

T.C.
GEBZE TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

GAZ DİFÜZYON TABAKASI GÖZENEKLİLİK
DEĞERLERİNİN PROTON DEĞİŞİM MEMBRAN YAKIT
HÜCRESİ (PEMFC) PERFORMANSINA ETKİSİNİN
HESAPLAMALI AKIŞKANLAR DİNAMİĞİ (CFD) YÖNTEMİ
İLE İNCELENMESİ

BURAK SEVİN
YÜKSEK LİSANS TEZİ
MAKİNE MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI

GEBZE
2019

T.C.
GEBZE TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

GAZ DİFÜZYON TABAKASI
GÖZENEKLİLİK DEĞERLERİNİN
PROTON DEĞİŞİM MEMBRAN YAKIT
HÜCRESİ (PEMFC) PERFORMANSINA
ETKİSİNİN HESAPLAMALI AKIŞKANLAR
DİNAMİĞİ (CFD) YÖNTEMİ İLE
İNCELENMESİ

BURAK SEVİN
YÜKSEK LİSANS TEZİ
MAKİNE MÜHENDİSLİĞİ ANA BİLİM DALI

DANIŞMANI
DR. ÖĞR. ÜYESİ SALİH ÖZEN ÜNVERDİ

GEBZE

2019

T.R.
GEBZE TECHNICAL UNIVERSITY
GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES

**A COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS
STUDY OF THE EFFECT OF GAS
DIFFUSION LAYER POROSITY ON
PROTON EXCHANGE MEMBRANE FUEL
CELL PERFORMANCE**

BURAK SEVİN
**A THESIS SUBMITTED FOR THE DEGREE OF
MASTER OF SCIENCE**
DEPARTMENT OF MECHANICAL ENGINEERING

THESIS SUPERVISOR
ASSIST. PROF. DR. SALİH ÖZEN ÜNVERDİ

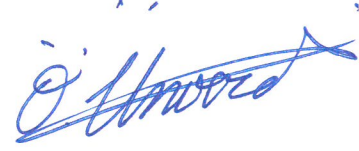
GEBZE
2019

GTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun 19/06/2019 tarih ve 2019/27 sayılı kararıyla oluşturulan jüri tarafından 30/09/2019 tarihinde tez savunma sınavı yapılan Burak SEVİN'in tez çalışması Makine Mühendisliği Anabilim Dalında YÜKSEK LİSANS tezi olarak kabul edilmiştir.

JÜRİ

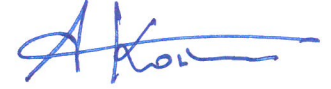
ÜYE

(TEZ DANIŞMANI) : DR. ÖĞR. ÜYESİ SALİH ÖZEN ÜNVERDİ



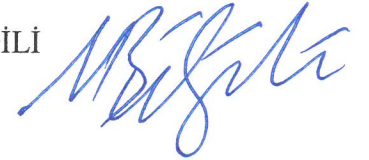
ÜYE

: PROF. DR. ALP ER KONUKMAN



ÜYE

: DR. ÖĞR. ÜYESİ MUHİTTİN BİLGİLİ



ONAY

Gebze Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun

...../...../..... tarih ve/..... sayılı kararı.

ÖZET

Bu tez çalışması kapsamında, düzlemsel geometriye sahip bir proton değişim membranlı yakıt hücresinin (PDMYH) matematiksel modeli, üç boyutlu olarak bilgisayar ortamında kurulmuştur. Anot ve katot olmak üzere iki bölümden ve toplamda dokuz katmandan oluşan PDMYH, akım toplayıcı tabakalar, gaz kanalları, gaz difüzyon tabakaları (GDL), katalizör tabakaları ve bu iki bölümü birleştiren bir membran içerir. Yakıt hücresi ağ yapısının kurulmasının ardından elektro-kimyasal tepkime, momentum, kütle, enerji ve elektrik yükü aktarım fenomenleri yöneten diferansiyel denklem sistemi ve sınır şartları tanımlanmış ve Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiğinde Sonlu Hacimler Yöntemiyle kurulan matematiksel model ANSYS FLUENT yazılımıyla çözülmüştür. GDL bileşeninin fiziksel özelliklerinden biri olan gözenekliliğin dört farklı değeri için PDMYH analiz edilerek, elektrik akımı yoğunluğunun hücre elektrik potansiyeline bağlı değişimi incelenmiştir. Yakıt hücre çeşitlerine ve tarihçelerine ayrıca değinilen bu çalışmada, seçilen anot ve katot GDL gözeneklilik değerleri için, HAD (CFD) yöntemiyle elde edilen basınç, hız, sıcaklık, hidrojen (H_2), oksijen (O_2) ve tepkime sonrası oluşan su (H_2O) mol oranları, sıvı su aktivitesi ve elektrik akımı yoğunluğu değerleri düzlemsel kesitlerde kontur grafikleri çizdirilerek görselleştirilmiş, hücre elektriksel gerilimine bağlı olarak hesaplanan üretilen akım yoğunlukları kutuplaşma eğrileriyle sunulmuş; elde edilen en yüksek ve en düşük akım yoğunluklarının sırası ile 0,6 ve 0,3 GDL gözeneklilik değerleri için ortaya çıktığı gözlenmiştir. Fiber yapılı GDL geçirgenliğinin gözenekliliğine bağlı olarak hesaplanmasının, çok fazlı akış modelinin aktive edilmesinin ve çok bileşenli gaz karışımı kütle difüzyon katsayısı hesabının yakıt hücresinin performans değerlerinin hesaplanması üzerindeki etkileri belirlenmiştir.

Anahtar Kelimeler: Gaz Difüzyon Tabakası (GDL), Gözeneklilik, Hesaplamalı Akışkanlar Dinamiği (HAD), PDMYH Modelleme, Temiz Enerji, Yakıt Hücresi.

SUMMARY

In this thesis, a mathematical model of a Proton Exchange Membrane Fuel Cell (PEMFC) with a planar geometry is formed in three dimensions in computer environment. The PEMFC consists of two sections called anode and cathode and a total of nine layers which include current collectors, gas channels, gas diffusion layers (GDL), catalyst layers, and a membrane which connects the two sections. After the generation of the fuel cell mesh structure, system of partial differential equations and relevant boundary conditions governing the electro-chemical reactions, momentum, mass, energy and electric charge transport phenomena that take place within the fuel cell are given and the mathematical model thus formed is solved by Finite Volume Method of the Computational Fluid Dynamics by means of ANSYS Fluent. Then, the change of electric current density as a function of cell electric potential is calculated by analyzing PEMFC for four values of anode and cathode GDL porosity. In this study, where fuel cell types and their histories are also introduced, for various values of GDL porosity, pressure, velocity, temperature, hydrogen (H₂), oxygen (O₂) and water (H₂O), which is generated as a result of electro-chemical reactions that take place within the cell, mole fractions, liquid water activity and electric current density results of the CFD simulations are visualized by means of contour plots in selected section cuts through the cell, as well as calculated generated electric current density curves as a function of cell electric potential, namely polarization curves, are presented, and maximum and minimum current densities are observed to arise for GDL porosity values of 0.6 and 0.3, respectively. The effects of calculation of GDL permeability as a function of its porosity for fibrous porous structures, activation of multi-phase flow model and accounting mass diffusion coefficient of a multi-component gas mixture on the accuracy of the fuel cell performance results are emphasized.

Key Words: Clean Energy, Computational Fluid Dynamics (CFD), Fuel Cell, Gas Diffusion Layer (GDL), PEMFC Modelling, Porosity.

TEŞEKKÜR

Başta, akademik hayatım ve yüksek lisans öğretimimde kıymetli vakitlerini bana ayıran ve yardımlarını hiçbir zaman esirgemeyip desteğini her zaman hissettiğim, bilgisi ile bu çalışmanın ortaya çıkmasının önünü açan danışmanım Dr. Öğr. Üyesi Salih Özen Ünverdi'ye,

Yüksek lisans öğretimimde teşviklerinden dolayı TIRSAN Treyler San. ve Tic. A.Ş. üst yönetimine,

Üniversite mezuniyetimden sonra ANOVA Mühendislik ve Danışmanlık'ın kapılarını bana açarak analiz dünyasına dahil olmamı sağlayan ve bana birçok konuda katkısı olan, bugünkü adı ile ANOVA Ar-Ge Teknolojileri San. ve Tic. A.Ş. firması kurucu ortaklarından Dr. Emre Öztürk'e,

Beni birçok konuda yüreklendiren ve yoluma ışık tutan CPA Danışmanlık Hizmetleri firmasının sahibi, yönetim sistemleri uzmanı Sn. Veli Ayçiçek'e,

Üniversite içi iş akışı ve prosedüre dayalı konularda yardımları ve yol göstericiliğinden dolayı GTÜ eski araştırma görevlilerinden değerli arkadaşım Ahmet Emin Şentürk'e,

ve son olarak hayatımın her anında desteklerini hissettiğim sevgili anne ve babama en içten şekilde teşekkürlerimi sunarım.

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZET	v
SUMMARY	vi
TEŞEKKÜR	vii
İÇİNDEKİLER	viii
SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ	x
ŞEKİLLER DİZİNİ	xiv
TABLolar DİZİNİ	xvii
1. GİRİŞ	1
1.1. Yakıt Hücrelerinin Tarihçesine Kısa Bir Bakış ve Ticari Boyutu	3
2. YAKIT OLARAK HİDROJENİN SEÇİLMESİ VE YAKIT HÜCRESİ TIPLERİ	9
2.1. Yakıt Hücresi Tiplerinin İncelenmesi	11
2.1.1. Alkali Yakıt Hücresi	11
2.1.2. Doğrudan (Direkt) Metanol Yakıt Hücresi	12
2.1.3. Fosforik Asit Yakıt Hücresi	12
2.1.4. Erimiş Karbonat Yakıt Hücresi	14
2.1.5. Katı Oksit Yakıt Hücresi	15
3. PROTON DEĞİŞİM MEMBRAN YAKIT HÜCRESİ VE LİTERATÜR ARAŞTIRMASI	18
3.1. Proton Değişim Membran Yakıt Hücresi	18
3.1.1. Membran Bileşeni	21
3.1.2. Özellikleri ve Çalışma Prensibi	22
3.2. Literatür Araştırması	24
4. MATEMATİKSEL MODEL VE NUMERİK YÖNTEM	33
4.1. Matematiksel Modelin Tanıtımı ve Oluşturulması	34
4.1.1. ANSYS DesignModeler ile Geometrinin Oluşturulması	34
4.1.2. Yakıt Hücresinin Ağ Yapı Modelinin Oluşturulması	38
4.1.2.1. Ağ Yapı Tipi ve Uygunluğu	44
4.1.3. Yakıt Hücresi Modelinin FLUENT Çözücüsüne Gönderilmesi	46

4.1.4. Yakıt Hücresi Modelinin Elektrokimyasal Parametreleri	48
4.1.5. PDYMH Modeli İçin Yapılan Kabuller	52
4.1.6. Uygulanan Sınır Şartlarının Değerleri	52
4.1.7. Kullanılan Malzeme Bilgileri	55
4.1.8. Çözümde Kullanılan Eşitlikler ve Çözücü Tipi	55
4.2. Sayısal Yöntem	65
4.2.1. Kullanılan Yöntemdeki Sınır Şartı Tanımlamaları	67
4.2.1.1. Kütleli Debi Girişi (Mass Flow Inlet) Sınır Şartı	67
4.2.1.2. Basınç Tanımlı Çıkış (Pressure Outlet) Sınır Şartı	68
4.2.1.3. Duvar (Wall) Sınır Şartı	68
5. SONUÇLAR	69
5.1. Yakınsama Kriterleri	71
5.2. İki Boyutlu Kesitler Üzerinden Sonuçların İncelenmesi	73
5.3. Kutuplaşma (Polarizasyon) Eğrilerinin Elde Edilmesi	86
6. TARTIŞMA	93
KAYNAKLAR	98
ÖZGEÇMİŞ	102

SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ

<u>Simgeler ve</u>	<u>Açıklamalar</u>
<u>Kısaltmalar</u>	
∇	: Nabla Operatörü
Δ	: Delta
ΔG	: Gibbs serbest enerji değişimi (kJ/kmol)
ΔH	: Entalpi değişimi (kJ/kmol)
ΔS	: Entropi değişimi (kJ/kmol.K)
ΔT	: Sıcaklık farkı (K)
∂	: Kısmi türev
a_{su}	: Sıvı su aktivitesi (-)
μ	: Dinamik Viskozite (Pa.s) (kg/m-s)
$\bar{\tau}$	: Gerilme tensörü (Pa)
τ_{gaz}	: Gaz-faza ait eğrilik (tortuosity)
$\bar{I}$	: Birim tensör
γ_p, γ_t	: Üs değerleri (-)
σ	: Elektriksel iletkenlik (s: elektronlar, m:protonlar) $((ohm.m)^{-1})$
σ_e^{eff}	: Efektif Elektriksel İletkenlik $((ohm.m)^{-1})$
$\eta_{a,c}$	: Aşırı gerilim (a: anot, c: katot) (Volt)
Br	: Brinkman sayısı (-)
C_i	: i türünün molar konsantrasyonu (kmol/m ³)
E	: Toplam enerji (kJ/kg)
k_t	: Türbülans ısıl iletkenliği (W/m.K)
p	: Statik basınç (Pa)
h	: Özgül entalpi (kJ/kg)
h_{faz}	: Suyun yoğunlaşma/buharlaşmasından kaynaklı birim zamanda hacimsel entalpi değişimi (W/m ³)
h_{reak}	: Elektrokimyasal reaksiyondan doğan birim zamanda hacimsel net entalpi değişimi (W/m ³)
i_s, i_m	: Akım yoğunluğu (A/m ²)
I	: Elektrik akımı (A)

$j_{a,c}$	: Transfer akım yoğunluğu - sırasıyla anot ve katot (A/m^3)
$\vec{j}_j$	: j türünün difüzyon akısı (kg/m^2)
k_{eff}	: Etkin ısı iletkenlik ($W/m-K$)
U_e	: Akış hızı (m/s)
D_i	: i türünün kütle difüzyon katsayısı (m^2/s)
D_i^0	: (P_0, T_0) için kütle difüzyon katsayısı (m^2/s)
$D_{i,eff}$	: Efektif difüzyon katsayısı (m^2/s)
D_l	: Membran sıvı su difüzyon katsayısı (m^2/s)
r_s	: Gözenek tıkanıklık üssü
ε	: Gözeneklilik (porozite)
ε_m	: Membran faz potansiyeli için elektrot gözeneklilik değeri
K	: Gözenekli ortamın gaz geçirgenliği (m^2)
K_d	: Ayrışma oranları
R	: Evrensel gaz sabiti ($8,314 kJ/kmol.K$)
R_{ohm}	: Ohmik direnç (ohm)
S_e, S_i	: Elektrik yükü korunumu denklemi için kaynak terimi (e: elektronlar, i: iyonlar) (A/m^3)
S_k	: Tür korunum denklemi için kaynak terimi ($kmol/m^3-s$)
S_m	: Kütle kaynak terim (kg/m^3-s)
$\vec{S}_u$	: Hacimsel momentum kuyusu (kg/m^2s^2) (N/m^3)
S_h	: Hacimsel enerji kaynağı (W/m^3)
S_ϕ	: Yük korunumu için kaynak terimi - Hacimsel transfer akımı ($A.m^{-3}$)
t	: Zaman (s)
T	: Sıcaklık (K)
Y	: Mol oranı
$\vec{v}$	: Akışkan hızı vektörü (m/s)
ρ	: Özgül kütle (kg/m^3)
Φ	: Faz potansiyeli (s: katı faz m:membrane) (Volt)
ϕ	: Bağımlı değişken
λ	: Su içeriği terimi
μ	: Dinamik viskozite ($kg/m-s$)
ABD	: Amerika Birleşik Devletleri

AC	: Alternatif akım
ACC	: Anot akım toplayıcı tabaka
ACL	: Anot katalizör tabaka
AGC	: Anot gaz kanalı
AGDL	: Anot gaz difüzyon tabakası
AYH	: Alkali yakıt hücresi (pili)
BP	: British Petroleum (Şirketi)
BPP	: Bipolar plaka
BYH	: Biyolojik yakıt hücresi
CAD	: Bilgisayar destekli tasarım (dizayn)
CC	: Akım toplayıcı tabaka
CCC	: Katot akım toplayıcı plaka
CCL	: Katot katalizör tabakası
CFD	: Computational fluid dynamics
CGC	: Katot gaz kanalı
CGDL	: Katot gaz difüzyon tabakası
CL	: Katalizör tabaka
CPU	: Merkezi işlem birimi (Bilgisayar işlemcisi)
DBYH	: Doğrudan borhidrür yakıt hücresi
DC	: Doğru akım
DEYH	: Doğrudan etanol yakıt hücresi
DM	: DesignModeler (ANSYS) Programı
DMYH	: Doğrudan metanol yakıt hücresi
EGYH	: Elektro galvanik yakıt hücresi
EKYH	: Erimiş karbonat yakıt hücresi
FAYH	: Fosforik asit yakıt hücresi
FEA	: Sonlu elemanlar analizi
FEM	: Sonlu elemanlar metodu
FSI	: Akışkan yapı etkileşimi
FSM	: “Fractional Step Method” Çözüm algoritması
GC	: Gaz kanalı
GDL	: Gaz difüzyon tabakası
GE	: General Electric (Şirketi)

GTÜ	: Gebze Teknik Üniversitesi
HAD	: Hesaplama akışkanlar dinamiği
HT-	: Yüksek sıcaklık proton değişim membranlı yakıt hücresi
PEMFC	
KOYH	: Katı oksit yakıt hücresi
MEÇ	: Membran elektrot çifti
MFM	: “Mapped Face Meshing” Ağ yapı kurma yöntemi
MHYH	: Metal hidrür yakıt hücresi
NASA	: National Aeronautics and Space Administration
OECD	: Ekonomik Kalkınma ve İş Birliği Örgütü
PBI	: Polibenzimidazol
PDMYH	: Proton değişim membranlı yakıt hücresi
PEM	: Proton Exchange Membrane (Proton değişim membranı)
PEMFC	: Proton Exchange Membrane Fuel Cell
PISO	: “Pressure-Implicit with Splitting of Operators” Çözüm algoritması
PSYH	: Proton seramik yakıt hücresi
PTFE	: Politetrafloroetilen
RAM	: Rasgele erişimli bellek
SIMPLE	: “Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations” Çözüm algoritması
SIMPLEC	: “Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations Consistent” Çözüm algoritması
TD	: Temel durum
TUI	: Text User Interface (Metin bazlı kullanıcı ara yüzü)
UDS	: User-defined Scalar (Kullanıcı tanımlı yönsüz nicelik)

ŞEKİLLER DİZİNİ

<u>Sekil No:</u>	<u>Sayfa</u>
1.1: 2017 Yılı küresel birincil enerji tüketim payları.	2
1.2: Soldan sağa doğru araştırmacılar, C. F. Schönbein, G. R. Grove ve F. T. Bacon’a ait olan fotoğraflar.	4
1.3: Bir yakıt piline ait gaz kanalının ağ yapı görünümü.	7
1.4: Doğrudan metanol yakıt hücresinin kesit alınan yüzeylerinden analiz sonuçlarının elektrik potansiyeli ve metanol konsantrasyonu bakımından incelenmesi.	8
1.5: Yakıt hücresi yığımına ait yapısal analiz ekran görüntüsü.	8
2.1: Alkali yakıt hücresinin çalışma şeması.	11
2.2: Doğrudan metanol yakıt hücresinin çalışma şeması.	12
2.3: Fosforik asit yakıt hücresinin çalışma şeması.	13
2.4: Erimiş karbonat yakıt hücresinin çalışma şeması.	14
2.5: Boru ve düz plaka şeklinde katı oksit yakıt hücresi bileşenleri.	16
2.6: Katı oksit yakıt hücresinin çalışma şeması.	16
3.1: Proton değişim membran yakıt hücresine ait bileşenler.	22
3.2: Proton değişim membran yakıt hücresinin çalışma şeması.	23
4.1: PDMYH’nin kesit biçimindeki şematik görünümü.	33
4.2: Workbench içerisinde oluşturulmuş ve içerisinde DesignModeler barındıran tekil bir Mesh hücresi.	34
4.3: XY Düzlemi altında tanımlanan geometrik kısıtlama ve verilen ölçüler.	36
4.4: Ekstrüzyon komutu sonrasında elde edilen katı bileşenler.	36
4.5: DM içerisinde yapılan işlem sırası.	37
4.6: Edge Sizing işleminin uygulanması.	39
4.7: MFM işlemi uygulanan yüzeyler.	40
4.8: Ağ yapısı kurulmuş olan PDMYH modeli.	40
4.9: PDMYH ağ yapısının kesit görünümü.	45
4.10: PDMYH ara yüzünün aktif edilmesi esnasında çıkan liste.	47
4.11: Ortak kullanılacak Mesh hücresinin çözücülere bağlanması.	48
4.12: “Fuel Cell and Electrolysis Models”-Model sekmesi.	49
4.13: ANSYS FLUENT çözücüsü içerisindeki türlere ait model penceresi.	59

4.14:	FLUENT Çözücüsünün genel kısmı altında bulunan seçimler.	66
4.15:	Çözüm metotlarına ait yapılan seçimler.	66
5.1:	PDMYH HAD Simülasyonuna ait bir yakınsama grafiği örneği.	71
5.2:	İki boyutlu yüzeylerin PDMYH modeli üzerinde gösterimi.	74
5.3:	PDMYH Modelinin seçilen düzlemlerde akım yoğunluğu (A/m^2) kontur grafikleri.	75
5.4:	PDMYH Modeliyle hesaplanan basınç (Pa) kontur grafikleri.	76
5.5:	PDMYH Modeliyle hesaplanan hız (m/s) dağılımı kontur grafikleri.	77
5.6:	Hidrojen gazı kütle oranı kontur grafikleri.	77
5.7:	Oksijen gazı kütle oranı kontur grafikleri.	78
5.8:	Reaksiyon sonrası oluşan suya ait sıvı su aktivitesi.	78
5.9:	Hidrojen gazı mol oranı kontur grafikleri.	79
5.10:	Oksijen gazı mol oranı kontur grafikleri.	79
5.11:	0,8 V Hücre gerilimi için a) 0,3, b) 0,4, c) 0,5 ve d) 0,6 GDL gözeneklilik değerlerinde, yüzey-3 üzerinde su mol oranı kontur grafikleri.	80
5.12:	0,8 V Hücre gerilimi için a) 0,3, b) 0,4, c) 0,5 ve d) 0,6 GDL gözeneklilik değerlerinde, yüzey-3 üzerinde sıvı su aktivitesi (oluşumu) kontur grafikleri.	81
5.13:	0,35 V Hücre gerilimi için a) 0,3, b) 0,4, c) 0,5 ve d) 0,6 GDL gözeneklilik değerlerinde, yüzey-3 üzerinde sıvı su aktivitesi (oluşumu) kontur grafikleri.	81
5.14:	0,8 V hücre gerilimi ve 0,5 GDL gözenekliliği için çoklu-faz hesabının aktif/pasif olması durumlarında sıvı su aktivitesi kontur grafikleri.	82
5.15:	Sıvı su aktivitesi için rapordan çekilen liste.	83
5.16:	Tüm senaryolara ait sıvı su aktivitesi.	83
5.17:	PDMYH Modeliyle hesaplanan sıcaklık (K) kontur grafikleri.	85
5.18:	TD-1 (GDL gözeneklilik değeri 0,3) için hesaplanan polarizasyon eğrisi.	87
5.19:	TD-2 (GDL gözeneklilik değeri 0,4) için hesaplanan polarizasyon eğrisi.	87
5.20:	TD-3 (GDL gözeneklilik değeri 0,5) için hesaplanan polarizasyon eğrisi.	88
5.21:	TD-4 (GDL gözeneklilik değeri 0,6) için hesaplanan polarizasyon eğrisi.	88
6.1:	Tüm temel durumlar için hesaplanan kutuplaşma eğrileri.	94

TABLÖLAR DİZİNİ

<u>Tablo No:</u>	<u>Sayfa</u>
1.1: Yakıt Hücrelerinin Elde Edilen Güç Değerine Göre Sınıflandırılması.	6
2.1: Hidrojen ve Benzine Ait Alt Isıl Değerler ve Adyabatik Alev Sıcaklıkları.	10
2.2: Hidrojen Elde Etme Yöntemleri.	10
2.3: İncelenen Yakıt Hücrelerine Ait Özelliklerin Sınıflandırılması.	17
4.1: Oluşturulan Yakıt Hücresine Ait Tasarım Ölçüleri.	37
4.2: Yakıt Hücresine Ait Olan Katmanların İsimlendirmeleri.	38
4.3: Sınır Şartı Ataması Yapılan Yüzeylere Ait Olan İsimlendirmeler.	41
4.4: PDMYH Ağ Yapısının Katman Kalınlıkları, Düğüm ve Eleman Sayıları.	42
4.5: PDMYH Ağ Yapısına Ait Diğer Parametrik Değerler.	42
4.6: PDMYH Ağ Yapısının Kalitesine Ait Olan İstatistikî Değerler.	43
4.7: Ağ Yapı Eleman Tipleri.	44
4.8: PDMYH Modeline Ait Elektrokimyasal Parametreler.	49
4.9: PDMYH Modeline Ait Diğer Fiziksel Özellikler.	51
4.10: PDMYH Matematiksel Modeline Ait Olan Sınır Şartı Değerleri.	54
4.11: Tabakalarda Kullanılan Malzemelere Ait Özellikler.	55
4.12: Bileşenlere Göre Kaynak Terimleri İçin Kullanılan Tanımlamalar.	57
4.13: PDMYH Modeli Anot ve Katot Tabakalarında Çözülen Diferansiyel Denklemler.	61
4.14: PDMYH Modelinde Katmanlar Bazında Çözülen Diferansiyel Denklem Sistemindeki (Korunum Yasalarındaki) Kaynak Terimleri.	62
5.1: Anot ve Katot GDL Gözeneklilik Değerlerine Göre Analiz Edilen Durumlar.	69
5.2: Kullanılan Tüm Değişkenler ile Yapılan Analizlere Ait Matris.	70
5.3: Gerçekleştirilen Analizlere Ait Çeşitli İstatistikî Veriler.	70
5.4: Artıkların FLUENT Çözücüsündeki Varsayılan Mertebeleri ve Bu Çalışmada 1000 İterasyon Sonrasında Ulaşılan Mertebeleri.	72
5.5: Tüm Analiz Senaryoları İçin Hesaplanan Akım Yoğunluğu Değerleri.	86
5.6: Senaryolarda Harcanan Oksijen Gazı Debileri.	89

5.7:	Analiz Sonucu ve Harcanan Oksijen Gazı Debisinden Hesaplanan Elektrik Akım Yoğunluklarına Ait Hata Oranları.	90
5.8:	Gerçekçi Modelle ve 0,5 GDL Gözeneklilik Değeri için Hatalı Geçirgenlik ve Basitleştirilmiş Akış Modelleriyle Hesaplanan Akım Değerlerinin Karşılaştırılması.	91
5.9:	Yalnızca Çoklu-faz Seçeneği Kapalı Durumun Karşılaştırması.	92

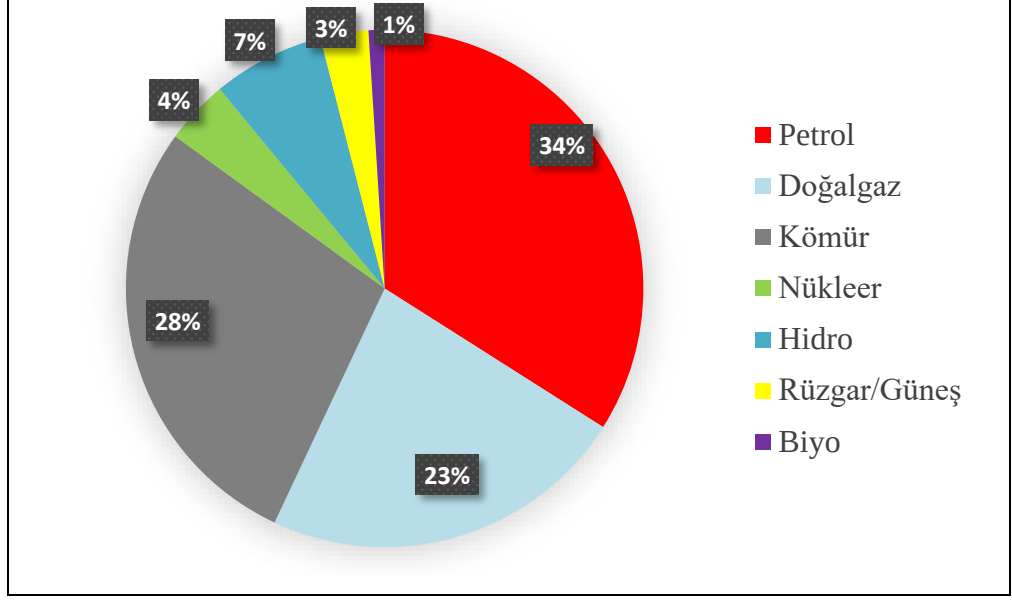
1. GİRİŞ

Dünya üzerinde, ülkelerin ekonomik hamleleri ve bu hamlelerin temelini oluşturan sanayide ve teknolojiye olan atılımlar, nüfus artışının da etkisiyle birlikte insanlığın enerjiye olan talebini büyük bir ivme ile arttırmaktadır. Ülke ve firmaların rekabetçi politikaları, piyasaya hâkim olma arzusunun önemini net bir şekilde vurgularken, teknolojinin gelişimi ve ilerlemesi endüstrinin hemen hemen her kulvarında enerji tüketimini üst düzeylere taşımaktadır.

Günden güne artan bu ihtiyaç, geçmişten bu yana dünya üzerinde savaşlara neden olduğu gibi, çevresel koşulları da bir o kadar olumsuz etkilemektedir. Dikkat edilmesi gereken ve birçok bilim insanı tarafından altı çizilen en büyük tehlike küresel ısınmadır. Küresel ısınmayı etkileyen faktörler doğal ve doğal olmayan (yapay) şeklinde ikiye ayrılmaktadır. Doğal olan faktörler güneş ve dünyanın hareketleri ile ortaya çıkmaktadır. 2017 yılında yayımlanan bir habere göre, küresel ısınmayı etkilen faktörlerden biri olan insan etkisinin, doğal sebeplerden kaynaklanan faktörlere kıyasla 170 kat daha etkili olduğu bilim adamları tarafından formüle edilmiştir [1]. Bunun dışında, Amerikan Science Dergisi'nde yayınlanan ve Çin Bilim Akademisi öncülüğünde yürütülen çalışmaya göre, 2018 yılı okyanuslar için en sıcak yıl olmuştur.

ExxonMobile'in 2040 yılına kadar, enerji arz ve taleplerini değerlendirdiği raporda, Paris İklim Anlaşması ve sera gazlarının salınımı ile ilgili olan konular odakta tutulmuştur. Bu rapora göre, global anlamda enerji ihtiyacı OECD dışı ülkelerin etkisi ile %25 artacak, endüstriyel faaliyetlerde enerji tüketimi artacak ve düşük karbonlu kaynakların yenilenebilir enerjideki payları büyüyecektir [2].

BP'nin 2017 yılı için yayımlanmış olduğu küresel düzeyde enerji tüketimleri dikkate alındığında ilk sırayı %34'lük pay ile petrol ürünleri almaktadır. Daha sonra sırası ile kömür (%28), doğalgaz (%23), hidro enerji (%7), nükleer enerji (%4), rüzgâr/güneş enerjisi (%3) ve son olarak biyo enerji (%1) gelmektedir. Enerji tüketim paylarına göre olan grafik Şekil 1.1'de yüzdeleri ile gösterilmektedir [3], [4].



Şekil 1.1: 2017 Yılı küresel birincil enerji tüketim payları.

Salınan sera gazlarının atmosferdeki değerleri %0,1'den azdır. Oran olarak bakıldığında çok küçük miktarda bulunan sera gazlarının bu oransal değerinin korunması ya da daha alt seviyelere düşürülmesi, iklim değişikliklerinin önüne geçilmesi adına çok önemlidir [5]. Bir diğer taraftan, sera gazlarının uygun bir oranda bulunması canlıların hayatını sürdürebilmesi için uygun sıcaklığı sağlamaktadır. Yeryüzü sıcaklık ortalamasının 15°C olduğu göz önüne alınarak ve sera gazlarının hiç bulunmaması yaklaşık 33°C'lik bir düşüş getireceği düşünüldüğünde, ortalama yeryüzü sıcaklığı -18°C olacaktır ve canlıların yaşamlarını sürdürme durumu ortadan kalkacaktır [5]. Küresel ısınmaya neden olan sera gazları karbondioksit (CO₂), metan (CH₄), karbon monoksit (CO), diazotoksit (N₂O), halokarbonlar ve ozon (O₃) şeklinde sayılabilmektedir [5].

Artan nüfus ve enerji ihtiyacı, fosil yakıtların günden güne rezervlerinin azalması ve kullanımlarından kaynaklı olarak çevreye verdikleri olumsuz etkiler göz önüne alındığında, temiz ve yenilenebilir enerji kaynakları gündeme gelmektedir. Alternatif olan ve temiz enerji kaynaklarına başlıca örnekler; rüzgâr enerjisi, hidroelektrik enerji, güneş enerjisi, biyokütle enerjisi, jeotermal enerji, dalga enerjisi ve hidrojen enerjisi şeklinde sıralanmaktadır.

Temiz enerji üretim yöntemlerinden biri olan hidrojen teknolojisinde, hidrojen kaynağı kullanılarak elektrik enerjisinin elde edilmesini sağlayan yakıt hücreleri, insanoğluna önemli bir gelecek vadetmektedir. Yakıt hücresi, ya da diğer bir tabir ile yakıt pili, yakıt ve oksitleyici kaynakların sağlandığı sürece kimyasal enerjiyi

elektrik enerjisine sürekli olarak çeviren elektrokimyasal bir cihazdır. Elektrokimyasal yapıları gereği güç üretim prosesi göz önüne alındığında, kimyasal piller ve yakıt hücreleri kendi aralarında benzerlik gösterirken, temelde bu iki üretici farklı kılan unsur, yakıt hücrelerine yakıt ve oksitleyici kaynak sağlandıkça, sürekli olarak çalışabilme yeteneğidir. Esasen sahip olduğu bu özellik bakımından, piller gibi kullan at durumlarının olmaması veya yeniden şarj edilmeye ihtiyaç duyulmaması ile birlikte, sessiz ve verimli bir şekilde de çalışabilmektedirler [6].

1.1. Yakıt Hücresinin Tarihçesine Kısa Bir Bakış ve Ticari Boyutu

Yakıt hücresinin prensipleri, ilk olarak Alman bilim adamı (kimyager) Christian Friedrich Schönbein tarafından 1838 yılında bulunmuş ve “Philosophical Magazine”in Ocak 1839 baskısında yayımlanmıştır [7]. Yakıt hücresinin buluşçusu olarak bilinen C. F. Schönbein, diğer bir taraftan “pamuk barutu” ve “ozon”un da keşifidir [8].

Yakıt hücresi üzerinde yapılan ilk geliştirme ise Galli bilim adamı William Robert Grove tarafından gerçekleştirilmiş olup, 1843’te günümüz fosforik asit yakıt hücresinde kullanılanlara benzer malzemeler kullanılarak yapılmıştır [9], [10]. Grove’un buluşu ise suyun elektrolizinin bir ters reaksiyonu sırasında sabit akım ve buna bağlı olarak güç ürettiğini fark etmesi ile ortaya çıkmıştır.

Kömürün elektrokimyasal enerjisinden yararlanarak elektrik elde etmek amacıyla, William W. Jacques 1896 yılında, eriyik elektrolitli yakıt pilinin ilk örneğini yaptığı çalışmalar ile ortaya koymuştur.

Ünlü bilim adamı Nerst’in öncülüğünü yaptığı katı oksit elektrolit ile çalışan yakıt hücresini, yaptığı çalışmalar ile Emil Baur 1937 yılında daha iyi bir noktaya taşımıştır.

Francis Thomas Bacon, alkalın yakıt pilleri üzerinde önemli çalışmalar ortaya koymuştur. 1959 yılında Bacon ve yine aynı yılda Harry Ihrig, yakıt hücreleri üzerinde geliştirmeler yapmışlardır. Bacon ve arkadaşları bir kaynak makinesini çalıştırabilen 5 kW’lık bir yakıt hücresi yapmışlardır. 1960’lı yıllarda Bacon’ın patentleri, Pratt & Whitney şirketinin çalışmanın önemini anlaması ve bu çalışmayı lisanslandırması ile ABD’nin uzay araştırma programlarında kullanılarak içme suyu ve elektrik enerjisi elde edilmiştir [11].

General Electric (GE) firması çalışanlarından kimyacı W. Thomas Grubb, 1955 yılında orijinal yakıt hücresi tasarımını deęiřtirmiş, yine bir GE firması çalışanı olan Leonard Niedrach hidrojenin oksidasyonu ve oksijenin endüksiyonu için katalizör görevi gören membran üzerine platin kaplama metodunu geliřtirmiřtir. Daha sonraları Grubb-Niedrach yakıt hücresi olarak bilinen bu hücre, GE ve NASA tarafından geliřtirilerek Gemini uzay projesinde ilk ticari yakıt hücresi olarak kullanılmıştır.



řekil 1.2: Soldan saęa doęru arařtırmacılar, C. F. Schönbein, G. R. Grove ve F. T. Bacon'a ait olan fotoęraflar.

Aynı yıllardaki çalışmalarına bakıldığında, ABD hükümetinin uzay programlarında bu teknolojinin kullanılabilmesi için 1950'li yıllarda olan gelişmelere hız verdięi görülmüřtür. Bunun temel nedeni ise uzay çalışmalarındaki ülkeler arası yarış gösterilebilir. Bu bilgiye paralel olarak, 1958 yılında, NASA, H₂-O₂ yakıt hücresini uzay araçlarına entegre etmeye başlamıştır.

Uzay çalışmaları dışında, 1980'li yıllarda petrol krizlerinin iyiden iyiye gündeme gelmesi bu teknoloji üzerindeki gelişmelere bir ivme kazandırmıştır. Süregelen zamanda, 2000'li yıllara bakılacak olursa, teknolojik gelişmeler ve buna baęlı olarak yakıt hücrelerinin kullanım alanlarının artması řirketlerin maliyetlerini düşürmedeki politikaları ile birleřtiğinde birçok alanda yakıt hücrelerinin devreye alındıęı gözlemlenebilmektedir [12].

Yakıt hücrelerinin kullanımlarına ticari boyut penceresinden bakıldığında birçok örneęin göz önüne geldięi görülmektedir. UTC Power řirketi, hastane, üniversite ve büyük işyerleri için, sabit yakıt hücresi sistemleri üreten ilk řirket

olmuştur. 200 kW'lık PureCell200 sistemi, bu şirketin sattığı ürünlerden biridir. UTC Power şirketi, NASA'ya Apollo ve bunun gibi birçok uzay mekiği programlarında kullanılmak üzere yakıt hücresi sağlayan tek şirket olup; ayrıca otomobil ve otobüs sektöründe kullanılabilen yakıt pilleri de geliştirmektedir. Bu şirket, donma koşullarında dahi çalışabilen proton değişim membranlı ilk otomotiv yakıt hücresinin tanıtımını yapmıştır [13].

Denizcilik sektöründen bir örnek verildiğinde, onaylı ve Dünya'nın ilk yakıt hücresi ile çalışan yolcu gemisi Hydra, Hamburg'da inşa edilmiştir ve 6,5 kW bir güce sahip Alkali yakıt pili (AYH) kullanmaktadır. Bu teknoloji ile -10°C donma koşullarında bile çalışarak bir avantaj sağlarken, problemsiz olarak 2000 civarında yolcu taşımıştır.

Toplu taşıma tarafında verilebilecek bir diğer örnek, DaimlerChrysler firmasının üretmiş olduğu yakıt hücreli otobüsler gösterilebilir. Ayrıca, batı Avustralya'nın başkenti Perth'de bu tür otobüsler kullanılmaktadır.

