Aspen Plus Programı Kullanılarak Katı Oksit Yakıt Hücresinin Çalışma Performansının İncelenmesi

Senem Sezer, Uğur Özveren

Kimya Mühendisliği Bölümü, Marmara Üniversitesi, İstanbul, Türkiye

senemsezer@marun.edu.tr, ugur.ozveren@marmara.edu.tr

ÖZET

Katı oksit yakıt hücreleri, temiz bir enerji üretim teknoloji olması sebebiyle son yıllarda oldukça dikkat çekmektedir. Katı oksit yakıt hücreleri diğer yakıt hücreleri ile karşılaştırıldığında; yüksek verimlilikte enerji üretimi, yakıt esnekliği ve elektrik üretim kapasitesi yüksekliği avantajlarıyla tercih edilmektedir.

Aspen Plus benzeşim programının sahip olduğu esneklik nedeni ile araştırmacılar tarafından yakıt hücrelerinin tasarımı ve optimizasyonu için tercih edilmektedir.

Bu çalışmada, Aspen Plus benzeşim programı kullanılarak katı oksit yakıt hücresine beslenen yakıt içeriğindeki hidrojen kompozisyonunun ve yakıt hücresi sıcaklığının yakıt hücresinin verimi üzerindeki etkisi incelenmiştir.

Anahtar Kelimeler: Aspen Plus**,** katı oksit yakıt hücresi, yenilenebilir enerji, elektrik üretimi, modelleme

1. GİRİŞ

Artan çevre kirliliği ve enerji talebine çözüm olabilmek için fosil kaynakların yerine yenilenebilir enerji kaynaklarının kullanılması için çalışmalar yapılmaktadır [1]. Kömür, petrol ve doğal gazdan sonra biyokütle;dördüncü büyük enerji kaynağı olarak bilinmektedir. Biyokütle genellikle "karbon-nötr" bir yakıt olarak kabul edilir ve düşük miktarda kükürt, azot içermesi sebebiyle çevre üzerinde çok az olumsuz etkiye sahiptir [2].

Biyokütleyi sentez gazı, etanol gibi biyoyakıtlara dönüştürmek için çeşitli termokimyasal (piroliz, gazlaştırma, sıvılaştırma, yakma) ve biyokimyasal (enzimatik hidroliz ve fermentasyon) teknolojileri mevcuttur [3]. Bunlar arasından gazlaştırma yüksek verimlilikte güç ve ısı elde edilmesi ve açığa çıkan gaz bileşiminden dolayı çevreye olan zararlı etkilerinin daha az olması sebebiyle diğer yöntemlere göre daha fazla tercih edilmektedir [4]. Biyokütle, prosese oksijen sağlayan bir yanıcı ajanla (hava, oksijen, buhar) reaksiyona girer ve hidrojen (H_2), karbon monoksit (CO), metan (CH_4) ve karbon dioksitten (CO_2) oluşan bir sentez gaz karışımına dönüşür[5]. Gazlaştırıcıların çoğu, güç üretmek için gaz motoru, buhar türbini ve gaz türbini ile kombine çevrimler oluşturmuştur. Gazlaştırma teknolojisinin yakıt hücreleriyle, özellikle de yüksek sıcaklıktaki yakıt hücreleriyle birlikte kullanılması enerji verimliliğini arttırmaktadır [6, 7].

Yenilenebilir enerji kaynaklarından biri olan yakıt hücreleri, temiz elektrik enerjisi ve yakıt üretiminden dolayı günümüzde umut vaat eden enerji üretim seçeneklerinden biri olarak kabul edilebilir[8]. Yakıt hücreleri yüksek verimlilik, yüksek kapasite, düşük emisyon, gürültüsüz işletim ve dayanıklılık gibi birçok avantaja sahiptirler [9].

