

การจำลองเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน



นาย จูติกร วาสนาเพียรพงศ์

สถาบันวิทยบริการ

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชาเคมีเทคนิค ภาควิชาเคมีเทคนิค

คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ปีการศึกษา 2546

ISBN 974-17-3627-4

ลิขสิทธิ์ของจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

SIMULATION OF PROTON EXCHANGE MEMBRANE FUEL CELL

Mr.Thitikorn Wassanarpheernphong

สถาบันวิทยบริการ

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of Master of Science in Chemical Technology

Department of Chemical Technology

Faculty of Science

Chulalongkorn University

Academic Year 2003

ISBN 974-17-3627-4

หัวข้อวิทยานิพนธ์ การจำลองเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน
โดย นาย จิตติกร วาสนาเพียรพงศ์
สาขาวิชา เคมีเทคนิค
อาจารย์ที่ปรึกษา รองศาสตราจารย์ ดร. พรพจน์ เปี่ยมสมบุญ

คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย อนุมัติให้รับวิทยานิพนธ์ฉบับนี้เป็นส่วน
หนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรบัณฑิต

..... คณบดีคณะวิทยาศาสตร์
(ศาสตราจารย์ ดร.เปี่ยมศักดิ์ เมนะเศวต)

คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์

..... ประธานกรรมการ
(รองศาสตราจารย์ ดร.ธราพงษ์ วิทิตสานต์)

..... อาจารย์ที่ปรึกษา
(รองศาสตราจารย์ ดร.พรพจน์ เปี่ยมสมบุญ)

..... กรรมการ
(รองศาสตราจารย์ ดร.เลอสรวง เมฆสุต)

..... กรรมการ
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.เก็จวลี พฤษาทร)

ฐิติกร วาสนาเพียรพงศ์ : การจำลองเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน (SIMULATION OF PROTON EXCHANGE MEMBRANE FUEL CELL) อ. ที่ปรึกษา : รศ.ดร.พรพจน์ เปี่ยมสมบูรณ์ จำนวนหน้า 91 หน้า. ISBN 974-17-3627-4.

แบบจำลองทางคณิตศาสตร์เพื่อจำลองกระบวนการเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นโปรตอน พัฒนาขึ้น แบ่งออกเป็น 2 ส่วนคือ การพัฒนาแบบจำลองโดยใช้โปรแกรม Fluent 4.5 เพื่อให้ได้แบบจำลองที่สามารถจำลองภาวะเชิงพลวัตของของไหลภายในเซลล์เชื้อเพลิงได้ ทำให้ทราบถึงการเคลื่อนที่ของแก๊สและน้ำในวัฏภาคของเหลวจากการจำลอง และส่วนที่ 2 คือการนำผลจากแบบจำลองโดยใช้โปรแกรม Fluent 4.5 มาประยุกต์สำหรับสร้างแบบจำลองโดยใช้โปรแกรม Aspen Plus ซึ่งเป็นโปรแกรมจำลองกระบวนการทางอุตสาหกรรมเคมีทั่วไป ทำให้ได้แบบจำลองที่มีความสมบูรณ์ยิ่งขึ้น กล่าวคือแบบจำลองที่ได้สามารถจำลองกระบวนการได้เหมือนกับแบบจำลองโดยใช้โปรแกรม Fluent 4.5 แต่จะมีการคำนวณที่รวดเร็วกว่า และสามารถจำลองกระบวนการเซลล์เชื้อเพลิงร่วมกับหน่วยปฏิบัติการอื่นๆ ได้ เช่นหน่วยเพิ่มความชื้น หน่วยแปลงรูปเชื้อเพลิง



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ภาควิชาเคมีเทคนิค ลายมือชื่อนิสิต

สาขาวิชา.....เคมีเทคนิค ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา

ปีการศึกษา.....2546

4372355023 : MAJOR CHEMICAL TECHNOLOGY

KEY WORD : PEMFC / FUEL CELL / SIMULATION / FLUENT / ASPEN PLUS

THITIKORN WASSANARPHEERNPHONG : SIMULATION OF PROTON EXCHANGE MEMBRANE FUEL CELL. THESIS ADVISOR : ASSOC.PROF.PORNPOTE PIUMSOMBOON, 91 pp. ISBN 974-17-3627-4.

The mathematical model for simulating a proton exchange membrane fuel cell is divided to two sections. The first section was to develop mathematical model for flow behavior in fuel cell by using a computational fluid dynamics (CFD) technique in Fluent 4.5. The result in this section will predict gas and water distribution in the cell. The second section, the results from the first part were transformed to empirical models for using in Aspen Plus, the program for simulating general chemical processes.

The advantage of the fuel cell model in Aspen Plus compared with that in Fluent 4.5 is that the Aspen model can be computed much faster and it also can be used to simulate together with other units such as humidifier and reformer unit.



Department..... Chemical Technology ... Student's signature.....

Field of study ... Chemical Technology ... Advisor's signature.....

Academic year.....2003

กิตติกรรมประกาศ

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้จะไม่สำเร็จล่วงไปได้เลย หากขาดความช่วยเหลืออันดียิ่งของ ท่านรองศาสตราจารย์ ดร. พรพจน์ เปี่ยมสมบุญณ์ อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ ซึ่งท่านได้มอบคำแนะนำ ข้อคิดเห็นอันเป็นประโยชน์ และเป็นกำลังใจในการทำงานวิจัยนี้ด้วยดีตลอดมา ตลอดจนคณาจารย์ทุกท่านในภาควิชาเคมีเทคนิคที่ให้คำแนะนำอันเป็นประโยชน์ งานวิจัยสามารถสำเร็จล่วงมาถึงวันนี้

ขอขอบคุณโครงการพัฒนาบัณฑิตศึกษาและวิจัยด้านเชื้อเพลิง และศูนย์ปิโตรเลียมและเทคโนโลยีปิโตรเคมี ที่ให้การสนับสนุนในด้านทุนทรัพย์จนกระทั่งงานวิจัยสำเร็จล่วงไปได้ด้วยดี

ขอขอบคุณเพื่อนร่วมงานในห้องวิจัยคอมพิวเตอร์ 'ไซเบอร์เนติกส์' ที่คอยให้คำแนะนำ และคอยให้กำลังใจมาตั้งแต่เริ่มต้นงานวิจัย จนกระทั่งมีวันนี้ได้

สุดท้ายขอขอบคุณครอบครัวที่ให้การสนับสนุนและเป็นกำลังใจเสมอมาตั้งแต่เกิดจนถึงทุกวันนี้



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

สารบัญ

หน้า

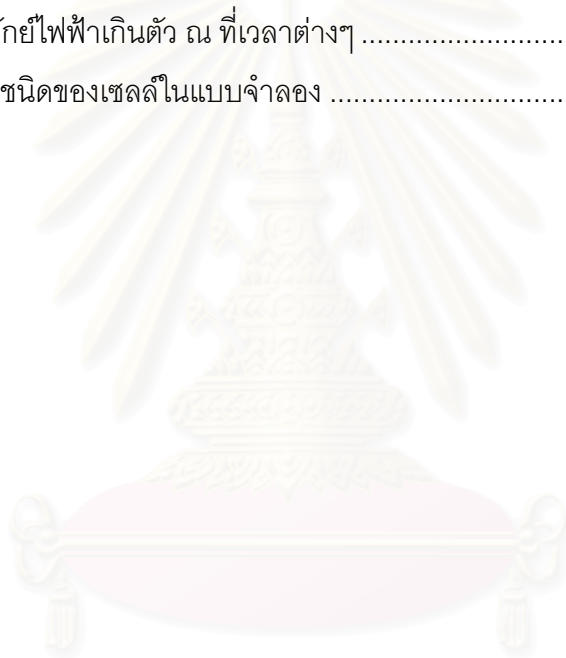
บทคัดย่อภาษาไทย	ง
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ.....	จ
กิตติกรรมประกาศ.....	ฉ
สารบัญ	ช
สารบัญตาราง.....	ฌ
สารบัญภาพ	ญ
บทที่	
1 บทนำ	1
1.1 ความสำคัญและที่มาของโครงการ.....	1
1.2 วัตถุประสงค์.....	2
1.3 ขอบเขตงานวิจัย	2
1.4 ขั้นตอนในการดำเนินงานวิจัย	2
1.5 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับจากงานวิจัย.....	2
2 เอกสารและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง	3
2.1 เซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน.....	3
2.2 การต่ออนุกรมของเซลล์เชื้อเพลิงโดยใช้แผ่น bipolar plate	7
2.3 การจัดการน้ำภายในระบบ	8
2.4 ลักษณะช่องทางไหลของแก๊ส.....	9
2.5 เซลล์เชื้อเพลิงชนิดอื่นๆ	11
2.6 การคำนวณเชิงพลวัตของของไหล	11
2.6.1 วิธีการผลต่างสี่บเนื่อง (finite difference method).....	13
2.6.2 วิธีการไฟไนต์เอลิเมนต์ (finite element method)	16
2.7 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง	19
3 วิธีการพัฒนาแบบจำลองกระบวนการเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน ...	21
3.1 แบบจำลองทางคณิตศาสตร์.....	21
3.1.1 สมมติฐานที่ใช้ในการพัฒนาแบบจำลอง.....	21
3.1.2 การคำนวณในชั้นอิเล็กโทรด.....	22
3.1.3 การคำนวณในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยา.....	25
3.1.4 การคำนวณในชั้นเยื่อแผ่น	26

สารบัญ (ต่อ)

บทที่	หน้า
3.1.5	สมการการเกิดปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมี28
3.1.5.1	อุณหภูมิศาสตร์.....28
3.1.5.2	ระบบผันกลับไม่ได้ของเซลล์เชื้อเพลิง.....30
3.2	ส่วนการจำลองโดยโปรแกรม Fluent 4.5.....33
3.3	ส่วนการจำลองโดยโปรแกรม Aspen Plus.....40
4	ผลงานวิจัยและการวิเคราะห์ผล47
4.1	การยืนยันความถูกต้องของแบบจำลองบนโปรแกรม Fluent 4.5.....47
4.2	ผลการจำลองกระบวนการจากกรณีศึกษาพื้นฐาน (base case)49
4.3	ผลของความดันแก๊สขาเข้าทางด้านซ้ายแคโทด.....56
4.4	ผลของความเข้มข้นของออกซิเจนขาเข้า.....56
4.5	พฤติกรรมของเซลล์เชื้อเพลิงเมื่อขึ้นกับเวลา57
4.6	การประยุกต์แบบจำลองบนโปรแกรม Aspen Plus62
5	สรุปผลงานวิจัยและข้อเสนอแนะ67
5.1	สรุปผลงานวิจัย67
5.1.1	ส่วนการจำลองโดยโปรแกรม Fluent 4.5.....67
5.1.2	ส่วนการจำลองโดยโปรแกรม Aspen Plus68
5.2	ข้อเสนอแนะ.....68
	รายการอ้างอิง.....69
	ภาคผนวก.....71
	ภาคผนวก ก.....72
	ภาคผนวก ข.....76
	ภาคผนวก ค.....80
	ประวัติผู้เขียนวิทยานิพนธ์91

สารบัญตาราง

ตาราง	หน้า
2.1 แสดงข้อมูลของเซลล์เชื้อเพลิงในชนิดต่างๆ	11
3.1 คงที่การคำนวณการถ่ายโอนมวลและค่าที่การคำนวณทางไฟฟ้าเคมี	37
3.2 ขนาดชั้นส่วนต่างๆ ของเซลล์เชื้อเพลิง	37
ก1 แสดงข้อมูลค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวต่างๆ ค่าความหนาแน่นกระแส และค่าศักย์ไฟฟ้าของเซลล์เชื้อเพลิงที่ภาวะการทำงานต่างๆ	72
ก2 แสดงข้อมูลค่าการนำไอออนของเยื่อแผ่น ความเข้มข้นของแก๊สออกซิเจน และสัดส่วนปริมาณน้ำในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาที่ภาวะการทำงานต่างๆ	74
ก3 ข้อมูลค่าความหนาแน่นกระแส ค่าศักย์ไฟฟ้า และค่าค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัว ณ ที่เวลาต่างๆ	75
ข1 การกำหนดชนิดของเซลล์ในแบบจำลอง	78



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

สารบัญภาพ

ภาพประกอบ	หน้า
2.1 รูปอธิบายหลักการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน.....	4
2.2 โครงสร้างของเอทีลินและเตตระฟลูออโรเอทีลิน	5
2.3 โครงสร้างของซัลโฟเนตฟลูออโรเอทีลิน.....	6
2.4 โครงสร้างของเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอนที่มีการดูดซึมน้ำเอาไว้.....	6
2.5 แผ่นสองขั้วสำหรับเซลล์เชื้อเพลิง.....	7
2.6 การไหลของน้ำในเซลล์เชื้อเพลิงเนื่องจากปัจจัยต่างๆ.....	8
2.7 ลักษณะช่องทางไหลแก๊สแบบธรรมดา.....	9
2.8 ลักษณะช่องทางไหลแบบ Interdigitated flow fields	10
2.9 แผ่นโลหะที่มีขอบโค้งลักษณะต่างๆ และการหาผลเฉลยด้วยวิธีการผลต่างสี่เหลี่ยม.....	12
2.10 การหาผลเฉลยบนแผ่นโลหะด้วยวิธีการไฟไนต์เอลิเมนต์.....	13
2.11 รูปร่างลักษณะทั่วไปของขอบเขตของปัญหา.....	14
2.12 การแบ่งรูปร่างลักษณะของปัญหาออกเป็นตารางสี่เหลี่ยม.....	14
2.13 การแบ่งรูปร่างลักษณะออกเป็นเอลิเมนต์แบบต่างๆ.....	16
2.14 เอลิเมนต์สามเหลี่ยมแบบอย่าง.....	17
3.1 โพลาริเซชันของเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน	32
3.2 ตำแหน่งขอบเขตแบบจำลองที่ศึกษา	34
3.3 ขอบเขตแบบจำลองของกรณีศึกษาพื้นฐาน	35
3.4 แผนผังการคำนวณของระบบเซลล์เชื้อเพลิงในโปรแกรม Fluent 4.5	39
3.5 หน้าต่าง Process Flowsheet แสดงการเชื่อมต่อระหว่างหน่วยปฏิบัติการ ในระบบเซลล์เชื้อเพลิง	41
3.6 หน้าต่างการกำหนดคำสั่งเพื่อกำหนดค่าความชื้นของแก๊สขาเข้า.....	42
3.7 หน้าต่างการกำหนดข้อมูลในหน่วยปฏิบัติการเซลล์เชื้อเพลิง.....	43
3.8 หน้าต่างการกำหนดคำสั่งเปลี่ยนค่าความหนาแน่นกระแสของเซลล์เชื้อเพลิง โดยอัตโนมัติ.....	44
3.9 แผนผังการคำนวณของระบบเซลล์เชื้อเพลิงในโปรแกรม Aspen Plus.....	45
3.10 แผนผังการคำนวณระหว่างโปรแกรม Fluent และโปรแกรม Aspen Plus.....	46
4.1 เปรียบเทียบผลการจำลองกับงานวิจัยของ He, W. และคณะ	48
4.2 ค่าสัดส่วนปริมาณน้ำภายในขอบเขตแบบจำลอง จากงานวิจัยของ He, W. และคณะ.....	48

ภาพประกอบ	หน้า
4.3 ค่าสัดส่วนปริมาณน้ำภายในขอบเขตแบบจำลอง จากงานวิจัยนี้.....	48
4.4 ลักษณะความดันที่ปรากฏ.....	50
4.5 ความเร็วแก๊สภายในเซลล์เชื้อเพลิง.....	50
4.6 สัดส่วนโดยโมลของน้ำในวัฏภาคแก๊สที่เวลา 30 วินาทีและค่า $\eta_{act_cath} = 0.5$ โวลต์....	51
4.7 โพลาริเซชันของกรณีศึกษาพื้นฐาน.....	52
4.8 ลักษณะสัดส่วนโดยโมลของแก๊สออกซิเจน ณ ค่า η_{act_cath} ต่างๆ.....	53
4.9 ลักษณะทิศทางการไหลของน้ำในชั้นเยื่อแผ่น ณ η_{act_cath} ต่างๆ.....	54
4.10 ช่วงศักย์ไฟฟ้าของเซลล์เชื้อเพลิง ค่าความหนาแน่นกระแส และกำลังไฟฟ้าที่เหมาะสมในกรณีศึกษาพื้นฐาน.....	55
4.11 โพลาริเซชันที่ภาวะการทำงานต่างๆ.....	56
4.12 ผลการเปลี่ยนแปลงตามเวลา ของค่าความหนาแน่นกระแส η_{ohm} และ E_{cell}	57
4.13 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าความหนาแน่นกระแสกับเวลา เมื่อเปลี่ยนค่าศักย์ไฟฟ้าคงที่.....	58
4.14 การกระจายตัวของน้ำในวัฏภาคของเหลวเปรียบเทียบกับเวลา.....	59
4.15 ก. แผนผังกระบวนการของเซลล์เชื้อเพลิงระหว่างตัวแปรค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัว เนื่องจากปฏิกิริยาเคมีทางด้านขั้วแคโทดและค่าความหนาแน่นกระแส.....	60
4.15 ข. แผนผังกระบวนการของเซลล์เชื้อเพลิงระหว่างตัวแปรค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัว เนื่องจากปฏิกิริยาเคมีทางด้านขั้วแคโทดและค่าศักย์ไฟฟ้าของเซลล์เชื้อเพลิง.....	60
4.16 แผนผังกระบวนการของเซลล์เชื้อเพลิงระหว่างตัวแปรค่าศักย์ไฟฟ้าของ เซลล์เชื้อเพลิงและค่าความหนาแน่นกระแส.....	61
4.17 ความสัมพันธ์ระหว่างสัดส่วนปริมาณน้ำในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยา (s) เทียบกับค่าความหนาแน่นกระแส (i) และค่าความดันทางด้านขั้วแคโทด (P_{cath}).....	63
4.18 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัมประสิทธิ์ในความสมการระหว่าง s และ i (B) เทียบกับค่าความดันด้านขั้วแคโทด (P_{cath}).....	63
4.19 ความสัมพันธ์ค่าความหนาแน่นกระแส (i) เทียบกับค่าความเข้มข้นของ แก๊สออกซิเจนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยา (x_{O_2}) และค่าความดันทางด้านขั้วแคโทด (P_{cath}).....	64
4.20 ความสัมพันธ์ระหว่างค่า i_j กับค่าความดันทางด้านขั้วแคโทด.....	65

ภาพประกอบ

หน้า

4.21 โพลาริเซชันที่ได้จากการจำลองในโปรแกรม Aspen Plus และ โปรแกรม Fluent 4.5.....	66
ข1 การกำหนดขอบเขตของแบบจำลองในโปรแกรม Fluent	76
ข2 การกำหนดช่วง ขนาด และจำนวนเซลล์ของแบบจำลอง	77
ข3 การกำหนดชนิดของเซลล์ในแบบจำลอง	78



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บทที่ 1

บทนำ

1.1 ความสำคัญและที่มาของโครงการ

ปัจจุบันเซลล์เชื้อเพลิงได้รับความสนใจและมีการพัฒนาเป็นอย่างมาก ด้วยเหตุผลที่เซลล์เชื้อเพลิงมีประสิทธิภาพการทำงานสูงกว่ากระบวนการอื่นๆ อีกทั้งยังแทบจะไม่ก่อให้เกิดมลภาวะต่อสิ่งแวดล้อม ด้วยเหตุนี้ นักวิทยาศาสตร์และวิศวกรจึงคาดหวังว่า เซลล์เชื้อเพลิงจะเป็นกระบวนการที่จะใช้เป็นแหล่งผลิตพลังงานสะอาดสำหรับอนาคต

งานวิจัยนี้ จะทำการจำลองกระบวนการเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน (Proton Exchange Membrane Fuel Cell, PEMFC) โดยใช้โปรแกรมในการจำลองกระบวนการ 2 โปรแกรมได้แก่ โปรแกรม Fluent รุ่น 4.5 สำหรับจำลองภาวะเชิงพลวัตของของไหลภายในเซลล์เชื้อเพลิง โดยใช้วิธีการพลวัตของไหลเชิงการคำนวณ (Computational Fluid Dynamics, CFD) ซึ่งข้อดีของโปรแกรมนี้อาจมีความสามารถในการคำนวณผลในเชิงโครงสร้างของเซลล์เชื้อเพลิงได้อย่างละเอียด แต่มีข้อเสียคือใช้เวลาในการจำลองกระบวนการค่อนข้างมากและไม่สามารถจำลองหน่วยปฏิบัติการเซลล์เชื้อเพลิงร่วมกับหน่วยปฏิบัติการอื่นๆ ได้เช่น หน่วยเพิ่มความชื้นให้กับแก๊สขาเข้า (Humidification) ส่วนอีกโปรแกรมคือ โปรแกรม Aspen Plus ซึ่งเป็นโปรแกรมจำลองกระบวนการทางอุตสาหกรรมเคมีทั่วไป (Process Simulator) โดยโปรแกรมนี้อาจมีข้อดีคือสามารถจำลองหน่วยปฏิบัติการหลายๆ หน่วยพร้อมกันได้ และใช้เวลาในการคำนวณน้อยกว่า เนื่องจากจำลองกระบวนการโดยพิจารณากระบวนการแต่ละกระบวนการเป็นแบบ Lumped แต่มีข้อเสียในจุดที่ไม่สามารถจำลองการคำนวณเชิงพลวัตของของไหลได้ นั่นคือ Aspen Plus จะพิจารณาองค์ประกอบภายในหน่วยปฏิบัติการเหมือนกันทั้งหมด (Homogeneous) ดังนั้นงานวิจัยนี้จึงเป็นการรวมเอาคุณสมบัติที่ดีและลดจุดอ่อนที่มีอยู่ในโปรแกรมทั้ง 2 เพื่อให้ได้ประโยชน์สูงสุดในการจำลองกระบวนการเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน

โปรแกรม Fluent จะจำลองการไหลภายในขั้วอิเล็กโทรดและชั้นเยื่อแผ่น ในภาวะอุณหภูมิคงที่ สำหรับระบบ 2 ภูมิภาค ได้แก่ภูมิภาคแก๊สและภูมิภาคของเหลว โดยทำการจำลองผลในลักษณะ 2 มิติ เพื่อจำลองค่ากระแสไฟฟ้า ศักย์ไฟฟ้าที่เซลล์เชื้อเพลิงผลิตได้ และการจัดการน้ำภายในเซลล์เชื้อเพลิง ส่วนโปรแกรม Aspen Plus จะเป็นการนำเอาผลการจำลองที่ได้จากโปรแกรม Fluent 4.5 มาสรุปรวมเป็นหน่วยปฏิบัติการง่ายๆ เพื่อให้มีความสะดวกในการนำเอาแบบจำลองของเซลล์เชื้อเพลิงไปใช้งานต่อไป การจำลองหน่วยปฏิบัติการเซลล์เชื้อเพลิงในโปรแกรม Aspen Plus จำเป็นต้องอาศัยข้อมูลที่สำคัญต่างๆ ที่ได้มาจากผลการจำลองการไหล

ในโปรแกรม Fluent อาทิเช่น ค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากการถ่ายโอนมวลสาร (Mass transfer Overpotential) ปริมาณน้ำภายในเซลล์เชื้อเพลิง เป็นต้น เนื่องจากค่าดังกล่าวเป็นค่าที่มีความสัมพันธ์โดยตรงกับลักษณะการไหลของสารภายในเซลล์เชื้อเพลิง

1.2 วัตถุประสงค์

เพื่อพัฒนาแบบจำลองคณิตศาสตร์สำหรับเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน และจำลองพฤติกรรมการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงโดยศึกษาพฤติกรรมการไหลและปริมาณพลังงานไฟฟ้าที่ผลิตได้

1.3 ขอบเขตงานวิจัย

1. ทำการจำลองกระบวนการเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน เพื่อศึกษาพฤติกรรมการไหลและปริมาณพลังงานไฟฟ้าที่ผลิตได้ ด้วยโปรแกรม Fluent 4.5 และโปรแกรม Aspen Plus
2. นำผลที่ได้มาวิเคราะห์ และสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์

1.4 ขั้นตอนในการดำเนินงานวิจัย

1. ค้นคว้าเอกสารและข้อมูลที่เกี่ยวข้อง
2. ศึกษาการใช้โปรแกรม Aspen Plus และ Fluent
3. เลือกหน่วยปฏิบัติการที่เหมาะสมและจำลองกระบวนการในโปรแกรม Aspen Plus
4. ออกแบบช่องทางเดินแก๊สที่ต้องการศึกษาและจำลองพลวัตของของไหลในโปรแกรม Fluent
5. พัฒนาแบบจำลอง โดยนำแบบจำลองจากทั้ง 2 โปรแกรมมาผนวกเข้าด้วยกัน
6. ศึกษาภาวะการทำงานที่เหมาะสม และทำการเปรียบเทียบข้อมูลกับงานวิจัยที่เกี่ยวข้องในอดีต
7. วิเคราะห์ข้อมูล สรุปผล และเขียนวิทยานิพนธ์

1.5 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับจากงานวิจัย

1. ได้แบบจำลองเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน เพื่อนำไปประยุกต์ใช้กับกระบวนการจริง
2. เป็นแนวทางในการพัฒนาเซลล์เชื้อเพลิงให้มีประสิทธิภาพต่อไปในอนาคต

บทที่ 2

เอกสารและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

เซลล์เชื้อเพลิง เป็นกระบวนการผลิตพลังงานไฟฟ้าด้วยวิธีทางไฟฟ้าเคมีชนิดหนึ่ง ซึ่งได้รับความนิยม และถูกพัฒนาอย่างต่อเนื่องในระยะเวลาที่ผ่านมามากกว่าสองศตวรรษที่ผ่านมา เพื่อนำไปใช้เป็นแหล่งผลิตพลังงานไฟฟ้าอีกทางเลือกหนึ่ง เพราะเป็นกระบวนการที่ให้ประสิทธิภาพสูง ไม่ก่อเกิดมลภาวะ (zero emission) อีกทั้งยังออกแบบและควบคุมได้ง่าย แต่อย่างไรก็ตามเนื่องจากต้นทุนการผลิตที่ยังสูงอยู่มาก จึงจำเป็นต้องมีการพัฒนาต่อไปหากจะนำมาทดแทนกระบวนการการเผาไหม้ที่ยังคงใช้กันอยู่ในปัจจุบัน

2.1 เซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน

เซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน มีการทำงานคล้ายกับแบตเตอรี่ทั่วไป คือเป็นอุปกรณ์ผลิตกระแสไฟฟ้าชนิดหนึ่ง แต่ต่างกันตรงที่เซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอนนั้น จะให้กระแสไฟฟ้าอย่างต่อเนื่องโดยไม่จำเป็นต้องอัดกระแสไฟฟ้าใหม่ การป้อนเชื้อเพลิงอย่างต่อเนื่อง อาทิเช่น แก๊สไฮโดรเจน (H_2) และออกซิเจน (O_2) ส่วนผลิตภัณฑ์ที่ได้จะมีเพียง พลังงานไฟฟ้า น้ำ และความร้อนจากการเกิดปฏิกิริยาเท่านั้น

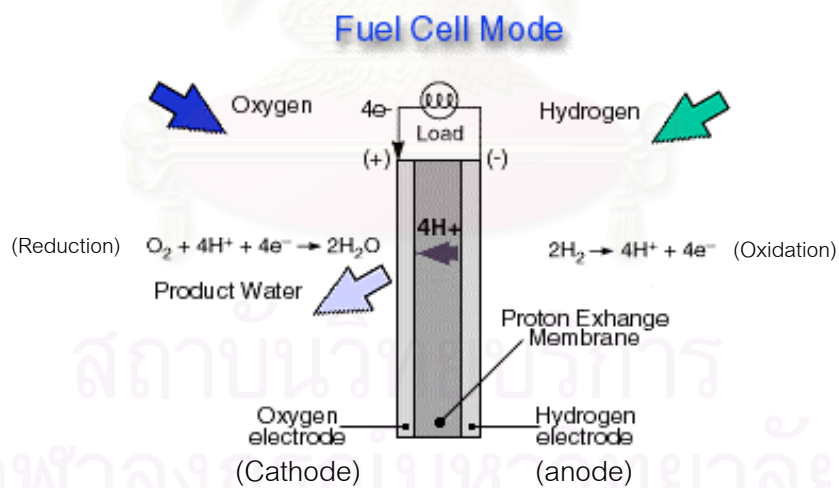
ภาวะการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอนนั้น จะอยู่ในช่วงอุณหภูมิที่ต่ำ กล่าวคือระหว่าง 60-100 องศาเซลเซียส ทำให้มีความเป็นไปได้ในการนำไปใช้เป็นแหล่งพลังงานให้กับอุปกรณ์ไฟฟ้าแบบพกพา เพื่อทดแทนการใช้แบตเตอรี่หรือถ่านไฟฉาย เพราะแบตเตอรี่ที่หมดพลังงานแล้วนั้น จัดเป็นขยะมีพิษที่ยากต่อการจัดเก็บและทำลาย หรือการจะนำกลับมาใช้ใหม่ก็ยังคงเป็นไปได้ยาก ทำให้แหล่งผลิตพลังงานสะอาดอย่างเซลล์เชื้อเพลิงเป็นทางเลือกที่กำลังเป็นที่ได้รับความนิยม

เซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน ประกอบด้วยชิ้นส่วนหลักๆ 3 ส่วน คือ

- 1) ช่องทางไหลของแก๊ส เป็นตัวกำหนดทิศทางการไหลของสารป้อนเข้าที่จะเข้าทำปฏิกิริยาภายในเซลล์เชื้อเพลิง
- 2) ขั้วไฟฟ้าหรือขั้วอิเล็กโทรด (electrode) แบ่งออกเป็น 2 ขั้วด้วยกันคือ ขั้วแอโนด (anode) และขั้วแคโทด (cathode) ที่ซึ่งปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมีเกิดขึ้น
- 3) เยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน (proton exchange membrane) ทำหน้าที่เป็นสารอิเล็กโทรไลต์ ซึ่งโปรตอนจะเคลื่อนที่ผ่าน

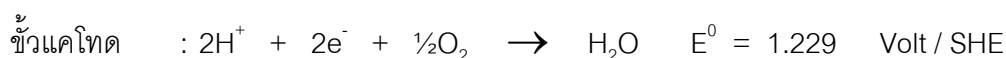
ภายในเซลล์เชื้อเพลิงจะมีการใส่ชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยา (catalyst layer) เพื่อเพิ่มอัตราการเกิดปฏิกิริยา โดยทั่วไปมักใช้สารแพลทินัม (platinum) เป็นตัวเร่งปฏิกิริยา ซึ่งชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยานี้จะอยู่ระหว่างชั้นของขั้วอิเล็กโทรดและชั้นของเยื่อแผ่น ขั้วอิเล็กโทรดจะผลิตจากแกรไฟต์ (graphite) ที่เป็นวัสดุนำไฟฟ้าได้ดี และมีลักษณะเป็นรูพรุน (porous media) เพื่อให้แก๊สไหลผ่านได้ ส่วนเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอนจะเป็นสารจำพวก perfluorosulphonic acid polytetrafluoroethylene copolymer ที่มีชื่อทางการค้าคือ “Nafion” มีลักษณะเป็นเยื่อแผ่นพอลิเมอร์บางๆ คุณสมบัติของเยื่อแผ่นทำหน้าที่เหมือนเป็นสารอิเล็กโทรไลต์ (polymer electrolyte membrane) โดยจะอนุญาตให้โปรตอน (H^+) และน้ำซึมผ่านได้เท่านั้น

หลักการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอนคือ แก๊สไฮโดรเจนที่ถูกป้อนเข้าทางด้านขั้วแอโนด จะเกิดปฏิกิริยาออกซิเดชัน (oxidation) โดยอาศัยตัวเร่งปฏิกิริยาได้เป็นอิเล็กตรอนและโปรตอน อิเล็กตรอนที่ได้จะวิ่งมาตามตัวนำไฟฟ้า (โดยทั่วไปคือสายไฟ) ผ่านเครื่องใช้ไฟฟ้า หรือเครื่องวัดกระแสไฟฟ้า (load) เพื่อมายังขั้วแคโทด ทำให้เกิดกระแสไฟฟ้าขึ้น ในขณะที่เดียวกัน โปรตอนก็จะแพร่ผ่านเยื่อแผ่นมายังขั้วแคโทดโดยที่ทางขั้วนี้จะมีการป้อนแก๊สออกซิเจนเข้ามา เกิดปฏิกิริยารีดักชัน (reduction) โดยอาศัยตัวเร่งปฏิกิริยา ระหว่างโปรตอนกับออกซิเจนและอิเล็กตรอนที่บริเวณขั้วแคโทด ทำให้ได้ผลิตภัณฑ์คือ น้ำ ดังแสดงในรูปที่ 2.1



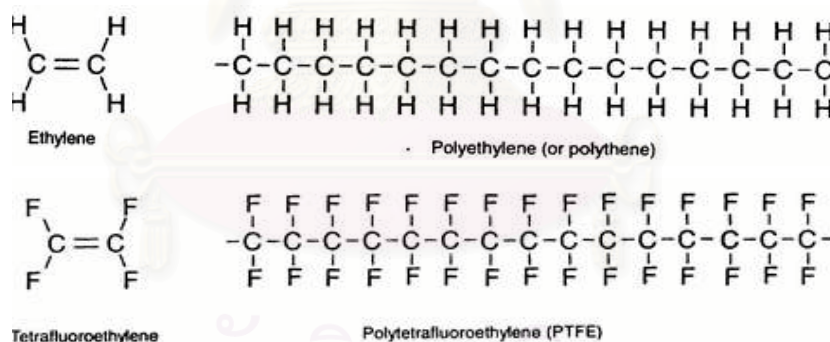
รูปที่ 2.1 รูปอธิบายหลักการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน ⁽¹⁾

ปฏิกิริยาเคมีที่เกิดขึ้นบนขั้วไฟฟ้าคือ



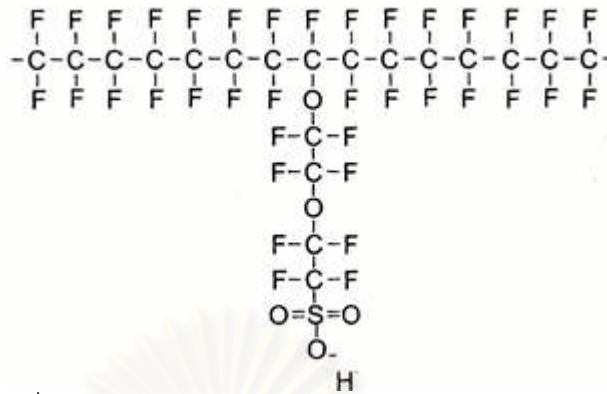
โดยเซลล์เชื้อเพลิง 1 เซลล์ จะให้ศักย์ไฟฟ้าตามทฤษฎี (E^0) = 1.229 โวลต์ ที่ภาวะมาตรฐาน (1 บรรยากาศ, 25 องศาเซลเซียส)

การเตรียมพอลิเมอร์เพื่อใช้สำหรับผลิตเยื่อแผ่นนั้น ทำได้โดยการให้อะตอมของฟลูออรีน เข้าแทนที่ตำแหน่งอะตอมของไฮโดรเจนบนโมเลกุลของสารเอทิลีน กระบวนการนี้เรียกว่า กระบวนการเปอร์ฟลูออรีเนชัน (perfluorination) โครงสร้างโมเลกุลที่ได้จะเรียกว่า เตตระฟลูออโรเอทิลีน (tetrafluoroethylene) เมื่อนำเอาโมเลกุลของสารเตตระฟลูออโรเอทิลีนมาเรียงต่อกันจะได้สายโซ่พอลิเมอร์ที่เรียกว่า พอลิเตตระฟลูออโรเอทิลีน (polytetrafluoroethylene) หรือ PTFE ดังแสดงในรูปที่ 2.2 ความแข็งแรงของพันธะระหว่างฟลูออรีนกับคาร์บอนทำให้พอลิเมอร์มีความทนทานสูง



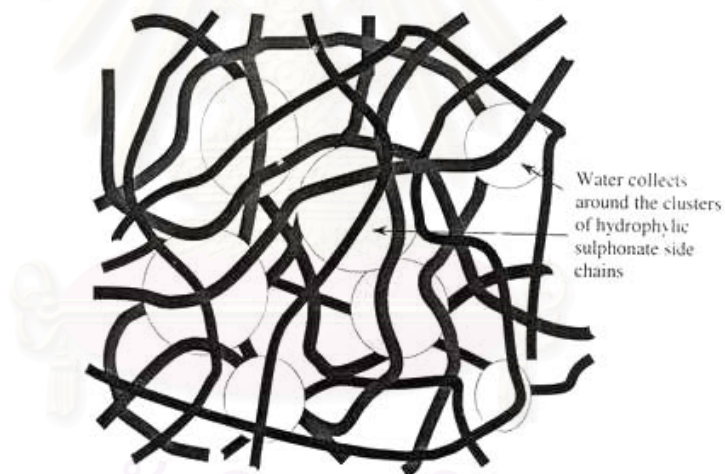
รูปที่ 2.2 โครงสร้างของเอทิลีนและเตตระฟลูออโรเอทิลีน⁽²⁾

นอกจากนี้การเตรียมเยื่อแผ่นจะทำโดยการเติมส่วนของซัลโฟเนต (sulfonate, SO₃⁻) ที่ ได้มาจากกรดซัลโฟนิก (sulfonic acid) ดังแสดงในรูปที่ 2.3 กระบวนการนี้เป็นกระบวนการทางเคมีที่ใช้กันอย่างแพร่หลาย ตัวอย่างเช่น ในกระบวนการผลิตผงซักฟอก หรือสารฟอกย้อมต่างๆ โมเลกุลของกรดซัลโฟนิกจะไปสร้างพันธะกับส่วนปลายของสายโซ่พอลิเมอร์กลายเป็นหมู่ซัลโฟเนต ทำให้ส่วนปลายของโมเลกุลพอลิเมอร์มีคุณสมบัติเป็นส่วนของที่ชอบน้ำ (hydrophilic) พอลิเมอร์ที่ได้จึงมีความสามารถในการดูดซึมโมเลกุลน้ำเอาไว้ได้



รูปที่ 2.3 โครงสร้างของซัลโฟเนตฟลูออโรเอทีลิน⁽²⁾

ในส่วนที่ชอบน้ำ (hydrophilic regions) จะทำหน้าที่ในการดูดซึมน้ำไว้ในอิเล็กทรอนิกส์ โดยส่วนนี้จะมีแรงพันธะในการยึดกันระหว่างหมู่ซัลโฟเนต (SO_3^-) กับโปรตอน (H^+) อ่อนลง ทำให้โปรตอนสามารถเคลื่อนที่ไปมาภายในเยื่อแผ่นได้นั่นเอง



