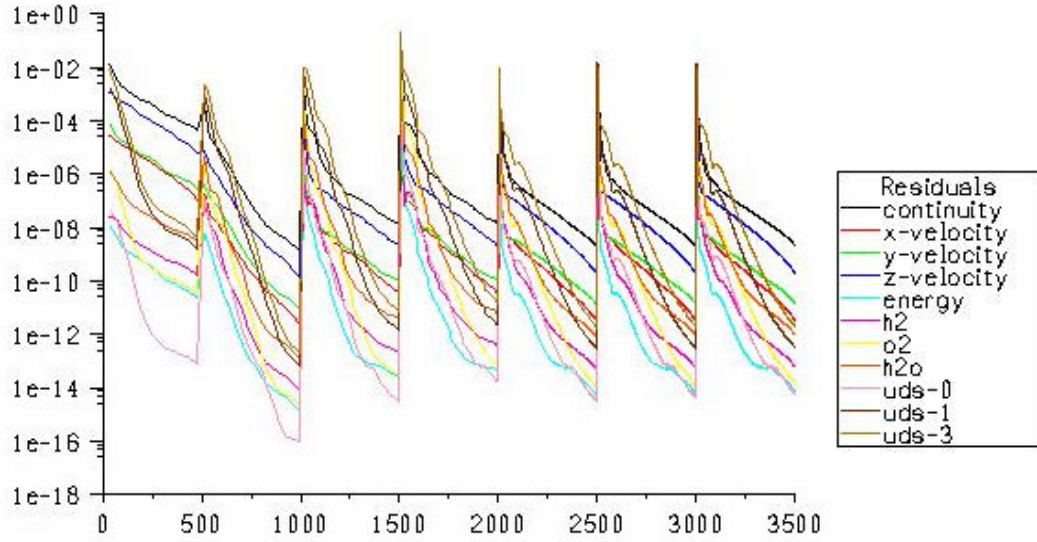


Şekil 6.5. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-4 çözümüne ait yakınsama grafiği

Şekil 6.6'da, Durum-5 için elde edilen kalıntıların yakınsama grafiğinde görüldüğü üzere, ilk çözüm için tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-4} 'den düşük değerde, 2-7 arası çözümlerde ise tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-8} 'den düşük değerdedir. Bu çözümler elde edilirken enerji denklemi kalıntısının 10^{-6} 'dan düşük olmasına dikkat edilmiştir. İlk çözüm 450 iterasyonda, 2. çözüm 550, 3-7 arası çözümlerde 500, iterasyonda yakınsamıştır. Toplam 3500 iterasyonda 7 çözüm yakınsamıştır.

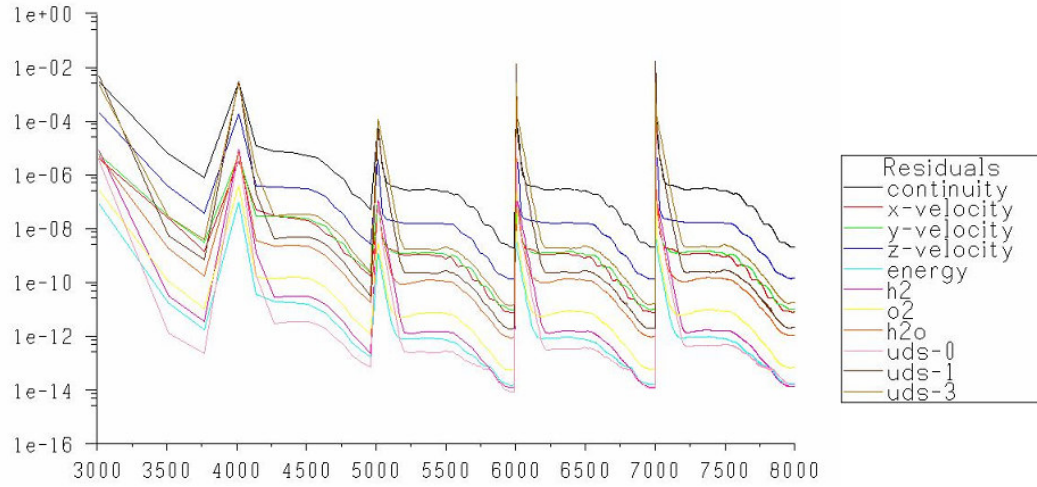
Şekil 6.7'de, Durum-6 için elde edilen kalıntıların yakınsama grafiğinde görüldüğü üzere, ilk iki çözüm için tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-4} 'ten düşük değerde, üçüncü çözümde, tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-6} 'dan düşük değerde, dördüncü çözümde, tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-7} 'den düşük değerde, 5-7 arası çözümlerde tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-8} 'den düşük değerdedir. Bu çözümler elde edilirken enerji denklemi kalıntısının 10^{-6} 'dan düşük olmasına dikkat edilmiştir. İlk çözüm 2000

iterasyonda, 2. çözüm 1000, 3. çözüm 750, 4. çözüm 1250, 5., 6. ve 7. çözümler 1000 iterasyonda yakınsamıştır. Toplam 7 çözüm 8000 iterasyonda yakınsamıştır.

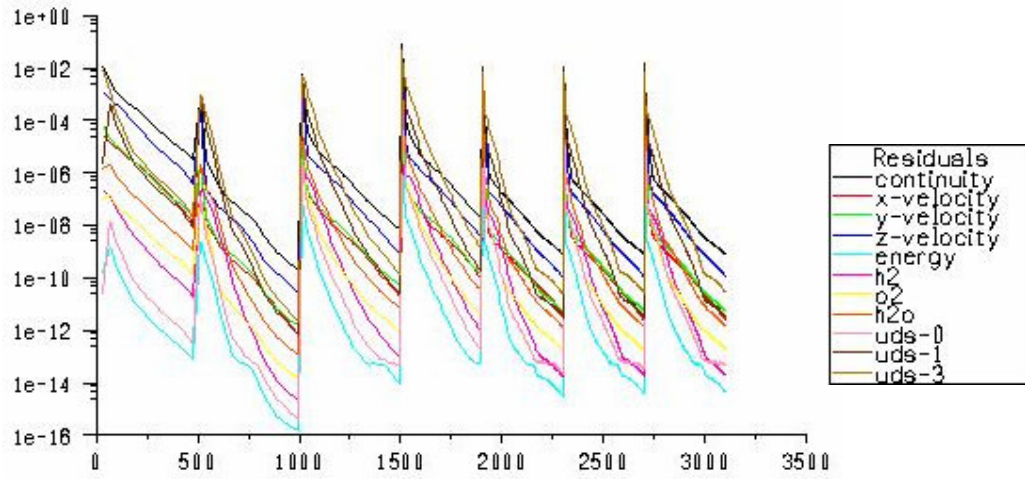


Şekil 6.6. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-5 çözümüne ait yakınsama grafiği

Şekil 6.8’de, Durum-7 için elde edilen kalıntıların yakınsama grafiğinde görüldüğü üzere, ilk çözüm için tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-5} ’den düşük değerde, 2. çözümde 10^{-9} , 3. ve 4. çözümlerde 10^{-8} , 5-7 arası çözümlerde ise 10^{-9} ’den düşük değerdedir. Bu çözümler elde edilirken enerji denklemi kalıntısının 10^{-6} ’dan düşük olmasına dikkat edilmiştir. İlk 3 çözüm 500 iterasyonda, 4. çözüm 400, 5. çözüm 400, 6. çözüm 350 ve 7. çözüm 450 iterasyonda yakınsamıştır. Toplam 3100 iterasyonda 7 çözüm yakınsamıştır

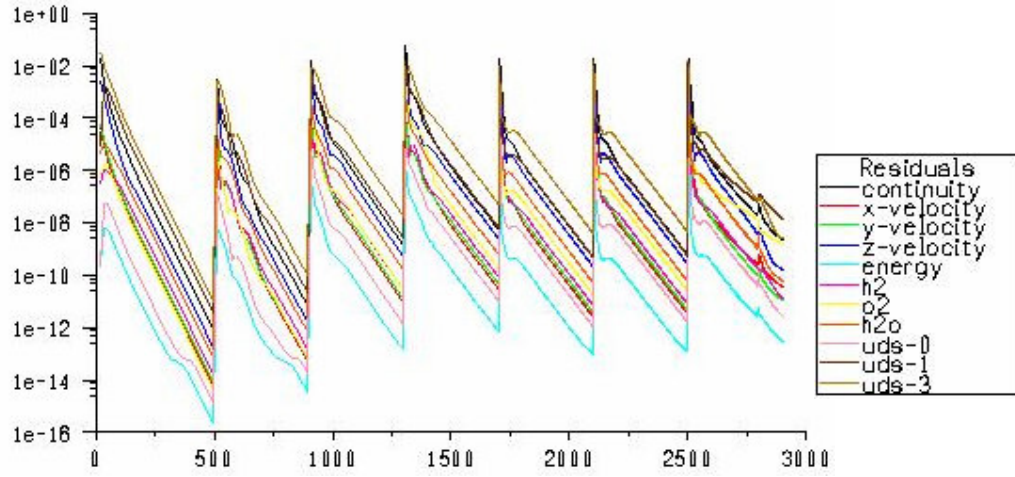


Şekil 6.7. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-6 çözümüne ait yakınsama grafiği

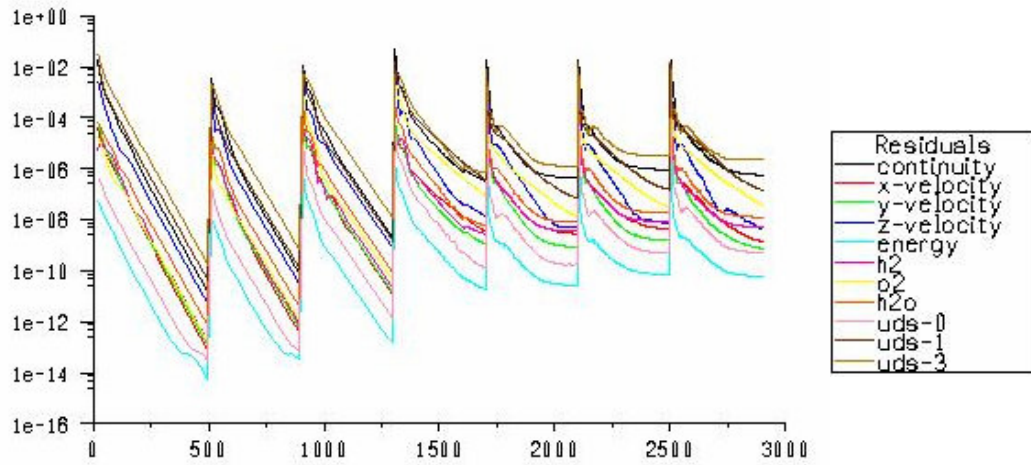


Şekil 6.8. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-7 çözümüne ait yakınsama grafiği

Şekil 6.9'da, Durum-8 için elde edilen kalıntıların yakınsama grafiğinde görüldüğü üzere, ilk 2 çözüm için tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-10} 'dan düşük değerlerde, 3-7 arası çözümlerde ise 10^{-7} 'den düşük değerdedir. Bu çözümler elde edilirken enerji denklemi kalıntısının 10^{-6} 'dan düşük olmasına dikkat edilmiştir. İlk çözüm 500 iterasyonda, 2-7 arası çözümler 400 iterasyonda yakınsamıştır. Toplam 2900 iterasyonda 7 çözüm yakınsamıştır.

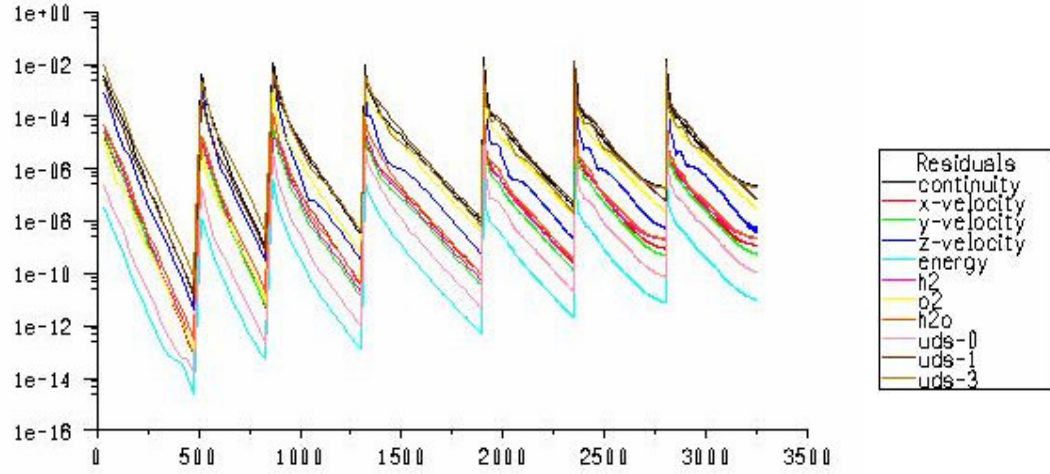


Şekil 6.9. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-8 çözümüne ait yakınsama grafiği

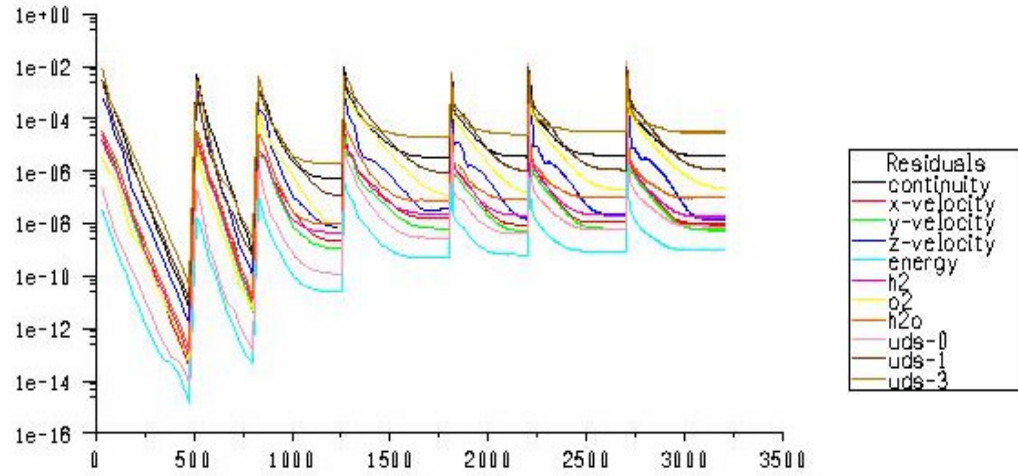


Şekil 6.10. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-9 çözümüne ait yakınsama grafiği

Şekil 6.10'da, Durum-9 için elde edilen kalıntıların yakınsama grafiğinde görüldüğü üzere, ilk 3 çözüm için tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-8} 'dan düşük değerde, 4-7 arası çözümlerde ise 10^{-6} 'dan düşük değerdedir. Bu çözümler elde edilirken enerji denklemleri kalıntısının 10^{-6} 'dan düşük olmasına dikkat edilmiştir. İlk çözüm 500 iterasyonda, 2-7 arası çözümler 400 iterasyonda yakınsamıştır. Toplam 2900 iterasyonda 7 çözüm yakınsamıştır.

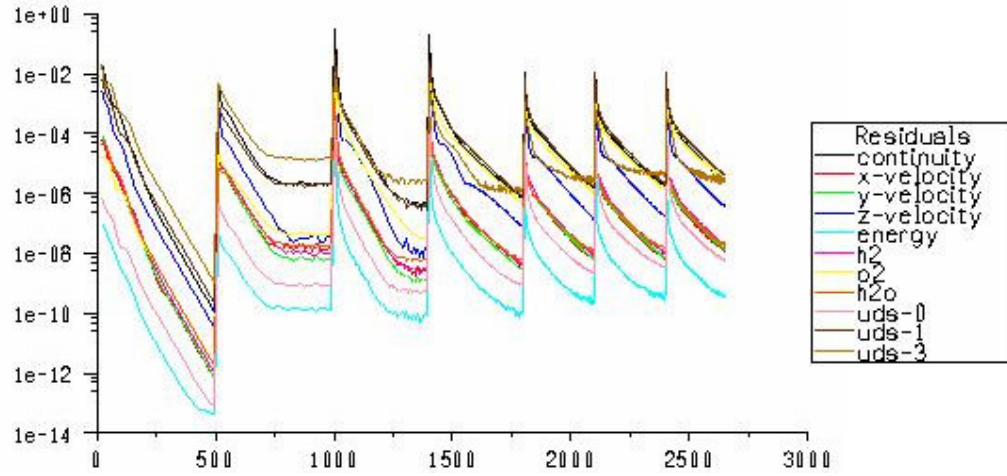


Şekil 6.11. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-10 çözümüne ait yakınsama grafiği



Şekil 6.12. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-11 çözümüne ait yakınsama grafiği

Şekil 6.11’de, Durum-10 için elde edilen kalıntıların yakınsama grafiğinde görüldüğü üzere, ilk çözüm için tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-10} ’dan düşük değerde, 2-4 arası çözümlerde 10^{-7} , 5-7 arası çözümlerde ise 10^{-6} ’dan düşük değerdedir. Bu çözümler elde edilirken enerji denklemi kalıntısının 10^{-6} ’dan düşük olmasına dikkat edilmiştir. İlk çözüm 500 iterasyonda, 2. çözüm 350, 3. çözüm 500, 4. çözüm 550, 5. çözüm 450, 6. çözüm 500 ve 7. çözüm 400 iterasyonda yakınsamıştır. Toplam 3250 iterasyonda 7 çözüm yakınsamıştır.



Şekil 6.13. Kutuplaşma eğrisi için elde edilen Durum-12 çözümüne ait yakınsama grafiği

Şekil 6.12’de, Durum-11 için elde edilen kalıntıların yakınsama grafiğinde görüldüğü üzere, ilk çözüm için tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-10} ’dan düşük değerde, 2. çözüm 10^{-8} , 3. çözüm 10^{-6} , 4-7 arası çözümler 10^{-4} ’ten düşük değerdedir. Bu çözümler elde edilirken enerji denklemi kalıntısının 10^{-6} ’dan düşük olmasına dikkat edilmiştir. İlk çözüm 500 iterasyonda, 2. çözüm 350, 3. ve 4. çözümler 500, 5. çözüm 400, 6. ve 7. çözümler 500 iterasyonda yakınsamıştır. Toplam 3250 iterasyonda 7 çözüm yakınsamıştır.

Şekil 6.13’de, Durum-12 için elde edilen kalıntıların yakınsama grafiğinde görüldüğü üzere, ilk çözüm için tüm niceliklerin kalıntıları 10^{-8} ’den düşük değerde, 2-7 arası çözümler 10^{-5} ’den düşük değerdedir. Bu çözümler elde edilirken enerji denklemi kalıntısının 10^{-6} ’dan düşük olmasına dikkat edilmiştir. İlk 2 çözüm 500 iterasyonda, 3. çözüm 400, 4. çözüm 400, 5. çözüm 250, 6. ve 7. çözümler 300 iterasyonda yakınsamıştır. Toplam 2650 iterasyonda 7 çözüm yakınsamıştır.

Çizelge 6.4’de 12 Durumun kutuplaşma eğrilerinin oluşturulmasında kullanılan 7 noktaya karşılık gelen iterasyon sayıları ve hesap süresi dağılımı görülmektedir. Basınç 2 atm (D2) değerinden 3 atm (D3) değerine artırıldığında, toplam iterasyon sayısında %22’lik bir azalma olduğu gözlenmektedir. Anot gazlarının toplam

kütlesel debisi 10^{-7} (D1) değerinden 10^{-6} (D4) değerine artırıldığında, toplam iterasyon sayısında %15'lik bir azalma olduğu görülmektedir. Katot gazları toplam kütlesel debisinin 10^{-6} (D1) değerinden 10^{-5} (D7) değerine yükselmesi ile toplam iterasyon sayısında %3'lük bir artış gözlenmiştir. Ancak bu artışta etkili olan parametrelerden biri de, artıklardaki azalma miktarıdır. D1'in yakınsama grafiğinden (Şekil 6.2), ilk iterasyon sona erdiğinde artıkların büyüklüğü 10^{-10} mertebesinde olduğu, D7'nin yakınsama grafiğinden (Şekil 6.8) ise ilk iterasyon sonucunda artıkların büyüklüğünün 10^{-5} mertebesinde olduğu görülür. Bu ise D7 çözümünün toplam iterasyon sayısının artışına katkıda bulunmuştur. Anot kısmındaki hidrojen kütle kesri 0.95 (D1) değerinden 0.90 (D8) değerine düşürüldüğünde, toplam iterasyon sayısında, %3'lük bir düşüş gözlenmiştir. Anot kısmındaki hidrojen kütle kesri 0.60 (D9) değerinden 0.39 (D10) değerine düşürüldüğünde, toplam iterasyon sayısında, %11'lik bir artış gözlenmiştir. Yakınsama eğrileri karşılaştırıldığında benzer özellikler göstermesine karşılık iterasyon sayısındaki bu artış sadece anot kısmındaki hidrojen kütle kesrinin azalmasından kaynaklandığı söylenebilir. Katot kısmındaki oksijen kütle kesrinin 0.23 (D1) değerinden 0.21 (D11) değerine düşürülmesi, toplam iterasyon sayısında %8'lik bir artışa sebebiyet vermiştir. Yakınsama eğrileri karşılaştırıldığında benzer özellikler göstermektedir. İterasyon sayısındaki artışın oksijen kütle kesrindeki düşüşten kaynaklandığı söylenebilir. Katot kısmındaki oksijen kütle kesrinin 0.23 (D1) değerinden 0.25 (D12) değerine artırımı, toplam iterasyon sayısında %12'lik bir azalmaya sebebiyet vermiştir. Yakınsama eğrileri karşılaştırıldığında benzer özellikler göstermektedir. İterasyon sayısındaki azalışın oksijen kütle kesrindeki artıştan kaynaklandığı söylenebilir.

Çizelge 6.4. 12 Durumun (D) kutuplaşma eğrilerinin oluşturulmasında kullanılan 7 noktaya (N) karşılık gelen iterasyon sayıları ve hesap süresi dağılımı

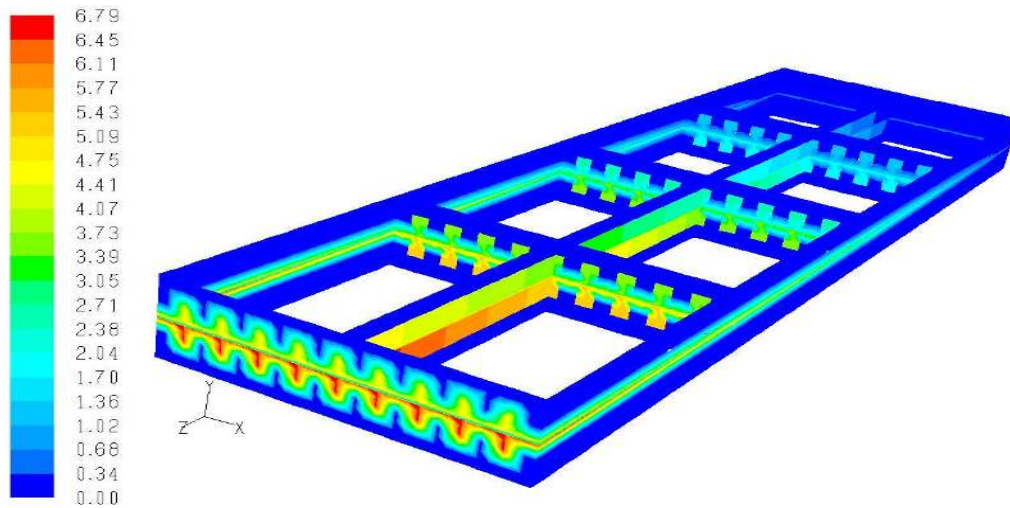
D	N1	N2	N3	N4	N5	N6	N7	Toplam iterasyon sayısı
1	500	500	400	400	400	400	400	3000
2	500	500	400	400	400	400	400	3000
3	500	200	350	350	250	350	350	2350
4	500	300	350	350	350	350	350	2550
5	450	550	500	500	500	500	500	3500
6	2000	1000	750	1250	1000	1000	1000	8000
7	500	500	500	400	400	350	450	3100
8	500	400	400	400	400	400	400	2900
9	500	400	400	400	400	400	400	2900
10	500	350	500	550	450	500	400	3250
11	500	350	500	500	400	500	500	3250
12	500	500	400	400	250	300	300	2650

6.3. Niceliklerin Hücre İçindeki Dağılımları

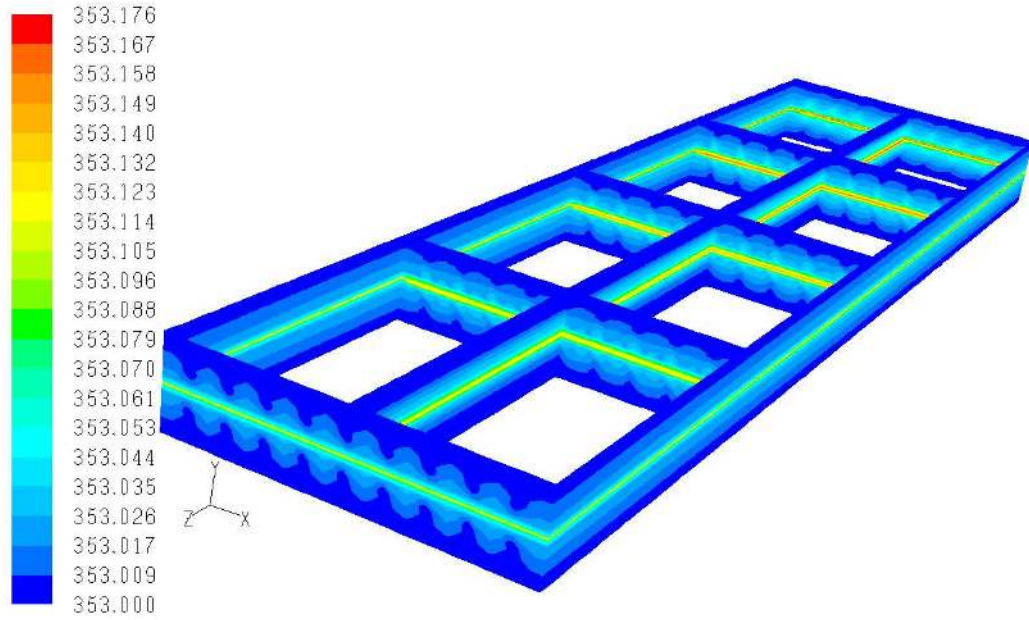
Bu kısımda, modeli kurulan PEM yakıt hücresi için Durum-1 parametreleri kullanılarak elde edilen sonuçlar analiz edilmiştir. Bu amaç doğrultusunda, FLUENT'te oluşturulan 2-B grafikler, niceliklerin değişimi izlenebilecek şekilde 3-B PEMFC geometri üzerinde, dış yüzeylerde ($x = 0$, $x = 0,19$, $z = 0$, $z = 0,07$) ve iç yüzeylerde ($z = 0,0175$, $z = 0,035$, $z = 0,0525$) alınmış ve bölüm 6.2.1'de sunulmuşlardır. Bölüm 6.2.2'de ise, (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki niceliklerin 2-B dağılımları sunulmuştur.

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

Şekil 6.14'de 3-B PEMFC geometrisi üzerinde seçilen yüzeylerdeki basınç dağılımları görülmektedir. Giriş kesitinde ($z = 0$) anot kısmında 1,5 atm basınç sınır şartı gözlenmektedir. Çıkışa doğru gidildikçe atmosferik basınca ulaşmaktadır. Dolayısıyla, elde edilen dağılımlar modelin çözümünde tanımlanan sınır şartları ile uyum göstermektedir.



Şekil 6.14. PEMFC dış yüzeylerindeki ($x = 0$, $x = 0,19$, $z = 0$, $z = 0,07$), ve iç yüzeylerindeki ($z = 0,0175$, $z = 0,035$, $z = 0,0525$) basınç dağılımı (Pa)

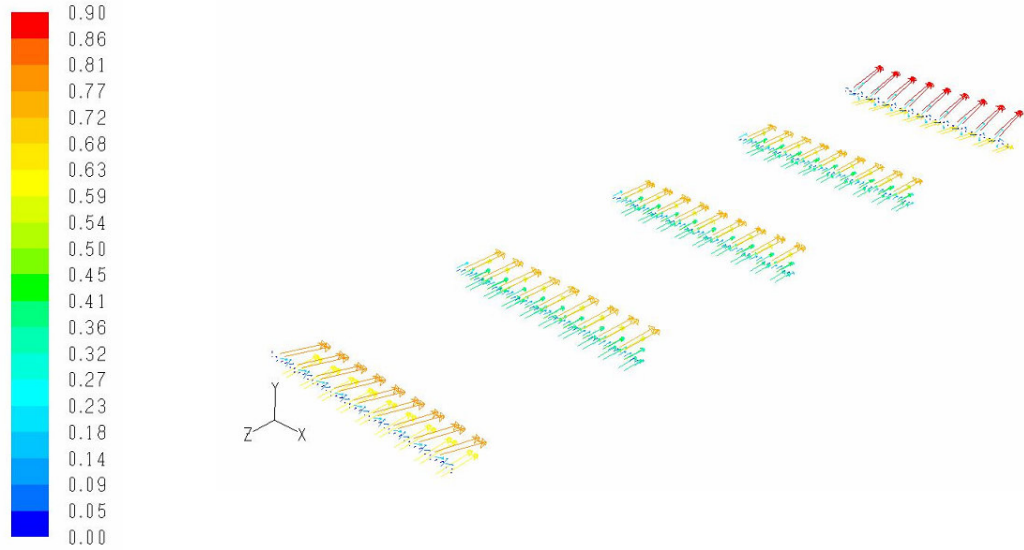


Şekil 6.15. PEMFC dış yüzeylerindeki ($x = 0$, $x = 0,19$, $z = 0$, $z = 0,07$), ve iç yüzeylerindeki ($z = 0,0175$, $z = 0,035$, $z = 0,0525$) sıcaklık dağılımı (K)

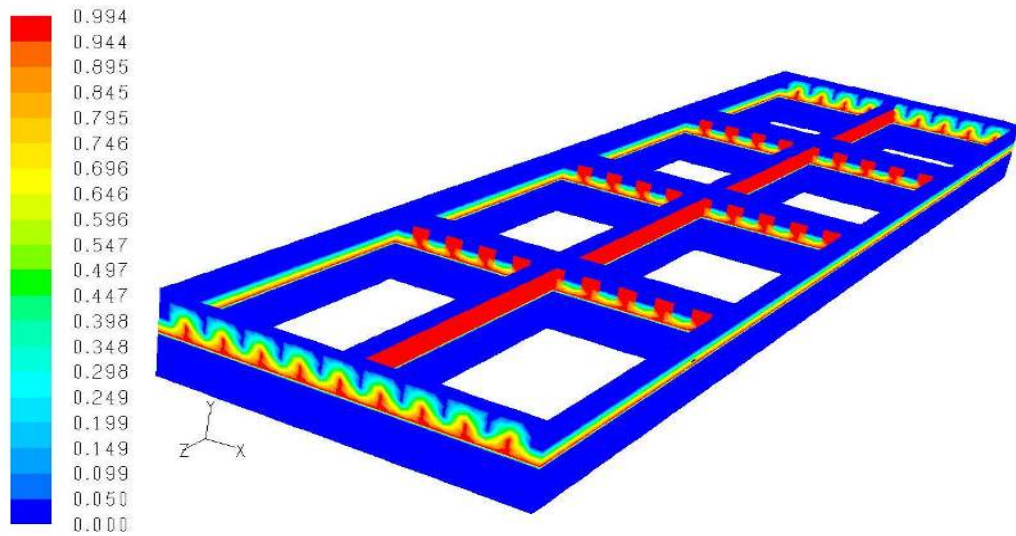
Şekil 6.15’de 3-B PEMFC geometrisi üzerinde seçilen yüzeylerdeki sıcaklık dağılımları görülmektedir. Çözüm bölgesinin tamamında sıcaklık 353 K civarında seyretmektedir. PEMFC boyutları ve PEMFC bileşenlerinin termo-fiziksel özellikleri dikkate alındığında sıcaklığın kararlı durumda hücre içerisinde değişmemesi beklenen bir olaydır.