Yakıt hücrelerinin malzeme yapısı ve çalışma koşullarına göre, Proton Değişim Membran Yakıt Hücresi (PEMFC), Fosforik Asit Yakıt Hücresi (PAFC), Alkalin Yakıt Hücresi (AFC), Katı Oksit Yakıt Hücresi (SOFC) gibi birçok çeşidi bulunmaktadır [10]. Bunlar arasından katı oksit yakıt hücresi oldukça dikkat çekmektedir. Katı oksit yakıt hücreleri, hidrojen gibi bir yakıtın kimyasal enerjisini doğrudan elektrik enerjisi ve ısıya dönüştüren, yüksek güç üretkenliği, düşük kirletici emisyonu ve yakıt esnekliği sağlayan elektrokimyasal sistemlerdir[11]. Yüksek çalışma sıcaklığından dolayı katı oksit yakıt hücresinin verimliliği diğer yakıt hücrelerinden daha yüksektir ve %67'nin üzerine ulaşabilir [12].

Katı oksit yakıt hücrelerini modellemek ve çalışma performansını inceleyebilmek için farklı matematiksel yöntemler kullanılmaktadır [13, 14]. Aspen Plus fiziksel ve kimyasal süreçlerin modellenmesinde sıklıkla kullanılan bir paket programdır. Aspen Plus benzeşim programının sahip olduğu esneklik nedeni ile araştırmacılar tarafından yakıt hücrelerinin tasarımı ve optimizasyonu için tercih edilmektedir [15]. Biyokütle gazlaştırma işleminin modellenmesinde Aspen Plus benzeşim programı kullanılması maliyet ve zaman açısından avantaj sağlamaktadır. Gazlaştırıcı ve yakıt hücresinin birlikte kullanıldığı modeller geliştirilmekte ve çevrimin performansını arttırmak için farklı araştırmacılar tarafından çalışmalar yapılmaktadır [16, 17].

Bu çalışmada biyokütle gazlaştırıcıda elde edilen sentez gazı katı oksit yakıt hücresinde elektrik enerjisi elde etmek için kullanıldı. Çevrim modeli Aspen Plus benzeşim programı kullanılarak geliştirildi. Oluşturulan katı oksit yakıt hücresi modelinin farklı çalışma sıcaklığı ve yakıt kompozisyonunda performansı incelendi.

2- YÖNTEM

2.1. Gazlaştırıcı Modeli

Katı oksit yakıt hücresinde yakıt olarak kullanılacak sentez gazı Aspen Plus benzeşim programında geliştirilen kabarcıklı akışkan yatak modelinden elde edildi. Gazlaştırıcıda biyokütle olarak buğday samanı tercih edildi. Biyokütle özellikleri; gazlaştırıcıdan elde edilen sentez gazı kompozisyonunu,

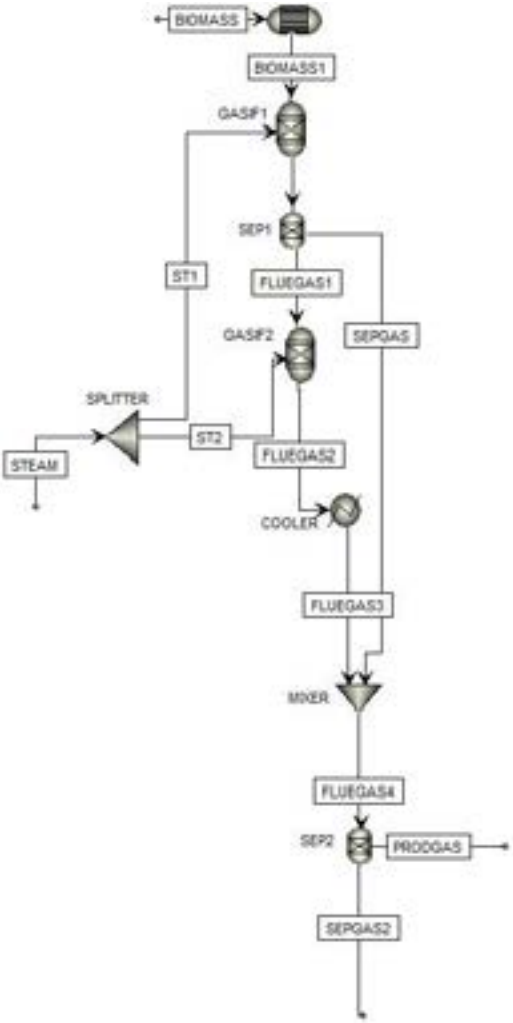
ekserji değerini ve üst ısıl değeri etkileyen önemli bir faktördür. Kullanılan biyokütlenin kısa ve elementel analiz sonuçları Tablo 1'de verilmiştir.

