

OTOTERMAL, BUHARLI VE KISMİ OKSİDASYONLU YAKIT PİLİ YAKIT DÖNÜŞTÜRÜCÜLERİNİN MODELLENMESİ

M. Turhan ÇOBAN

Ege Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi Makina Mühendisliği Bölümü ,
35100-Bornova/İzmir

Telefon: (232) 388 85 62/5387, Fax: (232) 388 85 62

e-mail: turhan.coban@ege.edu.tr

Özet: Yakıt dönüştürücüler yakıt pili sistemlerinin en önemli alt elemanlarını oluştururlar. Temel olarak yakıt pili yakıt dönüştürme sistemlerinin performansı, gibbs serbest enerji minimizasyon teknikleri kullanılarak irdelenebilir. Yakıt dönüştürücü modellenmesi Gibbs serbest enerji minimizasyon teknikleri kullanılarak yakıt dönüştürücülerimizin gaz çıkış ve enerji dengelerini hesaplayan modellerdir. Modeller Java programlama dilinde oluşturulmuştur. Bu çalışmada ototermal, buharlı ve kısmi oksidasyonlu yakıt pili yakıt dönüştürme sistemlerinin modellenmesi incelenecektir.

MODELLING OF AUTOTHERMAL, STEAM AND PARTIAL OXIDATION FUEL CELL REFORMERS

Abstract: Fuel reformers are one of the most important components of fuel cell systems. Basic thermodynamic performances of a fuel cell reformer can be analysed by using Gibbs free energy minimisation. Models investigated in this article will be utilised Gibbs free energy minimisation method to calculate energy balances and exit gas formation from the reformer. Simulation models are prepared in Java programming language in class formats. In this study Autothermal, partial oxidation and steam reformers will be investigated.

1. GİRİŞ

Yakıt pilleri, kimyasal reaksiyonun enerjisini direkt olarak elektrik enerjisine çeviren aygıtlardır. Temel bir yakıt hücresinde, gaz yakıtlar anottan (negatif elektrodan) devamlı olarak beslenirken, oksitleyici (Hava veya oksijen) gazlarda katoddan (pozitif elektrodan) devamlı olarak gönderilir. Elektrik akımını oluşturmak için elektronlarda elektro kimyasal reaksiyonlar meydana gelir. Bir yakıt pili, bilinen bataryalardan bazı yönleri ile farklılıklar gösterir. Batarya bir tür enerji depolama aygıtı olup, kendisinde depolanmış kimyasal enerjinin miktarı ile belirlenen maksimum enerjiyi depolar. Bu nedenle batarya depolanmış kimyasal enerji bitene kadar (deşarj) elektrik enerjisi üretmeye devam edecektir. Yakıt pili yakıt ve yakıcının elektrodalarda bulunduğu süre boyunca elektrik enerjisini üretme yeteneğine teorik olarak sahip olan enerji dönüşüm aygıtıdır.

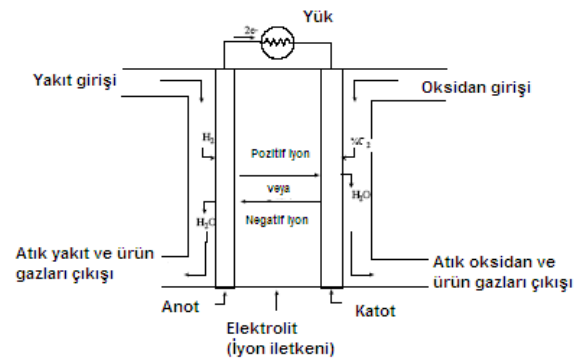
Birtakım yakıt hücreleri halen geliştirilmektedir. Bunlar genellikle hücrelerinde kullanılan elektrolitlere göre sınıflandırılmaktadır. Şu anda üzerinde çalışılan başlıca yakıt pilleri türleri şunlardır :

1. Proton değişim membranlı (Proton Exchange Membrane-PEM) veya katı polimer elektrolitli yakıt pili (Solid Polimer Electrolyte Fuel Cell-SPEFC)
2. Alkali yakıt pili (Alkaline fuel cell-AFC)

