

แบบจำลองเชิงพลวัต 3 มิติของเซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็มขนาด 5 ตารางเซนติเมตร

นายธนวัฒน์ วรรณทอง

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชาเคมีเทคนิค ภาควิชาเคมีเทคนิค

คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ปีการศึกษา 2554

ลิขสิทธิ์ของจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บทคัดย่อและแฟ้มข้อมูลฉบับเต็มของวิทยานิพนธ์ตั้งแต่ปีการศึกษา 2554 ที่ให้บริการในคลังปัญญาจุฬาฯ (CUIR)

เป็นแฟ้มข้อมูลของนิสิตเจ้าของวิทยานิพนธ์ที่ส่งผ่านทางบัณฑิตวิทยาลัย

The abstract and full text of theses from the academic year 2011 in Chulalongkorn University Intellectual Repository (CUIR)

are the thesis authors' files submitted through the Graduate School.

THREE-DIMENSIONAL DYNAMIC MODEL OF 5 cm² PEM FUEL CELL

Mr. Thanawat Kornthong

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

Department of Chemical Technology

Faculty of Science

Chulalongkorn University

Academic Year 2011

Copyright of Chulalongkorn University

หัวข้อวิทยานิพนธ์

แบบจำลองเชิงพลวัต 3 มิติของเซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็มขนาด
5 ตารางเซนติเมตร

โดย

นายธนวัฒน์ วรรณทอง

สาขาวิชา

เคมีเทคนิค

อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก

รองศาสตราจารย์ ดร. พรพจน์ เปี่ยมสมบุญ

คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย อนุมัติให้หัวข้อวิทยานิพนธ์ฉบับนี้เป็นส่วนหนึ่ง
ของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรบัณฑิต

..... คณบดีคณะวิทยาศาสตร์
(ศาสตราจารย์ ดร. สุพจน์ หารหนองบัว)

คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์

..... ประธานกรรมการ
(รองศาสตราจารย์ ดร. เกียรติ พงษ์ชาติ)

..... อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก
(รองศาสตราจารย์ ดร. พรพจน์ เปี่ยมสมบุญ)

..... กรรมการ
(ศาสตราจารย์ ดร. สุทธิชัย อัสสะบำรุงรัตน์)

..... กรรมการภายนอกมหาวิทยาลัย
(รองศาสตราจารย์ ดร. นวดี เหล่าศิริพจน์)

ธนวัฒน์ วรรณทอง : แบบจำลองเชิงพลวัต 3 มิติของเซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็มขนาด 5 ตารางเซนติเมตร. (THREE-DIMENSIONAL DYNAMIC MODEL OF 5 cm² PEM FUEL CELL) อ. ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก: รศ.ดร.พรพจน์ เปี่ยมสมบูรณ์, 117 หน้า.

แบบจำลองสามมิติของเซลล์เชื้อเพลิงแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอนถูกสร้างขึ้นเพื่อจำลองพลศาสตร์ของไหลและทำนายปรากฏการณ์การถ่ายโอนมวลสารในเซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็ม แบบจำลองมุ่งเน้นที่การศึกษาการไหลของของไหลในช่องการไหลของแก๊ส การกระจายตัวของแก๊สและโปรตอน การเกิดปฏิกิริยาในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาทั้งทางฝั่งแอโนดและฝั่งแคโทด และความหนาแน่นกระแสที่ได้ ในงานวิจัยนี้ได้สร้างแบบจำลองของเซลล์เชื้อเพลิงขนาด 5 ตารางเซนติเมตรซึ่งประกอบด้วยช่องการไหลของแก๊สแบบขนานและคดเคี้ยว ชั้นการแพร่แก๊ส ชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาและเมมเบรนโดยใช้โปรแกรมการคำนวณทางพลศาสตร์ของไหลชื่อว่า ANSYS FLUENT 12.1 ตัวแปรต่างๆ ที่ใช้ในการคำนวณได้มาจากการงานวิจัยอื่นๆ และจากการทดลอง ในงานวิจัยนี้เน้นศึกษาผลของความเร็วแก๊สขาเข้าและค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนที่มีต่อการกระจายตัวของแก๊สและโปรตอน อัตราการเกิดปฏิกิริยาและการกำจัดน้ำ จากผลการทดลองแสดงให้เห็นว่าทางฝั่งแอโนด โปรตอนเคลื่อนที่ออกจากระบบมากขึ้นเมื่อความเร็วของแก๊สขาเข้ามากขึ้นอย่างไรก็ตามอัตราการเกิดปฏิกิริยาจะเพิ่มขึ้นเพียงเล็กน้อยสำหรับทางฝั่งแคโทดความเร็วของแก๊สขาเข้าที่มากขึ้นยังช่วยกำจัดน้ำที่เกิดจากปฏิกิริยาได้ดีขึ้น ทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาเพิ่มขึ้นซึ่งทำให้ความหนาแน่นกระแสและสมรรถนะของเซลล์เพิ่มขึ้น ในส่วนของผลกระทบจากค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนแสดงให้เห็นว่าเมื่อค่าสัมประสิทธิ์มีค่าลดลงจะทำให้โปรตอนมีปริมาณสะสมมากขึ้นเนื่องจากโปรตอนแพร่ได้ช้าลงและถูกเคลื่อนที่ได้ยากขึ้น และในส่วนของผลจากความแตกต่างของช่องทางการไหลพบว่าช่องการไหลแบบคดเคี้ยวให้ผลของการกำจัดน้ำและการกระจายตัวของแก๊สออกซิเจนฝั่งแคโทดดีกว่าช่องการไหลแบบขนาน

ภาควิชา.....เคมีเทคนิค.....ลายมือชื่อนิสิต.....
 สาขาวิชา.....เคมีเทคนิค.....ลายมือชื่อ อ.ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก.....
 ปีการศึกษา.....2554.....

5172309323 : MAJOR CHEMICAL TECHNOLOGY

KEYWORDS : PEM FUEL CELL / COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS /
ELECTROCHEMICAL REACTION

THANAWAT KORNTONG: THREE-DIMENSIONAL DYNAMIC MODEL OF 5
cm² PEM FUEL CELL. ADVISOR: ASSOC.PROF. PORNPOTE
PIUMSOMBOON, Ph.D, 117 pp.

A three-dimensional model of proton exchange membrane fuel cell (PEMFC) has been developed for simulating the fluid dynamics and predicting the transport phenomena in PEMFC. The model was focusing on fluid flow in gas flow channel, gas and proton distributions and reactions on catalyst layers for both anode and cathode sides and current density. In this work, a 5 cm² PEM fuel cell consisting of gas flow channel with parallel and serpentine types, gas diffusion layer, catalyst layer and membrane was developed under commercial software, namely ANSYS FLUENT 12.1, using computational fluid dynamics (CFD) technique. All model parameters were determined from published literature and the experiment. This study is focused on the impact of gas inlet velocity and proton diffusion coefficient on gas and proton distributions, reaction rate and water removal. The results show that more protons flow out by increasing the gas inlet velocity on the anode side even if the reaction rate is increasing because the reaction rate is slightly increasing. Moreover, the increase of the gas inlet velocity improves the generated water removals that enhance the rate of reaction on the cathode side. Subsequently it increases current density and the cell performance. In the case of the effect of the proton diffusion coefficient show that the decreasing of coefficient will increase the proton accumulation because protons diffuse slower and move harder. The result from different gas flow channels shows that the serpentine flow field gives an oxygen distribution and water removal better than parallel flow field.

Department :Chemical Technology..... Student's Signature

Field of Study :Chemical Technology... Advisor's Signature

Academic Year :2011.....

กิตติกรรมประกาศ

วิทยานิพนธ์แบบจำลองเชิงพลวัต 3 มิติของเซลล์เชื้อเพลิงฟิวส์ชนิด 5 ตารางเซนติเมตรฉบับนี้สำเร็จลุล่วงได้ด้วยดี ด้วยความช่วยเหลืออย่างดียิ่งของ รองศาสตราจารย์ ดร. พรพจน์ เปี่ยมสมบูรณ์ อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก รวมทั้งคณาจารย์ทุกท่านในภาควิชาเคมีเทคนิค ซึ่งท่านได้ให้คำแนะนำและข้อคิดเห็นต่างๆ ในงานวิจัยนี้ตลอดมา

ขอกราบขอบพระคุณ รองศาสตราจารย์ ดร. เก็จวลี พุกษาทร ประธานกรรมการสอบวิทยานิพนธ์ ศาสตราจารย์ ดร.สุทธิชัย อัสสะบำรุงรัตน์ และ รองศาสตราจารย์ ดร.นวดล เหล่าศิริพจน์ กรรมการสอบวิทยานิพนธ์ ที่กรุณาให้คำแนะนำในการจัดทำวิทยานิพนธ์ให้มีความสมบูรณ์

สุดท้ายนี้ขอกราบขอบพระคุณบิดา มารดา ญาติพี่น้อง ที่ให้ความช่วยเหลือ เป็นกำลังใจอย่างดีและให้การสนับสนุนจนสำเร็จการศึกษา รวมทั้งขอขอบคุณพี่ๆ เพื่อนๆ และน้องๆ ชาวเคมีเทคนิคทุกคนที่ให้กำลังใจและความช่วยเหลือที่อบอุ่น ด้วยดีเสมอมา

สารบัญ

	หน้า
บทคัดย่อภาษาไทย	ง
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ	จ
กิตติกรรมประกาศ.....	ฉ
สารบัญ	ช
สารบัญตาราง.....	ญ
สารบัญภาพ	ฎ
บทที่	
1 บทนำ.....	1
1.1 ความสำคัญและที่มาของโครงการ.....	1
1.2 วัตถุประสงค์	2
1.3 ขอบเขตงานวิจัย	2
1.4 ขั้นตอนการดำเนินงานวิจัย	3
1.5 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ	3
2 ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง.....	4
2.1 เซลล์เชื้อเพลิง	4
2.2 องค์ประกอบทั่วไปของเซลล์เชื้อเพลิง.....	4
2.3 ชนิดและหลักการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิง	5
2.4 เซลล์เชื้อเพลิงฟิวส์เซลล์ (Proton Exchange Membrane Fuel Cell, PEMFC).....	11
2.4.1 หลักการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงฟิวส์เซลล์	11
2.4.2 องค์ประกอบของเซลล์เชื้อเพลิงฟิวส์เซลล์	12
2.4.2.1 อิเล็กโทรไลต์(electrolyte).....	12
2.4.2.2 ขั้วไฟฟ้า (Electrode)	14
2.5 พลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณด้วยระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่ม	15
2.5.1 สมการควบคุมพื้นฐาน	15
2.5.2 ปัญหาการแพร่	17

บทที่	หน้า
2.5.3	ปัญหาการพาและการแพร่ 19
2.5.4	เงื่อนไขขอบ (Boundary conditions)..... 25
2.5.4.1	เงื่อนไขขอบที่ผนัง 25
2.5.4.2	เงื่อนไขขอบแบบสมมาตร 27
2.6	งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง..... 28
3	แบบจำลองทางคณิตศาสตร์และวิธีการสร้างแบบจำลองการไหล 32
3.1	แบบจำลองการไหล 32
3.1.1	สมมติฐานสำหรับการพัฒนาแบบจำลองกระบวนการเซลล์เชื้อเพลิง แบบพีซีเอ็ม 32
3.1.2	สมการอนุรักษ์พื้นฐาน 33
3.1.2.1	สมการอนุรักษ์มวล..... 33
3.1.2.2	สมการอนุรักษ์โมเมนตัม 33
3.1.2.3	สมการอนุรักษ์องค์ประกอบ 35
3.2	การสร้างแบบจำลองการไหลโดยโปรแกรม Design Modeler และการจำลอง โดยใช้โปรแกรม ANSYS FLUENT V.12.1 39
3.2.1	การสร้างแบบจำลองการไหลด้วยโปรแกรม DesignModeler และ รายละเอียดของโครงสร้างแบบจำลอง 40
3.2.1.1	การวาดโครงสร้างแบบจำลองด้วยโปรแกรม DesignModeler..... 41
3.2.1.2	การจำลองภาวะโดยโปรแกรม ANSYS FLUENT V.12.1 44
3.2.1.2.1	การกำหนดชนิดของเครื่องมือการแก้สมการ (Solver) 45
3.2.1.2.2	การกำหนดชั้นเวลาและการจำลองภาวะ..... 48
4	ผลงานวิจัยและการวิเคราะห์ผล 49
4.1	ตัวแปรทางการจำลองและการตรวจสอบความเหมาะสมของแบบจำลอง 49
4.2	การศึกษาอุทกพลศาสตร์และการเกิดปฏิกิริยาภายในเซลล์เชื้อเพลิงพีซีเอ็ม 51
4.2.1	การศึกษาการเกิดปฏิกิริยาของเซลล์เชื้อเพลิงเทียบกับผลจาก ห้องปฏิบัติการ 51

บทที่	หน้า
4.2.2 การศึกษาอุทกพลศาสตร์และการเกิดปฏิกิริยาของเซลล์เชื้อเพลิงฝั่ง แอโนด	53
4.2.2.1 ผลจากความเร็วมวลของแก๊สขาเข้า	54
4.2.2.2 ผลจากค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอน	59
4.2.2.3 ผลจากความแตกต่างของช่องการไหลของแก๊ส	67
4.2.3 การศึกษาอุทกพลศาสตร์และการเกิดปฏิกิริยาของเซลล์เชื้อเพลิงฝั่ง แคโทด	74
4.2.3.1 ผลจากความเร็วมวลของแก๊สขาเข้า	74
4.2.3.2 ผลจากค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอน	87
4.2.3.3 ผลจากความแตกต่างของช่องการไหลของแก๊ส	91
5 สรุปผลการวิจัย และข้อเสนอแนะ	105
5.1 สรุปผลการวิจัย	105
5.1.1 การศึกษาอุทกพลศาสตร์และการเกิดปฏิกิริยาของเซลล์เชื้อเพลิงฝั่ง แอโนด	105
5.1.1.1 ผลจากความเร็วมวลของแก๊สขาเข้า	105
5.1.1.2 ผลจากค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอน	105
5.1.1.3 ผลจากความแตกต่างของช่องการไหลของแก๊ส	106
5.1.2 การศึกษาอุทกพลศาสตร์และการเกิดปฏิกิริยาของเซลล์เชื้อเพลิงฝั่ง แคโทด	106
5.1.2.1 ผลจากความเร็วมวลของแก๊สขาเข้า	106
5.1.2.2 ผลจากค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอน	106
5.1.2.3 ผลจากความแตกต่างของช่องการไหลของแก๊ส	107
5.2 ข้อเสนอแนะ	107
รายการอ้างอิง	108
ภาคผนวก	112
ประวัติผู้เขียนวิทยานิพนธ์	117

สารบัญตาราง

ตารางที่		หน้า
2.1	แสดงข้อมูลของเซลล์เชื้อเพลิงในชนิดต่างๆ.....	10
3.1	ขนาดของแบบจำลองที่ใช้ในการคำนวณ.....	41
3.2	ค่าคงที่ที่ใช้ในการคำนวณแบบจำลอง.....	48
4.1	อัตราการเกิดปฏิกิริยาจากความหนาแน่นกระแสที่ศักย์ไฟฟ้าต่างๆ.....	52
4.2	เปอร์เซ็นต์ความคลาดเคลื่อนระหว่างค่าจากการทดลองกับค่าจากแบบจำลอง.	53
4.3	ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนจากค่า water content ต่างๆ.....	60

สารบัญภาพ

ภาพที่	หน้า	
2.1	หลักการทํางานของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดแอลคาไลน์	6
2.2	หลักการทํางานของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดกรดฟอสฟอริก	7
2.3	หลักการทํางานของเซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็ม.....	8
2.4	หลักการทํางานของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดเกลือคาร์บอนเนตหลอม.....	9
2.5	หลักการทํางานของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์ของแข็ง.....	10
2.6	โครงสร้างของแนฟิออน (Nafion).....	12
2.7	โครงสร้างของเมมเบรนที่มีการดูดซึมนํ้าเอาไว้.....	13
2.8	การถ่ายโอนโปรตอนระหว่างสายโพลีเมอร์ในเมมเบรน.....	13
2.9	การแบ่งขอบเขตของปัญหาด้วยระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มออกเป็นพื้นที่ควบคุม เล็ก ๆ.....	16
2.10	พื้นที่ควบคุมในระบบสองมิติของปัญหาการแพร่.....	17
2.11	พื้นที่ควบคุมที่ผนัง.....	25
2.12	การกระจายตัวของความเร็วที่ผนัง.....	26
2.13	ลักษณะของผนังเคลื่อนที่.....	27
2.14	ก) ช่องการไหลที่สมมาตร ข) โดเมนของช่องการไหลที่ใช้เงื่อนไขสมมาตรแล้ว...	28
3.1	ภาพวาดโครงสร้างสามมิติของเซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็มที่มีอยู่ในห้องทดลอง.....	42
3.2	ภาพวาดโครงสร้างสามมิติของเซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็มแบบท่อขนาน (parallel)....	42
3.3	ภาพวาดโครงสร้างสามมิติของเซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็มที่มีอยู่ในห้องทดลอง บน โปรแกรม ANSYS FLUENT V.12.1 ซึ่งแบ่งช่องการคำนวณออกเป็นช่องเล็ก ๆ...	43
3.4	ภาพวาดโครงสร้างสามมิติของเซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็มแบบท่อขนาน บนโปรแกรม ANSYS FLUENT V.12.1 ซึ่งแบ่งช่องการคำนวณออกเป็นช่องเล็ก ๆ.....	44
3.5	แผนภาพกระบวนการแก้ปัญหาโดยรวมของวิธีแก้ปัญหาแบบ Segregated.....	45
3.6	แผนผังการจำลองปรากฏการณ์เซลล์เชื้อเพลิงแบบพีอีเอ็มที่ฝั่งขั้วแอโนดและ ฝั่งขั้วแคโทดขั้วแคโทด.....	47
4.1	(ก) ความเข้มข้นของไฮโดรเจนฝั่งแอโนด (ข) ความเข้มข้นของออกซิเจนและนํ้า ฝั่งแคโทดในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาที่เวลาต่างๆ.....	50

ภาพที่	หน้า	
4.2	กราฟโพลาริเซชันของเซลล์เชื้อเพลิงแบบพีอีเอ็ม.....	51
4.3	โพลาริเซชันเทียบผลระหว่างการทดลองจริงกับแบบจำลอง.....	53
4.4	อัตราการเกิดปฏิกิริยาในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแอโนดที่ความเร็วแก๊ส ขาเข้าต่างๆ.....	55
4.5	ความดันในช่องการไหลของแก๊สฝั่งแอโนดที่ความเร็วแก๊สขาเข้า เท่ากับ 0.47 m/s.....	55
4.6	ความดันในช่องการไหลของแก๊สฝั่งแอโนดที่ความเร็วแก๊สขาเข้า เท่ากับ 1.00 m/s.....	56
4.7	ความดันในช่องการไหลของแก๊สฝั่งแอโนดที่ความเร็วแก๊สขาเข้า เท่ากับ 3.00 m/s.....	56
4.8	ความดันในช่องการไหลของแก๊สฝั่งแอโนดที่ความเร็วแก๊สขาเข้า เท่ากับ 5.00 m/s.....	57
4.9	ความเข้มข้นของไฮโดรเจนในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแอโนดที่ความเร็วแก๊ส ขาเข้าต่างๆ.....	57
4.10	ความดันลดในช่องการไหลของแก๊สฝั่งแอโนดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าต่างๆ.....	58
4.11	ความเข้มข้นของโปรตอนบนชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแอโนดที่ความเร็วแก๊ส ขาเข้าต่างๆ.....	58
4.12	ความเข้มข้นของไฮโดรเจนที่ช่องแก๊สขาออกฝั่งแอโนดที่ความเร็วแก๊สขาเข้า ต่างๆ.....	59
4.13	การเปรียบเทียบความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแอโนด ที่ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนแต่ละค่า.....	61
4.14	การเปรียบเทียบความเข้มข้นของไฮโดรเจนในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแอโนด ที่ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนแต่ละค่า.....	61
4.15	การเปรียบเทียบอัตราการเกิดปฏิกิริยาในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแอโนดที่ค่า สัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนแต่ละค่า.....	62
4.16	ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นเมมเบรนที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 0.47 m/s และค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเท่ากับ $2.88 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$	63

ภาพที่	หน้า
4.17 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นเมมเบรนที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 0.47 m/s และค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเท่ากับ 2.27×10^{-6} m ² /s.....	64
4.18 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นเมมเบรนที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 0.47 m/s และค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเท่ากับ 1.72×10^{-6} m ² /s.....	64
4.19 ความดันพลศาสตร์ในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแอโนดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 0.47 m/s และค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเท่ากับ $2 \times 88 \cdot 10^{-5}$ m ² /s.....	65
4.20 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นเมมเบรนที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 1.00 m/s และค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเท่ากับ 1.72×10^{-6} m ² /s.....	65
4.21 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นเมมเบรนที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 3.00 m/s และค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเท่ากับ 1.72×10^{-6} m ² /s.....	66
4.22 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นเมมเบรนที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 5.00 m/s และค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเท่ากับ 1.72×10^{-6} m ² /s.....	66
4.23 การเปรียบเทียบความเข้มข้นของไฮโดรเจนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแอโนดของช่องการไหลแบบคดเคี้ยวและแบบขนาน.....	68
4.24 การเปรียบเทียบอัตราการเกิดปฏิกิริยาในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแอโนดของช่องการไหลแบบคดเคี้ยวและแบบขนาน.....	68
4.25 ความดันในช่องการไหลของแก๊สฝั่งแอโนดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 0.47 m/s ของช่องการไหลแบบขนาน.....	69
4.26 ความดันในช่องการไหลของแก๊สฝั่งแอโนดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 1.00 m/s ของช่องการไหลแบบขนาน.....	69
4.27 ความดันในช่องการไหลของแก๊สฝั่งแอโนดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 3.00 m/s ของช่องการไหลแบบขนาน.....	70
4.28 ความดันในช่องการไหลของแก๊สฝั่งแอโนดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 5.00 m/s ของช่องการไหลแบบขนาน.....	70
4.29 การเปรียบเทียบความดันเฉลี่ยในช่องการไหลฝั่งแอโนดของช่องการไหลแบบคดเคี้ยวและแบบขนาน.....	71
4.30 การเปรียบเทียบความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแอโนดของช่องการไหลแบบคดเคี้ยวและแบบขนาน.....	71

ภาพที่	หน้า
4.31 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นเมมเบรนที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 0.47 m/s ของช่องการไหลแบบขนาน.....	72
4.32 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นเมมเบรนที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 1.00 m/s ของช่องการไหลแบบขนาน.....	72
4.33 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นเมมเบรนที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 3.00 m/s ของช่องการไหลแบบขนาน.....	73
4.34 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นเมมเบรนที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 5.00 m/s ของช่องการไหลแบบขนาน.....	73
4.35 ความเข้มข้นของออกซิเจนในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าต่างๆ.....	75
4.36 อัตราการเกิดปฏิกิริยาในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าต่างๆ.....	76
4.37 ความหนาแน่นกระแสที่ความเร็วแก๊สขาเข้าต่างๆ.....	76
4.38 ความดันลดในช่องการไหลของแก๊สฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าต่างๆ.....	77
4.39 ความดันในช่องการไหลของแก๊สฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 0.47 m/s.....	77
4.40 ความดันในช่องการไหลของแก๊สฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 1.00 m/s.....	78
4.41 ความดันในช่องการไหลของแก๊สฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 3.00 m/s.....	78
4.42 ความดันในช่องการไหลของแก๊สฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 5.00 m/s.....	79
4.43 ความเข้มข้นของออกซิเจนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 0.47 m/s.....	79
4.44 ความเข้มข้นของออกซิเจนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 1.00 m/s.....	80
4.45 ความเข้มข้นของออกซิเจนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 3.00 m/s.....	80

ภาพที่	หน้า
4.46 ความเข้มข้นของออกซิเจนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊ส ขาเข้าเท่ากับ 5.00 m/s.....	81
4.47 ความเข้มข้นของน้ำในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้า เท่ากับ 0.47 m/s.....	81
4.48 ความเข้มข้นของน้ำในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้า เท่ากับ 1.00 m/s.....	82
4.49 ความเข้มข้นของน้ำในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊ส ขาเข้าเท่ากับ 3.00 m/s.....	82
4.50 ความเข้มข้นของน้ำในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊ส ขาเข้าเท่ากับ 5.00 m/s.....	83
4.51 ความเข้มข้นของน้ำในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊ส ขาเข้าต่างๆ.....	83
4.52 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊ส ขาเข้าต่างๆ.....	84
4.53 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊ส ขาเข้าเท่ากับ 0.47 m/s และค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเท่ากับ $2.88 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$	85
4.54 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊ส ขาเข้าเท่ากับ 1.00 m/s และค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเท่ากับ $2.88 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$	85
4.55 39 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊ส ขาเข้าเท่ากับ 3.00 m/s และค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเท่ากับ $2.88 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$	86
4.56 39 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊ส ขาเข้าเท่ากับ 5.00 m/s และค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเท่ากับ $2.88 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$	86

ภาพที่	หน้า
4.57 ความดันพลศาสตร์ในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 0.47 m/s และค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเท่ากับ $2.88 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$	87
4.58 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 0.47 m/s และค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเท่ากับ $1.13 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$	88
4.59 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 0.47 m/s และค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเท่ากับ $8.58 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$	89
4.60 การเปรียบเทียบความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนแต่ละค่า.....	89
4.61 การเปรียบเทียบความเข้มข้นของออกซิเจนในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนแต่ละค่า.....	90
4.62 ความหนาแน่นกระแสที่ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนแต่ละค่า.....	90
4.63 การเปรียบเทียบความเข้มข้นของน้ำในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนแต่ละค่า.....	91
4.64 ความดันในช่องการไหลของแก๊สฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้า 0.47 m/s ของช่องการไหลแบบขนาน.....	92
4.65 ความดันในช่องการไหลของแก๊สฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้า 1.00 m/s ของช่องการไหลแบบขนาน.....	93
4.66 ความดันในช่องการไหลของแก๊สฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้า 3.00 m/s ของช่องการไหลแบบขนาน.....	93
4.67 ความดันในช่องการไหลของแก๊สฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้า 5.00 m/s ของช่องการไหลแบบขนาน.....	94
4.68 การเปรียบเทียบความดันในช่องการไหลฝั่งแคโทดของช่องการไหลแบบคดเคี้ยวและแบบขนาน.....	94
4.69 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 0.47 m/s ของช่องการไหลแบบขนาน.....	95

ภาพที่	หน้า
4.84	การเปรียบเทียบอัตราการเกิดปฏิกิริยาในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดของช่อง การไหลแบบคเคียวและแบบขนาน..... 103
4.85	การเปรียบเทียบความความหนาแน่นกระแสฝั่งแคโทดของช่องการไหลแบบค เคียวและแบบขนาน..... 104

บทที่ 1

บทนำ

1.1 ความสำคัญและที่มาของโครงการ

เซลล์เชื้อเพลิงแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอน (proton exchange membrane fuel cells, PEMFC) คืออุปกรณ์แปรรูปพลังงานจากพลังงานเคมี (chemical energy) ของเชื้อเพลิงแก๊สไฮโดรเจน กับตัวออกซิแดนต์ (oxidant) เช่นแก๊สออกซิเจน ให้อยู่ในรูปแบบของพลังงานไฟฟ้า (electrical energy) โดยตรงด้วยกลไกปฏิกิริยาเคมีไฟฟ้า (electrochemical reaction) กระบวนการแปรรูปพลังงานด้วยเซลล์เชื้อเพลิงจึงมีประสิทธิภาพสูงและไม่ก่อให้เกิดมลพิษต่อสิ่งแวดล้อม (กรรณก หงส์ทอง, 2547) ด้วยเหตุนี้เซลล์เชื้อเพลิงแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอนจึงได้รับความสนใจในการศึกษาวิจัยเพื่อนำไปประยุกต์ใช้ในอุตสาหกรรมยานยนต์ ใช้แทนแบตเตอรี่สำหรับอุปกรณ์เครื่องใช้ไฟฟ้าแบบพกพา และเป็นอุปกรณ์ผลิตกระแสไฟฟ้าตามบ้านเรือน

โครงสร้างพื้นฐานของเซลล์เชื้อเพลิงหนึ่งเซลล์ประกอบด้วยส่วนประกอบหลักดังต่อไปนี้คือขั้วอิเล็กโทรด 2 ขั้วคือขั้วแอโนด (anode) และขั้วแคโทด (cathode) ที่มีความพรุนและมีตัวเร่งปฏิกิริยา (catalyst) เกาะอยู่กับแผ่นเมมเบรนพอลิเมอร์ของแข็งซึ่งทำหน้าที่เป็นอิเล็กโทรไลต์และเป็นตัวกลางแลกเปลี่ยนโปรตอนที่รวมเรียกว่าหน่วยประกอบเมมเบรนและขั้วไฟฟ้า (membrane electrode assemblies, MEAs) และแผ่นสะสมกระแสแบบสองขั้ว (bipolar current collector plate) ส่วนเชื้อเพลิงที่ใช้กับเซลล์เชื้อเพลิงแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอนคือ แก๊สไฮโดรเจนและออกซิเจนที่มีความชื้น (humidified gas) แก๊สไฮโดรเจนถูกป้อนเข้าสู่เซลล์เชื้อเพลิงทางด้านขั้วแอโนดและเกิดปฏิกิริยาออกซิเดชัน (oxidation reaction) ได้ผลิตภัณฑ์คือไฮโดรเจนไอออนหรือโปรตอน (hydrogen ion, H^+) และอิเล็กตรอน (electron, e^-) ไฮโดรเจนไอออนจะเคลื่อนที่ผ่านเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอนมายังขั้วแอโนดและอิเล็กตรอนจะถูกนำออกไปจากเซลล์เพื่อใช้กับอุปกรณ์เครื่องใช้ไฟฟ้าต่างๆ และกลับมายังขั้วแคโทด ทำปฏิกิริยากับไฮโดรเจนไอออน อิเล็กตรอนและแก๊สออกซิเจนเกิดปฏิกิริยารีดักชัน (reduction reaction) ได้ผลิตภัณฑ์คือ น้ำ

ในการดำเนินการเซลล์เชื้อเพลิงนั้นน้ำที่ได้จากปฏิกิริยาส่วนใหญ่จะถูกกำจัดออกไปพร้อมกับแก๊สออกทางฝั่งแคโทด ถ้าหากปริมาณน้ำที่ถูกกำจัดออกมีปริมาณน้อยกว่าน้ำที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยาจะทำให้เกิดปรากฏการณ์น้ำท่วม (flooding) ที่ขั้วแอโนดปฏิกิริยาฝั่งขั้วแคโทดทำให้แก๊สเข้ามาทำปฏิกิริยาได้น้อยลงส่งผลให้สมรรถนะของเซลล์เชื้อเพลิงลดลง การแก้ปัญหาวิธีหนึ่งที่ทำ

ได้ง่ายคือการเพิ่มความเร็วแก๊สขาเข้าให้มากขึ้น แต่ถึงกระนั้นน้ำยังคงมีความสำคัญต่อเซลล์เชื้อเพลิงในส่วนของชั้นเมมเบรนเนื่องจากปริมาณน้ำที่มีในเมมเบรนส่งผลต่อการนำโปรตอนจากขั้วแอโนดไปสู่ขั้วแคโทดซึ่งถ้าหากเมมเบรนแห้งเกินไปความสามารถในการนำโปรตอนของเมมเบรนจะลดลง เพื่อที่จะเข้าใจลักษณะการกระจายตัวของแก๊สและประจุที่อยู่ภายในเซลล์เชื้อเพลิงขณะที่เซลล์กำลังดำเนินการต้องอาศัยแบบจำลองทางคณิตศาสตร์เข้ามาช่วยเนื่องจากการสังเกตเพื่อศึกษาพฤติกรรมภายในเซลล์เชื้อเพลิงในขณะที่เซลล์กำลังดำเนินการนั้นทำได้ยาก

ดังนั้นเป้าหมายของงานวิจัยนี้คือการศึกษาผลของความเร็วของแก๊สขาเข้าและค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนต่อการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิง การกระจายตัวของแก๊สและประจุภายในเซลล์เชื้อเพลิง อีกทั้งยังศึกษาผลของรูปแบบช่องการไหลของแก๊สที่มีต่อการกระจายตัวของสสารในระบบโดยงานวิจัยนี้ได้แบ่งออกเป็นสองส่วนคือ การจำลองเซลล์เชื้อเพลิงทางฝั่งแอโนด และการจำลองทางฝั่งแคโทด โดยใช้โปรแกรม ANSYS FLUENT 12.1 ซึ่งเป็นโปรแกรมพลศาสตร์ของไหลเชิงการคำนวณ (Computational Fluid Dynamics, CFD) เพื่อศึกษาถึงอิทธิพลของความเร็วของแก๊สขาเข้าและค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนที่มีต่อการถ่ายโอนมวลสารภายในเซลล์เชื้อเพลิง และสมรรถนะของเซลล์เชื้อเพลิง

1.2 วัตถุประสงค์

1. สร้างแบบจำลองเชิงพลวัตในระบบ 3 มิติ เพื่อจำลองสภาวะภายในเซลล์เชื้อเพลิงแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอน ขนาด 5 ตารางเซนติเมตรในห้องปฏิบัติการ และเทียบผลจากการจำลองกับค่าที่ได้จากการทดลอง
2. ศึกษาการกระจายตัวของมวลบริเวณช่องการไหลและชั้นการแพร่ของแก๊ส อีกทั้งศึกษาการกระจายตัวของประจุในชั้นของเมมเบรน
3. ศึกษาความเร็วของแก๊สภายในเซลล์เชื้อเพลิงที่มีผลต่อการถ่ายโอนน้ำภายในเซลล์และสมรรถนะที่ได้จากเซลล์เชื้อเพลิง

1.3 ขอบเขตงานวิจัย

ทำการจำลองกระบวนการเซลล์เชื้อเพลิงแบบพีอีเอ็ม ขนาด 5 ตารางเซนติเมตรเพื่อศึกษาพฤติกรรมภายในและปริมาณพลังงานไฟฟ้าที่ผลิตได้ ด้วยโปรแกรม ANSYS FLUENT 12.1 และนำผลที่ได้มาวิเคราะห์

1.4 ขั้นตอนการดำเนินงานวิจัย

1. ค้นคว้าเอกสารงานวิจัยและข้อมูลที่เกี่ยวข้อง
2. ศึกษาการใช้งานโปรแกรม ANSYS FLUENT 12.1
3. สร้างแบบจำลองเซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็มในระบบ 3 มิติ โดยสร้างโครงร่างของเซลล์เชื้อเพลิงโดยใช้โปรแกรม ANSYS FLUENT 12.1 และกำหนด Boundary Types หลังจากนั้นนำโครงร่างของเซลล์เชื้อเพลิงที่ได้มาใช้งานกับโปรแกรม ANSYS FLUENT 12.1 เพื่อศึกษากระบวนการพลวัตที่เกิดขึ้นในแบบจำลองเซลล์เชื้อเพลิง
4. จำลองภาวะการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงที่สภาวะต่างๆ แบบพลวัต
5. ตรวจสอบผลที่ได้จากการจำลองกับผลการทดลอง เพื่อตรวจสอบความแม่นยำของแบบจำลอง
6. ปรับปรุงแบบจำลองเพื่อกำจัดปัญหาหรือข้อผิดพลาดที่เกิดขึ้น เพื่อพัฒนาแบบจำลองให้ดียิ่งขึ้น
7. วิเคราะห์ข้อมูล, สรุปผล และเขียนวิทยานิพนธ์

1.5 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

1. ได้แบบจำลองเชิงพลวัตของเซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็มในระบบ 3 มิติที่ทำนายผลได้ใกล้เคียงกับการทดลองมากขึ้น
2. เข้าใจกระบวนการไหล การถ่ายโอนโมเมนตัมที่เกิดขึ้นภายในเซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็มดียิ่งขึ้น
3. แบบจำลองที่ได้เป็นแนวทางในการพัฒนาเซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็มต่อไปเพื่อขยายผลสู่การศึกษาโครงการอื่นๆในอนาคต

บทที่ 2 ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

2.1 เซลล์เชื้อเพลิง

เซลล์เชื้อเพลิงคืออุปกรณ์แปลงพลังงานเคมี (Chemical energy) ในเชื้อเพลิงให้กลายเป็นไฟฟ้าโดยผ่านกระบวนการทางปฏิกิริยาเคมีไฟฟ้า (Electrochemical reaction) ซึ่งเป็นกระบวนการที่มีประสิทธิภาพในการแปรรูปพลังงานสูงกว่าเมื่อเทียบกับกระบวนการแปรรูปพลังงานที่ใช้กันอยู่ในปัจจุบันเช่น กระบวนการสันดาป อีกทั้งก่อให้เกิดมลพิษต่อสิ่งแวดล้อมน้อยกว่า (กรรณก หงส์ทอง, 2547) ดังนั้นเซลล์เชื้อเพลิงจึงได้รับความสนใจในการศึกษาวิจัยเพื่อพัฒนาสมรรถนะและลดต้นทุนในการแปรรูปพลังงานไฟฟ้าเพื่อให้เหมาะสมในการนำไปประยุกต์ใช้จริง

2.2 องค์ประกอบทั่วไปของเซลล์เชื้อเพลิง (วิทวัส รัตนถาวร, 2552)

เซลล์เชื้อเพลิงแบ่งโครงสร้างออกเป็น 5 ส่วนใหญ่ ๆ ได้แก่

1. ช่องการไหลของแก๊ส (Flow field) โดยปกติจะเป็นร่องที่ถูกเจาะอยู่บนแผ่นวัสดุที่ทำด้วยแกรไฟต์ (Graphite) ซึ่งช่องการไหลที่นิยมโดยทั่วไปมีอยู่สองลักษณะ คือ แบบขนานและแบบคดเคี้ยว โดยวัสดุที่นำมาใช้จะต้องมีสมบัติในการนำอิเล็กตรอนและความร้อนได้ดี ทนต่อการกัดกร่อนและสามารถทนต่อภาวะขณะที่เซลล์เชื้อเพลิงกำลังทำงาน

2. ชั้นการแพร่แก๊ส (Gas diffusion layer) เป็นวัสดุที่ช่วยการแพร่กระจายและถ่ายเทมวลสารของแก๊สเชื้อเพลิง และตัวออกซิไดซ์ให้แพร่กระจายเข้าทำปฏิกิริยาบริเวณชั้นตัวเร่งปฏิกิริยา (Catalyst layer) ได้ดีและสม่ำเสมอ โดยชั้นการแพร่แก๊สมักทำจากวัสดุที่ไม่ชอบน้ำ มีรูพรุนสูงและต้องสามารถนำอิเล็กตรอนได้ดี

3. ตัวเร่งปฏิกิริยา (Catalyst) เป็นสารที่ช่วยทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาของเชื้อเพลิงและตัวออกซิไดซ์เกิดขึ้นได้อย่างรวดเร็ว โดยตัวเร่งปฏิกิริยาที่ดีจะต้องไม่มีการเปลี่ยนแปลงสภาพหรือถูกใช้จนหมดไปในปฏิกิริยา

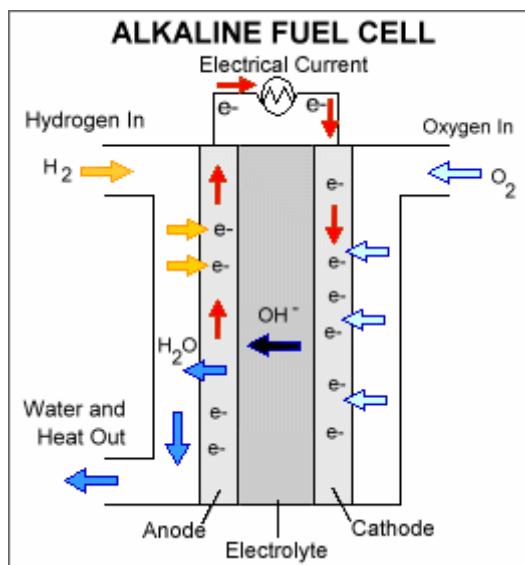
4. ขั้วไฟฟ้า (Electrode) มีหน้าที่ส่งอิเล็กตรอนหรือกระแสไฟฟ้าออกจากขั้วแอโนด (Anode) ไปยังวงจรไฟฟ้าภายนอกแล้วรับส่งอิเล็กตรอนกลับเข้าสู่ขั้วแคโทด (Cathode)

5. อิเล็กโทรไลต์ (Electrolyte) เป็นสารส่งผ่านไอออนระหว่างขั้วแอโนดและแคโทดซึ่งอิเล็กโทรไลต์ที่ดีต้องสามารถถ่ายโอนประจุได้ดี แต่ไม่นำอิเล็กตรอนหรือกระแสไฟฟ้า โดยทั่วไปอิเล็กโทรไลต์จะเป็นสารจำพวก กรด เบส หรือเกลือ และมีทั้งที่เป็นสถานะของแข็ง และของเหลว

2.3 ชนิดและหลักการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิง (Nice และ Strickland, 2010 : online; EERE, 2009 : online; BTI, 2000 : online)

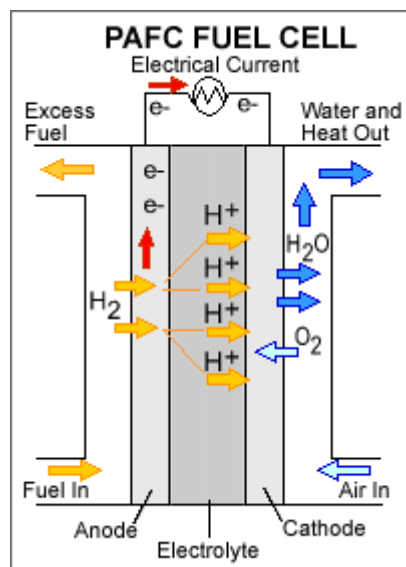
หลักการทำงานโดยทั่วไปของเซลล์เชื้อเพลิงจะมีลักษณะการทำงานคล้ายคลึงกันคือ ภายในของเซลล์เชื้อเพลิงประกอบด้วยขั้วไฟฟ้าที่มีความพรุนคือขั้วแคโทด (Cathode) และขั้วแอโนด (Anode) สัมผัสกับสารอิเล็กโทรไลต์ (Electrolyte) ซึ่งอาจอยู่ในรูปของของเหลวหรือของแข็งที่สัมผัสอยู่กับขั้วไฟฟ้า แก๊สเชื้อเพลิง ได้แก่ แก๊สธรรมชาติหรือแก๊สไฮโดรเจนจะถูกป้อนเข้าที่ขั้วแอโนด และตัวออกซิไดซ์จะถูกป้อนเข้าที่ขั้วแคโทด จากนั้นจะเกิดปฏิกิริยาเคมีไฟฟ้าขึ้นที่บริเวณ three-phase boundary ซึ่งเป็นส่วนที่แก๊สเชื้อเพลิง สารอิเล็กโทรไลต์ และตัวเร่งปฏิกิริยาสัมผัสกัน โดยที่แก๊สเชื้อเพลิงจะเกิดปฏิกิริยาออกซิเดชัน (Oxidation) ได้ผลิตภัณฑ์เป็นโปรตอนไฮดรอน (H^+) และอิเล็กตรอน (e^-) ในขณะที่ปฏิกิริยารีดักชัน (Reduction) ของตัวออกซิไดซ์ซึ่งจะเป็นตัวรับอิเล็กตรอนที่เกิดจากปฏิกิริยาออกซิเดชันซึ่งไฮดรอนของโปรตอนรวมตัวเกิดเป็นน้ำ ผลิตภัณฑ์ที่ได้จากการเกิดปฏิกิริยา คือ กระแสไฟฟ้า น้ำ และความร้อน โดยแรงดันไฟฟ้า (Voltage) ที่ผลิตขึ้นในเซลล์เชื้อเพลิงจะขึ้นอยู่กับค่าพลังงานอิสระของกิบส์ (Gibb's free energy) ของเชื้อเพลิงที่ใช้ ความว่องไว (Activity) ของสารตั้งต้น ตลอดจนกระแสไฟฟ้าที่ถูกดึงออกจากเซลล์เชื้อเพลิง ด้านการประยุกต์การใช้งานของเซลล์เชื้อเพลิง กระแสไฟฟ้าที่ได้จะเป็นไฟฟ้ากระแสตรง (Direct current, DC) บางกรณีจะมีการใช้เครื่องอินเวอร์เตอร์ (Inverter) เพื่อเปลี่ยนเป็นไฟฟ้ากระแสสลับ (Alternating current power, AC) ก่อนที่จะนำกระแสไฟฟ้าไปใช้ การแบ่งชนิดของเซลล์เชื้อเพลิงนั้น สามารถแบ่งตามชนิดของสารอิเล็กโทรไลต์ที่ใช้ ซึ่งสามารถจำแนกเป็น 5 ประเภทได้ดังนี้

1. เซลล์เชื้อเพลิงชนิดแอลคาไลน์ (Alkaline Fuel cell, AFC) ใช้สารละลายโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ (KOH) เป็นอิเล็กโทรไลต์ โดยใช้แก๊สออกซิเจนบริสุทธิ์เป็นตัวออกซิไดซ์และแก๊สไฮโดรเจนบริสุทธิ์เป็นเชื้อเพลิงเท่านั้น อุณหภูมิที่ใช้ในการดำเนินการอยู่ในช่วง 50-200 องศาเซลเซียส ซึ่งน่าจะใช้เซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้ในกระสวยอวกาศ เพราะมีประสิทธิภาพสูงถึง 70% และให้น้ำดื่มกับนักบินอวกาศ หลักการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้แสดงได้ดังภาพที่ 2.1



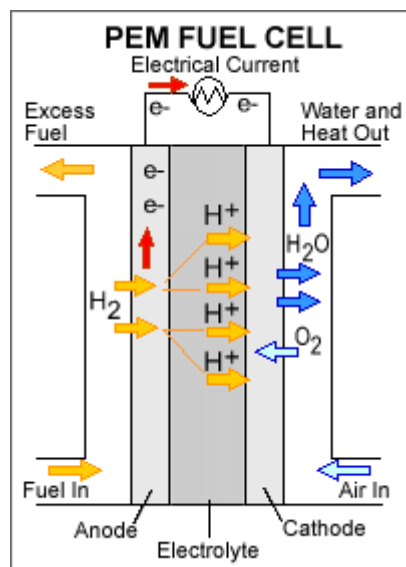
ภาพที่ 2.1 หลักการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดแอลคาไลน์ (EERE, 2009 : online)

- เซลล์เชื้อเพลิงชนิดกรดฟอสฟอริก (Phosphoric Acid Fuel Cell, PAFC) ใช้กรดฟอสฟอริก (H₃PO₄) เป็นสารอิเล็กโทรไลต์ ประสิทธิภาพของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้ประมาณ 40% และใช้แก๊สไฮโดรเจนเป็นเชื้อเพลิงและแก๊สออกซิเจนเป็นตัวออกซิไดซ์ ซึ่งข้อดีของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้คือสามารถสามารถใช้อากาศที่มีแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ (CO₂) อยู่ เนื่องจากเซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้มีสภาวะการทำงานที่อุณหภูมิประมาณ 170- 200 องศาเซลเซียส ทำให้ช่วยลดความเป็นพิษของแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ ที่มีผลต่อตัวเร่งปฏิกิริยาลง ปัญหาที่สำคัญของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้ คือ การกักความร้อนของกรดในขณะดำเนินการ และมีค่าใช้จ่ายในการดำเนินการสูง หลักการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดกรดฟอสฟอริก แสดงได้ดังภาพที่ 2.2 ปัจจุบันได้มีการใช้ในเชิงพาณิชย์แล้ว โดยมีขนาดกำลังไฟฟ้า 1 กิโลวัตต์ถึง 1 เมกะวัตต์



