

**T.C.
ERCIYES ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
ENERJİ SİSTEMLERİ MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI**

**POLİMER ELEKTROLİT MEMBRAN (PEM)
ELEKTROLİZÖR BİLEŞENLERİNİN MAKİNE
ÖĞRENİMİ İLE OPTİMİZASYONU**

**Hazırlayan
Abdelmola Albadwi Alkhalifa OMER**

**Danışman
Doç. Dr. Mehmet Fatih KAYA**

Yüksek Lisans Tezi

**Temmuz 2025
KAYSERİ**

T.C.
ERCIYES ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
ENERJİ SİSTEMLERİ MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI

POLİMER ELEKTROLİT MEMBRAN (PEM)
ELEKTROLİZÖR BİLEŞENLERİNİN MAKİNE
ÖĞRENİMİ İLE OPTİMİZASYONU
(Yüksek Lisans Tezi)

Hazırlayan
Abdelmola Albadwi Alkhalifa OMER

Danışman
Doç. Dr. Mehmet Fatih KAYA
Dr. Öğr. Üyesi Saltuk Buğra SELÇUKLU

Bu çalışma, Erciyes Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Birimi tarafından FYL-2024-13769 proje kodlu proje, Yurtdışı Türkler ve Akraba Topluluklar Başkanlığı burs programı (YTB-21SD016376) ve FBA-2024-13646 Genel Araştırma Projesi (GAP) kapsamında desteklenmiştir.

Temmuz 2025
KAYSERİ

BİLİMSEL ETİĞE UYGUNLUK

Bu çalışmadaki tüm bilgilerin, akademik ve etik kurallara uygun bir şekilde elde edildiğini beyan ederim. Aynı zamanda bu kural ve davranışların gerektirdiği gibi, bu çalışmanın özünde olmayan tüm materyal ve sonuçları tam olarak aktardığımı ve referans gösterdiğimi belirtirim.

Abdelmola Albadwi Alkhalifa OMER

İmza

“Polimer Elektrolit Membran (PEM) Elektrolizör Bileşenlerinin Makine Öğrenimi İle Optimizasyonu” adlı Yüksek Lisans Tezi, Erciyes Üniversitesi Lisansüstü Tez Önerisi ve Tez Yazma Yönergesi’ ne uygun olarak hazırlanmıştır.

Hazırlayan

Abdelmola Albadwi Alkhalifa OMER

Danışman

Doç. Dr. Mehmet Fatih KAYA

Enerji Sistemleri Mühendisliği ABD Başkanı

Prof. Dr. Gamze GENÇ

İmza

TEŐEKKÜR

Bana alıőmalarım süresince her türlü yardımı ve fedakârlığı sađlayan danıőmanım Do. Dr. Mehmet Fatih Kaya'ya ve birlikte alıőmaktan büyük memnuniyet duyduğum ikinci danıőmanım Dr. Öğr. Üyesi Saltuk Buđra Seluklu'ya sonsuz teőekkürlerimi sunarım.

Deneysel alıőmalarım sırasında karşılaőtığım zorlukları aőmamda yardımlarından dolayı aynı laboratuvarı paylaőtığımız alıőma arkadaőlarım ve özellikle üyesi olduğum Erciyes Üniversitesi H2FC Hidrojen Enerjisi Araőtırma Grubuna teőekkür ederim.

Bu tez alıőması, Erciyes Üniversitesi Bilimsel Araőtırma Projeleri Birimi tarafından desteklenen YTB-21SD016376, FYL-2024-13769 numaralı proje ile FBA-2024-13646 numaralı Genel Araőtırma Projesi (GAP) kapsamında gerçekleştirilmiş olup, sađladığı desteklerden dolayı Erciyes Üniversitesi'ne teőekkürlerimi bor bilirim.

Hayatımın her anında olduğ u gibi bu süreçte de sabır, hoşgör u ve desteklerini esirgemeyen sevgili annem Zahra BABKIR, babam Albadwi OMER ve kardeőlerime, sonsuz sevgi ve teőekkürlerimi ifade etmek isterim.

Abdelmola Albadwi Alkhalifa OMER

Temmuz 2025, KAYSERİ

POLİMER ELEKTROLİT MEMBRAN (PEM) ELEKTROLİZÖR BİLEŞENLERİNİN MAKİNE ÖĞRENİMİ İLE OPTİMİZASYONU

Abdelmola Albadwi Alkhalifa OMER

Erciyes Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü

Yüksek Lisans Tezi, Temmuz 2025

Danışman: Doç. Dr. Mehmet Fatih KAYA

ÖZET

Polimer elektrolit membran (PEM) su elektrolizörleri (PEMSE) sürdürülebilir hidrojen üretimi için umut vericidir, ancak performanslarının optimize edilmesi halen zorlu bir konudur. Bu çalışma, PEM elektrolizör bileşenleri için makine öğrenmesi (MÖ) tabanlı bir optimizasyon yaklaşımı sunmakta olup, anot ve katot elektrokatalizör yüklemelerinin performans üzerindeki birleşik etkilerini araştırmaktadır. Katalizör yüklemeleri, membran türü, sıcaklık, akış hızı, tork ve akım yoğunluğu gibi parametreleri içeren 1344 örneklik deneysel veri seti analiz edilmiştir. XGBoost, Rastgele Orman (RF), Karar Ağacı (DT) ve CatBoost olmak üzere dört MÖ modeli Bayesian hiperparametre optimizasyonu ile eğitilmiş ve sırasıyla (0,9594, 0,8944, 0,9594 ve 0,9404) R^2 değerleri elde edilmiştir. DT modeli en düşük hata varyasyonu ($46,8 \text{ mA/cm}^2$) ile en iyi performansı göstermiş olup, Wilcoxon işaretli-sıra testi ile doğrulanmış ve modeller arasında anlamlı farklar tespit edilmiştir ($p \leq 0,05$). SHapley Katkı Açıklamaları (SHAP) analizi, sıcaklık ve katot katalizör yüklemesini en etkili özellikler olarak belirlemiştir. Optimal performans $0,6 \text{ mg cm}^{-2}$ platin-karbon (Pt/C) ve $3,0 \text{ mg cm}^{-2}$ iridyum dioksit (IrO_2) değerlerinde elde edilmiş olup, katalizör yüklemeleri ile akım yoğunluğu arasında doğrusal olmayan korelasyonlar gözlemlenmiştir. Maliyet-performans analizi, optimal konfigürasyonun (19,36\$ toplam maliyet) yüksek maliyetli alternatiflere göre %14,8 performans iyileştirmesi sağladığını ortaya koymuş ve stratejik katalizör azaltmanın hem performansı hem de ekonomik uygulanabilirliği artırdığını göstermiştir. Bu çalışma, açıklanabilir makine öğrenmesinin PEMWE tasarım ve optimizasyonunda rehberlik etme potansiyelini göstermekte olup, büyük ölçekli uygulamalar için ekonomik uygulanabilirlik sağlarken hidrojen üretim verimliliğini artırmak için veri odaklı bir çerçeve sunmaktadır..

Anahtar Kelimeler: Hidrojen Üretimi, PEM Su Elektrolizörleri, Açıklanabilir Makine Öğrenimi, Katalizör Yükleme, Elektrokimyasal Performans.

OPTIMIZATION OF POLYMER ELECTROLYTE MEMBRANE (PEM) ELECTROLYZER COMPONENTS USING MACHINE LEARNING

Abdelmola Albadwi Alkhalifa OMER

Erciyes University, Graduate School of Natural and Applied Sciences

Master Thesis, July 2025

Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Mehmet Fatih KAYA

ABSTRACT

Polymer electrolyte membrane (PEM) water electrolyzers (PEMWE) are promising for sustainable hydrogen production, but optimizing their performance remains challenging. This study presents a machine learning-based optimization approach for PEM electrolyzer components, investigating the combined effects of anode and cathode electrocatalyst loadings on performance. An experimental dataset of 1344 samples, incorporating parameters such as catalyst loadings, membrane type, temperature, flow rate, torque, and current density, was analyzed. Four machine learning models namely XGBoost, Random Forest (RF), Decision Tree (DT), and CatBoost) were trained with Bayesian hyperparameter optimization, achieving R^2 values of 0.9594, 0.8944, 0.9594, and 0.9404, respectively. DT model demonstrated the best performance with lowest error variation (46.8 mA/cm²), validated by Wilcoxon signed-rank test showing significant differences between models ($p \leq 0.05$). SHapley Additive exPlanations (SHAP) analysis identified temperature and cathode catalyst loading as most influential features. Optimal performance was achieved at 0.6 mg cm⁻² platinum-carbon (Pt/C) and 3.0 mg cm⁻² iridium dioxide (IrO₂), with nonlinear correlations observed between catalyst loadings and current density. Cost-performance analysis revealed the optimal configuration (\$19.36 total cost) provided 14.8% performance improvement over higher-cost alternatives, demonstrating that strategic catalyst reduction enhances both performance and economic viability. This study demonstrates the potential of explainable machine learning in guiding the design and optimization of PEMWE, providing a data-driven framework for enhancing hydrogen production efficiency while achieving economic viability for large-scale applications.

Keywords: Hydrogen Production, PEM Water Electrolyzers, Explainable Machine Learning, Catalyst Loading, Electrochemical Performance.

İÇİNDEKİLER

POLİMER ELEKTROLİT MEMBRAN (PEM) ELEKTROLİZÖR BİLEŞENLERİNİN MAKİNE ÖĞRENİMİ İLE OPTİMİZASYONU

BİLİMSEL ETİĞE UYGUNLUK.....	ii
YÖNERGEYE UYGUNLUK.....	iii
KABUL VE ONAY.....	iv
TEŞEKKÜR.....	v
ÖZET.....	vi
ABSTRACT.....	vii
İÇİNDEKİLER.....	viii
KISALTMALAR.....	xi
TABLolar LİSTESİ.....	xiii
ŞEKİLLER LİSTESİ.....	xiv
GİRİŞ.....	1

1.BÖLÜM

GENEL BİLGİLER ve LİTERATÜR ÇALIŞMASI

1.1. Yenilenebilir Enerji.....	2
1.1.1. Karbon Azaltımı ve Zorluklar.....	4
1.1.2. Yenilenebilir Enerji ve Hidrojen.....	5
1.2. Yenilenebilir Enerji Kaynaklarından Hidrojen Üretimi.....	6
1.2.1. Hidrojen Üretim Yöntemleri.....	7
1.2.2. Suyun Elektrolizi.....	9
1.2.2.1. Alkali Su Elektrolizi (AWE).....	10
1.2.2.2. Anyonik Değişim Membranı (AEM) Elektrolizi.....	11
1.2.2.3. Katı Oksit Elektroliz Hücreleri (SOEC).....	11
1.2.2.4. PEM Elektrolizörler.....	12
1.3. PEMSE Sistemleri ve Bileşenleri.....	13
1.3.1. Bipolar Plaka Tasarımı ve Malzemeleri.....	13
1.3.2. Katot ve Anot Tarafı Malzeme Çözümleri.....	14
1.3.3. Elektrotlar ve Kaplamalar.....	15
1.3.4. Gaz Difüzyon Tabakası (GDL).....	15

1.3.5. Membran Elektrot Grubu	16
1.3.6. Akım Toplayıcıları	18
1.4. Optimizasyonun Temel Prensipleri	18
1.4.1. Makine Öğrenimi ve Veri Tabanlı Optimizasyon Yaklaşımları	19
1.4.2. Açıklanabilir Makine Öğrenimi	20
1.5. Literatür İncelemesi	21

2. BÖLÜM

MATERYAL VE YÖNTEM

2.1. Deneysel Kurulum.....	32
2.1.1. Elektrot Hazırlığı	32
2.1.2. Membran Elektrot Montajı Entegrasyonu	33
2.1.3. PEMSE Tek Hücre Testleri ve Veri Toplama	33
2.2. Makine Öğrenmesi Yöntemleri	34
2.2.1. Rastgele Orman Algoritması	36
2.2.2. Aşırı Gradyan Artırma	36
2.2.3. Karar Ağaçları	36
2.2.4. Cat Boost	36
2.2.5. SHAP	37
2.2.6. Makine Öğrenmesi Modellerinin Performans Değerlendirmesi	37
2.2.7. Bayesian Hiperparametre Ayarı	38

3. BÖLÜM

BULGULAR VE SONUÇ

3.1. Katalizör Yüklemesinin Etkisi.....	40
3.2. PEM elektrolizör Çalışma koşullarının değerlendirilmesi	49
3.3. Makine Öğrenimi Modellerinin Karşılaştırması	51
3.4. Makine Öğrenimi Modellerinin Tanımlanması	56

3. BÖLÜM

TARTIŞMA VE ÖNERİLER

4.1. Tartışma	59
4.2. Sonuç ve Öneriler	60

KAYNAKÇA.....	61
ÖZGEÇMİŞ.....	73



KISALTMALAR

AEM:	Anyon Değişim Membranı
ANN:	Yapay Sinir Ağları
AWE:	Alkali Su Elektrolizi
CCM:	Katalizör Kaplı Membran
CNN:	Evrişimsel Sinir Ağı
CO ₂ :	Karbon Dioksit
CVD:	Kimyasal Buhar Biriktirme
DNN:	Derin Sinir Ağı
DRT:	Karar Regresyon Ağacı
DT:	Karar Ağacı
GA:	Genetik Algoritma
GDL:	Gaz Difüzyon Tabakası
Ir:	İridyum
IrO ₂ :	İridyum Dioksit
KNN:	K-En Yakın Komşu
KOH:	Potasyum Hidroksit
MAE:	Ortalama Mutlak Hata
MEG:	Membran Elektrot Grubu
MLP:	Çok Katmanlı Perceptron
MÖ:	Makine Öğrenimi
NaOH	Sodyum Hidroksit
:	
PEM:	Proton Değişim Membranı
PEMS	PEM su elektrolizörleri
E:	
PFSA:	Perflorosülfonik Asit
Pt:	Platin
Pt/C:	Karbon Üzerinde Platin
PVD:	Fiziksel Buhar Biriktirme
R ² :	R-kare (Belirleme Katsayısı)
RF:	Rastgele Orman

RMSE:	Kök Ortalama Kare Hatası
SHAP:	SHapley Katkı Açıklamaları
SOCE:	Katı Oksit Hücre Elektrolizi
XGBOOST	Aşırı Gradyan Güçlendirme
:	
XML:	Açıklanabilir Makine Öğrenimi



TABLULAR LİSTESİ

Tablo 2.1. Deneysel parametreler.....	34
Tablo 2.2. Bayesian hiperparametre ayarı ile farklı MÖ modelleri.....	39
Tablo 3.1 Farklı durumlarda katalizör yüklemesinin maliyet analizi.....	50
Tablo 3.2. Standart ve bayesyen optimizasyon ayarlarında MÖ modellerinin eğitim süresi.....	54
Tablo 3.3. Bayesian ve bayesyen hiperparametreler olmadan MÖ modellerinin performans metriklerinin karşılaştırılması.	55
Tablo 3.4. Çiftli model karşılaştırması için Wilcoxon işaretli sıralı test.	56



ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 1.1. 1,5°C senaryosu ışığında, 2020'den 2050'ye kadar yenilenebilir enerji kaynaklarıyla ve olmaksızın elektrik üretimindeki eğilim	4
Şekil 1.2. Hidrojen üretim yollarının şematik gösterimi.....	6
Şekil 1.3. a) Katı Oksit,b) PEM c) Alkali Su ,d) AEM Elektrolizörü	10
Şekil 1.4. PEM Su elektrolizöründeki temel bileşenlerin şematik gösterimi.....	13
Şekil 1.5. GDL.....	16
Şekil 1.6. CCM süreci.....	17
Şekil 1.7. Makine öğrenmesinin türleri [50].	19
Şekil 2.1. Laboratuvar deneysel düzeni ve b) şematik görünüm.....	31
Şekil 2.2. Korelasyon matrisi grafiği	35
Şekil 3.1. Nafion 115 membran / Anot yüklemesi 3 mg IrO ₂ cm ⁻² için LSV eğrileri; a) 0,4 mg Pt/C cm ⁻² , b) 0,5 mg Pt/C cm ⁻² , c) 0,6 mg Pt/C cm ⁻² ve d) 0,7 mg Pt/C cm ⁻² katot yüklemelerinde.....	42
Şekil 3.2. Farklı katot katalizör yüklemelerinde, Nafion 115 membran ve anot yüklemesi 3 mg IrO ₂ cm ⁻² için kutu grafiği.....	43
Şekil 3. 3. Nafion 115 membran, anot yüklemesi 4 mg IrO ₂ cm ⁻² olan LSV eğrileri; a) 0,4 mg Pt/C cm ⁻² , b) 0,5 mg Pt/C cm ⁻² , c) 0,6 mg Pt/C cm ⁻² ve d) 0,7 mg Pt/C cm ⁻² katot yüklemelerinde.....	44
Şekil 3.4. Farklı katot katalizör yüklemelerinde, Nafion 115 membran ve anot yüklemesi 3 mg IrO ₂ cm ⁻² için kutu grafiği.....	45
Şekil 3.5. Aquivion membranı için, anot yüklemesi 3 mgIrO ₂ .cm ⁻² olacak şekilde a) 0,4 mgPt/C.cm ⁻² , b) 0,5 mgPt/C.cm ⁻² , c) 0,6 mgPt/C.cm ⁻² ve d) 0,7 mgPt/C.cm ⁻² durumlarında elde edilen LSV eğrileri.....	46
Şekil 3.6. Farklı katot katalizör yüklemelerinde, Aquivion membran ve anot yüklemesi 3 mg IrO ₂ .cm ⁻² için kutu grafiği	47
Şekil 3.7. Aquivion membranı için, anot yüklemesi 4 mg IrO ₂ .cm ⁻² olacak şekilde a) 0,4 mg Pt/C.cm ⁻² , b) 0,5 mg Pt/C.cm ⁻² , c) 0,6 mg Pt/C.cm ⁻² ve d) 0,7 mg Pt/C.cm ⁻² durumlarına ait LSV eğrileri.	48
Şekil 3.8. Farklı katot katalizör yüklemelerinde, Aquivion membran ve anot yüklemesi 4 mg IrO ₂ .cm ⁻² için kutu grafiği	49

Şekil 3.9. a) XGBoost, b) RF, c) DT ve d) CatBoost modelleri için model tahminleri ile deneysel verilerin karşılaştırıldığı eşitlik (parity) grafikleri.	52
Şekil 3.10. MÖ modellerinin tahmin hataları: (a) Standart ve (b) Bayesyen hiperparametre optimizasyonu kullanılarak.	53
Şekil 3.11. a) XGBoost, b) RF, c) DT, d) CatBoost modelleri için ortalama SHAP değerleri, e) XGBoost, f) RF, g) DT ve h) CatBoost modelleri için SHAP değerleri. ...	57



GİRİŞ

PEMSE sürdürülebilir hidrojen üretiminde öncü teknolojiler arasında yer almakta olup, verimli ve ekonomik enerji dönüşümü için kritik öneme sahiptir. PEM elektrolizörlerinin performansını etkileyen en önemli parametrelerden biri, anot ve katot elektrokatalizör yüklemeleridir. Katalizör yüklemelerinin doğru optimizasyonu, elektrokimyasal aktivitenin artırılması, maliyetlerin düşürülmesi ve uzun ömürlü işletmenin sağlanması açısından gereklidir. Ancak, bu parametrelerin birbiriyle olan etkileşimi ve sistem üzerindeki karmaşık etkileri nedeniyle, geleneksel deneysel yöntemlerle en uygun kombinasyonun belirlenmesi zorlaşmaktadır. Bu bağlamda, MÖ teknikleri, çok değişkenli deneysel verilerin analizi ve tahmininde güçlü araçlar olarak öne çıkmaktadır. Özellikle XML yöntemleri, modellerin karar süreçlerini şeffaflaştırarak, parametrelerin performans üzerindeki etkilerini detaylı olarak ortaya koyabilmektedir.

Bu çalışmada, PEM su elektrolizörlerinde anot ve katot katalizör yüklemelerinin, membran tipi, sıcaklık, akış hızı ve tork gibi işletme koşulları ile birlikte performans (akım yoğunluğu) üzerindeki birleşik etkileri, 1,344 deneysel örnek içeren geniş bir veri seti kullanılarak incelenmiştir. XGBoost, RF, DT ve CatBoost modelleri, Bayesyen hiperparametre optimizasyonu ile eğitilmiş ve performansları karşılaştırılmıştır. Model çıktılarını yorumlamak için SHAP analizi kullanılarak, en etkili parametrelerin belirlenmesi sağlanmıştır. Bu kapsamlı yaklaşım, katalizör yüklemeleri ile performans arasındaki doğrusal olmayan ilişkilerin ortaya konmasına olanak sağlamış ve optimum yüklemelerle maliyet-performans dengesinin sağlanmasına katkı sunmuştur. Çalışmanın sonuçları, PEMSE'nin tasarım ve işletme stratejilerinde veri odaklı optimizasyonun önemini vurgulamaktadır.

1.BÖLÜM

GENEL BİLGİLER ve LİTERATÜR ÇALIŞMASI

1.1. Yenilenebilir Enerji

Günümüzde dünyadaki sürekli kentleşme ile nüfus ve ekonomik büyümenin artışı, enerji talebinde önemli bir yükselişe yol açmıştır. Günümüzde küresel enerji tüketiminin yaklaşık %80'i, hızla tükenen fosil yakıtlar tarafından karşılanmaktadır [1]. Fosil yakıtlarla enerji üretimi, çevrede sera gazları ve CO₂ emisyonlarında önemli artışlara neden olarak olumsuz iklim değişikliklerine yol açmaktadır. Yenilenemeyen enerji kaynaklarının tükenmesi ve çevresel etkileri, fosil yakıtların hızla azalması ve çevresel sonuçları nedeniyle araştırmacıların sürdürülebilir ve yeşil enerji sistemlerine olan ilgisini artırmıştır [2, 3]. Araştırmacılar enerji ile ilgili ağlar kurarak gelecekteki enerji talebi ve krizlerini tahmin edebilmektedir. Dünya Enerji Konseyi istatistiklerine göre, 2060 yılına kadar başlıca enerji kaynağı sadece yenilenebilir enerji olacaktır [4].

Mevcut tüketim hızlarına göre, dünya petrol, doğalgaz ve kömür rezervlerinin sırasıyla yaklaşık 200, 40 ve 60 yıl daha yeteceği tahmin edilmektedir. Sıvı yakıt ve gaz üretiminde zirve seviyelerinin 2015-2030 yılları arasında gerçekleşeceği öngörülmektedir. Bundan sonra toplam kaynaklar azalmaya başlayacaktır. Fosil yakıtların tükenebilir yapısı, konvansiyonel yakıtların sürdürülebilirliği konusunda önemli bir endişe kaynağı olmuştur. Bu nedenle, alternatif, sürdürülebilir, yeşil ve yenilenebilir enerji yoluyla enerji karbondan arındırılması, gelecekteki enerji yönetimi ve sürdürülebilir kalkınma için kritik öneme sahiptir [5].

Günümüzde, dünya toplam enerji talebinin yaklaşık %23,7'si güneş, hidroelektrik, rüzgar ve biyokütle gibi yenilenebilir kaynaklar tarafından karşılanmaktadır.

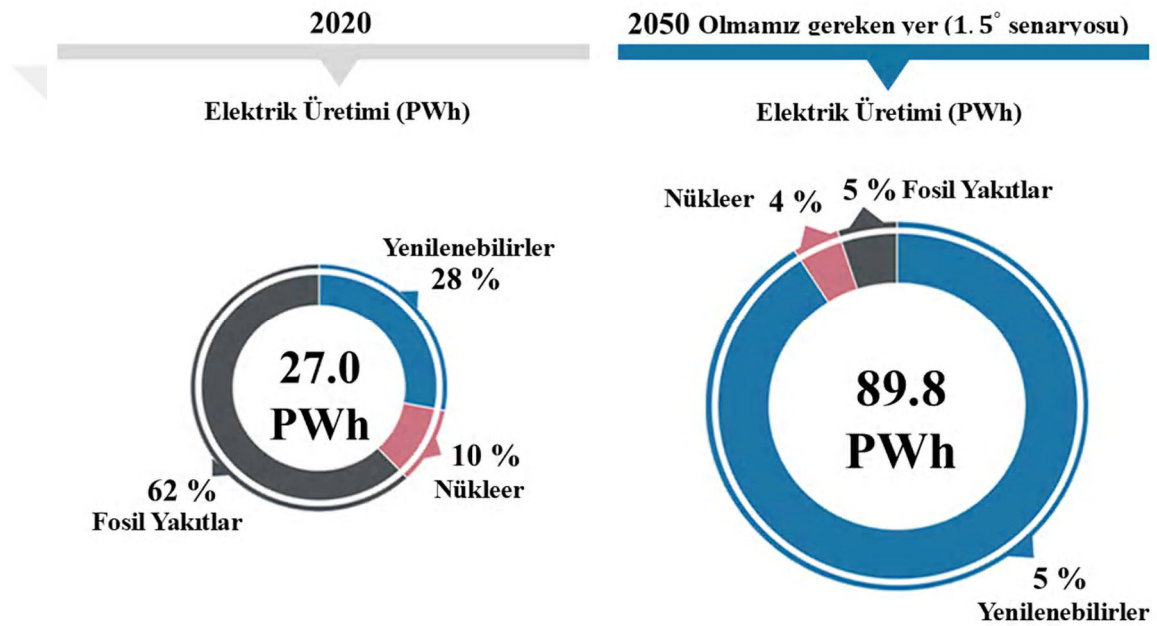
Hidroelektrik, rüzgar ve güneş enerjisi kesintili enerji kaynakları olarak kabul edilmektedir [2]. Jeneratör şebekeye bağlandığında voltaj düşüşü, arz belirsizliği, dengesiz ve bozuk enerji tedariki gibi çeşitli kalite sorunları ortaya çıkabilir. İnsanlık binlerce yıldır biyokütleyi enerji kaynağı olarak kullanmaktadır. Geleneksel biyokütle enerjisinin, toplam yenilenebilir yakıt arzının yaklaşık %80'ini sağladığı tahmin edilmektedir [6]. Biyokütlenin enerji amaçlı kullanımı insanlığa yeni bir başlangıç noktası sunabilir. Ancak özellikle hidrojen üretimi başta olmak üzere biyokütlenin enerji üretiminde kullanımıyla ilgili sorunların aşılması gerekmektedir.

Başlıca sorunlar arasında özellikle gelişmiş ülkelerde artan gıda fiyatları ve biyokütle ürünlerinin çevresel zararları tamamen çözmemesi bulunmaktadır [7]. Biyokütle lojistiğiyle ilgili bir diğer sorun ise depolama alanının kullanımı ve bulunabilirliği gibi hammaddenin özelliklerine bağlı konulardır [8]. Enerji verimliliği kontrolü, güvenilirlik ve enerji kalitesini artırmak için enerji depolama da önemli bir zorluktur. Bataryalar gibi enerji depolama sistemleri dağıtım sisteminin güvenilirliğini, enerji verimliliğini ve kaliteyi artırabilir. Ancak batarya enerji depolama sistemlerinin ağırlık, yüksek ilk satın alma maliyeti, sürüş menzili, ısı kontrol ve kullanım ömrü gibi sınırlamaları ve zorlukları bulunmaktadır [9]. Sonuç olarak, satışlarda ve MWh üretiminde en yüksek pazar payına sahip olan kurşun-asit bataryalar, üretim aşamasındaki çevresel etkiler ve geri dönüşüm zorunluluğu nedeniyle çevresel sorunlarla karşı karşıyadır [10].

