

**KOCAELİ ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**MAKİNE MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**ÇALIŞMA PARAMETRELERİNİN TEK HÜCRELİ PEM YAKIT  
PİLİ PERFORMANSINA ETKİLERİNİN HAD METODU İLE ÜÇ  
BOYUTLU İNCELENMESİ**

**MURAT KILIÇ**

**KOCAELİ 2017**

**KOCAELİ ÜNİVERSİTESİ**  
**FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**


**MAKİNE MÜHENDİSLİĞİ**  
**ANABİLİM DALI**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**ÇALIŞMA PARAMETRELERİNİN TEK HÜCRELİ PEM**  
**YAKIT PİLİ PERFORMANSINA ETKİLERİNİN HAD**  
**METODU İLE ÜÇ BOYUTLU İNCELENMESİ**

**MURAT KILIÇ**

**Doç. Dr. Cenk Çelik**  
**Danışman, Kocaeli Üniversitesi**  
**Doç. Dr. Hüseyin Pehlivan**  
**Jüri Üyesi, Sakarya Üniversitesi**  
**Yard. Doç. Dr. Ramiz Gültekin Akay**  
**Jüri Üyesi, Kocaeli Üniversitesi**



**Tezin Savunulduğu Tarih: 12.12.2017**

## ÖNSÖZ VE TEŞEKKÜR

Geleceğin yeşil enerjisi olarak adlandırılan hidrojen, hiç şüphesiz ki önümüzdeki yıllarda adından sıklıkla bahsettirecektir. Günümüzde ulaşımdan enerji üretimine, enerji depolama teknolojisinden askeri alanlara kadar birçok alanda yer edinmeye başlayan bu teknoloji, gelecek yıllar boyunca insanlığın belki de en önemli enerji kaynağı olarak adlandırılacaktır. Bu kapsamda yürütülen bu tez çalışması, hidrojen teknolojisinin yapı taşı olan yakıt pili teknolojisinin yaygınlaştırılmasına, bilimsel çalışmaların kolaylaştırılmasına şüphesiz birçok katkı sağlayacaktır. Tez çalışmasının yürütüldüğü süre boyunca, yakıt pili teknolojisi alanında yapmış olduğum çalışmaları destekleyen, yol gösteren, önemli katkılarda bulunan danışmanım sayın Doç. Dr. Cenk Çelik'e teşekkürlerimi sunarım.

Türkiye'de yakıt pili teknolojisine gelişmesine katkıda bulunan, tez çalışmamın hazırlanmasına imkân ve zemin hazırlayan kurumum Tübitak MAM Enerji Enstitüsü ve Tübitak MAM yönetimine, Enerji Enstitüsü Yakıt Pili grubundaki çok kıymetli iş arkadaşlarıma, anne ve babama, sevgili eşim Esin'e ve dünyaya gelerek bana en büyük mutluluğu yaşatan kızım Gül Nihan'a vermiş oldukları sonsuz desteklerden ve varlıklarından dolayı teşekkürü bir borç bilirim.

Aralık-2017

Murat KILIÇ

## İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ VE TEŞEKKÜR .....	i
İÇİNDEKİLER .....	ii
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	iv
TABLolar DİZİNİ .....	vii
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ.....	viii
ÖZET .....	x
ABSTRACT .....	xi
GİRİŞ .....	1
1. GENEL BİLGİLER.....	3
1.1. Tez Çalışmasının Amacı .....	3
1.2. Literatür Özeti .....	4
2. YAKIT PİLLERİ.....	12
2.1. Yakıt Pillerinin Tarihçesi .....	13
2.2. Yakıt Pili Türleri .....	18
2.2.1. Alkali yakıt pili.....	18
2.2.2. Erimiş karbonat yakıt pili .....	20
2.2.3. Fosforik asit yakıt pili.....	21
2.2.4. Katı oksit yakıt pili .....	22
2.2.5. Doğrudan metanol yakıt pili.....	23
2.2.6. Polimer elektrolit membranlı yakıt pili .....	25
2.3. Yakıt Pili Uygulamaları .....	28
2.4. Polimer Elektrolit Membranlı Yakıt Pili Bileşenleri.....	29
2.4.1. Polimer elektrolit membran.....	30
2.4.2. Elektrotlar .....	31
2.4.3. Bipolar plakalar .....	31
3. TEMEL REAKSİYONLAR VE YAKIT PİLİ TERMODİNAMİĞİ .....	34
3.1. Sıcaklığın Etkisi .....	37
3.2. Yakıt Pili Verimliliği.....	38
3.3. Basıncın Etkisi.....	38
3.4. Yakıt Pili Kayıpları .....	39
3.4.1. Aktivasyon kayıpları .....	40
3.4.2. Direnç kayıpları .....	40
3.4.3. Konsantrasyon kayıpları .....	41
4. MODELLEME ÇALIŞMALARI.....	42
4.1. Elektrokimyasal Modelleme ve Denklemler.....	42
4.2. Akım ve Kütlenin Korunumu Denklemleri.....	45
4.3. Isı Kaynağı .....	45
4.4. Sıvı Su Oluşumu, Taşınımı ve Etkileri.....	46
4.5. Modellemede Kullanılan Bazı Katsayılar ve Özellikleri .....	47
4.5.1. Gaz fazındaki türlerin difüzyonu.....	47
4.5.2. Membran iyonik iletkenliği .....	48
4.5.3. Ozmotik sürüklenme katsayısı .....	48
4.5.4. Geri difüzyon akısı .....	48

4.5.5. Membran su difüzyonu.....	49
4.5.6. Su içeriği.....	49
4.5.7. Su buhar basıncı .....	49
4.5.8. Yoğuşma basıncı .....	49
4.6. Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği Modellemesi .....	50
4.6.1. Modelleme kabulleri ve kullanılan sabitler .....	51
4.6.2. Geometrik model oluşturma .....	53
4.6.3. Ağ yapısı ve sınır şartlarının oluşturulması.....	58
5. PARAMETRİK ANALİZLER.....	71
5.1. Temel Model Analizleri .....	71
5.2. Deneysel Çalışma ve Temel Model Analizinin Doğrulanması.....	76
5.3. Sıcaklığın Etkisi .....	80
5.4. Basıncın Etkisi.....	84
5.5. Nem Miktarı Etkisi.....	86
5.5.1. Anot tarafı nemliliği .....	86
5.5.2. Katot tarafı nemliliği .....	89
5.6. Stokiyometrinin Etkisi.....	94
5.6.1. Anot stokiyometrisi .....	94
5.6.2. Katot stokiyometrisi .....	95
5.7. Deneysel Analizler .....	96
6. SONUÇLAR VE ÖNERİLER .....	100
KAYNAKLAR .....	104
KİŞİSEL YAYINLAR VE ESERLER .....	107
ÖZGEÇMİŞ .....	108

## ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1.	Yakıt pilinin tek aşamalı elektrik üretim prosesi .....	12
Şekil 2.2.	William Grove tarafından 1843 yılında çizilmiş ‘Gaz Pili’ .....	13
Şekil 2.3.	Thomas Bacon ve geliştirmiş olduğu 5 kW yakıt pili .....	14
Şekil 2.4.	Gemini uzay programında kullanılan yakıt pili .....	15
Şekil 2.5.	Apollo programında kullanılan alkali yakıt pili.....	15
Şekil 2.6.	Perry firması tarafından üretilen yakıt pilli denizaltı.....	16
Şekil 2.7.	GreenCar, ilk yakıt pilli araç uygulaması (1993) .....	17
Şekil 2.8.	Yıllara göre yakıt pili üreticisi firmaların hisse senedi artışları.....	17
Şekil 2.9.	Yıllara göre yakıt pili teknolojisinde alınan patent sayısı.....	18
Şekil 2.10.	Alkali yakıt pilinin gösterimi .....	19
Şekil 2.11.	Erimiş karbonat yakıt pilinin gösterimi .....	21
Şekil 2.12.	Fosforik asit yakıt pilinin gösterimi.....	22
Şekil 2.13.	Katı oksit yakıt pilinin gösterimi .....	23
Şekil 2.14.	Doğrudan metanol yakıt pili gösterimi .....	24
Şekil 2.15.	PEM yakıt pilinin gösterimi.....	25
Şekil 2.16.	Toyota Mirai yakıt pilli araç .....	29
Şekil 2.17.	Yakıt pili yığını ve bileşenleri .....	30
Şekil 3.1.	Yakıt hücresinde potansiyel kayıplar ve polarizasyon eğrisi.....	40
Şekil 4.1.	$\emptyset_{sol}$ ve $\emptyset_{mem}$ için sınır şartları .....	43
Şekil 4.2.	Oluşturulan model geometrisi kesiti .....	54
Şekil 4.3.	Oluşturulan üç boyutlu model.....	55
Şekil 4.4.	WB içerisinde açılan Mesh çalışma alanı .....	58
Şekil 4.5.	Sonlu hacimler metodu gösterimi. ....	59
Şekil 4.6.	Otomatik ağ yapısı oluşturma komutu ile oluşturulan yapı .....	60
Şekil 4.7.	Membran ve anot-katot katalizör katmanları kenar çizgisi mesh işlemi.....	61
Şekil 4.8.	Membran ve katalizör katmanlarının ağ yapısı oluşumu için hazırlanması .....	61
Şekil 4.9.	GDL hacimlerinin ağ yapısının oluşturulması .....	62
Şekil 4.10.	Membran ve katalizör katmanlarının ağ yapısı.....	62
Şekil 4.11.	Tüm hücreye ait ağ yapısının önden görünüşü .....	63
Şekil 4.12.	Hücreye ait ağ yapısının yandan görüntüsü .....	64
Şekil 4.13.	Hücreye ait ağ yapısının perspektif görüntüsü.....	64
Şekil 4.14.	Ağ yapısının kesit görünümü .....	65
Şekil 4.15.	PEMFC modülünün aktifleştirilmesi için gerekli kod .....	66
Şekil 4.16.	Fluent PEMFC modülü parametre menüsü .....	66
Şekil 4.17.	Fluent PEMFC modülü malzeme seçimi menüsü.....	67
Şekil 4.18.	Kütle-akış girişi sınır şartının oluşturulması.....	68
Şekil 4.19.	Kütle-akış girişi sınır şartına ait parametre sayfası.....	69
Şekil 5.1.	İterasyon ve çözümleme başlangıç ekranı .....	71
Şekil 5.2.	5200 adet iterasyona sahip temel model analizi .....	73
Şekil 5.3.	Çözümleme sırasında işlemci ve bellek kullanımı.....	73
Şekil 5.4.	Temel model polarizasyon ve güç eğrisi .....	74

Şekil 5.5.	Temel model simülasyonunda hücre giriş yüzeyinde akım yoğunluğu kesit grafiği .....	75
Şekil 5.6.	Temel model için hücre girişinden itibaren 10 <sup>3</sup> ar mm ara ile akım yoğunluğu kesitleri .....	75
Şekil 5.7.	Temel model ve %100 katot bağımlılığında modelleme ve deneysel polarizasyon eğrileri .....	77
Şekil 5.8.	Scribner 850e yakıt pili test sistemi .....	77
Şekil 5.9.	Deneysel çalışmalarda kullanılan membran elektrot ünitesi .....	78
Şekil 5.10.	Deneysel çalışmalarda kullanılan tek hücre yakıt pili .....	79
Şekil 5.11.	Hücre çalışma sıcaklığının hücre performansına etkisi (polarizasyon eğrisi) .....	80
Şekil 5.12.	Hücre çalışması sıcaklığının hücre performansına etkisi (güç yoğunluğu eğrisi) .....	81
Şekil 5.13.	Farklı çalışma sıcaklıklarında anot katalizör katmanı ile membran ara yüzündeki sıcaklık dağılımı .....	82
Şekil 5.14.	Farklı çalışma sıcaklıklarında membran su içeriği ile akım yoğunluğu değişimi .....	83
Şekil 5.15.	Farklı sıcaklıklarda Cat_a ile membran arayüzünde proton iletkenliği .....	83
Şekil 5.16.	Farklı basınç koşullarında elde edilen polarizasyon eğrisi .....	84
Şekil 5.17.	Farklı basınç koşullarında elde edilen güç yoğunluğu eğrisi.....	85
Şekil 5.18.	Hücre genelinde farklı basınçlarda oksijen kullanım oranının 0,6 V gerilim değerindeki değişimi .....	86
Şekil 5.19.	Anot tarafı nemliliğinin hücre performansına etkisi (polarizasyon eğrisi) .....	87
Şekil 5.20.	Anot tarafı nemliliğinin hücre performansına etkisi (güç yoğunluğu eğrisi).....	87
Şekil 5.21.	Farklı gerilim ve anot nemlilik oranlarında membran su içeriği eğrileri.....	88
Şekil 5.22.	Katot tarafı nemliliğinin hücre performansına etkisi (polarizasyon eğrisi) .....	89
Şekil 5.23.	Katot tarafı nemliliğinin hücre performansına etkisi (güç yoğunluğu eğrisi) .....	90
Şekil 5.24.	Farklı hücre gerilimi ve katot nemliliklerinde katot GDT üzerinde sıvı su yoğunlaşma aktivitesi.....	91
Şekil 5.25.	Farklı katot nemlilik oranlarında katot katalizör katmanı üzerinde O <sub>2</sub> kütle kesiri.....	92
Şekil 5.26.	0,45V hücre geriliminde, %25 Katot nemlilik oranında katot tarafı GDT üzerindeki su doymunluğu .....	93
Şekil 5.27.	0,45V hücre geriliminde, %100 Katot nemlilik oranında katot tarafı GDT üzerindeki su doymunluğu .....	93
Şekil 5.28.	Farklı anot stokiyometrilerinde hücre performansındaki değişim (polarizasyon eğrisi) .....	95
Şekil 5.29.	Farklı katot stokiyometrilerinde hücre performansındaki değişim (polarizasyon eğrisi) .....	96
Şekil 5.30.	%25 katot bağımlılığında modelleme ve deneysel polarizasyon eğrileri karşılaştırması .....	97
Şekil 5.31.	%50 katot bağımlılığında modelleme ve deneysel polarizasyon eğrileri karşılaştırması .....	97

Şekil 5.32. %75 katot bağıl nemliliğinde modelleme ve deneysel polarizasyon eğrileri karşılaştırması .....	98
Şekil 5.33. Katot tarafı nemliliğinin hücre performansına etkisi (deneysel) .....	99





## TABLULAR DİZİNİ

Tablo 2.1. Yakıt pili türleri arasındaki farklılıklar .....	27
Tablo 3.1. Reaktant ve ürünler için entalpi ve entropi oluşum değerleri (25 °C ve 1 atm basınçta) .....	36
Tablo 3.2. Entalpi, entropi, Gibbs serbest enerjisi ve teorik hücre geriliminin sıcaklık ile değişimi .....	37
Tablo 4.1. Modellemede kullanılan sabit değerler .....	52
Tablo 4.2. Membran fiziksel parametreleri .....	53
Tablo 4.3. Geometrik modele ait boyutlar .....	55
Tablo 4.4. DM uygulamasında hacimlerin ve yüzeylerin isimlendirilmesi .....	56
Tablo 4.5. Modelde oluşturulan hacimlerin faz sınıflandırılması .....	57
Tablo 5.1. Temel modele ait çalışma parametreleri .....	72

## SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

$A_a$	: Aktif alan ( $m^2$ )
$V_{oc}$	: Açık devre gerilimi (V)
$I$	: Akım (Amper)
$\eta_{akt}$	: Aktivasyon kaybı
$RH_{an}$	: Anot besleme nemliliği
$\alpha_a$	: Anot transfer katsayısı
$\gamma$	: Bağımlı konsantrasyon üsteli
$P$	: Basınç veya kısmi basınç (Pa)
$i_0$	: Değişim akım yoğunluğu ( $A/m^2$ )
$D_i$	: Difüzyon katsayısı ( $m^2/s$ )
$\Omega$	: Direnç (ohm)
$\eta_{ohm}$	: Direnç kayıpları
$\emptyset$	: Elektrik potansiyeli
$E$	: Elektrik potansiyeli (V)
$W$	: Elektriksel iş (J/mol)
$\sigma$	: Yüzey gerilimi ( $N/m^2$ )
$n$	: Elektron sayısı
$\Delta H$	: Entalpi değişimi
$\Delta S$	: Entropi değişimi
$F$	: Faraday sabiti (C/kmol)
$V$	: Gerilim (Volt)
$\Delta G$	: Gibbs serbest enerji değişimi
$D_h$	: Hidrojen referans difüzyonu
$R$	: İdeal gaz sabiti veya hacimsel transfer akımı ( $A/m^3$ )
$\emptyset_{sol}$	: Katı faz elektrik potansiyeli (Volt)
$\sigma_{sol}$	: Katı faz elektriksel iletkenlik (1/ohm-m)
$R_{sol}$	: Katı faz hacimsel transfer akımı ( $A/m^3$ )
$RH_c$	: Katot besleme nemliliği
$S$	: Kaynak terimi
$\alpha_c$	: Katot transfer katsayısı
$\varepsilon$	: Kuru gözeneklilik
$[\cdot], [\cdot]_{ref}$	: Lokal tür konsantrasyonu ( $kgmol/m^3$ )
$\emptyset_{mem}$	: Membran elektrik potansiyeli (Volt)
$R_{mem}$	: Membran fazında transfer akımı ( $A/m^3$ )
$\sigma_{mem}$	: Membran iyonik iletkenliği (S/m)
$c_{Pmem}$	: Membran özgül ısısı (j/kg-K)
$\rho_m$	: Membran yoğunluğu ( $kg/m^3$ )
$mS$	: Mili-siemens
$V_m$	: Molar hacim ( $m^3/mol$ )
$M$	: Molekül ağırlığı (kg/kmol)
$D_o$	: Oksijen referans difüzyonu
$H_f$	: Oluşum ısısı (kJ/mol)

$\eta$	: Potansiyel kaybı (V)
$j_0^{\text{ref}}$	: Referans akım yoğunluğu ( $\text{A}/\text{m}^2$ )
$c_{\text{ref}}$	: Referans konsantrasyonu
T	: Sıcaklık (K)
K	: Sıcaklık birimi (Kelvin)
$\zeta$	: Spesifik aktif alan ( $1/\text{m}$ )
$\alpha$	: Su aktivitesi
$h_l$	: Su buharlaşması sonucu entalpi değişimi
s	: Su doygunluğu
$D_w$	: Su referans difüzyonu
$\lambda$	: Su oranı
$r_w$	: Su yoğuşma oranı
$\eta_{\text{th}}$	: Yakıt pili teorik verimi
$c_r$	: Yoğuşma oranı katsayısı ( $1/\text{s}$ )
q	: Yük (Coulombs/mol)

### Kısaltmalar

AYP	: Alkali yakıt pilleri
ABD	: Amerika Birleşik Devletleri
CPU	: Central process unit (Merkezi işlem birimi, işlemci)
CFD	: Computational fluid dynamics (Hesaplamalı akışkanlar dinamiği)
CNC	: Computer numerical control (Bilgisayar sayımlı yönetim)
DOE	: Department of Energy (Amerikan Enerji Bakanlığı)
DC	: Direct current (Doğru akım)
DM	: Desing Modeler (Tasarım modelleyici)
DMYP	: Doğrudan metanol yakıt pilleri
EKYP	: Erimiş karbonat yakıt pilleri
FAYP	: Fosforik asit yakıt pilleri
GDL	: Gas diffusion layer (Gaz difüzyon tabakası)
HAD	: Hesaplamalı akışkanlar dinamiği
KOYP	: Katı oksit yakıt pilleri
MAM	: Marmara Araştırma Merkezi
MEÜ	: Membran elektrot ünitesi
NASA	: National Aeronautics and Space Administration (Amerikan Ulusal Havacılık ve Uzay Dairesi)
PBI	: Polibenzimidazol
PEM	: Proton exchange membrane (Proton değişim membranı)
PEMFC	: Proton exchange membrane fuel cell (PEM yakıt pili)
SO	: Stokiyometrik oran
TÜBİTAK	: Türkiye Bilimsel ve Teknolojik Araştırma Kurumu
WB	: Workbench (Çalışma alanı)

# ÇALIŞMA PARAMETRELERİNİN TEK HÜCRELİ PEM YAKIT PİLİ PERFORMANSINA ETKİLERİNİN HAD METODU İLE ÜÇ BOYUTLU İNCELENMESİ

## ÖZET

Bu tez çalışmasında, PEM yakıt pilleri hakkında genel bilgiler verilmiş ve temel yakıt pili denklemleri açıklanmıştır. Simülasyon çalışmaları kapsamında, izotermal olmayan, üç boyutlu, yatışkın durumda, iki fazlı ve tek kanallı PEM yakıt pili modeli geliştirilmiştir. Geliştirilen modele ait HAD simülasyonları, Ansys Fluent yazılımı kullanılarak sonlu hacimler yöntemi ile çözdürülmüştür. Geliştirilen model, enerji, momentum, kütle korunumu, elektrokimyasal reaksiyonlar ve su taşınım olaylarını incelemiştir.

Parametrik analizler optimum hücre çalışma koşullarının belirlenmesi için gerçekleştirilmiştir. Sıcaklık, basınç, anot ve katot bağıl nemlilikleri ve stokiyometrik oranlar gibi parametreler, değişen hücre gerilimlerine göre incelenmiştir. Elde edilen verilere göre her bir parametre için polarizasyon ve güç yoğunluğu eğrileri oluşturulmuştur. Elde edilen karşılaştırmalı veriler ile optimum hücre çalışma koşulları belirlenmiştir. Modelleme sonuçları deneysel çalışmalar ile doğrulanarak oluşturulan modelin geçerliliği ispatlanmıştır.

**Anahtar kelimeler:** Ansys Fluent, HAD, Modelleme, Parametrik Analiz, PEM Yakıt pili.

# **THREE-DIMENSIONAL INVESTIGATION OF EFFECT OF WORKING PARAMETERS ON SINGLE PEM FUEL CELL PERFORMANCE BY CFD METHOD**

## **ABSTRACT**

In this thesis study, general information about the fuel cell is given and the basic fuel cell equations are explained. In the context of simulation studies, a two-phase, three-dimensional and single-channel fuel cell model has been developed in non-isothermal and steady state situation. CFD simulations of the developed model were solved by the finite volume method using Ansys Fluent software. The developed model examines energy, momentum, mass conservation, electrochemical reactions and water transport phenomenon.

Parametric analyses performed in this study were carried out to determine optimal cell operating conditions. Parameters such as temperature, pressure, anode and cathode relative humidity and stoichiometric ratios were investigated according to varying cell voltages. A polarisation and power density curves were generated for each parameter according to the obtained data. Optimal cell operating conditions were determined with the obtained comparative data. The validity of the generated model is confirmed by verifying model results with experimental studies.

**Keywords:** Ansys Fluent, CFD, Modeling, Parametric Analysis, PEM Fuel Cell.

## GİRİŞ

Yaşadığımız gezegeninin karşı karşıya olduğu başlıca zorluk, kıt kaynakların paylaşımı ve yaşamak için gerekli olan şartların sağlanabilmesi olarak görülmektedir. Dünyamızın bir kısmı, sadece temel yaşam ihtiyaçlarını karşılayabilmek için mücadele ve savaşlar verirken, bir kısmı da dünya kaynaklarını ele geçirme ve kendi toplumuna kazandırma savaşı vermektedir. İki ayrı cephedeki bu mücadelenin getirdiği sonuçlar şüphesiz ki en ağır tahribatı yaşadığımız dünyaya vermiştir. 18. yüzyıl sonlarından itibaren başlayan sanayileşme çabaları ilk başlarda göz ardı edilmiş olsa da çevresel manada dünyaya büyük zararlar vermiştir. Fosil temelli yakıtların kullanılmasıyla başlayan bu sanayileşme çabaları, insanlığın daha fazla kazanma arzusu ile birleştiğinde içinden çıkılmaz bir hale dönüşmüştür. Kullanılan fosil yakıtların çevreye ve atmosfere verdiği zarar ilk zamanlarda gözlemlenmese de artık günümüzde etkilerini açıkça hissettirmektedir. Küresel ısınma, iklim değişikliği ve çevre bilimleri hakkında yapılan çalışmalar bunu açıkça ortaya koymaktadır.

Fosil yakıtların enerjiden ulaşım, hammaddeden üretime kadar birçok alanda rakipsiz olduğu daha dün kadar değişmez bir gerçektir. Ancak son yıllarda toplumların bilinçlenmesi, tüketimde sürdürülebilir odaklara yönelmesi kamusal düzeyde bir bilinçlenme hareketine öncülük etmiştir. Son yıllarda, bu bilinçlenme ile fosil yakıtların temel tüketim alanları olan ulaşım ve enerji sektörlerinde büyük değişimler yaşanmaktadır. Yenilenebilir enerji kaynaklarını kullanılabilir enerjiye dönüştüren güneş hücreleri ve rüzgâr türbinleri gibi sistemler zaman geçtikçe yaygınlaşmaktadırlar. Geçmişte düşük verimli ve yüksek maliyetli olmaları kullanılmalarının önünde büyük bir engel olsa da, günümüzde kamu düzeyinde oluşan yenilenebilir enerji kaynaklarına yönelme talebi ile birlikte, bu alanlardaki araştırmalar ve devletlerin sağlamış olduğu üretim teşvikleri ile bu enerji dönüşüm sistemleri sürdürülebilir maliyet seviyelerine inmişlerdir. Bu gelişmeler ışığında, özellikle Avrupa ülkelerinde rüzgâr ve güneş santralleri yatırım öncelikli alanlar ilan edilmiş ve bu alandaki bilimsel araştırmalar fonlama mekanizmalarında öncelikli kabul edilmiştir. Bazı Avrupa ülkeleri nükleer enerji projelerini rafa kaldırarak

yenilenebilir enerji kaynaklarına yönelmektedirler. Ülkemizde de Türkiye Bilimsel ve Teknolojik Araştırma Kurumu (TÜBİTAK) tarafından açılan proje çağrılarında bu alanlar öncelikli alanlar ilan edilmiş, birçok proje fonlanmış ve fonlanmaya devam etmektedir.

Enerji sektöründeki bu gelişmeler şüphesiz ki ulaşım sektörünü de etkilemiştir. Pil teknolojisindeki gelişmeler ışığında elektrikli araç çalışmalarına hız verilmiş, birçok firma elektrikli araç üretme yarışına girmiştir. Araçlarda kullanılan pillerin maliyetlerinin düşmesi ve ağırlık olarak hafiflemesi üreticiler için bir fırsat olmuş, bu konudaki araştırmalar hız kazanmıştır. Yenilenebilir enerji kaynaklarından üretilen enerji ile yollarda seyreden araçlar görmek artık günümüz dünyası için şaşırılacak bir gelişme olmaktan çıkmıştır. Ancak gün geçtikte yaygınlaşan ve kullanılan elektrikli araçlarda kullanılan pil teknolojisi, araç menzillerinin kısalığı ve uzun şarj süreleri sebebiyle, elektrikli araçların kullanıcılar tarafından henüz istenilen düzeyde tercih edilmemesine sebep olmaktadır. Pil teknolojisindeki bu olumsuzluklar, içten yanmalı motorlara sahip araçların günümüzde hala en çok tercih edilen araçlar olmasında en büyük sebeptir. Pil teknolojisindeki çalışmalar ve araştırmalar bu teknolojiyi her geçen gün daha da ileriye taşısa da, araç üreticilerine yapılan emisyon baskıları ve düşük emisyonlu araçlara getirilen teşvikler üreticileri alternatif enerji kaynaklarına yönelmeye başlamıştır. 1800'lü yıllarda ilk çalışmalarına başlanan yakıt pili teknolojisi, 20. yüzyıl ortalarında NASA tarafından daha da geliştirilerek uzay mekiklerinde kullanılmaya başlanmıştır. Son yıllarda yaşanan gelişmeler ile birçok araç üreticisi de yakıt pili teknolojisine yönelerek prototip düzeyde çalışmalar gerçekleştirmiştir. Araçlarda kullanılan yakıt pili teknolojisi, sessizliği, sıfır emisyon değerlerine sahip olması, az bakım gerektirmesi ve çok kısa sürede yakıt dolumu gibi avantajları ile birlikte sektörde büyük bir sıçrama gerçekleştirmiş, bazı üreticiler yakıt pilli araçların seri üretimine başlamıştır.

Yakıt Pili teknolojisi birçok avantaja sahip olsa da içerisinde barındırdığı membran elektrot ünitesinde kullanılan platin katalizörler sebebiyle henüz istenilen ekonomik erişim kolaylığına ulaşamamıştır. Bu sebeple, bu teknolojinin maliyetlerinin düşürülmesi için birçok araştırma yapılmaktadır. Bu araştırmalar; yakıt pillerinin enerji yoğunluklarının (kW/kg) yükseltilmesi, bileşen maliyetlerinin düşürülmesi ve hacimsel manada küçültme gibi çeşitli çalışmalar üzerinde yoğunlaşmaktadır.

## 1. GENEL BİLGİLER

### 1.1. Tez Çalışmasının Amacı

Yakıt pili deneysel çalışmalarında kullanılan ekipman ve sarf malzemelerin yüksek maliyetli oluşları ve test sürelerinin uzunluğu bu çalışmaları yapan kişi ve kurumlara çeşitli zorluklar ortaya çıkarmaktadır. Bu negatif yönleri ortadan kaldırmak, eş zamanlı parametrik analizler yapılmasına düşük maliyetlerle olanak sağlamak amacıyla yakıt pili optimizasyon çalışmalarında matematiksel hesaplamalar ile birlikte hesaplamalı akışkanlar dinamiği yöntemi ile yapılan analizler de ön plana çıkmıştır. Düşük maliyetli olması ve parametrik çalışmalara imkân vermesi bu yöntemi avantajlı kılmaktadır.

Hesaplamalı akışkanlar dinamiği kullanılarak gerçekleştirilen parametrik analizler, tez çalışmasında hedeflenen PEM yakıt pillerinin optimum çalışma şartlarının ve çalışma parametrelerinin etkilerinin belirlenmesi için en uygun seçenektir. Gerçekleştirilen bu analizler sıcaklık, basınç, nemlilik, stokiyometri gibi temel parametrelerin etkilerinin anot ve katot için ayrı ayrı gözlemlenmesi sonucunda farklı çalışma koşullarında optimum performansı sağlayacak anot-katot çalışma parametrelerinin elde edilmesini sağlayacaktır. Tez çalışması ile mevcut literatüre farklı anot ve katot çalışma koşullarının hücre performansına olan etkisini detaylı şekilde açıklayacak ve katkı sağlayacaktır.

Tez çalışmasında elde edilecek veriler ile PEM tipi yakıt pillerinin çalışma parametrelerinin belirlenmesi, özellikle otomotiv ve savunma sanayisi alanlarında kullanılacak kritik öneme sahip yakıt pili uygulamaları için referans olacaktır. PEM yakıt pillerinin sıcaklık, nem, basınç ve yakıt stokiyometrik oranlarının değişimlerinin yakıt pili performansına ve elde edilecek polarizasyon eğrisine etkileri incelenecektir.

Bu tez çalışması temel olarak aşağıdaki bölümlerden oluşmaktadır;



- Genel bilgiler ve PEM yakıt hücresi hesaplamalı akışkanlar dinamiği modellenmesine ait kısa literatür bilgisi
- PEM yakıt hücreleri ve diğer yakıt hücresi türleri hakkında genel bilgi
- PEM yakıt hücrelerinde hesaplamalı akışkanlar dinamiği modelinin detaylı sunumu
- Sınır şartlarının belirlenmesi
- Temel model analizi ve model doğrulama
- Parametrik analizler
- Sonuçların irdelenmesi ve özetlenmesi

## 1.2. Literatür Özeti

Yakıt pillerinin modellenmesi üzerine uzun yıllardır çalışmalar yapılmaktadır. Son yıllarda bilgisayar teknolojisinin gelişmesi ile bu modelleri simüle edebilecek birçok paket program ortaya çıkmıştır. Bu gelişmeler ışığında, sayısı binleri bulan makale, yayın vb. bilimsel çıktılar yakıt pillerinin modellenmesi üzerine hazırlanmıştır. Oldukça geniş olan bu havuzda bütün yayınları incelemek neredeyse imkânsız hale gelmiştir. Bu sebeple tez çalışmasının konusu ile paralellik gösteren parametrik hesaplamalı akışkanlar dinamiği modellemeleri konusunda belirli yayınlar incelenmiştir. Aynı zamanda HAD analizlerine referans olabilecek modelleme yayınları da incelenmiş ve aşağıda özeti sunulmuştur.

Um ve arkadaşları proton değişimli membran yakıt pillerini simüle etmek için üç boyutlu, zamana bağlı, bir model geliştirmişlerdir. Model aynı zamanda elektrokimyasal kinetik, akım dağılımı, hidrodinamik ve çok bileşenli transferler için de geçerli hale getirilmiştir. Akış kanalları, gaz difüzyon tabakaları, katalizör tabakaları ve membran için geçerli olan tek bir koruma denklemi geliştirilmiş ve hacimsel tabanlı hesaplamalı akışkanlar dinamiği tekniği kullanılarak sayısal olarak çözülmüştür. Sayısal model deneysel verilerle de doğrulanmıştır. Daha sonra, model üzerinde, anot akış kanalı üzerinde hidrojen seyrelme etkilerini de keşfetmek için detaylı analizler gerçekleştirilmiştir [1].

Berning ve arkadaşları bir polimer elektrolit membranlı yakıt hücresinin kapsamlı, izotermal olmayan, üç boyutlu bir hesaplama modeli geliştirmişlerdir. Model hem

membran-elektrot ünitesi hem de gaz dağıtıcı akış kanallarıyla birlikte hücrenin tüm bileşenlerini içermektedir. Faz değişikliği hariç, model, tüm önemli taşınım olaylarını da açıklamıştır. Model, bir hesaplamalı akışkanlar dinamiği kodu olan CFX 4.3 programı ile hazırlanmış ve simülasyonlar, reaktant konsantrasyonları, akım yoğunlukları, sıcaklık ve su akılarının detaylı üç boyutlu dağılımları gösterilmiştir. Sonuçlar, membran elektrot ünitesi üzerinde birkaç derecelik sıcaklık farklarının, taşınımın üç boyutlu yapısına, özellikle akış plakalarının sırt yüzeylerinin altında gözlenen akım dağılımı ve sınırlayıcı akım yoğunluğunda önemli bir etkiye sahip olduğunu açığa çıkarmıştır [2].

Wang ve arkadaşları ise proton değişim membranlı (PEM) yakıt pillerinin performanslarına farklı işletim parametrelerinin, anot tarafında saf hidrojen ve katot tarafında hava kullanılarak, etkisini deneysel olarak açıklamaya çalışmışlardır. Farklı yakıt hücresi işletim sıcaklıkları, farklı katot ve anot nemlendirme sıcaklıkları, farklı çalışma basınçları ve bu parametrelerin çeşitli kombinasyonları ile deneyler gerçekleştirmişlerdir. Deneysel sonuçlar, çeşitli çalışma parametrelerinin PEM yakıt pili performansı üzerindeki etkilerini gösteren polarizasyon eğrileri biçiminde sunulmuştur. Parametre etkilerinin olası mekanizmaları ve bunların birbirleriyle olan ilişkileri tartışılmıştır. Buna ek olarak, kapsamlı bir üç boyutlu yakıt hücresi modeli kısaca sunulmuş ve modelleme sonuçları deney verileriyle karşılaştırılmıştır. Yapılan bu çalışmada karşılaştırma, modelleme sonuçları ile deneysel veriler arasındaki örtüşmeyi göstermiştir [3].

Svertsen ve arkadaşları da proton değişim membranlı (PEM) yakıt hücreleri için kapsamlı, izotermal olmayan, çok boyutlu bir model geliştirmiş ve hesaplamalı akışkan dinamiği (HAD) koduna uygulamışlardır. Geliştirilmiş model, paralel hesaplamaya olanak tanıyarak büyük akış alanlı simülasyonların gerçekleştirilmesine olanak sağlamıştır. Katot ve anoda elektrokimyasal tepkime ile ilişkili dağılık ısı üretimi modeli de dâhil etmişlerdir. Oluşturulan model, elektrotlardaki ve membrandaki elektrik ve iyonik potansiyelleri çözerek, yerel aktivasyon kayıp dağılımlarını, yerel akım yoğunluğu dağılımını daha doğru bir şekilde tahmin etmeyi mümkün kılmıştır. Omik kayıpların katalizör tabakasındaki konsantrasyon kayıpları üzerinde hakim etkisinin bir sonucu olarak, plaka sırt yüzeylerinde maksimum akım yoğunluklarını gözlemlemişlerdir [4].

Bir diğerk çalışmada Min ve arkadaşları parametre duyarlılığı analizi yapmışlardır. Aktarım katsayısı, aktif alana göre belirlenmiş transfer akım yoğunluğu, gözeneklilik, difüzyon katsayısı, mutlak geçirgenlik ve membran faz iletkenliği dahil olmak üzere 11 ana parametrenin polarizasyon eğrisi üzerindeki etkisini araştırmışlardır. Sonuçlar, PEM yakıt pilinin polarizasyon eğrisinin birçok parametreden etkilendiğini ve katot tarafı parametrelerinin anot tarafındaki parametrelere göre polarizasyon eğrisi üzerinde daha etkili olduğunu göstermiştir. Aynı zamanda, polarizasyon eğrisinin doğrulama için yeterli olmadığını gösteren, neredeyse aynı polarizasyon eğrisine neden olabilecek iki farklı parametre grubu da belirlenmiştir. PEMFC model doğrulamasına ilişkin ayrıntılı inceleme yapılmış ve sayısal sonuçlarla polarizasyon eğrisinin ve yerel akım yoğunluğu dağılımının hala model doğrulaması için yeterli olmadığı gösterilmiştir. Daha sonra kesin bir doğrulama sağlaması beklenen üç adımlı bir doğrulama yaklaşımı önerilmiştir. Bunlar; polarizasyon eğrisinin doğrulanması, yerel akım yoğunluğu dağılım eğrisinin doğrulanması ve katot kayıplarının akım yoğunluğu eğrisine göre doğrulanması olarak açıklanmıştır [5].

Al-Baghdadi ve arkadaşları düz akış kanallarına sahip bir PEM yakıt pilinin çok boyutlu, izotermal olmayan bir hesaplamalı akışkanlar dinamiği modelini geliştirmişlerdir. Bu kapsamlı model bir PEM yakıt pilindeki konvektif ve difüze ısı ve kütle transferi, elektrot kinetikleri ve potansiyel alanlar gibi nakil olaylarını açıklamaktadır. Bu çalışmada geliştirilen algoritmanın özelliği, yerel aktivasyon kayıplarını doğru bir şekilde hesaplayabilme özelliğidir ve bu da yerel akım yoğunluğu dağılımının daha iyi tahmin edilmesine sebep olmuştur. Model, deneysel olarak incelenemeyen birçok etkileşimli, karmaşık elektrokimyasal ve taşınım fenomenini incelemiştir. Bu model, çeşitli işletim, tasarım ve malzeme parametrelerinin yakıt hücresi performansı üzerindeki etkilerini incelemek için kullanılmıştır. Çeşitli çalışma koşulları altında yakıt hücresi performansının detaylı analizleri yapılmıştır ve incelenmiştir. Analiz, kritik parametrelerin belirlenmesine yardımcı olmuş ve çeşitli çalışma koşullarında bir yakıt hücresi performansına olumsuz etkilere yol açan fiziksel mekanizmalar hakkında fikir vermiştir [6].

Yine Al-Baghdadi ve arkadaşları farklı bir çalışmada, yakıt pili performansını etkileyen önemli parametreleri içeren, kapsamlı, çok boyutlu, çok fazlı, izotermal

olmayan bir PEM yakıt hücresi modeli kullanan bir optimizasyon çalışmasının sonuçları sunmuşlardır. Model aynı hesaplama alanındaki hem gaz hem de sıvı fazı hesaba katarak gaz difüzyon katmanlarındaki faz değişiminin incelenmesine olanak sağlamıştır. Model, polimer membranda çözünen gaz fazındaki türlerin, sıvı suyun, protonların, enerjinin ve suyun taşınmasını içerir. Suyun üç evrede transfer edildiği kabul edilmiştir. Sıvı, buhar ve çözünmüş halde bulunur ve bu fazlar arasındaki bir denge olduğu varsayılır. Modelde, lokal akım yoğunluğu dağılımının daha iyi tahmin edilmesine yol açan, yerel aktivasyon kayıplarının daha gerçekçi bir gösterimini mümkün kılan bir algoritma bulunmaktadır. Bu model aynı zamanda, gözenekli gaz difüzyon tabakasında olduğu gibi, kanallardaki farklı türlerin taşınması ve difüzyonunu, katılardaki ısı transferinin yanı sıra gazlar ve elektrokimyasal reaksiyonları da hesaba katar. Sonuçlar mevcut çok fazlı modelin, gaz difüzyon tabakalarının ıslanma davranışı için önemli parametreleri belirleyebildiğini ve yakıt üzerinde zararlı bir etkiye sahip gözenekli yapının tıkanmasa sebep olabilecek koşulların belirlenmesinde kullanılabileceğini göstermiştir. Bu model, çeşitli işletme, tasarım ve malzeme parametrelerinin yakıt hücresi performansı üzerindeki etkilerini incelemek için kullanılmış ve çeşitli çalışma koşulları altında yakıt hücresi performansının detaylı analizlerini yapmış ve incelemiştir [7].

Farklı bir çalışmada, Dawes ve arkadaşları da, üç boyutlu PEM yakıt pili modeli geliştirmiş ve hücre içi su oluşumlarının hücre performans parametreleri üzerindeki etkilerini araştırmak için kullanmışlardır. Katot gaz difüzyon katmanında (GDL) sıvı su bulunması, katot katalizör tabakasına reaktantların akışını sınırlar ve böylece toplam reaksiyon oranını düşürür ve hücrede üretilen azami gücü azaltır. Su oluşumlarının gaz difüzyonu üzerindeki etkilerini karakterize etmek için, gözenekli yakıt hücresi elektrotlarının kıvrımlı yapıları ve göreceli su doygunluğunu açıklayan etkili difüzivite modelleri perkolasyon teorisinden türetilmiş ve tek fazlı bir akış iskeletinde HAD modeliyle birleştirilmiştir. Daha sonra, birleştirilmiş HAD ve perkolasyon teorisine dayanan efektif difüzivite modellerini temsil eden üç boyutlu PEM yakıt hücresi modelinin tümleşik denklemleri sonlu hacim metodu kullanılarak çözülmüştür. Gaz difüzyon tabakası geçirgenliği, giriş nemi ve reaktantların difüzivitesinin, reaktant / ürün konsantrasyonu ve hücre akım yoğunluğu gibi çeşitli hücre performans parametreleri üzerindeki etkilerini karakterize etmek için

parametrik çalışmalar yapılmıştır. Bu çalışmada, gaz difüzyon tabakası geçirgenliğinin, gaz akışının difüzyon hakim doğasına bağlı olarak akım yoğunluğuna çok az veya hiç etkisi olmadığı saptanmıştır. Bununla birlikte, perkolasyon teorisine dayalı etkin difüzyon modelinin mevcut modelle birleşmesiyle benzer deneysel gözlemlere çok yakından benzeyen hücre performansında gözle görülür bir azalma gözlenmiştir [8].

Falcao ve arkadaşları, iki boyutlu ve üç boyutlu sayısal simülasyonlar gerçekleştirmiş ve bir PEM yakıt pilinden elde edilen deneysel verilerle karşılaştırmışlardır. Çok boyutlu sayısal simülasyonlar FLUENT PEMFC modülü kullanılarak elde edilmiştir. Sonuçlar, su akışının tek fazlı olduğu durumlarda tek ve çok boyutlu modellerin benzer sonuçlar ortaya koyduğunu göstermiştir. Bununla birlikte, yakıt hücresi performansının tahmin edilmesinde 3D simülasyonların deney verilerine daha iyi uyum sağladığı gözlemlenmiştir. Gazların bağıl neminin ve hücre çalışma sıcaklığının yakıt hücresi performansı üzerindeki etkisi hem iki boyutlu hem de üç boyutlu simülasyonlar ve deneysel veriler sonucunda elde edilen polarizasyon eğrileri, membran su içeriği ve diğer fiziksel parametreler göz önüne alınarak incelenmiştir. Polarizasyon eğrisi, iki boyutlu model için 5 dakikalık sürede elde edilirken, üç boyutlu model için 24 saat sürmüştür. Sonuçlar, iki boyutlu modelin optimal işletim tahmininde bulunabileceğini göstermektedir. Sonuçlar, iki boyutlu modelin, PEM yakıt pillerinde optimum çalışma koşullarını ve birkaç önemli fiziksel parametrenin yakıt hücresi performansı üzerindeki etkisinin genel eğilimlerini tahmin etmek için kullanılabileceğini göstermektedir. Bu çalışmanın önemli bir sonucu, düşük CPU kullanan basit bir modelin gerçek zamanlı PEMFC simülasyonlarında kullanılma potansiyeline sahip olduğunun gösterilmesini amaçlamıştır [9].