Tablo 1. Buğday samanı[18] kısa ve elementel analiz sonuçları

Kısa Analiz (ağ%)	Uçucu Madde	78.8
	Kül	3.41
	Nem Miktarı	10.5
	Sabit Karbon	17.79
Elementel Analiz (ağ%)	Sülfür	0.12
	Oksijen	44.17
	Azot	0.55
	Hidrojen	5.78
	Karbon	45.97

Geliştirilen kabarcıklı akışkan yatak gazlaştırıcı modeli Şekil 1'de gösterilmektedir.

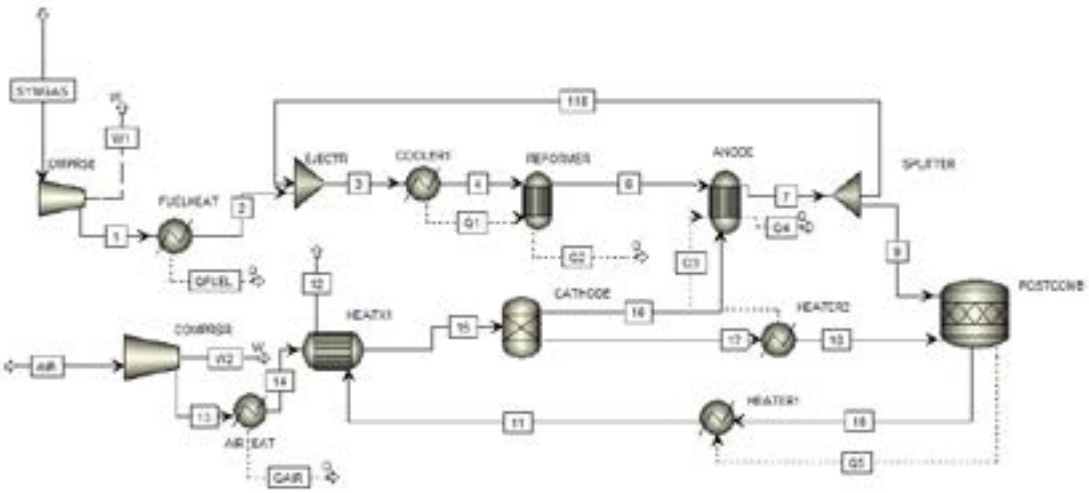
Kabarcıklı akışkan yatak gazlaştırıcı modeli kimyasal denge prensibine göre oluşturuldu. Sırasıyla; düşük sıcaklık pirolizi, yüksek sıcaklık pirolizi, gazlaştırma ve yanma aşamalarından oluşacak şekilde kabarcıklı akışkan yatak gazlaştırıcının benzeşimi yapıldı. Elde edilecek sentez gazı içerisindeki hidrojen miktarını arttırmak amacıyla gazlaştırıcı ajanı olarak su buharı kullanıldı. Düşük sıcaklıkta gerçekleşen piroliz, biyokütleyi kısa ve elementel analiz değerlerine göre konvensiyonel bir yapıya dönüştürür. Yüksek sıcaklıktaki piroliz ise buğday samanını sentez gazına dönüştürülmesinin ilk adımıdır. Piroliz adımlarından sonra, gazlaştırma olayı meydana gelir. Gazlaştırıcı, Şekil 1'de gösterildiği gibi Decomp, Gasif1, Gasif2 olarak üç bölüme ayrılmıştır. SEP2 bloğuyla sentez gazından su, kül ve H_2S ayrılırak içeriğinde H_2, CH_4, CO ve CO_2 bulunan sentez gazı katı oksit yakıt hücresinnde kullanılmak üzere elde edildi.