Yenilenebilir enerji kaynaklarının akıllı şebeke teknolojileri ve enerji yönetim sistemleri ile entegrasyonu, kesintili enerji sorunlarına umut verici çözümler sunmaktadır. Gelişmiş tahmin sistemleri, talep yanıt programları ve dağıtık enerji kaynakları, arz ve talebi dengeleyerek şebeke kararlılığını koruyabilir. Ayrıca yenilenebilir enerji ile çalışan elektroliz yoluyla yeşil hidrojen üretiminin gelişimi, uzun vadeli enerji depolama ve elektrik, ulaşım ile sanayi uygulamaları arasında sektör entegrasyonu için fırsatlar yaratmaktadır. Yenilenebilir enerji teknolojilerindeki gelişmeler maliyetleri önemli ölçüde düşürmüş, 2010'dan bu yana sırasıyla %85 ve %70 maliyet azalmaları ile güneş fotovoltaik ve rüzgar enerjisi, çoğu pazarda en ucuz elektrik kaynakları haline gelmiştir [11].

1.1.1. Karbon Azaltımı ve Zorluklar

Yenilenebilir enerji sistemlerine geçiş, uluslararası iklim anlaşmalarıyla belirlenen iddialı emisyon azaltım hedeflerini karşılamının aciliyetinden kaynaklanmaktadır. Şekil 1.1'e göre, 1,5°C hedefi senaryosunda 2020–2050 yılları arasında elektrik üretimi üç kat artarken, yenilenebilir enerjinin payı %28'den %91'e çıkacaktır. Kömür ve petrol temelli elektrik üretimi önümüzdeki on yıl içinde keskin bir düşüş yaşayacak ve yüzyılın ortasına gelindiğinde tamamen ortadan kalkacaktır [12].



Şekil 1.1. 1,5°C senaryosu ışığında, 2020'den 2050'ye kadar yenilenebilir enerji kaynaklarıyla ve olmaksızın elektrik üretimindeki eğilim [13].

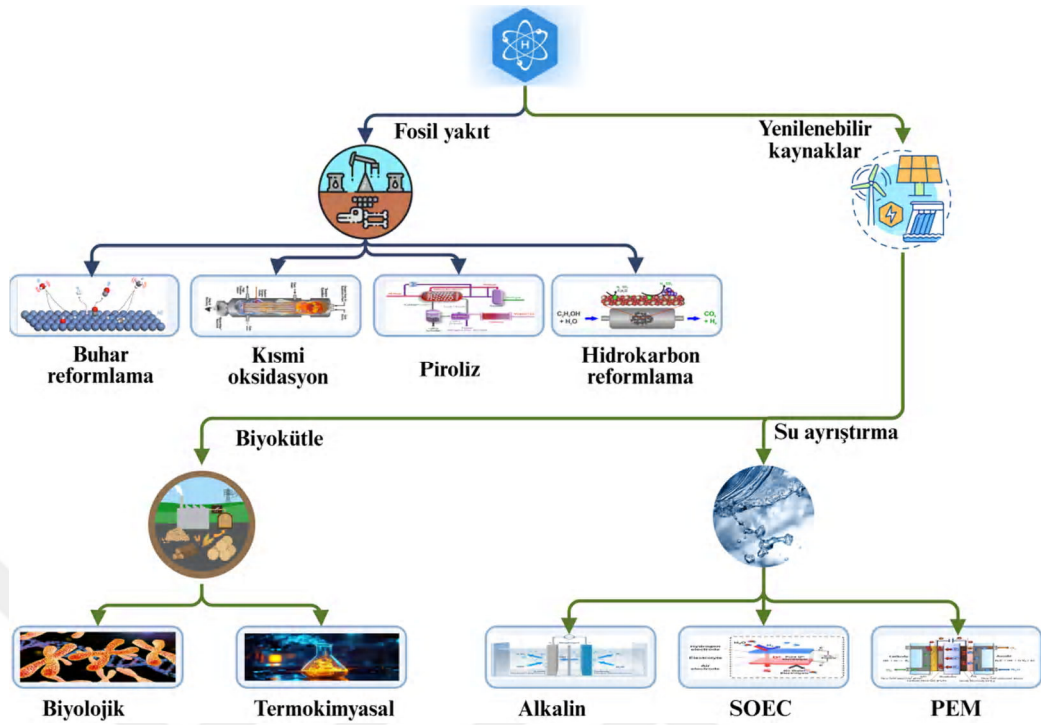
Nükleer enerji santralleri, 2050 yılına kadar küresel elektrik ihtiyacının %4'ünü karşılayacak; doğal gaz ise bu toplamın %5'ini sağlayacaktır [13]. Bu dönüşüm, giderek daha erişilebilir hale gelen yenilenebilir enerji kaynakları ile özellikle ulaşım ve ısıtma gibi nihai kullanım alanlarında elektrikli teknolojilerin yaygın kullanımı arasındaki sinerjiyle karakterize edilmektedir. Isı, ulaşım ve diğer nihai kullanım alanlarının elektrifikasyonu, 2050 sonuna kadar 1,5°C hedefinin başarılması için küresel yenilenebilir enerji üretim kapasitesinin yaklaşık 12 kat artırılmasını gerektirmektedir [14].

Karbon fiyatlandırma mekanizmaları, enerji dönüşümünü hızlandıran önemli politika araçları olarak ortaya çıkmış ve 46 ülke genelinde 70'in üzerinde karbon fiyatlandırma sistemi hayata geçirilmiştir. Dünyanın en büyük karbon piyasası olan AB Emisyon Ticareti Sistemi , fosil yakıt temelli elektrik üretimini daha pahalı hale getirerek düşük karbon yatırımlarını teşvik eden fiyat sinyalleri sağlamaktadır [15]. Üretim vergi kredileri, besleme tarifeleri ve ters açık artırmalar gibi destekleyici politikalarla birleşen bu piyasa mekanizmaları, yenilenebilir enerji sektöründe benzersiz yatırım fırsatları yaratmıştır.

Uluslararası Enerji Ajansı (IEA), 2050'de net sıfır emisyona ulaşmak için 2030'a kadar yıllık temiz enerji yatırımlarının 4 trilyon dolara çıkması gerektiğini öngörmektedir. Bu yatırım ihtiyacı, yenilenebilir enerji teknolojilerinde, enerji depolama sistemlerinde ve şebeke altyapısında teknolojik yenilikler ve maliyet düşüşlerini tetiklemiştir [16]. Ancak, değişken yenilenebilir enerjinin yüksek payda entegrasyonu, şebeke esnekliği, enerji depolama yatırımları ve zorlu sektörlerde emisyonları azaltacak yenilikçi teknolojiler ile kapsamlı politika çerçevelerinin uygulanmasını gerektirmektedir. Emisyon hedeflerinin yenilenebilir enerji kullanım hedefleriyle uyumlu hale getirilmesi, iklim hedeflerine ulaşırken enerji güvenliği ve ekonomik kalkınmanın sağlanması için en uygun yoldur.

1.1.2. Yenilenebilir Enerji ve Hidrojen

Hidrojen, yenilenebilir ve yenilenemez kaynaklar da dahil olmak üzere çeşitli yollar, teknolojiler ve çok geniş bir hammadde yelpazesi üzerinden elde edilebilir. Farklı yollar, hammaddeler ve yenilenebilir ya da yenilenemez kaynaklara dayanan çeşitli teknolojilere Şekil 1.2 'de yer verilmiştir. [17].



Şekil 1.2. Hidrojen üretim yollarının şematik gösterimi

1.2. Yenilenebilir Enerji Kaynaklarından Hidrojen Üretimi

Yenilenebilir enerji kaynaklarından hidrojen üretimi, küresel sürdürülebilirlik hedefleri ve enerji dönüşümü amaçlarıyla uyumlu olarak birkaç kritik nedenle hayati önem taşımaktadır [18].

- Yenilenebilir hidrojen üretimi, konvansiyonel fosil yakıt bazlı yöntemlerle ilişkili karbon ayak izini ortadan kaldırarak doğrudan sera gazı azaltım hedeflerine ve iklim taahhütlerine katkı sağlar.
- Yüksek üretim ve düşük talep dönemlerinde kısıtlanacak olan fazla yenilenebilir enerjinin depolanmasına olanak tanıyarak yenilenebilir enerji yatırımlarının genel verimliliği ve ekonomik uygulanabilirliğini artırır.
- Yenilenebilir hidrojen enerji sistemi esnekliği ve şebeke hizmetleri için fırsatlar yaratır; böylece yenilenebilir enerji projeleri, elektrik piyasaları, endüstriyel hammadde tedariki ve ulaşım yakıtı sağlama gibi çoklu değer zincirlerinde yer alabilir.

Gelişmekte olan yenilenebilir hidrojen üretim teknolojileri arasında, konvansiyonel yöntemlere kıyasla birçok avantaj sunabilecek yenilikçi yaklaşımlar sürekli olarak geliştirilmektedir. Bu ileri teknolojiler, enerji verimliliğini artırmaya, malzeme maliyetlerini düşürmeye ve operasyonel esnekliği geliştirmeye odaklanmaktadır [19]. Yeni üretim yöntemleri, daha elverişli koşullarda çalışmayı hedeflerken pahalı malzemelere ve karmaşık altyapıya olan bağımlılığı azaltmayı amaçlamaktadır. Bu teknolojiler doğrudan yenilenebilir elektrikle çalışabilir ve mevcut yenilenebilir enerji tesisleriyle entegrasyonu kolaylaştıran modüler ölçeklenebilirlik sunar; böylece sistem tasarımı ve uygulamasında daha fazla esneklik sağlar [20].

Yenilenebilir elektrik maliyetlerinin düşmesi ve politika destek mekanizmalarının güçlenmesiyle yenilenebilir hidrojen üretiminin ekonomik uygulanabilirliği artmaya devam etmektedir. Karbon fiyatlandırması, yenilenebilir yakıt standartları ve ulusal hidrojen stratejileri gibi hükümet girişimleri, temiz hidrojenin yaygınlaşması için elverişli koşullar yaratmaktadır. Yenilenebilir hidrojen üretiminin güneş ve rüzgar enerjisi sistemleriyle entegrasyonu, elektrik fiyat sinyallerine ve yenilenebilir enerji erişilebilirliğine dinamik olarak yanıt verebilen bir çalışma imkânı sunarak enerji kullanımını ve hidrojen üretim maliyetlerini optimize eder [21]. Yenilenebilir enerji yaygınlaştıkça ve teknoloji maliyetleri azaldıkça, yenilenebilir kaynaklardan üretilen hidrojen konvansiyonel üretim yöntemleriyle daha rekabetçi hale gelirken çevresel ve enerji güvenliği açısından önemli faydalar sağlamaktadır.

1.2.1. Hidrojen Üretim Yöntemleri

Hidrojen, küresel enerji dönüşümünde kritik bir bileşen olarak öne çıkmış ve sanayi süreçleri, ulaşım ve enerji depolama sektörlerinde karbon azaltım hedeflerine ulaşmak için çok yönlü bir enerji taşıyıcısı haline gelmiştir [22]. Dünya genelinde hükümetler ve endüstriler net sıfır emisyon taahhütlerini hızlandırırken, hidrojen üretim yöntemlerinin çeşitliliği ve karmaşıklığı, standartlaştırılmış sınıflandırma sistemlerinin geliştirilmesini gerekli kılmıştır. Enerji sektörü, hammadde kaynakları, enerji girdileri ve çevresel etkiler temelinde hidrojen üretim yollarını kategorize eden kapsamlı bir renk kodlama çerçevesi oluşturmuştur. Bu, paydaşlara sürdürülebilirlik kriterleri, ekonomik uygulanabilirlik ve teknolojik olgunluk için net değerlendirme ölçütleri sunmaktadır

[23]. Mevcut renk kodlama sistemi, yaygın kabul görmüş sınıflandırmalarla çeşitli hidrojen türlerini ayırır.

- Gri hidrojen, doğal gazın buhar metan reformasyonu yoluyla üretilen ve dünya genelinde yaklaşık %95'lik paya sahip en yaygın formdur; kilogram başına 9-12 kg CO₂ açığa çıkarır.
- Mavi hidrojen, karbon yakalama ve depolama teknolojileriyle birleştirilmiş fosil yakıt üretimidir; %85-95 oranında emisyon azaltımı sağlar ancak metan kaçakları ve uzun vadeli karbon depolama kalıcılığı konularında endişeler bulunmaktadır.
- Yeşil hidrojen, elektroliz süreçlerinde yenilenebilir enerji kullanarak sıfır emisyonlu hidrojen üretir; kilogram başına 50-55 kWh elektrik tüketir.
- Pembe hidrojen, nükleer enerji kullanarak kesintisiz baz yük üretimi sağlar.
- Turkuaz hidrojen ise metan pirolizi ile hidrojen ve katı karbon üretir; gri hidrojene göre daha düşük emisyon sunar ancak yüksek enerji gereksinimi vardır.

Son araştırmalar, hidrojen üretiminde enerji katkı maddelerinin katalitik geliştiriciler olarak kullanıldığına işaret etmektedir. Literatür, hidrojen üretimi için radyasyon, plazma ve biyolojik enerji gibi ikincil enerji türlerini de ana enerji kategorileri arasında tanımakta ve çoklu enerji entegrasyon yaklaşımlarına olanak tanımaktadır [24]. Ancak mevcut gri, mavi, yeşil üç renkli sınıflandırma sistemi, yalnızca enerji kaynağı türüne odaklanmakta ve kapsamlı çevresel etki değerlendirmesi yapmamaktadır. Bu yüzeysel yaklaşım, üretim yaşam döngüsü boyunca sera gazı emisyonlarını, alt sistemleri ve ekipman üretim aşamalarını kapsamlı biçimde ölçmemektedir [25].

Bu nedenle araştırmacılar, tüm yenilenebilir enerji kaynaklarının karbon yakalama yöntemlerinden daha düşük emisyon üretilmediği sorusuna cevap veren hassas temizlik değerlendirmesi sağlayan yenilikçi bir renk spektrumu konseptine ihtiyaç olduğunu ortaya koymuştur. Bu gelişmiş sınıflandırma çerçevesi, daha doğru çevresel

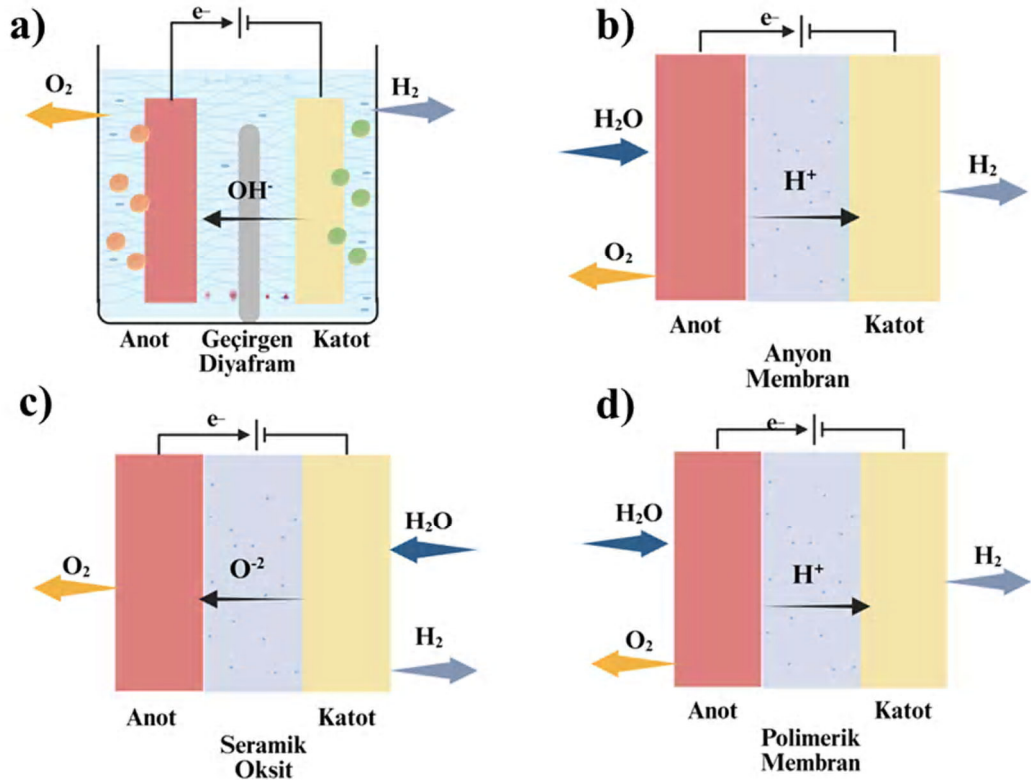
değerlendirmeler yapılmasını ve hidrojen teknolojisi seçimi ile politika geliştirme süreçlerinde bilinçli karar verilmesini destekler.

1.2.2. Suyun Elektrolizi

Su elektrolizi, suyun elektriksel enerji kullanılarak hidrojen ve oksijen gazlarına ayrıştırılması işlemidir ve günümüzde dört farklı teknolojik yaklaşımla gerçekleştirilmektedir. Elektrolizörler, elektriksel ve termal enerjiyi absorbe ederek kimyasal enerjiye çevirir ve hidrojen formunda depolar [26]. Buhar reformasyonu ile benzin, dizel, etanol, metanol, doğal gaz veya propan gibi fosil yakıtlardan düşük saflıkta hidrojen eldesi yapılmasının aksine, elektroliz yöntemi ile yüksek kalite ve saflıkta hidrojen üretimi mümkün olmaktadır. Elektroliz sürecinde gerçekleşen kimyasal reaksiyonlar Eş. 1.1'de gösterilmektedir :



Bu reaksiyonda suyun, elektriksel ve ısı enerji katkıları ile hidrojen ve oksijen bileşenlerine parçalandığı gözlenmektedir. Çevre dostu hidrojen eldesi için elektroliz sürecinde ihtiyaç duyulan enerji girişi, güneş ışınımı ve rüzgâr gücü gibi yenilenebilir kaynaklardan temin edilebilir. Bu sayede çevresel kirlenici unsurlar içermeyen temiz enerji kaynakları kullanılarak hidrojen üretim süreci tamamlanır. Şekil 1.3 yenilenebilir hidrojen üretiminin başlıca türlerini göstermektedir. Bu teknolojiler arasında Katı Oksit , PEM, Alkalın Su ve AEM Elektrolizörleri yer almaktadır. Teknoloji seçimi, enerji verimliliği, işletme maliyeti, dayanıklılık ve sistem gereksinimlerine bağlı olarak değişkenlik gösterir.



Şekil 1.3. a) Katı Oksit, b) PEM c) Alkali Su , d) AEM Elektrolizörü [27]

1.2.2.1. Alkali Su Elektrolizi (AWE)

Alkali su elektrolizi, yenilenebilir enerji kaynaklarından hidrojen üretimi için en olgun ve ticari olarak en yaygın teknoloji olup, yüzyılı aşkın sanayi uygulaması ve sürekli teknolojik iyileştirmelerle desteklenmektedir [27]. AWE sistemleri, elektrotlar arasında iyon iletimi sağlamak için tipik olarak potasyum hidroksit (KOH) veya sodyum hidroksit (NaOH) içeren alkali bir elektrolit kullanır; su molekülleri hidrojen ve oksijen gazlarına ayrılır (Şekil 1.3a). Teknoloji, 60-80°C arasında nispeten ılıman sıcaklıklarda çalışır ve hidrojenin alt ısı değerine göre %62-82 sistem verimliliği elde edebilir. AWE sistemleri 60.000 saati aşan uzun ömürlü ile büyük ölçekli endüstriyel uygulamalar için caziptir [28].

Başlıca avantajları, diğer elektrolizör teknolojilerine kıyasla daha düşük sermaye maliyetleri, nikel bazlı gibi kıymetli olmayan metal katalizörlerin kullanımı ve megavat seviyesinde ölçeklenebilirliktir. Ancak, değişken yenilenebilir enerji girişlerine yanıt verme kabiliyetinin düşük olması, yavaş başlama süreleri ve kısmi yüklerde verimlilik

düşüşü gibi sınırlamaları vardır [29]. Diyafram ayırıcıdan gaz geçişi ve alkali elektrolitin aşındırıcı doğası, sistem tasarımı ve bakımında ek zorluklar yaratır.

1.2.2.2.Anyonik Değişim Membranı (AEM) Elektrolizi

AEM elektrolizi, alkali elektrolizle membran bazlı sistemlerin tasarım avantajlarını birleştiren umut vaat eden hibrit bir teknolojidir. AEM sistemleri, katot ve anot bölümleri arasında fiziksel ayırım sağlayan, hidroksit iyonlarını ileten katı polimer membran kullanır; sıvı alkali elektrolite ihtiyaç duymaz ve kıymetli olmayan metal katalizörlerin kullanımına izin verir (Şekil 1.3b). Bu teknoloji, saf su beslemesiyle çalışabilir, sistem tasarımı basitleştirir ve sıvı elektrolitlere bağlı korozyon sorunlarını azaltır [30].

AEM elektrolizörler, geleneksel alkali sistemlere kıyasla daha yüksek akım yoğunlukları (genellikle 1-3 A/cm²) sunar ve nikel, kobalt bazlı bol ve düşük maliyetli katalizörlerle uyumludur [31]. Dinamik yanıt karakteristikleri iyileştirilmiştir; bu da güneş ve rüzgar gibi değişken yenilenebilir enerji kaynaklarıyla entegrasyona uygundur. Güncel araştırmalar, uzun süreli alkali koşullarda yüksek iyonik iletkenlik ve düşük gaz geçiş oranları sağlayabilen stabil aniyon değişim membranları geliştirmeye odaklanmaktadır .

1.2.2.3.Katı Oksit Elektroliz Hücreleri (SOEC)

SOEC, yenilenebilir enerji kaynakları ve atık ısı geri kazanım sistemleriyle entegre edildiğinde en yüksek hidrojen üretim verimliliklerini sunan yüksek sıcaklık elektrokimyasal teknolojisidir (Şekil 1.3c). SOEC sistemleri, 700-850°C arasında çalışır; oksijen iyonlarını ileten katı seramik elektrolit kullanarak buhar ve elektriği hidrojen ve oksijene dönüştürür [32]. Yüksek çalışma sıcaklığı termodinamik ve kinetik avantaj sağlar; konsantre güneş enerjisi veya jeotermal gibi harici ısı enerjisi mevcutsa %95 veya daha yüksek elektrik verimliliği elde edilir.

SOEC'nin benzersiz avantajı, hem elektrik hem termal enerji girdilerini kullanabilmesi ve ters işletimde katı oksit yakıt hücresi olarak çift yönlü enerji dönüşümü sağlayabilmesidir; bu da sistem esnekliğini ve değer önerisini artırır. Endüstriyel yüksek sıcaklık atık ısı üreten süreçlerle entegrasyon için mükemmel bir perspektif sunar.

Ancak, termal döngü dayanıklılığı, yüksek sıcaklıkta uzun süreli malzeme stabilitesi ve gelişmiş ısı yönetim sistemleri ihtiyacı gibi zorluklar mevcuttur [33].

1.2.2.4. PEM Elektrolizörler

PEMSE teknolojisinin başlangıcı, 1950'lerde Grubb'un öncü çalışmasına dayanmakta olup, daha sonra General Electric tarafından Katı Polimer Elektrolit prensiplerinin uygulanmasıyla geliştirilmiştir [34]. Bu gelişmeler, geleneksel Alkalın Su Elektrolizi sistemlerinin sahip olduğu sınırlamaların üstesinden gelmeyi amaçlamıştır. PEMSE, PEM yakıt hücresi teknolojisine benzer prensiplerle çalışmakta ve Nafion, Flemion, Aciplex ve Fumapem gibi perflorosülfonik asit bazlı katı membran malzemelerini elektrolit olarak kullanmaktadır.

PEMSE'de katalizörler, protonların reaksiyon bölgelerinden elektrolit ortamına etkin bir şekilde taşınmasını sağlamak üzere membran yüzeylerine stratejik olarak yerleştirilmiştir ve böylece kütle transferine bağlı kısıtlamalar önemli ölçüde azaltılmıştır (Şekil 1.3d). Bu tasarım, iyonik iletkenliği artırmak için konsantre elektrolit çözeltilerine olan ihtiyacı ortadan kaldırarak sistemin yalnızca saf su ile çalışmasına olanak tanımaktadır [31]. PEM elektrolizörün anot ve katot kısımlarında gerçekleşen stokiyometrik reaksiyonları Eş. 1.2-1.4'ta verilmiştir.

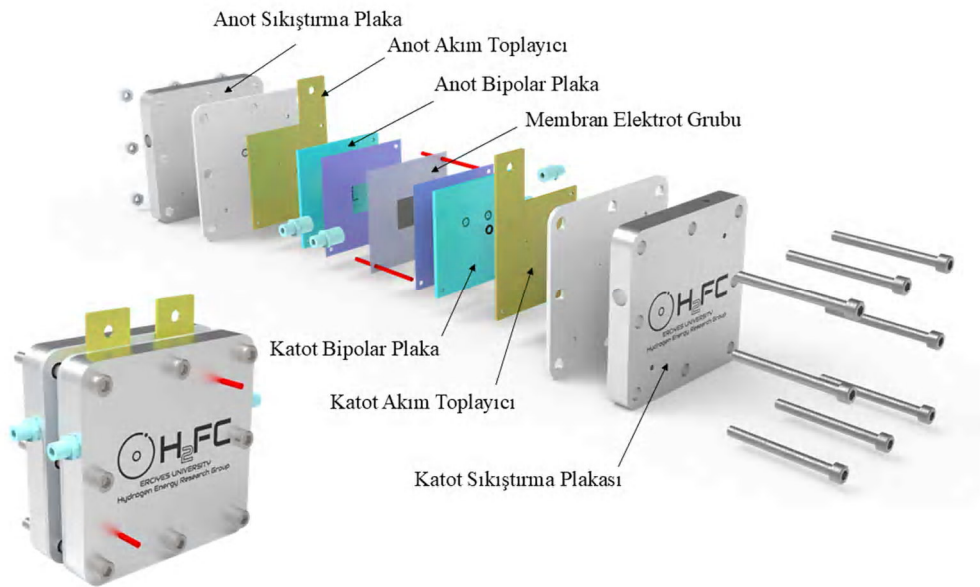


PEMSE'nin temel çalışma prensibi, doğru akım uygulamasıyla su moleküllerinin elektrokimyasal olarak ayrıştırılmasıdır; bu süreçte anotta oksijen gazı, katotta ise hidrojen gazı üretilmektedir. Bu işlem, pozitif elektrottaki oksijen evrimi reaksiyonu (OER) ile negatif elektrottaki hidrojen evrimi reaksiyonunu (HER) içeren iki ayrı elektrokimyasal yarı reaksiyondan oluşur. Anotta su molekülleri, oksijen gazı, proton ve elektronlara ayrışırken, oluşan protonlar katı polimer elektrolit membranı geçerek katot bölmesine ulaşır [35].

Anot çıkışından oksijen gazı ve reaksiyona girmemiş su ayrılarak sistemden dışarı çıkar. Elektronlar ise dış elektrik devresi üzerinden anottan katoda hareket eder ve katotta protonlarla birleşerek hidrojen gazını oluşturur. Bu elektrokimyasal döngü, PEMSE'nin yenilenebilir enerji kaynakları ile çalışan verimli hidrojen üretim kapasitesinin temelini oluşturmaktadır ve sürdürülebilir enerji sistemlerine geçişte önemli bir teknoloji olarak konumlanmaktadır [36].

1.3. PEMSE Sistemleri ve Bileşenleri

PEMSE sistemleri, suyu hidrojen ve oksijene ayırmak için birlikte çalışan birden fazla bağlı bileşenden oluşur. Temel yapı, membran elektrot grubu (MEG), elektrik akımı dağıtım bileşenleri ve gaz ayrıştırma elemanlarını içerir. Tek hücreler, hidrojen üretim kapasitesini artırmak amacıyla daha büyük yığın konfigürasyonlarında birleştirilebilir (Şekil 1.4).