Bunun dışında diğer firmalara bakıldığında, General Motors, Nissan, Ford, Opel, Toyota, Honda ve BMW gibi otomotiv sektörünün başını çeken firmalar yakıt hücrelerinin araçlara adaptasyonu konusundaki çalışmalarını yıllardır sürdürmektedir. Yakıt hücresi teknolojisini kullanan araçlar incelendiğinde, günümüzde kullanılan araçlara göre daha sessiz çalıştıkları ilk göze çarpan avantaj olmaktadır. Bu sistemler hareketli güç aktarma sistemi parçalarına ihtiyaç duymamakla birlikte, otto veya dizel araç sistemlerine göre yüksek verime sahiptirler. Örneğin, PEM tipi yakıt hücreli bir sistem, otto sistemine göre 2 kat, dizel sistemine göre ise 1,5 kat verimle çalışmaktadır. Bahsedilen bu iki sistemin, yakıt hücreli sisteme göre düşük verime sahip olmasındaki unsurlardan biri hareketli parçaların sürtünme etkisi ile toplam sisteme yaşattığı kayıptır. Diğer unsur, içten yanmalı motorlarda yakıtın tam olarak yanamamasından kaynaklanmaktadır. Honda firmasının 2008 yılı öncesinde, vermiş olduğu bilgiye göre, yakıt hücre adaptasyonlu bir araç 160 litre hidrojen gazı ile beslendiği durumda yaklaşık olarak 430 km yol kat edebilmektedir. Daha önce de bahsedildiği gibi, avantajlardan bir diğeri de düşük emisyon konusudur [14].

Ancak bu tip yakıt hücreli araçların kullanılmasında bir tartışma hakimdir. Bu tartışma, saf hidrojen gazının kullanılmasından dolayı, yüksek basınçlı şekilde tanklara depolanması, hafif silindirlerin sistem içerisinde bulunması, hacim ve ağırlık bakımından bazı kısıtlar ortaya çıkarmaktadır. Yakıt hücresi teknolojisini kullanan

binek araçlarda depolamayı sağlayan hidrojen tanklarının konumlandırılması, araçta bulunan arka koltukların altına yerleştirilmesi şeklinde düşünülmektedir. Ayrıca, sistem için gerekli olan hidrojen gazının, nereden tedarik edileceği konuları da bu tartışma kapsamındadır; çünkü, hidrojen üreten kompleksler yaygın olarak bulunmamaktadır.

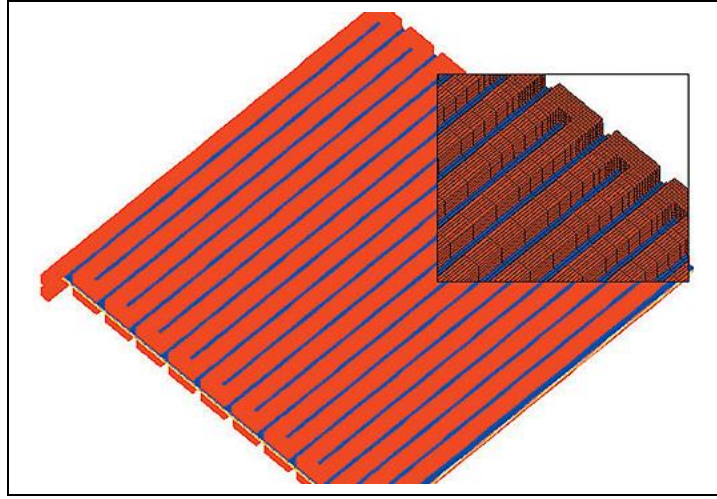
Yakıt hücrelerinin uygulama alanları, elde edilen güce göre sınıflandırılabilir. Elde edilen güç 1-10 kW'lık bir değerde ise, sistem düşük güç sınıfına ait olmakta ve kullanım alanları konut, site ve mikro uygulamalar şeklinde söylenebilmektedir. 10-300 kW'lık güç elde edilen sistemler orta güç sınıfında yer almakta olup, uygulamalar yine site ve ayrıca ticari boyutta olarak gösterilebilir. Son olarak, 250 kW ila 10 MW güç elde edilen sistemler, büyük güç sınıfında yer almakta ve santrallerde kullanılmaktadır. Elde edilen güçlere göre yapılan sınıflandırma ve uygulama alanları Tablo 1.1'de gösterilmiştir.

Tablo 1.1: Yakıt Hücrelerinin Elde Edilen Güç Değerine Göre Sınıflandırılması.

Elde Edilen Güce Bağlı Olduğu Sınıf	Elde Edilen Güç Miktarı [kW]	Uygulama Alanları
Düşük	1-10	Konut ve Mikro Uygulamalar
Orta	10-300	Site-Ticari Uygulamalar
Büyük	250-10000	Santraller

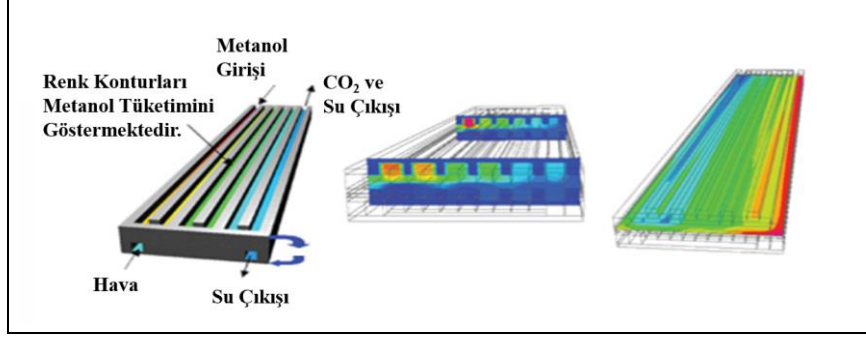
Günümüzde üretimde önemli olan unsurlardan diğerleri de işçilik, zaman ve fazla sayıda prototip üretmeden optimum olarak bir ürünü ortaya koyabilmektir. Doğru ürünü bir çıktı olarak sunabilmek için fazla sayıda prototip çıkartmak üreticiye vakit, maliyet ve mühendislik, işçilik saatlerinin kayıplarını beraberinde getirir; bu da üreticiyi verimlilikten uzaklaştıracaktır. Dolayısıyla, bilgisayar ve simülasyon teknolojisinin gelişmesiyle de yazılımlar, bu prototip sayılarının azaltılmasını sanal test ortamlarını kullanıcıya sunarak sağlamaktadır. Mekanik kulvarda sonlu elemanlar analizleri (FEA) bu gibi işleri ortaya koyarken, akışkanlar mekaniği, termodinamik ve diğer akış hesapları konularında da sonlu hacimler yöntemini kullanan programlar bu katma değeri kullanıcılara sunar. Örnek olarak, yakıt pillerinin üretimlerinin ne kadar zorlu olduğu düşünülürse, bu üreteçlerin yapılmasından evvel, performanslarının öngörülebilmesi için ANSYS FLUENT,

MATLAB gibi ticari yazılımlar bu kulvarda büyük rol oynamaktadır. Gerek bir boyut gerek çok boyutlu (iki ve üç boyutlu simülasyonlar) problemlerin ele alınması, gerekse tekil hücre ya da yığın olarak tabir edilen (stack) yakıt hücrelerinin bir araya gelmesiyle oluşmuş sistemlerin numerik metotlar ile çözdürülebilmesi bu platformların sunduğu kendi içlerine gömülü şekilde entegre edilen yazılımlar ile yapılmaktadır. Kullanıcı veya üreticiler, geometrilerini oluşturdukları yakıt hücrelerinin matematiksel modellerini ağ yapılar ile kurmalarının ardından, sınır şartlarını atamaları ve aldıkları belirli kabuller ile analizlerini gerçekleştirebilmektedirler. Şekil 1.3'te bir yakıt piline ait gaz kanalının ağ yapı görünümünden bir örnek bulunmaktadır.



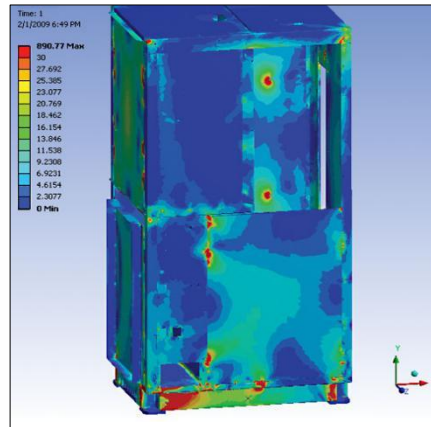
Şekil 1.3: Bir yakıt piline ait gaz kanalının ağ yapı görünümü.

Aynı biçimde, Şekil 1.4'te doğrudan metanol yakıt hücresinde (DMYH), metanol işlemi HAD metodu ile incelenmiş, metanolün hücre içerinden geçiş etkisi sırasında metanol konsantrasyonunun ve katalizör tabaka üzerindeki elektrik potansiyelinin görüntülenmesi bilgisayar simülasyon yazılımı yardımı ile yapılmıştır. Şekilde görüldüğü üzere, yakıt pili üzerinden dikine ve akış kanallarını enine kesecek doğrultuda yüzeyler, ki bu yüzeyler iso-surface olarak anılmaktadır, oluşturulmuş ve bulgular incelenmiştir.



Şekil 1.4: Doğrudan metanol yakıt hücresinin kesit alınan yüzeylerinden analiz sonuçlarının elektrik potansiyeli ve metanol konsantrasyonu bakımından incelenmesi.

Konutlarda ve sitelerde güç üretimi bakımından kullanılan yakıt hücrelerine örnek teşkil edecek bir diğer uygulama da ClearEdge Power şirketinin üretmiş olduğu yakıt hücresi yığınıdır. Bu sistemde, ilk olarak doğal gaz katalitik bir işlem ile temiz hidrojene dönüştürülmüştür. Ardından, elde edilen hidrojen gazı yakıt pili yığınınına uğrayarak doğru akıma (DC), kullanılabilir ısıya ve suya dönüşmektedir. DC akım, sistemde bulunan güç düzenleme ünitesine yönlendirilerek, alternatif akıma (AC) dönüştürülmüş ve konut içerisine sürekli bir güç sağlanmıştır. Firmanın mühendisleri yakıt hücresi sistemine dair olan tüm bileşenleri Autodesk Inventor yazılımını kullanarak tasarlamış, sonrasında da analizlerini ANSYS yazılımı üzerinden gerçekleştirmiştir. HAD yöntemine bağlı yapılan analizler dışında, yapısal analizler de yakıt hücrelerinin istif durumu için yapılmıştır. Şekil 1.5'te yığın halinde bulunan yakıt hücresinin dinamik ve statik stres analizleri yapılarak yapısal bütünlük durumları, sismik gereksinimler, devreye alınma ve taşınma durumlarında ortaya çıkabilecek yükler incelenmiş, kritik noktalar belirlenmiştir [15].



Şekil 1.5: Yakıt hücresi yığınınına ait yapısal analiz ekran görüntüsü.

2. YAKIT OLARAK HİDROJENİN SEÇİLMESİ VE YAKIT HÜCRESİ TİPLERİ

Bu çalışmanın başında değinildiği üzere, fosil bazlı yakıtların tüketilmekte ve emisyon bakımından çevreye olumsuz etkilerinin olması, yakıt fiyatları üzerindeki artışlar, yanma sonucu karbon bazlı ürünlerin ortaya çıkmaması gibi unsurlardan dolayı bilim insanları alternatif yakıt arayışına başlamışlardır. Ayrıca karbon içerikli yakıtların yanmaması sonucu da asit yağmurları ve canlılar üzerinde astım, solunum yolu problemleri gibi olumsuzluklar meydana gelmektedir. Geçmişten bu yana yapılan bilimsel inceleme ve araştırmalar, hidrojen gazının evrende çokça bulunabilir olması bakımından alternatif yakıt konusunda gözlerin bu noktaya çevrilmesini sağlamıştır. Bu yakıt türünün mevcut yakıt türleri ile kıyaslanabilir ve hatta yarışabilir olması kavramı, teoride yanma sonucu ortaya çıkan temiz ve tüketilebilir su, bileşiminde karbon molekülünün bulunmayışı, karışımlar sonucu tepkimelerde alevlenme, diğer bir tabiri ile tutuşma hızında olan artış, çevrimler arasındaki delta basınç farkının düşük miktarda olması gibi avantajlar ile tercih edilmesinde ağır basmaktadır.

İçten yanmalı motorlar konusunda bir değerlendirme yapıldığında, hava ile rahatça karışabilme, buharlaşabilme ve yine tutuşma hadiseleri petrol türevi yakıtların bu sistemlerde yıllarca kullanılmasının önünü açmıştır. Fakat beraberinde getirdiği ve bu bölümün başında bahsedilen olumsuzluklar dolayısıyla hidrojenin içten yanmalı motorlarda da kullanımı iyiden iyiye bir hedef haline gelmiştir. Hidrojen gazının, “yenilenebilir enerji” adıyla anılmasındaki esas etken, yanması sonucu ortaya çıkan su ile, yeniden hidrojen üretme imkânı tanınmasıdır [16].

Fiziksel özellikler bakımından hidrojen, sıvı ve gaz fazları ile kullanılabilirdiği gibi, gaz hali havadan 14 kat, sıvı hali ise hidrokarbon yakıtlara göre 10 kat daha hafiftir. Tutuşma özellikleri bakımından incelendiklerinde, hidrojenin alt ısı değeri 119,93 kJ/g iken, benzinin alt ısı değeri 43,4 kJ/g'dır. Adyabatik alev sıcaklığı yaklaşık olarak benzine yakındır. Aşağıda bulunan, Tablo 2.1'de hidrojen ve benzin yakıtları kütle ve hacimsel alt ısı değerleri ve adyabatik alev sıcaklıkları bakımından karşılaştırılmıştır [16].

Tablo 2.1: Hidrojen ve Benzine Ait Alt Isıl Değerler ve Adyabatik Alev Sıcaklıkları.

	Yakıt Türü	
	Hidrojen	Benzin
Kütleli Alt Isıl Değeri (kJ/g)	119,93	43,4
Hacimsel Alt Isıl Değeri (MJ/litre)	8,41	31,8
Adyabatik Alev Sıcaklığı (K)	2318	2470

Hidrojen üretimi çeşitli kaynaklar vasıtası ile yapılabilmektedir. Hidrojen, kömür ve doğalgazdan da elde edilebilmektedir; ancak bu kaynakların sınırlı rezervlere sahip olmasından dolayı, üretimi için çevrede sıkça bulunan su kaynağına yönelim olmaktadır. Hidrojenin kullanım alanlarının çeşitliliği, yılda 600 milyar metreküp üretime sebep olmaktadır. Sudan hidrojen elde etmenin en bilinen yolu suyun elektroliz yöntemi ile ayrıştırılmasıdır. Elektroliz yöntemi ile bu yakıtın elde edilebilir olması sonsuz enerji olarak adlandırılmasını sağlamaktadır. Daha başka üretim yöntemlerinin ortaya konulması gerekirse biyokütle, dalga, rüzgâr ve güneş enerjileri ile jeotermal enerji metotları ile hidrojen elde edilebilmektedir. Tablo 2.2’de hidrojenin elde edilme yöntemleri kategorize edilmiştir [16].

Tablo 2.2: Hidrojen Elde Etme Yöntemleri.

Üretim Kaynağı Sınıfı	Hidrojen Elde Etme Yöntemi
Fosil Yakıtlardan Elde Etme	Doğal Gazın Katalitik Buhar Islahı
	Petrolün Kısmi Oksidasyonu
	Buhar Demir İşlemi
	Kömür Gazlaştırılması
Elektroliz ile Elde Etme	Suyun Doğru Akım ile Ayrıştırılması
Isıl Kimyasal Yöntemden Elde Etme	Fosil veya Nükleer Yakıtlardan Elektroliz Yolu ile Temin Edilmesi

Tüm bu incelemeler sonucu bakıldığında, hidrojenin verim bakımından olan değerliliği, çevreye dost bir yakıt olması, depolama ve temin edilebilme sorunlarının ortadan kalkmasıyla gelecekte hemen hemen her enerji alanında kullanılabilecek bir yakıt olacağı gerçeğini net bir şekilde göstermektedir.

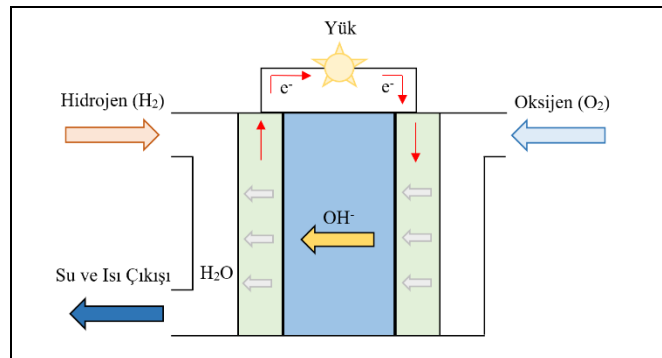
2.1. Yakıt Hücresi Tiplerinin İncelenmesi

Enerji elde etmede kullanılan yakıt hücreleri, kullandığı yakıt türü, membran yapı malzemesi, katalizör malzemesi, güç yoğunluğu, çalışma sıcaklığı ve verimleri bakımından farklılık göstermektedir. Bu başlık altında, belli başlı yakıt hücresi tipleri incelenerek, sonrasında da tablo üzerinde sınıflandırmaları yapılmıştır. Araştırma konusu olan PEM yakıt hücresi tipinin incelenmesi daha detaylı olarak ayrı bir başlık altında bulunmaktadır.

2.1.1. Alkali Yakıt Hücresi

Alkali yakıt hücrelerinin (AYH), üzerine çalışılması ve uygulamaları incelendiğinde diğer yakıt hücrelerine nazaran geride olduğu görülmektedir. Çalışma, ya da diğer bir adı ile işletme sıcaklıklarına bakıldığında, ortalama 80°C bir sıcaklıkta çalıştıklarından dolayı kimyasal tepkime sonrasında elde edilen ısıнын kullanımı uygun olmamaktadır. AYH için diğer bir önemli unsur, hava kaynağının mümkün mertebe karbon-dioksitten arındırılmış olması gerekmektedir. Bunun nedeni, alkali çözeltisi ile reaksiyona girmesi ve karbonatları üretecek olan karbon-dioksitleri içermesidir. Bu sebepten dolayı, AYH'lar için CO₂ zehirlenmesindeki hassaslık söylenmektedir [17].

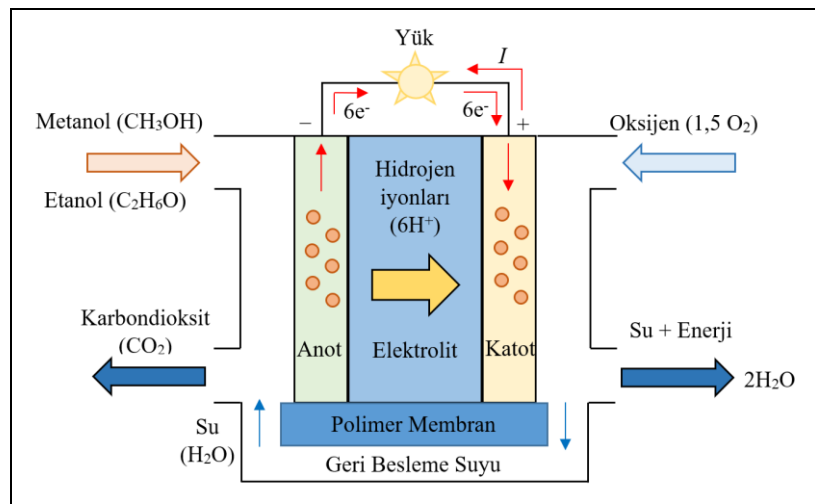
Bünyesinde platin kullanımı olmayan AYH'lar, saf hidrojen kullanmaktadırlar. Verimleri %42 ila 73 arasındadır. Çalıştırılmaları sonrasında içilebilir su ortaya çıkmasından dolayı uzay çalışmalarında kullanılmışlardır. Genellikle iletim için kullanılmışlardır. Güç yoğunlukları ise, 35 ila 105 W/kg olarak geçmektedir. Şekil 2.1'de AYH tipinin çalışmasına ait görsel bulunmaktadır.



Şekil 2.1: Alkali yakıt hücresinin çalışma şeması.

2.1.2. Doğrudan (Direkt) Metanol Yakıt Hücresi

İsminden de anlaşılacağı gibi bu yakıt hücresi metanolün doğrudan hücreye beslenmesi ile kullanılmakta ve çalışma prensibi proton değişim membran yakıt hücresine benzemektedir. Hücreye direkt beslenen metanol-su karışımı anot üzerinden bir reaksiyona neden olmaktadır. Elektrokimyasal reaksiyon sonucu metanolün parçalanması ile ürün olarak ortaya elektronlar, protonlar ve karbondioksit çıkmaktadır. Çalışma sıcaklıkları 25-130°C arasında değiştiğinden dolayı düşük sıcaklık kategorisindedirler. Bundan dolayı, düşük ve orta güç tarzı uygulamalarda kullanılmaktadırlar. Elektrolit olarak polimer iletken membran kullanan DMYH, verim olarak ortalama %40'lık bir değere sahiptir. Platin elementinin küçük organik moleküllerin ayrıştırılmasında önemli bir hızlandırıcı etkiye sahip olmasından dolayı anot katalizörlerinde bu element kullanılmaktadır. AYH tipi yakıt hücresinde bahsedilen zehirlenme durumu, DMYH düşük sıcaklıkta çalışmasına bağlı olarak CO ile katalizör zehirlenmesini gündeme getirmektedir. Böylece zamana bağlı olarak verim ve işletme aktivitesi düşüş göstermektedir [18]. DMYH tipi yakıt hücresine ait görsel Şekil 2.2'de gösterilmektedir.



Şekil 2.2: Doğrudan metanol yakıt hücresinin çalışma şeması.

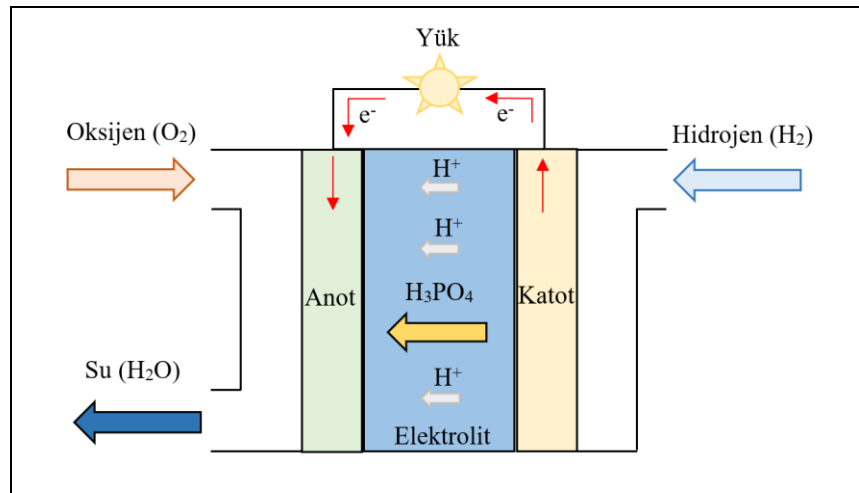
2.1.3. Fosforik Asit Yakıt Hücresi

Köklü bir tarihe sahip olan fosforik asit yakıt hücresi (FAYH), mobil uygulamalar dışında, büyük sistemler ve ticari uygulamalarda da kullanılmaktadır.

Elektrolit olarak sıvı fosforik asit kullanılan bu hücre tipinde, işletim sıcaklıkları 160-220°C arasında bulunmaktadır. Yani iletken olarak konsantre H_3PO_4 çözeltisi kullanılmaktadır. Ortalama olarak verimleri %55 civarındadır. Hücresinin verimi yüksek sıcaklık ve basınçlarda artış göstermektedir. Yakıt olarak hava, hidrojen, oksijen, doğalgaz ve biyogaz kullanabilen FAYH'nin, elektroliti asit olduğu için karbon-dioksit bu yapının elektrolitinde negatif bir sonuç doğuramamaktadır. Sıvı fosforik aside sahip olan elektrolit yardımıyla, pozitif yüklü iyonlar (H_2) katoda doğru geçiş yapmaktadır. Anot tarafında oluşan elektronlar, dış bir devreden yol alarak katoda geri dönüş yapmaktadır ve enerji üretimi bu şekilde sağlanmaktadır. Elektrokimyasal reaksiyon sonucunda ortaya çıkabilecek karbon-monoksit gazı üreticinin zehirlenmesine neden olabilir. Platin katalizöre ihtiyaç duymaktadırlar.

Birleşik güç sistemi ve birleşik ısı prensiplerine dayanan “kojenerasyon” sistem, modüler bir sistem olmakla beraber belirli bölgelerdeki ısınma ihtiyacını yararlı ısı enerjisi ile destekleyerek ısı ve elektrik enerjileri üretebilen sistemlerdir. FAYH tipleri, kojenerasyon mantığı ile kullanıldıklarında verim değeri %80'lere ulaşmaktadır [17].

Fosforik asit yakıt hücresinin çalışma sistemi Şekil 2.3'teki görsel ile açıklanmaktadır.



Şekil 2.3: Fosforik asit yakıt hücresinin çalışma şeması.

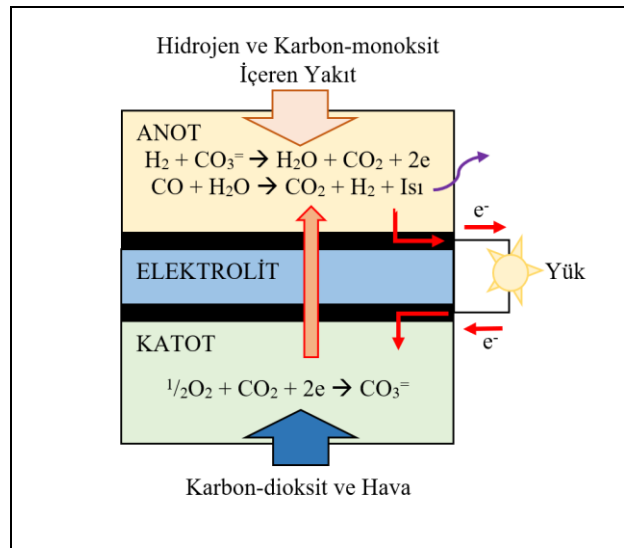
2.1.4. Erimiş Karbonat Yakıt Hücresi

Erimiş karbonat yakıt hücreleri (EKYH) elektrolit olarak alkali karbonatlarını kullanmasının (LiKCO_3 veya LiNaCO_3 gibi) yanı sıra bu yakıt tiplerinin çalışma sıcaklıkları $620\text{-}660^\circ\text{C}$ dereceleri arasında değişmektedir. Büyük ebattaki güç santralleri için uygulanmaya çalışan EKYH'nin verimliliği %45 ila %65 değerleri arasındadır. Bu tip yakıt hücrelerinde enerji elde etmek için yakıt olarak doğalgaz, kömür gazı, biyogaz veya hidrojen kullanılabilir. Erimiş karbonat yakıt hücrelerinin çalışma sistemi Şekil 2.4'teki görsel ile açıklanmaktadır [19].

İşletme sıcaklıklarının yüksekliğinden dolayı, kullanılan bileşenlerinin malzemeleri yüksek sıcaklık rezistansına sahip olmalıdır [17]. Yüksek çalışma sıcaklığına olan ihtiyaç, karbonat elektrolitinin yeterli iletkenliğe ulaşmasını sağlamak içindir. Bu konu ile ilgili avantajlardan biri de soy metal katalizörlerinin yakıt pili indirgeme hadiseleri ve oksidasyonu için gereğinin olmamasıdır [19].

Daha önce değinildiği üzere, büyük güç santralleri uygulamalarında kullanılan EKYH'leri elektriksel hizmetler ve askeri alanlarda da kullanılmaktadır [19].

Fosil yakıtlardan türetilen gaz içerisinde karbon-dioksit ve karbon-monoksit bulunmaktadır; bu yakıt pili tipinin karbon-dioksit bakımından duyarsız olmasının yanı sıra karbon-monoksit zehirlenmesine karşı dirayetlidir [17]. Erimiş karbonat yakıt hücresinin çalışma sistemi Şekil 2.4'teki görsel ile açıklanmaktadır [19].



Şekil 2.4: Erimiş karbonat yakıt hücresinin çalışma şeması.

2.1.5. Katı Oksit Yakıt Hücresi

Hidrokarbon yakıtlardan elektrik üretmek için uygun olan katı oksit yakıt hücreleri (KOYH), elektrolit olarak erimiş alkali metal karışımı kullanılmaktadırlar. Katı oksit yakıt hücrelerinin işletme sıcaklıkları 600-1000°C arasında olduğu için reaksiyonlar sonucunda kaliteli atık (yan) ısı üretmektedirler. Bu sebepten, daha evvelden değinildiği gibi, kojenerasyon mantığı ile kullanımlarına olanak sağlamaktadır. Zirkonyum oksit ya da zirkonya (ZrO_2) bu tip yakıt pillerinde elektrolit malzemesi olarak kullanılmaktadır. Molar %8 ila %9 yitriyum oksit (Y_2O_3) metal oksit eklemesi yardımı ile zirkonyum yalıtkanlık durumundan iletken hale geçirilebilmektedir. Başka bir taraftan açıklamak gerekir ise, sert ve gözeneksiz olan seramik bileşik elektrolit olarak bu yakıt pilinde devreye alınmaktadır [20], [21]. Katı oksit yakıt hücrelerinin ticari ve teknik olarak imalat alanlarında karşılaşılan en büyük zorluk malzeme fiyatları ve seramik yapıların imal edilmesidir [19].

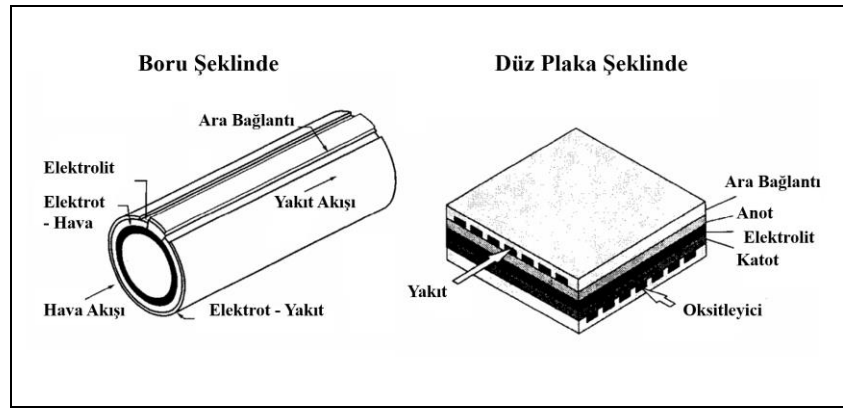
Katı oksit yakıt hücreleri, yakıt olarak hidrojen, biyogaz, doğalgaz ve kömür gazlarını kullanabilirken, oksitleyici olarak da oksijen ve hava kullanılmaktadırlar. Elektriksel verimleri %60 ila %65 arasında değişkenlik göstermektedir. Kojeneratif durumlarda ise verim değerleri %80-%85 arasındadır. Verimlerin düzgün olarak sağlanabilmesi ya da korunabilmesi için tıpkı diğer yakıt hücrelerindeki gibi üretece ait olan bileşenler kimyasal olarak belirli bir kararlılığa sahip olmalıdır.

Katı oksit yakıt hücrelerinin çalışma şekli incelendiğinde ilk olarak, oksitleyici katot tarafından hücrenin içerisine girerek elektrokimyasal reaksiyon sonrasında oksijen iyonları elektrolit yapısı içinden ilerleyerek anot bölgesine gider. Bu noktada sistemde bulunan yakıt oksitlenir. Bu olaya, diğer bir adıyla yükseltgenme denilmektedir.

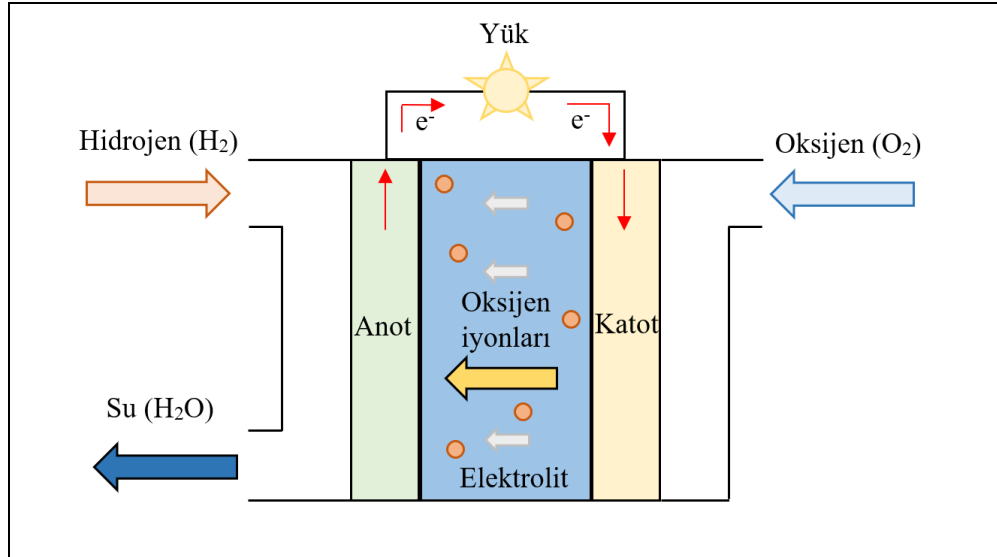
Amerika, Almanya ve Japonya gibi ülkelerde, hastane, kamu binaları, konut vb. uygulamalarda elektrik ihtiyacının karşılanmasında kullanılmaktadırlar. Yüksek verim, yüksek işletme sıcaklıkları ve atık ısının tekrar kullanılabilmesi bakımından büyük güç santrali uygulamaları için biçilmiş kaftandır. Bu durumu destekleyici olarak, doğalgaz santrallerinin yakınlarına bu sistemlerin kurulması tercih edilmektedir. Uygulamalardan somut bir örnek verilirse, Siemens-Westinghouse ortaklığında 2002 yılı itibarıyla, toplamda 1 MW'lık bir yakıt pili tesisi kullanıma açılmıştır. Araçlardaki uygulamalar konusunda birçok şirket çalışmalarını bu tip

yakıt pillerinin adaptasyonu konusunda yürütürken, karşılarına çıkan en büyük problem ya da dezavantaj yüksek sıcaklıkların düşürülmesi konusudur. Deniz uygulamalarından verilebilecek örnek, İsveç'in UDINE isimli arabalı feribotunda, 20kW gücündeki KOYH sistemi, telsiz ve navigasyon cihazlarının kullanımına hizmet vermektedir.

Katı oksit yakıt hücresinin boru şeklinde ve düz plaka şeklindeki görselleri Şekil 2.5'te bulunmaktadır [19]. Şekil 2.6'da ise KOYH'nin çalışma şekli gösterilmektedir.



Şekil 2.5: Boru ve düz plaka şeklinde katı oksit yakıt hücresi bileşenleri.



Şekil 2.6: Katı oksit yakıt hücresinin çalışma şeması.

Yukarıda ayrı başlıklar altında incelenen yakıt hücreleri dışında da farklı tiplerde yakıt hücreleri bulunmaktadır. Bunlar:

- Biyolojik yakıt hücresi (BYH)
- Metal hidrür yakıt hücresi (MHYH)
- Elektro galvanik yakıt hücresi (EGYH)
- Doğrudan borhidrür yakıt hücresi (DBYH)
- Doğrudan etanol yakıt hücresi (DEYH)
- Proton seramik yakıt hücresi (PSYH)

isimleri ile anılmaktadırlar.

Başlıklar altında incelenen yakıt hücresi tiplerinin elektrolit, çalışma sıcaklığı, elektriksel verim ve yakıt-oksitleyici özelliklerine göre sınıflandırılma durumu Tablo 2.3'te belirtilmektedir.

Tablo 2.3: İncelenen Yakıt Hücrelerine Ait Özelliklerin Sınıflandırılması.

Yakıt Hücresi Tipi	Kullandığı Elektrolit	İşletme Sıcaklığı [°C]	Elektriksel Verim Değerleri [%]	Yakıt	Oksitleyici
Alkali	Potasyum Hidroksit çözeltisi	25-80	42-73	H ₂	O ₂
Doğrudan Metanol	Polimer İletken Membran	25-130	20-40	CH ₃ OH	O ₂ , Hava
Fosforik Asit	Sıvı fosforik asit	160-220	55-80	H ₂ , Doğalgaz, Biyogaz	O ₂ , Hava
Erimiş Karbonat	Alkali karbonatlar	620-660	45-65	H ₂ , Doğalgaz, Biyogaz, Kömür gazı	O ₂ , Hava
Katı Oksit	Erimiş alkali metal karışımı	600-1000	60-85	H ₂ , Doğalgaz, Biyogaz, Kömür gazı	O ₂ , Hava

3. PROTON DEĞİŞİM MEMBRAN YAKIT HÜCRESİ VE LİTERATÜR ARAŞTIRMASI

Çalışmanın bu bölümünde daha önceki bölümlerde değinildiği gibi proton değişim membran yakıt hücresi temelleri hakkında bilgi verilmiş olup hücreye ait olan bileşenler ve çalışma esasları belirtilmiştir. Sonrasında, tez çalışmasında yapılan çalışma ile ilgili literatürde gerçekleştirilen araştırma ve çalışmalar anlatılmıştır.

3.1. Proton Değişim Membran Yakıt Hücresi

Elektrik üretme biçimi, çalışma sistemi ve dizaynı bakımından en iyi üreteçlerden biri olan proton değişim membran yakıt hücreleri, aynı zamanda katı polimer yakıt hücresi ismiyle de anılmaktadır. Bu üreticinin ilk geliştiricisi General Electric firması olup, 1960'lı yıllarda NASA'nın insanlı uzay araştırma programında kullanılmıştır [22].

PDMYH için kompakt yapı tabiri, akılcı tasarımı sayesinde az yer kaplaması ya da diğer bir söylemle kısıtlı alan işgal etmesi olarak açıklanabilir. PDMYH sandviç bir yapıya sahiptir ve toplamda dokuz katmandan oluşmaktadır. Hücre, ortasında bulunan ve zar bir yapıya sahip olan elektrolit veya membran ile, anot ve katot olarak iki temel bölgeye ayrılmaktadır.

En dış katmandan başlanması gerekirse, akım toplayıcı plakalar ilk karşılaşılan katmanlardır. Akım toplayıcı plakaların görevi enerji ve akımı transfer etmektir. Akım toplayıcı plakalar hacimsel olarak bir yakıt hücresinin hemen hemen bütününe kaplamaktadır. Ortalama bir değer verilirse, kütleli anlamda da %80'ine tekabül etmektedir. Bipolar plakalar adı verilen bu katmanlar içerisinde, elektrokimyasal reaksiyonların gerçekleşebilmesi için gerekli olan yakıt ve oksitleyici malzemelerin geçiş yapmasına olanak sağlayan akış kanalları bulunmaktadır.

Sözü edilen bu akış kanalları, PDMYH için verim hesaplamalarında tasarımları bakımından birçok araştırmaya konu olmuştur. Akış (gaz) kanallarında temel olarak aranan özellik hücre içerisinde mümkün mertebe fazla koridora sahip olmasıdır; yani, kanallara ait yüzey alanının geniş tutulması manasına gelmektedir. Dolayısıyla kanal tasarımları çoğunlukla serpantin bir yapıya sahiptir. Kaba bir tabirin kullanılması

gerekirse, kanallar tıpkı bir yılan gibi hücre içerisinde kıvrılarak geniş bir bölgeye yayılmalıdır. Serpantin kanalların kullanılması ve uygulamaları dışında spiral kanal tipleri için yine birçok çalışma yapılmıştır.