Şekil 1. Kabarcıklı Akışkan Yatak Gazlaştırıcı Aspen Plus Akış Diyagramı

2.2. Katı Oksit Yakıt Hücresi Modeli

Katı oksit yakıt hücresi için geliştirilen model Şekil 2'de gösterildi. Kabarcıklı akışkan yatakk gazlaştırıcıdan gelen SYNGAS akımı direkt olarak katı oksit yakıt hücresine beslendi. Rgibbs bloğu REFORMER ve ANODE reaktörlerinde gerçekleşen reaksiyonlarını Gibbs serbest enerjisini minimize edecek şekilde simüle etti. Sisteme alınan hava kompresör ve ısıtıcıdan geçtikten sonra CATHODE reaktöründe O_2 ayrılarak ANODE'a iletildi. RSTOIC reaktörü reaksiyona girmeyen yakıt ve oksijeni yakarak ısı elde etmek ve sistem verimini arttırmak için kullanıldı.



Şekil 2. Katı Oksit Yakıt Hücresi Aspen Plus Akış Diyagramı

Katı oksit yakıt hücresi performansı içerisinde meydana gelen elektrokimyasal reaksiyonlara bağlıdır. Biri negatif (anot) ve diğeri pozitif (katot) olmak üzere iki elektrottan meydana gelmektedir. Gerçekleşen reaksiyonlar aşağıda belirtilmiştir[19];

Anot reaksiyonu: $H_2 \rightarrow 2H^+ + 2e^-$ (1)

Katot reaksiyonu: $1/2\ O_2 + 2H^+ + 2e^- \rightarrow H_2O$ (2)

Net reaksiyon: $H_2 + 1/2\ O_2 \rightarrow H_2O$ (3)

Aspen Plus benzeşim programında gazlaştırıcıyı ya da katı oksit yakıt hücresini tanımlayacak hazır bir reaktör veya blok yoktur. Modellerin aşamalarının benzeşimi için farklı reaktör ve blokların kombinasyonları kullanılmıştır. Her iki model aşağıda belirtilen varsayımlar yapılarak geliştirildi:

- Modeller yatışkın hal koşullarında çalışır,
- Gazlar ideal davranır,
- Kül inerttir ve gazlaştırma işleminde meydana gelen reaksiyonlara dâhil değildir,
- Boru hatlarıdaki ısı yayılımı ve basınç düşümü ihmal edilmiştir,
- Katı oksit yakıt hücresinde anot ve katot sıcaklıkları eşittir.

Gazlaştırıcıdan farklı kompozisyonlarda gelen sentez gazının ve farklı çalışma sıcaklıklarının katı oksit yakıt hücresinin verim ve voltaj değeri üzerindeki etkisi incelendi. 5 farklı sentez gazı kompozisyonı ve çalışma sıcaklığı için sonuçlar değerlendirildi.

3. SONUÇLAR

3.1. Modelin Doğrulanması

Katı oksit yakıt hücresinin doğru çalışıp çalışmadığını kontrol etmek için literatürden alınan veriler modelden elde edilen verilerle karşılaştırılarak geliştirilen modelin doğrulanması için kullanıldı. Doğrulama sonuçları Tablo 2'de görülmektedir.