Şekil 1.4. PEM Su Elektrolizöründeki temel bileşenlerin şematik gösterimi [34].

1.3.1. Bipolar Plaka Tasarımı ve Malzemeleri

Bipolar plakalar, PEM su elektroliz sistemlerinde birden fazla kritik işlevi yerine getirir. Elektrokimyasal hücre içinde reaktantların eşit dağılımını sağlar, özel olarak tasarlanmış akış kanalları aracılığıyla üretilen gazların uzaklaştırılmasına olanak tanır, yığın

yapılandırmalarında bitişik hücreler arasında elektrik akımını iletir ve genel yapıya mekanik destek sağlar. Akış kanalı geometrisi, paralel, sarmal, parmaklı, örgü ve spiral gibi farklı düzenlerde tasarlanabilir ve her biri performans ile operasyonel gereksinimlere göre optimize edilir [37].

Bipolar plakalar için uygun malzeme seçimi, zorlu çalışma koşulları nedeniyle mühendislik açısından önemli bir meydan okumadır. Bu parçalar, üstün elektrik iletkenliği, yüksek korozyon direnci, etkin termal yönetim, mekanik dayanıklılık, düşük gaz geçirgenliği, düşük ara yüzey elektrik direnci ve ticari ölçekte ekonomik uygunluk gibi özelliklere sahip olmalıdır [38]. Yüksek voltajlar, asidik ortamlar ve yüksek sıcaklıklar altında uzun süreli stabilite gösterebilmeleri gerekir.

1.3.2. Katot ve Anot Tarafı Malzeme Çözümleri

Katot tarafında, grafit bazlı malzemeler üstün elektrik iletkenlikleri ve korozyona karşı dayanımları sebebiyle ideal tercih olarak öne çıkar. PEM su elektroliz sistemlerinde karbon bazlı bipolar plakalar sadece katot tarafında kullanılır çünkü bu bölgedeki çalışma ortamı daha az aşındırıcıdır ve bu malzemeler uzun süre performanslarını koruyabilir.

Anot tarafında ise ortam çok daha zorludur [39]. Çalışma voltajları 2V civarına ulaşabilir ve bu koşullar karbon bazlı malzemelerde yaklaşık 1.8V'da oksidasyon reaksiyonlarına yol açarak iletkenlik kaybına ve sistem performansının düşmesine neden olur.

Elektrot malzemeleri, yüksek elektriksel iletkenlik, dayanıklılık ve kimyasal stabilite özelliklerine sahip olmalıdır. Genellikle Pt , Ir veya bu metallerin alaşımları gibi maddeler, yüksek elektrokimyasal aktiviteye sahip oldukları için tercih edilir. Ancak bu malzemeler pahalı olduğundan, son yıllarda elektrotlar için daha ekonomik ve verimli alternatif malzemeler araştırılmaktadır.

Anot ve katot elektrotlarının doğru tasarımı, elektrot yüzeyinin etkinliğini artırırken, elektrot malzemesinin seçimi, elektrot ömrünü de uzatabilir. Elektrotlar arasındaki uzaklık ve iletkenlik, sistemin genel enerji verimliliğini etkileyen önemli faktörlerdir. Ayrıca, elektrot yüzeyine uygulanan kaplamalar, elektrotların performansını iyileştirebilir ve koruyabilir. [40].

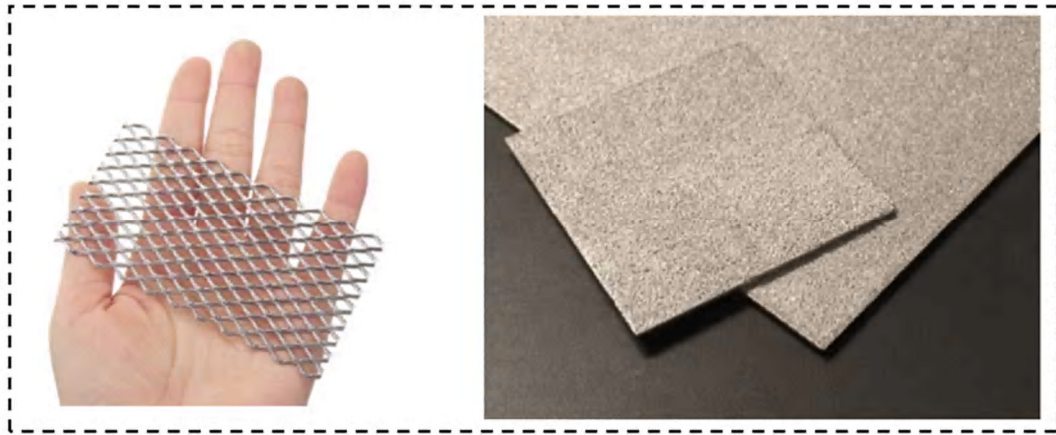
1.3.3. Elektrotlar ve Kaplamalar

PEM su elektroliz sistemlerinin zorlu çalışma ortamı, özellikle anot tarafında, gelişmiş yüzey koruma yöntemleri gerektirir. Titanyum bazlı bipolar plakalar, yüksek voltajlar ve korozyon koşullarında yüzey oksidasyonunu önlemek için koruyucu kaplamalarla donatılır. Altın ve platin gibi değerli metal kaplamalar, gerekli korumayı sağlarken üstün elektrik iletkenliği ve korozyon direnci sunar [41, 42]. Kaplama metodları, elektrot bileşenlerinin performansını ve dayanıklılığını artırmak için farklı tekniklerle uygulanır. Bu koruyucu tabakalar, yüksek sıcaklık, asidik ortam ve yüksek elektrokimyasal potansiyel gibi ekstrem koşullar altında bütünlüğünü korumalıdır. Kaplama seçimi, maliyet, performans gereksinimleri ve ticari üretim ölçeklenebilirliği gibi faktörlere bağlıdır.

Catalyst Coated Membrane (CCM) teknolojisi, spray ultrasonik kaplama, fiziksel buhar biriktirme (PVD), kimyasal buhar biriktirme (CVD), elektrolitik kaplama ve termal püskürtme gibi çeşitli uygulama yöntemleri, elektrot komponentlerinin performansını ve dayanıklılığını geliştirmek için kullanılır. Bu koruyucu katmanlar, yüksek ısı, asit ortamı ve yüksek elektrokimyasal potansiyel gibi ekstrem şartlar altında yapısal bütünlüğünü sürdürmelidir. Kaplama tercihi, maliyet faktörleri, performans gereksinimleri ve endüstriyel üretim ölçeklendirilmesi gibi unsurlar dikkate alınarak belirlenir.

1.3.4. Gaz Difüzyon Tabakası (GDL)

Gaz difüzyon tabakaları, aktif elektrot yüzeyi boyunca reaktantların eşit dağılımını sağlamak üzere tasarlanmış gözenekli taşıyıcı medya olarak işlev görür. Bu bileşenler, elektrolizörler, yakıt hücreleri ve elektrokimyasal kompresörler gibi enerji dönüşüm cihazlarında yüksek akım yoğunluğu operasyonları ve minimum malzeme taşıyım kayıpları için optimize edilmiştir. PEM su elektroliz uygulamalarında sistem verimliliği, katalizör-membran arayüzüne ulaşan su miktarı ile doğrudan ilişkilidir. Anot tarafındaki gaz difüzyon tabakalarının gözeneklilik özellikleri, su akışı kısıtlamalarını önlemek için dikkatle dengelenmelidir [42]. Şekil 1.5 GDL ticari yapısını göstermektedir.



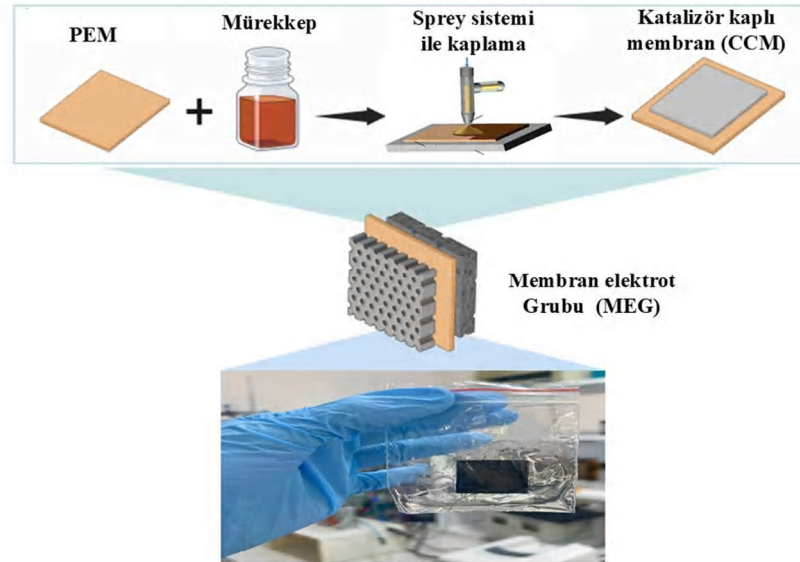
Şekil 1.5. PEMSE'de kullanılan farklı GDL konfigürasyonları

Yetersiz gözeneklilik su akışını engellerken aşırı gözeneklilik, aktif yüzey alanında yetersiz su dağılımına yol açarak performansı düşürür. Yüksek oksitleyici anot ortamı, temas direncinde artış, ohmik kayıplar ve aktivasyon aşırı potansiyellerinde yükselmeye yol açarak hücre verimini önemli ölçüde azaltan korozyona karşı yüksek dirençli malzemeler gerektirir. Anot tarafında platin kaplı titanyum örgü yapılar, üstün korozyon direnci nedeniyle yaygın olarak kullanılır. Ancak titanyum malzemelerin yüksek maliyeti, ticari uygunluk için maliyetleri azaltacak alternatif malzeme araştırmalarını teşvik etmektedir [43].

1.3.5. Membran Elektrot Grubu

PEMSE için yüksek performanslı MEG 'lar, katalizör ve membran arasında güçlü yapışma sağlamalı, elektrolit ve katalizörlerin optimal etkileşimde bulunduğu etkili üç fazlı sınır bölgeleri oluşturmalı, katalizör katmanları ile membran arasında düşük elektriksel direnç ve reaksiyon noktalarından gaz kabarcıklarının etkin uzaklaştırılmasını mümkün kılmalıdır [42]. Ayrıca kimyasal stabilite, mekanik dayanıklılık ve ticari üretim maliyetleri önemli hususlardır. MEG üretim süreci tipik olarak üç ana aşamada gerçekleştirilir: katalizör mürekkep hazırlama, kaplama uygulama ve laminasyon/sıkıştırma aşamaları. Üretim teknikleri, yakıt hücresi üretim süreçlerine benzerlik göstermektedir. Yaygın yöntemler arasında CCM ve CCG teknikleri yer alır, burada katalitik malzemeler ya membran yüzeyine ya da destek

tabakasına hassas bir şekilde uygulanır. Şekil 1.6 PEMSE sistemleri için kullanılan CCM işlem sürecini detaylı bir şekilde göstermektedir.



Şekil 1.6. CCM süreci [42]

PEMSE için yüksek performanslı MEG 'lar, katalizör ve membran arasında güçlü yapışma sağlamalı, elektrolit ve katalizörlerin optimal etkileşimde bulunduğu etkili üç fazlı sınır bölgeleri oluşturmalı, katalizör katmanları ile membran arasında düşük elektriksel direnç ve reaksiyon noktalarından gaz kabarcıklarının etkin uzaklaştırılmasını mümkün kılmalıdır. Ayrıca kimyasal stabilite, mekanik dayanıklılık ve ticari üretim maliyetleri önemli hususlardır. MEG üretim teknikleri, yakıt hücresi üretim süreçlerine benzerlik göstermektedir [44].

Membran, MEG 'nın merkezi bileşenidir ve hem gaz saflığı hem de sistem dayanıklılığı üzerinde büyük etkiye sahiptir. Hidrojen ve oksijen gazlarının karışmasını önleyerek yüksek saflıkta gaz üretimini sağlar; bu, yakıt hücresi uygulamaları ve çeşitli endüstriyel süreçler için kritiktir. Yüksek kaliteli membranlar, yüksek sıcaklık, yüksek nem ve asidik ortamlarda çalışabilmeli, kimyasal bozulmaya ve mekanik strese karşı dayanıklı olmalıdır. Perflorosülfonik asit (PFSA) polimer membranlar, günümüzde kullanılan teknoloji standardını oluşturur. Ticari ürünler arasında Nafion (N115, N117), Aquivion, Fumion, Aciplex ve Flemion gibi markalar bulunur [45]. Bu gelişmiş malzemeler, sülfonik asit fonksiyonel grupları ile hidrofobik aromatik omurga

yapılarının sofistike faz ayrışımı mimarilerini kullanarak proton taşınımını optimize ederken yapısal bütünlüğü korur.

Nafion ve Aquivion membranlar, 80°C ve %100 bağıl nemde 0.09-0.11 S/cm aralığında yüksek proton iletkenliği ve yaklaşık 20 MPa mekanik dayanım gösterir. Ancak maliyetleri yüksektir, florür göçü nedeniyle metal bileşenlerde korozyon riski taşır ve yüksek sıcaklık ve kalınlıklarda ohmik direnç artışı nedeniyle yüksek akım yoğunluklarında verim kayıplarına neden olabilir [46].

1.3.6. Akım Toplayıcıları

Akım toplayıcılar, dış enerji kaynaklarından elektrokimyasal hücre yapısına elektrik enerjisinin etkin iletiminden sorumludur. Aktif elektrot alanlarında uniform akım dağılımını sağlayarak elektriksel kayıpları en aza indirir ve elektroliz süreci boyunca optimum performansı destekler [47]. Tek hücreli konfigürasyonlarda doğrudan elektriksel temas sağlar, çok hücreli yığımlarda ise bitişik hücreler arasında elektriksel sürekliliği bipolar plakalarla birlikte sağlar.

Güncel akım toplayıcı uygulamalarında altın kaplı bakır, karbon kaplı paslanmaz çelik, gümüş kaplı nikel, iridyum kaplı titanyum ve grafit kompozit malzemeler kullanılmaktadır. Bu malzemeler yüksek elektrik iletkenliği, mekanik dayanıklılık ve PEM elektrolizör ortamıyla uyumluluk göstermelidir. Malzeme seçimi performans, maliyet ve ticari uygunluk dengesi gözetilerek yapılır. Doğru tasarım ve malzeme seçimi, sistem verimliliği ve uzun ömür açısından kritik öneme sahiptir.

1.4. Optimizasyonun Temel Prensipleri

Son yıllarda, veri odaklı yaklaşımlar karmaşık mühendislik sistemlerinin analizinde, modellenmesinde ve kontrolünde giderek daha fazla önem kazanmıştır. Termodinamik veya elektrokimyasal denklemler gibi fiziksel yasalara dayanan geleneksel modelleme teknikleri, özellikle doğrusal olmayan davranışlar, belirsizlikler ve çok sayıda etkileşimli değişken söz konusu olduğunda gerçek sistem davranışını tam anlamıyla yakalamada sınırlı kalabilmektedir [48]. Veri odaklı tahmin yöntemleri, geçmiş veya gerçek zamanlı operasyonel verileri kullanarak sistemi modelleme ve gelecekteki durumları tahmin etme konusunda etkili bir alternatif sunmaktadır. Enerji sistemlerinde,

MÖ modelleri, genellikle geçmiş operasyonel veriler, sensör okumaları veya yüksek doğrulukta simülasyon sonuçları kullanılarak eğitilir. Eğitilen modeller, yeni veya daha önce karşılaşılmamış koşullar altında sistem davranışını güvenilir şekilde tahmin edebilir; böylece gerçek zamanlı tahmin, sanal deneyler ve proaktif sistem yönetimi gibi uygulamalara olanak tanır. Bu esneklik, altta yatan fiziksel olayların geleneksel analitik yöntemlerle modellenmesinin çok karmaşık, maliyetli veya zaman alıcı olduğu durumlarda özellikle faydalıdır [50].

Veri yapısı, hacmi, boyutları ve yorumlanabilirlik gereksinimlerine bağlı olarak farklı MÖ algoritmaları tercih edilebilir. Bu algoritmalar, yapılandırılmış ve yapılandırılmamış verileri işleyebilmekte, ince desenleri ortaya çıkarabilmekte ve sınırlı veriyle bile güçlü genelleme yeteneği gösterebilmektedir.

MÖ modellerinin dayanıklılığı ve tahmin kalitesi, genellikle Kök Ortalama Kare Hata (RMSE), Ortalama Mutlak Hata (MAE) ve belirleme katsayısı (R^2) gibi standart metriklerle değerlendirilir. Yüksek tahmin doğruluğu, bu modellerin sistem çıktılarının güvenle öngörülmesi, performans optimizasyonunun yönlendirilmesi ve karmaşık mühendislik sistemlerinde veri odaklı karar alma süreçlerine destek verilmesi açısından kritik öneme sahiptir [48].

1.4.2. Açıklanabilir Makine Öğrenimi

MÖ modelleri genellikle yüksek tahmin doğruluğu sağlasa da, girdilerin tahminler üzerindeki etkisinin şeffaf olmaması nedeniyle sıklıkla “kara kutu” olarak değerlendirilirler [50]. Bu şeffaflık eksikliği, özellikle güvenlik, güvenilirlik ve paydaş güveninin kritik olduğu mühendislik uygulamalarında önemli bir sınırlama teşkil eder. Bu zorlukların üstesinden gelmek amacıyla, MÖ modellerinin yorumlanabilirliğini ve şeffaflığını artırmaya odaklanan XML alanı ortaya çıkmıştır.

XML teknikleri, her bir girdinin model çıktısına olan katkısını niceliksel ve görsel olarak ortaya koymayı hedefler. Bu yöntemler, model davranışının hem küresel düzeyde yani tüm veri seti genelinde özelliklerin tahminlere etkisi hem de yerel düzeyde tek tek tahminlerde özelliklerin etkisi daha iyi anlaşılmasını sağlar [48]. En yaygın kullanılan XML yaklaşımları şunlardır:

- **SHAP** : İş birliği oyun teorisine dayanan teorik bir çerçeveye sunar ve hem küresel hem yerel model tahminlerini açıklamak için her girdiye katkı değerleri atar.
- **Özellik Önem Grafikleri** : Her bir özelliğin model performansına göreceli etkisini görselleştirerek özellik seçimi ve sistem analizi için rehberlik sağlar.

XML tekniklerinin uygulanmasıyla, araştırmacılar sistem performansını en çok etkileyen işletim parametrelerini veya belirli girdilerdeki değişimlerin tahmini sonuçlar üzerindeki etkisini ortaya koyabilirler. Bu içgörüler, sadece model şeffaflığını artırmakla kalmaz, aynı zamanda deney tasarımını destekler, karar alma süreçlerine rehberlik eder ve veri odaklı tahmine dayalı modellerin güvenilirliğini yükseltir [50].

1.5. Literatür İncelemesi

MÖ modelleri, PEMSE performansını artırma konusunda önemli potansiyel göstermektedir. PEMSE tasarım optimizasyonunda MÖ'nün gücünü gösteren önemli bir örnek, Yang ve ark. [51] tarafından sunulmuştur. Çalışmada 1062 farklı tasarım ve K-En Yakın Komşu (KNN) ile Dinamik Rota Tablosu (DRT) kombinasyonunu içeren çok modlu bir yaklaşım kullanılarak uygun akış konfigürasyonu seçilmiştir. Beş girdi; hidrojen verimi, elektrot bölgesi, anot akış bölgesi, katot sıvı alanı, hücre tasarım tipi olarak değerlendirilmiş ve hidrojen üretim hızı çıktı olarak alınmıştır. Sonuçlar, MÖ modelinin 50 ile 3000 mL/dakika arasında ticari hidrojen üretimine uygun optimum tasarım ve akış alanı desenini başarılı şekilde tahmin edebildiğini göstermiştir.

MÖ'nün elektrokatalitik tasarıma uygulanması alanını genişleten Ding ve ark. [52], web büyük verisi, kara kutu yorumlama, SHAP değerlendirmesi ve Yapay Sinir Ağı (ANN) metodolojilerini yüksek güvenilirlik derecesine sahip tam otomatik bir veri çekme sistemi ile kullanarak yeni perspektifler sunmuştur. Önerilen modeller, genel eğilimleri ve desenleri etkili şekilde yakalamış, bu yaklaşım PEMSE teknolojisinde malzeme bilimi uygulamaları için büyük veri ile MÖ'nün birleşiminin gücünü ortaya koymuştur.

Lizhen Wu ve ark. [53] tarafından yapılan güncel bir çalışmada, PEMSE'de gaz ayrıştırma katmanı ve taban yüksekliği optimizasyonunu hızlandırmak için Derin Sinir Ağı (DNN) vekil modeli geliştirilmiştir. DNN, hacim akışkan simülasyonlarından üretilen verilerle eğitilmiş ve kabarcık ayrılma sürelerinin hızlı tahminine olanak

sağlamıştır. Daha sonra, genetik algoritma (GA) modeli, DNN tahminlerine dayanarak katman yüksekliklerinin optimum kombinasyonunu verimli şekilde aramak için kullanılmıştır.

Chen ve ark. [54] PEMSE kanal boyutlarını optimize etmek için ANN ile entegre çok fiziksel model kullanmıştır. Bu yaklaşım, akım yoğunluğunda önemli bir artış sağlamış ve deneysel veya fiziksel modellerle MÖ yöntemlerinin kritik PEMSE bileşenleri optimizasyonundaki etkinliğini göstermiştir.

Birçok çalışma, PEMSE performans değerlendirme ve optimizasyonunda MÖ'nün kullanımına odaklanmıştır. Shakibi ve ark. [55] dört ANN algoritması (Çok Katmanlı Algılayıcı (MLP) Tepki Yüzeyi Metotları kullanarak sistemin hassasiyetini kapsamlı biçimde değerlendirmiştir. Poröz katı soğutucu, membran filtrasyonu ve sıvılaştırılmış petrol gazı gibi faktörler incelenmiş, sistemin net güç, hidrojen ve tatlı su üretiminde üstün performans sergilediği ortaya konmuştur.

Mohamed ve ark. [56] 789 gözlem içeren veri tabanını kullanarak PEMSE fonksiyonelliğini geliştirmek için MÖ tekniklerini uygulamışlardır. Katot yüzeyinde saf Pt, anot destek malzemesi olarak Ti ve anot yüzeyinde Pt, Ir, Co ve Ru katalizörlerinin kombinasyonu yüksek performans sağlamıştır. Ayrıca, elektrotlarda Ti poröz yapılar, elektrolit olarak saf su ve Nafion ile Aquivion tipi membranlar da performans artışına katkıda bulunmuştur.

Hai ve ark. [57] deneysel örnekler ve evrimsel algoritmalarla MÖ modelleri ile GA'yı kullanarak PEMSE performansını artırmayı incelemiştir. Sonuçlar, enerji sisteminin optimum işletme noktasının birkaç megavatlık faydalı güç çıktısı ile yüksek hidrojen akış hızına olanak verdiğini göstermiştir. Son dönemde, MÖ tekniklerinin MEG bileşenlerini optimize etmek için entegrasyonu ve böylece performans ile maliyet etkinliğini artırma çalışmaları artmıştır.

Zhang ve ark. [58] 58 MEG üretilen test ederek oluşturdukları kapsamlı veri tabanı ile 16 özellik ve 11.025 deneysel veri içeren bir set kullanmıştır. Termal gradyanlar veri setinin büyüklüğünü artırmak için eklenmiştir. XGBoost, SHAP ve evrimsel algoritma kullanılarak elektrolizör sıcaklıkları optimize edilmiş ve MEG hızında önemli

iyileşmeler sağlanmıştır. Bu çalışma, MÖ'nün MEG verimliliği ve hızını önemli ölçüde artırmadaki potansiyelini göstermektedir.

Bu temelin üzerine, Satjaritanun ve ark. [59] PEMSE'de PTL yapısı ile MEG optimizasyonu arasındaki ilişkiyi MÖ modelleriyle incelemiştir. Sonuçlar, MÖ ile MEG performansı arasında yüksek doğrulukta korelasyon göstererek MEG tasarımı ve endüstriyel üretimde MÖ'nün etkin bir araç olduğunu doğrulamıştır.

Performans tahmininde, Kim ve ark. [60] PEMSE sistemi için veri odaklı yaklaşımlar ve en uygun MÖ algoritmaları kullanmıştır. Araştırmalarına göre, PEMSE işletme voltajı su akış hızıyla korelasyonludur. Su yoğunluğu arttıkça hız artışı nedeniyle voltaj düşer ve verimlilik artar. Yüksek sıcaklıklarda ise aktivasyon kaybı azalır ve düşük voltaj nedeniyle verimlilik iyileşir. PEMSE sistemleri için MÖ yöntemleri, akış koşullarına bağlı performans haritası üzerine geliştirilmiştir. Özellikle, yüksek performanslı MEG tasarımı desteklemek için açıklanabilir MÖ destekli bir keşif iş akışı geliştiren yenilikçi bir yaklaşım sunulmuştur. Sıcaklık, nem, özgül hacim, Nafion fiziksel özellikleri ve GDL kalınlığı gibi değişkenler girdi olarak kullanılmış, katalizör katmanı boyutunda bir denge gösterilmiştir. MEG malzeme tasarımı ve optimizasyonunda da MÖ tekniklerinin gücü birçok çalışmada kanıtlanmıştır.

Ding ve ark. [61] MEG 'yı iyileştirmiş ve değerli olmayan metal elektrot malzemeleri için en önemli kriterleri belirlemiştir. Bulguları, yüksek performanslı değerli olmayan metalik elektrokatalizör bazlı PEMSE için kritik faktörlerin tespiti konusunda MÖ modellerinin uygulanabilirliğini doğrulamıştır. ANN, güç yoğunluğunu tahmin etmede ve tekrarlanabilirliği sağlamada DT ve XGBoost'a kıyasla üstünlük göstermiş, MEG tasarımının geliştirilmesinde MÖ'nün etkinliğini ortaya koymuştur.

Uenishi ve ark. [62] Katot Katalizör Tabakasının performansını artırmak için GA tabanlı bir model kullandı. Farklı karbon yüzeyleri ve katalizör katmanları gibi özelliklerle deneyler gerçekleştirerek voltaj seviyelerine dayalı eğriler kullandılar. Bu veri odaklı modelleme yaklaşımı, optimize edilmiş MEG katot katalizör tabakaları yaratmada etkili olduğunu gösterdi.

Jienkulsawad ve ark. [63], PEM yakıt hücresi katalizör tabakası yapısını temel olarak tanımlamışlardır. Bunu takiben, birçok araştırmacı özellik çıkarımı, Gated Long Short-

Term Memory (G-LSTM), Tekrarlayan Sinir Ağları ve geliştirilmiş çok adımlı Echo State Networks gibi veri odaklı ve yarı ampirik modelleme tekniklerini kullanarak PEMFC bozulmasının tahminini incelemiştir.

Bahr ve ark. [64], 40 kW kapasiteli bir PEM elektrolizörün deneysel verilerini kullanarak ANN tabanlı bir yaşlanma simülasyonu geliştirmiştir. Önerilen model, hücre bozulmasının farklı seviyelerini eğitim seti içinde esnek şekilde ele alabilmektedir. Liu ve ark. [65] ise 1 kW'lık bir yakıt hücresinde 1154 saat ve 70 A akım altında LSTM ve RNN modellerini kullanmış, deneylere kıyasla yüksek doğruluk elde etmiştir. Ayrıca, 100×100 piksel boyutundaki görüntülerin 50×50 olanlara göre daha açıklayıcı girdiler sağladığını belirtmişlerdir.