Kanalların üzerinde en çok uygulanan araştırma konularından bir diğeri de içerlerine engel konulmasıdır. Bir kanalın içerisine engel teşkil edecek yapıların yerleştirilmesi, yakıt ve oksitleyici malzemelerin bu hücreler içerisine bir nevi hapsedilerek sistemde kalma sürelerini uzatmaya yönelik bir harekettir. Sistem içerisinde yakıt ve oksitleyici ne kadar uzun süre tutulursa, hücrede bir o kadar elektrik üretilerek verim elde edilir. Fakat, atlanılmaması gereken nokta, sistem içerisine yapılacak olan yakıt ve oksitleyici beslemesinin ihmal edilmemesidir. Engel olan yapıların diğeri bir görevi de akış karakteristiğini değiştirmesidir. Yakıt hücrelerinin işletmesinde, kanallar tarafından karşılaşılan sorunlardan biri de duvarlarda meydana gelen suyun yoğunlaşması problemidir. Bu problem literatürde kanalların içine su basması (flooding) ismi ile geçmektedir. Birçok numerik uygulamalarda su, sıvı değil gaz fazı olarak kabul edilmiştir.

Akım toplayıcı plakalar (CC: ACC ve CCC) ve gaz (akış) kanallarının (AGC ve CGC) hemen altında gaz difüzyon tabakaları (GDL) bulunmaktadır. Katalizör tabakalarında (CL), reaksiyon sonucu oluşan elektronların iletilmesi, GDL yapısının en önemli görevidir [23]. Değinildiği üzere, kanal tasarım ve boyutlarının nasıl yakıt pili verimi üzerinde etkileri var ise, GDL bileşenlerinin de verim üzerinde önemli etkileri bulunmaktadır. GDL bileşenleri için verime etkisi olan unsurlar şu şekilde sıralanabilir:

- Eğrilik (tortuosity)
- Geçirgenlik
- Gözeneklilik (porozite)
- Hidrofobik davranış.

Gaz difüzyon tabakalarının diğeri bir adı literatürde destek katmanı (backing layer) olarak geçmektedir. GDL yapıları, genelde ince şekilde grafitleştirilmiş kumaşa asetilen siyahın uygulanması ile meydana gelmektedir. Ağırlıklarının %35'ini politetrafloroetilen (PTFE) oluşturmaktadır. Bu tabakalar yüksek iletkenlik özelliğinden karbon tel yapılara (lifli yapı) sahiptirler. GDL bileşeni katalizör

tabakanın bütün bölgelerine düzgün ve homojen bir şekilde tepkimeye yönelik gaz kaynağı sağlamaktadır. Birçok yakıt hücresinde rezerv bakımından karşılaşılan durumlarda olduğu gibi, oksitleyici gaz bakımından tamamen saf oksijenin gönderilemeyip hava içerisinde bulunan oksijenin yakıt pili sistemine gönderildiği durumlarda GDL bileşeninin gözenekliliği çok büyük bir önem arz etmektedir [24].

Membran bileşenine doğru ilerlendiğinde, GDL bileşenine bitişik olarak anot ve katot katalizör tabakalar ile (ACL ve CCL) karşılaşılmaktadır. GDL bileşenleri ve membran bileşenine ait ara yüzeye konumlandırılmaktadırlar. Katalizör terimi adından da anlaşılacağı gibi, reaksiyonu hızlandıran ve kolaylaştıran bir unsurdur. Yakıt ve oksitleyici penceresinden bakıldığında, normal şartlarda veya oda sıcaklığında hidrojen ve oksijenin bir araya gelmesinden herhangi bir reaksiyon ortaya çıkmamaktadır. Buradan hareket ile, kendiliğinden reaksiyona giremeyen bileşenlerin, enerji seviyelerinin beklenen reaksiyon için belirli bir mertebeye ulaşması gerekmektedir. Bu enerjiye aktivasyon enerjisi adı verilir ve Gibbs enerji değişimi ile belirtilmektedir. Yakıt pili içerisinde katalizör tabakanın (CL) bulunması bu enerji sınırını aşağıya çekmekte, dolayısıyla reaksiyon çok daha düşük sıcaklıklarda ortaya çıkmaktadır. Verim bakımından incelendiğinde pozitif bir etki ortaya koyar [25].

Gibbs serbest enerji değişimi veya mevcut enerji

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S \quad (3.1)$$

denklemini ile tanımlanmaktadır. Bu denklemde, ΔH , T ve ΔS sırası ile entalpi değişimi (J/mol), sıcaklık (K) ve entropi (J/mol) değişimini belirtmektedir.

Aynı zamanda, Gibbs serbest enerji değişimi

$$\Delta G = RT \ln K_d \quad (3.2)$$

denklemini ile de tanımlanabilmektedir. Burada R ve K_d terimleri sırasıyla gaz sabiti 8,314 (J/K.mol) ve ayrışma oranlarını (birimsiz) belirtmektedir.

Anot ve katot taraflarında kullanılan katalizör tabakaları için en doğru malzeme platindir. Katalizör tabakaları, PDMYH uygulamalarının ilk zamanlarında kullanılırken 28 (mg.cm⁻²) platin oranında kullanılmıştır. Maliyet unsurunun göz

önüne alınması ile bu oran ilerleyen yıllar sonucunda 0,2 (mg.cm⁻²)'ye indirilmiştir [22].

Katalizör tabakalarının ardından, yakıt hücresini iki ana bölüme ayıran membran (elektrolit) bileşeni bulunmaktadır.

Önceki kısımlarda değinilen GDL ve CL tabakalarının, membran bileşeni ile oluşturduğu beşli bileşen grubu, Membran Elektrot Çifti (MEÇ) ismiyle anılmaktadır [26]. PDMYH sistemlerine dair verim araştırmaları, bu MEÇ katman topluluğunun kalınlık değerlerinin değiştirilmesi ile birçok araştırma projesine konu olmuştur. Bu çalışmalara dair örneklere, literatür araştırması bölümünde yer verilmiştir.

3.1.1. Membran Bileşeni

Elektrolit adıyla da anılan membranın görevlerinden biri reaksiyon gazlarını ayırırken iletken bir yol sağlamasıdır. Polimer yapısı gereği iyon iletimi, iyonik gruplar halinde gerçekleşmekte olup, oluşan suya büyük oranda bağlılık göstermektedir. Uzay uygulamaları için 1960'lı yıllarda üretilen ve hala bugünlerde de kullanılan teflon bazlı malzeme DuPont'a ait olup, Nafion'dur. Uygulamalarda en çok kullanılan tipleri Nafion 115 ve 117'dir [19], [25]. Nafion elektrolitler kararlılık yönleri ile ön plandadırlar. Nafion, teflona benzemekte olup floropolimer bir iskelete sahiptir. Bunun anlamı florlanmış bir polimer yapıda olmasıdır. Zehirlenme ya da reaksiyonlar sonucu hücre içerisinde oluşan kimyasal ataklara karşı olan dayanıklılığı flor ve karbon arasındaki güçlü bağlardan gelmektedir. Hidrofobik özelliğe sahiptirler; bu da hücre içi su basmasını önleyecek bir özelliktir. Başka bir alandan örnek vermek gerekirse, bu benzer özellik dış giyim ve ayakkabı sektörlerinde kullanılmaktadır [22].

Nafion elektrolitler 50.000 saatin üzerinde gösterdikleri ömür ile birçok elektrokimyasal uygulamalarda tercih edilmektedirler. Fakat buna karşın, elektrolit yapıda meydana gelen kuruma probleminden dolayı, uzun ömürlerinin sağlanabilmesi için nemli tutulmaları çok önemlidir [25]. Nemliliğin, bileşen ömrüne katkısı olduğu gibi, verime de etkisi bulunmaktadır. Optimum bir denge sağlanması, daha önce değinilen su birikme problemi ile karşılaşılmasını bakımından elzemdir.

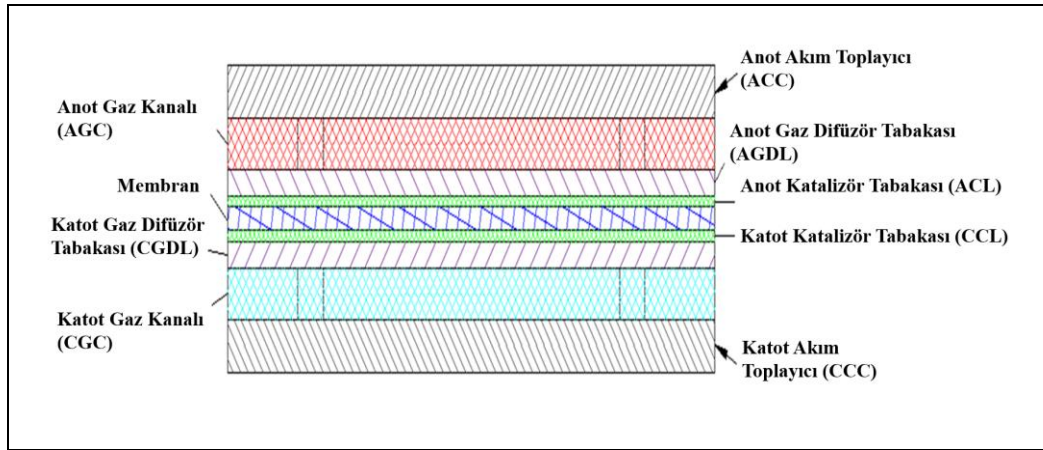
3.1.2. Özellikleri ve Çalışma Prensibi

Yakıt ve oksitleyici olarak sırasıyla hidrojen ve oksijen (hava) kullanan PDMYH'leri tıpkı KOYH'leri gibi, katı membran kullanmaktadır ve bu özellik sayesinde gaz geçişine karşı fevkalade bir direnç ortaya koymaktadır. Birçok kaynakta geçmesi ve genel özelliği bakımından düşük sıcaklıklarda çalışması kavramına zıt bir şekilde, yüksek sıcaklıklarda çalışabilen PDMYH için araştırma faaliyetleri yapılmaktadır [27]. Ortalama işletim sıcaklıkları incelenecek olursa, genelde değerler 25-80°C arasında değişiklik göstermektedir. Verilen bu değerler, yüksek sıcaklık PDMYH (HT-PEMFC) haricindedir. Yüksek sıcaklık konusunun, PDMYH sistemine getirebileceği negatif etki, su barındırması ve buharlaşmaya bağlı olarak basıncın kontrol altında tutulamama senaryosu, sızdırmazlık durumunun ihlali ile hücre yapısının hasarlanabilmesidir.

Genelleme yapılan bir değer olarak, elektriksel verimleri %40 civarında olan PDMYH, kojenerasyon uygulamalarında kullanıldıklarında verim değerleri %80'e ulaşmaktadır [20], [25].

Yapılan fiziki test sonuçlarına istinaden, PDMYH, diğer yakıt pilleri ile mukayese edildiklerinde yüksek akım yoğunluklarında çalışabilmektedirler [19].

Toplamda dokuz katmandan oluşan PDMYH'nin katmanlarına (bileşen) ait şema Şekil 3.1'de gösterilmektedir [25].



Şekil 3.1: Proton değişim membran yakıt hücresine ait bileşenler.

PDMYH için çalışma şeması Şekil 3.2’de gösterilmektedir. İlk olarak sisteme, yakıt olarak AGC boyunca hidrojen gönderilmektedir. Yapı içerisine giren hidrojenden elektronlar ayrılmaya başlar. Ayrılan elektronlar farklı bir devre güzergahı kullanarak katoda yönlendirilir. Ayrılan elektronlardan ortaya çıkan protonlar ise, proton geçirgen zar boyunca ilerleterek katot bölgesine yönlendirilir. Diğer bir taraftan, katot bölgesinde, CGC boyunca gönderilen oksitleyici (oksijen veya hava) ile, bu bölgeye ulaşan proton ve elektronların buluşması sonucu elektrokimyasal reaksiyon meydana gelir; bu sayede devre tamamlanmış olur. Ürün olarak su ve enerji elde edilir.

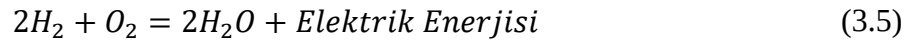
Yakıt hücresinin anot tarafında hidrojen molekülünün proton ve elektronlarına ayrışması



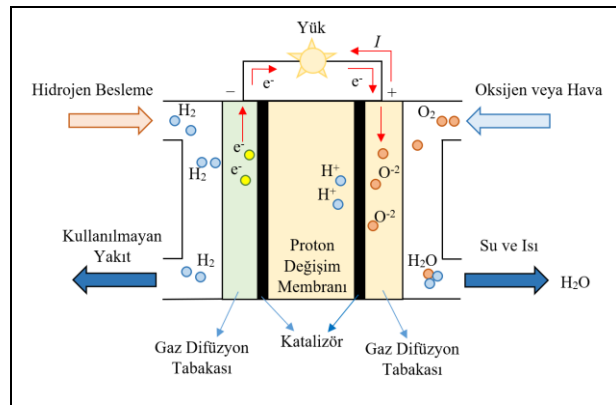
denklemleri ile ifade edilen biçimde gerçekleşir. Katot tarafında gerçekleşen reaksiyon ise



denkleminde gösterildiği gibidir. Toplam reaksiyon sonucu ise



çıktısı ürün olarak elde edilir.



Şekil 3.2: Proton değişim membran yakıt hücresinin çalışma şeması.

3.2. Literatür Araştırması

Literatür taraması sonucunda, yakıt hücrelerinin değinilen farklı tipleri için birçok araştırma yapıldığı görülmüştür. Aynı şekilde, bu çalışmada değinilen PDMYH için de farklı yöntemlerle araştırmalar yapılmış, araştırmacılar genel yani etraflı bir şekilde veya özel yani belirli unsurlara odaklanarak birçok değişkenden elde ettikleri verileri numerik ve deneysel sonuçlara dayandırarak literatüre geçirmişlerdir. Bir genelleme yapmak gerekirse, araştırmalara konu olan yakıt hücrelerinin incelemeleri, yakıt hücresine ait kısmi bir bölge, tüm bileşenleri içeren komple bir yapı ve hücrelerin bir araya gelmesi ile oluşmuş yığın yapılar şeklinde sınıflandırılabilirler. Fiziki testler dışında yapılan sanal ortam incelemeleri (simülasyonlar) iki ve üç boyutlu olarak gerçekleştirilmiş; bu incelemelerin kapsamına göre çözüm sürelerinde değişiklikler görülmüştür. Daha doğru bir ifadenin kullanılması gerekirse, simülasyonlarda üç boyutlu çözüm alanları (domain) tercih etmek ve ağ yapı sıklığını artırmak pahalı çözüm denilen (computationally expensive) zamanları gündeme getirirken, deneyselle yakın sonuçları da beraberinde taşımaktadır.

Atlanılmaması gereken noktalar, her deneysel tasarımda olduğu gibi, deneylerin kontrollü ve bilirkişiler tarafından uygulanması, sınır şartlarının net olarak belirlenmesi ve fiziki test ile sanal testin doğrulanarak araştırmalara yön verilmesi şeklinde sıralanabilirler. Bilindiği üzere, deneysel tasarım kuralları çerçevesinde, testlerde uygulanan değişkenlerin hangi sonuçlara yol açtığını belirleyebilmek için diğer değişken değerleri sabit tutulacak şekilde, bir değişken değeri üzerinden değerlendirmeler yapılmalı ve bunların kombinasyonu ile nihai deney sayılarına ulaşılmalıdır. Ancak bu şekilde değişkenlerin hangi parametreleri etkilediği net olarak belirlenebilir.

Bıyıkoglu ve Alpat'ın yaptığı çalışmalarda, düz kanallı bir PDMYH modelini üç boyutlu modelleyerek sistem içerisinde gerçekleşen tür taşınma hadiselerini, işletme basınçlarının değiştirilmesi ile anottan ve katottan gönderilen gaz oranlarının kurulan yakıt hücresi verimine olan etkilerini parametrik bir biçimde çözdürmüştür. Alınan sonuçlar çerçevesinde, bu üretece ait olan kutuplaşma eğrileri oluşturulmuş ve elde edilen değerler ile verimler ortaya konulmuştur. Katot bölgesinde su buharına ait kütle kesri, akım yoğunluğunu ciddi bir mertebede arttırmaktadır. Çözüm sonucu

elde edilen suyun sıvı fazda kabul edilmemesinden yani buhar fazı kabulünün yapılmasından da akımdaki artışa katkısının olduğunu belirtmiştir. Basınç değişkenlerinin sonuçlara yaptığı etki baskın olarak görülmüştür [25],[28].

İşletme basınçlarının yakıt hücresinde olan etkilerinin incelendiği bir diğer çalışma da Bilgili ve Sivrioğlu'na aittir [26]. Çözüm için üç boyutlu ve tek hücre bir PDMYH modeli incelenmiş olup, yazılım olarak Bıyıkoglu ve Alpat'ın çalışmalarında da başvurduğu ANSYS FLUENT yazılımı kullanılmıştır. Basınç etkisi farklı MEÇ kalınlıkları için yapılmıştır. Bunlardan, birinci MEÇ kalınlığı 0,845 mm, ikinci MEÇ kalınlığı ise 0,825 mm değerlerindedir. Uygulanılan işletme basınç değerleri ise sırasıyla 150 kPa, 200 kPa, 300 kPa, 400 kPa ve 500 kPa'dır. Çalışmada, iki farklı MEÇ kalınlığı ve beş farklı basınç değeri olmasına karşın yapılan on adet durumun birinde (Durum-10), farklı bir analiz olarak birinci MEÇ kalınlığına sahip olan model beşte bir anot ve katot kütle debilerinde belirlenen sınır şartı ile incelenmiştir. 300, 400 ve 500 kPa Basınç değerleri ve birinci MEÇ kalınlığına sahip olan durumlara göre, basıncın artması akım yoğunluğunda yükselmeye neden olmaktadır. Yine, ikinci MEÇ kalınlığına sahip olan modelin kendi içerisinde yapılan incelemede, yüksek basınç değerleri için akım yoğunluğunda artış elde edilmiştir. Elde edilen önemli bulgulardan biri ise, birinci MEÇ kalınlığına sahip modele ait basıncın 200 kPa değerinden 300 kPa'a çıkartıldığı durumda akım yoğunluğundaki artışın %117,44 olmasıdır. Debilerin değiştirilmesinin incelendiği durumda hücre voltajı arttıkça, elde edilen akımların farkı kapanmaktadır. Akım yoğunluğu değerinin, debiden az miktarda etkilendiği bulgusu edinilmiştir [26].

Aydın çalışmasında, PDMYH matematiksel modelinin iki boyutlu oluşturmuş ve kararlı hal bazında incelemelerde bulunmuştur. Yöntem olarak gaz basıncının, gözenekli alanlarda hesaplamalarının yapılabilmesi için Darcy kuralını kullanılmıştır. Gerilim dağılımı hesaplamalarında iletken ortam DC tercih edilmiştir; anot ve katot bölgeleri için gaz konsantrasyonu dağılımlarının hesaplamalarında konveksiyon ve difüzyon kütle dengesini kullanmıştır. Sonuçlarında oksitleyici, yakıt ve ürün olarak elde edilen suyun konsantrasyon dağılımlarını, farklı hücre voltaj değerlerinden gelen polarizasyon eğrileri ile voltaj-akım yoğunluğunu incelemiştir. PDMYH için oluşturduğu iki boyutlu matematiksel modelin çözümünde kullandığı yazılım MATLAB'tir [29].

PDMYH konusunda, farklı çalışma basınçları değerlendirmesine katkıda bulunan incelemelerden biri de Özdoğan vd. ait olan araştırmadır. Basınç değişkeninin yanı sıra, geometrik boyutların değişiminin getirdiği veriler de incelemeye tabi tutulmuştur. Boyutsal değişikliklerden kasıt, farklı kanal genişlikleridir. Matematiksel model incelenirken, hücre sıcaklığı 343 K değerinde sabit tutulmuş; işletme basınçları 100 kPa, 200 kPa ve 300 kPa olarak uygulanmıştır. Bulgular incelendiğinde, gaz kanalı boyutlarındaki artış reaksiyon sonucu oluşan akımı arttırmıştır. Hücre voltajının düşük olduğu durumlarda kanal kesitinin akım üzerindeki tesiri daha baskındır. İşletme basınçlarındaki artış, alınan verim bakımından pozitif bir etki gösterse de bu basıncın artırılması daha yüksek basınçlarda aynı etkiyi verememektedir [30].

Kırlı, optimizasyon ve dizayn parametreleriyle birlikte matematiksel modelin değerlendirmesine ait çalışmayı yapmıştır. Çalışma, birçok incelemenin derlemesi olup istatistiksel hassasiyet analizlerine başvurulmuştur. Bir PDMYH'ye ait optimum tasarım bulguları bir çıktı olarak bileşen kalınlıkları, kanal uzunlukları, basınçlar vb. değişkenler üzerinden sunulmaktadır [12].

Paralel, kapalı (interdigitated) ve serpantin akış alanlarına sahip PDMYH modelleri, iki fazlı ve üç boyutlu olarak Chiu vd. tarafından üretece olan performans ve taşıma hadiseleri çerçevesinde incelenmiştir. Matematiksel modellerin çözümü sonucunda, belirtilebilecek ilk bulgu serpantin ve paralel akış kanalına sahip hücrelerin kanal genişlik ve yüksekliği arttıkça su doygunluğu artmaktadır. Buna karşın, kapalı akış alanına sahip yapı, bu boyutlardan bağımsız olduğunu ortaya koymaktadır. İki fazlı inceleme sonucunda varılan bulgu, kapalı akış alanlı yapının hücre içerisinden sıvı suyun taşınması diğerlerine göre daha baskındır ve bunu serpantin akış alanlı yapı takip etmektedir. Özellikle serpantin akış kanallı hücre için, kanal kesitinin daraltılması ile hücre performansındaki artış vurgulanmaktadır. Ayrıca en-boy oranının, yakıt hücresi performansı üzerindeki kanal geometrisi etkisinin uygun bir parametre olmadığı belirtilmiştir [31].

Deneyssel bir çalışma yapan Cooper vd., paralel ve kapalı akış alanlarına sahip PDMYH'lerini stokiometriyi de hesaba katarak kanal geometrilerinin hücreden alınan güce olan etkisini araştırmıştır. Kanallara ait ideal bir hidrolik çapın, anot tarafında 1,5 ve katot tarafında 2,0 stokiometri değerleri ile, net sistem güç yoğunluğu için yaklaşık 0,4-0,45 mm arasında olması gerektiği bulgular sonucu ortaya konulmuştur. Maksimum net güç yoğunlukları için, daha yüksek hidrolik

kanal aplarına daha yksek stokiometri deęerleri gerekmektedir. Bu alıřmadaki nemli bulgulardan bir dięeri, kk hidrolik apların, kapalı akıř alanlı tasarımlar iin uygun olmamasıdır [32].

Deneyssel arařtırmalardan bir dięeri, akıř kanalı tasarımının pil performansına olan etkisi inceleyen elik'in alıřmasıdır. elik, karřılařtırma iin iki tip farklı dairesel serpantin, kare řekilli serpantin, modifiye edilmiř serpantin ve paralel akıř kanallarına sahip PDMYH tipleri ile toplamda beř farklı hcreyi sabit nem ve sabit sıcaklık kořullarında kıyaslamıřtır. Kare řeklindeki dizayn iin kanal dnřlerinin kavisli-kavissiz durumlarının karřılařtırmaları ve paralel kanallar ile karřılařtırması yapılmıřtır. Farkları az da olsa, kare řekilli tasarımın daha iyi performansa sahip olması, kanal geniřlięinin artması ile performanstaki dřř, kanal boyutlarında 1 mm deęerinin performans iin yeterli olması elde edilen en nemli bulgulardır [33].

İřletme sıcaklıęı, akıř kanallarının dizaynı ve katot gaz karıřımındaki baęıl nemin PDMYH performansı zerine etkileri Cheng vd. tarafından incelenmiřtir. Sıcaklık ve baęıl nem sırasıyla, 333 K ila 352 K arasında 10 K arttırılarak ve %50-%100 arasında %25 deęer arttırılarak er adet deęiřken řeklinde incelenmiřtir. Bulgular sonucunda, kanal dizaynının performans zerindeki etkisi en baskın olanıdır ve onu sıcaklık deęiřkeni takip etmektedir. En az etkiye baęıl nemin neden olduęu gzlenmiřtir [34].

Rohendi vd. tarafından yapılan bu alıřmada, 80°C ve 10 psi geri basınta 100 saat alıřmıř bir PDMYH aık devre voltajının kullanılması yardımıyla, performansındaki bozulma arařtırılmıřtır. Deneyssel olan bu arařtırmada, elektron mikroskopu yardımı ile ME yapısı incelenmiřtir. Geri basın, performans bakımından rete ierisindeki iletimi arttırmaktadır. Fakat, 100 saat sonrası karbon korozyonunun platin ile yıęıřması ve bozulması sonucunda, hcrede katot ve anot blgelerinde aktivitenin dřtę, kuruma ve membran bileřeninde atlamalar olduęu gzlenmiřtir [35].

Dięer bir HAD alıřması Bilgili vd. tarafından yapılmıřtır. Bu alıřma kapsamında, PDMYH ierisindeki gaz kanallarına engel yerleřtirilmesi gerekleřtirilerek hcrenin performansı incelenmiřtir. Arařtırmada kullanılan deęiřkenler baęıl nem, sıcaklık ve anot tarafındaki stokiometridir. Bu tez alıřmasında GDL bileřenleri gzeneklilik bakımından incelendięi gibi, bahsedilen Bilgili vd. alıřmasında da bulgular engellerin, gaz akıř kanalları boyunca

konsantrasyon dağılımını iyileştirdiği ve GDL bileşenlerinde daha düzgün taşınımın olduğu yönündedir [36].

Zhang vd. araştırmalarında HAD yöntemini kullanarak bir DC PDMYH modelini çoklu faz durum için analiz etmişlerdir. İncelemedeki odak noktası, katot tarafındaki sıvı su doygunluk dağılımı ve diğer işletme parametrelerinin yakıt hücresi geliştirmedeki performansına olan etkileridir. İlk bulgu, reaksiyon sonrası hücre içinde su birikmesine bağlı olarak oksijen difüzyon oranı düşüş göstermiştir. Diğer bulgulara devam edildiğinde, hücre için en uygun çalışma sıcaklığı 80°C olup; hücre performansının kritik sıcaklık değerlerine ulaşmadan yapılacak olan artışın performansa pozitif olarak etkimesidir. Son olarak, basıncın 1 atm değerinden 4 atm değerine yükseltilmesi ile oksijen difüzyon oranı ve hücre performansı iyileşme göstermektedir [37].

Yapılan araştırmalar doğrultusunda, PDMYH'lerinde sıcaklığın artırılması hücre performansı bakımından olumlu sonuçlar getireceği belirtilse de kritik değerlere ulaşıldığında hücre içerisinde kurumalar, buna bağlı olarak bileşenlerde meydana gelen çatlama ve bozulmalar gözlenmiştir. Dolayısıyla sıcaklığın kontrol altında tutularak yükseltilmesi, aynı zamanda nemlilikten ve doygunluktan fire verilmeden yapılacak hareketler ile çok daha yüksek performanslara ait PDMYH modelleri ortaya konulabilmektedir. Bu yönde araştırmacılar gözlerini, alışılmış sıcaklıklar haricinde varlık gösterebilecek yüksek sıcaklık proton değişim membran yakıt hücrelerini (HT-PEMFC) geliştirme konusunda çevirmişlerdir.

Rasheed vd. gelecek araştırmalara ışık tutabilmesi bakımından HT-PEMFC konusunda incelemede bulunmuşlardır. Birçok konuda araştırma yapılması ile ilgili açık kapı bırakan çalışmada, matematiksel modeller ortaya konulmuştur. Matematiksel modellerin geçerliliğinin kanıtlanabilmesi için bilimsel çalışmaların, belirtilen konu başlıkları kapsamında yapılması ve ilerleyen teknolojik gelişmelerin bu yapıyı tamamlayacak katkılar sunabilmesi için ileri tarihli faydaların beklendiği vurgulanmıştır [27].

HT-PEMFC konusunda incelenen bir diğer çalışma da Reddy vd. tarafına aittir. HAD yönteminin kullanılması ile, otomotiv endüstrisinde uygulanabilecek bir hücre yığınının incelemesi yapılmıştır. Hücre yığınının çalışma sıcaklığı 200°C mertebesinde dir. Matematiksel model, uygun bir ampirik polarizasyon eğrisi ile aşırı yüklenme, akım yoğunluğu ve sıcaklığın arasındaki bağıntıyı açıklamaktadır. Hücredeki akım yoğunluğu bakımından bakır soğutma plakaları önemli bir avantaj

sağlarken, grafitten yapılmış soğutucu plakalar benzer avantaj göstermektedir. Yığın içerisindeki dört hücreden birinde bulunan grafit soğutucu plakalar ile, çalışılan hücre alanına göre özel bir akım yoğunluğu elde edilmiştir [38].

Bilindiği üzere, HAD ve sonlu elemanlar metodlarının (FEM) birbirlerine bağlı olarak kullanıldıkları yöntemin ismi akışkan yapı etkileşimi (FSI) olarak anılmaktadır. İncelenen çözüm alanında, akış tek taraflı olarak yalnızca yapıya etki ediyorsa, buna tek yönlü akışkan yapı etkileşimi (one way FSI); akışın yapıya olan etkisinden sonra, yapı tekrardan akışkan karakteristiklerini değiştirecek yönde bir tesirde bulunuyor ise, bu yöntemde de iki yönlü akışkan yapı etkileşimi (two way FSI) denilmektedir.

Oh vd., çalışmalarında fosforik asit katkılı polibenzimidazol (PBI) bir elektrolite sahip HT-PEMFC yapısını üç boyutlu olarak reaksiyonlar sonucunda hücre üzerinde oluşan stres dağılımlarını FSI metodu ile incelemişlerdir. Bu incelemedeki amaç, HT-PEMFC işletilmesinden sonra hücre üzerindeki deformasyonları öngörerek çalışma şartlarını optimize edebilmektir. Burada elde edilen önemli bulgulardan biri, membran ve CL bileşenlerine kıyasla, GDL bileşeni daha fazla deforme olmaktadır. Bunun nedeni düşük elastisite modülüne sahip olmasıdır. Bu çalışma, MEÇ özellikleri ve hücre veya yığın montajlarında karşılaşılabilecek durumlara ışık tutacak özelliğe sahiptir [39].

Uygulamalar tarafında bir araştırma örneği ise Semiz'e ait olan çalışmadır. İnsansız hava araçlarında kullanılmak üzere en büyüğü 200 Watt güç değerine sahip dört farklı hava soluyan PDMYH üretilmiştir. Platinle ilgili bileşenlerin kaplanması ve performansı direkt olarak etkileyen zar elektrot montajı konuları detaylı olarak çalışılmıştır. İşletme zamanı yönünden hücre performansının incelendiği bu çalışmada, Semiz'in belirttiği üzere, insansız hava araçlarında kullanılabilecek nitelikte ilk olarak Türkiye'de üretilen piller bu çalışma sonucu ortaya çıkmıştır [40].

Yakıt hücrelerinin düzlemsel geometriler dışında boru şeklinde olan tipleri de bulunmaktadır. Bu tip geometriler üzerinde yapılan çalışmalardan biri Ahmar vd.'ne aittir. Farklı tabaka sayılarının ve farklı tasarımların, boru biçiminde olan PDMYH modellerinin performansına olan etkilerini incelemişlerdir. Biraz daha ayrıntılı anlatım gerekirse, beş adet boru şeklindeki PDMYH modelleri üzerinde farklı MEÇ düzenlemeleri kıyaslanmıştır. Bulgulardan biri, kanal sayısındaki artışın hücre akım ve güç yoğunluğundaki artışı beraberinde getirmesidir. Tüm senaryolarda giriş ve çıkış arasında olan basınç düşüşü farklı hücre gerilim değerlerinde ciddi bir fark

ortaya koymamıştır. Sıcaklık ve akım yoğunluğu bakımından elde edilen sonuca göre, sekiz dilime ayrılmış boru şekelindeki PDMYH modeli en yüksek, iki dilimli model ise en düşük değerlere sahiptir [41].

Tüp şeklinde olan PDMYH numerik simülasyonlarından bir diğer çalışma da Sierra vd. tarafından yapılmıştır. Matematiksel model, tüp şeklindeki plakalara sahip üç boyutlu PDMYH incelenmesidir. Çalışmanın temel amacı, akış alanlarında karşılaşılan basınç kayıplarını düşürmek ve katot bölgesindeki kütle transferini iyileştirmektir. Basınç kayıplarının analizi Butler-Volmer elektrokimyasal modeli kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Yaygın olarak kullanılan serpantin, kapalı ve düz akış alanlarına sahip modeller, tüp biçimindeki yapılara uygulanarak karşılaştırmalı incelemelerde bulunulmuştur. Performans değerlendirmeleri polarizasyon eğrileri üzerinden yapılmıştır ve benzer yapıların çıktıları ile mukayese edilmişlerdir. Akış alanlarındaki açılma ve kanalların bükülmesi basınç kayıplarını azaltmakla beraber, suyun tahliyesinin daha rahat bir şekilde gerçekleştiği gözlenmiştir. Akım yoğunluğu dağılımında en düzenli dağılım, serpantin yapı kullanılan tasarıma aittir. Tüm bulgular neticesinde, bu tip yakıt hücresi tasarımlarının mobil uygulamalardaki kullanımlarının önemi ve verdikleri gelecek vaatleri vurgulanmaktadır [42].

Tez çalışması kapsamında PDMYH modeline ait GDL bileşenlerinin özelliklerinden biri olan gözeneklilik değerinde uygulanacak olan sayısal değişikliklerin hücre performansına olan etkileri polarizasyon eğrilerinin elde edilmesi ile incelenmiştir. Yapılan bu çalışmaya ışık tutması bakımından, GDL bileşeni nitelikleri ve özelinde gözeneklilik değerlerinin yarattığı etkileri incelemek amacı ile literatür taramasının bu kısmında ilgili çalışmalara yer verilmiştir.

GDL bileşenlerine ait olan yapısal ve fiziksel özelliklerin hücre üzerine olan etkilerini Wilde vd. araştırmışlardır. Yaptıkları çalışmada, sıkıştırıcı kuvvetin (compressive force) fonksiyonu niteliğinde, GDL bileşenine ait kalınlık, düzlem boyunca olan direnç, gaz geçirgenliği ve gözenek boyutları gibi parametreler ortaya konulmuştur. Bir firma tarafından üretilen akım toplayıcı plakalar ve GDL bileşenlerine ait kendine has özellikler çalışma kapsamında değerlendirilmiştir. Elde edilen yüksek kaliteli gözenek boyut dağılımları diğer GDL değerlerinin ölçümleri ile korele edilmiştir [43].

Kahveci ve Taymaz çalışmasında, GDL gözeneklilik değerinin PDMYH performansı üzerindeki etkisini incelemek adına, bu değeri 0,3'ten başlatarak ve 0,1 arttırarak en son 0,6 değeri dahil olacak şekilde analiz değişkenlerini oluşturmuştur.

HAD yönteminin kullanıldığı bu çalışmada, model kararlı halde ve sabit basınç altında üç farklı kanal genişliği için ANSYS FLUENT platformunda analiz edilmiştir. Bulgular kapsamında kutuplaşma eğrileri oluşturulmuş ve yüksek gözenekliliğe sahip olan modellerin performanslarının diğerlerine göre daha yüksek olduğu gözlenmiştir. Yakıt ve oksitleyiciye ait kütle debilerinin sabit tutularak, kanal genişliklerinin arttırıldığı durumlarda ise, gaz hızının düşmesiyle birlikte performansların düştüğü belirtilmiştir [23].

Bunun dışında, Kahveci ve Taymaz'ın gözeneklilik konusunda değindikleri önemli bir nokta ise, 2012 yılında Wang vd. araştırmasında belirttikleri üzere, katot GDL bileşeninin hücre performansı üzerinde en büyük etkiye sahip olması durumudur. Bunu katot CL bileşeninin gözeneklilik değeri takip etmektedir. Anot GDL ve anot CL gözeneklilik değerleri ihmal edilebilir etkiler göstermektedir [23], [44].

İki boyutlu ve HAD yöntemi ile yapılan çalışmada, Afshari, PDMYH GDL gözenekliliğinin kısmi olarak bloke edilen katot akış kanalındaki oksijen transferi üzerindeki etkilerini araştırmıştır. Analiz edilerek incelenen değerler sırası ile oksijen akış oranı, üretilen suyun konsantrasyonu ve basınç kayıplarıdır. Önemli bulgulardan biri, etkili kanal alanının daraltılması ile gaz transferi artmakta, bu da beraberinde basınç kayıplarını getirmektedir. Ancak basınç kayıplarının önüne geçmek için, GDL gözeneklilik değerinin arttırılmasının gerekliliği çalışmada belirtilmektedir. Kanal içerisindeki bloke işlemi şaşırtma plakasının yerleştirilmesi ile sağlanmıştır. Şaşırtma plakası akış hızını hızlandırmış; GDL tarafına doğru hızlanan akış sonucunda oksijen difüzyon değeri artarak reaksiyonda hızlanma meydana gelmiştir. İdeal gaz denkleminde de bilineceği üzere hızın artması basınçtaki düşüşü ortaya çıkarmaktadır. Çalışma sonucu incelenen diğer bir durum, düşük GDL gözeneklilik değerlerinde akış şaşırtma arkasında kalarak girdaba neden olmaktadır [45].

Fadzillah vd. çalışmalarında, oluşturdukları iki boyutlu bir matematiksel model ve MATLAB yazılımını kullanarak, GDL bileşeninin kalınlığı ve gözeneklilik değerleri üzerinden PDMYH performansına olan etkilerini incelemişlerdir. Sayısal çözüm niteliğindeki çalışmalarını, literatürdeki deneysel verilerle de doğrulamışlardır. Bulgular göstermiştir ki, gözeneklilik değerlerinin artması katalizör tabakaya doğru olan oksijen difüzyon oranını arttırarak hücre performansında iyileşme sağlamaktadır. Kalın bir GDL tabakası kullanmak ise performans üzerinde

negatif bir etkiye neden olmaktadır. Önemli bir nokta olarak, GDL gözenekliliği ve kalınlığı için belirtilen optimum değerler sırasıyla 0,8 ve 130 μm 'dir [46].

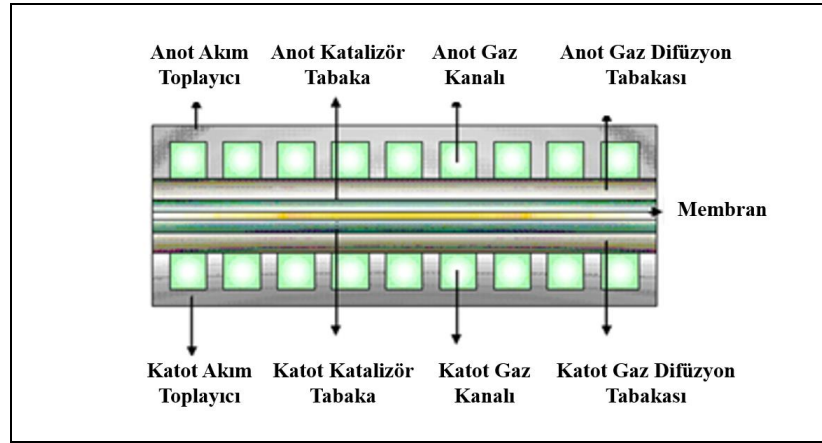
Pei vd. tarafından yapılan çalışma, üç boyutlu PDMYH modellerinin, FLUENT yazılımı kullanılarak GDL gözeneklilik değerlerinin, GDL kalınlıklarının hücre performansı üzerine olan etkilerini araştırma niteliğindedir. GDL gözeneklilik değerinin yükseltilmesi hücre performansını iyileştirirken; gözeneklilik değerinin arttırılmaya devam edilmesi ile performansta düşüş gözlenmektedir. Polarizasyon eğrisi incelendiğinde, 0,2 gözenekliliğe ait değer en düşük akım yoğunluğuna sahip olmaktadır. Hücre performansının en yüksek olduğu GDL gözeneklilik değeri ise 0.5'tir. Ayrıca, GDL kalınlık değerinin arttırıldığı durumda performans düşüşleri olduğu belirtilmektedir [47].