3. Fosforik asit yakıt pili (Phosphoric Acid Fuel Cell-PAFC)

4. Erimiş karbonat yakıt pili (Molten Carbobate Fuel Cell-MCFC)

5. Katı oksitli yakıt pili (Solid Oxide Fuel Cell-SOFC)



Şekil 1. Yakıt pili çalışması şematik gösterimi

Yakıt pillerinde yakıt olarak doğalgaz, dizel, metanol ve benzeri hidrojen içeren hidrokarbonlar kullanılabilir. Ancak genellikle bu yakıtlar doğrudan kullanılamazlar. Direk Metanol yakıt pillerinde (PEM tipi yakıt pillerinin özel bir türü) metanolün direkt kullanıldığını söylemek mümkün olsa da asıl proses pil içi yakıt dönüşüm prosesidir. Genel olarak yakıtların barındırdıkları hidrojenin (bazı durumlarda CO₂ ve metan da yakıt pilinde

direk olarak kullanılabilir) ayrıştırılarak yakıt piline gönderilmesi gerekmektedir. Bu işlem için kullanılan araçlara yakıt dönüştürücüler denmektedir. Bu çalışmada yaygın olarak kullanılan üç yakıt dönüştürücü incelenecektir. Bunlar buharlı yakıt dönüştürücü, ototermal yakıt dönüştürücü ve kısmi oksidasyonlu buharlı yakıt dönüştürücüsüdür.

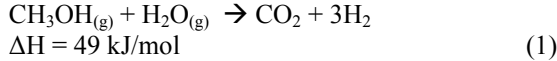
Buharlı yakıt dönüştürücülerde yakıtta belirli bir miktar buhar ilave edilerek yakıtın yüksek sıcaklıkta reaksiyona girmesi sağlanır. Oluşan reaksiyon endotermik bir reaksiyondur ve reaksiyon sonucunda gazların çıkış sıcaklıkları düşmektedir. Isı değiştiricisi ile entegre buharlı yakıt dönüştürücüler de buharlı yakıt dönüştürücülerle aynı düzene sahiptir. Ancak bu sistemlerde reaksiyonun çıkış sıcaklığı ısı değiştiricisi aracıyla sabit tutulmaya çalışılmakta ve verim artırılmaktadır. Kısmi yanma yakıtın tam yanmaya yetmeyecek kadar az miktarda hava ile yakılma prosesidir. Yakıtın bir kısmı karbonmonoksit(CO) ve hidrojene(H₂) dönüşürken bir kısmı da karbondioksite(CO₂) dönüşür. Ototermal yakıt dönüştürücüler ise kısmi yanma ile buharlı yakıt dönüştürücülerin bir karışımıdır. Bir yandan yakıtın bir kısmı oksijenle yakılarak hidrojen ve enerji üretilmekte, öte yandan yakıt ile buhar reaksiyona girerek hidrojen oluşmaktadır.

2. YAKIT DÖNÜŞTÜRÜCÜLER

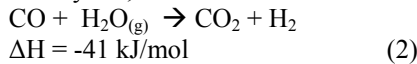
Bu bölümde yakıt dönüştürücüleri biraz daha detaylı olarak incelenecektir.

Buharlı yakıt dönüştürücü

Bir örnek olarak metanolün buharlı yakıt dönüşümü (Steam reforming) denklem 1 'de verilmiştir .



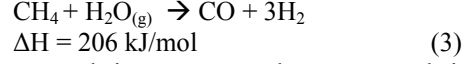
Metanol ve su buharlaştırılarak katalist ortamda reaksiyona sokularak CO₂ ve H₂'e dönüştürülür. Uygulamada reaksiyon sonucu hidrojen, karbondioksit ve karbonmonoksit oluşmaktadır. Düşük sıcaklık dönüşümünü izleyen yüksek sıcaklık dönüşümü ile karbonmonoksit karbondioksite dönüştürülür ve elde edilen hidrojen miktarı artırılır. Bu reaksiyon endotermik bir reaksiyondur. Her iki durumda da su-gaz dönüşüm reaksiyonu;



Su-gaz dönüşüm reaksiyonu egzotermik bir reaksiyondur. Bu yüzden, eğer çok fazla ısı oluşursa reaksiyon tersine dönerek girenler tarafına doğru yönelir (Le Chatelier prensibi). Bundan korunmak için, reaksiyon bir kaç aşamada meydana getirilir ve uygulamada aşamalar arasında ara soğutma yapılır. Yüksek sıcaklık dönüşümü için en iyi katalist 400 ile 550⁰C sıcaklıkları arasında iyi bir etkinlik gösteren demir ve kromoksit(Fe₃O₄ ve Cr₂O₃) karışımıdır. Metanolün düşük sıcaklık

dönüşümü içinde benzer işletme şartlarında bakır katalistler kullanılmaktadır.