Şekil 6.16’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 10^{-7} kg/s ve katot gaz akış kanallarının giriş kısmında “kütleli debi giriş” sınır şartı değeri 10^{-6} kg/s olarak tanımlanmıştır. PEMFC modelinin çözümü incelendiğinde anot gaz akış kanalı girişindeki hız değeri 0,767 m/s, katot gaz akış kanalı girişindeki hız değeri ise 0,632 m/s civarında olduğu Şekil 6.16’dan gözlenmektedir. PEMFC modelinin çözümü incelendiğinde anot gaz akış kanalı çıkışındaki hız değeri 0,902 m/s, katot

gaz akış kanalı çıkışındaki hız değeri ise 0,677 m/s civarında olduğu Şekil 6.16'dan gözlenmektedir. Kanal kesit geometrisi dikkate alındığında bu sonuçların sınır şartlarıyla uyum gösterdiği söylenebilir.

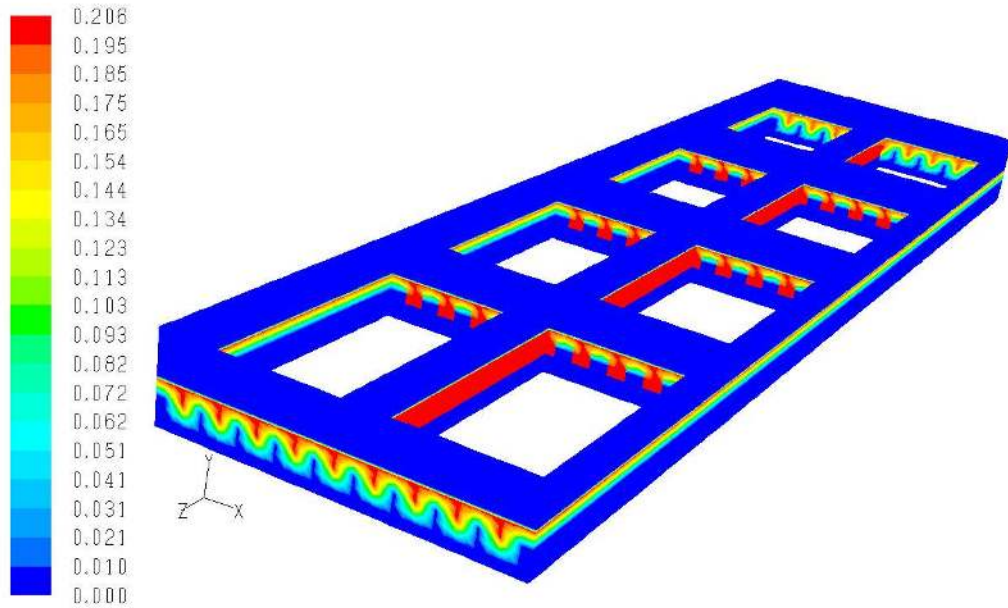


Şekil 6.16. PEMFC dış yüzeylerindeki ($z = 0$, $z = 0,07$), ve iç yüzeylerindeki ($z = 0,0175$, $z = 0,035$, $z = 0,0525$) hız dağılımı (m/s)



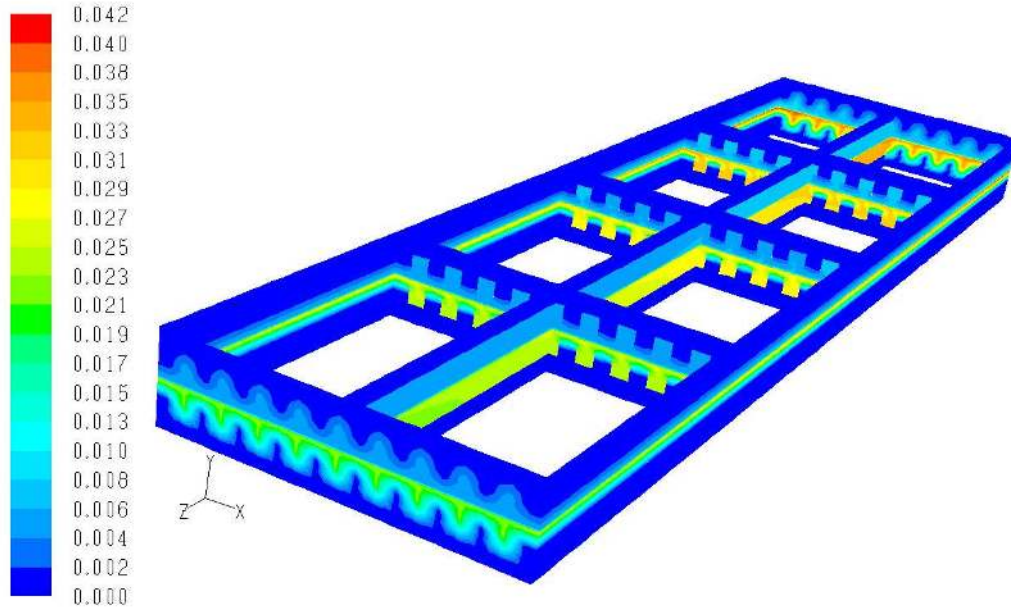
Şekil 6.17. PEMFC dış yüzeylerindeki ($x = 0$, $x = 0,19$, $z = 0$, $z = 0,07$), ve iç yüzeylerindeki ($z = 0,0175$, $z = 0,035$, $z = 0,0525$) H_2 dağılımı (Mol kesri)

Şekil 6.17’de 3-B PEMFC geometrisi üzerinde seçilen yüzeylerdeki hidrojen mol kesri dağılımları görülmektedir. PEMFC modeli giriş kesitinin ($z = 0$) anot kısmında hidrojen kütle kesri olarak 0,95 tanımlanmıştır. PEMFC modelinin çözümü incelendiğinde anot girişinde mol kesrinin girişte tanımlanan değerle uyumlu olduğu gözlenmektedir.



Şekil 6.18. PEMFC dış yüzeylerindeki ($x = 0$, $x = 0,19$, $z = 0$, $z = 0,07$), ve iç yüzeylerindeki ($z = 0,0175$, $z = 0,035$, $z = 0,0525$) O₂ dağılımı (Mol kesri)

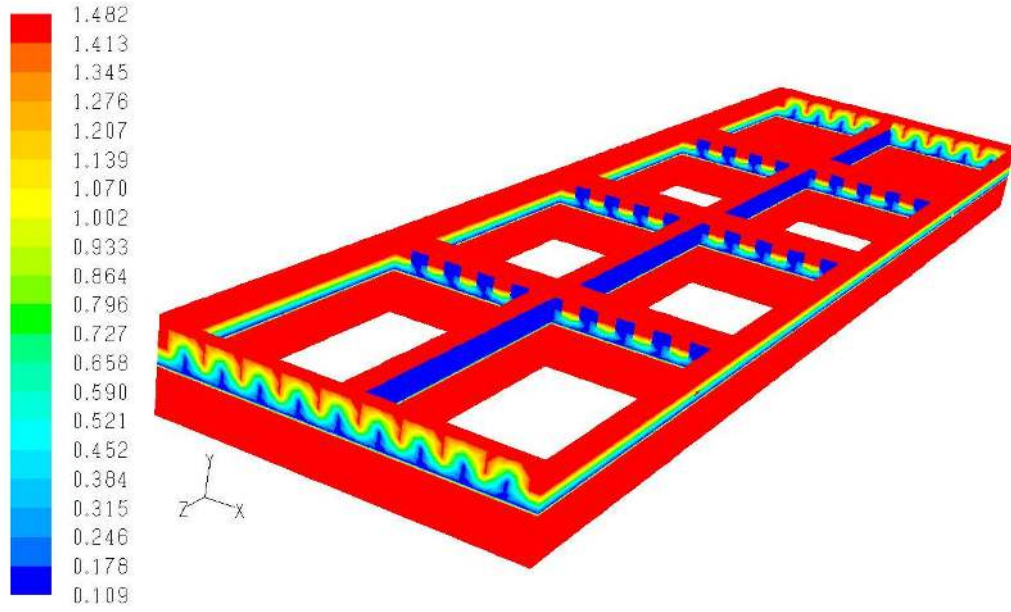
Şekil 6.18’de 3-B PEMFC geometrisi üzerinde seçilen yüzeylerdeki oksijen mol kesri dağılımları görülmektedir. PEMFC modeli giriş kesitinin ($z = 0$) katot kısmında oksijen kütle kesri 0,23 olarak tanımlanmıştır. PEMFC modelinin çözümü incelendiğinde katot girişinde mol kesrinin girişte tanımlanan değerle uyumlu olduğu gözlenmektedir.



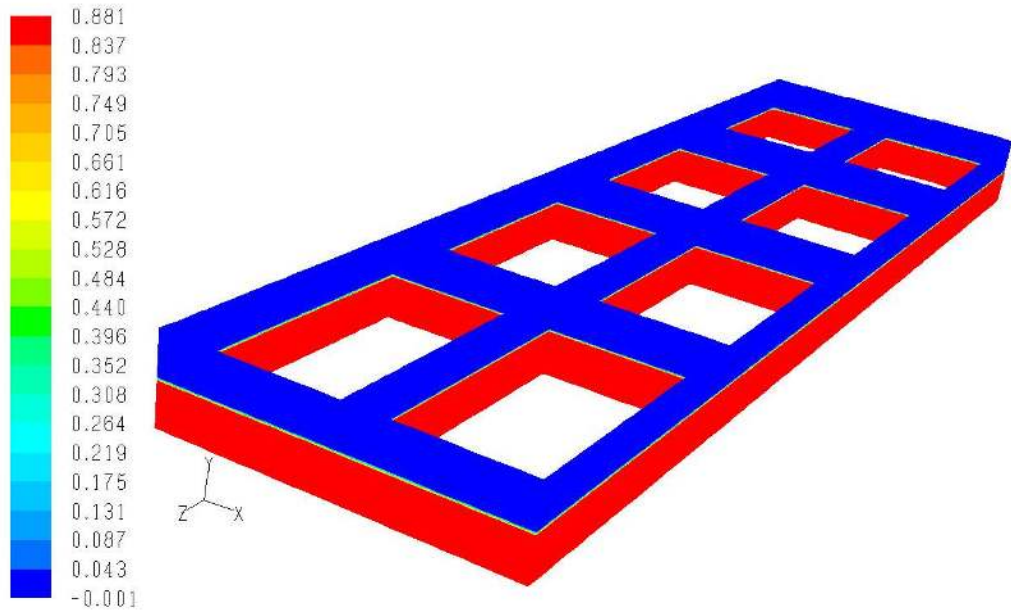
Şekil 6.19. PEMFC dış yüzeylerindeki ($x = 0$, $x = 0,19$, $z = 0$, $z = 0,07$), ve iç yüzeylerindeki ($z = 0,0175$, $z = 0,035$, $z = 0,0525$) H_2O dağılımı (Mol kesri)

Şekil 6.19’da 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 0,05 olarak tanımlanmıştır. PEMFC modeli giriş kesitinin ($z = 0$) katot kısmında su buharı kütle kesri 0,01 olarak tanımlanmıştır. PEMFC modelinin çözümü incelendiğinde anot ve katot girişlerinde mol kesrinin modelde tanımlanan değerle uyumlu olduğu gözlenmektedir.

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

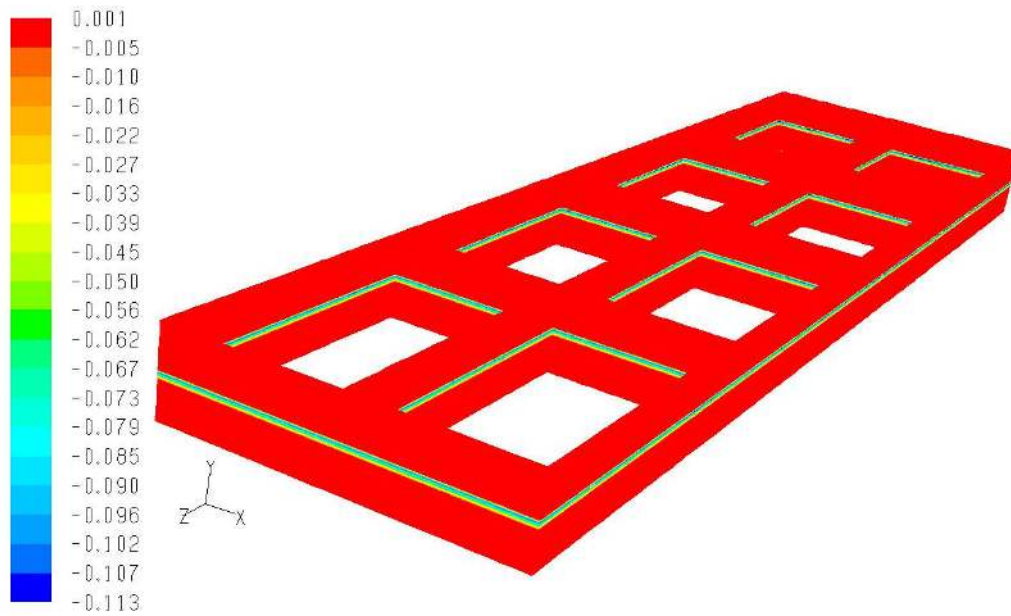


Şekil 6.20. PEMFC dış yüzeylerindeki ($x = 0$, $x = 0,19$, $z = 0$, $z = 0,07$), ve iç yüzeylerindeki ($z = 0,0175$, $z = 0,035$, $z = 0,0525$) yoğunluk (kg/m³)



Şekil 6.21. PEMFC dış yüzeylerindeki ($x = 0$, $x = 0,19$, $z = 0$, $z = 0,07$), ve iç yüzeylerindeki ($z = 0,0175$, $z = 0,035$, $z = 0,0525$) elektrik potansiyeli dağılımı (V)

Şekil 6.21’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.

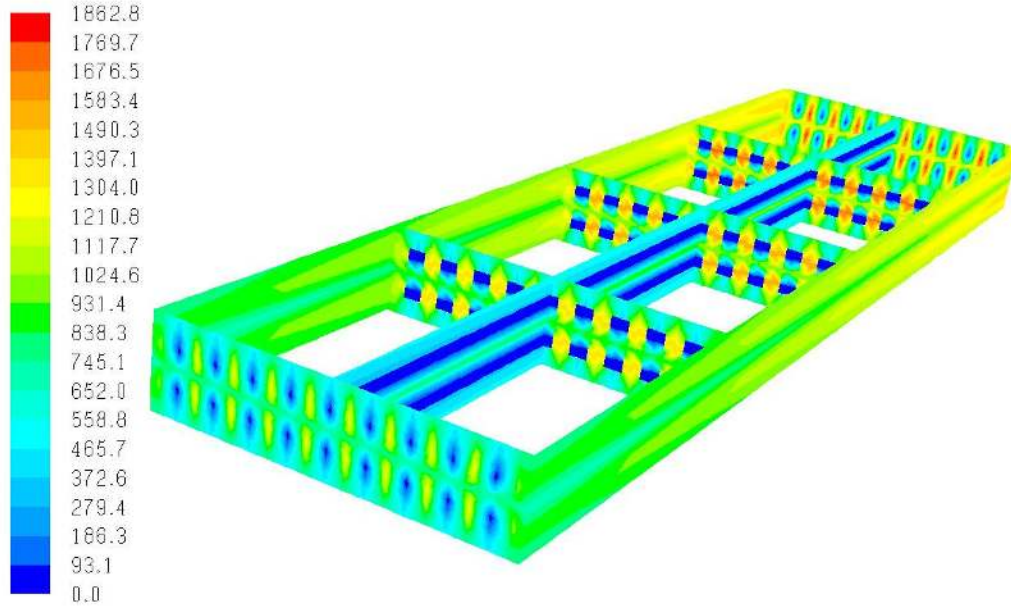


Şekil 6.22. PEMFC dış yüzeylerindeki ($x = 0$, $x = 0,19$, $z = 0$, $z = 0,07$), ve iç yüzeylerindeki ($z = 0,0175$, $z = 0,035$, $z = 0,0525$) aşırı potansiyel dağılımı (V)

Şekil 6.22’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 6.23’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 dış yüzeylerindeki ($x = 0$, $x = 0,19$, $z = 0$, $z = 0,07$), ve iç yüzeylerindeki ($z = 0,0175$, $z = 0,035$, $z = 0,0525$) akım yoğunluğu şiddetinin dağılımı (A/m^2)

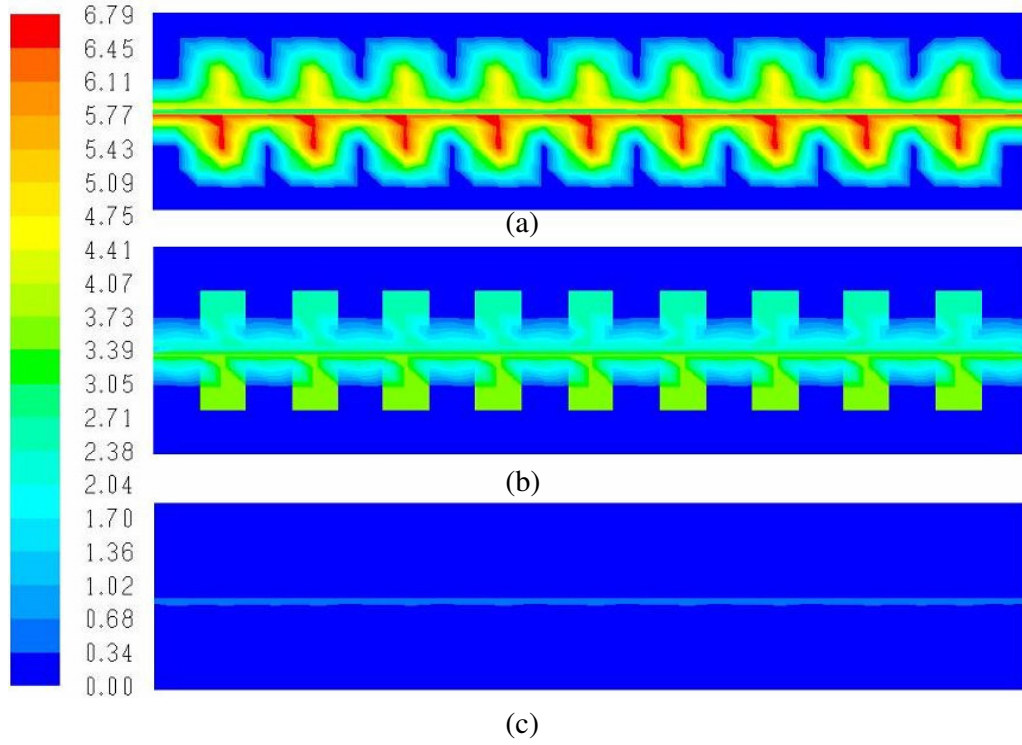
PEMFC modelinin çözümü incelendiğinde, hücre çıkışına doğru gidildikçe anot ve katot kısımlarında elde edilen akım yoğunluğu değerlerinin arttığı gözlenmektedir.

6.3.2. Giriş, orta ve çıkış yüzeylerindeki dağılımların karşılaştırılması

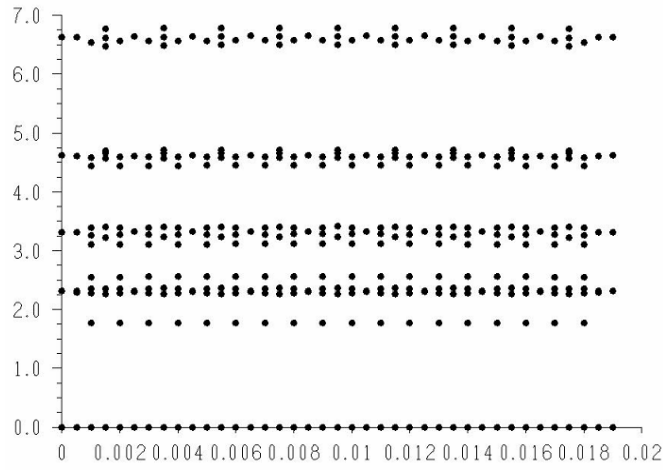
Bu kısımda, (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki niceliklerin 2-B dağılımları karşılaştırmalı olarak sunulmuştur.

Şekil 6.24’de, PEMFC modelinin çözümünden elde edilen giriş, orta ve çıkış kesitlerindeki basınç dağılımı sunulmaktadır. Giriş kesitinde basınç 5 Pa değerinde gözlenirken orta kesitte 2 Pa ve çıkış kesitinde “0” Pa değerine ulaştığı gözlenmektedir. Hücre kanallarının çıkışta atmosfere açık olduğu düşünülürse bu

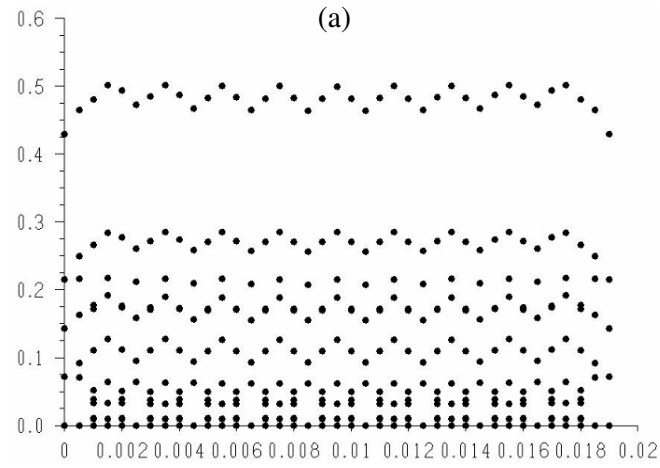
sonucun makul olduđu söylenebilir. Basınç sonuçları, mutlak basınç ile atmosferik basınç arasındaki fark cinsinden elde edildiđi için 5 Pa, 1,5 Atmosfer basıncına, “0” Paskal ise atmosferik basınca karşılık gelmektedir. Kanal dışındaki katı kısımlarda ise “0” Paskal gözlenmektedir.



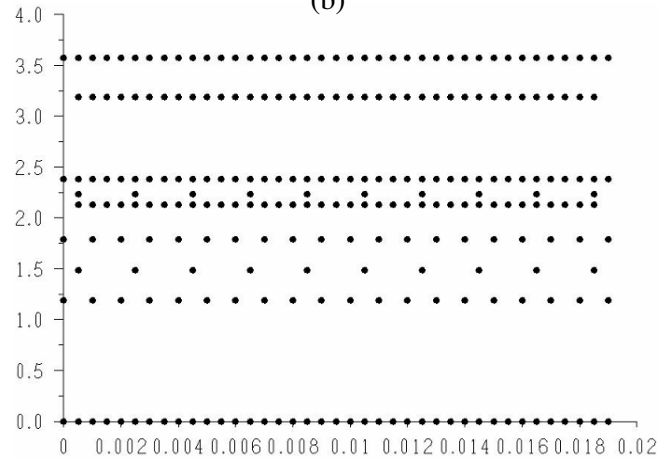
Şekil 6.24. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki basınç dağılımı (Pa)



(a)



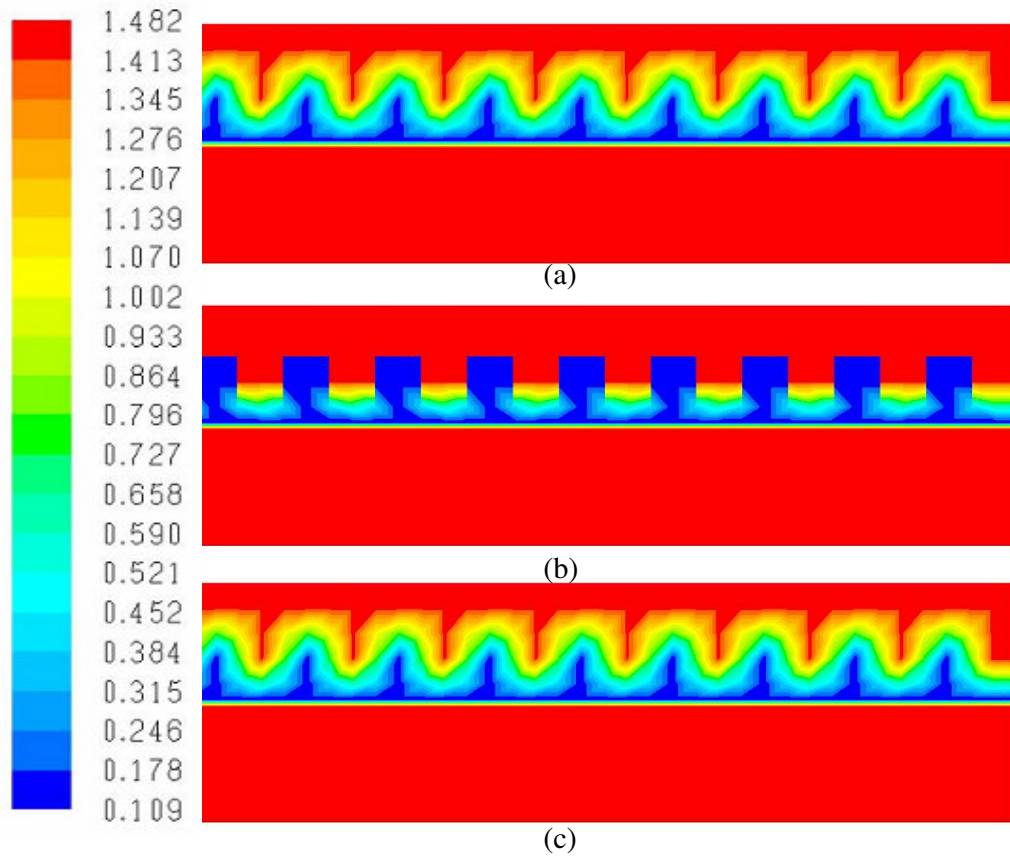
(b)



(c)

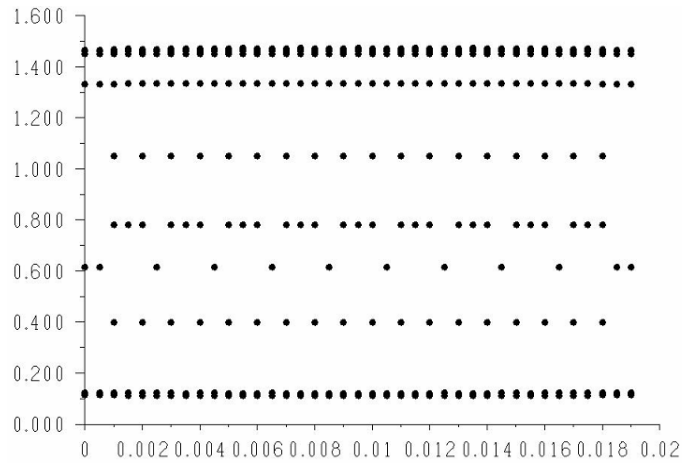
Şekil 6.25. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki basıncın istatistiksel dağılımı (Pa)

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 5 farklı (6,6 - 4,5 - 3,2 - 2,2 - 1,9) basınç değeri vardır. Orta kesitteki basınç dağılımının değerleri 1,2 Pa ile 3,5 Pa arasında değişmektedir. Çıkış kesitindeki basınç dağılımının değerleri 0,48 Pa ile “0” Pa arasında değişmektedir. Basınç değerlerinin çoğu “0” Pa ile 0,26 Pa arasında kümelenmiştir.

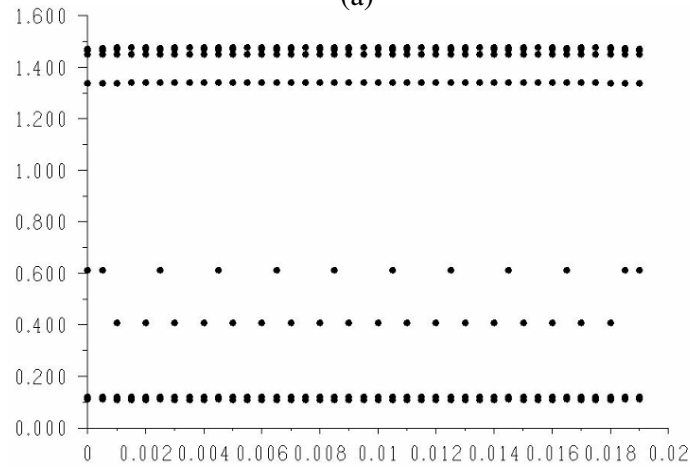


Şekil 6.26. PEMFC (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki yoğunluk (kg/m^3)

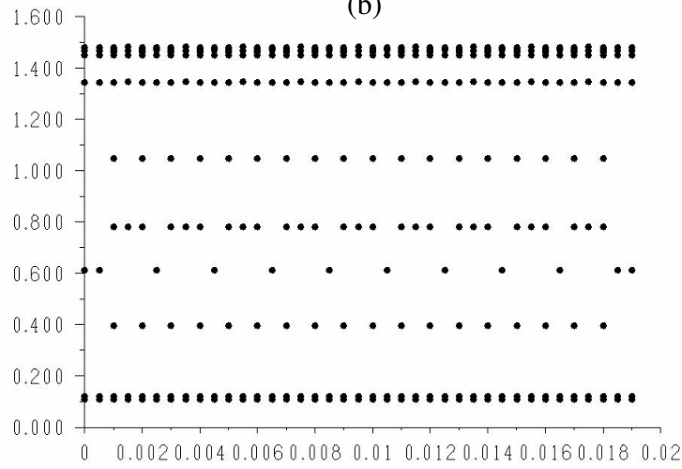
Şekil 6.26’da, PEMFC modelinin (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki yoğunluk dağılımı izlenmektedir. Türlerin hücre boyunca olan dağılımına benzer bir dağılım elde edilmiştir.