Espinoza vd. tarafından yapılan çalışmada, GDL geçirgenlik değerlerinin gözeneklilik değerleri ile ifade edildiğine dair bağıntılar, bu tez çalışmasındaki gözeneklilik değerlerine bağlı özelliklerin hesaplanmasında temel alınarak kullanılmıştır. Bağıntılardaki en önemli özellik, GDL yapılarını oluşturan fiber çaplardan bağımsız (ölçüsel bağımsızlığı olan) olmasıdır. Bu çalışmada geçen terimler ve denklemler "Çözümde Kullanılan Eşitlikler ve Çözücü Tipi" başlığı altında detaylı olarak anlatılmaktadır [48].

4. MATEMATİKSEL MODEL VE NUMERİK YÖNTEM

Çalışmanın bu kısmında, sayısal çözüm için gerekli olan matematiksel modelin oluşturulma safhalarına dair bilgiler bulunmaktadır. Bu safhalar belirtilirken ağ yapı durumu, sınır şartları, hangi değişkenlerin inceleme için kullanıldığı bilgileri detaylı olarak verilirken, yazılım tabanında hangi denklemlerin çözüldüğüne dair numerik yöntemlerden ayrıntılı olarak bahsedilmektedir.

Şekil 4.1’de PDMYH’ne ait kesit şeklinde bir şematik gösterimi bulunmaktadır [25]. Daha önceki kısımlarda da değinildiği üzere, PDMYH, anot ve katot bölgeleri için toplamda iki adet akım toplayıcı plaka, iki adet gaz difüzyon tabakası, iki adet katalizör tabakası, gaz kanalları ve anot-katot bölgelerini ayıran bir membran bileşenden oluşmaktadır.



Şekil 4.1: PDMYH'nin kesit biçimindeki şematik görünümü.

HAD yöntemi ile incelemesi yapılan yakıt hücresinin ölçüleri, ANSYS 13 versiyonunda kullanılan bir yakıt hücresine ait olan dış ölçüler ve bileşen ölçüleri baz alınarak belirlenmiş; ardından ANSYS Workbench içerisinde bulunan, ağ yapı kurulumu öncesi geometri temizliği (CAD Clean-up) ve içerisinde tasarım yapılabilen DesignModeler yazılımı kullanılarak hücre katısı oluşturulmuştur [49].

Simülasyonu yapılmak istenen bir CAD geometrisi dış bir program (farklı bir yazılım) kullanılarak da oluşturulabilir. Bu şekilde oluşturulan geometri, ağ yapı kurulumu gerçekleştirilmeden, yine DesignModeler ara yüzüne gönderilerek sadeleştirilmesi gerçekleştirilebilmektedir. Yabancı ismi ile “CAD Clean-up” denilen

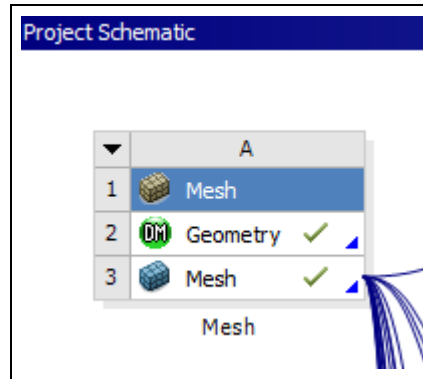
geometri sadeleştirme işleminin amacı, ağ yapı elemanlarının istenen kriterlere göre kurulabilmesi için simülasyon sonucunu etkilemeyecek geometrik detayların çözüm alanından uzaklaştırılmasıdır. Bu işlem yapılmadığı takdirde, bazı durumlarda geometriye bir ağ yapı kurulamadığı gibi, aksine bu detaylar etrafında istenilmeyen sayıda ağ yapı elemanı oluşarak gereğinden fazla bir çözüm süresi ile karşılaşılabilir.

Bu çalışmada, DesignModeler (DM) içerisinde bir katı dizayn edildiği için, geometrik temizlik yapılmasına ihtiyaç kalmamıştır.

4.1. Matematiksel Modelin Tanıtımı ve Oluşturulması

4.1.1. ANSYS DesignModeler ile Geometrinin Oluşturulması

Çalışmada ANSYS Workbench'in 15.0.7 versiyonu kullanılmıştır. Workbench ortamı içerisinde, simülasyonlar için gerekli birçok tekil (standalone) veya paket yazılım sistemini bulundurmaktadır. Birincil olarak Workbench ortamında, bir Mesh hücresi oluşturulmuş ve düşünülen yakıt hücresi geometrisi bu tekil hücre içerisinde gömülü olarak bulunan DM içerisinde tasarlanmıştır. Şekil 4.2'de Workbench ortamı içerisinde oluşturulmuş tekil bir Mesh hücresi gösterilmiştir.



Şekil 4.2: Workbench içerisinde oluşturulmuş ve içerisinde DesignModeler barındıran tekil bir Mesh hücresi.

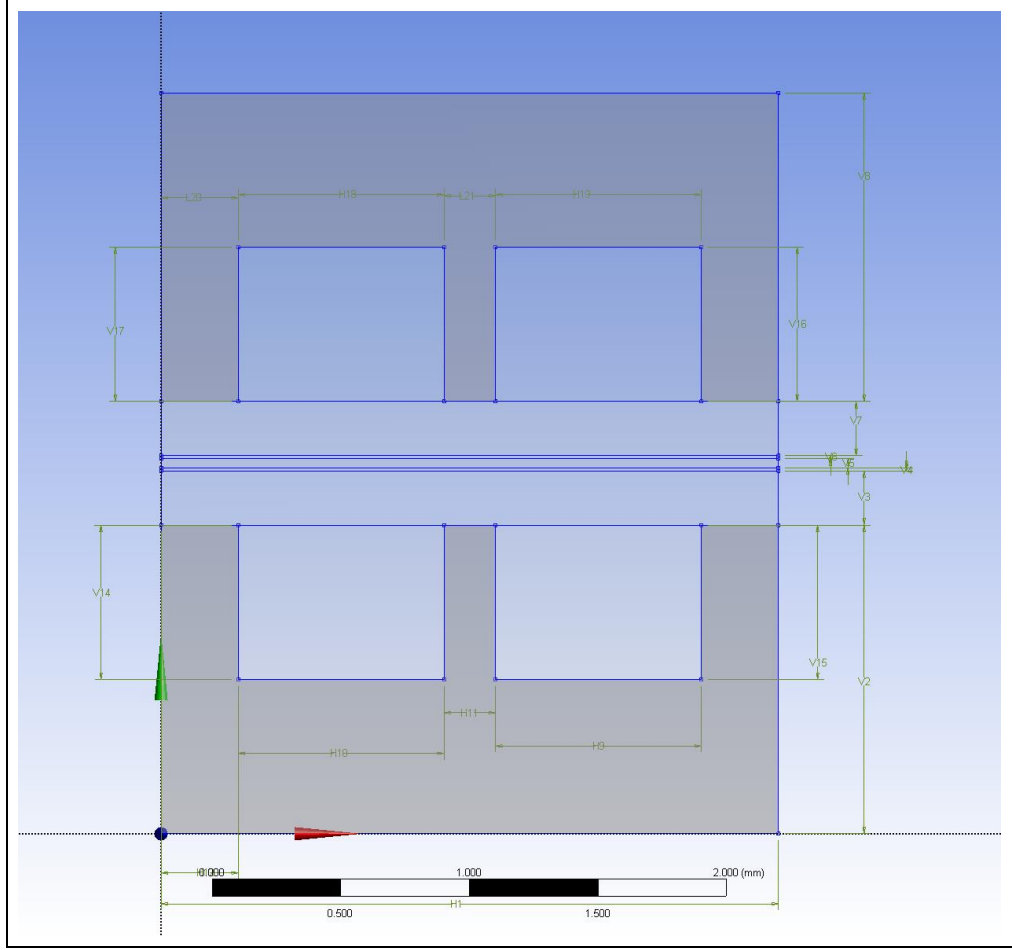
DM içerisinde yapılan işlemlere çok kısa değinilmesi gerekirse, işlem sırası şu şekilde sıralanabilir:

- XY Düzleminde tüm geometrik kısıtlamalara (constraints) uyularak, herhangi bir geometrik ölçü boşluğu bırakılmaksızın yakıt hücresinin tüm katmanları ayrı taslak çizimler (sketch) altına çizilir.
- Hücre uzunluğu istenilen ölçü çerçevesinde verilerek, ekstrüzyon işlemi tüm taslak çizimler için uygulanır; böylelikle tüm katmanların katı geometrisi elde edilmiş olur. Ekstrüzyon komutunun uygulandığı ölçü, bu yapı için 125 mm'dir ve bu işlem pozitif Z koordinatında yapılmaktadır.
- Gaz kanalları, akım toplayıcı plakaların üzerinde bulunduğu için, katılar birbirlerine girişim yapmaktadır. Bu girişimin engellenmesi adına, çıkarma komutu (subtract) ile gaz kanalları, katıları işlem sonrası kaybolmayacak şekilde birbirleri içerisinden çıkartılır. Yapılan işlem sonucunda gaz kanalları geometrilerine uygun şekilde akım toplayıcı tabakalar bir nevi oyulmuş olur. Bu yakıt hücresi modelinde anot ve katot için iki adetten, toplamda dört adet gaz kanalı bulunmaktadır. Bundan dolayı, ANSYS DM ara yüzünde, sırası ile Create ve Boolean işlem silsilesinin altında bulunan çıkarma işleminden (subtract) iki kez uygulanmıştır (anot ve katot bölgeleri için).
- Akım toplayıcı tabakalar haricinde tüm geriye kalan yedi katman akışkan (fluid) olarak tanımlanır.
- Ağ yapı kurulması sırasında, ayrı katmanlar içerisinde bulunan düğümlerin birbirleri ile öpüşebilmesi için, yakıt hücresinin dokuz katmanı montaj mantığı ile tek bir parça (part) altına toplanır.
- Tüm katmanlara ilgili isimleri verilir.

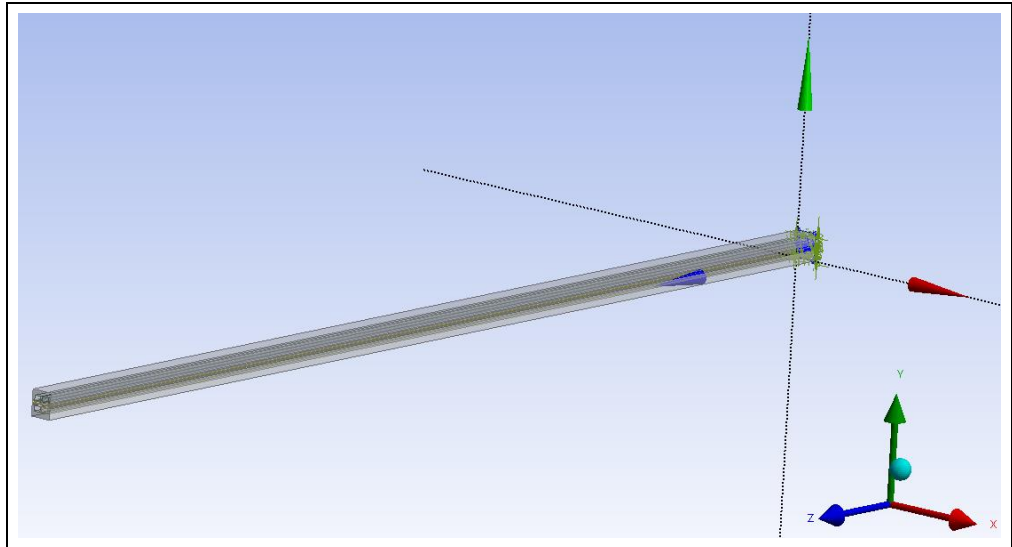
Tüm bu işlem sırasının ardından yakıt hücresinin katısı hazırlanmış olur. Bir sonraki işlem basamağı ağ yapının kurulması işlemidir.

Ağ yapı kurulma işlemine geçilmeden, yakıt hücresinin katısının oluşturulmadan önce, geometrik kısıtlarının verilen haline ait olan ekran alıntısı Şekil 4.3'te gösterilmiştir.

Ekstrüzyon komutu (extrude) ile elde edilen katılara ait olan ekran alıntısı Şekil 4.4 ile gösterilmektedir.

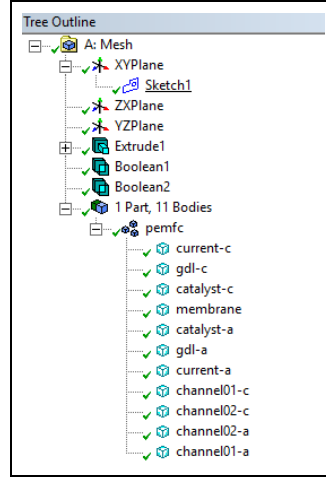


Şekil 4.3: XY Düzlemi altında tanımlanan geometrik kısıtlama ve verilen ölçüler.



Şekil 4.4: Ekstrüzyon komutu sonrasında elde edilen katı bileşenler.

Ayrıca, yakıt hücresi katısı oluşturulurken yapılan tüm işlemlerin sırası DM ara yüzünde sol tarafta bulunan “Tree Outline” altına atılmaktadır. Bahsedilen görsellerin arkasından, işlem sırasına ait ekran alıntısı Şekil 4.5’te gösterilmektedir.



Şekil 4.5: DM içerisinde yapılan işlem sırası.

Yakıt hücresi oluşturulurken boyutlandırmada Tablo 4.1’de gösterilen tasarım ölçüleri kullanılmıştır.

Tablo 4.1: Oluşturulan Yakıt Hücresine Ait Tasarım Ölçüleri.

Tasarım Ölçüleri	Değer
Hücre Uzunluğu @+Z Koordinatı[mm]	125
Kanal Uzunluğu @+Z Koordinatı [mm]	125
Kanal Yüksekliği @+Y Koordinatı [mm]	0,6
Kanal Genişliği @+X Koordinatı [mm]	0,8
Çift Kanallın Birbirleri Arasındaki Mesafe @+X Koordinatı [mm]	0,2
Kanalların CC Dış Duvarına Olan Mesafesi [mm]	0,3
CC Kalınlığı @+Y Koordinatı [mm]	1,2
CC / Hücre Genişliği @+X Koordinatı [mm]	2,4
GDL Kalınlığı @+Y Koordinatı [µm]	210
CL Kalınlığı @+Y Koordinatı [µm]	12
Membran Kalınlığı @+Y Koordinatı [µm]	36
Toplam PDMYH Kalınlığı @+Y Koordinatı [mm]	2,88

Tasarım ölçüleri dikkate alındığında, PDMYH sırasıyla 2,4 mm ve 2,88 mm genişlik ve yükseklik değerlerine sahiptir. Tüm hücrenin boyu ise 125 mm'dir. Bu bilgiler dahilinde MEÇ kalınlığı 0,48 mm olmaktadır.

Diğer bir tarafta çözüm alanı denilen domain belirtilecek olursa, hücre yapısı uzayda koordinatların (X, Y, Z) sırası ile 0, 0, 0 ve 2,4, 2,88, 125 mm aralığında uzanmaktadır.

Tek bir montaj parçasının altına atılan katmanların hangi isimlendirmeler ile belirtildiği Tablo 4.2'de gösterilmektedir.

Tablo 4.2: Yakıt Hücresine Ait Olan Katmanların İsimlendirmeleri.

Yakıt Hücresine Ait Olan Katmanlar	Verilen İsimlendirmeler
Anot Akım Toplayıcı	current-a
Katot Akım Toplayıcı	current-c
Anot Gaz Difüzyon Tabakası	gdl-a
Katot Gaz Difüzyon Tabakası	gdl-c
Anot Katalizör Tabakası	catalyst-a
Katot Katalizör Tabakası	catalyst-c
Anot Gaz Kanalı	channel01-a, channel02-a
Katot Gaz Kanalı	channel01-c, channel02-c
Membran	membrane

4.1.2. Yakıt Hücresinin Ağ Yapı Modelinin Oluşturulması

ANSYS Workbench proje ekranında oluşturulan Mesh hücresinin içinde bulunan DesignModeler kısmında geometri tasarlandıktan sonra sıradaki yapılması gereken işlem ağ yapının kurulması işlemidir. Ağ yapının kurulduğu bu kısma ANSYS Mesh Platform denilmektedir.

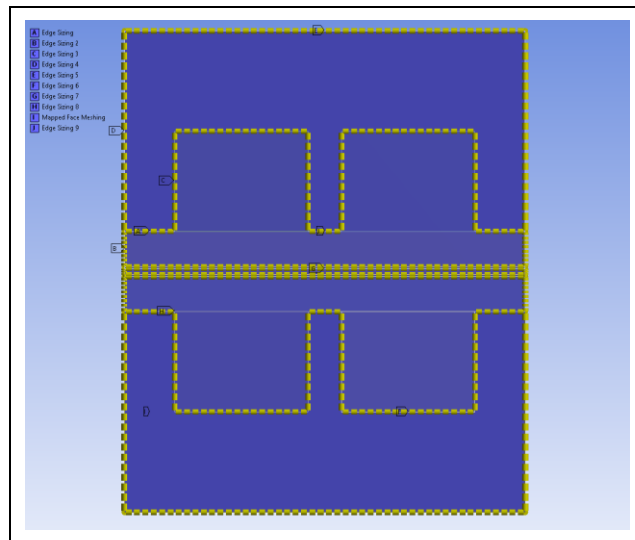
ANSYS Mesh Platform içine gönderilen geometrinin ağ yapı kurulumu için şu işlemler sırası ile uygulanmıştır:

- Hücre geometrisi XY düzlemi üzerinde oluşturulmaya başlandığı ve bu düzlemden ekstrüzyon işlemi ile katıya çevrildiği düşünüldüğünde, XY düzlemi üzerinde bulunan kenarlara “Edge Sizing” boyutlandırılması ile kenarlar

mantazam Őekilde b l nebilecektir. Bundan dolayı, ilgili t m kenarlar se ilerek bu boyutlandırma parametreleri uygulanmıŐtır.

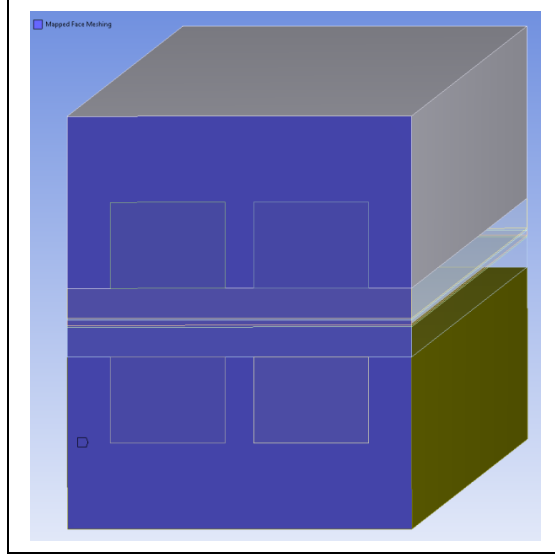
- Kenar boyutlandırma iŐleminin ardından “Mapped Face Meshing” (MFM) iŐlemi ile y zey  zerinde d zg n elemanların oluŐturulması saėlanmaktadır. D zlem bazında atılan aė yapı elemanları  zerinde durmak gerekirse, bu elemanlar d rt adet d ė m noktasına ve d rt adet kenara sahip dikd rtgen elemanlardır.
- “Edge Sizing” iŐleminin aynısı, yakıt h cresi geometrisi boyunca pozitif Z-koordinatında uzanan ve uzunlukları 125 mm olan t m kenarlara da uygulanmaktadır.
- T m bu boyutlandırma ayarlarının yapılması sonrasında ANSYS Mesh Platform’da g ncelle (Update) ya da bir diėer adı ile aė yapı  ret (Generate Mesh) komutu ile istenilen ayarlarda aė yapı elemanları oluŐturulmaktadır.
- Genel aė yapı kontrol  sonrasında, ANSYS FLUENT   z c s nde sınır Őartlarının doėru ve kolay bir Őekilde verilebilmesi i in belirli y zeyler duruma g re tek tek veya toplu olarak se ilerek isimlendirilmektedir.
- Aė yapısı kurulmuŐ olan PDMYH modeli, FLUENT   z c s ne g nderilmek  zere, ANSYS Workbench proje ortamında kaydedilir.

Őekil 4.6’da boyutlandırmada kullanılan Edge Sizing iŐleminin ekran alıntısı g sterilmektedir.



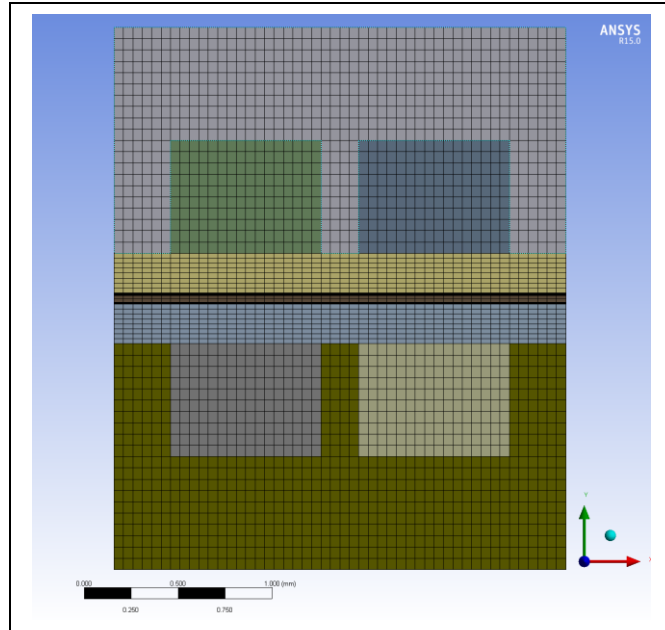
Őekil 4.6: Edge Sizing iŐleminin uygulanması.

Şekil 4.7’deki ekran alıntısında ise mavi renk ile belirtilen yüzeylere ağ yapısını düzenlemesi için MFM işleminin uygulanması gösterilmektedir.



Şekil 4.7: MFM işlemi uygulanan yüzeyler.

Ağ yapısı kurulmuş olan PDMYH modeline ait görsel Şekil 4.8’de gösterilmektedir.



Şekil 4.8: Ağ yapısı kurulmuş olan PDMYH modeli.

İşlemler sırasında değinilen ve sınır şartlarının atanmasında kullanılan yüzeylere ait yapılan isimlendirmeler Tablo 4.3'te gösterilmektedir.

Tablo 4.3: Sınır Şartı Ataması Yapılan Yüzeylere Ait Olan İsimlendirmeler.

Yüzey Adı ve Pozisyonu	İsimlendirme	FLUENT Çözücüsündeki Sınır Şartı Karşılığı
Anot Tarafı Giriş ($z = 125$)	mass-flow-inlet-01-a	MASS FLOW INLET
	mass-flow-inlet-02-a	MASS FLOW INLET
Katot Tarafı Giriş ($z = 0$)	mass-flow-inlet-01-c	MASS FLOW INLET
	mass-flow-inlet-02-c	MASS FLOW INLET
Anot Tarafı Çıkış ($z = 0$)	outlet-01-a	PRESSURE OUTLET
	outlet-02-a	PRESSURE OUTLET
Katot Tarafı Çıkış ($z = 125$)	outlet-01-c	PRESSURE OUTLET
	outlet-02-c	PRESSURE OUTLET
Anot Terminal ($y = 2,88$)	wall-terminal-a	WALL
Katot Terminal ($y = 0$)	wall-terminal-c	WALL
Anot Tarafı Gaz Kanalı Duvarları	wall-ch-01-a	WALL
	wall-ch-02-a	WALL
Katot Tarafı Gaz Kanalı Duvarları	wall-ch-01-c	WALL
	wall-ch-02-c	WALL
Yakıt Hücresinin Bitiş Yüzeyleri	wall-ends	WALL
Anot Tarafı Difüzyon Tabakası Duvarları	wall-gdl-a	WALL
Katot Tarafı Difüzyon Tabakası Duvarları	wall-gdl-c	WALL
Yakıt Hücresinin Yanal Sınırları	wall-sides	WALL

Ağ yapı detaylarına girildiğinde, hücre bileşenlerinin kalınlığını temsil eden Y-koordinatı boyunca kaç katman mesh atıldığı, katmanların her birinin kaç adet düğüm ve elemandan oluştuğuna dair istatistik Tablo 4.4'te verilmektedir. Ayrıca Tablo 4.5'te ağ yapı ile ilgili diğer parametrelere ve değerlerine yer verilmiştir.

Tablo 4.4: PDMYH Ağ Yapısının Katman Kalınlıkları, Düğüm ve Eleman Sayıları.

Bileşen Adı	Bileşen Kalınlığı [mm]	Y-Koordinatı Boyunca Atılan Ağ Yapı (Mesh) Katmanı Sayısı	Toplam Düğüm Sayısı	Toplam Eleman Sayısı
ACC	1,2	20	91.854	80.000
AGC	0,6	10	47.124	40.000
AGDL	0,21	8	55.566	48.000
ACL	0,012	8	55.566	48.000
Membran	0,036	8	55.566	48.000
CCL	0,012	8	55.566	48.000
CGDL	0,21	8	55.566	48.000
CGC	0,6	10	47.124	40.000
CCC	1,2	20	91.854	80.000
Toplam	2,88	100	500.094	480.000

Tablo 4.4 dikkatli incelendiğinde, toplam düğüm sayısının 555.786 olması gerekirken 500.094 olduğu görülmektedir. Bunun sebebi, çözüm sırasında hesaplamanın yapılabilmesi için katmanların montaj mantığı ile tek bir parça altına atılmasından gelen, öpüşen ya da konuşan diye tabir edilen ortak düğüm noktalarıdır.

Tablo 4.5: PDMYH Ağ Yapısına Ait Diğer Parametrik Değerler.

Parametre Adı	Değeri
Dış Duvar-Kanal Arası Olan Kalınlık [mm]	0,3
İki Kanal Arasındaki Duvar Mesafesi [mm]	0,2
Dış Duvar-Kanal Arası Uygulanan Ağ Yapı Bölüntü Sayısı	6
İki Kanal Arasındaki Duvara Uygulanan Ağ Yapı Bölüntü Sayısı	4
Akım Toplayıcı Bileşenlerinin X-Koordinatında Uygulanan Ağ Yapı Bölüntü Sayısı	48
Gaz Kanallarına X-Koordinatında Uygulanan Ağ Yapı Bölüntü Sayısı	16
GDL, CL ve Membran Bileşenlerinin X-Koordinatında Uygulanan Ağ Yapı Bölüntü Sayısı	48
Z-Koordinatında Uzanan Tüm Kenarlara Uygulanan Ağ Yapı Bölüntü Sayısı	125

Değinilen ağ yapı bölüntülerinin “Edge Sizing” işlemleri ile uygulanması sırasında, ağ yapıyı oluşturacak elemanların düzlemsel bazda bozulmaması ya da farklı bir anlatımla, çarpıklığa uğramaması için bölüntü davranışları (Behavior) “Hard” olarak tanımlanmıştır. Bu davranış parametresinin, “Hard” yerine zıttı olan “Soft” bırakılması durumunda, ki varsayılan parametresi “Soft”tur, bileşenlerin diğer bileşenler ile geçiş yaptığı bölgelerde çarpılmalar görünecektir.

Gerek HAD gerekse sonlu elemanlar metotlarının çözüm kısmına geçilmeden evvel, kurulan ağ yapıdaki elemanların kalitesinin kontrolünün yapılması hem sağlıklı bir çözüm almak hem de çözüm esnasında bir problemle karşılaşmamak için büyük bir önem arz etmektedir. Bu sebepten ötürü, oluşturulan ağ yapı ANSYS Mesh Platformun sağlamış olduğu istatistiki veriler ile kontrol edilmiş ve bu değerler Tablo 4.6’da gösterilmiştir.

Tablo 4.6: PDMYH Ağ Yapısının Kalitesine Ait Olan İstatistiki Değerler.

İstatistik Adı	Değer			
	Minimum	Maksimum	Ortalama	Standart Sapma
En-Boy Oranı	20	666,67	173,175	253,6311
Jacobian Oranı	1	1	1	0
Maksimum Köşe Açısı [°]	90	90	90	0
Ortogonal Kalite	1	1	1	0
Eğrilik (Warping) Faktörü	0	$3,6056 \times 10^{-12}$	$7,902 \times 10^{-14}$	0
Çarpıklık (Skewness)	$1,3057 \times 10^{-10}$	$1,5413 \times 10^{-10}$	$1,3107 \times 10^{-10}$	0

Tablo 4.6’dan da görülebileceği üzere, PDMYH ağ yapısını oluşturan eleman kaliteleri istenilen mertebelerdedir. Burada dikkat çeken değer en-boy oranının maksimum değeridir; 12 µm kalınlığındaki CL bileşeninin kalınlığının sekiz elemana bölünmesi ve her bir elemanın Z-koordinatında 1 mm uzunluğa sahip olmasından (125 adet bölüntü) gelmektedir. Denklem 4.1’de bu hesaplama gösterilmiştir.

$$\frac{\text{Eleman Uzunluğu}}{\text{Eleman Kalınlığı}} = \frac{1 \text{ mm}}{(0,012/8) \text{ mm}} = 666,6667 \quad (4.1)$$

Yakıt ve oksijenin, hücre içerisindeki ilerleme yönü olan Z-koordinatında 1 mm eleman uzunluğu yeterli olarak kabul edilmiş; elektrokimyasal reaksiyonların ve taşıma hadiselerinin etkili olarak gerçekleştiği Y-koordinatı ise verilerin daha doğru elde edilebilmesi açısından, bileşenler bu ekseninde daha küçük bölüntüler ile modellenmiştir. Kontrol açısından baz alınan ANSYS FLUENT uygulamasında da hücre uzunluğu 125 mm olup, tüm hücrenin ağ yapısı Z-koordinatında 125 bölüntü ile kurulmuştur [49].

4.1.2.1. Ağ Yapı Tipi ve Uygunluğu

Bilindiği üzere, matematiksel modellerin kurulması aşamasında kullanılan farklı ağ yapı elemanı tipleri bulunmaktadır. Bunların sınıflandırılması yapılırsa ve ANSYS terminolojisine göre (diğer yazılımlarda isimler farklılık gösterebilmektedir) belirtilirse, ağ yapı tipleri iki boyutlu ve üç boyutlu olarak Tablo 4.7’de incelenmiştir:

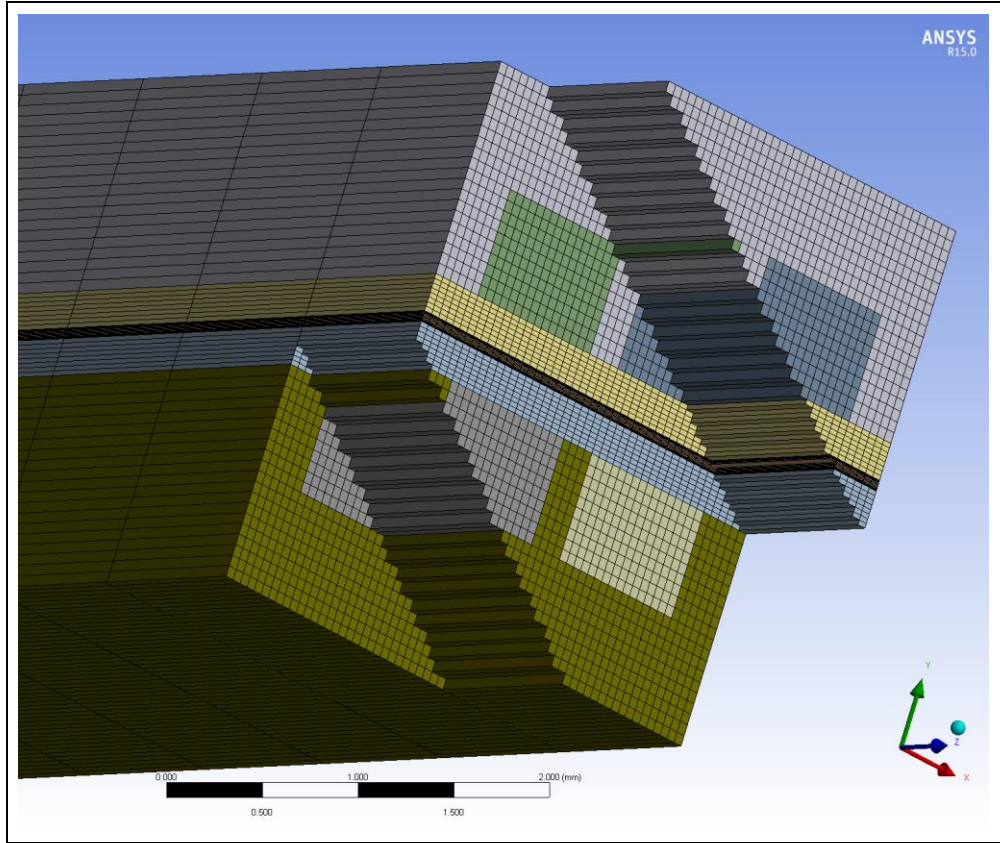
Tablo 4.7: Ağ Yapı Eleman Tipleri.

Boyut	Eleman Tipi (ANSYS)	Eleman Tipi (HyperWorks)	Yüzey Sayısı	Düğüm Sayısı
2D	Triangle	Tria3, Tria6	1	3 (Midside nodes ile 6)
	Quadrilateral	Quad4, Quad8	1	4 (Midside nodes ile 8)
3D	Tetrahedron	Tetra4, Tetra10	4	4 (Midside nodes ile 10)
	Hexahedron	Hex8, Hex20	6	8 (Midside nodes ile 20)
	Wedge	Penta6, Penta15	5	6 (Midside nodes ile 15)
	Pyramid	Pyramid5, Pyramid13	5	5 (Midside nodes ile 13)

Bu çalışmada PDMYH modeli için yalnızca hexahedron eleman tipi kullanılmıştır. Genelde, komplike yapılarda tetrahedron tip ağ yapı elemanı kullanmak çok daha kolay yöntemdir. Çünkü, yuvarlak hatlı yüzeyler üzerine dikdörtgenler prizması şeklinde yapılar oturtmak yerine, dört köşesi de üçgenlerden oluşan tetrahedron elemanları yerleştirmek çok daha uygulanabilir bir yöntemdir. Ancak avantaj ve dezavantajlar bakımından incelendiğinde, hexahedron yapılar için birçok tercih edilme sebebi bulunmaktadır. Bunlar listelenirse:

- HAD metodu için hexahedron yapılar, akış doğrultusunda uzanabilmekte iken, tetrahedron yapılar fizikleri gereği akış yönünde uzanamamaktadırlar. Bu da hesaplama sırasında bazı yüzdesel hataların ortaya çıkmasına neden olmaktadır.
- Bir hexahedron ağ yapı elemanı hacim ve kenar sayısı olarak içerisinde daha fazla tetrahedron elemanı bulundurabileceğinden dolayı, eleman sayısının düşük olmasına göre çözüm süresi de kısa olmaktadır.
- Sonlu elemanlar metodu çerçevesinden de incelemek gerekirse, triangle ve tetrahedron yapıların quadrilateral ve hexahedron yapılara göre daha fazla katılığı olduğu için, analiz sonuçlarında olduğundan yüksek mertebede stres seviyeleri gösterebilmektedirler. Bu yüzden de FEM kullanılan problemlerde yine dört veya sekiz köşeli yapılar tercih sebebidir.

Şekil 4.9'da yalnızca hexahedron yapılardan oluşan PDMYH matematiksel modelinin ağ yapısının kesiti alınmış görüntüsü bulunmaktadır.



Şekil 4.9: PDMYH ağ yapısının kesit görünümü.

Alpat tarafından yapılan çalışmada, anot ve katot bölgesinde dokuzar adet olmak üzere toplamda on sekiz gaz kanalından oluşan ve MEÇ alanı $13,3 \text{ cm}^2$ olan PDMYH matematiksel modeli, ağ yapı bakımından bağımsızlık analizlerine tabi tutulmuş ve toplam ağ yapı sayısı olarak 69160 elemanın sonuçlar için yeterli olduğu görülmüştür. Diğer bir tabir ile 69160 elemandan alınan sonuçlar, sonuç değişiminin %1'in altında bir değer vermesinden dolayı ağ yapı bağımsızlığını sağlamıştır [25]. Bu çalışmada ise, toplamda dört kanala sahip (anot ve katot bölgelerinde ikişer adet) ve MEÇ alanı 3 cm^2 olan PDMYH modeline, önceki kısımlarda da değinildiği üzere toplamda 480000 adet ağ yapı elemanı kurulmuştur. Bu sayıya dayanarak, ağ yapı sayısı oldukça yüksek çözünürlükte kabul edilmiş ve tekrardan bir ağ yapı bağımsızlık (mesh independency) çalışmasına gerek görülmemiştir.

4.1.3. Yakıt Hücresi Modelinin FLUENT Çözücüsüne Gönderilmesi

Ağ yapı kurulum işlemi tamamlandıktan sonra yapılması gereken işlem FLUENT çözücüsü içerisine bu modelin gönderilmesi işlemidir.

Yapılacak olan işlem sırası şu şekildedir:

- Workbench proje ekranının sol tarafında bulunan bileşen sistemlerinin (Component Systems) altında bulunan FLUENT çözücüsü, sürükle-bırak yöntemi ile proje şematiği penceresine getirilir.
- Mesh bileşenine ait olan hücrenin, en alt sekmesinde bulunan Mesh kutucuğu tutularak, yine sürükle bırak işlemi ile daha önceden getirilen FLUENT çözücüsüne ait bileşen sisteminin ayar kısmına (Setup) bağlanır.
- Bağlantının sağlandığı, bu ayar kısmının “güncelleme bekliyor” ikonundan anlaşılabilmektedir.
- Ağ yapının, ilgili hücreden FLUENT çözücüsü içerisine gönderilebilmesi için ayar kutucuğuna güncelleme komutu verilir (Update) ve ağ yapı, çözücü içerisine transfer edilir.
- FLUENT çözücüsüne ait olan hücrenin, ayar kutucuğuna çift tıklanarak çözücü çalıştırılır ve çözücü giriş penceresi kullanıcının karşısına çıkmaktadır. Modelin üç boyutlu olarak oluşturulmasından dolayı ölçü kısmı (Dimension) seçime kapalı ve otomatik bir şekilde 3D seçeneği işaretli olarak gelmektedir.

- İşlem seçenekleri (Processing Options) kısmında, çözümde kullanılacak olan işlemci yöntemi kullanıcının seçimine sunulmaktadır. Seri veya paralel seçimleri ile sırasıyla, kullanıcının tek bilgisayar işlemcisi (CPU) veya çoklu bilgisayar işlemcisi kullanmasına olanak sağlanmaktadır. Bu çalışmada, dört adet paralel CPU tercih edilmiştir. Bunun sebebi, bu dört işlemciye matematiksel modelin bölüştürülmesi ile hızlı çözüm elde etmektir.
- FLUENT çözücüsüne ait pencerede, en son yapılması gereken işlem çifte hassasiyet (Double Precision) seçimidir. Bu seçim yapılmaz ise, çözücü virgülden sonra gelen sekiz haneyi hesaplayacaktır. Çalışmada, çift hassasiyet seçimi yapılmış ve virgülden sonra gelen on altı hanelik değerler hesaba katılmıştır. Bu seçim ile numerik hatalardan gelen yuvarlama hatası (Round-off Error) daha alt mertebelere çekilmiştir.
- Çözücü giriş penceresinde istenilen ayarların yapılmasının ardından, çözücü açılır ve ağ yapı model otomatik olarak okutulur FLUENT ortamına getirilir.
- Çözücü şu hali ile bir yakıt hücresi modelini çözebilecek safhada değildir. Gerek PDMYH gerekse KOYH modellerinin çözdürülebildiği FLUENT ortamında, çözücünün ilgili yakıt hücresi seçeneklerini aktif edebilmesi için komut satırından (TUI: Text User Interface) `/define/models/addon-module` 3 komutunun yazılması gerekmektedir. Bu komutun uygulanmasının hemen ardından, FLUENT çözücüsü içerisinde gömülü olarak bulunan PDMYH ara yüzünü yükleyerek aktif duruma getirecektir.
- Komut silsilesinden `addon-module` komutu sonrası çıkan liste incelendiğinde, bu çalışma ile ilgili olarak ve adı geçen PDMYH ve KOYH ara yüzlerinin sırası ile 3 ve 4 numaralara ait olduğu görülebilmektedir. Ara yüz seçimi ile PDMYH modelinin aktif olup olmadığının kontrolü, çözüm ayarları (Solution Setup) altında bulunan listede modeller (Models) kısmına girilerek sağlanabilir. Şekil 4.10'da açılan listeye dair ekran alıntısı bulunmaktadır.