Jeon ve arkadaşları katot tarafının bağıl neminin proton değişim membranlı (PEM) yakıt pilleri üzerindeki etkisini otomotiv uygulamalarına yönelik olarak incelemişlerdir. Hesaplamalı akışkanlar dinamiği (HAD) simülasyonları, farklı katot bağıl nemi seviyelerindeki 300 cm<sup>2</sup> serpantinli bir akış alanı konfigürasyonunda gerçekleştirilmiştir. Akım yoğunluğuna, membran su içeriğine, net su akışının performansa ve homojenliğe bağımlılığı araştırılmıştır. Akım yoğunluğu ve sıcaklığın homojenliği, standart sapma yöntemi kullanılarak değerlendirilmiştir. Bir

yakıt pili içindeki su dengesi, elektro-ozmotik sürüklenme ve geri difüzyonu açıklanarak incelenmiştir. Katot bağıl neminin hücre performansı ve homojenlik üzerinde güçlü bir etkisi olduğu sonucuna varılmıştır. Katot tarafındaki kuruluk, düşük hücre voltajı ve akım yoğunluğuna sebep olmuştur; buna karşılık yüksek katot nemi, hücre gerilimi, akım yoğunluğu ve sıcaklığın homojenliği üzerinde olumlu etkiler göstermiştir. Yakıt pili uygulamalarında harici nemlendiricinin kullanılmaması otomotiv uygulamaları kullanım açısından tercih edilir ancak membran elektrot ünitesinin kurumasından dolayı hücre performansını ve kullanım ömrünü düşürebilir. Bu nedenle, katot tarafının uygun şekilde nemlendirilmesinin gerekliliğini ortaya koymuşlardır [10].

Bilgili ve arkadaşları üç boyutlu bir hesaplama modeli kullanarak, anot ve katot gaz akış kanallarında, akışa karşı çeşitli engeller içeren PEM yakıt pillerinin performansını araştırmak için sayısal simülasyonlar gerçekleştirmişlerdir. Bu simülasyonlar, belirlenen koşullarda anot ve katot kanallarına yerleştirilen engellerin etkilerini ortaya çıkarmak için farklı çalışma koşullarında (stokiometri, bağıl nem ve sıcaklık) yürütülmüştür. Benzetimler, gaz akış kanallarındaki engellerin, kanallar boyunca konsantrasyon dağılımını ve gaz difüzyon katmanı (GDL) boyunca reaksiyona giren gazların taşınımını olumlu yönde etkilediği göstermiştir ve sonucunda yüksek akım yoğunluklarında daha yüksek hücre voltajı elde edilmiştir [11].

PEM yakıt pilleri alanındaki modelleme çabaları hem iki hem de üç boyutlu (2D ve 3D) PEM yakıt hücresi modellerinin geliştirilmesine odaklanmıştır. Daha yüksek boyutsal modeller, yakıt pili süreçlerinin daha gerçekçi ve doğru açıklanmalarını sağlar, ancak karmaşıklık ve oldukça geniş hesaplama kaynakları gerektirirler. Dolayısıyla, yüksek boyutlu yakıt hücresi modellerinin varlığına rağmen, düşük boyutlu modeller günümüzde de doğruluklarını korumakta ve yaygın şekilde kullanılmaktadırlar. İki ve üç boyutlu modeller arasındaki farklılıklar, sadece çok boyutlu modellerden kaynaklı bir etki olarak atfedilemez. Raj ve arkadaşları literatürdeki bu boşluğu doldurmayı hedeflemişlerdir. Çok boyutlu modellerin etkisi, COMSOL'da benzer iki kararlı durum için iki ve üç boyutlu model geliştirilerek analiz edilmiştir. Bu modellerin her ikisi de benzer geometriye sahiptir ve benzer çalışma koşullarında simüle edilmiştir. Çok boyutluluğun tür konsantrasyonu

üzerindeki etkisi, çeşitli giriş stokiyometrilerinde, membran iletkenliklerinde ve bağıl nem değerlerinde araştırılmıştır. Her iki modeldeki tür dağılımındaki farklılık ile temsil edilen çok boyutlu etki, daha düşük çalışma voltajlarında belirgin olarak katot tarafında gözlemlenmiştir. Katottaki giriş stokiyometrisi ve membran iletkenlik değerlerinin çok boyutluluk etkilerini de etkilediği ortaya çıkarılmıştır [12].

Ozden ve Tari, bir polimer elektrolit membran (PEM) yakıt pilini, literatürde bildirilen bozulma paternleri yardımıyla sayısal olarak hem bozunmamış hem de bozunmuş olarak modellemişlerdir. Bozunmamış yakıt pili modeli literatürdeki verilerle de doğrulanmıştır. Bozunmadan etkilenen parametreleri değiştirerek modeli modifiye etmek, bozunmuş bir PEM yakıt hücresi modeli yaratmış ve bozunan yakıt hücresi, ticari bir hesaplamalı akışkanlar dinamiği (HAD) yazılımı kullanılarak parametrik olarak analiz edilmiştir. İncelenen parametreler; membran eşdeğer ağırlığı, katalizör katmanı gözenekliliği ve viskoz direnç, gaz difüzyon katmanı gözenekliliği ve çift kutuplu plaka temas direnci olmuştur. İlk defa, PEM yakıt hücresinin genel bozunumunun, bozulmuş bireysel bileşenlerden gelen deney verileri birleştirilerek sayısal olarak tahmin edilebileceği bu çalışmada gösterilmiştir. İki yıllık çalışma sonucunda bozunmamış ve bozunmuş PEM yakıt hücrelerinin simülasyon sonuçları karşılaştırıldığında, 70 °C çalışma sıcaklığı ve 0,95 V açık devre geriliminde, toplam hücre geriliminde gerçekleşen bozunmanın % 17 olduğu görülmüştür [13].

Caglayan ve arkadaşları 25 cm<sup>2</sup>'lik bir aktif alana sahip olan bir yüksek sıcaklık polimer elektrolit membran (PEM) yakıt pili için üç boyutlu bir model geliştirmişlerdir. Modelde tek hücrede, fosforik asit katkılı polibenzimidazol (PBI) membranlı üçlü karışık serpantin akış kanalı kullanılmıştır. Sistem için kararlı durum, izotermal, tek fazlı varsayımlar olarak tanımlanmıştır. Model, çalışma sıcaklığının hücrenin performansı üzerindeki etkisini araştırmak için 100 ila 180 °C arasında değişen farklı sıcaklıklarda simüle edilmiştir. Çalışma sıcaklığı arttıkça hücrenin performansında bir iyileşme olduğu görülmüştür. Deneysel veriler, hem tek kanal hem de üçlü karışık serpantin için modeli doğrulamak için kullanılmıştır. Akım yoğunluğu dağılımı, farklı çalışma voltajlarında elde edilmiştir. Elde edilen sonuçlar, yüksek çalışma voltajlarında yerel akım yoğunluğunun hemen hemen eşit olduğunu,

buna karşın çalışma voltajının düşürülmesi yerel akım yoğunluğunda düzensizliklere neden olduğunu ortaya koymuştur [14].

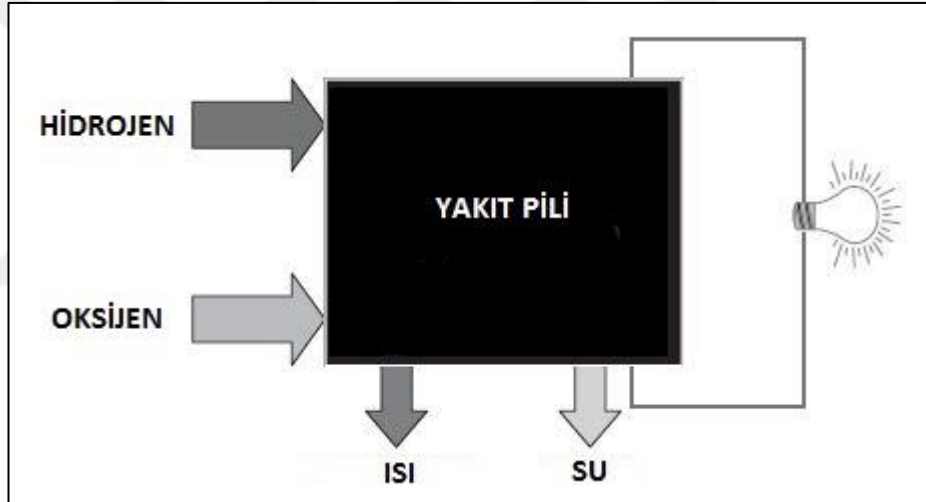
Macedo-Valencia ve arkadaşları membran, gaz difüzyon katmanları, akım toplayıcılar, katalizör katmanları ve akışı içeren beş hücreli PEM yakıt pili istifinde akışkanların akışını, ısı transferini, elektrokimyasal reaksiyonu ve türlerin geçişini ifade etmek için tek fazlı, üç boyutlu bir model uygulamışlardır. Sayısal modeli çözmek için ticari bir hesaplamalı akışkan dinamiği (HAD) kodu olan Ansys 15.0 kullanılmıştır. Sayısal sonuçlar, yığın içerisindeki beş membran elektrot düzeneği içerisindeki ısı kaynakları ve sıcaklığın yanı sıra hidrojen ve oksijen kütle fraksiyonlarının detaylı dağılımlarını göstermiştir. Tür konsantrasyonu her zaman girişlerde daha yüksek olmak üzere kanallar boyunca yavaş yavaş azalmıştır. En düşük sıcaklık, oksijenin 300 K sıcaklığında verildiği katodun girişinde gözlenmiştir. Benzer şekilde, PEM yakıt hücresindeki ısı kaynakları, membran elektrot düzeneğindeki akım yoğunluğu dağılımlarıyla sıkı bir şekilde ilişkilendirilmiştir. Ayrıca sonuçlar, bir Horizon PEM yakıt hücresi (H-100) içinde yapılan deneylerden elde edilen polarizasyon eğrileri ve deney verileri ile doğrulanmıştır [15].

Salva ve arkadaşları, daha önce hücre sıcaklığı, basınç, reaktantlar bağıl nem ve katot stokiyometrisi için farklı deney koşulları için deneysel verilere göre doğrulanmış iki boyutlu analitik bir model kullanarak 50 cm<sup>2</sup> PEM yakıt pilinin çalışma koşullarının optimizasyonunu sunmaktadır. Analitik model, verilen PEM yakıt pilinin her akım yoğunluğu değeri için maksimum ve minimum güç çıkışını sağlayan çalışma koşullarını tahmin etmek için kullanılmıştır. Böylece, çalışma koşullarının her akım yoğunluğu için sabit olmadığı, ancak akım yoğunluğunun her bir değeri için mümkün olan maksimum güç çıkışını sağlamak için modifiye edilmiş bir performans polarizasyon eğrisi geliştirilmiştir. Elde edilen çalışma koşulları gerçek hücrede test edilmiş ve maksimum hatanın, maksimum güç durumunda %2'nin altında ve minimum güç durumunda %3'ün altında olduğu gösterilmiş ve ayrıca deneysel veriler ve modelleme sonuçları arasında iyi bir uyum olduğunu ortaya çıkarılmıştır. Karşılaştırma, maksimum güç eğrisi için çalışma koşullarını kullanan güç çıktısının, minimum güç eğrisini kullanmaktan yaklaşık %100 daha yüksek olduğunu göstermiştir [16].



## 2. YAKIT PİLLERİ

Yakıt pilleri elektrokimyasal yakıt enerjisini doğrudan DC akıma çeviren elektrokimyasal enerji dönüştürücüleridir. Yakıtlardan elektrik üretim prosesi, genel olarak yakıtın yakılması ve kimyasal enerjinin ısı enerjisine çevrilmesi ile olur. Elektrik üretim proseslerinde genellikle yakıcılar, buharlaştırıcılar, türbinler ve jeneratörler bulunmaktadır. Yakıt pilleri tüm bu prosesleri gereksiz kılarak tek bir adımda, hareketli hiç bir donanım olmaksızın elektrik üretilmesine olanak sağlamaktadır. Tüm bu avantajlar yakıt pili teknolojisine ilgiyi arttırmaktadır.



Şekil 2.1. Yakıt pilinin tek aşamalı elektrik üretim prosesi

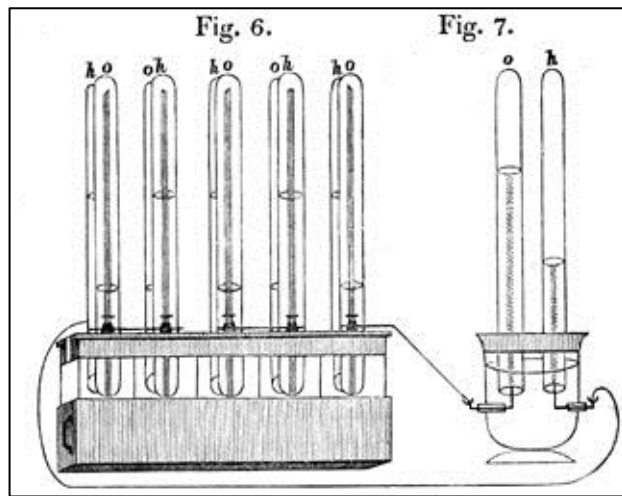
Yakıt pilleri diğer bir yönleriyle de bataryalar ile benzerlikler gösterirler. Kimyasal enerjiyi doğrudan elektriğe çeviren elektrolite, pozitif ve negatif elektrotlara sahiptirler. Ancak yakıt pilleri bataryalardan farklı olarak elektrik akımı üretebilmek için yakıt ve oksitleyiciye ihtiyaç duymaktadır. Yakıt pillerindeki elektrotlar batarya elektrotları gibi kimyasal bir değişim süreci yaşamaz. Bu sebeptendir ki bazı bataryalar tekrar şarj edilebilirken bazıları edilemez. Bu olay yakıt pillerinde gözlenmez. Yakıt ve oksitleyici beslendiği sürece akım üretebilirler. Şekil 2.1.'de yakıt pilinin tek aşamalı elektrik üretim prosesi gösterilmektedir.

## 2.1. Yakıt Pillerinin Tarihçesi

Yakıt pilleri, yüksek teknolojik ürünler olmalarına ve karmaşık görünmelerine rağmen bilim çevrelerince yaklaşık 150 yılı aşkın bir süredir bilinmekte ve kullanılmaktadırlar. Yakıt pillerinin dönüm noktası varsayacağımız tarihler ikinci dünya savaşının başlangıcına dayanmaktadır. Bu tarihten itibaren ilk olarak NASA'nın uzay programlarında kullanılması yakıt pillerinin ticarileşmesine büyük olanak sağlamıştır.

Yakıt pillerinin tarihsel gelişimi incelendiğinde 1800'lü yıllara dayanmaktadır. İlk çalışmalar 1838 yılında Sir William Grove tarafından başlatılmıştır. "Grove hücresi" olarak adlandırılan hücre, çinko sülfat içerisine çinko elektrot ve nitrik asit içerisine platin elektrot daldırılarak oluşturulmuştur. Hidrojen ve oksijenin yakıt olarak kullanıldığı, yaklaşık 1,8 volt civarında 12 amperlik bir akımın üretildiği ilk yakıt pili Grove tarafından üretilmiştir [17].

19. yüzyıl boyunca bazı yakıt pili üretim denemeleri olsa da, bu devirde yakıt pilleri hep bir bilinmez olarak kalmıştır. Bu periyod içerisinde, kimya alanında Nobel sahibi bir bilim adamı olan W.F.Ostwald, yakıt pillerinin teorisi hakkında birçok çalışmalar yapmıştır. Enerji dönüşümünün içten yanmalı motorlarda Carnot verimi sebebiyle düşük kaldığını, bu sebeple atmosferi kabul edilemeyecek seviyede kirlettiğini ortaya koymuştur. Aynı zamanda yakıt pillerinin doğrudan elektrik ürettiklerini, yüksek verimli olduklarını ve çevreyi kirletmediklerini ortaya koymuştur [18].



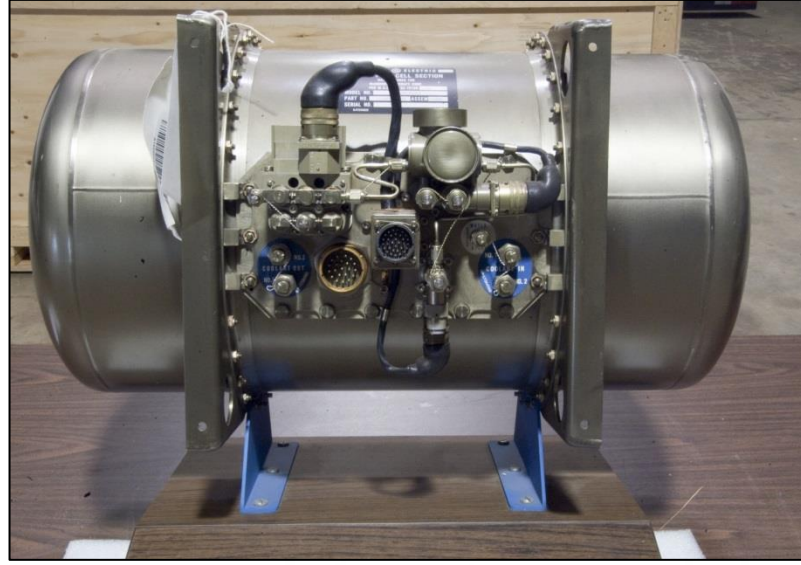
Şekil 2.2. William Grove tarafından 1843 yılında çizilmiş 'Gaz Pili' [19]

İlk yakıt pili çalışmalarının üzerinden yüzyıllık bir süre geçmesine rağmen 1932 yılına kadar yakıt pili çalışmaları Grove'un çalışmaları üzerinde yoğunlaşmıştır. 1932 senesinde İngiliz bir mühendis olan Francis T. Bacon, üretilbilir bir yakıt pili üzerinde çalışmaya başlamış ve 1959 senesinde 5 kW gücünde bir yakıt pilinin üretimini tamamlamıştır. Bu gelişme ile beraber, ilk yakıt pili uygulaması Amerikan uzay programı ile başlamıştır. Şekil 2.2.'de William Grove tarafından çizilen gaz pili gösterilmektedir.



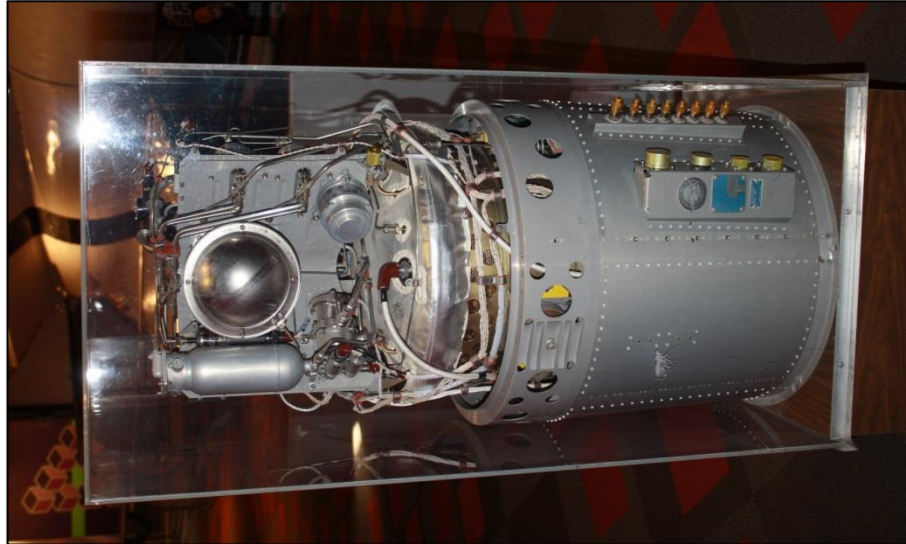
Şekil 2.3. Thomas Bacon ve geliştirmiş olduğu 5 kW yakıt pili [20]

1955 yılında General Electric firmasında kimyager olarak çalışan Willard T.Grubb, yakıt pillerinde bir takım değişiklikler yaparak proton değişim membranı (PEM) geliştirmiştir. 1958 yılında ise General Electric'de çalışan kimyager Leonard Niedrach, proton değişim membranı üzerine platin katalizör yükleyerek Grubb-Niedrach adı verilen yakıt pilini üretmiştir. Bu buluş GEMINI uzay projelerinde kullanılmıştır [21]. Şekil 2.3.'de Thomas Bacon ve geliştirmiş olduğu yakıt pili gösterilmektedir.



Şekil 2.4. Gemini uzay programında kullanılan yakıt pili [22]

1960'lı yıllarda uçak üreticisi Pratt&Whitney, Bacon patentlerinin lisansını almış ve ilk tasarımı değiştirerek, General Electric firmasının ürettiği yakıt pilinden daha uzun ömürlü olan "Bacon Cell" tasarımı ortaya koymuş ve NASA'nın yürütmüş olduğu Apollo projelerinde kullanılmıştır. Bu yakıt pili ile uzayda astronotların kullanımı için elektrik, ısı ve içilebilir kalitede su üretilmiştir. Şekil 2.4. ve Şekil 2.5.'de uzay programlarında kullanılan yakıt pilleri gösterilmektedir.



Şekil 2.5. Apollo programında kullanılan alkali yakıt pili [23]

1960'lı yılların ortalarında General Motor firması ilk olarak Union-Carbide firması tarafından üretilen yakıt pillerini bir panelvan araçta uygulamıştır. Electrovan adı verilen araç yakıt pili ilk araç olma özelliği taşımaktadır. Bu araçta yakıt olarak sıvı

hidrojen ve sıvı oksijen kullanılmıştır. Bu araç tam yakıt ile 200 km menzile sahip olup, maksimum 110 km/s hıza ulaşabilmiştir [24].

Devam eden yıllarda Union-Carbide firmasının üretmiş olduğu bu yakıt pili NASA'nın uzay programlarında kullanılmaya devam etmiştir. 1980'li yılların sonralarına doğru Perry Technologies adlı firma ile Ballard adlı bir yakıt pili üreticisi firma ortak bir proje ile PEM tipi bir yakıt pilini bir denizaltıya uygulamıştır. 1993 senesinde Ballard firması üretmiş olduğu yakıt pillerini otobüslere uygulamıştır.



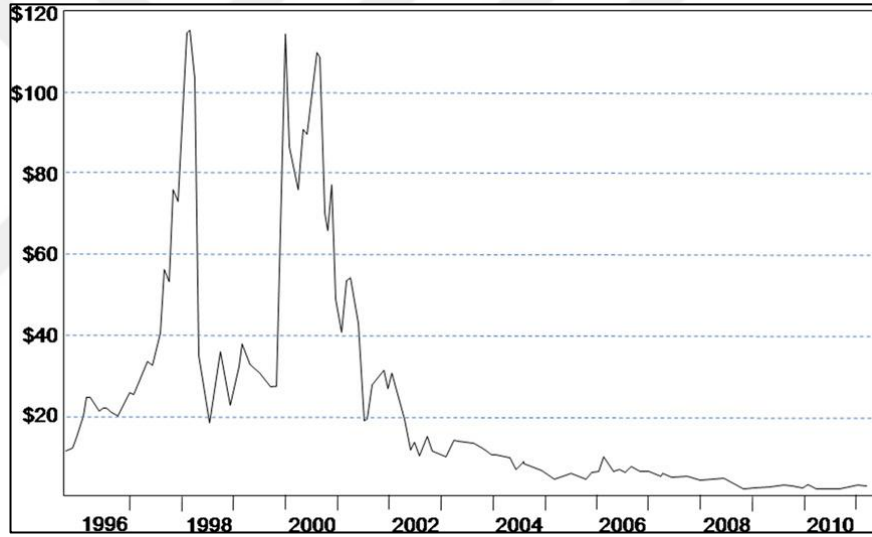
Şekil 2.6. Perry firması tarafından üretilen yakıt pilli denizaltı [18]

Yine 1993 yılı içerisinde, başını Perry Technologies firmasının çektiği enerji partnerleri, ilk defa PEM yakıt pilini Şekil 2.7.'de görülen otomobile uygulamıştır. 1990'lı yılların sonuna doğru, Amerikan Enerji Bakanlığı (DOE) tarafından desteklenen otomobil üreticilerinin neredeyse tamamı yakıt pilli araç uygulamalarına başlamıştır.

Geçmişten günümüze doğru geldikçe yakıt pili teknolojisindeki gelişimin hızla arttığı görülmektedir. Özellikle fosil yakıt tüketimindeki artışlar ve gelişen çevre bilinci bu teknolojiye olan ilgiyi git gide arttırmaktadır.

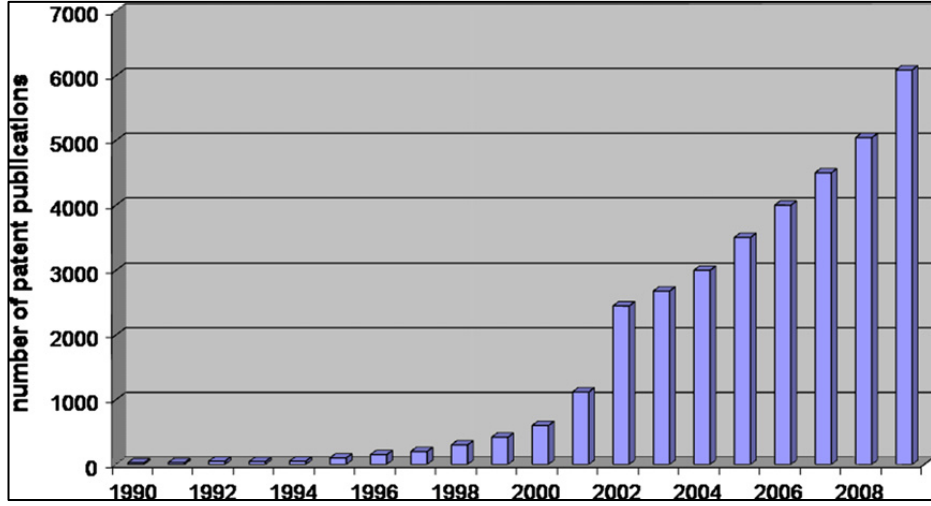


Şekil 2.7. GreenCar, ilk yakıt pilli araç uygulaması (1993) [18]



Şekil 2.8. Yıllara göre yakıt pilli üreticisi firmaların hisse senedi artışları [18]

Şekil 2.8.'de yakıt pilli üreticisi firmalarının yıllara göre hisse artışları gösterilmektedir. Özellikle Japonya ve ABD verileri ön planda olarak, teknolojik gelişmelere paralel olarak yakıt pilli teknolojisinde patent artış oranı Şekil 2.9.'da gösterilmiştir. 2008 ve 2009 yıllarında yıllık olarak yaklaşık 6000 adet olarak açıklanmıştır [18].



Şekil 2.9. Yıllara göre yakıt pili teknolojisinde alınan patent sayısı [18]

## 2.2. Yakıt Pili Türleri

Günümüzde dünyada kullanım alanına, ihtiyaca ve çalışma parametrelerine göre farklı tiplerde yakıt pilleri kullanılmaktadır. Yakıt hücreleri öncelikle kullandıkları elektrolit türüne göre sınıflandırılır. Bu sınıflandırma, hücrede meydana gelen elektrokimyasal reaksiyonların türünü, gerekli katalizörlerin tipini, hücrenin çalıştığı sıcaklık aralığını, kullanılan yakıt ve diğer faktörleri belirler. Bu özellikler, hücrelerin kullanılacakları alanları ve uygulamalarını belirler. Halen geliştirilmekte olan, kendi avantajları, kısıtlamaları ve potansiyel uygulamaları olan çeşitli yakıt hücreleri türleri bulunmaktadır.

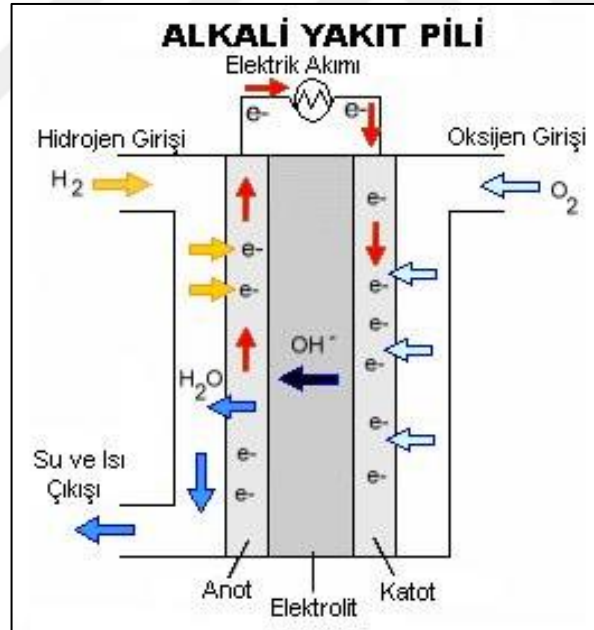
- Alkali yakıt pilleri (AYP)
- Erimiş karbonat yakıt pilleri (EKYP)
- Fosforik asit yakıt pili (FAYP)
- Katı oksit yakıt pili (KOYP)
- Direkt metanol yakıt pili (DMYP)
- Polimer elektrolit membranlı yakıt pili (PEMYP)

### 2.2.1. Alkali yakıt pili

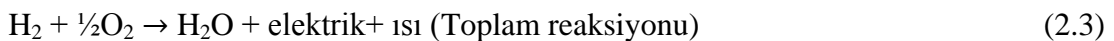
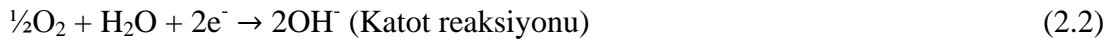
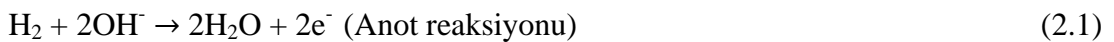
Alkali yakıt pilleri, geliştirilen ilk yakıt pili türlerinden biri olması sebebiyle NASA uzay programlarında elektrik enerjisi ve su üretimi için yaygın olarak kullanılan ilk yakıt pili türüdür. Bu yakıt hücreleri elektrolit olarak suda çözülmüş potasyum

hidroksit çözeltisi kullanır ve anot ve katot katalizörleri kıymetli olmayan çeşitli metalleri kullanabilirler. Son yıllardaki gelişmeler ile, elektrolit olarak polimer membran kullanılan yeni AYP'ler de geliştirilmiştir. Alkali yakıt pilleri geleneksel polimer elektrolit membranlı yakıt pilleri ile doğrudan ilişkilidirler, ancak doğrudan asidik bir membran kullanmak yerine alkali bir membran kullanırlar. Alkali yakıt pillerinin performansı, hücre içerisindeki elektrokimyasal reaksiyonların verimine bağlıdır. AYP'ler uzay uygulamalarında %60 ve üzeri verimlilik ile çalışmışlardır.

Alkali yakıt pillerine yakıt olarak gönderilen hidrojen molekülleri anotta elektron kaybederek hidrojen iyonlarına dönüşür. Bu iyonlar elektrolit üzerinden yola devam ederken, elektronlar ise bir dış devre üzerinden katoda ulaşır. Bu esnada hidrojen iyonları, katoda iletilen oksijen, dış devre ile gelen elektronlar reaksiyona girerek devre tamamlanır. Reaksiyon sonucunda ürün olarak su oluşur. Denklem (2.1)'de anot reaksiyonu, Denklem (2.2)'de katot reaksiyonu ve Denklem (2.3)'de ise toplam reaksiyon gösterilmektedir;



Şekil 2.10. Alkali yakıt pilinin gösterimi [25]

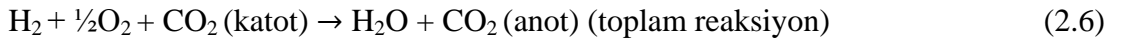
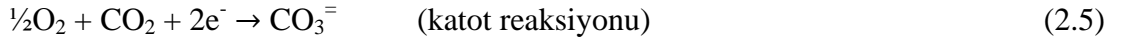
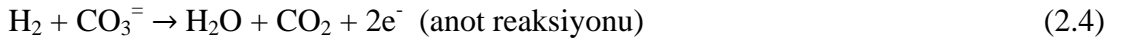


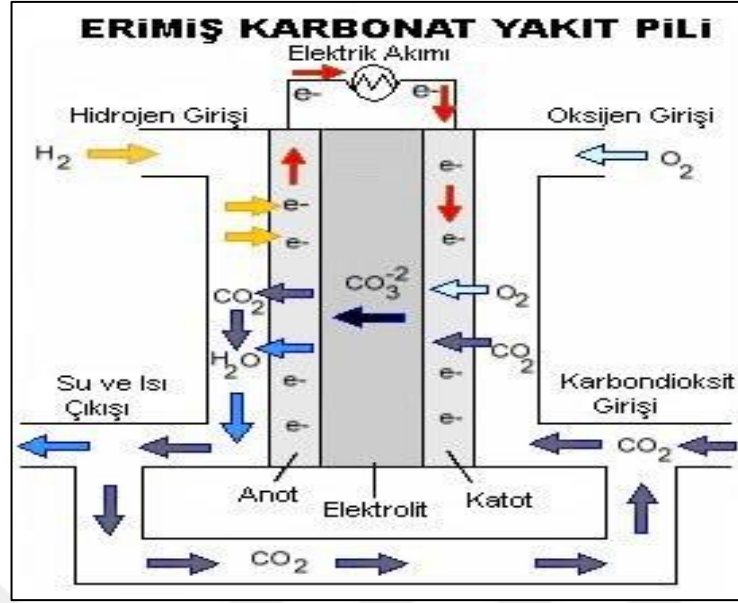


### 2.2.2. Erimiş karbonat yakıt pili

Erimiş karbonat yakıt hücreleri, gözenekli, kimyasal olarak inert bir seramik lityum alüminyum oksit matrisinde süspansiyon haline getirilmiş eriyik karbonat tuzu karışımından oluşan bir elektroliti kullanan yüksek sıcaklıklı yakıt hücreleridir. Bu eriyik, karbon iyonları aracılığı ile katottan anoda kütle ve şarj aktarımını sağlar ve inert gözenekli yapıda tutar. Elektrolit üzerinden anoda geçen karbonat iyonları burada hidrojen iyonları ile birleşerek su ve CO<sub>2</sub> oluşturur ve iki elektron serbest bırakılır. 650 °C ye kadar yüksek sıcaklıklarda çalıştılarından, değerli olmayan metaller anot ve katot katalizörleri olarak kullanılabilir. Bu da maliyetlerini düşüren bir etmendir. EKYP'ler deki verimin artırılması da maliyetleri düşürmenin ayrı bir yoludur. Bu tip yakıt hücreleri, bir gaz türbini ile kombine edildiği takdirde tesisin verimi %65 seviyelerine çekilmektedir. Atık ısı da yakalanıp kullanıldığında ise toplam yakıt verimliliği % 85 seviyesinin üzerine çıkabilmektedir.

Alkali, Fosforik asit ve PEM tipi yakıt pillerinden farklı olarak, doğal gaz ve biyogaz gibi yakıtları hidrojene dönüştürmek için harici bir yakıcı-dönüştürücü ünitesine ihtiyaç duymazlar. EKYP'ler çalıştıkları yüksek sıcaklıklarda, yakıtlardaki metan ve diğer hafif hidrokarbonları dâhili reform adı verilen bir işlemle yakıt hücresinin içerisinde hidrojene dönüştürürler. Bu da maliyetleri düşüren diğer bir etmendir. Denklem (2.4)'de anot reaksiyonu, Denklem (2.5)'de katot reaksiyonu ve Denklem (2.6)'da ise toplam reaksiyon gösterilmektedir;





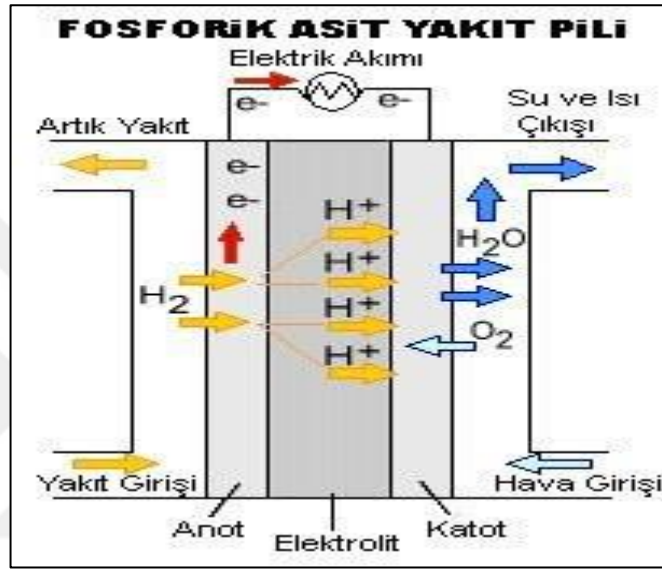
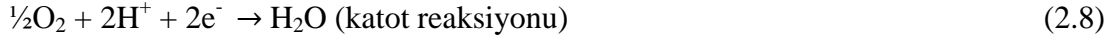
Şekil 2.11. Erimiş karbonat yakıt pilinin gösterimi [25]

### 2.2.3. Fosforik asit yakıt pili

Fosforik asit yakıt hücreleri, elektrolit olarak sıvı fosforik asit kullanırlar; asit, teflon bağlı silikon karbür matrisinin içerisinde bulunur ve platin katalizör içeren gözenekli karbon elektrotlar içerir. FAYP'ler, modern yakıt pillerinin “ilk nesli” olarak görülürler. En eski yakıt pili türlerinden biridir ve ticari olarak bir uygulamada ilk kez bu tip hücreler kullanılmıştır. Bu tip yakıt hücreleri tipik olarak sabit, taşınmaz elektrik üretimi uygulamaları için kullanılır, ancak bazı FAYP'ler şehir içi otobüsler gibi hareketli araçlara da güç sağlamak için kullanılmıştır.

FAYP'ler, karbon monoksit ile kolayca zehirlenebilen PEM tipi yakıt pillerine göre, hidrojene dönüştürülen fosil yakıtlarındaki safsızlıklara karşı daha toleranslıdır, çünkü karbon monoksit anottaki platin katalizörüne bağlanır ve yakıt pilinin verimliliğini azaltır. FAYP'ler, elektrik ve ısı ortak üretimi sistemlerinde (kojenerasyon) kullanıldığında % 85 ve üstü verimliliklere ulaşırlar, ancak tek başlarına kullanıldıklarında verimleri düşmektedir (% 37-42). Bu tip yakıt pillerinin verimliliği, genellikle %33 verim ile çalışan yakma temelli santrallerin verimlerinden biraz daha fazladır. FAYP'ler, aynı ağırlıkta ve hacimdeki diğer yakıt pilleri ile karşılaştırıldıklarında güç yoğunlukları daha düşüktür. Diğer yakıt pillerine oranla daha fazla platin katalizör yüklemelerine ihtiyaç duyarlar. Sonuç olarak bu tip yakıt

pilleri ağır ve maliyetlidirler. Denklem (2.7)'de anot reaksiyonu, Denklem (2.8)'de katot reaksiyonu ve Denklem (2.9)'da ise toplam reaksiyon gösterilmektedir;

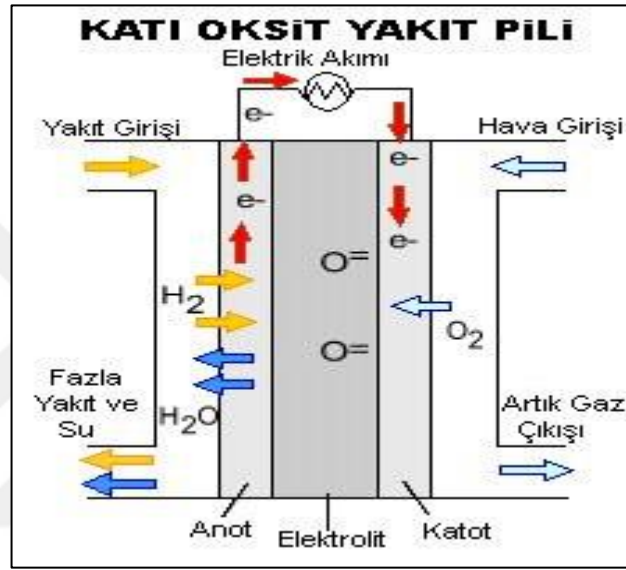


Şekil 2.12. Fosforik asit yakıt pilinin gösterimi [25]

#### 2.2.4. Katı oksit yakıt pili

Katı oksit yakıt pilleri (KOYP), elektrolit olarak sert, gözeneksiz seramik bir yapı kullanır. Yakıtın elektriğe dönüştürülmesinde KOYP'ların verimi yaklaşık %60 seviyelerindedir. Sistemin atık ısını yakalamak ve kullanmak için tasarlanan uygulamalarda (kojenerasyon), toplam yakıt kullanımını verimliliği %85'in üzerine çıkabilir. KOYP'lar 1000 °C gibi yüksek sıcaklıklarda çalışırlar. Bu sıcaklıklarda çalışma, değerli metal katalizör ihtiyacını ortadan kaldırır ve böylece maliyetleri düşürür. Aynı zamanda KOYP'lar yüksek sıcaklıkta çalıştılarından, doğrudan reformat gazlarını kullanımına olanak verirler. KOYP'lar kükürtlere karşı en dayanıklı yakıt pilleridir. Diğer türlere göre daha çok kükürt sülfür miktarını tolere edebilirler. Buna ek olarak, karbon monoksitten zehirlenmezler. Bu özellik KOYP'ların doğal gaz, biyogaz ve kömürden üretilen gazları kullanmasına olarak tanır. Yüksek sıcaklıkta çalıştırılmalarının bazı sonuçları vardır; hem sistemin

başlatılması hem de kapatılması uzun süreler almaktadır, aynı zamanda yüksek sıcaklığa dayanıklı, yüksek mukavemetli ve ucuz malzemelerin geliştirilmesine ihtiyaç duymaktadırlar. KOYP teknolojisindeki çalışmalar, 700 °C veya daha düşük sıcaklıklar çalışabilen ve daha az mekanik mukavemete ihtiyaç duyan, düşük maliyetli KOYP teknolojileri üzerinde yoğunlaşmaktadır. Denklem (2.10)'da anot reaksiyonu, Denklem (2.11)'de katot reaksiyonu ve Denklem (2.12)'de ise toplam reaksiyon gösterilmektedir;



Şekil 2.13. Katı oksit yakıt pilinin gösterimi [25]



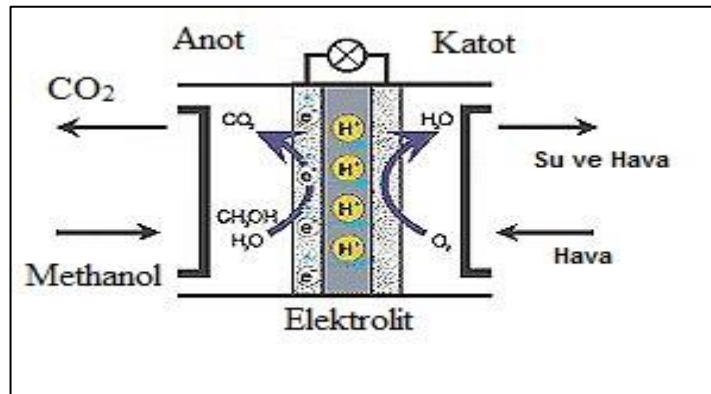
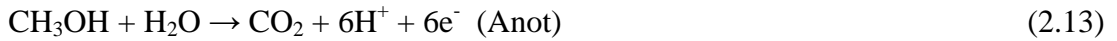
### 2.2.5. Doğrudan metanol yakıt pili

Çoğu yakıt hücresi, hücre içerisine direkt olarak beslenen hidrojen veya metanol, etanol ve hidrokarbon yakıtları gibi hidrojen açısından zengin yakıtların reforme edilerek kullanılması ile çalışırlar. Bununla birlikte, doğrudan metanol yakıt hücreleri (DMFC), genellikle su ile karıştırılan ve doğrudan yakıt hücresi anoduna beslenen saf metanol ile çalışmaktadırlar.