(a)



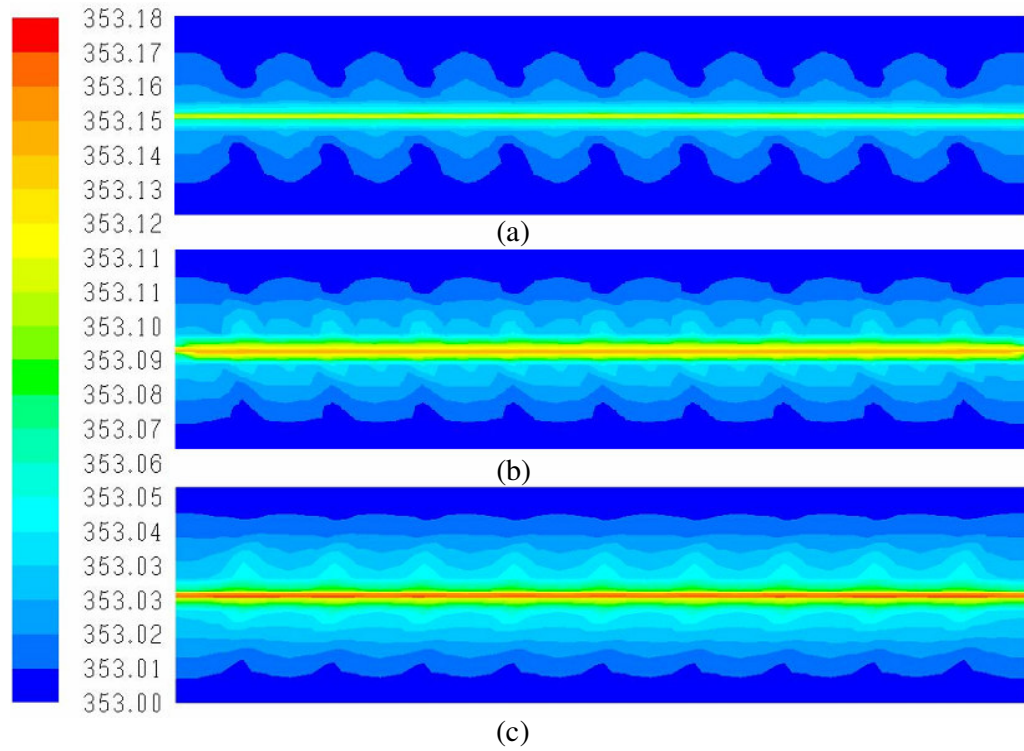
(b)



(c)

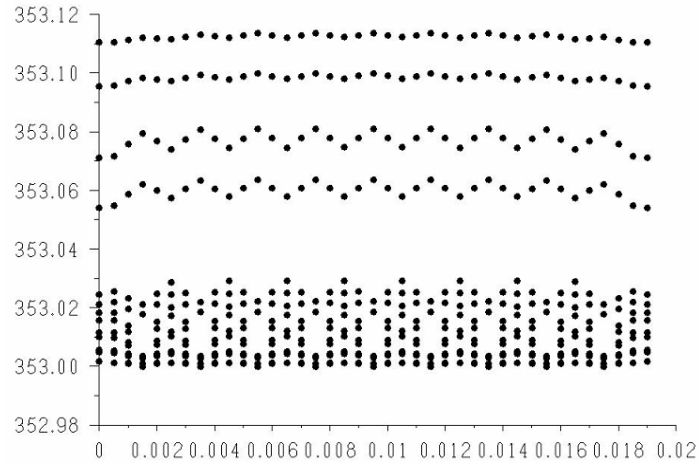
Şekil 6.27. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki yoğunluğun istatistiksel dağılımı (kg/m^3)

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 1,42 ile 0,10 arasında değişmektedir. 7 farklı (0,1 - 0,4 - 0,6 - 0,8 - 1,0 - 1,3 - 1,4) yoğunluk değeri gözlenmiştir. Orta kesitteki yoğunluk dağılımının değerleri 1,42 ile 0,10 arasında değişmektedir. 0,6 değerinin altında ve 1,3 değerinin üstünde kümelenmeler oluşmuştur. Çıkış kesitindeki yoğunluk dağılımının değerleri 1,42 ile 0,10 arasında değişmektedir. Giriş kesitindeki dağılıma benzer bir dağılım gözlenmektedir.

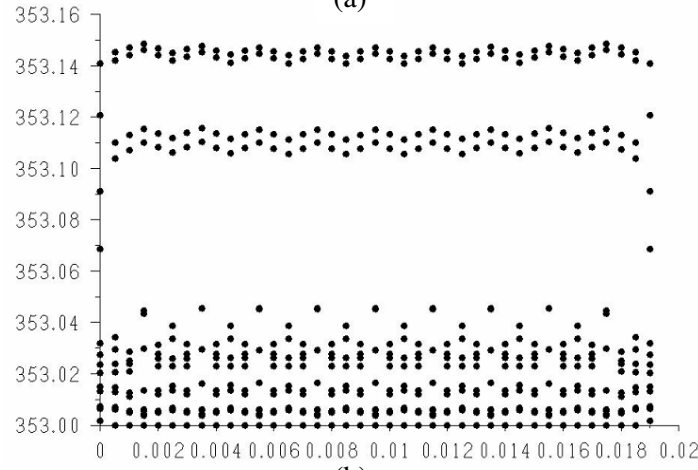


Şekil 6.28. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki sıcaklık dağılımı (K)

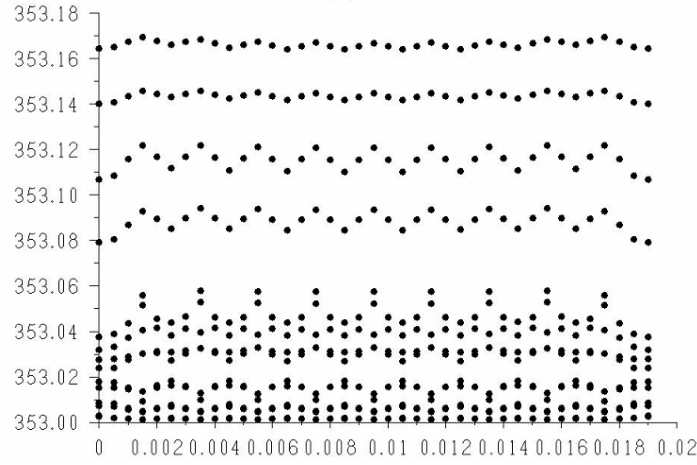
Şekil 6.28’de PEMFC modelinin (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki sıcaklık (K) dağılımları gözlenmektedir. Tüm kesitlerde akım toplayıcı ve gaz kanallarında sıcaklığın 353,00 K değerinde olduğu, membran, katalizör ve gaz difüzyon tabakalarında ise sıcaklığın en fazla 353,18 K değerine ulaştığı gözlenmektedir.



(a)



(b)

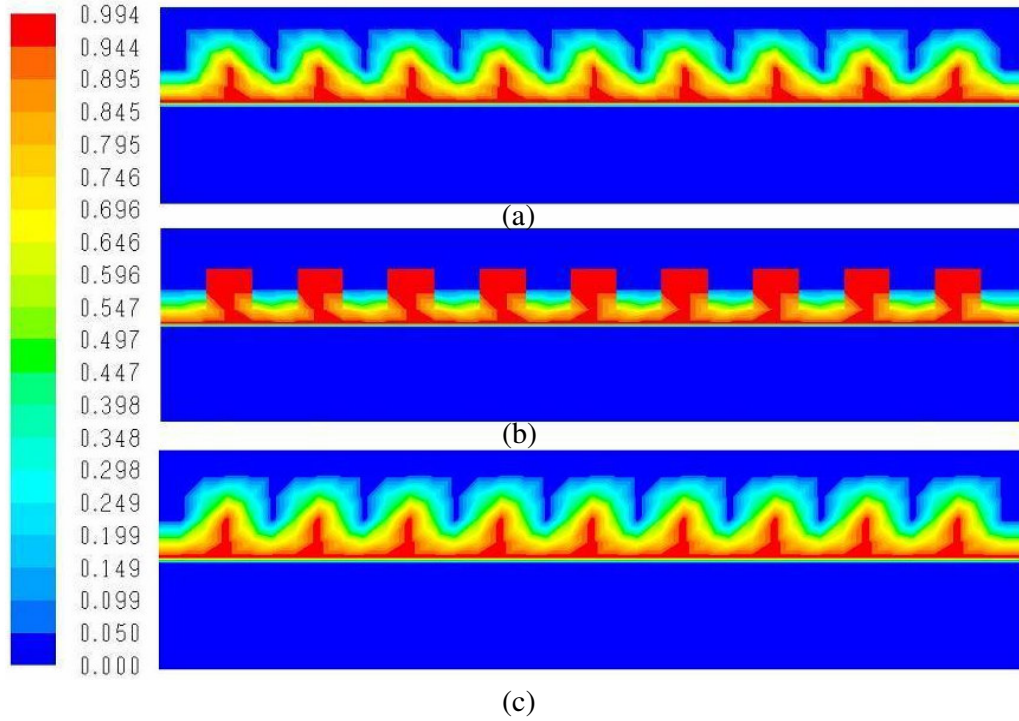


(c)

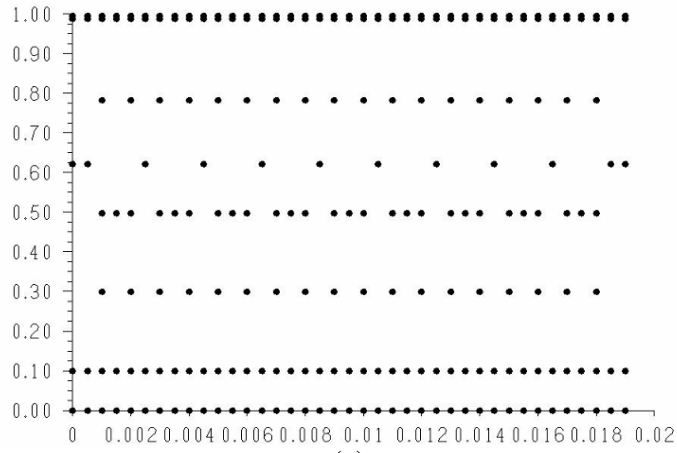
Şekil 6.29. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki sıcaklığın istatistiksel dağılımı (K)

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 353,11 K arasında değişmektedir. 353,02 K sıcaklığından düşük sıcaklıklarda kümelenme oluşmuştur. Orta kesitte, sıcaklık değerleri 353,00 ile 353,15 K arasında değişmektedir. 353,04 K sıcaklığından düşük sıcaklıklarda kümelenme oluşmuştur. Çıkış kesitinde ise, sıcaklık değerleri 353,00 ile 353,17 arasında değişmektedir. 353,06 K sıcaklığından düşük sıcaklıklarda kümelenme oluşmuştur.

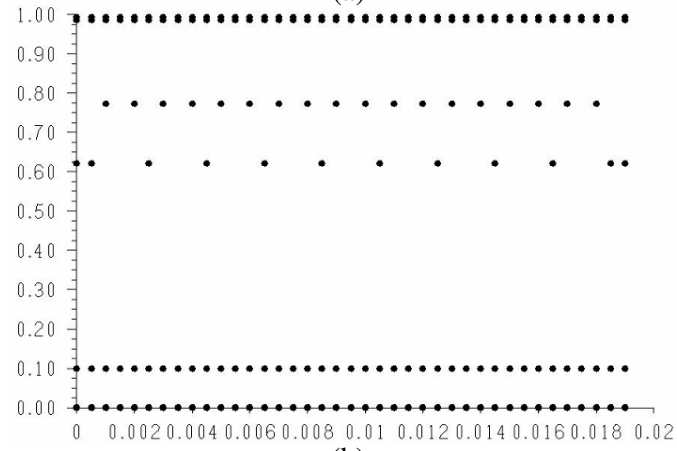
Şekil 6.30'da, PEMFC modeli çözümünden elde edilen (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki molar hidrojen dağılımı görülmektedir. Model anot girişinde hidrojen kütle kesri, 0,95 olarak tanımlanmıştır. Model çözümünden elde edilen değerlerle tanımlanan değerler uyum göstermektedir. Katot tarafında ve anot akım toplayıcıda hidrojen bulunmadığı doğal olarak gözlenmiştir.



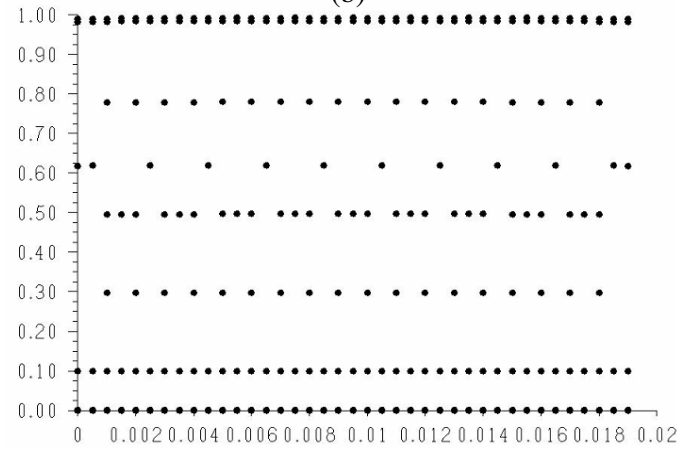
Şekil 6.30. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki H_2 dağılımı (Mol kesri)



(a)



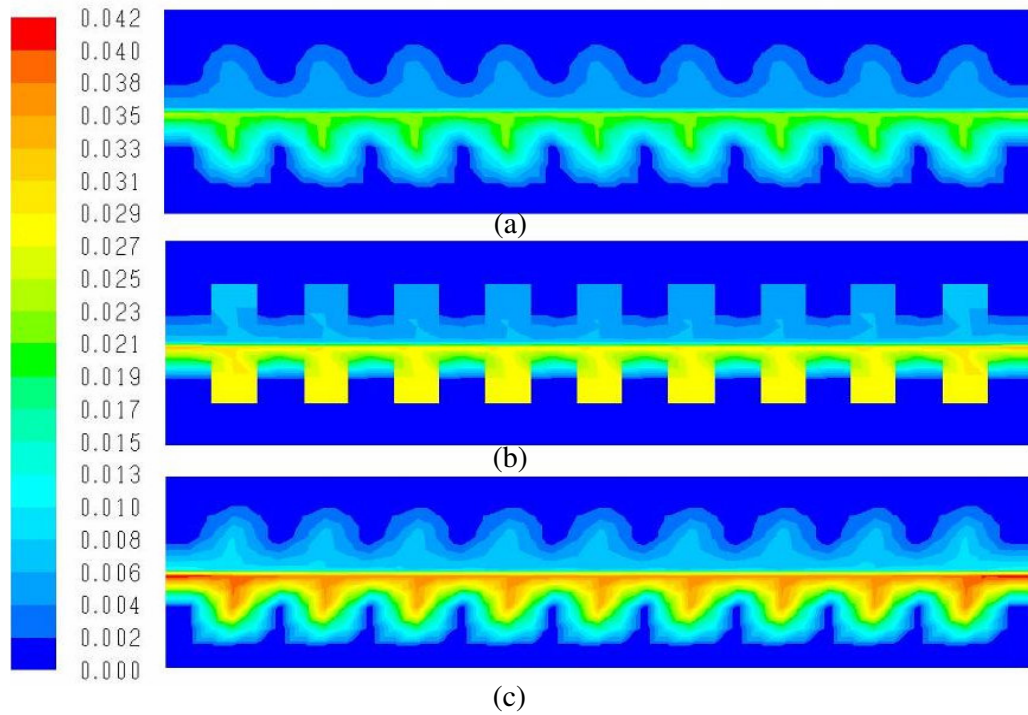
(b)



(c)

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 0,95 ile 0,00 değerleri arasında bir değişim gözlenmektedir. 7 farklı (0,00 - 0,10 - 0,30 - 0,50 - 0,62 - 0,79 - 0,98) molar hidrojen değeri gözlenmiştir. Orta kesitte, 0,98 ile 0,00 değerleri arasında bir değişim gözlenmektedir. 5 farklı (0,00 - 0,10 - 0,62 - 0,78 - 0,98) molar hidrojen değeri gözlenmiştir. Çıkış kesitinde, 0,98 ile 0,00 değerleri arasında bir değişim gözlenmektedir.

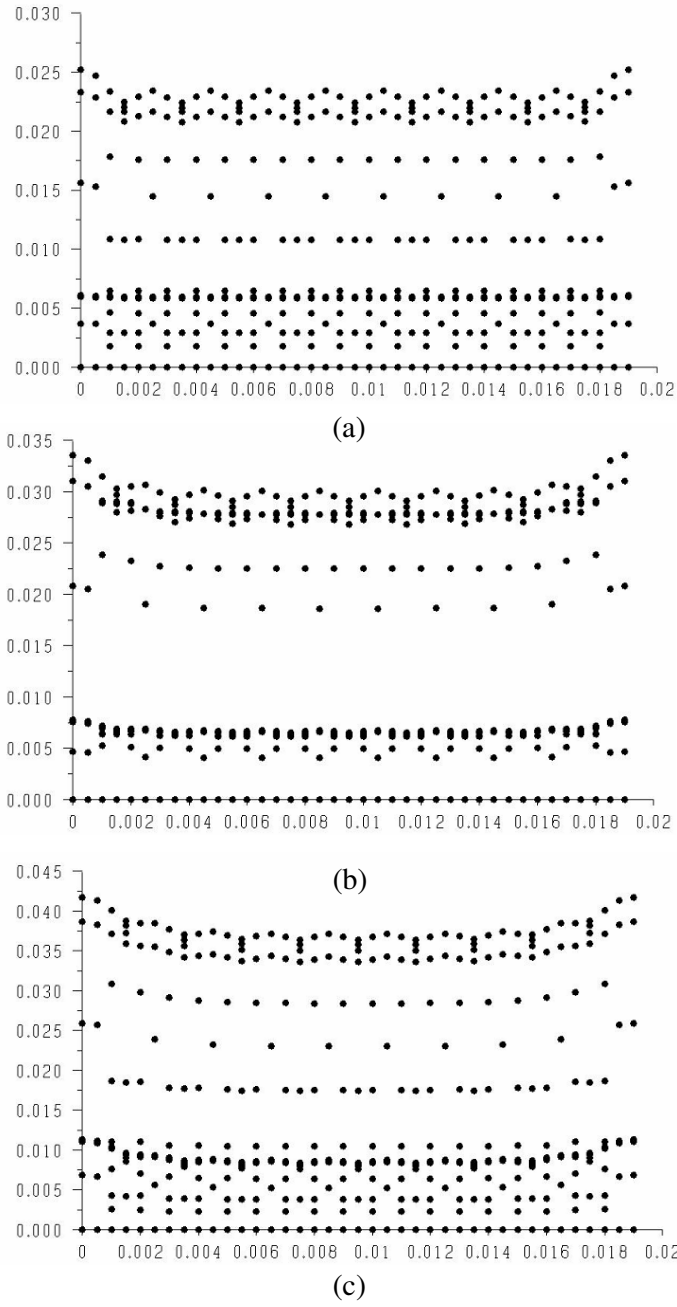


Şekil 6.32. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki H_2O dağılımı (Mol kesri)

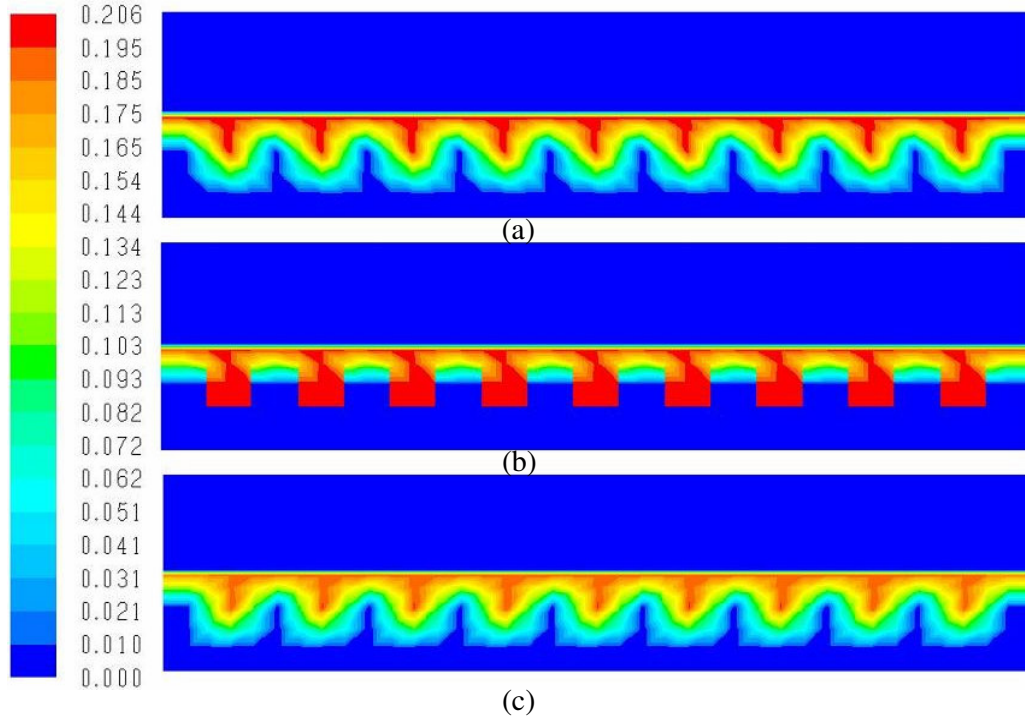
Şekil 6.32’de, PEMFC modelinin çözümünden elde edilen (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki molar su buharı dağılımı görülmektedir. Modelde, anot tarafı girişinde su buharı kütle kesri, 0,05, katot tarafı girişinde su buharı kütle kesri 0,01 olarak tanımlanmıştır. Model çözümü incelendiğinde, anot giriş kesitinde, molar su buharı değeri 0,006, katot giriş kesitinde ise molar su buharı değeri, 0,023 civarında seyretmektedir. Orta kesitte, anot kısmında molar su buharı

0,006 değerinde ve kanallara yayılmış vaziyettedir. Katot kısmında ise molar su buharı 0,029 değerinde ve kanallara yayılmış vaziyettedir. Çıkış kesitinde, anot kısmında molar su buharı maksimum 0,010 değerinde ve kanal kesitinden akım toplayıcılara doğru gidildikçe azalarak değişen bir dağılım göstermektedir. Katot kısmında, molar su buharı maksimum 0,038 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 0,025 ile 0,00 değerleri arasında bir değişim gözlenmektedir. 4 farklı (0,00 - 0,01 - 0,02 - 0,03) molar su buharı değeri gözlenmiştir. Su buharı molar değerlerinin çoğu 0,01'den düşük değerlerde kümelenmişlerdir. Orta kesitte, 0,035 ile 0,00 değerleri arasında bir değişim gözlenmektedir. 5 farklı (0,00 - 0,01 - 0,018 - 0,025 - 0,035) molar su buharı değeri gözlenmiştir. Su buharı molar değerlerinde, 0,01'in altında ve 0,03'ün üstündeki değerlerde kümelenme gözlenmiştir. Çıkış kesitinde, 0,045 ile 0,00 değerleri arasında bir değişim gözlenmektedir. 5 farklı (0,00 - 0,01 - 0,02 - 0,03 - 0,04) molar su buharı değeri gözlenmiştir. Su buharı molar değerlerinde, 0,01'in altında ve 0,04'ün üstündeki değerlerde kümelenme gözlenmiştir.

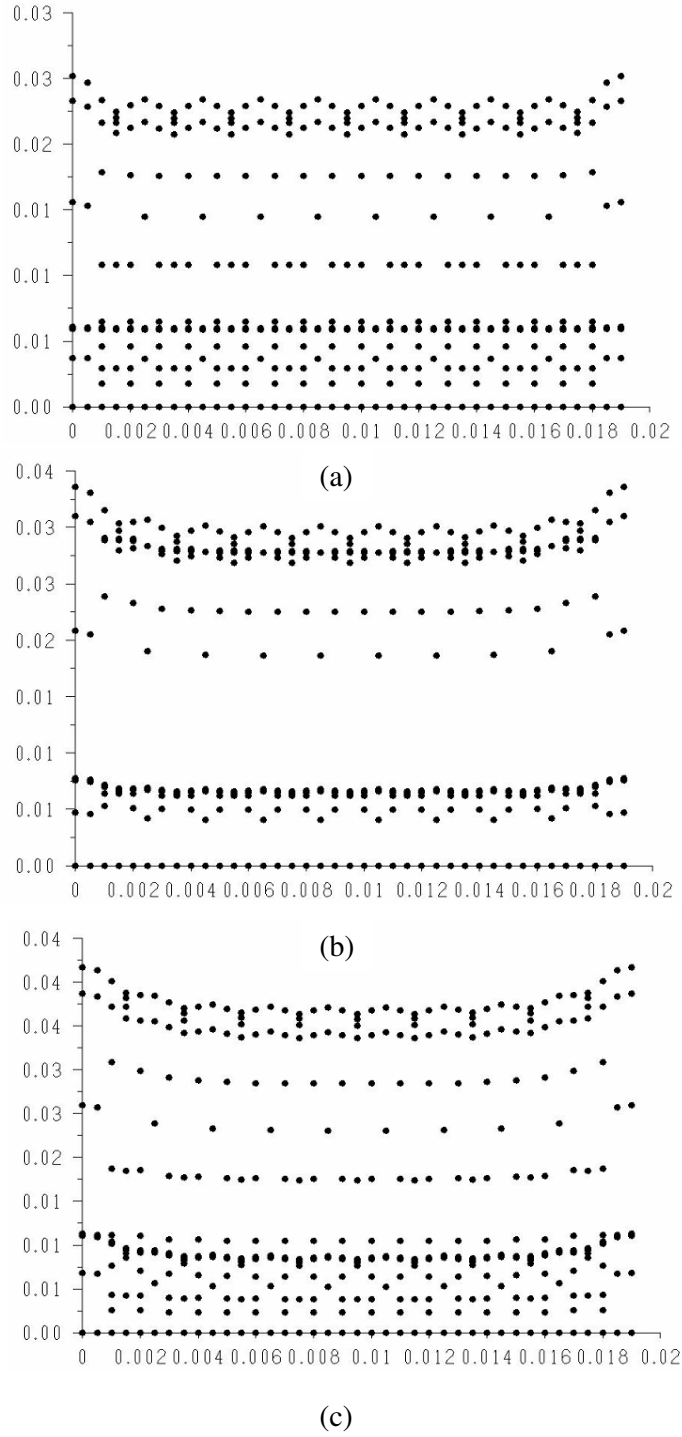


Şekil 6.33. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki H_2O istatistiksel dağılımı (Mol kesri)



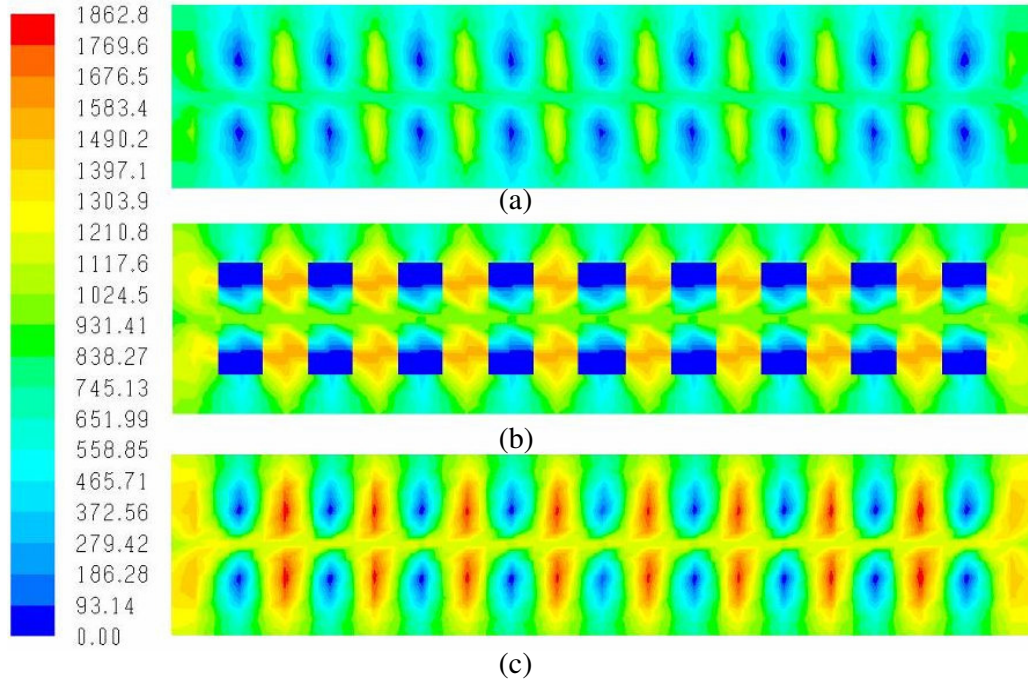
Şekil 6.34. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki O_2 dağılımı (Mol kesri)

Şekil 6.43’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 0,23, anot tarafı girişinde su buharı kütle kesri 0.05 olarak tanımlanmıştır. Model çözümünde, giriş kesitinin anot tarafında bulunan su buharından dolayı, molar oksijen kesri 0,01 olarak gözlenmektedir. Orta kesitte, katot tarafında molar oksijen miktarının 0,206 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 0,20 ile 0,00 değerleri arasında bir değişim gözlenmektedir. 7 farklı (0,00 - 0,06 - 0,10 - 0,13 - 0,16 - 0,19 - 0,20) molar oksijen değeri gözlenmiştir. Orta kesitte, 0,20 ile 0,00 değerleri arasında bir değişim gözlenmektedir. 5 farklı (0,00 - 0,13 - 0,15 - 0,18 - 0,20) molar oksijen değeri gözlenmiştir. Çıkış kesitinde, 0,19 ile 0,00 değerleri arasında bir değişim gözlenmektedir.

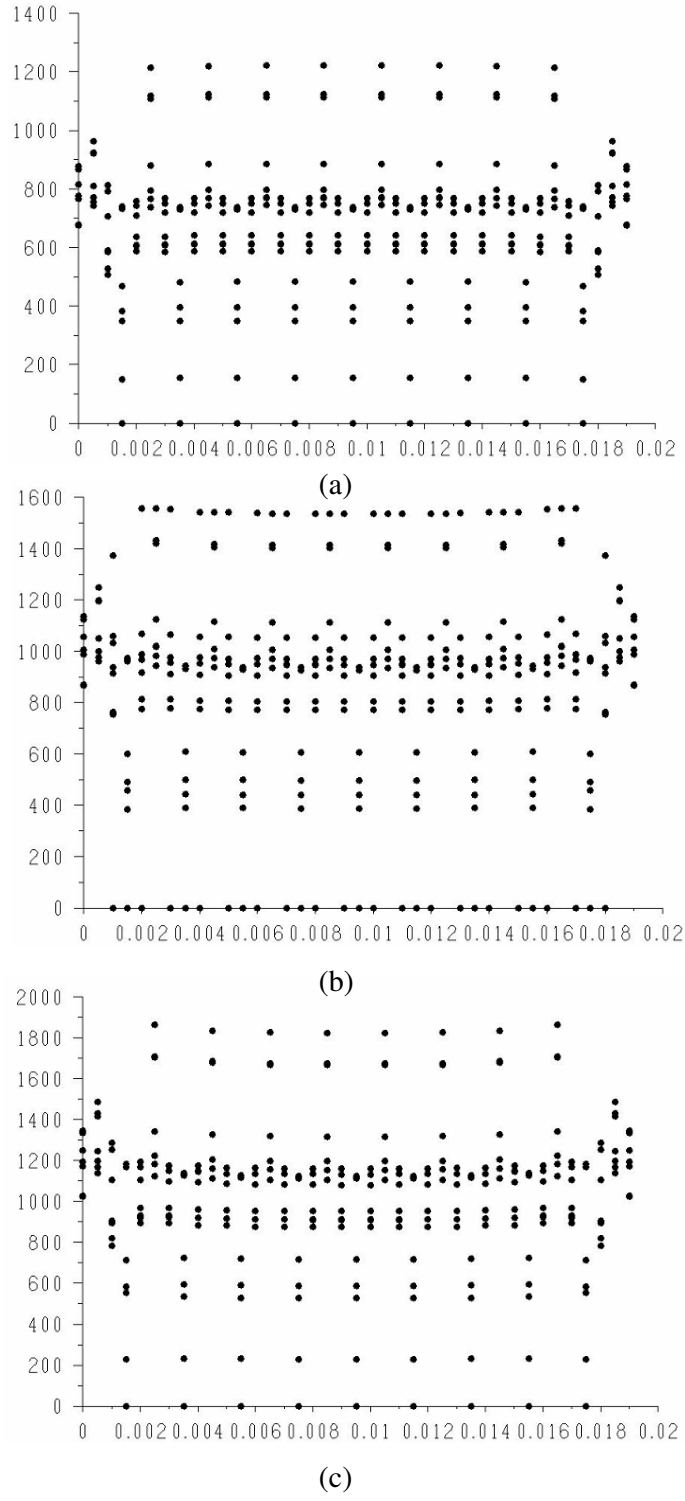


Şekil 6.35. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0,035$ ve (c) çıkış, $z=0,07$ yüzeylerindeki O_2 istatistiksel dağılımı (Mol kesri)

Şekil 6.36'da, PEMFC model çözümünden elde edilen (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki akım yoğunluğu dağılımı görülmektedir. Giriş kesitinde, membran, katalizör, gaz difüzyon tabakaları ile akım toplayıcının gaz difüzyon tabakaları ile temas eden ayaklarında 900 A/m^2 civarında bir akım yoğunluğu olduğu gözlenmiştir. Orta kesite doğru gidildikçe, akım yoğunluğunun 1300 A/m^2 değerine ulaştığı ve akım toplayıcının ayaklarına tamamen yayıldığı gözlenmektedir. Çıkış kesitinde ise, akım toplayıcı ayaklarında 1800 A/m^2 değerlerine ulaşmakta ve akım toplayıcı ayaklarında 1300 ile 1800 A/m^2 değerleri arasında bir dağılım gözlenmektedir.

