

**YALOVA ÜNİVERSİTESİ ★ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**POLİMER ELEKTROLİT MEMBRANLI YAKIT HÜCRESİ İÇİN MODEL  
GELİŞTİRİLMESİ VE COMSOL PROGRAMI İLE SİMÜLASYONU**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**Fatih SORGULU**

**Enerji Sistemleri Mühendisliği Anabilim Dalı**

**Enerji Sistemleri Mühendisliği Programı**

**EYLÜL 2016**



**YALOVA ÜNİVERSİTESİ ★ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**POLİMER ELEKTROLİT MEMBRANLI YAKIT HÜCRESESİ İÇİN MODEL  
GELİŞTİRİLMESİ VE COMSOL PROGRAMI İLE SİMÜLASYONU**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**Fatih SORGULU  
135103004**

**Enerji Sistemleri Mühendisliği Anabilim Dalı**

**Enerji Sistemleri Mühendisliği Programı**

**Tez Danışmanı: Yrd. Doç. Dr. M. Ekrem ÇAKMAK**

**EYLÜL 2016**

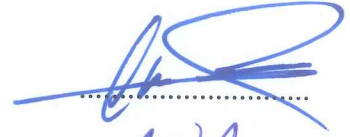


YALOVA ÜNİVERSİTESİ, Fen Bilimleri Enstitüsü'nün 135103004 numaralı Yüksek Lisans öğrencisi **Fatih SORGULU**, ilgili yönetmeliklerin belirlediği gerekli tüm şartları yerine getirdikten sonra hazırladığı “**Polimer Elektrolit Membranlı Yakıt Hücresi için Model Geliştirilmesi ve COMSOL Programı ile Simülasyonu**” başlıklı tezini aşağıda imzaları olan jüri önünde başarı ile sunmuştur.

**Tez Danışmanı :** Yrd. Doç Dr. M. Ekrem ÇAKMAK  
Yalova Üniversitesi



**Jüri Üyeleri :** Prof. Dr. Ömer KAYNAKLI  
Uludağ Üniversitesi



Yrd. Doç. Dr. Mehmet DİREK  
Yalova Üniversitesi



Yrd. Doç Dr. M. Ekrem ÇAKMAK  
Yalova Üniversitesi



**Teslim Tarihi** : 31 Ağustos 2016  
**Savunma Tarihi** : 28 Eylül 2016



## ÖNSÖZ

Bu tez çalışmasının hazırlanmasında bilgisini ve emeğini hiçbir zaman esirgemeyen, yönlendirmeleriyle bana destek olan danışmanım Sn. Yrd. Doç. Dr. M. Ekrem Çakmak'a, yüksek lisans eğitimim boyunca desteklerini benden esirgemeyen başta Enerji Sistemleri Mühendisliği Bölüm Başkanı Sn. Prof. Dr. Fikret Yüksel olmak üzere Enerji Sistemleri Mühendisliği Bölümü Öğretim Elemanlarına, özellikle elektrik konusundaki yardımlarından ötürü Sn. Dr. Sunay Türkdoğan'a,

Akademisyenliğin zorluklarının üstesinden gelebilmem için sabır, hoşgörü ve desteğini hiçbir zaman eksik etmeyen sevgili eşime,

Eğitim hayatım boyunca yanımda olan aileme teşekkür ederim.

Bu çalışma Yalova Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Komisyonu tarafından desteklenmiştir. Proje Numarası: 2015-BAP-121.

Eylül 2016

Fatih SORGULU  
Arş. Gör.





## İÇİNDEKİLER

### Sayfa

ÖNSÖZ.....	v
İÇİNDEKİLER .....	vii
KISALTMALAR .....	ix
ÇİZELGE LİSTESİ.....	xi
ŞEKİL LİSTESİ.....	xiii
ÖZET.....	xv
SUMMARY .....	xvii
<b>1. GİRİŞ .....</b>	<b>1</b>
1.1 Polimer Elektrolit Membranlı Yakıt Hücresi .....	3
1.1.1 Çalışma Prensibi .....	5
1.1.2 PEM Yakıt Hücresi Bileşenleri.....	9
1.1.3 PEM Yakıt Hücresi Performansı.....	12
1.2 Modelleme ve Simülasyon .....	13
1.2.1 COMSOL ve Sonlu Elemanlar Metodu (Finite Elements Method).....	15
1.2.2 Modelleme ve Simülasyon Basamakları.....	15
1.3 Tezin Amacı .....	19
<b>2. MATERYAL VE METOT .....</b>	<b>29</b>
2.1 PEMYH'nin Modellenmesinin ve Simülasyonunun Amacı .....	29
2.2 Yöntem .....	29
2.3 Modelin Geometrisi.....	30
2.4 Modeldeki Proseslerin Fiziksel ve Matematiksel Tanımları.....	31
2.4.1 Akışkan hareketi için kullanılan denklemler .....	33
2.4.2 Kütle transferi için kullanılan denklemler .....	35
2.4.3 Akım yoğunluğu için kullanılan denklemler .....	36
2.5 Başlangıç ve Sınır Şartları.....	39
2.6 Ağ (Mesh) Yapısı .....	40
<b>3. SONUÇLAR VE DEĞERLENDİRME .....</b>	<b>43</b>
3.1 Elektrolit Potansiyeli .....	43
3.2 Hız Dağılımı .....	44
3.3 Polarizasyon Eğrisi.....	46
3.4 Varım ve Öneriler.....	50
<b>KAYNAKLAR .....</b>	<b>51</b>
<b>ÖZGEÇMİŞ.....</b>	<b>55</b>



## **KISALTMALAR**

<b>PEMYH</b>	: Polimer Elektrolit Membranlı Yakıt Hücresi
<b>GDT</b>	: Gaz Difüzyon Tabakası
<b>KT</b>	: Katalizör Tabaka
<b>NASA</b>	: Amerikan Ulusal Havacılık ve Uzay İdaresi
<b>AIP</b>	: Air Independent Propulsion - Havadan Bağımsız Tahrik
<b>CAD</b>	: Computer Aided Design – Bilgisayar Destekli Tasarım





## ÇİZELGE LİSTESİ

### Sayfa

Çizelge 2.1 : Modelin Geometrik Büyüklükleri. ....	31
Çizelge 2.2 : Kullanılan Sabitler ve Fiziksel Büyüklükler. ....	33
Çizelge 2.3 : Model için belirlenen başlangıç şartları. ....	39
Çizelge 2.4 : Model için belirlenen sınır şartları. ....	40





## ŞEKİL LİSTESİ

### Sayfa

Şekil 1.1: 2015 yılı Türkiye’de elektrik üretiminin kaynaklara göre dağılımı (Url-1).	1
Şekil 1.2: PEMYH çalışma şekli.....	6
Şekil 1.3: PEMYH yığını (Sasmito ve diğ, 2012).....	7
Şekil 1.4: PEMYH ile çalışan bir otobüs (Cheng ve diğ, 2015). ....	8
Şekil 1.5: PEMYH enine kesit şematik gösterimi (Owejan ve diğ, 2008).....	9
Şekil 1.6: Plaka akış kanalları a) Paralel b) Kıvrımlı c) Noktasal d) Birbirine geçmiş (Wang ve diğ, 2008).....	10
Şekil 1.7: PEMYH’nde meydana gelen reaksiyonlar ve bileşenler (Url-5).....	11
Şekil 1.8: Örnek bir polarizasyon eğrisi (Sharaf ve Orhan, 2014).....	12
Şekil 1.9: Örnek bir ağ yapısı.....	18
Şekil 1.10: Akış kanalları a: Geleneksel b: Birbirine geçmiş (Yan ve diğ, 2006b) ...	21
Şekil 1.11: Engelli model geometrileri, a: Dikdörtgen b: Dairesel c: İkizkenar yamuk (Ekiz ve diğ, 2011).....	22
Şekil 1.12: Kumar ve Reddy, (2003) kanal tasarımı a: Kanal genişliği, b: Boşluk genişliği, c: Kanal derinliği. ....	23
Şekil 1.13: Akış kanalı modelleri: (A) Kıvrımlı 3 kanallı (B) 6 kanallı (C) 13 kanallı (D) 26 kanallı (E) 26 kanallı karmaşık (Shimpalee ve diğ, 2006). ....	24
Şekil 1.14: Çalışmada kullanılan akış kanalları a) Kıvrımlı b) Paralel (Feng ve Su, 2007). ....	25
Şekil 1.15: Modellenen kanal tasarımları: a) 8 kanal b) 10 kanal c) 12 kanal ..... d) 16 kanal e) 22 kanal f) 38 kanal (Wang ve diğ, 2010).....	27
Şekil 2.1: Modelin COMSOL Multiphysics programında çizimi.....	30
Şekil 2.2: Simülasyonu yapılan model.....	30
Şekil 2.3: Modele ait parametreler. ....	32
Şekil 2.4: Denklemlerin COMSOL programında gösterilen hali.....	37
Şekil 2.5: Akım yoğunluğu için kullanılan denklemlerin COMSOL programında gösterilen hali. ....	38
Şekil 2.6: Gaz giriş çıkışları ve adyabatik kısımlar.....	39
Şekil 2.7: Modelin ağ yapısı.....	41
Şekil 3.1: Elektrolit Potansiyeli (V).....	44
Şekil 3.2: Hücrenin anot kısmının hız profili (m/s). ....	45
Şekil 3.3: Hücrenin katot kısmının hız dağılımı (m/s).....	46
Şekil 3.4: Polarizasyon Eğrisinin Çizimi. ....	47
Şekil 3.5: Polarizasyon eğrisi (Ekiz ve diğ. 2011 ile karşılaştırma). ....	47
Şekil 3.6: Polarizasyon eğrisi (Barakat ve diğ. (2013) ve Cheng ve diğ. (2007) ile karşılaştırma).....	48
Şekil 3.7: Polarizasyon eğrisi (Perng ve diğ. 2009 ile karşılaştırma). ....	49
Şekil 3.8: Güç eğrisi (Perng ve diğ. (2009) ile karşılaştırma).....	49





## **POLİMER ELEKTROLİT MEMBRANLI YAKIT HÜCRESİ İÇİN MODEL GELİŞTİRİLMESİ VE COMSOL PROGRAMI İLE SİMÜLASYONU**

### **ÖZET**

Polimer Elektrolit Membranlı Yakıt Hücreleri (PEMYH) kolay çalıştırılma, yüksek akım ve güç yoğunluğu, düşük çalışma sıcaklığı ve buna bağlı olarak düşük miktarda atık ısı ile taşınabilir ve hareketli sistemlerde yaygın olarak kullanılan enerji dönüşüm sistemlerinden biridir.

PEMYH'nin çalışması ve performansı ile ilgili pek çok çalışma bulunmasına rağmen karmaşık yapılarından dolayı çözülmeyi bekleyen çok fazla problem bulunmaktadır. PEMYH araştırmalarında başvurulan çözüm teknikleri içinde bilgisayarlı modelleme ve simülasyon PEMYH uygulamaları için umut vadeden bir araştırma yöntemidir. Pek çok araştırmacı daha iyi modeller geliştirebilmek için PEMYH'nin çalışmasını bilgisayar ortamında taklit etmeye çalışmaktadır. Tüm modellerin diğerlerine göre avantajları ve dezavantajları bulunmakla birlikte halen geliştirilmeleri gerekmektedir.

Bu çalışmada literatürde bulunan önceki çalışmalardan iki boyutlu bir PEMYH modeli belirlenmiş ve COMSOL Multiphysics v5.1 programı kullanılarak simülasyonu yapılmıştır. Gaz kanallarındaki serbest akış için Navier-Stokes, gözenekli ortamdaki akış için Brinkman, kütle transferi için Maxwell-Stefan ve akım yoğunluğu için Butler-Volmer denklemleri COMSOL v5.1 programı aracılığı ile numerik olarak çözülmüş ve akışkanların ( $H_2$ , hava, su) PEMYH içerisindeki serbest ve gözenekli ortamdaki akışları, iyonların ( $H^+$ ) konsantrasyon dağılımları ve elektrolit potansiyeli dağılımı elde edilmiş; polarizasyon eğrisi çizilmiş ve önceki çalışmalarla karşılaştırılmıştır. Yapılan karşılaştırmalarda tez kapsamında oluşturulan simülasyon sonucu bulunan sonuçların literatürdeki çalışmalarda bulunan sonuçlarla uyumlu olduğu görülmüş; farklar değerlendirilmiştir.



# **MODEL DEVELOPMENT AND COMPUTATIONAL SIMULATION OF POLYMER ELECTROLYTE MEMBRANE FUEL CELL WITH COMSOL MULTIPHYSICS**

## **SUMMARY**

A fuel cell is an electrochemical device that efficiently converts chemical energy directly into electrical energy in a clean and silent way. Among many types of fuel cells, Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell (PEMFC) is one of the most commonly used fuel cell type due to its relatively easy startup phase, low operating temperature, low amount of waste heat, high power density, and longer lifetime. PEMFC has a large usage area both in households and industries either as a portable or stationary power system.

Although there are a vast amount of studies on PEMFCs, there are unsolved problems due to their intricate structure. Among the available scientific techniques used in PEMFC research, computational modeling and simulation is a promising tool that could reveal micro-processes limiting rate and efficiency encountered in PEMFC operation. Thus, many researchers have been trying to develop better models mimicking an operating PEMFC. So far developed models have their own advantages and disadvantages. And the models are still needed to be improved.

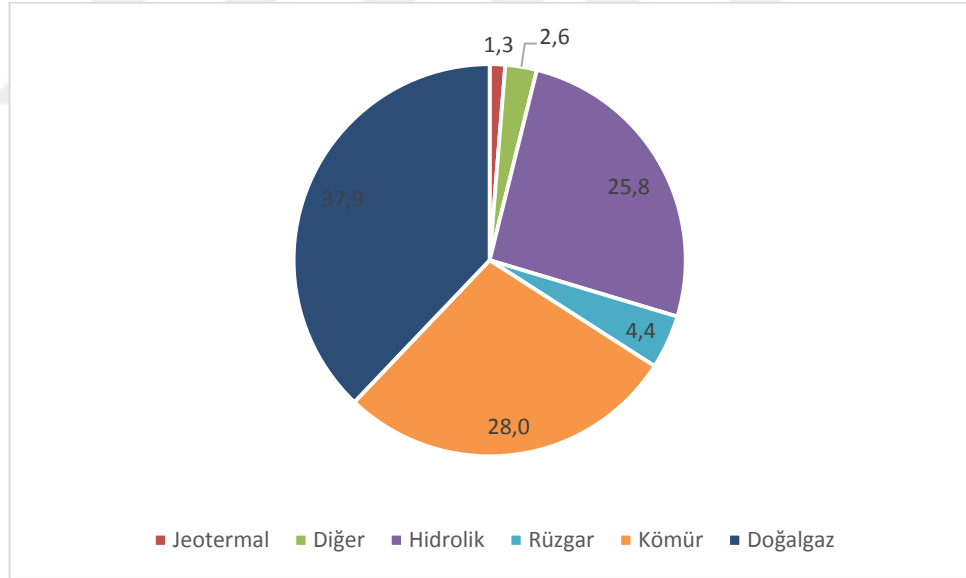
In this study a 2D PEMFC model is adopted from previous studies and simulated using COMSOL MP v5.1 in order to have a starting point for developing a better representative PEMFC model. Navier-Stokes, Brinkman, Butler-Volmer, and Maxwell-Stefan equations are solved to calculate the free flow in the gas channels, the species transport in porous layers, current distribution and the mass transport in the model, respectively.

Velocity field and electrolyte potential are obtained from the numerical solution. Furthermore, the polarization curve is plotted and compared with the previous studies. It is found that the results are in compliance with previous studies.



## 1. GİRİŞ

Enerji ihtiyacı; nüfus artışı, sanayileşme ve teknolojik gelişmelere bağlı olarak hızla artmaktadır. Türkiye’de sanayi ve günlük kullanım için gereken enerjinin büyük bir kısmı fosil yakıtlardan karşılanmaktadır (Şekil 1.1). Ancak fosil yakıtlar yenilenebilir ve tekrar kullanılma imkânları olmadığı için hızla tükenmektedir. Ayrıca artan çevre bilinci ile fosil yakıtların çevreye olan zararı günümüzde yaygın şekilde tartışılır hale gelmiştir (Li ve diğ, 2008). Fosil yakıtların yanması sonucu ortaya karbon dioksit, karbon monoksit, azot oksitler, metan, kükürt dioksit gibi gazlar çıkar. Bu gazlar küresel ısınma, iklim değişikliği ve sera etkisi gibi insanlığı ve geleceği ciddi manada etkileyecek çevre sorunlarına yol açmaktadır.



Şekil 1.1: 2015 yılı Türkiye’de elektrik üretiminin kaynaklara göre dağılımı (Url-1).

Günümüzde rezervleri azalan ve çevreyi kirleten bu fosil kaynakların yerine daha verimli, daha temiz ve yenilenebilir enerji kaynaklarıyla uyumlu yeni nesil enerji dönüşüm teknolojileri arayışı içine girilmiştir. Bir yandan güneş, rüzgâr, biokütle, hidrojen ve jeotermal gibi yenilenebilir enerji kaynakları kullanımı artarken diğer yandan da yeni nesil enerji üretimi için yanma reaksiyonlarına ihtiyaç duymayan, ileri teknoloji enerji üretici ve dönüştürücü teknolojilerin gelişimi hızlanmıştır. Yakıt hücresi, tüm bu gereksinimleri karşılayan en umut verici enerji dönüştürme teknolojisi olarak karşımıza çıkmaktadır (Sharma ve Ghoskal, 2015).

Yakıt hücreleri az da olsa birincil güç üretimi için kullanılsa da, hibrit sistemlerde yedek güç kaynağı olarak kullanımı çok daha yaygındır. Özellikle rüzgâr, güneş gibi süreklilik arz etmeyen yenilenebilir enerji kaynakları kullanılarak güç üretimi yapılan sistemlerde yakıt hücreleri de ikincil güç üretimi için kullanılmakta; birincil güç üretimi ihtiyaçtan fazla olduğu durumda hidrojen üretimi ve depolanması yapılmakta ve birincil üretim yetersiz kaldığında yakıt hücresi ile elektrik üretilmektedir. Yakıt hücresinin ikincil güç olarak kullanıldığı hibrit sistemlere bir diğer örnek de içten yanmalı motorlarla birlikte kullanıldığı uygulamalardır. Bilindiği üzere içten yanmalı motorlarda yanma reaksiyonu sırasında sıcaklık 2000 °C'ye kadar çıkabilmekte ve ortama büyük miktarda atık ısı yayılmaktadır. Bu atık ısı birleşik güç ve ısı sistemleri sayesinde geri kazanılabilmekte; kazanılan enerji ile hidrojen üretimi yapılarak yakıt hücresinin çalışması sağlanmaktadır (Spiegel, 2007).

Uygulamalarda yaygın kullanılan yakıt hücreleri; 150-200°C çalışma sıcaklığına sahip *fosforik asit yakıt hücreleri*; 600-700°C çalışma sıcaklığına sahip *ergimiş karbonat yakıt hücreleri*; 1000°C civarında çalışma sıcaklığı olan *katı oksit yakıt hücreleri* ve 60-180°C çalışma sıcaklığına sahip *polimer elektrolit membranlı yakıt hücreleridir*.

Polimer elektrolit membranlı yakıt hücreleri (PEMYH) diğer yakıt hücresi tiplerine göre, düşük çalışma sıcaklığı (dolayısıyla düşük atık ısı), reaksiyonlar neticesinde atık olarak sadece su açığa çıkarması gibi birçok açıdan avantajlı konumda bulunan ve en geniş kullanım alanı olan yakıt hücresi çeşididir (Sharaf ve Orhan, 2014).

Yakıt hücreleri elektrokimyasal dönüşümle direkt olarak elektrik üretimine imkân vermektedirler. Hidrojenin yakıt olarak kullanılması, reaksiyon sonucu ortaya su ve ısı çıkması, çevre kirletici unsurların olmaması, sessiz çalışması, bakım maliyetinin düşük olması yakıt hücresinin önemini artırmaktadır. Yakıt hücrelerinin sahip olduğu tüm bu avantajlar, bu teknolojinin geliştirilmesi ve ticarileştirilmesini hızlandırmıştır. Bununla birlikte PEMYH ile enerji üretiminde uygulama ve çalışma esnasında çeşitli zorluklar da bulunmaktadır. Uygulamadaki zorluklar hidrojenin üretim, iletim, dağıtım ve depolanması konusundaki zorluklardır. Çalışma esnasındaki zorluklar ise hücre içyapısı ile alakalı oluşan limitasyonlardır. Bunlar hücrenin tasarımı ile alakalı hidrojen, su, hava ya da oksijen taşınım problemleri, katalizör malzemesinden kaynaklı olarak reaksiyonun yeterli aktivasyon enerjisini kazanamaması, membranın yapısından kaynaklı olarak elektron ve proton taşınımı ile ilgili limitasyonlardır. Üretimi ve çalışması esnasında karşılaşılan bu zorlukların üstesinden gelebilmek için tüm dünyada çalışmalar yoğun bir şekilde devam etmektedir (Sorgulu ve Cakmak, 2015; Sharaf ve Orhan, 2014).