รูปที่ 2.4 โครงสร้างของเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอนที่มีการดูดซึมน้ำเอาไว้⁽²⁾

เยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอนที่ทำหน้าที่เป็นอิเล็กทรอนิกส์จะต้องมีสมบัติดังต่อไปนี้⁽³⁾

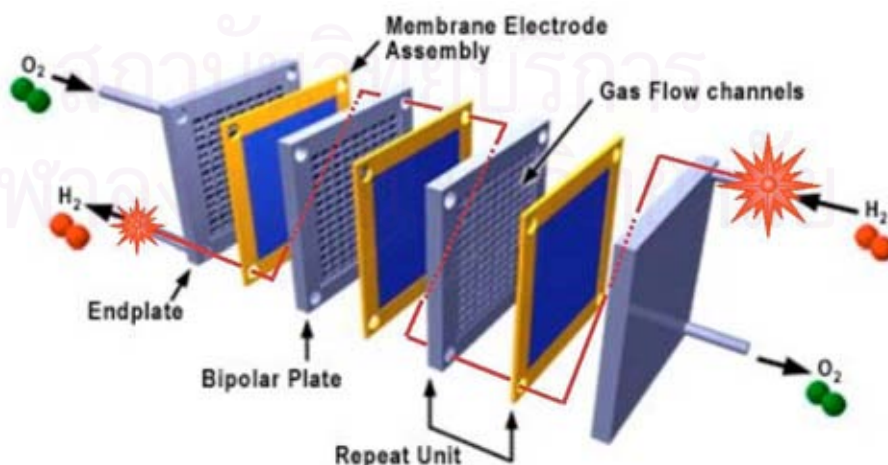
- 1) มีค่าการนำไอออนสูงแต่มีค่าการนำอิเล็กตรอนต่ำ
- 2) มีค่าการแพร่ของแก๊สต่ำ
- 3) มีขนาดที่แน่นอน (ไม่มีการบวม)
- 4) มีค่าความแข็งแรงเชิงกลสูง
- 5) มีค่าการแพร่ของน้ำต่ำ

- 6) มีค่าความต้านทานต่อการสูญเสียน้ำหรือมีความต้านทานต่อการเกิดดีไฮเดรชัน (dehydration)
- 7) มีความต้านทานต่อการเกิดออกซิเดชัน รีดักชัน และไฮโดรไลซิส (hydrolysis)
- 8) มีค่าการถ่ายเทแคทไอออน (cation) สูง
- 9) พื้นผิวของเยื่อแผ่นต้องสามารถเชื่อมตัวเร่งปฏิกิริยาให้เกาะบนพื้นผิวได้ดี มีความเป็นเนื้อเดียวกัน (homogeneity)

โดยปกติในการจัดทำเซลล์เชื้อเพลิง หรือเซลล์เชื้อเพลิงที่ขายกันอยู่ทั่วไป มักจะทำการรวมชั้นของอิเล็กโทรดและชั้นของเยื่อแผ่นให้เป็นชั้นเดียวเพื่อสะดวกในการถอดประกอบตัวเซลล์เชื้อ โดยจะเรียกชั้นส่วนประกอบเสร็จของชั้นอิเล็กโทรดและเยื่อแผ่นว่า membrane electrode assembly, MEA

2.2 การต่ออนุกรมของเซลล์เชื้อเพลิงโดยใช้แผ่น bipolar plate

จากที่ได้อธิบายมาแล้วในข้างต้นคือ เซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน 1 เซลล์ ให้ศักย์ไฟฟ้าตามทฤษฎี 1.229 โวลต์ แต่ในการทำงานจริงจะให้ศักย์ไฟฟ้าได้เพียงประมาณ 0.6 – 0.7 โวลต์ เท่านั้น เนื่องจากภาวะผันกลับไม่ได้ของระบบ ดังนั้นเพื่อให้ได้กำลังไฟฟ้าตามต้องการจึงจำเป็นต้องนำเซลล์เชื้อเพลิงหลายๆ เซลล์ มาต่ออนุกรมเข้าด้วยกัน เรียกว่า ห่อเซลล์เชื้อเพลิง (fuel cell stack) เพื่อเพิ่มศักย์ไฟฟ้าของระบบให้สูงเพียงพอกับการนำไปใช้งาน การต่อเซลล์เชื้อเพลิงแต่ละเซลล์เข้าด้วยกัน จะใช้แผ่นวัสดุที่นำไฟฟ้าได้ดีที่ทำหน้าที่เป็นทั้งขั้วแคโทดและขั้วแอโนด พร้อมกับมีการออกแบบช่องทางไหลของแก๊สเพื่อช่วยกระจายแก๊สให้สัมผัสกับขั้วอิเล็กโทรดได้อย่างทั่วถึง วัสดุชั้นนี้เรียกว่า แผ่นสองขั้ว (bipolar plate) ดังแสดงในรูปที่ 2.5

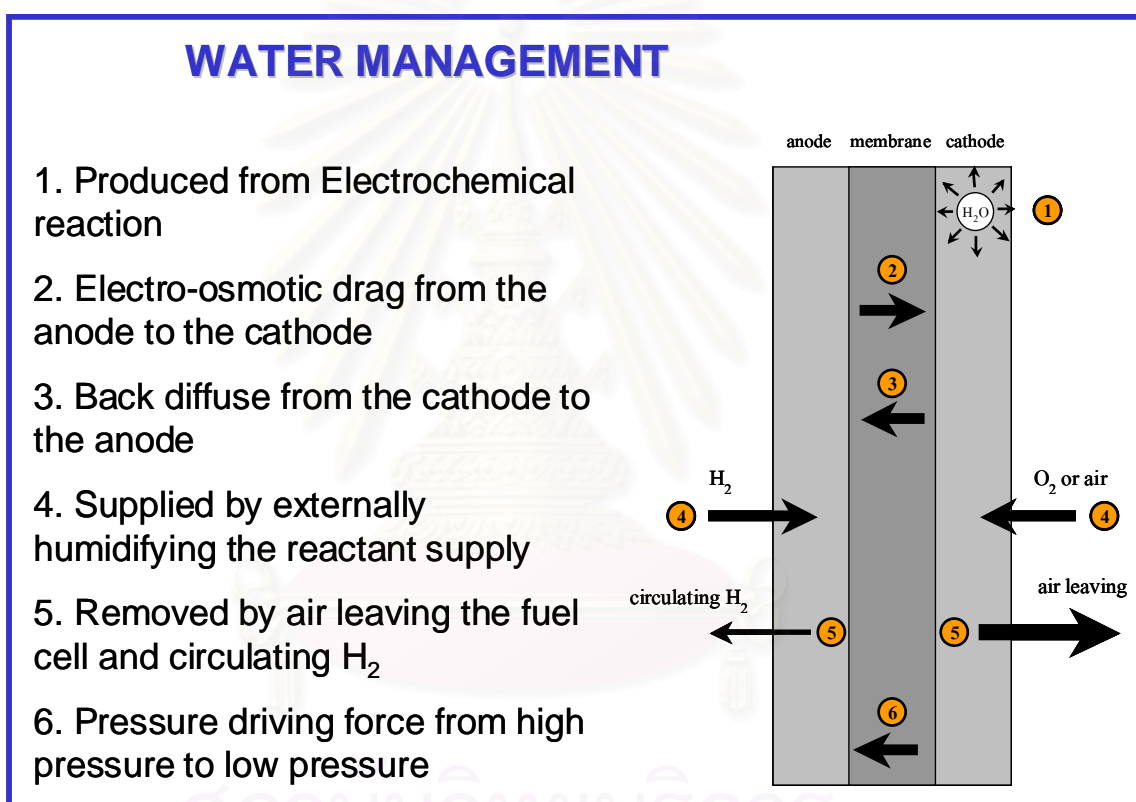


รูปที่ 2.5 แผ่นสองขั้วสำหรับเซลล์เชื้อเพลิง⁽⁴⁾

2.3 การจัดการน้ำภายในระบบ

น้ำในระบบเซลล์เชื้อเพลิง ถือเป็นตัวแปรสำคัญอย่างยิ่งที่ต้องนำมาพิจารณา เพราะถ้าหากในระบบมีปริมาณน้ำมากเกินไป ก็จะทำให้เกิดน้ำส่วนเกินเหลืออยู่ในระบบในรูปของของเหลว ซึ่งจะเข้าไปขัดขวางการเข้าทำปฏิกิริยาของแก๊ส หรือเกิดการท่วม (flooding) ขึ้น ส่งผลให้สมรรถนะของเซลล์เชื้อเพลิงลดลง แต่ในทางตรงกันข้าม ถ้าหากในระบบมีปริมาณน้ำน้อยเกินไป ก็จะทำให้เยื่อแผ่นแห้งได้ ค่าการนำไอออนของเยื่อแผ่นลดลง ก็ส่งผลให้สมรรถนะของเซลล์เชื้อเพลิงลดลงอีกเช่นกัน

เราสามารถจำแนกลักษณะของน้ำที่เกิดและเข้า – ออกระบบได้ 6 ส่วนดังรูปที่ 2.6



รูปที่ 2.6 การไหลของน้ำในเซลล์เชื้อเพลิงเนื่องจากปัจจัยต่างๆ

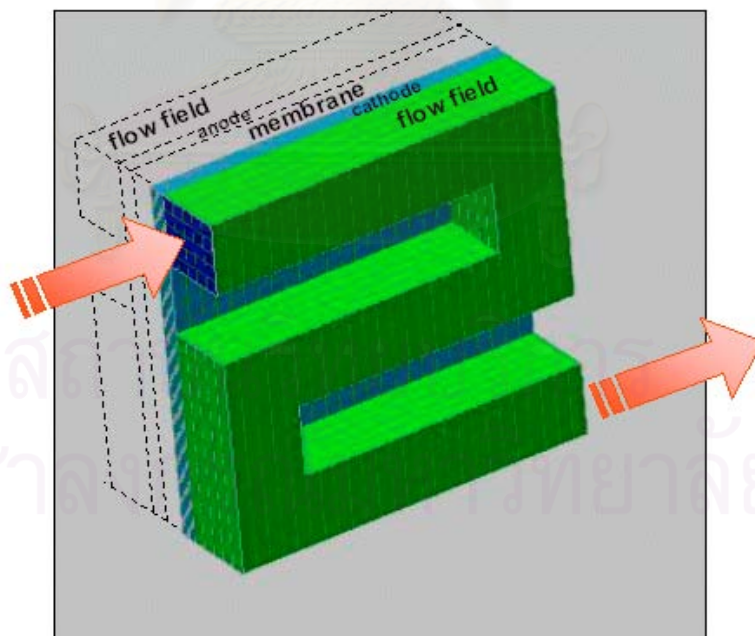
1. น้ำที่เกิดจากปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมีที่ขั้วแคโทด
2. น้ำที่ถูกพาจากขั้วแอโนดไปยังขั้วแคโทด โดยการไหลของโปรตอนในชั้นของเยื่อแผ่น เรียกปรากฏการณ์นี้ว่า Electro – osmotic drag
3. ถ้าน้ำที่ขั้วแคโทดมีปริมาณสูง ก็จะทำให้เกิดการแพร่ย้อนกลับ (back diffuse) ไปยังขั้วแอโนดได้เช่นกัน
4. น้ำบางส่วนอาจถูกนำเข้ามาในระบบโดยกระบวนการทำให้ชื้น (Humidification) ของสารตั้งต้นที่ป้อนเข้ามาทำปฏิกิริยา

5. น้ำส่วนเกินภายในระบบ จะถูกกำจัดออกจากระบบด้วยการระเหยของน้ำไปกับสารผลิตภัณฑ์ หรือไปกับสารตั้งต้นที่เหลือจากปฏิกิริยา
6. การไหลของน้ำเนื่องจากผลของความแตกต่างระหว่างความดันทางด้านขั้วแอโนดและแคโทด

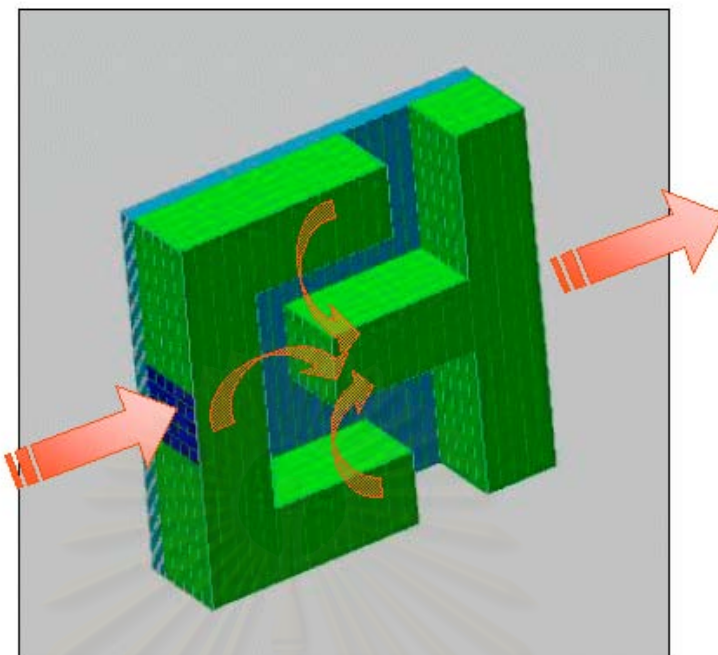
2.4 ลักษณะช่องทางไหลของแก๊ส

จากการศึกษาพฤติกรรมการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอนพบว่าปัจจัยที่สำคัญที่สุดในการควบคุมสมรรถนะของเซลล์เชื้อเพลิง คือการควบคุมการเกิดปฏิกิริยาที่ขั้วแคโทด ซึ่งเป็นปฏิกิริยารีดักชันของแก๊สออกซิเจนที่เกิดขึ้นได้ช้า และยังขึ้นกับอัตราการเข้าทำปฏิกิริยาของแก๊สออกซิเจนที่ขั้วแคโทดที่อาจลดลงเนื่องมาจากปัญหาการท่วมของน้ำทางขั้วแคโทด เพราะปริมาณน้ำในรูปของเหลวที่เกิดจากปฏิกิริยาเป็นตัวบดบังชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยา ทำให้สมรรถนะที่ได้ลดต่ำลงเป็นอย่างมาก

จากผลงานวิจัยของ Nguyen, T. V. ⁽⁵⁾ ได้ทำการออกแบบช่องการไหลในลักษณะ Interdigitated flow fields เพื่อแก้ปัญหการท่วมภายในขั้วแคโทด โดยทำการทดลองเปรียบเทียบระหว่าง เซลล์เชื้อเพลิงที่ใช้ช่องการไหลแก๊สแบบธรรมดา (รูปที่ 2.7) และในแบบ Interdigitated flow fields (รูปที่ 2.8)



รูปที่ 2.7 ลักษณะช่องการไหลแก๊สแบบธรรมดา



รูปที่ 2.8 ลักษณะช่องการไหลแบบ Interdigitated flow fields

พบว่าในการไหลในช่องแบบ Interdigitated flow fields ให้สมรรถนะการทำงานที่สูงกว่าอย่างเห็นได้ชัด กล่าวคือที่ศักย์ไฟฟ้าเดียวกัน ช่องการไหลแบบ Interdigitated flow fields จะให้ค่าความหนาแน่นกระแสสูงกว่าช่องการไหลแบบธรรมดาอย่างมาก ซึ่งสามารถอธิบายได้คือ ช่องการไหลแบบ Interdigitated flow fields จะมีฉากกั้นบังคับให้แก๊สไหลผ่านรูพรุนในชั้นแคโทด ทำให้เพิ่มการถ่ายเทมวลสารของแก๊สที่จะเข้าทำปฏิกิริยากับผิวหน้าชั้นตัวเร่งปฏิกิริยา (catalyst layer) มากขึ้น โดยเปลี่ยนจากกลไกการแพร่ (diffusion mechanism) เป็นกลไกการพา (convection mechanism) และที่สำคัญคือ เกิดแรงเฉือน (shear force) ระหว่างภูมิภาคแก๊ส และภูมิภาคของเหลว จากการไหลผ่านของแก๊สทำให้ช่วยกำจัดน้ำในสถานะของเหลวส่วนใหญ่ที่สะสมและขัดขวางการไหลภายในรูพรุนของชั้นแคโทด หรือช่วยแก้ปัญหาการท่วมให้ลดลง

ดังนั้นงานวิจัยนี้จึงเน้นไปที่การจำลองเซลล์เชื้อเพลิงที่ออกแบบช่องการไหลแบบ Interdigitated flow fields เป็นหลัก

2.5 เซลล์เชื้อเพลิงชนิดอื่น ๆ

นอกจากเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอนแล้ว ยังมีเซลล์เชื้อเพลิงชนิดอื่น ๆ อีกหลายชนิด โดยทั่วไปลักษณะการทำงานจะคล้ายคลึงกัน จะแตกต่างกันที่ชนิดของเชื้อเพลิง สารออกซิไดซ์ที่ใช้ ช่วงอุณหภูมิในการดำเนินงาน และชนิดของไอออนที่เคลื่อนที่ (mobile ion) เพื่อการนำไปใช้งานในลักษณะที่แตกต่างกันออกไป ซึ่งในขณะนี้เท่าที่มีการนำไปใช้งานจริงที่อยู่ด้วยกัน 5 ชนิด โดยแบ่งตามชนิดของสาร electrolyte ที่ใช้ ดังแสดงในตารางที่ 2.1

ตารางที่ 2.1 แสดงข้อมูลของเซลล์เชื้อเพลิงในชนิดต่างๆ⁽²⁾

Fuel Cell Type	Mobile Ion	Operating Temp.	Applications and notes
Alkaline - AFC	OH ⁻	50 - 200 C	Used in space vehicles, e.g. Apollo Shuttle.
Proton exchange membrane - PEM	H ⁺	50 - 100 C	Especially suitable for vehicles and mobile applications, but also for lower power CHP* systems
Phosphoric acid PAFC	H ⁺	~ 220 C	Large numbers of 200 kW CHP* systems in use.
Molten carbonate MCFC	CO ₃ ²⁻	~ 650 C	Suitable for medium to large scale CHP* systems, up to MV capacity
Solid oxide SOFC	O ²⁻	500 - 1000 C	Suitable for all sizes of CHP* systems, 2 kW to multi MW.

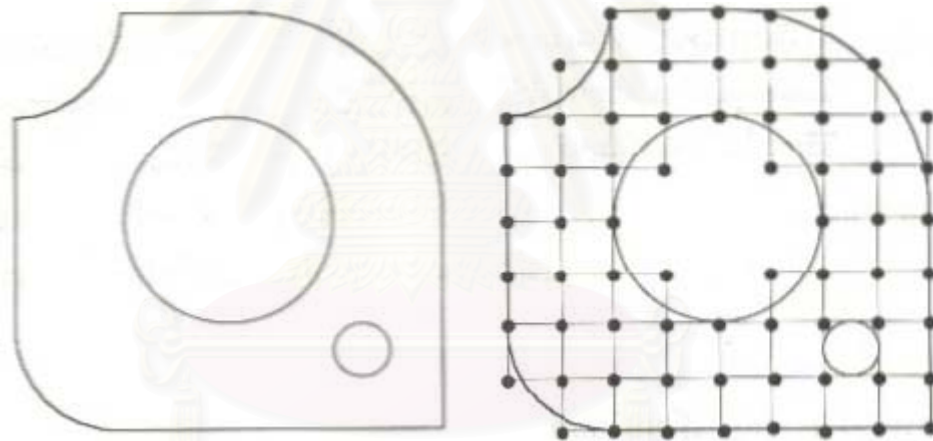
CHP* = Combined heat and power

2.6 การคำนวณเชิงพลวัตของของไหล

การคำนวณเชิงพลวัตของของไหลจะเริ่มต้นจากการกำหนดสมการเชิงอนุพันธ์ (differential equation) ที่อธิบายสถานะของความสมดุลของการไหล สำหรับสมการเชิงอนุพันธ์ที่สอดคล้องกับปัญหาต่างๆ นั้น ปกติจะประดิษฐ์ขึ้นมาได้โดยไม่ยากนัก หากแต่ว่าในบางกรณีที่สมการเชิงอนุพันธ์มีความสลับซับซ้อน ทำให้การหาผลเฉลยแม่นยำตรง (exact solution) ที่ต้องการนั้นทำได้ยากลำบากมากหรืออาจจะหาไม่ได้เลยก็ได้ เหตุผลดังกล่าวก่อให้เกิดวิธีการหาผลเฉลยโดยประมาณ (approximate solution) ขึ้น วิธีการหาผลเฉลยโดยประมาณนั้นมีหลายๆ วิธีการ วิธีการที่ได้รับความนิยมกันอย่างกว้างขวางในอดีตที่ผ่านมา คือ วิธีการผลต่างสืบเนื่อง (finite difference method)

หลักการที่สำคัญของวิธีการผลต่างสี่เหลี่ยมก็คือการหาค่าผลเฉลยโดยประมาณโดยเริ่มจากการเขียนสมการเชิงอนุพันธ์ให้อยู่ในรูปแบบของระบบสมการผลต่างสี่เหลี่ยม ข้อดีของวิธีการผลต่างสี่เหลี่ยมนี้ก็คือ วิธีการดังกล่าวเป็นวิธีการที่ง่ายแก่การศึกษาและการทำความเข้าใจ รวมไปถึงความสะดวกในการเขียนโปรแกรมคอมพิวเตอร์เพื่อใช้ในการคำนวณหาผลเฉลยของปัญหานั้นๆ แต่ข้อเสียที่สำคัญที่สุดของการใช้วิธีการผลต่างสี่เหลี่ยมก็คือความยากลำบากในการประยุกต์วิธีการนี้เพื่อใช้กับปัญหาที่มีรูปร่างลักษณะซับซ้อน ซึ่งการออกแบบสิ่งที่มีรูปร่างลักษณะซับซ้อนในปัจจุบันนี้ ได้กลายเป็นสิ่งที่จำเป็นเพื่อการพัฒนาปรับปรุงคุณภาพสิ่งของนั้นๆ ให้ดีขึ้น

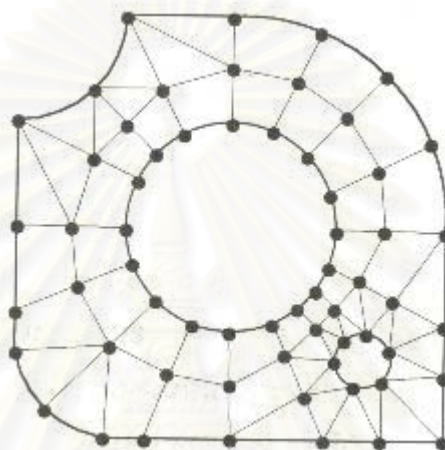
รูปที่ 2.9 แสดงลักษณะของแผ่นโลหะลักษณะหนึ่ง การวิเคราะห์หาการกระจายของความเค้น (stress distribution) โดยการใช้วิธีการผลต่างสี่เหลี่ยมจะเริ่มจากการแบ่งแผ่นโลหะนี้ออกเป็นช่องตารางสี่เหลี่ยม ตารางสี่เหลี่ยมเหล่านี้ต่อกันที่จุดต่อ (grid points) ตามหัวมุมของสี่เหลี่ยมต่างๆ ซึ่งจำนวนของตัวแปรไม่ทราบค่าจะขึ้นอยู่กับจำนวนของจุดต่อนี้เอง



รูปที่ 2.9 แผ่นโลหะที่มีขอบโค้งลักษณะต่างๆ และการหาผลเฉลยด้วยวิธีการผลต่างสี่เหลี่ยม⁽⁶⁾

เห็นได้ว่าตารางสี่เหลี่ยมที่ใช้ในวิธีการผลต่างสี่เหลี่ยมไม่สามารถจำลองรูปร่างลักษณะดั้งเดิมที่แท้จริงของแผ่นโลหะได้เที่ยงตรง หากใช้ขนาดตารางสี่เหลี่ยมให้มีขนาดเล็กลงซึ่งหมายถึงต้องเพิ่มจำนวนตารางสี่เหลี่ยมให้มากขึ้นก็จะสามารถจำลองรูปร่างลักษณะดั้งเดิมที่แท้จริงได้ใกล้เคียงมากยิ่งขึ้น แต่ในขณะเดียวกัน จำนวนจุดต่อที่เพิ่มมากขึ้นจะทำให้จำนวนสมการผลต่างสี่เหลี่ยมมากขึ้นด้วย และกระบวนการในการแก้ปัญหาจำเป็นต้องการหน่วยความจำบนเครื่องคอมพิวเตอร์เพิ่มขึ้นรวมถึงเวลาที่ใช้ในการคำนวณจะสูงมากขึ้นตามไปด้วย

สาเหตุของความยากลำบากดังกล่าวมีส่วนก่อให้เกิดวิธีการหาผลเฉลยโดยประมาณวิธีใหม่ที่เรียกว่าวิธีการไฟไนต์เอลิเมนต์ (finite element method) วิธีการนี้สามารถนำมาใช้ในการคำนวณเชิงพลวัตของของไหลกับแบบจำลองที่มีรูปร่างลักษณะซับซ้อนเช่นใดก็ได้ โดยสามารถจำลองรูปร่างลักษณะดั้งเดิมที่แท้จริงของแบบจำลองได้ใกล้เคียงเที่ยงตรงสูงกว่าวิธีการผลต่างสี่เหลี่ยม ก่อร่างคือ ใน ตัวอย่างของแผ่นโลหะ จะสามารถแบ่งแผ่นโลหะออกเป็นเอลิเมนต์ขนาดต่างๆ กันโดยเอลิเมนต์ต่างๆ นี้อาจอยู่ในรูปลักษณะของสามเหลี่ยมและสี่เหลี่ยมด้านไม่เท่าก็ได้ ดังแสดงในรูปที่ 2.10

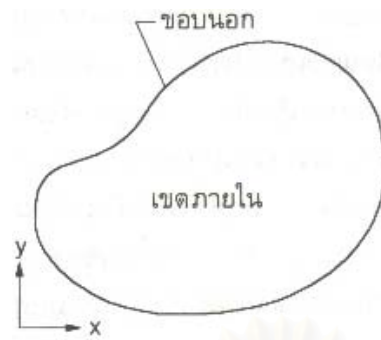


รูปที่ 2.10 การหาผลเฉลยบนแผ่นโลหะด้วยวิธีการไฟไนต์เอลิเมนต์⁽⁶⁾

ผลที่เห็นได้ชัดเจนเมื่อเปรียบเทียบกับวิธีการผลต่างสี่เหลี่ยมในรูปที่ 2.9 ก็คือ วิธีการไฟไนต์เอลิเมนต์สามารถจำลองรูปร่างลักษณะดั้งเดิมของแผ่นโลหะได้เป็นอย่างดี ซึ่งหมายถึงการหาผลเฉลยโดยประมาณจากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่มีรูปร่างลักษณะใกล้เคียงกับของจริงดั้งเดิมมากที่สุด ดังนั้นค่าผลเฉลยโดยประมาณที่คำนวณได้จะมีความแม่นยำมากขึ้นตามไปด้วย

2.6.1 วิธีการผลต่างสี่เหลี่ยม (finite difference method)⁽⁶⁾

วิธีที่จะทำให้เกิดความเข้าใจของลำดับขั้นตอนในการหาค่าผลเฉลยโดยประมาณโดยวิธีการผลต่างสี่เหลี่ยมสามารถทำได้ไม่ยากนักด้วยการใช้สมการทางคณิตศาสตร์ที่อยู่ในรูปของสมการลาปลาซ (Laplace's equation) อาทิเช่น สมการสมดุลของโครงสร้าง สมการสมดุลของการถ่ายเทความร้อน รวมไปถึงสมการสมดุลของการไหล สมการลาปลาซดังกล่าวสำหรับปัญหาใน 2 มิติบนระนาบ x และ y สามารถเขียนให้อยู่ในรูปของสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยได้ดังนี้



$$\nabla^2 \phi = 0 \quad (2.1)$$

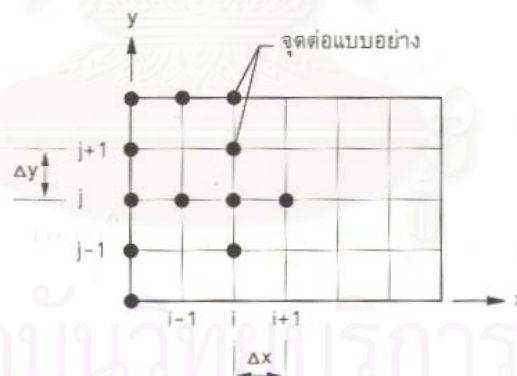
รูปที่ 2.11 รูปร่างลักษณะทั่วไปของขอบเขตของปัญหา⁽⁶⁾

โดย $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ เป็นสัญกรณ์ของตัวดำเนินการ (operator notation)

$\phi = \phi(x, y)$ เป็นตัวแปรไม่ทราบค่าซึ่งต้องการหาในเขตภายใน ϕ (เช่น อาจแทนการกระจายของอุณหภูมิที่ตำแหน่ง x, y ต่างๆ)

หลักการในการใช้วิธีการผลต่างสี่เหลี่ยมเพื่อหาผลเฉลยโดยประมาณสามารถทำได้อย่างง่าย ๆ โดยใช้ขั้นตอนเพียง 4 ขั้นตอน ดังต่อไปนี้

ขั้นตอนที่ 1 ทำการสร้างตารางสี่เหลี่ยมลงในรูปร่างลักษณะของปัญหาที่กำหนด สมมติว่ารูปร่างลักษณะของปัญหาเป็นรูปสี่เหลี่ยมผืนผ้า ซึ่งอยู่ในระนาบ $x-y$ ดังแสดงในรูป 2.12



รูปที่ 2.12 การแบ่งรูปร่างลักษณะของปัญหาออกเป็นตารางสี่เหลี่ยม⁽⁶⁾

สี่เหลี่ยมเล็กๆ ทั้งหมดที่สร้างขึ้นมานี้มีขนาด Δx และ Δy ในทางแกน x และ y ตามลำดับ และต่อกันที่จุดต่อ (grid points) ที่อยู่ในตำแหน่งต่างๆ กัน เช่น จุดต่อ ณ ตำแหน่ง i, j ดังแสดงในรูปที่ 2.12 นี้แสดงถึงจุดต่อที่ $x = i$ และ $y = j$ เป็นต้น และที่จุดต่อนี้เอง เป็นตำแหน่งที่จะหาค่าของผลเฉลยโดยประมาณ นั่นคือเป็นตำแหน่งของตัวไม่ทราบค่า เช่น สมมติว่ากำลังแก้ปัญหาเกี่ยวกับการถ่ายเทความร้อน ตัวไม่ทราบค่าที่จุดต่อเหล่านี้ก็คืออุณหภูมิที่ต้องการ เป็นต้น

ขั้นตอนที่ 2 ทำการแปลงสมการอนุพันธ์ย่อยให้อยู่ในรูปของตัวไม่ทราบค่าที่จุดต่อต่างๆ

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0 \quad (2.2)$$

โดยที่เราสามารถเขียนสมการดังกล่าวให้อยู่ในรูปของตัวไม่ทราบค่าที่จุดต่อได้ด้วยการใช้ออนุกรมเทย์เลอร์ (Taylor series) เช่น ค่าอนุกรมที่จุดต่อ $i + 1$ สามารถเขียนให้อยู่ในรูปของอนุกรมที่จุดต่อ i ได้ดังนี้

$$\phi_{i+1} = \phi_i + \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_i \Delta x + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \Big|_i (\Delta x)^2 + \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \Big|_i (\Delta x)^3 + \dots \quad (2.3)$$

ในทำนองเดียวกันค่าอนุกรมที่จุดต่อ $i - 1$ ก็สามารถเขียนให้อยู่ในรูปของอนุกรมที่จุดต่อ i ได้ดังนี้

$$\phi_{i-1} = \phi_i - \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_i \Delta x + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \Big|_i (\Delta x)^2 - \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \Big|_i (\Delta x)^3 + \dots \quad (2.4)$$

หากนำสมการ 2.3 และ 2.4 นี้มารวมกัน จะได้

$$\phi_{i+1} + \phi_{i-1} = 2\phi_i + \frac{2}{2!} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \Big|_i (\Delta x)^2 + \frac{2}{4!} \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} \Big|_i (\Delta x)^4 + \dots \quad (2.5)$$

เนื่องจากเราต้องการพจน์อนุพันธ์อันดับสอง (second order term) ซึ่งคือพจน์ $\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$ เพื่อที่จะแทนลงในสมการ 2.2 เราจึงตัดพจน์อนุพันธ์ที่มีอันดับที่สูงๆ ขึ้นไปในสมการ 2.5 ทั้ง ซึ่ง จะก่อให้เกิดค่าของพจน์อนุพันธ์อันดับสองโดยประมาณ คือ

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \cong \frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{(\Delta x)^2} \quad (2.6)$$

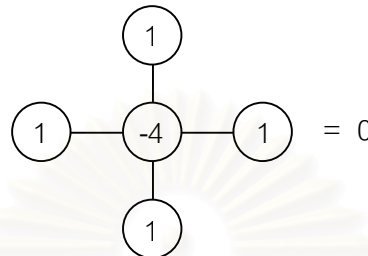
ในทำนองเดียวกัน หากเราดำเนินการเช่นเดียวกันในทางแกน y เราจะได้

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \cong \frac{\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}}{(\Delta y)^2} \quad (2.7)$$

หลังจากแทนพจน์อนุพันธ์อันดับสองจากสมการ 2.6 และ 2.7 ลงในสมการ 2.2 และหากให้ Δx เท่ากับ Δy เราจะได้

$$\phi_{i+1} + \phi_{i-1} + \phi_{j+1} + \phi_{j-1} - 4\phi_j = 0 \quad (2.8)$$

ซึ่งอาจเขียนให้อยู่ในรูปแบบของแผนภาพสมการ (stencil form) เพื่อสะดวกในการประยุกต์ใช้ได้ ดังนี้



$$\begin{array}{c} \textcircled{1} \\ | \\ \textcircled{1} - \textcircled{-4} \textcircled{1} \\ | \\ \textcircled{1} \end{array} = 0 \quad (2.9)$$

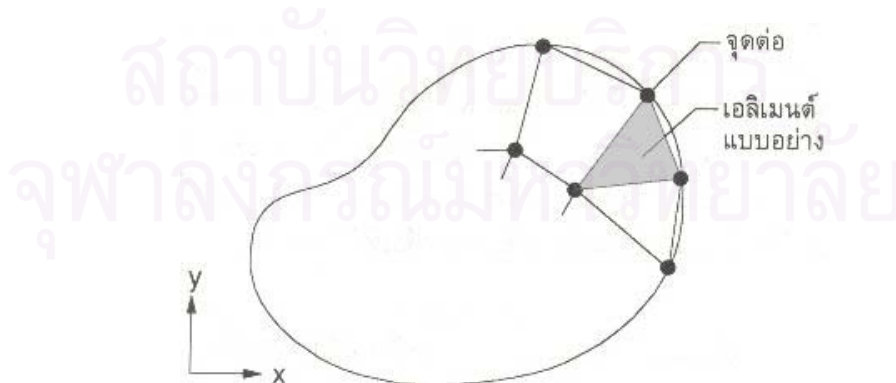
ขั้นตอนที่ 3 ทำการประยุกต์รูปแบบของแผนภาพสมการ 2.9 ลงในทุกๆ จุดต่อที่อยู่ในขอบเขตภายในของปัญหานั้น จะก่อให้เกิดระบบของสมการพร้อมกัน (a set of simultaneous equations) ขึ้น โดยมีตัวไม่ทราบค่าเช่น ϕ_i, ϕ_{i+1} ณ จุดต่อต่างๆ ภายในขอบเขตของปัญหานั้น

ขั้นตอนที่ 4 ทำการแก้ระบบสมการที่เกิดขึ้นมานั้น เพื่อหาค่าโดยประมาณของตัวไม่ทราบค่า (unknowns) ณ จุดต่อนั้นๆ

2.6.2 วิธีการไฟไนต์เอลิเมนต์ (finite element method) ⁽⁶⁾

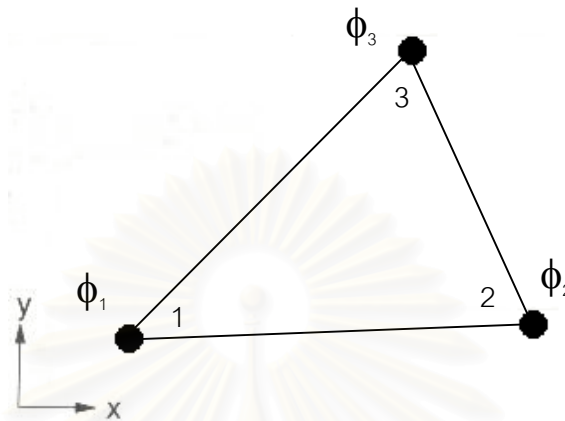
วิธีการไฟไนต์เอลิเมนต์ประกอบด้วยขั้นตอนใหญ่ 6 ขั้นตอน ดังนี้

ขั้นตอนที่ 1 การแบ่งขอบเขตรูปร่างลักษณะของปัญหาที่จะหาค่าผลลัพธ์นั้นออกเป็นเอลิเมนต์ย่อยๆ ดังแสดงในรูปที่ 2.13 ขอบเขตดังกล่าวอาจเป็นขอบเขตของปัญหาชนิดต่างๆ กัน เช่น ปัญหาความยืดหยุ่นในของแข็ง (Elasticity problem) ปัญหาที่เกี่ยวกับอุณหภูมิและความร้อน (Thermal problem) รวมทั้งปัญหาของการไหล (Fluid problem)



รูปที่ 2.13 การแบ่งรูปร่างลักษณะออกเป็นเอลิเมนต์แบบต่างๆ ⁽⁶⁾

ขั้นตอนที่ 2 การเลือกฟังก์ชันประมาณในเอลิเมนต์ (element interpolation functions) เช่น เอลิเมนต์แบบอย่าง ดังแสดงในรูปที่ 2.13 เอลิเมนต์ดังกล่าวประกอบด้วย 3 จุดต่อที่มีหมายเลข 1, 2 และ 3 ดังแสดงในรูปที่ 2.14



