

EGE ÜNİVERSİTESİ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

**YAKIT DÖNÜŞTÜRÜCÜDE DÖNÜŞTÜRÜLMÜŞ
DOĞALGAZ YAKITLI KATI OKSİTLİ YAKIT PİLİ
DİZİNİ MODELLEMESİ**

Semih YILMAZ

Tez Danışmanı : Yrd. Doç. Dr. Turhan ÇOBAN

Makine Mühendisliği Anabilim Dalı

Bilim Dalı Kodu : 625.05.00

Sunuş Tarihi : 14.09.2010

Bornova-İZMİR

2010

YÜKSEK LİSANS TEZ SAVUNMA JÜRİ TUTANAĞI

Semih Yılmaz tarafından yüksek lisans tezi olarak sunulan “**Yakıt Dönüştürücüde Dönüştürülmüş Doğalgaz Yakıtlı Katı Oksitli Yakıt Pili Dizini Modellemesi**” başlıklı bu çalışma E.Ü. Lisansüstü Eğitim ve Öğretim Yönetmeliği ile E.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü Eğitim ve Öğretim Yönergesi’nin ilgili hükümleri uyarınca tarafımızdan değerlendirilerek savunmaya değer bulunmuş ve 14.09.2010 tarihinde yapılan tez savunma sınavında aday oybirliği/oyçokluğu ile başarılı bulunmuştur.

Jüri Üveleri:

İmza

Jüri Başkanı : Yrd. Doç. Dr. M. Turhan ÇOBAN

Raportör Üye : Prof. Dr. Necdet ÖZBALTA

Üye : Doç. Dr. Dilek KUMLUTAŞ

ÖZET

YAKIT DÖNÜŞTÜRÜCÜDE DÖNÜŞTÜRÜLMÜŞ DOĞALGAZ YAKITLI KATI OKSİTLİ YAKIT PİLİ DİZİNİ MODELLEMESİ

YILMAZ, Semih

Yüksek Lisans Tezi, Makina Mühendisliği Bölümü

Tez Yöneticisi: Yrd. Doç. Dr. Turhan ÇOBAN

Eylül 2010, 72 sayfa

Bu çalışmada yakıt dönüştürücüde dönüştürülmüş doğalgaz yakıtlı katı oksitli yakıt pili dizini modellenmiştir. Birim hücre baz alınarak analizler yapılmıştır.

Dönüştürülmüş doğalgaz ile çalışan üç boyutlu, düzlemsel, karşıt akışlı bir model dizayn edilmiştir. Modelde, katı oksitli yakıt pili dizinin akım yoğunluğu dağılımı, anot ve katot kütle gazları kütle dengesi, gaz kanalları momentum dengesi, gözenekli elektrotlardaki gaz geçişi, elektronik akım dengesi incelenmiştir.

Ayrıca anot ve katottaki gaz dağılımları, hız dağılımı, polarizasyon eğrisi, güç-voltaj ve güç akım yoğunluğu eğrileri incelenmiştir. Model, sonlu elemanlar yöntemiyle COMSOL 3.5a ticari yazılımı yardımıyla gerçekleştirilmiştir.

Anahtar sözcükler: Yakıt pili, katı oksitli yakıt pili, doğalgaz, HAD analizi, sonlu elemanlar yöntemi, düzlemsel KOYP dizini, elektrokimya.

ABSTRACT

SOLID OXIDE FUEL CELL STACK MODELING WITH PREREFORMED NATURAL GAS

YILMAZ, Semih

MSc in Mechanical Engineering

Supervisor: Yrd. Doç. Dr. Turhan ÇOBAN

September 2010, 72 pages

In this paper , solid oxide fuel cell stack is modeled with prereformed natural gas. Analysis has been made, which is based on unit cell.

A model designed which is working with prereformed natural gas, 3D, planar and co-flow. At the model, range of the current density of solid oxide fuel cell stack, mass balance of anode and cathode gases, momentum equilibrium of gas channels, the gas transition in porous electrodes, electronic current balance are examined.

Further, gas dispersion in anode and cathode, velocity distribution, polarization curve, power-voltage and power-current curves are examined. The model performed by finite element method with support of COMSOL 3.5a commercial software.

Key words: Fuel cell, solid oxide fuel cell, natural gas, CFD analysis, finite element analysis, planar SOFC stack, electrochemistry.

TEŞEKKÜR

Bu tez çalışmam süresince; mezun olmaktan gurur duyduğum Ege Üniversitesine, çalışmama büyük katkıları olan ve her zaman bana destek veren tez danışmanım Sayın Yrd. Doç. M.Turhan ÇOBAN'a, tez değerlendirme jürisine katılan Sayın Prof. Dr. Necdet ÖZBALTA'ya, Sayın Doç. Dr. Dilek KUMLUTAŞ'a, çalışmalarımda moral desteğini ve yardımlarını esirgemeyen arkadaşlarım Ece SÖKMEN, Kimya Müh. Murat ÇAKTU, Mak. Müh. Cem TEKİN, Mak. Müh. Sevdî ÖZTÜRK, Mak. Müh. Volkan SEZGİN, Mak Müh. Metin KAYIBOĞLU, Dr. Müh. Yarbay Cüneyt EZGİ, Yük. Müh. Özer ÖĞÜÇLÜ'ye, çalışmama maddi ve manevi destek olan şirket arkadaşlarıma, benim bu noktaya gelmemi sevgi ve destekleri ile sağlayan ailem ve öğretmenlerime sonsuz teşekkürler...

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET	v
ABSTRACT	vii
TEŞEKKÜR	ix
ŞEKİLLER DİZİNİ	xv
ÇİZELGELER DİZİNİ.....	xviii
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ	xx
1. GİRİŞ	1
2. ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR	5
2.1 Üniversitemizdeki Çalışmalar	5
2.2 Katı Oksitli Yakıt Pili (KOYP) ile Yapılan Çeşitli Çalışmalar.....	5
3. KATI OKSİTLİ YAKIT PİLİ SİSTEMİ.....	7
3.1 Katı Oksitli Yakıt Pili	7
3.1.1. KOYP'lerinin prensipleri ve tarihi geçmişi	7
4. DOĞALGAZ YAKITLI KATI OKSİTLİ YAKIT PİLİ DİZİNİ MODELLEMESİ.....	12
4.1 Giriş	12
4.2 Modelin Açıklanması	12

İÇİNDEKİLER (devamı)

4.3 Yük Dengeleri.....	14
4.4 Çok Bileşenli Taşınım.....	16
4.5 Gaz Akış Denklemleri.....	19
4.5.1 Açık hücre kanallarında akış.....	19
4.5.2 Hücre gazları ve gaz karışımları viskozite hesapları	20
4.6 Model Parametreleri ve Kabuller.....	22
4.7 Grafiksel Kullanıcı Arabirimini Kullanarak Modelleme.....	26
4.7.1 Çözüm basamakları	26
4.7.2 Geometrik modelleme	27
4.7.3 İki boyutlu (2D) kesiti	27
4.7.4 Ağ ve uzatılmış ağ	28
4.7.5 Seçenekler ve ayarlar	30
4.7.6 Alt etki alanı ayarları – İletken ortam DC (Elektronik)	37
4.7.7 Sınır koşulları ayarları - İletken ortam DC (Elektronik)	38
4.7.8 Alt etki alanı ayarları – İletken ortam DC (İyonik)	38
4.7.9 Sınır koşulları ayarları – İletken ortam DC (İyonik)	39

İÇİNDEKİLER (devamı)

4.7.10 Alt etki alanı ayarları - Zayıfça sıkıştırılabilir Navier-Stokes	39
4.7.11 Sınır koşulları ayarları - Zayıfça sıkıştırılabilir Navier-Stokes	40
4.7.12 Alt etki Alanı Ayarları - Maxwell-Stefan dağılımı ve taşınımı (chms) (Katot).....	41
4.7.13 Sınır koşulları ayarları - Maxwell-Stefan dağılımı ve taşınımı (chms) (Katot).....	43
4.7.14 Alt etki Alanı Ayarları - Maxwell-Stefan dağılımı ve taşınımı (chms2) (Anot).....	43
4.7.15 Sınır koşulları ayarları - Maxwell-Stefan dağılımı ve taşınımı (chms2) (Anot)	45
4.7.16 Çözüm ve grafik analizleri.....	46
4.7.17 Son işlemler ve görselleştirme	46
4.8 Hidrojen gazı ile yapılan KOYP modeli	55
4.9 KOYP Modelinin deneysel çalışmalar ile karşılaştırılması	60
5. SONUÇ VE TARTIŞMALAR	66
KAYNAKLAR DİZİNİ.....	68

İÇİNDEKİLER (devamı)

EKLER	73
EK 1 GazTablosu.java	73
EK 2 Gkarışım.java.....	81
ÖZGEÇMİŞ	113

ŞEKİLLER DİZİNİ

<u>Şekil</u>	<u>Sayfa</u>
1.1 Katı oksitli yakıt pili çalışma prensibi	3
3.1 KOYP Çalışma prensibi	7
3.2 KOYP Çalışma diyagramı	8
4.1 KOYP Birim hücre geometrisi	12
4.2 Yakıt pili dizini yapısı	13
4.3 Yakıt pili dizini bileşenleri	14
4.4 Yakıt pili hücre modeli ön görünüş	23
4.5 Yakıt pili hücre modeli genel görünüş ölçüler	23
4.6 Yakıt pili hücre modeli ön görünüş ölçüler	24
4.7 KOYP hücre modeli 2D görünüşü.....	28
4.8 KOYP hücre modeli 2D ağ görünümü	29
4.9 KOYP hücre modeli 3D ağ görünümü	30
4.10 Maxwell-Stefan katot efektif dağılım katsayıları	42
4.11 Maxwell-Stefan katot akış kanalı dağılım katsayıları	42
4.12 Maxwell-Stefan anot efektif dağılım katsayıları	44
4.13 Maxwell-Stefan anot akış kanalı dağılım katsayıları.....	44

ŞEKİLLER DİZİNİ (devamı)

4.14 Anottaki H_2 (w3) dağılımı	46
4.15 Anottaki CH_4 (w1) dağılımı.....	47
4.16 Anottaki H_2O (w2) dağılımı	47
4.17 Anottaki CO (w2) dağılımı	47
4.18 Anottaki CO_2 (w5) dağılımı.....	48
4.19 Anottaki O_2 (w6) dağılımı	48
4.20 Anottaki N_2 (w7) dağılımı	48
4.21 Anot ve katottaki hız dağılımı	49
4.22 Polarizasyon eğrisi	50
4.23 0,1 V Hücre voltajında akım yoğunluğu	51
4.24 0,6 V Hücre voltajında akım yoğunluğu	51
4.25 0,8 V Hücre voltajında akım yoğunluğu	52
4.26 Çıkış gücü - hücre voltajı	53
4.27 Çıkış gücü – akım yoğunluğu	54
4.28 Katottaki O_2 (w1) dağılımı	55
4.29 Katottaki H_2O (w2) dağılımı	55

ŞEKİLLER DİZİNİ (devamı)

4.30 Katottaki N ₂ (w3) dağılımı	56
4.31 Anottaki H ₂ (w4) dağılımı.....	56
4.32 Anottaki H ₂ O (w5) dağılımı.....	57
4.33 Polarizasyon eğrisi.....	57
4.34 0,5 V Hücre voltajında akım yoğunluğu	58
4.35 Çıkış gücü - hücre voltajı grafiği	58
4.36 Çıkış gücü – akım yoğunluğu grafiği	59
4.37 10 dizinli yakıt pili hücresinin dış görünüşü	61
4.38 Dizin voltajı – Zaman grafiği	61
4.39 10 hücreli dizin voltajı – akım- güç yoğunluğu grafiği	62
4.40 80 hücreli dizin voltajı – akım- güç yoğunluğu grafiği	62
4.41 KOYP Modeli çıkış gücü- hücre voltajı grafiği	63
4.42 KOYP Modeli çıkış gücü- akım yoğunluğu grafiği	63
4.43 KOYP Modeli hücre voltajı - akım eğrisi grafiği	64
4.44 Farklı sıcaklıklardaki hücre voltajı – akım – güç yoğunluğu grafiği.....	64

ÇİZELGELER DİZİNİ

<u>Çizelge</u>	<u>Sayfa</u>
1.1 Değişik tipteki yakıt pillerinin karakteristikleri ve güncel durumu	2
3.1 Hücre bileşenleri, malzemeler ve SWH KOYP üretim yöntemleri.....	9
4.1 Hücre gazları molar difüzyon hacimleri.....	18
4.2 Anot tarafı gazları mol oranları	22
4.3 Katot tarafı gazları mol oranları	22
4.4 Anot, katot ve elektrolitin fiziksel ve elektrokimyasal özellikleri	24
4.5 Sabitler.....	30
4.6 Skaler ifadeler.....	36
4.7 Alt etki alanı ifadeleri.....	36
4.8 Sınır birleşim değişkeni.....	37
4.9 Alt etki alanı birleşim değişkeni.....	37
4.10 Elektronik alt etki alanı ayarları	37
4.11 İyonik alt etki alanı ayarları.....	39
4.12 Navier-Stokes alt etki alanı ayarları	40
4.13 Gözenekli bölge alt etki alanı ayarları.....	40
4.14 Yoğunluk, sıcaklık, basınç ve hız ayarları	42
4.15 Yoğunluk, sıcaklık, basınç ve hız ayarları	44

ÇİZELGELER DİZİNİ (devamı)

4.16 40 x 40 mm boyutundaki düzlemsel hücre malzemeleri ve özellikleri60

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

<u>Simgeler</u>	<u>Açıklamalar</u>
σ_1	Akım besleyicisinin elektronik iletkenliği (S/m)
σ_2	İyonik iletkenlik (S/m)
A	Amper (A)
$\phi_{elektronik}$	Akım besleyicisinin elektronik potansiyeli (V)
ϕ_{iyonik}	İyonik potansiyel (V)
S_a	Spesifik yüzey alanı (1/m)
i_{ict}	Yük transfer yoğunluğu (A/m ²)
$i_{0,a}$	Anot değişen akım yoğunluğu (A/m ²)
$i_{0,c}$	Katot değişim akım yoğunluğu (A/m ²)
x_i	Herhangi i bileşeninin molar kesri
c_t	Türlerin toplam konsantrasyonu (mol/m ³)
$c_{h2,ref}$	H ₂ referans konsantrasyon (mol/m ³)
$c_{ch4,ref}$	CH ₄ referans konsantrasyon (mol/m ³)
F	Faraday sabiti (Coulomb/mol)
R	Gaz sabiti (J/(mol·K))
T	Sıcaklık (K)

<u>Simgeler</u>	<u>Açıklamalar</u>
η	Aşırı gerilim (V)
$\Delta\phi_{eq}$	Denge potansiyel farkı (V)
V_{cell}	Hücre voltajı (V)
V_{pol}	Polarizasyon (V)
$\bar{D}_{ij}$	Maxwell-Stefan dağılımdan elde edilen ölçülen çok bileşenli Fick difüzyonunun “ij” bileşeni
ρ	Akışkanın yoğunluğu (kg/m ³)
p	Akışkanın basıncı (Pa)
R_i	i türleri için tepki kaynak terimi (J/(m ³ .s))
x_j	j türlerinin molar kesri
M_i	i türlerinin molar kütlesi (g/mol)
M_j	j türlerinin molar kütlesi (g/mol)
V_i	Stokiyometrik katsayı
n_i	Tepkimedeki elektronların sayısı
μ	Dinamik viskozite (Pa.s)
ε	Ortamın gözenekliliği
κ	Ortamın geçirgenliği
Q	Kütle kaynak terimi (kg/(m ³ .s))

<u>Simgeler</u>	<u>Açıklamalar</u>
E_o	Açık devre voltajı (V)
$P_{o(c)}$	Katottaki oksijen kısmi basıncı (bar)
$P_{o(a)}$	Anottaki oksijen kısmi basıncı (bar)
ω_i	Bileşenlerin ağırlık oranı
ν	Viskozite (μP)
ξ	İndirgenmiş ters viskozite (μP) ⁻¹
T_r	İndirgenmiş sıcaklık
F_p^o	Kutupluluk etkisi katsayısı
F_Q^o	Kuantum etkisi katsayısı
T_c	Kritik sıcaklık (K)
M	Molar kütle (g/mol)
P_c	Kritik basınç (bar)
T_{rm}	Ortalama indirgenmiş sıcaklık
P_{cm}	Ortalama kritik basınç (bar)
M_m	Ortalama moleküler ağırlık (g/mol)
F_{pm}^o	Ortalama kutupluluk etkisi katsayısı
F_{Qm}^o	Ortalama kuantum etkisi katsayısı
A	Kuantum düzeltme faktörü

Kısaltmalar

CFD (HAD)	Computational fluid dynamics (Hesaplamalı akışkan dinamiği)
Chms-katot	Katot comsol değişkeni
Chms2-anot	Anot comsol değişkeni
DPT	Devlet planlama teşkilatı
EVD	Elektrokimyasal buhar çökeltme
FAYP	Fosforik asitli yakıt pili
GDE	Gaz difüzyon elektrotu
GLS	Aerodinamik dağılım
KOYP	Katı oksitli yakıt pili
MOLB	Mono block layer built (Tek bloklu katman yapısı)
MKYP	Molten karbonatlı yakıt pili
OCV	Açık devre voltajı (V)
PEYP	Polimer elektrolit yakıt pili
SWH	Siemens westinghouse power
SOFC	Solid oxide fuel cell (Katı oksitli yakıt pili)
YSZ	Yttria stabilized zirkonia (İtiryum dengeli zirkonya)

1. GİRİŞ

İnsanlık varoluşundan bu yana enerjiye ve onu üretecek araçlara ihtiyacı olmuştur. Ateşin bulunmasıyla başlayan süreçte enerji kaynağı olarak odun, kömür gibi katı yakıtlar, daha sonraları ise petrol ve doğalgaz kullanılmaya başlanmıştır. Elektriğin keşfi ile enerji kavramı daha farklı bir boyuta taşınmıştır.

Günümüze gelindiğinde ise yeni bir enerji kaynağı olan “hidrojen” ile tanışmış durumdayız. Hidrojen, kullanım verimi yüksek bir yakıttır. Çevre dostudur. Teknolojik gelişim, çevre etkisini de içeren efektif maliyetin diğer yakıtlardan düşük olmasını sağlamıştır.

Hidrojenin kullanılmasını gerektiren başlıca iki neden olup, biri fosil yakıtların yanmaları sonucunda oluşan karbondioksitin küresel ısınmaya ve çevresel yıkıma neden olması, diğeri petrol ve doğalgaz gibi akışkan hidrokarbonların bilinen üretilebilir rezerv ömürlerinin insan ömrü ile kıyaslanabilecek boyuta düşmüş olmasıdır.

Bu noktada yakıt pillerinin ne denli önemli olduğu ortaya çıkmaktadır. Çünkü dünyanın giderek daha fazla kirlendiği bilinmektedir ve bunun sonucunda da çeşitli sorunlarla karşı karşıya kalınmaktadır. Eğer dünya üzerinde fosil yakıt tüketimi bu hızla devam edecek olursa çok yakın bir zamanda dünya aşırı ısınma tehlikesi ile karşı karşıya kalacaktır. Bu yüzden fosil yakıt tüketiminin azaltılması ve daha düşük emisyon değerlerine ulaşılması gerekmektedir. Bu da ancak yakıt pillerinin daha yaygın olarak kullanılmasıyla gerçekleşecektir.

Yakıt pilleri, verimli, ekonomik, sessiz ve çevre ile uyumlu enerji üretiminde kullanılan, gelecek kuşaklarda çok daha yaygın olarak kullanılacağı tahmin edilen önemli enerji üretim araçlarından biridir. Yakıt pilinde, yakıt gazlarındaki kimyasal enerji, düşük enerjili, minimum hareketli parçalar içeren ve hava kirliliğine sebep olmayan elektrokimyasal bir işlemde elektrik enerjisine dönüştürülür.

İlk yakıt pilinin 1839 yılında Sir William Grove tarafından yapıldığı kabul edilir (Wang et al., 2007). Bu yakıt pili oda sıcaklığında çalışan, seyreltik sülfürik asit elektrolitli, bir hidrojen anotlu ve bir oksijen katotlu sistemdir.

Yakıt pilleri, bir enerji çevrim aracıdır. Gaz yakıtlardan elektrokimyasal tepkimelerle elektrik üretirler. Yakıt pilleri günümüzde kullanılan konvansiyonel

güç üretim sistemlerine göre çok fazla avantajlara sahiptirler. Özellikle yüksek verimliliği, boyutları ve çevresel etkileri bakımından avantajlı konumdadırlar. Pratikte ilk başarılı yakıt pili uygulaması 1960’larda uzay araçlarında gerçekleştirilmiştir. 1980 ve 1990’lı yıllarındaki yoğun çalışmalar sabit güç santralleri ve ulaşım araçlarında kullanılma potansiyeline kavuşmuştur (Priddy and Li,1985). Bu süreçte, Polimer Elektrolit Yakıt Pili (PEYP), Fosforik Asitli Yakıt Pili (FAYP), Molten Karbonatlı Yakıt Pili (MKYP), Katı Oksitli Yakıt Pili (KOYP) geliştirilmiştir. Çizelge 1.1’de yakıt pili çeşitleri ayrıntılı olarak gösterilmiştir.

Çizelge 1.1 Değişik tipteki yakıt pillerinin karakteristikleri ve güncel durumu (Wang et al., 2007)

	PEYP	FAYP	MKYP	KOYP
Elektrolit	Nafyon	H ₃ PO ₄	Na ₂ CO ₂ -Li ₂ CO ₃	ZrO ₂ -Y ₂ O ₃
Çalışma Sıcaklığı (° C)	70–80	200	650–700	900-1000
Yakıt	H ₂	H ₂	H ₂ , CO, CH ₄	H ₂ , CO, CH ₄
Beklenen Verim (%)	30–40	35–42	45–60	45–65
Güç (kW)	12.5 ^a	100 ^b	1000 ^c	100 ^d ,15 ^e
Verim (%)	40	40	45	43 ^d , 50 ^e

^a Allied signal.

^b Fuji electric.

^c MCFC Research Association, Japan.

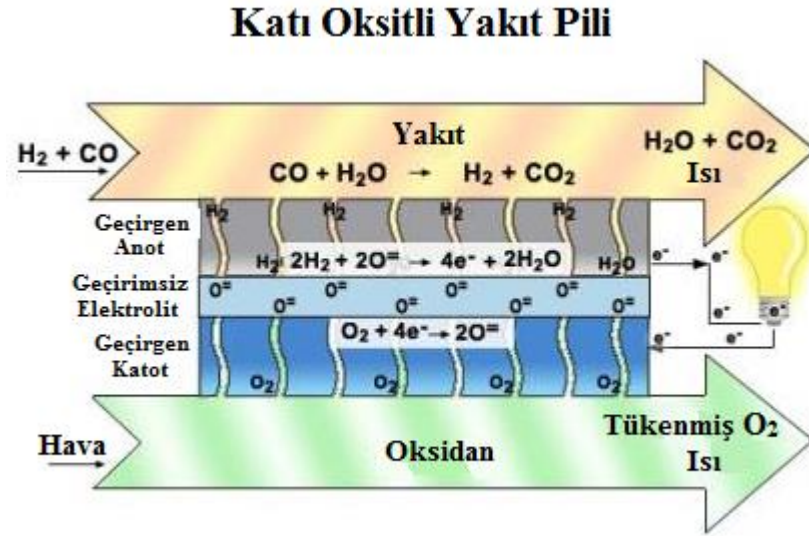
^d Siemens Westinghouse.

^e Mitsubishi Heavy Industry and Electric Power Development, Japan (5 bar’da).

KOYP’leri, %65’e varan yüksek verimlilikleri sayesinde sabit güç sistemleri için önemli bir potansiyel arz etmektedir. Ayrıca KOYP’leri yanmalı türbin sistemleri ile birlikte kullanıldığında verim %70’lere kadar çıkmaktadır (Wang et al., 2007).

Katı oksit yakıt pilleri $\sim 1000^\circ\text{C}$ sıcaklıkta çalışırlar ve sıvı bir elektrolit yerine sert, seramik bir elektrolit kullanırlar. Katı elektrolitin her iki tarafı geçirgen özel elektrot maddeyle kaplanmıştır.

Yüksek çalışma sıcaklığında, negatif yüklü oksijen iyonları kristal madde içerisinde hareket eder. Hidrojen içeren bir yakıt gazı anottan geçirildiğinde negatif yüklü oksijen iyonları yakıtı okside etmek için elektrolitten geçer. Oksijen genellikle katot tarafında havadan elde edilir. Anotta oluşan elektronlar harici bir yol kat ederek elektrik devresini tamamlar ve elektrik enerjisi üretilmiş olur. Katı oksit yakıt pillerinde verim %60 seviyesindedir. KOYP çalışma prensibi Şekil 1.1.'de gösterilmiştir.



Şekil 1.1 Katı Oksitli Yakıt Pili Çalışma Prensibi

Bu çalışmadaki amaç ise doğalgazı yakıt olarak kullanan düzlemsel bir katı oksitli yakıt pilini dizinini ele alıp, sonlu elemanlar yöntemi ile üç boyutlu olarak

analiz etmektir. Bu maksatla, gerekli ön parametreler belirlenip, uygun olanlar çalışmada kullanılacaktır.

Günümüzde en yaygın ağı sahip ve kolay bulunabilen bir gaz olan doğalgaz, direkt yakılmak yerine dönüştürülerek yakıt pilinde kullanıldığında yüksek gaz emisyonlarına ve çevre kirliliğine neden olmadan, temiz ve güvenilir bir şekilde elektrik enerjisine çevrilir.

Önümüzdeki yıllarda yakıt pilinin dünya çapında enerji üretimindeki payının inanılmaz şekilde artacağı ve büyük rağbet göreceği tahmin edilmektedir. Enerji stoklarımızı korumak, çevremizi korumak ve yaşam kalitesini düzeltmek için dünyanın enerji ihtiyaçları için teknolojiye yeterince yararlanmak gereklidir.

Bu tez;

- Verimli ve güvenilir enerji üretimi,
- Az miktarda soğutma suyu kullanımı,
- Katı atık, gürültü ve titreşim olmadan enerji üretimi,
- Zararlı gazların çevreye daha az yayılması,
- Montaj, işletme ve bakım kolaylığı,

konularında katkı sağlayacak, geleceğimiz demek olan çevreye ve ülkemize faydalı olacaktır.

2. ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR

2.1 Üniversitemizdeki Çalışmalar

Ege Üniversitesi Makine Mühendisliği bölümünde 2005 yılından itibaren tez danışmanım Yrd. Doç. Dr. Turhan ÇOBAN tarafından “yakıt pilleri” ile ilgili ders verilmektedir. Buna ek olarak DPT destekli 06-DPT-005 nolu “Doğalgaz Yakıtlı Küçük ve Orta Ölçekli Katı Oksitli (Seramik) Yakıt Pili Kojenerasyon Sistemlerinin Geliştirilmesi” projesi; Mak. Müh. Abdullah TAZEBAY’ın hazırladığı “Doğalgaz Yakıtlı Katı Oksitli Yakıt Pili Sisteminin Bilgisayar Benzeşimi” adlı yüksek lisans tezi çalışması; Mak. Müh. Süleyman KAVAS’ın hazırladığı “Doğalgaz Yakıtlı Katı Oksitli Yakıt Pili Sistemi İçin Sabit Sıcaklık Buharlı Yakıt Dönüştürücü Tasarımı” adlı yüksek lisans tezi çalışması ile Yük. Mak. Müh. Cüneyt EZGİ’nin hazırladığı “Su Üstü Savaş Gemisinde NATO F-76 Dizel Yakıtlı Katı Oksitli Yakıt Pili Sistemi Tasarımı ve Analizi” adlı doktora tezi çalışması gerçekleştirilmiştir.

Yük. Mak. Müh. Özer ÖĞÜÇLÜ tarafından hazırlanan “Doğalgaz ile Çalışan Katı Oksitli Yakıt Pilleri için İzotermal Buharlı Yakıt Dönüştürücü Optimizasyonu ve Dizaynı” adlı doktora çalışmasının ise 2010 yılı sonunda tamamlanması öngörülmektedir.

2.2 Katı Oksitli Yakıt Pili (KOYP) ile Yapılan Çeşitli Çalışmalar

Şimdi bu teze daha yakın çalışmalara değineceğiz. Burada en son teknolojiye sahip KOYP'lerinden bahsederek, önümüze iki farklı tasarım çıkar: Elektrolit veya elektrot destekli tasarım. Daha önceki tasarımlarda kalın elektrolitlerden (120-200 μm) oluşmakta ve düşük sıcaklıklarda yüksek ohmik kayıplara sebep olmaktaydı. Daha sonraki tasarımlar kalın anot ve/veya katot destekli (400-1800 μm) ve ince elektrolit destekli (8-20 μm) tasarımlardır.