Yapılan çalışmalar deneysel ve bilgisayar destekli model geliştirme ve simülasyonlar üzerinde yoğunlaşmaktadır (Manso ve diğ, 2012). Özellikle deneysel çalışmalar ile elde edilemeyen yakıt hücresi içindeki her bir kanaldaki akışa ait hız, basınç gibi fiziksel veriler bilgisayar destekli simülasyonlar aracılığı ile elde edilebilmektedir. Ancak bilgisayar destekli simülasyon yapabilmek için yakıt hücresinde gerçekleşen tüm proseslerin deneysel ve teorik bilgiler ışığında ayrıntılı ortaya konulup matematiksel denklemler yardımı ile açıklanabilmeleri gereklidir. Böyle bir çalışmanın ilk adımı yakıt hücresindeki proseslerin hem fiziksel hem de kimyasal olarak ayrı ayrı incelenmeleri ve daha sonra birbirleri ile olan ilişkilerinin ortaya konmasıdır. Daha sonra bu proseslerin matematiksel olarak tanımlanması gereklidir. Bu noktadan sonra en önemli adım ise elde edilen bu karmaşık (lineer olmayan ve kararlılığı zayıf) denklemlerin nümerik olarak çözülmesidir.

### **1.1 Polimer Elektrolit Membranlı Yakıt Hücresi**

Polimer elektrolit membranlı yakıt hücresi ya da Proton Değişim Membranlı Yakıt Hücresi (PEMYH) 1950'li yıllarda General Elektrik şirketi tarafından geliştirilmiş, 1960'lı yıllarda NASA için uzay araçlarında kullanılmak üzere tasarlanmıştır. 1965 yılında Gemini-7 uzay aracında güç ünitesi olarak kullanılmıştır. Gemini-7 uzay

aracında her birinde 32 bireysel hücre olmak üzere 3 ünite yakıt hücresi kullanılmış ve 1'er kW güç elde edilmiştir (Url-2). Günümüzde de PEMYH halen uzay endüstrisi başta olmak üzere askeri uygulamalarda, taşınabilir cihazlarda, taşıma sistemlerinde kullanılmaktadır.

Yakıt hücreleri kimyasal enerjiyi doğrudan elektrik enerjisine çeviren sistemlerdir. Yakıt hücreleri çalışma şekilleri bakımından pillere benzetilse de yakıt beslenmesi halinde çalışmaya devam etmesi özelliğinden dolayı pillerden farklıdır (Spiegel, 2007). Yakıt hücreye dışarıdan beslenir ve beslendiği sürece elektrik üretimi devam eder. Yakıtın enerjiye dönüşümü geleneksel sistemlerdeki gibi yanma ile değil, elektrokimyasal yolla olur.

Yakıt hücreleri; anot ve katot kısımdaki akış kanalları, elektrotlar ve bunların ortasında elektrotlarla temas halinde olan elektrolitten oluşur. Akış kanalları yakıtı ve oksitleyici yönlendirme vazifesi yapan çift kutuplu (bipolar) plakalar üzerine oyulmuş kanallardır. Elektrotlar, yüksek gaz geçirgenliğine sahip gözenekli yapıdadır. Elektrolit ise kullanılan yakıt hücresi çeşidine göre farklılık gösterir. Genel manada çalışma prensipleri tüm yakıt hücresi çeşitleri için benzerdir.

Son 20 yılda yakıt hücresi uygulamaları araçlarda, taşınabilir güç sistemleri ve sabit güç sağlayıcı sistemlerde yaygın şekilde kullanılmaya başlandı. Ancak yakıt hücresinin tarihi 20 yıl ile sınırlı değil, 200 yıllık bir geçmişi vardır (Andujar ve Segura, 2009). Bu alanda 1800'lü yıllardan beri bilim adamlarının çalışma yaptığı bilinmektedir. 1838 yılında William Robert Grove elektroliz olayındaki reaksiyonu tersine oluşturmayı başarmış, hidrojen ve oksijenden elektrik enerjisi üretmiştir. Sanayi devrimiyle birlikte yakıt hücresi ile ilgili çalışmalar azalmış, ilk geniş kapsamlı araştırma NASA (National Aeronautics and Space Administration) tarafından 1960 yılında başlatılmıştır. 1939 yılında Francis Bacon ilk yakıt hücresini inşa etti. Bacon 1959 yılında Marshall Aerospace firmasının da katkılarıyla 40 hücreden oluşan, 5 kW gücünde ve %60 verimle çalışan bir yakıt hücresi üretti (Andujar ve Segura, 2009). Francis Bacon'ın geliştirdiği bu yakıt hücresini NASA Apollo uzay mekiğinde kullandı. Halen NASA uzay araçlarında yakıt hücrelerini kullanmaktadır (Spiegel, 2007). Honda firması 2007 yılında ilk yakıt hücreli arabayı ürettiğini duyurdu. 2007 yılından bugüne otomobil üreticileri yakıt hücresiyle çalışan ya da yedek güç olarak yakıt hücresini kullanan hibrit otomobiller üretmeye başladılar (Andujar ve Segura, 2009).



İlk geliştirilen yakıt hücresi alkali yakıt hücresidir. Elektrolit olarak potasyum hidroksit kullanıldığı alkali yakıt hücresi düşük sıcaklık, hızlı çalışma, düşük maliyetli parçalar ile öne çıksa da; elektrolit yönetimdeki zorluklar, yakıt ve hava içindeki CO<sub>2</sub>'e karşı hassaslık hücrenin çalışmasını güçleştirmekte ve güç yoğunluğunu azaltmakta, polimer elektrolit membranlı yakıt hücrelerine göre dezavantajlı olmaktadır. Ayrıca çalışma sıcaklığı 220°C'ye kadar çıkabilmekte dolayısıyla da PEMYH'ne göre daha fazla atık ısı ortaya çıkarmaktadır. Özellikle askeri uygulamalar ve taşıma sistemlerinde yedek güç olarak kullanımı mevcuttur (Andujar ve Segura, 2009).

### 1.1.1 Çalışma Prensibi

Tüm yakıt hücresi çeşitleri, kullanılan yakıttan alınan kimyasal enerjiyi elektrokimyasal reaksiyonlar neticesinde direk olarak elektrik enerjisine çevirir. PEMYH'nde bu reaksiyonlar 60-180°C aralığında gerçekleşir (Sharaf ve Orhan, 2014). Çalışma sıcaklıkları fosforik asit yakıt hücrelerinde 150-200°C, ergimiş karbonat yakıt hücresinde 600-700°C, katı oksit yakıt hücresinde ise 1000°C'ye kadar çıkabilmektedir (Mench ve diğ, 2001; Spiegel, 2007; Andujar ve Segura, 2009;). Yakıt ve oksijen (veya hava), reaksiyonun gerçekleştiği yakıt hücresinin anot ve katot kısımlarına ayrı ayrı gönderilir. PEMYH'nde yakıt olarak saf hidrojen, oksitleyici olarak da hava ya da oksijen kullanılır.

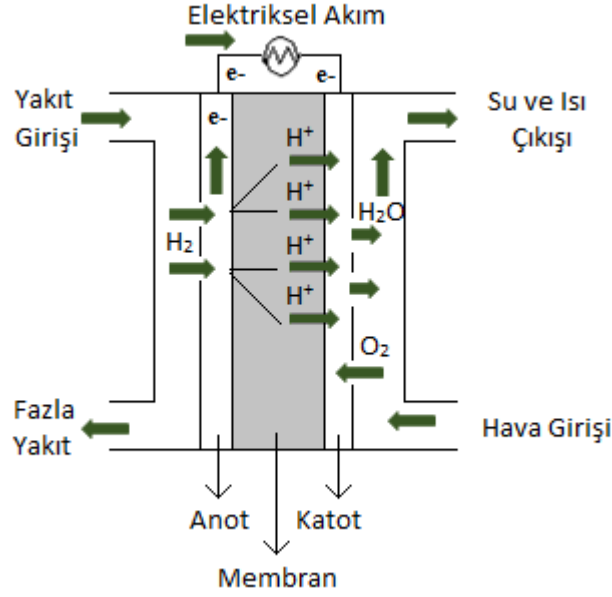
Anot akış kanalından gönderilen nemlendirilmiş saf hidrojen, gaz difüzyon tabakası boyunca yayılır. Katalizör tabakadan geçerken iyonlarına ayrışır. Katot kısmından ise hücreye hava ya da oksijen beslemesi yapılır. Anot ve katot kısımları arasında elektrolit olarak membran bulunur.

Membran aracılığı ile anottan katota protonlar direk geçiş yaparken; elektronlar membrandan geçemeyip, kurulan bir elektrik devresi aracılığı ile anot gaz difüzyon tabakasından katot gaz difüzyon tabakasına geçer. Oluşan potansiyel fark sayesinde elektrik üretilmiş olur. Katot kısmına ulaşan hidrojen iyonları ve elektronlar, oksijen ile birleşir ve su oluşur;

Anotta:  $H_2 \rightarrow 2H^+ + 2e^-$  reaksiyonu

Katotta:  $\frac{1}{2} O_2 + 2H^+ + 2e^- \rightarrow H_2O$  reaksiyonu

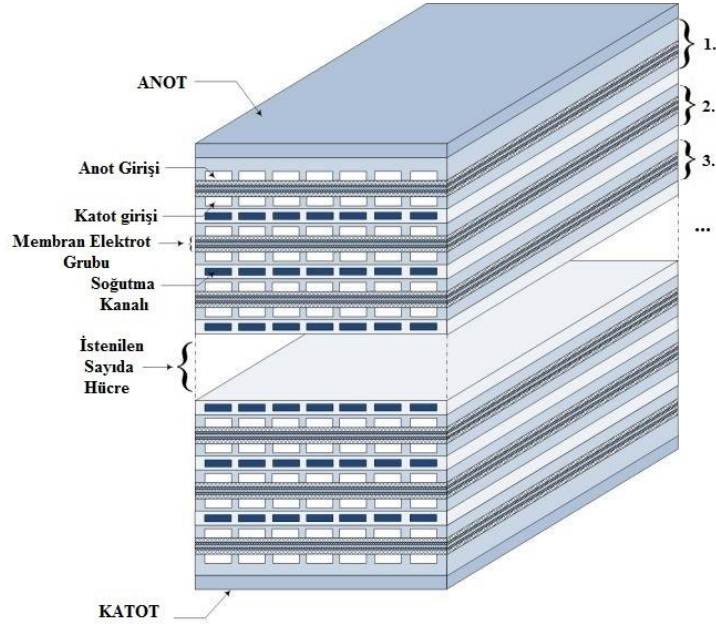
Toplamda da  $H_2 + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow H_2O$  reaksiyonu gerçekleşmiş olur ve reaksiyonun sonunda ısı ve su açığa çıkar (Şekil 1.2).



**Şekil 1.2:** PEMYH çalışma şekli.

PEMYH'nde yakıt olarak saf hidrojen kullanılır. Hidrojen doğada en çok bulunan element olmasına karşın saf halde bulunmaz. Bu yüzden de genellikle yakıt hücresinin çalışabilmesi için hidrojen elde etme ünitesi de yakıt hücresi ile birlikte tasarlanmakta ya da hibrit sistemler ile hidrojen üretimi yapılmaktadır. Hibrit sistemlerde hidrojen; birincil güçten sağlanan enerjiden elektroliz yöntemiyle, kömür, petrol gibi fosil kaynaklar ya da yenilenebilir yağların kısmi oksidasyonu ile, doğal gazın ya da biyogazın buhar yapılandırması ya da kısmi oksidasyonu ile, etanol ve metanol gibi alkollerin yapılandırılması ile elde edilebilir (Sharma ve Ghoskal, 2015).

PEMYH'leri, kullanım ihtiyacına ve istenen güce bağlı olarak; tek bir hücreden ya da yüzlerce hücreden oluşan yığın (stack) sistemler olarak kullanılabilir (Şekil 1.3) (Sasmito ve diğ, 2012).

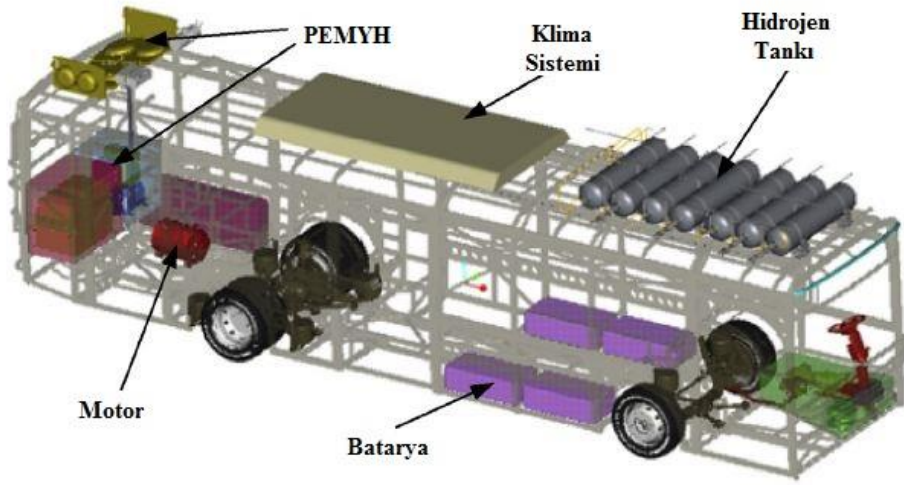


Şekil 1.3: PEMYH yığını (Sasmito ve diğ, 2012).

Polimer Elektrolit Membranlı Yakıt Hücreleri günlük hayatta kullanılan cihazlarda, konut ve işyeri projelerinde, çeşitli endüstriyel uygulamalarda kısacası elektriğe ihtiyaç duyulan ve özellikle şebekeye uzak olan her yerde kullanılmaktadır. PEMYH kullanımının artmasıyla çevreye verilen zararın azalması ve ekonominin gelişmesi umut edilmektedir (Hayashi ve diğ, 2005).

PEMYH insansız hava araçlarından denizaltılara, telsizlerden tanklara askeri projelerde elektrik elde etmek, sisteme güç takviyesi yapmak, yedek güç olarak kullanmak üzere tasarlanmaya, geliştirilmeye devam etmektedir. Özellikle sessiz olması askeri projelerde güç üretimi için PEMYH'ni vazgeçilmez kılmaktadır. Herhangi bir şekilde şebekeye ihtiyacının olmaması özellikle arazide, tesisten uzaktaki uygulamalarda PEMYH kullanımını artırmaktadır. Ülkemizde AIP (Air Independent Propulsion - Havadan Bağımsız Tahrik) tipi deniz altılarında PEMYH kullanılmaktadır. Yine ülkemizde Zorlu Holding ve Savunma Sanayi işbirliği ile PEMYH ile güç üretimi yapan araçlar geliştirmektedir (Url-3).

Değişen koşullarla birlikte taşıt üreticilerinin tamamı yakıt hücresi ile çalışan araç üretmek için çalışmalar yapmaktadır. Sessiz ve çevre dostu olmasından dolayı hem üreticiler hem de tüketiciler tarafından rağbet görmektedir. 2000'li yıllardan günümüze çok hızlı bir gelişim süreci yaşanmış; PEMYH, otomobillerde (Andujar ve Segura, 2009), otobüslerde (Cheng ve diğ, 2015; Chen ve diğ, 2007) (Şekil 1.4), trenlerde (Miller ve diğ, 2007;), motor bisikletlerde (International Energy Holdings, 2007), tırlarda (US Army TACOM, 2003) kullanılmaya başlanmıştır.



**Şekil 1.4:** PEMYH ile çalışan bir otobüs (Cheng ve diğ, 2015).

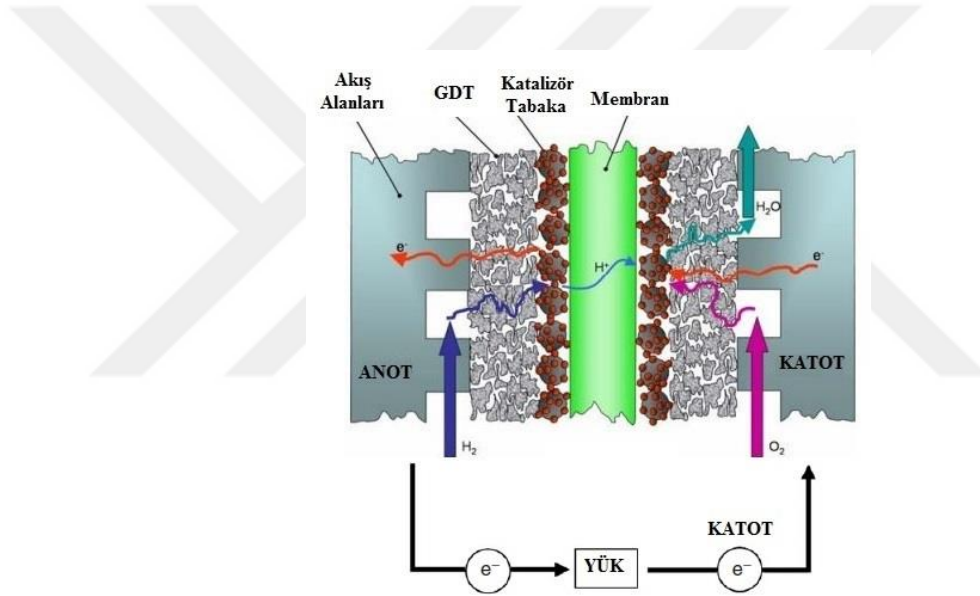
PEMYH hem taşınabilir hem de sabit sistemlerde yedek güç ve asıl güç olarak kullanılmaktadır. Özellikle şebekeye erişimin olmadığı yerlerde güneş ve rüzgâr sistemleri ile birlikte kullanımı yaygındır (Andujar ve Segura, 2009; Lehman ve diğ, 2000; Hakim 1998; Sifer ve Gardner, 2004). Geliştirilen hibrit sistemlerde elektrik birincil olarak güneş ya da rüzgâr enerjisinden sağlanırken; üretilen gücün fazla olması durumunda hidrojen elde edilmekte ve güneş ya da rüzgâr enerjisinin yetersiz olduğu durumlarda yakıt hücresi depolanan hidrojenle elektrik üretmektedir.

Şebekeye ihtiyaç duymaması ve yakıt beslemesi yapıldığı sürece çalışmaya devam etmesi gibi avantajlarından dolayı uzay araçlarında güç üretimi için tercih edilmektedir. NASA'nın 1965 yılında Gemini uzay aracında ve Apollo projelerinde kullanılmasından bu yana uzay gemileri ve istasyonlarında yaygın şekilde kullanılmaktadır (Url-2).

PEMYH'nin diğ er bir avantajı da reaksiyonlar neticesinde içilebilir su açığa çıkmasıdır. Astronotlar gerekli olan su ihtiyaçlarının bir kısmını yakıt hücresinden karşılamaktadırlar (Kim ve diğ, 2011).

### 1.1.2 PEM Yakıt Hücresi Bileşenleri

PEMYH anot (anode), katot (cathode) ve elektrolit (electrolyte) olmak üzere üç kısımdan oluşur. Anot ve katot kısmında *gaz akış kanalları* (gas flow channels), *katalizör tabaka* (catalyst layer) ve *gaz difüzyon tabakası* (gas diffusion layer) bulunurken, elektrolit görevini bu iki kısım arasında bulunan *membran* yapar (Şekil 1.5). Membran, gaz difüzyon tabakaları ve katalizör tabakalar membran elektrot grubu olarak da adlandırılır.

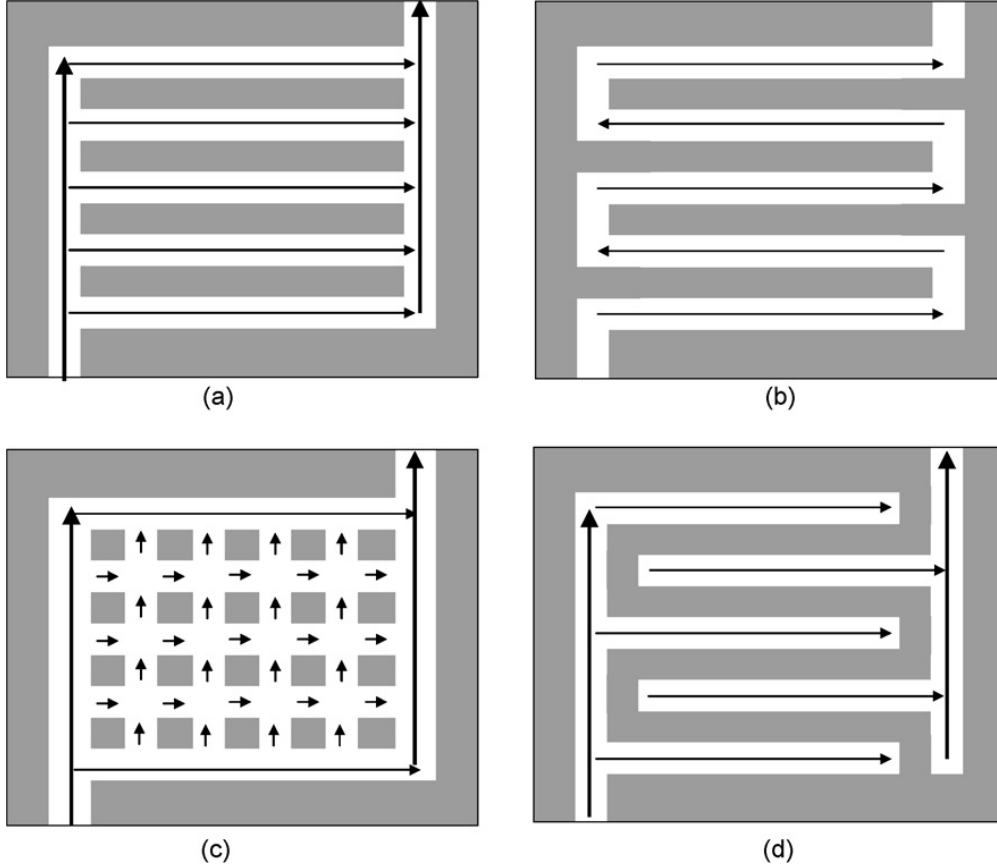


Şekil 1.5: PEMYH enine kesit şematik gösterimi (Owejan ve diğ, 2008).