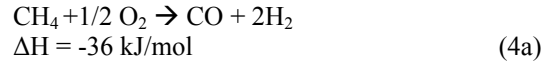
Doğalgazdaki metandan buharlı yakıt dönüşümü ile hidrojen eldesi endüstride sıklıkla kullanılan bir yöntemdir. Metanın buharlı yakıt dönüşümü reaksiyonu denklem 3 ile gösterilmektedir.



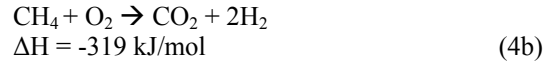
Bu reaksiyonu su-gaz dönüşümü reaksiyonu izler (Denklem 2). Metanın buharlı dönüşümünde çoğunlukla nikel katalistler kullanılır. Reaksiyon 750 ile 1000⁰C arasında karbon oluşmasını engellemek için fazla buhar vererek gerçekleştirilir. Verilen buhar miktarı genellikle buhar-karbon oranı ismini verdiğimiz önemli bir parametreyle ölçülür. Buhar karbon oranının çok düşük olması sistemde karbon oluşumunu tetiklerken çok yüksek olması sistem verimini düşürür, bu yüzden optimum değerlerinin bulunarak kullanılması önemlidir.

Kısmi yanma

Endüstriyel ölçekte kullanılan bir diğer önemli yakıt dönüştürme süreci kısmi yanmadır (Partial oxidation-POX). Bu işlem genelde ağır hidrokarbonlar için yada özel gereksinimler olduğu zaman kullanılır. Örneğin saf oksijenin var olduğu durumlar için kısmi yanma uygun bir seçim olabilir. Denklem 4a ve 4b de görüldüğü gibi stokiyometrik miktarın altında oksijen kullanımında da, stokiyometrik miktarda oksijen kullanıldığı kadar hidrojen üretilmektedir.



ve/veya



Ototermal yakıt dönüştürücü (ATR)

Ototermal yakıt dönüştürücü(Autothermal fuel reformer), buharlı yakıt dönüşümü ile kısmi yanma işleminin faydalarını bir arada tek bir yöntemde toplayabilmektir. İdeal olarak kararlı hal egzotermik reaksiyonlar ilk başlangıç için ve endotermik reaksiyonları beslemek için kullanılmaktadır. Reaksiyonlar çok iyi ısıl bağlantı sağlanmış ayrı reaktörlerde oluşabileceği gibi tek bir katalitik reaktörde de olabilir. Bu kombine işlem ototermal yakıt dönüşümü olarak bilinmektedir.

3. YAKIT DÖNÜŞTÜRÜCÜLERİN MODELLENMESİ

Yakıt pili yakıt dönüştürücülerinin modellenmesinde reaksiyonların kimyasal denge durumuna ulaştıkları varsayılacaktır. Kimyasal denge hesaplarını oluşturabilmek için gibbs serbest enerjisi minimizasyonu kullanılmıştır. Bu şu şekilde formüle edilebilir.

$$g = \sum_{j=1}^{NS} \mu_j n_j \quad (5)$$

Burada NS karışımdaki madde sayısını , g birim kmol başına gibbs enerjisini , μ kilomol başına kimyasal potensiyeli ve n mol sayısını ifade etmektedir.

$$\mu_j = \left(\frac{\partial g}{\partial n_j} \right)_{T,P,n_{i \neq j}} \quad (6)$$

Burada denge bileşimini elde etmek için denklem 5 ile ifade edilen toplam gibbs enerjisinin minimum olduğu noktayı bulmamız gerekir. Ancak bileşim aynı zamanda kütle korunumunu da sağlamalıdır.

$$\sum_{j=1}^{NS} a_{ij} n_j - b_i^0 = 0 \quad (i=1, \dots, l) \quad (7)$$

buradaki l reaksiyona giren maddelerin içerdiği elementlerin sayısını vermektedir. Dolayısı ile karışımdaki problem 5 denklemi ile ifade edilen gibbs enerjisinin 7 kısıtına bağlı olarak n_j mol sayıları bağımsız değişkeni üzerinden minimize edilmesidir. Her ne kadar 5 ifadesi lineer bir toplam gibi gözükse de μ_j den dolayı problem non lineer bir minimizasyon problemidir.

$$\mu_j = \mu_j^0 + RT \ln \frac{n_j}{n} + RT \ln P \quad (8)$$

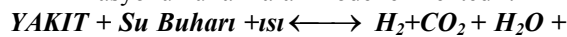
5 denklemi ile 7 kısıtı Lagrange çarpanları yöntemi ile birleştirilirse şu tek denkleme ulaşırız.

$$G = \sum_{j=1}^{NS} \mu_j n_j + \sum_{i=1}^l \lambda_i \sum_{j=1}^{NS} (a_{ij} n_j - b_i^0) \quad (9)$$

Bu denklem sisteminin çözümü bize denge bileşimini verecektir. Bu sistemin çözümü için NASA yöntemiyle gibbs serbest enerji modeli java programlama dilinde geliştirilmiş ve gibbs.java programı oluşturulmuştur.