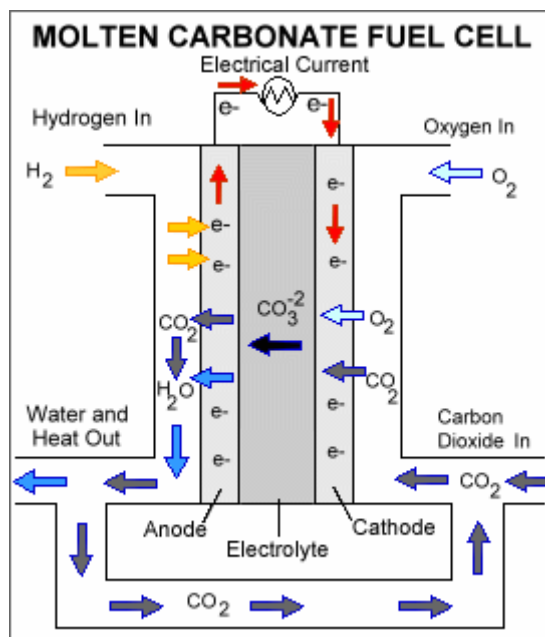
ภาพที่ 2.2 หลักการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดกรดฟอสฟอริก (EERE, 2009 : online)

- เซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็มหรือเซลล์เชื้อเพลิงแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอน (Proton Exchange Membrane Fuel Cell, PEMFC) ดังภาพที่ 2.3 อิเล็กโทรไลต์ที่ใช้จะเป็นเมมเบรนพอลิเมอร์ เนื่องจากของเหลวที่อยู่ภายในเซลล์ คือ น้ำที่เกิดจากปฏิกิริยาดังนั้นจึงไม่มีปัญหาการกัดกร่อนที่เกิดจากของเหลว อิเล็กโทรไลต์ อุณหภูมิในการดำเนินการไม่เกิน 100 องศาเซลเซียส ใช้แก๊สไฮโดรเจนและออกซิเจนในการทำปฏิกิริยา ข้อเสียของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้คือไม่ทนทานต่อสิ่งเจือปนในแก๊สเชื้อเพลิง เช่นแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ ส่วนใหญ่นำมาใช้กับรถยนต์ไฟฟ้า อุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ และอุปกรณ์ขนาดเล็ก รายละเอียดต่าง ๆ จะกล่าวต่อไปในหัวข้อ 2.2



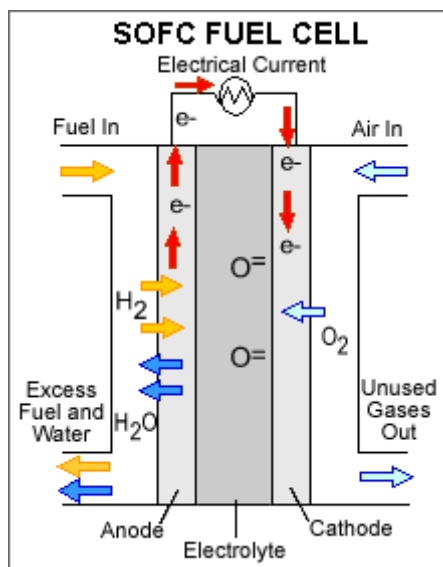
ภาพที่ 2.3 หลักการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็ม (EERE, 2009 : online)

4. เซลล์เชื้อเพลิงชนิดคาร์บอนเนตหลอมเหลว (Molten Carbonate Fuel Cell, MCFC) อิเล็กโทรไลต์ที่ใช้เป็นสารลิเทียมคาร์บอเนต (Li_2CO_3) โซเดียมคาร์บอเนต (Na_2CO_3) หรือโพแทสเซียมคาร์บอเนต (K_2CO_3) ที่หลอมเหลว เซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้ไม่จำเป็นต้องใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาเนื่องจากการดำเนินการที่อุณหภูมิสูง คือ ประมาณ 500-700 องศาเซลเซียส และไม่ได้รับผลกระทบจากแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ (CO_2) เชื้อเพลิงที่ใช้ได้แก่สารประกอบไฮโดรคาร์บอนชนิดต่าง แต่ข้อควรระวังคือหากแก๊สเชื้อเพลิงที่มีไฮโดรเจนซัลไฟด์ (H_2S) ปะปนอยู่จะทำให้เป็นพิษต่อขั้วอิเล็กโทรด เนื่องจากระบบของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้ที่ใช้ค่อนข้างซับซ้อนจึงเหมาะแก่การใช้ในโรงไฟฟ้าขนาด 10 กิโลวัตต์ถึง 20 เมกกะวัตต์ หลักการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดคาร์บอนเนตหลอมเหลวแสดงดังภาพที่ 2.4 ปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นมีดังนี้



ภาพที่ 2.4 หลักการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดเกลือคาร์บอเนตหลอม (EERE, 2009 : online)

- เซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็ง (Solid Oxide Fuel Cell, SOFC) เป็นเซลล์เชื้อเพลิงที่ทั้งอิเล็กโทรดและสารอิเล็กโทรไลต์ที่ใช้ทำมาจากวัสดุเซรามิกจำพวกออกไซด์แข็ง เช่น อิตเรียม (yttria) หรือเซอร์โคเนีย (zirconia) โดยจะมีความสามารถในการนำไอออน (O^{2-}) ที่อุณหภูมิสูง มีอุณหภูมิในการดำเนินการสูงประมาณ 900-1000 องศาเซลเซียส เซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้ได้รับความสนใจในการนำมาพัฒนาในการผลิตไฟฟ้าเชิงอุตสาหกรรมเนื่องจากสารไฮโดรคาร์บอนต่าง ๆ สามารถนำมาใช้เป็นเชื้อเพลิงได้ ซึ่งเชื้อเพลิงเหลวที่ใช้สามารถถูกแปรรูปให้กลายเป็นก๊าซไฮโดรเจนภายในตัวเซลล์เชื้อเพลิงและออกซิเจนในอากาศนำมาใช้เป็นตัวออกซิไดซ์ได้ อีกทั้งยังทนต่อสารกำมะถันและสิ่งเจือปนในสารตั้งต้นเช่นเดียวกับเซลล์เชื้อเพลิงชนิดเกลือคาร์บอเนตหลอมเหลว และความร้อนที่เกิดจากกระบวนการสามารถนำไปใช้ประโยชน์ได้ หลักการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งแสดงได้ดังภาพที่ 2.5



ภาพที่ 2.5 หลักการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์ของแข็ง
(EERE, 2009 : online)

จะเห็นว่าโดยทั่วไปลักษณะการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดต่าง ๆ จะคล้ายคลึงกัน จะแตกต่างกันที่ชนิดของเชื้อเพลิงและตัวออกไซด์ที่ใช้ ช่วงอุณหภูมิในการดำเนินงานและชนิดของไอออนที่เคลื่อนที่ (Mobile ion) เพื่อการนำไปใช้งานในลักษณะที่ต่างกันไป ซึ่งสามารถสรุปได้ดังแสดงในตารางที่ 2.1

ตารางที่ 2.1 ข้อมูลของเซลล์เชื้อเพลิงในชนิดต่างๆ (EERE, 2009 : online)

ชนิดของเซลล์เชื้อเพลิง	ไอออนที่เคลื่อนที่	อุณหภูมิในการใช้งาน	ประสิทธิภาพ
เซลล์เชื้อเพลิงชนิดแอลคาไลน์ (AFC)	OH ⁻	50-200°C	60%
เซลล์เชื้อเพลิงชนิดกรดฟอสฟอริก (PAFC)	H ⁺	170-200°C	40%
เซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็ม (PEMFC)	H ⁺	20-80°C	60%
เซลล์เชื้อเพลิงชนิดคาร์บอนาทลอสมเหลว (MCFC)	CO ₃ ²⁻	500-700°C	45-50%
เซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์ของแข็ง (SOFC)	O ²⁻	900-1000°C	60%

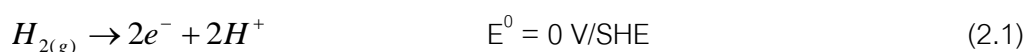
2.4 เซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็ม (Proton Exchange Membrane Fuel Cell, PEMFC) (กรกนก หงส์ทอง, 2547; จูติกร วาสนาเพียรพงศ์, 2546)

เซลล์เชื้อเพลิงชนิดพีอีเอ็ม หรือเซลล์เชื้อเพลิงแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอนเป็นเซลล์เชื้อเพลิงที่ใช้แผ่นพอลิเมอร์ซึ่งมีสถานะเป็นของแข็งเป็นสารสารถิเล็กโทรไลต์ มีลักษณะเป็นแผ่นบางๆ สำหรับการเป็นตัวกลางในการส่งผ่านโปรตอนระหว่างขั้วแอโนดและแคโทด แผ่นพอลิเมอร์จะถูกประกบด้วยขั้วไฟฟ้า 2 ขั้วที่มีความพรุนและตัวเร่งปฏิกิริยาที่เป็นแพลทินัม (Pt) พอกพูนอยู่ภาวะขณะทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้ จะทำงานที่อุณหภูมิและความดันต่ำประมาณ 60-100 องศาเซลเซียส และ 1-2 ความดันบรรยากาศ เมื่อกระบวนการเคมีไฟฟ้าเกิดขึ้นน้ำที่เกิดจากกระบวนการจะถูกกำจัดออกมาพร้อมแก๊สทางด้านแคโทด ส่วนความร้อนที่เกิดจะถูกดึงออกด้วยระบบหล่อเย็น ประสิทธิภาพของเซลล์เชื้อเพลิงจะขึ้นอยู่กับความชื้นของเมมเบรนเนื่องจากกระบวนการนำไฮดรอกซิลหรือโปรตอนจะเกิดขึ้นได้ดีเมื่อเมมเบรนมีความชื้น

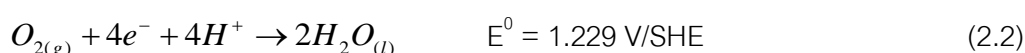
2.4.1 หลักการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็ม

หลักการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดพีอีเอ็มคือแก๊สไฮโดรเจนจะถูกป้อนเข้าทางด้านขั้วแอโนดของเซลล์เชื้อเพลิง เมื่อแก๊สแพร่ไปถึงและสัมผัสกับตัวเร่งปฏิกิริยาจะเกิดปฏิกิริยาออกซิเดชัน (Oxidation reaction) แตกตัวได้เป็นผลิตภัณฑ์เป็นอิเล็กตรอนและโปรตอนไฮดรอกซิล ดังสมการที่ (2.1) อิเล็กตรอนที่เกิดขึ้นจะผ่านออกไปสู่วงจรไฟฟ้าภายนอกก่อนจะไหลกลับเข้าสู่เซลล์เชื้อเพลิงทางฝั่งขั้วแคโทดทำให้เกิดกระแสไฟฟ้าขึ้น ในขณะที่โปรตอนก็จะแพร่ไปยังขั้วแคโทดผ่านเมมเบรนที่ทำหน้าที่เป็นอิเล็กโทรไลต์ เมื่ออิเล็กตรอนกับโปรตอนเคลื่อนที่มาถึงขั้วแคโทดจะเกิดปฏิกิริยารีดักชัน (Reduction) ที่ตัวเร่งปฏิกิริยากับแก๊สออกซิเจนที่ถูกป้อนเข้ามาทางฝั่งแคโทด จะได้ผลิตภัณฑ์ที่ได้ คือ น้ำ ดังสมการที่ (2.2) โดยปฏิกิริยารวม แสดงดังสมการที่ (2.3)

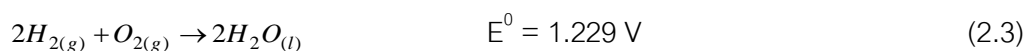
ปฏิกิริยาที่ขั้วแอโนด



ปฏิกิริยาที่ขั้วแคโทด



ปฏิกิริยารวม



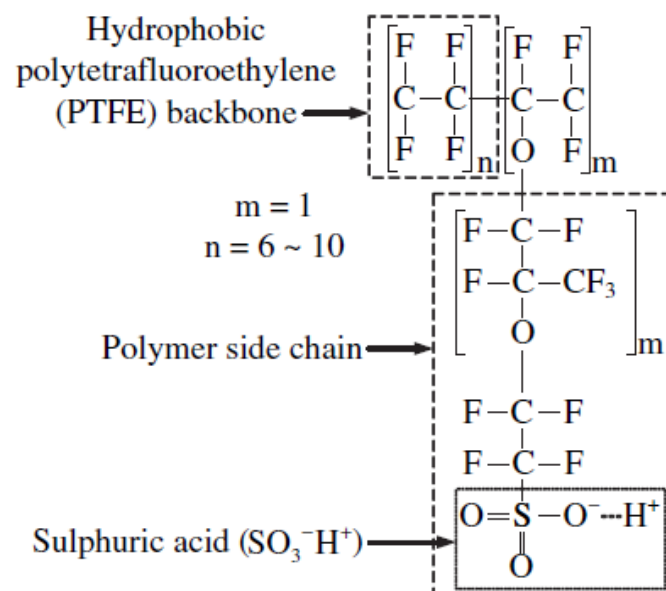
โดยเซลล์เชื้อเพลิง 1 เซลล์ จะให้ศักย์ไฟฟ้าตามทฤษฎี (E^0) = 1.229 โวลต์ ที่ภาวะมาตรฐาน (1 บรรยากาศ, 25 องศาเซลเซียส)

2.4.2 องค์ประกอบของเซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็ม

องค์ประกอบที่สำคัญของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดพีอีเอ็มได้แก่ อิเล็กโทรไลต์ (electrolyte) และ ขั้วไฟฟ้า (electrode) ดังนั้นจึงขอกล่าวถึงรายละเอียดที่เกี่ยวข้อง ดังนี้

2.4.2.1 อิเล็กโทรไลต์ (electrolyte)

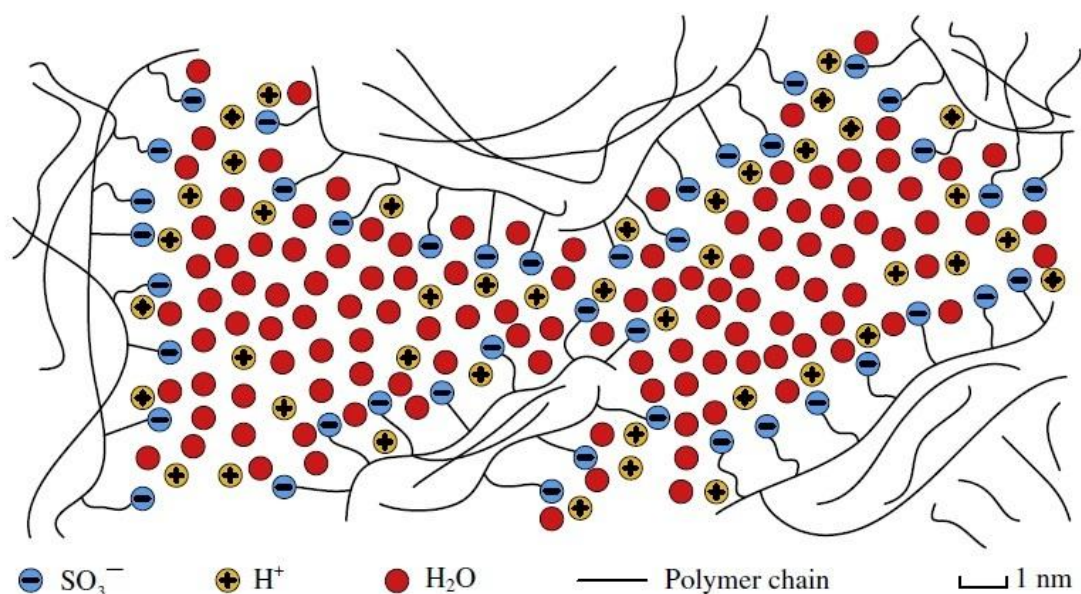
เป็นองค์ประกอบที่สำคัญของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดพีอีเอ็ม ทำหน้าที่ในการส่งผ่านโปรตอนที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยาฝั่งขั้วแอโนดไปสู่ขั้วแคโทด ซึ่งมีลักษณะเป็นเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอน ลักษณะโครงสร้างเป็นสารซัลโฟเนตเตตระฟลูออโรเอทิลีน (sulfonated tetrafluoroethylene) บนพลูออโรพอลิเมอร์ (fluoropolymer) มีชื่อทางการค้าคือเนฟิออน (Nafion) เมื่อเมมเบรนดูดซับน้ำก็จะเกิดการแตกตัวโดยไอออนลบที่เกิดขึ้นจะอยู่บนเมทริกซ์ของเมมเบรน ทำให้เกิดการเคลื่อนที่ของโปรตอนบนเมมเบรนได้



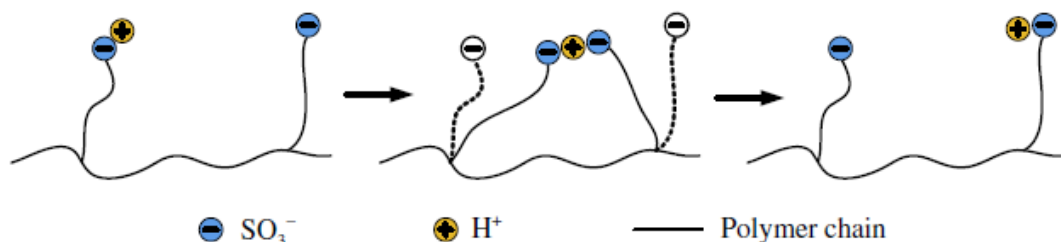
ภาพที่ 2.6 โครงสร้างของเนฟิออน (Nafion) (Jiao และ Li, 2011)

เนื่องจากโครงสร้างของพันธะระหว่างฟลูออรีนกับคาร์บอนมีความแข็งแรงทำให้พอลิเมอร์มีความทนทานต่อสารเคมีและภาวะขณะทำงาน และจากโครงสร้างพบว่าโมเลกุลของกรดซัลโฟ

นิกที่สร้างพันธะที่ปลายของพอลิเมอร์กลายเป็นหมู่ SO_3^- มีความสามารถในการดูดซึ่มโมเลกุลของน้ำไว้ในอิเล็กทรอนิกส์เนื่องจากส่วนปลายช่วงนี้เป็นช่วงที่ชอบน้ำ (Hydrophilic) ดังแสดงในภาพที่ 2.7 โดยความแข็งแรงของพันธะในการยึดกันของหมู่ SO_3^- กับ H^+ ในบริเวณที่ดูดซึ่มน้ำจะมีค่าต่ำ จึงทำให้ H^+ สามารถเคลื่อนที่ในเมมเบรนได้ ดังแสดงในภาพที่ 2.8



ภาพที่ 2.7 โครงสร้างของเมมเบรนที่มีการดูดซึ่มน้ำเอาไว้ (Jiao และ Li, 2011)



ภาพที่ 2.8 การถ่ายโอนโปรตอนระหว่างสายพอลิเมอร์ในเมมเบรน (Jiao และ Li, 2011)

สมบัติของเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอนที่ดี คือ ต้องทนทานต่อการฉีกขาด ทนการกัดกร่อนของสารเคมี สามารถดูดซึ่มน้ำได้หรือมีค่าการสูญเสียน้ำ(Dehydration) ต่ำ มีค่าการนำโปรตอนหรือไอออนบวก (Cation) สูงแต่มีค่าการนำอิเล็กตรอนต่ำ แก๊สแพร่ผ่านได้น้อย มีความคงตัวสูงหรือไม่มีการบวม มีความทนทานต่อการเกิดออกซิเดชัน รีดักชัน และไฮโดรไลซิส (Hydrolysis) มีความเป็นเนื้อเดียวกัน (Homogeneity) และสามารถให้ตัวเร่งปฏิกิริยายึดเกาะไว้บนพื้นผิวได้ดี

2.4.2.2 ขั้วไฟฟ้า (Electrode)

ขั้วไฟฟ้าประกอบด้วยส่วนประกอบสำคัญอยู่สองส่วน ส่วนแรกคือชั้นการแพร่แก๊ส (Gas diffusion layer) มีหน้าที่ทำให้แก๊สแพร่ผ่านไปยังชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาได้อย่างมีประสิทธิภาพและหน้าที่ของชั้นการแพร่แก๊สยังรวมไปถึงการจัดการน้ำ การสะสมกระแส เป็นตัวรองรับทางกลและการนำความร้อน นอกจากนี้ชั้นการแพร่แก๊สยังมีสมบัติเป็นตัวนำไฟฟ้าที่สามารถถ่ายโอนอิเล็กตรอนเข้าและออกจากชั้นตัวเร่งปฏิกิริยา ส่วนที่สองคือชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยา (catalyst layer) จะเป็นส่วนที่อยู่ระหว่างเมมเบรนอิเล็กโทรไลต์และชั้นการแพร่แก๊ส ชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาจะเป็นส่วนที่เกิดปฏิกิริยาครึ่งเซลล์ในเซลล์เชื้อเพลิง โดยขั้วแอโนดจะเกิดปฏิกิริยาออกซิเดชันและขั้วแคโทดจะเกิดปฏิกิริยารีดักชัน วัสดุที่ใช้แทนตัวเร่งปฏิกิริยาส่วนใหญ่คือโลหะมีตระกูลจำพวกแพลตินัม(Pt) โดยขั้วไฟฟ้าที่ดีจะต้องมีความเป็นรูพรุนมาก เนื่องจากรูพรุนของชั้นแพร่แก๊สจะช่วยเพิ่มพื้นที่ผิวของการเกิดปฏิกิริยาของขั้วไฟฟ้า ควรจะมีพื้นที่ผิวในการเกิดปฏิกิริยาต่อพื้นที่ของชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยามากที่สุด ซึ่งขั้วไฟฟ้าต้องมีความต้านทานทางไฟฟ้าต่ำหรือมีความสามารถในการนำกระแสไฟฟ้าได้ดี การเคลื่อนที่ของแก๊สในขั้วไฟฟ้าแบ่งออกเป็น 3 ขั้นตอนดังนี้

1. โมเลกุลของแก๊สเคลื่อนที่ผ่านชั้นการแพร่แก๊ส (Gas diffusion layer) ไปยังบริเวณผิวสัมผัสระหว่างชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาและเมมเบรนอิเล็กโทรไลต์
2. แก๊สดูดซับลงบนพื้นผิวตัวเร่งปฏิกิริยา โดยจะขึ้นกับพื้นที่ผิวในการเกิดปฏิกิริยา (Specific surface area) ของตัวเร่งปฏิกิริยา
3. โมเลกุลของแก๊สเกิดปฏิกิริยาบนตัวเร่งปฏิกิริยาบริเวณที่เป็น Three phase boundary ได้ผลิตภัณฑ์เป็นโปรตอนและอิเล็กตรอน โดยที่โปรตอนจะเคลื่อนที่ผ่านเมมเบรนอิเล็กโทรไลต์ไปอีกด้านหนึ่งของขั้วไฟฟ้าซึ่งความสามารถในการเคลื่อนที่ของโปรตอนจะขึ้นอยู่กับความหนาและปริมาณน้ำที่มีอยู่ในเมมเบรนอิเล็กโทรไลต์ ส่วนอิเล็กตรอนจะถูกนำออกโดยวงจรไฟฟ้าภายนอกแล้วจึงกลับเข้ามายังขั้วไฟฟ้าอีกฝั่งโดยไม่ผ่านเมมเบรนอิเล็กโทรไลต์

โดยปรกติในการจัดทำเซลล์เชื้อเพลิงหรือเซลล์เชื้อเพลิงที่ขายกันอยู่ทั่วไป มักจะทำการรวมชั้นของขั้วไฟฟ้าและชั้นของเมมเบรนอิเล็กโตรไลต์ให้เป็นชั้นเดียวโดยจะเรียกชั้นส่วนประกอบเสร็จของขั้วไฟฟ้าและชั้นของเมมเบรนอิเล็กโตรไลต์ว่า Membrane electrode assembly หรือ MEA เพื่อสะดวกในการถอดและประกอบในตัวเซลล์เชื้อเพลิง

2.5 พลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณด้วยระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่ม (Patankar, 1980; Versteeg และ Malasekera, 2007)

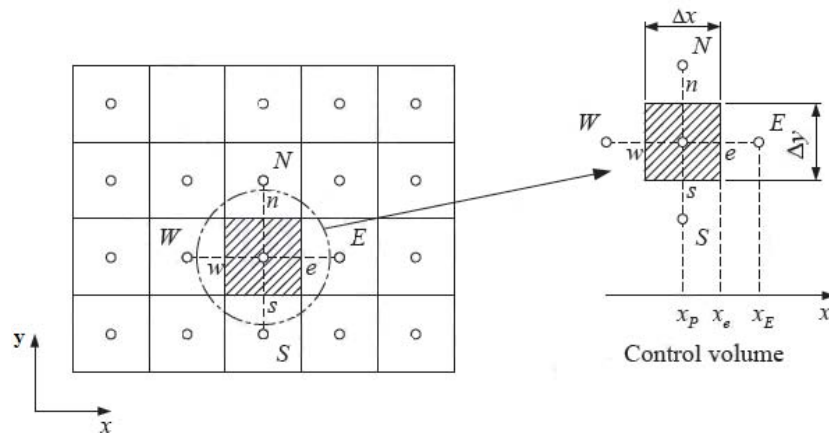
พลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณ (Computational Fluid Dynamics, CFD) เป็นแขนงวิชาหนึ่งของกลศาสตร์ของไหล สำหรับการวิเคราะห์การไหล การถ่ายโอนความร้อนและปรากฏการณ์ต่างๆ ที่เกี่ยวข้องกับการไหล โดยอาศัยหลักการทางคณิตศาสตร์เข้ามาช่วย

ปรากฏการณ์ทางการไหล การถ่ายโอนความร้อน และปฏิกิริยาเคมีต่าง ๆ สามารถอธิบายได้ด้วยสมการเชิงอนุพันธ์ย่อย (Partial differential equation) แบบไม่เป็นเชิงเส้น ซึ่งระบบสมการเหล่านี้สามารถแก้ด้วยวิธีการวิเคราะห์เชิงคณิตศาสตร์ (Analytical analysis) เพื่อหาผลเฉลยแม่นยำ (Exact solution) ได้เพียงบางกรณีพิเศษเท่านั้น ดังนั้นจึงต้องอาศัยหลักการวิเคราะห์ด้วยระเบียบวิธีเชิงตัวเลข (Numerical analysis) ในการกระจายพจน์ต่าง ๆ สำหรับการหาผลเฉลยโดยประมาณ (Approximate solution) เพื่อประมาณสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยด้วยระบบสมการพีชคณิต (System of algebraic equations) โดยใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์ช่วยในการหาผลเฉลยของระบบสมการนี้

ต่อไปจะทำการอธิบายขั้นตอนต่าง ๆ ของระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่ม เช่น การประมาณพจน์ของการแพร่และการพา เป็นต้น จากการประยุกต์ใช้ระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่ม (Finite volume method) กับสมการการไหลพื้นฐานและสมการการถ่ายโอนความร้อน

2.5.1 สมการควบคุมพื้นฐาน

ระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่ม เป็นระเบียบวิธีเชิงตัวเลขที่แบ่งขอบเขตของปัญหาที่สนใจออกเป็นพื้นที่หรือปริมาตรควบคุมเล็ก ๆ แล้วหาปริพันธ์ (Integrate) สมการการอนุรักษ์บนพื้นที่ควบคุม (Control area) หรือปริมาตรควบคุม (Control volume) ดังภาพที่ 2.9



ภาพที่ 2.9 การแบ่งขอบเขตของปัญหาด้วยระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มออกเป็นพื้นที่ควบคุมเล็กๆ (Patankar, 1980)

การแก้ไขปัญหาคาร์และการแพร่ของของไหลโดยใช้ระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่ม สามารถแสดงรูปทั่วไปของสมการควบคุมพื้นฐาน (Governing equations) ซึ่งเป็นสมการการไหลพื้นฐานที่ภาวะคงตัวในรูปของตัวแปรตัวแปร ϕ ได้ดังนี้

$$\underbrace{\frac{\partial(\rho u \phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v \phi)}{\partial y}}_{\text{Convection Terms}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)}_{\text{Diffusion Terms}} + \underbrace{S_\phi}_{\text{Source Term}} \quad (2.4)$$

พจน์ทางด้านซ้ายของสมการ (2.4) คือ พจน์ของการพา (Convective term) ตามแกน x และ y ส่วนพจน์แรกทางขวาของสมการ (2.4) คือ พจน์ของการแพร่ (Diffusion term) ตามแกน x และ y และพจน์ที่ 2 ทางขวาของสมการ (2.4) คือ พจน์เพิ่มเติม (Source Term) เนื่องจากสมการการอนุรักษ์พื้นฐานของการไหลแบบปั่นป่วน (turbulence flow) มีรูปแบบทั่วไปเหมือนสมการ (2.4) จึงขอแสดงขั้นตอนของระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มที่ใช้กับปัญหาการไหลแบบราบเรียบ (laminar flow) เท่านั้น

โดยรูปแบบของสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยของสมการ (2.4) ซึ่งเป็นสมการเชิงอนุพันธ์พื้นฐานที่จะนำมาแก้สมการสามารถเปลี่ยนให้เป็นสมการพีชคณิตโดยใช้ระเบียบวิธีเชิงตัวเลขไฟไนต์วอลุ่มทำให้สามารถการคำนวณได้ง่ายขึ้นโดยการหาปริพันธ์ตลอดพื้นที่ควบคุมได้เป็น

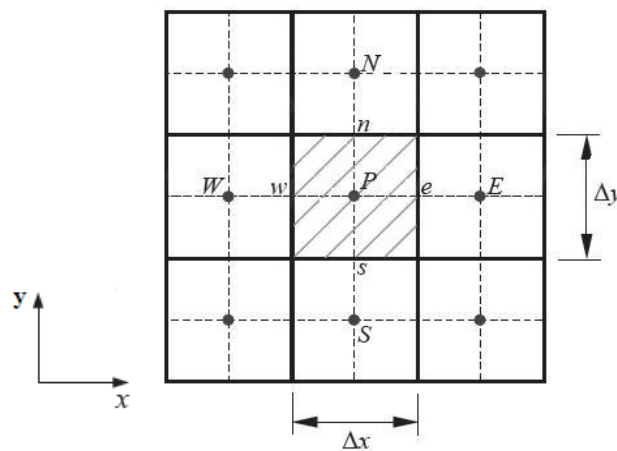
$$\int_{CV} \frac{\partial(\rho u \phi)}{\partial x} dV + \int_{CV} \frac{\partial(\rho v \phi)}{\partial y} dV = \int_{CV} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dV + \int_{CV} \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) dV + \int_{CV} S_\phi dV \quad (2.5)$$

ซึ่งสมการ (2.5) ก็คือรูปทั่วไปของสมการพื้นฐานที่เขียนอยู่ในรูปของปริพันธ์ (Integral) นั่นเอง

2.5.2 ปัญหาการแพร่

การแก้ไขปัญหาการแพร่ในระบบสองมิติในรูปสมการทั่วไปที่สภาวะคงตัวด้วยการคำนวณแบบระเบียบวิธีเชิงตัวเลข เมื่อพิจารณาพจน์การแพร่เพียงพจน์เดียว จากสมการที่ (2.4) จะได้รูปแบบสมการของการแพร่ ดังนี้

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + S_\phi = 0 \quad (2.6)$$



ภาพที่ 2.10 พื้นที่ควบคุมในระบบสองมิติของปัญหาการแพร่ (Patankar, 1980)

เมื่อทำการหาปริพันธ์สมการที่ (2.6) ตลอดพื้นที่ควบคุมสองมิติตามภาพที่ 2.10 จะได้

$$\int_{\Delta V} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dx dy + \int_{\Delta V} \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) dx dy + \int_{\Delta V} S_\phi dx dy = 0 \quad (2.7)$$

กำหนดให้ $A_e = A_w = 1 \times \Delta y$ และ $A_n = A_s = \Delta x \times 1$ จะได้

$$\left[\Gamma_e A_e \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \Gamma_w A_w \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \right] + \left[\Gamma_n A_n \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_n - \Gamma_s A_s \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_s \right] = 0 \quad (2.8)$$

จากสมการ (3.5) ฟลักซ์ที่ไหลผ่านทิศทางต่างๆ ของพื้นที่ควบคุม สามารถแสดงได้ดังนี้

$$\text{ทิศตะวันตก} \quad \Gamma_w A_w \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_w = \Gamma_w A_w \frac{(\phi_P - \phi_W)}{\Delta x_{WP}} \quad (2.9 ก)$$

$$\text{ทิศตะวันออก} \quad \Gamma_e A_e \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_e = \Gamma_e A_e \frac{(\phi_E - \phi_P)}{\Delta x_{PE}} \quad (2.9 ข)$$

$$\text{ทิศใต้} \quad \Gamma_s A_s \left. \frac{\partial \phi}{\partial y} \right|_s = \Gamma_s A_s \frac{(\phi_P - \phi_S)}{\Delta y_{SP}} \quad (2.9 ค)$$

$$\text{ทิศเหนือ} \quad \Gamma_n A_n \left. \frac{\partial \phi}{\partial y} \right|_n = \Gamma_n A_n \frac{(\phi_N - \phi_P)}{\Delta y_{PN}} \quad (2.9 ง)$$

เมื่อนำฟลักซ์ที่ไหลผ่านพื้นที่ควบคุมจากทิศต่างๆ ของสมการ (2.9 ก-ง) แทนลงในสมการ (2.8) จะได้รูปสมการคือ

$$\Gamma_e A_e \frac{(\phi_E - \phi_P)}{\Delta x_{PE}} - \Gamma_w A_w \frac{(\phi_P - \phi_W)}{\Delta x_{WP}} + \Gamma_n A_n \frac{(\phi_N - \phi_P)}{\Delta y_{PN}} - \Gamma_s A_s \frac{(\phi_P - \phi_S)}{\Delta y_{SP}} + \bar{S} \Delta V = 0 \quad (2.10)$$

เมื่อกำหนดให้การกระจายของพจน์เพิ่มเติมเป็นแบบเชิงเส้นบนพื้นที่ควบคุมจะได้ $\bar{S} \Delta V = S_u + S_p \phi_p$ เมื่อจัดรูปสมการ (2.10) ใหม่จะได้สมการเป็น

$$\left(\frac{\Gamma_w A_w}{\Delta x_{WP}} + \frac{\Gamma_e A_e}{\Delta x_{PE}} + \frac{\Gamma_s A_s}{\Delta y_{SP}} + \frac{\Gamma_n A_n}{\Delta y_{PN}} - S_p \right) \phi_P = \left(\frac{\Gamma_w A_w}{\Delta x_{WP}} \right) \phi_W + \left(\frac{\Gamma_e A_e}{\Delta x_{PE}} \right) \phi_E + \left(\frac{\Gamma_s A_s}{\Delta y_{SP}} \right) \phi_S + \left(\frac{\Gamma_n A_n}{\Delta y_{PN}} \right) \phi_N + S_u \quad (2.11)$$

สมการทั่วไปในรูปของสมการพีชคณิตคือ

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N + S_u \quad (2.12)$$

เมื่อ

$$a_W = \frac{\Gamma_w A_w}{\delta x_{WP}}$$

$$a_E = \frac{\Gamma_e A_e}{\delta x_{PE}}$$

$$a_S = \frac{\Gamma_s A_s}{\delta y_{SP}}$$

$$a_N = \frac{\Gamma_n A_n}{\delta y_{NP}}$$

และ

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N - S_P$$

จากสมการ (2.12) จะสามารถแก้ไขปัญหาการนำความร้อนได้โดยกำหนดและแทนค่าเงื่อนไขขอบต่างๆ ของปัญหาที่พิจารณาลงในสมการ

2.5.3 ปัญหาการพาและการแพร่

ปัญหาลักษณะนี้จะมีการพิจารณาร่วมกันระหว่างผลจากการพาและการแพร่ โดยพจน์ของการพานี้เกิดจากการไหลของของไหล และเพื่อให้สามารถทราบถึงค่าของตัวแปรเช่น อุณหภูมิ ความเข้มข้นของสสารที่มีการเปลี่ยนแปลงจากการไหล ดังนั้นจึงจำเป็นต้องทราบสภาพการไหลที่เกิดขึ้นเพื่อให้ได้ค่าตัวแปรดังกล่าว จากสมการ (2.4) สามารถเขียนสมการในรูปตัวแปร ϕ สำหรับปัญหาการแพร่และการพาที่สภาวะคงตัวในรูปแบบสมการสองมิติได้ดังนี้

$$\frac{\partial(\rho u \phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v \phi)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + S_\phi \quad (2.13)$$

ทำการหาปริพันธ์ของสมการตั้งต้นตลอดทั้งพื้นที่ควบคุมตามภาพที่ 2.10 เพื่อเปลี่ยนรูปสมการให้อยู่ในรูปแบบสมการพีชคณิตโดยระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่ม จากสมการตั้งต้นที่เป็นรูปแบบของสมการเชิงอนุพันธ์จะได้รูปสมการตั้งสมการที่ (2.14)

$$\int_{\Delta V} \left[\frac{\partial(\rho u \phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v \phi)}{\partial y} \right] dV = \int_{\Delta V} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + S_\phi \right] dV \quad (2.14)$$

เมื่อแยกพิจารณาปริพันธ์ที่ละพจน์ โดยกำหนดให้ $A_e = A_w = 1 + \Delta y$ และ $A_n = A_s = \Delta x \times 1$ จะได้พจน์ของการพาในแนวแกน x และ y คือ

$$\int_{\Delta V} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u \phi) dV = (\rho u A)_e \phi_e - (\rho u A)_w \phi_w = F_e \phi_e - F_w \phi_w \quad (2.15 ก)$$

$$\int_{\Delta V} \frac{\partial}{\partial y} (\rho v \phi) dV = (\rho v A)_n \phi_n - (\rho v A)_s \phi_s = F_n \phi_n - F_s \phi_s \quad (2.15 ข)$$

โดยพจน์การแพร่ คือ

$$\int_{\Delta V} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right] dV = \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} A \right)_e - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} A \right)_w = D_e (\phi_E - \phi_P) - D_w (\phi_P - \phi_W) \quad (2.16 ก)$$

$$\int_{\Delta V} \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \right] dV = \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} A \right)_n - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} A \right)_s = D_n (\phi_N - \phi_P) - D_s (\phi_P - \phi_S) \quad (2.16 ข)$$

และพจน์เพิ่มเติมคือ

$$\int_{\Delta V} S_\phi dV = S_\phi V \quad (2.17)$$

กำหนดให้ F คือ สัมประสิทธิ์การพา ซึ่งมีค่าเท่ากับ $\rho u A$
 และ D คือ สัมประสิทธิ์การแพร่ ซึ่งมีค่าเท่ากับ $\frac{\Gamma A}{\delta}$

จากสมการข้างต้นทำให้สามารถหาค่าของ ϕ บนพื้นที่ควบคุมในพจน์การพาที่อยู่ในสมการได้ โดยใช้การประมาณค่าด้วยหลักการตามระเบียบวิธี (Scheme) ต่างๆ เช่น Central differencing, Upwind differencing, Hybrid differencing หรือ Power-Law scheme

รูปแบบของระเบียบวิธี (Scheme) ต่าง ๆ มีดังต่อไปนี้

1. ระเบียบวิธี Central differencing

เป็นการประมาณเชิงเส้นของค่า ϕ โดยการหาค่าเฉลี่ยที่เกิดขึ้นที่ผิวสัมผัส (interface) ของพื้นที่ควบคุม ดังนี้

$$\phi_e = \frac{1}{2}(\phi_E + \phi_P) \quad (2.18 \text{ ก})$$

$$\phi_w = \frac{1}{2}(\phi_P + \phi_W) \quad (2.18 \text{ ข})$$

$$\phi_n = \frac{1}{2}(\phi_N + \phi_P) \quad (2.18 \text{ ค})$$

$$\phi_s = \frac{1}{2}(\phi_P + \phi_S) \quad (2.18 \text{ ง})$$

เมื่อนำค่าที่ได้จากสมการ (2.15 ก-ข), (2.16 ก-ข) และ (2.17) แทนลงในสมการ (2.14) และนำค่าเฉลี่ยของค่า ϕ ที่ผิวสัมผัส (interface) ต่างๆ ตามสมการ (2.18 ก-ง) แทนค่าลงในสมการจะได้รูปสมการ (2.19)

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}(\rho u)_e(\phi_E + \phi_P) - \frac{1}{2}(\rho u)_w(\phi_P + \phi_W) + \frac{1}{2}(\rho v)_n(\phi_N + \phi_P) - \frac{1}{2}(\rho v)_s(\phi_P + \phi_S) \\ & = \frac{\Gamma_e(\phi_E - \phi_P)}{(\delta x)_e} - \frac{\Gamma_w(\phi_P - \phi_W)}{(\delta x)_w} + \frac{\Gamma_n(\phi_N - \phi_P)}{(\delta y)_n} - \frac{\Gamma_s(\phi_P - \phi_S)}{(\delta y)_s} + S_\phi V \end{aligned} \quad (2.19)$$

โดย $F = \rho uA$ และ $D = \frac{\Gamma A}{\delta x}$ ซึ่งสามารถเขียนสมการทั่วไปในรูปของสมการพีชคณิตจากสมการที่ (2.19) ได้ดังนี้

$$a_p \phi_p = a_w \phi_w + a_e \phi_e + a_s \phi_s + a_n \phi_n + S_\phi V \quad (2.20)$$

โดย $a_n = D_n - \frac{F_n}{2}$

$$a_s = D_s + \frac{F_s}{2}$$

$$a_e = D_e - \frac{F_e}{2}$$

$$a_w = D_w + \frac{F_w}{2}$$

และ $a_p = a_n + a_s + a_e + a_w + (F_n - F_s + F_e - F_w)$

เมื่อใช้กฎของการอนุรักษ์มวล $F_n - F_s + F_e - F_w = 0$ จะได้ว่า

$$a_p = a_n + a_s + a_e + a_w$$

จากรูปของสมการ (2.20) จะเห็นว่าการใช้ระเบียบวิธี Central-differencing อาจส่งผลให้ค่าสัมประสิทธิ์ a_n, a_s, a_e หรือ a_w มีค่าติดลบ ซึ่งเป็นการละเมิดกฎพื้นฐาน (Basic rules) ที่ว่า ถ้าหากค่าสัมประสิทธิ์มีค่าติดลบจะทำให้ $a_p \neq \sum |a_{nb}|$ ไม่เป็นไปตาม Scarborough criterion ส่งผลให้ผลเฉลยของปัญหาไม่สามารถเข้าสู่ค่าใดๆ ดังนั้นจึงทำให้ระเบียบวิธีแบบ Central-difference ไม่เป็นที่นิยมใช้สำหรับแก้ปัญหาในระบบของการพาและการแพร่ที่มีเพกเลตน์มเบอร์ (Peclet number, Pe) สูง

2. ระเบียบวิธี Upwind differencing

จุดประสงค์ของการคิดค้นวิธีนี้คือเพื่อแก้ไขปัญหาที่เกิดขึ้นจากการสมมติค่าของการพาที่บริเวณผิวสัมผัส (Interface) ϕ_e เกิดจากการเฉลี่ยค่าระหว่าง ϕ_e และ ϕ_p โดยกำหนดให้พจน์ของการแพร่ไม่มีการเปลี่ยนแปลง ส่วนพจน์การพาสามารถหาค่าโดยกำหนดให้ค่าของ ϕ ที่ผิวสัมผัส (Interface) มีค่าเท่ากับค่าของ ϕ ที่ Grid point ของผิวสัมผัสพื้นที่ควบคุมด้านบนของกระแสการไหล (Upstream) นั่นคือ

$$\phi_e = \phi_P \quad \text{เมื่อ} \quad F_e > 0 \quad (2.21 \text{ ก})$$

$$\phi_e = \phi_E \quad \text{เมื่อ} \quad F_e < 0 \quad (2.21 \text{ ข})$$

$$\phi_w = \phi_W \quad \text{เมื่อ} \quad F_w > 0 \quad (2.21 \text{ ค})$$

$$\phi_w = \phi_P \quad \text{เมื่อ} \quad F_w < 0 \quad (2.21 \text{ ง})$$

ค่าของ ϕ_n และ ϕ_s ก็สามารถคำนวณหาได้ในลักษณะเดียวกัน ดังนั้นรูปสมการพีชคณิตของสมการทั่วไปจึงมีรูปดังสมการ (2.22)

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N + S_\phi V \quad (2.22)$$

$$\text{โดย} \quad a_N = \max[-F_n, 0]$$

$$a_S = \max[F_s, 0]$$

$$a_E = \max[-F_e, 0]$$

$$a_W = \max[F_w, 0]$$

$$\text{และ} \quad a_P = a_N + a_S + a_E + a_W + (F_n - F_s + F_e - F_w)$$

ซึ่งกำหนดให้ $\max[A, B]$ คือค่าสูงสุดที่ได้จากการเปรียบเทียบค่าของ A และ B

จากรูปสมการสังเกตได้ว่าค่าสัมประสิทธิ์ต่างๆ ไม่สามารถมีค่าติดลบได้ ทำให้สามารถแก้ปัญหาดังกล่าวได้โดยผลเฉลยสามารถเข้าสู่ค่าใดค่าหนึ่งและผลเฉลยที่ได้มีค่าเป็นไปตามลักษณะทางกายภาพที่เกิดขึ้นจริง

3. ระเบียบวิธี Hybrid differencing

รูปแบบของ Scheme นี้เป็นการรวมข้อดีของระเบียบวิธี Central differencing และระเบียบวิธี Upwind differencing เอาไว้ด้วยกัน โดยอาศัยการเลือกใช้จากเพกเลตนิมเบอร์ $Pe = \frac{F}{D}$ ซึ่งระเบียบวิธี Central differencing จะมีผลต่อการแกว่งของผลลัพธ์ที่ได้จากการคำนวณเมื่อเพกเลตนิมเบอร์มีค่ามากกว่า 2 และน้อยกว่า -2 ดังนั้นระเบียบวิธี Hybrid differencing จะเลือกใช้ระเบียบวิธี Central differencing ในช่วงเพกเลตนิมเบอร์ระหว่าง -2 ถึง 2 เท่านั้น ส่วนเพกเลตนิมเบอร์ที่อยู่นอกเหนือจากช่วง -2 ถึง 2 จะใช้ระเบียบวิธี Upwind

differencing ที่มีความแม่นยำในอันดับที่หนึ่ง (1st-order accuracy) ที่มีเสถียรภาพในการคำนวณที่ดีกว่า ซึ่งสามารถเขียนสมการทั่วไปให้อยู่ในรูปของรูปสมการพีชคณิตได้ดังสมการ (2.23)

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N + S_\phi V \quad (2.23)$$

$$\begin{aligned} \text{โดย} \quad a_N &= \max \left[-F_n, D_n - \frac{F_n}{2}, 0 \right] \\ a_S &= \max \left[F_s, D_s + \frac{F_s}{2}, 0 \right] \\ a_E &= \max \left[-F_e, D_e - \frac{F_e}{2}, 0 \right] \\ a_W &= \max \left[F_w, D_w + \frac{F_w}{2}, 0 \right] \\ \text{และ} \quad a_P &= a_N + a_S + a_E + a_W + (F_n - F_s + F_e - F_w) \end{aligned}$$

4. ระเบียบวิธี Power-Law

เนื่องจากระเบียบวิธี Power-Law นี้พัฒนามาจากการหาคำตอบเชิงวิเคราะห์ในระบบหนึ่งมิติ ทำให้ระเบียบวิธี Power-Law เป็นวิธีที่สามารถหาค่าผลเฉลยที่ใกล้เคียงกับผลเฉลยแม่นยำตรงสำหรับปัญหาในระบบหนึ่งมิติมากกว่าระเบียบวิธี Hybrid scheme โดยวิธีการแบบระเบียบวิธี Power-Law จะกำหนดค่าในพจน์ของการแพร่โดยการประมาณแบบพหุนาม (Polynomial) และเมื่อค่าเพกเลตนัมเบอร์มีค่ามากกว่า 10 จะให้พจน์ของการแพร่มีค่าเท่ากับศูนย์ ซึ่งสามารถเขียนสมการพีชคณิตได้ดังสมการ (2.24)

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N + S_\phi V \quad (2.24)$$

$$\begin{aligned} \text{โดย} \quad a_N &= D_n \max[0, (1 - 0.1|Pe_n|)^5] + \max[-F_n, 0] \\ a_S &= D_s \max[0, (1 - 0.1|Pe_s|)^5] + \max[F_s, 0] \\ a_E &= D_e \max[0, (1 - 0.1|Pe_e|)^5] + \max[-F_e, 0] \\ a_W &= D_w \max[0, (1 - 0.1|Pe_w|)^5] + \max[F_w, 0] \\ \text{และ} \quad a_P &= a_N + a_S + a_E + a_W - (F_n - F_s + F_e - F_w) \end{aligned}$$