*Akış kanalları*, yakıt hücresinin anot ve katot tarafında en dış kısımda yer alan plakalarda bulunur. Plakalar genellikle grafitten imal edilir. Grafit yüksek elektrik iletkenliği, yüksek ısıl iletkenlik, düşük korozyon oranına sahiptir ve hafiftir. Ancak grafit içine akış kanallarının işlenmesi zordur, maliyeti yüksektir. Bazı metal alaşımlar ve karbon kompozitler de plaka üretimi için tercih edilmektedir (Wu, 2009).

Hücresinin anot tarafındaki akış kanallarından yakıt (hidrojen) beslemesi yapılırken katot tarafındaki kanallarından da oksitleyici (hava ya da oksijen) beslemesi yapılır.

Gazların gaz difüzyon tabakasına ulaşmasını akış kanalları sağlar. Plakanın akış kanallarının tasarımı; direnci, ohmik kayıpları, hücre ağırlığını dolayısıyla yakıt hücresi performansını önemli ölçüde etkiler (Li ve diğ, 2008; Rajalakshmi ve diğ, 2004). Gaz akış kanalları düz, kıvrımlı veya birbirine geçmiş akış alanları şeklinde tasarlanabilir (Şekil 1.6).



**Şekil 1.6:** Plaka akış kanalları a) Paralel b) Kıvrımlı c) Noktasal d) Birbirine geçmiş (Wang ve diğ, 2008).

*Gaz difüzyon tabakaları* membran etrafındaki katalizör tabaka ile birlikte bulunur. Reaktan gazları ile suyun taşınmasını ve elektron transferini sağlar. Gaz difüzyon tabakasının su ve ısı yönetimine katkısı ile membranın ve kanalların kurumaması ya da aşırı suya maruz kalmaması sağlanır.

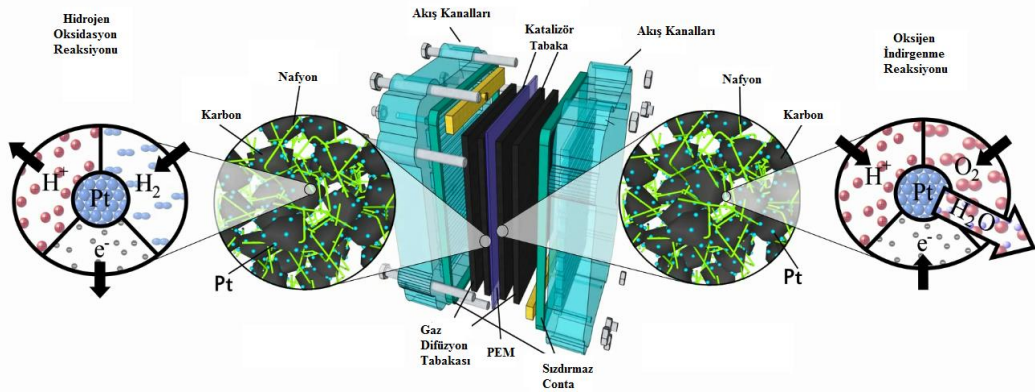
Gaz difüzyon tabakaları karbon içerikli gözenekli malzemeden üretilir. Karbon tabanlı gaz difüzyon tabakalarının yüksek geçirgenlik, elektrik iletkenliği ve esnekliğe sahip olduğu tespit edilmiştir. Ayrıca karbon tabanlı gaz difüzyon tabakaları su hareketini hızlandırmakta ve hücre performansını artırmaktadır (Park ve diğ, 2012).

PEMYH'nin elektrik üretim süreci boyunca katot ve anot kısmında ayrı ayrı reaksiyonlar gerçekleşir. Bu elektrokimyasal reaksiyonlar, özellikle katot tarafında, düşük sıcaklıkta ve yavaş gerçekleşir. Katot tarafında reaksiyonların yavaş gerçekleşmesi su üretimini azaltır. Suyun azalması ile plakada kuruluk ve çatlaklar meydana gelir. Bu reaksiyonları hızlandırmak, hücre performansını artırmak için, membran ince bir *katalizör tabaka* ile kaplanır. Katalizör tabakası iyonomer bir matris içine gömülü karbon parçacıklardan oluşur ve platin katalizörle desteklenir (Wu, 2009).

PEMYH'nde elektrolit olarak *katı polimer membran* kullanılır. Katı elektrolitin korozyonu ve elektrolit yönetim problemlerini önlemesi yakıt hücreleri için çok önemli bir avantajdır. En yaygın kullanılan membran çeşidi Perfluoro Senfonik asittir. Ticari ismi Nafyondur. Nafyon® 1960'lı yıllarda Dupont firması tarafından üretilmiş ve günümüzde halen aynı firma tarafından üretilmektedir (Url-4).

Membran; yüksek proton iletkenliğine, yüksek kimyasal ve ısıl kararlılığa sahip olmalıdır. Polimer elektrolitlerde proton iletkenliği nemliyen artar. Bu yüzden reaktan gazlar akış kanallarından su ile birlikte hücreye beslenir. Membranın istenilen düzeyde nemli kalması için akış kanallarının tasarımı çok önemlidir.

Membrana yeterli suyun beslenememesi halinde membran kurur, suyun fazla olduğu durumlarda da aşırı su (flooding) oluşur. Her iki durumda da hücre performansı düşer hatta hücre çalışmaz hale gelebilir. Bu nedenle, yakıt hücresi içindeki su yönetimi PEM yakıt hücresi operasyonu için kritiktir (Wu, 2009). Optimum su yönetimi de ancak akış kanallarının düzgün tasarlanmasıyla mümkün olabilmektedir. Polimer elektrolit membranlı yakıt hücresini oluşturan parçalar Şekil 1.7'de gösterilmiştir.



Şekil 1.7: PEMYH'nde meydana gelen reaksiyonlar ve bileşenler (Url-5).

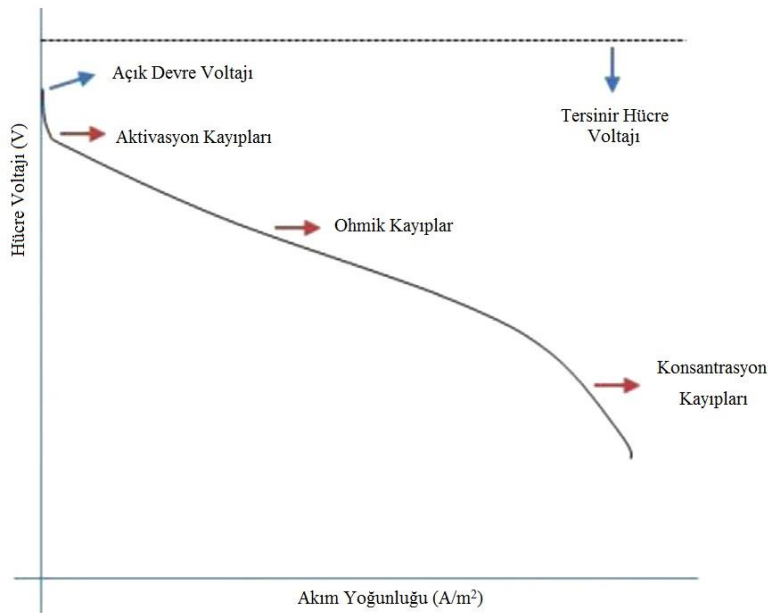
### 1.1.3 PEM Yakıt Hücresi Performansı

Yakıt hücrelerinin performansını belirlemek için polarizasyon ve güç eğrileri çizilir. Akım geçerken elektrot potansiyelinde meydana gelen değişime “polarizasyon” denir. Polarizasyon eğrisi akım yoğunluğu ve gerilim arasındaki değişimi gösteren grafikdir. Güç eğrileri ise hücrenin gücünün akım yoğunluğu ile değişimini gösterir.

PEMYH'nin çalışması esnasında meydana gelen kayıplar;

- Katalizör tabakada reaksiyonların yavaşlığından kaynaklanan *aktivasyon kayıpları* (activation losses);
- Plakalarda ve gaz difüzyon tabakada reaksiyon sırasında ya da membrandan geçişte elektronların iyonik elektriksel direncinden ve membranın iyonik akışa gösterdiği tepkiden kaynaklanan *direnç kayıpları* (ohmic losses)
- Akışkan hareketi süresince oksijen miktarının sürekli azalmasından kaynaklanan *konsantrasyon kayıpları* (concentration losses) ya da diğer adıyla *kütle transfer kayıpları* (mass transport losses)

Tüm bu kayıpların görülebileceği ve bulunan sonuçların diğer çalışmalarla karşılaştırılabileceği polarizasyon eğrileri, yakıt hücresi ile ilgili çalışma yapan bilim adamları tarafından kullanılmaktadır (Şekil 1.8).



Şekil 1.8: Örnek bir polarizasyon eğrisi (Sharaf ve Orhan, 2014).



Elektrotların (gaz difüzyon tabakası ve katalizör tabaka) yüzeyinde meydana gelen reaksiyonların yavaşlığından kaynaklanan kayıplar *aktivasyon kayıplarıdır*. Tepkime sırasında üretilen gerilimin bir kısmı, elektron transferi esnasında kaybolur. Anot tarafında hidrojen gazı, katot tarafında ise oksijen gazı ve hidrojen iyonları belirli bir aktivasyon enerjisine ulaşamazlarsa reaksiyonlar gerçekleşmez. Bu sebeple reaksiyonların gerçekleşmesi için katalizör kullanılır. Çalışma sıcaklığının, elektrot pürüzlülüğünün, reaktan gazların konsantrasyonunun ve basıncın belli seviyeye kadar artması aktivasyon kaybını azaltılır (EG&G Technical Services, 2004).

Hücre içerisindeki elektron ve iyonların hareketleri esnasında, elektrotların iyonik elektriksel direncinden ve membranın iyon akışına gösterdiği tepkiden kaynaklanan kayıp yaşanır. Oluşan bu kayıplara *direnç kayıpları ya da ohmik kayıplar* denilmektedir.

Anotta hidrojen iyonu membrandan geçip katot kısmına ulaşır ve çok azı tekrar anot kısma geri döner. Dolayısıyla konsantrasyonla alakalı ciddi bir farklılık ve kayıp oluşmaz. Ancak katot kısmında oksijen sürekli yüzde olarak azalır ve konsantrasyon kayıpları meydana gelir. Aynı şekilde oluşan fazla miktardaki sıvı suyun gözenekli ortam içinde ve mikro kanallarda tıkanmaya sebebiyet vermesinden dolayı kayıp meydana gelir. Oluşan bu kayıplara *konsantrasyon kayıpları yada kütle transfer kayıpları* adı verilir.

Burada dikkat edilecek en önemli nokta; özellikle aktivasyon kayıpları ve konsantrasyon kayıpları olarak isimlendirilen iki noktadaki prosesleri ayrıntılı olarak inceleyebilmek için kütle transferi denklemlerinin ve buna bağlı olarak da akış denklemlerinin çözümlerinin şart olmasıdır. Tüm bu bilgiler ışığında PEMYH için belirlenen matematiksel denklemlerin nümerik yollarla çözülmesi yani modelleme ve simülasyon ile yakıt hücrelerinin çalışma prensipleri hakkında daha detaylı bilgiler elde edilebilmektedir.

## **1.2 Modelleme ve Simülasyon**

Modelleme bir nesnenin fiziksel ve/veya matematiksel olarak aynı özelliklere sahip bir benzerini oluşturmaktır. Fiziksel, somut bir benzeri oluşturup prototip ya da model üretilebileceği gibi bilgisayar kullanılarak da sanal modeller oluşturulabilir. Simülasyon (benzetim) ise bilgisayar kullanılarak gerçek nesnenin davranışlarını

anlama işidir. Bilgisayar kullanılarak yapılan modelleme ve simülasyon sanal bir deney ortamı oluşturup ürünün somut örneklerini üretmeden istenilen tüm şartlar için deney yapılabilmesini sağlar.

Modelleme ve simülasyonun doğru bir şekilde yapılabilmesi için çok ciddi bir bilgi birikimi gerekir. Bir mühendisin karmaşık mühendislik problemlerini simülasyon yardımıyla çözebilecek seviyeye gelmesi yıllarını almaktadır. O yüzden problemin çözümü analitik yöntemlerle mümkün olduğunda ya da geliştirilen prototip üzerinde tahribatsız muayene yeterli olacaksa simülasyon klasik yöntemlere göre pahalı ve zahmetli olabilir. Çünkü tecrübeli eleman istihdam edilmesi ve bilgisayar programı gerekecektir.

Günümüzde modelleme ve simülasyon çözümü analitik yöntemlerle mümkün olmayan ya da çok fazla teste tabi tutulması gereken ürünlerin testi için kullanılmaktadır. Kullanılan bilgisayar programları sayesinde simülasyon, üreticiyi kalite kontrol yapabilmesi için defalarca üretim yapma zahmetinden ve maliyetinden kurtarır. Bununla beraber her ne kadar analitik çözüm yapılabilse de bu çözümü elde etmek için gereken ön kabuller sonucun gerçekliğini azaltmaktadır. Bu sebeple gelişen bilgisayar teknolojisi sayesinde, mühendislikte nümerik yöntemler kullanılarak yapılan simülasyonlar önem kazanmıştır (Çengel ve Ghajar, 2015)

Prototip üretme, ilk çağlardan beri tüm üreticilerin ürettiklerini test etmekte kullandıkları en klasik yöntemdir. Ancak bu yöntem üretilen ürün ve yapılacak testlere göre çok pahalı ve zahmetli olabilmektedir. Örneğin bir otomobil üreticisi çarpışma testi yapmak istediğinde farklı tüm koşullar için yeni bir otomobil üretmek zorunda kalacaktır. Oysa sanal ortamda oluşturacağı model ile tek bir deney yapıp modelin fiziksel doğruluğunu kanıtladıktan sonra farklı koşullar için yeniden üretim yapmadan testlerini gerçekleştirebilecektir.

1900'lü yılların ortalarından bu güne hem bilgisayar teknolojisinde gelişmeler hem de nümerik yöntemlerin keşfi ile simülasyon çalışmaları artmıştır. 1950'li yıllarda bilim adamları bugün kullandığımız paket programların da sayısal çözüm altyapısını oluşturan, nümerik bir yöntem olan sonlu elemanlar metodunu (finite elements method) ortaya çıkardılar. Bu konuda ilk kitap Zienkiewicz ve Cheung (1967) tarafından yazıldı. Teknolojik gelişmeler de matematiksel gelişmeleri takip etti, ilk simülasyon denemeleri aynı yıllarda Boeing firmasının uçakları için yapıldı (Clough

ve Wilson, 1999). 1970 yılında ilk simülasyon paket programı olan ANSYS programı piyasaya çıktı (Url-6). Bugün sonlu elemanlar metodunu kullanarak matematiksel hesap yapıp simülasyon yapan COMSOL Multiphysics, ANSYS, Autodesk, OpenFOAM, Solidworks gibi pek çok program bulunmaktadır.

### **1.2.1 COMSOL ve Sonlu Elemanlar Metodu (Finite Elements Method)**

COMSOL Multiphysics kullanım kolaylığı, düşük hata yüzdesi, tüm fiziksel modüllerin (ısı transferi, akışkanlar mekaniği, yapı mekaniği vs.) aynı programda olması gibi özelliklerinden dolayı yaygın şekilde kullanılmaktadır. COMSOL Multiphysics programı, nümerik çözüm olarak sonlu elemanlar metodunu kullanmaktadır.

Sonlu elemanlar metodu mühendislik ile ilgili karmaşık problemlerin çözülebilmesine imkân sağlayan nümerik bir metottur. Kâinattaki tüm nesnelere buldukları düzlemde sonsuz sayıda nokta içerirler. Sonlu elemanlar metodu ise adından da anlaşılacağı gibi nesnelere sonlu sayıda noktaya (eleman) ayırarak çözüme gitmeye çalışır. Bu metod ile ilgili ilk çalışmaların Courant (1943) tarafından yapıldığı kabul edilmektedir. Yayınladığı makalede burulma problemine bölgesel bir yaklaşım geliştirmiş ve çözüm üretmiştir.

Simülasyon programlarından önce sonlu elemanlar metodu ile çözüm elle yapılmakta idi. Bu yüzden nesnelere karmaşıklıklarına göre 10-100 parçaya (elemana) bölünebiliyor, hassas çözüm yapılamıyordu. Ancak teknolojik gelişmeler sayesinde eleman sayısı ve buna bağlı olarak çözümdeki hassasiyet arttı. Bugün bir uçak kanadı, uzay mekiği ya da bir otomobil 15-20 milyon elemana bölünebilmekte (meshing – ağ yapısı oluşturma) ve bilgisayarla nümerik olarak hesap yapılabilmektedir (Çengel ve Cimbala, 2015).

Sonlu elemanlar metodunu kullanan bilgisayar programları sayesinde bugün akışkanlar mekaniği, ısı transferi, kimyasal, elektriksel, elektrokimyasal, statik problemlerinin tek, iki ya da üç boyutlu; tek ya da çift fazlı çözümleri yapılabilmektedir.

### **1.2.2 Modelleme ve Simülasyon Basamakları**

Modelleme ve simülasyon işlemi; *problemin belirlenmesi, geometrinin oluşturulması, fiziksel ve matematiksel hesaplamalar, mesh (ağ) yapısı oluşturulması*

gibi pek çok adımdan oluşmaktadır. Bu adımların başarıyla tamamlanıp simülasyonun yapılabilmesi için ciddi bir fiziksel ve matematiksel altyapı ve program bilgisi gerekmektedir.

Modelleme ve simülasyon yaparken ilk aşama *problemin belirlenmesidir*. Problemin belirlenmesi; problemin denklemlerinin boyutunun ve zamana bağlı olup olmadığının belirlenmesidir.

Öncelikle denklemlerde nelerin ihmal edileceğinin belirlenmesi için boyut tercihi yapılır, problemin zamana bağlı (time dependent / transient) mı yoksa zamandan bağımsız (stationary) mı çözüleceğine karar verilir. Seçim yapıldığında denklemlerde zaman ifadeleri ve seçilecek koordinata göre boyutlar otomatik olarak program tarafından ayarlanmaktadır.

Daha sonra problemin fiziksel ve kimyasal özellikleri belirlenir. Örneğin problem içinde akışkan hareketi varsa akışın laminar mı türbülanslı mı olduğu yani Reynold sayısı; kaç fazlı akışkan olduğu; akışın gözenekli ortamda (porous media) mı serbest ortamda (free flow) mı olduğu; yüksek hızlı bir cismin aerodinamik hesabı yapılacaksa Mach sayısı belirlenmeli, uygun arayüzler seçilmelidir. Aynı şekilde bir ısı transferi hesabı yapılacaksa ısı geçişinin taşınım, iletim ya da ışınım yollarından hangisi ya da hangileri ile gerçekleştiği belirlenmelidir. Ya da yapı statığı hesabı yapılacaksa burulma, yorulma, gerilme hesaplarından hangisinin yapılacağı ve nesnenin etkide kaldığı kuvvetler ve bu kuvvetlerden doğan momentler belirlenir.

Problem belirlendikten sonra *geometrinin oluşturulmasına* yani nesnenin çizimine geçilir. Çizim modelleme ve simülasyon programları yardımı ile yapılabileceği gibi CAD (Computer aided design – Bilgisayar destekli tasarım) programları ile de yapılabilir. Geometrinin doğru bir şekilde oluşturulması cismin bire bir çizilmesi gerekmektedir. Aksi halde sonuçlar hatalı çıkacaktır.