DMYP teknolojisi, PEM tipi yakıt hücrelerinin bir alt kolu gibidir. Bu teknoloji, sıvı yakıtın avantajlarından ötürü özellikle taşınabilir elektronik ve araç uygulamaları için umut vericidir. DMYP, metanolün reaksiyon yoluyla CO<sub>2</sub>'ye dönüştüğü bir anoda, oksijen veya havanın suya ve buhara dönüştüğü bir katoda sahiptir. Metanol yakıt pilleri düşük sıcaklıkta (50-120 °C) çalışmaktadırlar ve verimleri %40 civarındadır.

DMYP'ler, metanolün teorik olarak sahip olduğu üstün enerji yoğunluğundan dolayı, PEM tipi yakıt pilleri ve araçlarda kullanılan bataryaların yerine geçme potansiyeline sahiptir. Bu özellikler, taşınabilir diz üstü bilgisayarlar ve cep telefonları için de DMYP'leri avantajlı hale getirmektedir. Tüm bu avantajlara rağmen bu teknolojinin ticarileşmesi için çeşitli dezavantajlar mevcuttur. Yakıt pili içerisindeki metanol geçişleri (metanol crossover), metanol moleküllerinin membrandan pozitif elektron vasıtasıyla anottan katoda geçmesi ve oksijen ile oksitlenmesi anlamına gelmektedir. Bu geçiş, hücre voltajını, akım yoğunluğunu ve yakıt kullanım oranını dolayısı ile hücre performansının ciddi ölçüde düşmesine sebep olmaktadır.

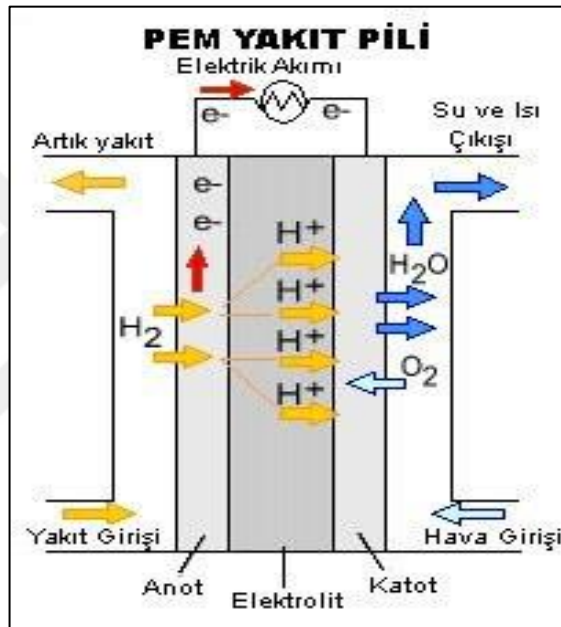
DMYP'lerin ticarileştirilmesindeki en büyük endişelerden biri, hücrenin uzun vadeli çalışma sırasında istikrarıdır. DMYP'lerin bozunma oranları, metanol oksidasyonundan dolayı üretilen ara ürünler dolayısıyla MEA zehirlenmesine bağlı olarak yüksektir. Bu dezavantajlar ve akım yoğunluklarının düşüklüğü, DMYP'lerin ticarileşmesindeki en büyük engellerdir [26]. Denklem (2.13)'de anot, Denklem (2.14)'de katot reaksiyonu şu şekilde ifade edilmiştir;



Şekil 2.14. Doğrudan metanol yakıt pili gösterimi [27]

### 2.2.6. Polimer elektrolit membranlı yakıt pili

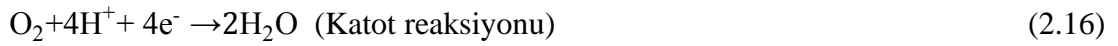
Proton deęişim membranı olarak da bilinen polimer elektrolit membranlı yakıt hücreleri, yüksek güç yoğunluğu sağlar ve dięer yakıt pili türleri ile karşılaştırıldıklarında düşük ağırlık ve hacim avantajı sunarlar. PEM yakıt hücreleri, bir elektrolit olarak katı polimer ve bir platin veya platin alaşımı katalizörü içeren gözenekli karbon elektrotları kullanır. Çalışmaları için sadece hidrojene ve havadan oksijene ihtiyaç duyarlar. Genellikle depolama tanklarından veya yakıcı-dönüştürücü ünitelerinden elde edilen hidrojeni yakıt olarak kullanırlar.



Şekil 2.15. PEM yakıt pilinin gösterimi [25]

PEM yakıt hücreleri 80 °C civarında nispeten düşük sıcaklıklarda çalışırlar. Düşük sıcaklıklı çalışma, hızlı bir şekilde çalışmaya başlamalarını sağlar (daha az ısınma süresi) ve sistem bileşenleri üzerinde daha az aşınma ile sonuçlanır. Bununla birlikte, hidrojenin elektronlarını ve protonlarını ayırmak için soy metal katalizörünün (tipik olarak platin) kullanılması gerekir ve böylece sistem maliyeti artar. Platin katalizör aynı zamanda karbon monoksit zehirlenmesine son derece duyarlıdır ve hidrojen bir hidrokarbon yakıttan türetilirse yakıt gazındaki karbon monoksiti azaltmak için ek bir reaktör kullanmayı gerekli kılmaktadır. Bu reaktör de aynı zamanda maliyetleri arttırmaktadır [28].

PEM yakıt pilleri öncelikli olarak ulaşım uygulamaları ve bazı sabit uygulamalar için kullanılırlar. Hızlı başlangıç zamanları ve yüksek ağırlık/güç oranları sebebi ile otobüsler ve binek araçlarda kullanımları yaygındır. Şekil 2.15.'de PEM yakıt pilinin gösterimi sunulmaktadır. Denklem (2.15)'de anot reaksiyonu, Denklem (2.16)'da katot reaksiyonu ve Denklem (2.17)'de ise toplam reaksiyon gösterilmektedir;



Yukarıda verilen bilgilere göre yakıt pili türleri arasındaki farklar Tablo 2.1.'de verilmiştir.

Tablo 2.1. Yakıt pili türleri arasındaki farklılıklar [25]

	PEMYP	AYP	FAYP	KOYP	EKYP	DMYP
<b>Çalışma sıcaklığı</b>	80 °C	65-220 °C	150-220 °C	600-1000 °C	650 °C	50-90 °C
<b>Katalizör</b>	Pt veya Pt/Ru	Pt	Pt	Perovskites	Nikel	Pt/Ru
<b>Yakıt Islahı</b>	Pil dışı	Pil dışı	Pil dışı	Pil içi	Pil içi	Gerekmez
<b>Anot Gazı</b>	H <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> , CH <sub>4</sub>	H <sub>2</sub> , CH <sub>4</sub>	Metanol çözeltisi
<b>Katot Gazı</b>	Hava/O <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>	Hava/O <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>	Hava/O <sub>2</sub>	Hava/O <sub>2</sub>
<b>Elektrolit</b>	Katı polimer membran	KOH	Sıvı fosforik asit	Y <sub>2</sub> O <sub>3</sub> içeren zirkonya	Sıvı erimiş karbonatlar	Katı polimer, sıvı alkalin
<b>Isıl Yönetim</b>	Soğutucu	Soğutucu Kojenerasyon	Kojenerasyon	Kojenerasyon	Kojenerasyon	Soğutucu
<b>Verim</b>	%35-60	%50-70	%35-50	%45-60	%40-55	%35-40
<b>Transfer edilen iyon</b>	H <sup>+</sup>	OH <sup>-</sup>	H <sup>+</sup>	O <sup>-2</sup>	CO <sub>3</sub> <sup>-2</sup>	H <sup>+</sup>



### 2.3. Yakıt Pili Uygulamaları

Günümüzde yakıt pilleri gerek bireysel, gerekse toplu taşımada yer tutmaya başlamıştır. Yakıt pilleri, araçların tahrik sistemlerine doğrudan veya dolaylı olarak eklenmektedirler. Doğrudan yakıt pilli olan sistemlerde yakıt pili ana tahrik unsuru olarak görev alıp, ek bir batarya ile tüm araç sistemlerini çalıştırabilmektedir. Dolaylı sistemlerde, yakıt pili, elektrikli bir araca destek olacak şekilde menzil arttırıcı görevi görür. Ana tahrik ve yan sistemlerin güç gereksinimi batarya üzerinden karşılanırken, yakıt pili batarya seviyesi belirli bir alt değere ulaştığında devreye girip, elektrikli aracın menzilinı arttırma görevi görmektedir. Ulaştırma ve taşımacılık sektöründe yakıt pillerinin kullanım alanları şu şekildedir;

- Sanayide kullanılan forkliftler ve havaalanlarında kullanılan bagaj taşıma araçları ve diğer mal taşıma araçları
- İki ve üç tekerlekli araçlar, bisiklet, motosiklet ve mobilet tarzı araçlar
- Otomobiller, kamyonetler ve hafif ticari araçlar gibi taşıtlar
- Otobüs ve tırlar
- Tren ve tramvay sistemleri
- Feribot ve küçük tekneler
- İnsanlı hava taşıtları
- İnsansız hava, deniz ve kara araçları

Otomotiv firmalarının elektrikli-bataryalı ve içten yanmalı araçlara alternatif olarak geliştirmiş olduğu yakıt pilli araçlar gün geçtikçe yaygınlaşmaktadırlar. Amerika Birleşik Devletleri (A.B.D), Avrupa ve Asya'nın gelişmiş ülkelerinde yakıt pilli araçlar kullanılmaya başlanmıştır. Ticari olarak satışta olan ve seri üretimi olan yakıt pilli araçlar; Şekil 2.16.'da gösterilen Toyota Mirai, Hyundai Tucson, Honda Clarity FCX'dir. Bu araçlardan ayrı olarak, hemen hemen tüm araç üreticisi firmalarının konsept ve prototip yakıt pilli araç çalışmaları mevcuttur. Ayrıca birçok firma yakıt pilli araçlarını 2020'li yıllarda seri üretime geçireceklerini açıklamışlardır.

Yakıt pilli araçlar günümüzde çok yaygınlaşmasalar da ticari potansiyelleri oldukça yüksektir. Dolum istasyonlarının yeterince olmaması, otomotiv yan sanayi ve parça üreticilerinin henüz bu teknolojiyi bilmiyor olmaları vb. etmenler teknolojinin

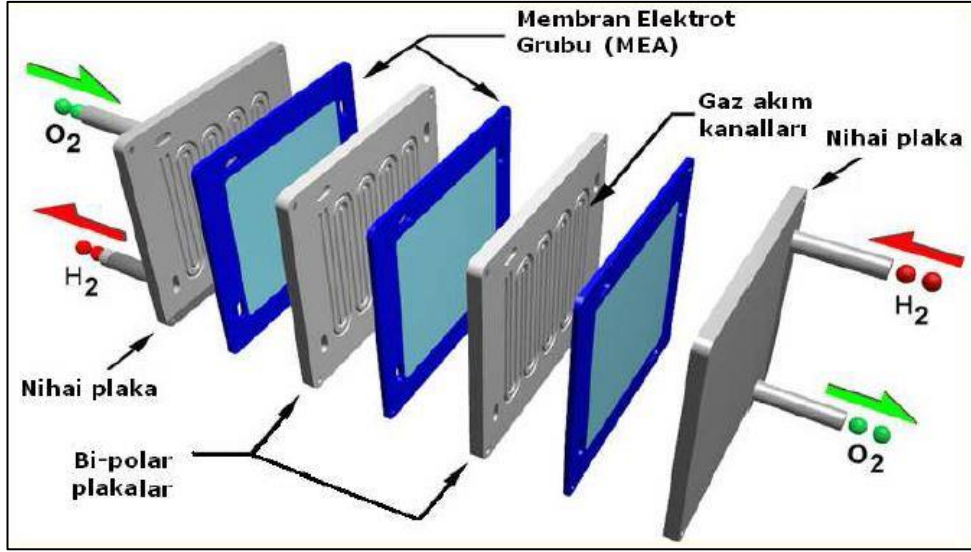
yayılmalarının önündeki engellerdir. Yakıt pilli araçlar, hızlı yakıt dolum süreleri, sessiz ve tamamen çevreci olmaları sebebiyle 21. yüzyılın ortalarında sektör tarafından benimsenecek ve müşteri tarafından da tercih edilir hale geleceklerdir.



Şekil 2.16. Toyota Mirai yakıt pilli araç [29]

#### 2.4. Polimer Elektrolit Membranlı Yakıt Pili Bileşenleri

PEM tipi yakıt pillerinin merkezlerinde polimer, proton iletken bir membran bulunmaktadır. Bu membranın her iki yanında gözenekli bir elektrot bulunur. Bu elektrotlar, reaktant gazların katalizör-membran ara yüzüne taşınabilmesi için gözenekli yapıya sahiptirler. Bu elektrotlar üretim prosesine bağlı olarak, membran veya gaz difüzyon tabalarına bağlı olabilirler. Membranın, her iki yanından elektrot ile kaplanmış haline membran elektrot ünitesi (MEÜ) adı verilir. MEÜ, üretilen akımı gaz difüzyon tabakaları ve sonrasında çift kutuplu plakalar aracılığıyla akım toplayıcı plakalara iletirler. Çift kutuplu plakalar, çok hücreli yakıt pillerinde bir hücrenin anodunu diğer hücrenin katoduna bağlarlar ve bu sebeple çift kutuplu plakalar olarak adlandırılırlar. Bu plakalar, reaktant gaz akışına izin verirler ve ürünlerin hücre dışına çıkarılmasını sağlarlar.



Şekil 2.17. Yakıt pili yığını ve bileşenleri [30]

#### 2.4.1. Polimer elektrolit membran

Membranın temel fonksiyonu anot ve katot arasındaki iyonik etkileşimi gerçekleştirmektir. Aynı zamanda reaksiyona giren iki gazı (hidrojen ve oksijen) birbirinden ayırır. PEM yakıt pilinde kullanılan membranın en önemli problemi kuruması ile proton ya da hidrojen iyonu iletiminin azalmasıdır. Su miktarının fazlalığı ise elektrotlarda su taşması ve geri basınç oluşumuna neden olmaktadır. Bu etkiler yakıt pili performansını önemli ölçüde etkilemektedir. Bu sebeple, membranda üzerinde iyi bir su yönetimi gereklidir. Yakıt pilinde meydana gelen elektrokimyasal reaksiyon sonucu açığa çıkan ısının da sistemden uzaklaştırılması önemlidir. Yakıt pili sıcaklığının sabit tutulma gerekliliği özellikle orta ve büyük ölçekli uygulamalarda uygun bir soğutma sistemine ihtiyacı ortaya çıkarmaktadır.

PEM yakıt pilinde çoğunlukla perfluorokarbon esaslı iyon değiştirici membranlar kullanılmaktadır. Günümüzde kullanılan standart elektrolit malzemesi Nafion'dur. 1960'lı yıllarda Dupont firması tarafından geliştirilmiştir ve teflon kökenli bir malzemedir. Çeşitli serileri üretilmiş olup günümüzde Nafion 200 serisi, Nafion 115-117, HP ve XL serilerinin kullanımı yaygındır. Nafion membranlar ısı ve kimyasal kararlılığa sahiptir. En çok kullanılan membran olan Nafion®, protonların aktarılması için membranın sıvı su nemlendirmesi prensibine dayanmaktadır. PEM yakıt hücrelerinin performansları proton transferini sağlayan membranın proton iletkenliği ile doğru orantılı olarak değişmektedir. Membran proton iletkenliği ise

hücre içerisindeki sıcaklık ve bağıl nemin bir fonksiyonu olan membran su içeriği ile doğru orantılı olarak değişmektedir. Suyun olmadığı durumlarda membran kuruyacağı için sistemin işletilmesi 80-90 °C'nin üzerindeki sıcaklıklarda uygun olmamaktadır. Diğer son zamanlarda ortaya çıkan membran tipleri Polibenzimidazol (PBI) veya fosforik asit temelli olup herhangi bir su yönetimine ihtiyaç duymaksızın 220 °C'ye kadar çıkabilmektedirler. Bu membranların belli başlı avantajlarının arasında yüksek sıcaklığın daha iyi verim, güç yoğunluğu, kolay soğuma (büyük sıcaklık farklarından dolayı) sağlaması, karbonmonoksit zehirlenmesine karşı düşük duyarlılık ve daha iyi kontrol (membranda su yönetimi işleminin yokluğundan dolayı) bulunmaktadır. Fakat bu son tip membranlar çok fazla yaygın olmamakla beraber, araştırma laboratuvarları ve ticari kuruluşlar Nafion tip membran kullanmaktadırlar [18, 31, 32].

#### **2.4.2. Elektrotlar**

Polimer elektrolit membranın her iki tarafına, bir tarafta anot, diğer tarafta katot katmanı olmak üzere kaplanmaktadırlar. Geleneksel elektrot tabakaları, yüksek yüzey alanlı bir karbon destek üzerine dağıtılmış nanometre boyutundaki platin parçaları içermektedirler. Bu desteklenen platin katalizör, iyon iletken bir polimer (iyonomer) ile karıştırılır ve membran ile gaz difüzyon tabakaları arasında preslenir. Anot tarafında, oksidasyon yarı reaksiyonu ile platin katalizör hidrojen moleküllerinin protonlara ve elektronlara ayrışmasını sağlar. Bu iyonlar iyonik iletkenliğe sahip polimer membrandan geçerek katot tabakasına ulaşırlar. Katot tarafında, anot tarafında üretilen protonlarla reaksiyona girerek su üreten, platin katalizör oksijen ile reaksiyona girerek su oluştururlar ve reaksiyon sırasında ısı açığa çıkarırlar. Bu reaksiyon kısmen düşük sıcaklıklarda meydana gelip (80-90 °C) anot ve katot da bulunan katalizörler yarı reaksiyonların hızlarını arttırmaktadırlar. Elektrotlar membran veya gaz difüzyon tabakası yüzeyinde 10 ile 50 µm kalınlığında bir yüzey oluştururlar. Elektrotlar membran veya gaz difüzyon tabakası yüzeylerine, vakum sıvama, sprey kaplama veya çıkartma (Decal) yöntemi ile kaplanmaktadırlar.

#### **2.4.3. Bipolar plakalar**

PEM yakıt pillerinin önemli bir parçası olan bipolar plakalar, toplam yığın ağırlıklarının yüzde 80'lik bir kısmını, toplam yığın maliyetlerinin ise yaklaşık yüzde

45'lik bir kısmını oluşturmaktadırlar. Reaktantları aktif alanlar üzerinde eşit olarak dağıtmak ve reaksiyon sonucu oluşan ısıyı uzaklaştırmak, hücreden hücreye akım taşımak ve reaktantların ve soğutucu akışkanın sızmasını önlemek gibi birçok fonksiyonu yerine getirmek üzere tasarlanırlar. Bu plakalar, ucuz ve hafif malzemelerden imal edilmeli ve kolaylıkla üretilebilmelidirler. Bu kriterleri karşılayan plakaları üretme çabaları sürerken bugüne kadar incelenen temel malzemeler, elektro grafit, sac malzemeler (kaplamalı ve kaplamasız) ve grafit polimer kompozitlerdir.

Bipolar plakalarda, termal genleşme katsayısı, yoğunluk ve hidrofobisite gibi etmenler önemli fiziksel özelliklerdir. Bipolar plakalarda aşağıdaki özellikler aranmaktadır;

- Elektriksel iletkenliğin yüksek olması, plaka direnci  $< 0,01 \Omega\text{cm}^2$
- Termal iletkenliğin yüksek olması
- Korozyon direnci, korozyon oranı  $< 0,016 \text{ mA/cm}^2$
- Basınç dayanımı  $> 1,5 \text{ bar}$
- Yoğunluk  $< 5\text{g/cm}^2$

Geleneksel olarak en yaygın olarak kullanılan bipolar plaka malzemesi, yakıt pili ortamında mükemmel kimyasal stabiliteye sahip olan kompozit, doğal ve sentetik grafitir. Grafit malzemelerin elektriksel dirençlerinin düşük oluşu, yüksek güç yoğunluklarına ulaşılmasına olanak tanır. Bununla birlikte, yüksek maliyet, düşük mekanik mukavemet ve akış kanallarının oluşturulması için CNC işleme ve taşlama gibi gereksinimlere ihtiyaç duymaktadır. Son yıllarda yapılan çalışmalar ile grafit plakaların üzerindeki kanallar kalıp ile şekillendirilerek bu dezavantajlar da ortadan kaldırılmaktadır.

Metal malzemeler, sac levha olarak, bipolar plaka olarak kullanıldıklarında iyi bir mekanik mukavemete ve yüksek termal iletkenliğe sahip olmalarının yanında kolayca şekillendirilebilir olmaları ve hafif olmaları sebebiyle bipolar plaka malzemesi olarak kullanılmaya başlanmışlardır. Özellikle taşınabilir uygulamalar, otomotiv ve insansız hava araçları uygulamalarında iyi bir alternatif olmuşlardır. Bununla birlikte, metal plakalar, yakıt pili ortamındaki sıcaklık ve 2-3 pH'lı bir

çalışma ortamına maruz kaldıklarında korozyona ya da çözünmeye meyilli olurlar. Çözünmüş metal iyonları ve oksitler, polimer membranın zehirlenmesine ve dolayısıyla iyonik iletkenliğinin düşmesine sebep olurlar. Dahası, bipolar plaka üzerindeki korozyon tabakası elektriksel direnci artırarak hücrenin performansını düşürür. Bu sebeple metal plakaların kaplamasız veya özel alaşım olmadan yakıt pillerinde kullanılmaları sakıncalıdır. Temel metal malzeme olarak alüminyum, titanyum, 304, 316L, 301 gibi çelik malzemeler kullanılır. Bununla birlikte özel alaşımlardan olan İnconel de bipolar plaka malzemesi olarak kullanılabilir. Metal plakalara yapılacak olan kapmalar iletken olmalı ve ana metal yüzeyine kusursuz tutunmalıdır. Ayrıca temel metal ve kaplama malzemesinin termal genleşme katsayıları mümkün olduğunca yakın olmalıdır. Aksi halde, oluşan farklı genleşmeler sebebiyle plaka yüzeylerinde mikro çatlaklar oluşacaktır. Kaplamalarda karbon esaslı ve metal esaslı kaplamalar tercih edilirler. Karbon esaslı kaplamalar arasında grafit, iletken polimer, elmas benzeri karbon ve organik monopolimerler bulunur. Metal bazlı kaplamalarda ise, soy metaller, metal nitrürler ve metal karbürler bulunurlar [33]. Yakıt pillerinin diğer bileşenleri ise şunlardır;

- Gaz difüzyon tabakaları
- Akım toplayıcılar
- Contalar
- Hardware plakaları

### 3. TEMEL REAKSİYONLAR VE YAKIT PİLİ TERMODİNAMİĞİ

Yakıt pillerindeki elektrokimyasal reaksiyonlar membranın hem anot hem de katot taraflarında eş zamanlı olarak meydana gelmektedir. Denklem (3.1)'de anot reaksiyonu, Denklem (3.2)'de katot reaksiyonu ve Denklem (3.3)'de ise toplam reaksiyon gösterilmektedir;



Bu reaksiyonlar çeşitli yan reaksiyonlar içerebilir ancak şimdilik temel yakıt pili proseslerini açıklamak için yeterli olacaktır. Toplam reaksiyon aslında hidrojen yanma reaksiyonu ile aynıdır. Yanma olayı enerji açığa çıkaran bir egzotermik reaksiyon olduğu için yakıt pili toplam reaksiyonu da bir yanma reaksiyonu olarak adlandırılabilir ve Denklem (3.4)'de ifade edilmiştir;



Kimyasal reaksiyon ısısı, ürünler ve reaktantlar arasındaki oluşum ısısı farkını ifade etmektedir. Bu Denklem (3.5)'de şu şekilde ifade edilmiştir;

$$\Delta H = (H_f)_{\text{H}_2\text{O}(l)} - (H_f)_{\text{H}_2} - \frac{1}{2}(H_f)_{\text{O}_2} \quad (3.5)$$

25 °C'deki sıvı fazdaki suyun oluşum ısısı  $-286,02 \text{ kJ mol}^{-1}$  dur. Bu değer hidrojenin üst ısı değeri ifadesi olarak da tanımlanır ve hidrojenin oksijen ile birlikte reaksiyonu sonucunda oluşan ısıya eşittir ve Denklem (3.6)'da ifade edilmiştir;

$$\Delta H = (H_f)_{\text{H}_2\text{O}(l)} - (H_f)_{\text{H}_2} - \frac{1}{2}(H_f)_{\text{O}_2} \quad (3.6)$$

$$= 286,02 \text{ kJmol}^{-1} - 0 - \frac{1}{2} \cdot 0 = -286,02 \text{ kJmol}^{-1}$$

Reaksiyon sonucunda entalpi deęerinin negatif olması, reaksiyonun egzotermik bir reaksiyon olduęunu belirtmektedir. Hidrojenin ısı deęeri yakıt hücresine verilen enerji miktarını temsil etmektedir. Bu enerji, hidrojenden alınabilecek maksimum termal enerjidir. Bu enerji ile yakıt hücrelerinde elektrik üretilmektedir. Ancak bu reaksiyonlarda verilen enerjinin tamamı elektrik enerjisine dönüştürülemez. Hidrojenin ısı deęerinin elektrik enerjisine çevrilebilecek miktarı Gibbs serbest enerji deęişimi ile bulunabilir. Gibbs serbest enerji deęişimi ( $\Delta G$ ) ile entalpi ve entropi deęişimleri ( $\Delta H$ ,  $\Delta S$ ) arasında ařaęıdaki baęıntı mevcuttur;

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S \quad (3.7)$$

Denklem (3.7)'den anlaşılacaęı üzere entropi deęişimi, yakıt hücresinde meydana gelen reaksiyon sebebiyle oluřan tersinmez (entropi) kayıpları ifade eder. Entropi deęişimi ürün ile reaktant entropisi arasındaki farkı ifade etmektedir ve Denklem (3.8)'de řu şekilde ifade edilmiřtir;

$$\Delta S = (S_f)_{H_2O(l)} - (S_f)_{H_2} - \frac{1}{2} (S_f)_{O_2} \quad (3.8)$$

Benzer olarak  $\Delta H$ , ürünler ve reaktantlar arasındaki entalpi farkını ifade etmektedir. Entalpi ve entropi deęerleri 1 atm ortam basıncında ve 25 °C'deki řartlarda geçerlidir.

Denklem (3.8) ve Tablo 3.1'deki deęerler dikkate alındıęında 25 °C'de, 286,02 kJ mol<sup>-1</sup> enerji açıęa çıkmaktadır. Bu enerjinin 237,34 kJ mol<sup>-1</sup> olan kısmı elektriksel enerjiye, 48,68 kJ mol<sup>-1</sup> lük kısmı ise ısıya dönüşmektedir. 25 °C'den farklı sıcaklıklarda bu deęerler deęişmektedir. Genel olarak elektriksel iř, akım ve potansiyelin bir ürünü olarak dile getirilmektedir.



Tablo 3.1. Reaktant ve ürünler için entalpi ve entropi oluşum değerleri (25 °C ve 1 atm basınçta)

Tür	$h_f$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$s_f$ (kJ mol <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )
Hidrojen, H <sub>2</sub>	0	0,13066
Oksijen, O <sub>2</sub>	0	0,20517
Su(sıvı), H <sub>2</sub> O(l)	-286,02	0,06996
Su (buhar), H <sub>2</sub> O(g)	-241,98	0,18884

$$W = qE \quad (3.9)$$

Denklem (3.9)'da belirtilen W elektriksel iş ( J mol<sup>-1</sup>), q yük (Coulombs mol<sup>-1</sup>) ve E elektriksel potansiyeli (V) ifade etmektedir. Bir mol hidrojenin yakıt hücresinde reaksiyona girmesi sonucunda transfer edilen yük miktarı Denklem (3.10)'da;

$$q = nF \quad (3.10)$$

ile ifade edilmektedir. n=2 dir ve bir molekül hidrojenden açığa çıkan elektron sayısını ifade etmektedir. F ise avagadro ile açığa çıkan bir elektron yükünün çarpımına eşit olan Faraday katsayısıdır ve Denklem (3.11) ile ifade edilmektedir;

$$F = 96485,3415 \text{ As mol}^{-1} \quad (3.11)$$

Denklem (3.10), Denklem (3.9)'da yerine yazıldığı takdirde;

$$W = nFE \quad (3.12)$$

Denklem (3.12) elde edilmektedir ve elektriksel işi ifade etmektedir.

Yakıt pillerinde maksimum elde edilecek elektriksel iş Gibbs serbest enerji değişimine eşit olduğu için  $\Delta G$ ;

$$W_{el} = -\Delta G \quad (3.13)$$

$$E = \frac{-\Delta G}{nF} \quad (3.14)$$

25 °C'deki Gibbs serbest enerji değeri kullanarak teorik hücre potansiyeli hesaplandığında Denklem (3.15) elde edilmektedir;

$$E = \frac{-\Delta G}{nF} = \frac{237,340 \text{ j mol}^{-1}}{2 \times 96485 \text{ As mol}^{-1}} = 1,23 \text{ Volt} \quad (3.15)$$

### 3.1. Sıcaklığın Etkisi

Yakıt hücrelerinden elde edilecek teorik maksimum hücre gerilimi sıcaklık ile değişmektedir ve Denklem (3.16) ile gösterilmiştir;

$$E = -\frac{\Delta H}{nF} - \frac{T\Delta S}{nF} \quad (3.16)$$

Tablo 3.2. Entalpi, entropi, Gibbs serbest enerjisi ve teorik hücre geriliminin sıcaklık ile değişimi [18]

T(K)	$\Delta H$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\Delta G$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	$\Delta S$ (kJ mol <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )	$E_{th}$ (V)
298,15	-286,02	-237,34	-0,16328	1,230
333,15	-284,85	-231,63	-0,15975	1,200
353,15	-284,18	-228,42	-0,15791	1,184
373,15	-283,52	-225,24	-0,15617	1,167

Sıcaklık ile teorik hücre geriliminin düşüşü Tablo 3.2. içerisinde gösterilmiştir. Düşük sıcaklıklarda hücre geriliminin daha yüksek olduğu, sıcaklığın artması ile

birlikte hücre geriliminde düşüşler meydana geldiği görülmektedir. Bununla birlikte, yakıt hücreleri çalıştırıldıklarında görülecektir ki hücre sıcaklığı arttığında hücre gerilimi de artacaktır. Bunun temel sebebi voltaj kayıplarının sıcaklığın yükselmesi ile düşecek olmasıdır. Bu düşüş, teorik hücre gerilimindeki düşüşten daha etkili olduğu için yakıt pillerinde sıcaklık ile hücre gerilimi yükselmektedir [18].

### 3.2. Yakıt Pili Verimliliği

Enerji dönüşüm sistemlerinde verim, sisteme giren enerji ile kullanılabilir şekilde çıkan enerjinin oranı olarak tanımlanır. Yakıt pili sistemlerinde ise verim, üretilen elektrik enerjisi ile sisteme giren hidrojenin entalpilerinin oranı olarak tanımlanabilir. 25 °C’de yakıt pilinin maksimum verimi Denklem (3.17) ile ifade edilmiştir;

$$\eta_{th} = \frac{-\Delta G_h}{-\Delta H} = \frac{237,34}{286,02} = 0,83 \quad (3.17)$$

Genellikle hidrojen alt ısı değeri de yakıt pili verim hesaplarında kullanılabilir. Bu değer kullanılması sebebi sadece verimin yüksek çıkması değil, aynı zamanda içten yanmalı motorlar ile (bu cihazların verim hesaplarında alt ısı değer baz alınır) karşılaştırmak için kullanılır. Bu değer baz alındığında maksimum teorik verim Denklem (3.18)’de ifade edilmiştir;

$$\eta_{th} = \frac{\Delta G_h}{\Delta H_{LHV}} = \frac{228,74}{241,98} = 0,945 \quad (3.18)$$

### 3.3. Basıncın Etkisi

Yukarıdaki hesaplamaların tamamı atmosferik koşullar için geçerlidir. Atmosferik şartlar değiştiğinde veya yakıt pili çalışma basıncı değiştirildiğinde Gibbs serbest enerji değişiminin basınç ile olan ilişkisi kullanılarak değişik basınçlardaki hücre potansiyeli değerleri hesaplanabilir. Gibbs serbest enerji değişiminin tanımına göre;

$$dG = V_m dP \quad (3.19)$$

şeklindedir ve Denklem (3.19)’da ifade edilmiştir.  $V_m$  molar hacim ( $m^3 mol^{-1}$ ) ve  $P$  kısmi basınç (Pa) tır. Denklem (3.20) ideal gaz kanununu ifade etmektedir;

$$PV_m = RT \quad (3.20)$$

olacak şekildedir. Denklem (3.20)'de  $V_m$  alınıp Denklem (3.19)'da yerine yazılır ve integral alınırsa Denklem (3.21) elde edilir;

$$G = G_0 + RT \ln \left( \frac{P}{P_0} \right) \quad (3.21)$$

Denklem (3.21)'de  $G_0$  standart koşullardaki Gibbs serbest enerji değişim değerini ve  $P_0$  ise standart koşullardaki kısmi basıncı ifade etmektedir. Gibbs serbest enerji değişiminin tanımına göre PEM yakıt hücresi için Denklem (3.22) elde edilir;

$$\Delta G = \Delta G_0 + RT \ln \left( \frac{P_{H_2O}}{P_{H_2} \sqrt{P_{O_2}}} \right) \quad (3.22)$$

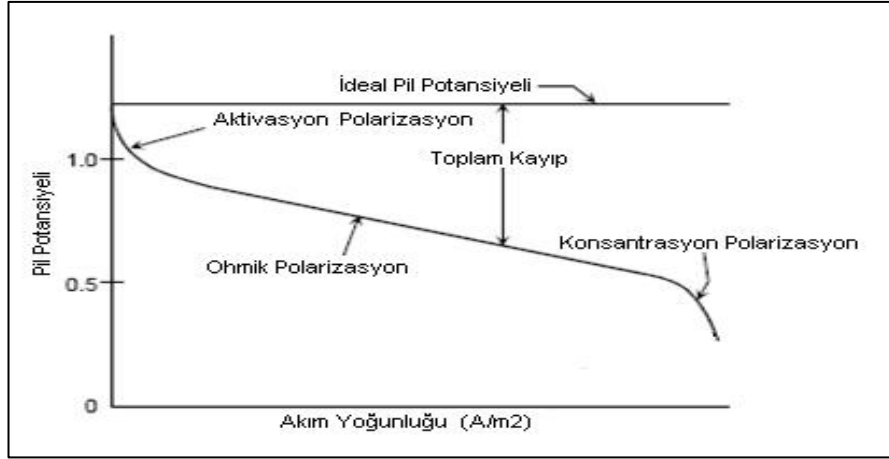
Elektrik potansiyelinin tanımı kullanılarak teorik hücre geriliminin değişimi Denklem (3.23) ile şu şekilde hesaplanabilir;

$$E = E_0 + \frac{RT}{2F} \ln \left( \frac{P_{H_2} \sqrt{P_{O_2}}}{P_{H_2O}} \right) \quad (3.23)$$

Denklem (3.23) Nernst eşitliği olarak adlandırılır ve teorik hücre geriliminin sıcaklık ve basınç ile değişimlerini ifade etmektedir. Nernst eşitliğine göre hidrojen ve oksijenin kısmi basınçlarının artması hücre gerilimini arttırmaktadır.

### 3.4. Yakıt Pili Kayıpları

Yakıt pillerini meydana getiren farklı katmanlarda meydana gelen kayıpların bütünü yakıt pili toplam kaybını ifade etmektedir. Bu katmanlardan, katalizör katmanında aktivasyon kayıpları, çift kutuplu plakalarda ve elektrotta elektron kaybı, membran elektrot ünitesinde proton kaybı, direnç kayıpları ve konsantrasyon kayıpları gibi kayıplar sebebiyle gerçek performans Şekil 3.1.'deki gibi meydana gelmektedir. Görüldüğü gibi gerçek yakıt pili performansı ideal performanstan farklı bir eğri çizer.



Şekil 3.1. Yakıt hücresinde potansiyel kayıplar ve polarizasyon eğrisi

### 3.4.1. Aktivasyon kayıpları

Elektrot yüzeylerinde gerçekleşen elektrokimyasal reaksiyonların hızlarına bağlı kayıplar aktivasyon kayıpları olarak adlandırılır. Elektrotlarda gerçekleşen reaksiyonların yavaşlığı sebebiyle gerçekleşen kayıplardır. Katot tarafındaki indirgenme reaksiyonunun, anot tarafındaki yükseltgenme reaksiyonundan yavaş olması sebebiyle daha fazla potansiyel fark gerekmekte ve katottaki aktivasyon kaybı anot tarafında göre daha yüksek olmaktadır. Tüm bu işlemler için gereken enerjiler ve elektron / proton kayıpları aktivasyon kayıplarını oluşturur. Aktivasyon kayıpları yarı deneysel Tafel eşitliği ile belirtilir ve Denklem (3.24) ile ifade edilir;

$$\eta_{th} = \frac{RT}{anF} \ln \frac{i}{i_0} \quad (3.24)$$

$\alpha$ , transfer katsayısını;  $i_0$  değişim akım yoğunluğunu ifade etmektedir.

Aktivasyon kayıpları akışkan ile elektrot ara yüzlerinin yüzey-temas oranları ile oynanarak geliştirilebilir. Ayrıca katalizör yüklemelerindeki oynamalar, elektrot pürüzlülüğü, reaktant konsantrasyonlarının artırılması gibi çalışmalar aktivasyon kayıplarını azaltabilir [22].

### 3.4.2. Direnç kayıpları

PEM yakıt pilinde direnç kayıpları, hidrojen iyonlarının hareketine karşı yakıt hücresinin bileşenlerinin dirençlerden dolayı meydana gelen kayıplardır. En önemli

direnç kayıpları membran üzerinde gerçekleşmektedir. Bu sebeple yüksek iletkenlikte malzeme kullanımı ve membran kalınlığının azaltılması direnç kayıplarının azaltılmasında en önemli faktörlerden biridir. Membranın elektriksel direnci, membran nem miktarı ve sıcaklığı ile doğrudan ilişkilidir. Direnç, membran kalınlığı ile doğru, iletkenliği ile ters orantılıdır. Aynı şekilde iletken çift kutuplu plakalarda önemli direnç kayıplarının olduğu noktalar. Plaka iletkenlikleri ve plaka polimer yapısının değiştirilmesi gibi benzer fiziksel önlemlerle direnç kayıpları azaltılabilir. Direnç kayıpları Ohm yasasına göre aşağıdaki gibi tanımlanabilir;

$$\eta_{ohm} = I \left( A \text{cm}^{-2} \right) \times R \text{ (Ohm-cm}^2\text{)} \quad (3.25)$$

Denklem (3.25)'de I hücre akım yoğunluğu, R ise hücre içi toplam dirençtir ve direnç kayıplarını ifade etmektedir.

### **3.4.3. Konsantrasyon kayıpları**

Bu tür kayıplar gaz taşınımından dolayı olan kayıp olarak da bilinir. Yakıt hücrelerinde katalizör bölgesinde reaktantlar tüketildikçe bu bölgelerde reaktantların kısmi basınçları düşer. Kısmi basıncın azalması kütle transferinin neden olduğu kayıpları artırır. Bu durum polarizasyon eğrisinde de rahatlıkla gözlemlenebilir. Yüksek akımlarda reaktant tüketiminin artması ile birlikte polarizasyon eğrisinin aşağıya doğru eğimlenmesi gözlemlenir. Reaktantların katalizör yüzeyinde harcanma hızı ile katalizör katmanına taşınma hızı eşit olduğunda limit bir akım yoğunluğuna ulaşılır. Bu akıma limit akım değeri denir. Limit akım değeri yakıt hücresinden belirli şartlarda alınabilecek maksimum akım yoğunluğunu ifade etmektedir.

Konsantrasyon kayıplarının azaltılması için çeşitli yollar izlenebilir. Saf hidrojen ve oksijen kullanılması veya sıcaklığın belirli bir düzeye kadar artırılması ile iyonik difüzyon artırılarak konsantrasyon kayıpları azaltılabilir. Ayrıca yakıt pilinin çalışması sırasında hidrojenin bir kısmı anottan ayrılıp membran üzerinden katot tarafına geçerek doğrudan oksijenle reaksiyona geçer. Bu durumda su üretilir fakat akım çıkışı olmaz. Aynı miktarda hidrojenden daha az güç üretilmiş olur. Bu olaya “yakıt karşıt geçişi” veya “iç akımlar” denir.

#### 4. MODELLEME ÇALIŞMALARI

Modelleme çalışmaları hesaplamalı akışkanlar dinamiği analizleri yapan bir paket program olan ANSYS Fluent kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Program, içerisinde oluşturduğu PEM yakıt pili modülü ile PEM yakıt pillerinin modellenmesine imkân tanımaktadır.

##### 4.1. Elektrokimyasal Modelleme ve Denklemler

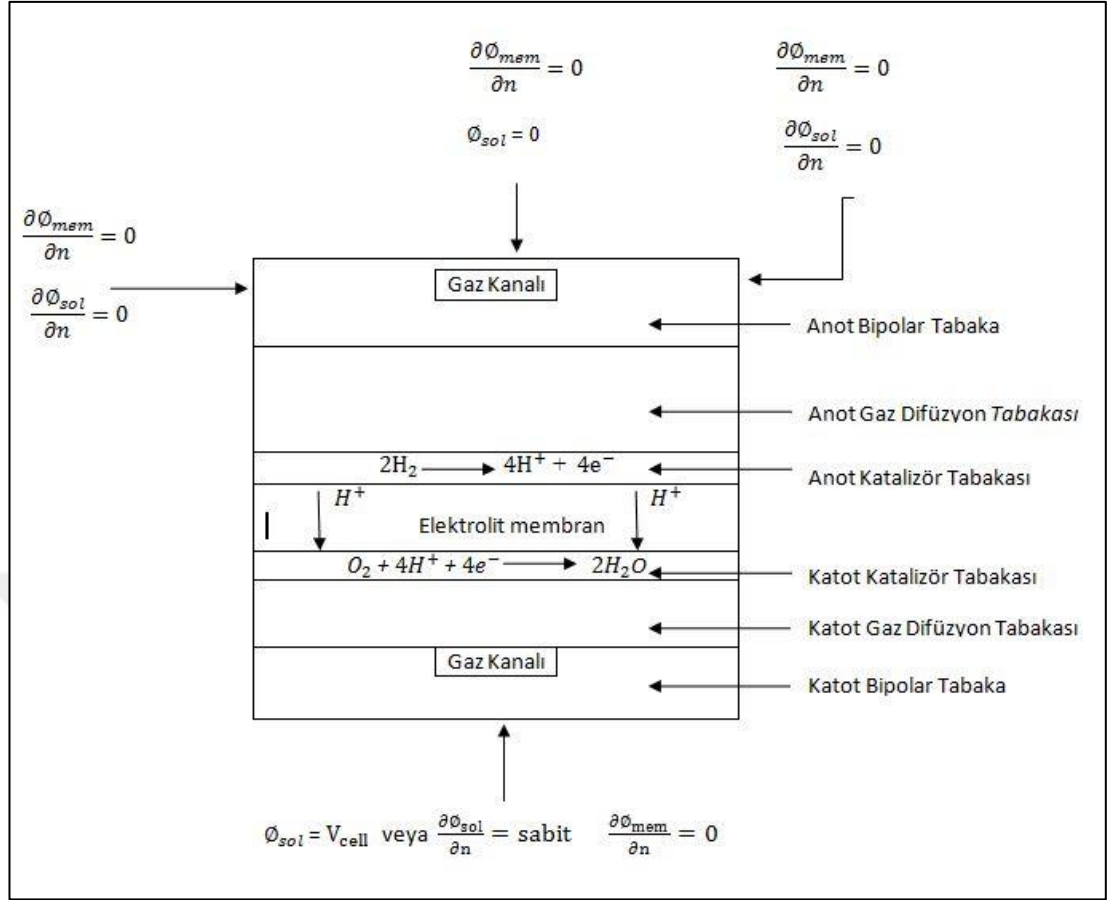
Elektrokimyanın merkezinde anodik ve katodik reaksiyonların oranlarının hesaplanması yer almaktadır. Bu reaksiyonlara sebep olan en büyük etki yüzey aşırı potansiyeli olarak kabul edilmektedir. Bu katı faz potansiyeli ve elektrolit/membran faz potansiyelleri arasındaki farktır. Bu iki denklem de ANSYS Fluent PEM modülünde çözdürülmektedir.

$$\nabla (\sigma_{\text{sol}} \nabla \phi_{\text{sol}}) + R_{\text{sol}} = 0 \quad (4.1)$$

$$\nabla (\phi_{\text{mem}} \nabla \phi_{\text{mem}}) + R_{\text{mem}} = 0 \quad (4.2)$$

Denklem (4.1) katı malzemelerdeki elektron transferi potansiyelini, Denklem (4.2) ise proton transferi sırasındaki potansiyeli açıklamaktadır. Bu denklemlerdeki ifadeler,  $\sigma_{\text{sol}}$  katı faz elektriksel iletkenlik (1/ohm-m),  $\phi$  elektrik potansiyelini (volt), R ise hacimsel transfer akımını ( $A/m^3$ ) ifade etmektedir.