Bir sonraki aşama tasarımlar elektrolitteki ohmik kayıpları azaltabildi. Fakat konsantrasyon kayıpları gaz difüzyon direnci yüzünden önem arz ettiği görüldü. Chan et al.,2001, anot destekli hücrenin, katot destekli hücreye göre daha geniş aralıktaki akım yoğunluğu ve yüksek güç yoğunluğu ile çalışabileceğini gösterdi (Bove and Ubertini, 2005).

Recknagle (2003), düz kanallı KOYP dizininde gazların dağılımını, sıcaklık ve akımı üç boyutlu model ile sundu. Bu çalışmada aynı yönlü, karşıt ve çapraz akışlar Star-CD yazılımı ile araştırıldı. Aynı yönlü akış, en iyi sıcaklık dağılımı ve en düşük sıcaklık gradyenlerini verdi (Perry et al., 2008).

Pasaoğulları ve Wang (2003), Fluent tabanlı, üç boyutlu, düzlemsel, elektrolit destekli, hidrojen ile çalışan bir tasarım geliştirdiler. Butler- Volmer denklemini Tafel sadeleştirilmesi ile elektrokimyasal kinetik hesabı yaptılar (Kakaç vd., 2007).

Zhu (2005), aynı yönlü akışlı, düzlemsel, anot destekli model geliştirdiler. Anot akış kanalı boyunca laminar ve tek boyutlu akış, gözenekli anot boyunca gaz taşınımını incelediler (Wen et al.,2002).

Klein (2007), HAD- Ace ticari programı ile 2 boyutlu, boru tipi, elektrolit destekli, içsel dönüşümlü metan yakıtlı KOYP sundular. Bu modelde kısmi basınçları, akım yoğunluğunu ve potansiyelini, elektronik ve iyonik fazlarda, anot tarafında hesapladılar (Hussain et al., 2007).

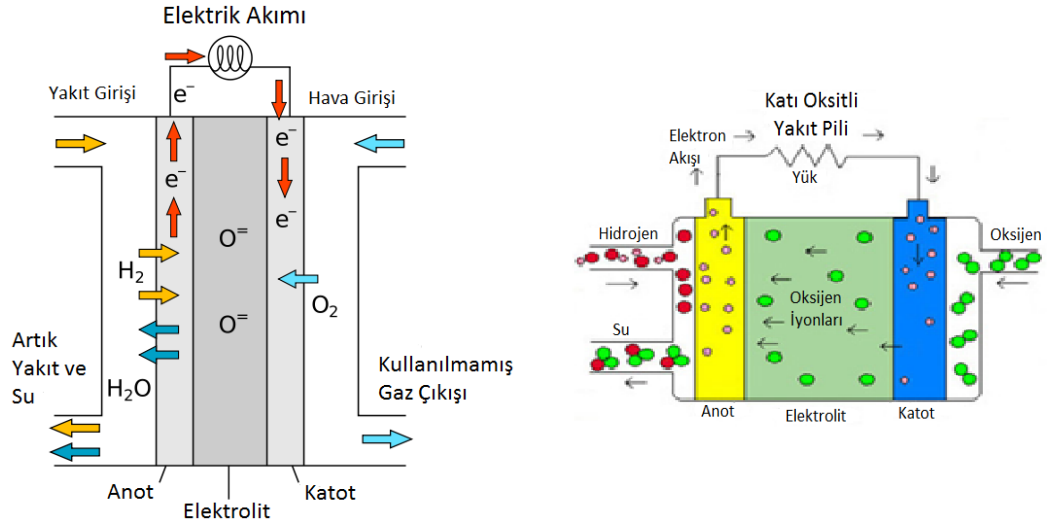
Janardhanan ve Deutschmann (2006, 2007), içsel dönüşümlü katı oksit yakıt pilinin HAD analizini yaparak, taşınım, heterojen kataliz ve elektrokimyasal prosesleri incelendiler (Ho et al., 2007). Ayrıca nemlendirilmiş metan yakıtlı katı oksitli yakıt pilleri üzerinde kütle ve ısı transferi nümerik analizleri üzerine çalıştılar (Holtappels et al., 1999)

3. KATI OKSİTLİ YAKIT PİLİ SİSTEMİ

3.1. Katı Oksitli Yakıt Pili

3.1.1. KOYP'lerinin prensipleri ve tarihi geçmişi:

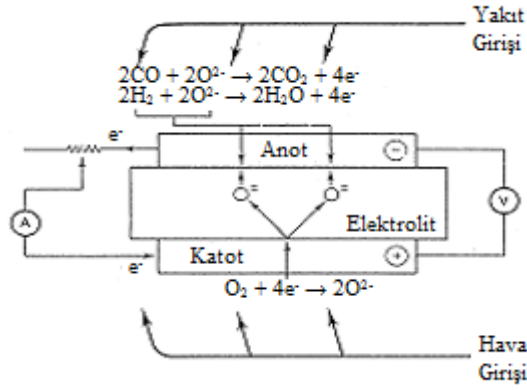
Oksit iyon iletkenine sahip bir KOYP'nin çalışma prensibi Şekil 3.1 ve Şekil 3.2'de gösterilmiştir. Hücreye bir dış kuvvet uygulandığı zaman, oksijen, oksit iyonları oluşturmak için geçirgen hava elektrotunda indirgenir. Bu iyonlar katı elektrolitten geçerek yakıt elektrotuna gelirler ve yakıtla tepkimeye girerler, H₂ veya CO, H₂O veya CO₂ üretirler. Alternatif olarak proton ileten katı elektrolit kullanılabilir.



Şekil 3.1. KOYP Çalışma prensibi

Alternatif olarak, H₂'nin oksitlenerek, akabinde oksijenle tepkimeye giren ve su oluşturan bir proton ileten katı elektrot da kullanılabilir. Bazı durumlarda, CO₂ ve H₂O oluşturmak için CH₄ direkt olarak anot üzerinde oksitlenebilir. Açık devre voltajı, E_o, katottaki P_{o(c)} ve anottaki P_{o(a)} oksijenin kısmi basınçlardan veya elektrokimyasal tepkimenin serbest enerji değişiminden (ΔG) hesaplanabilir.

$$E_o = -\frac{\Delta G}{nF} - \frac{RT}{nF} \left(\frac{\ln P_{o(c)}}{\ln P_{o(a)}} \right) \quad (3.1)$$



Şekil 3.2 KOYP Çalışma diyagramı

Bu denklemde “R” (J/(mol.K)) gaz sabiti, “T (K)” mutlak sıcaklık, “F (C/mol)” Faraday sabiti ve “n” oksijenin elektron karşılığı ($n=4$). 1000°C’de katkısız hidrojen ve hava ile KOYP’nin hücre voltajı yaklaşık olarak 1V’tur. Hücre voltajı, akımın, polarizasyon sebebi ile emilmesiyle birlikte düşer. Hücresinin toplam polarizasyonu, η , üç terimin toplamıdır: anot polarizasyonu, η_a , katot polarizasyonu, η_c , ve rezistans polarizasyonu, η_r . Polarizasyon elektrotun malzemesine, elektrolite, hücre tasarımına ve çalışma sıcaklığına bağlıdır. 1000°C’de çalışan ilk KOYP, Baur ve Preis tarafından 1937’de imal edilmiştir (Wang et al., 2007).

Nernst 1899’da, ağırlıkça %15-Y₂O₃ ile ZrO₂’nin katı bir oksit iyon iletkeni olduğunu keşfetti (Wang et al., 2007). Şu anda en gelişmiş KOYP’inde % 8–10 mol Y₂O₃ (YSZ) ile itriyum dengeli zirkonyum elektrolit olarak kullanılıyor.

YSZ’nin oksit iyon iletkenliği, 1000 °C’de, 0,1 Siemens/cm (S/cm) civarındadır. Elektrolitle birlikte diğer KOYP elemanları için yıllardır çalışmalar sürüyor, ancak yüksek çalışma sıcaklıkları, malzeme seçimini limitli kılıyor. Baur ana Preis’in ilk KOYP’lerinde, anot olarak demir veya karbon kullanıldı (Wang et al., 2007). Westinghouse Electric’ten Weissbart ve Ruka (şimdi Siemens Westinghouse Power, (SWH) 1962’de platin kullandılar (Wang et al., 2007). Şu sıralar nikel, yüksek katalitik aktivitesi ve düşük maliyeti dolayısı ile en çok kullanılan malzemedir.

Nikel-YSZ madeni seramik anot, 500°C gibi düşük sıcaklıklarda çalışabilir. Katot malzemeleri, oksitleyici ortamda kararlı, iyi elektrik iletkenliğine sahip ve çalışma şartları altında, oksijen indirgenmesi için yeterli katalitik aktiviteye sahip olması gerekir. Birçok tip katot malzemesi incelenmiştir. Baur ve Preis, katot olarak Fe_3O_4 kullandılar. Fe_3O_4 'ün elektrik iletkenliği oda sıcaklığında 102 S/cm gibi yüksek değere sahiptir ancak katalitik aktivitesi yeterli değildir. Weissbart ve Ruka katot olarak platin kullandılar (Wang et al., 2007). KOYP'lerinde alaşımlar, ısı genleşmeler ve diğer hücre bileşenleriyle uyuşmamasından dolayı sorunlara sebep olmuştur. Çizelge 3.1, en gelişmiş SWH SOFC için hücre bileşenlerini, malzemeleri ve üretim yöntemlerini özetliyor. Birkaç farklı yapıda KOYP'leri geliştirmiştir.

Çizelge 3.1 Hücre bileşenleri, malzemeler ve SWH KOYP üretim yöntemleri

Bileşen	Malzeme	Kalınlık	Üretim Yöntemi
Hava elektrot tüplü	Dolgulu LaMnO	2,2 mm	Çıkarma
Elektrolit	$\text{ZrO}_2\text{-Y}_2\text{O}_3$	40 mm	EVD
Yakıt elektrot	$\text{Ni- ZrO}_2\text{-Y}_2\text{O}_3$	100 mm	Bulamaç kaplı EVD
Ara bağlantı	Dolgulu LaCrO_3	85 mm	EVD

İlk KOYP modülü, Brown Boveri tarafından 1975'te tanıtılmıştır (Wang et al., 2007). Modül, konik tüp şeklindeki hücreleri iç içe geçirerek yapılmıştır. Komşu hücrelerin anot ve katodunun teması, seriler halinde imal edilerek sağlandı. Havada ve yakıt atmosferinde, elektronik temas ve sızdırmazlık sağlamak için birbirlerine bağlı malzemeler kullanılır (dolgulu CoCr_2O_4 veya LaCrO_3). H_2 ve

hava, reaksiyon gazı olmakla beraber, 120 seri bağı hücreli modülde, $0,22 \text{ W/cm}^2$ 'ye eşdeğer, 110-120 V toplam voltaj ve maksimum 115W'lık bir güç çıkışı elde edildi. Bu modül konsepti, büyük pillerin imalatında karşılaşılan dezavantajdan etkilenmiştir, nispeten daha pahalı bir imalat yöntemidir. Bu yöntemde birçok tek hücre üretilmeli ve seriler şeklinde bağlanmalıdır. Daha sonra, basitleştirme ve hücre imalat maliyetini düşürmek için kimyasal buhar çöktürme veya plazma püskürtme gibi ince film teknikleri kullanılabilir.

Bir gözenekli elektrot tabakası, bir sıkı gaz ZrO_2 elektrolit film tabaka ve bir sıkı ara bağlantı malzemesi ile aynı zamanda iyi bir ikinci gözenekli elektrot, yüksek geçirgen seramik desteğin üzerine uygulandı. 1970'de Westinghouse bu KOYP kavramını kullanan bir 100 kW'lık kömür yakıtlı hücre elektrik santrali teklif etti. Bu zamanlarda, seri olarak bağlanmış hücreler ömür ve performans olarak tatmin edici gözükmeydi, proje durduruldu. Daha sonra, Westinghouse, 1980'de contasız bir tüp şeklinde tasarım teklif etti. Bu tip hücrenin malzeme ve fabrikasyon işlemleri Çizelge 3.1'de gösterilmiştir. Günümüzde, Westinghouse tarafından ilk teklif edildiğinden 30 yıl sonra, 100 kW büyüklüğünde bir KOYP tekrar denenmektedir. Westinghouse tarafından 1969'da teklif edilen seriler halinde parçalı hücre tasarımı, Japonya'da Electric Technical Laboratory tarafından değiştirildi ve 10 kW büyüklüğünde bir ünite Electric Power Development tarafından test edildi.

Birçok modifiye edilmiş düzlemsel tasarım son yirmi yıl içinde önerildi. Monolitik bir KOYP tasarımı Argonne National Laboratory tarafından 1984'te önerilmiştir. Bu tasarım, küçük hücre boyutu ve geniş aktif alanı sayesinde daha yüksek güç yoğunluğuna ulaşma potansiyeline sahiptir. Monolitik KOYP için güç yoğunluğu 8 kW/kg veya 4 kW/l civarında hesaplanır. Monolitik tasarımın olabilirliği, sadece laboratuvar ortamında anlaşılabilir.

Oksijen indirgenmesi için platinin yüksek katalitik aktivitesi sebebi ile elektrot reaksiyonlarından kaynaklanan polarizasyon önemli değildir. Yüksek sıcaklıklarda platinin buharlaşması ihmal edilemez olduğundan ve maliyetin yüksek olması dolayısı ile büyük ölçekli KOYP'lerinde platin katot kullanılması şansı yoktur. Perovskite ailesinden bazı karmaşık oksitler, elektrik iletkenliği göz önünde bulundurulunca gereklilikleri sağlayabilirler. General Electric'den Tedmon, 1969'da perovskite'in (PrCoO_3) katot olarak performansıyla ilgili çalışmalar yaptı. 6 ayın üzerinde, 1000°C 'de sabit bir güç yoğunluğu elde edildi ($0,3 \text{ W/cm}^2$). Bu tip

katot malzemelerinin dezavantajları, ısı genleşme uyumsuzluğu ve elektrolit ile uyumsuzluktu. Şu anda, katot malzemesi olarak genellikle iyileştirilmiş lantanyum manganit kullanılıyor. Ancak, orta sıcaklıklarda çalışan KOYP (500–700°C) geliştirmek için, düşük sıcaklıklarda, yüksek performansla çalışacak yeni katot malzemeleri geliştirilmesine ihtiyaç vardır. 1000°C’de çalışan KOYP’lerindeki ara bağlantı malzemesi için temel gereklilikler sadece birkaç oksit sistemde mevcuttur.

KOYP’lerindeki ara bağlantı malzemesi, oksitleyici ve indirgenmiş atmosferler altında kararlı olmalıdır ve her ortamda yeterli elektronik iletkenliğe sahip olmalıdırlar. İyileştirilmiş lantanyum kromit, yakıt ve oksitleyici atmosfer altında yüksek elektronik iletkenliğine göre daha uygundur. Lantanyum kromit (LaCrO_3) 1970’lerden beri KOYP ara bağlantı malzemesi olarak kullanılmaktadır. Şu sıralar, 5 w/o (ağırlık oranı) Fe ile Cr alaşımları ve 0,4–1,0 w/o Y_2O_3 veya Cr_2O_3 ’ün metalik bağlayıcıları, LaCrO_3 ’e alternatif olarak değerlendirilebilir. Bu alaşımlar, YSZ’nin ısı genleşmesine çok benzer bir ısı genleşme katsayısına sahiptirler ancak ara bağlantı malzemeleri, oksitleyici atmosferde ve yüksek sıcaklıklarda daha az ısı dayanıklılığına sahip ve düzensizdirler.

Daha gelişmiş bir monolitik konfigürasyon tasarımı Chubu Electric Power Co ve Mitsubishi Heavy Industry tarafından geliştirilmiştir ve adı Mono Block Layer Built (MOLB) konulmuştur. 5 kW ölçeğinde bir MOLB tipi KOYP’i imal edilmiş ve başarılı neticelere ulaşılmıştır. Şimdiye kadar, düşük sıcaklık KOYP’leri için kabul edilebilir bir malzeme bulunamadığı için büyük ölçekli KOYP üniteleri 1000°C civarında çalışmıştır. 500–800°C aralığında, daha düşük bir çalışma sıcaklığı birçok avantaj sağlayabilir. Maliyeti yüksek olan lantanyum kromit bağlantılar, konvansiyonel metalik ara bağlantılarla değiştirilebilir ve düzlemsel KOYP’lerindeki gaz sızdırmazlık malzemelerinin seçimi daha kolay olabilir. 500°C veya altında çalışan KOYP’leri, günümüzde elektrikli araç uygulamalarında göz önünde bulundurulmaktadır (Wang et al., 2007).

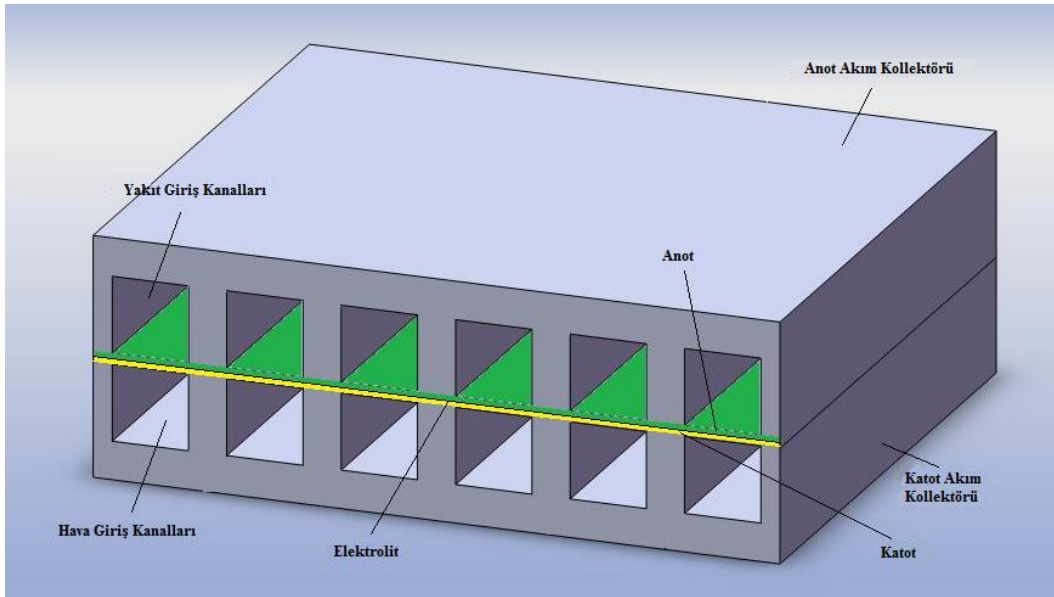
4. DOĞALGAZ YAKITLI KATI OKSİTLİ YAKIT PİLİ DİZİNİ MODELLEMESİ

4.1. Giriş

Bu model bir katı oksitli yakıt pilindeki akım yoğunluğu dağılımıyla çalışır. Model, anot ve katottaki kütle dengesinin, gaz kanallarındaki momentum dengesinin, gözenekli elektrotlardaki gaz akışının, oksit iyon tarafından taşınan iyonik akım dengesinin birleşimini içerir.

4.2 Modelin Açıklanması

Bir KOYP ortasında bir elektrolit bulunan iki gözenekli gaz difüzyon elektrotundan (GDE) meydana gelir ([Şekil 4.1](#)).



Şekil 4.1 KOYP birim hücre geometrisi.

Burada yakıt giriři anottan yapılır. Anot ve katot birbirine göre ters akıřlıdır. Anot tarafında yakıt dönüřtürücüde dönüřtürülmüř doęalgaz, katot tarafından ise hava geçmektedir.

Pil içindeki kimyasal reaksiyonlar ařaęıda verilmiřtir:

Anot:

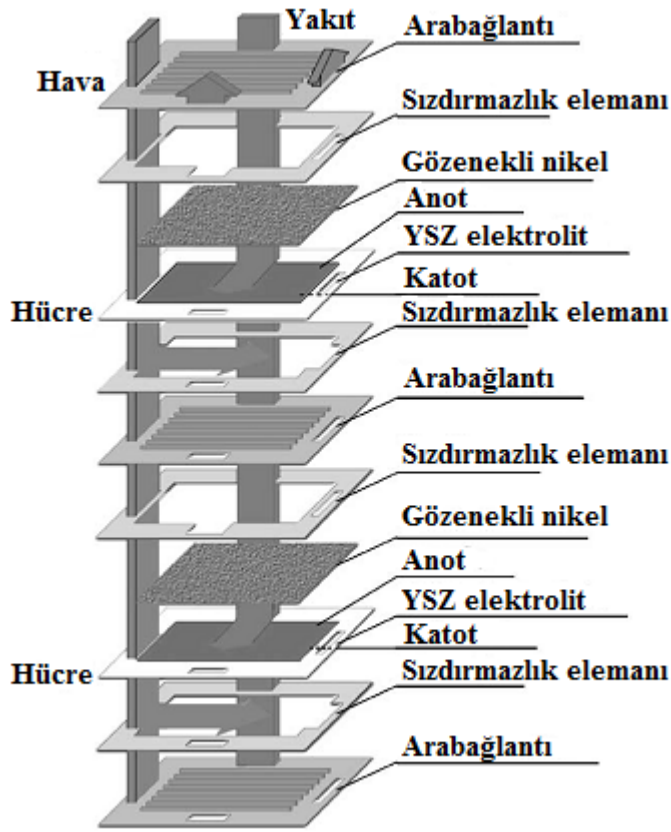


Katot:

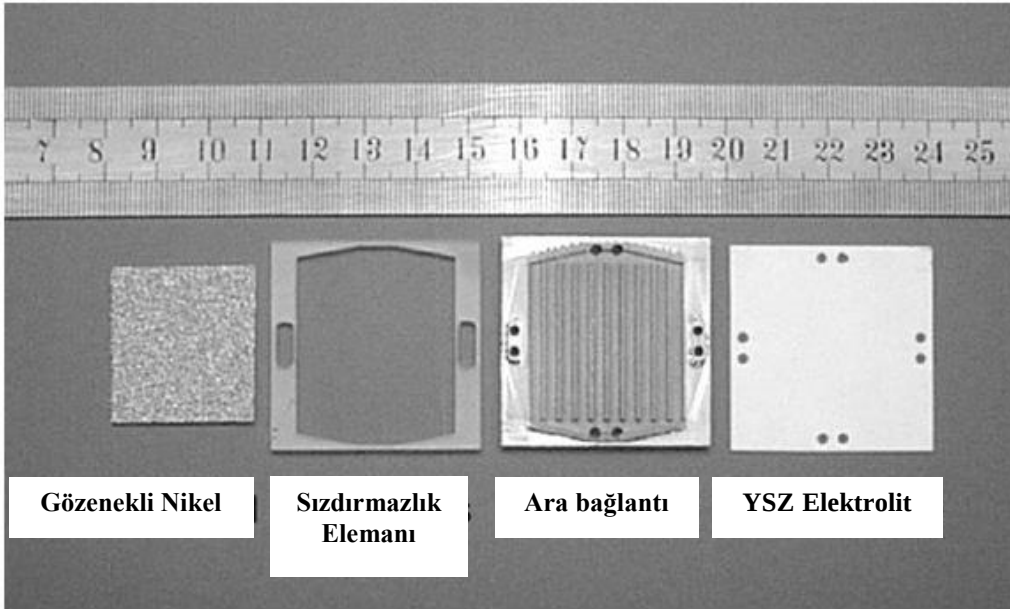


CO elektrokimyasal reaksiyonu burada ihmal edildi. Çünkü CO, su-gaz shift reaksiyonuna (Dussan Reaksiyonu) katılır. Burada daha çok CO'ya nispeten H₂ ve CO₂ üretilir (Holtappels et al., 1999). Ayrıca sadece H₂ yakıtlı yakıt pili ile %25 CO- %75 H₂ yakıt karıřımlı yakıt pili arasında performans farklılıęı görülmemiřtir (Yakabe et al., 2001; Zhang et al., 2007).

Ařaęıdaki řekil 4.2 ve řekil 4.3'te yakıt pili dizini yapısı ve kullanılan malzemeler görülmektedir:



Şekil 4.2 Yakıt pili dizini yapısı (Wen et al.,2002)



Şekil 4.3 Yakıt pili dizini bileşenleri (Wen et al.,2002)

Model aşağıdaki süreçleri içerir:

- Elektronik yük dengesi (Ohm Kanunu)
- İyonik yük dengesi (Ohm Kanunu)
- Butler-Volmer yük transfer kinetikleri
- Gaz kanallarındaki akış dağılımı (Navier-Stokes)
- Gözenekli GDE'lerindeki akış (Brinkman denklemleri)
- Gaz kanallarındaki ve gözenekli elektrotlardaki gaz faz kütle dengesi (Maxwell-Stefan Diffusion and Convection)

4.3 Yük Dengeleri

Anot ve katot akım besleyicilerindeki elektronik yük dengesi şu şekilde verilir: (Kakaç et al.,2007; Zhang et al.,2007; Bove et al.,2005)

$$\nabla \cdot (-\sigma_1 \nabla \phi_{elektronik}) = 0 \quad (4.3)$$

Burada σ_1 , akım besleyicisinin elektronik iletkenliğini ve $\phi_{elektronik}$, besleyicinin elektronik potansiyelini ifade eder. Benzer şekilde, iyonik iletkende geçerli iyonik yük dengesi;

$$\nabla \cdot (-\sigma_2 \nabla \phi_{iyonik}) = 0 \quad (4.4)$$

şeklindedir. Burada " σ_2 ", iyonik iletkenlik ve " ϕ_{iyonik} ", iyonik potansiyeldir.

Anot ve katot GDE'unda elektronlar, iyonik iletim elektrolit fazı ve elektronik iletim fazı arasında iletilir. Bu, yük dengesi denklemlerinin akım kaynağı terimlerini aşağıdaki gibi içerdiğini gösterir: (Prinkey et al.,2004)

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (-\sigma_1 \nabla \phi_{elektronik}) &= S_a i_{ict} \\ \nabla \cdot (-\sigma_2 \nabla \phi_{iyonik}) &= S_a i_{ict} \end{aligned} \quad (4.5)$$

Burada " $S_a i_{ict}$ ", spesifik yüzey alanı olan " S_a "nın yük transfer yoğunluğu olan " i_{ict} " ile çarpımıyla gösterilir.

Butler-Volmer yük transfer kinetiklerinin, yük transfer akım yoğunluğunu tanımladığını farz edelim. Anotta, hidrojen ve metan suya indirgenir ve aşağıdaki yük transfer kinetikleri denklemi şu şekilde uygulanır:

$$i_{a,ct} = i_{0,a} x_{h_2} \frac{c_t}{c_{h_2,ref}} + i_{0,a} x_{ch_4} \frac{4c_t}{c_{ch_4,ref}} \left(\left[\exp\left(\frac{0,5F}{RT} \eta\right) - \exp\left(\frac{-0,5F}{RT} \eta\right) \right] \right) \quad (4.6)$$

Burada “ $i_{0,a}$ ”, anot değişen akım yoğunluğu, (A/m²), “ x_{h_2} ”, hidrojenin molar kesri, “ x_{ch_4} ”, metanın molar kesri, “ c_t ”, türlerin toplam konsantrasyonu, (mol/m³) ve “ $c_{h_2,ref}, c_{ch_4,ref}$ ”, referans konsantrasyonudur (mol/m³). Ayrıca “ F ”, Faraday sabiti (C/mol), “ R ”, gaz sabiti (J/(mol·K)), “ T ”, sıcaklık (K), ve “ η ” aşırı gerilimdir (V).

Katot için aşağıdaki bağıntı kullanılır:

$$i_{c,ct} = i_{0,c} \left[\exp\left(\frac{0,5F}{RT} \eta\right) - x_{o_2} \frac{c_t}{c_{o_2,ref}} \exp\left(\frac{-0,5F}{RT} \eta\right) \right] \quad (4.7)$$

Burada “ $i_{0,c}$ ”, katot değişim akım yoğunluğu (A/m²) ve “ x_{o_2} ”, oksijen molar kesridir.

Aşırı Gerilim şu şekilde ifade edilir:

$$\eta = \phi_{elektronik} - \phi_{iyonik} - \Delta\phi_{eq} \quad (4.8)$$

Burada

“ $\Delta\phi_{eq}$ ”, denge potansiyel farkıdır (V).

Anodun giriş sınırında potansiyel, sıfır referans potansiyeline sabitlenir. Katodun giriş sınırında, potansiyel hücre voltajına ayarlanır, “ V_{cell} ”. Denklem ise şu şekildedir:

$$V_{cell} = \Delta\phi_{eq,c} - \Delta\phi_{eq,a} - V_{pol} \quad (4.9)$$

Burada “ V_{pol} ”, polarizasyondur. Bu modelde, anot ve katot başlangıç voltajları $\Delta\phi_{eq,a} = 0 \text{ V}$ ve $\Delta\phi_{eq,c} = 0,95 \text{ V}$ olarak kabul edilir. Yakıt pili voltaj aralığını ($0,2 \text{ V} \leq V_{cell} \leq 0,9$), parametrik çözücü için polarizasyon voltaj aralığını $0,05 \text{ V}$ ve $0,85 \text{ V}$ olarak modelin çözümüne başlanır.