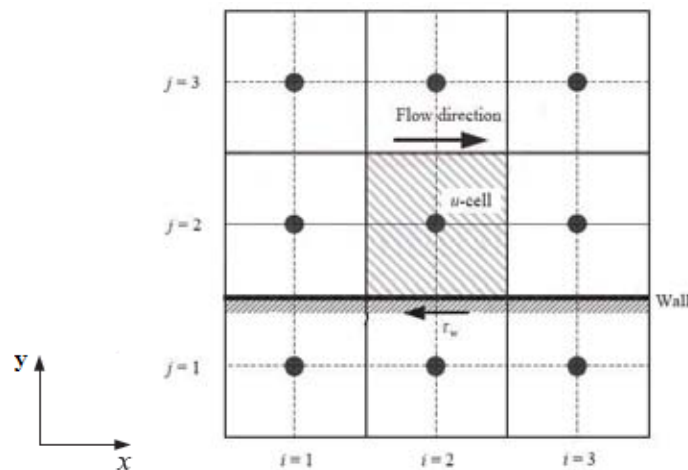
2.5.4 เงื่อนไขขอบ (Boundary conditions)

การใช้ระเบียบวิธีเชิงตัวเลขนั้นจำเป็นต้องมีการกำหนดเงื่อนไขขอบ (Boundary conditions) และเงื่อนไขเริ่มต้น (Initial conditions) ก่อนการคำนวณเพื่อแก้ปัญหา เนื่องจากสภาพทางกายภาพของระบบที่จำลองมาจะขึ้นกับการกำหนดเงื่อนไขเหล่านั้น ซึ่งในหัวข้อนี้จะเสนอรูปแบบของการกำหนดเงื่อนไขขอบโดยทั่วไปที่ใช้ในการแก้ปัญหาด้วยวิธีไฟไนต์วอลุ่ม โดยสามารถแบ่งเงื่อนไขขอบออกเป็นสองประเภทหลักๆ คือ

- เงื่อนไขขอบที่ผนัง (Wall boundary condition)
- เงื่อนไขขอบแบบสมมาตร (Symmetric boundary condition)

2.5.4.1 เงื่อนไขขอบที่ผนัง (Wall boundary condition)

ผนังเป็นเงื่อนไขขอบที่สามารถพบได้ทั่วไปในปัญหาการไหล ซึ่งอาจแบ่งเงื่อนไขขอบลักษณะนี้เป็นเงื่อนไขย่อยอื่นๆ หลายประเภท ในที่นี้จะใช้ผนังที่ขนานกับแนวแกน x (ภาพที่ 2.11) ในการพิจารณา



ภาพที่ 2.11 ผนังที่ควบคุมที่ผนัง (Patankar, 1980)

เงื่อนไขขอบที่ไม่มีการลื่นไถล (No-slip condition) เป็นเงื่อนไขในการประมาณค่าของความเร็วที่พื้นผิวของของแข็งโดยให้ความเร็วที่ขอบ ($j = 1$) มีค่าเท่ากับศูนย์ ($u = 0, v = 0$) และพื้นที่ควบคุมที่อยู่ติดผนังมีค่า $a_s = 0$ เนื่องจากค่า Pressure correction ไม่มีการคำนวณที่ตำแหน่งนี้

เงื่อนไขขอบที่ผนังสำหรับการไหลแบบราบเรียบ จะพบว่าบริเวณผนังมีค่าความเค้นเฉือนในแนวแกน x มีค่าเป็น

$$\tau_w = \mu \frac{u_p}{\Delta y_p} \quad (2.25)$$

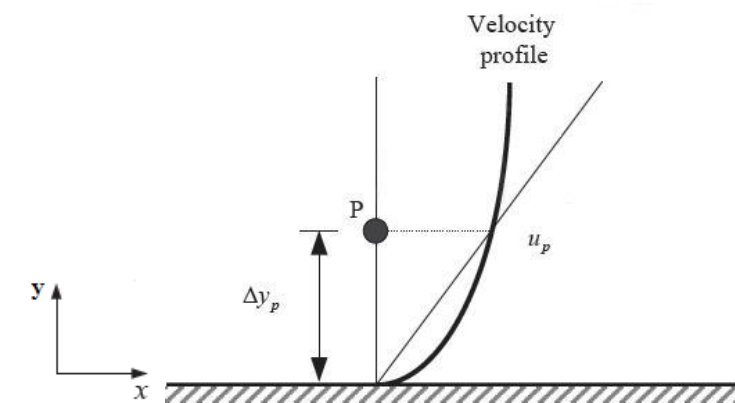
จากรูปแบบของความเร็วในภาพที่ 2.12 ถ้าให้ค่า u_p คือค่าความเร็วที่ Node ซึ่งเป็นการประมาณค่าที่พิจารณาบริเวณใกล้พื้นผิวและการเปลี่ยนแปลงความเร็วเป็นความสัมพันธ์เชิงเส้นตรงเมื่อเทียบกับระยะทาง สามารถคำนวณแรงเฉือนได้ดังสมการ (2.26)

$$\begin{aligned} F_S &= -\tau_w A_{cell} \\ &= -\mu \frac{u_p}{\Delta y_p} A_{cell} \end{aligned} \quad (2.26)$$

โดย A_{cell} คือพื้นที่ผนังของพื้นที่ควบคุม

เมื่อใส่พจน์ของแรงเฉือนนี้เข้าไปในพจน์เพิ่มเติมของ u จะสามารถเขียนพจน์เพิ่มเติมได้เป็น

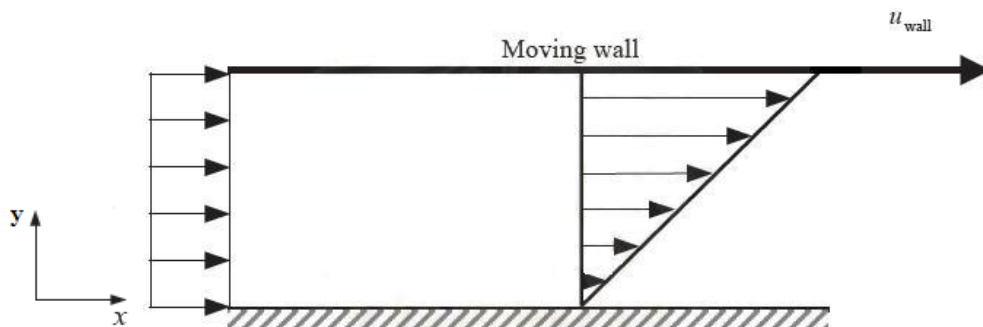
$$S_p = -\frac{\mu}{\Delta y_p} A_{cell} \quad (2.27)$$



ภาพที่ 2.12 การกระจายตัวของความเร็วที่ผนัง (Patankar, 1980)

เงื่อนไขขอบสำหรับผนังที่มีการเคลื่อนที่ เป็นการแก้ปัญหาที่สมมติให้ผนังมีการเคลื่อนที่ (Moving walls) โดยที่มีการเคลื่อนที่ไปในทิศทางตามแนวแกน x (ภาพที่ 2.13) ทำให้ของไหลมีการเคลื่อนที่เนื่องจากความเค้นเฉือนที่เกิดขึ้นบริเวณผนัง ซึ่งแรงเฉือนที่เกิดขึ้นมาจากความแตกต่างระหว่างความเร็วที่ Node ในแนวแกน y ก่อนถึงผนังกับความเร็วของผนังเคลื่อนที่ ดังสมการ (2.28)

$$F_s = -\mu \frac{(u_p - u_{wall})}{\Delta y_p} A_{cell} \quad (2.28)$$

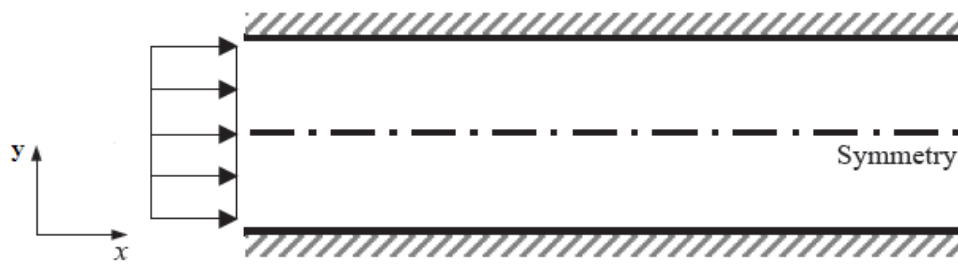


ภาพที่ 2.13 ลักษณะของผนังเคลื่อนที่ (Patankar, 1980)

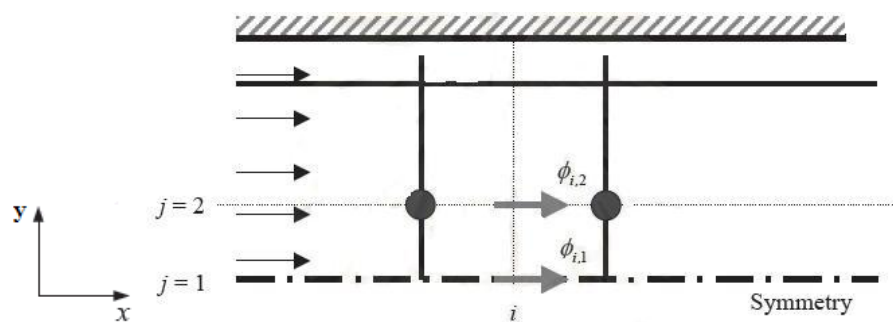
2.5.4.2 เงื่อนไขขอบแบบสมมาตร (Symmetric boundary condition)

ในปัญหาที่มีลักษณะรูปร่างเป็นแบบสมมาตร การคำนวณโดยใช้ขอบเขตของปัญหาทั้งหมดมาคำนวณจะทำให้สิ้นเปลืองหน่วยความจำของคอมพิวเตอร์โดยไม่จำเป็น เพื่อลดการใช้เนื้อที่ในหน่วยความจำของคอมพิวเตอร์และเพิ่มประสิทธิภาพการคำนวณ การกำหนดเงื่อนไขแบบสมมาตรจะช่วยให้การคำนวณมีความรวดเร็วยิ่งขึ้น ซึ่งการกำหนดขอบเขตในลักษณะสมมาตรนี้สามารถทำได้โดยตั้งเงื่อนไขว่าไม่มีการไหลและฟลักซ์ผ่านขอบเขต นั่นคือกำหนดค่าให้ความเร็วในแนวตั้งฉากกับขอบเขตที่สมมาตรให้มีค่าเป็นศูนย์และค่าของตัวแปรที่ขอบผนังมีค่าเท่ากับตัวแปรนั้นบน Cell ถัดขึ้นมาจากผนัง ($\phi_{i,1} = \phi_{i,2}$) ดังแสดงในภาพที่ 2.14

ผลเฉลยที่ได้จากการตั้งเงื่อนไขสมมาตรจะมีค่าเท่ากับผลเฉลยที่ได้จากการคำนวณจากขอบเขตทั้งหมด นอกจากนี้การใช้เงื่อนไขแบบสมมาตรสามารถเพิ่มความละเอียดในการคำนวณให้เพิ่มมากขึ้น



(ก)



(ข)

ภาพที่ 2.14 ก) ช่องการไหลที่สมมาตร ข) โดเมนของช่องการไหลที่ใช้เงื่อนไขสมมาตรแล้ว
(Patankar, 1980)

2.6 เอกสารและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

Real และคณะ (2007) ได้สร้างแบบจำลองเชิงพลวัตของเซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็มขึ้นมาจากการใช้โปรแกรม Matlab/Simulink โดยเน้นไปที่การควบคุมและหาภาวะการทำงานที่เหมาะสม และสามารถนำไปใช้ในการออกแบบระบบของเซลล์เชื้อเพลิง ซึ่งแบบจำลองที่ได้สามารถช่วยอธิบายพลวัตของของไหลในบริเวณที่มีการไหลของแก๊สและชั้นของการแพร่ แสดงพลวัตของอุณหภูมิและผลกระทบจากอุณหภูมิ อีกทั้งยังให้อัลกอริทึมใหม่สำหรับคำนวณค่าโพลาริเซชันจากการทดลอง แบบจำลองที่ได้ยังสามารถทำนายได้ทั้งสภาวะคงตัวและที่สภาวะขณะเปลี่ยนแปลงอีกครั้งยังให้ค่าที่เท่ากับค่าที่ได้จากการวัด

Jeon และคณะ (2008) ได้สร้างแบบจำลองของเซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็มขึ้นมาเพื่อศึกษาผลกระทบจากความชื้นที่มาจากแก๊สขาเข้าต่อการสูญเสียศักย์ไฟฟ้า การกระจายตัวของความหนาแน่นกระแสและปริมาณน้ำภายในเมมเบรน โดยสร้างแบบจำลองที่มีช่องการไหลแบบ serpentine ขึ้นมา 4 รูปแบบ คือ single channel, double channel, cyclic-single channel และ symmetric-single channel เมื่อพิจารณาที่แก๊สขาเข้าความชื้นต่ำ พบว่า ค่าการสูญเสียจาก

ความต้านทานมีค่าเพิ่มขึ้น เนื่องจากเมมเบรนมีปริมาณน้ำอยู่น้อย แต่เมื่อความชื้นต่ำจะทำให้การสูญเสียความต่างศักย์ลดลง เมื่อพิจารณาที่ความชื้นสูง พื้นที่การไหลแบบ double channel มีสมรรถนะมากที่สุด แต่ที่แก๊สเข้าความชื้นต่ำสมรรถนะไม่ต่างกันมากนัก

Jiao และ Zhou (2008) ทำการทดลองเกี่ยวกับการไหลของน้ำและอากาศผ่านชั้นการแพร่แก๊ส (GDL) ที่ถูกดัดแปลงกับชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาและช่องการไหลแบบ serpentine ที่ขั้วแคโทดในเซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็มโดยใช้ชุดการคำนวณพลศาสตร์ของไหล (CFD) ของโปรแกรม FLUENT เพื่อศึกษาผลกระทบจากความสามารถในการกักน้ำของขั้วแคโทดซึ่งก็คือความชอบและไม่ชอบน้ำ ที่มีผลกระทบต่อรูปแบบการไหลของน้ำอย่างมีนัยสำคัญ ซึ่งมีความสอดคล้องกับสมรรถนะของเซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็ม จากการทดลองพบว่าชั้นการกระจายตัวของแก๊สแบบที่ชอบน้ำ จะทำให้มีน้ำติดอยู่ภายในมากจึงเกิดน้ำท่วมภายในเซลล์ได้ง่าย และถ้าใช้เฉพาะการกระจายตัวของแก๊สแบบที่ไม่ชอบน้ำ จะทำให้น้ำถูกถ่ายเทออกไปสู่ชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาได้ ซึ่งชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาจึงเป็นแบบไม่ชอบน้ำ ฉะนั้นจากการทดลองที่ได้ ชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาต้องมีความไม่ชอบน้ำมากกว่าหรือเท่ากับ การกระจายตัวของแก๊ส

Jung และคณะ (2008) ได้สร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์แบบสถานะคงตัวและอุณหภูมิคงที่ของเซลล์เชื้อเพลิงแบบตัวนำโพลีเมอร์ (PEFC) ซึ่งเป็นการถ่ายโอนเชื้อเพลิงแบบ 2 สถานะ โดยใช้เทคนิคการคำนวณของไหลแบบพลวัต (CFD) แบบจำลองที่ได้มุ่งเน้นศึกษาการถ่ายโอนและการเกิดปฏิกิริยาเคมีที่เกิดขึ้นภายในเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอนและชั้นตัวเร่งปฏิกิริยา จากผลการจำลองที่ได้แสดงให้เห็นว่า ความหนาของเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอนเป็นตัวแปรที่สำคัญมากสำหรับการถ่ายโอนน้ำระหว่างขั้วแอโนดและแคโทด ซึ่งมีผลต่อสมรรถนะของเซลล์เชื้อเพลิงเป็นอย่างมาก อีกทั้งการถ่ายโอนน้ำผ่านเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอนยังส่งผลกระทบต่อปริมาณการกระจายตัวของน้ำและความหนาแน่นกระแส

Kuo และคณะ (2008) ศึกษาเกี่ยวกับการเพิ่มสมรรถนะของการพาความร้อนและลักษณะการไหลของแก๊สตามลักษณะการออกแบบช่องการไหลในรูปแบบ 2 มิติ เพื่อแสดงว่าการเพิ่มการขีดขวางภายในช่องการไหลของแก๊สจะช่วยลดขนาดของมุมตัดระหว่างทิศทางของความเร็วกับการกระจายตัวของอุณหภูมิ ผลที่ได้คือ ช่องการไหลที่มีสิ่งกีดขวางภายในสามารถเพิ่มการกระจายตัวของอุณหภูมิ อีกทั้งยังสามารถเพิ่มสมรรถนะการแพร่ของแก๊สไปสู่ชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาอีกด้วย

Le และ Zhou (2008) ได้สร้างแบบจำลองเชิงพลวัตสามมิติของเซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็มขึ้นมาโดยช่องการไหลเป็นแบบ serpentine แบบจำลองที่สร้างขึ้นเน้นหนักเพื่อศึกษาผลกระทบ

จากน้ำในสถานะของเหลวที่มีผลกระทบต่อสมรรถนะของเซลล์เชื้อเพลิงฟิวเอ็ลล์จากผลที่ได้จากแบบจำลองพบว่าน้ำส่วนใหญ่จะรวมตัวอยู่บริเวณจุดหักเลี้ยวในช่องการไหลของแก๊สซึ่งไปขัดขวางการไหลของแก๊สทำให้เกิดการสูญเสียจากความเข้มข้นภายในท่อ ทำให้สารตั้งต้นกระจายภายในเซลล์ได้ลดลง ซึ่งเป็นผลทำให้ความหนาแน่นกระแสลดลง

Qu และคณะ (2008) ศึกษาผลกระทบของการเปลี่ยนแปลงองค์ประกอบของอากาศที่มีต่อสมรรถนะของเซลล์เชื้อเพลิงฟิวเอ็ลล์ ทั้งยังรวมถึงอัตราการป้อนและรูปแบบการไหล โดยใช้แบบจำลองเชิงพลวัต 2 มิติ พบว่า เมื่อมีการดึงกระแสมากขึ้น ปริมาณของออกซิเจนบริเวณพื้นที่เกิดปฏิกิริยาในช่องการไหลของแก๊สจะลดลงอย่างมาก ซึ่งสามารถแก้ไขได้โดยการเปลี่ยนแปลงอัตราส่วนของอากาศที่ป้อนเข้า อีกทั้งยังเทียบผลที่ได้จากการจำลองกับผลที่ได้จากการทดลองพบว่ามีความใกล้เคียงกันและสามารถใช้ทดแทนกันได้

Baschuk และ Li (2009) ได้สร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของเซลล์เชื้อเพลิงฟิวเอ็ลล์ขึ้นมา โดยแบบจำลองที่ได้เป็นแบบอนุกรมที่มีสถานะคงตัวและเป็น 2 มิติ น้ำในระบบอยู่ในสถานะแก๊สและอยู่ภายในรูพรุนของตัวนำพอลิเมอร์ การถ่ายโอนน้ำและไอออนใช้สมการของ Stefan-Maxwell ในการอธิบาย สำหรับการแก้สมการควบคุมเลือกใช้ทฤษฎีไฟไนต์โวลุ่มกับรหัสคอมพิวเตอร์ที่พัฒนาขึ้นเอง แบบจำลองที่ได้นำมาอธิบายปรากฏการณ์ 3 ชนิดที่เกิดขึ้นภายในเซลล์เชื้อเพลิงฟิวเอ็ลล์คือ การไหลของแก๊สในช่องการไหล การไหลของแก๊สในตัวรองรับขั้วไฟฟ้า และการไหลของแก๊สในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยา ซึ่งการถ่ายโอนมวลของไฮโดรเจนจากขั้วแอโนดไปแคโทด ช่วยป้องกันการไหลของออกซิเจนไม่ให้ไปสู่ขั้วแคโทด อีกทั้งยังพบว่าความยาวของช่องการไหลมีผลต่อการสร้างกระแสของเซลล์เชื้อเพลิงฟิวเอ็ลล์ โดยช่องการไหลที่ยาวกว่าจะให้สมรรถนะต่ำกว่าช่องการไหลที่สั้นกว่า ซึ่งเป็นผลมาจากช่องการไหลที่ยาวกว่าสามารถเก็บน้ำไว้ได้มากกว่าส่งผลให้เกิดการอุดตันง่ายกว่า

Boddu และคณะ (2009) ได้สร้างแบบจำลองการคำนวณเชิงพลวัตของไบโพลาร์เพลทกับช่องการไหลแบบ serpentine หลายรูปแบบ โดยศึกษาเกี่ยวกับลักษณะการไหล รวมทั้งการผันแปรของความดันในช่องการไหลผ่านไบโพลาร์เพลท เปรียบเทียบความดันลดในแต่ละลักษณะช่องการไหล จากการทดลองที่ได้แสดงว่าจำนวนที่มากขึ้นและขนาดที่เล็กของช่องการไหล ทำให้การสัมผัสกันระหว่างพื้นผิวของไบโพลาร์เพลทดียิ่งขึ้นรวมทั้งความดันลดที่ได้ยังมีค่าน้อยลงอีกด้วย ทั้งนี้ความสัมพันธ์ของค่าสัมประสิทธิ์ต่างๆ ของพื้นที่ขาเข้า ยังมีประโยชน์ต่อแบบจำลองของเซลล์เชื้อเพลิงฟิวเอ็ลล์ ในการประเมินผลกระทบจากการออกแบบไบโพลาร์เพลทที่มีต่อการถ่ายโอนมวล กระแสทั้งหมด และความหนาแน่นของกำลังไฟฟ้าของเซลล์เชื้อเพลิง

Yu และคณะ (2009) ได้สร้างแบบจำลองสามมิติของ เซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็มที่มีพื้นที่การไหลเป็นแบบ interdigitated และเป็นกรไหลแบบ แก๊ส-ของเหลว ซึ่งแบบจำลองที่ได้ถูกนำไปใช้จำลองในแบบหลายมิติ การไหลหลายสถานะและการถ่ายโอนมวลสารทั้งทางชั่วแอโนดและชั่วแคโทดของเซลล์เชื้อเพลิง และจำลองสมรรถนะของเซลล์กับตัวแปรที่เกี่ยวข้องกับการดำเนินงาน การจำลองเน้นหนักที่การทำความเข้าใจทางกายภาพของเซลล์ซึ่งประกอบด้วย การกระจายตัวของความเร็ว ความเข้มข้นของออกซิเจน ความเข้มข้นของไอน้ำ ความเข้มข้นของน้ำสถานะของเหลวปริมาณน้ำที่อยู่ในเมมเบรน จำนวนฟลักซ์ของน้ำต่อฟลักซ์ของโปรตอนทั้งหมด ความหนาแน่นกระแสและการสูญเสียความต่างศักย์ เมื่อเปรียบเทียบค่าที่ได้จากการทำนายกับค่าที่ได้จากการทดลองพบว่ามีความใกล้เคียงกัน

บทที่ 3

แบบจำลองคณิตศาสตร์และวิธีการสร้างแบบจำลองการไหล

3.1 แบบจำลองการไหล

แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่ใช้สำหรับการจำลองกระบวนการเซลล์เชื้อเพลิงแบบฟิวเซลล์ ซึ่งเซลล์เชื้อเพลิงประกอบด้วย 4 ส่วนหลักๆ คือช่องการไหลของแก๊ส ชั้นการแพร่ของแก๊ส ชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยา และชั้นเมมเบรน โดยสมการที่ใช้ในแบบจำลอง คือสมการการถ่ายโอนมวล (Mass transfer equation) และการถ่ายโอนโมเมนตัม (Momentum transfer equation) เพื่อใช้อธิบายปรากฏการณ์การถ่ายโอนของสสารภายในขอบเขตของแบบจำลอง ในงานวิจัยนี้ใช้โปรแกรม ANSYS FLUENT 12.1 เพื่อออกแบบและจำลองปรากฏการณ์โดยใช้การคำนวณเชิงพลวัตของการไหล สำหรับการถ่ายโอนพลังงาน (Energy transfer equation) ไม่ได้นำมาพิจารณาในการพัฒนาแบบจำลองครั้งนี้ เนื่องจากตั้งสมมุติฐานว่าเป็นระบบอุณหภูมิคงที่ (isothermal) ในส่วนสุดท้ายคือ สมการการเกิดปฏิกิริยาเคมีไฟฟ้า (Electrochemical reaction equation) ซึ่งใช้อธิบายปรากฏการณ์ และปฏิกิริยาเคมีไฟฟ้าที่เกิดขึ้นภายในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาของเซลล์เชื้อเพลิง เพียงแต่มีการดัดแปลงรูปแบบการใช้สมการเล็กน้อยเพื่อให้ง่ายต่อการนำไปใช้ในแบบจำลอง

3.1.1 สมมุติฐานสำหรับการพัฒนาแบบจำลองกระบวนการเซลล์เชื้อเพลิงแบบฟิวเซลล์

การศึกษานี้พัฒนาแบบจำลองสามมิติ หนึ่งภูมิภาค ของเซลล์เชื้อเพลิงฟิวเซลล์โดยฝั่งขั้วแอโนดและขั้วแคโทดถูกพัฒนาขึ้นแบบแยกจากกันโดยใช้โปรแกรมสำเร็จรูป ANSYS FLUENT 12.1 เพื่อศึกษาถึงอิทธิพลของความเร็วของแก๊สขาเข้า ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอน และรูปแบบของช่องการไหลที่มีต่อสมรรถนะของเซลล์เชื้อเพลิงและการกระจายตัวของสสารภายในระบบที่ฝั่งขั้วแอโนดและฝั่งขั้วแคโทดโดยมีสมมุติฐานในการสร้างแบบจำลองคือ

- แบบจำลองสามมิติ
- เซลล์เชื้อเพลิงทำงานที่สภาวะพลวัต
- เซลล์เชื้อเพลิงมีอุณหภูมิคงที่เท่ากับ 60 องศาเซลเซียสและมีค่าเท่ากันทุกจุด
- น้ำที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยามีลักษณะเป็นละอองน้ำเล็กๆ (แบบจำลองหนึ่งภูมิภาค)
- แก๊สทุกชนิดในระบบประพฤติตัวเป็นแก๊สอุดมคติแบบอัดไม่ได้
- การไหลของแก๊สทุกชนิดภายในระบบเป็นการไหลแบบราบเรียบ
- ผิวของช่องการไหลของแก๊ส มีลักษณะเป็นผิวเรียบ

- ขั้วอิเล็กโทรดแบบมีรูพรุนมีสมบัติทางกายภาพที่สม่ำเสมอทั่วทั้งแผ่น
- ค่าศักย์ไฟฟ้าและการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าภายในระบบทั้งหมดไม่ต้องพิจารณา

3.1.2 สมการอนุรักษ์พื้นฐาน (Fluent, Inc, 2003; Barbir, 2005)

3.1.2.1 สมการอนุรักษ์มวล

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = S_m \quad (3.1)$$

เมื่อ	ρ	คือค่าความหนาแน่นของของไหล (กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร, kg/m ³)
	v	คือความเร็วของของไหลในทิศทางตามแกน (เมตรต่อวินาที, m/s)
	S_m	คือพจน์เพิ่มเติมกรณีที่มีการถ่ายโอนมวลสารระหว่างวัฏภาค (กิโลกรัมต่อวินาที, kg/s)

สมการที่ 3.1 สามารถใช้ได้ทั้งในกรณีของไหลอัดได้ และของไหลอัดไม่ได้ พจน์เพิ่มเติมนี้สามารถเขียนเพิ่มเติมและเรียกใช้ได้เมื่อระบบมีการถ่ายโอนมวลสารระหว่างวัฏภาค โดยพจน์เพิ่มเติมจะมีค่าเป็นบวกเมื่อมีการถ่ายโอนมวลสารเข้าสู่วัฏภาคที่กำลังทำการพิจารณา สำหรับในงานวิจัยนี้ไม่มีการเรียกใช้พจน์เพิ่มเติมเนื่องจากเป็นการพิจารณาระบบหนึ่งวัฏภาคจึงไม่มีการถ่ายโอนมวลสารระหว่างวัฏภาค และละเลยพจน์การสะสมมวลเนื่องจากพิจารณาที่สภาวะคงตัว

3.1.2.2 สมการอนุรักษ์โมเมนตัม

การอนุรักษ์โมเมนตัมสำหรับของไหลในระบบสามมิติสามารถอธิบายได้ดังสมการ

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\vec{\tau}) + \rho \vec{g} + \vec{F} + S_{mo} \quad (3.2)$$

เมื่อ	p	คือความดัน (พาสคัล, Pa)
	τ	คือความเค้นเทนเซอร์ (stress tensor) (พาสคัล, Pa)
	\vec{g}	คือค่าความเร่งเนื่องจากแรงโน้มถ่วงของโลก (เมตรต่อวินาทีกำลังสอง, m/s ²)

- \vec{F} คือแรงภายนอกที่กระทำต่อของไหล หรือพจน์เพิ่มเติมอื่นๆ เช่น กรณีตัวกลางที่มีรูพรุน (นิวตัน, N)
- S_{mo} คือพจน์เพิ่มเติมกรณีมีการถ่ายโอนโมเมนตัม (นิวตันต่อลูกบาศก์เมตร, N/m^3)

ค่าความเค้นสามารถคำนวณได้จากสมการดังต่อไปนี้

$$\vec{\tau} = \mu \left[(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} I \right] \quad (3.3)$$

- เมื่อ μ คือความหนืดของของไหล (กิโลกรัมต่อเมตรวินาที, $kg/m \cdot s$)
- I คือเมตริกซ์หน่วย (unit tensor)

พจน์ที่สองทางด้านขวามือของสมการที่ (3.3) เป็นนิทธิพลของการเปลี่ยนแปลงปริมาตรของวัสดุภาคที่สอง สำหรับสมการอนุรักษ์โมเมนตัมในชั้นที่มีรูพรุนนั้นสามารถพิจารณาได้โดยการเพิ่มพจน์เพิ่มเติมเข้าไปในสมการที่ (3.2) ซึ่งพจน์เพิ่มเติมนี้คือ

$$S_{mo} = - \left(\frac{\mu}{\alpha} v_i + C_2 \frac{1}{2} \rho |v| v_i \right) \quad (3.4)$$

- เมื่อ α คือค่าการซึมผ่านของของไหลในตัวกลางที่มีรูพรุน (ตารางเมตร, m^2)
- C_2 คือตัวประกอบความต้านทานความเฉื่อย (ต่อเมตร, $1/m$)
- v คือความเร็วของของไหลภายในตัวกลางที่มีรูพรุน (เมตรต่อวินาที, m/s)

พจน์เพิ่มเติมนี้เป็นการอธิบายการเกิดความดันลดของของไหลที่ไหลภายในตัวกลางที่มีรูพรุน สำหรับกรณีที่พิจารณาเฉพาะการไหลแบบราบเรียบภายในตัวกลางที่มีรูพรุนเท่านั้น ค่าคงที่ C_2 ในสมการจะมีค่าเท่ากับศูนย์ เมื่อจัดรูปสมการแล้วความดันลดที่เกิดขึ้นภายในตัวกลางที่มีรูพรุนจะมีค่าแปรผันตรงกับความเร็วของของไหลที่อยู่ภายในรูพรุนของตัวกลาง ทำให้ปรากฏการณ์การถ่ายโอนโมเมนตัมของของไหลที่อยู่ภายในรูพรุนของตัวกลางเป็นไปตามกฎของดาร์ซี (Darcy's law) ดังสมการ (3.5)

$$\nabla p = -\frac{\mu}{\alpha} \vec{v} \quad (3.5)$$

3.1.2.3 สมการอนุรักษ์องค์ประกอบ

แบบจำลองที่ทำการแก้สมการอนุรักษ์องค์ประกอบนี้จะถูกคำนวณดังสมการที่ (3.6)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_i) = -\nabla \cdot \vec{J}_i + R_i + S_i \quad (3.6)$$

เมื่อ	Y_i	คือสัดส่วนโดยมวลขององค์ประกอบ (ไม่มีหน่วย)
	\vec{J}_i	คือฟลักซ์การแพร่ขององค์ประกอบ (กิโลกรัมต่อตารางเมตรวินาที, $\text{kg/m}^2 \cdot \text{s}$)
	R_i	คืออัตราการเกิดปฏิกิริยา (กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตรวินาที, $\text{kg/m}^3 \cdot \text{s}$)
	S_i	คือพจน์เพิ่มเติมขององค์ประกอบ (กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตรวินาที, $\text{kg/m}^3 \cdot \text{s}$)

พจน์ฟลักซ์การแพร่ในสมการที่ (3.6) เป็นอิทธิพลมาจากความแตกต่างระหว่างความเข้มข้นขององค์ประกอบ ณ จุดสองจุดในระบบซึ่งอธิบายได้ดังสมการ

$$\vec{J}_i = -\rho D_i \nabla Y_i \quad (3.7)$$

เมื่อ D_i คือสัมประสิทธิ์การแพร่ขององค์ประกอบในของผสม

โดยปกติแล้วในการสร้างแบบจำลองของเซลล์เชื้อเพลิงจะมีสมการอนุรักษ์อีกชุดที่นำมาใช้ในแบบจำลองเพื่อใช้อธิบายปรากฏการณ์ทางเคมีไฟฟ้าคือสมการอนุรักษ์ประจุ โดยจะประกอบด้วยสมการอนุรักษ์อิเล็กตรอนและสมการอนุรักษ์โปรตอน ซึ่งแสดงดังสมการ (3.8) และสมการ (3.9) (ANSYS, Inc, 2009)

สมการอนุรักษ์อิเล็กตรอน

$$\nabla \cdot (\sigma_{ele} \nabla \phi_{ele}) + S_{ele} = 0 \quad (3.8)$$

สมการอนุรักษ์โปรตอน

$$\nabla \cdot (\sigma_{pro} \nabla \phi_{pro}) + S_{pro} = 0 \quad (3.9)$$

เมื่อ	σ	คือค่าการนำไฟฟ้า (ต่อโอห์มเมตร, 1/ohm·m)
	ϕ	คือค่าศักย์ไฟฟ้า (โวลต์, volts)
	S_{ele}	คือการถ่ายโอนกระแสต่อปริมาตรของอิเล็กตรอน (แอมแปร์ต่อลูกบาศก์เมตร, A/m ³)
	S_{pro}	คือการถ่ายโอนกระแสต่อปริมาตรของโปรตอน (แอมแปร์ต่อลูกบาศก์เมตร, A/m ³)

จากสมการที่ (3.9) ค่าการนำโปรตอนจะขึ้นอยู่กับปริมาณน้ำที่มีอยู่ในเมมเบรนซึ่งสามารถคำนวณได้ดังสมการ (3.10)

$$\sigma_{pro} = (0.514\lambda - 0.326) \exp \left[1268 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (3.10)$$

เมื่อ λ คือสัดส่วนปริมาณน้ำในเมมเบรน (ไม่มีหน่วย)

พจน์ของ S ในสมการ (3.8) และ สมการ (3.9) คือกระแสไฟฟ้าที่เกิดขึ้นภายในระบบซึ่งสามารถอธิบายได้จากสมการของ Butler-Volmer จะได้

ฝั่งแอโนด

$$S_{ele} = -Ai_0 \frac{[C]}{[C_{ref}]} \exp \left(\frac{\alpha_{an} \eta_{an} F}{RT} \right) \quad (3.11)$$

$$S_{pro} = Ai_0 \frac{[C]}{[C_{ref}]} \exp \left(\frac{\alpha_{an} \eta_{an} F}{RT} \right) \quad (3.12)$$

ฝั่งแคโทด

$$S_{ele} = Ai_0 \frac{[C]}{[C_{ref}]} \exp\left(\frac{\alpha_{cat}\eta_{cat}F}{RT}\right) \quad (3.13)$$

$$S_{pro} = -Ai_0 \frac{[C]}{[C_{ref}]} \exp\left(\frac{\alpha_{cat}\eta_{cat}F}{RT}\right) \quad (3.14)$$

เมื่อ	A	คือค่า Specific Active Surface Area (ต่อเมตร, 1/m)
	i_0	คือค่า Exchange Current Density (แอมแปร์ต่อตารางเมตร, A/m ²)
	$[C_{ref}]$	คือค่าความเข้มข้นมาตรฐานของแก๊สที่ความดัน 1 บรรยากาศ (กิโลโมลต่อลูกบาศก์เมตร, kmol/m ³)
	$[C]$	คือค่าความเข้มข้นของสารตั้งต้นในสถานะแก๊สที่บริเวณผิวหน้าของตัวเร่งปฏิกิริยา ณ เวลาใดๆ (กิโลโมลต่อลูกบาศก์เมตร, kmol/m ³)
	α	คือค่า Charge Transfer Coefficient มีค่าระหว่าง 0 ถึง 1 (ไม่มีหน่วย)
	η	คือค่าโวลตาไรเซชันของปฏิกิริยาเคมี (โวลต์, V)
	F	คือค่าคงที่ของฟาราเดย์, 9.65×10^7 (คูลอมบ์ต่อกิโลโมล, C/kmol)
	R	คือค่าคงที่ของแก๊ส, 8.314×10^3 (จูลต่อกิโลโมลเคลวิน, J/kmol·K)
	T	คืออุณหภูมิของระบบ (เคลวิน, K)
	an	คือตัวห้อยแสดงค่าตัวแปรฝั่งแอโนด
	cat	คือตัวห้อยแสดงค่าตัวแปรฝั่งแคโทด

เนื่องจากการนำสมการอนุพันธ์ประจุมมาใช้ในรูปแบบจำลองภายใต้โปรแกรม ANSYS FLUENT V.12.1 มีความซับซ้อน เพื่อลดความซับซ้อนของงานวิจัยนี้ลงในงานวิจัยนี้จึงได้กำหนดให้สมการอนุพันธ์ประจุมเป็นส่วนหนึ่งของสมการอนุพันธ์องค์ประกอบ โดยจากพจน์ที่สองของสมการ (3.8) และ สมการ (3.9) คือค่าความหนาแน่นกระแสจะมีค่าเทียบเท่ากับพจน์ R_i ของสมการอนุพันธ์องค์ประกอบ (3.6) ซึ่งก็คืออัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีไฟฟ้าตามสมการอาร์เรเนียส โดยที่ค่าคงที่เฉพาะของอัตราการเกิดปฏิกิริยาแสดงดังสมการ (3.15) และอัตราการเกิดปฏิกิริยา(kmol/m³-s) ดังสมการ (3.16)

$$k_r = A_r \exp(-E_a / RT) \quad (3.15)$$

$$rate = k_r [C] \quad (3.16)$$

เมื่อ	A_r	คือค่า Pre-exponential Factor สำหรับปฏิกิริยา
	E_a	คือค่าพลังงานกระตุ้นสำหรับปฏิกิริยา (J/kmol)
	$[C]$	คือค่าความเข้มข้นของสารตั้งต้นในสถานะแก๊สที่บริเวณผิวหน้าของตัวเร่งปฏิกิริยา ณ เวลาใดๆ (กิโลโมลต่อลูกบาศก์เมตร, kmol/m ³)

ซึ่งการจะแปลงค่าความหนาแน่นกระแสให้กลายเป็นอัตราการเกิดปฏิกิริยา (kg/m³-s) เพื่อใช้ในสมการอนุรักษ์ประจุสามารถทำได้โดยใช้กฎของฟาราเดย์ (Faraday's law) จากทฤษฎีทางเคมีไฟฟ้าดังสมการที่ (3.17) และ (3.18)

สำหรับสมการอนุรักษ์องค์ประกอบของอิเล็กตรอน

$$R_i = k_r [C] \times MW = S_{ele} \times \frac{MW}{nF} \quad (3.17)$$

สำหรับสมการอนุรักษ์องค์ประกอบของโปรตอน

$$R_i = k_r [C] \times MW = S_{pro} \times \frac{MW}{nF} \quad (3.18)$$

เมื่อ	MW	คือน้ำหนักโมเลกุลของสารแต่ละชนิด
	n	คือจำนวนโมลของอิเล็กตรอนที่ได้ต่อโมลของสารที่เข้าทำปฏิกิริยา ซึ่งมีค่าเท่ากับ 2 ในกรณีของไฮโดรเจน มีค่าเป็น 4 ในกรณีออกซิเจนและน้ำ
	$[C]$	คือค่าความเข้มข้นของสารตั้งต้นในสถานะแก๊สที่บริเวณผิวหน้าของตัวเร่งปฏิกิริยา ณ เวลาใดๆ (กิโลโมลต่อลูกบาศก์เมตร, kmol/m ³)
	S_{ele}	คือการถ่ายโอนกระแสต่อปริมาตรของอิเล็กตรอน (แอมแปร์ต่อลูกบาศก์เมตร, A/m ³)
	S_{pro}	คือการถ่ายโอนกระแสต่อปริมาตรของโปรตอน (แอมแปร์ต่อลูกบาศก์เมตร, A/m ³)

เช่นเดียวกันสำหรับพจน์แรกของสมการ (3.8) และ สมการ (3.9) ที่เป็นผลของการนำทางไฟฟ้าซึ่งเมื่อเทียบกับสมการอนุพันธ์ของคัพระกอบ (3.6) จะค่าเทียบเท่ากับพจน์ฟลักซ์การแพร่ ซึ่งเราสามารถแปลงรูปการนำทางไฟฟ้าให้เทียบเท่ากับพจน์ฟลักซ์การแพร่โดยการคูณพจน์แรกของสมการ (3.8) และ สมการ (3.9) ด้วยน้ำหนักโมเลกุล (Molecular weight) ของสารนั้นๆ แล้วหารด้วยค่าฟาราเดย์ (F) จะสามารถแปลงรูปการนำทางไฟฟ้าให้อยู่ในรูปของฟลักซ์การแพร่ได้

จากสมมติฐานในการสร้างแบบจำลองและการใช้สมการในแบบจำลองที่กล่าวมาทำให้แบบจำลองมีข้อจำกัดบางประการที่ไม่สามารถอธิบายได้จากแบบจำลองที่สร้างขึ้นมาคือ

1. แบบจำลองไม่สามารถให้ผลการจำลองในส่วนจอตศักย์ไฟฟ้าได้ เนื่องจากการสร้างแบบจำลองได้เลือกใช้สมการอนุพันธ์ของคัพระกอบแทนสมการอนุพันธ์ประจุ ทำให้อิเล็กทรอนิกส์และโปรตอนในระบบเสมือนเป็นสารอนุภาคหนึ่ง ไม่มีค่าทางประจุหรือทางไฟฟ้าทำให้ไม่สามารถอธิบายผลการทดลองทางศักย์ไฟฟ้าได้
2. แบบจำลองเป็นแบบวิทยาศาสตร์เดียวทำให้น้ำภายในระบบอยู่ในวิทยาศาสตร์ของแก๊สเท่านั้น ทำให้ไม่สามารถจำลองการเกิดน้ำท่วมขังภายในเซลล์เชื้อเพลิงได้
3. แบบจำลองแยกการจำลองของขั้วแอโนดและแคโทดออกจากกัน ทำให้ไม่สามารถจำลองการถ่ายโอนมวลสารระหว่างขั้วแอโนดและแคโทดได้อย่างถูกต้องมากนัก เนื่องจากการทดลองจริงน้ำที่เกิดขึ้นบางส่วนสามารถแพร่จากขั้วแคโทดไปสู่ขั้วแอโนดได้ ซึ่งทำให้ประสิทธิภาพการเกิดปฏิกิริยามทางขั้วแอโนดลดลง

3.2 การสร้างแบบจำลองการไหลโดยโปรแกรม DesignModeler และการจำลองโดยใช้โปรแกรม ANSYS FLUENT V.12.1

การจำลองการไหลในงานวิจัยนี้เป็น การจำลองภาวะการไหลภายในเซลล์เชื้อเพลิงพีซีเอ็ม ที่มีขนาดเท่ากับเซลล์ในห้องปฏิบัติการจริง ซึ่งเป็นงานวิจัยของ สุดารัตน์ สายยืนยงค์ (2552) โดยใช้โปรแกรม DesignModeler ทำการสร้างแบบจำลองเชิงเรขาคณิตซึ่งเป็นการสร้างแบบจำลองเชิงโครงสร้างสามมิติ เพื่อเป็นตัวแทนเซลล์เชื้อเพลิงตามรูปทรงจริงทางเรขาคณิต โปรแกรม DesignModeler โดยโปรแกรม DesignModeler มีหน้าที่และลักษณะการทำงานคล้ายกับโปรแกรม Computer Aided Design (CAD) ทั่วไปโดยใช้สำหรับวาดโครงสร้างของอุปกรณ์ที่ต้องการศึกษา เมื่อวาดโครงสร้างของแบบจำลองเสร็จแล้วจะนำโครงสร้างที่ได้ไปแบ่งออกเป็นหน่วยปริมาตรขนาดเล็ก (mesh) ที่เชื่อมต่อกันเพื่อใช้สำหรับการคำนวณ จากนั้นจึงนำโครงสร้างแบบจำลองที่ถูกแบ่งแล้วส่งเข้าไปคำนวณในโปรแกรม ANSYS FLUENT V.12.1 เพื่อทำการ

คำนวณโดยใช้ระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มในการจำลองสภาวะการณ ซึ่งผู้ใช้สามารถกำหนดภาวะขอบต่างๆ เพื่อเป็นค่าเริ่มต้นสำหรับการคำนวณและแก้ปัญหาเพื่อให้ได้ผลเฉลยต่อไป ขั้นตอนในการสร้างแบบจำลองการไหลและการวิเคราะห์ผลที่ได้จากแบบจำลอง สามารถสรุปได้เป็น 3 ขั้นตอนคือ

1. การสร้างแบบจำลองเชิงเรขาคณิตที่กำหนดพื้นที่และขอบเขตการไหลด้วยโปรแกรม DesignModeler ซึ่งเป็นโปรแกรมที่ใช้ในการสร้างแบบจำลองเชิงเรขาคณิต (Pre-processing)

2. การนำโครงสร้างแบบจำลองที่สร้างจากโปรแกรม DesignModeler ไปทำการคำนวณโดยใช้โปรแกรม ANSYS FLUENT 12.1 (Solver Execution)

3. นำผลที่ได้จากการคำนวณแบบจำลองการไหลไปวิเคราะห์ (Post-processing)

ในส่วนของการใช้งานโปรแกรม DesignModeler จะมีขั้นตอน 3 ขั้นตอนดังนี้

1. การวาดโครงสร้างแบบจำลอง (Geometry)

2. กำหนดชนิดของขอบเขตของแบบจำลอง (Boundary types)

3. การแบ่งพื้นที่การคำนวณ (Meshing)

ในส่วนของโปรแกรม ANSYS FLUENT V.12.1 นั้นแบ่งได้เป็น 6 ขั้นตอนดังนี้

1. เลือกรูปแบบสมการการคำนวณสำหรับแบบจำลอง (Models)

2. เลือกสารที่ใช้ในแบบจำลอง (Materials) และการเกิดปฏิกิริยาเคมี (Transport and Reaction)

3. กำหนดสมบัติทางกายภาพของแต่ละพื้นที่การคำนวณ เงื่อนไขสำหรับขอบเขตที่จะใช้กับแบบจำลอง (Boundary conditions)

4. กำหนดค่าเริ่มต้นก่อนการจำลอง (Initialize values)

5. กำหนดจำนวนรอบสำหรับการคำนวณซ้ำ (Iterations)

3.2.1 การสร้างแบบจำลองการไหลด้วยโปรแกรม DesignModeler และรายละเอียดของโครงสร้างแบบจำลอง

ขั้นตอนในการการสร้างแบบจำลองเชิงเรขาคณิตด้วยโปรแกรม DesignModeler เพื่อใช้เป็นตัวแทนของเซลล์เชื้อเพลิงฟิวเอ็ลในการทำการจำลองการไหล มีดังต่อไปนี้

3.2.1.1 การวาดโครงสร้างแบบจำลองด้วยโปรแกรม DesignModeler

สำหรับในกรณีศึกษาพื้นฐานนี้เป็นการจำลองกระบวนการเซลล์เชื้อเพลิงฟิวเซลล์ ในงานวิจัยนี้จะทำการสร้างแบบจำลองในลักษณะสามมิติ ภายในขอบเขตแบบจำลองที่ศึกษาเพื่อเลียนแบบเซลล์เชื้อเพลิงขนาด 5 ตารางเซนติเมตรที่มีอยู่ในห้องทดลอง ซึ่งแบบจำลองที่ศึกษามีลักษณะเป็นเซลล์เชื้อเพลิงที่ประกอบด้วยช่องการไหลแบบคดเคี้ยว (Serpentine) และแบบขนาน (Parallel) ชั้นการกระจายตัวของแก๊ส (Gas Diffusion Layer, GDL) ชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยา (Catalyst Layer, CL) และชั้นของเมมเบรน (Membrane) โดยโครงสร้างสามมิติที่วาดขึ้นและขนาดของแบบจำลองแสดงดังภาพที่ 3.1 และตาราง 3.1 ตามลำดับ