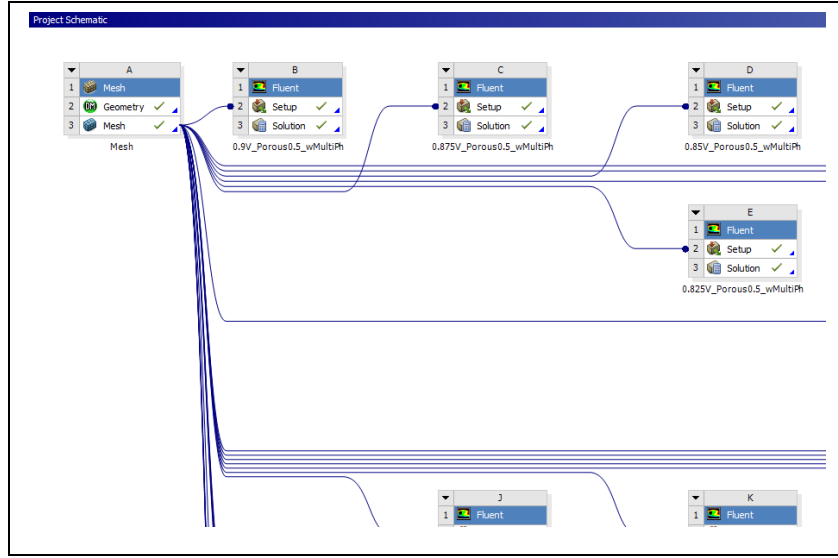
```

/define/models> addon
Fluent Addon Modules:
  0. None
  1. MHD Model
  2. Fiber Model
  3. Fuel Cell and Electrolysis Model
  4. SOFC Model with Unresolved Electrolyte
  5. Population Balance Model
  6. Adjoint Solver
  7. Single-Potential Battery Model
  8. Dual-Potential MSHD Battery Model
Enter Module Number: [0] |

```

Şekil 4.10: PDMYH ara yüzünün aktif edilmesi esnasında çıkan liste.

Şekil 4.11’de ise değinilen ANSYS Workbench proje şematiği ekranında, farklı değişkenler ile analizi gerçekleştirilecek modellere ait çözücü hücrelerinin ortak ağ yapısını kullanan (Mesh Platform) ilgili hücreye olan bağlantıları örneklendirilmektedir.



Şekil 4.11: Ortak kullanılacak Mesh hücresinin çözücülere bağlanması.

Ara yüzün de aktif edilerek, PDMYH seçeneklerinin FLUENT çözücüsü içerisine getirilmesi ardından genel ağ yapı ve ölçü kontrolü yapılmaktadır. Ağ yapı kontrolünün yapılmasındaki en önemli kriter negatif hacim hatasının bulunup bulunmadığının tespiti. Negatif hacme sahip olan bir çözüm alanında (domain) hesaplama beklenemez; çözücünün hata vererek işlemi durdurması kesindir.

Çalışmanın bu bölümünden sonra, çözücü içerisinde kullanılan elektrokimyasal parametreler, kabuller, fiziksel özellikler ve denklemler detaylı olarak incelenmektedir.

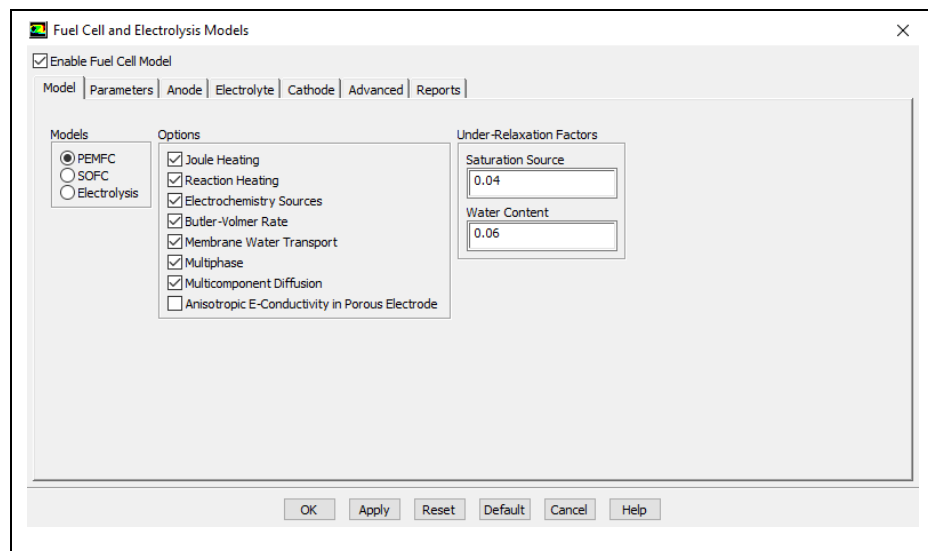
4.1.4. Yakıt Hücresi Modelinin Elektrokimyasal Parametreleri

Yakıt hücresi modelinin FLUENT çözücüsüne gönderilmesi ve ağ yapı kontrolü arkasından PDMYH modeline ait elektrokimyasal parametrelerin Modeller (Models) sekmesi altında bulunan “Fuel Cells and Electrolysis-PEMFC” kısmına tanımlanması gerekmektedir. Bu bölüme tanıtılan özelliklere ait veriler Tablo 4.8’de belirtilmiştir [49].

Tablo 4.8: PDMYH Modeline Ait Elektrokimyasal Parametreler.

Elektrokimyasal Parametreler	Değerler
Anot Referans Akım Yoğunluğu	7500 (A/m ²)
Anot Referans Konsantrasyonu	1 (kmol/m ³)
Anot Konsantrasyon Üssü	0,5
Anot Dönüşüm (Transfer) Katsayısı	2
Katot Referans Akım Yoğunluğu	20 (A/m ²)
Katot Referans Konsantrasyonu	1 (kmol/m ³)
Katot Konsantrasyon Üssü	1
Katot Dönüşüm (Transfer) Katsayısı	2
Açık Devre Voltajı	0,95 (V)
Kaçak Akım (Specific Leakage Current)	0 (A)
Hidrojen Referans Diffüzivitesi	3×10^{-5} (m ² /s)
Oksijen Referans Diffüzivitesi	3×10^{-5} (m ² /s)
Su Referans Diffüzivitesi	3×10^{-5} (m ² /s)
Diğer Türlerin Referans Diffüzivitesi	3×10^{-5} (m ² /s)

“Fuel Cell and Electrolysis-PEMFC” bölümünde Model sekmesinin altında “PEMFC” seçeneğinin otomatik olarak seçili olduğu görülmektedir. Bu kısım ile ilgili görsel Şekil 4.12’de bulunmaktadır.



Şekil 4.12: “Fuel Cell and Electrolysis Models”-Model sekmesi.

Seenekler kısmında bazı maddelerin seili olduėu grlmektedir. Detaylı olarak anlatıma geilmeden, rahatlatma faktrlerinden bahsedilirse, doyma kaynaėı (Saturation Source) deėeri ve su ieriėi (Water Content) deėerleri sırasıyla 0,04 ve 0,06 olarak kullanılmıřtır.

Seenekler kısmındaki maddeler detaylı olarak anlatıldıėında:

- “Joule Heating” Seeneėi: Enerji kaynak terimini iererek ohmik ısıtmayı hesaplamaya katar.
- “Reaction Heating” Seeneėi: Enerji kaynak terimi ierisindeki elektrokimyasal reaksiyon sonucu retilen ısıyı, rnlerin transfer akımını ve ařırı potansiyeli hesaplamaya katar.
- “Electrochemistry Sources” Seeneėi: Elektrokimyasal etkiler hesaplamaya katılır. Eėer sadece yakıt hcresindeki temel akıř alanı ile ilgileniliyorsa, elektrokimya kaynakları seeneėi devre dıřı bırakılmalıdır. Yakıt pili ve elektroliz modelinin tm etkilerini devre dıřı bırakmak iin, membran su tařınımı ve oklu-faz seeneklerinin de kapatılması gerekmektedir.
- “Butler-Volmer Rate” Seeneėi: Butler-Volmer oranı seeneėi, CL ierisindeki transfer edilecek akımları hesaplamada kullanılmaktadır. Bu zelliėin devre dıřı bırakılması ile hesaplamada “Tafel yaklařımı” kullanılmıř olur.
- “Membrane Water Transport” Seeneėi: Bu zelliėin devreye alınması ile membran boyunca olan su tařınması hesaplamaya katılacaktır. Bu zellik iin belirtilmesi gereken nemli bir husus, yalnızca PDMYH modelinde aktif halde bulunmasıdır.
- “Multiphase” Seeneėi: oklu fazlı akıř seildiėi taktirde GDL bileřeni ierisindeki sıvı tařınması hesaplamaya katılacaktır. Yapılan bu alıřmada, ok fazlı akıř zelliėi seilerek sıvı su tařınması hesaplamalara katılmıřtır.
- “Multicomponent Diffusion” Seeneėi: Gzenekli ortam iin gaz trlerinin ktlesel yayılmasını hesaplamada kullanılmaktadır. alıřmada bu zellik de seilerek hesaplamalara katılması saėlanmışır.
- “Anisotropic E-Conductivity in Porous Electrode” Seeneėi: Gzenekli elektrot seeneėinde anizotropik e-iletkenlik, tipik olarak izotropik olmayan elektriksel iletkenliėi modellemek iin kullanılmaktadır. Bu seenek, alıřma iin devre dıřı bırakılmıřtır.

PDMYH modelinin, FLUENT çözücüsü içerisinde tanıtılan diğer fiziksel özellikleri Tablo 4.9’da belirtilmiştir. Ayrıca bu tabloda, çalışmanın esas amacı olan GDL gözeneklilik değişkenleri de anot ve katot bölümleri olmak üzere gösterilmektedir.

Tablo 4.9: PDMYH Modeline Ait Diğer Fiziksel Özellikler.

Fiziksel Özellikler	Değerler
AGDL Gözeneklilik	0,3 / 0,4 / 0,5 / 0,6
AGDL Viskoz Direnç	Denklem 4.19 (1/m ²)
ACL Gözeneklilik	0,5
ACL Viskoz Direnç	$4,294360153 \times 10^{12}$ (1/m ²)
ACL Yüzey/Hacim Oranı	83333 (1/m)
Membran Eşdeğer Ağırlığı	1100 (kg/kmol)
Membran Protonik İletim Katsayısı	1
Membran Protonik İletim Üssü	1
CGDL Gözeneklilik	0,3 / 0,4 / 0,5 / 0,6
CGDL Viskoz Direnç	Denklem 4.19 (1/m ²)
CCL Gözeneklilik	0,5
CCL Viskoz Direnç	$4,294360153 \times 10^{12}$ (1/m ²)
CCL Yüzey/Hacim Oranı	83333 (1/m)
Elektrolit Yüzey Alanı	3 (cm ²)

Tablo 4.9’da GDL gözeneklilik değerleri yapılan tüm analizler için değişken parametre niteliğindedir. Buna bağlı olarak, GDL viskoz direnç de Denklem 4.19 kullanılarak hesaplanmıştır. Anot ve katot CL gözeneklilik değerleri 0,5 olarak sabit tutulmuş ve aynı denklemin hesabından elde edilen, 0,5 gözeneklilik değerine karşılık gelen $4,294360153 \times 10^{12}$ (1/m²) viskoz direnç değeri kullanılmıştır. Geriye kalan değerler varsayılan değerler olup; bu şekilde alınmalarının nedeni literatürdeki ilgili çalışmalar ile karşılaştırılmasının yapılabilmesidir. CL Fiziksel özelliklerinden biri olan yüzey/hacim oranı (1/m) ise basit bir hesap olarak 12 µm tabaka kalınlığının metre birimine çevrilerek tersinin alınması ile hesaplanmıştır.

4.1.5. PDMYH Modeli İçin Yapılan Kabuller

Elektrokimyasal parametrelerin ve fiziksel özelliklerin matematiksel model içerisine tanımlanmasının ardından sınır şartlarının belirtilmesine geçilmeden önce, çözüm için kullanılacak yaklaşımlar belirli kabuller ile yapılmalıdır.

PDMYH matematiksel modelinin çözümünde kullanılan kabuller şu şekilde sıralanabilir:

- Yakıt ve oksitleyiciyi temsil eden gaz akışları kararlı durum için incelenecektir.
- Akış karakteristiği laminardır.
- Kanallardan gönderilen gazların viskoziteleri sabittir ve sıkıştırılmaz akış durumundadırlar.
- PDMYH içerisine kütleli debiler ile sağlanan yakıt ve oksitleyici, gaz kanallarına ait yüzeylere dik olarak girmektedir.
- Matematiksel modelin kurulması safhasında da görüldüğü üzere, çoklu faz seçeneği aktif edilmiştir; sıvı halde bulunan suyun durumu da incelenecektir.
- Membranın homojen bir yapıya sahip olduğu kabul edilmiştir. Membran kararlı haldedir.
- Gaz difüzyon tabakaları için kararlı durum söz konusudur.
- Gaz difüzyon tabakaları homojen ve izotropik bir yapıya sahiptir.
- Kararlı halde bulunan katalizör tabakaları, homojen ve izotropik bir yapıya sahiptir.
- Katalizör tabakalarının viskoz direnci, 0,5 gözeneklilik değerine göre hesaplanmıştır ve tüm senaryolarda CL gözeneklilik değeri 0,5 kullanıldığı için viskoz direnç değeri sabittir.
- Yakıt ve oksitleyici gazların, hücre tabakaları boyunca taşınması işlemi yalnızca difüzyon ile sağlanmaktadır.
- Elektrokimyasal reaksiyona uğrayan türler ideal gaz özelliği taşımaktadır.

4.1.6. Uygulanan Sınır Şartlarının Değerleri

PDMYH Matematiksel modelinde uygulanan sınır şartları bu başlık altında maddeler halinde anlatılmış olup, sonrasında ayrı bir tablo altında verilen değerler gösterilmiştir.

Tüm bu sınır şartları belirtilecek olursa:

- Anot voltaj bağlantı ucu (terminal) için, gerilim topraklanmış durumdadır ve sıcaklık sabittir. İsim olarak “wall-terminal-a” ile belirtilen yüzeye ait termal sekmeye sabit sıcaklık değeri olan 353 K girilir. UDS sekmesi altından, elektrik potansiyel değeri 0 Volt olarak tanımlanır. Bunun anlamı, bu yüzeyin topraklanmış olmasıdır.
- Katot voltaj bağlantı ucu (terminal) için, termal sekmeye gidilerek sabit sıcaklık değeri olan 353 K değeri tanımlanır. Yine UDS sekmesi altından, elektrik potansiyeli değeri başlangıç olarak 0,9 Volt girilir. Bu kısımda önemli olan nokta, polarizasyon eğrileri yani diğer bir tabir ile kutuplaşma eğrilerinin oluşturulabilmesi için, bir önceki kısımda belirtilen anot voltaj bağlantı ucu her daim 0 Volt olarak bırakılırken, katot terminalinin belirtildiği yüzey olan “wall-terminal-c” yüzeyinin değerleri sırası ile 0,9 V, 0,875 V, 0,85 V, 0,825 V ve 0,8 V, 0,75 V, 0,7 V, 0,65 V, 0,6 V, 0,55 V, 0,5 V, 0,45, 0,425 V, 0,4 V, 0,375 V, 0,35 V ve son olarak 0,325 V girilerek (toplamda 17 adet) analizler gerçekleştirilecektir. Bu değişkenler, akım değerlerinin elde edilmesinde önemli ve gerekli olup, çalışmanın inceleme konusu olan tüm GDL gözeneklilik değerleri için ayrı ayrı uygulanacaktır.
- Tekrar hatırlatılması gerekirse, bu çalışmada anot ve katot kısımlarında ikişer adet gaz kanalı bulunmaktadır. İsimleri “mass-flow-inlet-01-a” ve “mass-flow-inlet-02-a” olan anot gaz kanallarının girişine kütle akısı sınır şartı tanımlanarak, yüzeye dik olacak şekilde 6×10^{-7} (kg/s) nemlendirilmiş hidrojen gazı kütleli debisinin değeri girilir. Termal sekmeden sıcaklık 353 K olarak tanımlanır. Türler (Species) sekmesi altından hidrojen, oksijen ve su için kütle kesirleri sırası ile 0,8, 0,0 ve 0,2 olarak belirtilir.
- Yüzeylerin isimleri “mass-flow-inlet-01-c” ve “mass-flow-inlet-02-c” olan katot gaz kanalları girişine, yine yüzeylere dik olacak şekilde 5×10^{-6} (kg/s) kütleli nemlendirilmiş hava debisi değeri girilir. Termal sekmeye 353 K sıcaklık tanımlanır. Türler (Species) sekmesi altından H₂, O₂ ve H₂O için kütle kesirlerine ait olan değerler sırası ile 0,0, 0,2 ve 0,1 olarak girilir.
- Anot ve katot için tüm gaz kanalı çıkışlarına (isimleri “outlet-01-a”, “outlet-02-a”, “outlet-01-c” ve “outlet-02-c” olan) basınç tanımlı çıkış (Pressure Outlet) sınır

şartı tanımlanarak; termal sekme altından sıcaklık (Backflow Total Temperature) 353 K olarak belirtilir.

- İşletme koşulları (Operating Conditions) sekmesi altından basınç 2×10^5 (Pa) olarak tanımlanır.

- Çözüm kontrolleri kısmından rahatlatma faktörlerinin (Under-relaxation Factors) yakınsama kolaylığı için ayarlanması gerekmektedir. Çünkü elektrik potansiyeli, proton potansiyeli, su doygunluğu ve su içeriği (water content) haricindeki diğer tüm denklemler ikinci dereceden çözülecektir. Bunun için rahatlatma faktörlerine ait değerler basınç için 0,5, yoğunluk için 0,75, gövdesel kuvvetleri (body forces) için 0,75, momentum için 0,2, hidrojen, oksijen, su, enerji, elektrik potansiyeli ve su içeriği için 0,75, proton potansiyeli ve su doygunluğu için 0,7 olarak ayarlanır. Varsayılan rahatlatma faktörlerinin kullanımının yakınsama zorlukları çıkardığı analizler süresince tespit edilmiştir.

PDMYH Matematiksel modelinde uygulanan tüm sınır şartı değerleri ve uygulandıkları yüzeylere ait olan bilgiler Tablo 4.10’da gösterilmektedir.

Tablo 4.10: PDMYH Matematiksel Modeline Ait Olan Sınır Şartı Değerleri.

Sınır Şartı	Uygulandığı Yüzey	İlgili Parametre	Değeri
wall	wall-terminal-a	Sıcaklık	353 (K)
		Elektrik Potansiyeli	0 (V)
wall	wall-terminal-c	Sıcaklık	353 (K)
		Elektrik Potansiyeli	0,9 / 0,875 / 0,85 / 0,825 / 0,8 / 0,75 / 0,7 / 0,65 / 0,6 / 0,55 / 0,5 / 0,45 / 0,425 / 0,4 / 0,375 / 0,35 / 0,325 (V)
mass-flow-inlet	mass-flow-inlet-01-a, mass-flow-inlet-02-a	Kütlesel Debi	6×10^{-7} (kg/s)
		Sıcaklık	353 (K)
		Türler-Kütle Oranları (H ₂ / O ₂ / H ₂ O)	0,8 / 0,0 / 0,2
mass-flow-inlet	mass-flow-inlet-01-c, mass-flow-inlet-02-c	Kütlesel Debi	5×10^{-6} (kg/s)
		Sıcaklık	353 (K)
		Türler-Kütle Oranları (H ₂ / O ₂ / H ₂ O)	0,0 / 0,2 / 0,1

Tablo 4.10: PDMYH Matematiksel Modeline Ait Olan Sınır Şartı Değerleri (Devam).

Sınır Şartı	Uygulandığı Yüzey	İlgili Parametre	Değeri
pressure outlet	outlet-01-a, outlet-02-a, outlet-01-c, outlet-02-c	Sıcaklık	353 (K)
operating pressure	-	İşletme Koşulları	2×10^5 (Pa)

Sınır şartı ile ilgili bütün ayarlamaların ardından, çözüme başlanılabilmesi için tüm çözüm alanı (domain) ilk değer atama denilen “initialize” işlemine tabi tutulur. İlk değer atama işleminde değer olarak yalnızca 353 K sıcaklığı girilir ve tüm ağ yapı elemanlarına bu sıcaklık değeri atanmış olur.

4.1.7. Kullanılan Malzeme Bilgileri

PDMYH Modelinin malzeme özellikleri FLUENT çözücüsünün varsayılan değerleri olarak alınmış olup, bu değerler Tablo 4.11’de gösterilmiştir.

Tablo 4.11: Tabakalarda Kullanılan Malzemelere Ait Özellikler.

Malzeme Özellikleri	Bileşenler (Tabakalar)			
	Membran	CL	GDL	CC
Yoğunluk (kg/m ³)	1980	2719	2719	2719
Özgül Isı (j/kg.K)	2000	871	871	871
Isıl İletkenlik (W/m.K)	2	10	10	100
Elektriksel İletkenlik (1/ohm.m)	1×10^{-16}	5000	5000	1×10^6

4.1.8. Çözümde Kullanılan Eşitlikler ve Çözücü Tipi

PDMYH Matematiksel modelinin çözümünde FLUENT çözücüsünün kullandığı eşitlikler bu bölümde anlatılmaktadır. Eşitlikler tanımlanırken barındırdıkları terimlerin açıklamaları yapılmıştır.

Süreklilik ya da diğer bir adı ile kütle korunum eşitliği aşağıdaki şekilde ifade edilmektedir.

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon\rho\vec{v}) = S_m \quad (4.2)$$

Süreklilik denklemi içerisinde geçen S_m kaynak terimini temsil etmektedir. Bu kaynak terimi faza sürekli olarak ilave edilen bir kaynağı da temsil etmekle birlikte, kullanıcı tarafından tanımlanan bir kaynak terimi olarak da düşünülebilir. Örnek olarak, faza sürekli olarak ilave edilmesinden anlaşılması gereken, buharlaşma sonucu dahil olan gaz kütlesi şeklinde tanımlanabilir. Denklem 4.2 hem sıkıştırılabilir hem de sıkıştırılamaz akışlar için geçerlidir.

Momentum korunum eşitliği ise Denklem 4.3 ile gösterilmektedir.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon\vec{v}) + \nabla \cdot (\rho\varepsilon\vec{v}\vec{v}) = -\varepsilon\nabla p + \nabla \cdot (\varepsilon\mu\nabla\vec{v}) + \vec{S}_u \quad (4.3)$$

Momentum korunum eşitliği içerisinde bulunan p statik basıncı, ∇ Nabla operatörü sonrasında gelen terimler gerilme tensörünü (denklemin sağ tarafı) ve $\vec{S}_u$ terimi ise gövdesel dış kuvvetleri ifade etmektedir. Denklem 4.2 ve Denklem 4.3 içerisinde geçen ε terimi gözeneklilik anlamına gelmektedir. Denklem 4.4 kullanılarak gerilme tensörü olan $\bar{\tau}$ ifadesi açılmıştır.

$$\bar{\tau} = \mu \left[(\nabla\vec{v} + \nabla\vec{v}^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} \bar{I} \right] \quad (4.4)$$

Yukarıdaki denklem içerisinde geçen μ ve $\bar{I}$ terimleri sırasıyla dinamik viskozite ve birim tensörü ifade etmektedir.

Ayrıca, Denklem 4.4'te, eşitliğin sağ tarafında bulunan ikinci ifade hacimsel genişlemenin etkisini belirtmektedir [25].

Gövdesel dış kuvvetleri ifade eden ve Denklem 4.3 içerisinde geçen $\vec{S}_u$ terimi, yakıt hücresi bileşenleri ile ilgili kaynak terimlerinin eşleştirildiği Tablo 4.12'de detaylı olarak gösterilmiştir [36].

Tablo 4.12: Bileşenlere Göre Kaynak Terimleri İçin Kullanılan Tanımlamalar.

Bileşen /Kaynak	S_m	S_u	S_k	S_h	S_e	S_i
BPP	—	—	—	$\frac{i_s^2}{\sigma_s^{eff}}$	0	—
GC	0	0	0	h_{faz}	—	—
GDL	0	$-\frac{\mu}{K_{GDL}} \varepsilon^2 \vec{v}$	0	$\frac{i_s^2}{\sigma_s^{eff}} + h_{faz}$	0	—
CL	$S_m = \sum_k S_k$	$-\frac{\mu}{K_{CL}} \varepsilon^2 \vec{v}$	$O_2: -\frac{M_{O_2}}{4F} j_c$ $H_2: -\frac{M_{H_2}}{2F} j_a$ $H_2O: \frac{M_{w_2}}{2F} j_c$ $+ \left(\frac{n_a M_w}{F} \right) j_c$	h_{reak} $- j_{a,c}$ $\cdot \eta_{a,c}$ $+ \frac{i_s^2}{\sigma_s^{eff}}$ $+ \frac{i_m^2}{\sigma_m^{eff}}$ $+ h_{faz}$	j	j
Membran	0	$-\frac{\mu}{K_{CL}} \varepsilon^2 \vec{v}$	0	$\frac{i_m^2}{\sigma_m^{eff}}$	—	0

PDMYH bileşenlerine göre kaynak terimlerine ait eşitliklerin eşleştirildiği Tablo 4.12’de S_m terimi kütle üretimi için olan kaynak terimini ifade etmektedir. S_u ve S_k terimleri ise sırasıyla momentum korunum denklemi içerisindeki kaynak terimi ve tür korunum denklemi için olan kaynak terimidir. Son iki sütunda bulunan S_e ve S_i terimleri ise yük korunum eşitliği için kaynak terimleri olup; e alt indisi elektronları, i alt indisi ise iyonları ifade etmektedir. Bu tablo içerisinde bulunan diğer terimler, çalışmanın ön kısmında bulunan simgeler ve kısaltmalar dizini içerisinde tanımlanmıştır.

FLUENT çözücüsünün hesaplamada kullandığı enerji eşitliği Denklem 4.5 ile belirtilmektedir.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon E) + \nabla \cdot [\vec{v}(\rho E + p)] = \nabla \cdot \left[k_{eff} \nabla T - \sum_j h_j \vec{J}_j + (\vec{\tau}_{eff} \cdot \vec{v}) \right] + S_h \quad (4.5)$$

Denklem 4.5 içerisinde bulunan k_{eff} terimi etkin iletkenlik anlamına gelmektedir ve bu terim de Denklem 4.6 ile tanımlanır.

$$k_{eff} = k + k_t \quad (4.6)$$

Denklem 4.6 içerisinde geçen k_t terimi de türbülans ısı iletkenlik olup; model için seçilen türbülans modeline göre tanımlanmaktadır [25]. Eşitlik içerisinde geçen $\vec{J}_j$ ise j türünün difüzyon akısını belirtmektedir. S_h Terimi ise hacimsel enerji kaynağı veya kuyusunu tanımlamaktadır. E Terimi toplam enerji anlamına gelmekte olup Denklem 4.7 ile açıklanmaktadır.

$$E = h - \frac{p}{\rho} + \frac{v^2}{2} \quad (4.7)$$

Denklem 4.7 içerisinde geçen h terimi özgül entalpi değeri olup, Denklem 4.8’de tanımlanmıştır.

$$h = \sum_j Y_j h_j \quad (4.8)$$

Eşitlikte geçen, j türünün kütle kesri ve özgül entalpisi sırası ile Y_j ve h_j terimleri ile belirtilmektedir.

S_h Terimindeki hacimsel kaynak detaylandırılırsa suyun gizli ve oluşum ısılarını, ohmik ısınmayı ve elektrik işini içerdiğini söylemek mümkündür. Bu da Denklem 4.9 ile ifade edilebilmektedir.

$$S_h = I^2 R_{ohm} + h_{reaksiyon} - R_{an,cat} \eta_{an,cat} + h_{faz} \quad (4.9)$$

Ohmik direnci R_{ohm} ve net entalpi değişimi ise $h_{reaksiyon}$ terimleri ifade etmektedir. Yoğuşma veya buharlaşma durumları için suyun entalpisindeki değişimi h_{faz} terimi göstermektedir. Son terimlerden olan $(R_{an,cat} \eta_{an,cat})$ ise anot ve katot CL elektriksel dirençleri ile aşırı potansiyellerinin çarpımını ifade etmektedir.

FLUENT çözücüsünde, çözüm ayarları kısmının altında bulunan genel sekmesi altından çözücü tipi ayarlanabilmektedir. Bu çalışmada seçilen çözüm tipi basınç-tabanlı (Pressure-Based) çözücü seçeneğidir. Basınç-tabanlı çözücünün diğer adı “ayrık çözücü” (segregated solver) olarak geçmektedir. Ayrık çözücü seçeneği,

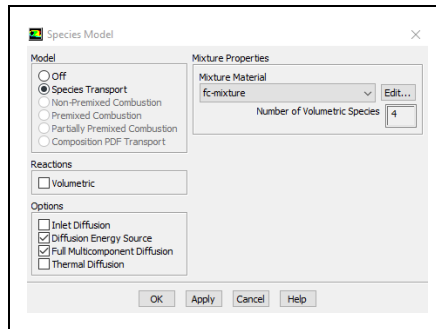
düşük hızlı sıkıştırılmaz akış rejimleri için geçerli olduğu gibi, yüksek hızlı sıkıştırılabilir akışlar için de kullanılabilir. Momentum ve süreklilik denklemlerini, sıralı bir şekilde ve ayrı matrisler içerisinde çözen ayrık çözücünün bu matrisleri birlikte çözdüğü farklı bir tipi de bulunmaktadır. Bu tip çözücü ise “basınç-tabanlı akuple çözücü” (pressure-based coupled solver) olarak isimlendirilmektedir. Ayrık çözücü tipi, akuple tipteki çözücüye göre daha az hafıza (RAM) ihtiyacı duymaktadır.

Ayrık çözücünün kullanılması ile, modeller sekmesi altında bulunan akış karakteristiği kısmındaki “viskoz ısıtma” seçeneği varsayılan seçim olarak pasif şekilde gelmektedir. Bunun nedeni ihmal edilebilir mertebede olmasındandır. Brinkman sayısı boyutsuz bir sayıdır ve akışta viskoz enerji kaybının ürettiği ısının katı cidardan akışkana moleküler difüzyonla olan ısı transferine oranıdır. Viskoz ısıtmanın önemi, Brinkman sayısının bire eşit veya birden büyük olduğu durumlarda ortaya çıkmaktadır. Bu boyutsuz sayı Denklem 4.10’da tanımlanmıştır.

$$Br = \frac{\mu U_e^2}{k \Delta T} \quad (4.10)$$

Tanımda μ akışkanın dinamik viskozitesi, U_e akış hızı, k akışkanın ısı iletim katsayısını, ΔT katı cidar ile akışkan arasındaki ortalama sıcaklık farkıdır.

Ayrık çözücü kullanılırken Türlerin Aktarımı (Species Transport) menüsü altındaki “Difüzyon Enerji Kaynağı” (Diffusion Energy Source) seçeneği aktif hale getirilerek Denklem 4.5 içerisinde geçen türlerin kütle difüzyonuyla entalpi aktarımı etkilerini içeren $\nabla(\sum_j h_j \vec{J}_j)$ terimi hesaplamaya katılmıştır. Değinen bilgi ile ilgili olan ekran alıntısı Şekil 4.13’te gösterilmektedir.



Şekil 4.13: ANSYS FLUENT çözücüsü içerisindeki türlere ait model penceresi.

Türlerin korunumunu ifade eden diferansiyel denklem sistemi Denklem 4.11 ile gösterilmektedir.

$$\frac{\partial(\varepsilon C_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon \vec{v} C_i) = \nabla \cdot (D_i \nabla C_i) + S_i \quad (4.11)$$

Denklem 4.11 içerisinde geçen C_i terimi i türünün konsantrasyonunu ifade etmektedir. Yine aynı denklem içerisinde bulunan D_i terimi i türünün difüzyon katsayısını ve S_i , türlere ait olan kaynak terimi belirtmektedir [26].

Gaz fazındaki türlerin diffüzivitesi Denklem 4.12 ile hesaplanmaktadır.

$$D_i = \varepsilon^{1.5} (1 - s)^{r_s} D_i^0 \left(\frac{p_0}{p} \right)^{\gamma_p} \left(\frac{T}{T_0} \right)^{\gamma_t} \quad (4.12)$$

Bu eşitlik içerisinde, i türünün referans sıcaklık ve basınç (P_0, T_0) için kütle difüzyonunu D_i^0 terimi göstermektedir. Denklem 4.12 içerisinde geçen diğer terimlerden r_s gözenek tıkanıklık üssünü, γ_p ve γ_t terimleri ise sırasıyla basınç ve sıcaklık oranlarının üs değerlerini, s ise gözenekli ortamda suyun doyma oranını, yani sıvı fazdaki su hacminin gözeneklerin hacmine oranını ifade etmektedir [26].

Efektif difüzyon katsayısının $D_{i,eff}$ GDL gözeneklilik değeri ile artışı Denklem 4.13 ile formüle edilmiştir [47].

$$D_{i,eff} = D_i \varepsilon^{1.5} \quad (4.13)$$

Yük korunumu diferansiyel denklemi Denklem 4.14 ile verilmiştir.

$$\nabla \cdot (\sigma_e^{eff} \nabla \Phi_e) + S_\Phi = 0 \quad (4.14)$$

Bu eşitlik içerisinde membranın ya da katı fazın elektrik potansiyeli Φ_e , etkin elektrik iletkenliği σ_e^{eff} , akım yoğunluğundaki değişimi gösteren kaynak terimi ($A.m^{-3}$) S_Φ ile gösterilmiştir. Elektrot gözenekliliğinin etkin elektrik iletkenliği

σ_e^{eff} üzerindeki etkisi Denklem 4.15'te verilen Bruggeman korelasyonu ile hesaplanır [26].

$$\sigma_e^{eff} = \varepsilon_m^{1.5} \sigma_e \quad (4.15)$$

Denklem 4.15'teki ε_m terimi membran faz potansiyeli için elektrot gözeneklilik değeridir [26].

Anot ve katot bileşenlerinde çözülen diferansiyel denklemler Tablo 4.13'te sunulmuştur.

Tablo 4.13: PDMYH Modeli Anot ve Katot Tabakalarında Çözülen Diferansiyel Denklemler.

Nicelik	Korunum Eşitlikleri
Kütle	$\nabla \cdot (\rho \vec{u}) = S_m$
Momentum	$\frac{1}{\varepsilon^2} \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + S_u$
Tür	$\nabla \cdot (\vec{u} C_k) = \nabla \cdot (D_k^{eff} \nabla C_k) + S_k$
Katı Faz Potansiyeli	$\nabla \cdot (\sigma_{sol} \nabla \phi_{sol}) + S_{\phi, sol} = 0$
Membran Potansiyeli	$\nabla \cdot (\sigma_{mem} \nabla \phi_{mem}) + S_{\phi, mem} = 0$
Enerji	$\nabla \cdot (\vec{u} \rho h) = \nabla \cdot (k^{eff} \nabla T) + S_h$

Anot ve katot tarafındaki tabakalar ve membran için Tablo 4.13'teki diferansiyel denklemlerde geçen kaynak terimleri Tablo 4.14'te verilmiştir.

Tablo 4.14: PDMYH Modelinde Katmanlar Bazında Çözülen Diferansiyel Denklem Sistemindeki (Korunum Yasalarındaki) Kaynak Terimleri.

Kaynak Terimleri					
Bileşenler	CC	GC	GDL	CL	Membran
Kütle, S_m	0	0	0	0	0
Momentum, S_u	0	0	$-\frac{\mu}{K} \varepsilon^2 \vec{u}$	$-\frac{\mu}{K} \varepsilon^2 \vec{u}$	$-\frac{\mu}{K} \varepsilon^2 \vec{u}$
Tür, S_k	0	0	0	$-\frac{M_{w,k}}{2F} R_{an} < 0, k = H_2$ $-\frac{M_{w,k}}{4F} R_{cat} < 0, k = O_2$ $\frac{M_{w,k}}{2F} R_{cat} > 0, k = H_2O$	0
Katı Faz Potansiyeli, $S_{\phi,sol}$	0	0	0	$-R_{an}$ R_{cat}	0
Membran Potansiyeli, $S_{\phi,mem}$	0	0	0	R_{an} $-R_{cat}$	0
Enerji, S_h	0	0	0	$h_{reaksiyon} - R_{an,cat} \eta_{an,cat}$ $+ I^2 R_{ohm}$ $+ h_{faz}$	0

Espinoza vd. çalışmalarında GDL bileşenine ait gözeneklilik, eğrilik (tortuosity) ve geçirgenlik özellikleri ile ilgili belirli bağıntılar kullanmışlardır. İlk olarak gözeneklilik konusu matematiksel bir bağıntı ile ifade edildiğinde, boşluk hacminin ($V_{boşluk}$), toplam hacme (V_{toplam}) oranı olarak belirtilmektedir. Denklem 4.16, gözenekliliğin formüle edilmiş halidir [48].

$$\varepsilon = \frac{V_{boşluk}}{V_{toplam}} \quad (4.16)$$

Espinoza vd.'ne ait bu çalışmada, eğriliğin tarifi için, gözenekli bir ortamda akış yolu düz olmadığı durumda bir değişken tanımlaması yapmanın gerekli olduğu belirtilmekte ve hidrolik, iyonik ve elektriksel olarak üç önemli eğrilik türünün olduğu söylenmektedir. Bu kısımda ilgilenilen tür hidrolik eğrilik olup, Denklem 4.17 ile formüle edilmektedir.

$$\tau_{gaz} = \frac{L_{fiili}}{L_{en\ kısa}} \quad (4.17)$$

Denklem 4.17’de geçen L_{fiili} terimi lifli parçacıkların ortalama fiili boyunu ve en kısa boyu tarif etmektedir. Elbette bu boy belirleme işlemi kolay bir işlem olmadığından dolayı bu uzunluk tabirleri için farklı yaklaşım ve tanımlamalar yapılmaktadır [48].