İyonik yük denge denklemleri için, bütün dış sınırlara yalıtım sınır koşulu uygulanır.

İç sınırlarda ise, akımda ve potansiyelde süreklilik varsayılan olarak ayarlanır.

4.4 Çok Bileşenli Taşınım

KOYP birçok farklı yakıtlarda çalışabilir. Bu model doğalgaz ve hava üzerinde çalışan bir birimi tanımlar. Anotta yakıt dönüştürücüde dönüştürülmüş doğalgaz yakıt olarak belirlenir. Burada doğalgaz beş bileşenden oluşur: metan, su buharı, hidrojen, karbon monoksit, karbon dioksit. Katotta ise oksijen ve nitrojen gibi iki bileşenden oluşan hava kabul edilir.

Modelimizde bileşen taşınımı Maxwell-Stefan difüzyonu ve taşınım denklemleri ile tanımlanır. i türlerinin ağırlık oranlarının “ ω_i ” olmasına izin verelim. Sabit durumda kütle dengesi şu şekilde kullanılır: (Kakaç et al.,2007)

$$\nabla \cdot \left(\omega_i \rho u - \rho \omega_i \sum_{j=1}^k \bar{D}_{ij} \left(\frac{M}{M_j} \left(\nabla \omega_j + \omega_j \frac{\nabla M}{M} \right) + (x_j - w_j) \frac{\nabla p}{p} \right) \right) = R_i \quad (4.10)$$

Burada “ $\bar{D}_{ij}$ ” Maxwell-Stefan dağılımından elde edilen ölçülen çok bileşenli Fick difüzyonunun “ ij ” bileşenini temsil ederken “ ρ ” akışkanın yoğunluğunu, “ p ” basıncı ve “ R_i ” i türleri için tepki kaynak terimini ve “ x_j ” j türlerinin molar kesrini temsil eder.

Fick difüzyonu, kinetik gaz teorisi temel alınarak şu şekilde basitleştirilebilir (Perry and Green, 2008):

$$D_{ij} = k \frac{T^{1,75}}{p(v_i^{1/3} + v_j^{1/3})} \left[\frac{1}{M_i} + \frac{1}{M_j} \right]^{1/2} \quad (4.11)$$

Burada; $k = 3,16 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2 / \text{s}$ olarak alınır. “ M_i ”, i türlerinin molar kütlelerini, “ M_j ”, j türlerinin molar kütlelerini verir.

Molar difüzyon katsayısı ile Fuller metodu ile belirlenir (Poling et al., 1987):

$$D_{AB} = \frac{0,00143T^{1,75}}{pM_{AB}^{1/2}[(\sum_v)_B^{1/3}]^2} \quad (4.12)$$

Çizelge 4.1 Hücre gazları molar difüzyon hacimleri

Hücre Gazı	Molar Difüzyon Hacmi (m^2/s)
CH ₄	$25,14 \times 10^{-6}$
H ₂ O	$13,1 \times 10^{-6}$
H ₂	$6,12 \times 10^{-6}$
CO	$18,0 \times 10^{-6}$
CO ₂	$26,9 \times 10^{-6}$
O ₂	$16,3 \times 10^{-6}$
N ₂	$18,5 \times 10^{-6}$

Ortalama mol kütleleri şu şekilde ölçülür:

$$M = \sum_{j=1}^k x_j M_j \quad (4.13)$$

Gazın ideal bir gaz olduğunu varsayarsak bunun için yoğunluk şu şekilde verilir:

$$\rho = \frac{pM}{RT} \quad (4.14)$$

Açık kanallarda tepkime kaynağı terimi sifıra ayarlanır. Ama GDE’lerinde kaynak terimi elektrokimyasal tepkime oranıyla verilir. Faraday’ın kanununa göre, yük transfer akım yoğunluğundan ölçülür:

$$R_i = V_i \frac{i_{ct,i} M_i}{n_i F} \quad (4.15)$$

Burada “ V_i ”, stokiyometrik katsayıdır ve “ n_i ” tepkimedeki elektronların sayısıdır. Gözenekli elektrotlarda efektif difüzivite ise Bruggeman bağıntısı ile bulunur (Poling et al., 1987);

$$D_{i,eff} = D_i \varepsilon^{1,5} \quad (4.16)$$

Gaz kanallarının duvarlarındaki ve GDE’undaki sınır koşulları “sıfır kütle akımıdır” (Yalıtım durumu). Girişte, çıkış koşulu “konvektif akım” iken bileşim tayin edilir. Bu varsayım ile konvektif terimi bu sınıra dikey olarak taşınım olduğunu ifade eder.

Bileşimdeki ve akımdaki devamlılık GDE ve kanallar arasında olan ara yüzeylerindeki bütün kütle denklikleri için uygulanır.

4.5 Gaz akış denklemleri

4.5.1 Açık hücre kanallarında akış

Zayıfça sıkıştırılabilir Navier-Stokes denkliği açık kanallardaki akışı kapsar: (Janardhanan and Deutschmann, 2006).

$$\rho(u \cdot \nabla)u = \nabla \cdot \left[-pI + \mu \left((\nabla u + (\nabla u)^T) - \frac{2}{3}(\nabla \cdot u)I \right) \right] \quad (4.17)$$

$$\nabla \cdot (\rho u) = 0$$

Burada “ μ ” dinamik viskozitedir (Pa·s).

Geçirgen GDE’lerinde , Brinkman denkliği akış hızını şu şekilde tanımlar:

$$\left(\frac{\mu}{\kappa} + Q\right)u = \nabla \cdot \left[-pI + \frac{\mu}{\varepsilon} \left(\nabla u + (\nabla u)^T - \frac{2}{3}(\nabla \cdot u)I \right) \right] \quad (4.18)$$
$$\nabla \cdot (\rho u) = Q$$

Burada “ ε ” ve “ κ ” sırasıyla ortamın gözenekliliği ve geçirgenliğidir ve “ Q ” , kütle kaynak terimidir ve bu yük akım yoğunluğuyla aşağıdaki gibi ilişkilidir: (Danilov et al.,2009).

$$Q = \sum_i S_a \frac{i_{ct,i} M_i}{\eta_i F} \quad (4.19)$$

Kimya mühendisliği modülünde, Brinkman denklemleri uygulama modu Navier-Stokes uygulama modu ile birleştirilmiştir. Burada tek bir uygulama modeli kullanılabilir. Herhangi bir alt etki alanında, serbest akış ve gözenekli bölge akışı arasındaki seçim, “Subdomain Settings” diyalog kutusu içindeki “Flow in porous media (Brinkman denklemleri)” kontrol kutusu ile yapılabilir. Gözenekli ve serbest alt etki alanlarındaki bütün sınırlar iç sınırlar gibi davranır.

Girişte ve çıkışta, akışkanı hareket ettirmek için girişte çıkışa oranla hafif bir basınç farkı belirlenir. (2 Pa anotta ve 4 Pa katotta).

4.5.2 Hücre gazları ve gaz karışımları viskozite hesapları

Modelimizde bulunan gazlar karışım halindedir. Karışım gazları viskozitesi ise çok farklı değişkenlere bağlı olarak değişir. Viskozite hesabı için burada saf gazların karışımında kullanılan Lucas metodu seçilmiştir (Poling et al., 1987). Aynı zamanda saf gazlarında viskozitesi de bu yöntemle hesaplanmıştır.

$$\nu\xi = [0,807T_r^{0,618} - 0,357 \exp(-0,449T_r) + 0,340 \exp(-4,058T_r) + 0,018]F_p^o F_Q^o \quad (4.20)$$

Burada;

ν , viskozite, (μP)

ξ , indirgenmiş, ters viskozite, $(\mu P)^{-1}$

T_r , indirgenmiş sıcaklık

F_p^o , kutupluluk etkisi katsayısı

F_Q^o , kuantum etkisi katsayısıdır.

Burada ξ ise;

$$\xi = 0,176 \left(\frac{T_c}{M^3 P_c^4} \right)^{1/6} \quad (4.21)$$

ξ , indirgenmiş, ters viskozite, $(\mu P)^{-1}$

T_c , kritik sıcaklık, (K)

M , mol kütlesi, (g/mol)

P_c , kritik basınç, (bar)

ile ifade edilir.

Gaz karışımlarında denklem bileşenleri ise şöyle hesaplanır:

$$T_{cm} = \sum_i y_i T_{ci} \quad (4.22)$$

$$T_{rm} = \sum_i y_i T_{ri} \quad (4.23)$$

$$P_{cm} = RT_{cm} \frac{\sum_i y_i Z_{ci}}{\sum_i y_i V_{ci}} \quad (4.24)$$

$$M_m = \sum_i M_i \quad (4.25)$$

$$F_{pm}^o = \sum_i y_i F_{pi}^o \quad (4.26)$$

$$F_{Qm}^o = \left(\sum_i y_i F_{Qi}^o \right) A \quad (4.27)$$

Burada karışım gazları için;

T_{cm} , kritik sıcaklık, (K)

T_{rm} , indirgenmiş sıcaklık,

P_{cm} , kritik basınç, (bar)

M_m , mol kütlesi, (g/mol)

F_{Pm}^o , kutupluluk etkisi katsayısı,

F_{Qm}^o , kuantum etkisi katsayısı,

A , kuantum düzeltme faktörüdür.

4.6 Model Parametreleri ve Kabuller

Modeldeki katı yakıt oksit pili hücre modeli düzlemsel, karşıt akışlı ve anot destekli olarak belirlenmiştir. Anot tarafında akışkan olarak yakıt dönüştürücüde dönüştürülmüş doğalgaz, katot tarafında akışkan olarak hava kullanılmıştır. Anot akışkanını hücreye soldan, katot akışkanını ise sağdan girmektedir. Kabul edilen anot ve katot akışkanları mol oranları Çizelge 4.1 ve Çizelge 4.2’de belirtilmiştir (Danilov et al.,2009).

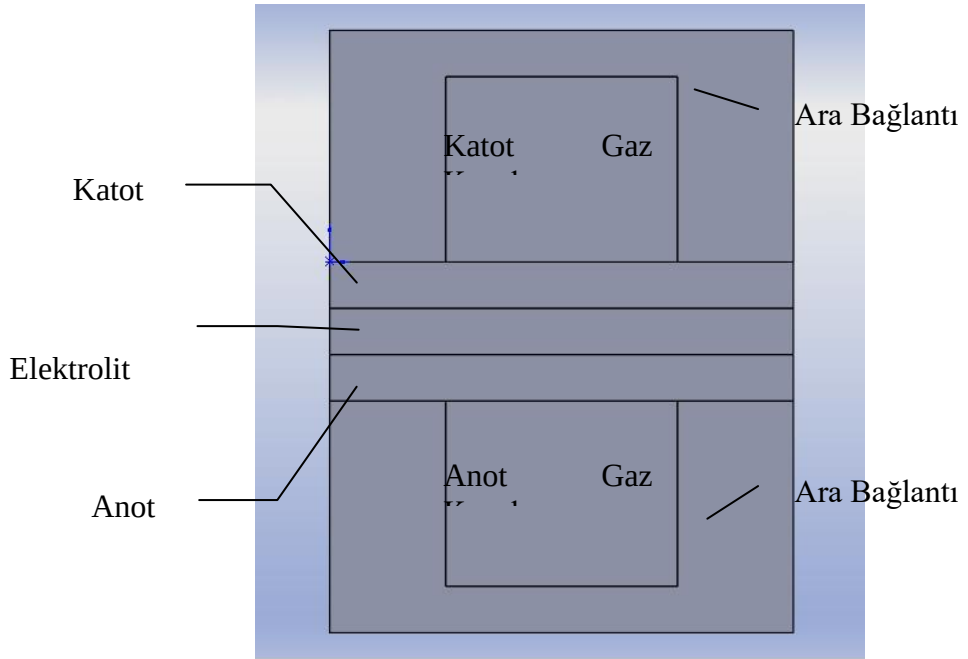
Çizelge 4.2 Anot tarafı gazları mol oranları

Anot tarafı gazları	Mol oranı
CH ₄	0,171
H ₂ O	0,493
H ₂	0,263
CO	0,029
CO ₂	0,044

Çizelge 4.3 Katot tarafı gazları mol oranları

Katot tarafı gazları	Mol oranı
O ₂	0,21
N ₂	0,79

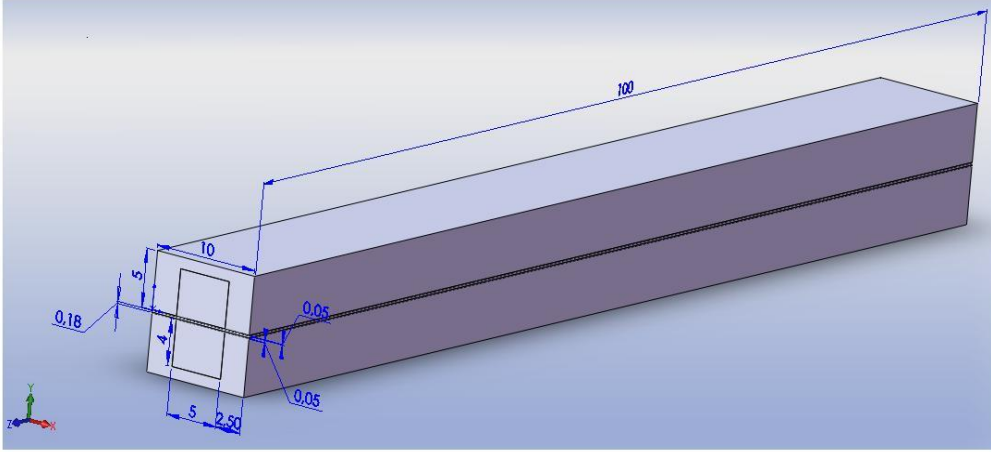
KOYP modelleri genellikle anot destekli, katot destekli ve elektrolit destekli olarak üç farklı biçimde tasarlanmaktadır. Burada 1000 ° C ve altında çalışmaya uygun olması açısından elektrolit destekli tasarım düşünülmüştür (Kakaç et al., 2007). Anot ve katot görece olarak çok daha ince seçilmiştir. Katı oksitli yakıt pili model çizimi ve ölçüleri Şekil 4.4, Şekil 4.5 ve Şekil 4.6'de ayrıntılı bir biçimde belirtilmiştir.



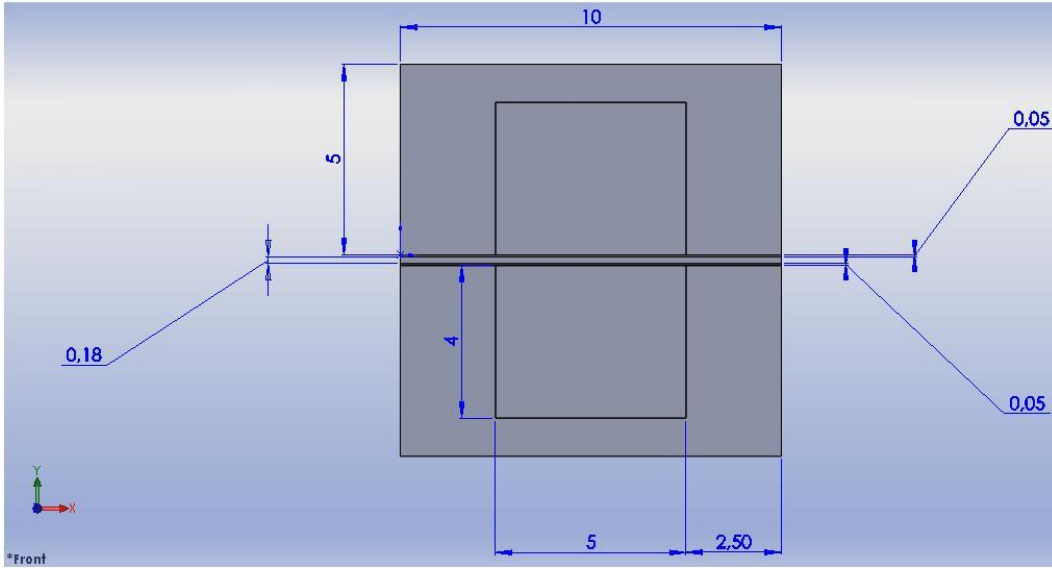
Şekil 4.4 Yakıt pili hücre modeli ön görünüş

Yakıt pili hücresinde ara bağlantıları, anot, katot ve elektrolitin dış kısımları dış etkenlerden izole olduğu kabulü yapılmıştır. Bileşenler arası temas direnci ihmal edilmiştir.

Kanallardaki akış laminar ve sıkıştırılmaz olarak kabul edilmiştir. Işınım yoluyla ısı transferi ve kanallardaki yakıt kaçakları ihmal edilmiştir.



Şekil 4.5 Yakıt pili hücre modeli genel görünüş ölçüler



Şekil 4.6 Yakıt pili hücre modeli ön görünüş ölçüler

Anot, katot ve elektrolitin fiziksel ve elektrokimyasal özellikleri Çizelge 4.3 ve Çizelge 4.4’de ayrıntıları ile gösterilmiştir (Holtappels et al., 1999; Huang et al., 2008; Kakaç et al., 2007).

Çizelge 4.4 Anot, katot ve elektrolitin fiziksel ve elektrokimyasal özellikleri

Hücre Bileşeni	Özellik	Değer
Anot	Malzeme	Ni/YSZ
	Elektriksel iletkenlik [S/m]	$\sigma_{anot} = \frac{9,5 \cdot 10^7}{T} \exp(\frac{-1150}{T})$
	Geçirgenlik [m ² /Pa.s]	1,7.10 ⁻¹⁰
	Isıl İletkenlik [W/m.K]	6,2
	Yoğunluk [kg/m ³]	6200
	C _p [kJ/kg.K]	0,65
	Gözeneklilik, ε	0,4
	Spesifik Yüzey Alanı, Sa_a [1/m]	5e ⁵
	Denge Voltajı, Δφ _{eq,a} [V]	0
	Değişken Akım Başlangıç Değeri, i _{0,a} [A/m ²]	5300
Katot	Malzeme	Sr-dolgulu LaMnO ₃
	Elektriksel iletkenlik [S/m]	$\sigma_{katot} = \frac{4,2 \cdot 10^7}{T} \exp(\frac{-1200}{T})$
	Geçirgenlik [m ² /Pa.s]	1,7.10 ⁻¹⁰
	Isıl iletkenlik [W/m.K]	9,6
	Yoğunluk[kg/m ³]	6000
	C _p [kJ/kg.K]	0,9
	Gözeneklilik, ε	0,4
	Spesifik Yüzey Alanı, Sa_a [1/m]	e ⁵
	Denge Voltajı, Δφ _{eq,c} [V]	0,85
	Değişken Akım Başlangıç	2000

	Değeri, $i_{0,c}$ [A/m ²]	
Elektrolit	Malzeme	Y ₂ O ₃ -dengeli ZrO ₂
	Elektriksel İletkenlik [S/m]	$\sigma_{elektrolit} = 3,34.10^4 \exp(\frac{-10300}{T})$
	Geçirgenlik [m ² /Pa.s]	-
	Isıl İletkenlik [W/m.K]	2,7
	Yoğunluk [kg/m ³]	5560
	C _p [kJ/kg.K]	0,3
Ara Bağlantı	Malzeme	LSC kaplı Haynes 230 alaşımlı çelik
	Elektriksel İletkenlik [S/m]	$\sigma_{ara\ bağlantı} = 9,3.10^6 \exp(\frac{-1100}{T})$
	Isıl İletkenlik [W/m.K]	9,6
	Yoğunluk [kg/m ³]	7700
	C _p [kJ/kg.K]	0,8

4.7 Grafiksel Kullanıcı Arabirimini Kullanarak Modelleme

4.7.1. Çözüm basamakları

1. “COMSOL Multiphysics” başlatılır.
2. “Model Navigator” içinden “Space dimension “ listesinden 3D seçilir.
3. “COMSOL Multiphysics>Electromagnetics>Conductive Media DC” seçilir.
4. “Dependent variables” alanının içine “ phi_electronic” yazılır.
5. “Application mode name” alanı içine “electronic” yazılır.
6. “Multiphysics” butonuna tıklanır sonra “Add” e tıklanır.
7. Uygulama modu seçilir:
“COMSOL Multiphysics> Electromagnetics > Conductive Media DC”
8. “Dependent variables” alanının içine “phi_ionic” yazılır.
9. “Application mode name” alanının içine “ionic” yazılır.
10. “Add” e tıklanır.

11. Uygulama modu seçilir. **“Chemical Engineering Module>Mass Transport>Maxwell-Stefan Diffusion and Convection”**. (chms-katot)
12. **“Dependent variables”** alanına **“w6 w7”** yazılır. (O₂, N₂)
13. **“Add”** e tıklanır.
14. Uygulama modu seçilir. **“Chemical Engineering Module>Mass Transport>Maxwell-Stefan Diffusion and Convection**. (chms2-anot)
15. **Dependent variables”** alanı içine **“w1 w2 w3 w4 w5”** yazılır..
(CH₄, H₂O, H₂, CO, CO₂)
16. **“Add”** e tıklanır.
17. Uygulama modu seçilir. **“Chemical Engineering Module > Flow with Variable Density > Weakly Compressible Momentum Transport > Weakly Compressible Navier-Stokes”**.
18. **“Add”** e tıklanır.
19. **“Add Geometry”** e tıklanır.
20. Select” **2D”** seçilir ve **“OK”** e tıklanır.
21. **“Model Navigator”** ı kapatmak için **“OK”** e tıklanır ve grafiksel kullanıcı arabirimi başlatılır.

4.7.2 Geometrik modelleme

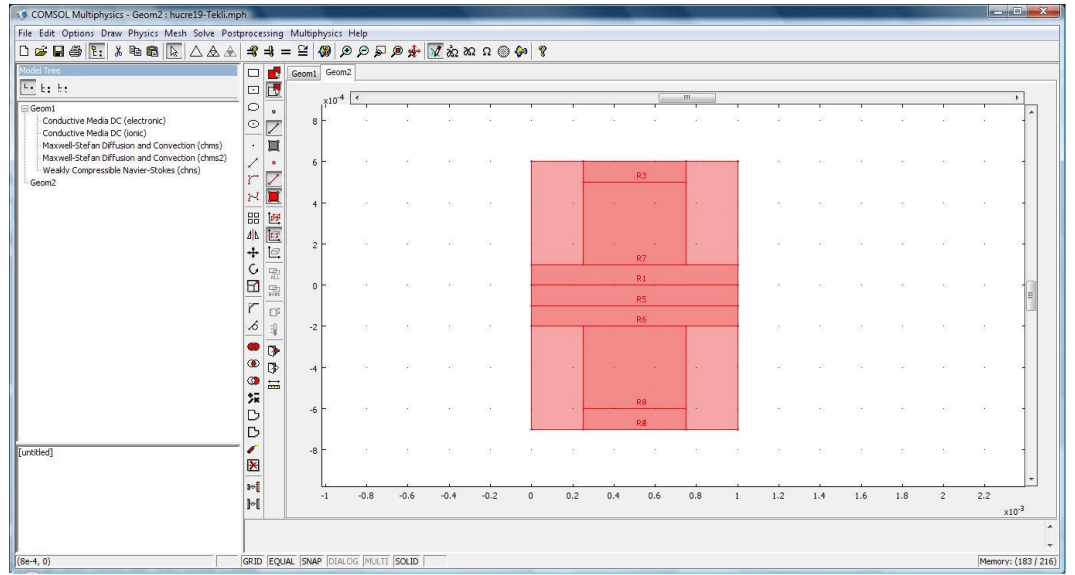
Bu modelde ilk olarak hücrenin 2 boyutlu (2D) kesiti yaratılır. Sonra 2D ağı kurulur ve 3D geometri modeli ve ağı yaratılır. Bu teknik, özellikle, uzatılmış bir nesneye sahip olduğu durumlarda, uzun boyutta birkaç ağ tabakasına ayrılmak istendiğinde son derece kullanışlıdır.

4.7.3 İki boyutlu (2D) kesiti

1. Menüden **“Draw>Specify Objects>Rectangle/Square”** seçilir.
2. **“Width”** alanına **“10e-4”** ve **“Height”** alanına **“5e-6”** yazarak boyutlar belirtilir, **“OK”** e tıklanır.
3. Ana araçlar menüsünden **“Zoom Extents”** butonuna tıklanır.

4. Seili dikdörtgeni (R1) kopyalamak için “Ctrl + C” ye ve yapıştırmak için “Ctrl + V” ye basılır.
5. “**Displacement**” alanında “y” bölümüne “-23e-6” yazılır. İkinci bir dikdörtgen (R2) yaratmak için “**OK**” e tıklanır.
6. “Menüden “**Draw>Specify Objects>Rectangle/Square**” seçilir.
7. **Width:** 10e-4, **Height:** 18e-6, **Base: Corner, x:**0, **y:** -18e-6.” **OK**” e tıklanarak nesne R3 oluşturulur.
8. Diğer dikdörtgen şu şekilde oluşturulur (R4): **Width:** 5e-4, **Height:** 4e-4, **Base: Corner, x:** 2,5e-4, **y:** 5e-6.” **OK**” e tıklanır.
9. “R4” seçilerek kopyalanıp yapışdırılır.
10. “y” alanı şu şekilde belirtilir: -4.28e-4, sonra “**OK**” e tıklanır. (Nesne R5 oluşturulur).
11. Başka bir dikdörtgen şu şekilde belirtilir(R6): **Width:** 10e-4, **Height:** 10,28e-4, **Base: Corner, x:** 0, **y:** -5,23e-6. ” **OK**” e tıklanır.
12. Başka bir dikdörtgen (R7) şu detaylarla yaratılır: **Width:** 5e-4, **Height:** 1e-4, **Base: Corner, x:** 2,5e-4, **y:** 4,05e-4.
13. R7 dikdörtgeni seçilerek, kopyalanıp yapışdırılır.
14. “y” alanı “-9,28e-4” yazılarak belirtilir. ” **OK**” e tıklanır ve R8 dikdörtgeni oluşturulmuş olur.
15. Çizim alanına geometriyi oturtmak için ana araçlar menüsünden “**Zoom Extents**” butonuna tıklayın.

Bu işlemle 3 boyutlu geometrinin 2 boyutlu kesiti tamamlanır. Geometri şimdi aşağıdaki şekle benzemiş olmalıdır:

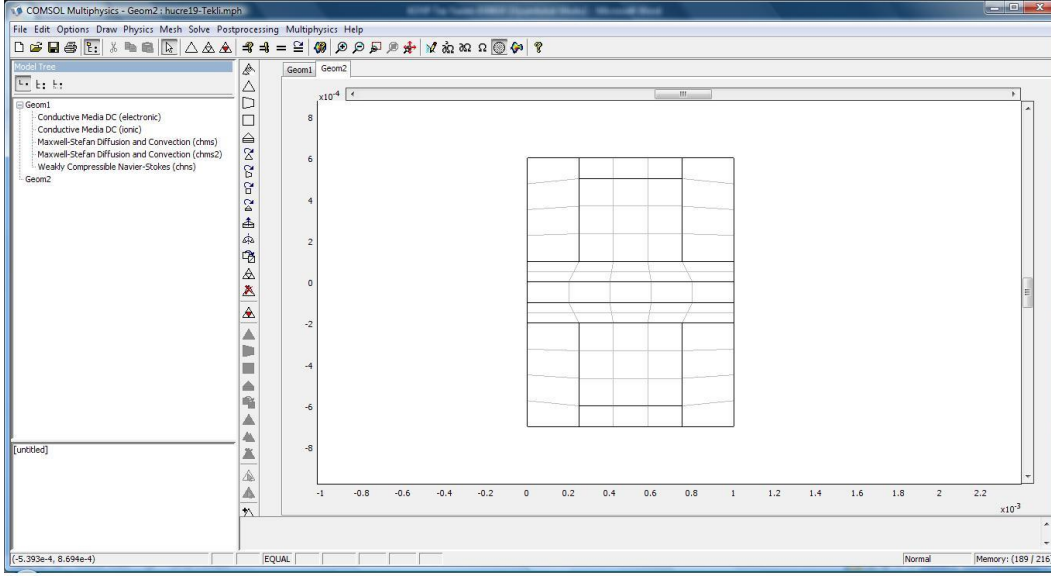


Şekil 4.7 KOYP hücre modeli 2D görünüşü

4.7.4 Ağ ve uzatılmış Ağ

Şimdi kesit için bir yapılandırılmış ağ yaratılır ve sonra bu ağ, uzatılmış ağ üzerinde bir 3D geometri yaratmak için uzatılır.