Gibbs minimizasyonu modelinin geliştirilmesinin ardından yakıt pili yakıt dönüşüm sisteminin ana bileşeni olan Yakıt Dönüştürücülerin modellenmesi işlemine geçilebilir. Geliştirilen Yakıt Dönüştürücü modelleri:

Su buharlı yakıt dönüştürücü : Bu modelde denklem (10) da verilen reaksiyon gibbs minimizasyonu kullanılarak modellenmektedir.



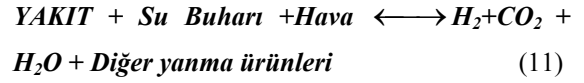
Diğer yanma ürünleri (10)

Bu reaksiyon endotermik olduğu için yakıt subuharı karışımının reaksiyon boyunca ısı alması veya her ikisinin ayrı ayrı bir ön ısıtıcı ile çıkış da istenen sıcaklığa ulaşılacak şekilde yüksek sıcaklığa ısıtılması gerekmektedir. Geliştirilen model ile şu hesaplamalar gerçekleştirilebilmektedir.

1. Ürünlerin istenilen sıcaklık da yakıt dönüştürücüyü terk edebilmeleri için verilmesi gereken ısı miktarını tespit etmek mümkündür.
2. Belirli bir sıcaklık da yakıt dönüştürücüye giren belirli yakıt su buharı karışımının hangi

sıcaklıkta yakıt dönüştürücüden çıkacağını belirlemek mümkün olmaktadır.

Ototermlal yakıt dönüştürücü : Bu modelde denklem (11) ile verilen reaksiyon gibbs minimizasyonu kullanılarak modellenmektedir.



Bu yakıt dönüştürücü modeli ise dönüşüm için gereken ısıyı yakıtın bir kısmını hava ile yakarak elde etmektedir. Dolayısı ile bir ön ısıtma işlemine gerek kalmamaktadır. Bu model ile de şu hesaplamalar yapılabilmektedir.

1. Belirli bir yakıt hava su buharı karışımı için belirli sıcaklık da ki çıkış molları hesaplanabilmektedir.
2. Belirli bir çıkış sıcaklığı yakalayabilmek için gereken yakıt/hava oranının tespit edilmesi mümkündür.
3. Reaksiyon sırasında oluşabilecek + veya - herhangi bir ısı geçişi ortamda çıkış değerlerini tespit etmek mümkündür.

Ayrıca yakıt dönüştürücü modelleri temelde gibbs minimizasyonuna dayanan modeller oldukları için bu modellerin herhangi bir yanma odası içinde kullanılmaları mümkündür. Bu yüzden kısmi oksidasyon modeli ayrıca geliştirilmemiştir. Ototermlal modelde giren su miktarını 0 olarak verdiğimizde kısmi oksidasyon model hesaplamalarını elde edebiliriz.

4. BİLGİSAYAR SİMULASYON PROGRAMLARI

Burada verilen temel modelleme bileşenleri kullanılarak çeşitli bilgisayar programları java programlama dili kullanılarak oluşturulmuştur. NASA Yöntemi kullanarak gibbs serbest enerji minimizasyonu yapan temel kodumuz : gibbs.java programıdır. Bu programdan türetilmiş olan buharlı yakıt dönüştürücü programımız steamRef.java da verilmiştir. Bu programı çağırma ve kullanmayı daha iyi açıklayabilmek için bir örnek problem oluşturalım: İlk problemimizde yakıt doğal gazdır. Doğal gaz %82CH₄, %12 C₂H₆ %4 C₃H₈ olarak alınmıştır. Yakıt pili dönüştürücüsüne giren buhar/karbon oranı 2.62 dir bu durumda her bir kmol doğal gaz için 3.3 kmol su yakıt dönüştürücüye girecektir. Sisteme herhangi bir ısı eklemesi olmamaktadır. Bu durumda toplam reaksiyon endotermik olduğunda denge durumunda çıkacak gazların sıcaklığının düşmesini bekleriz.