Geometrinin oluşturulmasının ardından belirlenen *fiziksel ve/veya kimyasal hesaplamalar* için gerekli tüm veriler programa aktarılır. Malzemeye ait özellikler, gerçekleşen fiziksel ya da kimyasal olaya ait tüm özellikler, başlangıç ve sınır şartları programa girilmelidir. Malzemeye ait tüm özellikler (viskozite, yoğunluk, iletkenlik vs.) elle girilebileceği gibi programın malzeme kütüphanesine (material library) malzeme ismi yazılarak da otomatik girilebilir. Model içinde birden fazla fiziksel veya kimyasal olay meydana geliyorsa başlangıç ve sınır şartları girilirken dikkat

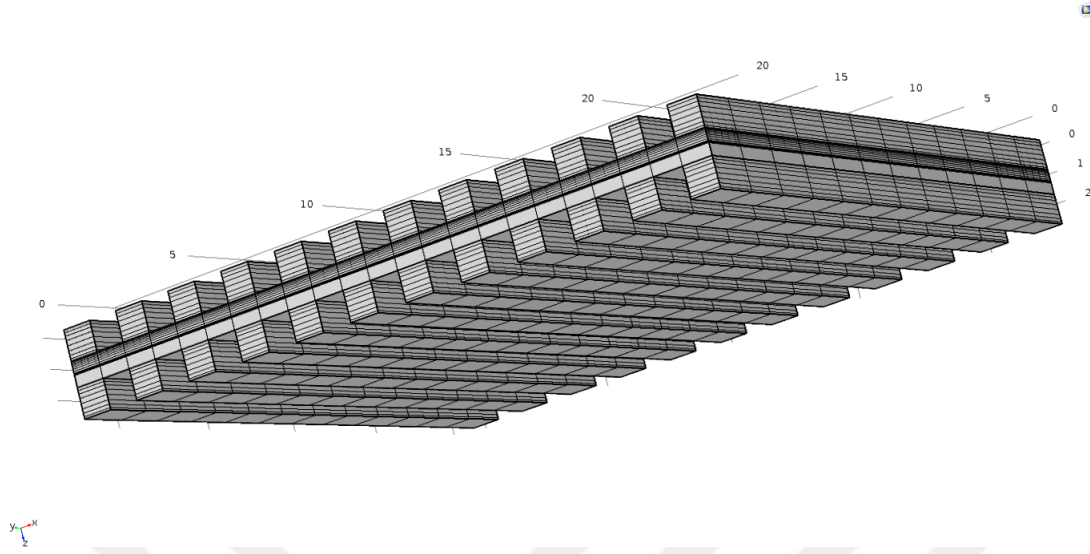
edilmeli, programa olayların oluş sırası ve birbiri ile bağlantısı iyi aktarılmalıdır. Örneğin; hem serbest akış hem de gözenekli ortamda akışın olduğu bir modelde, serbest akış uygun başlangıç değeri tayin edilerek laminar ya da türbülanslı olması durumuna göre çözülür. Daha sonra bu çözümden elde edilen hız değeri gözenekli ortamda akış için başlangıç değeri olarak kullanılır. Hem ısı transferinin hem de akışkan hareketinin olduğu bir sistemde önce akışkan hareketinin çözümü yapılmalı elde edilecek hız değeri ısı transferinde kullanılmalıdır.

Çözüm için en önemli aşama *mesh (ağ) yapısının oluşturulmasıdır*. Çözüm nümerik yöntemle yapılacağı için tam doğru sonuç bulmaya değil sonuca yaklaşılmaya çalışılacaktır. Cisimler, tek parça değil, karmaşık geometrilerden oluşuyorsa her bir geometrik şekle kendi şekline uygun ağ yapısı oluşturulmalı, uygun eleman sayısına bölünmelidir (Şekil 1.9). Eleman sayısı arttıkça bilgisayarın problem çözme süresi de artacak, gücüne ve problemin karmaşıklığına bağlı olarak günleri belki haftaları bulacaktır. Örneğin; kılcal boru içinden geçen iki fazlı akışın modellenmesi ve nümerik olarak çözümü 16 GB RAM'e sahip bilgisayar ile birkaç hafta sürmektedir (Çakmak, 2011). Tek fazlı, üç boyutlu, içinde hem akışkan hareketi olan hem de ısı transferi gerçekleşen silindirik bir cismin sadece ağ yapısının oluşturulması ve nümerik çözümün yapılması 8 GB RAM'e sahip bir bilgisayar ile bir kaç saat sürmektedir. Tek fazlı, iki boyutlu, gözenekli ortam içindeki akışın modellenmesi ve simülasyon için gerekli ağ yapısının oluşturulması basit bir geometri için uygun seçim ile bir kaç dakikada yapılabilmektedir.

Seçilen eleman sayısına, ağ yapısının sıklığına ya da kabalığına göre sonuç değişebilir. Bu yüzden çalışma yapılırken farklı sayıda elemanla simülasyon denenmeli ve simülasyon sonuçlarının ağ yapısından bağımsızlığı gösterilmelidir (Datta ve Rakesh, 2010).

Ağ yapısının yanlış seçilmesi ya da kaba ağ yapısı sonuçların yanlış çıkmasına sebep olabilir. Ancak ağ yapısının iyi seçilmesi ile fiziksel sonucun doğru çıkması kesinleşmiş olmaz. Eğer sınır şartları düzgün belirtilmez, denklemler yanlış seçilirse sonuçlar da fiziksel olarak anlamlı olmaz. Bu noktada bir mühendisin ihtiyacı olan tek şey zamanla elde edeceği mühendislik tecrübesi ve hissiyatıdır (Çengel ve Cimbala, 2015). Her problem için en uygun ağ yapısı tecrübelerle dayanarak özel olarak edilir ve test edilerek kesinlik kazanır.

Mesh (ağ) yapısının model üzerindeki görünüşü Şekil 1.9'da gösterilmiştir.



**Şekil 1.9:** Örnek bir ağ yapısı.

Uygun fiziksel koşullar, boyut, uygun başlangıç ve sınır şartları, uygun ağ yapısı belirlendikten sonra çözüm aşamasına geçilir. Bu aşamada paket program ile çözüm yaptırılacağı gibi uygun kod yazılması ile yine bilgisayar kullanılarak simülasyon programlarını kullanmadan da çözüm yaptırılabilir. Paket programlar ile çözümün yapılması bir kaç dakika içinde tamamlanmaktadır. Çünkü kod yazmaya gerek kalmamaktadır. Paket programların kullanıcıya en büyük katkısı belki de kod yazmaktan kurtarmasıdır. Ama diğer bütün işlemler için sağlam bir bilgi altyapısına ve tecrübeye gerek vardır.

Simülasyondaki en önemli aşamalardan biri de sonuçların doğru bir şekilde yorumlanmasıdır. Sonuçlar programdan renklendirilmiş grafikler halinde alınabileceği gibi metin dosyası formatında da alınabilir. Metin dosyasında alınan sonuçlar Excel ya da benzer veri işleme programları yardımıyla görüntülenebilir, istenilen grafikler oluşturulabilir. İlk olarak sonuçların fiziğe mantıklı çıkıp çıkmadığı kontrol edilmelidir. Tüm veriler elle girildiği, uygun denklemler, başlangıç ve sınır koşulları, uygun ağ yapısı kullanıcı tarafından elle girildiği için programın hata vermeden çözüme ulaşması sonuçların doğru olacağı anlamına gelmez. Başlangıç ya da sınır şartına girilen yanlış değer ya da yanlış fiziksel seçim; örneğin akış laminarken türbülans seçilmesi ya da yetersiz ağ yapısı sonuçları olması gerekenden farklı çıkarabilir. Mümkünse denklemlerin analitik ve/veya nümerik

çözümü elle de yapılmalı programın bulduğu sonuçlar kontrol edilmelidir. Sonuçların elle çözümü ile programın sonuçlarına güvenilebilir ve istenilen her noktadaki sonuçlar ya da dağılım görülebilir. Burada hedef çalışan ve doğruluğu test edilmiş bir model elde etmek ve bu model üzerinde simülasyonlar gerçekleştirerek birçok parametrenin sistem üzerine etkisi incelenebilir. Bu sebeple her ne kadar modelin oluşturulması ve doğruluğunun test edilmesi zahmetli olsa da doğruluğu test edilmiş modeller sayesinde hem zamandan hem de masraftan çok büyük ölçüde tasarruf sağlanır.

### **1.3 Tezin Amacı**

Yapılan bu çalışmanın amacı; Polimer Elektrolit Membranlı Yakıt Hücresi (PEMYH) için bilgisayar destekli model geliştirilmesi ve bu modelin COMSOL programı ile simülasyonunun yapılmasıdır. Bu sayede deneysel sistemlere bağlı kalmadan bilgisayarlı simülasyonlar aracılığı ile PEMYH hakkında daha hızlı, kolay ve anlaşılabilir bilgiler elde edebilmek amaçlanmaktadır.

Bu amaç için literatür incelendiğinde PEMYH'nin bilgisayar destekli simülasyonları hakkında hem iki (He ve diğ, 2000; Guvelioglu ve Stenger, 2005; Yan ve diğ, 2006b; Serincan ve Yeşilyurt, 2007) hem de üç boyutlu (Kumar ve Reddy, 2003; Wang ve diğ, 2008a; Jaruwatant ve Khunatorn, 2011); hem tek (Jeon ve diğ, 2008; Ekiz ve diğ, 2011) hem de çok kanallı (Kumar ve Reddy, 2003; Wang ve diğ, 2010; Shimpalee ve diğ, 2006) çalışmalar olduğu; bu çalışmaların bir kısmında gaz difüzyon tabakası, katalizör tabaka ve membranın ayrı ayrı incelendiği, bazılarında ise üçünün de gözenekli ortam olması sebebiyle membran elektrot grubu olarak üçünün birlikte tek parça kabul edildiği görülmüştür.

Gözenekli ortamdaki akışın incelendiği çalışmalar gözden geçirildiğinde çalışmaların bir kısmında gözenekli ortam aglomerat kabul edilip bir model belirlendiği; bir kısmında ise sabit bir gözeneklilik belirlenerek çalışma yapıldığı görülmüştür.

Gözenekli ortamdaki çalışmalarda diğ bir farklılık ise katalizör tabaka ile ilgilidir. Çalışmaların bir kısmında katalizör tabaka, tıpkı gaz difüzyon tabakası ve membran gibi alan (domain) kabul edilmiş; bir kısmında ise çok ince olduğu gerekçesiyle alan değil sadece sınır şartı (boundary conditions) olarak hesaba katılmıştır.

Bu tez çalışması kapsamında özellikle hücreyi komple ele alan hem akış kanalı hem de gözenekli ortam tasarımlarının hücreye etkisinin incelendiği çalışmalar taranmış; çalışmalarda çelişkilerin ve bilgi eksikliklerinin bulunduğu, sonuçların farklı olduğu görülmüştür (Ekiz ve diğ. 2011; Barakat ve diğ. 2013; Cheng ve diğ. 2007; Perng ve diğ. 2009). Simülasyon yapılan benzer çalışmalarda sonuçların farklı olmasının bilgisayar teknolojisinin gelişiminden dolayı olduğu düşünülmektedir. Çünkü bilgisayar teknolojisi geliştikçe hali hazırda kullanılan modellere eklenebilecek ayrıntılar ve kullanılan nümerik metotların hassasiyetleri de artırılabilir.

Genel kabul görmüş çalışmalar incelenecek olursa;

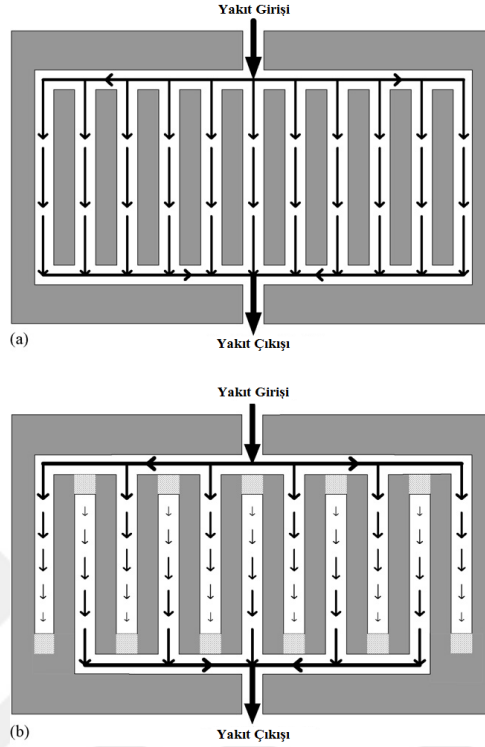
He ve diğ. (2000) PEMYH'nde birbirine geçmiş kanal yapısı kullanarak katot kısmında iki fazlı, iki boyutlu inceleme yapmışlar; gaz ve sıvı haldeki suyun davranışını anlamaya çalışmışlar; basınç farkı, elektrot kalınlığı, kanal sayısının değişimi ve kanal/plaka oranının değişiminin performansa etkilerini incelemiştir. Gaz fazının taşınımının hesabı Darcy kanuna göre yapılmıştır. Gözenekli elektrot boyunca sıvı suyun taşınımı kılcallık kuvveti ve gaz akışkanın kayma kuvveti ile gerçekleştiği ifade edilmiştir. Sonuçlar, birbirine geçmiş kanallarda hücrenin katot kısmından suyu atma işleminin en önemli iki olayının sıvı su taşınımı ve buharlaşma yoluyla olduğunu, giriş ve çıkış kanalları arasındaki yüksek basınç farkının elektrot performansını artırdığını göstermiştir.

Guvelioglu ve Stenger, (2005) kararlı halde, izotermal ve iki boyutlu bir model geliştirilen çalışmalarında kanal genişliği ve plakaların geometrisi, porozite ve hidrojenin nem oranının hücre performansına etkilerini incelemiştir; daha küçük kanal genişliği ve plaka tutucusunun daha yüksek akım gerektirdiğini anlamışlardır. Ayrıca girişteki akışın bağıl neminin katot tarafındaki gazın bağıl neminden daha önemli olduğu anlaşılmıştır.

Yan ve diğ. (2006b) hücrenin gaz akış oranı, katot giriş nemlendirme sıcaklığı, hücre sıcaklığı gibi çeşitli çalışma koşullarının PEMYH'ne etkisinin incelendiği deneysel bir çalışma yapmış; geleneksel ve birbirine geçmiş akış alanlarını ayrı ayrı incelemiştir (Şekil 1.10). Yapılan deneyler sonucunda artan katot giriş gaz akış oranı, katot nemlendirme sıcaklığı ve hücre sıcaklığının hücre performansını iyileştirdiği görülmüştür. Fakat hücre sıcaklığı anot nemlendirme sıcaklığına eşit ya da daha fazla olduğunda hücre performansının hücrenin nemlendirilmesinin azalması



nedeniyle kötüleştiği tespit edilmiştir. Katot girişinde hava kullanıldığı zaman birbirine geçmiş akış kanallarının geleneksel akış kanallarına göre 1,4 kat daha fazla güç ürettiği tespit edilmiştir.



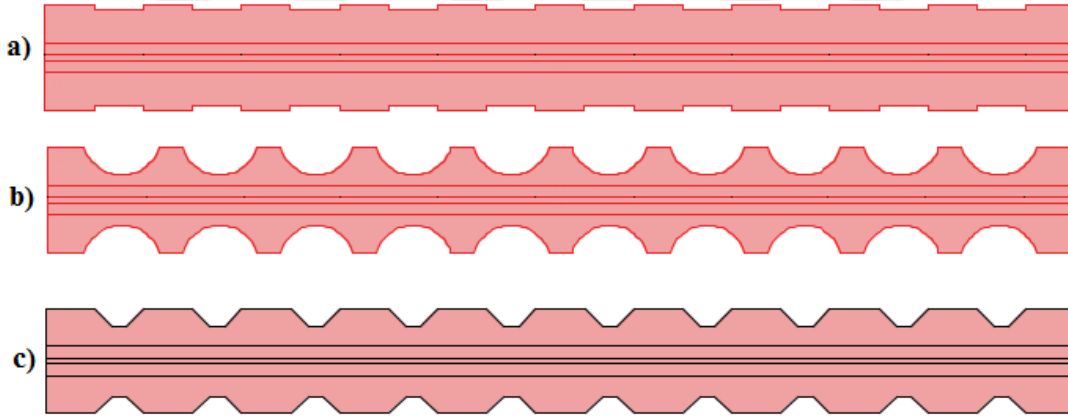
**Şekil 1.10:** Akış kanalları a: Geleneksel b: Birbirine geçmiş (Yan ve diğ, 2006b).

Shimpalee ve Zee (2007) kıvrımlı akış kanallarının kanal ve giriş boyutlarının akışı nasıl etkilediğini incelemişler, nümerik çözüm yapmışlar ve hücre içinde reaksiyona giren gazların konsantrasyon değişimlerini hesaplamaya çalışmışlardır. Ayrıca akış yönünün, hücre performansı ve reaksiyona giren gazların konsantrasyon dağılımlarına etkilerini incelenmişlerdir. Hem sabit kullanım hem de hareketli kullanım yerleri için analiz yapılmaya çalışılmış; daha yüksek performans için hücrenin hareketsiz kullanılacağı uygulamalarda dar kanallı ve kanallar arası mesafenin fazla olmasının daha uygun olduğu, hareketli kullanım alanlarında ise, geniş kanallı ve kanallar arası mesafenin az olmasının daha uygun olduğu belirlenmiştir.

Serincan ve Yeşilyurt (2007) geliştirdikleri iki boyutlu, tek fazlı modelde membran içindeki su transferini ve gözenekli ortamdaki türlerin taşınımını süreksiz hal için incelemişler, membran elektrot grubu içindeki kütle momentum ve yük korunumunun matematiksel modelini oluşturmuşlardır. Sonuçta hücre içindeki taşınımın ve fiziksel olayların en kritik olanının membran içindeki suyun taşınımını

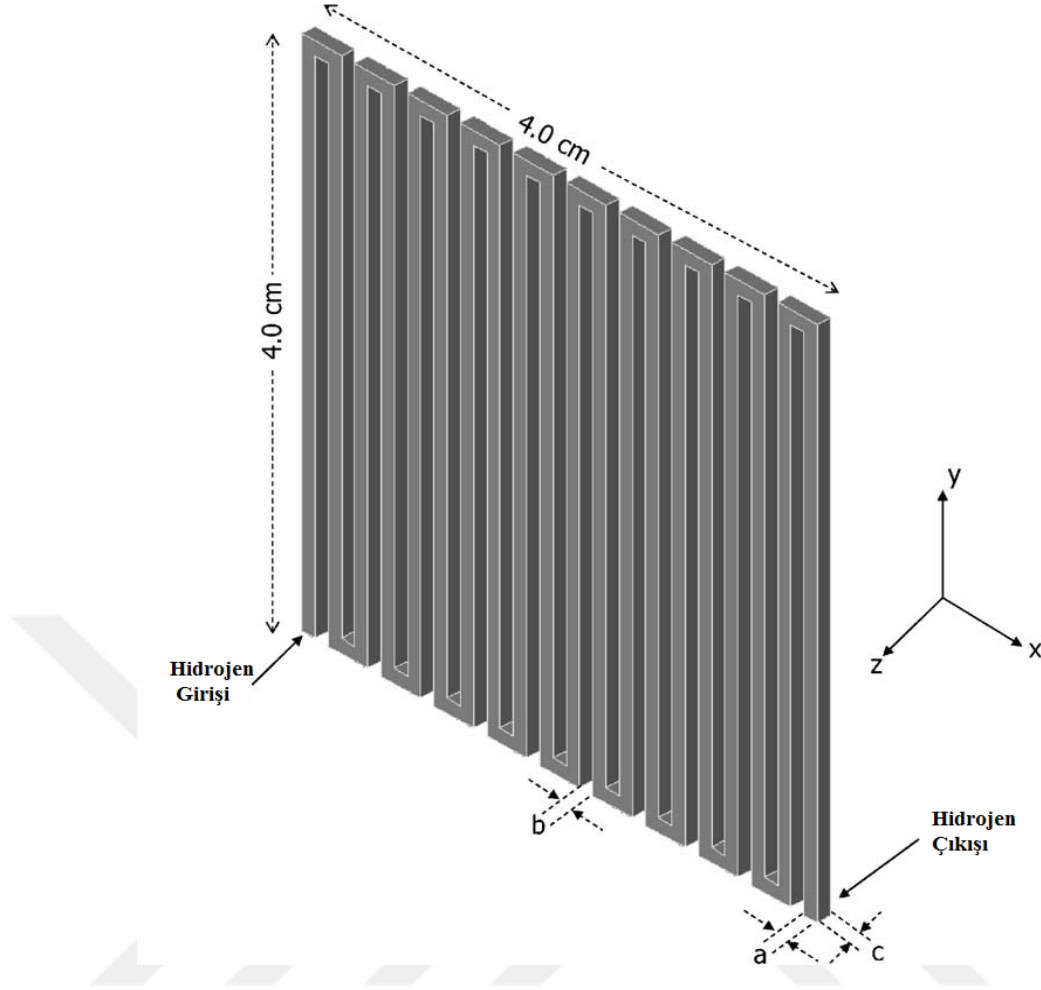
olduğunu tespit etmişlerdir. Oluşturdukları geometri için suyun membran içindeki geçişinin 20 ile 30 saniye arasında olduğunu tespit etmişlerdir.