Xu ve ark. [66], elektrolizör voltajındaki zamana bağlı değişimleri tahmin etmek için CNN ve LSTM modellerinin birleşimini kullanmış, bu model özellikle uzun dönem tahminlerinde geleneksel yöntemlerden daha iyi performans göstermiştir. 1000 saat sonunda elektrolizörün sabit çalışmada %2,5, dur-kalk çalışmada ise %4,5 oranında bozulduğu tespit edilmiştir. Bu yöntem, elektrolizör sistemlerinin gerçek zamanlı izlenmesi için umut vaat etmektedir.

Zaveri ve ark. [67], hücre yığını potansiyel farkı ile basınç, hava ve hidrojen sıcaklığı, akım yoğunluğu gibi giriş değişkenlerine odaklanmış; mekânsal filtreleme yöntemleri geliştirmiş ve bozunma göstergesi tahminini Interacting Multiple Model Extended Kalman Filter ile optimize etmiştir. Ayrıca, SVM, sınıflandırma ağaçları, rastgele orman ve ANN modellerinden oluşan ML yöntemleriyle bağlı nem tahmininde SVM modelinin üstün olduğu belirlenmiştir. Bu istatistiksel ML algoritmaları, taşma veya kuruma kaynaklı arızaların takibinde etkin olmuştur.

Cawte ve ark. [68] GD) porozitesi ve optimum membran kuruluşunu belirlemek için CNN, LSTM, RNN ve KNN algoritmalarını kullanmıştır. Optimum hidrasyon akım yoğunluğu uygun GDL mikro yapısı düzenlemeleri için hedef olarak seçilmiştir. Derin öğrenme ile KNN'in birleşimi, ve 3D CNN düşük hata oranıyla tahmin ettiğini göstermiştir.

Wang ve ark. [69], bozulmuş GDL'yi ANN gibi ML tabanlı vekil modellerle optimize etmiş; çıktı olarak akım yoğunluğu ve oksijen dağılımını değerlendirmiştir. GA, ANN

ve çok amaçlı GA yöntemleri kullanarak MEG optimizasyonu önermiştir. Çalışmalar, işletme hücre voltajlarının ideal MEG bileşiminde belirleyici olduğunu ve yüksek yüklerde katalizör tabakası geçirgenliğinin artırılması ile elektrolit ağırlık yüzdesinin azaltılmasının verimliliği iyileştirdiğini ortaya koymuştur.

Xing ve ark. [70] elektrolit ağırlık yüzdesinin artırılması ve MEG geçirgenliğinin azaltılmasının düşük akış yoğunluğunda kaliteyi artırdığını; yüksek platin yüklemesinin ve küçük agregasyon yarıçapının tüm hücre voltajlarında akım değerini yükselttiğini belirtmiştir.

Ozdemir ve ark. [71] RSM, KNN, SVM ve Doğrusal Regresyon yöntemleri ile işletme parametrelerinin optimal değerlerini belirlemişlerdir. Nemlendirmenin güç üretimi sırasında ısıyı azalttığını ve PEMSE verimliliğini artırdığını göstermiştir. Bu, sıcaklık, hücre voltajı ve servis koşullarının PEMSE performansındaki önemli etkisini vurgulamaktadır.

Wilberforce ve ark. [72], ML ve ANFIS kullanarak yeni bipolar plaka şekilleri (baffling kare, dikdörtgen, paralel ve serpantin kanallar) geliştirmiştir. Basınç, ısı, membran kalınlığı ve nem gibi özellikler değerlendirilmiş ve baffling kare kanal tasarımı, hidrojen oranı, güç yoğunluğu ve akımda belirgin üstünlük sağlamıştır.

Lin ve ark. [73], sonlu eleman analizini ML modelleri ile birleştirerek BP malzeme dağılımını optimize etmeyi önermiştir. Mevcut bir tasarımdan başlayarak hafif ve yüksek kaliteli plaka üretimini hedefleyen bu yöntem, belirlenen tasarım alanı içinde optimal malzeme yerleşimi sağlar.

Ozdemir ve ark. [71], LR, Ridge Regresyon ve Polinom Regresyon gibi ML algoritmaları kullanarak akış plakalarının üretiminde kullanılan kimyasalların etkilerini incelemişlerdir. Sonuçlar, alüminyumun alaşımlı çelik ve bakıra kıyasla tüm bipolar plaka bileşimlerinde daha üstün olduğunu göstermiştir.

Li W ve ark. [73], paslanmaz çelik (SS316) bipolar plakalar kullanarak tek hücreli bir PEM prototipi oluşturmuştur. Araştırmaları, reçine karışımının BP özellikleri üzerindeki kritik rolünü ortaya koymuştur.

Kumar ve ark. [74], %25 buharlı fenolik reçine içeriğinin plakanın üretim özelliklerini iyileştirdiğini bulmuşlardır. Grafit BP'ler ile genişletilmiş grafit/fenolik restoratif malzemelerden yapılmış BP'lerin karşılaştırılması, elektro-kimyasal empedans spektroskopisi ile gösterildiği üzere, toplam dirençte azalma olduğunu ortaya koymuştur. Ayrıca, BP optimizasyonunda MÖ uygulamalarının çeşitli yönlerde önemli ilerlemeler kaydettiği gözlemlenmiştir.

PEMSE teknolojisinde etkin ve uygun maliyetli katalizör malzemelerinin geliştirilmesi kritik bir zorluk olmaya devam etmektedir. PEMSE sistemi, MÖ uygulamalarının büyük potansiyel gösterdiği iki temel elektrokimyasal reaksiyona dayanmaktadır. Katot tarafında, HER iki elektron transferiyle gerçekleşirken, MÖ algoritmaları geleneksel katalizörlere düşük maliyetli alternatifler bulmada başarılı olmuştur. Ancak, anot tarafındaki OER dört elektron transfer mekanizması nedeniyle daha karmaşık bir optimizasyon sorunu teşkil etmekte olup, sistemin hız belirleyici adımıdır. Geleneksel yöntemler OER için genellikle pahalı soy metal bazlı Ir ve Ru oksit katalizörlere dayanırken, MÖ tekniklerinin entegrasyonu performans ve maliyet dengesi sağlayan alternatif malzemelerin keşfedilmesi için yeni yollar açmıştır.

Kim ve ark. [75], DFT ve MÖ yöntemlerini kullanarak PEMSE katalizinde çok-metalik kompozitler için ideal malzeme ve yapıyı araştırmışlardır. Eğitim veri setlerinde alaşımın gerçek bileşimleri, temas alanı, gelişmiş işlem miktarı ve katalitik empedans yer almıştır. Araştırmaları, katalizör seçimi yoluyla güç yoğunluğunu optimize ederek, sadece öncü kombinasyon bileşimleri kullanılarak modellerin başarıyla oluşturulabileceğini göstermiştir. Zubatiuk ve ark. [76], 9.5 milyon noktadan oluşan veri seti ve CO adsorpsiyon modellemesi ile standart Pt yüzeylerine benzer performans gösteren on bir Pt bazlı alaşım keşfetmişlerdir. Chen ve ark. [77] ise yüksek performanslı malzeme geliştirilmesinin DFT hesaplamalarının yüksek maliyetiyle engellendiğini belirtmiş, fakat ML'nin malzeme özelliklerini tahmin ederek keşif sürecini hızlandırabileceğini göstermiştir. DNN ve Schrödinger Sinir Ağı kullanılarak 2973 bileşim arasından 43 umut vaat eden elektrokatalizör tanımlanmıştır. DFT veritabanları ile ML ve SchNet'in entegrasyonu, HER katalizörlerinin hızlı ve doğru taranmasında etkili olmuştur.

Zhang ve ark. [78] GA, ANN ve En Küçük Mutlak Azaltma Seçimli Operasyon yöntemlerini kullanmışlardır. Bunlara ek olarak, dönen açılar, bağ uzunlukları ve bant yapısının oranı gibi tanımlayıcıları, morfolojik yapısal özelliklerden türetilen 20 simetri faktörüne genişletmişlerdir. Beklenen adsorpsiyon enerjileri deneysel değerlerle yakından uyumludur. Ayrıca, 300 W sistemi, hem HER hem OER için daha düşük hücre voltajları elde ederek mevcut en iyi performanslardan üstün elektrokatalitik aktivite göstermiştir.

Anand ve ark. [79], MXene formülasyonlarını, HER ve OER katalitik aktivitesi ve dayanıklılığı açısından incelemişlerdir. AdaBoost, Bagging, GB, LightGBM, Gauss Süreç Regresyonu ve CatBoost gibi MÖ tabanlı sınıflandırıcı teknikleri kullanarak hesaplamalarla uyumlu sonuçlar elde etmişlerdir. Kararlı boşluk bölgelerinde tek atom adsorpsiyonu ve alt yüzey metalik yüzeyde tek atom değişimi için, adsorbat genişletme mekanizmasının Tek Atom Katalizörleri için daha uygun olduğunu göstermişlerdir. Algoritmanın umut vaat eden OER parametrelerine sahip alternatifleri yönlendirme yeteneği, geliştirilmiş tahmin doğruluğunu ortaya koymaktadır.

Kapse ve ark. [80], OER katalitik özelliklerini karakterize etmek için Destek Vektör Regresyonu, DFT, MÖ Teknikleri ve Rastgele Orman Regresyonu uygulamışlardır. Araştırmaları, grafit nanoribon yapılarının OER aktivitesi ile O-atom birikimi miktarı arasında bir korelasyon olduğunu göstermiştir. Katalitik performansı tahmin etmek için enerji özellikleri ile elektron tabanlı tanımlayıcılar birlikte kullanılmıştır. DFT hesaplamalarıyla desteklenen SVR modeli, en etkili aktif OER bölgesini belirlemiş ve DFT ile ML tekniklerini entegre etmiştir.

Niu ve ark. [81], K-En Yakın Komşu Regresyonu ve Gradient Boosting Regresyonu modelleriyle fonksiyonel elektrokatalizörler oluşturmuş, son derece etkin OER ve ORR performansı sağlamıştır. Sonuçları, mevcut fizikokimyasal parametreler ve Yakıt Tek Atom Elektrokatalizörlerinin OER aktivitelerinin desenini açıklamada en etkili ML modellerini vurgulamıştır. DFT hesaplamaları, ML modellerinin doğruluğunu ve güvenilirliğini en iyi SAC'lerin doğrulanmasıyla büyük ölçüde desteklemiştir. Rh-Pc, Co-N-C ve Rh-C₄N₃, soymetal katalizörlerden daha yüksek aktivite gösteren üç umut verici oksijen elektrokatalizörüdür.

Timmermann ve ark. [82], Gaussian Yaklaşım Potansiyeli ve hesaplamalı tekniklerle farklı kristal yüzey desenlerini incelemişlerdir. Bazı desenlerin teorik olarak diğerlerine benzer kararlılık gösterdiğini bulmuşlardır. Deneysel sonuçları, test edilen birçok kristalin X-ışını absorpsiyon testlerinde beklenen özellikleri gösteren özgül bir yüzey desenine sahip olduğunu ortaya koymuştur. Önceki çalışmalardan daha fazla aktif malzeme keşfedilmiş ve farklı oksit yüzeyler için OER overpotansiyellerini tahmin eden otomatik bir yöntem geliştirilmiştir. DFT sonuçlarına dayanarak katalizör tasarım yaklaşımları önerilmiş ve umut vaat eden reaksiyon türleri tanımlanmıştır; bu türler bilinen yüzeylerden daha iyi performans göstermiştir. Keşfedilmemiş kimyasal alanların katalizör tasarımındaki önemi, yüzey örtüşmelerini ve aktif bölge aktivitelerini tahmin eden bir ML modeliyle daha da vurgulanmıştır.

Back ve ark. [83], vekil yöntemler ve Aktif Öğrenme tekniklerini kullanarak yeni tasarlanmış IrO_2 ile RuO_2 çeşitlerinin OER özelliklerini karşılaştırmıştır. Önceden mevcut malzeme veri setlerinde 956 varyant tespit etmiş, 38000'in üzerinde morfolojik aday üretmişlerdir. Rutile kompozisyon, AL tekniğiyle termal amorf sentezlenebilirlik sınırı içinde 196 IrO_2 polimorf keşfiyle doğrulanmıştır. Perovskitlerin yüzey yapıları ve yerine geçen elementlerin özellikleri üzerine elde edilen bilgiler, MÖ modellerinde yüzey katalitik süreçlerini doğru bir şekilde modelleyen merkezi özellik modeli oluşturmuştur.

Li ve ark. [84], elektronik yapı özellikleri ve Gaussian süreçli olasılıksal eğitim setleri içeren çok doğruluklu (multi-fidelity) elemanları kullanarak ABO₃ tipi kübik perovskitlerde üstün OER katalizörleri tanımlamışlardır. Bu teknikler, oksit perovskit katalizörlerinin OER performansını iyileştirmek için tasarımda yardımcı olmuştur. Malzeme bileşeni ve DFT ile hesaplanan bulk kafes tanımlayıcıları tasarım sürecine rehberlik etmiştir.

Wang ve ark. [85], DFT hesaplamalarını içeren atomik ve topolojik özelliklere dayalı OER aktivitesi için MÖ tahmin modeli geliştirmiştir. Polimer kimyasında sembolik regresyonun endüstriyel uygulamalarını, özellikle dönüşüm kinetik kuralı ve farklı geçişler için öğrenme yardımcı fonksiyonları tanıtımı açısından vurgulamışlardır.

Tai ve ark. [86], çok fiziksel formül tarafından doğrulanan 1497 örnek kullanarak DNN, ve MÖ yöntemlerinin birleşimiyle polimer kompozit elektrotların performans gereksinimlerini geliştirmiştir. Doğrulanmış DNN modeliyle yapılan ampirik analiz, platin içeriği, Pt/C karışımı, inorganik dolgu hacim yüzdesi, GDL mikro yapısı ve karbon kompozit çapındaki artışlarla elektrokimyasal performansta düşüş gözlemlenmiştir.

Qiu ve ark. [87] ise GA, radyal bazlı fonksiyon sinir ağı ve optimum Latin hiperküp tasarımı kullanarak GDL'lerdeki basınç dağılımının homojenliği ve karşılaştırılabilir büyüklüğünü artırmıştır. Sonuçlar, önerilen gelişmiş ajan tabanlı optimizasyon tekniğinin yakıt hücresi paketleme bileşenlerinde verimliliği önemli ölçüde artırabileceğini göstermiştir. Yakıt hücreleri için sıkıştırma konfigürasyonları, işlem maliyetlerini düşürerek çok amaçlı değerlendirme yapabilen GA tabanlı optimizasyondan büyük fayda sağlayacaktır [88].

Pourrahmani ve ark. [89] ANN modeli kullanarak PEMSE'de GDL mikro yapısının suyun uzaklaştırılmasında etkinliğini artırmayı amaçlamıştır. Model, çeşitli gözenek yapıları ve geçirgenlik değerleri için GDL'deki sıvı su geçişini simüle etmiştir. Girdi değişkenleri olarak basınç, voltaj, O₂ kütle akışı, GDL gözenek boyutu ve yoğunluğu kullanılmıştır. Bulgular, gözenek yapısının artmasının hem GDL su uzaklaştırma hem de PEMSE verimliliğini artırdığını göstermiştir. Ayrıca, ANN, GA ve CNN modelleri kullanarak gözeneklilik ile gözenek yapı özellikleri arasında örtük bir ilişki kurmuş, 5262 giriş görüntüsünü üç farklı kumtaşı türüne ayırarak yüksek doğrulama başarısı elde etmişlerdir. Ortalama parçacık boyutu, spesifik yüzey alanı ve geçirgenlik hesaplanmış, GA-ANN modeli gözenek yapı metriklerine dayalı geçirgenlik tahmininde güçlü performans göstermiştir.

Alqahtani ve ark. [90], mikro- veya nano-bilgisayarlı tomografi ile elde edilen gerçek gözenekli malzeme görüntülerini analiz eden bir çerçeve sunmuştur. Modelin ikili fotoğraflarla eğitilmesi yüzey alanı ve ortalama gözenek boyutunda minimum varyans sağlarken, gri tonlamalı görüntüler biraz daha yüksek sapma göstermiştir. Gözeneklilik, geçirgenlik ve dolambaçlılığın gözenekli ortamların orijinal bariyer yapısı ve ölçütleri arasındaki ilişkiyi temsil etmek için kodlanması gereken üç temel özellik olduğunu önermiştir. Ayrıca, Graczyk ve ark. [91], CNN ve Derin Öğrenme kullanarak yapay,

rastgele ve kontrollü gözeneklilik içeren kapsamlı bir veri setini değerlendirmiştir. Model, gözeneklilik, geçirgenlik ve dolambaçlılık parametrelerini yüksek doğrulukla tahmin etmiştir. Wu ve ark. [92], geçirgenlik tahmini için CNN ve derin öğrenme görüntü sistemleri ile ince ayarlanmış GA araç kutusunu kullanarak PEMSE anot kenarında oksijen kabarcığı birikimini analiz etmiştir. Yaklaşım, iki fazlı akış rejimi özelliklerini vurgulamış ve yüksek ortalama doğruluk sağlamıştır. Artan akış hızları, kabarcık örtüsünde ve ortalama tek kabarcık alanında azalma; artan akım ise kabarcık hacmi ve örtüsünde artışa yol açmıştır.

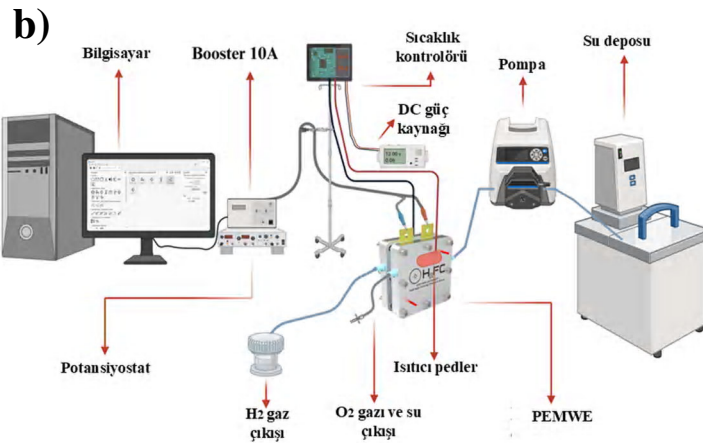
Pourrahmani ve ark. [93], 5700'den fazla GDL etkileşim açısı değeri içeren ANN ve GA modellerini kullanarak GDL temas alanının optimal sıvı uzaklaştırma üzerindeki etkilerini incelemiştir. GDL sıvı uzaklaştırma değerinin artırılmasıyla su yönetiminin iyileştiği ve maksimum sıvı uzaklaştırmanın belirli bir temas açısında gerçekleştiği gözlenmiştir.

Bu tez çalışması, PEMSE performansını artırmak amacıyla anot ve katot katalizör yüklemelerinin sistem üzerindeki birleşik etkilerini kapsamlı bir şekilde incelemektedir. Önceki çalışmalarda genellikle izole olarak ele alınan bu parametrelerin karşılıklı etkileşimleri, 1.344 deneysel veri noktası içeren geniş bir veri seti kullanılarak sistematik biçimde analiz edilmiştir. XGBoost, RF, DT ve CatBoost gibi ileri MÖ modelleri ile bu parametrelerin PEMSE performansına olan etkileri değerlendirilmiş; Bayesyen hiperparametre optimizasyonu sayesinde modellerin doğruluğu artırılmıştır. Model çıktılarının güvenilirliği, Wilcoxon işaretli sıralar testi ile istatistiksel olarak doğrulanmıştır. Ayrıca, katalizör yüklemelerinin sistem verimliliği ve maliyet etkinliği üzerindeki etkileri detaylı olarak incelenmiş, elektrot tasarımı ve işletme koşullarının optimizasyonuna yönelik pratik öneriler sunulmuştur. SHAP analizi kullanılarak, model yorumlanabilirliği geliştirilmiş ve parametrelerin performans üzerindeki katkıları ile aralarındaki karmaşık ilişkiler detaylı biçimde ortaya konmuştur.

2. BÖLÜM

MATERYAL VE YÖNTEM

Erciyes Üniversitesi H₂FC Hidrojen Enerjisi Araştırma Grubu laboratuvarında deneysel bir PEMSE tek hücresi tasarlanmış ve üretilmiştir. Bu çalışmada kullanılan deneysel sistem, Şekil 2.1'de, laboratuvar konfigürasyonu ve şematik gösterimi ile birlikte sunulmuştur.



Şekil 2.1. Laboratuvar deneysel düzeni ve b) şematik görünüm

2.1. Deneysel Kurulum

Farklı katalizör yüklemeleri ve çalışma parametrelerinin etkilerini incelemek amacıyla kontrollü koşullar altında bir tek hücreli PEM su elektrolizörü monte edilip test edilmiştir. Sistem, bir potansiyostat (Autolab PGSTAT204) ile birlikte 10 A'lık booster ünitesi, peristaltik pompa (Heidolph PD 5201) ve ısıtma pedi kontrolü için DC güç kaynağı (Korad KA3305P) içerir. Elektrolit sıcaklığını sabit tutmak için sirkülasyonlu su banyosu (LAUDA Alpha RA 8) kullanılırken, sıcaklık kontrolörü hücre ara yüzeyinde kararlı termal koşullar sağlar. Ayrıca, elektrot hazırlama, membran elektrot montajları, elektroliz testleri ve veri toplama prosedürleri deneysel kurulumun bir parçası olarak gerçekleştirilmiştir.

2.1.1. Elektrot Hazırlığı

PEMSE hücre performansı üzerindeki farklı katalizör yüklemelerinin etkisi sistematik olarak anotta ve katotta farklı bileşimlerle elektrotlar üretilerek incelenmiştir. Elektrotlar tek tek hazırlanmış olup, anot katalizör mürekkebi 60°C'de tutulan bir GDL üzerine manuel olarak hava ile püskürtülmüştür. İki farklı IrO₂ yüklemesi hazırlanmıştır: i) 18 mg IrO₂, 60 µL Nafion çözeltisi (ASP-Nafion %10 ağırlık), 1,2 mL etanol ve 240 mL deiyonize su (18 µS iletkenlik) içeren mürekkep bileşimiyle 3 mg/cm² yükleme, ii) 24 mg IrO₂, 80 µL Nafion çözeltisi, 1,2 mL etanol ve 240 mL deiyonize su ile 4 mg/cm² yükleme.

Katot hazırlığında ise 0,4–0,7 mgPt/C cm² (Vulcan XC-72R üzerinde %20 Pt, Fuel cell store) arasında değişen katalizör yüklemeleri kullanılmış ve püskürtme işlemi yine 60°C'de gerçekleştirilmiştir. Tüm mürekkep formülasyonları, uygun dağılımı sağlamak için 15 dakika sonikasyona tabi tutulmuştur. Elektrotlar Nafion 115 (Fuel Cell Store) ve Aquivion E98-09S membranlarla entegre edilmiştir. Mürekkep nüfuzunu minimuma indirmek ve GDL'nin kuru kalmasını sağlamak için adım adım püskürtme yöntemi uygulanmış, bu süreç boyunca katalizör ve iyonomer yüklemeleri hassas şekilde kontrol edilmiştir.

2.1.2. Membran Elektrot Montajı Entegrasyonu

Nafion 115 ve Aquivion E98-09S membranlara MEG 'ya entegrasyon öncesinde özel bir ön işlem protokolü uygulanmıştır. Nafion 115 membranlar, 5 cm² aktif alan (22,5 mm × 22,5 mm) olarak kesilmiş ve aşağıdaki ardışık kimyasal koşullandırma sürecinden geçirilmiştir:

(i) 500 mL deiyonize suda 1 saat kaynatma,

(ii) organik kirleticileri gidermek için 50 mL hidrojen peroksit (H₂O₂, Sigma-Aldrich) içinde 1 saat bekletme,

(iii) 17 mL sülfürik asit (H₂SO₄, %37, Merck) ile 83 mL deiyonize su karışımında 1 saat işlem,

(iv) ardından deiyonize su ile iyice durulama.

Nafion membranların ön işlem süreci yaklaşık 6 saat sürmüştür [94]. Aquivion E98-09S membran aynı adımları uygulamış ancak her adım 1,5 saat sürmüştür. Koşullandırmanın ardından anot ve katot katalizör mürekkepleri membranlara püskürtülerek katalizör kaplı membranlar (CCM) oluşturulmuş, bu CCM'ler MEG 'lara monte edilerek optimize edilmiş parametrelerde sıcak preslenmiştir: Nafion bazlı MEG 'lar için 2 bar ve 120°C'de 2 dakika, Aquivion bazlı MEG 'lar için ise 5 MPa ve 155°C'de 2 dakika [95].

2.1.3. PEMSE Tek Hücre Testleri ve Veri Toplama

PEMSE hücresi, 5 cm² aktif alana sahip entegre bir MEG ile tasarlanmıştır. Anot tarafında farklı kalınlıklarda (2 mil ve 10 mil) Pt kaplı Ti mesh GDL'ler ve aktif alan boyunca su dağılımını optimize etmek için karbon kağıt (Toray Paper 120, Fuel cell store) kullanılmıştır. Katot tarafında serpantin akış alanı grafit bipolar plaka üzerine işlenmiş, Au kaplı bakır akım toplayıcıları elektriksel temas sağlamıştır. Sızdırmaz operasyon için tüm montajda teflon contalar kullanılmıştır. Montaj, iki uç plakası arasında 2 ve 2.5 N·m tork ile sıkılmış vidalarla sabitlenmiştir. Deiyonize su, kapalı devre çalışması için sızdırmaz bir tankta saklanıp peristaltik pompa ile hücreye sürekli beslenmiştir. Hidrojen ve oksijen gazları özel çıkışlardan tahliye edilmiştir. Potansiyostat (Autolab PGSTAT204, 10A booster ile) kullanılarak elektrokimyasal

ölçümler, I-V eğrileri ve empedans spektroskopisi gerçekleştirilmiş, veriler bağlı bilgisayar aracılığıyla kaydedilmiştir. Deneysel veri seti ve parametre değerleri Tablo 2.1’de detaylandırılmıştır.

Tablo 2.1. Deneysel Parametreler.

Parametre	Birim	Min.	Maks.
Anot katalizör yüklemesi (IrO ₂)	mg.cm ⁻²	3	4
Katot katalizör yüklemesi (Pt/C)	mg. cm ⁻²	0.4	0.7
Membran Tipi	Nafion 115 / Aquivion E98-09S	-	-
Akış hızı	mL dk ⁻¹	50	100
Sıcaklık	°C	50	80
Tork	N·m	2	2.5
Akım yoğunluğu	mA cm ⁻²	12,47	372,49
Uygulanan Potansiyel	V	0	2

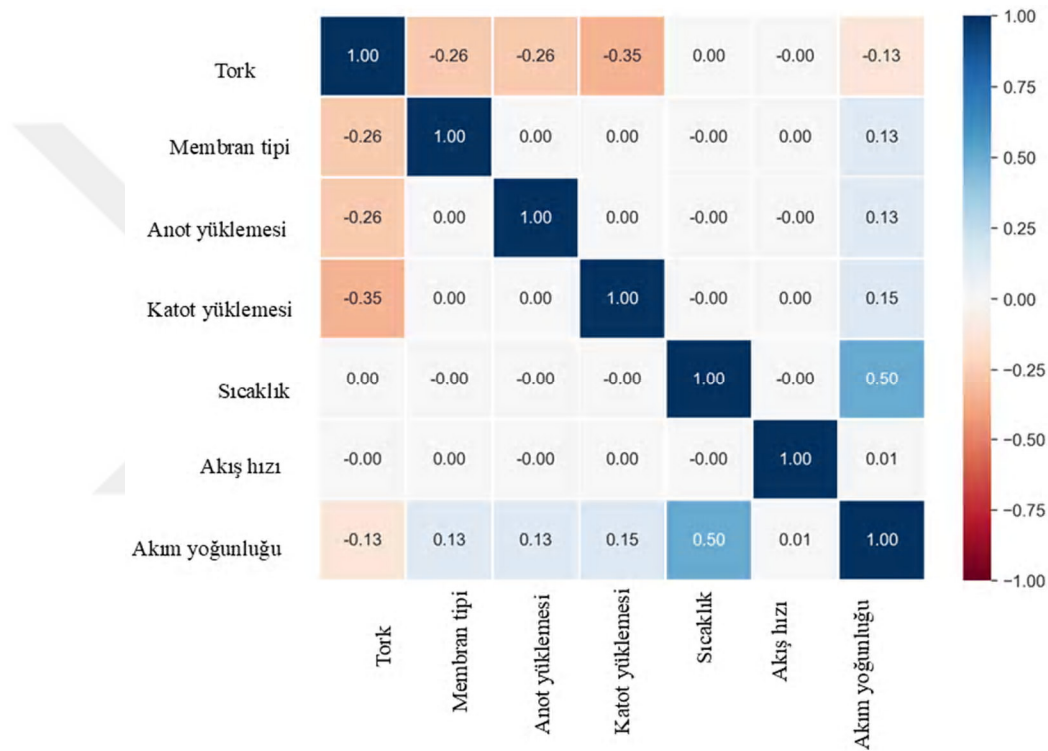
Tablo 2.1’de belirtildiği gibi, PEMSE operasyon parametreleri arasında anot katalizör yüklemesi, katot katalizör yüklemesi, membran tipi, akış hızları, çalışma sıcaklıkları, uygulanan tork, akım yoğunlukları ve 0-2 V aralığında uygulanan LSV potansiyeli ile sırasıyla 0,001 ve 0,00244 tarama hızı ve adımı yer almaktadır.

