

*Ырысбай кызы Н., Калбеков А.*

**ОТУН ЭЛЕМЕНТИНИН МАТЛАВ ПРОГРАММАСЫ МЕНЕН  
ИШТӨӨСҮНҮН СИМУЛЯЦИЯСЫ**

*Ырысбай кызы Н., Калбеков А.*

**СИМУЛЯЦИЯ РАБОТЫ ТОПЛИВНОГО ЭЛЕМЕНТА  
С ПОМОЩЬЮ ПРОГРАММЫ МАТЛАВ**

*Irisbay kızı N., A. Kalbekov*

**YAKIT HÜCRE SININ PERFORMANSININ MATLAB  
PROGRAM ILE SIMÜLASYONU**

*Yrysbaı kyzy N., A. Kalbekov*

**SIMULATION OF FUEL CELL PERFORMANCE  
WITH PROGRAM MATLAB**

УДК: 541.37

*Отун элементи, бүгүнкү күндөгү энергетикалык ресурстарга өтө жакшы бир альтернатива болгондуктан мунун иштөөсүн түшүнүү өтөө маанилүү. Бул изилдөөдө, отун элементинин иштөөсүнүн симуляциясы MATLAB программалоо тили менен жасалды. Изилдөөдөн төмөнкү жыйынтыктар табылды. Отун элементиндеги реакция экзотермикалык реакция болгондуктан, температуранын жогорулашы элементтин иштөөсүнө таасирин тийгизет. Реакция гетерогендик реакция болгондуктан, реактанттардын жарым-жартылай басымын жогорулатуу элементтин потенциалын арттырат. Элементтеги процесс илгерилеген сайын башкача айтканда агым арткан сайын кээ бир жоготуулар болгондуктан чыгыштагы чыңалуу башкача айтканда элемент потенциалы илгерилеген сайын азаят. Элементтин күчү математикалык жактан эки бир-бирине карама каршы векторлордон болгондуктан белгилүү бир чекитте максимумга чыгат жана андан кийин түшөт. Бул жыйынтыктардан белгилүү болгондой, отун элементтеринин иштөөсүнүн симуляциясын жасоо өтөө маанилүү*

**Негизги сөздөр:** отун элементи, симуляция, матрикалык лаборатория (MATLAB), альтернативдик энергия, Батлер-Вольмер теңдемеси, Нернст теңдемеси, электрик энергия.

*Поскольку топливный элемент является лучшей альтернативой сегодняшним источникам энергии, очень важно понять его работу. В этом исследовании симуляция работы топливного элемента было выполнено с использованием языка программирования MATLAB. В ходе исследования были получены следующие результаты. Поскольку реакция в топливном элементе является экзотермической, повышение температуры влияет на производительность. Поскольку реакция представляет собой гетерогенную реакцию, увеличение парциальных давлений реагентов увеличивает потенциал элемента. По мере развития процесса в элементе, то есть при увеличении тока, возникают некоторые потери, поэтому выходное напряжение или потенциал элемента постепенно уменьшаются. Сила элемента математически состоит из двух противоположных векторов, таким образом, достигая максимума в определенной точке и затем падая. Из этих результатов очевидно, что важно моделировать работу топливных элементов.*

**Ключевые слова:** Топливный элемент, моделирование, матричная лаборатория (MATLAB), альтернативная энергия, уравнение Батлера-Вольмера, уравнение Нернста, электрическая энергия.

*Yakıt hücre si günümüzdeki enerji kaynaklarına en iyi bir alternatif olduğundan dolayı bunun çalışmasını anlamak çok önemlidir. Bu çalışmada, yakıt hücre sinin performans simülasyonu, MATLAB programlama dili ile yapılmıştır. Çalışma esnasında, aşağıdaki sonuçlar elde edilmiştir. Yakıt hücre sinde oluşan reaksiyon ekzotermik olduğundan dolayı sıcaklık artması performans üzerine etki yapar. Reaksiyon heterojen bir reaksiyon olduğundan reaktantların kısmi basınçlarının artması hücre nin potansiyelini artırır. Hücre de oluşan proses ilerledikçe yani akım arttıkça, bazı kayıplar olduğundan dolayı çıkış voltaj yani hücre potansiyeli gittikçe düşer. Hücre nin gücü ise, matematiksel olarak iki karşı yöndeki vektörlerden olduğundan, belli bir noktada maksimuma ulaşır ve sonra düşer. Bu sonuçlardan belli oluyor ki, yakıt pillerinin performans simülasyonu yapılması önemlidir.*

**Anahtar kelimeler:** yakıt pili, simülasyon, matris laboratuvarı (MATLAB), alternatif enerji, Butler-Volmer denklemi, Nernst denklemi, elektrik enerji.