Tablo 1 : Örnek adyabatik yakıt dönüştürücüsü problemini çözen test programı

```
import java.util.Vector;
public class steamRefTest10v
{
    public static void main(String[] arg) throws
    InappropriateArrayException
    {
        double Tref=973.15; Vector[] v1=new Vector[3];
        v1[0]=new Vector();v1[1]=new Vector();
        v1[2]=new Vector();
        //Yakıt bileşenleri
        v1[0].add("CH4");v1[0].add("C2H6");v1[0].add("C3H8");
```

```
//Yakıt kmol miktarlar
v1[1].add(0.82);v1[1].add(0.12);v1[1].add(0.04);
//Yakıt giriş sıcaklıkları
v1[2].add(Tref);v1[2].add(Tref);v1[2].add(Tref);
//çıkan ek gazlar
Vector v2=new Vector();
v2.add("CO");v2.add("CO2");v2.add("H2");v2.add("H2O");
//Giren buhar miktarı
double oNsteam=3.3;
//Giren buhar sıcaklığı
double oTsteam=973.15;
//Giren ısı miktarı
double oQ=0;
//sistem basıncı (denge durumunda)
double oP=1.013;
steamRef stRf=new steamRef(v1,oNsteam,oTsteam,oQ,oP);
stRf.calcEq();
}}
```

Şeklinde verilir. Program girdisi olarak önce yakıt bileşenindeki gaz isimleri, gazın kmol değerleri, gazın sıcaklık değerleri tanımlanmıştır. Daha sonra su buharının kmol değeri ve sıcaklığı tanımlanmış en son olarakta girişte mevcut olmayan, çıkışta olan gaz isimleri verilmiştir. Programımızı çağırmak için

```
steamRef stRf=new
steamRef(v1,oNsteam,oTsteam,oQ,oP);
```

Programın hesapları yapıp sonuçları vermesi için de **stRf.calcEq();** deyimi çağrılmıştır. Programın hesapladığı çıkış değerlerini giriş değerleri ile birlikte tablo olarak verirsek:

Tablo 2 Adyabatik (Isı transferi olmayan) buharlı yakıt dönüştürücüsü

Sıcaklık (giriş)	973.15K (700 C)	
Sıcaklık (çıkış)	717.41 K (444.26 C)	
Basınç	1.013 bar	
Reaksiyon entalpisi	-3.460836596786976E-4 kJ/kmol doğal gaz (yaklaşık 0)	
	Giriş kmol	çıkış kmol
H2O(g)	3.30E+00	2.6095377312934565
H2(g)	0.00E+00	1.2005116140870273
CH4(g)	8.20E-01	0.8249696544680541
CO2(g)	0.00E+00	0.33543948698569204
CO(g)	0.00E+00	0.019583294735129264
C2H6(g)	1.20E-01	3.78180576141471E-6
C3H8(g)	4.00E-02	6.653406671234332E-11

Şeklinde oluşur. Şimdi aynı problemin bu sefer dışarıdan ısı vererek sıcaklığını sabit tuttuğumuz bir ısı değiştiricisi ile entegre edilmiş buharlı yakıt dönüştürücüsünde deneyelim. Giriş şartları tablo 1 ile aynı olsun, ancak çıkış sıcaklığı giriş sıcaklığı ile aynı olsun (izotermal proses)

Tablo 3 : izotermal ısı değiştirgeci ile entegre izotermal (sabit sıcaklıklı) Buharlı yakıt dönüştürücüsü test programı

```
import java.util.Vector;
public class steamRefTest11v {
public static void main(String[] arg)throws
InappropriateArrayException {
double Tref=973.15;Vector[] v1=new Vector[3];
v1[0]=new Vector();v1[1]=new Vector();v1[2]=new Vector();
//Yakıt bileşenleri
v1[0].add("CH4");v1[0].add("C2H6");v1[0].add("C3H8");
```

```
//Yakıt kmol miktarlar
v1[1].add(0.82);v1[1].add(0.12);v1[1].add(0.04);
//Yakıt giriş sıcaklıkları
v1[2].add(Tref);v1[2].add(Tref);v1[2].add(Tref);
//çıkan ek gazlar
Vector v2=new Vector();
v2.add("CO");v2.add("CO2");v2.add("H2");v2.add("H2O");
//Giren buhar miktarı
double oNsteam=3.3;
//Giren buhar sıcaklığı
double oTsteam=973.15;
//çıkış sıcaklığı
double oTout=973.15;
//çıkış basıncı
double oP=1.013;
steamRef stRf=new
steamRef(oTout,v1,oNsteam,oTsteam,oP,v2);
stRf.calcEq();
}}
```