2.2. Makine Öğrenmesi Yöntemleri

MÖ teknikleri, açık programlama gerektirmeden veri desenlerinden öğrenen matematiksel algoritmalar aracılığıyla tahmin ve sınıflandırma yapan yapay zeka yaklaşımlarıdır [48]. Bu yöntemler, mantıksal yapılarını doğrudan veri setlerinden geliştirir, manuel kural kodlamayı ortadan kaldırır ve denetimli (girdi-hedef ilişkilerini belirleme), denetimsiz (gizli desenleri keşfetme) veya pekiştirmeli öğrenme (çevresel etkileşimle öğrenme) olarak sınıflandırılır [49]. Bu çalışmada, PEMSE sistemlerine RF , XGBoost, DT ve CatBoost modelleri uygulanmış; optimizasyon için Bayes hiperparametre ayarı ve açıklanabilirlik için SHAP teknikleri kullanılmış, istatistiksel anlamlılık ise Wilcoxon işaretli sıra testi ile değerlendirilmiştir [50].

Herhangi bir ML modeli uygulamadan önce, 192 deney (1344 veri noktası) içeren deneysel veri setimiz ithal edilip kapsamlı veri analizi yapılmıştır. Veri setinde yedi

girdi özelliği bulunmaktadır: akış hızı, membran tipi, anot/katot katalizör yüklemesi, sıcaklık ve tork. Veri ön işleme, temizleme ve eksik değerlerin yönetimi önemli bir ön aşama olarak gerçekleştirilmiştir. PEMSE performansını nicelleştirmek için çıkış parametresi olarak LSV karakterizasyonunu takiben akım yoğunluğu seçilmiştir; bu da elektrokimyasal ölçümlerin önemini vurgulamaktadır. Değişkenler arasındaki karşılıklı bağımlılıkları değerlendirmek için korelasyon analizi yapılmış ve sonuçlar Şekil 2.2’te gösterilmiştir.



Şekil 2.2.. Korelasyon matrisi grafiği

Isı haritası, tork ile yüklemeler (membran tipi, anot ve katot) arasında orta düzeyde negatif korelasyon olduğunu ortaya koymaktadır; bu da yüklemelerin artmasıyla torkun azalmasının ilişkili olduğunu göstermektedir. Ayrıca, sıcaklık ile akım yoğunluğu arasında pozitif bir korelasyon bulunmuş, bu da sıcaklığın akım oluşumu üzerinde potansiyel bir etkisi olduğunu işaret etmektedir. Akış hızı ise diğer değişkenlerle minimal korelasyon sergilemiş, bu da incelenen parametre aralığında akış hızının sınırlı bir etkisi olduğunu düşündürmektedir.

2.2.1. Rastgele Orman Algoritması

Random Forest, birden fazla karar ağacını bir araya getirerek tahmin doğruluğunu ve model dayanıklılığını artıran bir topluluk öğrenme yöntemidir [96, 97]. Farklı veri alt kümeleri üzerinde eğitim alan çeşitli ağaçlar oluşturmak için bootstrap toplaması kullanır ve bölünme noktalarında özellik rastgeleleştirilmesi uygular. Bu yaklaşım aşırı uyumu minimize eder ve varyansı azaltır, bu nedenle karmaşık PEMSE veri setleri için özellikle etkilidir. PEMSE performansını tahmin ederken, Random Forest akış hızı, membran tipi, katalizör yüklemesi, sıcaklık, tork ve akım yoğunluğu gibi işletme parametreleri arasındaki doğrusal olmayan ilişkileri yakalar. Önemli bir avantajı, modelin ayrı bir test setine ihtiyaç duymadan optimal ağaç sayısını belirlemeye olanak tanıyan out-of-bag örnekler ile performansı değerlendirebilmesidir [98, 99].

2.2.2. Aşırı Gradyan Artırma

XGBoost, paralelleştirme ve verimli veri işleme ile üstün regresyon performansı sağlayan ileri seviye bir MÖ algoritmasıdır; ancak daha basit yöntemlere göre daha az şeffaftır [100]. Önceki hatalardan öğrenerek ardışık ağaçlar oluşturur ve tahminleri aşamalı olarak iyileştirerek optimal doğruluğa ulaşır [101].

2.2.3. Karar Ağaçları

Karar Ağaçları, özyinelemeli ikili bölme yoluyla hiyerarşik tahmin yapıları oluşturur ve veri normalizasyonuna gerek kalmadan doğrusal olmayan ilişkileri doğal olarak yakalar [102]. Görünür karar yolları sayesinde yüksek yorumlanabilirlik sunarken, bireysel ağaçlar karmaşık elektrokimyasal sistemlerde aşırı uyuma ve kararsız tahminlere eğilimlidir. Bu nedenle, daha sağlam PEMSE performans tahmini için topluluk yöntemlerinde kullanılırlar [103, 104].

2.2.4. Cat Boost

CatBoost, Yandex tarafından geliştirilmiş ileri seviye bir gradient boosting çerçevesidir [105]. Kategorik özelliklere sahip veri setlerinde kapsamlı ön işleme gerektirmeden üstün performans gösterir. Bu algoritma, ardışık boosting modellerinde yaygın olan tahmin kayması ve hedef sızıntısı etkilerini azaltmak için simetrik ağaç yapısına sahip sıralı boosting uygular. Yenilikçi permutasyon temelli yaklaşımı sayesinde, karmaşık

özellik etkileşimlerini yakalayan etkili kodlama yöntemleriyle kategorik değişkenleri başarıyla işler [106].

Algoritma, optimizasyon için kritik hiperparametreler sunar: öğrenme hızı (gradient descent adım büyüklüğünü kontrol eder), iterasyon sayısı (ardışık ağaç sayısını belirler), derinlik (ağaçların maksimum derinliğini aşırı uyumu önlemek için sınırlar), sınır sayısı (sayısal özellikler için kuantizasyon seviyesi), ve bagging sıcaklığı (özellik seçimi sırasında rastgeleliği düzenler). CatBoost, bu parametreleri otomatik olarak dengeler ve karışık değişken türlerine sahip veri setlerinde sağlam performans sağlar [106].

2.2.5. SHAP

SHAP, kara kutu MÖ modellerinin nasıl çalıştığını açıklamaya yardımcı olan bir tekniktir. Oyun teorisi kavramlarına dayanarak, her bir özelliğe önemli bir değer atar ve bu özelliğin tahmine katkısını gösterir [105]. Bu, kullanıcılara sadece nihai tahmini vermek yerine model kararlarının arkasındaki nedenleri anlamada yardımcı olur. SHAP, özellikle tıp, finans veya elektrokimya gibi kritik uygulamalarda tahminlerin nedenlerini anlamının önemli olduğu durumlarda değer taşır. Karmaşık modelleri yorumlanabilir içgörülere dönüştürerek kullanıcıların model davranışına güvenmesini ve doğrulamasını sağlar [106].

2.2.6. MÖ Modellerinin Performans Değerlendirmesi

Model performansını hem eğitim hem de test veri setleri üzerinde değerlendirmek için çeşitli standart performans metrikleri kullanılmıştır. Analizimizde başlıca değerlendirme ölçütleri olarak MAE, RMSE, MAPE ve R^2 kullanılmıştır [107]. Bu performans metrikleri, aşağıda verilen Eş.2.1'den 2.4'e kadar olan formüllere göre hesaplanmaktadır [108]:

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i| \quad \#(2.1)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad \#(2.2)$$

$$MAPE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|y_i - \hat{y}_i|}{y_i} * 100 \#(2.3)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \#(2.4)$$

Burada, y_i gerçek gözlemlenen değeri, \hat{y}_i model tarafından tahmin edilen değeri, n örnekleme toplam veri sayısını ve tüm gözlemlenen değerlerin ortalamasını ifade etmektedir.

Modeller arasındaki performans farklarının istatistiksel olarak anlamlı olup olmadığını değerlendirmek için Wilcoxon işaretli sıra testi kullanılmıştır. Galvão ve ark. [109] tarafından belirtildiği gibi, bu parametrik olmayan yöntem eşleştirilmiş veri setlerinin analizinde oldukça uygundur. Analizde anlamlılık eşiği 0,05 olarak belirlenmiştir. Eğer elde edilen p-değeri bu eşik değerine eşit veya küçükse, eşleştirilmiş tahminler arasında fark olmadığına dair sıfır hipotezi reddedilir. P-değeri 0,05'ten büyükse, farkların istatistiksel olarak anlamlı olmadığı ve modellerin benzer çıktılar verdiği kabul edilir. Bu yöntem modeller arasındaki performans farklılıklarının sağlam bir şekilde değerlendirilmesini sağlamıştır.

2.2.7. Bayesian Hiperparametre Ayarı

Model performanslarını maksimize etmek amacıyla hiperparametre ayarı için Bayesian optimizasyon yöntemi kullanılmıştır. Bu yöntem, genellikle Gauss Süreci (GP) olan olasılıksal bir vekil model kullanarak, önceki gözlemlere dayanarak bilinmeyen hedef fonksiyonun yaklaşık modelini oluşturur. Model, posterior dağılımı kullanarak fonksiyon hakkındaki bilgisini sürekli günceller [110]. Her iterasyonda, algoritma mevcut en iyi gözlemlenen değere göre keşfedilecek en umut verici noktayı belirlemek için genellikle beklenen iyileştirmeyi maksimize eden edinim fonksiyonunu kullanarak bir sonraki değerlendirme noktasını seçer [111].

Süreç, rastgele seçilen bazı başlangıç noktalarıyla veri setini başlatmakla başlar ve her iterasyonda GP modeli mevcut veri setine uyarlanır. Daha sonra, bir sonraki değerlendirme noktası seçilir ve hedef fonksiyon kullanılarak değeri hesaplanır. Veri seti, yeni değerlendirme noktası eklenerek güncellenir ve iterasyon sayısı artırılır. Bu

süreç, maksimum iterasyon sayısına ulaşılan kadar veya yakınsama sağlanana kadar devam eder.

Burada, her ML modeli için model performansı üzerindeki etkilerine göre en iyi hiperparametreler seçilmiştir (Tablo 2.2). Optimizasyon işlemi tamamlandıktan sonra, en iyi hiperparametrelerle tüm eğitim veri seti kullanılarak modeller yeniden eğitilmiş ve nihai modeller elde edilmiştir.

Tablo 2.2. Bayesian Hiperparametre Ayarı ile Farklı MÖ Modelleri

Modeller	Parametre	Arama Alanı	Seçilen Değer
XGBoost	learning_rate	(0,1- 0,3)	0.245
	max_depth	(1- 10)	8
	n_estimators	(1-100)	46
	colsample_bytree	(0,3 – 1,0)	0,952
	alpha	(0.1, 1.0)	0,248
	subsample	(0,5, - 1,0)	0.867
	min_child_weight	(1 - 10)	2
	gamma	(0,0 -5,0)	3,948
RF	n_estimators	(50 - 500)	500
	max_depth	(3 - 20)	20
	max_features	(5 - 30)	5
	min_samples_split	(2 -15)	3
	min_samples_leaf	(1 - 10)	1
DT	max_depth	(50 - 500)	197
	min_samples_split	(2 - 10)	4
	min_samples_leaf	(1 - 5)	1
	max_features	(1 - 50)	49
	min_impurity_decrease	(0,0 – 0,2)	0,2
CatBoost	iterations	(1 - 100)	90
	depth	(1 - 5)	5
	learning_rate	(0,1 – 0,3)	0,249
	l2_leaf_reg	(1 - 10)	1
	border_count	(32 - 255)	255
	bagging_temperature	(0,1 - 1)	0,1
	random_strength	(1 - 5)	1
	min_data_in_leaf	(1 - 5)	2

3. BÖLÜM

BULGULAR VE SONUÇ

3.1. Katalizör Yüklemesinin Etkisi

Şekil 3.1.a, 3 mg IrO₂ cm⁻² anot yüklemesi ve 0,4 mg Pt/C cm⁻² katot katalizör yüklemesiyle Nafion 115 membranı kullanan bir elektrokimyasal hücre için yapılan LSV ölçüm sonuçlarını göstermektedir. En yüksek akım yoğunluğu, 80°C sıcaklıkta ve 100 ml dak⁻¹ su akış hızında gözlemlenmiş ve uygulanan 2 V potansiyelde 111,12 mA cm⁻²'ye ulaşılmıştır. Bu çalışma parametresi, aynı sıcaklıktaki 75 ml dak⁻¹ ve 50 ml dak⁻¹ akış hızlarına kıyasla daha yüksek bir performans sergilemiştir. Özellikle, 80°C'deki 100 ml dak⁻¹ su akışı, düşük aşırı potansiyelde oksijen gelişimini mümkün kılarak enerji verimliliğini artırmıştır. Aynı sıcaklıkta, 75 ml dak⁻¹ ve 50 ml dak⁻¹ akış hızları sırasıyla 95,45 mA cm⁻² ve 91,75 mA cm⁻² akım yoğunlukları üretmiştir. Öte yandan, 50°C'de 50 ml dak⁻¹ akış hızıyla çok düşük elektrokimyasal aktivite kaydedilmiş ve yalnızca 51,92 mA cm⁻² elde edilmiştir.

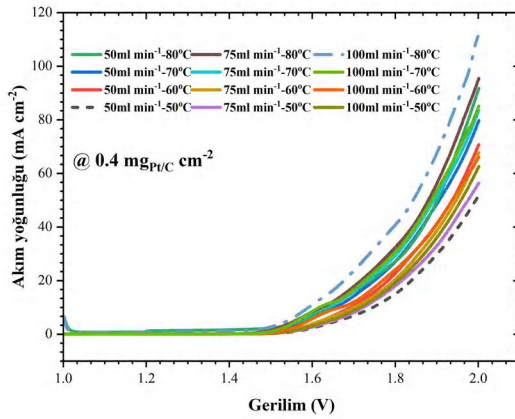
Şekil 3.1.b, daha yüksek katot katalizör yüklemesi (0,5 mgPt/C cm⁻²) altındaki elektrokimyasal performans verilerini sunmaktadır. Bu koşullar altında, 80°C'deki 100 ml dak⁻¹ su akışı en yüksek performansı sürdürerek 69,54 mA cm⁻² akım yoğunluğu sağlamıştır. Buna karşılık, 50°C'deki 75 ml dak⁻¹ akışta performans önemli ölçüde düşerek 11,93 mA cm⁻² olarak ölçülmüştür. Dikkat çekici bir şekilde, 0,5 mgPt/C cm⁻² katot yüklemesinde elde edilen akım yoğunlukları, 0,4 mgPt/C cm⁻² yüklemeli duruma göre daha düşük kalmış, bu da katalizör yüklemesi ile elektrokimyasal performans arasında doğrusal olmayan bir ilişki olabileceğini göstermektedir.

Şekil 3.1.c'de, 0,6 mgPt/C cm⁻² katot katalizör yüklemesi kullanıldığında, en yüksek akım yoğunluğu 70°C'de 50 ml dak⁻¹ su akış hızı ile elde edilmiş ve 2 V

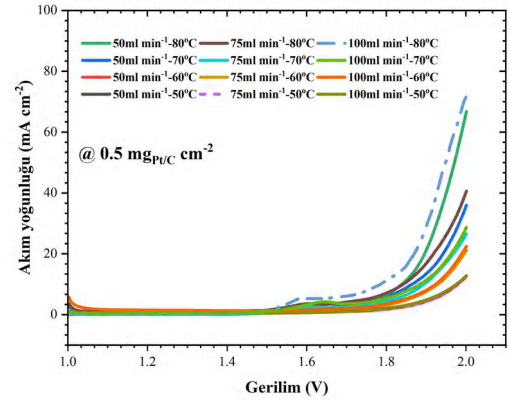
uygulandığında $372,49 \text{ mA cm}^{-2}$ 'ye ulaşılmıştır. Aynı akış hızı (50 ml dak^{-1}) 50°C 'de uygulandığında, benzer bir potansiyelde akım yoğunluğu önemli ölçüde azalarak $118,45 \text{ mA cm}^{-2}$ 'ye düşmüştür.

Şekil 3.1.d, belirli çalışma parametreleri altında, 80°C 'deki 50 ml dak^{-1} akış hızının en yüksek akım yoğunluğunu ($94,23 \text{ mA cm}^{-2}$) ürettiğini, buna karşın 50°C 'deki 75 ml dak^{-1} akışta en düşük elektrokimyasal aktivitenin ($38,44 \text{ mA cm}^{-2}$) gözlemlendiğini göstermektedir. Bu deneysel sonuçlar, katot katalizör yüklemesinin sıcaklık ve akış hızı parametreleriyle birlikte elektrokimyasal performans üzerinde önemli bir etkiye sahip olduğunu göstermektedir.

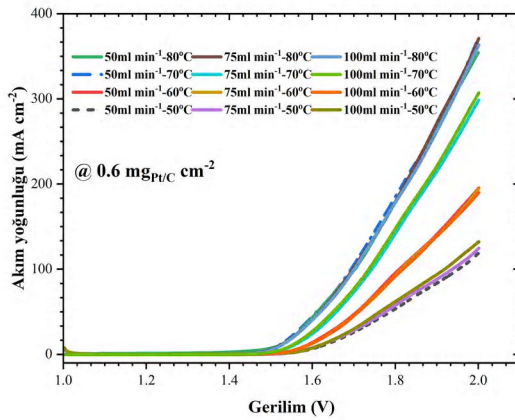
Veriler, en iyi performansın, katalizör yüklemesi, sıcaklık ve akış hızı gibi birbirine bağımlı değişkenlerin hassas kalibrasyonu ile elde edildiğini; bu parametrelerin her birinin ayrı ayrı artırılmasının tek başına optimum sonucu vermediğini ortaya koymaktadır. Yüksek sıcaklık, farklı konfigürasyonlarda elektrokimyasal aktiviteyi sürekli olarak artırırken, en uygun akış hızı ise kullanılan katalizör yüklemesine bağlılık göstermektedir.



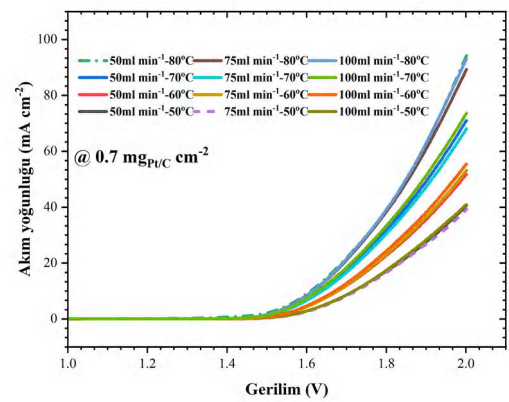
(a)



(b)



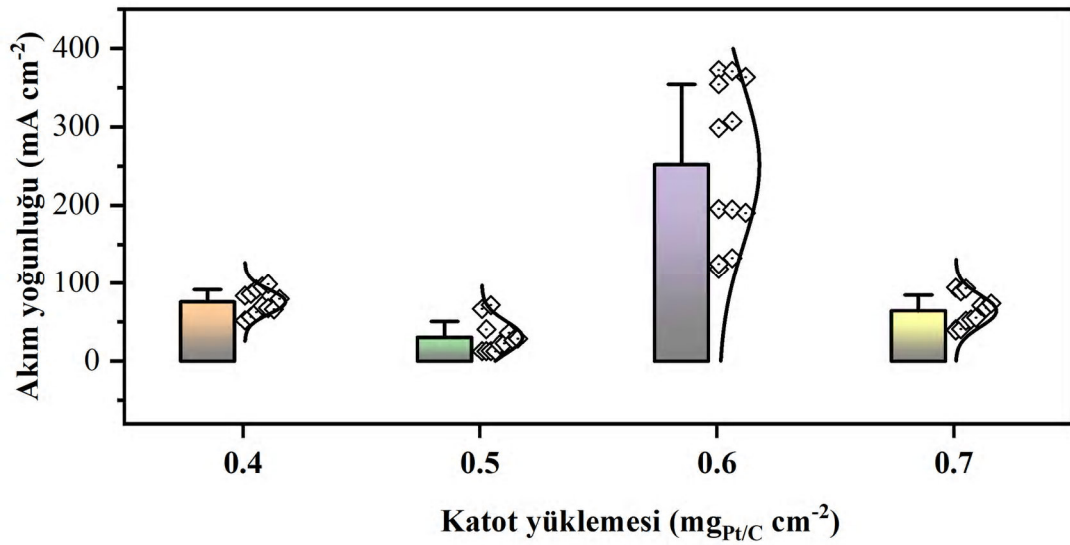
(c)



(d)

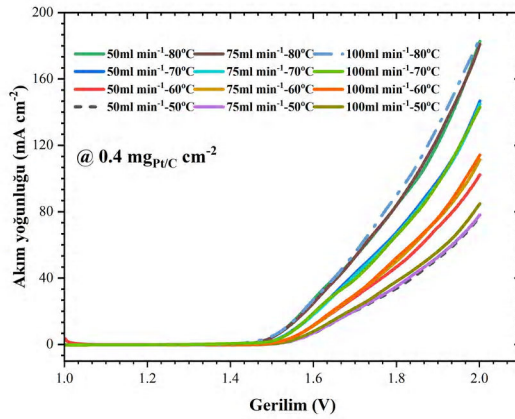
Şekil 3.1. Nafion 115 membran / Anot yüklemesi $3 \text{ mg IrO}_2 \text{ cm}^{-2}$ için LSV eğrileri; a) $0,4 \text{ mg Pt/C cm}^{-2}$, b) $0,5 \text{ mg Pt/C cm}^{-2}$, c) $0,6 \text{ mg Pt/C cm}^{-2}$ ve d) $0,7 \text{ mg Pt/C cm}^{-2}$ katot yüklemelerinde

Şekil 3.2’teki kutu grafiği, Nafion 115 membranı ve $3 \text{ mg IrO}_2 \text{ cm}^{-2}$ anot yüklemesi ile farklı katot yüklemeleri altında elde edilen akım yoğunluğu değişimlerini göstermektedir. $0,6 \text{ mg Pt/C cm}^{-2}$ katot yüklemesi, maksimum $372,49 \text{ mA cm}^{-2}$ ile diğer yüklemelere ($0,4$ ve $0,7 \text{ mg Pt/C cm}^{-2}$) kıyasla belirgin şekilde daha yüksek bir performans sergilemiştir; bu diğer yüklemelerdeki akım yoğunlukları 100 mA cm^{-2} ’nin altında kalmıştır. Ayrıca, $0,6 \text{ mg Pt/C cm}^{-2}$ yüklemesine ait verilerin %50’si 300 mA cm^{-2} ’nin üzerinde akım yoğunluklarına ulaşmıştır; bu da bu yüklemenin güçlü ve tekrarlanabilir bir performans ortaya koyduğunu göstermektedir.

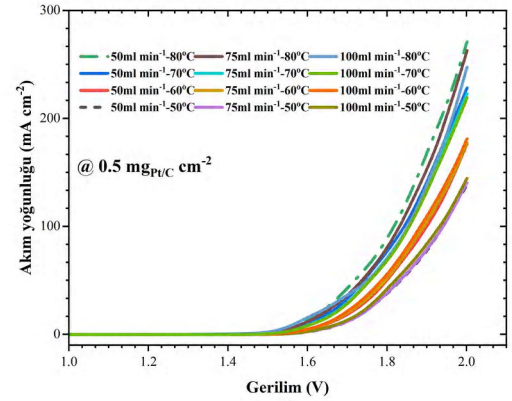


Şekil 3.2. Farklı Katod Katalizör Yüklemelerinde, Nafion 115 Membran ve Anot Yüklemesi 3 mg IrO₂ cm⁻² için Kutu Grafiği

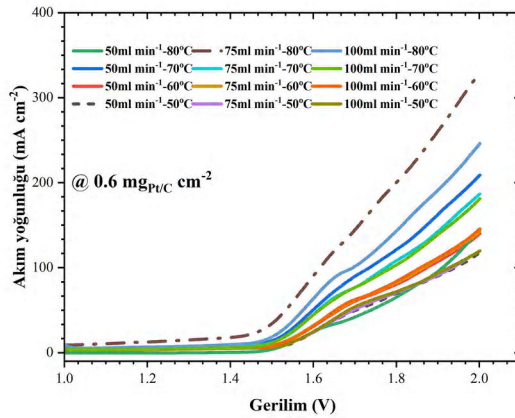
Şekil 3.3.a'da, 4 mgIrO₂ cm⁻² anot yüklemesi ve 0,4 mgPt/C cm⁻² katod katalizörü ile birlikte Nafion 115 membranı kullanıldığında, 80°C'de ve 100 ml dak⁻¹ akış hızında maksimum akım yoğunluğu 184,68 mA cm⁻²'ye ulaşmıştır. Ancak, 0,5 mgPt/C cm⁻² katod yüklemesi kullanıldığında, 80°C'de 265,10 mA cm⁻² ile daha iyi bir performans elde edilmiştir (Şekil 3.3.b). Ayrıca, 0,6 mgPt/C cm⁻² yüklemesiyle, 80°C'de 75 ml dak⁻¹ akış hızıyla 324,59 mA cm⁻² gibi zirve bir performans gözlemlenmiştir (Şekil 3.3.c). 0,7 mgPt/C cm⁻² yüklemesinin kullanıldığı durumda (Şekil 3.3.d), Şekil 3.3.c ile karşılaştırıldığında performansta hafif bir düşüş meydana gelmiştir. Öte yandan, daha düşük sıcaklıklar (50°C), tüm katalizör yüklemeleri için belirgin şekilde daha düşük akım yoğunluklarına yol açmış ve sıcaklığın elektrokimyasal performans üzerindeki kritik rolünü ortaya koymuştur.