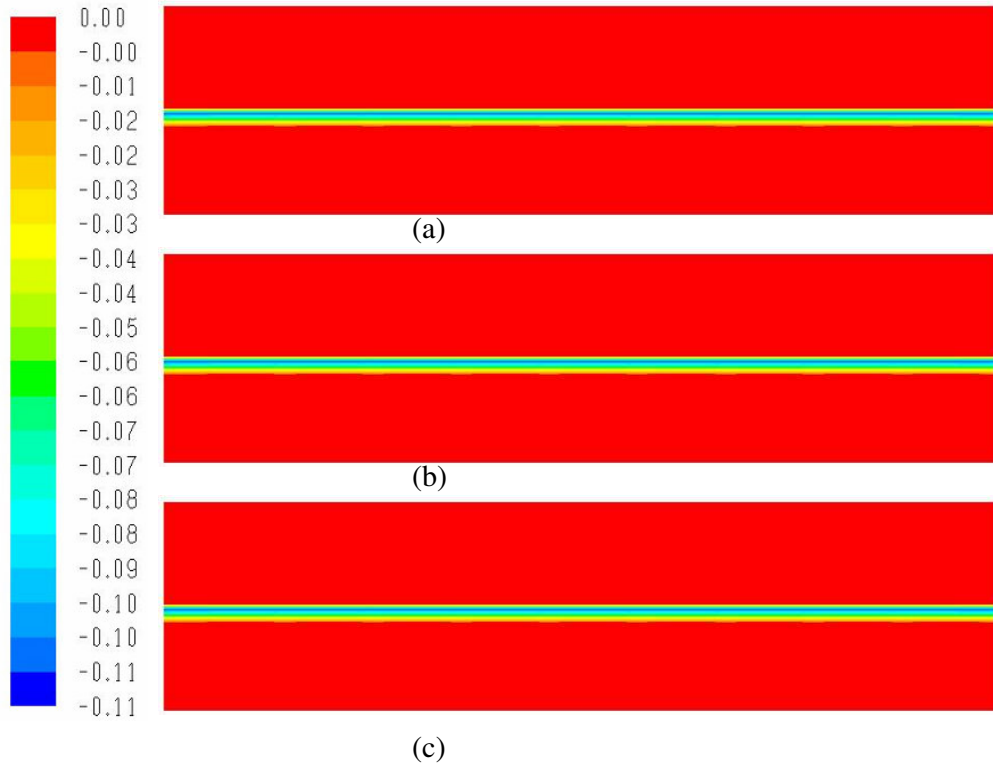


Şekil 6.36. PEMFC (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki akım yoğunluğu şiddeti dağılımı (A/ m^2)



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 dağılımı görülmektedir. Giriş kesitinde 1200 ile 0,00 değerleri arasında bir değişim gözlenmektedir. 6 farklı akım yoğunluğu değeri gözlenmiştir; 0, 150, 400, 600, 750, 1200. Akım yoğunluğu değerlerinin, 800 ve 600 civarında kümелendiği gözlenmektedir. Orta kesitte, 1550 ile 0,00 değerleri arasında bir değişim gözlenmektedir. 8 farklı akım yoğunluğu değeri gözlenmiştir; 0, 400, 500, 600, 800, 1000, 1400, 1550. Akım yoğunluğu değerlerinin çoğunun 1000 A/m^2 civarında kümелendiği gözlenmiştir. Çıkış kesitinde, 1800 ile 0 değerleri arasında bir değişim gözlenmektedir. 9 farklı akım yoğunluğu değeri gözlenmiştir; 0, 200, 500, 700, 900, 1100, 1300, 1700, 1800. Akım yoğunluğu değerlerinin çoğunun, 1100 A/m^2 civarında kümelenme gözlenmiştir



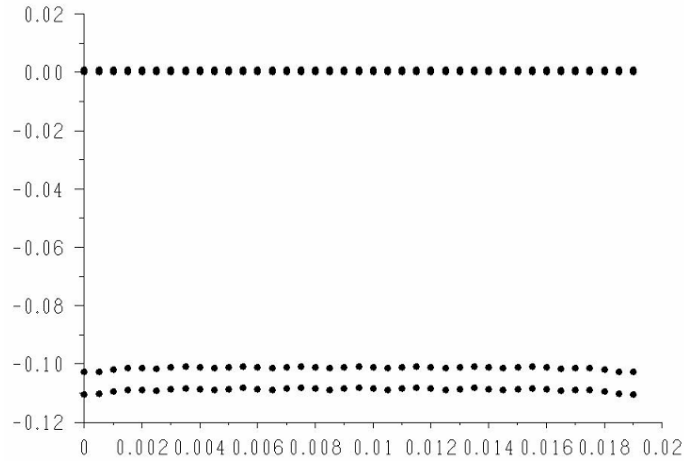
Şekil 6.38. PEMFC (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki aşırı potansiyel dağılımı (V)

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 -0,11 ile 0 değerleri arasında bir dağılım gözlenmektedir.

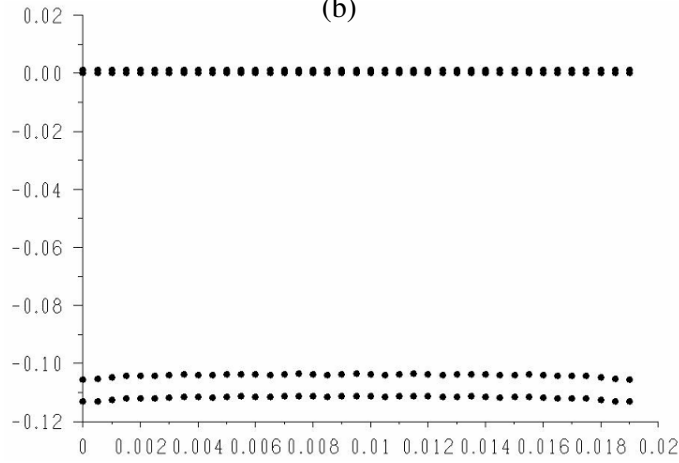
Şekil 6.39’da, PEMFC modelinin çözümünden elde edilen (a) giriş, $z = 0$, (b) orta, $z = 0,035$ ve (c) çıkış, $z = 0,07$ yüzeylerindeki istatistiksel aşırı-potansiyel dağılımı görülmektedir. Giriş kesitinde -0,11 ile 0,00 değerleri arasında bir değişim gözlenmektedir. 3 farklı aşırı-potansiyel değeri gözlenmiştir. Orta kesitte, -0,11 ile 0,00 değerleri arasında bir değişim gözlenmektedir. Çıkış kesitinde, -0,11 ile 0,00 değerleri arasında bir değişim gözlenmektedir.



(a)

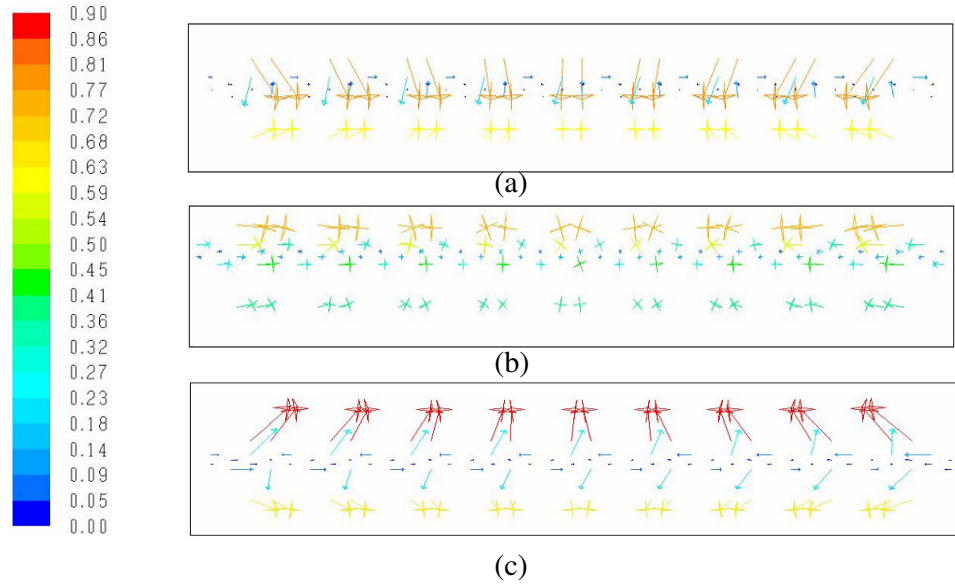


(b)



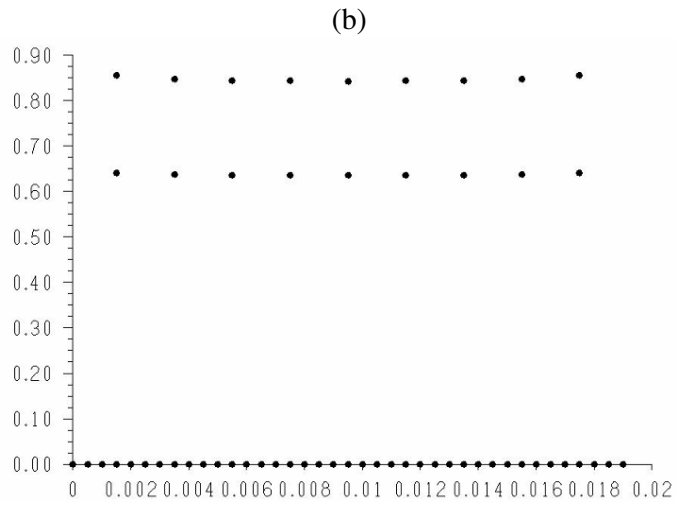
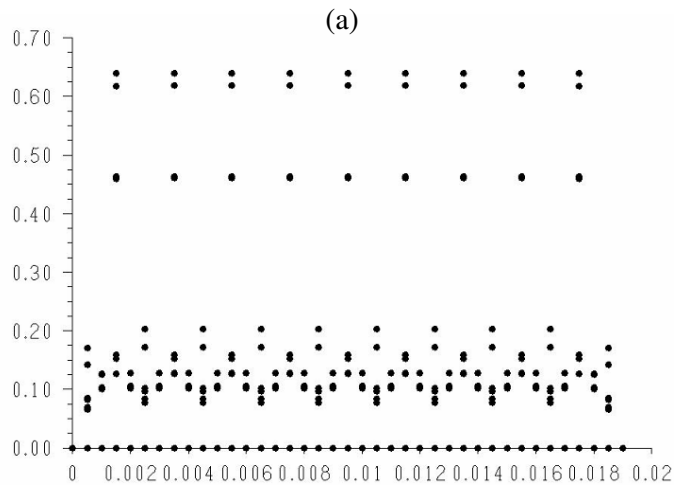
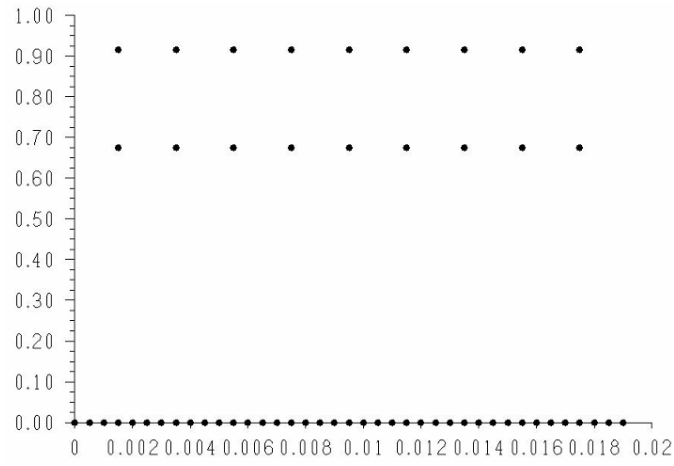
(c)

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 "kütleli debi giriş" sınır şartı verilmiştir. Anot gaz akış kanallarının giriş kısmında "kütleli debi giriş" sınır şartı değeri 10^{-7} kg/s ve katot gaz akış kanallarının giriş kısmında "kütleli debi giriş" sınır şartı değeri 10^{-6} kg/s olarak tanımlanmıştır. PEMFC modelinin çözümü incelendiğinde anot gaz akış kanalı girişindeki hız değeri 0,767 m/s, katot gaz akış kanalı girişindeki hız değeri ise 0,632 m/s civarında olduğu Şekil 6.40'da gözlenmektedir. PEMFC modelinin çözümü incelendiğinde anot gaz akış kanalı çıkışındaki hız değeri 0,9 m/s, katot gaz akış kanalı çıkışındaki hız değeri ise 0,677 m/s civarında olduğu Şekil 6.40'da gözlenmektedir. Kanal kesit geometrisi dikkate alındığında bu sonuçların sınır şartlarıyla uyum gösterdiği söylenebilir

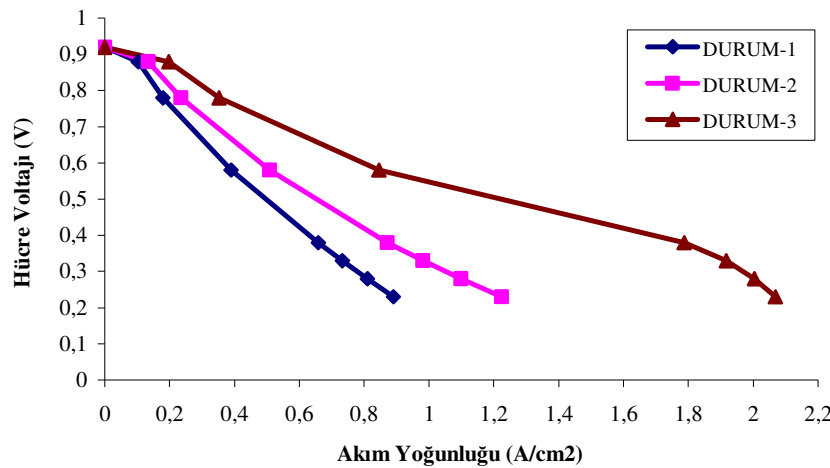


(c)

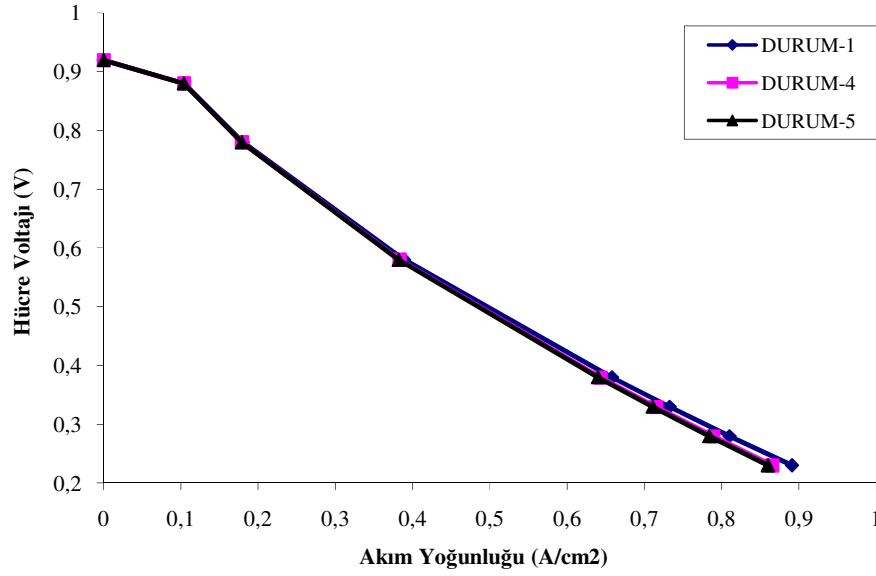
Şekil 6.41. PEMFC (a) giriş, $z=0$, (b) orta, $z=0.035$ ve (c) çıkış, $z=0.07$ yüzeylerindeki hızın istatistiksel dağılımı (m/s)

6.4. Kutuplaşma Eğrileri

Kutuplaşma eğrilerinin oluşturulmasında izlenen yol ayrıntılı olarak EK-4’de anlatılmıştır. Bu kısımda elde edilen sonuçlar sunulacaktır. Şekil 6.42’de, basınç değişiminin akım yoğunluğu üzerine etkisi görülmektedir. Basıncın 1,5 atm (D1) değerinden 2 atm (D2) değerine yükseltilmesi ile akım yoğunluğunun maksimum değerlerinde % 37 bir artış gözlenmiştir. Hücre potansiyelinin artması ile D1 ve D2 akım yoğunluğu değerleri arasındaki fark azalmaktadır. Basınç 2 atm (D2) değerinden 3 atm (D3) değerine yükseltilince, akım yoğunluğunun maksimum değerinde %70 bir artış gözlenmiştir. Hücre potansiyelinin 0,20-0,33 V değerleri arasında, D2 ve D3 akım yoğunluğu değerleri arasındaki fark artmakta, 0,33 - 0,92 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. Aktivasyon kayıpları ve hesabı ile ilgili ayrıntılı bilgi EK-8’de verilmiştir. Basınç 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.

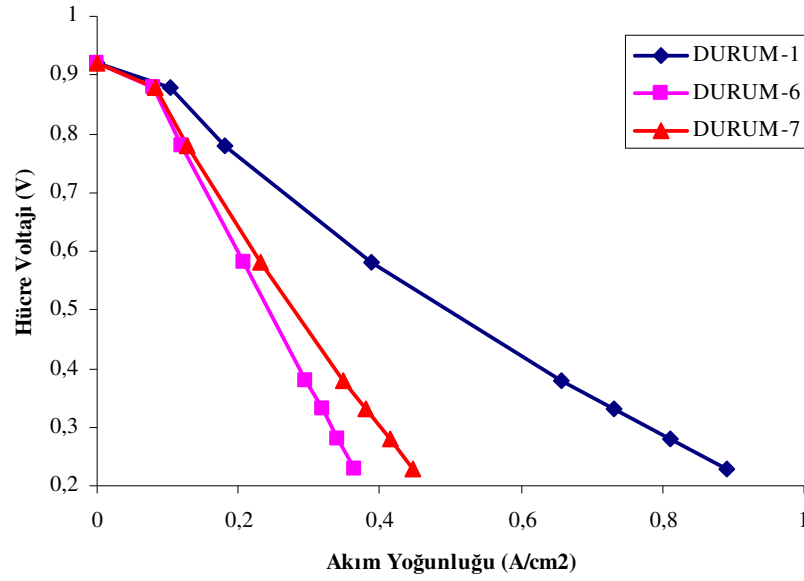


Şekil 6.42. Farklı basınç değerleri için; P=1,5 atm (D1), P=2 atm (D2), P=3 atm (D3) elde edilen kutuplaşma eğrileri



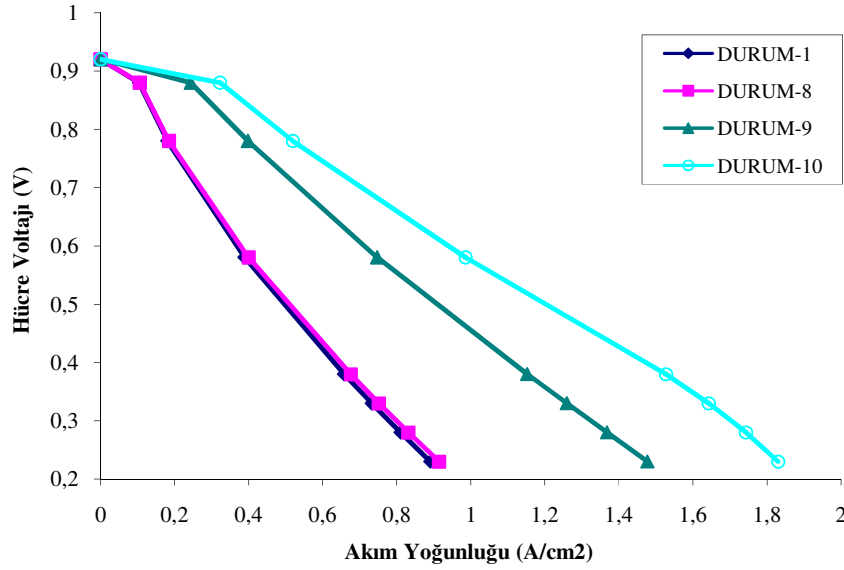
Şekil 6.43. Anot kütle debisinin farklı değerleri için; (D1), (D4), (D5) elde edilen kutuplaşma eğrileri

Şekil 6.43'de, anot kütle debisi değişiminin akım yoğunluğu üzerine etkisi görülmektedir. Anot kütle debisinin $\dot{m}_{an} = 10^{-7} \text{ kg/s}$ (D1) değerinden $\dot{m}_{an} = 10^{-6} \text{ kg/s}$ (D4) değerine yükseltilmesi ile akım yoğunluğunun maksimum değerlerinde % 3 azalma gözlenmiştir. Hücre potansiyelinin artması ile D1 ve D2 akım yoğunluğu değerleri arasındaki fark azalmaktadır. Anot kütle debisi $\dot{m}_{an} = 10^{-6} \text{ kg/s}$ (D4) değerinden $\dot{m}_{an} = 10^{-5} \text{ kg/s}$ (D5) değerine yükseltilince, akım yoğunluğunun maksimum değerinde %1 azalma gözlenmiştir. 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-8'de verilmiştir. Anot kütle debisinin 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. Katot kütle debisinin farklı değerleri için; (D1), (D6), (D7) elde edilen kutuplaşma eğrileri

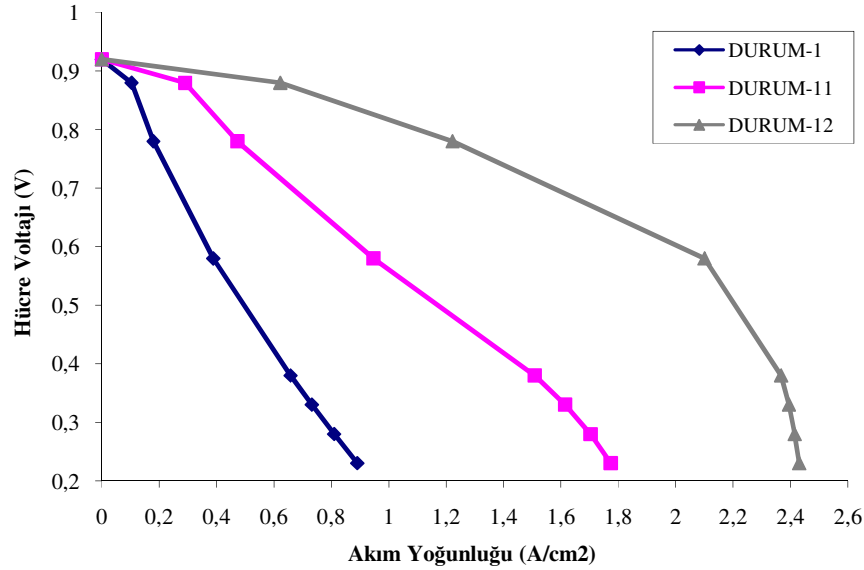
Şekil 6.44'de, katot kütle debisi değişiminin akım yoğunluğu üzerine etkisi görülmektedir. Katot kütle debisinin $\dot{m}_{cat} = 10^{-6} \text{ kg/s}$ (D1) değerinden $\dot{m}_{cat} = 10^{-5} \text{ kg/s}$ (D7) değerine yükseltilmesi ile akım yoğunluğunun maksimum değerlerinde % 50 azalma gözlenmiştir. Hücre potansiyelinin artması ile D1 ve D7 akım yoğunluğu değerleri arasındaki fark azalmaktadır. Katot kütle debisi $\dot{m}_{cat} = 10^{-5} \text{ kg/s}$ (D7) değerinden $\dot{m}_{cat} = 10^{-4} \text{ kg/s}$ (D6) değerine yükseltilince, akım yoğunluğunun maksimum değerinde %8 azalma gözlenmiştir. 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-8'de verilmiştir. Anot kütle debisinin 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. Hidrojen kütle kesrinin farklı değerleri için; (D1), (D8), (D10) elde edilen kutuplaşma eğrileri

Şekil 6.45’de, hidrojen kütle kesri değişiminin akım yoğunluğu üzerine etkisi görülmektedir. Hidrojen kütle kesrinin $y_{H_2} = 0,95$ (D1) değerinden $y_{H_2} = 0,90$ (D8) değerine düşürülmesi ile akım yoğunluğunun maksimum değerinde % 2 artış gözlenmiştir. Hücre potansiyelinin artması ile D1 ve D8 akım yoğunluğu değerleri arasındaki fark azalmaktadır. Hidrojen kütle kesrinin $y_{H_2} = 0,90$ (D8) değerinden $y_{H_2} = 0,60$ (D9) değerine düşürülmesi ile akım yoğunluğunun maksimum değerinde % 63 artış gözlenmiştir. Hücre potansiyelinin artması ile D8 ve D9 akım yoğunluğu değerleri arasındaki fark azalmaktadır. Hidrojen kütle kesrinin $y_{H_2} = 0,60$ (D9) değerinden $y_{H_2} = 0,38$ (D10) değerine düşürülmesi ile akım yoğunluğunun maksimum değerinde % 24 artış gözlenmiştir. Hücre potansiyelinin artması ile D9 ve (D10) akım yoğunluğu değerleri arasındaki fark 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. Aktivasyon kayıpları ve hesabı ile ilgili ayrıntılı bilgi EK-8’de verilmiştir. Hidrojen kütle kesri 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. Katot kısmındaki su için belirlenen üç farklı kütle kesri değeri için; (D1), (D8), (D9) elde edilen kutuplaşma eğrileri

Şekil 6.46’da, katot kısmındaki su kütle kesri değişiminin akım yoğunluğu üzerine etkisi görülmektedir. Katot kısmındaki su kütle kesrinin $y_{H_2O} = 0,01$ (D1) değerinden $y_{H_2O} = 0,10$ (D11) değerine artırılması ile akım yoğunluğunun maksimum değerinde % 99 artış gözlenmiştir. Hücre potansiyelinin artması ile D11 ile (D12) akım yoğunluğu değerleri arasındaki fark azalmaktadır. Katot kısmındaki su kütle kesrinin $y_{H_2O} = 0,10$ (D11) değerinden $y_{H_2O} = 0,20$ (D12) değerine artırılması ile akım yoğunluğunun maksimum değerinde % 37 artış gözlenmiştir. Hücre potansiyeli değerinin 0,20 - 0,58 V arasında, D11 ile D12 akım yoğunluğu değerleri arasındaki fark artmakta, 0,58 - 0,92 V 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. Aktivasyon kayıpları ve hesabı ile ilgili ayrıntılı

bilgi EK-8’de verilmiştir. Katot kısmındaki su buharı kütle kesri 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.

7. DENEYSEL VERİLERLE KARŞILAŞTIRMA

Wang, Husar, Zhou ve Liu [49]'e ait deneysel ve sayısal çalışmadaki 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 [49] belirtilen şartlar Çizelge 7.1'de sunulmuştur.

Çizelge 7.1. Wang ve ark. [49]'nin deneysel çalışma durumlarına ait veriler¹

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		

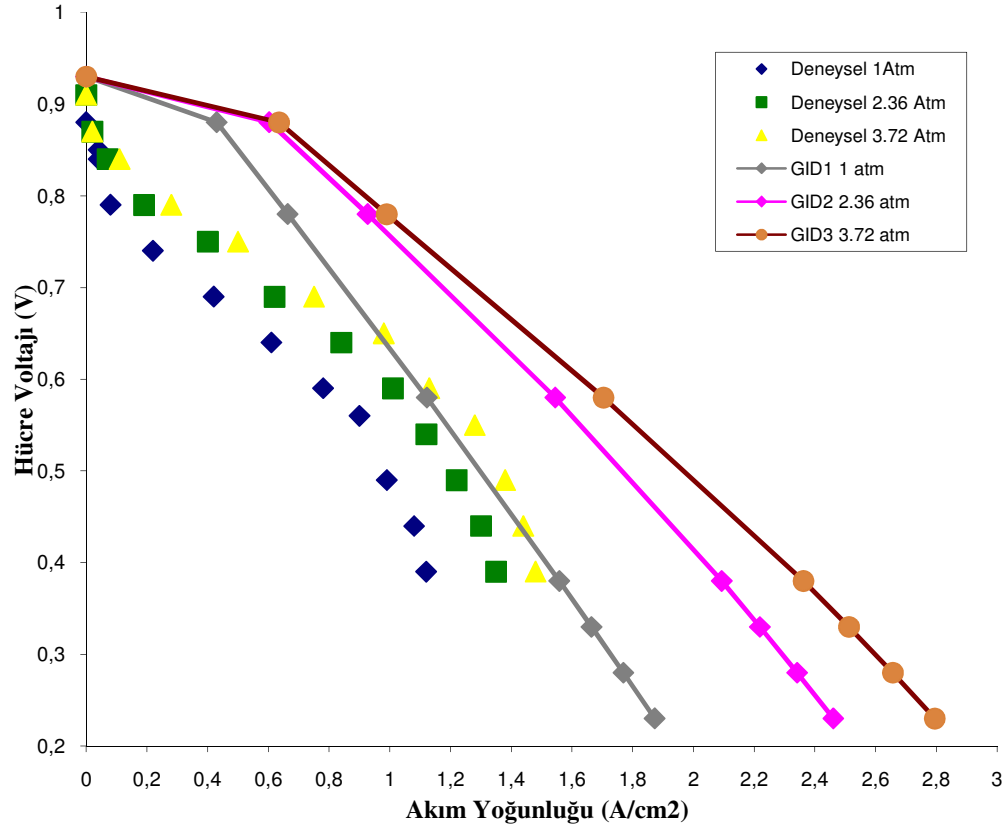
¹ Hacimsel debiler standart şartlarda verilmiştir.