Modellerde iki farklı dış sınır tipi mevcuttur. Dış sınırdaki protonik geçişler olmadığından dolayı membran faz potansiyeli bu bölgede sıfıra eşitlenmiştir. Yakıt pilinde anot ve katot taraflarında dış devre ile bağlı ve sadece elektriksel akımın olduğu sınır bölgeleri bulunmaktadır. Katı faz potansiyelinde diğer bütün dış sınırlar için sıfır akı şartı uygulanmaktadır.



Şekil 4.1.  $\phi_{sol}$  ve  $\phi_{mem}$  için sınır şartları

Şekil 4.1. katı ve membran ( $\phi_{sol}$  ve  $\phi_{mem}$ ) elektrik potansiyeli çözmek için uygulanan sınır şartlarını ifade etmektedir. Denklem (4.1) ve (4.2)'de belirtilen transfer akımları veya kaynak terimleri yalnızca katalizör tabakalarında sıfırdan farklı bir değerdedir.

Katı faz için,  $R_{sol} = -R_{an}$  ( $<0$ ) anot tarafında,  $R_{sol} = +R_{cat}$  ( $>0$ ) katot tarafında, Membran fazı için,  $R_{mem} = +R_{an}$  ( $>0$ ) anot tarafında,  $R_{mem} = -R_{cat}$  ( $<0$ ) katot tarafında olarak açıklanmaktadır. Denklem (4.1) ve (4.2)'deki ifadeler Denklem (4.3) ve Denklem (4.4)'de şu formülasyonlarla ifade edilmektedir;

$$R_{an} = j_{an}^{ref} \left( \frac{[H_2]}{[H_2]_{ref}} \right)^{\gamma_{an}} (e^{\alpha_{an} F \mu_{an} / RT} - e^{-\alpha_{an} F \mu_{an} / RT}) \quad (4.3)$$

$$R_{cat} = j_{cat}^{ref} \left( \frac{[O_2]}{[O_2]_{ref}} \right)^{\gamma_{cat}} (-e^{+\alpha_{an} F \mu_{cat} / RT} + e^{-\alpha_{an} F \mu_{cat} / RT}) \quad (4.4)$$



Bu denklemlerde semboller;

- $J^{\text{ref}}$ , hacimsel referans akım yoğunluğu ( $A/m^3$ )
- $\zeta$ , spesifik aktif alan ( $1/m$ )
- $[ ], [ ]_{\text{ref}}$ : Lokal türün konsantrasyonu, referans değer ( $kgmol/m^3$ )
- $\gamma$ , bağımlı konsantrasyon (birimsiz)
- $\alpha$ , transfer katsayısı (birimsiz)
- $F$ , faraday sabiti ( $9,6485 \times 10^7 C/kmol$ )
- $T$ , sıcaklık (Kelvin)

olarak ifade edilmektedir.

Yukarıda ifade edilen denklemler Butler-Volmer denkleminin genel formülasyonudur. Bu denklemin basitleştirilmiş durumu Tafel eşitliğini verir ve şu şekildedir anot ve katot için Denklem (4.5) ve Denklem (4.6) da ifade edilmiştir;

$$R_{\text{an}} = (\zeta_{\text{an}} j_{\text{an}}^{\text{ref}}) \left( \frac{[H_2]}{[H_2]_{\text{ref}}} \right)^{\gamma_{\text{an}}} (e^{\alpha_{\text{an}} F \eta_{\text{an}} / RT}) \quad (4.5)$$

$$R_{\text{cat}} = (\zeta_{\text{cat}} j_{\text{cat}}^{\text{ref}}) \left( \frac{[O_2]}{[O_2]_{\text{ref}}} \right)^{\gamma_{\text{cat}}} (e^{-\alpha_{\text{cat}} F \eta_{\text{cat}} / RT}) \quad (4.6)$$

Denklem (4.5) ve (4.6)'da belirtilen  $\eta$  aktivasyon kaybını sembolize etmektedir. Aynı zamanda membran ve katı fazlar arasındaki potansiyel farkı ifade etmektedir.

Katot tarafına dış devre vasıtasıyla anottan geçen elektrik potansiyeli, katot tarafındaki açık devre voltajı ( $V_{\text{oc}}$ ) çıkarılarak hesaba katılır. ANSYS Fluent yakıt pili modülü içerisinde Butler-Volmer eşitliği katalizör tabakasındaki transfer akımlarını hesaplamak için varsayılan olarak ayarlanmıştır, anot ve katot için aktivasyon kayıpları Denklem (4.7) ve Denklem (4.8)'de şu şekilde ifade edilmiştir;

$$\eta_{\text{an}} = \phi_{\text{sol}} - \phi_{\text{mem}} \quad (4.9)$$

$$\eta_{\text{cat}} = \phi_{\text{sol}} - \phi_{\text{mem}} - V_{\text{oc}} \quad (4.8)$$

## 4.2. Akım ve Kütlenin Korunumu Denklemleri

ANSYS Fluent PEM yakıt pili modülünde kütle ve akımın korunumu denklemleri Hidrojen için Denklem (4.9)'da, oksijen için Denklem (4.10)'da ve su için Denklem (4.11)'de şu şekilde verilmiştir;

$$S_{H_2} = -\frac{M_{w,H_2}}{2F} R_{an} < 0 \quad (4.9)$$

$$S_{O_2} = -\frac{M_{w,O_2}}{4F} R_{cat} < 0 \quad (4.10)$$

$$S_{H_2O} = \frac{M_{w,H_2O}}{2F} R_{cat} > 0 \quad (4.11)$$

Toplam elektrik akımı anot ve katotta üretildiği için bu iki akımın aynı olması gerekir. Bu sebeple Denklem (4.12) yazılabilir. Hidrojen için kaynak terimi katot katalizör katmanında sıfır iken, anot katalizör katmanında Denklem (4.9) ile verilen elektrokimyasal reaksiyon ile tüketim hızına eşittir. Aynı şekilde Denklem (4.10)'da oksijen için kaynak terimi anot katalizör katmanında sıfır iken, katot katalizör katmanında elektrokimyasal reaksiyon ile tüketim hızına eşittir. Burada  $R_{an}$  hacimsel transfer akımı,  $M_{w,H_2}$  hidrojen molekül ağırlığıdır.

$$\int_{an} R_{cat} dV = \int_{cat} R_{an} dV \quad (4.12)$$

## 4.3. Isı Kaynağı

Termal enerji denklemlerinde hacimsel kaynak terimleri olmasının sebebi, prosesin tersinmez oluşu ile elektrokimyasal reaksiyonlar sonucunda ortaya çıkan kimyasal enerjinin tamamen elektriksel işe çevrilemiyor olmasıdır. Toplam enerji Denklem (4.13)'de şu şekilde ifade edilir;

$$S_h = \Delta H - R_{an,cat} \mu_{an,cat} + I^2 R_{ohm} + h_L \quad (4.13)$$

Denklem (4.13)'de  $\Delta H$  elektrokimyasal reaksiyonlar sonucunda net entalpi değişimini,  $R_{an,cat} \cdot \mu_{an,cat}$  terimi ise anot ve katottaki gerilim kayıpları ve transfer

akımının sonucunu,  $I^2 R_{ohm}$  ise ohmik direnç sonrası oluşan ısıyı,  $h_L$  ise suyun yoğuşma ve buharlaşması sonucu ortaya çıkan entalpi değişimini ifade eder.

#### 4.4. Sıvı Su Oluşumu, Taşınımı ve Etkileri

PEM tipi yakıt pillerinin göreceli olarak düşük sıcaklıklarda çalışmalarından dolayı ( $<100$  °C), özellikle yüksek akım yoğunluklarında üretilen su miktarının artması ile beraber buhar fazındaki su yoğuşarak sıvı faza geçebilir. Sıvı suyun yakıt pili içerisindeki varlığı membranı sulu hale getirir, bu su aynı zamanda gaz difüzyon tabakasındaki gözeneklerin tıkanmasına sebep olarak difüzyon oranının düşmesine ve aktif reaksiyon yüzey alanının ve dolayısıyla hücre performansının düşmesine sebep olur. Sıvı suyun oluşumu ve taşınımı Denklem (4.14)'e şu şekilde açıklanmaktadır;

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho_1s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_1 \vec{V}_1s) = r_w \quad (4.14)$$

Denklem (4.14)'de alt indis olarak verilen 1 sıvı fazdaki su,  $r_w$  ise yoğuşma oranını göstermektedir. İfadesi Denklem (4.15)'de şu şekildedir;

$$r_w = c_r \max \left( \left[ (1-s) \frac{P_{wv} - P_{sat}}{RT} M_{w,H_2O} \right], [-s\rho_1] \right) \quad (4.15)$$

Denklem (4.15)'de belirtilen  $r_w$ , hem su buharı hem de basınç doğrulama denkleminde eklenir. Bu terim membran denkliğine uygulanmaz. Yoğuşma oranı katsayısı fiziksel olarak  $c_r = 100 \text{ s}^{-1}$  dir. Kanal içerisindeki sıvı fazdaki suyun hızı,  $V_1$ , kanallardaki gazların hızlara eşit olarak kabul edilmiştir. Yüksek akış direnci oluşan poroz yapıların içerisinde, kılcal difüzyon terimi Denklem (4.16)'da;

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho_1s)}{\partial t} + \nabla \cdot \left[ \rho_1 \frac{K_s^3}{\mu_1} \frac{dp_c}{ds} \nabla_s \right] = r_w \quad (4.16)$$

olarak verilmiştir.

Yaş faza bağlı olarak kapiler basınç Denklem (4.17)'de gösterilen Leverett fonksiyonu olarak hesaplanmıştır;

$$p_c = \begin{cases} \frac{\sigma \cos \theta_c}{\left(\frac{K}{\varepsilon}\right)^{0,5}} (1,417(1-s) - 2,12(1-s)^2 + 1,263(1-s)^3), \theta_c < 90^\circ \\ \frac{\sigma \cos \theta_c}{\left(\frac{K}{\varepsilon}\right)^{0,5}} (1,417s - 2,12s^2 + 1,263s^3), \theta_c > 90^\circ \end{cases} \quad (4.17)$$

Denklem (4.17)'da  $\varepsilon$  porozite,  $\sigma$  yüzey gerilimini ( $N/m^2$ ),  $\theta$  temas açısı ve  $K$  mutlak sıcaklığı ifade etmektedir.

## 4.5. Modellemede Kullanılan Bazı Katsayılar ve Özellikleri

### 4.5.1. Gaz fazındaki türlerin difüzyonu

Gaz fazındaki türlerin difüzyonu hem seyreltilmiş yaklaşım hem de çok bileşenli difüzyon yaklaşımı metodu ile çözülebilir. Seyreltilmiş yaklaşım metodu ile elde edilen Denklem (4.18) ile;

$$D_i = \varepsilon^{1,5} (1-s)^{r_s} D_i^0 \left(\frac{p_0}{p}\right)^{\gamma_p} \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\gamma_t} \quad (4.18)$$

olarak ifade edilir.

$D_i^0$  referans alınan sıcaklık ve basınçta,  $i$ 'ninci terime ait gaz difüzyon özelliğini gösterir [1]. Bu referans değerler ve semboller ( $\gamma_p$ ,  $\gamma_t$ ) ve gözenek tıkanım katsayısı ( $r_s$ ) Ansys Fluent PEM yakıt pili modülündeki kullanıcı tanımlı fonksiyonlarda şu şekilde tanımlanmıştır;

$$P_0 = 101325 \text{ N/m}^2$$

$$T_0 = 300 \text{ K}$$

$$\gamma_p = 1$$

$$\gamma_t = 1,5$$

$$r_s = 2,5$$

Denklem (4.18)'e ek olarak, ANSYS Fluent PEM modülü aynı zamanda gaz fazındaki türlerin de difüzyonunu hesaba katar (çok bileşenli difüzyon modeli poroz yapının dolambaçlılığını hesap eder) ve Denklem (4.19) ile ifade edilir;

$$D_{\text{eff}}^{ij} = \varepsilon^{1,5} D^{ij} \quad (4.19)$$

Denklem (4.19)'da  $D_{\text{eff}}^{ij}$  terimi efektif gaz fazındaki türlerin difüzyonunu,  $\varepsilon$  terimi poroz yapının porozitesini,  $D^{ij}$  ise gazların kütleli difüzyonunu ifade eder ve çok bileşenli difüzyon modelini ANSYS Fluent programındaki fiziksel parametreleri kullanarak hesaplar.

#### 4.5.2. Membran iyonik iletkenliği

ANSYS Fluent PEM modülünde membran iyonik iletkenliği Denklem (4.20)'de şu şekilde ifade edilmektedir;

$$\sigma_{\text{mem}} = \beta \varepsilon (0,514\lambda - 0,326)^\omega e^{1268 \left( \frac{1}{303} - \frac{1}{T} \right)} \quad (4.20)$$

Denklem (4.20)'de  $\lambda$  su içeriğini ifade etmektedir. ANSYS Fluent modülünde  $\beta = \omega = 1$  olarak kabul edilir.

#### 4.5.3. Ozmotik sürüklenme katsayısı

ANSYS Fluent PEM modülünde ozmotik sürüklenme katsayısı Denklem (4.21)'de şu şekilde ifade edilmektedir;

$$n_d = 2,5 \frac{\lambda}{22} \quad (4.21)$$

#### 4.5.4. Geri difüzyon akısı

ANSYS Fluent PEM modülünde geri difüzyon akısı Denklem (4.22)'de şu şekilde ifade edilmektedir;

$$J_w^{\text{diff}} = - \frac{\rho_m}{M_m} M_{\text{H}_2\text{O}} D_1 \nabla \lambda \quad (4.22)$$

Denklem (4.22)'de  $\rho_m$  ve  $M_m$  kuru membranın eşdeğer yoğunluğu ve kütlesidir.

#### 4.5.5. Membran su difüzyonu

ANSYS Fluent PEM modülünde membran su difüzyonu Denklem (4.23)'de şu şekilde ifade edilmektedir;

$$D_1 = f(\lambda)e^{\left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T}\right)} \quad (4.23)$$

#### 4.5.6. Su içeriği

Su içeriği  $\lambda$ 'nın modelleme hesaplamalarında kullanılan çok önemli bir katsayı olduğu görülmüştür [34]. Su içeriği Denklem (4.24)'de şu şekilde ifade edilmiştir;

$$\lambda = 0,043 + 17,18\alpha - 39,85\alpha^2 + 36\alpha^3 \quad (\alpha < 1)$$
$$\lambda = 14 + 1,4(\alpha - 1) \quad (\alpha > 1) \quad (4.24)$$

Denklem (4.24)'deki su aktivitesi olarak adlandırılan  $\alpha$  Denklem (4.25)'de;

$$\alpha = \frac{P_{wv}}{P_{sat}} + 2s \quad (4.25)$$

olarak tanımlanmıştır.

#### 4.5.7. Su buhar basıncı

PEM yakıt pillerinin modellenmesinde su buhar basıncı, su buharı molar fraksiyonu ve lokal basınç temel alınarak hesaplanır ve Denklem (4.26)'da şu şekilde ifade edilmiştir;

$$P_{wv} = x_{H_2O}P \quad (4.26)$$

#### 4.5.8. Yoğuşma basıncı

Yoğuşma basıncı atm basınç birimi cinsinden Denklem (4.27)'de şu şekilde hesaplanır;

$$\log_{10} P_{\text{sat}} = -2,1794 + 0,02953(T-273,17) - 9,18 \times 10^{-5}(T-273,17)^2 + 1,4454 \times 10^{-7}(T-273,17)^3 \quad (4.27)$$

#### 4.6. Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği Modellemesi

Hesaplamalı akışkanlar dinamiği (HAD) modellemesi, her türlü akışkanın farklı koşul ve ortamlardaki analizlerini yapmaya olanak sağlayan sayısal çözümleme metodudur. Akışkan hareketini ve etkileşimini tanımlayan diferansiyel denklemlerin çözümlendiği bu metot, deneysel çalışmalarla elde edilemeyen, basınç, hız, sıcaklık ve akım çizgisi dağılımları hakkında kullanıcılara detaylı bilgi sunmaktadır.

Bu tez çalışmasında konu edilen parametrik çalışmalarda Ansys Fluent paket programı kullanılmıştır. ANSYS Fluent, sıkıştırılabilir veya sıkıştırılmaz, laminer ve türbülanslı akışkan problemleri için geniş kapsamlı modelleme olanakları sunmaktadır. Durağan veya zamana bağlı analizler yapılabilir. ANSYS Fluent'te, transport olguları için geniş bir yelpazedeki (ısı transferi ve kimyasal reaksiyonlar gibi) matematiksel modeller, karmaşık geometrileri modelleme becerisi ile birleştirmektedir. ANSYS Fluent uygulamalarına örnek verilecek olursa; proses teçhizatı içerisindeki laminer newtonian olmayan akışları, turbo makinada konjuge ısı transferi ve otomotiv motor parçaları, şebeke kazanlarında pülverize kömür yakma, harici aerodinamik, kompresörler, pompalar ve fanlar yoluyla akış, çok fazlı akışlar, yakıt pilleri, reaktörler ve deniz araçları vb. birçok endüstriyel uygulamaları mevcuttur.

ANSYS Fluent tüm akışlar için, kütle ve momentum koruma denklemlerini çözmektedir. Isı transferi veya sıkıştırılabilirlik içeren akışlarda enerji korunumu için ilave bir denklem çözer. Türlerin karıştırılması veya reaksiyonlarını içeren akışlar için de bir tür koruma denklemi çözülür. Ön karışma olmayan yanma modeli kullanıldığında ise karışım fraksiyonu koruma denklemleri ve değişkenleri çözülür. Ayrıca akış türbülanslı ise ek transport denklemleri de çözülür [35].

#### 4.6.1. Modelleme kabulleri ve kullanılan sabitler

Modelleme, tek hücreli, üç boyutlu, tek kanallı, kapalı besleme anot ve katot tasarımına sahip bir yakıt pili sayısal modelinin çalışma şartlarının parametrik analizlerini hedeflemektedir.

Model oluşturulurken çeşitli varsayımlar kabul edilmiştir, bunlar;

- Gaz karışımı idealdir.
- Akış laminar olarak kabul edilmiştir.
- Yerçekimi ivmesi ihmal edilmiştir.
- İzotermal olmayan ortam kabul edilmiştir.
- Yatışkın durum kabul edilmiştir.
- Üç boyutlu model oluşturulmuştur.
- Yakıt olarak hidrojen, oksitleyici olarak hava beslendiği kabul edilmiştir.
- Gaz difüzyon tabakasının homojen yapıda olduğu kabul edilmiştir.
- Katalizör ve membran tabakalarının homojen ve izotropik olduğu kabul edilmiştir.
- Temas dirençleri ihmal edilmiştir.
- Elektrokimyasal reaksiyonlarda Butler-Volmer kinetik denklemleri kullanılmıştır.
- Atmosferik basınç 101325 Pa olarak kabul edilmiştir.



Tablo 4.1. Modellemede kullanılan sabit değerler

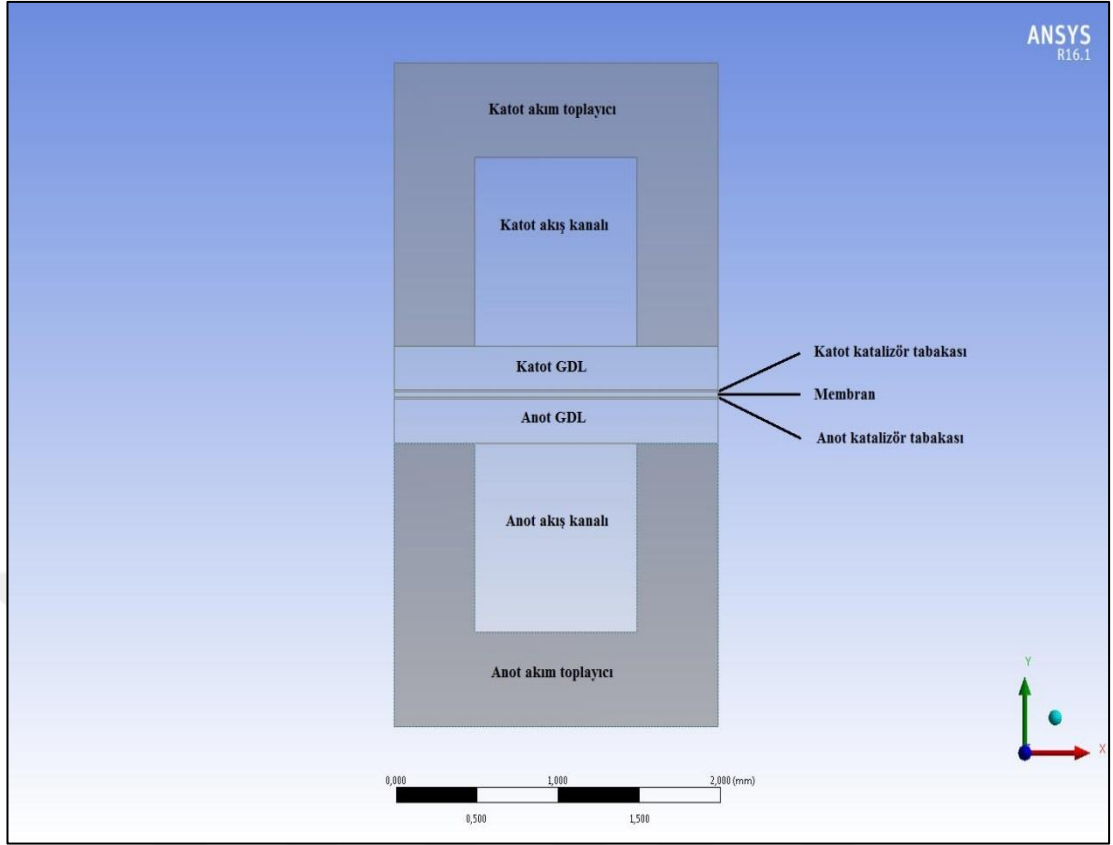
Parametre	Sembol	Birim	Değer	Kaynak
Genel Sabitler				
Faraday Sabiti	F	As/mol	96487	[18]
Genel Gaz Sabiti	R	J/mol K	8,314	
Atmosferik Basınç	P <sub>0</sub>	Pa	1,013x10 <sup>5</sup>	
Anot Elektrot Parametreleri				
Referans akım yoğunluğu	$j_0^{\text{ref}}$	A/m <sup>2</sup>	2465,598	[6]
Referans konsantrasyon	c <sub>ref</sub>	kmol/m <sup>3</sup>	5,64x10 <sup>-2</sup>	
Konsantrasyon üsteli	$\gamma$		0,5	
Elektrot ve GDL porozitesi	$\epsilon$		0,4	[6]
Transfer katsayısı	$\alpha_a$		0,5	[6]
Katot Elektrot Parametreleri				
Referans akım yoğunluğu	$j_0^{\text{ref}}$	A/m <sup>2</sup>	1,808x10 <sup>-3</sup>	[6]
Referans konsantrasyon	c <sub>ref</sub>	kmol/m <sup>3</sup>	3,39x10 <sup>-3</sup>	
Konsantrasyon üsteli	$\gamma$		1	
Elektrot ve GDL porozitesi	$\epsilon$		0,4	[6]
Transfer katsayısı	$\alpha_c$		1	[6]
Genel Parametreler				
Açık devre voltajı	V <sub>oc</sub>	V	0,95	
Aktif Alan	A <sub>a</sub>	m <sup>2</sup>	1x10 <sup>-4</sup>	
Referans difüzyon H <sub>2</sub>	D <sub>h</sub>	m <sup>2</sup> /s	8,79x10 <sup>-5</sup>	
Referans difüzyon O <sub>2</sub>	D <sub>o</sub>	m <sup>2</sup> /s	2,54x10 <sup>-5</sup>	
Referans difüzyon H <sub>2</sub> O	D <sub>w</sub>	m <sup>2</sup> /s	2,54x10 <sup>-5</sup>	

Tablo 4.2. Membran fiziksel parametreleri

Membran Parametreleri	Sembol	Birim	Değer	Kaynak
Yoğunluk	$\rho_m$	kg/m <sup>3</sup>	1980	
Özgül ısı	$c_{Pmem}$	J/kgK	1170	
Termal iletkenlik	$k_M$	W/mK	0,455	[36]
Membran iyonik iletkenlik	$\lambda_m$	mS/cm	72	[37]

#### 4.6.2. Geometrik model oluşturma

Modelleme çalışmalarında Ansys 16.1 programı kullanılmıştır. Modelleme çalışmalarında kullanılan geometri Ansys Workbench Design Modeler uygulaması ile oluşturulmuştur. Ansys Workbench programı açıldıktan sonra Fluid Flow (Fluent) uygulaması çalıştırılır. Oluşturulan çalışma sayfası içerisinde “Geometry” sekmesi sağ tıklanır ve “Edit Geometry in Design Modeler” sekmesine çift tıklanılır. Açılan sayfa içerisinde çizim alanı oluşturulur ve Tablo 4.3.’deki boyutlarda geometriler oluşturulur. Şekil 4.2.’de oluşturulan geometriye ait gösterim bulunmaktadır. Önden kesit şeklinde gösterilen geometride, model üzerindeki bağımsız alanların isimlendirilmeleri gösterilmektedir. Bu isimlendirmeler model oluşturulur iken sınır şartlarının belirlenmesi aşamasında büyük kolaylıklar sağlamaktadır. Şekil 4.2.’de modelin membran katmanı yatay eksende kesen bir düzlemde simetrik olduğu görülmektedir.

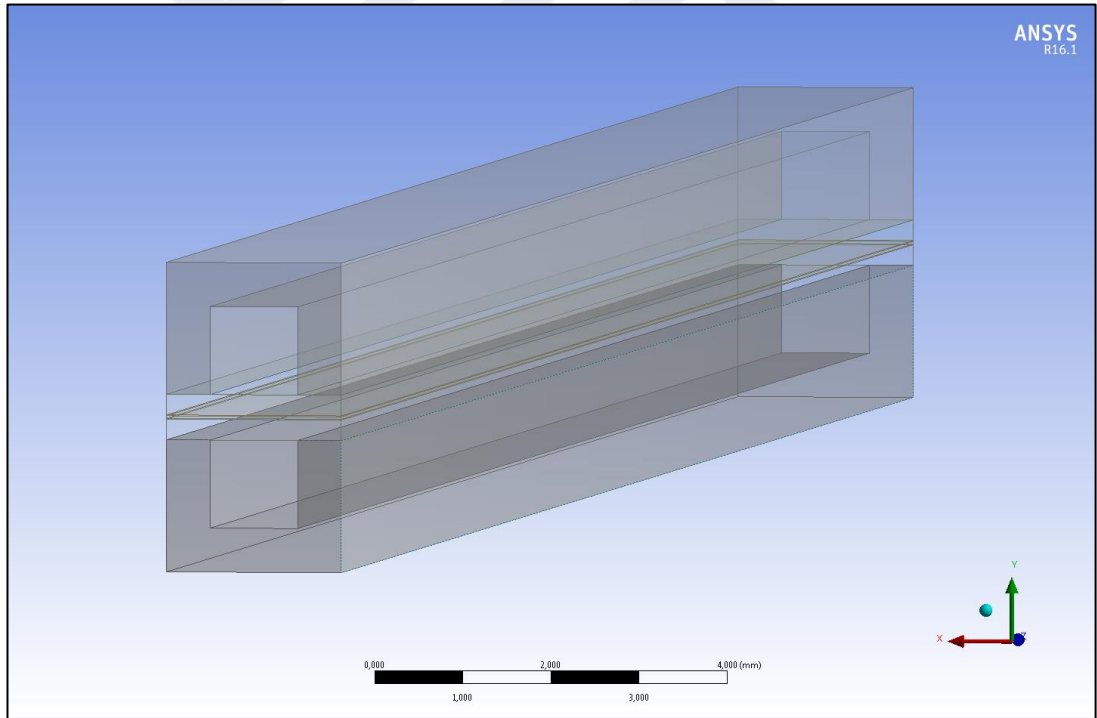


Şekil 4.2. Oluşturulan model geometrisi kesiti

Ansyes Design Modeler uygulaması ile oluşturulan geometriye ait boyutlar Tablo 4.3.'de verilmiştir. Oluşturulan hücre, anot ve katot akım toplayıcılar, anot ve katot akış kanalları ve gaz difüzyon tabakaları, katalizör katmanları ve membrandan oluşmaktadır. Tek ve düz kanallı olarak gerçekleştirilen bu tasarım, Ansyes Design Modeler uygulaması ile modellemeye hazırlanmaktadır. Ayrı birer hacim olarak tasarlanan her bir geometri Ansyes DM içerisindeki "Form New Part" komutu ile tek bir hacim haline dönüştürülür. Bu dönüşümün sebebi ağ yapısı oluşturma ve modelleme işlemi sırasında farklı hacimlerin arasındaki kontak yüzeylerinin oluşturulmasıdır. Oluşturulan bu yüzeyler vasıtası ile kütle, akım transferleri ve difüzyon olayları gerçekleşmekte ve reaksiyonlar meydana gelmektedir. Ansyes DM içerisinde oluşturulan iki boyutlu çizimler "Extrude" komutu ile genişletilerek üç boyutlu hale dönüştürülürler.

Tablo 4.3. Geometrik modele ait boyutlar

	Yükseklik (mm)	Genişlik (mm)	Uzunluk (mm)
Katot akım toplayıcı	1,5	2	50
Katot akış kanalı	1	1	50
Katot GDL	0,235	2	50
Katot katalizör tabakası	0,01	2	50
Membran	0,0275	2	50
Anot akım toplayıcı	1.5	2	50
Anot akış kanalı	1	1	50
Anot GDL	0,235	2	50
Anot katalizör tabakası	0,01	2	50



Şekil 4.3. Oluşturulan üç boyutlu model

Şekil 4.3.'de katı modele ait üç boyutlu çizim görülmektedir. Üç boyutlu hale dönüştürülen geometrik model üzerinde hacimlerin katı veya akış alanı olarak tanımlanabilmesi için "Named Selection" seçimleri yapılmalıdır. Ayrıca modelin Ansys Fluent içerisinde hazırlanabilmesi için gaz giriş ve çıkışlarının, duvarların,

terminallerin isimlendirilmesi gerekmektedir. İsimlendirmelerde terminal olarak adlandırılan alanlar akımların ve voltajın okunduğu akım toplayıcı plakaları temsil etmektedir. DM içerisinde gerçekleştirilen bu isimlendirmeler, Fluent tarafından tanınmakta ve isimlendirilmeye bağlı olarak sınır şartları program tarafından otomatik olarak yapılmaktadır. Tablo 4.4.'de tanımlanan isimlendirmeler verilmiştir.

Tablo 4.4. DM uygulamasında hacimlerin ve yüzeylerin isimlendirilmesi

<b>Alan adı</b>	<b>Tanımlama (Named Selection)</b>
Katot terminali	terminal_c
Katot akım toplayıcı	current_c
Katot akış kanalı	channel_c
Anot akış kanalı	channel_a
Anot akım toplayıcı	current_a
Anot terminali	terminal_a
Katot GDL	gdl_c
Anot GDL	gdl_a
Katot katalizör tabakası	cat_c
Anot katalizör tabakası	cat_a
Membran	Membrane
Katot gaz girişi	inlet_c
Katot gaz çıkışı	outlet_c
Anot gaz girişi	inlet_a
Anot gaz çıkışı	outlet_a
Sol taraf duvarları	wall_left
Sağ taraf duvarları	wall_right
Gaz giriş tarafı duvarları	wall_front
Gaz çıkış tarafı duvarları	wall_out
Katot akış kanalı iç duvarları	wall_channel_c
Anot akış kanalı iç duvarları	wall_channel_a

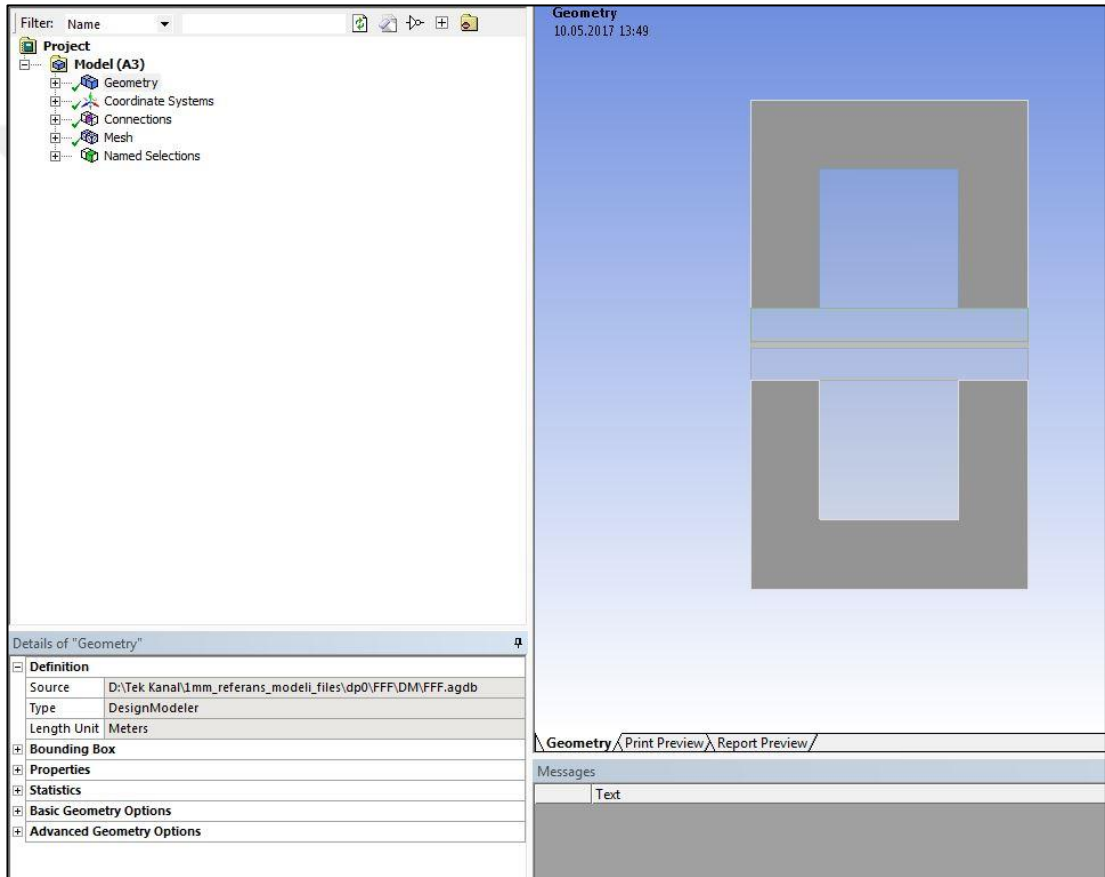
Yapılan hacim oluřturma ve isimlendirme iřlemlerinin ardından hacimlerin katı veya akıř alanı olarak seilmesi iřlemi gerekleřtirilir.

Tablo 4.5. Modelde oluřturulan hacimlerin faz sınıflandırılması

<b>Alan Adı</b>	<b>Tanımlama</b>
Katot akım toplayıcı	SOLID
Katot akıř kanalı	FLUID
Anot akıř kanalı	FLUID
Anot akım toplayıcı	SOLID
Katot GDL	FLUID
Anot GDL	FLUID
Katot katalizör tabakası	FLUID
Anot katalizör tabakası	FLUID
Membran	FLUID

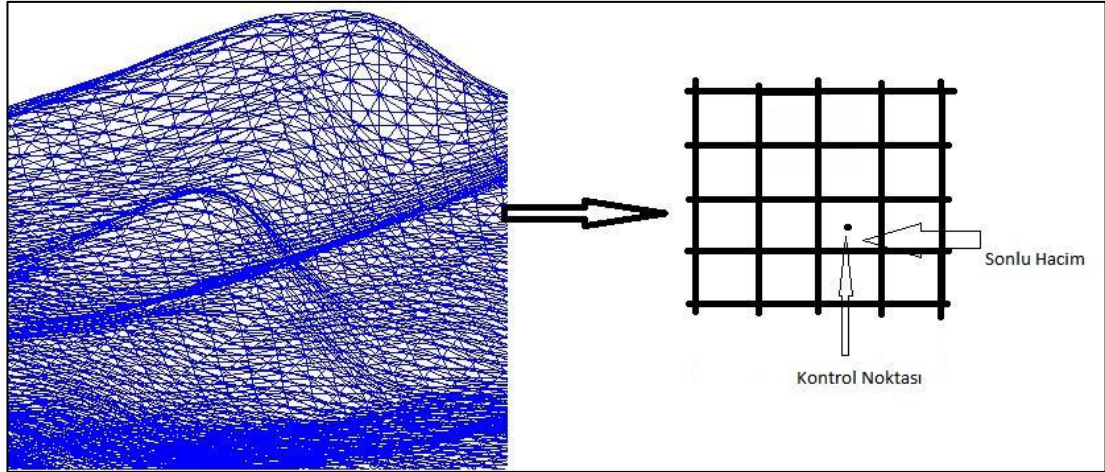
### 4.6.3. Ağ yapısı ve sınır şartlarının oluşturulması

Model üzerinde gerekli faz sınıflandırmaları ve isimlendirmeleri yapıldıktan sonra DM uygulamasından çıkılır. Ağ yapısının oluşturulması için WB sayfası içerisinde Mesh sekmesine çift tıklanarak Mesh uygulaması açılır. Şekil 4.4.'de görülen Mesh çalışma sayfası içerisinde DM içerisinde oluşturulan geometri görüntülenecektir. Dm içerisinde birleştirilen hacimlerin oluşturduğu bağlantı yüzeyleri Mesh sayfası içerisinde "Connections" sekmesi altında görüntülenmektedir.



Şekil 4.4. WB içerisinde açılan Mesh çalışma alanı

Ağ yapısı oluşturma (Mesh) uygulaması HAD uygulamaları için sonlu hacimler yöntemini esas almaktadır. Sonlu hacimler yöntemi kısmi diferansiyel denklemlerle ifade edilen ancak çözümü oldukça güç olan problemlerde kontrol hacmini belirli sayıda sonlu hacimlere bölerek çözüm arayan bir yöntem olarak karşımıza çıkmaktadır. Sonlu sayıda hacimlere bölünmüş olan kontrol hacminin her bir parçasında korunum denklemleri uygulanır ve hesaplanan değer kontrol hacminin merkezindeki kontrol noktası ile ifade edilir [38].

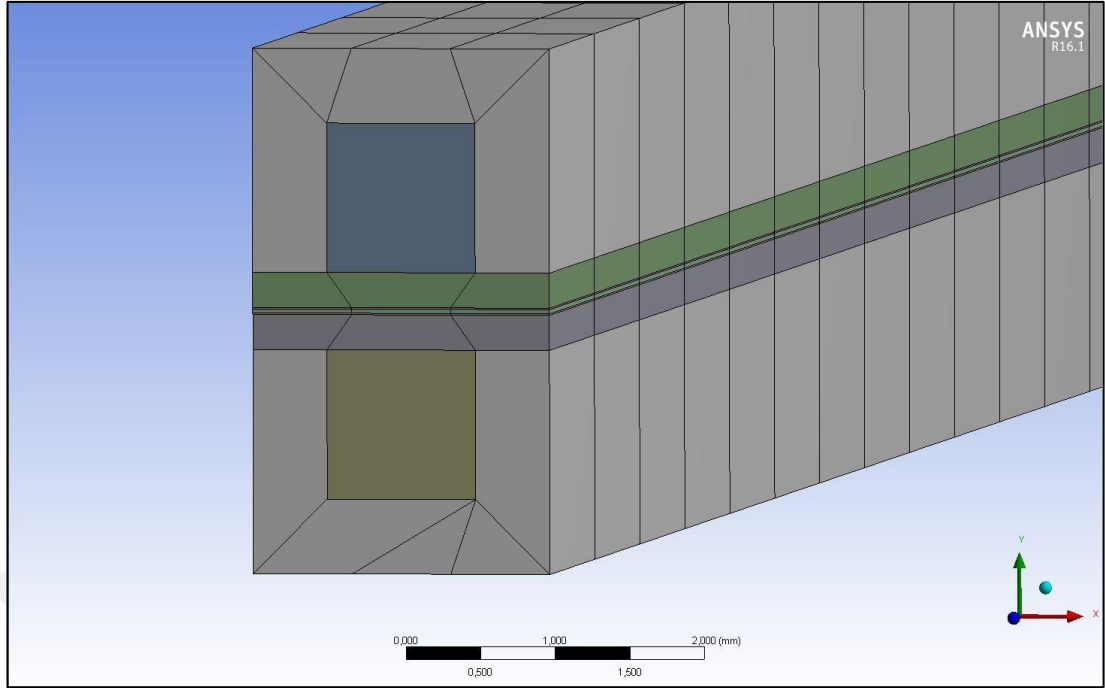


Şekil 4.5. Sonlu hacimler metodu gösterimi [38]

Şekil 4.5.'de sonlu hacimler metoduna ait örnek gösterim görülmektedir. Model üzerinde 9 farklı kontrol hacmi olması, çok ince yapılara sahip olması ağ yapısı oluşturma (Mesh) işlemini oldukça zorlaştırmaktadır. Ağ yapısı oluşturma (mesh) uygulaması içerisinde otomatik ağ oluşturma komutu ile oluşturulan ağ yapısı incelendiğinde ortaya kaba olarak tabir edilen bir ağ yapısı ortaya çıkmaktadır. Bu sebeple her bir kontrol hacminin ve kontrol hacmine ait köşe çizgilerinin ayrı ayrı ağ oluşturma işlemine tabi tutulması gerekmektedir.

Yakıt pili modelleme çalışmalarında genellikle tek kanal çalışmasının sebebi, çok ince ve dar yüzeylerde ağ yapısı oluşturma işlemi sebebiyle oldukça fazla eleman sayısına ulaşılması ve bunun sonucunda çözüm sürelerinin oldukça uzaması olarak gösterilebilir. Örnek verilecek olunursa, 10 mikron kalınlığındaki bir katalizör tabakasının en az 2 katmana bölünmesi tavsiye edilmektedir. Bu, 2 mm genişliğinde ve 10 mikron kalınlığında bir katalizör katmanında 20.000 adet eleman sayısına ulaşılacağına göstergesidir. Bu rakam statik mukavemet çözümlerinde sonlu elemanlar yöntemi için dahi yüksek bir rakamdır. Verilen örnekte, sadece katalizör katmanı ile bu yüksek rakama ulaşılmış olması tek bir kanal ile yapılan modellerin dahi uzun süreler, yüksek bellek ve işlemci kapasitesi gerektirdiğini ortaya koymaktadır. Şekil 4.6.'da yazılım tarafından otomatik olarak oluşturulan ağ yapısı görülmektedir.



