

## PEM TİPİ YAKIT PİLLERİ İÇİN ÇİFT KUTUPLU AKIŞ PLAKALARININ MODELLENMESİ

Ahmet EKİZ<sup>1,2</sup>, Talha CAMCI<sup>1</sup>, İbrahim TÜRKMEN<sup>1</sup>, Mehmet SANKIR<sup>1,\*</sup>, Sıtkı USLU<sup>2</sup>, Derek K. BAKER<sup>3</sup>, Ertan AĞAR<sup>3,4</sup>

<sup>1</sup>Mikro ve Nano Teknoloji Yüksek Lisans Programı, Fen Bilimleri Enstitüsü, TOBB ETÜ, 06560 Söğütözü-Ankara,

<sup>2</sup>Makine Mühendisliği Bölümü, Mühendislik Fakültesi, TOBB ETÜ, 06560 Söğütözü-Ankara

<sup>3</sup>Makine Mühendisliği Bölümü, Mühendislik Fakültesi, ODTÜ 06531 Ankara

<sup>4</sup>Makine Mühendisliği Bölümü, Mühendislik Fakültesi Drexel University, 19104 Philadelphia/ABD

[msankir@etu.edu.tr](mailto:msankir@etu.edu.tr)

(Geliş/Received: 11.10.2010; Kabul/Accepted: 24.05.2011)

### ÖZET

Yakıt pili teknolojisi, hidrojen enerjisini en ekonomik ve verimli kullanan teknolojilerden bir tanesidir. Kullandığı yakıt ve üretebildiği güç miktarı bakımından çeşitli yakıt pilleri mevcuttur. Bu yakıt pilleri içerisinde en çok polimer elektrolit membranlı yakıt pillerinin (PEMYP) gelecek vaad ettiği öngörülmektedir. Bu çalışmada tek hücreli bir polimer elektrolit membranlı yakıt pili Comsol Multiphysics programı kullanılarak iki boyutlu olarak modellenmiştir. Akışa paralel kesitte model oluşturulmuştur. Akış kanalına farklı geometrilerde engeller konularak daha fazla yakıtı reaksiyona zorlamak hedeflenmiştir. Bu şekilde ideal performans değerlerine yakın akım ve güç yoğunlukları oluşturulmaya ve kayıplar en aza indirilmeye çalışılmıştır. Sınır koşulları olarak değişik hız değerleri girilmiştir. Ayrıca çıkış sınır şartları için farklı basınç değerleri verilerek performans etkisi araştırılmıştır. Yapılan çalışmalar sonucu görülmüştür ki; giriş hızının artması, çıkış basıncının artması, katot tarafındaki sınır şartlarına anoda göre daha fazla oksidant beslenmesi ve kanal boyunca bulunan engellerin derinliğinin artması sonrasında yakıt hücresi performansı artmıştır.

**Anahtar Kelimeler:** PEM Yakıt Pili, Comsol, Yakıt Hücresi, 2-D Modelleme.

## MODELING OF BIPOLAR PLATES FOR PROTON EXCHANGE MEMBRANE FUEL CELLS

### ABSTRACT

Fuel cell technology is one of the most economic and efficient ways to utilize hydrogen energy. Various types of fuel cells are present regarding the fuel type and amount of power produced. Among these, proton exchange membrane fuel cells (PEMFCs) are very promising. In this work, a 2D proton exchange membrane fuel cell unit cell was modeled using Comsol Multiphysics software. Cell section was taken parallel to flow direction. Obstacles with various geometries were placed in the flow channel in order to force more reactant species to react. The goal is to have current and power densities that approach ideal performance and to minimize losses. As boundary conditions, several inlet velocities were applied. Also, the effect of setting different pressure values at the outlet was investigated. Consequently, it was observed that increasing inlet velocity and outlet pressure, feeding more reactant at the cathode compared to the anode, and increasing the depth of the obstacles placed through the channel enhanced the fuel cell performance.

**Key Words:** PEM Fuel Cell, Comsol, Fuel Cell, 2-D Modeling.

### 1. GİRİŞ (INTRODUCTION)

Yakıt pilleri ve özellikle PEMYP ile ilgili olarak literatürde çok fazla sayıda çalışma yer almaktadır. Özellikle model çalışmaları ile ilgili olarak; bir

boyuttan 3 boyuta, tek fazdan çift faza, farklı geometrilerden farklı çalışma şartlarına kadar çok sayıda çalışma mevcuttur. Gurau ve arkadaşları tarafından oluşturulan modelde ilk defa hesaplamalı akışkanlar dinamiği (CFD) çözülmüştür. Bu model,

akış kanallarını da ele alan iki boyutlu, tek fazlı ve izotermal olmayan bir modeldir ve gaz akış kanalları boyunca Navier-Stokes denklemleri çözülmüştür. Yapılan çalışmada; gözeneklilik, sıcaklık gibi parametrelerin yakıt pili üzerindeki etkileri, elektrotlarda gaz dağılımları ve akım yoğunluğu dağılımları ile akım yoğunluğundaki değişimlerin membranda su dengesine olan etkisi incelenmiştir. Oksijen mol oranlarında kanal boyunca lineer olmayan değişim gözlemlenmiş, gerçek yakıt pilleri performanslarına yakın sonuçlar elde edilmiştir [1].

Dutta ve arkadaşları oluşturdukları üç boyutlu nümerik modelde, parçalı akış kanallarına sahip bir yakıt pilindeki kütle transferini incelemişlerdir. Çeşitli yük karışımları için Navier-Stokes denklemleri çözülmüştür. Anot ve katot tarafında bulunan kanallardaki akış ile membran elektrot birleşimindeki tüketim ilişkilendirilmiştir. Su iletiminin elektro-osmotik akı ve difüzyonla gerçekleştiği kabul edilmiştir. Sonuçta düz akış kanallarında basınç azalmasının gerçek değerlerinden daha düşük olduğu bulunmuştur [2].

He ve arkadaşları parçalı tip kanal geometrisi kullanarak oluşturdukları modelde iki fazlı inceleme yapmış; basınç farkı, elektrot kalınlığı, kanal sayısının değişimi, kanal/plaka oranının değişiminin performansa etkilerini incelemişlerdir [3].

Um ve Wang oluşturdukları modelde düz ve parçalı kanal geometrisinde gaz taşınımı ve elektrokimyasal olayları incelemiştir. Yapılan bu çalışma parçalı tip kanalın olduğu modelin daha iyi sonuçlar verdiğini göstermiştir. Bu tasarımın oksijen taşınımını artırarak yakıt pili performansını da arttırdığı görülmüştür. Modelin doğruluğu için Penn State Elektrokimyasal Motor Merkezi'nden alınan deneysel polarizasyon eğrileri de çalışmalarına eklenmiştir [4].

Güvelioğlu ve Stenger, kanal geometrisi ve hidrojenin namlendirilmesinin yakıt pili performansına etkilerini incelemişlerdir. Yaptıkları çalışmada anot ve katot taraflarında farklı basınç değerleri (3-5 atm) kullanmışlardır. Sonuçta daha yüksek akım yoğunluğu elde etmek için daha küçük kanal boyu ve pil geometrisi gerekli olduğunu göstermişlerdir [5].

Hermann ve arkadaşları çift kutuplu plakaların PEM yakıt hücreleri için önemini ifade etmişlerdir. Bu çalışmalarında çift kutuplu plakaların; yakıtı ve havayı eşit miktarda dağıttıklarını, elektrik akımını hücreden hücreye ilettiklerini, ısıyı aktif alandan uzaklaştırdıklarını belirtmiş, gazların ve soğutucunun kaçak yapmasını önlediklerinden bahsederek çift kutuplu plaka imalatı için kullanılan malzemeleri özetlemişlerdir [6].

Shimpalee ve Zee yaptıkları çalışmada, farklı serpantin gaz akış kanal kesit alanlarının hücre performansına ve hücre içindeki reaksiyona giren

gazların konsantrasyon dağılımına etkilerini sayısal olarak incelemiştir. Bir PEM yakıt hücresindeki reaksiyona giren gazların konsantrasyonlarındaki değişiklik, PEM yakıt hücresinin yerel akım yoğunluğu, sıcaklığı ve oluşan suyun konsantrasyon dağılımını etkilemektedir. PEM yakıt hücresindeki reaksiyona giren gazların konsantrasyonlarındaki değişikliğe en büyük etkenlerden biri de hücre geometrisidir. Gerekli analizler yapılmadığı takdirde, yakıt hücresinin farklı bölgelerinde gerilmeler meydana gelebilir. Bu gerilmeleri azaltmanın en etkili yöntemlerinden biri akış alanının boyutlarını değiştirmektir. Yapılan bu çalışma ile de uygun kanal geometrisi belirlenerek hücre performansının artırılması amaçlanmıştır. Ayrıca akış yönünün, hücre performansı ve reaksiyona giren gazların konsantrasyon dağılımlarına etkileri incelenmiştir. Sonuç olarak, PEM yakıt hücresinin sabit kullanım alanlarında dar kanallı ve kanallar arası mesafenin fazla olmasının daha uygun olduğu, hareketli kullanım alanlarında ise, geniş kanallı ve kanallar arası mesafenin az olmasının daha uygun olduğu belirlenmiştir [7].

Soo Kim ve arkadaşları iki boyutlu modeller ile üç boyutlu modelleri karşılaştırmışlardır. Üç boyutlu modeller iki boyutlu modellere göre daha gerçekçi ve daha öğreticidir. Fakat yapılan bu çalışma, iki boyutta oluşturulan modellerde ihmal edilen diğer üçüncü boyuttaki kütle, ısı ve yük transferinin önemsiz olduğunu göstermiştir. İki boyutlu modellerde elde edilen sonuçlar üç boyutlu modellerde elde edilen sonuçlardan çok farklı değildir. Bu nedenle zaman alıcı ve maliyetli üç boyutlu modeller yerine 2 boyutlu modeller oluşturmanın daha avantajlı olduğu belirtilmiştir [8].

Lobato ve arkadaşları; üç boyutlu, 50 cm<sup>2</sup> aktif alanlı bir yakıt pili modeli oluşturarak hesaplamalı akışkanlar dinamiği (CFD) yöntemi ile inceleme yapmışlardır. Oluşturdukları bu modelde, yakıt pilini düşük oksijen debileri ile beslediklerinde kütle transferi ve düşük akım yoğunluğu sorunları ortaya çıkmıştır. Ayrıca giriş hızını kademeli olarak arttırdıklarında belli bir değerden sonra performansın çok fazla artmadığı görülmüştür [9].