Her iki guruba ait durumlardaki, PEMFC modülünde girilmesi gereken sınır şartlarının belirlenmesinde izlenen yol EK-7'de sunulmuştur. Deneysel çalışma durumlarına karşılık gelen ve FLUENT'te girilmesi gereken parametreler hesaplanmış ve Çizelge 7.2'de sunulmuştur.

Çizelge 7.2. Wang ve ark. [49]'nin deneysel çalışma durumlarına karşılık gelen ve PEMFC modülünde girilmesi gereken veriler

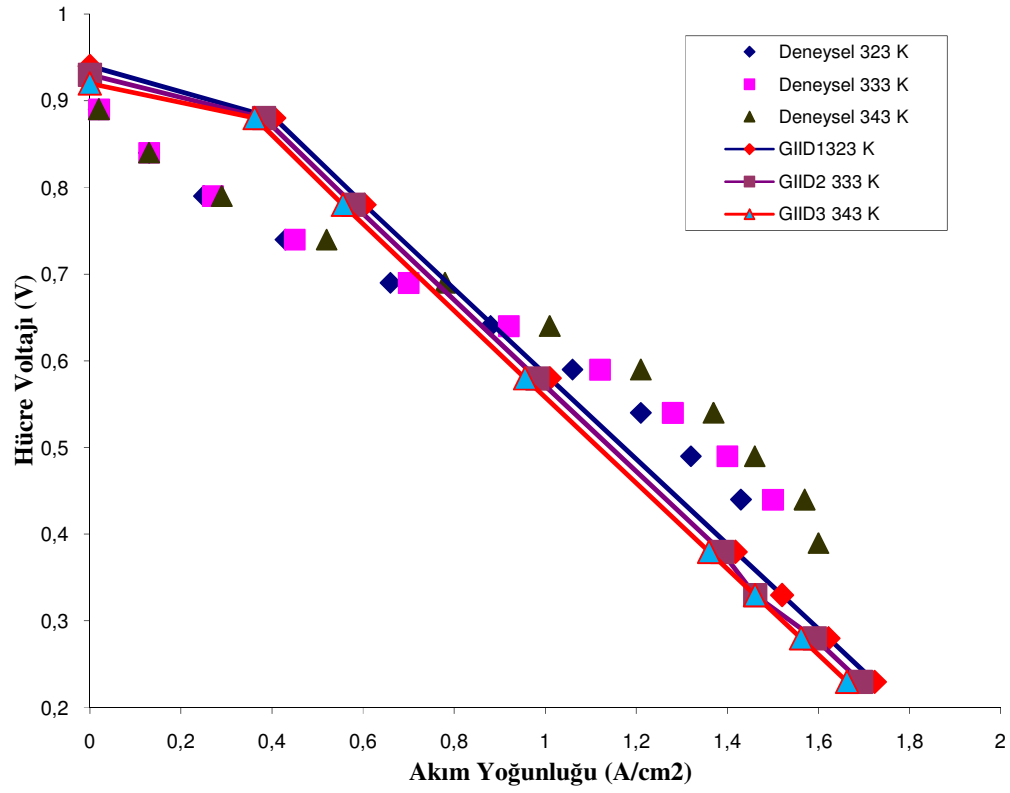
G	D	P_i [Atm]	T [°C]	$\dot{m}_{an}$ [kgs ⁻¹] 10 ⁻⁵	$\dot{m}_{cat}$ [kgs ⁻¹] 10 ⁻⁵	Anot kütle kesri		Katot kütle kesri		
						y_{H_2}	y_{H_2O}	y_{O_2}	y_{H_2O}	y_{N_2}
I	1	1	70	0,5398	3,2940	0,2010	0,7989	0,2125	0,0826	0,7004
	2	2,36	70	0,2914	3,4236	0,4273	0,5727	0,2123	0,0853	0,6983
	3	3,72	70	0,2372	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

Basınç değişiminin kutuplaşma eğrilerine etkisi incelenmiştir. Şekil 7.1'den görüleceği üzere, farklı basınçlarda elde edilen deneysel sonuçlar ile modeli oluşturulan PEMFC yakıt hücresinin sayısal sonuçları arasında oldukça büyük farklılıklar gözlenmektedir. Bu farklılıkların olası iki önemli sebebi vardır: Deneysel sonuçların elde edildiği makalede [49], 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. Ayrıca, deneysel çalışmada, membran elektrokinetik geçirgenlik değeri, $1,13 \times 10^{-19} \text{ m}^2$, sayısal çalışmada ise $1,8 \times 10^{-18} \text{ m}^2$ olarak alınmıştır. 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 [49] ve sayısal (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 sonuçlar ile modeli oluşturulan PEMFC yakıt hücresinin sayısal sonuçları arasında farklılıklar gözlenmektedir. Bu farklılıkların olası iki önemli sebebi vardır: Deneysel sonuçların elde edildiği makalede [49] 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. Ayrıca, deneysel çalışmada, membran elektrokinetik geçirgenlik değeri, $1,13 \times 10^{-19} \text{ m}^2$, sayısal çalışmada ise $1,8 \times 10^{-18} \text{ m}^2$ olarak alınmıştır. 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 sıcaklıklarda elde edilen deneysel [49] ve sayısal (GIID1, GIID2, GIID3) kutuplaşma eğrilerinin karşılaştırılması

8. SONUÇLARIN DEĞERLENDİRİLMESİ

Bu çalışmada, FLUENT-PEMFC modülü kullanılarak modeli oluşturulan PEM yakıt hücresinde 12 farklı durum için çözüm elde edilmiştir (Çizelge 6.1). Çözümler 0,5 sıklıktaki ağ yapısı kullanılarak elde edilmiştir.

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 1 alınarak 11970 (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 6.3 incelendiğinde, birbirini takip eden sonuçlardaki % değişim miktarının %1'in altına düştüğü ilk durum, yani 69160 elemanın kullanıldığı 0,5 sıklıktaki ağ yapısının (Çizelge 5.1) sonuçlardan etkilenmediği kabul edilmiştir.

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

Bu şartlar altında elde edilen kutuplaşma eğrileri incelendiğinde, basıncın etkisinin çok büyük olduğu gözlenmiştir. Ayrıca katot tarafındaki su buharı kütle kesri de akım yoğunluğunun artmasına en büyük katkı yapan niceliklerden biridir. Hidrojen kütle kesrinin de akım yoğunluğunu artırmada etkili olduğu gözlenmiştir. İlginç bir sonuç olarak, anot kütle debisini artırmanın akım yoğunluğunu çok fazla değiştirmedeği görülmektedir. (Şekil 6.43)

Model sonuçları deneysel sonuçlarla [49] karşılaştırıldığında oldukça büyük farklılıklar gözlenmiştir. Bu farklılıkların olası iki önemli sebebi vardır: Deneysel sonuçların elde edildiği makalede [49], 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. Ayrıca, deneysel çalışmada, membran elektrokinetik geçirgenlik değeri, $1,13 \times 10^{-19} \text{ m}^2$, sayısal çalışmada ise $1,8 \times 10^{-18} \text{ m}^2$ olarak alınmıştır. İkinci olarak, sayısal çalışmada sıvı fazda su oluşumunun etkisi dikkate alınmamıştır. Bu ise sayısal çalışmada akım yoğunluklarının fazla hesaplanmasına yol açmıştır.

Sonuç olarak, deneysel çalışmadaki veri eksiklikleri, karşılaştırmanın güvenilirliğini azaltmaktadır. Bu modelin geçerliliğinin ispatlanabilmesi için, tüm verilerin mevcut olduğu deneysel bir çalışma gerçekleştirildikten veya literatürden temin edildikten sonra model ile karşılaştırılması yapılmalıdır.

KAYNAKLAR

1. Wang, C. Y., "Fundamental Models for Fuel Cell Engineering" , *Chem. Rev.*, 104 : 4727-4766 (2004).
2. Prater, K. B., "Polymer electrolyte fuel cells A review of recent developments" , *J. Power Sources*, 51 : (1-2) , 129-144 (1994).
3. Gottesfeld, S., Zawodzinski, T. A., "Polymer Electrolyte Fuel Cells" , *In Advances in Electrochemical Science and Engineering*, 5 : 197-203 (1997).
4. "Fuel Cells A Handbook 3rd ed." , Hrschenhofer, J. F., Stauffer, D. B., Engleman, R. R., *U. S. Department of Energy*, Office of Fossil Energy (1981).
5. Biyikoglu, A., "Review of proton exchange membrane fuel cell models" , *Int. J. of Hydrogen Energy*, 30 : 1181-1212 (2005).
6. Bernardi, D. M., Verbrugge, M. W., "Mathematical model of a gas diffusion electrode bonded to a polymer electrolyte" , *AIChE J.*, 37 (8) : 1151-1163 (1991).
7. Bernardi, D. M., Verbrugge, M. W., "Mathematical model of the solid-polymer-electrolyte fuel cell" , *J. Electrochem. Soc.*, 139 (9) : 2477-2491 (1992).
8. Springer, T. E., Zawodzinski, T. A. Gottesfeld, S., "Polymer electrolyte fuel cell model" , *J. Electrochem. Soc.*, 138 (8) : 2334-2342 (1991).
9. Springer, T. E., Wilson, M. S., Gottesfeld, S., "Modeling and experimental diagnostics in polymer electrolyte fuel cells" , *J. Electrochem. Soc.*, 140 (12) : 3513-3526 (1993).
10. Fuller, T. F., Newman, J., "Water and thermal management in solid-polymer-electrolyte fuel cells" , *J. Electrochem. Soc.*, 140 (5) : 1218-1225 (1993).
11. Nguyen, T., White, R. E., "A water and heat management models for proton-exchange-membrane fuel cells" , *J. Electrochem. Soc.*, 140 : 2178-2186 (1993).
12. Yi, J. S., Nguyen, T. V., "Multicomponent transport in porous electrodes of proton exchange membrane fuel cells using the interdigitated gas distributors" , *J. Electrochem. Soc.*, 146 (1) : 38-45 (1999).
13. Yi, J. S., Nguyen, T. V., "Along-the-channel model for proton exchange membrane fuel cells" , *J. Electrochem. Soc.*, 145 (4) : 1149-1159 (1998).

14. Promislow, K., Stockie, J. M., “Adiabatic relaxation of convective-diffusive gas transport in a porous fuel cell electrode” , *SIAM J. Appl. Math.*, 62 (1) : 180-205 (2002).
15. Stockie, J. M., Promislow, K., Wetton, B. R., “A finite volume method for multicomponent gas transport in a porous fuel cell electrode” , *Int. J. Numer. Methods Fluids.*, 41 (6) : 577-599 (2002).
16. Gurau, V., Liu, H., Kakac, S., “Two-dimensional model for proton exchange membrane fuel cells” , *AIChE J.*, 44 : 2410 (1999).
17. Um, S., Wang, C. Y., Chen, K. S., “Computational fluid dynamics modeling of proton exchange membrane fuel cells” , *J. Electrochem. Soc.* 147 (12) : 4485-4493 (2000).
18. Um, S., Wang, C. Y., “Three dimensional analysis of transport and reaction in proton exchange membrane fuel cells” , *In Proceedings of the ASME Heat Transfer Division*, Orlando, FL, 1 : 19-25 (2000).
19. Dutta, S., Shimpalee, S., Van Zee, J. W., “Three-dimensional numerical simulation of straight channel PEM fuel cells” , *J. Appl. Electrochem.*, 30 (2) : 135-146 (2000).
20. Dutta, S., Shimpalee, S., Van Zee, J. W., “Numerical prediction of mass-exchange between cathode and anode channels in a PEMFC” , *Int. J. Heat Mass Transfer*, 44 (11) : 2029-2042 (2000).
21. Um, S., Wang, C. Y., “Three-dimensional analysis of transport and electrochemical reactions in polymer electrolyte fuel cells” , *J. Power Sources*, 125 (1) : 40-51 (2004).
22. Lee, W.,K., Shimpalee, S., Van Zee, J. W., “Verifying predictions of water and current distributions in a serpentine flow field polymer electrolyte membrane fuel cell” , *J. Electrochem. Soc.*, 150 (3) : A341-A348 (2003).
23. Zhou, T., Liu, H., “A general three-dimensional model for proton exchange membrane fuel cell.” , *Int. J. Transport Phenom.*, 3 : 177-198 (2001).
24. Berning, T., Lu, D. M., Djilali, N., “Three-dimensional computational analysis of transport phenomena in a PEMFC” , *J. Power Sources*, 106 (1-2) : 284-294 (2002).
25. Mazumder, S., Cole, J. V., “Rigorous 3-D mathematical modeling of PEM fuel cells II. Model predictions with liquid water transport” , *J. Electrochem. Soc.*, 150 (11) : A1510-1517 (2003).

26. 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).
27. Wang, Y.; Wang, C. Y., "Electron Transport in PEFCs" *Int. J. Heat Mass Transfer*, 151 (3) : A358-A367 (2004).
28. Wang, Y.; Wang, C. Y., "A Nonisothermal, Two-Phase Model for Polymer Electrolyte Fuel Cells" *Electrochim.*, 153 (6) : A1193-A1200 (2006).
29. Pasaogullari, U., Wang, C. Y., "Liquid water transport in gas diffuser layer of polymer electrolyte fuel cells", *J. Electrochem. Soc.*, 151 (3) : A399-A406 (2004).
30. 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).
31. Meng, H., Wang, C. Y., "Electron Transport in PEFCs", *J. Electrochem. Soc.*, 151(3) : A358-A367 (2004).
32. Meng, H., Wang, C. Y., "Large-scale simulation of polymer electrolyte fuel cells by parallel computin", *Chem. Eng. Sci.*, 59 (16) : 3331-3343 (2004).
33. Wang, Z. H., Wang, C. Y., Chen, K. S., "Two-phase flow and transport in the air cathode of proton exchange membrane fuel cells", *J. Power Sources.*, 94 : 40-50 (2001).
34. He, W., Yi, J. S., Nguyen, T. V., " Two-phase flow model of the cathode of PEM fuel cells using interdigitated flow fields", *AIChE J.*, 46 (10) : 2053-2064 (2000).
35. Natarajan, D., Nguyen, T. V., "A two-dimensional, two-phase, multicomponent, transient model for the cathode of a proton exchange membrane fuel cell using conventional gas distributors", *J. Electrochem. Soc.*, 150 (3) : (2003).
36. Natarajan, D., Nguyen, T. V., "Three-dimensional effects of liquid water flooding in the cathode of a PEM fuel cell", *J. Power Sources*, 115 (1) : 66-80 (2003).
37. You, L., Liu, H., "A two-phase flow and transport model for the cathode of PEMFCs", *Int. J. Heat Mass Transfer*, 45 (11) : 2277-2287 (2003).
38. Mazumder, S., Cole, J. V., "Rigorous 3-D mathematical modeling of PEM fuel cells II. Model predictions with liquid water transport", *J. Electrochem. Soc.*, 150 (11) : A1510-A1517 (2003).

39. Berning, T., Djilali, N., "A 3D, multiphase, multicomponent model of the cathode and anode of a PEM fuel cell" , **J. Electrochem. Soc.**, 150 (12) : A1589-A1598 (2003).
40. Pasaogullari, U., Wang, C. Y., "Two-phase transport and the role of micro-porous layer in polymer electrolyte fuel cells" , **Electrochimica Acta**, 49 (25) : 4359-4369 (2004).
41. Wang, C. Y.; Gu, W., "Three dimensional, two phase flow mathematical model for PEM fuel cell" , **B. J. Electrochem. Soc.**, 145 (10) : 3407-17 (1998).
42. Kaviany, M., "Principles of Heat Transfer in Porous Media" , **Springer-Verlag**: New York, 598 (1991).
43. Plumb, O. A. "In Handbook of Porous Media" , Vafai, K., Hadim, H. A., Eds., **Marcel Dekker**: New York, 754 (2000).
44. Wang, C. Y., Cheng, P., "Multiphase Flow and Heat Transfer in Porous Media" , **Adv. Heat Transfer** , 30 (93) : 196 (1997).
45. 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).
46. 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).
47. 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).
48. Sivertsen, B. R., Djilali, N., "CFD-based modelling of proton exchange membrane fuel cells" , **Journal of Power Sources**, 141 : 65-78 (2005).
49. 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).
50. 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).

51. 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).
52. 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* (2005)
53. 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).
54. 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).
55. 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 Management*, 48 : 40-51 (2007).
56. Su, A., Sun, C.C., Weng, F.B. and Chen, Y.M., "Experimental Investigation of the Performance of a Single Proton Exchange Membrane Fuel Cell Using Dry Fuel", *Experimental Heat Transfer*, 16 : 97-109 (2003).
57. 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).
58. 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 (2002)
59. Fluent 6.2 UDF Manual, Fluent Inc. (2003)
60. 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).
61. Nguyen, T. V., "An along-the-channel model", *Electrochemical Soc. Proceedings*, 99 (14) : 222-241 (1999).
62. Nam, J.H. and Karvian, M., "Effective Diffusivity and Water-Saturation Distribution in Single- and Two-layer PEMFC Diffusion Medium", *Int. J. Heat Mass Transfer*, 46 (24) : 4595-4611 (2003).

63. Springer, T.E., Zawodzinski, T.A. and Gottesfeld, S., "Polymer electrolyte fuel cell model", *J. Electrochemical Society*, 138 (8) : 2334-2342 (1991).
64. Balmer R., "Chapter 6, Thermodynamics" , *West, St Paul* (1990).
65. Keenan J.H. and Kaye J. Gas Tables, *Wiley & Sons*, New York. (1948).
66. Van Wylen G.J. and Sonntag R.E., "Fundamentals of Classical Thermodynamics, 3rd ed." , *Wiley & Sons*, New York, 688 (1986).
67. Larminie J. and Dicks A., "Fuel Cell Systems Explained," 2nd Edition, *John Wiley and Sons*, 2003, England, 400 (2003).

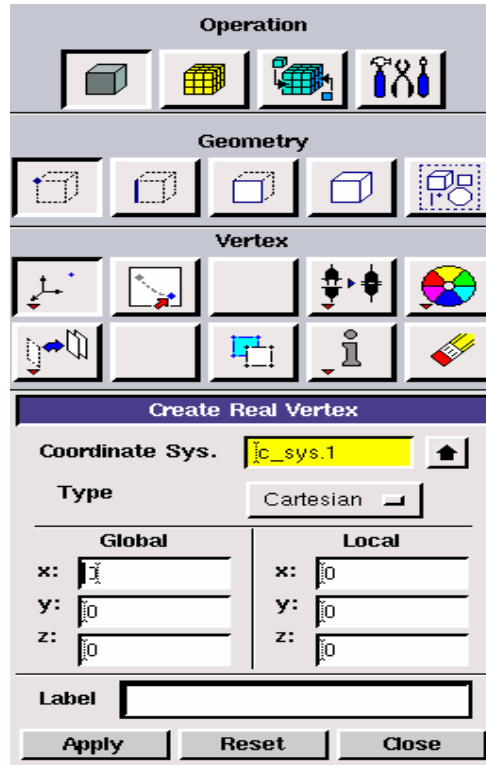
EKLER

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.

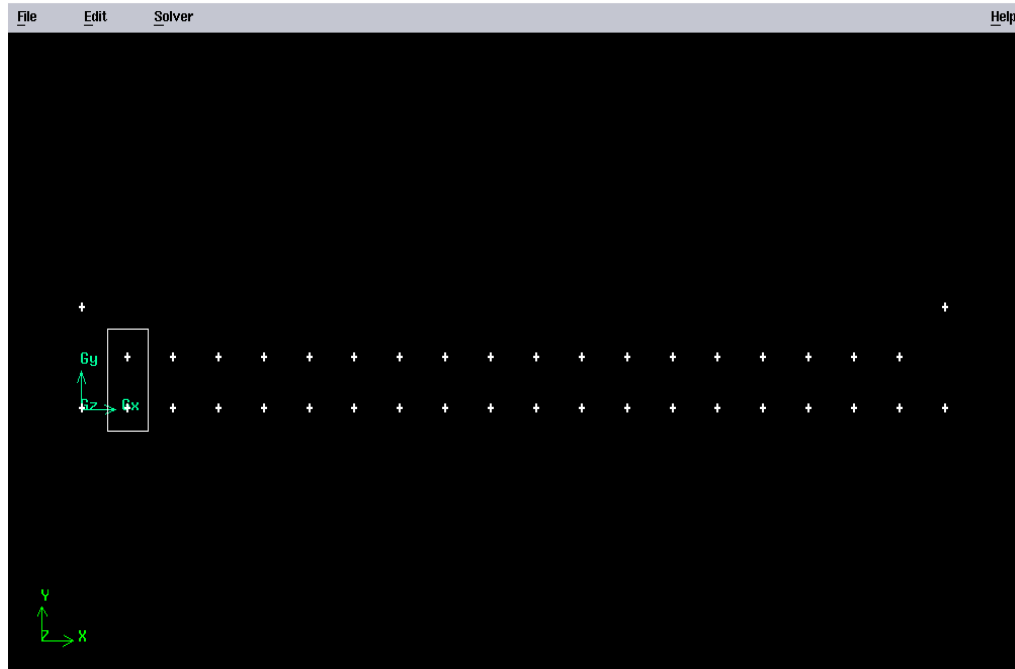


Şekil 1.1. Koordinat sisteminde nokta oluşturulması

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

$A-(x,y,z) = (0,0,0)$	Apply
$B-(x,y,z) = (0,2,0)$	Apply
$C-(x,y,z) = (19,0,0)$	Apply
$D-(x,y,z) = (19,2,0)$	Apply
$E-(x,y,z) = (1,1,0)$	Apply
$F-(x,y,z) = (1,0,0)$	Apply

İşlem süresini azaltmak için, diğer noktaların koordinat sisteminde tek tek girilmesi yerine, yukarıda belirtilmiş olan altı ana noktanın kopyalanması ile diğer noktalar oluşturulabilmektedir. Kopyalama işlemi ise yine aynı buton altında bulunan Move / Copy Vertices butonu kullanılarak yapılmaktadır.



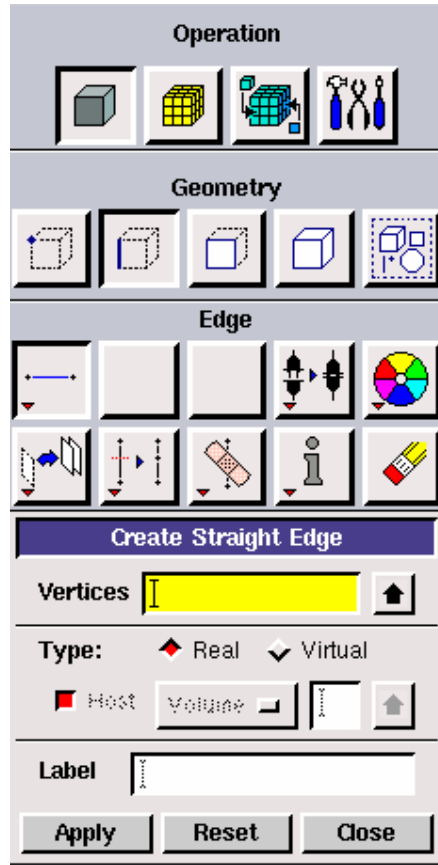
Şekil 1.2. Koordinat sisteminde oluşturulan noktalar

Şekil 1.2’de çerçeve içerisinde gösterilmiş olan iki nokta seçilir. X yönünde 1 birim uzaklığa kopyalanır. Sırası ile şekilde gözüken noktalar, bu yöntem ile oluşturulur.

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

Operation → Geometry → Create Edge → Create Straight Edge

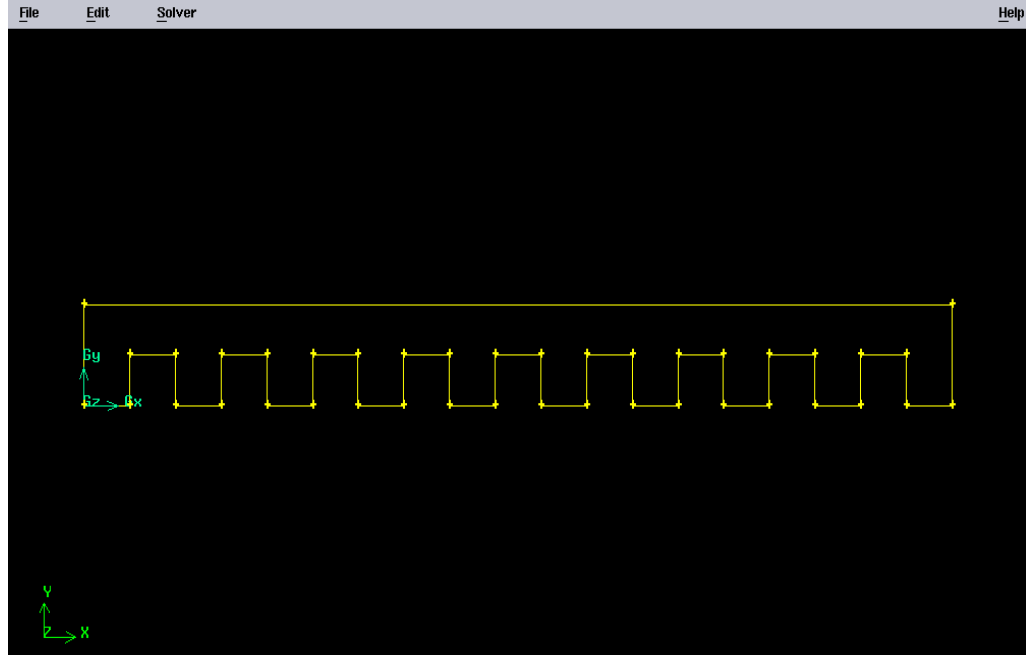
Bu komut ile koordinat sisteminde oluşturulan noktalar seçilerek kenarlar çizilir. Şekil 1.3’de gösterilmiş olan “Label” alanına oluşturulan kenarın ismi yazılarak daha sonra yapılacak işlemlerde ve sınır şartlarının verilmesinde kolaylık sağlayacağı göz önünde tutulmalıdır.



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

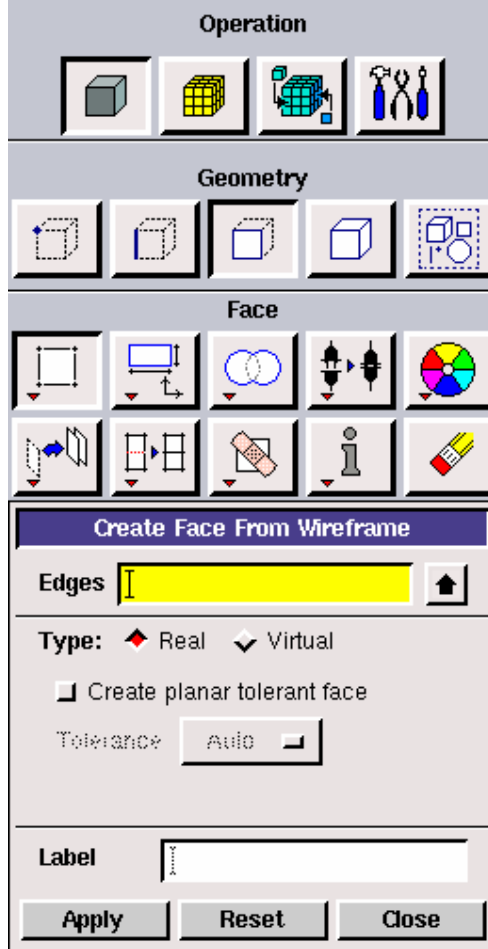


Şekil 1.4 Noktaların birleştirilmesi ile oluşturulan kenarlar

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 yazılır.

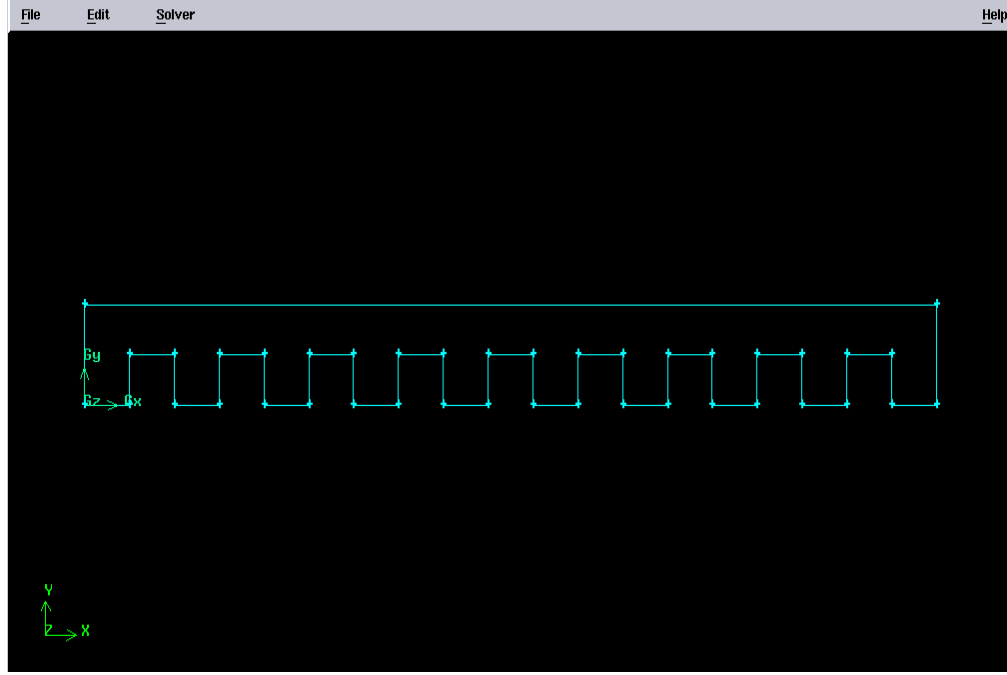
EK-1. (Devam) Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması



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.

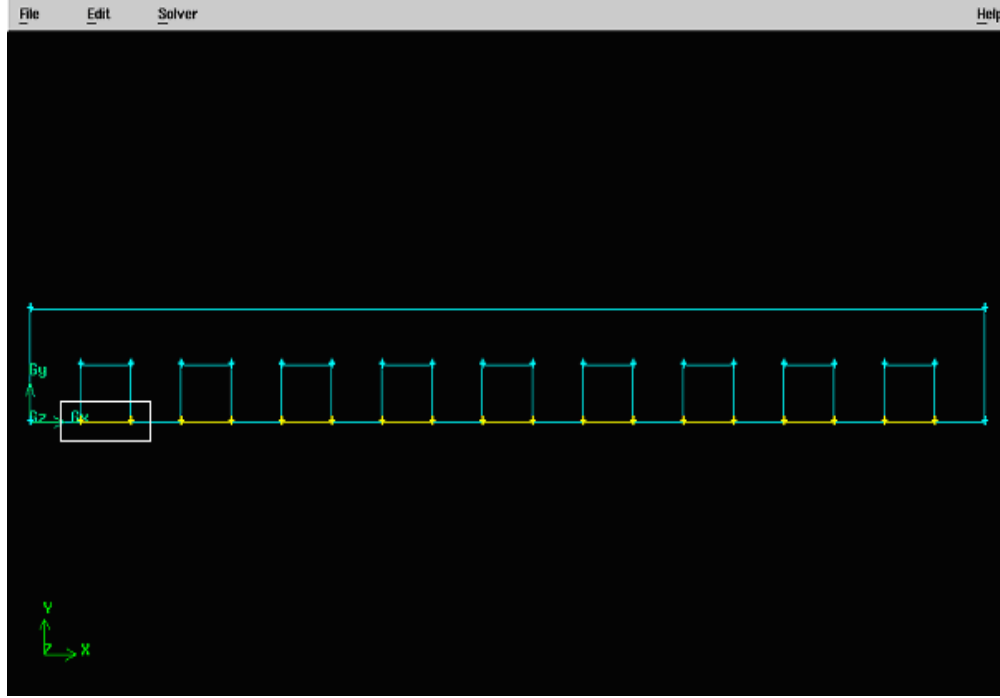
EK-1. (Devam) Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması



Şekil 1.6. Çizgilerin birleştirilmesi ile oluşturulan yüzey

Şekil 1.6'da gösterilmiş olan yüzey, anot akım toplatıcı 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 toplatıcı plakanın yüzeylerinden faydalananarak, gaz kanalları Şekil 1.7'de gösterildiği gibi oluşturulmaktadır.