Ekiz ve diğ. (2011) yakıt miktarının hücre performansına etkisi ile ilgili yaptıkları iki boyutlu bir çalışmada tek hücreli bir polimer elektrolit membranlı yakıt hücresi modellemiş, gözenekli ortamı aglomerat modeline göre hesaplamış, kanalları akışı zorlayacak şekilde tasarlamış ve daha fazla yakıtın reaksiyona girmesini amaçlamışlardır (Şekil 1.11). Fazla yakıtın reaksiyona girmesiyle ideal performans değerlerine yakın akım ve güç yoğunlukları oluşturulmaya çalışılmış ve yakıt hücresinin çalışması esnasında meydana gelen kayıplar minimize edilmeye çalışılmıştır. Çalışmaların neticesinde, yakıt hücresinin performansının; giriş hızının artması, çıkış basıncının artması ve kanal boyunca bulunan engellerin derinliğinin artması ile arttığını görmüşlerdir.



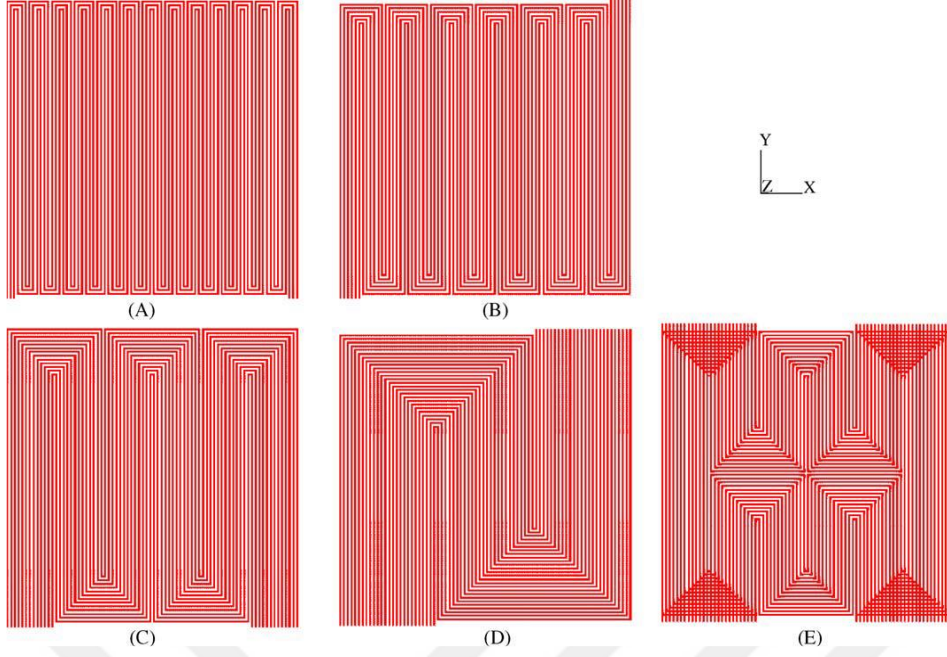
**Şekil 1.11:** Engelli model geometrileri, a: Dikdörtgen b: Dairesel c: İkizkenar yamuk (Ekiz ve diğ, 2011).

Kumar ve Reddy, (2003) PEMYH içindeki çift kutuplu plakaların kanal uzunluklarının akışkan hareketine etkisini inceleyen bir çalışma yapmışlar; tek yollu kıvrımlı bir akışkan akımı tasarımı üzerinde çalışmışlar; tasarımın anottaki hidrojen tüketimine etkisini incelemişlerdir. Kanallar 0,5 den 4 mm'ye kadar farklı kanal genişliği ve derinliği için simüle edilmiş, optimum uzunluklar bulunmuştur. Hidrojen tüketiminin yüksek olduğu durumda (yaklaşık %80) optimum uzunluklar kanal genişliği ve kanal derinliği için 1,5 mm kanallar arası boşluk genişliği için ise 0,5 mm bulunmuştur (Şekil 1.12). Sonuçlar üçgen ve yarı küresel kesit ile anotta hidrojen tüketiminin %9 civarında arttığını dolayısıyla da hücre performansının arttığını göstermiştir.



**Şekil 1.12:** Kumar ve Reddy, (2003) kanal tasarımı a: Kanal genişliği, b: Boşluk genişliği, c: Kanal derinliği.

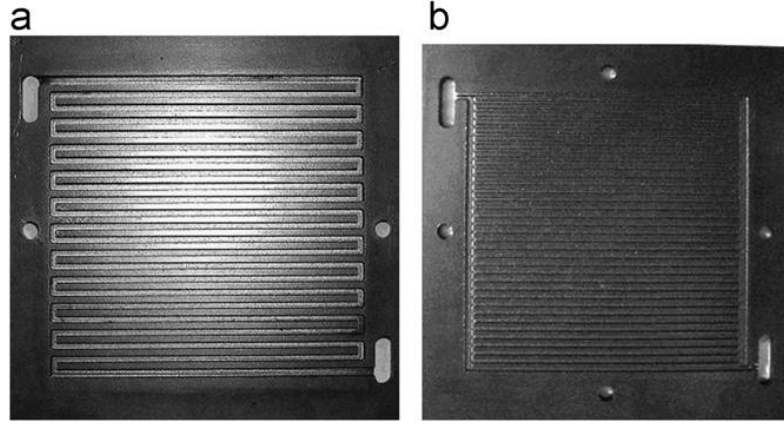
Shimpalee ve diğ. (2006) akış kanalının uzunluğunun hücre performansına etkisini inceledikleri çalışmada  $200 \text{ cm}^2$  akış alanını beş farklı kanal uzunlukları ve farklı tasarımlar ile denemişlerdir (Şekil 1.13). Bulunan sonuçlar yerel sıcaklık, su içeriği ve akım yoğunluğu dağılımının kıvrımlı akış alanı ve daha kısa akış kanal uzunlukları ile daha üniform hale geldiğini göstermiştir.



**Şekil 1.13:** Akış kanalı modelleri: (A) Kıvrımlı 3 kanallı (B) 6 kanallı (C) 13 kanallı (D) 26 kanallı (E) 26 kanallı karmaşık (Shimpalee ve diğ, 2006).

Yan ve diğ. (2006c) yaptıkları deneysel çalışmada PEMYH için en iyi çalışma koşullarını sağlayacak akış alanı tasarlamaya çalışmışlardır. Hücrenin akış kanallarının sayısını ve uzunluğunu; kanallardaki köşe ve engel sayısının hücre performansına etkisini incelemişlerdir. Deneysel sonuçlar katot akış kanallarında birbirine geçmiş kanalların hücre performansını artırdığını göstermiştir. Dahası birbirine geçmiş akış kanallarının konveksiyonel akış kanallarına göre daha az yakıt tüketimi ile aynı performansı yakaladıkları görülmüştür.

Ferng ve Su (2007) farklı akış kanallarının PEMYH performansına etkisini incelemek için üç boyutlu bir model geliştirmiş; paralel ve kıvrımlı akış kanalları, tek ve çoklu yola sahip kanallar ve tek düze ve farklı genişliklerle simülasyon sonuçlarını elde etmişlerdir (Şekil 1.14). Üniversitelerinin yakıt hücresi merkezinde tasarladıkları modellerin üretimlerini ve deneylerini de yapmış ve buldukları sonuçlarla karşılaştırmışlardır. Deneysel sonuçlarla doğrulanan simülasyon sonuçları, aşamalı derinliğe sahip paralel akış kanallarının hücre performansını ciddi şekilde artırdığını göstermiştir. Fakat kıvrımlı akış kanallarına sahip kanalların derinliğe karşı duyarsız olduğu, aynı sayıda ve kıvrımdaki kanallarda yapılan simülasyonlarda hücre performansının derinliğe göre değişmediği gözlenmiştir.



**Şekil 1.14:** Çalışmada kullanılan akış kanalları a) Kıvrımlı b) Paralel (Ferng ve Su, 2007).

Jeon ve diğ. (2008) tek kanal, çift kanal, halkalı tek kanal ve simetrik tek kanal olmak üzere dört farklı kıvrımlı akış kanalı tasarlamış ve bu kanalların hücre performansına etkisini anlamak için simülasyon yapmışlardır. Ayrıca modeller kanal girişinde yüksek ve düşük nem oranına göre ayrı ayrı incelenmiş, akım yoğunluğu, fazla potansiyel ve membranın su içeriği farklı voltajlarda hesaplanmıştır. Girişte yüksek nem oranında çift akış kanalı tasarımının en iyi performansı sergilediği görülmüştür (diğer kanal tasarımlarından %2-3 arası daha fazla). Fakat düşük nem oranında farklı kanal tasarımlarında hücre performansının çok az değiştiği tespit edilmiştir.

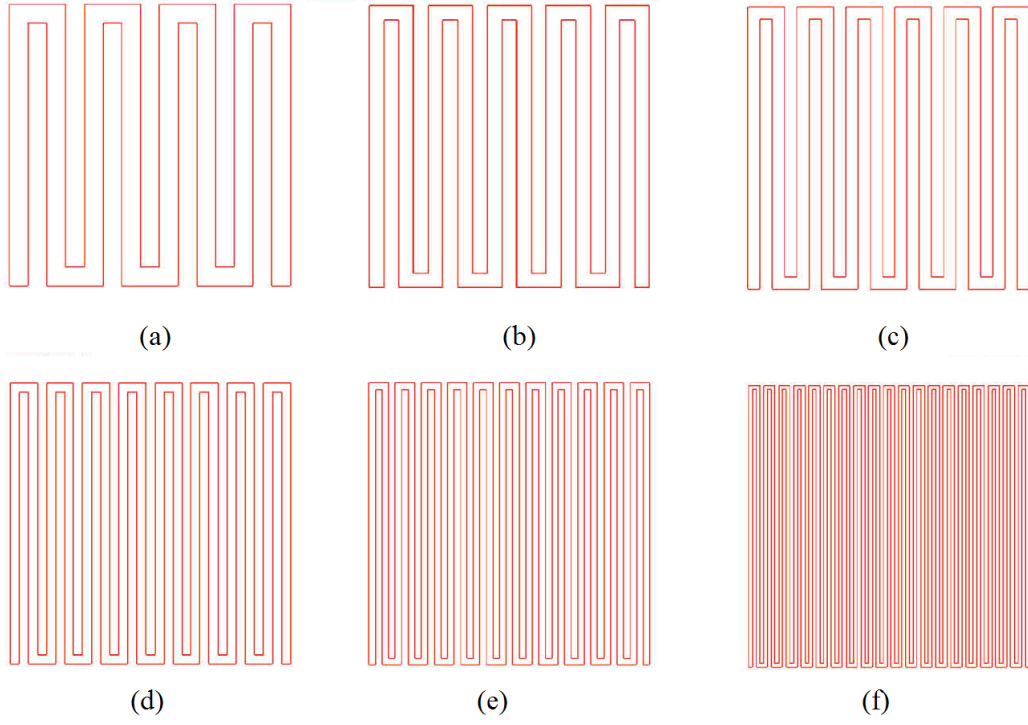
Wang ve diğ. (2008a) katot tarafındaki akışı anlayabilmek için yaptıkları bir çalışmada üç boyutlu bir model geliştirmiş, taşınımı kıvrımlı ve birbirine geçmiş iki farklı tasarımla incelemiş, birbirine geçmiş akış kanallarına sahip plakanın daha iyi performansa sahip olduğunu görmüşlerdir. Kanallar farklı en/boy oranına göre ve farklı kesit alanları için denenmiş, yakıt hücresinin en iyi performansına kanal en/boy oranı 1 olduğu ve kesit alanının da  $1\text{mm} \times 1\text{mm}$  olduğu durumda ulaştığı görülmüştür. Yine aynı çalışmada farklı voltajlar için denemeler yapılmış ve çalışma voltajının akışa etkisi incelenmiştir. 0.7V ve üzeri voltajda elektrokimyasal reaksiyon oranının ve oksijen tüketiminin düşük olduğu ve sıvı su üretiminin az olduğu tespit edilmiş, bu yüzden de akışa etkisinin çok az olduğu gözlenmiştir. 0.7V altındaki çalışma voltajlarında ise elektrokimyasal reaksiyon oranının ciddi bir şekilde artış gösterdiği, buna bağlı olarak da oksijen tüketimi ve sıvı su üretiminin arttığı gözlenmiştir.

Bulunan sonuçlar çalıştırma performansının akış performansını nasıl etkilediğini göstermiştir.

Wang ve diğ. (2008b) reaktanların bağıl nem oranının ve akış kanalı tasarımının hücre performansına etkisini inceledikleri bir çalışmada, kıvrımlı ve birbirine geçmiş akış alanı tasarımlarının üç boyutlu analizini yaparak reaktan taşınımındaki sıvı su oluşumunu incelemişlerdir. Sonuçlar bağıl nemin ve akış kanalı tasarımının hücre performansında önemli ölçüde etkili olduğunu göstermiştir. Aynı çalışma şartlarında ve aynı bağıl neme sahip reaktanlar farklı akış kanalı tasarımlarında denenmiş ve birbirine geçmiş kanal tasarımlarının kıvrımlı kanal tasarımından daha iyi performansa sahip olduğu görülmüştür. Anot tarafında sabit %100 bağıl nem, daha düşük çalışma voltajı ve katot kısmında daha düşük bağıl nemin katotta oluşan su fazlalığını azalttığı ve hücre performansını artırdığı tespit edilmiştir. Katot tarafında sabit %100 bağıl nem ile daha düşük çalışma voltajı ve anot kısmında daha düşük bağıl nemin hem katalizör tabakaya daha fazla hidrojen sağladığı hem de anot ve katot arasındaki su konsantrasyonunu artırdığı görülmüştür. Böylelikle katot tarafındaki su fazlalığı azalmış ve hücre performansı artmıştır. Fakat daha yüksek çalışma voltajlarında anot tarafında, hücre performansının bağıl neme bağlı olmadığı görülmüştür.

Wang ve diğ. (2010) kıvrımlı akış kanallarına sahip bir PEMYH'nin simülasyonunu yapmış; PEMYH içindeki yerel basınç yoğunlukları, oksijenin kütleli debisi ve sıvı su konsantrasyonunu analiz edip; kanal boyutlarının hücre performansına etkisini incelemişlerdir (Şekil 1.15). Yaptıkları çalışma neticesinde, kanal boyutlarının küçüldüğünde hücre performansının arttığı görülmüş; uyguladıkları çalışma koşulları için en uygun tasarımın  $0,535 \times 0,535 \text{ mm}^2$  olduğunu belirlemişlerdir.

Wang ve diğ. (2010) çalışmasında tercih edilen akış kanalları Şekil 1.15'te gösterilmiştir.



**Şekil 1.15:** Modellenen kanal tasarımları: a) 8 kanal b) 10 kanal c) 12 kanal d) 16 kanal e) 22 kanal f) 38 kanal (Wang ve diğ, 2010).

Jaruwasupant ve Khunatorn (2011) geliştirdikleri üç boyutlu model ile hız dağılımını ve basınç düşüşünü tahmin etmeye, kanal uzunluğunun, genişliğinin ve kanalın kavisinin etkisini anlamaya çalışmışlar. Geliştirdikleri tasarımın daha iyi performansa sahip olduğunu gözlemlemişler; pürüzsüz ve keskin eğimli kanallar için optimum güç yoğunluğunu belirlemişlerdir.

Yapılan çalışmaların büyük kısmında çalışmacılar kendi geliştirdikleri matematiksel denklemleri kullanarak çözüm yapmışlardır. Bunun sebebi 2010'lu yıllara kadar bilgisayar sistemlerinin pahalı ve hızlarının düşük olması, simülasyon programlarının ihtiyacı olan altyapıda olmaması olduğu düşünülmektedir.





## **2. MATERYAL VE METOT**

### **2.1 PEMYH'nin Modellenmesinin ve Simülasyonunun Amacı**

Polimer elektrolit membranlı yakıt hücresinin modellenmesindeki amaç; doğruluğu, deneysel olarak kanıtlanmış; geometrik özelliklerin değiştirilebileceği ve yeni hesaplamaların yapılabileceği sanal bir deney ortamı oluşturmaktır. Simülasyondaki fiziksel ve matematiksel altyapının doğruluğu kanıtlandıktan sonra deney yapılmasına ihtiyaç kalmadan modelin üzerinde yapılacak değişikliklere tepkisi görülebilecektir.

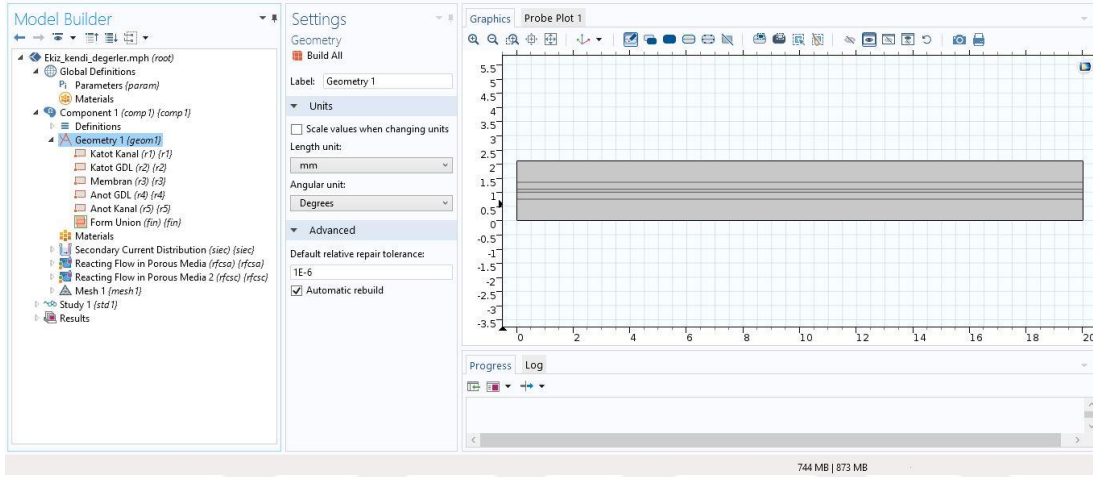
### **2.2 Yöntem**

Modelleme, sayısal çözüm ve simülasyon için COMSOL Multiphysics (v5.1) kullanılmıştır. COMSOL Multiphysics programı sayısal çözüm için sonlu elemanlar yöntemini kullanmaktadır. Sonlu elemanlar yöntemi bölüm 1.2.1'de ifade edildiği gibi nesnelere sonlu miktarda noktaya (eleman) bölerek (meshing – ağ yapısı oluşturma) hesaplamasını yapan nümerik bir çözüm yöntemidir.

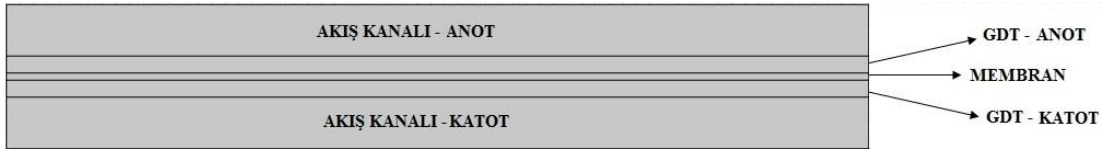
Bu çalışmada PEMYH ile ilgili ilk olarak daha önce yapılan çalışmalar arasından modelleme ve simülasyonu ya da laboratuvar ortamında deneyi yapılan polimer elektrolit membranlı yakıt hücrelerine ait çalışmalar incelendi. Öncelikle COMSOL arayüzünde modelin geometrisi oluşturuldu. Daha sonra COMSOL arayüzlerindeki denklemler ve literatürde geliştirilmiş olan denklemler karşılaştırıldı ve uygun arayüzler seçildi. Ardından fiziksel ve kimyasal akışı belirlenen modelin simülasyonu yapıldı. Yapılan simülasyon neticesinde elde edilen bulgular literatürdeki çalışmalar ile karşılaştırıldı ve validasyon sağlandı. Validasyonun sağlanması ile çalışmanın doğruluğu kanıtlanmış oldu.

## 2.3 Modelin Geometrisi

Modelin geometrisinin çizimi COMSOL Multiphysics programı kullanılarak yapılmıştır (Şekil 2.1). Model anot ve katot tarafında birer akış kanalı ve membran elektrot grubundan (gaz difüzyon tabakası (GDT), katalizör tabaka ve membran) oluşmaktadır (Şekil 2.2). Çizilen bu iki boyutlu model için modelleme koşulları belirlenmiş ve simülasyonla çözüm elde edilmiştir.



Şekil 2.1: Modelin COMSOL Multiphysics programında çizimi.



Şekil 2.2: Simülasyonu yapılan model.

PEMYH'ni oluşturulan bileşenlerin (akış kanalı, gaz difüzyon tabakası, membran) geometrik büyüklükleri Çizelge 2.1'de verilmiştir.

**Çizelge 2.1 : Modelin geometrik büyüklükleri**

Boyutlar	Değer
<b>Kanalın;</b>	
Yüksekliği	0,75 mm
Genişliği	20 mm
<b>Gaz Difüzyon Tabakasının;</b>	
Yüksekliği	0,25 mm
Genişliği	20 mm
<b>Membranın;</b>	
Yüksekliği	0,1 mm
Genişliği	20 mm

#### **2.4 Modeldeki Proseslerin Fiziksel ve Matematiksel Tanımları**

PEM yakıt hücresi içinde meydana gelen fiziksel olaylar kütle, momentum, enerji ve elektrik yükü korunumu denklemleri ile ifade edilir.