Bu çalışmanın amacı, PEM tipi bir yakıt pili için çift kutuplu akış plakalarını iki boyutlu olarak modelleyerek elde edilen voltaj ve akım yoğunluğu değerlerine dayanarak oluşturulan polarizasyon eğrileriyle yakıt pili performans değerlerine ulaşmaktır. Oluşturulan model farklı akış kanalı geometrilerine sahip olup yine farklı çalışma şartlarında inceleme yapılmıştır. Kanal boyunun, giriş hızının, çıkış basıncının ve kanal boyunca konulan engellerin yakıt pili performansına etkisi ayrı ayrı incelenmiştir.

## 2. PEM YAKIT PİLİNİN SAYISAL MODELLENMESİ (NUMERICAL MODELING OF THE PEM FUEL CELL)

Bu çalışmada; sürekli halde çalışan iki boyutlu sayısal bir PEM yakıt pili modeli kurularak geometrik özelliklerin ve çalışma parametrelerinin yakıt pili performansı üzerindeki etkileri incelenmiştir. Model, akış alanına paralel bir kesit olarak oluşturulmuş (Şekil 1) ve literatürde yapılan çalışmalar da dikkate alınarak farklı uzunluklarda denemeler yapılmıştır [5]. Sonrasında polarizasyon eğrileri daha iyi olan kanal uzunluğu baz alınarak akış kanalına engeller konulmuştur. Kanal boyunca konulan engellerin yakıt pili performansına etkileri araştırılmıştır. Elde edilen veriler sonuçlar bölümünde ayrıntılı olarak anlatılmıştır.

Model; anot ve katot akış kanalları, anot ve katot elektrotları, ve iyonik membrandan oluşmaktadır. Anot tarafında hidrojen molekülleri, katalist tabakasında proton ve elektronlarına ayrılarak iyonik akımı katot tarafına ulaştıran protonları sağlamaktadır. Bu çalışmada 1 protonun 1 su molekülünü anot tarafından katot tarafına sürüklediği kabul edilmiştir. Katot katalist tabakasında ise bu protonlar oksijenle birlikte reaksiyona girerek, dış bir devre ile anottan katoda geçirildiği varsayılan hidrojen elektronlarının da katılımıyla ürün olarak su oluşturmaktadır. Katalist tabakasındaki reaksiyonları tanımlamak için aglomerat modeli kullanılmıştır. Aglomeratlar, polimer elektrolit içerisinde gömülü olan katalist ve karbon partiküllerden oluşmaktadır. Aglomerat model denklemleri, küresel gözenekli bir partiküldeki difüzyon-reaksiyon probleminin analitik bir çözümünden elde edilmiştir [37, 38].

Model için kabul edilen varsayımları ise aşağıdaki gibidir:

- Yakıt olarak kullanılan hidrojen ve oksitleyici olarak kullanılan hava ideal gaz olarak kabul edilmiştir.
- Elektrotlar ve kanalların geçirgenlik, gözeneklilik ve iletkenlik gibi özellikleri homojen kabul edilmiştir.
- Sabit sıcaklık seçilmiştir. (80 °C)
- Model tek fazlı olup türler gaz fazındadır ve sıvı mevcudiyeti ihmal edilmiştir.
- Gazlar hem konveksiyonla hem de difüzyonla taşınmaktadır.
- Akış sıkıştırılmaz kabul edilmiştir.
- Sistem sürekli halde çalışmaktadır.
- İki boyutlu inceleme yapılmıştır.
- Nemlendirilmiş hidrojen ve nemlendirilmiş hava akış kanallarının girişlerinden verilmektedir.

Modelleme işi COMSOL ticari yazılımı ile yapılmıştır. Oluşturulan 2 boyutlu modelin fizik koşullarının temelinde elektriksel yük dengesi,

sıkıştırılmaz akış ve difüzyon ile taşınım kavramlarına dair denklemler yer almaktadır.

Elektriksel yük dengesini ve PEM yakıt hücresindeki potansiyel dağılımını tanımlamak için yüklerin korunumu denklemleri kullanılmıştır.

$$\nabla \cdot (-\kappa_s \phi_s) = 0 \quad (\text{anot ve katot için}) \quad (1)$$

$$\nabla \cdot (-\kappa_m \phi_m) = 0 \quad (\text{membran için}) \quad (2)$$

Burada  $\kappa_s$  katı hal elektronik iletkenlik (S/m) ve  $\kappa_m$  membran'ın iyonik iletkenliğidir. Membran boyunca oluşan potansiyel  $\phi_s$  ve  $\phi_m$  tarafından belirlenmektedir. Denklem (1) elektrotlar için, denklem (2) ise membran için kullanılmaktadır. Katalist tabakasında sınır koşulu olarak potansiyel kullanılmıştır. Bu potansiyelden yola çıkarak akım yoğunluğunu hesaplamak için Butler-Volmer kinetik denklemleri kullanılmıştır. Membranda ise sınır koşulu olarak içeri doğru olan iyonik akım yoğunluğu anot ve katot taraflarında tanımlanmıştır. Bu değerler ise  $i_a$  ve  $i_c$  olup, aşağıda ifade edilmiştir:

$$i_e = L_{act} (1 - \varepsilon_{mac}) j_{agg,e} \quad (3)$$

Burada; 'a', anot ve 'c' katot anlamına gelmektedir.  $L_{act}$  aktif tabakanın kalınlığıdır (m).  $\varepsilon_{mac}$  makroskobik gözeneklilik olup  $j_{agg,e}$  ise aglomerat model tarafından verilen akım yoğunluğudur. Anot ve katot için tanımlanan aglomerat modelinde, aktif katalist tabakasındaki akım yoğunluğu yerel olarak tanımlanabilir. Bu yerel akım yoğunlukları difüzyon denklemlerinin ve Butler-Volmer denklemlerinin analitik çözümüyle verilebilir.

$$i_{agg,e} = -6n_e \frac{D_{agg}}{R_{agg}} (1 - \lambda_e \coth \lambda_e) \beta_e \quad (4)$$

Denklem (4) de  $\beta$  ve  $\lambda$  anot ve katot için bilinmesi gereken değerlerdir. Bu modelde bağımsız olarak aşağıda verilen formül yardımıyla bulunabilirler.

$$\lambda_a = \sqrt{\frac{i_{0a} S R_{agg}^2}{2 F c_{H_2,ref} D_{agg}}} \quad (5)$$

$$\lambda_c = \sqrt{\frac{i_{0c} S R_{agg}^2}{4 F c_{O_2,ref} D_{agg}} \exp\left(-\frac{F}{2RT} \eta_c\right)} \quad (6)$$

$$\beta_a = [c_{H_2,ref} - c_{H_2,ref} \exp\left(-\frac{2F}{RT} \eta_a\right)] \quad (7)$$

$$\beta_c = c_{O_2,agg} \quad (8)$$

Burada;  $D_{agg}$ , aglomerat gaz difüzebilitesi ( $m^2/s$ ),  $R_{agg}$ , aglomerat yarıçapıdır (m).  $n_c$ , yük transfer sayısı ( $H^+$  için 1 ve  $O_2^{2-}$  için -2) olup S, aglomerat içerisindeki katalistin spesifik alanıdır ( $1/m$ ). F, Faraday sabiti ( $C/mol$ ),  $c_{i,ref}$ , türlerin referans konsantrasyonu ( $mol/m^3$ ),  $c_{agg,i}$ , agglomerat yüzeyindeki konsantrasyonlar ( $mol/m^3$ ),  $i_{0a}$  ve  $i_{0c}$  değişim akım yoğunlukları ( $A/m^2$ ), R, gaz sabiti ( $J/(mol K)$ ) ve T ise sıcaklıktır (K). Dahası, anot ve katot taraflarındaki kutuplaşma aşağıda verilmiştir ( $\eta_a$  ve  $\eta_c$ ).

$$\eta_a = \phi_s - \phi_m - E_{eq,a} \quad (9)$$

$$\eta_c = \phi_s - \phi_m - E_{eq,c} \quad (10)$$

Burada  $E_{eq}$  denge gerilimini ifade etmektedir. Oksijen ve hidrojen reaksiyonla birlikte tüketilirken, agglomerat yüzeyindeki katalist içindeki hidrojen ve oksijen konsantrasyonları Henry Kanunu ile hesaplanabilen her bir türün molar oranına bağlıdır.

$$c_{agg,H_2} = \frac{P_H X_H}{K_H} \quad (11)$$

$$c_{agg,O_2} = \frac{P_O X_O}{K_O} \quad (12)$$

Burada,  $K$ , Henry sabitidir ( $Pa.m^3/mol$ ). Anot plakası ve katot plakası arasındaki gerilim farkı toplam hücre gerilimini vermektedir. Anot tarafındaki gerilim değeri sifıra eşitlenirken katot tarafındaki gerilim değeri ise  $V_{cell}$ 'e eşitlenmiştir. Hücre gerilimi bu iki

değerin farkına eşittir.  $\partial\Omega_a$  anot bölgesini,  $\partial\Omega_c$  ise katot bölgesini temsil etmektedir.

$$\phi_s = 0 \quad (\partial\Omega_a) \quad (13)$$

$$\phi_s = V_{cell} \quad (\partial\Omega_c) \quad (14)$$

Navier-Stokes sıkıştırılmaz akış denklemleri ile, akışa paralel olarak kurulan bu modelde gözenekli ortamdaki akış için Brinkman Denklemleri kullanılmıştır. Literatürdeki çoğu çalışmada gözenekli ortam akışı için Darcy Kanunu kullanılmıştır. Brinkman Denklemleri, Darcy Kanunu'nun viskoz etkileri de dikkate alarak genişletilmiş bir halidir. Bu denklemlerde kayma gerilmesinden kaynaklanan momentumun transferi önem arz etmektedir. Daha da önemlisi, Brinkman Denklemleri COMSOL içerisinde

serbest akış denklemleri ile uyumlu bir şekilde çözülebilmektedir. Bu seçim özellikle akışa paralel olarak oluşturulan modellerin incelenmesinde oldukça verimli sonuçlar vermiştir. Ayrıca Brinkman denklemleri sayesinde hidrojen akış kanalı ile anot elektrodu ve hava akış kanalı ile katot elektrodu arasında fazladan sınır koşulu tanımlamaya gerek kalmamaktadır. Bu yüzden kanal ile elektrotların temas yüzeyinde sınır koşulu tanımlamaya gerek yoktur.

Boş kanallardaki akış Navier-Stokes denklemleri ile tanımlanmaktadır.

$$\nabla(\rho_{mix}u) = 0 \quad (15)$$

$$\nabla[-\mu(\nabla u + (\nabla u)^T + pI)] = -\rho_{mix}(u\nabla)u \quad (16)$$

Burada;  $\mu$ , dinamik viskozite (Pa.s), u, akışkanın hızı (m/s),  $\rho_{mix}$ , akışkan karışımının yoğunluğu ( $kg/m^3$ ) ve p ise basınçtır (Pa).