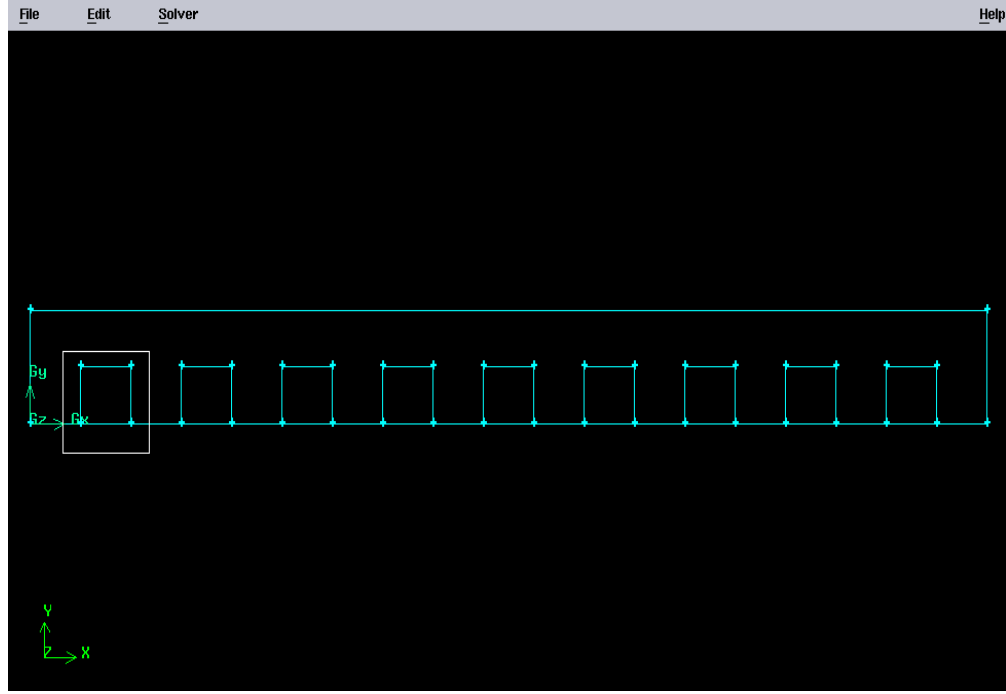
EK-1. (Devam) Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması



Şekil 1.7. Anot hava kanallarının oluşturulması

Şekil 1.7’de görüldüğü gibi, anot akım toplayıcıya ait noktalar kullanılarak hava kanallarının kenarları oluşturulur. Renk farklılıkları, çizimlerin karıştırılmamasında büyük kolaylık sağlamaktadır. Gaz kanallarının alt kenarları 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. Bu işlem diğer sekiz kanal için teker teker uygulanır.

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

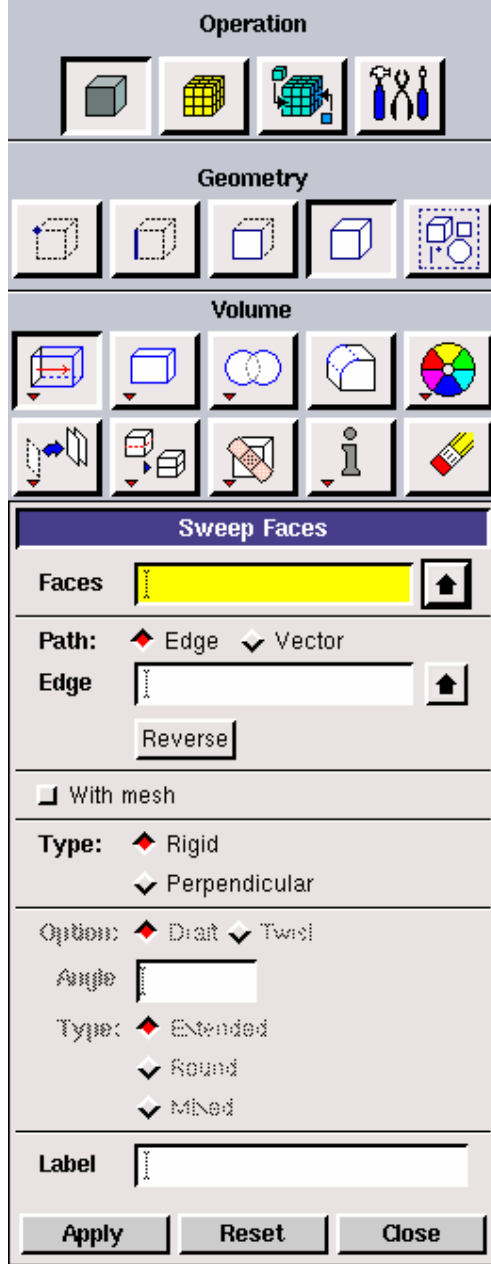


Şekil 1.8. Anot gaz kanallarına ait ön yüzeylerin oluşturulması

Operation → Geometry → Volume → Sweep Faces

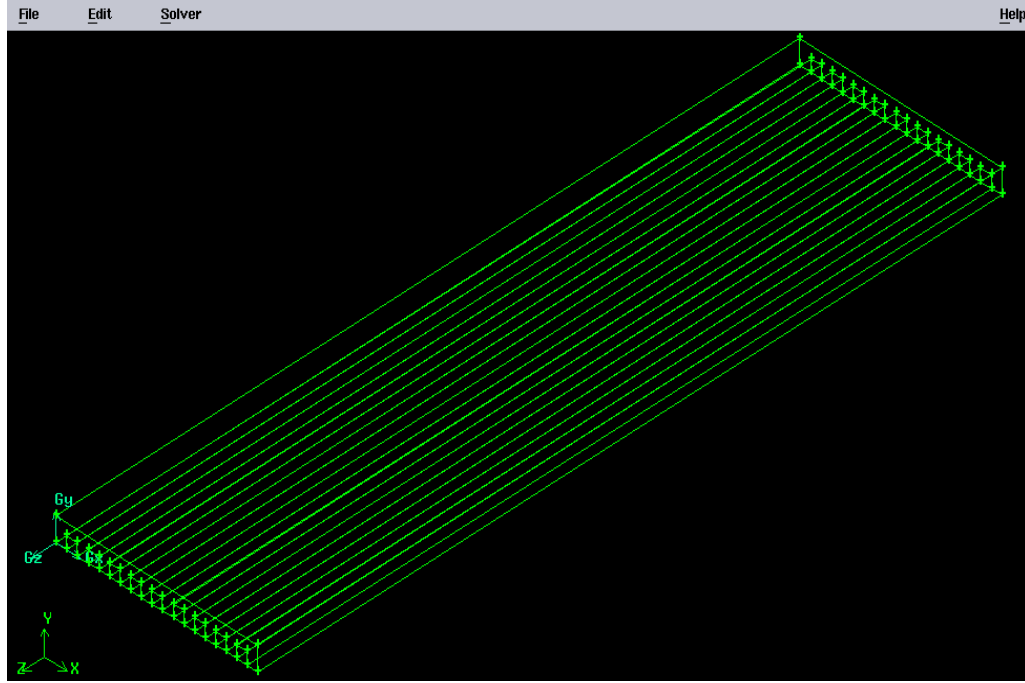
İki boyutlu oluşturduğumuz, anot akım toplatıcı ve anot hava kanallarına ait ön yüzeyler Sweep Faces komutu kullanılarak üç boyutlu hale dönüştürülür. Şekil 1.9'da açılan pencereden tüm yüzeyler seçilerek Vector butonu aktif hale getirilir. Define kısmından z eksenini seçilir ve Magnitude kısmına, yakıt 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

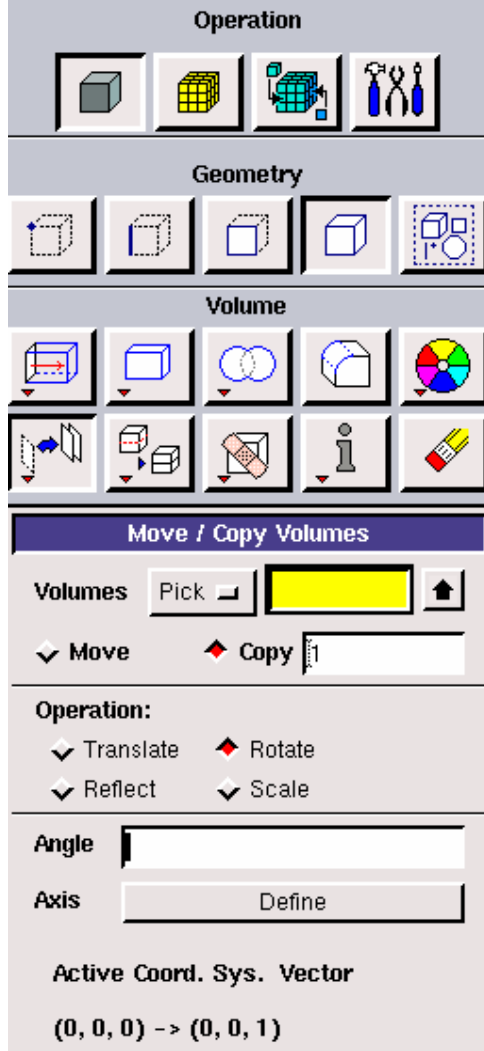
EK-1. (Devam) Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması



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

Üç boyutlu anot akım toplayıcı ve anot gaz kanalları oluşturulduktan sonra Şekil 1.11’de gösterilen ekrandan Copy / Rotate butonu aktif hale getirildikten sonra, oluşturulan iki hacim seçilerek y ekseninde 0,7338 birim uzaklığa, 180 derece döndürülerek kopyalanır ve katot akım toplayıcı ile katot gaz kanalları oluşturulur.

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

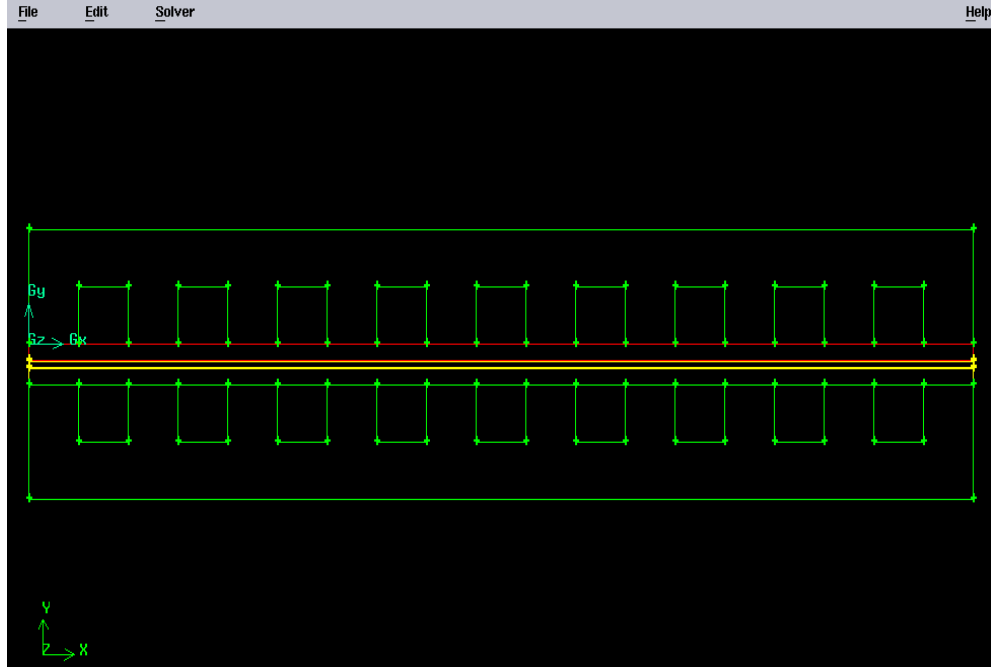


Şekil 1.11. Hacim kopyalanması veya taşınması

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 1.12’de anot gaz difüzyon tabakanın ön yüzeyinin oluşturulması detaylı olarak gösterilmiştir.

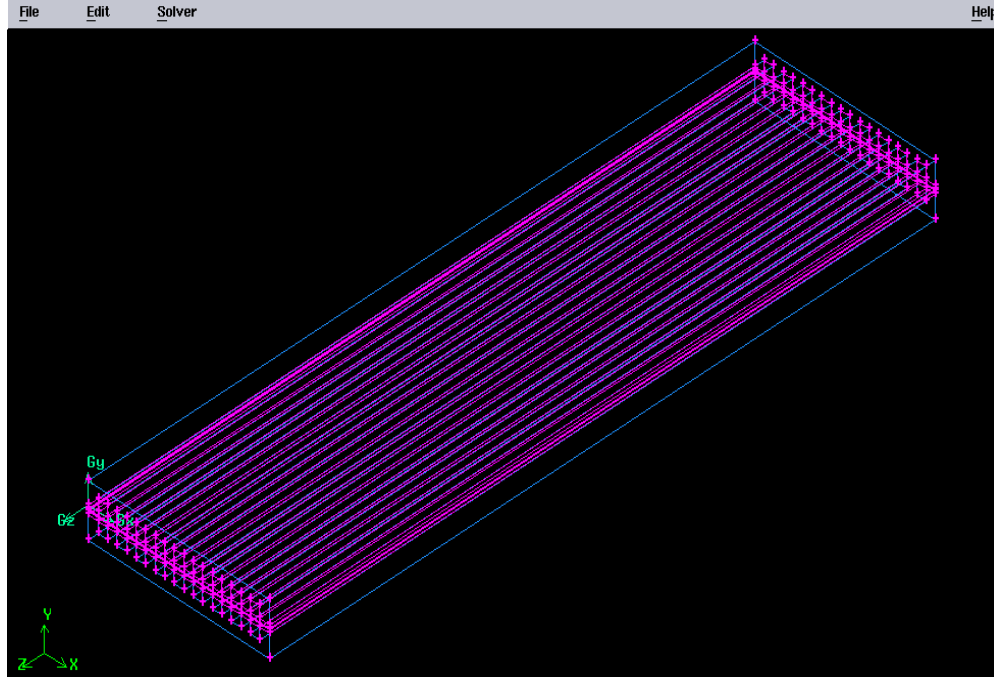
EK-1. (Devam) Gambit kullanımı ile problem geometrisinin oluşturulması



Şekil 1.12. Anot gaz difüzyon tabakanın ön yüzeyinin oluşturulması

Şekil 1.12’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 1.13’de gösterildiği gibi geometrimiz üç boyutlu bir hale dönüştürülür.

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



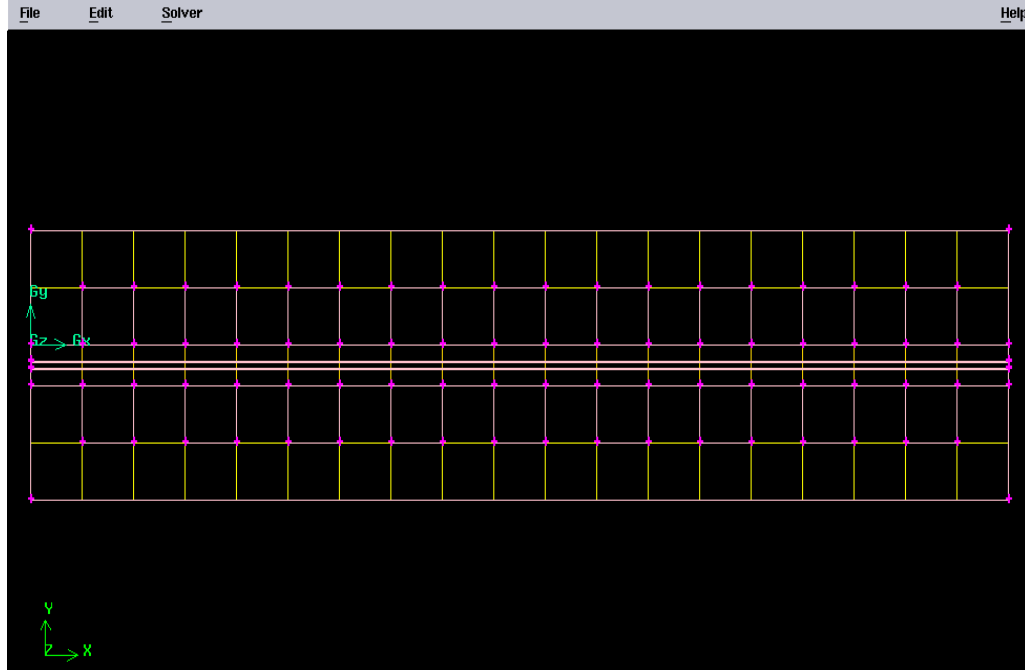
Şekil 1.13. Yakıt hücresinin üç boyutlu görünümü

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.

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



Şekil 1.14. 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 gözükmektedir. Her sınır için tek tek koşul yazılır ve “name” bölümüne yüzeyin adı yazılır. Geometrinin ön yüzünde bulunana 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

ANOT	Anot Akım Toplatıcı Tabaka
KATOT	Katot Akım Toplayıcı Tabaka
ADT	Anot Difüzyon Tabaka
KDT	Katot Difüzyon Tabaka
AKT	Anot Katalizör Tabaka
KKT	Katot Katalizör Tabaka
AK1	Anot Gaz Kanalı 1
AK2	Anot Gaz Kanalı 2
AK3	Anot Gaz Kanalı 3
AK4	Anot Gaz Kanalı 4
AK5	Anot Gaz Kanalı 5
AK6	Anot Gaz Kanalı 6
AK7	Anot Gaz Kanalı 7
AK8	Anot Gaz Kanalı 8
AK9	Anot Gaz Kanalı 9
KK1	Katot Gaz Kanalı 1
KK2	Katot Gaz Kanalı 2
KK3	Katot Gaz Kanalı 3
KK4	Katot Gaz Kanalı 4
KK5	Katot Gaz Kanalı 5
KK6	Katot Gaz Kanalı 6
KK7	Katot Gaz Kanalı 7
KK8	Katot Gaz Kanalı 8
KK9	Katot Gaz Kanalı 9
MEMBRAN	MEMBRAN

Operation → Zones → Specify Continuum Types

Zone menüsündeki Specify Continuum Types bölümünden Anot gaz kanallarının hepsi seçilerek anot gaz kanalı , katot gaz kanalları da yine tek bir hacim altında toplanarak 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.

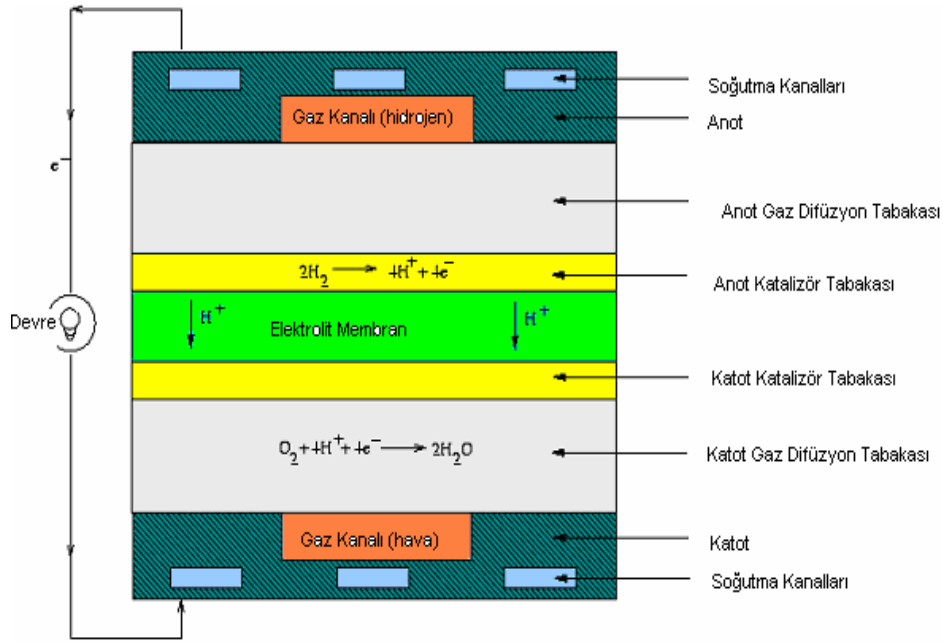
EK-2. Fluent paket programı PEMFC modülü tanıtımı

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 ilıştırılan 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 oluştururlar.

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.

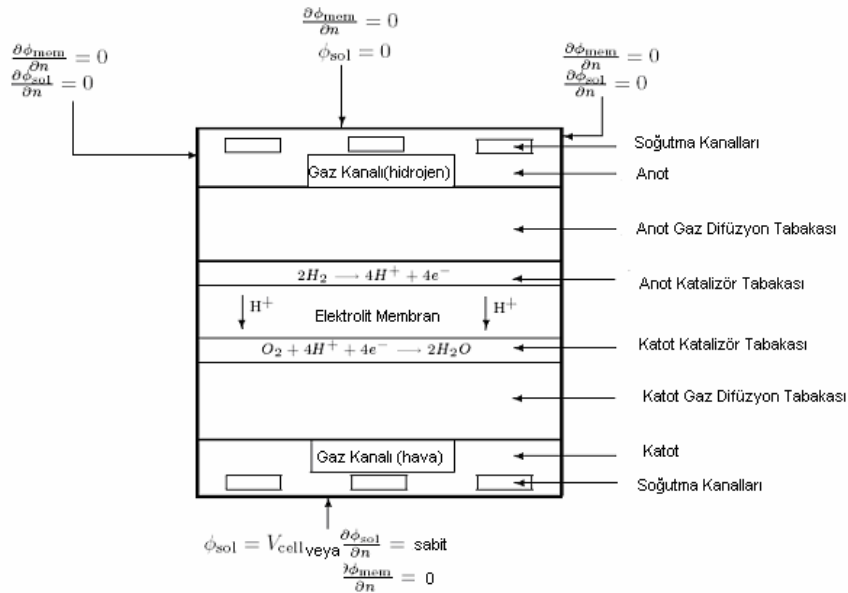
$$\nabla \cdot (\sigma_{sol} \nabla \phi_{sol}) + R_{sol} = 0 \quad (2.1)$$

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

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_{memn} 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/m³]:

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

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

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 doymuşluğu aşağıdaki eşitliklerle yönetilir.

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

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

$-r_w$ terimi membrana uygulanmaz. Yoğunlaşma oranı sabiti c_r ’ye bağlantılıdır, ve $c_r = 100\text{s}^{-1}$ ‘dir. Farz edilen sıvı hızı, V_l , 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.

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

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

(Leverette fonksiyonu).

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

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

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

Eş. 2.20'de, ε , porozite, σ , yüzey gerilimi (N/m^2), 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/fuelcells2.2 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.

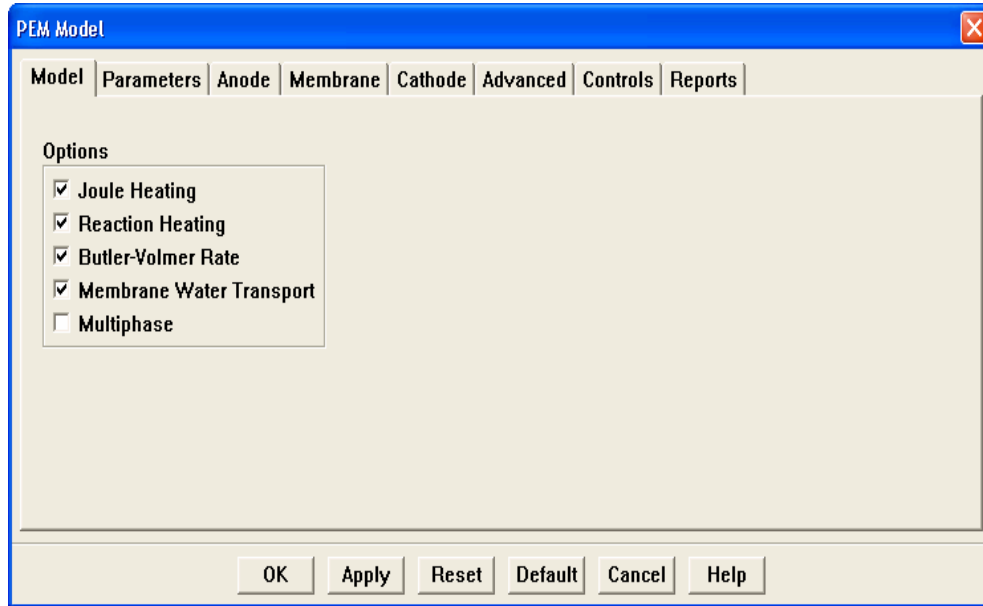
Burada, akım kolektörü, gaz difüzyon tabakaları, katalizör tabakaları, ve membran için ilgili alanları tanımlayabilirsiniz. Aşağıdaki girdileri PEM model panelini kullanarak belirtebilirsiniz. Opsiyonel girdiler aşağıdaki şekildedir:

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, özdirençlerin 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/m3)	Ref. Current Density (A/m3)
1.5e+09	4000000
Ref. Concentration (kmol/m3)	Ref. Concentration (kmol/m3)
1	1
Concentration Exponent	Concentration Exponent
0.5	1
Exchange Coefficient	Exchange Coefficient
2	2

Open-Circuit Voltage (V) 0.95

Reference Diffusivity

h2 (m2/s)	3e-05
o2 (m2/s)	3e-05
h2o (m2/s)	3e-05
Other Species (m2/s)	3e-05

OK Apply Reset Default Cancel Help

Şekil 3.2. PEM model panelin parametre çizelgesi

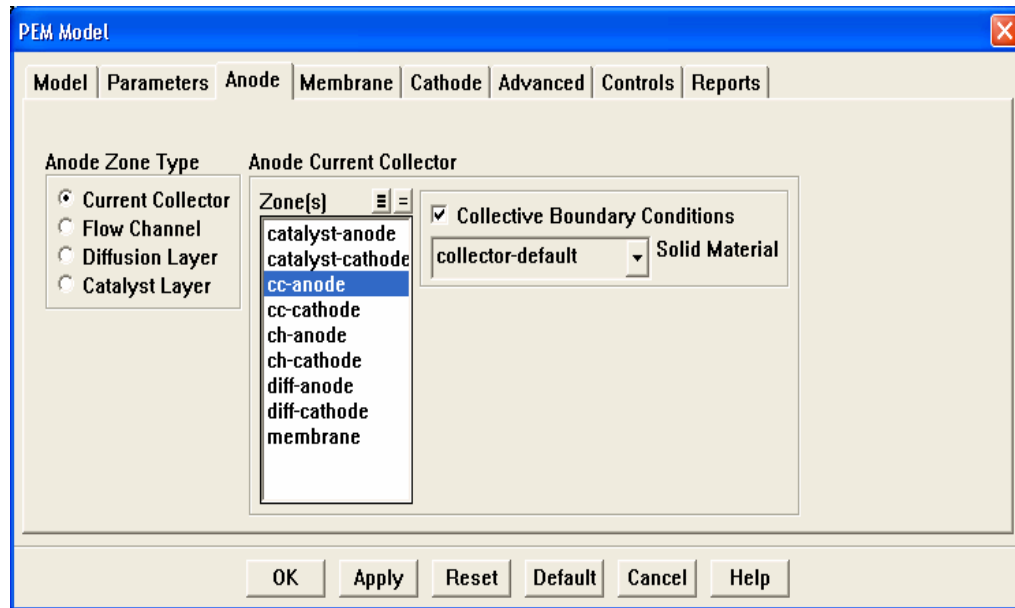
PEM model panelde elektrokimya altında çeşitli parametreler vardır. Anot ve katodun her ikisi için, varsayılan değerleri değiştirebilir veya aşağıdaki parametreleri ayarlayabilirsiniz.

- 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

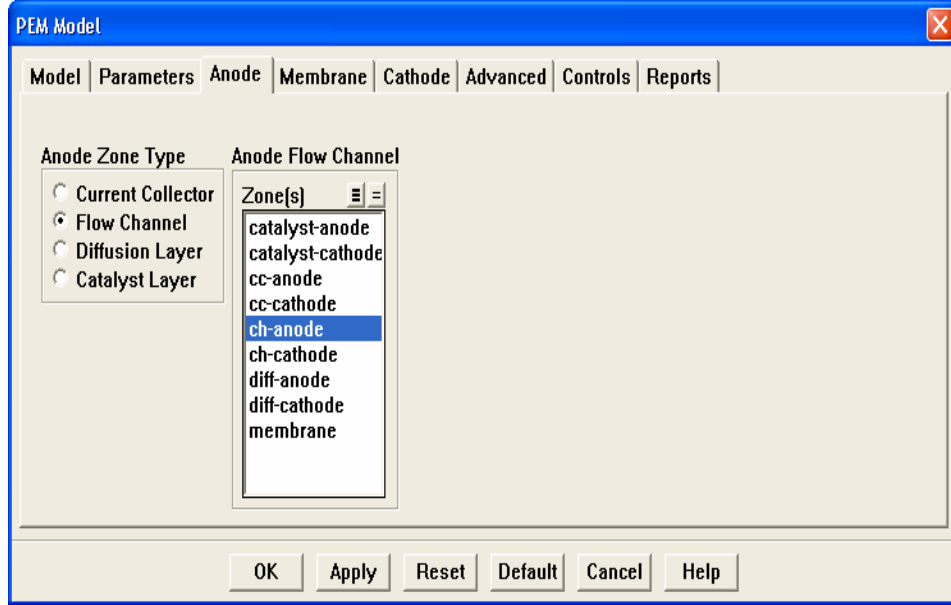
Akış kanalı, difüzyon tabakası ve PEM yakıt hücresinin anot kısmı için katalizör tabakası alanlarını belirtmede ve akım kolektörünün özelliklerinde PEM model panelin anot çizelgesini kullanabilirsiniz.



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 düzenebilir. electrical conductivity için, materials panelinden yalnızca bir sabit değer seçebilirsiniz. Katı elektriksel iletkenliği değeri katı alanında katı faz potansiyelinin difüzyon hızıdır.