รูป 2.14 เอลิเมนต์สามเหลี่ยมแบบอย่าง⁽⁶⁾

โดยที่จุดต่อนี้เป็นตำแหน่งของตัวไม่ทราบค่า (nodal unknowns) ซึ่งคือ ϕ_1 , ϕ_2 และ ϕ_3 ตัวไม่ทราบค่าที่จุดต่อเหล่านี้ อาจเป็นค่าการยืดหรือหดตัว (displacement) ถ้าเป็นปัญหาการยืดหยุ่นในของแข็ง หรืออาจเป็นค่าอุณหภูมิสำหรับปัญหาของการถ่ายเทความร้อน หรืออาจเป็นความเร็วของของไหลเมื่อเป็นปัญหาเกี่ยวกับการไหล ลักษณะการกระจายตัวของตัวไม่ทราบค่าบนเอลิเมนต์ อาจเขียนให้อยู่ในรูปของฟังก์ชันการประมาณภายในและตัวไม่ทราบค่าที่จุดต่อได้ดังนี้

$$\phi(x, y) = N_1(x, y)\phi_1 + N_2(x, y)\phi_2 + N_3(x, y)\phi_3 \quad (2.10)$$

โดย $N_i(x, y)$, $i = 1, 2, 3$ คือฟังก์ชันของการประมาณค่าภายในเอลิเมนต์

สมการ 2.10 สามารถเขียนให้อยู่ในรูปของเมตริกซ์ได้ดังนี้

$$\begin{aligned} \phi(x, y) &= [N_1 \ N_2 \ N_3] \begin{Bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \end{Bmatrix} \\ &= [N] \{\phi\} \end{aligned} \quad (2.11)$$

(1×3) (3×1)

โดย $[N]$ คือ เมตริกซ์ของฟังก์ชันการประมาณภายในเอลิเมนต์ และ $\{\phi\}$ คือ เวกเตอร์เมตริกซ์ที่ประกอบด้วยตัวไม่ทราบค่าที่จุดต่อของเอลิเมนต์นั้นๆ สัญลักษณ์ $[]$ แสดงถึงเมตริกซ์แถวอน (row matrix) และ $\{ \}$ แสดงถึงเมตริกซ์แแถวตั้ง (column matrix)

ขั้นตอนที่ 3 การสร้างสมการของเอลิเมนต์ (element equation) ดังตัวอย่างเช่น สมการของเอลิเมนต์สามเหลี่ยมแบบอย่างดังแสดงในรูปที่ 2.14 จะอยู่ในรูปแบบดังนี้

$$\begin{bmatrix} k_{11} & k_{12} & k_{13} \\ k_{21} & k_{22} & k_{23} \\ k_{31} & k_{32} & k_{33} \end{bmatrix}_e \begin{Bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \end{Bmatrix}_e = \begin{Bmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \end{Bmatrix}_e \quad (2.12)$$

ซึ่งเขียนย่อได้เป็น

$$[K]_e \{\phi\}_e = \{F\}_e \quad (2.13)$$

ขั้นตอนที่ 3 นี้ถือเป็นหัวใจสำคัญของวิธีการไฟไนต์เอลิเมนต์ การสร้างสมการของเอลิเมนต์ซึ่งอยู่ในรูปแบบสมการ 2.12 สามารถทำได้โดย

- . วิธีการโดยตรง (direct approach)
- . วิธีการแปรผัน (variational approach)
- . วิธีการถ่วงน้ำหนักเศษตกค้าง (method of weighted residuals)

ขั้นตอนที่ 4 การนำเอาสมการของแต่ละเอลิเมนต์มาประกอบกัน ก่อให้เกิดระบบสมการพร้อมกันขึ้น (system of simultaneous equations) ในรูปแบบดังนี้

$$\sum (\text{element equation}) \Rightarrow [K]_{\text{sys}} \{\phi\}_{\text{sys}} = \{F\}_{\text{sys}} \quad (2.14)$$

ขั้นตอนที่ 5 ทำการประยุกต์เงื่อนไขขอบเขต (boundary conditions) ลงในสมการที่ 2.14 แล้วทำการแก้สมการเพื่อหาค่า $\{\phi\}_{\text{sys}}$ อันประกอบด้วยตัวไม่ทราบค่าที่จุดต่อ ซึ่งอาจจะเป็นค่าของการเคลื่อนตัว ณ ตำแหน่งต่างๆ ของโครงสร้าง หรือค่าของความเร็วของของไหลหากเป็นปัญหาเกี่ยวกับการไหล

ขั้นตอนที่ 6 เมื่อได้ผลการคำนวณค่าต่างๆ ที่จุดต่อแล้วก็สามารถทำการหาค่าอื่นๆ ที่ต้องการทราบต่อไปได้ เช่นเมื่อรู้ค่าการเคลื่อนตัว ณ ตำแหน่งต่างๆ เราสามารถนำไปใช้ในการหาค่าความเครียด (strain) และความเค้น (stress) ได้ต่อไป หรือเมื่อรู้คุณสมบัติที่จุดต่างๆ ก็สามารถคำนวณหาปริมาณการถ่ายเทความร้อนได้ หรือเมื่อรู้ความเร็วของของไหลก็สามารถนำไปคำนวณหาปริมาณอัตราการไหลทั้งหมดได้ เป็นต้น

จากขั้นตอนทั้งหมดจะเห็นว่าวิธีการไฟไนต์เอลิเมนต์เป็นวิธีการที่มีระเบียบแบบแผนเป็นขั้นเป็นตอน โดยมีหัวใจที่สำคัญคือการสร้างสมการของเอลิเมนต์ในขั้นตอนที่ 3

2.7 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

Amphlett, J.C. และคณะ⁽⁷⁾ ได้ออกแบบแบบจำลองการคาดคะเนผลของการตอบสนองช่วงการเปลี่ยนแปลง (model predicting transient responses) ของเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน อ้างอิงจากทฤษฎีทางไฟฟ้าเคมี สมดุลมวลสารและพลังงาน เพื่ออธิบายพฤติกรรมของเซลล์เชื้อเพลิงในภาวะคงตัว (Steady – state) และภาวะไม่คงตัว (Unsteady – state) เช่น ภาวะเริ่มต้นระบบ (system start – up) ภาวะปิดระบบ (system shut – down) และภาวะที่ระดับพลังงานในระบบเปลี่ยนแปลงมากๆ (large change in the power level) โดยในการศึกษานี้ใช้เซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอนของ The Ballard Mark V ขนาด 5 กิโลวัตต์ stack ที่ประกอบด้วยเซลล์เชื้อเพลิง 35 เซลล์ เรียงต่อกันแบบอนุกรม อยู่ใน ผลที่ได้พบว่า แบบจำลองสามารถอธิบายพฤติกรรมของกระบวนการได้เป็นอย่างดี และให้ผลใกล้เคียงเมื่อเปรียบเทียบกับข้อมูลการทดลอง

Bezzo, F. และคณะ⁽⁸⁾ เป็นงานวิจัยที่ศึกษาวิธีการจำลองกระบวนการในอุตสาหกรรม โดยรวมเอาการคำนวณกระบวนการพลวัตของของไหล (Computational fluid dynamics, CFD) และการจำลองกระบวนการ (process simulation) ซึ่งเป็นเทคโนโลยีที่สำคัญในการวิเคราะห์พฤติกรรมของกระบวนการเข้าด้วยกัน ทำให้สามารถอธิบายกระบวนการในเชิงภาวะคงตัว เชิงพลวัต และลักษณะการผสมและพฤติกรรมของไหลของของไหลได้อย่างกว้างขวาง CFD package ที่ใช้คือโปรแกรม Fluent 4.5 และ process simulation package ที่ใช้คือโปรแกรม gPROMS1.7

Nguyen, T. V.⁽⁵⁾ ได้สรุปผลการทดลองว่า เซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอนที่ออกแบบช่องการไหลแก๊สเป็นแบบ interdigitated flow fields จะให้พลังงานไฟฟ้าสูงกว่าเมื่อเปรียบเทียบกับผลการทดลองของเซลล์เชื้อเพลิงที่ออกแบบช่องการไหลแก๊สแบบธรรมดา อย่างเห็นได้ชัด โดยปรับเปลี่ยนภาวะที่ใช้ในการทดลองได้แก่ ใช้แก๊สออกซิเจนบริสุทธิ์เป็นสารป้อน อุณหภูมิของเซลล์เชื้อเพลิงคือ 22 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ และใช้อากาศเป็นสารป้อน อุณหภูมิของเซลล์เชื้อเพลิงคือ 25 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ

Gurau, V. และคณะ⁽⁹⁾ ได้ออกแบบแบบจำลองคณิตศาสตร์ของเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอนในลักษณะ 2 มิติ ระบบอุณหภูมิคงที่ และระบบ 2 มิติ ประกอบด้วยการไหลในวัฏภาคแก๊ส และการไหลในวัฏภาคของเหลว เมื่อเปรียบเทียบผลที่ได้จากการจำลองกับผลจากการทดลองพบว่า แบบจำลองที่ได้นี้มี ความถูกต้อง คือสามารถคำนวณปริมาณกระแสไฟฟ้าและศักย์ไฟฟ้าที่ได้จากเซลล์เชื้อเพลิงตรงกับผลที่ได้จากการทดลอง จากนั้นงานวิจัยนี้จึงได้นำแบบจำลองดังกล่าวมาทำการจำลองเซลล์เชื้อเพลิงที่ภาวะการทำงานต่างๆ เช่น ปรับเปลี่ยนอุณหภูมิของเซลล์เชื้อเพลิง ได้แก่ 353, 323 และ 303 องศาเซลเซียส และปรับ

เปลี่ยนความเร็วอากาศขาเข้า ได้แก่ 0.35, 0.50, 1.00 และ 2.00 เมตรต่อวินาที พบว่าที่ อุณหภูมิสูงเซลล์เชื้อเพลิงจะให้พลังงานไฟฟ้าสูงกว่าที่อุณหภูมิต่ำ และที่ความเร็วอากาศขาสูง จะให้ค่าความหนาแน่นกระแสจำกัดของเซลล์เชื้อเพลิงสูงกว่าที่ความเร็วอากาศขาต่ำ

He, W. และคณะ⁽¹⁰⁾ ได้นำเอาการคำนวณทางพลวัตของของไหลมาจำลองพฤติกรรม การไหลของเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอนในลักษณะ 2 มิติ ระบบ อุณหภูมิตั้งที่ และระบบ 2 ภูมิภาค ประกอบด้วยการไหลในภูมิภาคแก๊ส และการไหลในภูมิภาค ของเหลวซึ่งคือน้ำ โดยเลือกศึกษาเฉพาะด้านหัวแคโทดเท่านั้น เนื่องจากน้ำที่เกิดขึ้นภายในระบบ จะเกิดจากปฏิกิริยารีดักชันที่หัวแคโทด จากการจำลองกระบวนการพบว่า การเพิ่มประสิทธิภาพ ของเซลล์เชื้อเพลิงสามารถทำได้โดยการเพิ่ม ΔP โดยจำลองที่ค่า $\Delta P = 0.005, 0.007$ และ 0.010 atm, การเพิ่มจำนวนช่องแก๊สในหนึ่งหน่วยความกว้างของอิเล็กโทรด จำลองที่ 2, 3 และ 5 ช่อง และการเพิ่มอัตราส่วนระหว่างความกว้างของช่องแก๊สต่อความกว้างของ shoulder : c/s จำลองที่ $c/s = 0.6/1.4, 1.0/1.0$ และ $1.4/0.6$ ส่วนการปรับเปลี่ยนความหนาของอิเล็กโทรด : h ไปจากกรณีพื้นฐาน ($\Delta P = 0.007$ atm, 3 ช่อง และ $c/s = 1.0/1.0$) จำลองที่ $h = 0.020, 0.025, 0.030, 0.060, 0.080$ และ 0.100 cm. พบว่าที่ $h = 0.060$ cm. ให้ประสิทธิภาพสูงสุด

บทที่ 3

วิธีการพัฒนาแบบจำลองกระบวนการ เซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน

3.1 แบบจำลองทางคณิตศาสตร์

แบบจำลองคณิตศาสตร์ที่ใช้เพื่อการจำลองกระบวนการเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอนจะแบ่งออกเป็น 4 ส่วนหลักๆ โดย 3 ส่วนแรกจะเป็นสมการการคำนวณในชั้นของอิเล็กโทรด ชั้นตัวเร่งปฏิกิริยา และชั้นเยื่อแผ่น จะประกอบด้วยสมการการไหลต่อเนื่อง (Continuity equation) สมการการถ่ายโอนมวล (Mass transfer equation) และการถ่ายโอนโมเมนตัม (Momentum transfer equation) เพื่ออธิบายปรากฏการณ์การถ่ายโอนของสสารภายในขอบเขตแบบจำลอง ซึ่งในงานวิจัยนี้จะอาศัยความสามารถของโปรแกรม Fluent ที่ออกแบบมาเพื่อทำการคำนวณเชิงพลวัตของของไหลโดยเฉพาะ โดยในส่วนของ การถ่ายโอนพลังงาน (Energy transfer equation) จะไม่ถูกนำมาใช้ในการพัฒนาแบบจำลอง เพราะได้พัฒนาแบบจำลองเป็นระบบอุณหภูมิคงที่ (isothermal) ในส่วนสุดท้ายคือ สมการการเกิดปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมี (Electrochemical reaction equation) ซึ่งใช้อธิบายปรากฏการณ์ และปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมีที่เกิดขึ้นภายในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาของเซลล์เชื้อเพลิง โดยนำทฤษฎีทางอุณหพลศาสตร์และจลนพลศาสตร์ มาอธิบายความสัมพันธ์ระหว่างปริมาณสารเคมี อัตราเร็วของปฏิกิริยา และปริมาณไฟฟ้าที่ผลิตได้ เพียงแต่มีการดัดแปลงสมการเล็กน้อยให้เหมาะสมกับการนำไปใช้ในแบบจำลอง

3.1.1 สมมติฐานที่ใช้ในการพัฒนาแบบจำลอง

- จำลองกระบวนการในระบบภาวะอุณหภูมิคงที่
- ระบบ 2 มิติ คือ มิติ แก๊สและของเหลว
- แบบจำลองที่ใช้มีลักษณะ 2 มิติ
- กำหนดให้การไหลของแก๊สภายในชั้นเยื่อแผ่นมีค่าน้อยที่สุด
- จำลองกระบวนการที่ภาวะพลวัต
- น้ำที่เกิดจากปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมีให้อยู่ในรูปของเหลว เนื่องจากอุณหภูมิต่ำกว่า 100 องศาเซลเซียส

3.1.2 การคำนวณในชั้นอิเล็กโทรด

3.1.2.1 สมการการไหลต่อเนื่อง

ในงานวิจัยของ He, W. และคณะ⁽¹⁰⁾ ได้อธิบายการดูดมวลสารภายในระบบ ดังสมการต่อไปนี

- ภูมิภาคของแก๊ส

$$0 = \nabla \cdot (C^g v^g) + r_w \quad (3.1)$$

เมื่อ
$$C^g = \frac{P}{RT} \quad (3.2)$$

C^g = ความเข้มข้นโดยโมลของสารทั้งหมดในภูมิภาคแก๊ส : kmol/m³

v^g = superficial velocity of gas phase : m/sec

r_w = อัตราการถ่ายโอนโมลของน้ำระหว่างภูมิภาค โดยกระบวนการกลั่น และการระเหย : kmol/m³ sec

P = ความดันรวม : kPa

R = เป็นค่าคงที่ของแก๊ส = 8.314 kJ/kmol K

T = อุณหภูมิ : K

อัตราการถ่ายโอนโมลของน้ำสามารถอธิบายได้ดังสมการ

$$r_w = k_c \frac{\varepsilon^g y_w}{RT} (y_w P - P_w^{\text{sat}}) q + k_v \frac{\varepsilon_0 s \rho_w}{M_w} (y_w P - P_w^{\text{sat}}) (1 - q) \quad (3.3)$$

k_c = ค่าคงที่สำหรับการกลั่นตัวของน้ำ : 1/sec

k_v = ค่าคงที่สำหรับการระเหยของน้ำ : 1/atm sec

ε_0 = ค่าความพรุน (porosity)

s = สัดส่วนปริมาตรของน้ำในช่องรูพรุน

$$\varepsilon^g = \text{สัดส่วนปริมาตรของแก๊สในช่องรูพรุน} = \varepsilon_0 (1 - s) \quad (3.4)$$

M_w = น้ำหนักโมเลกุล (molecular weight) ของน้ำ : kg/kmol

y_w = สัดส่วนโดยโมลของน้ำในภูมิภาคแก๊ส

ρ_w = ความหนาแน่นของน้ำในภูมิภาคของเหลว : kg/m³

P_w^{sat} = ความดันอิ่มตัวของน้ำ : atm

R = เป็นค่าคงที่ของแก๊ส = 0.0821 atm m³/kmol K

q = ฟังก์ชันสลับ (switching function)

$$\text{โดย } q = \frac{1 + \left| \frac{(y_w P - P_w^{\text{sat}})}{(y_w P - P_w^{\text{sat}})} \right|}{2} \quad (3.5)$$

เมื่อความเข้มข้นมากกว่าความเข้มข้นอิ่มตัว จะเกิดการกลั่นตัว $q = 1, r_w > 0$

เมื่อความเข้มข้นน้อยกว่าความเข้มข้นอิ่มตัว จะเกิดการระเหย $q = 0, r_w < 0$

- รัศมีภาคของเหลว

$$0 = \nabla \cdot \left(\frac{\epsilon_0 s P_w}{M_w} v^l \right) - r_w \quad (3.6)$$

s = สัดส่วนปริมาตรของน้ำในช่องรูพรุน

v^l = superficial velocity ของรัศมีภาคของเหลว : m/sec

3.1.2.2 สมการการถ่ายโอนมวล

สมการเพื่อทำสมดุลองค์ประกอบของสารแต่ละชนิด ซึ่งประกอบด้วยกระบวนการการแพร่ และการพา แสดงสมการได้ดังนี้

$$\nabla \cdot (C_i^g v_i^g - C_i^g D_i^g \nabla y_i) = 0 \quad (3.7)$$

$$\nabla \cdot (C_w^g v_w^g - C_w^g D_w^g \nabla y_w) + r_w = 0 \quad (3.8)$$

y_i = สัดส่วนโดยโมลของสาร i ได้แก่ไฮโดรเจน ออกซิเจนและไนโตรเจน

y_w = สัดส่วนโดยโมลของน้ำ

D_i^g = ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของสาร i ภายในชั้นรูพรุน : m^2/sec

D_w^g = ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของน้ำภายในชั้นรูพรุน : m^2/sec

$$\text{เมื่อ } D_i^g = D_i (\epsilon^g)^{1.5} \quad (3.9)$$

D_i = ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของสาร i : m^2/sec

3.1.2.3 สมการการถ่ายโอนโมเมนตัม

สำหรับในส่วนนี้ งานวิจัยนี้ได้หยิบยกเอาสมการของ Darcy หรือ Darcy's Law ⁽¹⁰⁾ ซึ่ง เป็นสมการการคำนวณความเร็วของของไหลภายใน porous media โดยละเอียดพจน์ที่เป็นผล ของแรงโน้มถ่วงออกไป

- วัฏภาคของแก๊ส

$$v^g = -\frac{K_0(1-s)}{\mu^g} \nabla P \quad (3.10)$$

K_0 = ค่าการซึมผ่านของแก๊ส : m^2

s = สัดส่วนปริมาตรของน้ำในช่องรูพรุน

μ^g = ค่าความหนืดของแก๊สผสม : $kg/m \text{ sec}$

- วัฏภาคของเหลว

$$v^l = -\frac{K^l}{\mu^l} \nabla p^l \quad (3.11)$$

K^l = ค่าการซึมผ่านของของเหลว : m^2

เมื่อ $K^l = K_0(1-s)$ (3.12)

μ^l = ค่าความหนืดของน้ำ : $kg/m \text{ sec}$

p^l = ความดันของวัฏภาคของเหลว : kPa

ในงานวิจัยนี้ได้นำรูปแบบการไหลของของเหลวในช่องแคบ (capillary force) มา พิจารณาร่วมด้วยดังนี้

$$p^l = P - p^c \quad (3.13)$$

p^c = capillary pressure : kPa

แทนสมการ (3.13) ลงในสมการที่ (3.11) และทำการจัดรูปสมการโดยแทนค่า ∇p^c ด้วยเทอม $\frac{dp^c}{ds} \nabla s$ เนื่องจากค่า p^c จะเป็นตัวแปรที่ขึ้นกับค่า s เท่านั้น และค่า s นั้นจะเป็น ตัวแปรที่ขึ้นกับตำแหน่ง จะได้เป็น

$$v^l = -\frac{K^l}{\mu^l} \nabla P + \frac{K^l}{\mu^l} \nabla p^c = -\frac{K^l}{\mu^l} \frac{\mu^g}{K_0(1-s)} \frac{K_0(1-s)}{\mu^g} \nabla P + \frac{K^l}{\mu^l} \frac{dp^c}{ds} \nabla s \quad (3.14)$$

ได้มีการกำหนดค่า interfacial drag coefficient (f) ขึ้นเพื่อจัดรูปสมการให้ง่ายขึ้นโดย

$$\text{กำหนด } f = \frac{K^l \mu^g}{\mu^l K_0(1-s)} = \frac{K^l \mu^g}{\mu^l K^g} \quad (3.15)$$

และกำหนดค่า capillary diffusion coefficient (D_c) ดังนี้

$$D_c = -\frac{K^l dp^c}{\mu^l ds} \quad (3.16)$$

เมื่อแทนสมการ (3.11), (3.15) และ (3.16) ลงในสมการ (3.14) จะได้สมการการคำนวณค่าความเร็วของของเหลว (v^l) มีความสัมพันธ์กับพจน์ 2 พจน์ โดยพจน์แรกอธิบายความเร็วของของเหลวที่เกิดขึ้นเนื่องจาก interfacial shear force และพจน์ที่ 2 เนื่องจาก capillary force ดังนี้

$$v^l = fv^g - D^c \nabla s \quad (3.17)$$

3.1.3 การคำนวณในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยา

ภายในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยานั้นจะมีการเกิดปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมีทำให้มีการเพิ่มพจน์สำหรับการถ่ายโอนมวลข้ามระหว่างวัฏภาคเข้าไปในสมการต่างๆ ดังนี้

3.1.3.1 สมการการไหลต่อเนื่อง

- วัฏภาคของแก๊ส

$$0 = \nabla \cdot (C^g v^g) + r_w + \frac{i}{1000 \times nFd} \quad (3.18)$$

i = ความหนาแน่นกระแส : A/m^2

d = ความหนาของชั้นตัวเร่งปฏิกิริยา : m

F = ค่าคงที่ของฟาราเดย์ = 96485 Coulomb/mole

n = จำนวนโมลของอิเล็กตรอนที่ได้ต่อโมลของสารที่เข้าทำปฏิกิริยา จะเท่ากับ 4 สำหรับออกซิเจนในฝั่งขั้วแคโทด และเท่ากับ 2 สำหรับไฮโดรเจนในฝั่งขั้วแอโนด สำหรับไนโตรเจน พจน์ i/nFd จะมีค่าเป็นศูนย์

- วัฏภาคของเหลว

$$0 = \nabla \cdot \left(\frac{\epsilon_0 s \rho_w}{M_w} v^l \right) - r_w - \frac{i}{1000 \times 2Fd} \quad (3.19)$$

3.1.3.2 สมการการถ่ายโอนมวล

$$\nabla(C^g v^g y_i - C^g D_i^c \nabla y_i) + \frac{i}{1000 \times n F d} = 0 \quad (3.20)$$

$$\nabla(C^g v^g y_w - C^g D_w^c \nabla y_w) + r_w = 0 \quad (3.8)$$

3.1.3.3 สมการการถ่ายโอนโมเมนตัม

- วิกฤภาคของแก๊ส

$$v^g = -\frac{K_0(1-s)}{\mu^g} \nabla P \quad (3.10)$$

- วิกฤภาคของเหลว

$$v^l = f v^g - D^c \nabla s \quad (3.17)$$

3.1.4 การคำนวณในชั้นเยื่อแผ่น

เนื่องจากได้ตั้งสมมติฐานไว้ให้การไหลของแก๊สภายในชั้นเยื่อแผ่นมีค่าน้อยที่สุด โดยให้มีเฉพาะวิกฤภาคของเหลวในชั้นเยื่อแผ่นเท่านั้น ดังนั้นในส่วนของชั้นเยื่อแผ่นจะไม่มีกรคำนวณในส่วนของวิกฤภาคของแก๊ส

3.1.4.1 สมการการไหลต่อเนื่อง

$$0 = \nabla \cdot \left(\frac{\epsilon_0 s \rho_w}{M_w} v^l \right) \quad (3.21)$$

3.1.4.2 สมการการถ่ายโอนโมเมนตัม

จากที่ได้กล่าวไว้ในส่วนของการจัดการน้ำภายในระบบ ภายในชั้นของเยื่อแผ่นนอกจากการไหลของน้ำเนื่องจากผลของความแตกต่างระหว่างความดันทางด้านขั้วแอโนดและแคโทดแล้วยังมีผลของปรากฏการณ์ Electro – osmotic drag โดยจากงานวิจัยของ Springer, T. E. et al.⁽¹¹⁾ ได้สรุปสมการการคำนวณหาปริมาณการไหลของน้ำภายในชั้นเยื่อแผ่นเนื่องจากปรากฏการณ์ Electro – osmotic drag ให้ขึ้นกับปัจจัยต่างๆ คือ ค่าความหนาแน่นกระแสของเซลล์เชื้อเพลิงและค่าความชื้นภายในเยื่อแผ่นดังสมการ

$$N_{w,drag} = \frac{2.5\lambda}{22} \frac{i}{F} \quad (3.22)$$

โดยที่ $N_{w,drag}$ คือปริมาณการไหลของน้ำภายในชั้นเยื่อแผ่นเนื่องจากปรากฏการณ์ Electro – osmotic drag มีหน่วยเป็น mole/m²sec

ดังนั้นเมื่อรวมกับการไหลของน้ำเนื่องจากผลของความแตกต่างระหว่างความดันทางด้าน
หัวแอดโนดและแคโทดแล้วจะได้สมการดังนี้

$$v^1 + N_{w,drag} \frac{M_w}{1000\rho_w} = -\frac{K^1}{\mu^1} \nabla p^1 \quad (3.23)$$

ได้มีการนิยามค่าความชื้นภายในเยื่อแผ่น (λ) โดยกำหนดเป็นค่าที่ได้จากการคำนวณ
อัตราส่วนของโมเลกุลของน้ำต่อหมู่ฟังก์ชันกรดซัลฟอนิก (SO_3^-) ซึ่งเป็นหมู่ฟังก์ชันที่สำคัญภายใน
โครงสร้างโมเลกุลของชั้นเยื่อแผ่นซึ่งทำให้เยื่อแผ่นมีสมบัติเป็นเยื่อเลือกผ่านโปรตอน

การคำนวณค่าของความชื้นภายในเยื่อแผ่น จะขึ้นกับความชื้นของแก๊สในตำแหน่งพื้นผิว
ระหว่างชั้นของเยื่อแผ่นและชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยา ดังสมการ

$$\lambda = 0.043 + 17.81a - 39.85a^2 + 36.0a^3 \quad \text{สำหรับ } 0 < a \leq 1$$

$$\lambda = 14 + 1.4(a - 1) \quad \text{สำหรับ } 1 \leq a \leq 3 \quad (3.24)$$

เมื่อ a คือค่า activity ของความชื้นของแก๊สในตำแหน่งพื้นผิวระหว่างชั้นของเยื่อแผ่น
และชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยา สามารถคำนวณได้จากสมการ

$$a = \frac{y_w p}{p^{sat}} \quad (3.25)$$

และค่าความดันไออิ่มตัวของน้ำในหน่วย atm (p^{sat}) สามารถคำนวณได้จากสมการ

$$\text{Log}_{10} p^{sat} = -2.0973 + 0.031086 T - 1.1288 \times 10^{-4} T^2$$

$$+ 2.3588 \times 10^{-7} T^3 \quad (3.26)$$

3.1.5 สมการการเกิดปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมี

3.1.5.1 อุณหพลศาสตร์⁽¹²⁾

ปฏิกิริยาที่เกิดภายในเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน แสดงได้ดังนี้



โดยอาศัยกฎข้อที่ 1 ทางอุณหพลศาสตร์ จะได้ว่า

$$\Delta U = Q - P\Delta V - \text{Electrical work done} \quad (3.28)$$

นั่นคือ ระบบมีการเปลี่ยนแปลงพลังงานภายใน (ΔU) โดยมีการแลกเปลี่ยนความร้อน (Q) กับสิ่งแวดล้อม และให้งานออกมาในรูปของการเปลี่ยนแปลงปริมาตร (ΔV) ที่ความดัน (P) กับงานในรูปของพลังงานไฟฟ้า (Electrical work done)

จากการนำสมการการเปลี่ยนแปลงเอนโทรปี (S) โดยอาศัยกฎข้อที่ 2 ทางอุณหพลศาสตร์ เพื่อให้ระบบเป็นแบบผันกลับได้ (reversibility) เข้ามาใช้ จะได้

$$\Delta S = Q/T \quad (3.29)$$

ซึ่งจะได้
$$\Delta U = T\Delta S - P\Delta V - \text{Electrical work done} \quad (3.30)$$

จากนิยามของพลังงานเสรีของกิบส์ (G) และเอนทาลปี (H) คือ

$$G = H - TS \quad (3.31)$$

และ
$$H = PV + U \quad (3.32)$$

เมื่อพิจารณาที่ความดันและอุณหภูมิคงที่ จะได้

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S \quad (3.33)$$

และ
$$\Delta H = P\Delta V + \Delta U \quad (3.34)$$

ดังนั้นเมื่อรวมสมการที่ (3.30), (3.33), และ (3.34) เข้าด้วยกัน จะได้

$$\Delta G = \text{Electrical work done} \quad (3.35)$$

ซึ่ง Electrical work done = charge \times voltage = $-nFE$ Joules.

โดยประจุไฟฟ้า (charge) ที่ไหลภายในระบบ คำนวณจากจำนวนอิเล็กตรอนที่ไหลในวง
จร n โมล คูณกับค่าของประจุต่อโมลของอิเล็กตรอน หรือค่าลบของค่าคงที่ของฟาราเดย์
($F = -96485$ คูลอมบ์ต่อโมล) ได้เป็น $-nF$ เมื่อนำค่าของประจุไฟฟ้าคูณกับศักย์ไฟฟ้า
(voltage, E) จึงได้ค่า Electrical work done = $-nFE$ ดังสมการข้างต้น และจากสมการที่
(3.35) จะได้

$$-\Delta G = nFE \quad (3.36)$$

สำหรับเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน ในปฏิกิริยารวม มีอิเล็กตรอน
ไหลในวงจร 2 โมล ต่อไฮโดรเจน 1 โมล จะได้

$$-\Delta G = 2FE \quad (3.37)$$

ต่อมาได้มีการพัฒนาสมการให้อยู่ในรูป อุณหภูมิที่ดำเนินการ และค่าแอกติวิตีของสารที่
เกี่ยวข้องในปฏิกิริยาแทนค่า ΔG เพื่อความสะดวกในการใช้งาน ได้เป็นสมการของเนินสต์
(Nerst equation)

$$E = E^0 + \frac{RT}{nF} \ln\left(\frac{a_{\text{react}}}{a_{\text{prod}}}\right) \quad (3.38)$$

E^0 เป็นค่าศักย์ไฟฟ้ามาตรฐานของเซลล์เชื้อเพลิง คำนวณจาก $\Delta G^0/nF$

T คืออุณหภูมิ หน่วยองศาเคลวิน และ $a_{\text{react}}/a_{\text{prod}}$ เป็นอัตราส่วนแอกติวิตีของตัวทำ
ปฏิกิริยาและผลิตภัณฑ์

สำหรับเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน $E^0 = 1.229$ โวลต์ ; $n = 2$

และจาก $a = P/P^0$ ค่าความดันที่อยู่ในหน่วยบาร์ จะได้ $P^0 = 1$ บาร์

ดังนั้นจากสมการข้างต้นสำหรับเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน จะได้

$$E = 1.229 + \frac{RT}{2F} \ln\left(\frac{P_{\text{H}_2} P_{\text{O}_2}^{1/2}}{P_{\text{H}_2\text{O}}}\right) \quad (3.39)$$

3.1.5.2 ระบบผันกลับไม่ได้ของเซลล์เชื้อเพลิง ⁽²⁾

เซลล์เชื้อเพลิงในการดำเนินงานจริงนั้นจะเป็นระบบที่ผันกลับไม่ได้ หรือโดยทั่วไปมักจะเรียกว่า กระบวนการโพลาไรเซชัน (Polarization) เป็นภาวะที่ศักย์ไฟฟ้าที่ได้จากกระบวนการตามความเป็นจริงมีค่าน้อยกว่าศักย์ไฟฟ้าที่คำนวณได้ตามทฤษฎี หรือเกิดค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวที่ต้องนำมาหักลบ (overpotential, η) โดยศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ที่ได้จริง (E_{cell}) สามารถเขียนได้ดังสมการ

$$E_{\text{cell}} = E_{\text{cell}}^{\text{O}} - \eta_{\text{act}} - \eta_{\text{ohm}} - \eta_{\text{mass}} \quad (3.40)$$

โดยที่ $E_{\text{cell}}^{\text{O}}$ คือ ศักย์ไฟฟ้ามาตรฐานเมื่อเทียบกับขั้วไฟฟ้ามาตรฐานไฮโดรเจน หรือศักย์ไฟฟ้าตามทฤษฎี

η_{act} คือ ศักย์ไฟฟ้าเกินตัวจากโพลาไรเซชันเนื่องจากปฏิกิริยาเคมี

η_{ohm} คือ ศักย์ไฟฟ้าเกินตัวจากโพลาไรเซชันเนื่องจากความต้านทานไฟฟ้า

η_{mass} คือ ศักย์ไฟฟ้าเกินตัวจากโพลาไรเซชันเนื่องจากการถ่ายโอนมวล

โดยศักย์ไฟฟ้าเกินตัวทั้ง 3 สามารถคำนวณได้ดังนี้

โพลาไรเซชันเนื่องจากปฏิกิริยาเคมี (Activation Polarization) เป็นการสูญเสียเนื่องมาจาก แรงต้านทานเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีที่เกิดขึ้นที่ผิวของตัวเร่งปฏิกิริยา ทำให้ศักย์ไฟฟ้าส่วนหนึ่งถูกใช้ไปกับการขับเคลื่อนปฏิกิริยาเคมี

อธิบายโดยใช้สมการของ Tafel กล่าวคือศักย์ไฟฟ้าเกินตัวขึ้นกับค่าความหนาแน่นกระแสดังสมการ

$$\eta_{\text{act}} = A \ln\left(\frac{i}{i_0}\right) \quad (3.41)$$

เมื่อ A = ค่าคงที่สัมประสิทธิ์ของ Tafel : volt

และ i_0 = exchange current density : A/m^2

โพลาริเซชันเนื่องจากความต้านทานไฟฟ้า (Ohmic Polarization) คือการสูญเสียเนื่องมาจากความต้านทานไฟฟ้าของวัสดุที่นำมาใช้เป็น electrode และ membrane

$$\eta_{\text{ohm}} = ir \quad (3.42)$$

เมื่อ r = area specific resistance ของเซลล์เชื้อเพลิง : ohm m²

โพลาริเซชันเนื่องจากการถ่ายโอนมวล (Mass transport or Concentration Polarization) คือการสูญเสียเนื่องมาจากแรงต้านทานอันเกิดจากความเข้มข้นของสารที่เข้าทำปฏิกิริยาที่ผิวหน้าของตัวเร่งปฏิกิริยา ลดต่ำลงเมื่อเพิ่มค่าความหนาแน่นกระแส เพราะสารถูกใช้ในอัตราที่สูง แต่การถ่ายเทมวลสารเข้าไปทำปฏิกิริยาเป็นไปได้ช้า

$$\eta_{\text{mass}} = B \ln\left(\frac{P_1}{P_2}\right) \quad (3.43)$$

เมื่อ B = ค่าคงที่สัมประสิทธิ์ของสมการโพลาริเซชันเนื่องจากการถ่ายโอนมวล

และ P_1 = ความดันที่ผิวหน้าตัวเร่งปฏิกิริยา เมื่อค่าความหนาแน่นกระแส = 0

P_2 = ความดันที่ผิวหน้าตัวเร่งปฏิกิริยา ที่ค่าความหนาแน่นกระแสใดๆ

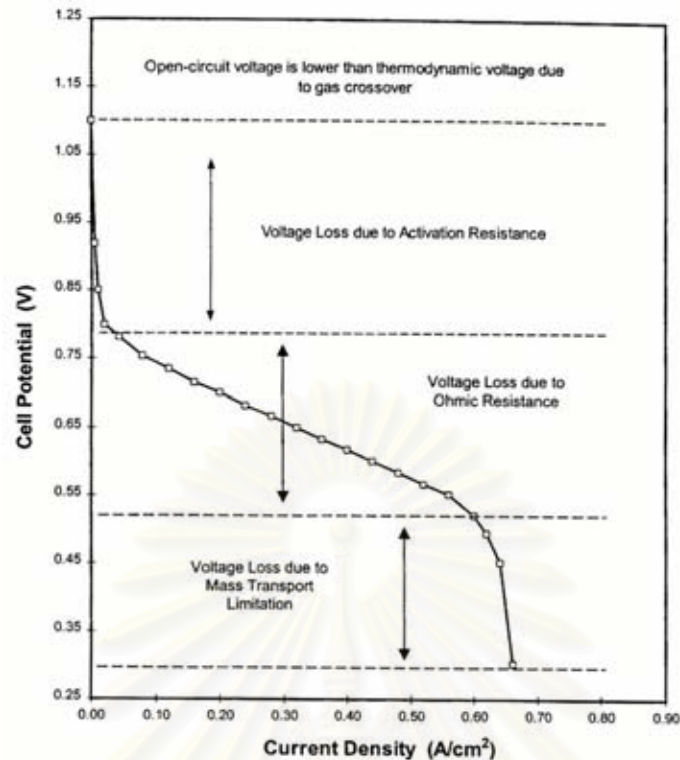
ถ้ากำหนดให้ความสัมพันธ์ระหว่างความดัน และความหนาแน่นกระแสเป็นแบบเส้นตรง จะได้

$$P_2 = P_1 \left(1 - \frac{i}{i_1}\right) \quad (3.44)$$

เมื่อ i_1 = ค่าความหนาแน่นกระแสจำกัด (limiting current density) ซึ่งเป็นค่าความหนาแน่นกระแสสูงสุดที่ทำให้ P_2 ลดลงมา = 0 และสามารถเขียนสมการ overpotential ขึ้นกับ ค่า i_1 ได้ดังนี้

$$\eta_{\text{mass}} = -B \ln\left(1 - \frac{i}{i_1}\right) \quad (3.45)$$

เมื่อนำค่าศักย์ไฟฟ้าของเซลล์เชื้อเพลิงที่ได้จริงนั้นมาเขียนเป็นกราฟเปรียบเทียบกับค่าความหนาแน่นกระแสที่ได้ กราฟที่ได้เราเรียกชื่อกราฟว่า “กราฟโพลาริเซชัน” (Polarization curve) และจะมีลักษณะดังรูปที่ 3.1