Tablo 2. Literatür ve model verilerinin karşılaştırılması

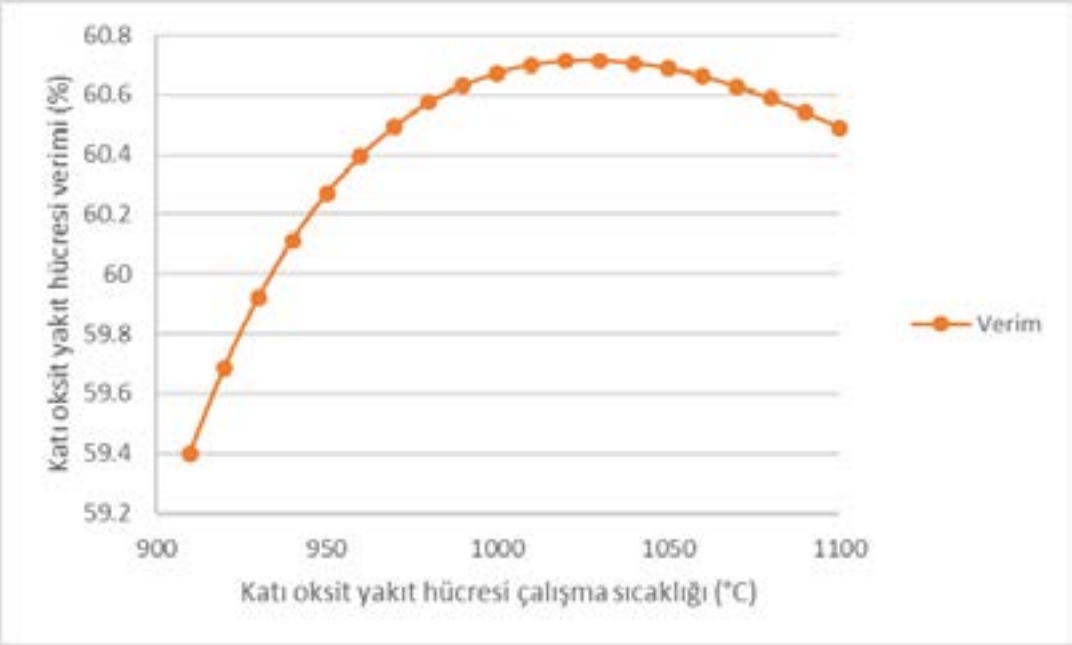
	Literatür [20]	**Model**
Voltaj (V)	0.7	0.8
Akım yoğunluğu (A/m^2)	1780	1494
Anot çıkışı gaz kompozisyonu (vol %)	H_2: 11.6 CO: 7.4 H_2O: 50.9 CO_2: 24.9 N_2: 5.1	H_2: 10.6 CO: 6.6 H_2O: 53.6 CO_2: 25.9 N_2: 3.1
Katot çıkışı gaz kompozisyonu (vol %)	O_2: 17.7 N_2: 82.3	O_2: 16.1 N_2: 83.9
Yanma Ürünleri Sıcaklığı (°C)	1012.35	910.00
Hücre çıkışı gaz kompozisyonu (vol %)	H_2O: 4.5 CO_2: 2.3 O_2: 15.9 N_2: 77.3	H_2O: 6.4 CO_2: 3.2 O_2: 13.8 N_2: 76.5

Sonuçları karşılaştırıldığında anot, katot ve hücre çıkışında gaz kompozisyonlarının birbirine çok yakın olduğu görüldü. Sonuçlar modelin uygun koşullarda çalıştığını göstermektedir.

3.2. Sıcaklığın Katı Oksit Yakıt Hücresi Çalışma Performansına Etkisi

Katı oksit yakıt hücresi verim ve voltaj değeri Aspen Plus design spec modülünde yazılan FORTRAN kodu ile

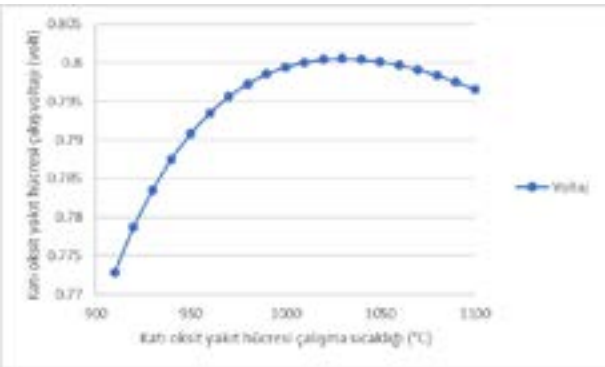
hesaplandı. Sıcaklık yakıt hücresi çalışma performanısını etkileyen önemli parametrelerden biridir. Yüksek sıcaklıklarda çalışan katı oksit yakıt hücresinde sıcaklığın hücre verimi ve çıkış voltajı üzerindeki etkisini inceleyebilmek için anot sıcaklığı 910-1100 °C aralığında değiştirildi. Şekil 3'te sıcaklık artışıyla katı oksit yakıt hücresi veriminin değişimini gösteren grafik verildi.



Şekil 3. Sıcaklığın katı oksit yakıt hücresi verimine etkisi

Sıcaklığın arttırılmasıyla verimin 910-980 °C aralığında hızla yükseldiği bu noktadan sonra daha yavaş bir artışla 1030 °C'de maksimuma ulaştığı görüldü. Hücre içerisinde gerçekleşen ekzotermik reaksiyonlar sıcaklık artışıyla hücre veriminin artmasını sağladı.