1. Şu menü öğeleri seçilir: **“Mesh>Mapped Mesh Parameters”**.
2. **“Boundary”** sekmesine tıklanır ve **“Boundary 5”** seçilir (orta katmanın kenarı).
3. **“Constrained edge element distribution”** onay kutusu seçilir ve **“Number of edge elements”** alanına **“1”** yazılır.
4. Sınırlar 14, 15, 17, ve 20 olarak seçilir.
5. **“Constrained edge element distribution”** onay kutusu seçilir ve **“Number of edge elements”** alanına **“3”** yazılır.
6. Benzer şekilde, 1 eleman elde etmek için sınırlar **“12”** ve **“19”** olarak belirlenir.
7. Son olarak, 1 eleman daha elde etmek için sınırlar **4, 10, 25, ve 27** olarak sınırlanır.
8. Ağı meydana getirmek için **“Remesh”** e tıklanır ve sonra **“OK”** e tıklanır. Ağ, şimdi aşağıdaki şekle benzemiş olmalıdır:

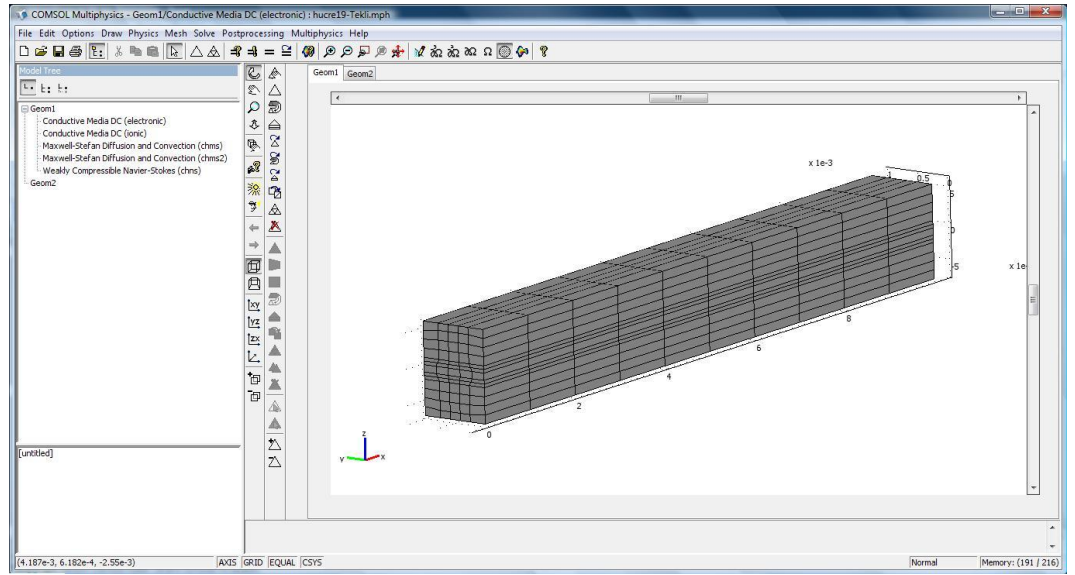


Şekil 4.8 KOYP hücre modeli 2D ağ görünümü

Ağı uzatmadan önce 2 boyutlu çalışma düzlemini şu şekilde tanımlamanız gerekir:

1. Menü öğelerinden şunlar seçilir: **“Draw>Work-Plane Settings”**. **“Quick”** sayfası üzerinde **“y-z”** düzlemi seçilir ve **“x”** alanındaki varsayılan değer **“0”** bırakılır. **” OK”** e tıklanır.
2. Menü öğelerinden şunlar seçilir: **“Mesh>Extrude Mesh”**.
3. **“Distance”** alanına **“10e-3”** yazılır.
4. **“Mesh”**.sayfası üzerinde **“Number of element layers”**, **“10e-3”** olarak belirtilir. **” OK”** e tıklanır

Şimdi aşağıdaki şekil elde edilmiş olunmalıdır:



Şekil 4.9 KOYP hücre modeli 3D ağ görünümü

4.7.5 Seçenekler ve ayarlar

Kullanıcı ara birimine sabitler ve skaler ifadeleri aktarmak için aşağıdaki adımlar uygulanır:

1. “**Options**” menüsünden “**Constants**” iletişim kutusu açılır.
2. Çizelge 4.5’te bulunan sabit değerleri girilir. “**OK**” e tıklanır.
3. “**Scalar Expressions**” iletişim kutusunu açmak için şunlar seçilir: “**Options>Expressions>Scalar Expressions**”.
4. Çizelge 4.6’te bulunan skaler ifadeler girilir. “**OK**” e basılır.
5. “**Options**” menüsünden “**Expressions>Subdomain Expressions**” seçilir
6. Alt etki alanı ifadeleri aşağıdaki Çizelge 4.7’ye uygun olarak tanımlanır. Üç ifadenin her birinin ayrı satırda girilmesine dikkat edilmelidir.

Çizelge 4.5 Sabitler

İsim	İfade	Açıklama
F	96500[C/mol]	Faraday sabiti

p_atm	1[atm]	Atmosfer basıncı
T	1000[K]	Sıcaklık
Rg	8,314 [J/(mol*K)]	Gaz sabiti
mu	3e-5 [Pa*s]	viskozite, hava
dp_a	2 [Pa]	Anot giriş basıncı
dp_c	4 [Pa]	Katot giriş basıncı
io_a	5300 [A/m^2]	Anotik değişken akım
io_c	2000 [A/m^2]	Katodik değişken akım
Sa_a	5e5 [1/m]	Anot spesifik yüzey alanı
Sa_c	1e5 [1/m]	Katot spesifik yüzey alanı
V_pol	0,05 [V]	Başlangıç hücre polarizasyonu
perm_a	1,76e-11 [m^2]	Anot geçirgenliği
perm_c	1.76e-11 [m^2]	Katot geçirgenliği
dphieq_a	0 [V]	Anot denge voltajı
dphieq_c	0,85 [V]	Katot denge

		voltajı
kleff_a	$3,34e4 \cdot \exp(-10300/T[1/K])$ [S/m]	Anot elektrolit efektif iletkenliği
kleff_c	$3,34e4 \cdot \exp(-10300/T[1/K])$ [S/m]	Katot elektrolit efektif iletkenliği
kseff_a	$(9,5e7/T[1/K]) \cdot \exp(-1150/T[1/K])$ [S/m]	Anot katı efektif iletkenliği
kseff_c	$(4,2e7/T[1/K]) \cdot \exp(-1200/T[1/K])$ [S/m]	Katot katı efektif iletkenliği
kl	$3,34e4 \cdot \exp(-10300/T[1/K])$ [S/m]	Elektrolit iletkenliği
ks	$(9,3e6/T[1/K]) \cdot \exp(-1100/T[1/K])$ [S/m]	Akım toplayıcı iletkenliği
vch4	25,14e-6	Atomik Difüzyon Hacmi, CH4
vh2o	13,1e-6	Atomik Difüzyon Hacmi, H2O
vh2	6,12e-6	Atomik Difüzyon Hacmi, H2
vco	18e-6	Atomik Difüzyon Hacmi, CO
vco2	26,9e-6	Atomik Difüzyon Hacmi, CO2

vo2	16,3e-6	Atomik Difüzyon Hacmi, O2
vn2	18,5e-6	Atomik Difüzyon Hacmi, N2
Mch4	16,043 [g/mol]	Molar kütle, CH4
Mh2o	18 [g/mol]	Molar kütle, H2O
Mh2	2 [g/mol]	Molar kütle, H2
Mco	28,01 [g/mol]	Molar kütle, CO
Mco2	44,01 [g/mol]	Molar kütle, CO2
Mo2	32 [g/mol]	Molar kütle, O2
Mn2	28 [g/mol]	Molar kütle, N2
kd	3,16e-8 [m ² /s]	Referans difüzivite
e_por	0,4	Gözeneklilik
mu_ch4	2,72e-5	Viskozite,CH4
mu_h2o	3,31e-5	Viskozite,H2O
mu_h2	1,91e-5	Viskozite, H2
mu_co	4,01e-5	Viskozite,CO
mu_co2	4,14e-5	Viskozite,CO2
mu_o2	2,05e-5	Viskozite,O2

mu_n2	1,79e-5	Viskozite,N2
mu_anot	1,68e-5	Viskozite, Anot
mu_katot	3,98e-5	Viskozite, Katot
Dch4h2o	$kd \cdot (T[1/K])^{1,75} / (p_atm[1/Pa] \cdot (vch4^{(1/3)} + v_{h2o}^{(1/3)})^2) \cdot (1[kg/mol]/Mch4 + 1[kg/mol]/M_{h2o})^{0,5}$	Difüzivite
Dch4h2	$kd \cdot (T[1/K])^{1,75} / (p_atm[1/Pa] \cdot (vch4^{(1/3)} + v_{h2}^{(1/3)})^2) \cdot (1[kg/mol]/Mch4 + 1[kg/mol]/M_{h2})^{0,5}$	Difüzivite
Dch4co	$kd \cdot (T[1/K])^{1,75} / (p_atm[1/Pa] \cdot (vch4^{(1/3)} + v_{co}^{(1/3)})^2) \cdot (1[kg/mol]/Mch4 + 1[kg/mol]/M_{co})^{0,5}$	Difüzivite
Dch4co2	$kd \cdot (T[1/K])^{1,75} / (p_atm[1/Pa] \cdot (vch4^{(1/3)} + v_{co2}^{(1/3)})^2) \cdot (1[kg/mol]/Mch4 + 1[kg/mol]/M_{co2})^{0,5}$	Difüzivite
Dh2oh2	$kd \cdot (T[1/K])^{1,75} / (p_atm[1/Pa] \cdot (v_{h2o}^{(1/3)} + v_{h2}^{(1/3)})^2) \cdot (1[kg/mol]/M_{h2o} + 1[kg/mol]/M_{h2})^{0,5}$	Difüzivite
Dh2oco	$kd \cdot (T[1/K])^{1,75} / (p_atm[1/Pa] \cdot (v_{h2o}^{(1/3)} + v_{co}^{(1/3)})^2) \cdot (1[kg/mol]/M_{h2o} + 1[kg/mol]/M_{co})^{0,5}$	Difüzivite
Dh2oco2	$kd \cdot (T[1/K])^{1,75} / (p_atm[1/Pa] \cdot (v_{h2o}^{(1/3)} + v_{co2}^{(1/3)})^2) \cdot (1[kg/mol]/M_{h2o} + 1[kg/mol]/M_{co2})^{0,5}$	Difüzivite
Dh2co	$kd \cdot (T[1/K])^{1,75} / (p_atm[1/Pa] \cdot (v_{h2}^{(1/3)} + v_{co}^{(1/3)})^2) \cdot (1[kg/mol]/M_{h2} + 1[kg/mol]/M_{co})^{0,5}$	Difüzivite
Dh2co2	$kd \cdot (T[1/K])^{1,75} / (p_atm[1/Pa] \cdot (v_{h2}^{(1/3)} + v_{co2}^{(1/3)})^2)$	Difüzivite

	$*(1[\text{kg/mol}]/M_{\text{H}_2}+1[\text{kg/mol}]/M_{\text{CO}_2})^{0,5}$	
Dcoco2	$k_d*(T[1/\text{K}]^{1,75}/(p_{\text{atm}}[1/\text{Pa}]*(v_{\text{CO}_2}^{(1/3)}+v_{\text{CO}_2}^{(1/3)})^2)*(1[\text{kg/mol}]/M_{\text{CO}}+1[\text{kg/mol}]/M_{\text{CO}_2})^{0,5}$	Difüzivite
Do2n2	$k_d*(T[1/\text{K}]^{1,75}/(p_{\text{atm}}[1/\text{Pa}]*(v_{\text{O}_2}^{(1/3)}+v_{\text{N}_2}^{(1/3)})^2)*(1[\text{kg/mol}]/M_{\text{O}_2}+1[\text{kg/mol}]/M_{\text{N}_2})^{0,5}$	Difüzivite
Dch4h2oeff	$D_{\text{ch4h2}}*e_{\text{por}}^{1,5}$	Difüzivite
Dch4h2eff	$D_{\text{ch4h2}}*e_{\text{por}}^{1,5}$	Difüzivite
Dch4coeff	$D_{\text{ch4co}}*e_{\text{por}}^{1,5}$	Difüzivite
Dch4co2eff	$D_{\text{ch4co2}}*e_{\text{por}}^{1,5}$	Difüzivite
Dh2oh2eff	$D_{\text{h2oh2}}*e_{\text{por}}^{1,5}$	Difüzivite
Dh2ocoeff	$D_{\text{h2oco}}*e_{\text{por}}^{1,5}$	Difüzivite
Dh2oco2eff	$D_{\text{h2oco2}}*e_{\text{por}}^{1,5}$	Difüzivite
Dh2coeff	$D_{\text{h2co}}*e_{\text{por}}^{1,5}$	Difüzivite
Dh2co2eff	$D_{\text{h2co2}}*e_{\text{por}}^{1,5}$	Difüzivite
Dcoco2eff	$D_{\text{coco2}}*e_{\text{por}}^{1,5}$	Difüzivite
Do2n2eff	$D_{\text{o2n2}}*e_{\text{por}}^{1,5}$	Difüzivite
x_ch4	0,171	Giriş Mol Oranı,CH4
x_h2o	0,493	Giriş Mol Oranı,H2O
x_h2	0,263	Giriş Mol Oranı,H2
x_co	0,029	Giriş Mol

		Oranı,CO
x_co2	0,044	Giriş Mol Oranı,CO2
x_o2	0,21	Giriş Mol Oranı,O2
x_n2	0,79	Giriş Mol Oranı,N2
w_ch4ref	$x_{ch4} \cdot M_{ch4} / M_{anot}$	Giriş Ağırlık Oranı,CH4
w_h2oref	$x_{h2o} \cdot M_{h2o} / M_{anot}$	Giriş Ağırlık Oranı,H2O
w_h2ref	$x_{h2} \cdot M_{h2} / M_{anot}$	Giriş Ağırlık Oranı,H2
w_coref	$x_{co} \cdot M_{co} / M_{anot}$	Giriş Ağırlık Oranı,CO
w_co2ref	$x_{co2} \cdot M_{co2} / M_{anot}$	Giriş Ağırlık Oranı,CO2
w_o2ref	$x_{o2} \cdot M_{o2} / M_{katot}$	Giriş Ağırlık Oranı,O2
w_n2ref	$x_{n2} \cdot M_{n2} / M_{katot}$	Giriş Ağırlık Oranı,N2
M_anot	$x_{ch4} \cdot M_{ch4} + x_{h2o} \cdot M_{h2o} + x_{h2} \cdot M_{h2} + x_{co} \cdot M_{co} + x_{co2} \cdot M_{co2}$	Anot Gazları Mol Kütlesi
M_katot	$x_{o2} \cdot M_{o2} + x_{n2} \cdot M_{n2}$	Katot Gazları Mol Kütlesi

c_tot	$p_{atm}/(Rg*T)$	Toplam molar konsantrasyon
c_h2ref	$c_{tot}*(w_{h2ref}/M_{h2})/(w_{h2ref}/M_{h2}+w_{ch4ref}/M_{ch4}+w_{h2oref}/M_{h2o})$	H2 referans konsantrasyonu
c_o2ref	$c_{tot}*(w_{o2ref}/M_{o2})/(w_{o2ref}/M_{o2}+w_{n2ref}/M_{n2})$	O2 referans konsantrasyonu

Çizelge 4.6 Skaler ifadeler

İsim	İfade	Açıklama
ict_c	$io_c*(exp(0,5*F*eta/(Rg*T))-x_{w6_chms}*(c_{tot}/c_{o2ref})*exp(-0,5*F*eta/(Rg*T))) [A/m^2]$	Katot yük transfer akımı
ict_a	$io_a*x_{w3_chms}^2*(c_{tot}/c_{h2ref})*(exp(0,5*F*eta/(Rg*T))-exp(-0,5*F*eta/(Rg*T))) [A/m^2]$	Anot yük transfer akımı
rho_a	$p/(Rg*T)*(x_{w6_chms}*M_{o2}+x_{w7_chms}*M_{n2}) [kg/m^3]$	Anot gaz yoğunluğu
rho_c	$p/(Rg*T)*(x_{w1_chms}^2*M_{ch4}+x_{w2_chms}^2*M_{h2o}+x_{w3_chms}^2*M_{h2}+x_{w4_chms}^2*M_{co}+x_{w5_chms}^2*M_{co2}) [kg/m^3]$	Katot gaz yoğunluğu
V_cell	$d_{phieq_c}-d_{phieq_a}-V_{pol} [V]$	Hücre voltajı
P_out	$j_{ec}*V_{cell} [W]$	Toplam çıkış

		gücü
--	--	------

Çizelge 4.7 Alt etki alanı ifadeleri

İsim	Alt etki alanı 2	Alt etki alanı 4	Alt etki alanı 7	Alt etki alanı 8
eta	phi_electronic- phi_ionic-dphieq_a	phi_electronic- phi_ionic-dphieq_c		
rho	rho_a	rho_c	rho_a	rho_c
ict	ict_a	ict_c		

7. Şunlar seçilir:

“Options>Integration Coupling Variables>Boundary Variables”.

8. Sınır “9” seçilir ve aşağıdaki tabloya göre arabirimin yüzey alanı için bir birleşim değişkeni belirtilir. Sonra ” **OK**” e tıklanır.

Çizelge 4.8 Sınır birleşim değişkeni

İsim	İfade	Birleşim Derecesi	Genel Yer
A	1	4	Evet

9. Şunlar seçilir:

Options>Integration Coupling Variables>Subdomain Variables.

10. Sınır “2” (anot GDE) seçilir. ve aşağıdaki tabloya göre bir birleşim değişkeni belirtilir. Yapıldığında ” **OK**” e tıklanır.

Çizelge 4.9 Alt etki alanı birleşim değişkeni

İsim	İfade	Birleşim Derecesi	Genel Yer
j_ec	ict*Sa_a/A	4	Evet

Elektrokimyasal akım yoğunluğunu veren bu ifade, yük dengesindeki kaynak terimine tekabül eder.

4.7.6 Alt etki alanı ayarları – İletken ortam DC (Elektronik)

1. Şunlar seçilir: “**Multiphysics>Conductive Media DC (electronic)**”.
2. Sonra “**Physics>Subdomain Settings**” seçilir.
3. Alt etki alanları aşağıdaki çizelgeye göre belirlenir:

Çizelge 4.10 Elektronik alt etki alanı ayarları

Ayarlar	Alt etki alanları 3, 7, 8	Alt etki alanları 1, 6, 10 (Anot Ara Bağlantı)	Alt etki alanları 5, 9, 11 (Katot Ara Bağlantı)	Alt etki alanı 2 (Anot GDE)	Alt etki alanı 4 (Katot GDE)
Aktif	Hayır	Evet	Evet	Evet	Evet
σ		ks	ks	kseff_a	kseff_c
Qj		0	0	-Sa_a*ict	-Sa_c*ict

4. Alt etki alanı “4” seçilir. “**Init**” sayfasında “**phi_electronic(t₀)**” kısmına “dphieq_c-dphieq_a-V_pol” yazılır. Böylece elektronik potansiyel için başlangıç değeri verilmiş olur.
5. “**Element**” sayfasında bütün alt etki alanları seçilir ve “**Predefined Elements**” listesinden “Lagrange-Linear” seçilir.
6. “**OK**” e tıklanır.

Burada elektrik iletkenliğinin yüksek ve gradyenlerin küçük olması dolayısıyla, doğrusal öğeler kullanılmıştır. Ayrıca çözüm sırasında daha az hafızaya gereksinim duyulur.

4.7.7 Sınır koşulları ayarları - İletken ortam DC (Elektronik)

1. Şunlar seçilir: **“Physics>Boundary Settings”**
2. Bir sınır seçilip “Ctrl + A” ya basarak bütün sınırlar seçilir ve **“Boundary condition”** listesinden **“Electric insulation”** seçilerek uygulanır.
3. Sınırlar “1,17,31” seçilir (anot girişindeki ara bağlantı). **“Boundary condition”** listesinden **“Ground”** durumu seçilir. Bu sıfır potansiyel anlamına gelir.
4. Sınırlar “50,54,56; seçilir (katot girişindeki ara bağlantı) ve **“Electric potential”** koşulu uygulanır.
5. **“V₀”** alanına **“V_{cell}”** yazılır ve **” OK”** e tıklanır. Bu hücre voltajının bu sınırdaki kullanıldığı anlamına gelir.

4.7.8 Alt etki alanı ayarları – İletken ortam DC (İyonik)

1. **“ Multiphysics>Conductive Media DC (ionic)”** seçilir.
2. Şunları seçin: **“Physics>Subdomain Settings”**.
3. Ayarlar aşağıdaki tabloya göre belirtilir. Yapıldığında **” OK”** e tıklanır.

Çizelge 4.11 İyonik alt etki alanı ayarları

Ayarlar	Alt etki alanları 1, 5-11;	Alt etki alanı 2 (Anot katı)	Alt etki alanı 3 (Elektrolit)	Alt etki alanı 4 (Katot katı)
Aktif	Hayır	Evet	Evet	Evet
σ		kleff_a	kl	kleff_c
Qj		Sa_a*ict	0	Sa_c*ict

4.7.9 Sınır koşulları ayarları – İletken ortam DC (İyonik)

Bütün dış sınırlar için varsayılan sınır koşulu “Toprak”tır. Aşağıdaki adımlar izlenerek bu ayar sıfır iyonik akım olarak değiştirilir.

1. Şunları seçin: **“Physics>Boundary Settings”**.
2. Bir sınır seçip “Ctrl + A” ya basarak tüm sınırlar seçilir.
3. **“Boundary condition”** listesinden **“Electric insulation”** seçilir. ” **OK”** e tıklanır.

4.7.10 Alt etki alanı Ayarları - Zayıfça sıkıştırılabilir Navier-Stokes

1. **“Multiphysics>Weakly Compressible Navier-Stokes (chns)”** seçilir.
2. Şunlar seçilir: **“Physics>Subdomain Settings”**.
3. Alt etki alanı ayarları aşağıdaki tabloya göre girilir:

Çizelge 4.12 Navier-Stokes alt etki alanı ayarları

Ayarlar	Alt etki alanları 1, 3, 5, 6, 9,10,11;	Alt etki alanları 2, 7;	Alt etki alanları 4, 8;
Aktif	Hayır	Evet	Evet
ρ		rho_a	rho_c
η		mu_anot	mu_katot

4. Sınırlar “2, 4, 7,8” seçilir ve **“Stabilization”** sekmesine tıklanır.
5. **“Streamline diffusion (GLS)”** ve **“Crosswind diffusion”** onay kutuları temizlenir.
6. **“Init”** sekmesine gidilir ve **“p(t₀)”** alanına “p_atm” yazılır.
7. **“Physics”** sayfasına geri dönülür ve alt etki alanları “2 ve 4” seçilir.

8. **“Flow in porous media (Brinkman equations)”** onay kutusu seçilir ve **“Porosity”** alanına **“e_por”** yazılır.
9. Aşağıdaki ayarlar belirtilerek **” OK”** e tıklanır.

Çizelge 4.13 Gözenekli bölge alt etki alanı ayarları

Ayarlar	Alt etki alanı 2	Alt etki alanı 4
κ	perm_a	perm_c
Q	$Sa_a \cdot \text{ict} \cdot ((Mh2o + Mco - Mh2 - Mco2) / (2 \cdot F) + (Mch4 - Mh2o) / (8 \cdot F))$	$Sa_c \cdot \text{ict} \cdot Mo2 / (4 \cdot F)$

4.7.11 Sınır koşulları ayarları - Zayıfça sıkıştırılabilir Navier-Stokes

1. **“Physics>Boundary Settings”** seçilir.
2. Sınır **“53”** (katot girişi) seçilir. **“Boundary type”** kısmı **“Stress”** olarak ve **“Boundary condition”** kısmı **“Normal stress, normal flow”** olarak belirtilir. **“f₀”** alanına **“p_atm+dp_c”** yazılır. Bu sayede girişte basınç farkı yaratılmış olur ve kanal içinde akış sağlanır.
3. Sınır **“20”** (anot girişi) seçilir. **“Boundary type”** kısmı **“Stress”** olarak ve **“Boundary condition”** kısmı **“Normal stress, normal flow”** olarak belirtilir. **“f₀”** kısmı **“p_atm+dp_a”** olarak ayarlanır. Aynı şekilde anot tarafında da basınç farkı oluşturulmuş olur.
4. Sınır **“24”** (katot çıkışı); **52** (anot çıkışı) seçilir. **“Boundary type”** kısmı **“Outlet”** olarak ve **“Boundary condition”** kısmı **“Normal stress”** olarak belirtilir. **“f₀”** kısmı **“p_atm”** olarak ayarlanır.
5. **” OK”** e tıklanır.

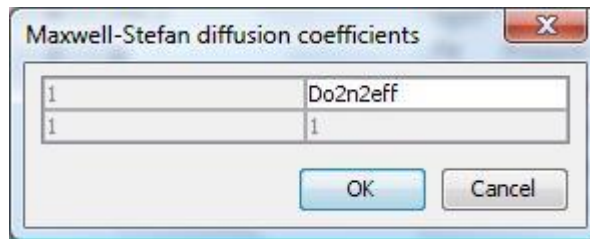
4.7.12 Alt etki alanı ayarları - Maxwell-Stefan dağılımı ve taşınımı (chms) (Katot)

1. “**Multiphysics> Maxwell-Stefan Diffusion and Convection (chms)**” seçilir.
2. “**Physics>Properties**” seçilir ve “**Equation form**” kısmı “**Conservative**” olarak ayarlanır. “**OK**” e tıklanır.
3. “**Physics>Subdomain Settings**” seçilir.
4. Bütün alt etki alanları seçilir ve “**Active in this domain**” onay kutusu temizlenerek “application mode” etkisiz hale getirilir.
5. Daha sonra şu alt etki alanları seçilir: “4 (katot)” ve “8 (katot akış kanalı)”.
Sonra “**Active in this domain**” onay kutusu seçilir.
6. İki etkin alt etki alanı için aşağıdaki ayarlar belirtilir:

Çizelge 4.14 Yoğunluk, sıcaklık, basınç ve hız ayarları (Aktif sınır 4 ve 8)

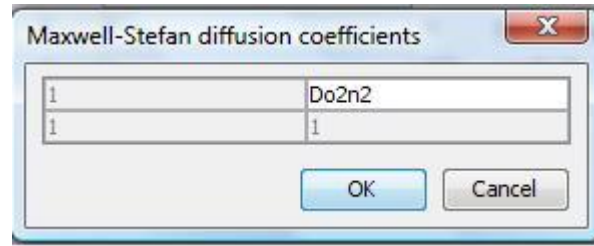
Özellik	Simge	İfade
Yoğunluk	ρ	rho_c
Basınç	p	p
Sıcaklık	T	T
Hız	u, v, w	u, v, w

7. Alt etki alanı “4 (katot)” seçilir ve “**Edit**” butonuna tıklanır. Yayılma hızı matrisi düzenlenir ve sabitlerin (Do2n2eff) matris konumları aşağıdaki gibi olur.



Şekil 4.10 Maxwell-Stefan katot efektif dağılım katsayıları

8. Alt etki alanı “8 (katot akış kanalı)” seçilir ve “**Edit**”e tıklanır. Yayılma hızı matrisi düzenlenir ve katot akış kanalında sabitlerin (Do2n2) matris konumları aşağıdaki gibi olur.



Şekil 4.11 Maxwell-Stefan katot akış kanalı dağılım katsayıları

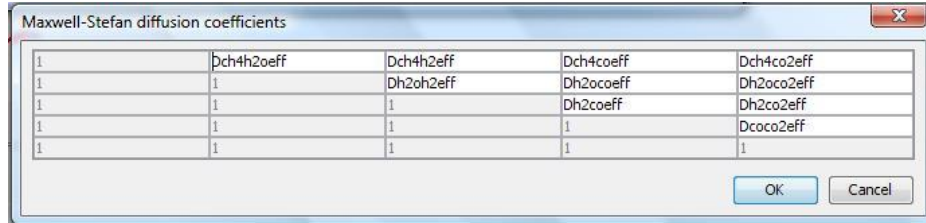
9. Alt etki alanları “4 (katot)” ve “8 (katot akış kanalı)” seçilir.
10. “**w6**” sayfasında, “**Molecular weight**” alanına “Mo2” yazılır.
11. “**w7**” sayfasında, “**Molecular weight**” alanına “Mn2” yazılır.
12. “**Init**” sekmesine tıklanır. “**w6(t0)**” kısmı “w_o2ref” olarak girilir.
13. Alt etki alanı “4 (katot)” seçilir ve “**R**” alanına “ $Sa_c \cdot ict_c \cdot Mo2 / (4 \cdot F)$ ” yazılır ve “**OK**” e tıklanır.

4.7.13 Sınır koşulları ayarları - Maxwell-Stefan dağılımı ve taşınımı (chms) (Katot)

1. “**Physics>Boundary Settings**” seçilir.
2. Katot giriş sınırında (53), “**w6**” için “**Boundary condition**” olarak “**Mass fraction**” seçilir. “**Mass fraction**” değeri “w_o2ref” ile belirtilir.
3. Katot çıkışında (24), “**w6**” için “**Convective flux**” seçilir.
4. “**OK**” e tıklanır.

