



บทที่ 2

วิธีการพัฒนาแบบจำลองระบบเซลล์เชื้อเพลิงแบบฟิวเอ็ลหรือเซลล์เชื้อเพลิงแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอน

เซลล์เชื้อเพลิงเป็นอุปกรณ์ไฟฟ้าเคมีที่เปลี่ยนพลังงานเคมีของเชื้อเพลิงให้เป็นพลังงานไฟฟ้าได้โดยตรง ซึ่งได้รับความสนใจนำมาใช้เพื่อผลิตพลังงานไฟฟ้าอีกทางเลือกหนึ่ง เนื่องจากเซลล์เชื้อเพลิงเป็นกระบวนการที่ให้ประสิทธิภาพสูง อีกทั้งยังไม่ก่อให้เกิดมลภาวะต่อสิ่งแวดล้อม

2.1 เซลล์เชื้อเพลิงแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอน

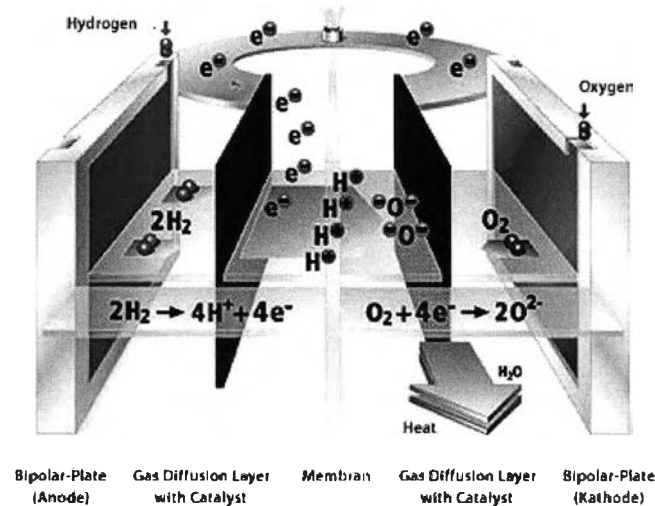
เซลล์เชื้อเพลิงแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอน มีลักษณะการทำงานคล้ายกับแบตเตอรี่แตกต่างกันตรงที่เซลล์เชื้อเพลิงสามารถผลิตและให้กระแสไฟฟ้าได้อย่างต่อเนื่องตลอดเวลาที่มีการป้อนเชื้อเพลิงในรูปของเหลวหรือแก๊สเข้าไปอย่างสม่ำเสมอ เช่น แก๊สไฮโดรเจน (H_2) และออกซิเจน (O_2) โดยเซลล์เชื้อเพลิงสามารถผลิตเป็นหน่วยย่อย ๆ แล้วนำมาต่อเข้าด้วยกันแบบอนุกรมเพื่อให้ได้กำลังการผลิตกระแสไฟฟ้าที่สูงขึ้น

ผลิตภัณฑ์ที่ได้จากการเกิดปฏิกิริยาของเซลล์เชื้อเพลิงแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอนคือน้ำและความร้อน จึงไม่เกิดแก๊สที่เป็นมลพิษต่อสิ่งแวดล้อม สภาพการทำงานจะอยู่ในช่วงอุณหภูมิต่ำมีค่าระหว่าง 60-100 องศาเซลเซียส และมีค่าความหนาแน่นกำลังไฟฟ้าสูงจึงเหมาะสมกับการนำไปใช้งานที่ต้องมีการเคลื่อนที่

2.2 หลักการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอน

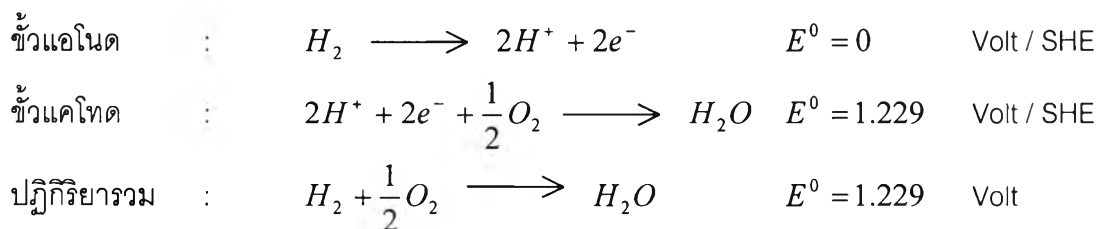
เซลล์เชื้อเพลิงแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอน ประกอบด้วยเมมเบรนโพลีเมอร์ซึ่งทำหน้าที่เป็นอิเล็กโทรไลต์เพื่อเป็นตัวกลางในการแลกเปลี่ยนไอออนไฮโดรเจนหรือโปรตอน เมมเบรนจะถูกประกบด้วยขั้วไฟฟ้า 2 ขั้ว ที่มีความพรุนตัวและมีตัวเร่งปฏิกิริยาเพื่อเพิ่มอัตราการเกิดปฏิกิริยา โดยทั่วไปตัวเร่งปฏิกิริยาที่ใช้คือ แพลทินัม (Platinum) เมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอนจะเป็นสารจำพวก perfluorosulphonic acid polytetrafluoroethylene copolymer ที่มีชื่อทางการคือ "Nafion" มีลักษณะเป็นเมมเบรนโพลีเมอร์บาง ๆ คุณสมบัติของเมมเบรนทำหน้าที่เหมือนเป็นสารอิเล็กโทรไลต์ (polymer electrolyte membrane) โดยจะยอมให้โปรตอนและน้ำซึมผ่านได้เท่านั้น

แก๊สไฮโดรเจนจะถูกป้อนเข้าทางด้านขั้วแอโนด เกิดปฏิกิริยาออกซิเดชัน (oxidation) โดยอาศัยตัวเร่งปฏิกิริยาแตกตัวได้เป็นอิเล็กตรอนและโปรตอน อิเล็กตรอนที่ได้จะวิ่งมาตามตัวนำไฟฟ้าเพื่อมายังขั้วแคโทด ทำให้เกิดกระแสไฟฟ้าขึ้น ในขณะเดียวกัน โปรตอนจะแพร่ผ่านเมมเบรนมายังขั้วแคโทดโดยที่ทางขั้วนี้จะมีการป้อนแก๊สออกซิเจนเข้ามา เกิดปฏิกิริยารีดักชัน (reduction) โดยอาศัยตัวเร่งปฏิกิริยาระหว่างโปรตอนกับออกซิเจนและอิเล็กตรอนที่บริเวณขั้วแคโทด ทำให้ได้ผลิตภัณฑ์ คือ น้ำ ดังแสดงในรูปที่ 2.1



รูปที่ 2.1 หลักการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอน [1]

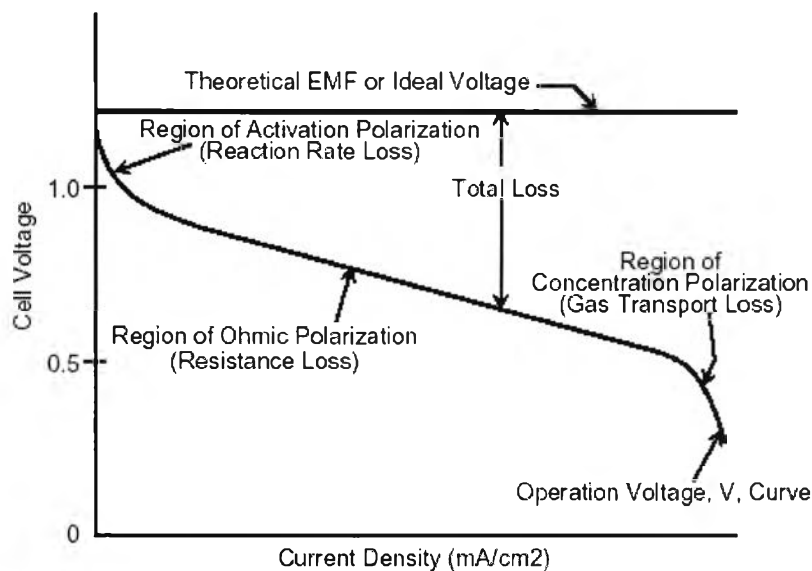
ประสิทธิภาพของเมมเบรนจะขึ้นอยู่กับความสามารถในการส่งผ่านไฮโดรเจนไอออน เซลล์เชื้อเพลิงแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอนต้องอาศัยความชื้นเป็นตัวกลางในการพาไฮโดรเจนไอออนให้เคลื่อนที่ผ่านเมมเบรนจากขั้วแอโนดไปยังขั้วแคโทด เนื่องจากเมมเบรนมีคุณสมบัติในการนำไอออนได้ดีเมื่อมีความชื้น ดังนั้นแก๊สไฮโดรเจนและแก๊สออกซิเจนที่ใช้ในการเกิดปฏิกิริยาต้องเป็นแก๊สที่มีความชื้น (humidified gases) ปฏิกิริยาเคมีที่เกิดขึ้นบนขั้วไฟฟ้าคือ



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

2.3 สมรรถนะของเซลล์เชื้อเพลิงแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอน

สมรรถนะของเซลล์เชื้อเพลิงสามารถศึกษาได้จากกราฟโพลาริเซชัน (Polarization curve) ดังรูปที่ 2.2 พบว่าเมื่อเซลล์มีการสร้างกระแสไฟฟ้าค่าศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ (cell potential) จะมีค่าลดลงจากค่าศักย์ไฟฟ้าขณะที่เซลล์ยังไม่ได้มีการผลิตกระแสไฟฟ้า (open circuit potential) ซึ่งการลดลงของค่าศักย์ไฟฟ้านี้เกิดขึ้นเนื่องจากการทำงานจริงของเซลล์เชื้อเพลิงนั้น เป็นกระบวนการไม่ผันกลับ และค่าศักย์ไฟฟ้าที่ลดลงจะเรียกว่า ศักย์ไฟฟ้าเกินตัว (overpotential) หรือโพลาริเซชัน (polarization)



รูปที่ 2.2 โพลาริเซชันของเซลล์เชื้อเพลิงแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอน [2]

รูปที่ 2.2 พบว่าที่ค่าความหนาแน่นกระแสเท่ากับศูนย์ ค่าศักย์ไฟฟ้าที่ได้จะมีค่าน้อยกว่าค่าศักย์ไฟฟ้าตามทฤษฎี โดยเรียกค่าศักย์ไฟฟ้าที่จุดนี้ว่า ค่าศักย์ไฟฟ้าเริ่มต้น (open circuit potential) ซึ่งเกิดจากการแพร่ข้ามฝั่ง (cross over) ของแก๊สระหว่างขั้วแอโนดและขั้วแคโทดผ่านเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอน เมื่อแก๊สข้ามไปยังอีกฝั่งหนึ่งจะเกิดปฏิกิริยากับผิวขั้วไฟฟ้า เช่น เมื่อแก๊สไฮโดรเจนแพร่ข้ามไปยังขั้วแคโทดก็เกิดปฏิกิริยาออกซิเดชันขึ้น ประกอบกับฝั่งขั้วแคโทดมีแก๊สออกซิเจน จึงเกิดปฏิกิริยารีดักชันภายในขั้วแคโทดเดียวกันส่งผลให้เกิดกระแสภายใน (internal current)[2] ทำให้เกิดศักย์ไฟฟ้าส่วนเกินขึ้นที่ขั้วแคโทด เช่นเดียวกันกับฝั่งแอโนดที่มีการแพร่ข้ามของออกซิเจน ก็จะทำให้เกิดศักย์ไฟฟ้าส่วนเกินที่ขั้วแอโนดเช่นเดียวกันจึงทำให้ค่าศักย์ไฟฟ้าที่ได้มีค่าลดลง

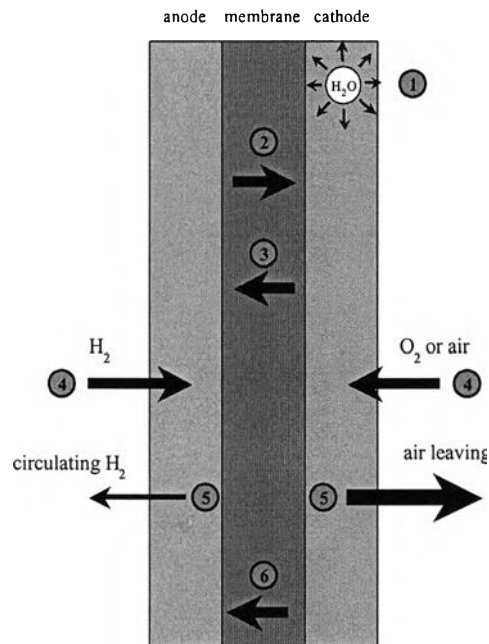
เมื่อค่าความหนาแน่นกระแสเพิ่มขึ้นพบว่าศักย์ไฟฟ้ามีค่าลดลง เนื่องมาจากการเกิดโพลาริเซชัน จากกราฟรูปที่ 2.2 พบว่าสามารถแบ่งช่วงการเกิดโพลาริเซชันออกได้เป็น 3 ช่วง คือ ช่วงที่หนึ่งเป็นช่วงที่เซลล์สูญเสียศักย์ไฟฟ้าส่วนใหญ่ไปกับการผลักดันให้มีการเกิดปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมี ดังนั้นในช่วงที่หนึ่งจึงถูกเรียกว่า ช่วงศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมี (activation overpotential region) ช่วงที่สองเกิดขึ้นเมื่อเซลล์มีการผลิตกระแสไฟฟ้าในปริมาณค่าความหนาแน่นกระแสที่มากขึ้น ซึ่งในช่วงนี้ภายในเซลล์จะเกิดการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนภายในชั้นของขั้วไฟฟ้าที่มีรูพรุนและภายในแผ่นสะสมกระแส และการเคลื่อนที่ของโปรตอนภายในเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอนเป็นจำนวนมาก ดังนั้นช่วงที่สองจึงถูกเรียกว่า ช่วงศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากความต้านทานไฟฟ้า (ohmic overpotential region) และช่วงที่สามจะเกิดขึ้นเมื่อเซลล์มีการสร้างกระแสที่ความหนาแน่นกระแสที่สูงมาก ๆ ในช่วงนี้ปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมีภายในเซลล์จะเกิดขึ้นอย่างรวดเร็วและสิ่งที่ตามมาคือ ที่ฝั่งขั้วแคโทดจะมีน้ำในสถานะของเหลวที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยาเป็นจำนวนมาก และหากระบบกำจัดน้ำภายในเซลล์ไม่ดีพอก็จะทำให้น้ำที่เกิดขึ้นไปบังบริเวณผิวหน้าของตัวเร่งปฏิกิริยา ทำให้พื้นผิวของการเกิดปฏิกิริยาลดลง และนอกจากนี้ในช่วงที่สามจะมีปริมาณค่าความเข้มข้นของแก๊สออกซิเจนที่พื้นผิวของตัวเร่งปฏิกิริยามีค่าต่ำมาก ดังนั้นกระบวนการสร้างกระแสไฟฟ้าในช่วงที่สามนี้จะถูกควบคุมด้วยอัตราการแพร่ของแก๊ส จึงมีการเรียกช่วงที่สามนี้ว่า ช่วงศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากการถ่ายโอนมวลหรือช่วงศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากความเข้มข้น (mass overpotential or concentration overpotential region)

2.4 อิทธิพลของตัวแปรต่าง ๆ ต่อสมรรถนะการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอน

2.4.1 อิทธิพลของน้ำที่มีผลต่อประสิทธิภาพการทำงานของเซลล์ [3]

ประสิทธิภาพของเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอนจะขึ้นอยู่กับความสามารถในการส่งถ่ายไอออนของไฮโดรเจนและกระบวนการนำไอออนของเมมเบรนจะไม่เกิดขึ้นหากในเมมเบรนไม่มีความชื้นอยู่ ดังนั้นปริมาณน้ำในเมมเบรนจึงเป็นปัจจัยสำคัญที่มีผลต่อค่าการนำไอออน ถ้าในเมมเบรนมีปริมาณน้ำน้อยจะทำให้ประสิทธิภาพในการส่งผ่านไอออนของเมมเบรนลดลง แต่ถ้าปริมาณน้ำในเมมเบรนมีมากเกินไป จะทำให้น้ำไปอุดตันรูพรุนบนขั้วไฟฟ้าทำให้แก๊สแพร่ผ่านเข้าทำปฏิกิริยาได้ยาก ส่งผลให้ประสิทธิภาพการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงลดลง

เราสามารถจำแนกลักษณะของน้ำที่เกิดและเข้า-ออกระบบได้ 6 ส่วนดังรูปที่ 2.3



รูปที่ 2.3 ปฏิกิริยาการไหลของน้ำในเซลล์เชื้อเพลิงเนื่องจากปัจจัยต่าง ๆ [4]

1. น้ำที่เกิดจากปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมีที่ขั้วแคโทด
2. น้ำที่ถูกพาจากขั้วแอโนดไปยังขั้วแคโทด โดยการไหลของโปรตอนในชั้นของเมมเบรน เรียกปรากฏการณ์นี้ว่า ' Electro-osmotic drag '
3. ถ้าน้ำที่ขั้วแคโทดมีปริมาณสูง ก็จะทำให้เกิดการแพร่ย้อนกลับ (back diffuse) ไปยังขั้วแอโนดได้เช่นกัน
4. น้ำบางส่วนอาจถูกนำเข้ามาในระบบโดยกระบวนการทำให้ชื้น (Humidification) ของสารตั้งต้นที่ป้อนเข้ามาทำปฏิกิริยา
5. น้ำส่วนเกินภายในระบบ จะถูกกำจัดออกจากระบบด้วยการระเหยของน้ำไปกับสารผลิตภัณฑ์ หรือไปกับสารตั้งต้นที่เหลือจากปฏิกิริยา
6. การไหลของน้ำเนื่องจากผลของความแตกต่างระหว่างความดันทางด้านขั้วแอโนดและแคโทด

2.4.2 อิทธิพลของความดันของแก๊สที่ป้อนเข้าขั้วแอโนดและแคโทด [3]

การเพิ่มความดันแก๊สโดยเฉพาะอย่างยิ่งแก๊สที่เป็นสารออกซิไดส์ จะมีผลทำให้ค่าความต่างศักย์ของเซลล์มีค่ามากขึ้น และมีค่าโดยประมาณ คือ

$$\Delta E_{cell} = \left(\frac{RT}{2F} \right) \ln \left(\frac{P''}{P'} \right) \quad (2.1)$$

ΔE_{cell}	คือ	ค่าความต่างศักย์ที่เพิ่มขึ้น (volt)
R	คือ	ค่าคงที่ของแก๊ส (gas constant) มีค่า 8.314 J/mol.K
T	คือ	อุณหภูมิสัมบูรณ์ (K)
F	คือ	ค่าคงที่ฟาราเดย์ (Faraday's constant) มีค่า 96,489 A.s/equiv
P''	คือ	ค่าความดันสุดท้าย (atm)
P'	คือ	ค่าความดันเริ่มต้น (atm)

จากสมการข้างต้นจะเห็นว่าเซลล์เชื้อเพลิงแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอน ควรทำงานที่ค่าความดันสูง ค่าความดันในการทำงานโดยปกติมีค่าอยู่ในช่วง 300-500 kPa ทั้งแก๊สไฮโดรเจนและแก๊สออกซิเจน แต่ในกรณีที่ใช้อากาศเป็นสารออกซิไดส์ เซลล์เชื้อเพลิงที่ใช้ความดันสูงจะช่วยลดปัญหาการเกิดโพลาไรเซชันเนื่องจากความเข้มข้นได้ เนื่องจากเมื่อใช้อากาศเป็นสารออกซิไดส์โอกาสที่ความเข้มข้นของออกซิเจนบริเวณขั้วไฟฟ้าจะลดลงเร็วกว่าการใช้ออกซิเจน ทำให้ความแตกต่างของความดันระหว่างขั้วแอโนดกับขั้วแคโทดมีมากกว่า ทำให้ประสิทธิภาพในการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงลดลง

2.4.3 อิทธิพลของอุณหภูมิการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิง [5]

ในกรณีอุณหภูมิการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงมีค่าสูง โพลาไรเซชันทางเคมีจะลดลงเพราะเมื่ออุณหภูมิสูงอัตราเร็วในการเกิดปฏิกิริยาจะเพิ่มขึ้น ทำให้ประสิทธิภาพในการทำงานของเซลล์ดีขึ้น แต่ถ้าอุณหภูมิการทำงานมีค่าสูงมากจนเกินไป ค่าความต่างศักย์จะลดลงอย่างรวดเร็วเมื่อค่าความหนาแน่นกระแสเพิ่มขึ้น เนื่องมาจากเมื่ออุณหภูมิการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงสูงโอกาสที่เมมเบรนภายในเซลล์เชื้อเพลิงจะเกิดการสูญเสียน้ำออกไปจะเป็นไปได้สูง ทำให้ขาดความสมดุลของน้ำภายในเซลล์เชื้อเพลิง และค่าความต้านทานไฟฟ้ามีค่าเพิ่มขึ้นด้วย

2.5 เซลล์เชื้อเพลิงชนิดอื่น ๆ

นอกจากเซลล์เชื้อเพลิงแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอนแล้ว ยังมีเซลล์เชื้อเพลิงชนิดอื่น ๆ อีกหลายชนิด โดยทั่วไปลักษณะการทำงานจะคล้ายกัน จะแตกต่างกันที่ชนิดของเชื้อเพลิง

สารออกซิไดส์ที่ใช้ ช่วงอุณหภูมิการทำงาน ชนิดของสารอิเล็กโทรไลต์ และชนิดของไอออนที่เคลื่อนที่ เพื่อการนำไปใช้งานในลักษณะที่แตกต่างกันออกไป เซลล์เชื้อเพลิงสามารถแบ่งตามชนิดของสารอิเล็กโทรไลต์ที่ใช้ ดังแสดงในตารางที่ 2.1

ตารางที่ 2.1 ข้อมูลของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดต่าง ๆ [3]

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

CHP* = Combined heat and power

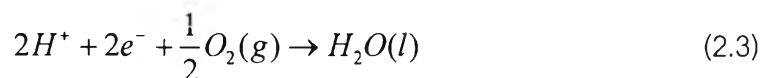
2.6 แบบจำลองของเซลล์เชื้อเพลิงแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอน

เซลล์เชื้อเพลิงแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอนในแบบจำลองนี้จะใช้แก๊สไฮโดรเจนและแก๊สออกซิเจนเพื่อเป็นสารตั้งต้นในการทำปฏิกิริยา ผลิตภัณฑ์ที่เกิดขึ้นคือ น้ำ, ความร้อนและพลังงานไฟฟ้า ปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมีที่เกิดขึ้นที่ขั้วไฟฟ้ามีดังนี้

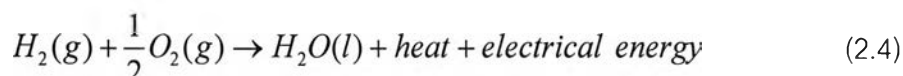
ปฏิกิริยาที่ขั้วแอโนด : แก๊สไฮโดรเจนจะถูกออกซิไดส์แล้วเกิดเป็นไฮโดรเจนไอออน (H⁺) และอิเล็กตรอน



ปฏิกิริยาที่ขั้วแคโทด : ไฮโดรเจนไอออนที่เกิดจากปฏิกิริยาที่ขั้วแอโนดจะเกิดแพร่ผ่านเมมเบรนมาที่ขั้วแคโทดและเกิดปฏิกิริยารีดักชันได้น้ำเป็นผลผลิต



ปฏิกิริยารวมของเซลล์เชื้อเพลิงแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอน คือ



ค่าศักย์ไฟฟ้าของเซลล์เชื้อเพลิงเมื่อเซลล์มีการสร้างกระแสไฟฟ้าที่ค่าความหนาแน่นกระแสใด ๆ สามารถเขียนสมการได้ดังนี้

$$E_{FC} = E_{Nernst} - \eta_{act} - \eta_{ohmic} - \eta_{conc} \quad (2.5)$$

- โดยที่
- E_{FC} = ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ที่ความหนาแน่นกระแสต่าง ๆ
 - E_{Nernst} = ศักย์ไฟฟ้าสมดุลของเซลล์ที่สภาวะการทำงานของเซลล์
 - η_{act} = ศักย์ไฟฟ้าเกินตัวจากโพลาริเซชันเนื่องจากปฏิกิริยาทางเคมี
 - η_{ohm} = ศักย์ไฟฟ้าเกินตัวจากโพลาริเซชันเนื่องจากความต้านทานไฟฟ้า
 - η_{conc} = ศักย์ไฟฟ้าเกินตัวจากโพลาริเซชันเนื่องจากความเข้มข้น

2.6.1 ศักย์ไฟฟ้าสมดุล[6]

ศักย์ไฟฟ้าสมดุล คือ ค่าศักย์ไฟฟ้าของเซลล์เมื่อเซลล์ยังไม่มีกระแสไฟฟ้าหรือเซลล์อยู่ในสถานะสมดุล (Equilibrium state) ซึ่งสามารถอธิบายได้ในทางเทอร์โมไดนามิกส์ (Thermodynamics) กล่าวคือ เมื่อเซลล์อยู่ในสมดุลที่สภาวะมาตรฐานคือที่อุณหภูมิ 25 °C ความดัน 1 atm และสารตั้งต้นทุกตัวมีความเข้มข้นเท่ากับ 1 mol/L หรือเทียบเท่า ดังนั้นความสามารถในการทำงานอันเนื่องมาจากการเกิดปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมีจะอธิบายได้ในรูปของความแตกต่างของค่าพลังงานเสรีของกิบส์ระหว่างผลิตภัณฑ์และสารตั้งต้นจะถูกเปลี่ยนไปเป็นงานทางไฟฟ้า และงานทางไฟฟ้านี้คือศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ที่สภาวะสมดุลนั้นคือ

$$\Delta G^0 = \sum_i G_{f,pi}^0 - \sum_j G_{f,pj}^0 = -nFE_{op}^0 \quad (2.6)$$

เมื่อ	$\sum_i G_{f,i}^0$	= ผลรวมของพลังงานเสรีของกิบส์ (standard Gibbs free energy of formation) ของสารผลิตภัณฑ์ (J/mole)
	$\sum_j G_{f,j}^0$	= ผลรวมของพลังงานเสรีของกิบส์ (standard Gibbs free energy of formation) ของสารตั้งต้น (J/mole)
	n	= จำนวนโมลของอิเล็กตรอน (equivalent/mole)
	F	= ค่าคงที่ฟาราเดย์ (96,500 C/equivalent)
	E_{op}^0	= ศักย์ไฟฟ้าสมดุลที่สภาวะมาตรฐาน (25 °C, 1 atm) (Volt)

สำหรับในกรณีของเซลล์เชื้อเพลิงแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอนซึ่งมีปฏิกิริยารวมดังสมการที่ 2.4 ดังนั้นสมการการคำนวณค่า E_{op}^0 ที่สภาวะมาตรฐาน คือ

$$\Delta G^0 = \Delta G_{f,H_2O}^0 - \Delta G_{f,H_2}^0 - \frac{1}{2} \Delta G_{f,O_2}^0 = -2FE_{op}^0 \quad (2.7)$$

เนื่องจากในความเป็นจริงสภาวะการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงจะอยู่นอกเหนือจากสภาวะมาตรฐาน ดังนั้น จึงจำเป็นต้องมีการคำนวณค่า Open-circuit cell potential ที่สภาวะการทำงานของเซลล์โดยอาศัยสมการของเนินสต์ (Nernst's equation) [3] จะได้ความสัมพันธ์ดังต่อไปนี้

$$E_{Nernst}(T, P) = E_{op}^0 + \frac{\Delta S}{nF}(T - T^0) + \frac{RT}{nF} \left[\ln(p_{H_2}) + \frac{1}{2} \ln(p_{O_2}) \right] \quad (2.8)$$

เมื่อ	ΔS	= การเปลี่ยนแปลงเอนโทรปีของปฏิกิริยา (J/mol-K)
	R	= ค่าคงที่ของแก๊ส (8.314 J/mol*K)
	p_{H_2}	= ความดันย่อยของแก๊สไฮโดรเจน (atm)
	p_{O_2}	= ความดันย่อยของแก๊สออกซิเจน (atm)

ซึ่งสมการของศักย์ไฟฟ้าสมดุลที่จะไปใช้ในแบบจำลองของเซลล์เชื้อเพลิงแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอนในงานวิจัยนี้จะมีค่า ดังนี้

$$E_{Nernst} = 1.229 - 0.85 \times 10^{-3} \cdot (T - 298.15) + 4.31 \times 10^{-5} \cdot T \cdot \left[\ln(p_{H_2}) + \frac{1}{2} \cdot \ln(p_{O_2}) \right] \quad (2.9)$$

2.6.2 ศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาทางเคมี (Activation overpotential)

ศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาทางเคมี คือ ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ที่สูญเสียไปในการผลักดันให้มีการถ่ายโอนประจุระหว่างขั้วไฟฟ้าและสารละลายอิเล็กโทรไลต์เพื่อให้เกิดเป็นปฏิกิริยาออกซิเดชัน (oxidation reaction) และปฏิกิริยารีดักชัน (reduction reaction) โดยสมการที่ใช้ในการอธิบายความสัมพันธ์ระหว่างค่าความหนาแน่นกระแสที่เซลล์สร้างขึ้นกับค่าศักย์ไฟฟ้าที่สูญเสียไปเนื่องจากการเกิดปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมีจะแสดงได้ดังสมการที่ 2.10 และ 2.11 คือสมการของ Butler-Volmer ซึ่งศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาทางเคมีนั้นจะเกิดขึ้นทั้งทางด้านขั้วแอโนดและขั้วแคโทด ดังต่อไปนี้

$$\text{Anode : } j_a = j_0^{ref} \left(\frac{C_{H_2}}{C_{H_2}^{ref}} \right)^{1/2} \left[\exp\left(\frac{\alpha_a F}{RT} \eta_{act} \right) - \exp\left(-\frac{\alpha_c F}{RT} \eta_{act} \right) \right] \quad (2.10)$$

$$\text{Cathode : } j_c = j_0^{ref} \left(\frac{C_{O_2}}{C_{O_2}^{ref}} \right) \left[\exp\left(\frac{\alpha_a F}{RT} \eta_{act} \right) - \exp\left(-\frac{\alpha_c F}{RT} \eta_{act} \right) \right] \quad (2.11)$$

- เมื่อ
- j_c = ค่าความหนาแน่นกระแสไฟฟ้า ณ จุดใด ๆ ที่ผิวหน้าของตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งขั้วแคโทด (local current density) (A/cm^2)
 - j_a = ค่าความหนาแน่นกระแสไฟฟ้า ณ จุดใด ๆ ที่ผิวหน้าของตัวเร่งปฏิกิริยาฝั่งขั้วแอโนด (local current density) (A/cm^2)
 - j_0^{ref} = ค่าความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าสมดุล (exchange current density) ที่สภาวะอ้างอิง (reference state) (A/cm^2)
 - η_{act} = activation overpotential (Volts)
 - C_i^{ref} = ค่าความเข้มข้นของแก๊ส i ที่บริเวณผิวหน้าของตัวเร่งปฏิกิริยาที่สภาวะอ้างอิง (mol/cm^3)
 - C_i = ค่าความเข้มข้นของแก๊ส i ที่บริเวณผิวหน้าของตัวเร่งปฏิกิริยาที่สภาวะใด ๆ (mol/cm^3)
 - α_a = ค่าสัมประสิทธิ์การถ่ายโอนประจุ (transfer coefficient) ที่ฝั่งขั้วแอโนด
 - α_c = ค่าสัมประสิทธิ์การถ่ายโอนประจุ (transfer coefficient) ที่ฝั่งขั้วแคโทด

2.6.2.1 ศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีทางด้านขั้วแอโนด [7]

จากสมการที่ 2.10 สามารถจัดให้อยู่ในรูปของศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีทางด้านขั้วแอโนดได้ดังนี้

$$\eta_{act,a} = -\frac{\Delta G}{2F} + \frac{RT}{2F} \ln(4FAk_a C_{H_2}) - \frac{RT}{2F} \ln i \quad (2.12)$$

- เมื่อ A = พื้นที่ในการเกิดปฏิกิริยา (cm^2)
 k_a = ค่าคงที่ของอัตราการผลิตปฏิกิริยาสำหรับปฏิกิริยาต้านแอโนด (cm/s)
 C_{H_2} = ความเข้มข้นของไฮโดรเจน (mol/cm^3)
 i = ค่ากระแสไฟฟ้า (Amp)

จากสมการที่ 2.12 เมื่อใส่ค่าตัวแปรต่าง ๆ แล้วจัดสมการใหม่แล้วจะได้

$$\eta_{act,a} = -(5.18 \times 10^{-6}) \Delta G + (4.309 \times 10^{-5}) \times T \cdot \left[12.863 + \ln \left(\frac{AC_{H_2} k_a}{i} \right) \right] \quad (2.13)$$

2.6.2.2 ศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีทางด้านขั้วแคโทด

จากสมการที่ 2.11 สามารถจัดให้อยู่ในรูปของศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีทางด้านขั้วแคโทดได้ดังนี้

$$\eta_{act,c} = \frac{RT}{\alpha_c F n} \left(\ln \left[nFAk_c \cdot \exp \left(-\frac{\Delta G_e}{RT} \right) \times (C_{O_2})^{(1-\alpha_c)} (C_{H^+})^{(1-\alpha_c)} (C_{H_2O})^{\alpha_c} \right] - \ln i \right) \quad (2.14)$$

- เมื่อ k_c = ค่าคงที่ของอัตราการผลิตปฏิกิริยาสำหรับปฏิกิริยาต้านแคโทด (cm/s)
 C_{O_2} = ความเข้มข้นของออกซิเจน (mol/cm^3)
 C_{H^+} = ความเข้มข้นของไฮโดรเจนไอออน (mol/cm^3)
 C_{H_2O} = ความเข้มข้นของน้ำ (mol/cm^3)

จากสมการที่ 2.12 เมื่อใส่ค่าตัวแปรต่าง ๆ แล้วจัดสมการใหม่แล้วจะได้



$$\eta_{act,c} = \frac{1}{\alpha_c} [-(10.36 \times 10^{-6}) \Delta G_e + (8.62 \times 10^{-5}) \times T \cdot (12.863 + \ln A + \ln k'_c + (1 - \alpha_c) \ln C_{O_2} - \ln i)] \quad (2.15)$$

$$\text{เมื่อ } k'_c = k_c C_{H^+} C_{H_2O}$$

2.6.2.3 ผลรวมของศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมี

$$\eta_{act} = -(\xi_1 + \xi_2 T + \xi_3 T [\ln(C_{O_2})]) + \xi_4 T [\ln(i)] \quad (2.16)$$

$$\text{เมื่อ } \xi_1 = -\frac{\Delta G}{2F} - \frac{\Delta G_e}{\alpha_c nF} \quad (2.16a)$$

$$\xi_2 = \frac{R}{\alpha_c nF} \ln [nFAk_c (C_{H^+})^{(1-\alpha_c)} (C_{H_2O})^{\alpha_c}] + \frac{R}{2F} \ln [4FAk_a C_{H_2}] \quad (2.16b)$$

$$\xi_3 = \frac{R(1-\alpha_c)}{\alpha_c nF} \quad (2.16c)$$

$$\xi_4 = -\left(\frac{R}{2F} - \frac{R}{\alpha_c nF} \right) \quad (2.16d)$$

$$C_{O_2} = \frac{P_{O_2}}{(5.08 \times 10^6) \cdot \exp^{-\frac{498}{T}}} \quad (2.16e)$$

ซึ่งสมการของศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีที่จะไปใช้ในแบบจำลองของเซลล์เชื้อเพลิงแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอนในงานวิจัยนี้จะมีค่า ดังสมการที่ 2.16 ซึ่งจะใช้ค่าตัวแปรต่าง ๆ ในตารางที่ 2.2

2.6.3 ศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากความต้านทานไฟฟ้า (Ohmic overpotential)

ศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากความต้านทานไฟฟ้า คือ ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ที่สูญเสียไปเนื่องจากความต้านทานในการเคลื่อนที่ของประจุไฟฟ้าภายในเซลล์ ในกรณีนี้ของเซลล์เชื้อเพลิงแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอน ศักย์ไฟฟ้าเกินตัวนี้จะเกิดจากความต้านทานในการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนผ่านขั้วไฟฟ้าที่มีรูพรุนและแผ่นสะสมกระแส และความต้านทานในการเคลื่อนที่ของโปรตอนผ่านเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอน

ในส่วนของ การคำนวณการเกิดศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากความต้านทานไฟฟ้าจะใช้กฎของโอห์มและจะนำค่าศักย์ไฟฟ้ามาใช้ในการงานวิจัยนี้ ดังสมการ

$$\eta_{ohmic} = \eta_{ohmic}^C + \eta_{ohmic}^M = i(R_C + R_M) \quad (2.17)$$

เมื่อ R_C = membrane equivalent contact resistance (Ω)

R_M = equivalent membrane resistance (Ω)

ซึ่ง
$$R_M = \frac{\rho_M \cdot \ell}{A}$$

ℓ = ความหนาของเมมเบรน (cm)

ρ_M = membrane specific resistivity ($\Omega \cdot cm$)

ซึ่ง
$$\rho_M = \frac{181.6 \times \left[1 + 0.03 \left(\frac{i_{FC}}{A} \right) + 0.062 \times \left(\frac{T}{303} \right)^2 \left(\frac{i_{FC}}{A} \right)^{2.5} \right]}{\left[\psi - 0.634 - 3 \left(\frac{i_{FC}}{A} \right) \right] \times \exp \left[4.18 \times \left(\frac{T - 303}{303} \right) \right]}$$

ψ = สัมประสิทธิ์ที่ใช้สำหรับแบบจำลองของความต้านทานของเมมเบรน

ศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากความต้านทานไฟฟ้าเกิดจากความต้านทานการเคลื่อนที่ของโปรตอนภายในเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอนซึ่งจะขึ้นอยู่กับปริมาณน้ำที่อยู่ในเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอน ปฏิกิริยาการถ่ายโอนน้ำภายในเมมเบรนจะถูกควบคุมด้วยกลไกหลักสามกลไก คือ การเคลื่อนที่ของน้ำเนื่องจากแรงทางไฟฟ้าระหว่างโปรตอนและประจุไฟฟ้าของเมมเบรน (electro-osmotic drag) การเคลื่อนที่ของน้ำเนื่องจากการขับเคลื่อนจากผลต่างความดันระหว่างขั้วแอโนดและขั้วแคโทด (pressure driving flux) และการเคลื่อนที่ของน้ำที่เกิดจากความแตกต่างของค่าความเข้มข้นของน้ำ (diffusion)

2.6.4 ศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากความเข้มข้น (Concentration overpotential)

ศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากความเข้มข้น เกิดจากเชื้อเพลิงหรือสารออกซิไดซ์ถูกใช้ไปอย่างรวดเร็วในการเกิดปฏิกิริยาที่บริเวณผิวหน้าของขั้วไฟฟ้า ทำให้ความเข้มข้นหรือความดันของสารตั้งต้นลดลง เนื่องจากไม่สามารถแพร่ผ่านชั้นต่าง ๆ เข้าไปที่ผิวของขั้วไฟฟ้าได้อย่างเพียงพอต่อการเกิดปฏิกิริยาเป็นผลทำให้ศักย์ไฟฟ้าลดลงตามสมการของเนินสต์ ดังนั้นเมื่อความดันของสารตั้งต้นเปลี่ยนแปลงจะทำให้ค่าศักย์ไฟฟ้าเปลี่ยนแปลงไปตามสมการ [3]

$$\eta_{conc} = B \ln \left(\frac{p_1}{p_2} \right) \quad (2.18)$$

เมื่อ B = ค่าคงที่สัมประสิทธิ์ของศักย์ไฟฟ้าเกินตัวเนื่องจากความเข้มข้น
 p_1 = ความดันที่ผิวหน้าของตัวเร่งปฏิกิริยา เมื่อค่าความหนาแน่นกระแส = 0
 p_2 = ความดันที่ผิวหน้าของตัวเร่งปฏิกิริยา ที่ค่าความหนาแน่นกระแสใด ๆ

ถ้ากำหนดให้ความสัมพันธ์ระหว่างความดัน และความหนาแน่นกระแสเป็นแบบเส้นตรงจะได้

$$p_2 = p_1 \left(1 - \frac{j}{j_e} \right) \quad (2.19)$$

เมื่อ j_e = ค่าความหนาแน่นกระแสจำกัด (limiting current density) ซึ่งเป็นค่าความหนาแน่นกระแสสูงสุดเมื่อ p_2 ลดลงมาเท่ากับศูนย์ ในงานวิจัยนี้จะใช้สัญลักษณ์เป็น j_{max} ดังนั้นสามารถเขียนสมการ (overpotential) ที่นำมาใช้ในงานวิจัยนี้ ได้ดังสมการ

$$\eta_{conc} = -B \ln \left(1 - \frac{j}{j_{max}} \right) \quad (2.20)$$

2.6.5 อัตราการไหลขาเข้าของแก๊สไฮโดรเจนที่ใช้ในการทำปฏิกิริยา [8]

การคำนวณหาอัตราการไหลของแก๊สไฮโดรเจนขาเข้าจะหาจากสมการอนุรักษ์ซึ่งสามารถเขียนได้ดังสมการที่ 2.21 และ 2.22 ค่าตัวแปรต่าง ๆ จะสามารถหาได้จากตารางที่ 2.2

$$\left(\frac{V_a}{RT}\right)\frac{dP_{H_2}}{dt} = \dot{m}_{H_2,in} - \dot{m}_{H_2,out} - \frac{i}{2F} \quad (2.21)$$

$$\left(\frac{V_a}{RT}\right)\frac{dP_{H_2}}{dt} = k_{up,a}(P_s - P_a) - k_{down,a}(P_a - P_{atm}) - \frac{i}{2F} \quad (2.22)$$

- เมื่อ
- $k_{up,a}$ = ค่าสัมประสิทธิ์อัตราการไหลขาเข้าทางด้านขั้วแอโนด (mole/atm.s)
 - $k_{down,a}$ = ค่าสัมประสิทธิ์อัตราการไหลขาออกทางด้านขั้วแอโนด (mole/atm.s)
 - P_s = ความดันของแก๊สไฮโดรเจนเริ่มต้น (atm)
 - V_a = ปริมาตรของช่องการไหลของขั้วแอโนด (cm³)
 - $\dot{m}_{H_2,in}$ = อัตราการไหลขาเข้าของแก๊สไฮโดรเจน (mole/s)
 - $\dot{m}_{H_2,out}$ = อัตราการไหลขาออกของแก๊สไฮโดรเจน (mole/s)

2.6.6 อัตราการไหลขาเข้าของแก๊สออกซิเจนที่ใช้ในการทำปฏิกิริยา [8]

การคำนวณอัตราการไหลเข้าของแก๊สออกซิเจนสามารถหาได้ในลักษณะเช่นเดียวกับอัตราการไหลของแก๊สไฮโดรเจนดังสมการที่ 2.23 และ 2.24

$$\left(\frac{V_c}{RT}\right)\frac{dP_{O_2}}{dt} = \dot{m}_{O_2,in} - \dot{m}_{O_2,out} - \frac{i}{4F} \quad (2.23)$$

$$\left(\frac{V_c}{RT}\right)\frac{dP_{O_2}}{dt} = k_{up,c}(P_s - P_c) - k_{down,c}(P_c - P_{atm}) - \frac{i}{4F} \quad (2.24)$$

- เมื่อ
- $k_{up,c}$ = ค่าสัมประสิทธิ์อัตราการไหลขาเข้าทางด้านขั้วแคโทด (mole/atm.s)
 - $k_{down,c}$ = ค่าสัมประสิทธิ์อัตราการไหลขาออกทางด้านขั้วแคโทด (mole/atm.s)
 - V_c = ปริมาตรของช่องการไหลของขั้วแคโทด (cm³)
 - $\dot{m}_{O_2,in}$ = อัตราการไหลขาเข้าของแก๊สออกซิเจน (mole/s)
 - $\dot{m}_{O_2,out}$ = อัตราการไหลขาออกของแก๊สออกซิเจน (mole/s)

2.6.7 อัตราการไหลของน้ำที่เกิดขึ้นจากการเกิดปฏิกิริยา [3]

$$\dot{m}_{H_2O} = \frac{i \cdot n}{2F} \quad (\text{mol/sec}) \quad (2.25)$$

เมื่อ n = จำนวนของเซลล์เชื้อเพลิง

เนื่องจากมวลโมเลกุลของน้ำมีค่า 18.02×10^{-3} kg/mol ดังนั้นน้ำที่เกิดขึ้นจากการเกิดปฏิกิริยาจะเป็นดังสมการ

$$\begin{aligned} \text{water}(\text{production}) &= \frac{(18.02 \times 10^{-3}) \times P}{2FV} \\ &= (9.34 \times 10^{-8}) \times \frac{P}{V} \quad (\text{kg/sec}) \quad (2.26) \end{aligned}$$

เมื่อ P = กำลังไฟฟ้า (วัตต์)

V = ศักย์ไฟฟ้า (โวลต์)

ตารางที่ 2.2 แสดงค่าตัวแปรต่าง ๆ ที่ใช้สำหรับสมการของแบบจำลองเซลล์เชื้อเพลิง

Parameter	Value	symbol	Unit
จำนวนของเซลล์เชื้อเพลิง	1	n	
พื้นที่การทำปฏิกิริยาของเมมเบรน	5	A	cm ²
ความหนาของเมมเบรน	0.0178	l	cm
อุณหภูมิ	333.15	T	°C
ความดันย่อยทางด้านแอโนด	0-1.8689	p_{H_2}	atm
ความดันย่อยทางด้านแคโทด	0-2.3914	p_{O_2}	atm
ปริมาตรของช่องการไหลขั้วแอโนด	0.005	V_a	cm ³
ค่าสัมประสิทธิ์อัตราการไหลขาเข้าทาง ด้านขั้วแอโนด	0.0017769	$k_{up,a}$	mole/atm.s
ค่าสัมประสิทธิ์อัตราการไหลขาออกทาง ด้านขั้วแอโนด	0.001085884	$k_{down,a}$	mole/atm.s

ตารางที่ 2.2 แสดงค่าตัวแปรต่าง ๆ ที่ใช้สำหรับสมการของแบบจำลองเซลล์เชื้อเพลิง (ต่อ)

Parameter	Value	symbol	Unit
ความดันของแก๊สไฮโดรเจนเริ่มต้น	2.4	P_s	atm
ความดันบรรยากาศ	1	P_{atm}	atm
ปริมาตรของช่องการไหลขั้วแคโทด	0.01	V_c	cm ³
ค่าสัมประสิทธิ์อัตราการไหลขาเข้าทาง ด้านขั้วแคโทด	1.13E-02	$k_{up,c}$	mole/atm.s
ค่าสัมประสิทธิ์อัตราการไหลขาออกทาง ด้านขั้วแคโทด	0.00006875	$k_{down,c}$	mole/atm.s
membrane equivalent contact resistance	0.0003	R_C	ohm
สัมประสิทธิ์ที่ใช้สำหรับการคำนวณการ สูญเสียเนื่องจากความเข้มข้น	0.016	B	V
parametric coefficient (ξ_1)	-0.948	ξ_1	
parametric coefficient (ξ_2)	$0.00286 + 0.0002 \cdot \ln A$ $+ (4.3 \times 10^{-5}) \cdot \ln(c_{H_2})$	ξ_2	
parametric coefficient (ξ_3)	7.6×10^{-5}	ξ_3	
parametric coefficient (ξ_4)	-1.93×10^{-4}	ξ_4	
สัมประสิทธิ์ที่ใช้สำหรับแบบจำลองของ ความต้านทานของเมมเบรน	32	ψ	
ความหนาแน่นกระแสจำกัด	0.2	j_{max}	A/cm ²

2.7 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

Arriagada และคณะ [9] : ได้ศึกษาแบบจำลองแบบนิรพลเน็ตเวิร์กเทียมสำหรับทำนายสมรรถนะของเซลล์เชื้อเพลิงแบบออกไซด์ของแข็ง นิรพลเน็ตเวิร์กเทียมเรียนรู้โดยใช้ข้อมูลที่ได้จากแบบจำลองคณิตศาสตร์ที่ทำการตรวจสอบความถูกต้องแล้วเพื่อเรียนรู้ความสัมพันธ์ระหว่างอินพุตและเอาต์พุตของระบบ เมื่อเน็ตเวิร์กถูกฝึกเรียบร้อยแล้ว แบบจำลองนิรพลเน็ตเวิร์กเทียมสามารถทำนายการตอบสนองของการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงได้ ผลของการศึกษาพบว่าแบบจำลองของเซลล์เชื้อเพลิงแบบออกไซด์ของแข็งที่ได้จากการฝึกนิรพลเน็ตเวิร์กเทียมแสดงผลที่สอดคล้องตรงกันกับแบบจำลองทางกายภาพ นอกจากความแม่นยำที่เกี่ยวกับตัวเลขแล้วแบบจำลองนิรพลเน็ตเวิร์กเทียมนั้นยังมีความเร็วและง่ายต่อการนำไปใช้งาน ซึ่งมีความเหมาะสมสำหรับการทำให้เกิด performance maps

Won-Yong และคณะ [10] : ได้เสนอแบบจำลองนิรพลเน็ตเวิร์กเทียมเพื่อใช้ในการวิเคราะห์แบบจำลองและการทดลองของเซลล์เชื้อเพลิง ซึ่งในการจำลองสมรรถนะของเซลล์เชื้อเพลิงนั้นจะไม่มีค่าคำนวณที่ยุ่งยาก ข้อมูลที่ได้จากการทดลองจะใช้เมมเบรน Nafion 115 และ Nafion 1135 การศึกษาพบว่าผลที่ได้จากแบบจำลองนิรพลเน็ตเวิร์กเทียมจะมีความสอดคล้องกับผลที่ได้จากการทดลอง ดังนั้นแบบจำลองแบบนิรพลเน็ตเวิร์กเทียมสามารถจำลองข้อมูลการทดลองสำหรับสภาวะเงื่อนไขของการทำงานที่แตกต่างกัน และสามารถใช้ในการตรวจสอบหาตัวแปรที่มีอิทธิพลต่อกระบวนการได้

Jemei และคณะ [11] : ได้ศึกษาแบบจำลองการให้กำลังไฟฟ้าในเซลล์เชื้อเพลิง on-board บนพื้นฐานของวิธีการนิรพลเน็ตเวิร์กเทียม โดยวัตถุประสงค์เพื่อการนำไปใช้งานในการขนส่ง แบบจำลองเพื่อเลียนแบบของระบบเซลล์เชื้อเพลิงทั้งระบบเป็นสิ่งที่สำคัญมาก ซึ่งจะทำให้มีความเหมาะสมที่จะทำให้การสร้างยานพาหนะมีความที่สมบูรณ์แบบ เนื่องจาก“แบบจำลองพฤติกรรมที่มีค่าน้อยที่สุด” ของระบบเซลล์เชื้อเพลิงสามารถที่จะประเมินตัวแปรขาออกและการเปลี่ยนแปลงของสภาวะของแก๊ส, สภาวะการรวมตัวกับน้ำ, อุณหภูมิ, ค่ากระแสที่กำหนดได้

Martins และคณะ [12] : ได้ศึกษาวิธีการควบคุมแบบใหม่บนพื้นฐานของวิธีการควบคุมแบบ proportional integral and derivative (PID) ที่เกี่ยวกับนิรพลเน็ตเวิร์กเทียมแบบป้อนไปข้างหน้า ซึ่งจะถูกใช้ในการทำนายแบบจำลองของตัวแปรควบคุม ผลลัพธ์ของการสร้างแบบจำลองแสดงให้เห็นถึงสมรรถนะของการควบคุมที่ดี ประสิทธิภาพของนิรพลเน็ตเวิร์กเทียมแบบป้อนไปข้างหน้าจะเป็นเช่นเดียวกับการจำลองกระบวนการเพื่อทำนายค่าในอนาคตของตัวแปรควบคุม ข้อดีของนิรพลเน็ตเวิร์กแบบป้อนไปข้างหน้าคือ จะทำการรวบรวมข้อมูลของกระบวนการที่มีความสัมพันธ์กับสิ่งรบกวน โดยที่ข้อมูลอินพุตกับเอาต์พุตนั้นจะได้มาจากกระบวนการและค่า

เหล่านั้นจะถูกนำไปใช้ในการฝึก อย่างไรก็ตามนิเวศน์เน็ตเวิร์กเทียมแบบป้อนไปข้างหน้าไม่ใช่แบบจำลองโปรแกรมแต่เป็นแบบจำลองการฝึกข้อมูล

Yerramalla และคณะ [13] : ได้พัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับใช้ตรวจสอบสมรรถนะทางไดนามิกส์ของเซลล์เชื้อเพลิงแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอน ผลที่ได้จากการทำแบบจำลองจะแสดงพฤติกรรมแบบชั่วคราวของศักย์ไฟฟ้าภายในเซลล์เซลล์เดี่ยวแต่ละเซลล์ และโดยเฉพาะภายในเซลล์ที่รวมกันเป็นหน่วยชั้นเซลล์เชื้อเพลิง ทำให้การพัฒนาแบบจำลองในงานวิจัยนี้สามารถนำไปใช้สำหรับการออกแบบเครื่องควบคุมที่มีความจำเป็นต่อการรวมเซลล์เชื้อเพลิงเข้าไปในระบบการกระจายกำลัง และแบบจำลองนี้สามารถใช้ในการทำนายประสิทธิภาพของระบบเซลล์เชื้อเพลิงกับการควบคุมแบบต่าง ๆ

Tao และคณะ [14] : ได้ศึกษาแบบจำลองไม่เป็นเชิงเส้นของเซลล์เชื้อเพลิงแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอนบนพื้นฐานของลักษณะเฉพาะตัวของโครงข่ายประสาทเทียม โดยจะใช้ความสามารถในการเรียนรู้ของโครงข่ายประสาทเทียมเพื่อสร้างแบบจำลองของระบบไม่เป็นเชิงเส้นและปรับปรุงวิธีการเรียนรู้แบบ Levenberg-Marquardt backpropagation (LMBP) เพื่อสร้างแบบจำลองทางไฟฟ้าของเซลล์เชื้อเพลิงแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอน พบว่าโครงข่ายประสาทเทียมซึ่งใช้วิธีการเรียนรู้แบบ LMBP ทำให้ได้แบบจำลองของระบบเซลล์เชื้อเพลิงที่ซับซ้อนและไม่เป็นเชิงเส้นซึ่งจะมีความแม่นยำของแบบจำลองสูง และเป็นทางเลือกถึงการคำนวณที่ยุงยากซับซ้อนที่เกิดเนื่องมาจากกลไกของพฤติกรรมแบบไดนามิกส์ ดังนั้นการค้นหาข้อมูลพื้นฐานที่จะใช้สำหรับการออกแบบ, วิเคราะห์ระบบของเซลล์เชื้อเพลิง เพื่อหาสมรรถนะที่เหมาะสมของเซลล์นั้นจึงเป็นสิ่งที่สำคัญ

Pathapati และคณะ [8] : ได้พัฒนาชุดของสมการที่เป็นลักษณะเฉพาะของผลกระทบของชั้นตัวเก็บประจุ, ไดนามิกส์ของอัตราการไหลและความดันในช่องการไหลของขั้วแอโนดกับขั้วแคโทด และลักษณะการเคลื่อนที่ชั่วคราวของการถ่ายโอนมวลและความร้อนในตัวเซลล์เชื้อเพลิง โดยใช้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ทำการจำลองปรากฏการณ์ชั่วคราวในระบบเซลล์เชื้อเพลิงแบบฟลูอิด ผลที่ได้จากการทำแบบจำลองจะมีความสอดคล้องที่ดีกับผลการศึกษาของ benchmark ที่มีอยู่ จากการวิเคราะห์ทำให้ทราบว่าผลกระทบที่สำคัญที่เกิดขึ้นภายในระบบเซลล์เชื้อเพลิงนั้นคือความสัมพันธ์ทางไดนามิกส์