Voltaj değeri katı oksit yakıt hücresi performansını değerlendirebilmek için incelenen bir diğer parametredir. Sıcaklığın voltaj değeri üzerindeki etkisi Şekil 4'te gösterilmiştir.



Şekil 4. Sıcaklığın katı oksit yakıt hücresi voltaj değerine etkisi

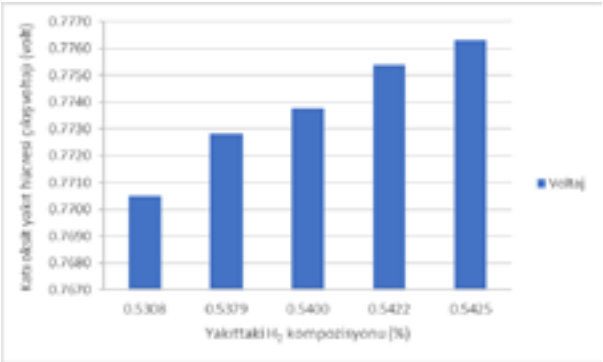
Sıcaklığın arttırılmasıyla voltaj değerinin 0,77'den 0,80 değerine kadar yükseldiği ve 1030°C'de 0,801 değerine ulaştığı soncu elde edildi. Voltaj ve verim değerinin benzer davranış gösterdiği aynı noktada maksimuma ulaştığı görüldü.

3.2. Yakıttaki H_2 Kompozisyonunun Katı Oksit Yakıt Hücresi Çalışma Performansına Etkisi

Yakıt hücreleri kimyasal enerjiyi doğrudan elektrik enerjisine çeviren sistemler olduğu için yakıtın kimyasal içerği oldukça önemlidir. Katı oksit yakıt hücreleri yakıt esnekliği açısından avantajlıdır. Yakıt içeriğindeki H_2 kompozisyonunun hücre verimini ve voltaj değerini nasıl etkilediği sırasıyla Şekil 5 ve 6'da gösterilmiştir.

Şekil 5. Yakıttaki H_2 Kompozisyonunun katı oksit yakıt hücresi verimine etkisi

Yakıt içeriğindeki H_2 kompozisyonunun artmasıyla hücre veriminin artış gösterdiği görülmektedir. H_2 miktarının artışı hücrede gerçekleşen reaksiyonların Le Cheatelier prensibine göre ürünler yönüne kaymasına ve hücreden elde edilen elektrik akımını arttırarak verim ve voltaj değerinin artmasını sağlamıştır.



Şekil 6. Yakıttaki H_2 Kompozisyonunun katı oksit yakıt hücresi voltaj değerine etkisi

Yakıttaki H_2 kompozisyonunun %53'ten %54.25 değerine yükselmesi voltaj değerinin 0.770'den 0.777'ye artmasını sağlamıştır.

4. YORUMLAR

- Yeni bir kabarcıklı akışkan yatak gazlaştırıcı – katı oksit yakıt hücresi modeli elde edildi, model literatürden alınan verilerle doğrulandı.
- Sıcaklık ve yakıt kompozisyonunun katı oksit yakıt hücresi çalışmasını etkileyen en önemli parametrelerden biri olduğu görüldü.
- Sıcaklığın 910-1030 °C arasında artmasıyla hücre verimi % 59.4'ten % 60.7'ye ve voltaj değeri 0.77 V'tan 0.80 V değerine ulaştı. Verim ve voltaj değerinin maksimuma ulaştığı nokta olan 1030 °C'den sonra sıcaklık artışı verim ve voltaj değerinin azalmasına sebep oldu.
- Yakıtın H_2 kompozisyonundaki ufak değişimin bile hücre verimini olumlu yönde etkilediği görüldü. Yakıttaki H_2 kompozisyonunun %53'ten %54.25'e arttırılması hücre verimini %59.38'den %59.63'e yükseltti.
- H_2 kompozisyonunun %53'ten %54.25'e artışı voltaj değerini 0.770'den 0.777'ye arttırdı.
- Hücrenin voltaj ve verim değeri sıcaklık ve H_2 kompozisyonu değişimiyle benzer davranış gösterdi.