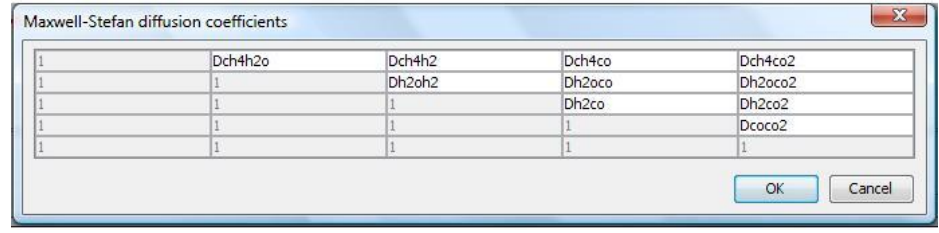
4.7.14 Alt etki alanı ayarları - Maxwell-Stefan dağılımı ve taşınımı (chms2) (Anot)

1. “**Multiphysics>Maxwell-Stefan Diffusion and Convection (chms2)**” seçilir.
2. Şunlar seçilir: **Physics>Properties**. “**Application Mode Properties**” iletişim kutusu içinde “**Equation form**” kısmı “**Conservative**” olarak ayarlanır. “**OK**” e tıklanır.
3. “**Physics>Subdomain Settings**” seçilir.
4. Bütün alt etki alanları seçilir ve “**Active in this domain**” onay kutusu temizlenerek “application mode” etkisiz hale getirilir.
5. Alt etki alanları “2 (anot)” ve “7 (anot akış kanalı)” seçilir. “**Active in this domain**” onay kutusu seçilir.
6. Alt etki alanı “2 (anot)” seçilir. “**General**” sayfasında “Dch4h2oeff, Dch4h2eff, Dch4coeff, Dch4co2eff, Dh2oh2eff, Dh2ocoeff, Dh2oco2eff, Dh2coeff, Dh2co2eff, Dcoco2eff” değerlerini yazmak için “**Edit**” butonuna tıklanır. Sonra “**OK**” e tıklanır.



Şekil 4.12 Maxwell-Stefan anot efektif dağılım katsayıları

7. Alt etki alanları “7 (anot akış kanalı)” seçilir. “Dch4h2o, Dch4h2, Dch4co, Dch4co2, Dh2oh2, Dh2oco, Dh2oco2, Dh2co, Dh2co2, Dcoco2” değerlerini girmek için aynı adımlar tekrarlanır.



Şekil 4.13 Maxwell-Stefan anot akış kanalı dağılım katsayıları

8. Alt etki alanlarının ikisi de “2 (anot)” ve “7 (anot akış kanalı)” seçilir ve aşağıdaki özellikler belirtilir:

Çizelge 4.15 Yoğunluk, sıcaklık, basınç ve hız ayarları (Aktif sınır 2 ve 7)

Özellik	Simge	İfade
Yoğunluk	ρ	rho_a
Basınç	p	P
Sıcaklık	T	T
Hız	u, v, w	u, v, w

9. “w1” sayfasında mol kütlesi olarak “Mch4”;
 “w2” sayfasında mol kütlesi olarak “Mh2o”;
 “w3” sayfasında mol kütlesi olarak “Mh2”;
 “w4” sayfasında mol kütlesi olarak “Mco”;
 “w5” sayfasında mol kütlesi olarak “Mco2” olarak yazılır.

10. “Init” bölümünde w1(t0) kısmına “w_ch4ref”;
 “Init” bölümünde w2(t0) kısmına “w_h2oref”;
 “Init” bölümünde w3(t0) kısmına “w_h2ref”;
 “Init” bölümünde w4(t0) kısmına “w_coref” olarak yazılır.

11. “w3” sayfasında alt etki alanı “2 (anot)” seçilir ve “R” alanına
 “-Sa_a*ict_a*Mh2/(2*F)” yazılır.

“w1” sayfasında ise “R” alanına, “ $-Sa_a \cdot ict_a \cdot Mch4 / (8 \cdot F)$ ” ;

“w4” sayfasında ise “R” alanına, “ $-Sa_a \cdot ict_a \cdot Mco / (2 \cdot F)$ ” yazılır. “OK” e tıklanır.

4.7.15 Sınır koşulları ayarları - Maxwell-Stefan dağılımı ve taşınımı (chms2) (Anot)

1. “Physics>Boundary Settings” seçilir.
2. Anot giriş sınırında sınır koşulu “20” için “Mass fraction” durumu seçilir ve;
“w1₀” alanına “w_ch4ref”
“w2₀” alanına “w_h2oref”
“w3₀” alanına “w_h2ref”
“w4₀” alanına “w_coref” yazılır.
3. Anot çıkış sınırında sınır koşulu “52” için “Convective flux” durumu seçilir.
4. “OK” e tıklanır.

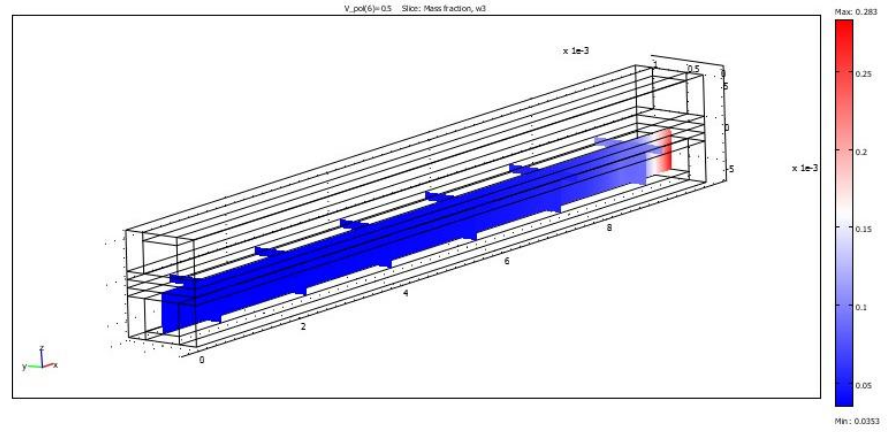
4.7.16 Çözüm ve grafik analizleri

1. “Solve” menüsünden “Solver Parameters” seçilir.
2. “Solver” listesinden “Parametric” seçilir.
3. “Parameters” alanında “Parameter names” kısmı “V_pol”, “Parameter values” kısmı “0.05 range (0.1,0.1,0.8)” olarak belirtilir.
4. “Linear system solver” listesinden “Direct (PARDISO)” seçilir.
5. ”OK” e tıklanır.
6. Modeli çözmek için “Solve” düğmesine basılır.

4.7.17 Son işlemler ve görselleştirme

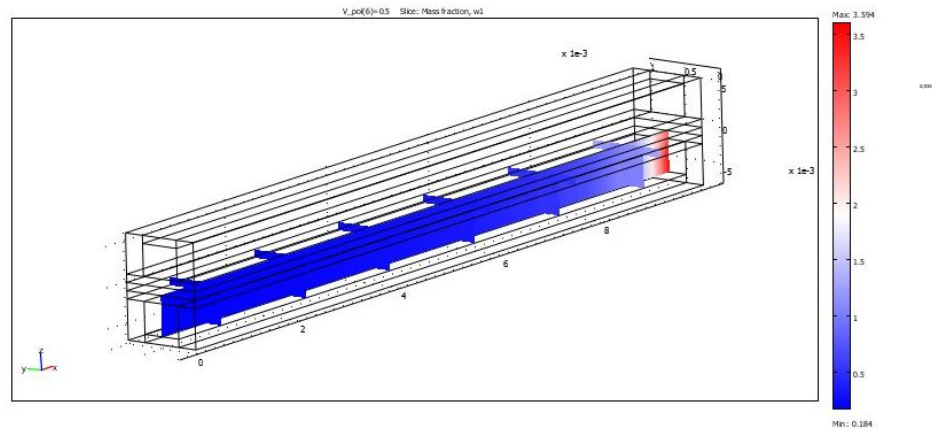
0,5 V hücre voltajında katot içindeki hidrojen (H_2) dağılımını görmek için şu adımlar uygulanmalıdır:

1. Menü öğelerinden **“Postprocessing>Plot parameters”** seçilir.
2. **“General”** sayfasında **“Parameter value”** listesinden **“0.5”** seçilir.
3. **“Slice”** sayfasında **“x levels”** ve **“y levels”** alanlarına sırasıyla **“6”** ve **“1”** yazılır.
4. **“Predefined quantities”** listesinden **“Mass fraction, w3”** seçilir.
5. Şekil 4.12’ deki çizimi meydana getirmek için **“Apply”**e tıklanır.

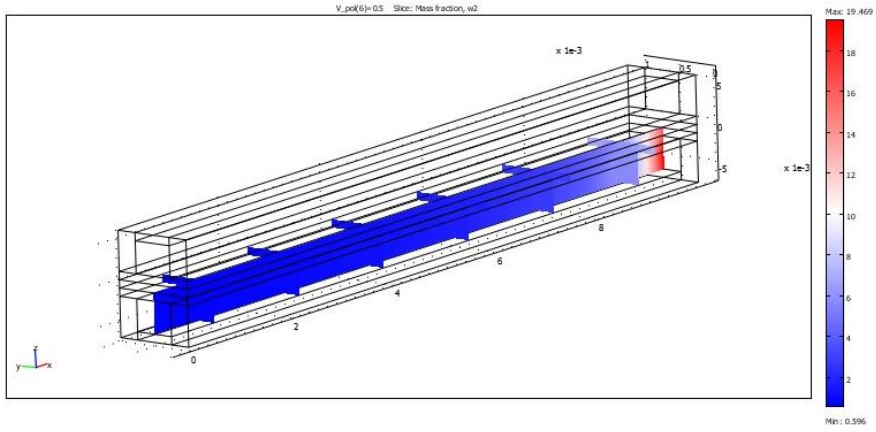


Şekil 4.14 Anottaki H_2 (w3) dağılımı

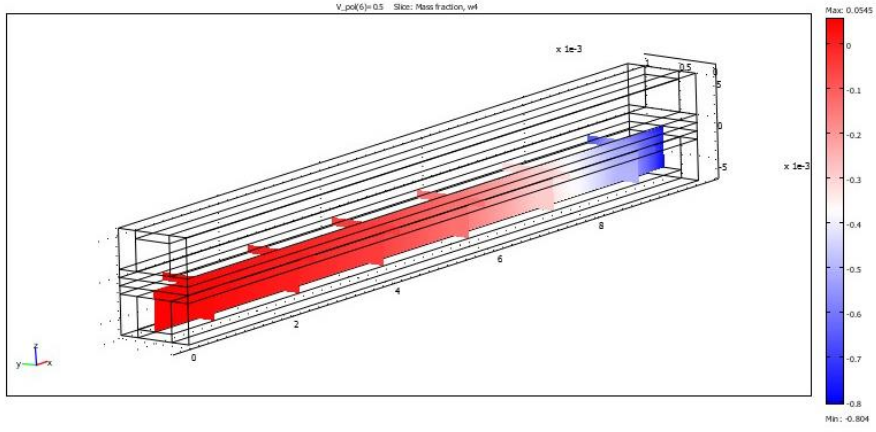
Anottaki CH_4 , H_2O , CO , CO_2 ve katottaki O_2 , N_2 dağılımlarının grafiklerini görmek için işlemler aynı şekilde uygulanır.



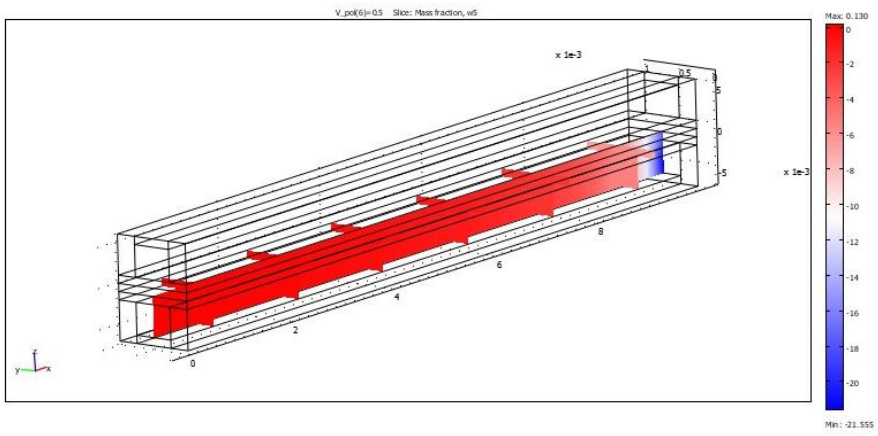
Şekil 4.15 Anottaki CH_4 (w1) dağılımı



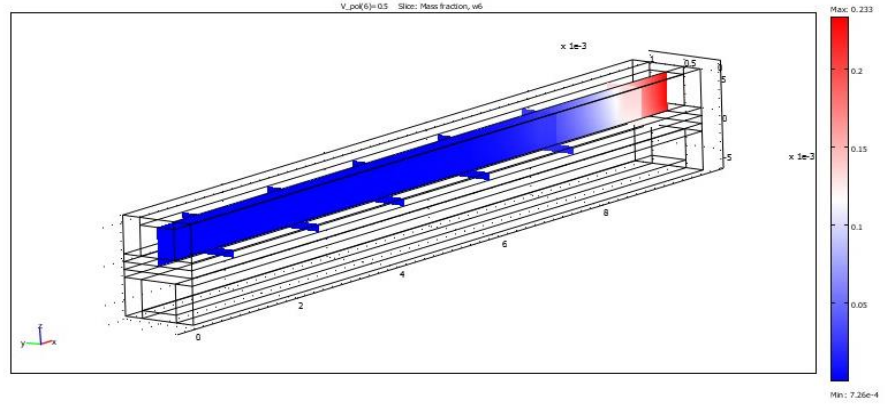
Şekil 4.16 Anottaki H_2O (w2) dağılımı



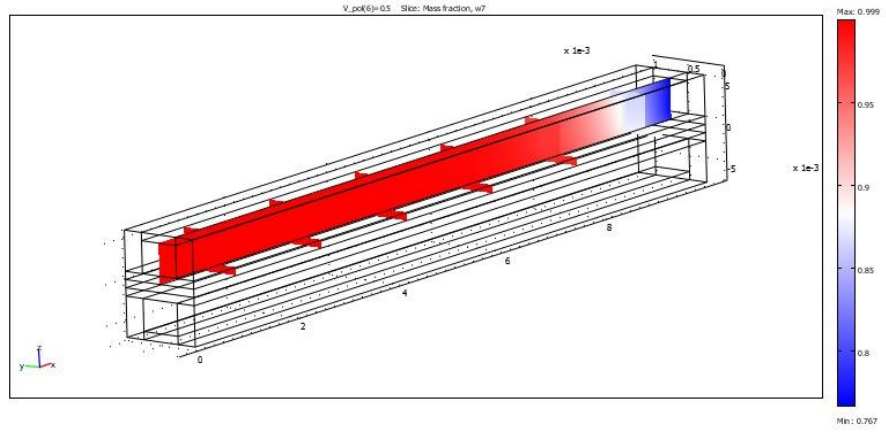
Şekil 4.17 Anottaki CO (w2) dağılımı



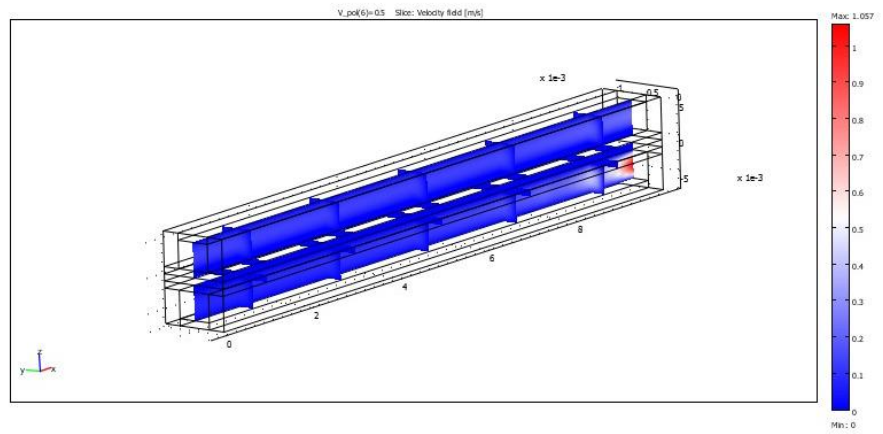
Şekil 4.18 Anottaki CO_2 (w5) dağılımı



Şekil 4.19 Katottaki O_2 (w6) dağılımı



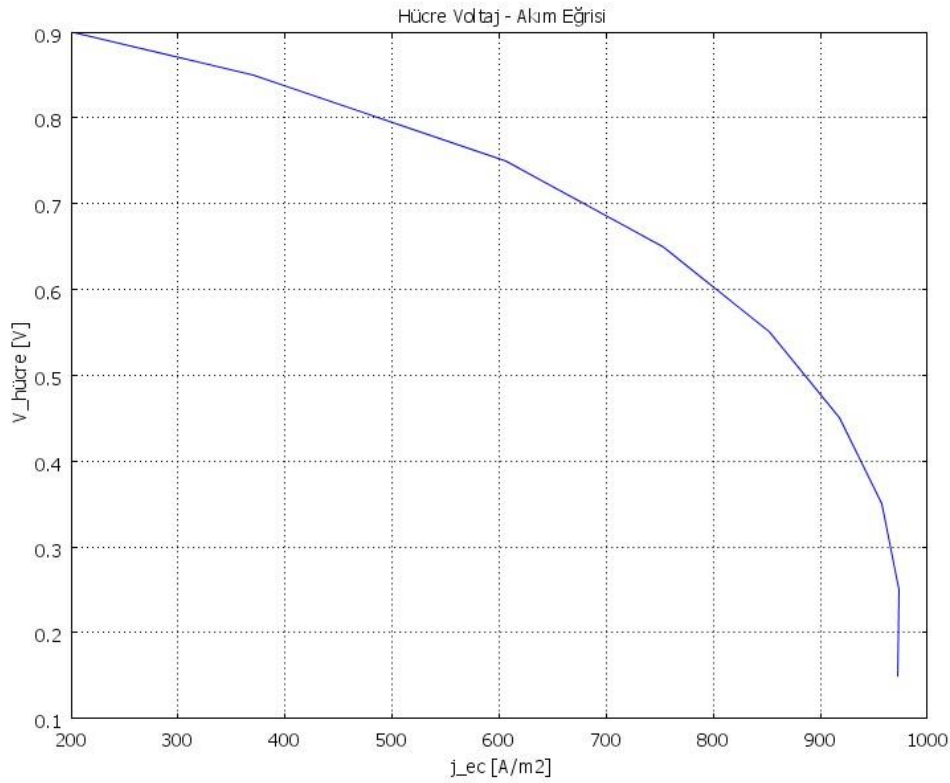
Şekil 4.20 Katottaki N_2 (w7) dağılımı



Şekil 4.21 Anot ve katottaki hız dağılımı

KOYP için bir polarizasyon eğrisi meydana getirmek için aşağıdaki adımlar izlenir:

1. Şunlar seçilir: **“Postprocessing>Domain Plot Parameters”**.
2. **“General”** sayfasında **“Solutions to use”** listesinden bütün çözümler seçilir.
3. **“Point”** sayfasında **“Expression”** alanına **“V_cell”** yazılır.
4. Herhangi bir nokta seçilir. Örneğin, **“Point 1”**.
5. **“x axis data”** alanında ilk olarak aşağıdaki butonuna **“Expression”** tıklanır.
6. **“x-Axis Data”** iletişim kutusunda **“Expression”** alanına **“j_ec”** yazılır.
”OK” e tıklanır.
7. Çizimi meydana getirmek için **”OK”** e tıklanır ve **“Domain Plot Parameters”** iletişim kutusu kapatılır. Çizim şimdi Şekil 4.22’deki gibi görünür.

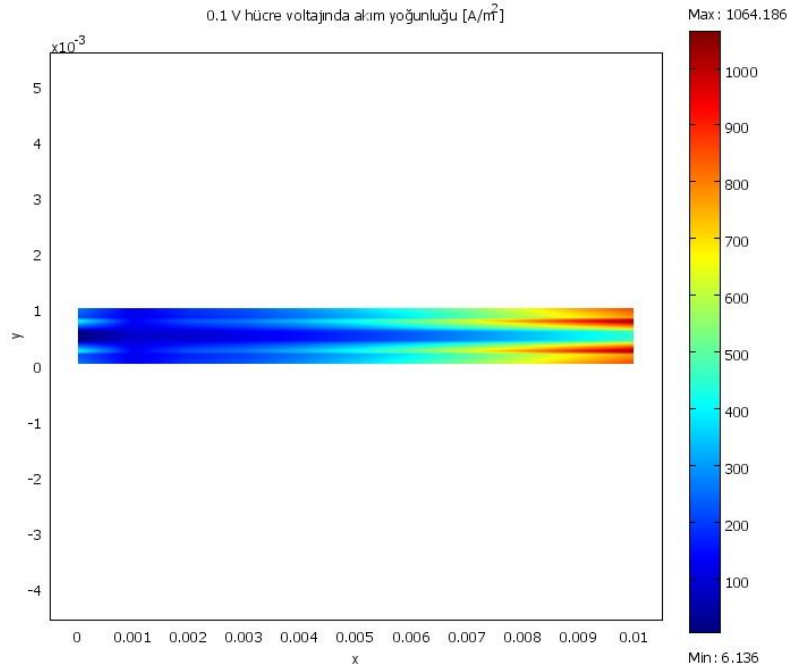


Şekil 4.22 Polarizasyon eğrisi

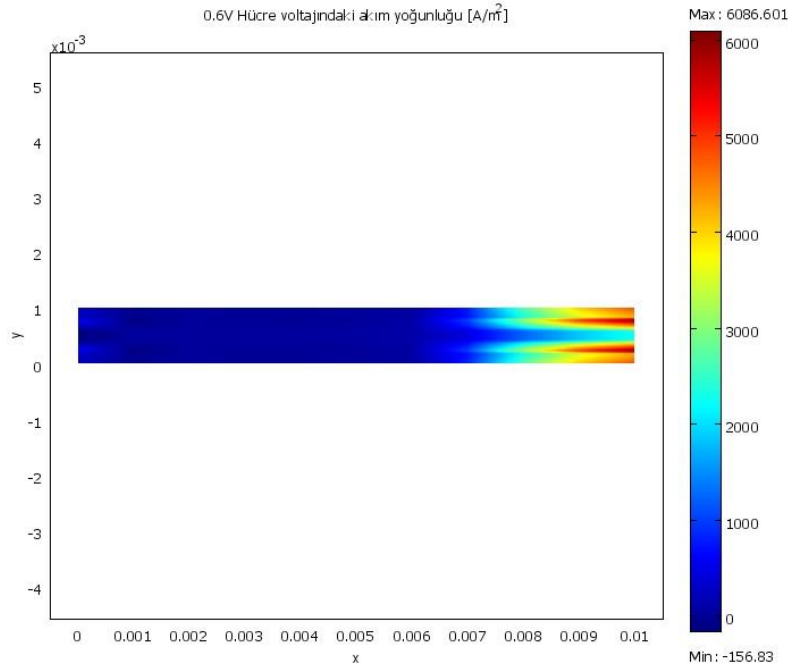
0,6 V polarizasyonundaki anot ve iyonik iletken arasındaki katman temas noktasında akım yoğunluğu dağılımı grafiğini oluşturmak için gerekli adımlar aşağıda sıralanmıştır:

1. Menü öğelerinden **“Postprocessing>Domain Plot Parameters”** seçilir.
2. **“General”** sayfasında **“Solutions to use”** listesinden **“0,6”** seçilir. **“Element refinement”** için **“Auto”** onay kutusu temizlenir ve **“associated”** alanına **“7”** yazılır.
3. **“Surface”** sayfasında sınır **“9”** seçilir. (Anot ve iyonik iletken arasındaki ara yüz) ve **“Predefined quantities”** listesinden **“Conductive Media DC (electronic)>Normal current density”** seçilir.
4. **“x- and y-axis”** veri alanından, aşağı açılır listeden **“xy-plane”** seçilir.
5. **“OK”** e tıklanır.

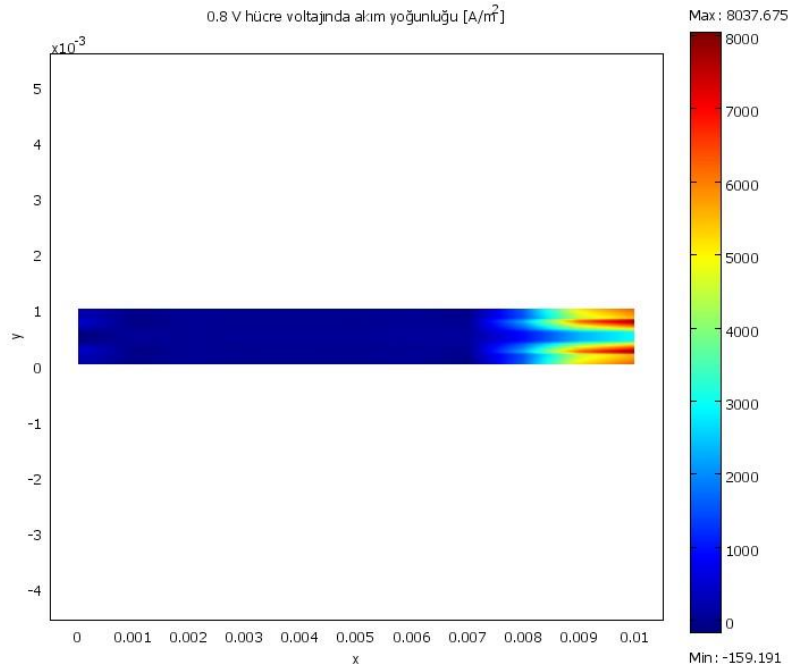
0,1 V, 0,6 V ve 0,8 V hücre voltajlarındaki akım yoğunluğu dağılımı Şekil 4.23, Şekil 4.24 ve Şekil 4.25’deki gibi oluşmuştur. Hücre voltajı arttıkça akım yoğunluğunda bir artış görülmekle birlikte, yoğunluk dağılımı da şekillerdeki gibi yer değiştirmektedir.



Şekil 4.23 0,1 V Hücre voltajında akım yoğunluğu



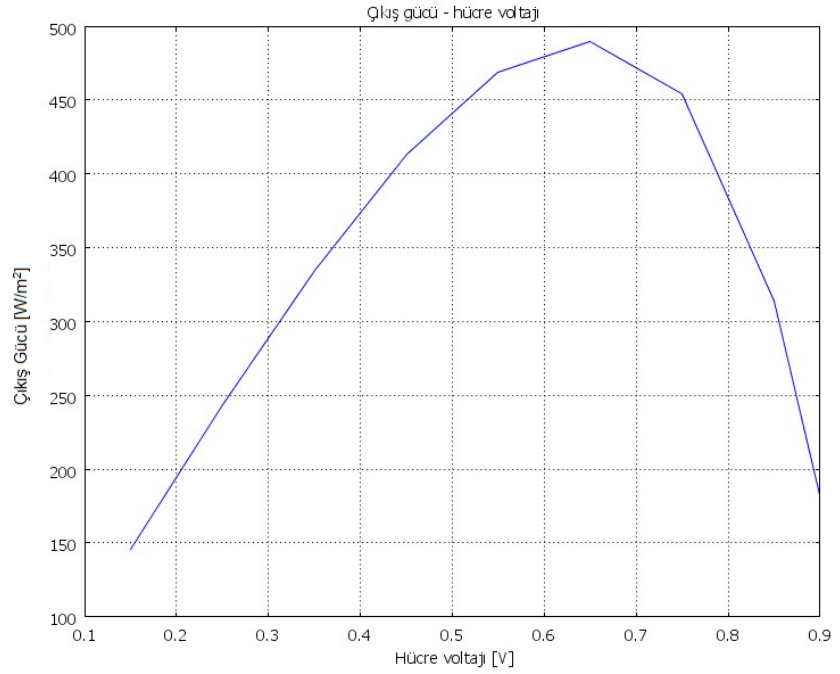
Şekil 4.24 0,6 V Hücre voltajında akım yoğunluğu



Şekil 4.25 0,8 V Hücre voltajında akım yoğunluğu

Maksimum çıkış gücü - hücre voltajı grafiği şu şekilde oluşturulur:

1. Menü öğelerinden **“Postprocessing>Domain Plot Parameters”** seçilir.
2. **“General”** sayfasında **“Solutions to use”** listesinden bütün çözümler seçilir.
3. **“Point”** sayfasında, **“Expression”** alanına **“P_out”** yazılır.
4. Herhangi bir nokta seçilir. Örneğin; 1. Nokta seçilir.
5. **“x-axis”** veri alanında, **“Expression”** alanına **“V_cell”** yazılır.
6. **“OK”** e tıklanır ve grafik oluşturulur.