Gözenekli ortamda Brinkman Denklemleri akışı tanımlar.

$$\nabla(\rho_{mix}u) = 0 \quad (17)$$

$$\nabla\left[\frac{-\eta}{\epsilon_p}(\nabla u + (\nabla u)^T + pI)\right] = \frac{-\eta}{\kappa_p}u \quad (18)$$

Burada;  $\kappa$ , geçirgenlik ( $m^2$ ) ve  $\epsilon_p$ , gözenekliliktir (birimsiz).

Kütle transferinde yaygınca bilinen bir kanun olan Fick Yasası türlerin sadece çözücü ile etkileşime girmesi kabulüne dayanmaktadır. Bununla beraber, difüzyon katsayıları böyle etkileşimlerde konsantrasyona bağlı değildir. Fakat, gaz karışımlarında bütün türler birbiri ile etkileşim halindedir ve bu yüzden difüzyon katsayıları basınç ve sıcaklığa ek olarak konsantrasyona da bağlıdır.

Bu modelde, anot tarafında  $H_2$  ve  $H_2O$  olmak üzere iki farklı, katot tarafından ise  $O_2$ ,  $N_2$  ve  $H_2O$  olmak üzere üç farklı tür bulunmaktadır. Maxwell-Stefan Kütle Transfer Denklemleri'ne göre her bir ikili etkileşim için bir difüzyon katsayısı tanımlanmalıdır. Difüzyon aşağıdaki denklemlere ile ifade edilir:

$$\frac{\partial}{\partial t} p w_i + \nabla \cdot [-\rho w_i \sum_{j=1}^N D_{ij} \left\{ \frac{M}{M_j} \left( \nabla w_j + w_j \frac{\nabla M}{M} \right) + (x_j - w_j) \frac{\nabla p}{p} \right\} + w_i \rho u + D_i^T \frac{\nabla T}{T}] = R_i \quad (19)$$

Hesaplama modeli kütle oranı  $\omega_i$ 'yi hesaplamaya çalışmaktadır. Burada  $R_i$  terimi, çalışma sabit sıcaklıkta gerçekleştiği için sıfır olarak kabul edilmektedir. Aynı şekilde model kararlı durumda olduğundan zamana bağlı ilk terimler de sıfıra eşit olmaktadır. Bu durumda katot tarafındaki kütle transferi denklemleri ise aşağıdaki şekilde ifade edilebilir. (oksijen=1, su=2 ve azot=3):

$$\nabla \left\{ -\rho w_1 \sum_j [D_{1j} (\nabla x_j + (x_j - w_j) (\nabla p / p))] \right\} = -(\rho u \cdot \nabla w_1) \quad (20)$$

$$\nabla \left\{ -\rho w_2 \sum_j [D_{2j} (\nabla x_j + (x_j - w_j) (\nabla p / p))] \right\} = -(\rho u \cdot \nabla w_2) \quad (21)$$

Burada  $D_{ij}$ , her bir ikili etkileşimden doğan difüzyon katsayılarından oluşan Maxwell-Stefan difüzyon matrisidir ( $m^2/s$ ). Giriş kısımlarında ise besleme gazlarının kütle oranları girdi olarak verilmiştir. Anot tarafında hidrojenin kütle akısı, katot tarafında ise oksijen ve suyun kütle akısı elektrokimyasal reaksiyonlar tarafından belirlenmiştir. Sınır koşullarında ise kütle transferini tanımlamak için aşağıdaki denklemler kullanılmıştır.

kullanılmıştır.

$$-n \cdot N_{H_2} \Big|_{anode} = \frac{j_{anode}}{2F} M_{H_2} \quad (22)$$

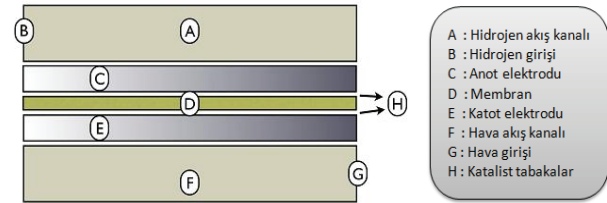
$$-n \cdot N_{O_2} \Big|_{cathode} = \frac{j_{cathode}}{4F} M_{O_2} \quad (23)$$

$$-n \cdot N_{H_2O} \Big|_{cathode} = \frac{j_{cathode}}{F} (0.5 + \lambda_{H_2O}) M_{H_2O} \quad (24)$$

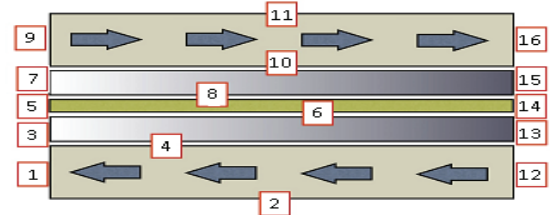
Burada ise  $j$  akım yoğunluğunu ( $A/cm^2$ ),  $F$  Faraday sabitini,  $\lambda_{H_2O}$  ise her bir hidrojen protonuyla membrandan geçerek katoda taşınan su molekülü sayısını,  $M$  molar kütleyi belirtmektedir.

### 3. MODEL ANALİZİ (ANALYSIS OF MODEL)

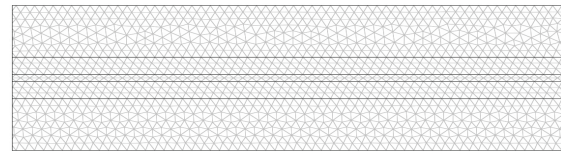
Bu bölümde, modelin COMSOL ticari yazılımı kullanılarak nasıl geliştirildiği anlatılmıştır. Akışa paralel olarak oluşturulan modelin basit şekli Şekil 1-a'da gösterilmiştir. Model boyutları ise Tablo 1'de gösterilmiştir. Öncelikle akışa paralel model, kanal boyu 20 mm ve 50 mm olacak şekilde iki farklı durumda incelenmiştir. Kanal boyunun kısalması performans eğrilerini olumlu yönde etkilemiştir. Bu konuda literatürdeki bazı çalışmalar da bu sonucu desteklemektedir [5]. Elde edilen bu sonuçlar ışığında 20 mm uzunluğundaki model ile çalışmalara devam edilerek akış kanalına farklı şekil ve boyutlarda engeller konulmuştur. Model çalışması için COMSOL ticari programında kullanılan sabit değerler Tablo 2'de verilmiştir.



a) Akışa paralel model (Parallel to flow model)



b) Paralel modelde sınır değerlerinin numaralandırılması (Boundary values for parallel model)



c) Paralel model çözüm ağı yapısı (Mesh structure for parallel model)

Şekil 1. Paralel model geometrisi, sınır değerleri ve çözüm ağı yapısı (Parallel to flow model, boundary values and mesh structure)

Tablo 1. Akışa paralel modelin geometrik özellikleri (Specifications of the parallel-to flow model geometry)

		Elektrot	Membran	Akış Kanalı
1. Durum	Uzunluk	50 mm	50 mm	50 mm
	Yükseklik	0,25 mm	0,1 mm	0,75 mm
2. Durum	Uzunluk	20 mm	20 mm	20 mm
	Yükseklik	0,25 mm	0,1 mm	0,75 mm

**Tablo 2.** Modellemede kullanılan sabit değerler (Model constants)

İsim	Anlatım	Değeri	Anlamı
kappa_s	1000[S/m]	1000[S/m]	Elektrotların elektronik iletkenliği
kappa_m	9[S/m]	9[S/m]	Membran iletkenliği
V_cell	0,6[V]	0,6[V]	Hücre voltajı
R	8,314[J/(mol*K)]	8,314[J/(mol	İdeal gaz sabiti
T	353[K]	353[K]	Sıcaklık
F	96485[C/mol]	96485[s]	Faraday sabiti
kappa_p	1e-13[m^2]	(1e-13)[m^2]	Elektrot geçirgenliği
Eta	2,1e-5[Pa*s]	(2,1e-5)[kg/(m s)]	Elektrot gözeneklerindeki gaz viskozitesi
p_ref	1,013e5[Pa]	1,013e5[Pa]	Referans basıncı
p_a_in	1,00001*p_ref	1,01301e5[Pa]	Anot giriş basıncı
p_c_in	1,00001*p_ref	1,01301e5[Pa]	Katot giriş basıncı
Drag	1	1	Su sürüklenme katsayısı
E_eq_a	0[V]	0[V]	Anot denge potansiyeli
E_eq_c	1[V]	1[V]	Katot denge potansiyeli
i0_a	1e5[A/m^2]	1e5[A/m^2]	Anot kısmı değişim akım yoğunluğu
i0_c	1[A/m^2]	1[A/m^2]	Katot kısmı değişim akım yoğunluğu
S	1e7[1/m]	1e7[1/m]	Elektrotların özgül yüzey alanı
R_agg	0,1[um]	(1e-7)[m]	Aglomerat parçacık çapı
l_act	10[um]	(1e-5)[m]	Katalizör katmanı kalınlığı
eps_mic	0,2	0,2	Aglomerat mikroskobik gözeneklilik
eps_mac	0,4	0,4	Aglomerat makroskobik gözeneklilik
D_agg	1,2e-10[m^2/s]*((1-eps_mac)*(eps_mic))^1,5	(5,0e-12)[m^2/s]	Aglomerat gaz yayılım katsayısı
D_effH2_H2O	0,915e-4[m^2/s]*(T/307,1[K])^1,5*(eps_mac)^1,5	(2,9e-5)[m^2/s]	H2 - H2O efektif ikili yayılım
D_effO2_H2O	0,282e-4[m^2/s]/(T/308,1[K])^1,5*(eps_mac)^1,5	(5,8e-6)[m^2/s]	O2_H2O efektif ikili yayılım
D_effO2_N2	0,22e-4[m^2/s]*(T/293,2[K])^1,5*(eps_mac)^1,5	(7,4e-6)[m^2/s]	O2_N2 efektif ikili yayılım
D_effH2O_N2	0,256e-4[m^2/s]*(T/307,5[K])^1,5*(eps_mac)^1,5	(7,9e-6)[m^2/s]	H2O_N2 efektif ikili yayılım
wH2_in	0,1	0,1	Anot girişindeki, hidrojen ağırlık oranı
wO2_in	0,21*0,8	0,168	Katot girişindeki, oksijen ağırlık oranı
wH2Oc_in	0,2	0,2	Katot girişindeki, su ağırlık oranı
MH2	2[g/mol]	0,002[kg/mol]	Hidrojenin mol kütlesi
MO2	32[g/mol]	0,032[kg/mol]	Oksijenin mol kütlesi
MH2O	18[g/mol]	0,018[kg/mol]	Suyun mol kütlesi
MN2	28[g/mol]	0,028[kg/mol]	Azotun mol kütlesi
xH2_in	(wH2_in/MH2)/(wH2_in/MH2+(1-wH2_in)/MH2O)	0,5[1]	Anot girişindeki, hidrojen mol oranı
xO2_in	(wO2_in/MO2)/(wO2_in/MO2+wH2Oc_in/MH2O+(1-wO2_in-wH2Oc_in)/MN2)	0,134849[1]	Katot girişindeki, oksijen mol oranı