4. KAYNAKÇALAR

1. De Cian, E. and I.S. Wing, *Global energy consumption in a warming climate.* Environmental and resource economics, 2019. **72**(2): p. 365-410.
2. Wan, W., *An innovative system by integrating the gasification unit with the supercritical water unit to produce clean syngas for solid oxide fuel cell (SOFC): System performance assessment.* International Journal of Hydrogen Energy, 2016. **41**(48): p. 22698-22710.
3. Galvagno, A., et al., *Analysis of an integrated agro-waste gasification and 120 kw SOFC CHP system: modeling and experimental investigation.* Energy Procedia, 2016. **101**: p. 528-535.
4. Gagliano, A., et al., *Development of an equilibrium-based model of gasification of biomass by Aspen Plus.* Energy Procedia, 2017. **111**: p. 1010-1019.
5. Patra, T.K., K. Nimisha, and P.N. Sheth, *A comprehensive dynamic model for downdraft gasifier using heat and mass transport coupled with reaction kinetics.* Energy, 2016. **116**: p. 1230-1242.
6. Colpan, C.O., F. Hamdullahpur, and I. Dincer. *Solid oxide fuel cell and biomass gasification systems for better efficiency and environmental impact*. in *Eighteenth World Hydrogen Energy Conference WHEC*. 2010.
7. Subotić, V., et al., *Optimization of an integrated biomass gasifier-fuel cell system: An experimental study on the cell response to process variations.* Energy Procedia, 2019. **158**: p. 2052-2057.
8. Bertei, A., et al., *Validation of a physically-based solid oxide fuel cell anode model combining 3D tomography and impedance spectroscopy.* international journal of hydrogen energy, 2016. **41**(47): p. 22381-22393.
9. Le, M.-V., T.-A. Nguyen, and T. Nguyen, *Modeling and Optimization of the BSCF-Based Single-Chamber Solid Oxide Fuel Cell by Artificial Neural Network and Genetic Algorithm.* Journal of Chemistry, 2019. **2019**.
10. Zhang, D., et al., *Optimization Control of SOFC Based on Bond Graph Model.* Energy Procedia, 2018. **152**: p. 174-179.
11. Damo, U., et al., *Solid oxide fuel cell hybrid system: A detailed review of an environmentally clean and efficient source of energy.* Energy, 2019. **168**(C): p. 235-246.
12. Wang, J., et al., *Thermodynamic analysis of an integrated power generation system driven by solid oxide fuel cell.* International Journal of Hydrogen Energy, 2012. **37**(3): p. 2535-2545.
13. Chavan, S.L. and D.B. Talange, *Modeling and performance evaluation of PEM fuel cell by controlling its input parameters.* Energy, 2017. **138**: p. 437-445.
14. Baldinelli, A., et al., *Regarding Solid Oxide Fuel Cells Simulation through Artificial Intelligence: A Neural Networks Application.* Applied Sciences, 2019. **9**(1): p. 51.
15. Anderson, T., P. Vijay, and M.O. Tade, *An adaptable steady state Aspen Hysys model for the methane fuelled solid oxide fuel cell.* Chemical Engineering Research and Design, 2014. **92**(2): p. 295-307.
16. Fernandez-Lopez, M., et al., *Simulation of the gasification of animal wastes in a dual gasifier using Aspen Plus®.* Energy conversion and management, 2017. **140**: p. 211-217.
17. Palomba, V., M. Prestipino, and A. Galvagno, *Tri-generation for industrial applications: development of a simulation model for a gasification-SOFC based system.* International Journal of Hydrogen Energy, 2017. **42**(46): p. 27866-27883.
18. Ghaly, A., A. Ergüdenler, and E. Laufer, *Agglomeration characteristics of alumina sand-straw ash mixtures at elevated temperatures.* Biomass and bioenergy, 1993. **5**(6): p. 467-480.
19. Ehyaei, M. and M.A. Rosen, *Optimization of a triple cycle based on a solid oxide fuel cell and gas and steam cycles with a multiobjective genetic algorithm and energy, exergy and economic analyses.* Energy conversion and management, 2019. **180**: p. 689-708.
20. Zhang, W., et al., *Simulation of a tubular solid oxide fuel cell stack using AspenPlusTM unit operation models.* Energy Conversion and Management, 2005. **46**(2): p. 181-196.