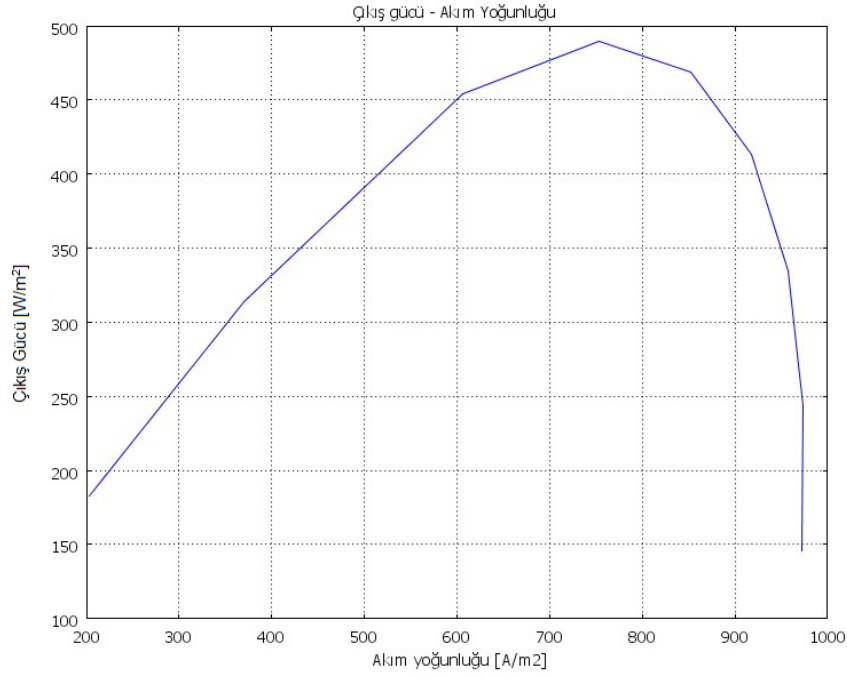
Şekil 4.26 Çıkış gücü - hücre voltajı

Bu grafik ile maksimum güç çıkışının **0,65V** hücre voltajında olduğu görüldü.

Son olarak, maksimum çıkış gücü- akım yoğunluğu şu şekilde oluşturulur:

1. Menü öğelerinden **“Postprocessing>Domain Plot Parameters”** seçilir.
2. **“General”** sayfasında **“Solutions to use”** listesinden bütün çözümler seçilir.
3. **“Point”** sayfasında, **“Expression”** alanına **“P_out”** yazılır.

4. Herhangi bir nokta seçilir. Örneğin; 1. Nokta seçilir.
5. “**x-axis**” veri alanında, “**Expression**” alanına “**j_ec**” yazılır.
6. “**OK**” e tıklanır ve grafik oluşturulur.

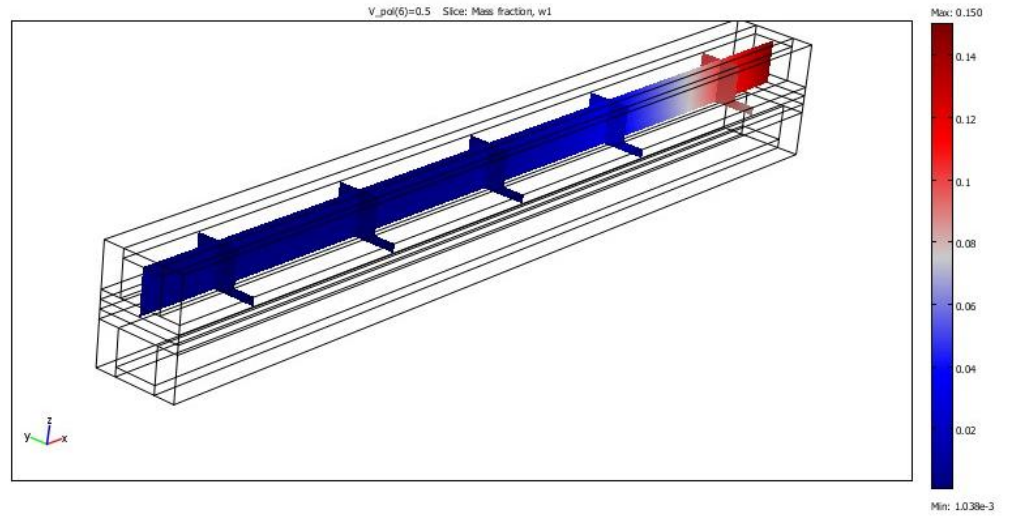


Şekil 4.27 Çıkış gücü – akım yoğunluğu

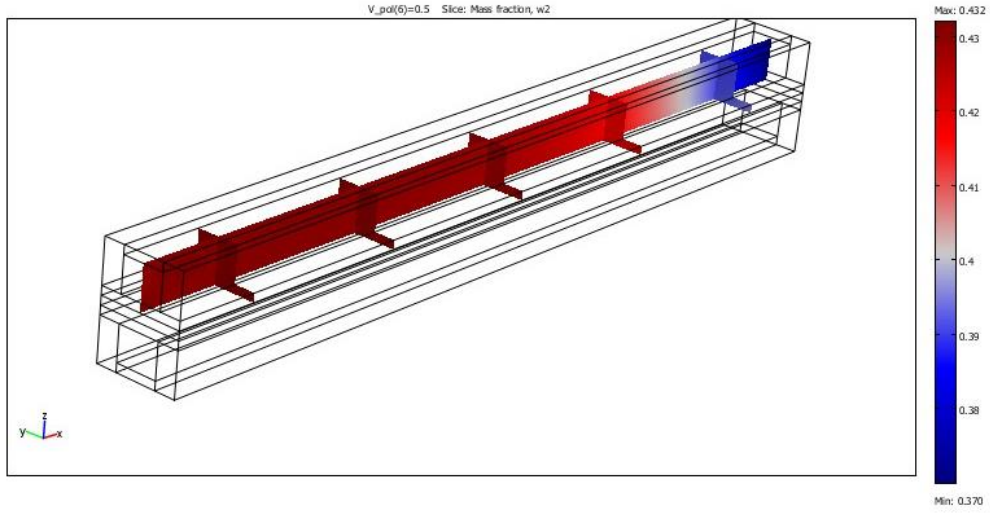
4.8 Hidrojen gazı ile yapılan KOYP modeli

KOYP modelinin anot akışkanı olarak hidrojen ve katot akışkanı olarak hava kullanıldığında oluşan sonuçlar bu kısımda açıklanacaktır.

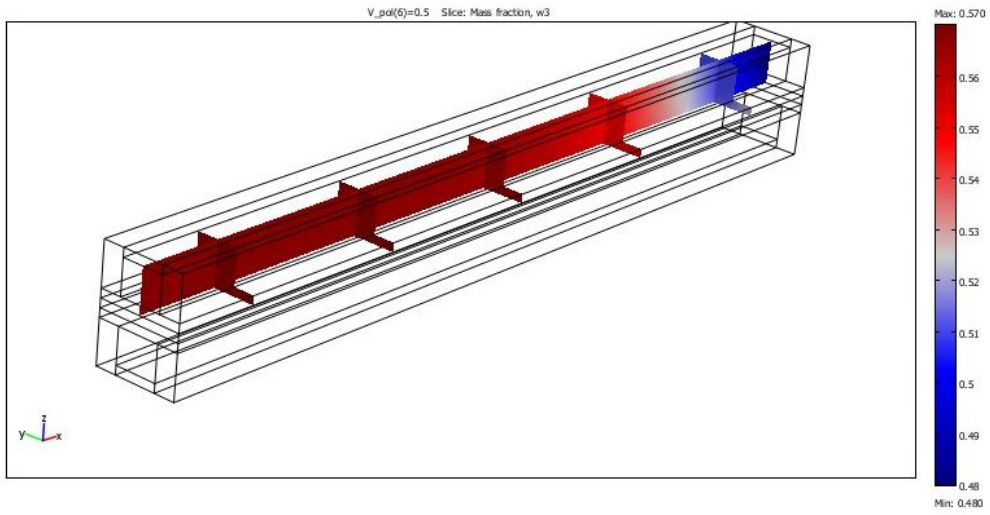
Anot ve katot akışkanları kütle oranları dağılımları aşağıdaki grafiklerdeki gibi oluşmuştur.



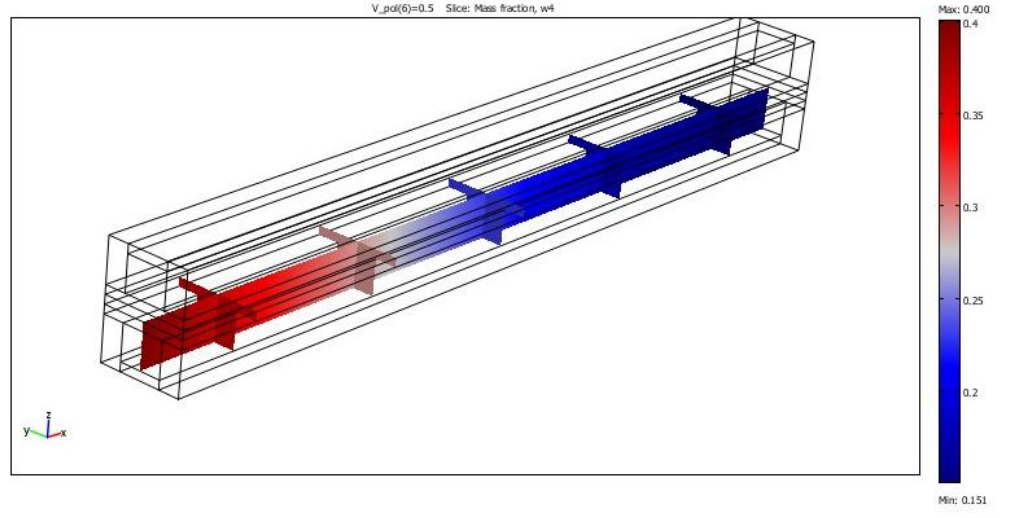
Şekil 4.28 Katottaki O_2 (w1) dağılımı



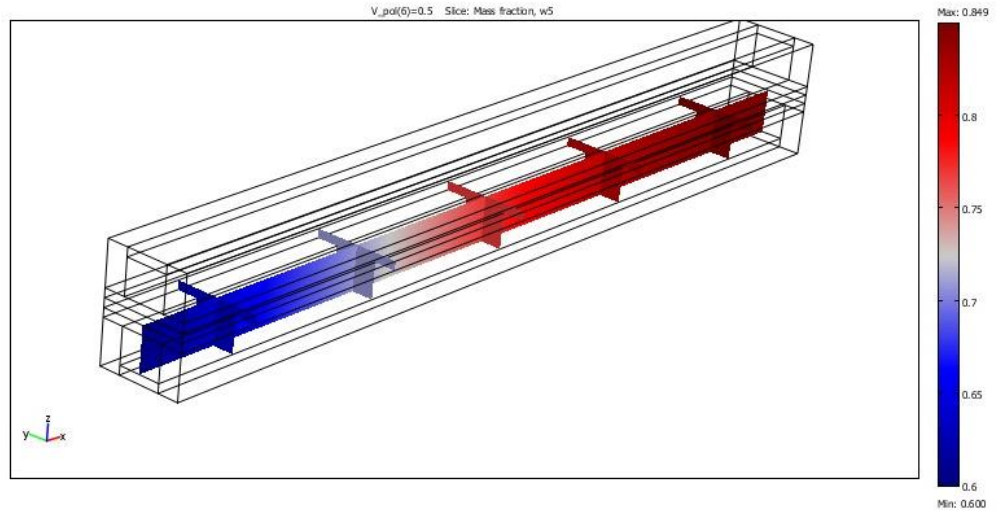
Şekil 4.29 Katottaki H₂O (w₂) dağılımı



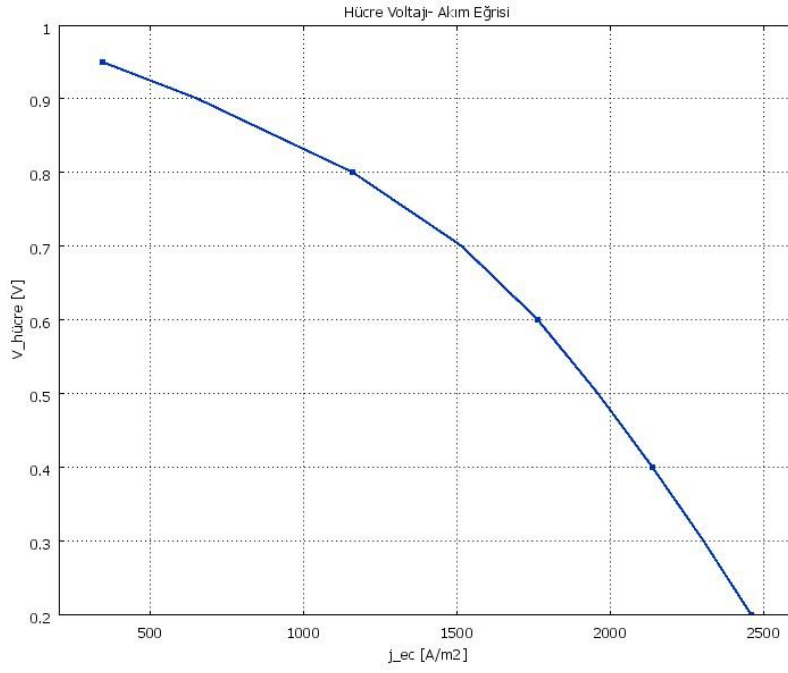
Şekil 4.30 Katottaki N₂ (w₃) dağılımı



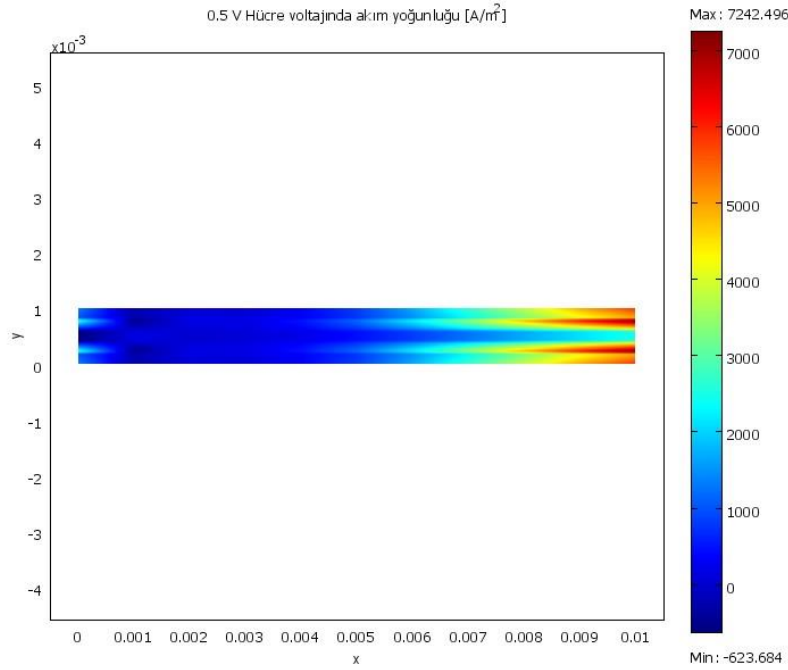
Şekil 4.31 Anottaki H₂ (w4) dağılımı



Şekil 4.32 Anottaki H₂O (w5) dağılımı



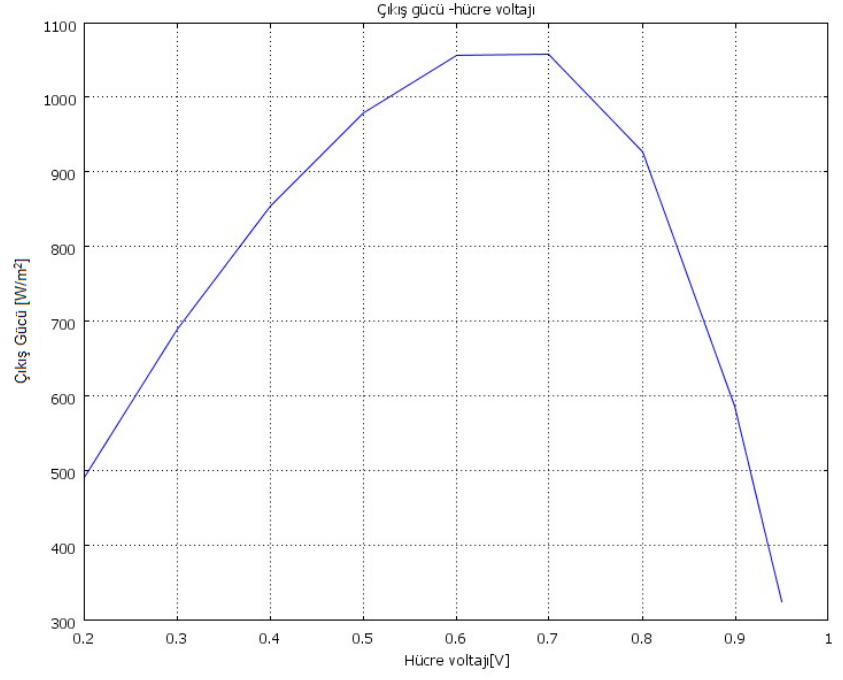
Şekil 4.33 Polarizasyon eğrisi



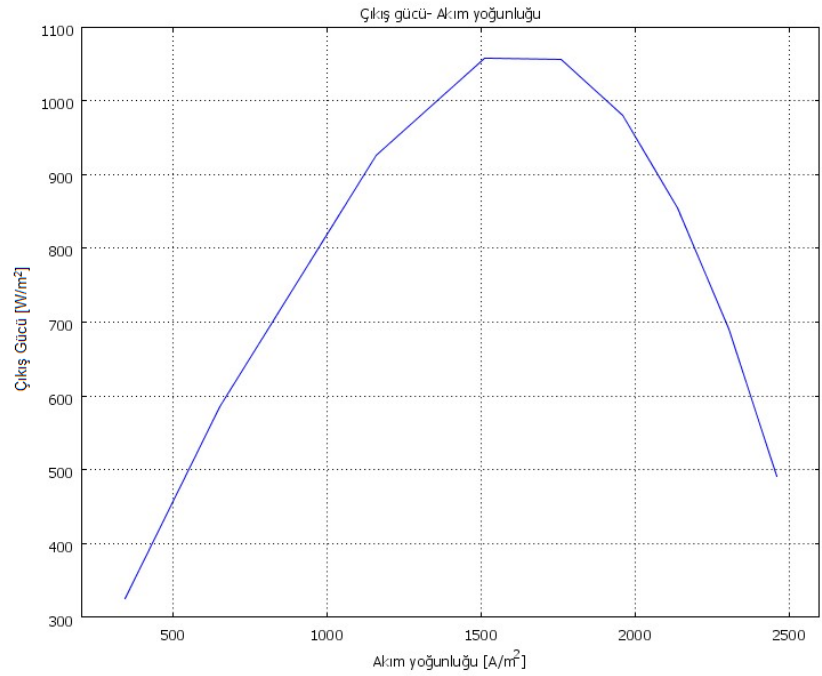
Şekil 4.34 0,5 V Hücre voltajında akım yoğunluğu

Oksijen tüketiminin sonucu olarak, akım yoğunluğu dağılımı zayıftır ve üretilen akımın çoğu katot girişine yakındır. Buna ek olarak, akım yoğunluğunun köşelerde hafifçe artmasıyla akım toplayıcısının pozisyonu

belirlenir. İşletme şartlarını geliştirmenin bir yolu da katot akış debisini arttırmaktır böylece oksijen kütle transferi de artmış olur.



Şekil 4.35 Çıkış gücü - hücre voltajı grafiği



Şekil 4.36 Çıkış gücü – akım yoğunluğu grafiği

Bu kısımda $H_2 - O_2$ yakıtlı KOYP birim hücresi doğalgaz yakıtlı birim hücre modeline bir karşılaştırma olarak sunulmuştur.

Burada 0,6 V hücre voltajında maksimum güce ulaşıldı. Maksimum güç olarak 1050 W/m^2 değeri görüldü.

0,6 V hücre voltajında akım yoğunluğu olarak 1500 A/m^2 değerine ulaşıldı.

4.9 KOYP Modelinin deneysel çalışmalar ile karşılaştırılması

Düzlemsel tipli katı oksitli yakıt pili modelimiz, 2002 yılında Shanghai Seramik Enstitüsü ve Çin Bilim Akademisinde yapılan bir araştırma ile karşılaştırılmıştır (Wen et al.,2002). Deneysel çalışmada 40 x 40 mm boyutundaki düzlemsel hücre malzemeleri ve özellikleri ise şöyledir:

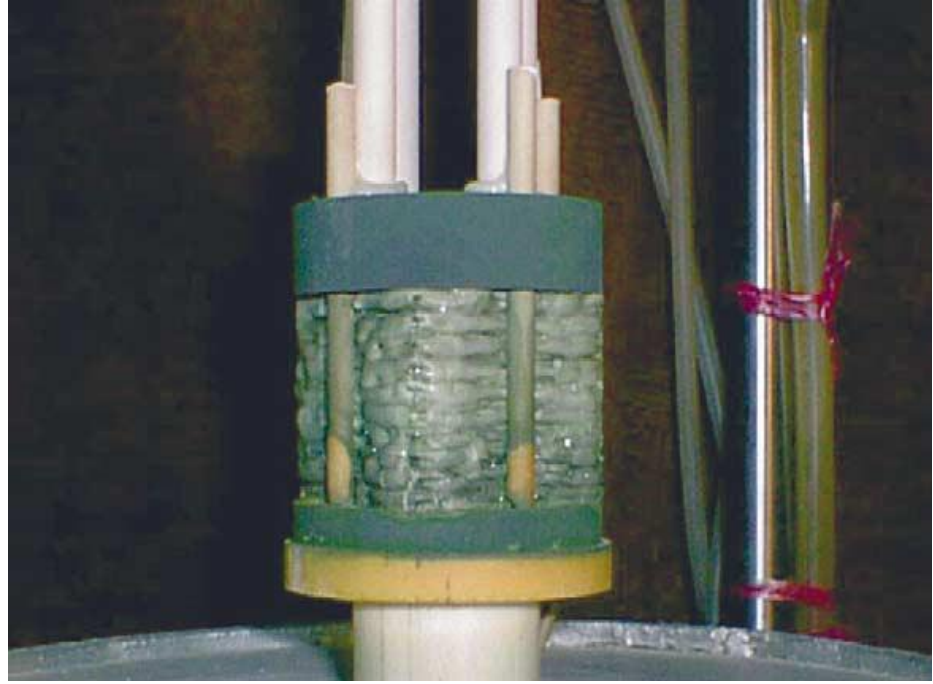
Çizelge 4.16 40 x 40 mm boyutundaki düzlemsel hücre malzemeleri ve özellikleri

Bileşen	Malzeme	Kalınlık
Elektrolit	İtriyum dengeli zirkonya(YSZ)	0,2 mm
Anot	Ni + YSZ Madeni seramik	40 μm
Katot	$\text{Pr}_{0,7}\text{Sr}_{0,3}\text{MnO}_3$	90 μm
Ara Bağlantı	Ni kaplı alaşımlı çelik	100 x 100mm

Ayrıca yalıtım malzemesi olarak $\text{SiO}_2\text{--Al}_2\text{O}_3\text{--CaO}$ kullanılmıştır.

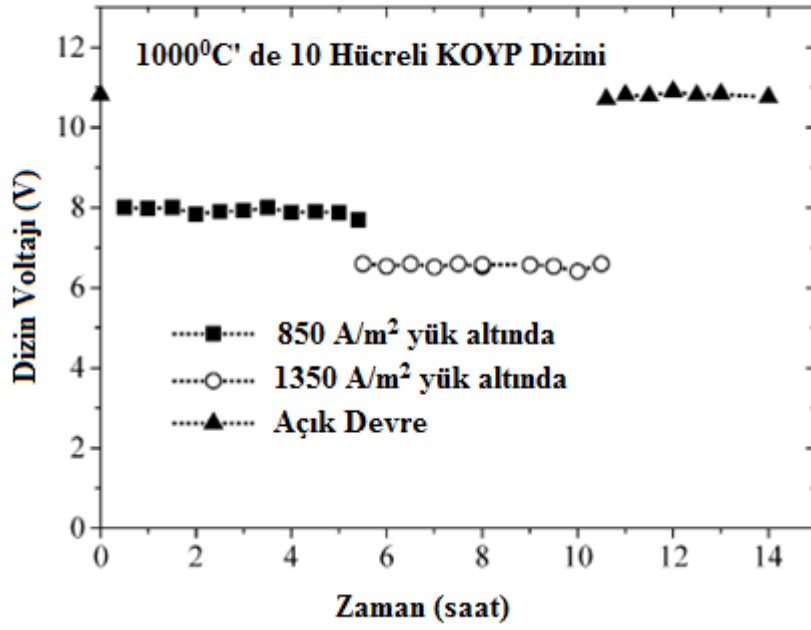
1999 başlarında malzeme araştırmasına ve bileşen imalatına dayandırılarak 10 hücreli KOYP dizini yapılmış ve çalıştırılmıştır. Deneyde elektrolit destekli hücre yapısı seçilmiştir. Dizin, 0,2 mm kalınlığında elektrolit içeren 10 hücreden meydana gelmiş olup 40x40 mm alana sahiptir. Kullanılan gazların oranları ise %10 H_2/Hava , %10 H_2/O_2 ve H_2/O_2 'dir. Bu oranlar için açık devre voltajları(OCV) ise, sırasıyla 8,6, 9,5 ve 10,7 V tur.

10 hücreli demetin, 900-1000 °C sıcaklıkta birkaç gün çalıştırdıktan sonraki halinin fotoğrafı Şekil 4.28'te gösterilmiştir.



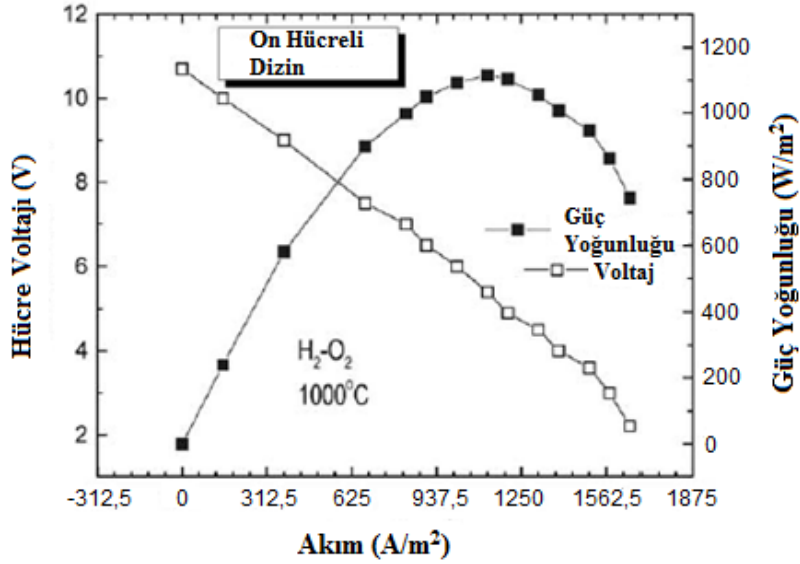
Şekil 4.37 10 dizinli yakıt pili hücresinin dış görünüşü (Wen et al., 2002)

Bu yakıt pili dizini 850 ve 1350 A/m^2 yükleri altında ve boşa çalıştığında dizin voltajı- zaman grafiği Şekil 4.38'de gösterilmiştir.



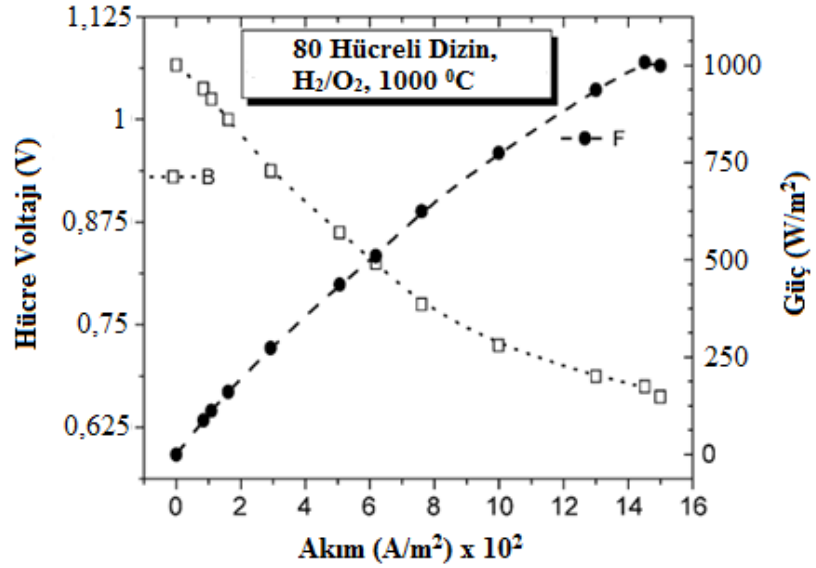
Şekil 4.38 Dizin voltajı – Zaman grafiği (Wen et al., 2002)

Burada 10 hücreli dizinin 1000 °C'deki güç yoğunluğu-akım grafiği Şekil 4.39'da gösterilmiştir. Hücre birim alanı ise 40 x 40 mm² (0,0016 m²) dir.