**Tablo 2.** Modellemede kullanılan sabit değerler, devam ediyor (Model constants, continued)

İsim	Anlatım	Değeri	Anlamı
KH2	3,9e4[Pa*m <sup>3</sup> /mol]	39000[J/mol]	Aglomerat içindeki hidrojen için Henry konsantrasyon sabiti
KO2	3,2e4[Pa*m <sup>3</sup> /mol]	32000[J/mol]	Aglomerat içindeki oksijen için Henry konsantrasyon sabiti
cH2_ref	xH2_in*p_ref/KH2	1,298718[mol/m <sup>3</sup> ]	Katalizör katmanında referans hidrojen konsantrasyonu
cO2_ref	xO2_in*p_ref/KO2	0,42688[mol/m <sup>3</sup> ]	Katalizör katmanında referans oksijen konsantrasyonu
Epsilon	0,4	0,4	Elektrotların kuru
rho mix a	0,8[kg/m <sup>3</sup> ]	0,8[kg/m <sup>3</sup> ]	Anot yoğunluğu
rho mix c	0,7[kg/m <sup>3</sup> ]	0,7[kg/m <sup>3</sup> ]	Katod yoğunluğu

Katoda giren havanın %21'inin oksijen olduğu kabul edilmiştir. Anot ve katottaki gaz karışımlarının yoğunlukları Denklem 25 ve 26 ile tanımlanmıştır:

$$\rho_{mix} = \frac{p}{R.T} (x_{H_2} M_{H_2} + x_{H_2O_a} M_{H_2O}) \quad (25)$$

(anot için)

$$\rho_{mix} = \frac{p}{R.T} (x_{O_2} M_{O_2} + x_{H_2O_c} M_{H_2O} + x_{N_2} M_{N_2}) \quad (26)$$

(katot için)

**Tablo 3.** Comsol uygulama modları için sınır koşulları (Boundary conditions for the Comsol application modes)

	Sınırlar	Tip	Değer
Incompressible Navier-Stokes modu için sınır değerler	1, 16	Çıkış-Basınç	p_ref (Pa)
	9	Giriş-Hız	0,2 (m/s)
	12	Giriş-Hız	0,4 (m/s)
İletken alan Dc uygulaması modu (elektrot) için sınır koşulları	3, 7, 13, 15	Elektrik yalıtım	0
	4	Elektrik potansiyeli	V_cell (V)
	6	İç akım	-i_c (A/m <sup>2</sup> )
	8	İç akım	-i_a (A/m <sup>2</sup> )
	10	Elektrik potansiyeli	0 (V)
İletken alan Dc uygulaması modu (zar) için sınır koşulları	5,14	Elektrik yalıtım	0
	6	İç akım	i_c (A/m <sup>2</sup> )
	8	İç akım	i_a (A/m <sup>2</sup> )
Anotta Maxwell-Stefan difüzyon ve iletim uygulama modu için sınır koşulları	7, 11, 15	Yalıtım / Simetri	0
	8	Akı	-i_a*MH2/(2*F) [kg/(m <sup>2</sup> s)]
	9	Kütlece yüzde	wH2_in
	16	Konvektif akı	wH2_in
Anotta Maxwell-Stefan difüzyon ve iletim uygulama modu için sınır koşulları	1	Konvektif akı	{wO2_in;wH2Oc_in}
	2-3, 13	Yalıtım/Simetri	{0;0}
	6	Akı	i_c*MO2/(4*F);- i_c*MH2O*(1/2+drag)/F [kg/(m <sup>2</sup> s)]
	12	Kütlece yüzde	{wO2_in;wH2Oc_in}

#### 4. SONUÇLAR VE TARTIŞMA (RESULTS AND DISCUSSIONS)

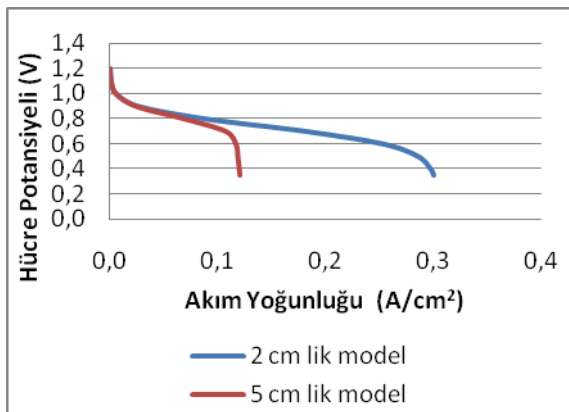
COMSOL ticari programı kullanılarak yapılan bu çalışmada, farklı geometrik özellikler ve farklı sınır şartlarında tek hücreli bir PEM yakıt hücresinin performansı test edilmiştir. Giriş sınır şartı olarak hız, çıkış sınır şartı olarak ise basınç kullanılmıştır.

Hücre potansiyeli-akım yoğunluğu grafiği yakıt hücrelerinde performans (polarizasyon) eğrisi olarak tanımlanmıştır. Bu eğriyi oluşturabilmek için genel olarak 0,2 V-1,2 V aralığında ve 0,1 V'luk artışlarla her hücre potansiyeli değeri için program çalıştırılmıştır. Oluşturulan tüm modellerin çözümü için kullanılan çözüm prosedürü aynı olup aşağıda kısaca bahsedilmiştir.

Şekil 1-b'de akışa paralel olarak oluşturulan model geometrisi yer almaktadır. Bu modelde; 2, 4, 6, 8, 10 ve 11 numaralı sınırlar için maksimum element boyutu  $1e^{-4}$  m olarak girilmiştir. Şekil 1-c'de paralel

model çözüm ağı yapısı gösterilmiştir. Paralel model için, kanal boyunun etkisi, giriş hızının etkisi ve çıkış basıncının etkisi ayrı ayrı incelenmiş olup elde edilen sonuçlar sırasıyla halinde anlatılacaktır. Tüm bu üç durum için de aynı çözüm ağı kullanılmıştır.

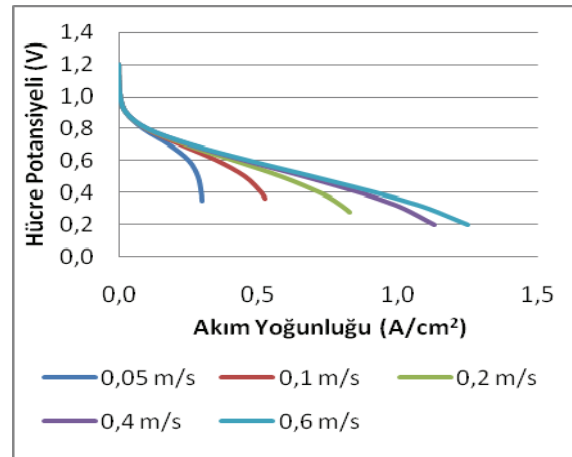
Öncelikle çalışmalar hiçbir engel olmayan akışa paralel model üzerinde yapılmıştır. İlk yapılan çalışma kanal boyunun performansa etkisini araştırılmıştır. İki farklı uzunlukta model oluşturulmuştur. İlk model 5 cm uzunluğundadır. Daha sonra model boyu kısaltılarak 2 cm uzunlukta bir model oluşturulmuştur. Sınır şartları olarak  $H_2$  ve Hava girişlerinde 0,05 m/s hız tanımlanmış olup çıkış şartı ise her iki kanal için de atmosferik basıncıdır (1atm). Şekil 2'de her iki kanal boyu için performans değerleri karşılaştırılmıştır. 2 cm'lik modelde türler kanalı daha çabuk terk etmektedir. Bu nedenle konsantrasyon kayıpları daha az olmaktadır. 5 cm'lik modelde ise diğerine göre kanal boyu daha uzun olduğu için türler kanalı terk edene kadar daha fazla konsantrasyon kaybına uğrarlar. Bunun sonucu olarak da 2 cm olan modelde 5 cm olan modele göre daha iyi bir performans eğrisi ortaya çıkmıştır. Bu durum Şekil 2'de de açıkça görülmektedir. Kanal boyunun kısalması sonucu hücre performansının artması ve en iyi performansta karşılaştırmalar yapılmak istenmesi nedeniyle bundan sonra yapılan çalışmalara 2 cm'lik kanal boyu baz alınarak devam edilmiştir. Programda minimum 0,35 V gerilim değerinde çalışmaya müsaade edilmiştir.



Şekil 2. Paralel modelde farklı iki uzunluğa göre performans eğrisi karşılaştırması (Giriş sınır şartı; her iki kanal için: 0,05 m/s, çıkış sınır şartı; her iki kanal için: 1 atm) (Comparison of performance curves for two parallel-to-flow models with different channel lengths)

#### 4.1. Giriş Hızı Etkisi

Bir önceki çalışmada  $H_2$  ve hava giriş hızları 0,05 m/s olarak verilmişti. Bu kısımda giriş hızı artışının performansa etkisi araştırılmıştır. Yine öncelikle 0,05 m/s hızla başlanılmak üzere bir önceki hızla göre 2 kat artışla 5 farklı hız değerinde program çalıştırılmıştır. Son hız değeri, 0,8 m/s hızla program yanıt vermediği için 0,6 m/s olarak alınmıştır. Çıkış sınır değeri her koşul için atmosferik basıncıdır. Elde edilen performans grafiği Şekil 3'te gösterilmiştir. Giriş hızını artırmak hücre performansını da artırmıştır. Performans eğrilerinden görüldüğü üzere, daha fazla yakıt ve havanın reaksiyona girmesi sağlanmıştır.