Gözenekli bir malzemenin gaz veya sıvı fazda bir akışkanı geçirebilme kapasitesi ve yeteneğine ortamın geçirgenliği denir. Bu tez çalışmasında, karbon kâğıt GDL ve CL geçirgenlikleri gözenekliliğin fonksiyonu olarak Espinoza vd.’nin çalışmasında belirtilen, Hao ve Cheng’in fiber yapılı gözenekli ortamlar için geliştirdikleri formül ile hesaplanmıştır. Simülasyon sonuçlarına dayanan, fiber yarıçaplarından bağımsız bu formül Denklem 4.18’de verilmiştir [48].

$$K = C \frac{\varepsilon^3}{(\ln \varepsilon)^2} \quad (4.18)$$

Denklem 4.18 kullanılarak GDL ve CL katmanlarına ait geçirgenlik değerleri hesaplanmış, sonrasında da bu değerlerin çarpmaya göre tersi olan viskoz direnç değerleri ANSYS FLUENT Çözücüsüne bir girdi olarak tanımlanmıştır. Denklem 4.18 içerisinde geçen ε terimi gözenekliliği, C terimi ise bir sabiti belirtmekte olup; C teriminin değeri $8,9504 \times 10^{-13} \text{ m}^2$ ’dir. Denklem 4.19, viskoz dirence tam olarak karşılık gelmektedir.

$$\text{Viskoz Direnç } (1/\text{m}^2) = 1/K \quad (4.19)$$

ANSYS FLUENT Yazılımı yakıt hücresi modelini çözerken iki temel elektrik potansiyel alanını çözmektedir. Bunlardan birisi membran ve katalizör tabakalar için olup, diğeri ise akım toplayıcı tabakalar, katalizör tabaka ve GDL bileşeni için çözülmüştür. Burada bahsedilen çözüm Denklem 4.14’te verilen yük korunumu ile ilgili eşitliktir. Terimlerden S_ϕ , akım yoğunluğundaki değişimi göstermekte (A/m^3) ve ANSYS FLUENT’in yakıt hücresi formülasyonlarında terminoloji olarak R_{sol} ve R_{mem} biçimi ile ifade edilmektedir. Şekil 4.12’de görseli bulunan “Fuel Cell and Electrolysis Models” sekmesinde “Butler-Volmer Rate” seçeneğinin aktif edilmesi

ile ANSYS FLUENT Butler-Volmer fonksiyonunu hesaplamada kullanır. Butler-Volmer fonksiyonu ile R_{sol} ve R_{mem} (S_ϕ) (A/m^3) hesaplanmakta olup, eşitlik Denklem 4.20 ve Denklem 4.21’de gösterilmektedir.

$$R_{an} = (\zeta_{an} j_{an}^{ref}) ([A]/[A]_{ref})^{\gamma_{an}} (e^{\alpha_{an} F \eta_{an}/RT} - e^{-\alpha_{cat} F \eta_{an}/RT}) \quad (4.20)$$

$$R_{cat} = (\zeta_{cat} j_{cat}^{ref}) ([C]/[C]_{ref})^{\gamma_{cat}} (-e^{+\alpha_{an} F \eta_{an}/RT} + e^{-\alpha_{cat} F \eta_{cat}/RT}) \quad (4.21)$$

Denklem 4.20 ve Denklem 4.21’de kullanılan terimlerden j^{ref} aktif yüzey alanı başına olan referans akım yoğunluğunu (A/m^2) (diğer terminolojideki i_s, i_m terimleri), ζ aktif yüzey alanını ($1/m$), $[]$ ve $[]_{ref}$ tür konsantrasyonunu ve referans tür konsantrasyonunu ($kmol/m^3$) (A ve C sırası ile H_2 ve O_2 türlerini temsil etmektedir), γ terimi konsantrasyon üssünü, α terimi dönüşüm transfer katsayısını, F terimi Faraday sabitini ($9,6485 \times 10^7$ C/kmol-elektron) ve son olarak η terimi ise aşırı potansiyel voltajını (Volt) ifade etmektedir.

ANSYS FLUENT Yazılımının “Fuel Cell and Electrolysis Models” penceresindeki “Butler-Volmer Rate” seçeneğinin kapatılması halinde yazılım Tafel formülasyonu ile çözüm yapacaktır. Tafel formülasyonu, Butler-Volmer formülasyonunun sadeleştirilmiş halidir ve Denklem 4.22 ile Denklem 4.23’te gösterilmektedir.

$$R_{an} = (\zeta_{an} j_{an}^{ref}) ([A]/[A]_{ref})^{\gamma_{an}} (e^{\alpha_{an} F \eta_{an}/RT}) \quad (4.22)$$

$$R_{cat} = (\zeta_{cat} j_{cat}^{ref}) ([C]/[C]_{ref})^{\gamma_{cat}} (e^{-\alpha_{cat} F \eta_{cat}/RT}) \quad (4.23)$$

PDMYH performansını ANSYS FLUENT yazılımında hesaplarken çözülen diferansiyel denklem sisteminin ve ilgili fiziksel parametrelerin tanıtılmasının ardından sayısal yöntem ile ilgili bilgilendirme yapılmıştır.

4.2. Sayısal Yöntem

ANSYS Fluent PDMYH matematiksel modeli sonlu hacimler yöntemiyle ayrık olarak çözülmüştür. Ayrık çözüm yöntemi içerisindeki işlemleri sıralamak gerekirse:

- Hız alanı momentum denkleminde elde edilmektedir.
- Basınç-hız eşleşme algoritmaları, süreklilik denkleminin yeniden biçimlendirilmesi ile elde edilmektedir. Bunun anlamı ise süreklilik yani kütle korunumunun bir basınç düzeltme denklemi çözülerek sağlanmasıdır.
- Enerji denklemi çözülür.
- İlave olarak türlerin ve elektrik yükünün korunumu denklemleri sırayla çözülmektedir.

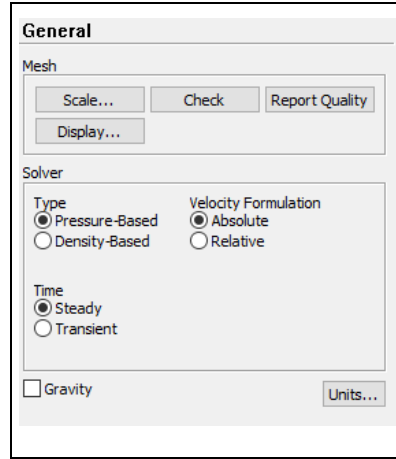
ANSYS FLUENT Çözücüsünde kullanılan beş farklı basınç-hız eşleşme çözüm seçeneği bulunmaktadır. Bunlar:

- SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations)
- SIMPLER (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations Consistent)
- PISO (Pressure-Implicit with Splitting of Operators)
- COUPLED
- FSM (Fractional Step Method)

şeklinde sıralanmaktadır.

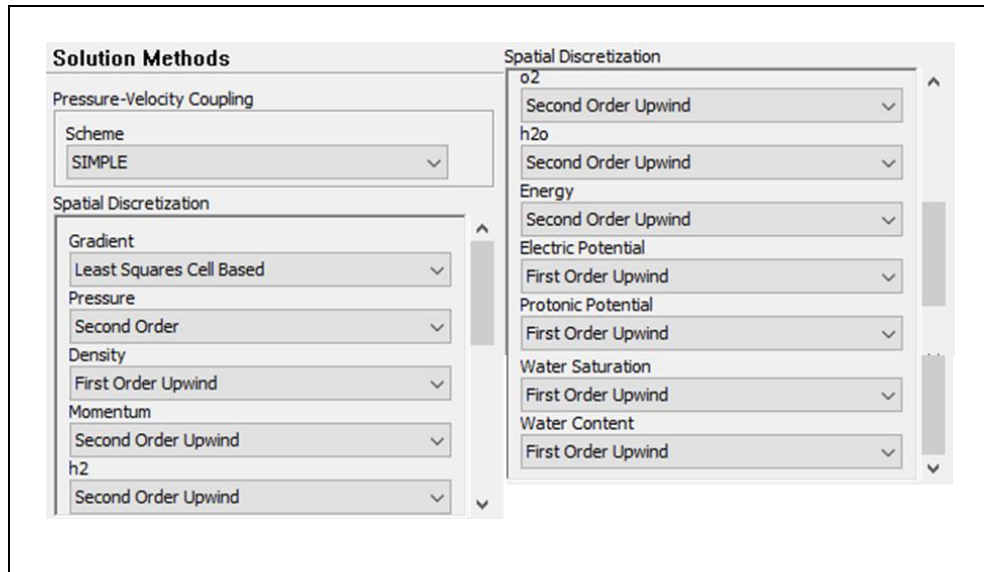
Çalışmada kullanılan SIMPLE çözüm algoritması, hız ile basınç arasındaki ilişkiyi kullanarak kontrol hacimlerindeki basınç eğrilerini elde etmekte ve kütle korunumunu sağlamaktadır. Bir basınç alanının tahmin edilmesi ile momentum eşitliği çözülürse; elde edilen yüzey akısı, kütle korunumunu sağlamayacaktır. Bundan dolayı kütle korunumunun sağlanabilmesi için, yüzey akısına bir düzeltme eklenmektedir. Bu algoritma, yüzey akısı düzeltme denklemlerini, ayrıklaştırılmış kütle korunumu eşitliği içerisinde yerleştirmektedir. Basınç düzeltme eşitliği ise, cebirsel çoklu ağ yöntemi kullanılarak çözülmektedir. Tüm bunların sonucunda, ilerleyen çözüm adımlarının her birinde, düzeltilen yüzey akısı, ayrıklaştırılmış sürekliliği sağlamaktadır.

FLUENT Çözücüsünün, çözüm ayarları sekmesinin altındaki genel kısmında bulunan çözücü tipi, hız formülasyonu ve zaman seçeneklerine ait ekran alıntısı, çalışmada kullanılan hali ile Şekil 4.14'te gösterilmektedir.



Şekil 4.14: FLUENT Çözücüsünün genel kısmı altında bulunan seçimler.

Çözüm yöntemleri altında bulunan basınç-hız bağlantı şeması ve mekansal ayrıklaştırma (Spatial Discretization) yöntemlerinin seçimini gösteren ekran alıntısı Şekil 4.15 ile verilmektedir.



Şekil 4.15: Çözüm yöntemlerine ait yapılan seçimler.

4.2.1. Kullanılan Yöntemdeki Sınır Şartı Tanımlamaları

Bu bölüm altında, çalışmada kullanılan PDMYH matematiksel modeline ait FLUENT çözücüsü içerisinde bulunan sınır şartlarının tanımlamaları yapılmıştır.

4.2.1.1. Kütleli Debi Girişi (Mass Flow Inlet) Sınır Şartı

Çözücü içerisinde kullanılan kütleli debi girişi sınır şartı, tanımlama yapılacak giriş yüzeyi için debiyi kütle bazında veya kütleli akı dağılımını belirtmek amacı ile kullanılırlar. Bir hız girişi (velocity inlet) sınır şartında olduğu gibi, kütle akışının belirtilmesi, toplam basıncın çözümde karşılık olarak değişmesine izin vermektedir. Kütle akışı değişirken toplam basıncın sabit tutulduğu bu koşul tipi, basınç tanımlı giriş (pressure inlet) sınır şartının tam tersini teşkil etmektedir. Bununla birlikte, bir hız girişi sınır şartından farklı olarak, kütleli debi girişi sınır şartı sıkıştırılamaz ve sıkıştırılabilir akışlara eşit olarak uygulanabilir [50].

Kısıtlamalarına ve özel durumlarına bakıldığında:

- Giriş toplam basıncının ayarlanması daha yavaş bir yakınsama ile sonuçlanabilmektedir; dolayısıyla hem basınç tanımlı giriş sınırı koşulu hem de kütle akışı giriş sınır koşulu kabul edilebilir seçimler olarak gözüke de basınç tanımlı giriş koşulunu seçmek daha uygun bir yaklaşım olacaktır.
- Sıkıştırılamaz akışlarda, kütleli debi giriş koşulunun kullanılması gerekli değildir, çünkü yoğunluk sabit olduğunda, hız giriş sınır koşulları kütle akışını sabitleyecektir.
- Tüm fazlar sıkıştırılamaz akış karakteristiğinde ise, kütleli debi girişi sınır koşulları çok fazlı modellerin hiçbirine uygulanamazlar.

Bu çalışmada, anot ve katot bölgelerinde bulunan gaz kanallarının girişlerine bu sınır koşulu tanımlanmıştır.

4.2.1.2. Basınç Tanımlı Çıkış (Pressure Outlet) Sınır Şartı

Basınç tanımlı çıkış sınır şartları, dış sınır üzerindeki statik veya geyç basıncının belirlenmesini gerektirmektedir. Belirtilen bu statik basıncın değeri yalnızca akış ses altı (subsonic) olduğu durumda kullanılmaktadır. Akışın yerel olarak süpersonik olması durumunda, belirtilen basınç artık kullanılmayacak; bunun yerine iç kısımdaki akıştan basınç dış değer bulma (extrapolation) yapılarak hesaplanacaktır.

Basınç tanımlı çıkış sınırında çözüm esnasında, akışın tersine yönde bir hareket olduğunda bir “geri akış” (back-flow) koşulu seti de tanımlanmaktadır. Kolay bir yakınsamanın elde edilebilmesi için, geri akış değerinin gerçekçi değerlerde girilmesi gerekmektedir [50].

Bu çalışma kapsamında, matematiksel modelde bulunan tüm gaz kanallarının çıkış yüzeylerinde bu sınır şartı tipi kullanılmıştır.

4.2.1.3. Duvar (Wall) Sınır Şartı

Katı ile akışkan bölge arasında bir hat oluşturmak için kullanılan duvar sınır koşulları; viskoz akış karakteristiklerinin olduğu durumlar için “kaymanın olmadığı koşul” (no-slip boundary condition) şekli ile tanımlanmaktadır. Ancak duvar sınırının, ötelenme veya dönme hareketi için teğetsel hız bileşeni belirtilebilmekte veya kesme tanımlanarak bir "kayma" duvarı modellenenmektedir. Bunun yanı sıra, simetri sınır tipi kullanılarak sıfır kesme içeren bir kayma duvarı tanımlanabilmektedir; ancak, bir simetri sınırını kullanmak tüm denklemler için simetri koşullarını uygulamaktadır.

Matematiksel modellerde enerji hesaplamalarının yapılabilmesi için katı ve akışkan bölge sınırlarında sıcaklık, ısı akısı veya taşınım ile ısı transferinin tanımlanması gerekmektedir [50].

Bu çalışmada, duvar sınır koşulu, PDMYH dış yüzeylerinde (GC giriş ve çıkışları hariç) kullanılmış olup; CC ile GC arasında ve CC ile GDL arasında bulunan yüzeylere de tanımlanmıştır.

5. SONUÇLAR

Bu çalışmada, anot ve katot difüzör tabakalarına ait gözeneklilik değerlerinin sırası ile 0,3, 0,4, 0,5 ve 0,6 olduğu durumlar incelenmiştir. Kutuplaşma (polarizasyon) eğrilerinin oluşturulmasında kullanılan gerilim değerleri hariç tutulduğunda, dört temel durum (TD) üzerinden analizler gerçekleştirilmiştir. Gözeneklilik değerlerine göre incelenen durumlar Tablo 5.1’de sunulmaktadır.

Tablo 5.1: Anot ve Katot GDL Gözeneklilik Değerlerine Göre Analiz Edilen Durumlar.

Temel Durum (TD)	GDL Gözeneklilik Değeri	
	Anot	Katot
TD-1	0,3	0,3
TD-2	0,4	0,4
TD-3	0,5	0,5
TD-4	0,6	0,6

Değinen bu dört adet temel durum ise, PDMYH analizleri sonucu elde edilen akım yoğunluklarının doğru şekilde karşılaştırılabilmesi için ve aynı zamanda, kutuplaşma eğrilerinin oluşturularak hücre performanslarının ortaya konulabilmesi için farklı on yedi (17) adet gerilim değerleri kullanılarak kırılıma uğratılmış; matematiksel model toplamda altmış sekiz (68) adet temel analize tabi tutulmuştur. Gerilim değerlerinin de işin içine girerek oluşturulan analiz matrisi Tablo 5.2’de gösterilmektedir.

Tablo 5.2: Kullanılan Tüm Değişkenler ile Yapılan Analizlere Ait Matris.

Hücre Gerilim Değeri (V)	Temel Durumlar			
	TD-1	TD-2	TD-3	TD-4
0,9	C-1	C-18	C-35	C-52
0,875	C-2	C-19	C-36	C-53
0,85	C-3	C-20	C-37	C-54
0,825	C-4	C-21	C-38	C-55
0,8	C-5	C-22	C-39	C-56
0,75	C-6	C-23	C-40	C-57
0,7	C-7	C-24	C-41	C-58
0,65	C-8	C-25	C-42	C-59
0,6	C-9	C-26	C-43	C-60
0,55	C-10	C-27	C-44	C-61
0,5	C-11	C-28	C-45	C-62
0,45	C-12	C-29	C-46	C-63
0,425	C-13	C-30	C-47	C-64
0,4	C-14	C-31	C-48	C-65
0,375	C-15	C-32	C-49	C-66
0,35	C-16	C-33	C-50	C-67
0,325	C-17	C-34	C-51	C-68

PDMYH Matematiksel modeline ait gerçekleştirilen analizlerin koşturulduğu platform, donanımın özellikleri, analizlere ait ortalama süreler vb. veriler ise Tablo 5.3'te sunulmuştur.

Tablo 5.3: Gerçekleştirilen Analizlere Ait Çeşitli İstatistik Veriler.

Veri Adı	Değerler
Matematiksel Modelde Bulunan Toplam Eleman Sayısı	480000
Kullanılan İşlemci Modeli	i7-8700K
Kullanılan İşlemcinin Frekansı (Normal)	3,70 GHz
Kullanılan Paralel Çekirdek Sayısı	4
Kullanılan RAM Frekansı	2400 MHz
Kullanılan RAM Tipi	DDR4
Çözüm Sırasında Kullanılan RAM (Ortalama) / Mevcut RAM	1418,61 MB / 65536 MB
Bir Analiz Senaryosu için Koşturulan Toplam İterasyon Sayısı	1000
Ortalama Bir İterasyon Süresi	4,6 sn.
Kutuplaşma (Polarizasyon) Eğrisi için Gerekli Ortalama Süre	20,17 saat

5.1. Yakınsama Kriterleri

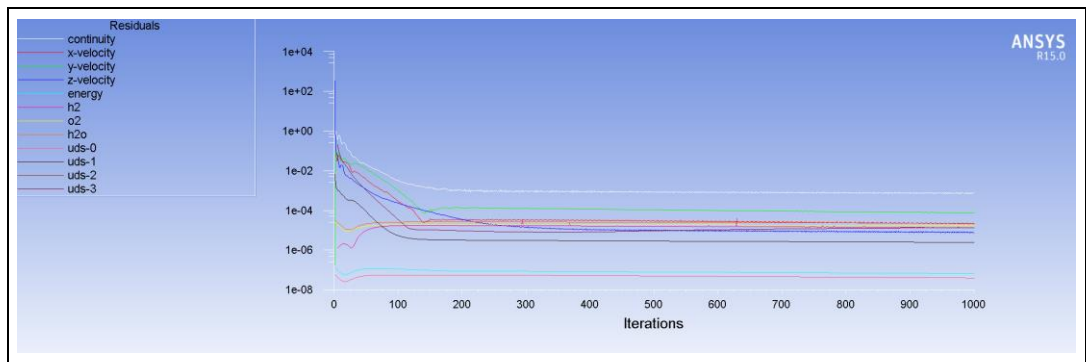
ANSYS FLUENT platformunda HAD simülasyonu gerçekleştiren bir kullanıcı, herhangi bir animasyon ya da grafik penceresi kurmamış ise, “ölçülen artıklar” (Scaled Residuals) isimli ilk pencereden, çözüm sırasında yakınsamanın durumunu gösteren “artıklar” (residuals) ile ilgili bilgiyi elde edebilmektedir. Artık değeri, gerçekleşen sayısal çözümün dengesizliğini ölçer; sayısal hata ile ilişkilidir ancak kesinlikle sayısal hataya eşit olduğu anlamı çıkartılmamalıdır.

HAD Yöntemi ile yapılan bir çözümde, yakınsamayı hızlandırmak için yapılması gereken en temel iki hareket rahatlatma faktörlerinin değerlerini arttırmak (over-relaxation) ve mekansal ayrıklaştırmada birinci derece çözüm yöntemlerini tercih etmektir.

Bir çözümde yakınsama elde edildiğine dair kesin bir kıstas bulunmamaktadır. Bu konudaki karar mekanizmasının doğru işleyebilmesi için artık değerlerinin mertebeleri belirli seviyelerin altında bulunmalıdır. İstisnai durumlar dışında, birçok HAD simülasyonunun gerçekleştirilmesinde, enerji hariç diğer eşitliklere ait artıkların 10^{-3} mertebelerinin altında olması istenmektedir. Enerji eşitliği için ise bu mertebe 10^{-6} değerinin altı olarak tanımlanmaktadır.

Normal olarak, PDMYH modeli çözümlerinde FLUENT çözücüsü otomatik olarak tüm denklemler için yakınsama kriterlerini etkisiz kılmaktadır. Bundan dolayı çözümün yakınsayıp yakınsamadığı durumu kullanıcının kontrolünde olmaktadır; ancak, güvenilir sonuçların elde edilebilmesi açısından, yukarıda söz edilen varsayılan mertebelerin çok daha altındaki değerlerde iterasyonlar durdurulmalıdır.

Bu çalışmada, örnek olarak Şekil 5.1’de yapılan analiz çalışmalarından bir yakınsama grafiği gösterilmektedir.



Şekil 5.1: PDMYH HAD Simülasyonuna ait bir yakınsama grafiği örneği.

Şekil 5.1’de verilen yakınsama grafiğinden de görüleceği üzere, her bir analiz senaryosunda süreklilik, momentum (x, y ve z hızları), enerji, tür (H₂, O₂ ve H₂O) denklemleri çözülerek artıkları kontrol edilmiştir. UDS-0, UDS-1, UDS-2 ve UDS-3 niceliklerine ait olan artıklar da bu grafik üzerinden bakılarak sayıldığında, toplamda 12 adet denkleme ait artık mertebesi kontrol altında tutulmaktadır. Burada UDS-0, UDS-1, UDS-2 ve UDS-3 isimli kullanıcı tanımlı yönsüz nicelikleri açıklanır ise:

- UDS-0: Elektrik potansiyeli (Katı faz potansiyeli) (Volt)
- UDS-1: Protonik potansiyel (Membran faz potansiyeli) (Volt)
- UDS-2: Gözenekli ortamın sıvı suyla hacimsel doyma oranı
- UDS-3: Su içeriği

şeklinde belirtilmektedir.

Bu çalışma için değinilen 68 adet analiz senaryosu, her birinde 1000 iterasyon koşturulacak şekilde gerçekleştirilmiştir. Çözüm metotları altında bulunan mekansal ayrıklaştırma (Spatial Discretization) sekmesinde geçen UDS niceliklerinin haricindeki tüm denklemler ikinci derece Upwind olarak çözdürülmüştür. Örneği Şekil 5.1’de verilen yakınsama grafiğindeki gibi, diğer analizlere ait olan yakınsama grafiklerinde de ortalama olarak 300-400 iterasyon sonrasında artıkların değerleri rejime oturmaktadır. Artıkların varsayılan mertebeleri ve bu çalışmada 1000 iterasyon sonrasındaki mertebeler için Tablo 5.4 oluşturulmuştur.

Tablo 5.4: Artıkların FLUENT Çözücüsündeki Varsayılan Mertebeleri ve Bu Çalışmada 1000 İterasyon Sonrasında Ulaşılan Mertebeleri.

Artık Adı	Ulaşılmaması İstenen Varsayılan Değeri	1000 İterasyon Sonunda Ulaşılan Değeri
Süreklilik	$<10^{-3}$	$<10^{-4}$
x-hızı	$<10^{-3}$	$<10^{-5}$
y-hızı	$<10^{-3}$	$<10^{-5}$
z-hızı	$<10^{-3}$	$<10^{-6}$
Enerji	$<10^{-6}$	$<10^{-7}$
H ₂	$<10^{-3}$	$<10^{-4}$
O ₂	$<10^{-3}$	$<10^{-4}$
H ₂ O	$<10^{-3}$	$<10^{-4}$

Tablo 5.4: Artıkların FLUENT Çözücüsündeki Varsayılan Mertebeleri ve Bu Çalışmada 1000 İterasyon Sonrasında Ulaşılan Mertebeleri (Devam).

Artık Adı	Ulaşılması İstenen Varsayılan Değeri	1000 İterasyon Sonunda Ulaşılan Değeri
UDS-0	$<10^{-3}$	$<10^{-7}$
UDS-1	$<10^{-3}$	$<10^{-5}$
UDS-2	$<10^{-3}$	$<10^{-4}$
UDS-3	$<10^{-3}$	$<10^{-4}$

Tablo 5.4'ten de görüldüğü üzere, artıkların değerleri varsayılan değerlerinin altına indirilecek şekilde çözümler yapılmıştır. Tüm analiz senaryoları sonrasında artıkların mertebeleri kontrol edilmiştir. En önemli tutulan artıklardan biri olan enerji niceliğinin mertebeleri tüm analiz senaryoları için 10^{-7} değerinin altında olduğu görülmüştür.

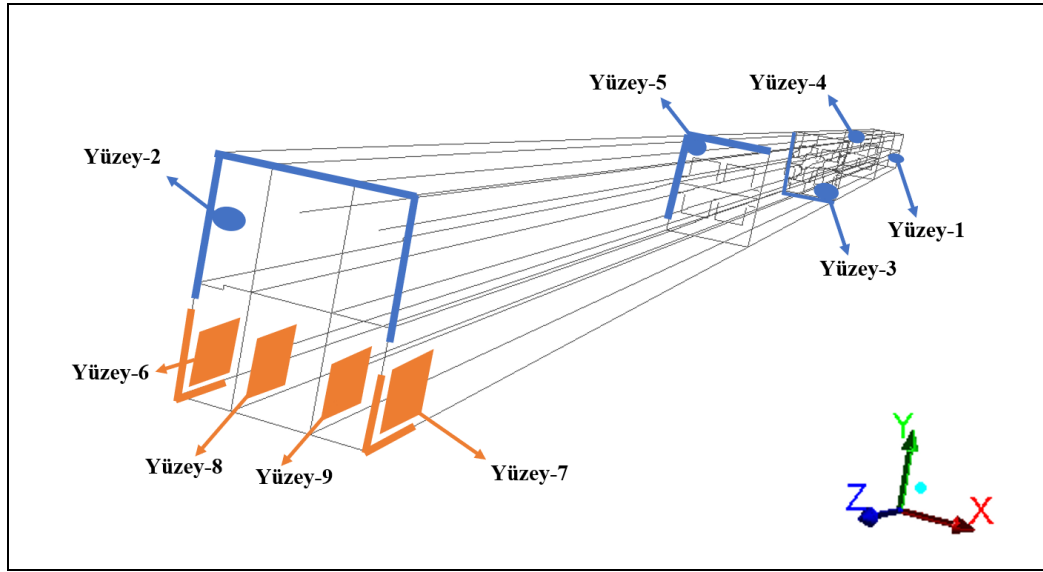
5.2. İki Boyutlu Kesitler Üzerinden Sonuçların İncelenmesi

ANSYS FLUENT çözücüsünün her bir senaryo için 1000 iterasyon ile koşturulmasının ardından, PDMYH modeline ait olan sonuçlar, oluşturulan düzlemsel kesitlerde değişkenlerin kontur eğrileri çizdirilerek alınmıştır. Kesitlerin uzaydaki konumları için bir betimleme gerekirse:

- Yüzey-1: plane-xy-01 (@z=0) (z-koordinatındaki en dış konumlardan biri)
- Yüzey-2: plane-xy-02 (@z=125) (z-koordinatındaki en dış konumlardan diğeri)
- Yüzey-3: plane-xy-03 (@z=62,5) (z-koordinatındaki orta konum)
- Yüzey-4: plane-xy-04 (@z=31,25) (z-koordinatındaki ara konumlardan biri)
- Yüzey-5: plane-xy-05 (@z=93,75) (z-koordinatındaki ara konumlardan diğeri)
- Yüzey-6: plane-yz-01 (@x=0) (x-koordinatındaki en dış konumlardan biri)
- Yüzey-7: plane-yz-02 (@x=2,4) (x-koordinatındaki en dış konumlardan diğeri)
- Yüzey-8: plane-yz-03 (@x=0,7) (x-koordinatındaki ara konumlardan biri)
- Yüzey-9: plane-yz-04 (@x=1,7) (x-koordinatındaki ara konumlardan diğeri)

şeklinde tanımlama yapılabilir.

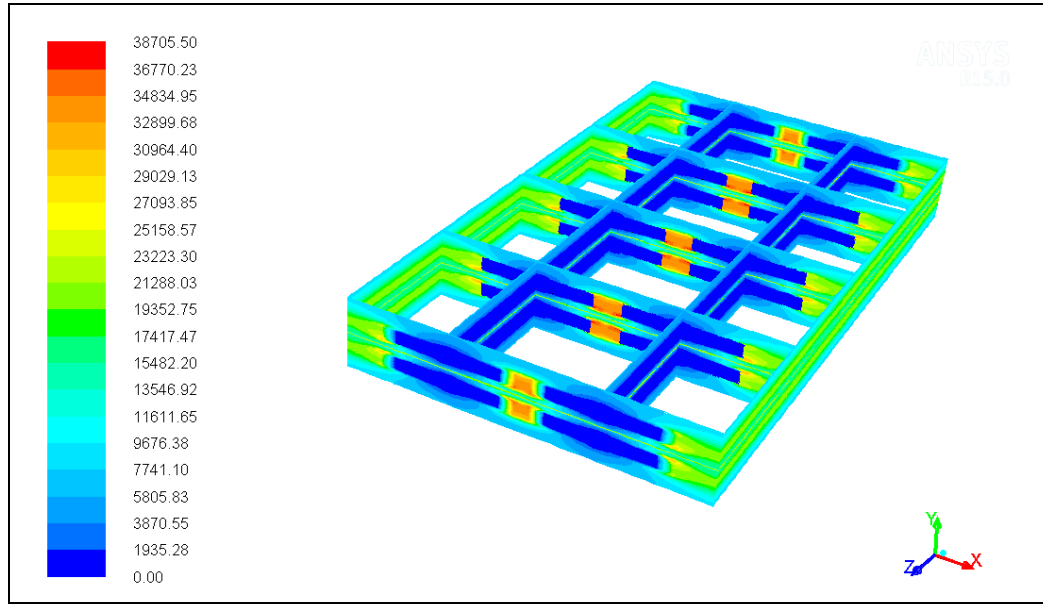
Yukarıda sözü edilen düzlemlerin PDMYH modeli üzerindeki konumları Şekil 5.2’de gösterilmektedir.



Şekil 5.2: İki boyutlu yüzeylerin PDMYH modeli üzerinde gösterimi.

Analizler sonucu elde edilen veriler, belirtilen düzlemlerde hız, basınç, tür kütle oranları, tür molar konsantrasyonlar ve akım yoğunluğu kontur grafikleri çizdirilerek gösterilmiştir. Önceden de değinildiği üzere, anot terminal duvar elektrik potansiyeli sınır şartı 0 Voltta tutulurken (topraklama), katot terminal duvar elektrik potansiyeli değişken tutularak kutuplaşma eğrileri elde edilmektedir. Yapılan analizler sonucunda da aynen literatürdeki verilerde de görüldüğü gibi en düşük katot terminal duvar elektrik potansiyeli değerinde en yüksek akım yoğunluğu yakıt hücresinden elde edilmektedir. Bu düşünce ile bir örnekleme yapılabilmesi açısından, bu çalışmaya ait olan ekran görüntüleri 0,325 Volt katot terminal gerilim duvar sınır şartına göre alınarak gösterilmektedir. GDL gözeneklilik değeri penceresinden de bakıldığında, bu ekran görüntüleri 0,5 anot ve 0,5 katot GDL gözeneklilik değerlerine ait olan ekran görüntüleridir. Tek gerilim değeri üzerinden gösterilmesindeki neden diğer senaryolarda da benzer durumların söz konusu olmasındandır. Elde edilen farklı analiz senaryolarına ait görseller, çalışmanın bu kısımlarında karşılaştırmalı (aynı hücre gerilimi - farklı gözeneklilik değeri) yorumlar halinde verilmektedir.

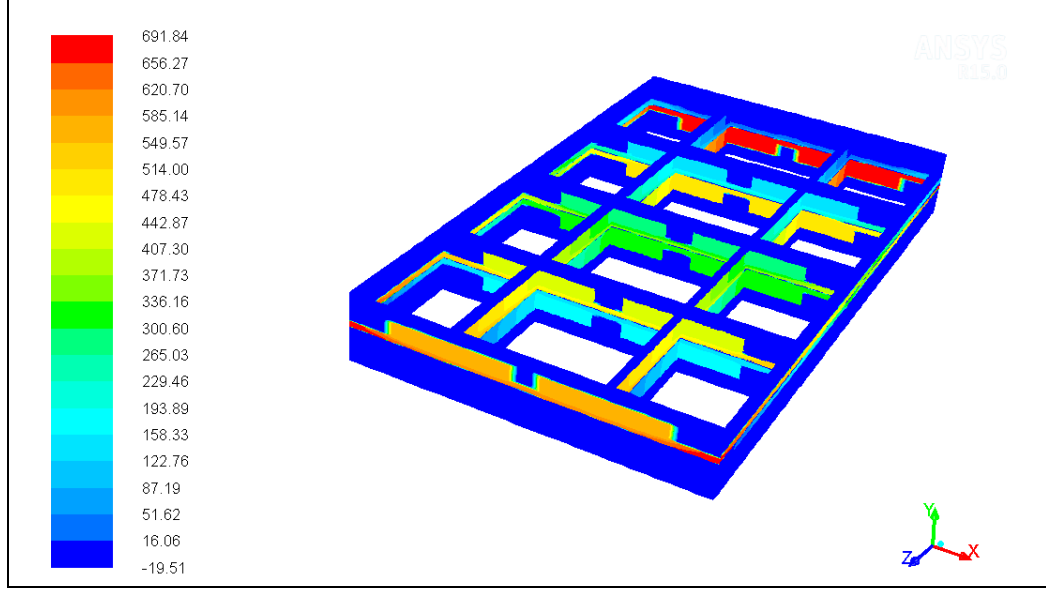
PDMYH modelinin belirtilen düzlemlerde akım yoğunluğu kontur grafikleri Şekil 5.3'te gösterilmiştir.



Şekil 5.3: PDMYH Modelinin seçilen düzlemlerde akım yoğunluğu (A/m^2) kontur grafikleri.

Ekran alıntılarının rahat bir şekilde görüntülenebilmesi ve yorumlanabilmesi için x, y ve z koordinatlarındaki uzunluklarda bir ölçülendirme yapılmıştır. Şekil 5.3'te verilen ve diğer niceliklere ait ekran alıntılarında x-koordinatında 6 kat, y-koordinatında 1 kat (aynı bırakılmıştır) ve z-koordinatında 0,2 kat ölçek katsayıları uygulanmıştır. Ekran alıntısında (Şekil 5.3) görüldüğü üzere, maksimum akım yoğunluğu yüzey-3 üzerinde (@z=62,5 mm) anot ve katot bölgelerinin akış kanalları arasında, akım toplayıcılarda okunmaktadır. Çünkü kütle akısı girişi sınır şartlarından da hatırlanacağı üzere, hücre modelinin ters akışlı (counter-flow) olması sebebiyle akım yoğunluğu yüzey-4 ve yüzey-5'in arasında maksimum değere ulaşır. Hücre dış sınırlarına doğru gidildikçe, akım yoğunluğunun arttığı görünmektedir. Her iki katmanda da iki kanalı ayıran 0,2 mm uzunluğundaki yapı iki kanal arasında kaldığı için, diğer bölgelere kıyasla bu bölgede akım yoğunluğu yüksektir. Bu kanalları ayıran 0,2 mm'lik duvarların da yine belirtildiği üzere maksimum akım yoğunluğuna sahip bölgesi, oluşturulan beş adet yüzeyden (XY-Düzlemi) ortada (yüzey-3) bulunmaktadır.

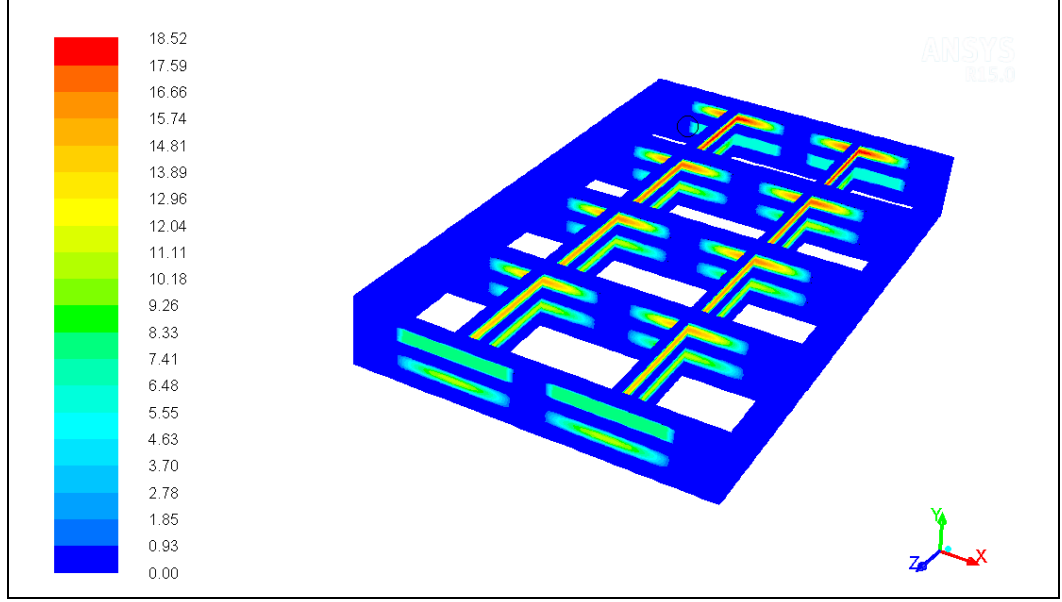
Bu çalışmada ANSYS FLUENT yazılımıyla hesaplanan PDMYH akım yoğunluğu dağılımı literatürdeki diğer çalışmalarla uyumludur [25], [49].



Şekil 5.4: PDMYH Modeliyle hesaplanan basınç (Pa) kontur grafikleri.

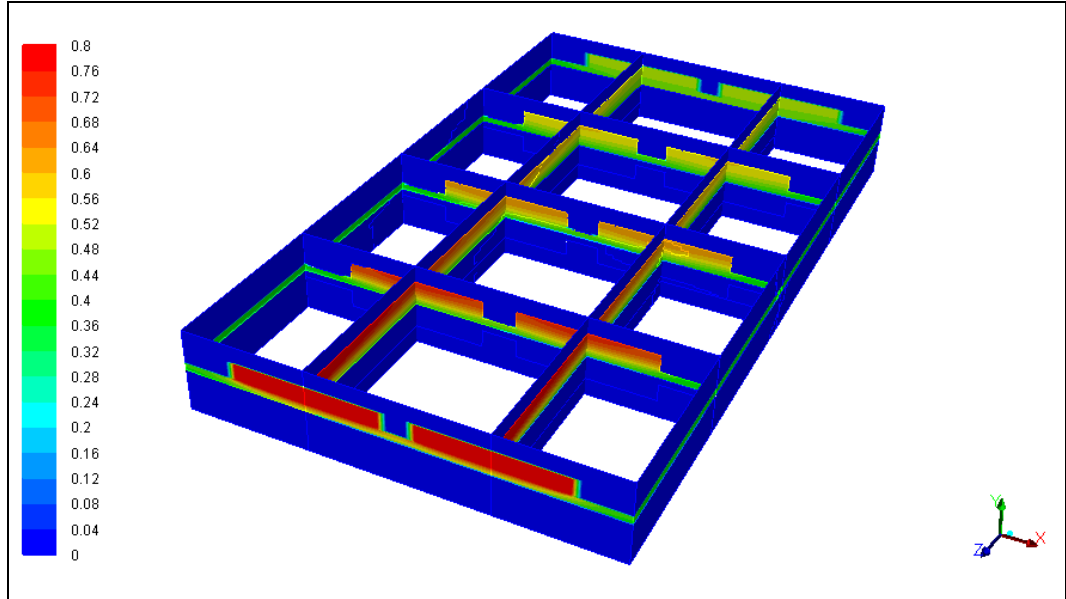
Şekil 5.4'te gösterilen basınç dağılımına bakıldığında, katot ve anoda ait giriş bölgelerinde basınç diğer bölgelere göre yüksek iken, kanal boyunca elektrokimyasal reaksiyon sonucu yakıt ve oksitleyicinin tüketilmesi sebebiyle, çıkış bölgelerine yaklaşıldıkça basıncın düştüğü görülebilir. Bu da analiz neticesinde beklenen durumlardandır. Sınır şartlarının tanımlanmasından da hatırlanacağı üzere, anot ve katoda ait olan basınç tanımlı çıkış yüzeylerinde, manometre basıncı 0 Pascal olarak girilmiştir. Bu durum yine analiz neticesinde elde edilen ekran alıntılarından okunabilmektedir. Katot gaz akış kanalları girişi tarafından bir ölçüm alındığında, basınç maksimum 691 Pa olarak okunmaktadır. Anot gaz akış kanallarının girişinde ise basınç maksimum 585 Pa olarak okunmaktadır.

Şekil 5.5'te belirtilen düzlemlerde hız kontur grafikleri gösterilmiştir. Hız değişiminin yalnızca gaz kanalları üzerinde olması beklenmektedir. Çünkü yakıt ve oksitleyici bu kanallardan yapı içerisine gönderilmektedir. Anot ve katot bölgelerindeki gazların sistem içerisine giriş yaptıkları hız değerleri sırası ile 8,33 m/s ve 6,48 m/s'dir. Anot ve katot bölgelerindeki gaz kanallarının çıkışında ise maksimum hızlar 18,51 m/s ve 9,25 m/s olarak hesaplanmıştır.