Bu programın kod olarak ta bir öncekine göre değişikliği çıkış ısı transferi yerine çıkış sıcaklığının verilmiş olmasıdır. Program girdisi olarak bir önceki problemde olduğu gibi önce yakıt bileşenindeki gaz isimleri, gazın kmol değerleri, gazın sıcaklık değerleri tanımlanmıştır. Daha sonra su buharının kmol değeri ve sıcaklığı tanımlanmış, en son olarakta girişte mevcut olmayan, çıkışta olan gaz isimleri verilmiştir. Son olarak ta gazın çıkış sıcaklığı ve basıncı verilmiştir. Programımızı çağırmak için

```
steamRef stRf=new
steamRef(oTout,v1,oNsteam,oTsteam,oP,v2);
```

Programın hesapları yapıp sonuçları vermesi için de **stRf.calcEq();** deyimi çağrılmıştır. Programın hesapladığı çıkış değerlerini giriş değerleri ile birlikte tablo olarak verirsek:

Tablo 4 ısı değiştirgeci ile entegre izotermal (sabit sıcaklıklı) Buharlı yakıt dönüştürücüsü çıktı değerleri

(giriş)	973.15K (700 C)	
Sıcaklık (çıkış)	717.41 K (444.26 C)	
Basınç	1.013 bar	
Reaksiyon entalpisi	225453.50468928288 kJ/kmol Doğal gaz	
	giriş kmol	çıkış kmol
H2(g)	0.00E+00	3.6962849774932884
H2O(g)	3.30E+00	1.6835042259289326
CO(g)	0.00E+00	0.6632933623260041
CO2(g)	0.00E+00	0.47660120587253396
CH4(g)	8.20E-01	0.040105297751566314
C2H6(g)	1.20E-01	6.702447719648723E-8
C3H8(g)	4.00E-02	3.0982512816823485E-13

Bir sonraki yakıt değiştiricimiz ototermal yakıt değiştiricisidir. Bu yakıt değiştiricisi AutoThermalRef.java programı ile tanımlanmıştır. Isı değiştirgeci ve buharlı adyabatik yakıt dönüştürücüsüne bir alternatif olan ototermal yakıt dönüştürücüde kısmi yanma ile birlikte buharlı yakıt dönüşümü kullanıyoruz. Bu durumda sıcaklığı sabit olarak koruyabiliriz. Aynı zamanda toplam ısı transferini de adyabatik olarak (Q=0) gerçekleştirebiliriz. Şimdi bir önce verdiğimiz

problemdede hava ekleyerek ototermal yanma oluřturacađımız bir orneđi inceleyelim. Yakıt dđnđřtđrđcđ giriř řartları Tablo 6 da verilmektedir. Burada da önce ornek problemin dđzđmđ iin girdi parametrelerini alarak programımızı dđđıran ve sonuları veren ornek programı listeleylim, sonra dđzđm setine gđz atalım

Tablo 5 : kısmi yanma artı buharlı yakıt dđnđřtđrđcđsđ (ototermal yakıt dđnđřmđ) programı

```
İmport java.util.Vector;
public class AutoThermalTest10v
{public static void main(String[] arg)throws
InappropriateArrayException {
double Tref=973.15;
Vector[] v1=new Vector[3];
v1[0]=new Vector();v1[1]=new Vector();v1[2]=new Vector();
//giren yakıt ve buhar gaz isimleri
v1[0].add("CH4");v1[0].add("C2H6");v1[0].add("C3H8");
v1[0].add("H2O");
//giren yakıt ve buhar gaz mollerı
v1[1].add(0.82);v1[1].add(0.12);v1[1].add(0.04);v1[1].add(3.3);
//giren yakıt ve buhar sıcaklık profili
v1[2].add(Tref);v1[2].add(Tref);v1[2].add(Tref);v1[2].add(Tref);
double oNsairMax=10.0;
double oTsair=973.15;
double oQ=0;
double oTout=973.15;
double oP=1.013;
AutoThermalRef stRf=new
AutoThermalRef(oTout,v1,oNsairMax,oTsair,oQ,oP);
stRf.calcEq();
}}
```

sonular dđđı tablosu formunda verilmiřtir :