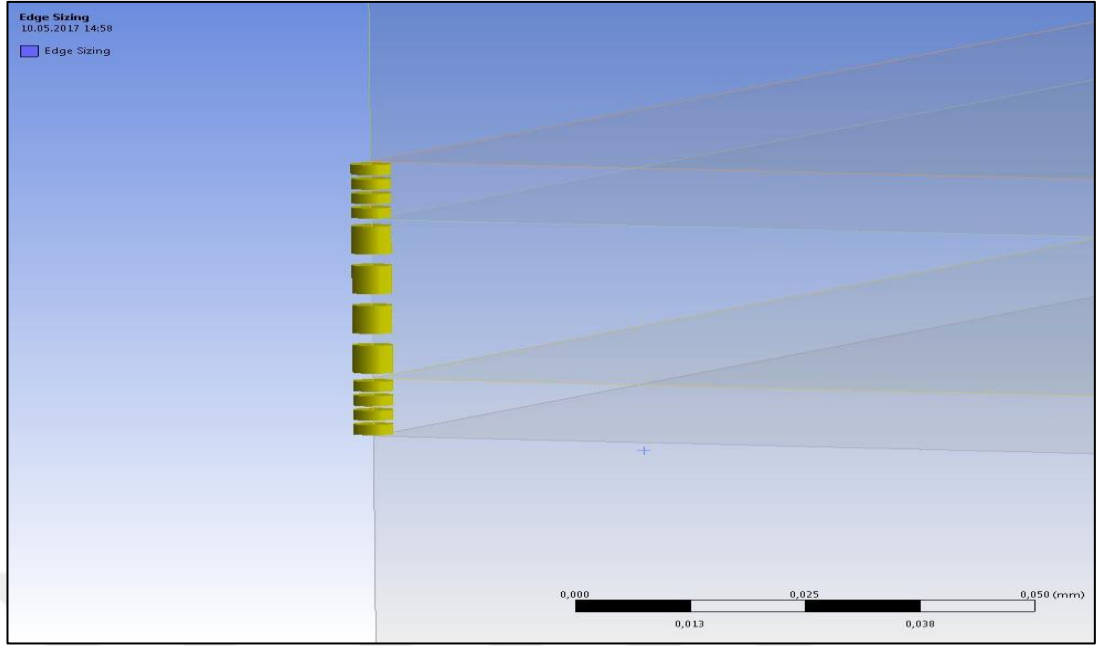


Şekil 4.6. Otomatik ağ yapısı oluşturma komutu ile oluşturulan yapı

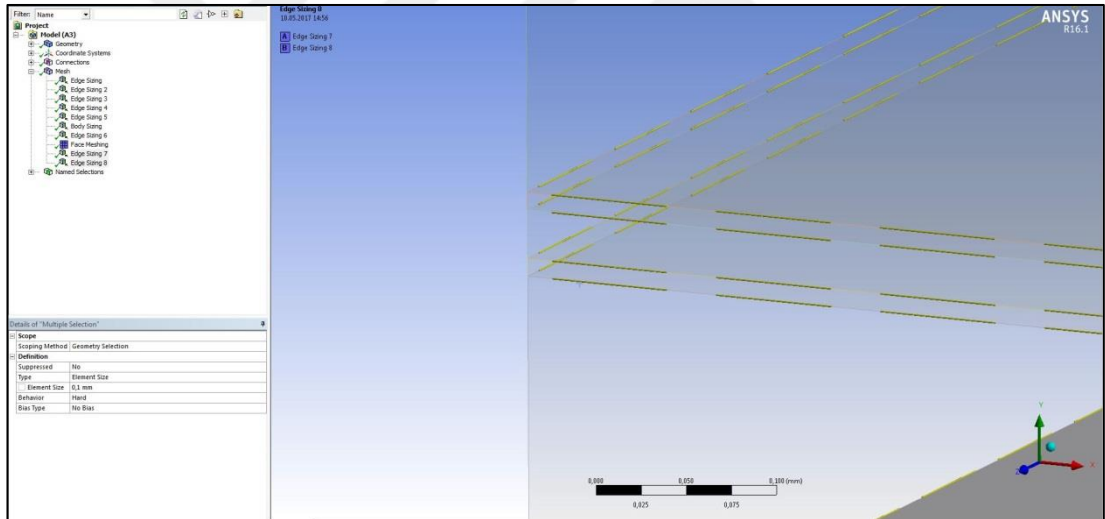
Tez çalışmasında gerçekleştirilecek olan modelleme çalışması için yüksek doğruluk ve yakınsama kriterleri hedeflendiği için ağ yapısının olabildiğince yoğun ve çözümü hızlandıracak şekilde oluşturulmasına özen gösterilmiştir. Ağ yapısı oluşturma işleminin her bir kontrol hacmi için ayrı ayrı gerçekleştirilecek olması, kontrol hacimleri arasındaki ağ yapısı geçişlerinin üniform ve düzgün olması gerekliliği sebebiyle ön görülen en küçük boyutta elemanlara sahip olacak kontrol hacimlerinden başlanarak ağ yapısı oluşturma çalışması gerçekleştirilmiştir. İlk olarak membran ve anot-katot katalizör katmanlarında ağ yapısı oluşturma çalışması gerçekleştirilmiştir.

Membran ve anot-katod katalizör katmanlarının ağ yapısı oluşturma işlemi ilk olarak kenar çizgilerinin dikey doğrultuda 4 ayrı katmana bölünmesi işlemi bölünme sayısı (number of divisions) komutu ile gerçekleştirilmiştir. Daha sonra bu kenar çizgileri dışında kalan tüm çizgiler kenar boyutu (edge sizing) komutu ile her bir parçası 0,1 mm olacak şekilde hacimlere ayrılmıştır ve Şekil 4.7. ve 4.8.'de gösterilmiştir.

Ağ yapısı oluşturma işlemi sonucunda katalizör katmanları 0,0025x0,1x0,1 mm boyutlarında, membran ise 0,00687x0,1x0,1 boyutlarında hacimlere bölünmüştür. Bu işlemden sonra benzer işlemler GDL hacimlerine uygulanmıştır.



Şekil 4.7. Membran ve anot-katod katalizör katmanları kenar çizgisi mesh işlemi

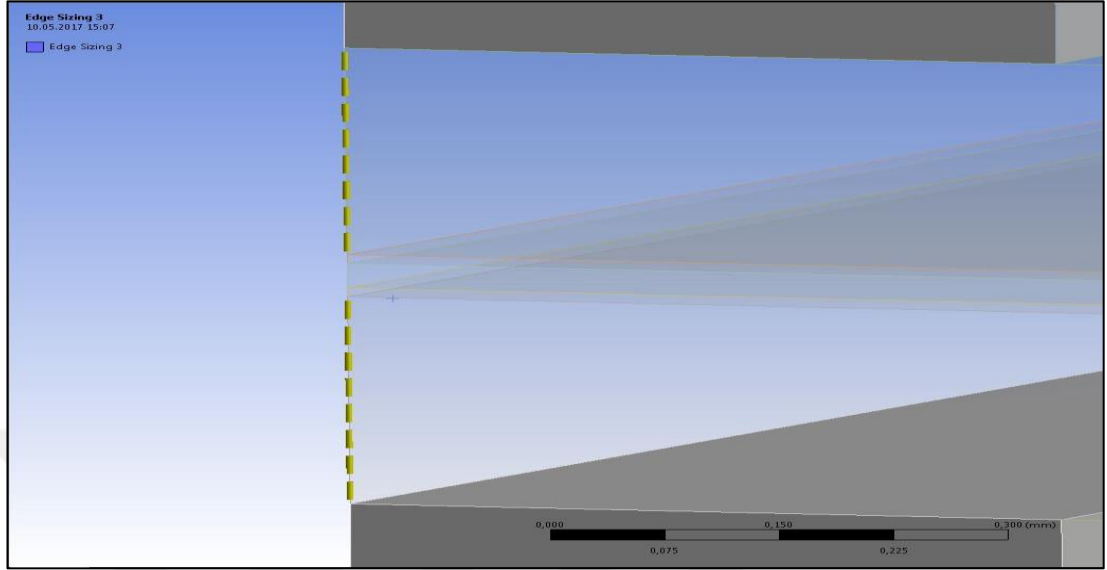


Şekil 4.8. Membran ve katalizör katmanlarının ağ yapısı oluşumu için hazırlanması

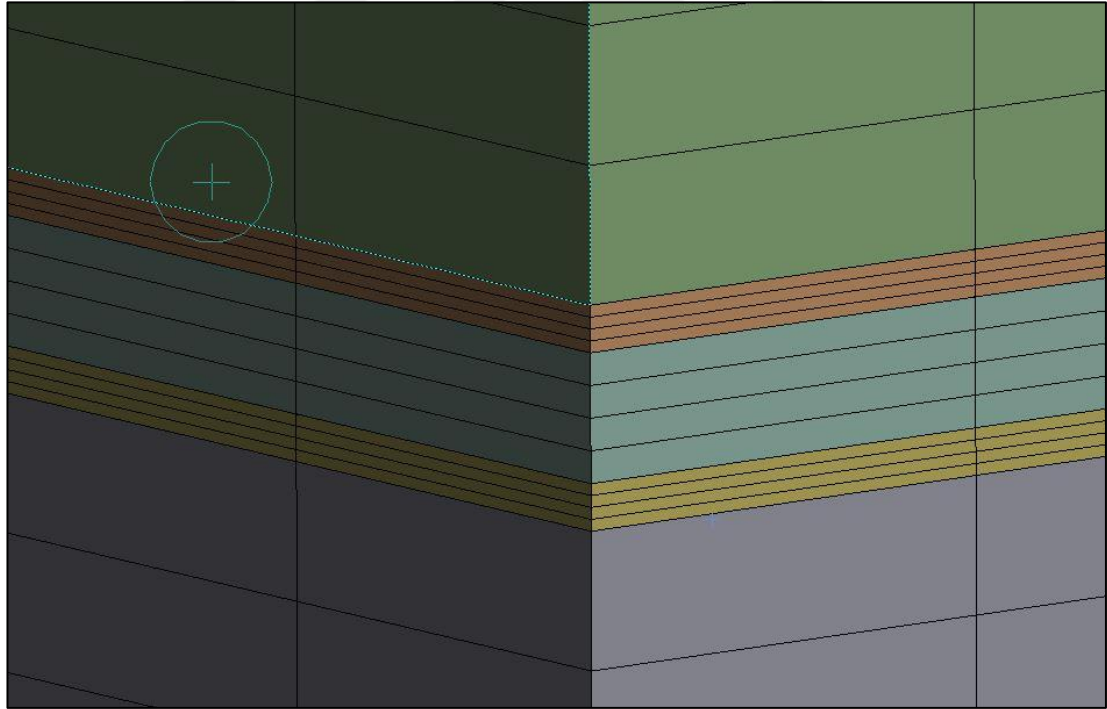
Şekil 4.9.'da görüleceği üzere membran ve katalizör katmanlarında olduğu gibi GDL katmanlarında da bölünme sayısı konutu uygulanmış ve GDL kalınlıkları membran ve katalizör katmanlarına nispeten kalın olduğu için GDL tabakaları dikey doğrultuda 8 eşit katmana bölünmüştür. GDL katmanlarda oluşan eleman hacimleri  $0,0293 \times 0,1 \times 0,1$  olacak şekilde ayarlanmıştır.

Akış kanalları ve akım toplayıcılar ise  $0,1 \times 0,1 \times 0,1$  mm boyutlarında hacimlere ayrılmıştır. Akım toplayıcıların ve akış kanallarının tüm köşe kenarları 0,1 mm

boyutunda çizgilere ayrılmış ve bu hacimlere gövde boyutlandırma komutu ile 0,1 mm ölçüsünde ağ yapısı oluşturulmuştur.



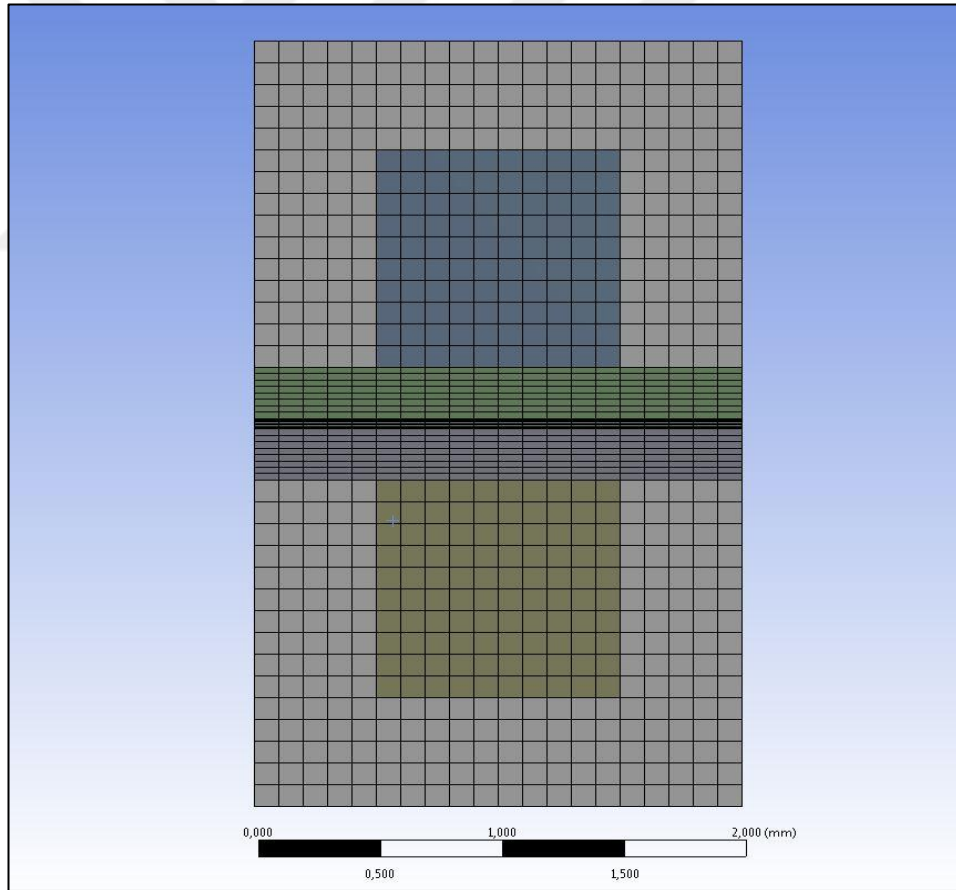
Şekil 4.9. GDL hacimlerinin ağ yapısının oluşturulması



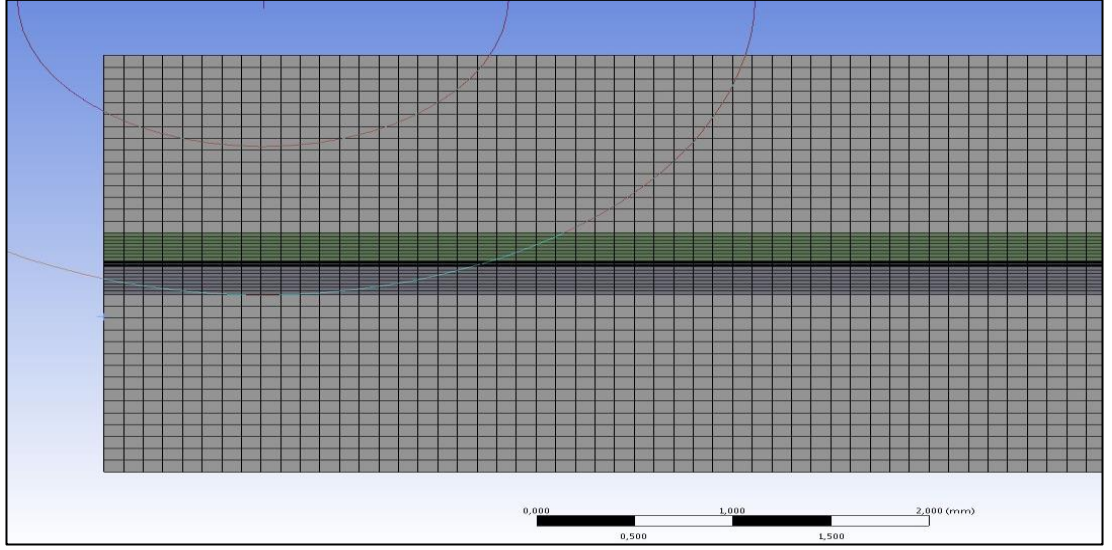
Şekil 4.10. Membran ve katalizör katmanlarının ağ yapısı

Şekil 4.10.'da görüldüğü üzere membran ve katalizör hacimleri 4 ayrı katmana ayrılmıştır. Benzer işlemler tüm hücreye uygulanmış ve Şekil 4.11. ve 4.12.'de gösterilen yapılar ortaya çıkmıştır.

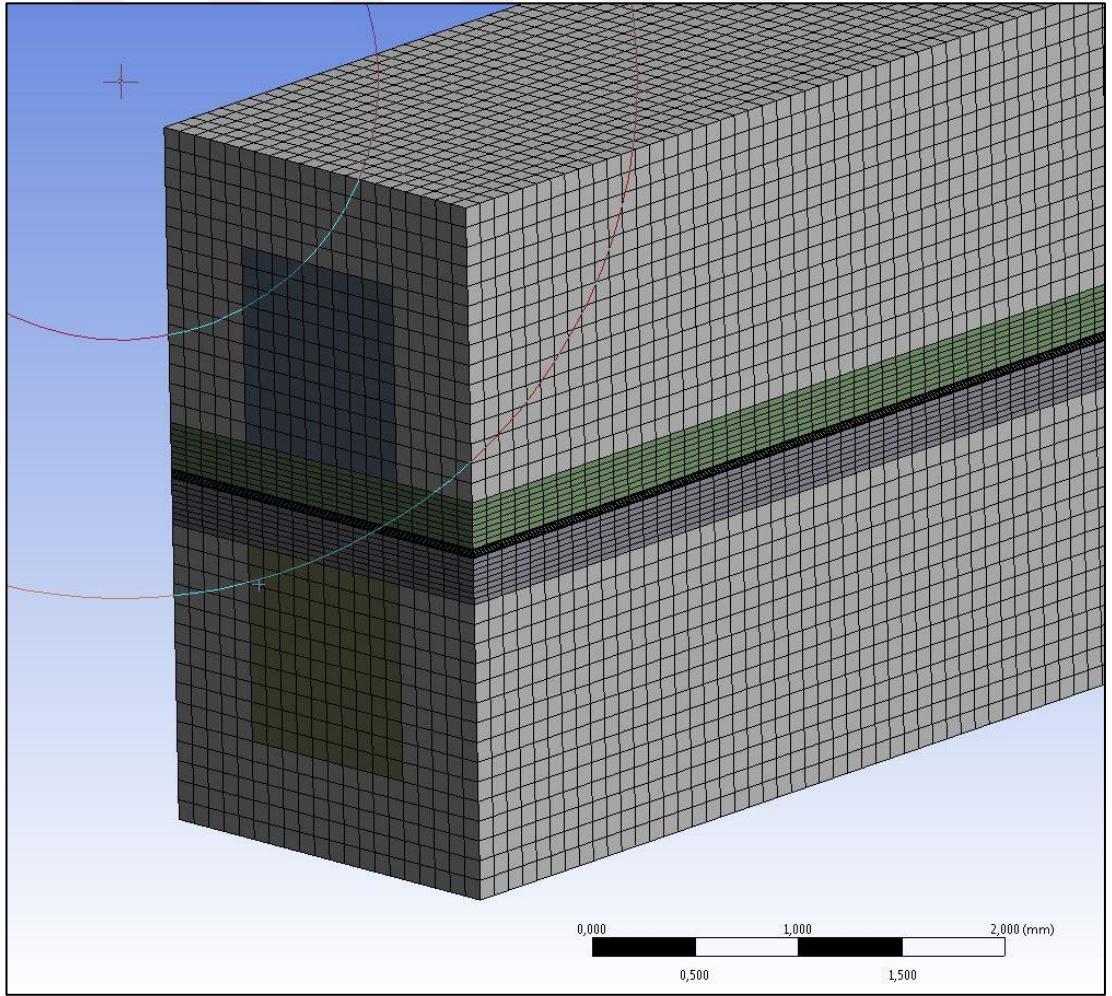
Oluşturulan ağ yapısının dış kısımlarında üniform bir halde olduğu Şekil 4.13.'de görülmektedir. Ağ yapısı kalitesi ve çözümün doğruluğu açısından bu yapının hacmin tamamında oluşup oluşmadığını anlamak için Şekil 4.14.'deki kesit görüntüsü incelenmiştir. İnceleme sonucunda model hacminin tamamında aynı yapının olduğu, tüm elemanların altı yüzlü yapıya sahip olduğu gözlemlenmiştir. Ağ yapısı oluşturma işlemlerinde kullanılan bir diğer kontrol işlemi ise çarpıklık ve boy-en oranı değerlerinin incelenmesidir. En-boy oranı terimi, oluşturulan hacmin en uzun kenarının en kısa kenara oranı olarak tanımlanmaktadır. Altı kenarlı ağ oluşturma işlemlerinde en ideal en-boy oranının 1 olması gerekmektedir. Ancak modelde çok ince yapılar olduğu için hücrenin tamamında bu oranın yakalanması mümkün değildir. Hücrelerin %60'lık bir kısmında 1 değeri yakalanmış, diğer kısımlarda ise 1 değerine oldukça yaklaşmıştır.



Şekil 4.11. Tüm hücreye ait ağ yapısının önden görünüşü



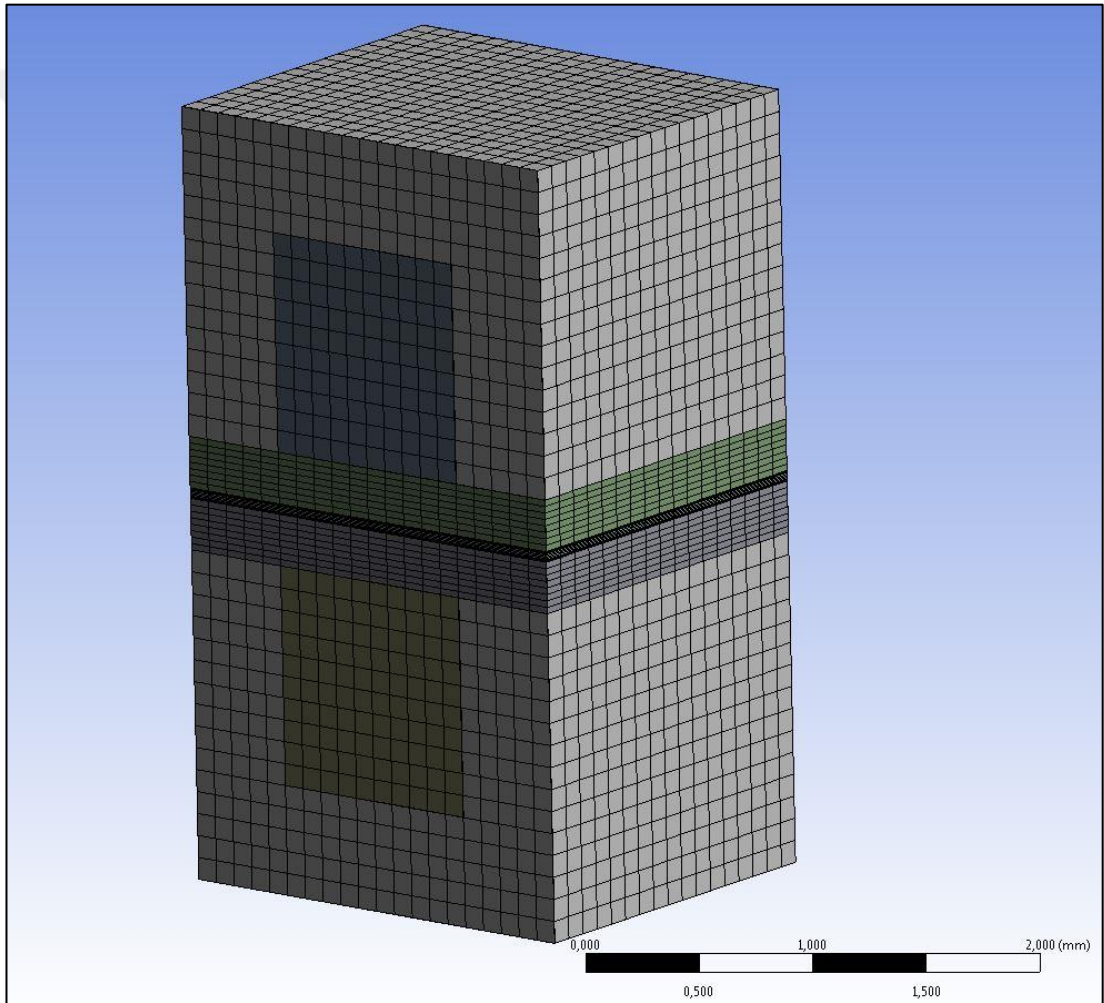
Şekil 4.12. Hücreye ait ağ yapısının yandan görüntüsü



Şekil 4.13. Hücreye ait ağ yapısının perspektif görüntüsü

Modelleme çalışmalarında ağ yapısı kalitesini ifade etmede kullanılan bir diğer değer çarpıklık değeridir. Bu değer ise 0,85 değerini aşmamalıdır. Modelimizin 6 kenarlı olması sebebiyle bu değer  $1,31 \times 10^{-4}$  değerine yaklaşmıştır. Ancak bu değer dört yüzlü ve üç yüzlü hacimlerde kalite açısından daha belirleyicidir. Model üzerinde 1.160.000 eleman sayısına ulaşılmıştır.

Ağ oluşturma işleminin tamamlanmasının ardından ağ (mesh) sekmesi kapatılır ve modelleme çalışması için WB çalışma sayfasında kurulum sekmesine çift tıklanılır. Bu işlemin ardından Fluent programı açılarak modelleme çalışmalarına başlanılır.



Şekil 4.14. Ağ yapısının kesit görünümü

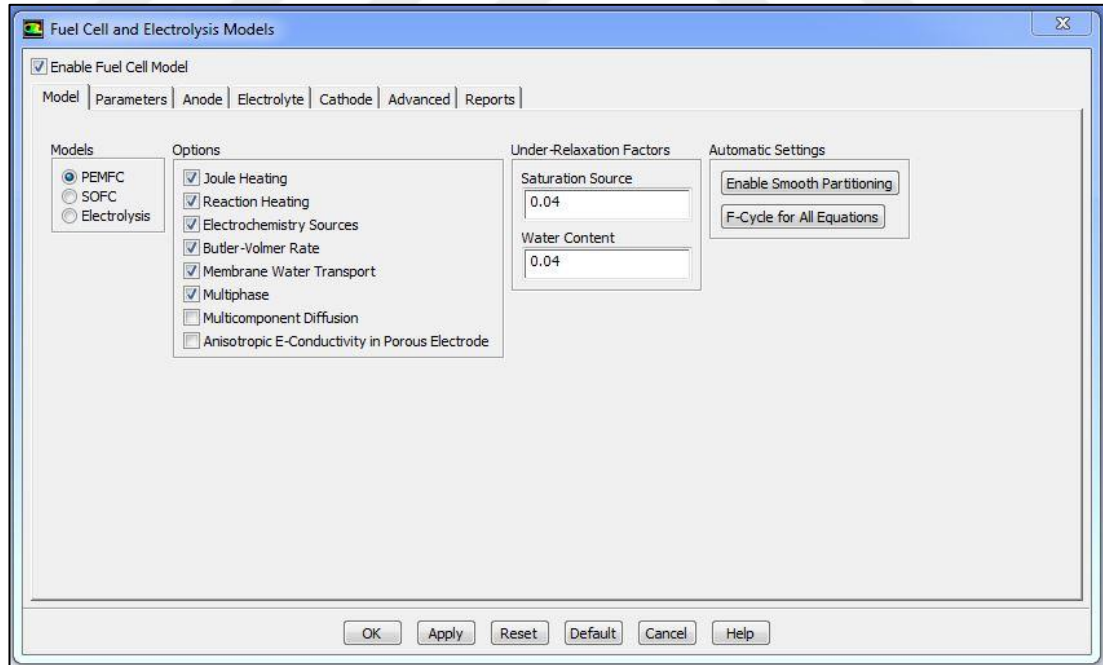
Ansys Fluent açılış sayfasından seri ve paralel işlem seçenekleri, işlemci sayısı gibi opsiyonlar seçilebilmektedir. Modellemelerde kullanılan iş istasyonu 12 çekirdekli işlemcili bir bilgisayar olduğu için 11 adet işlemci çekirdeği modelleme çalışmaları için ayrılmıştır. Bu sebeple paralel işlem seçeneği seçilmiştir. Ansys Fluent

programında tanımlı olarak birçok ek çözümleyici geliştirilmiş ancak bunlar programın her açılışında tanımlı olarak kullanılamamaktadır. Bazı çözümleyicilerin aktif hale gelebilmesi için komut satırına bazı kodların girilmesi gerekmektedir. Fluent programında PEMFC modülünün aktifleştirilmesi için Şekil 4.15.'deki kodun komut satırına yazılması gerekmektedir.

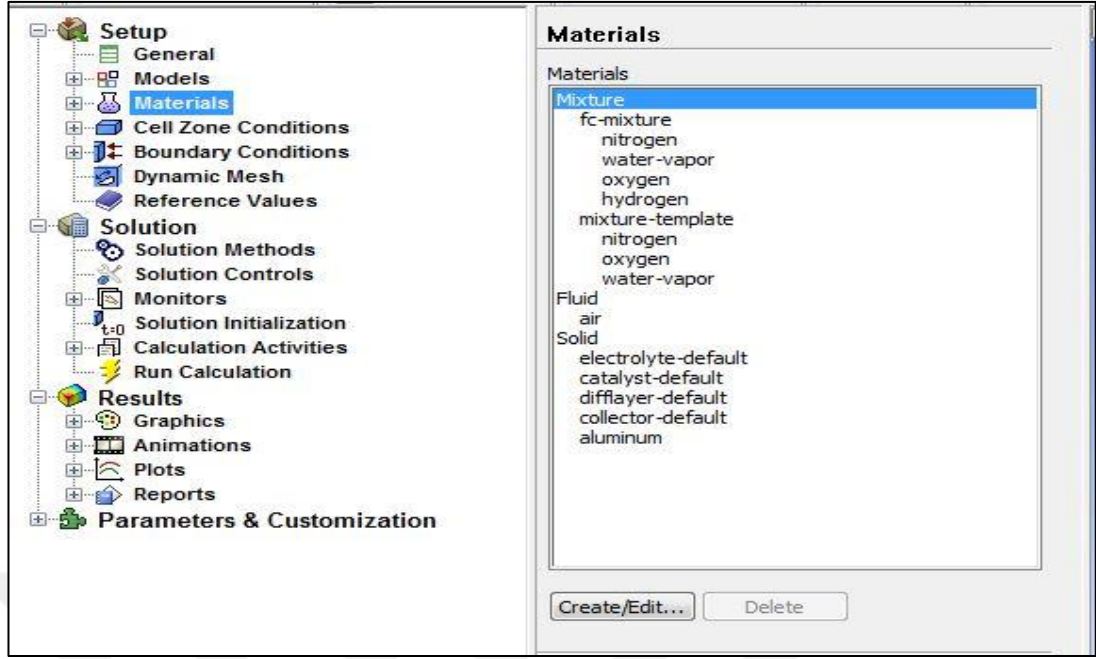
```
define/models/addon-module/3
```

Şekil 4.15. PEMFC modülünün aktifleştirilmesi için gerekli kod

Aktifleştirme işlemi sonrasında Fluent programında modeller menüsü altında PEMFC sekmesi aktif hale gelir. Aktif hale gelen PEMFC modülü parametre sayfasında Tablo 4.1. ve 4.2.'deki parametreler açılan sekmeli sayfalarda anot, katot ve membran için ayrı ayrı girilir. Şekil 4.16.'da gösterilen seçenekler sekmesi altında "Multiphase" sekmesi aktif hale getirilir.



Şekil 4.16. Fluent PEMFC modülü parametre menüsü

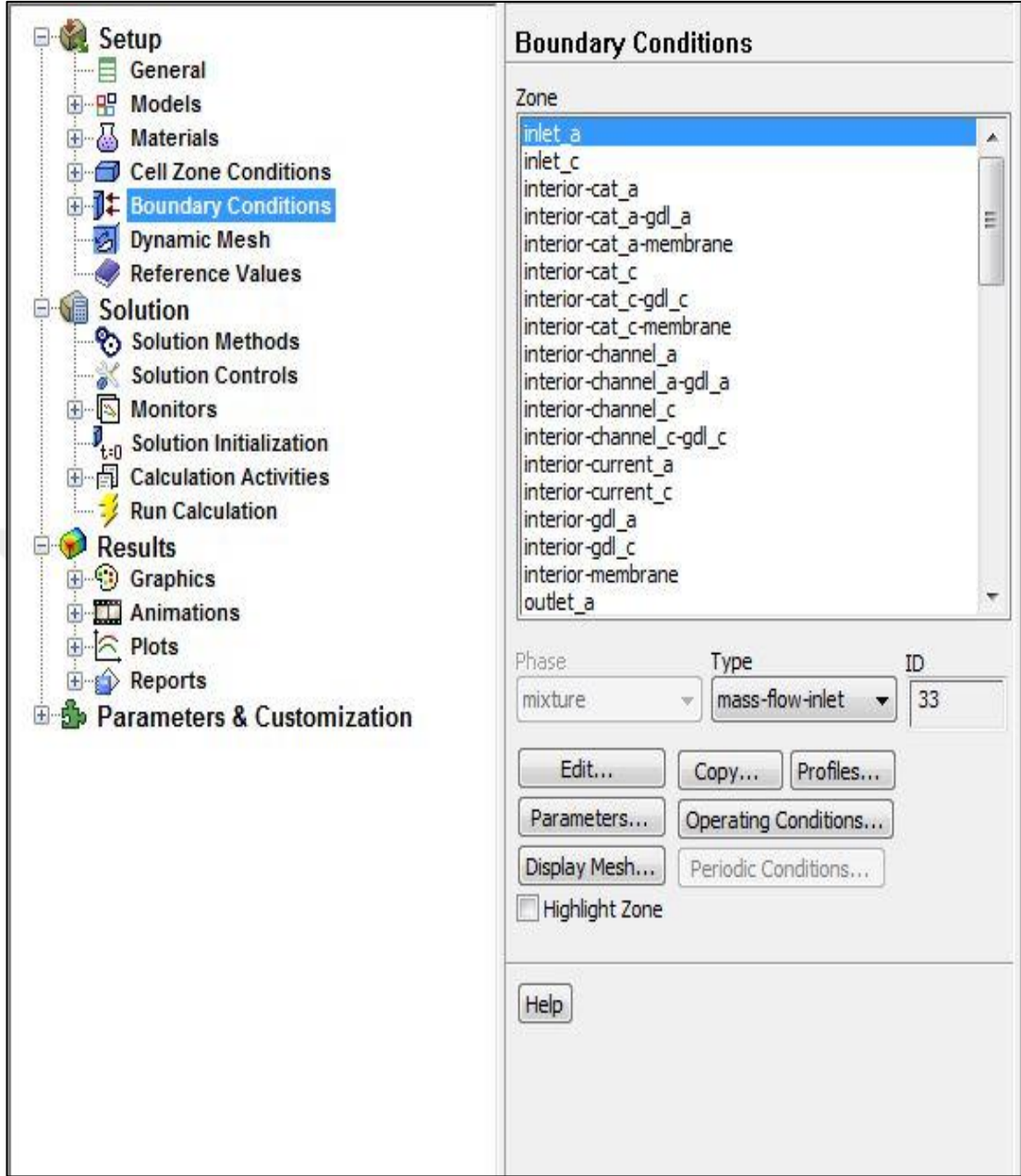


Şekil 4.17. Fluent PEMFC modülü malzeme seçimi menüsü

Model ile ilgili parametreler girildikten sonra her bir hacim için malzeme seçimi işlemine başlanılır. Fluent yazılımında PEMFC modülü aktif hale getirildikten sonra yakıt pilleri için standart malzeme özellikleri aktif hale gelir. Malzeme menüsü Şekil 4.17.'de görülmektedir. Malzeme özelliklerinde değişiklik yapılacak ise "Create/Edit" sekmesi ile istenilen değişiklikler ilgili malzeme üzerinde uygulanabilmektedir. Tez çalışması için Tablo 4.1. ve Tablo 4.2.'deki değerler baz alınarak malzeme özelliklerinde değişiklikler gerçekleştirildi.

Malzeme seçimi gerçekleştirildikten sonra sınır şartlarının oluşturulması amacıyla Şekil 4.18.'deki sınır şartları sekmesine girilerek sınır şartları oluşturulur. Tablo 4.4.'de verilen isimlendirmeler kullanılarak gaz giriş ve çıkışları, anot ve katot terminallerine ait parametrelerin girişi yapılır. İlk olarak anot giriş isimlendirmesi seçilir ve açılan sayfadan kütleli akış girişi seçimi yapılır.

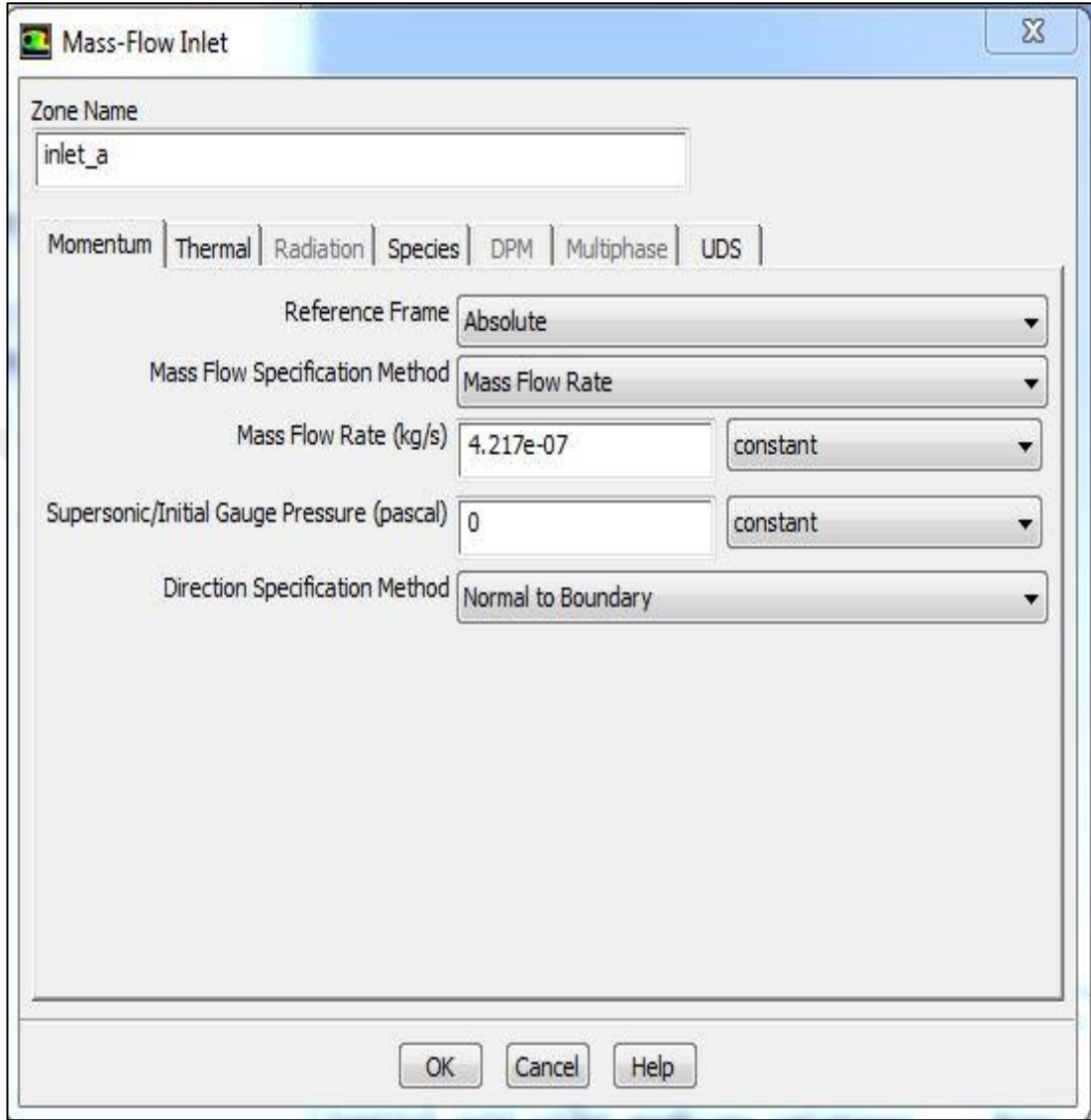




Şekil 4.18. Kütle-akış girişi sınır şartının oluşturulması

Kütlesel akış girişi sınır şartı oluşturulduktan sonra Şekil 4.19.'daki parametre sayfasından hidrojen gazı ve su buharı için ait akış debisi, sıcaklık ve kütle kesirlerinin girişleri yapılır. Aynı işlem giriş sınır şartı için hava ve su buharı için tekrarlanarak gaz giriş sınır şartları oluşturulur. Çıkış sınır şartı için ise sadece sıcaklık değerleri giriş yapılarak anot ve katot için çıkış sınır şartları oluşturulmuş olur. Anot ve katot terminallerine ait sınır şartları için sıcaklık ve elektrik potansiyeli parametreleri girilir. Anot terminali için elektrik potansiyeli sıfır girilir. Katot

elektrik potansiyeli ise hücrenin hangi gerilimde çalıştırılacağını belirlediği için 0-0,95V arasında bir değer girilir.



Şekil 4.19. Kütle-akış girişi sınır şartına ait parametre sayfası

DM içerisinde oluşturulan isimlendirmelerden ve duvar olarak nitelendirilen yüzler Fluent içerisinde duvar sınır şartı olarak otomatik olarak atanmıştır. İsimlendirilme yapılmamış diğer tüm yüzler ise arayüz olarak otomatik olarak atanmaktadır.

Modelleme için gerekli olan tüm sınır şartları oluşturulduktan sonra çözüm metotları menüsünden gerekli seçimler yapılır. Basınç-hız eşleşmesi menüsünde basit şeması seçilir. Bu şema durağan ve laminer akışların olduğu, basınç tabanlı problemlerin çözümünde kullanılır. Fluent programında da varsayılan şema olarak atanmıştır.

Metot sayfasındaki seçimler yapıldıktan sonra çözüm kontrolleri sayfasına geçilir. Burada rahatlama parametrelerinin giriři yapılır. Bu parametreler çözümün yakınsanması ile doğrudan bağlantılıdır. Çözüm sırasında yakınsama grafikleri incelenerek bu deęer ile oynanabilir. Genellikle 1 olan bu deęer düşürülerek farklı parametreler için yakınsama sağlanabilir. Tüm bu parametreler sisteme girildikten sonra çözüm süreci başlatılır.



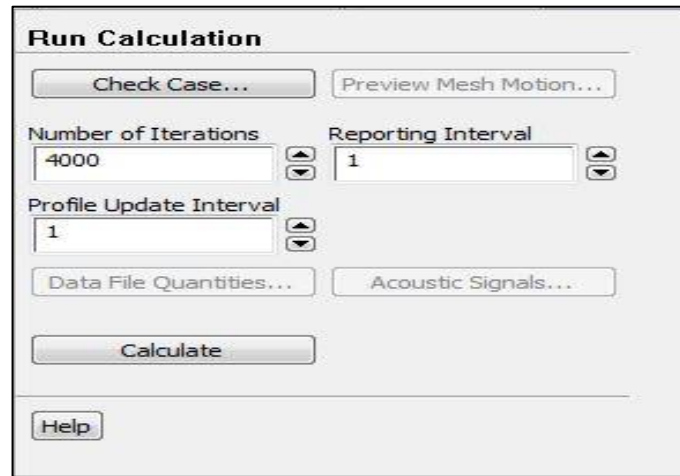
## 5. PARAMETRİK ANALİZLER

Parametrik analizler, ilk olarak temel model analizlerine başlanarak gerçekleştirilecektir. Temel model analizlerinde elde edilen verilere göre diğer parametreler ile karşılaştırmalar yapılacaktır.