รูปที่ 3.1 กราฟโวลตาไรเซชันของเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแลกเปลี่ยนโปรตอน⁽¹³⁾

จากกราฟรูปที่ 3.1 แสดงการเกิดโวลตาไรเซชัน เราจะพบว่าที่ค่าความหนาแน่นกระแสเท่ากับศูนย์ ค่าศักย์ไฟฟ้าที่ได้มีค่าน้อยกว่าค่าศักย์ไฟฟ้าตามทฤษฎีอยู่ก่อนแล้ว ค่าศักย์ไฟฟ้าที่จุดนี้ เราเรียกว่า ค่าศักย์ไฟฟ้าเริ่มต้น (open-circuit potential) ซึ่งเกิดจากการแพร่ข้ามฝั่งของแก๊ส (cross over) ระหว่างขั้วแคโทดและขั้วแอโนดผ่านเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน ไปเกิดปฏิกิริยากันเองโดยตรง ตัวอย่างเช่น แก๊สออกซิเจนข้ามไปทำปฏิกิริยากับแก๊สไฮโดรเจนที่ฝั่งแอโนด หรือแก๊สไฮโดรเจนข้ามไปทำปฏิกิริยากับแก๊สออกซิเจนที่ฝั่งแคโทด คือไม่เกิดปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมีที่ฝั่งขั้วอิเล็กโทรดด้านของตัวเอง ส่งผลให้เกิดเป็นกระแสภายใน (internal current) ซึ่งไม่ส่งผ่านกระแสออกนอกระบบให้กับเครื่องใช้ไฟฟ้า (load) ทำให้เกิดศักย์ไฟฟ้าเกินตัวขึ้นภายในเซลล์เชื้อเพลิง ศักย์ไฟฟ้าที่ได้จริงจึงมีค่าลดลงในช่วงนี้

เมื่อค่าความหนาแน่นกระแสเพิ่มขึ้น จากรูปที่ 3.1 จะพบว่าค่าศักย์ไฟฟ้าลดลง ซึ่งเกิดจากการเกิดโวลตาไรเซชัน โดยเมื่อสังเกตจากกราฟจะพบว่าสามารถแบ่งช่วงการเกิดโวลตาไรเซชันออกได้เป็น 3 ช่วงคือ โวลตาไรเซชันเนื่องจากปฏิกิริยาเคมี (Activation Polarization) โวลตาไรเซชันเนื่องจากความต้านทานไฟฟ้า (Ohmic Polarization) และโวลตาไรเซชันเนื่องจากการถ่ายโอนมวล (Mass transport Polarization)

3.2 ส่วนการจำลองโดยโปรแกรม Fluent 4.5

สำหรับแบบจำลองที่ใช้ในโปรแกรม Fluent 4.5 จะทำการคำนวณโดยเริ่มต้นจากกำหนดค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวให้เป็นตัวแปรต้น เพื่อหาค่าความหนาแน่นกระแสที่ตำแหน่งต่างๆ (local current density) และค่าความเข้มข้นของแก๊สที่ทำปฏิกิริยา ณ ตำแหน่งนั้นๆ ในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยา โดยอาศัยสมการการเกิดปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมีในงานวิจัยของ He, W. และคณะ⁽¹⁰⁾ ที่ใช้สมการของ Butler – Volmer⁽¹⁴⁾ มาทำการดัดแปลง ได้เป็น

$$i = i_0 \frac{C^g y_i}{C_{ref}} \exp\left(\frac{\alpha F}{RT} \eta_{act}\right) \quad (3.46)$$

C_{ref} = ค่าความเข้มข้นมาตรฐานของแก๊สที่ความดัน 1 บรรยากาศ

α = charge transfer coefficient (ค่าจะอยู่ในช่วง 0 – 1)

เป็นสมการที่ผนวกเอาสมการการเกิดโพลาริเซชันเนื่องจากปฏิกิริยาเคมี (จากสมการ (3.41)) และการเกิดโพลาริเซชันเนื่องจากการถ่ายโอนมวล (จากสมการ (3.43)) มาประยุกต์ใช้ โดยนำค่าความพรุน (porosity) มาพิจารณาาร่วมด้วยได้เป็นสมการที่ 3.46

$$i = i_0 \frac{\epsilon^g}{\epsilon_0} \frac{C^g y_i}{C_{ref}} \exp\left(\frac{\alpha F}{RT} \eta_{act}\right) \quad (3.47)$$

จากสมการที่ 3.4 นำมาดัดแปลงสมการที่ 3.47 ได้เป็น

$$i = i_0 (1-s) \frac{C^g y_i}{C_{ref}} \exp\left(\frac{\alpha F}{RT} \eta_{act}\right) \quad (3.48)$$

ในส่วนของการคำนวณการเกิดโพลาริเซชันเนื่องจากความต้านทานไฟฟ้า จากงานวิจัยของ Springer, T. E. et al.⁽¹¹⁾ ได้เสนอไว้ว่า สามารถคำนวณค่าดังกล่าวได้จากค่าการนำไอออนของชั้นเยื่อแผ่น ($\sigma_m(T)$) ซึ่งขึ้นกับค่าความชื้นของชั้นเยื่อแผ่น และอุณหภูมิของเยื่อแผ่น มีหน่วยเป็น ต่อโอมต่อเมตร ดังสมการ

$$\sigma_m(T) = \sigma_m^{ref} \exp\left[1,268 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T}\right)\right] \quad (3.49)$$

เมื่อ σ_m^{ref} คือค่าการนำไอออนของชั้นเยื่อแผ่นที่อุณหภูมิอ้างอิงที่ 303 องศาเควิน และคำนวณจากสมการ

$$\sigma_m^{ref} = 0.005139\lambda - 0.00326 \quad \text{เมื่อ } \lambda \geq 1 \quad (3.50)$$

ทำให้สามารถคำนวณค่าการเกิดโพลาริเซชันเนื่องจากความต้านทานไฟฟ้า ได้จากสมการ

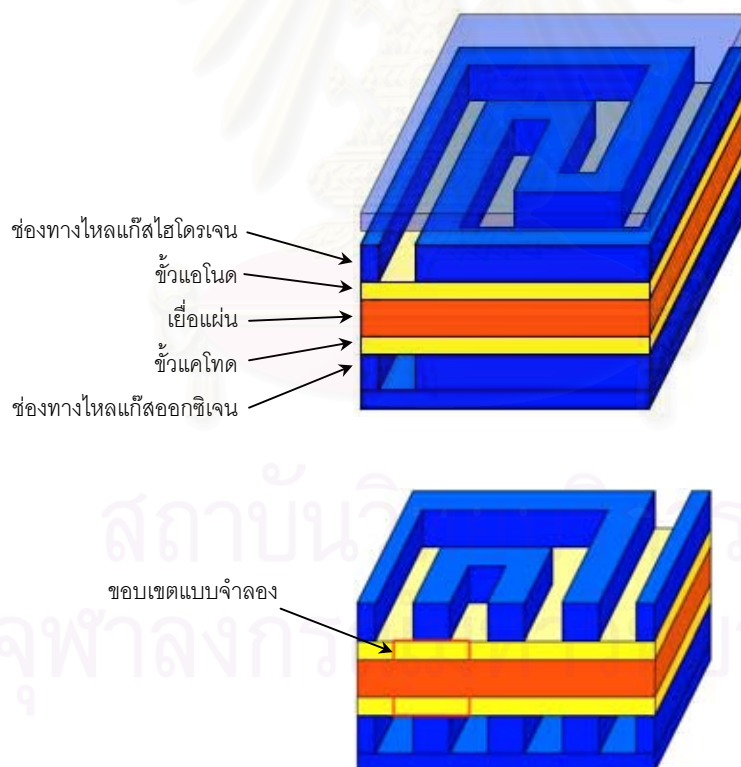
$$\eta_{\text{ohm}} = i \frac{L_m}{\sigma_m(T)} \quad (3.51)$$

เมื่อ L_m เป็นค่าความหนาของชั้นเยื่อแผ่น

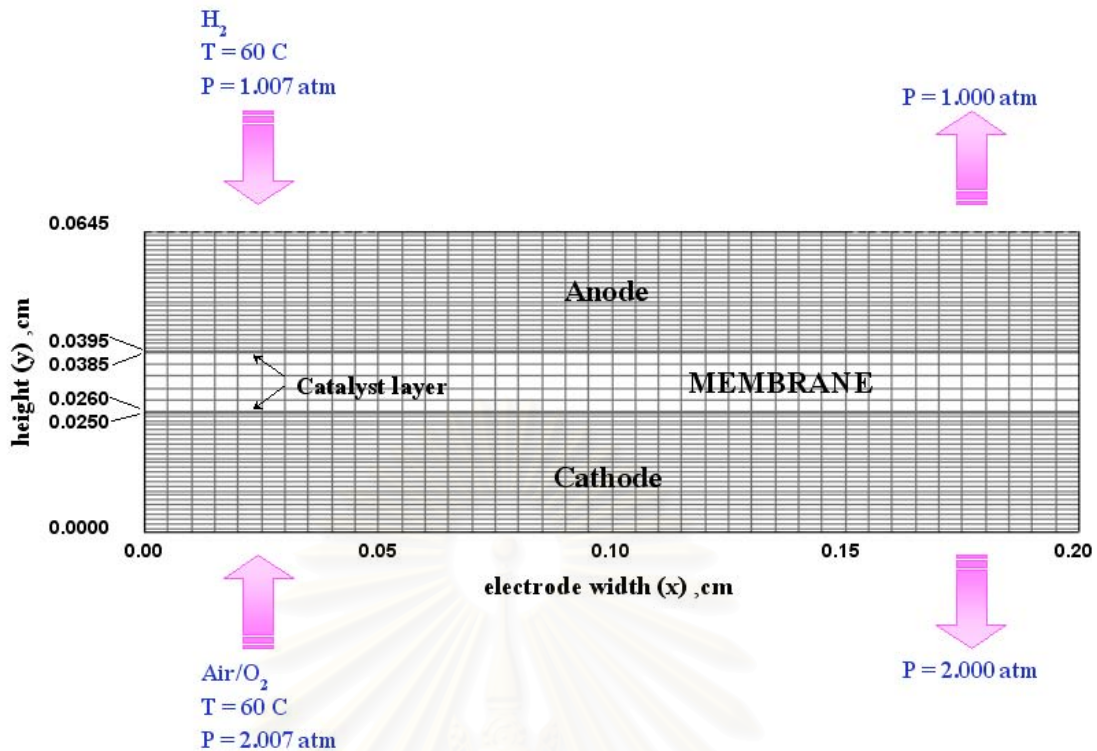
$$r = \frac{L_m}{\sigma_m(T)} \quad (3.52)$$

ลักษณะกรณีศึกษาพื้นฐาน (base case)

ลักษณะกรณีศึกษาพื้นฐานของการจำลองกระบวนการเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน ในงานวิจัยนี้จะทำการสร้างแบบจำลองในลักษณะ 2 มิติ เพื่อศึกษาพลวัตของของไหลและองค์ประกอบของสาร วม ตำแหน่งต่างๆ ภายในขอบเขตแบบจำลองที่ศึกษาดังรูปที่ 3.2 ส่วนรายละเอียดขอบเขตแบบจำลองของกรณีศึกษาพื้นฐานจะแสดงไว้ในรูปที่ 3.3



รูปที่ 3.2 ตำแหน่งขอบเขตแบบจำลองที่ศึกษา



รูปที่ 3.3 ขอบเขตแบบจำลองของกรณีศึกษาพื้นฐาน

แบบจำลองที่ศึกษามีลักษณะเป็นรูปสี่เหลี่ยมผืนผ้า มีขอบเขตครอบคลุมส่วนประกอบเสร็จของชั้นอิเล็กโทรดและเยื่อแผ่น (membrane electrode assemble, MEA) ที่เป็นวัสดุมีรูพรุน ความสูง (y) (หรือคือช่วงความหนา MEA) และความยาว (x) ซึ่งขอบเขตที่กำหนด จะสามารถอธิบายปรากฏการณ์ของทั้งระบบได้ โดยให้ส่วนนอกเหนือจากขอบเขตที่ทำการจำลองมีความเป็นสมมาตรกัน จึงทำให้ไม่มีความจำเป็นต้องจำลองระบบทั้งหมด

ภายในขอบเขตที่ทำการจำลองจะมีเส้นแบ่งเขต (boundary) ทั้งหมด 6 ส่วน คือ

ส่วนที่ 1 $0 \text{ cm} < x < 0.05 \text{ cm}, y = 0 \text{ cm}$ และ $0 \text{ cm} < x < 0.05 \text{ cm}, y = 0.0645 \text{ cm}$: เป็นครึ่งหนึ่งของช่องทางเข้าแก๊สออกซิเจนหรืออากาศ และแก๊สไฮโดรเจนตามลำดับ

ส่วนที่ 2 $0.05 \text{ cm} < x < 0.15 \text{ cm}, y = 0 \text{ cm}$ และ $0.05 \text{ cm} < x < 0.15 \text{ cm}, y = 0.0645 \text{ cm}$: เป็นส่วนหนึ่งที่สัมผัสกับฉากกั้น (shoulder) บนแผ่น bipolar plate และไม่มีการถ่ายเทมวล

ส่วนที่ 3 $0.15 \text{ cm} < x < 0.2 \text{ cm}, y = 0 \text{ cm}$ และ $0.15 \text{ cm} < x < 0.2 \text{ cm}, y = 0.0645 \text{ cm}$ เป็นครึ่งหนึ่งของช่องทางออกแก๊สออกซิเจนหรืออากาศ และแก๊สไฮโดรเจนตามลำดับ

ส่วนที่ 4 $x = 0 \text{ cm}, 0 \text{ cm} < y < 0.0645 \text{ cm}$ และ $x = 0.2 \text{ cm}, 0 \text{ cm} < y < 0.0645 \text{ cm}$ เป็นเส้นแบ่งเขตที่แสดงแนวสมมาตรกับหน่วยที่อยู่ถัดออกไป

ส่วนที่ 5 $0 \text{ cm} < x < 0.2 \text{ cm}, y = 0.025 \text{ cm}$ และ $0 \text{ cm} < x < 0.2 \text{ cm}, y = 0.0395 \text{ cm}$ เป็นเส้นแบ่งเขตระหว่างชั้นอิเล็กโทรดและชั้นตัวเร่งปฏิกิริยา

ส่วนที่ 6 $0 \text{ cm} < x < 0.2 \text{ cm}, y = 0.026 \text{ cm}$ และ $0 \text{ cm} < x < 0.2 \text{ cm}, y = 0.0385 \text{ cm}$ เป็นเส้นแบ่งเขตระหว่างชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาและชั้นเยื่อแผ่น

ภาวะการจำลองที่ใช้คือ อุณหภูมิของระบบคงที่ที่ 60 องศาเซลเซียส สารออกซิไดซ์ที่ป้อนเข้าทางด้านขั้วแอโนด จะใช้แก๊สออกซิเจนผสมกับแก๊สไนโตรเจนในอัตราส่วนโดยมวล 0.1 : 0.9 หรือเท่ากับอัตราส่วนโดยโมล 0.0886 : 0.9114 ตามลำดับ ส่วนเชื้อเพลิงที่ป้อนเข้าทางด้านขั้วแคโทด จะใช้แก๊สไฮโดรเจนบริสุทธิ์ และกำหนดให้ค่าความดันต่างระหว่างขาเข้าและขาออกทั้งทางด้านขั้วแคโทดและขั้วแอโนดคงที่เท่ากับ 0.007 บรรยากาศ โดยทางด้านขั้วแคโทดมีความดันขาเข้าเท่ากับ 2.007 บรรยากาศ ปล่องออกที่ความดัน 2 บรรยากาศ ส่วนทางด้านขั้วแอโนดมีความดันขาเข้าเท่ากับ 1.007 บรรยากาศ และปล่องออกที่ความดัน 1 บรรยากาศ สำหรับสาเหตุที่ทางผู้วิจัยกำหนดค่าความดันต่างระหว่างขาเข้าและขาออกให้เท่ากับ 0.007 บรรยากาศ นั้น ก็เพื่อจะได้ทำการจำลองภาวะเลียนแบบงานวิจัยของ He, W. และคณะ⁽¹⁰⁾ และนำผลที่ได้มาเปรียบเทียบกันได้ ส่วนการกำหนดค่าความชื้นเข้ามาในระบบนั้นในงานวิจัยนี้จะกำหนดให้ไม่มีความชื้นขาเข้า แต่สามารถกำหนดค่าความชื้นขาเข้าได้โดยการกำหนดอัตราส่วนโดยมวลของน้ำที่เข้ามาในระบบได้โดยตรง

เนื่องจากแบบจำลองที่สร้างขึ้น ผู้ใช้สามารถกำหนดให้แก๊สระหว่างขั้วแคโทดและขั้วแอโนด ไม่สามารถไหลข้ามผ่านไปยังขั้วฝั่งตรงข้ามได้ โดยอาศัยการกำหนดค่าการซึมผ่านของแก๊สภายในชั้นเยื่อแผ่นไว้สูงมากๆ จึงถือได้ว่าเซลล์เชื้อเพลิงที่ทำการจำลองนั้น ไม่มีการเกิดกระแสภายใน (internal current) ขึ้นในระบบ

ค่าคงที่ที่สำคัญในการคำนวณในแบบจำลองเซลล์เชื้อเพลิง จะสรุปค่าทั้งหมดไว้ในตารางที่ 3.1 และ 3.2

ตารางที่ 3.1 คงที่การคำนวณการถ่ายโอนมวลและค่าที่การคำนวณทางไฟฟ้าเคมี

Parameters	Value	Symbol	Unit
Anode exchange current density ⁽¹⁰⁾	100	$I_{0,\text{anode}}$	A/m ²
Cathode exchange current density ⁽¹⁵⁾	5.00E+06	$I_{0,\text{cath}}$	A/m ²
Anode charge transfer coefficient ⁽²⁾	0.5	α_{anode}	-
Cathode charge transfer coefficient ⁽¹⁵⁾	0.5	α_{cath}	-
Gas Viscosity ⁽¹⁰⁾	2.03E-05	μ^g	Kg/m sec
Water Viscosity ⁽¹⁰⁾	4.67E-04	μ^l	Kg/m sec
Gas permeability of the electrode layer ⁽¹⁰⁾	1.20E-12	K_0	m ²
Hydraulic permeability of membrane ⁽¹⁵⁾	1.58E-18	K^l	m ²
Capillary diffusion coefficient ⁽¹⁰⁾	1.00E-08	D_c	m ² /sec
interfacial drag coefficient ⁽¹⁰⁾	0.005	f	-
Condensation rate constant *	1.00	k_c	1/sec
Vaporization rate constant *	1.00	k_v	1/atm sec

* กำหนดค่าคงที่สำหรับการกลั่นตัวและการระเหยของน้ำขึ้นเอง

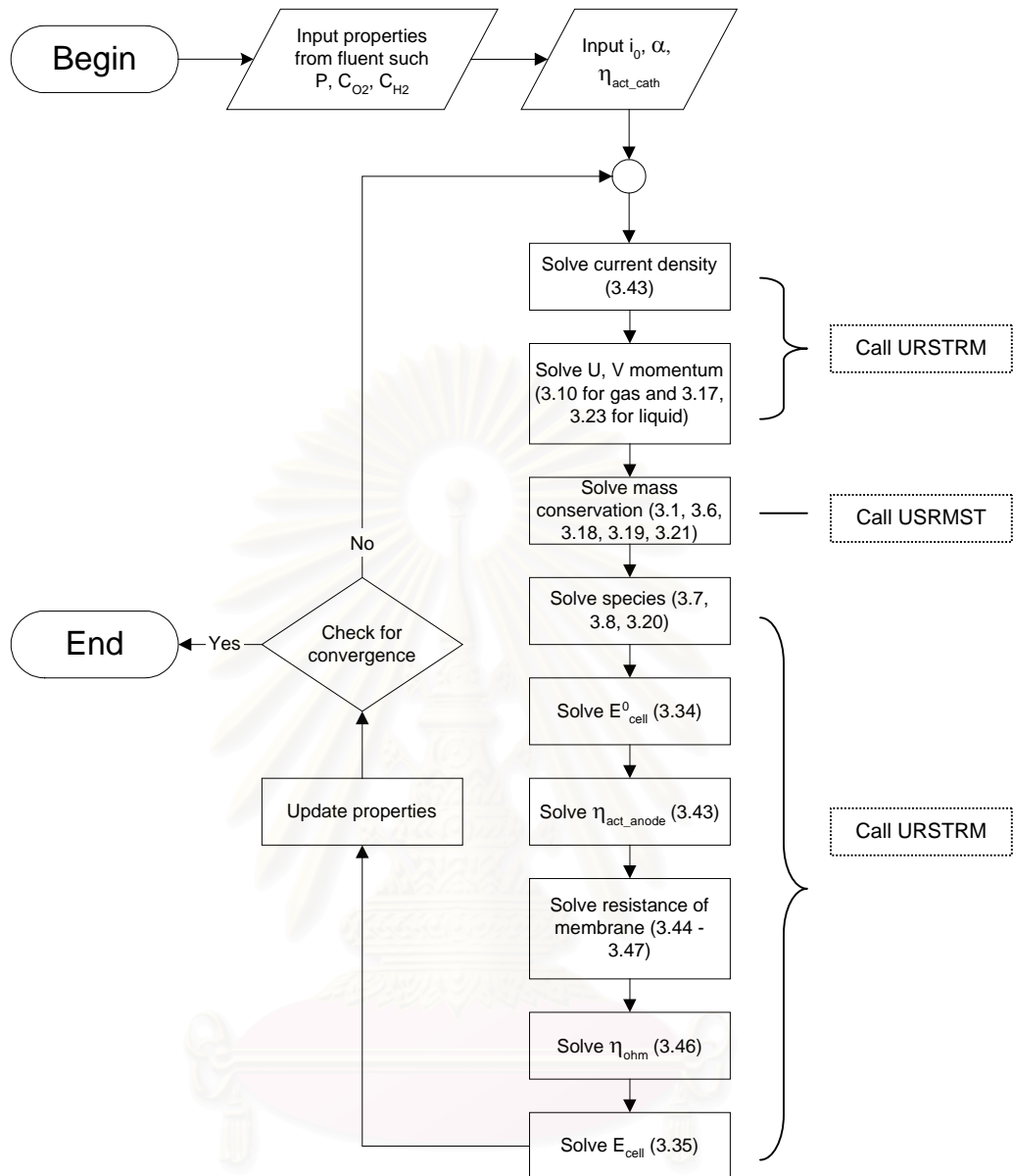
ตารางที่ 3.2 ขนาดชิ้นส่วนต่างๆ ของเซลล์เชื้อเพลิง

Parameters	Value	Unit
Inlet channel width (half) ⁽¹⁰⁾	0.05	cm
Shoulder width ⁽¹⁰⁾	0.10	cm
Outlet channel width (half) ⁽¹⁰⁾	0.05	cm
Electrode height ⁽¹⁰⁾	0.025	cm
Catalyst layer height ⁽¹⁵⁾	10	μm
Membrane layer height ⁽¹⁵⁾	125	μm

การคำนวณภายในเซลล์เชื้อเพลิง เพื่อให้ได้มาซึ่งค่าศักย์ไฟฟ้าและค่าความหนาแน่นกระแสของเซลล์เชื้อเพลิง มีขั้นตอนวิธีการคำนวณที่สลับซับซ้อน ทำให้การกำหนดค่าเริ่มต้นการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงโดยเริ่มจากค่าศักย์ไฟฟ้าของเซลล์หรือค่าความหนาแน่นกระแสแทบจะเป็นไปไม่ได้ ดังนั้นทางผู้วิจัย จึงเสนอวิธีการคำนวณตามแผนผังการคำนวณในรูปที่ 3.4 โดยเริ่มจากการกำหนดค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีทางด้านขั้วแคโทดเป็นอันดับแรก จากนั้นจึงส่งค่าดังกล่าวไปยังส่วน user defined subroutine ซึ่งเป็นฟังก์ชันเพิ่มเติมในโปรแกรม Fluent ที่ผู้ใช้สามารถเขียนคำสั่งโดยใช้ภาษาฟอร์แทรนบนแม่แบบ (template file) ต่างๆ เพื่อทำการคำนวณสมการเพิ่มเติมสำหรับแก้ไขการคำนวณเชิงพลวัตของของไหลภายในเซลล์เชื้อเพลิง และการถ่ายโอนมวลภายในแบบจำลองกระบวนการเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน

แม่แบบที่ใช้ในแบบจำลอง มี 2 ฉบับคือ URSTRM และ USRMST โดยเพิ่ม URSTRM ใช้การคำนวณโมเมนต์ และการเกิดปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมี ส่วนเพิ่ม USRMST ใช้สำหรับคำนวณการถ่ายโอนมวลระหว่างภูมิภาค สำหรับขั้นตอนการใช้โปรแกรม Fluent และการใช้ฟังก์ชัน user defined subroutine สามารถศึกษาได้ในส่วนภาคผนวก ข และภาคผนวก ค

สำหรับการคำนวณในรอบหนึ่งๆ (iteration) นั้น ในการคำนวณรอบแรก โปรแกรม Fluent จะนำค่าสมบัติต่างๆ เช่นความเร็ว ความดัน ความเข้มข้น ฯลฯ ที่คำนวณได้มาเปรียบเทียบกับค่าเริ่มต้น หากพบว่าผลของความแตกต่างของค่าดังกล่าวหรือค่าความผิดพลาด (residue) ยังสูงเกินกว่าค่าที่จะรับได้ซึ่งมีค่าเท่ากับ 10^{-3} ก็จะทำให้การคำนวณในรอบต่อไป โดยนำค่าสมบัติต่างๆ ที่ได้คำนวณไว้ในรอบแรกนำมาเป็นค่าเริ่มต้นของการคำนวณในรอบต่อไป จนกว่าค่าความผิดพลาดจะต่ำกว่าค่าที่รับได้ จึงจะสิ้นสุดการคำนวณ



รูปที่ 3.4 แผนผังการคำนวณของระบบเซลล์เชื้อเพลิงในโปรแกรม Fluent 4.5

ขั้นตอนสุดท้ายเมื่อได้แบบจำลองที่ถูกต้องแล้ว งานวิจัยนี้จะนำแบบจำลองที่สร้างขึ้นไปจำลองกระบวนการเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอนที่ภาวะการทำงานต่างๆ โดยปรับเปลี่ยนตัวแปรอันได้แก่ ค่าความดันของแก๊สขาเข้าทางด้านขั้วแคโทด และค่าความเข้มข้นของแก๊สออกซิเจนที่ป้อนให้กับระบบ

3.3 ส่วนการจำลองโดยโปรแกรม Aspen Plus

การจำลองกระบวนการในโปรแกรม Fluent 4.5 จะเริ่มต้นจากการกำหนดค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีเป็นค่าเริ่มต้น ทำให้ได้ค่าความเข้มข้นของแก๊สออกซิเจนและไฮโดรเจนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยา ค่าสัดส่วนของน้ำในช่องรูพรุนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยา ค่าความต้านทานของเยื่อแผ่น ค่าศักย์ไฟฟ้าของเซลล์เชื้อเพลิง และค่าความหนาแน่นกระแส ที่ภาวะการทำงาน of เซลล์เชื้อเพลิงต่างๆ

สำหรับการใช้ค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีเป็นค่าเริ่มต้นสำหรับการจำลองเซลล์เชื้อเพลิงในโปรแกรม Aspen Plus นั้น ผู้วิจัยมีความเห็นว่า ไม่น่าจะเป็นวิธีการที่เหมาะสมเนื่องจากในการปฏิบัติงานจริง การกำหนดค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีให้กับกระบวนการเป็นสิ่งที่ไม่สามารถกระทำได้โดยตรง แต่มักจะใช้วิธีการกำหนดค่าความหนาแน่นกระแสหรือกำหนดค่าศักย์ไฟฟ้าของเซลล์เชื้อเพลิงเป็นค่าเริ่มต้น ดังนั้นทางผู้วิจัยจึงได้นำผลจากการจำลองกระบวนการในโปรแกรม Fluent 4.5 ที่เวลาการคำนวณสูงๆ เพื่อให้ผลที่ได้มีความใกล้เคียงกับที่ภาวะคงตัวมากที่สุด มาสรุปหาสมการความสัมพันธ์ต่างๆ ที่ขึ้นกับภาวะการทำงาน of เซลล์เชื้อเพลิง เพื่อส่งความสัมพันธ์ดังกล่าวให้กับแบบจำลองในโปรแกรม Aspen Plus ซึ่งทำการจำลองกระบวนการในภาวะคงตัว และใช้การกำหนดค่าความหนาแน่นกระแสเป็นค่าเริ่มต้นแทน ซึ่งต้องมีการดัดแปลงสมการการเกิดปฏิกิริยาเคมีเล็กน้อยเพื่อให้เหมาะสมและง่ายต่อการนำไปจำลองกระบวนการ ดังนี้

จากสมการที่ 3.48 นำค่าความเข้มข้นขาเข้าเริ่มต้น ($C^g y_{in,i}$) คูณทั้งเศษและส่วนจะได้ (เป็นค่าเดียวกับค่าความเข้มข้นเมื่อยังไม่มีการเกิดกระแสในระบบเซลล์เชื้อเพลิง)

$$i = i_0(1-s) \frac{C^g y_i}{C_{ref}} \frac{C^g y_{in,i}}{C^g y_{in,i}} \exp\left(\frac{\alpha F}{RT} \eta_{act}\right) \quad (3.53)$$

ทำการจัดรูปสมการเสียใหม่โดยย้ายค่าให้เหลือค่า η_{act} เพียงค่าเดียว

$$\eta_{act} = \frac{RT}{\alpha F} \ln\left(\frac{i}{i_0} \frac{C_{ref}}{C^g y_{in,i} (1-s)}\right) - \frac{RT}{\alpha F} \ln\left(\frac{C^g y_i}{C^g y_{in,i}}\right) \quad (3.54)$$

$$\text{กำหนดให้ } i_{0,new} = i_0 \frac{C^g y_{in,i} (1-s)}{C_{ref}} \quad (3.55)$$

เมื่อให้ $i_{0,new}$ เป็นค่า exchange current density ใหม่ ซึ่งขึ้นกับความเข้มข้นของแก๊สขาเข้า และสัดส่วนปริมาตรของน้ำในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยา

$$\text{และจากสมการ 3.44 จะได้ } \frac{C^g y_i}{C^g y_{in,i}} = 1 - \frac{i}{i_1} \quad (3.56)$$

จะได้สมการใหม่คือ

$$\eta_{\text{act}} = \frac{RT}{\alpha F} \ln\left(\frac{i}{i_{0,\text{new}}}\right) - \frac{RT}{\alpha F} \ln\left(1 - \frac{i}{i_1}\right) \quad (3.57)$$

จากสมการ 3.57 พบว่าเมื่อเทียบกับสมการการคำนวณค่าโพลาริเซชันเนื่องจากปฏิกิริยา (สมการ 3.41) และสมการการคำนวณค่าโพลาริเซชันเนื่องจากการถ่ายโอนมวล (สมการ 3.45) จะได้ว่า

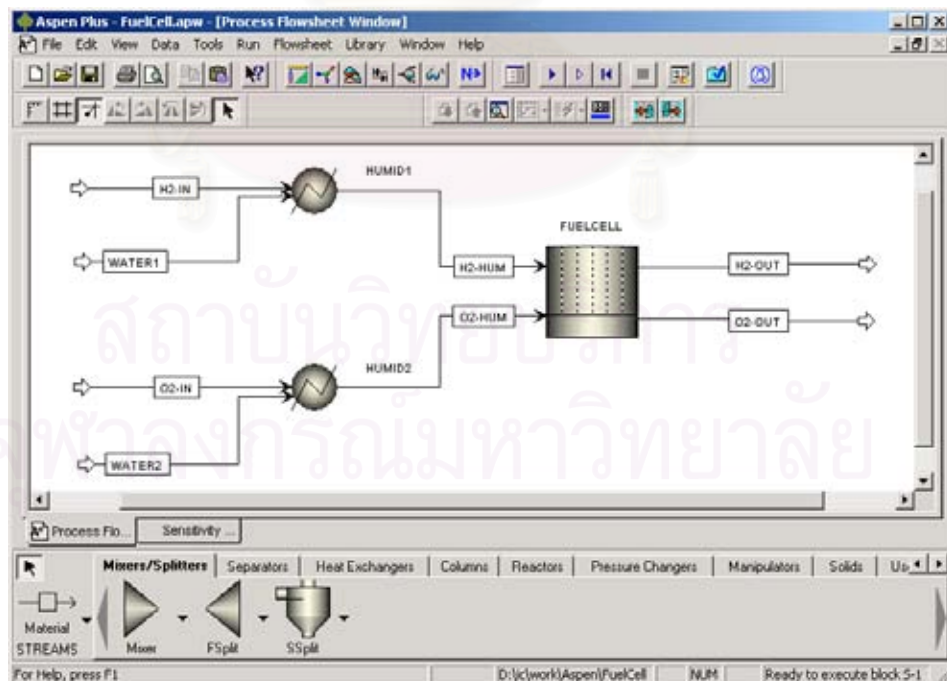
$$\eta_{\text{act}} = \eta_{\text{act,new}} + \eta_{\text{mass}} \quad (3.58)$$

$$\text{เมื่อ } \eta_{\text{act,new}} = \frac{RT}{\alpha F} \ln\left(\frac{i}{i_{0,\text{new}}}\right) \quad (3.59)$$

$$\text{และ } \eta_{\text{mass}} = -\frac{RT}{\alpha F} \ln\left(1 - \frac{i}{i_1}\right) \quad (3.60)$$

ขั้นตอนการสร้างแบบจำลองบนโปรแกรม Aspen Plus

เริ่มต้นจากเปิดโปรแกรม Aspen Plus แบบจำลองที่สร้างจะใช้การคำนวณแบบแก๊สอุดมคติ ทำการสร้างหน่วยปฏิบัติการต่างๆ บนหน้าต่าง Process Flowsheet ดังแสดงในรูปที่ 3.5



รูปที่ 3.5 หน้าต่าง Process Flowsheet แสดงการเชื่อมต่อระหว่างหน่วยปฏิบัติการในระบบเซลล์เชื้อเพลิง

โดยเลือกหน่วยปฏิบัติที่ใช้ได้แก่

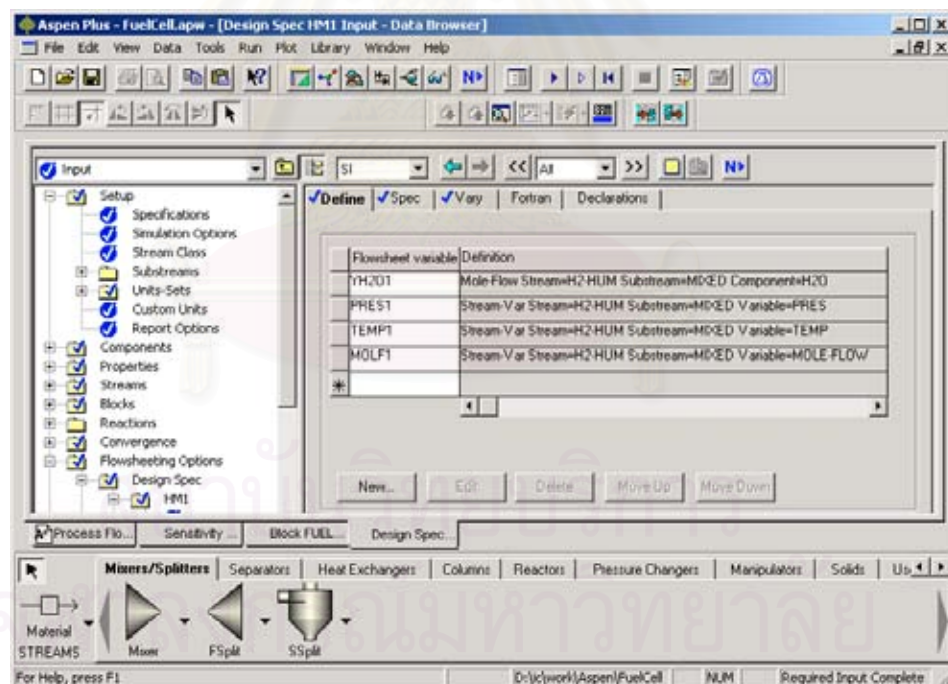
- Heater 2 ตัว ใช้เป็นตัวแทนหน่วยเพิ่มความชื้นให้แก่แก๊สขาเข้าเซลล์เชื้อเพลิง ตั้งชื่อเป็น HUMID1 และ HUMID2

- User2 1 ตัว ใช้เป็นตัวแทนหน่วยเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน ตั้งชื่อเป็น FUELCELL

HUMID1 ใช้สำหรับเพิ่มความชื้นแก๊สไฮโดรเจน มีการป้อนแก๊สไฮโดรเจนในสาย H2-IN และน้ำในสาย WATER1 แก๊สไฮโดรเจนชื้นจะออกมาในสาย H2-HUM

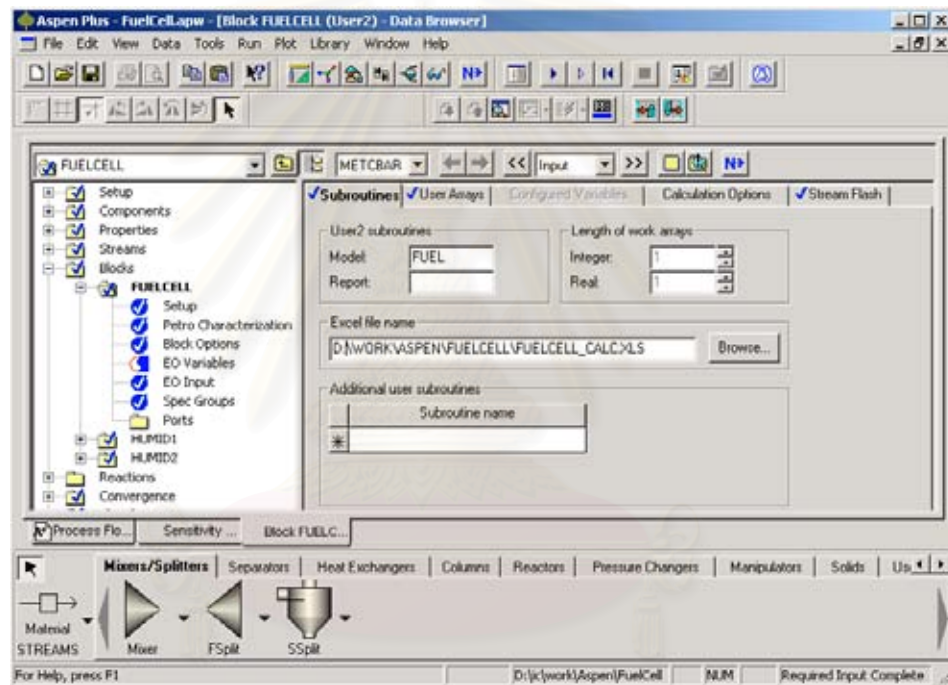
เช่นเดียวกัน HUMID2 ใช้สำหรับเพิ่มความชื้นแก๊สออกซิเจน มีการป้อนแก๊สออกซิเจนในสาย O2-IN และน้ำในสาย WATER2 แก๊สออกซิเจนชื้นจะออกมาในสาย O2-HUM