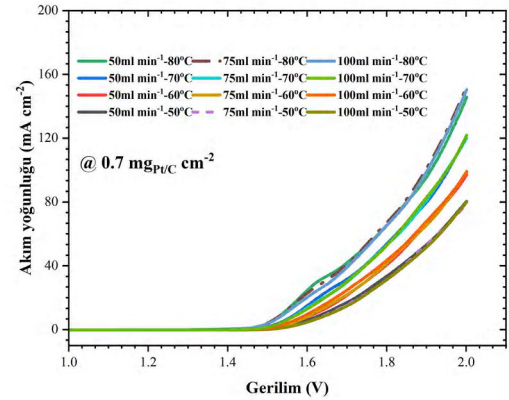
(a)



(b)



(c)

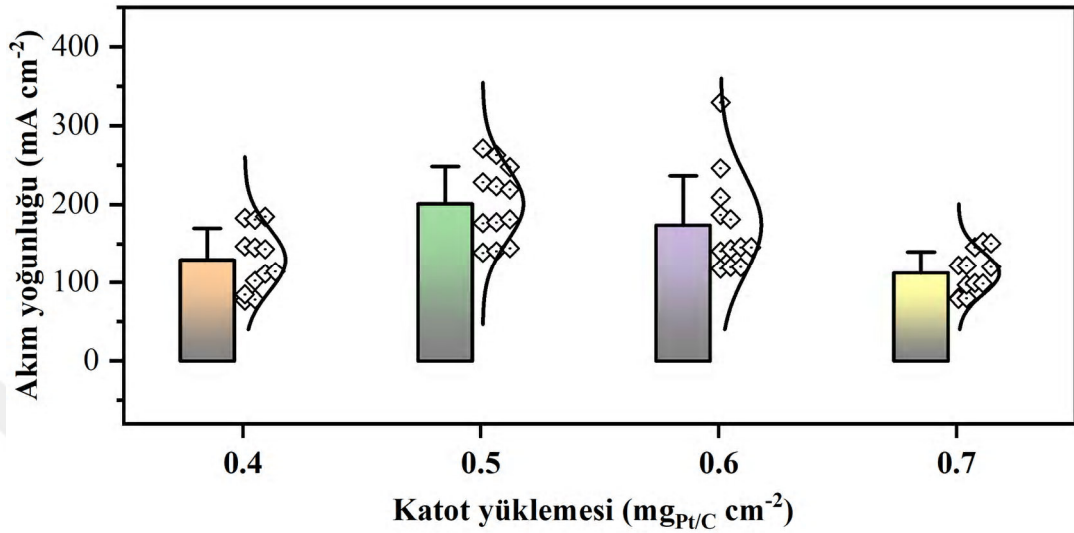


(d)

Şekil 3.3. Nafion 115 membran, Anot yüklemesi $4 \text{ mg IrO}_2 \text{ cm}^{-2}$ olan LSV eğrileri; a) $0,4 \text{ mg Pt/C cm}^{-2}$, b) $0,5 \text{ mg Pt/C cm}^{-2}$, c) $0,6 \text{ mg Pt/C cm}^{-2}$ ve d) $0,7 \text{ mg Pt/C cm}^{-2}$ katot yüklemelerinde

Şekil 3.4, $4 \text{ mg IrO}_2 \text{ cm}^{-2}$ anot yüklemesine sahip Nafion 115 membranının, farklı katot katalizör yüklemeleri altındaki elektrokimyasal performansını göstermektedir. $0,6 \text{ mg Pt/C cm}^{-2}$ yüklemesi, $324,59 \text{ mA cm}^{-2}$ 'ye ulaşan akım yoğunluklarıyla yüksek bir performans sergilemiştir. $0,5 \text{ mg Pt/C cm}^{-2}$ yüklemesinde $265,10 \text{ mA cm}^{-2}$, $0,4 \text{ mg Pt/C cm}^{-2}$ yüklemesinde ise $184,68 \text{ mA cm}^{-2}$ ile daha düşük performans gözlemlenmiştir. Öte yandan, $0,7 \text{ mg Pt/C cm}^{-2}$ yüklemesi yaklaşık 100 mA cm^{-2} ile daha düşük bir performans göstermiştir. Dikkat çekici olarak, $0,6 \text{ mg Pt/C cm}^{-2}$ yüklemesine ait verilerin yaklaşık %16'sı 250 mA cm^{-2} 'nin üzerine çıkarken, $0,5 \text{ mg Pt/C cm}^{-2}$ yüklemesine ait verilerin %60'ı $150\text{--}250 \text{ mA cm}^{-2}$ aralığında yer almıştır. Bu sonuçlar, $0,6 \text{ mg Pt/C cm}^{-2}$ yüklemesinin en uygun katalizör miktarı olabileceğini, bunun da

muhtemelen iyileştirilmiş katalizör kullanımı, gelişmiş kütle transferi ve elektrot mikro yapısı içindeki daha düşük ohmik dirençten kaynaklandığını göstermektedir.



Şekil 3.4. Farklı Katot Katalizör Yüklemelerinde, Nafion 115 Membran ve Anot Yüklemesi 4 mg IrO₂ cm⁻² için Kutu Grafiği

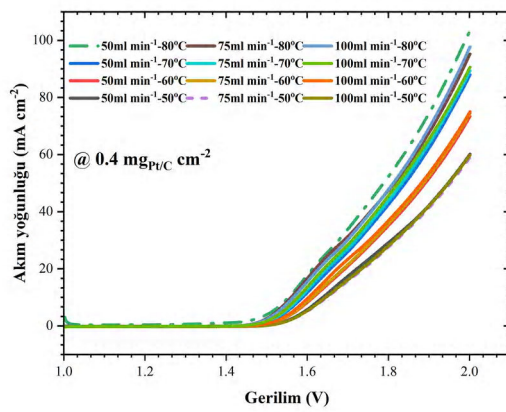
Araştırmamız, iki farklı membran türüne odaklanmış olup, özellikle farklı katalizör yüklemeleriyle birlikte kullanılan Aquivion E98-09S membranları ve çeşitli çalışma koşulları altındaki performansları detaylı şekilde incelenmiştir.

Şekil 3.5.a, 3 mgIrO₂ cm⁻² anot yüklemesi ve 0,4 mgPt/C cm⁻² katot katalizörü ile kullanılan Aquivion E98-09S membranının performansını göstermektedir. Bu yapılandırma, 80°C sıcaklıkta ve 50 ml dak⁻¹ akış hızında maksimum 103,43 mA cm⁻² akım yoğunluğuna ulaşmıştır. Buna karşılık, 50°C sıcaklıkta ve 75 ml dak⁻¹ akış hızında, yaklaşık 57,63 mA cm⁻² ile en düşük kinetik aktivite gözlemlenmiştir (2 V uygulandığında).

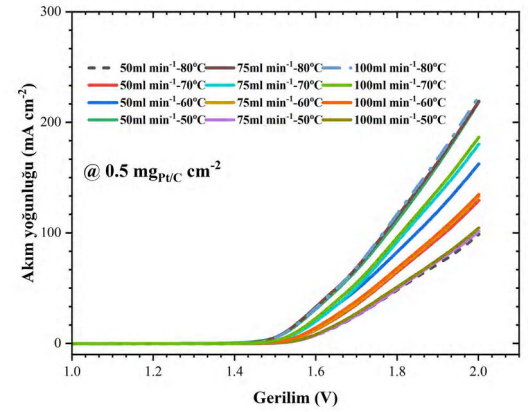
Şekil 3.5.b, 0,5 mgPt/C cm⁻² katot yüklemesiyle elde edilen geliştirilmiş performansı göstermektedir; bu durumda 80°C ve 100 ml dak⁻¹ akışta 223,73 mA cm⁻²'lik bir akım yoğunluğu sağlanmıştır. Ayrıca, Şekil 3.5.c'de görüldüğü üzere, 0,6 mgPt/C cm⁻² katot yüklemesiyle 80°C sıcaklık ve 100 ml dak⁻¹ akış koşullarında yaklaşık 263,94 mA cm⁻²'lik üstün bir kinetik aktivite elde edilmiştir. Aynı koşullarda, 0,7 mgPt/C cm⁻²

yüklemesiyle yapılan paralel bir deneyde ise $249,88 \text{ mA cm}^{-2}$ 'lik kinetik aktivite gözlemlenmiştir (Şekil 3.5.d).

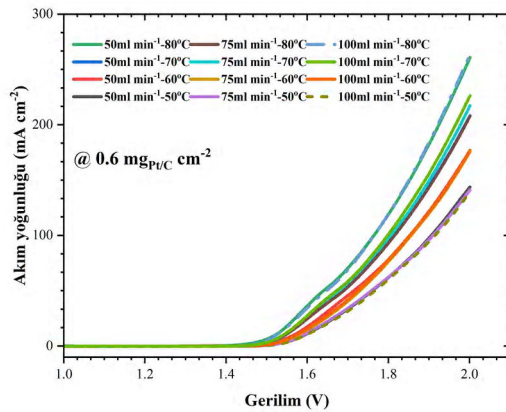
Düşük kinetik aktivite, katalitik performanstaki azalma ile ilişkilidir ve bu durum elektrotun elektrolizör sistemindeki etkinliğini azaltabilir. Ayrıca, optimal olmayan çalışma koşulları, su elektrolizinin başlangıç potansiyeline ulaşmak için daha yüksek potansiyellerin uygulanmasını gerektirmektedir.



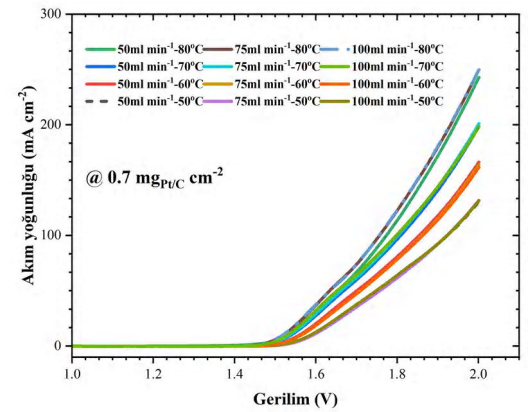
(a)



(b)



(c)

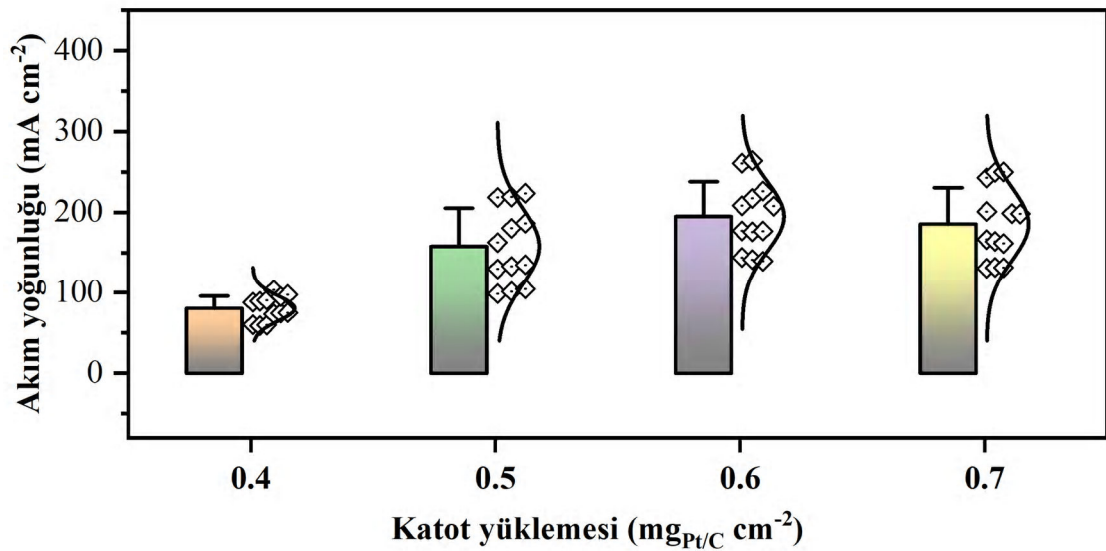


(d)

Şekil 3.5. Aquivion membranı için, anot yüklemesi $3 \text{ mgIrO}_2 \cdot \text{cm}^{-2}$ olacak şekilde a) $0,4 \text{ mgPt/C} \cdot \text{cm}^{-2}$, b) $0,5 \text{ mgPt/C} \cdot \text{cm}^{-2}$, c) $0,6 \text{ mgPt/C} \cdot \text{cm}^{-2}$ ve d) $0,7 \text{ mgPt/C} \cdot \text{cm}^{-2}$ durumlarında elde edilen LSV eğrileri.

Şekil 3.6, 3 mgIrO₂ cm⁻² anot yüklemesi altında Aquivion E98-09S membranı için farklı katot yüklemelerine göre akım yoğunluğu dağılımını göstermektedir. 0,6 mgPt/C cm⁻² katot yüklemesi, 263,94 mA cm⁻²'ye ulaşan akım yoğunlukları ve en tutarlı dağılım deseniyle en iyi performansı sergilemiştir. 0,5 ve 0,7 mgPt/C cm⁻² yüklemeleri ise sırasıyla 223,73 ve 249,88 mA cm⁻² ile orta düzeyde performans göstermiştir. Buna karşılık, 0,4 mgPt/C cm⁻² yüklemesi, 103,43 mA cm⁻² ile belirgin şekilde daha düşük bir çıktı sunmuştur.

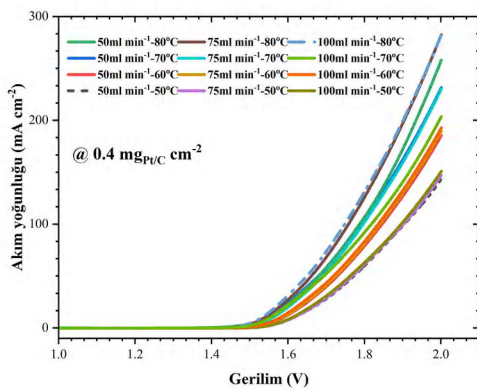
Öte yandan, Aquivion® E98-09S membranına kıyasla, aynı anot yüklemesi koşullarında (3 mgIrO₂ cm⁻²) kullanılan Nafion® 115 membranı, %30'un üzerinde daha yüksek elektrokimyasal performans göstermiştir.



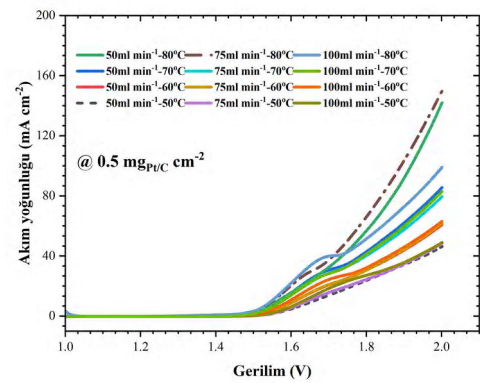
Şekil 3.6. Farklı Katot Katalizör Yüklemelerinde, Aquivion Membran ve Anot Yüklemesi 3 mg IrO₂·cm⁻² için Kutu Grafiği

Şekil 3.7.a, 3 mgIrO₂ cm⁻² anot yüklemesi ve 0.4 mgPt/C cm⁻² katot katalizörüyle birlikte kullanılan Aquivion E98-09S membranı için performansı göstermektedir. Bu yapılandırma, 80°C sıcaklıkta ve 100 ml dak⁻¹ akış hızında 280,26 mA cm⁻² ile en yüksek akım yoğunluğuna ulaşmış ve aynı katalizör yüklemesine sahip diğer örneklerle karşılaştırıldığında en yüksek değer olarak kaydedilmiştir. Buna karşılık, 50°C sıcaklıkta ve 50 ml dak⁻¹ akış hızında gerçekleştirilen çalışmada yaklaşık 143,59 mA cm⁻² ile en düşük kinetik aktivite gözlemlenmiştir.

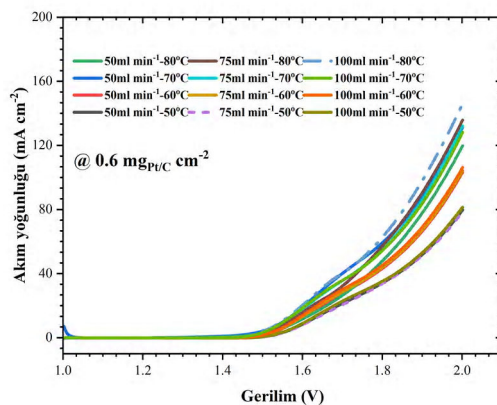
Şekil 3.7.b, 0,5 mgPt/C cm⁻² katot yüklemesinin 80°C sıcaklık ve 75 ml dak⁻¹ akış hızında 148,75 mA cm⁻²'lik bir akım yoğunluğu elde ettiğini göstermektedir. Ayrıca, Şekil 3.7.c'de görüldüğü üzere, 0,6 mgPt/C cm⁻² katot yüklemesiyle elde edilen kinetik aktivite, aynı katalizör yüklemesiyle yapılan diğer denemelere göre daha düşüktür; 80°C ve 100 ml dak⁻¹ akış koşullarında yaklaşık 143,37 mA cm⁻² seviyesinde kalmıştır. Şekil 3.7.d, 0,7 mgPt/C cm⁻² yüklemesinin 80°C ve 100 ml dak⁻¹ akış hızında 335,57 mA cm⁻² ile daha yüksek kinetik aktivite sergilediğini ortaya koymaktadır.



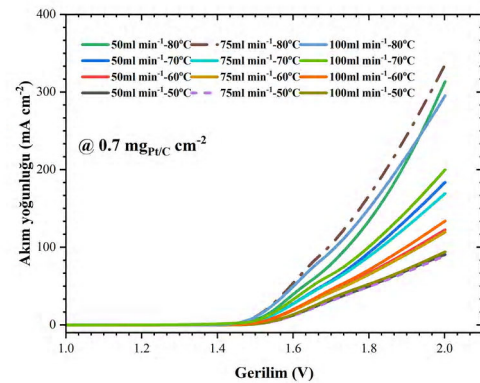
(a)



(b)



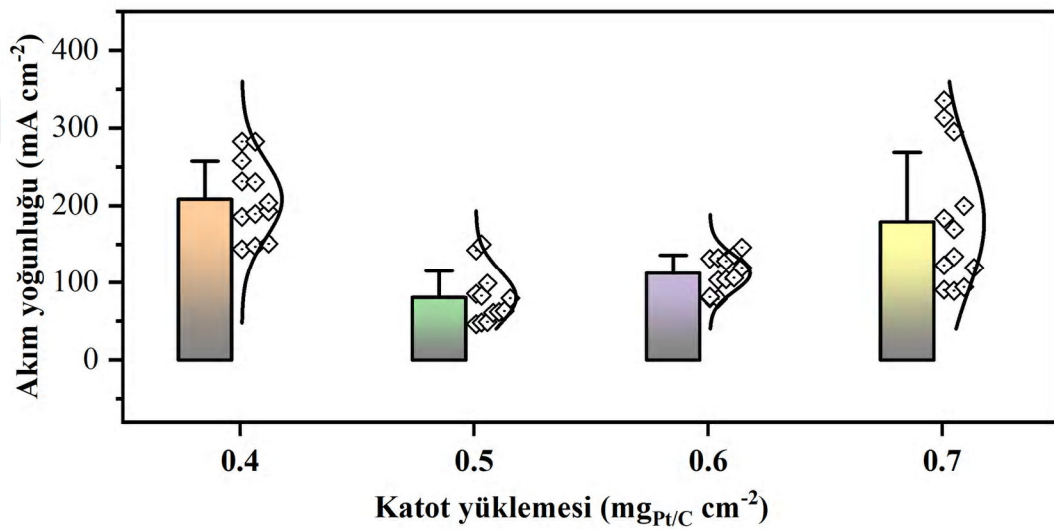
(c)



(d)

Şekil 3.7. Aquivion membranı için, anot yüklemesi 4 mg IrO₂·cm⁻² olacak şekilde a) 0,4 mg Pt/C·cm⁻², b) 0,5 mg Pt/C·cm⁻², c) 0,6 mg Pt/C·cm⁻² ve d) 0,7 mg Pt/C·cm⁻² durumlarına ait LSV eğrileri.

Şekil 3.8, 4 mgIrO₂ cm⁻² anot yüklemesine sahip Aquivion E98-09S membranı için farklı katot yüklemeleri altında elde edilen akım yoğunluğu dağılımlarını göstermektedir. 0,7 mgPt/C cm⁻² katot konfigürasyonu, yaklaşık 335,57 mA cm⁻² ile en yüksek değerlere ulaşmıştır. Buna ek olarak, 0,4 mgPt/C cm⁻² yüklemesi de 280,26 mA cm⁻² ile önemli düzeyde bir çıktı sergilemiştir. 0,6 mgPt/C cm⁻² yüklemesi orta düzeyde bir performans sunarken, 0,5 mgPt/C cm⁻² yüklemesi minimum elektrokimyasal aktivite göstermiştir.



Şekil 3.8. Farklı Katot Katalizör Yüklemelerinde, Aquivion Membran ve Anot Yüklemesi 4 mg IrO₂·cm⁻² için Kutu Grafiği

3.2. PEM elektrolizör Çalışma koşullarının değerlendirilmesi

PEMSE tek hücreleri için en uygun işletme koşulları, en yüksek akım yoğunluğunu gösteren kutu grafiği sonuçlarına dayanarak değerlendirilmiştir. Değerlendirme sürecinde membran türü, sıcaklık, akış hızı, katot yüklemesi, anot yüklemesi ve maliyet analizi dikkate alınmıştır.

Sentetik katalizörler için yapılan maliyet analizi, toplam sermaye maliyeti üzerinden gerçekleştirilmiş ve deneyler sırasında gözlemlenen yüksek akım yoğunluğuna göre dört durum seçilmiştir. Bu durumlar, Tablo 3.1'te özetlenmiştir.

Tablo 3.1. Farklı durumlarda katalizör yüklemesinin maliyet analizi

Parametreler	Durum (1)	Durum (2)	Durum (3)	Durum (4)
Akım Yoğunluğu ($\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2}$)	372,49	324,59	263,94	335,57
Membran Türü	N115	N115	Aquivion	Aquivion
Sıcaklık ($^{\circ}\text{C}$)	70	80	80	80
Debi ($\text{ml}\cdot\text{dk}^{-1}$)	50	75	100	100
Katot Yükleme (mg Pt/C $\cdot\text{cm}^{-2}$)	0.6	0.6	0.6	0.7
Anot Yükleme (mg $\text{IrO}_2\cdot\text{cm}^{-2}$)	3	4	3	4
Toplam Maliyet (\$)	19,36	23,46	17,92	22,53

Toplam maliyet, aşağıda verilen Eş. 1.5 kullanılarak hesaplanmıştır [45]:

$$\text{Toplam Maliyet (\$)} = \text{Malzeme Birim Fiyatı (\$/g)} \times \text{Malzeme Miktarı (g)} \quad (1.5)$$

Güncellenmiş malzeme fiyatları tedarikçilerden (Fuel Cell Store, Sigma-Aldrich vb.) temin edilebilir. Durum (1), en yüksek akım yoğunluğu olan $372,49 \text{ mA cm}^{-2}$ 'yi elde etmiş olup, bu değer Durum (2)'ye göre yaklaşık %14,8 Durum (3)'e göre ise %41,1 daha yüksektir. Bu konfigürasyon, Nafion 115 membranını 70°C 'de, 50 ml/dak akış hızında ve anot/katod yüklemeleri sırasıyla $3 \text{ mgIrO}_2 \text{ cm}^{-2}$ ve $0,6 \text{ mgPt/C cm}^{-2}$ olarak kullanmış ve toplam maliyeti 19,36 \$ olmuştur.

Buna karşın, Durum (2), daha yüksek sıcaklık (80°C) ve akış hızı (75 ml/dak) ile birlikte daha yüksek anot yüklemesi ($4 \text{ mgIrO}_2 \text{ cm}^{-2}$) kullanmıştır. Bu durumun toplam maliyeti 23,46 \$ olup, Durum (1)'den %21,2 daha pahalıdır. Ancak, maliyetteki bu artış, akım yoğunluğunda Durum (1)'e kıyasla hafif bir azalma ile birlikte gerçekleşmiştir. Bu da, daha yüksek anot yüklemesi ve sıcaklığın mutlaka en yüksek performansı sağlamayabileceğini göstermektedir. Öte yandan, Durum (3) Aquivion membranını kullanmış ve en düşük akım yoğunluğunu elde etmiştir. Buna rağmen, toplam maliyeti 17,92 \$ ile en uygun maliyetli durum olmuştur; bu da Durum (1)'e kıyasla

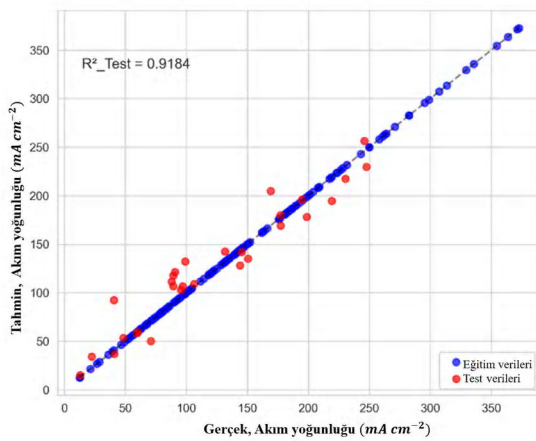
%7,4'lük bir maliyet tasarrufu anlamına gelir. Bu durum, performanstan taviz verilmesine rağmen, önemli ölçüde maliyet avantajı sağlandığını göstermektedir. Ayrıca, Durum (4) dengeli bir yaklaşım sunmuş; Durum (1) performansının %89,9'unu sağlarken, Durum (3)'ten %25,7 daha yüksek maliyete katlanmıştır. Bu da performans ve maliyet arasında bir denge arayanlar için uygun bir seçenek olabileceğini işaret etmektedir.

Sonuç olarak, en yüksek performans için Durum (1) tercih edilirken, maliyet etkinliği için Durum (3) en iyi seçimdir. Ancak, Durum (4), bu iki uç nokta arasında orta yol sunmaktadır. PEMSE performansını artırmaya yönelik çabalarımız doğrultusunda, hem katalizör yüklemesinin hem de membran seçimlerinin elektrokimyasal verimlilik üzerinde önemli etkileri olduğunu gözlemledik. Yine, Nafion 115 membranı ile 0,6 mgPt/C cm⁻² katot ve 3 mgIrO₂ cm⁻² anot yüklemesi, 70°C'de en yüksek akım yoğunluğunu sağlamıştır.

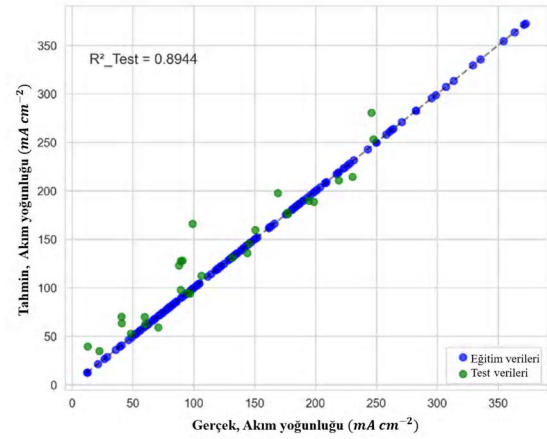
Bu sonuç, optimize edilmiş katalizör kullanımı, azalmış direnç ve verimli kütle taşınımının avantajlarını vurgulamaktadır. İyileşme muhtemelen dengeli bir katalizör tabakası ve düzgün partikül dağılımından kaynaklanmakta olup, bunlar birlikte etkili yük transferi ve reaksiyon kinetiklerini desteklemektedir.