Modellemelerde kullanılacak bilgisayar, 12 adet işlemci çekirdeğine ve 80 GB belleğe sahiptir. Parametrik modellemelerde 11 çekirdek aktif olarak kullanılmış ve paralel işlem seçeneği tercih edilmiştir. Tüm parametrik analizlerde stabilizasyon metodu olarak iki bileşenli gradyan stabilizasyon metodu seçilmiştir. Bu metot, modellerin analizinde düzensiz yakınsamalardan kaçınmayı sağlamaktadır.

### 5.1. Temel Model Analizleri

Temel model analizinde Tablo 4.1. ve Tablo 4.2.'deki elektrot ve membran parametreleri temel alınmıştır. Bu parametrelerin haricinde temel modelde kullanılacak, sıcaklık, debi, nem oranı, stokiyometri gibi önemli parametreler ise Tablo 5.1'de verilmiştir. Parametrelerin girişi Fluent yazılımında yapıldıktan sonra uygun iterasyon sayısı ile çözüm başlatılır. İterasyon sayısının girileceği alan ve başlatma ekranı Şekil 5.1.'de verilmiştir.

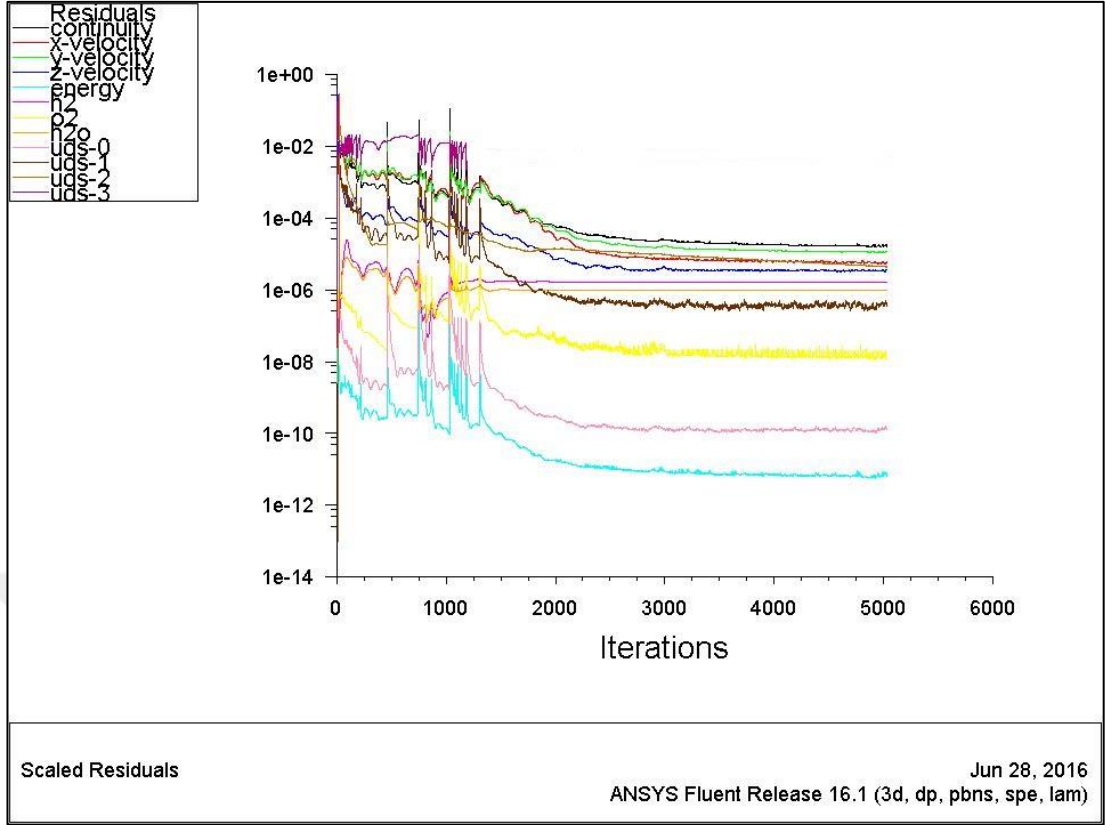


Şekil 5.1. İterasyon ve çözümlene başlangıç ekranı

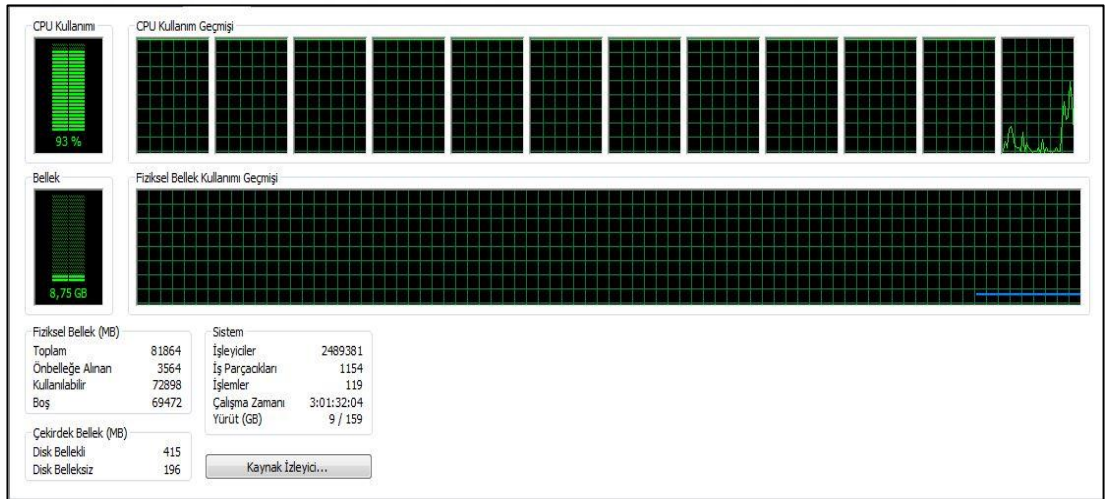
Tablo 5.1. Temel modele ait çalışma parametreleri

Parametre	Değer	Birim
Anot giriş sıcaklığı	353,15	K
Anot çıkış sıcaklığı	353,15	K
Katot giriş sıcaklığı	353,15	K
Katot çıkış sıcaklığı	353,15	K
Anot giriş debisi	$1,381 \times 10^{-7}$	kg/saniye
Katot giriş debisi	$1,05 \times 10^{-6}$	kg/saniye
Anot nem oranı	%100	-
Katot nem oranı	%100	-
Anot giriş basıncı	1	atm
Katot giriş basıncı	1	atm
Anot stokiyometrisi	1,5	-
Katot stokiyometrisi	2	-

Parametrik analizlerde onlarca farklı çözüm gerçekleştirilecek olması sebebiyle çok uzun çözüm süreleri gerekmektedir. Bu sürelerin kısaltılması, çözüm sonucu elde edilen çözümlerin doğruluğu ile ilgilidir. Yakınsama kriterleri göz önüne alındığında, yüksek çalışma gerilimlerinde yakınsamanın uzadığı, farklı çalışma koşullarında da benzer şekilde farklı sonuçlar alındığı görülmüştür [39]. Bu farklılıkları ortadan kaldırmak için uzun süreli bir çözüm gerçekleştirilmiş ve yakınsamanın gerçekleştiği iterasyon sayısı tüm çözümlere uygulanmıştır. Şekil 5.2.'de 5200 iterasyon sayısına sahip çözümler görülmektedir. Yakınsamanın yaklaşık olarak 3500 iterasyondan sonra gerçekleştiği görülmektedir. Bu veriler göz önüne alındığında tüm modellerde minimum 3500 iterasyon uygulanmış ve çözüm elde edilmiştir. İşlem süresi 10080 saniye sürmüştür. Toplam işlemcilerin %93 lük bir kısmı ve ortalama 8,75 GB bellek sürekli kullanılmıştır.

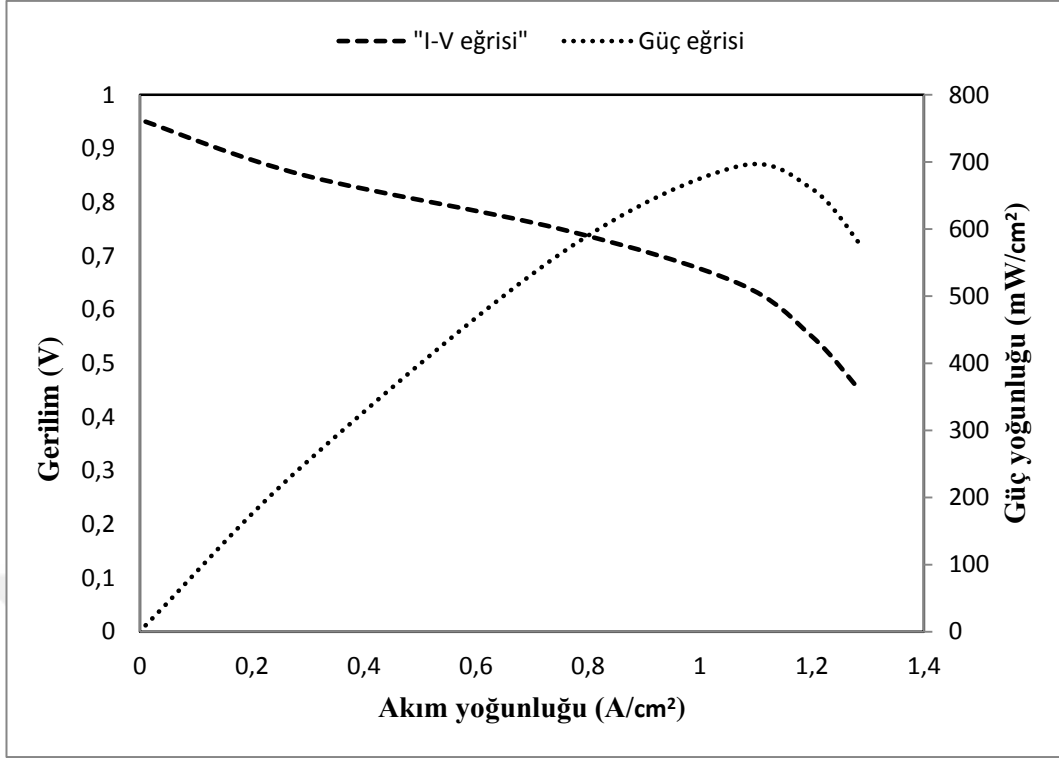


Şekil 5.2. 5200 adet iterasyona sahip temel model analizi



Şekil 5.3. Çözümleme sırasında işlemci ve bellek kullanımı

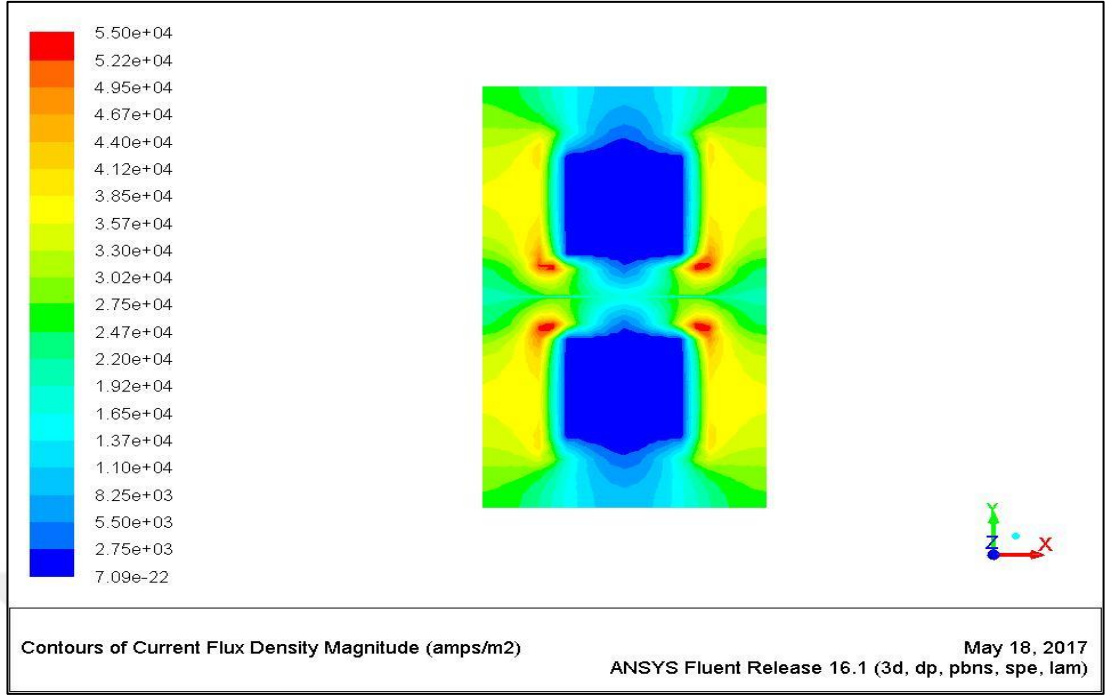
Temel model analizinin sonucunda polarizasyon eğrisi ortaya çıkmaktadır. 80 °C sıcaklıkta, 1,5 anot ve 2 katot stokiyo metri lerinde %100 nem oranlarında elde edilen veriler Şekil 5.4.'deki gibi ortaya çıkmaktadır.



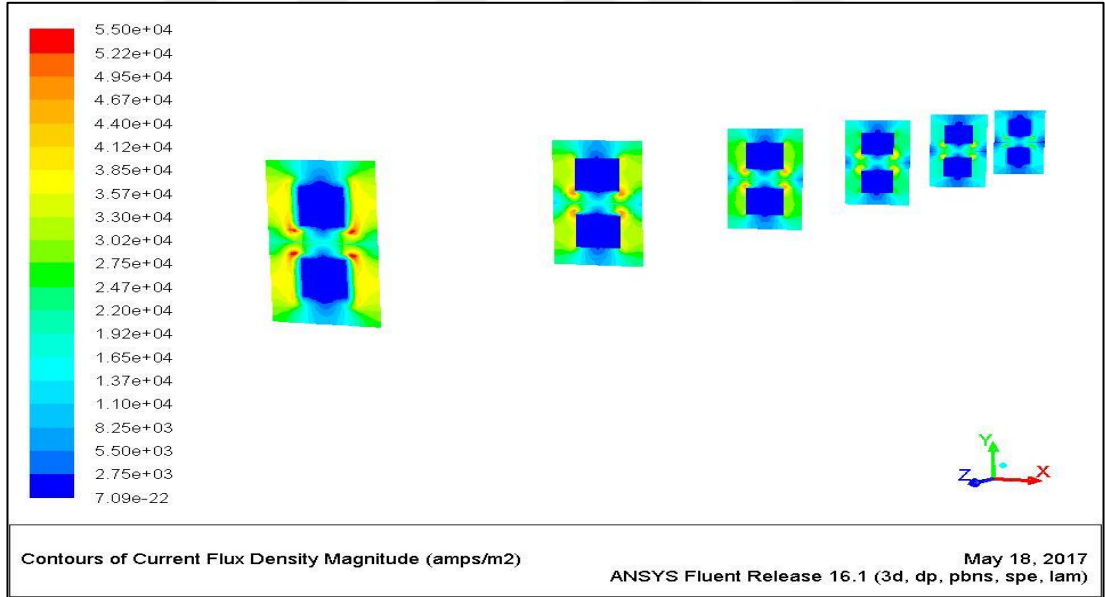
Şekil 5.4. Temel model polarizasyon ve güç eğrisi

6 farklı gerilim değeri ile yapılan analizler neticesinde elde edilen polarizasyon eğrisi, Şekil 5.4.'de görüleceği üzere, %100 anot ve katot nemlendirmeleri ile yaklaşık  $700 \text{ mW/cm}^2$  değerinde bir güç yoğunluğuna ve bu güç yoğunluğunda  $1,1 \text{ A/cm}^2$  akım yoğunluğuna ulaşmıştır. Polarizasyon eğrisinde  $1,1 \text{ A/cm}^2$  değerinden sonra hücrede konsantrasyon kayıplarının meydana geldiği ve limit akım değerine ulaşıldığı anlaşılmaktadır.

Şekil 5.5.'de, temel model simülasyonunda elde edilen akım yoğunluğu kesit grafiği gösterilmiştir. Reaksiyon sonucu oluşan akım yoğunluğunun maksimum ve minimum seviyelere ulaştığı alanlar açıkça görülmektedir. Şekil 5.6.'da ise 10'ar mm ara ile akım yoğunluğuna ait kesitler alınarak hücre boyunca akım yoğunluğu değerlerinin değişimi gösterilmiştir. Hücre girişinden itibaren akım yoğunluğunun dinamik parametrelerden etkilenecek şekilde azaldığı açıkça görülmektedir.



Şekil 5.5. Temel model simülasyonunda hücre giriş yüzeyinde akım yoğunluğu kesit grafiği



Şekil 5.6. Temel model için hücre girişinden itibaren 10'ar mm ara ile akım yoğunluğu kesitleri



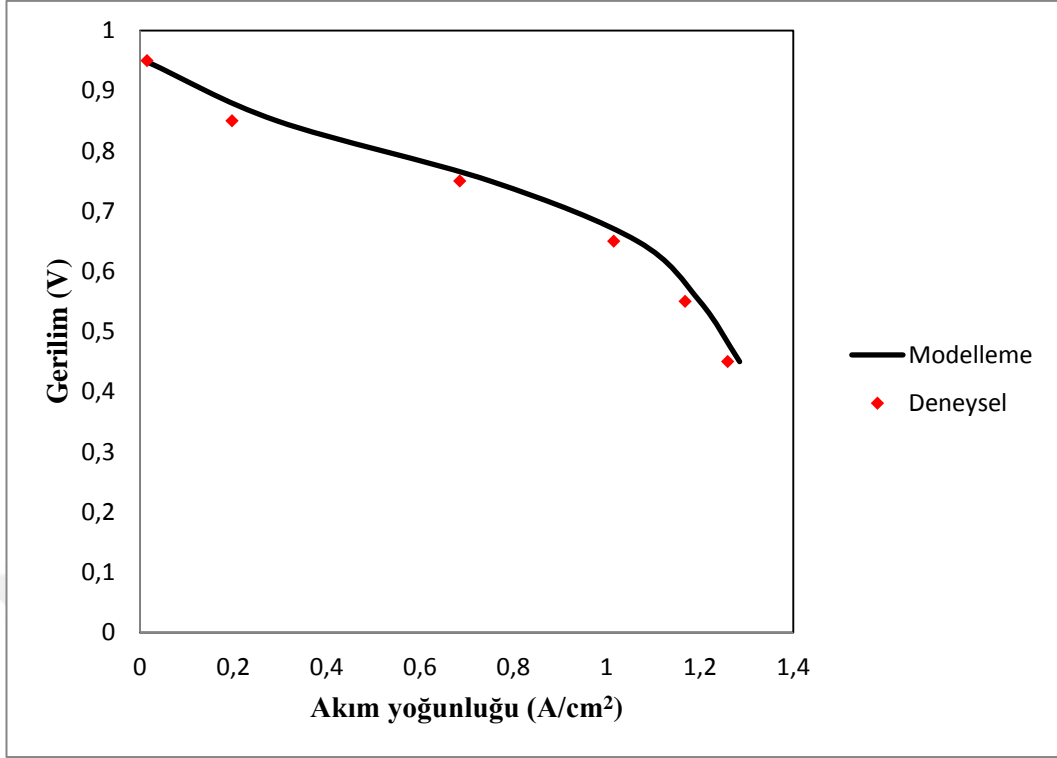
## 5.2. Deneysel Çalışma ve Temel Model Analizinin Doğrulanması

Temel model analizlerinin ve gerçekleştirilecek onlarca farklı parametrik analizlere geçilmeden önce oluşturulan modelin doğrulanması için temel model analizi deneysel ortama taşınmıştır. Deneysel çalışmalar, Şekil 5.8.'de gösterilen Scribner firmasına ait 850e Multi Range yakıt pili test istasyonu ile gerçekleştirilmiştir. Bu test sistemi, gücü 100W' a kadar yakıt pilleri için kullanılmaktadır. Test sistemi, hücrenin istenen gerilime ve akıma ayarlanmasına, istenilen sıcaklık ve nem oranlarında gaz debilerinin çok hassas şekilde ayarlanmasına olanak sağlamakta, parametrik çalışmalara imkân vermektedir.

Deneysel çalışmalarda, Şekil 5.9.'da gösterilen 25 cm<sup>2</sup> aktif alana sahip, Sigracet 29BC gaz difüzyon tabakası ve Nafion XL membran kullanılan ve 0,6 mg/cm<sup>2</sup> Pt katalizör yüklü membran elektrot ünitesi kullanılmıştır. Kullanılan membran ve gaz difüzyon tabakası modelleme çalışmalarında temel alınan özelliklere sahiptir.

Deneysel doğrulama çalışmalarında, tek kanallı, modelde kullanılan akış kanalı geometrisi ile bire bir uyumlu 1mm kanal derinliği ve genişliğine sahip akım toplayıcı plakalar kullanılmıştır. Deneysel çalışmalarda kullanılan hücre ve plakalar Şekil 5.10.'da gösterilmiştir. Deneysel analizler Scribner firmasına ait test istasyonunun yazılımı Fcell uygulaması ile gerçekleştirilmiştir. Gerekli sıcaklık, debi ve nem oranları ayarlanarak testlere başlanılmıştır. Temel model analizi parametresi test edilmiştir.

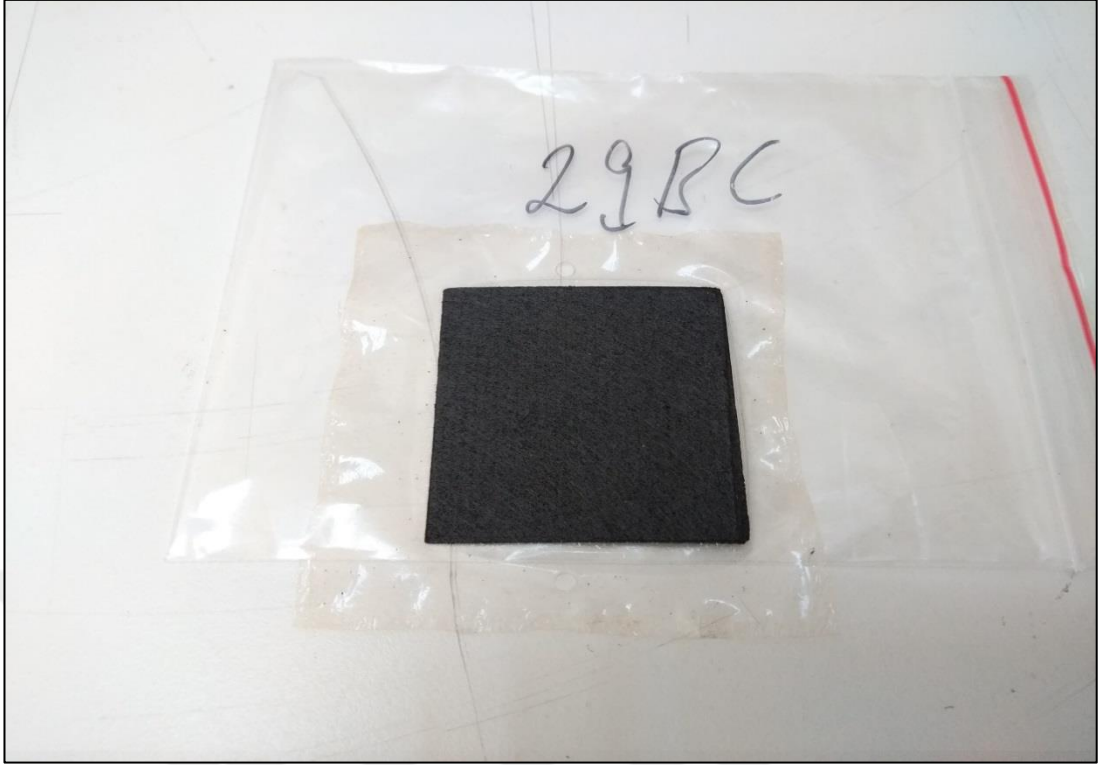
Şekil 5.7.'de temel model ve deneysel çalışmalara ait polarizasyon eğrileri görülmektedir. Deneysel çalışmalar sonucunda elde edilen veriler incelendiğinde, oluşturulan modelin deneysel çalışmalar ile büyük bir uyum içinde olduğu, model parametrelerinin bu model için doğru seçildiği açıkça görülmektedir. Yapılan bu deneysel çalışma ve doğrulama sonucunda parametrik modelleme çalışmalarına geçiş yapılacaktır.



Şekil 5.7. Temel model ve %100 katot bağımlılığında modelleme ve deneysel polarizasyon eğrileri



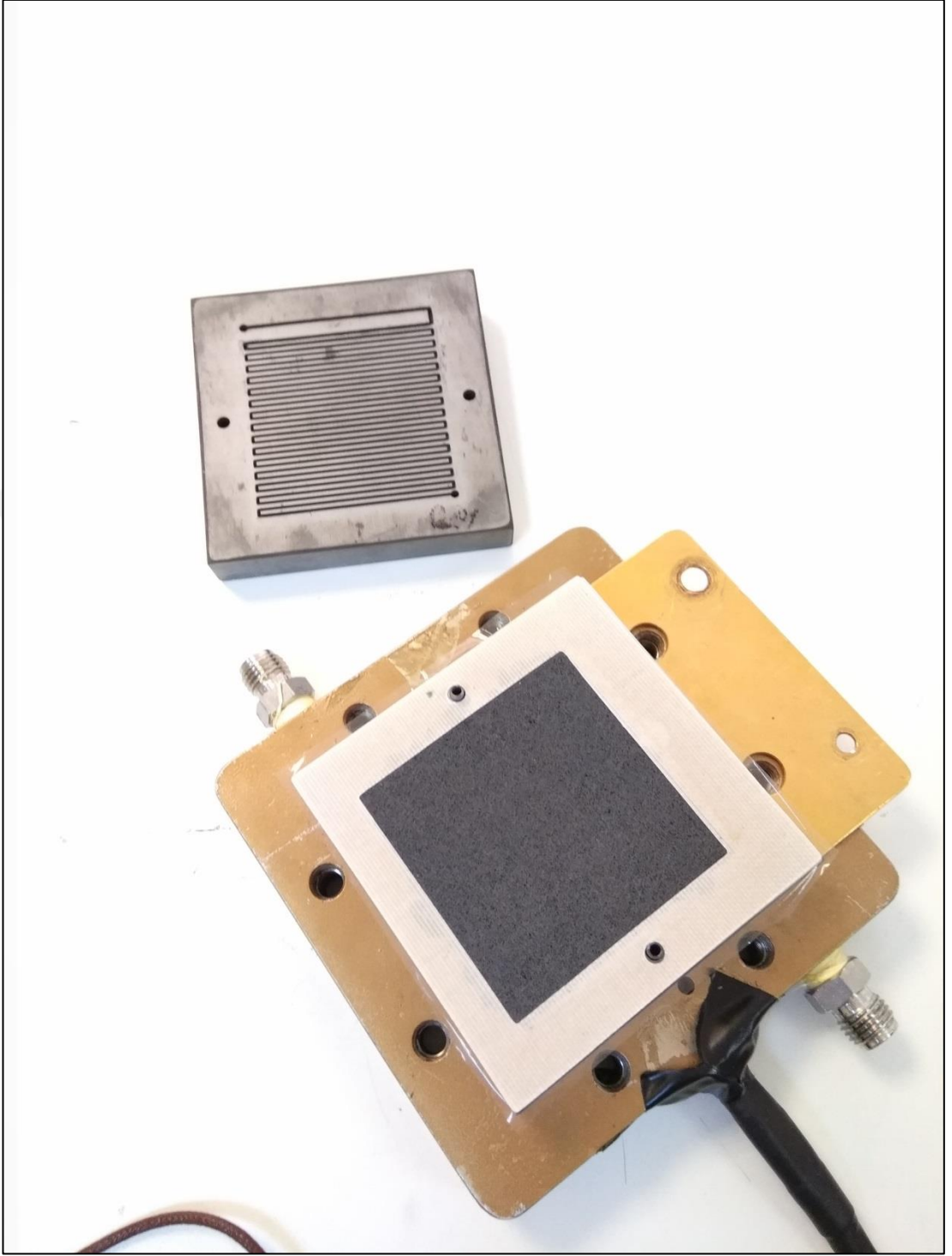
Şekil 5.8. Scribner 850e yakıt pili test sistemi



Şekil 5.9. Deneysel çalışmalarda kullanılan membran elektrot ünitesi

Temel model simülasyonu ve deneysel çalışmaları sonucunda elde edilen performans değerlerinin iyileştirilmesi, hücreden alınabilecek maksimum akım ve güç değerinin gözlemlenebilmesi için çeşitli parametrik analizler gerçekleştirilecektir. Parametrik çalışmalar kapsamında, temel model simülasyonları için 6 analiz, 4 farklı sıcaklık değeri için yaklaşık 24 analiz, 4 farklı basınç değeri için 24 analiz, anot ve katot tarafında 8 farklı nem değeri için 48 analiz, 8 farklı stokiyometri değeri için de 48 analiz olmak üzere toplamda 150 farklı analiz koşturulmuştur. Ortalama olarak bir analizin 10800 saniye sürdüğü göz önüne alındığında 450 saatlik bir süreyi bulan analiz zamanı sadece simülasyonların çözümü için harcanmıştır.

Parametrik analizlerde karşılaştırma parametresi olarak Şekil 5.4.'deki veriler dikkate alınacaktır. Bu veriler ile parametrik analizlerden elde edilen veriler yine polarizasyon ve güç eğrileri ile ifade edilecektir.

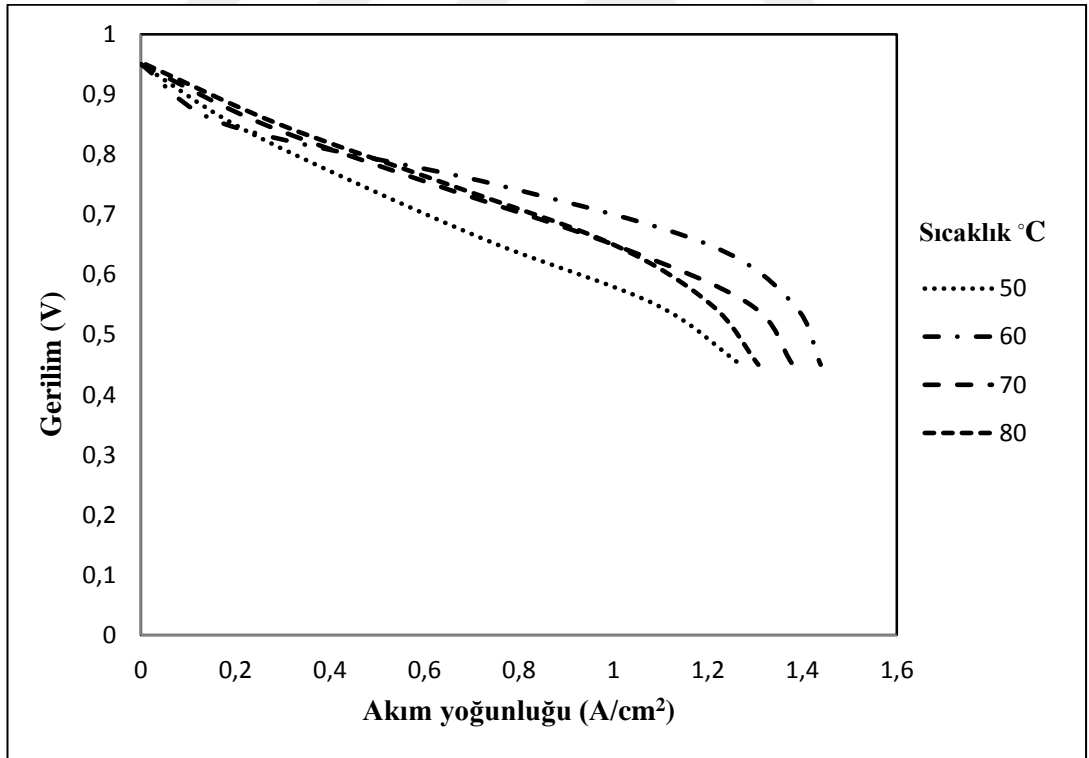


Şekil 5.10. Deneysel çalışmalarda kullanılan tek hücre yakıt pili

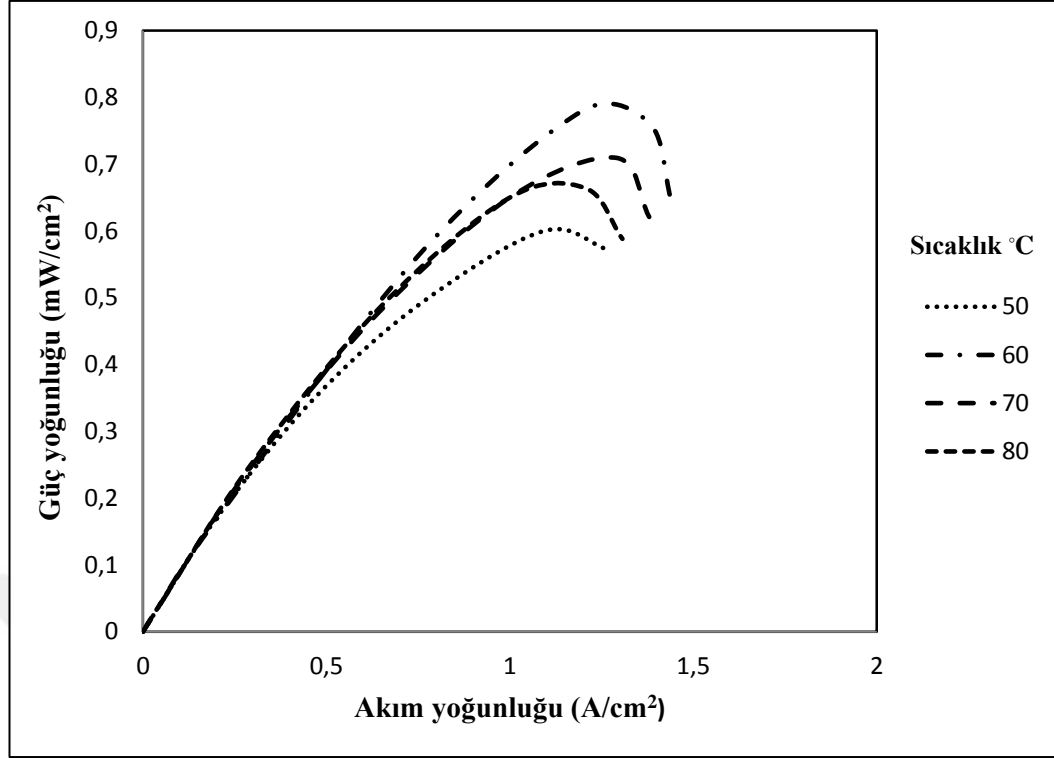
### 5.3. Sıcaklığın Etkisi

Bilindiği üzere yakıt pillerinde sıcaklığın etkisi olumlu yönde olmaktadır. Daha önce ifade edilen Denklem (3.16) ve Tablo 3.2’de sıcaklığın yakıt pili üzerindeki etkisi açıkça görülmektedir. Sıcaklık yükseldikçe voltaj kayıplarının azaldığı, dolayısıyla hücre performansının iyileştiği görülmektedir. Oluşturulan modelde gerek aktif alanın küçüklüğü, gerekse tek hücreden oluşuyor olması hücrenin reaksiyonlar sonucunda ısınmasının önündeki en büyük engeldir. Bu sebeple simülasyonlar sırasında hücreye ait terminaller ve akım toplayıcı plakalar istenilen sıcaklıkta tutulmuş ve analizler bu şekilde gerçekleştirilmiştir. 50 °C ile 80 °C arasında 10’ar derecelik artışlarla 4 farklı sıcaklık değeri için analizler gerçekleştirilmiştir.

Sıcaklığın hücre performansına olan etkisinin incelendiği bu analizler, sabit besleme akımı ve nem oranlarında gerçekleştirilmiştir. Nem oranları her sıcaklıkta %100 olacak şekilde debiler ayarlanmıştır.



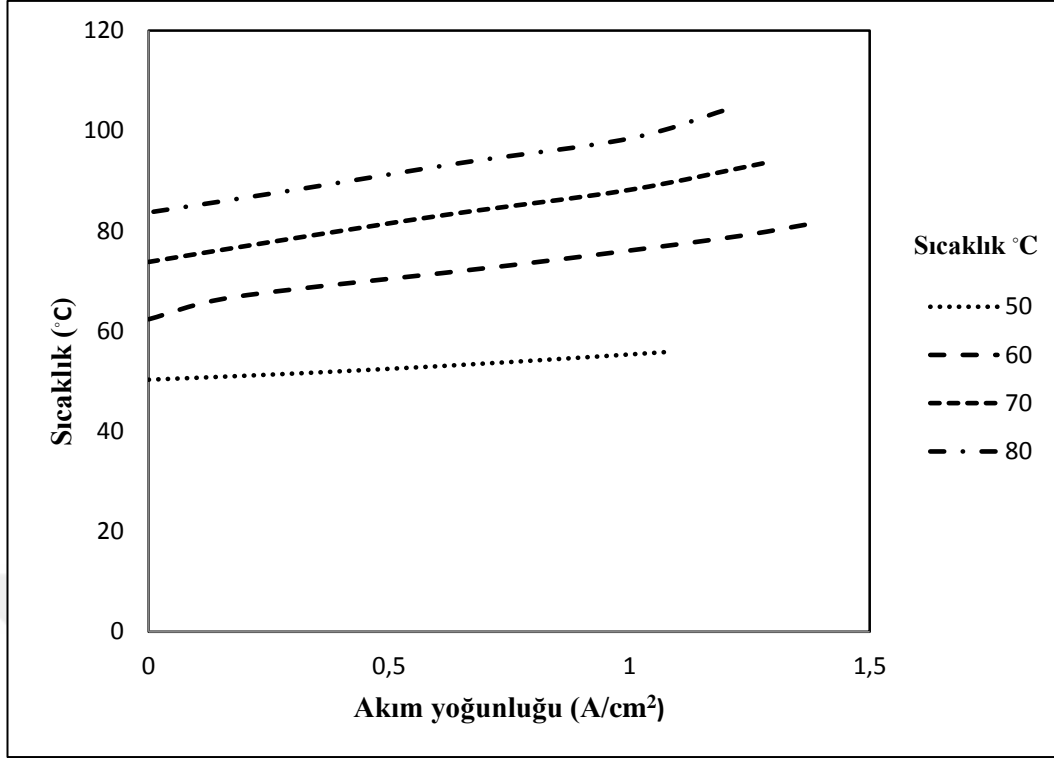
Şekil 5.11. Hücre çalışma sıcaklığının hücre performansına etkisi (polarizasyon eğrisi)



Şekil 5.12. Hücre çalışması sıcaklığının hücre performansına etkisi (güç yoğunluğu eğrisi)

Şekil 5.11.'de görüleceği üzere 0,5 A/cm<sup>2</sup> akım yoğunluğuna kadar yüksek sıcaklık çalışma şartlarının daha iyi performans gösterdiği ancak 1 A/cm<sup>2</sup> akım yoğunluklarında teorik olarak maksimum performansın beklendiği 80 °C sıcaklık çalışma koşulunda performansın düştüğü gözlenmiştir. Her ne kadar performans eğrisindeki düşüşün kaynağı konsantrasyon kayıpları gibi gözükse de tüm sıcaklık koşulları için aynı stokiometrik oran ve nem de olacak şekilde debiler ayarlanmıştır. Maksimum performans sırası ile 60, 70, 80 ve 50 °C de gözlenmiştir. Şekil 5.12.'de hücre çalışma sıcaklığının hücre performansına etkisi güç yoğunluğu grafikleri ile ifade edilmiştir.

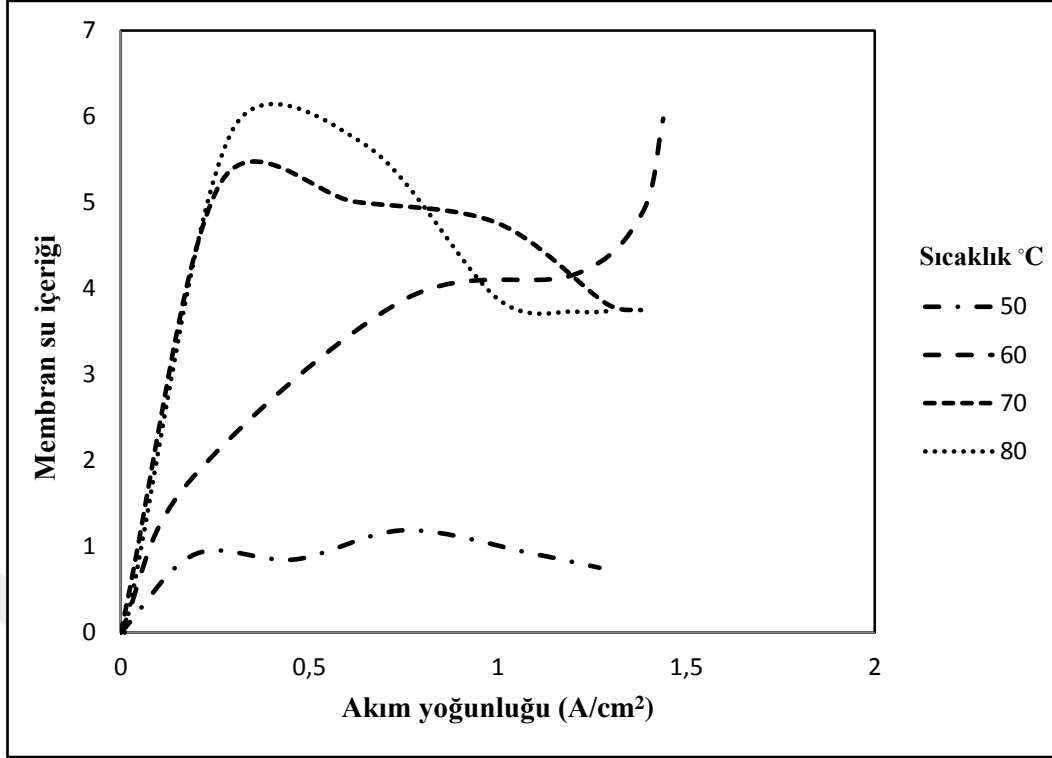
Yakıt pillerinde teorik olarak sıcaklığın performans üzerindeki etkisi olumlu yönde olsa da, deneysel çalışmalarda ve modelleme çalışmalarında aynı durum her zaman gözlemlenememektedir. Sıcaklık ile birlikte membran su miktarı, proton iletkenliği, kanal içlerindeki su yoğunlaşması, gaz difüzyon tabakası ve katalizör katmanındaki sıvı su birikmeleri gibi etmenler yakıt pili performansına etki etmektedir. Bu sebeple ilk olarak anot katalizör katmanı ve membran ara yüzündeki sıcaklık dağılımları incelenmiştir.