Polimer elektrolit membranlı yakıt hücresi içinde meydana gelen prosesler; anot akış kanalı içinde hidrojen gazının serbest akışı (free flow), anot kısmındaki gözenekli ortamdaki (gaz difüzyon ve katalizör tabakaları) hidrojen iyonlarının hareketleri (porous media flow), membrandan katot kısma geçen hidrojen iyonlarının ve membrandan geçemeyip elektriksel iletkenlik ile devreyi tamamlayarak elektrik enerjisine dönüşen  $e^-$  iyonlarının hareketi (charge transfer), katot kısmındaki akış kanalı içindeki oksijenin (ya da havanın) serbest akışı, katot kısmındaki gözenekli ortamda suyun ve oksijenin (ya da havanın) hareketidir. Tüm bu prosesler sonunda kimyasal enerji elektrik enerjisine dönüşmüş olur.

Tüm bu fiziksel ve kimyasal proseslere uygun olacağını düşündüğümüz COMSOL Multiphysics programının akışları modelleyebilmek ve hız, basınç ve konsantrasyon değişimlerini elde edebilmek için “Reacting Flow in Porous Media” arayüzü ve akım yoğunluğu dağılımı ve bu yoğunluğun potansiyel fark ile değişimini elde edebilmek için “Secondary Current Distribution” arayüzündeki denklemler hesaplamalarımızda kullanılmıştır.

Reacting Flow in Porous Media arayüzü, hidrojenin, oksijenin ve suyun hem kanallardaki serbest akışı hem de gözenekli ortamın boşlukları boyunca devam eden akışının kimyasal reaksiyonlar da hesaba katılarak simülasyonunun yapılması için

kullanılır. Gerçekleşen bu kimyasal proses boyunca değişen konsantrasyon, hız ve basınç dağılımı Navier Stokes ve Brinkman denklemleri yardımıyla bu arayüz kullanılarak hesaplanabilir (COMSOL v5.1, 2015).

Secondary Current Distribution arayüzü ise elektrot potansiyeli ile elektrolit potansiyeli arasında fark olduğu durumlarda (fazla potansiyel) Ohm yasasından faydalanarak elektrokimyasal hücrelerdeki ohmik kayıpları tahmin etmek için kullanılır. Yük transferi ve fazla potansiyel arasındaki ilişki Butler-Volmer ve Tafel denklemleri gibi denklemler yardımıyla anlaşılabilir (COMSOL v5.1, 2015).

Arayüzlerin belirlenmesinden sonra oluşturulması düşünülen model için başlangıç şartları, sınır şartları, fiziksel hesaplamalarda kullanılacak büyüklükler ve sabitlerden oluşan tüm parametreler belirlenir ve COMSOL Multiphysics arayüzüne girilir (Şekil 2.3).

İsmlendirme	İfade	Acıklama
x_O2_in	$(w_{O2\_in}/M_{O2})/(w_{O2\_in}/M_{O2}+w_{H2O\_c\_in}/M_{H2O}+(1-w_{O2\_in}-w_{H2O\_c\_in})/M_{N2})$	Katod Girişindeki Oksijen Mol Oranı
x_H2_in	$(w_{H2\_in}/M_{H2})/(w_{H2\_in}/M_{H2}+(1-w_{H2\_in})/M_{H2O})$	Anot Girişindeki Hidrojen Mol Oranı
w_O2_in	0.21*0.8	Katod Girişindeki oksijen Agirlik Oranı
w_H2O_c_in	0.2	Katod Girişindeki Su Agirlik Oranı
w_H2_in	0.1	Anot Girişindeki Hidrojen Agirlik Oranı
V_in_c	0.4[m/s]	Havanın Kanallara Giriş Hızı
V_in_a	0.2[m/s]	Hidrojenin Kanallara Giriş Hızı
V_cell	0.6[V]	Hücre Voltajı
Tort	353[K]	Sıcaklık
S	1e7[1/m]	Elektrotların özgül yüzey alanı
rho_mix_c	0.7[kg/m^3]	Katod Yoğunluğu
rho_mix_a	0.8[kg/m^3]	Anot Yoğunluğu
R	8.314[J/(mol*K)]	İdeal Gaz Sabiti
p_ref	1[atm]	Referans Basıncı
p_out_c	1[atm]	Çıkış Basıncı Katod
p_out_a	1[atm]	Çıkış Basıncı Anot
p_c_in	1.00001*p_ref	Katod Giriş Basıncı
p_a_in	1.00001*p_ref	Anot Giriş Basıncı
M_O2	32[g/mol]	Oksijenin mol Kutlesi
M_N2	28[g/mol]	Azotun mol Kutlesi
M_H2O	18[g/mol]	Suyun Mol Kutlesi
M_H2	2[g/mol]	Hidrojenin mol Kutlesi
l_act	10[um]	Katalizör Katmanı Kalınlığı
kappa_s	1000[S/m]	Elektrotların elektronik iletkenliği
kappa_p	1e-13[m^2]	Elektrot Geçirgenliği
kappa_l	9[S/m]	Membran iletkenliği
K_O2	3.2e4[Pa*m^3/mol]	Oksijen için Konsantrasyon Sabiti
K_H2	3.9e4[Pa*m^3/mol]	Hidrojen için Konsantrasyon Sabiti
i0_c	1[A/m^2]	Katod Kısmi Değişim Akım Yoğunluğu
i0_a	1e5[A/m^2]	Anot Kısmi Değişim Akım Yoğunluğu
F	96485[C/mol]	Faraday Sabiti
Eta	2.1e-5[Pa*s]	Elektrot Gözeneklerindeki Gaz Viskozitesi
Epsilon	0.4	Elektrotların kuru
eps_mic	0.2	Mikroskobik Gözeneklilik
eps_mac	0.4	Makroskobik Gözeneklilik
E_eq_c	1[V]	Katod Denge Potansiyeli
E_eq_a	0[V]	Anot Denge Potansiyeli
drag	1	Su sürüklenme katsayısı
D_eff_O2_N2	$0.22e-4[m^2/s]*(Tort/293.2[K])^{1.5}*(eps\_mac)^{1.5}$	O2-N2 efektif ikili yayılım
D_eff_O2_H2O	$0.282e-4[m^2/s]/(Tort/308.1[K])^{1.5}*(eps\_mac)^{1.5}$	O2-H2O efektif ikili yayılım
D_eff_H2O_N2	$0.256e-4[m^2/s]*(Tort/307.5[K])^{1.5}*(eps\_mac)^{1.5}$	H2O-N2 efektif ikili yayılım
D_eff_H2_H2O	$0.915e-4[m^2/s]*(Tort/307.1[K])^{1.5}*(eps\_mac)^{1.5}$	H2-H2O efektif ikili yayılım
c_O2_ref	$x_{O2\_in}*p\_ref/K_{O2}$	Katalizör Katmanındaki Referans Oksijen Konsantrasyonu
c_H2_ref	$x_{H2\_in}*p\_ref/K_{H2}$	Katalizör Katmanındaki Referans Hidrojen Konsantrasyonu

Şekil 2.3: Modele ait parametreler.

Denklemler için gerekli sabitler ve fiziksel büyüklükler Ekiz ve diğ (2011); Guvelioglu ve Stenger (2005)'den alınmıştır. Elektrokimyasal reaksiyonlar ve fiziksel hesaplamalar için gerekli sabitler ve büyüklükler Çizelge 2.2'de verilmiştir.

**Çizelge 2.2 : Kullanılan Sabitler ve Fiziksel Büyüklükler**

Parametre	Sembol	Değer
Atmosfer Basıncı	$p_0$	1 atm
İdeal Gaz Sabiti	R	8,314 J/mol.K
Faraday Sabiti	F	96487 C/mol
Sıcaklık	T	353 K
Hidrojenin Mol Kütlesi	M	2 g/mol
Oksijenin Mol Kütlesi	M	32 g/mol
Suyun Mol Kütlesi	M	18 g/mol
Azotun Mol Kütlesi	M	28 g/mol
Katot Kısmı Gaz Yoğunluğu	$\rho$	0,7 kg/m <sup>3</sup>
Anot Kısmı Gaz Yoğunluğu	$\rho$	0,8 kg/m <sup>3</sup>
Gaz Vizkozitesi	$\mu$	2,1×10 <sup>-5</sup> Pa.s
<b>Gaz Difüzyon Tabakasının;</b>		
Porozitesi	$\epsilon$	10 <sup>-13</sup> m <sup>2</sup>
İletkenliği	$\sigma$	1000 S/m
<b>Katalizör Tabakanın;</b>		
Porozitesi	$\epsilon$	10 <sup>-13</sup> m <sup>2</sup>
İletkenliği	$\sigma$	1000 S/m
<b>Membranın;</b>		
İletkenliği	$\sigma$	9 S/m
Anodik Transfer Katsayısı	$\alpha_a$	0,5
Anodik Transfer Katsayısı	$\alpha_c$	0,5

Model için kabul edilen varsayımlar;

- Hücre iki boyutlu modellenmiştir.
- Çalışma zamandan bağımsız (stationary) şekilde modellenmiştir.
- Yakıt olarak hidrojen, oksitleyici olarak hava kullanılmıştır.
- Akışkanlar ideal gaz kabul edilmiştir.
- Sıcaklık hücre boyunca sabit kabul edilmiştir (353K).
- Sıkıştırılmaz akış kabulü yapılmıştır.

#### 2.4.1 Akışkan hareketi için kullanılan denklemler

Kanallardaki akışın modellenmesi için Navier Stokes, gözenekli ortamdaki akışın modellenmesi içinse Brinkman denklemleri kullanılmıştır.

Kartezyen koordinatlardaki sıkıştırılmaz daimi akış kabulleri için Navier Stokes (Süreklilik ve Momentum) denklemleri (2.1), (2.2) ve (2.3) 'te, Brinkman denklemleri ise (2.4) ve (2.5)'da verilmiştir.

Navier Stokes denklemleri kütle korunumu (süreklilik denklemi) ve momentumun korunumu denklemlerinden oluşur.

Fiziksel ve kimyasal tüm proseslerde kütle korunur. Kütle korunumu, prensibi gereğince sıkıştırılmaz akış için süreklilik denkleminin zamandan bağımsız hali (2.1)'deki gibi ifade edilebilir;

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (2.1)$$

$u$ : Akışkanın x yönündeki hızı (m/s)

$v$ : Akışkanın y yönündeki hızı (m/s)

Kütle korunumu ilkesine dayanarak yazılan (2.1) numaralı süreklilik denklemi yakıt hücresi içindeki akışkan hareketi, difüzyon, faz değişikliği ve elektrokimyasal reaksiyon gibi tüm prosesler için yazılabilir.

Sisteme dışardan herhangi bir kuvvet uygulanmadığında sistem içindeki momentumun değişmez. Zamandan bağımsız, sıkıştırılmaz akış için kartezyen koordinatlardaki momentumun korunumu denklemleri (2.2) ve (2.3)'deki gibi ifade edilebilir.

$$\text{x yönü; } u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + g_x + \nu \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad (2.2)$$

$$\text{y yönü; } u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} + g_y + \nu \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) \quad (2.3)$$

$u$ : Akışkanın x yönündeki hızı (m/s)

$v$ : Akışkanın y yönündeki hızı (m/s)

$\rho$ : Akışkanın yoğunluğu (kg/m<sup>3</sup>)

$P$ : Akışkanın basıncı (Pa)

$\nu$ : Akışkanın kinematik viskozitesi ( $m^2/s$ )

$g$ : Yer çekimi ivmesi ( $m/s^2$ )

Gözenekli ortamdaki (gaz difüzyon tabakası ve membran) akışın matematiksel modellemesinde ise Brinkman denklemleri (2.4) ve (2.5) kullanılmıştır. Brinkman denklemleri Darcy denkleminde ihmal edilen viskoz etkileri de göz önüne alarak geliştirilmiştir;

$$\rho \nabla u = Q_{br} \quad (2.4)$$

$$\frac{\rho}{\varepsilon_p} \left( (u \nabla) \frac{u}{\varepsilon_p} \right) = -\nabla p + \nabla \left[ \frac{1}{\varepsilon_p} \left\{ \mu (\nabla u + (\nabla u)^T) - \frac{2}{3} \mu (\nabla u) I \right\} \right] - \left( \kappa^{-1} \mu + \frac{Q_{br}}{\varepsilon_p^2} \right) u + F \quad (2.5)$$

$\rho$  : Yoğunluk ( $kg/m^3$ )

$u$  : Hız ( $m/s$ )

$Q_{br}$  : Kaynak Terimi ( $kg/m^3.s$ )

$\varepsilon_p$  : Porozite

$p$  : Basınç (Pa)

$\kappa$  : Geçirgenlik ( $m^2$ )

$\mu$  : Dinamik Viskozite ( $kg/m.s$ )

$F$  : Normal Kuvvet ( $kg/m^2.s^2$ )

#### 2.4.2 Kütle transferi için kullanılan denklemler

Hücre içindeki kütle transferi taşınım ve difüzyon ile gerçekleşmektedir. Kütle transferi hesabı için kullanılan denklemler (2.6) ve (2.7)'de verilmiştir.

$$\nabla(\rho \omega_i u) + \nabla j_i = R_i \quad (2.6)$$

$\rho$ : Yoğunluk ( $kg/m^3$ )

$\omega_i$ : Kütle Kesri (1)

$u$ : Hız ( $m/s$ )

$j_i$ : Kütlenin ortalama hızından kaynaklanan ısı akısı ( $kg/(m^2.s)$ )

$R_i$ : Tüketim veya üretimi tanımlayan oran ifadesi ( $kg/(m^3.s)$ ).

Çok bileşenli karışımlar için kütle transferi modellenmesi Maxwell – Stefan denklemi (2.7) ile yapılmaktadır.

$$j_i = -\rho\omega_i \sum_{k=1}^Q \tilde{D}_{ik} d_k - D_i^T \nabla \ln T \quad (2.7)$$

$j_i$ : Kütlenin ortalama hızından kaynaklanan ısı akısı (kg/(m<sup>2</sup>.s))

$\rho$ : Yoğunluk (kg/m<sup>3</sup>),

$\omega_i$ : Kütle kesri (1),

$\tilde{D}_{ik}$ : Fick yayını (m<sup>2</sup>/s),

$d_k$ : Yayınım itici gücü (2.8) (1/m)

$T$ : Sıcaklık (K),

$D_i^T$ : Isıl yayınım katsayısı (kg/m.s).

$$d_k = \nabla x_k + \frac{1}{p} [(x_k - \omega_k) \nabla p - \rho \omega_k g_k + \omega_k \sum_{l=1}^Q \rho \omega_l g_l] \quad (2.8)$$

$x_k$ : Mol kesri (2.9),

$$x_k = \frac{\omega_k}{M_k} M \quad (2.9)$$

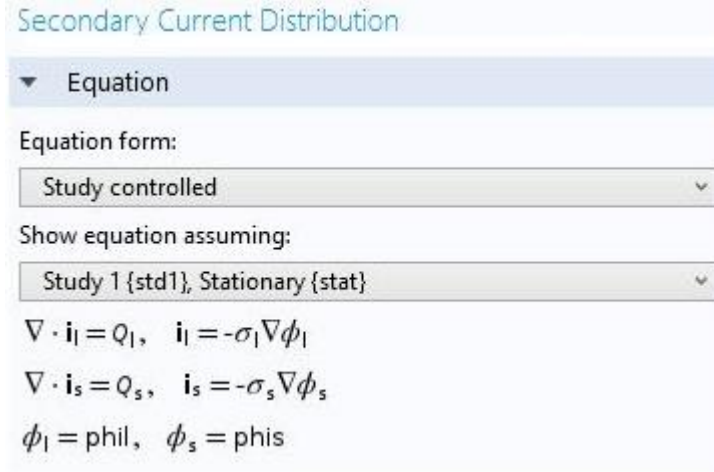
$M$ : Ortalama molar kütle (2.10) (kg/mol),

$$M = \left( \sum_{i=1}^Q \frac{\omega_i}{M_i} \right)^{-1} \quad (2.10)$$

### 2.4.3 Akım yoğunluğu için kullanılan denklemler

Programlar arayüzde seçilip başlangıç ve sınır şartları girildikçe denklemler ortaya çıkmakta, denklemler üzerinde değişiklik yapabilmek mümkün olmaktadır. Denklemlerin COMSOL Multiphysics programında görünüşü Şekil 2.4'te gösterilmiştir.





Şekil 2.4: Denklemlerin COMSOL programında gösterilen hali.

Akım yoğunluğu elektrik devresinde yoğunluğu ifade eder. Akım yoğunluğu elektrolit ve elektrotun iletkenliğine ve potansiyeline bağlı olarak değişmektedir. Hücrenin akım yoğunluğunu hesaplamak için kullanılan denklemler (2.11), (2.12) ve (2.13)'te verilmiştir;

$$\nabla i_l = Q_l, \quad i_l = -\sigma_l \nabla \phi_l \quad (2.11)$$

$$\nabla i_s = Q_s, \quad i_s = -\sigma_s \nabla \phi_s \quad (2.12)$$

$\phi_l$ : Elektrolit Potansiyeli (V),

$\phi_s$ : Elektrot Potansiyeli (V),

$\sigma_l$ : Elektrolitin İletkenliği (S/m),

$\sigma_s$ : Elektriksel İletkenlik (S/m),

$Q_l$ : Elektrolit Kaynak Terimi

$Q_s$ : Elektrot Kaynak Terimi

Butler-Volmer denklemi elektrot elektrolit arasındaki akım yoğunluğunu tanımlamak için kullanılmaktadır. Akım yoğunluğu, sıcaklığa ve akımın başlangıçtaki yoğunluğuna bağlı olarak değişmektedir (2.13) (Yan ve diğ, 2006a; Spiegel, 2007; Jang ve diğ, 2006).

▼ Electrode Kinetics

Kinetics expression type:  
Butler-Volmer

Exchange current density:  
 $i_0$   A/m<sup>2</sup>

Anodic transfer coefficient:  
 $\alpha_a$   1

Cathodic transfer coefficient:  
 $\alpha_c$   1

$$i_{loc} = i_0 \left( \exp\left(\frac{\alpha_a F \eta}{RT}\right) - \exp\left(\frac{-\alpha_c F \eta}{RT}\right) \right)$$

Limiting current density

**Şekil 2.5:** Akım yoğunluğu için kullanılan denklemlerin COMSOL programında gösterilen hali.

$$i_{loc} = i_0 \left( \exp\left(\frac{\alpha_a F \eta}{RT}\right) - \exp\left(\frac{-\alpha_c F \eta}{RT}\right) \right) \quad (2.13)$$

$i_{loc}$ : Yerel akım yoğunluğu (A/m<sup>2</sup>),

$i_0$ : Yer değiştirme tepkimesi akım yoğunluğu (A/m<sup>2</sup>),

$\alpha_a$ : Anodik yük transfer katsayısı (1),

$\alpha_c$ : Katodik yük transfer katsayısı (1),

$F$ : Faraday sabiti (96485 Coulomb),

$R$ : İdeal Gaz Sabiti (J/mol.K)

$T$ : Sıcaklık (K).

$\eta$ : Fazla potansiyel (V) (2.14),

$$\eta = \phi_s - \phi_l - E_{eq} \quad (2.14)$$

$\phi_s$ : Elektrot Potansiyeli (V),

$\phi_l$ : Elektrolit Potansiyeli (V),

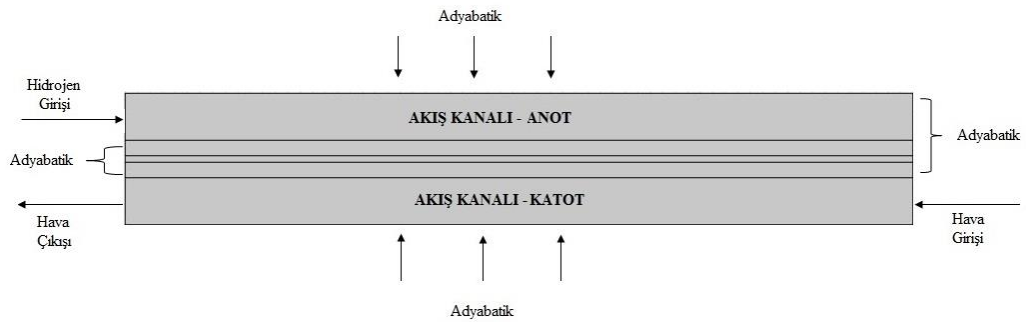
$E_{eq}$ : Denge Potansiyeli (V).

Burada belirtmek gerekir ki bütün bu denklemlerin birbirleri ile olan ilişkilerini çok iyi bir şekilde sınır şartları yardımı ile sağlamak gerekir. Zaten analitik çözümü olmayan bu non-linear denklemlerin numerik çözümlerinde dikkat edilmesi gereken en önemli hususlardan biri denklemler arası bağlantıyı sağlayan değerleri belirleyen sınır şartlarının fiziksel, matematiksel ve kullanılan numerik yöntemine uygun olarak dikkatli bir şekilde seçilmesidir. Bunun için birçok deneme yanılma işlemi yapılabilmektedir.