3.3. Makine Öğrenimi Modellerinin Karşılaştırması

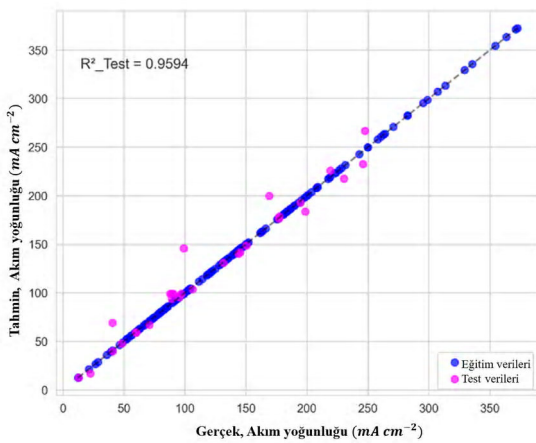
Bu bölümde, Bayesyen hiperparametre optimizasyonu sonrası dört MÖ modeli, akım yoğunluğu tahmini için değerlendirilmiştir. Şekil 3.9.a-d, sırasıyla XGBoost, RF, DT ve CatBoost modellerinin tahmin edilen ve gerçek akım yoğunluğu değerleri arasındaki korelasyonu göstermektedir. En iyi performansı, $R^2 = 0,9594$ ile DT modeli sergilemiş olup, onu CatBoost modeli $R^2 = 0,9404$ ile yakından takip etmektedir. XGBoost modeli ise $R^2 = 0,9184$ ile izlenirken, RF modeli $R^2 = 0,8944$ ile en düşük performansa sahip olmasına rağmen, her iki model de güçlü tahmin yetenekleri göstermiştir.



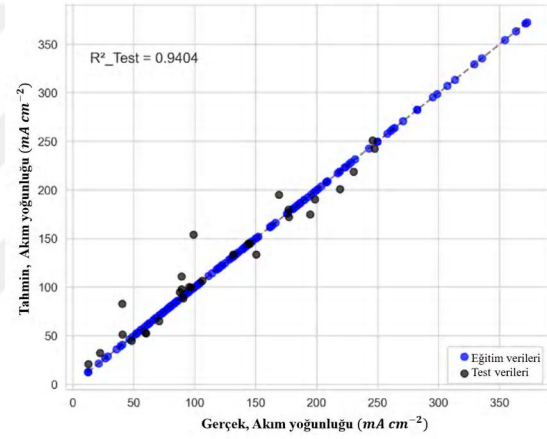
(a)



(b)



(c)

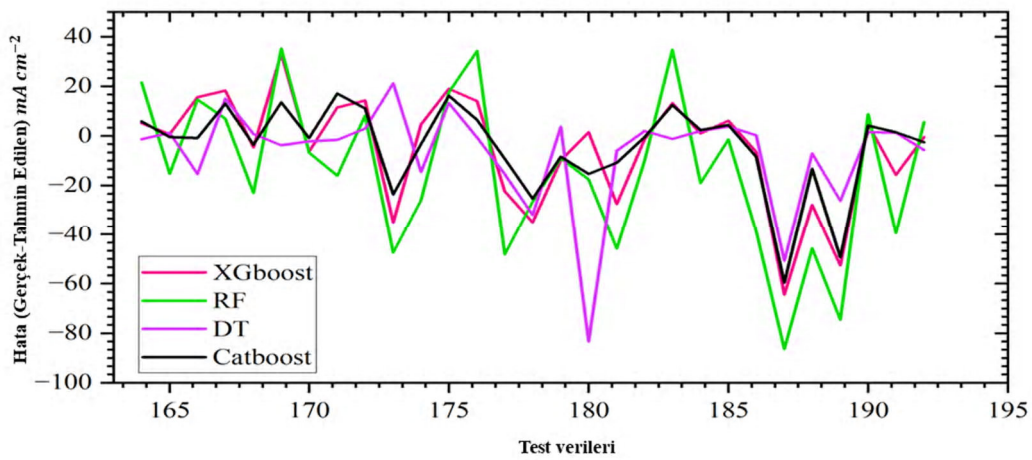


(d)

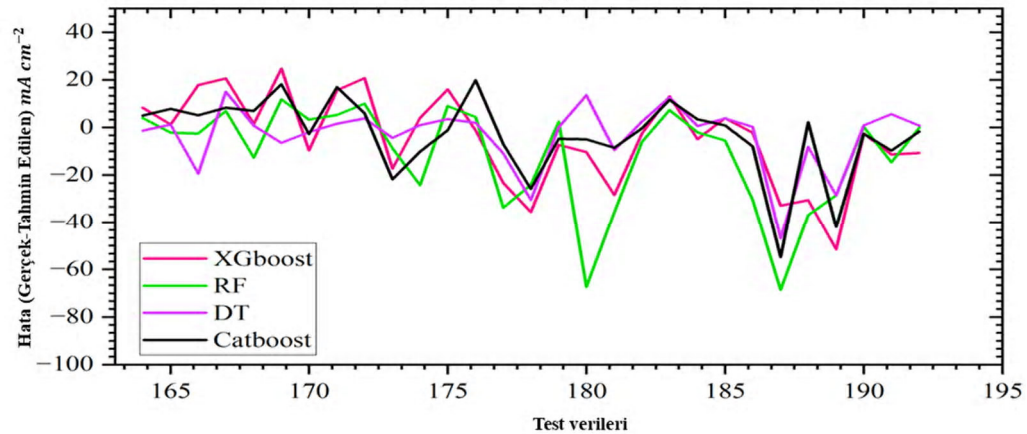
Şekil 3.9. a) XGBoost, b) RF, c) DT ve d) CatBoost modelleri için model tahminleri ile deneysel verilerin karşılaştırıldığı eşitlik (parity) grafikleri.

Tüm modeller, akım yoğunluğunun tüm aralığında sağlam performans göstermiştir; marjinal histogramlar çok modlu dağılımlar ortaya koymuş ve bu dağılımlar her algoritma tarafından tutarlı şekilde yakalanmıştır. Ayrıca, yaklaşık %96 varyansı açıklayan Karar Ağacı (DT) modelinin üstün performansı, optimize edilmiş ağaç tabanlı yöntemlerin akım yoğunluğu tahmini için etkinliğini doğrulamaktadır. Öte yandan, topluluk (ensemble) yöntemlerin biraz daha düşük performansı, bu uygulamada karmaşıklığın mutlaka doğruluk artışı sağlamadığını göstermektedir. Rastgele Orman (RF) modeli, diğer modellere kıyasla belirli veri noktalarında aşırı hatalar dahil bazı önemli dalgalanmalar sergilemiştir. Yine de, tüm modellerin güçlü performansı, pratik uygulamalarda kullanılma potansiyellerini işaret etmekte ve kapsamlı deneysel ölçümlere olan bağımlılığı azaltmaktadır.

Şekil 3.10.a, XGBoost, RF, DT ve CatBoost modellerinin test verilerindeki tahmin hatalarının karşılaştırmasını sunmaktadır. Y eksenindeki hata değerleri, gerçek ve tahmin edilen değerler arasındaki farkı (mA/cm^2 cinsinden) göstermektedir. Modeller arasında, RF ve DT en yüksek hata dalgalanmalarını sergilemiş ve sırasıyla yaklaşık $86,4 \text{ mA}/\text{cm}^2$ ve $83,3 \text{ mA}/\text{cm}^2$ 'ye ulaşmıştır. Buna karşılık, XGBoost ve CatBoost daha istikrarlı performans göstermiş olup, maksimum hata değerleri sırasıyla $59,5 \text{ mA}/\text{cm}^2$ ve $64,4 \text{ mA}/\text{cm}^2$ seviyesinde kalmıştır.



(a)



(b)

Şekil 3.10. MÖ modellerinin tahmin hataları: (a) Standart ve (b) Bayesyen hiperparametre optimizasyonu kullanılarak.

Şekil 3.10.b, Bayesyen hiperparametre optimizasyonu sonrası tahmin hatalarının karşılaştırmasını göstermektedir. RF ve CatBoost, sırasıyla $68,6 \text{ mA cm}^{-2}$ ve $54,8 \text{ mA cm}^{-2}$ ile en yüksek hata dalgalanmalarını sergilemiştir. Buna karşılık, XGBoost ve DT

daha tutarlı performans göstermiş; maksimum hata değerleri sırasıyla $51,9 \text{ mA cm}^{-2}$ ve $46,8 \text{ mA cm}^{-2}$ olup, en az sapmayı DT modeli göstermiştir.

Bu çalışmada, MÖ modellerinin hesaplama verimliliğini değerlendirmek için eğitim süresi de incelenmiştir. Tablo 3.2, XGBoost, RF, DT ve CatBoost modellerinin standart ayarlar ve Bayesyen hiperparametre optimizasyonu altında eğitim sürelerini (saniye) göstermektedir. Standart parametrelerde, en kısa eğitim süresine sahip model DT olup, bu süre 0,0020 saniye olarak ölçülmüştür; bunu sırasıyla XGBoost (0,050 s), CatBoost (0,0618 s) ve RF (0,490 s) takip etmektedir.

Ancak, hiper parametre araması ve en iyi modelin uygulanmasını içeren toplam Bayesyen optimizasyon süreci, eğitim süresini önemli ölçüde artırmakta, özellikle DT modeli için 195,91 saniyeye kadar yükselmektedir. RF ve CatBoost da eğitim sürelerinde artış göstermiş ve sırasıyla 77,36 ve 75,992 saniyeye ulaşmıştır. Buna karşın, XGBoost bu süreçte en hızlı kalarak 67,08 saniyede tamamlanmıştır.

Tablo 3.2. Standart ve Bayesyen optimizasyon ayarlarında MÖ modellerinin eğitim süresi

Model / Süre (s)	XGBoost	RF	DT	CatBoost
Bayesyen	67,08	77,36	195,91	75,992
Standart	0,050	0,490	0,0020	0,0618

Tablo 3.3, Bayesyen hiperparametre ayarı yapılmış ve yapılmamış MÖ modellerinin performans metriklerini karşılaştırmaktadır. Metrikler arasında, hem eğitim hem de test setleri için R^2 (\uparrow ne kadar yüksek o kadar iyi), RMSE, MAE ve MAPE (\downarrow ne kadar düşük o kadar iyi) yer almaktadır. Test seti sonuçlarına bakıldığında, Bayesyen optimizasyonun genel olarak model performansını iyileştirdiği görülmektedir.

XGBoost, Bayesyen ayarlama ile test setinde $R^2 = 0,9184$ elde ederken, standart modelde bu değer 0,8885'tir. RF modeli, Bayesyen optimizasyon ile test setinde $R^2 = 0,8944$ 'e yükselmiş, ayarsız modelde ise 0,7481 olarak kalmıştır. Karar Ağacı (DT) modeli, Bayesyen ayarlama ile test setinde $R^2 = 0,9594$ 'e ulaşarak tüm modeller

arasında en yüksek R^2 değerini göstermiştir. Son olarak, CatBoost, Bayesyen optimizasyon ile test setinde $R^2 = 0,9404$ 'e yükselirken, standart modelde 0,9292'de kalmıştır.

Tablo 3.3. Bayesyen ve bayesyen hiperparametreler olmadan MÖ modellerinin performans metriklerinin karşılaştırılması.

Model	Hyperparameter tuning	$\uparrow R^2$		\downarrow RMSE (mA cm ⁻²)		\downarrow MAE (mA cm ⁻²)		\downarrow MAPE (%)	
		Train	Test	Train	Test	Train	Test	Train	Test
XGboost	Bayesian	0,9951	0,9184	5,683	19,191	3,789	14,818	3,444	17,635
	Standard	0,9962	0,8885	5,197	22,526	3,717	16,284	3,634	20,582
RF	Bayesian	0,9933	0,8944	6,622	21,832	3,629	15,287	2,877	24,540
	Standard	0,9700	0,7481	13,60	33,711	10,07	27,036	11,01	44,417
DT	Bayesian	0,9752	0,9594	12,29	13,532	5,396	8,1880	3,567	8,7960
	Standard	0,9980	0,9010	3,775	21,144	1,474	11,116	1,080	11,116
Catboost	Bayesian	0,9931	0,9404	6,759	16,402	4,469	10,992	4,322	15,415
	Standard	0,9940	0,9292	6,238	17,888	3,916	11,853	3,449	15,158

Tablo 3.4, MÖ modelleri arasındaki ikili karşılaştırmalar için Wilcoxon İşaretli Sıralar Testi sonuçlarını sunmaktadır. Kalın yazılan p-değerleri, model performansları arasında istatistiksel olarak anlamlı farklar olduğunu ($p \leq 0,05$) gösterirken, 0,05'ten büyük p-değerleri anlamlı bir fark olmadığını işaret etmektedir. Test, XGBoost ile DT arasında ($p = 0,00007$) ve DT ile RF arasında ($p = 0,00198$) anlamlı performans farkları olduğunu ortaya koymaktadır. Ancak, CatBoost ile DT ($p = 0,09196$) ve RF ile XGBoost ($p = 0,60888$) modelleri arasında anlamlı bir fark gözlemlenmemiştir. Önemle belirtilmelidir ki, bu istatistiksel farklılıklara rağmen, DT modeli en yüksek R^2 değerini elde ederek verideki varyansı açıklamada üstün bir güce sahip olduğunu göstermiştir.

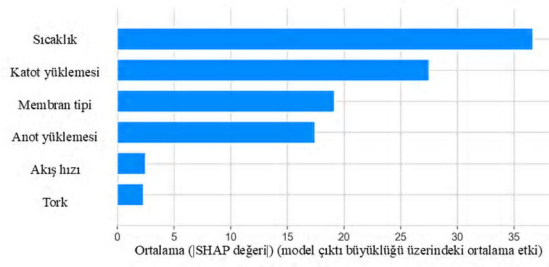
Tablo 3.4. Çiftli model karşılaştırması için Wilcoxon işaretli sıralı test.

Model	XGBoost	RF	DT	CatBoost
XGBoost	-	0,60888	0,00007	0,03863
RF	-	-	0,00198	0,31449
DT	-	-	-	0,09196
CatBoost	-	-	-	-

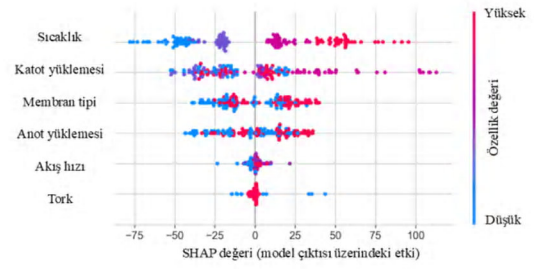
3.4. Makine Öğrenimi Modellerinin Tanımlanması

SHAP değerleri, modelin tahminlerindeki her bir özelliğin göreceli önemini ortaya koyar. Ortalama mutlak SHAP değerleri (Şekil 3.11.a, b, c, d), her özelliğin model çıktısı üzerindeki ortalama etkisini nicelendirir. Daha büyük ortalama mutlak SHAP değerleri, hedef parametre olan akım yoğunluğunu tahmin etmede o özelliğin daha güçlü bir etkisi olduğunu gösterir. SHAP değer grafikleri (Şekil 3.11.e, f, g, h), her bir özelliğin model çıktısı üzerindeki etkisinin ayrıntılı bir görünümünü sunar. Bu grafiklerde her veri noktası belirli bir özellik değerini temsil eder. Kırmızı nokta, yüksek özellik değerini; mavi nokta ise düşük özellik değerini simgeler. Yatay eksen SHAP değerini gösterir; pozitif SHAP değeri (0'ın sağındaki noktalar) tahmin edilen akım yoğunluğu üzerinde artırıcı bir etkiye işaret ederken, negatif SHAP değeri (0'ın solundaki noktalar) azaltıcı bir etki anlamına gelir.

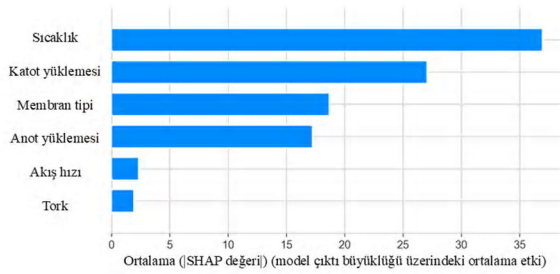
Dolayısıyla, eğer kırmızı noktalar yatay eksenin pozitif tarafında yoğunlaşmışsa, o özelliğin yüksek değerleri akım yoğunluğunu artırır. Tersine, mavi noktalar pozitif tarafta yoğunsa, o özelliğin düşük değerleri akım yoğunluğunu artırmaktadır.



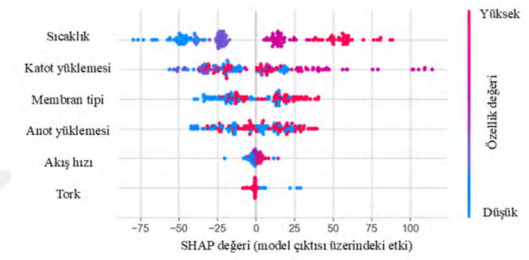
(a)



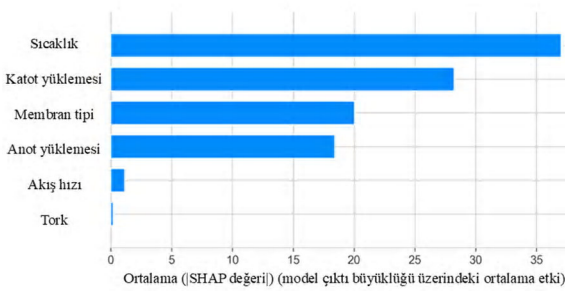
(e)



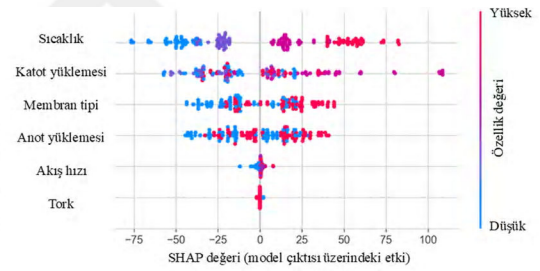
(b)



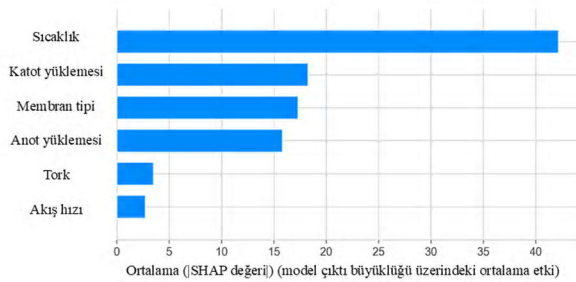
(f)



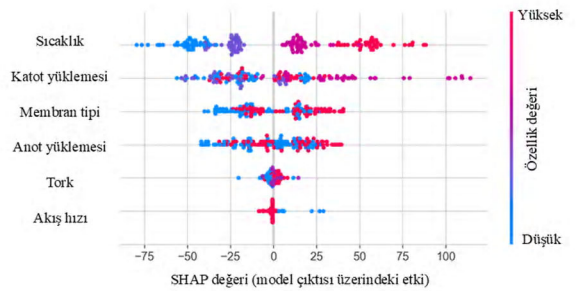
(c)



(g)



(d)



(h)

Şekil 3.11. a) XGBoost, b) RF, c) DT, d) CatBoost modelleri için ortalama SHAP değerleri, e) XGBoost, f) RF, g) DT ve h) CatBoost modelleri için SHAP değerleri.

Analizimiz, en etkili parametrenin sıcaklık olduğunu ortaya koymaktadır. Yüksek sıcaklıklar, artan akım yoğunluğuyla ilişkilendirilirken, düşük sıcaklıklar akım yoğunluğunda azalmaya yol açmaktadır. Katot yüklemesi ikinci en önemli özellik olup, etkisi doğrusal olmayan bir ilişki göstermektedir. Genel olarak, katot yüklemesinin artması akım yoğunluğunu artırsa da aşırı yüksek değerler akım yoğunluğunun düşmesine neden olmakta ve bu da maksimum akım yoğunluğu için optimal bir yükleme noktasının varlığını işaret etmektedir. Anot yüklemesi ise katot yüklemesine benzer bir eğilim sergilemekle birlikte, etkisi daha az belirgindir. Sadece iki membran tipi değerlendirildiğinden, dağılan SHAP değerleri membran tipinin akım yoğunluğu üzerindeki etkisinin diğer faktörlere bağlı olduğunu göstermektedir. Buna rağmen, Nafion 115 membranın akım yoğunluğu üzerinde hafifçe olumlu bir etkisi olduğu gözlemlenmiştir.

Su akış hızı, akım yoğunluğu ile küçük ama pozitif bir korelasyon göstermektedir; yani daha yüksek akış hızları artan akım yoğunluğuna karşılık gelmektedir. Buna karşılık, tork akım yoğunluğu ile hafif ters bir ilişki sergiler; düşük tork değerleri biraz daha yüksek akım yoğunluğu ile ilişkilidir.

4. BÖLÜM

TARTIŞMA VE ÖNERİLER

4.1. Tartışma

PEMSE sürdürülebilir ve temiz hidrojen üretimi alanında en umut vadeden teknolojiler arasında bulunmaktadır. Özellikle karbon ayak izinin azaltılması ve yenilenebilir enerji kaynaklarının entegrasyonu bağlamında, PEMSE sistemlerinin performansının optimize edilmesi kritik bir öneme sahiptir. Bu bağlamda, elektrokatalizör yüklemelerinin doğru seçimi ve işletme koşullarının hassas kontrolü, sistem verimliliğini artırmak ve maliyetleri minimize etmek için zorunludur.

- i. Bu çalışmada, anot ve katot elektrokatalizör yüklemelerinin PEMSE performansı üzerindeki karmaşık ve çok değişkenli etkileri, geniş kapsamlı deneysel veri seti (1344 örnek) üzerinden XML yöntemleriyle incelenmiştir. Katalizör yüklemeleri, membran tipi, sıcaklık, akış hızı, tork ve akım yoğunluğu gibi parametrelerin birleşik etkileri derinlemesine analiz edilmiştir. XGBoost, RF, DT ve CatBoost modelleri Bayesyen hiperparametre optimizasyonu kullanılarak eğitilmiş ve karşılaştırılmıştır.
- ii. Bayesyen optimizasyonun, özellikle model genelleme yeteneği ve tahmin doğruluğunda belirgin iyileştirmeler sağladığı gözlemlenmiştir. Model performansları arasında en yüksek R^2 değeri (0,9594) Karar Ağacı modeli tarafından elde edilmiştir. Bu sonuç, Wilcoxon işaretli sıralar testi ile istatistiksel olarak da desteklenmiştir. Modelin açıklanabilirliği için SHAP analizi uygulanmış ve sıcaklık ile katot katalizör yüklemesinin sistem performansını belirleyen en kritik özellikler olduğu ortaya konmuştur. Ayrıca membran tipi, anot yüklemesi, su akış hızı ve tork gibi diğer parametrelerin performans üzerindeki karmaşık ve doğrusal olmayan etkileri ayrıntılı şekilde açıklanmıştır.

- iii. Model sonuçlarına göre, katotta $0,6 \text{ mg Pt/C} \cdot \text{cm}^{-2}$ ve anotta $3,0 \text{ mg IrO}_2 \cdot \text{cm}^{-2}$ yüklemeleriyle en iyi elektrokimyasal performans elde edilmiştir. Bu yüklemeler altında, akım yoğunluğunda belirgin artışlar gözlemlenmiş ve katalizör kullanım verimliliği optimize edilmiştir. Bunun yanında, maliyet-performans analizleri, ekonomik açıdan sürdürülebilir ve yüksek performanslı bir konfigürasyonun mümkün olduğunu göstermiştir. Özellikle, 70°C 'de Nafion 115 membran kullanılarak uygulanan bu optimum yüklemeler toplam sistem maliyetini düşürürken, performansta %14,8'lik bir iyileşme sağlamıştır.

Çalışmanın bulguları, PEMSE sistemlerinde klasik deneysel yöntemlerle tespit edilmesi zor olan parametreler arası karmaşık etkileşimlerin, açıklanabilir MÖ modelleri ile başarıyla ortaya konabileceğini göstermektedir. Bu yaklaşım, sadece performans tahmini yapmakla kalmayıp aynı zamanda model içi parametre etkilerini detaylı şekilde analiz ederek tasarım kararlarını desteklemektedir.

4.2. Sonuç ve Öneriler

Bu çalışma, PEMSE'lerinde anot ve katot katalizör yüklemelerinin, işletme koşulları ile birlikte performans üzerindeki karmaşık etkilerinin başarılı bir şekilde MÖ teknikleriyle incelenebileceğini göstermiştir. Karar Ağacı modeli, Bayesyen hiperparametre optimizasyonu sayesinde üstün tahmin başarısı sergilemiş ve model açıklanabilirliği SHAP analizi ile desteklenmiştir. Bu sayede, sistem parametrelerinin performansa olan etkileri ayrıntılı olarak ortaya konmuştur. Elde edilen bulgular, PEMSE tasarımında veri odaklı optimizasyonun önemini vurgulamakta ve sürdürülebilir hidrojen üretiminde maliyet-etkin performans artırımı için güçlü bir çerçeve sunmaktadır. Gelecek çalışmalarda, EIS ölçümleri ve hücre testi gibi ileri elektrokimyasal karakterizasyonların yanı sıra, farklı membran tipleri ve katalizör kombinasyonlarının daha kapsamlı araştırılması önerilmektedir. Ayrıca, MÖ modellerinin daha geniş parametre aralıkları ve gerçek zamanlı izleme ile entegre edilmesi, PEMSE sistemlerinin işletme verimliliğini ve ömrünü artırmada önemli katkılar sağlayabilir. Sonuç olarak, XML yaklaşımları, hidrojen üretim teknolojilerinin ticari uygulamalarda yaygınlaşmasına ve küresel enerji dönüşümünde kritik rol oynamasına destek olacak güçlü araçlardır.