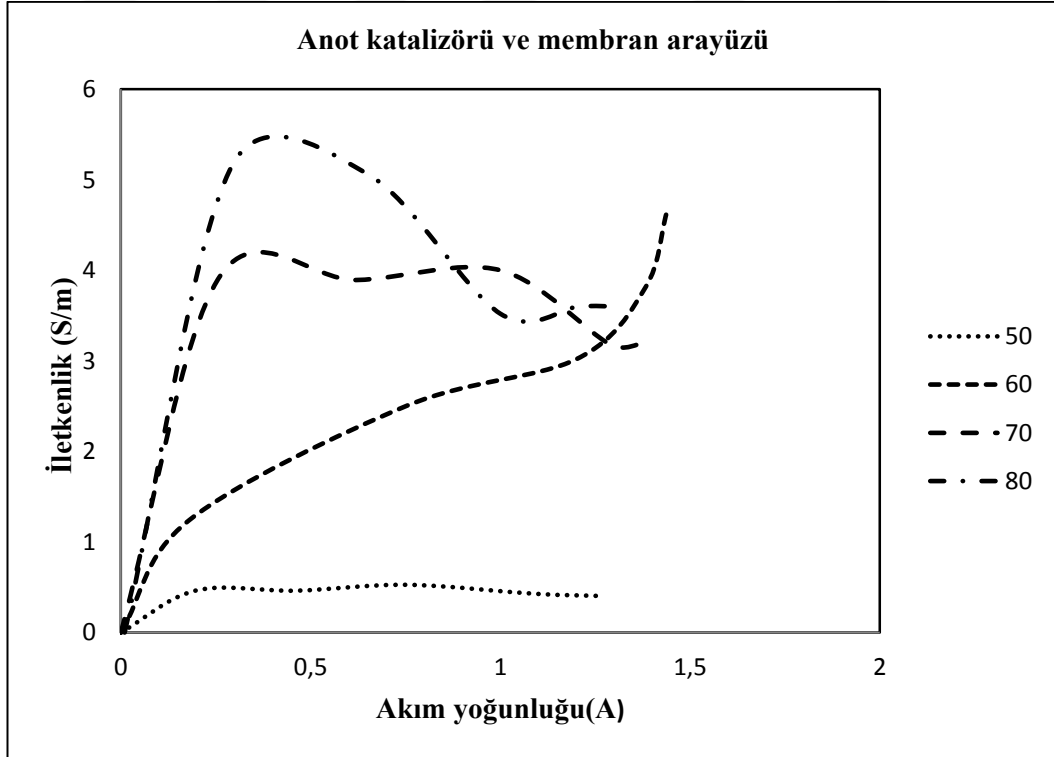
Şekil 5.13. Farklı çalışma sıcaklıklarında anot katalizör katmanı ile membran ara yüzündeki sıcaklık dağılımı

Şekil 5.13.'de görüldüğü üzere yüksek sıcaklıklarda membran ile anot katalizör katmanı ara yüzündeki sıcaklık belirli bölgelerde yüksek akım yoğunluklarına ulaşıldığında 100 °C ye kadar yükselmektedir. Bu sıcaklıklarda membran yüzeyindeki su buharlaşacağı için membran su içeriği ile doğrudan ilişkili olan ve hücre performansını doğrudan etkileyen membran proton iletkenliği de düşecektir. Yüksek akım yoğunluklarında reaksiyon sonucunda oluşan su miktarı artsa da buharlaşmanın daha fazla olduğu, membran yüzeyinde kurumaların gerçekleştiği hücre performans eğrisinde açıkça görülmektedir. Modelleme çalışmasında kullanılan model üzerinde herhangi bir soğutma kanalı olmadığı ve hücrenin soğumasına izin verilmediği için reaksiyonun gerçekleştiği katalizör katmanları ve membran ara yüzünde sıcaklıklar fazlasıyla yükselmiştir.

Şekil 5.14. ve Şekil 5.15.'de görüleceği üzere, 0,5 A/cm<sup>2</sup> akım yoğunluğuna kadar membran ve katalizör katmanları ara yüzündeki sıcaklıkların ve buharlaşma hızlarının su oluşma hızından düşük olması sebebiyle membran su içerikleri ve proton iletkenliği dolayısı ile hücre performansı sıcaklık yükseldikçe artmaktadır.



Şekil 5.14. Farklı çalışma sıcaklıklarında membran su içeriği ile akım yoğunluğu değişimi



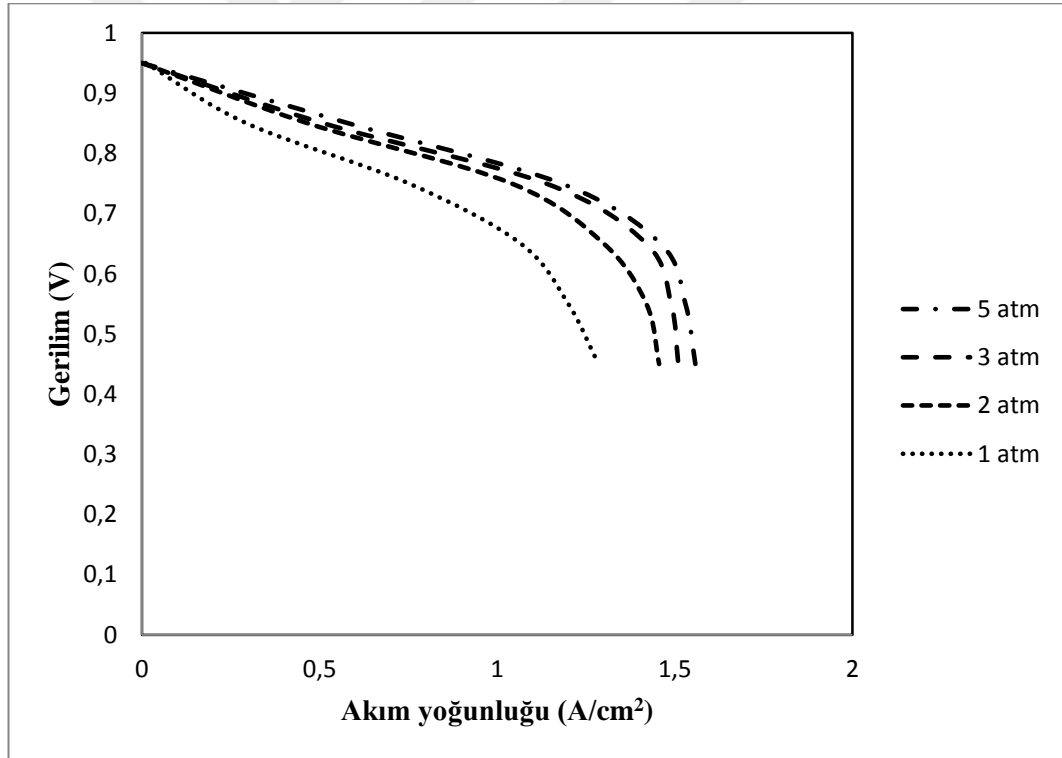
Şekil 5.15. Farklı sıcaklıklarda Cat\_a ile membran arayüzünde proton iletkenliği



#### 5.4. Basıncın Etkisi

Yakıt pillerinin performansını etkileyen önemli hususlardan biri de çalışma basıncıdır. Bu analizlerde anot ve katot tarafı çalışma basınçları eşit tutularak temel model parametreleri baz alınmıştır. Hücre 1,5 anot ve 2 katot stokiyometrisinde 80 °C sıcaklıkta çalıştırılmıştır. Debiler 80 °C sıcaklıkta farklı basınçlarda %100 nemliliği sağlayacak şekilde normalize edilmiştir. Farklı çalışma basınçlarında 1, 2, 3 ve 5 atm basınç altında performans ve güç yoğunluğu eğrileri oluşturulmuştur.

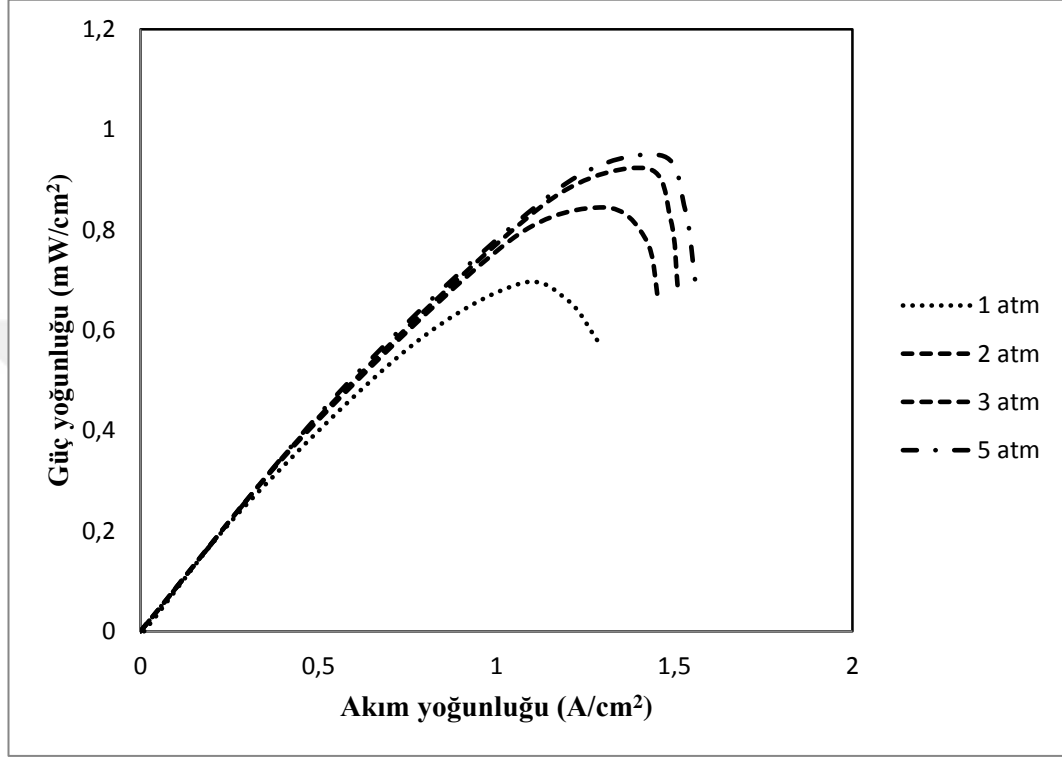
Denklem (3.23)'de Nernst eşitliğinde görüleceği üzere, basıncın artması ile hücre teorik geriliminin artacağı görülmektedir. Yapılan analizler sonucunda farklı çalışma basıncından elde edilen performans ve güç eğrileri Şekil 5.16. ve Şekil 5.17.'de verilmiştir.



Şekil 5.16. Farklı basınç koşullarında elde edilen polarizasyon eğrisi

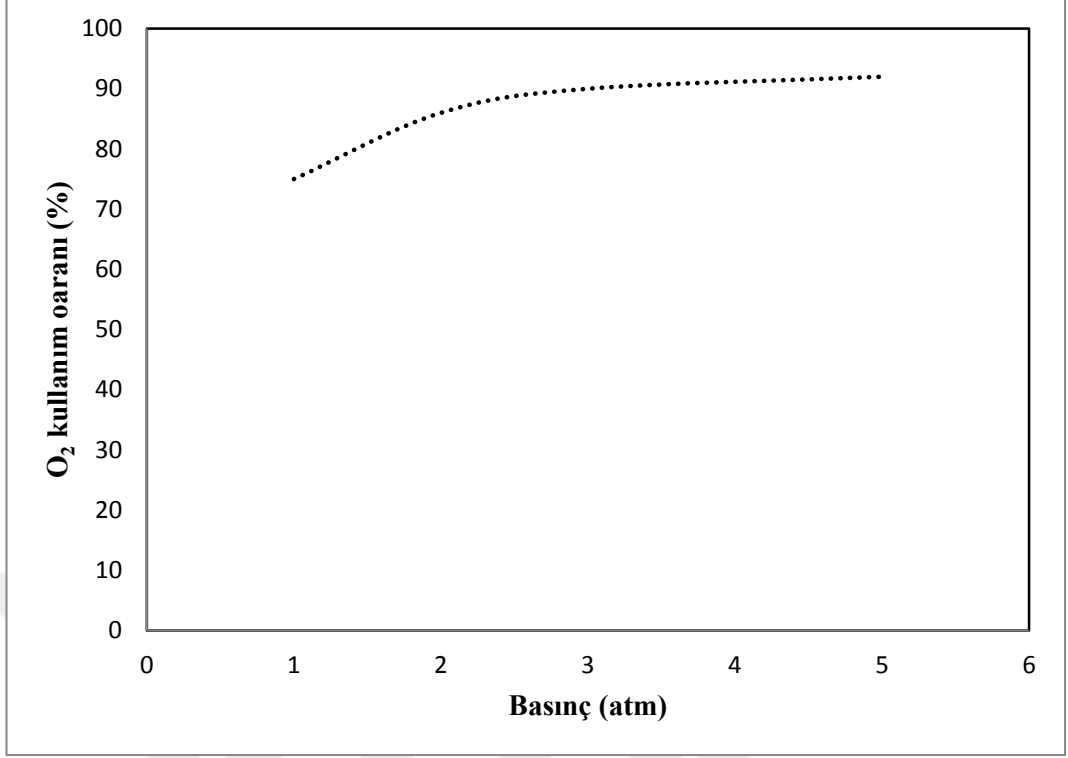
Şekil 5.16.'da görüleceği üzere basıncın 1 atm değerinden 2 atm ve 3 atm değerlerine yükseltilmesi performansı olumlu derecede arttırmıştır. Ancak 3 atm den 5 atm değerine yükseltilmesi performansta gözle görülür derece bir artışa sebep olmamıştır.

Hücre çalışma basıncının artması ile yükselen performansın sebebi ağırlıklı olarak katot katalizör katmanında oksijen difüzyon katsayısının düşmesi olarak açıklanabilir. Oksijen difüzyon katsayısının düşmesi ile katalizör katmanında etkin olarak oksijen kullanımı artmakta ve performans yükselmektedir.



Şekil 5.17. Farklı basınç koşullarında elde edilen güç yoğunluğu eğrisi

Şekil 5.18.'de farklı basınçlarda hücre genelinde oksijen kullanım oranının yüzde olarak değişimi verilmiştir. 0,6 V hücre geriliminde alınan veriler ışığında, hücre çalışma basıncının artması ile oksijen kullanım oranının arttığı görülmüştür. Oksijen kullanım oranının artması hem yakıt pili verimliliğini hem de yakıt kullanım verimini arttırmıştır. Basıncın artması oksijenin katalizör katmanlarının kullanılmayan bölümlerine difüzyonu arttırmış ve reaksiyona giren etkin katalizör yüzey alanını arttırmıştır. Düşük basınçlarda oksijen difüzyon katsayısının yükselmesi ile katot katalizör katmanındaki difüzyon azalarak oksijen kullanım oranını düşürmüştür. Aynı şekilde düşük basınçlarda yakıt pili içerisinde reaksiyon sonucunda oluşan sıvı suyun uzaklaştırılması zorlaşmakta, katalizör katmanın bazı bölgeleri sıvı tarafından bloke edilmekte ve bunun sonucu olarak yakıt pili performansı düşmektedir.



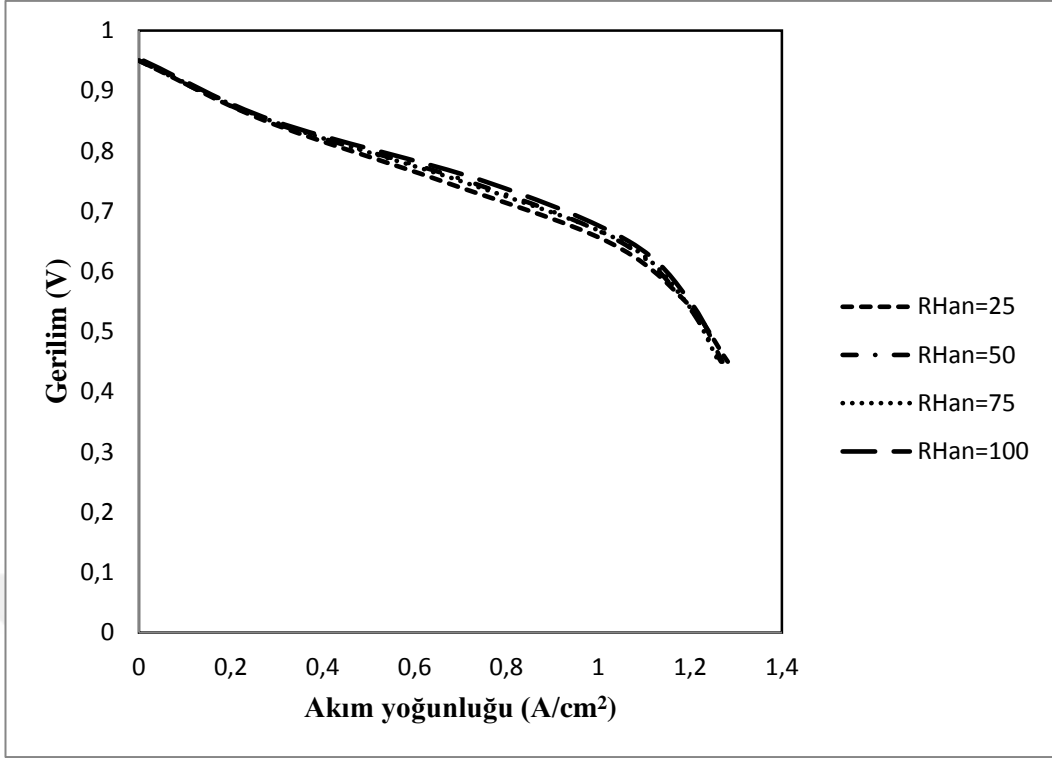
Şekil 5.18. Hücre genelinde farklı basınçlarda oksijen kullanım oranının 0,6 V gerilim değerindeki değişimi

### 5.5. Nem Miktarı Etkisi

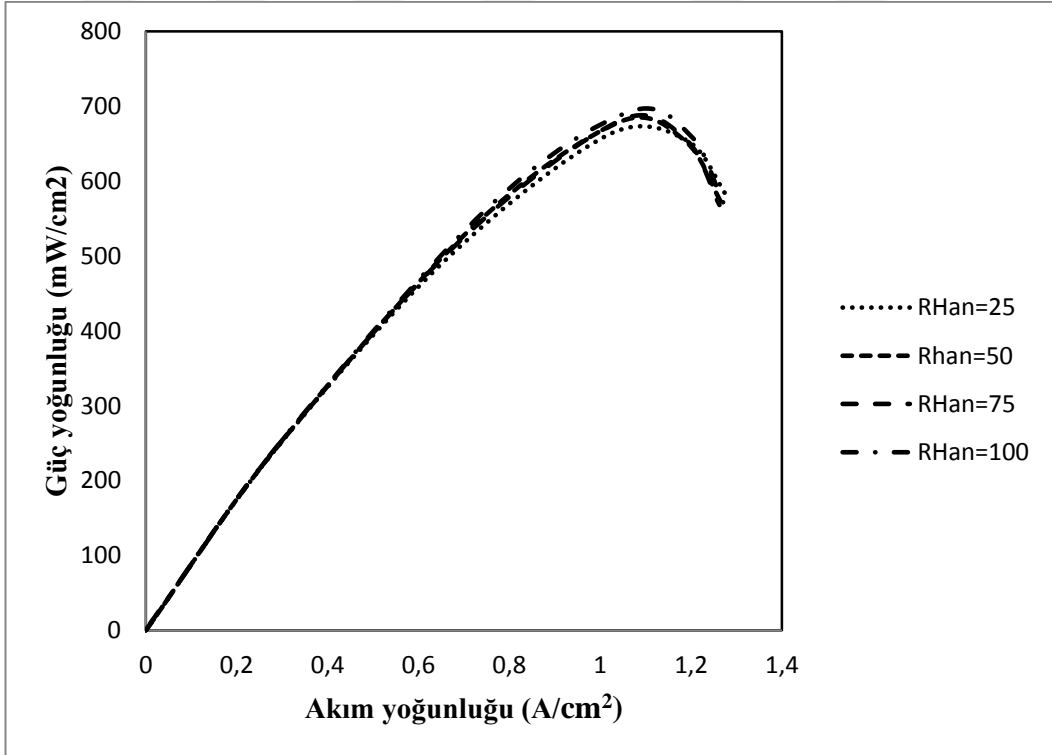
Yakıt pillerinin performansında en önemli faktörlerden biri şüphesiz su yönetimidir. Reaksiyonlar sonucunda oluşan suyun hücre kanalları içerisinde uzaklaştırılması, membran ve katalizör katmanlarında proton iletkenliğinin sağlanması için suya olan ihtiyaç gibi birçok parametre yakıt pili performansını etkilemektedir. Suyun bu kadar etkili olduğu bir mekanizma içerisinde anot ve katot gazlarının nemliliği de büyük bir önem arz etmektedir. Bu sebeple, temel model analizleri baz alınarak 1 atm basınç altında, 80 °C sıcaklıkta anot ve katot tarafları için %25'lik artışlarla %25, %50, %75 ve %100 nemlilik oranları için parametrik analizler gerçekleştirilmiş ve performans eğrileri oluşturulmuştur.

#### 5.5.1. Anot tarafı nemliliği

Anot tarafı nemliliğinin performans üzerindeki etkisi temel model baz alınarak incelenmiştir. Katot tarafı tüm analizler için %100 nemlilikte, anot tarafı nemliliği ise %25, %50, %75 ve %100 olarak alınmıştır.

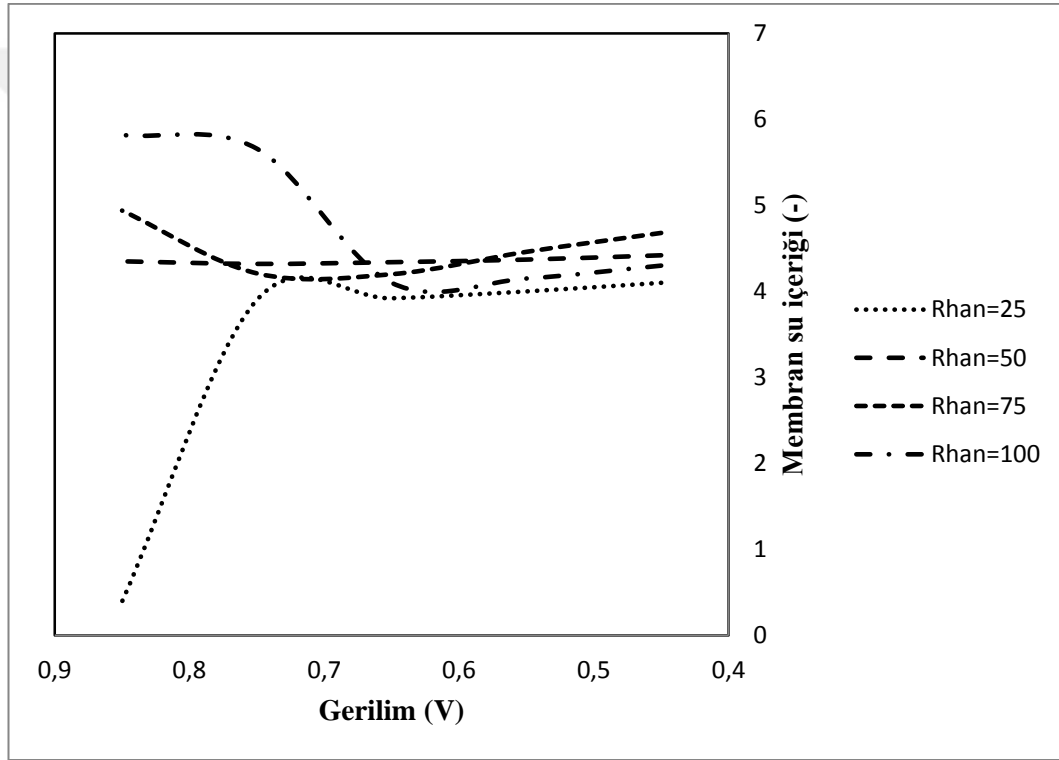


Şekil 5.19. Anot tarafı nemliliğinin hücre performansına etkisi (polarizasyon eğrisi)



Şekil 5.20. Anot tarafı nemliliğinin hücre performansına etkisi (güç yoğunluğu eğrisi)

Şekil 5.19. ve Şekil 5.20.'den görüleceği üzere anot tarafı nemliliğinin hücre performansına gözle görülür düzeyde bir etkisinin olmadığı açıkça görülmektedir. Çok düşük nemliliklerde dahi yakıt pili performansında bir kayıp olmamıştır. Anot besleme nemliliğinin yakıt pili performansına etkisinin bu kadar düşük olmasının sebebi katot tarafının %100 nemlilikte besleniyor olmasıdır. Katot tarafında reaksiyon sonucu üretilen su ve besleme akımında taşınan su buharının katottan anoda geri difüzyon ile geçişi anot tarafının düşük nemlilik değerleri için dahi nemli kalmasını sağlamıştır. Nemli kalan membran sebebiyle proton iletkenliği istenilen düzeylerde kalmış ve hücre performansında bir düşüş gerçekleşmemiştir.



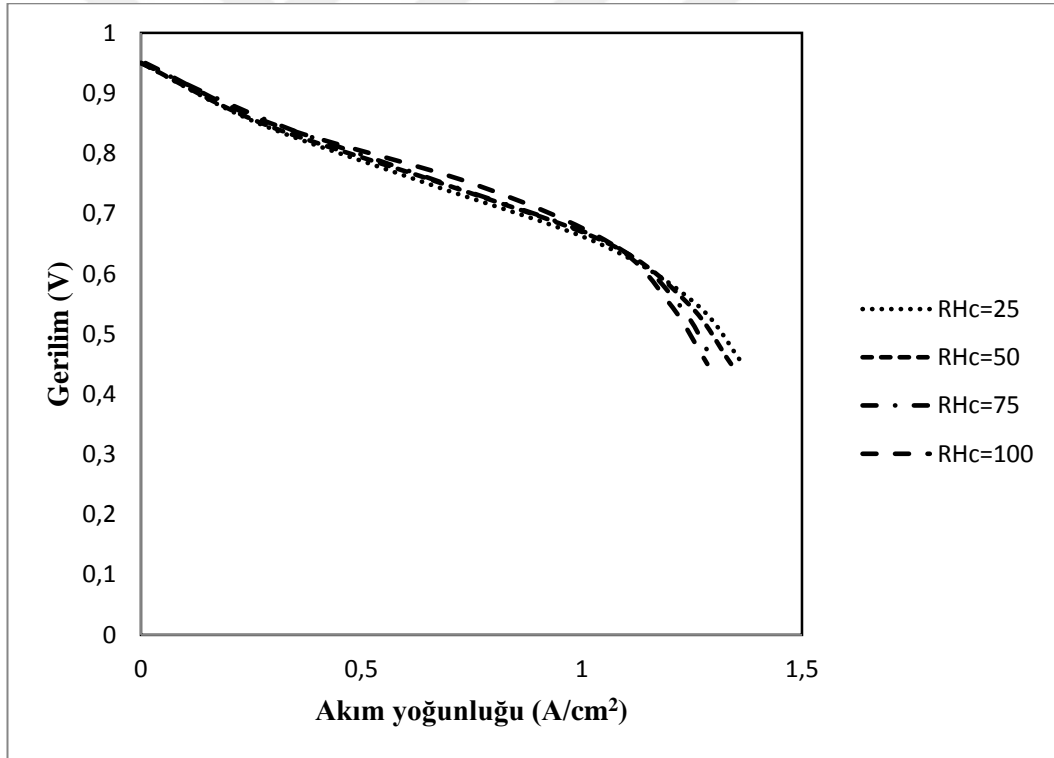
Şekil 5.21. Farklı gerilim ve anot nemlilik oranlarında membran su içeriği eğrileri

Şekil 5.21.'de farklı besleme nem oranları ve farklı hücre gerilimlerinde membran su içeriğine ait grafikler görülmektedir. Hücre gerilimlerinin açık devre voltajına en yakın olduğu 0,85V ve 0,95V değerlerinde, akım değerlerinin düşük olması ve besleme nemliliğinin düşük olması sebebiyle %25'lik anot besleme nemliliğinde membran su içeriğinin düşük olduğu görülmektedir. Ancak bu düşüşün yüksek voltajlarda olması ve çok düşük akım değerlerine denk gelmesi sebebiyle performans karşılaştırması açısından bir anlam ifade etmemektedir.

Hücre geriliminin 0,65V seviyelerine çekilmesi durumunda %25 nemlilik oranına sahip besleme akımında dahi membran su içeriği diğer besleme akımı nemlilikleri ile aynı seviyelere gelmiştir. Yüksek akımlara çıkıldıkça, anot tarafında %25 ve %100 nemlilikte dahi benzer sonuçlar alınması bu şekilde açıklanmaktadır. Proton iletkenliği eğrileri de membran su içeriği eğrileri ile benzerlik göstermektedir.

### 5.5.2. Katot tarafı nemliliği

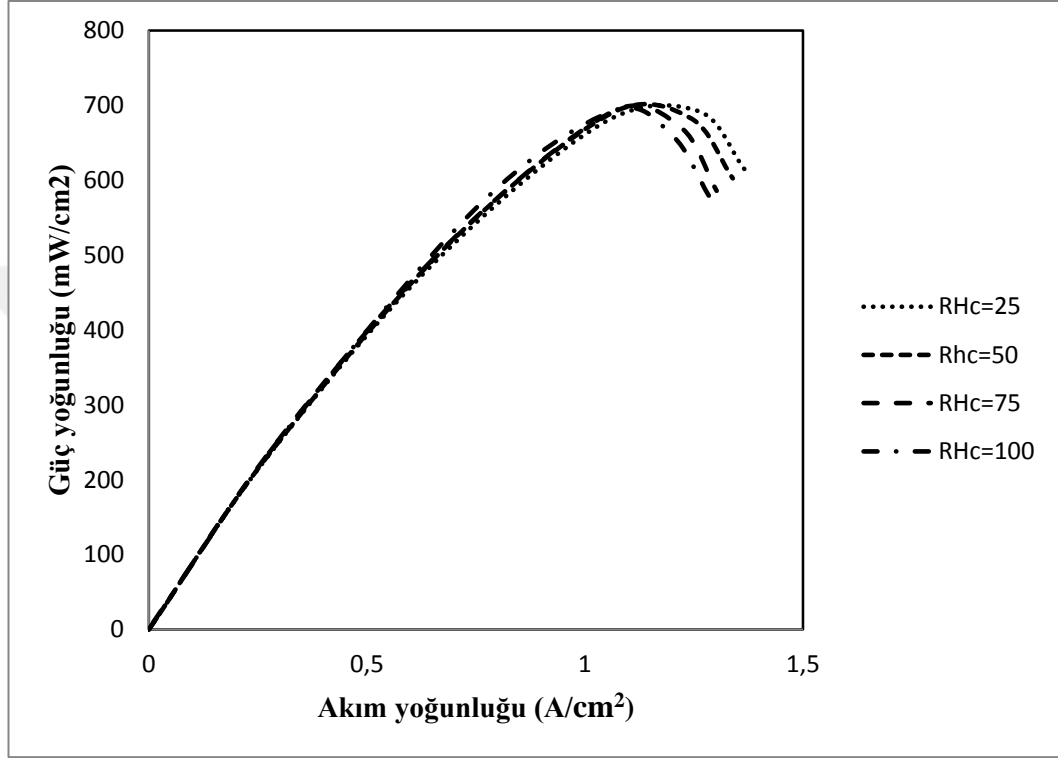
Katot tarafı nemliliği analizleri, anot tarafı nemliliği %100 olacak şekilde %25, %50, %75 ve %100 nemlilikte beslenmiştir. 1,5 anot stokiyometrisi ve 2 katot stokiyometrisi ile hücre sıcaklığı 80 °C olacak şekilde temel model parametreleri kabul edilmiştir. Farklı katot nemlilikleri ile yapılan analizler sonucunda elde edilen veriler Şekil 5.22. ve 5.23.'de verilmiştir.



Şekil 5.22. Katot tarafı nemliliğinin hücre performansına etkisi (polarizasyon eğrisi)

Şekil 5.22. ve 5.23.'de farklı katot besleme nemliliklerine ait performans eğrileri görülmektedir. Polarizasyon eğrisinden görüleceği üzere, farklı katot tarafı nemliliğinin hücre performansı üzerinde etkileri bulunmaktadır. Bekleneceği üzere, %100 katot nemliliğinde 1 A/cm<sup>2</sup> akım yoğunluğuna kadar performansın diğer

nemlilik oranlarına göre bir miktar yüksek olduğu görülmektedir. Ancak  $1 \text{ A/cm}^2$  değeri geçildikten sonra katot tarafı bağıl nemliliği %100 olan besleme durumunda, performansın gittikçe kötüleştiği ve  $1 \text{ A/cm}^2$  akım yoğunluğunun altındaki akım yoğunluklarında en düşük performansa sahip %25 katot nemliliği besleme akımının maksimum performansa ulaştığı görülmektedir.

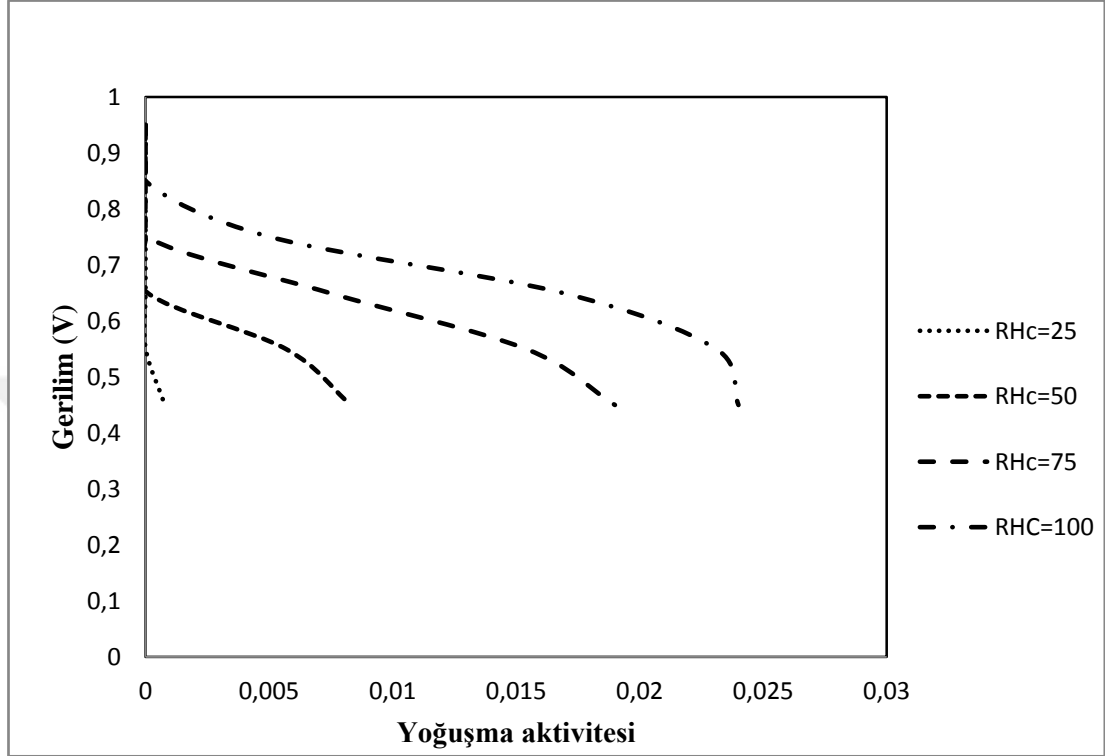


Şekil 5.23. Katot tarafı nemliliğinin hücre performansına etkisi (güç yoğunluğu etkisi)

Düşük akım yoğunluğu değerlerinde ve besleme nemliliğinin düşük olduğu durumlarda, hücre performansında meydana gelen düşüşün sebebi incelenmiştir. Düşük katot nemliliği beslemelerinde, düşük katot tarafı nemliliğinin dengelenmesi amacıyla osmotik sürüklenme ile anottan katoda taşınan su miktarı artmıştır. Bu artış ile beraber, anot tarafı membran su içeriğinde zamanla azalma meydana gelmekte ve membran proton iletkenliği düşürmektedir.

Düşük akım yoğunluklarında ve yüksek katot nemliliği beslemelerinde ise, katot tarafı nemliliğinin yüksek olması ve geri difüzyonun katottan anoda doğru suyu taşınması sebebiyle performans yükselmiştir. Yüksek akım yoğunluklarında ( $> 1 \text{ A/cm}^2$ ), %25 nemlilik oranına sahip besleme akımının diğer nem oranlarına nazaran daha yüksek performans verdiği açıkça görülmektedir. Aynı zamanda %100

nemliliğe sahip besleme akımının da minimum performansı verdiği görülmektedir. Detaylı incelemeler yapıldığında yüksek akım yoğunluklarında katot tarafında reaksiyon sonucunda üretilen su miktarının oldukça arttığı görülmektedir.

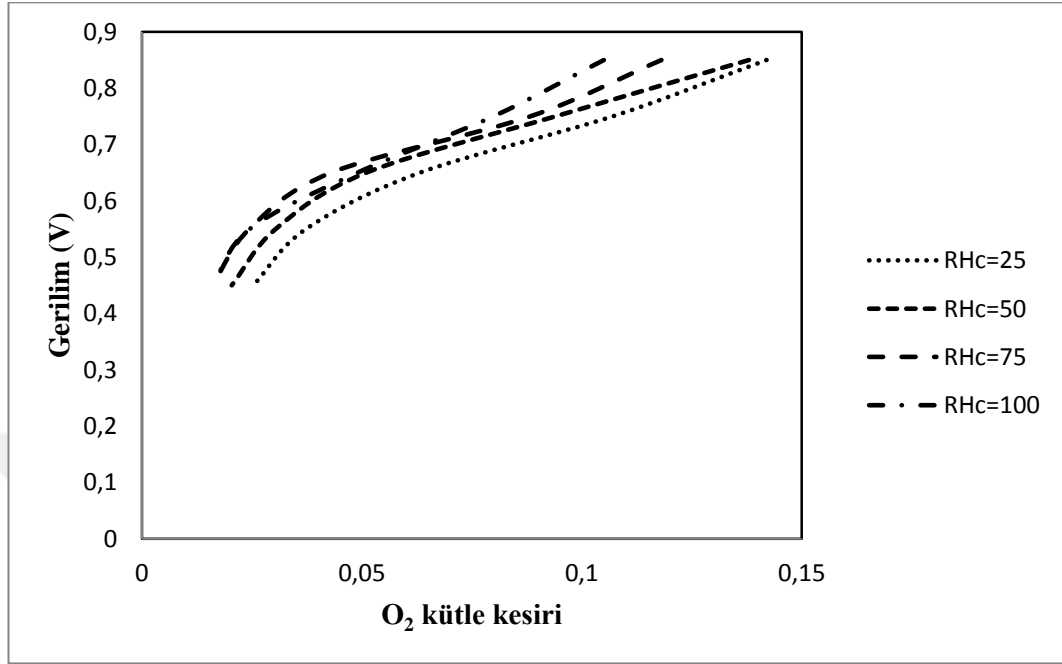


Şekil 5.24. Farklı hücre gerilimi ve katot nemliliklerinde katot GDT üzerinde sıvı su yoğunlaşma aktivitesi

Şekil 5.24.'de katot gaz difüzyon tabakası üzerinde sıvı suyun değişik hücre gerilimleri için yoğunlaşma aktivitesi görülmektedir. Katot tarafının %25 nemlilik oranında katot gaz difüzyon tabakası üzerinde yoğunlaşma aktivitesinin önemsenmeyecek kadar az olduğu, nemlilik oranı arttıkça yoğunlaşma aktivitesinin de arttığı gözlemlenmektedir. Anot ve katot tarafındaki nemlilik oranlarının hücre performansına olumlu yönde etkileri olduğu açıktır, ancak sıvı su yoğunlaşma şeklinde katalizör ve gaz difüzyon tabakalarındaki gözenekliliği düşürdüğü takdirde konsantrasyon kayıpları artmakta ve oksidant ve reaktantlar reaksiyona girmeden hücreyi terk etmektedirler. Şekil 5.25.'de farklı katot nemliliklerinde katot katalizör katmanı üzerindeki O<sub>2</sub> yoğunlukları görülmektedir. Hücre geriliminin düşmesi ile birlikte yüksek nemlilik oranlarında katot gaz difüzyon tabakası üzerinde meydana gelen yoğunlaşmalar sebebiyle O<sub>2</sub> katalizör katmanına difüze edememiştir. %25



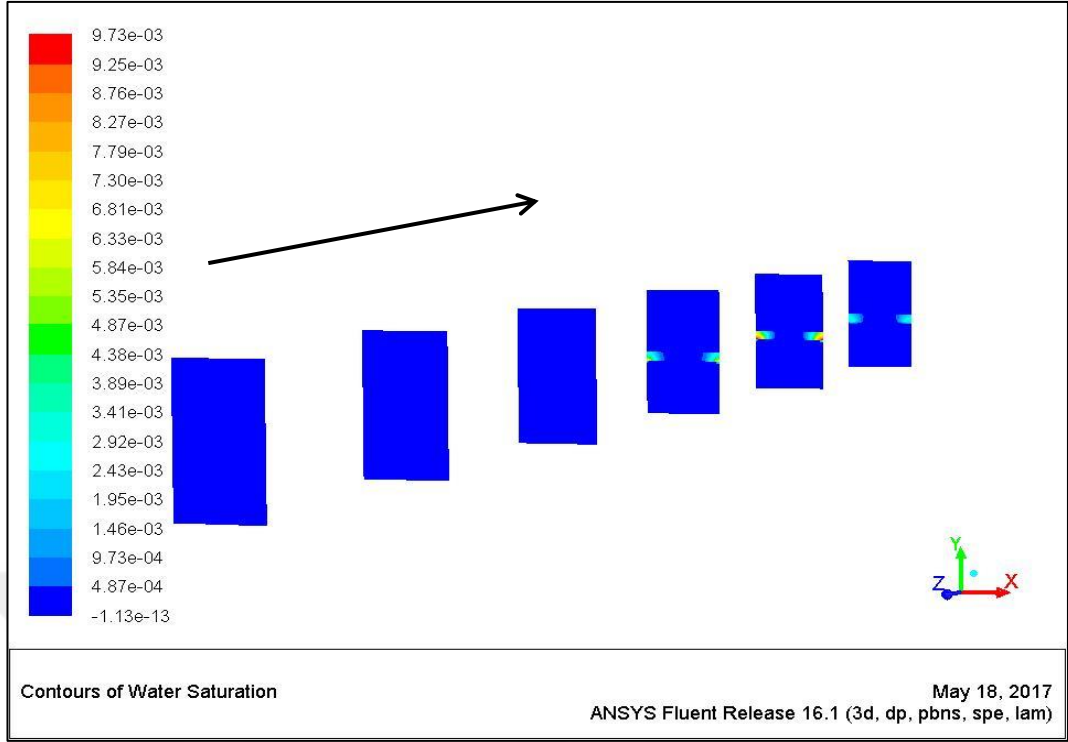
nemlilik oranına sahip besleme akımında katot katalizör katmanı üzerinde O<sub>2</sub> konsantrasyonunun maksimum olduğu görülmektedir.



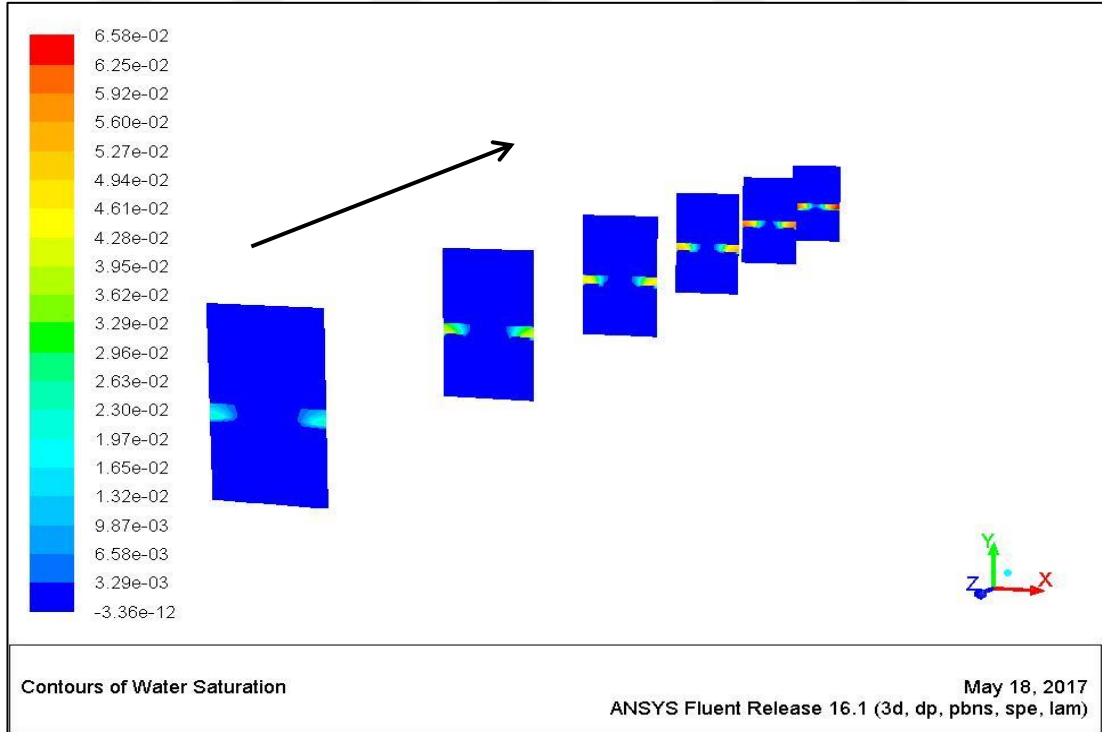
Şekil 5.25. Farklı katot nemlilik oranlarında katot katalizör katmanı üzerinde O<sub>2</sub> kütlesi kesiri

Fluent programında gerçekleştirilen analizlerin sonucunda elde edilen veriler incelendiğinde, model üzerinde uzunlamasına eksen olan Z (+) yönünde 0 noktasından başlayarak 10'ar mm ara ile alınan kesitler sonucunda elde edilen görsel verilerde katot tarafı gaz difüzyon tabakası üzerindeki yoğunlaşma olayları incelenmiştir. Şekil 5.26.'da ok ile gösterilen akış yönüdür. Akış yönüne göre ilk kesit gaz girişini temsil etmektedir. Görüldüğü üzere %25 katot nemlilik oranında, gaz girişinin olduğu bölümlerde bir yoğunlaşma olmamaktadır. Son kısımdaki kesitlerde ise az bir miktarda yoğunlaşma olayı gözlenmektedir.