สำหรับการกำหนดค่าความชื้นให้กับแก๊สออกซิเจนและไฮโดรเจน จะใช้คำสั่ง Design Spec. ซึ่งอยู่ภายในคำสั่ง Flowsheeting Options ตั้งชื่อเป็น HM1 และ HM2 ดังแสดงในรูปที่ 3.6 เพื่อคำนวณปริมาณน้ำในสาย WATER1 และ WATER2 ที่ป้อนเข้า โดยการป้อนเป็นค่าเปอร์เซ็นต์ความชื้นที่ต้องการให้ออกในสาย H2-HUM และ O2-HUM ได้ทันทีในหน้า Spec



รูปที่ 3.6 หน้าต่างการกำหนดคำสั่งเพื่อกำหนดค่าความชื้นของแก๊สขาเข้า

หน่วยปฏิบัติการ User2 ดังแสดงในรูปที่ 3.7 จะเป็นหน่วยปฏิบัติการที่ทางโปรแกรม Aspen Plus เปิดโอกาสให้ผู้ใช้สามารถจำลองหน่วยปฏิบัติการที่โปรแกรม Aspen Plus ไม่ได้เตรียมไว้ให้ได้ เพื่อให้ผู้ใช้ได้กำหนดคุณลักษณะภายในหน่วยปฏิบัติด้วยตัวเอง โดยอาศัยการคำนวณและส่งข้อมูลเชื่อมกันระหว่างโปรแกรม Aspen Plus กับคำสั่งในภาษาฟอร์แทรน หรือเชื่อมกับโปรแกรม Excel ได้โดยอัตโนมัติ ซึ่งทางผู้วิจัยจะขอให้โปรแกรม Excel เป็นตัวกำหนดการคำนวณของหน่วยปฏิบัติการเซลล์เชื้อเพลิงให้กับโปรแกรม Aspen Plus แทน เพราะมีความคุ้นเคย และใช้งานได้สะดวกกว่า ส่วนวิธีการเชื่อมต่อโปรแกรมนั้นเป็นวิธีที่ค่อนข้างจะยุ่งยากซับซ้อน หากผู้ใดสนใจสามารถศึกษาได้จากคู่มือที่แนบมากับโปรแกรม Aspen Plus

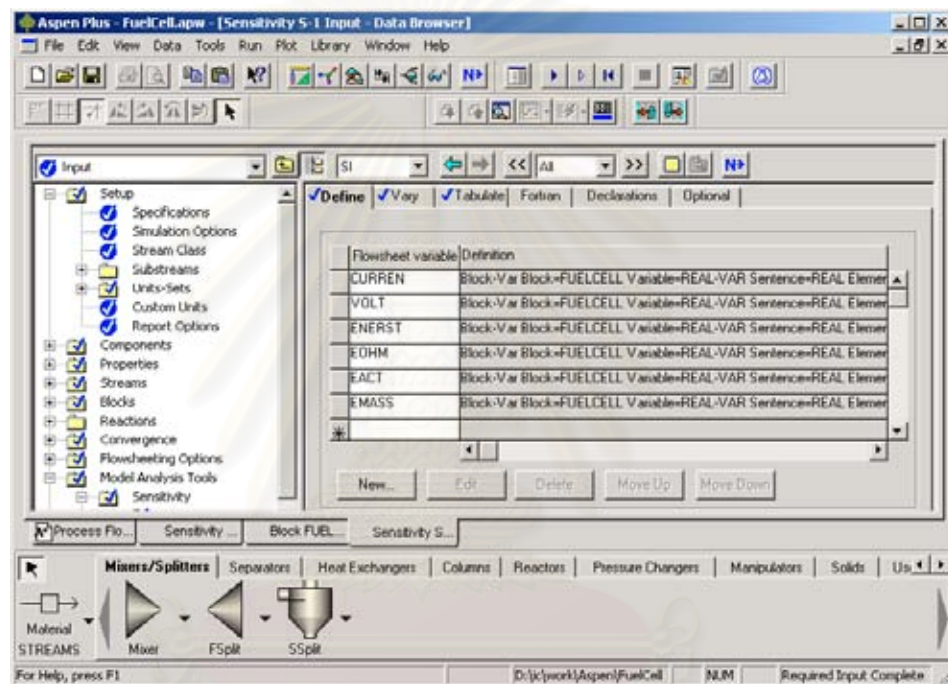


รูปที่ 3.7 หน้าต่างการกำหนดข้อมูลในหน่วยปฏิบัติการเซลล์เชื้อเพลิง

การส่งค่า นั้นจะเริ่มจาก โปรแกรม Aspen Plus จะคำนวณสมบัติต่างๆ ของสาย H₂-HUM และ O₂-HUM ที่ป้อนเข้าหน่วย FUELCELL ภายในหน่วย FUELCELL จะให้ผู้ใช้กำหนดค่าต่างๆ คือ ค่าอุณหภูมิในเซลล์เชื้อเพลิง จำนวนเซลล์เชื้อเพลิงที่นำมาต่อ ขนาดพื้นที่ที่ทำปฏิกิริยาของเยื่อแผ่น และค่าความหนาแน่นกระแส จากนั้นโปรแกรม Aspen Plus ก็ส่งค่าสมบัติของสารป้อนและค่าต่างๆ ให้กับโปรแกรม Excel เพื่อทำการคำนวณค่า ศักย์ไฟฟ้าเกินตัวต่างๆ ศักย์ไฟฟ้าที่ได้จากเซลล์เชื้อเพลิง และปริมาณสารที่เหลือออกจากหน่วยปฏิบัติการ ส่งกลับไปแสดงผลในส่วนแสดงผลของโปรแกรม Aspen Plus เพื่อให้โปรแกรม Aspen Plus

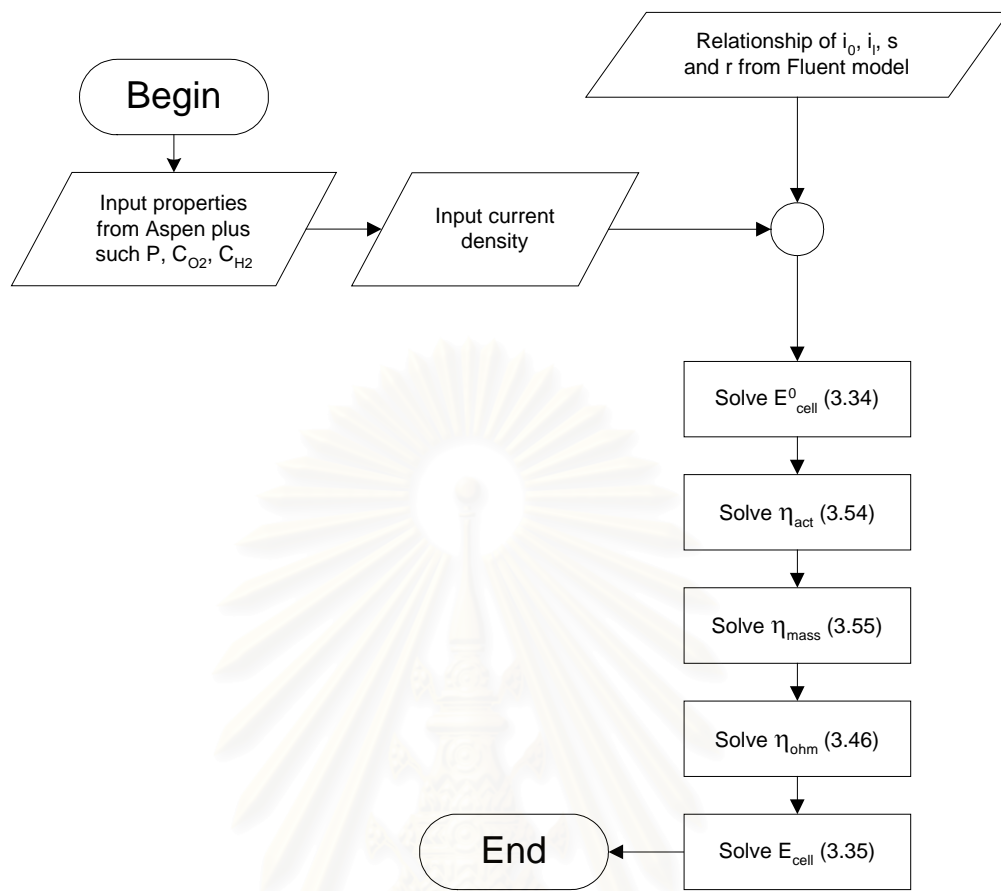
คำนวณค่าสมบัติของแก๊สที่ออกจากหน่วย FUELCELL ในสาย H2-OUT และ O2-OUT เป็น การสิ้นสุดการคำนวณ

ในการกำหนดค่าความหนาแน่นกระแสให้หน่วยปฏิบัติการนั้น เพื่อให้งานทุกอย่างง่ายขึ้น ทางผู้วิจัยได้เลือกใช้คำสั่ง Sensitivity ที่อยู่ในส่วน Model Analysis Tools ตั้งชื่อเป็น S-1 ดังแสดงในรูปที่ 3.8 ใช้สำหรับปรับเปลี่ยนค่าความหนาแน่นกระแสค่าต่างๆ และแสดงผลของค่า ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์เชื้อเพลิงและศักย์ไฟฟ้าเกินตัวชนิดต่างๆ ได้ในคราวเดียว เพื่อนำผลที่ได้ไป เขียนเป็นกราฟโพลาริเซชันต่อไป



รูปที่ 3.8 หน้าต่างการกำหนดคำสั่งเปลี่ยนค่าความหนาแน่นกระแส ของเซลล์เชื้อเพลิงโดยอัตโนมัติ

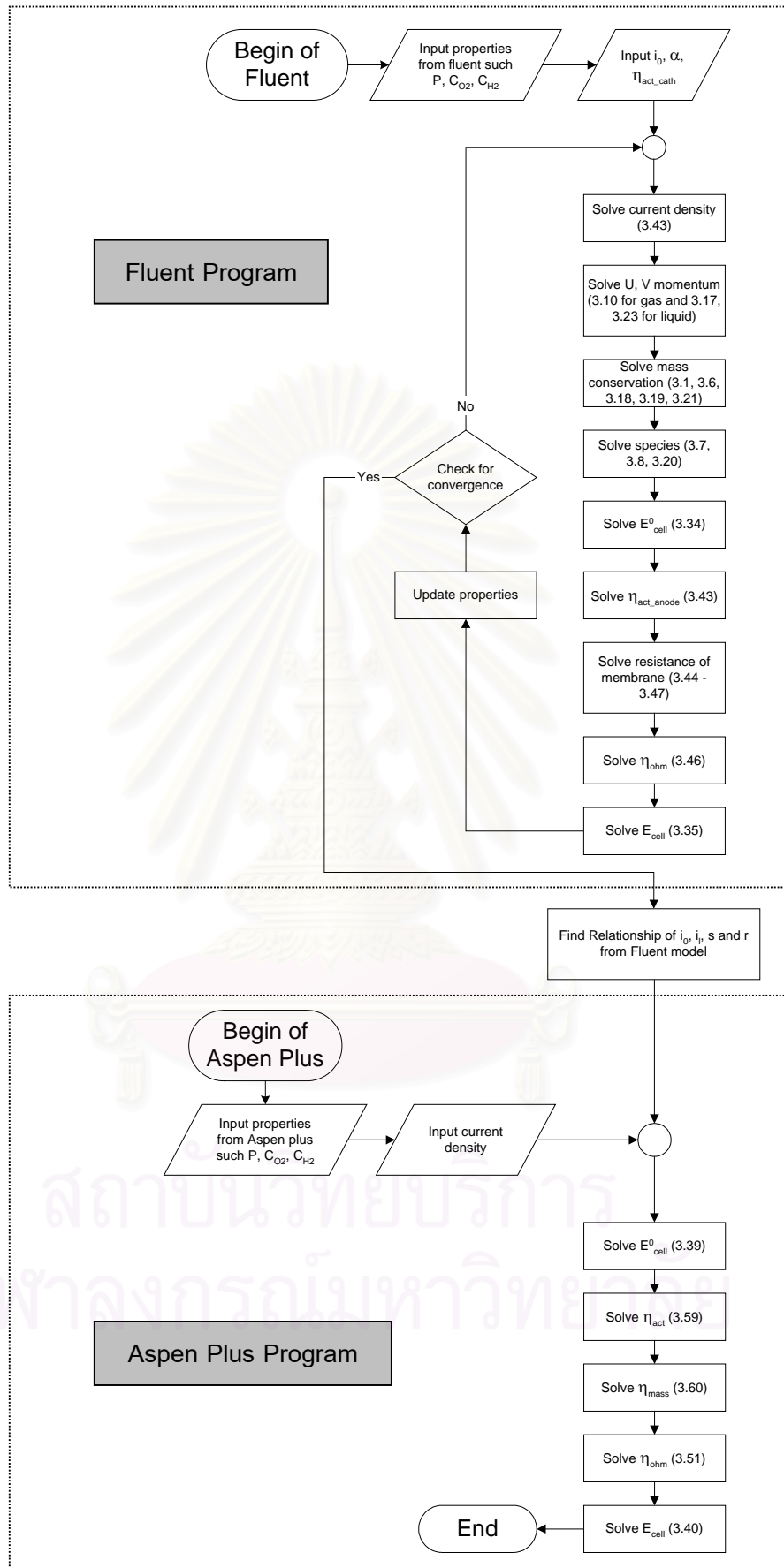
สำหรับขั้นตอนการคำนวณในโปรแกรม Aspen Plus สามารถเขียนเป็นแผนผังได้ดังรูปที่ 3.9 โดยเริ่มต้นจากกำหนดภาวะการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงและค่าความหนาแน่นกระแสที่ต้องการ จากนั้นโปรแกรม Aspen Plus จะทำการคำนวณหาค่า $i_{0,new}$, i_l และ r ซึ่งอาศัยความสัมพันธ์กับภาวะการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิง ที่ได้จากการวิเคราะห์ผลการจำลอง จากโปรแกรม Fluent 4.5 และนำค่าที่ได้ไปคำนวณค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวชนิดต่างๆ โดยใช้สมการ 3.59, 3.60 และ 3.42 ไปหาค่าศักย์ไฟฟ้าที่ได้ตามทฤษฎี เพื่อให้ได้ค่าศักย์ไฟฟ้าของ เซลล์เชื้อเพลิงออกมา



รูปที่ 3.9 แผนผังการคำนวณของระบบเซลล์เชื้อเพลิงในโปรแกรม Aspen Plus

สุดท้ายเราจะสามารถเขียนแผนผังการคำนวณระหว่างโปรแกรม Fluent และโปรแกรม Aspen Plus รวมกันได้เป็นแผนผังดังรูปที่ 3.10

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย



รูปที่ 3.10 แผนผังการคำนวณระหว่างโปรแกรม Fluent และโปรแกรม Aspen Plus

บทที่ 4

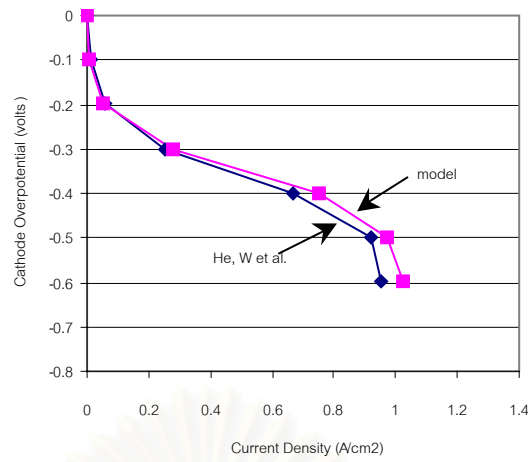
ผลงานวิจัยและการวิเคราะห์ผล

ผลจากการพัฒนาแบบจำลองคณิตศาสตร์ของกระบวนการเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่น แลกเปลี่ยนโปรตอนทำให้สามารถใช้ในการทำนายพฤติกรรมของเซลล์เชื้อเพลิงได้ในระดับหนึ่ง โดยในส่วนของผลการวิเคราะห์ผลนั้น จะแบ่งออกเป็น 2 ส่วนหลักๆ คือ ส่วนของผลที่ได้จากแบบจำลองกระบวนการบนโปรแกรม Fluent 4.5 ผลจากการจำลองถูกวิเคราะห์เพื่อยืนยันความถูกต้องของแบบจำลองที่สร้างขึ้น จากนั้นจึงนำแบบจำลองดังกล่าวไปทำการจำลองกระบวนการเซลล์เชื้อเพลิงเพื่อศึกษาผลของการปรับเปลี่ยนตัวแปรภาวะการทำงานได้แก่ ความดันแก๊สเข้าทางด้านขั้วแคโทด ความเข้มข้นของออกซิเจนเข้า และพฤติกรรมของเซลล์เชื้อเพลิงที่ขึ้นกับเวลา ส่วนที่ 2 จะเป็นการวิเคราะห์ผลที่ได้จากแบบจำลองบนโปรแกรม Aspen Plus ซึ่งแบบจำลองนี้ ได้ประยุกต์มาจากผลที่ได้จากแบบจำลองบนโปรแกรม Fluent 4.5 ทำให้แบบจำลองบนโปรแกรม Aspen Plus นั้นสามารถทำนายพฤติกรรมของเซลล์เชื้อเพลิงได้ถูกต้องเช่นเดียวกัน ใช้เวลาในการคำนวณที่สั้นลงสะดวกในการนำแบบจำลองไปใช้ อีกทั้งยังสามารถจำลองกระบวนการเซลล์เชื้อเพลิงร่วมกับหน่วยปฏิบัติการอื่นๆ ได้ตามต้องการ

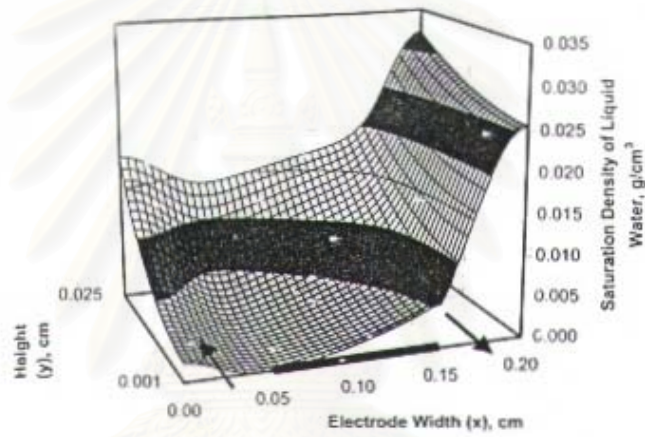
4.1 การยืนยันความถูกต้องของแบบจำลองบนโปรแกรม Fluent 4.5

แบบจำลองที่พัฒนาขึ้น เริ่มต้นจากการพัฒนาให้มีลักษณะคล้ายคลึงกับแบบจำลองในงานวิจัยของ He, W และคณะ⁽¹⁰⁾ ที่ได้พัฒนาแบบจำลองในภาวะคงตัว และจำลองเพียงแค่ชั้นขั้วแคโทดเท่านั้น โดยงานวิจัยนี้ได้พัฒนาแบบจำลองเพิ่มเติมในส่วนของชั้นเยื่อแผ่นและชั้นขั้วแอโนด และในภาวะพลวัต เพื่อให้แบบจำลองเซลล์เชื้อเพลิงมีความถูกต้องครบถ้วนมากที่สุด จากนั้นจึงนำผลการจำลองมาเปรียบเทียบกัน เพื่อยืนยันความถูกต้องของแบบจำลองที่งานวิจัยนี้ได้พัฒนาขึ้น เพราะแบบจำลองในงานวิจัยของ He, W และคณะ⁽¹⁰⁾ ได้ผ่านการยืนยันความถูกต้องโดยเปรียบเทียบกับผลจากการทดลองมาแล้ว

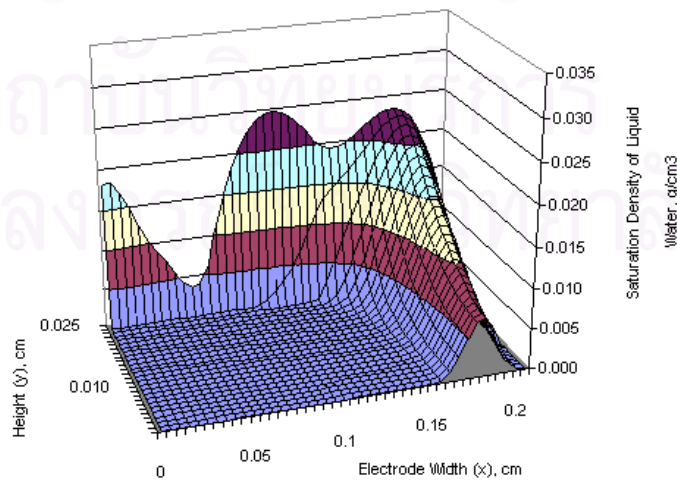
กรณีศึกษาที่นำมาจำลองเปรียบเทียบกันคือ กำหนดภาวะการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงที่อุณหภูมิ 60 องศาเซลเซียส สารออกซิไดซ์ที่ใช้คืออากาศ ความดันขาเข้าเท่ากับ 1.007 บรรยากาศ และความดันขาออกเท่ากับ 1 บรรยากาศ จากนั้นทำการจำลองโดยปรับเปลี่ยนค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีทางด้านขั้วแคโทด (η_{act_cath}) เพื่อหาปริมาณความหนาแน่นกระแสที่ได้



รูปที่ 4.1 เปรียบเทียบผลการจำลองกับงานวิจัยของ He,W และคณะ⁽¹⁰⁾



รูปที่ 4.2 ค่าสัดส่วนปริมาณน้ำภายในขอบเขตแบบจำลอง จากงานวิจัยของ He, W และคณะ⁽¹⁰⁾



รูปที่ 4.3 ค่าสัดส่วนปริมาณน้ำภายในขอบเขตแบบจำลอง จากงานวิจัยนี้

จะพบว่าผลที่ได้จากแบบจำลองที่สร้างขึ้น เปรียบเทียบกับผลจากแบบจำลองของ He, W. และคณะ⁽¹⁰⁾ มีค่าตรงกันในช่วงค่าความหนาแน่นกระแสต่ำๆ แต่ที่ค่าความหนาแน่นกระแสสูงๆ ผลจากงานวิจัยนี้จะมีค่าความหนาแน่นกระแสสูงกว่าเล็กน้อย ดังแสดงในกราฟรูปที่ 4.1 และเมื่อพิจารณาค่าสัดส่วนปริมาณน้ำภายในขอบเขตแบบจำลองที่ค่า $\eta_{act_cath} = -0.5$ โวลต์ ในงานวิจัยของ He, W. และคณะ⁽¹⁰⁾ ดังแสดงในกราฟรูปที่ 4.2 เปรียบเทียบกับค่าสัดส่วนปริมาณน้ำภายในขอบเขตแบบจำลองจากงานวิจัยนี้ดังแสดงในกราฟรูปที่ 4.3 ก็พบว่า ปริมาณน้ำบริเวณชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาในงานวิจัยของ He, W. และคณะ⁽¹⁰⁾ มีปริมาณสูงกว่าผลจากงานวิจัยนี้เล็กน้อย จึงน่าจะเป็นสาเหตุที่ทำให้ค่าความหนาแน่นกระแสที่ได้ในงานวิจัยของ He, W. และคณะ⁽¹⁰⁾ มีค่าที่น้อยกว่าเล็กน้อย เนื่องจากมีน้ำเป็นตัวปิดกั้นและลดพื้นที่การเข้าทำปฏิกิริยาของแก๊ส

ส่วนสาเหตุที่ทำให้ปริมาณน้ำบริเวณชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาจากผลการจำลองในงานวิจัยนี้มีค่าน้อยกว่าของ He, W. และคณะ⁽¹⁰⁾ อาจเป็นเพราะเวลาที่ใช้ในการคำนวณยังไม่นานเพียงพอ จึงทำให้ผลที่ได้แตกต่างจากผลการจำลองในงานวิจัยของ He, W. และคณะ⁽¹⁰⁾ ซึ่งทำการจำลองที่ภาวะคงตัว กล่าวคือปริมาณน้ำที่สะสมยังอาจเพิ่มสูงได้อีก เมื่อใช้เวลาในการคำนวณที่ยาวนานเพิ่มขึ้น

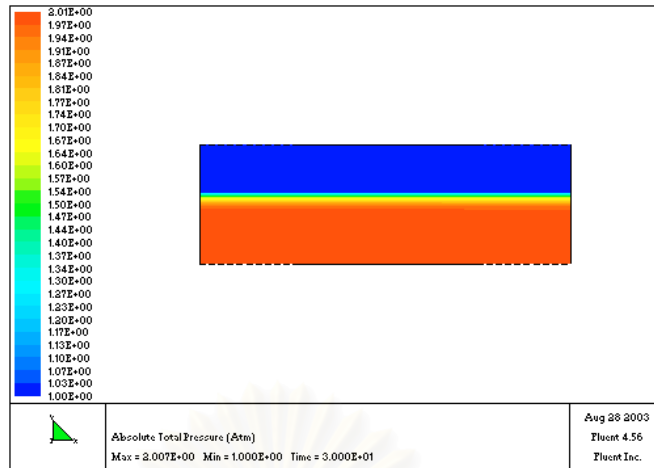
4.2 ผลการจำลองกระบวนการจากกรณีศึกษาพื้นฐาน (base case)

จากการจำลองกรณีศึกษาพื้นฐาน ทำให้สามารถเห็นพฤติกรรมต่างๆ ที่เกิดขึ้นภายในเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอนได้อย่างชัดเจน เช่น

ลักษณะความดันภายในเซลล์เชื้อเพลิง ดังแสดงในรูปที่ 4.4 ความดันจะมีลักษณะแบ่งขอบเขตเป็น 3 ส่วน คือทางฝั่งขั้วแคโทด ฝั่งขั้วแอโนด และในชั้นเยื่อแผ่น โดยขั้วแคโทดมีความดันตลอดทั้งชั้นเท่ากับ 2 บรรยากาศโดยประมาณ และขั้วแอโนดมีความดันตลอดทั้งชั้นเท่ากับ 1 บรรยากาศโดยประมาณ ส่วนในชั้นของเยื่อแผ่น ลักษณะความดันที่ปรากฏจะมีค่าลดหลั่นตั้งแต่ 2 บรรยากาศ ถึง 1 บรรยากาศ ในทิศทางจากขั้วแคโทดไปยังขั้วแอโนด ทั้งนี้เนื่องจากคุณลักษณะของเยื่อแผ่น จะเป็นตัวปิดกั้นไม่ให้แก๊สระหว่างขั้วอิเล็กโทรดทั้ง 2 ฝั่งไหลข้ามไปมาได้ แต่จะให้น้ำซึมผ่านได้ในปริมาณเล็กน้อยเท่านั้น

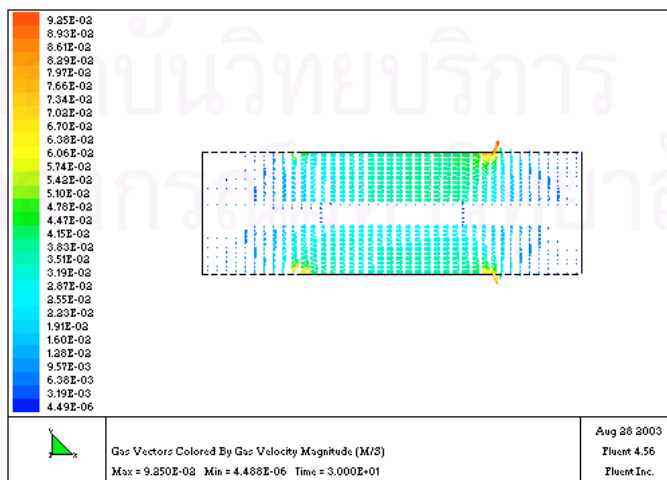
ลักษณะความเร็วแก๊สในเซลล์เชื้อเพลิง ดังแสดงในรูปที่ 4.5 พบว่าความเร็วของแก๊สจะสูงมากที่ช่องแก๊สขาเข้าและขาออกบริเวณขอบที่ติดกับฉากกัน ทั้งนี้เนื่องมาจากระยะทางระหว่างช่องแก๊สขาเข้ากับขาออกที่บริเวณนี้มีระยะทางสั้นที่สุด จึงทำให้แก๊สสามารถไหลผ่านได้เร็วกว่าบริเวณอื่นๆ

สำหรับค่าความเร็วเฉลี่ยภายในชั้นขั้วอิเล็กโทรดจะอยู่ที่ประมาณ 4 เซนติเมตรต่อวินาที

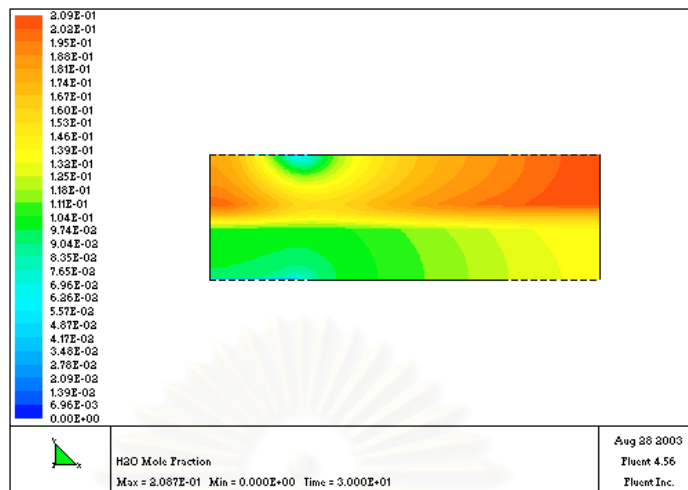


รูปที่ 4.4 ลักษณะความดันที่ปรากฏ

เมื่อสังเกตความเร็วแก๊สทางด้านฝั่งแอดโนดจะพบว่า ความเร็วขาเข้ามีค่าต่ำกว่าความเร็วขาออก ทั้งนี้เนื่องมาจาก แก๊สที่ป้อนเข้าทางด้านขั้วแอดโนดนั้นเป็นแก๊สไฮโดรเจนบริสุทธิ์ ที่ไม่ได้ผ่านกระบวนการทำให้ขึ้นก่อน เมื่อแก๊สไหลผ่านภายในเซลล์เชื้อเพลิง จะพาเอาน้ำภายในเซลล์เชื้อเพลิงให้ระเหยออกมาด้วยกระบวนการปรับสมดุลความชื้นของแก๊ส แต่ลักษณะความเร็วที่เพิ่มขึ้นเช่นนี้จะพบเพียงเล็กน้อยทางด้านขั้วแคโทด เพราะแม้ว่าแก๊สที่ป้อนเข้าทางด้านขั้วแคโทด จะไม่ได้ผ่านกระบวนการทำให้ขึ้นมาก่อนเช่นกัน แต่เนื่องจากความดันทางด้านขั้วแคโทดนั้นสูงกว่าทางด้านขั้วแอดโนด โดยที่อุณหภูมิ 60 องศาเซลเซียสนั้น ค่าความดันไอของน้ำจะมีค่าประมาณ 0.2 บรรยากาศ สัดส่วนโดยโมลของน้ำทางด้านขั้วแอดโนดจึงมีค่าสูงกว่าทางด้านขั้วแคโทด ดังแสดงในรูปที่ 4.6 และปริมาตรของแก๊สที่เพิ่มขึ้นเนื่องจากความชื้นทางด้านขั้วแอดโนดมีมากกว่าทางด้านขั้วแคโทด จึงส่งผลให้ความเร็วขาออกทางด้านขั้วแอดโนดนั้น สูงกว่าขาเข้าอย่างเห็นได้ชัด



รูปที่ 4.5 ความเร็วแก๊สภายในเซลล์เชื้อเพลิง

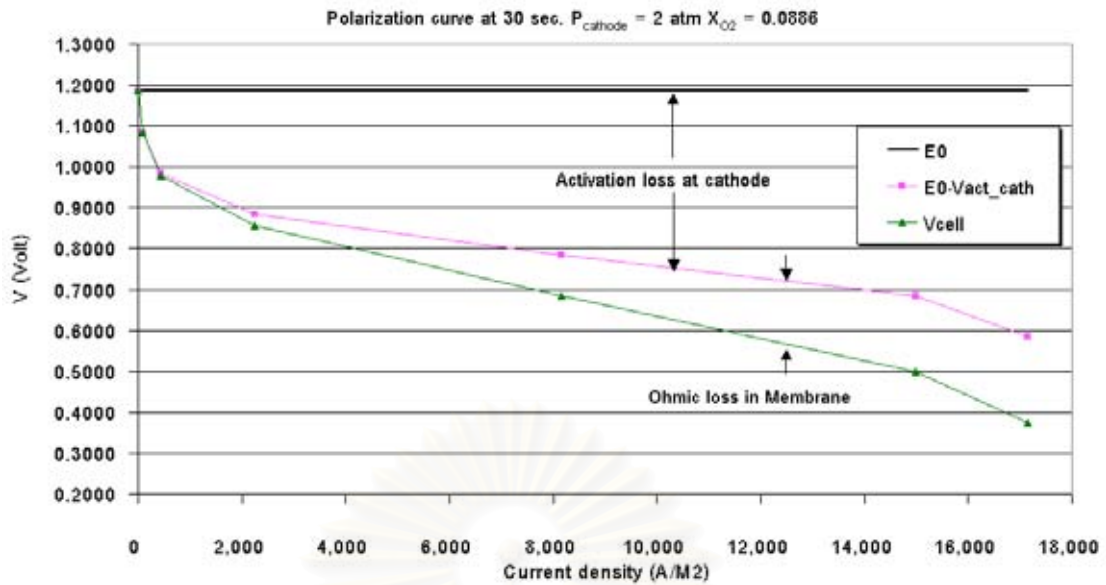


รูปที่ 4.6 สัดส่วนโดยโมลของน้ำในวัฏภาคแก๊สที่เวลา 30 วินาทีและค่า $\eta_{act_cath} = 0.5$ โวลต์

ผลของการจำลองเมื่อทำการปรับเปลี่ยนค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีทางด้านขั้วแคโทด สามารถคำนวณค่าความหนาแน่นกระแส ค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากความต้านทานไฟฟ้า และศักย์ไฟฟ้าที่ได้ของเซลล์เชื้อเพลิง และนำมาเขียนกราฟโพลาริเซชันได้ดังรูปที่ 4.7

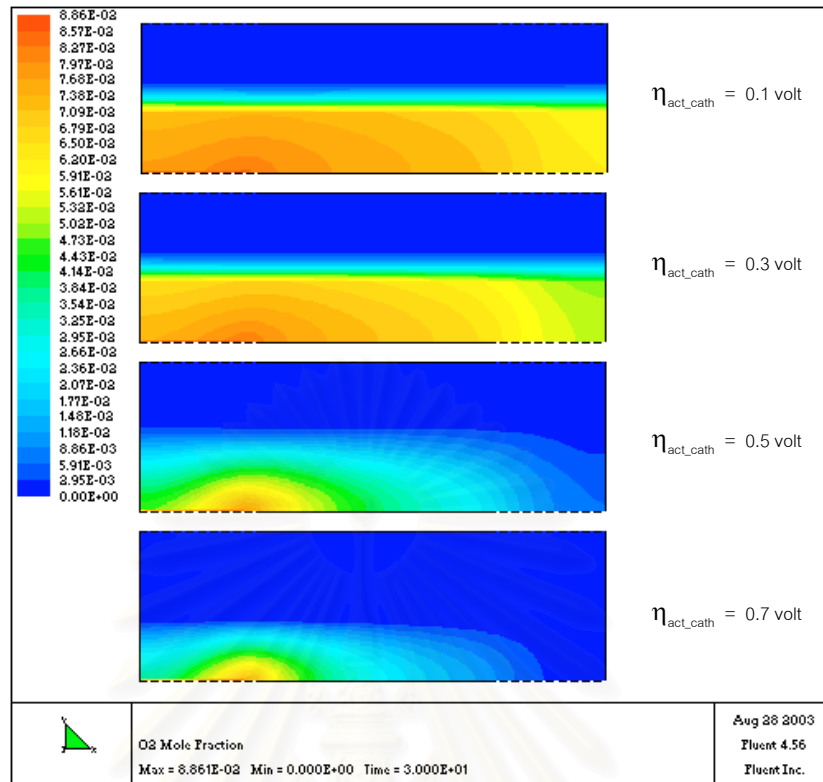
เนื่องจากแบบจำลองที่ได้พัฒนาขึ้นนั้น ตั้งสมมติฐานว่าไม่มีการแพร่ข้ามฝั่งของแก๊ส (cross over) ระหว่างขั้วแคโทดและขั้วแอโนดผ่านเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอนออกไป จึงไม่มีการเกิดค่ากระแสภายใน (internal current) ทำให้ศักย์ไฟฟ้าเริ่มต้นที่ได้จากแบบจำลอง มีค่าเท่ากับศักย์ไฟฟ้าตามทฤษฎี โดยที่ภาวะกรณีศึกษาพื้นฐาน จะมีค่าศักย์ไฟฟ้าตามทฤษฎีเท่ากับ 1.186 โวลต์