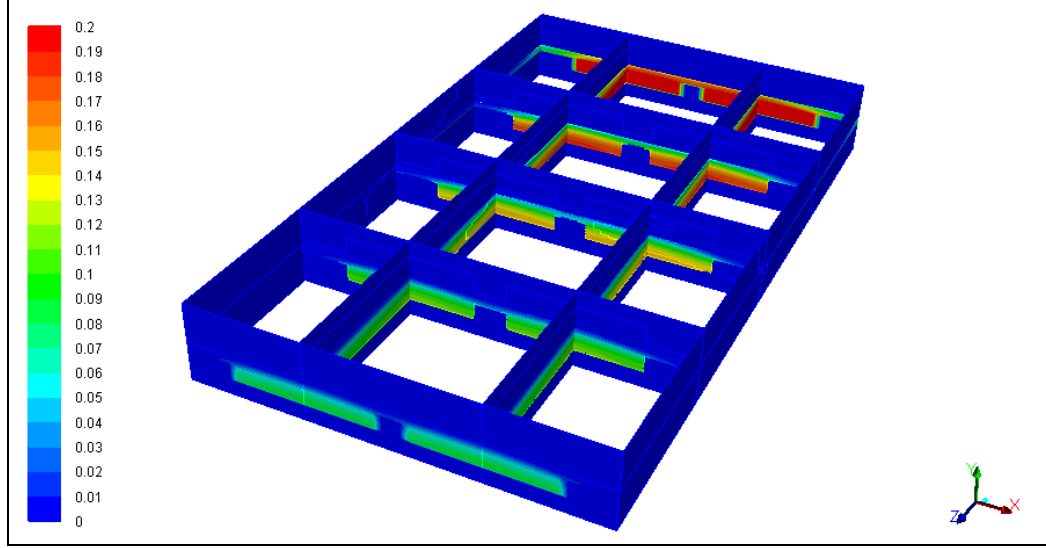


Şekil 5.5: PDMYH Modeliyle hesaplanan hız (m/s) dağılımı kontur grafikleri.

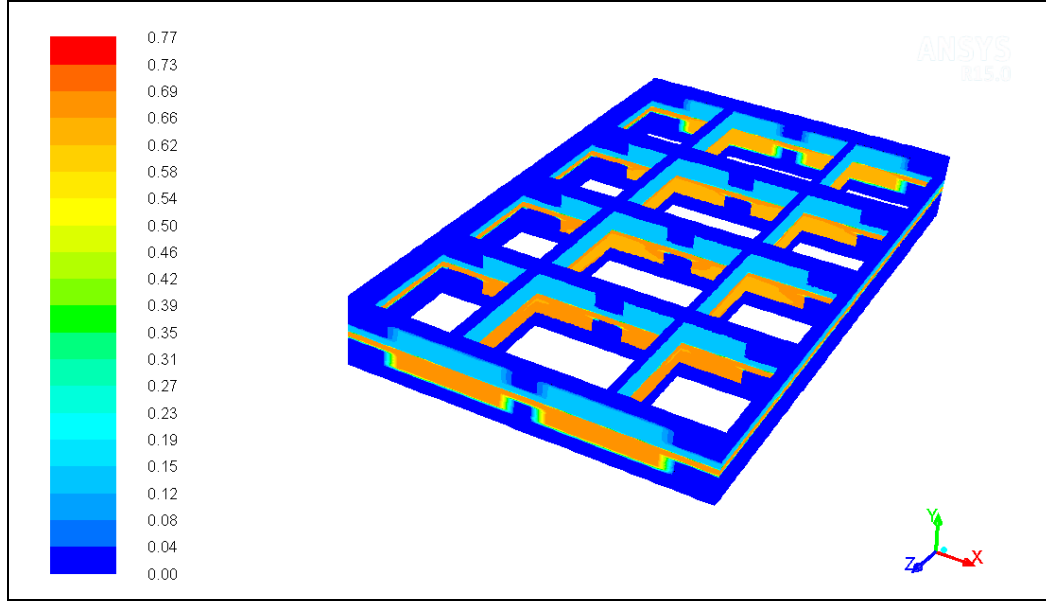
Analizler neticesinde elde edilen türlerin kütle oranları kontur grafikleri H_2 ve O_2 için sırasıyla Şekil 5.6 ve Şekil 5.7’de gösterilmiştir. Sonuçlardan hidrojen ve oksijenin sistemde elektrokimyasal reaksiyon sonucunda giderek tükendikleri görülebilir.



Şekil 5.6: Hidrojen gazı kütle oranı kontur grafikleri.



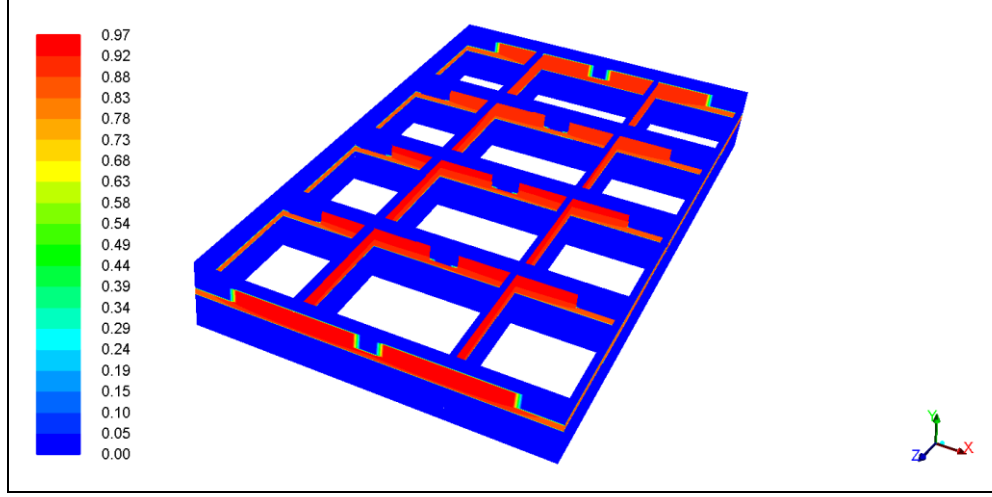
Şekil 5.7: Oksijen gazı kütle oranı kontur grafikleri.



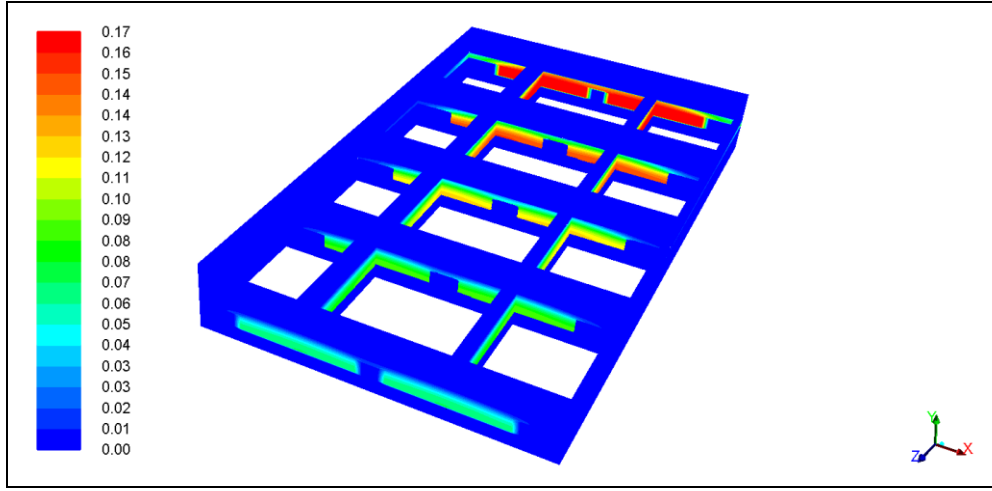
Şekil 5.8: Reaksiyon sonrası oluşan suya ait sıvı su aktivitesi.

Şekil 5.8’de sıvı su aktivitesi (Liquid Water Activity (PEM)) kontur grafikleri belirtilen düzlemlerde çizdirilmiş olup, elektrokimyasal tepkime sonucu ortaya çıkan su kısmen yoğunlaşarak, sıvı su katot bölgesinde toplanmaktadır.

Yine analizler neticesinde, örnek olarak alınan 0,325 Volt katot duvar terminal gerilim değeri ve 0,5 GDL gözeneklilik değerlerine sahip PDMYH modeliyle hesaplanan türlerin mol kesri dağılımları H_2 ve O_2 için sırasıyla Şekil 5.9 ve Şekil 5.10’da gösterilmiştir.



Şekil 5.9: Hidrojen gazı mol oranı kontur grafikleri.

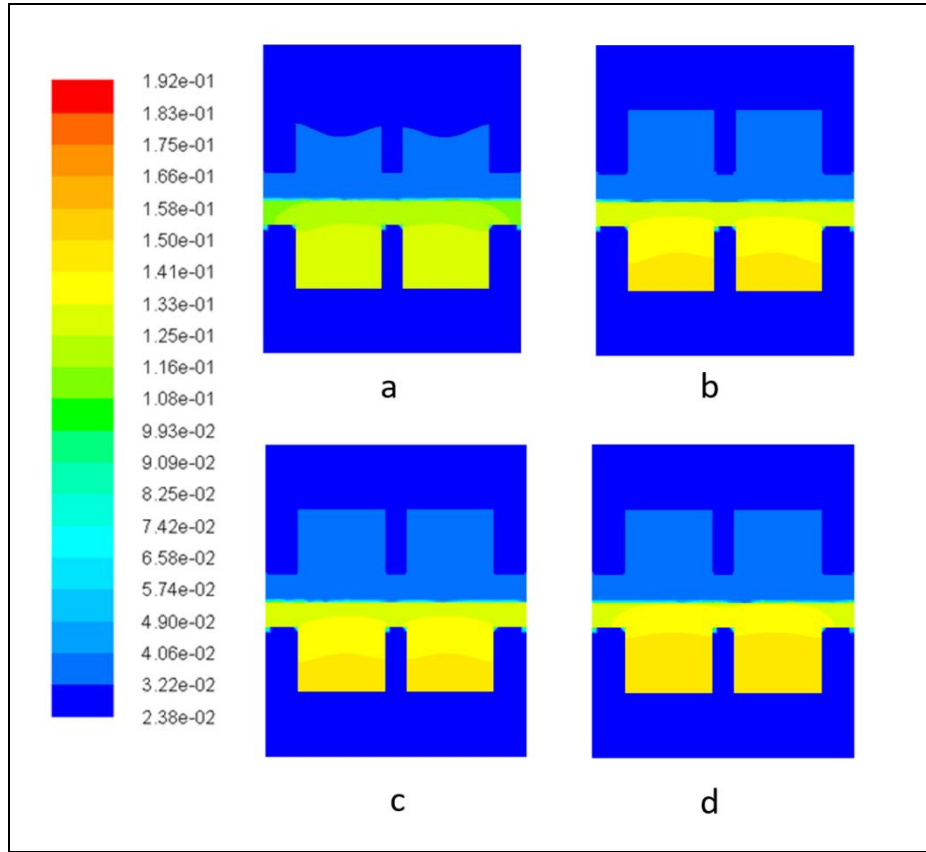


Şekil 5.10: Oksijen gazı mol oranı kontur grafikleri.

Bu bölümün girişinde bahsedildiği üzere, çeşitli niceliklere ait ekran görüntüleri aşağıda karşılaştırmalı olarak verilmiştir. Bu ekran görüntülerinde, seçilen bir hücre gerilim değerinde, farklı GDL gözeneklilikleri için bazı düzlemsel kesitlerde hesaplanan büyüklüklerin kontur grafikleri bulunmaktadır. Her kontur grafiğinde a, b, c ve d harfleri sırası ile 0,3, 0,4, 0,5 ve 0,6 GDL gözeneklilik değerlerini belirtmektedir.

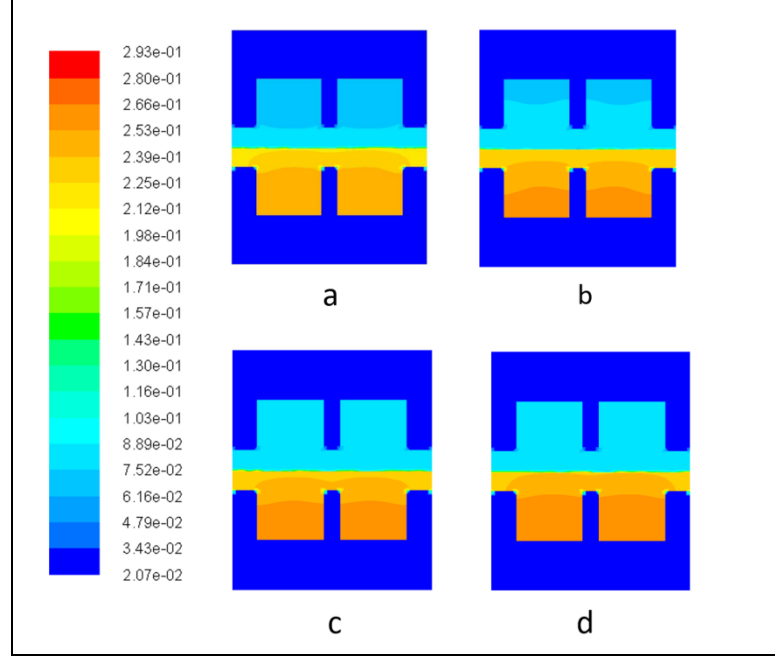
Şekil 5.11’de 0,8 V hücre gerilim değeri için tüm GDL gözeneklilik değerlerinde su mol oranı kontur grafikleri gösterilmiştir. Bu ekran görüntüsü yüzey-3 üzerinden (@z=62,5 mm) alınmıştır. GDL gözenekliliği 0,3’ten 0,6’ya kadar artarken (a’dan d’ye) su mol oranı giderek yükselmektedir. Çünkü GDL Gözeneklilik değeri yükseldikçe, hücrenin ürettiği elektrik akımının artması sebebiyle (kutuplaşma

eğrileri bölümünde gösterildiği üzere) elektrokimyasal tepkime sonucu birim zamanda üretilen su miktarı da artmaktadır.



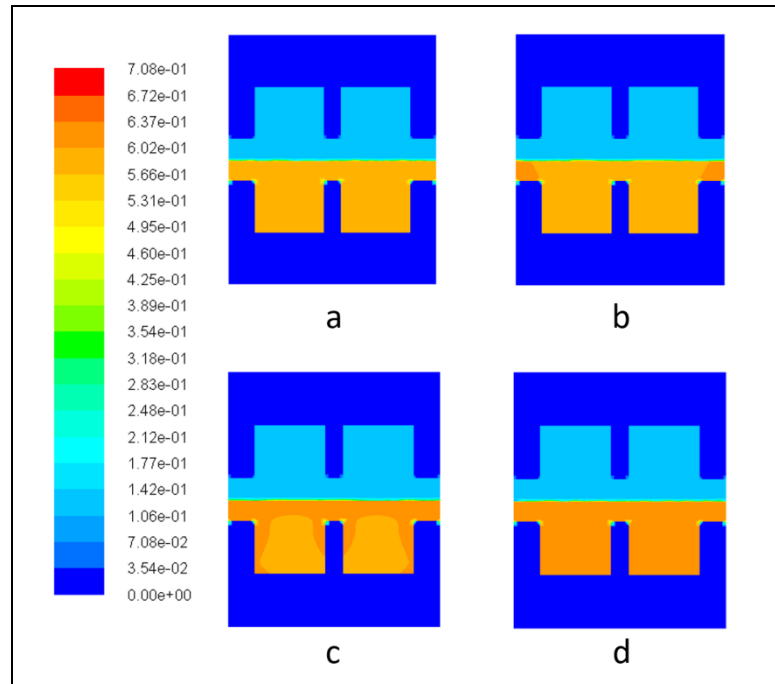
Şekil 5.11: 0,8 V Hücre gerilimi için a) 0,3, b) 0,4, c) 0,5 ve d) 0,6 GDL gözeneklilik değerlerinde, yüzey-3 üzerinde su mol oranı kontur grafikleri.

Şekil 5.12’de, belirtilen GDL gözeneklilik değerleri için sıvı suya ait olan ekran görüntüsü bulunmaktadır. Yine, yüzey-3 üzerinden elde edilen bu ekran alıntısından görülebileceği üzere, gözeneklilik değeri arttıkça, sıvı su miktarındaki değişim de artış yönündedir. Bu da gözeneklilik değeri arttıkça, üretilen akımın yükselmesi ve dolayısıyla üretilen su miktarının yükselmesi ile açıklanabilir.



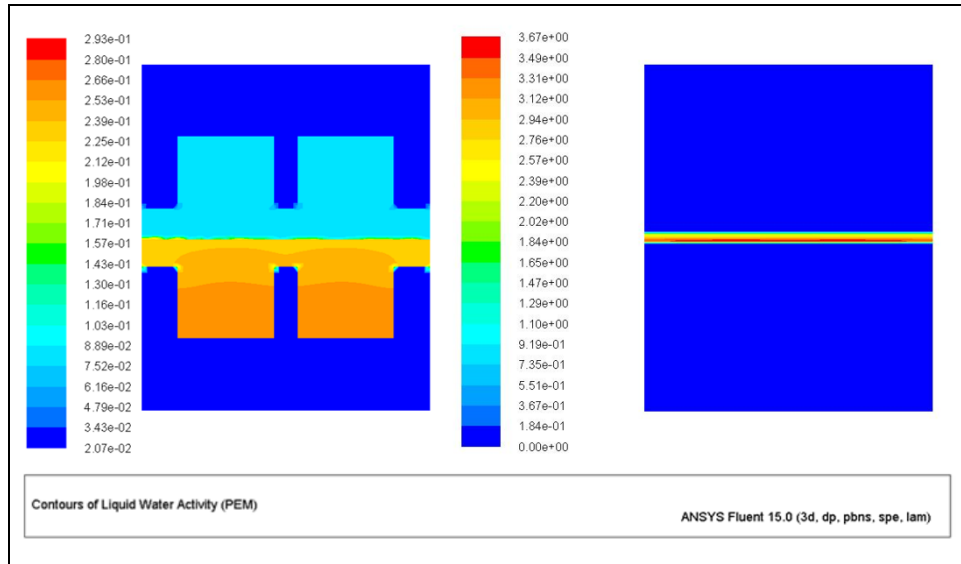
Şekil 5.12: 0,8 V Hücre gerilimi için a) 0,3, b) 0,4, c) 0,5 ve d) 0,6 GDL gözeneklilik değerlerinde, yüzey-3 üzerinde sıvı su aktivitesi (oluşumu) kontur grafikleri.

Şekil 5.13'te ise 0,35 V hücre gerilimi için belirtilen GDL gözeneklilik değerlerinde yüzey-3 üzerinde sıvı su oluşumu kontur grafikleri gösterilmiştir.



Şekil 5.13: 0,35 V Hücre gerilimi için a) 0,3, b) 0,4, c) 0,5 ve d) 0,6 GDL gözeneklilik değerlerinde, yüzey-3 üzerinde sıvı su aktivitesi (oluşumu) kontur grafikleri.

Benzer olarak, Şekil 5.13'te de GDL gözeneklilik değerinin yükselmesiyle birlikte sıvı su oluşumunda artış meydana gelmektedir. Bunun dışında dikkat edilmesi gereken durum, sıvı su oluşumunun katot bölgesinde görüntülenmesidir ve bu durum beklenen bir hadisedir. Başka bir karşılaştırma yapmak gerekirse, çoklu-faz hesabının aktif edilmediği durumda su aktivitesi kontur grafiklerinin çizdirilmesi gerçekçi olmayacaktır. Örneğin, Şekil 5.14'te 0,8 V hücre gerilimi ve 0,5 GDL gözeneklilik değeri için çoklu fazın hesaba katıldığı ve katılmadığı hallerde sıvı su aktivitesi kontur grafikleri aynı düzlemde (yüzey-3) gösterilmiştir. Çoklu fazın hesaba katılmadığı halde, sağdaki grafikten de belli olduğu üzere, sıvı su yalnızca membran üzerinde yakalanmaktadır. Soldaki senaryoda ise çoklu fazın aktif olması ile PDMYH elektro-kimyası ve fiziği gereği suyun katot bölgesinde (y-koordinatında alt bölge) toplandığı gerçekçi çözüme ulaşıldığı görülmektedir.



Şekil 5.14: 0,8 V hücre gerilimi ve 0,5 GDL gözenekliliği için çoklu-faz hesabının aktif/pasif olması durumlarında sıvı su aktivitesi kontur grafikleri.

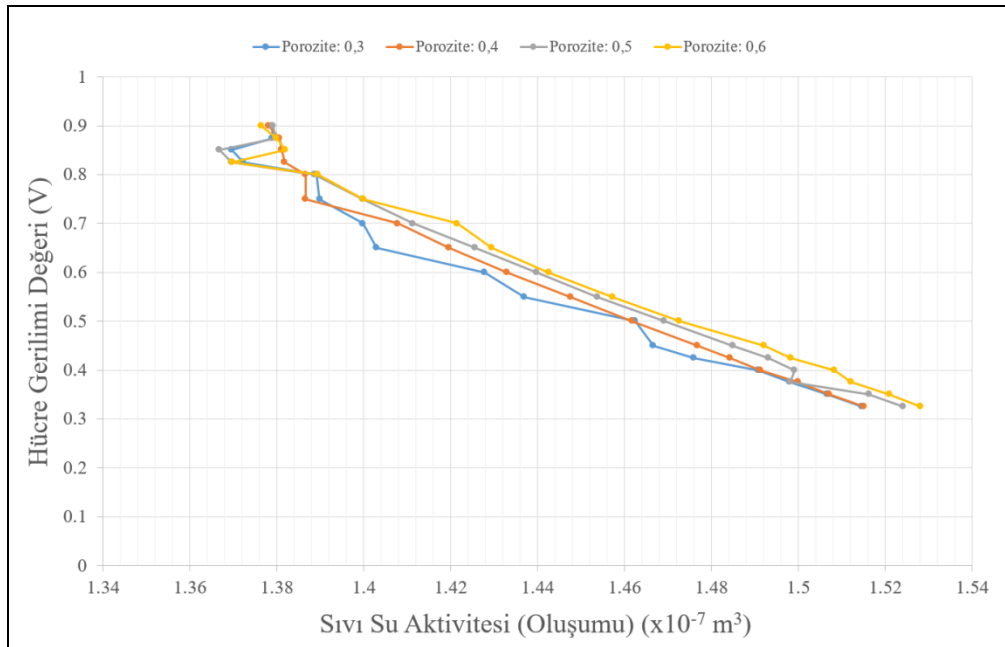
Ayrıca, sıvı su aktivitesi ile ilgili ANSYS FLUENT yazılımından tüm GDL gözeneklilik ve tüm hücre gerilimi değerleri için rapor alınmıştır. Rapor hacim integralleri (Volume Integrals) bölümünden, rapor tipi olarak yine hacim integrali seçilerek elde edilmiştir. Saha değişkeni olarak, UDM ve Liquid Water Activity (PEM) kullanılmıştır. Sonuçlar m^3 bazında ve tüm çözüm alanları için (membran, anot ve katot CC, GC, GDL ve CL) listelenmektedir. Yine beklenildiği üzere, çözüm bölgeleri (domains) incelendiğinde, akım toplayıcı tabakalarda herhangi bir sıvı su

aktivitesine rastlanılmamaktadır. Bu da örnek olarak verilen Şekil 5.15'teki listeden görülebilir (örnek: 0,4 V ve 0,5 GDL gözeneklilik değeri için).

Total Volume Integral Liquid Water Activity (PEM)	(m3)
pemfc-gdl-c	4.098118e-08
pemfc-catalyst-c	2.3419092e-09
pemfc-membrane	2.8587938e-09
pemfc-catalyst-a	5.3121874e-10
pemfc-gdl-a	9.1202282e-09
pemfc-channel01-c	3.8853789e-08
pemfc-channel02-c	3.8853049e-08
pemfc-channel02-a	8.1887546e-09
pemfc-channel01-a	8.189742e-09
pemfc-current-c	0
pemfc-current-a	0
Net	1.4991866e-07

Şekil 5.15: Sıvı su aktivitesi için rapordan çekilen liste.

Tüm senaryolar için (68 adet) hesaplanan sıvı su aktivitesi değerleri yazılımdan çekilerek, Şekil 5.16'da gösterilen grafik oluşturulmuştur.



Şekil 5.16: Tüm senaryolara ait sıvı su aktivitesi.

0,9 V ve 0,8 V hücre gerilim değerleri aralığında, sıvı su aktivitesine ait değerlerde üst üste binmeler görülse de genel eğilim: herhangi bir hücre gerilimi için GDL gözenekliliğinin artması ile sıvı su aktivitesinin artması yönündedir. Buna ilave

olarak, tüm GDL gözeneklilik değerleri için sıvı su aktivitesi azaldıkça hücre geriliminin arttığı sonucuna ulaşılmıştır.

UDM teriminin açılımı “kullanıcı tanımlı hafıza (User Defined Memory)” olup, iterasyonlar sonucunda hesaplanan akım yoğunluğu, sıvı su aktivitesi vb. nicelikler PDMYH modeli için bu başlık (seçenek) altından görüntülenebilmektedir.

Denklem 5.1’de verildiği üzere, sıvı su aktivitesi, su buharı basıncının, ortam sıcaklığında su doyma basıncına oranına, gözenekli ortamın sıvı suyla hacimsel doyma oranının iki katı eklenerek hesaplanır.

$$a_{su} = \frac{P_{wv}}{P_{sat}} + 2s \quad (5.1)$$

Denklem 5.1’de a_{su} sıvı su aktivitesini, P_{wv} su buharı basıncını, P_{sat} ortam sıcaklığında suyun doyma basıncını ve s gözenekli ortamın sıvı suyla hacimsel doyma oranını belirtmektedir.

PDMYH modeli için, sıvı su aktivitesi ile ilgili terim, su içeriğini (λ) ifade eden formülasyon içerisinde geçmektedir. Springer vd. tarafından elde edilen bu formülasyon Denklem 5.2 ve Denklem 5.3’te verilmektedir [50].

$$\lambda = 0,043 + 17,18a_{su} - 39,85(a_{su})^2 + 36(a_{su})^3 \quad (a_{su} < 1) \quad (5.2)$$

$$\lambda = 14 + 1,4(a_{su} - 1) \quad (a_{su} > 1) \quad (5.3)$$

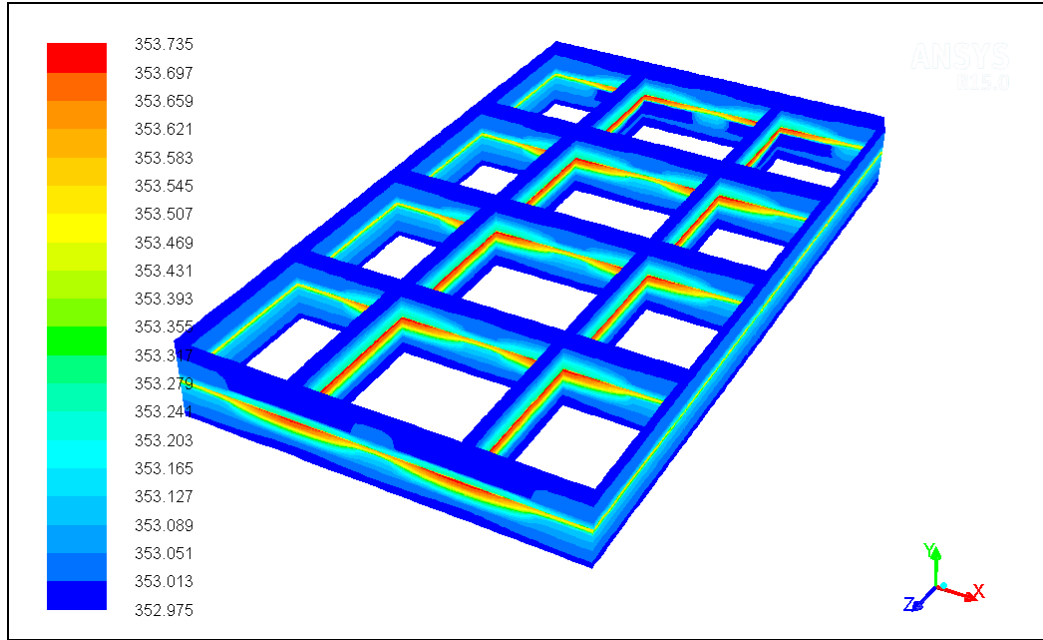
Membran su diffüzivitesi, Denklem 5.4’te verilmiştir ve bu terim, su içeriğinin bir fonksiyonudur.

$$D_l = f(\lambda)e^{2416 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T} \right)} \quad (5.4)$$

Sıvı su aktivitesinin ardından, bu bölümün başında bahsedilen iki boyutlu kesitler üzerinden PDMYH modeline ait sıcaklık konturları alınmıştır. Şekil 5.17’den de görüldüğü üzere, sıcaklıklar başlangıç sıcaklığı olan 353 K civarında değişmektedir. Benzer olarak, Alpat da çalışmasında bu durumun beklenildiğini belirtmiş ve benzer bir durumla karşılaşmıştır. Alpat’a ait olan çalışmada, sıcaklık

skalasındaki deęerler minimum 353 K, maksimum 353,176 K olarak g r nmektedir [25].

Bu  alıřmada dıř y zeyler ve i  y zeyler i in sıcaklık deęerleri minimum 352,975 K, maksimum 353,735 K olarak g r nt lenmektedir. Buradan hareket ile, sistemin kararlı bir sıcaklıkta bulunduęu s ylenebilir. Dięer bir deyiř ile, sıcaklık farkı ihmal edilebilir derecelerde olduęu i in izotermal bir durumdan bahsetmek m mk nd r.



řekil 5.17: PDMYH Modeliyle hesaplanan sıcaklık (K) kontur grafikleri.

Bundan sonraki b l mde kutuplařma eęrilerinden ve deęerlendirmelerden s z edilmektedir.

5.3. Kutuplaşma (Polarizasyon) Eğrilerinin Elde Edilmesi

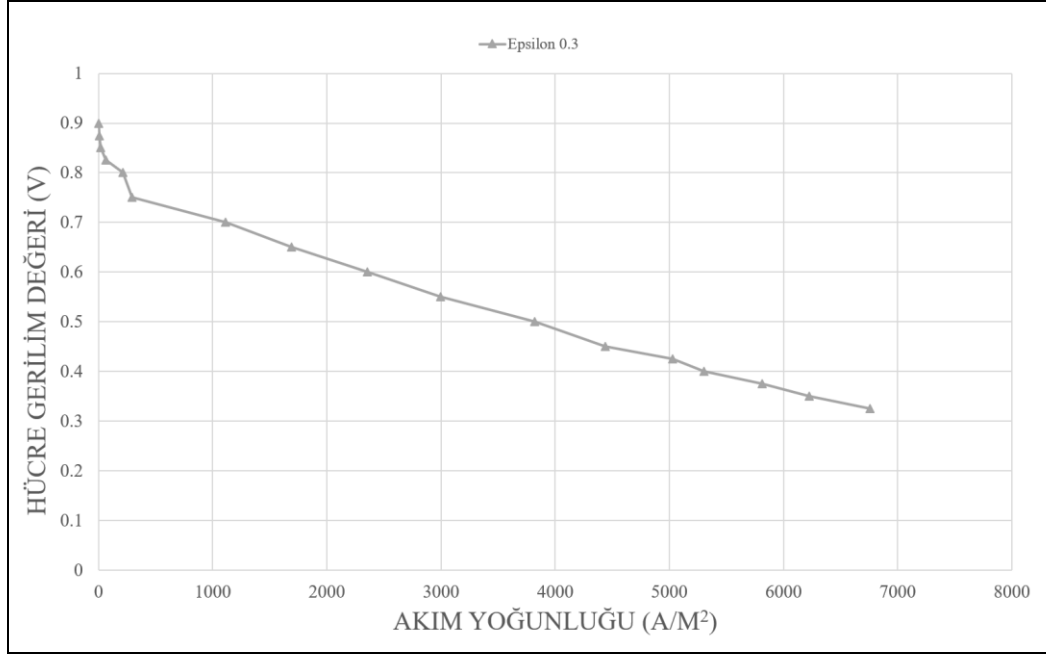
Çalışmanın sonuçlarını içeren bu bölümde, GDL gözeneklilik değerlerinin PDMYH performansına olan etkilerinin karşılaştırılabilmesi açısından farklı hücre gerilim değerleri için analizler yapılarak kutuplaşma, diğer bir adı ile polarizasyon eğrilerine ulaşılmıştır. Polarizasyon eğrilerinin gösteriminden önce, Tablo 5.1’de verilen 4 adet GDL gözeneklilik değerinin (TD-1’den başlayarak TD-4 dahil olarak) her biri için Tablo 5.2’de belirtilen hücre gerilimleriyle tanımlanan 68 adet senaryo analiz edilerek hesaplanan elektrik akım değerleri Tablo 5.5’de gösterilmiştir.

Tablo 5.5: Tüm Analiz Senaryoları İçin Hesaplanan Akım Yoğunluğu Değerleri.

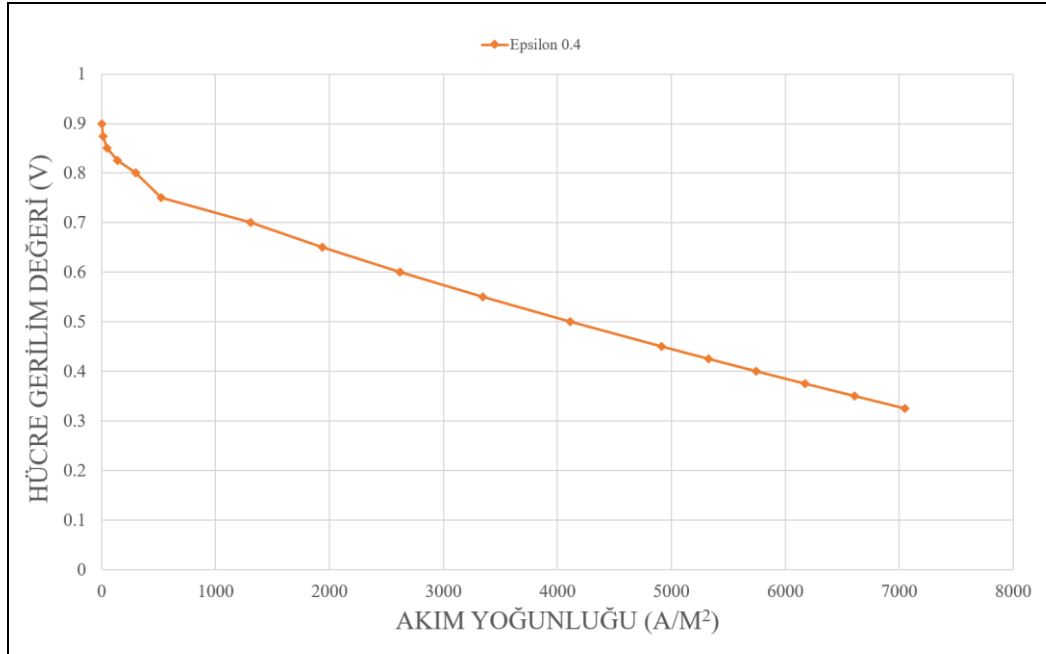
Hücre Gerilim Değeri (V)	Temel Durumlar / Elde Edilen Akım Yoğunlukları (A/m ²)			
	TD-1	TD-2	TD-3	TD-4
0,9	1,1234	1,767341167	5,29618	9,17632
0,875	6,32788	10,91698867	23,72005633	45,987113
0,85	17,96241	44,71661667	126,5052333	187,9680247
0,825	63,87552	136,7013667	327,8293967	406,00254
0,8	211,35198	296,94659	430,7943	519,32874
0,75	295,17996	519,30025	962,2265	1163,079521
0,7	1112,8027	1308,8107	1580,221867	1755,1203
0,65	1690,4142	1936,291667	2251,899033	2469,00257
0,6	2355,97001	2618,7571	2968,5263	3209,2781
0,55	2995,771	3345,426667	3723,593333	4126,3042
0,5	3818,5532	4112,239	4512,81	4985,748333
0,45	4438,7002	4914,264333	5332,78	5619,6308
0,425	5027,34679	5326,699333	5753,683333	6094,3562
0,4	5300,4347	5746,494667	6181,196667	6427,21408
0,375	5811,9701	6173,183667	6641,733333	6827,0331
0,35	6225,66372	6606,755333	7056,137	7322,6752
0,325	6759,1346	7046,938	7502,798333	7826,9733

Akım yoğunluğu değerleri A/m² biriminde hesaplanmış olup, 3-boyutlu matematiksel modeli hazırlanan PDMYH membran alanı 3 cm²’dir.

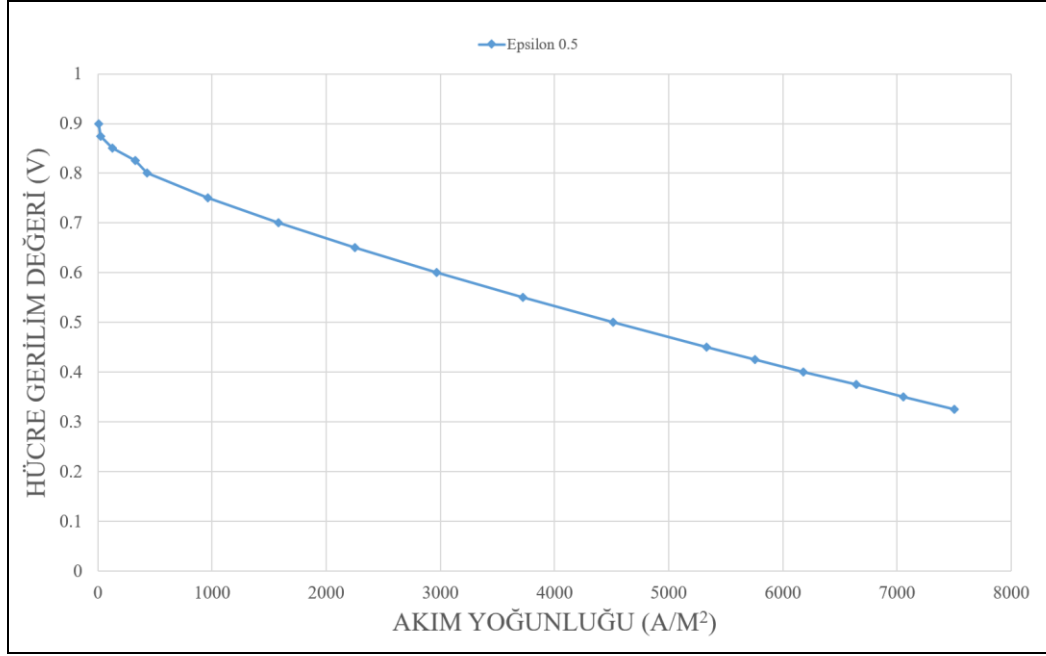
TD-1, TD-2, TD-3 ve TD-4 (GDL gözeneklilik değerleri sırasıyla 0,3, 0,4, 0,5 ve 0,6) için hesaplanan polarizasyon eğrileri, sırasıyla Şekil 5.18, 5.19, 5.20 ve 5.21’de gösterilmiştir.