Şekil 4.39 10 hücreli dizinin voltajı – akım- güç yoğunluğu grafiği (Wen et al., 2002)

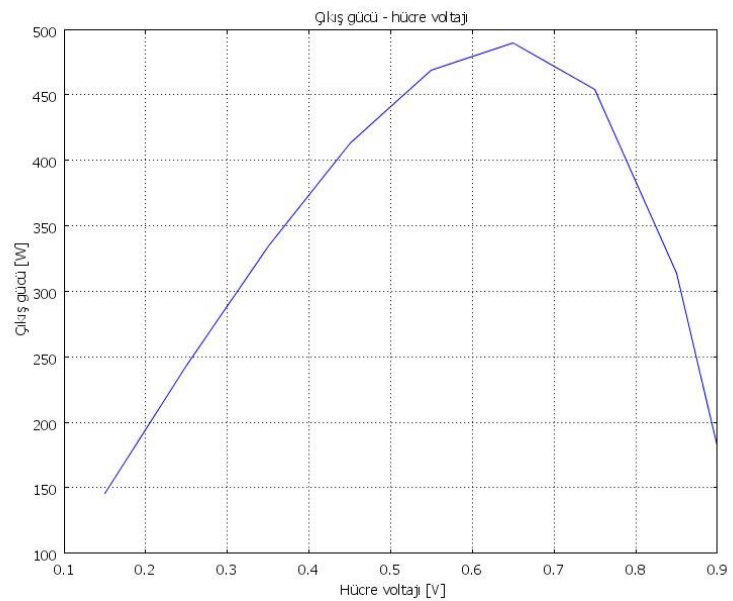
Burada ise 80 hücreli dizinin 1000 °C'deki güç yoğunluğu-akım grafiği Şekil 4.40'ta gösterilmiştir. Hücre birim alanı ise 100 x 100 mm² (0,01 m²) dir.



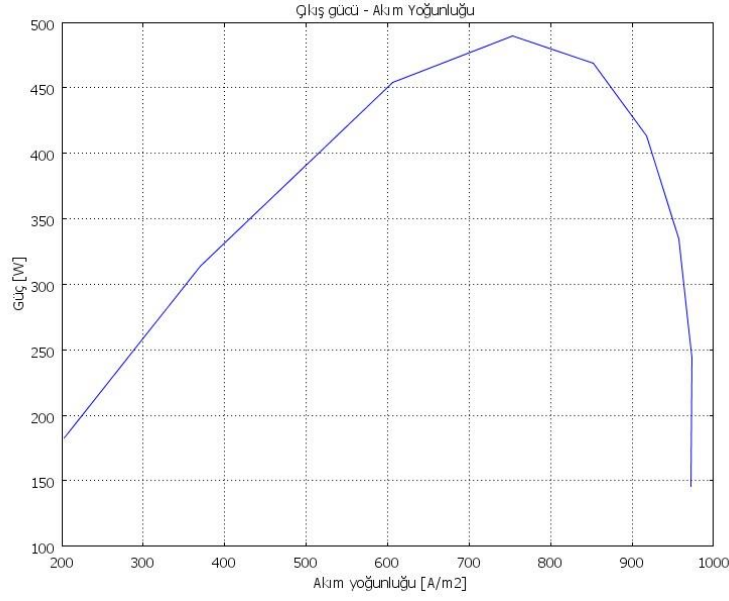
Şekil 4.40 80 hücreli dizinin voltajı – akım- güç yoğunluğu grafiği (Wen et al., 2002)

Bu çalışmada 1000 °C'de 80 adet dizine kadar deneyler yapılmıştır. Anot tarafında yakıt olarak hidrojen, katot tarafında oksitleyici olarak oksijen ile yapılan deneylerde maksimum çıkış gücü olarak 810 W görülmüştür (Wen et al., 2002).

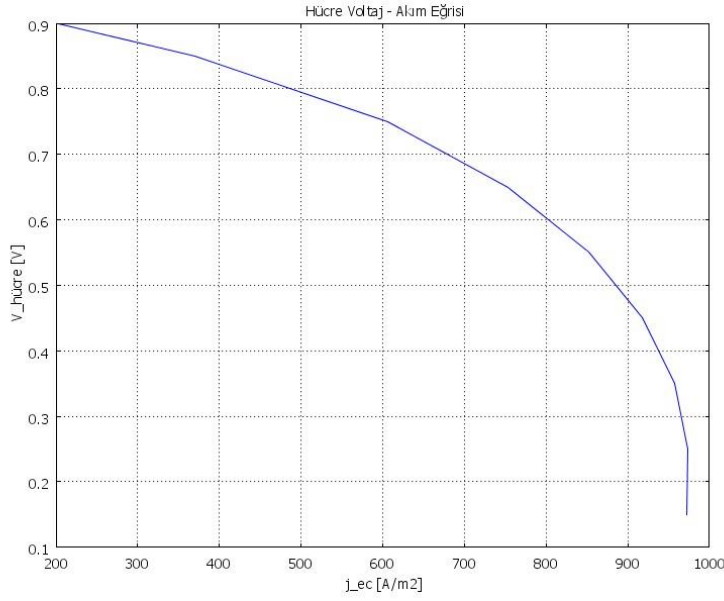
KOYP Modelimizdeki değerlerde aşağıdaki gibi oluşmuştur ve yukarıdaki deneysel sonuçlarla karşılaştırıldığında uyumlu sonuçlar göstermektedir:



Şekil 4.41 KOYP Modeli çıkış gücü- hücre voltajı grafiği

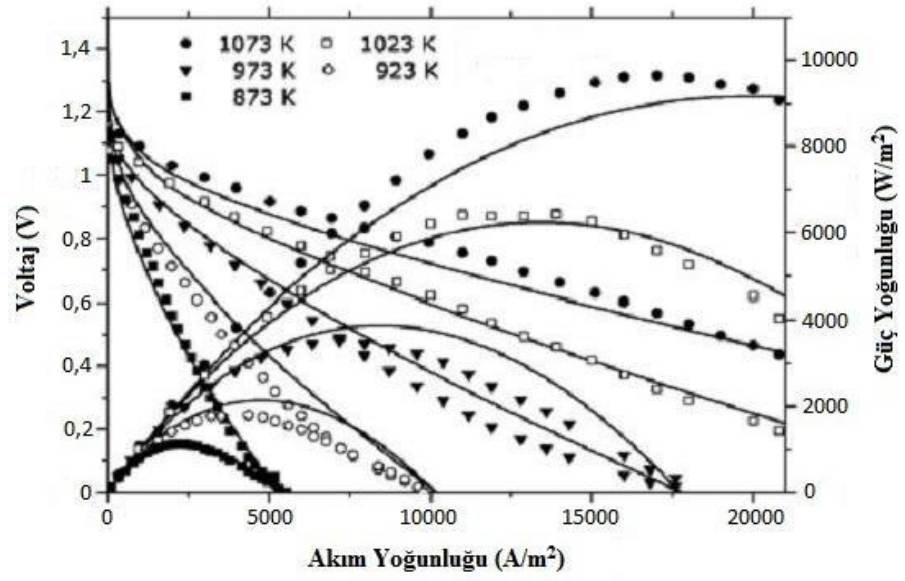


Şekil 4.42 KOYP Modeli çıkış gücü- akım yoğunluğu grafiği



Şekil 4.43 KOYP Modeli hücre voltajı - akım eğrisi grafiği

Ayrıca modelimizden daha yüksek sıcaklıklarda yapılan deneysel çalışmalar ve sonuçları aşağıdaki grafikte gösterilmiştir (Janardhanan and Deutschmann, 2006).



Şekil 4.44 Farklı sıcaklıklardaki hücre voltajı – akım – güç yoğunluğu grafiği

Buradaki çalışmada yakıt bileşimi %97 CH₄ - %3 H₂O olarak değişik sıcaklık aralığında tasarım yapılmıştır. Deneysel çalışma sonuçları ile tasarım hesaplamaları yakın sonuçlar göstermiştir (Janardhanan and Deutschmann, 2006). Sıcaklıklar azaldıkça akım yoğunluğunda modelimizdeki gibi düşüş gözlenmiştir.

5. SONUÇ VE TARTIŞMALAR

Çağımızda modern toplumların ilk ihtiyacı her zaman enerji olmuştur. Fakat enerji sürekli ve temiz olduğu zaman bir anlam kazanmaktadır. Bu manada konvansiyonel enerji üretimine karşı, katı oksitli yakıt pillerinin önemli avantajları olduğu açıktır.

Bu çalışmada yakıt dönüştürücüde dönüştürülmüş doğalgaz yakıtlı katı oksitli yakıt pili dizini modellenmiştir. Birim hücre temel alınarak analizler yapılmıştır. Model ise sonlu elemanlar yöntemiyle COMSOL 3.5a ticari yazılımı yardımıyla gerçekleştirilmiştir.

Dünyadaki uygulamalarından referans alınarak birim hücre geometrisi tasarlanmıştır. Anot tarafı akışkanı olarak dönüştürülmüş doğalgaz, katot tarafı akışkanı olarak hava düşünülmüştür. Anot ve katot tarafı gazlarının giriş ve çıkış kütle oranları incelenmiş, ayrıntılı grafiklerle (Şekil 4.14 - 4.20) sunulmuştur.

Akım yoğunluğu dağılımı, 0,1 V, 0,6 V ve 0,8 V hücre voltajlarındaki Şekil 4.23, Şekil 4.24 ve Şekil 4.25'deki gibi oluşmuştur. Hücre voltajı arttıkça akım yoğunluğunda bir artış görülmekle birlikte, yoğunluk dağılımı da şekillerdeki gibi yer değiştirmektedir.

Polarizasyon eğrisi incelendiğinde, akım yoğunluğu arttıkça hücre voltajında bir düşüş olduğu gözlemlendi. Oluşan eğri, Şekil 4.39, Şekil 4.40 ve Şekil 4.44'teki deneysel çalışmalar ile uygunluk göstermektedir (Wen et al.,2002; Janardhanan and Deutschmann, 2006; Yamamoto O.,1999; Wang et al.,2009).

Maksimum güç çıkışının olduğu 0,65 V hücre voltajında, 650 A/m^2 akım yoğunluğuna ulaşıldı ve güç çıkışı olarak 500 W değeri görüldü. Şekil 4.39 ve Şekil 4.40'teki verilerle karşılaştırıldığında yakın sonuçlar elde edildiği görülmektedir.

Yakıt dönüştürücüde dönüştürülmüş doğalgaz yakıtlı KOYP modelimizin performansını karşılaştırmak için daha önceden literatüre girmiş bir çalışma ele alınmıştır. Bu deneysel çalışmada, bizim çalışmamıza benzer olarak 1000 ° C sıcaklıkta, anot tarafı akışkanı hidrojen ve katot tarafı akışkanı oksijen olarak 10 ile 80 hücreli bir dizin meydana getirilmiştir. Sonuçlar karşılaştırıldığında hücre voltajı-akım yoğunluğu ve hücre voltajı- güç çıkışı sonuçları uygunluk göstermektedir. 80 hücreli dizin çalışmasında deneysel olarak birim hücre başına 810 W maksimum çıkış gücüne ulaşılmıştır. Modelimizde ise 500 W çıkış gücü elde edilmiştir. Bu farklılık, model boyutları, yakıt pili akışkanları, gözeneklilik, yalıtım gibi faktörler sonucunda oluşmuştur.

Şekil 4.44'te grafik ile gösterilen çalışmada yakıt bileşimi %97 CH₄ - %3 H₂O olarak değişik sıcaklık aralığında tasarım yapılmıştır. Deneysel çalışma sonuçları ile tasarım hesaplamaları yakın sonuçlar göstermiştir (Janardhanan and Deutschmann, 2006). Sıcaklıklar azaldıkça akım yoğunluğunda modelimizdeki gibi düşüş gözlenmiştir.

Ayrıca KOYP modelimiz, karşılaştırma yapmak amacıyla, hidrojen yakıtı ile diğer parametreler aynı kalacak biçimde yeniden tasarlanmıştır. Model sonuçları, Şekil 4.28- 4.36 grafikleri ile ayrıntılı bir biçimde gösterilmiştir. Bu modelde 0,6 V hücre voltajında maksimum güce ulaşıldı. Maksimum güç olarak 1050 W/m² ve akım yoğunluğu olarak 1500 A/m² değerine ulaşıldı.

Sonuç olarak, doğalgaz yakıtlı KOYP'lerinin verimini tasarım geometrisi, boyutları, sıcaklık, anot-katot- elektrolit malzeme yapısı, yalıtım gibi faktörler değiştirmektedir. Malzeme bilimi ve nano-teknoloji geliştikçe, KOYP'leri hayatımızda daha çok yer alacaklardır.

KAYNAKLAR DİZİNİ

Akhtar, N., Decent, S. P., Loghin, D., Kendall, K., 2009, A three-dimensional numerical model of a single-chamber solid oxide fuel cell, international journal of hydrogen energy 34:8645-8663pp.

Autissier N., Larrain,D., Herle, J.V., and Favrat, D., 2003, CFD simulation tool for solid oxide fuel cells, Journal of Power Sources 131:313–319pp.

Beale, S.B., Lin, Y.S., Zhubrin V., and Dong, W., 2003,Computer methods for performance prediction in fuel cells, Journal of Power Sources 118:79–85pp.

Bedogni, S., Campanari, S., Iora, P., Montelatici, L., and Silva, P., 2007, Experimental analysis and modeling for a circular-planar type IT-SOFC, Journal of Power Sources 171:617–625pp.

Bessler, W.G., Gewies, S., Vogler, M., 2007, A new framework for physically based modeling of solid oxide fuel cells, Electrochimica Acta 53:1782–1800pp.

Bove, R., and Ubertini, S., 2005, Modeling solid oxide fuel cell operation: Approaches, techniques and results, Journal of Power Sources 159:543–559pp.

Chan, S.H., Khor, K.A., Xia, Z.T., 2001, A complete polarization model of a solid oxide fuel cell and its sensitivity to the change of cell component thickness. Journal of Power Sources 93:130–140pp.

Chapra,P.A., ve Canale, R.P., 2003, Yazılım ve Programlama Uygulamalarıyla Mühendisler için Sayısal Yöntemler,(Çev. H. Heperkan ve U. Kesgin), Literatür Yayıncılık, İstanbul,1004s.

KAYNAKLAR DİZİNİ (devamı)

Çengel, A.Y., ve Boles, M.A., 1996, Mühendislik Yaklaşımıyla Termodinamik, (Çev. T. Derbentli), Literatür Yayıncılık, İstanbul, 867s.

Danilov, A.V. and Tade, O.M., 2009, A CFD-based model of a planar SOFC for anode flow field design, International Journal of Hydrogen Energy, 9p

Hirschenhofer, J.H., Stauffer, D.B., Engleman, R.R. and Klett, M.G., 2000, Fuel Cell Handbook, Parsons Inc., 268p.

Hoogers G., 2003, Fuel Cell Technology Handbook, CRC Press, 450p.

Ho, X.T., Kosinski, P., Hoffmann, A.C., Vik, A., 2009, Modeling of transport, chemical and electrochemical phenomena in a cathode-supported SOFC, Chemical Engineering Science 64:3000 – 3009pp.

Holtappels, P., DeHaart, L.G.J., Stimming, U., Vinke, I.C., Mogensen, M., 1999, Reaction of CO/CO₂ gas mixtures on Ni-YSZ cermet electrodes, Journal of Applied Electrochemistry 29(5):561–568pp.

Huang, C.M., Shy, S.S., Lee, C.H., 2008, On flow uniformity in various interconnects and its influence to cell performance of planar SOFC, Journal of Power Sources 183:205–213pp.

Hussain, M.M., Li X., Dincer, I., 2007, Mathematical modeling of transport phenomena in porous SOFC anodes, International Journal of Thermal Sciences 46:48–56pp.

Janardhanan, V.M., and Deutschmann. O., 2006, CFD analysis of a solid oxide fuel cell with internal reforming: coupled interactions of transport, heterogeneous catalysis and electrochemical processes, Journal of Power Sources 162:1192–1202pp.

KAYNAKLAR DİZİNİ (devamı)

Janardhanan, V.M., and Deutschmann, O., 2007, Numerical study of mass and heat transport in solid-oxide fuel cells running on humidified methane, Chemical Engineering Science 62:5473–5486pp.

Kakaç S., Pramuanjaroenkij A., and Zhou X.Y., 2007, A review of numerical modeling of solid oxide fuel cells, International Journal of Hydrogen Energy 32:761 – 786pp.

Klein, J.M., Bultel, Y., Georges, S., Pons, M., 2007, Modeling of a SOFC fuelled by methane: from direct internal reforming to gradual internal reforming, Chemical Engineering Science 62:1636–1649pp.

Larrain, D., Vanherle, J., Autissier, N., Wuillemin, Z., Molinelli, M. and Favrat, D., 2005, Modeling and experimental validation of solid oxide fuel cell materials and stacks, Journal of the European Ceramic Society 25:2627–2632pp.

Nikooyeh K., Jeje A.A. and Hill M.J., 2007, 3D modeling of anode-supported planar SOFC with internal reforming of methane, Journal of Power Sources 171:601–609, 9p.

Pasaogullari, U., and Wang, C.Y., 2003, Computational fluid dynamics modeling of solid oxide fuel cells. In: The Electrochemical Society Proceedings, vol. 7. Pennington, NJ, 1403–1412pp.

Perry H.R., and Green W.D., 2008, Perry's Chemical Engineering Handbook, eighth edition, Mc-Graw Hill, New York, 2735 p.

Poling B.E, Prausnitz M.J. and Reid R.C., 1987, The Properties of Gases and Liquids fourth edition, Mc-Graw Hill, New York, 753 p.

KAYNAKLAR DİZİNİ (devamı)

Priddy, P.A., and Li, K.W., 1985, Power Plant System Design, John Wiley & Sons , 641p.

Prinkey, M., Shahnam, M., and Rogers, W. A., 2004, SOFC FLUENT Model Theory Guide and User Manual, Release Version 1.0, FLUENT, Inc.,

Recknagle, K.P., Williford, R.E., Chick, L.A., Rector, D.R., Khaleel, M.A., 2003, Threedimensional thermo-fluid electrochemical modeling of planar SOFC stacks, Journal of Power Sources 113, 109–114pp.

Singhal, S.C., and Kendall, K., 2003, High Temperature Solid Oxide Fuel Cells: Fundamentals, Design and Applications, Elsevier Ltd.,430 p.

Singhal, S.C., 2000, Advances in solid oxide fuel cell technology, *Solid State Ionics* 135:305 –313pp.

Wang, G., Yang, Y., Zhang, H., Xia, W., 2007, 3-D model of thermo-fluid and electrochemical for planar SOFC, Journal of Power Sources 167:398–405pp.

Wang, Q., Li, L., Wang, C., 2009, Numerical study of thermoelectric characteristics of a planar solid oxide fuel cell with direct internal reforming of methane, Journal of Power Sources 186:399–407pp.

Wen, T.L., Wang, D., Chen, M., Tu, H., Lu, Z., Zhang, Z., Nie, H., Huang, W., 2002, Material research for planar SOFC stack, Solid State Ionics 148:513–519pp.

Wen, T.L., Wang, D., Tu, H.Y., Chen, M., Lu, Z., Zhang, Z., Nie, H., Huang, W., 2002, Research on planar SOFC stack, Solid State Ionics 152–153:399–404pp.

KAYNAKLAR DİZİNİ (devamı)

Yakabe, H., Ogiwara, T., Hishinuma, M. and Yasuda, I. , 2001, 3D model calculation for planar SOFC. Journal of Power Sources 102:144–54pp.

Yakabe, H. and Sakurai, T., 2004, 3D Simulation on the current path in planar SOFCs, Solid State Ionics, 174:295-302pp.

Yamamoto O.,1999, Solid oxide fuel cells: fundamental aspects and prospects, Electrochimica Acta 45:2423–2435pp.

Zhang, X., Li, G., Li, J., Feng, Z., 2007, Numerical study on electric characteristics of solid oxide fuel cells, Energy Conversion and Management 48:977–989pp.

Zhu, H., Kee, R.J., Janardhanan, V.M., Deutschmann, O., Goodwin, D.G., 2005, Modeling elementary heterogeneous chemistry and electrochemistry in solid oxide fuel cells, Journal of the Electrochemical Society 152:2427-2440pp.

EKLER

EK 1 GazTablosu.java

// =====

```

// Thermodynamics package in java
// GasPropertySWF class to calculate properties of gases
// user interface (JFrame)
// Dr. Turhan Coban
// TUBITAK Ulusal Metroloji Enstitüsü
// email : Turhan.Coban@ume.tubitak.gov.tr
// =====

import java.io.*;
import java.applet.Applet;
import java.awt.*;
import java.awt.event.*;
import java.util.*;
import javax.swing.*;
import javax.swing.table.*;

public class GasTable extends JApplet implements
ActionListener,ItemListener,Serializable
{
    private static final long serialVersionUID=3580448895730030990L;
    String s1[]={"SI","EN"};
    String s2[]={"mole","mass"};
    String unit;
    String base;
    JPanel inputPanel;
    JPanel outputPanel;
    JPanel totalPanel;
    JLabel l1[]=new JLabel[5];    // Label
    JLabel l2[]=new JLabel[5];    // Label
    JTextField t1[]=new JTextField[3]; // input fields
    JComboBox c1[]=new JComboBox[3]; // selection field
    JTextArea outputTextArea;
    GasModel gm;

```



```

public Gas g1;
JTable jt;
double T;
double P;
public String gasName;

protected File gmixFile;
protected StringTokenizer token;
String st[];
Color bg;
Color fg;

public void init()
{
    Container c=getContentPane();
    c.setLayout(new FlowLayout());
    bg=c.getBackground();
    fg=c.getForeground();
    //adding max-min prompts and input fields
    gasName=new String("air");
    unit="SI";
    base="mole";
    T=25.0;
    P=1.0;
    inputPanel=new JPanel();
    inputPanel.setLayout(new GridLayout(5,3,80,1));
    outputPanel=new JPanel();
    outputPanel.setLayout(new BorderLayout());
    totalPanel=new JPanel();
    totalPanel.setLayout(new BorderLayout());
    c1[0]=new JComboBox(s1);
    c1[1]=new JComboBox(s2);
    try{

```

```

g1=new Gas(gasName);
System.out.println("gf="+g1.gf);
token=new StringTokenizer(g1.readGasNames());
st=new String[token.countTokens()];
} catch(IOException ioe) {System.out.println("IOException");}

int i=0;
while(token.hasMoreTokens())
{
st[i++]=new String((String)token.nextToken());
}
c1[2]=new JComboBox(st);
t1[0] = new JTextField();
t1[1] = new JTextField();
t1[2] = new JTextField();
t1[2].setText(gasName);
gasName=(String)c1[2].getSelectedItem();
try{
    g1=new Gas(gasName);
    } catch(IOException ioe) {System.out.println("IOException");}

l1[0]=new JLabel("unit system      ");
fg=l1[0].getForeground();
l1[1]=new JLabel("mass/mole      ");
l1[2]=new JLabel("gas Name      ");
l1[3]=new JLabel("temperature      ");
l1[4]=new JLabel("pressure      ");
l2[0]=new JLabel(" ");
l2[1]=new JLabel(" ");
l2[2]=new JLabel(" ");
l2[3]=new JLabel(" degree C      ");
l2[4]=new JLabel(" bars      ");
outputTextArea=new JTextArea();
Font fn=l1[0].getFont();
for(i=0;i<5;i++)

```

```

    { l1[i].setBackground(Color.lightGray);
      l2[i].setBackground(Color.lightGray);
    }
    t1[0]=new JTextField(""+T);
    t1[1]=new JTextField(""+P);
    for(i=0;i<3;i++)
    { t1[i].setBackground(bg);t1[i].setFont(fn); }
    for(i=0;i<3;i++)
    { c1[i].setBackground(bg);t1[i].setFont(fn); }
    outputTextArea.setBackground(bg);
    outputTextArea.setForeground(fg);

    outputTextArea.setFont(fn);

    inputPanel.add(l1[0]);
    inputPanel.add(c1[0]);
    inputPanel.add(l2[0]);

    inputPanel.add(l1[1]);
    inputPanel.add(c1[1]);
    inputPanel.add(l2[1]);

    inputPanel.add(l1[2]);
    inputPanel.add(c1[2]);
    inputPanel.add(t1[2]);

    inputPanel.add(l1[3]);
    inputPanel.add(t1[0]);
    inputPanel.add(l2[3]);

    inputPanel.add(l1[4]);
    inputPanel.add(t1[1]);
    inputPanel.add(l2[4]);

```

```

c1[0].addItemListener(this);
c1[1].addItemListener(this);
c1[2].addItemListener(this);

t1[0].addActionListener(this);
t1[1].addActionListener(this);
t1[2].addActionListener(this);
double TK=T+273.0;
gm=new GasModel(g1,TK,P);
jt=new JTable(gm);
jt.setBackground(bg);
jt.setFont(fn);
setArea();
outputPanel.add(outputTextArea,BorderLayout.NORTH);
outputPanel.add(jt,BorderLayout.SOUTH);
totalPanel.add(inputPanel,BorderLayout.NORTH);
totalPanel.add(outputPanel,BorderLayout.SOUTH);
c.add(totalPanel,BorderLayout.NORTH);
}

```

```

public void setArea()
{
    t1[0].setText(Double.toString(T));
    t1[1].setText(Double.toString(P));
    String s="";
    s+="Dr. Turhan Çoban, \n";
    s+="Ege Üniversitesi, Mühendislik Bilimleri Fak., Makina Bölümü\n";
    s+="phone : 90(232)3434000-5387\n";
    s+="email : turhan.coban@mail.ege.edu.tr\n";
    s+="web   : www.axtelsoft.com/turhan.coban\n";    //note if you would like to
list additional information on the screen
    //add to string s

```

```

s+="Gas Formula : "+g1.toString()+"\n";
gm.setValues(g1,unit,base,T,P);
outputTextArea.setText(s);
}

```

```

public void itemStateChanged(ItemEvent ev)
{
gasName=(String)c1[2].getSelectedItem();
t1[2].setText(gasName);
unit=(String)c1[0].getSelectedItem();
if(unit=="EN") {l2[3].setText(" degree F      ");
                l2[4].setText(" psia (lbf/in^2)      ");}
else {l2[3].setText(" degree C      ");
      l2[4].setText(" bars      ");}
base=(String)c1[1].getSelectedItem();
try{
g1=new Gas(gasName);
g1.base(base);
g1.unit(unit);
t1[0].setText(" ");
t1[1].setText(" ");
} catch(IOException ioe1) {System.out.println("IOException");}
//g1.property(T,P);
setArea();
repaint();
}

```

```

public void actionPerformed( ActionEvent e)
{
if(e.getSource()==t1[2])
{
String st1=(String)c1[2].getSelectedItem();

```

```

gasName=st1;
String st2=t1[2].getText();
for(int j=0;j<st.length;j++)
{
    if(st[j].equals(st2))
    {
        gasName=st2;
        c1[2].setSelectedItem(st2);
        try{
            g1=new Gas(gasName);
            g1.base(base);
            g1.unit(unit);
        } catch(IOException ioe1) {System.out.println("IOException");}
        break;
    }
}
Double valTemp=new Double(t1[0].getText());
T=valTemp.doubleValue();
Double valPressure=new Double(t1[1].getText());
P=valPressure.doubleValue();
getContentPane().setLayout(new FlowLayout(FlowLayout.RIGHT));
setArea();
repaint();
}

public static void main(String s[]) {
    JFrame f = new JFrame("Properties of Perfect Gases ");
    f.addWindowListener(new WindowAdapter() {
        public void windowClosing(WindowEvent e) {System.exit(0);}
    });
    JApplet applet = new GasTable();
    f.getContentPane().add("Center", applet);
    applet.init();
}

```

```
f.pack();  
f.setSize(new Dimension(500,600));  
f.setVisible(true);  
}  
}
```

EK 2 Gkarışım.java

```

//
=====

===

// File Name   : Gmix.java
// Author      : Dr. Turhan Coban
// TUBITAK Ulusal Metroloji Enstitüsü
// email       : Turhan.Coban@ume.tubitak.gov.tr
// Description  : This file contains class gmix which calculates
// thermophysical properties of mixture of perfect gases.
//             following properties can be calculated
//             T()   : Temperature degree K
//             h(T)  : enthalpy KJ/kmol
//             hf    : formation enthalpy KJ/kg
//             ht(T) : total enthalpy KJ/kg (h+hf)
//             M     : molar mass kg/kmol
//             HT(T) : total enthalpy KJ : M*ht(T)
//             P()   : pressure bar
//             s(T,P) : entropy KJ/kmol K
//             Cp(T) : specific heat at constant pressure KJ/kmol K
//             Cv(T) : specific heat at constant volume KJ/kg K
//             gamma(T): adiabatic constant Cp/Cv
//             c(T)  : speed of sound m/s
//             u(T)  : Internal energy KJ/kmol
//             vis(T) : viscosity
//             k(T)  : thermal conductivity KW/kg K
// DATA FILE DEFINITION
// gas mixture definitions are given the data file "Gmix.txt"
// if gas mixture data is not given in the Gmix.txt user can be add
// his own data to the file which has the following format
//-----
// gmixName
// ngas
// gname_0 N_0