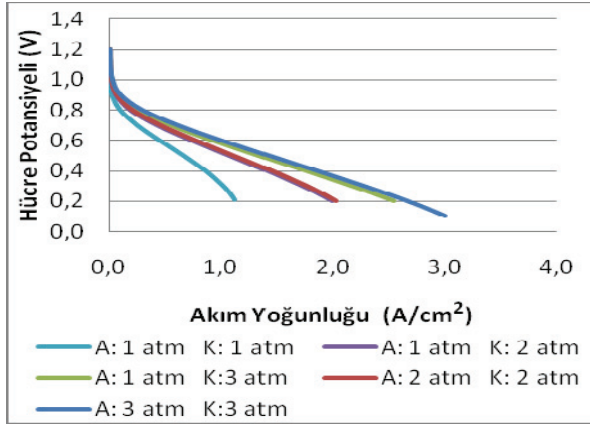


Şekil 3. Paralel modelde farklı giriş hızlarında performans eğrisi karşılaştırması (Çıkış sınır şartı, her durum için: 1 atm) (Comparison of performance curves for the parallel-to-flow models with different inlet velocities)

#### 4.2. Çıkış Basıncı Etkisi

Bundan önceki iki bölümde anlatılan çalışmalarda çıkış sınır şartları sabit tutulmuş o da atmosferik basınca eşitlenmiştir. Zorlanmış koşullarda hücre performansını test etmek için ise çıkış sınır değerleri değiştirilmiştir. Çıkış basınçları 1 atm'den 3 atm'e kadar değişik kombinasyonlarda denenmiştir. Önceki çalışmalardan farklı olarak burada anot ve katot tarafındaki kanallar için farklı sınır değerler verilmiştir. Bundan önceki çalışmalarda  $H_2$  ve hava giriş-çıkışları için aynı sınır şartları verilmişti. Burada ise öncelikle giriş değerleri tanımlanmıştır. Farklı hızlarda yapılan çalışmalar sonrasında gelecek çalışmalarda da optimizasyon sağlamak için anot tarafındaki kanalda  $H_2$  giriş hızı 0,2 m/s katot tarafındaki kanalda hava giriş hızı ise 0,4 m/s olarak verilmiştir. Bu değerler sabit tutularak farklı çıkış basınçlarının performansa etkileri araştırılmıştır. Bunun için 5 farklı durum denenmiştir. Elde edilen sonuçların grafiği ise Şekil 4'te yer almaktadır.



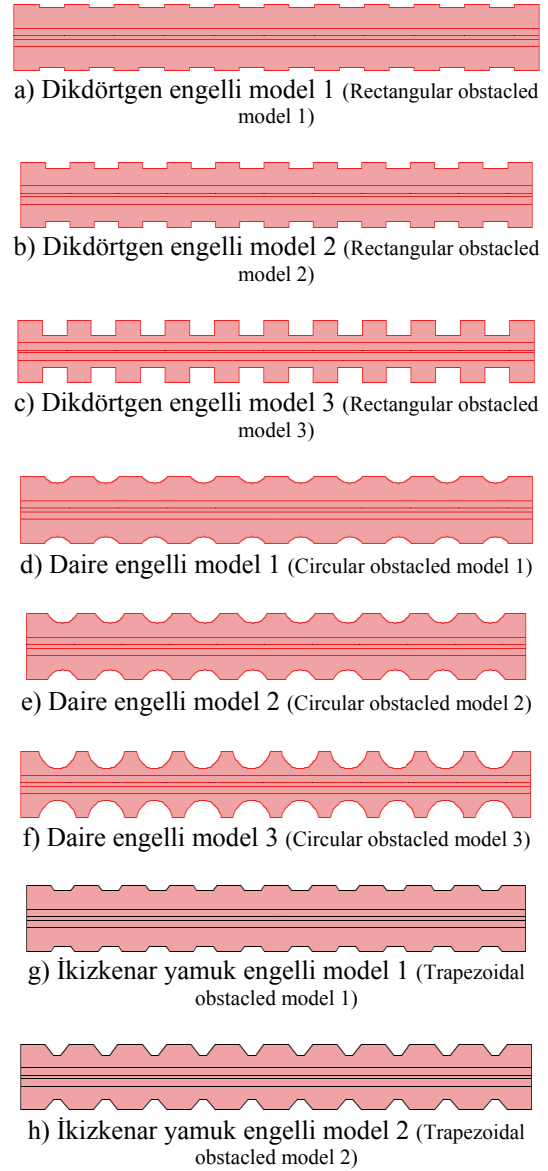


**Şekil 4.** Paralel modelde farklı çıkış basınçlarında performans eğrisi karşılaştırması (Giriş sınır şartı; anot tarafındaki kanal için: 0,2 m/s, katot tarafındaki kanal için: 0,4 m/s) (Comparison of performance curves for the paralel-to-flow models with different outlet velocities)

Katot tarafındaki kanalın giriş ve çıkış değerleri anot tarafındaki kanala göre daha yüksek verilmiştir. Çünkü reaksiyonu esas belirleyen kısım katot tarafıdır. Elde edilen sonuçlar göstermiştir ki katot tarafındaki kanalda verilen sınır şartlarının anot tarafındaki kanala göre yüksek olması her ikisinin de aynı olduğu duruma göre daha yüksek hücre performansı sağlamıştır. Şekil 4'teki grafikte görüldüğü üzere anot tarafındaki kanal çıkış basıncı 1 atm ve katot tarafındaki kanal çıkış basıncı 2 atm olan durum ile her iki taraf çıkış basınçları 2 atm olan durum birbirlerine çok yakındır. Aynı durum 1 atm - 3 atm ve 3 atm - 3 atm şartları için de söylenebilir. Zorlanmış şartlar her ne kadar performans artışı sağlasa da sistem maliyetine getirdiği fazladan yükler nedeniyle tartışılan bir konu olmuştur. Bu nedenle her iki kısımda da yüksek çıkış basıncı vermek yerine anot tarafındaki kanal atmosferik basınç şartlarında tutularak sadece katot tarafındaki kanalın çıkış basıncı artırılabilir.

### 4.3. Akış Kanalına Engel Konulması

Şimdiye kadar yapılan çalışmalarda paralel akış kanalı kullanılmış akışa engel teşkil edecek herhangi bir geometrik değişiklik model üzerinde yapılmamıştır. Buradaki amacımız ise akış boyunca kanala engeller koyarak daha fazla miktarda yakıt ve havayı reaksiyona girmeye zorlamaktır. Bunun da hücre performansını artırması beklenir. Akış kanalı boyunca üç farklı geometrik özellikte engel konulmuştur. Bunlar dikdörtgen şeklinde, daire ve yamuk şeklindedir. Bunların derinlikleri de kademe kademe artırılarak toplamda 8 farklı şekil ortaya çıkmıştır (Şekil 5). Her biri kendi arasında sıgıdan derine doğru numaralandırılmıştır. Bundan sonraki bölümlerde engelli modellerin performans eğrileri oluşturularak engel olmayan paralel model ile karşılaştırılacaktır.



**Şekil 5.** Engelli model geometrileri (Obstructed model geometries)

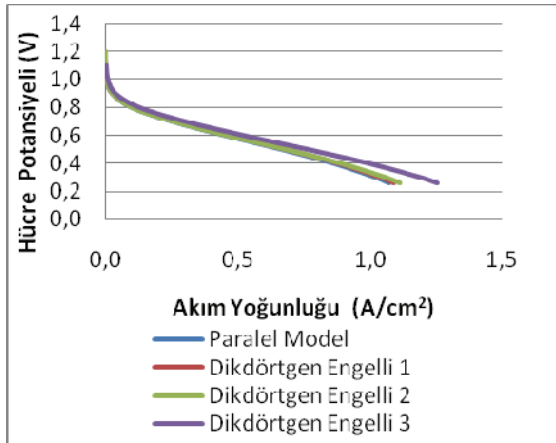
Paralel model ile engelli modelleri karşılaştırmak için sınır şartları aşağıdaki gibi tanımlanmıştır.  $H_2$  0,2 m/s hızıyla kanala girmekte ve 1 atm basınç altında kanalı terk etmektedir. Hava ise 0,4 m/s hız ile kanala girip 1 atm basınç altında kanalı terk etmektedir. Tüm değerlerin bir grafikte toplanması oldukça karışık görüldüğü için paralel model ile engelli modeller gruplar halinde gösterilmiştir (Şekil 6-8). Şekil 9'da bunlara ek olarak paralel modele göre en iyi performansı veren model ile ara bir değere sahip bir model karşılaştırılmıştır. Tablo 4'te ise tüm modellerde 0,6 V ve 0,5 V hücre gerilimi değerlerinde elde edilen akım yoğunluğu değerleri sayısal olarak verilmiştir. Tüm engelli modellerin performansı paralel modele göre daha iyi olup bunların yüzdesel farkları da ayrıca belirtilmiştir. Bu tabloda verilen değerler de göstermiştir ki  $H_2$  ve hava sabit debide kanallara gönderildiğinde önüne çıkan engel nedeniyle katalist tabakaya daha fazla yönlenecek ve

reaksiyona daha fazla girmektedir. Bunun sonucunda da hücre performansı artmaktadır. En iyi sonucu en derin olan engelli model vermiştir. Son olarak farklı çıkış basınçları kullanılması sonucunda engelli modellerin performansı karşılaştırılmıştır. Giriş değerleri bir önceki uygulamada olduğu gibi  $H_2$  girişi için 0,2 m/s hava girişi için ise 0,4 m/s verilmiştir. Çıkış değerleri ise

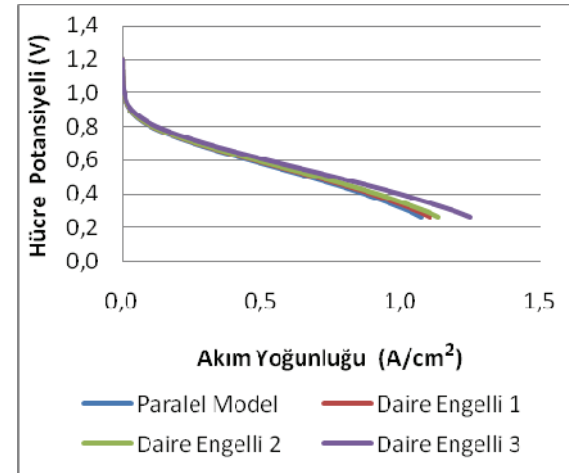
$H_2$  kanalında 1 atm, hava kanalında ise 3 atm olarak girilmiştir. Burada daha derin olan modeller seçilerek toplamda 5 adet engelli model için çözüm yapılmıştır. Sonuçlar aşağıdaki grafiklerde gösterilmiştir (Şekil 6-11). Burada elde edilen performans değerleri atmosferik çıkış şartlarından daha iyidir.