ช่วงค่าความหนาแน่นกระแสต่ำๆ เมื่อค่าความหนาแน่นกระแสมีค่าเพิ่มขึ้นจะพบว่า ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์จะลดต่ำลงอย่างรวดเร็ว อันเป็นผลมาจากศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีทางด้านขั้วแคโทดเกิดขึ้นในช่วงนี้สูง ส่วนค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีทางด้านขั้วแอโนดนั้น แบบจำลองไม่สามารถคำนวณออกมาได้ เนื่องจากค่า exchange current density (i_0) ทางด้านขั้วแอโนดมีค่าสูงมากคือเท่ากับ 5×10^6 แอมป์ต่อตารางเมตร เมื่อเปรียบเทียบกับทางด้านขั้วแคโทดที่มีค่าเท่ากับ 100 แอมป์ต่อตารางเมตร โดยเมื่อพิจารณาสมการการเกิดปฏิกิริยาเคมี (สมการที่ 3.43) จะพบว่า ยิ่งค่า i_0 มีค่าสูง ศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีจะมีค่าต่ำ ค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีทางด้านขั้วแอโนดที่ได้จากการจำลองจึงมีค่าเท่ากับศูนย์



รูปที่ 4.7 โพลาริเซชันของกรณีศึกษาพื้นฐาน

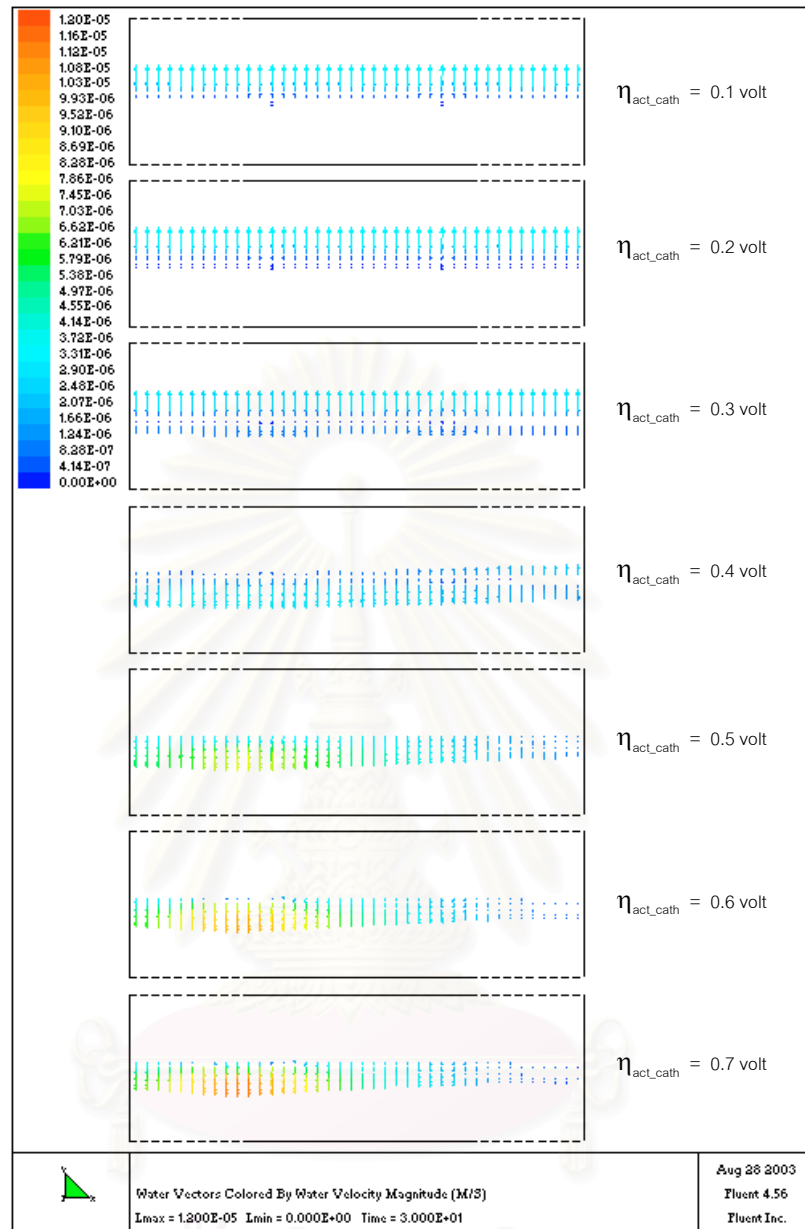
เมื่อพิจารณาช่วงค่าความหนาแน่นกระแสสูงๆ จะพบว่าค่าศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ลดต่ำลงอย่างรวดเร็วอีกครั้ง ทั้งนี้เป็นผลมาจากปริมาณสารตั้งต้นถูกใช้ไปในอัตราที่สูง ความเข้มข้นของสารตั้งต้นบริเวณชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาจึงลดต่ำลง ดังแสดงในรูปที่ 4.8 ทำให้เกิดโพลาริเซชันเนื่องจากการถ่ายโอนมวลเพิ่มขึ้น ส่งผลให้ค่าความหนาแน่นกระแสที่ได้ถูกจำกัด คือไม่สามารถเพิ่มสูงขึ้นมากกว่าช่วงดังกล่าวได้อีก ค่าความหนาแน่นกระแสสูงสุดที่ระบบจะให้ได้นั้น ก็คือค่าความหนาแน่นกระแสจำกัด (limiting current density) นั่นเอง แต่เนื่องจากแบบจำลองที่ใช้ ได้รวมเอาสมการการเกิดโพลาริเซชันเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีและโพลาริเซชันเนื่องจากการถ่ายโอนมวลเข้าไว้ด้วยกัน (สมการที่ 3.43) ค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวที่ใช้ในแบบจำลองบนโปรแกรม Fluent 4.5 จึงแสดงรวมไว้เป็นค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีเพียงค่าเดียว



รูปที่ 4.8 ลักษณะสัดส่วนโดยโมลของแก๊สออกซิเจน ณ ค่า $\eta_{act,cath}$ ต่างๆ

ค่าความหนาแน่นกระแสจำกัด จะมีค่าขึ้นกับภาวะการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงนั้นๆ งานวิจัยนี้ทำการวิเคราะห์ผลของการปรับเปลี่ยนภาวะการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงที่ส่งผลต่อค่าความหนาแน่นกระแสจำกัดไว้ในหัวข้อผลของความดันทางด้านขั้วแคโทดและหัวข้อผลของความเข้มข้นของออกซิเจนขาเข้า โดยที่ค่าความหนาแน่นกระแสจำกัดสำหรับกรณีศึกษาเบื้องต้นสามารถคำนวณได้ค่าเท่ากับ 18,300 แอมป์ต่อตารางเมตร โดยวิธีการคำนวณค่าความหนาแน่นกระแสจำกัดจะอธิบายไว้ในส่วนของการประยุกต์แบบจำลองบนโปรแกรม Aspen Plus

เมื่อตรวจสอบค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากความต้านทานไฟฟ้าที่ได้จากการจำลองพบว่าค่าจะเพิ่มขึ้นอย่างคงที่ แปรผันตรงกับค่าความหนาแน่นกระแส เนื่องจากค่าการนำไอออน (ion conductivity) ของเยื่อแผ่นที่จำลองได้มีค่าค่อนข้างคงที่อยู่ที่ประมาณ 10.2 – 10.3 ต่อโห์มต่อเมตร การคำนวณค่าการนำไอออนจะคำนวณจากสมการ 3.44 และ 3.45

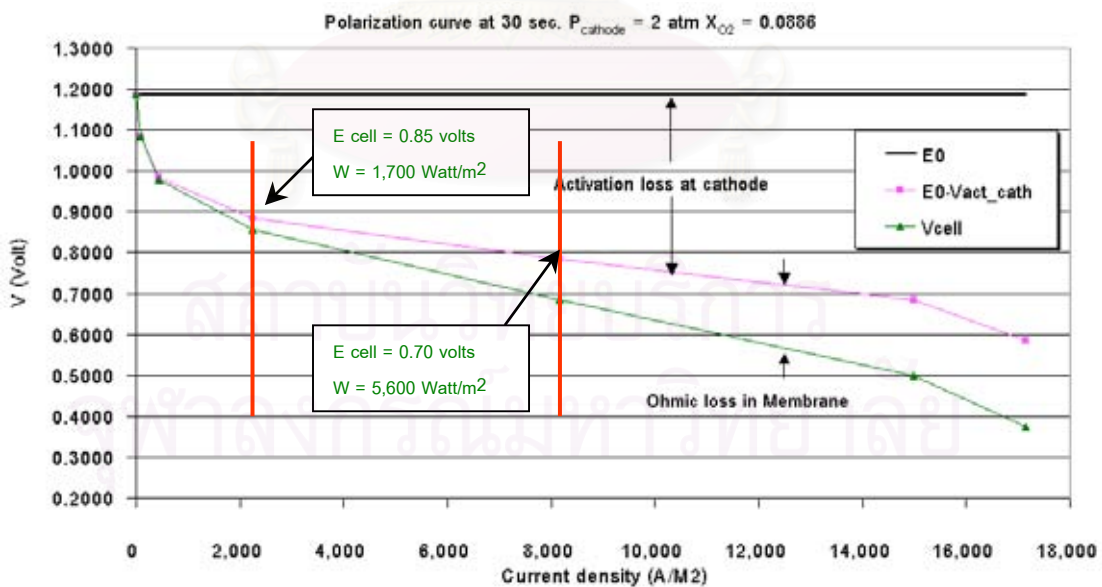


รูปที่ 4.9 ลักษณะทิศทางการไหลของน้ำในชั้นเยื่อแผ่น ณ $\eta_{act,cath}$ ต่างๆ

งานวิจัยนี้ได้ทำการศึกษาทิศทางการไหลของน้ำในชั้นเยื่อแผ่น เพราะทิศทางการไหลของน้ำในชั้นเยื่อแผ่นเป็นตัวแปรสำคัญที่สามารถอธิบายว่า ภาวะการทำงานแบบใดหรือช่วงค่าความหนาแน่นกระแสเท่าใด จึงจะเหมาะสมในการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิง โดยปรกติปริมาณน้ำที่สะสมภายในเซลล์เชื้อเพลิงจะมีมากเฉพาะทางด้านขั้วแคโทดเนื่องจากปฏิกิริยารีดักชันทางด้านขั้วแคโทดได้น้ำเป็นผลิตภัณฑ์ และยังมีน้ำที่ไหลจากด้านขั้วแอโนดมายังขั้วแคโทดเนื่องจากปรากฏการณ์ electro – osmotic drag จึงทำให้เกิดความไม่สมดุลของน้ำภายในระบบเซลล์เชื้อเพลิงขึ้น คือ จะเกิดการท่วมที่ด้านแคโทด หรือเกิดการแห้งขึ้นทางด้านแอโนด

ทางแก้ไขความไม่สมดุลของน้ำภายในเซลล์เชื้อเพลิงสามารถทำได้โดย เพิ่มความดันทางด้านขั้วแคโทด ให้สูงกว่าทางด้านขั้วแอโนด เพื่อบังคับให้น้ำบางส่วนถูกผลักดันให้เคลื่อนที่ไปยังด้านแอโนดมากขึ้น หรืออีกวิธีคือ รักษาค่าความหนาแน่นกระแสให้คงที่ในระดับที่เหมาะสม เพราะการที่เซลล์เชื้อเพลิงมีค่าความหนาแน่นกระแสสูงเกินพอดี จะทำให้อิทธิพลเนื่องจากปรากฏการณ์ electro-osmotic drag มีมากขึ้น จนเกิดความไม่สมดุลของน้ำภายในเซลล์เชื้อเพลิงขึ้นได้

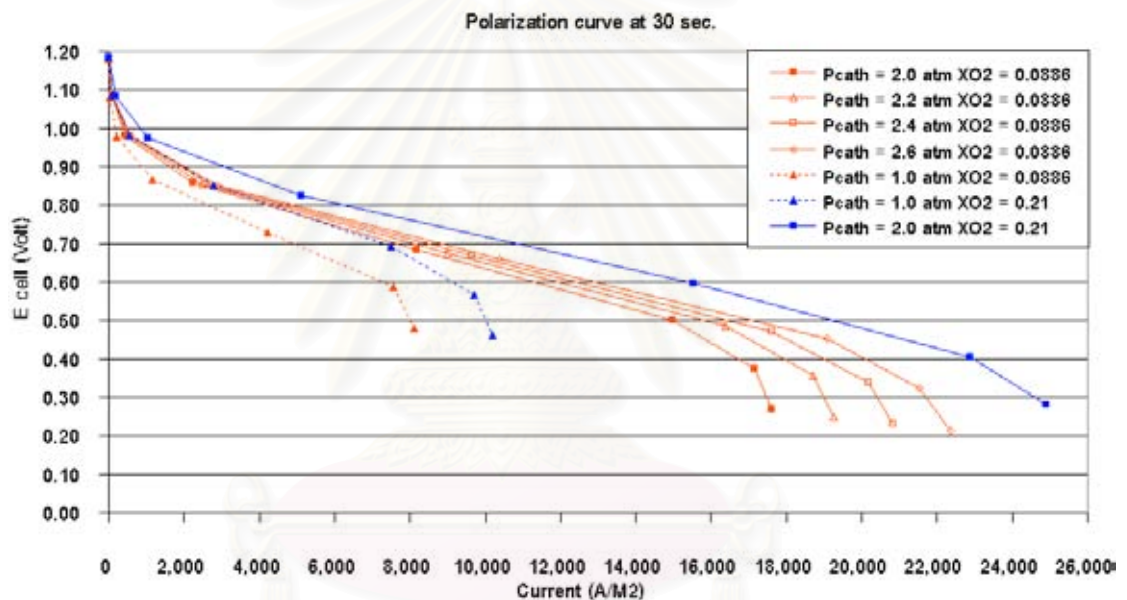
จากรูปที่ 4.9 จะพบว่าที่ค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีต่ำ หรือค่าความหนาแน่นกระแสต่ำ ทิศทางการไหลของน้ำในชั้นเยื่อแผ่นจะไหลจากทางด้านขั้วแคโทด ไปยังด้านขั้วแอโนด ทั้งนี้เป็นผลเนื่องมาจากอิทธิพลของความดันมีมากกว่า แต่เมื่อเพิ่มค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีหรือเพิ่มค่าความหนาแน่นกระแสของเซลล์เชื้อเพลิงจะพบว่า ทิศทางการไหลของน้ำในชั้นเยื่อแผ่นจะไหลกลับทางจากด้านขั้วแอโนดไปยังด้านขั้วแคโทดแทน เป็นผลเนื่องมาจากอิทธิพลของปรากฏการณ์ electro-osmotic drag เพิ่มขึ้นจนมากกว่าอิทธิพลของความดันนั่นเอง สำหรับภาวะกรณีศึกษาพื้นฐาน จะพบว่าค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมี ช่วง 0.3 – 0.4 โวลต์ หรือค่าความหนาแน่นกระแส ช่วง 2,000 – 8,000 แอมป์ต่อตารางเมตร เป็นค่าที่เหมาะสมสำหรับใช้ในการทำงาน โดยศักย์ไฟฟ้าของเซลล์เชื้อเพลิงจะอยู่ในช่วง 0.7 – 0.85 โวลต์ และกำลังไฟฟ้าที่ได้คือ ช่วง 1,700 – 5,600 วัตต์ต่อตารางเมตร ดังแสดงในกราฟรูปที่ 4.10



รูปที่ 4.10 ช่วงศักย์ไฟฟ้าของเซลล์เชื้อเพลิง ค่าความหนาแน่นกระแส และกำลังไฟฟ้าที่เหมาะสมในกรณีศึกษาพื้นฐาน

4.3 ผลของความดันแก๊สขาเข้าทางด้านขั้วแคโทด

งานวิจัยนี้ได้ทำการศึกษาผลของการปรับเปลี่ยนค่าความดันแก๊สขาเข้าทางด้านขั้วแคโทด พบว่า ในขณะที่ความเร็วของแก๊สขาเข้าไม่เปลี่ยนแปลง เพราะได้กำหนดให้ผลต่างของความดันระหว่างแก๊สขาเข้าและขาออกเท่ากับ 0.007 บรรยากาศเสมอ หรือทำให้อัตราการไหลโดยปริมาตรของแก๊สไม่มีการเปลี่ยนแปลง เมื่อมีการเพิ่มค่าความดันแก๊สขาเข้าทางด้านขั้วแคโทด จึงเป็นการทำให้ความหนาแน่นของแก๊สมีค่าสูงกว่าที่ความดันต่ำ หรือปริมาณอัตราการไหลโดยมวลของแก๊สขาเข้าที่ความดันสูงจะมีปริมาณสูงกว่าที่ความดันต่ำ เป็นไปตามกฎของแก๊สอุดมคติ เซลล์เชื้อเพลิงจึงสามารถผลิตกระแสไฟฟ้าได้มากยิ่งขึ้น หรือปริมาณความหนาแน่นกระแสของเซลล์เชื้อเพลิงจะมีค่าเพิ่มขึ้น ดังแสดงในกราฟรูปที่ 4.11



รูปที่ 4.11 โพรไฟล์เซลล์ที่ภาวะการทำงานต่างๆ

4.4 ผลของความเข้มข้นของออกซิเจนขาเข้า

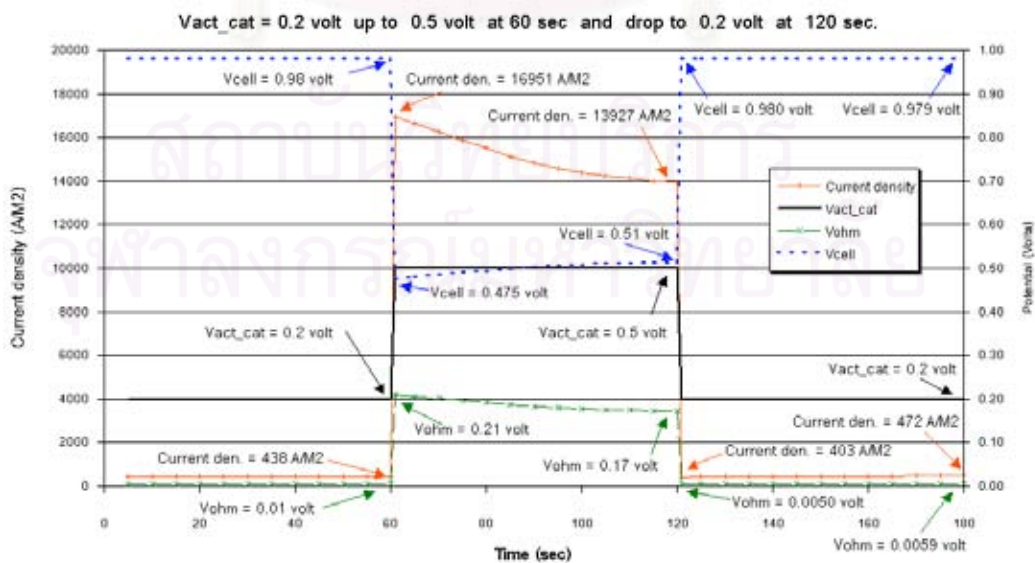
ผลของการปรับเปลี่ยนค่าความเข้มข้นของออกซิเจนขาเข้า จะทำการปรับเปลี่ยน 2 ค่า คือ สัดส่วนโดยโมลของออกซิเจนขาเข้าเท่ากับ 0.21 และ 0.0886 หรือมีค่าสัดส่วนโดยมวลของออกซิเจนขาเข้าเท่ากับ 0.233 และ 0.1 ผลที่ได้เช่นเดียวกับผลของค่าความดันแก๊สขาเข้าทางด้านขั้วแคโทด คือเมื่อเพิ่มค่าความเข้มข้นของออกซิเจนขาเข้า เซลล์เชื้อเพลิงจะให้ค่าความหนาแน่นกระแสที่สูงกว่า ทั้งที่ความดันทางด้านขั้วแคโทดเท่ากับ 1 บรรยากาศ และ 2 บรรยากาศ ดังแสดงในกราฟรูปที่ 4.11

4.5 พฤติกรรมของเซลล์เชื้อเพลิงเมื่อขึ้นกับเวลา

จากการจำลองกระบวนการเซลล์เชื้อเพลิงบนโปรแกรม Fluent 4.5 นั้น จะทำการจำลองเป็นแบบภาวะไม่คงตัว (Unsteady – state) จึงสามารถเก็บผลจากการจำลอง ณ เวลาต่างๆ มาวิเคราะห์การเปลี่ยนแปลงของตัวแปรที่สนใจต่างๆ เทียบกับเวลาได้ เช่น ค่าความหนาแน่นกระแส ค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากความต้านทานไฟฟ้า ค่าศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ที่ผลิตได้ และลักษณะการกระจายตัวของน้ำในวัฏภาคของเหลว

จากกราฟรูปที่ 4.12 เป็นผลการจำลองเซลล์เชื้อเพลิงในระยะเวลา 3 นาที ภาวะการทำงานที่ใช้คือ ความดันแก๊สขาเข้าทางด้านซ้ายแคโทดเท่ากับ 2 บรรยากาศ สัดส่วนโดยโมลของออกซิเจนเท่ากับ 0.0886 โดยช่วง 1 นาทีแรก จะกำหนดค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีเท่ากับ 0.2 โวลต์ 1 นาทีถัดมา กำหนดให้ค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีเพิ่มขึ้นเป็น 0.5 โวลต์ และ 1 นาทีหลังสุด จะกำหนดให้ค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีลดลงกลับมาเท่ากับ 0.2 โวลต์อีกครั้ง

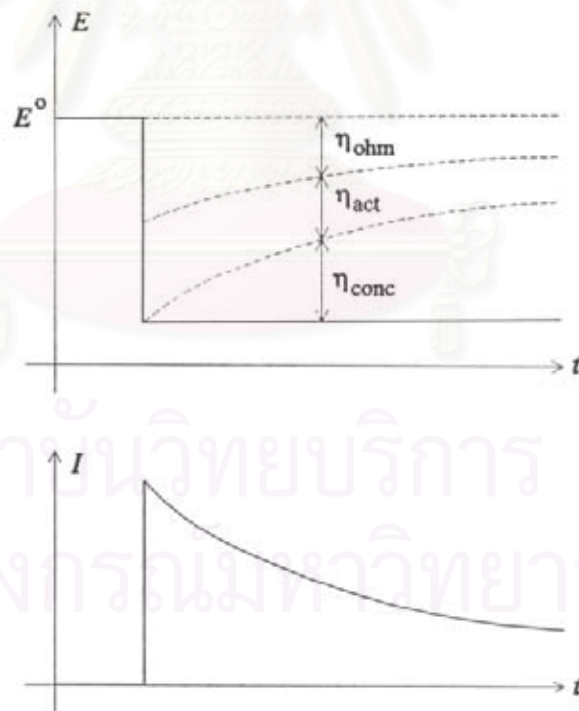
พบว่าในช่วง 1 นาทีแรก จะมีการเปลี่ยนแปลงค่าตัวแปรต่างๆ เพียงเล็กน้อยเท่านั้น เพราะที่ค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีน้อยๆ ปฏิกิริยาภายในเซลล์เชื้อเพลิงที่เกิดขึ้นมีเพียงเล็กน้อย ระบบจึงเข้าสู่ภาวะคงตัวได้อย่างรวดเร็ว แต่ในช่วงนาที่ที่ 2 ที่กำหนดค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีไว้สูงกว่า จะมีการเกิดปฏิกิริยาภายในเซลล์เชื้อเพลิงที่สูง ตัวแปรต่างๆ ภายในระบบมีการเปลี่ยนแปลงมาก ทำให้ระบบเข้าสู่ภาวะคงตัวได้ช้า และในช่วงนาที่ที่ 3 เมื่อกำหนดค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีลดลงมาเหลือเท่ากับ 0.2 โวลต์ตามเดิม ค่าตัวแปรต่างๆ ภายในเซลล์เชื้อเพลิงก็จะปรับมาจนกระทั่งเหมือนกับช่วงนาที่แรกอีกครั้ง



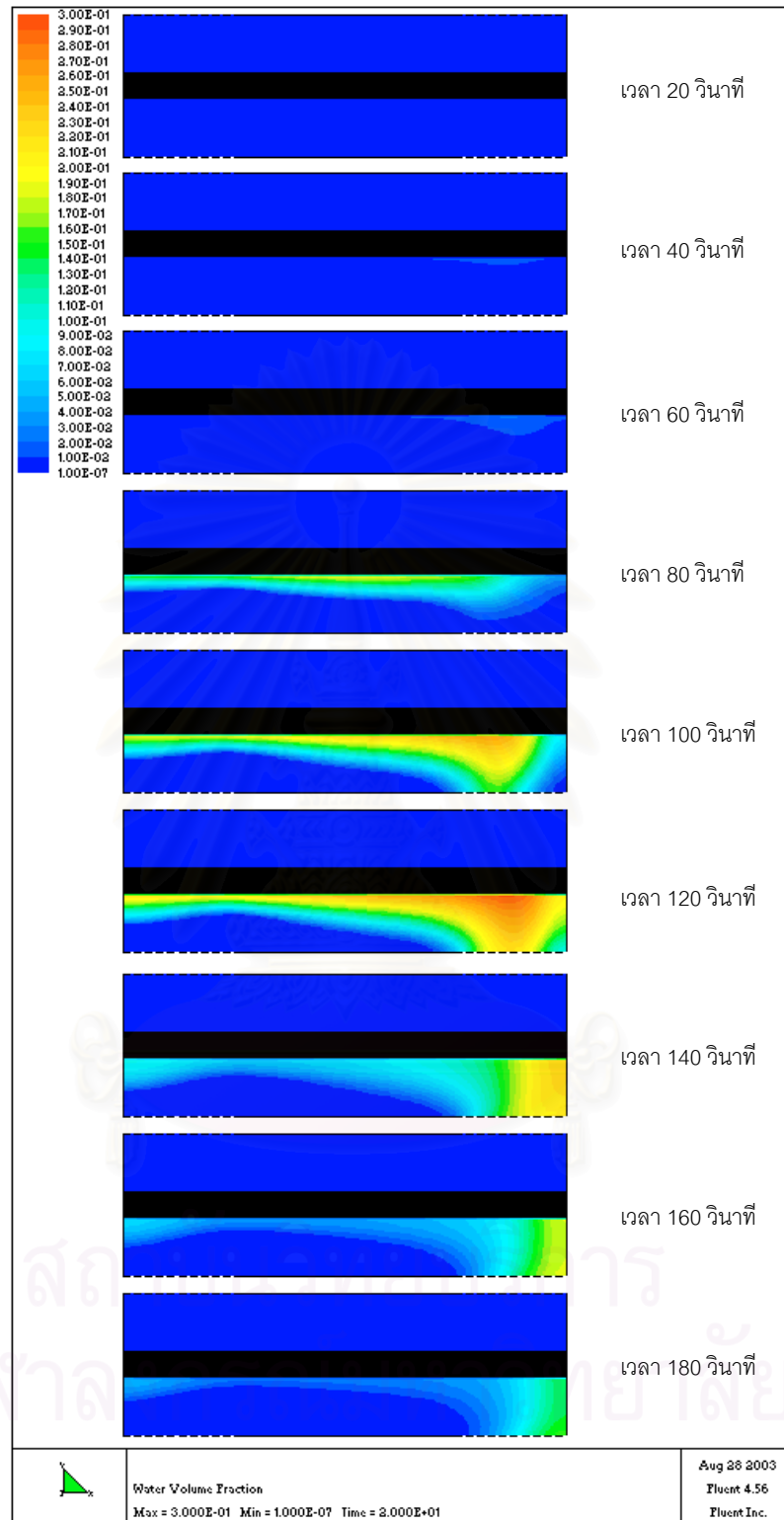
รูปที่ 4.12 ผลการเปลี่ยนแปลงตามเวลาของค่าความหนาแน่นกระแส η_{ohm} และ E_{cell}

เมื่อทำการพิจารณาการกระจายของน้ำในวัฏภาคของเหลว ผลที่ได้จะแสดงดังรูปที่ 4.14 ก็พบว่าในช่วง 1 นาทีแรก ปริมาณน้ำที่เกิดขึ้นมีการเปลี่ยนแปลงน้อยมาก ระบบของเซลล์เชื้อเพลิงจึงไม่เกิดการเปลี่ยนแปลงมากนัก แต่เมื่อเข้าสู่เวลาที่ 2 จะพบว่าจะมีปริมาณน้ำเกิดขึ้นภายในเซลล์เชื้อเพลิงอย่างรวดเร็ว น้ำที่เกิดขึ้นนี้ จะไปบดบังพื้นผิวการเกิดปฏิกิริยาของเซลล์เชื้อเพลิง ทำให้ค่าความหนาแน่นกระแสที่ได้ ค่อยๆ ลดต่ำลงเรื่อยๆ เมื่อเทียบกับเวลา ส่วนค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากความต้านทานไฟฟ้าก็จะลดลงเช่นเดียวกันเมื่อค่าความหนาแน่นกระแสลดลง จนเข้าสู่ภาวะคงตัวใหม่ และเมื่อเข้าสู่ช่วงเวลาที่ 3 เมื่อปรับค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีลดลงเหลือ 0.2 โวลต์ เท่ากับช่วงเวลาที่แรก ปริมาณน้ำภายในเซลล์เชื้อเพลิงก็จะค่อยลดลงตาม โดยอาศัยกระบวนการการพาเอาน้ำออกไปจากเซลล์ด้วยการไหลของแก๊สภายในเซลล์ จึงทำให้ค่าความหนาแน่นกระแสมีการเปลี่ยนแปลงเพิ่มขึ้นเล็กน้อย

พฤติกรรมของเซลล์เชื้อเพลิงเมื่อขึ้นกับเวลาที่ปรากฏจากผลการจำลองกระบวนการ พบว่ามีความสอดคล้องกับพฤติกรรมที่ได้อธิบายไว้ในหนังสือ “Fundamentals of electrochemical science”⁽¹⁴⁾ ดังแสดงในรูปที่ 4.13



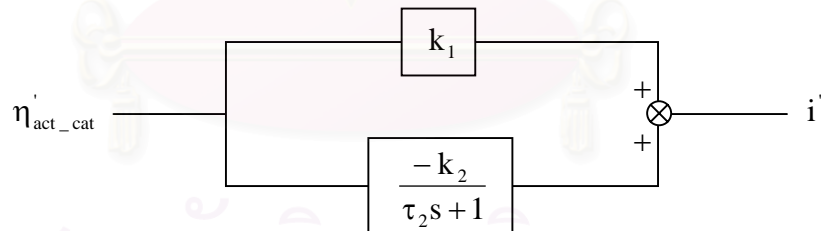
รูปที่ 4.13 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าความหนาแน่นกระแสกับเวลา
เมื่อเปลี่ยนค่าศักย์ไฟฟ้าคงที่⁽¹⁴⁾



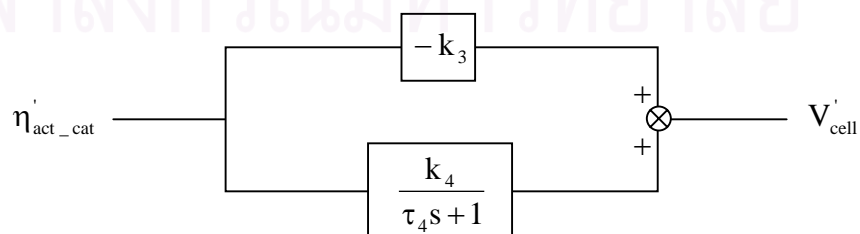
รูปที่ 4.14 การกระจายตัวของน้ำในภูมิภาคของเหลวเปรียบเทียบกับเวลา

นั่นคือเมื่อทำการลดค่าศักย์ไฟฟ้าของเซลล์เชื้อเพลิง จะทำให้ค่าความหนาแน่นกระแสเพิ่มขึ้นในทันที และจะค่อยๆ ลดลงเล็กน้อยจนเข้าสู่ภาวะคงตัว ทั้งนี้สามารถอธิบายได้ว่า เมื่อค่าศักย์ไฟฟ้าลดลง ค่าความหนาแน่นกระแสจะเพิ่มขึ้นในทันที ทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมีเพิ่มขึ้น ส่งผลให้สารตั้งต้นในการทำปฏิกิริยามีปริมาณค่อยๆ ลดต่ำลง ค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากการถ่ายโอนมวลจึงค่อยๆ เพิ่มขึ้นตามเวลา จากนั้นเมื่อสารตั้งต้นในการทำปฏิกิริยาค่อยๆ ลดลง จะส่งผลย้อนกลับไปทำให้ค่าความหนาแน่นกระแสที่ได้ค่อยๆ ลดต่ำลงเช่นกัน ส่วนค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากความต้านทานไฟฟ้า และค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีจะไม่ค่อยเปลี่ยนแปลงตามเวลานัก แต่จะขึ้นกับค่าความหนาแน่นกระแสเป็นหลัก จึงทำให้ค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวทั้ง 2 ชนิดลดลงตามเวลาเนื่องจากการลดลงของค่าความหนาแน่นกระแส

จากพฤติกรรมของเซลล์เชื้อเพลิงเมื่อขึ้นกับเวลาดังแสดงในกราฟรูปที่ 4.12 สามารถสรุปเป็นแผนผังกระบวนการ (Process diagram) สำหรับกระบวนการในระบบพลวัตระหว่างตัวแปรของค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีทางด้านขั้วแคโทดและค่าความหนาแน่นกระแสได้ดังรูปที่ 4.15 ก. และระหว่างตัวแปรของค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีทางด้านขั้วแคโทดและค่าศักย์ไฟฟ้าของเซลล์เชื้อเพลิงได้ดังรูปที่ 4.15 ข. คือพฤติกรรมดังกล่าวจะมีลักษณะคล้ายกับบล็อกไดอะแกรมของกระบวนการตอบสนองในทันที (Step change respond) ร่วมกับกระบวนการที่ตอบสนองแบบอันดับหนึ่ง (1^{st} order respond)



รูปที่ 4.15 ก. แผนผังกระบวนการของเซลล์เชื้อเพลิงระหว่างตัวแปรค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีทางด้านขั้วแคโทดและค่าความหนาแน่นกระแส



รูปที่ 4.15 ข. แผนผังกระบวนการของเซลล์เชื้อเพลิงระหว่างตัวแปรค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีทางด้านขั้วแคโทดและค่าศักย์ไฟฟ้าของเซลล์เชื้อเพลิง

สุดท้ายจากรูปที่ 4.15 ก. และ 4.15 ข. ทำให้เราสามารถเขียนแผนผังกระบวนการระหว่างตัวแปรค่าศักย์ไฟฟ้าของเซลล์เชื้อเพลิงและค่าความหนาแน่นกระแสได้ดังรูปที่ 4.16

$$V'_{\text{cell}} \longrightarrow \left(\frac{k_1 \tau_2 S + k_1 - k_2}{-k_3 \tau_4 S - k_3 + k_4} \right) \left(\frac{\tau_4 S + 1}{\tau_2 S + 1} \right) \longrightarrow i'$$

รูปที่ 4.16 แผนผังกระบวนการของเซลล์เชื้อเพลิงระหว่างตัวแปรค่าศักย์ไฟฟ้าของเซลล์เชื้อเพลิงและค่าความหนาแน่นกระแส

ค่า k_i และค่า τ_i จะได้ผลดังนี้

ในช่วงเวลาตั้งแต่ 60 วินาที ถึง 120 วินาที ที่ทำการเพิ่มค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีทางด้านขั้วแคโทดจาก 0.2 โวลต์ เป็น 0.5 โวลต์จะได้ผลดังนี้

k_1	=	55040	A/cm ² volt
k_2	=	10080	A/cm ² volt
k_3	=	1.670	A/cm ² volt
k_4	=	0.1247	A/cm ² volt
τ_2	=	23.94	วินาที
τ_4	=	23.95	วินาที

ในช่วงเวลาตั้งแต่ 120 วินาที ถึง 180 วินาที ที่ทำการลดค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีทางด้านขั้วแคโทดจาก 0.5 โวลต์ เป็น 0.2 โวลต์จะได้ผลดังนี้

k_1	=	45080	A/cm ² volt
k_2	=	231.2	A/cm ² volt
k_3	=	1.556	A/cm ² volt
k_4	=	0.00284	A/cm ² volt
τ_2	=	17.16	วินาที
τ_4	=	16.99	วินาที

4.6 การประยุกต์แบบจำลองบนโปรแกรม Aspen Plus

จากการวิเคราะห์ผลการจำลองในโปรแกรม Fluent 4.5 นั้น ทางผู้วิจัยจะนำเอาผลในการจำลองภาวะการทำงานที่สัดส่วนโดยมวลของแก๊สออกซิเจนเข้าคงที่เท่ากับ 0.0886 และการเปลี่ยนค่าความดันทางด้านซ้ายแคโทดเท่ากับ 2.0, 2.2, 2.4 และ 2.6 มาวิเคราะห์หาความสัมพันธ์ เพราะมีข้อมูลการจำลองที่มากเพียงพอ โดยจะหาความสัมพันธ์ระหว่างค่า $i_{0,new}$, i_l และค่า r เทียบกับภาวะการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงดังกล่าว เพื่อนำไปใช้ในสมการที่ 3.54, 3.55 และ 3.46 สำหรับการออกแบบแบบจำลองกระบวนการเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอนในโปรแกรม Aspen Plus ต่อไป

แต่เนื่องจากผลการจำลองในโปรแกรม Fluent 4.5 พบว่าไม่สามารถคำนวณหาค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาทางด้านขั้วแอโนดได้และได้กำหนดค่าให้เป็นศูนย์ ดังนั้นทางผู้วิจัยจึงได้ทำการคำนวณหาความสัมพันธ์ของค่า $i_{0,new}$, i_l ทางด้านขั้วแคโทดเทียบกับเวลาเท่านั้น

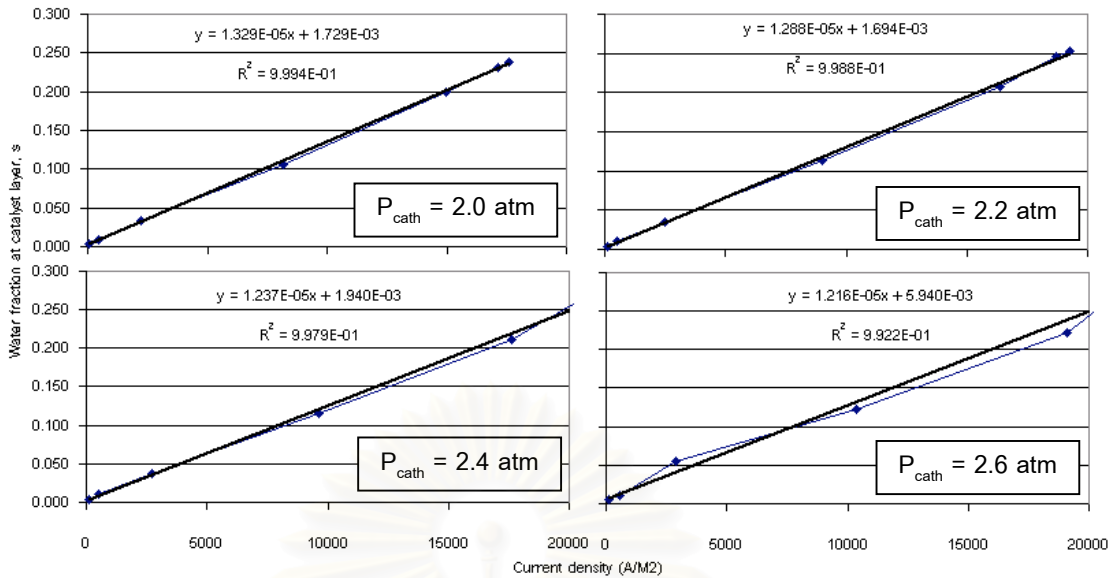
เมื่อทำการวิเคราะห์หาความสัมพันธ์ พบว่าค่า $i_{0,new}$, i_l และค่า r นั้นมีความสัมพันธ์กับภาวะการทำงานดังต่อไปนี้