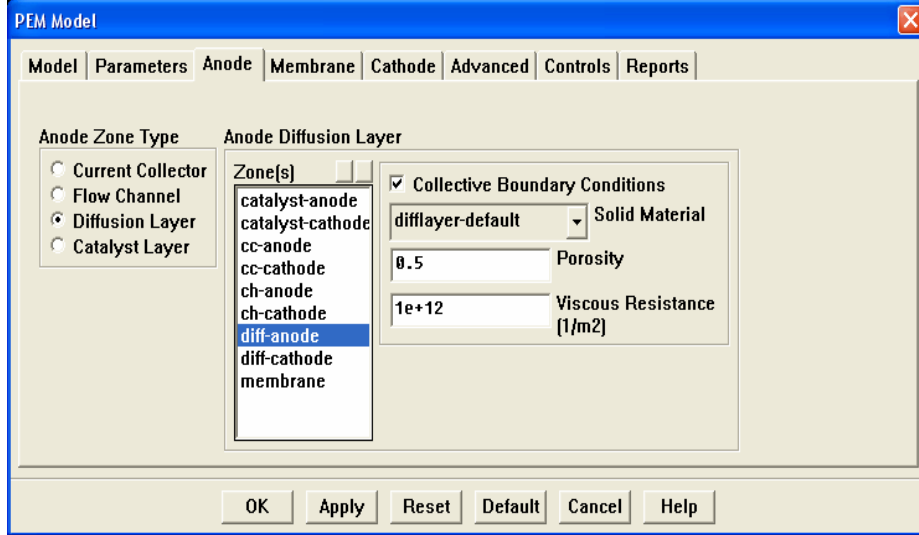
EK-3. (Devam) PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı



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.

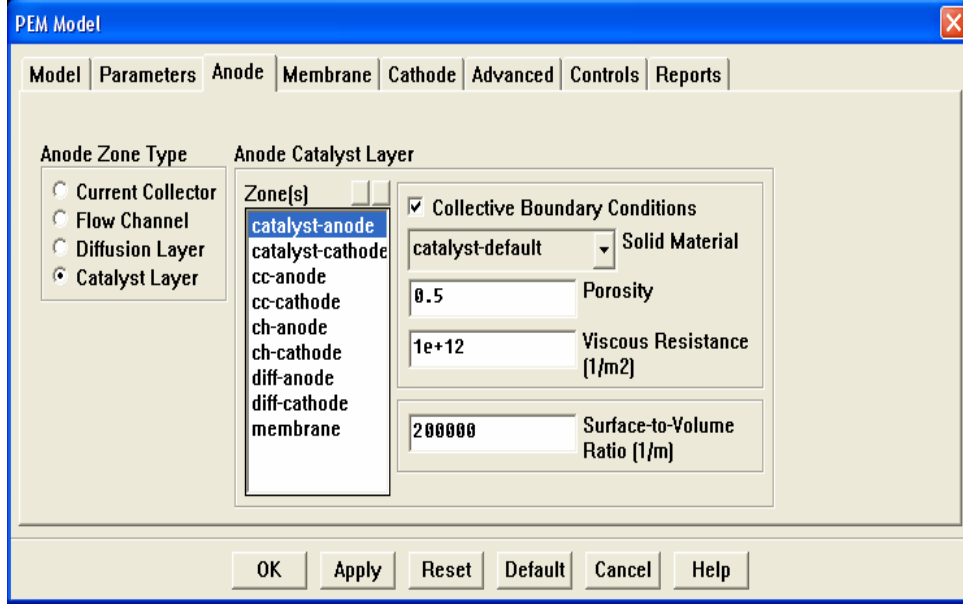
EK-3. (Devam) PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı



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 modelleniyorsanız, 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 evre PEM hesaplamaları için Contact Angle için bir değer belirtilir.

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



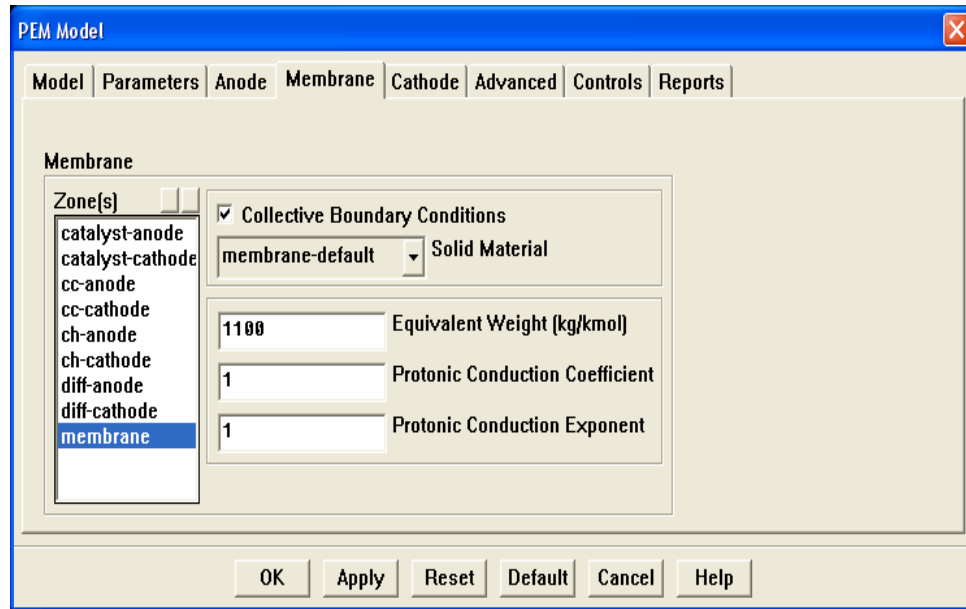
Şekil 3.6. Seçilen katalizör tabakasıyla birlikte PEM model panelin anot çizelgesi

- 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 modelleniyorsanız, 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.

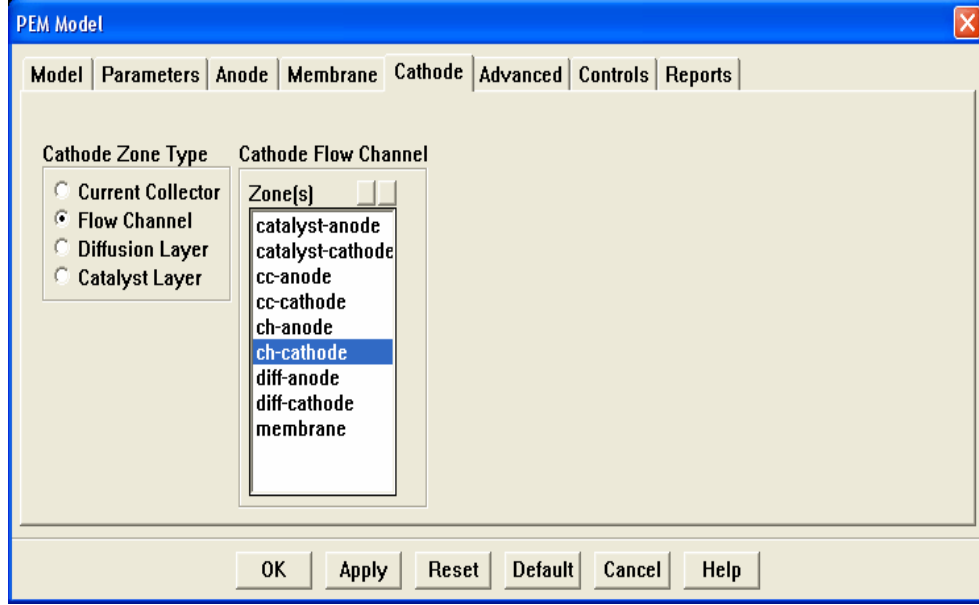
Membrana bir katı materyal atadığınız zaman, bir sınır koşulu ayarlamış olursunuz. Collective boundary collection seçeneğinin açılmasıyla birlikte(varsayılan ayarlar), bu sınır koşulu alan listesinden seçilen bütün ayarlara uygulanır. Eğer her alan için sınır koşulunu tek tek ayarlamak istiyorsanız ilgili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

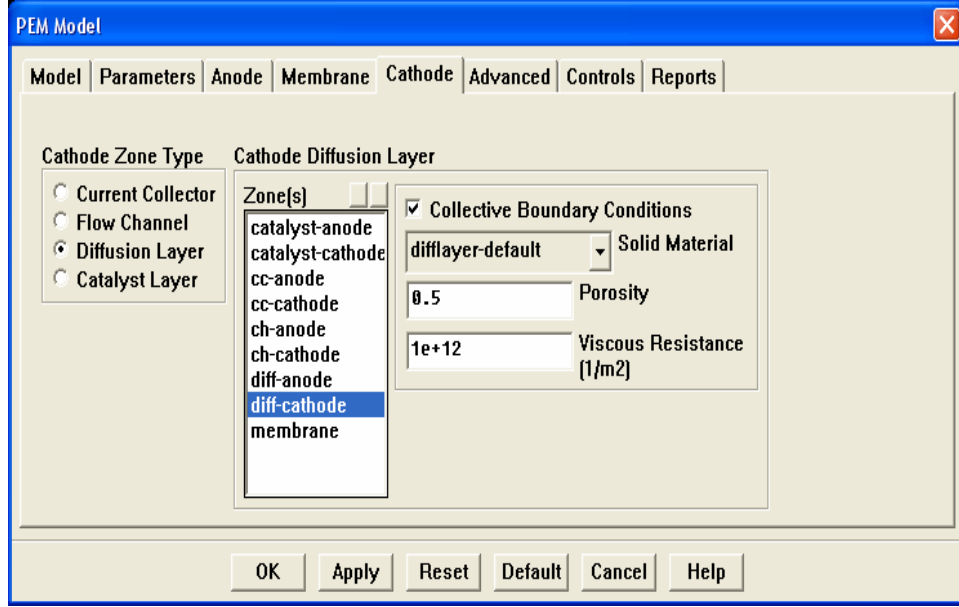
EK-3. (Devam) PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı



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.

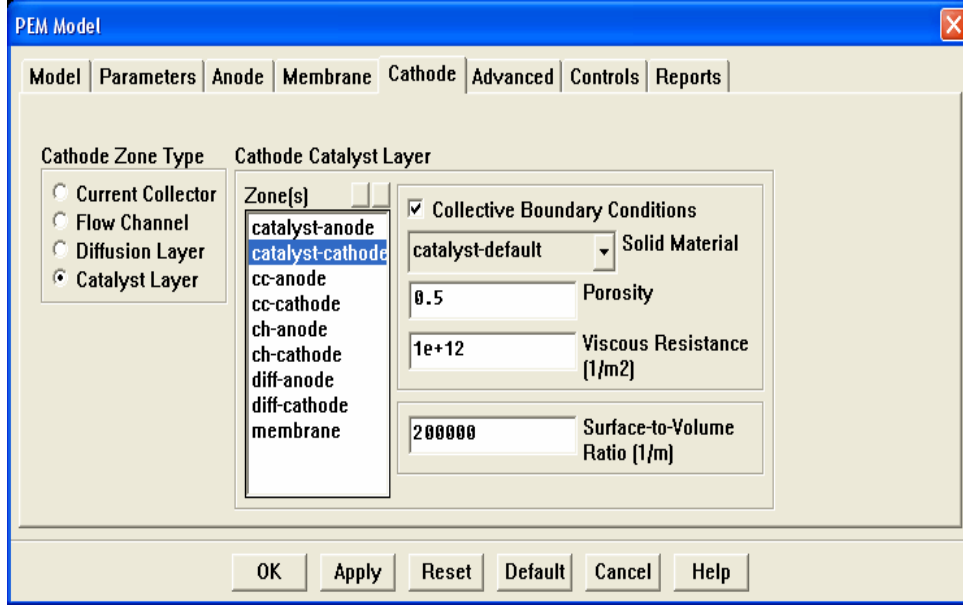
EK-3. (Devam) PEM yakıt hücresi modelinin kullanımı



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.

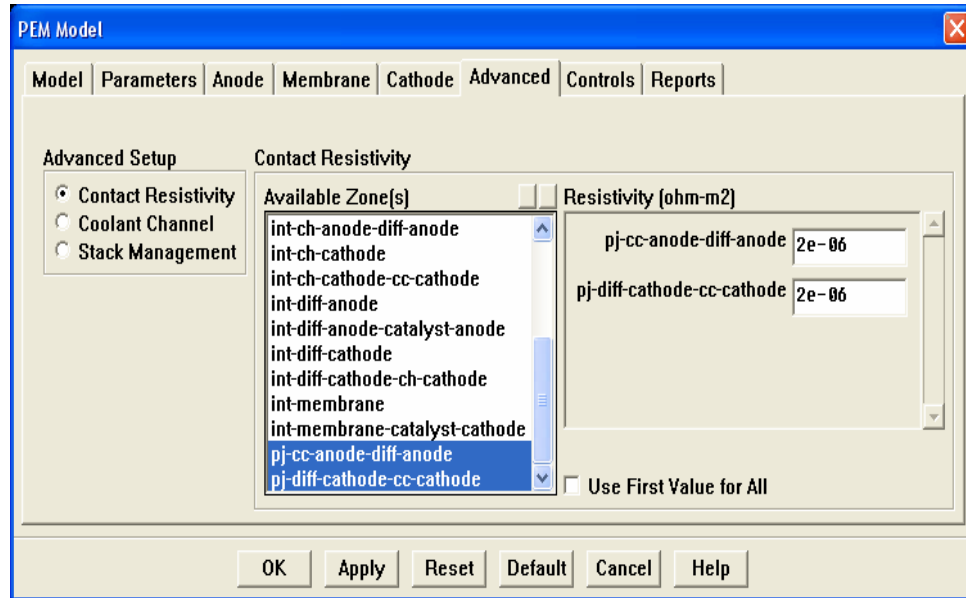
- PEM model panelinde cathode çizelgesi seçilir.
- Cathode zone type altında catalyst layer seçilir
- Zone listesinden ilgili bir alan seçilir. Eğer bir yakıt hücresi yığını modelliyorsanız, bir grup olarak bir özel tipin bütün bölgelerini toplamalısınız.
- İlgili drop-down listesinden bir katı materyal 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.

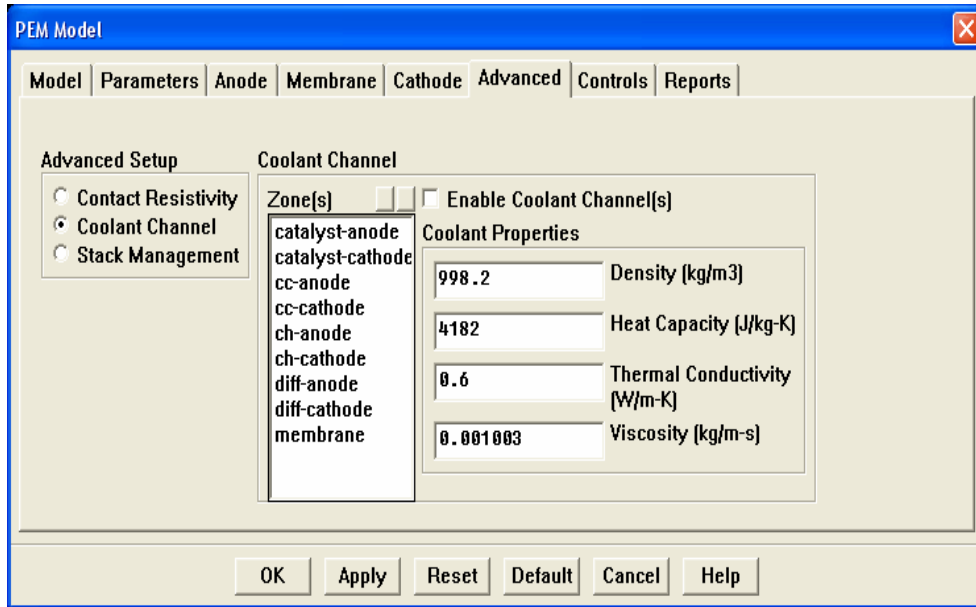


Şekil 3.11. Temas dirençliliği için PEM model panelinin ileri çizelgesi.

- 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.

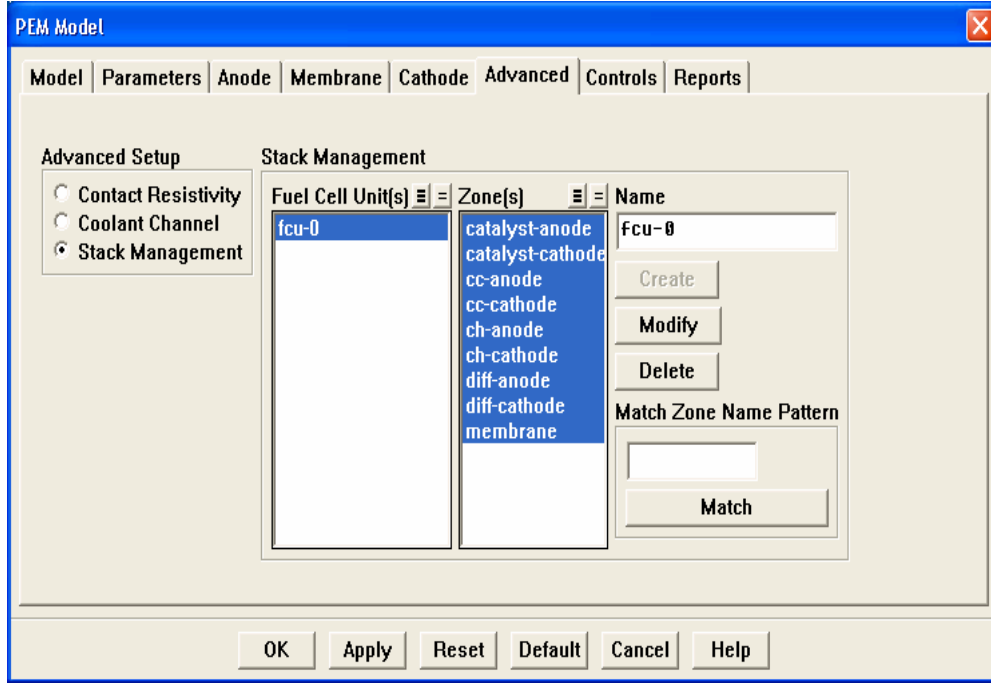


Şekil 3.12. Soğutucu kanal için PEM modelin advanced çizelgesi.

- 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 ayarlama ihtiyacı 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

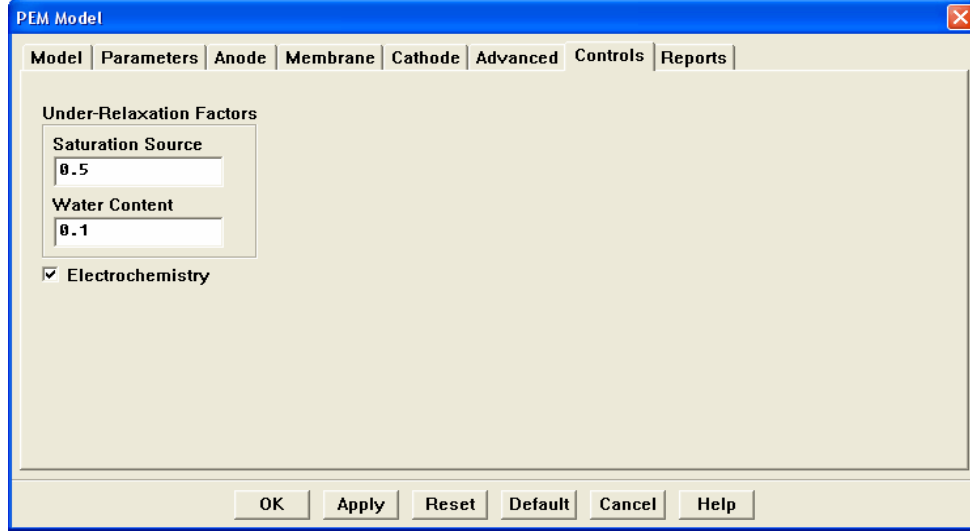
- Create butonuna tıklayarak yeni bir yakıt hücresi ünitesi oluşturulur. Yeni yakıt hücresi ünitesi varsayılan bir isimle birlikte fuel cell unit'in altında listelenmiş olur.
- Yakıt hücresi listesinde seçilmiş olan bir yakıt hücresi ünitesini kaldırabilir veya delete butonunu kullanarak silebilirsiniz.

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



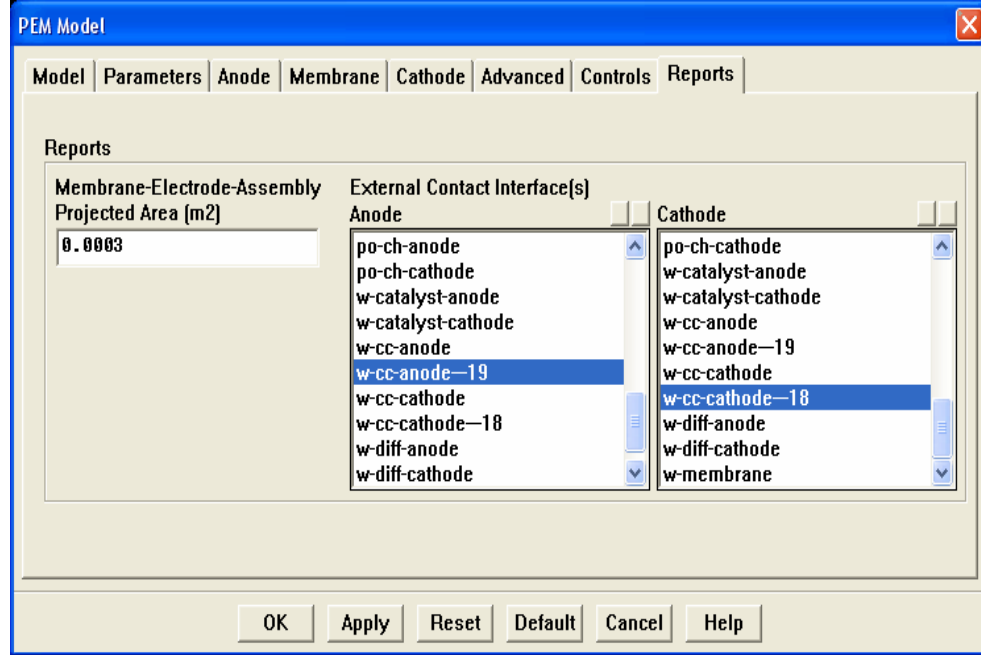
Şekil 3.14. PEM model panelin kontrol çizelgesi.

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/m^2 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 multigrad 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 ($kg/m^3 \cdot s$)
UDM 8	Ozmotik Sürüklenme Katsayısı
UDM 9	Sıvı Su Aktivitesi
UDM 10	Membran Su İçeriği
UDM 11	İyonik İletkenlik ($1/ohm \cdot m$)
UDM 12	Geri Difüzyon Kütle Kaynağı ($kg/m^3 \cdot s$)
UDM 13	Akım Transferi (A/m^3)
UDM 14	Ozmotik Sürüklenme Kaynağı ($kg/m^3 \cdot s$)

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 tiplerini 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 [60]

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 7 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

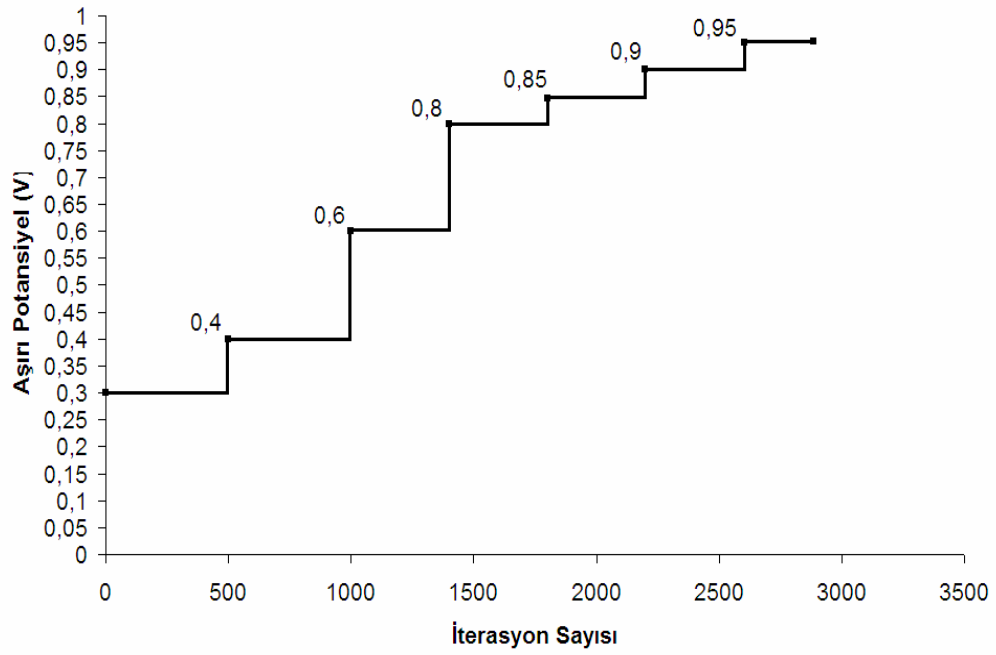
¹ Teorik açık devre voltajının 1,18 V olduğu temel şartlar için hücre voltajı hesaplanmıştır. İşletim şartları değişikçe teorik açık devre voltajı yeniden hesaplanmıştır.

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

EK-4. (Devam) Kutuplaşma eğrilerinin oluşturulması

Her biri 500 iterasyon gerektiren 7 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 voltajı, 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 [64].

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 [65]. 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 [66]. 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 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

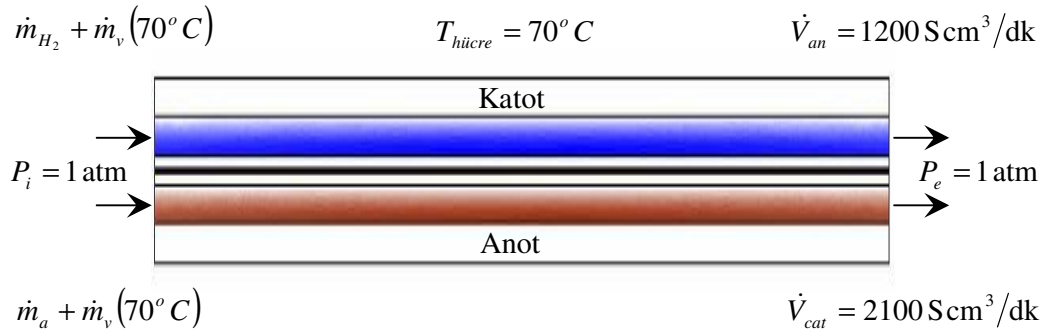
Çizelge 5.4. Hücre sıcaklığı ile açık devre voltajının değişimi

T_{Hücre} [°C]	OCV [V]
50	1.2021
60	1.1934
70	1.1847
80	1.1826

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)

$\dot{V} = 2100 \text{ S} \cdot \text{cm}^3 dk^{-1}$ 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. 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 $\dot{m}_a = 3,0220 \times 10^{-5} \text{ kg}_a/s$ olarak hesaplanır. Nem oranı tanımı, $\dot{m}_v = W \dot{m}_a$ kullanılarak katot girişindeki su buharının kütleli debisi, $\dot{m}_v = 0,2719 \times 10^{-5} \text{ kg}_v/s$ 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

içerdiği kabul edilirse, katot girişindeki O₂ ve N₂ 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 $\dot{m}_{O_2} = 0,7008$ kg_{O₂}/s ve $\dot{m}_{N_2} = 2,3072$ kg_{N₂}/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 $\dot{m}_{cat} = 3,2939 \times 10^{-5}$ kg/s olarak hesaplanır. Katot girişindeki nemli hava karışımını oluşturan O₂, N₂ ve H₂O 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.

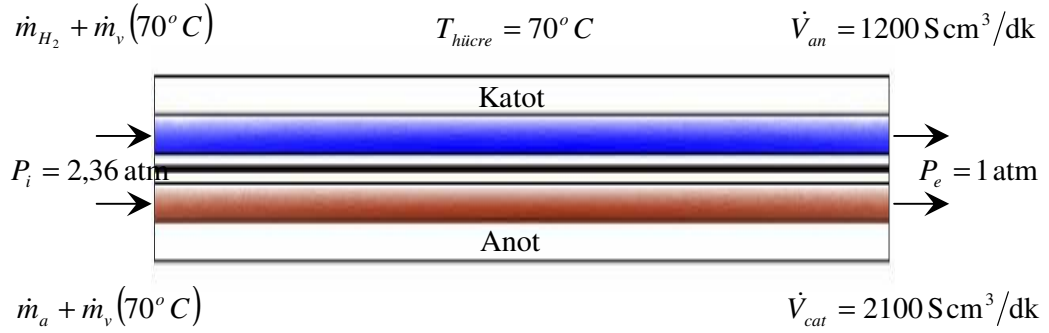
$$y_{O_2} = \dot{m}_{O_2} / \dot{m}_{cat} \quad (6.18)$$

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

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

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 basıncındaki 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’dan 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.