## 2.5 Başlangıç ve Sınır Şartları

Başlangıç ve sınır şartları diferansiyel denklemlerin probleme uyarlanabilmesi için ilk adımdır. Oluşturulan modelin içindeki akışkan hareketi ve modelin fiziksel hali, belirlenen başlangıç ve sınır şartları ile programa tanıtılır. Başlangıç ve sınır şartlarının yanlış seçilmesi problemi ve modeli değiştirir ve hatalı çözüm yapılmış olur.

Model üzerinde gaz giriş veya çıkışı olmayan kısımlar adyabatik kabul edilmiştir (Şekil 2.6).



**Şekil 2.6:** Gaz giriş çıkışları ve adyabatik kısımlar.

Elektron geçişi her zaman  $-$ 'den  $+$ 'ya olacağı için Butler-Volmer denklemi ile hesaplanan akım yoğunluğu hücrenin anot tarafı için  $(-)$  katot tarafı için  $(+)$  değerde girilmiştir. Model için belirlenen diğer tüm başlangıç ve sınır şartları Çizelge 2.3'te (Ekiz ve diğ, 2011; Guvelioglu ve Stenger, 2005) verilmiştir.

**Çizelge 2.3:** Model için belirlenen başlangıç şartları

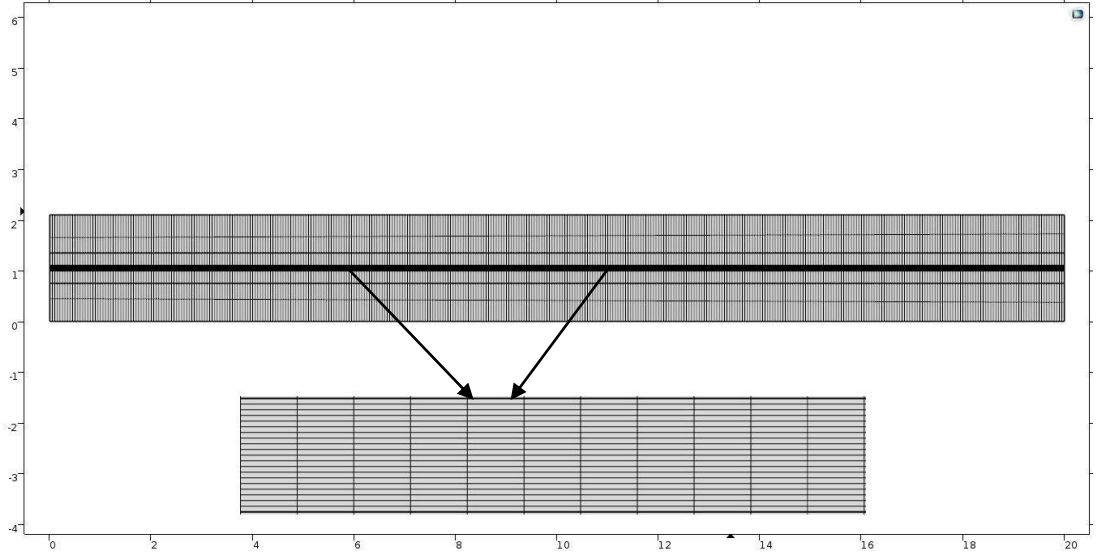
Özellik	Değer
Sıcaklık	353 K
Hidrojen Gazının Giriş Hızı	0,2 m/s
Havanın Giriş Hızı	0,4 m/s
Katot Denge Potansiyeli	1 V
Anot Denge Potansiyeli	0 V

**Çizelge 2.4:** Model için belirlenen sınır şartları

Özellik	Değer
Hücre Voltajı	0,6 V
Hidrojen Gazının Çıkış Basıncı	1 atm
Havanın Çıkış Basıncı	1 atm
Katot Değişim Akım Yoğunluğu Başlangıç Değeri	1 A/m <sup>2</sup>
Anot Değişim Akım Yoğunluğu Başlangıç Değeri	10 <sup>5</sup> A/m <sup>2</sup>

## 2.6 Ağ (Mesh) Yapısı

Modelin geometrisine uygun olarak belirlenen ağ yapısı Şekil 2.6'da verilmiştir. Ağ yapısı belirlerken dikkat edilmesi gereken husus; modelin geometrisi ve çalışması esnasında meydana gelen fiziksel ve kimyasal proseslerdir. Ağ yapısı belirlemede önemli olan ölçütlerden biri de en boy oranıdır. Membranın kalınlığı ve kalınlığa bağlı olarak en boy oranı çok düşük olduğu için membrana akış kanallarına olduğundan daha farklı bir ağ yapısı belirlenmiştir.



**Şekil 2.7:** Modelin ağ yapısı.

Bu çalışmada birçok ağ çeşidi denenmiş olup modelin simülasyonunun hatasız çalışması sağlanmıştır. Model için oluşturulan mesh yapısının hata vermesi nümerik çözümün yetersiz olduğu yada model için yapılan fiziksel tanımlamanın yanlış olduğu anlamına gelmektedir. Bu durumda öncelikle denklemin fiziksel ve kimyasal koşullarına göre seçilen başlangıç ve sınır şartları kontrol edilir sonrasında yeniden ağ oluşturulur.



### 3. SONUÇLAR VE DEĞERLENDİRME

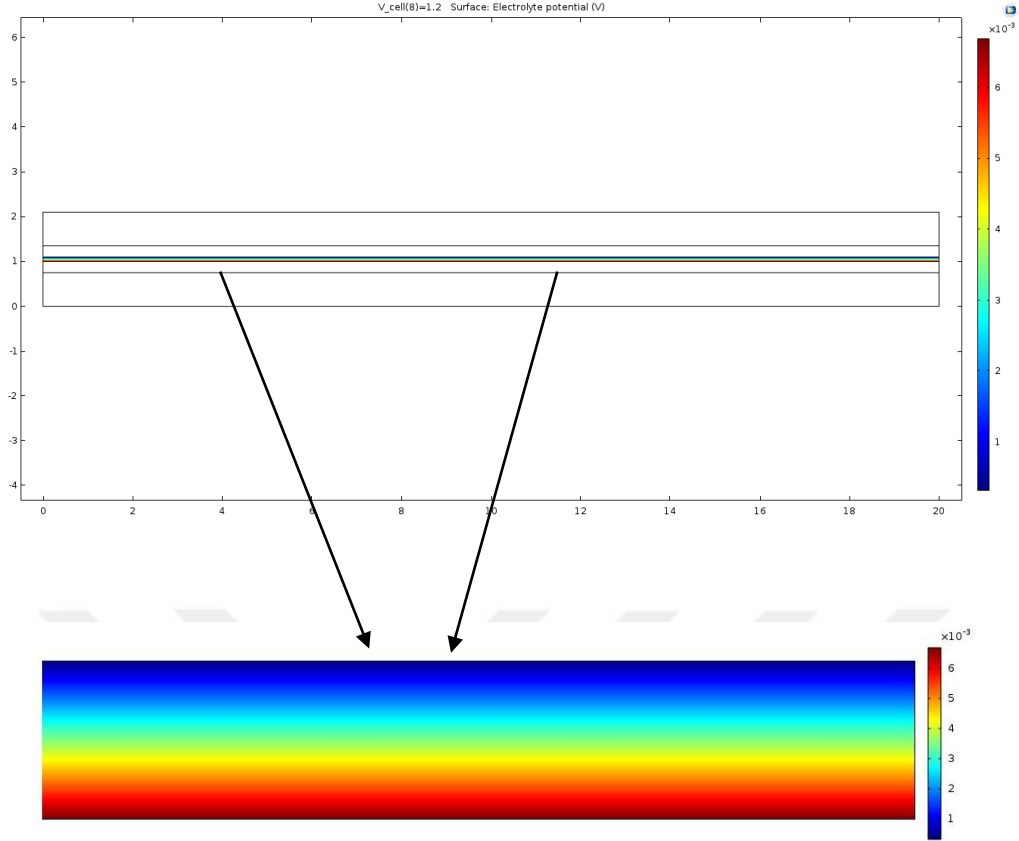
Bu çalışmada verileri literatürden alınan akış kanalı, gaz difüzyon tabakası ve membrandan oluşan bir Polimer Elektrolit Membranlı Yakıt Hücresinin iki boyutlu simülasyonu; COMSOL Multiphysics programı kullanılarak yapılmıştır.

Polimer Elektrolit Membranlı Yakıt Hücresi ile elektrik üretimi boyunca  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $H_2O$ ,  $H^+$  taşınımı konveksiyon ve difüzyon ile sağlanır. Taşınım hem anot hem katot tarafında boş kanallardan başlar, gözenekli ortamdan devam eder. Elektronların taşınması ise elektriksel iletkenlik ile sağlanır. Tüm bu proseslerin matematiksel olarak ifade edilmesi ve nümerik metotlar ile çözülebilmesi çok zordur. Bu yüzden modelleme yapılmakta ve simülasyon programları kullanılmaktadır.

Akış kanallarının giriş sınır şartı için hız, çıkış sınır şartı için ise basınç belirlenmiştir. Gözenekli ortamın geçirgenliği ve gözenekliliği sabit kabul edilmiş, akım yoğunluğu ve potansiyel fark hesabı yapılmıştır. Akışkan giriş çıkışının olmadığı tüm sınırlar duvar ve adyabatik olduğu kabul edilmiştir.

#### 3.1 Elektrolit Potansiyeli

Şekil 3.1 membranda meydana gelen potansiyel farkın dağılımını göstermektedir. Kırmızı renk tonları potansiyel farkın fazla olduğu yerleri, mavi renk tonları ise potansiyel farkın kırmızı tonlara göre daha düşük olduğu yerleri göstermektedir. Membranın katot tarafında (alt) potansiyel fark anot tarafına (üst) göre daha fazladır. Bunun sebebi de anot kısmındaki hidrojenin basıncının çalışma şartlarına oksijenden daha az etki etmesi, yani reaksiyonu esas belirleyen kısmın katot tarafı olmasıdır.



Şekil 3.1: Elektrolit Potansiyeli (V).

### 3.2 Hız Dağılımı

Şekil 3.2 ve Şekil 3.3 hücredeki hız dağılımını göstermektedir. Kırmızı renk tonları hızın mavi renk tonlarına göre daha yüksek olduğu yerleri göstermektedir. Beklendiği gibi gaz difüzyon tabakasında hız çok düşüktür ve kanallarda akış tam gelişmiş hale geldikten sonra dağılımda yatay ekseninde çok büyük değişiklik olmamaktadır. Akışın tam gelişmiş hale geldiği uzunluk laminer akış için (3.1) numaralı denklem ile yaklaşık olarak hesaplanabilir (Kays ve Crawford, 2004; Shah ve Bhatti, 1987; Cengel ve Cimbala, 2015).

$$\frac{L_{h,laminer}}{D} \cong 0,05Re \quad (3.1)$$

$$Re = \frac{\rho VL}{\mu} = \frac{(0,8kg/m^3) \cdot (0,2m/s) \cdot (20 \cdot 10^{-3}mm)}{2,1 \cdot 10^{-5}Pa \cdot s} = 152 \quad (3.2)$$

$$\frac{L_{h,laminer,anot}}{0,75mm} \cong 0,05 * 152$$

$$L_{h,laminer,anot} \cong 5,71mm$$



$L_{h,laminer}$  : Laminer akışa sahip bir borudaki akışın giriş uzunluğu (akışın tam gelişmiş hale geldiği uzunluk)

Re : Reynolds Sayısı (Atalet kuvvetleri/Viskoz Kuvvetler)

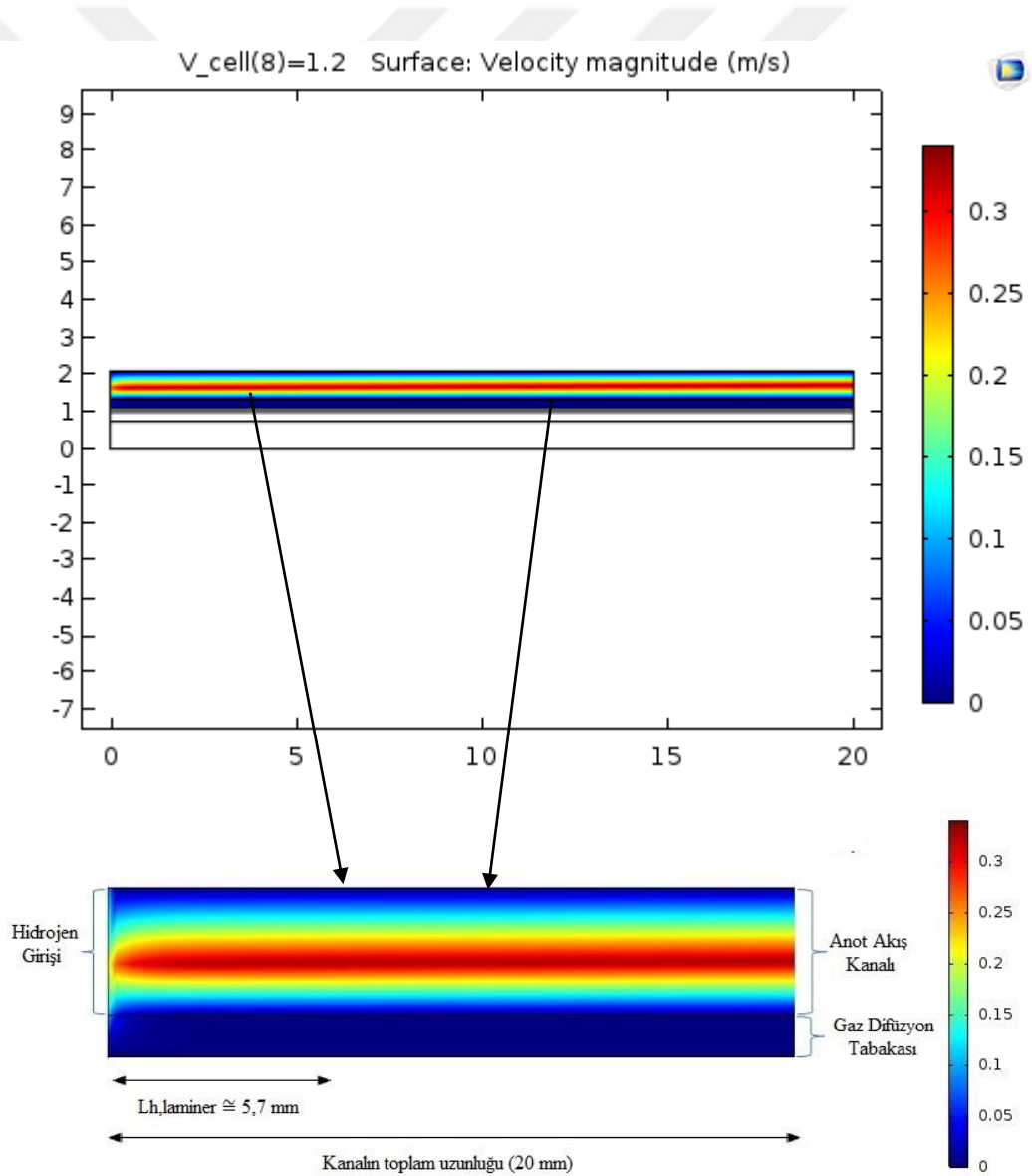
D : Kanal çapı

$\rho$  : Yoğunluk ( $\rho_{hidrojen}=0,8 \text{ kg/m}^3$   $\rho_{hava}=0,7 \text{ kg/m}^3$ )

V : Akışkanın kanala giriş hızı ( $V_{hidrojen} = 0,2 \text{ m/s}$   $V_{hava} = 0,4 \text{ m/s}$ )

L : Kanalın uzunluğu (20 mm)

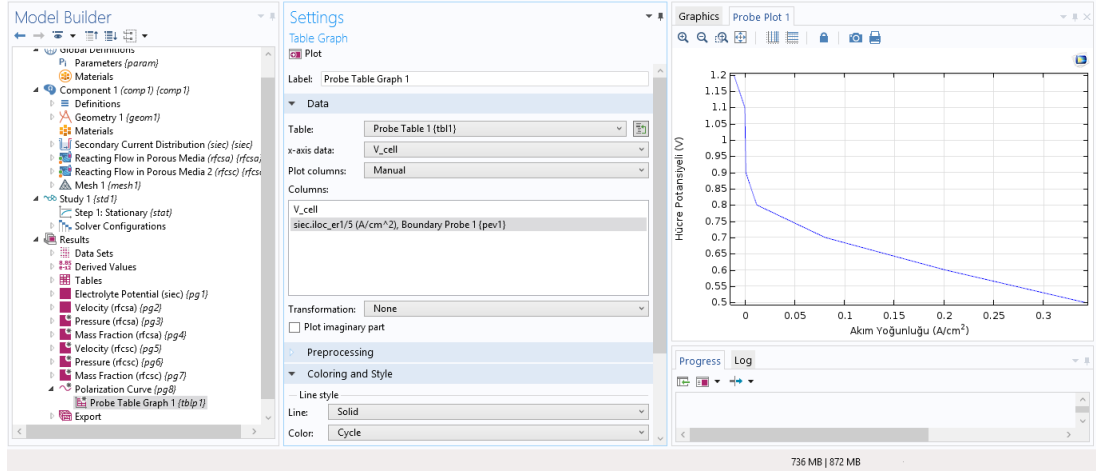
$\mu$  : Viskozite ( $\mu_{gaz} = 2,1 * 10^{-5} \text{ Pa * s}$ )



Şekil 3.2: Hücrenin anot kısmının hız profili (m/s).

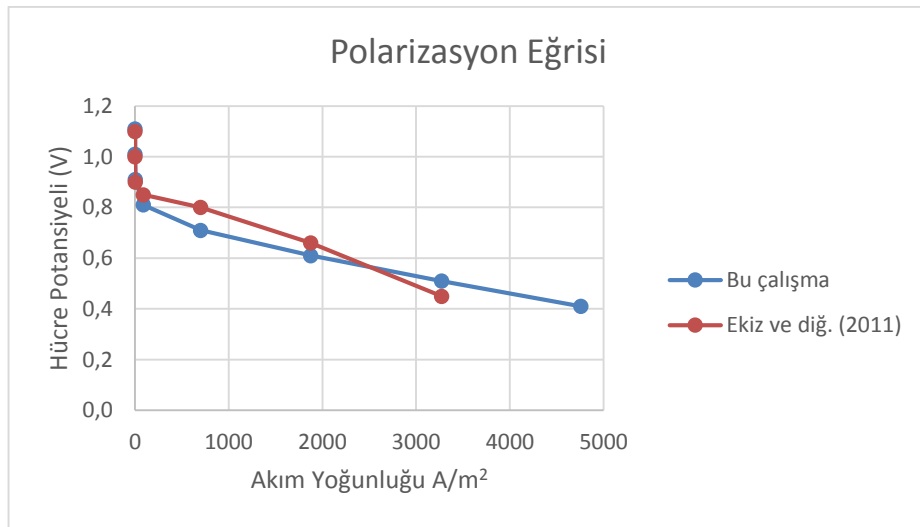


COMSOL Multiphysics programında polarizasyon eğrisi oluşturma arayüzü Şekil 3.4'te verilmiştir.



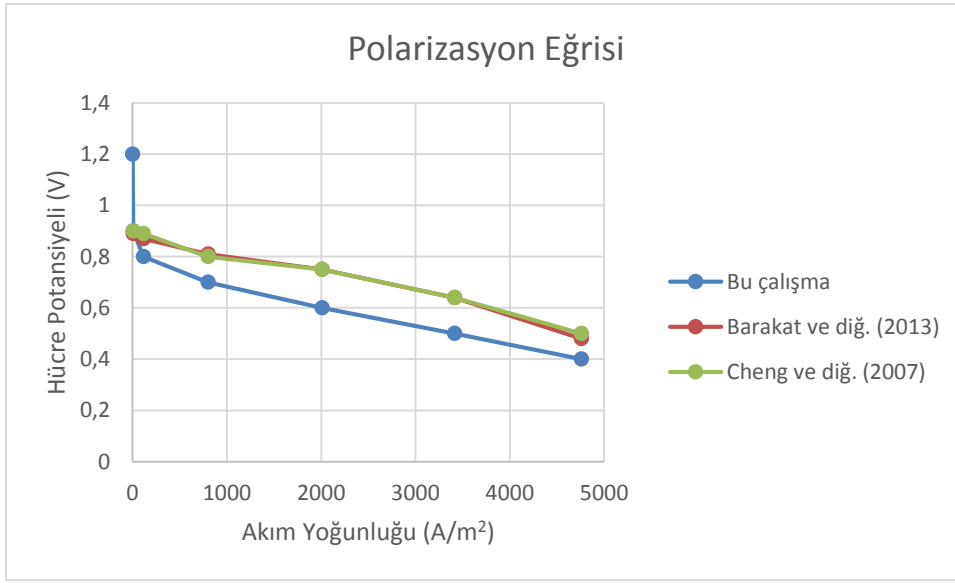
Şekil 3.4: Polarizasyon Eğrisinin Çizimi.