**Tablo 4.** Tüm modeller ile paralel (engelsiz) modelin performans kıyaslaması (Performance comparison of obstructed and no-obstacle models)

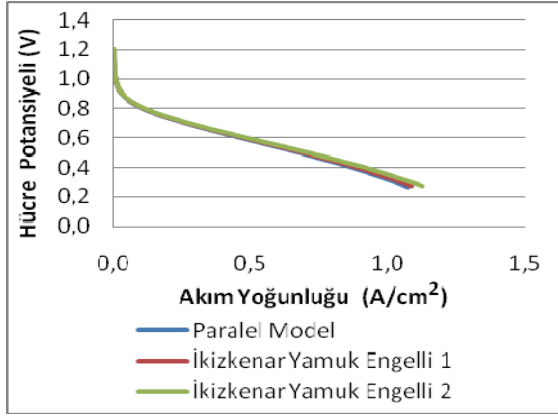
	V=0,6 V için			V=0,5 V için		
	Akım Yoğunluğu	FARK	DEĞİŞİM	Akım Yoğunluğu	FARK	DEĞİŞİM
	(A/m <sup>2</sup> )	(A/m <sup>2</sup> )	%	(A/m <sup>2</sup> )	(A/m <sup>2</sup> )	%
Dikdörtgen Engelli 3	5192	631	13,83	7625	937	14,02
Daire Engelli 3	5165	604	13,25	7578	891	13,32
İkizkenar Yamuk Engelli 2	4804	243	5,33	7048	361	5,39
Daire Engelli 2	4780	219	4,81	7013	326	4,87
Daire Engelli 1	4700	139	3,04	6877	190	2,84
İkizkenar Yamuk Engelli 1	4690	129	2,83	6860	173	2,58
Dikdörtgen Engelli 1	4671	110	2,41	6827	139	2,08
Dikdörtgen Engelli 2	4628	67	1,47	6829	141	2,11
Paralel Model	4561	0	0,00	6688	0	0,00



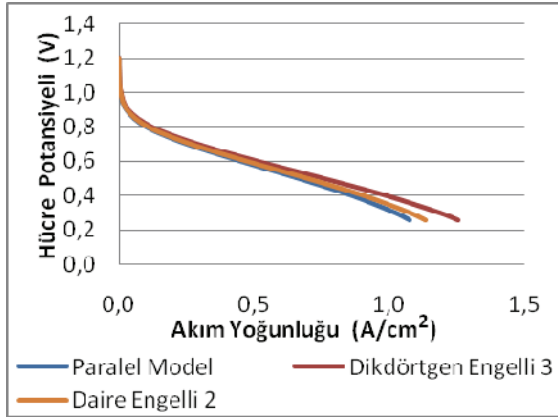
**Şekil 6.** Paralel model ile dikdörtgen engelli modellerin karşılaştırılması (Giriş sınır şartı; anot tarafındaki kanal için: 0,2 m/s, katot tarafındaki kanal için: 0,4 m/s. Çıkış sınır şartı; her iki kanal için: 1 atm) (Comparison of the no-obstacle model and the rectangular obstructed models with inlet boundary conditions of 0.2 m/s at the anode and 0.4 m/s at the cathode, and outlet boundary conditions of 1 atm for both channels)



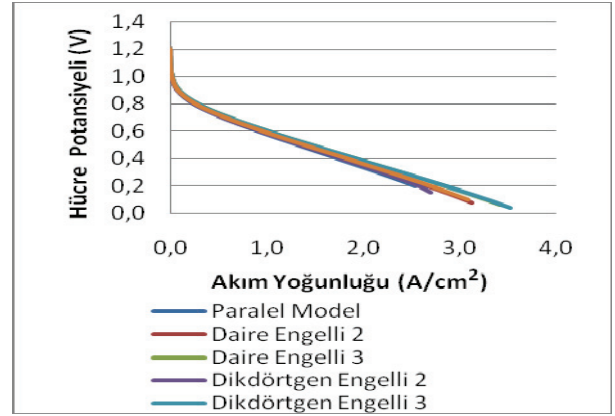
**Şekil 7.** Paralel model ile daire engelli modellerin karşılaştırılması (Giriş sınır şartı; anot tarafındaki kanal için: 0,2 m/s, katot tarafındaki kanal için: 0,4 m/s. Çıkış sınır şartı; her iki kanal için: 1 atm) (Comparison of the no-obstacle model and the circular obstructed models with inlet boundary conditions of 0.2 m/s at the anode and 0.4 m/s at the cathode, and outlet boundary conditions of 1 atm for both channels)



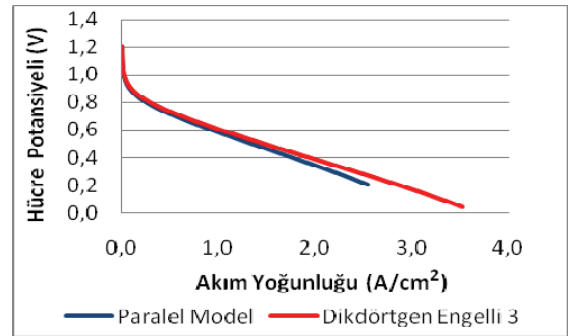
**Şekil 8.** Paralel model ile ikizkenar yamuk engelli modellerin karşılaştırılması (Giriş sınır şartı; anot tarafındaki kanal için: 0,2 m/s, katot tarafındaki kanal için: 0,4 m/s. Çıkış sınır şartı; her iki kanal için: 1 atm) (Comparison of the no-obstacle model and the trapezoidal obstructed models with inlet boundary conditions of 0.2 m/s at the anode and 0.4 m/s at the cathode, and outlet boundary conditions of 1 atm for both channels)



**Şekil 9.** En uç iki değer ile arada yer alan herhangi bir değer karşılaştırılması (Giriş sınır şartı; anot tarafındaki kanal için: 0,2 m/s, katot tarafındaki kanal için: 0,4 m/s. Çıkış sınır şartı her iki kanal için: 1 atm) (Comparison of two most different values and an arbitrary value between with inlet boundary conditions of 0.2 m/s at the anode and 0.4 m/s at the cathode, and outlet boundary conditions of 1 atm for both channels)



**Şekil 10.** Farklı basınçtaki çıkış sınır değeri için engelli modeller ile paralel modelin karşılaştırılması (Giriş sınır şartı; anot tarafındaki kanal için: 0,2 m/s, katot tarafındaki kanal için: 0,4 m/s. Çıkış sınır şartı; anot tarafındaki kanal için: 1 atm, katot tarafındaki kanal için: 3 atm) (Comparison of models with different outlet boundary conditions of 1 atm for the anode and 3 atm for the cathode, and inlet boundary conditions of 0.2 m/s at the anode and 0.4 m/s at the cathode)

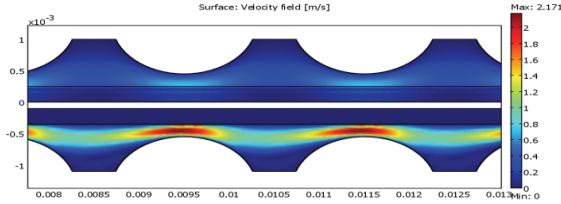


**Şekil 11.** Farklı basınçtaki çıkış sınır değeri için en uç iki modelin karşılaştırılması (Giriş sınır şartı; anot tarafındaki kanal için: 0,2 m/s, katot tarafındaki kanal için: 0,4 m/s. Çıkış sınır şartı; anot tarafındaki kanal için: 1 atm, katot tarafındaki kanal için: 3 atm) (Comparison of models with two most different values and with different outlet boundary conditions of 1 atm for the anode and 3 atm for the cathode, and inlet boundary conditions of 0.2 m/s at the anode and 0.4 m/s at the cathode)

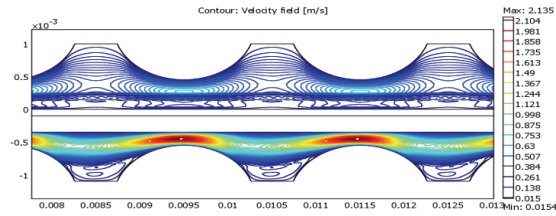
**Tablo 5.** Farklı basınçtaki çıkış sınır değeri (anot tarafındaki kanalda 1 atm, katot tarafındaki kanalda 3 atm) için tüm modeller ile paralel (engelsiz) modelin kıyaslanması (Comparison of all models, with different outlet boundary conditions of 1 atm for the anode and 3 atm for the cathode)

	V=0,6 V için			V=0,5 V için		
	Akım Yoğunluğu	FARK	DEĞİŞİM	Akım Yoğunluğu	FARK	DEĞİŞİM
	(A/m <sup>2</sup> )	(A/m <sup>2</sup> )	%	(A/m <sup>2</sup> )	(A/m <sup>2</sup> )	%
Dikdörtgen Engelli 3	10194	1006	10,95	14651	1371	10,32
Daire Engelli 3	10156	967	10,53	14590	1309	9,86
İkizkenar Yamuk	9633	445	4,84	13916	635	4,78
Dairesel Engelli 2	9587	398	4,34	13848	567	4,27
Dikdörtgen Engelli 2	9256	68	0,74	13411	130	0,98
Paralel Model	9188	0	0,00	13281	0	0,00

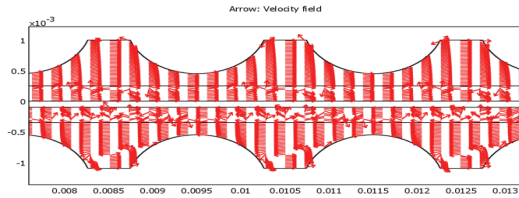
En son yapılan incelemede, zorlanmış şartlarda 5 farklı engelli modelin performans eğrileri çıkartılarak paralel model ile karşılaştırılmıştı. Burada çözüm sırasındaki sınır şartları; anot tarafındaki kanal giriş hızı 0,2 m/s, katot tarafındaki kanal giriş hızı 0,4 m/s, anot tarafındaki kanal çıkış basıncı 1 atm ve katot tarafındaki kanal çıkış basıncı 3 atm olarak verilmişti. Bu bölümde ise bu modellerin akış analizi incelenmiştir.