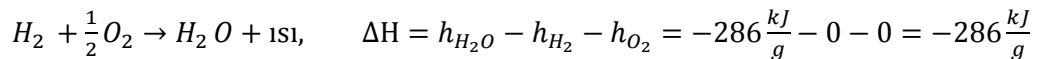
As the fuel cell is the best alternative to today's energy sources, it is very important to understand its operation. In this study, the simulation of the performance of the fuel cell was carried out with MATLAB programming language. During the study, the following results were obtained. Because the reaction in the fuel cell is exothermic, the increase in temperature affects the performance. Since the reaction is a heterogeneous reaction, increasing the partial pressures of the reactants increases the potential of the cell. As the process in the cell progresses, as the current increases, some losses occur, so the output voltage or the cell potential decreases gradually. The power of the cell is mathematically composed of two opposing vectors, thus it reaches a maximum at a certain point and then drops. It is obvious from these results that it is important to simulate the performance of fuel cells.

**Key words:** fuel cell, simulation, matrix laboratory (MATLAB), alternative energy, Butler-Volmer equation, Nernst equation, electrical energy.

**1. Giriş.** Global ekonomik gelişmeler ve insan popülasyonunun hızla artması enerji ihtiyacını da aynı hızla artırmaktadır. İnsan ihtiyaçlarının karşılanması için gerekli olan enerjinin günümüzdeki en popüler kaynaklarını fosil yakıtları (kömür, doğal gaz, petrol, vb), nükleer enerji ve hidrolik enerji oluşturmaktadırlar. Ama bu enerji kaynaklarının bazılarını kullanmak zor ve tehlikeli ve aynı zamanda ileri gittikçe azalmaktadır. Bu yüzden alternatif bir yakıt ve enerji sisteminin kurulmasına ihtiyaç duyulmaktadır. Yakıt pili sistemi bu alternatif olabilir. Çünkü temiz bir enerji kaynağını ve sonuçta bir elektrik akımı ve temiz su elde edilmektedir. Yakıt pili sistemi, diğer enerji sistemlerine göre daha yüksek verimliliğe sahiptir ve % 80 oranında toplam verimliliğe ve %40-60'lık elektriksel verimliliğe ulaşabilir [1,2]. Şu anda yaygın olarak kullanılan makine motorü gibi diğer enerji sistemlerinin verimliliği ideal durum olan Carnot çevrimine göre % 54'den yüksek olamaz. Bu açıdan yakıt pili en iyisidir. Ama yakıt pilinin en büyük dezavantajı ise onun fiyatıdır. Örneğin, bir yakıt pilindeki katalizör tabakası üzerinde meydana gelen reaksiyon çok yavaştır ve bunu hızlandırmak için kullanılan katalizör ise çok pahalıdır. Bu yüzden bütün unite pahalı olur [3,4]. Ama yukarıda belirtildiği gibi yakıt pilinin avantajı çoktur. Bundan dolayı son zamanlarda uzay araçlarında çokça kullanılır ve bunun çalışma prensiplerini öğrenmek çok önemlidir [5,6]. Bunun için de performans simülasyonu yapılmalıdır.

**2. Kullanılan aletler ve simülasyon yöntemi.** MATLAB yazılımını kullanılarak genel performans simülasyonu yapılmıştır [7,8].

Önce yakıt pilinin termodinamiğine bakılmıştır. Burada sadece yakıt hücresindeki reaksiyonun termodinamiğini göz önüne aldığımızda:



Ancak her kimyasal reaksiyonda bir miktar entropi değişimi olur ve bu nedenle hidrojenin enerjisinin bir kısmı elektrığe dönüştürülemez. Bu yüzden aşağıdaki ifadeleri yapabiliriz [9,10].

$$\Delta G = \Delta H - T \Delta S$$

$$\Delta S = s_{H_2O} - s_{H_2} - s_{O_2}$$

25° C'de (= 298,15 K),  $237 \frac{kJ}{g}$  ve  $286 \frac{kJ}{g}$  electrical elektrik enerjisine ve kalan  $49 \frac{kJ}{g}$  ise ısıya dönüşür.