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

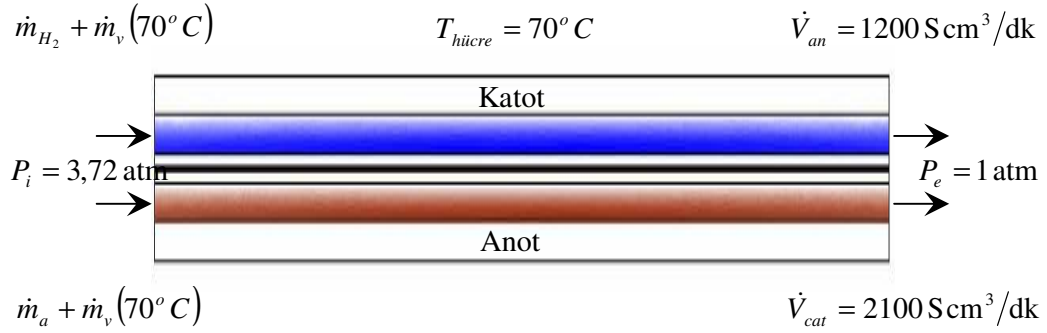
Katot girişindeki kuru havanın kısmi basıncı, Eş.6.4 kullanılarak $P_a = 207,94 \text{ kPa}$ olarak bulunur. Özgül hacim tanımından, $v_a = V/m_a$ ve ideal gaz eşitliğinden faydalananarak özgül hacim için $v_a = R_a T / P_a$ eşitliği bulunur. Bu eşitlik kullanılarak kuru havanın özgül hacmi, $v_a = 0,4736 \text{ m}^3 / \text{kg}_a$ 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 $\dot{m}_a = 3,1314 \times 10^{-5} \text{ kg}_a / \text{s}$ 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 $\dot{N}_v = 0,0162 \times 10^{-5}$ kmol/s ve $\dot{N}_a = 0,1081 \times 10^{-5}$ 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 $\dot{N}_{O_2} = 0,0227 \times 10^{-5}$ kmol/s ve $\dot{N}_{N_2} = 0,0854 \times 10^{-5}$ kmol/s olarak hesaplanır. Molar debiden tekrar kütleli debiye geçmek için Eş.6.13 ve Eş.6.15 kullanılarak $\dot{m}_{O_2} = 0,7267$ kg $_{O_2}$ /s ve $\dot{m}_{N_2} = 2,3906$ kg $_{N_2}$ /s olarak hesaplanır. Katot kısmındaki toplam kütleli debi, Eş.6.17 kullanılarak $\dot{m}_{cat} = 3,4236 \times 10^{-5}$ 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 basıncındaki 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)

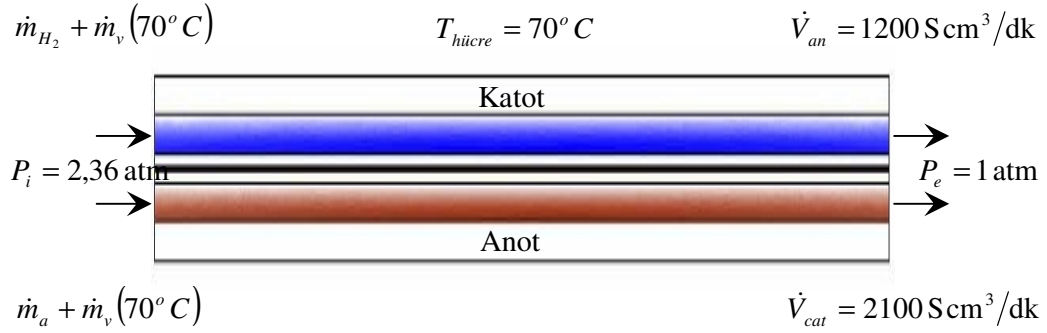
$\dot{V} = 2100 \text{ S} \cdot \text{cm}^3 \text{dk}^{-1}$ Standart durumdaki hacimsel debinin m-s cinsinden değeri $\dot{V} = 3,5 \times 10^{-5} \text{ S} \cdot \text{m}^3 \text{s}^{-1}$ olarak hesaplanır. Standart durumdan giriş basıncı olan 3,72 atmosfer değerine karşılık gelen hacimsel debiyi bulmak 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, $P_v = 31,19 \text{ kPa}$ olarak bulunur. Su buharının kısmi basıncı hesaplandıktan sonra, nem oranı $W = 0,0561 \text{ kg}_v/\text{kg}_a$ olarak elde edilir. Katot girişindeki kuru havanın kısmi basıncı, $P_a = 345,74 \text{ kPa}$ olarak bulunur. Kuru havanın özgül hacmi, $v_a = 0,2849 \text{ m}^3/\text{kg}_a$ olarak hesaplanır. Katot girişindeki kuru havanın kütleli debisi, toplam hacimsel debi ve kütleli debi ile hacimsel debi arasındaki bağıntı, kullanılarak $\dot{m}_a = 3,3030 \times 10^{-5} \text{ kg}_a/\text{s}$ olarak hesaplanır. Nem oranı tanımı, $\dot{m}_v = W \dot{m}_a$ kullanılarak katot girişindeki su buharının kütleli debisi, $\dot{m}_v = 0,1853 \times 10^{-5} \text{ kg}_v/\text{s}$ 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, $\dot{N}_v = 0,0103 \times 10^{-5} \text{ kmol/s}$ ve $\dot{N}_a = 0,1140 \times 10^{-5} \text{ kmol/s}$ 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 $\dot{N}_{\text{O}_2} = 0,0240 \times 10^{-5} \text{ kmol/s}$ ve $\dot{N}_{\text{N}_2} = 0,0901 \times 10^{-5} \text{ kmol/s}$ olarak hesaplanır. Molar debiden tekrar kütleli debiye dönüştürülerek $\dot{m}_{\text{O}_2} = 0,7664 \times 10^{-5} \text{ kg}_{\text{O}_2}/\text{s}$ ve $\dot{m}_{\text{N}_2} = 2,5217 \times 10^{-5} \text{ kg}_{\text{N}_2}/\text{s}$ olarak hesaplanır. Katot kısmındaki toplam kütleli debi, $\dot{m}_{\text{cat}} = 3,4883 \times 10^{-5} \text{ kg/s}$ olarak hesaplanır. Katot girişindeki nemli hava karışımını oluşturan O_2 , N_2 ve H_2O bileşenlerinin kütle kesirleri, $y_{\text{O}_2} = 0,2197$, $y_{\text{N}_2} = 0,7228$ ve $y_v = 0,0531$ olarak hesaplanır.

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

Gurup 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 denklemde 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)

$\dot{V} = 2100 \text{ S} \cdot \text{cm}^3 \text{ dk}^{-1}$ 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 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 $\dot{V} = 1,1666 \times 10^{-5} \text{ S} \cdot \text{m}^3 \text{ s}^{-1}$ 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.

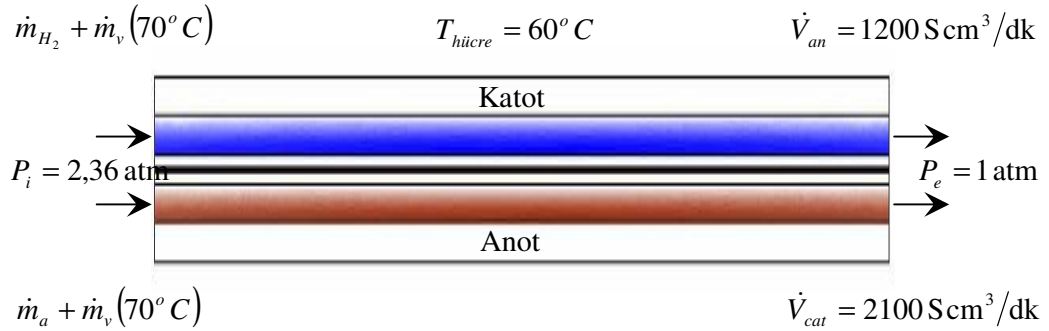
EK-6 (Devam) Karşılaştırma durumları için giriş-çıkış şartlarının belirlenmesi

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, $P_v = 31,19 \text{ kPa}$ olarak bulunur. Su buharının kısmi basıncı hesaplandıktan sonra, $W = 0,622 P_v / (P - P_v)$ formülü kullanılarak nem oranı $W = 0,07122 \text{ kg}_v / \text{kg}_a$ olarak elde edilir. Kuru havanın kısmi basıncı, $P_a = P - P_v$ formülü kullanılarak $P_a = 272,79 \text{ kPa}$ olarak bulunur. Özgül hacim tanımından, $v_a = V / m_a$ ve ideal gaz denkleminde faydalanarak özgül hacim için $v_a = R_a T / P_a$ formülü bulunur. Bu formül kullanılarak kuru havanın özgül hacmi, $v_a = 0,3610 \text{ m}^3 / \text{kg}_a$ 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 $\dot{m}_a = 3,2315 \times 10^{-5} \text{ kg}_a / \text{s}$ olarak hesaplanır. Nem oranı tanımı, $\dot{m}_v = W \dot{m}_a$ kullanılarak katot girişindeki su buharının kütleli debisi, $\dot{m}_v = 0,2298 \times 10^{-5} \text{ kg}_v / \text{s}$ 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, $\dot{N}_v = \dot{m}_v / MW_v$ ve $\dot{N}_a = \dot{m}_a / MW_a$ formülleri kullanılarak $\dot{N}_v = 0,0127 \times 10^{-5} \text{ kmol/s}$ ve $\dot{N}_a = 0,1116 \times 10^{-5} \text{ kmol/s}$ 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 $\dot{N}_{\text{O}_2} = 0,0234 \times 10^{-5} \text{ kmol/s}$ ve $\dot{N}_{\text{N}_2} = 0,0881 \times 10^{-5} \text{ kmol/s}$ olarak hesaplanır. Nolar debiden tekrar kütleli debiye geçmek için $\dot{m}_{\text{O}_2} = \dot{N}_{\text{O}_2} MW_{\text{O}_2}$ ve $\dot{m}_{\text{N}_2} = \dot{N}_{\text{N}_2} MW_{\text{N}_2}$ formülleri kullanılarak $\dot{m}_{\text{O}_2} = 0,7498 \text{ kg}_{\text{O}_2} / \text{s}$ ve $\dot{m}_{\text{N}_2} = 2,4674 \text{ kg}_{\text{N}_2} / \text{s}$ olarak hesaplanır. Katot kısmındaki toplam kütleli debi, $\dot{m}_{cat} = \dot{m}_a + \dot{m}_v$ formülü kullanılarak $\dot{m}_{cat} = 3,4613 \times 10^{-5} \text{ kg/s}$ 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)

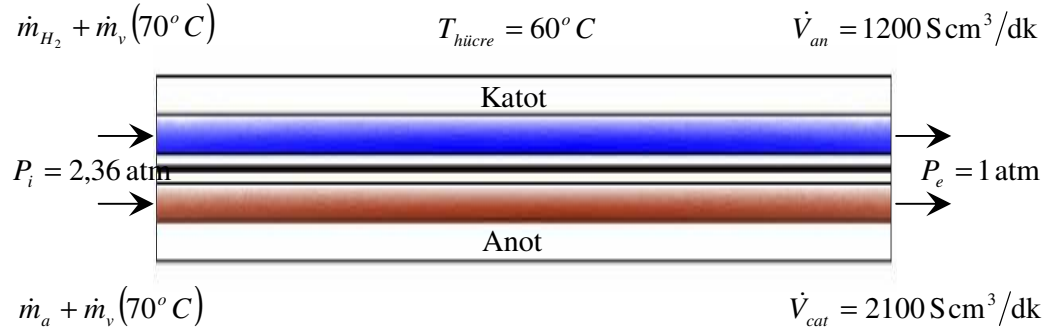
Grup II- Durum 1'den farkı sadece hücre sıcaklığının değişmiş olmasıdır. Hücre sıcaklığındaki değişim hücre girişindeki kütle kesirlerini ve toplam kütleli debi miktarını etkilemez. Dolayısıyla, GII-D1 değerlerinin aynısı alınır. Yani; $y_{H_2} = 0,4946$, $y_v = 0,5054$ ve $\dot{m}_{an} = 0,2598 \times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

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)

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 $\dot{m}_{an} = 0,2598 \times 10^{-5} \text{ kg/s}$.

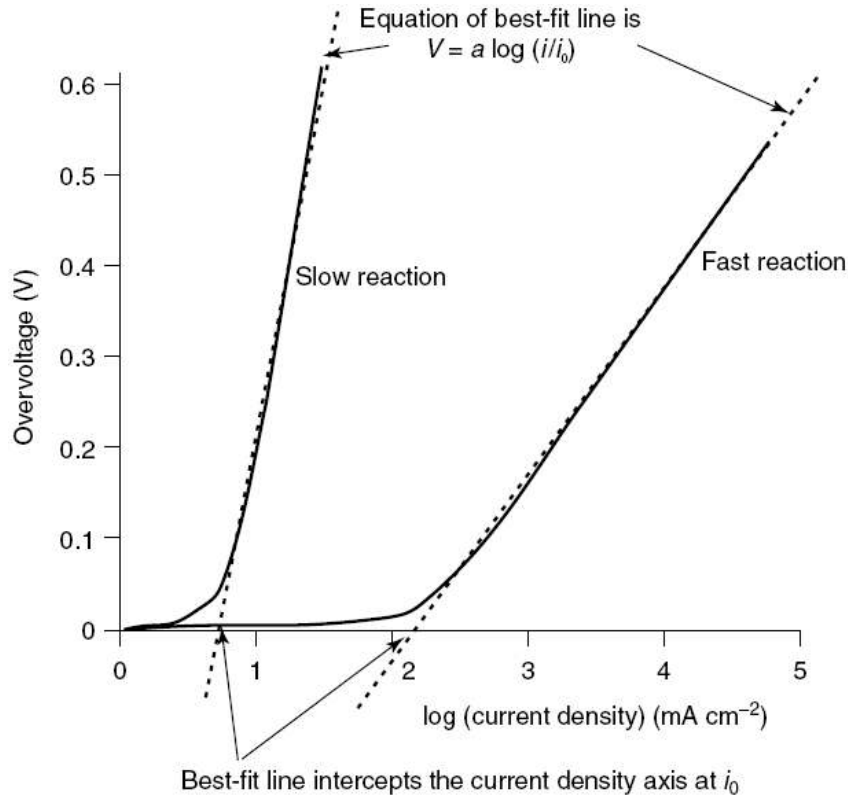
Katot tarafı giriş (Hava + Su buharı)

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-7 Aktivasyon kayıpları hesabı

AKTİVASYON KAYIPLARI [67]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 denkleminde 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. Bunun yanı sıra, hücre içerisindeki en büyük kayıp, katot arayüzeyindeki elektronların transferinden kaynaklanıyorsa, bu iki olayın hücre voltajı üzerine olan etkisi aynı olur.

İç elektrik akımları ve yakıt ters-akışı, temel olarak birbirine benzemesine ve yakıt ters-akışı en önemli kayıp olmasına rağmen, sadece iç elektrik akımı dikkate alınırsa bu iki olayın hücre voltajı üzerine olan etkisi daha kolay anlaşılır.

EK-7 (Devam) Aktivasyon kayıpları hesabı

Sadece birkaç mAcm^{-2} 'lik akım yoğunluğuna sebep olan yakıt ve elektronların akışı az olur. Enerji kaybı cinsinden bu tersinmezlik çok önemli değildir. Bununla birlikte, düşük sıcaklıkta çalışan yakıt hücrelerinde, bu olay, açık devrede çok önemli bir voltaj düşüşüne sebep olmaz. Yakıt hücrelerini kullananlar, bir hücrenin işletim voltajının teorik “kayıpsız” tersinir voltajdan daha az olduğunu bilirler. Bununla birlikte, açık devrede, iş yapılmadığı zaman, işletim voltajı ile teorik tersinir volta aynı olur. PEM hücreleri gibi düşük sıcaklıklı hücrelerle, ortam basıncında hava ile çalışırken, voltaj, yaklaşık 1,2 V civarında seyreden teorik tersinir voltajdan en az 0,2 V düşük olur.

Sadece katot üzerinde “aktivasyon aşırı-voltajının sebep olduğu kayıpları olan bir yakıt hücresini ele alırsak, hücre voltajı aşağıdaki eşitlik ile hesaplanır:

$$V = E - A \ln \left(\frac{i}{i_o} \right) \quad (7.8)$$

Normal basınçta, yaklaşık 30°C sıcaklıkta hava ile çalışan bir PEM yakıt hücresi için Eş. 7.8'deki sabitlerin aldığı değerler; $E = 1,2 \text{ V}$; $A = 0,06 \text{ V}$ ve $i_o = 0,04 \text{ mAcm}^{-2}$ olarak alınabilir.

Düşük akım yoğunluğunda elde edilen voltaj değerleri tablosunu kullanarak, Çizelge 7.2'deki değerleri elde ederiz.

EK-7 (Devam) Aktivasyon kayıpları hesabı

Çizelge 7.2. Düşük akım yoğunluklarındaki hücre voltajları

Akım yoğunluğu, i_o (mA cm ⁻²)	Voltaj (V)
0	1,2
0,25	1,05
0,5	1,01
1,0	0,97
2,0	0,92
3,0	0,90
4,0	0,88
5,0	0,87
6,0	0,86
7,0	0,85
8,0	0,84
9,0	0,83

Hücre açık devre olsa bile, iç akım yoğunluğundan dolayı, hücre akım yoğunluğu sıfır olmaz. Örnek olarak, iç akım yoğunluğu 1 mA cm⁻² olduğunda, açık devre voltajı, teorik açık devre voltajı (OCV)'ndan 0,2 V veya (20%) daha yüksek, 0,97 V olur. Elektrolit neminin değiştirilmesi ile yakıt ters-akışındaki ve/veya iç elektrik akımında elde edilen ufak bir değişim, açık devre voltajında büyük değişimlerin oluşmasına sebep olabilir.

Ammetre devre içerisine yerleştirilemediği için yakıt ters-akışının ve iç elektrik akımının ölçülmesi kolay değildir. Yakıt ters-akışını ve iç elektrik akımını ölçmenin bir yolu, açık devrede, reaktan gazların tüketim miktarını ölçmektir. Tek hücreler için ve küçük yığınlar için, normal gaz akış-ölçerler kullanarak, çok düşük miktarlardaki gaz kullanım debileri ölçülemez. Bu gibi durumlarda, kabarcık sayaçlar, gaz şiringaları veya benzer teknikler kullanılmalıdır. Örnek olarak, normal sıcaklık ve basınçta, 10 cm² alana sahip küçük bir PEM hücresinin açık devre hidrojen tüketim debisi, 0,0034 cm³s⁻¹ olabilir. Avagadro kanunundan, standart sıcaklık ve basınçta, herhangi bir gazın 1 molünün hacmi 2,43x10⁴ cm³'tür. Dolayısıyla, gaz kullanım hacimsel debisi 1,4x10⁻⁷ mol s⁻¹ olur.

EK-7 (Devam) Aktivasyon kayıpları hesabı

Tek hücre içerisindeki hidrojen yakıtının hacimsel debisi ile akım arasında aşağıdaki bağıntı mevcuttur.

$$I = 2F\dot{V} \quad (7.9)$$

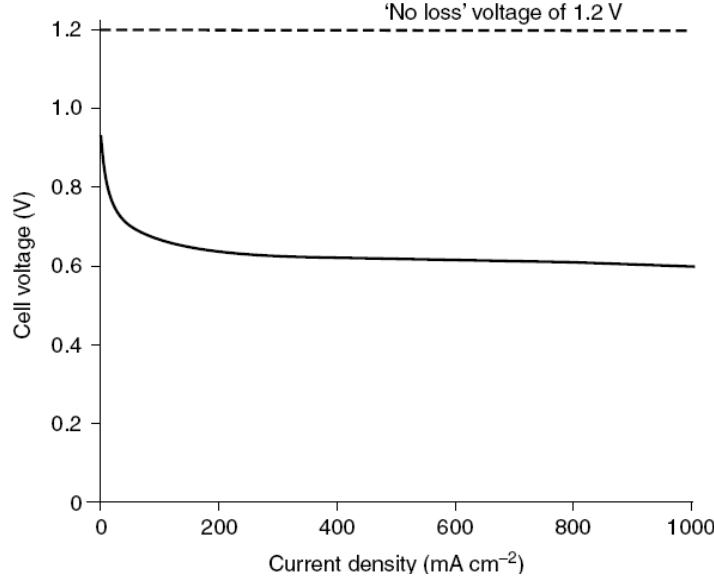
Bu denklemde geçen $\dot{V}$ [mole s⁻¹] hacimsel gaz debisidir. Bu durumda, elektrik akımına karşılık gelen kayıplar, $I = 2(9,65 \times 10^4)(1,40 \times 10^{-7}) = 27$ mA. Hücre alanı 10 cm²'dir. Bu ise 2,7 mA cm⁻² akım yoğunluğuna karşılık gelmektedir. Bu akım yoğunluğu, yakıt karşı-akışı ve gerçek iç akım yoğunluğunun sebep olduğu yakıt kaybına denk toplam akım yoğunluğunu verir.

Bu iç akım yoğunluğunun değeri i_n ile gösterilirse, hücre voltajı için kullanılan eşitlik aşağıdaki hali alır,

$$V = E - A \ln \left(\frac{i + i_n}{i_o} \right) \quad (7.10)$$

Düşük sıcaklıkta çalışan bir hücrenin değerlerini ($E = 1,2$ V, $A = 0,06$ V, $i_o = 0,04$ mAcm⁻²) ve iç akım yoğunluğunun değerini, $i_n = 3$ mA cm⁻² kullanarak voltaja karşılık akım yoğunluğunu veren grafiği elde ederiz.

EK-7 (Devam) Aktivasyon kayıpları hesabı



Şekil 7.2 Yakıt karşı-akışı/iç elektrik akımı ile aktivasyon kayıplarını dikkate alarak modellenen yakıt hücre voltajı

Değişim akım yoğunluğu, i_0 değerinin yüksek olduğu, yüksek sıcaklıkta çalışan hücreler için, bu iç elektrik akımının önemi daha azdır. Özetlenecek olursa, iç elektrik akımı ve/veya bir yakıt hücresinin elektroliti içerisinde geçen hidrojen difüzyonunun, işletim verimi açısından çok büyük önemi yoktur. Bununla birlikte, düşük sıcaklıkta çalışan hücrelerde, bu parametrelerin açık devre voltajı üzerinde kayda değer etkisi vardır.

Bu çalışmada ele alınan yakıt hücresinin sahip olduğu parametreler Durum I için; $E=1,18V$, $A=0,06 V$, $i_0=0,04 \text{ mA cm}^{-2}$ ve iç akım yoğunluğunun değeri, $i_n=3 \text{ mA cm}^{-2}$ olarak alınabilir. Bu durumda, Eş. (7.11) kullanılarak, gerçek açık devre voltajı, $V=0,92 V$ olarak hesaplanır.

EK-8 Program raporları

RAPORLAR

FLUENT

Version: 3d, dp, pbns, spe, lam (3d, double precision, pressure-based, species, laminar)

Release: 6.3.26

Title:

Models

Model	Settings

Space	3D
Time	Steady
Viscous	Laminar
Heat Transfer	Enabled
Solidification and Melting	Disabled
Radiation	None
Species Transport	Non-Reacting (4 species)
Coupled Dispersed Phase	Disabled
Pollutants	Disabled
Pollutants	Disabled
Soot	Disabled

Boundary Conditions

Zones

name	id	type

kk1	2	fluid
kk2	3	fluid
kk3	4	fluid
kk4	5	fluid
kk5	6	fluid
kk6	7	fluid
kk7	8	fluid
kk8	9	fluid
kk9	10	fluid
ak9	11	fluid
ak8	12	fluid
ak7	13	fluid
ak6	14	fluid
ak5	15	fluid
ak4	16	fluid
ak3	17	fluid
ak2	18	fluid
ak1	19	fluid
membran	20	fluid

EK-8 (Devam) Program raporları

kkt	21	fluid
akt	22	fluid
kdt	23	fluid
adt	24	fluid
katot	25	fluid
anot	26	fluid
wall.47-shadow	195	wall
wall.48-shadow	194	wall
wall.49-shadow	193	wall
wall.50-shadow	192	wall
wall.51-shadow	191	wall
wall.52-shadow	190	wall
wall.53-shadow	189	wall
wall.54-shadow	188	wall
wall.55-shadow	187	wall
wall.56-shadow	186	wall
wall.57-shadow	185	wall
wall.58-shadow	184	wall
wall.59-shadow	183	wall
wall.60-shadow	182	wall
wall.61-shadow	181	wall
wall.62-shadow	180	wall
wall.63-shadow	179	wall
wall.64-shadow	178	wall
memu	27	porous-jump
mema	28	porous-jump
wall.124	29	wall
wall.123	30	wall
wall.122	31	wall
wall.121	32	wall
wall.120	33	wall
wall.119	34	wall
wall.118	35	wall
wall.117	36	wall
wall.116	37	wall
wall.115	38	wall
wall.114	39	wall
wall.113	40	wall
porous_jump.111	41	porous-jump
porous_jump.110	42	porous-jump
porous_jump.109	43	porous-jump
porous_jump.108	44	porous-jump
porous_jump.107	45	porous-jump
porous_jump.106	46	porous-jump
porous_jump.105	47	porous-jump
porous_jump.104	48	porous-jump
porous_jump.103	49	porous-jump
porous_jump.102	50	porous-jump
porous_jump.101	51	porous-jump
porous_jump.100	52	porous-jump
porous_jump.99	53	porous-jump
porous_jump.98	54	porous-jump
porous_jump.97	55	porous-jump
porous_jump.96	56	porous-jump

EK-8 (Devam) Program raporları

porous_jump.95	57	porous-jump
porous_jump.94	58	porous-jump
porous_jump.93	59	porous-jump
porous_jump.92	60	porous-jump
porous_jump.91	61	porous-jump
porous_jump.90	62	porous-jump
porous_jump.89	63	porous-jump
porous_jump.87	64	porous-jump
porous_jump.86	65	porous-jump
porous_jump.85	66	porous-jump
porous_jump.84	67	porous-jump
porous_jump.83	68	porous-jump
porous_jump.82	69	porous-jump
porous_jump.81	70	porous-jump
porous_jump.80	71	porous-jump
porous_jump.79	72	porous-jump
porous_jump.78	73	porous-jump
porous_jump.77	74	porous-jump
porous_jump.76	75	porous-jump
porous_jump.75	76	porous-jump
porous_jump.74	77	porous-jump
porous_jump.73	78	porous-jump
wall.72	79	wall
wall.71	80	wall
wall.70	81	wall
wall.69	82	wall
wall.68	83	wall
wall.67	84	wall
wall.66	85	wall
wall.65	86	wall
wall.64	87	wall
wall.63	88	wall
wall.62	89	wall
wall.61	90	wall
wall.60	91	wall
wall.59	92	wall
wall.58	93	wall
wall.57	94	wall
wall.56	95	wall
wall.55	96	wall
wall.54	97	wall
wall.53	98	wall
wall.52	99	wall
wall.51	100	wall
wall.50	101	wall
wall.49	102	wall
wall.48	103	wall
wall.47	104	wall
anotustduvar	105	wall
katotaltduvar	106	wall
wall.44	107	wall
wall.43	108	wall
wall.42	109	wall
wall.41	110	wall

EK-8 (Devam) Program raporları

wall.40	111	wall
wall.39	112	wall
wall.38	113	wall
wall.37	114	wall
ac4	115	pressure-outlet
ac3	116	pressure-outlet
ac2	117	pressure-outlet
ac1	118	pressure-outlet
ac5	119	pressure-outlet
ac6	120	pressure-outlet
ac7	121	pressure-outlet
ac8	122	pressure-outlet
ac9	123	pressure-outlet
kc9	124	pressure-outlet
kc8	125	pressure-outlet
kc7	126	pressure-outlet
kc6	127	pressure-outlet
kc5	128	pressure-outlet
kc4	129	pressure-outlet
kc3	130	pressure-outlet
kc2	131	pressure-outlet
kc1	132	pressure-outlet
ag9	133	mass-flow-inlet
ag8	134	mass-flow-inlet
ag7	135	mass-flow-inlet
ag6	136	mass-flow-inlet
ag5	137	mass-flow-inlet
ag4	138	mass-flow-inlet
ag3	139	mass-flow-inlet
ag2	140	mass-flow-inlet
ag1	141	mass-flow-inlet
kg9	142	mass-flow-inlet
kg8	143	mass-flow-inlet
kg7	144	mass-flow-inlet
kg6	145	mass-flow-inlet
kg5	146	mass-flow-inlet
kg4	147	mass-flow-inlet
kg3	148	mass-flow-inlet
kg2	149	mass-flow-inlet
kg1	150	mass-flow-inlet
default-interior	152	interior
default-interior:001	1	interior
default-interior:151	151	interior
default-interior:153	153	interior
default-interior:154	154	interior
default-interior:155	155	interior
default-interior:156	156	interior
default-interior:157	157	interior
default-interior:158	158	interior
default-interior:159	159	interior
default-interior:160	160	interior
default-interior:161	161	interior
default-interior:162	162	interior
default-interior:163	163	interior

EK-8 (Devam) Program raporları

default-interior:164	164	interior
default-interior:165	165	interior
default-interior:166	166	interior
default-interior:167	167	interior
default-interior:168	168	interior
default-interior:169	169	interior
default-interior:170	170	interior
default-interior:171	171	interior
default-interior:172	172	interior
default-interior:173	173	interior
default-interior:174	174	interior
default-interior:175	175	interior
default-interior:176	176	interior

Solver Controls

Equations

Equation	Solved
Flow	yes
h2	yes
o2	yes
h2o	yes
Energy	yes
Electric Potential	yes
Protonic Potential	yes
Water Saturation	no
Water Content	yes

Numerics

Numeric	Enabled
Absolute Velocity Formulation	yes

Relaxation

Variable	Relaxation Factor
Pressure	0.30000001
Density	1
Body Forces	1
Momentum	0.30000001
h2	1
o2	1
h2o	1
Energy	1
Electric Potential	1
Protonic Potential	1
Water Saturation	1
Water Content	1

EK-8 (Devam) Program raporları

Linear Solver

Solver Variable	Termination Type	Residual Criterion	Reduction Tolerance
Pressure	V-Cycle	0.1	
X-Momentum	Flexible	0.1	0.7
Y-Momentum	Flexible	0.1	0.7
Z-Momentum	Flexible	0.1	0.7
h2	Flexible	0.1	0.7
o2	Flexible	0.1	0.7
h2o	Flexible	0.1	0.7
Energy	Flexible	0.1	0.7
Electric Potential	Flexible	0.1	0.7
Protonic Potential	Flexible	0.1	0.7
Water Saturation	Flexible	0.1	0.7
Water Content	Flexible	0.1	0.7

Pressure-Velocity Coupling

Parameter	Value
Type	SIMPLE

Discretization Scheme

Variable	Scheme
Pressure	Standard
Density	First Order Upwind
Momentum	First Order Upwind
h2	First Order Upwind
o2	First Order Upwind
h2o	First Order Upwind
Energy	First Order Upwind
Electric Potential	First Order Upwind
Protonic Potential	First Order Upwind
Water Saturation	First Order Upwind
Water Content	First Order Upwind

Solution Limits

Quantity	Limit
Minimum Absolute Pressure	1
Maximum Absolute Pressure	5e+10
Minimum Temperature	1
Maximum Temperature	5000

Material Properties

Material: (nitrogen . pem-mixture) (fluid)

EK-8 (Devam) Program raporları

Property	Units	Method	Value(s)
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	constant	1040.67
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0242
Viscosity	kg/m-s	constant	1.663e-05
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	28.0134
L-J Characteristic Length	angstrom	constant	3.621
L-J Energy Parameter	k	constant	97.53
Electrical Conductivity	1/ohm-m	constant	1e-16
Speed of Sound	m/s	none	

Material: (water-vapor . pem-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	constant	2014
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0261
Viscosity	kg/m-s	constant	1.34e-05
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	18.01534
L-J Characteristic Length	angstrom	constant	2.605
L-J Energy Parameter	k	constant	572.4
Electrical Conductivity	1/ohm-m	constant	1e-16
Speed of Sound	m/s	none	

Material: (oxygen . pem-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	constant	919.31
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0246
Viscosity	kg/m-s	constant	1.919e-05
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	31.9988
L-J Characteristic Length	angstrom	constant	3.458
L-J Energy Parameter	k	constant	107.4
Electrical Conductivity	1/ohm-m	constant	1e-16
Speed of Sound	m/s	none	

Material: (hydrogen . pem-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	constant	14283
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.1672
Viscosity	kg/m-s	constant	8.411e-06
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	2.01594
L-J Characteristic Length	angstrom	constant	2.92
L-J Energy Parameter	k	constant	38
Electrical Conductivity	1/ohm-m	constant	1e-16
Speed of Sound	m/s	none	

Material: membrane-default (solid)

EK-8 (Devam) Program raporları

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	2000
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	constant	500
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	70
Electrical Conductivity	1/ohm-m	constant	1e-16

Material: catalyst-default (solid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	1240
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	constant	0.22499999
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.23999999
Electrical Conductivity	1/ohm-m	constant	1250

Material: diffplayer-default (solid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	450
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	constant	730
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	20
Electrical Conductivity	1/ohm-m	constant	1250

Material: collector-default (solid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	2100
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	constant	1100
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	20
Electrical Conductivity	1/ohm-m	constant	10000

Material: air (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m3	constant	1.225
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	constant	1006.43
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0242
Viscosity	kg/m-s	constant	1.7894e-05
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	28.966
L-J Characteristic Length	angstrom	constant	3.711
L-J Energy Parameter	k	constant	78.6
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0
Electrical Conductivity	1/ohm-m	constant	1000000
Speed of Sound	m/s	none	

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : ALPAT, Ceren Özge
Uyruğu : T.C.
Doğum tarihi ve yeri : 02.07.1982 Ankara
Medeni hali : Bekar
e-mail : cerenalpat@yahoo.co.uk

Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet tarihi
Lisans	İnönü Üniversitesi Makine Mühendisliği Bölümü	2003

Yabancı Dil

İngilizce