Şekil 5.27.'de ise %100 nemlilikte hücreye giren katot gazının hücre içerisinde oluşturduğu yoğunlaşma olayları görülmektedir. Ok gaz akış yönünü göstermektedir. %100 katot nemlilik oranında, gaz akış yönüne göre ilk kesit resminde dahi su yoğunlaşması açıkça görülmektedir. Son kesitler incelendiğinde yoğunlaşmanın hücre çıkış tarafında gittikçe arttığı açıkça görülmektedir. Bu yoğunlaşma sonucunda hücre içerisinde, katalizör ve gaz difüzyon tabakalarının geçirgenliklerinde ciddi oranda düşüş olmuş ve hücrede konsantrasyon kayıpları yaşanmıştır.



Şekil 5.26. 0,45V hücre geriliminde, %25 Katot nemlilik oranında katot tarafı GDT üzerindeki su doymunluğu



Şekil 5.27. 0,45V hücre geriliminde, %100 Katot nemlilik oranında katot tarafı GDT üzerindeki su doymunluğu

## 5.6. Stokiyometrinin Etkisi

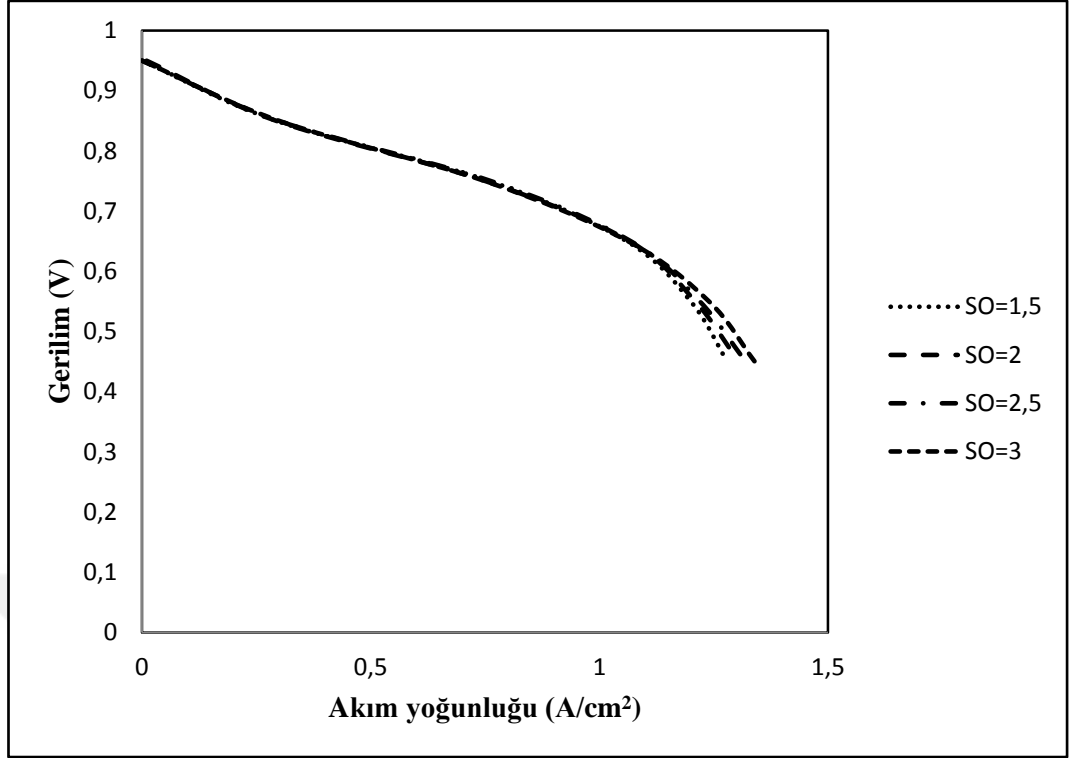
Yakıt pillerinde reaksiyona giren gazların eksilmesinden/tükenmesinden kaçınmak ve gazların kanal boyunca GDL ve katalizör tabakası içerisinde eşit dağılımını sağlamak için hücreye verilen gazlar ihtiyaç olandan daha fazla verilirler. Aynı zamanda, yakıt pillerinde reaktantların katalizör yüzeylerine difüzyonunu sağlamak, yakıt pili içerisinde reaksiyon sonucu üretilen sıvı suyun hücre içerisinden uzaklaştırılması kolaylaştırmak amacıyla gaz debileri ihtiyaçların üzerinde beslenmektedirler.

Teoride bir hücreden 1A akım çekebilmek için hücreye en az 7 ml/dk H<sub>2</sub>, 16,9 ml/dk hava beslenmelidir. Stokiyometrik oran bu değerlerin belirli bir oran ile çarpılmış halleridir. Temel model analizlerde belirtildiği üzere referans akım yoğunluğu 1A/cm<sup>2</sup> alınmıştır. Farklı stokiyometrik oranlar 1,5, 2, 2,5 ve 3 için anot ve katot taraflarında ayrı ayrı analizler gerçekleştirilmiştir.

### 5.6.1. Anot stokiyometrisi

Bu çalışmada, PEM yakıt pillerinde anot stokiyometrik oranının etkileri incelenmiştir. Anot stokiyometrisi 1.5 olan temel model stokiyometrisinin üzerine 2, 2,5 ve 3 olacak şekilde anot besleme stokiyometrisi güncellenmiş ve sonuçlar Şekil 5.28.'de paylaşılmıştır. Görüldüğü üzere anot stokiyometrisinin 1,5'den 3'e yükseltilmesi ile birlikte hücre performansında önemli bir değişim olmamıştır. Sonuçlardan görüleceği üzere, 1,5 stokiyometri ile beslenen anot tarafının gaz kullanım oranının oldukça yüksek olduğu açıkça anlaşılmaktadır.

1,5 olan anot stokiyometrik oranın yükseltilmesi ile performansta bir değişimin görülmemesinin sebebi ise, hücre üzerinde 1,5 stokiyometrik oran ile konsantrasyon kayıplarının oldukça az olması olarak açıklanabilir. %100 nemlilik oranında 1,5 stokiyometrik oran ile beslenen anot gazının maksimum performansa yakın bir değer verdiği ve çalışma şartlarında daha üst stokiyometri değerlerine çıkılmasına gerek duyulmayacağı görülmektedir.

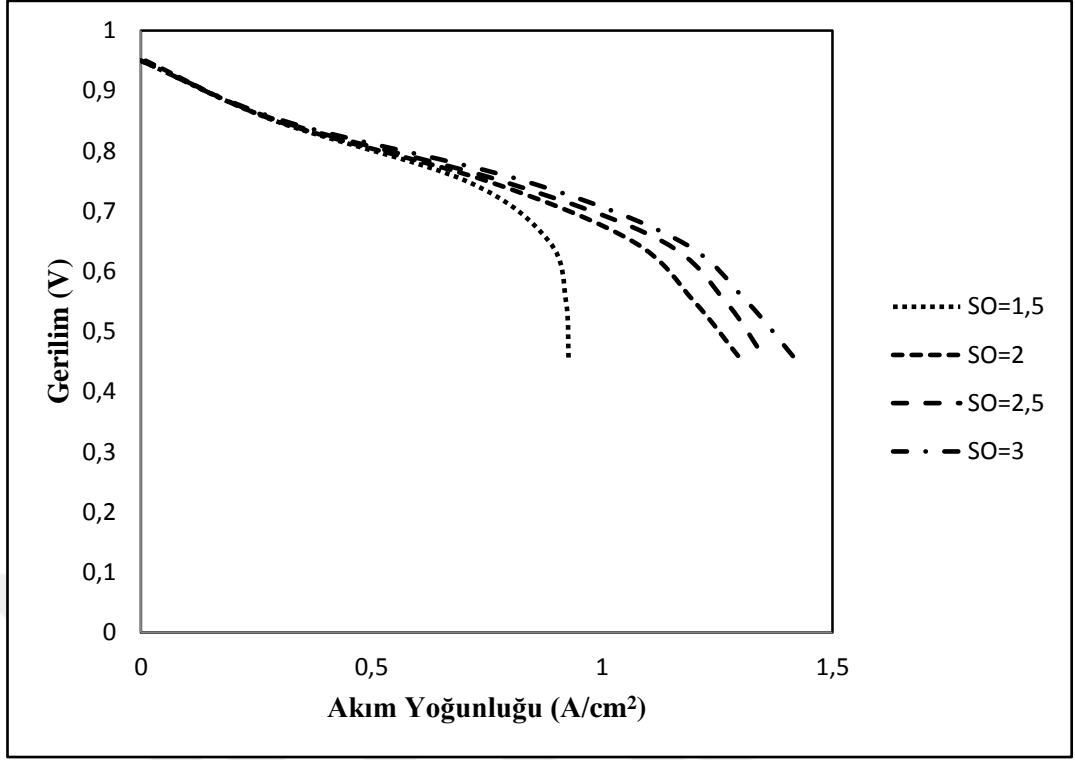


Şekil 5.28. Farklı anot stokiyometrilerinde hücre performansındaki değişim (polarizasyon eğrisi)

### 5.6.2. Katot stokiyometrisi

Katot stokiyometrisinin incelendiği bu çalışmada, anot stokiyometrisi temel model baz alınarak 1,5 olarak kabul edilmiştir. Katot stokiyometrisi ise 1,5, 2, 2,5 ve 3 olarak değiştirilerek performans testleri gerçekleştirilmiştir. Şekil 5.29.'da görüldüğü üzere düşük 1,5 katot stokiyometrisinde hücre performansında ciddi bir düşüş meydana geldiği görülmektedir. 1,5 katot stokiyometrik oranında hücreye giren oksijenin hücre çıkışına gelmeden tükendiği ve konsantrasyon kayıplarının arttığı görülmektedir. 1,5 stokiyometri oranından 2 değerine çıkıldığında hücrede ciddi bir performans artışı görüldüğü ancak 2'den 2,5 ve 3'e çıkıldığında ise hücrede ufak artışlar meydana geldiği görülmektedir.

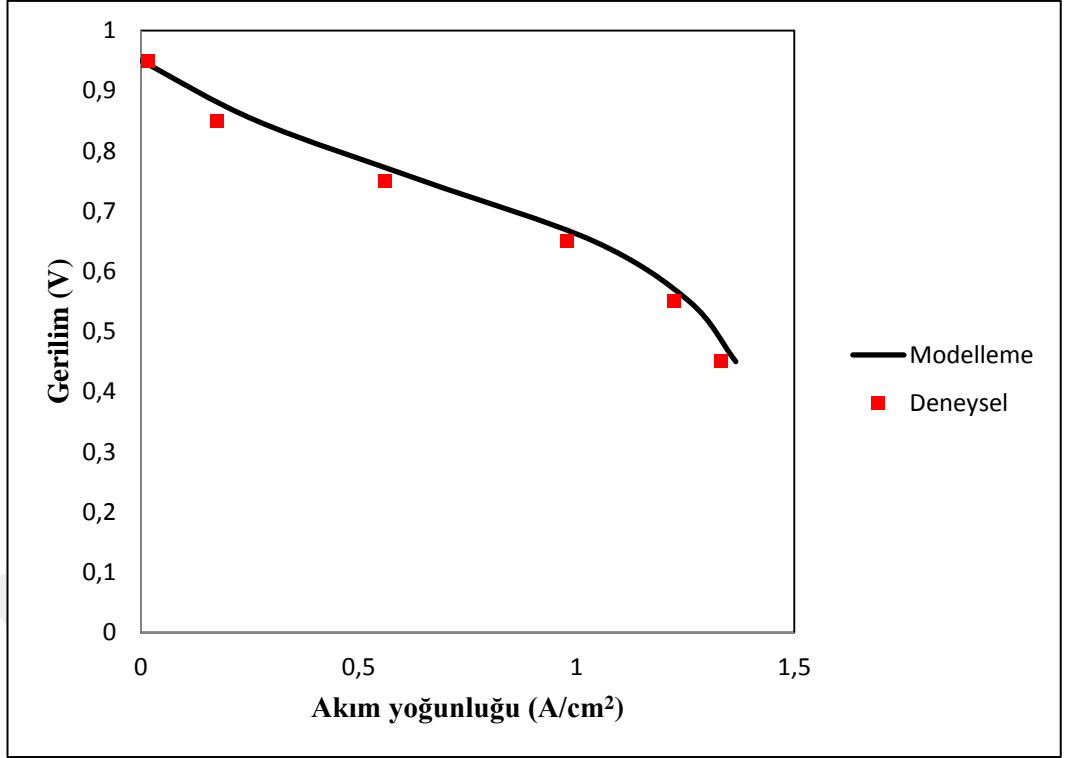
Stokiyometrinin artırılması ile kanal içerisindeki çizgisel hızların arttığı ve katot katalizör katmanında oksijen derişiminin artması ile üniform dağılım gerçekleştiği modellenme sonucunda açıkça görülmektedir.



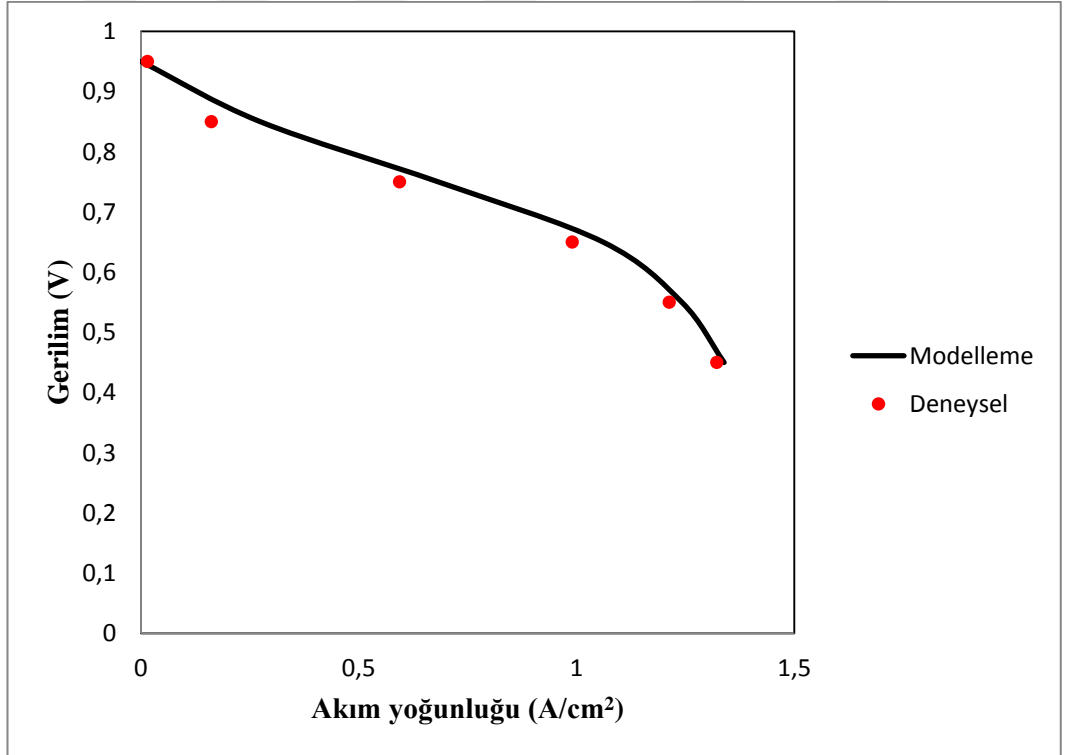
Şekil 5.29. Farklı katot stokiyometrilerinde hücre performansındaki değişim (polarizasyon eğrisi)

### 5.7. Deneysel Analizler

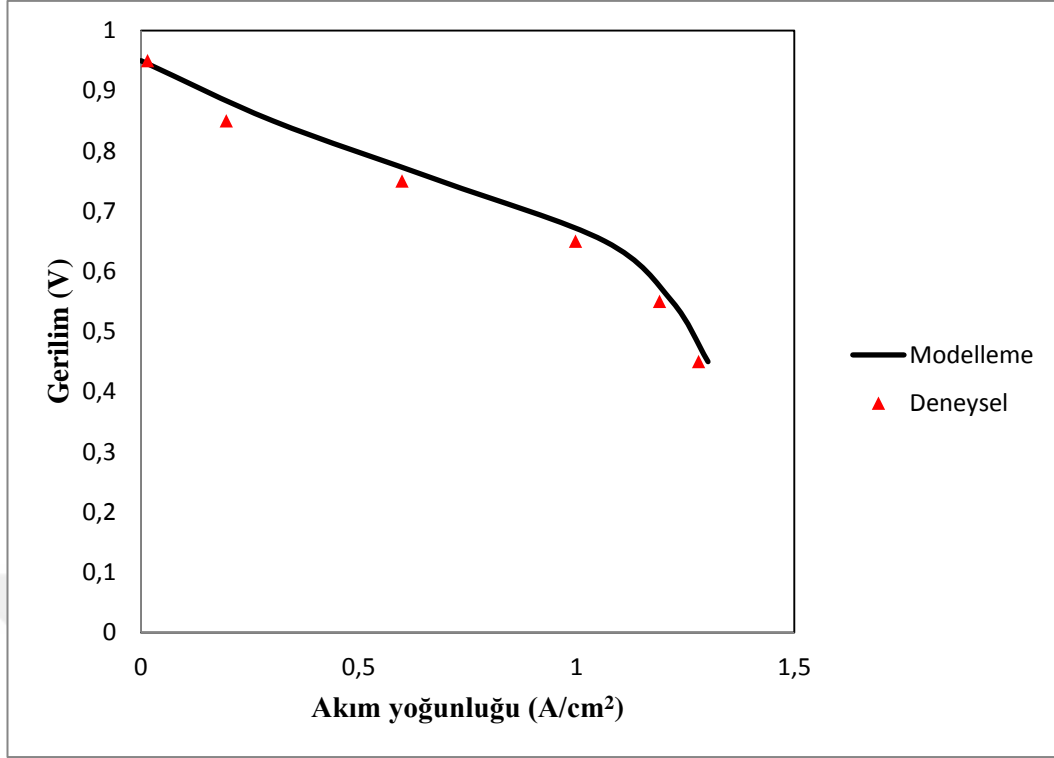
Parametrik analizler sonucunda elde edilen veriler neticesinde yakıt pillerinin çalışma parametrelerinin performans üzerindeki etkileri açıklanmıştır. Bu çalışmada, temel model üzerinden gerçekleştirilen model doğrulama işleminden bağımsız olarak deneysel çalışmalar gerçekleştirilmiştir. Bu çalışmanın amacı, temel model için doğrulanan parametrelerin farklı çalışma koşullarında davranışlarının incelenmesi olacaktır. Deneysel çalışmada, tüm parametrik analizleri gerçekleştirmek için uzun çalışma sürelerine ihtiyaç olduğu için parametrik analizler içinden katot nemliliğinin etkisi parametreleri seçilmiştir. 80 °C çalışma sıcaklığında, anot bağıl nemi %100 de tutularak, katot bağıl nemi %25, %50, %75 ve %100 olacak şekilde deneysel çalışmalar gerçekleştirilmiştir. Şekil 5.30.'da %25, Şekil 5.31.'de %50 ve Şekil 5.32.'de de %75 katot bağıl nemine ait modelleme ve deneysel çalışmaların karşılaştırmalı grafikleri görülmektedir. %100 katot nemliliği çalışması temel model ile aynı olması ve daha önceki çalışmada doğrulaması yapıldığı için bu bölümde %100 katot nemliliği çalışmasına yer verilmemiştir.



Şekil 5.30. %25 katot bağıl nemliliğinde modelleme ve deneysel polarizasyon eğrileri karşılaştırması

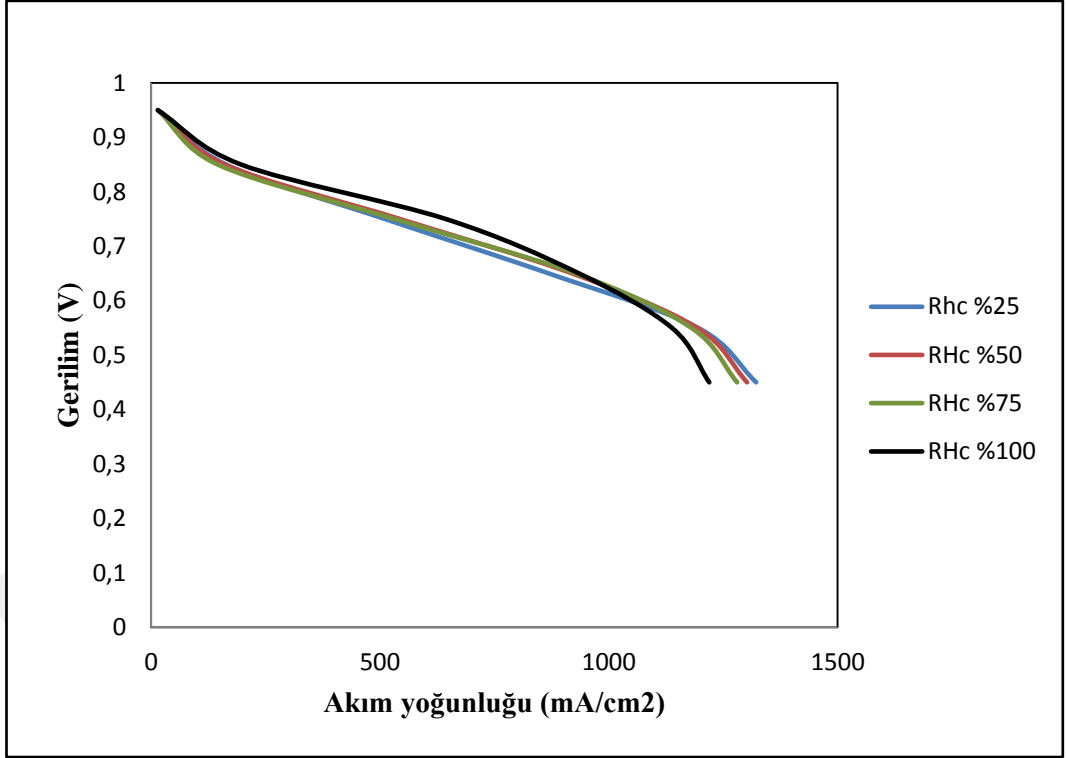


Şekil 5.31. %50 katot bağıl nemliliğinde modelleme ve deneysel polarizasyon eğrileri karşılaştırması



Şekil 5.32. %75 katot bağıl nemliliğinde modelleme ve deneysel polarizasyon eğrileri karşılaştırması

Deneysel analizler ile modelleme sonuçları incelendiğinde aktivasyon bölgesinde deneysel sonuçların daha yüksek akım seviyesinde olduğu, gerilim düşüklüğe deneysel ile modelleme analizlerinin yüksek doğrulukta uyum gösterdiği görülmektedir. Katot neminin hücre performansına olan etkisinin incelendiği modelleme çalışmalarında, Şekil 5.18.'de görüldüğü üzere düşük akım değerlerinde maksimum performans %100 nemlilik oranında, 1 A/cm<sup>2</sup> ve üzeri akım yoğunluğuna ulaşıldığında %25 nemlilik oranında görülmüştür. Deneysel çalışmalar sonucunda elde edilen veriler ile modelleme çalışmaları sonucunda elde edilen veriler incelendiğinde sonuçların yüksek doğruluk ile uyduğu görülmektedir. Şekil 5.33.'de görüldüğü üzere, 1 A/cm<sup>2</sup> ve altındaki akım yoğunluklarında %100 katot bağıl nemliliğinde, 1 A/cm<sup>2</sup> ve üzeri akım yoğunluğu değerlerinde %25 katot bağıl nemliliğinin maksimum performansı verdiği görülmüştür. Şekil 5.33. ve Şekil 5.22. karşılaştırıldığında performans eğilimlerinin benzer nemlilik oranlarında aynı karakteristiklere sahip olduğu gözlemlenmiştir. Her iki çalışmada elde edilen veriler incelendiğinde yüksek çalışma gerilimlerinde deneysel ve modelleme çalışmaları arasındaki sonuçlarda sapma oranlarının yükseldiği, yüksek akım yoğunluklarında %3 seviyesine kadar düştüğü görülmüştür.



Şekil 5.33. Katot tarafı nemliliğinin hücre performansına etkisi (deneysel)



## 6. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Bu tez çalışması kapsamında, tek kanallı, 50 mm kanal uzunluğuna sahip, 1mm kanal derinliğine ve genişliğine sahip, 3 boyutlu, çok fazlı ve izotermal olmayan bir yakıt pili modeli oluşturulmuş ve bu modele ait temel simülasyon parametreleri ortaya çıkarılmıştır. Temel simülasyon parametreleri kapsamında ilk analizler gerçekleştirilmiştir. Temel simülasyon sonuçları elde edildikten sonra oluşturulan modelin doğrulanması ve parametrik çalışmalara doğru model ile devam edilebilmesi için temel model sınır şartları ile deneysel çalışma gerçekleştirilmiştir. Deneysel çalışma ile doğrulan model kullanılarak 4 farklı parametre ile farklı hücre gerilimlerinde polarizasyon ve güç eğrileri oluşturulmuştur. Analizlerde kullanılan parametreler şu şekildedir;

- Hücre çalışma sıcaklığı
- Hücre çalışma basıncı
- Anot ve katot nemlilik oranları
- Anot ve katot stokiyometrik oranları

İlk olarak hücre çalışma sıcaklıkları üzerinde oynama yapılarak analizler gerçekleştirilmiştir. 50, 60, 70 ve 80 °C’de %100 nemlilikte yapılan analizler sonucunda maksimum performans 60 °C’de görülmüştür. Ancak 0,5 A/cm<sup>2</sup> akım yoğunluğuna kadar maksimum performans 80 °C çalışma koşulunda görülmüştür. Nernst eşitliğinde pay kısmında olan sıcaklığın artması ile hücre teorik geriliminin artması beklenirken oluşturulan modelde bu gözlemlenmemiştir. Hücre içerisindeki su oluşumları, membran su içerikleri ve membran yüzeyindeki sıcaklıklar incelendiğinde 80 °C’ de çalıştırılan modelde hücre içi soğutma yapılamadığı için membran yüzey sıcaklığı 100 °C’ye kadar yükselmiştir. Yüksek sıcaklık sebebiyle buharlaşma artmış ve membran kurumuştur. Bu sebeple, membran proton iletkenliği ve performans düşmüştür. Maksimum performansın gözlemlendiği 60 °C çalışma koşulu sıcaklık-nem dengesinin en iyi gözlemlendiği sıcaklıktır.

Modellerin daha sağlıklı sonuçlar vermesi adına bu ve benzer çalışmalarda soğutma sıvısı parametresi de modele eklenebilir. Hücre belirli sıcaklıkta tutularak sıcaklık parametresi için daha sağlıklı sonuçlar elde edilebilir.

Model üzerinde yapılan analizlerin bir diğer parametresi basınç olmuştur. Farklı işletim basınçları altında hücrenin performansındaki değişimler gözlemlenmiştir. Hücre, temel model parametreleri bazı alınarak 1, 2, 3 ve 5 atm basınç altında çalıştırılmış ve polarizasyon eğrisi ortaya çıkarılmıştır. Hücre performansının en düşük olduğu değer 1 atm, en yüksek olduğu değer ise 5 atm olarak gözlemlenmiştir. Hücre basıncının 1 atm' den 2 atm değerine yükseltilmesi en belirgin performans artışına sebep olan değişim olmuştur. 3 atm ile 5 atm arasında ufak bir performans artışı olmuş olsa da, bu artış önemsenmeyecek kadar ufak olmuştur. Hücre çalışma basıncının artması ile oksijen ve hidrojen etkin difüzyonu artmış, membran ve katalizör katmanları arasındaki etkin oksijen ve hidrojen konsantrasyonunu artırarak hücre performansını temel modele nazaran iyileştirmiştir [3].

Anot ve katot tarafı nemlilikleri analizlerde kullanılan bir diğer parametre olmuştur. Her iki taraf için de ayrı ayrı, %25, %50 %75 ve %100 olmak üzere farklı bağıl nemlilik oranlarında analizler gerçekleştirilmiştir. Yapılan analizler sonucunda, katot tarafının %100 nemlilik ile beslendiği durumlarda anot tarafı nemliliğinin performans üzerinde herhangi bir etkisinin olmadığı görülmüştür. Katot tarafının %100 nemlilikte oluşu, katottan anoda geri difüzyon ile geçen su, hücre içerisindeki nem dengesini korumuş ve performans kaybına engel olmuştur. Anot tarafının %100 nemlilikte olup, katot tarafı nemliliğinin değiştirildiği analizlerde ise, membran nem miktarının hücre performansına olumlu etkileri göz önüne alındığında beklenenin aksine düşük nemlilik oranlarında daha yüksek performans değerlerine ulaşılmıştır. Sebepleri incelendiğinde yüksek katot nemliliklerinde katot gaz difüzyon katmanı üzerinde sıvı su yoğunmalarının gerçekleştiği, yoğunlaşma sayesinde katalizör katmanı üzerinde oksidant difüzyonunda azalma meydana geldiği ve konsantrasyon kayıplarının arttığı gözlemlenmiştir.

Parametrik analizlerde kullanılan son parametre ise stokiyometrik oranlar olmuştur. Anot ve katot stokiyometrilere ayrı ayrı değiştirilerek hücre performansı üzerindeki etkileri incelenmiştir. Anot ve katot stokiyometrilere sırasıyla 1,5, 2, 2,5 ve 3 olarak

değiştirilmiştir. Anot stokiyometrisinin arttırılması ile hücre performansında gözle görülür bir değişim yaşanmamıştır. Katot stokiyometrisinin 1,5'e düşürülmesi ile performans kayıplarının yaşandığı, 2 ve üstü stokiyometrilere çıkıldığında ise katot tarafı hücre içi hızların artması ve gaz difüzyon katmanından katalizör yüzeyine difüzyonun artması ile birlikte oksidant derişiminin arttığı ve hücre performansında olumlu etkiye sahip olduğu görülmüştür.

Yapılan parametrik analizlerin sonuçları göz önüne alındığında, bu model için çalışma sıcaklığının 60 °C, anot tarafı nemliliğinin %100, katot tarafı nemliliğinin %25, çalışma basıncının 3 veya 5 atm ve anot stokiyometrisinin 1,5 ve katot stokiyometrisinin 3 olduğu işletim koşulları yapılan parametrik analizler sonucunda bu model için en iyi performansı sağlayan parametreler olarak ortaya çıkmıştır.

Parametrik analizler ile elde edilen verilerin ve temel model deneysel çalışmaları ile doğrulanan model parametrelerinin, temel model şartlarının bağımsız olarak tekrar doğrulanması amacıyla katot nemliliği çalışması deneysel olarak incelenmiştir. Gerçekleştirilen bu deneysel analizler parametrik modelleme sonuçları ile yüksek oranda örtüşerek model parametrelerinin bu tasarım için tekrar doğrulamıştır.

Oluşturulan model, sonraki çalışmalar için tek hücre testlerinde referans model olarak kullanılabilir, parametrik deneysel çalışmalara gerek duymadan parametre analizlerini çok daha kısa sürede ve oldukça düşük maliyetlerle simülasyon ortamında yapılmasına olanak sağlayacaktır. Model ile deneysel çalışmalar arasında polarizasyon eğrisi üzerinde, özellikle aktivasyon ve direnç kayıplarının yaşandığı bölgelerde performans üzerinde farklılıklar görülmüştür. Bu farklılıklar genel olarak parametre davranışlarını etkilememiştir. Deneysel çalışmalarda kullanılan 4 farklı parametre, modelleme çalışmalarında gözlemlenen davranışlar ile bire bir uyum sağlamıştır. Ancak model ile deneysel çalışmalar arasındaki ufak farklılıklar şu şekilde açıklanabilir;

- Modelleme çalışmalarında GDT ve katalizör katmanlarının porozitelerinin üniform kabul edilişi
- Artan sapma oranlarının görüldüğü yüksek gerilimlerde, akım yoğunluklarının ihmal edilebilir seviyede düşük olması ile sapma oranının yükselmesi

- Modellemede kabul edilen katot tarafı transfer akım yoğunluğunu katsayısının düşük olması [5]
- Modellemede kabul edilen katot tarafı transfer katsayısının yüksekliđi [5]
- Deneysel alıřmada yzeyler arasındaki temas direnlerinin yksek oluřu
- MEÜ retiminde sırasında preslenen elektrotların porozitelerinin dūřmesi
- Deneysel alıřmada kullanılan 25 cm<sup>2</sup> aktif alanlı hcrede, kanallar boyunca oluřan basın dūřmeleri ve su ynetimi zorluđu.

Modelleme alıřmalarında yapılan tm analizlerin tek kanal olması ve sistemin yatıřık kabul edilmesi, yakıt pillerinin alıřmaları sırasında ortaya ıkan dinamik etkilerin sonularının gvrlmesine kısmen engel olmuřtur. Ancak, elde edilen sonular incelendiđinde bu etkilerin ihmal edilebilir seviyelerde olduđu, ozellikle yakıt pillerinin genel olarak ykleme alıřma aralıđı olan 0,65 ile 0,5 V gerilimler arasında %90 ve izerinde dođruluđa eriřildiđi gvrlmüřtur. Bylelikle, bu tez alıřması, ileride yapılacak modellemelere ve deneysel alıřmalara yon verecek, tek hcre testleri iin iyi bir referans olacak, retim ve tasarım faaliyetleri kapsamında dođru alıřma parametrelerinin belirlenmesinde onemli bir kaynak olacaktır.

## KAYNAKLAR

- [1] Um S., Wang C. Y., Chen K.S., Computational Fluid Dynamics Modeling of Proton Exchange Membrane Fuel Cells, *Journal of Electrochemical Society*, 2000, **147**(12), 4485-4493
- [2] Berning T., Lu D. M., Djilali N., Three-Dimensional Computational Analysis of Transport Phenomena in a Pem Fuel Cell, *Journal of Power Sources*, 2002, **106**(1-2), 284-294
- [3] Wang L., Husar A., Zhou T., A Parametric Study of PEM Fuel Cell Performances, *International Journal of Hydrogen Energy*, 2003, **28**(11), 1263-1272
- [4] Sivertsen B. R., Djilali N., CFD-Based Modelling of Proton Exchange Membrane Fuel Cells, *Journal of Power Sources*, 2005, **141**(1), 65-78
- [5] Min C. H., He Y. L., Liu X. L., Parameter Sensitivity Examination and Discussion of PEM Fuel Cell Simulation Model Validation Part II: Results of Sensitivity Analysis and Validation of the Model, *Journal of Power Sources*, 2006, **160**(1), 374-385
- [6] Al-Baghdadi M., Al-Janabi H., Parametric and Optimization Study of a PEM Fuel Cell Performance Using Three-Dimensional Computational Fluid Dynamics Model, *Renewable Energy*, 2007, **32**(7), 1077-1101
- [7] Al-Baghdadi M., Al-Janabi H., Modeling Optimizes PEM Fuel Cell Performance Using Three-Dimensional Multi-Phase Computational Fluid Dynamics Model, *Energy Conversion and Management*, 2007, **48**(12), 3102-3119
- [8] Dawes J. E., Hanspal N. S., Family O. A., Three-Dimensional CFD Modelling of PEM Fuel Cells: An Investigation into the Effects of Water Flooding, *Chemical Engineering Science*, 2009, **64**(12), 2781-2794
- [9] Falcao D. S., Gomes P.J., Oliveira V. B., 1D and 3D Numerical Simulations in PEM Fuel Cells, *International Journal of Hydrogen Energy*, 2011, **36**(19), 12486-12498
- [10] Jeon D., Kim K., Baek S., The Effect of Relative Humidity of the Cathode on the Performance and the Uniformity of PEM Fuel Cells, *International Journal of Hydrogen Energy*, 2011, **36**(19), 12499-12511
- [11] Bilgili M., Bosomoiu M., Tsotridus G., Gas Flow Field with Obstacles for PEM Fuel Cells at Different Operating Conditions, *International Journal of Hydrogen Energy*, 2015, **40**(5), 2303-2311

- [12] Raj A., Shamim T., Investigation of the Effect of Multidimensionality in PEM Fuel Cells, *Energy Conversion and Management*, 2014, 86, 443-452
- [13] Ozen E., Tari I., Proton Exchange Membrane Fuel Cell Degradation: A Parametric Analysis Using Computational Fluid Dynamics, *Journal of Power Sources*, 2016, 304, 64 -73
- [14] Caglayan D., Sezgin B., Devrim Y., Three-Dimensional Modeling of a High Temperature Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell at Different Operation Temperatures, *International Journal of Hydrogen Energy*, 2016, **41**(23), 10060-10070
- [15] Macedo-Valencia J., Sierra J. M., Figueroa-Ramirez S. J., 3D CFD Modeling of a PEM Fuel Cell Stack, *International Journal of Hydrogen Energy*, 2016, **41**(48), 23425-34433
- [16] Salva A., Iranzo A., Rosa F., Optimisation of a PEM Fuel Cell Operating Conditions: Obtaining the Maximum Performance Polarization Curve, *International Journal of Hydrogen Energy*, 2016, **41**(43), 19713-19723
- [17] Bıyıkođlu A., Yakıt Hücrelerinin Tarihsel Gelişimi, Çalışma Prensipleri ve Bugünkü Durumu, *G.Ü Fen Bilimleri Dergisi*, **16**(3), 523-542, 2003
- [18] F. Barbir., *PEM Fuel Cells: Theory and Practice*, 2nd ed., Elsevier Academic Press, London, 2005
- [19] <http://www.americanhistory.si.edu/fuelcells/origins/orig1.htm> (Ziyaret tarihi: 10 Ekim 2016)
- [20] <https://www.britannica.com/biography/Francis-Thomas-Bacon> (Ziyaret tarihi: 10 Ekim 2016)
- [21] <http://www.fuelcelltoday.com/history> (Ziyaret tarihi: 16 Kasım 2016)
- [22] <https://airandspace.si.edu/collection-objects/fuel-cell-gemini-3> (Ziyaret tarihi: 11 Ekim 2016)
- [23] <https://airandspace.si.edu/collection-objects/fuel-cell-apollo-0> (Ziyaret tarihi: 11 Ekim 2016)
- [24] [https://history.gmheritagecenter.com/wiki/index.php/1966\\_GM\\_Electrovan](https://history.gmheritagecenter.com/wiki/index.php/1966_GM_Electrovan) (Ziyaret tarihi 17.11.2016)
- [25] Aydın M., Pem Yakıt Pilinin İki Boyutlu Modellenmesi, Yüksek Lisans Tezi, İstanbul Teknik Üniversitesi, Enerji Enstitüsü, 2007, 185605
- [26] Kamarudin S. K., Achmad F., Overview on the Application of Direct Methanol Fuel Cell for Portable Electronics Devices, *International Journal of Hydrogen Energy*, 2009, **34**(16), 6902-6916

- [27] [http://www.nfrcr.uci.edu/3/FUEL\\_CELL\\_INFORMATION/FCexplained/FC\\_Types.aspx](http://www.nfrcr.uci.edu/3/FUEL_CELL_INFORMATION/FCexplained/FC_Types.aspx) (Ziyaret tarihi: 12 Ekim 2016)
- [28] <http://energy.gov/eere/fuelcells/types-fuel-cells> (Ziyaret tarihi: 21 Kasım 2016)
- [29] <http://www.motortrend.com/cars/toyota/mirai/2017/> (Ziyaret tarihi: 17 Kasım 2017)
- [30] <http://www.fcrgroup.org/pages.php?id=36> (Ziyaret tarihi: 17 Kasım 2017)
- [31] EG&G Technical Services, Inc., *Fuel Cell Handbook*, 7th ed., U.S.Department of Energy Office of Fossil Energy National Energy Technology Laboratory, USA, 2004
- [32] Obut S., Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği ile Proton Değişim Membranlı Yakıt Hücresinin Modellenmesi, Doktora Tezi, Hacettepe Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, 2010, 284642
- [33] Hermann A., Chaudhuri T., Spagnol P., Bipolar Plates for PEM Fuel Cells: A Review, *International Journal of Hydrogen Energy*, 2005, 30, 1297-1302
- [34] Springer T.E., Zawadzinski T.A., Gottesfeld S., Polymer Electrolyte Fuel Cell Model, *Journal of Electrochemical Society*, 1991, 138(8), 2334-2342
- [35] Ansys Inc., Ansys Fluent Theory Guide, <https://support.ansys.com>, (Ziyaret tarihi: 26 Nisan 2017)
- [36] Nguyen P. T., Berning T., Djilali N., Computational Model of a PEM Fuel Cell with Serpentine Gas Flow Channels, *Journal of Power Sources*, 2004, **130**(1-2), 149-157
- [37] <http://www.fuelcellstore.com/spec-sheets/nafion-xl-spec-sheet.pdf> (Ziyaret tarihi: 20 Mayıs 2016)
- [38] Karkınlı A., Kurban T., Kesikoğlu A., Cbs'de Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği Tabanlı Risk Simülasyonları ve Yönetimi, *TMMOB Coğrafi Bilgi Sistemleri Kongresi*, Antalya, Türkiye, 31 Ekim-4 Kasım 2011
- [39] Arvay A., Ahmed A; Peng X., Convergence Criteria Establishment for 3D Simulation of Proton Exchange Membrane Fuel Cell, *International Journal of Hydrogen Energy*, 2011, **37**(2012), 2482-2489

## KİŞİSEL YAYINLAR VE ESERLER

- [1] Hassan N., **Kilic M.**, Okumus E., Experimental Determination Of Optimal Clamping Torque For Ab-pem Fuel Cell, *Journal of Electrochemical Science and Engineering*, 2016, **6**(1), 9-16
- [2] Okumus E., San F.G., Okur O., Turk B., Cengelci E., **Kilic M.**, Development of Boron-based Hydrogen and Fuel Cell System for Small Unmanned Aerial Vehicle, *International Journal of the Hydrogen Energy*, 2017, **42**(4), 2691-2697





## ÖZGEÇMİŞ

1988 yılında İstanbul'da doğdu. İlk, orta öğrenimini Muallim Cevdet ilköğretim okulunda, lise öğrenimini İstanbul Çapa Anadolu Öğretmen Lisesinde tamamladı. 2006 yılında girdiği Kocaeli Üniversitesi Makine Mühendisliği Bölümü'nden 2011 yılında Makine Mühendisi olarak mezun oldu. 2012 yılından itibaren Kocaeli Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Makine Mühendisliği Anabilim Dalı'nda Yüksek Lisans öğrenimine devam etmektedir. 2013 yılından beri TÜBİTAK Marmara Araştırma Merkezi Enerji Enstitüsü'nde araştırmacı olarak, yakıt pili ve hidrojen teknolojileri üzerine çalışmalarını sürdürmektedir.