(a) Daire engelli model 3 için yüzeysel hız değişimi (Velocity field surface for the circular obstructed model)



(b) Daire engelli model 3 için hız konturları (Velocity field contours for the circular obstructed model)

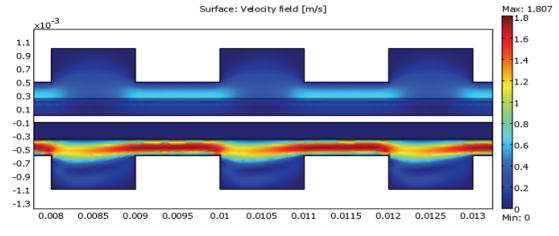


(c) Daire engelli model 3 için hız vektörleri (Velocity field vectors for the circular obstructed model)

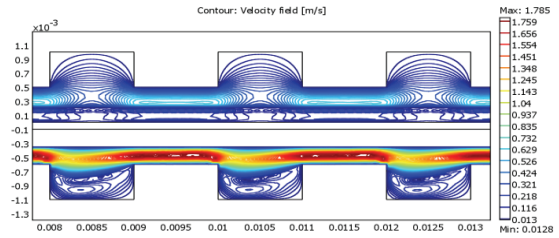
**Şekil 12.** Daire engelli model 3 için yüzeysel hız değişimi, hız konturları ve hız vektörleri (Giriş sınır şartı; anot tarafındaki kanal için: 0,2 m/s, katot tarafındaki kanal için: 0,4 m/s. Çıkış sınır şartı; anot tarafındaki kanal için: 1 atm, katot tarafındaki kanal için: 3 atm) (Velocity field surface, contours and vectors for the circular obstructed model 3 with inlet boundary conditions of 0.2 m/s at the anode and 0.4 m/s at the cathode and outlet boundary conditions of 1 atm for the anode and 3 atm for the cathode)

Akış kanalına engel konulması sonucu türler katalist tabakaya doğru daha çok nüfuz eder. Engelin geometrik şekline göre katalist tabakaya yönlendirilen yakıt veya hava miktarı değişir. Özellikle daire şekilli engellerin olduğu modelde akış kanallarında daha düzgün bir akış varken dikdörtgen engelli modellerde türler katalist tabakaya daha çok yönelmektedir. Dikdörtgen kesitli engelli modellerde derinlik arttıkça akış daha çok zorlanmaktadır. Hatta belli bölgelerde ters akışlar ve girdaplar oluşmaktadır. Bu da

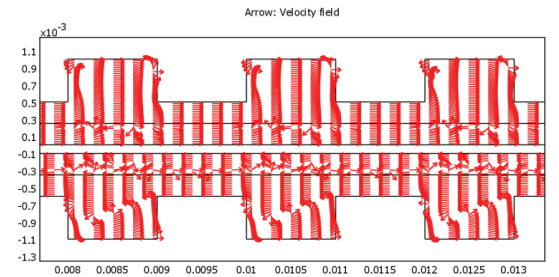
dikdörtgen engellerin derinliği arttıkça daha fazla türü katalist tabakaya yönlendirdiğini gösterir. Şekil 11'de de görüldüğü üzere en iyi performans değerini en derin olan dikdörtgen engelli model vermiştir. Aşağıda her engelli modelden birer örnek seçilerek akış analizini gösteren hız vektörleri, konturlar ve hız değişiminin genel yüzeysel görünümü ayrı ayrı gösterilmiştir (Şekil 12-14).



(a) Dikdörtgen engelli model 3 için yüzeysel hız değişimi (Velocity field surface for the rectangular obstructed model)



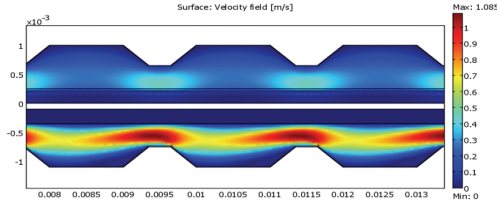
(b) Dikdörtgen engelli model 3 için hız konturları (Velocity field contours for the rectangular obstructed model)



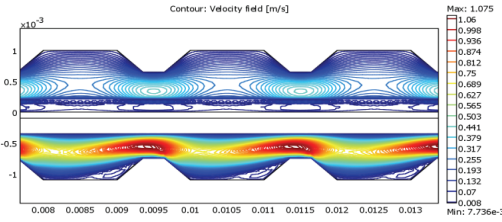
(c) Dikdörtgen engelli model 3 için hız vektörleri (Velocity field vectors for the rectangular obstructed model)

**Şekil 13.** Dikdörtgen engelli model 3 için yüzeysel hız değişimi, hız konturları ve hız vektörleri (Giriş sınır şartı; anot tarafındaki kanal için: 0,2 m/s, katot tarafındaki kanal için: 0,4 m/s. Çıkış sınır şartı; anot tarafındaki kanal için: 1 atm, katot tarafındaki kanal için: 3 atm) (Velocity field surface, contours and vectors for the rectangular obstructed model 3 with inlet boundary conditions of 0.2 m/s at the anode and 0.4 m/s at the cathode and outlet boundary conditions of 1 atm for the anode and 3 atm for the cathode)

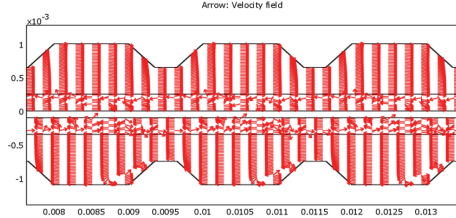




(a) İkizkenar yamuk engelli model 2 için yüzeysel hız değişimi (Velocity field surface for the trapezoidal obstructed model)



(b) İkizkenar yamuk engelli model 2 için hız konturları (Velocity field contours for the trapezoidal obstructed model)

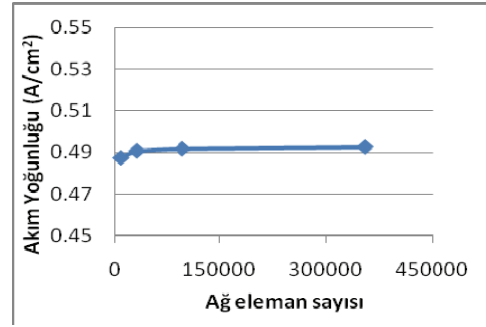


(c) İkizkenar yamuk engelli model 2 için hız vektörleri (Velocity field vectors for the trapezoidal obstructed model)

**Şekil 14.** İkizkenar yamuk engelli model 2 için yüzeysel hız değişimi, hız konturları ve hız vektörleri (Giriş sınır şartı; anot tarafındaki kanal için: 0,2 m/s, katot tarafındaki kanal için: 0,4 m/s. Çıkış sınır şartı; anot tarafındaki kanal için: 1 atm, katot tarafındaki kanal için: 3 atm) (Velocity field surface, contours and vectors for the trapezoidal obstructed model 3 with inlet boundary conditions of 0.2 m/s at the anode and 0.4 m/s at the cathode and outlet boundary conditions of 1 atm for the anode and 3 atm for the cathode)

#### 4.4. Çözüm Ağı Eleman Sayısının Sonuçlara Etkisi

Sonlu eleman yöntemi ile hesaplama yapılan bu model çalışmasında, çözüm ağı eleman sayısının sonuçlar üzerinde etkili olması kaçınılmazdır. Fakat bu çalışmada kullanılan 2 boyutlu hesaplama geometrisinde çözüm ağı eleman sayısının sonuçlar üzerindeki etkisinin ihmal edilebilir derecede küçük olması öngörülmüştür. Bu öngörüğü doğrulamak adına, çözüm ağı, farklı eleman kaliteleri seçilerek değiştirilmiş ve her bir çözüm ağı için 0,5 V altında akım yoğunlukları hesaplanmıştır. Çözüm ağı eleman sayısı, elle belirlenen eleman kalitesinin bir fonksiyonudur. Görüldüğü üzere (Şekil 15) ağı eleman sayısının artırılmasının sonuçlar üzerinde önemli bir etkisi yoktur. Bu sebeple ağı elemanı sayısı çözüm hızının artması amaçlı düşüklü tutulmuştur.



**Şekil 15.** 0,5 V altında farklı eleman sayısına sahip çözüm ağlarında ortaya çıkan akım yoğunlukları (Comparison of generated current densities of models with different mesh element numbers)

## 5. SONUÇLARIN DEĞERLENDİRİLMESİ (CONCLUSIONS)

PEM tipi bir yakıt pili için çift kutuplu akış plakaları iki boyutlu olarak modellenmiştir. Farklı akış kanalı geometrilerinde ve farklı sınır değerlerinde model çözdürülmüştür. Giriş sınır şartı olarak hız, çıkış sınır şartı olarak ise basınç kullanılmıştır. Kanal uzunluğunun etkisi, giriş hızı etkisi, çıkış basıncı etkisi ve akış kanalına konulan engellerin etkisi olmak üzere dört farklı durum için tek hücreli bir PEM yakıt pilinin performans eğrilerine ulaşılmaya çalışılmıştır. Yakıt pili termodinamiği kısmında da anlatıldığı gibi hücre potansiyeli-akım yoğunluğu grafiği yakıt hücrelerinde performans (polarizasyon) eğrisi olarak tanımlanmıştır. Bu eğriyi oluşturabilmek için genel olarak 0,2 V-1,2 V aralığında ve 0,1 V'luk artışlarla her hücre potansiyeli değeri için oluşturulan modeller çözdürülmüştür.

Öncelikle iki farklı kanal uzunluğunda akışa paralel model oluşturulmuştur. İlk model 5 cm uzunluğunda ikincisi ise 2 cm uzunluğundadır. Her iki modelde de aynı sınır şartları tanımlanmıştır. Giriş hızı  $H_2$  ve Hava girişlerinde 0,05 m/s, çıkış basıncı ise her iki kanal için de atmosferik basınçtır (1 atm). 2 cm'lik modelde türler kanalı daha çabuk terk etmektedir. Bu nedenle konsantrasyon kayıpları daha az olmaktadır. 5 cm'lik modelde ise diğerine göre kanal boyu daha uzun olduğu için türler kanalı terk edene kadar daha fazla konsantrasyon kaybına uğrarlar. Bunun sonucu olarak da daha kısa olan modelin performans eğrisi daha iyi olmaktadır.

Bir diğer durum giriş hızı artışının performansa etkisinin incelenmesidir. 0,05 m/s ilk hızla başlanmak üzere bir önceki hıza göre 2 kat artışla 5 farklı hız değerinde program çalıştırılmıştır. Son hız değeri, 0,8 m/s hızla program yanıt vermediği için 0,6 m/s olarak alınmıştır. Çıkış sınır değeri her koşul için atmosferik basınçtır. Giriş hızını artırmak hücre performansını da artırmıştır. Bu durum daha fazla yakıt ve oksidanın reaksiyona girmesine neden olur. İncelenen bir başka durumda ise katot tarafındaki kanalın giriş ve çıkış

değerleri anot tarafındaki kanala göre daha yüksek verilmiştir. Çünkü net reaksiyonun hızı katottaki reaksiyona bağlıdır. Dolayısıyla, katot tarafındaki kanalda verilen hız sınır şartlarının anot tarafındaki kanala göre yüksek olması her ikisinin de aynı olduğu duruma göre daha yüksek hücre performansı sağlamıştır.