Tablo 6. kısmi yanma(oksıdasyon) artı yakıt dđnđřtđrđcđsđ (ototermal yakıt dđnđřmđ) girdi ve dđđı deđerleri

	giriř kmol	dđđı kmol
H2(g)	0.00E+00	3.05028256
H2O(g)	3.30E+00	2.39425597
N2(g)	1.72119578	1.72119578
CO2(g)	0.00E+00	0.64854087
CO(g)	0.00E+00	0.5237284
CH4(g)	8.20E-01	0.00773073
C2H6(g)	1.20E-01	3.02E-09
C3H8(g)	4.00E-02	3.26E-15
O2(g)	0.45753305	1.55E-192

Son olarak kısmi oksıdasyon reaksiyonunu inceleyelim. Burada da önce ornek problemin dđzđmđ iin girdi parametrelerini alarak programımızı dđđıran ve sonuları veren ornek programı listeleylim, sonra dđzđm setine gđz atalım

Tablo 7 : kısmi yanma(oksıdasyon) yakıt dđnđřtđrđcđsđ test programı

```
import java.util.Vector;
public class AutoThermalTest11v {public static void
main(String[] arg)throws InappropriateArrayException {
double Tref=973.15;
Vector[] v1=new Vector[3];
v1[0]=new Vector();v1[1]=new Vector();v1[2]=new Vector();
//Kısmi oksıdasyon yakıt giriři
v1[0].add("CH4");v1[0].add("C2H6");v1[0].add("C3H8");
v1[1].add(0.82);v1[1].add(0.12);v1[1].add(0.04);
v1[2].add(Tref);v1[2].add(Tref);v1[2].add(Tref);
//Kısmi oksıdasyon eksoz dđđıřı
Vector v2=new Vector()
v2.add("CO");v2.add("CO2");v2.add("H2");v2.add("H2O");
double oNsair=0.45;
double oNsairMax=10.0;
double oTsair=973.15;
double oQ=0;
double oTout=973.15;;
double oP=1.013;
AutoThermalRef stRf=new
AutoThermalRef(v1,oNsair,oTsair,oQ,oP,v2);
stRf.calcEq();
}}
```

Bu sonulara dđđı tablosu formunda bakarsak :

Tablo 8 kısmi yanma(oksıdasyon) yakıt dđnđřtđrđcđsđ girdi ve dđđı deđerleri

	giriř kmol	dđđı kmol
H2(g)	0.00E+00	1.5988802800087623
H2O(g)	3.30E+00	3.054955535948976E-4
N2(g)	1.6159090909090912	1.6159090909090912
CO2(g)	0.00E+00	1.2302897852078042E-4
CO(g)	0.00E+00	0.8994484464893646
CH4(g)	8.20E-01	0.2803428906597541
C2H6(g)	1.20E-01	4.279386497341477E-5
C3H8(g)	4.00E-02	1.5380804487318407E-8
O2(g)	0.45	1.7289669805311335E-173

Su olmadan sadece yanmayla dđđıřan yakıt dđnđřtđrđcđde gđreveli olarak az miktarda Hidrojen oluřmuřtur.

5. SONULAR

Önceki bđlđmđmđzde irdelenen ornek problemlerimizdeki ornek durumlar 1 numaralı referanstan alınmıřtır. Bu referansta Aynı řartlardaki yakıt dđnđřtđrđcđler HSC[3] paketindeki Gibbs serbest enerji minimizasyon programı kullanılarak hesaplanmıřtır. Karřılařtırmak iin bizim modellerin hesap sonularını HSC hesap sonuları ile birlikte listeleylim.

Tablo 9 Adyabatik (Isı transferi olmayan) buharlı yakıt dönüştürücüsü HSC steamRef karşılaştırma

Sıcaklık (giriş)		973.15K (700 C)	
Sıcaklık (çıkış)		717.41 K (444.26 C)	
Basınç		1.013 bar	
	Giriş kmol	çıkış kmol (HSC)	çıkış kmol (steamRef.java)
H2O(g)	3.30E+00	2.61E+00	2.6095377
H2(g)	0.00E+00	1.20E+00	1.2005116
CH4(g)	8.20E-01	8.25E-01	0.8249697
CO2(g)	0.00E+00	3.36E-01	0.3354395
CO(g)	0.00E+00	1.89E-02	0.0195833
C2H6(g)	1.20E-01	3.77E-06	3.78E-06
C3H8(g)	4.00E-02	6.46E-11	6.65E-11
Reaksiyon entalpisi		Yaklaşık 0	-3.46083659E-4 kJ/kmol Doğal gaz

Tablo 10 ısı değıştirgeci ile entegre isoterml (sabit sıcaklıklı) Buharlı yakıt dönüştürücüsü HSC steamRef karşılaştırma