Modelin simülasyonu ile bulunan sonuçlar ve Ekiz ve diğ. (2011) çalışmasında bulunan sonuçlar karşılaştırılmış ve arasında çok küçük farklılık olduğu görülmüştür (Şekil 3.5). Bu farklılığın temel sebebi gözenekli ortam tercihinden kaynaklandığı düşünülmektedir. Ekiz ve diğ. (2011) gözenekli ortamı aglomerat modeline göre çözümlenmişler; bu tez kapsamında oluşturulan modelde ise gözenekli ortam sabit gözeneklilik belirlenerek Butler-Volmer denklemleri ile çözümlenmiştir. Akım yoğunluğunda meydana gelen farklılığın diğer bir sebebinin de nümerik çözüm olduğu düşünülmektedir. Bilgisayar teknolojisindeki gelişmeler ve kullanıcılardan gelen geri beslemeler ile simülasyon programları her yıl güncellenmekte ve nümerik çözüm için yeni denklemler eklenmektedir.



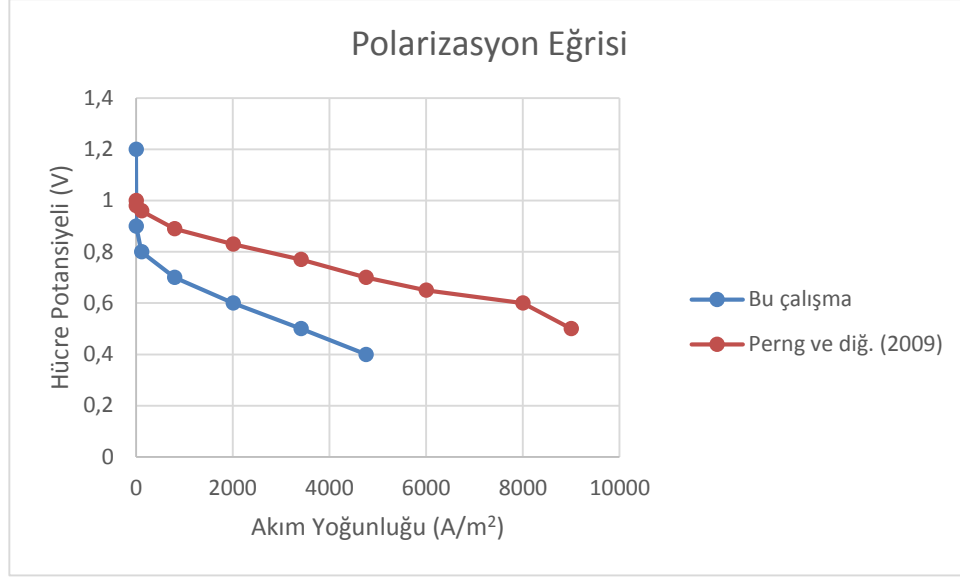
Şekil 3.5: Polarizasyon eğrisi (Ekiz ve diğ. 2011 ile karşılaştırma).

Bulunan sonuçlar benzer geometriye sahip, daha düşük sıcaklıktaki (323 K) Barakat ve diğ. (2013) çalışmasındaki simülasyon ve Cheng ve diğ. (2007) çalışmasındaki deney sonuçları ile karşılaştırılmıştır (Şekil 3.6). Aynı potansiyel farkta tez kapsamında simülasyonu yapılan modeldeki akım yoğunluğunun daha düşük olduğu görülmüştür. Bölüm 2.4.3'te bahsedilen akım yoğunluğu denklemlerinden de açıkça görülebileceği gibi akım yoğunluğu ve sıcaklık ters orantılıdır. Bu yüzden akım yoğunluğunun azalmasının sıcaklık artışına bağlı olduğu düşünülmektedir.



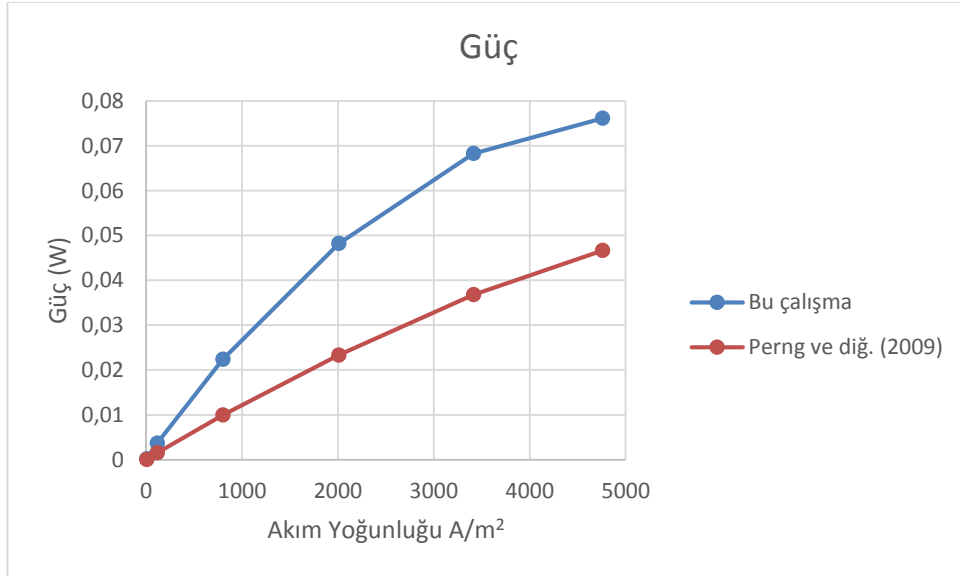
**Şekil 3.6:** Polarizasyon eğrisi (Barakat ve diğ. (2013) ve Cheng ve diğ. (2007) ile karşılaştırma).

Tez kapsamında simülasyonu yapılan model çalışma sıcaklıkları aynı (353K), daha küçük ölçülere sahip bir yakıt hücresinin analizinin yapıldığı Perng ve diğ. (2009) çalışmasındaki sonuçlarla karşılaştırılmış ve tez kapsamında simülasyonu yapılan modelin akım yoğunluğunun daha düşük olduğu görülmüştür (Şekil 3.7). Bunun sebebinin de yakıt hücresinin uzunluğunun, kanal ve gözenekli ortam yüksekliğinin artmasıyla potansiyelinin düşmesi olduğu tahmin edilmektedir. Bu sebeple uygulamalarda yüzlerce yakıt hücresi seri bağlı halde kullanılmaktadır.



**Şekil 3.7:** Polarizasyon eğrisi (Perng ve diğ. 2009 ile karşılaştırma).

Çalışmaları yapılan modellerin geometrik ölçüleri farklı olduğu için potansiyelin farkın (V) akım yoğunluğu ( $A/m^2$ ) ile değişimini gösteren polarizasyon eğrisinin yanında potansiyel farkın (V) güçle (W) değişimin grafiği çizilmiştir (Şekil 3.8). Bu grafik sayesinde hücrenin gerçek boyutlarının ulaşabildiği maksimum güç görülebilmektedir. Grafikten de anlaşılacağı üzere tez kapsamında çalışması yapılan modelin akım yoğunluğu Perng ve diğ. (2009) çalışmasındaki modelden daha düşük olsa da hücrenin elde edeceği güç daha fazladır.



**Şekil 3.8:** Güç eğrisi (Perng ve diğ. (2009) ile karşılaştırma).

### 3.4 Varım ve Öneriler

- Önceki çalışmalara uygun olarak Polimer Elektrolit Membranlı Yakıt Hücresine ait 2-D bir model geliştirildi.
- Modelin bilgisayar destekli simülasyonunun yapılabilmesi için gerekli denklemlerin nümerik olarak çözülebilmesini sağlayan uygun mesh yapısı deneme yanılma metodu ile belirlendi.
- Yapılan nümerik çözüm sayesinde elektrolit potansiyeli dağılımı, hız dağılımı ve akım yoğunluğu dağılımı elde edildi.
- Potansiyel fark ve akım yoğunluğu arasındaki ilişkiyi veren polarizasyon eğrisi çizildi ve literatürdeki çalışmalar ile karşılaştırma yapılarak validasyon sağlandı.
- Validasyonun sağlanması ile simülasyonun fiziksel altyapısının doğruluğu kanıtlandı.
- Çalışmakta olan 2-D model 3-D hale getirildi. Halen uygun mesh yapısı üzerinde çalışılmaktadır.
- İlerleyen çalışmalarda, simülasyonu yapılan 3-D model üzerinde farklı parametreler için polarizasyon eğrileri oluşturulmalıdır.

## KAYNAKLAR

- Andujar J. M., Segura F.** (2009). Fuel cells: History and updating. A walk along two centuries. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 13, 2309–2322. doi:10.1016/j.rser.2009.03.015.
- Chen F., Fernandes T. R. C., Roche M. Y., Carvalho M. G.** (2007). Investigation of challenges to the utilization of fuel cell buses in the EU vs transition economies. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 11, 357–364. doi:10.1016/j.rser.2005.01.007.
- Cheng S., Fang C., Xu L., Li J., Ouyang M.** (2015). Model-based temperature regulation of a PEM fuel cell system on a city bus. *International Journal of Hydrogen Energy*, 40, 13566 – 13575. doi:10.1016/j.ijhydene.2015.08.042.
- Clough R. W., Wilson E. L.** (1999). Early Finite Element Research at Berkeley, *Fifth U.S. National Conference on Computational Mechanics*, Aug. 4-6, Colorado.
- COMSOL v5.1** (2015). Batteries & Fuel Cells Module, User's Guide. COMSOL Inc.
- Çakmak M. E.** (2011). Computational Fluid Flow and Transport of Colloidal Particles in Soil Pores. (*Doctoral dissertation*). <https://cornell.edu/>
- Çengel Y. A., Cimbala J. M.** (2015) Akışkanlar Mekaniği: Temelleri ve Uygulamaları. *Palme*, Ankara.
- Çengel Y. A., Ghajar A. J.** (2015) Isı ve Kütle Transferi: Esaslar ve Uygulamalar. *Palme*, Ankara.
- Datta A., Rakesh V.** (2010) An Introduction to Modeling of Transport Processes. *Cambridge University Press*, Cambridge.
- EG&G Technical Services, Inc.** (2004). Fuel Cell Handbook (7th ed.). Morgantown, West Virginia.
- Ekiz, A., Camcı T., Türkmen İ., Sankır M., Uslu S., Baker D. K., Açar E.** (2011). Pem Tipi Yakıt Pilleri İçin Çift Kutuplu Akış Plakalarının Modellenmesi. *Gazi Üniversitesi Mühendislik ve Mimarlık Fakültesi Dergisi*, 26, 591-605.
- Ferng Y. M., Su A.** (2007). A three-dimensional full-cell CFD model used to investigate the effects of different flow channel designs on PEMFC performance. *International Journal of Hydrogen Energy*, 32, 4466–4476. doi:10.1016/j.ijhydene.2007.05.012.
- Guvelioglu G. H., Stenger H. G.** (2005). Computational fluid dynamics modeling of polymer electrolyte membrane fuel cells. *Journal of Power Sources*, 147, 95–106. doi:10.1016/j.jpowsour.2005.01.01.

- Hakim E. B.** (1998). Why Use PEMs in Military Equipment Users Response. *Microelectronics Reliability*, 38, 403-407.
- Hayashi, A., Kosugi, T., Yoshida, H.** (2005) Evaluation of polymer electrolyte fuel cell application technology R&Ds by GERT analysis. *International Journal of Hydrogen Energy*, 30, 931-941.
- He W., Yi J. S., Nguyen T. V.** (2000). Two-Phase Flow Model of the Cathode of PEM Fuel Cells Using Interdigitated Flow Fields. *Aiche Journal*, 46, 2053 – 2064. doi: 10.1002/aic.690461016.
- International Energy Holdings** (2007). Intelligent Energy powers Suzuki motorcycle prototype. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1464285907704042> alındığı tarih 22.11.2015.
- Jang J. H., Yan W. M. Li H. Y., Chou Y. C.** (2006). Humidity of reactant fuel on the cell performance of PEM fuel cell with baffle-blocked flow field designs. *Journal of Power Sources*, 159, 468–477. doi:10.1016/j.jpowsour.2005.07.096
- Jaruwasupant N., Khunatorn Y.** (2011). Effects of difference flow channel designs on Proton Exchange Membrane Fuel Cell using 3-D Model. *Energy Procedia*, 9, 326 – 337. doi: 10.1016/j.egypro.2011.09.035.
- Jeon D. H., Greenway S., Shimpalee S., Van Zee J. W.** (2008). The effect of serpentine flow-field designs on PEM fuel cell performance. *International Journal of Hydrogen Energy*, 33, 1052-1066. doi:10.1016/j.ijhydene.2007.11.015.
- Kim T., Lee S., Park H.** (2011). The potential of PEM fuel cell for a new drinking water source. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 15, 3676-3689. doi:10.1016/j.rser.2011.06.006.
- Kumar A., Reddy R. G.** (2003). Effect of channel dimensions and shape in the flow-field distributor on the performance of polymer electrolyte membrane fuel cells. *Journal of Power Sources* 113, 11–18. doi: 10.1016/S0378-7753(02)00475-5.
- Lehman P. A. Chamberlin C. E. Zoellick J. I., Engel R. A. A** (2000): A Photovoltaic/Fuel Cell Power System for a Remote Telecommunications Station, *28th IEEE Photovoltaic Specialists Conference*, Anchorage, Alaska, September 15-20.
- Li H., Tang Y., Wang Z., Shi Z., Wu S., Songa D., Zhang J., Fatih K., Zhang J., Wang H., Liu Z., Abouatallah R., Mazzab A.** (2008). A review of water flooding issues in proton Exchange membrane fuel cell. *Journal of Power Sources*, 178, 103-117. doi:10.1016/j.jpowsour.2007.12.068.
- Manso A. P., Marzo F. F., Barranco J., Garikano X., Garmendia Mujika M.** (2012) Influence of geometric parameters of the flow fields on the performance of a PEM fuel cell. A review. *International Journal of Hydrogen Energy*, 15256-15287. doi: 10.1016/j.ijhydene.2012.07.076



- Mench M. M., Wang C. Y., Thynell S. T.** (2001). An Introduction to Fuel Cells and Related Transport Phenomena. An introduction to fuel cells and related transport phenomena. *International Journal of Transport Phenomena*, 3, 151–176.
- Miller A. R., Hess K. S., Barnes D. L., Erickson T. L.** (2007). System design of a large fuel cell hybrid locomotive. *Journal of Power Sources*, 173, 935-942. doi:10.1016/j.jpowsour.2007.08.045.
- Owejan J. P., Gagliardo J. J., Sergi J. M., Trabold T. A.** (2008) Two-Phase Flow Considerations In PEMFC Design And Operation, *Proceedings of the Sixth International ASME Conference on Nanochannels*, and ICNMM2008 June 23-25, Darmstadt, Germany.
- Park S., Lee J. W., Popov B. N.** (2012). A review of gas diffusion layer in PEM fuel cells: Materials and designs. *International Journal of Hydrogen Energy*, 37, 5850-5865, doi:10.1016 / j.ijhydene.2011.12.148.
- Rajalakshmi N., Jayanth T. T., Thangamuthu R., Sasikumar G., Sridhar P., Dhathathreyan K. S.** (2004). Water transport characteristics of polymer electrolyte membrane fuel cell. *International Journal of Hydrogen Energy*, 29, 1009-1014. doi:10.1016/j.ijhydene.2003.06.001.
- Serincan M. F., Yesilyurt S.** (2007). Transient analysis of proton electrolyte membrane fuel cells (PEMFCs) at start-up and failure. *Fuel Cells* 07, 2, 118-127
- Sharaf O.Z., Orhan M. F.** (2014) An overview of fuel cell technology: Fundamentals and applications. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 32, 810-853 doi: /10.1016/j.rser.2014.01.012
- Sharma S., Ghoshal S. K.** (2015). Hydrogen the future transportation fuel: From production to applications. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 43, 1151–1158. doi:10.1016/j.rser.2014.11.093
- Sasmito A. P., Birgersson E. Mujumdar A. S.** (2012). Computational Study of Thermal, Water and Gas Management in PEM Fuel Cell Stacks. *Hydrogen Energy – Challenges and Perspectives*, 305-332. doi:10.5772/49952.
- Shimpalee S., Greenway S., Van Zee J. W.** (2006). The impact of channel path length on PEMFC flow-field design. *Journal of Power Sources*, 160, 398–406. doi:10.1016/j.jpowsour.2006.01.099.
- Shimpalee S., Van Zee J. W.** (2007). Numerical studies on rib&channel dimension of flow-field on PEMFC performance. *International Journal of Hydrogen Energy*, 32, 842 – 856. doi:10.1016/j.ijhydene.2006.11.032.
- Sifer N., Gardner K.** (2004) An analysis of hydrogen production from ammonia hydride hydrogen generators for use in military fuel cell environments. *Journal of Power Sources*, 132, 135–138. doi:10.1016/j.jpowsour.2003.09.076.
- Spiegel, C.** (2007). Designing and Building Fuel Cells. (1st ed.). *McGraw-Hill*. New York, NY

**Url-1** <<http://www.emo.org.tr>>, alındığı tarih: 19.11.2015.

- Url-2** <<http://americanhistory.si.edu>>, alındığı tarih: 19.11.2015.
- Url-3** <[www.ssm.gov.tr](http://www.ssm.gov.tr)>, alındığı tarih: 20.11.2015.
- Url-4** <<http://www.dupont.com>>, alındığı tarih: 20.11.2015.
- Url-5** <[www.birmingham.ac.uk](http://www.birmingham.ac.uk)>, alındığı tarih: 14.10.2014.
- Url-6** <[www.ansys.com/](http://www.ansys.com/)>, alındığı tarih: 11.02.2016.
- US Army TACOM (2003). Second US Army truck with fuel cell APU.** <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1464285903005108>>, alındığı tarih: 22.11.2015.
- Wang Y., Basu S., Wang C. Y. (2008).** Modeling two-phase flow in PEM fuel cell channels. *Journal of Power Sources* 179, 603–617. doi:10.1016/j.jpowsour.2008.01.047.
- Wang X. D., Duan Y. Y., Yan W. M., Peng X. F. (2008a).** Effects of flow channel geometry on cell performance for PEM fuel cells with parallel and interdigitated flow fields. *Electrochimica Acta*, 53, 5334–5343. doi:10.1016/j.electacta.2008.02.095.
- Wang X. D., Duan Y. Y., Yan W. M., Weng F. B. (2008b).** Effect of humidity of reactants on the cell performance of PEM fuel cells with parallel and interdigitated flow field designs. *Journal of Power Sources*, 176, 247–258. doi:10.1016/j.jpowsour.2007.10.065.
- Wang X. D., Yan W. M., Duan Y. Y., Weng F. B., Jung G. B., Lee C. Y. (2010).** Numerical study on channel size effect for proton exchange membrane fuel cell with serpentine flow field. *Energy Conversion and Management*, 51, 959–968. doi:10.1016/j.enconman.2009.11.037.
- Wu H. (2009).** Mathematical Modeling of Transient Transport Phenomena in PEM Fuel Cells. (*Doctoral dissertation*). <https://uwaterloo.ca>.
- Yan W. M., Li H. Y., Tsai W. C. (2006).** Three-Dimensional Analysis of PEMFCs with Different Flow Channel Designs. *Journal of The Electrochemical Society*, 153, A1984-A1991. doi: 10.1149/1.2234732.
- Yan W. M., Chen C. Y., Mei A. C., Soong C. Y., Chen F. (2006).** Effects of operating conditions on cell performance of PEM fuel cells with conventional or interdigitated flow field. *Journal of Power Sources*, 162, 1157–1164. doi:10.1016/j.jpowsour.2006.07.044.
- Yan W. M., Yang C. H., Soong C.Y., Chen F., Mei S. C. (2006b)** Experimental studies on optimal operating conditions for different flow field designs of PEM fuel cells. *Journal of Power Sources*, 160, 284–292. doi:10.1016/j.jpowsour.2006.01.031.
- Zienkiewicz ve Cheung (1967).** The Finite Element Method in Structural and Continuum Mechanics. *Mc Graw-Hill*. New York, NY

## ÖZGEÇMİŞ

**Adı Soyadı:** Fatih Sorgulu

**Doğum Yeri ve Tarihi:** Kayseri / 1988

**E-Posta:** fatih.sorgulu@gmail.com

**Lisans:** Makine Mühendisliği

**Mesleki Deneyim: Araştırma Görevlisi:** Aralık 2013 - Halen

### Yayın ve Patent Listesi:

#### TEZDEN TÜRETİLEN YAYINLAR/SUNUMLAR

▪ **SORGULU F., ÇAKMAK M.E.**, 2015: Simulation of Single Phase Flow in 2-D Porous Media: Implications for Water Management in PEMFCs. *4. Renewable Energy System Winter School*, Ocak, 2015 Afyon, Türkiye.

▪ **SORGULU F., ÇAKMAK M.E.**, 2014: Pore-Scale Simulation of Fluid Flow and Mass Transport in Energy-Related Systems. *Turkish – German Conference On Energy Technologies*, 1, 70-71, Ekim 2014, Ankara, Türkiye.

#### DİĞER YAYINLAR

▪ **SOYLU E., COŞKUN C., SORGULU F., ÇAKMAK M. E., MERT M. S.**, Deneysel Ve Hesaplamalı Olarak Elde Edilen Isı Transferi Verileri Arasındaki Farklılıkların Belirlenmesi. *20. Ulusal Isı Bilimi ve Tekniği Kongresi*, 2-5 Eylül 2015, Balıkesir, Türkiye.