ตารางที่ 3.1 ขนาดของแบบจำลองที่ใช้ในการคำนวณ

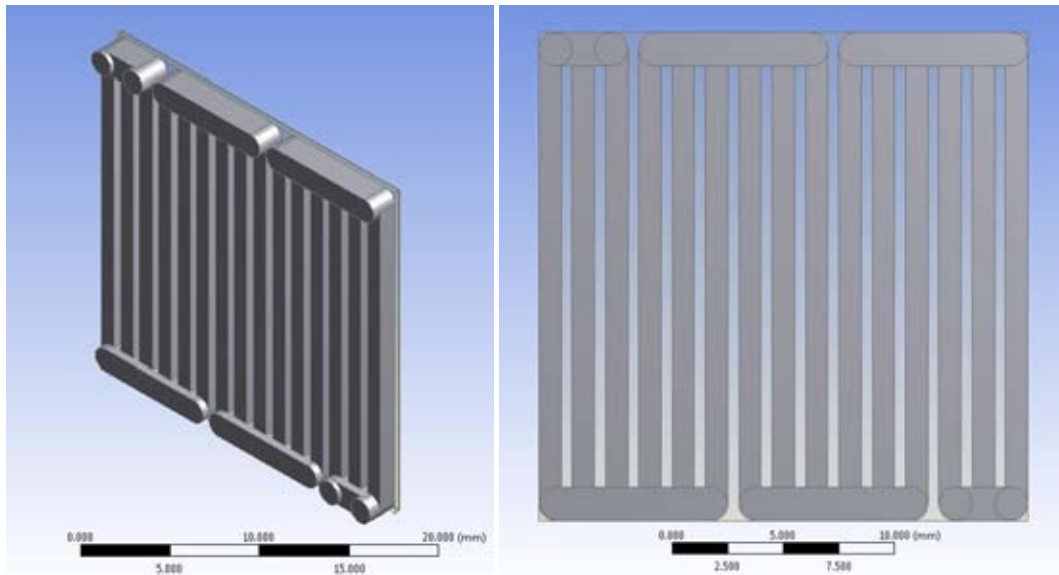
พื้นที่	แกน	ค่า	หน่วย
ขนาดพื้นที่หน้าตัด	กว้าง (x)	22	มิลลิเมตร
	ยาว (y)	22	มิลลิเมตร
ช่องการไหลของแก๊ส			
ท่อปกติ	กว้าง (x)	1	มิลลิเมตร
	ยาว (y)	19	มิลลิเมตร
	สูง (z)	1.2	มิลลิเมตร
ระยะห่างระหว่างท่อ	กว้าง	0.5	มิลลิเมตร
ท่อบริเวณจุดหักเลี้ยว	กว้าง (x)	8.5	มิลลิเมตร
	ยาว (y)	1.5	มิลลิเมตร
	สูง (z)	1.7	มิลลิเมตร
ท่อบริเวณช่องแก๊สขาเข้าและขาออก	กว้าง (x)	4	มิลลิเมตร
	ยาว (y)	1.5	มิลลิเมตร
	สูง (z)	1.7	มิลลิเมตร
ช่องแก๊สขาเข้าและขาออก	พื้นที่	1.767	ตารางมิลลิเมตร
ชั้นการกระจายตัวของแก๊ส	สูง (z)	0.05	มิลลิเมตร
ชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยา	สูง (z)	0.3	มิลลิเมตร

ชั้นของเมมเบรน

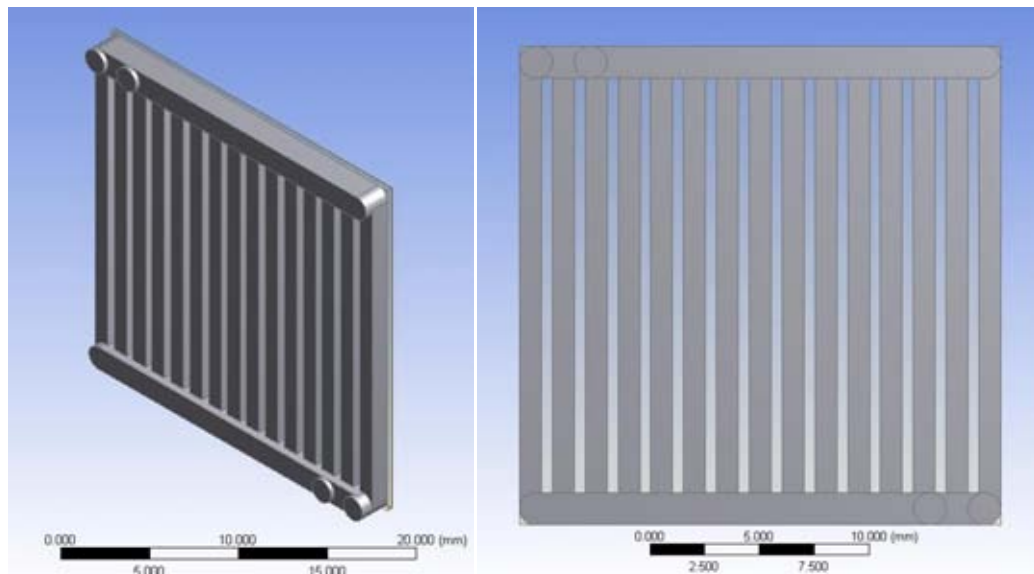
สูง (z)

0.01

มิลลิเมตร



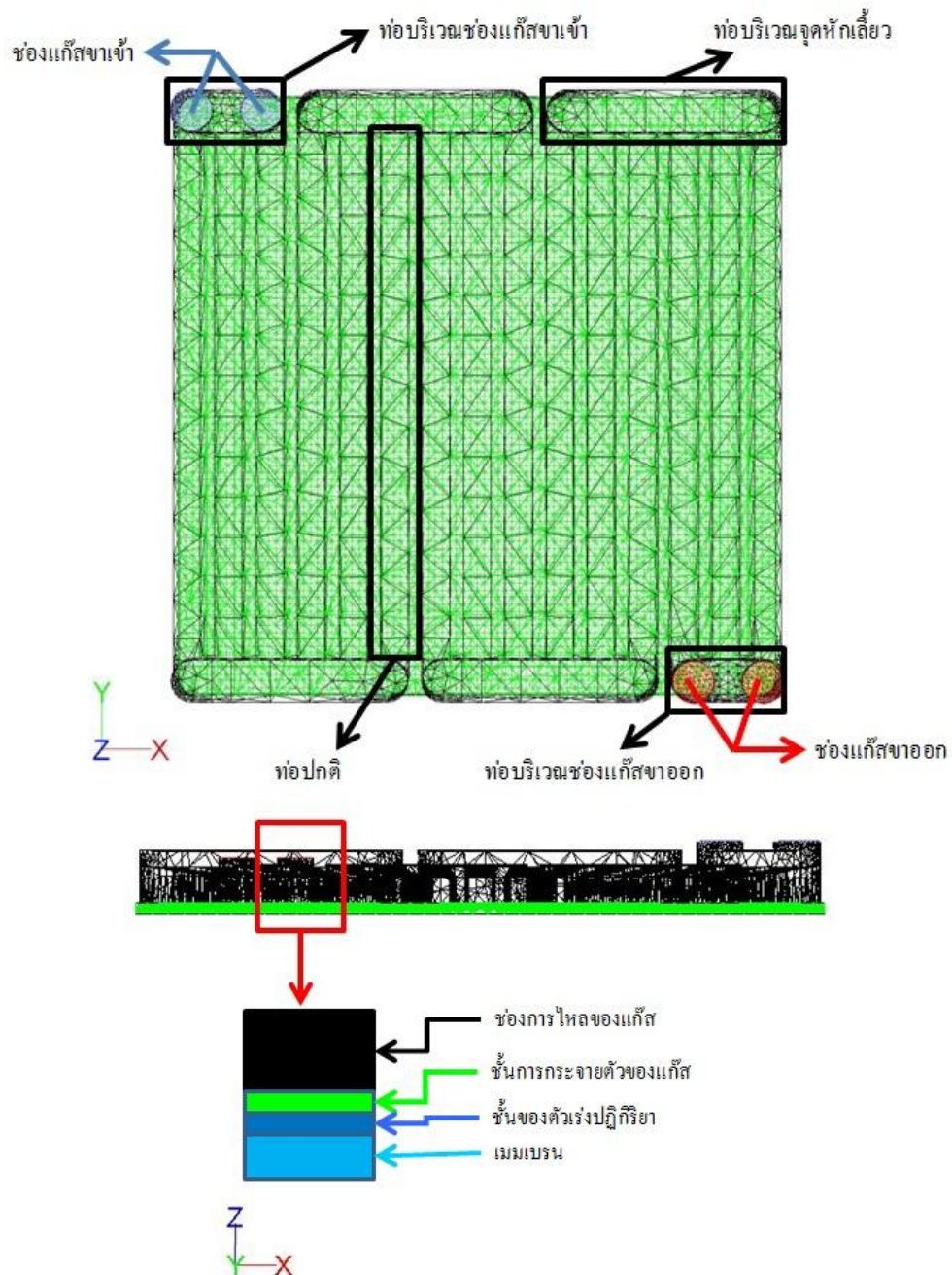
ภาพที่ 3.1 ภาพวาดโครงสร้างสามมิติของเซลล์เชื้อเพลิงฟิวเอมที่มีอยู่ในห้องทดลอง



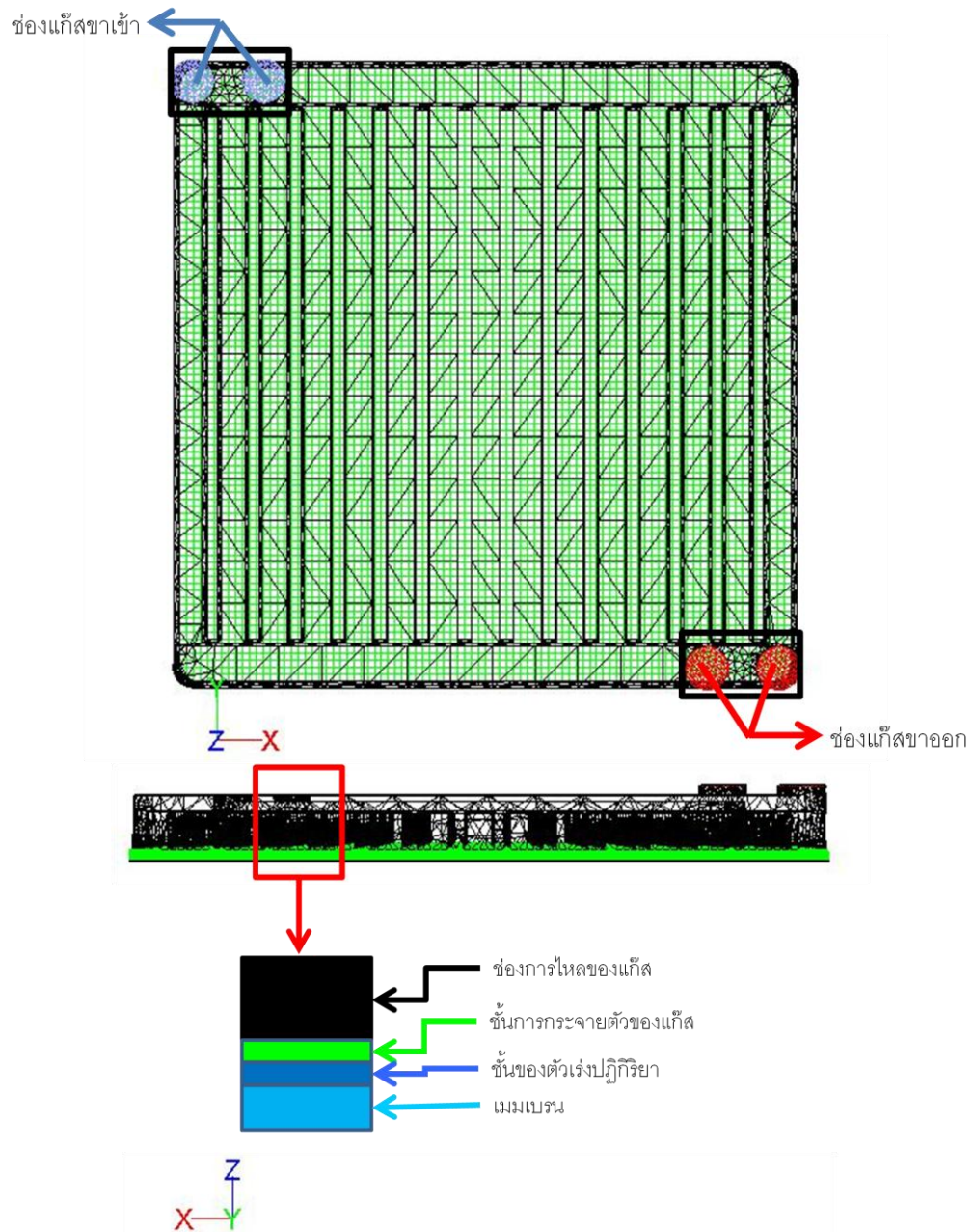
ภาพที่ 3.2 ภาพวาดโครงสร้างสามมิติของเซลล์เชื้อเพลิงฟิวเอมแบบท่อขนาน (parallel)

นำแบบจำลองเชิงเรขาคณิตที่สร้างขึ้นมาทำการแบ่งช่องการคำนวณ (Mesh) โดยใช้รูปแบบสี่เหลี่ยมเป็นตัวแทนปริมาตรเล็กๆ ของระบบ จำนวนเซลล์ทั้งหมดในขอบเขตการไหลที่ทำการศึกษาที่มีช่องการไหลแบบคดเคี้ยวเท่ากับ 137,686 เซลล์ และแบบขนานเท่ากับ 154,765 เซลล์ ซึ่งความละเอียดของการแบ่งพื้นที่การคำนวณจะเน้นที่บริเวณช่องแก๊สขาเข้าและช่องแก๊ส

ขาออก อีกทั้งยังเน้นความละเอียดในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาที่เป็นบริเวณเกิดปฏิกิริยาของเซลล์เชื้อเพลิงอีกด้วย โดยโครงสร้างของแบบจำลองที่ทำการแบ่งพื้นที่การคำนวณแล้วแสดงดังภาพที่ 3.2 (ANSYS FLUENT 12.0 Fuel Cells Module Manual, 2010)



ภาพที่ 3.3 ภาพวาดโครงสร้างสามมิติของเซลล์เชื้อเพลิงฟิวเอ็ลที่มีอยู่ในห้องทดลอง บนโปรแกรม ANSYS FLUENT V.12.1 ซึ่งแบ่งช่องการคำนวณออกเป็นช่องเล็กๆ



ภาพที่ 3.4 ภาพวาดโครงสร้างสามมิติของเซลล์เชื้อเพลิงฟิวเซลล์แบบท่อขนาน บนโปรแกรม ANSYS FLUENT V.12.1 ซึ่งแบ่งช่องการคำนวณออกเป็นช่องเล็กๆ

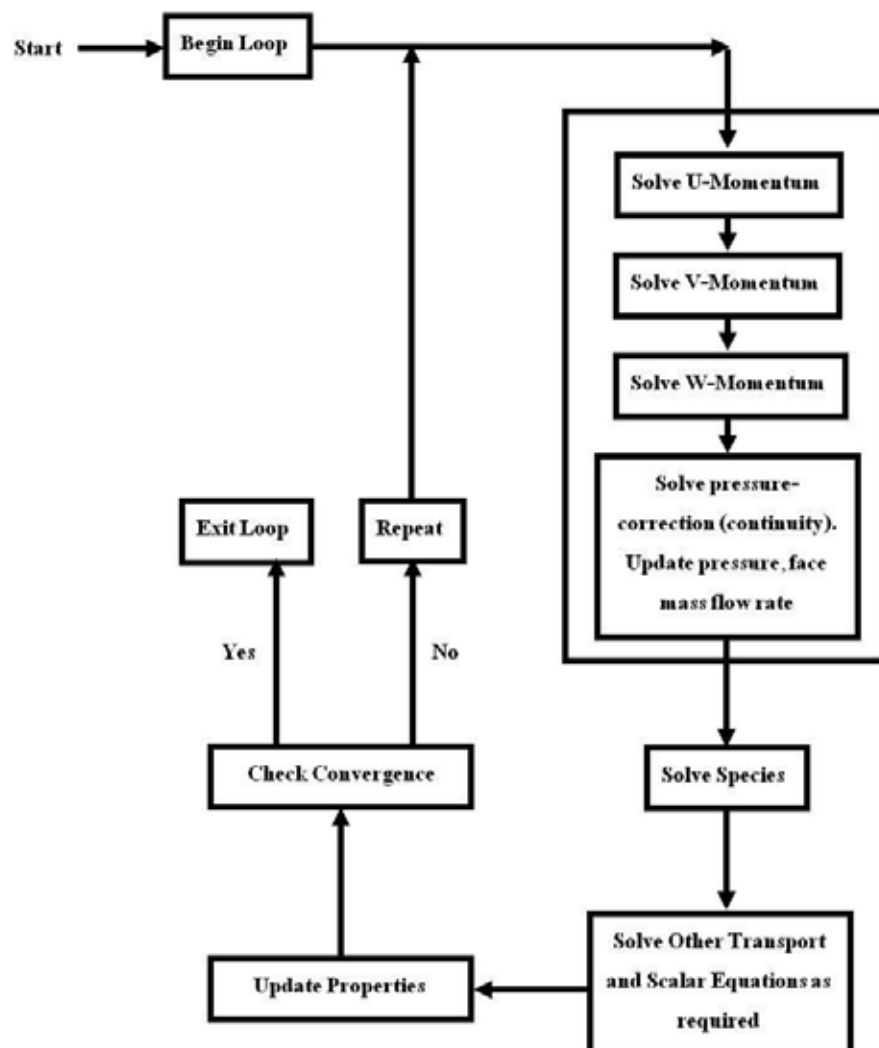
3.2.1.2 การจำลองภาวะโดยโปรแกรม ANSYS FLUENT V.12.1

การจำลองภาวะการไหลด้วยโปรแกรม ANSYS FLUENT V.12.1 เริ่มต้นด้วยการนำโครงสร้างของแบบจำลองที่กำหนดลักษณะและชนิดของภาวะขอบการไหลที่สร้างขึ้นจากโปรแกรม DesignModeler เข้าสู่โปรแกรม ANSYS FLUENT V.12.1 หลังจากนั้นทำการกำหนด

ลักษณะของการคำนวณ และทำการเลือกแบบจำลองการไหลที่จะใช้คำนวณในการจำลองภาวะ และทำการกำหนดสมภาวะขอบที่ต้องการ และค่าเริ่มต้นในการจำลองภาวะโดยมีขั้นตอนดังนี้

3.2.1.2.1 การกำหนดชนิดของเครื่องมือการแก้สมการ (Solver)

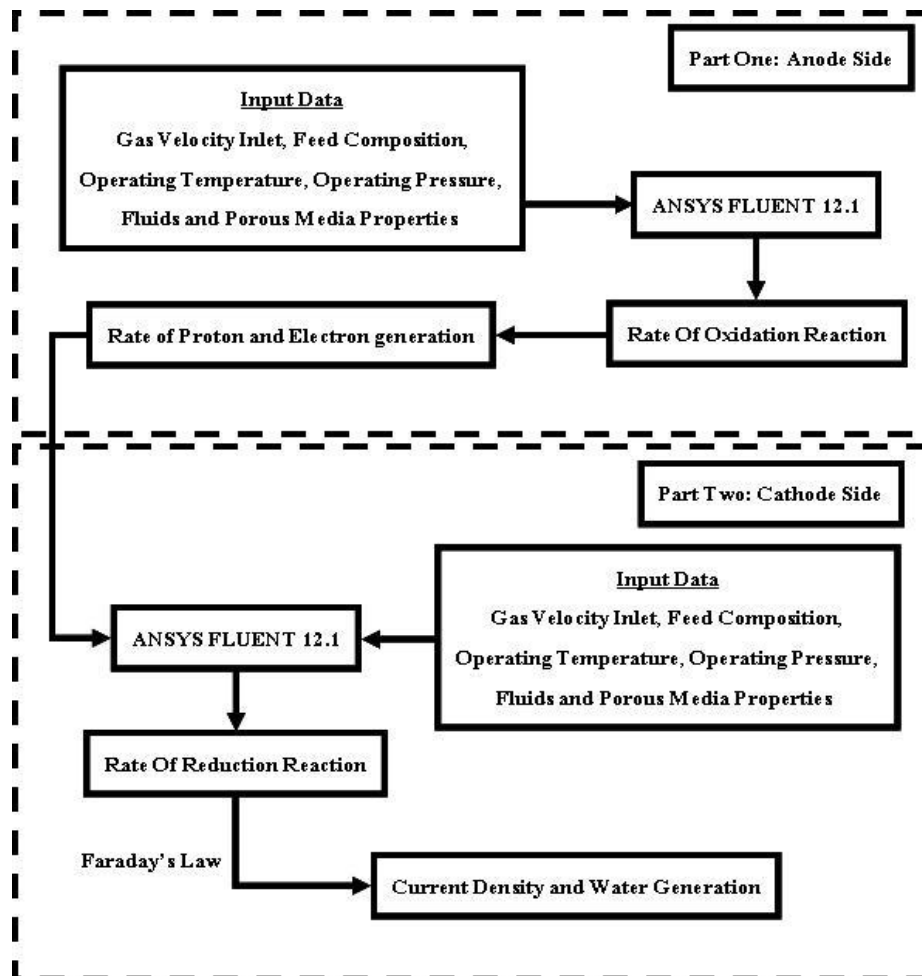
ในขั้นตอนแรกของการจำลองภาวะการไหลในเซลล์เชื้อเพลิงฟิวเอ็ลล์ ต้องทำการกำหนดเครื่องมือสำหรับใช้ในการแก้สมการ โดยสามารถเลือกจากเมนู Solver จากหน้าต่างของโปรแกรม ANSYS FLUENT V.12.1 โดยในการวิจัยครั้งนี้ได้เลือกใช้เครื่องมือสำหรับแก้สมการเป็นแบบ Segregated สำหรับการแก้สมการควบคุม (Governing Equation) โดยลำดับการแก้สมการในระบบกระบวนการแก้ปัญหาแบบ Segregated แสดงภาพที่ 3.3



ภาพที่ 3.5 แผนภาพกระบวนการแก้ปัญหาโดยรวมของวิธีแก้ปัญหาแบบ Segregated (FLUENT

จากภาพที่ 3.3 การคำนวณเพื่อแก้ปัญหาจะเริ่มที่โปรแกรมรับค่าคุณสมบัติต่างๆ สำหรับการคำนวณ ขั้นตอนนี้ถ้าหากเป็นการคำนวณครั้งแรกโปรแกรมจะรับค่าเริ่มต้นจากการกำหนดของผู้ใช้งานที่ป้อนให้กับโปรแกรม แต่ถ้าเป็นขั้นตอนที่อยู่ระหว่างการคำนวณโปรแกรมจะรับค่าจากผลที่ได้จากการคำนวณที่ขึ้นเวลาก่อนหน้า เมื่อโปรแกรมรับค่าเข้ามาแล้วจะนำค่าที่ได้รับมาแก้สมการโมเมนต์ก่อนเพื่อหาความเร็วตามแนวแกนทั้งสามแกน (U, V, W) จากนั้นจึงนำความเร็วที่ได้ไปตรวจสอบและปรับค่าความดัน (Pressure-correction) เมื่อโปรแกรมทำการปรับปรุงและแก้ไขค่าความดันจากความเร็วเสร็จแล้วโปรแกรมจะทำการปรับปรุงค่าคุณสมบัติอื่นๆ ที่ต้องใช้ในการคำนวณด้วยค่าความดันที่ได้จากการคำนวณใหม่และทำการแก้ปัญหสมการช่วงของการไหล และสมการสเกลาร์ (Scalar Equation) อื่นๆ จากนั้นในขั้นตอนสุดท้ายโปรแกรมจะตรวจสอบค่าต่างๆ ที่ได้จากการคำนวณว่าลู่เข้าสู่คำตอบหรือไม่โดยโปรแกรมจะตรวจสอบกับส่วนตกค้าง (Residual) ที่ได้จากการเทียบผลค่าเก่าและค่าใหม่ที่ได้จากการคำนวณ ถ้าผลลัพธ์การคำนวณที่ได้ในรอบนั้นยังไม่ลู่เข้าหรือส่วนตกค้างยังไม่ถึงค่าที่ต้องการ โปรแกรมจะทำการนำค่าที่ได้จากการคำนวณรอบล่าสุดกลับไปเป็นค่าเริ่มต้นในการคำนวณรอบต่อไปจนกว่าค่าที่ได้จะลู่เข้าสู่คำตอบหรือส่วนตกค้างถึงค่าที่ต้องการ หรือเท่ากับจำนวนรอบทำซ้ำสูงสุด (Max Iteration) ที่ผู้ใช้กำหนดไว้ โดยค่าที่ลู่เข้าแล้วจะถูกนำไปใช้สำหรับปรับปรุงค่าสมบัติต่างๆ เพื่อการคำนวณขั้นเวลาต่อไป

การจำลองสำหรับการทำวิจัยนี้แบ่งออกเป็นสองขั้นตอนคือ ขั้นตอนแรกจะจำลองเซลล์เชื้อเพลิงทางฝั่งแอโนดก่อน แล้วจึงนำค่าอัตราการเกิดปฏิกิริยาของไฮโดรเจนไดอิเล็กโตรอนและโปรตอนที่น่าไปใช้ในฝั่งแคโทดต่อไปดังภาพที่ 3.4 ภาวะการจำลองที่ใช้คือ อุณหภูมิของระบบคงที่ที่ 60 องศาเซลเซียสสารรีดิวซ์ที่ป้อนเข้าทางด้านขั้วแอโนดคือไฮโดรเจนแห้ง สารออกซิไดซ์ที่ป้อนเข้าทางด้านขั้วแคโทดคือออกซิเจนแห้ง และกำหนดให้ค่าความดันขาออกทางด้านขั้วแอโนดและแคโทดปล่อยออกที่ความดัน 1 บรรยากาศ ส่วนแก๊สขาเข้าใช้เป็นความเร็วขาเข้ามีค่าเท่ากับ 0.47 เมตรต่อวินาทีและปรับเปลี่ยนตามสภาวะที่ศึกษา สำหรับสาเหตุที่กำหนดค่าความเร็วขาเข้ามีค่าเท่ากับ 0.47 เมตรต่อวินาทีนั้น ก็เพื่อจะได้ทำการจำลองภาวะที่ใช้ในห้องทดลอง เพื่อนำผลที่ได้มาเปรียบเทียบกัน ส่วนการกำหนดค่าความชื้นเข้ามาในระบบนั้นในงานวิจัยนี้จะกำหนดให้ไม่มี ความชื้นขาเข้า แต่สามารถกำหนดค่าความชื้นขาเข้าได้โดยทั้งการกำหนดอัตราส่วนโดยมวลของไอน้ำที่เข้ามาในระบบได้โดยตรง



ภาพที่ 3.6 แผนผังการจำลองปรากฏการณ์เซลล์เชื้อเพลิงแบบพีอีเอ็มที่ฝั่งขั้วแอโนดและฝั่งขั้วแคโทด (กรกนก หงส์ทอง, 2547)

สำหรับค่าคงที่ที่สำคัญในการคำนวณแบบจำลองเซลล์เชื้อเพลิงกรณีศึกษาพื้นฐานได้สรุปค่าไว้ในตารางที่ 3.2 การคำนวณปรากฏการณ์การไหล เพื่อให้ได้อัตราการเกิดปฏิกิริยาของอิเล็กตรอนและโปรตอนจากฝั่งแอโนด เริ่มจากการกำหนดค่าปริมาณความหนาแน่นกระแสที่ต้องการ แล้วแปลงให้อยู่ในรูปของอัตราการเกิดปฏิกิริยาตามสมการอาร์เรเนียสแล้วนำอัตราการเกิดปฏิกิริยาที่ได้และค่าคงที่ตามตารางที่ 3.2 ป้อนให้กับโปรแกรม ANSYS FLUENT 12.1 ซึ่งผลลัพธ์ที่ได้จากโปรแกรม ANSYS FLUENT 12.1 คือค่า อัตราการเกิดปฏิกิริยาจริงๆ ของฝั่งแอโนด จากนั้นนำค่า อัตราการเกิดปฏิกิริยาของฝั่งแอโนดที่ได้ ไปใช้เป็นอัตราการเกิดของโปรตอนและอิเล็กตรอนสำหรับการจำลองทางฝั่งแคโทด ผลการจำลองจากโปรแกรมที่ได้คือน้ำที่เกิดจากปฏิกิริยาและอัตราการเกิดปฏิกิริยาทางฝั่งแคโทดซึ่งอัตราการเกิดปฏิกิริยาที่ได้สามารถนำไปคำนวณเป็นค่าความหนาแน่นกระแสได้โดยอาศัยกฎของฟาราเดย์ดังสมการที่ 3.11 ได้

ตารางที่ 3.2 ค่าคงที่ที่ใช้ในการคำนวณแบบจำลอง

ตัวแปร	ค่า	สัญลักษณ์	หน่วย	อ้างอิง
พลังงานกระตุ้นของปฏิกิริยาออกซิเดชัน	3.48×10^7	E_o	J/kmol	Korsgaard et al.2008
พลังงานกระตุ้นของปฏิกิริยารีดักชัน	7.65×10^7	E_r	J/kmol	Harvey et al. 2008
อุณหภูมิ	333	T	K	
ผนัง	No-slip	-	-	
ค่าการซึมผ่านได้ของชั้นการแพร่ของแก๊ส	1.76×10^{-10}	α	m^2	Li et al. 2011
ค่าการซึมผ่านได้ของชั้นตัวเร่งปฏิกิริยา	1.716×10^{-11}	α	m^2	Li et al. 2011
ค่าการซึมผ่านได้ของชั้นเมมเบรน	1.8×10^{-18}	α	m^2	Li et al. 2011
ค่าความพรุนของชั้นการแพร่ของแก๊ส	0.5	ϵ	-	Li et al. 2011
ค่าความพรุนของชั้นตัวเร่งปฏิกิริยา	0.4	ϵ	-	Li et al. 2011
ค่าความพรุนของชั้นเมมเบรน	0.28	ϵ	-	Li et al. 2011
ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของแก๊ส	2.88×10^{-5}	D_i	m^2/s	Constant Dilute Approximate

3.2.1.2.2 การกำหนดขั้นเวลาและการจำลองภาวะ

ผู้ใช้งานโปรแกรมจำเป็นจะต้องกำหนดค่าเริ่มต้น (Initialize) ก่อนที่จะให้โปรแกรมเริ่มทำการคำนวณ และต้องทำการกำหนดค่า Under-Relaxation ซึ่งเป็นตัวคูณสำหรับใช้ปรับค่าตัวแปรต่างๆ ในแต่ละรอบ โดยค่า Under-Relaxation ที่ใช้ในงานวิจัยนี้เท่ากับ 0.001 และเลือกใช้ขั้นเวลา (Time Step) สำหรับทำการจำลองเท่ากับ 0.001 วินาที โดยกำหนดให้คำนวณซ้ำ (Iteration) สูงสุดไม่เกิน 100 รอบต่อหนึ่งขั้นเวลา ดังนั้นการจำลองภาวะให้ได้เวลาจริงเท่ากับ 10 วินาที ต้องกำหนดให้โปรแกรมคำนวณเท่ากับ 10,000 ขั้นเวลา ในงานวิจัยนี้ใช้เครื่องคอมพิวเตอร์ที่มีหน่วยประมวลผลกลางรุ่น Intel® Core™ i7 มีสัญญาณนาฬิกา (clock speed) เท่ากับ 2.93 กิกะเฮิรตซ์ มีหน่วยความจำ (RAM) เท่ากับ 16 กิกะไบต์

บทที่ 4

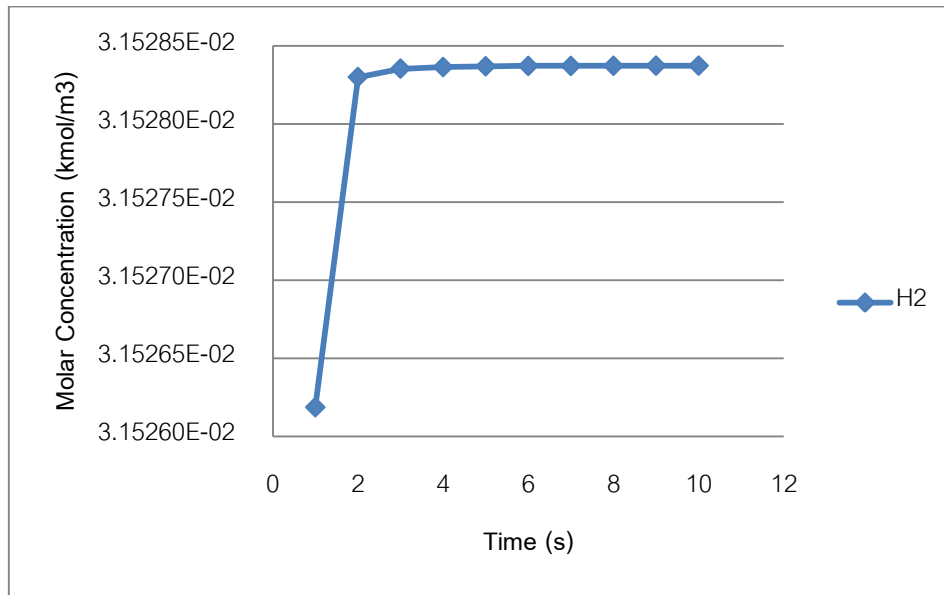
ผลงานวิจัยและการวิเคราะห์ผล

ผลจากการพัฒนาแบบจำลองการไหลวฏภาคเดียวของเซลล์เชื้อเพลิงแบบพีอีเอ็ม จากผลที่ได้พบว่าพบว่าแบบจำลองสามารถใช้ในการทำนายพฤติกรรมการไหลและอุทกพลศาสตร์ที่เกิดขึ้นภายในเซลล์เชื้อเพลิงได้ในระดับหนึ่ง ในส่วนของทฤษฎีการวิเคราะห์ผล แบ่งการพิจารณาเป็น 2 ส่วน คือ ผลจากความเร็วของแก๊สขาเข้าและผลจากการแพร่ของโปรตอนที่มีต่อพฤติกรรมการไหลและปฏิกิริยาภายในเซลล์เชื้อเพลิง ผลที่ได้จากการจำลองถูกนำไปตรวจสอบความถูกต้องโดยเปรียบเทียบกับผลการทดลองที่ได้มาจากห้องทดลองจริง โดยในงานวิจัยนี้จะทำการจำลองภาวะด้วยแบบจำลองที่พัฒนาขึ้นที่ภาวะเดียวกันกับการทดลองจริง เมื่อผลจากการจำลองภาวะในส่วนนี้มีความเหมาะสมแล้ว จึงนำแบบจำลองที่ได้ไปปรับเปลี่ยนค่าความเร็วของแก๊สขาเข้าและค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเพื่อทำนายผลต่อไป

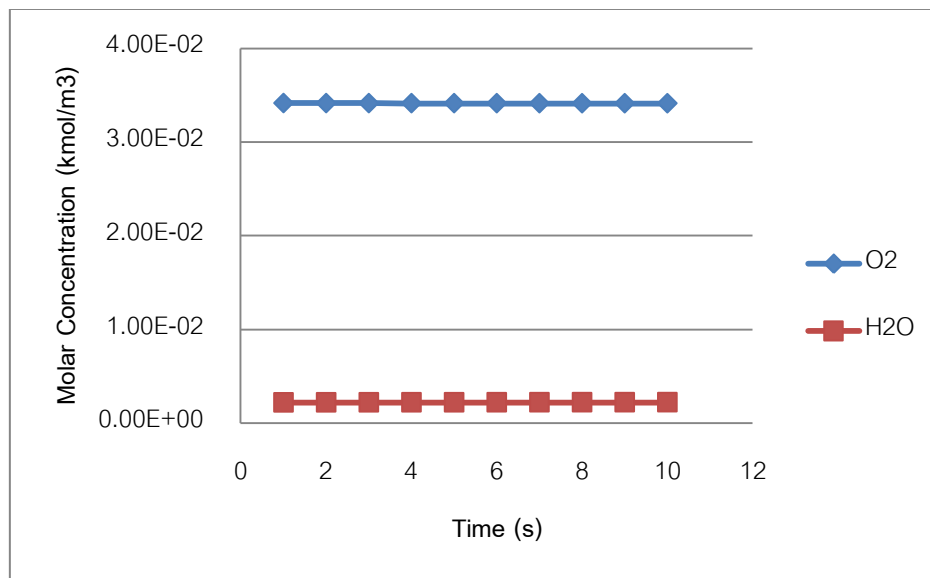
4.1 ตัวแปรทางการจำลองและการตรวจสอบความเหมาะสมของแบบจำลอง

ในส่วนนี้จะทำการจำลองภาวะของเซลล์เชื้อเพลิงแบบพีอีเอ็มโดยแบบจำลองการไหลเป็นแบบวฏภาคเดียว ใช้แบบจำลองการไหลแบบราบเรียบในการจำลองภาวะการไหล เพื่อเป็นการตรวจสอบศักยภาพและความเหมาะสมของแบบจำลองการไหลที่พัฒนาขึ้น ผลที่ได้จากการจำลองภาวะจะถูกนำไปเปรียบเทียบกับผลการทดลอง โดยจะทำการพิจารณาปริมาณความหนาแน่นกระแสที่ได้จากการจำลอง ซึ่งคิดได้จากอัตราการเกิดปฏิกิริยาในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดนั่นเอง

การเก็บค่าจากแบบจำลองนั้นจะเก็บค่าได้เมื่อแบบจำลองเข้าสู่ภาวะคงตัว (steady state) จากภาพที่ 4.1 แสดงค่าความเข้มข้นของไฮโดรเจน ออกซิเจน และน้ำที่ได้จากการจำลองภาวะที่บริเวณชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยา จะเห็นได้ว่าระบบจะเริ่มเข้าสู่ภาวะคงตัว หลังจากเวลา 5 วินาทีเป็นต้นไป ดังนั้นในการดำเนินงานวิจัยต่อไป ต้องนำผลการคำนวณที่ได้หลังจากเวลา 5 วินาทีมาทำการวิเคราะห์ ซึ่งในงานวิจัยนี้เลือกที่เวลา 10 วินาที



(ก)



(ข)

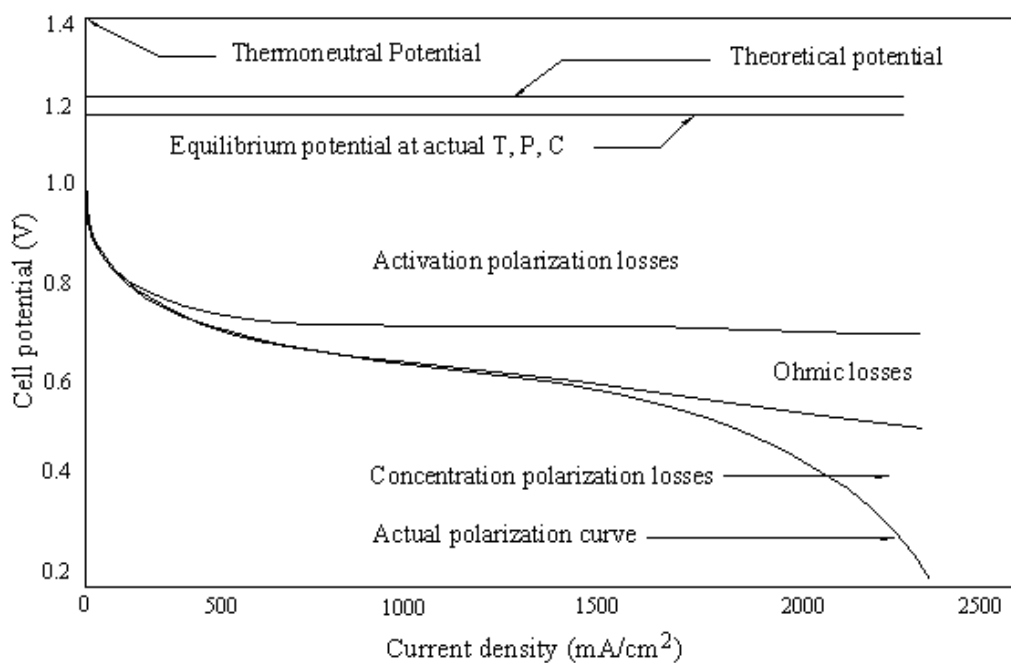
ภาพที่ 4.1 (ก) ความเข้มข้นของไฮโดรเจนฝั่งแอโนด (ข) ความเข้มข้นของออกซิเจน และน้ำฝั่งแคโทดในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาที่เวลาต่างๆ

4.2 การศึกษาอุทกพลศาสตร์และการเกิดปฏิกิริยาภายในเซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็ม

4.2.1 การศึกษาการเกิดปฏิกิริยาของเซลล์เชื้อเพลิงเทียบกับผลจากห้องปฏิบัติการ

ในการศึกษาอุทกพลศาสตร์และการเกิดปฏิกิริยาภายในเซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็ม อันดับแรกจะศึกษาอัตราการเกิดปฏิกิริยา โดยจะทำการเปรียบเทียบผลจากการจำลองกับผลการทดลอง

ในเซลล์เชื้อเพลิงนั้น สิ่งที่เป็นตัวบ่งบอกถึงปริมาณการเกิดปฏิกิริยาที่ได้ก็คือความหนาแน่นกระแส (Current Density) ที่ได้จากเซลล์เชื้อเพลิงนั่นเอง ซึ่งความหนาแน่นกระแสที่ได้จากเซลล์เชื้อเพลิงนั้นจะแสดงออกมาในรูปความสัมพันธ์ออกมาในรูปของกราฟโพลาริเซชัน (Polarization Curve) โดยกราฟเป็นการเขียนความสัมพันธ์ของความหนาแน่นกระแสและศักย์ไฟฟ้า (I-V) ดังภาพ 4.2 แต่เนื่องด้วยข้อจำกัดของโปรแกรม ANSYS FLUENT 12.1 ที่ใช้ไม่สามารถจำลองค่าศักย์ไฟฟ้าได้ จึงเลือกเพียงแค่ค่าความหนาแน่นกระแสในแต่ละจุดมาเปรียบเทียบเท่านั้น



ภาพที่ 4.2 กราฟโพลาริเซชันของเซลล์เชื้อเพลิงแบบพีอีเอ็ม (Case, 2011 : online)

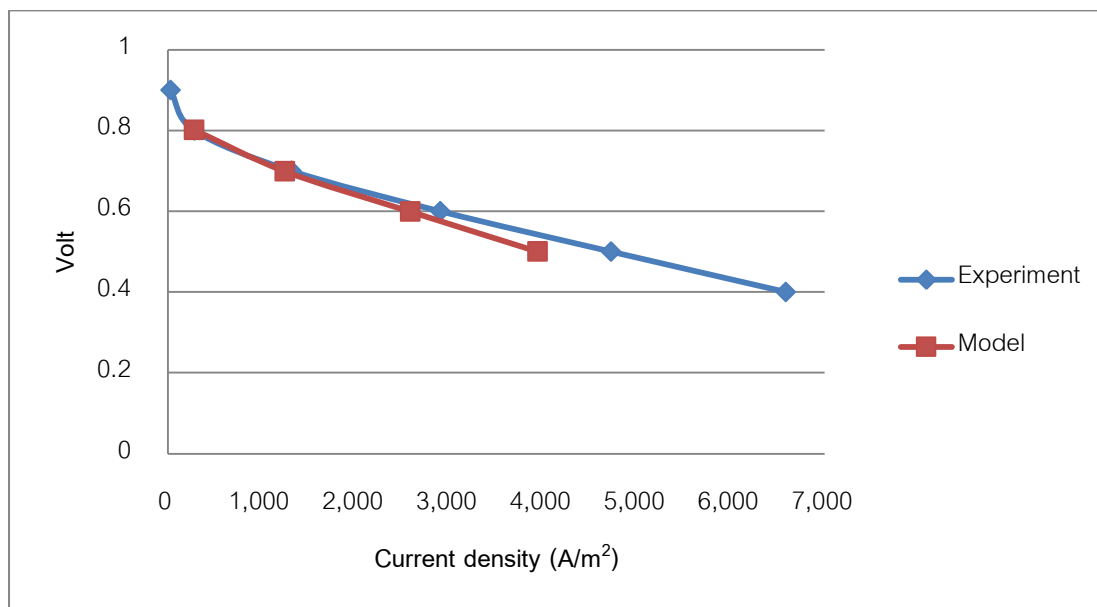
ในการจำลองเพื่อเทียบกับผลการทดลองในห้องปฏิบัติการนั้น งานวิจัยชิ้นนี้ได้เลือกจุดที่จะนำมาเปรียบเทียบกัน 4 จุด คือจุดที่มีค่าศักย์ไฟฟ้าเท่ากับ 0.8 V, 0.7 V, 0.6 V และ 0.5 V โดย

ที่ภาวะดำเนินการของเซลล์อยู่ที่อุณหภูมิ 60 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ ซึ่งแต่ละจุดที่เลือกมามีความหนาแน่นกระแสเท่ากับ 280 A/m^2 1314 A/m^2 2900 A/m^2 และ 4720 A/m^2 ตามลำดับ และค่าความเร็วแก๊สเข้าทั้งฝั่งแอโนดและแคโทดมีค่าเท่ากับ 0.47 m/s ค่าความหนาแน่นกระแสที่ได้มานี้ยังไม่สามารถใช้กับแบบจำลองได้ จำเป็นต้องมีการแปลงค่าโดยอาศัยกฎของฟาราเดย์ ทำให้สามารถแปลงค่าความหนาแน่นกระแสให้กลายเป็นอัตราการเกิดปฏิกิริยาตามสมการของอาร์เรเนียสได้ แต่ข้อควรระวังของการแปลงค่าคือจำนวนอิเล็กตรอนที่เกี่ยวข้องในการเกิดปฏิกิริยา เนื่องจากการเกิดปฏิกิริยาออกซิเดชันที่ฝั่งแอโนดมีอิเล็กตรอนในปฏิกิริยาเท่ากับ 2 ตัว และปฏิกิริยารีดักชันที่ฝั่งแคโทดมีอิเล็กตรอนในปฏิกิริยาเท่ากับ 4 ตัวแคโทด ทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาที่ฝั่งแอโนดและแคโทดมีค่าไม่เท่ากัน ซึ่งอัตราการเกิดปฏิกิริยาที่แปลงได้แล้วมีค่าดังตารางที่ 4.1

ตารางที่ 4.1 อัตราการเกิดปฏิกิริยาจากความหนาแน่นกระแสที่ศักย์ไฟฟ้าต่างๆ

ศักย์ไฟฟ้า (Volt)	ความหนาแน่นกระแส (A/m^2)	อัตราการเกิดปฏิกิริยาฝั่งแอโนด ($\text{kmol/m}^3\text{-s}$)	อัตราการเกิดปฏิกิริยาฝั่งแคโทด ($\text{kmol/m}^3\text{-s}$)
0.8	280	0.1451	0.0725
0.7	1314	0.6808	0.3404
0.6	2900	1.5026	0.7513
0.5	4720	2.4456	1.2230

เมื่อได้อัตราการเกิดปฏิกิริยาที่ต้องการแล้วจึงนำค่าอัตราการเกิดปฏิกิริยาที่ได้ไปใช้กับแบบจำลอง โดยที่จะเริ่มทำการจำลองทางฝั่งแอโนดก่อน แล้วจึงนำผลที่ได้จากการจำลองไปใช้ในการจำลองทางฝั่งแคโทด เมื่อได้ผลการจำลองทั้งสองฝั่งมาจึงนำไปเปรียบเทียบกับผลการทดลองที่ได้จากห้องปฏิบัติการ ผลการการเปรียบเทียบแสดงดังภาพ 4.3 จากการเปรียบเทียบที่ได้จะเห็นว่าแบบจำลองที่สร้างขึ้นสามารถทำนายผลได้ใกล้เคียงกับความเป็นจริง การจำลองเพื่อดูผลกระทบต่างๆที่จะศึกษาต่อไปจะใช้ค่าอัตราการเกิดปฏิกิริยาที่จุดค่าศักย์ไฟฟ้าเท่ากับ 0.7 โวลต์ เนื่องจากเป็นจุดที่แบบจำลองให้ค่าความหนาแน่นกระแสมีความผิดพลาดน้อย อีกทั้งกระแสและศักย์ไฟฟ้าที่ได้ยังมีค่ามากพอที่จะนำไปใช้งานด้วย