Sıcaklık (giriş)		973.15K (700 C)	
Sıcaklık (çıkış)		717.41 K (444.26 C)	
Basınç		1.013 bar	
Reaksiyon entalpisi		225453.50468928288 kJ/kmol Doğal gaz	
	giriş kmol	çıkış kmol (HSC)	çıkış kmol (steamRef.java)
H2(g)	0.00E+00	3.71E+00	3.696285
H2O(g)	3.30E+00	1.68E+00	1.683504
CO(g)	0.00E+00	6.60E-01	0.663293
CO2(g)	0.00E+00	4.82E-01	0.476601
CH4(g)	8.20E-01	3.83E-02	0.040105
C2H6(g)	1.20E-01	6.36E-08	6.70E-08
C3H8(g)	4.00E-02	2.84E-13	3.10E-13
Reaksiyon entalpisi		2.259E+02 kJ/mol Doğalgaz	225453.5 kJ/kmol Doğal gaz

Tablo 11 kısmi yanma(oksidasyon) artı yakıt dönüştürücüsü (ototerml yakıt dönüşümü) çıktı değeri

Sıcaklık (giriş)		973.15K (700 C)		
Sıcaklık (çıkış)		973.15K (700 C)		
Basınç		1.013 bar		
	giriş kmol (AutotermlRef.java)	çıkış kmol (AutotermlRef.java)	giriş kmol (HSC)	çıkış kmol (HSC)
H2(g)	0.00E+00	3.050282563	0.00E+00	3.07E+00

H2O(g)	3.30E+00	2.394255972	3.30E+00	2.38E+00
N2(g)	1.721195778	1.721195778	1.69E+00	1.69E+00
CO2(g)	0.00E+00	0.648540871	0.00E+00	6.52E-01
CO(g)	0.00E+00	0.523728396	0.00E+00	5.21E-01
CH4(g)	8.20E-01	0.007730728	8.20E-01	7.53E-03
C2H6(g)	1.20E-01	3.02E-09	1.20E-01	2.97E-09
C3H8(g)	4.00E-02	3.26E-15	4.00E-02	3.16E-15
O2(g)	0.457533055	1.55E-192	4.50E-01	7.22E-21
Reaksiyon entalpisi		72.4384 kJ/kmol doğal gaz		Yaklaşık 0

Tablo 8 deki kısmi oksidasyonlu yakıt dönüştürücü sistemi karşılaştırmamıştır. Bunun temel sebebi karşılaştırma verilerini aldığımız makalede bu yakıt dönüştürücünün HSC ile modellemesinin yer almış olmasıdır. Tablolardan da görüleceği gibi **steamRef** ve **AutoThermalRef** modelleri denge denklemlerinin hesaplanması ve yakıt dönüştürücü çıkışlarını saptama konusunda oldukça başarılıdır. Bu programlar tüm yakıt pili sisteminin simülasyonunu gerçekleştiren bir paketin parçaları olarak hesaplanmıştır. Programlarımız bu konuda çalışmak isteyen tüm araştırmacılara ücretsiz (GNU lisansı) olarak sunulabilir.

5. KAYNAKLAR

1. M. Turhan Çoban, 20 KW çıkışlı, doğal gaz yakıtlı, katı oksitli yakıt pili sistemi dizayn parametrelerinin oluşturulması ve sistem performanslarının hesabı, Doğal Gaz Günleri, 1-2-3 Haziran 2006, TMMOB Makine Mühendisleri Odası, Bildiriler Kitabı ISBN 978-9944-89-315-2
2. M. Turhan Çoban, Süleyman Kavas, Doğalgaz yakıtlı katı oksitli yakıt pili sisteminde üç farklı yakıt dönüştürücüsünün performans üzerine etkilerinin araştırılması, IV. Ege Enerji sempozyumu, 21-23 Mayıs 2008, Ege Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Makina Mühendisliği Bölümü, İzmir ISBN 978-975-483-774-2
3. HSC Chemistry 5.11, Outokumpu Research Oy, Pori Finland, bilgisayar programı
4. M. Turhan Çoban, Katı Oksitli Yakıt Pillerinin Modellenmesi, IV. Ege Enerji sempozyumu, 21-23 Mayıs 2008, Ege Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Makina Mühendisliği Bölümü, İzmir ISBN 978-975-483-774-2
5. Fuel Cells Handbook (Fifth Edition), U.S. Department of Energy, Office of Fossil Energy, National Energy Technology Laboratory
6. M. Blomen and Michael N. Mugerwa, Fuel Cell Systems, Edited by Leo J. Plenum Press, ISBN 0-306-44158-6