Son olarak, akış kanalına akış yönüne dik engeller konulmuştur. Buradaki amaç daha fazla miktarda yakıt ve havayı kataliz tabakasına yönlendirmek ve türleri reaksiyona girmeye zorlamaktır. Akış kanalı boyunca üç farklı geometrik özellikte engel konulmuştur. Bunlar dikdörtgen şeklinde, daire ve yamuk şeklindedir. Bunların derinlikleri de kademe kademe artırılarak toplamda 8 farklı şekil ortaya çıkmıştır (Şekil 5). Her biri kendi arasında sığdan derine doğru numaralandırılmıştır. Elde edilen sonuçlar göstermiştir ki akış kanalına engel konulması sabit debi çalışma şartlarında beklendiği üzere hücre performansını arttırmıştır. Engel derinliğinin artması ile birlikte en iyi performans değerlerine ulaşılmıştır.

### Teşekkür

T.C. Sanayi ve Ticaret Bakanlığı Sanayi Ar-Ge Müdürlüğü'ne SANTEZ #00277.STZ.2008 nolu kontrat numarası ile verdikleri destekten dolayı teşekkürlerimizi sunarız.

### SEMBOL LİSTESİ

#### Simgeler Açıklama

<b>e</b>	Bir elektronun yükü
<b>E<sub>eq</sub></b>	Denge gerilimi
<b>F</b>	Faraday sabiti, 96485 [C/mol]
<b>h<sub>r</sub></b>	Oluşum ısısı
<b>H</b>	Entalpi
<b>i</b>	Akım yoğunluğu [A/m <sup>2</sup> ] Değişim akım yoğunluğu [A/m <sup>2</sup> ]
<b>i<sub>0</sub></b>	
<b>K</b>	Henry sabiti (Pa.m <sup>3</sup> /mol).
<b>M</b>	Mol kütlesi [kg/kmol]
<b>n</b>	Mol başına elektron sayısı, H <sub>2</sub> için.
<b>N</b>	Avogadro sayısı
<b>R</b>	İdeal gaz sabiti (8.3145 J/mol <sup>o</sup> K)
<b>T</b>	Sıcaklık
<b>V<sub>cell</sub></b>	Hücre voltajı
<b>w</b>	Kütle kesri
<b>x</b>	Mol kesri

#### Yunan Harfleri

<b>α</b>	Elektron transfer katsayısı
<b>α</b>	Mesafe [m]
<b>δ</b>	Gözeneklilik
<b>ε</b>	

<b>η</b>	Gaz viskozitesi [mPa.s]
<b>η<sub>act</sub></b>	Aktivasyon kaybı
<b>η<sub>conc</sub></b>	Konsantrasyon kaybı
<b>η<sub>ohmic</sub></b>	Ohmik kayıp
<b>η<sub>rev</sub></b>	Tersinir (ideal) verim
<b>κ</b>	İletkenlik [S/m]
<b>κ<sub>p</sub></b>	Geçirgenlik [m <sup>2</sup> ]
<b>κ<sub>H<sub>2</sub>O</sub></b>	Sürüklenme katsayısı, su için
<b>λ</b>	Yoğunluk [kg/m <sup>3</sup> ]
<b>φ</b>	Potansiyel [V]

#### İndisler Açıklama

<b>A</b>	Anot
<b>Act</b>	Aktivasyon
<b>Agg</b>	Agglomerate
<b>C</b>	Katot
<b>Cell</b>	Hücre
<b>Cons</b>	Konsantrasyon
<b>E</b>	Türler
<b>El</b>	Elektrik
<b>Eq</b>	Denge
<b>Gas</b>	Gaz
<b>İn</b>	İç
<b>Liq</b>	Sıvı
<b>Mix</b>	Karışım
<b>Ref</b>	Referans

#### KAYNAKLAR

1. Gurau, V., Liu, H. And Kakac, S., Two-Dimensional Model for Proton Exchange Membrane Fuel Cells, **AICHE Journal**, 44, 2410-2422, 1998.
2. Dutta S., Shimpalee S., Vanzee W.J., Three-dimensional numerical simulation of straight channel PEM fuel cells, **J. Applied Electrochemistry**,(30) 135-146, 1999.
3. He, W., Yi, J.S. and Nguyen, T.V., Two-Phase Flow Model of the Cathode of PEM Fuel Cells Using Interdigitated Flow Fields, **AICHE Journal**, 46, 2053-2064, 2000.
4. Um, S. and Wang, C.Y., Three-dimensional analysis of transport and electrochemical reactions in polymer electrolyte fuel cells, **Journal of Power Sources**, 125, 40-51, 2004.
5. Guvelioglu, G.H. and Stenger, H.G., Computational fluid Dynamics modeling of polymer electrolyte membrane fuel cells, **Journal of Power Sources**, 147, 95-106, 2005.

6. Hermann, A., Chaudhuri, T., Spagnol, P., **International Journal of Hydrogen Energy**, 30, 1297, 2005.
7. Shimpalee, S., Van Zee, J.W., "Numerical Studies on Rib & Channel Dimension of Flow Field on PEMFC Performance", **International Journal of Hydrogen Energy**, 80-102, (2006).
8. Soo Kim, G., Sui, P.C., Shah, A.A., Djilali, N., Reduced-dimensional models for straight-channel proton exchange membrane fuel cells, **Journal of Power Sources**, 195, 3240-3249, 2010.
9. Lobato, J., Canizares, P., Rodrigo, M.A., Pinar, J.F., Mena, E., Ubeda, D., Three-dimensional model of a 50 cm<sup>2</sup> high temperature PEM fuel cell. Study of the flow channel geometry influence, **International Journal of Hydrogen Energy**, xxx, i-ii, 2010.
10. Larminie, J., Dicks, A., **Fuel Cell Systems Explained**, Wiley, 2003.
11. Hoogers, G., **Fuel Cell Technology Handbook**, CRC Press, 2002.
12. Kakaç, S., Vasiliev, L., Pramuanjaroenkij, A., **Mini-Mikro Fuel Cell Fundamentals and Applications**, Springer, 2007.
13. Barbir, F., **PEM Fuel Cells: Theory and Practice**, Elsevier Academic Press, 2005.
14. EG&G Technical Services, Inc., **Fuel Cell Handbook (Seventh Edition)**, U.S. Department of Energy Office of Fossil Energy National Energy Technology Laboratory, 2004.
15. EG&G Services Parsons, Inc. Science Applications International Corporation, **Fuel Cell Handbook (Fifth Edition)**, U.S. Department of Energy Office of Fossil Energy National Energy Technology Laboratory, 2000.
16. Açar, E., 2010, **2-D Modeling of a Proton Exchange Membrane Fuel**, Yüksek Lisans Tezi, O.D.T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.
17. Bıyıkoğlu, A., Yakıt Hücrelerinin Tarihsel Gelişimi, Çalışma Prensipleri Ve Bugünkü Durumu, **G.Ü. Fen Bilimleri Dergisi**, 16(3), 523-542, 2003.
18. Barbir, F., Fuel cell basic chemistry, electrochemistry and thermodynamics. In **Mini-Micro Fuel Cells: Fundamentals and Applications**, pages 13–26, 2008.
19. "Elektrik İşleri Etüd İdaresi" erişim adresi: <http://www.eie.com/>, erişim tarihi: 26 Nisan 2010.
20. "Fuel Cell Online, Fuel Cell Information" erişim adresi: <http://www.fuelcells.org/>, erişim tarihi: 28 Temmuz 2010.
21. "U.A. Department of Energy, Energy Efficiency & Renewable Energy" erişim adresi: [http://www1.eere.energy.gov/hydrogenandfuelcells/fuelcells/fc\\_types.html](http://www1.eere.energy.gov/hydrogenandfuelcells/fuelcells/fc_types.html), erişim tarihi: 26 Nisan 2010.
22. "The National Institute of Standards and Technology (NIST)" erişim adresi: <http://physics.nist.gov/MajResFac/NIF/pemFuelCells.html> erişim tarihi : 26 Nisan 2010.
23. Scientific Computing World erişim adresi: <http://www.scientific-computing.com/scwjnfeb03fuelcell.html> erişim tarihi: 20 Temmuz 2010.
24. Robalinho, E., Cunha, E.F., Andrade, A.B., Bejarano, M.L.M., Linardi, M., Cekinski, E., COMSOL Modelling and Simulation of PEM Fuel Cell's Flow Channels, **Excerpt from the Proceedings of the COMSOL Conference**, Boston, U.S.A., 2007.
25. Siegel, C., Review of computational heat and mass transfer modeling in polymer-electrolyte-membrane (PEM) fuel cells, **Energy**, 33, 1331–1352, 2008.
26. Mehta, V. and Cooper, J., Review and analysis of pem fuel cell design and manufacturing, **Journal of Power Sources**, 114, 32–53, 2003.
27. Tsuchiya, H. and O Kobayashi, O., Mass production cost of pem fuel cell by learning curve, **International Journal of Hydrogen Energy**, 29, 985–990, 2004.
28. Li, X. and Sabir, I., Review of bipolar plates in pem fuel cells: Flow-field designs, **International Journal of Hydrogen Energy**, 30, 359–371, 2005.
29. Hermann, A., Chaudhuri, T. and Spagnol, P., Bipolar plates for pem fuel cells: A review, **International Journal of Hydrogen Energy**, 30, 1297–1302, 2005.
30. Tawfik, H., Hung, Y. and Mahajan, H., Metal bipolar plates for pem fuel cell—a review, **Journal of Power Sources**, 163, 775–767, 2007.
31. Wind, J., Spah, R., Kaiser, W. and Böhm, G., Metallic bipolar plates for pem fuel cells, **Journal of Power Sources**, 105, 256–260, 2002.
32. Xing, Q.X., Lum, K.W., Poh, H.J., Wu, Y.L., Geometry optimization for proton-exchange membrane fuel cells with sequential quadratic programming method, **Journal of Power Sources**, 186, 10–21, 2009.
33. Comsol Multiphysics. **Proton exchange membrane fuel cell. In Chemical Engineering Module Model Library**, Comsol, 2009.
34. Comsol Multiphysics. **Chemical Engineering Module User's Guide**. Comsol, 2008.
35. "General Motors Company" resmi internet sitesi erişim adresi: <http://www.gm.com/vehicles/innovation/fuel-cells/> erişim tarihi: 28 Temmuz 2010.
36. Sankır, M., PhD Dissertation, 2005.
37. K. Broka, P. Ekdunge, Modelling the PEM fuel cell cathode, **Journal of Applied Electrochemistry**, 27: 281-289, 1997.
38. K. Dannenberg, P. Ekdunge and G. Lindbergh, Mathematical model of the PEMFC, **Journal of Applied Electrochemistry** 30: 1377–1387, 2000.