ภาพ 4.3 โพลาร์ไรเซชันเทียบผลระหว่างการทดลองจริงกับแบบจำลอง

ตารางที่ 4.2 เปอร์เซ็นต์ความคลาดเคลื่อนระหว่างค่าจากการทดลองกับค่าจากแบบจำลอง

ศักย์ไฟฟ้า (Volt)	ความหนาแน่นกระแส (A/m ²)		ความคลาดเคลื่อน (%)
	จากการทดลอง	จากแบบจำลอง	
0.8	280.00	276.51	1.25
0.7	1314.00	1242.98	5.40
0.6	2900.00	2579.92	11.04
0.5	4720.00	3936.89	16.59

4.2.2 การศึกษาอุทกพลศาสตร์และการเกิดปฏิกิริยาของเซลล์เชื้อเพลิงฝั่งแอโนด

หลังจากทำการศึกษาเพื่อเทียบผลของแบบจำลองกับเซลล์เชื้อเพลิงในห้องปฏิบัติการจริง จะทำการศึกษาพฤติกรรมมวลการไหลและปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นภายในเซลล์เชื้อเพลิงจากการปรับค่าตัวแปรที่ต้องการศึกษา ซึ่งในงานวิจัยนี้ต้องการศึกษาผลกระทบที่มาจากความเร็วของแก๊สขาเข้าที่มีผลต่อการกระจายตัวของแก๊สในระบบและการเกิดปฏิกิริยาภายในเซลล์เชื้อเพลิง และศึกษาความสัมพันธ์การแพร่ของโปรตอนที่มีผลต่อการกระจายตัวของโปรตอนภายในชั้นของเมมเบรน ในส่วนแรกของการศึกษาจะทำการจำลองเซลล์เชื้อเพลิงที่ฝั่งแอโนดก่อน ซึ่งแบบจำลองจะประกอบด้วยช่องการไหลของแก๊ส ชั้นการกระจายตัวของแก๊ส และชั้นของเมมเบรน โดยสาเหตุที่

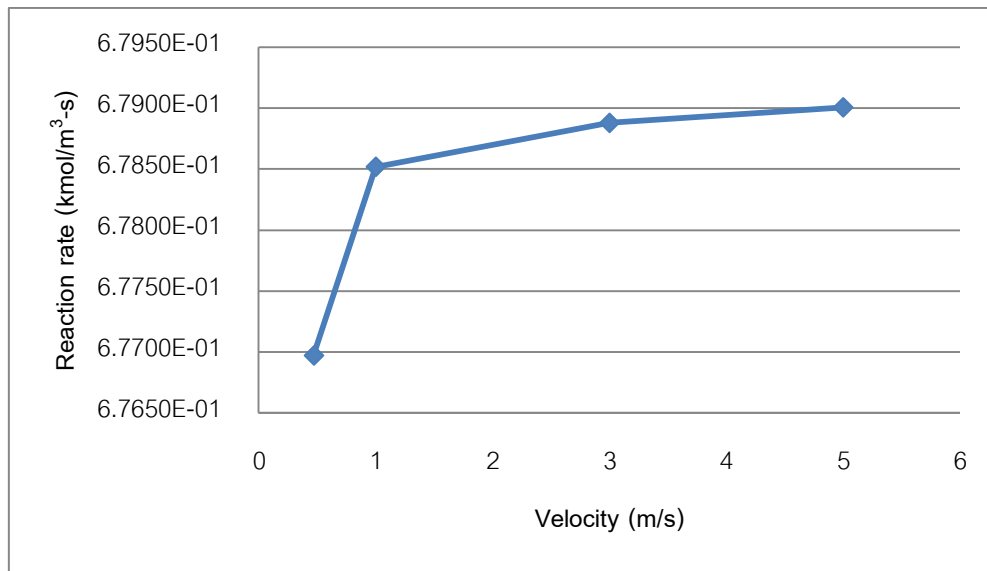
ต้องแยกแบบจำลองออกเป็นสองส่วนเนื่องมาจากการสร้างแบบจำลองแบบเต็มเซลล์จะเกิดปัญหาแก๊สป้อนเข้าแพร่ข้ามไปฝั่งชั่วคราวข้ามทำให้แก๊สที่ข้ามฝั่งไปบดบังพื้นที่สำหรับเกิดปฏิกิริยาของแก๊สฝั่งนั้นๆ อีกทั้งในระบบการทดลองจริงแก๊สที่ป้อนเข้าจะไม่เกิดปัญหาการแพร่ข้ามฝั่ง

4.2.2.1 ผลจากความเร็วยของแก๊สขาเข้า

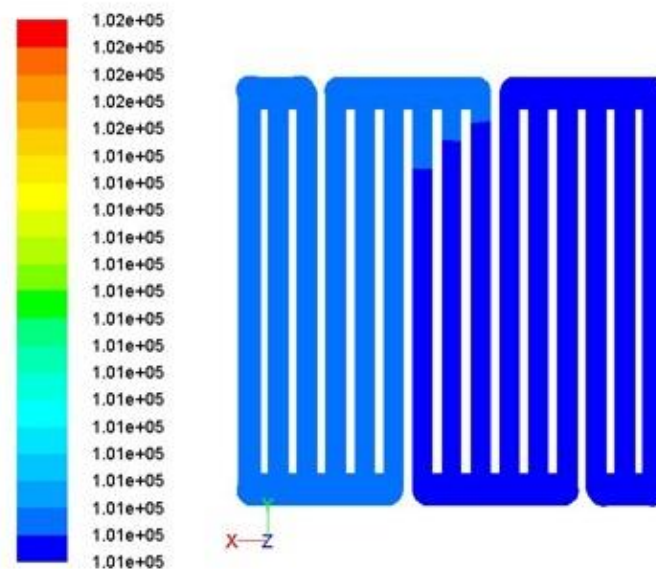
ในส่วนของการศึกษาผลกระทบจากความเร็วยของแก๊สขาเข้าทางฝั่งแอโนดที่มีผลกระทบต่อการกระจายตัวของแก๊สในการเกิดปฏิกิริยา ค่าความเร็วยที่ใช้ในการศึกษามีค่าเท่ากับ 0.47 m/s, 1 m/s, 3 m/s และ 5 m/s ซึ่งค่าความเร็วย 0.47 เป็นค่าความเร็วยที่แปลงมาจากอัตราการไหลเชิงปริมาตรที่ใช้ในห้องปฏิบัติการที่มีค่าเท่ากับ 100 SCCM (Standard Cubic Centimeters per Minute) ส่วนค่าความเร็วยอื่นๆ เป็นความเร็วยที่กำหนดขึ้นมาเพื่อทำการศึกษา

ผลจากการจำลองที่ได้แสดงให้เห็นว่าเมื่อความเร็วยของแก๊สขาเข้าที่เพิ่มขึ้นจะทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาเพิ่มมากขึ้นดังภาพที่ 4.4 เนื่องจากการเพิ่มความเร็วยของแก๊สขาเข้าเป็นผลให้ความดันไฮโดรเจนภายในเซลล์เพิ่มขึ้นเป็น 101334 Pa, 101345 Pa, 101388 Pa และ 101439 Pa ที่ความเร็วยแก๊สขาเข้า 0.47 m/s, 1 m/s, 3 m/s และ 5 m/s ตามลำดับดังภาพที่ 4.5-4.8 ทำให้ไฮโดรเจนสามารถแพร่เข้าไปทำปฏิกิริยาบริเวณชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาได้มากขึ้นดังกราฟภาพที่ 4.9 ซึ่งอัตราการเกิดปฏิกิริยาตามสมการของอาร์เรเนียสนั้นจะขึ้นอยู่กับความเข้มข้นสารตั้งต้น ดังนั้นความเข้มข้นของไฮโดรเจนที่มากขึ้นจึงทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยามากขึ้น แต่ถึงแม้ว่าการเพิ่มความเร็วยของแก๊สขาเข้าจะทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยามากขึ้น อัตราเร็วยที่เพิ่มส่งผลให้เกิดความดันลด (Pressure Drop) ภายในช่องการไหลของแก๊สมากขึ้นด้วยดังแสดงในภาพที่ 4.10 โดยที่ความดันลดเพิ่มขึ้นจาก 17.16 Pa ที่ความเร็วยแก๊สขาเข้า 0.47 m/s ขึ้นมาเป็น 223.89 Pa ที่ความเร็วยแก๊สขาเข้า 5.00 m/s อีกทั้งยังทำให้ความเข้มข้นของโปรตอนที่มีอยู่ในระบบลดลงดังภาพที่ 4.11 เนื่องมาจากโปรตอนในแบบจำลองถูกจำลองให้มีลักษณะเป็นองค์ประกอบแก๊สตัวหนึ่งทำให้ความเร็วยของแก๊สขาเข้ามีผลต่อโปรตอนซึ่งถึงแม้ว่าการเพิ่มความเร็วยของแก๊สขาเข้าจะทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาเพิ่มขึ้นแต่ก็เพิ่มในปริมาณที่น้อยมากเสมือนคงที่ ความเร็วยที่เพิ่มขึ้นจึงทำให้โปรตอนถูกพัดออกไปจากชั้นตัวเร่งปฏิกิริยามากขึ้นทำให้ความเข้มข้นโปรตอนที่เหลือในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาลดลง อีกทั้งการเพิ่มความเร็วยแก๊สขาเข้าจะทำให้สูญเสียไฮโดรเจนที่ไม่ได้ทำปฏิกิริยาออกไปจากระบบมากขึ้นดังกราฟภาพที่ 4.12 ทำให้มีความสิ้นเปลืองจากไฮโดรเจนที่ไม่ได้ใช้ประโยชน์ ดังนั้นเมื่อพิจารณาจากอัตราการเกิดปฏิกิริยาที่ความเร็วยแก๊สขาเข้าต่างๆ แล้ว พบว่าที่ความเร็วยแก๊สขาเข้าตั้งแต่ 1 m/s เป็นต้นไปการเพิ่มขึ้นของอัตราการเกิดปฏิกิริยาเริ่มไม่

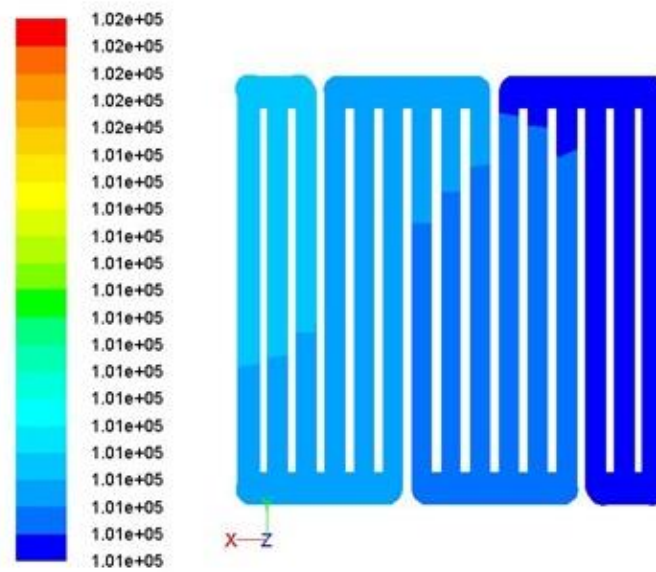
เปลี่ยนแปลง ดังนั้นความเร็วแก๊สขาเข้าที่ 1 m/s จึงเป็นความเร็วแก๊สขาเข้าที่เพียงพอสำหรับระบบ
ที่ทำการศึกษา



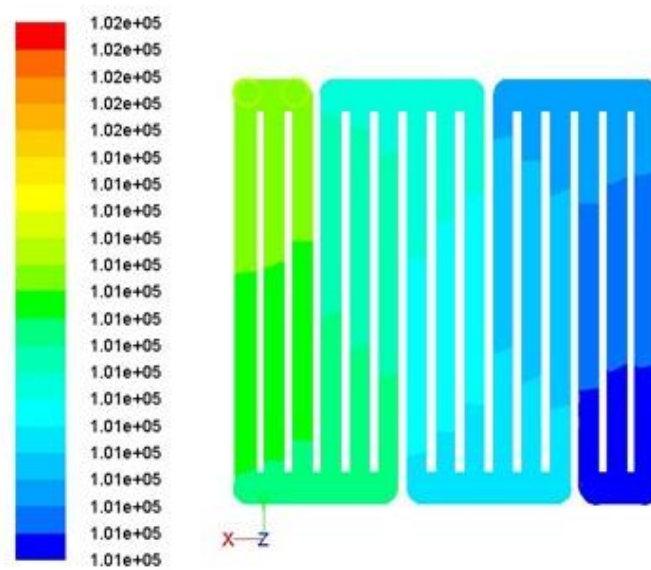
ภาพที่ 4.4 อัตราการเกิดปฏิกิริยาในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแอโนดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าต่างๆ



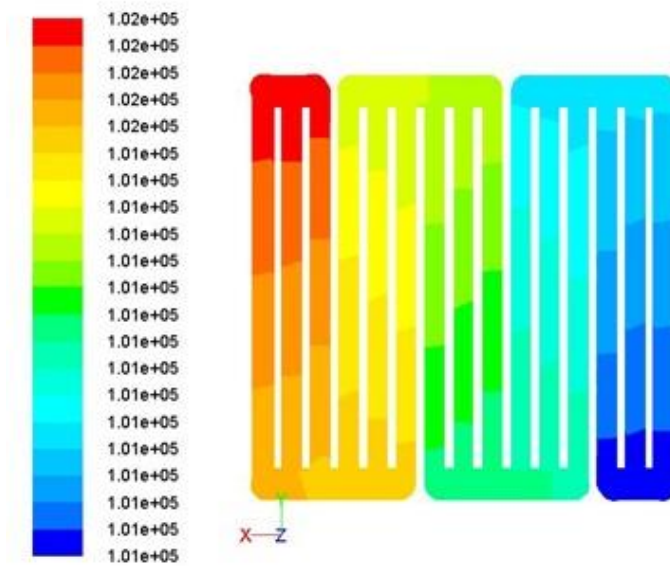
ภาพที่ 4.5 ความดันในช่องกรวไหลของแก๊สฝั่งแอโนดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 0.47 m/s



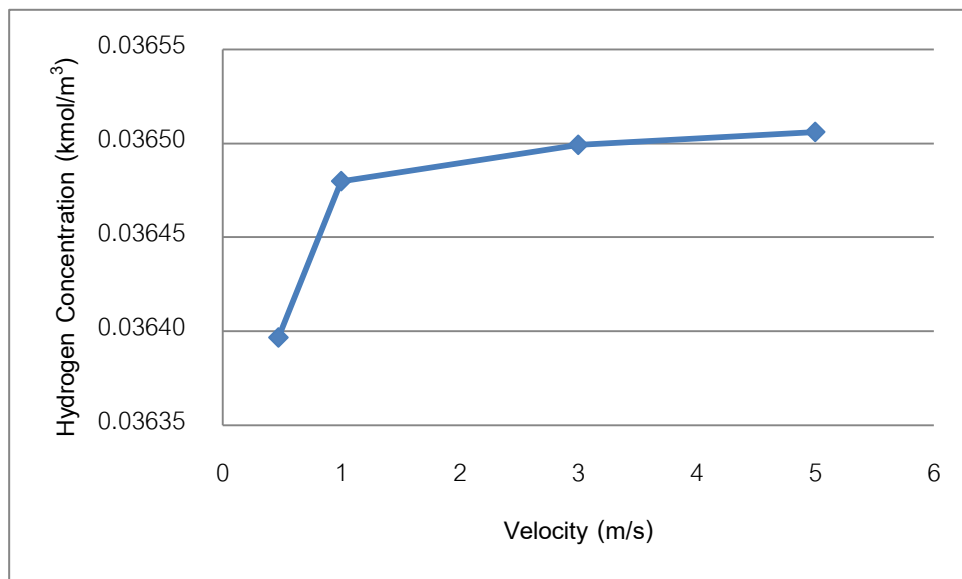
ภาพที่ 4.6 ความดันในช่องการไหลของแก๊สฝิ่งแอนโนดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 1.00 m/s



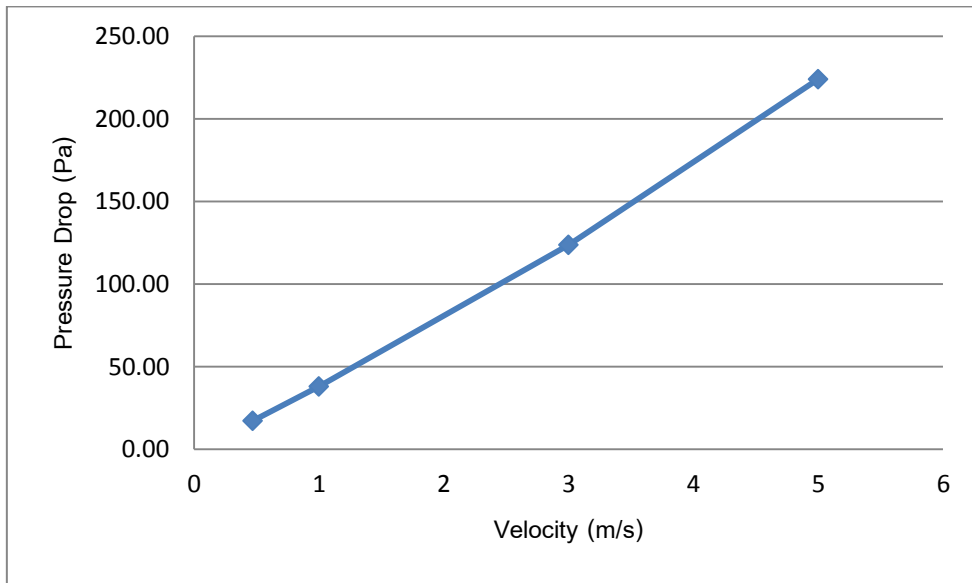
ภาพที่ 4.7 ความดันในช่องการไหลของแก๊สฝิ่งแอนโนดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 3.00 m/s



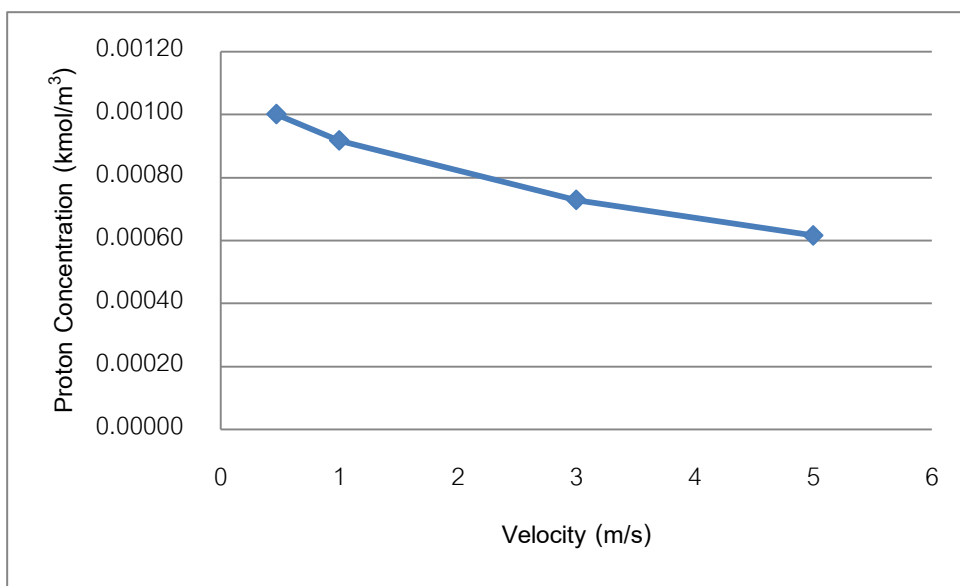
ภาพที่ 4.8 ความดันในช่องการไหลของแก๊สฝั้แอนโดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 5.00 m/s



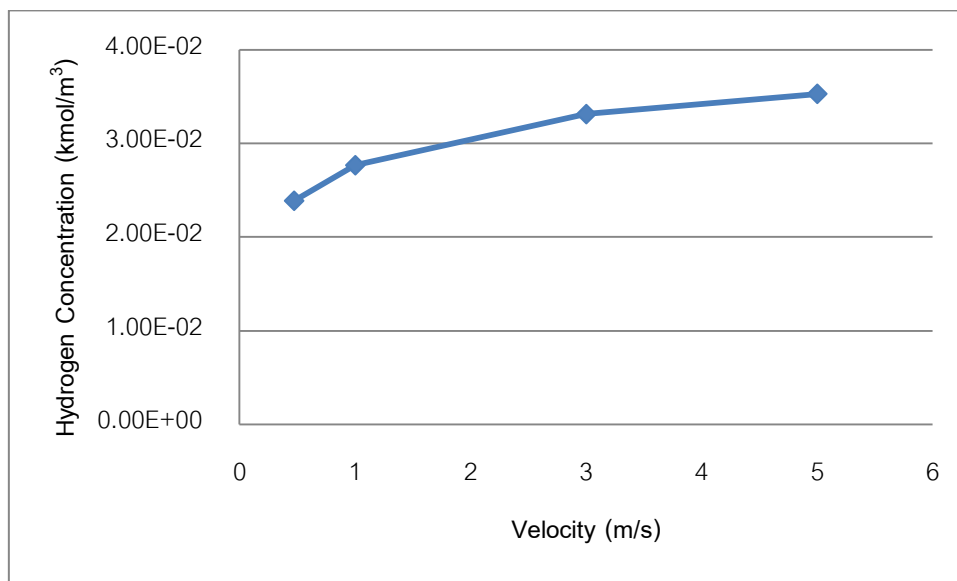
ภาพที่ 4.9 ความเข้มข้นของไฮโดรเจนในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาฝั้แอนโดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าต่างๆ



ภาพที่ 4.10 ความดันลดในช่องการไหลของแก๊สฝั่งแอโนดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าต่างๆ



ภาพที่ 4.11 ความเข้มข้นของโปรตอนบนชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแอโนดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าต่างๆ



ภาพที่ 4.12 ความเข้มข้นของไฮโดรเจนที่ช่องแก๊สขาออกฝั่งแอโนด
ที่ความเร็วแก๊สเข้าต่างๆ

4.2.2.2 ผลจากค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอน

การแพร่ของสสารในระบบนั้นจะขึ้นอยู่กับค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของสสารแต่ละชนิด ซึ่งถ้าค่าสัมประสิทธิ์การแพร่มีค่ามากสสารก็สามารถแพร่ได้ดี ในส่วนนี้จะทำการศึกษาค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนที่มีผลต่อระบบเซลล์เชื้อเพลิง

โดยปกติแล้วการถ่ายโอนโปรตอนในเซลล์เชื้อเพลิงจะเกิดขึ้นที่ชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาและชั้นของเมมเบรน และจะถูกอธิบายด้วยสมการอนุรักษ์ประจุซึ่งเป็นการอธิบายในเชิงศักย์ไฟฟ้า ความสามารถในการถ่ายโอนโปรตอนนั้นจะถูกกำหนดด้วยค่าการนำโปรตอน (Proton Conductivity) ซึ่งจะขึ้นอยู่กับปริมาณน้ำที่มีอยู่ในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาและชั้นของเมมเบรน (water content, λ) ถ้ามีปริมาณน้ำมากจะทำให้การนำโปรตอนมีค่ามากขึ้นด้วย แต่ด้วยสมมติฐานของแบบจำลองใน ANSYS FLUENT 12.1 ที่กำหนดให้แบบจำลองดำเนินการแบบวัฏภาคเดียว อีกทั้งแบบจำลองใน ANSYS FLUENT 12.1 ยังกำหนดให้อิเล็กตรอนและโปรตอนประพฤติตัวเสมือนเป็นองค์ประกอบของแก๊สองค์ประกอบหนึ่งทำให้ไม่สามารถอธิบายปรากฏการณ์ของอิเล็กตรอนและโปรตอนตามสมการอนุรักษ์ประจุได้ ในการศึกษาจึงต้องมีการแปลงค่าการนำโปรตอนให้กลายเป็นค่าสัมประสิทธิ์การแพร่แทนเพื่อนำมาใช้สำหรับการจำลอง ซึ่งในการทดลองจะเลือกใช้ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเพื่อศึกษาผลกระทบดังตารางที่ 4.2

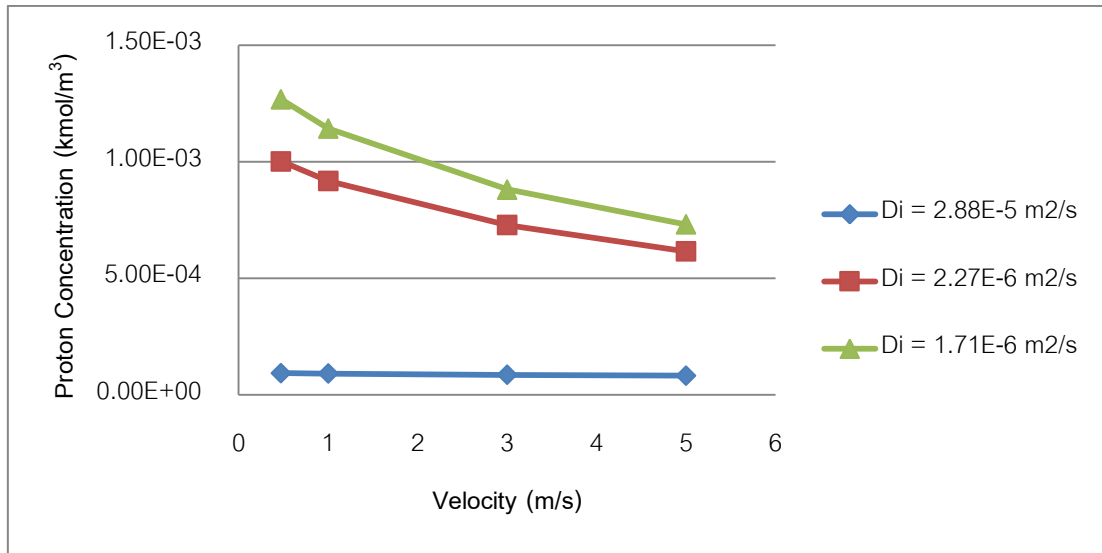
ตารางที่ 4.3 ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนจากค่า water content ต่างๆ

ค่า water content λ	ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอน, D_i	
	ฝั่งแอโนด (m^2/s)	ฝั่งแคโทด (m^2/s)
-	2.88×10^{-5}	2.88×10^{-5}
22	2.27×10^{-6}	1.13×10^{-6}
16.8	1.71×10^{-6}	8.58×10^{-7}

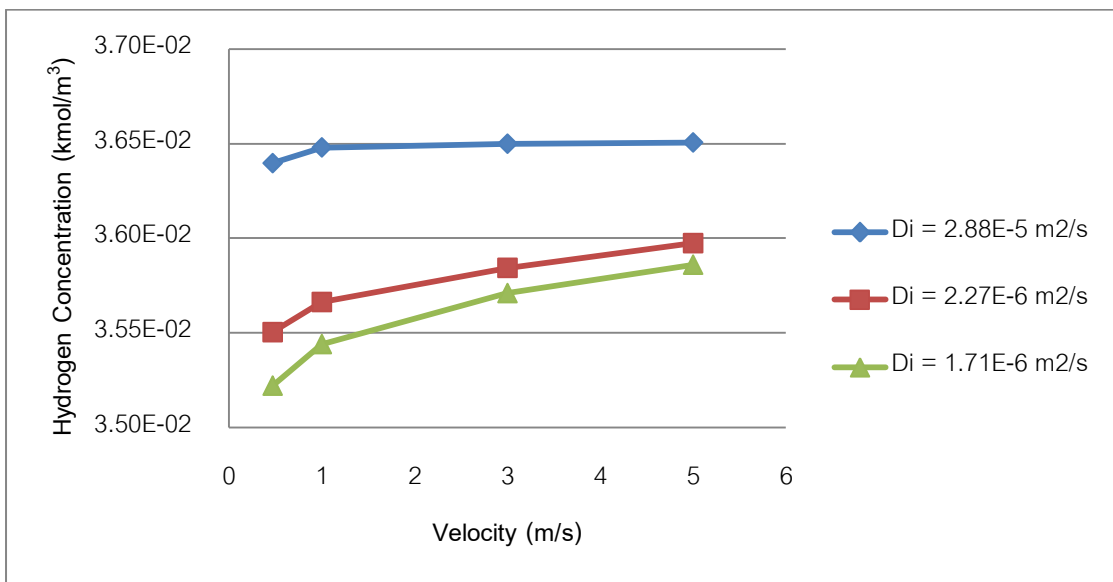
จากตาราง 4.3 ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนค่าแรกไม่ได้แปลงมาจากค่า water content แต่เป็นค่ามาตรฐานของโปรแกรมนโดยใช้หลักการ Dilute-approximate ในส่วนอีก 2 ค่าที่เหลือเลือกมาจากค่าสูงสุดที่ได้มาจากการวิจัยอื่นๆ จะเห็นได้ว่าค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนทางฝั่งแอโนดและแคโทดไม่เท่ากันทั้งนี้เนื่องมาจากอิเล็คตรอนที่เกี่ยวข้องในปฏิกิริยาทั้งสองฝั่งไม่เท่ากันทำให้ค่าที่แปลงได้ทั้งสองฝั่งไม่เท่ากัน โดยอิเล็คตรอนที่เกี่ยวข้องกับปฏิกิริยาทางฝั่งแคโทดจะมีมากกว่าคือ 4 ตัวจึงทำให้ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนทางฝั่งแคโทดมีค่าน้อยกว่า

เมื่อทำการจำลองค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนที่ค่าต่างๆ จากผลการจำลองที่ได้แสดงให้เห็นว่าเมื่อค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนมีค่าลดลงความเข้มข้นของโปรตอนที่อยู่ในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาจะมีความเข้มข้นมากขึ้นด้วยเนื่องจากโปรตอนที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยาแพร่ออกไปจากชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาได้น้อยลง ถึงแม้ความเข้มข้นโปรตอนที่มีอยู่ในบริเวณชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาจะมีความเข้มข้นมากขึ้นแต่ไม่ได้ส่งผลต่อการเกิดปฏิกิริยาเนื่องจากอัตราการเกิดปฏิกิริยาขึ้นกับความเข้มข้นของไฮโดรเจน ซึ่งถ้าหากโปรตอนที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยาแพร่ออกไปได้ช้าและยังคงสะสมอยู่ในบริเวณชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาแล้วจะส่งผลให้ความเข้มข้นเฉลี่ยของไฮโดรเจนลดลงส่งผลให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาเฉลี่ยที่ได้ลดลงไปด้วย จากภาพที่ 4.13 และ 4.14 จะเห็นได้ว่าการแก้ไขปัญหาค่าความเข้มข้นของโปรตอนที่เหมาะสมอยู่ในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาสามารถทำได้โดยเพิ่มความเร็วก๊าซเข้า เมื่อความเร็วก๊าซเข้ามากขึ้นจะทำให้ไฮโดรเจนมีความเข้มข้นมากขึ้นเป็นการลดความเข้มข้นโปรตอนส่วนเกิน และยังให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาเฉลี่ยมากขึ้นดังภาพ 4.15 แต่อย่างไรก็ตามที่ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเท่ากับ $2.88 \times 10^{-5} m^2/s$ มีการเปลี่ยนแปลงของอัตราการเกิดปฏิกิริยาน้อยมากเมื่อเทียบกับค่าอื่นๆ เนื่องจากค่าสัมประสิทธิ์การ

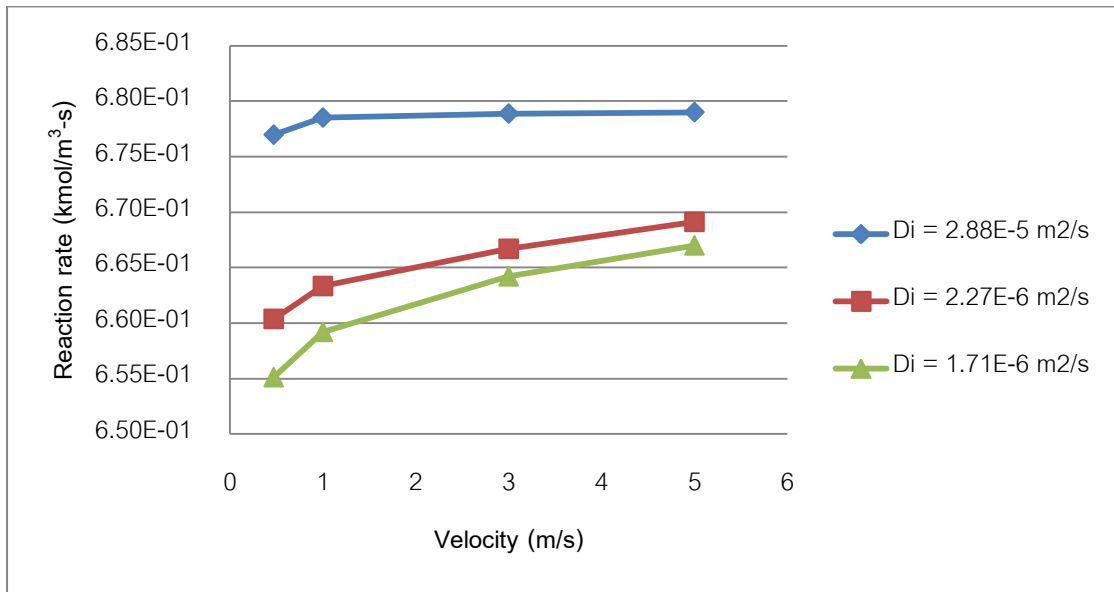
แพร่ของโปรตอนมีค่าสูงมากทำให้ไม่เกิดการสะสมของโปรตอน ซึ่งมีผลทำไฮโดรเจนในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยามีการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นน้อยมากด้วย



ภาพที่ 4.13 การเปรียบเทียบความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแอโนดที่ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนแต่ละค่า



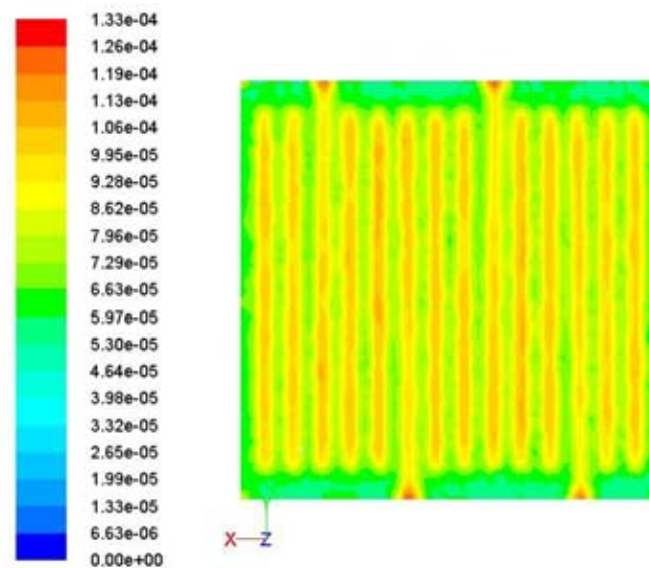
ภาพที่ 4.14 การเปรียบเทียบความเข้มข้นของไฮโดรเจนในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแอโนดที่ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนแต่ละค่า



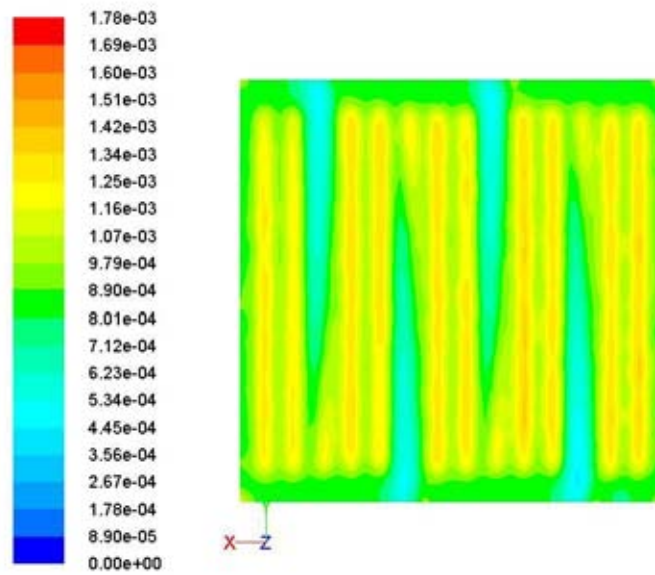
ภาพที่ 4.15 การเปรียบเทียบอัตราการเกิดปฏิกิริยาในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแอโนด
ที่ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนแต่ละค่า

เมื่อดูผลของค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนที่มีผลต่อการกระจายตัวของโปรตอนในชั้นเมมเบรนแล้วพบว่าที่ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนสูงสุด จะมีการกระจายตัวของโปรตอนที่สม่ำเสมอตามแนวของช่องการไหลของแก๊สดังภาพที่ 4.16 โปรตอนที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยาจะไปสะสมอยู่บริเวณส่วนที่อยู่ใต้สันของช่องการไหลของแก๊สมากกว่าเนื่องจากเมื่อไฮโดรเจนทำปฏิกิริยาแล้วโปรตอนที่เกิดขึ้นจะถูกผลักดันโดยแก๊สไฮโดรเจนที่เข้ามาทำปฏิกิริยาต่อโปรตอนที่เกิดขึ้นจึงถูกผลักดันให้ไปสะสมบริเวณใต้สันขอบของช่องการไหลของแก๊ส และเมื่อทำการปรับค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนให้มีค่าเท่ากับ 2.27×10^{-6} m²/s จะได้ผลดังภาพที่ 4.17 สังเกตได้ว่าการกระจายตัวของโปรตอนเริ่มไม่สม่ำเสมอเนื่องจากความสามารถในการแพร่ลดลง ซึ่งบริเวณที่ลักษณะการกระจายตัวเปลี่ยนไปจากเดิมส่วนใหญ่จะอยู่บริเวณใต้สันขอบของช่องการไหลของแก๊สที่กั้นระหว่างช่องการไหลในการหักเลี้ยวแต่ละครั้ง ปรากฏการณ์นี้เกิดขึ้นเนื่องจากความดันบริเวณมุมหักเลี้ยวจะมากกว่าบริเวณอื่นทำให้ไฮโดรเจนที่ไหลมาตามช่องการไหลแพร่ไปสู่ชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาได้ดีกว่าบริเวณอื่นดังภาพที่ 4.19 อีกทั้งเมื่อค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนมีค่าต่ำลง โปรตอนที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยาจะแพร่ไปสู่พื้นที่อื่นได้น้อยลง ทำให้โปรตอนยังคงสะสมอยู่ใกล้บริเวณที่เกิดปฏิกิริยาซึ่งก็คือบริเวณใต้แนวช่องการไหลของแก๊ส และการสะสมของโปรตอนใต้แนวช่องการไหลของแก๊สจะมากยิ่งขึ้นเมื่อทำการปรับค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนให้มีค่าเท่ากับ 1.71×10^{-6} m²/s ตามภาพที่ 4.18 และเมื่อศึกษาผลกระทบบจาก

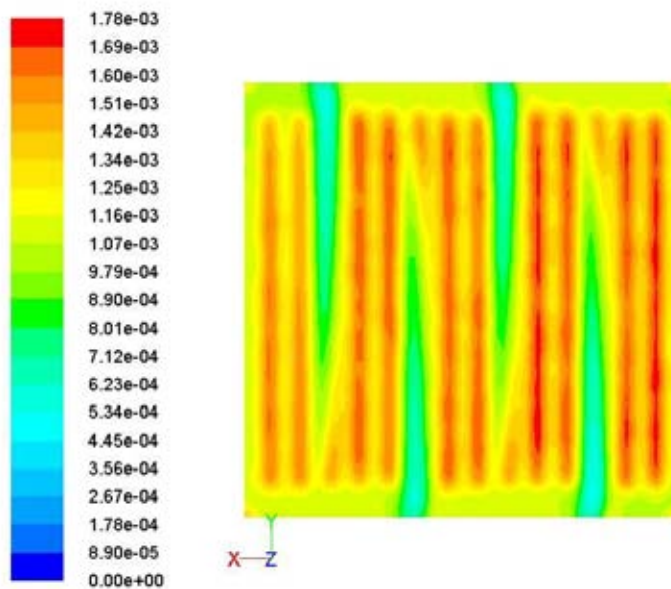
ความเร็วของแก๊สขาเข้า ความเข้มข้นของโปรตอนที่เหมาะสมจะลดลงตามอัตราเร็วของแก๊สที่เพิ่มขึ้น ดังแสดงในภาพที่ 4.20-4.22 จะเห็นว่าที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 0.47 m/s มีความเข้มข้นมากที่สุดเมื่อเทียบกับความเร็วขาเข้าอื่นๆ เนื่องจากความเร็วแก๊สขาเข้าต่ำทำให้โปรตอนถูกพัดออกจากรัศมีตัวเร่งปฏิกิริยาได้น้อยจึงมีโปรตอนเหลือในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยามากทำให้แพร่เข้าสู่เมมเบรนได้มาก เมื่อความเร็วของแก๊สขาเข้ามากขึ้นจึงทำให้มีโปรตอนเหลือในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาน้อยลง ทำให้ความเข้มข้นโปรตอนที่แพร่เข้าสู่เมมเบรนมีปริมาณน้อยลง



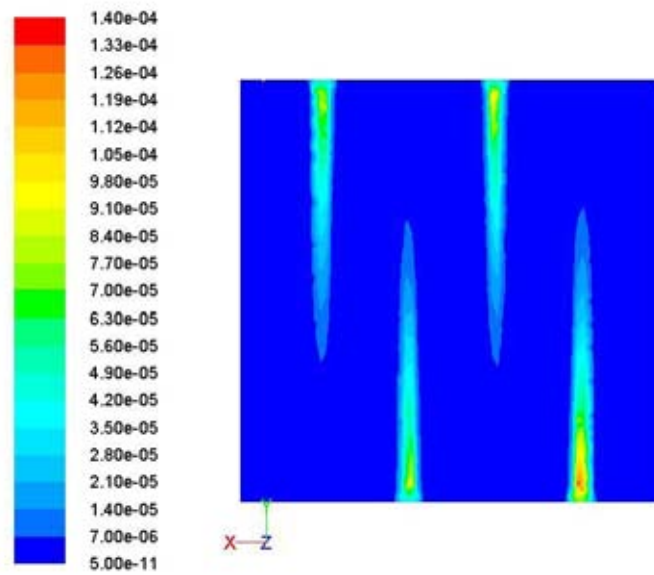
ภาพที่ 4.16 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นเมมเบรนที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 0.47 m/s และค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเท่ากับ $2.88 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$



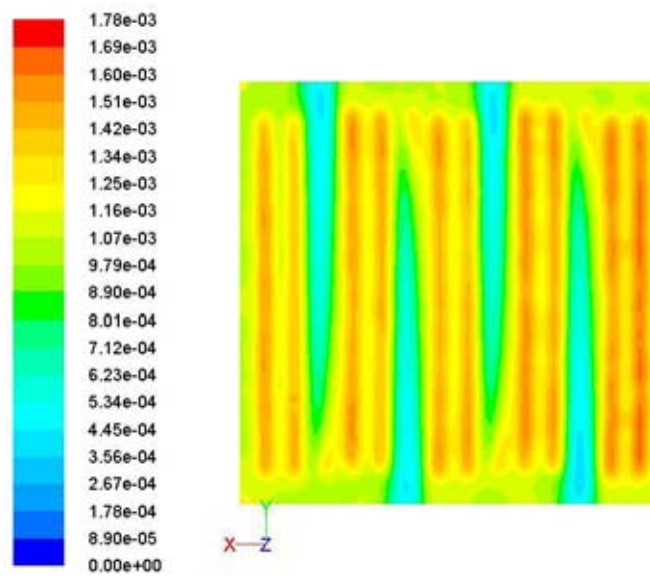
ภาพที่ 4.17 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นเมมเบรนที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 0.47 m/s และค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเท่ากับ $2.27 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$



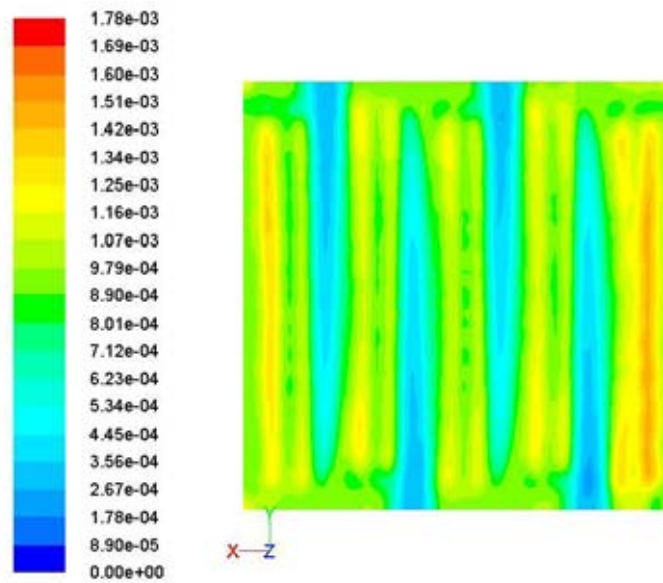
ภาพที่ 4.18 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นเมมเบรนที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 0.47 m/s และค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเท่ากับ $1.72 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$



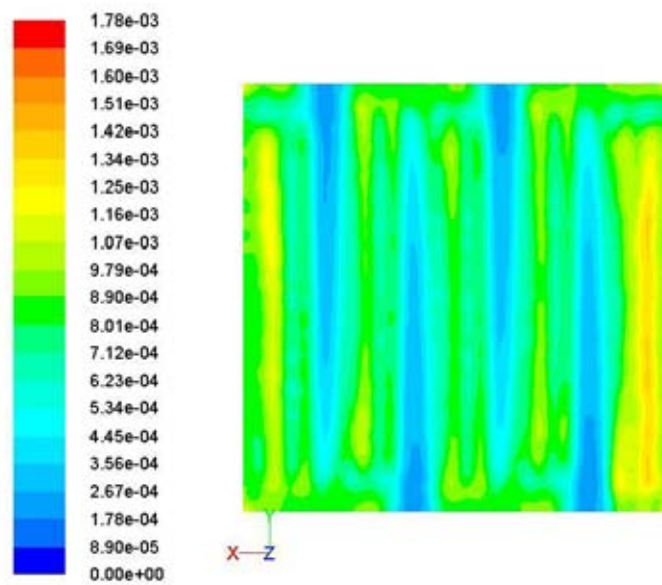
ภาพที่ 4.19 ความดันพลศาสตร์ในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแอโนดที่ความเร็วแก๊สเข้าเท่ากับ 0.47 m/s และค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเท่ากับ $2.88 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$



ภาพที่ 4.20 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นเมมเบรนที่ความเร็วแก๊สเข้าเท่ากับ 1.00 m/s และค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเท่ากับ $1.72 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$



ภาพที่ 4.21 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นเมมเบรนที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 3.00 m/s
และค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเท่ากับ $1.72 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$

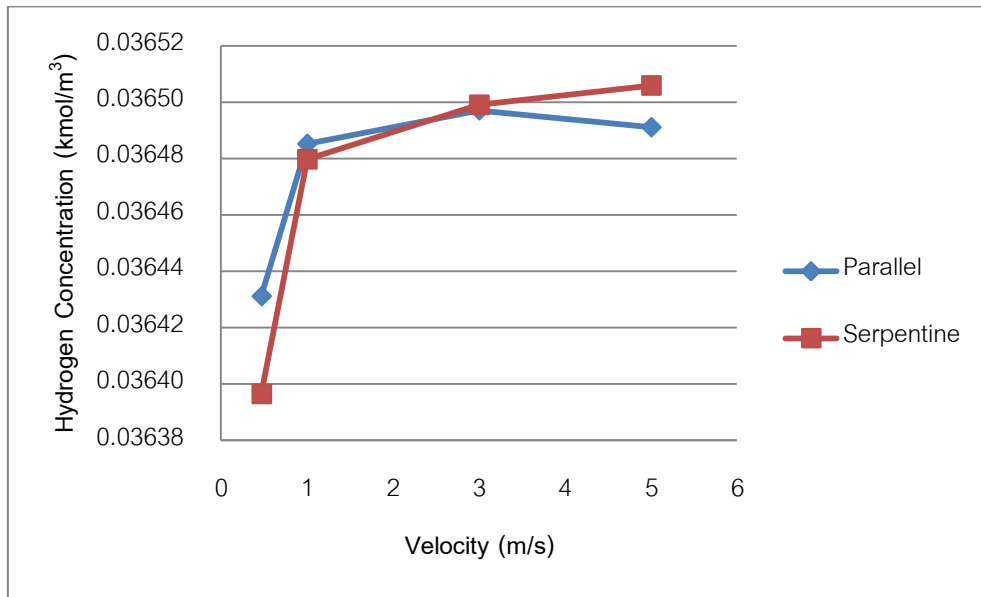


ภาพที่ 4.22 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นเมมเบรนที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 5.00 m/s
และค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเท่ากับ $1.72 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$

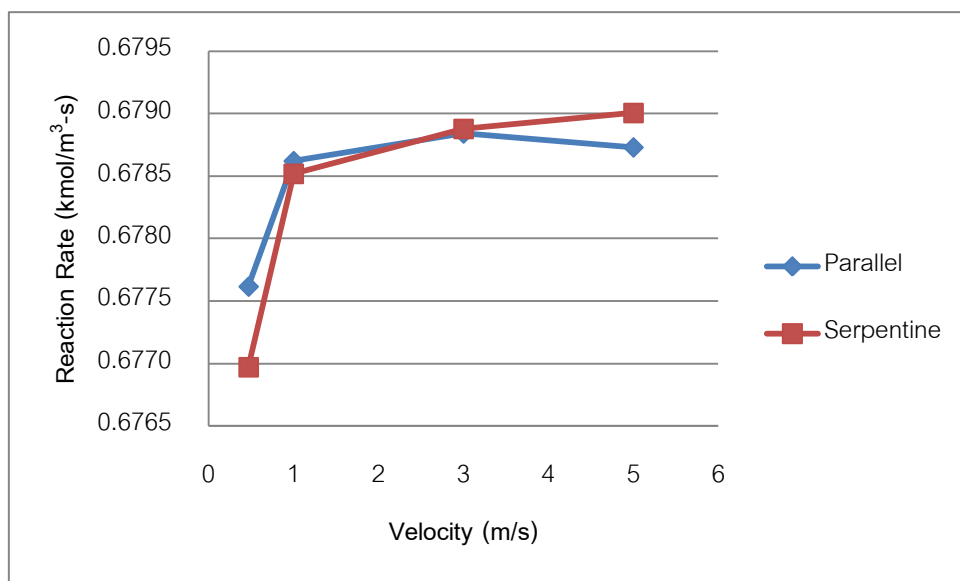
4.2.2.3 ผลจากความแตกต่างของช่องการไหลของแก๊ส

ในส่วนของการศึกษาผลที่ได้จากช่องการไหลของแก๊สรูปแบบอื่นนอกเหนือจากที่มีในห้องทดลองได้เลือกใช้ช่องการไหลแบบขนาน (parallel) เพื่อมาเปรียบเทียบกับช่องการไหลแบบคดเคี้ยว (serpentine) ที่ใช้ในห้องทดลอง โดยแบบจำลองของช่องการไหลแบบขนานที่สร้างขึ้นมีขนาดพื้นที่หน้าตัดเท่ากับแบบจำลองของช่องการไหลแบบคดเคี้ยวเพียงแต่ท่อบริเวณจุดหักเลี้ยวถูกต่อให้เป็นท่อเดียวกันตลอดแนว ค่าตัวแปรที่ใช้ในการจำลองช่องการไหลแบบขนานมีค่าเท่ากับแบบจำลองของช่องการไหลแบบคดเคี้ยวทุกประการ โดยเลือกเทียบค่าที่ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเท่ากับ $2.88 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ ที่ความเร็วแก๊สขาเข้า 0.47 m/s, 1 m/s, 3 m/s และ 5 m/s

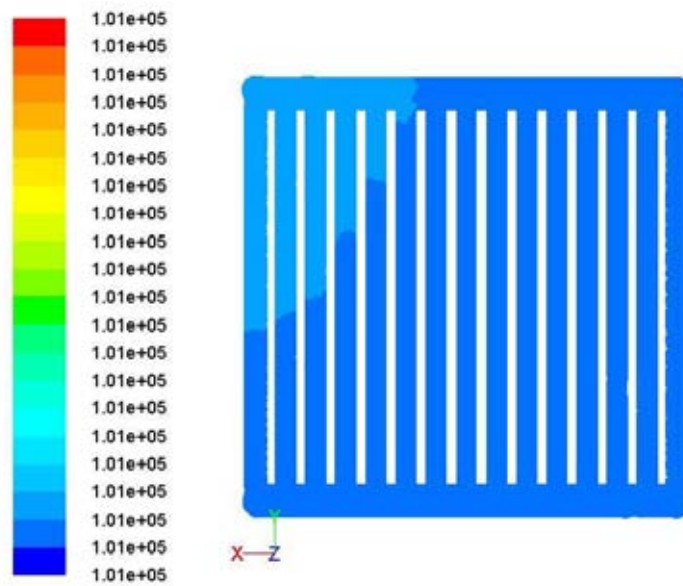
จากผลการจำลองพบว่าความเข้มข้นของไฮโดรเจนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาระหว่างช่องการไหลแบบขนานและแบบคดเคี้ยวมีความแตกต่างกันไม่มากนักดังแสดงในกราฟภาพที่ 4.23 ซึ่งส่งผลให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาที่ได้มีค่าใกล้เคียงกันดังกราฟภาพที่ 4.24 ในส่วนของความดันในระบบผลที่ได้มีความแตกต่างจากช่องการไหลแบบคดเคี้ยวคือ ในช่องการไหลแบบคดเคี้ยวความดันจะลดลงตามเส้นทางของช่องการไหล แต่สำหรับช่องการไหลแบบขนานความดันจะลดลงไปตามแนวเส้นทแยงระหว่างช่องแก๊สขาเข้าและช่องแก๊สขาออกดังภาพที่ 4.25-4.28 และเมื่อเปรียบเทียบผลกับช่องการไหลแบบคดเคี้ยวพบว่าช่องการไหลแบบคดเคี้ยวต้องใช้ความดันในช่องการไหลสูงกว่าช่องการไหลแบบขนานดังกราฟภาพที่ 4.29 ซึ่งแสดงว่าช่องการไหลแบบขนานมีความดันลดหรือความดันสูญเสียต่ำกว่า ซึ่งการที่มีความดันต่ำกว่าภายในช่องการไหลแบบขนานส่งผลให้มีแรงผลักและความเร็วที่กระทำต่อโปรตอนที่เกิดจากปฏิกิริยาน้อยกว่าช่องการไหลแบบคดเคี้ยว โปรตอนที่สะสมอยู่ในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาของช่องการไหลแบบขนานจึงมากกว่าช่องการไหลคดเคี้ยวดังกราฟ ภาพที่ 4.30 ถึงแม้ความเร็วของแก๊สขาเข้าจะมีผลต่อโปรตอนที่มีอยู่ แต่เมื่อดูการกระจายตัวของโปรตอนในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาพบว่าการกระจายตัวของโปรตอนไม่แตกต่างกันที่ความเร็วต่างๆ ดังภาพที่ 4.31- 4.34 ซึ่งโปรตอนส่วนใหญ่จะไปสะสมอยู่ในบริเวณได้สันขอบของช่องการไหล



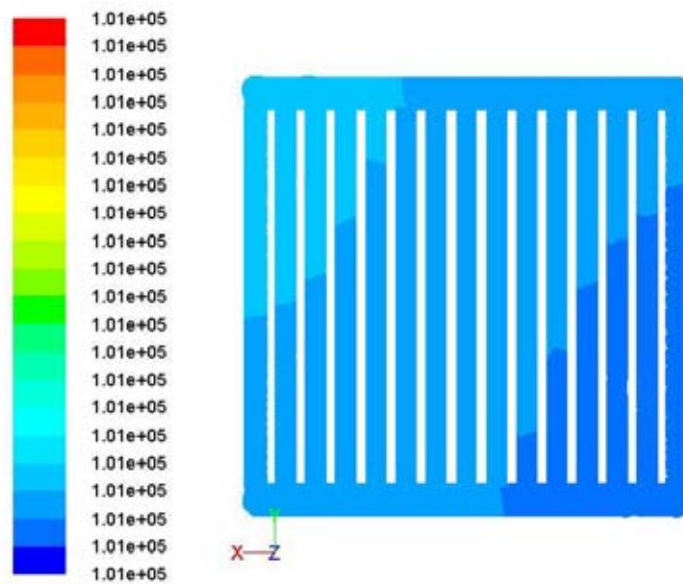
ภาพที่ 4.23 การเปรียบเทียบความเข้มข้นของไฮโดรเจนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแอโนดของช่องการไหลแบบคดเคี้ยวและแบบขนาน



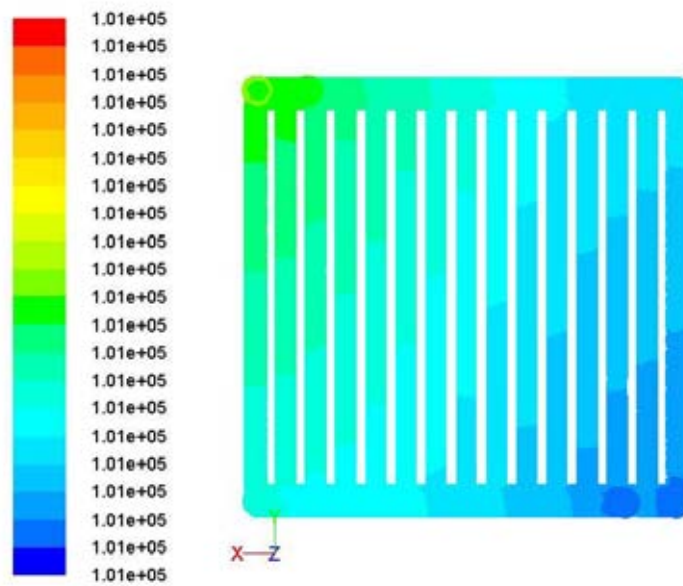
ภาพที่ 4.24 การเปรียบเทียบอัตราการเกิดปฏิกิริยาในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแอโนดของช่องการไหลแบบคดเคี้ยวและแบบขนาน



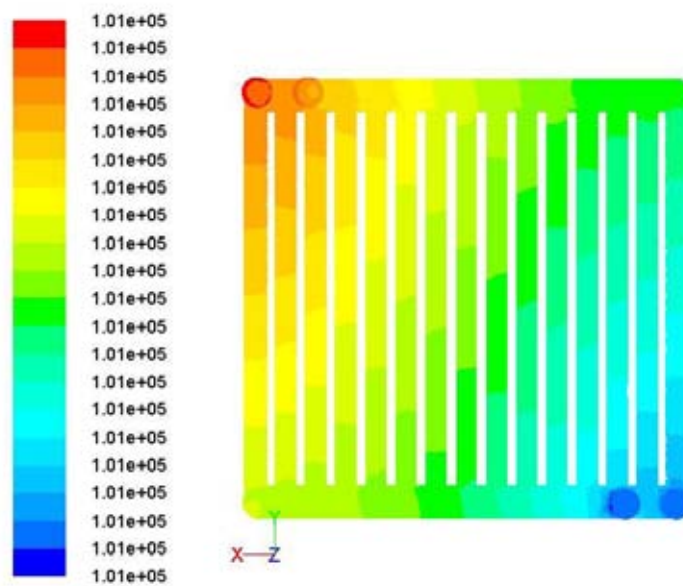
ภาพที่ 4.25 ความดันในช่องกรไหลของแก๊สฝั่งแอโนดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 0.47 m/s ของช่องกรไหลแบบขนาน



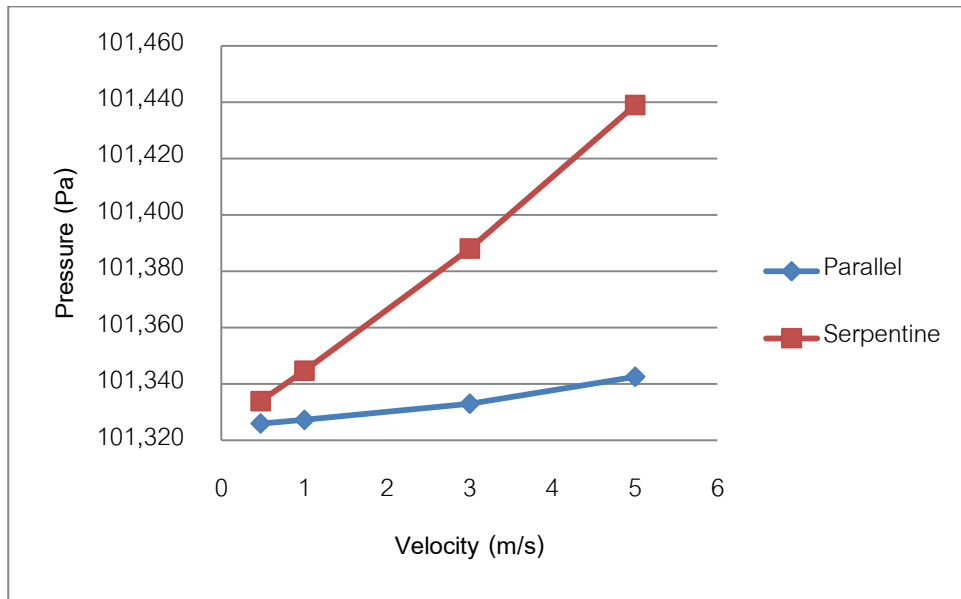
ภาพที่ 4.26 ความดันในช่องกรไหลของแก๊สฝั่งแอโนดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 1.00 m/s ของช่องกรไหลแบบขนาน



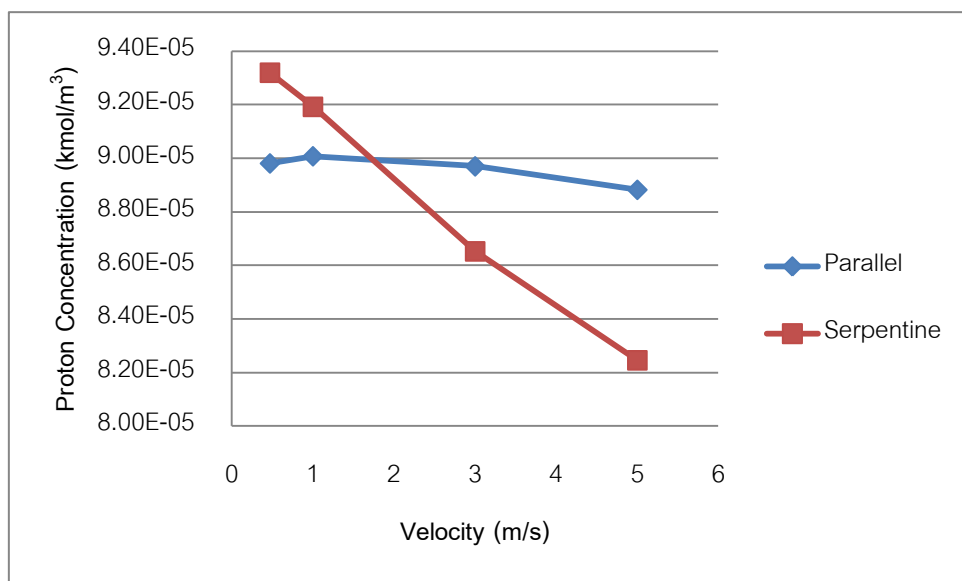
ภาพที่ 4.27 ความดันในช่องการไหลของแก๊สฝั่งแอนโนดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 3.00 m/s
ของช่องการไหลแบบขนาน



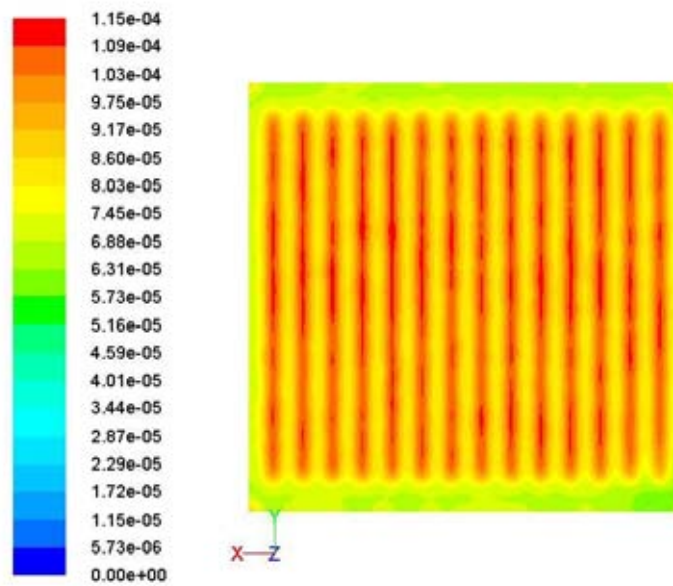
ภาพที่ 4.28 ความดันในช่องการไหลของแก๊สฝั่งแอนโนดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 5.00 m/s
ของช่องการไหลแบบขนาน



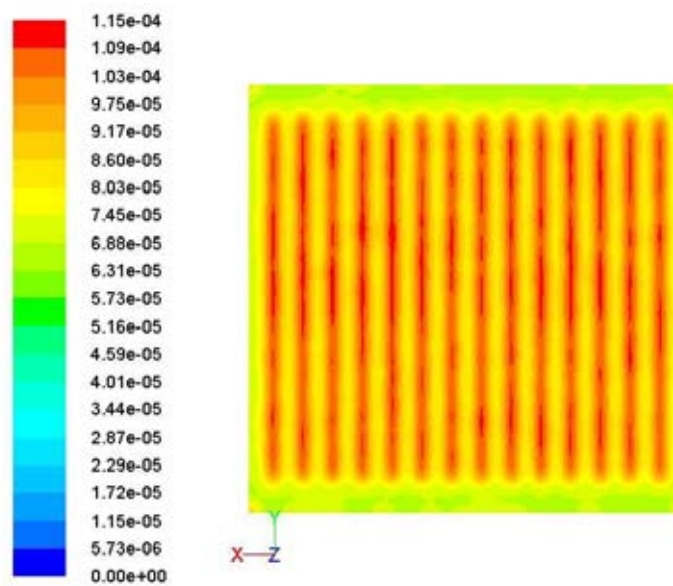
ภาพที่ 4.29 การเปรียบเทียบความดันเฉลี่ยในช่องการไหลฝั่งแอโนด
ของช่องการไหลแบบคดเคี้ยวและแบบขนาน



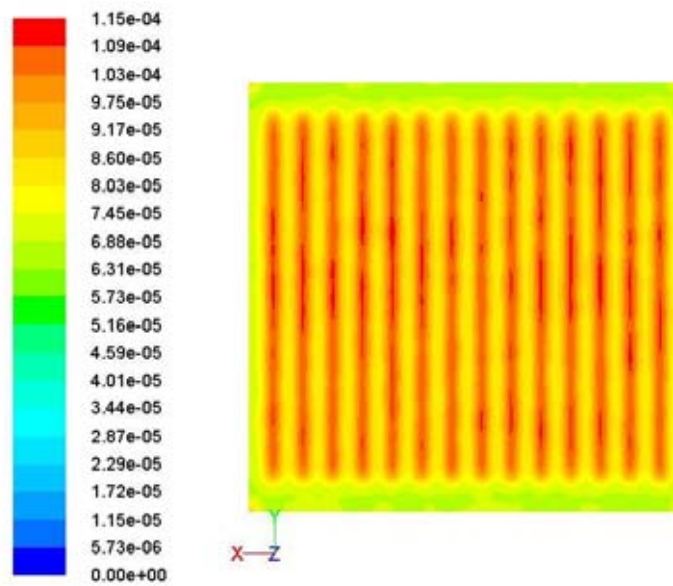
ภาพที่ 4.30 การเปรียบเทียบความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแอโนด
ของช่องการไหลแบบคดเคี้ยวและแบบขนาน



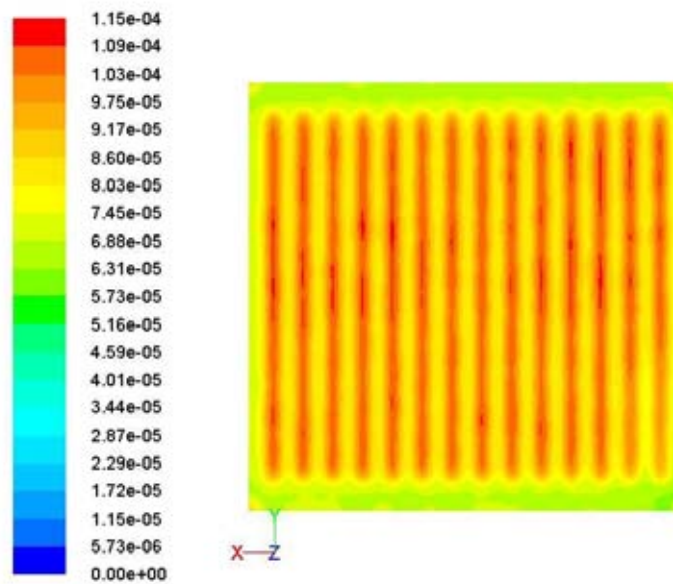
ภาพที่ 4.31 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นเมมเบรนที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 0.47 m/s ของช่องการไหลแบบขนาน



ภาพที่ 4.32 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นเมมเบรนที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 1.00 m/s ของช่องการไหลแบบขนาน



ภาพที่ 4.33 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นเมมเบรนที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 3.00 m/s ของช่องการไหลแบบขนาน



ภาพที่ 4.34 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นเมมเบรนที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 5.00 m/s ของช่องการไหลแบบขนาน

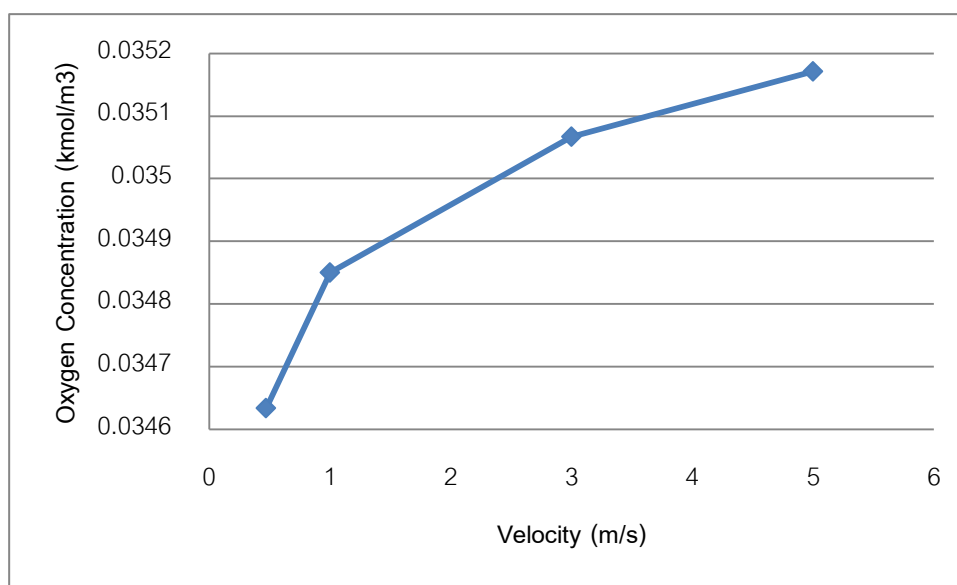
4.2.3 การศึกษาอุทกพลศาสตร์และการเกิดปฏิกิริยาของเซลล์เชื้อเพลิงฝั่งแคโทด

เมื่อทำการศึกษาแบบจำลองทางฝั่งแอโนดแล้ว จึงนำค่าที่จำลองได้มาใช้ในฝั่งแคโทด โดยแบบจำลองทางฝั่งแคโทดจะประกอบด้วยช่องการไหลของแก๊ส ชั้นการกระจายตัวของแก๊ส และชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยา ค่าของตัวแปรที่นำมาใช้คือค่าของโปรตอนและอิเล็กตรอนที่เกิดขึ้น โดยโปรตอนจะตั้งให้แพร่เข้ามาในระบบทางด้านหลังของชั้นตัวเร่งปฏิกิริยา ส่วนอิเล็กตรอนนั้นจะกำหนดให้มีอัตราการเกิดขึ้นเท่ากับที่เกิดขึ้นทางฝั่งแอโนด การเกิดปฏิกิริยาทางฝั่งแคโทดเป็นปฏิกิริยาซึ่งจะเกิดการรวมตัวของอิเล็กตรอน โปรตอน และออกซิเจนได้ผลิตภัณฑ์เป็นน้ำออกมา อีกทั้งการคิดปริมาณกระแสไฟฟ้าที่ได้จากเซลล์เชื้อเพลิงจะคิดจากปฏิกิริยาทางฝั่งแคโทดด้วย

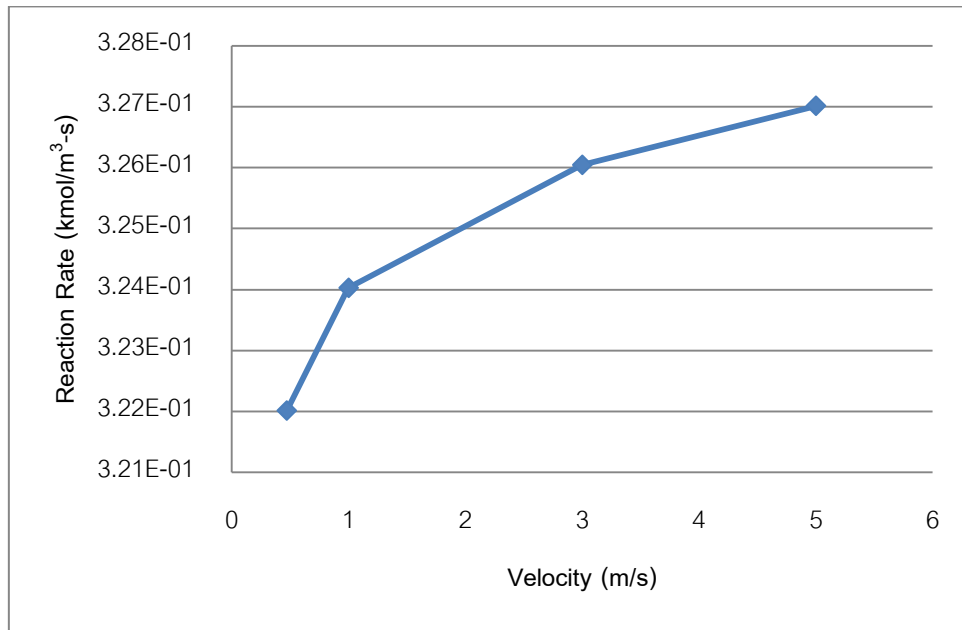
4.2.3.1 ผลจากความเร็วยของแก๊สขาเข้า

จากการจำลองผลที่ได้เป็นไปในรูปแบบเดียวกับฝั่งแอโนดคือเมื่อความเร็วของแก๊สขาเข้าที่เพิ่มขึ้นจะทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาเพิ่มมากขึ้นตามสมการของอาร์เรเนียส เนื่องจากความเข้มข้นออกซิเจนที่มากขึ้นตามความเร็วของแก๊สขาเข้าที่เพิ่มขึ้นดังกราฟภาพที่ 4.35 ทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาเพิ่มขึ้นดังกราฟภาพที่ 4.36 เมื่อทราบอัตราการเกิดปฏิกิริยาฝั่งแคโทดแล้วทำให้สามารถคำนวณความหนาแน่นกระแสที่ได้โดยอาศัยกฎของฟาราเดย์ ซึ่งความหนาแน่นกระแสที่ได้เพิ่มขึ้นตามปฏิกิริยาที่เพิ่มขึ้นดังกราฟภาพที่ 4.37 โดยความหนาแน่นกระแสที่ได้มีค่าเท่ากับ 1242.98 A/m^2 , 1250.75 A/m^2 , 1258.53 A/m^2 และ 1262.27 A/m^2 แต่การเพิ่มความเร็วของแก๊สขาเข้าก็ทำให้เกิดความดันภายในช่องการไหลและความดันลดเพิ่มขึ้นตามความเร็วเช่นเดียวกับทางฝั่งแอโนดดังกราฟภาพที่ 4.38 และภาพที่ 4.39-4.42 โดยที่ความดันลดมีค่า 10.72 Pa , 50.77 Pa , 207.63 Pa , และ 419.76 Pa แต่สิ่งที่แตกต่างจากทางฝั่งแอโนดคือ เมื่อเกิดปฏิกิริยาทางฝั่งแคโทดแล้วมีเกิดผลิตภัณฑ์เพิ่มขึ้นมาด้วยซึ่งก็คือน้ำ โดยน้ำที่เกิดจากปฏิกิริยาส่วนหนึ่งจะถูกกำจัดออกจากระบบโดยไหลออกไปตามช่องการไหลของแก๊สไปพร้อมกับออกซิเจน อีกส่วนจะแพร่กลับเข้าไปในเมมเบรนเพื่อให้เมมเบรนมีความชุ่มชื้นทำให้น้ำประจุได้ดีขึ้น แต่แบบจำลองนี้ละเลยในส่วนของการแพร่ของน้ำกลับเข้าเมมเบรน โดยจะศึกษาเฉพาะการกำจัดน้ำออกทางช่องการไหลของแก๊สเท่านั้น ถึงแม้ว่าน้ำที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยาจะมีส่วนช่วยทำให้เมมเบรนมีความชุ่มชื้นตลอดเวลาแต่ถ้าหากน้ำที่เกิดขึ้นมีปริมาณมากเกินไปจะส่งผลเสียต่อระบบ คือน้ำจะแทรกตัวอยู่ในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยา ชั้นการแพร่ของแก๊สและช่องการไหลของแก๊สทำให้แก๊สออกซิเจนเข้าไปทำปฏิกิริยาได้น้อยลงส่งผลให้เกิดปฏิกิริยาได้น้อยลงและกระแสที่ได้ก็จะน้อยลง จากภาพที่ 4.43 ที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 0.47 m/s จะเห็นได้ว่าความเข้มข้นของออกซิเจนในชั้นของตัวเร่ง

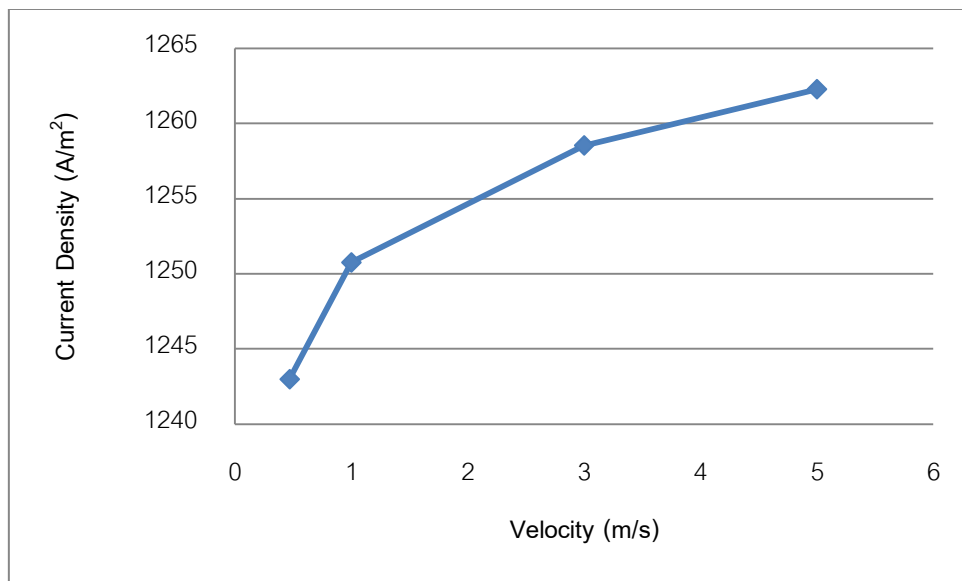
ปฏิกิริยาจะมากที่สุดบริเวณช่องแก๊สขาเข้าและจะลดลงเรื่อยๆ ตามแนวช่องการไหล การลดลงของออกซิเจนนี้จะเกิดจากสาเหตุอยู่ 2 ประการคือการถูกใช้ไปในปฏิกิริยาและการถูกบดบังจากน้ำที่เกิดขึ้น แต่เนื่องจากการเกิดปฏิกิริยาทางฝั่งแคโทดจะเกิดขึ้นได้ช้าดังนั้นสาเหตุหลักของการลดลงของออกซิเจนจึงมาจากการบดบังของน้ำดังจะสังเกตได้จากออกซิเจนจะมีความเข้มข้นน้อยในบริเวณที่มีน้ำมาก โดยเฉพาะบริเวณช่องแก๊สขาออกเพราะน้ำจะถูกพัดและกำจัดออกที่บริเวณนี้ การแก้ปัญหาที่ตกค้างอยู่ในระบบนี้สามารถแก้ไขได้โดยการเพิ่มความเร็วของแก๊สขาเข้าเพื่อให้แก๊สมีแรงดันมากพอที่จะดันน้ำออกไปได้มากขึ้น อีกทั้งยังช่วยเพิ่มความเข้มข้นออกซิเจนให้มากขึ้นดังภาพที่ 4.44-4.46 ทำให้เกิดปฏิกิริยาได้มากขึ้นและได้กระแสมากขึ้นจากภาพที่ 4.47-4.50 จะเห็นได้ว่าเมื่อเพิ่มความเร็วของแก๊สขาเข้ามากขึ้น ปริมาณน้ำที่ตกค้างอยู่ในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาจะลดลงทำให้ออกซิเจนเข้าไปทำปฏิกิริยาในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยามากขึ้น ซึ่งความสัมพันธ์ระหว่างความเร็วแก๊สขาเข้ากับปริมาณน้ำที่ตกค้างแสดงดังกราฟภาพที่ 4.51 ถึงแม้การกำจัดน้ำออกจากระบบจะช่วยเพิ่มประสิทธิภาพให้เซลล์เชื้อเพลิง แต่ในการทดลองจริงการกำจัดน้ำออกมากเกินไปอาจส่งผลให้เมมเบรนสูญเสียความชุ่มชื้นจะทำให้การนำโปรตอนลดลง ทำให้ประสิทธิภาพของเซลล์เชื้อเพลิงลดลง



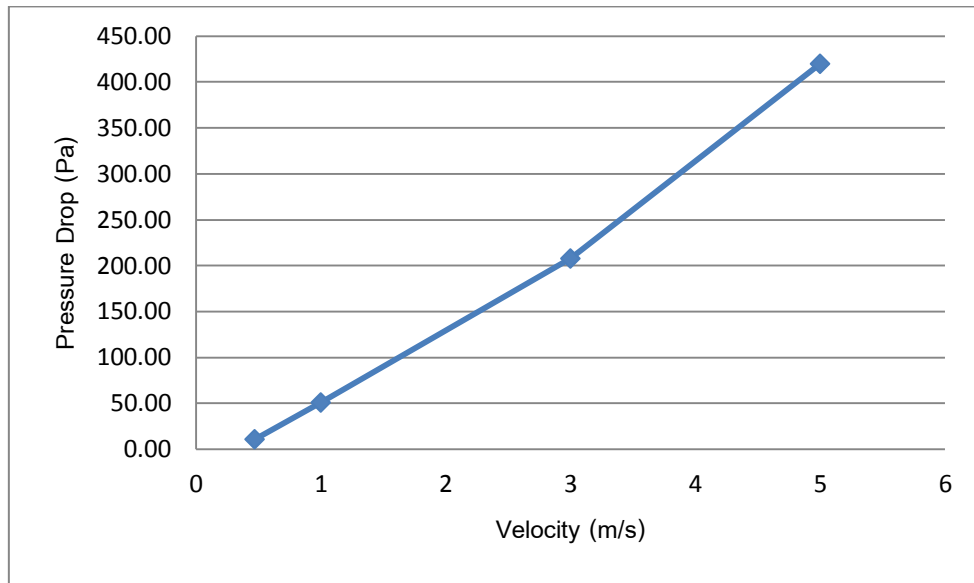
ภาพที่ 4.35 ความเข้มข้นของออกซิเจนในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าต่างๆ



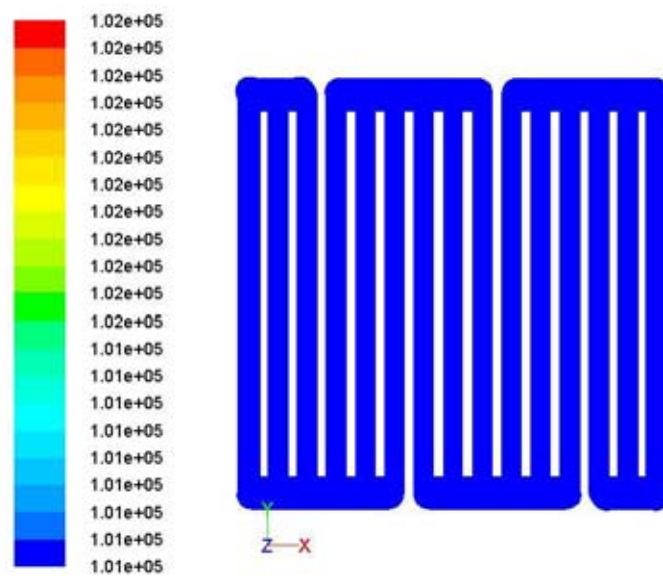
ภาพที่ 4.36 อัตราการเกิดปฏิกิริยาในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าต่างๆ



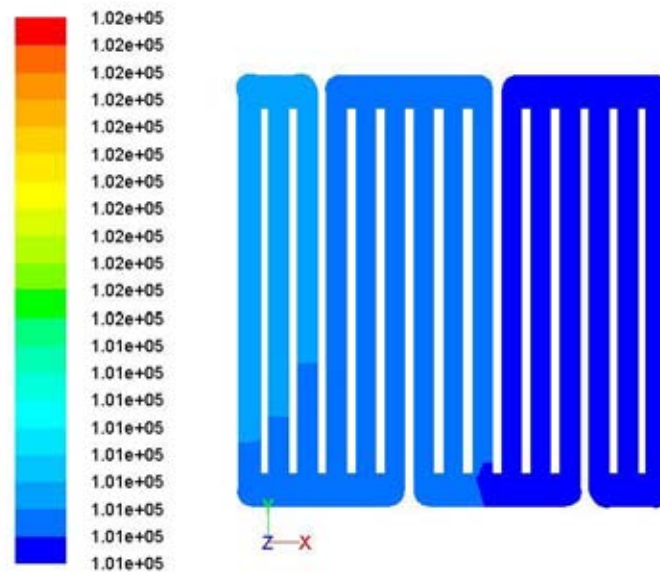
ภาพที่ 4.37 ความหนาแน่นกระแสที่ความเร็วแก๊สขาเข้าต่างๆ



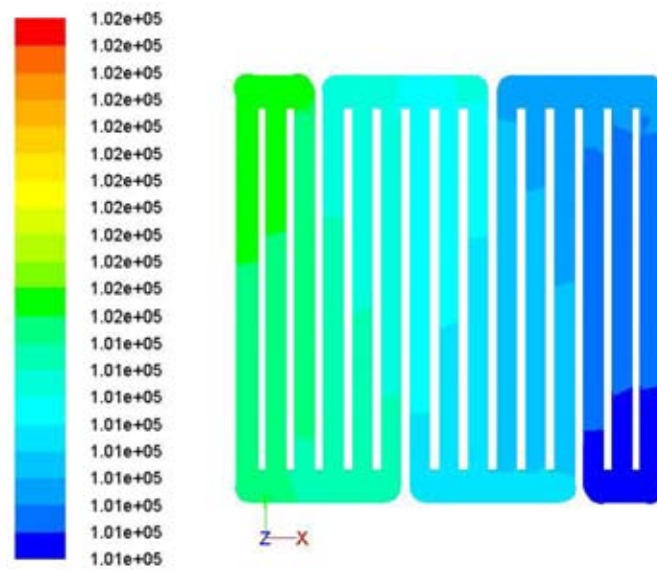
ภาพที่ 4.38 ความดันลดในช่องการไหลของแก๊สฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าต่างๆ



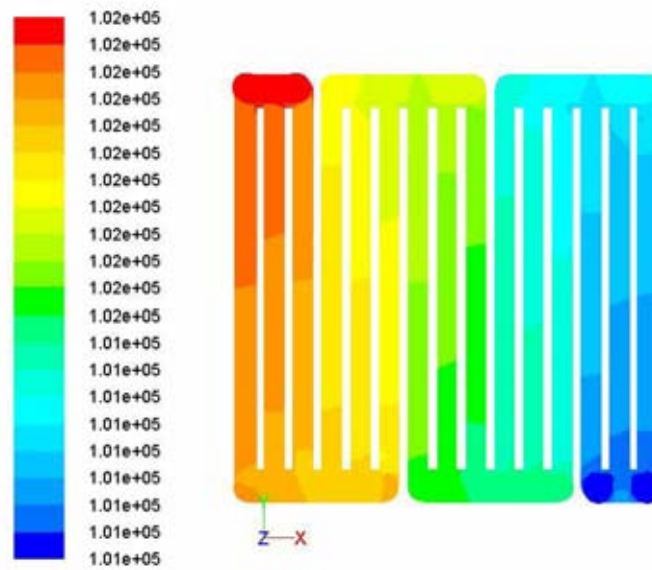
ภาพที่ 4.39 ความดันในช่องการไหลของแก๊สฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 0.47 m/s



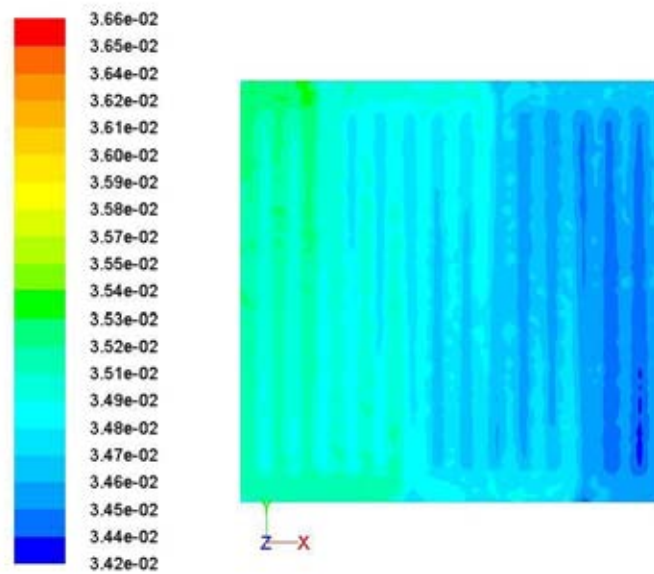
ภาพที่ 4.40 ความดันในช่องการไหลของแก๊สฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 1.00 m/s



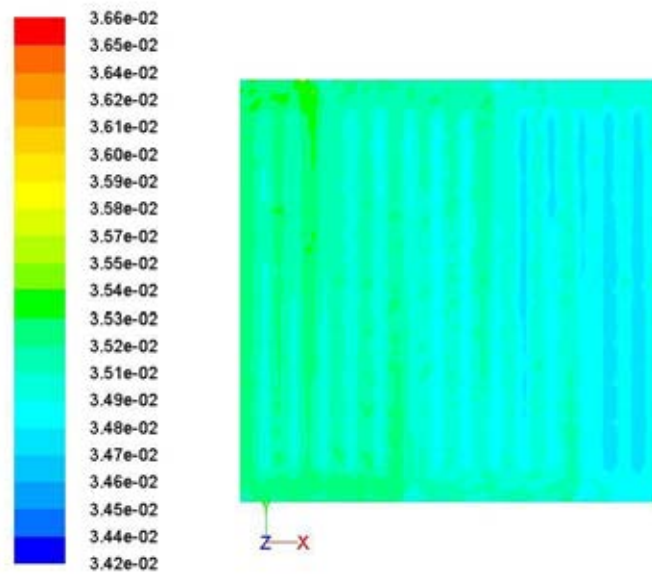
ภาพที่ 4.41 ความดันในช่องการไหลของแก๊สฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 3.00 m/s



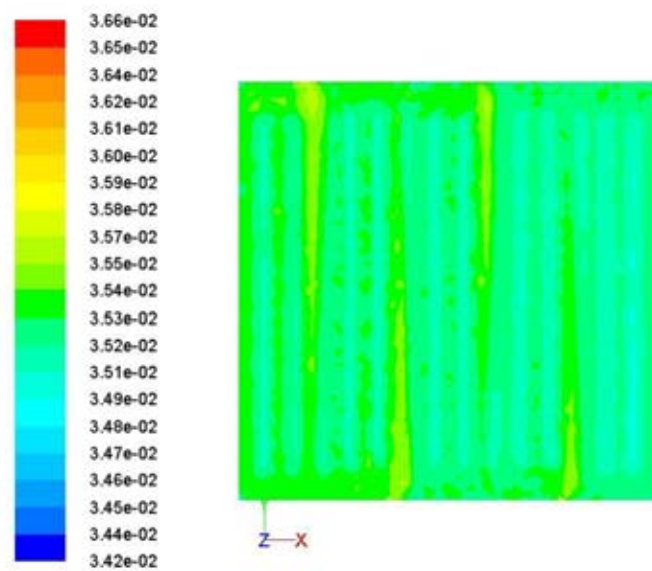
ภาพที่ 4.42 ความดันในช่องการไหลของแก๊สฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 5.00 m/s



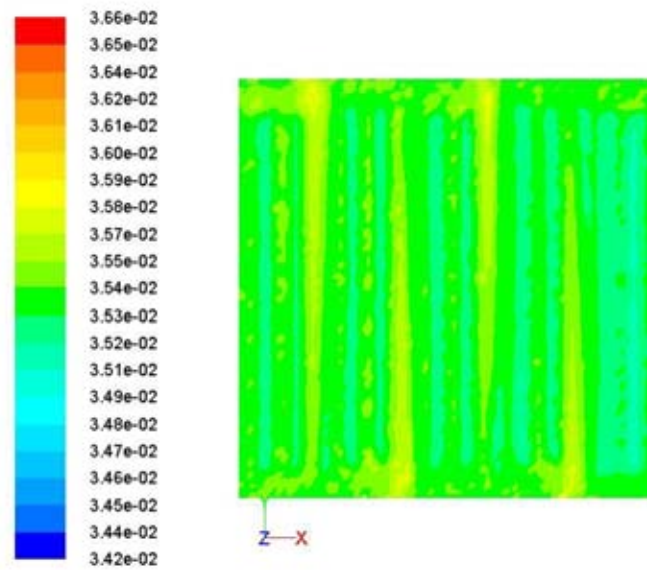
ภาพที่ 4.43 ความเข้มข้นของออกซิเจนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทด
ที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 0.47 m/s



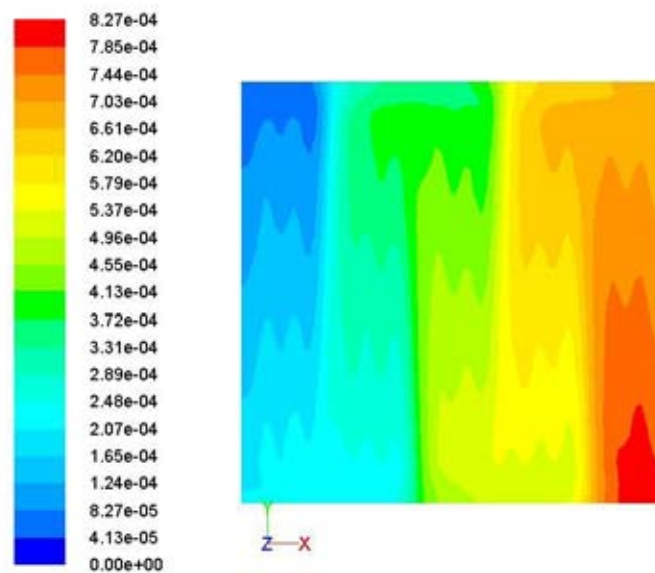
ภาพที่ 4.44 ความเข้มข้นของออกซิเจนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทด
ที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 1.00 m/s



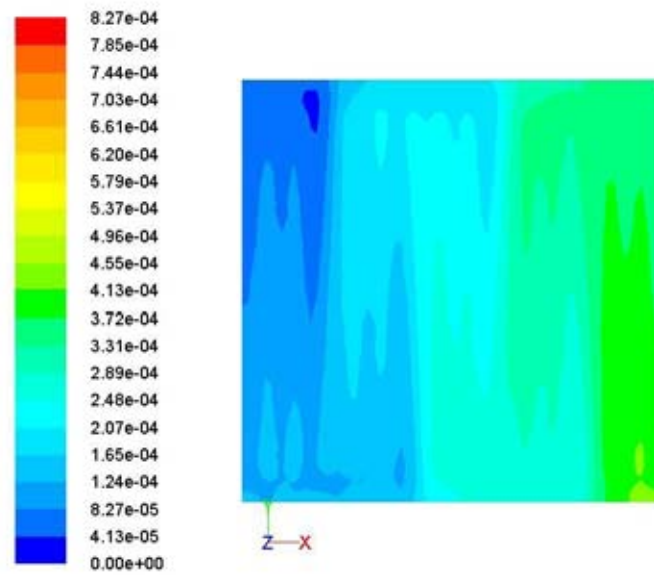
ภาพที่ 4.45 ความเข้มข้นของออกซิเจนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทด
ที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 3.00 m/s



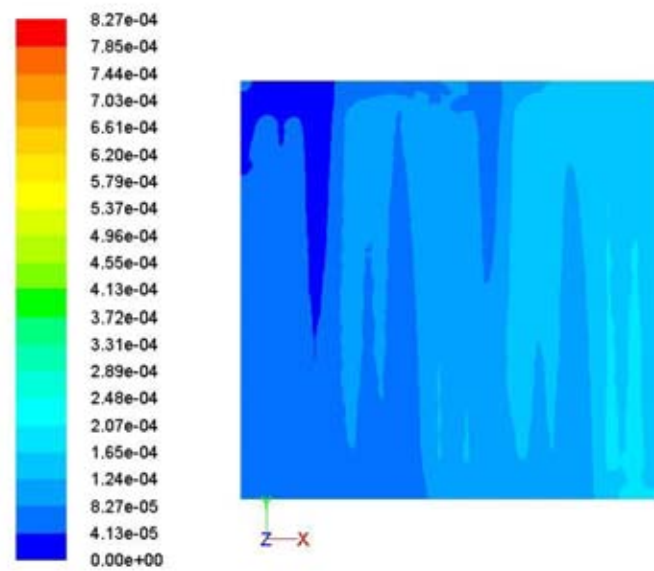
ภาพที่ 4.46 ความเข้มข้นของออกซิเจนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทด
ที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 5.00 m/s



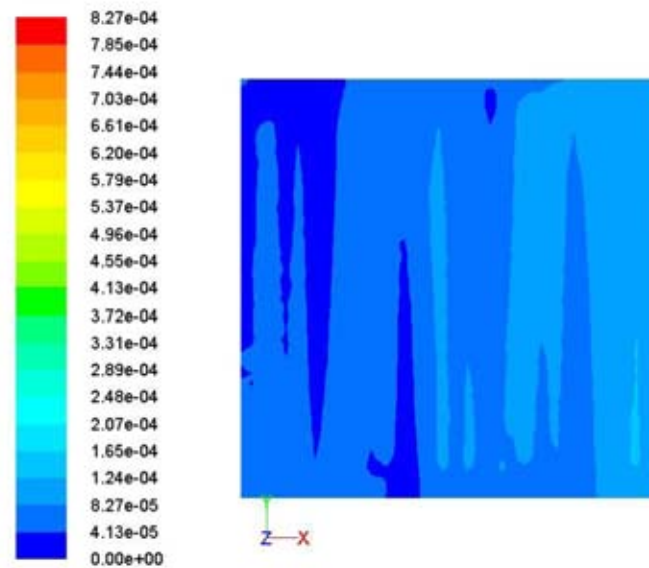
ภาพที่ 4.47 ความเข้มข้นของน้ำในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้า
เท่ากับ 0.47 m/s



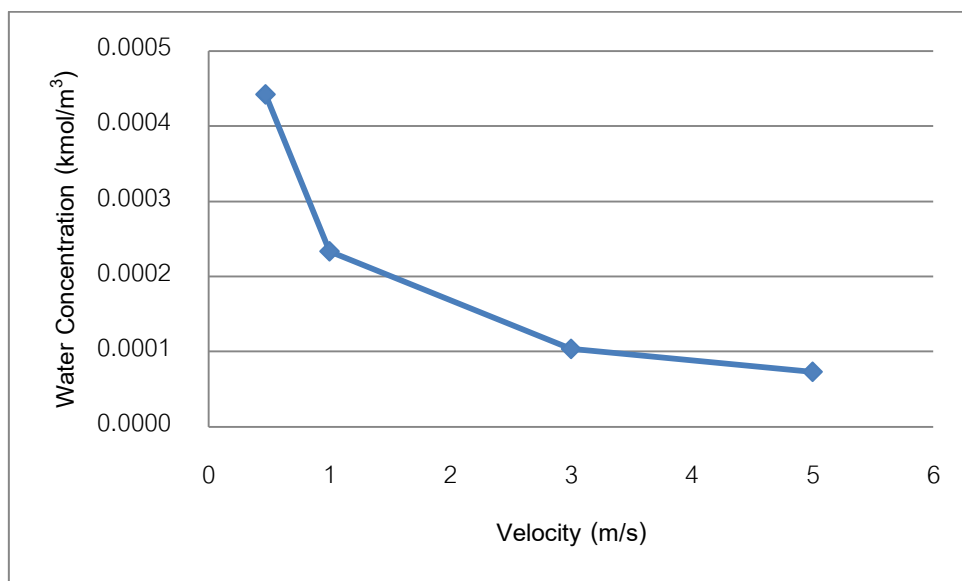
ภาพที่ 4.48 ความเข้มข้นของน้ำในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้า เท่ากับ 1.00 m/s



ภาพที่ 4.49 ความเข้มข้นของน้ำในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้า เท่ากับ 3.00 m/s



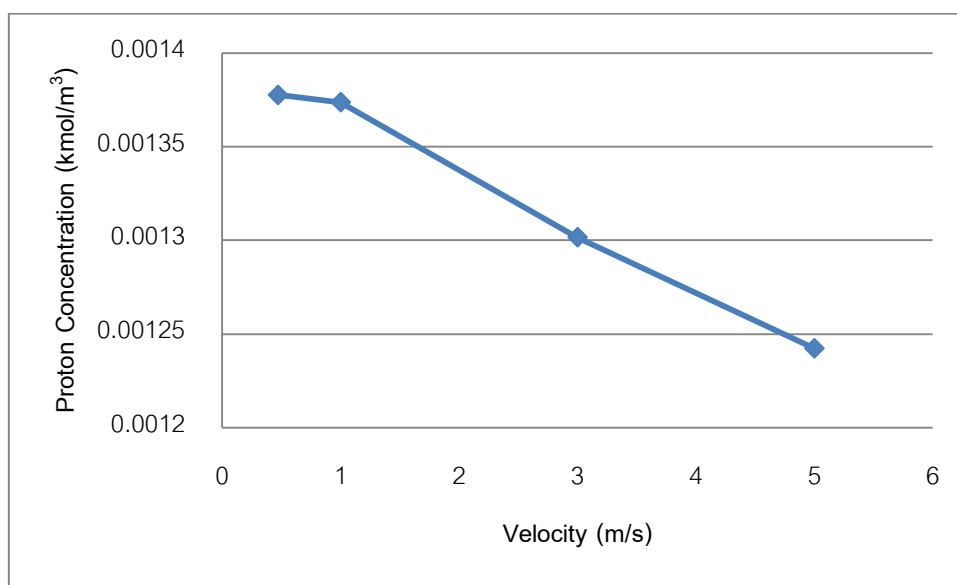
ภาพที่ 4.50 ความเข้มข้นของน้ำในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 5.00 m/s



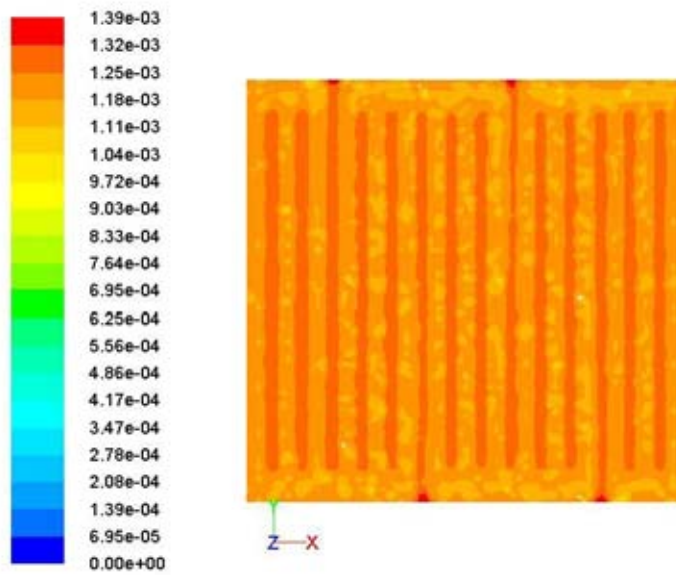
ภาพที่ 4.51 ความเข้มข้นของน้ำในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าต่างๆ

เมื่อศึกษาผลกระทบจากความเร็วของแก๊สขาเข้าทางฝั่งแคโทดที่มีผลต่อการกระจายตัวของโปรตอนจะศึกษาแค่ในบริเวณชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาเท่านั้นโดยที่กำหนดให้โปรตอนที่ได้จากการจำลองปฏิกิริยาทางฝั่งแอโนดแพร่เข้ามาบริเวณผิวสัมผัสของเมมเบรนและชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทด ซึ่งกำหนดให้แพร่เข้าทั่วเท่ากันทั้งระนาบ จากผลการจำลองที่ได้จะเห็นว่าความเข้มข้น

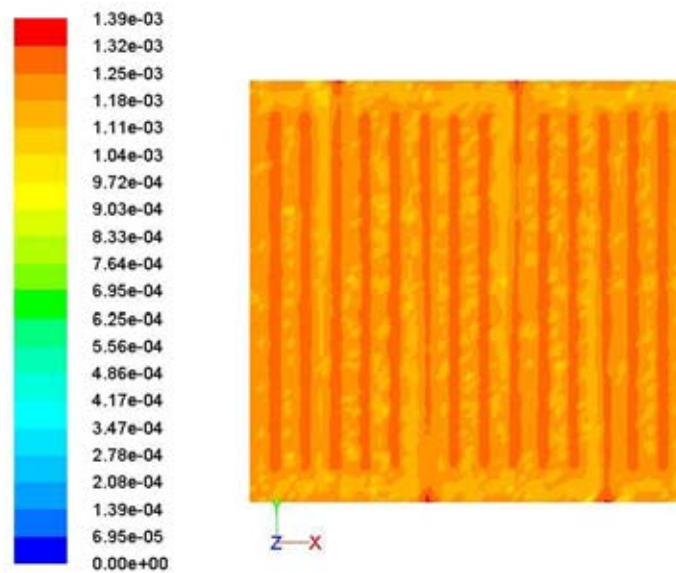
โปรตอนที่จะกระจายอยู่ในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาจะมีความเข้มข้นค่อนข้างสม่ำเสมอ บริเวณที่โปรตอนมีความเข้มข้นต่ำลงคือบริเวณที่อยู่ใต้ช่องการไหลของแก๊สเนื่องมาจากการถูกใช้ไปในปฏิกิริยาและถูกออกซิเจนในระบบดันมาจากช่องการไหล อีกทั้งการเพิ่มความเร็วของแก๊สเข้าฝั่งแอโนดยังทำให้โปรตอนที่ได้มีความเข้มข้นน้อยลง อย่างไรก็ตามความเข้มข้นของโปรตอนที่มีอยู่ในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาก็ยังมีปริมาณที่มากพอต่อการเกิดปฏิกิริยาถึงแม้การเพิ่มความเร็วของแก๊สเข้ามากขึ้นจะทำให้ความเข้มข้นโปรตอนลดลงดังแสดงในกราฟภาพที่ 4.52 และภาพที่ 4.53-4.56 ซึ่งเมื่อเปรียบเทียบกับกราฟแสดงปริมาณกระแสที่ยังคงเพิ่มขึ้นไม่ลดลงตามความเข้มข้นโปรตอนที่มีอยู่ และการเพิ่มขึ้นของความเร็วแก๊สเข้ายังส่งผลต่อการกระจายตัวของโปรตอนบริเวณใต้สันขอบของช่องการไหลของแก๊สที่กั้นระหว่างช่องการไหลในการหักเลี้ยวแต่ละครั้งเช่นเดียวกับที่เกิดทางฝั่งแอโนด ซึ่งเหตุผลที่ใช้อธิบายก็เช่นเดียวกับทางฝั่งแอโนดคือความดันบริเวณมุมหักเลี้ยวจะมากกว่าบริเวณอื่นดังแสดงในภาพที่ 4.57



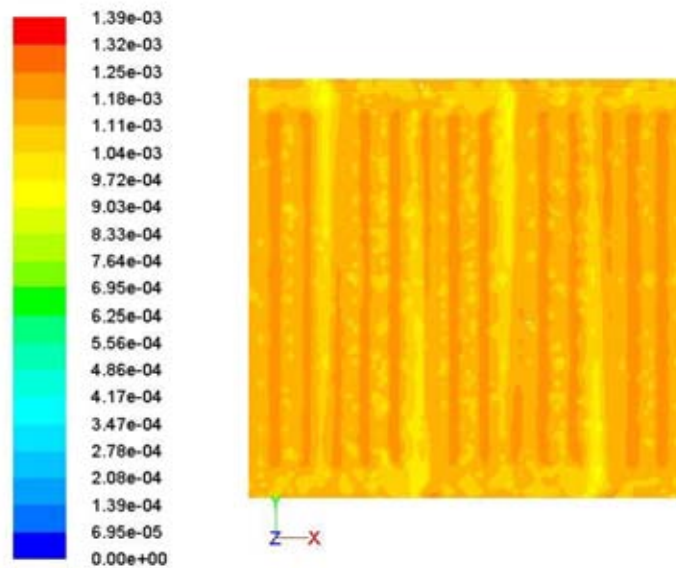
ภาพที่ 4.52 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สเข้าต่าง ๆ



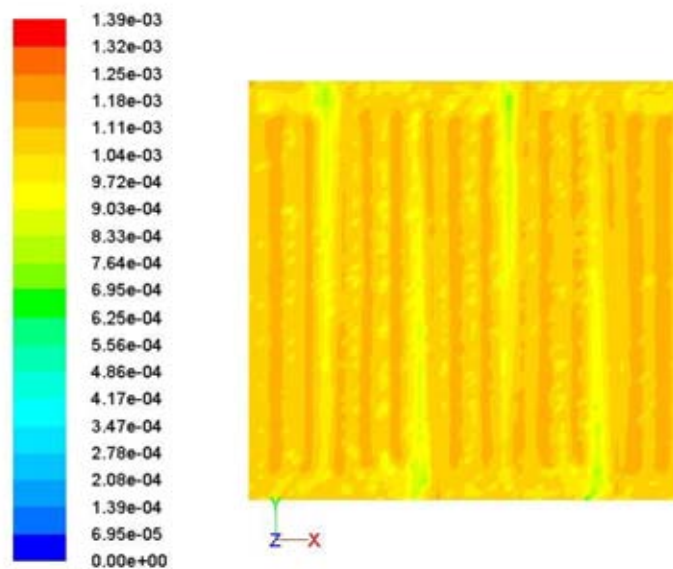
ภาพที่ 4.53 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 0.47 m/s และค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเท่ากับ $2.88 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$



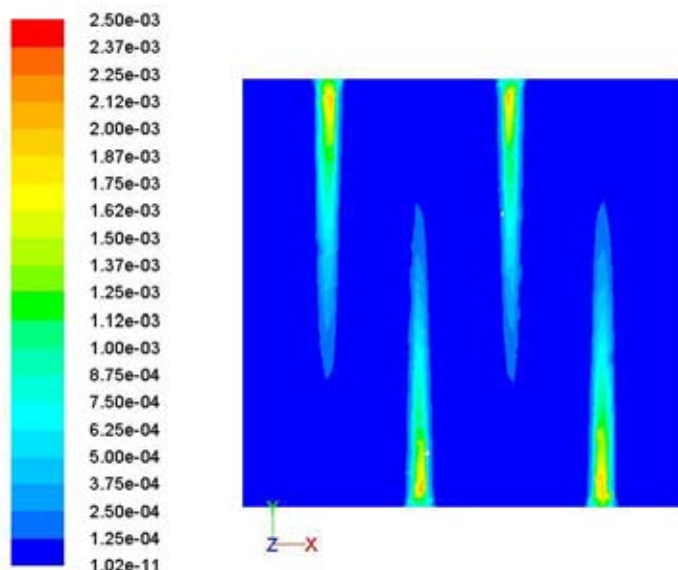
ภาพที่ 4.54 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 1.00 m/s และค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเท่ากับ $2.88 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$



ภาพที่ 4.55 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 3.00 m/s และค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเท่ากับ $2.88 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$



รูปที่ 4.56 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 5.00 m/s และค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเท่ากับ $2.88 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$

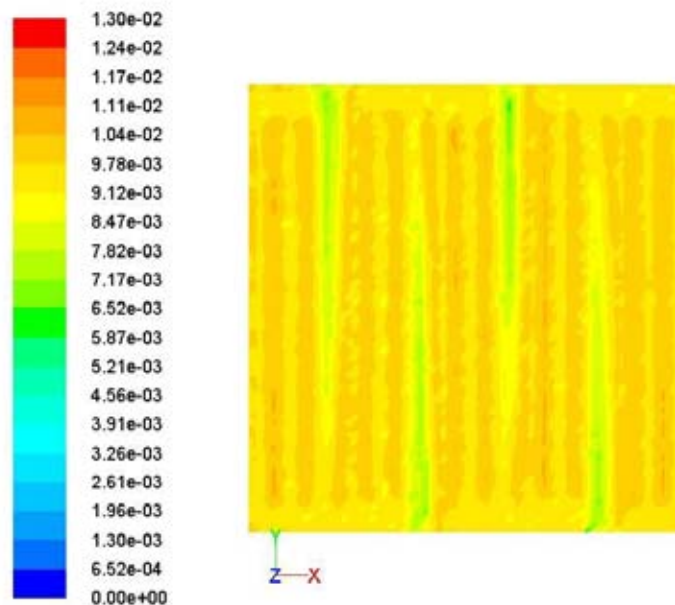


รูปที่ 4.57 ความดันพลศาสตร์ในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 0.47 m/s และค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเท่ากับ 2.88×10^{-5} m²/s

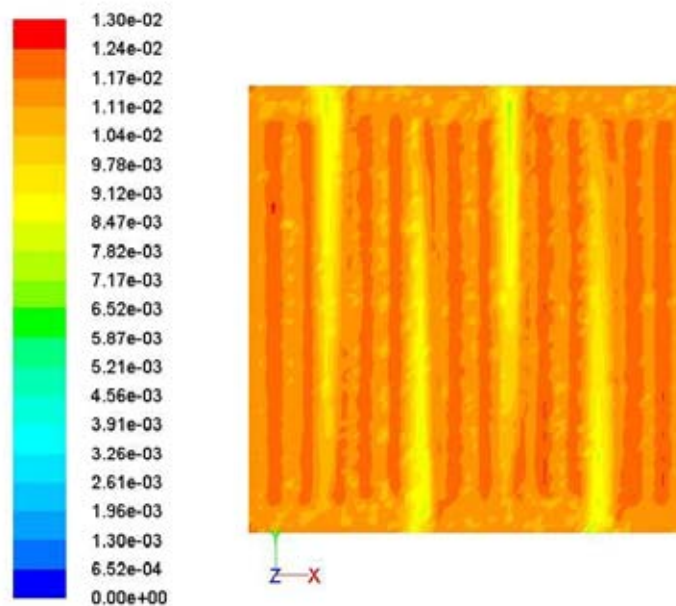
4.2.3.2 ผลจากค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอน

การศึกษาค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนทางฝั่งแคโทดที่มีผลต่อการกระจายตัวของโปรตอน โดยพิจารณาโปรตอนบริเวณที่ผิวสัมผัสระหว่างชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาและชั้นการแพร่ของแก๊ส ผลที่ได้คือเมื่อค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนมีค่าลดลงที่ความเร็วแก๊สออกซิเจนขาเข้าเดียวกัน ความเข้มข้นของโปรตอนที่อยู่ในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาจะมีความเข้มข้นมากขึ้น ดังภาพที่ 4.58-4.59 เนื่องจากที่ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนต่ำทำให้โปรตอนที่สะสมอยู่ภายในเมมเบรนมีค่ามากกว่าที่ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนสูง ส่งผลให้ความเข้มข้นของโปรตอนในเมมเบรนที่ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนต่ำมีค่าสูงกว่าที่ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนสูง ดังนั้นความเข้มข้นของโปรตอนที่นำมาใช้แพร่เข้าสู่ชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดจึงแปรผกผันกับค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอน ทำให้ความเข้มข้นของโปรตอนภายในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดมีค่ามากกว่าที่ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนต่ำ อีกทั้งการที่มีความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาที่มากขึ้นทำให้มีพื้นที่ให้ออกซิเจนแพร่เข้าไปทำปฏิกิริยาที่ชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาได้ลดลง และเมื่อเพิ่มความเร็วของแก๊สขาเข้ามากขึ้นความเข้มข้นของโปรตอนที่อยู่ในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยามีค่าน้อยลงดังกราฟภาพที่ 4.60 เพราะออกซิเจนที่ป้อนเข้ามีความดันที่สูงขึ้นทำให้แก๊สออกซิเจนสามารถผลักโปรตอนและเข้าไปทำปฏิกิริยาในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยา

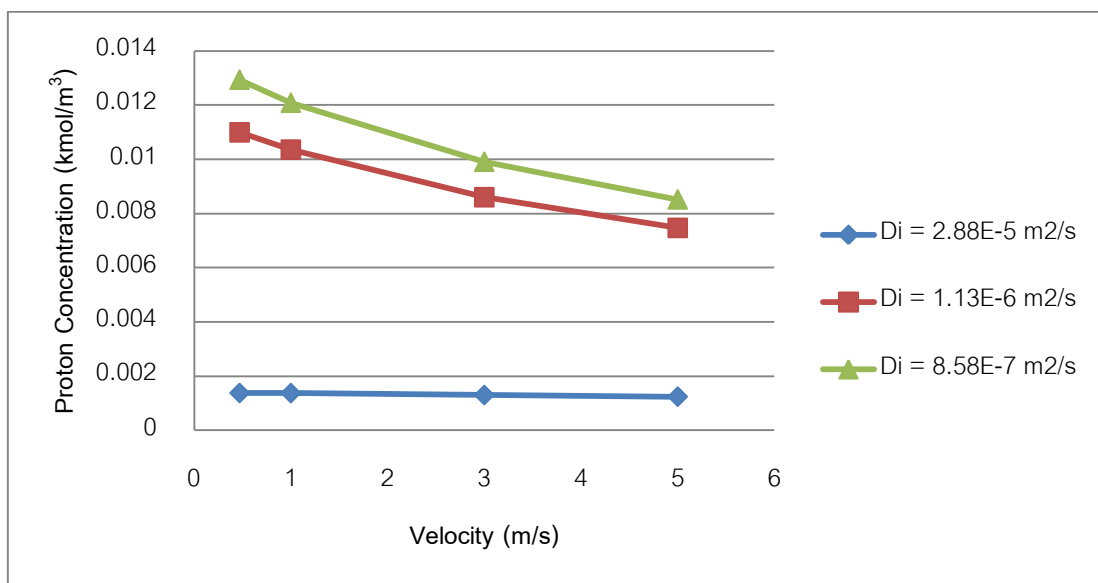
ได้มากขึ้นดังกราฟภาพที่ 4.61 ซึ่งทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยามากขึ้น ส่งผลให้ความหนาแน่นกระแสที่ได้เพิ่มมากขึ้นด้วยดังกราฟภาพที่ 4.62 ถึงแม้ว่าการเพิ่มความเร็วแก๊สออกซิเจนเข้าจะทำให้ได้ค่าความหนาแน่นกระแสมากขึ้นซึ่งหมายความว่าผลิตภัณฑ์ที่เป็นน้ำควรจะได้ปริมาณมากขึ้นด้วย แต่เมื่อเพิ่มความเร็วแก๊สออกซิเจนเข้าปริมาณน้ำกลับลดลงดังกราฟภาพที่ 4.63 ทั้งนี้เนื่องมาจากความเข้มข้นของออกซิเจนที่มากในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาทำให้น้ำที่ได้จากปฏิกิริยาถูกออกซิเจนผลัดออกมาจากชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาได้มากอีกทั้งเมื่อความเร็วแก๊สเข้าเพิ่มขึ้นยังทำให้น้ำที่ได้ถูกกำจัดออกไปได้มากขึ้น เมื่อเปรียบเทียบปริมาณน้ำที่ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนที่แตกต่างกันจะเห็นว่าที่ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนต่ำปริมาณน้ำที่สะสมอยู่ในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาก็จะต่ำลงเนื่องจากโปรตอนมีความเข้มข้นสะสมมากขึ้นทำให้พื้นที่ในชั้นปฏิกิริยาสูญเสียไปกับโปรตอนทำให้พื้นที่ที่น้ำจะอยู่ภายในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยามีน้อยลง



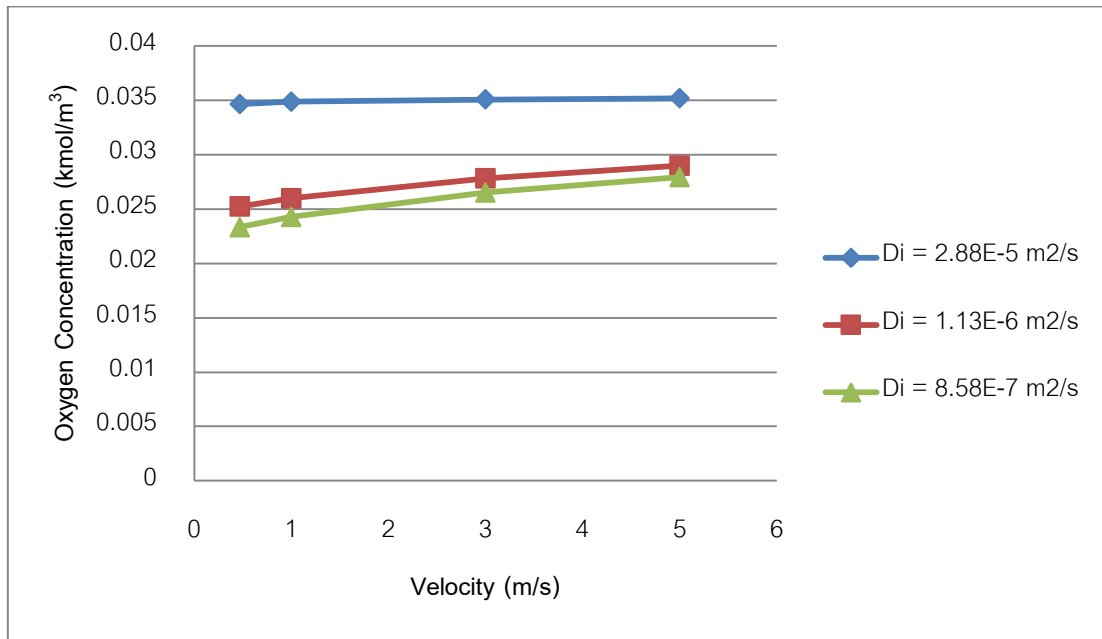
ภาพที่ 4.58 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สเข้าเท่ากับ 0.47 m/s และค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเท่ากับ $1.13 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$



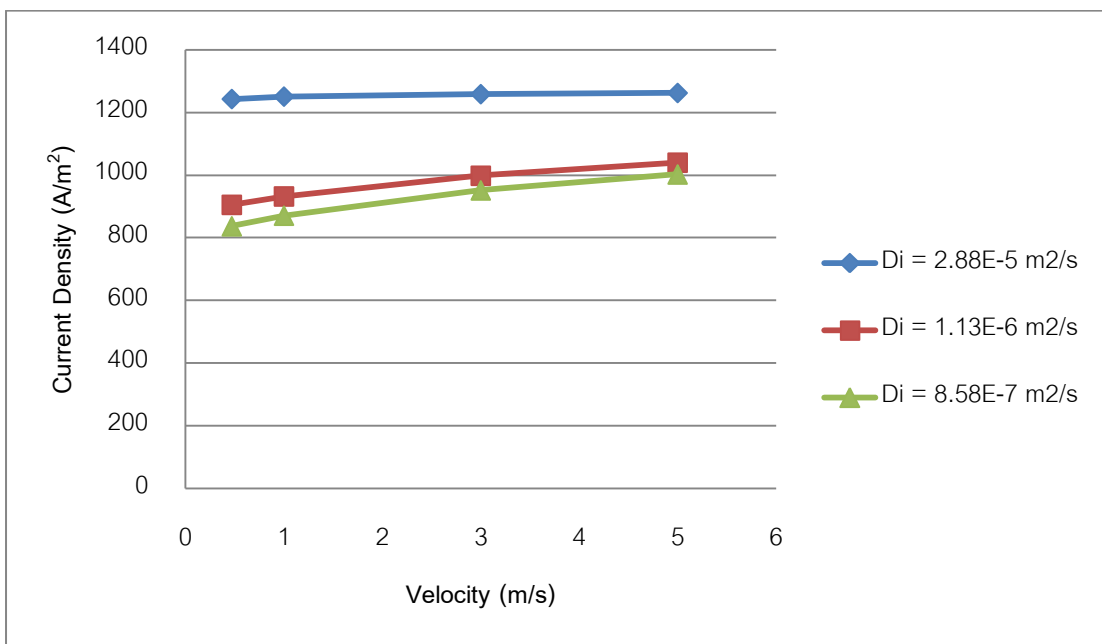
ภาพที่ 4.59 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 0.47 m/s และค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนเท่ากับ $8.58 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$



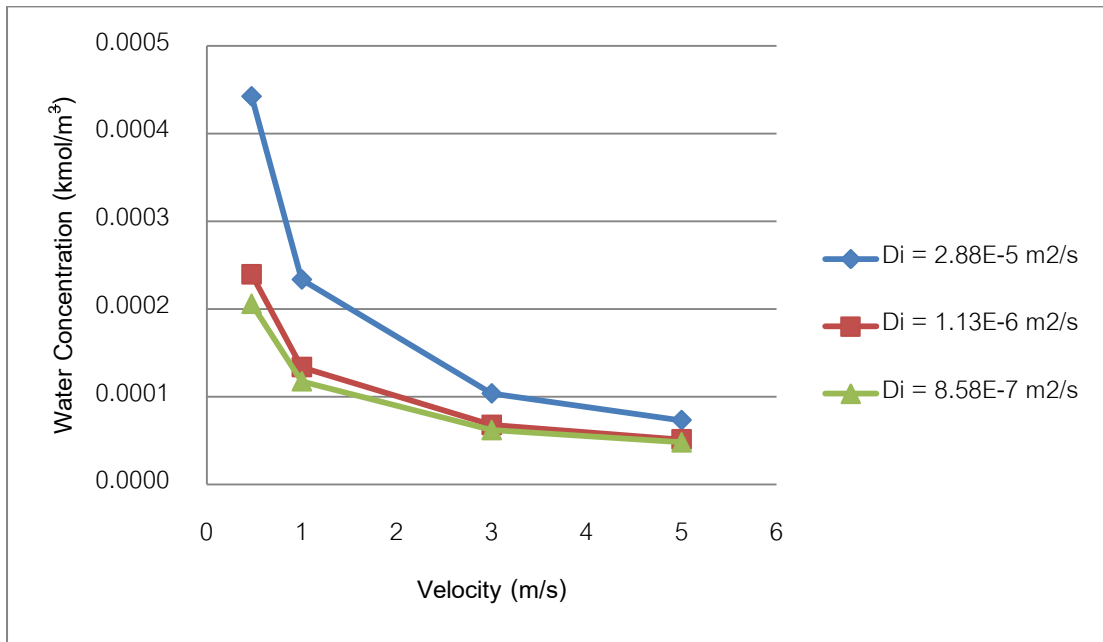
ภาพที่ 4.60 การเปรียบเทียบความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนแต่ละค่า



ภาพที่ 4.61 การเปรียบเทียบความเข้มข้นของออกซิเจนในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทด
ที่ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนแต่ละค่า



ภาพที่ 4.62 ความหนาแน่นกระแสที่ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนแต่ละค่า

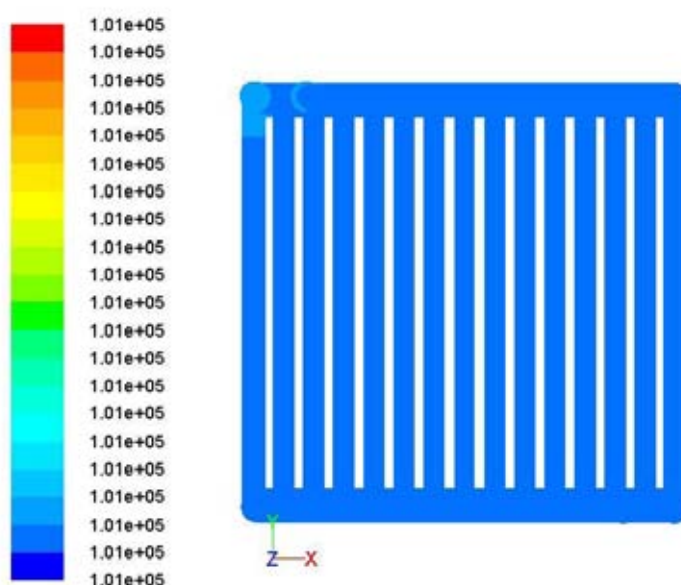


ภาพที่ 4.63 การเปรียบเทียบความเข้มข้นของน้ำในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทด
ที่ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนแต่ละค่า

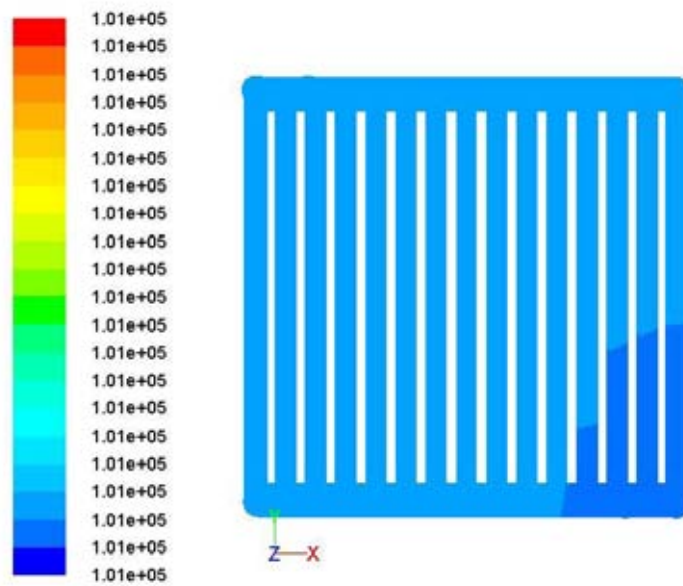
4.2.3.3 ผลจากความแตกต่างของช่องการไหลของแก๊ส

ในส่วนของการศึกษาความแตกต่างของช่องการไหลทางฝั่งแคโทด จากผลการจำลองพบว่าความดันภายในช่องการไหลมีลักษณะคล้ายคลึงกับฝั่งแอโนดคือความดันจะลดลงไปตามแนวเส้นทแยงระหว่างช่องแก๊สขาเข้าและช่องแก๊สขาออกดังภาพที่ 4.64-4.67 เมื่อเปรียบเทียบความดันเฉลี่ยในช่องการไหลพบว่าความดันเฉลี่ยในท่อการไหลแบบขนานมีค่าน้อยกว่าช่องการไหลแบบคดเคี้ยวดังกราฟภาพที่ 4.68 แต่อย่างไรก็ตาม ความดันมีแนวโน้มเพิ่มขึ้นตามแนวท่อแกนตั้งมากกว่าเนื่องจากมีช่องทางให้แก๊สไหลไปได้มากกว่าท่อตามแนวแกนนอน เมื่อศึกษาผลกระทบจากความเร็วของแก๊สขาเข้าทางฝั่งแคโทดที่มีผลต่อการกระจายตัวของโปรตอนในบริเวณชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาซึ่งกำหนดให้โปรตอนที่ได้จากการจำลองปฏิกิริยาทางฝั่งแอโนดแพร่เข้ามาบริเวณผิวสัมผัสของเมมเบรนและชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดเช่นเดียวกับการกำหนดค่าในแบบจำลองช่องการไหลแบบคดเคี้ยว ซึ่งกำหนดให้แพร่เข้าทั่วเท่ากันทั้งระนาบ จากผลการจำลองที่ได้จะเห็นว่าความเข้มข้นของโปรตอนที่กระจายอยู่ในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาจะมีความเข้มข้นต่ำลงบริเวณที่อยู่ใต้ช่องการไหลของแก๊สเนื่องมาจากการถูกใช้ไปในปฏิกิริยาและถูกออกซิเจนในระบบดันมาจากช่องการไหลดังภาพที่ 4.69-4.72 อย่างไรก็ตามการกระจายตัวไม่มีการเปลี่ยนแปลงมากนักเมื่อความเร็วแก๊สขาเข้าเพิ่มขึ้น เมื่อเปรียบเทียบความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยา

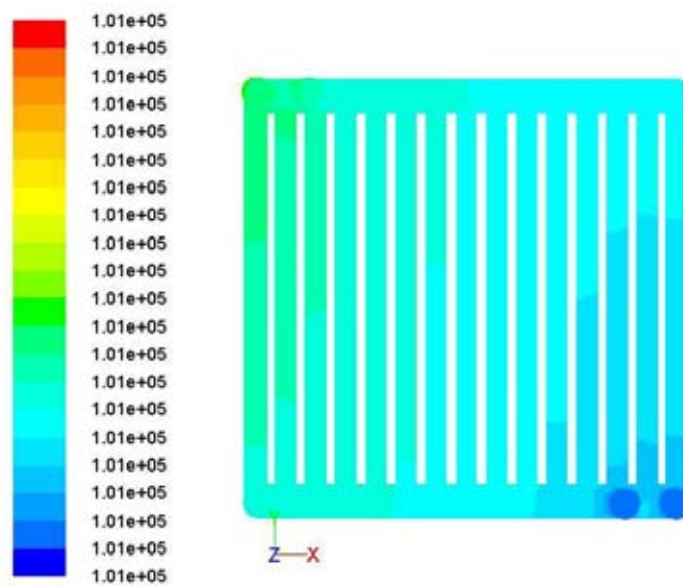
ระหว่างเซลล์ที่มีช่องการไหลแบบคดเคี้ยวและช่องการไหลแบบขนานพบว่าช่องการไหลแบบคดเคี้ยวมีความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาจะลดต่ำลงเมื่อความเร็วแก๊สขาเข้าเพิ่มขึ้น ในขณะที่ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาของช่องการไหลแบบขนานมีการเปลี่ยนแปลงน้อยมากและมีความเข้มข้นของโปรตอนมากกว่าเมื่อความเร็วแก๊สขาเข้าเพิ่มขึ้น ดังกราฟภาพที่ 4.73 ทั้งนี้เนื่องมาจากโปรตอนที่มาจากฝั่งแอโนดของช่องการไหลแบบขนานมีปริมาณสูงกว่าโปรตอนของช่องการไหลคดเคี้ยว



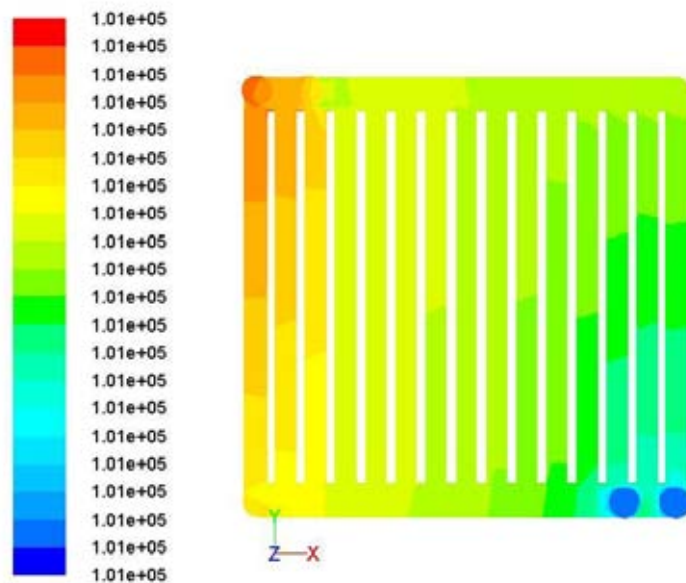
ภาพที่ 4.64 ความดันในช่องการไหลของแก๊สฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 0.47 m/s ของช่องการไหลแบบขนาน



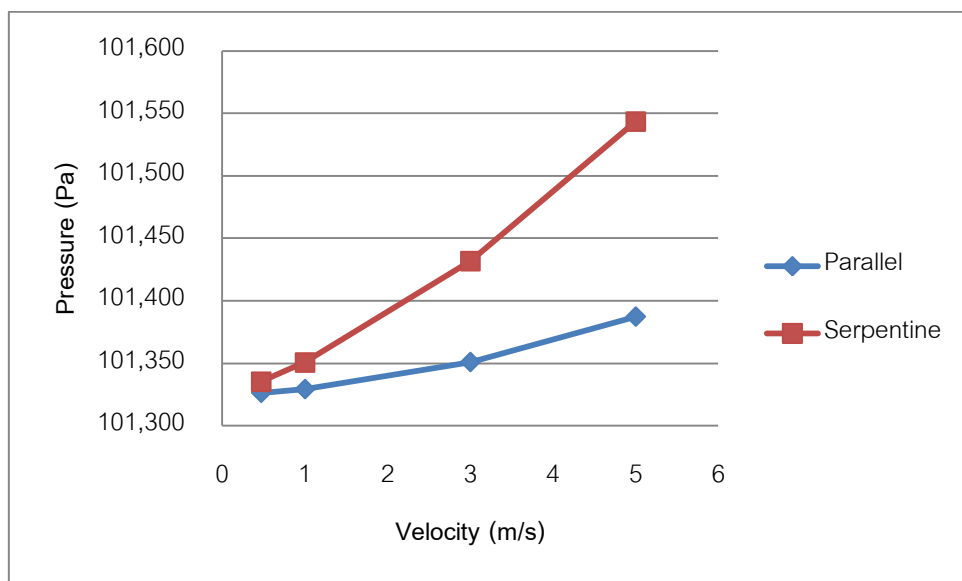
ภาพที่ 4.65 ความดันในช่องการไหลของแก๊สฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 1.00 m/s
ของช่องการไหลแบบขนาน



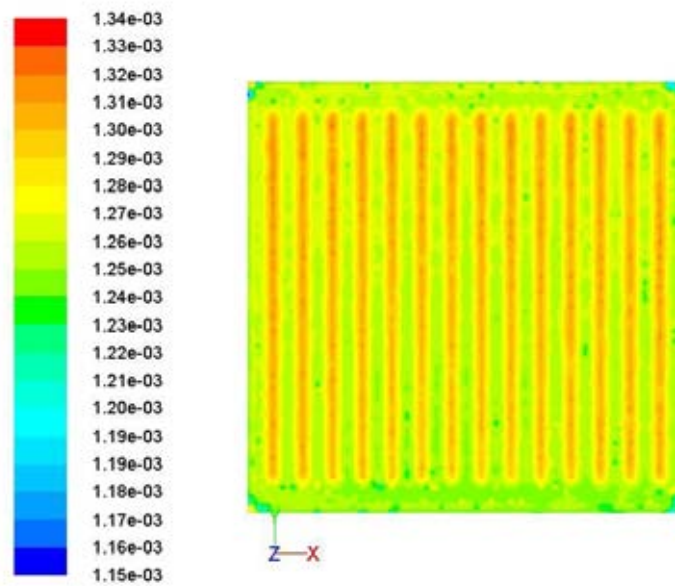
ภาพที่ 4.66 ความดันในช่องการไหลของแก๊สฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 3.00 m/s
ของช่องการไหลแบบขนาน



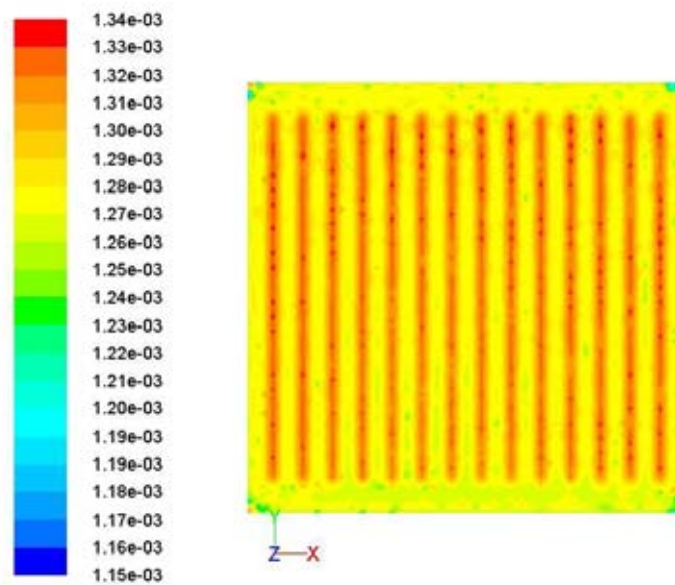
ภาพที่ 4.67 ความดันในช่องการไหลของแก๊สฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 5.00 m/s
ของช่องการไหลแบบขนาน



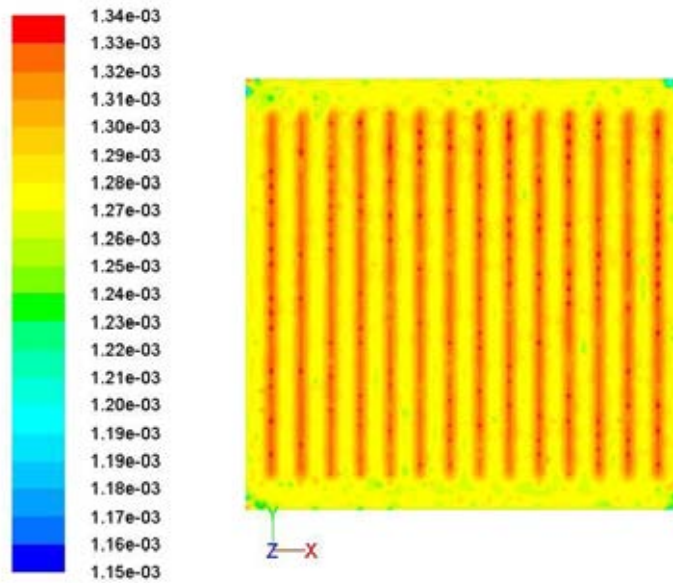
ภาพที่ 4.68 การเปรียบเทียบความดันในช่องการไหลฝั่งแคโทด
ของช่องการไหลแบบคดเคี้ยวและแบบขนาน



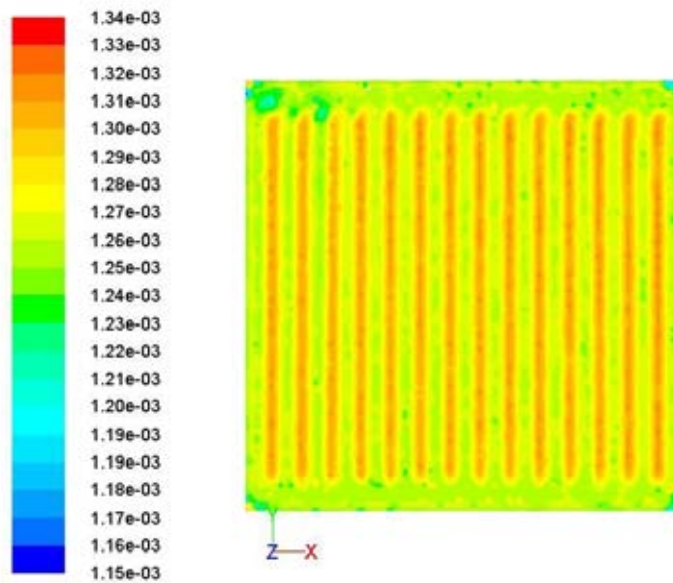
ภาพที่ 4.69 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 0.47 m/s ของช่องการไหลแบบขนาน



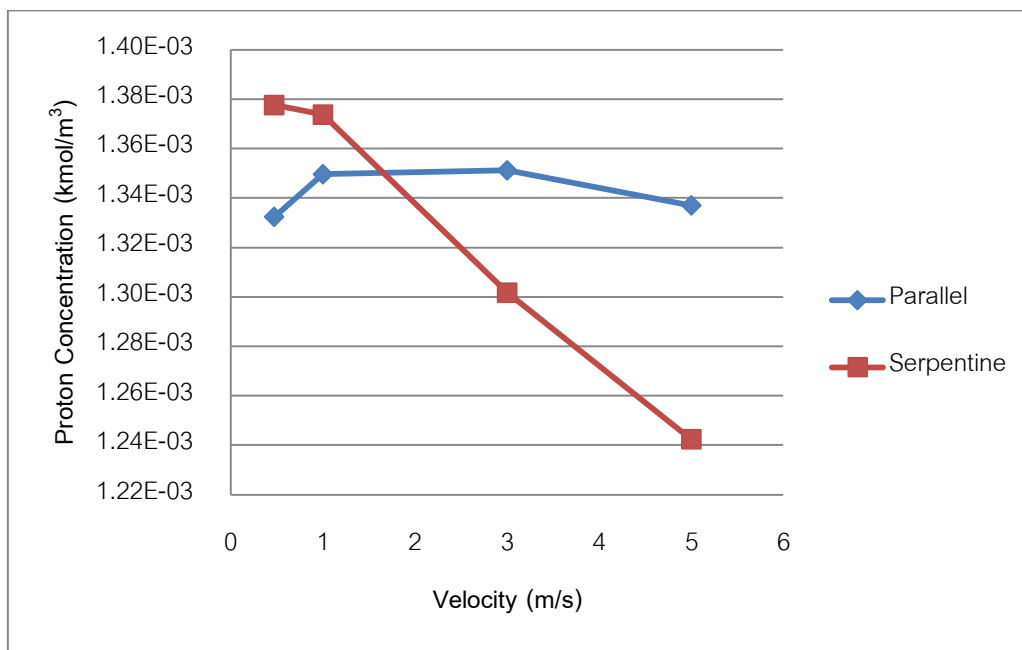
ภาพที่ 4.70 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 1.00 m/s ของช่องการไหลแบบขนาน



ภาพที่ 4.71 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 3.00 m/s ของช่องการไหลแบบขนาน

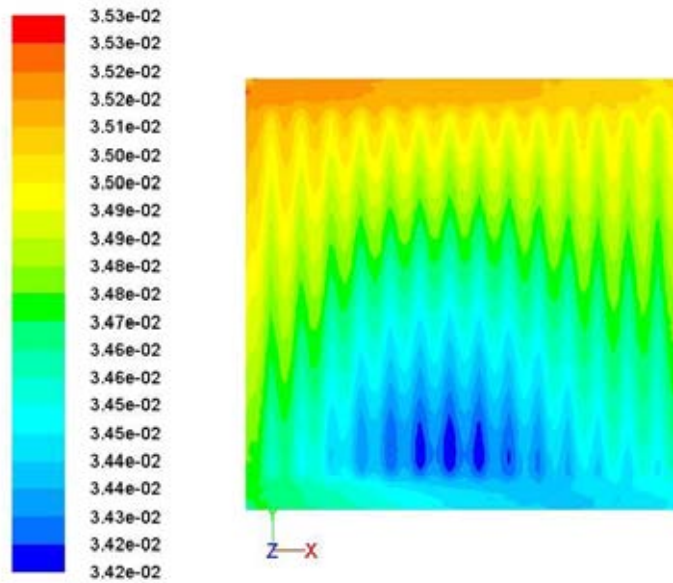


ภาพที่ 4.72 ความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 5.00 m/s ของช่องการไหลแบบขนาน

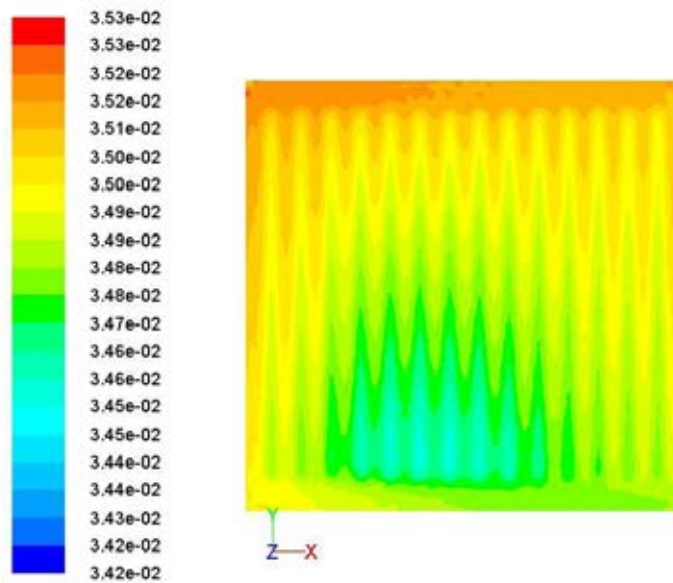


ภาพที่ 4.73 การเปรียบเทียบความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดของช่องการไหลแบบคดเคี้ยวและแบบขนาน

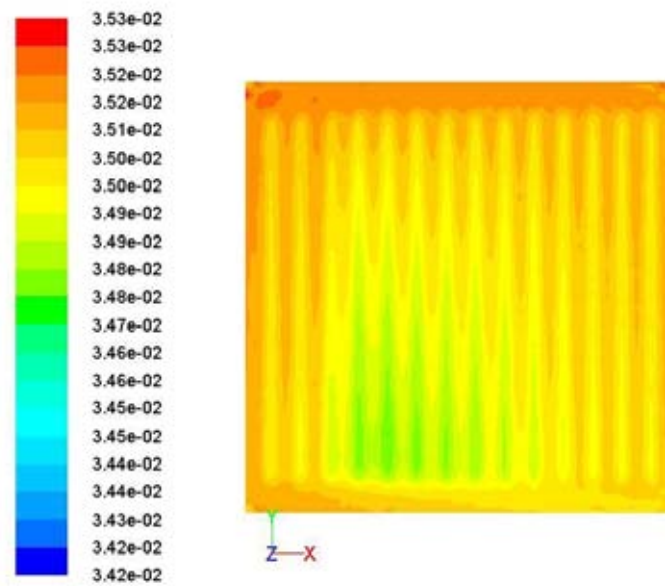
เมื่อศึกษาการกระจายตัวของแก๊สออกซิเจนในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยา พบว่าการกระจายตัวของแก๊สออกซิเจนจะหนาแน่นบริเวณช่องการไหลตามท่อสองทิศทาง คือส่วนแรกจะไหลไปตามท่อตามแนวตั้งที่ต่อจากช่องแก๊สขาเข้าแล้วจึงแล้วเข้าท่อแนวนอนไปสู่ช่องแก๊สขาออก ส่วนที่สองคือไหลไปตามท่อแนวนอนที่ติดกับช่องแก๊สขาเข้าแล้วจึงเลี้ยวเข้าสู่ท่อแนวตั้งเพื่อไปสู่ช่องแก๊สขาออก โดยที่ความเข้มข้นของออกซิเจนจะต่ำที่สุดบริเวณจุดกึ่งกลางฝั่งใกล้กับช่องแก๊สขาออกดังภาพที่ 4.74-4.77 ซึ่งแตกต่างจากช่องการไหลแบบคดเคี้ยวที่ออกซิเจนจะลดลงตามแนวความยาวของท่อ ทั้งนี้เนื่องมาจากออกซิเจนมีแนวโน้มที่จะไหลไปสู่ท่อตามแนวนอนมากกว่าที่จะเลี้ยวออกไปตามท่อแนวตั้ง และจะเกิดการสะสมที่มุมหักเลี้ยวมากกว่า ทำให้การกระจายตัวของออกซิเจนที่ความเร็วต่ำกระจายตัวอยู่บริเวณส่วนบนของเซลล์ใกล้กับช่องแก๊สขาเข้ามากกว่าบริเวณส่วนล่างของเซลล์ซึ่งบริเวณที่มีออกซิเจนต่ำนี้คือบริเวณที่มีน้ำไปสะสมอยู่ เมื่อเพิ่มความเร็วของแก๊สขาเข้าให้มากขึ้นจะทำให้การกระจายตัวของออกซิเจนมีความสม่ำเสมอทั่วชั้นตัวเร่งปฏิกิริยามากขึ้น เนื่องจากความเร็วแก๊สขาเข้าที่เพิ่มขึ้นทำให้สามารถกำจัดน้ำที่สะสมอยู่ออกไปได้มากขึ้นดังภาพที่ 4.78-4.81



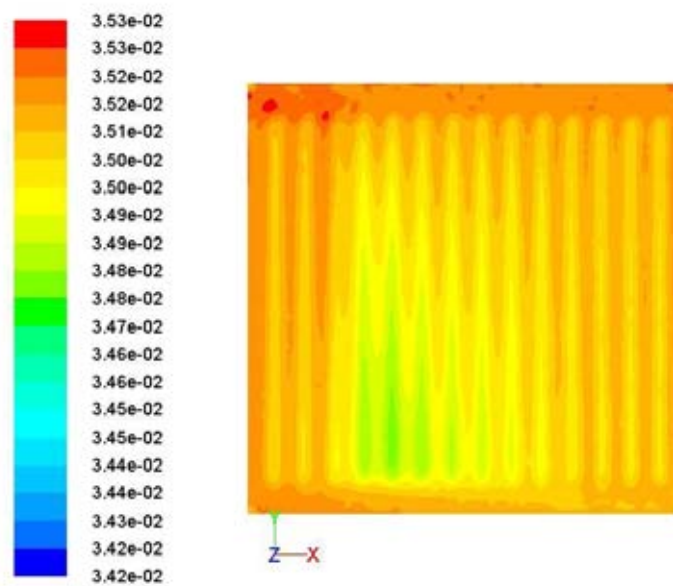
ภาพที่ 4.74 ความเข้มข้นของออกซิเจนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 0.47 m/s ของช่องการไหลแบบขนาน



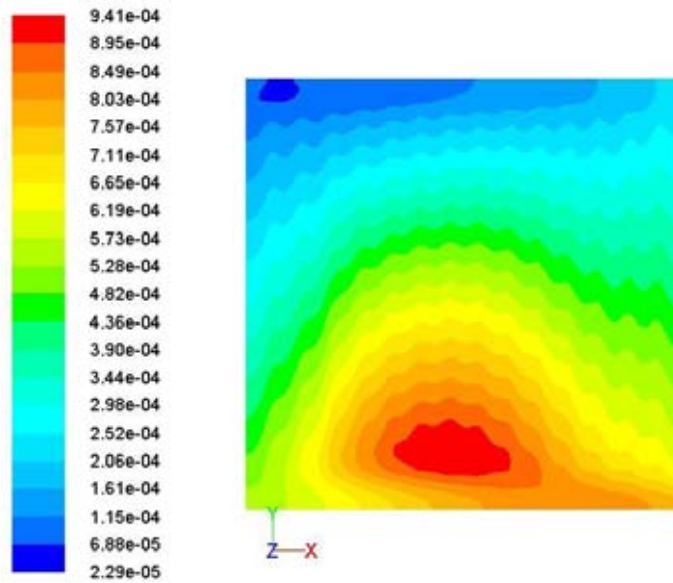
ภาพที่ 4.75 ความเข้มข้นของออกซิเจนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 1.00 m/s ของช่องการไหลแบบขนาน



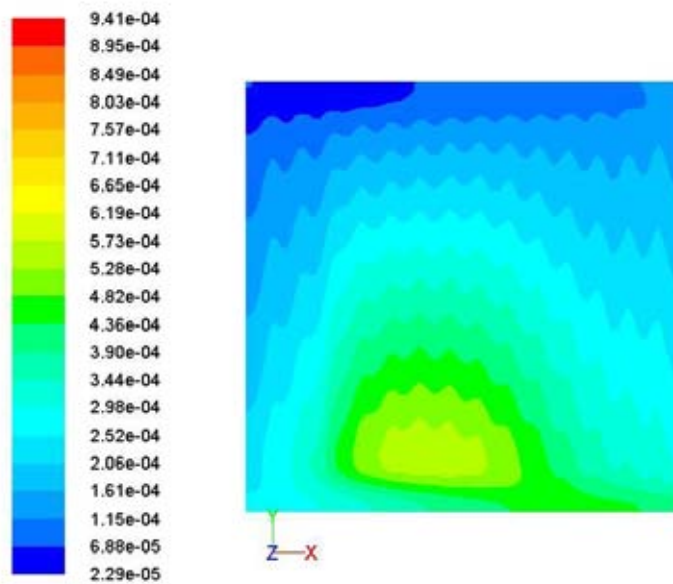
ภาพที่ 4.76 ความเข้มข้นของออกซิเจนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 3.00 m/s ของช่องการไหลแบบขนาน



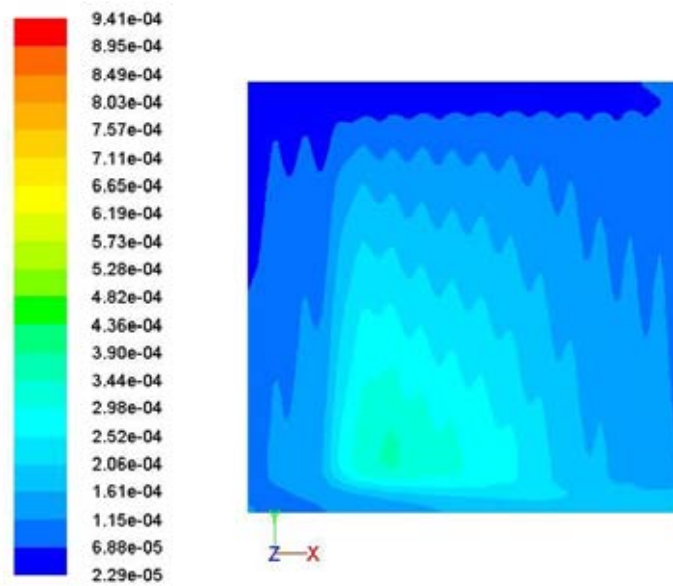
ภาพที่ 4.77 ความเข้มข้นของออกซิเจนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 5.00 m/s ของช่องการไหลแบบขนาน



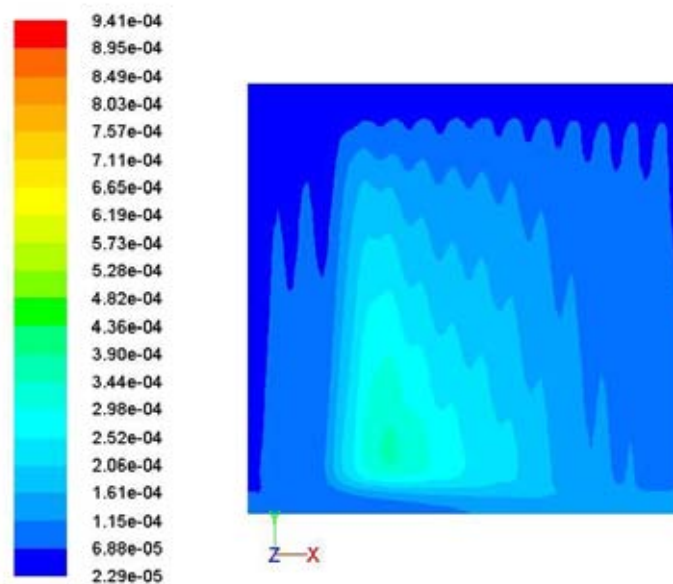
ภาพที่ 4.78 ความเข้มข้นของน้ำในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สเข้าเท่ากับ 0.47 m/s ของช่องการไหลแบบขนาน



ภาพที่ 4.79 ความเข้มข้นของน้ำในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สเข้าเท่ากับ 1.00 m/s ของช่องการไหลแบบขนาน



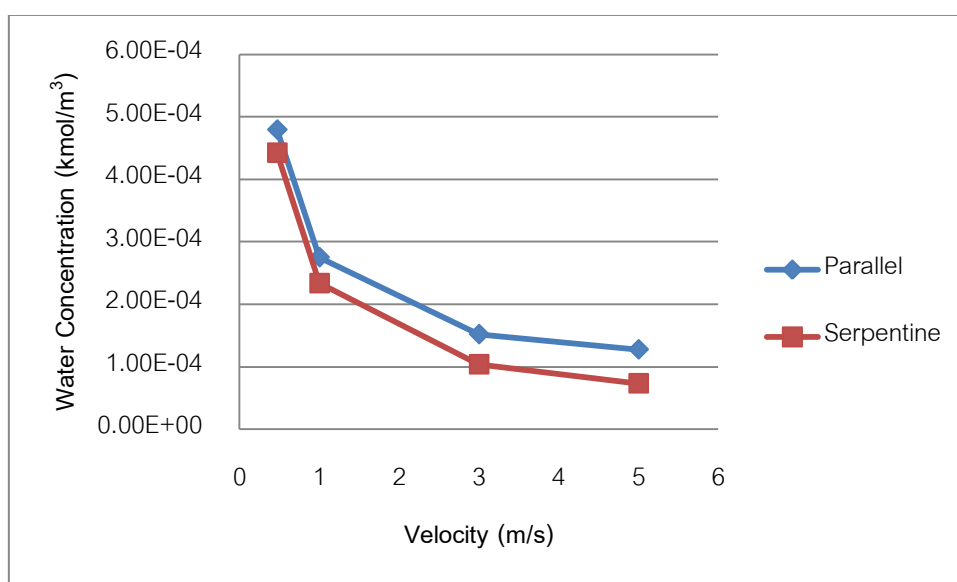
ภาพที่ 4.80 ความเข้มข้นของน้ำในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 3.00 m/s ของช่องการไหลแบบขนาน



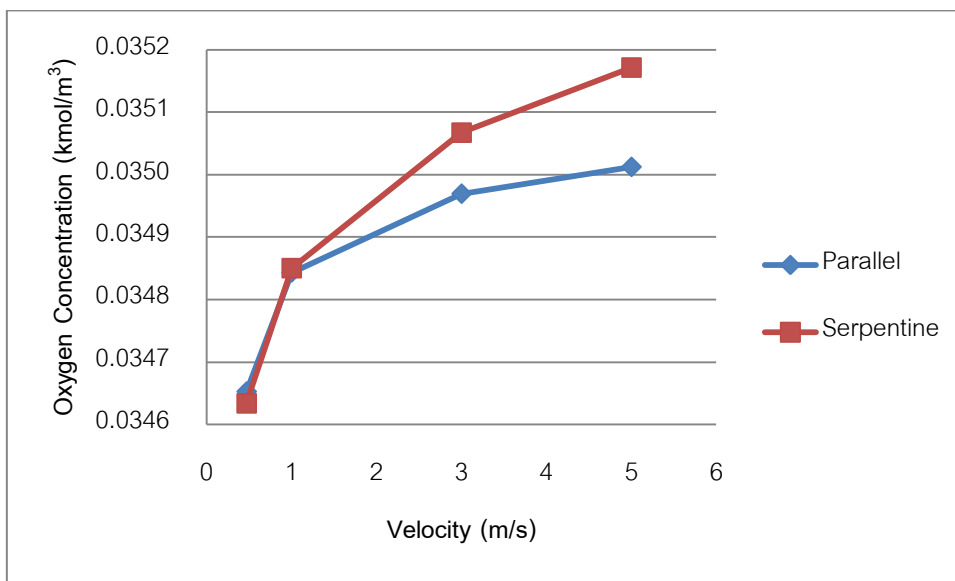
ภาพที่ 4.81 ความเข้มข้นของน้ำในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดที่ความเร็วแก๊สขาเข้าเท่ากับ 5.00 m/s ของช่องการไหลแบบขนาน

เมื่อเปรียบเทียบความเข้มข้นของออกซิเจนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาของเซลล์ที่มีช่องการไหลแบบคดเคี้ยวและช่องการไหลแบบขนานพบว่าเมื่อเพิ่มความเร็วแก๊สขาเข้ามากขึ้นความเข้มข้น

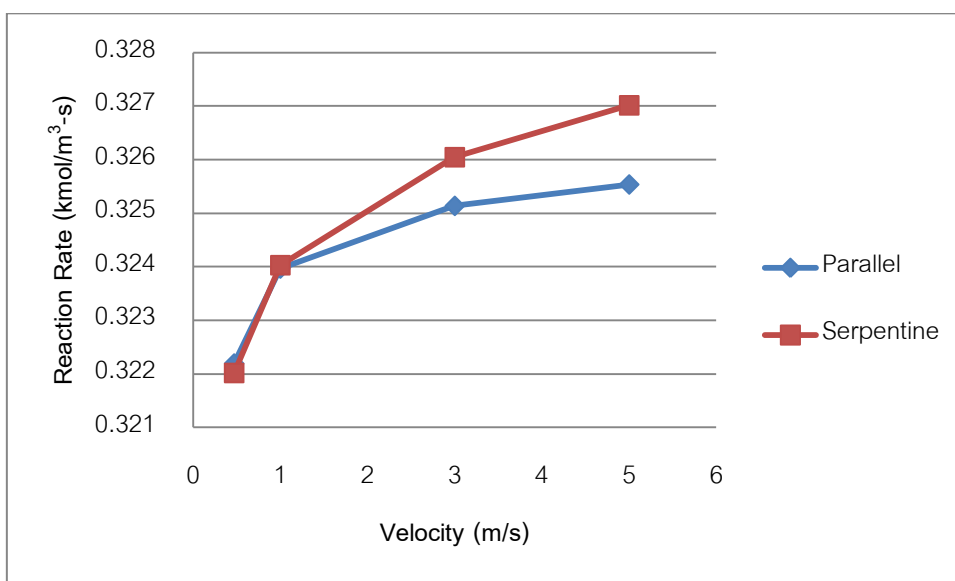
ของออกซิเจนในช่องการไหลแบบคดเคี้ยวมีมากกว่าช่องการไหลแบบขนานเนื่องจากในช่องการไหลแบบคดเคี้ยวมีความดันสูงกว่าทำให้ออกซิเจนเคลื่อนที่เข้าไปสู่ชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาได้ดีกว่า อีกทั้งในช่องการไหลแบบคดเคี้ยวยังกำจัดน้ำที่สะสมอยู่ได้ดีกว่าดังภาพที่ 4.82 เพราะแก๊สออกซิเจนที่ไหลในช่องการไหลจะไหลไปตามแนวตลอดทั้งท่อ ต่างจากช่องการไหลแบบขนานที่แก๊สออกซิเจนมีแนวโน้มที่จะไหลไปแค่ท่อตามแนวตั้งและแนวนอนที่ติดอยู่กับช่องแก๊สขาเข้าเท่านั้น และเมื่อมีความเข้มข้นของออกซิเจนสูงกว่าจึงทำให้ช่องการไหลแบบคดเคี้ยวมีอัตราการเกิดปฏิกิริยามากกว่าดังกราฟภาพที่ 4.84 ทำให้ได้ปริมาณความหนาแน่นกระมากกว่าดังภาพที่ 4.83



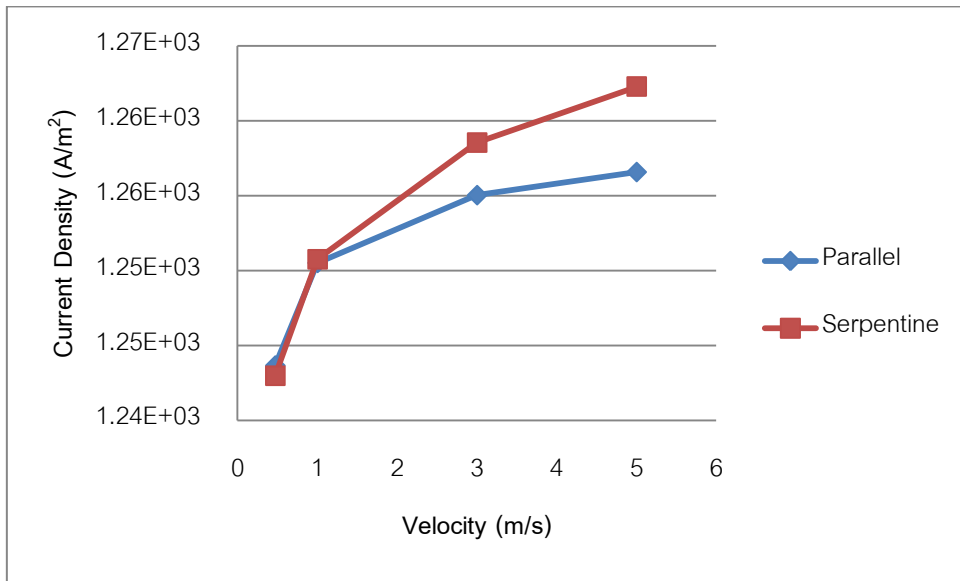
ภาพที่ 4.82 การเปรียบเทียบความเข้มข้นของน้ำในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดของช่องการไหลแบบคดเคี้ยวและแบบขนาน



ภาพที่ 4.83 การเปรียบเทียบความเข้มข้นของออกซิเจนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดของช่องการไหลแบบคดเคี้ยวและแบบขนาน



ภาพที่ 4.84 การเปรียบเทียบอัตราการเกิดปฏิกิริยาในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดของช่องการไหลแบบคดเคี้ยวและแบบขนาน



ภาพที่ 4.85 การเปรียบเทียบความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าของช่องการไหลแบบคดเคี้ยวและแบบขนาน

บทที่ 5

สรุปผลการวิจัย และข้อเสนอแนะ

5.1 สรุปผลการวิจัย

งานวิจัยนี้ได้มีการพัฒนาแบบจำลองสามมิติหนึ่งภูมิภาคของเซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็มขนาด 5 ตารางเซนติเมตร ฝั่งขั้วแอโนด และ แคโทดที่แยกจากกันโดยอิสระ ด้วยโปรแกรม ANSYS FLUENT 12.1 เพื่อศึกษาอิทธิพลของช่องทางการไหลของแก๊สที่มีต่อสมรรถนะของเซลล์ฝั่งขั้วแอโนดและแคโทด ซึ่งแบบจำลองที่พัฒนาขึ้นมีความน่าเชื่อถือในระดับหนึ่ง เนื่องจากผลที่ได้จากแบบจำลองมีแนวโน้มสอดคล้องกับผลการทดลอง แต่เนื่องจากเป็นแบบจำลองหนึ่งภูมิภาค m ทำให้แบบจำลองไม่สามารถทำนายปรากฏการณ์น้ำท่วมที่เกิดขึ้นทางฝั่งขั้วแคโทดได้

5.1.1 การศึกษาอุทกพลศาสตร์และการเกิดปฏิกิริยาของเซลล์เชื้อเพลิงฝั่งแอโนด

5.1.1.1 ผลจากความเร็วก๊าซขาเข้า

การเพิ่มความเร็วก๊าซขาเข้ามีผลทำให้ไฮโดรเจนเข้าไปทำปฏิกิริยาในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาได้มากขึ้นทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาเพิ่มมากขึ้นแต่เพียงเล็กน้อยเท่านั้นเนื่องจากที่ความเร็วของก๊าซขาเข้าค่าต่ำที่สุดความเข้มข้นเฉลี่ยของไฮโดรเจนในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยามีความเข้มข้นใกล้เคียงกับความเข้มข้นขาเข้า นอกจากนี้โปรตอนประพุดตัวเหมือนแก๊สตัวหนึ่งทำให้โปรตอนที่เกิดจากปฏิกิริยาถูกอิทธิพลจากความเร็วของก๊าซขาเข้าพัดออกไปจากชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาได้มากขึ้นตามความเร็วของก๊าซขาเข้าที่เพิ่มขึ้นทำให้ความเข้มข้นของโปรตอนมีค่าลดลง และความเร็วก๊าซขาเข้าที่เพียงพอสำหรับระบบที่ทำการศึกษาคือ 1 m/s

5.1.1.2 ผลจากค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอน

เมื่อค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนมีค่าลดลงจะทำให้โปรตอนเคลื่อนที่ออกไปจากตัวเร่งปฏิกิริยาได้ยากขึ้นทำให้โปรตอนตกค้างอยู่ในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยามากขึ้น ส่งผลให้ไฮโดรเจนเข้าไปทำปฏิกิริยาในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาได้น้อยลงเนื่องจากโปรตอนที่ตกค้างอยู่ไปบดบังพื้นที่ในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาทำให้ไฮโดรเจนเข้าไปทำปฏิกิริยาได้น้อยลงทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาลดลงและเนื่องจากโปรตอนที่สะสมอยู่มากขึ้นจึงทำให้แพร่เข้าสู่เมมเบรนและไปสู่ขั้วแคโทดมากขึ้น

5.1.1.3 ผลจากความแตกต่างของช่องการไหลของแก๊ส

ผลของความแตกต่างของช่องการไหลระหว่างช่องการไหลแบบคดเคี้ยวและช่องการไหลแบบขนานทางฝั่งแอโนดแสดงให้เห็นถึงความแตกต่างกันของความดันภายในซึ่งช่องการไหลแบบขนานจะมีความดันในระบบน้อยกว่าแบบคดเคี้ยว อีกทั้งปริมาณโปรตอนที่สะสมอยู่ในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาของช่องการไหลแบบขนานมีค่ามากกว่าช่องการไหลแบบคดเคี้ยวเนื่องจากโปรตอนถูกพัดออกไปจากระบบมากกว่า แต่ความเข้มข้นของไฮโดรเจนและอัตราการเกิดปฏิกิริยาในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาไม่มีความแตกต่างกันมากนักในช่องการไหลทั้งสองแบบ

5.1.2 การศึกษาอุทกพลศาสตร์และการเกิดปฏิกิริยาของเซลล์เชื้อเพลิงฝั่งแคโทด

5.1.2.1 ผลจากความเร็วของแก๊สขาเข้า

การเพิ่มความเร็วแก๊สขาเข้ามีผลทำให้ออกซิเจนทำปฏิกิริยาในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยากับโปรตอนและอิเล็กตรอนที่มาจากปฏิกิริยาฝั่งแอโนดได้ดียิ่งขึ้นส่งผลให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาและความหนาแน่นกระแสที่ได้มีค่าเพิ่มมากขึ้น อีกทั้งความเร็วแก๊สขาเข้าที่เพิ่มขึ้นยังมีส่วนทำให้น้ำที่ได้จากปฏิกิริยาถูกพัดออกไปจากตัวเร่งปฏิกิริยามากขึ้นทำให้ออกซิเจนเข้าทำปฏิกิริยาในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาได้มากขึ้น แต่ข้อควรระวังคือการกำจัดน้ำที่มากขึ้นอาจทำให้เมมเบรนแห้งได้

5.1.2.2 ผลจากค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอน

ผลของค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนให้ผลต่อเนื่องมาจากฝั่งแอโนดคือ เมื่อค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนมีค่าลดลงทำให้โปรตอนตกค้างอยู่ในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยามากขึ้นทำให้โปรตอนแพร่เข้าสู่เมมเบรนมากขึ้นจากนั้นจึงแพร่เข้าสู่ชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดมากขึ้นจึงทำให้โปรตอนที่อยู่ในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งแคโทดมากขึ้น เนื่องจากโปรตอนประพุดิตัวเหมือนแก๊สตัวหนึ่งดังนั้นความเข้มข้นของโปรตอนในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาที่มากขึ้นทำให้มีพื้นที่สำหรับออกซิเจนเข้าทำปฏิกิริยาในชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาได้น้อยลง อัตราการเกิดปฏิกิริยาและความหนาแน่นกระแสที่ได้จึงน้อยลง

5.1.2.3 ผลจากความแตกต่างของช่องการไหลของแก๊ส

ผลกระทบที่มาจากช่องการไหลแบบคดเคี้ยวและแบบขนานทางฝั่งแคโทดมีความแตกต่างกันชัดเจนในส่วนของการกำจัดน้ำที่สะสมอยู่ในระบบ โดยช่องการไหลแบบคดเคี้ยวสามารถกำจัดน้ำที่สะสมอยู่ในระบบได้ดีกว่าแบบขนาน อีกทั้งการกระจายตัวของแก๊สออกซิเจนในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาในช่องการไหลแบบคดเคี้ยวยังสม่ำเสมอมากกว่าช่องการไหลแบบขนาน ทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาและความหนาแน่นกระแสที่ได้ยิ่งมากกว่าช่องการไหลแบบขนาน

5.2 ข้อเสนอแนะ

งานวิจัยนี้ ต้องการสร้างแบบจำลองคณิตศาสตร์ของกระบวนการของเซลล์เชื้อเพลิงแบบฟิวเอ็่มเพื่อศึกษาปรากฏการณ์และพฤติกรรมของสสารภายในได้ อีกทั้งสามารถนำไปประยุกต์สำหรับการทำนายผลที่น่าจะเกิดขึ้นในกระบวนการ แต่ถึงกระนั้นแบบจำลองยังคงมีจุดที่ต้องปรับปรุงอยู่คือแบบจำลองที่ใช้มีลักษณะแยกเป็นสองส่วนคือขั้วแอโนดและแคโทด ไม่มีการคิดสมการอนุพันธ์พลังงาน แบบจำลองวัฏภาคเดียว และประจุที่อยู่ภายในแบบจำลองประจุตัวเป็นแก๊ส ดังนั้นจึงควรมีการพัฒนาแบบจำลองต่อไปควรให้เป็นลักษณะดังนี้

1. พัฒนาแบบจำลองทั้งระบบของเซลล์เชื้อเพลิงให้ขั้วแอโนดและแคโทดเป็นแบบจำลองชุดเดียวเพื่อจำลองการถ่ายโอนสารระหว่างขั้วได้ดียิ่งขึ้น
2. รวมสมการอนุพันธ์พลังงานไว้ในแบบจำลองเพื่อศึกษาความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยาและความต้านทานภายในเซลล์
3. พัฒนาแบบจำลองให้เป็นระบบสองวัฏภาค ซึ่งน่าจะทำนายปรากฏการณ์น้ำท่วมที่เซลล์ฝั่งขั้วแคโทดได้
4. ใช้สมการอนุพันธ์ประจุสำหรับเพื่อให้แบบจำลองสามารถจำลองการการถ่ายโอนประจุภายในเซลล์ ศักย์ไฟฟ้าและความหนาแน่นกระแสได้

รายการอ้างอิง

ภาษาไทย

กรกนก หงส์ทอง. ผลของรูปแบบช่องทางการไหลของแก๊สต่อสมรรถนะของเซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็ม.

วิทยานิพนธ์ปริญญามหาบัณฑิต, ภาควิชาเคมีเทคนิค คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย, 2547.

ฐิติกร วาสนาเพียรพงศ์. การจำลองเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแผ่นแลกเปลี่ยนโปรตอน. วิทยานิพนธ์

ปริญญามหาบัณฑิต, ภาควิชาเคมีเทคนิค คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย, 2546.

วิวัฒน์ รัตนถาวร. การเตรียมชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาแพลทินัมรูทีเนียม/คาร์บอนโดยการพิมพ์อิงก์เจ็ตบน

ชั้นพร่งแก๊สสำหรับเซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็ม. วิทยานิพนธ์ปริญญามหาบัณฑิต, ภาควิชาเคมีเทคนิค คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย, 2552.

สุดารัตน์ สายเย็นยงค์. การสร้างหน่วยชั้นเซลล์เชื้อเพลิงพีอีเอ็ม. วิทยานิพนธ์ปริญญามหาบัณฑิต,

ภาควิชาเคมีเทคนิค คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย, 2552.

ภาษาอังกฤษ

- ANSYS, Inc. ANSYS FLUENT 12.0 Fuel Cells Module Manual. [Electronic Documentation]. 2009.
- Barbir, F. PEM Fuel Cells: Theory and Practice. London: Elsevier, 2005.
- Baschuk, J.J., and Li, X. A comprehensive, consistent and systematic mathematical model of PEM fuel cells. Applied Energy 86 (2009): 181-193.
- Boddu, R., Marupakula, U. K., Summers, B., and Majumdar, P. Development of bi-polar plates with different flow channel configurations for fuel cells. Journal of Power Sources 189 (2009): 1083-1092.
- Breakthrough Technologies Institute (BTI). Fuel Cells. [Online]. 2000 Available from : <http://www.fuelcells.org/fuel-cells-and-hydrogen/types/> [2012, April 1]
- Case Western Reserve University (Case). PROTON EXCHANGE MEMBRANE or POLYMER ELECTROLYTE MEMBRANE (PEM) FUEL CELLS. [Online]. 2011 Available from : <http://electrochem.case.edu/encycl/art-f04-fuel-cells-pem.htm> [2012, April 1]
- Fluent, Inc. FLUENT 6.3 User's Guide. [Electronic Documentation]. 2006.
- Energy Efficiency and Renewable Energy (EERE). Fuel Cells. [Online]. 2009 Available from : http://www1.eere.energy.gov/hydrogenandfuelcells/fuelcells/fc_types.html [2012, April 1]
- Harvey, D., Pharoah, J. G., and Karan, K., A comparison of different approaches to modeling the PEMFC catalyst layer, Journal of Power Sources 179 (2008): 209-219.
- Jeon, D. H., Greenway, S., Shimpalee, S., and Zee, J. W. V. The effect of serpentine flow-field designs on PEM fuel cell performance. International Journal of Hydrogen Energy 33 (2008): 1052-1066.
- Jiao, K., and Li, X. Water transport in polymer electrolyte membrane fuel cells. Progress in Energy and Combustion Science 37 (2011): 221-291.

- Jiao, K., and Zhou, B. Effects of electrode wettabilities on liquid water behaviours in PEM fuel cell cathode. Journal of Power Sources 175 (2008): 106-119.
- Jung, C. Y., Lee, C. S., and Yi, S. C. Computational analysis of transport phenomena in proton exchange membrane for polymer electrolyte fuel cells. Journal of Membrane Science 309 (2008): 1-6.
- Korsgaard, A. R., Nielsen, M. P., and Koer, S. K. Part one: A novel model of HTPEM-based micro-combined heat and power fuel cell system. Journal of Hydrogen Energy 33 (2008): 1909-1920.
- Kuo, J. K., Yen, T. S., and Chen, C. K., Improvement of performance of gas flow channel in PEM fuel cells. Energy Conservation and Management 49 (2008): 2776-2787.
- Le, A. D., and Zhou, B. A general model of proton exchange membrane fuel cell. Journal of Power Sources 182 (2008): 197-222.
- Li, H. Y., Weng, W. C., Yan, W. M., Wang, X. D., Transient characteristics of proton exchange membrane fuel cells with different flow field designs. Journal of Power Sources 196 (2011): 235-245.
- Nice, K., and Strickland, J. How Stuff Works: Fuel Cells. [Online]. 2010 Available from : <http://auto.howstuffworks.com/fuel-efficiency/alternative-fuels/fuel-cell.htm> [2012, April 1]
- Patankar, S. V. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Series in computational methods in mechanics and thermal sciences. New York: McGraw-Hill, 1980.
- Qu, S., Li, X., Hou, M., Shao, Z., and Yi, B. The effect of air stoichiometry change on the dynamic behavior of a proton exchange membrane fuel cell. Journal of Power Sources 185 (2008): 302-310.
- Real, A. J. D., Arce, A., and Bordons, C. Development and experimental validation of a PEM fuel cell dynamic model. Journal of Power Sources 173 (2007): 310-324.
- Versteeg, H.K. and Malasekera, W. An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method. 2nd ed. Harlow: Pearson Education, 2007.

Yu, L. J., Ren, G. P., Qin, M. J., and Jiang, X. M. Transport mechanisms and performance simulations of a PEM fuel cell with interdigitated flow field. Renewable Energy 34 (2009): 530-543.

ภาคผนวก

ภาคผนวก ก

การแปลงค่าจากสมการอนุรักษ์ประจุเป็นค่าสำหรับสมการอนุรักษ์องค์ประกอบ

อัตราการเกิดปฏิกิริยา

สมการสมการอนุรักษ์ประจุ

$$\nabla \cdot (\sigma_{ele} \nabla \phi_{ele}) + S_{ele} = 0$$

$$\nabla \cdot (\sigma_{pro} \nabla \phi_{pro}) + S_{pro} = 0$$

เมื่อ	σ	คือค่าการนำไฟฟ้า (ต่อโอห์มเมตร, 1/ohm-m)
	ϕ	คือค่าศักย์ไฟฟ้า (โวลต์, V)
	S_{ele}	คือการทำลายไอออนกระแสต่อปริมาตรของอิเล็กตรอน (แอมแปร์ต่อลูกบาศก์เมตร, A/m ³)
	S_{pro}	คือการทำลายไอออนกระแสต่อปริมาตรของโปรตอน (แอมแปร์ต่อลูกบาศก์เมตร, A/m ³)

สมการอนุรักษ์องค์ประกอบ

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho v Y_i) = -\nabla \cdot (-\rho D_i \nabla Y_i) + R_i + S_i$$

เมื่อ	ρ	คือค่าความหนาแน่นของของไหล (กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตร, kg/m ³)
	Y_i	คือสัดส่วนโดยมวลขององค์ประกอบ (ไม่มีหน่วย)
	R_i	คืออัตราการเกิดปฏิกิริยา (กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตรวินาที, kg/m ³ -s)
	v	คือความเร็วของของไหลในทิศทางตามแกน (เมตรต่อวินาที, m/s)
	S_i	คือพจน์เพิ่มเติมของสมการองค์ประกอบ (กิโลกรัมต่อลูกบาศก์เมตรวินาที, kg/m ³ -s)
	D_i	คือสัมประสิทธิ์การแพร่ขององค์ประกอบในของผสม

ในการแปลงค่าการถ่ายโอนกระแสต่อปริมาตรของสมการอนุพันธ์ประจุ (S_{ele} และ S_{pro}) ให้กลายเป็นอัตราการเกิดปฏิกิริยาทางอาร์เรเนียสของสมการอนุพันธ์องค์ประกอบ (R_i) สามารถทำได้โดยใช้หลักการตามกฎของฟาราเดย์

$$R_i = S_{ele}, S_{pro} \times \frac{MW}{nF}$$

- เมื่อ MW คือน้ำหนักโมเลกุลของสารตั้งต้น
 n คือจำนวนโมลของอิเล็กตรอนที่ได้ต่อโมลของสารที่เข้าทำปฏิกิริยา ซึ่งมีค่าเท่ากับ 2 ในกรณีของไฮโดรเจน มีค่าเป็น 4 ในกรณีออกซิเจนและน้ำ
 F คือค่าคงที่ของฟาราเดย์, 9.65×10^7 (คูลอมบ์ต่อกิโลโมล, C/kmol)

ตัวอย่าง

การแปลงค่าความหนาแน่นกระแส 1314 A/m² ที่ศักย์ไฟฟ้า 0.7 V เป็นอัตราการเกิดปฏิกิริยาของไฮโดรเจนฝั่งแอโนด

นำค่าความหนาแน่นกระแสหารด้วยความหนาแน่นของชั้นตัวเร่งปฏิกิริยา 0.00001 m

ได้การถ่ายโอนกระแสต่อปริมาตรเท่ากับ 1.314×10^8 A/m³

นำค่าที่ได้แปลงเป็นอัตราการเกิดปฏิกิริยา

$$R_i = 1.314 \times 10^8 \times \frac{2}{2 \times 9.65 \times 10^7} \times \frac{A}{m^3} \times \frac{kg / kmol}{C / kmol}$$

$$R_i = 0.681 \frac{kg}{m^3 \cdot s}$$

ดังนั้นอัตราการเกิดปฏิกิริยาของไฮโดรเจนฝั่งแอโนดมีค่าเท่ากับ 0.681 kg/m³-s ที่ค่าความหนาแน่นกระแส 1314 A/m² ศักย์ไฟฟ้า 0.7 V

สัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอน

จากสมการอนุรักษ์ประจุของโปรตอนและสมการอนุรักษ์องค์ประกอบเมื่อเทียบพจน์ทั้งสองสมการค่าของการนำโปรตอน (σ_{pro}) ในสมการอนุรักษ์ประจุของโปรตอนสามารถใช้กฎของฟาราเดย์ในการแปลงค่าให้มีค่าเทียบเท่ากับค่าความหนาแน่นของของไหลคูณกับสัมประสิทธิ์การแพร่ขององค์ประกอบ (ρD_i) ในสมการสมการอนุรักษ์องค์ประกอบ

$$\sigma_{pro} \times \frac{MW}{nF} = \rho D_i$$

จากสมการข้างต้นค่าที่ใช้สำหรับโปรแกรม ANSYS FLUENT 12.1 คือค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ (D_i) ดังนั้นรูปสมการเพื่อหาค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนคือ

$$D_i = \frac{\sigma_{pro} \times \frac{MW}{nF}}{\rho}$$

โดยที่ค่าของการนำโปรตอน (σ_{pro}) สามารถหาได้จากความสัมพันธ์

$$\sigma_{pro} = (0.514\lambda - 0.326) \exp \left[1268 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T} \right) \right]$$

เมื่อ λ คือสัดส่วนปริมาณน้ำในเมมเบรน (ไม่มีหน่วย)

และค่าความหนาแน่นของของไหล (ρ) สามารถหาได้จากกฎ Incompressible Ideal Gas

$$\rho = \frac{P_{op}}{\frac{R}{MW_i} T}$$

เมื่อ MW_i คือน้ำหนักโมเลกุลของสารที่สนใจ

P_{op} คือความดันในการดำเนินงาน, 101,325 (พาสคาล, Pa)

R คือค่าคงที่ของแก๊ส, 8.314×10^3 (จูลต่อกิโลโมลเคลวิน, J/kmol·K)

ตัวอย่าง

การแปลงค่าเพื่อหาค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอน (D_i) ทางฝั่งแอโนดจากค่าสัดส่วนปริมาณน้ำในเมมเบรน (λ) ที่มีค่าเท่ากับ 22 ที่อุณหภูมิ 60 °C
ขั้นแรกนำค่า λ แทนในสมการค่าของการนำโปรตอน (σ_{pro})

$$\sigma_{pro} = ((0.514 \times 22) - 0.326) \exp \left[1268 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{(60 + 273)} \right) \right]$$

$$\sigma_{pro} = 16.010876 \quad \frac{1}{\Omega \cdot m}$$

หาค่าความหนาแน่นของของไหล (ρ) ที่โดยที่ MW_i ของโปรตอนคือ 1.00742 kg/kmol

$$\rho = \frac{101,325}{\frac{8.314 \times 10^3}{1.00742} (60 + 273)} \quad \frac{Pa}{\frac{J / kmol \cdot K}{kg / kmol} \cdot K}$$

$$\rho = 0.0368679 \quad \frac{kg}{m^3}$$

นำค่าของการนำโปรตอน (σ_{pro}) และหาค่าความหนาแน่นของของไหล (ρ) ที่ได้แทนในสมการเพื่อหาค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอน

$$D_i = \frac{16.010876 \times \frac{1.00742}{2 \times 9.65 \times 10^7}}{0.0368679} \quad \frac{1 / \Omega \cdot m \times \frac{kg / kmol}{C / kmol}}{kg / m^3}$$

$$D_i = 2.2668 \times 10^{-6} \quad \frac{C \cdot s}{kg}$$

ถึงแม้ตัวเลขที่คำนวณได้มีหน่วยเท่ากับ C·s/kg ซึ่งในความเป็นจริงค่าสัมประสิทธิ์การแพร่มีหน่วยเป็น m²/s แต่เนื่องสมมุติฐานที่ตั้งขึ้นและเพื่อความง่ายในการนำไปใช้ในโปรแกรมในวิทยานิพนธ์ฉบับนี้จึงเขียนค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนในหน่วย m²/s ดังนั้นค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของโปรตอนฝั่งแอโนดมีค่าเท่ากับ 2.2668 × 10⁻⁶ m²/s ที่อุณหภูมิ 60 °C และปริมาณน้ำในเมมเบรน (λ) มีค่าเท่ากับ 22

ประวัติผู้เขียนวิทยานิพนธ์

นายธนวัฒน์ กรณ์ทอง เกิดเมื่อวันอาทิตย์ที่ 7 ตุลาคม พ.ศ. 2527 สำเร็จการศึกษาปริญญาตรีวิทยาศาสตร์บัณฑิต สาขาเคมีวิศวกรรม ภาควิชาเคมีเทคนิค จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ในปีการศึกษา 2550 และเข้าศึกษาต่อในหลักสูตรวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต สาขาเคมีเทคนิค ภาควิชาเคมีเทคนิค คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย เมื่อ พ.ศ. 2551