KAYNAKÇA

1. Bhandari, R., Adhikari, N., 2024. A comprehensive review on the role of hydrogen in renewable energy systems. **International Journal of Hydrogen Energy**, **82**: 923-951.
2. Bampaou, M., Panopoulos, K., 2025. An overview of hydrogen valleys: Current status, challenges and their role in increased renewable energy penetration. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, **207**: 114923.
3. Nnabuife, S. G., Hamzat, A. K., Whidborne, J., Kuang, B., Jenkins, K. W., 2024. Integration of renewable energy sources in tandem with electrolysis: A technology review for green hydrogen production. **International Journal of Hydrogen Energy**,
4. Laimon, M., Yusaf, T., 2024. Towards energy freedom: Exploring sustainable solutions for energy independence and self-sufficiency using integrated renewable energy-driven hydrogen system. **Renewable Energy**, **222**: 119948.
5. Zhao, A. P., Li, S., Xie, D., Wang, Y., Li, Z., Hu, P. J.-H., Zhang, Q., 2025. Hydrogen as the nexus of future sustainable transport and energy systems. **Nature Reviews Electrical Engineering**,
6. Yan, Y., Wang, Y., Yan, J., Zhang, H., Shang, W., 2024. Wind electricity-hydrogen-natural gas coupling: An integrated optimization approach for enhancing wind energy accommodation and carbon reduction. **Applied Energy**, **369**: 123482.
7. Mignogna, D., Szabó, M., Ceci, P., Avino, P., 2024. Biomass energy and biofuels: Perspective, potentials, and challenges in the energy transition. **Sustainability**, **16**: (16): 7036.
8. Mola-Yudego, B., Dimitriou, I., Gagnon, B., Schweinle, J., Kulišić, B., 2024. Priorities for the sustainability criteria of biomass supply chains for energy. **Journal of Cleaner Production**, **434**: 140075.
9. Mahek, M. K., Ramadan, M., bin Dol, S. S., Ghazal, M., Alkhedher, M., 2024. A comprehensive review of thermoelectric cooling technologies for enhanced thermal management in lithium-ion battery systems. **Heliyon**,

10. Nyamathulla, S., Dhanamjayulu, C., 2024. A review of battery energy storage systems and advanced battery management system for different applications: Challenges and recommendations. **Journal of Energy Storage**, **86**: 111179.
11. Simpa, P., Solomon, N. O., Adenekan, O. A., Obasi, S. C., 2024. The safety and environmental impacts of battery storage systems in renewable energy. **World Journal of Advanced Research and Reviews**, **22**: (2): 564-580.
12. Chang, S.-F., Chiu, H.-H., Jao, H.-S., Shang, J., Lin, Y.-J., Yu, B.-Y., 2025. Comprehensive evaluation of various CO₂ capture technologies through rigorous simulation: Economic, equipment footprint, and environmental analysis. **Carbon Capture Science & Technology**, **14**: 100342.
13. Teutrine, C., Schuster, M., Bornhöft, S. C., Lueg, R., Bouzzine, Y. D., 2024. Stock price reactions to climate science information from the Intergovernmental Panel on Climate Change: A mitigation function of corporate and sector emissions responsibility? **Business Strategy and the Environment**, **33**: (6): 5346-5365.
14. Mudhee, K. H., Hilal, M. M., Alyami, M., Rendal, E., Algburi, S., Sameen, A. Z., Khurramov, A., Abboud, N. G., Barakat, M., 2025. Assessing climate strategies of major energy corporations and examining projections in relation to Paris Agreement objectives within the framework of sustainable energy. **Unconventional Resources**, **5**: 100127.
15. Błażejowska, M., Czarny, A., Kowalska, I., Michalczewski, A., Stępień, P., 2024. The Effectiveness of the EU ETS Policy in Changing the Energy Mix in Selected European Countries. **Energies**, **17**: (17): 4243.
16. Fam, A., Fam, S., 2024. Review of the US 2050 long term strategy to reach net zero carbon emissions. **Energy Reports**, **12**: 845-860.
17. Guo, X., Zhu, H., Zhang, S., 2024. Overview of electrolyser and hydrogen production power supply from industrial perspective. **International Journal of Hydrogen Energy**, **49**: 1048-1059.
18. Reda, B., Elzamar, A. A., AlFazzani, S., Ezzat, S. M., 2024. Green hydrogen as a source of renewable energy: a step towards sustainability, an overview. **Environment, Development and Sustainability**, 1-21.
19. Rubinsin, N. J., Karim, N. A., Timmiati, S. N., Lim, K. L., Isahak, W. N. R. W., Pudukudy, M., 2024. An overview of the enhanced biomass gasification for

- hydrogen production. **International journal of hydrogen energy**, **49**: 1139-1164.
20. Xu, S., Huang, X., Lu, H., 2024. Photocatalytic reforming of biomass for hydrogen production: A comprehensive overview. **Fuel Processing Technology**, **255**: 108057.
 21. Shimomura, M., Keeley, A. R., Matsumoto, K. i., Tanaka, K., Managi, S., 2024. Beyond the merit order effect: Impact of the rapid expansion of renewable energy on electricity market price. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, **189**: 114037.
 22. Zainal, B. S., Ker, P. J., Mohamed, H., Ong, H. C., Fattah, I., Rahman, S. A., Nghiem, L. D., Mahlia, T. I., 2024. Recent advancement and assessment of green hydrogen production technologies. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, **189**: 113941.
 23. Singla, M. K., Gupta, J., Beryozkina, S., Safaraliev, M., Singh, M., 2024. The colorful economics of hydrogen: Assessing the costs and viability of different hydrogen production methods-A review. **International Journal of Hydrogen Energy**, **61**: 664-677.
 24. Rampai, M., Mtshali, C., Seroka, N. S., Khotseng, L., 2024. Hydrogen production, storage, and transportation: recent advances. **RSC advances**, **14**: (10): 6699-6718.
 25. Kumar, R., Singh, R., Dutta, S., 2024. Review and outlook of hydrogen production through catalytic processes. **Energy & Fuels**, **38**: (4): 2601-2629.
 26. Nnabuife, S. G., Hamzat, A. K., Whidborne, J., Kuang, B., Jenkins, K. W., 2025. Integration of renewable energy sources in tandem with electrolysis: A technology review for green hydrogen production. **International Journal of Hydrogen Energy**, **107**: 218-240.
 27. Sharshir, S. W., Joseph, A., Elsayad, M. M., Tareemi, A. A., Kandeal, A. W., Elkadeem, M. R., 2024. A review of recent advances in alkaline electrolyzer for green hydrogen production: Performance improvement and applications. **International Journal of Hydrogen Energy**, **49**: 458-488.
 28. Sebbahi, S., Assila, A., Alaoui Belghiti, A., Laasri, S., Kaya, S., Hlil, E. K., Rachidi, S., Hajjaji, A., 2024. A comprehensive review of recent advances in

- alkaline water electrolysis for hydrogen production. **International Journal of Hydrogen Energy**, **82**: 583-599.
29. Akyüz, E. S., Telli, E., Farsak, M., 2024. Hydrogen generation electrolyzers: Paving the way for sustainable energy. **International Journal of Hydrogen Energy**, **81**: 1338-1362.
 30. Mulk, W. U., Aziz, A. R. A., Ismael, M. A., Ghoto, A. A., Ali, S. A., Younas, M., Gallucci, F., 2024. Electrochemical hydrogen production through anion exchange membrane water electrolysis (AEMWE): Recent progress and associated challenges in hydrogen production. **International Journal of Hydrogen Energy**, **94**: 1174-1211.
 31. Zeng, W., Guan, B., Zhuang, Z., Chen, J., Zhu, L., Ma, Z., Hu, X., Zhu, C., Zhao, S., Shu, K., Dang, H., Zhu, T., Huang, Z., 2025. Comprehensive review on the advances and comparisons of proton exchange membrane fuel cells (PEMFCs) and anion exchange membrane fuel cells (AFCs): From fundamental principles to key component technologies. **International Journal of Hydrogen Energy**, **102**: 222-246.
 32. Xu, Y., Cai, S., Chi, B., Tu, Z., 2024. Technological limitations and recent developments in a solid oxide electrolyzer cell: A review. **International Journal of Hydrogen Energy**, **50**: 548-591.
 33. Lv, Z., Chen, G., Wei, K., Yu, L., Nan, X., Xu, S., You, J., Geng, S., 2024. Preparation and performance evaluation of low temperature SOEC using lithium compounds as electrodes. **International Journal of Hydrogen Energy**, **55**: 386-393.
 34. Afzal, J., Wang, H., 2025. A review on sulfonated organic polymer based composite membranes for PEM water electrolyzers. **International Journal of Hydrogen Energy**, **123**: 100-117.
 35. K1st1, M., Huner, B., Albadwi, A., Ozdogan, E., Uzgoren, I. N., Uysal, S., Conağası, M., Suzen, Y. O., Demir, N., Kaya, M. F., 2025. Recent advances in polymer electrolyte membrane water electrolyzer stack development studies: a review. **ACS omega**, **10**: (10): 9824-9853.
 36. Wang, X., Star, A. G., Ahluwalia, R. K., 2023. Performance of polymer electrolyte membrane water electrolysis systems: Configuration, stack materials, turndown and efficiency. **Energies**, **16**: (13): 4964.

37. Yasin, M. C., Johar, M., Gupta, A., Shahgaldi, S., 2024. A comprehensive review of the material innovations and corrosion mitigation strategies for PEMWE bipolar plates. **International Journal of Hydrogen Energy**, **88**: 726-747.
38. Zagoraïou, E., Krishan, S., Siriwardana, A., Moschovi, A. M., Yakoumis, I., 2024. Performance of Stainless-Steel Bipolar Plates (SS-BPPs) in Polymer Electrolyte Membrane Water Electrolyser (PEMWE): A Comprehensive Review. **Compounds**, **4**: (2): 252-267.
39. Qiu, C., Xu, Z., Chen, F.-Y., Wang, H., 2024. Anode engineering for proton exchange membrane water electrolyzers. **ACS Catalysis**, **14**: (2): 921-954.
40. McLeod, A. J., Böhre, L. V., Bensmann, B., Herrera, O. E., Mérida, W., 2024. Anode and cathode overpotentials under accelerated stress testing of a PEM electrolysis cell. **Journal of Power Sources**, **589**: 233750.
41. Ferner, K. J., Litster, S., 2024. Composite Anode for PEM Water Electrolyzers: Lowering Iridium Loadings and Reducing Material Costs with a Conductive Additive. **ACS Applied Energy Materials**, **7**: (18): 8124-8135.
42. Huang, Y., Williams, S., Heo, T. W., Marshall, A., Wood, B., Kennedy, J., Metson, J., Woo, M. W., Liu, J., 2025. Understanding the impact of the gas diffusion layer structure on catalyst utilization in the PEM water electrolyzer. **Next Energy**, **8**: 100319.
43. Stein, L., Dittrich, A., Walter, D. C., Trinke, P., Bensmann, B., Hanke-Rauschenbach, R., 2025. Degradation of PGM and PGM-free Coatings on PEMWE Porous Transport Layers. **ACS Applied Materials & Interfaces**, **17**: (12): 19070-19085.
44. Cieluch, M., Dürkop, D., Kazamer, N., Wirkert, F., Podleschny, P., Rost, U., Schmiemann, A., Brodmann, M., 2024. Manufacturing and investigation of MEG s for PEMWE based on glass fibre reinforced PFSA/ssPS composite membranes and catalyst-coated substrates prepared via catalyst electrodeposition. **International Journal of Hydrogen Energy**, **52**: 521-533.
45. Yang, P., Huang, J., Chen, F., Mecheri, B., D'Epifanio, A., Traversa, E., Song, J., Xu, G., Li, J., Zhu, X., 2025. Acid-assisted hydration of a membrane electrode assembly to enhance the performance and stability of proton exchange membrane water electrolysis. **Journal of Power Sources**, **643**: 237044.

46. Yu, L., Tian, B., Huang, W., Zhou, X., Li, W., 2024. Advancements in ordered membrane electrode assembly (MEG) for water electrolysis. **Current Opinion in Electrochemistry**, 101595.
47. Giesbrecht, P. K., Freund, M. S., 2024. Impact of cell design and conditioning on polymer electrolyte membrane water electrolyzer operation. **International Journal of Hydrogen Energy**, **95**: 806-817.
48. Franić, N., Pivac, I., Barbir, F., 2025. A review of machine learning applications in hydrogen electrochemical devices. **International journal of hydrogen energy**, **102**: 523-544.
49. Mendonça, M. O., Netto, S. L., Diniz, P. S., Theodoridis, S., 2024. Machine learning: Review and trends. **Signal processing machine learning theory**, 869-959.
50. Barbierato, E., Gatti, A., 2024. The challenges of machine learning: A critical review. **Electronics**, **13**: (2): 416.
51. Yang, R., Mohamed, A., Kim, K., 2023. Optimal design and flow-field pattern selection of proton exchange membrane electrolyzers using artificial intelligence. **Energy**, **264**: 126135.
52. Ding, R., Wang, X., Tan, A., Li, J., Liu, J., 2023. Unlocking New Insights for Electrocatalyst Design: A Unique Data Science Workflow Leveraging Internet-Sourced Big Data. **ACS Catalysis**, **13**: (20): 13267-13281.
53. Wu, L., Pan, Z., Yuan, S., Huo, X., Zheng, Q., Yan, X., An, L., 2024. Optimization of dual-layer flow field in a water electrolyzer using a data-driven surrogate model. **Energy and AI**, **18**: 100411.
54. Chen, J., Lv, H., Shen, X., Zhang, C., 2024. Multi-objective optimization design and sensitivity analysis of proton exchange membrane electrolytic cell. **Journal of Cleaner Production**, **434**: 140045.
55. Shakibi, H., Faal, M. Y., Assareh, E., Agarwal, N., Yari, M., Latifi, S. A., Ghodrat, M., Lee, M., 2023. Design and multi-objective optimization of a multi-generation system based on PEM electrolyzer, RO unit, absorption cooling system, and ORC utilizing machine learning approaches; a case study of Australia. **Energy**, **278**: 127796.

56. Mohamed, A., Ibrahim, H., Kim, K., 2022. Machine learning-based simulation for proton exchange membrane electrolyzer cell. **Energy Reports**, **8**: 13425-13437.
57. Hai, T., Aziz, K. H. H., Zhou, J., Dhahad, H. A., Sharma, K., Almojil, S. F., Almohana, A. I., Alali, A. F., Kh, T. I., Mehrez, S., 2023. -Neural network-based optimization of hydrogen fuel production energy system with proton exchange electrolyzer supported nanomaterial. **Fuel**, **332**: 125827.
58. Zhang, Y., Tan, A., Yuan, Z., Zhao, K., Shi, X., Liu, P., Liu, J., 2024. Data-Driven Optimization of High-Dimensional Variables in Proton Exchange Membrane Water Electrolysis Membrane Electrode Assembly Assisted by Machine Learning. **Industrial & Engineering Chemistry Research**,
59. Satjaritanun, P., O'Brien, M., Kulkarni, D., Shimpalee, S., Capuano, C., Ayers, K. E., Danilovic, N., Parkinson, D. Y., Zenyuk, I. V., 2020. Observation of preferential pathways for oxygen removal through porous transport layers of polymer electrolyte water electrolyzers. **Iscience**, **23**: (12): 60.
61. Ding, R., Wang, R., Ding, Y., Yin, W., Liu, Y., Li, J., Liu, J., 2020. Designing AI-Aided Analysis and Prediction Models for Nonprecious Metal Electrocatalyst-Based Proton-Exchange Membrane Fuel Cells. **Angewandte Chemie**, **132**: (43): 19337-19345.
62. Uenishi, T., Imoto, R., 2023. Optimization of cathode catalyst layer of membrane electrode assembly for polymer electrolyte fuel cells using machine learning. **Journal of Power Sources**, **573**: 233105.
63. Jienkulsawad, P., Wiranarongkorn, K., Chen, Y., Arpornwichanop, A., 2022. Identifying catalyst layer compositions of proton exchange membrane fuel cells through machine-learning-based approach. **International Journal of Hydrogen Energy**, **47**: (75): 32303-32314.
64. Bahr, M., Gusak, A., Stypka, S., Oberschachtsiek, B., 2020. Artificial neural networks for aging simulation of electrolysis stacks. **Chemie Ingenieur Technik**, **92**: (10): 1610-1617.
65. Liu, J., Li, Q., Chen, W., Yan, Y., Qiu, Y., Cao, T., 2019. Remaining useful life prediction of PEMFC based on long short-term memory recurrent neural networks. **International Journal of Hydrogen Energy**, **44**: (11): 5470-5480.

66. Xu, B., Ma, W., Wu, W., Wang, Y., Yang, Y., Li, J., Zhu, X., Liao, Q., 2024. Degradation prediction of PEM water electrolyzer under constant and start-stop loads based on CNN-LSTM. **Energy and AI**, **18**: 100420.
67. Zaveri, J. C., Dhanushkodi, S. R., Kumar, C. R., Taler, J., Majdak, M., Węglowski, B., 2023. Predicting the Performance of PEM Fuel Cells by Determining Dehydration or Flooding in the Cell Using Machine Learning Models. **Energies**, **16**: (19): 6968.
68. Cawte, T., Bazylak, A., 2022. A 3D convolutional neural network accurately predicts the perMEG bility of gas diffusion layer materials directly from image data. **Current Opinion in Electrochemistry**, 101101.
69. Wang, J., Jiang, H., Chen, G., Wang, H., Lu, L., Liu, J., Xing, L., 2023. Integration of multi-physics and machine learning-based surrogate modelling approaches for multi-objective optimization of deformed GDL of PEM fuel cells. **Energy and AI**, **14**: 100261.
70. Xing, L., Song, X., Scott, K., Pickert, V., Cao, W., 2013. Multi-variable optimisation of PEMFC cathodes based on surrogate modelling. **international journal of hydrogen energy**, **38**: (33): 14295-14313.
71. Ozdemir, S. N., Taymaz, I., Okumuş, E., Boyacı San, F. G., Akgün, F., 2023. Optimization of operating parameters for boosting the performance of the PEMEC by the response surface methodology. **International Journal of Green Energy**, 1-12.
72. Wilberforce, T., Olabi, A., Monopoli, D., Dassisti, M., Sayed, E. T., Abdelkareem, M. A., 2023. Design optimization of proton exchange membrane fuel cell bipolar plate. **Energy Conversion and Management**, **277**: 116586.
73. Li, W., Jing, S., Wang, S., Wang, C., Xie, X., 2016. Experimental investigation of expanded graphite/phenolic resin composite bipolar plate. **International Journal of Hydrogen Energy**, **41**: (36): 16240-16246.
74. Kumar, A., Reddy, R. G., 2004. Materials and design development for bipolar/end plates in fuel cells. **Journal of Power Sources**, **129**: (1): 62-67.
75. Kim, M., Ha, M. Y., Jung, W. B., Yoon, J., Shin, E., Kim, I. d., Lee, W. B., Kim, Y., Jung, H. t., 2022. Searching for an Optimal Multi-Metallic Alloy Catalyst

- by Active Learning Combined with Experiments (Adv. Mater. 19/2022). **Advanced Materials**, **34**: (19): 2270147.
76. Zubatiuk, T., Isayev, O., 2021. Development of multimodal machine learning potentials: Toward a physics-aware artificial intelligence. **Accounts of Chemical Research**, **54**: (7): 1575-1585.
77. Chen, L., Tian, Y., Hu, X., Yao, S., Lu, Z., Chen, S., Zhang, X., Zhou, Z., 2022. A universal machine learning framework for electrocatalyst innovation: a case study of discovering alloys for hydrogen evolution reaction. **Advanced Functional Materials**, **32**: (47): 2208418.
78. Zhang, J., Hu, P., Wang, H., 2020. Amorphous catalysis: machine learning driven high-throughput screening of superior active site for hydrogen evolution reaction. **The Journal of Physical Chemistry C**, **124**: (19): 10483-10494.
79. Anand, R., Nissimagoudar, A. S., Umer, M., Ha, M., Zafari, M., Umer, S., Lee, G., Kim, K. S., 2021. Late transition metal doped MXenes showing superb bifunctional electrocatalytic activities for water splitting via distinctive mechanistic pathways. **Advanced Energy Materials**, **11**: (48): 2102388.
80. Kapse, S., Janwari, S., Waghmare, U. V., Thapa, R., 2021. Energy parameter and electronic descriptor for carbon based catalyst predicted using QM/ML. **Applied Catalysis B: Environmental**, **286**: 119866.
81. Niu, H., Wan, X., Wang, X., Shao, C., Robertson, J., Zhang, Z., Guo, Y., 2021. Single-atom rhodium on defective g-C₃N₄: a promising bifunctional oxygen electrocatalyst. **ACS Sustainable Chemistry & Engineering**, **9**: (9): 3590-3599.
82. Timmermann, J., Kraushofer, F., Resch, N., Li, P., Wang, Y., Mao, Z., Riva, M., Lee, Y., Staacke, C., Schmid, M., 2020. IrO₂ Surface Complexions Identified through Machine Learning and Surface Investigations. **Physical review letters**, **125**: (20): 206101.
83. Back, S., Tran, K., Ulissi, Z. W., 2019. Toward a design of active oxygen evolution catalysts: insights from automated density functional theory calculations and machine learning. **Acs Catalysis**, **9**: (9): 7651-7659.
84. Li, Z., Achenie, L. E., Xin, H., 2020. An adaptive machine learning strategy for accelerating discovery of perovskite electrocatalysts. **ACS Catalysis**, **10**: (7): 4377-4384.

85. Wang, Y., Wagner, N., Rondinelli, J. M., 2019. Symbolic regression in materials science. **MRS Communications**, **9**: (3): 793-805.
86. Tai, X. Y., Xing, L., Christie, S. D., Xuan, J., 2023. Deep learning design of functionally graded porous electrode of proton exchange membrane fuel cells. **Energy**, **283**: 128463.
87. Qiu, Y., Wu, P., Miao, T., Liang, J., Jiao, K., Li, T., Lin, J., Zhang, J., 2020. An intelligent approach for contact pressure optimization of PEM fuel cell gas diffusion layers. **applied sciences**, **10**: (12): 4194.
88. Lan, S., Lin, R., Lou, M., Lu, K., "Image Recognition of Gas Diffusion Layer Structural Features Based on Artificial Intelligence" *0148-7191* (SAE Technical Paper, 2022).
89. Pourrahmani, H., 2022. Water management of the proton exchange membrane fuel cells: Optimizing the effect of microstructural properties on the gas diffusion layer liquid removal. **Energy**, **256**: 124712.
90. Alqahtani, N., Alzubaidi, F., Armstrong, R. T., Swietojanski, P., Mostaghimi, P., 2020. Machine learning for predicting properties of porous media from 2d X-ray images. **Journal of Petroleum Science and Engineering**, **184**: 106514.
91. Graczyk, K. M., Matyka, M., 2020. Predicting porosity, permeability, and tortuosity of porous media from images by deep learning. **Scientific reports**, **10**: (1): 21488.
92. Wu, J., Yin, X., Xiao, H., 2018. Seeing permeability from images: fast prediction with convolutional neural networks. **Science bulletin**, **63**: (18): 1215-1222.
93. Pourrahmani, H., Van Herle, J., 2022. The impacts of the gas diffusion layer contact angle on the water management of the proton exchange membrane fuel cells: Three-dimensional simulation and optimization. **International Journal of Energy Research**, **46**: (11): 16027-16040.
94. Kaya, M. F., Demir, N., Rees, N. V., El-Kharouf, A., 2021. Magnetically modified electrocatalysts for oxygen evolution reaction in proton exchange membrane (PEM) water electrolyzers. **International journal of hydrogen energy**, **46**: (40): 20825-20834.
95. Hansen, M. K., Aili, D., Christensen, E., Pan, C., Eriksen, S., Jensen, J. O., Von Barner, J. H., Li, Q., Bjerrum, N. J., 2012. PEM steam electrolysis at 130 C

using a phosphoric acid doped short side chain PFSA membrane. **International journal of hydrogen energy**, **37**: (15): 10992-11000.

96. Chen, X., Rex, A., Woelke, J., Eckert, C., Bensmann, B., Hanke-Rauschenbach, R., Geyer, P., 2024. Machine learning in proton exchange membrane water electrolysis—A knowledge-integrated framework. **Applied Energy**, **371**: 123550.
97. Zhang, Y., Tan, A., Yuan, Z., Zhao, K., Shi, X., Liu, P., Liu, J., 2024. Data-driven optimization of high-dimensional variables in proton exchange membrane water electrolysis membrane electrode assembly assisted by machine learning. **Industrial Engineering Chemistry Research**, **63**: (3): 1409-1421.
98. Sun, Z., Wang, G., Li, P., Wang, H., Zhang, M., Liang, X., 2024. An improved random forest based on the classification accuracy and correlation MEG surement of decision trees. **Expert Systems with Applications**, **237**: 121549.
99. Salman, H. A., Kalakech, A., Steiti, A., 2024. Random forest algorithm overview. **Babylonian Journal of Machine Learning**, **2024**: 69-79.
100. Deng, Y., Lumley, T., 2024. Multiple imputation through xgboost. **Journal of Computational Graphical Statistics**, **33**: (2): 352-363.
101. Hakkal, S., Lahcen, A. A., 2024. XGBoost to enhance learner performance prediction. **Computers Education: Artificial Intelligence**, **7**: 100254.
102. Salari, A., Shakibi, H., Habibi, A., Hakkaki-Fard, A., 2023. Optimization of a solar-based PEM methanol/water electrolyzer using machine learning and animal-inspired algorithms. **Energy Conversion Management**, **283**: 116876.
103. Awad, M. M., Kotob, E., Taialla, O. A., Hussain, I., Ganiyu, S. A., Alhooshani, K., 2024. Recent developments and current trends on catalytic dry reforming of Methane: Hydrogen Production, thermodynamics analysis, techno feasibility, and machine learning. **Energy Conversion Management**, **304**: 118252.
104. El-Amarty, N., Marzouq, M., El Fadili, H., Bennani, S. D., Ruano, A., Rabehi, A., 2024. A new evolutionary forest model via incremental tree selection for short-term global solar irradiance forecasting under six various climatic zones. **Energy Conversion Management**, **310**: 118471.

105. Zhan, Y., Ren, X., Zhao, S., Guo, Z., 2025. Enhancing prediction of electron affinity and ionization energy in liquid organic electrolytes for lithium-ion batteries using machine learning. **Journal of Power Sources**, **629**: 235992.
106. Sahu, N., Azad, C., Kumar, U., 2024. Study and prediction of photocurrent density with external validation using machine learning models. **International Journal of Hydrogen Energy**, **92**: 1335-1355.
107. Makhsoos, A., Kandidayeni, M., Ziane, M. A., Boulon, L., Pollet, B. G., 2025. Model benchmarking for PEM Water Electrolyzer for energy management purposes. **Energy Conversion Management**, **323**: 119203.
108. Mohamadi-Baghmolaei, M., Zahedizadeh, P., Khajeh, M., Zendehboudi, S., Saady, N. M. C., 2024. Developing a hybridized thermodynamic and data-driven model for catalytic supercritical water gasification of biomass for hydrogen production. **Energy Conversion and Management**, **307**: 118302.
109. Galvão, S. L. J., Matos, J. C. O., Kitagawa, Y. K. L., Conterato, F. S., Moreira, D. M., Kumar, P., Nascimento, E. G. S. J. A., 2022. Particulate matter forecasting using different deep neural network topologies and wavelets for feature augmentation. **13**: (9): 1451.
110. Wu, J., Chen, X.-Y., Zhang, H., Xiong, L.-D., Lei, H., Deng, S.-H., 2019. Hyperparameter optimization for machine learning models based on Bayesian optimization. **Journal of Electronic Science Technology**, **17**: (1): 26-40.
111. Feurer, M., Hutter, F., 2019. Hyperparameter optimization. Springer International Publishing,

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı: Abdelmola OMER

Uyruğu: Sudan

Doğum Tarihi ve Yeri:

Medeni Durum:

e-mail:

EĞİTİM

Derece	Kurum	Mezuniyet Tarihi
Yüksek Lisans	Erciyes Üniversitesi, Enerji Sistemleri Mühendisliği, Kayseri	2025
Yüksek Lisans	Southwest Jiaotong Üniversitesi, Makine Mühendisliği, Çin	2023
Lisans	Omdurman İslamic Üniversitesi, Makine Mühendisliği, Hartum	2020
Lise	H.E. Bashir Lisesi, White Nile	2014

İŞ DENEYİMLERİ

Yıl	Kurum	Görev
2024-2025	Erciyes Üniversitesi H2FC Hidrojen Enerjisi Araştırma Grubu	FBA-2024-13646 kodlu GAP Projesi, Araştırmacı Bursiyer

YABANCI DİL

Türkçe, Arapça, İngilizce

YAYINLAR

1. **Albadwi, A.**, Selçuklu, S. B., & Kaya, M. F. (2024). Machine learning applications on proton exchange membrane water electrolyzers: A component-level overview. **International Journal of Hydrogen Energy**, 94, 806-828.
2. **Albadwi, A.**, Selçuklu, S., & Kaya, M. F. (2025, Mart 25). Experimental analysis of proton exchange membranes for water electrolyzers across a range of operating parameters. **9th International Hydrogen Technologies Congress (IHTEC-2025)**.
3. **Albadwi, A.**, Elzein, A., Bashir, A. A. A., Selçuklu, S. B., & Kaya, M. F. (2025). Multi-criteria decision-making in hydrogen production, storage, and transportation: An overview. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, 222, 115947.
4. Kıstı, M., Huner, B., **Albadwi, A.**, Ozdogan, E., Uzgoren, I. N., Uysal, S., ... & Kaya, M. F. (2025). Recent advances in polymer electrolyte membrane water electrolyzer stack development studies: a review. **ACS omega**, 10(10), 9824-9853.
5. **Albadwi, A.**, Selçuklu, S. B., & Kaya, M. F.. Performance prediction of proton exchange membrane water electrolyzers using explainable machine learning: Effects of varying anode and cathode catalyst loadings. **ACS Catalysis**. (under review)