```



```

// .....
// gname_ngas-1 N_ngas-1
//-----
// and defination : gmix a(gmixName); will defined this gas mixture
// the same mixture can be defined directly in the main program as :
// -----
// Gas a_0=new Gas("a_0");
//.....
// Gas a_ngas=new Gas("a_ngas");
// Gmix a=new Gmix;
// a=N_0*a_0+...+N_ngas*a_ngas;
// -----
//=====
==
// VARIABLE IDENTIFICATION
// all the variables that type is not defined is a double variable
// PUBLIC VARIABLES :
// gasName : String class variable of gas mixture name
// ngas : int variable, number of simple gasses
// N : total molar mass of the gas mixture
// gasList :gas class vector variables
// All the other variables defined for class gas is also valid for gmix
import java.io.*;
import java.util.*;

//
//=====
===
class Gmix{
// this class calculates perfect gas thermodynamic
// properties when the perfect gas constitutes of
// several single gases
    boolean mole=false;

```

```

boolean SI=true;
public int ngas; // number of simple gasses inside of the gas mixture
String gasName;
public double M; // molar mass of atom kg/kmol
public double h0; // enthalpy at T=298 K
public double hf; // enthalpy of formation
public double sf; // entropy of formation   kJ/kmol K
public double N; // moles of gas kmol
int ierror;
int natom;      //number of unique atoms in the atom list
Gas  gasList[]; //list of the component gasses
Atom atomList[]; //list of component atoms
File gmixFile;  // File name and directory
BufferedReader cfin;
// construction methods :
//=====definations of class gmix =====
//constructor functions
    public Gmix(String name) throws IOException
    {
        // class complex gas construction function
        // this function reads the initial gases in
        // the mixture and their molar weight from
        // the file Gmix.txt and construct mixed gas
try{
cfin=new BufferedReader(new FileReader("Gmix.txt"));
    int ierror=1;
    int i,j;
    N=0;
    M=0;
    hf=0;
    natom=0;
    try{
        while(cfin!=null)

```

```

        {
            gasName=Text.readString(cfin);
            if(gasName.equals(name)) { ierror=0; break;}
        } //end of while
    } catch(EOFException e_eof)
    {
        System.out.println("error required gas mixture "+name+" is not found");
        cfin.close();return;
    }
    //cfin>>ngas;
    ngas=Text.readInt(cfin);
    gasList=new Gas[ngas];
    //ierror=0;
    String pgasName;
    double ppercent;
    Gas tempgas;
    for(i=0;i<ngas;i++)
    {
        pgasName=Text.readString(cfin);
        ppercent=Text.readDouble(cfin);
        //cfin>>pgasName>>ppercent;
        tempgas=new Gas(pgasName,ppercent);
        ierror=tempgas.ierror;
        {
            if(ierror!=1)
            {
                try{
                    gasList[i]=new Gas(tempgas);
                } catch(IOException ioe) {System.out.println("IOException");}
                N+=tempgas.N;
                M+=tempgas.N*tempgas.M;
                hf+=tempgas.N*tempgas.hf;
            }
        }
    }

```

```

else
{
    System.out.println("gas is not found in the list");
    System.out.println("this gas is not added to the list");
    i--;
    ngas--;
}
}
}
M=M/N;
hf=hf/N;
arrange_atoms();
} catch(FileNotFoundException fnfe) {System.out.println("File not found");}

}

//
=====
===
public String readGmixNames() throws IOException
{
    String temp=new String("");
    String pgasName;
    double ppercent;
    try{
        cfin=new BufferedReader(new FileReader("Gmix.txt"));
        try {
            while(cfin!=null)
            {
                temp=temp+Text.readString(cfin)+ " ";
                ngas=Text.readInt(cfin);
                for(int i=0;i<ngas;i++)
                {
                    pgasName=Text.readString(cfin);

```

```

        ppercent=Text.readDouble(cfin);
    } //end of while
}
} catch(EOFException e_eof) {cfin.close();}
}
catch(FileNotFoundException fnfe) {System.out.println("File Gmix.txt not
found");}
return temp;
}

```

```
//
```

```

=====
===

```

```

public void arrange_atoms() throws IOException
{
int i,j;
    for(i=0;i<ngas;i++)
    {
        for(j=0;j<gasList[i].natom;j++)
        {
            add_atom(i,j);
        }
    }
}

```

```

public int add_atom(int i,int j) throws IOException
{
int k;
//Atom
tempAtom=new
Atom(gasList[i].atomList[j].symbol,gasList[i].atomList[j].N*gasList[i].N/N);
for(k=0;k<natom;k++)
{

```

```

//String s0=gasList[i].gasName;
String s1=gasList[i].atomList[j].symbol;
String s2=atomList[k].symbol;
//System.out.println("natom          =" +natom+"k          =
"+k+atomList[k].symbol+"s0="+s0+"s1="+s1+"s2="+s2);
if(s1.equals(s2))
{
    atomList[k]=new
Atom(atomList[k].symbol,atomList[k].N+gasList[i].atomList[j].N*gasList[i].N/N);
    return 1;
}
}
Atom atomL[];
atomL=new Atom[natom+1];
for(k=0;k<natom;k++)
atomL[k]=new Atom(atomList[k]);
atomL[natom]=new
Atom(gasList[i].atomList[j].symbol,gasList[i].atomList[j].N*gasList[i].N/N);
atomList=atomL;
natom+=1;
return 2;
}

//=====
=====

public Gmix() throws IOException
{
    //empty construction function
    N=0;
    M=0;
    String pgasname="\0";
    ngas=0;
}

```

```
//
```

```
=====
```

```
===
```

```
public Gmix(Gmix g1) throws IOException
{
    gasName=g1.gasName;
    gasName=gasName;
    N=g1.N;
    M=g1.M;
    hf=g1.hf;
    ngas=g1.ngas;
    natom=g1.natom;
    gasList=new Gas[ngas];
    for(int i=0;i<ngas;i++) gasList[i]=new Gas(g1.gasList[i]);
    for(int i=0;i<natom;i++) atomList[i]=new Atom(g1.atomList[i]);
}
```

```
//
```

```
=====
```

```
===
```

```
public Gmix(Gas g1) throws IOException
{
    gasName=g1.gasName;
    gasName=gasName;
    N=g1.N;
    M=g1.M;
    hf=g1.hf;
    ngas=1;
    natom=g1.natom;
    gasList=new Gas[ngas];
    for(int i=0;i<ngas;i++) gasList[i]=new Gas(g1);
    for(int i=0;i<natom;i++) atomList[i]=new Atom(g1.atomList[i]);
}
```

```
//
=====

===

public void changeN(double newN) throws IOException
{
    normalise();
    for(int i=0;i<ngas;i++)
        { gasList[i].N*=newN; }
    N=newN;
}

    public boolean base(String s)
    {
        if(s.equals("mole")) {mole=true;for(int i=0;i<ngas;i++){ gasList[i].mole=true; }}
        else {mole=false;for(int i=0;i<ngas;i++){ gasList[i].mole=false; }}
        return mole;
    }

    public boolean unit(String s)
    {
        if(s.equals("SI")) {SI=true;for(int i=0;i<ngas;i++){ gasList[i].SI=true; }}
        else {SI=false;for(int i=0;i<ngas;i++){ gasList[i].SI=false; }}
        return SI;
    }
//
=====

===

    public void add(Gas g1) throws IOException
    {
        // this function adds a single gas to the mixture
        int gasflag=1;
        // if the gas exist in the list simply change N and M values
        for(int i=0;i<ngas;i++)
```



```

{
if(gasList[i].gasName.equals(g1.gasName))
    {
        gasflag=0;
        M=M*N+g1.M*g1.N;
        gasList[i].N+=g1.N;
        N+=g1.N;
        M=M/N;
    }
}
if(gasflag!=0)
{
    Gas newGas[];
    newGas=new Gas[ngas+1];
    for(int i=0;i<ngas;i++)
    {
        newGas[i]=new Gas(gasList[i]);
    }
    ngas++;
    double MT=M*N+g1.M*g1.N;
    N+=g1.N;
    M=MT/N;
    newGas[ngas-1]=new Gas(g1);
    gasList=newGas;
}
arrange_atoms();
}

// =====

public void remove(String name) throws IOException
{
    // this function removes a single gas
    // from the list
    int i,k;

```

```

for(i=0;i<ngas;i++)
{
    if(gasList[i].gasName.equals(name))
    {
        Gas newGas[];
        newGas=new Gas[ngas];
        M=0;
        N=0;
        for(k=0;k<i;k++)
        { newGas[k]=new Gas(gasList[k]);
          M+=newGas[k].M*newGas[k].N;
          N+=newGas[k].N;
        }
        for( k=i;k<(ngas-1);k++)
        {
            newGas[k]=new Gas(gasList[k+1]);
            M+=newGas[k].M*newGas[k].N;
        }
        N+=newGas[k].N;
        M=M/N;
        ngas--;
        gasList=newGas;
        break;
    }
}
arrange_atoms();
// correct dynamic memory size
}

// =====

public void add(String name,double Nnew) throws IOException
{
    // this function adds a single gas to the mixture
    Gas g1=new Gas(name,Nnew);

```

```

int gasflag=1;
// if the gas exist in the list simply change N and M values
for(int i=0;i<ngas;i++)
{
if(gasList[i].gasName.equals(g1.gasName))
{
gasflag=0;
M=M*N+g1.M*g1.N;
gasList[i].N+=g1.N;
N+=g1.N;
M=M/N;
}
}
if(gasflag!=0)
{
Gas newGas[];
newGas=new Gas[ngas+1];
for(int i=0;i<ngas;i++)
{
newGas[i]=new Gas(gasList[i]);
}
ngas++;
double MT=M*N+g1.M*g1.N;
N+=g1.N;
M=MT/N;
newGas[ngas-1]=new Gas(g1);
gasList=newGas;
}
arrange_atoms();
}

// =====

public void simplify() throws IOException

```

```

{
// this function combines any single gas
// that repeated in the list
double ngasold=ngas;
int i,j,k;
for(i=0;i<ngas;i++)
{
for(j=i+1;j<ngas;j++)
{
if(gasList[i].gasName.equals(gasList[j].gasName))
{
gasList[i].N+=gasList[j].N;
for(k=j;k<(ngas-1);k++)
{ gasList[k]=new Gas(gasList[k+1]); }
ngas--;
}
}
}
// correct dynamic memory size
if(ngasold!=ngas)
{
Gas newGas[];
newGas=new Gas[ngas];
for(i=0;i<ngas;i++)
{
newGas[i]=new Gas(gasList[i]);
}
gasList=newGas;
}
}

//
=====
===

```

```

public void normalise() throws IOException
{
for(int i=0;i<ngas;i++)
{
    gasList[i].N=gasList[i].N/N;
}
N=1.0;
arrange_atoms();
}

// =====

public void changeMix(double Nmix[]) throws IOException
{
    // this function changes
        // all the molar weights in the mixture
    N=0;
    M=0;
        for(int i=0;i<ngas;i++)
        {
            gasList[i].N=Nmix[i];
            N+=Nmix[i];
            M+=Nmix[i]*gasList[i].M;
        }
    M=M/N;
    arrange_atoms();
}

// =====

public double vis(double T)
{
    // dynamic viscosity of the mixture
    // note that viscosity of the mixture IS NOT the simple addition
    // of viscosity of component gasses
    double vmix=0;
    for(int i=0;i<ngas;i++)

```

```

{
T=T;
double fij;
double xj=0;
double p1;
double c1,c2,c3;
for(int j=0;j<ngas;j++)
{
double vratio;
double xi=gasList[i].M/gasList[j].M;
if(gasList[j].vis(T)!=0)
{
c1=gasList[i].vis(T)/gasList[j].vis(T);
vratio=Math.sqrt(c1);
}
else
vratio=0;
c2=Math.pow(xi,0.25);
p1=(1+vratio/c2);
c3=8.0+8.0*xi;
fij=p1*p1 / Math.sqrt(c3);
xj+=fij*gasList[j].N/N;
}
vmix+=gasList[i].N/N*gasList[i].vis(T)/xj;
}
return vmix;
}

// =====

public double k(double T)
{
// thermal conductivity of the mixture
// note that thermal conductivity of the mixture IS NOT the
// simple addition of the thermal conductivity of component gasses

```

```

double vmix=0;
for(int i=0;i<ngas;i++)
{
    T=T;
    double fij;
    double xj=0;
    double p1;
    double c1,c2,c3;
    for(int j=0;j<ngas;j++)
    {
        double vratio;
        double xi=gasList[i].M/gasList[j].M;
        if(gasList[j].k(T)!=0)
        {
            c1=gasList[i].k(T)/gasList[j].k(T);
//            if(c1<0) System.out.println("negative c1 value ");
            vratio=Math.sqrt(c1);
        }
        else
            vratio=0;
        c2=Math.pow(xi,0.25);
        p1=(1+vratio/c2);
        c3= 8.0+8.0*xi;
//        if(c2<0) System.out.println(" negative c2 value ");
        fij=p1*p1/Math.sqrt(c3);
        xj+=fij*gasList[j].N/N;
    }
    vmix+=gasList[i].N/N*gasList[i].k(T)/xj;
}
return vmix;
}

```

```

//
=====

===

public double Prandtl(double t)
{
    // Prandtl number
    return Cp(t)*vis(t)/k(t)/M*1e3;
}

//
=====

===

public double h(double T)
{
    //specific enthalpy of the mixture KJ/kmol
    double HH=0;
    for(int i=0;i<ngas;i++)
        { HH+=gasList[i].h(T)*gasList[i].N; }
    return HH/N;
}

//
=====

===

public double ht(double T)
{
    //specific enthalpy of the mixture ht=h+hf
    // hf : formation enthalpy
    double HH=0;
    for(int i=0;i<ngas;i++)
        { HH+=gasList[i].ht(T)*gasList[i].N; }
    return HH/N;
}

```



```

//
=====

===

public double H(double t)
{
    //total enthalpy of the mixture KJ
    return h(t)*N;
}

//
=====

===

public double HT(double t)
    //total enthalpy of the mixture HT=N*(h+hf) KJ
    {
        return ht(t)*N;
    }

//
=====

===

public double u(double T)
{
    // specific internal energy of the mixture KJ/kmol
    double UU=0;
    for(int i=0;i<ngas;i++)
        { UU+=gasList[i].u(T)*gasList[i].N; }
    return UU/N;
}

//=====

public double g(double T,double P)
{
    return h(T)-T*s(T,P);
}

```

```
public double gt(double T,double P)
{
    return h(T)+hf-T*s(T,P);
}
```

```
public double gt(double T)
{
    double Pref;
    if(!SI) {Pref=14.503684;}
    else {Pref=1.0;}
    return h(T)+hf-T*s(T,Pref);
}
```

```
public double g(double T)
{
    double Pref;
    if(!SI) {Pref=14.503684;}
    else {Pref=1.0;}
    return h(T)-T*s(T,Pref);
}
```

```
public double G(double T,double P)
{
    return g(T,P)*N;
}
```

```
public double G(double T)
{
    return g(T)*N;
}
```

```
public double GT(double T)
```

```

{
    return gt(T)*N;
}

```

```

public double GT(double T,double P)

```

```

{
    return gt(T,P)*N;
}

```

```

//

```

```

=====

```

```

===

```

```

    public double  Cp(double T)

```

```

    {

```

```

        // Specific energy at constant pressure  KJ/kmol K

```

```

        double C=0;

```

```

            for(int i=0;i<ngas;i++)

```

```

                { C+=gasList[i].Cp(T)*gasList[i].N; }

```

```

        return C/N;

```

```

    }

```

```

// =====

```

```

    public double  Cv(double T)

```

```

        //Specific energy at constant volume  KJ/kmol K

```

```

    {

```

```

        double C=0;

```

```

        for(int i=0;i<ngas;i++)

```

```

            { C+=gasList[i].Cv(T)*gasList[i].N; }

```

```

        return C/N;

```

```

    }

```

```

// =====

```

```

    public double  gamma(double T)

```

```

    {

```

```

        //adiabatic constant

```

```

        return Cp(T)/Cv(T);

```

```

    }

// =====

    public double c(double T)
    //speed of sound m/s
    {
        return Math.sqrt(8314.5/M*T*gamma(T));
    }

// =====

    public double s(double T, double P)
    {
        //specific entropy KJ/kmol K
        double SS=0;
        for(int i=0;i<ngas;i++)
        {
            SS+=gasList[i].s(T,P)*gasList[i].N;
        }
        return SS/N;
    }

    public double s(double T)
    {
        //specific entropy KJ/kmol K
        double P=1.0;
        double SS=0;
        for(int i=0;i<ngas;i++)
        {
            SS+=gasList[i].s(T,P)*gasList[i].N;
        }
        return SS/N;
    }

    public double pr(double T)
{
double Tref, Rref;

```

```

    if(!SI) {Tref=491.67;Rref=1.986;}
    else {Tref=273.15;Rref=8.3145;}
    if(!mole) Rref/=M;
    return Math.exp((s(T)-s(Tref))/Rref);
}

```

```

public double vr(double T)
{
    double Rref;
    if(!SI) {Rref=1.986;}
    else {Rref=8.3145;}
    return (Rref/M)*T/pr(T)*10;
}

```

```

// =====

```

```

public double v(double T, double P)
{
    double VV=0;
    for(int i=0;i<ngas;i++)
        { VV+=gasList[i].v(T,P)*gasList[i].N; }
    return VV/N;
}

```

```

// =====

```

```

public double T( char name,double y0,double p)
{
    double t=300;
    if(name=='v') {t= p*1e5*y0/8.314e3;}
    else
    {
        double dt;
        int nmax=400;
        double tolerance=1.0e-8;
        for(int i=0;i<nmax;i++)

```

```

{
if (name=='h') dt=-( h(t) - y0 ) /Cp(t);
else if(name=='u') dt=-( u(t) - y0 ) /Cv(t);
else if(name=='s') dt=-( s(t,p) - y0 ) /(Cp(t)/t);
    else { System.out.println("wrong name defined please try h,u,s or v");
break;}
    t+=dt;
    if(Math.abs(dt)<tolerance) break;
}
}
return t;
}
// =====
public double P( char name,double y0,double t1)
{
if(name=='v')    return 8.314e3*t1/y0*1e-5;
else if (name=='s') return Math.exp((s(t1,1.0)-y0)/8.314);
else { System.out.println("wrong name defined please try s or v"); return 1.0;}
}
// =====
public void multiplyassign(double Nx)
{
    for(int i=0;i<ngas;i++)
        { gasList[i].N*=Nx; }
    N*=Nx;
}
// =====
public void addassign(Gas g1) throws IOException
{
    // this function adds a single gas to the mixture
    int gasflag=1;
    // if the gas exist in the list simply change N and M values
    for(int i=0;i<ngas;i++)

```

```

    {
    if(gasList[i].gasName==g1.gasName)
        {
            gasflag=0;
            M=M*N+g1.M*g1.N;
            gasList[i].N+=g1.N;
            N+=g1.N;
            M=M/N;
        }
    }
    if(gasflag!=0)
    {
        Gas newGas[];
        newGas=new Gas[ngas+1];
        for(int i=0;i<ngas;i++)
        {
            newGas[i]=new Gas(gasList[i]);
        }
        ngas++;
        double MT=M*N+g1.M*g1.N;
        N+=g1.N;
        M=MT/N;
        newGas[ngas-1]=new Gas(g1);
        gasList=newGas;
    }
}

// =====

public void addassign(Gmix right) throws IOException
{
    // this function adds a gas mixture to the mixture
    for(int i=0;i<right.ngas;i++)
    {
        add(right.gasList[i]);
    }
}

```

```

        }
    }
// =====
public Gmix multiply( double Nx,Gmix right) throws IOException
{
    Gmix g1=new Gmix(right);
    g1.N*=Nx;
    for(int i=0;i<g1.ngas;i++)
    {
        g1.gasList[i].N*=Nx;
    }
    return g1;
}
// =====
public Gmix add(Gas l,Gas r) throws IOException
{
    Gmix g1=new Gmix(r);
    Gas g2=new Gas(l);
    g1.add(g2);
    return g1;
}
// =====
public Gmix add(Gmix l,Gas r) throws IOException
{
    Gmix g1=new Gmix(l);
    Gas g2=new Gas(r);
    g1.add(g2);
    return g1;
}
// =====
public Gmix add(Gas l,Gmix r) throws IOException
{
    Gmix g1=new Gmix(r);

```



```

Gas g2=new Gas(l);
g1.add(g2);
return g1;
}

// =====

public Gmix add(Gmix l,Gmix r) throws IOException
{
Gmix g1=new Gmix(l);
for(int i=0;i<r.ngas;i++)
    {
        g1.add(r.gasList[i]);
    }
return g1;
}

// =====

public void assign(Gmix g1) throws IOException
{
    gasName=g1.gasName;
    N=g1.N;
    M=g1.M;
    ngas=g1.ngas;
    Gas newGas[];
    newGas=new Gas[ngas];
    for(int i=0;i<ngas;i++) newGas[i]=g1.gasList[i];
    gasList = newGas;
}

// =====

public void assign(Gas g1) throws IOException
{
// a single gas is assigned to the mixture
    gasName=g1.gasName;
    N=g1.N;
    M=g1.M;

```

```

ngas=1;
gasList=new Gas[ngas];
gasList[0]=new Gas(g1);
}

```

```

public String toString(String ch)
{
//return the c
String s="";
int i,j;
if(ch.equals("name"))
    s=s+gasName+"\n";
else if(ch.equals("formula"))
{
    for(i=0;i<ngas;i++)
        { s=s+" "+gasList[i].toString()+" "+gasList[i].N+"\n"; }
}
else if(ch.equals("composition"))
{
    for(i=0;i<natom;i++)
        s=s+atomList[i].toString()+"\n";
}
return s;
}

```

```

public String[][] toString1(double v1, double v2)
{
String s1[][]=new String[20][3];
s1[0][0]="P, pressure          ";
s1[1][0]="T, temperature          ";
s1[2][0]="v, specific volume      ";
s1[3][0]=" density                ";
s1[4][0]="h, enthalpy              ";

```

```

s1[5][0]="u, internal energy      ";
s1[6][0]="s, entropy              ";
s1[7][0]="g, qibbs free energy    ";
s1[8][0]="ht,chemical entropy     ";
s1[9][0]="gt,chemical gibbs f.e.  ";
s1[10][0]="Cp, specific heat at const P ";
s1[11][0]="Cv, specific heat at const v";
s1[12][0]="Cp/Cv, adiabatic constant ";
s1[13][0]="c, speed of sound      ";
s1[14][0]="viscosity              ";
s1[15][0]="thermal conductivity   ";
s1[16][0]="M, molecular weight     ";
s1[17][0]="Prandtl number          ";
s1[18][0]="Pr, reduced pressure    ";
s1[19][0]="vr, reduced volume      ";

```

```

if(SI && !mole)

```

```

{
s1[0][2]=" bars      ";
s1[1][2]=" deg K     ";
s1[2][2]=" m^3/kg     ";
s1[3][2]=" kg/m^3     ";
s1[4][2]=" KJ/kg      ";
s1[5][2]=" KJ/kg      ";
s1[6][2]=" KJ/kg K    ";
s1[7][2]=" KJ/kg      ";
s1[8][2]=" KJ/kg      ";
s1[9][2]=" KJ/kg      ";
s1[10][2]=" KJ/kg K   ";
s1[11][2]=" KJ/kg K   ";
s1[12][2]="           ";
s1[13][2]=" m/s       ";
s1[14][2]=" Ns/m^2    ";

```

```

s1[15][2]=" W/m K    ";
s1[16][2]=" kg/kmol   ";
s1[17][2]="          ";
s1[18][2]="          ";
s1[19][2]="          ";
}
else if(SI && mole)
{
s1[0][2]=" bars      ";
s1[1][2]=" deg K     ";
s1[2][2]=" m^3/kmole  ";
s1[3][2]=" kmole/m^3  ";
s1[4][2]=" KJ/kmole   ";
s1[5][2]=" KJ/kmole   ";
s1[6][2]=" KJ/kmole K  ";
s1[7][2]=" KJ/kmole   ";
s1[8][2]=" KJ/kmole   ";
s1[9][2]=" KJ/kmole   ";
s1[10][2]=" KJ/kmole K  ";
s1[11][2]=" KJ/kmole K  ";
s1[12][2]="          ";
s1[13][2]=" m/s       ";
s1[14][2]=" Ns/m^2     ";
s1[15][2]=" W/m K     ";
s1[16][2]=" kg/kmol    ";
s1[17][2]="          ";
s1[18][2]="          ";
s1[19][2]="          ";
}
else if(!SI && mole)
{
s1[0][2]=" lbf/in^2, psia ";
s1[1][2]=" deg R       ";

```

```

s1[2][2]=" ft^3/lbmole  ";
s1[3][2]=" lbmole/ft^3  ";
s1[4][2]=" BTU/lbmole  ";
s1[5][2]=" BTU/lbmole  ";
s1[6][2]=" BTU/lbmole K  ";
s1[7][2]=" BTU/lbmole  ";
s1[8][2]=" BTU/lbmole  ";
s1[9][2]=" BTU/lbmole  ";
s1[10][2]=" BTU/lbmole K  ";
s1[11][2]=" BTU/lbmole K  ";
s1[12][2]="          ";
s1[13][2]=" ft/s          ";
s1[14][2]=" lbm/(ft.s)  ";
s1[15][2]=" BTU/(hr ft R)  ";
s1[16][2]=" lbm/lbmole  ";
s1[17][2]="          ";
s1[18][2]="          ";
s1[19][2]="          ";
}
else if(!SI && !mole)
{
s1[0][2]=" lbf/in^2, psia  ";
s1[1][2]=" deg R          ";
s1[2][2]=" ft^3/lbm       ";
s1[3][2]=" ft^3/lbm       ";
s1[4][2]=" BTU/lbm        ";
s1[5][2]=" BTU/lbm        ";
s1[6][2]=" BTU/lbm K      ";
s1[7][2]=" BTU/lbm        ";
s1[8][2]=" BTU/lbm        ";
s1[9][2]=" BTU/lbm        ";
s1[10][2]=" BTU/lbm K     ";
s1[11][2]=" BTU/lbm K     ";

```

```

s1[12][2]="          ";
s1[13][2]=" ft/s      ";
s1[14][2]=" lbm/(ft.s)  ";
s1[15][2]=" BTU/(hr ft R) ";
s1[16][2]=" lbm/lbmole  ";
s1[17][2]="          ";
s1[18][2]="          ";
s1[19][2]="          ";
}
double pp[]=property(v1,v2);
for(int i=0;i<20;i++)
{s1[i][1]="" +pp[i];}
return s1;
}

```

```

public double[] property(double t, double p)
{
double pp[]=new double[20];
pp[0]=p;
pp[1]=t;
pp[2]=v(t,p);
pp[3]=1.0/pp[2];
pp[4]=h(t);
pp[5]=u(t);
pp[6]=s(t,p);
pp[7]=g(t,p);
pp[8]=ht(t);
pp[9]=gt(t,p);
pp[10]=Cp(t);
pp[11]=Cv(t);
pp[12]=gamma(t);
pp[13]=c(t);
pp[14]=vis(t);

```

```
pp[15]=k(t);  
pp[16]=M;  
pp[17]=Prandtl(t);  
pp[18]=pr(t);  
pp[19]=vr(t);  
return pp;  
}
```

```
}//end of class
```

ÖZGEÇMİŞ

Semih YILMAZ, 23 Eylül 1985'te Ankara'da doğmuştur. İlk ve orta öğrenimini Ankara'da yapmış, 2003 yılında Ankara Atatürk Anadolu Lisesi'nden mezun olmuştur. Yükseköğrenimini 2003- 2007 yıllarında Ege Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Makine Mühendisliği bölümünde yapmış, 2007 yılında Erasmus bursu ile Rovira i Virgili Üniversitesi, Tarragona/İSPANYA'DA değişimli öğrenci olarak öğrenim görmüştür. Aynı yıl bölüm birincisi olarak mezun olmuştur. 2008 yılında Ege Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Enerji Anabilim Dalı'nda yüksek lisansa başlamıştır.

2007-2008 yılları arasında Ege Üniversitesi Makine Mühendisliği bölümünde Yrd. Doç. Dr. M. Turhan Çoban tarafından yürütülmekte olan “Doğalgaz Yakıtlı Katı Oksitli Yakıt Pili Sisteminin Geliştirilmesi” adlı DPT projesinde çalışmıştır.

2008 yılında SENKA ENERJİ LTD. ŞTİ. bünyesinde proje ve geliştirme mühendisi olarak işe başlamıştır, halen bu firmada iş hayatına devam etmektedir.