- ค่า $i_{0,new}$
จากสมการที่ 3.50

$$i_{0,new} = i_0 \frac{C^g y_{in,i} (1-s)}{C_{ref}} \quad (3.50)$$

ความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัดส่วนปริมาณน้ำในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาทางด้านขั้วแคโทด (s) กับค่าความหนาแน่นกระแสต่างๆ ที่ภาวะความดันทางด้านขั้วแคโทดเท่ากับ 2.0, 2.2, 2.4 และ 2.6 แสดงในกราฟรูปที่ 4.17

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

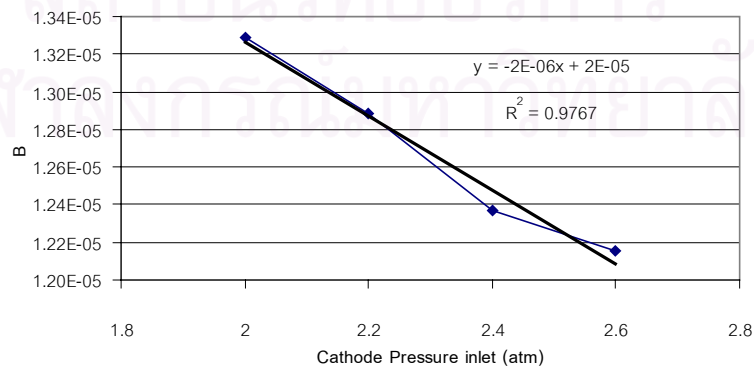


รูปที่ 4.17 ความสัมพันธ์ระหว่างสัดส่วนปริมาณน้ำในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยา (s) เทียบกับค่าความหนาแน่นกระแส (i) และค่าความดันทางด้านขั้วแคโทด (P_{cath})

จากกราฟรูปที่ 4.17 จะได้สมการความสัมพันธ์ดังนี้

$$\begin{aligned}
 \text{ที่ } P_{\text{cath}} = 2.0 \text{ atm} \text{ ได้ } s &= (1.329E-05) i + 1.729E-03 \\
 \text{ที่ } P_{\text{cath}} = 2.2 \text{ atm} \text{ ได้ } s &= (1.288E-05) i + 1.694E-03 \\
 \text{ที่ } P_{\text{cath}} = 2.4 \text{ atm} \text{ ได้ } s &= (1.237E-05) i + 1.940E-03 \\
 \text{ที่ } P_{\text{cath}} = 2.6 \text{ atm} \text{ ได้ } s &= (1.216E-05) i + 5.940E-03
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

พจน์ด้านหลังของแต่ละสมการคือปริมาณน้ำในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นเมื่อค่าความหนาแน่นกระแสเป็นศูนย์ แต่เนื่องจากเป็นค่าที่ค่อนข้างน้อยมาก ดังนั้นทางผู้วิจัยจึงจะละทิ้งค่าในส่วนนี้ จากนั้นจะสมมติให้ค่าสัมประสิทธิ์หน้าตัวแปร i เป็นค่าตัวแปร B จากนั้นนำค่า B ดังกล่าวไปเขียนกราฟเพื่อหาความสัมพันธ์เทียบกับความดันด้านขั้วแคโทดได้ดังกราฟรูปที่ 4.18



รูปที่ 4.18 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัมประสิทธิ์ในความสัมพันธ์ระหว่าง s และ i (B) เทียบกับค่าความดันด้านขั้วแคโทด (P_{cath})

จากกราฟรูปที่ 4.18 จะได้สมการความสัมพันธ์ของค่า B เทียบกับค่าความดันทางด้านขั้วแคโทดดังสมการที่ 4.2 โดยความสัมพันธ์นี้จะใช้ได้ในช่วงค่าความดันทางด้านขั้วแคโทดเท่ากับ 2.0 – 2.6 บรรยากาศ

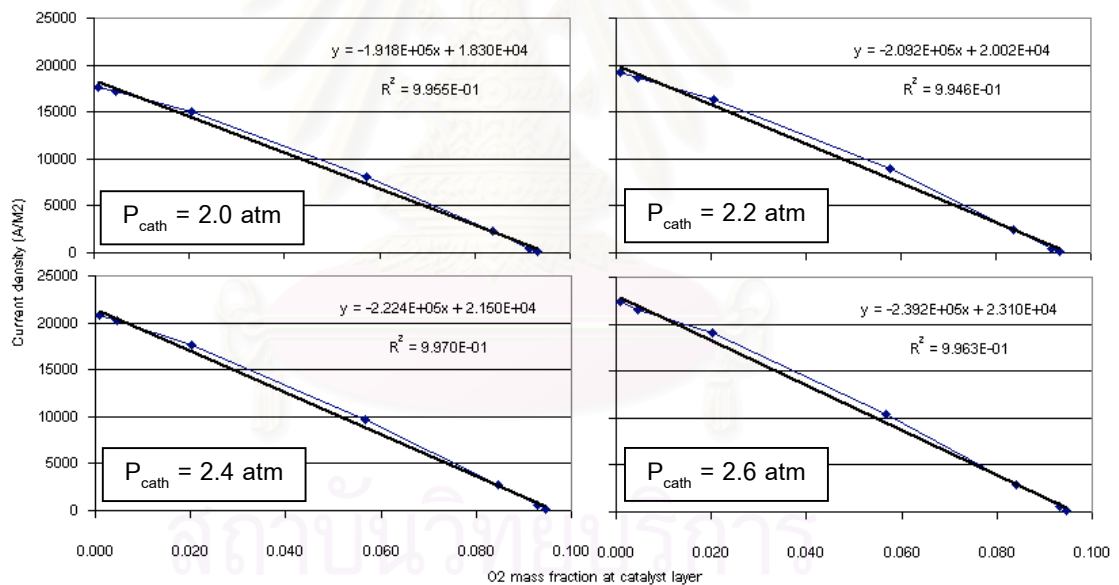
$$B = (-2E-06) P_{\text{cath}} + 2E-05 \quad (4.2)$$

สุดท้ายจะสามารถเขียนความสัมพันธ์ของค่าสัดส่วนปริมาณน้ำในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาเพื่อใช้ในการคำนวณค่า $i_{0,\text{new}}$ ได้ดังสมการที่ 4.3

$$s = [(-2E-06) P_{\text{cath}} + 2E-05] i \quad (4.3)$$

- ค่า i_i

จากผลการจำลองในโปรแกรม Fluent 4.5 สามารถหาค่า i_i ได้จากการเขียนกราฟระหว่างค่าความหนาแน่นกระแสของเซลล์เชื้อเพลิงเทียบกับค่าความเข้มข้นของแก๊สออกซิเจนที่บริเวณชั้นตัวเร่งปฏิกิริยา จะสามารถหาค่า i_i โดยจะเป็นค่าที่จุดตัดแกน y หรือค่าความหนาแน่นกระแสเมื่อความเข้มข้นของแก๊สออกซิเจนที่บริเวณชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาเป็นศูนย์



รูปที่ 4.19 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าความหนาแน่นกระแส (i) เทียบกับค่าความเข้มข้นของแก๊สออกซิเจนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยา (x_{O_2}) และค่าความดันทางด้านขั้วแคโทด (P_{cath})

จากกราฟรูปที่ 4.19 จะได้ i_i ดังนี้

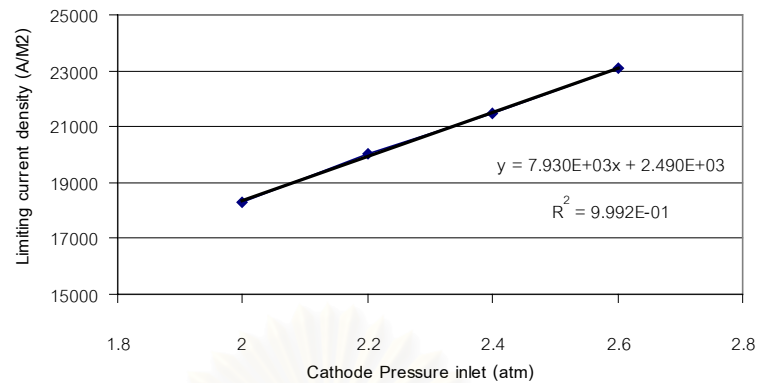
ที่ $P_{\text{cath}} = 2.0 \text{ atm}$ ได้ $i_i = 1.830E+04$

ที่ $P_{\text{cath}} = 2.2 \text{ atm}$ ได้ $i_i = 2.002E+04$

ที่ $P_{\text{cath}} = 2.4 \text{ atm}$ ได้ $i_i = 2.150E+04$

ที่ $P_{\text{cath}} = 2.6 \text{ atm}$ ได้ $i_i = 2.310E+04$

นำค่าที่ได้ไปเขียนกราฟความสัมพันธ์ดังกราฟรูปที่ 4.20



รูปที่ 4.20 ความสัมพันธ์ระหว่างค่า i_l กับค่าความดันทางด้านขั้วแคโทด

จะได้สมการความสัมพันธ์ระหว่างค่า i_l กับค่าความดันทางด้านขั้วแคโทดดังสมการที่ 4.4

$$i_l = (7.930E+06) P_{\text{cath}} + 2.490E+03 \quad (4.4)$$

โดยความสัมพันธ์นี้จะใช้ได้ในช่วงค่าความดันทางด้านขั้วแคโทดเท่ากับ 2.0 - 2.6

บรรยากาศ

- ค่า r

สำหรับค่า r เป็นค่าความต้านทานไฟฟ้าของชั้นเยื่อแผ่นในเซลล์เชื้อเพลิง คำนวณได้จากสมการที่ 3.47

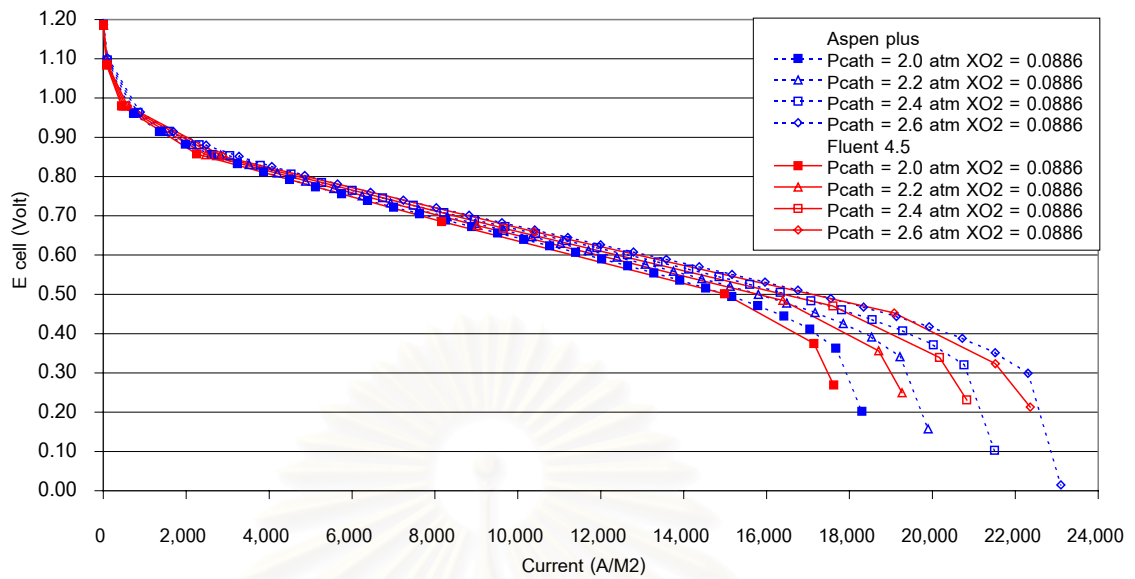
$$r = \frac{L_m}{\sigma_m(T)} \quad (3.47)$$

เมื่อ L_m = ความหนาของชั้นเยื่อแผ่น

และ σ_m = ค่าการนำไอออน

จากผลการจำลองกระบวนการในเซลล์เชื้อเพลิงพบว่าค่าการนำไอออนของชั้นเยื่อแผ่นจะมีค่าค่อนข้างคงที่อยู่ที่ประมาณเท่ากับ 10.23 ต่อโอห์มต่อเมตร ส่วนค่าความหนาของเยื่อแผ่นที่ใช้มีค่าเท่ากับ 125 μm ดังนั้นค่าความต้านทานของเซลล์เชื้อเพลิงจะกำหนดให้เท่ากับ 0.00128 โอห์ม เมตร²

เมื่อได้ความสัมพันธ์ระหว่างค่า $i_{0,\text{new}}$, i_l และค่า r เทียบกับภาวะการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิง จึงนำความสัมพันธ์ดังกล่าวป้อนเข้าในโปรแกรม Excel ซึ่งเป็นส่วนการคำนวณที่เชื่อมต่อกับข้อมูลกับหน่วยปฏิบัติการเซลล์เชื้อเพลิงในโปรแกรม Aspen Plus และทำการทดสอบความถูกต้องของแบบจำลองกระบวนการเซลล์เชื้อเพลิงในโปรแกรม Aspen Plus โดยการเปรียบเทียบกับผลที่ได้จากการจำลองในโปรแกรม Fluent 4.5 ในรูปของกราฟโพลาริเซชันดังแสดงในรูปที่ 4.21



รูปที่ 4.21 โพลาริเซชันที่ได้จากการจำลองในโปรแกรม Aspen Plus และ โปรแกรม Fluent 4.5

พบว่าผลของแบบจำลองในโปรแกรม Aspen Plus มีความคลาดเคลื่อนจากผลของแบบจำลองในโปรแกรม Fluent 4.5 เพียงเล็กน้อย (ประมาณ 3% ที่ค่าความหนาแน่นกระแสสูง) ทั้งนี้ความคลาดเคลื่อนเนื่องมาจากการกำหนดให้ความสัมพันธ์ของค่าต่างๆ เป็นแบบเชิงเส้น แต่ผลที่ได้ก็ถือว่าใกล้เคียงกันมากพอสมควร

ดังนั้นจึงสรุปได้ว่าแบบจำลองที่พัฒนาขึ้นโดยใช้โปรแกรม Aspen Plus สามารถนำไปใช้สำหรับจำลองการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงได้ ซึ่งจะช่วยลดเวลาในการจำลองลงได้มาก

แต่อย่างไรก็ตามแบบจำลองดังกล่าวจะสามารถจำลองการปรับเปลี่ยนภาวะการทำงานได้เพียงแค่การปรับเปลี่ยนค่าความดันทางด้านขั้วแคโทดในช่วง 2.0 – 2.6 atm เท่านั้น ส่วนการปรับเปลี่ยนค่าตัวแปรต่างๆ เช่นความเข้มข้นของแก๊สขาเข้า อุณหภูมิในระบบ และค่าความชื้นขาเข้า แบบจำลองในโปรแกรม Aspen Plus ยังไม่สามารถจำลองได้ เนื่องจากข้อมูลที่ได้จากโปรแกรม Fluent ยังไม่ครอบคลุมหรือยังไม่สามารถจำลองได้ในขณะนี้

บทที่ 5

สรุปผลงานวิจัยและข้อเสนอแนะ

งานวิจัยนี้ได้มีการพัฒนาแบบจำลองกระบวนการเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอนให้มีความสมบูรณ์มากยิ่งขึ้นกว่าแบบจำลองในงานวิจัยของ He, W. และคณะ⁽¹⁰⁾ กล่าวคือแบบจำลองกระบวนการเซลล์เชื้อเพลิงประกอบด้วยส่วนของชั้นขั้วอิเล็กโทรดทั้ง 2 ขั้ว คือขั้วแคโทดและขั้วแอโนด และชั้นเยื่อแผ่น โดยอยู่ภายใต้สมมติฐานดังต่อไปนี้

- จำลองกระบวนการในระบบภาวะอุณหภูมิคงที่
- ระบบ 2 วัฏภาค คือ วัฏภาคแก๊สและของเหลว
- แบบจำลองที่ใช้มีลักษณะ 2 มิติ
- กำหนดให้มีการไหลของแก๊สภายในชั้นเยื่อแผ่นให้น้อยที่สุด
- จำลองกระบวนการที่ภาวะพลวัต
- น้ำที่เกิดจากปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมีให้อยู่ในรูปของเหลว เนื่องจากอุณหภูมิระบบต่ำกว่า 100 องศาเซลเซียส

5.1 สรุปผลการจำลอง

5.1.1 ส่วนการจำลองโดยโปรแกรม Fluent 4.5

1) แบบจำลองกระบวนการเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอนที่ได้จากโปรแกรม Fluent 4.5 มีความถูกต้อง และสามารถใช้อ้างอิงกระบวนการเซลล์เชื้อเพลิงได้ โดยยืนยันผลกับงานวิจัยของ He, W. และคณะ⁽¹⁰⁾

2) ได้มีการพัฒนาแบบจำลองให้มีความสมบูรณ์มากยิ่งขึ้นเมื่อเปรียบเทียบกับแบบจำลองในงานวิจัยของ He, W. และคณะ⁽¹⁰⁾ โดยจากแบบจำลองที่มีเพียงแคชั้นของขั้วแคโทดเท่านั้น ในงานวิจัยนี้ได้เพิ่มในส่วนของชั้นตัวเร่งปฏิกิริยา ชั้นเยื่อแผ่น และชั้นแอโนด ทำให้สามารถศึกษาพฤติกรรมการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงได้มากยิ่งขึ้น

3) แบบจำลองสามารถแสดงทิศทางการไหลของน้ำในชั้นเยื่อแผ่นซึ่งเป็นปัจจัยสำคัญในการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงได้ และจะสัมพันธ์โดยตรงกับค่าความหนาแน่นกระแส และค่าความดันต่างระหว่างขั้วแคโทดและขั้วแอโนด

4) การเพิ่มความดันทางด้านขั้วแคโทด จะทำให้ค่าความหนาแน่นกระแสที่ได้สูงขึ้น เพราะเป็นการเพิ่มปริมาณแก๊สออกซิเจนให้กับระบบ

5) การเพิ่มความเข้มข้นของแก๊สออกซิเจนขาเข้า จะทำให้ค่าความหนาแน่นกระแสที่ได้สูงขึ้น เพราะเป็นการเพิ่มปริมาณแก๊สออกซิเจนให้กับระบบ

5.1.2 ส่วนการจำลองโดยโปรแกรม Aspen plus

1. ความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัดส่วนปริมาณน้ำในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยา (s) กับค่าความหนาแน่นกระแส (i) และค่าความดันทางด้านหัวแคโทด สามารถเขียนเป็นสมการได้ดังสมการ 4.3 คือ

$$s = [(-2E-06) P_{\text{cath}} + 2E-05] i \quad (4.3)$$

2. ความสัมพันธ์ระหว่างค่าความหนาแน่นกระแสจำกัด (i_l) กับค่าความดันทางด้านหัวแคโทด สามารถเขียนเป็นสมการได้ดังสมการ 4.4

$$i_l = (7.930E+06) P_{\text{cath}} + 2.490E+03 \quad (4.4)$$

3. ค่าความต้านทานของเยื่อแผ่นจะมีค่าค่อนข้างคงที่เท่ากับ 0.00128 โอห์ม เมตร² ที่ทุกภาวะการทำงาน

4. แบบจำลองบนโปรแกรม Aspen Plus สามารถจำลองกระบวนการเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน ได้เหมือนกับแบบจำลองบนโปรแกรม Fluent 4.5 ทำให้ได้แบบจำลองที่มีความถูกต้องสูง ใช้เวลาในการจำลองเพียงเล็กน้อย และสามารถจำลองกระบวนการเซลล์เชื้อเพลิงร่วมกับหน่วยปฏิบัติการอื่นๆ ได้ เช่นหน่วยเพิ่มความชื้นให้กับแก๊สขาเข้า

5.2 ข้อเสนอแนะ

งานวิจัยนี้ ต้องการสร้างแบบจำลองคณิตศาสตร์ของกระบวนการเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน ให้มีความถูกต้อง และสามารถนำไปประยุกต์สำหรับการทำนายผลที่น่าจะเกิดขึ้นในกระบวนการ โดยได้ผนวกเอาองค์ความรู้และรายละเอียดต่างๆ ที่สำคัญ ที่มีความเป็นไปได้มากที่สุดมาใช้ในการพัฒนาแบบจำลอง แต่ด้วยข้อจำกัดของงานวิจัย คือสมรรถนะของคอมพิวเตอร์ที่มีอยู่ในปัจจุบันยังถือว่าช้าอยู่มาก สำหรับใช้ในการจำลองการคำนวณทางพลวัตของของไหล ทำให้แบบจำลองที่ได้มีความละเอียดของโครงสร้างไม่มากนัก ซึ่งแนวทางที่จะสามารถพัฒนาแบบจำลองเพิ่มเติมได้แก่

- เพิ่มรายละเอียดในส่วนของ การคำนวณคุณลักษณะในเซลล์เชื้อเพลิง เพื่อให้แบบจำลองสามารถจำลองปริมาณพลังงานความร้อนที่เกิดภายในกระบวนการเซลล์เชื้อเพลิงได้ โดยจำเป็นต้องหาข้อมูลความสัมพันธ์ระหว่างค่าตัวแปรต่างๆ เทียบกับอุณหภูมิเพิ่มเติม

- พัฒนาแบบจำลองไปสู่ลักษณะ 3 มิติ เพื่อให้สามารถจำลองระบบเซลล์เชื้อเพลิงได้อย่างแท้จริง และสามารถออกแบบลักษณะช่องทางไหลของแก๊สได้ ซึ่งจำเป็นต้องเพิ่มสมรรถนะของคอมพิวเตอร์ที่ใช้ในการคำนวณโดยทำการจำลองกระบวนการด้วยวิธีการใช้คอมพิวเตอร์หลายๆ เครื่องมาทำการคำนวณในลักษณะต่อคู่ขนานกัน

รายการอ้างอิง

1. 3M United States. What is PEM fuel cell? [Online]. 2003 Available from: http://www.3m.com/us/mfg_industrial/fuelcells/overview/pemfc.jhtml
[2003, Aug 30]
2. Larminie, J., and Dick, A. Fuel cell systems explained Chichester: John Wiley & Sons LTD., 2000.
3. เทคโนโลยีพระจอมเกล้าธนบุรี, มหาวิทยาลัย และ นโยบายพลังงานแห่งชาติ, สำนักงานคณะกรรมการ เอกสารประกอบการประชุมผู้เชี่ยวชาญเซลล์เชื้อเพลิง ครั้งที่ 1, 21 มีนาคม 2543 ณ มหาลัยเทคโนโลยีพระจอมเกล้าธนบุรี.
4. Energy Science Australia. How does a fuel cell work? [Online]. 2003 Available from: <http://earthsci.org/energy/fuelcell/fuelcell.html> [2003, Aug 30]
5. Nguyen, T. V. A gas distributor design for proton – exchange – membrane fuel cells. Journal of Electrochemical Society 143 (1996): L103 – L105.
6. ปราโมทย์ เดชะอำไพ, ไฟไนต์เอลิเมนต์ในงานวิศวกรรม พิมพ์ครั้งที่ 2 กรุงเทพฯ สำนักพิมพ์แห่งจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย, 2542.
7. Amphlett, J. C., Mann, R. F., Peppley, B. A., Roberge, P. R. and Rodrigues, A. A model predicting transient responses of proton exchange membrane fuel cells. Journal of Power Sources 61 (1996): 183 – 188.
8. Bezzo, F., Macchietto, S. and Pantelides C. C. A general framework for the integration of computational fluid dynamics and process simulation. Computers and Chemical Engineering 24 (2000): 653 – 658.
9. Gurau, V., Liu, H. and Kakac, S. Two – dimensional model for proton exchange membrane fuel cells. AIChE Journal 44 (1998): 2410 – 2422.
10. He, W., Yi, J. S. and Nguyen T. V. Two – Phase Flow Model of the Cathode of PEM Fuel Cells Using Interdigitated Flow Fields. AIChE Journal 46 (1998): 2053 – 2064.
11. Springer, T.E., Zawodzinski, T.A., and Gottesfeld, S. Polymer electrolyte fuel cell model. Journal of Electrochemical Society 138 (1991): 2334 – 2341.
12. พิษณุ เจริญสมศักดิ์, เซลล์เชื้อเพลิงแบบแผ่นแลกเปลี่ยนไอออน. วิทยานิพนธ์ปริญญา มหาบัณฑิต คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย, 2525.

13. Wood, D. L., III, Yi, J. S., and Nguyen, T. V. Effect of direct liquid water injection and interdigitated flow field on the performance of proton exchange membrane fuel cells. Electrochimica Acta 43 (1998): 3795 – 3809.
14. Oldham, K. B. and Mylan, J. C. Fundamentals of electrochemical science New York: Academic Press, INC., 1994.
15. Pasaogullari, U. and Wang C. Y. Computational fluid dynamics modeling of proton exchange membrane fuel cells using fluent [Online]. Available from: http://university.fluent.com/2002contest/results/STD0013144_paper.pdf



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย



ภาคผนวก

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ภาคผนวก ก
ข้อมูลประกอบการจำลองผล

ตารางที่ ก1 ข้อมูลค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัวต่างๆ ค่าความหนาแน่นกระแส
และค่าศักย์ไฟฟ้าของเซลล์เชื้อเพลิงที่ภาวะการทำงานต่างๆ

P_{cath} (atm)	X_{O_2}	$\eta_{\text{act_cat}}$ (volt)	current (A/M2)	η_{res} (volt)	E (volt)
1.0	0.21	0.0	0	0.000	1.186
		-0.1	96	0.001	1.085
		-0.2	537	0.007	0.980
		-0.3	2775	0.034	0.852
		-0.4	7500	0.092	0.694
		-0.5	9700	0.119	0.567
		-0.6	10210	0.125	0.461
1.0	0.0886	0.0	0	0.000	1.180
		-0.1	41	0.000	1.080
		-0.2	227	0.003	0.977
		-0.3	1165	0.014	0.866
		-0.4	4233	0.052	0.728
		-0.5	7553	0.093	0.587
		-0.6	8121	0.100	0.481
2.0	0.0886	0.0	0	0.000	1.185
		-0.1	79	0.001	1.185
		-0.2	440	0.005	1.185
		-0.3	2250	0.028	1.185
		-0.4	8162	0.100	1.185
		-0.5	14989	0.185	1.185
		-0.6	17144	0.212	1.185
		-0.7	17622	0.218	1.185

P_{cath} (atm)	X_{O_2}	$\eta_{\text{act_cat}}$ (volt)	current (A/M2)	η_{res} (volt)	E (volt)
2.2	0.0886	0.0	0	0.000	1.186
		-0.1	87	0.001	1.085
		-0.2	486	0.006	0.980
		-0.3	2473	0.030	0.855
		-0.4	9016	0.110	0.675
		-0.5	16394	0.201	0.485
		-0.6	18705	0.229	0.356
		-0.7	19269	0.236	0.250
2.4	0.0886	0.0	0	0.000	1.186
		-0.1	96	0.001	1.085
		-0.2	538	0.007	0.980
		-0.3	2725	0.033	0.853
		-0.4	9657	0.118	0.668
		-0.5	17603	0.216	0.471
		-0.6	20173	0.247	0.339
		-0.7	20829	0.255	0.231
2.6	0.0886	0.0	0	0.000	1.187
		-0.1	105	0.001	1.086
		-0.2	583	0.007	0.980
		-0.3	2885	0.035	0.852
		-0.4	10390	0.127	0.660
		-0.5	19079	0.234	0.453
		-0.6	21517	0.264	0.323
		-0.7	22363	0.274	0.213
2.0	0.21	0.0	0	0.000	1.186
		-0.1	186	0.002	1.084
		-0.2	1034	0.013	0.974
		-0.3	5105	0.063	0.824
		-0.4	15529	0.190	0.596
		-0.5	22872	0.281	0.406
		-0.6	24883	0.305	0.281

ตารางที่ ก2 ข้อมูลค่าการนำไอออนของเยื่อแผ่น ความเข้มข้นของแก๊สออกซิเจน และสัดส่วนปริมาณน้ำในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาที่ภาวะการทำงานต่างๆ

P_{cath} (atm)	X_{O_2}	η_{cat} (volt)	conductivity (1/ohm M)	X_{O_2} at cat. Layer .	Water Vol. at cat layer
2.0	0.0886	-0.1	10.19	0.093	0.003
		-0.2	10.19	0.091	0.009
		-0.3	10.20	0.084	0.033
		-0.4	10.21	0.057	0.105
		-0.5	10.19	0.021	0.199
		-0.6	10.20	0.004	0.231
		-0.7	10.20	0.001	0.238
2.2	0.0886	-0.1	10.21	0.093	0.003
		-0.2	10.21	0.092	0.010
		-0.3	10.22	0.084	0.035
		-0.4	10.23	0.058	0.113
		-0.5	10.21	0.021	0.207
		-0.6	10.21	0.004	0.246
		-0.7	10.21	0.001	0.253
2.4	0.0886	-0.1	10.23	0.095	0.003
		-0.2	10.23	0.093	0.011
		-0.3	10.23	0.085	0.038
		-0.4	10.25	0.057	0.116
		-0.5	10.21	0.020	0.211
		-0.6	10.22	0.004	0.258
		-0.7	10.22	0.001	0.263
2.6	0.0886	-0.1	10.24	0.095	0.004
		-0.2	10.24	0.093	0.011
		-0.3	10.25	0.084	0.054
		-0.4	10.26	0.057	0.122
		-0.5	10.29	0.020	0.223
		-0.6	10.31	0.005	0.280
		-0.7	10.31	0.001	0.282

ตารางที่ ก3 ข้อมูลค่าความหนาแน่นกระแส ค่าศักย์ไฟฟ้า
และค่าค่าศักย์ไฟฟ้าเกินตัว ณ ที่เวลาต่างๆ

time (sec)	Current density (A/m ²)	η_{act_cat} (Volt)	η_{ohm} (Volt)	E_{cell} (Volt)	time (sec)	Current density (A/m ²)	η_{act_cat} (Volt)	η_{ohm} (Volt)	E_{cell} (Volt)
5	452	0.2000	0.0056	0.9795	95	14582	0.5000	0.1800	0.5051
10	445	0.2000	0.0055	0.9796	100	14395	0.5000	0.1777	0.5074
15	442	0.2000	0.0054	0.9797	105	14245	0.5000	0.1758	0.5093
20	441	0.2000	0.0054	0.9797	110	14117	0.5000	0.1742	0.5109
25	440	0.2000	0.0054	0.9797	115	14014	0.5000	0.1730	0.5121
30	440	0.2000	0.0054	0.9797	120	13927	0.5000	0.1719	0.5132
35	439	0.2000	0.0054	0.9797	121	403	0.2000	0.0050	0.9801
40	439	0.2000	0.0054	0.9797	125	422	0.2000	0.0053	0.9798
45	438	0.2000	0.0054	0.9797	130	434	0.2000	0.0054	0.9797
50	438	0.2000	0.0054	0.9797	135	442	0.2000	0.0055	0.9796
55	438	0.2000	0.0054	0.9797	140	448	0.2000	0.0056	0.9795
60	438	0.2000	0.0054	0.9797	145	453	0.2000	0.0057	0.9794
61	16951	0.5000	0.2093	0.4758	150	458	0.2000	0.0057	0.9794
65	16646	0.5000	0.2056	0.4795	155	461	0.2000	0.0058	0.9794
70	16265	0.5000	0.2008	0.4843	160	464	0.2000	0.0058	0.9793
75	15868	0.5000	0.1959	0.4892	165	467	0.2000	0.0058	0.9793
80	15494	0.5000	0.1913	0.4938	170	469	0.2000	0.0058	0.9793
85	15127	0.5000	0.1867	0.4984	175	471	0.2000	0.0059	0.9792
90	14817	0.5000	0.1829	0.5022	180	472	0.2000	0.0059	0.9792

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ภาคผนวก ข

คู่มือการใช้งานโปรแกรม

ขั้นตอนการสร้างแบบจำลองบนโปรแกรม Fluent 4.5

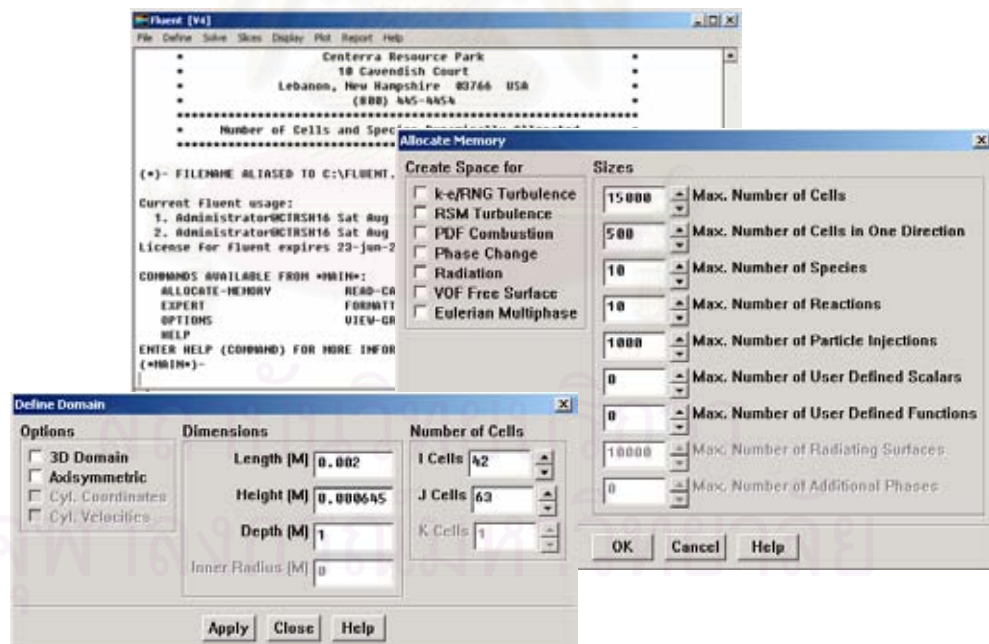
จะแบ่งออกเป็น 2 ขั้นตอนคือ

1) ขั้นตอนการสร้างรูปแบบจำลองเชิงเรขาคณิต (Geometric Modeling)

เริ่มต้นจาก เปิดโปรแกรม Fluent 4.5 ขึ้นมา หน้าต่างที่พบจะเป็นหน้าต่างรับคำสั่งแบบตัวอักษร (Text editor) ดังแสดงในรูปที่ ข1

เลือกเมนูคำสั่ง Define / Allocate... เพื่อทำการกำหนดหน่วยความจำที่ใช้งานสำหรับแบบจำลองที่จะสร้างขึ้น กดปุ่มตกลง ดังแสดงในรูปที่ ข1

จากนั้นเลือกเมนูคำสั่ง Define / Domain... เพื่อกำหนดขนาดขอบเขตของแบบจำลองในที่นี้จะจำลองกระบวนการในลักษณะ 2 มิติ ความยาวเท่ากับ 0.002 เมตร จำนวนเซลล์ที่ใช้สำหรับคำนวณเท่ากับ 40 เซลล์ และต้องบวกเพิ่มเซลล์ที่อยู่บริเวณขอบของแบบจำลองอีก 2 เซลล์ จึงเท่ากับ 42 เซลล์ ความสูงเท่ากับ 0.000645 เมตร จำนวนเซลล์ที่ใช้สำหรับคำนวณเท่ากับ 61 เซลล์ เพิ่มบริเวณขอบจะเท่ากับ 63 เซลล์ ดังแสดงในรูปที่ ข1

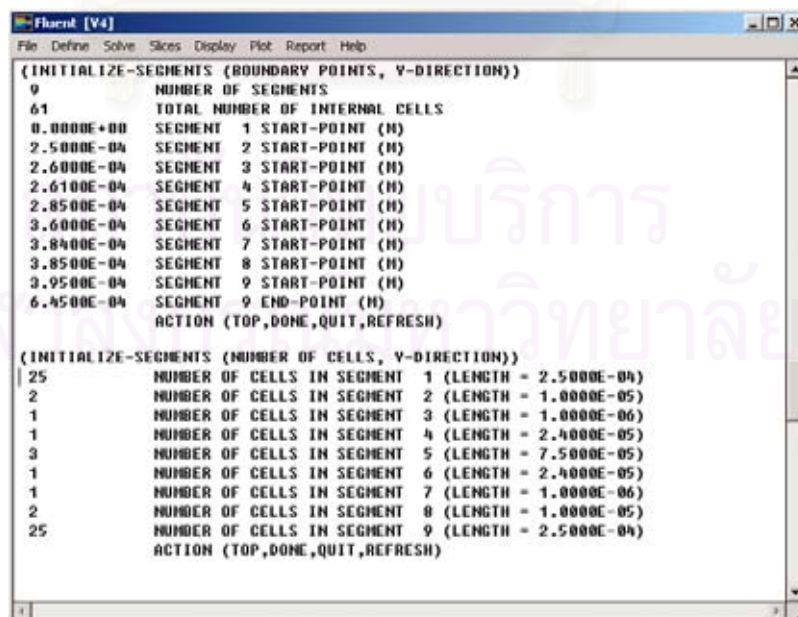


รูปที่ ข1 การกำหนดขอบเขตของแบบจำลองในโปรแกรม Fluent

จากนั้นทำการกำหนดขนาดของเซลล์ที่ใช้สำหรับการคำนวณในชั้นขั้วอิเล็กโทรด ชั้นตัวเร่งปฏิกิริยา และชั้นเยื่อแผ่น โดยมาที่หน้าต่าง Text editor แล้วเข้าไปที่คำสั่ง setup – 1 / generate – grid (ด้วยการพิมพ์คำสั่ง “s1 gg”) เลือกทิศทางแกน y (พิมพ์ “2”) สำหรับกำหนดขนาดของเซลล์ เลือกคำสั่ง initialize – segment (พิมพ์ “is”) กำหนดช่วงเซลล์ที่ต้องการเป็น 9 ช่วง คือ