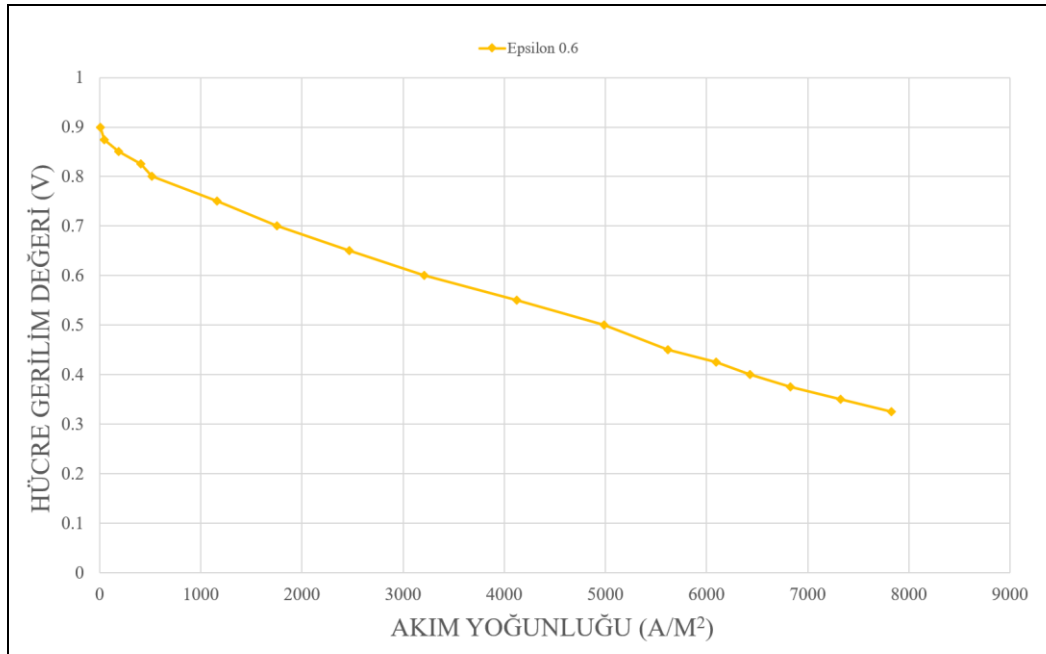
Şekil 5.18: TD-1 (GDL gözeneklilik değeri 0,3) için hesaplanan polarizasyon eğrisi.



Şekil 5.19: TD-2 (GDL gözeneklilik değeri 0,4) için hesaplanan polarizasyon eğrisi.



Şekil 5.20: TD-3 (GDL gözeneklilik değeri 0,5) için hesaplanan polarizasyon eğrisi.



Şekil 5.21: TD-4 (GDL gözeneklilik değeri 0,6) için hesaplanan polarizasyon eğrisi.

Çalışma sırasında, elde edilen akım yoğunluğu değerlerinin kontrolü, artıkların (residuals) belirli değerlerin altına inmesi dışında, harcanan gaz miktarlarından yola çıkılarak hesaplanması ile de yapılabilmektedir. Analiz sonucunda, türlerinin sarfiyatına ait bir rapor istendiğinde gerek hidrojen gerekse oksijen gazının ne miktarda harcandığı görüntülenebilmektedir.

Metin kullanıcı arayüzüne (TUI): /report/species-mass-flow komutunun yazılması ile analiz sonucunda harcanan tür miktarları verilecektir. Bu raporda son satırda verilen “net species-mass-flow” ifadesinden sonra gelen ikinci değer tüketilen oksijen gazına aittir. Tüketilen oksijen gazı miktarı kullanılarak hesaplanan elektrik akım değeri Denklem 5.5’de verilmiştir.

$$I = \frac{\dot{m}\vartheta F}{M} \quad (5.5)$$

Denklem 5.5’de geçen $\dot{m}$ harcanan gaz debisini (kg/s), ϑ molekül valansını (oksijen atomu için 4), F Faraday sabitini ($9,6485 \times 10^7$ C/kmol-elektron) ve M molar kütleyi (oksijen için 31,9988 kg/kmol) göstermektedir.

Tablo 5.5’te verilen 68 adet analiz senaryosuna ait elektrik akım yoğunluğu değerleri, Denklem 5.5’de ifade edilen hesap ile kontrol edilmiştir. Tüketilen net oksijen gazı debilerine ait veriler Tablo 5.6’da gösterilmiştir.

Tablo 5.6: Senaryolarda Harcanan Oksijen Gazı Debileri.

GDL Gözenekliliği	0,3	0,4	0,5	0,6
Voltaj (V)	$\dot{m}_{O_2}$	$\dot{m}_{O_2}$	$\dot{m}_{O_2}$	$\dot{m}_{O_2}$
0,9	2,78139782E-11	4,38777216E-11	1,30986143E-10	2,27000680E-10
0,875	1,56998528E-10	2,70216975E-10	5,88811644E-10	1,14199687E-09
0,85	4,46001679E-10	1,11003360E-09	3,14661527E-09	4,67330853E-09
0,825	1,58900078E-09	3,39901645E-09	8,14883168E-09	1,00677982E-08
0,8	5,24983247E-09	7,38112597E-09	1,07131644E-08	1,28024469E-08
0,75	7,33876149E-09	1,29167628E-08	2,37998202E-08	2,88882885E-08
0,7	2,77000242E-08	3,25129884E-08	3,93011270E-08	4,35016795E-08
0,65	4,12998733E-08	4,79965551E-08	5,58889002E-08	6,12470027E-08
0,6	5,85992168E-08	6,51039458E-08	7,37666257E-08	7,97501642E-08
0,55	7,44987302E-08	8,31996502E-08	9,28201679E-08	1,02312547E-07
0,5	9,48647920E-08	1,02008111E-07	1,11762177E-07	1,23787742E-07
0,45	1,10000245E-07	1,21999659E-07	1,31882038E-07	1,38330280E-07
0,425	1,24879522E-07	1,31796014E-07	1,43003798E-07	1,50016783E-07
0,4	1,31839833E-07	1,42563198E-07	1,53499822E-07	1,59000287E-07
0,375	1,43124578E-07	1,53302794E-07	1,63897742E-07	1,67727360E-07
0,35	1,54005978E-07	1,62119782E-07	1,75412976E-07	1,81794582E-07
0,325	1,68001198E-07	1,73678000E-07	1,85900378E-07	1,93872546E-07

Sayısal hatalar, analizin ıraksaması vb. etkenlere bağlı olarak elde edilen akım yoğunluğu ile Denklem 5.5 ile harcanan oksijen debilerine bağlı olarak hesaplanan elektrik akım yoğunluklarının farklı olması söz konusu olabilir. Dolayısıyla, analizlerin güvenilirliği açısından, harcanan oksijen gazı debisine bağlı olarak elektrik akım yoğunluğu hesabı yapılmıştır. Bu hesap ile elde edilen akım yoğunluğuna ait yüzdesel hata oranları Tablo 5.7’de verilmiştir.

Tablo 5.7: Analiz Sonucu ve Harcanan Oksijen Gazı Debisinden Hesaplanan Elektrik Akım Yoğunluklarına Ait Hata Oranları.

Gözeneklilik Değeri	0.3	0.4	0.5	0.6
Voltaj (V)	%Hata			
0.9	0,46	0,19	0,57	0,55
0.875	0,25	0,49	0,20	0,16
0.85	0,18	0,20	0,00	0,04
0.825	0,01	0,04	0,07	0,31
0.8	0,14	0,07	0,02	0,89
0.75	0,05	0,00	0,56	0,14
0.7	0,08	0,13	0,01	0,35
0.65	1,78	0,34	0,22	0,27
0.6	0,00	0,05	0,10	0,09
0.55	0,02	0,02	0,22	0,31
0.5	0,12	0,27	0,43	0,18
0.45	0,37	0,19	0,57	1,04
0.425	0,13	0,53	0,08	1,04
0.4	0,00	0,26	0,16	0,54
0.375	1,00	0,16	0,79	1,23
0.35	0,55	1,35	0,06	0,19
0.325	0,07	0,91	0,39	0,42

Tablo 5.7’ye göre GDL’nin 0,3 gözeneklilik değeri ve 0,65 V hücre gerilimi için yapılan analizinde hata oranı %1,78 olarak hesaplanmaktadır. Maksimum hata oranı bu senaryoya ait olup (C-8), müteakiben %1,23 hata oranı ile 0,6 GDL gözenekliliği ve 0,375 V hücre gerilimine ait (C-66) analiz senaryosu gelmektedir. Tüm senaryolar için hata oranları incelenerek analiz neticelerinin doğruluğu teyit edilmiştir.

Bu çalışmada kullanılan matematiksel model, yapılan 68 analiz senaryosundan bağımsız olarak, aşağıda belirtilen hatalı gözenekli ortam geçirgenliği ve aşırı

basitleştirilmiş fiziksel modeller kullanılarak dört ayrı hücre gerilim değeri için analiz edilmiştir:

- Anot ve katot tarafları için, GDL gözeneklilik değerleri 0,5 alınmış ancak bu gözeneklilik değerine uygun geçirgenlik veya viskoz direnç hesabı yapılmaksızın yazılımın sağladığı varsayılan değer kullanılmıştır ($1 \times 10^{12} \text{ 1/m}^2$) ve
- Çoklu-faz (Multiphase) ve Çok Bileşenli Difüzyon (Multicomponent Diffusion) seçenekleri seçilmemiştir.

Belirtilen varsayımlarla, 0,9 V, 0,75 V, 0,6 V ve 0,45V hücre gerilim değerleri için analizler yapılmıştır. Elde edilen akım yoğunlukları Tablo 5.8’de karşılaştırılmaktadır.

Tablo 5.8: Gerçekçi Modelle ve 0,5 GDL Gözeneklilik Değeri için Hatalı Geçirgenlik ve Basitleştirilmiş Akış Modelleriyle Hesaplanan Akım Değerlerinin Karşılaştırılması.

Hücre Gerilim Değeri (V)	Viskoz Direnç Hesabı ve Çok Fazlı Akış, Çok Bileşenli Difüzyon Devrede - Akım Yoğunluğu (A/m^2)	
	Evet-Devrede	Hayır-Devre Dışı
0,9	5,29618	15,16019
0,75	962,2265	3108,952233
0,6	2968,5263	10664,46
0,45	5332,78	30744,43167

Tablo 5.8 yorumlandığında, dört farklı hücre gerilimi için, viskoz direnç hesabının yapılmadığı ve çoklu-faz, çok bileşenli difüzyon (multicomponent diffusion) seçeneklerinin aktif edilmediği analizlerde hesaplanan akım yoğunluğu değerlerinin çok yüksek olduğu görülmektedir. Yüksek hücre geriliminden düşük hücre gerilimine doğru gidildikçe, hesaplanan gerçekçi ve hatalı akım yoğunluklarının oranı sırasıyla 2,86, 3,23, 3,59 ve 5,76 olarak giderek artmaktadır. Yalnızca çoklu-faz hesaplaması kapatıldığı durumda (gözeneklilik değerlerine ait uygun viskoz direnç değerleri girildiğinde), elde edilen sonuçlar Tablo 5.9’da gösterilmektedir.

Tablo 5.9: Yalnızca Çoklu-faz Seçeneği Kapalı Durumun Karşılaştırması.

Hücre Gerilim Değeri (V)	Viskoz Direnç Hesabı (E/H) ve Çok Fazlı Akış Devrede - Akım Yoğunluğu (A/m ²)	
	Evet-Devrede	Evet-Devre Dışı
0,8	430,7943	446,2975
0,5	4512,81	4699,988
0,35	7056,137	7299,109

Tablo 5.9 yorumlandığında, yalnızca çoklu-faz seçeneğinin kapatılması sonucu akım yoğunluğu değerlerinin sırası ile %3,6, %4,14 ve %3,44 (ortalama %3,72) etkilendiği gözlenmektedir.

GDL gözenekliliğine bağlı olarak akım yoğunluğu ve hücre performansı hesaplarında dikkat edilmesi gereken en önemli etkenlerden biri geçirgenlik; dolayısıyla buna bağlı viskoz direnç değerinin doğru hesaplanması bu çalışmayla gösterilmiştir. Çok-fazlı akışın hesaba katılmaması ise hesaplanan akım yoğunluğu değerlerinin biraz yüksek çıkmasına sebep olur.

PDMYH Kutuplaşma eğrilerinin oluşturulmasında izlenen yöntemlerden ilkinde, başlangıçta seçilen hücre gerilim değeri kullanılarak, iterasyon sonucunda yakınsayan analizden akım değeri alınır; ardından hücre gerilimi bir sonraki değerine değiştirilerek yeni akım yoğunluğunun hesaplanması için itersayona devam edilir.

Bu çalışmada izlenen diğer yöntem ise, koşturulan analizin yakınsatılmasından sonra ANSYS Workbench proje ekranında kaydedilmesi; ardından yakınsatılan ve sonucu alınan ANSYS FLUENT hücresinin kopyasının oluşturulması sureti ile yeni hücre gerilim değerinin bu çalışma üzerinden girilerek yeni analizin yapılmasıdır.

İlk izlenen yöntemde, geriye dönük işlemler yapılabilmesi için ilgili data dosyaları kaydedilmemiş ise analizlerin tekrar koşturulması gerekebilir; ayrıca, olası yazılımsal bir veri kaybı sebebiyle risklidir. İkinci yönteme göre avantajı, dosya boyutlarının küçülmesidir.

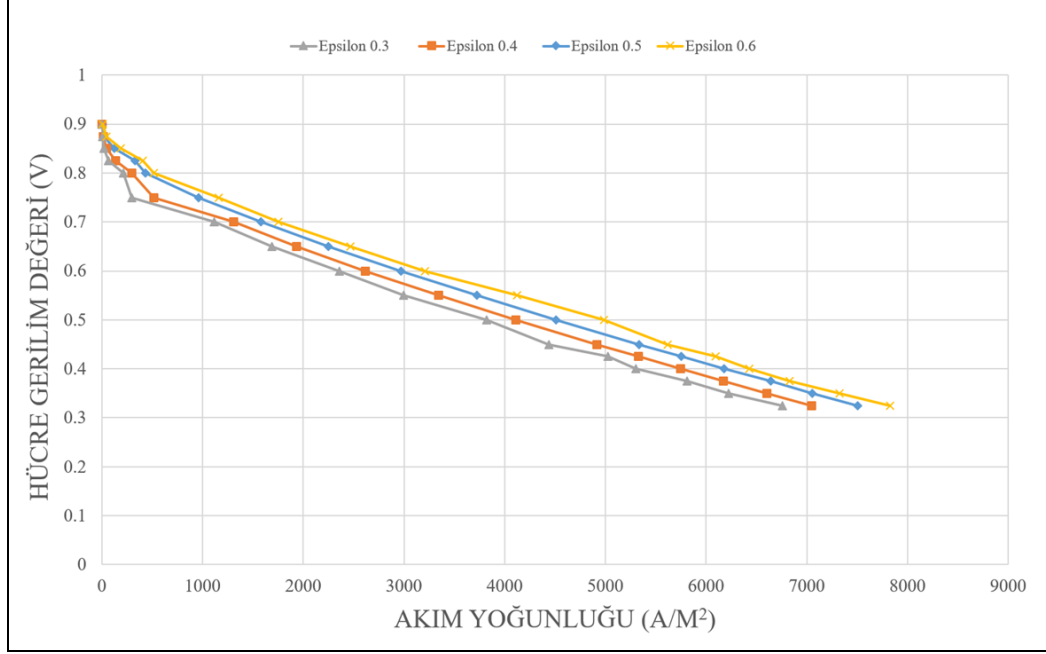
6. TARTIŞMA

Bu çalışmada, matematiksel modeli oluşturulan bir PDMYH, farklı dört adet GDL gözeneklilik değeri için ANSYS FLUENT yazılımına ait gömülü yakıt hücresi modülüyle analiz (ANSYS Workbench'in ve ANSYS FLUENT'in 15.0.7 versiyonu ile) edilmiştir.

Ağ yapı sıklığının yeterlilik durumu için, hücre akış doğrultusunda uzanan kısmın göreceli uzunluğu (125 mm) sebebiyle eleman uzunluk-kalınlık oranının (aspect ratio) yüksek olmasına rağmen, bu oran elde edilen değerleri ile kabul edilmiş (666,67); sayısal hesaplamaların doğru yapılabilmesi için GDL, CL, membran gibi çok ince yapıya sahip katmanların yeterli çözünürlükte ağ yapı tabakaları ile bölünmüş olmasına dikkat edilmiştir (her biri için 8 adet ağ yapı katmanı). Tablo 4.4'te analizlerde kullanılan ağ yapısına ilişkin veriler belirtilmiştir. Bunlardan ayrı olarak, çözümün ağ yapısından bağımsızlığının ortaya konulabilmesi adına, Alpat çalışmasında $13,3 \text{ cm}^2$ bir membran alanına sahip olan PDMYH modelinin ağ yapı bağımsızlığını 69190 eleman sayısı ile sağladığını belirtmiştir. Bu tez çalışmasında ise membran alanı 3 cm^2 olan ve bahsedilen diğer yapıya göre alanı 4,43 kat küçük olan model, toplamda 480000 eleman ile analiz edildiği için ağ yapısı sıklaştırılarak analizlerin tekrarlanmasına gerek görülmemiş ve ağ yapı bağımsızlığı bu temel dahilinde kabul edilmiştir [25].

Çözümlerde, kontrol kriteri olarak iki faktör göz önünde tutulmuştur. Bunlardan birincisi, artıkların uygun mertebelerin altına inmesi durumudur. Tablo 5.4'ten de görülebileceği üzere, çözdürülen tüm denklemlere ait artıklar baz mertebelerin altında kalmaktadır. İkinci ve en önemli kontrol kriteri ise, harcanan oksijen gazı miktarından hareketle akım yoğunluğunun hesaplanması; ardından hesaplanan akım yoğunluğu değeri ile FLUENT'ten çektilen raporda geçen akım yoğunluk değerlerinin karşılaştırılmasıdır. Bahsedilen hesap Denklem 5.5'de anlatılmaktadır. Ayrıca, Tablo 5.7'de hata yüzdeleri verileri sunulmuş ve maksimum hata oranı %1,78 olduğu için (68 adet senaryo içerisinde biri için) analizlerin sonuçları kabul edilmiştir.

Bir önceki bölümde elde edilen kutuplaşma eğrileri tek bir grafikte toplanarak, hücre gerilim değerlerine bağlı olarak hesaplanan akım yoğunlukları Şekil 6.1'de gösterilmiştir.



Şekil 6.1: Tüm temel durumlar için hesaplanan kutuplaşma eğrileri.

Tüm polarizasyon eğrileri incelendiğinde, en yüksek akım yoğunlukları, anot ve katot GDL gözenekliliğinin 0,6 değeri için elde edilmektedir. Yani, TD-4 ile en yüksek akım yoğunluğuna ulaşılmaktadır. Bunun arkasından TD-3 (GDL gözenekliliği 0,5) ile ikinci yüksek akım yoğunlukları elde edilmektedir. Bu iki temel durumun arkasından sırası ile TD-2 (GDL gözenekliliği 0,4) ve TD-1'in (GDL gözenekliliği 0,3) geldiği görülmektedir.

Çalışmada, gözeneklilik değerinin yükselmesi ile hücre performansının yükseldiği görülmektedir. Gözeneklilik ve geçirgenlik (devamında viskoz direnç) arasındaki ilişki, Espinoza vd.'nin çalışmasında belirttiği ve Hao ve Cheng tarafından kullanılan fiber malzeme çaplarından bağımsız olarak ortaya konulan bağıntı temel alınarak (Denklem 4.18'in kabulü ile) kurulmuş ve analizde uygulanmıştır. Aslında, özelden genele doğru gidildiğinde, çalışmada kullanılan temel denklem, Kozeny-Carman denklemi ile Darcy kuralının kombinasyonundan ortaya çıkan Kozeny denkleminin türetilmiş halidir. Bu denklemin, simülasyon sonuçları baz alınarak oluşturulduğu belirtilmektedir [48].

Bu çalışmadaki bulgular, Pei vd. tarafından yapılan çalışmalardaki bulgular ile örtüşmektedir [47]. Pei vd., katot GDL gözeneklilik değerlerini değişken olarak kullanmışlar ve sonuç olarak en yüksek akım yoğunluğunu 0,5 gözeneklilik değerinde elde ederken, en düşük akım yoğunluğu değerine ise 0,2 gözeneklilik

değerinde ulaşmışlardır ve bulgularını da daha önceki bölümde verilen Denklem 4.13 ile formüle etmişlerdir [47].

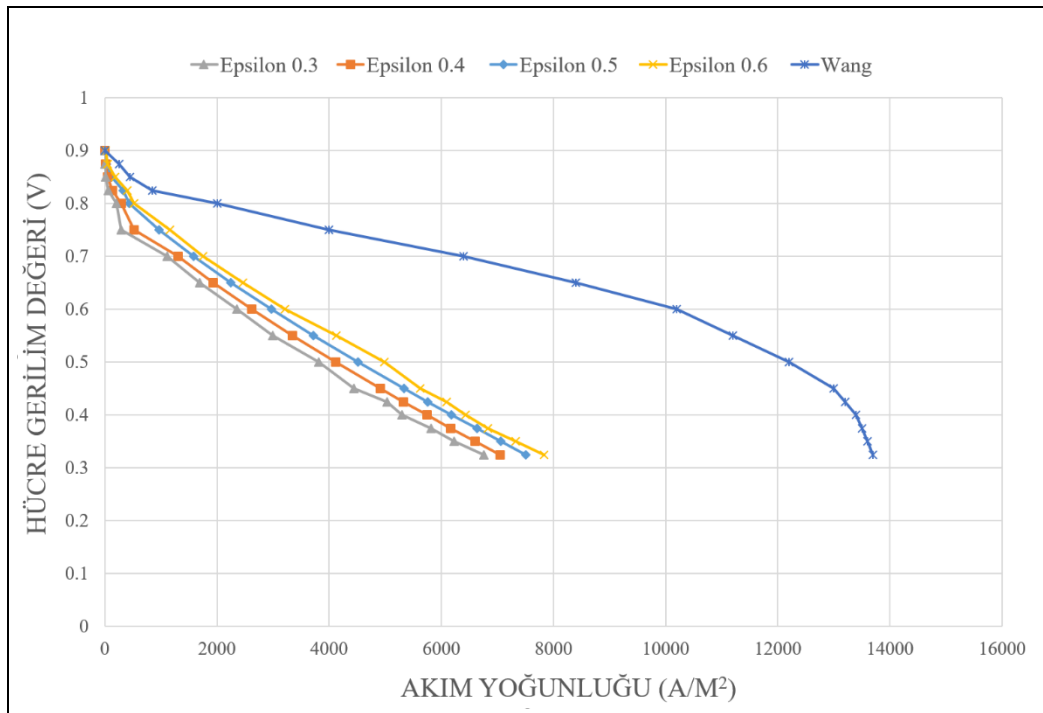
Kahveci ve Taymaz çalışmalarında GDL gözeneklilik değerinin hücre performansı üzerine olan etkisini 0,3 değerinden başlayarak 0,6 değerine, 0,1 artırmak koşulu ile incelemişlerdir. Yüksek GDL gözeneklilik değerinin, yüksek akım yoğunluğunun elde edilmesine etkisinde yakaladıkları bulgular, bu çalışma kapsamında elde edilen bulguları desteklemektedir [23].

Kahveci ve Taymaz'a ait olan çalışmanın üzerinde durulmasının bir diğer nedeni de PDMYH modellerine ait birçok sınır şartlarının ve fiziksel özelliklerin benzer niteliklerde ve değerlerde olmasıdır. Örneğin, boyutsal anlamda hücre uzunluğu (125 mm) ve kanal genişliği (0,8 mm) değerleri aynıdır. Fiziksel özelliklerden ise CL gözeneklilik değeri, anot ve katot referans akım yoğunluk değerleri, elektrolit alanın büyüklüğü, açık devre voltajı, yakıt-oksitleyici giriş debileri bu çalışmadaki değerlerle aynıdır [23].

Cheema vd. ait çalışmada, bu çalışmadakine benzer geometride bir PDMYH matematiksel modeli kullanılmıştır. Yapı kesiti, bu çalışmadaki geometri gibi çift anot-katot gaz kanallarından oluşmaktadır. Çalışmalarında gözeneklilik değerleri olarak 0,4, 0,5, 0,6 ve 0,7 değerlerini incelenmişlerdir. 0,35 V hücre geriliminde elde ettikleri maksimum akım yoğunlukları $6600-7800 \text{ A/m}^2$ arasında değişmekte olup, bu çalışmadaki veriler ile örtüşmektedir [51].

Wang vd. ait çalışma deneysel ve matematiksel modele dayanan parametrik bir çalışmadır. Sıcaklık, basınç vb. değişkenler çerçevesinde çalışmalar yapılmıştır. Şekil 6.2'de, Wang vd. ait 2,36 atm basınç ve 70°C sıcaklıktaki deneysel bir çalışmanın kutuplaşma eğrisi olup, tez çalışması kapsamında elde edilen kutuplaşma eğrileri ile karşılaştırılmıştır. Dört temel duruma ait akım yoğunlukları, Wang vd.'ne ait çalışma sonucu çıkan akım yoğunluklarından düşük değerdedir. Ölçüsel anlamda bir karşılaştırma yapıldığında, Wang vd.'ne ait PDMYH yapısının katman kalınlıkları daha kalındır (GDL kalınlığı $3 \times 10^{-4} \text{ m}$, CL kalınlığı $1,29 \times 10^{-5} \text{ m}$ ve membran kalınlığı $1,08 \times 10^{-4} \text{ m}$). Membran gözeneklilik değeri 0,25 olup, tez çalışmasında kullanılan modeldeki değere göre yarısı durumdadır. GDL bileşenlerine ait olan geçirgenlik değerleri kıyaslandığında, Wang vd.'ne ait yapının değerleri yaklaşık olarak 258 kat daha fazladır. Yine aynı şekilde, CL bileşenine ait olan geçirgenlik değeri kıyaslandığında Wang vd.'ne ait yapının değeri 67,84 kat yüksektir [52]. Tüm bu veriler bir arada kullanıldığında, Wang vd.'ne ait yapının

bileşenleri ölçü bakımından kalın olmasına rağmen, geçirgenlik değerlerinin bir hayli yüksek oluşu yüksek akım değerlerinin elde edilmesinde önemli rol oynadığı söylenebilir. Bunun dışında, literatür bölümünde de değinildiği üzere yüksek basınç değerlerinin hücre performansı üzerinde pozitif etkisi olmaktadır. Buradan hareketle, yapının işletme basıncı, tez çalışmasında kullanılan modelin işletme basıncından 0,321 atm yüksek değerdedir. Deneysel çalışma ile kıyaslandığında, PDMYH modelinin performans bakımından farklı olmasındaki diğer etkenlerden biri de hücre bileşenlerine ait malzeme özelliklerinin kaynak içerisinde bulunmayışıdır (ısıl ve elektriksel iletkenlikler, yoğunluk vb.). Dolayısıyla, bu özellikler deneysel çalışmada kullanılanlar ile farklılık teşkil edebilmektedir. Yine geometrik ölçülerin farklı olması da sonuçları etkileyen faktörler arasındadır [52].



Şekil 6.2: Simülasyona ait çalışmanın deneysel çalışma ile karşılaştırılması.

Performans eğrilerinin oluşturulması sırasında karşılaştırma yapmak adına, çoklu-faz seçeneğinin aktif ediliş edilmemesi ve geçirgenlik değerlerinin doğru olarak modele uygulanması üzerinde durulmuştur. Geçirgenlik hesaplarının yapılmayarak varsayılan değerlerin kabul edildiği veya doğru tanımlanmadığı durumda, elde edilen akım yoğunluklarında çok yüksek sapmaların olduğu gözlenmiştir. Bunun dışında, çoklu-faz seçeneğinin açılması veya kapalı tutulması

ortalama olarak sonuçlara %3,72'lik bir sapma olarak yansımaktadır. Geçirgenlik hesabının sonuçlara etkisi, çoklu-faz seçeneğinin etkisinden çok daha baskın olmaktadır. Dolayısıyla, gözenekliliğe dayalı incelemelerde geçirgenlik hesaplarının hassas yapılması ya da elde güvenilir ampirik verilerin olması büyük bir önem arz etmektedir. Bu bulgu, çalışmanın en kritik noktası olarak söylenebilir.

KAYNAKLAR

- [1] Web 1, (2017), https://www.ntv.com.tr/teknoloji/kuresel-isinmada-insan-etkisi-dogal-sebeplerden-170-kat-daha-fazla,U1YUM3b62kuWZt2J6SRQ?_ref=infinite, (Eriřim Tarihi: 13/01/2019).
- [2] Web 2, (2018), <https://www.dunyaenerji.org.tr/2018-enerji-gorunumu-2040a-bakis/>, (Eriřim Tarihi: 10/01/2019).
- [3] Web 3, (2018), <https://notalotofpeopleknowthat.wordpress.com/2018/06/15/bp-energy-review/>, (Eriřim Tarihi: 17/08/2018).
- [4] Web 4, (2018), <https://www.bp.com/en/global/corporate/energy-economics/statistical-review-of-world-energy.html>, (Eriřim Tarihi: 02/01/2019).
- [5] Akın G., (2006), “Küresel Isınma, Nedenleri ve Sonuçları”, Ankara Üniversitesi Dil ve Tarih-Coğrafya Fakültesi Dergisi, 46 (2), 29-43.
- [6] Hoogers G., (2002), “Fuel Cell Technology Handbook”, 1st Edition, CRC Press.
- [7] Bagotsky V. S., (2009), “Fuel Cells Problems and Solutions”, John Wiley & Sons Inc. Publishing, 27-30.
- [8] Web 5, (2018), http://en.wikipedia.org/wiki/Christian_Friedrich_Schönbein, (Eriřim Tarihi: 10/01/2016).
- [9] Web 6, (2018), http://tr.wikipedia.org/wiki/Yak%C4%B1t_h%C3%Bccresi, (Eriřim Tarihi: 10/01/2016).
- [10] Web 7, (2018), http://en.wikipedia.org/wiki/William_Robert_Grove, (Eriřim Tarihi: 10/01/2016).
- [11] Web 8, (2018), http://en.wikipedia.org/wiki/Francis_Thomas_Bacon, (Eriřim Tarihi: 12/01/2016).
- [12] Kırılı F., (2008), “Proton Değişim Membranlı Yakıt Hücrelerinin Matematiksel Modeli Üzerine Bir Değerlendirme”, Yüksek Lisans Tezi, Selçuk Üniversitesi.
- [13] Web 9, (2018), http://www.utc.com/StaticFiles/UTC/StaticFiles/2009_utc_brochure_us.pdf, (Eriřim Tarihi: 18/01/2018).
- [14] Alkaya L., Behçet R., İlkılıç C., (2008), “Yakıt Pilleri ve Uygulama Alanları”, Doğu Anadolu Bölgesi Araştırmaları (DAUM), 67-71.
- [15] Web 10, (2009), <https://www.designworldonline.com/designing-small-fuel-cells-for-homes/>, (Eriřim Tarihi: 06/03/2018).

- [16] Kahraman N., Akansu S. O., Albayrak B., (2007), “İçten Yanmalı Motorlarda Alternatif Yakıt Olarak Hidrojen Kullanılması”, Mühendis ve Makine, 48 (569), 9-15.
- [17] Bıyıkoglu A., (2003), “Yakıt Hücrelerinin Tarihsel Gelişimi, Çalışma Prensipleri ve Bugünkü Durumu”, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi, 16 (3), 523-542.
- [18] Kıvrak H., Ulaş B., (2017), “Doğrudan Metanol Yakıt Pili Karbon-Destekli Pt-Ru Anot Katalizörlerinin Sıralı İndirgeme Yöntemi ile Sentezi ve Geliştirilmesi”, Journal of the Institute of Natural & Applied Sciences, 22 (1), 21-32.
- [19] EG&G Technical Services Inc. Science Applications International Corporation, (2002), “Fuel Cell Handbook”, 6th Edition, U.S. Department of Energy Office of Fossil Energy National Energy Technology Laboratory.
- [20] Yıldırım Y., (2011), “Yakıt Pilleri Ders Notları (Çev 346)”, Zonguldak Karaelmas Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Çevre Mühendisliği Bölümü.
- [21] Braun R. J., (2002), “Optimal Design and Operation of Solid Oxide Fuel Cell Systems for Small-scale Stationary Applications”, Doctoral Thesis, University of Wisconsin-Madison.
- [22] Larminie J., Dicks A., (2003), “Fuel Cell Systems Explained”, 2nd Edition, John Wiley & Sons.
- [23] Kahveci E. E., Taymaz İ., (2014), “An Investigation of GDL Porosity on PEM Fuel Cell Performance”, Chemical Engineering Transactions, 42, 37-42.
- [24] Bagotsky V. S., (2009), “Fuel Cells-Problems and Solutions”, 1st Edition, John Wiley & Sons.
- [25] Alpat C. Ö., (2007), “Düz Kanallı Proton Aktaran Membran Yakıt Hücresinin Sayısal Çözümü”, Yüksek Lisans Tezi, Gazi Üniversitesi.
- [26] Bilgili M., Sivrioğlu M., (2016), “PEM Yakıt Pili'nin Değişik Membran Elektrot Çifti Kalınlıklarında ve Farklı Çalışma Basıncı Koşullarında Üç Boyutlu Sayısal Analizi”, Journal of Faculty of Engineering and Architecture of Gazi University, 31 (1), 51-63.
- [27] Rasheed R. K. A., Liao Q., Caizhi Z., Chan S. H., (2016), “A Review on Modelling of High Temperature Proton Exchange Fuel Cells (HT-PEMFCs)”, International Journal of Hydrogen Energy, 42 (2017), 3142-3165.
- [28] Biyikoglu A., Alpat C.Ö., (2011), “Parametric Study of A Single Cell Proton Exchange Membran Fuel Cell For A Bundle of Straight Gas Channels”, Gazi Univ. J. Sci., 24 (4), 883-899.

- [29] Aydın M., (2007), “Pem Yakıt Pilinin İki Boyutlu Modellenmesi”, Yüksek Lisans Tezi, İstanbul Teknik Üniversitesi.
- [30] Özdoğan M., Namlı L., Durmuş A., (2016), “PEM Yakıt Hücrelerinde Geometrik Boyutların Hücre Performansı Üzerine Etkilerinin Sayısal İncelemesi”, Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi, 7 (2), 116-124.
- [31] Chiu H. C., Jang J. H., Yan W. M., Li H. Y., Liao C. C., (2012), “A Three-Dimensional Modelling of Transport Phenomena of Proton Exchange Membrane Fuel Cells with Various Flow Fields”, Applied Energy, 96, 359-370.
- [32] Cooper N. J., Smith T., Santamaria A. D., Park J. W., (2016), “Experimental Optimization of Parallel and Interdigitated PEMFC Flow-Field Channel Geometry”, International Journal of Hydrogen Energy, 41 (2016), 1213-1223.
- [33] Çelik S., (2018), “Akış Kanalı Tasarımının PEM Yakıt Pili Performansına Etkilerinin İncelenmesi”, Niğde Ömer Halisdemir Üniversitesi Mühendislik Bilimleri Dergisi, 7 (1), 407-416.
- [34] Cheng S. J., Miao J. M., Wu S. J., (2011), “Investigating The Effects of Operational Factors on PEMFC Performance Based on CFD Simulations Using a Three-Level Full-Factorial Design”, Renewable Energy, 39 (2012), 250-260.
- [35] Rohendi D., Majlan E. H., Mohamad A. B., Daud W. R. W., Kadhum A. A. H., Shyuan L. K., (2015), “Effects of Temperature and Backpressure on The Performance Degradation of MEA in PEMFC”, International Journal of Hydrogen Energy, 40 (2015), 10960-10968.
- [36] Bilgili M., Bosomoiu M., Tsotridis G., (2015), “Gas Flow Field with Obstacles for PEM Fuel Cells at Different Operation Conditions”, International Journal of Hydrogen Energy, 40 (2015), 2303-2311.
- [37] Zhang Z., Liu W., Wang Y., (2019), “Three Dimensional Two-Phase and Non-Isothermal Numerical Simulation of Multi-Channels PEMFC”, International Journal of Hydrogen Energy, 44 (2019), 379-388.
- [38] Reddy E. H., Monder D. S., Jayanti S., (2013), “Parametric Study of An External Coolant System for A High Temperature Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell”, Applied Thermal Engineering, 58 (2013), 155-164.
- [39] Oh K., Chippar P., Ju H., (2014), “Numerical Study of Thermal Stresses in High-Temperature Proton Exchange Membrane Fuel Cell (HT-PEMFC)”, International Journal of Hydrogen Energy, 39 (2014), 2785-2794.
- [40] Semiz L., (2012), “İnsansız Hava Araçları İçin PEM Tipi Yakıt Pili Üretilmesi ve Test Edilmesi”, Yüksek Lisans Tezi, TOBB Ekonomi ve Teknoloji Üniversitesi.

- [41] Ahmar A. M., Osanloo B., Solati A., Ghasemi J., (2016), "Performance Improvement of The Circular Tubular PEMFC by Using Different Architectures and Number of Layers", *Energy Conversion and Management*, 128 (2016), 238-249.
- [42] Sierra J. M., Ramirez S. J. F., Diaz S. E., Vargas J., (2014), "Numerical Evaluation of A PEM Fuel Cell With Conventional Flow Fields Adapted to Tubular Plates", *International Journal of Hydrogen Energy*, 39 (2014), 16694-16705.
- [43] Wilde P. M., Mändle M., Murata M., Berg N., (2004), "Structural and Physical Properties of GDL and GDL/BPP Combinations and Their Influence on PEMFC Performance", *Fuel Cells*, 4 (3), 180-184.
- [44] Wang X. D., Xu J. L., Lee D. J., (2012), "Parameter Sensitivity Examination for A Complete Three-Dimensional, Two Phase, Non-Isothermal Model of Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell", *International Journal of Hydrogen Energy*, 37 (2012), 15766-15777.
- [45] Afshari E., (2014), "Effects of GDL Porosity on Oxygen Transport in A PEM Fuel Cell With Partially Blocked Cathode Flow Channel", *Indian Journal of Science Res.*, 1 (2), 713-719.
- [46] Fadzillah D. M., Nee C. L., Rosli M. I., (2015), "The Model Development of Gas Diffusion Layer for PEM Fuel Cell", *International Journal of Mechanical & Mechatronics Engineering*, 15 (5), 83-89.
- [47] Pei F., Yuan H., Zhang T., Zhou S., (2013), "A Study on PEMFC Performance and Faults Diagnosis Using FLUENT 3D Models", *Procedia Engineering*, 61 (2013), 370-375.
- [48] Espinoza M., Andersson M., Yuan J., Sundén B., (2015), "Compress Effects on Porosity, Gas-Phase Tortuosity and Gas Permeability in A Simulated PEM Gas Diffusion Layer", *International Journal of Energy Research*, 39 (2015), 1528-1536.
- [49] Tutorial, (2011), "Modelling A Single-Channel, Counter-Flow, Polymer Electrolyte Membrane (PEM) Fuel Cell", ANSYS Inc.
- [50] "ANSYS FLUENT Help Documentation, ANSYS Inc.", 2014.
- [51] Cheema T.A., Kim G. M., Lee C. Y., Kwak M. K., Kim H. B., Park C. W., (2014), "Effects of Composite Porous Gas-Diffusion Layers on Performance of Proton Exchange Membrane Fuel Cell", *International Journal of Precision Engineering and Manufacturing-Green Technology*, 1 (4), 305-312.
- [52] Wang L., Husar A., Zhou T., Liu H., (2003), "A Parametric Study of PEM Fuel Cell Performances", *International Journal of Hydrogen Energy*, 28 (2013), 1263-1272.

ÖZGEÇMİŞ

Burak Sevin 1985 yılında Ankara’da doğdu. Üniversite öğrenimine 2003 yılında başladığı Gazi Üniversitesi Mühendislik ve Mimarlık Fakültesi’ne bağlı Makine Mühendisliği Bölümü’nden 2009 yılında mezun oldu. 2013 yılı içerisinde Gebze Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Makine Mühendisliği Ana Bilim Dalı’nda yüksek lisans öğrenimine başladı. 2015 senesinden bu yana Sakarya’da bulunan TIRSAN Treyler San. ve Tic. A.Ş. bünyesinde yer alan Kässbohrer Fahrzeugwerke GmbH şirketine bağlı Low-Bed ve Özel Araç KOBİ’sinde çalışmakta olan Burak Sevin, CAE Yapısal Analiz Sorumlu Uzmanı olarak görevine devam etmekte ve TIRSAN bünyesinde üretilen, çoğunlukla Low-Bed ve diğer treyler tiplerinin yapısal analiz projelerinde yer almaktadır.