Yakıt hücresinin teorik potansiyeli aşağıdaki gibidir.

$$E = -\frac{\Delta G}{nF}; \quad \Delta G \text{ ve } F \text{ (Faraday) } 25^\circ C \text{ için bilinir, daha sonra}$$

$$E = -\frac{\Delta G}{nF} = \frac{237}{2 \cdot 96485} = 1.23 V \text{ } 25^\circ C \text{ de yakıt hücresinin teorik}$$

potansiyeli 1.23 V olarak bulunur.

Verimlilik ise  $\eta = \frac{237}{286} = \% 83$ 'dür.

Ancak sıcaklığın etkisi büyüktür. Yakıt hücresinin Gibbs serbest enerjisi entalpi ve entropiye bağlı olduğundan, bu iki parametre de özgül ısının fonksiyonlarıdır ve özgül ısı da sıcaklığa bağlıdır. Specific ısının sıcaklığa bağlılığını gösteren formül:

$$C_p = a + bT + cT^2$$

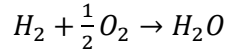
Burada  $a$ ,  $b$  ve  $c$  sabitlerdir.

$$h_T = h_{25} + \int_{25}^T C_p dT; \quad s_T = s_{25} + \int_{25}^T C_p dT;$$

Yakıt pilin potansiyeli Gibbs serbest enerjine direkt bağlıdır. Gibbs serbest enerjisi ise sıcaklığa bağlıdır.

$$E = -\frac{\Delta G}{nF}; \quad \Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

Basıncın potansiyele olan etkisine bakmak, gaz fazı reaksiyonu olduğu için, çok önemlidir. Basıncın etkisin görebilmek için, meşhur Nernst denklemi kullanılır.



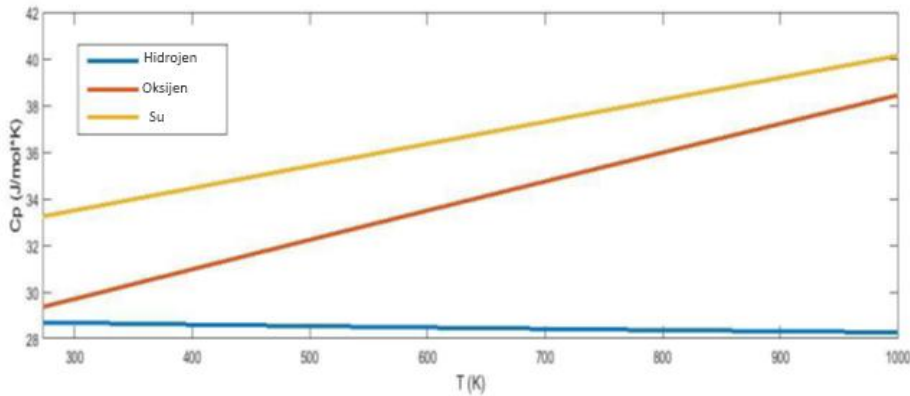
Reaksiyonu için ideal gaz denkleminde teorik potansiyel denklemine (Nernst denklemi) basıncı eklediğimizde, denklem şöyle olur:

$$\Delta G = \Delta G_o + RT \ln \left( \frac{P_{H_2O}}{P_{H_2} P_{O_2}^{0.5}} \right), \quad \text{ve} \quad E = E_0 + \frac{RT}{nF} \ln \left( \frac{P_{H_2} P_{O_2}^{0.5}}{P_{H_2O}} \right)$$

Yakıt hücresinde oluşan reaksiyonun kinetiğine baktığımızda, bunun elektrokimyası çok karmaşıktır. Yakıt hücresindeki proses sırasında bazı kayıplar (aşırı potansiyeden dolayı) vardır. Temel olarak, bunlar: aktivasyon potansiyeli (Tafel denkleminde), Ohmik potansiyel (Ohm yasasından) ve konsantrasyon potansiyelidir. Butler-Volmer denklemi, yukarıda belirtilen aşırı potansiyeli içeren yakıt hücresinin elektrokimyasını tanımlamak için kullanılır [11-14]:

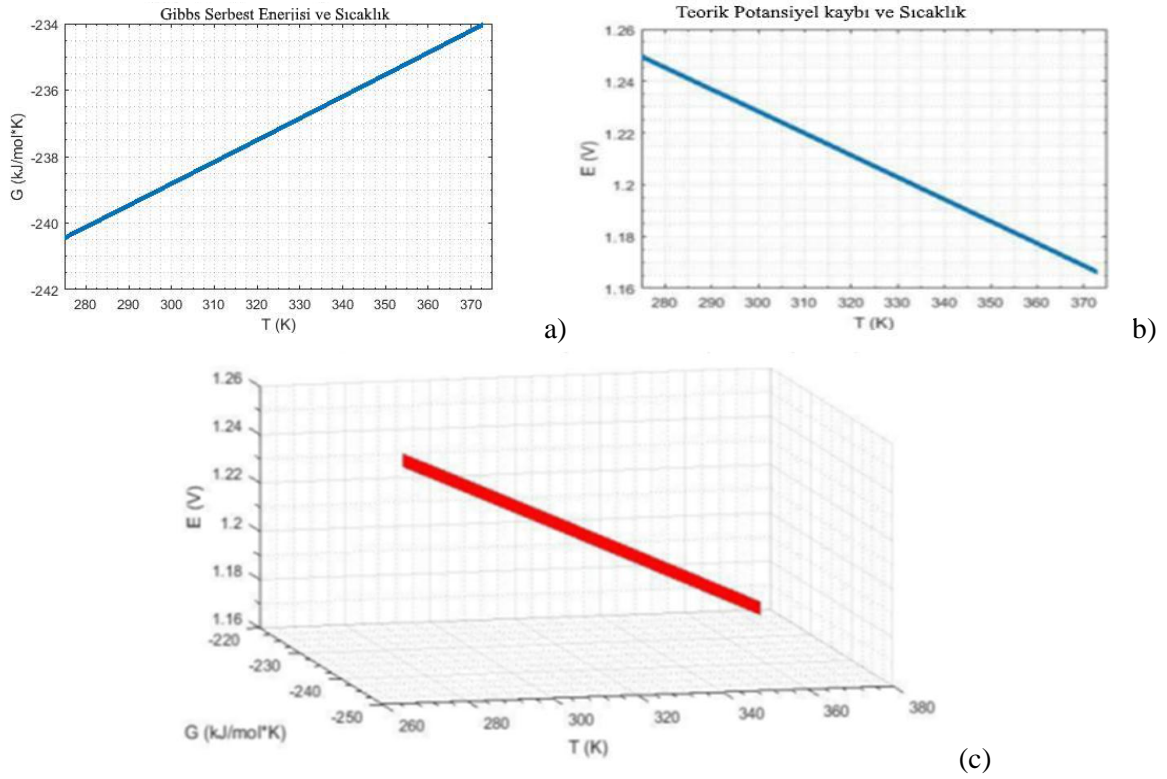
$$i = i_0 \left\{ \exp \left[ \frac{-a_{Rd} F (E - E_r)}{RT} \right] - \exp \left[ \frac{-a_{Ox} F (E - E_r)}{RT} \right] \right\}$$

**3. Sonuç ve tartışmalar.** Yukarıda belirttiğimiz gibi sıcaklık etkisi çok önemlidir. Yakıt pildeki oluşan reaksiyon ekzotermik olduğundan dolayı sıcaklık artışı olumsuz yönde etkilenir. Reaksiyon entalpisi ve entropisi özgül ısıya bağlıdır. Bu yüzden önce özgül ısının değişimine bakalım. Sıcaklığın artması, suyun ve oksijenin özgül ısılarını olumlu etkiler ama hidrojenin özgül ısını biraz ters yönde etkiler (Şekil 1).



Şekil 1. Özgül ısının sıcaklığa göre değişimi.

Gibbs serbest enerjisi, entalpi, entropi ve sıcaklığa bağlı olduğundan dolayı bunları birlikte çözerek simüle ettiğimizde, Şekil 2'den gözdüğümüz gibi sıcaklık arttıkça, Gibbs serbest enerjisi azalmakta (a) ve teorik potansiyel de sırasıyla azalmaktadır (b).



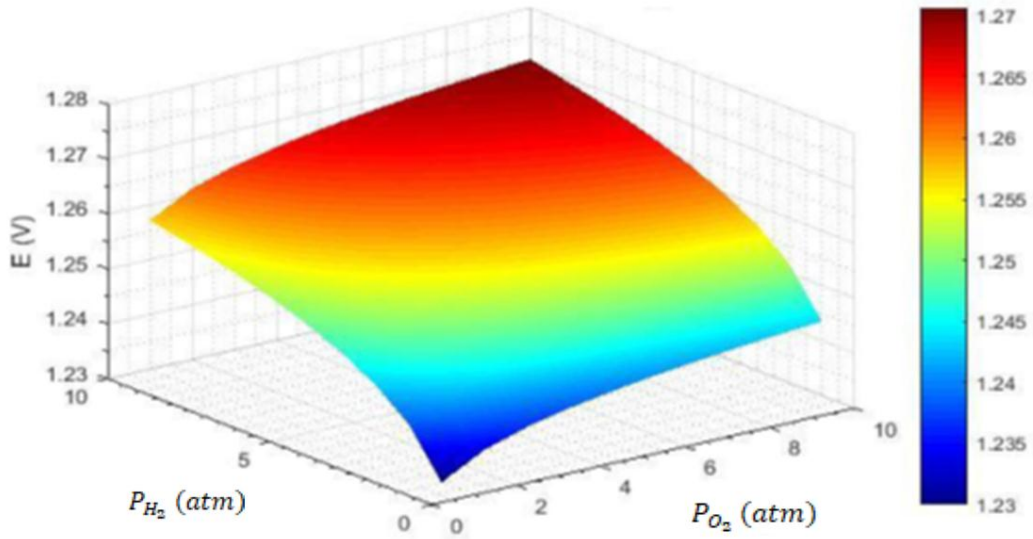
Şekil 2. (a), (b), (c) - Sıcaklığın etkisi.

Teorik potansiyel kaybı da, sıcaklık arttıkça daha büyük olabilir. Sıcaklığa göre doğrusal olarak artar (Şekil 3).



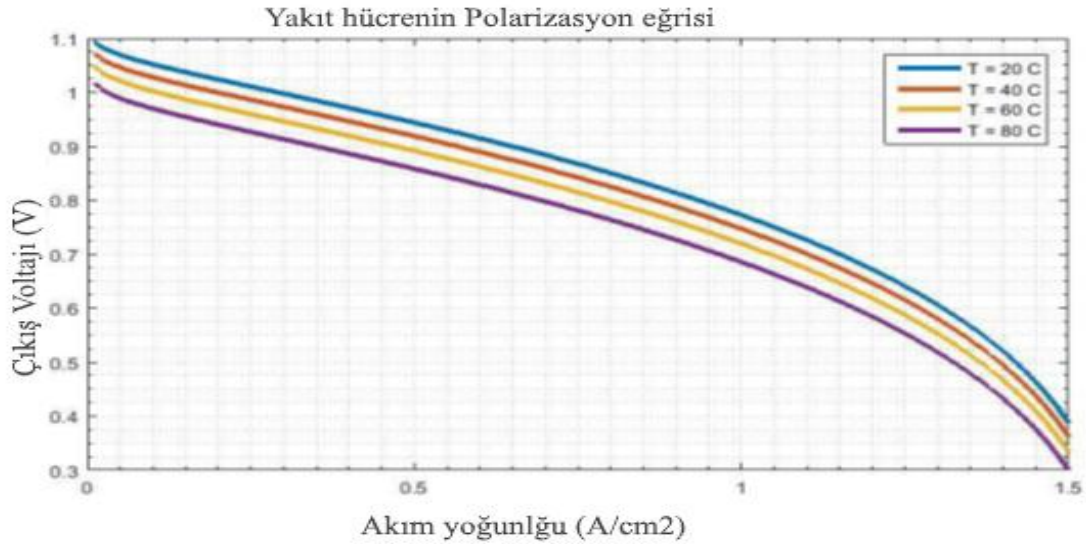
Şekil 3. Sıcaklığa bağlı potansiyel kaybı.

$H_2$  ve  $O_2$  kısmi basınçlarının artması kesinlikle yakıt hücresinin potansiyelini arttıracaktır.  $H_2$ 'nin kısmi basıncının artması potansiyeli daha fazla etkileyecektir. Çünkü  $H_2$  elektrodundaki reaksiyon hız tayin edici adımdır (Şekil 4).



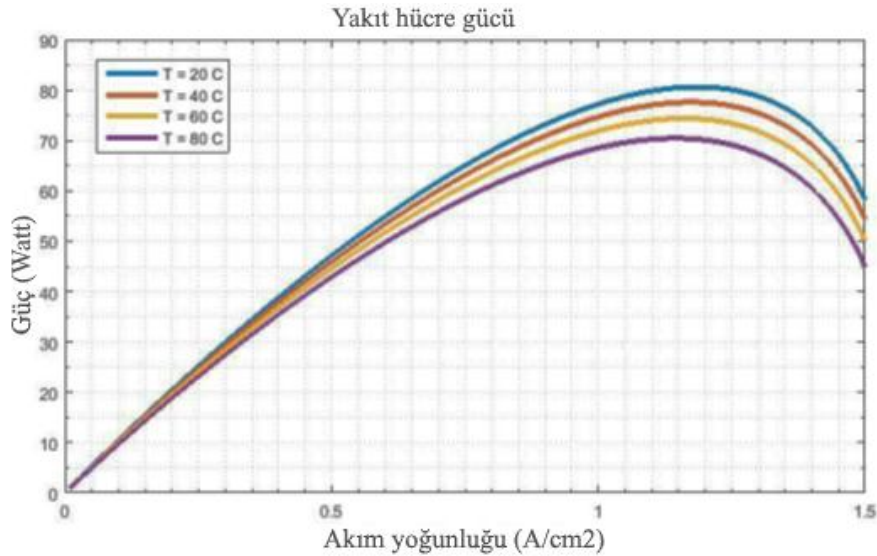
Şekil 4. Teorik potansiyele kısmi basınçların etkileri.

Butler-Volmer denklemini kullanarak reaksiyonun kinetiğinin simülasyonun yaparsak, Şekil 5'te gördüğümüz gibi, yakıt pilinden çıkan voltaj gittikçe azalır. Bu da, akım yoğunluğunu arttırmanın potansiyel veya çıkış voltajının kaybına neden olduğu demektir.



Şekil 5. Yakıt hücresinin aşırı potansiyeli.

Yakıt hücresinin gücü ise, belirli akım yoğunluğunda maksimum noktaya ulaşacak ve sonra inecektir (Şekil 6).



Şekil 6. Yakıt hücresinin güç değişimi.

Sonuçta, yakıt hücresinin elektrik elde etmede çok verimli olduğunu görüyoruz. Reaksiyonun termodinamiğine baktığımızda verimlilik % 80'in üzerindedir. Reaksiyon ekzotermik bir reaksiyon olduğundan, sıcaklık-taki artış olumsuz yönde etkilenecek ve verimlilik kaybına neden olacaktır. Reaksiyon katalitik bir reaksiyondur ve bu yüzden reaktantların kısmi basınçlarının artmaları verimliliği arttırır. Mevcut hücre akım yoğunluğunu artırarak yakıt hücresinde aşırı hızlanma artmakta ve bunun sonucunda yakıt hücresi gücü maksimum noktaya ulaşacak ve düşmeye başlayacaktır.

#### Referanslar:

1. Department of Energy USA, Fuel Cell System Cost – 2016, 2016.
2. EG&G Services, etc., Fuel Cell Handbook, 5E, 2000
3. Jiujiu Zhang, PEM fuel cell catalysis and catalyst layers, 2008.
4. M.T.M. Koper, Fuel Cell Catalysis, 2009.
5. D.P. Wilkinson, ve ark., Proton Exchange Membrane Fuel Cells, 2010.
6. G.Hoogers, Fuel Cell Technology Handbook, 2003.
7. S.Gültekin, MATLAB ile Kimya Mühendisliğinde Matematiksel Modelleme (Mathematical Modelling in Chemical Engineering using MATLAB), KTMÜ Yayını, Bişkek, 2017.
8. S.Gültekin, ve ark., "Catalyst Deactivation", Arabian Journal for Science and Engineering, 12, 1 (1986) 59-72.
9. O.Levenspiel, Understanding Engineering Thermo, 1996.
10. A.Kabza, Fuel Cell Formulary, 2016.
11. D.Song, ve ark., "Numerical Optimization Study of the Fuel Cell Catalyst Layer of PEM Fuel Cell Cathod." Journal of Power Source 126 (2004) 104-111.
12. C.Spiegel, PEM Fuel Cell Modeling and Simulation Using MATLAB, 2008.
13. M.J. Eslamibidgoli, ve ark., "How Theory and Simulation Can Drive Fuel Cell Electrocatalysis." Nano Energy 29 (2016) 334-361.
14. F.Barbir, PEM Fuel Cells: Theory and Practice, 2005.

Рецензент: к.т.н., доцент Боркоев Б.