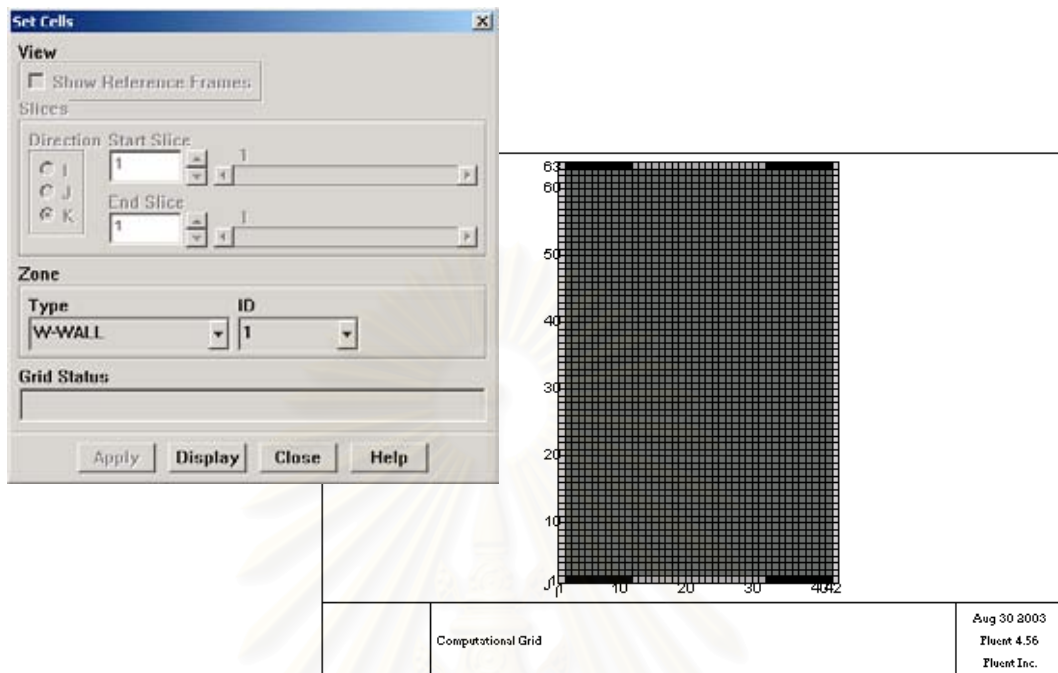
ช่วงที่ 1	เริ่มต้นที่ 0 เมตร	ถึง 2.50E-4 เมตร
ช่วงที่ 2	เริ่มต้นที่ 2.50E-4 เมตร	ถึง 2.60E-4 เมตร
ช่วงที่ 3	เริ่มต้นที่ 2.60E-4 เมตร	ถึง 2.61E-4 เมตร
ช่วงที่ 4	เริ่มต้นที่ 2.61E-4 เมตร	ถึง 2.85E-4 เมตร
ช่วงที่ 5	เริ่มต้นที่ 2.85E-4 เมตร	ถึง 3.60E-4 เมตร
ช่วงที่ 6	เริ่มต้นที่ 3.60E-4 เมตร	ถึง 3.84E-4 เมตร
ช่วงที่ 7	เริ่มต้นที่ 3.84E-4 เมตร	ถึง 3.85E-4 เมตร
ช่วงที่ 8	เริ่มต้นที่ 3.85E-4 เมตร	ถึง 3.95E-4 เมตร
ช่วงที่ 9	เริ่มต้นที่ 3.95E-4 เมตร	ถึง 6.45E-4 เมตร

พิมพ์คำสั่ง Done เพื่อไปขั้นตอนกำหนดจำนวนเซลล์ในแต่ละช่วง โดยช่วงที่ 1 และ 9 นั้นจะเป็นชั้นของขั้วแคโทดและขั้วแอโนดตามลำดับ กำหนดให้เท่ากับ 25 เซลล์ ช่วงที่ 2 และ 8 เป็นชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยา กำหนดให้เท่ากับ 2 เซลล์ และช่วงที่ 3 – 7 จะเป็นชั้นของเยื่อแผ่น แบ่งออกเป็น 5 ช่วง กำหนดให้เท่ากับ 1, 1, 3, 1 และ 1 เซลล์ตามลำดับ ดังแสดงในรูปที่ ข2



รูปที่ ข2 การกำหนดช่วง ขนาด และจำนวนเซลล์ของแบบจำลอง

ขั้นตอนต่อไป ทำการกำหนดชนิดของเซลล์ที่ตำแหน่งต่างๆ โดยไปที่เมนูคำสั่ง Define / Cells... กดปุ่ม Display จะแสดงรูปแบบจำลองแบ่งเป็นเซลล์เล็กดังรูปที่ ข3



รูปที่ ข3 การกำหนดชนิดของเซลล์ในแบบจำลอง

กำหนดชนิดของเซลล์โดยลากเมาส์ไปบนเซลล์ที่ต้องการ และกลับมาที่หน้าต่าง Set Cells เลือกชนิดและหมายเลขของช่วงเซลล์ที่ช่อง Zone : Type, ID ทำการกำหนดค่าตามตารางที่ ข1 เป็นอันเสร็จขั้นตอนการสร้างรูปแบบจำลองเชิงเรขาคณิต

ตารางที่ ข1 การกำหนดชนิดของเซลล์ในแบบจำลอง

Type	ID	I		J	
		from	to	from	to
W-WALL	1	12	31	1	1
		12	31	63	63
SYMMETRY	1	1	1	1	63
		42	42	1	63
INLET	1	2	11	1	1
	2	32	41	1	1
	3	2	11	63	63
	4	32	41	63	63
*(POROUS)	1	2	41	2	26
		2	41	38	62
	2	2	41	27	28
		2	41	36	37
3	2	41	29	35	

2) ขั้นตอนการกำหนดสมการที่ใช้ในแบบจำลอง

โปรแกรม Fluent 4.5 มีความยืดหยุ่นในการทำงานสูง ทำให้สามารถจำลองกระบวนการได้หลากหลายประเภท กล่าวคือโปรแกรมเปิดโอกาสให้ทางผู้ใช้สามารถป้อนสมการการคำนวณเพิ่มเติมด้วยคำสั่งในภาษาฟอร์แทรน (fortran) ให้กับแบบจำลองได้ เรียกคุณลักษณะเพิ่มเติมนี้ว่า “User defined subroutine” และในงานวิจัยนี้ต้องป้อนสมการการคำนวณด้านไฟฟ้าเคมีลงใน user defined subroutine

คุณลักษณะ User defined subroutine นั้นจะมี แม่แบบ (template file) ที่เขียนขึ้นด้วยภาษาฟอร์แทรน แม่แบบฉบับก็จะทำหน้าที่การทำงานแตกต่างกันไป เพื่อให้ผู้ใช้สามารถแก้ไขเพิ่มเติมสมการการคำนวณได้ง่าย โดยในงานวิจัยนี้จะใช้ file แม่แบบ 2 ตัวด้วยกันคือ urstrm.f และ usrmst.f

file urstrm.f ผู้ใช้สามารถเขียนคำสั่งเพิ่มเติมสมการการคำนวณในส่วนต่างๆ ได้แก่ ส่วนการแก้ไขสมการดุลโมเมนต์ เพื่อกำหนดค่าความเร็วของสารภายในแบบจำลอง และส่วนการคำนวณการเกิดปฏิกิริยาปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมีของเซลล์เชื้อเพลิงขององค์ประกอบภายในวฏภาคแก๊สได้แก่ แก๊สออกซิเจน ไฮโดรเจน และน้ำ การสั่งให้ตัว user defined subroutine เรียกใช้ file urstrm.f ทำโดยผู้ใช้เข้าไปที่ setup-1 / expert / user – subroutines / source – term (พิมพ์ “s1 ex us st”) เพื่อเลือกสมการการคำนวณย่อยที่จะใช้ ในงานวิจัยนี้จะเลือกใช้สมการการคำนวณโมเมนต์ในแกน x และ y และสมการการคำนวณองค์ประกอบสารภายในระบบ

ส่วน file usrmst.f เป็นตัวกำหนดสมการสมดุลระหว่างวฏภาค เพื่อใช้คำนวณปริมาณการถ่ายโอนมวลของน้ำข้ามระหว่างวฏภาคแก๊สและของเหลว ในกระบวนการการกลั่นตัวและการระเหยของน้ำ การสั่งให้ตัว user defined subroutine เรียกใช้ file urstrm.f ให้เข้าไปที่ setup-1 / expert / user – subroutines / physical – models (พิมพ์ “s1 ex us pm”) และเลือกใช้สมการการคำนวณการถ่ายโอนมวลระหว่าง 2 วฏภาค

คำสั่งที่ทางผู้วิจัยได้ป้อนเพิ่มเข้าไปนั้นจะเขียนแสดงไว้ในส่วนของภาคผนวก ค

ภาคผนวก ค

คำสั่งเพิ่มเติมที่ใช้ประกอบกับแบบจำลองบนโปรแกรม Fluent 4.5

File urstrm.f

```

SUBROUTINE URSTRM( IVBLE, ATERM, BTERM, IPHASE )
C SCCS ID @(#)urstrm.F4.10 08/10/98
C-----C
C
C   NAME : URSTRM
C
C   (C) COPYRIGHT BY FLUENT INC., 08/10/98
C
C   ARGS          DESCRIPTION
C
C   INPUT : IVBLE - EQUATION INDICATOR
C              = 1 - U-MOMENTUM EQUATION
C              = 2 - V-MOMENTUM EQUATION
C              = 3 - W-MOMENTUM EQUATION
C              = 4 - ENTHALPY (H) EQUATION
C              = 5 - PP-EQUATION (PRSSURE CORRECTION)
C              = 6 - E-EQUATION (TURB. K.E.)
C              = 7 - D-EQUATION (TURB. K.E. DISSIPATION)
C              > 7 - SPECIES EQUATIONS
C              > 7 + NSPEC - VOF equations
C
C   IPHASE - PHASE INDICATOR
C              = 0 - SINGLE PHASE FLOW OR VOF MODEL FOR ALL
C              SOURCE TERMS EXCEPT THE SOURCE TERM
C              FOR VOF EQUATION
C              > 0 - PHASE NUMBER IN MULTIPHASE FLOW:
C              = 1 - FIRST SECONDARY PHASE
C              . . .
C              = NPHASE - LAST SECONDARY PHASE
C              = NPHASE+1 - PRIMARY PHASE
C
C   OUTPUT : ATERM - CONSTANT COMPONENT OF SOURCE TERM
C            BTERM - LINEAR COMPONENT OF SOURCE TERM
C
C   PURPOSE : THIS ROUTINE COMPUTES THE USER SPECIFIED SOURCE TERMS
C             FOR ALL THE TRANSPORT EQUATIONS
C
C   COMMENTS : ALL VARIABLES ARE ACCESSED THROUGH COMMON. THIS IS
C              CALLED AFTER ALL OTHER SOURCE TERMS (INCLUDING B.C.)
C              ARE COMPUTED. ATERM AND BTERM ARE ADDED TO THE
C              CURRENT VALUES OF THE CONSTANT AND LINEAR PART OF
C              THE SOURCE TERM RESPECTIVELY. NOTE : GENERALLY
C              NUMERICAL STABILITY CONSTRAINTS REQUIRE BTERM TO BE
C              NEGATIVE. A POSITIVE VALUE OF BTERM SHOULD BE USED
C              WITH CAUTION. NOTE THAT IN CYLINDRICAL VELOCITIES
C              ARE BEING SOLVED, THE U-MOMENTUM IS THE AXIAL
C              MOMENTUM, V-MOMENTUM IS THE RADIAL MOMENTUM AND THE
C              W-MOMENTUM IS THE TANGENTIAL MOMENTUM.
C              FOR MULTIPHASE FLOWS SOURCE TERMS CAN BE COMPUTED
C              FOR ALL VELOCITY COMPONENTS, SOLIDS PRESSURE AND
C              VOLUME FRACTIONS OF EACH PHASE. NOTE, THAT FOR VOF
C              MODEL SOURCE TERMS CAN BE COMPUTED FOR SECONDARY
C              PHASES ONLY
C
C              WHEN ADDING MASS SOURCES WITH SPECIFIC DESTINATION
C              SPECIES, THE FOLLOWING APPROACH SHOULD BE USED FOR
C              SPECIES SOURCE TERMS:
C              M = TOTAL MASS SOURCE TO BE SPECIFIED (KG/SEC)
C              Mi = MASS SOURCE FOR SPECIES I (SUM Mi = M)
C
C              SOURCE FOR SPECIES i = Mi + M * SPCON(L,i)
C
C   WARNING : ALL DIMENTIONAL QUANTITIES ACCESSED THROUGH COMMON
C             BLOCKS ARE IN THE METERS, KILOGRAMS, SECONDS UNITS
C             SYSTEM. SOURCE TERMS ARE NOT PER UNIT VOLUME.
C             APPROPRIATE UNITS ARE:
C
C   IVARBL   EQUATION   ATERM   BTERM
C   -----   -
C   1         U-MOMENTUM   KG-M/SEC**2   KG/SEC
C   2         V-MOMENTUM   KG-M/SEC**2   KG/SEC
C   3         W-MOMENTUM   KG-M/SEC**2   KG/SEC
C   4         ENTHALPY     Watts         KG/SEC
C   5         PRESSURE COR.   KG/SEC       M-SEC
C   (5       PRESSURE COR.   M**3/SEC     M**4-SEC/KG VOF METHOD)
C   6         E-EQUATION     KG-M**2/SEC**2   KG/SEC
C   7         D-DSSIPATION   KG-M**2/SEC**3   KG/SEC
C   7+       SPECIES        KG/SEC        KG/SEC
C   7+NSPEC+ VOF EQN.      KG/SEC        KG/SEC   EULERIAN
C                                     M**3/SEC     M**3/SEC   VOF METHOD
C
C   CALLED BY : UCALC, VCALC, WCALC, PCALC, ECALC, DCALC,
C              HCALC, SCALC, VOFPCAL, UPDTBF, VOCALC, VOFCSL,
C              WRCALC, WRCYLN, U2CALC, V2CALC, W2CALC, W2RCAL,
C              W2RCLN, UPDBF2
C-----C

```

```

C
#include "IMPLICIT.INC"
C
#include "SIZE.INC"
#include "SPECSZ.INC"
#include "USPARS.INC"
C
C-----C
C      COMMON BLOCKS...
C-----C
C
#include "BOUNDS.INC"
#include "GRID.INC"
#include "FLOVEL.INC"
#include "FLOPRO.INC"
#include "FLPEXV.INC"
#include "FLPGEO.INC"
#include "SPCONS.INC"
#include "FTURB.INC"
#include "MPHASE.INC"
#include "MPPROP.INC"
#include "MPVOF.INC"
#include "CSHEAR.INC"
#include "DNITER.INC"
#include "TDFLOW.INC"
#include "USFUNS.INC"
#include "POLAR.INC"
#include "GAPS.INC"
#include "AREAS.INC"
#include "LOCATE.INC"
#include "LOCATV.INC"
#include "LCTYPE.INC"
#include "LBOUND.INC"
#include "WSFLOW.INC"
#include "TDTEMP.INC"
#include "CHANEL.INC"
#include "NCHANL.INC"

C
C-----C
C      ARGUMENT TYPE DECLARATIONS...
C-----C
C
      INTEGER IVBLE
      INTEGER IPHASE
C
      REAL      ATERM
      REAL      BTERM
C
C-----C
C      LOCAL VARIABLE TYPE DECLARATIONS...
C-----C
C
      INTEGER NUMSPC
      INTEGER NUMVOF
C
C-----C
C      USPARS DEFIND
C-----C
C      USPAR1 = Cathode Overpotential (Volt)           = vary
C      USPAR2 = Capillary Diffusion of water           = 1E-08 M2/sec
C      USPAR3 = Condensation Coeff.                   = 1
C      USPAR4 = Evaporation Coeff.                     = 1
C      USPAR5 = Correction factor of water flow        = 1
C              in membrane
C      USPAR6 = Correction factor of multiphase         = 1
C      USPAR7 = Interfacial drag coeff. (f)            = 0.005
C              by gas drag force in electrode
C      USPAR8 = Evap and condence or not? 0: non solve 1: solve
C      USPAR9 = RXN or not?                            0: non rxn 1: rxn
C      USPA10 = Write data file or not?                0: no write 1: write
C      Must active Species Source term
C-----C
C
C      (OTHER LOCAL VARIABLE DECLARATIONS HERE)...
C
C-----C
C      BEGIN SUBROUTINE URSTRM...
C-----C
C
C-----GAS CONSTANT (M2*ATM/KMOL*K)-----C
      RGAS1 = 0.08206
C-----GAS CONSTANT (KJ/KMOL*K)-----C
      RGAS2 = 8.314
C-----FARADAY CONSTANT -----C
      FAR = 96485.0
C-----EXCHANGE CURRENT DENSITY OF CATHODE AND ANODE AT 60 C (AMP/M2)-C
      IO = 100.0
      IOA = 5.0E6
C-----REF. CONCENTRATION AT 1 ATM AND SAME REF.TEMP OF IO (KMOL/M3)--C
      Cref = 1/RGAS1/333.15
C-----VISCOSITY OF LIQ.WATER ASSUME CONSTANT AT 60 C-----C
      VISWATER = 4.665E-4

C-----change units-----C
      TEMP = T(L)-273
      PRES = (P(L)+101325)/101325
      DENW = DEN2(L,1)/VOF(L,1)

```



```

      IF      ( IVBLE .EQ. 1 ) THEN
C=====
C  U S E R   S O U R C E   T E R M   F O R   U - E Q...   C
C=====
C
      IF ( IPHASE .EQ. 0 ) THEN
C
      SINGLE PHASE FLOW :
C
      ATERM = 0.0
      BTERM = 0.0
      ELSE
C
      MULTIPHASE FLOW :
C
      IF (IPHASE .EQ. 1) THEN
C*****
      IF ((YC(L)<=0.255E-3) .or. (YC(L)>=0.39E-3)) THEN
C*****
          ATERM = -VIS(L)/1.2e-12*YACOB(L)/USPAR7*VOF(L,1)
          &*USPAR2*( VOF(L,1)-VOF(LXMV(L),1) )/(0.05E-3)
          BTERM = -VIS(L)/1.2e-12*YACOB(L)/USPAR7*VOF(L,1)
          ELSE
          ATERM = 0.0
          BTERM = -VIS2(L,1)/1.58e-18*YACOB(L)
          END IF
          ELSE
          ATERM = 0.0
          BTERM = 0.0
          END IF
          END IF
C
      ELSE IF ( IVBLE .EQ. 2 ) THEN
C=====
C  U S E R   S O U R C E   T E R M   F O R   V - E Q...   C
C=====
C
      IF ( IPHASE .EQ. 0 ) THEN
C
      SINGLE PHASE FLOW :
C
      ATERM = 0.0
      BTERM = 0.0
      ELSE
C
      MULTIPHASE FLOW :
C
      IF (IPHASE .EQ. 1) THEN
C*****
      IF ((YC(L)<=0.255E-3) .or. (YC(L)>=0.39E-3)) THEN
C*****
          IF (VOF(L,1)>=1) VOF(L,1) = 1
          IF (VOF(LYMV(L),1)>=1) VOF(LYMV(L),1) = 1
          ATERM = -VIS(L)/1.2e-12*YACOB(L)/USPAR7*VOF(L,1)
          &*USPAR2*( VOF(L,1)-VOF(LYMV(L),1) )/(0.01E-3)
          BTERM = -VIS(L)/1.2e-12*YACOB(L)/USPAR7*VOF(L,1)
          ELSE
          IF (USPAR9 == 1) THEN
          ATERM = -VIS2(L,1)/1.58e-18*YACOB(L)*WATFLOW
          ELSE
          ATERM = 0.0
          END IF
          BTERM = -VIS2(L,1)/1.58e-18*YACOB(L)
          END IF
          ELSE
          ATERM = 0.0
          BTERM = 0.0
          END IF
          END IF
C
      ELSE IF ( IVBLE .EQ. 3 ) THEN
C=====
C  U S E R   S O U R C E   T E R M   F O R   W - E Q...   C
C=====
C
      IF ( IPHASE .EQ. 0 ) THEN
C
      SINGLE PHASE FLOW :
C
      ATERM = 0.0
      BTERM = 0.0
      ELSE
C
      MULTIPHASE FLOW :
C
      ATERM = 0.0
      BTERM = 0.0
      END IF
C
      ELSE IF ( IVBLE .EQ. 4 ) THEN

```

```

C
C=====C
C   U S E R   S O U R C E   T E R M   F O R   H - E Q . . . .   C
C=====C
C
C   I F   (   I P H A S E   . E Q .   0   )   T H E N
C
C       S I N G L E   P H A S E   F L O W   :
C
C           A T E R M   =   0 . 0
C           B T E R M   =   0 . 0
C       E L S E
C
C           M U L T I P H A S E   F L O W   :
C
C           A T E R M   =   0 . 0
C           B T E R M   =   0 . 0
C       E N D   I F
C
C   E L S E   I F   (   I V B L E   . E Q .   5   )   T H E N
C
C=====C
C   U S E R   S O U R C E   T E R M   F O R   P R E S . C O R R E C . - E Q . . . C
C=====C
C
C   I F   (   I P H A S E   . E Q .   0   )   T H E N
C
C       S I N G L E   P H A S E   F L O W   :
C
C           A T E R M   =   0 . 0
C           B T E R M   =   0 . 0
C       E L S E
C
C           M U L T I P H A S E   ( G R A N U L A R )   F L O W   :
C
C           A T E R M   =   0 . 0
C           B T E R M   =   0 . 0
C       E N D   I F
C
C   E L S E   I F   (   I V B L E   . E Q .   6   )   T H E N
C
C=====C
C   U S E R   S O U R C E   T E R M   F O R   K - E Q . . . .   C
C=====C
C
C   I F   (   I P H A S E   . E Q .   0   )   T H E N
C
C       S I N G L E   P H A S E   F L O W   :
C
C           A T E R M   =   0 . 0
C           B T E R M   =   0 . 0
C       E L S E
C
C           M U L T I P H A S E   F L O W   :
C
C           A T E R M   =   0 . 0
C           B T E R M   =   0 . 0
C       E N D   I F
C
C   E L S E   I F   (   I V B L E   . E Q .   7   )   T H E N
C
C=====C
C   U S E R   S O U R C E   T E R M   F O R   E P S I L O N - E Q . . . .   C
C=====C
C
C   I F   (   I P H A S E   . E Q .   0   )   T H E N
C
C       S I N G L E   P H A S E   F L O W   :
C
C           A T E R M   =   0 . 0
C           B T E R M   =   0 . 0
C       E L S E
C
C           M U L T I P H A S E   F L O W   :
C
C           A T E R M   =   0 . 0
C           B T E R M   =   0 . 0
C       E N D   I F
C
C   E L S E   I F   (   (   I V B L E   . G E .   8   )   . A N D .
C       +   (   I V B L E   . L E .   ( N S P E C   +   7   )   )   )   T H E N
C
C=====C
C   U S E R   S O U R C E   T E R M   F O R   S P E C I E S - E Q . . . .   C
C=====C
C       S P E C I E S   N U M B E R   =   N U M S P C   F O R   S I N G L E   P H A S E
C   N U M S P C 1   =   S P E C I E S   N U M B E R   I N   P R I M A R Y   P H A S E           C
C   N U M S P C 2   =   S P E C I E S   N U M B E R   I N   S E C O N D A R Y   P H A S E   C
C=====C
C
C       N U M S P C   =   I V B L E   -   7
C
C
C

```



```

      IF ( IPHASE .EQ. 0 ) THEN
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C      SINGLE PHASE FLOW :      C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC

      NUMSPC1 = NUMSPC

      IF (IVBLE == 8) THEN
C
C      First species
C
      ATERM = 0.0
      BTERM = 0.0

      ELSE IF (IVBLE == 9) THEN
C
C      Second species
C
      NUMSPC12 = NUMSPC1

      ATERM = 0.0
      BTERM = 0.0

      ELSE

      ATERM = 0.0
      BTERM = 0.0

      END IF

CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C      MULTIPHASE FLOW :      C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC

      ELSE IF (IPHASE == 3) Then

      NUMSPC1 = NUMSPC
C
C      Primary phase
C
C#####
C#####
      IF (IVBLE == 8) THEN

C
C      First species      H2O vapor
C
      IF (USPAR9 == 1) THEN
      IF ((YC(L)>=0.25E-3).and.(YC(L)<=0.255E-3)) THEN
      ATERM1 = -SPCON(L,1)*ATERMN
      ELSE IF ((YC(L)>=0.39E-3).and.(YC(L)<=0.395E-3)) THEN
      ATERM1 = -SPCON(L,1)*ATERMN
      ELSE
      ATERM1 = 0.0
      END IF
      ELSE
      ATERM1 = 0.0
      END IF

      IF (USPAR8 == 1) THEN
C#####
      IF ((YC(L)<=0.26E-3).or.(YC(L)>=0.385E-3)) THEN
C#####

      IF (HUMID>100) THEN

      ATERM4 = (1-SPCON(L,1))*USPAR3*SPCON11/
&(RGAS1*T(L))*(SPSAT-SPCON11*PRES)*18*YACOB(L)

      ELSE

      IF (VOF(L,1)>1e-7) THEN
      ATERM4 = (1-SPCON(L,1))*USPAR4*DENW*
&(SPSAT-SPCON11*PRES)*YACOB(L)

      ELSE

      ATERM4 = 0.0

      END IF

      END IF
      ELSE
      ATERM4 = 0.0
      END IF
      ELSE
      ATERM4 = 0.0
      END IF

      ATERM = ATERM1+ATERM4
      BTERM = 0.0

```

```

C#####
C#####
      ELSE IF (IVBLE == 9) THEN
C
C   Second species   O2 gas
C
      IF (USPAR9 == 1) THEN
        IF ((YC(L) >= 0.25E-3) .and. (YC(L) <= 0.255E-3)) THEN
          ATERM1 = (1-SPCON(L,2))*ATERMN
        ELSE IF ((YC(L) >= 0.39E-3) .and. (YC(L) <= 0.395E-3)) THEN
          ATERM1 = -SPCON(L,2)*ATERMN
        ELSE
          ATERM1 = 0.0
        END IF
      ELSE
        ATERM1 = 0.0
      END IF

      IF (USPAR8 == 1) THEN
C*****
        IF ((YC(L) <= 0.26E-3) .or. (YC(L) >= 0.385E-3)) THEN
C*****
          IF (HUMID > 100) THEN

            ATERM4 = -SPCON(L,2)*USPAR3*SPCON11/
&(RGAS1*T(L))*(SPSAT-SPCON11*PRES)*18*YACOB(L)

            ELSE

              IF (VOF(L,1) > 1e-7) THEN
                ATERM4 = -SPCON(L,2)*USPAR4*DENW*
&(SPSAT-SPCON11*PRES)*YACOB(L)

              ELSE

                ATERM4 = 0.0

              END IF

            END IF
          ELSE
            ATERM4 = 0.0
          END IF
        ELSE
          ATERM4 = 0.0
        END IF

        ATERM = ATERM1+ATERM4
        BTERM = 0.0

C#####
C#####
      ELSE IF (IVBLE == 10) THEN
C
C   Third species   H2 gas
C
      IF (USPAR9 == 1) THEN
        IF ((YC(L) >= 0.25E-3) .and. (YC(L) <= 0.255E-3)) THEN
          ATERM1 = -SPCON(L,3)*ATERMN
        ELSE IF ((YC(L) >= 0.39E-3) .and. (YC(L) <= 0.395E-3)) THEN
          ATERM1 = (1-SPCON(L,3))*(4/32)*(2/2)*ATERMN
        ELSE
          ATERM1 = 0.0
        END IF
      ELSE
        ATERM1 = 0.0
      END IF

      IF (USPAR8 == 1) THEN
C*****
        IF ((YC(L) <= 0.26E-3) .or. (YC(L) >= 0.385E-3)) THEN
C*****
          IF (HUMID > 100) THEN

            ATERM4 = -SPCON(L,3)*USPAR3*SPCON11/
&(RGAS1*T(L))*(SPSAT-SPCON11*PRES)*18*YACOB(L)

            ELSE

              IF (VOF(L,1) > 1e-7) THEN
                ATERM4 = -SPCON(L,3)*USPAR4*DENW*
&(SPSAT-SPCON11*PRES)*YACOB(L)

              ELSE

                ATERM4 = 0.0

              END IF

            END IF
          ELSE
            ATERM4 = 0.0
          END IF
        ELSE
          ATERM4 = 0.0
        END IF

        ATERM = ATERM1+ATERM4
        BTERM = 0.0

```

```

C-----Write data to txt file-----C
IF (USPA10 == 1) THEN
  open(1,FILE='zcurrent.txt')
  IF ((YC(L)>=0.25E-3).and.(YC(L)<=0.255E-3)) THEN
  IF (XC(L)<=0.05e-3) THEN
    write (1, '("*****")')
  END IF
  write (1, '("XC      =" ,E12.5," YC      =" ,E12.5
&," CURRENT      =" ,E12.5)') XC(L),YC(L),CURRENT
  END IF

  open(2,FILE='zconduc.txt')
  IF ((YC(L)>=0.255E-3).and.(YC(L)<=0.384E-3)) THEN
  IF ((XC(L)<=0.05e-3).and.(YC(L)<=0.26E-3)) THEN
    write (2, '("*****")')
  END IF
  write (2, '("XC      =" ,E12.5," YC      =" ,E12.5
&," CONDUCT      =" ,E12.5," OVERRES      =" ,E12.5)')
& XC(L),YC(L),CONDUCT,OVERRES
  END IF

  open(3,FILE='zoveranode.txt')
  IF ((YC(L)>=0.384E-3).and.(YC(L)<=0.385E-3)) THEN
  IF (XC(L)<=0.05e-3) THEN
    write (3, '("*****")')
  END IF
  write (3, '("XC      =" ,E12.5," YC      =" ,E12.5
&," OVERANODE      =" ,E12.5)') XC(L),YC(L),OVERANODE
  END IF

  open(4,FILE='zConcentrate.txt')
  IF ((YC(L)>=0.25E-3).and.(YC(L)<=0.255E-3)) THEN
  write (4, '("XC      =" ,E12.5," YC      =" ,E12.5
&," SPCON(L,2)      =" ,E12.5)') XC(L),YC(L),SPCON(L,2)
  END IF

  open(5,FILE='zWaterVol.txt')
  IF ((YC(L)>=0.25E-3).and.(YC(L)<=0.255E-3)) THEN
  write (5, '("XC      =" ,E12.5," YC      =" ,E12.5
&," VOF(L,1)      =" ,E12.5)') XC(L),YC(L),VOF(L,1)
  END IF

  IF (YC(L)>=0.5e-3) THEN
    close(1)
    close(2)
    close(3)
    close(4)
    close(5)
  END IF
END IF

C#####
C#####

ELSE

C
C Secondary phase
C

  ATERM = 0.0
  BTERM = 0.0

END IF

C
  ELSE IF ( ( IVBLE .GT. (NSPEC + 7) ) .AND.
+ ( IVBLE .LE. (NSPEC + 7 + MXPHAZ + 1) ) ) THEN
C
C=====C
C U S E R S O U R C E T E R M F O R V O F - E Q . . . C
C=====C
C PHASE NUMBER = NUMVOF C
C=====C
C
  NUMVOF = IVBLE - 7-NSPEC
C
  ATERM = 0.0
  BTERM = 0.0
C
  ELSE
C
C=====C
C R E S E R V E D F O R F U T U R E U S E . . . C
C=====C
C
  ATERM = 0.0
  BTERM = 0.0
C
  ENDIF
C
C-----C
C END SUBROUTINE URSTRM AND RETURN. . . C
C-----C
C
RETURN
END

```



```

C-----C
C   USPARS DEFIND                                     C
C-----C
C   USPAR1 = Cathode Overpotential (Volt)             = vary
C   USPAR2 = Capillary Diffusion of water             = 1E-08 M2/sec
C   USPAR3 = Condensation Coeff.                     = 1
C   USPAR4 = Evaporation Coeff.                       = 1
C   USPAR5 = Correction factor of water flow          = 1
C             in membrane
C   USPAR6 = Correction factor of multiphase           = 1
C   USPAR7 = Correction factor of water flow          = 0.005
C             by gas drag force in electrode
C   USPAR8 = Evap and condence or not? 0: non rxn    1: rxn
C   USPAR9 = RXN or not?                          0: non rxn    1: rxn
C   USPA10 = Write data file or not?                0: no write   1: write
C-----C
C
C-----C
C   BEGIN FUNCTION USREXM...                          C
C-----C
C
C-----GAS CONSTANT (M2*ATM/KMOL*K)-----C
RGAS1 = 0.08206
C-----GAS CONSTANT (KJ/KMOL*K)-----C
RGAS2 = 8.314
C-----FARADAY CONSTANT -----C
FAR = 96485.0
C-----EXCHANGE CURRENT DENSITY OF CATHODE AND ANODE AT 60 C (AMP/M2)-C
IO = 100.0
IOA = 5.0E6
C-----REF. CONCENTRATION AT 1 ATM AND SAME REF.TEMP OF IO (KMOL/M3)--C
Cref = 1/RGAS1/333.15
C-----VISCOSITY OF LIQ.WATER ASSUME CONSTANT AT 60 C-----C
VISWATER = 4.665E-4

C-----change units-----C
TEMP = T(L)-273
PRES = (P(L)+101325)/101325
DENW = DEN2(L,1)/VOF(L,1)

C-----change Mass fraction ---> Mole fraction-----C
SPCON11=SPCON(L,1)/18/(SPCON(L,1)/18+SPCON(L,2)/32
&+SPCON(L,3)/2+SPCON(L,4)/28)
SPCON22=SPCON(L,2)/32/(SPCON(L,1)/18+SPCON(L,2)/32
&+SPCON(L,3)/2+SPCON(L,4)/28)
SPCON33=SPCON(L,3)/2/(SPCON(L,1)/18+SPCON(L,2)/32
&+SPCON(L,3)/2+SPCON(L,4)/28)
SPCON44=1-SPCON11-SPCON22-SPCON33

C-----Cal. Sat Vapor Pressure of H2O and Cal.%Humid-----C
SPSAT = 10**(-2.0973e-1+3.1086e-2*TEMP-1.1288e-4*TEMP**2
&+2.3588e-7*TEMP**3)/101.325
HUMID = SPCON11*PRES/SPSAT*100

C
C-----C
C   MASS TRANSFER FOR TWO-PHASE ONLY M_12            C
C-----C
C
IF ((IPHAS1==1).and.(IPHAS2==3)) THEN
  IF (USPAR9 == 1) THEN
    IF ((YC(L)>=0.25E-3).and.(YC(L)<=0.255E-3)) THEN
      IF (SPCON(NEWLL,3) >= 1.0E-3) THEN
        suterm1 = IO/Cref/4/FAR/1000
        suterm2 = (-32)*suterm1*(PRES/RGAS1/T(L))*SPCON22
        &*EXP(0.5*FAR/RGAS2/T(L)*USPAR1)*(1-(VOF(L,1)/(1-VOF(L,2))))
        suterm3 = suterm2/(0.01E-3)
      ELSE
        suterm1 = 0.0
        suterm2 = 0.0
        suterm3 = 0.0
      END IF
    ELSE
      suterm1 = 0.0
      suterm2 = 0.0
      suterm3 = 0.0
    END IF
  ELSE
    suterm1 = 0.0
    suterm2 = 0.0
    suterm3 = 0.0
  END IF
END IF

```

```

IF (USPAR8 == 1) THEN
C*****
IF ((YC(L)<=0.255E-3).or.(YC(L)>=0.385E-3)) THEN
C*****
IF (HUMID>=100) THEN

      suter4 = USPAR3*SPCON11/
&((0.0821)*T(L))*(SPSAT-SPCON11*PRES)*18

      ELSE
      IF (VOF(L,1)>1e-7) THEN
      suter4 = USPAR4*DENW*
&(SPSAT-SPCON11*PRES)
      ELSE
      suter4 = 0.0
      END IF
      END IF
      ELSE
      suter4 = 0.0
      END IF
      ELSE
      suter4 = 0.0
      END IF

      suter = suter3+suter4

ELSE IF ((IPHAS1==1).and.(IPHAS2==2)) THEN

IF (USPAR9 == 1) THEN
IF ((YC(L)>=0.25E-3).and.(YC(L)<=0.255E-3)) THEN
IF (SPCON(NEWLL,3) >= 1.0E-3) THEN
suter1 = I0/Cref/4/FAR/1000
suter2 = (-4)*suter1*(PRES/RGAS1/T(L))*SPCON22
&*EXP(0.5*FAR/RGAS2/T(L)*USPAR1)*(1-(VOF(L,1)/(1-VOF(L,2))))
suter = suter2/(0.01E-3)*USPAR6
ELSE
suter1 = 0.0
suter2 = 0.0
suter = 0.0
END IF
ELSE
suter1 = 0.0
suter2 = 0.0
suter = 0.0
END IF
ELSE
suter1 = 0.0
suter2 = 0.0
suter = 0.0
END IF

ELSE IF ((IPHAS1==2).and.(IPHAS2==3)) THEN

IF (USPAR9 == 1) THEN
IF ((YC(L)>=0.39E-3).and.(YC(L)<=0.395E-3)) THEN
IF (SPCON(NEWLL,3) >= 1.0E-3) THEN
suter1 = I0/Cref/2/FAR/1000
suter2 = (-2)*suter1*(PRES/RGAS1/T(L))*SPCON22
&*EXP(0.5*FAR/RGAS2/T(L)*USPAR1)*(1-(VOF(L,1)/(1-VOF(L,2))))
suter = suter2/(0.01E-3)
ELSE
suter1 = 0.0
suter2 = 0.0
suter = 0.0
END IF
ELSE
suter1 = 0.0
suter2 = 0.0
suter = 0.0
END IF
ELSE
suter1 = 0.0
suter2 = 0.0
suter = 0.0
END IF

ELSE
suter = 0.0
END IF

C
C-----C
C      END FUNCTION USRMST AND RETURN...      C
C-----C
C
RETURN
END

```

ประวัติผู้เขียนวิทยานิพนธ์

นายฐิติกร วาสนาเพียรพงศ์ เกิดวันที่ 18 มกราคม พ.ศ. 2522 ที่จังหวัดสมุทรสาคร สำเร็จการศึกษาปริญญาตรีวิทยาศาสตร์บัณฑิต สาขาเคมีวิศวกรรม ภาควิชาเคมีเทคนิค คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ในปีการศึกษา 2542 และเข้าศึกษาต่อในหลักสูตรวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต ที่จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย เมื่อ พ.ศ. 2543



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย