การใช้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์เพื่อวิเคราะห์การสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็ง

นายชาญวิทย์ จันสถิรพานิช

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต
สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี ภาควิชาวิศวกรรมเคมี
คณะวิศวกรรมศาสตร์ 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.

APPLICATION OF MATHEMATICAL MODEL FOR ANALYSIS OF CONCENTRATION OVERPOTENTIAL LOSS OF SOLID OXIDE FUEL CELL

Mr. Chanwit Chansatirapanich

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of Master of Engineering Program in Chemical Engineering
Department of Chemical Engineering
Faculty of Engineering
Chulalongkorn University
Academic Year 2011
Copyright of Chulalongkorn University

หัวข้อวิทยานิพนธ์	การใช้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์เพื่อวิเคราะห์การสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็ง
โดย	นาย ชาญวิทย์ จันสถิรพานิช
สาขาวิชา	วิศวกรรมเคมี
อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก	อาจารย์ ดร. วรัญ แต้ไพสิฐพงษ์

คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย อนุมัติให้นับวิทยานิพนธ์ฉบับนี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญามหาบัณฑิต

………………………………………….. คณบดีคณะวิศวกรรมศาสตร์
(รองศาสตราจารย์ ดร. บุญสม เลิศหิรัญวงศ์)

คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์

…………………………………………… ประธานกรรมการ
(รองศาสตราจารย์ ดร. เหมือนเดือน พิศาลพงศ์)

………………………………………….. อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก
(อาจารย์ ดร. วรัญ แต้ไพสิฐพงษ์)

…………………………………………… กรรมการ
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. อมรชัย อาภรณ์วิชานพ)

…………………………………………… กรรมการภายนอกมหาวิทยาลัย
(รองศาสตราจารย์ ดร. สมศักดิ์ วรมงคลชัย)

ชาญวิทย์ จันสถิรพานิช : การใช้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์เพื่อวิเคราะห์การสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็ง. (APPLICATION OF MATHEMATICAL MODEL FOR ANALYSIS OF CONCENTRATION OVERPOTENTIAL LOSS OF SOLID OXIDE FUEL CELL) อ. ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก : อ. ดร. วรัญ แต้ไพสิฐพงษ์, 189 หน้า.

งานวิจัยนี้มุ่งใช้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการถ่ายเทมวลสาร (mass transfer) และความยาวของสภาวะขอบสามเฟส (triple-phase-boundary length) เพื่อทำนายคุณสมบัติโครงสร้างภายในขั้วแอโนดที่เหมาะสม ที่มีผลถึงประสิทธิภาพขั้วแอโนดของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็ง (solid oxide fuel cell) ซึ่งเชื่อมโยงความสัมพันธ์ระหว่างความยาวของสภาวะขอบสามเฟสกับค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้น (concentration overpotential)โดยใช้สมการการแพร่ของฟิค (Fick diffusion equation) และสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์(Stefan-Maxwell equation) เป็นเครื่องมือในการอธิบายปริมาณสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจน (H_2) และคาร์บอนมอนอกไซด์ (CO) ภายในขั้วแอโนด ที่อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ และใช้สมการเชิงเรขาคณิตทำการวิเคราะห์ถึงความยาวและรอยต่อของสภาวะขอบสามเฟสภายในขั้วแอโนด โดยเลือกคำนวณที่ขนาดอนุภาคภายในขั้วแอโนดตั้งแต่ 0.25 ถึง 6.0 ไมโครเมตร และค่าสัดส่วนความพรุนตั้งแต่ร้อยละ 10 ถึง 90 พบว่าขนาดอนุภาคภายในขั้วแอโนดและค่าสัดส่วนความพรุนมีผลต่อค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นของเซลล์เชื้อเพลิงและความยาวของสภาวะของสามเฟสต่อหน่วยปริมาตร (volume specific triple-phase-boundary length) ผลการคำนวณแสดงให้เห็นว่าขั้วแอโนดจะมีประสิทธิภาพสูงสุดที่ค่าสัดส่วนความพรุนอยู่ในช่วงร้อยละ 50 ถึง 60 ที่ขนาดอนุภาคภายในขั้วแอโนด 1.0 ถึง 2.0 ไมโครเมตร ดังนั้นการกำหนดลักษณะโครงสร้างที่เหมาะสมของขั้วแอโนดสำหรับเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งให้มีประสิทธิสูงสุด สามารถทำได้ด้วยการควบคุมค่าสัดส่วนความพรุน ขนาดของอนุภาคภายในขั้วแอโนด และขนาดของรัศมีรูพรุนเฉลี่ยของระบบ

ภาควิชา วิศวกรรมเคมี ลายมือชื่อนิสิต ....

สาขาวิชา วิศวกรรมเคมี ลายมือชื่อ อ.ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก ....

ปีการศึกษา 2554

5270270121 : MAJOR CHEMICAL ENGINEERING

KEYWORDS : SOLID OXIDE FUEL CELL / CONCENTRATION OVERPOTENTIAL / TRIPLE-PHASE-BOUNDARY LENGTH / MASS TRANSFER IN ANODE SUPPORT

CHANWIT CHANSATIRAPANICH : APPLICATION OF MATHEMATICAL MODEL FOR ANALYSIS OF CONCENTRATION OVERPOTENTIAL LOSS OF SOLID OXIDE FUEL CELL. ADVISOR : VARUN TAEPAISITPHONGSE, Ph.D., 189 pp.

The research primarily used mathematical simulation of mass transfer and triple-phase-boundary length to predict the appropriate anode structure that affected the anode performance of solid oxide fuel cell, which connects the relationship of the triple-phase-boundary length and the concentration ovepotential. The Fick diffusion equation and Stefan-Maxwell equation were used as tools to explain the mole fraction of hydrogen (H_2) fuel and carbon monoxide (CO) fuel within the anode support at 750 ^{o}C and 1 atm, whereas the geometrical equation analysis of the anode structure was used to analysis the triple-phase-boundary length. The grain size of the anode support ranging from 0.25 to 6.0 micrometers and the porosity from 10 to 90 percent were selected for simulation in this research. It was found that the grain size of anode support and porosity affected the concentration overpotential and volume specific triple-phase-boundary length. The results showed that the most effective performance of anode support occurred at the porosity range of 50 to 60 percent and at anode support grain size 1.0 to 2.0 micrometer. So, the appropriate structure for the anode of solid oxide fuel cell with maximum efficiency can be achieved by controlling porosity, grain size and pore size.

Department : Chemical Engineering	Student's Signature ....
Field of Study : Chemical Engineering	Advisor's Signature ....
Academic Year : 2011	

กิตติกรรมประกาศ

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้ สำเร็จลุล่วงตามวัตถุประสงค์ เพราะได้รับความช่วยเหลือจากหลายฝ่าย ผู้เขียนขอขอบพระคุณอาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ อ. ดร. วรัญ แต้ไพสิฐพงษ์ ที่ให้ความช่วยเหลือในทุกด้านเป็นอย่างดีตลอดมา ความรู้ คำแนะนำ คำปรึกษา และชี้แนะแนวทางแก้ไขปัญหา รวมถึงประธานกรรมการและคณะกรรมการตรวจสอบวิทยานิพนธ์ทุกท่าน ที่ได้เสียสละเวลามอบคำแนะนำ และตรวจสอบวิทยานิพนธ์ฉบับนี้ให้เสร็จสมบูรณ์

ผู้เขียนขอขอบพระคุณความช่วยเหลือที่ได้รับจากบุคคลต่างๆ ดังนี้

อ. ดร.วลัยรัตน์ สุขสมัย อาจารย์ประจำสาขาวิชาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง สำหรับคำแนะนำ และคำวิจารณ์ในการทำงานวิจัยด้านเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งโดยตลอดมา ซึ่งท่านเป็นผู้มอบแรงบันดาลใจในการทำงานวิจัยด้านนี้ให้กับผู้เขียน ตั้งแต่ผู้เขียนศึกษาอยู่ในระดับปริญญาตรี ที่คณะวิศวกรรมศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

อ. ดร. นาวี กังวาลย์ อาจารย์ประจำภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเชียงใหม่ สำหรับความช่วยเหลือด้านเครื่องมือวิจัย และสถานที่ทำงานวิจัย

คุณ รฐวรรธน์ แดงเงิน นักศึกษาระดับปริญญาเอก ภาควิชาเคมีและเคมีประยุกต์ คณะวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี มหาวิทยาลัยอลาสก้า วิทยาเขตแฟร์แบงค์ ประเทศสหรัฐอเมริกา และ คุณ ชาญชัย สัตยนนท์ นักศึกษาระดับปริญญาโท ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเชียงใหม่ สำหรับความช่วยเหลือการติดต่อสถานที่ทำงานวิจัยและที่พักอาศัย

อ. ดร. รัตนาภร ยวงสวัสดิ์ อาจารย์ประจำภาควิชาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีราชมงคลกรุงเทพ สำหรับการร่วมอภิปราย คำแนะนำ และแสดงความคิดเห็นโดยตลอดมา

ผศ. ไพชยนต์ สิริเสถียรวัฒนา ผู้แต่งหนังสือ การใช้โปรแกรม MAPLE สำหรับคำแนะนำในการแก้ปัญหาเชิงตัวเลขด้วยโปรแกรม MAPLE 13

สุดท้ายนี้ผู้เขียนขอขอบพระคุณบุพการี คณาจารย์ทุกท่านและเพื่อนๆ ทุกคนที่คอยช่วยเหลือ ให้ความรู้ คำแนะนำ และกำลังใจที่ดีตลอดมา

ทั้งนี้หากมีข้อผิดพลาดประการใด ผู้เขียนขอน้อมรับและขออภัยมา ณ ที่นี้

สารบัญ

	หน้า
บทคัดย่อภาษาไทย	ง
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ	จ
กิตติกรรมประกาศ	ฉ
สารบัญ	ช
สารบัญตาราง	ญ
สารบัญรูป	ฎ
คำอธิบายสัญลักษณ์และคำย่อ	ด
บทที่	
1 บทนำ	1
1.1 ที่มาและความสำคัญของงานวิจัย	1
1.2 วัตถุประสงค์	3
1.3 ขอบเขตงานวิจัย	3
1.4 ขั้นตอนการดำเนินงาน	4
2 ทฤษฎี	5
2.1 เซลล์เชื้อเพลิง	5
2.1.1 ส่วนประกอบของเซลล์เชื้อเพลิง	5
2.1.2 ชนิดของเซลล์เชื้อเพลิง	6
2.1.2.1 เซลล์เชื้อเพลิงชนิดอัลคาไลน์	6
2.1.2.2 เซลล์เชื้อเพลิงชนิดเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอน	6
2.1.2.3 เซลล์เชื้อเพลิงชนิดป้อนสารเมทานอลโดยตรง	6
2.1.2.4 เซลล์เชื้อเพลิงชนิดกรดฟอสฟอริก	7
2.1.2.5 เซลล์เชื้อเพลิงชนิดเกลือคาร์บอเนตหลอม	7
2.1.2.6 ชนิดออกซิเจนไอออนเคลื่อนที่ผ่านอิเล็กโทรไลต์	7
2.2 สมการปรากฏการณ์การขนถ่าย	11
2.2.1 สมการปรากฏการณ์การขนถ่าย	11
2.2.2 สมการการเคลื่อนที่	11
2.2.3 สมการความต่อเนื่องของการถ่ายเทมวล	12
2.2.4 การถ่ายเทมวลสาร	12
2.2.4.1 การแพร่ของโมเลกุล	12
2.2.4.2 การแพร่คนุดเซน	13
2.2.4.3 สัมประสิทธิ์การแพร่	13

หน้า

2.2.4.4 สมการการแพร่ของฟิค 15

2.2.4.5 สมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ 16

2.2.4.6 สมการการแพร่ดัสตีแก๊ส 16

2.2.5 การสูญเสียศักย์ไฟฟ้าภายในเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็ง 16

2.2.5.1 การสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากพลังงานกระตุ้น 17

2.2.5.2 การสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความต้านทานภายใน 18

2.2.5.3 การสูญเสียศักย์ไฟฟ้าซึ่งเกิดจากการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นภายในขั้วอิเล็กโทรด 18

2.2.6 ระบบโครงสร้างภายในขั้วแอโนด 19

3 ทบทวนวรรณกรรม 24

3.1 ความสัมพันธ์ระหว่างการถ่ายเทมวลสารภายในขั้วแอโนดกับค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้น 24

3.2 ความสัมพันธ์ระหว่างระบบโครงสร้างภายในขั้วแอโนดกับความยาวของสภาวะของสามเฟสต่อหน่วยปริมาตร 31

4 การพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ 40

4.1 ระบบถ่ายเทมวลสาร 40

4.1.1 การถ่ายเทมวลสารที่ไม่เกิดการเปลี่ยนของความเข้มข้นภายในสายป้อนของขั้วแอโนด 40

4.1.1.1 ข้อสมมติฐานของระบบการถ่ายเทมวลสารที่ไม่เกิดการเปลี่ยนของความเข้มข้นภายในสายป้อนของขั้วแอโนด 41

4.1.1.2 แผนผังการคำนวณ 42

4.1.2 การถ่ายเทมวลสารที่เกิดการเปลี่ยนของความเข้มข้นภายในสายป้อนของขั้วแอโนด 43

4.1.2.1 ข้อสมมติฐานระบบการถ่ายเทมวลสารที่เกิดการเปลี่ยนของความเข้มข้นภายในสายป้อนของขั้วแอโนด 44

4.1.2.2 แผนผังการคำนวณ 44

4.2 ระบบโครงสร้างภายในขั้วแอโนด 46

4.2.1 ข้อสมมติฐานของระบบโครงสร้างภายในขั้วแอโนด 46

4.2.2 แผนผังการไหล 47

4.3 โปรแกรมสำหรับการพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ 48

4.3.1 ภาษาซี 48

4.3.2 โปรแกรม Maple 48

4.4 ตัวแปรควบคุมและค่าสภาวะของระบบ 49

หน้า

5 ผลการทดลองและการวิจารณ์ 50
5.1 การถ่ายเทมวลสารเมื่อไม่เกิดการเปลี่ยนของความเข้มข้นภายในสายป้อนของขั้วแอโนด 50
5.1.1 ทำนายพฤตติกรรมแก๊สในระบบด้วยสมการการแพร่ของฟิค 50
5.1.2 ทำนายพฤตติกรรมแก๊สในระบบด้วยสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ 57
5.2 การถ่ายเทมวลสารที่เกิดการเปลี่ยนของความเข้มข้นภายในสายป้อนของขั้วแอโนด 62
5.2.1 ทำนายพฤตติกรรมแก๊สในระบบด้วยสมการการแพร่ของฟิค 63
5.2.2 ทำนายพฤตติกรรมแก๊สในระบบด้วยสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ 70
5.3 ระบบโครงสร้างภายในขั้วแอโนด 79
5.3.1 แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่ใช้สมการการแพร่ของฟิคคำนวณค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นของระบบโครงสร้างภายในขั้วแอโนด 81
5.3.2 แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่ใช้สมการสเตฟาน-แม็คเวลล์คำนวณค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นของระบบโครงสร้างภายในขั้วแอโนด 86
6 สรุปผลการทดลองและข้อเสนอแนะ 89
6.1 สรุปผลการทดลอง 89
6.2 ข้อเสนอแนะ 90
รายการอ้างอิง 91

ภาคผนวก 95
ภาคผนวก ก ค่าคงที่ในการคำนวณ 96
ภาคผนวก ข การแก้สมการและการคำนวณสมการการแพร่ของระบบ 102
ภาคผนวก ค แสดงรหัสโปรแกรมสำหรับแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ 106

ประวัติผู้เขียนวิทยานิพนธ์ 189

สารบัญตาราง

ตารางที่ หน้า

4.1	ตัวแปรควบคุมและค่าคงที่ของเซลล์เชื้อเพลิงฝั่งขั้วแอโนด	46
5.1	สรุปช่วงหวังผลของการทำนายด้วยสมการการแพร่ของฟิคและสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์โดยใช้เชื้อเพลิงไฮโดรเจนและคาร์บอนมอนอกไซด์	78
ก-1	ค่าคงที่ทั่วไปเพิ่มเติม	96
ก-2	ค่าคงที่แก๊สในระบบ	97
ก-3	ผลการทดลองของ Yakabe, H. et al. [5] ของระบบเชื้อเพลิงแก๊สไฮโดรเจน	98
ก-4	ผลการทดลองของ Yakabe, H. et al. [5] ของระบบเชื้อเพลิงแก๊สคาร์บอน-มอนอกไซด์	99

สารบัญภาพ

ภาพที่		หน้า
2.1	ตัวอย่างส่วนประกอบของเซลล์เชื้อเพลิงลักษณะเซลล์แผ่นแบน	5
2.2	การทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งชนิดไอออนของออกซิเจนเคลื่อนที่ผ่านอิเล็กโทรไลต์	8
2.3	การทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งชนิดไอออนของไฮโดรเจนเคลื่อนที่ผ่านอิเล็กโทรไลต์	9
2.4	เซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งลักษณะทรงกระบอก	9
2.5	เซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งลักษณะแผ่นแบน	10
2.6	เซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งลักษณะโมโนลิติก	10
2.7	การแพร่ของโมเลกุลแบบสุ่ม	12
2.8	การเชื่อมต่อของอนุภาคภายในโครงสร้างขั้วแอโนด	19
2.9	บริเวณที่เกิดสภาวะขอบสามเฟส	20
2.10	การทับซ้อนของอนุภาคทรงกลม	20
3.1	ลักษณะชุดเซลล์และเซลล์เดียวของขั้วแอโนดเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็ง	25
3.2	แนวคิดการซึมผ่านและการแพรผ่านภายในขั้วแอโนด	26
3.3	การคำนวณค่าการสูญเสียการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นภายในขั้วแอโนดและแคโทด	28
3.4	การคำนวณค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นภายในขั้วแอโนด โดยใช้ระบบแก๊สผสมของแก๊สไฮโดรเจน ไอน้ำ และแก๊สอาร์กอน (H_2-H_2O-Ar)	29
3.5	การคำนวณค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นภายในขั้วแอโนด โดยใช้ระบบแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์กับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ (CO-CO_2)	29
3.6	ความสัมพันธ์ของค่าการการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าซึ่งเกิดจากการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นเมื่อเกิดการเปลี่ยนแปลงค่าความหนาแน่นกระแส ในระบบที่คำนวณและไม่คำนวณค่าความหนาของชั้นการเกิดปฏิกิริยาภายในขั้วแอโนด	30
3.7	ความสัมพันธ์ของค่าการการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าซึ่งเกิดจากการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นเมื่อเกิดการเปลี่ยนแปลงค่าความหนาแน่นกระแส ในระบบที่คำนวณและไม่คำนวณค่าความหนาของชั้นการเกิดปฏิกิริยาภายในขั้วแอโนด	31
3.8	ความสัมพันธ์ของค่าโคออร์ดิเนชันกับหลักเกณฑ์การจับกลุ่มเพอร์โคเลชันแสดงให้เห็นถึงลักษณะการสัมผัสของอนุภาคทรงกลม	32

ภาพที่		หน้า
3.9	กราฟสามมิติของความสัมพันธ์ระหว่างความยาวสภาวะขอบสามเฟสต่อขนาดอนุภาคของแข็งและสัดส่วนความพรุน เมื่อกำหนดให้สัดส่วนความพรุนที่ร้อยละ 30 (a) และขนาดรูพรุนที่ 5 ไมโครเมตร (b)	33
3.10	การวิเคราะห์เฟสในรูปแบบสามมิติแสดงโลหะนิกเกิล (สีเขียว) เทียม-สเตบิไลซ์เซอร์โคเนีย (ทึบ/เทา) ช่องว่าง (สีฟ้า)	34
3.11	การวิเคราะห์เฟสในรูปแบบสามมิติแสดงถึงรอยต่อของแต่ละเฟสซึ่งส่งผลให้เกิดความยาวของสภาวะขอบสามเฟส	35
3.12	ความสัมพันธ์ระหว่างความยาวของสภาวะขอบสามเฟสต่อปริมาตรและสัดส่วนความพรุนสำหรับระบบที่มีขนาดของอนุภาคเฟสไอออนิกกับอนุภาคเฟสอิเล็กทรอนิกส์เท่ากันและสัดส่วนโดยปริมาตรทั้งสองเฟสเท่ากัน	36
3.13	ความสัมพันธ์ระหว่างความยาวของสภาวะขอบสามเฟสต่อปริมาตรและสัดส่วนความพรุนสำหรับระบบที่มีขนาดของอนุภาคเฟสไอออนิกกับอนุภาคเฟสอิเล็กทรอนิกส์ไม่เท่ากันและสัดส่วนโดยปริมาตรทั้งสองเฟสไม่เท่ากัน	36
3.14	ภาพมุมบนที่ได้จากกล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอนชนิดส่องกราด (Scanning Electron Microscope) โดย (a) คือ อิเล็กโทรไลต์อิเทียม-สเตบิไลซ์เซอร์โคเนีย, (b) คือ โลหะไทเทเนียมไดออกไซด์ที่เพิ่มจากภาพ (a), (c) คือ โลหะแพลทินัมที่เพิ่มจากภาพ (b) ที่อัตรากำลังขยาย 5000 หรือระดับ 500 ไมโครเมตร	37
3.15	อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีของเชื้อเพลิงแก๊สเอทิลีน ร้อยละของการเปลี่ยนแปลงเชื้อเพลิง และศักย์ไฟฟ้าคร่อมเซลล์ ที่อุณหภูมิ 280 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ ภาพบนเป็นตัวเร่งปฏิกิริยาเคมีที่ไม่ได้เติมโลหะไทเทเนียมไดออกไซด์และภาพล่างเป็นภาพที่มีการเติมโลหะไทเทเนียมไดออกไซด์	38
3.16	ภาพมุมบนที่ได้จากกล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอนชนิดส่องกราดของโลหะแพลทินัมบนตัวรองรับอิเทียม-สเตบิไลซ์เซอร์โคเนีย โดยภาพ a คือ ตัวเร่งปฏิกิริยาเคมีที่ได้จากวิธีสปัตเตอริง และภาพ b คือ ตัวเร่งปฏิกิริยาเคมีที่ได้จากวิธีเพลสท์	38
3.17	อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีของตัวเร่งปฏิกิริยาเคมีโลหะแพลทินัมบนตัวรองรับอิเทียม-สเตบิไลซ์เซอร์โคเนีย โดย (∗) แสดงถึงวิธีสปัตเตอริง และ (△) แสดงถึงวิธีเพลสท์	39
4.1	ระบบแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งฝั่งขั้วแอโนด	42
5.1	เปรียบเทียบผลการคำนวณค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่ค่าความหนาแน่นกระแสของระบบ 0.3, 0.7, 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร และสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงที่ 0.1 ถึง 0.8 จากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ด้วยสมการการแพร่ของฟิคระบบ H_2-H_2O-Ar เปรียบเทียบกับงานวิจัยของ Yakabe, H. et al. [1] ที่อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ โดยเส้นทึบคือ ผลที่ได้จากการคำนวณ และเส้นประคือ ผลที่ได้จากการทดลองจริง	50

ภาพที่ หน้า

5.2 ผลการคำนวณค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่ค่าความหนาแน่นกระแสของระบบ 0.1, 0.3, 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร และสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงที่ 0.1 ถึง 0.8 จากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ด้วยสมการการแพร่ของฟิคระบบ $CO-CO_2$ เปรียบเทียบกับงานวิจัยของ Yakabe, H. et al. [1] ที่อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ โดยเส้นทึบคือ ผลที่ได้จากการคำนวณ และเส้นประคือ ผลที่ได้จากการทดลองจริง 51
5.3 การเปลี่ยนแปลงสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนตามระยะความหนาของขั้วแอโนด ที่ความหนาแน่นกระแส 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร โดยสมการการแพร่ของฟิค 52
5.4 การเปลี่ยนแปลงสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนตามระยะความหนาของขั้วแอโนด ที่ความหนาแน่นกระแส 0.7 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร โดยสมการการแพร่ของฟิค 53
5.5 การเปลี่ยนแปลงสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนตามระยะความหนาของขั้วแอโนด ที่ความหนาแน่นกระแส 0.3 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร โดยสมการการแพร่ของฟิค 53
5.6 การเปลี่ยนแปลงสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงคาร์บอนมอนอกไซด์ตามระยะความหนาของขั้วแอโนด ที่ความหนาแน่นกระแส 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร โดยสมการการแพร่ของฟิค 54
5.7 การเปลี่ยนแปลงสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงคาร์บอนมอนอกไซด์ตามระยะความหนาของขั้วแอโนด ที่ความหนาแน่นกระแส 0.3 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร โดยสมการการแพร่ของฟิค 54
5.8 การเปลี่ยนแปลงสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงคาร์บอนมอนอกไซด์ตามระยะความหนาของขั้วแอโนด ที่ความหนาแน่นกระแส 0.1 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร โดยสมการการแพร่ของฟิค 55
5.9 ความสัมพันธ์ระหว่างสัดส่วนความพรุน ขนาดรูพรุน และสัมประสิทธิ์การแพร่โดยรวมของแก๊สไฮโดรเจน โดยสมการการแพร่ของฟิค 55
5.10 ความสัมพันธ์ระหว่างสัดส่วนความพรุน ขนาดรูพรุน และค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นของระบบแก๊สไฮโดรเจน โดยสมการการแพร่ของฟิค 56
5.11 ความสัมพันธ์ระหว่างสัดส่วนความพรุน สัมประสิทธิ์การแพร่โดยรวมของแก๊สไฮโดรเจนและค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นของระบบแก๊สไฮโดรเจน โดยสมการการแพร่ของฟิค 56

ภาพที่		หน้า

5.12 ผลการคำนวณค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่ค่าความหนาแน่นกระแสของระบบ 0.3, 0.7, 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร และสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงที่ 0.1 ถึง 0.8 จากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ด้วยสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ ระบบ H_2-H_2O-Ar เปรียบเทียบกับงานวิจัยของ Yakabe, H. et al. [1] ที่อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ โดยเส้นทึบคือ ผลที่ได้จากการคำนวณ และเส้นประคือ ผลที่ได้จากการทดลองจริง 58

5.13 ผลการคำนวณค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่ค่าความหนาแน่นกระแสของระบบ 0.1, 0.3, 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร และสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงที่ 0.1 ถึง 0.8 จากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ด้วยสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ระบบ CO-CO_2 เปรียบเทียบกับงานวิจัยของ Yakabe, H. et al. [1] ที่อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ โดยเส้นทึบคือ ผลที่ได้จากการคำนวณ และเส้นประคือ ผลที่ได้จากการทดลองจริง 58

5.14 การเปลี่ยนแปลงสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนตามระยะความหนาของขั้วแอโนด ที่ความหนาแน่นกระแส 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร โดยสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ 59

5.15 การเปลี่ยนแปลงสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนตามระยะความหนาของขั้วแอโนด ที่ความหนาแน่นกระแส 0.7 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร โดยสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ 60

5.16 การเปลี่ยนแปลงสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนตามระยะความหนาของขั้วแอโนด ที่ความหนาแน่นกระแส 0.3 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร โดยสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ 60

5.17 การเปลี่ยนแปลงสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงคาร์บอนมอนอกไซด์ตามระยะความหนาของขั้วแอโนด ที่ความหนาแน่นกระแส 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร โดยสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ 61

5.18 การเปลี่ยนแปลงสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงคาร์บอนมอนอกไซด์ตามระยะความหนาของแอโนด ที่ความหนาแน่นกระแส 0.3 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร โดยสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ 61

5.19 การเปลี่ยนแปลงสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงคาร์บอนมอนอกไซด์ตามระยะความหนาของขั้วแอโนด ที่ความหนาแน่นกระแส 0.1 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร โดยสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ 62

ภาพที่ หน้า

5.20 ผลการคำนวณค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้นของระบบ 0.3, 0.7, 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร และสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงที่ 0.1 ถึง 0.8 จากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ด้วยสมการการแพร่ของฟิคระบบ H_2-H_2O-Ar เปรียบเทียบกับงานวิจัยของ Yakabe, H. et al. [1] ที่อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ โดยเส้นทึบคือ ผลที่ได้จากการคำนวณ และเส้นประคือ ผลที่ได้จากการทดลองจริง ---- 64

5.21 การเปลี่ยนแปลงของค่าความหนาแน่นกระแสกับสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนตามระยะทาง ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.6 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ ---- 64

5.22 การเปลี่ยนแปลงของค่าความหนาแน่นกระแสกับค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นตามระยะทาง ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.6 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ ---- 65

5.23 การเปลี่ยนแปลงของค่าความหนาแน่นกระแสตามระยะทาง ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 0.3, 0.7 และ 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.6 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ ---- 65

5.24 การเปลี่ยนแปลงของค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นตามระยะทาง ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 0.3, 0.7 และ 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.6 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ ---- 66

5.25 ผลการคำนวณค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้นของระบบ 0.1, 0.3, 0.5 แอมแปรต่อตารางเซนติเมตร และสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงที่ 0.1 ถึง 0.8จากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ด้วยสมการการแพร่ของฟิคระบบ CO-CO_2 เปรียบเทียบกับงานวิจัยของ Yakabe, H. et al. [1] ที่อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศโดยเส้นทึบคือ ผลที่ได้จากการคำนวณ และเส้นประคือ ผลที่ได้จากการทดลองจริง ---- 67

5.26 การเปลี่ยนแปลงของค่าความหนาแน่นกระแสตามระยะทาง ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 0.1, 0.3 และ 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.64 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ ---- 68

ภาพที่ หน้า

5.27 การเปลี่ยนแปลงของค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นตามระยะทางที่ความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 0.1, 0.3 และ 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.64 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ 68

5.28 การเปลี่ยนแปลงของค่าความหนาแน่นกระแสกับสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนตามระยะทาง ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 0.3 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.64 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียสและความดัน 1 บรรยากาศ 69

5.29 การเปลี่ยนแปลงของค่าความหนาแน่นกระแสกับค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นตามระยะทาง ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 0.3 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.64 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ 69

5.30 ผลการคำนวณค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้นของระบบ 0.3, 0.7, 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร และสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงที่ 0.1 ถึง 0.8 จากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ด้วยสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ ระบบ H2-H2O-Ar เปรียบเทียบกับงานวิจัยของ Yakabe, H. et al. [1] ที่อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ โดยเส้นทึบคือ ผลที่ได้จากการคำนวณและเส้นประคือ ผลที่ได้จากการทดลองจริง 70

5.31 การเปลี่ยนแปลงของค่าความหนาแน่นกระแสตามระยะทาง ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 0.3, 0.7 และ 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.6 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ 71

5.32 การเปลี่ยนแปลงของค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นตามระยะทาง ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 0.3, 0.7 และ 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.6 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ 72

5.33 การเปลี่ยนแปลงของค่าความหนาแน่นกระแสกับสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนตามระยะทาง ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.6 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1บรรยากาศ 73

ภาพที่ หน้า

5.34 การเปลี่ยนแปลงของค่าความหนาแน่นกระแสกับค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นตามระยะทาง ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.6 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ 73

5.35 ผลการคำนวณค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้นของระบบ 0.1, 0.3, 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร และสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงที่ 0.1 ถึง 0.8 จากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ด้วยสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ระบบ CO-CO_2 เปรียบเทียบกับงานวิจัยของ Yakabe, H. et al. [1] ที่อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ โดยเส้นทึบคือ ผลที่ได้จากการคำนวณและเส้นประคือ ผลที่ได้จากการทดลองจริง 74

5.36 การเปลี่ยนแปลงของค่าความหนาแน่นกระแสตามระยะทาง ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 0.1, 0.3 และ 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงคาร์บอนมอนอกไซด์ในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.64 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ 75

5.37 การเปลี่ยนแปลงของค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นตามระยะทางที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 0.1, 0.3 และ 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงคาร์บอนมอนอกไซด์ในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.64 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ 75

5.38 การเปลี่ยนแปลงของค่าความหนาแน่นกระแสกับสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนตามระยะทาง ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.64 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ 76

5.39 การเปลี่ยนแปลงของค่าความหนาแน่นกระแสกับค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นตามระยะทาง ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงคาร์บอนมอนอกไซด์ในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.64 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ 77

5.40 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัดส่วนความพรุนกับความยาวของสภาวะของสามเฟสต่อหน่วยปริมาตรที่ขนาดอนุภาคตั้งแต่ 0.25 ถึง 6.0 ไมโครเมตร 79

5.41 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัดส่วนความพรุนกับความยาวของสภาวะของสามเฟสต่อหน่วยปริมาตรที่ขนาดอนุภาคตั้งแต่ 0.25 ถึง 1.0 ไมโครเมตร 80

5.42 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัดส่วนความพรุนกับความยาวของสภาวะของสามเฟสต่อหน่วยปริมาตรที่ขนาดอนุภาคตั้งแต่ 0.15 ถึง 4.0 ไมโครเมตร 80

ภาพที่ หน้า

5.43 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัดส่วนความพรุนกับความยาวของสภาวะของสามเฟสต่อหน่วยปริมาตรที่ขนาดอนุภาคตั้งแต่ 4.5 ถึง 6.0 ไมโครเมตร 81
5.44 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัดส่วนความพรุนกับค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่ขนาดอนุภาคตั้งแต่ 0.25 ถึง 6.0 ไมโครเมตร ระบบแก๊ส H_2-H_2O 82
5.45 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัดส่วนความพรุนกับขนาดรูพรุนที่เหมาะสม ที่ขนาดอนุภาคตั้งแต่ 0.25 ถึง 6.0 ไมโครเมตร 83
5.46 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัดส่วนความพรุนกับสัมประสิทธิ์โดยรวมของการแพร่ของแก๊สในระบบที่ขนาดอนุภาคตั้งแต่ 0.25 ถึง 6.0 ไมโครเมตร ระบบแก๊ส H_2-H_2O 83
5.47 ความสัมพันธ์ระหว่างขนาดอนุภาคภายในขั้วแอโนดตั้งแต่ 0.25 ถึง 6.0 ไมโครเมตร กับค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้น ที่ค่าสัดส่วนความพรุนร้อยละ 50 ระบบแก๊ส H_2-H_2O 84
5.48 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัดส่วนความพรุนกับค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่ขนาดอนุภาคตั้งแต่ 0.25 ถึง 6.0 ไมโครเมตร ระบบแก๊ส CO-CO_2 85
5.49 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัดส่วนความพรุนกับสัมประสิทธิ์โดยรวมของการแพร่ของแก๊สในระบบที่ขนาดอนุภาคตั้งแต่ 0.25 ถึง 6.0 ไมโครเมตร ระบบแก๊ส CO-CO_2 85
5.50 ความสัมพันธ์ระหว่างขนาดอนุภาคภายในขั้วแอโนดตั้งแต่ 0.25 ถึง 6.0 ไมโครเมตร กับค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้น ที่ค่าสัดส่วนความพรุนร้อยละ 50 ระบบแก๊ส CO-CO_2 86
5.51 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัดส่วนความพรุนกับค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นและสัมประสิทธิ์โดยรวมของการแพร่ของแก๊ส ระบบแก๊ส H_2-H_2O 87
5.52 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัดส่วนความพรุนกับค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นและสัมประสิทธิ์โดยรวมของการแพร่ของแก๊ส ระบบแก๊ส CO-CO_2 88
ก.1 การเปลี่ยนแปลงสัดส่วนเชิงโมลของแก๊สไฮโดรเจนตามความหนาและความยาวของขั้วแอโนด ที่ความเข้มข้นเริ่มต้นของเชื้อเพลิงไฮโดรเจน 0.04 โมลาร์ 100
ก.2 การเปลี่ยนแปลงของสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงแก๊สไฮโดรเจนตามความหนาและความยาวของเซลล์เชิง ที่ความเข้มข้นเริ่มต้นของเชื้อเพลิงไฮโดรเจน 0.04 โมลาร์ 101

คำอธิบายสัญลักษณ์และคำย่อ

ศัพท์เฉพาะ

a	คือ	รัศมีของพื้นที่ซ้อนทับ, (m)
A	คือ	พื้นที่หน้าตัด, (cm^2)
B_0	คือ	สัมประสิทธิ์การซึมผ่าน
c_i	คือ	ความเข้มข้นของสาร i, (mol/cm^3)
d_{pore}	คือ	เส้นผ่านศูนย์กลางเฉลี่ยของรูพรุนม, (cm)
d	คือ	ระยะห่างระหว่างจุดศูนย์กลางของทั้งสองอนุภาค, (m)
D_{ij}	คือ	สัมประสิทธิ์การแพร่ของสาร i ผ่านองค์ประกอบสาร j, (cm^2/s)
D_{ij}^{eff}	คือ	สัมประสิทธิ์โดยรวมของการแพร่ของสาร i ในสาร j, (cm^2/s)
D_{KA}	คือ	สัมประสิทธิ์การแพร่คนุดเซน, (cm^2/s)
F	คือ	ค่าคงที่ฟาราเดย์, (96485.3 C/mole)
ΔG_{ox}	คือ	พลังงานอิสระพลังงานอิสระกิบส์ของปฏิกิริยาออกซิเดชั่น, ($mole.cm^2/s^2$)
i	คือ	ความหนาแน่นกระแส, (A/cm^2)
i_0	คือ	ความหนาแน่นกระแสแลกเปลี่ยน, (A/cm^2)
i_e	คือ	กระแสไฟฟ้า, (A)
k	คือ	ค่าคงที่ของโบลท์ซมานน์, (J/K)
K_i	คือ	ค่าการซึมผ่าน (permeability) ของสาร i , ($m^2/(Pa.s)$)
L_{TPB}	คือ	ความยาวของสภาวะขอบสามเฟสเฉลี่ย, (m)
l_a	คือ	ความหนาของขั้วแอโนด, (mm)
M_i	คือ	น้ำหนักโมเลกุลของสาร i, (g/mole)
M	คือ	อัตราส่วนจำนวนอนุภาคเฟสไอออนิกและเฟสของอิเล็กทรอนิกส์
n	คือ	จำนวนอิเล็กตรอนอิสระของระบบต่อ 1 โมเลกุล
n_e	คือ	จำนวนอิเล็กตรอนที่แลกเปลี่ยนในระบบต่อหนึ่งปฏิกิริยา
N	คือ	เลขอาโวกาโดร 6.022 X 10^{23} โมเลกุลต่อโมล
N_P	คือ	จำนวนอนุภาคทั้งหมด
N_{P1}	คือ	จำนวนอนุภาคทั้งหมดของรัศมีของอนุภาคที่ 1 ซึ่งมีขนาดใหญ่กว่า
N_i	คือ	ฟลักซ์เชิงโมลของสาร i, ($mol/(cm^2.s)$)
N_i^d	คือ	ฟลักซ์เชิงโมลของการซึมผ่าน, ($mol/(cm^2.s$)
N_i^p	คือ	ฟลักซ์เชิงโมลของการแพร่ผ่าน, ($mol/(cm^2.s$)
N_{P2}	คือ	จำนวนอนุภาคทั้งหมดของรัศมีของอนุภาคที่ 2 ซึ่งมีขนาดเล็กกว่า
N_i	คือ	ฟลักซ์เชิงโมลโดยรวม, ($mol/(cm^2.s$)

ศัพท์เฉพาะ

p	คือ	ความดันระบบ, (Pa)
p_{raact}	คือ	ความดันย่อยของแก๊สเชื้อเพลิงของระบบ
p_{oxid}	คือ	ความดันย่อยของแก๊สที่เป็นตัวออกซิไดส์ของระบบ
p_{prod}	คือ	ความดันย่อยของแก๊สผลิตภัณฑ์ของระบบ
P	คือ	ความดัน, (atm)
P_c	คือ	ความดันวิกฤต, (atm)
p_{O_2}	คือ	ความดันย่อยของแก๊สออกซิเจนที่ผิวหน้าอิเล็กโทรไลต์, (Pa)
$p_{O_2}^0$	คือ	ความดันย่อยของแก๊สออกซิเจนในสารป้อน, (Pa)
R	คือ	ค่าคงที่ของแก๊ส, ((82.057 cm^3.atm/(mole.K)), (8.3143 J/(K g.mole)))
r	คือ	รัศมีของอนุภาคเมื่อทุกอนุภาคมีขนาดเท่ากัน , (m)
r_1	คือ	รัศมีของอนุภาคที่ 1 ซึ่งมีขนาดใหญ่กว่า, (m)
r_2	คือ	รัศมีของอนุภาคที่ 2 ซึ่งมีขนาดเล็กกว่า, (m)
r_p^{opt}	คือ	ขนาดของรูพรุนที่เหมาะสม, (m)
R_e	คือ	ค่าความต้านทานประจุ, (Ω)
R_i	คือ	อัตราการเกิดปฏิกิริยาของสาร i, (mol/(cm^2.s))
T	คือ	อุณหภูมิสัมบูรณ์, (K)
T_b	คือ	จุดเดือดปกติ, (K)
T_c	คือ	อุณหภูมิวิกฤต, (K)
u	คือ	ความเร็วของสารในการแพร่, (cm/s)
u_i	คือ	ความเร็วที่ผิว (superficial velocity), (m/s)
v	คือ	ความเร็วของของไหล, (cm/s)
V_0	คือ	ศักย์ไฟฟ้าอุดมคติ, (V)
$V1$	คือ	ปริมาตรของพื้นซ้อนทับ, (m^3)
V_b	คือ	ปริมาตรต่อโมลที่จุดเดือดปกติ, (cm^3/g mole)
V_c	คือ	ปริมาตรวิกฤต, (cm^3/g mole)
V_{cell}	คือ	ศักย์ไฟฟ้าสุทธิ, (V)
vL_{TPB}	คือ	ความยาวของสภาวะของสามเฟสต่อหน่วยปริมาตร, (m/m^3)
V_t	คือ	ปริมาตรของระบบ, (m^3)
y_i	คือ	สัดส่วนเชิงโมลของสาร i
y_i	คือ	สัดส่วนโมลของสาร i
$y_{prod,bilk}$	คือ	สัดส่วนโมลของผลิตภัณฑ์ในสายป้อน
$y_{prod,TPB}$	คือ	สัดส่วนโมลของผลิตภัณฑ์บริเวณสภาวะขอบสามเฟส
$y_{react,bilk}$	คือ	สัดส่วนโมลของเชื้อเพลิงในสายป้อน

ศัพท์เฉพาะ

$y_{react,TPB}$ คือ สัดส่วนโมลของเชื้อเพลิงบริเวณสภาวะขอบสามเฟส

Z คือ ค่าเฉลี่ยเลขโคออร์ดิเนชัน

z2 คือ ความหนาที่แก๊สสามารถแพร่ภายในขั้วแอโนด, (mm)

Z_i คือ เลขโคออร์ดิเนชันของอนุภาคไอออนิก

Z_e คือ เลขโคออร์ดิเนชันของอนุภาคอิเล็กทรอนิกส์

Z_{i-e} คือ เลขโคออร์ดิเนชันระหว่างอนุภาคตัวนำไอออนิกกับอิเล็กทรอนิกส์

ตัวอีกษรกรีก

ρ คือ ความหนาแน่นของของไหล, (g/cm^3)

μ คือ ความหนืดของแก๊ส, (atm.s)

η_{ohm} คือ ค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความต้านทานภายใน, (V)

η_{act} คือ ค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากพลังงานกระตุ้น, (V)

η_{conc} คือ ค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าซึ่งเกิดจากการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้น, (V)

κ คือ ค่าคงที่โบลต์ซมันน์, 1.38 X 10^{-23} J/K

τ คือ ค่าความคดเคี้ยวของรูพรุน

ε_{ij} คือ ค่าพลังงานที่แสดงแรงกระทำระหว่างโมเลกุล i กับโมเลกุล j, (J)

ε_i คือ ค่าพลังงานที่แสดงแรงกระทำระหว่างโมเลกุล i, (J)

σ_{ij} คือ ตัวแปรเลนนาร์ด-โจนส์ของสาร i ผ่านองค์ประกอบสาร j, (10^{-10}m)

Ω_D คือ ตัวแปรไร้หน่วยของค่าการชนร่วม

ξ_i คือ ตัวแปรกำหนดทิศทางของสาร i , (Pa)

ϕ คือ ฟลักซ์ของโมเมนตัม (g.mole/(cm.s^2))

ϕ_i คือ สัดส่วนโดยปริมาตรของเฟสไอออนิก

ϕ_1 คือ สัดส่วนโดยปริมาตรของเฟสรัศมีของอนุภาคที่ 1 ซึ่งมีขนาดใหญ่กว่า

ϕ_2 คือ สัดส่วนโดยปริมาตรของเฟสรัศมีของอนุภาคที่ 2 ซึ่งมีขนาดเล็กกว่า

ϕ_e คือ สัดส่วนโดยปริมาตรของเฟสอิเล็กทรอนิกส์

ψ คือ สัดส่วนการซ้อนทับ

ε คือ สัดส่วนค่าความพรุนของวัสดุ

β คือ สัดส่วนรัศมีอนุภาคไอออนิกต่ออนุภาคอิเล็กทรอนิกส์

บทที่ 1

บทนำ

1.1 ที่มาและความสำคัญของงานวิจัย

ในปัจจุบันเป็นที่รู้กันดีว่าพลังงานหลักที่ใช้ในกิจกรรมประจำวันของมนุษย์นั้นได้มาจากเชื้อเพลิงฟอสซิล (Fossil Fuel) เป็นส่วนใหญ่ โดยการแปลงเชื้อเพลิงฟอสซิลให้อยู่ในรูปพลังงานที่ต้องการ เช่น พลังงานไฟฟ้า พลังงานกล และพลังงานความร้อน เป็นต้น วิธีการใช้ในการแปลงเชื้อเพลิงฟอสซิลให้เป็นพลังงานเหล่านั้น ส่วนใหญ่เกิดขึ้นด้วยการใช้กระบวนเผาไหม้ (Combustion) เป็นหลัก และกระบวนการเผาไหม้ของเชื้อเพลิงฟอสซิลนั้นได้นำไปสู่การเกิดแก๊สที่เป็นมลพิษทางอากาศ เช่น แก๊สคาร์บอนมอนนอกไซด์ (CO) แก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ (CO_2) แก๊สออกไซด์ของไนโตรเจน (NO_x) และแก๊สซัลเฟอร์ไดออกไซด์ (SO_2) เป็นต้น ซึ่งแก๊สเหล่านี้มีผลกระทบต่อสิ่งมีชีวิตบนโลกทั้งทางตรงและทางอ้อม โดยผลกระทบที่เห็นได้ชัดเจนในทุกวันนี้คือปัญหามลภาวะทางอากาศเป็นพิษ การเปลี่ยนแปลงของฤดูกาลที่ไม่เหมาะสม และการที่อุณหภูมิโลกสูงขึ้นอย่างรวดเร็วกว่าที่ควรจะเป็น เป็นต้น [1] ปรากฏการณ์เหล่านี้มนุษย์รู้จักกันดีในชื่อ “ปรากฏการณ์สภาวะเรือนกระจก (Greenhouse Effect)” ด้วยเหตุผลเหล่านี้ทำให้ในปัจจุบันได้มีความพยายามหาแหล่งพลังงานทดแทนต่างๆ เช่น พลังงานลม พลังงานแสงอาทิตย์ และพลังงานชีวภาพ เป็นต้น และอุปกรณ์ทางเลือกต่างๆ เพื่อทดแทนวิธีการผลิตพลังงานไฟฟ้าจากการใช้กระบวนการเผาไหม้ เช่น เซลล์เชื้อเพลิง (Fuel cell) [1, 2]

เซลล์เชื้อเพลิงคือ อุปกรณ์ที่สามารถผลิตพลังงานไฟฟ้าด้วยปฏิกิริยาทางเคมี และในช่วงที่ผ่านมาได้มีงานวิจัยหลายชิ้นที่ยืนยันว่าเซลล์เชื้อเพลิงมีแนวโน้มในเชิงประสิทธิภาพของการแปลงเชื้อเพลิงเป็นพลังงานไฟฟ้าได้สูงกว่ากระบวนการทั่วไปที่ใช้อยู่ในปัจจุบัน เช่น กระบวนการเผาไหม้ เป็นต้น [1, 3] ด้วยเหตุผลเหล่านี้เซลล์เชื้อเพลิงจึงถือได้ว่าเป็นอุปกรณ์ที่ผลิตพลังงานไฟฟ้าที่สะอาดและมีความเป็นไปได้ที่จะใช้ทดแทนกระบวนการเผาไหม้ เพราะเซลล์เชื้อเพลิงไม่มีการปลดปล่อยแก๊สที่เป็นมลพิษทางอากาศหรือมีการปลดปล่อยที่น้อยเมื่อเทียบกับกระบวนการอื่นๆ ซึ่งขึ้นอยู่กับการออกแบบเซลล์เชื้อเพลิง เชื้อเพลิงที่ใช้ และชนิดของเซลล์เชื้อเพลิง โดยชนิดของเซลล์เชื้อเพลิงในปัจจุบันมีอยู่หลายชนิด แต่ชนิดที่ได้รับความสนใจเป็นอย่างมากคือ เซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็ง (Solid Oxide Fuel Cell : SOFC) [2]

ในช่วงที่ผ่านมามีการศึกษาและพัฒนาเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็ง โดยเฉพาะเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งชนิดออกซิเจนไอออนเคลื่อนที่ผ่านอิเล็กโทรไลต์ (solid oxide fuel cell type oxygen ion conducted) ซึ่งเป็นชนิดที่ได้รับความนิยมเนื่องจากมีความคงทนต่อการเสื่อมสภาพอันเนื่องมาจากมลทินภายในเชื้อเพลิง และในปัจจุบันวัสดุที่ใช้ทำขั้วอิเล็กโทรดและอิเล็กโทรไลต์ของเซลล์ชนิดนี้มีราคาถูกกว่าเซลล์เชื้อเพลิงชนิดอื่น แต่เซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้ก็มีข้อด้อยกว่าเซลล์เชื้อเพลิงชนิดอื่นด้วยเช่นกันคือ เซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งที่เป็นชนิดออกซิเจนไอออนเคลื่อนที่ผ่านอิเล็กโทรไลต์มีช่วงอุณหภูมิในการทำงานที่สูงอยู่ที่ 600 ถึง 1000 องศาเซลเซียส เพราะเหตุผลข้อนี้เองทำให้เซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้เหมาะแก่การนำไปใช้ร่วมกับกระบวนการที่มีแหล่งความร้อนเหลือทิ้งเป็นปริมาณมาก เช่น กระบวนการผลิตไฟฟ้าด้วยพลังงานความร้อนร่วม (Electrical

Co-Generation Process) เป็นต้น และการหาวัสดุเชื่อมต่อระหว่างเซลล์ (Interconnect) ที่มีค่าการขยายตัวทางความร้อนที่ใกล้เคียงกันกับขั้วอิเล็กโทรดและอิเล็กโทรไลต์นั้นหาได้ยาก

เหตุผลข้างต้นส่งผลให้ในช่วงที่ผ่านมามีความตื่นตัวเป็นอย่างมากในการค้นคว้าและพัฒนาประสิทธิภาพของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งชนิดนี้ ไม่ว่าจะเป็นทั้งการศึกษาในระดับจุลภาค (micro scale) และระดับมหาภาค (Macro scale) ซึ่งศึกษาในระดับจุลภาคทำให้ทราบได้ว่ามีสามสาเหตุหลักที่ทำให้เซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งชนิดนี้มีประสิทธิภาพลดลงด้วยกัน นั่นคือ การสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากพลังงานกระตุ้น (Activation overpotential) การสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความต้านทานภายใน (Ohmic overpotential) และการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าซึ่งเกิดจากการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นภายในขั้วอิเล็กโทรด (Concentration overpotential) Chan et al. [4] และ Yakabe et al. [5] ใช้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์มาศึกษาประสิทธิภาพของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งโดยศึกษาพฤติกรรมของเชื้อเพลิงภายในขั้วแอโนด (Anode) ของเซลล์เชื้อเพลิงที่มีขนาดเล็ก แล้วนำผลที่ได้เทียบกับผลการทดลองจริงในสภาวะดำเนินการเดียวกัน ผลการศึกษาที่ได้แสดงให้เห็นถึงอิทธิพลของการถ่ายเทมวลสารของเชื้อเพลิงที่มีผลต่อการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าซึ่งเกิดจากการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นภายในขั้วแอโนด และอิทธิพลของค่าการสูญเสียในรูปแบบนี้มีผลต่อเซลล์เชื้อเพลิงสูงเมื่อเกิดขึ้นในบริเวณขั้วแอโนด ซึ่งนำไปสู่การลดลงของประสิทธิภาพของเซลล์เชื้อเพลิงโดยตรง

นอกจากงานวิจัยรูปแบบที่กล่าวมาข้างต้น ยังมีงานวิจัยที่สามารถอธิบายถึงประสิทธิภาพของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งชนิดนี้ได้ดี นั้นคือ งานวิจัยในเชิงวัสดุศาสตร์ (materials science) ของวัสดุที่ใช้เป็นขั้วอิเล็กโทรดภายในเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็ง เพื่อให้เซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้มีประสิทธิภาพสูงสุด โดยจากงานวิจัยที่ผ่านมาพบว่าความยาวของสภาวะขอบสามเฟส (Triple-phase-boundary length) มีผลเป็นอย่างยิ่งสำหรับการชี้วัดถึงประสิทธิภาพของขั้วอิเล็กโทรด โดยความยาวของสภาวะขอบสามเฟสมีบทบาทที่สำคัญเกี่ยวกับความสามารถของการเกิดปฏิกิริยาทางไฟฟ้าเคมี ซึ่งเป็นบริเวณที่อนุภาคอิเล็กทรอนิกส์ (electronic grain) กับอนุภาคไอออนิก (ionic grain) สัมผัสกันและทำปฏิกิริยากับเชื้อเพลิง [3, 6]

Wilson et al. [7] ได้นำเสนอค่าความยาวของสภาวะขอบสามเฟสของขั้วแอโนดสำหรับเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งที่วัดได้จริงด้วยกล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอนแบบส่องกราดด้วยไอออน (ion-beam scanning electron microscopy) เท่ากับ 4.28×10^{12} m/m^3 และงานวิจัยของ Janardhanan et al. [8] และ Deng et al. [9] ได้รายงานถึงลักษณะโครงสร้างภายในของขั้วแอโนดเมื่อมีขนาดอนุภาคอิเล็กทรอนิกส์ (electronic grain size) เท่ากับขนาดอนุภาคไอออนิก (ionic grain size) และสัดส่วนโดยปริมาตรของเฟสอิเล็กทรอนิกส์ (volume fraction of electronic phase) เท่ากับสัดส่วนโดยปริมาตรของเฟสไอออนิก (volume fraction of ionic phase) พบว่าสภาวะขอบสามเฟสมีผลโดยตรงต่อประสิทธิภาพที่ได้จากเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งชนิดนี้ ซึ่งนำไปสู่การค้นหาวิธีการขึ้นรูปขั้วอิเล็กโทรดให้มีประสิทธิภาพสูงต่อไปได้

จากงานวิจัยทั้งสองรูปแบบข้างต้นทำให้เกิดความพยายามในการค้นคว้าเกี่ยวกับระบบขั้วแอโนดที่มีประสิทธิภาพสูง โดยงานวิจัยนี้จึงมุ่งความสนใจไปยังการศึกษาด้วยแบบจำลองทางคณิตศาสตร์เพื่อหาความสัมพันธ์ของลักษณะโครงสร้างภายในขั้วแอโนดที่มีผลต่อค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นและความยาวของสภาวะขอบสามเฟส เพื่อทำนายถึงความเหมาะสมของลักษณะโครงสร้างภายในขั้วแอโนด มุ่งหวังลดการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าซึ่งเกิดจากการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นภายในขั้วแอโนดและได้ความยาวของสภาวะขอบสามเฟสที่เหมาะสมที่สุด

1.2 วัตถุประสงค์

งานวิจัยนี้พัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์เพื่อศึกษาหาความสัมพันธ์ของลักษณะโครงสร้างภายในขั้วแอโนดที่มีผลต่อค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นและความยาวของสภาวะขอบสามเฟส เพื่อทำนายถึงความเหมาะสมของลักษณะโครงสร้างภายในขั้วแอโนดที่ให้ผลในเชิงประสิทธิภาพสูงสุด

1.3 ขอบเขตงานวิจัย

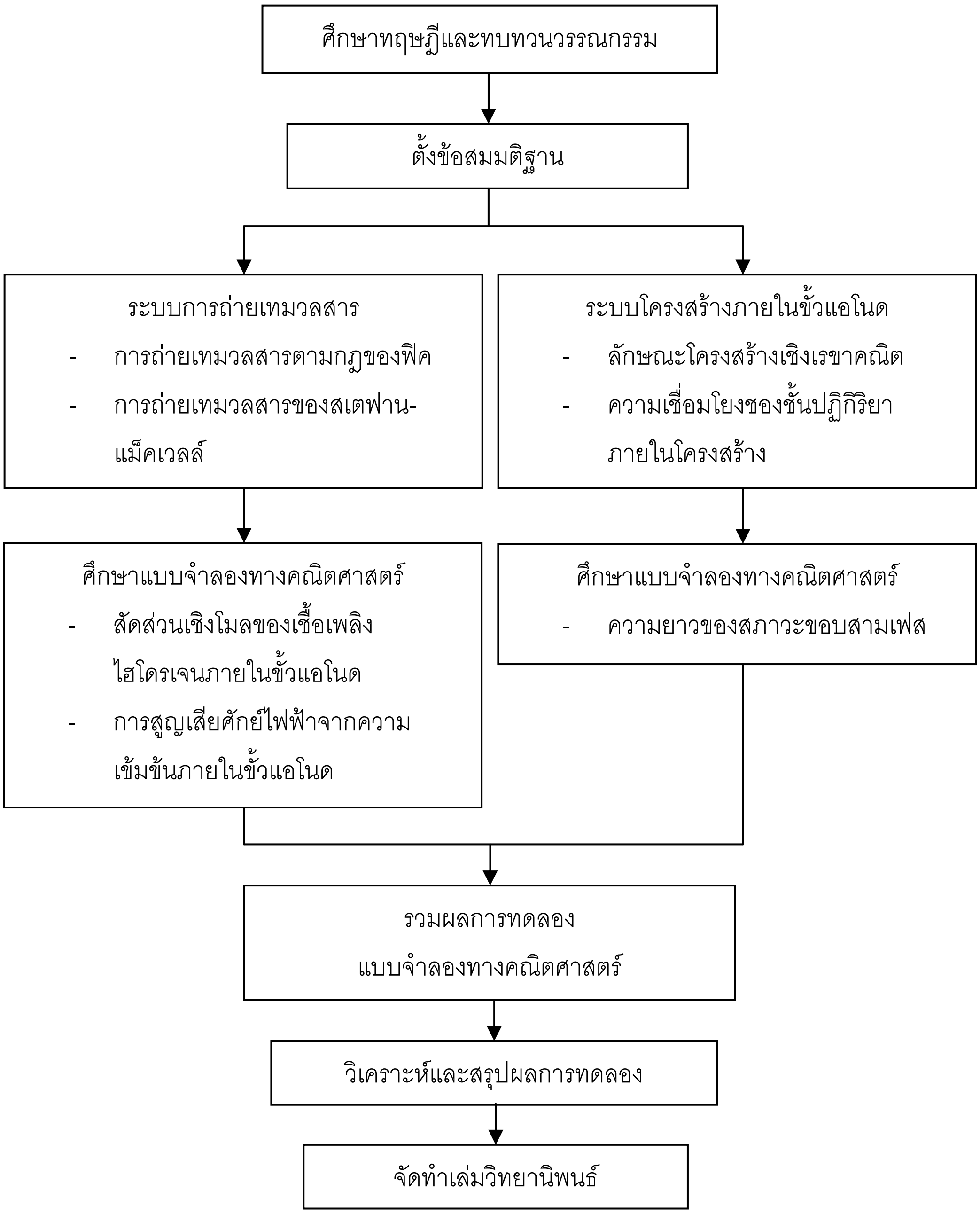
1. ใช้เชื้อเพลิงไฮโดรเจนในการศึกษาขั้วแอโนดของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็ง ที่อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ

2. ศึกษาเปรียบเทียบทฤษฎีการถ่ายเทมวลสารด้วยสมการการแพร่ของฟิค (Fick's model) และสเตฟาน-แม็คเวลล์ (Stefan-Maxwell model) ด้านความเหมาะสมในการอธิบายพฤติกรรมของแก็สเชื้อเพลิงภายในขั้วแอโนด อันส่งผลถึงการเกิดค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นภายในขั้วแอโนด

3. ใช้ทฤษฎีเชิงเรขาคณิตอธิบายถึงระบบโครงสร้างภายในขั้วแอโนด อันส่งผลถึงค่าความยาวของสภาวะขอบสามเฟสของขั้วแอโนดภายในเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็ง

4. ศึกษาความสัมพันธ์ระหว่างค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นภายในขั้วแอโนดกับค่าความยาวของสภาวะขอบสามเฟสของขั้วแอโนด ที่เชื่อมโยงไปถึงประสิทธิภาพของขั้วแอโนดภายในเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็ง

1.4 ขั้นตอนการดำเนินงาน



บทที่ 2

ทฤษฎี

2.1 เซลล์เชื้อเพลิง (Fuel Cell)

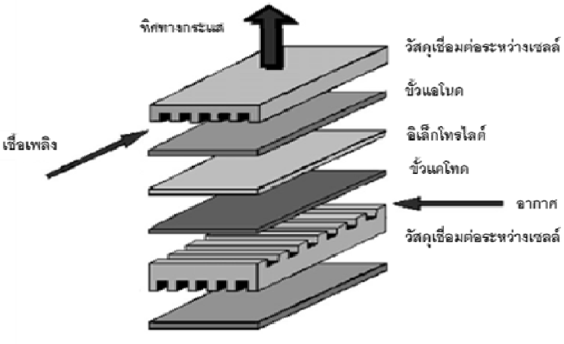
เซลล์เชื้อเพลิงคือ อุปกรณ์ชนิดหนึ่งที่สามารถให้กำเนิดพลังงานไฟฟ้าด้วยกระบวนการทางไฟฟ้าเคมี ซึ่งเกิดขึ้นภายในตัวของเซลล์เชื้อเพลิง โดยเซลล์เชื้อเพลิงสามารถใช้เชื้อเพลิงได้อย่างหลากหลาย ขึ้นอยู่กับชนิดของเซลล์เชื้อเพลิง เช่น แก๊สไฮโดรเจน (H_2) แก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ (CO) แก๊สมีเทน (CH_4) และแก๊สจากถ่าน-หิน (gasified coal) เป็นต้น [1, 10, 11]

ลักษณะการทำงานที่แท้จริงของเซลล์เชื้อเพลิงคล้ายกับการทำงานของแบตเตอรี่ ส่วนที่ต่างกันคือ เซลล์เชื้อเพลิงจำเป็นต้องได้รับการป้อนเชื้อเพลิงอย่างต่อเนื่องเพื่อสามารถผลิตพลังงานไฟฟ้าได้ต่อเนื่อง แต่แบตเตอรี่นั้นสามารถเก็บพลังงานไฟฟ้าไว้ได้ในตัวเอง นอกจากนี้เซลล์เชื้อเพลิงยังมีข้อดีที่ไม่ได้ใช้ระบวนการเผาไหม้ทำให้ปราศจากมลภาวะทางอากาศรวมไปถึงมลภาวะทางเสียงอีกด้วย [2, 10]

การใช้งานจริงของเซลล์เชื้อเพลิงเริ่มต้นในปี ค.ศ. 1960 โดยใช้เป็นแหล่งพลังงานหมุนเวียนบนยาน-อวกาศขององค์การนาซา (NASA) ซึ่งเซลล์เชื้อเพลิงที่ใช้ในครั้งนั้นใช้แก๊สไฮโดรเจนเป็นตัวรีดิวซ์ (reducing agent) และใช้แก๊สออกซิเจนเป็นตัวออกซิไดซ์ (oxidizing agent) เซลล์เชื้อเพลิงนี้นอกจากจะให้พลังงานไฟฟ้าได้แล้ว ยังให้ผลิตภัณฑ์ที่เป็นน้ำบริสุทธิ์กลับออกมาด้วย ในปัจจุบันได้มีการใช้เซลล์เชื้อเพลิงอย่างจริงจังกับด้านระบบขนส่ง ยานพาหนะส่วนบุคคล และใช้เป็นแหล่งกำเนิดพลังงานในที่พักอาศัย เป็นต้น [3]

2.1.1 ส่วนประกอบของเซลล์เชื้อเพลิง

ภายในเซลล์เชื้อเพลิงจะประกอบไปด้วยส่วนประกอบสำคัญ 4 ส่วนด้วยกันคือ อิเล็กโทรไลต์ (Electrolyte) ขั้วแอโนด (Anode) ขั้วแคโทด (Cathode) และวัสดุเชื่อมต่อระหว่างเซลล์ (Interconnect) ซึ่งประกอบเซลล์เดี่ยวจะมีลักษณะดังภาพที่ 2.1



ภาพที่ 2.1 ตัวอย่างส่วนประกอบของเซลล์เชื้อเพลิงลักษณะเซลล์แผ่นแบน (Planar cell) [6]

2.1.2 ชนิดของเซลล์เชื้อเพลิง

ในปัจจุบันมีเซลล์เชื้อเพลิงที่ถูกคิดค้นและนำมาใช้งานได้จริงหลายชนิด ซึ่งแบ่งประเภทได้ตามอุณหภูมิที่ใช้งาน และวัสดุที่ใช้เป็นอิเล็กโทรไลต์ ชนิดที่นิยมใช้และรู้จักกันดีในปัจจุบัน มีทั้งสิ้น 6 ชนิด ดังนี้

2.1.2.1 เซลล์เชื้อเพลิงชนิดอัลคาไลน์ (Alkaline Fuel Cell, AFC)

เซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้นิยมใช้สารอิเล็กโทรไลต์เป็นโปตัสเซียมไฮดรอกไซด์ (Potassium hydroxide, KOH) ดำเนินงานที่อุณหภูมิ 50 ถึง 200 องศาเซลเซียส ข้อดีของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้คือ สารอิเล็กโทรไลต์มีมูลค่าไม่สูงมาก และที่ผ่านมาพบว่าประสิทธิภาพต่อหน่วยเชื้อเพลิงในการผลิตกระแสไฟฟ้าสูงสุดของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้ทำได้ประมาณร้อยละ 70 [5] แต่ข้อเสียคือจำเป็นต้องใช้ก๊าซไฮโดรเจนและแก๊สออกซิเจนที่มีความบริสุทธิ์สูงมาก ต้นทุนการผลิตของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้ในปัจจุบันมีแนวโน้มค่อนข้างสูง ซึ่งทำให้การใช้เซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้จำกัดอยู่เฉพาะงานในด้านอวกาศเท่านั้น องค์การนาซาใช้เซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้เป็นแหล่งจ่ายกระแสไฟฟ้าและน้ำให้กับยานอวกาศในโครงการอพอลโล และโครงการเจมินี [2, 12]

2.1.2.2 เซลล์เชื้อเพลิงชนิดเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอน (Proton Exchange Membrane Fuel Cell, PEMFC)

เป็นเซลล์เชื้อเพลิงที่ใช้อิเล็กโทรไลต์ในรูปแบบแผ่นโพลิเมอร์แบบบาง โดยโพลิเมอร์ที่นิยมนำมาใช้เป็นอิเล็กโทรไลต์มีชื่อทางการค้าคือ แนฟอน (Nafion) ใช้เชื้อเพลิงเป็นแก๊สไฮโดรเจนและเมทานอล (CH_3OH) มีข้อดีคือ เซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้ทำงานที่อุณหภูมิค่อนข้างต่ำประมาณ 50 ถึง 80 องศาเซลเซียส [6] ใช้อิเล็กโทรไลต์เป็นของแข็งจึงไม่มีปัญหาการรั่วซึมของอิเล็กโทรไลต์และเกิดการกัดกร่อนน้อย จึงเหมาะสำหรับการใช้งานในอาคารบ้านเรือนและยานพาหนะ แต่มีข้อเสียคือ ต้องใช้เชื้อเพลิงที่มีความบริสุทธิ์สูงเท่านั้น และโลหะแพลทินัม(Platinum, Pt) ที่ใช้ภายเซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้ปัจจุบันมีราคาสูง [12]

2.1.2.3 เซลล์เชื้อเพลิงชนิดป้อนสารเมทานอลโดยตรง (Direct Methanol Fuel Cell, DMFC)

เซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้ถูกพัฒนาขึ้นมาจากเซลล์เชื้อเพลิงชนิดแบบเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอน โดยใช้เชื้อเพลิงเป็นเมทานอลป้อนเข้าสู่เซลล์เชื้อเพลิงได้โดยตรง เซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้ทำงานที่สภาวะอุณหภูมิประมาณ 60 ถึง 200 องศาเซลเซียส [6] และใช้อิเล็กโทรไลต์เป็นโพลิเมอร์เช่นเดียวกับเซลล์เชื้อเพลิงชนิดเมมเบรนแลกเปลี่ยนโปรตอน เซลล์ชนิดนี้สามารถทำงานได้ดีที่สภาวะอุณหภูมิค่อนข้างต่ำ จึงเหมาะสมที่จะพัฒนาให้เป็นแหล่งพลังงานสำหรับอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์แบบพกพา เช่น คอมพิวเตอร์แลบท็อบ (Laptop) โทรศัพท์มือถือ หรือนำมาใช้กับยานพาหนะขับเคลื่อนด้วยพลังงานไฟฟ้าแบบเติมเมทานอล เป็นต้น [12]

2.1.2.4 **เซลล์เชื้อเพลิงชนิดกรดฟอสฟอริก** (Phosphoric Acid Fuel Cell, PAFC)

เซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้ใช้กรดฟอสฟอริก (H_3PO_4) เป็นสารอิเล็กโทรไลต์ ทำงานที่อุณหภูมิประมาณ 160 ถึง 210 องศาเซลเซียส มีข้อดีคือ เป็นเซลล์เชื้อเพลิงที่สามารถใช้กับเชื้อเพลิงได้หลายชนิด เช่น แก๊สโซลีน (Gasoline) แต่ต้องกำจัดกำมะถันในน้ำมันออกก่อน อย่างไรก็ตามจำเป็นต้องใช้โลหะที่มีความว่องไวในการทำปฏิกิริยา เช่น โลหะแพลทินัมที่มีราคาค่อนข้างสูงในปัจจุบัน และตัวเซลล์เชื้อเพลิงยังมีขนาดใหญ่ น้ำหนักมาก ด้านประสิทธิภาพมีแนวโน้มการผลิตกระแสไฟฟ้าต่ำเมื่อเทียบกับเซลล์ชนิดอื่น และจำเป็นต้องใช้วัสดุประกอบเซลล์ที่ทนทานต่อการกัดกร่อนของกรดได้ดี [1]

2.1.2.5 **เซลล์เชื้อเพลิงชนิดเกลือคาร์บอเนตหลอม** (Molten Carbonate Fuel Cell, MCFC)

เซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้ใช้สารลิเทียมคาร์บอเนต (Li_2CO_3) โซเดียมคาร์บอเนต (Na_2CO_3) และโปตัสเซียม-คาร์บอเนต (K_2CO_3) ที่หลอมเหลวเป็นสารอิเล็กโทรไลต์ [12] อุณหภูมิในการดำเนินงานอยู่ที่ 630 ถึง 650 องศา-เซลเซียส เชื้อเพลิงที่ใช้กับเซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้ได้ เช่น แก๊สไฮโดรเจน แก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ แก๊สธรรมชาติ (Natural Gas) และน้ำมันดีเซล (Diesel Fuel) เป็นต้น [1] เซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้มีข้อเสียที่สำคัญคือ ที่สภาวะอุณหภูมิสูงจะเกิดการกัดกร่อนของสารอิเล็ดโทรไลต์ค่อนข้างมากจึงทำให้อายุการใช้งานต่ำลง [12]

2.1.2.6 **เซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็ง** (Solid Oxide Fuel Cell, SOFC)

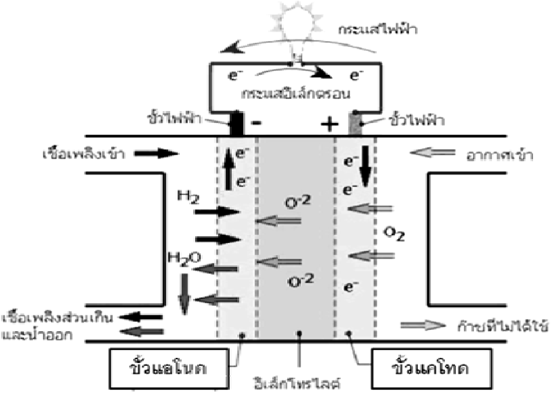
เซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้ใช้อิเล็กโทรไลต์ที่เป็นของแข็งทำจากสารประกอบเซรามิก เช่น เซอร์โคเนียม-ออกไซด์ (ZrO_2) เป็นต้น มีอุณหภูมิในการทำงานประมาณ 600 ถึง 1000 องศาเซลเซียส มีข้อดีคือ เซลล์เชื้อเพลิงทำงานที่สภาวะอุณหภูมิสูงจึงไม่จำเป็นต้องใช้โลหะว่องไวที่มีมูลค่าสูงเป็นตัวเร่งปฏิกิริยา นอกจากนี้ยังสามารถใช้เชื้อเพลิงได้หลากหลายชนิด เช่น แก๊สไฮโดรเจน แก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ แก๊สมีเทน (CH_4) แก๊ส-ธรรมชาติ และแก๊สโพรเพน (C_3H_8) เป็นต้น เพราะเซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้ทนทานต่อคาร์บอนมอนอกไซด์ได้ดี แต่มีข้อด้อยคือ ต้องเสียเวลาในการอุ่นเครื่องนาน และจำเป็นต้องสร้างผนังหนาเพื่อป้องกันความร้อนที่แผ่ออกมา จึงทำให้เซลล์ชนิดนี้เหมาะแก่การนำไปประยุกต์ใช้ร่วมกับกระบวนการที่มีความร้อนเหลือทิ้งมากกว่าดำเนินงานด้วยตัวเซลล์เพียงระบบเดียว [1, 2]

เซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งสามารถแบ่งได้ออกเป็น 2 ชนิด โดยการแบ่งตามชนิดของอิเล็กโทรไลต์ที่ใช้คือ ชนิดออกซิเจนไอออนเคลื่อนที่ผ่านอิเล็กโทรไลต์ และชนิดไฮโดรเจนไอออนเคลื่อนที่ผ่านอิเล็กโทรไลต์ ดังนี้

2.1.2.6.1 **ชนิดออกซิเจนไอออนเคลื่อนที่ผ่านอิเล็กโทรไลต์**

ปัจจุบันเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งชนิดนี้มีส่วนประกอบที่ใช้นิกเกิลบนเซอร์โคเนียออกไซด์ (สารผสมระหว่างเซรามิกส์กับโลหะ, Ni/ZrO_2) เป็นขั้วแอโนด และแลนทานัม-แมงกาไนท์ (La-manganite, LSM) เป็น

ขั้วแคโทด ระหว่างขั้วอิเล็กโทรดมีอิเทียม-สเตบิไลซ์เซอร์โคเนีย (Yttria-stabilized zirconia, YSZ) เป็นอิเล็กโทรไลต์ซึ่งทำหน้าที่เป็นตัวนำออกซิเจนไอออน ดังในภาพที่ 2.2



ภาพที่ 2.2 การทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งชนิดไอออนของออกซิเจนเคลื่อนที่ผ่านอิเล็กโทรไลต์ [13]

การทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งจะทำงานที่อุณหภูมิสูงประมาณ 600 ถึง 1000 องศาเซลเซียส โดยการทำงานของเชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งเป็นดังในภาพที่ 2.2 ที่ขั้วแคโทด โมเลกุลของออกซิเจนจะรับอิเล็กตรอนเปลี่ยนรูปเป็นออกซิเจนไอออน โดยไอออนนี้จะเคลื่อนที่ผ่านอิเล็กโทรไลต์ไปทำปฏิกิริยากับเชื้อเพลิงไฮโดรเจนที่ขั่วแอโนด โดยปฏิกิริยานี้จะได้น้ำ และอิเล็กตรอนอิสระ ซึ่งปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นมีดังนี้ [1, 14]

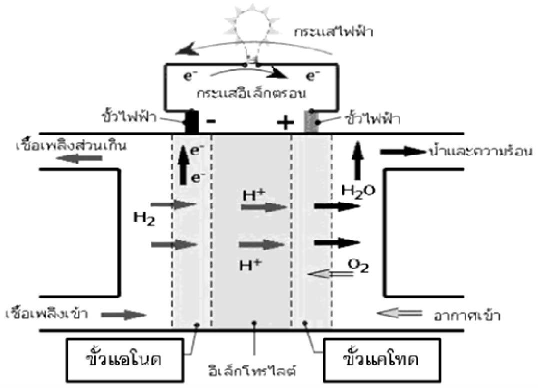
ที่ขั้วแอโนด: $H_2 \rightarrow 2H^+ + 2e^-$ (2-ก)

ที่ขั้วแคโทด: $\frac{1}{2}O_2 + 2e^- \rightarrow O^{2-}$ (2-ข)

ปฏิกิริยารวม: $H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow H_2O$ (2-ค)

2.1.2.6.2 ชนิดไฮโดรเจนไอออนเคลื่อนที่ผ่านอิเล็กโทรไลต์

ปัจจุบันพบว่าเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกซ์แข็งที่มีอิเล็กโทรไลต์ชนิดไฮโดรเจนไอออนเคลื่อนที่ผ่านมีความนิยมน้อยน้อยกว่าชนิดออกซิเจนไอออนเคลื่อนที่ผ่านอิเล็กโทรไลต์ เนื่องจากอายุการใช้งานของอิเล็กโทรไลต์และขั้วอิเล็กโทรดมีระยะเวลาที่สั้นกว่าชนิดออกซิเจนไอออนเคลื่อนที่ผ่านอิเล็กโทรไลต์ ซึ่งเกิดจากมลทินเจือปนที่ติดมากับเชื้อเพลิงถูกป้อนเข้าสู่เซลล์เชื้อเพลิงฯ [15]

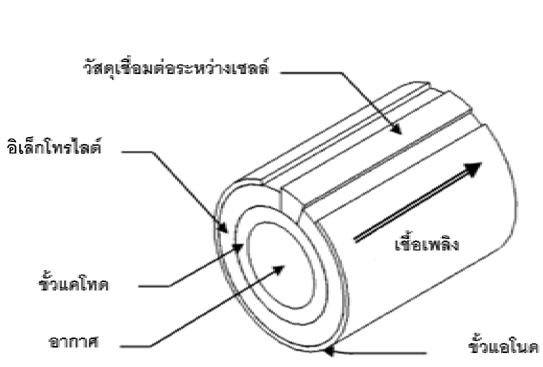


ภาพที่ 2.3 การทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งชนิดไอออนของไฮโดรเจนเคลื่อนที่ผ่าน อิเล็กโทรไลต์ [13]

หลักการทำงานของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งโดยใช้อิเล็กโทรไลต์ชนิดไฮโดรเจนไอออนเคลื่อนที่เป็นดังภาพที่ 2.3 โดยจะมีหลักการทำงานคล้ายคลึงกันกับการใช้อิเล็กโทรไลต์ชนิดออกซิเจนไอออนเคลื่อนที่ แต่ต่างกันตรงชนิดของอิเล็กโทรไลต์ที่ใช้จะยอมให้ไอออนประจุบวกของไฮโดรเจนเคลื่อนที่ผ่านเท่านั้น และการเกิดปฏิกิริยารวมของเซลล์จะเกิดที่ขั้วแคโทด ซึ่งอิเล็กโทรไลต์ที่นิยมใช้จะเป็น Metal-doped $BaCeO_3$ หรือ Y-doped $BaCeO_3$เป็นต้น ซึ่งการทำงานจะอยู่ในช่วงอุณหภูมิระหว่าง 600 ถึง 900 องศาเซลเซียส และเมื่อเปรียบเทียบค่าการนำกระแส (Conductivity) พบว่าการใช้อิเล็กโทรไลต์ชนิดไฮโดรเจนไอออนเคลื่อนมีค่าที่ดีกว่าการใช้อิเล็กโทรไลต์ชนิดออกซิเจนไอออนเคลื่อนที่สภาวะการทำงานเดียวกัน [1, 14]

2.1.2.6.3 ลักษณะของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งที่ถูกออกแบบเพื่อใช้งาน

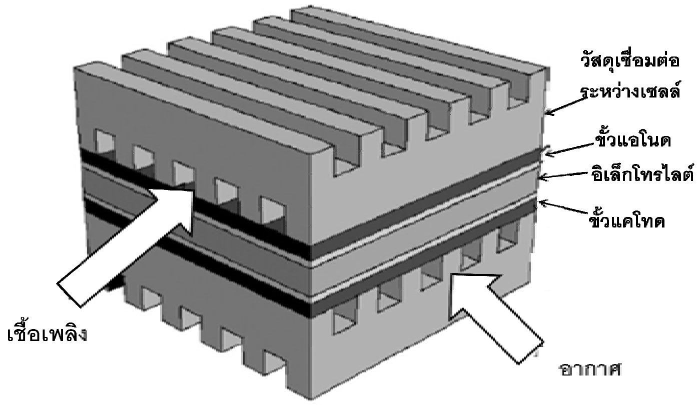
ก. ลักษณะทรงกระบอก (Tubular Designs) เป็นเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งที่ออกแบบเป็นรูปทรงกระบอก แสดงตัวอย่างดังภาพที่ 2.4 เซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งแบบทรงกระบอกที่ได้มีการพัฒนาไปได้มากที่สุดนั้นจะให้พลังงาน 25 กิโลวัตต์ จากการสร้างเซลล์โดยนำเซลล์เดี่ยวทรงกระบอกหลายๆ เซลล์มาต่อเข้าด้วยกันโดยใช้แผ่น Ni เป็นตัวเชื่อม [12]



ภาพที่ 2.4 เซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งลักษณะทรงกระบอก [6]

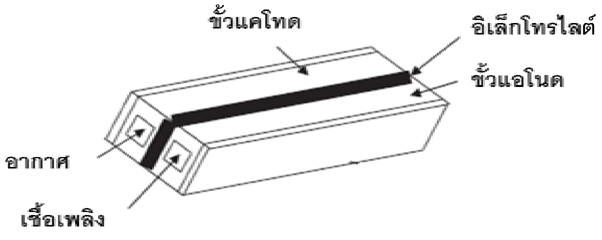
ข้อดีของเซลล์รูปทรงกระบอก คือไม่ต้องใช้ตัวประสานระหว่างแคโทดและแอโนด แต่มีข้อเสียคือให้พลังต่อพื้นที่ต่ำเมื่อเทียบกับแบบอื่นๆ และมีราคาสูงมากเกินกว่าที่จะทำเพื่อประกอบการทางเชิงพาณิชย์ [13]

ข. ลักษณะแผ่นแบน (Planar Designs) เป็นเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งที่ออกแบบให้มีลักษณะเป็นแผ่นดังแสดงในภาพที่ 2.5 โดยที่อิเล็กโทรดและอิเล็กโทรไลต์จะทำให้เป็นชั้นบางๆ แผ่นที่ใช้เชื่อมระหว่างอิเล็กโทรดกับอิเล็กโทรไลต์ทำจากวัสดุที่เป็นเซรามิกส์หรือโลหะอัลลอยด์ที่มีความเสถียรที่อุณหภูมิสูงและมีช่องให้แก๊สผ่านเข้าไปได้ แต่ละเซลล์จะเชื่อมต่อกันด้วยตัวประสานที่ทนต่อความร้อนสูง เซลล์ที่ออกแบบด้วยวิธีนี้มีแนวโน้มว่าจะเป็นเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งที่ราคาถูกที่สุด [13]



ภาพที่ 2.5 เซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งลักษณะแผ่นแบน [6]

ค. ลักษณะโมโนลิติก (Monolithic design) มีลักษณะดังภาพที่ 2.6 เป็นเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งที่ออกแบบลักษณะนี้กำลังอยู่ในระหว่างการวิจัยพัฒนาภายใต้หน่วยงาน Allied Signal Aerospace โดยมีข้อพิจารณาอยู่ 3 ประการ คือการให้เชื้อเพลิงและตัวออกซิไดซ์ผ่านเข้าไปในเซลล์ในทิศทางเดียวกัน หรือให้ผ่านสวนทางกันหรืออาจให้ผ่านในทิศทางที่ตัดกัน เซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งในลักษณะนี้มีแนวโน้มให้พลังงานต่อพื้นที่สูง จึงเป็นที่น่าสนใจและดึงดูดใจที่จะพัฒนาขึ้นมาใช้สำหรับการเดินทางไปอวกาศ และประยุกต์ใช้ในการคมนาคมประเภทต่างๆ



ภาพที่ 2.6 เซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งลักษณะโมโนลิติก [6]

2.2 **สมการปรากฏการณ์การขนถ่าย** (The transport phenomena equation)

2.2.1 **สมการปรากฏการณ์การขนถ่าย** (The equation continuity of system)

แสดงอยู่ในรูปของสมการเวคเตอร์ดังสมการที่ (2-1) สำหรับงานวิจัยนี้สนใจระบบพิกัดแบบคาร์ทีเซียน (Cartesian coordinate) ดังสมการที่ (2-2) [16, 17]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = (\nabla \bullet \rho v) \tag{2-1}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\left(\frac{\partial}{\partial x} \rho v_x + \frac{\partial}{\partial y} \rho v_y + \frac{\partial}{\partial z} \rho v_z \right) \tag{2-2}$$

เมื่อ ρ คือ ความหนาแน่นของของไหล, (g/cm^3)

v_x, v_y, v_z คือ ความเร็วของของไหลในแนวแกน x, y และ z ตามลำดับ, (cm/s)

2.2.2 **สมการการเคลื่อนที่** (The equation of motion)

สมการการเคลื่อนที่แสดงถึงการเปลี่ยนแปลงแรงหรืออัตราการเปลี่ยนแปลงโมเมนตัมในระบบสามารถเขียนเป็นสมการคณิตศาสตร์ได้ดังสมการที่ (2-3) ซึ่งเป็นสมการอยู่ในรูปแบบเวกเตอร์-เทนเซอร์ (vector-tensor)

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho v = -[\nabla \cdot \phi] + \rho g \tag{2-3}$$

เมื่อ ϕ คือ ฟลักซ์ของโมเมนตัม (g.mole/(cm.s^2))

สำหรับงานวิจัยนี้สนใจระบบพิกัดแบบคาร์ทีเซียน (Cartesian coordinate) ทำให้สมการที่ (2-3) สามารถเขียนอยู่ในแนวแกน x, y และ z แสดงดังสมการที่ (2-4), (2-5) และ (2-6) ตามลำดับ

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho v_x = -\left(\frac{\partial}{\partial x} \phi_{xx} + \frac{\partial}{\partial y} \phi_{yx} + \frac{\partial}{\partial z} \phi_{zx} \right) + \rho g_x \tag{2-4}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho v_y = -\left(\frac{\partial}{\partial x} \phi_{xy} + \frac{\partial}{\partial y} \phi_{yy} + \frac{\partial}{\partial z} \phi_{zy} \right) + \rho g_y \tag{2-5}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho v_z = -\left(\frac{\partial}{\partial x} \phi_{xz} + \frac{\partial}{\partial y} \phi_{yz} + \frac{\partial}{\partial z} \phi_{zz} \right) + \rho g_z \tag{2-6}$$

2.2.3 **สมการความต่อเนื่องของการถ่ายเทมวล** (The equation continuity of species)

สมการความต่อเนื่องของการถ่ายเทมวลสาร แสดงถึงการเปลี่ยนแปลงของมวลแต่ละชนิด โดยแสดงในรูปสมการคณิตศาสตร์สำหรับสาร i ได้ดังนี้ [16]

$$[\nabla \cdot N_i] + \frac{\partial c_i}{\partial t} = R_i \tag{2-7}$$

เมื่อ N_i คือ ฟลักซ์เชิงโมลของสาร i, (mol/(cm^2.s))

c_i คือ ความเข้มข้นของสาร i, (mol/cm^3)

R_i คือ อัตราการเกิดปฏิกิริยาของสาร i, (mol/(cm^2.s))

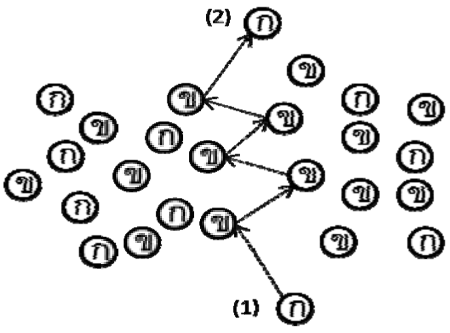
ในระบบพิกัดมุมฉาก (rectangular coordinates) สามารถแสดงสมการได้ดังนี้

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}N_{i,x} + \frac{\partial}{\partial y}N_{i,y} + \frac{\partial}{\partial z}N_{i,z}\right] + \frac{\partial c_i}{\partial t} = R_i \tag{2-8}$$

2.2.4 **การถ่ายเทมวลสาร** (Mass transfers)

2.2.4.1 **การแพร่ของโมเลกุล** (Molecular diffusion)

การถ่ายเทมวลสารโดยการแพร่ของโมเลกุลเป็นการเคลื่อนที่ของโมเลกุลในตัวกลางซึ่งไม่เคลื่อนที่หรือตัวกลางที่มีการไหลแบบราบเรียบ (laminar flow) ในกรณีที่เป็นแก๊ส โมเลกุลอาจมีการชนกัน แล้วเคลื่อนที่ต่อไป ภาพที่ 2.7 แสดงการแพร่ของโมเลกุล ก ผ่านโมเลกุล ข โดยเส้นประเป็นเส้นทางที่แพร่จากบริเวณ (1) ไปบริเวณ (2) การแพร่เช่นนี้เรียกได้ว่าเป็นการแพร่แบบสุ่ม (Molecular random diffusion) [18]



ภาพที่ 2.7 การแพร่ของโมเลกุลแบบสุ่ม [18]

โมเลกุล ก อาจเคลื่อนที่ไปยังบริเวณที่มีความเข้มข้นของ ก สูงกว่าหรือต่ำกว่าก็ได้ แต่ถ้าในตอนเริ่มต้นโมเลกุล ก บริเวณ (1) มากกว่าบริเวณ (2) โมเลกุล ก เคลื่อนที่จากบริเวณ (1) ไปบริเวณ (2) มากกว่าบริเวณ (2) ไปบริเวณ (1) ซึ่งหมายความว่าการแพร่สุทธิเกิดจากบริเวณที่ในความเข้มข้นสูงไปยังบริเวณความเข้มข้นต่ำ

2.2.4.2 **การแพร่คนุดเซน** (Knudsen diffusion)

เป็นการแพร่ของแก๊สผ่านรูพรุนขนาดเล็กหรือช่องขนาดเล็ก (capillary) เมื่อระยะทางเฉลี่ยที่โมเลกุลเคลื่อนที่โดยไม่ชนกับโมเลกุลอื่น (Mean free path) ยาวกว่าเส้นผ่านศูนย์กลางของโมเลกุลมาก ทำให้โมเลกุลชนกับผนังของช่องว่างมากกว่าที่จะชนกับโมเลกุลอื่น [18-20] การชนผนังทำให้ฟลักซ์ลดลง จากการใช้ทฤษฎีจลน์ของแก๊สสามารถคำนวณฟลักซ์การแพร่ของแก๊สนั้นๆ ได้ ซึ่งทำให้คำนวณสัมประสิทธิ์การแพร่คนุดเซน (Knudsen diffusion coefficient) ได้ดังสมการต่อไปนี้

$$D_{KA} = \frac{d_{pore}}{3}u = \frac{d_{pore}}{3}\sqrt{\frac{8\kappa NT}{\pi M_i}} = 4850 d_{pore}\sqrt{\frac{T}{M_i}} \tag{2-9}$$

เมื่อ D_{KA} คือ สัมประสิทธิ์การแพร่คนุดเซน, (cm^2/s)

d_{pore} คือ เส้นผ่านศูนย์กลางเฉลี่ยของรูพรุนม, (cm)

u คือ ความเร็วของสารในการแพร่, (cm/s)

κ คือ ค่าคงที่โบลต์ซมันน์, 1.38 X 10^{-23} J/K

N คือ เลขอาโวกาโดร 6.022 X 10^{23} โมเลกุลต่อโมล

M_i คือ น้ำหนักโมเลกุลของสาร i, (g/mole)

T คือ อุณหภูมิสัมบูรณ์, (K)

2.2.4.3 **สัมประสิทธิ์การแพร่** (Diffusion coefficient)

สัมประสิทธิ์การแพร่มักจะเป็นค่าคงที่ที่มีหน่วยเป็นระยะทางยกกำลังสองต่อหน่วยเวลา โดยค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ขึ้นอยู่กับอุณหภูมิ ความดัน และส่วนประกอบของระบบ ทั่วไปแล้วสัมประสิทธิ์การแพร่สามารถหาได้จากการทดลอง ในกรณีที่ไม่สามารถหาค่าจากการทดลองได้อาจจะต้องใช้วิธีคำนวณ โดยค่าสัมประสิทธิ์การแพร่นั้นมีอยู่หลายระบบคือ สัมประสิทธิ์การแพร่ของแก๊ส สัมประสิทธิ์การแพร่ของของเหลว และสัมประสิทธิ์การแพร่ในของแข็ง แต่ในที่นี้ขอนำเสนอสัมประสิทธิ์การแพร่ของแก๊สเพียงอย่างเดียว

2.2.4.3.1 **สัมประสิทธิ์การแพร่ของแก๊ส** (Gas diffusion coefficient)

วิธีทางทฤษฎีในการคำนวณสัมประสิทธิ์การแพร่ของแก๊สผสมที่มีความหนาแน่นต่ำ จะใช้ความรู้เรื่องทฤษฎีจลน์ของแก๊สมาประกอบ โดยสมมติว่าโมเลกุลของแก๊สเปรียบเสมือนอนุภาคทรงกลมที่มีความคงรูป

(rigid) มีแรงกระทำระหว่างโมเลกุล สมการสำหรับคำนวณค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของแก๊สเมื่อแก๊สผสมสองชนิดมีความหนาแน่นต่ำเป็นแบบไม่มีขั้ว (non-polar) และไม่ทำปฏิกิริยาต่อกัน ดังนี้

$$D_{ij} = \frac{0.001858T^{3/2}\left[\frac{1}{M_i} + \frac{1}{M_j}\right]^{1/2}}{P\sigma_{ij}^2\Omega_D} \qquad (2\text{-}10)$$

เมื่อ D_{ij} คือ สัมประสิทธิ์การแพร่ของสาร i ผ่านองค์ประกอบสาร j, (cm^2/s)

T คือ อุณหภูมิสัมบูรณ์, (K)

M_i, M_j คือ น้ำหนักโมเลกุลของสาร i และ j, (g/mole)

P คือ ความดัน, (atm)

σ_{ij} คือ ตัวแปรเลนนาร์ด-โจนส์ของสาร i ผ่านองค์ประกอบสาร j, (10^{-10}m)

Ω_D คือ ตัวแปรไร้หน่วยของค่าการชนร่วม (collision integral)

ในการใช้สมการ (2-10) จะต้องทราบวิธีค่าตัวแปรเลนนาร์ด-โจนส์ของสาร i ผ่านองค์ประกอบสาร j และตัวแปรไร้หน่วยของค่าการชนร่วมซึ่งค่าตัวแปรไร้หน่วยของค่าการชนร่วมเป็นฟังก์ชั่นกับ $\kappa T/\varepsilon_{ij}$ เมื่อ ε_{ij} เป็นค่าพลังงานที่แสดงแรงกระทำระหว่างโมเลกุลมีหน่วยเป็นจูลส์ (J) โดยค่า Ω_D แสดงอัตราส่วนกรณีที่แก๊สคู่นั้นมีแรงกระทำต่อกัน กรณีที่แก๊สเป็นทรงกลมคงรูป ไม่มีแรงกระทำต่อกัน ค่า Ω_D จึงมีการเบี่ยงเบนไปจาก 1.0 [9] ตัวแปร σ_{ij} , Ω_D และ ε_{ij} สามารถหาได้ด้วยการคำนวณจากความสัมพันธ์ต่อไปนี้

$$\varepsilon_i = 0.77T_c\kappa \qquad (2\text{-}11)$$

$$\varepsilon_i = 1.15T_b\kappa \qquad (2\text{-}12)$$

$$\sigma_i = 1.18(V_b)^{1/3} \qquad (2\text{-}13)$$

$$\sigma_i = 0.841(V_c)^{1/3} \qquad (2\text{-}14)$$

$$\sigma_i = 2.44\left(\frac{T_c}{P_c}\right)^{1/3} \qquad (2\text{-}15)$$

$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2} \qquad (2\text{-}16)$$

$$\varepsilon_{ij} = \sqrt{\varepsilon_i\,\varepsilon_j} \qquad (2\text{-}17)$$

เมื่อ V_b คือ ปริมาตรต่อโมลที่จุดเดือดปกติ, (cm^3/g mole)

V_c คือ ปริมาตรวิกฤต, (cm^3/g mole)

T_c คือ อุณหภูมิวิกฤต, (K)

T_b คือ จุดเดือดปกติ, (K)

P_c คือ ความดันวิกฤต, (atm)

ε_i คือ ค่าพลังงานที่แสดงแรงกระทำระหว่างโมเลกุล i, (J)

ε_{ij} คือ ค่าพลังงานที่แสดงแรงกระทำระหว่างโมเลกุล i กับโมเลกุล j, (J)

2.2.4.3.2 **สัมประสิทธิ์โดยรวมของการแพร่ผ่านรูพรุน** (Effective diffusion coefficient)

สัมประสิทธิ์โดยรวมของการแพร่ผ่านรูพรุนเป็นการนำค่าสัมประสิทธิ์การแพร่คนุดเซนรวมกับสัมประสิทธิ์การแพร่ของแก๊สและสัดส่วนระหว่างค่าความพรุนกับค่าความคดเคี้ยวของรูพรุน แสดงได้ดังสมการต่อไปนี้

$$D_i^{eff} = \frac{\varepsilon}{\tau}\left(\frac{1}{D_{AB}} + \frac{1}{D_{KA}}\right) \tag{2-18}$$

เมื่อ ε คือ สัดส่วนค่าความพรุนของวัสดุ

τ คือ ค่าความคดเคี้ยวของรูพรุน

2.2.4.4 **สมการการแพร่ของฟิค** (Fick diffusion equation)

สมการการแพร่ของฟิคใช้สำหรับอธิบายลักษณะกลไกการแพร่และการละลายของสารที่เป็นของไหลซึ่งสามารถอธิบายได้ในระบบที่เกิดการแพร่และการละลายจริงในตัวกลางและความสามารถของโมเลกุลในการแพร่ผ่านผิวของตัวกลาง โดยสามารถใช้อธิบายได้กับตัวกลางที่เป็นของแข็งและของไหลได้ เมื่อการแพร่ของโมเลกุลอยู่ในรูปของฟลักซ์เชิงโมล สำหรับในระบบซึ่งอุณหภูมิคงที่ [18, 21] และการแพร่ในทิศทาง z แสดงได้ดังนี้

$$N_{i,z} = \frac{1}{RT}\left(-D_{ij}^{eff}\frac{\partial(y_{i,z}P)}{\partial z} + \frac{B_0 y_{i,z}P}{\mu}\frac{\partial P}{\partial z}\right) \tag{2-19}$$

เมื่อ $N_{i,z}$ คือ ฟลักซ์เชิงโมลของสาร i ในทิศทางแกน z, (mole/(cm^2/s))

y_i คือ สัดส่วนโมลของสาร i

μ คือ ความหนืดของแก๊ส, (atm.s)

D_{ij}^{eff} คือ สัมประสิทธิ์โดยรวมของการแพร่ของสาร i ในสาร j, (cm^2/s)

B_0 คือ สัมประสิทธิ์การซึมผ่าน

P คือ ความดันของระบบ, (atm)

R คือ ค่าคงที่ของแก๊ส, (82.057 cm^3.atm/(mole.K))

ซึ่งเทอมที่หนึ่งและสองของทางฝั่งขวามือ คือ เทอมของความสามารถในการแพร่ผ่านและเทอมของความสามารถในส่งผ่านนำพา (convection transport term) ซึ่งเทอมที่สองนี้อธิบายได้จากสมการดาซี่ (Darcy's equation) [21]

2.2.4.5 **สมการสเตฟาน-แม็คเวลล์** (Stefan-Maxwell equation)

สมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ใช้อธิบายการแพร่ของของไหลผ่านตัวกลางที่ไม่มีรูพรุนหรือมีขนาดรูพรุนเล็กมาก ในเทอมของสเตฟาน-แม็คเวลล์ [22, 23] แสดงไว้ดังสมการที่ (2-20)

$$\sum_{j=1,\, j\neq i} \frac{y_j N_i - y_i N_j}{D_{ij}^{eff}} = -\frac{P}{RT}\frac{dy_i}{dz} \tag{2-20}$$

2.2.4.6 **สมการการแพร่ดัสตีแก๊ส** (Dusty gas equation)

สมการการแพร่ดัสตีแก๊สเป็นสมการการแพร่ของของไหลในสถานะแก๊สที่นำสมการของสเตฟาน-แม็ค-เวลล์มาประยุกต์ใช้ร่วมกับการแพร่คนุดเซน โดยมีแนวคิดที่มองโมเลกุลของแก๊สให้รวมกันเป็นกลุ่มก้อนเล็กๆ (dust) แล้วกระจายตัวอยู่ในบริเวณพื้นที่รูพรุน โมเลกุลก้อนแก๊สจะถือว่าเป็นแบบจำลองในสารผสม [24] ซึ่งสามารถอธิบายด้วยสมการดังต่อไปนี้

$$\frac{N_i}{D_{i,k}^{eff}} \sum_{j=1,\, j\neq i} \frac{y_j N_i - y_i N_j}{D_{ij}^{eff}} = -\frac{1}{RT}\left(\frac{Pdy_i}{dz} + y_i\frac{dP}{dz}\left(1+\frac{B_0 P}{D_{i,k}^{eff}\mu}\right)\right) \tag{2-21}$$

2.2.5 **การสูญเสียศักย์ไฟฟ้าภายในเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็ง** (Solid Oxide Fuel Cell Overpotential)

การสูญเสียศักย์ไฟฟ้าภายในเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งเป็นสิ่งที่หลีกเลี่ยงไม่ได้ โดยสามารถคำนวณหาค่าความสูญเสียเหล่านี้ได้โดยใช้สมการทางไฟฟ้าเคมี ซึ่งค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าภายในเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งสามารถแบ่งออกได้ 3 ชนิดด้วยกัน คือ การสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากพลังงานกระตุ้น (activation overpotential, η_{act}) ความสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความต้านทานภายใน (ohmic overpotential, η_{ohm}) และการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าซึ่งเกิดจากการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นภายในขั้วอิเล็กโทรด (concentration overpotential, η_{conc}) โดยศักย์ไฟฟ้าในระบบอุดมคติเกิดขึ้นเมื่อระบบไม่มีการสูญเสียใดๆ การคำนวณหาค่าศักย์ไฟฟ้าสุทธิสามารถหาได้จากสมการที่ (2-22) และ (2-23) [6]

$$V_{cell} = V_0 - Losses \tag{2-22}$$

$$V_{cell} = V_0 - \eta_{act} - \eta_{ohm} - \eta_{conc} \quad (2\text{-}23)$$

เมื่อ V_{cell} คือ ศักย์ไฟฟ้าสุทธิ, (V)

V_0 คือ ศักย์ไฟฟ้าอุดมคติ, (V)

โดยศักย์ไฟฟ้าอุดมคติสามารถหาได้จากสมการของเนิร์นสท์ (Nernst Equation) ดังนี้

$$V_0 = -\frac{\Delta G_{ox} T}{n_e F} - \frac{RT}{n_e F} \ln\left(\frac{p_{prod}}{p_{react} \sqrt{p_{oxid}}} \right) \quad (2\text{-}24)$$

เมื่อ ΔG_{ox} คือ พลังงานอิสระพลังงานอิสระกิบส์ของปฏิกิริยาออกซิเดชั่น, (mole.cm^2/s^2)

F คือ ค่าคงที่ฟาราเดย์, (96485.3 C/mole)

p_{prod} คือ ความดันย่อยของแก๊สผลิตภัณฑ์ของระบบ

p_{raact} คือ ความดันย่อยของแก๊สเชื้อเพลิงของระบบ

p_{oxid} คือ ความดันย่อยของแก๊สที่เป็นตัวออกซิไดส์ของระบบ

T คือ อุณหภูมิองศาสมบูรณ์, (K)

R คือ ค่าคงที่ของแก๊ส, (8.3143 J/K g.mole)

2.2.5.1 **การสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากพลังงานกระตุ้น** (Activation Overpotential, η_{act})

เป็นการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าที่เกิดขึ้นที่บริเวณผิวหน้าของขั้วอิเล็กโทรด เนื่องมาจากเกิดความเฉื่อยของปฏิกิริยาเคมีไฟฟ้าที่ขั้วอิเล็กโทร์ด (Electrode) ซึ่งศักย์ไฟฟ้าที่สูญเสียไปนั้นถูกนำไปใช้ในการเอาชนะพลังงานกระตุ้นที่เป็นเหมือนกำแพงบริเวณผิวหน้าของขั้วอิเล็กโทร์ด [25] โดยการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากพลังงานกระตุ้นจะมีผลสูงสำหรับระบบที่เซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งดำเนินการที่อุณหภูมิต่ำ และมีผลกระทบน้อยมากในระบบที่เซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งที่ดำเนินการในอุณหภูมิสูง โดยสามารถคำนวณศักย์ไฟฟ้าที่สูญเสียจากพลังงานกระตุ้นนี้ได้จากสมการของบูทเลอร์-โวลเมอร์ (Butler-Volmer equation) [6]

$$\eta_{act} = \frac{2RT}{n_e F} \sin^{-1}\left(\frac{i}{2i_0} \right) \quad (2\text{-}25)$$

เมื่อ η_{act} คือ ค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากพลังงานกระตุ้น, (V)

i คือ ความหนาแน่นกระแส, (A/cm^2)

i_0 คือ ความหนาแน่นกระแสแลกเปลี่ยน, (A/cm^2)

R คือ ค่าคงที่แก๊ส, (8.3143 J/K g.mole)

n_e คือ จำนวนอิเล็กตรอนที่แลกเปลี่ยนในระบบต่อหนึ่งปฏิกิริยา

F คือ ค่าคงที่ฟาราเดย์, (96485.3 C/mole)

2.2.5.2 **การสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความต้านทานภายใน** (Ohmic Overpotential, η_{ohm})

เป็นค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าที่เกิดขึ้นจากคุณสมบัติการนำไฟฟ้าและการส่งผ่านประจุของขั้วอิเล็กโทร์ดและอิเล็กโทรไลต์ โดยสิ่งที่เกิดขึ้นสามารถอธิบายได้ด้วยสมการตามกฎของโอห์ม (Ohm’s law) [4] ดังนี้

$$\eta_{ohm} = i_e R_e \qquad (2\text{-}26)$$

เมื่อ R_e คือ ค่าความต้านทานประจุ, (Ω)

η_{ohm} คือ ค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความต้านทานภายใน, (V)

i_e คือ แระแสไฟฟ้า, (A)

2.2.5.3 **การสูญเสียศักย์ไฟฟ้าซึ่งเกิดจากการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นภายในขั้วอิเล็กโทรด (Concentration overpotential, η_{conc})**

เป็นค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าที่พบขึ้นในเซลล์เชื้อเพลิง ซึ่งแปรผันตามขนาดของเซลล์เชื้อเพลิง เป็นผลมาจากการลดลงของความเข้มข้นของเชื้อเพลิงและการเกิดขึ้นของผลิตภัณฑ์ภายในขั้วอิเล็กโทร์ด ซึ่งส่งผลให้ความดันย่อยของเชื้อเพลิงในขั้วแอโนดลดลงในขณะที่ผลิตภัณฑ์มีความดันย่อยที่เพิ่มขึ้น [25] สำหรับปัจจัยหลักๆ ที่มีผลต่อการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าซึ่งเกิดจากการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นภายในขั้วอิเล็กโทรดขึ้นอยู่กับอิทธิพลของโครงสร้างจุลภาคของขั้วอิเล็กโทร์ด (Microstructure of Electrode) สัมประสิทธิ์การแพร่ของแก๊สโดยรวมในระบบ ความดันย่อยในระบบ (Partial Pressures of System) และค่าความหนาแน่นกระแส (Current Density) [26, 27] สำหรับขั้วแอโนดปรากฏการณ์นี้จะเกิดขึ้นที่บริเวณสภาวะขอบสามเฟส (Triple phase boundary, TPB) นั่นคือภายในขั้วแอโนดเหนือจากผิวสัมผัสระหว่างอิเล็กโทรไลต์กับขั้วแอโนด [28] สามารถอธิบายได้ด้วยสมการของสมการเนิร์นสท์ (Nernst equation) ดังนี้

$$\eta_{conc} = -\frac{RT}{2F}\ln\left(\frac{(y_{reat,TPB})(y_{prod,bulk})}{(y_{react,bulk})(y_{prod,TPB})}\right) \qquad (2\text{-}27)$$

เมื่อ η_{conc} คือ ค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าซึ่งเกิดจากการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้น, (V)

$y_{react,TPB}$ คือ สัดส่วนโมลของเชื้อเพลิงบริเวณสภาวะขอบสามเฟส

$y_{prod,TPB}$ คือ สัดส่วนโมลของผลิตภัณฑ์บริเวณสภาวะขอบสามเฟส

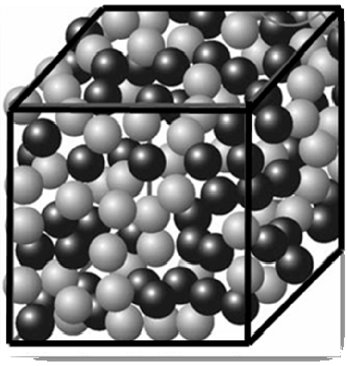
$y_{react,bilk}$ คือ สัดส่วนโมลของเชื้อเพลิงในสายป้อน

$y_{prod,bilk}$ คือ สัดส่วนโมลของผลิตภัณฑ์ในสายป้อน

R คือ ค่าคงที่ของแก๊ส, (8.3143 J/K.(g.mole))

2.2.6 **ระบบโครงสร้างภายในขั้วแอโนด** (Structure system of anode-suppoted)

ระบบโครงสร้างภายในของขั้วแอโนดของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งชนิดออกซิเจนไอออนเคลื่อนที่ผ่านอิเล็กโทรไลต์ถูกมองว่ามีลักษณะเป็นการเชื่อมต่อกันของอนุภาคทรงกลมหลายๆ ลูก ซึ่งลักษณะที่ได้เป็นดังภาพที่ 2.8 วัสดุที่เลือกมาใช้เป็นขั้วแอโนดของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้นั้นจะต้องมีความสามารถในการนำไฟฟ้าและนำไอออนได้เป็นอย่างดี ในปัจจุบันโลหะนิกเกิลบนเซอร์โคเนียออกไซด์ (Ni/ZrO_2) ได้รับนิยมในการใช้เป็นขั้วแอโนดอย่างแพร่หลาย [7, 29] เนื่องมาจากวัสดุชนิดนี้มีความทนทานที่ดีต่อสารมลทินภายในเชื้อเพลิง มีค่าการนำไฟฟ้าและนำไอออนที่ดีในสภาวะอุณหภูมิที่ต่ำกว่าวัสดุชนิดอื่นๆ และมีค่าการขยายตัวทางความร้อนที่เหมาะสมกับมีอิเทียม-สเตบิไลซ์เซอร์โคเนีย (Yttria-stabilised zirconia, YSZ) [15, 30] ซึ่งนิยมนำมาใช้เป็นอิเล็กโทรไลต์ โดยการเชื่อมต่อกันจะเกิดช่องว่างระหว่างอนุภาคและจุดที่เกิดการเชื่อมต่อจะมีการซ้อนทับกันของอนุภาค บริเวณที่เกิดการเชื่อมต่อกันของแต่ละอนุภาคภายในโครงสร้างขั้วแอโนดนั้นมีความสอดคล้องถึงการ-เชื่อมต่อของบริเวณที่เกิดปฏิกิริยาภายในขั้วแอโนดหรือความยาวของสภาวะขอบสามเฟส (Triple-Phase-Boundary length) [7-9]

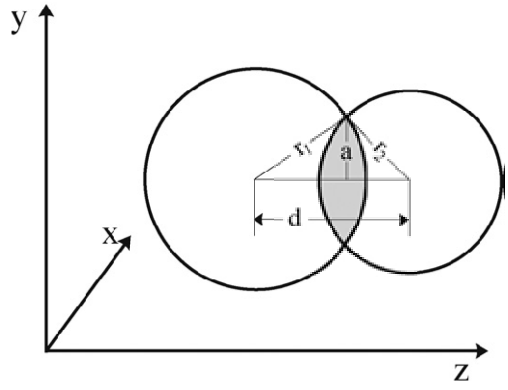


ภาพที่ 2.8 การเชื่อมต่อของอนุภาคภายในโครงสร้างขั้วแอโนด [31]

ความยาวของสภาวะขอบสามเฟสเป็นการแสดงถึงการเชื่อโยงของบริเวณที่เกิดปฏิกิริยาเคมีภายในขั้วแอโนด โดยบริเวณนี้เกิดขึ้นเมื่อเชื้อเพลิงแพร่ผ่านไปในขั้วแอโนดและได้สัมผัสกับเฟสของอนุภาคไอออนิกและอิเล็กทรอนิกส์พร้อมกัน พบว่าบริเวณนี้ทำให้เกิดปฏิกิริยาออกซิเดชัน (Oxidation reaction) ทำให้เชื้อเพลิงเกิดการเสียอิเล็กตรอน (Electron) ออกไป ซึ่งอิเล็กตรอนที่เสียออกไปนี้จะวิ่งผ่านอนุภาคที่ประพฤติตนเป็นเฟส-อิเล็กทรอนิกส์และโหลดไฟฟ้าเกิดเป็นพลังงานไฟฟ้าต่อไป ส่วนไอออนที่เกิดขึ้นจะวิ่งผ่านอนุภาคที่ประพฤติตัวเป็นเฟสไอออนิกและเข้าทำปฏิกิริยาอีกครั้งที่บริเวณเหนือผิวสัมผัสของอิเล็กโทรไลต์กับขั้วแอโนด [30]

ภาพที่ 2.9 บริเวณที่เกิดสภาวะขอบสามเฟส [31]

ลักษณะโครงสร้างภายในขั้วแอโนดของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งชนิดนี้สามารถใช้สมการทางคณิตศาสตร์อธิบายถึงความสัมพันธ์ของการเชื่อมต่อในแต่ระอนุภาคได้ ซึ่งผลที่ได้นำไปสู่การประมาณค่าความยาวของสภาวะขอบสามเฟส เมื่อเราเริ่มมองถึงการเชื่อมต่อของแต่ละอนุภาคภายในขั้วแอโนด จะพบว่าทุกๆ จุดเชื่อมต่อจะมีการเกิดพื้นที่ซ้อนทับขึ้น แสดงดังภาพที่ 2.10



ภาพที่ 2.10 การทับซ้อนของอนุภาคทรงกลม [8, 32]

บริเวณที่เกิดการซ้อนทับระหว่างอนุภาคของแต่ละเฟสที่มีขนาดไม่เท่ากันและมีรูปร่างเป็นทรงกลม สามารถหาปริมาตรของพื้นซ้อนทับ ($V1$) และรัศมีของพื้นที่ซ้อนทับ (a)ได้ดังสมการที่ (2-28) และ (2-29) ตามลำดับ [8] และเมื่อระบบมีขนาดอนุภาคที่เท่ากันสามารถหาปริมาตรของพื้นซ้อนทับและรัศมีของพื้นที่ซ้อนทับได้ดังสมการที่ (2-30) และ (2-31) ตามลำดับ [32]

$$V1 = \frac{\pi(r_1 + r_2 - d)^2(d^2 + 2dr_2 - 3r_2^2 + 2dr_1 + 6r_2r_1 - 3r_1^2)}{12d} \tag{2-28}$$

$$a = \frac{1}{2d}\sqrt{4d^2 r_1^2 - (d^2 - r_2^2 + r_1^2)^2} \tag{2-29}$$

$$V_1 = \frac{\pi(2r-d)^2(d^2+4dr)}{12d} \tag{2-30}$$

$$a = \frac{1}{2d}\left(4d^2 r^2 - d^4\right)^{1/2} \tag{2-31}$$

เมื่อ $V1$ คือ ปริมาตรของพื้นซ้อนทับ, (m^3)

a คือ รัศมีของพื้นที่ซ้อนทับ, (m)

r_1 คือ รัศมีของอนุภาคที่ 1 ซึ่งมีขนาดใหญ่กว่า, (m)

r_2 คือ รัศมีของอนุภาคที่ 2 ซึ่งมีขนาดเล็กกว่า, (m)

r คือ รัศมีของอนุภาคเมื่อทุกอนุภาคมีขนาดเท่ากัน , (m)

d คือ ระยะห่างระหว่างจุดศูนย์กลางของทั้งสองอนุภาค, (m)

สมการที่ (2-28) ถึง (2-31) จะเป็นจริงได้เมื่อระยะห่างระหว่างจุดศูนย์กลางของทั้งสองอนุภาคมีค่าน้อยกว่าผลรวมของรัศมีของอนุภาคที่ 1 ซึ่งมีขนาดใหญ่กว่ากับรัศมีของอนุภาคที่ 2 ซึ่งมีขนาดเล็กกว่า ($d < r_1 + r_2$) หรือมีขนาดน้อยกว่าสองเท่าของรัศมีของอนุภาคเมื่อทุกอนุภาคมีขนาดเท่ากัน ($d < 2r$)

เมื่อระบบถูกมองว่าภายในโครงสร้างของขั้วแอโนดประกอบไปด้วยช่องว่าง (Pore) และอนุภาคทรงกลมแข็งสองเฟสคือ เฟสของอิเล็กทรอนิกส์ (Electronic phase) และเฟสไอออนิก (Ionic phase) เราสามารถคำนวณหาจำนวนอนุภาคทั้งหมดของเฟสของอิเล็กทรอนิกส์และเฟสไอออนิกได้ โดยใช้สามารถที่ (2-32) อธิบายถึงระบบที่มีขนาดอนุภาคในแต่ละเฟสไม่เท่ากันและมีรูปร่างเป็นทรงกลม ซึ่งจะแสดงการรวมจำนวนอนุภาคทั้งอนุภาคเฟสของอิเล็กทรอนิกส์ และอนุภาคเฟสไอออนิก สมการที่ (2-33) จะสามารถใช้ในการคำนวณหาค่าจำนวนอนุภาคทั้งหมดของกลุ่มอนุภาคที่มีขนาดรัศมีที่ 1 ได้ [8] ส่วนระบบที่มีขนาดอนุภาคของทั้งสองเฟสเท่ากันและมีรูปร่างเป็นทรงกลมจะสามรถอธิบายได้ดังสมการที่ (2-34) [8, 32]

$$N_P = N_{P1} + N_{P2} = \frac{(1-\varepsilon)V_t(1+M)}{(4/3)\pi\left(r_1^3 + Mr_2^3\right) - (1-\psi)(1+M)V_1} \tag{2-32}$$

$$N_{P1} = \frac{(1-\varepsilon)V_t}{(4/3)\pi\left(r_1^3 + Mr_2^3\right) - (1-\psi)(1+M)V_1} \tag{2-33}$$

$$Np = \frac{(1-\varepsilon)V_t}{(4/3)\pi(r^3) - (1-\psi)V1} \tag{2-34}$$

เมื่อ N_P คือ จำนวนอนุภาคทั้งหมด

N_{P1} คือ จำนวนอนุภาคทั้งหมดของรัศมีของอนุภาคที่ 1 ซึ่งมีขนาดใหญ่กว่า

N_{P2} คือ จำนวนอนุภาคทั้งหมดของรัศมีของอนุภาคที่ 2 ซึ่งมีขนาดเล็กกว่า

V_t คือ ปริมาตรของระบบ, (m^3)

M คือ อัตราส่วนจำนวนอนุภาคเฟสไอออนิกและเฟสของอิเล็กทรอนิกส์

ψ คือ สัดส่วนการซ้อนทับ

อัตราส่วนจำนวนอนุภาคเฟสไอออนิกและเฟสของอิเล็กทรอนิกส์เป็นค่าที่แสดงถึงอัตราส่วนระหว่างค่าสัดส่วนโดยปริมาตรของเฟสที่มีอนุภาคใหญ่กว่ากับค่าสัดส่วนโดยปริมาตรของเฟสที่มีอนุภาคเล็กกว่า ซึ่งรวมถึงอัตราส่วนของรัศมีของทั้งสองเฟสด้วย แสดงได้ดังสมการที่ (2-35) [8] โดยอัตราส่วนจำนวนอนุภาคเฟสไอออนิกและเฟสของอิเล็กทรอนิกส์จะมีผลต่อระบบที่มีขนาดอนุภาคในแต่ละเฟสไม่เท่ากันและมีรูปร่างเป็นทรงกลม

$$M = \frac{N_{P2}}{N_{P1}} = \frac{\phi_2 r_1^3}{\phi_1 r_2^3} \tag{2-35}$$

เมื่อ ϕ_1 คือ สัดส่วนโดยปริมาตรของเฟสรัศมีของอนุภาคที่ 1 ซึ่งมีขนาดใหญ่กว่า

ϕ_2 คือ สัดส่วนโดยปริมาตรของเฟสรัศมีของอนุภาคที่ 2 ซึ่งมีขนาดเล็กกว่า

ความยาวของสภาวะขอบ (Boundary length) ที่เกิดขึ้นเนื่องจากการซ้อนทับของสองอนุภาคทรงกลมที่เกิดขึ้นบริเวณขอบของเส้นรอบวงอนุภาคทรงกลมนั้น จะเกิดขึ้นได้เมื่อเกิดการซ้อนทับกับเฟสตรงข้ามกันเท่านั้น และความยาวของสภาวะขอบสามเฟสมีความสัมพันธ์กับพื้นที่ผิวรูพรุน (pore space) ของเนื้อวัสดุ ซึ่งความยาว-ของสภาวะขอบสามเฟสเฉลี่ย (The average Triple-Phase-Boundary length) ของวัสดุเนื้อผสม (composite materials) สามารถหาได้ดังสมการที่ (2-36) [8, 9]

$$L_{TPB} = 2N_P Z_{i-e} \varepsilon(\pi a) \tag{2-36}$$

เมื่อ L_{TPB} คือ ความยาวของสภาวะขอบสามเฟสเฉลี่ย, (m)

Z_{i-e} คือ เลขโคออร์ดิเนชันระหว่างอนุภาคตัวนำไอออนิกกับอิเล็กทรอนิกส์

การแสดงความสัมพันธ์ระหว่างอนุภาคตัวนำทั้งเฟสอิเล็กทรอนิกส์และเฟสไอออนิกนั้นแสดงได้ด้วยเลขโคออร์ดิเนชันระหว่างอนุภาคตัวนำไอออนิกกับอิเล็กทรอนิกส์ (Coordination number between ionic and electronic conductor) ซึ่งแสดงจำนวนอนุภาคไอออนิกที่อยู่ล้อมรอบอนุภาคอิเล็กทรอนิกส์ โดยเลขโคออร์ดิเนชันระหว่างอนุภาคตัวนำไอออนิกกับอิเล็กทรอนิกส์แสดงในสมการที่ (2-37) สำหรับเลขโคออร์ดิเนชันของอนุภาคอิเล็กทรอนิกส์ (Z_e) และเลขโคออร์ดิเนชันของอนุภาคไอออนิก (Z_i) แสดงในสมการที่ (2-38) และ (2-39) [33] ตามลำดับ

$$Z_{i-e} = Z_{e-i} = \phi_i \phi_e Z_i Z_e \tag{2-37}$$

$$Z_e = 3 + \frac{Z-3}{\phi_e + \phi_i \beta^2} \tag{2-38}$$

$$Z_i = 3 + \frac{(Z-3)\beta^2}{\phi_e + \phi_i \beta^2} \tag{2-39}$$

เมื่อ Z_e คือ เลขโคออร์ดิเนชันของอนุภาคอิเล็กทรอนิกส์

Z_i คือ เลขโคออร์ดิเนชันของอนุภาคไอออนิก

Z คือ ค่าเฉลี่ยเลขโคออร์ดิเนชัน

ϕ_e คือ สัดส่วนโดยปริมาตรของเฟสอิเล็กทรอนิกส์

ϕ_i คือ สัดส่วนโดยปริมาตรของเฟสไอออนิก

β คือ สัดส่วนรัศมีอนุภาคไอออนิกต่ออนุภาคอิเล็กทรอนิกส์, (r_i/r_e)

ความยาวของสภาวะของสามเฟสต่อหน่วยปริมาตร (Volume specific Triple-Phase-Boundary length) ถูกนำมาใช้ในการอธิบายถึงความยาวของสภาวะขอบสามเฟสภายในขั้วแอโนดของระบบ ซึ่งเปรียบเทียบอยู่ในหน่วยปริมาตรทั้งหมดของขั้วแอโนด สำหรับระบบที่มีขนาดอนุภาคในแต่ละเฟสไม่เท่ากันและมีรูปร่างเป็นทรงกลม แสดงค่าความยาวของสภาวะขอบสามเฟสต่อหน่วยปริมาตรได้ดังสมการที่ (2-40) และสำหรับระบบที่ขนาดอนุภาคของทั้งสองเฟสเท่ากันและมีรูปร่างเป็นทรงกลม แสดงค่าความยาวของสภาวะของสามเฟสต่อหน่วยปริมาตรได้ดังสมการที่ (2-41) [8, 32]

$$vL_{TPB} = \frac{\varepsilon(1-\varepsilon)(1+M)Z_{i-e}(2a\pi)}{(4/3)\pi(r_1^3 + Mr_2^3) - (1-\psi)(1+M)V_1} \tag{2-40}$$

$$vL_{TPB} = \frac{\varepsilon(1-\varepsilon)Z_{i-e}(2a\pi)}{(4/3)\pi r^3 - (1-\psi)V_1} \tag{2-41}$$

เมื่อ vL_{TPB} คือ ความยาวของสภาวะของสามเฟสต่อหน่วยปริมาตร, (m/m^3)

บทที่ 3

ทบทวนวรรณกรรม

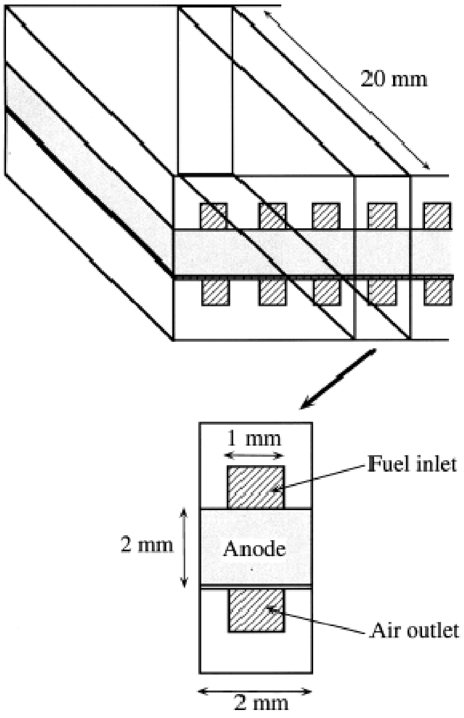
หลายปีที่ผ่านมาได้มีงานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับแบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งเป็นจำนวนมาก ซึ่งงานวิจัยที่ผ่านมาได้มุ่งความสนใจในด้านที่แตกต่างกันไป เช่น ในเชิงประสิทธิภาพ การควบคุมระบบ และการประยุกต์ใช้งาน เป็นต้น โดยงานวิจัยนี้ได้มุ่งความสนใจในการทบทวนวรรณกรรมที่เกี่ยวข้องกับแบบจำลองทางคณิตศาสตร์เพื่อวิเคราะห์ประสิทธิภาพของขั้วแอโนดภายในเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออไซด์แข็ง โดยแบ่งออกเป็นสองหัวข้อคือ ความสัมพันธ์ระหว่างการถ่ายเทมวลสารภายในขั้วแอโนดกับค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้น (The relationship between mass transfers within anode-supported and concentration overpotential) และความสัมพันธ์ระหว่างระบบโครงสร้างภายในขั้วแอโนดกับความยาวของสภาวะของสามเฟสต่อหน่วยปริมาตร (The relationship between structure system of anode-suppoted and volume specific Triple-Phase-Boundary length) ซึ่งทำให้เห็นถึงความเป็นมาของงานวิจัยในช่วงที่ผ่านมา และแสดงถึงข้อดีขอเสียที่นำไปสู่การแนวคิดของงานวิจัยนี้

3.1 ความสัมพันธ์ระหว่างการถ่ายเทมวลสารภายในขั้วแอโนดกับค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้น

ความสัมพันธ์ระหว่างการถ่ายเทมวลสารภายในขั้วแอโนดกับค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นเป็นองค์ความรู้ที่มีศึกษาสำหรับเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออไซด์แข็งชนิดนี้มาอย่างช้านาน และสามารถอธิบายโดยใช้สมการทางคณิตศาสตร์เพื่อแสดงถึงพฤติกรรมที่เกิดขึ้น ซึ่งปัจจัยที่มีผลเชื่อมโยงความสัมพันธ์ระหว่างการถ่ายเท-มวลสารภายในขั้วแอโนดและค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นนั้นมีอยู่หลายปัจจัยคือ ชนิดเชื้อเพลิงและสารผลิตภัณฑ์ ขนาดโมเลกุลของเชื้อเพลิงและสารผลิตภัณฑ์ อุณหภูมิระบบ ความดันระบบ วัสดุที่ใช้เป็นขั้วแอโนด รูปทรงของขั้วแอโนด สัดส่วนความพรุนของขั้วแอโนด ขนาดรูพรุนของขั้วแอโนด ความคดเคี้ยวของรูพรุนภายในขั้วแอโนด เป็นต้น

ในปี ค.ศ. 2000 Yakabe, H. et al. [5] ศึกษาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของคุณสมบัติขั้วแอโนดของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็ง โดยใช้แบบจำลองที่เป็นลักษณะเซลล์แผ่นแบน (planar cell) โดยใช้สมการการซึมผ่านพรุนตามกฎดาร์ซี่ (Darcy's law) แสดงดังสมการที่ (3-1) มาศึกษาการแพร่ผ่านรูพรุนในขั้วแอโนดของแก๊สไฮโดรเจนและคาร์บอนมอนอกไซด์ของระบบแก๊สผสมระหว่าง แก๊สไฮโดรเจน ไอน้ำ และแก๊สอาร์กอน (H_2-H_2O-Ar) และแก๊สผสมระหว่างแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์กับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ (CO-CO_2) ตามลำดับ ที่สภาวะ 1 บรรยากาศ 750 องศาเซลเซียส และเชื่อมโยงความสัมพันธ์กับค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นภายในขั้วแอโนด ซึ่งในตอนนั้นผลการทดลองของพวกเขาทำให้ทราบว่าค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นภายในขั้วแอโนดสามารถคำนวณได้ด้วยสมการของเนิร์นสท์ (Nernst equation) แสดงดังสมกาที่ (3-2) โดยใช้ความดันย่อยของแก๊สออกซิเจนที่ขั้วแคโทดกับความดันย่อยกับของแก๊สออซิเจนที่ผิวหน้าระหว่างขั้วแอโนดกับอิเล็กโทรไลต์ แล้วจึงนำค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าซึ่งจากความเข้มข้นภายในขั้วแอโนดที่ได้จาก

แบบจำลองทางคณิตศาสตร์นำไปเปรียบเทียบกับผลที่ได้จากการทดลองจริง พวกเขาใช้เซลล์เชื้อเพลิงที่มีความกว้างของขั้วแอโนด 2 มิลลิเมตร ความยาว 20 มิลลิเมตร และความสูง 2 มิลลิเมตร ดังภาพที่ 3.1 ซึ่งพบว่าสมการการซึมผ่านรูพรุนตามกฎดาร์ซี่สามารถอธิบายค่าการการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นภายในขั้วแอโนดได้ใกล้เคียงกับความเป็นจริง เมื่อป้อนเชื้อเพลิงแก๊สไฮโดรเจนเข้าสู่ระบบในปริมาณที่มีสัดส่วนเชิงโมลในช่วง 0.35 ถึง 0.8 และเมื่อป้อนเชื้อเพลิงแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์เข้าสู่ระบบในปริมาณที่มีสัดส่วนเชิงโมลในช่วง 0.45 ถึง 0.64 โดยทั้งสองเชื้อเพลิงที่ทำการทดลองจะมีค่าใกล้เคียงกัลป์ผลการทดลองจริงเมื่อใช้ค่าความหนาแน่นกระแสที่อยู่ในช่วงต่ำกว่า 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร ต้องกำหนดค่าความหนาของชั้นที่เกิดปฏิกิริยาภายในขั้วแอโนดให้มีความหนาที่ 50 ไมโครเมตร



ภาพที่ 3.1 ลักษณะชุดเซลล์และเซลล์เดียวของขั้วแอโนดเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็ง [5]

$$-K_i u_i = \frac{\partial p}{\partial \xi_i} \tag{3-1}$$

$$\eta_c = \frac{RT}{4F}\ln\left(\frac{p^0_{O_2}}{p_{o_2}}\right) \tag{3-2}$$

เมื่อ K_i คือ ค่าการซึมผ่าน (permeability) ของสาร i , (m^2/(Pa.s))

u_i คือ ความเร็วที่ผิว (superficial velocity), (m/s)

p คือ ความดันระบบ, (Pa)

ξ_i คือ ตัวแปรกำหนดทิศทางของสาร i , (Pa)

$p^0_{O_2}$ คือ ความดันย่อยของแก๊สออกซิเจนในสารป้อน, (Pa)

p_{O_2} คือ ความดันย่อยของแก๊สออกซิเจนที่ผิวหน้าอิเล็กโทรไลต์, (Pa)

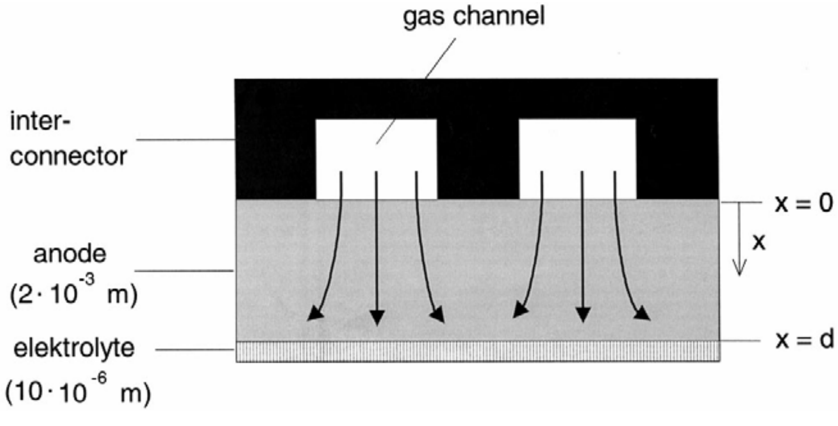
ในปี ค.ศ. 2000 งานวิจัยของ Lehnert, W. et al. [34] ทำการศึกษาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของพฤติกรรมการถ่ายเทมวลสารที่ขั้วแอโนดของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็ง โดยเปรียบเทียบขั้วแอดโนดที่มีอัตราส่วนความพรุนต่อความคดเคี้ยวของรูพรุน (ratio of porosity per tortuosity) แตกต่างกันสามชนิดคือ ดี-เอสสี่สิบสอง (DS42) ดีเอสสี่สิบสาม (DS43) และขั้วเซรามิคมาตรฐาน พวกเขาใช้สมการการแพร่ผ่านรูพรุนของสเตฟาน-แม็คเวลล์ (Stefan-Maxwell equation) ดังสมการที่ (2-20) วิเคราะห์การแพร่ผ่านรูพรุนของเชื้อเพลิงภายในขั้วแอโนดและใช้สมการการซึมผ่านรูพรุนตามกฎดาร์ซี่ (Darcy’s law) ดังสมการที่ (3-1) วิเคราะห์การการซึมผ่านรูพรุนของเชื้อเพลิงภายในขั้วแอโนด โดยรวมทั้งสองสมการด้วยสมการที่ (3-3) และสมการทั้งสองนำมาอธิบายถึงพฤติกรรมของแก๊สมีเทน (CH_4) ไฮโดรเจน (H_2) คาร์บอนมอนอกไซด์ (CO) และน้ำ (H_2O) อุณหภูมิ 850 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ ใช้ความหนาของขั้วแอโนด 2 มิลลิเมตร และกำหนดให้ค่าความหนาของชั้นที่เกิดปฏิกิริยาภายในขั้วแอโนดให้มีความหนาที่ 50 ไมโครเมตร เช่นเดียวกับ Yakabe, H. et al. [5] และงานวิจัยของ Lehnert, W. et al. [34] มีความสอดคล้องกัน ซึ่งพบว่าแบบจำลองสามารถให้ผลการเปลี่ยนแปลงของเชื้อเพลิงแก๊สมีเทนแปรผันตรงกับอัตราส่วนความพรุนต่อความคดเคี้ยวของรูพรุน และระบบที่เกิดปฏิกิริยาเปลี่ยนน้ำเป็นแก๊ส (Water gas shift reaction) ทำให้ค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าซึ่งเกิดจากการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นภายในขั้วแอโนดลดลงด้วย

$$N_i = N_i^d + N_i^p \tag{3-3}$$

เมื่อ N_i คือ ฟลักซ์เชิงโมลโดยรวม, (mol/(cm^2.s)

N_i^d คือ ฟลักซ์เชิงโมลของการซึมผ่าน, (mol/(cm^2.s)

N_i^p คือ ฟลักซ์เชิงโมลของการแพร่ผ่าน, (mol/(cm^2.s)



ภาพที่ 3.2 แนวคิดการซึมผ่านและการแพรผ่านภายในขั้วแอโนด [34]

จะเห็นได้ว่าทั้งงานวิจัยของ Yakabe, H. et al. [5] และงานวิจัยของ Lehnert, W. et al. [34] ได้จัดทำขึ้นในปีเดียวกันคือ ปี ค.ศ. 1999 และต่างถูกตีพิมพ์ขึ้นในปี ค.ศ. 2000 ทั้งคู่ ซึ่งทั้งสองงานวิจัยมีความคล้ายและให้ผลที่สอดคล้องกันในหลายๆ เรื่อง แต่งานวิจัยของ Lehnert, W. et al. [34] ได้ใช้สมการการแพร่ผ่านรูพรุนของสเตฟาน-แม็คเวลล์ (Stefan-Maxwell equation) ร่วมกับสมการการซึมผ่านพรุนตามกฎดาร์ซี่ (Darcy's law) ซึ่งทำให้เห็นถึงผลกระทบของรูพรุนที่มีผลต่อการแพร่ได้อย่างชัดเจน เนื่องจากสมการการซึมผ่านรูพรุนตามกฎดาร์ซี่นั้นสามารถอธิบายได้เพียงฟลักซ์ของการซึมผ่านซึ่งขึ้นกับสัมประสิทธิ์การซึมผ่าน (permeability coefficient) เท่านั้น ซึ่งเป็นลักษณะกลไกการไหลผ่านรูพรุนเพียงอย่างเดียว แต่เมื่อนำสมการการแพร่ผ่านรูพรุนของสเตฟาน-แม็คเวลล์มารวมอธิบายจะพบว่าผลที่ได้มีความใกล้เคียงกับความเป็นจริงมากขึ้น เป็นเช่นนี้เพราะสมการการแพร่ผ่านรูพรุนของสเตฟาน-แม็คเวลล์สามรถอธิบายโดยใช้หลักกลไกการแพร่การละลาย

ในปี ค.ศ. 2001 Chan, S. H. et al. [4] จัดทำแบบจำลองทางคณิตศาสตร์เพื่อศึกษาการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าภายในเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็ง โดยมีแนวคิดจากการศึกษาทฤษฎีการกำเนิดพลังงานไฟฟ้า พวกเขาเห็นว่าวัฏจักรกำเนิดพลังงานไฟฟ้าต่างๆ สามารถอธิบายถึงประสิทธิภาพของระบบได้ด้วยการคำนึงถึงค่าการสูญเสียทั้งวัฏจักร เช่น พลังไอน้ำ (vapour power) อธิบายด้วยวัฏจักรแรนคิน (Rankine cycle) และกังหันแก๊ส (gas turbine) อธิบายด้วยวัฏจักรเบรย์ตัน (Brayton) ด้วยเหตุข้างต้นนำพาพวกเขาไปสู่งานวิจัยที่มีความมุ่งหวังหาค่าการสูญเสียที่ครอบคลุมทั้งระบบเซลล์ ซึ่งประกอบด้วยการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากพลังงานกระตุ้น (activation overpotential) ค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความต้านทานภายใน (ohmic overpotential) และการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าซึ่งเกิดจากการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้น (concentration overpotential) โดยศึกษาเพื่อค้นหาว่าส่วนใดของเซลล์เชื้อเพลิงมีคุณสมบัติในการชี้วัดคุณสมบัติเชิงประสิทธิภาพของเซลล์เชื้อเพลิงเปรียบเทียบระหว่าง ขั้วแอโนด ขั้วแคโทด และอิเล็กโทรไลต์ โดยใช้เชื้อเพลิงเป็นไฮโดรเจนและไอน้ำในการป้อนเข้าสู่เซลล์เชื้อเพลิง และได้นำสมการบูทเลอร์-โวลเมอร์ (Butler-Volmer equation) แสดงดังสมการที่ (2-25) มาใช้ในการอธิบายค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากพลังงานกระตุ้น นำสมการตามกฎของโอม (Ohm's law) แสดงดังสมการที่ (2-26) ในการอธิบายค่าการความสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความต้านทานภายใน และนำสมการการแพร่คนุดเซน (Knudsen diffusion equation) ประยุกต์กับสมการของเนิร์นสท์ (Nernst equation) มาอธิบายค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าซึ่งเกิดจากการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นภายในขั้วอิเล็กโทรด แสดงดังสมกาที่ (2-27) และจากงานวิจัยของพวกเขาพบว่าสมการบูทเลอร์-โวลเมอร์นั้นสามารถแบ่งเป็นสองช่วงการทำงานเพื่อความแม่นยำคือ ช่วงที่มีค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากพลังงานกระตุ้นน้อยกว่า 0.1 V และมากกว่า 0.28 V โดยใช้สมการเส้นตรงของบูทเลอร์-โวลเมอร์ (Linear current-potential of Butler-Volmer equation) และสมการแท-เฟล (Tafel equation) แสดงดังสมกาที่ (3-4) และ (3-5) ตามลำดับ และยังพบว่าที่ระบบอุณหภูมิสูงและความหนาแน่นกระแสสูง ค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นภายในขั้วอิเล็กโทร์ดจะมีผลกระทบต่อเซลล์เชื้อเพลิงเป็นอย่างมากโดยเฉพาะบริเวณขั้วแอโนดมากกว่าส่วนอื่น ซึ่งแสดงดังกราฟภาพที่ 3.3

$$\eta_{atc} = \frac{RT}{n_e F i_0} i \tag{3-4}$$

$$\eta_{atc} = -\left(\frac{RT}{\vartheta n_e F}\right) \ln i_0 + \left(\frac{RT}{\vartheta n_e F}\right) \ln i \tag{3-5}$$

เมื่อ η_{act} คือ ค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากพลังงานกระตุ้น, (V)

i คือ ความหนาแน่นกระแส, (A/cm^2)

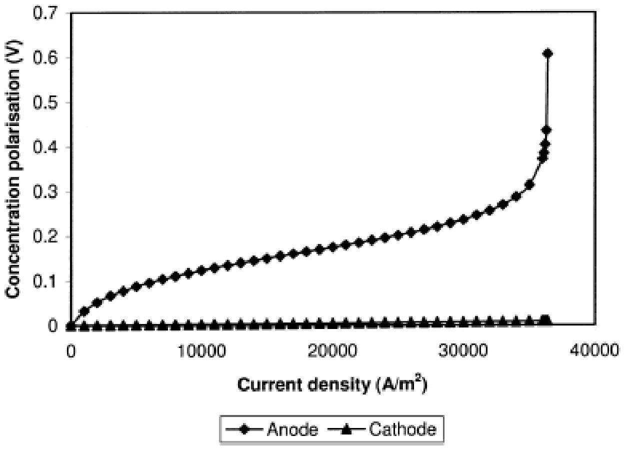
i_0 คือ ความหนาแน่นกระแสแลกเปลี่ยน, (A/cm^2)

R คือ ค่าคงที่แก๊ส, (8.3143 J/K g.mole)

n_e คือ จำนวนอิเล็กตรอนที่แลกเปลี่ยนในระบบต่อหนึ่งปฏิกิริยา

F คือ ค่าคงที่ฟาราเดย์, (96485.3 C/mole)

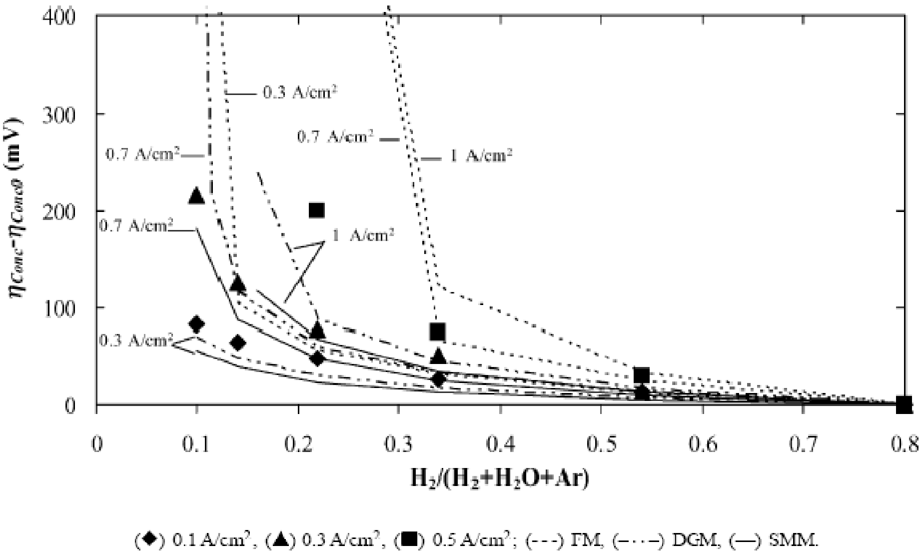
ϑ คือ สัมประสิทธิ์การถ่ายเทไอออน



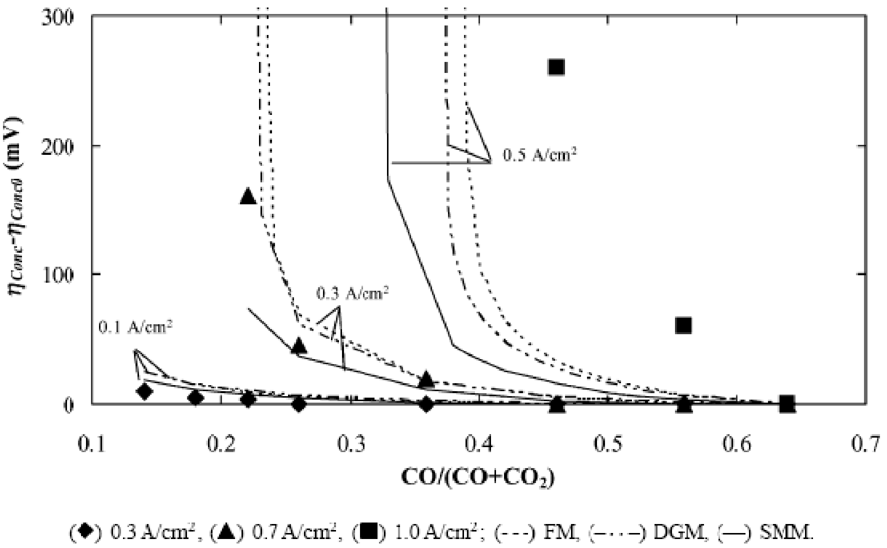
ภาพที่ 3.3 การคำนวณค่าการสูญเสียการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นภายในขั้วแอโนดและแคโทด [4]

ในปี ค.ศ. 2003 Suwanwarangkul, R. et al. [21] ได้ทำแบบจำลองทางคณิตศาสตร์เพื่อเปรียบเทียบความแม่นยำของสมการการแพร่ผ่านรูพรุนทั้งสามสมการต่อระบบแก๊สผสมของแก๊สไฮโดรเจน ไอน้ำ และแก๊สอาร์กอน (H_2-H_2O-Ar) และแก๊สผสมระหว่างแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์กับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ (CO-CO_2) คือ สมการการแพร่ของฟิค (Fick diffusion equation) สมการดัสทีแก๊ส (Dusty gas equation) และสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ (Stefan-Maxwell equation) แสดงดังสมการที่ (2-19) (2-20) และ (2-21) ตามลำดับ โดยใช้สภาวะตามงานวิจัยของ Yakabe, H. et al. [5] เพื่อทำการเปรียบเทียบค่าการการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าซึ่งเกิดจากการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นภายในขั้วแอโนดของผลการทดลองที่ได้จากแบบจำลองกับผลการทดลองจริง พบว่าสมการดัสทีแก๊ส (Dusty gas equation) สามารถอธิบายพฤติกรรมการเกิดค่าการการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าซึ่งเกิดจากการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นภายในขั้วแอโนดของระบบระบบแก๊สผสมของแก๊สไฮโดรเจน ไอน้ำ และแก๊สอาร์กอน (H_2-H_2O-Ar) และแก๊สผสมระหว่างแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์กับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ (CO-CO_2) ได้อย่างดีที่สภาวะอุณหภูมิสูง ค่าความหนาแน่นกระแสสูง ใช้ช่วงความเข้มข้นของเชื้อเพลิงที่ไม่สูง และขนาดรูพรุนของขั้วแอโนดที่เล็ก ส่วนสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์เหมาะแก่การใช้อธิบายค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นภายในขั้วแอโนดของระบบแก๊สผสมของแก๊สไฮโดรเจน ไอน้ำ และแก๊สอาร์กอน (H_2-H_2O-Ar) ซึ่งเหมาะกับระบบที่มีสัดส่วนความพรุนต่ำและขนาดรูพรุนที่เล็กมาก และสมการการแพร่ของฟิคเหมาะแก่การใช้

อธิบายค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นภายในขั้วแอโนดของระบบแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์กับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ (CO-CO_2) โดยเหมาะกับระบบที่มีสัดส่วนความพรุนตั้งแต่ระดับกลางถึงระดับที่สูง ผลการศึกษาที่ได้แสดงดังภาพที่ 3.4 และ 3.5 ซึ่งภาพที่ 3.4 การคำนวณค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นภายในขั้วแอโนด โดยใช้ระบบแก๊สผสมของแก๊สไฮโดรเจน ไอน้ำ และแก๊สอาร์กอน (H_2-H_2O-Ar) และภาพที่ 3.5 การคำนวณค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นภายในขั้วแอโนด โดยใช้ระบบแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์กับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ (CO-CO_2)

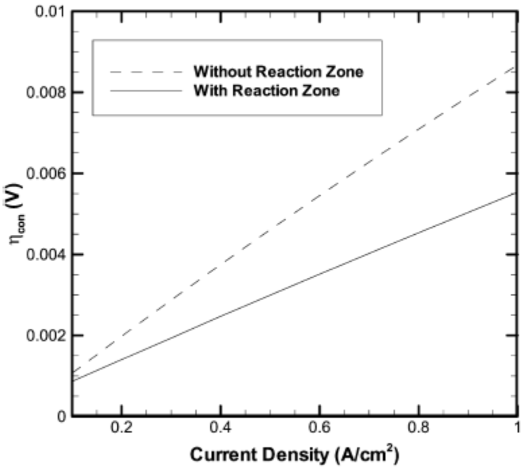


ภาพที่ 3.4 การคำนวณค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นภายในขั้วแอโนด โดยใช้ระบบแก๊สผสมของแก๊สไฮโดรเจน ไอน้ำ และแก๊สอาร์กอน (H_2-H_2O-Ar) [21]

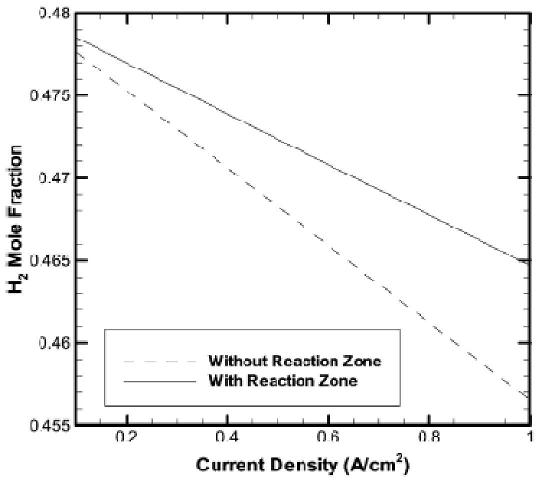


ภาพที่ 3.5 การคำนวณค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นภายในขั้วแอโนด โดยใช้ระบบแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์กับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ (CO-CO_2) [21]

ในปี ค.ศ. 2007 Hussain, M. M. et al. [35] ได้ทำแบบจำลองทางคณิตศาสตร์เพื่อศึกษาความสัมพันธ์ของความหนาของชั้นการเกิดปฏิกิริยาภายในขั้วแอโนด ความหนาแน่นกระแส และค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าซึ่งเกิดจากการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นภายในขั้วแอโนด โดยใช้สมการการแพร่ผ่านรูพรุนของสเตฟาน-แม็คเวลล์ (Stefan-Maxwell equation) ดังสมกาที่ (2-21) ซึ่งอธิบายพฤติกรรมของแก๊สไฮโดรเจน คาร์บอนมอนอกไซด์ คาร์บอนไดออกไซด์ และไอน้ำ ซึ่งเกิดจากการเปลี่ยนรูปของเอทานอล (C_2H_5OH) ป้อนเข้าทางฝั่งขั้วแอโนด ที่อุณหภูมิ 800 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ สิ่งที่พบคือ เมื่อคิดค่าความหนาของชั้นการเกิดปฏิกิริยาภายในขั้วแอโนดจะทำให้ค่าการการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นภายในขั้วแอโนดมีค่าต่ำกว่ากรณีไม่คิดค่าความหนาของชั้นการเกิดปฏิกิริยาภายในขั้วแอโนด แสดงดังภาพที่ 3.6 และพบว่าการเกิดปฏิกิริยาเปลี่ยนน้ำเป็นแก๊ส (water gas shift) มีผลให้ค่าการการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นภายในขั้วแอโนดลดลงสำหรับระบบที่มีค่าความหนาแน่นกระแสในช่วงที่สูงกว่าประมาณ 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร และทำให้ค่าการการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นภายในขั้วแอโนดสูงขึ้นสำหรับระบบที่มีค่าความหนาแน่นกระแสในช่วงที่ต่ำกว่าประมาณ 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร ซึ่งข้อสรุปข้อนี้สอดคล้องกับผลของงานวิจัยของ Lehnert, W. et al. [34] แสดงดังภาพที่ 3.7



ภาพที่ 3.6 ความสัมพันธ์ของค่าการการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าซึ่งเกิดจากการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นเมื่อเกิดการเปลี่ยนแปลงค่าความหนาแน่นกระแส ในระบบที่คำนวณและไม่คำนวณค่าความหนาของชั้นการเกิดปฏิกิริยาภายในขั้วแอโนด [35]



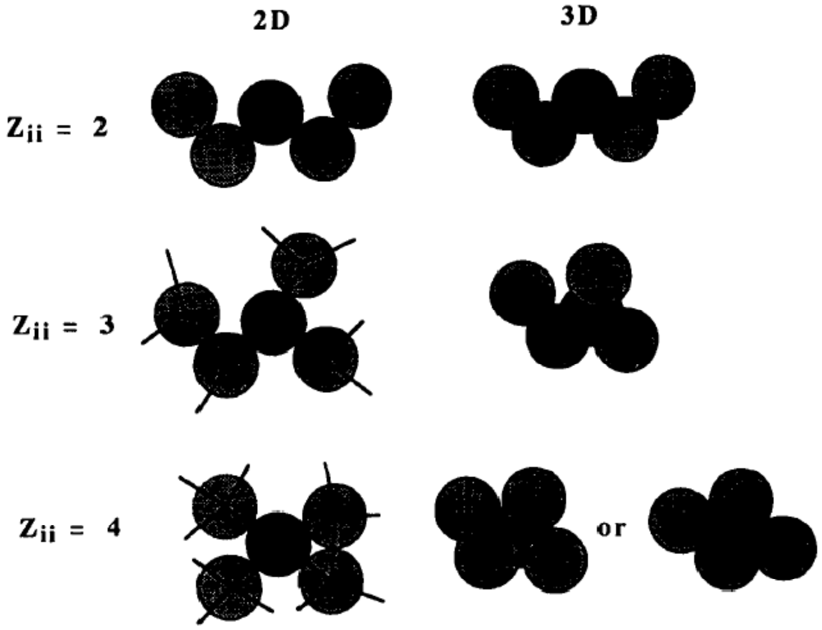
ภาพที่ 3.7 ความสัมพันธ์ของค่าการการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าซึ่งเกิดจากการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นเมื่อเกิดการเปลี่ยนแปลงค่าความหนาแน่นกระแส ในระบบที่คำนวณและไม่คำนวณค่าความหนาของชั้นการเกิดปฏิกิริยาภายในขั้วแอโนด [35]

3.2 ความสัมพันธ์ระหว่างระบบโครงสร้างภายในขั้วแอโนดกับความยาวของสภาวะของสามเฟสต่อหน่วยปริมาตร

เป็นความสัมพันธ์ที่ถูกพัฒนาขึ้นจากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์โดยแท้จริง ที่เริ่มต้นมากจากความพยายามอธิบายลักษณะโครงสร้างภายของเนื้อวัสดุ สำหรับขั้วแอโนดของของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็ง ได้มีการตั้งข้อสมมติฐานว่า อนุภาคที่ใช้ในการขึ้นรูปวัสดุเป็นทรงกลม และเกิดการเชื่อมต่อกันเป็นกลุ่มก้อน เมื่อการพัฒนาในด้านวัสดุศาสตร์ (Material science) ได้มีความก้าวหน้าจึงทำให้มนุษย์มีเครื่องมือวิเคราะห์ที่ดีขึ้น ซึ่งทำให้มองเห็นถึงการเชื่อมต่อของอนุภาคภายในเนื้อวัสดุได้ ในความก้าวหน้าส่วนนี้ได้มีงานวิจัยในช่วงที่ผ่านมามีความพยายามเชื่อมโยงความสัมพันธ์ของการขึ้นรูปวัสดุกับการพัฒนาประสิทธิภาพ ซึ่งมีงานวิจัยหลายงานชิ้นที่ตีพิมพ์ในช่วงปี ค.ศ. 2003 ถึงปัจจุบันยืนยันถึงการวัดประสิทธิภาพด้วยความยาวของสภาวะของสามเฟสต่อหน่วยปริมาตร โดยงานวิจัยเหล่านั้นได้ถึงแสดงภายในหัวข้อนี้

ในปี ค.ศ. 1991 Bouvard, D. et al. [33] ศึกษาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการขึ้นรูปวัสดุจากอนุภาคทรงกลม โดยใช้หลักเกณฑ์เพอร์โคเลชัน (Percolation threshold) ในการพิสูจน์ถึงคุณลักษณะของวัสดุ ซึ่งในตอนนั้นการนำความรู้เรื่องการเรียงตัวของอนุภาคในเนื้อรูปวัสดุเป็นวิธีที่ช่วยในการคำนวณค่าโคออร์ดิเนชัน (Coordination) การสตุหรือการซินเตอริ่ง (Sintering) และค่าความสามารถในการซึมผ่าน (Permeability) ภายในระบบที่ขึ้นรูปด้วยอนุภาคที่เป็นผงโลหะ ซึ่งระบบที่พวกเขาได้ทำการศึกษานั้นเป็นระบบที่อธิบายถึงการเชื่อมโยงของรอยต่ออนุภาคทรงกลมตั้งแต่จุดสัมผัส 2 จุดขึ้นไป ของผงวัสดุที่แตกต่างกันสองชนิด แต่ละชนิดมีขนาดอนุภาคเท่ากัน แสดงดังภาพที่ 3.8 โดยงานวิจัยของพวกเขาในตอนนั้นมีความมุ่งหวังประมวลผลการสูญเสียรูปของระบบระบบเนื้อผสม (deformation processing of composite systems) โดยใช้หลักเกณฑ์เพอร์โคเลชันร่วมกับการคำนวณค่าโคออร์ดิเนชัน สำหรับระบบที่มีการบรรจุอนุภาคแบบสุ่ม (random packing) ของ

อนุภาคทรงกลมที่มีขนาดอนุภาคในแต่ละชนิดเท่ากัน พวกเขาเลือกใช้ค่าเฉลี่ยเลขโคออร์ดิเนชันหรือจำนวนหน้าสัมผัสเฉลี่ยต่อหนึ่งอนุภาค (the mean number of contacts per particle) สำหรับระบบที่เป็นขนาดอนุภาคทรงกลมเดียว (the monosized spheres pack) มีค่าประมาณ 0.57 ถึง 0.64 ซึ่งผลตรงนี้ขึ้นอยู่กับความหนาแน่นในการจัดเรียงตัวของอนุภาค



ภาพที่ 3.8 ความสัมพันธ์ของค่าโคออร์ดิเนชันกับหลักเกณฑ์การจับกลุ่มเพอร์โคเลชัน แสดงให้เห็นถึงลักษณะการสัมผัสของอนุภาคทรงกลม [33]

ในปี ค.ศ. 2005 Deng, X et al. [9] ได้ทำการศึกษาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ โดยใช้หลักการทางเรขาคณิต เพื่อทำนายผลกระทบของขนาดอนุภาคของแข็ง (grain size) ขนาดรูพรุน (pore size) และสัดส่วนความพรุน (porosity) ของขั้วแอโนดภายในเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งที่มีต่อสภาวะขอบสามเฟส (triple-phase-boundary length) พวกเขาได้มุ่งหวังค้นหาปัจจัยที่ส่งผลให้เกิดเพิ่มขึ้นของบริเวณที่เกิดปฏิกิริยาภายในขั้วแอโนด เพื่อนำไปสู่การขึ้นรูปขั้วแอโนดที่ส่งผลให้มีประสิทธิภาพสูงสุด ระบบขั้วแอโนดที่พวกเขาพิจารณาประกอบไปด้วย อนุภาคเฟสไอออนิก (ionic grain phase) อนุภาคเฟสอิเล็กทรอนิกส์ (electronic grain phase) เฟสแก๊สหรือเฟสรูพรุน (pore phase) ซึ่งในที่นี้พวกเขาได้ตั้งข้อสมมติฐานว่าอนุภาคเฟสไอออนิกมีขนาดเท่ากับอนุภาคเฟสอิเล็กทรอนิกส์และอนุภาคทั้งสองเฟสเกิดการกระจายในปริมาตรที่ทำการขึ้นรูปอย่างสมบูรณ์แบบ พวกเขาได้นำแบบจำลองลักษณะการเชื่อมโยงของการขึ้นรูปขั้วแอโนดด้วยอนุภาคทรงกลมของ Maggio, G. et al. [36] มาอธิบายถึงการเกิดปริมาตรซ้อนทับที่เกิดขึ้นระหว่างอนุภาคในการขึ้นรูปขั้วแอโนด และใช้สมการทางเรขาคณิตสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่สามารถคำนวณความยาวของสภาวะขอบสามเฟสสำหรับระบบขั้วแอโนดต่างๆ ซึ่งผลที่ได้พวกเขาพบว่าความยาวของสภาวะขอบสามเฟสจะแปรผกผันกับขนาดอนุภาคของแข็งทั้งสองเฟส และสามารถเพิ่มประสิทธิภาพของขั้วแอโนดต่อการเกิดปฏิกิริยาการปรับขนาดของรูพรุนและสัดส่วนความพรุนพรุนให้มีค่าสภาวะขอบสามเพิ่มที่สูงที่สุด แสดงดังภาพที่ 3.9 นอกจากนี้พวกเขายังพบ

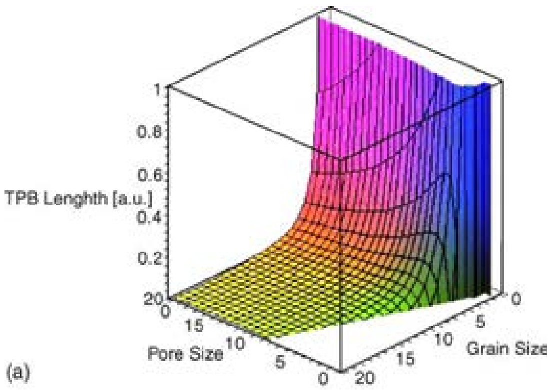
สมการที่ทำให้ได้ขนาดของรูพรุนที่เหมาะสม ซึ่งเกิดจากความสัมพันธ์ระหว่างขนาดของอนุภาคของแข็งกับสัดส่วนความพรุน แสดงดังสมกาที่ (3-6) [9] และสอดคล้องกับผลการทดลองของ Maggio, G. et al. [36]

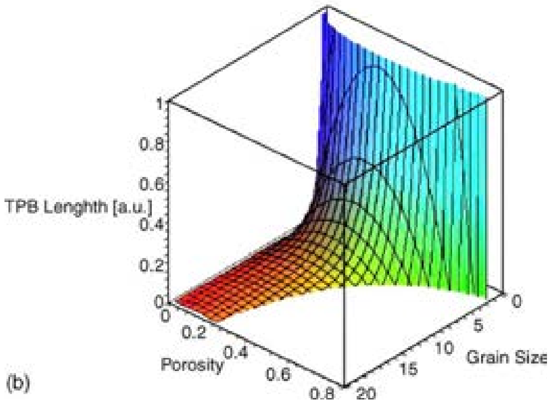
$$r_{pore}^{opt} = (2r)\frac{\varepsilon}{(1-\varepsilon)} \tag{3-6}$$

เมื่อ r_p^{opt} คือ ขนาดของรูพรุนที่เหมาะสม, (m)

r คือ รัศมีของอนุภาคของแข็ง, (m)

ε คือ สัดส่วนความพรุน

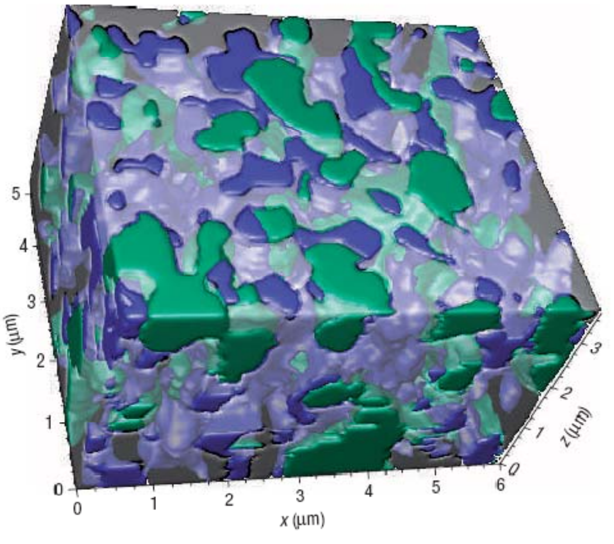




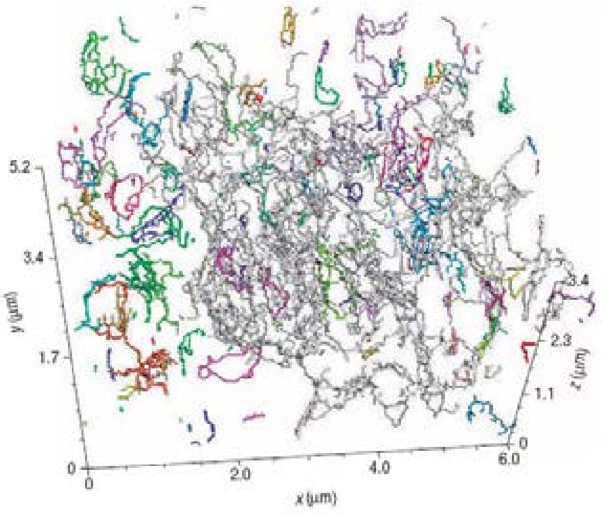
ภาพที่ 3.9 กราฟสามมิติของความสัมพันธ์ระหว่างความยาวสภาวะขอบสามเฟสต่อขนาดอนุภาคของแข็งและสัดส่วนความพรุน เมื่อกำหนดให้สัดส่วนความพรุนที่ร้อยละ 30 (a) และขนาดรูพรุนที่ 5 ไมโครเมตร (b) [9]

ปี ค.ศ. 2006 Wilson, J. R. et al. [7] ได้นำเสนองานวิจัยเกี่ยวข้องกับการวิเคราะห์โครงสร้างภายในของขั้วแอโนดของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งในรูปแบบสามมิติ (3D) งานวิจัยของพวกเขามีพื้นฐานจากความพยายามที่จะศึกษาความสัมพันธ์ของระบบโครงสร้างภายในที่มีความสอดคล้องกับสภาวะขอบสามเฟสอันส่งผลไปถึงประสิทธิภาพในเชิงปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมี (electrochemical performance) โดยงานวิจัยก่อนหน้านั้นได้มีการตีพิมพ์การวิเคราะห์เช่นนี้ในรูปแบบสองมิติ (2D) ที่วิเคราะห์ด้วยกล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอนแบบ

สแกนนิง (Scaning eletron microscopy) แต่การวิเคราะห์ในรูปแบบสองมิตินั้นไม่สามรถแยกความแตกต่างระหว่างเฟสไอออนิก (ionic phase) เฟสอิเล็กทรอนิกส์ (electronic phase) เฟสแก๊สหรือเฟสรูพรุน (pore phase) ร่วมไปถึงไม่สามารถบอกลักษณะเส้นทางการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนที่จะส่งผลให้ทราบถึงสภาวะขอบสามเฟสโดยแท้จริงได้ แต่งานวิจัยของพวกเขาได้เลือกใช้กล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอนแบบส่องกราดด้วยไอออน (Ion-beam scanning electron microscopy) ซึ่งสามารถวิเคราะห์ได้ในระดับนาโนเมตรและแสดงผลในรูปแบบสามมิติ ซึ่งเป็นสิ่งที่ในยุคก่อนหน้านั้นไม่สามารถทำได้ เนื่องจากความสามารถของเทคโนโลยีเครื่องวิเคราะห์ไม่เพียงพอ โดยงานวิจัยของพวกศึกษาขั้วแอโนดที่เป็นวัสดุเนื้อผสมของโลหะนิกเกิลผสมกับอิเทียม-สเตบิไลซ์เซอร์โคเนีย (Ni-YSZ) ซึ่งขึ้นรูปในลักษณะรองรับขั้วแอโนด (anode support) ขึ้นรูปโดยประกอบด้วยอัตราส่วนร้อยละโดยปริมาตรของโลหะนิกเกิล อิเทียม-สเตบิไลซ์เซอร์โคเนีย และช่องว่างเป็น 25.9, 54.6 และ 19.5 ตามลำดับ ผลที่ได้พวกเขาพบว่าอนุภาคภายในขั้วแอโนดนั้นมีการเรียงตัวเชื่อมต่อกันคล้ายคลึงกับอนุภาคทรงกลมเชื่อมโยงด้วยการซ้อนทับของผิวหน้า และเมื่อมองการเคลื่อนที่ของไอออนและอิเล็กตรอนภายในขั้วแอโนดจะพบว่าความเชื่อมโยงของระบบจะแบ่งออกเป็นสามเฟสที่ผสมกันนั้นคือ เฟสไอออนิก (ionic phase) เฟสอิเล็กทรอนิกส์ (electronic phase) เฟสแก๊สหรือเฟสรูพรุน (pore phase) ซึ่งการเชื่อมต่อระหว่างเฟสทั้งสามจะเกิดบริเวณที่มีปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมีเกิดขึ้น แสดงดังภาพที่ 3.10 และ 3.11 ซึ่งนั้นหมายความถึงประสิทธิภาพของขั้วแอโนดจะมากหรือน้อยขึ้นอยู่กับบริเวณที่เกิดปฏิกิริยาทางไฟฟ้าเคมีอย่างแท้จริง ซึ่งงานวิจัยของพวกเขาสามารถวัดค่าความยาวของสภาวะขอบสามเฟสต่อปริมาตรได้เท่ากับ 4.28×10^6 เมตรต่อตารางเซนติเมตร



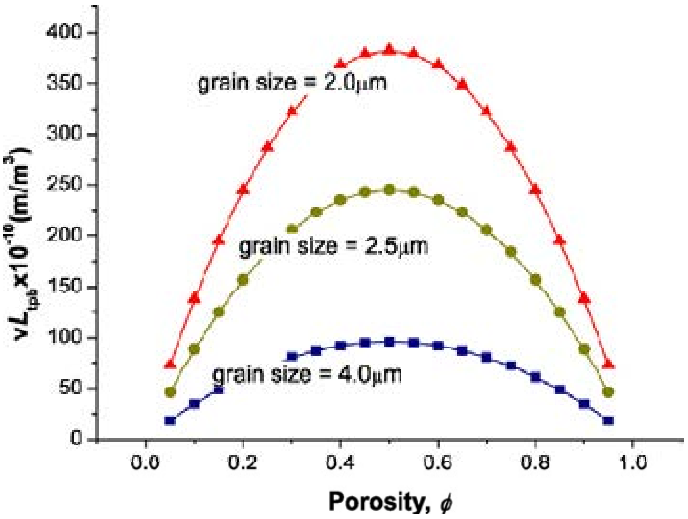
ภาพที่ 3.10 การวิเคราะห์เฟสในรูปแบบสามมิติแสดงโลหะนิกเกิล (สีเขียว) เทียม-สเตบิไลซ์เซอร์โคเนีย (ทึบ/เทา) ช่องว่าง (สีฟ้า) [7]



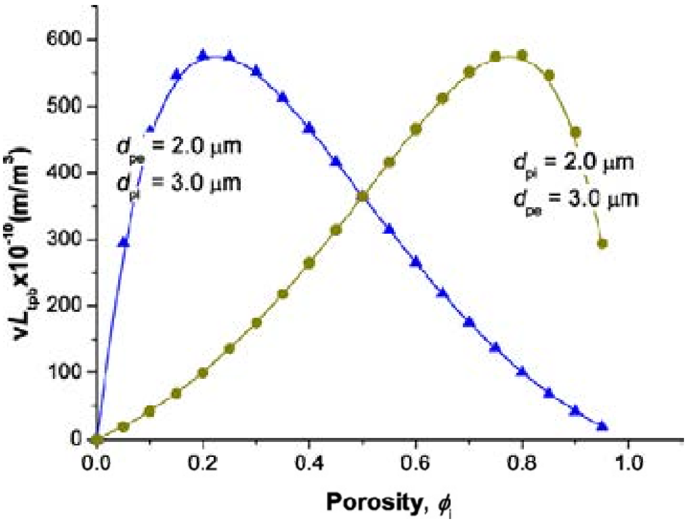
ภาพที่ 3.11 การวิเคราะห์เฟสในรูปแบบสามมิติแสดงถึงรอยต่อของแต่ละเฟสซึ่งส่งผลให้เกิดความยาวของสภาวะขอบสามเฟส [7]

ผลงานวิจัยของ Wilson, J. R. et al. [7] ในปี ค.ศ. 2006 ที่ได้ทำการทดลองวัดค่าความยาวของสภาวะขอบสามเฟสของขั้วแอโนดภายในเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งนั้น ทำให้เห็นได้ว่าข้อสมมติฐานของ Deng, X et al. [9] ในปี ค.ศ. 2005 มีความใกล้เคียงกับความจริงในหลายข้อคือ ข้อสมมติฐานที่ว่าระบบขั้วแอโนดที่พวกเขาประกอบไปด้วย อนุภาคเฟสไอออนิก (ionic grain phase) อนุภาคเฟสอิเล็กทรอนิกส์ (electronic grain phase) เฟสแก๊สหรือเฟสรูพรุน (pore phase) ที่มีลักษณะของอนุภาคของแต่ละเฟสเป็นทรงกลม และมีการซ้อนทับกันทำให้เกิดสภาวะขอบสามเฟสขึ้น

ปี ค.ศ. 2008 Janardhanan, V. M. et al. [8] ได้ศึกษาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับทำนายค่าความยาวของสภาวะขอบสามเฟสต่อปริมาตรของขั้วแอโนดของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็ง โดยใช้สมการทางเรขาคณิตและความสัมพันธ์ของโคออร์ดิเนชัน (Coordination) ของอนุภาคเป็นหลัก ซึ่งงานวิจัยของพวกเขานั้นต่อยอดจากงานวิจัยของ Wilson, J. R. et al. [7] ที่สามารถวัดค่าความยาวของสภาวะขอบสามเฟสต่อปริมาตรได้จริง และมีเฟสไอออนิกกับเฟสอิเล็กทรอนิกส์จริง ซึ่งงานวิจัยของเขาสามารถแสดงการหาค่าความยาวของสภาวะขอบสามเฟสต่อปริมาตรเป็นสมการคณิตศาสตร์ ดังสมการที่ (2-40) และ (2-41) ซึ่งงานวิจัยของพวกเขาได้พัฒนาการทำนายสำหรับระบบที่มีขนาดของอนุภาคเฟสไอออนิกกับอนุภาคเฟสอิเล็กทรอนิกส์ทั้งเท่ากันและไม่เท่ากัน (uniform particle size distribution and non-uniform particle size distribution) พวกเขาเลือกพิจารณาขนาดของอนุภาคภายในขั้วแอโนดตั้งแต่ 2.0 ถึง 4.0 ไมโครเมตร ซึ่งผลที่ได้พวกเขาพบว่าสำหรับระบบที่มีขนาดของอนุภาคเฟสไอออนิกกับอนุภาคเฟสอิเล็กทรอนิกส์เท่ากันและสัดส่วนโดยปริมาตรทั้งสองเฟสเท่ากัน จะมีค่าความยาวของสภาวะขอบสามเฟสต่อปริมาตรสูงที่สุดที่ค่าสัดส่วนความพรุนอยู่ที่ร้อยละ 50 แสดงดังภาพที่ 3.11 และสำหรับระบบที่มีขนาดของอนุภาคเฟสไอออนิกกับอนุภาคเฟสอิเล็กทรอนิกส์ไม่เท่ากันและสัดส่วนโดยปริมาตรทั้งสองเฟสไม่เท่ากัน จะมีค่าความยาวของสภาวะขอบสามเฟสต่อปริมาตรสูงที่สุดขึ้นกับขนาดของอนุภาค ค่าสัดส่วนความพรุน และสัดส่วนโดยปริมาตรของทั้งสองเฟส แสดงดังภาพที่ 3.12



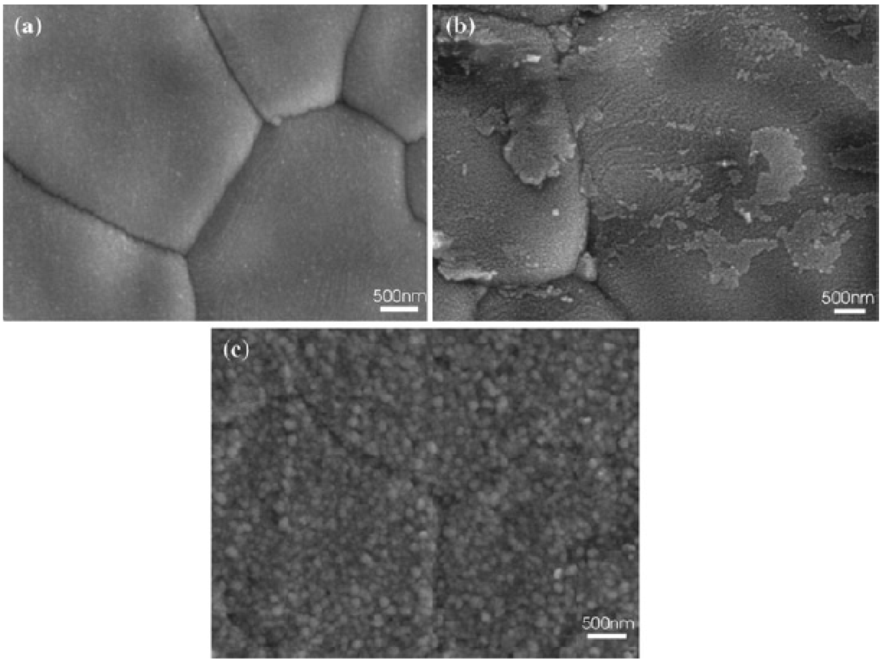
ภาพที่ 3.12 ความสัมพันธ์ระหว่างความยาวของสภาวะขอบสามเฟสต่อปริมาตรและสัดส่วนความพรุน สำหรับระบบที่มีขนาดของอนุภาคเฟสไอออนิกกับอนุภาคเฟสอิเล็กทรอนิกส์เท่ากันและสัดส่วนโดยปริมาตรทั้งสองเฟสเท่ากัน [8]



ภาพที่ 3.13 ความสัมพันธ์ระหว่างความยาวของสภาวะขอบสามเฟสต่อปริมาตรและสัดส่วนความพรุน สำหรับระบบที่มีขนาดของอนุภาคเฟสไอออนิกกับอนุภาคเฟสอิเล็กทรอนิกส์ไม่เท่ากันและสัดส่วนโดยปริมาตรทั้งสองเฟสไม่เท่ากัน [8]

จากงานวิจัยของ Papaioannou, E. I. et al. [37] ในปี ค.ศ. 2010 ศึกษาถึงการเตรียมตัวเร่งปฏิกิริยาเคมีที่ใช้ทำเป็นขั้วอิเล็กโทรด โดยศึกษาโลหะแพลทินัม (Platinum, Pt) กับโลหะไทเทเนียมไดออกไซด์ (Titanium Dioxide, TiO_2) บนตัวรองรับที่เป็นอิเทียม-สเตบิไลซ์เซอร์โคเนีย (Yttria-stabilized zirconia, YSZ) เปรียบเทียบผลการทดลองที่ได้กับขั้วอิเล็กโทรดที่ใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาเคมีโลหะแพลทินัมบนตัวรองรับอิเล็กโทรไลต์อิเทียม-สเต-

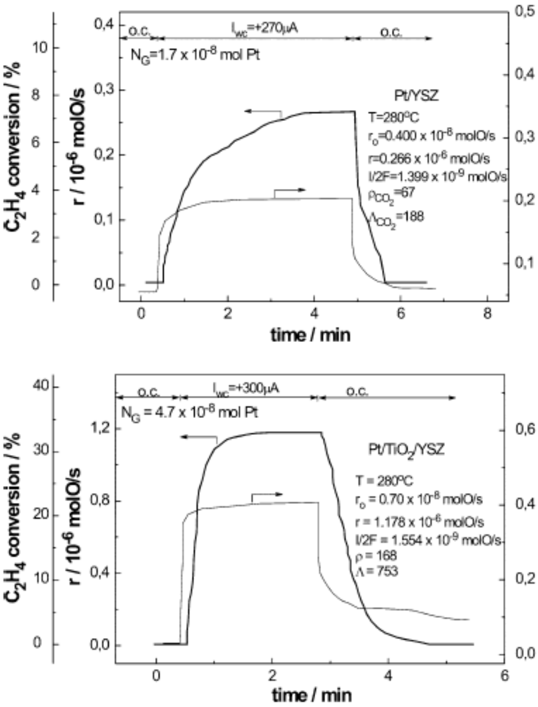
บิไลซ์เซอร์โคเนีย และใช้เชื้อเพลิงแก๊สเอทิลีน (Ethylene, C_2H_4) ในการทดลอง โดยป้อนเข้าสู่ระบบที่ความดันย่อย 0.19 กิโลปาสกาล และป้อนแก๊สออกซิเจนที่ความดันย่อย 8.2 กิโลปาสกาล อุณหภูมิ 280 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ ผลการทดลองแสดงให้เห็นว่าขั้วอิเล็กโทรดที่เพิ่มโลหะไทเทเนียมออกไซด์เข้าไปนั้นทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีของเชื้อเพลิง ร้อยละของการเปลี่ยนแปลงเชื้อเพลิง และศักย์ไฟฟ้าคร่อมเซลล์สูงกว่าขั้วอิเล็กโทรดที่ไม่ได้ใส่โลหะไทเทเนียมไดออกไซด์ ที่เป็นเช่นนี้พวกเขาให้เหตุผลหลักคือ การเพิ่มไทเทเนียมไดออกไซด์ทำให้เกิดการกระจายตัวของโลหะแพลทินัมที่ดีขึ้น อันส่งผลให้ความยาวของสภาวะขอบสามเฟสนั้นสูงขึ้นตาม ด้วยเหตุผลนี้จึงทำให้ผลการทดลองที่ได้เป็นเช่นนี้ ซึ่งแสดงดังภาพที่ 3.15



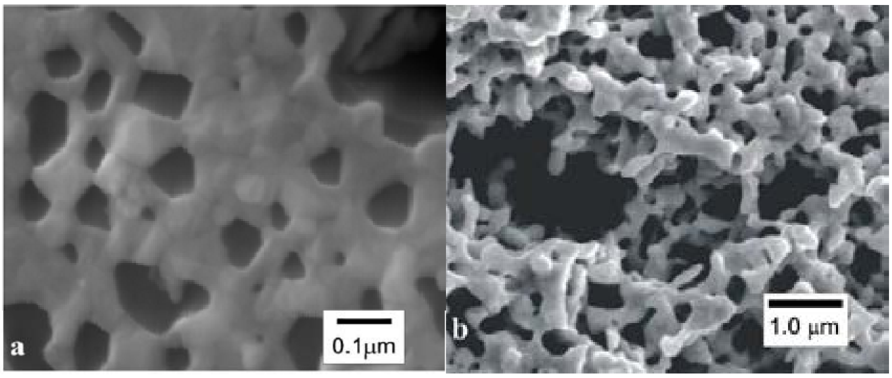
ภาพที่ 3.14 ภาพมุมบนที่ได้จากกล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอนชนิดส่องกราด (Scanning Electron Microscope) โดย (a) คือ อิเล็กโทรไลต์อิเทียม-สเตบิไลซ์เซอร์โคเนีย, (b) คือ โลหะไทเทเนียมไดออกไซด์ที่เพิ่มจากภาพ (a), (c) คือ โลหะแพลทินัมที่เพิ่มจากภาพ (b) ที่อัตรากำลังขยาย 5000 หรือระดับ 500 ไมโครเมตร [37]

ในปี ค.ศ. 2010 งานวิจัยของ Lizarraga, L. et al. [38] ศึกษาการวิธีการเตรียมตัวเร่งปฏิกิริยาเคมีโลหะแพลทินัมที่ใช้งานทางไฟฟ้าเคมี โดยเขาได้เลือกใช้โลหะแพลทินัมในขนาดระดับนาโนเมตรบนตัวรองรับอิเทียม-สเตบิไลซ์เซอร์โคเนียคู่กับวิธีการเตรียมสองวิธีคือ สปัตเตอริง (Sputtering) และเพสท์ (Paste) โดยสภาวะที่ทำการทดสอบตัวเร่งปฏิกิริยาเคมีอยู่ที่ อุณหภูมิ 150 ถึง 550 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ ป้อนเชื้อเพลิงแก๊สโพรเพน (Propane, C_3H_8) ต่อแก๊สออกซิเจนเป็นร้อยละ 1200 ในล้านส่วนต่อ 1.2 (1200 ppm/1.2%) ผลที่ได้พบว่าวิธีสปัตเตอริงทำให้ความยาวของสภาวะขอบสามเฟสที่เห็นได้ด้วยการส่องกล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอนชนิดส่องกราดมีค่าสูงกว่าวิธีเพสท์ แสดงดังภาพที่ 3.16 และอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีที่ได้จากวิธีสปัตเตอริงมีค่าสูงกว่าวิธีเพสท์เมื่ออุณหภูมิสูงขึ้น แสดงดังภาพที่ 3.17 พวกเขให้เหตุผลที่เป็นเช่นนี้เพราะ

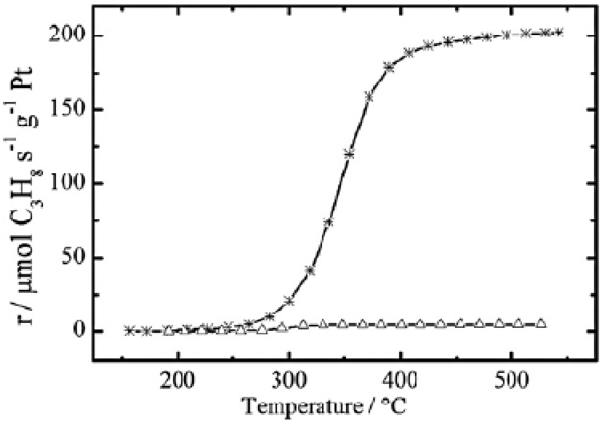
ลักษณะการกระจายตัวของโลหะแพลทินัมมีความสำคัญต่อบริเวณที่เกิดปฏิกิริยา ซึ่งวิธีสปัตเตอริง ช่วยปรับปรุงคุณสมบัติของตัวเร่งให้มีประสิทธิภาพที่สูงขึ้น และผลการทดลองของงานวิจัยนี้ก็แสดงให้เห็นว่าความยาวของสภาวะขอบสามเฟสมีผลต่อการปรับปรุงประสิทธิภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาเคมีที่ใช้ในทางไฟฟ้าเคมีอย่างแท้จริง ซึ่งให้ผลที่สอดคล้องกับงานวิจัยของ Papaioannou, E. I. et al. [37]



ภาพที่ 3.15 อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีของเชื้อเพลิงแก๊สเอทิลีน ร้อยละของการเปลี่ยนแปลงเชื้อเพลิง และศักย์ไฟฟ้าคร่อมเซลล์ ที่อุณหภูมิ 280 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ ภาพบนเป็นตัวเร่งปฏิกิริยาเคมีที่ไม่ได้เติมโลหะไทเทเนียมไดออกไซด์ และภาพล่างเป็นภาพที่มีการเติมโลหะไทเทเนียมไดออกไซด์ [37]



ภาพที่ 3.16 ภาพมุมบนที่ได้จากกล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอนชนิดส่องกราดของโลหะแพลทินัมบนตัวรองรับอิเทียม-สเตบิไลซ์เซอร์โคเนีย โดยภาพ a คือ ตัวเร่งปฏิกิริยาเคมีที่ได้จากวิธีสปัตเตอริง และภาพ b คือ ตัวเร่งปฏิกิริยาเคมีที่ได้จากวิธีเพสท์ [38]



ภาพที่ 3.17 อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีของตัวเร่งปฏิกิริยาเคมีโลหะแพลทินัมบนตัวรองรับอิเทียม-สเตบิไลซ์เซอร์โคเนีย โดย (∗) แสดงถึงวิธีสปัตเตอริง และ (△) แสดงถึงวิธีเพสท์ [38]

ด้วยองค์ความรู้ต่างๆ เหล่านี้ แสดงให้เห็นได้ว่าความพยายามที่จะประเมินค่าประสิทธิภาพของขั้วแอโนดสำหรับเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งนั้นได้เข้าใกล้ความเป็นจริงเป็นอย่างยิ่ง และส่งผลให้งานวิจัยนี้มีความมุ่งหวังจะนำความรู้ข้างต้นที่ถูกกล่าวมาตั้งแต่บทที่ 2 จนถึงบทนี้ที่เป็นการทบทวนวรรณกรรมมาใช้ให้เกิดประโยชน์ เพื่อใช้สำหรับการทำนายถึงความเหมาะสมของลักษณะโครงสร้างภายในขั้วแอโนดที่ให้ผลในเชิงประสิทธิภาพสูงสุด ซึ่งแสดงถึงความเป็นไปได้ในการค้นหาวัสดุขั้วแอโนดที่มีคุณสมบัติทางกายภายได้ตามผลการทำนายต่อไปในอนาคตต่อไป

บทที่ 4

การพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์

บทนี้กล่าวถึงแนวคิด ข้อสมมติฐาน แผนผังการไหล (Flow chart diagrams) และโปรแกรมสำหรับการพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ โดยแบ่งออกเป็นสี่ส่วนด้วยกันคือ ระบบถ่ายเทมวลสารเพื่อศึกษาความสัมพันธ์ระหว่างการถ่ายเทมวลสารภายในขั้วแอโนดกับค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้น ระบบโครงสร้างภายในขั้วแอโนดเพื่อศึกษาความสัมพันธ์ระหว่างระบบโครงสร้างภายในขั้วแอโนดกับความยาวของสภาวะของสามเฟสต่อหน่วยปริมาตร โปรแกรมสำหรับการพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ และข้อมูลตัวแปรควบคุมและค่าสภาวะของระบบ

4.1 ระบบถ่ายเทมวลสาร

ระบบถ่ายเทมวลสารมีความสัมพันธ์ต่อประสิทธ์ภาพของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งเป็นอย่างยิ่ง ซึ่งจากเนื้อหาในบทที่ 3 แสดงให้เห็นว่า ประสิทธิภาพที่ดีเกิดจากการสูญเสียที่น้อย ซึ่งการถ่ายเทมวลสารของเชื้อเพลิงและสารเคมีที่เกิดขึ้นภายในขั้วแอโนดนั้นมีความสำคัญเป็นอย่างยิ่งต่อการเกิดค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้น (concentration overpotential) ซึ่งในหัวข้อนี้จะแสดงถึงกระบวนการวิเคราะห์และค้นหาปัจจัยที่ทำให้เกิดค่าการสูญเสียจากความเข้มข้นที่เกี่ยวเนื่องจากระบบการถ่ายเทมวลสารภายในขั้วแอโนด โดยตัวแปรที่มีผลต่อความสัมพันธ์ดังกล่าวนั้นมีอยู่หลายตัว เช่น น้ำหนักโมเลกุลของสารเคมีในระบบ ขนาดรูพรุนและความคดเคี้ยวของรูพรุนภายในขั้วแอโนด ความเข้มข้นของสารเคมีในระบบ ความดัน และอุณหภูมิของระบบ เป็นต้น

ในหัวข้อนี้จะแสดงแนวคิดการหาความสัมพันธ์ระหว่างการถ่ายเทมวลสารในรูปแบบปกติที่ไม่เกิดการลดลงของความเข้มข้นเชื้อเพลิงภายในสายป้อนของขั้วแอโนดภายในเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งที่มีลักษณะเซลล์เป็นชนิดแผ่นแบน (Planar cell) ความยาว 20 มิลลิเมตร ซึ่งเป็นความยาวปกติของหนึ่งเซลล์ย่อย (single cell) สำหรับเซลล์เชื้อเพลิงชนิดนี้ [4, 5, 21, 34] เทียบกับผลกระทบจากการถ่ายเทมวลสารที่เกิดการลดลงของเชื้อเพลิงภายในสายป้อนของขั้วแอโนดภายในเซลล์เซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งที่ระบบเดียวกัน

4.1.1 การถ่ายเทมวลสารที่ไม่เกิดการเปลี่ยนของความเข้มข้นภายในสายป้อนของขั้วแอโนด

การถ่ายเทมวลสารที่ไม่เกิดการเปลี่ยนของความเข้มข้นภายในสายป้อนของขั้วแอโนด เป็นการคำนึงถึงลักษณะการแพร่ของเชื้อเพลิงภายในขั้วแอโนดที่อธิบายด้วยสมการการแพร่ของฟิค (Fick diffusion equation) และสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ (Stefan-Maxwell equation) และใช้สมการของเนิร์นสท์ (Nernst equation) อธิบายถึงค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นภายในขั้วแอโนด

4.1.1.1 ข้อสมมติฐานของระบบการถ่ายเทมวลสารที่ไม่เกิดการเปลี่ยนของความเข้มข้นภายในสายป้อนของขั้วแอโนด

ข้อสมมติฐานงานวิจัยสำหรับหัวข้อนี้มีความสอดคล้องกับข้อสมมติฐานงานวิจัยของ Yakabe, H. et al. [5] และ Suwanwarangkul, R. et al. [21] โดยมีข้อสมมติฐาน ดังนี้

- ระบบที่ศึกษาคือ การถ่ายเทมวลสารที่เกิดขึ้นภายในขั้วแอโนดจนถึงผิวหน้าของชั้นปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมีเท่านั้น เชื้อเพลิงภายในช่องสายป้อนมีทิศทางการเคลื่อนที่มวลสารในแนวแกน y และเชื้อเพลิงเกิดการแพร่ผ่านในแนวแกน z ภายในขั้วแอโนด เป็นดังภาพที่ 4.1
- เชื้อเพลิงที่ศึกษาคือ แก๊สไฮโดรเจน (H_2) และแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ (CO) และระบบที่สนใจศึกษาเป็นไปตามสมการ (ง) และ (จ) โดยพิจารณาระบบแก๊สผสมดังนี้
    1. ระบบแก๊สไฮโดรเจนกับไอน้ำ (H_2-H_2O)
    2. ระบบแก๊สไฮโดรเจน ไอน้ำ และแก๊สอาร์กอน (H_2-H_2O-Ar)
    3. ระบบแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์กับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ (CO-CO_2)

$$H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow H_2O \qquad (ง)$$

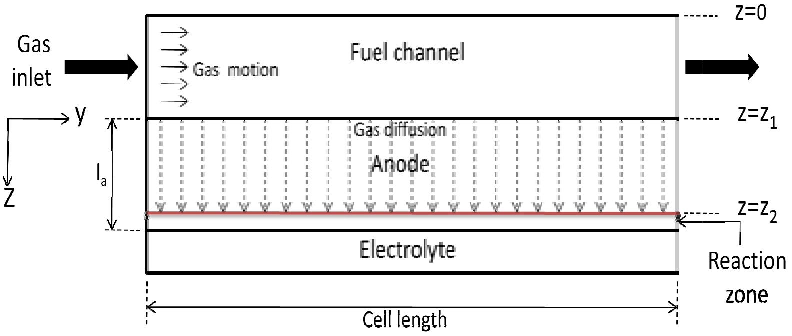
$$CO + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO_2 \qquad (จ)$$

- ความหนาแน่นกระแส (Current density) ของระบบมีค่าคงที่ เนื่องจากถือว่าพิจารณาระบบที่มีขนาดสั้นจนถือได้ว่าเชื้อเพลิงในสายป้อนมีการเปลี่ยนแปลงเพียงเล็กน้อย
- ระบบอยู่ในสภาวะคงตัว (Steady-state) และแก๊สในระบบมีพฤติกรรมเป็นแก๊สอุดมคติ (Ideal gas)
- อุณหภูมิและความดันรวมของระบบมีค่าคงที่ อยู่ที่ 750 องศาเซลเซียส 1 บรรยากาศ ตามลำดับ และความดันรวมภายในรูพรุนขั้วแอโนดมีการเปลี่ยนแปลงน้อยมากจนสามารถละเลยได้ โดยปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมีที่เกิดขึ้นภายในขั้วแอโนดของแก๊สไฮโดรเจนและแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์แสดงดังสมการ (ฉ) และ (ช) ตามลำดับ

$$H_2 + O^{2-} \rightarrow H_2O + 2e^- \qquad (ฉ)$$

$$CO + O^{2-} \rightarrow CO_2 + 2e^- \qquad (ช)$$

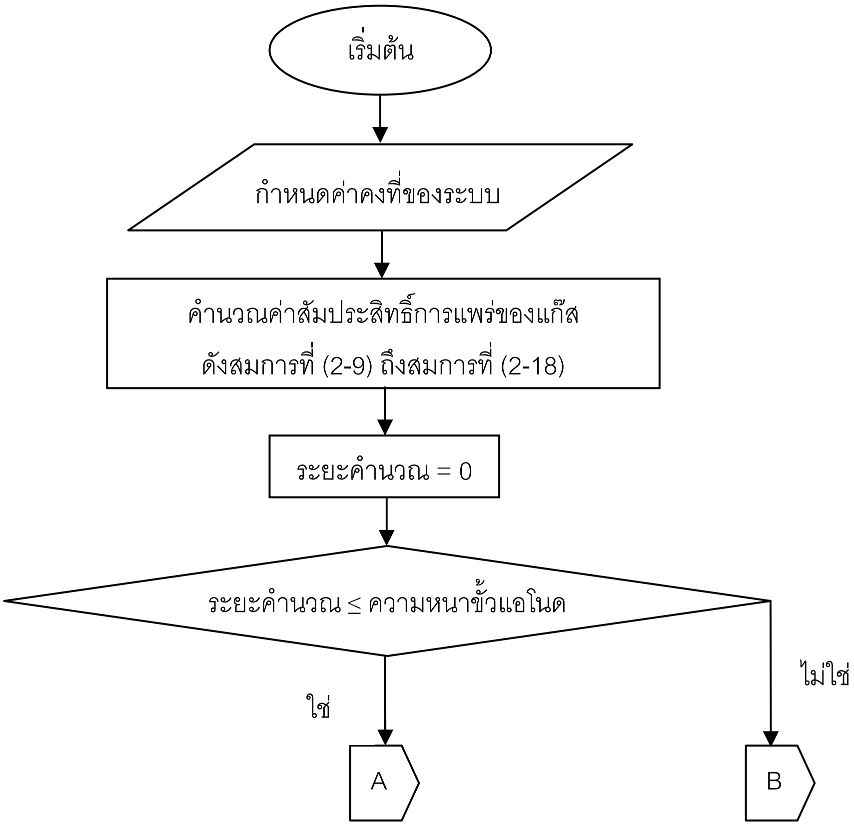
- ให้กระบวนการแพร่ผ่านของแก๊สเป็นขีดจำกัดของระบบการแพร่ของแก๊สเชื้อเพลิงภายในระบบ โดยถือว่าที่ความหนาของขั้วแอโนดที่ 2 มิลลิเมตร จะมีชั้นปฏิกิริยาหนา 50 ไมโครเมตร ทำให้ระยะการแพร่ผ่านของเชื้อเพลิงภายในขั้วแอโนดหนา 1.95 มิลลิเมตร ดังภาพที่ 4.1

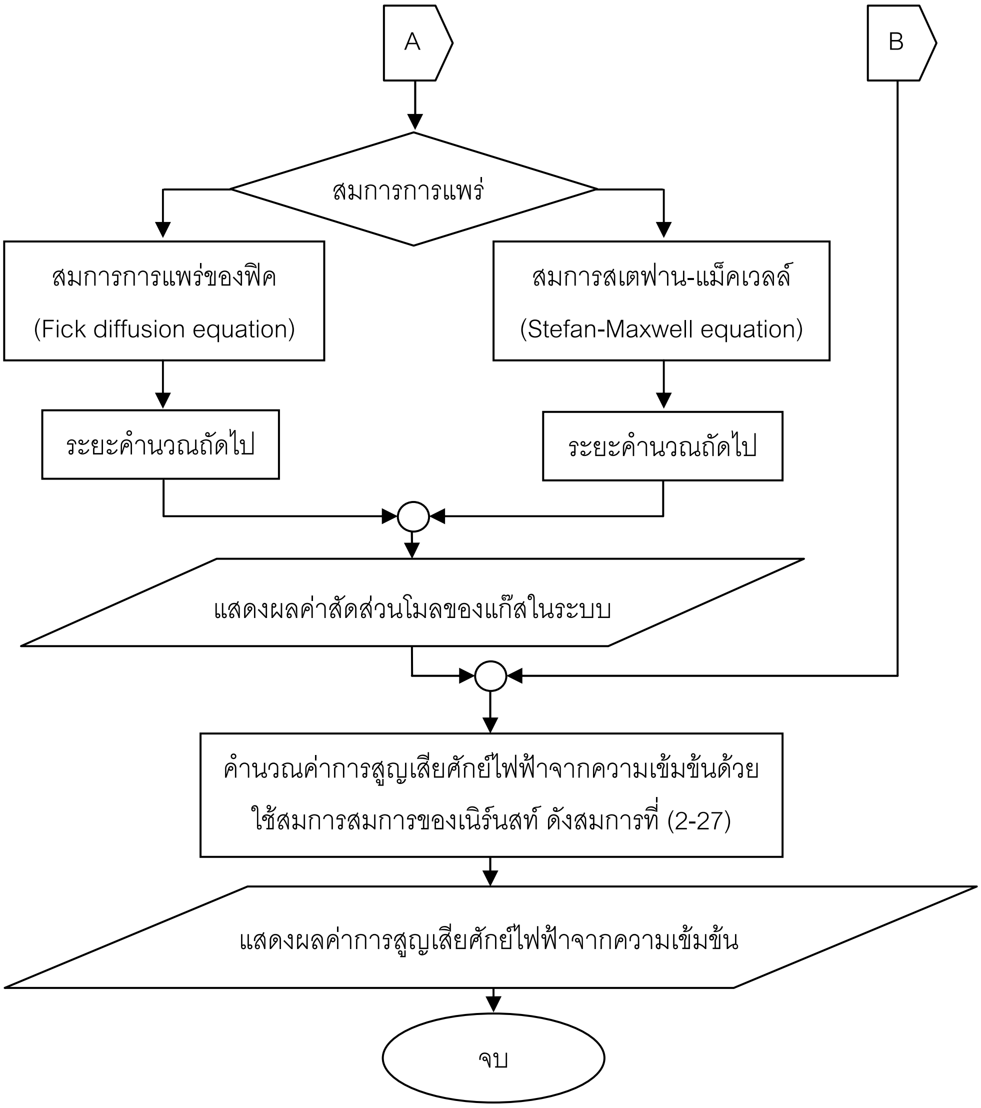


ภาพที่ 4.1 ระบบแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งฝั่งขั้วแอโนด [21, 32, 39]

4.1.1.2 แผนผังการคำนวณ (Flow chart diagrams)

หัวข้อนี้แสดงถึงกระบวนการคิดในการออกแบบแบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับศึกษาระบบถ่ายเทมวลการภายในขั้วแอโนดของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็ง เพื่อใช้ในการสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ด้วยภาษาซี ซึ่งเป็นไปตามไวยากรณ์ของโปรแกรม แสดงในภาคผนวก ค.





4.1.2 การถ่ายเทมวลสารที่เกิดการเปลี่ยนของความเข้มข้นภายในสายป้อนของขั้วแอโนด

การถ่ายเทมวลสารที่เกิดการเปลี่ยนของความเข้มข้นภายในสายป้อนของขั้วแอโนด เป็นการคำนึงถึงลักษณะการแพร่ของเชื้อเพลิงภายในขั้วแอโนดที่อธิบายด้วยสมการการแพร่ของฟิค (Fick diffusion equation) และสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ (Stefan-Maxwell equation) และใช้สมการของเนิร์นสท์ (Nernst equation) อธิบายถึงค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นภายในขั้วแอโนด โดยคำนวณการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นหรือสัดส่วนเชิงโมลของสายป้อนภายในขั้วแอโนดตามระยะทางที่เปลี่ยนแปลง

4.1.2.1 ข้อสมมติฐานระบบการถ่ายเทมวลสารที่เกิดการเปลี่ยนของความเข้มข้นภายในสายป้อนของขั้วแอโนด

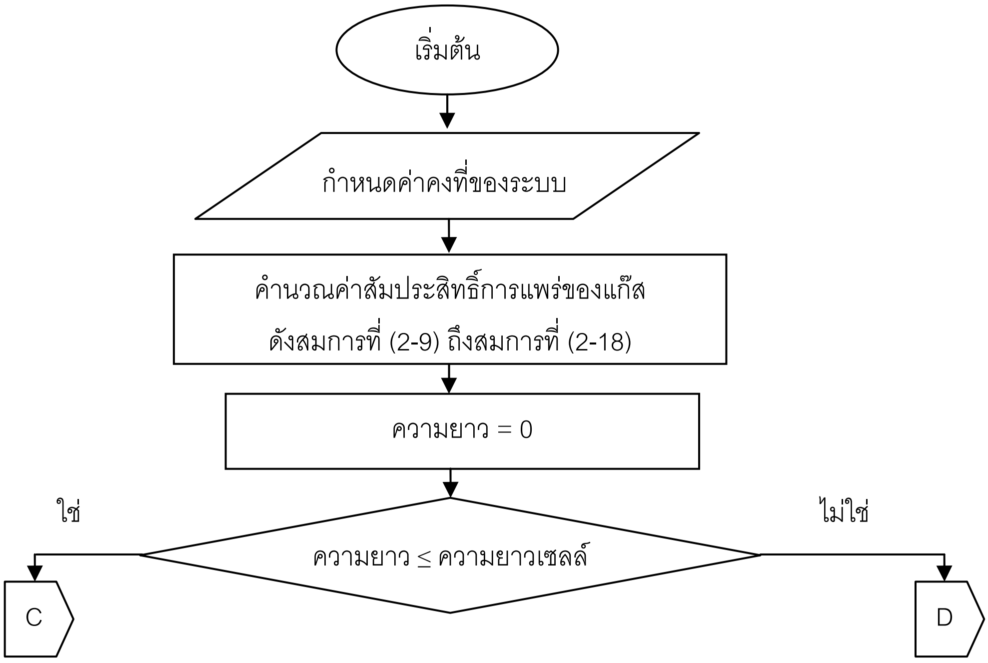
หัวข้อนี้มีความสอดคล้องกับหัวข้อที่ 4.1.1.1 เป็นอย่างมาก โดยมีความมุ่งหวังที่จะประมาณค่าผลกระทบที่เกิดขึ้นของการเปลี่ยนของเชื้อเพลิงภายในสายป้อนเหนือผิวหน้าขั้วแอโนด ที่มีผลต่อการเกิดค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้น ซึ่งในหัวข้อนี้ขอใช้ข้อสมมติฐานเช่นเดียวกับหัวข้อที่ 4.1.1.1 แต่เพิ่มข้อสมมติฐานดังนี้

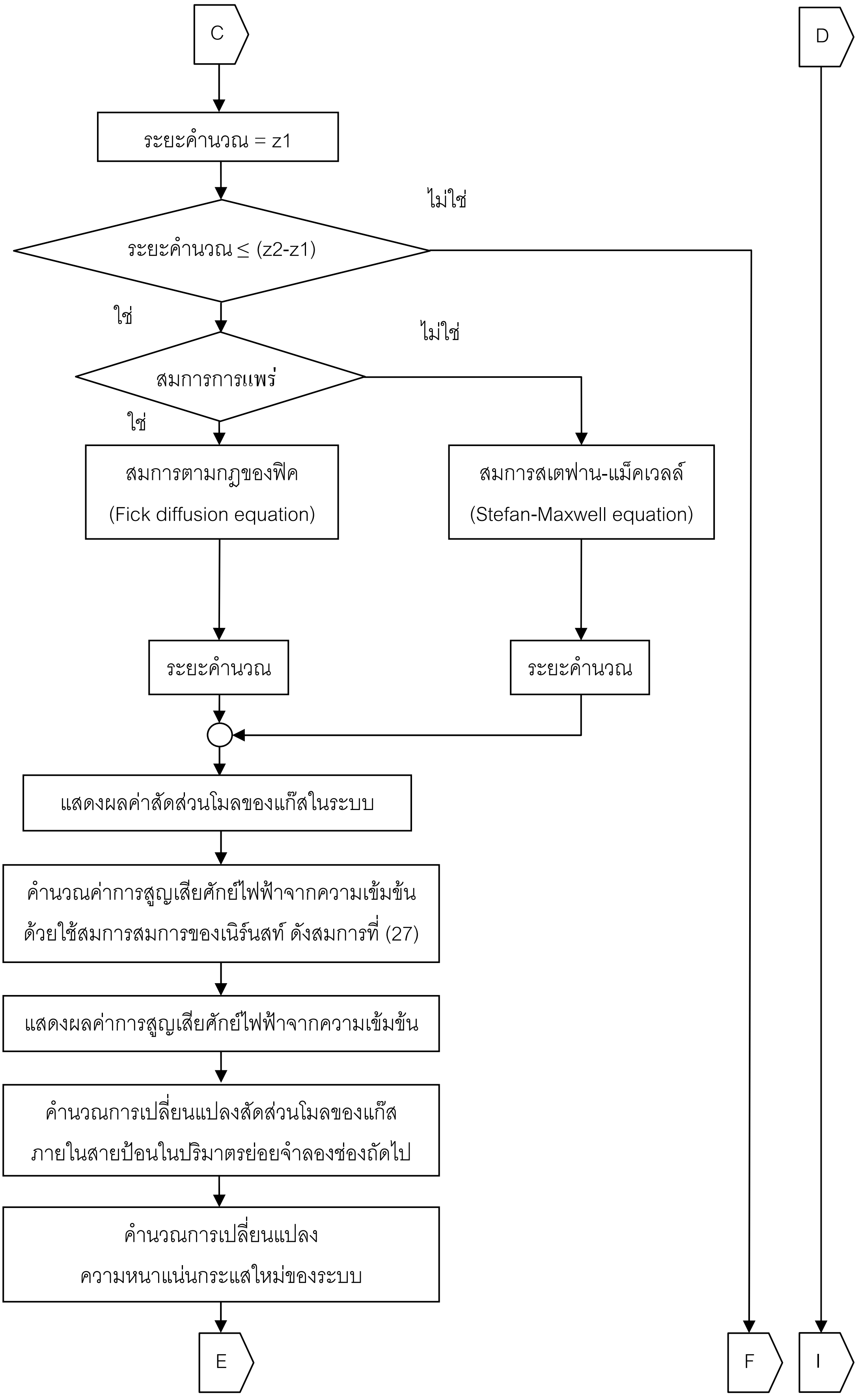
- การผสมในสายป้อนเชื้อเพลิงเกิดขึ้นอย่างสมบรูณ์ และของไหลที่เคลื่อนที่สัมผัสกับผนังช่องสายป้อนถือว่ามีความเร็วเป็นศูนย์ (No slip condition)

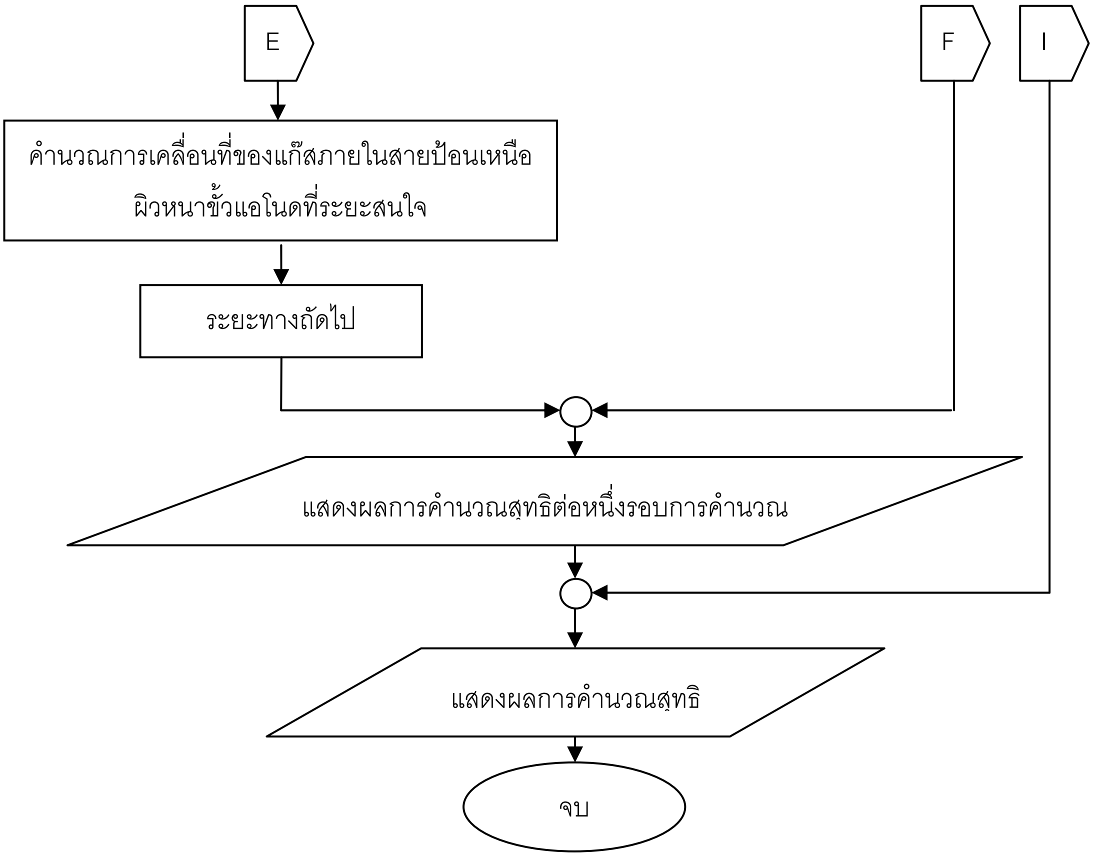
จากข้อสมมติฐานของหัวข้อที่ 4.1.1.1 สำหรับหัวข้อนี้ ขอตัดข้อสมมติฐานที่กล่าวไว้ว่า “ความหนาแน่นกระแส (Current density) ของระบบมีค่าคงที่ เนื่องจากถือว่าพิจารณาระบบที่มีขนาดสั้นจนถือได้ว่าเชื้อเพลิงในสายป้อนมีการเปลี่ยนแปลงเพียงเล็กน้อย” เนื่องด้วยการเปลี่ยนแปลงของสัดส่วนโมลของเชื้อเพลิงภายในสายป้อนเหนือผิวหน้าขั้วแอโนดนั้นแปรผันตรงกับฟลักซ์เชิงโมลของเชื้อเพลิงและค่าความหนาแน่นกระแสของระบบ [6]

4.1.2.2 แผนผังการคำนวณ (Flow chart diagrams**)**

หัวข้อนี้แสดงถึงกระบวนการคิดในการออกแบบแบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับศึกษาระบบถ่ายเทมวลการภายในขั้วแอโนดของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็ง เพื่อใช้ในการสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ด้วยภาษาซี ซึ่งเป็นไปตามไวยากรณ์ของโปรแกรม แสดงในภาคผนวก ค.




C
D
ระยะคำนวณ = z1
ไม่ใช่
ระยะคำนวณ ≤ (z2-z1)
ใช่
ไม่ใช่
สมการการแพร่
ใช่
สมการตามกฎของฟิค
(Fick diffusion equation)
สมการสเตฟาน-แม็คเวลล์
(Stefan-Maxwell equation)
ระยะคำนวณ
ระยะคำนวณ
แสดงผลค่าสัดส่วนโมลของแก๊สในระบบ
คำนวณค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้น
ด้วยใช้สมการสมการของเนิร์นสท์ ดังสมการที่ (27)
แสดงผลค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้น
คำนวณการเปลี่ยนแปลงสัดส่วนโมลของแก๊ส
ภายในสายป้อนในปริมาตรย่อยจำลองช่องถัดไป
คำนวณการเปลี่ยนแปลง
ความหนาแน่นกระแสใหม่ของระบบ
E
F
I



4.2 ระบบโครงสร้างภายในขั้วแอโนด

จากบทที่ 2 และ 3 แสดงให้เห็นว่าระบบโครงสร้างภายในของขั้วแอโนดมีความสัมพันธ์ถึงค่าความยาวของสภาวะขอบสามเฟส (Triple-Phase-Boundary length) ซึ่งค่าความยาวของสภาวะขอบสามเฟสสามารถแสดงถึงประสิทธิ์ภาพของขัวแอโนดได้ ภายในหัวข้อนี้เป็นการแสดงข้อสมมติฐาน และแผ่นผังการไหลของการวิเคราะห์และออกแบบแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ เพื่อใช้หาตัวแปรที่มีผลกระทบต่อค่าความยาวของสภาวะขอบสามเฟสต่อปริมาตร (Volume specific Triple-Phase-Boundary length) ของระบบโครงสร้างภายในขั้วแอโนด ซึ่งตัวแปรที่สนใจในการวิเคราะห์คือ ขนาดของอนุภาคทั้งเฟสของอิเล็กทรอนิกส์ (Electronic phase) และเฟสไอออนิก (Ionic phase) ขนาดรูพรุน (pore size) สัดส่วนความพรุน (porosity) สัดส่วนโดยปริมาตรของเฟสอิเล็กทรอนิกส์ (volume fraction of electronic phase) และสัดส่วนโดยปริมาตรของเฟสไอออนิก (volume fraction of ionic phase)

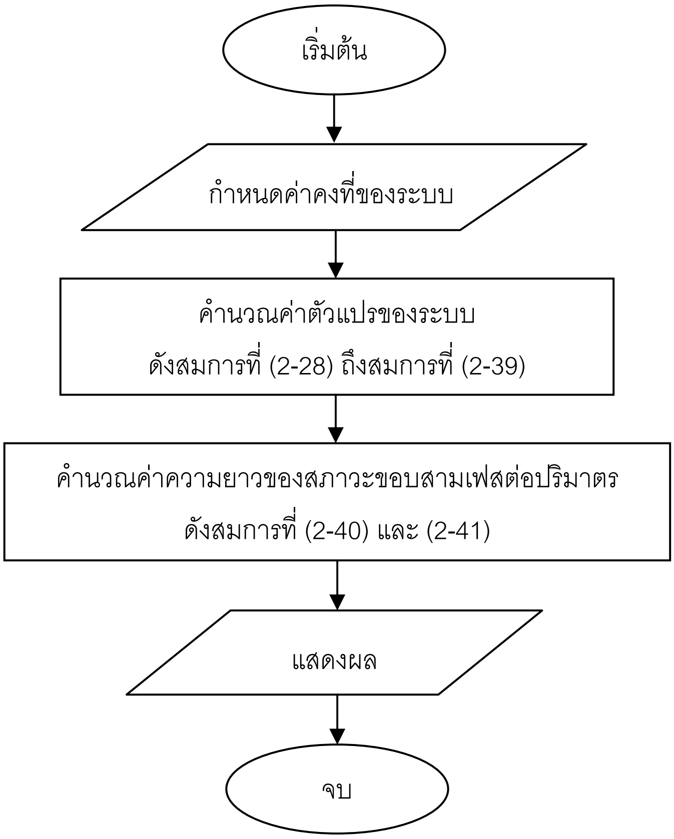
4.2.1 ข้อสมมติฐานของระบบโครงสร้างภายในขั้วแอโนด

ข้อสมมติฐานสำหรับหัวข้อนี้มีความสอดคล้องกับงานวิจัยของ Deng, X et al. [9] และ Janardhanan, V. M. et al. [8] โดยมีข้อสมมติฐาน ดังนี้

- ภายในโครงสร้างของขั้วแอโนดประกอบไปด้วยช่องว่าง (pore) และของแข็งสองเฟสคือ เฟสของอิเล็กทรอนิกส์กับเฟสไอออนิก
- สัดส่วนโดยปริมาตรของเฟสของอิเล็กทรอนิกส์กับเฟสไอออนิกมีค่าเท่ากันที่ร้อยละ 50
- ของแข็งทั้งสองเฟสต่างมีลักษณะอนุภาคเป็นทรงกลมที่มีรัศมีของอนุภาคเฉลี่ยเท่าๆ กัน กระจายตัวอย่างสมบูรณ์ภายในปริมาตรขั้วแอโนด
- อนุภาคภายในโครงสร้างขั้วแอโนดจะเกิดการทับซ้อนดังภาพที่ 2.10 โดยถือว่ามีพื้นที่ทับซ้อนเฉลี่ยเท่าๆ กัน

4.2.2 แผนผังการไหล (Flow chart diagrams)

หัวข้อนี้แสดงถึงกระบวนการคิดในการออกแบบแบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับศึกษาระบบถ่ายเทมวลการภายในขั้วแอโนดของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็ง เพื่อใช้ในการสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ด้วยภาษาซี ซึ่งเป็นไปตามไวยากรณ์ของโปรแกรม แสดงในภาคผนวก ค.



4.3 โปรแกรมสำหรับการพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์

4.3.1 ภาษาซี (C language) [40]

ภาษาซีคือ ชุดคำสั่งที่ถูกสร้างขึ้นเพื่อใช้เขียนโปรแกรม ซึ่งจัดเป็นภาษาระดับสูงที่มีลักษณะคล้ายกับภาษาอังกฤษทั่วๆ ไป ที่สำคัญคือ ผู้เขียนไม่จำเป็นจะต้องเรียนรู้เกี่ยวกับระบบฮาร์ดแวร์ของเครื่องคอมพิวเตอร์ ตัวอย่างภาษาระดับที่จัดอยู่ในระดับเดียวกันกับภาษาซี เช่น ฟอร์แทรน (Fortran) โคบอล (Cobol) เบสิก (Basic) และปาสคาล (Pascal) เป็นต้น

ภาษาซีที่ถูกใช้ในงานวิจัยนี้ถูกใช้อยู่ในโปรแกรมชุดคำสั่งของโปรแกรมเทอร์โบซี (Turbo C) การทำงานของโปแกรมเทอร์โบซีจะแปลภาษาซีให้กลายเป็นภาษาเครื่องคอมพิวเตอร์ซึ่งอยู่ในรูปแบบเลขฐานสองโดยใช้คอมไพเลอร์เป็นตัวแปรภาษา ซึ่งจะทำการแปรเมื่อเขียนชุดคำสั่งครบและถูกต้องตามหลักไวยกรณ์

4.3.2 โปรแกรม Maple [41]

โปรแกรม Maple เป็นโปรแกรมที่รวมภาษาการเขียนโปรแกรมและการตอบโต้ระหว่างการรับส่งค่าข้อมูลและผลคำตอบต่อผู้ใช้ที่อนุญาตให้ผู้ใช้งานโปรแกรมสามารถป้อนข้อมูลที่เป็นสัญลักษณ์ทางคณิตศาสตร์ได้ตามความต้องการแบบต่อเนื่อง โดยไวยกรณ์ที่ป้อนเข้าไปนั้นคือ ไวยกรณ์ภาษา Maple ซึ่งถูกแทนด้วยชุดคำสั่งที่เป็นภาษาระดับสูงผสมกับสัญลักษณ์ทางคณิตศาสตร์ โดยการประมวลผลจะใช้ Maple เคอร์เนล (Maple kernel) เป็นคอมไพเลอร์เพื่อแปลงชุดคำสั่งให้เป็นภาษาเครื่อง ซึ่ง Maple เคอร์เนลนั้นถูกพัฒนาหรือเขียนขึ้นด้วยภาษาซี

แนวคิดของโปรแกรม Maple เกิดขึ้นมาจากการประชุมทางวิชาการของมหาวิทยาลัยวอเตอร์ลู (University of Waterloo) ประเทศแคนาดา ในปี ค.ศ. 1980 เดือน พฤศจิกายน นักวิทยาศาสตร์และนักวิจัยของมหาลัยมีความต้องการที่จะซื้อคอมพิวเตอร์ที่มีกำลังมากพอที่จะประมวลผลแมคซีมา (Macsyma) แทนที่จะตัดสินใจพัฒนาระบบคอมพิวเตอร์พีชคณิตศาสตร์ที่มีกำลังมากพอที่จะประมวลผลได้ประสิทธิภาพบนเครื่องคอมพิวเตอร์เพียงเครื่องเดียว ด้วยเหตุนี้โพรเจกต์ในการดำเนินการพัฒนาจึงเริ่มขึ้น โดยเป้าหมายเน้นไปที่สร้างการประมวลผลในระบบพีชคณิตสัญลักษณ์ และพยายามประมวลผลโดยไม่ใช้หลักการประมาณแต่พิสูจน์การแก้สมการโดยหลักการแม่นตรงและพีชคณิตขั้นสูงแทน

สำหรับงานวิจัยนี้ได้นำโปแกรม Maple มาใช้ในการแก้สมการในรูปแบบสมการเชิงอนุพันธ์สามัญ (Ordinary Differential Equation) และสมการเชิงอนุพันธ์ย่อย (Partial Differential Equation) ซึ่งเวอร์ชันที่เลือกใช้นั่นคือ เวอร์ชัน 13 (Maple 13)

4.4 ตัวแปรควบคุมและค่าสภาวะของระบบ

ตัวแปรควบคุมและค่าสภาวะของระบบเป็นค่าคงที่ที่ใช้ในการกำหนดเพื่อการศึกษาสำหรับงานวิจัยนี้ ซึ่งถือได้ว่าเป็นการกำหนดขอบเขตและสภาวะพื้นฐานของระบบที่จะพิจารณา โดยแสดงข้อมูลค่าคงที่ สัญลักษณ์ และข้อมูลอ้างอิงตามตารางต่อไปนี้

ตารางที่ 4.1 ตัวแปรควบคุมและค่าคงที่ของเซลล์เชื้อเพลิงฝั่งขั้วแอโนด

ตัวแปรควบคุม	สัญลักษณ์	ค่าคงที่	หน่วย	อ้างอิง
อุณหภูมิของระบบ	T	750	องศาเซลเซียส	[5, 21]
ความดันของระบบ	P	1	บรรยากาศ	[5, 21]
สัดส่วนความคดเคี้ยวของรูพรุนขั้วแอโนด	τ	4.5	ไร้หน่วย	[5]
สัดส่วนความพรุนขั้วแอโนด	ε	0.46	ไร้หน่วย	[5]
ความหนาชั้นปฏิกิริยา	$l_a - z2$	50	ไมโครเมตร	[4-6, 21, 25, 34, 35]
ความหนาขั้วแอโนด	l_a	2	มิลลิเมตร	[5, 21, 39]
ความยาวของเซลล์เชื้อเพลิง		20	มิลลิเมตร	[5, 21, 39]
ความกว้างช่องสายป้อน		1	มิลลิเมตร	[5, 21, 39]
สัดส่วนการทับซ้อน	ψ	0.9	ไร้หน่วย	[8]
ระยะห่างระหว่างโมเลกุล	d	0.9	ไร้หน่วย	[8, 9]
เลขโคออร์ดิเนชันระหว่างอนุภาคตัวนำไอออนิกกับอิเล็กทรอนิกส์	Z_{i-e}	7.2	ไร้หน่วย	[8, 33]

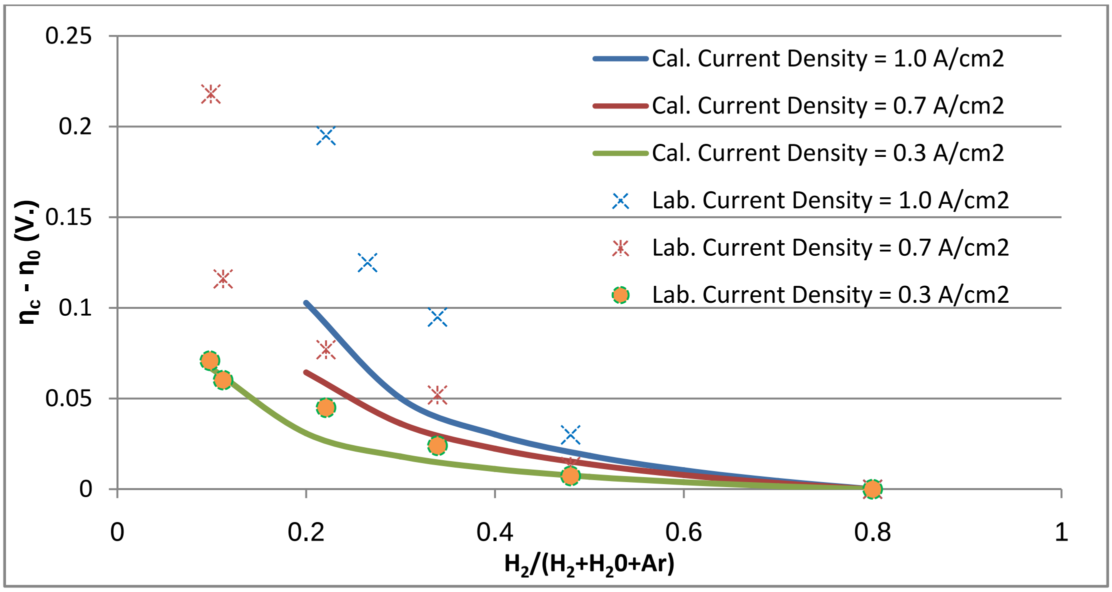
บทที่ 5

ผลการทดลองและการวิจารณ์

5.1 การถ่ายเทมวลสารเมื่อไม่เกิดการเปลี่ยนของความเข้มข้นภายในสายป้อนของขั้วแอโนด

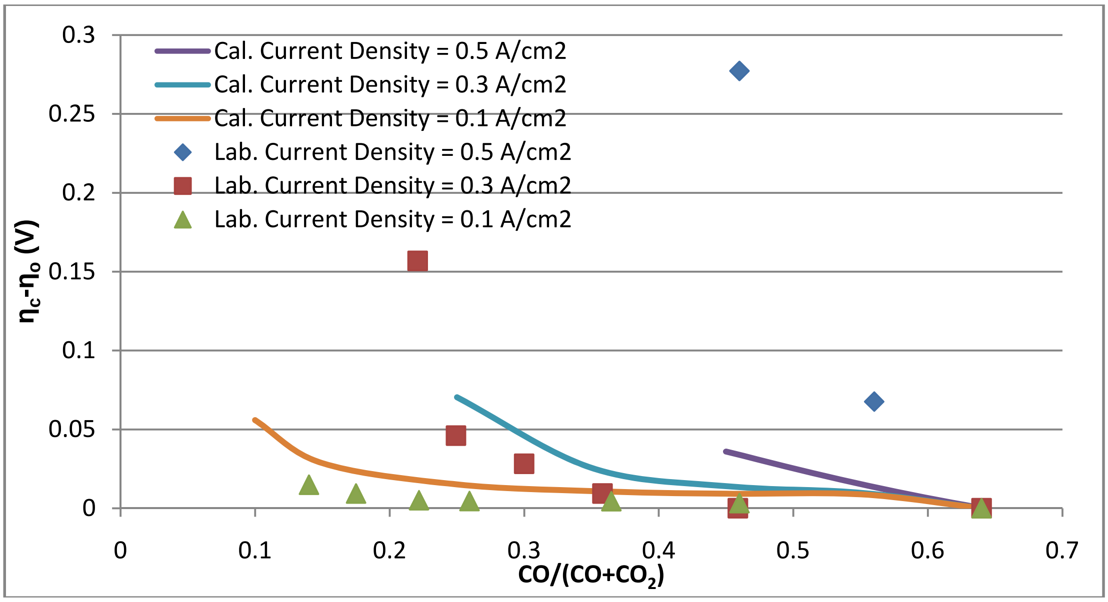
การศึกษาการถ่ายเทมวลสารที่ไม่เกิดการเปลี่ยนของความเข้มข้นภายในสายป้อนของขั้วแอโนด ซึ่งถือว่าความเข้มข้นในสายป้อนภายในขั้วแอโนดไม่มีการเปลี่ยนแปลง และผลการเกิดค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นมีผลจากการแพร่ของเชื้อเพลิง สารผลิตภัณฑ์ และแก็สเฉื่อยที่ป้อนเข้าสู่ระบบเท่านั้น โดยลักษณะของระบบแสดงดังภาพที่ 4.1 และสภาวะของระบบจะมีค่าดังตารางที่ 4.1 ซึ่งภายในหัวข้อนี้มุ่งหวังตรวจสอบความแม่นยำของสมการการแพร่ทั้งสมการการแพร่ของฟิค (Fick diffusion equation) และสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ (Stefan-Maxwell equation) และตรวจสอบผลความถูกต้องของแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของงานวิจัยนี้

5.1.1 ทำนายพฤตติกรรมแก๊สในระบบด้วยสมการการแพร่ของฟิค



ภาพที่ 5.1 เปรียบเทียบผลการคำนวณค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่ค่าความหนาแน่นกระแสของระบบ 0.3, 0.7, 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร และสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงที่ 0.1 ถึง 0.8 จากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ด้วยสมการการแพร่ของฟิคระบบ H_2-H_2O-Ar เปรียบเทียบกับงานวิจัยของ Yakabe, H. et al. [5] ที่อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ โดยเส้นทึบคือ ผลที่ได้จากการคำนวณ และเส้นประคือ ผลที่ได้จากการทดลองจริง

การศึกษาการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นโดยใช้สมการการแพร่ของฟิค โดยผลที่แสดงนั้นเป็นค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้น (η_c) ลบกับค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นพื้นฐาน (η_0) จากงานวิจัยของ Yakabe, H. et al. [5] ค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นพื้นฐานคือ ค่าที่วัดได้จากระบบ $H_2/(H_2+H_2O+Ar)$ = 0.8 สำหรับระบบ H_2-H_2O-Ar และ $CO/(CO+CO_2)$ = 0.64 สำหรับระบบ CO-CO_2 โดยระบบ H_2-H_2O-Ar นั้นใช้อัตราส่วนของ H_2:H_2O คือ 4:1 ซึ่งการเปลี่ยนสัดส่วนเชิงโมลของแก๊สไฮโดรเจน (H_2) นั้นจะถูกเปลี่ยนแปลงด้วยปริมาณโมลของแก๊สอาร์กอน (Ar) ผลที่ได้สำหรับระบบ H_2-H_2O-Ar และ CO-CO_2 นั้นได้ถูกแสดงดัง ภาพที่ 5.1 และ 5.2 ตามลำดับ ซึ่งผลที่ได้ใช้ค่าสภาวะอ้างอิงตามตารางที่ 4.1

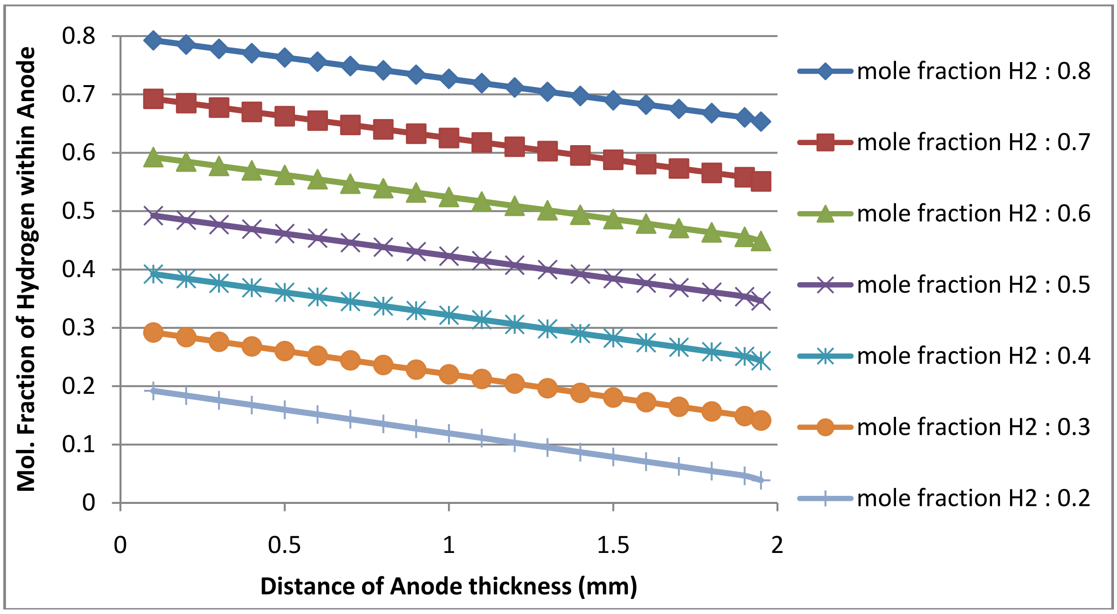


ภาพที่ 5.2 ผลการคำนวณค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่ค่าความหนาแน่นกระแสของระบบ 0.1, 0.3, 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร และสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงที่ 0.1 ถึง 0.8 จากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ด้วยสมการการแพร่ของฟิคระบบ CO-CO_2 เปรียบเทียบกับงานวิจัยของ Yakabe, H. et al. [5] ที่อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ โดยเส้นทึบคือผลที่ได้จากการคำนวณ และเส้นประคือ ผลที่ได้จากการทดลองจริง

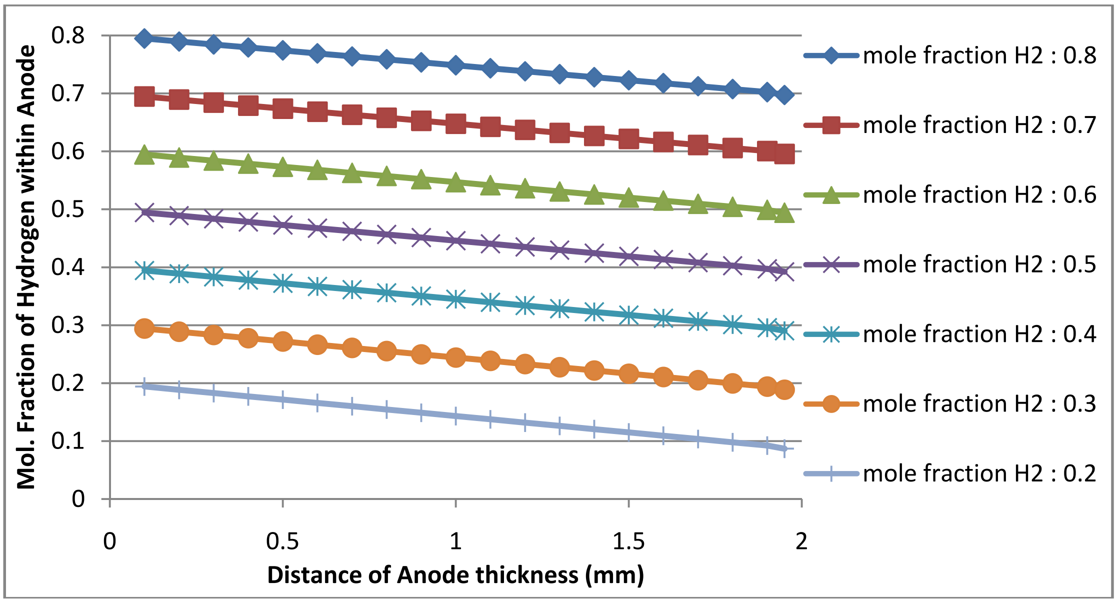
จากภาพที่ 5.1 เป็นการนำสมการของฟิคมาใช้ในการทำนายถึงค่าการแพร่ผ่านของแก๊สภายในระบบที่ส่งผลถึงค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้น ที่ความหนาแน่นกระแสค่าต่างๆ เห็นได้ว่าระบบที่มีค่าความหนาแน่นกระแสสูงจะมีค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นสูงขึ้นตามด้วย และเมื่อสัดส่วนเชิงโมล ของเชื้อเพลิงลดลงค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นจะแปรผกผันไปในทางตรงกันข้าม นอกจากนี้จุดประสงค์หลักของผลการทดลองที่แสดงดังภาพที่ 5.1 และ 5.2 แสดงให้เห็นว่าสมการการแพร่ของฟิคให้ผลการทำนายที่ค่อนข้างแม่นยำ สำหรับระบบ H_2-H_2O-Ar ที่มีค่าความหนาแน่นกระแสไม่สูงนัก ที่ 0.3 และ 0.7 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลประมาณ 0.47 ถึง 0.8 และ 0.5 ถึง 0.8 ตามลำดับ จะให้ผลที่ใกล้เคียงกับผลการทดลองของ Yakabe, H. et al. [5] ซึ่งจะเห็นว่าเส้นกราฟระหว่างเส้นประและเส้นทึบที่มีสี

เดียวกันจะมีค่าใกล้เคียงกัน และเช่นเดียวกันกับภาพที่ 5.2 ซึ่งเป็นการแสดงค่าการทำนายค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นของระบบ $CO-CO_2$ ที่ได้จากสมการการแพร่ของฟิค จะเห็นว่าผลการทดลองที่ได้เมื่อใช้ค่าความหนาแน่นกระแสไม่สูงนักคือ 0.1 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตรลงไป จะมีค่าที่ใกล้เคียงกับความผลการทดลองจริงตลอดช่วงสัดส่วนเชิงโมลที่ทดลอง สำหรับที่ค่าความหนาแน่นกระแส 0.3 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตรลงไป จะมีค่าที่ค่อนข้างใกล้เคียงกับผลการทดลองจริงที่สัดส่วนเชิงโมลประมาณ 0.3 ถึง 0.64 และที่ค่าความหนาแน่นกระแส 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร เป็นช่วงที่ไม่มีสัดส่วนเชิงโมลค่าใดใกล้เคียงความเป็นจริง

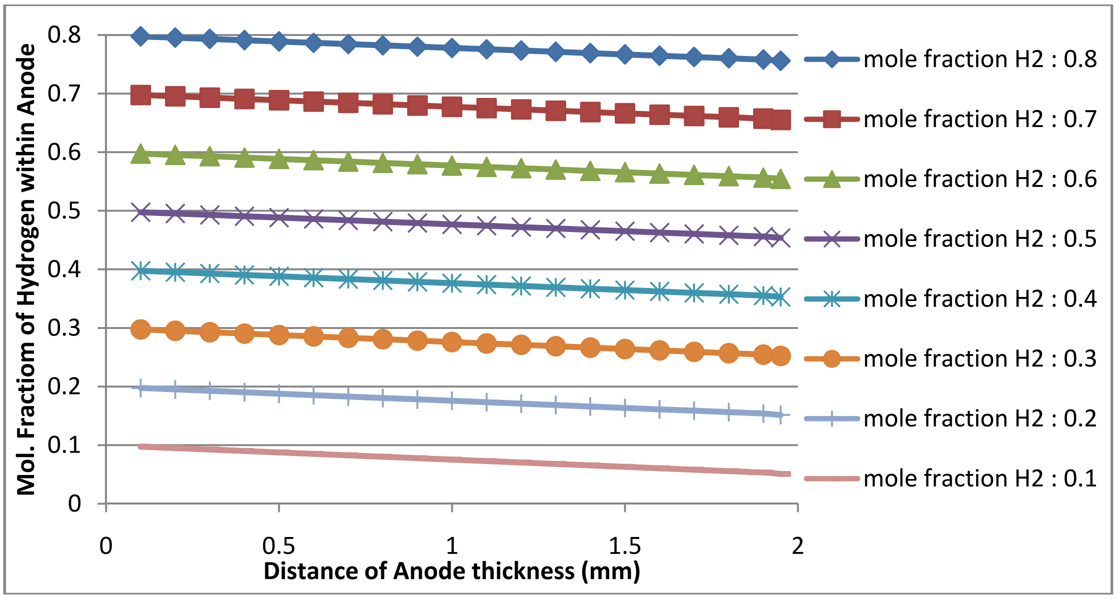
เมื่อพิจารณาสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงที่เปลี่ยนแปลงไปตามระยะทางตามแนวตั้งหรือตามความหนาของขั้วแอโนด พบว่าทั้งระบบแก๊สไฮโดรเจนและแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์มีการลดลงของสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงตามระยะทางความหนาของขั้วแอโนด เมื่อพิจารณาค่าความหนาแน่นกระแส สังเกตได้ว่า ระบบที่ใช้ความหนาแน่นกระแสที่สูง จะมีการลดลงของสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงที่มากกว่า ซึ่งสังเกตได้จากความชันของเส้นกราฟ แสดงดังภาพที่ 5.3, 5.4 และ 5.5 เป็นระบบแก๊สไฮโดรเจนที่ค่าความหนาแน่นกระแสคงที่ 1.0, 0.7 และ 0.3 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร ตามลำดับ และภาพที่ 5.6, 5.7 และ 5.8 เป็นระบบแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ที่ค่าความหนาแน่นกระแสคงที่ 0.5, 0.3 และ 0.1 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร ตามลำดับ และเมื่อพิจารณาชนิดของเชื้อเพลิงโดยมองในเชิงการแพร่ของของไหลผ่านวัสดุ จะเห็นว่า แก๊สไฮโดรเจนที่มีขนาดและมวลโมเลกุลน้อยกว่าแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ จะมีการแพร่ได้ที่ดีกว่า สังเกตได้จากการลดลงของสัดส่วนเชิงโมลของระบบแก๊สไฮโดรเจนจะมีค่าน้อยกว่าระบบแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ ถึงแม้ว่าจะใช้ความหนาแน่นกระแสของระบบที่มากกว่าก็ตาม



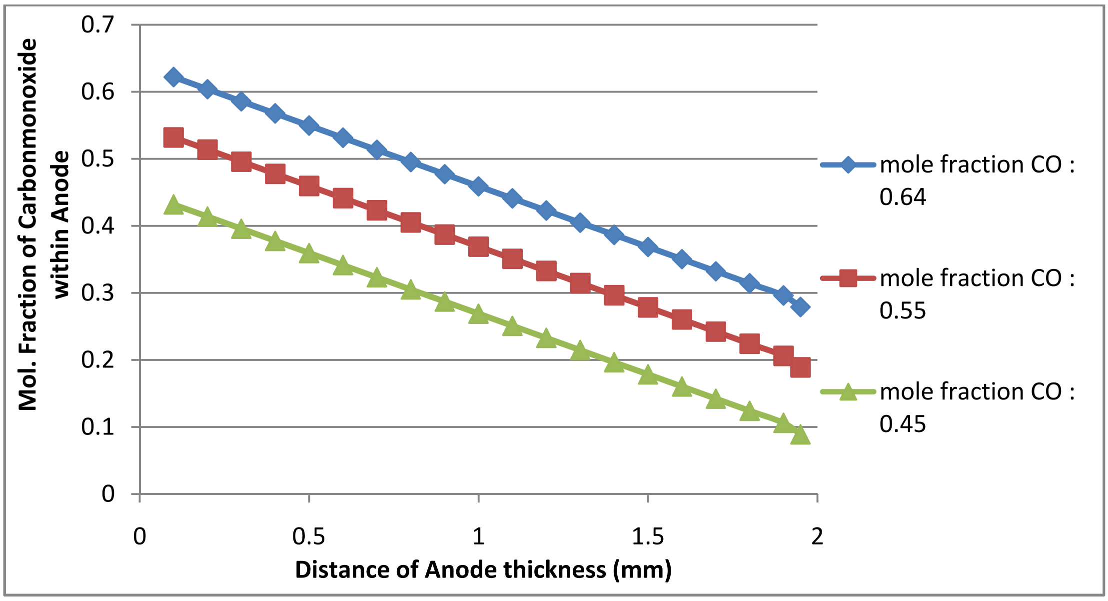
ภาพที่ 5.3 การเปลี่ยนแปลงสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนตามระยะความหนาของขั้วแอโนด ที่ความหนาแน่นกระแส 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร โดยสมการการแพร่ของฟิค



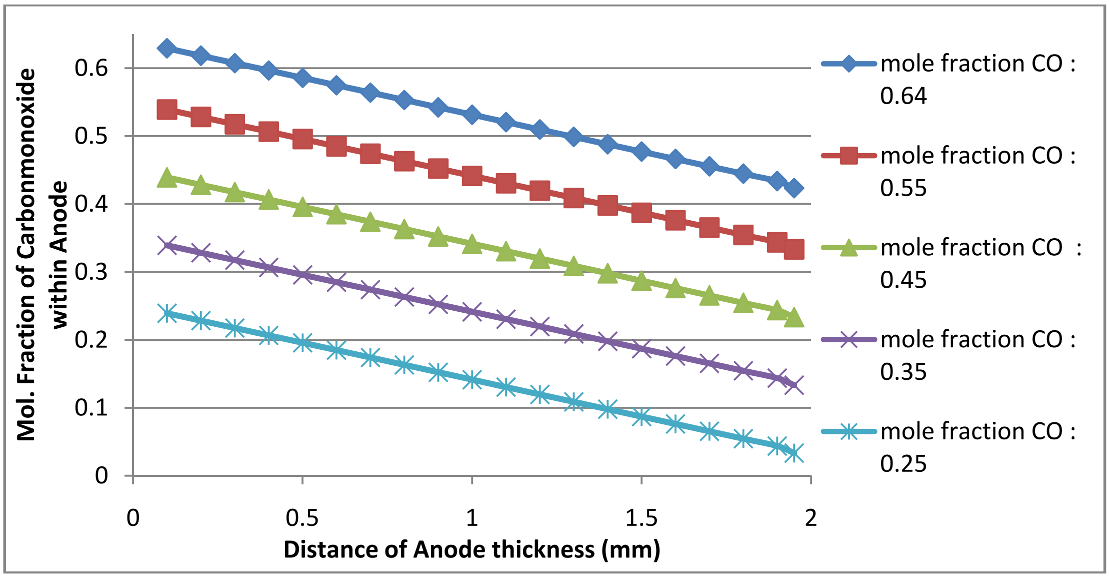
ภาพที่ 5.4 การเปลี่ยนแปลงสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนตามระยะความหนาของขั้วแอโนด ที่ความหนาแน่นกระแส 0.7 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร โดยสมการการแพร่ของฟิค



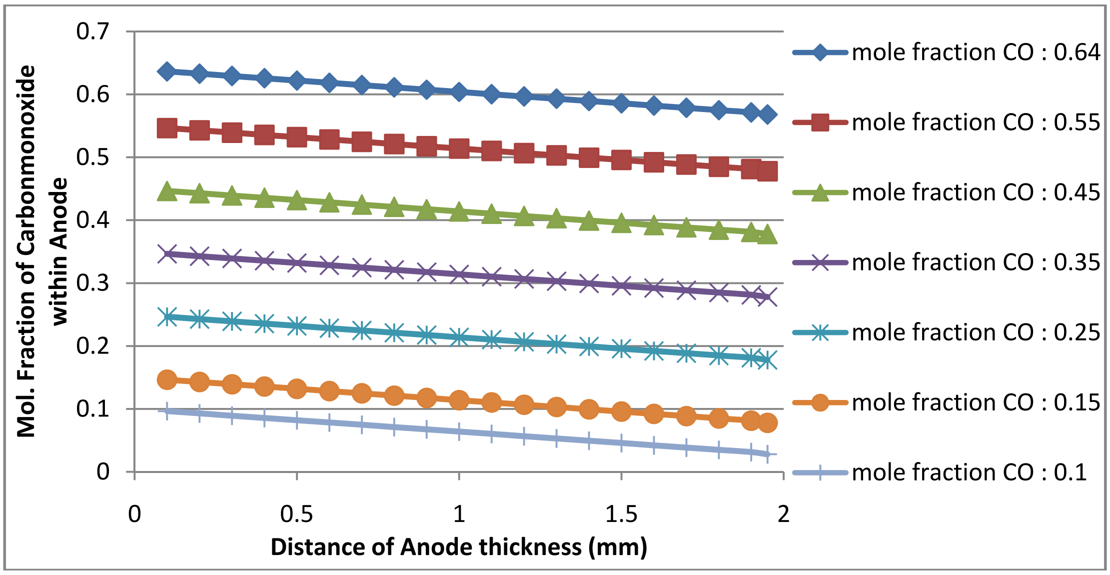
ภาพที่ 5.5 การเปลี่ยนแปลงสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนตามระยะความหนาของขั้วแอโนด ที่ความหนาแน่นกระแส 0.3 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร โดยสมการการแพร่ของฟิค



ภาพที่ 5.6 การเปลี่ยนแปลงสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงคาร์บอนมอนอกไซด์ตามระยะความหนาของขั้วแอโนด ที่ความหนาแน่นกระแส 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร โดยสมการการแพร่ของฟิค

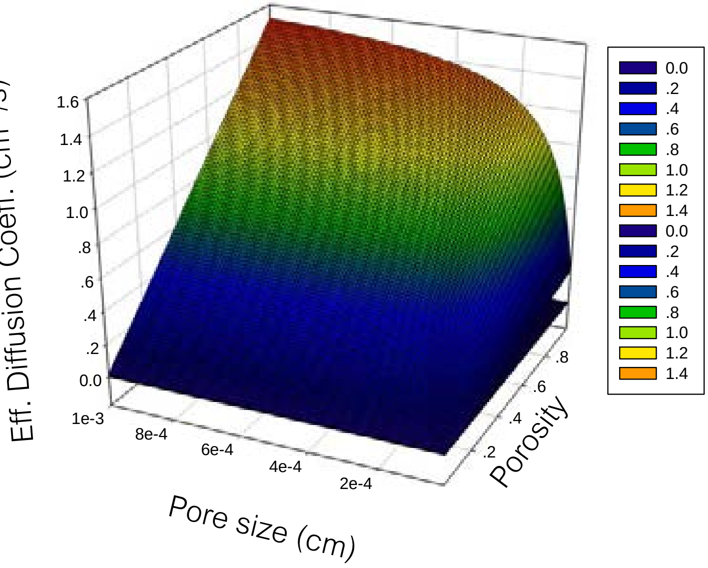


ภาพที่ 5.7 การเปลี่ยนแปลงสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงคาร์บอนมอนอกไซด์ตามระยะความหนาของขั้วแอโนด ที่ความหนาแน่นกระแส 0.3 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร โดยสมการการแพร่ของฟิค

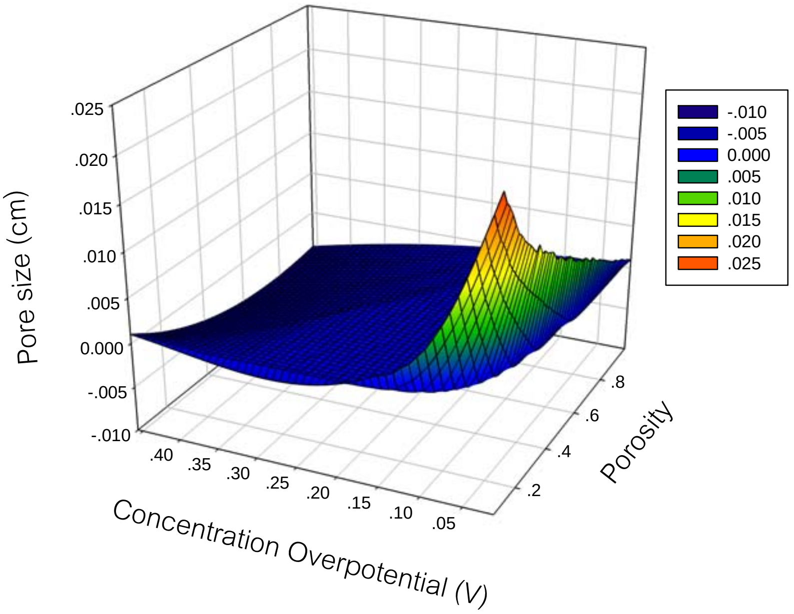


ภาพที่ 5.8 การเปลี่ยนแปลงสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงคาร์บอนมอนอกไซด์ตามระยะความหนาของขั้วแอโนด ที่ความหนาแน่นกระแส 0.1 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร โดยสมการการแพร่ของฟิค

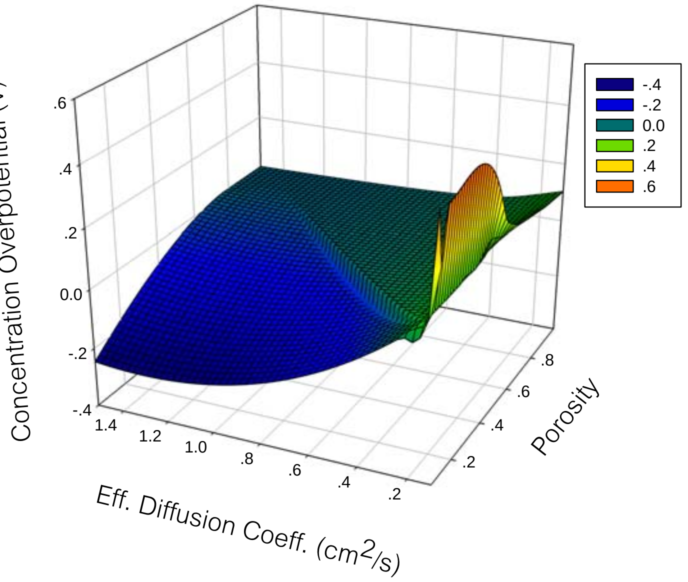
สมการการแพร่ของฟิคมีความสัมพันธ์ถึงสัดส่วนความพรุน ขนาดของรูพรุน และสัมประสิทธิ์การแพร่โดยรวมของแก๊ส ซึ่งส่งผลถึงค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้น โดยงานวิจัยนี้ขอยกตัวอย่างความสัมพันธ์ของตัวแปรเหล่านี้ในลักษณ์ภาพสามมิติ แสดงดังภาพที่ 5.9 ถึง 5.11 เป็นผลการทดลองโดยใช้แก๊สไฮโดรเจนเป็นเชื้อเพลิง ป้อนที่สัดส่วนเชิงโมล 0.8 และสัดส่วนเชิงโมลไอน้ำ 0.2 ที่ค่าความหนาแน่นกระแส 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร



ภาพที่ 5.9 ความสัมพันธ์ระหว่างสัดส่วนความพรุน ขนาดรูพรุน และสัมประสิทธิ์การแพร่โดยรวมของแก๊สไฮโดรเจน โดยสมการการแพร่ของฟิค



ภาพที่ 5.10 ความสัมพันธ์ระหว่างสัดส่วนความพรุน ขนาดรูพรุน และค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นของระบบแก๊สไฮโดรเจน โดยสมการการแพร่ของฟิค

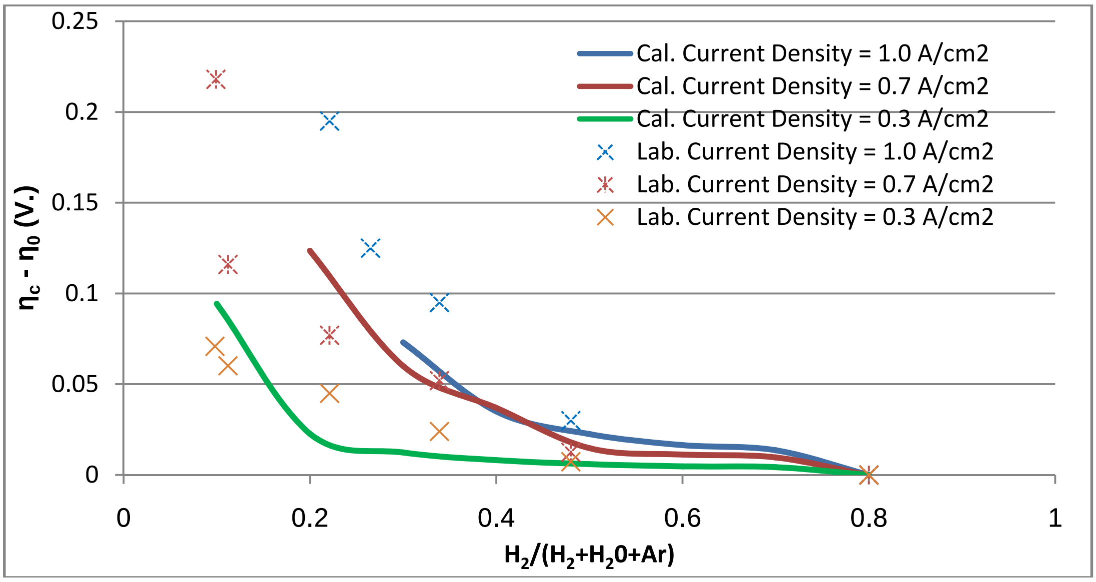


ภาพที่ 5.11 ความสัมพันธ์ระหว่างสัดส่วนความพรุน สัมประสิทธิ์การแพร่โดยรวมของแก๊สไฮโดรเจน และค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นของระบบแก๊สไฮโดรเจน โดยสมการการแพร่ของฟิค

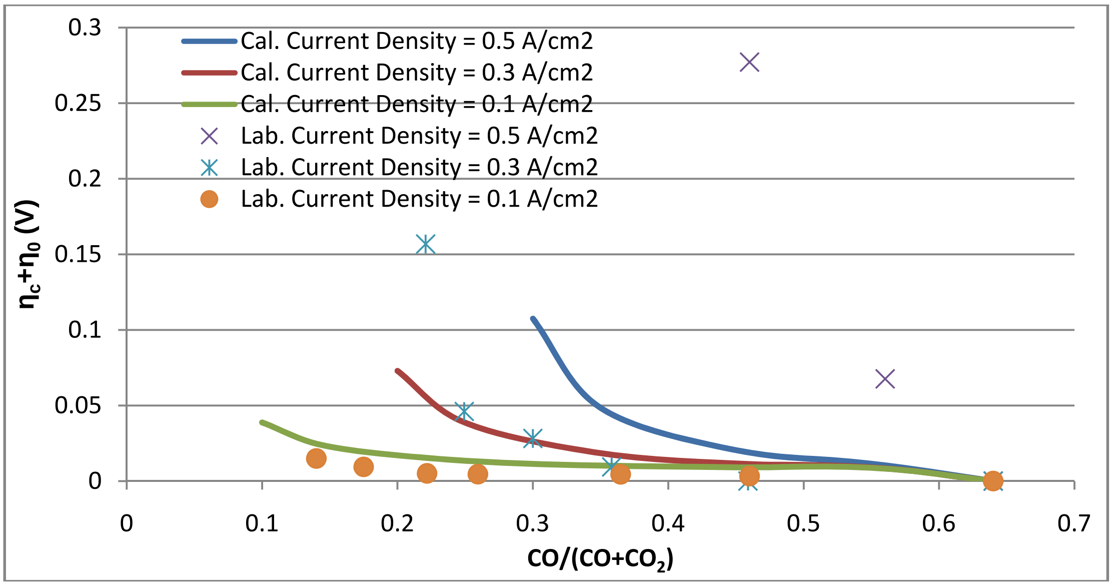
5.1.2 ทำนายพฤตติกรรมแก๊สในระบบด้วยสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์

การศึกษาค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นด้วยสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ ใช้วิธีการเดียวกับหัวข้อที่ 5.1.1 สมการสเตฟาน-แม็คเวลล์นั้นถูกนำมาใช้อธิบายลักษณะแพร่ของของไหลภายในตัวกลางที่มีความพรุนต่ำ ดังนั้นข้อแตกต่างที่สำคัญของสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์กับสมการการแพร่ของฟิคนั่นคือ ค่าสัมประสิทธิ์โดยรวมของการแพร่ของแก๊สในระบบ เนื่องจากสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์จะสนใจเฉพาะผลกระทบของของไหลที่แพร่ระหว่างกัน แต่สมการการแพร่ของฟิคจะสนใจถึงการแพร่ผ่านระหว่างของไหลกับรูพรุนของตัวกลางด้วย ซึ่งทำให้ในสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ไม่มีผลกระทบของขนาดรูพรุนที่คำนวณอยู่ในค่าสัมประสิทธิ์โดยรวมของการแพร่ของแก๊สในระบบ ผลการทดลองที่ได้สำหรับระบบ H_2-H_2O-Ar และ CO-CO_2 ถูกแสดงดังภาพที่ 5.12 และ 5.13 ตามลำดับ

จากภาพที่ 5.12 ผลการทดลองด้วยการใช้สมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ทำนายถึงค่าการแพร่ผ่านของแก๊สภายในระบบที่ส่งผลถึงค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้น ที่ความหนาแน่นกระแส 0.3, 0.7 และ 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ โดยเชื้อเพลิงที่ใช้คือ ระบบ H_2-H_2O-Ar เมื่อเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Yakabe, H. et al. [5] พบว่าสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์สามารถทำนายค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นได้ใกล้เคียงกับผลการทดลองของ Yakabe, H. et al. [5] ที่ค่าสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนที่สูงในทุกๆ ค่าความหนาแน่นกระแสนั่นคือ ที่ความหนาแน่นกระแส 0.3 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร จะมีผลการทำนายที่ใกล้เคียงที่สัดส่วนเชิงโมลเชื้อเพลิงไฮโดรเจนที่ 0.5 ถึง 0.8 ที่ความหนาแน่นกระแส 0.7 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร จะมีผลการทำนายที่ใกล้เคียงที่สัดส่วนเชิงโมลเชื้อเพลิงไฮโดรเจนที่ 0.4 ถึง 0.8 และที่ความหนาแน่นกระแส 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร จะมีผลการทำนายที่ใกล้เคียงที่สัดส่วนเชิงโมลเชื้อเพลิงไฮโดรเจนที่ 0.5 ถึง 0.8



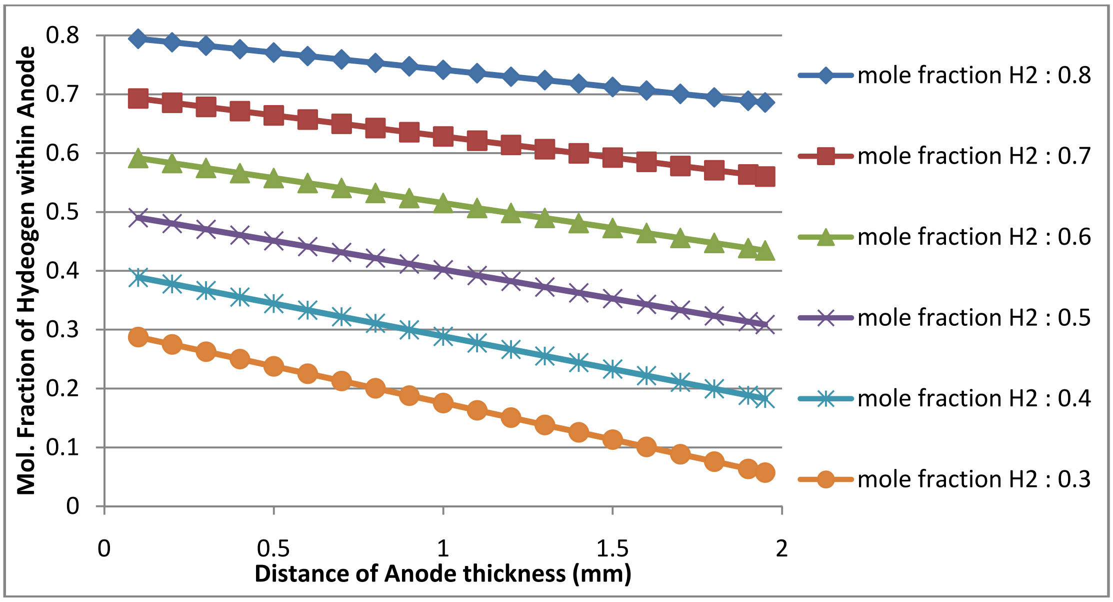
ภาพที่ 5.12 ผลการคำนวณค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่ค่าความหนาแน่นกระแสของระบบ 0.3, 0.7, 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร และสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงที่ 0.1 ถึง 0.8 จากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ด้วยสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ ระบบ H_2-H_2O-Ar เปรียบเทียบกับงานวิจัยของ Yakabe, H. et al. [5] ที่อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ โดยเส้นทึบคือ ผลที่ได้จากการคำนวณ และเส้นประคือ ผลที่ได้จากการทดลองจริง



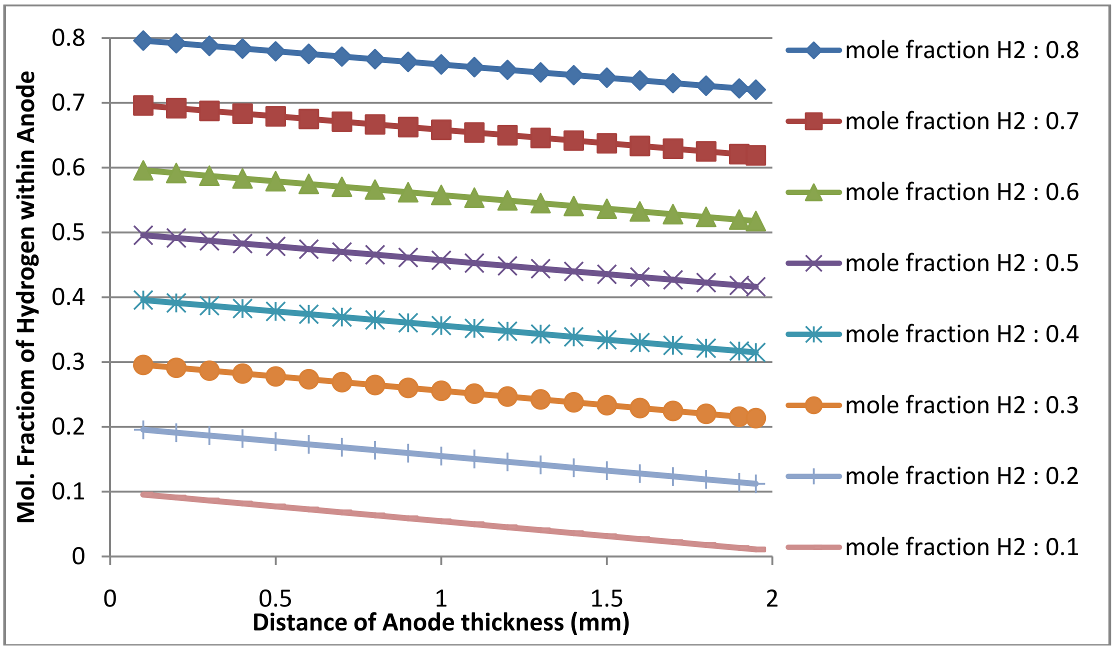
ภาพที่ 5.13 ผลการคำนวณค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่ค่าความหนาแน่นกระแสของระบบ 0.1, 0.3, 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร และสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงที่ 0.1 ถึง 0.8 จากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ด้วยสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ระบบ CO-CO_2 เปรียบเทียบกับงานวิจัยของ Yakabe, H. et al. [5] ที่อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ โดยเส้นทึบคือ ผลที่ได้จากการคำนวณ และเส้นประคือ ผลที่ได้จากการทดลองจริง

จากภาพที่ 5.13 ผลการทดลองด้วยการใช้สมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ทำนายถึงค่าการแพร่ผ่านของแก๊สภายในระบบที่ส่งผลถึงค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้น ที่ความหนาแน่นกระแส 0.1, 0.3 และ 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ โดยเชื้อเพลิงที่ใช้คือ ระบบ CO-CO_2 เมื่อเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Yakabe, H. et al. [5] พบว่าสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์สามารถทำนายค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นได้ใกล้เคียงกับผลการทดลองของ Yakabe, H. et al. [5] เมื่อทดลองโดยใช้ค่าความหนาแน่นกระแสที่ไม่สูงนัก ซึ่งเห็นได้ว่าที่ค่าความหนาแน่นกระแส 0.1 และ 0.3 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร จะให้ผลที่ใกล้เคียงกับการทดลองของ Yakabe, H. et al. [5] ในช่วงสัดส่วนเชิงโมล ของเชื้อเพลิงคาร์บอนมอนอกไซด์ประมาณ 0.15 ถึง 0.64 และ 0.3 ถึง 0.64 ตามลำดับ ส่วนที่ความหนาแน่นกระแส 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร พบว่าผลการทดลองที่ได้ไม่ใกล้เคียงกับผลการทดลองของ Yakabe, H. et al. [5] ซึ่งถือได้ว่าไม่ใช่ค่าความหนาแน่นกระแสที่หวังผลได้สำหรับการใช้สมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ในการทำนายค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้น

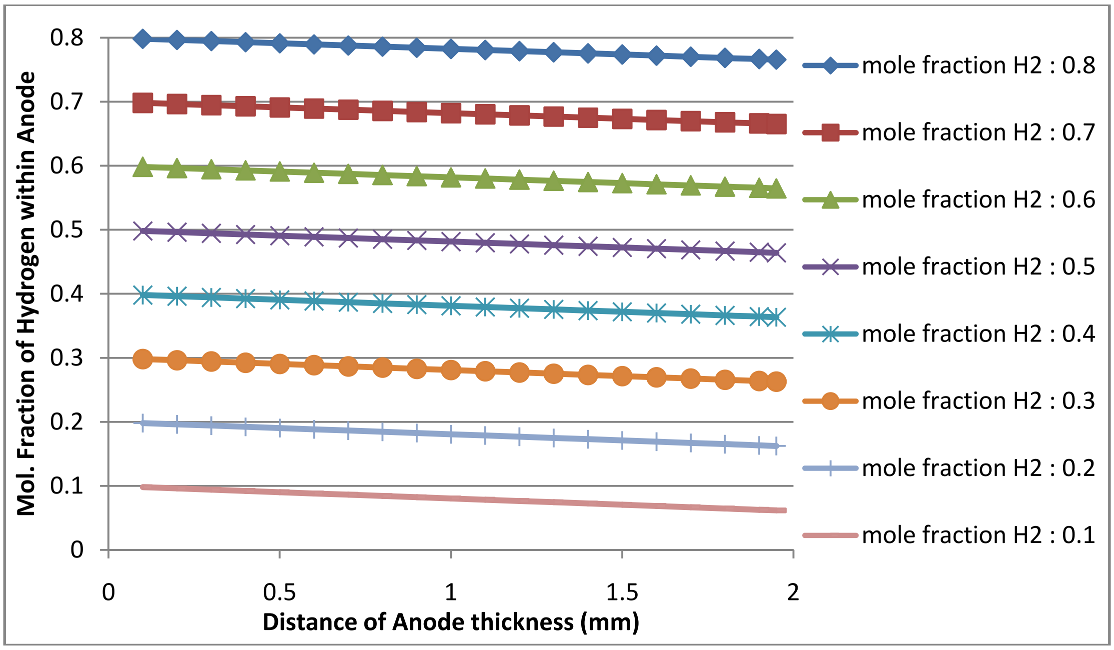
เมื่อพิจารณาสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงที่เปลี่ยนแปลงไปตามระยะทางตามแนวตั้งหรือตามความหนาของขั้วแอโนด แสดงดังภาพที่ 5.14, 5.15 และ 5.16 เป็นระบบแก๊สไฮโดรเจนที่ค่าความหนาแน่นกระแสคงที่ 1.0, 0.7 และ 0.3 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร ตามลำดับ และภาพที่ 5.17, 5.18 และ 5.19 เป็นระบบแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ที่ค่าความหนาแน่นกระแสคงที่ 0.5, 0.3 และ 0.1 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร ตามลำดับ ซึ่งผลที่ได้ยังคงมีแนวโน้มในทางเดียวกันกับสมการการแพร่ของฟิค



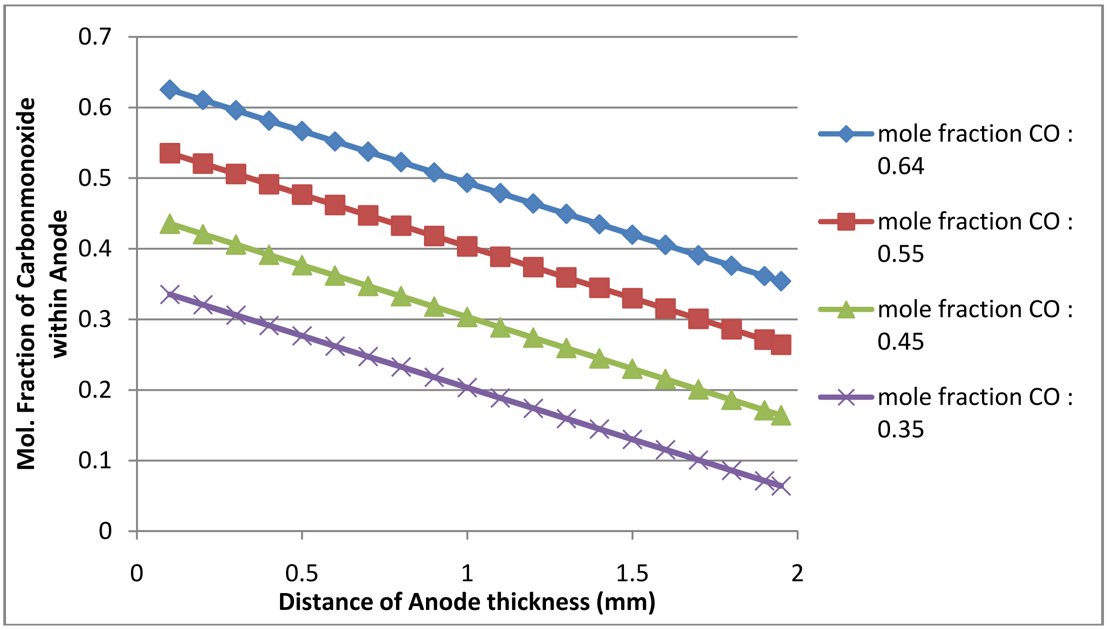
ภาพที่ 5.14 การเปลี่ยนแปลงสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนตามระยะความหนาของขั้วแอโนด ที่ความหนาแน่นกระแส 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร โดยสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์



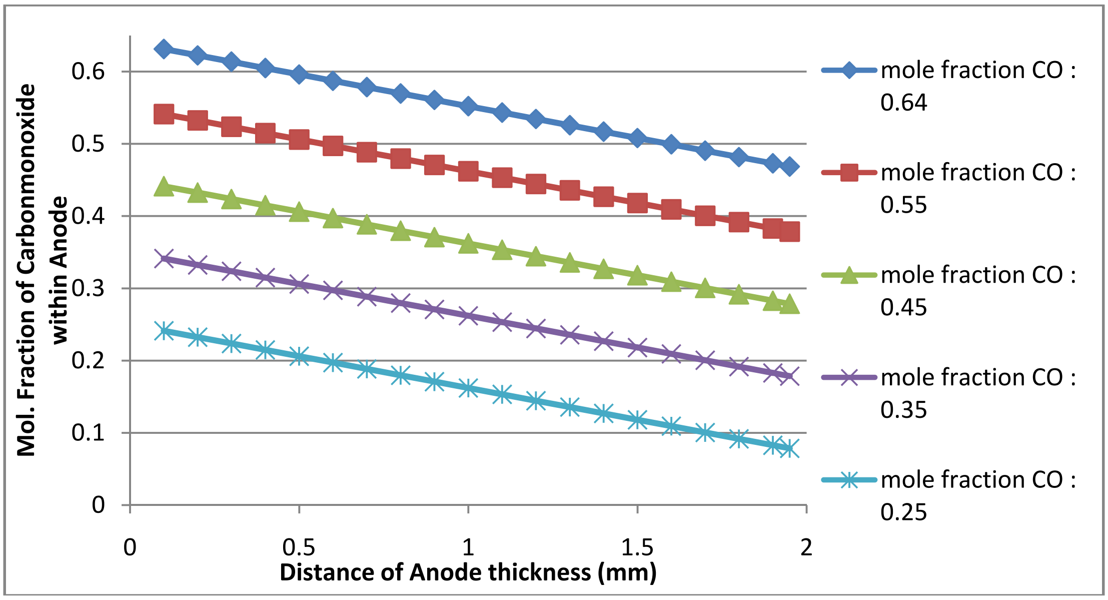
ภาพที่ 5.15 การเปลี่ยนแปลงสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนตามระยะความหนาของขั้วแอโนด ที่ความหนาแน่นกระแส 0.7 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร โดยสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์



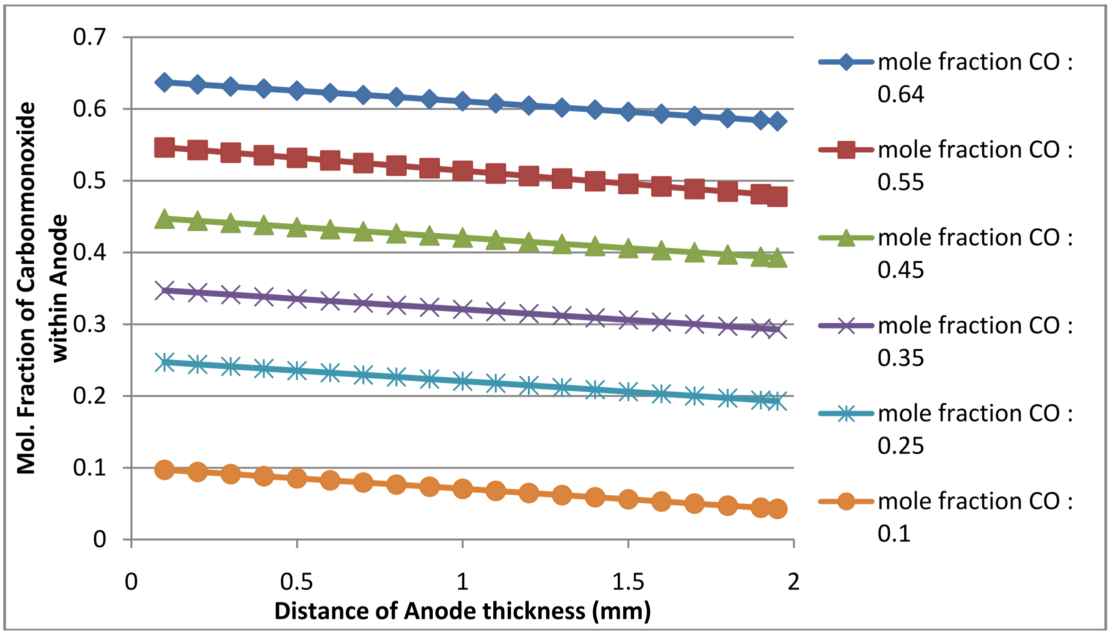
ภาพที่ 5.16 การเปลี่ยนแปลงสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนตามระยะความหนาของแอโนด ที่ความหนาแน่นกระแส 0.3 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร โดยสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์



ภาพที่ 5.17 การเปลี่ยนแปลงสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงคาร์บอนมอนอกไซด์ตามระยะความหนาของขั้วแอโนด ที่ความหนาแน่นกระแส 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร โดยสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์



ภาพที่ 5.18 การเปลี่ยนแปลงสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงคาร์บอนมอนอกไซด์ตามระยะความหนาของแอโนด ที่ความหนาแน่นกระแส 0.3 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร โดยสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์



รูปที่ 5.19 การเปลี่ยนแปลงสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงคาร์บอนมอนอกไซด์ตามระยะความหนาของขั้วแอโนด ที่ความหนาแน่นกระแส 0.1 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร โดยสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์

5.2 การถ่ายเทมวลสารที่เกิดการเปลี่ยนของความเข้มข้นภายในสายป้อนของขั้วแอโนด

การศึกษาการถ่ายเทมวลสารที่เกิดการเปลี่ยนของความเข้มข้นภายในสายป้อนของขั้วแอโนด ซึ่งถือว่าความเข้มข้นในสายป้อนภายในขั้วแอโนดเกิดการเปลี่ยนแปลงเนื่องจากเชื้อเพลิงที่ถูกดึงไปใช้ตามระยะทางที่เคลื่อนที่ ซึ่งส่งผลให้ค่าความหนาแน่นกระแสของระบบลดลง โดยเป็นไปตามกฎของฟาราเดย์ [1, 6] เมื่อเป็นเช่นนั้นเท่ากับว่าสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงแปรผันตรงกับความหนาแน่นกระแสของระบบ เป็นไปตามสมการที่ (5-1) [42] และค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นมีผลจากการแพร่ของสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงที่เปลี่ยนแปลงไปตามระยะทางเช่นกัน ซึ่งหัวข้อนี้ใช้สมการการแพร่ของฟิค (Fick diffusion equation) และสมการการแพร่ของสเตฟาน-แม็คเวลล์ (Stefan-Maxwell equation) ในการทำนายค่าสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงและสารเคมีในระบบ เพื่อนำผลการทดลองที่ได้ถูกคำนึงถึงการเปลี่ยนแปลงของเชื้อเพลิงภายในสารป้อน และค่าความหนาแน่นกระแสของระบบ ไปเปรียบเทียบกับผลการทดลองที่ได้จากหัวข้อที่ 5.1

$$N_i = y_i N_t = \frac{i}{nAF} \tag{5-1}$$

เมื่อ N_i คือ ฟลักซ์เชิงโมลของสาร i, (mol/(cm^2.s))

N_t คือ ฟลักซ์เชิงโมลของระบบ, (mol/(cm^2.s))

y_i คือ สัดส่วนเชิงโมลของสาร i

n คือ จำนวนอิเล็กตรอนอิสระของระบบต่อ 1 โมเลกุล

A คือ พื้นที่หน้าตัด, (cm^2)

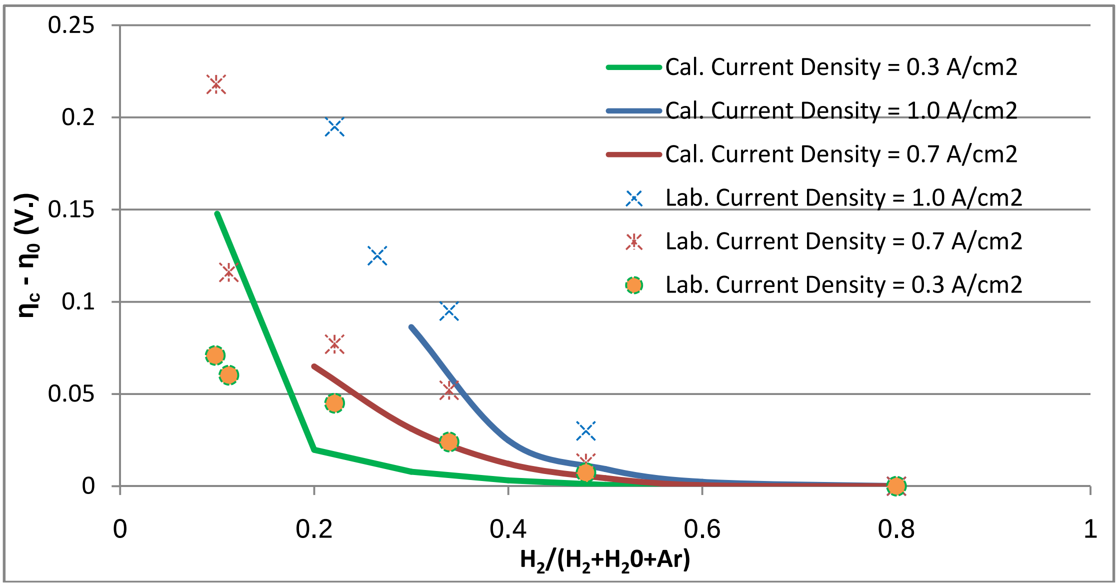
สำหรับหัวข้อนี้จะใช้วิธีการเดียวกันกับหัวข้อที่ 5.1 ซึ่งใช้หลักการเปรียบเทียบผลการทดลองที่ได้จากการทำนายกับผลการทดลองของ Yakabe, H. et al. [5] สำหรับเชื้อเพลิงระบบ H_2-H_2O-Ar และ CO-CO_2

5.2.1 ทำนายพฤตติกรรมแก๊สในระบบด้วยสมการการแพร่ของฟิค

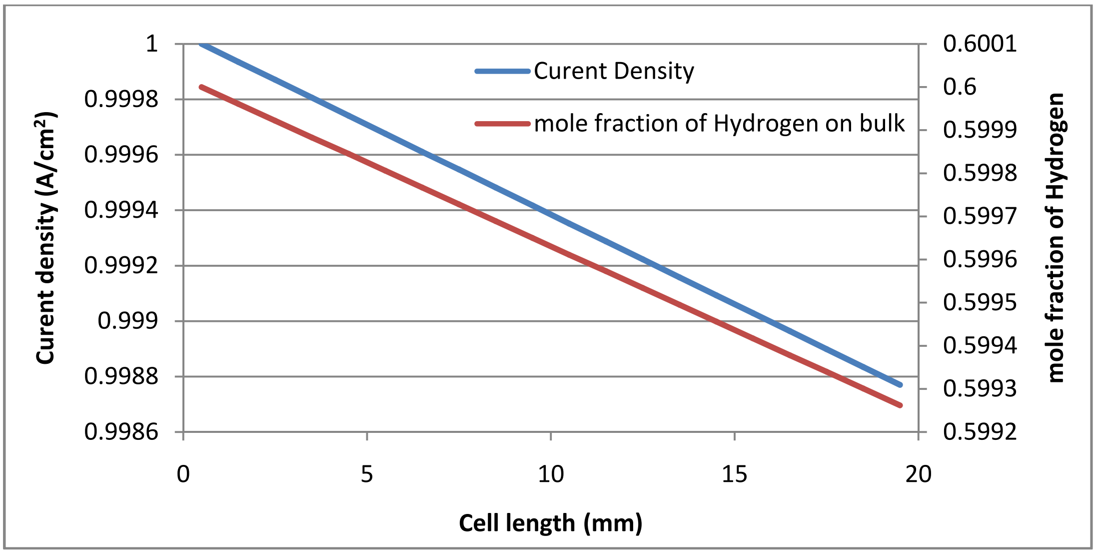
หัวข้อนี้ใช้สมการตามกฎขอฟิคอธิบายและทำนายถึงการแพร่ของของไหลภายในขั้วแอโนด ซึ่งเป็นเช่นเดียวกับหัวข้อที่ 5.1.1 แต่ได้คำนึงถึงการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นของเชื้อเพลิงในรูปของสัดส่วนเชิงโมลภายในสายป้อน ผลกระทบที่เกิดจากการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นของเชื้อเพลิงภายในสายป้อนต่อค่าความหนาแน่นกระแสของระบบ และค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่เปลี่ยนแปลงไปตามระยะทาง

จากภาพที่ 5.20 แสดงถึงค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่คำนวณได้เปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Yakabe, H. et al. [5] ที่ค่าสัดส่วนเชิงโมลตั้งแต่ 0.1 ถึง 0.8 ของระบบ H_2-H_2O-Ar และค่าความหนาแน่นกระแส 0.3, 0.7 และ 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร เห็นได้ว่าบริเวณที่เกิดการซ้อนทับกันระหว่างเส้นที่ได้จากการคำนวณและเส้นที่ได้จากการทดลองนั้นมีอยู่น้อยมาก ซึ่งมีช่วงที่ได้ผลใกล้เคียงกันที่ค่าความหนาแน่นกระแส 0.3 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร และสัดส่วนเชิงโมลประมาณ 0.6 ถึง 0.8 เท่านั้น สำหรับค่าความหนาแน่นกระแสอื่นๆ ได้ผลที่ไม่ใกล้เคียง และเมื่อลองมองเปรียบเทียบผลที่ได้จากภาพที่ 5.20 กับ ภาพที่ 5.21 พบว่าการทำนายพฤตติกรรมแก๊สในระบบด้วยสมการการแพร่ของฟิคโดยไม่เกิดการเปลี่ยนของสัดส่วนเชิงโมล ของเชื้อเพลิงภายในสายป้อนนั้นมีความแม่นยำกว่ามาก ผลที่เกิดขึ้นดังกล่าวมีความเป็นไปได้จากการเปลี่ยนแปลงค่าความหนาแน่นกระแสของระบบที่ลดลงแสดงดังภาพที่ 5.21 และ 5.22 เพราะเนื่องจากผลการทดลองที่ผ่านมาจะพบว่าที่ค่าความหนาแน่นกระแสสูงๆ จะมีค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่สูงกว่าระบบที่มีค่าความหนาแน่นกระแสต่ำกว่า อันส่งผลให้ค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นค่อยๆ ลดลงไปตามระยะทางเช่นกัน จึงเป็นไปได้ว่าค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่คำนวณได้จากวิธีนี้จะได้ผลที่ต่ำกว่าความเป็นจริงสำหรับระบบ H_2-H_2O-Ar

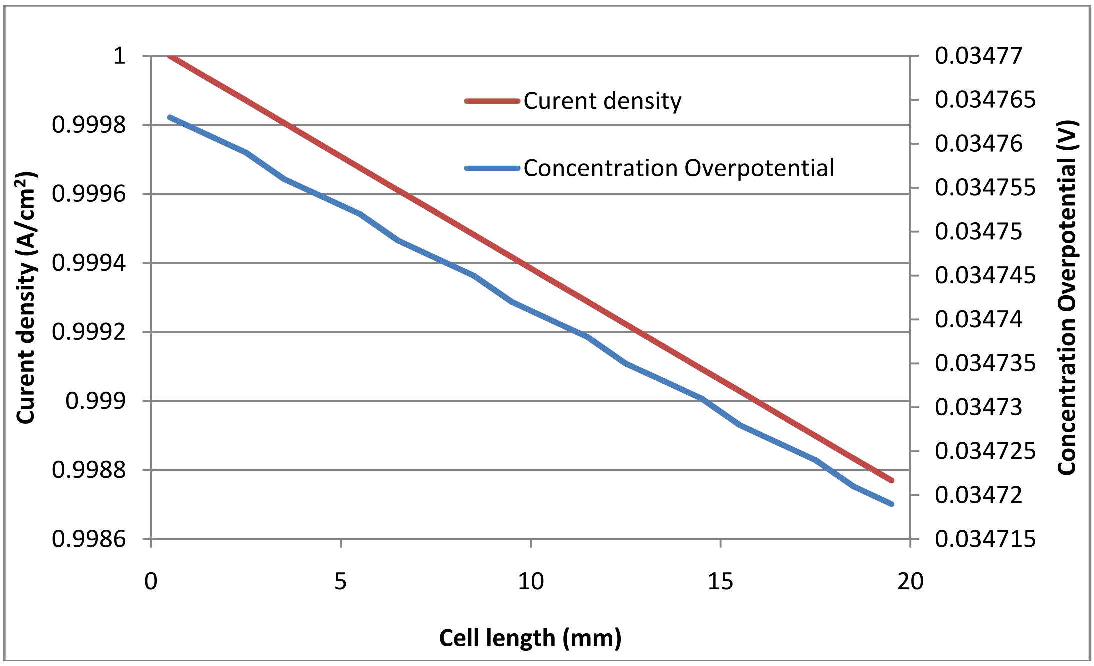
ภาพที่ 5.23 และ 5.24 แสดงถึงการเปลี่ยนแปลงที่น้อยมากของค่าความหนาแน่นกระแสและค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 0.3, 0.7 และ 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร ตามลำดับ ซึ่งด้วยเหตุนี้ทำให้ในหลายๆ งานวิจัยเมื่อทำการทดลองโดยใช้เซลล์เชื้อเพลิงชนิดเซลล์เดี่ยว (single cell) ที่มีขนาดเล็กและสั้นไม่เกิน 20 มิลลิเมตร ใช้ขอสมมติฐานให้สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงภายในระบบของสายป้อนไม่มีการเปลี่ยนแปลง



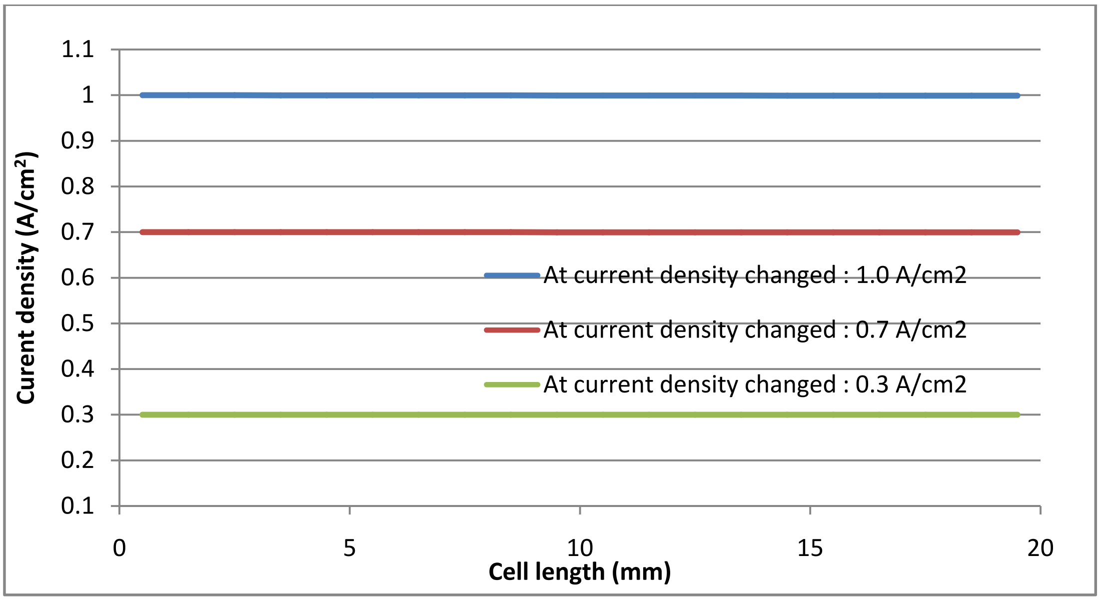
ภาพที่ 5.20 ผลการคำนวณค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้นของระบบ 0.3, 0.7, 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร และสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงที่ 0.1 ถึง 0.8 จากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ด้วยสมการการแพร่ของฟิคระบบ H_2-H_2O-Ar เปรียบเทียบกับงานวิจัยของ Yakabe, H. et al. [5] ที่อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ โดยเส้นทึบคือ ผลที่ได้จากการคำนวณ และเส้นประคือ ผลที่ได้จากการทดลองจริง



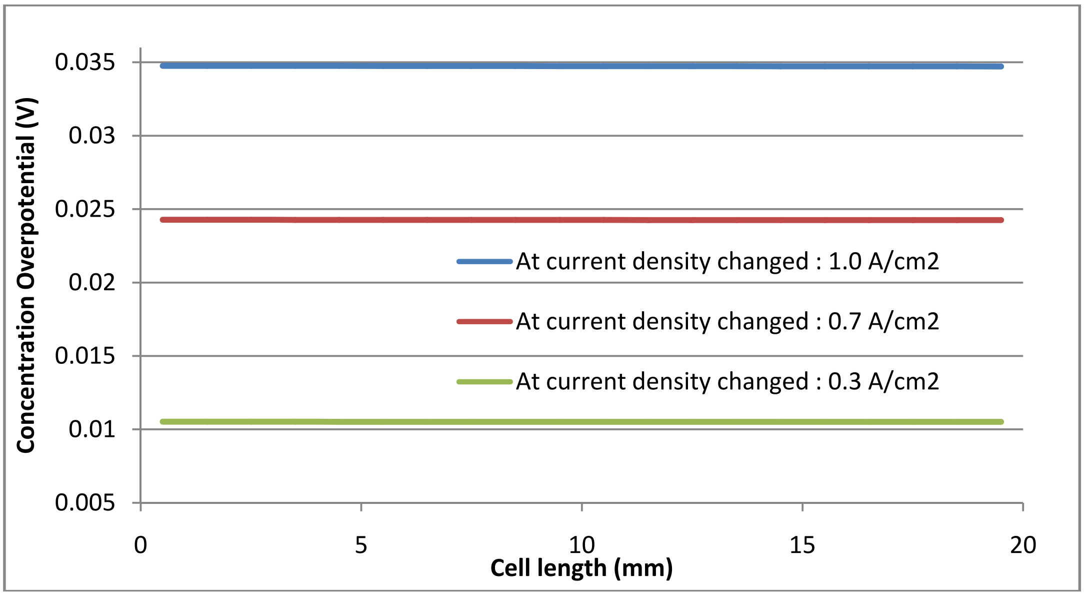
ภาพที่ 5.21 การเปลี่ยนแปลงของค่าความหนาแน่นกระแสกับสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนตามระยะทาง ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.6 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ



ภาพที่ 5.22 การเปลี่ยนแปลงของค่าความหนาแน่นกระแสกับค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นตามระยะทาง ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.6 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ

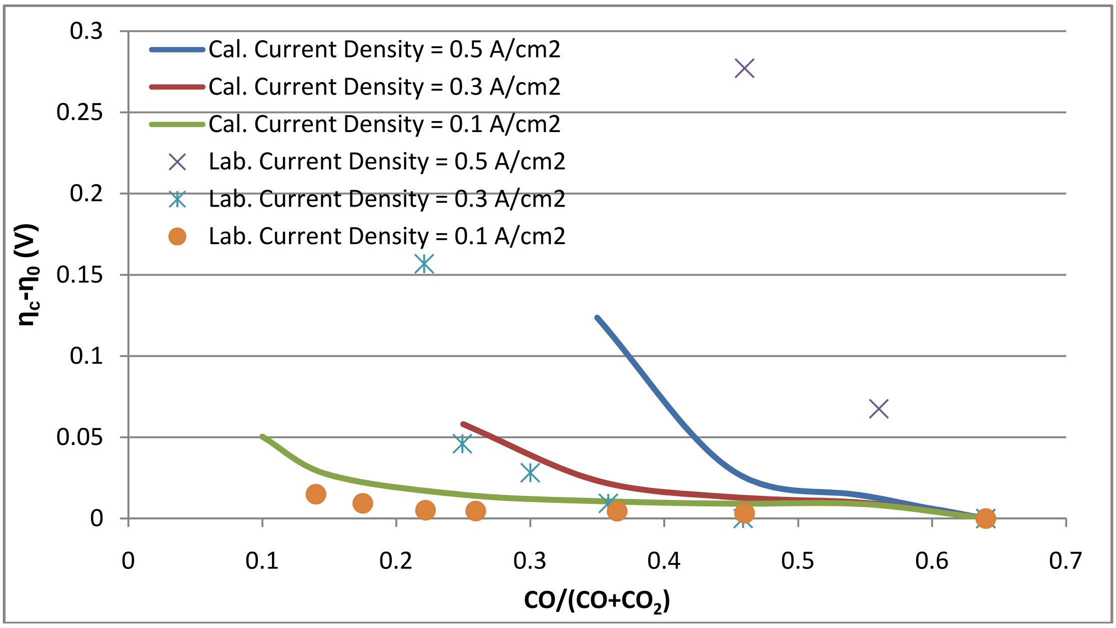


ภาพที่ 5.23 การเปลี่ยนแปลงของค่าความหนาแน่นกระแสตามระยะทาง ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 0.3, 0.7 และ 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.6 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ



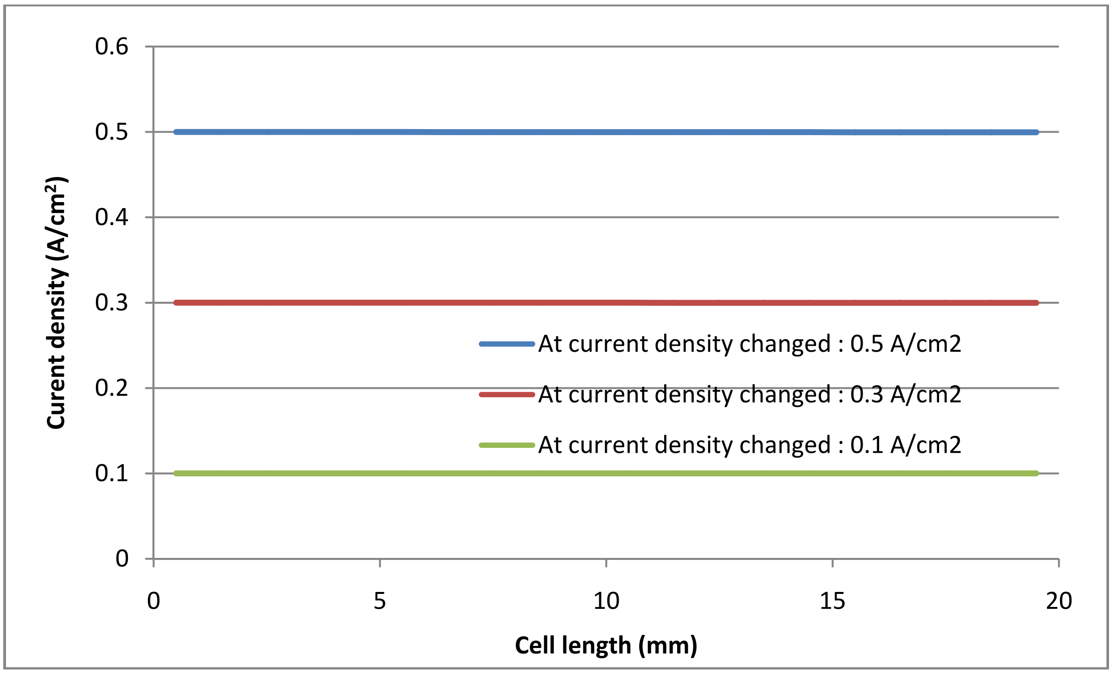
ภาพที่ 5.24 การเปลี่ยนแปลงของค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นตามระยะทาง ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 0.3, 0.7 และ 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.6 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ

ภาพที่ 5.25 แสดงถึงค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่คำนวณได้เปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Yakabe, H. et al. [5] ที่ค่าสัดส่วนเชิงโมลตั้งแต่ 0.1 ถึง 0.64 และค่าความหนาแน่นกระแส 0.1, 0.3 และ 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร ของระบบ CO-CO_2 เห็นได้ว่าบริเวณที่เกิดการซ้อนทับกันระหว่างผลการทดลองที่ได้จากการคำนวณและผลการทดลองเกิดขึ้นที่ค่าความหนาแน่นกระแส 0.1 และ 0.3 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร ในช่วงของสัดส่วนเชิงโมล 0.15 ถึง 0.64 และ 0.25 ถึง 0.64 ตามลำดับ ส่วนที่ค่าความหนาแน่นกระ 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร ไม่มีช่วงใดที่ซ้อนทับหรือใกล้เคียง ซึ่งแสดงว่าสมการการแพร่ของฟิคมีความสามารถในการทำนายผลของค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นของระบบ CO-CO_2 ได้ดีกว่าระบบ H_2-H_2O-Ar

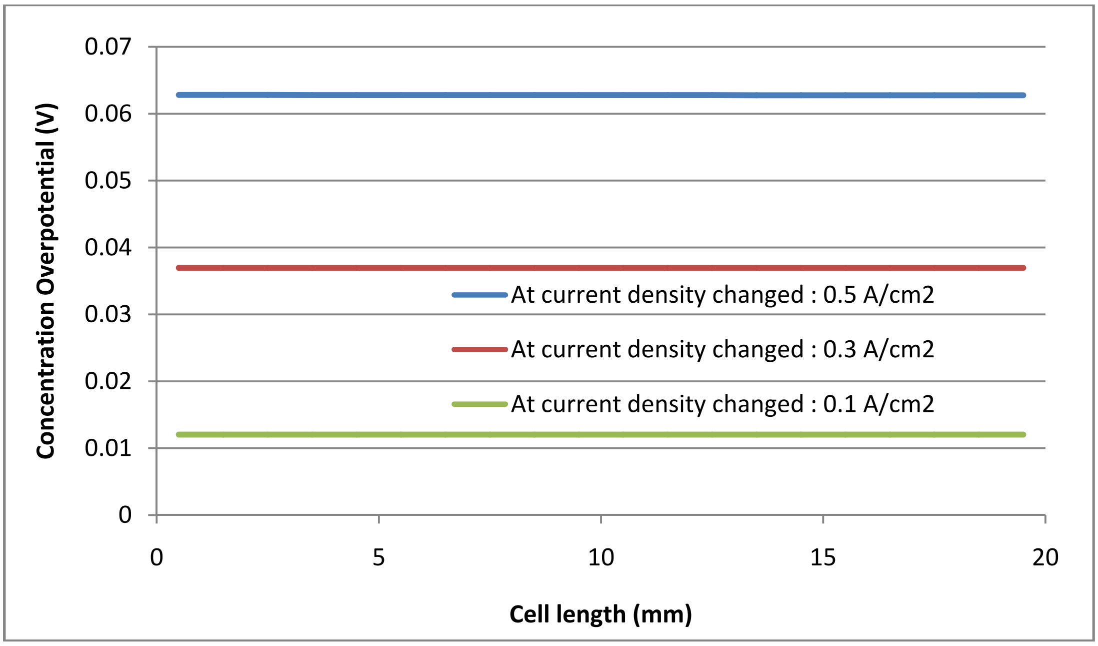


ภาพที่ 5.25 ผลการคำนวณค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้นของระบบ 0.1, 0.3, 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร และสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงที่ 0.1 ถึง 0.8 จากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ด้วยสมการการแพร่ของฟิคระบบ CO-CO_2 เปรียบเทียบกับงานวิจัยของ Yakabe, H. et al. [1] ที่อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ โดยเส้นทึบคือ ผลที่ได้จากการคำนวณ และเส้นประคือ ผลที่ได้จากการทดลองจริง

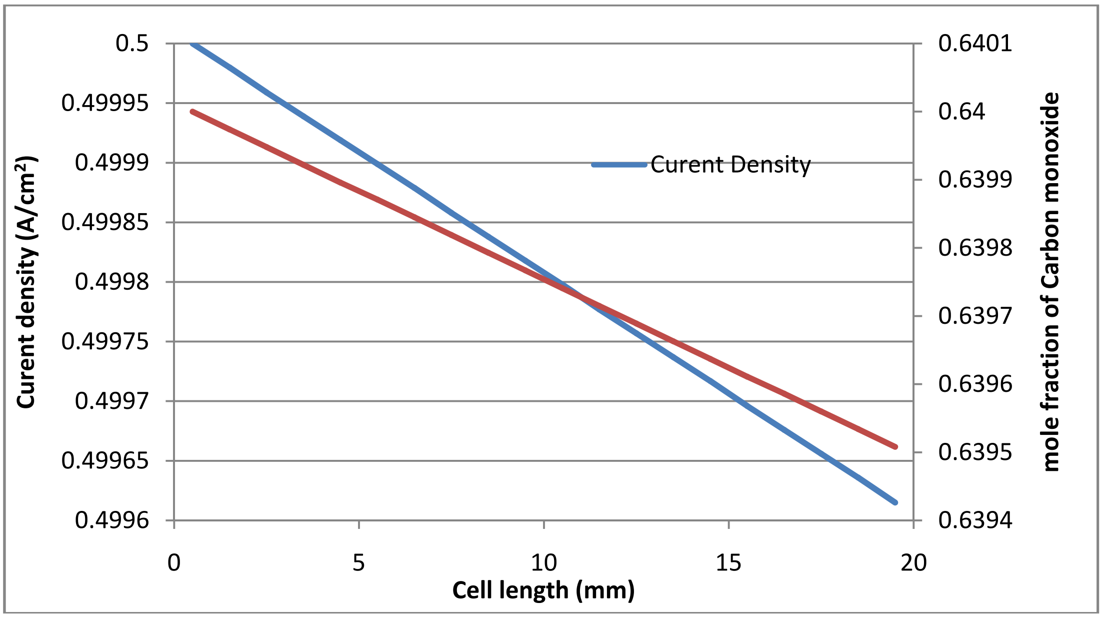
เมื่อเปรียบเทียบผลการทดลองที่ได้แสดงดังภาพที่ 5.2 กับภาพที่ 5.25 พบว่าระหว่างระบบที่เกิดการเปลี่ยนสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงคาร์บอนมอนอกไซด์ภายในสายป้อนกับระบบที่ไม่มีการเปลี่ยนแปลงให้ผลที่ได้ใกล้เคียงกันมาก ซึ่งอาจเป็นเพราะด้วยผลของการเปลี่ยนแปลงค่าความหนาแน่นกระแสที่เกิดขึ้นน้อยมาก ผลที่ได้จากหัวข้อนี้อาจกล่าวได้ว่าสมการการแพร่ของฟิคอาจจะเหมาะกับการวิเคราะห์โมเลกุลแก๊สที่มีขนาดใหญ่กว่าแก๊สไฮโดรเจน เมื่อพิจารณ์ค่าความหนาแน่นกระแสที่เปลี่ยนแปลงตามระยะทางและค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นตามระยะทางดังภาพที่ 5.26 และ 5.27 เห็นได้ว่าการเปลี่ยนแปลงที่เกิดขึ้นเป็นเส้นตรงที่ดูเหมือนไม่มีการเปลี่ยนแปลง แต่เมื่อลองมองอย่างละเอียดจะพบการเปลี่ยนแปลงที่เกิดขึ้นดังภาพที่ 5.28 และ 5.29 เป็นการเปลี่ยนแปลงของค่าความหนาแน่นกระแสของระบบตามระยะทางและการเปลี่ยนแปลงค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นตามระยะทางตามลำดับ ที่ค่าความหนาแน่นกระแสของระบบเริ่มต้น 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ในสายป้อนที่เริ่มต้น 0.64 พบว่าค่าความหนาแน่นกระแสของระบบ ค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้น และสัดส่วนเชิงโมลแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ภายในสายป้อน มีลักษณะการลดต่ำลงตามระยะทางเป็นเส้นตรง และมีการเปลี่ยนแปลงที่น้อยมาก



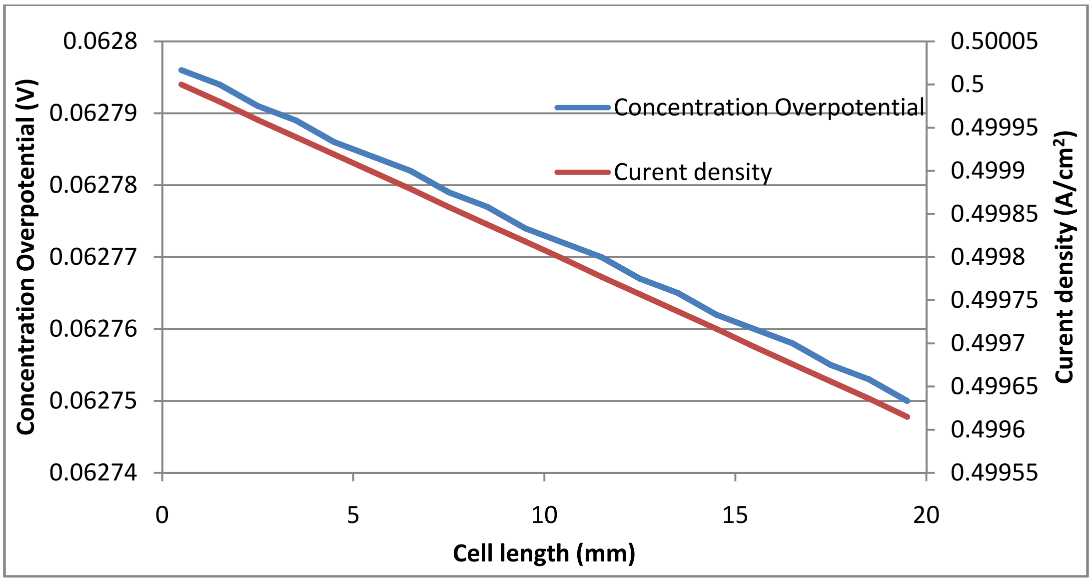
ภาพที่ 5.26 การเปลี่ยนแปลงของค่าความหนาแน่นกระแสตามระยะทาง ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 0.1, 0.3 และ 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.64 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ



ภาพที่ 5.27 การเปลี่ยนแปลงของค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นตามระยะทาง ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 0.1, 0.3 และ 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.64 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ



ภาพที่ 5.28 การเปลี่ยนแปลงของค่าความหนาแน่นกระแสกับสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนตามระยะทาง ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 0.3 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.64 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ

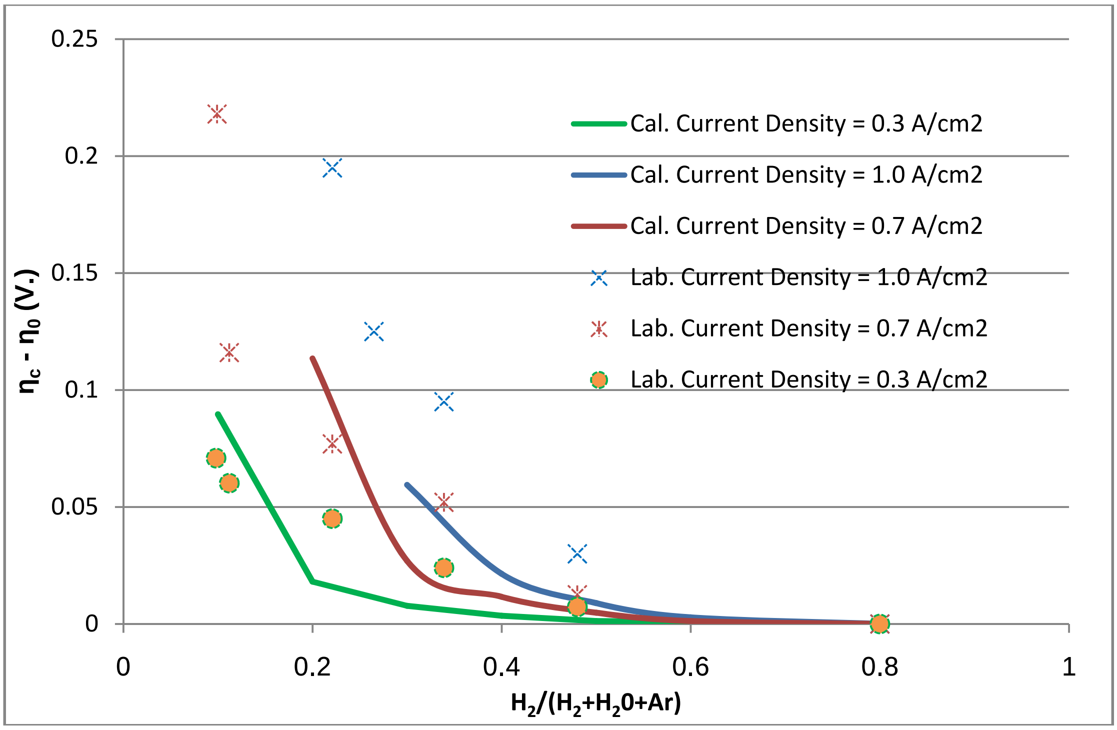


ภาพที่ 5.29 การเปลี่ยนแปลงของค่าความหนาแน่นกระแสกับค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นตามระยะทาง ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 0.3 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.64 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ

ผลการทดลองที่ได้จากทั้งสองระบบเชื้อเพลิงคือ ระบบ H_2-H_2O-Ar และระบบ CO-CO_2 จะเห็นได้ว่าค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นมีแนวโน้มที่ลดลงตามระยะทาง ซึ่งอาจจะขัดต่อความน่าจะเป็นที่ว่าเมื่อสัดส่วนเชิงโมลหรือความเข้มข้นของเชื้อเพลิงภายในสายป้อนลดลงตามระยะทาง ค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นควรจะเพิ่มขึ้นตามระยะทางด้วย แต่ผลที่ได้กลับตรงกันข้าม เพราะการลดลงของสัดส่วนเชิงโมลหรือความเข้มข้นของเชื้อเพลิงภายในสายป้อนของระบบตามระยะทาง ทำให้ค่าความหนาแน่นกระแสของระบบเกิดการลดลงไปด้วย ผลที่เกิดขึ้นส่งผลให้ค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นลดลงตามระยะทาง

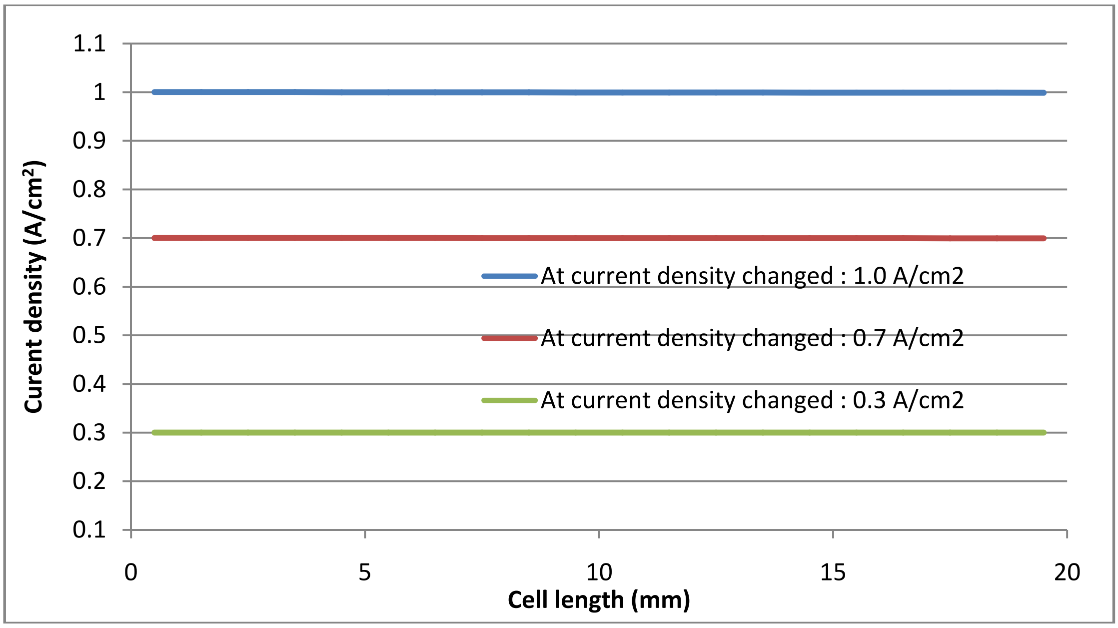
5.2.2 ทำนายพฤตติกรรมแก๊สในระบบด้วยสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์

หัวข้อนี้ใช้สมการสเตฟาน-แม็คเวลล์อธิบายและทำนายถึงการแพร่ของของไหลภายในขั้วแอโนด ซึ่งเป็นเช่นเดียวกับหัวข้อที่ 5.1.2 แต่ได้คำนึงถึงการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นของเชื้อเพลิงในรูปของสัดส่วนเชิงโมลภายในสายป้อน ผลกระทบที่เกิดจากการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นของเชื้อเพลิงภายในสายป้อนต่อความหนาแน่นกระแสของระบบ และค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นเปลี่ยนแปลงไปตามระยะทาง

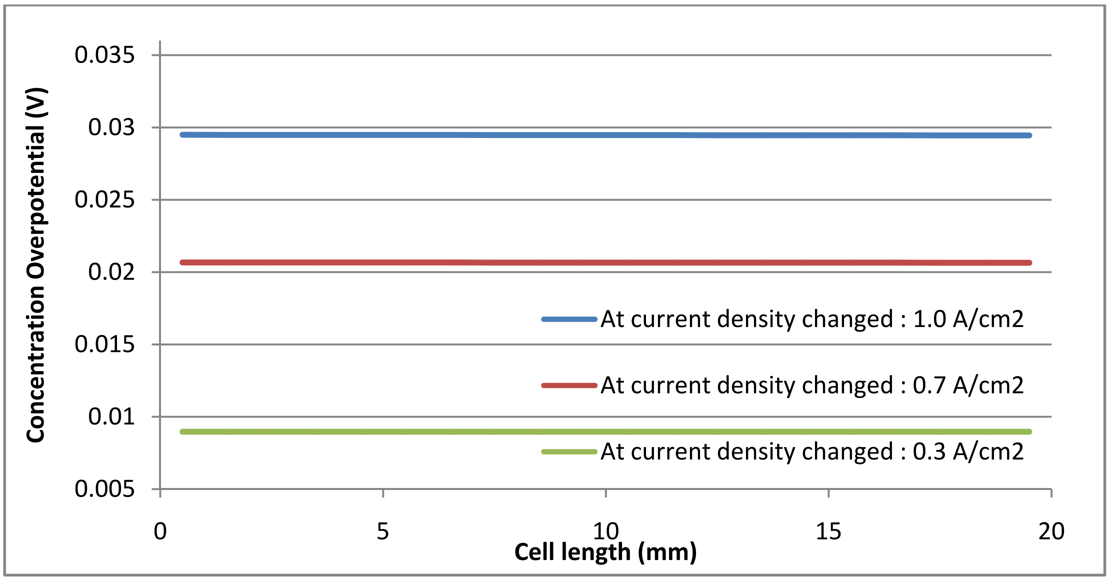


ภาพที่ 5.30 ผลการคำนวณค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้นของระบบ 0.3, 0.7, 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร และสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงที่ 0.1 ถึง 0.8 จากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ด้วยสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ระบบ H_2-H_2O-Ar เปรียบเทียบกับงานวิจัยของ Yakabe, H. et al. [5] ที่อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ โดยเส้นทึบคือ ผลที่ได้จากการคำนวณ และเส้นประคือ ผลที่ได้จากการทดลองจริง

จากภาพที่ 5.30 แสดงถึงค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่คำนวณได้เปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Yakabe, H. et al. [5] ที่ค่าสัดส่วนเชิงโมลตั้งแต่ 0.1 ถึง 0.8 ของระบบ H_2-H_2O-Ar และค่าความหนาแน่นกระแส 0.3, 0.7 และ 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร ผลการทดลองแสดงให้เห็นว่าสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ไม่สามารถทำนายพฤติกรรมการแพร่ของแก๊สระบบ H_2-H_2O-Ar ที่ทำให้เกิดค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นได้ เห็นได้ว่าไม่มีส่วนใดของเส้นกราฟเกิดการซ้อนทับกัน แต่ช่วงที่ใกล้เคียงที่สุดคือ ที่ความหนาแน่นกระแส 0.3 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมล 0.6 ถึง 0.8 และเมื่อสังเกตค่าสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงเมื่อสัดส่วนเชิงโมลลดต่ำลงทำให้ค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นยิ่งลดต่ำลงออกห่างจากความเป็นจริงมากขึ้นในทุกค่าความหนาแน่นกระแส เมื่อเปรียบเทียบผลที่ได้ระหว่างภาพที่ 5.30 กับภาพที่ 5.12 ในหัวข้อที่ 5.1.2 พบว่าผลที่ได้จากระบบที่ไม่พิจารณาการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นของเชื้อเพลิงภายในสายป้อนได้ผลที่ได้ดีกว่าในทุกช่วงความหนาแน่นกระแส

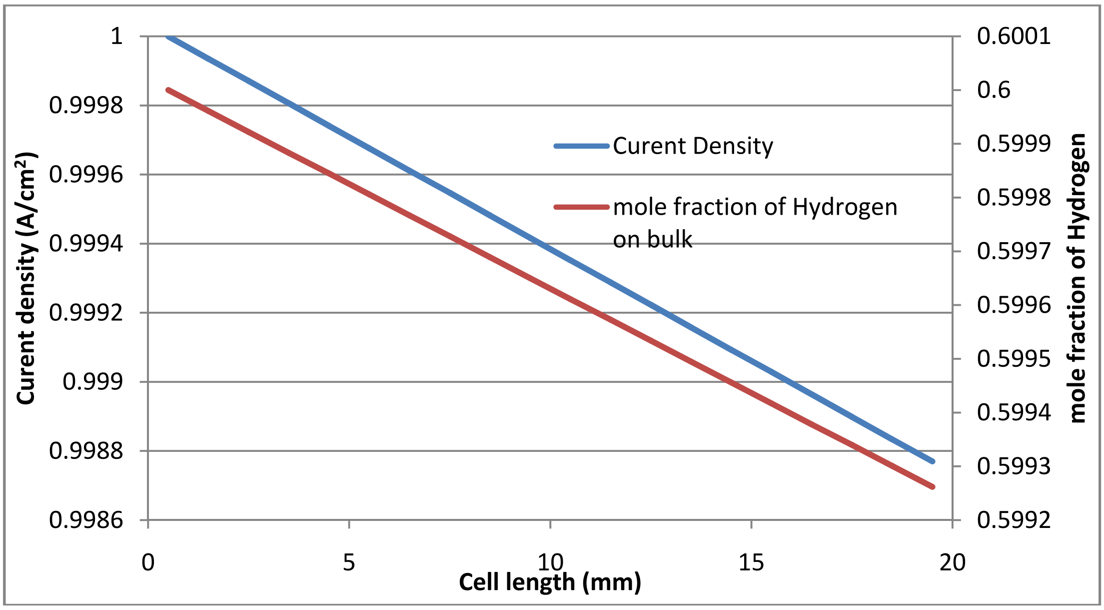


ภาพที่ 5.31 การเปลี่ยนแปลงของค่าความหนาแน่นกระแสตามระยะทาง ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 0.3, 0.7 และ 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.6 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ

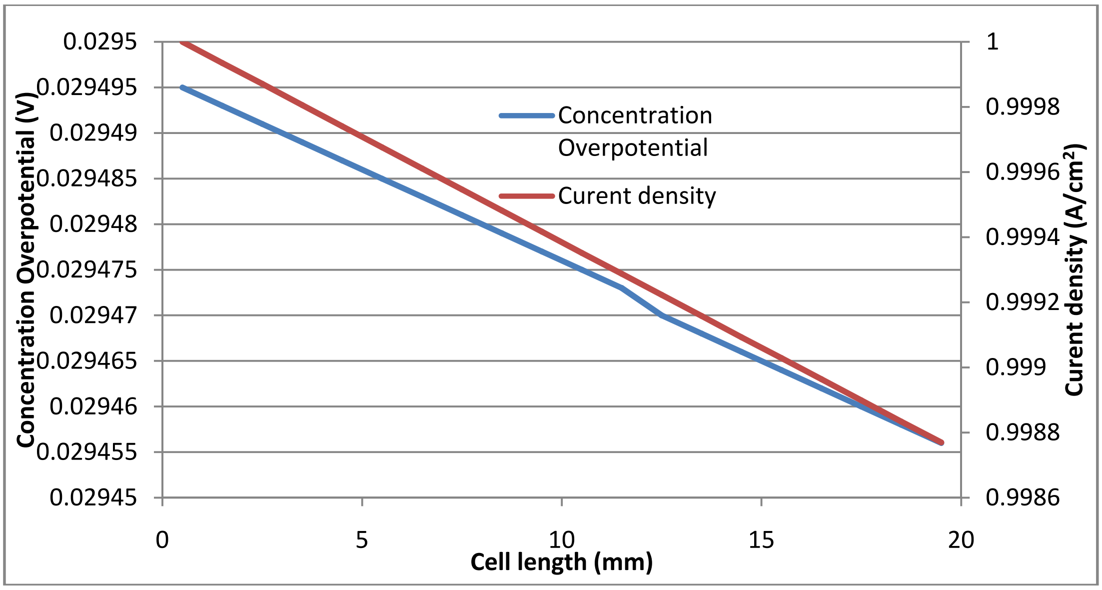


ภาพที่ 5.32 การเปลี่ยนแปลงของค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นตามระยะทาง ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 0.3, 0.7 และ 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.6 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ

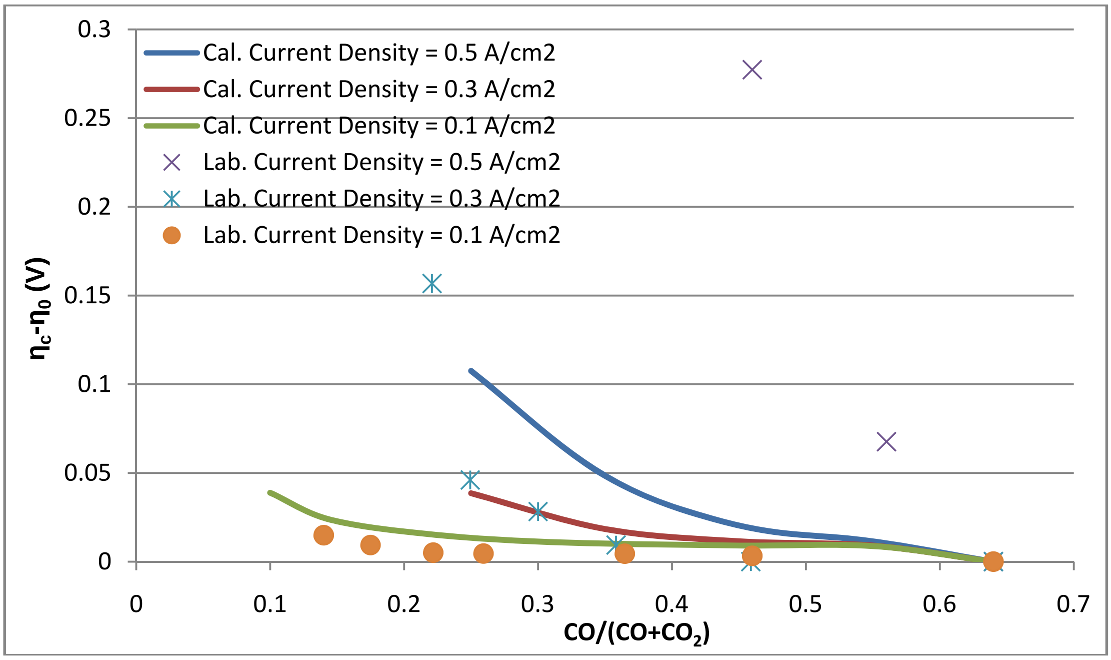
จากภาพที่ 5.31 และภาพที่ 5.32 แสดงถึงการเปลี่ยนแปลงที่เกิดขึ้นของค่าความหนาแน่นกระแสและค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นตามระยะทางตามลำดับ โดยกำหนดค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้นที่ 0.3, 0.7 และ 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.6 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ เห็นได้ว่าผลการทดลองที่ได้มีการเปลี่ยนแปลงที่เกิดขึ้นเพียงเล็กน้อยจนไม่สามารถสังเกตเห็นได้ในช่วงสเกลความห่างของข้อมูลที่ต่ำ และเมื่อเลือกพิจารณาที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้นที่ 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลภายในสายป้อนที่จุดเริ่มต้นเท่ากับ 0.6 ดังภาพที่ 5.33 และภาพที่ 5.34 ซึ่งแสดงการเปลี่ยนของค่าความหนาแน่นกระแสและค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นตามระยะทางตามลำดับ จะเห็นได้ถึงการเปลี่ยนแปลงที่มีแนวโน้มเป็นเส้นตรงและลดลงตามระยะทางที่เชื้อเพลิงเคลื่อนที่ จากภาพที่ 5.33 แสดงให้เห็นว่าเมื่อเชื้อเพลิงในสายป้อนมีสัดส่วนเชิงโมลที่ค่อยๆ ลดลงตามระยะทาง ทำให้ค่าความหนาแน่นกระแสเกิดการลดลงด้วย ซึ่งส่งผลให้ค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นลดลงตามเช่นกัน แสดงดังภาพที่ 5.34 การลดลงเกิดขึ้นเพียงเล็กน้อยเนื่องจากระยะทางของเซลล์เชื้อเพลิงที่สั้น และการทดลองใช้ความความหนาแน่นกระแสที่ไม่สูงมาก



ภาพที่ 5.33 การเปลี่ยนแปลงของค่าความหนาแน่นกระแสกับสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนตามระยะทาง ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.6 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ

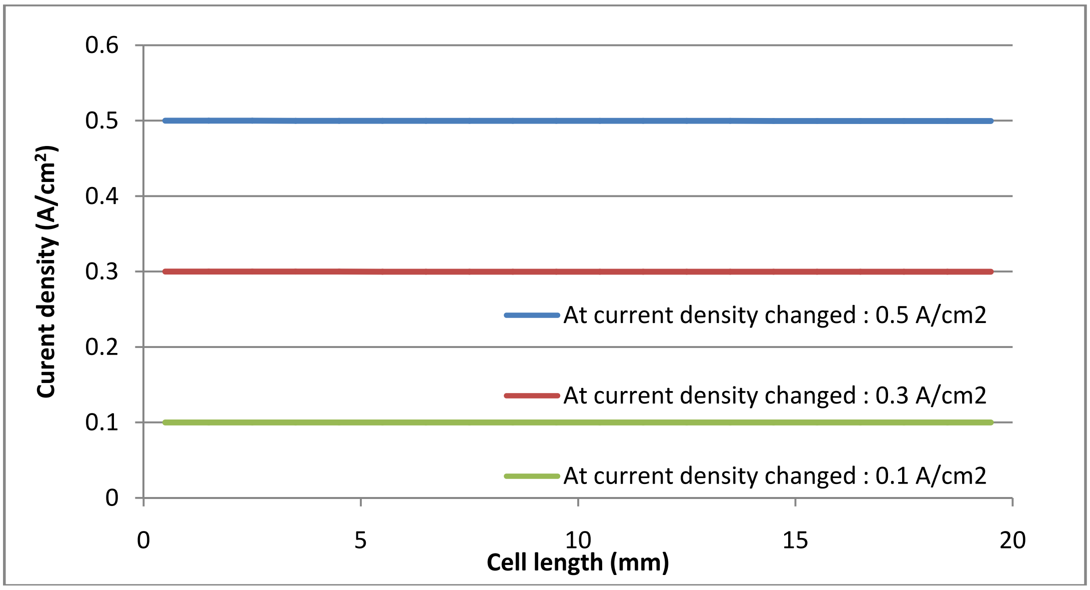


ภาพที่ 5.34 การเปลี่ยนแปลงของค่าความหนาแน่นกระแสกับค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นตามระยะทาง ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.6 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ

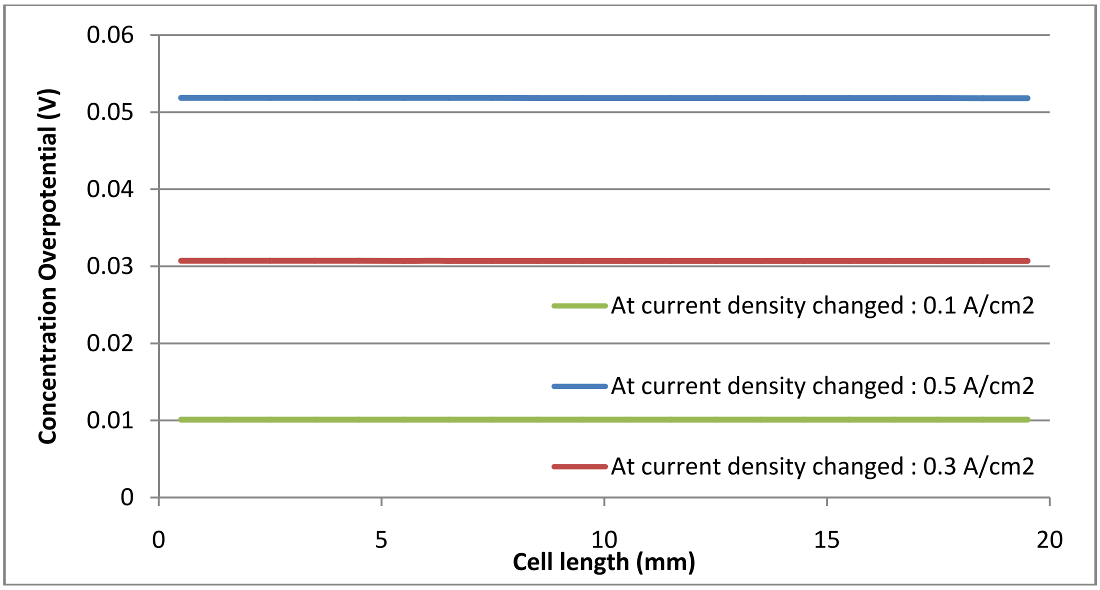


ภาพที่ 5.35 ผลการคำนวณค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้นของระบบ 0.1, 0.3, 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร และสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงที่ 0.1 ถึง 0.8 จากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ด้วยสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ระบบ CO-CO_2 เปรียบเทียบกับงานวิจัยของ Yakabe, H. et al. [1] ที่อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ โดยเส้นทึบคือ ผลที่ได้จากการคำนวณ และเส้นประคือ ผลที่ได้จากการทดลองจริง

สำหรับระบบ CO-CO_2 สมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ทำนายพฤติกรรมการแพร่ของแก๊สเชื้อเพลิงคาร์บอนมอนอกไซด์ที่นำไปสู่การคำนวณค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้น พิจารณาที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 0.1, 0.3 และ 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ โดยเปลี่ยนแปลงค่าสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงคาร์บอนมอนอกไซด์ของสายป้อนเริ่มต้นตั้งแต่ 0.1 ถึง 0.64 แสดงดังภาพที่ 5.35 เห็นได้ว่าสำหรับระบบ CO-CO_2 สมการสเตฟาน-แม็คเวลล์สามารถทำนายค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นได้แม่นยำเป็นอย่างยิ่ง ในช่วงค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 0.1 และ 0.3 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร ค่าสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงคาร์บอนมอนอกไซด์ช่วง 0.35 ถึง 0.64 และ 0.25 ถึง 0.64 ตามลำดับ ส่วนในช่วงค่าสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงคาร์บอนมอนอกไซด์ 0.15 ถึง 0.35 ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 0.1 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร ให้ค่าที่ใกล้เคียงกับผลการทดลองจริง ซึ่งอยู่ในช่วงที่หวังผลในการทำนายได้ แต่สำหรับผลการทดลองที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 0.5 ในทุกๆ ช่วงของค่าสัดส่วนเชิงโมล ของเชื้อเพลิงคาร์บอนมอนอกไซด์ ไม่มีช่วงใดที่ใกล้เคียงกับผลการทดลองจริง ซึ่งถือว่าไม่สามารถหวังผลหรือใช้ในการทำนายได้

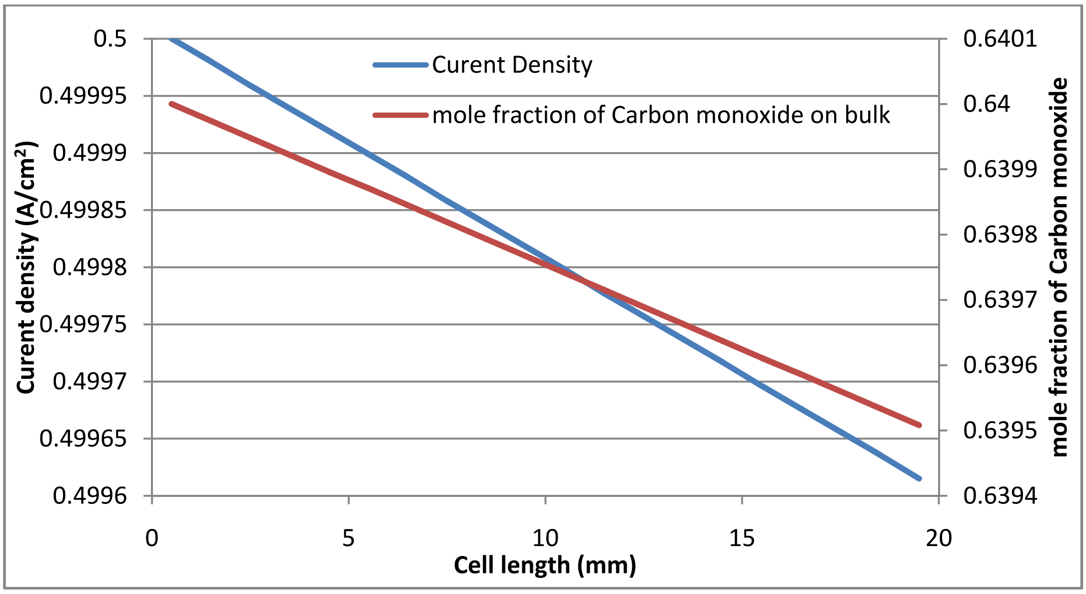


ภาพที่ 5.36 การเปลี่ยนแปลงของค่าความหนาแน่นกระแสตามระยะทาง ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 0.1, 0.3 และ 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงคาร์บอนมอนอกไซด์ในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.64 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ

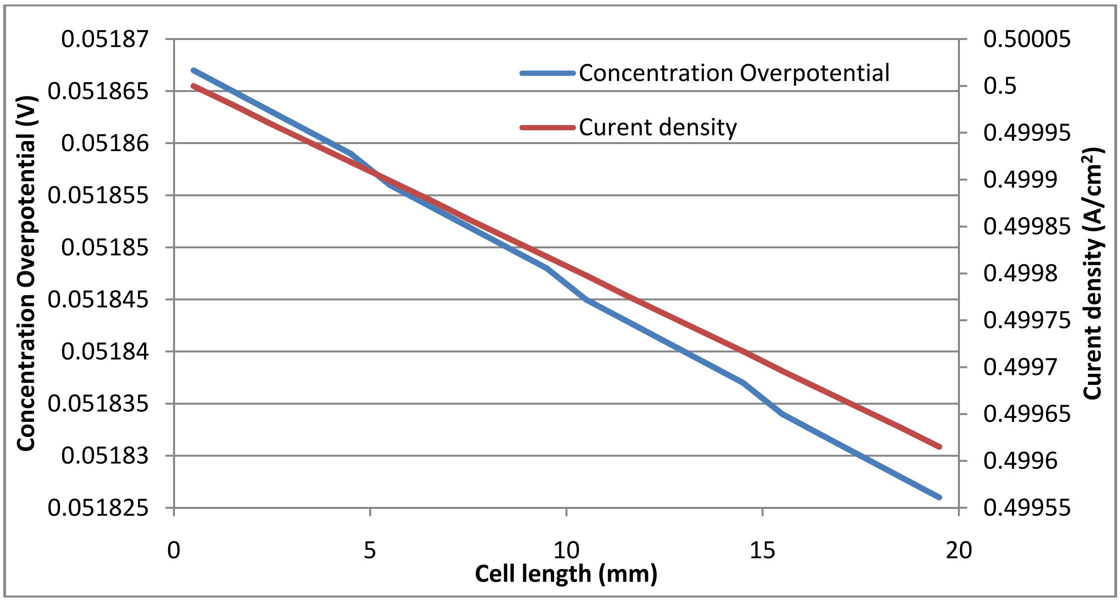


ภาพที่ 5.37 การเปลี่ยนแปลงของค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นตามระยะทาง ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 0.1, 0.3 และ 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงคาร์บอนมอนอกไซด์ในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.55 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ

จากภาพที่ 5.36 และภาพที่ 5.37 แสดงถึงการเปลี่ยนแปลงที่เกิดขึ้นของค่าความหนาแน่นกระแสและค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นตามระยะทางตามลำดับ โดยกำหนดค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้นที่ 0.1, 0.3 และ 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงคาร์บอนมอนอกไซด์ในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.64 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ เห็นได้ว่าผลที่ได้เป็นตามเช่นผลการทดลองของระบบเชื้อเพลิงไฮโดรเจนคือ กราฟที่เห็นเป็นเส้นตรงที่มีค่าความชันเป็นศูนย์ นั้นเท่ากับการเปลี่ยนแปลงของเชื้อเพลิงแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ในสายป้อนไม่ส่งผลใดๆ ต่อค่าความหนาแน่นกระแส และค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้น แต่เมื่อลองพิจารณาการเปลี่ยนแปลงอย่างละเอียดที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้นที่ 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงคาร์บอนมอนอกไซด์ในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.64 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ พบว่าผลได้ที่มีการเปลี่ยนแปลงของค่าความหนาแน่นกรในทิศทางลดลงตามระยะทาง ซึ่งเกิดจากผลของการลดลงสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงคาร์บอนมอนอกไซด์ตามระยะทาง โดยผลกระทบของการลดลงทั้งสองค่าส่งผลให้ค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นลดลงตามระยะทางด้วยเช่นกัน แสดงดังภาพที่ 5.38 และภาพที่ 5.39



ภาพที่ 5.38 การเปลี่ยนแปลงของค่าความหนาแน่นกระแสกับสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนตามระยะทาง ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.64 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ



ภาพที่ 5.39 การเปลี่ยนแปลงของค่าความหนาแน่นกระแสกับค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นตามระยะทาง ที่ค่าความหนาแน่นกระแสเริ่มต้น 0.5 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงคาร์บอนมอนอกไซด์ในสายป้อนที่เริ่มต้นคือ 0.64 อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ

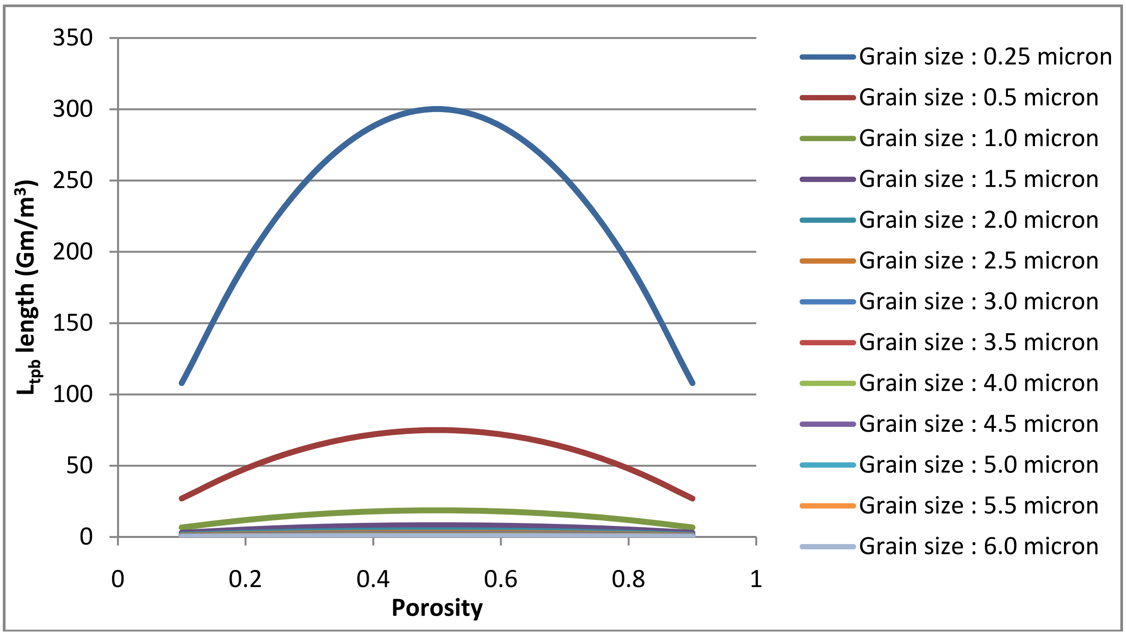
ตารางที่ 5.1 สรุปช่วงหวังผลของการทำนายด้วยสมการการแพร่ของฟิคและสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ โดยใช้เชื้อเพลิงไฮโดรเจนและคาร์บอนมอนอกไซด์

สมการการแพร่	การเปลี่ยนแปลงสัดส่วนเชิงโมล	แก๊สเชื้อเพลิง	ช่วงหวังผลในการทำนาย	
			ความหนาแน่นกระแส (A/cm^2)	สัดส่วนเชิงโมล
สมการการแพร่ของฟิค	ไม่เปลี่ยนแปลง	ไฮโดรเจน	0.3	0.47 - 0.8
			0.7	0.5 - 0.8
		คาร์บอนมอนอกไซด์	0.1	0.1 - 0.64
			0.3	0.3 - 0.64
	เปลี่ยนแปลง	ไฮโดรเจน	0.3	0.6 - 0.8
		คาร์บอนมอนอกไซด์	0.1	0.15 - 0.64
			0.3	0.25 - 0.64
สมการสเตฟาน-แม็คเวลล์	ไม่เปลี่ยนแปลง	ไฮโดรเจน	0.3	0.5 - 0.8
			0.7	0.4 - 0.8
			1.0	0.5 - 0.8
		คาร์บอนมอนอกไซด์	0.1	0.15 - 0.64
			0.3	0.3 - 0.64
	เปลี่ยนแปลง	ไฮโดรเจน	0.3	0.6 - 0.8
		คาร์บอนมอนอกไซด์	0.1	0.15 - 0.64
			0.3	0.25 - 0.64

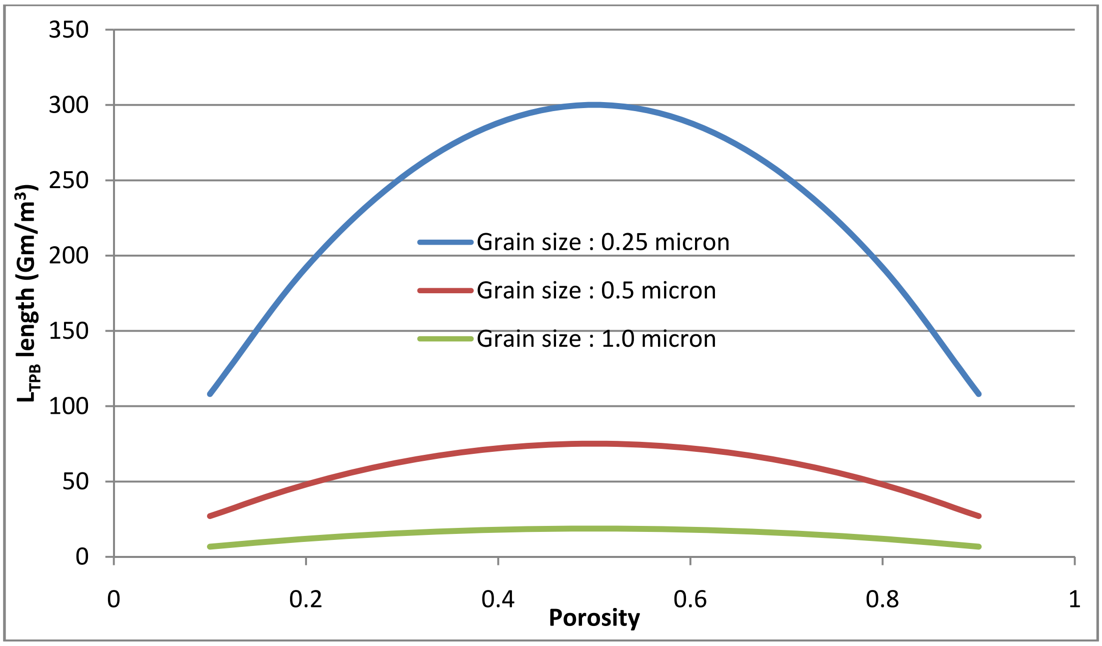
จากผลการทดลองในหัวข้อที่ 5.1 และหัวข้อที่ 5.2 จะเห็นว่า สำหรับระบบ H_2-H_2O-Ar การกำหนดให้เกิดการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นหรือสัดส่วนเชิงโมลในสายป้อนของระบบ ได้ผลที่ไม่น่าพอใจเมื่อเทียบผลที่ได้จากการกำหนดให้สัดส่วนเชิงโมลในสายป้อนของระบบคงที่ ซึ่งได้ผลที่ใกล้เคียงกับความเป็นจริง เหตุดังกล่าวอาจเกิดขึ้นจากความสัมพันธ์ที่เลือกใช้กับหัวข้อที่ 5.2 นั้นไม่มีความเหมาะสมเพียงพอ หรืออาจมีปัจจัยอื่นที่มีผลต่อค่าความหนาแน่นกระแสที่เปลี่ยนแปลงมากกว่าสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงไฮโดรเจนในสายป้อนเพียงอย่างเดียว สำหรับระบบ CO-CO_2 ผลการทดลองที่ได้จากหัวข้อที่ 5.1 และหัวข้อที่ 5.2 พบว่าผลที่ได้มีความใกล้เคียงไม่แต่ต่างกันมากนัก ด้วยเหตุนี้อาจกล่าวได้ว่าหัวข้อที่ 5.2 นั้นมีความสัมพันธ์กับคุณสมบัติเชิงกายภาพของแก๊สเชื้อเพลิง ซึ่งอาจจะเหมาะกับแก๊สเชื้อเพลิงที่มีขนาดโมเลกุลที่ไม่จนเล็กเกินไป นั้นหมายความได้ว่าระบบแก๊ส CO-CO_2 เหมาะสมในการเลือกใช้ในการทำนายค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็งภายในขั้วแอโนดที่มีการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นหรือสัดส่วนเชิงโมลในสายป้อนของระบบ

5.3 ระบบโครงสร้างภายในขั้วแอโนด

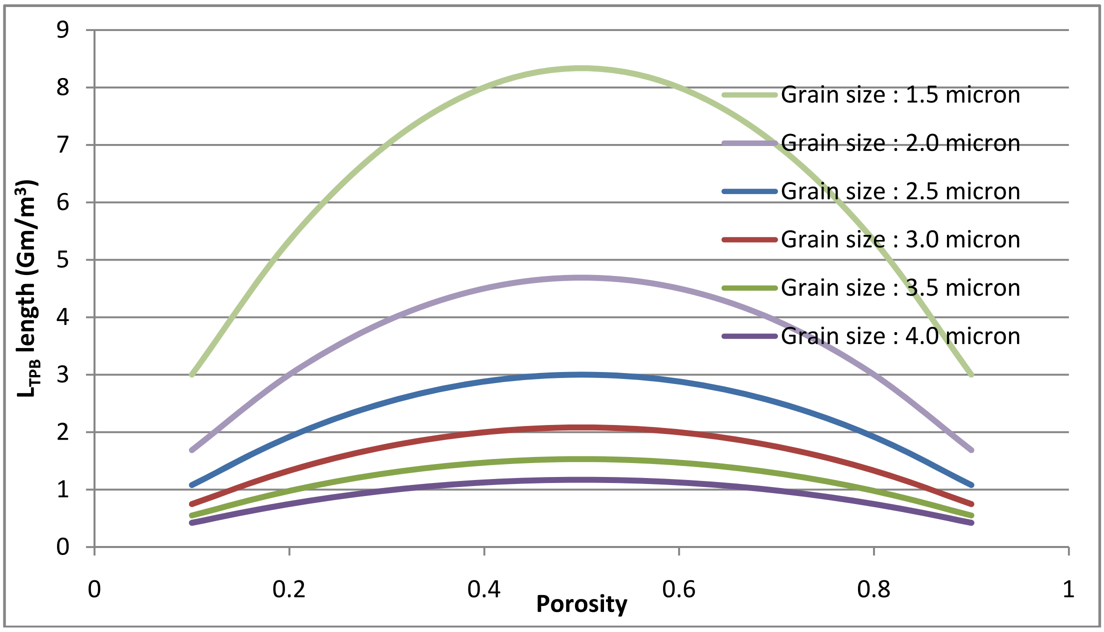
หัวข้อนี้แสดงถึงผลความสัมพันธ์ของขนาดอนุภาคทรงกลมในเชิงโครงสร้างเพียงอย่างเดียว ที่มีต่อความยาวของสภาวะของสามเฟสต่อหน่วยปริมาตร เป็นไปตามข้อสมมติฐานจากข้อที่ 4.2.1 โดยแสดงผลที่ได้ออกในรูปกราฟความสัมพันธ์ของขนาดอนุภาคกับความยาวของสภาวะของสามเฟสต่อหน่วยปริมาตร ที่เปลี่ยนแปลงไปตามสัดส่วนความพรุนของขั้วแอโนด แสดงดังภาพที่ 5.40 ถึงภาพที่ 5.43



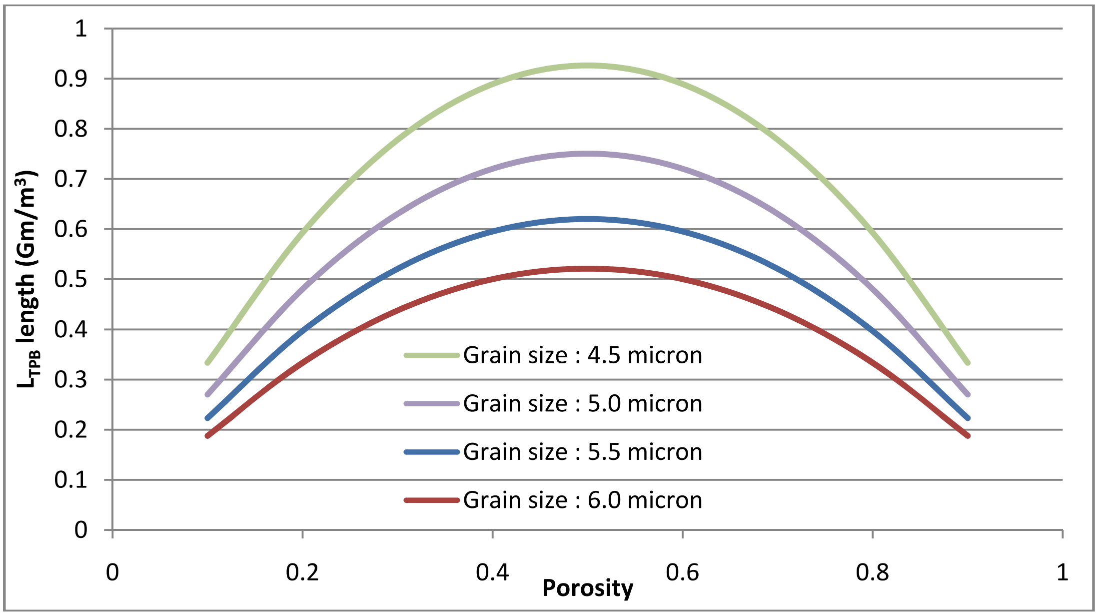
ภาพที่ 5.40 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัดส่วนความพรุนกับความยาวของสภาวะของสามเฟสต่อหน่วยปริมาตรที่ขนาดอนุภาคตั้งแต่ 0.25 ถึง 6.0 ไมโครเมตร



ภาพที่ 5.41 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัดส่วนความพรุนกับความยาวของสภาวะของสามเฟสต่อหน่วยปริมาตรที่ขนาดอนุภาคตั้งแต่ 0.25 ถึง 1.0 ไมโครเมตร



ภาพที่ 5.42 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัดส่วนความพรุนกับความยาวของสภาวะของสามเฟสต่อหน่วยปริมาตรที่ขนาดอนุภาคตั้งแต่ 0.15 ถึง 4.0 ไมโครเมตร



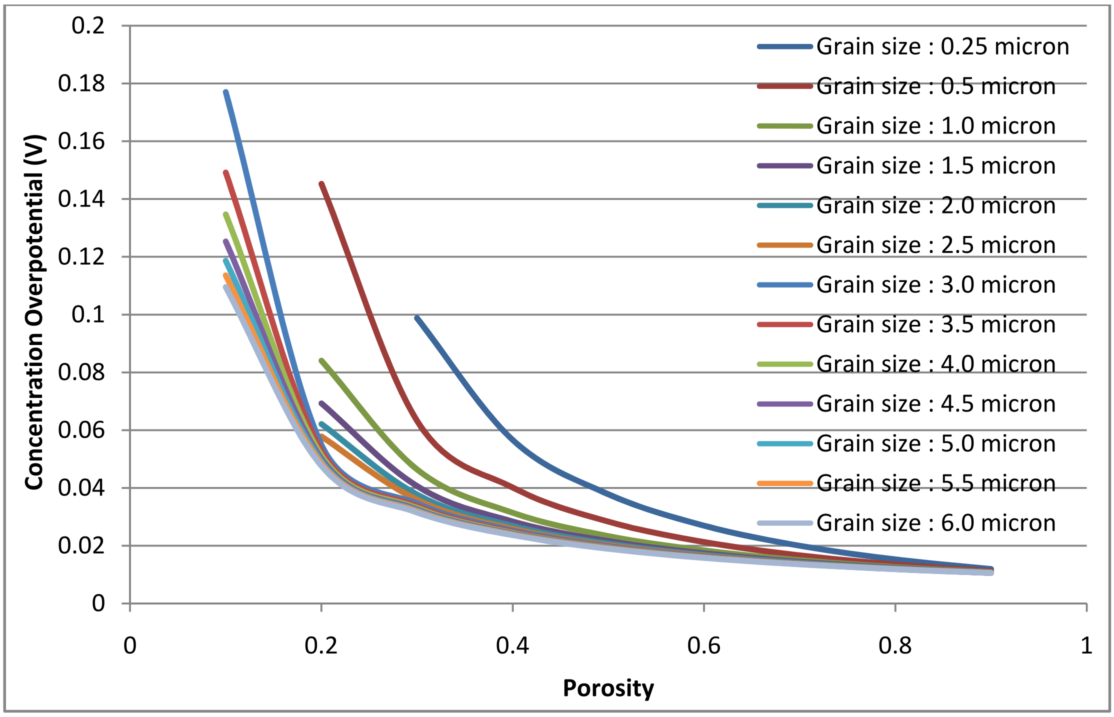
ภาพที่ 5.43 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัดส่วนความพรุนกับความยาวของสภาวะของสามเฟสต่อหน่วยปริมาตร ที่ขนาดอนุภาคตั้งแต่ 4.5 ถึง 6.0 ไมโครเมตร

5.3.1 แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่ใช้สมการการแพร่ของฟิคคำนวณค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นของระบบโครงสร้างภายในขั้วแอโนด

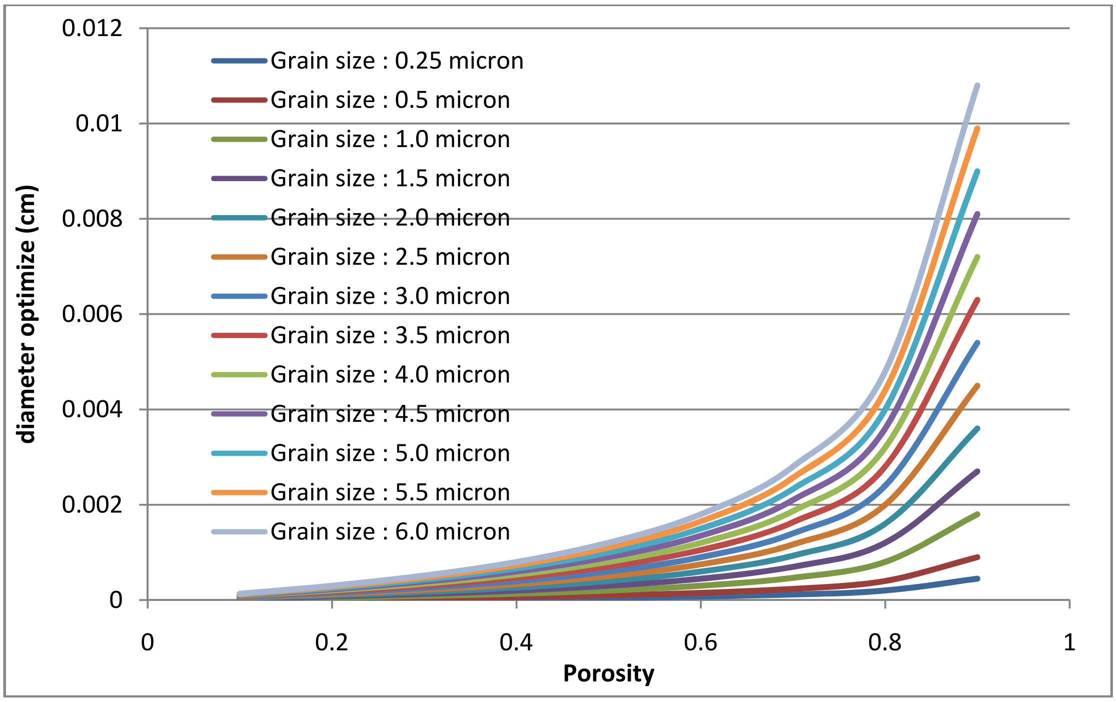
การนำสมการการแพร่ของฟิคมาอธิบายค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นของระบบโครงสร้างภายในขั้วแอโนด เพื่อหาลักษณะโครงสร้างภายในขั้วแอโนดที่ดีที่สุด ซึ่งใช้ความสัมพันธ์ของการเปลี่ยนแปลงขนาดอนุภาคภายในขั้วแอโนดจาก 0.25 ถึง 6.0 ไมโครเมตร ค่าสัดส่วนความพรุนที่ 0.1 ถึง 0.9 และนำสมการที่ (3-6) ได้จากงานวิจัยของ Deng, X et al. [9] ซึ่งเป็นสมการที่ทำให้ได้ขนาดของรูพรุนที่เหมาะสม สำหรับหัวข้อนี้ทำการทดลองเช่นเดียวกับหัวข้อที่ 5.3.1 โดยใช้แก๊สเชื้อเพลิงเป็นแก๊สไฮโดรเจนและแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ ซึ่งสำหรับระบบแก๊สไฮโดรเจนจะประกอบด้วย แก๊สไฮโดรเจนเป็นแก๊สเชื้อเพลิง และไอน้ำเป็นแก๊สผสมร่วมกับสารผลิตภัณฑ์ที่เกิดขึ้น ระบบดังกล่าวเขียนในรูป H_2-H_2O ส่วนระบบคาร์บอนมอนอกไซด์ประกอบด้วย แก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์เป็นเชื้อเพลิง และคาร์บอนไดออกไซด์เป็นแก๊สผสมร่วมกับสารผลิตภัณฑ์ ระบบดังกล่าวเขียนในรูป CO-CO_2

การทดลองในหัวข้อนี้จะเลือกใช้ลักษณะถ่ายเทมวลสารที่ไม่เกิดการเปลี่ยนของความเข้มข้นภายในสายป้อนของขั้วแอโนด ซึ่งเป็นไปตามหัวข้อที่ 5.1 และเลือกใช้ค่าความหนาแน่นกระแสที่สูงที่สุดในช่วงที่สมการการแพร่ของฟิคทำนายได้ใกล้เคียง สำหรับระบบ H_2-H_2O ใช้ค่าความหนาแน่นกระแสที่ 0.7 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร และระบบ CO-CO_2 ใช้ค่าความหนาแน่นกระที่ 0.3 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร เนื่องจากการใช้ค่าความหนาแน่นกระแสที่สูงส่งผลให้มองเห็นการเปลี่ยนแปลงของค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นได้ชัดเจน โดยเลือกใช้สัดส่วนเชิงโมลของแก๊สไฮโดรเจนที่ 0.8 และเลือกใช้สัดส่วนเชิงโมลของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ที่ 0.64

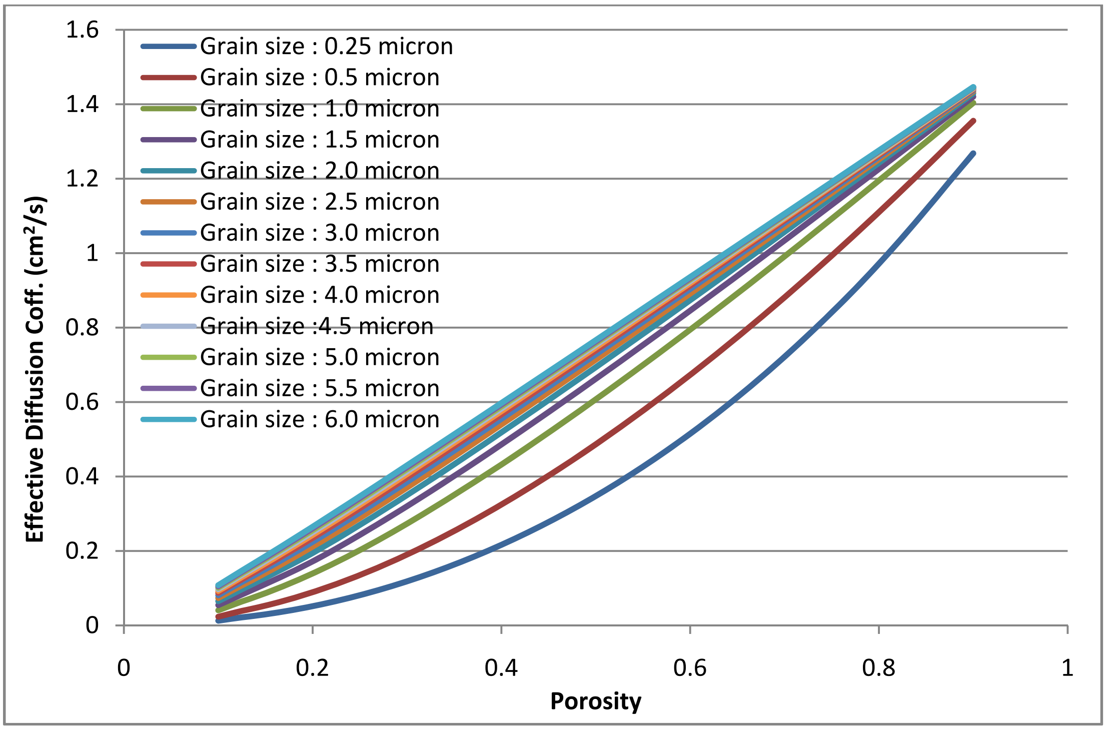
เมื่อพิจารณาระบบ H_2-H_2O ที่สัดส่วนเชิงโมลของแก๊สไฮโดรเจนเป็น 0.8 และสัดส่วนเชิงโมลของไอน้ำเป็น 0.2 ค่าความหนาแน่นกระแส 0.7 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร ผลที่ได้แสดงให้เห็นถึงค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่เปลี่ยนแปลงไปตามค่าสัดส่วนความพรุนและขนาดของอนุภาค แสดงดังภาพที่ 5.44 เห็นได้ว่าเมื่อค่าสัดส่วนความพรุนเพิ่มมากขึ้นทำให้ค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นลดลงไปตามลักษณะการแปรผกผันกัน และเมื่อสังเกตการเปลี่ยนแปลงขนาดของอนุภาค พบว่าที่ขนาดอนุภาค 0.25 ไมโครเมตร ซึ่งเป็นขนาดอนุภาคที่เล็กที่สุด จะมีค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นสูงสุด และขนาดอนุภาคที่ใหญ่ที่สุดคือ 6.0 ไมโครเมตร จะมีค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นน้อยที่สุด ซึ่งจากความสัมพันธ์ดังกล่าวทำให้เข้าใจได้ว่า เมื่อขนาดอนุภาคภายในขั้วแอโนดที่มีขนาดใหญ่และค่าสัดส่วนความพรุนที่สูง จะมีค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่ต่ำ ผลกระทบที่เกิดขึ้นจากเปลี่ยนแปลงขนาดอนุภาคภายในขั้วแอโนดและค่าสัดส่วนความพรุนถูกอธิบายด้วยสมการที่ (3-6) โดยขนาดรูพรุนที่เหมาะสมขึ้นกับการเปลี่ยนแปลงของค่าสัดส่วนความพรุนกับขนาดอนุภาคภายในขั้วแอโนด แสดงดังภาพที่ 5.45 โดยขนาดรูพรุนที่เหมาะสมมีผลต่อค่าสัมประสิทธิ์โดยรวมของการแพร่ของแก๊สในระบบ ซึ่งอยู่ในเทอมของสัมประสิทธิ์การแพร่คนุดเซน ดังสมการที่ (2-19) และ (2-9) ตามลำดับ ผลจากความสัมพันธ์ของขนาดอนุภาคและค่าสัดส่วนความพรุนที่มีผลต่อค่าสัมประสิทธิ์โดยรวมของการแพร่ของแก๊สในระบบแสดงดังภาพที่ 5.46



ภาพที่ 5.44 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัดส่วนความพรุนกับค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้น ที่ขนาดอนุภาคตั้งแต่ 0.25 ถึง 6.0 ไมโครเมตร ระบบแก๊ส H_2-H_2O

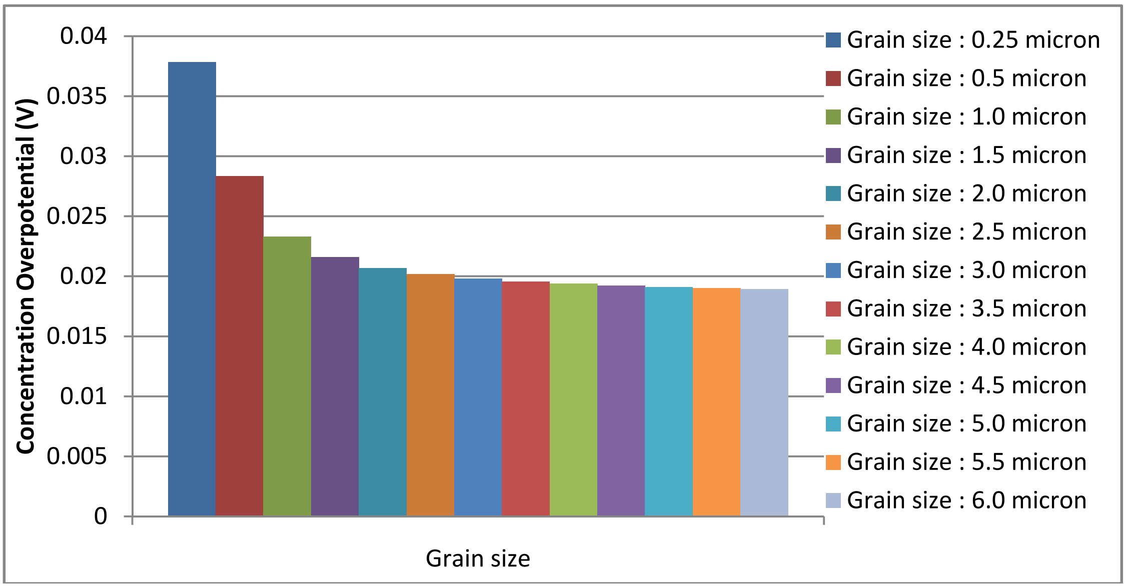


ภาพที่ 5.45 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัดส่วนความพรุนกับขนาดรูพรุนที่เหมาะสม ที่ขนาดอนุภาคตั้งแต่ 0.25 ถึง 6.0 ไมโครเมตร



ภาพที่ 5.46 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัดส่วนความพรุนกับสัมประสิทธิ์โดยรวมของการแพร่ของแก๊สในระบบ ที่ขนาดอนุภาคตั้งแต่ 0.25 ถึง 6.0 ไมโครเมตร ระบบแก๊ส H_2-H_2O

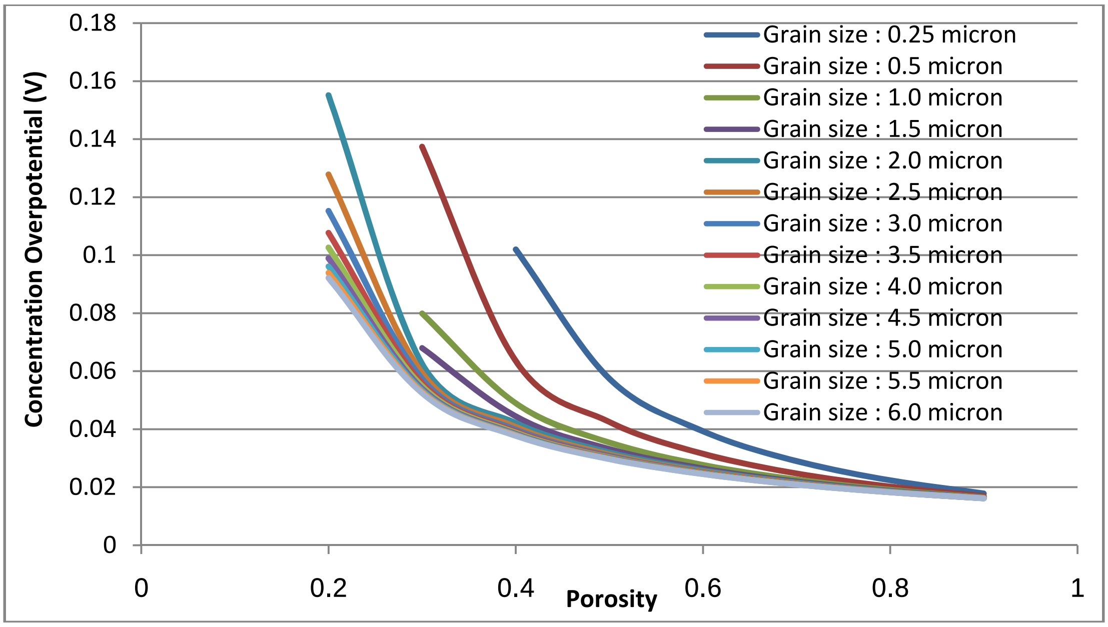
เมื่อพิจารณาค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่ค่าสัดส่วนความพรุนร้อยละ 50 เมื่อขนาดของอนุภาคภายในขั้วแอโนดเปลี่ยนเปลี่ยนตั้งแต่ 0.25 ถึง 6.0 ไมโครเมตร ของระบบแก๊ส H_2-H_2O แสดงดังภาพที่ 5.47 พบว่าที่ขนาดอนุภาคภายในขั้วแอโนดตั้งแต่ 1.5 ไมโครเมตร ถึง 6.0 ไมโครเมตร ค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าที่คำนวณได้มีความแตกต่างกันไม่มากนัก อยู่ในช่วง 18.935 ถึง 21.578 มิลลิโวลต์ แต่ที่ขนาดอนุภาคภายในขั้วแอโนดตั้งแต่ 0.25 ถึง 1.0 ไมโครเมตร ค่าความหนาแน่นกระแสค่อนข้างมีค่าสูงแตกต่างจากช่วงที่ขนาดอนุภาคใหญ่กว่าคือ อยู่ในช่วง 23.304 ถึง 37.823 มิลลิโวลต์ ที่ผลเป็นเช่นนี้เพราะขนาดของรูพรุนนั้นแปรผันตรงกับขนาดของอนุภาคภายในขั้วแอโนด เมื่อขนาดของรูพรุนเล็กลง ค่าสัมประสิทธิ์โดยรวมของการแพร่ของแก๊สในระบบจึงลดต่ำลงด้วย ดังภาพที่ 5.46 ด้วยเหตุผลนี้จึงทำให้อนุภาคภายในขั้วแอโนดตั้งแต่ 0.25 ถึง 1.0 ไมโครเมตร มีค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นสูงโดนเด่น สำหรับระบบนี้ขนาดอนุภาคภายในขั้วแอโนดที่ 1.5 ไมโครเมตร มีค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นเป็น 21.578 มิลลิโวลต์ ซึ่งเป็นขนาดอนุภาคที่เล็กที่สุด ที่ทำให้มีค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่ไม่สูงนัก



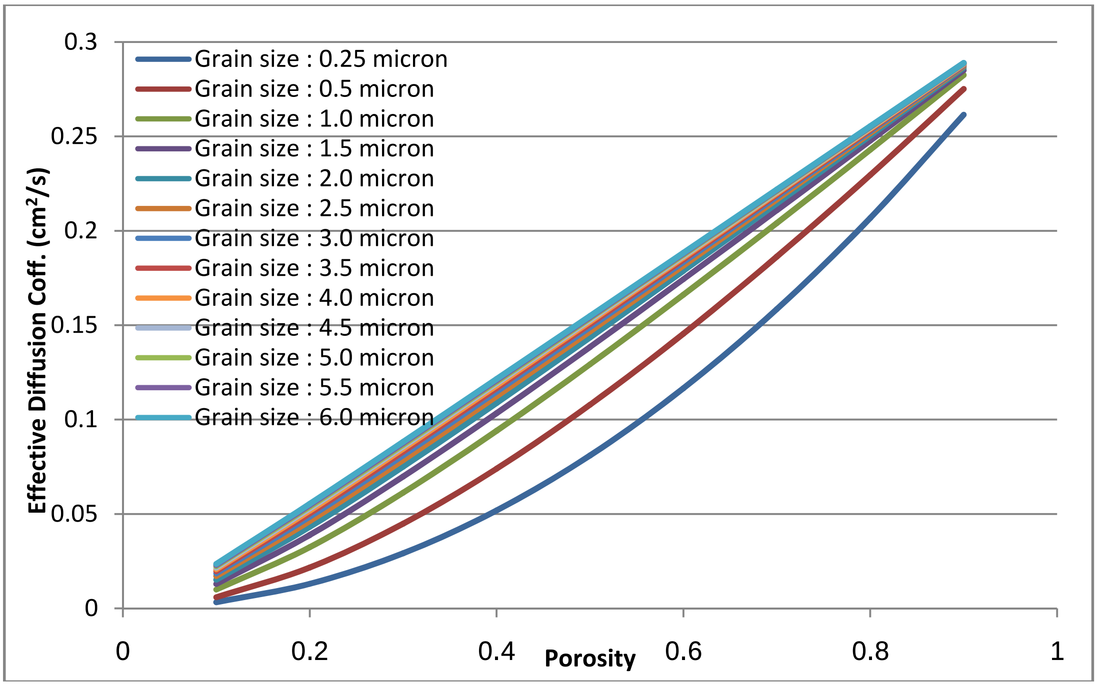
ภาพที่ 5.47 ความสัมพันธ์ระหว่างขนาดอนุภาคภายในขั้วแอโนดตั้งแต่ 0.25 ถึง 6.0 ไมโครเมตร กับค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้น ที่ค่าสัดส่วนความพรุนร้อยละ 50 ระบบแก๊ส H_2-H_2O

เมื่อพิจารณาระบบ CO-CO_2 ที่สัดส่วนเชิงโมลของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์เป็น 0.64 และสัดส่วนเชิงโมล ของแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์เป็น 0.36 ค่าความหนาแน่นกระแส 0.3 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร การทดลองได้ทดลองเช่นเดียวกันกับระบบ H_2-H_2O ซึ่งจะดูการเปลี่ยนแปลงของขนาดอนุภาคภายในขั้วแอโนดและค่าสัดส่วนความพรุนที่ส่งผลต่อค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้น แสดงดังภาพที่ 5.48 ผลที่ได้แสดงให้เห็นว่าเมื่อค่าสัดส่วนความพรุนเพิ่มขึ้นค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นจะลดลง และที่ขนาดอนุภาคภายในขั้วแอโนดใหญ่ขึ้นจะมีค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นจะลดลงเช่นกัน ผลที่ได้เป็นเช่นเดียวกับระบบ H_2-H_2O โดยขนาดของรูพรุนที่เหมาะสม และสัมประสิทธิ์โดยรวมของการแพร่ของแก๊สในระบบที่

เปลี่ยนแปลงตามขนาดของอนุภาคภายในขั้วแอโนดกับค่าสัดส่วนความพรุนถูกแสดงไว้ดังภาพที่ 5.45 และ 5.49 ตามลำดับ



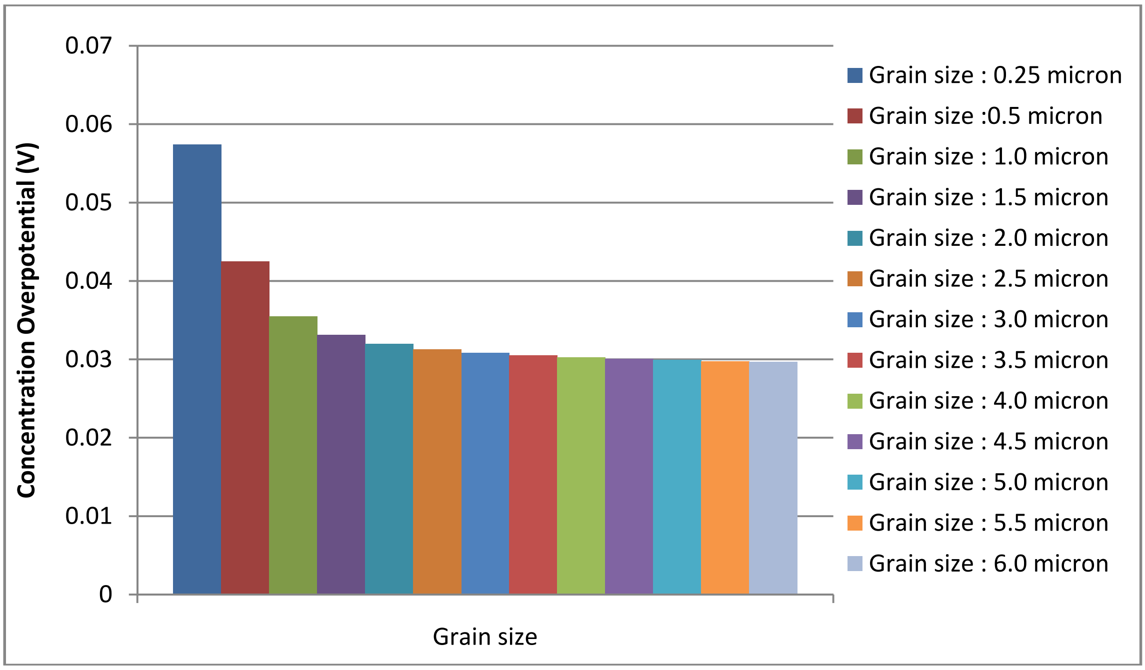
ภาพที่ 5.48 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัดส่วนความพรุนกับค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้น ที่ขนาดอนุภาคตั้งแต่ 0.25 ถึง 6.0 ไมโครเมตร ระบบแก๊ส $CO\text{-}CO_2$



ภาพที่ 5.49 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัดส่วนความพรุนกับสัมประสิทธิ์โดยรวมของการแพร่ของแก๊สในระบบ ที่ขนาดอนุภาคตั้งแต่ 0.25 ถึง 6.0 ไมโครเมตร ระบบแก๊ส $CO\text{-}CO_2$

ภาพที่ 5.45 แสดงถึงความสัมพันธ์ของค่าสัดส่วนความพรุนกับขนาดรูพรุนที่เหมาะสม ซึ่งสามารถใช้ได้กับทั้งระบบแก๊ส H_2-H_2O และ ระบบแก๊ส CO-CO_2 เนื่องจากคำนวณได้จากสมการที่ (3-6) เช่นเดียวกัน

เมื่อพิจารณาค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่ค่าสัดส่วนความพรุนร้อยละ 50 เมื่อขนาดของอนุภาคภายในขั้วแอโนดเปลี่ยนเปลี่ยนตั้งแต่ 0.25 ถึง 6.0 ไมโครเมตร ของระบบแก๊ส CO-CO_2 แสดงดังภาพที่ 5.50 พบว่าที่ขนาดอนุภาคภายในขั้วแอโนดตั้งแต่ 1.5 ไมโครเมตร ถึง 6.0 ไมโครเมตร ค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าที่คำนวณได้มีความแตกต่างกันไม่มากนัก อยู่ในช่วง 29.661 ถึง 33.122 มิลลิโวลต์ แต่ที่ขนาดอนุภาคภายในขั้วแอโนดตั้งแต่ 0.25 ถึง 1.0 ไมโครเมตร ค่าความหนาแน่นกระแสค่อนข้างมีค่าสูงแตกต่างจากช่วงที่ขนาดอนุภาคใหญ่กว่า คืออยู่ในช่วง 35.442 ถึง 57.409 มิลลิโวลต์ สำหรับระบบนี้ขนาดอนุภาคภายในขั้วแอโนดที่ 1.5 ไมโครเมตร มีค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นเป็น 33.122 มิลลิโวลต์ ซึ่งเป็นขนาดอนุภาคที่เล็กที่สุด ที่ทำให้มีค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่ไม่สูงนัก โดยผลที่ได้สอดคล้องและเป็นเช่นเดียวกันกับระบบ H_2-H_2O



ภาพที่ 5.50 ความสัมพันธ์ระหว่างขนาดอนุภาคภายในขั้วแอโนดตั้งแต่ 0.25 ถึง 6.0 ไมโครเมตร กับค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้น ที่ค่าสัดส่วนความพรุนร้อยละ 50 ระบบแก๊ส CO-CO_2

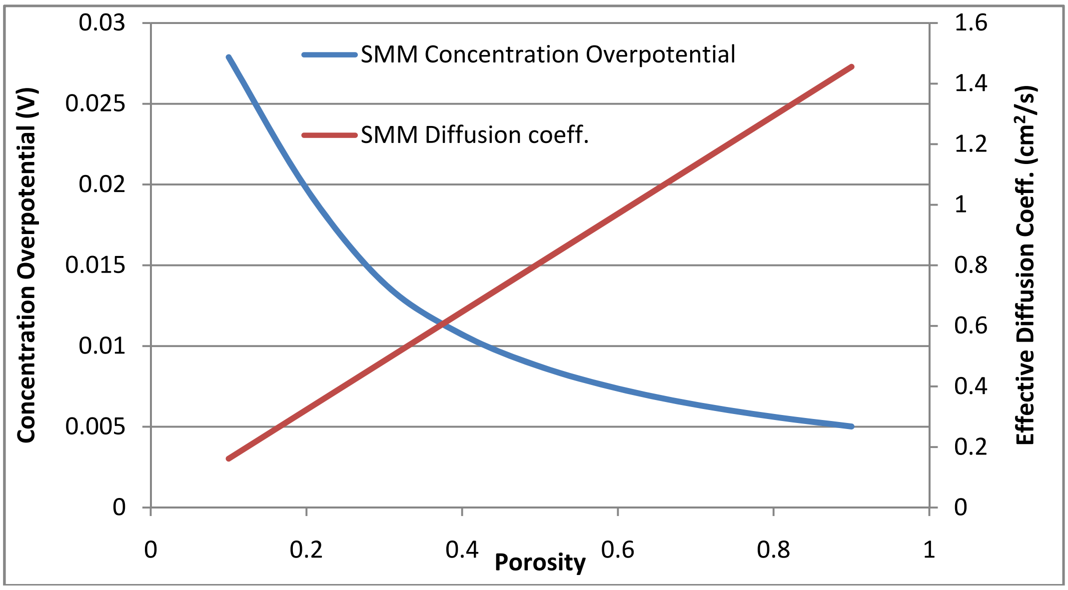
5.3.2 แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่ใช้สมการสเตฟาน-แม็คเวลล์คำนวณค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นของระบบโครงสร้างภายในขั้วแอโนด

การนำสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์มากอธิบายค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นของระบบโครงสร้างภายในขั้วแอโนด เพื่อหาลักษณะโครงสร้างภายในขั้วแอโนดที่ดีที่สุด ซึ่งใช้ความสัมพันธ์ของการเปลี่ยนแปลงขนาดอนุภาคภายในขั้วแอโนดจาก 0.25 ถึง 6.0 ไมโครเมตร ค่าสัดส่วนความพรุนที่ 0.1 ถึง 0.9

และนำสมการที่ (3-6) ได้จากงานวิจัยของ Deng, X et al. [9] โดยใช้แก๊สเชื้อเพลิงเป็นแก๊สไฮโดรเจนและแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ ซึ่งสำหรับระบบแก๊สไฮโดรเจนจะประกอบด้วย แก๊สไฮโดรเจนเป็นแก๊สเชื้อเพลิง และไอน้ำเป็นแก๊สผสมร่วมกับสารผลิตภัณฑ์ที่เกิดขึ้น ระบบดังกล่าวเขียนในรูป H_2-H_2O ส่วนระบบคาร์บอนมอนอกไซด์ประกอบด้วย แก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์เป็นเชื้อเพลิง และคาร์บอนไดออกไซด์เป็นแก๊สผสมร่วมกับสารผลิตภัณฑ์ ระบบดังกล่าวเขียนในรูป CO-CO_2

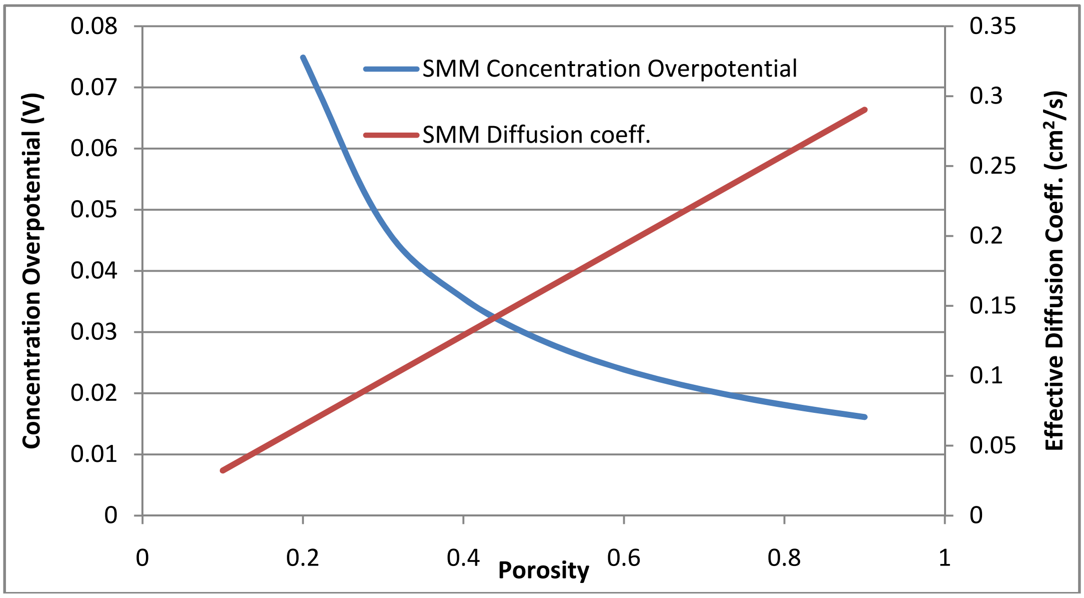
การทดลองในหัวข้อนี้จะเลือกใช้ลักษณะถ่ายเทมวลสารที่ไม่เกิดการเปลี่ยนของความเข้มข้นภายในสายป้อนของขั้วแอโนด ซึ่งเป็นไปตามหัวข้อที่ 5.1 และเลือกใช้ค่าความหนาแน่นกระแสที่สูงที่สุดในช่วงที่สมการการแพร่ของฟิคทำนายได้ใกล้เคียง สำหรับระบบ H_2-H_2O ใช้ค่าความหนาแน่นกระแสที่ 0.7 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร และระบบ CO-CO_2 ใช้ค่าความหนาแน่นกระที่ 0.3 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร เนื่องจากการใช้ค่าความหนาแน่นกระแสที่สูงส่งผลให้มองเห็นการเปลี่ยนแปลงของค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นได้ชัดเจน โดยเลือกใช้สัดส่วนเชิงโมลของแก๊สไฮโดรเจนที่ 0.8 และเลือกใช้สัดส่วนเชิงโมลของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ที่ 0.64 ดังเช่นหัวข้อที่ 5.3.1

เมื่อพิจารณาระบบ H_2-H_2O ที่สัดส่วนเชิงโมลของแก๊สไฮโดรเจนเป็น 0.8 และสัดส่วนเชิงโมลของไอน้ำเป็น 0.2 ค่าความหนาแน่นกระแส 0.7 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร แสดงดังภาพที่ 5.51 เห็นได้ว่าผลที่ได้มีความซับซ้อนน้อยและมีเส้นกราฟต่อค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นและค่าสัมประสิทธิ์โดยรวมของการแพร่ของแก๊สในระบบอย่างละเส้น ที่เป็นเช่นนี้เนื่องจากสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ไม่มีความสัมพันธ์กับขนาดของรูพรุน ด้วยเหตุนี้จึงทำให้ขนาดของอนุภาคภายในขั้วแอโนดไม่มีผลต่อค่าสัมประสิทธิ์โดยรวมของการแพร่ของแก๊สในระบบและค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้น



ภาพที่ 5.51 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัดส่วนความพรุนกับค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นและสัมประสิทธิ์โดยรวมของการแพร่ของแก๊ส ระบบแก๊ส H_2-H_2O

ผลที่ได้จากภาพที่ 5.51 เห็นได้ว่าเมื่อค่าสัดส่วนความพรุนเพิ่มขึ้นทำให้สัมประสิทธิ์โดยรวมของการแพร่ของแก๊สเพิ่มตาม อันส่งผลให้ค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นลดลง ซึ่งผลที่ได้มีแนวโน้มเช่นเดียวกับหัวข้อที่ 5.3.1 และเมื่อพิจารณาระบบ CO-CO_2 ที่สัดส่วนเชิงโมลของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์เป็น 0.64 และสัดส่วนเชิงโมล ของแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์เป็น 0.36 ค่าความหนาแน่นกระแส 0.3 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร ก็ได้ผลในลักษณะเช่นเดียวกันกับระบบ H_2-H_2O แสดงดังภาพที่ 5.52



ภาพที่ 5.52 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัดส่วนความพรุนกับค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นและสัมประสิทธิ์โดยรวมของการแพร่ของแก๊ส ระบบแก๊ส CO-CO_2

บทที่ 6

สรุปผลการทดลองและข้อเสนอแนะ

6.1 สรุปผลการทดลอง

แบบจำลองทางคณิตศาสตร์นี้ได้นำสมการการถ่ายเทมวลสารมาอธิบายถึงค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นและรวมความสัมพันธ์ของระบบโครงสร้างภายในขั้วแอโนดที่บอกถึงค่าความยาวของสภาวะขอบสามเฟสต่อปริมาตร ซึ่งเชื่อมโยงถึงประสิทธิภาพของขั้วแอโนดภายในเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็ง

สำหรับระบบการถ่ายเทมวลสาร เป็นการนำสมการการถ่ายเทมวลสารมาอธิบายถึงค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้น พบว่าสมการการถ่ายเทมวลสารตามกฎของฟิคและสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์สามารถคำนวณให้ผลการคำนวณที่มีแนวโน้มเช่นเดียวกับผลการทดลองจริงเมื่อใช้ร่วมกับข้อสมมติฐานที่กำหนดให้ไม่เกิดการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นของเชื้อเพลิงภายในสายป้อนของขั้วแอโนด แนวโน้มความใกล้เคียงที่ได้อยู่ในระดับที่ดี ทั้งระบบที่ใช้เชื้อเพลิงแก๊สไฮโดรเจนและแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ แต่เมื่อกำหนดให้ระบบเกิดการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นของเชื้อเพลิงภายในสายป้อนของขั้วแอโนด พบว่าสมการการแพร่ของฟิคและสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์มีความสามารถในการทำนายค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นของระบบที่ใช้เชื้อเพลิงแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ใกล้เคียงกัน ส่วนสำหรับระบบที่ใช้เชื้อเพลิงแก๊สไฮโดรเจนสมการสเตฟาน-แม็คเวลล์สามารถให้แนวโน้มในการคำนวณค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นได้ใกล้เคียงกว่าเล็กน้อย และเมื่อเกิดเปลี่ยนแปลงของขนาดอนุภาคภายในขั้วแอโนดกับค่าสัดส่วนความพรุนของขั้วแอโนด พบว่าสมการการแพร่ตามกฎของฟิคและสมการการแพร่ของสเตฟาน-แม็คเวลล์มีแนวโน้มในทิศทางเดียวกันคือสัดส่วนความพรุนและขนาดอนุภาคภายในของขั้วแอโนดจะแปรผกผันกับค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้น ผลที่ได้จากสมการการแพร่ของฟิคที่กำหนดให้ค่าสัดส่วนความพรุนคงที่ที่ร้อยละ 50 แสดงให้เห็นว่าที่ขนาดอนุภาค 1.0 ถึง 2.0 ไมโครเมตร เป็นช่วงขนาดอนุภาคภายในขั้วแอโนดที่ทำให้เกิดค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นที่มีการเปลี่ยนแปลงไม่สูงเกินไป ซึ่งถือว่าเหมาะสมที่สุดเมื่อเทียบกับค่าความยาวของสภาวะขอบสามเฟสต่อปริมาตรที่สูงขึ้นเมื่อขนาดอนุภาคเล็กลง

สำหรับระบบโครงสร้างภายในขั้วแอโนด ที่แสดงถึงค่าความยาวของสภาวะขอบสามเฟสต่อปริมาตรผลที่ได้สำหรับระบบที่มีสัดส่วนโดยปริมาตรของเฟสอิเล็กทรอนิกส์เท่ากับสัดส่วนโดยปริมาตรของเฟสไอออนิก และทั้งสองเฟสมีรัศมีของอนุภาคเฉลี่ยเท่าๆ กัน พบว่าขนาดของอนุภาคภายในโครงสร้างขั้วแอโนดจะแปรผกผันกับความยาวของสภาวะขอบสามเฟสโดยปริมาตร ซึ่งค่าสัดส่วนความพรุนที่ทำให้ระบบมีความยาวของสภาวะขอบสามเฟสต่อปริมาตรสูงสุดอยู่ที่ร้อยละ 50 และที่ขนาดอนุภาค 0.25 ไมโครเมตร ทำให้เกิดค่าความยาวของสภาวะขอบสามเฟสต่อปริมาตรที่สูงที่สุดคือ 3.0015×10^{14} เมตรต่อลูกบาศก์เมตร

จากการพิจารณาทั้งสองความสัมพันธ์คือ ค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นและความยาวของสภาวะขอบสามเฟสต่อปริมาตร ผลการทดลองแสดงให้เห็นว่าขั้วแอโนดจะมีประสิทธิภาพสูงสุดที่ค่าสัดส่วนความพรุนอยู่ในช่วงร้อยละ 50 ถึง 60 ขนาดอนุภาคที่เหมาะสมในการขึ้นรูปอยู่ในช่วง 1.0 ถึง 2.0 ไมโครเมตร และขนาดรูพรุนในช่วง 2.0 ถึง 6.0 ไมโครเมตร เมื่อขนาดของอนุภาคภายในขั้วแอโนดแปรผกผันกับค่าการ

สูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้นและความยาวของสภาวะขอบสามเฟสต่อปริมาตร ทำให้การกำหนดลักษณะโครงสร้างที่เหมาะสมของขั้วแอโนดสำหรับเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์ให้มีประสิทธิสูงสุดสามารถทำได้ด้วยการควบคุมค่าสัดส่วนความพรุน ขนาดของอนุภาคภายในขั้วแอโนด และขนาดของรัศมีรูพรุนเฉลี่ยของระบบ

6.2 ข้อเสนอแนะ

1. การพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์นี้ คาดว่าสามารถมุ่งเข้าใกล้ความเป็นจริงในการคำนวณค่าการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้น ด้วยการใช้ข้อสมติฐานให้แก๊สในระบบเป็นแก๊สจริง
2. งานวิจัยนี้ไม่ได้คำนึงถึงการชี้วัดประสิทธิภาพเชิงปฏิกิริยาเคมี ซึ่งอาจจะทำให้ผลที่ได้ไม่ครอบคลุมกับความเป็นจริงในบางกรณี
3. งานวิจัยนี้สามารถตัดข้อสมมติฐานที่กำหนดให้ทุกอนุภาคภายในขั้วแอโนดมีขนาดเท่ากันได้ ด้วยการใช้สมการทางเรขาคณิตหาความสัมพันธ์ระหว่างขนาดอนุภาคอิเล็กทรอนิกส์ อนุภาคไอออนิกและค่าสัดส่วนความพรุนของขั้วแอโนด ที่ส่งผลให้ได้ค่าขนาดรูพรุนที่สอดคล้องกับระบบโครงสร้างนั้นๆ
4. การขึ้นรูปขั้วแอโนดด้วยขนาดอนุภาคที่แตกต่างกันหรือเป็นการคละขนาดอนุภาคที่สัดส่วนโดยปริมาตรของเฟสอิเล็กทรอนิกส์และเฟสไอออนิกแตกต่างกัน มีความเป็นได้ที่จะทำให้ความยาวของสภาวะขอบสามเฟสมีค่าสูงขึ้น

รายการอ้างอิง

[1] Sangwiroon, P.; and Chansatirapanich, C. Feasibility study of the use an integrated system of a hydrogen generation unit and solid oxide fuel cell as power plant. Bachelor Degree Thesis, Department of Engineering King Mongkut's Institute of Technology Ladkrabang, Bangkkok, 2008.

[2] อภิรัตน์ เลาห์บุตรี และ นัทธมน คูณแสง Fuel Cell and Research Development of Solid Oxide Fuel Cell. วารสารมหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ (2546): 112-136.

[3] Boudghene Stambouli, A.; and Traversa, E. Fuel cells, an alternative to standard sources of energy. Renewable and Sustainable Energy Reviews 6 (2002): 295-304.

[4] Chan, S.H.; Khor, K.A.; and Xia, Z.T. A complete polarization model of a solid oxide fuel cell and its sensitivity to the change of cell component thickness. Journal of Power Sources 93 (2001): 130-140.

[5] Yakabe, H.; Hishinuma, M.; Uratani, M.; Matsuzaki, Y.; and Yasuda, I. Evaluation and modeling of performance of anode-supported solid oxide fuel cell. Journal of Power Sources 86 (2000): 423-431.

[6] Kaka, S.; Pramuanjaroenkij, A.; and Zhou, X.Y. A review of numerical modeling of solid oxide fuel cells. International Journal of Hydrogen Energy 32 (2007): 761-786.

[7] Wilson, J.R. *et al.* Three-dimensional reconstruction of a olid-oxide fuel-cell anode. nature materials 5 (2006): 541-545.

[8] Janardhanan, V.M.; Heuveline, V.; and Deutschmann, O. Three-phase boundary length in solid-oxide fuel cells: A mathematical model. Journal of Power Sources 178 (2008): 368-372.

[9] Deng, X.; and Petric, A. Geometrical modeling of the triple-phase-boundary in solid oxide fuel cells. Journal of Power Sources 140 (2005): 297-303.

[10] Vielstich, W.; Lamm, A.; and Gassteiger, H.A. Hanbook of Fuel Cell. Volume 1. 1st edition. West Sussex: John Wiley & Sons. 2003.

[11] ไพศาล นาคพิพัฒน์ กระบวนการอุตสาหกรรมสำหรับวิศวกรเคมี. 1st edition. กรุงเทพมหานคร: แผนกตำรา คณะวิศวกรรมศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง. 2007.

[12] สรัฐ ขวัญเมือง; ธนิษฐ์ ปราณีนราศักดิ์; อธิคม เพียงโงก; และ วรรณศิริ ลิ้มสุขนิรันดร์ พลังงานเชื้อเพลิงในอนาคต[online]. Bangkok: Rajamangala University of Technology.(n.d.). Available from: http://www.rmutphysics.com/charud/naturemystery/sci2/fuel-cell/fuel-cell/fuel-cellthai5.htm [2010, may 5].

[13] ศรีนลิน พิมพ์ประเสริฐ; และ ปวีณา มีป่อง บทความวิชาการออนไลน์ เซลล์เชื้อเพลิง[online]. Bangkok: Rajamangala University of Technology Thanyaburi.(n.d.). Available from: http://www.neutron.rmutphysics.com/teaching-glossary/index.php?option=com_content&task=view&id=4577&Itemid=11 [2010, May 17].

[14] Suksamai, W. Intermediate Temperature Operation OfaProto-Conducting Solid Oxide Fuel Cell. Ph.D. Degree Thesis, Academic, Department University of Manchester, Manchester, 2007.

[15] Fehringer, G.; Janes, S.; Wildersohn, M.; and Clasen, R. Proton--conducting ceramics as electrode/electrolyte--materials for SOFCs: Preparation, mechanical and thermal-mechanical properties of thermal sprayed coatings, material combination and stacks. Journal of the European Ceramic Society 24 (2004): 705-715.

[16] Bird, R.B.; Stewart, W.E.; and Lightfoot, E.N. Transport Phenomena. 2nd edition. New York: John Wiley & Sons. 2007.

[17] Tosun, I. Modelling In Transport Phenomena A Conceptual Approach. 1st edition. Netherlands: Elsevier Science B.V. 2002.

[18] รัตนา จิระรัตนานนท์ การถ่ายเทมวลสาร. 2nd edition. กรุงเทพมหานคร: แผนกตำรา คณะวิศวกรรมศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าธนบุรี,. 1995.

[19] Welty, J.R.; Wilson, R.E.; and Wicks, C.E. Fundamentals of momentum, heat, and mass transfer. 5th edition. New York: John Wiley. 2008.

[20] สุทธิชัย อัสสะบำรุงรัตน์ "เอกสารคำสอนวิชาเทคโนโลยีแผ่นเยื่อบาง", ผลงานวิชาการเพื่อขอตำแหน่งรองศาสตราจารย์, 2001.

[21] Suwanwarangkul, R.; Croiset, E.; Fowler, M.W.; Douglas, P.L.; Entchev, E.; and Douglas, M.A. Performance comparison of Fick's, dusty-gas and Stefan-Maxwell models to predict the concentration overpotential of a SOFC anode. Journal of Power Sources 122 (2003): 9-18.

[22] Sleep, B.E. Modeling transient organic vapor transport in porous media with the dusty gas model. Advances in Water Resources 22 (1998): 247-256.

[23] Veldsink, J.W.; van Damme, R.M.J.; Versteeg, G.F.; and van Swaaij, W.P.M. The use of the dusty-gas model for the description of mass transport with chemical reaction in porous media. The Chemical Engineering Journal and the Biochemical Engineering Journal 57 (1995): 115-125.

[24] Vasan, S.S.; Field, R.W.; and Cui, Z. A Maxwell-Stefan-Gouy-Debye model of the concentration profile of a charged solute in the polarisation layer. Desalination 192 (2006): 356-363.

[25] Sorrentino, M.; Pianese, C.; and Guezennec, Y.G. A hierarchical modeling approach to the simulation and control of planar solid oxide fuel cells. Journal of Power Sources 180 (2008): 380-392.

[26] Cussler, E.L. Diffusion: Mass Transfer in Fluid Systems. 2nd edition. Cambridge: Cambridge University Press. 1997.

[27] Mason, E.A.; and Malinauskas, A.P. Gas transport in porous media : the dusty-gas model. 1st edition. New York: Elsevier. 1983.

[28] Tseronis, K.; Kookos, I.K.; and Theodoropoulos, C. Modelling mass transport in solid oxide fuel cell anodes: a case for a multidimensional dusty gas-based model. Chemical Engineering Science 63 (2008): 5626-5638.

[29] Brown, M.; Primdahl, S.; and Mogensen, M. Structure/Performance Relations for Ni/Yttria-Stabilized Zirconia Anodes for Solid Oxide Fuel Cells. The Electrochemical Society 147 (2000): 475-485.

[30] Singhal, S.C.; and Kendall, K. Hight Temperature Solid Oxide Fuel Cell: Fundamentals, Design and Applications. 1st edition. Oxford: Elsevier. 2004.

[31] Nam, J.H.; and Jeon, D.H. A comprehensive micro-scale model for transport and reaction in intermediate temperature solid oxide fuel cells. Electrochimica Acta 51 (2006): 3446-3460.

[32] Chansatirapanich, Ch.; and Taepaisitphongse, V. The study of relationship between concentration overpotential and triple-phase-boundary length on the anode performance. In E-NETT 2011, pp. 543-548. 3-5 May 2011 Phuket Thailand, 2011.

[33] Bouvard, D.; and Lange, F.F. Relation between percolation and particle coordination in binary powder mixtures. Acta Metallurgica et Materialia 39 (1991): 3083-3090.

[34] Lehnert, W.; Meusinger, J.; and Thom, F. Modelling of gas transport phenomena in SOFC anodes. Journal of Power Sources 87 (2000): 57-63.

[35] Hussain, M.M.; Li, X.; and Dincer, I. Mathematical modeling of transport phenomena in porous SOFC anodes. International Journal of Thermal Sciences 46 (2007): 48-56.

[36] Maggio, G.; Ielo, I.; Antonucci, V.; and Giordano, N. Morphological op-timization of a SOFC anode based on theoretical consideration : a preliminary approach. The Second International Symposium on SOFC (1991): 611-620.

[37] Papaioannou, E.I.; Souentie, S.; Sapountzi, F.M.; Hammad, A.; Brosda, S.; and Vatyenas, C.G. The role of TiO_2 layers deposited on YSZ on the slectrchemical promotion of C_2H_4 oxidation on Pt. Journal of Apply Electrochem 40 (2010): 1859-1865.

[38] Lizarraga, L.; Guth, M.; Billard, A.; and Vernoux, P. Electrochaemical catalysis for propane combustion using nanometric sputtered-deposited Pt films. Catalysis Today 157 (2010): 61-65.

[39] ชาญวิทย์ จันสถิรพานิช และ วรัญ แต้ไพสิฐพงษ์. การศึกษาการถ่ายเทและการเคลื่อนทีมวลสารที่มีผลต่อประสิทธิภาพของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็ง. ใน การประชุมวิศวกรรมเคมีและเคมีประยุกต์แห่งประเทศไทยครั้งที่ 20, หน้า 63-68. 22-23 พฤศจิกายน 2553 ณ ศูนย์ประชุมแห่งชาติสิริกิติ์ กรุงเทพมหานคร, 2553.

[40] Horton, I. Beginning Visual C++ 2008. 1st edition. Indianapolis: Wiley Publishing. 2008.

[41] ไพชยนต์ สิริเสถียรวัฒนา การใช้โปรแกรม Maple. 1st edition. กรุงเทพมหานคร: จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย. 2009.

[42] Walsh, F. A First Course in Electrochemical Engineering. 1st edition. The electrochemical consultancy. 1993.

ภาคผนวก

ภาคผนวก ก

ค่าคงที่ในการคำนวณและผลการทดลองของ Yakabe, H. et al

ก-1 ค่าคงที่ในการคำนวณ

ตารางที่ ก-1 ค่าคงที่ทั่วไปเพิ่มเติม

ตัวแปร	สัญลักษณ์	ค่าคงที่	หน่วย	หมายเหตุ
อุณหภูมิระบบ	T	1023.15	K	-
ความดันระบบ	P	1	atm	-
ค่าคงที่ของโบลท์ซมานน์	k	$1.38\text{x}10^{-23}$	J/K	-
ค่าคงที่ฟาราเดย์	F	96485.3	C/mol	-
ค่าคงที่แก๊ส	R	82.0578	$(cm^3.atm)/(mol.K)$	-
		8.31451	J/(mol.K)	
สัมประสิทธิ์การแพร่ของแก๊สไฮโดรเจนในไอน้ำ	D_{H_2,H_2O}	0.85	cm^2/s	ที่ 293.15 K 1 atm
สัมประสิทธิ์การแพร่ของแก๊สไฮโดรเจนในแก๊สอาร์กอน	$D_{H_2,Ar}$	0.794	cm^2/s	ที่ 293.15 K 1 atm
สัมประสิทธิ์การแพร่ของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ในแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์	D_{CO,CO_2}	0.162	cm^2/s	ที่ 293.15 K 1 atm

ตารางที่ ก-2 ค่าคงที่แก๊สในระบบ

ตัวแปร	สัญลักษณ์	ค่าคงที่	หน่วย
มวลโมเลกุลของแก๊สไฮโดรเจน	M_{H_2}	2.015	g/mol
มวลโมเลกุลของไอน้ำ	M_{H_2O}	18.015	g/mol
มวลโมเลกุลแก๊สอาร์กอน	M_{Ar}	79.896	g/mol
มวลโมเลกุลของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์	M_{CO}	28.010	g/mol
มวลโมเลกุลของแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์	M_{CO_2}	44.010	g/mol
อุณหภูมิวิกฤตของแก๊สไฮโดรเจน	T_{c,H_2}	33.2	K
อุณหภูมิวิกฤตของไอน้ำ	T_{c,H_2O}	647.3	K
อุณหภูมิวิกฤตของแก๊สอาร์กอน	$T_{c,Ar}$	150.8	K
อุณหภูมิวิกฤตของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์	$T_{c,CO}$	132.9	K
อุณหภูมิวิกฤตของแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์	T_{c,CO_2}	304.2	K
ความดันวิกฤตของแก๊สไฮโดรเจน	P_{c,H_2}	13.0	atm
ความดันวิกฤตของไอน้ำ	P_{c,H_2O}	221.2	atm
ความดันวิกฤตของแก๊สอาร์กอน	$P_{c,Ar}$	48.7	atm
ความดันวิกฤตของแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์	$P_{c,CO}$	35.0	atm
ความดันวิกฤตของแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์	P_{c,CO_2}	73.8	atm

ก-2 ผลการทดลองของ Yakabe, H. et al. [5]

งานวิจัยของ Yakabe, H. et al. [5] ศึกษาการถ่ายเทมวลสารของเชื้อเพลิงแก๊สไฮโดรเจนและคาร์บอนมอนอกไซด์ที่มีผลต่อการสูญเสียศักย์ไฟฟ้าจากความเข้มข้น ดังที่ได้กล่าวไว้ในบทที่ 3 ซึ่งผลการทดลองได้แบ่งออกเป็นสองส่วนด้วยกันคือ ส่วนของเชื้อเพลิงแก๊สไฮโดรเจนและแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ ซึ่งเขาได้ทำการทดลองที่อุณหภูมิ 750 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ และใช้ค่าคงที่เช่นเดียวกับงานวิจัยนี้ ดังแสดงในตารางที่ 4.1 งานวิจัยของ Yakabe, H. et al. [5] ได้ป้อนแก๊สเชื้อเพลิงเข้าไปในอัตรา 0.8 มิลลิโมล ต่อปริมาตร 40 ลูกบาศก์มิลลิเมตร ซึ่งคิดเป็นความเข้มข้นเท่ากับ 20 โมลาร์

ตารางที่ ก-3 ผลการทดลองของ Yakabe, H. et al. [5] ของระบบเชื้อเพลิงแก๊สไฮโดรเจน

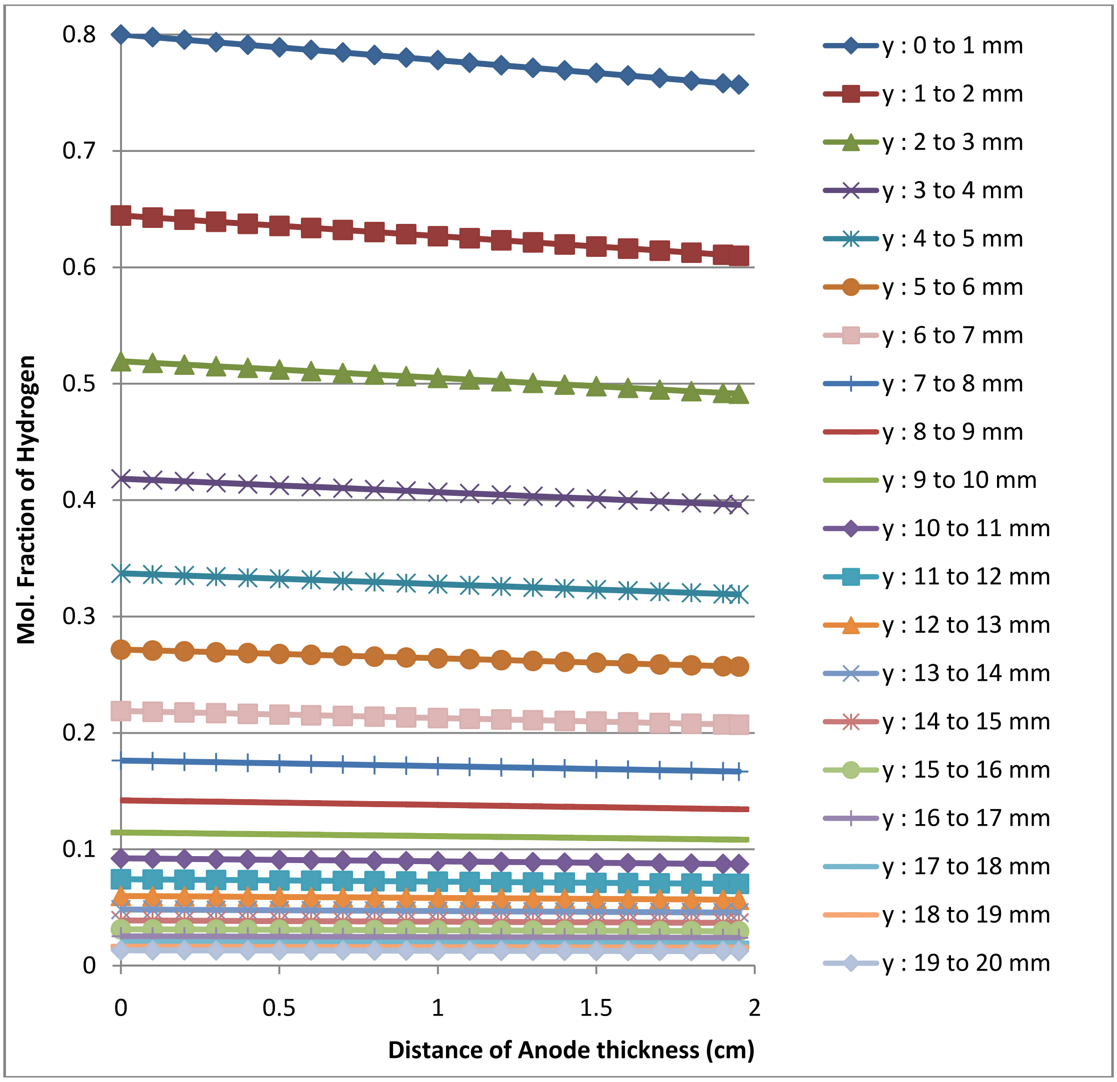
ความหนาแน่นกระแส (A/cm^2)	สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิง	η_0-η_c (V)
1.0	0.8	0
	0.48	0.03
	0.35	0.095
	0.26	0.125
	0.22	0.195
0.7	0.8	0
	0.48	0.0125
	0.35	0.052
	0.22	0.077
	0.11	0.116
	0.099	0.218
0.3	0.8	0
	0.48	0.0073
	0.35	0.024
	0.22	0.045
	0.11	0.0602
	0.098	0.0709

ตารางที่ ก-4 ผลการทดลองของ Yakabe, H. et al. [5] ของระบบเชื้อเพลิงแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์

ความหนาแน่นกระแส (A/cm^2)	สัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิง	η_0-η_c (V)
0.5	0.64	0
	0.55	0.058
	0.45	0.268
0.3	0.64	0
	0.45	0.000937
	0.35	0.000978
	0.3	0.0188
	0.25	0.0366
	0.22	0.147
0.1	0.64	0
	0.45	0.000608
	0.35	0.00488
	0.25	0.00478
	0.22	0.00428
	0.15	0.00558

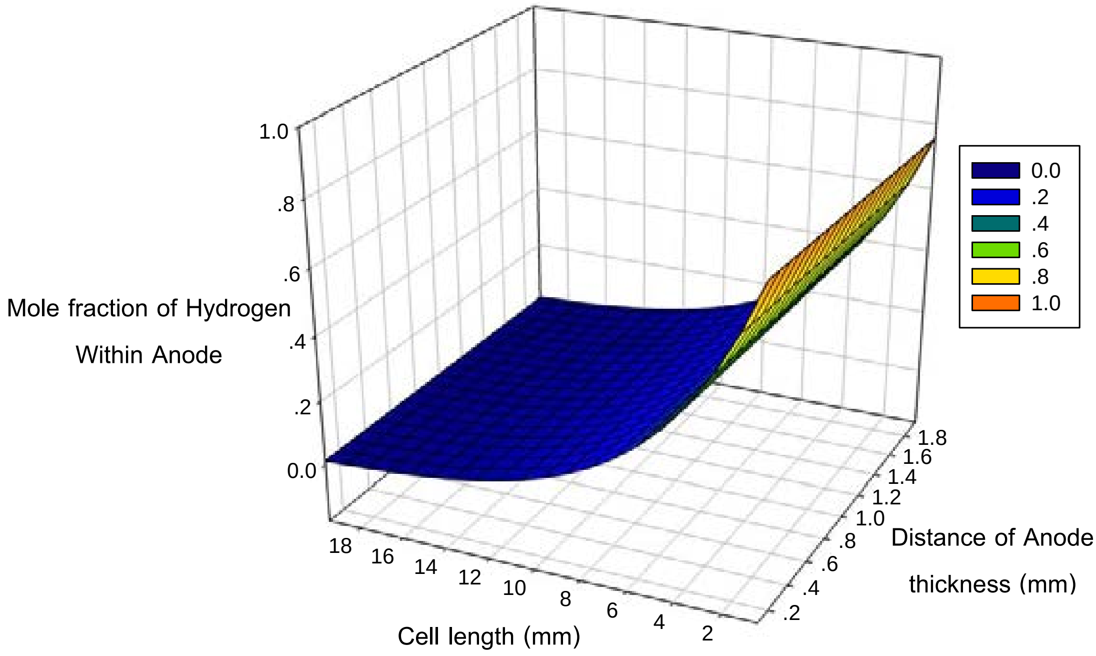
ก-3 ผลการทดลองเมื่อลดความเข้มข้นของเชื้อเพลิงในสายป้อนของระบบแก๊สไฮโดรเจน สำหรับงานวิจัยนี้

การเปลี่ยนแปลงสัดส่วนเชิงโมลของแก๊สไฮโดรเจนตามความหนาของขั้วแอโนดที่กำหนดให้เกิดการเปลี่ยนแปลงสัดส่วนเชิงโมลภายในสายป้อน โดยทดลองที่ค่าความหนาแน่นกระแส 1.0 แอมแปร์ต่อตารางเซนติเมตร ป้อนแก๊สไฮโดรเจน 8×10^{-8} โมล ที่สัดส่วนเชิงโมล 0.8 โดยคิดเป็นความเข้มข้นที่ 0.04 โมลาร์ โดยแก๊สไฮโดรเจนที่ป้อนเข้าไปถูกพิจารณาในปริมาตรย่อยของสายป้อนขนาด กว้าง 1 มิลลิเมตร ยาว 1 มิลลิเมตร สูง 2 มิลลิเมตร และความยาวของเซลล์เชื้อเพลิงคือ 20 มิลลิเมตร ซึ่งทำให้เกิดช่องสายป้อนของปริมาตรย่อยจำนวน 20 ช่อง ผลที่ได้แสดงดังภาพที่



ภาพที่ ก.1 การเปลี่ยนแปลงสัดส่วนเชิงโมลของแก๊สไฮโดรเจนตามความหนาและความยาวของขั้วแอโนด ที่ความเข้มข้นเริ่มต้นของเชื้อเพลิงไฮโดรเจน 0.04 โมลาร์

จากภาพที่ ก.1 เห็นได้ว่าที่ระยะเริ่มต้นจะมีค่าสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงที่สูง ทำให้ความชันของเส้นกราฟลดลงอย่างชัดเจน แต่เมื่อสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงลดลงที่ความยาวเซลล์เพิ่มขึ้น เห็นได้ว่าความชันของเส้นกราฟในช่วงปลายมีค่าน้อยกว่าช่วงต้นที่มีความเข้มข้นสูงกว่า เพราะเนื่องจากในช่วงส่วนปลายของเซลล์เชื้อเพลิงนั้นมีค่าความหนาแน่นกระแสที่ต่ำกว่าช่วงต้นด้วย จึงทำให้กราฟการแพร่ของเชื้อเพลิงมีความชันที่ลดลงต่ำกว่าช่วงต้นนั่นเอง ซึ่งภาพในรูปแบบสามมิติได้แสดงดังภาพที่ ก.2 ผลที่ได้เป็นดังอธิบายตามภาพที่ ก.1 แต่ภาพที่ ก.2 สามารถแสดงความต่อเนื่องของการลดลงของสัดส่วนเชิงโมลของแก๊สไฮโดรเจนในระบบได้ชัดเจนกว่า



ภาพที่ ก.2 การเปลี่ยนแปลงของสัดส่วนเชิงโมลของเชื้อเพลิงแก๊สไฮโดรเจนตามความหนาและความยาวของเซลล์เชิง ที่ความเข้มข้นเริ่มต้นของเชื้อเพลิงไฮโดรเจน 0.04 โมลาร์

ภาคผนวก ข

การแก้สมการและการคำนวณสมการการแพร่ของระบบ

เนื้อหาภายในภาคผนวก ข แสดงถึงการแก้สมการการแพร่ที่ใช้ในงานวิจัยนี้อย่างรวบรัด ซึ่งประกอบด้วยสมการการแพร่ของฟิคและสมการสเตฟาน-แม็คเวล สำหรับระบบสารสองและสามองค์ประกอบ

ข-1 สมการการแพร่ของฟิคสำหรับระบบการแพร่ของสารสององค์ประกอบ

จากสมการที่ (19)

$$N_{i,z} = \frac{1}{RT}\left(-D_{ij}^{eff}\,\frac{\partial(y_{i,z}P)}{\partial z} + \frac{B_0 y_{i,z}P}{\mu}\frac{\partial P}{\partial z}\right) \quad \text{(ข-1)}$$

จากสมการที่ (8)

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}N_{i,x} + \frac{\partial}{\partial y}N_{i,y} + \frac{\partial}{\partial z}N_{i,z}\right] + \frac{\partial c_i}{\partial t} = R_i \quad \text{(ข-2)}$$

ข้อสมมติฐานจากหัวข้อ 4.1.1 ทำให้สมการ (ข-1) เป็น (ข-3) และ (ข-2) เป็น (ข-4)

$$N_{i,z} = \frac{1}{RT}\left(-D_{ij}^{eff}\,\frac{\partial(y_{i,z}P)}{\partial z}\right) \quad \text{(ข-3)}$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial z}N_{i,z}\right] = 0 \quad \text{(ข-4)}$$

แทนสมการที่ (ข-3) ในสมการที่ (ข-4) ดังได้สมการที่ (ข-5)

$$\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{RT}\left(-D_{ij}^{eff}\,\frac{\partial(y_{i,z}P)}{\partial z}\right)\right) = 0 \quad \text{(ข-5)}$$

$$\frac{\partial}{\partial z}\left(\left(\frac{\partial(y_{i,z}P)}{\partial z}\right)\right) = 0 \quad \text{(ข-6)}$$

แก้สมการด้วยการอินทิเกรตสมการที่ (ข-6) แล้วแทนสภาวะขอบ

สภาวะขอบที่ $z = z1 \quad , \quad y_{i,z} = y_{i,z,bulk}$

$z = z2 \quad , \quad y_{i,z} = y_{i,z,TPB}$

$$y_{i,z} = \frac{N_{i,z}RT}{D_i^{eff}P}(z1-z) + y_{i,z,bulk} \tag{ข-7}$$

$$y_{i,TPB} = \frac{N_{i,z}RT}{D_i^{eff}P}(z1-z2) + y_{i,z,bulk} \tag{ข-8}$$

จากสมการที่ (48) แทนใน (ข-7) และ (ข-8)

$$y_{i,z} = \frac{iRT}{2FD_i^{eff}P}(z1-z) + y_{i,z,bulk} \tag{ข-9}$$

$$y_{i,TPB} = \frac{iRT}{2FD_i^{eff}P}(z1-z2) + y_{i,z,bulk} \tag{ข-10}$$

แทนสมการที่ (27) ด้วย (ข-9) และ (ข-10)

$$\eta_{conc} = -\frac{RT}{2F}\ln\left(\frac{\left(\frac{iRT}{2FD_i^{eff}P}(z1-z2)+y_{i,z,bulk}\right)(1-y_{i,z,bulk})}{(y_{i,z,bulk})\left(1-\left(\frac{iRT}{2FD_i^{eff}P}(z1-z2)+y_{i,z,bulk}\right)\right)}\right) \tag{ข-11}$$

ข-2 สมการการแพร่ของฟิคสำหรับระบบการแพร่ของสารสามองค์ประกอบ

ผลคำตอบของสมการจะได้ดังระบบสององค์ประกอบ แต่แตกต่างตรงที่ค่าสัมประสิทธิ์โดยรวมของการแพร่ของสารจะเป็นลักษณะสามองค์ประกอบ [21] ดังนี้

$$D_{1,T}^{eff} = \frac{1}{\left(\frac{1}{D_{i,k}^{eff}}\right)+\left(\frac{1}{D_{1,3}^{eff}}\right)+\left(\left(\frac{1}{D_{1,2}^{eff}}\right)-\left(\frac{1}{D_{1,3}^{eff}}\right)\right)(1-y_3)} \tag{ข-12}$$

ข-3 สมการสเตฟาน-แม็คเวลสำหรับระบบการแพร่ของสารสององค์ประกอบ

จากสมการที่ (20)

$$\sum_{j=1,\, j\neq i} \frac{y_jN_i - y_iN_j}{D_{ij}^{eff}} = -\frac{P}{RT}\frac{dy_i}{dz} \tag{ข-13}$$

แทนระบบ i และ j ลงใน (ข-14)

$$\frac{y_j N_i - y_i N_j}{D_{ij}^{eff}} = -\frac{P}{RT}\frac{dy_i}{dz} \qquad (ข\text{-}14)$$

จากกฎของแกรแฮม $\left(N_j/N_i\right) = -\left(M_i/M_j\right)^{0.5}$ [reff] กำหนดให้ $\alpha = 1 - \left(\frac{M_i}{M_j}\right)^{0.5}$

$$N_i\left(\frac{1 - y_i \cdot \alpha}{D_{ij}^{eff}}\right) = -\frac{P}{RT}\frac{dy_i}{dz} \qquad (ข\text{-}15)$$

$$\frac{\partial}{\partial z}\left(\left(\frac{1 - y_i \cdot \alpha}{D_{ij}^{eff}}\right)^{-1}\left(-\frac{P}{RT}\frac{dy_i}{dz}\right)\right) = 0 \qquad (ข\text{-}16)$$

$$(1 - y_i \cdot \alpha)\frac{d^2 y_i}{dz^2} - \alpha\left(\frac{dy_i}{dz}\right)^2 = 0 \qquad (ข\text{-}17)$$

ที่สภาวะขอบ $y_i = y_{i,bulk}$, $z = z1$ และ $\left.\frac{dy_i}{dz}\right|_{z=z1} = \left(\frac{i}{2F}\right)\left(\frac{-RT}{P}\right)\left(\frac{1 - y_{i,bulk} \cdot \alpha}{D_{ij}^{eff}}\right)$

จากจุดนี้สามารถแก้สมการที่ (ข-17) ได้ด้วยโปรแกรม Maple ต่อไป

ข-4 สมการสเตฟาน-แม็คเวลสำหรับระบบการแพร่ของสารสามองค์ประกอบ

จัดรูปสมการที่ (20) ให้ได้ระบบสามองค์ประกอบ i, j และ k

$$\frac{y_j N_i - y_i N_j}{D_{ij}^{eff}} + \frac{y_k N_i - y_i N_k}{D_{ik}^{eff}} = -\frac{P}{RT}\frac{dy_i}{dz} \qquad (ข\text{-}18)$$

จากกฎของแกรแฮม และกำหนดให้ y_k เป็นสัดส่วนเชิงโมลของแก๊สเฉื่อย มีค่าคงที่ทั้งระบบ

$$N_i\left(\frac{1 - y_k - y_i\left(1 - \left(\frac{M_i}{M_j}\right)^{0.5}\right)}{D_{ij}^{eff}}\right) + N_i\left(\frac{y_k + y_i\left(\frac{M_i}{M_k}\right)^{0.5}}{D_{ik}^{eff}}\right) = -\frac{P}{RT}\frac{dy_i}{dz} \qquad (ข\text{-}19)$$

ให้ $\alpha_1 = 1 - \left(\frac{M_i}{M_j}\right)^{0.5}$ และ $\alpha_2 = \left(\frac{M_i}{M_k}\right)^{0.5}$

$$N_i\left(\frac{1-y_k-y_i\cdot\alpha_1}{D_{ij}^{eff}}\right)+N_i\left(\frac{y_k+y_i\cdot\alpha_2}{D_{ik}^{eff}}\right)=-\frac{P}{RT}\frac{dy_i}{dz} \quad (ข\text{-}20)$$

$$N_i=\left[\left(\frac{1-y_k-y_i\cdot\alpha_1}{D_{ij}^{eff}}\right)+\left(\frac{y_k+y_i\cdot\alpha_2}{D_{ik}^{eff}}\right)\right]^{-1}\cdot\left[-\frac{P}{RT}\frac{dy_i}{dz}\right] \quad (ข\text{-}21)$$

แทนสมการที่ (ข-21) เข้าระบบเหมือนเช่นสมการที่ (ข-4)

$$\frac{\partial}{\partial z}\left\{\left[\left(\frac{1-y_k-y_i\cdot\alpha_1}{D_{ij}^{eff}}\right)+\left(\frac{y_k+y_i\cdot\alpha_2}{D_{ik}^{eff}}\right)\right]^{-1}\cdot\left[-\frac{P}{RT}\frac{dy_i}{dz}\right]\right\}=0 \quad (ข\text{-}22)$$

$$\frac{\left[\left(\frac{1-y_k-y_i\cdot\alpha_1}{D_{ij}^{eff}}\right)+\left(\frac{y_k+y_i\cdot\alpha_2}{D_{ik}^{eff}}\right)\right]\left(\frac{d^2y_i}{dz^2}\right)+\frac{\alpha_1}{D_{ij}^{eff}}\left(\frac{dy_i}{dz}\right)^2-\frac{\alpha_2}{D_{ik}^{eff}}\left(\frac{dy_i}{dz}\right)^2}{\left[\left(\frac{1-y_k-y_i\cdot\alpha_1}{D_{ij}^{eff}}\right)+\left(\frac{y_k+y_i\cdot\alpha_2}{D_{ik}^{eff}}\right)\right]^2}=0 \quad (ข\text{-}23)$$

ที่สภาวะขอบของระบบ $y_i = y_{i,bulk}$, $z = z1$

และ $\left.\frac{dy_i}{dz}\right|_{z=z1}=\left(\frac{i}{2F}\right)\left(\frac{-RT}{P}\right)\left(\frac{1-y_k-y_{i,bulk}\cdot\alpha_1}{D_{ij}^{eff}}\right)+\left(\frac{y_k+y_i\cdot\alpha_2}{D_{ik}^{eff}}\right)$

จากข้อมูลทั้งหมดสามารถแก้สมการที่ (ข-23) ได้โดยใช้โปรแกรม Maple

ภาคผนวก ค

แสดงรหัสโปรแกรม

สำหรับแบบจำลองทางคณิตศาสตร์

ภาคผนวก ค แสดงรหัสที่ใช้ในการเขียนโปรแกรมด้วยภาษาซี โดยรหัสทั้งหมดที่แสดงในภาคผนวกนี้ถูกใช้ในการคำนวณและทำนายผลการทดลองในบทที่ 5 และแสดงตัวอย่างรหัสที่ใช้ในการคำนวณด้วยโปรแกรม Maple ที่สัมพันธ์กับรหัสโปรแกรมภาษาซี

ตารางที่ ค-1 แสดงคุณสมบัติของแต่ละรหัสโปรแกรมที่ใช้ในงานวิจัยนี้

ชื่อโปรแกรม	ระบบเชื้อเพลิง	หัวข้อที่แสดงผล	หมายเหตุ
FISH2T1.CPP	H_2-H_2O-Ar	5.1.1	-
FISK2V2.CPP	CO-CO_2	5.1.1	-
SML01.CPP	H_2-H_2O, CO-CO_2	5.1.2, 5.2.2, 5.3	เชื่อมโยง vL_{TPB}
SMMTM01.CPP	H_2-H_2O-Ar	5.1.2	-
FTMHJ05.CPP	H_2-H_2O	5.2.1, 5.3	เชื่อมโยง vL_{TPB}
FTMHJ03.CPP	H_2-H_2O-Ar	5.2.1	-
FTMHJ04.CPP	CO-CO_2	5.2.1, 5.3	เชื่อมโยง vL_{TPB}
SML03.CPP	CO-CO_2	5.2.2, 5.3	เชื่อมโยง vL_{TPB}

ค-1 แสดงรหัสโปรแกรม FISH2T1.CPP

```
#include<stdio.h>
#include<math.h>
#include<conio.h>
#include<stdlib.h>

float Terrydif(float Pop,float dp,float Top,float Ma,float Tca,float Tcb,float k,float Treff,float Preff,float
Dabref, float e,float t,float yAr,float TcAr,float DaArref);

FILE *super;
void main()
{
        /* Consnt variable of Cell*/
        float
/*in put*/wt=0.1                    ,   /* Width of chanel fuel cell, (cm) */
/*in put*/z1=0.2                    ,   /* depth of chanel fuel cell, (cm) */
/*in put*/J=1.0                 ,   /* Curent Dencity ,(A/cm2) */
/*in put*/z2=0.3995                 ,   /* depth of Anode fuel cell, (cm)*/
/*in put*/e= 0.46                   ,   /* Porosity (%/100) */
/*in put*/t= 4.5                    ,   /* Tortuosity dimensionless */
/*in put*/celllength=2.01           ,   /* Total Cell length ,(cm) */
Na=     0               ,   /* Molar Flux of H2 ,(mol/cm2/s) */
/*in put*/dp=2.6*pow(10,-4)         ;   /* Average pore size ,(cm) */
/* Consnt variable of Operation */
float
/*in put*/R= 82.057                 ,   /* Gas constant. (cm3*atm/mol/K) */
/*in put*/Top=  1023.15             ,   /* Temperature operation ,(K) */
/*in put*/Pop=  1.0                 ,   /* Pressure operation ,(atm) */
F=   96485.3            ,   /* Faraday Constant */
/*in put*/Tca=  33.2                ,   /* Critical Temperature of A. ,(K) */
   //    Pca=  12.8                 ,   /* Critical Pressure of B. , (atm) */
/*in put*/Tcb=  647.1               ,   /* Critical Temperature of B. ,(K) */
                TcAr= 150.8             ,   /* Critical Temperature of Ar. ,(K) */
                k=   1.38*pow(10,-16)   ,   /* Boltzmann Constant ,(ergs/K) */
```

```
//          Du=   0                        ,
            Dd1                 ,
            Dd2                            ,
/*in put*/molAold=  0.008               ,    /* mol.of H2 flow rate ,(mol/s) */
/*in put*/molBold=  0.002               ,    /* mol.of O2 flow rate ,(mol/s) */
/*in put*/molAr  =  0.07     ,    /* mol.of Ar flow rate ,(mol/s) */
            Ma=   2                        ,    /* Molecula wight of Hydrogen,(g/mol) */
            yAr = 0                        ;    /* Mole. Fraction of Ar. : Ar/(H2O+H2+Ar) */
      /* Have input variable of Operation */
      float
            Pa[256]                        , /* Pressure of Gas A in Chanel Feed , (atm)*/
//          Pab=                           ,
/*in put*/um=20.4597925               , /* Viscousity of A. , (Pa/s) */
            v[100][100]                    , /* velocity profile , (m/s) */
            vmax[256]                      , /* velocity maximun , (m/s) */
            Daeff                          , /* effective diffusion coefficient ,(cm2/s) */
            ya[50][50]                     , /* mol. fraction of gas A */
            ytpb[255]={0}                  , /* mol. fraction of gas A at TPB. */
            yab[256]                       , /* mol. fraction of gas A at Bulk phase */
            ybb[255]                       , /* mol. fraction of gas B at Bulk phase */
            nconc[256]                     , /* concrntration overpotential */
            navg                           , /* Avg. of concrntration overpotential */
            nsum=0                         , /* Sum. of concrntration overpotential */
            molAuse                        ,
            NT=0                           ,
//          ybb=   0                ,
            Tn                             ;
      /* Variable for Calculate Diffusion Ternary */
      float
            eab                            , /* Collision diameter of binary A and B */
            ea                             , /* Collision diameter of A */
            eb                             , /* Collision diameter of B */
            Dik                            , /* Knudsen diffusion coefficient, (cm2/s) */
            Dab                            , /* diffusion coefficient of A&B , (cm2/s) */
```

```
/*in put*/Dabref=  0.850          , /* diffusion coefficient of A&B at Treff=293 K,Preff=1atm ,
(cm2/s) */
            DaArref= 0.77              ; /* diffusion coefficient of A&Ar at Treff=293
K,Preff=1atm , (cm2/s) */
      /* Operation Variable */
      float
/*in put*/znext=0.01              ,
            z=0                   ,
            y=0                   ,
            zu=0                  ,
/*in put*/ynext=0.1               ;

      int   a=0                   ,
            b=0                   ,
            i=0                   ,
            g=0                   ,
            h=0                   ;
      /* Check Run % */
      float
            check=0                     ,
            nub=0                 ;

      /* Constant Variable Refferent */
      float
/*in put*/Preff=1                 , /* Pressure reffernce for cal Dab, (atm) */
/*in put*/Treff=293               ; /* Temperature refference For cal. Da1 and Dab , (K) */
//    FILE *super;
      super=fopen("C:\\PROJECT2\\DATA\\FISH2T1.txt","w+");
      clrscr();
//    ynext = 0.01;
//    znext = 0.01;
      printf(" \n\n Check +++++++++++++++++++++");
      getch();
      /* Set operating variable */
```

```
		NT=molAold+molBold+molAr;
		yab[0] = molAold/NT;
		ybb[0] = molBold/NT;
		yAr    = molAr/NT;
		Pa[0]  = yab[0]*Pop;
		printf("\n\n yab[0] : %f\tybb[0] : %f",yab[0],ybb[0]);
		/* Start write the code */
/*		ea = 0.77*Tca*k;
		eb = 0.77*Tcb*k;
		eab= pow((ea*eb),0.5);
		Tn = k*Top/eab;
		printf("\n\n Tn of eab at Top : %f K",Tn);
		Dd2 = (1.06036/pow(Tn,0.15610)) + (0.193/exp(0.47635*Tn)) +(1.03587/exp(1.52996*Tn)) +
(1.76474/exp(3.89411*Tn)) ;
		printf("\n\n Dd2 : %f egsd",Dd2);
		Tn = k*Treff/eab;
		printf("\n\n Tn of eab at Treff : %f K",Daeff);
		Dd1 = (1.06036/pow(Tn,0.15610)) + (0.193/exp(0.47635*Tn)) +(1.03587/exp(1.52996*Tn)) +
(1.76474/exp(3.89411*Tn)) ;
		printf("\n\n Dd1 : %f egsd",Dd1);
		Dab = Dabref*(Preff/Pop)*pow((Top/Treff),1.5)*(Dd1/Dd2);
		printf("\n\n Dab : %f cm2/s",Dab);
		Dik = 4850*dp*pow((Top/Ma),0.5);
		printf("\n\n Dik : %f cm2/s",Dik);
		Daeff = (e/t)* pow(((1/Dab)+(1/Dik)),-1);
		printf("\n\n Daeff : %f cm2/s",Daeff);
*/
//		getch();
		Daeff =  Terrydif(Pop,dp,Top,Ma,Tca,Tcb,k,Treff,Preff,Dabref, e, t, yAr, TcAr, DaArref);
		y+=ynext;
		a=0;
		while(y<=celllength)
		{
			printf("\n\n in The Roop1\n");
//			getch();
```

```
                z = z1+znext;
                b = 0;
                nub=(z2-z1)/znext;
                while(z<=z2)
                {
                        printf("\n\n In The ROOP 2");
                        printf("\n\n Yab[%d] : %f",a,yab[a]);
            //  getch();
                        printf("(J*R*Top/(2*F*Daeff*Pop)*(z1-z)) :%f",(J*R*Top/(2*F*Daeff*Pop)*(z1-
z)));
                        ya[a][b] = (J*R*Top/(2*F*Daeff*Pop)*(z1-z)) + yab[a];
                        b++;
                        z=z+znext;
                        check=b/nub*100;
            //  clrscr();
                        printf("\nRun fine H2 mol fraction : %.3f persen",check);
                        printf("\n\nYa[%d][%d] : %f\n\n",a,b-1,ya[a][b-1]);
        //              getch();
                }
                printf("\n\nYa[%d][%d] : %f\n\n",a,b,ya[a][b]);
                printf("\n\n Out of roop");
//              getch();
                ytpb[a] = (J*R*Top / (2*F*Daeff*Pop)*(z1-z2))+yab[a];
                printf("\n\n YTPB  : %f \t at y=%f",ytpb[a],y);
                printf("\n+++++++++++++++++");
//              getch();
//              nconc[a] = (-1)*(R*Top/2/F) * (1.013/10) * log((J*R*Top/2/F/Daeff/Pop*(z1-z2) +
yab[a]) * (1-yab[a]) / yab[a]  / ( 1 - (J*R*Top/2/F/Daeff/Pop*(z1-z2))) );
                nconc[a] = (-1)*(R*Top/2/F) * (1.013/10) * log(ytpb[a] * (1-yab[a]-yAr) / yab[a]  / ( 1
- ytpb[a]-yAr) );
                printf("\n\n nconc[%d] : %f mV.",a,nconc[a]);
//              getch();
                /* Calculation For molar coverse at reaction zone */
                Na = (ytpb[a]-yab[a])*Daeff*Pop/(R*Top)/(z1-z2);
                molAuse = Na * (ynext*wt);
```

```
                        yab[a+1] = (molAold - molAuse)/NT;
                        ybb[a+1] = (1-yab[a+1]-yAr);
                        Pa[a+1] = Pa[a]*(molAold-molAuse)/molAold;
                        molAold -= molAuse;
//                      molAold = yab[a+1]*NT;
                        /* **************** End of CaL. ****************** */
                        i= 0+znext;
                        g = 0;
                        zu=0;
                        printf("\n\n Befor think : Vmax");
                        printf("\n\nPa[%d] : %f\nPa[%d] : %f\num : %f\nynext : %f\nz1 :
%f",a,Pa[a],a+1,Pa[a+1],um,ynext,z1);
//                      getch();
                        printf("\nzu : %f\tz1 : %f\tvmax[%d] : %fcm/s\n\n\n",zu,z1,a,vmax[a]);
//                      getch();
                        vmax[a] = (Pa[a] - Pa[a+1])/2/um/ynext * (z1*z1/4) * (1.013*pow(10,5));
                        printf("\n\n Vmax[a] : %f",vmax[a]);
                        printf("\n\n\n ++++++++++++++++ befor into the loop ZU");
//                      getch();
                        printf("\nzu : %f\tz1 : %f\tvmax[%d] : %fcm/s\n\n\n",zu,z1,a,vmax[a]);
//                      getch();
                        while(zu<=z1)
                        {
                                printf("\n\nINTER LOPP ZU");
                                printf("\nzu : %f\tz1 : %f\tvmax[%d] : %fcm/s",zu,z1,a,vmax[a]);
//                              getch();
                                v[a][g] = 4*(zu/z1)*vmax[a]*(z1-zu)/z1;
                                g++;
                                zu+=znext;
                                printf("\n\n\nV[%d][%d] : %f cm/s",a,g-1,v[a][g-1]);
//                              getch();
                        }
                        y+=ynext;
                        a++;
                }
```

```
        for(i=0;i<a;i++)
        {
                nsum = nsum + nconc[i];
        }
//      printf("\n\n\n I : %d",i);
//      getch();
        navg = nsum/i;
        /*********************  Show output in File Data **************/
//      fprintf(super,"\nData of The System ");
        fprintf(super,"\nFeed H2 : %f mol/s\tyH2 : %f",molAold,yab[0]);
        fprintf(super,"\nFeed H2O : %f mol/s\tyH2O : %f",molBold,ybb[0]);
        fprintf(super,"\nFeed Ar : %f mol/s\tyAr : %f",molAr,yAr);
//      fprintf(super,"\n\nKnudsen diffusion : %f cm2/s",Dik);
//      fprintf(super,"\nH2O-H2 diffusion : %f cm2/s",Dab);
//      fprintf(super,"\nH2-Ar diffusion : %f cm2/s",DaAr);
//      fprintf(super,"\nH2O-H2-Ar diffusion : %f cm2/s",Daeff);
        celllength-=0.01;
        fprintf(super,"\n\nData of Fuel cell size ");
        fprintf(super,"\n\nCell length : %f cm.",celllength);
        fprintf(super,"\nCell Wide : %f cm.",wt);
        fprintf(super,"\nFeed Chanel high : %f cm.",z1);
        fprintf(super,"\nAnode deep : %f cm.",z2-z1);
        fprintf(super,"\nPorosity : %f persen",e*100);
        fprintf(super,"\nTortuosity : %f ",t);
        fprintf(super,"\nDiff of direction Y : %f cm",ynext);
        fprintf(super,"\nDiff of direction Z : %f cm",znext);
        fprintf(super,"\nCerrent Density : %f A/cm2",J);
//      fprintf(super,"Distance\tyA in chanel\tCC OV");
/*      for(i=0;i<a;i++)
        {
                fprintf(super,"%f\t%f\t%f",i*ynext,yab[i],nconc[i]);
        }
*/
        fprintf(super,"\n\nAvg. Concentration overpotential : %f V",navg);
        fprintf(super,"\nSum.Toatal Concentration overpotential : %f V",nsum);
```

```
y=0;
for(i=0;i<a;i++)
{
    z=z1;
    y+=ynext;
    fprintf(super,"\n\n\nRaYa  :  %f to %f\nz : %f\t\tH2Bulk Frac. : %f",y-ynext,y,z,yab[i]);
    fprintf(super,"\nPa[%d] : %f atm.",i,Pa[i]);
    fprintf(super,"\nMol.A bulk : %f mol/s",yab[i]*NT);
//  fprintf(super,"\nz : %f\t\tH2Bulk Frac. : %f",z,yab[i]);
    for(h=0;h<b;h++)
    {
        z+=znext;
        fprintf(super,"\nz : %f\t\tH2faction    : %f",z,ya[i][h]);
    }
    fprintf(super,"\n\nY(TPB) : %f\tAT Z2 : %f cm.",ytpb[i],z2);
    fprintf(super,"\nConcentration Overpotential : %f V.",nconc[i]);
}
/*+++++++++++++++++++++++Print Velocity +++++++++++++++++++++++++++*/
/******************************************************************/
fprintf(super,"\n\n\n**********Calculation The Velocity**************");
y=0;
for(i=0;i<a;i++)
{
    z=0;
    y+=ynext;
    fprintf(super,"\n\n\nRaYa  :  %f to %f\nz : %f",y-ynext,y);
//  fprintf(super,"\nz : %f\t\tH2Bulk Frac. : %f",z,yab[i]);
    for(h=0;h<g;h++)
    {
        fprintf(super,"\nz : %f\t\tVelocity    : %f cm2/s",z,v[i][h]);
        z+=znext;
    }
    fprintf(super,"\n\nVmax : %f cm/s",vmax[i]);
}
```

```
        fclose(super);
        printf("\n\n\n\n\n\n\n\t************************END OF RUN***************************** ");
        getch();
}
float Terrydif(float Pop,float dp,float Top,float Ma,float Tca,float Tcb,float k,float Treff,float Preff,float
Dabref, float e,float t,float yAr,float TcAr,float DaArref)
{
/*      float
                yAr=0.2                 ,
                Pop=1                   ,
                dp =2.6*pow(10,-4)      ,
                Top =1023.15            ,
                Ma = 2                  ,
                Tca= 33.2               ,
                Tcb= 647.1              ,
                k =  1.38*pow(10,-16)   ,
                TcAr= 150.8             ,
                Treff= 293              ,
                Preff=    1             ,
                Dabref=  0.850          ,
                DaArref=  0.77          ,
                e=          0.46        ,
                t=          4.5         ;
*/
        float
                DTeff=0                 ,
                DaAr=0          ,
                Dab=0                   ,
//              Daeff=0                 ,
                Dik=0                   ,
                ea=0                    ,
                eb=0                    ,
                eab=0                   ,
                Tn=0                    ,
                Dd2=0                   ,
```

```
            Dd1=0                    ,
            eAr=0                    ,
            eaAr=0                   ;
    clrscr();
    /* Calculation The Knudsen diffusion */
    Dik = 4850*dp*pow((Top/Ma),0.5);
    printf("\n\n Dik : %f cm2/s",Dik);
    /* Calculation The D12 binary diffusion */
    ea = 0.77*Tca*k;
    eb = 0.77*Tcb*k;
    eab= pow((ea*eb),0.5);
    Tn = k*Top/eab;
    printf("\n\n Tn of eab at Top : %f K",Tn);
    Dd2 = (1.06036/pow(Tn,0.15610)) + (0.193/exp(0.47635*Tn)) +(1.03587/exp(1.52996*Tn)) +
(1.76474/exp(3.89411*Tn)) ;
    printf("\n\n Dd2 of Dab : %f egsd",Dd2);
    Tn = k*Treff/eab;
    printf("\n\n Tn of eab at Treff : %f K",Tn);
    Dd1 = (1.06036/pow(Tn,0.15610)) + (0.193/exp(0.47635*Tn)) +(1.03587/exp(1.52996*Tn)) +
(1.76474/exp(3.89411*Tn)) ;
    printf("\n\n Dd1 of Dab : %f egsd",Dd1);
    Dab = Dabref*(Preff/Pop)*pow((Top/Treff),1.5)*(Dd1/Dd2);
    printf("\n\n Dab : %f cm2/s",Dab);
    /* Calculation The B1Ar of innert gas Vs. Fuel gas Diffusion */
    eAr = 0.77*TcAr*k;
    eaAr= pow((ea*eAr),0.5);
    Tn = k*Top/eaAr;
    printf("\n\n Tn of eAr at Top : %f K",Tn);
    Dd2 = (1.06036/pow(Tn,0.15610)) + (0.193/exp(0.47635*Tn)) +(1.03587/exp(1.52996*Tn)) +
(1.76474/exp(3.89411*Tn)) ;
    printf("\n\n Dd2 of DaAr : %f egsd ",Dd2);
    Tn = k*Treff/eaAr;
    printf("\n\n Tn of eab at Treff : %f K",Tn);
```

```
        Dd1 = (1.06036/pow(Tn,0.15610)) + (0.193/exp(0.47635*Tn)) +(1.03587/exp(1.52996*Tn)) +
(1.76474/exp(3.89411*Tn)) ;
        printf("\n\n Dd1 of DaAr : %f egsd",Dd1);
        DaAr = DaArref*(Preff/Pop)*pow((Top/Treff),1.5)*(Dd1/Dd2);
        printf("\n\n DaAr : %f cm2/s",DaAr);
        /**********Calculation The ternary diffusion coefficient **********/
        DTeff = (e/t) * (1/((1/Dik) + (1/DaAr) + (((1/Dab) - (1/DaAr))*(1-yAr)) ));
        printf("\n\n\n\nShow the result of Ternary Diffusion ");
        printf("\n\nDTeff : %f cm2/s",DTeff);
        fprintf(super,"\nData of The System of H2-H2O-Ar");
        fprintf(super,"\n\nKnudsen diffusion : %f cm2/s",Dik);
        fprintf(super,"\nH2O-H2 diffusion : %f cm2/s",Dab);
        fprintf(super,"\n\nH2-Ar diffusion : %f cm2/s",DaAr);
        fprintf(super,"\nH2O-H2-Ar diffusion : %f cm2/s",DTeff);
        getch();
        return(DTeff);
}
```

ค-2 แสดงรหัสโปรแกรม FISK2V2.CPP

```
#include<stdio.h>
#include<math.h>
#include<conio.h>
#include<stdlib.h>

void main()
{
        /* Consnt variable of Cell*/
        float
/*in put*/wt=0.1                  ,   /* Width of chanel fuel cell, (cm) */
/*in put*/z1=0.2                  ,   /* depth of chanel fuel cell, (cm) */
/*in put*/J=1.0                ,   /* Curent Dencity ,(A/cm2) */
/*in put*/z2=0.3995                       ,   /* depth of Anode fuel cell, (cm)*/
/*in put*/e= 0.46                 ,   /* Porosity (%/100) */
/*in put*/t= 4.5                  ,   /* Tortuosity dimensionless */
/*in put*/celllength=2.01         ,   /* Total Cell length ,(cm) */
                Na=     0                 ,   /* Molar Flux of H2 ,(mol/cm2/s) */
/*in put*/dp=2.6*pow(10,-4)       ;   /* Average pore size ,(cm) */
/* Consnt variable of Operation */
        float
/*in put*/R= 82.057               ,    /* Gas constant. (cm3*atm/mol/K) */
/*in put*/Top=  1023.15           ,    /* Temperature operation ,(K) */
/*in put*/Pop=  1.0               ,    /* Pressure operation ,(atm) */
F=    96485.3           ,   /* Faraday Constant */
/*in put*/Tca=  33.2              ,    /* Critical Temperature of A. ,(K) */
 //        Pca=  12.8             ,    /* Critical Pressure of B. , (atm) */
/*in put*/Tcb=  647.1             ,    /* Critical Temperature of B. ,(K) */
k=    1.38*pow(10,-16)    ,   /* Boltzmann Constant ,(ergs/K) */
        //      Du=   0                   ,
                Dd1               ,
                Dd2                       ,
/*in put*/molAold=  0.008         ,    /* mol.of H2 flow rate ,(mol/s) */
/*in put*/molBold=  0.002         ,    /* mol.of O2 flow rate ,(mol/s) */
```

```
                    Ma=   2                 ;   /* Molecula wight of Hydrogen,(g/mol) */
        /* Have input variable of Operation */
        float
                    Pa[256]                 , /* Pressure of Gas A in Chanel Feed , (atm)*/
        //          Pab=                    ,
/*in put*/um=20.4597925             , /* Viscousity of A. , (Pa/s) */
                    v[100][100]             , /* velocity profile , (m/s) */
                    vmax[256]               , /* velocity maximun , (m/s) */
                    Daeff                   , /* effective diffusion coefficient ,(cm2/s) */
                    ya[50][50]              , /* mol. fraction of gas A */
                    ytpb[255]={0}           , /* mol. fraction of gas A at TPB. */
                    yab[256]                , /* mol. fraction of gas A at Bulk phase */
                    ybb[255]                , /* mol. fraction of gas B at Bulk phase */
                    nconc[256]              , /* concrntration overpotential */
                    navg                    , /* Avg. of concrntration overpotential */
                    nsum=0                  , /* Sum. of concrntration overpotential */
                    eab                     , /* Collision diameter of binary A and B */
                    ea                      , /* Collision diameter of A */
                    eb                      , /* Collision diameter of B */
                    Dik                     , /* Knudsen diffusion coefficient, (cm2/s) */
                    Dab                     , /* diffusion coefficient of A&B , (cm2/s) */
/*in put*/Dabref=  0.850            , /* diffusion coefficient of A&B at Treff=293 K,Preff=1atm ,
(cm2/s) */
                    molAuse                 ,
                    NT=0                    ,
    //              ybb=   0              ,
                    Tn                      ;
        /* Operation Variable */
        float
/*in put*/znext=0.01                ,
                    z=0                     ,
                    y=0                     ,
                    zu=0                    ,
/*in put*/ynext=0.1                 ;
```

```
        int     a=0                 ,
                b=0                 ,
                i=0                 ,
                g=0                 ,
                h=0                 ;
        /* Check Run % */
        float
                check=0                        ,
                nub=0               ;
        /* Constant Variable Refferent */
        float
/*in put*/Preff=1                   , /* Pressure reffernce for cal Dab, (atm) */
/*in put*/Treff=293                 ; /* Temperature refference For cal. Da1 and Dab , (K) */
        FILE *super;
        super=fopen("C:\\PROJECT2\\DATA\\FISK2V2.txt","w+");
        clrscr();
//      ynext = 0.01;
//      znext = 0.01;
        printf(" \n\n Check +++++++++++++++++++++");
        getch();
        /* Set operating variable */
        NT=molAold+molBold;
        yab[0] = molAold/NT;
        ybb[0] = 1-yab[0];
        Pa[0]  = yab[0]*Pop;
        printf("\n\n yab[0] : %f\tybb[0] : %f",yab[0],ybb[0]);
        /* Start write the code */
        ea = 0.77*Tca*k;
        eb = 0.77*Tcb*k;
        eab= pow((ea*eb),0.5);
        Tn = k*Top/eab;
        printf("\n\n Tn of eab at Top : %f K",Tn);
        Dd2 = (1.06036/pow(Tn,0.15610)) + (0.193/exp(0.47635*Tn)) +(1.03587/exp(1.52996*Tn)) +
(1.76474/exp(3.89411*Tn)) ;
        printf("\n\n Dd2 : %f egsd",Dd2);
```

```
		Tn = k*Treff/eab;
		printf("\n\n Tn of eab at Treff : %f K",Daeff);
		Dd1 = (1.06036/pow(Tn,0.15610)) + (0.193/exp(0.47635*Tn)) +(1.03587/exp(1.52996*Tn)) + 
(1.76474/exp(3.89411*Tn)) ;
		printf("\n\n Dd1 : %f egsd",Dd1);
		Dab = Dabref*(Preff/Pop)*pow((Top/Treff),1.5)*(Dd1/Dd2);
		printf("\n\n Dab : %f cm2/s",Dab);
		Dik = 4850*dp*pow((Top/Ma),0.5);
		printf("\n\n Dik : %f cm2/s",Dik);
		Daeff = (e/t)* pow(((1/Dab)+(1/Dik)),-1);
		printf("\n\n Daeff : %f cm2/s",Daeff);
//		getch();
		y+=ynext;
		a=0;
		while(y<=celllength)
		{
			printf("\n\n in The Roop1\n");
//			getch();
			z = z1+znext;
			b = 0;
			nub=(z2-z1)/znext;
			while(z<=z2)
			{
				printf("\n\n In The ROOP 2");
				printf("\n\n Yab[%d] : %f",a,yab[a]);
		//	getch();
				printf("(J*R*Top/(2*F*Daeff*Pop)*(z1-z)) :%f",(J*R*Top/(2*F*Daeff*Pop)*(z1-
z)));
				ya[a][b] = (J*R*Top/(2*F*Daeff*Pop)*(z1-z)) + yab[a];
				b++;
				z=z+znext;
				check=b/nub*100;
		//	clrscr();
				printf("\nRun fine H2 mol fraction : %.3f persen",check);
				printf("\n\nYa[%d][%d] : %f\n\n",a,b-1,ya[a][b-1]);
```

```
//                      getch();
                    }
                    printf("\n\nYa[%d][%d] : %f\n\n",a,b,ya[a][b]);
                    printf("\n\n Out of roop");
//                  getch();
                    ytpb[a] = (J*R*Top / (2*F*Daeff*Pop)*(z1-z2))+yab[a];
                    printf("\n\n YTPB  : %f \t at y=%f",ytpb[a],y);
                    printf("\n++++++++++++++++");
//                  getch();
                    nconc[a] = (-1)*(R*Top/2/F) * (1.013/10) * log(ytpb[a] * (1-yab[a]) / yab[a]  / ( 1 -
ytpb[a]) );
                    printf("\n\n nconc[%d] : %f mV.",a,nconc[a]);
//                  getch();
                    /* Calculation For molar coverse at reaction zone */
                    Na = (ytpb[a]-yab[a])*Daeff*Pop/(R*Top)/(z1-z2);
                    molAuse = Na * (ynext*wt);
                    yab[a+1] = (molAold - molAuse)/NT;
                    ybb[a+1] = (1-yab[a+1]);
                    Pa[a+1] = Pa[a]*(molAold-molAuse)/molAold;
                    molAold -= molAuse;
//                  molAold = yab[a+1]*NT;
                    /* **************** End of CaL. ****************** */
                    i= 0+znext;
                    g = 0;
                    zu=0;
                    printf("\n\n Befor think : Vmax");
                    printf("\n\nPa[%d] : %f\nPa[%d] : %f\num : %f\nynext : %f\nz1 :
%f",a,Pa[a],a+1,Pa[a+1],um,ynext,z1);
//                  getch();
                    printf("\nzu : %f\tz1 : %f\tvmax[%d] : %fcm/s\n\n\n",zu,z1,a,vmax[a]);
//                  getch();
                    vmax[a] = (Pa[a] - Pa[a+1])/2/um/ynext * (z1*z1/4) * (1.013*pow(10,5));
                    printf("\n\n Vmax[a] : %f",vmax[a]);
                    printf("\n\n\n ++++++++++++++++ befor into the loop ZU");
//                  getch();
```

```
            printf("\nzu : %f\tz1 : %f\tvmax[%d] : %fcm/s\n\n\n",zu,z1,a,vmax[a]);
//          getch();
            while(zu<=z1)
            {
                printf("\n\nINTER LOPP ZU");
                printf("\nzu : %f\tz1 : %f\tvmax[%d] : %fcm/s",zu,z1,a,vmax[a]);
//              getch();
                v[a][g] = 4*(zu/z1)*vmax[a]*(z1-zu)/z1;
                g++;
                zu+=znext;
                printf("\n\n\nV[%d][%d] : %f cm/s",a,g-1,v[a][g-1]);
//              getch();
            }
            y+=ynext;
            a++;
        }
        for(i=0;i<a;i++)
        {
            nsum = nsum + nconc[i];
        }
//      printf("\n\n\n I : %d",i);
//      getch();
        navg = nsum/i;
        /********************  Show output in File Data **************/
        celllength -= 0.01;
        z2=z2-z1;
        fprintf(super,"\nData of The System of H2-H2O");
        fprintf(super,"\n\nFeed H2 : %f mol/s\tyH2 : %f",molAold,yab[0]);
        fprintf(super,"\nFeed H2O : %f mol/s\tyH2O : %f",molBold,ybb[0]);
        fprintf(super,"\n\nKnudsen diffusion : %f cm2/s",Dik);
        fprintf(super,"\nH2-H2O diffusion : %f cm2/s",Dab);
        fprintf(super,"\ndiffusion effect of H2 : %f cm2/s",Daeff);
        fprintf(super,"\n\n\nData of Fuel cell size ");
        fprintf(super,"\n\nCell length : %f cm.",celllength);
        fprintf(super,"\nCell Wide : %f cm.",wt);
```

```
fprintf(super,"\nFeed Chanel high : %f cm.",z1);
fprintf(super,"\nAnode deep : %f cm.",z2);
fprintf(super,"\nAnode Reaction Zone deep : %f cm",0.4-z2);
fprintf(super,"\nDiff of direction Y : %f cm",ynext);
fprintf(super,"\nDiff of direction Z : %f cm",znext);
fprintf(super,"\nCerrent Density : %f A/cm2",J);
fprintf(super,"\n\n\nAvg. Concentration overpotential : %f V",navg);
fprintf(super,"\nSum.Toatal Concentration overpotential : %f V",nsum);
y=0;
for(i=0;i<a;i++)
{
        z=z1;
        y+=ynext;
        fprintf(super,"\n\n\nRaYa  :  %f to %f\nz : %f\t\tH2Bulk Frac. : %f",y-ynext,y,z,yab[i]);
        fprintf(super,"\nPa[%d] : %f atm.",i,Pa[i]);
        fprintf(super,"\nMol.A bulk : %f mol/s",yab[i]*NT);
//      fprintf(super,"\nz : %f\t\tH2Bulk Frac. : %f",z,yab[i]);
        for(h=0;h<b;h++)
        {
                z+=znext;
                fprintf(super,"\nz : %f\t\tH2faction    : %f",z,ya[i][h]);
        }
        fprintf(super,"\n\nY(TPB) : %f\tAt Z2 : %f cm.",ytpb[i],z2+0.2);
        fprintf(super,"\nConcentration Overpotential : %f V.",nconc[i]);
}
/*++++++++++++++++++++++Print Velocity ++++++++++++++++++++++++++*/
/****************************************************************/
fprintf(super,"\n\n\n**********Calculation The Velocity**************");
y=0;
for(i=0;i<a;i++)
{
        z=0;
        y+=ynext;
        fprintf(super,"\n\n\nRaYa  :  %f to %f\nz : %f",y-ynext,y);
//      fprintf(super,"\nz : %f\t\tH2Bulk Frac. : %f",z,yab[i]);
```

```
            for(h=0;h<g;h++)
            {
                    fprintf(super,"\nz : %f\t\tVelocity    : %f cm2/s",z,v[i][h]);
                    z+=znext;
            }
            fprintf(super,"\n\nVmax : %f cm/s",vmax[i]);
    }
    fclose(super);
    printf("\n\n\n\n\n\n\n\t************************END OF RUN***************************** ");
    getch();
}
```

ค-3 แสดงรหัสโปรแกรม SMMTM01.CPP

```
#include<stdio.h>
#include<conio.h>
#include<math.h>
#include<stdlib.h>
/***** Cal. Fick's Model Ternary Diffusion Hydrogen fuel System Version 1 ******/
float DiffusCoeffAB(float Top, float Pop,float dp,double e,float t);
float DiffusCoeffAAr(float Top, float Pop,float dp,double e,float t);
float Molfrac(float J, float Top, float Pop, float z1, float yabulk, float RDeep, float z2, float DaeffAB,
float DaeffAAr, float yAr);
void  ConvMolf(float ytpb, float yabulk, float Pop, float Top, float z1, float z2, float ynext, float wt, float
molAold, float NT, float Pa, float DaeffAB, float DaeffAAr, float yAr);
float CerrentChange(float NT, float yabulk, float F, float ynext, float wt, float Top, float Daeff, float Pop,
float z1, float z2);
void  VeloPro(float Pa, float Panew, float um, float ynext, float z1, float y);
void  avgsum();
void  printKeep();
float     sum = 0;          /* Sumasion of concentration overpotential ,(v)*/
int       nub = 0;      /* Count of loop in calculation process , (times)*/
float     temp[10];     /* Temp of transfer data of function */
float     keep[25];         /* keep in data for printf in file of power */
FILE *super;
FILE *power;
void main()
{
/******* Variable Show That : Fix system *******/
          float   J           = 0.7,              /* Curent Dencity ,(A/cm2) */
                  F           = 96485.3,          /* Faraday Constant */
                  Top         = 1023.15,          /* Temperature operation ,(K) */
                  Pop         = 1.0,          /* Pressure operation ,(atm) */
                  um          = 20.4597925,       /* Viscousity of A. , (Pa/s) */
                  DaeffAB     = 0,            /* effective diffusion coefficient ,(cm2/s) */
                  DaeffAAr    = 0,            /* effective diffusion coefficient ,(cm2/s) */
                  z1          = 0.2,          /* depth of chanel fuel cell, (cm) */
```

```
            z2              = 0.395,              /* depth of Anode fuel cell, (cm)*/
            wt              = 0.1,                /* whild of chanel fuel cell, (cm)*/
            celllength      = 2.01,               /* total cell length ,(cm) */
            yabulk          = 0,              /* mol. fraction of gas A at Bulk phase */
            ybbulk          = 0,                  /* mol. fraction of gas B at Bulk phase */
            yAr             = 0,             /* Mole fraction of Ar in System */
            ytpb            = 0,                  /* mol. fraction of gas A at TPB */
            RDeep           = 0.005;              /* Thickness of reaction zone ,(cm) */
      float e       = 0.46,                       /* Porosity (%/100) */
            t       = 4.5,                    /* Tortuosity dimensionless */
            dp      = 2.6*pow(10,-4);             /* Average pore size ,(cm) */
      float NT      = 0     ,            /* Total mol in the system ,(mol/s) */
            molAold = 0.0008     ,                      /* mol A  at operate start
process ,(mol/s) */
            molBold = 0.0002     ,               /* mol B  at operate start process ,(mol/s)
*/
            molAr   = 0.007  ,           /* mol Ar at operate start process ,(mol/s) */
            Pa      = 0      ,           /* Partial Pressure A ,(atm) */
            Panew   = 0      ;
      float y       = 0      ,           /* operate Raya of cell ,(cm) */
            ynext   = 0.1    ;           /* move the y ,(cm) */
/****** Open White Code File and Clrscr Screen Output *******/
      clrscr();
      super=fopen("C:\\PROJECT3\\DATA\\SMMTM01.txt","w+");
      power=fopen("C:\\PROJECT3\\DATA\\SMMTM01C.txt","w+");
/* Set operating variable */
      NT = molAold+molBold+molAr;
      yabulk = molAold/NT;
      ybbulk = molBold/NT;
      yAr = 1.0 - (yabulk+ybbulk);
      Pa  = yabulk*Pop;
      printf("\nyA : %f",yabulk);
      printf("\nyB : %f",ybbulk);
      printf("\n\n\n\n yAr : %f",yAr);
//    getch();
```

```
/***************************/
/********* Start Show The Data Setup The System ************/
        fprintf(super,"+++++++Start Show The Data Setup The System+++++++");
        fprintf(super,"\nCurent Dencity                              : %f (A/cm2)",J);
        fprintf(super,"\nTemperature operation                       : %f (K)",Top);
        fprintf(super,"\nPressure operation                     : %f (atm)",Pop);
        fprintf(super,"\ndepth of chanel fuel cell (z1)              : %f (cm)",z1);
        fprintf(super,"\ndepth of Anode fuel cell  (z2)              : %f (cm)",z2);
        fprintf(super,"\nMol. fraction of gas A at Bulk phase   : %f ",yabulk);
        fprintf(super,"\nMol. fraction of gas B at Bulk phase   : %f ",ybbulk);
        fprintf(super,"\nMole fraction of Ar in System               : %f ",yAr);
        fprintf(super,"\nMole A Feed at Bulk phase              : %f ",molAold);
        fprintf(super,"\nMole B Feed at Bulk phase              : %f ",molBold);
        fprintf(super,"\nMole Ar Feed at Bulk phase             : %f ",molAr);
        fprintf(super,"\nTotal of mol in the system             : %f ",NT);
        fprintf(super,"\nPartial Pressure A                     : %f (atm)",Pa);
        fprintf(super,"\nThickness of reaction zone             : %f (cm)",RDeep);
        fprintf(power,"Data Cut of : ");
        fprintf(power,"\nRaya\t     nub-
loop\tJ(A/cm2)\tPa(atm)\t\tyabulk\t\tVmax(cm/s)\tyAtpb\t\tnconc");
/****** Run Code *******/
        DaeffAB  = DiffusCoeffAB(Top,Pop,dp,e,t);
        DaeffAAr = DiffusCoeffAAr(Top,Pop,dp,e,t);
        y = y+ynext;
        while(y<=celllength)
        {
                fprintf(super,"\n\n\n\n\n\n\n*********************Raya y : %f cm to y : %f
cm***********************************",y-ynext,y);
                fprintf(super,"\n\nData in This Loop nub : %d",nub+1);
                fprintf(super,"\n\nCerrent density (J) : %f A/cm2",J);
                fprintf(super,"\nyAbulk : %f ",yabulk);
                fprintf(super,"\nyBbulk : %f ",ybbulk);
                fprintf(super,"\nMole fraction of Ar in System           : %f ",yAr);
                fprintf(super,"\nPartial Pressure A                 : %f (atm)",Pa);
```

```
                    keep[0] = y;
                    keep[1] = J;
                    keep[2] = Pa;
                    keep[3] = yabulk;
                    keep[10]= ynext;
                    ytpb = Molfrac(J,Top,Pop,z1,yabulk,RDeep,z2,DaeffAB,DaeffAAr,yAr);
                    keep[5] = ytpb;
                    ConvMolf(ytpb, yabulk, Pop, Top, z1, z2, ynext, wt, molAold, NT, Pa, DaeffAB,
DaeffAAr, yAr);
                    temp[4] = J;
                    J = CerrentChange(NT,yabulk,F,ynext,wt,Top,DaeffAB,Pop,z1,z2);
                    yabulk = temp[0];
                    Panew  = temp[1];
                    molAold= temp[2];
                    ybbulk = temp[3];
                    VeloPro(Pa,Panew,um,ynext,z1,y);
                    Pa = Panew;
                    y += ynext;
                    printKeep();
          }
          avgsum();
          getch();
          fclose(super);
          fclose(power);
}
float DiffusCoeffAB(float Top, float Pop,float dp,double e,float t)
{
/******* Variable Show That : recive value of Calculate *******/
          float     ea        = 0,                          /* Collision diameter of A */
                    eb        = 0,              /* Collision diameter of B */
                    eab       = 0,              /* Collision diameter of binary A and B */
                    Tn        = 0,
                    Dd1       = 0,
                    Dd2       = 0,
```

```
                    Dab     = 0,                /* diffusion coefficient of A&B , (cm2/s) */
                    Dik     = 0,                /* Knudsen diffusion coefficient, (cm2/s) */
                    Daeff   = 0;                /* effective diffusion coefficient ,(cm2/s) */
/******* Variable Show That : Fix of System Binary Diffusion  *******/
        float       Tca     = 33.2,                     /* Critical Temperature of A. ,(K) */
                    Tcb     = 647.1,                    /* Critical Temperature of B. ,(K) */
                    k       = 1.38*pow(10.0,-16.0), /* Boltzmann Constant ,(ergs/K) */
                    Treff   = 293.0,                    /* Pressure reffernce for cal Dab, (atm) */
                    Preff   = 1.0,              /* Temperature refference For cal. Da1 and Dab , (K) */
                    Dabref  = 0.850,                    /* diffusion coefficient of A&B at Treff=293
K,Preff=1atm , (cm2/s) */
                    Ma      = 2.0;              /* Molecula wight of Hydrogen,(g/mol) */
/******* RUN CODE *******/
        ea = 0.77*Tca*k;
        eb = 0.77*Tcb*k;
        eab= pow((ea*eb),0.5);

        Tn = k*Top/eab;
        printf("\n\n Tn of eab at Top : %f K",Tn);
        Dd2 = (1.06036/pow(Tn,0.15610)) + (0.193/exp(0.47635*Tn)) +(1.03587/exp(1.52996*Tn)) +
(1.76474/exp(3.89411*Tn)) ;
        printf("\n\n Dd2 : %f egsd",Dd2);
        Tn = k*Treff/eab;
        printf("\n\n Tn of eab at Treff : %f K",Tn);
        Dd1 = (1.06036/pow(Tn,0.15610)) + (0.193/exp(0.47635*Tn)) +(1.03587/exp(1.52996*Tn)) +
(1.76474/exp(3.89411*Tn)) ;
        printf("\n\n Dd1 : %f egsd",Dd1);
        Dab = Dabref*(Preff/Pop)*pow((Top/Treff),1.5)*(Dd1/Dd2);
        printf("\n\n Dab : %f cm2/s",Dab);
        Dik = 4850*dp*pow((Top/Ma),0.5);
        printf("\n\n Dik : %f cm2/s",Dik);
        Daeff = (e/t)*Dab;
        printf("\n\n Daeff : %f cm2/s",Daeff);
//      getch();
```

```
        /**********Show Data Result of Diffusion***************************/
        printf("\n\n\n\nShow the result of Binary Diffusion ");
        printf("\n\nDTeff : %f cm2/s",Daeff);
        /**********Show Data Base Subport of Diffusion***************************/
        fprintf(super,"\n\n***Data Base Subport***");
        fprintf(super,"\nBlosmann Constand : %.18f ergs/K ",k);
        fprintf(super,"\nAverage pore size            : %f (cm)",dp);
        fprintf(super,"\nMolecula wight of Hydrogen          : %f (g/mol)",Ma);
        fprintf(super,"\nCritical Temperature of A.   : %f (K)",Tca);
        fprintf(super,"\nCritical Temperature of B.   : %f (K)",Tcb);
        fprintf(super,"\ndiffusion coefficient of A&B  at Treff= %f (K), Preff= %f (atm) : %f
(cm2/s)",Treff,Preff,Dabref);
        /**********Show Data Result of Diffusion***************************/
        fprintf(super,"\n\n***Data of The System H2-H2O-***");
        fprintf(super,"\nKnudsen diffusion             : %f cm2/s",Dik);
        fprintf(super,"\nH2O-H2 diffusion              : %f cm2/s",Dab);
        fprintf(super,"\nPorosity (e/100)              : %f",e);
        fprintf(super,"\nTortuosity dimensionless      : %f",t);
        fprintf(super,"\n\nH2O-H2 Diffusion effective      : %f cm2/s",Daeff);
        return(Daeff);
}
float DiffusCoeffAAr(float Top, float Pop,float dp,double e,float t)
{
/******* Variable Show That : recive value of Calculate *******/
        float   ea      = 0,                    /* Collision diameter of A */
                eb      = 0,            /* Collision diameter of B */
                eab     = 0,            /* Collision diameter of binary A and B */
                Tn      = 0,
                Dd1     = 0,
                Dd2     = 0,
                Dab     = 0,            /* diffusion coefficient of A&B , (cm2/s) */
                Dik     = 0,            /* Knudsen diffusion coefficient, (cm2/s) */
                Daeff   = 0;            /* effective diffusion coefficient ,(cm2/s) */
/******* Variable Show That : Fix of System Binary Diffusion  *******/
        float   Tca     = 33.2,                 /* Critical Temperature of A. ,(K) */
```

```
			TcAr	= 150.8,		/* Critical Temperature of Ar. ,(K) */
			k	= 1.38*pow(10.0,-16.0), /* Boltzmann Constant ,(ergs/K) */
			Treff	= 293.0,			/* Pressure reffernce for cal Dab, (atm) */
			Preff	= 1.0,		/* Temperature refference For cal. Da1 and Dab , (K) */
			Dabref	= 0.794,			/* diffusion coefficient of A&B at Treff=293
K,Preff=1atm , (cm2/s) */
			Ma	= 2.0,		/* Molecula wight of Hydrogen,(g/mol) */
			Tcb	= 0.0;		/* Critical Temperature of B. ,(K) */
/******* RUN CODE *******/
		Tcb = TcAr;
		ea = 0.77*Tca*k;
		eb = 0.77*Tcb*k;
		eab= pow((ea*eb),0.5);
		Tn = k*Top/eab;
		printf("\n\n Tn of eab at Top : %f K",Tn);
		Dd2 = (1.06036/pow(Tn,0.15610)) + (0.193/exp(0.47635*Tn)) +(1.03587/exp(1.52996*Tn)) +
(1.76474/exp(3.89411*Tn)) ;
		printf("\n\n Dd2 : %f egsd",Dd2);
		Tn = k*Treff/eab;
		printf("\n\n Tn of eab at Treff : %f K",Tn);
		Dd1 = (1.06036/pow(Tn,0.15610)) + (0.193/exp(0.47635*Tn)) +(1.03587/exp(1.52996*Tn)) +
(1.76474/exp(3.89411*Tn)) ;
		printf("\n\n Dd1 : %f egsd",Dd1);
		Dab = Dabref*(Preff/Pop)*pow((Top/Treff),1.5)*(Dd1/Dd2);
		printf("\n\n Dab : %f cm2/s",Dab);
		Dik = 4850*dp*pow((Top/Ma),0.5);
		printf("\n\n Dik : %f cm2/s",Dik);
		Daeff = (e/t)*Dab;
		printf("\n\n Daeff : %f cm2/s",Daeff);
//		getch();
		/**********Show Data Result of Diffusion***************************/
		printf("\n\n\n\nShow the result of Binary Diffusion of A&Ar ");
		printf("\n\nDTeff A&Ar : %f cm2/s",Daeff);
		/**********Show Data Base Subport of Diffusion***************************/
		fprintf(super,"\n\n***Data Base Subport***");
```

```
            fprintf(super,"\nBlosmann Constand : %.18f ergs/K ",k);
            fprintf(super,"\nAverage pore size                : %f (cm)",dp);
            fprintf(super,"\nMolecula wight of Hydrogen              : %f (g/mol)",Ma);
            fprintf(super,"\nCritical Temperature of A.     : %f (K)",Tca);
            fprintf(super,"\nCritical Temperature of Ar.    : %f (K)",Tcb);
            fprintf(super,"\ndiffusion coefficient of A&Ar  at Treff= %f (K), Preff= %f (atm) : %f
(cm2/s)",Treff,Preff,Dabref);
            /**********Show Data Result of Diffusion***************************/
            fprintf(super,"\n\n***Data of The System H2-Ar***");
            fprintf(super,"\nKnudsen diffusion                 : %f cm2/s",Dik);
            fprintf(super,"\nAr-H2 diffusion                   : %f cm2/s",Dab);
            fprintf(super,"\nPorosity (e/100)                  : %f",e);
            fprintf(super,"\nTortuosity dimensionless          : %f",t);
            fprintf(super,"\n\nH2-Ar Diffusion effective        : %f cm2/s",Daeff);
            return(Daeff);
}
float Molfrac(float J, float Top, float Pop, float z1, float yabulk, float RDeep, float z2, float DaeffAB,
float DaeffAAr, float yAr)
{
/******* Variable Show That : Operate Program  *******/
            float       i           = 0,
                        znext       = 0.01;
/******* Variable Show That : recive data of Calcuate  *******/
            float   ya = 0,                 /* mol. fraction of gas A */
                        yatpb       = 0,        /* mol. fraction of gas A at TPB. */
                        nconc       = 0,        /* concrntration overpotential */
                        F           = 96485.3,          /* Faraday Constant */
                        R1          = 82.057,           /* Gas constant. (cm3*atm/mol/K) */
                        R2          = 8.3143;           /* Gas constant. (J/mol/K) */
/******* Run Code *******/
            i=z1+znext;
            fprintf(super,"\n\nStart ya,bulk : %f at Z : %f",yabulk,z1);
            printf("Start ya,bulk : %f at Z : %f",yabulk,z1);
            while(i<=z2)
            {
```

```
			ya = ((J*R1*Top/(2*F*Pop*DaeffAB*DaeffAAr)) * ((DaeffAAr*(1-yAr)) +
(DaeffAB*yAr)) * (z1-i)) + yabulk;
			fprintf(super,"\nZ : %f cm.\tya : %f",i,ya);
			printf("\nZ : %f cm.\tya : %f",i,ya);
			i=i+znext;
		}
		yatpb = ((J*R1*Top/(2*F*Pop*DaeffAB*DaeffAAr)) * ((DaeffAAr*(1-yAr)) + (DaeffAB*yAr)) *
(z1-z2)) + yabulk;
		nconc = (-1) * (R2*Top) / (2*F) * log(yatpb*(1-yabulk)/yabulk/(1-yatpb));
		keep[6] = nconc;
		sum += nconc;
		nub++;
		fprintf(super,"\n\nZ : %f cm. \tya,TPB : %f",z2,yatpb);
		fprintf(super,"\n\nThe Concentration Overpotential : %f V. at Reaction Deep : %f
cm.",nconc,RDeep);
		printf("\n\nZ : %f cm. \tya,TPB : %f",z2,yatpb);
		printf("\n\nThe Concentration Overpotential : %f V. at Reaction Deep : %f
cm.",nconc,RDeep);
		return(yatpb);
}
void ConvMolf(float ytpb, float yabulk, float Pop, float Top, float z1, float z2, float ynext, float wt, float
molAold, float NT, float Pa, float DaeffAB,float DaeffAAr, float yAr)
{
		float	R = 82.057 ;	/* Gas Constant ,cm3.atm/mol/K */
		float	Na		,
			molAuse		,
			yabnew		,
			ybbnew		,
			Panew		,
			molAoldnew	;
		Na = (ytpb-yabulk)*(Pop*DaeffAB*DaeffAAr)/(z1-z2)/(R*Top*(DaeffAAr*(1-
yAr)+(DaeffAB*yAr)));
		molAuse = Na * (ynext*wt);
		yabnew = (molAold - molAuse)/NT;
		ybbnew = (1-yabnew);
```

```
            Panew = Pa*(molAold-molAuse)/molAold;
            molAoldnew = molAold-molAuse;
            temp[0] = yabnew;
            temp[1] = Panew;
            temp[2] = molAoldnew;
            temp[3] = ybbnew;
            fprintf(super,"\n\n\nData of function Mol. Convers");
            fprintf(super,"\n\nmolAuse : %.10f mol",molAuse);
            fprintf(super,"\nmolAold : %.10f mol",molAold);
            fprintf(super,"\nmolAnew for next element : %.10f mol",molAoldnew);
            fprintf(super,"\nPressure A old : %f atm",Pa);
            fprintf(super,"\nPressure A new : %f atm",Panew);
            fprintf(super,"\nyAbulk new : %f",yabnew);
            fprintf(super,"\nyBbulk new : %f",ybbnew);
}
float CerrentChange(float NT, float yabulk, float F, float ynext, float wt, float Top, float Daeff, float Pop,
float z1, float z2)
{
            float Jnew = 0;                 /* Cerrent Dencity for new calculate */
            float R = 82.057;       /* Gas Constant cm3.atm/(mol.K) */
            Jnew = NT*yabulk*2.0*F / (ynext*wt) / (1.0 - (NT*R*Top/(ynext*wt)/Daeff/Pop*(z1-z2)));
            Jnew = temp[4] * (temp[0]/yabulk);
            printf("\n\ntemp[4] : %f",temp[4]);
            printf("\ntemp[0] : %f",temp[0]);
            printf("\nyabulk : %f",yabulk);
            printf("\n Jnew : %f A/cm2",Jnew);
//          getch();
            fprintf(super,"\n\nFunction *** CerrentChange ***");
            fprintf(super,"\n\nNew Cerrent density (Jnew) for next Loop (nub : %d) : %f
A/cm2",nub+2,Jnew);
            return(Jnew);
}
void VeloPro(float Pa, float Panew, float um, float ynext, float z1, float y)
{
            float       zu   = 0  , /* operate z direcsion ,cm */
```

```
                vmax = 0        , /* max verocity ,cm/s */
                v    = 0   ; /* vorocity cal profile ,cm/s */
        float   znext = 0.01        ; /* znext for operate ,cm */
        fprintf(super,"\n\n\nFunction VeloPrp ******************************");
        vmax = (Pa - Panew)/2.0/um/ynext * (z1*z1/4.0) * (1.013*pow(10,5.0));
        keep[4] = vmax;
        fprintf(super,"\n\nRaya in Y Direction %f to %f cm",y-ynext,y);
        fprintf(super,"\n\nRaya %f cm\tVmax : %f cm/s\n",z1/2,vmax);
        while(zu<=z1)
        {
                v = 4.0*(zu/z1) * vmax * (z1 - zu)/z1;
                fprintf(super,"\nRaya : %f cm\t\tv : %f cm/s",zu,v);
                printf("\nRaya : %f cm\t\tv : %f cm/s",zu,v);
                zu += znext;
        }
}
void avgsum()
{
        float   ans = 0  ;
        ans = sum/nub;
        fprintf(super,"\n\n\nResult of Concentration Overpotential : ");
        fprintf(super,"\n\nSum of Concentration Overpotential : %f V",sum);
        fprintf(super,"\namonut of Loop in system : %d times",nub);
        fprintf(super,"\n\nAvg. of concentration ov. : %f V",ans);
        printf("\n\n\nAvg. of concentration ov. : %f V",ans);
}
void printKeep()
{
        fprintf(power,"\n%.2f-%.2f\t%d\t%f\t%f\t%f\t%f\t%f\t%f",keep[0]-
keep[10],keep[0],nub,keep[1],keep[2],keep[3],keep[4],keep[5],keep[6]);
}
```

ค-4 แสดงรหัสโปรแกรม SML01.CPP

```
#include<stdio.h>
#include<conio.h>
#include<math.h>
#include<stdlib.h>
float DiffusCoeff(float Top, float Pop,float dp,double e,float t);
void Ltpb(double e,double fe,double fi,double Vt,double  ri,double re,double next);
FILE *super;
FILE *power;
void main()
{
/******* Variable Show That : Fix system *******/
        float   J       = 1.0,                  /* Curent Dencity ,(A/cm2) */
                Top     = 1023.15,              /* Temperature operation ,(K) */
                Pop     = 1.0,          /* Temperature operation ,(K) */
                Daeff   = 0,            /* effective diffusion coefficient ,(cm2/s) */
                z1      = 0.2,          /* depth of chanel fuel cell, (cm) */
                z2      = 0.395,                /* depth of Anode fuel cell, (cm)*/
                yabulk  = 0.8,          /* mol. fraction of gas A at Bulk phase */
                R       = 82.057,               /* Gas Constand , cm3.atm/(mol.K) */
                R2      = 8.3143,               /* Gas constant. (J/mol/K) */
                RDeep   = 0.005;                /* Thickness of reaction zone ,(cm) */
        double  e = 0.1                 ,     /* Porosity (%/100) */
                fe= 0.5                 ,
                fi= 0.5                 ,
                Vt= 4.0*pow(10.0,-9.0)  ,
                ri= 4.0*pow(10.0,-6.0)  ,
                re= 4.0*pow(10.0,-6.0)  ;
        float  dp       = 2.6*pow(10,-4),       /* Average pore size ,(cm) */
                t       = 4.5;          /* Tortuosity dimensionless */
//      float  znext    = 0.001         ;     /* Next step of function Molfrac */
        double  next    = 0.000001      ;       /* Next step of function Ltpb*/
        float  beta                     ,
        nconc                   ,
```

```
                yatpb                   ,
                F       = 96485.3       ,
                alfa    = 0.665475      ;
/****** Run Code *******/
        clrscr();
        super=fopen("C:\\PROJECT3\\DATA\\SML01.txt","w+");
        power=fopen("C:\\PROJECT3\\DATA\\SML01C.txt","w+");
/********* Start Show The Data Setup The System ************/
        fprintf(super,"+++++++Start Show The Data Setup The System+++++++");
        fprintf(super,"\nCurent Dencity                              : %f (A/cm2)",J);
        fprintf(super,"\nTemperature operation                       : %f (K)",Top);
        fprintf(super,"\nPressure operation                  : %f (atm)",Pop);
        fprintf(super,"\ndepth of chanel fuel cell (z1)              : %f (cm)",z1);
        fprintf(super,"\ndepth of Anode fuel cell  (z2)              : %f (cm)",z2);
        fprintf(super,"\nMol. fraction of gas A at Bulk phase   : %f ",yabulk);
        fprintf(super,"\nThickness of reaction zone          : %f (cm)",RDeep);
/****** Run Code *******/
        while(e<1)
        {
                fprintf(super,"\n\n\n+++++++++++++++++ Cal. At Porosity :
%f++++++++++++++++++++++++++++++++++",e);

        fprintf(super,"\n+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
+++++++++++++++++++++++++");
                Daeff = DiffusCoeff(Top,Pop,dp,e,t);
                beta = (-1.0)*(R*Top/Pop)*(J/2.0/F)*(1.0-(alfa*yabulk))/Daeff;
                printf("\n\n\n Alfa  : %f",alfa);
                printf("\n\n beta  : %f 1/m",beta);
                printf("\n\n Daeff : %f cm2/s",Daeff);
                getch();
                printf("\n\nAt e : %f, Enter Ytpb Input Data : ",e);
                scanf("%f",&yatpb);
                printf("\n\n You input Data Ytpb : %f",yatpb);
                getch();
```

```
                    nconc = (-1) * (R2*Top) / (2*F) * log(yatpb*(1-yabulk)/yabulk/(1-yatpb));
                    fprintf(super,"\n\n\n++++++++++++++++ Result of Overpotential
++++++++++++++++++++++++");
                    fprintf(super,"\n\nAlfa  : %f",alfa);
                    fprintf(super,"\nbeta  : %f 1/m",beta);
                    fprintf(super,"\nDaeff : %f cm2/s",Daeff);
                    fprintf(super,"\nyatpb : %f ",yatpb);
                    fprintf(super,"\nnconc : %f V",nconc);
                    Ltpb(e,fe,fi,Vt,ri,re,next);
                    fprintf(power,"\n\te : %f\tdp : %f\tDaeff : %f cm2/s\tnconc : %f V",e,dp,Daeff,nconc);
                    e = e+0.1;
          }
          fprintf(super,"\n\n+++++++++++++++++++++++++++ E n d  O f  Cal.
+++++++++++++++++++++++");
          fprintf(super,"\n+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
++++++++++++++++");
          printf("\n\n+++++++++++++++++++++++++++ E n d  O f  Cal.
+++++++++++++++++++++++");
          getch();
          fclose(super);
          fclose(power);
}
float DiffusCoeff(float Top, float Pop,float dp,double e,float t)
{
/******* Variable Show That : recive value of Calculate *******/
          float     ea        = 0,                          /* Collision diameter of A */
                    eb        = 0,            /* Collision diameter of B */
                    eab       = 0,            /* Collision diameter of binary A and B */
                    Tn        = 0,
                    Dd1       = 0,
                    Dd2       = 0,
                    Dab       = 0,            /* diffusion coefficient of A&B , (cm2/s) */
                    Dik       = 0,            /* Knudsen diffusion coefficient, (cm2/s) */
                    Daeff     = 0;            /* effective diffusion coefficient ,(cm2/s) */
/******* Variable Show That : Fix of System Binary Diffusion  *******/
```

```
	float	Tca	= 33.2,			/* Critical Temperature of A. ,(K) */
		Tcb	= 647.1,			/* Critical Temperature of B. ,(K) */
		k	= 1.38*pow(10.0,-16.0), /* Boltzmann Constant ,(ergs/K) */
		Treff	= 293.0,			/* Pressure reffernce for cal Dab, (atm) */
		Preff	= 1.0,		/* Temperature refference For cal. Da1 and Dab , (K) */
		Dabref	= 0.850,			/* diffusion coefficient of A&B at Treff=293
K,Preff=1atm , (cm2/s) */
		Ma	= 2.0;		/* Molecula wight of Hydrogen,(g/mol) */
/******* RUN CODE *******/
	ea = 0.77*Tca*k;
	eb = 0.77*Tcb*k;
	eab= pow((ea*eb),0.5);
	Tn = k*Top/eab;
	printf("\n\n Tn of eab at Top : %f K",Tn);
	Dd2 = (1.06036/pow(Tn,0.15610)) + (0.193/exp(0.47635*Tn)) +(1.03587/exp(1.52996*Tn)) +
(1.76474/exp(3.89411*Tn)) ;
	printf("\n\n Dd2 : %f egsd",Dd2);
	Tn = k*Treff/eab;
	printf("\n\n Tn of eab at Treff : %f K",Tn);
	Dd1 = (1.06036/pow(Tn,0.15610)) + (0.193/exp(0.47635*Tn)) +(1.03587/exp(1.52996*Tn)) +
(1.76474/exp(3.89411*Tn)) ;
	printf("\n\n Dd1 : %f egsd",Dd1);
	Dab = Dabref*(Preff/Pop)*pow((Top/Treff),1.5)*(Dd1/Dd2);
	printf("\n\n Dab : %f cm2/s",Dab);
	Dik = 4850*dp*pow((Top/Ma),0.5);
	printf("\n\n Dik : %f cm2/s",Dik);
	Daeff = (e/t)*Dab;
	printf("\n\n Daeff : %f cm2/s",Daeff);
//	getch();
	/**********Show Data Result of Diffusion***************************/
	printf("\n\n\n\nShow the result of Binary Diffusion ");
	printf("\n\nDTeff : %f cm2/s",Daeff);
	/**********Show Data Base Subport of Diffusion***************************/
	fprintf(super,"\n\n***Data Base Subport***");
	fprintf(super,"\nBlosmann Constand : %.18f ergs/K ",k);
```

```
	fprintf(super,"\nAverage pore size			: %f (cm)",dp);
	fprintf(super,"\nMolecula wight of Hydrogen		: %f (g/mol)",Ma);
	fprintf(super,"\nCritical Temperature of A.	: %f (K)",Tca);
	fprintf(super,"\nCritical Temperature of B.	: %f (K)",Tcb);
	fprintf(super,"\ndiffusion coefficient of A&B  at Treff= %f (K), Preff= %f (atm) : %f
(cm2/s)",Treff,Preff,Dabref);
	/**********Show Data Result of Diffusion***************************/
	fprintf(super,"\n\n***Data of The System H2-H2O-Ar***");
	fprintf(super,"\nKnudsen diffusion			: %f cm2/s",Dik);
	fprintf(super,"\nH2O-H2 diffusion			: %f cm2/s",Dab);
	fprintf(super,"\nPorosity (e/100)			: %f",e);
	fprintf(super,"\nTortuosity dimensionless		: %f",t);
	fprintf(super,"\n\nH2O-H2 Diffusion effective		: %f cm2/s",Daeff);
	return(Daeff);
}
void Ltpb(double e,double fe,double fi,double Vt,double  ri,double re,double next)
{
	double	M			,
		vLtpb			,
		Zie			,
		a			,
		OV	= 0.9		,
		V1			,
		Zi			,
		Ze			,
		AL			,
		Ltpb			,
		f1			,
		f2			,
		r1			,
		r2			;
	double	temp			,
		temp1			,
		Answer			;
	int	num  = 0		;
```

```
            double   Z = 6.0                              ,
                     d = 0.9*(ri+re)      ;

/****************** CODE RUN ***********************/
            if(ri>re)
            {
                     r1 = ri;
                     r2 = re;
                     f1 = fi;
                     f2 = fe;
            }
            else
            {
                     r1 = re;
                     r2 = ri;
                     f1 = fe;
                     f2 = fi;
            }
            M = (f2/f1) * (pow(r1,3.0))/(pow(r2,3.0));
            printf("\n\n\tM : %lf",M);
//          getch();
            a = (1.0/(2.0*d)) * pow(((4.0*d*d*r1*r1) - pow((d*d* - r2*r2 - r1*r1),2.0)),0.5);
            printf("\n\ta : %lf",a);
//          getch();
            V1= (22.0/7.0) * pow((r1+r2-d),2.0)*(d*d + 2.0*d*r2 - 3.0*r2*r2 + 2.0*d*r1 + 6.0*r2*r1 -
3.0*r1*r1)/(12.0*d);
            printf("\n\tV1 : %.30lf m3",V1);
/*
            temp = (1.0-e)*Vt;
            printf("\n\ttemp : %.15lf \n",temp);
            getch();
            OV = 1.1;
            Answer = 0.0;
            while(temp>Answer)
            {
```

```
			OV   -= next;
			temp1 = ((4.0/3.0)*(22.0/7.0)*(r1*r1*r1 + M*r2*r2*r2)) - ((1-OV)*(1+M)*V1);
			Answer = ((1.0-e)*Vt*(1.0/temp1)*(4.0/3.0)*(22.0/7.0)*pow(r1,3.0)) + ((1.0-
e)*Vt*M*(1/temp1)*(4.0/3.0)*(22.0/7.0)*pow(r2,3.0)) + ((1.0-e)*Vt*(1.0+M)*(1/temp1)*(1-OV)*V1);

			printf("\n(1-e)Vt : %.12lf\tOV : %.7lf\tAnswer : %.15lf",temp,OV,Answer);
		}
		printf("\n\nFacsion Overlamp(OV) : %lf",OV);
		getch();
*/
		AL = ri/re;
		Zi = 3.0+((Z-3.0)*pow(AL,2.0)/(fe+fi*AL*AL));
		Ze = 3.0+((Z-3.0)/(fe+fi*AL*AL));
		Zie = fi+fe+Zi+Ze;
		printf("\n\n\tZi-e : %lf",Zie);
/*		getch();
		printf("\n\n Are You OK. about Value of Zi-e. (Yes=1,N0=0) : ");
		scanf("%d",&num);
		if(num==0)
		{
			printf("\n\nEnter Your new Zi-e : ");
			scanf("%lf",&Zie);
		}
		else
		{
			printf("\n\nWe use Zi-e : %lf",Zie);
			getch();
		}
*/
		vLtpb = (e*(1.0-e)*(1.0+M)*Zie*(2.0)*(22.0/7.0)*a) / (((4.0/3.0)*(22.0/7.0)*(r1*r1*r1 +
M*r2*r2*r2)) - ((1.0-OV)*(1.0+M)*V1));
		Ltpb = vLtpb*Vt;
/************ Show Result OUTPUT AT STDIO ******************************************/
		printf("\n\n\n\n************ Model of looking for vLtpb **************");
		printf("\n\nM  : %lf",M);
```

```
        printf("\na  : %lf m",a);
        printf("\nV1 : %lf m3",V1);
        printf("\nFacsion Overlamp(OV) : %lf",OV);
        printf("\nAL(ri/re) : %lf",AL);
        printf("\nZi  : %lf",Zi);
        printf("\nZe  : %lf",Ze);
        printf("\nZie : %lf",Zie);
        printf("\n\nvLtpb : %lf m/m3",vLtpb);
        printf("\nvLtpb : %lf Gm/m3",vLtpb/(1*pow(10,12)));
        printf("\n\nLtpb  : %lf m",Ltpb);
        printf("\n\nLtpb  : %lf km",Ltpb/(1*pow(10,3)));
/************ Show Result OUTPUT AT FILE ******************************************/
        fprintf(super,"\n\n\n\n************ Model of looking for vLtpb**************");
        fprintf(super,"\n\nM  : %lf",M);
        fprintf(super,"\na  : %lf m",a);
        fprintf(super,"\nV1 : %.20lf m3",V1);
        fprintf(super,"\nFacsion Overlamp(OV) : %lf",OV);
        fprintf(super,"\nAL(ri/re) : %lf",AL);
        fprintf(super,"\nri  : %lf m",ri);
        fprintf(super,"\nre  : %lf m",re);
        fprintf(super,"\nfi  : %lf m",fi);
        fprintf(super,"\nfe  : %lf m",fe);
        fprintf(super,"\nZi  : %lf",Zi);
        fprintf(super,"\nZe  : %lf",Ze);
        fprintf(super,"\nZie : %lf",Zie);
        fprintf(super,"\nTotal Volume : %.15lf m3",Vt);
        fprintf(super,"\n\nvLtpb : %lf m/m3",vLtpb);
        fprintf(super,"\nvLtpb : %lf Gm/m3",vLtpb/(1*pow(10,12)));
        fprintf(super,"\n\nLtpb  : %lf m",Ltpb);
        fprintf(super,"\n\nLtpb  : %lf km",Ltpb/(1*pow(10,3)));
}
```

ค-5 แสดงรหัสโปรแกรม FTMHJ05.CPP

```
#include<stdio.h>
#include<conio.h>
#include<math.h>
#include<stdlib.h>
/***** Cal. Fick's Model Ternary Diffusion Hydrogen fuel System Version 1 ******/
float DiffusCoeff(float Top, float Pop ,float yAr);
float Molfrac(float J, float Top, float Pop, float Daeff, float z1, float yabulk, float RDeep, float z2);
void  ConvMolf(float ytpb, float yabulk, float Daeff, float Pop, float Top, float z1, float z2, float ynext,
float wt, float molAold, float NT, float Pa);
float CerrentChange(float NT, float yabulk, float F, float ynext, float wt, float Top, float Daeff, float Pop,
float z1, float z2);
void  VeloPro(float Pa, float Panew, float um, float ynext, float z1, float y);
void  avgsum();
void  printKeep();
float     sum = 0;          /* Sumasion of concentration overpotential ,(v)*/
int       nub = 0;      /* Count of loop in calculation process , (times)*/
float     temp[10];     /* Temp of transfer data of function */
float     keep[25];         /* keep in data for printf in file of power */
FILE *super;
FILE *power;
void main()
{
/******* Variable Show That : Fix system *******/
          float     J              = 0.3,                /* Curent Dencity ,(A/cm2) */
                    F              = 96485.3,            /* Faraday Constant */
                    Top            = 1023.15,            /* Temperature operation ,(K) */
                    Pop            = 1.0,           /* Pressure operation ,(atm) */
                    um             = 20.4597925,         /* Viscousity of A. , (Pa/s) */
                    Daeff          = 0,             /* effective diffusion coefficient ,(cm2/s) */
                    z1             = 0.2,           /* depth of chanel fuel cell, (cm) */
                    z2             = 0.395,              /* depth of Anode fuel cell, (cm)*/
                    wt             = 0.1,                /* whild of chanel fuel cell, (cm)*/
                    celllength   = 2.01,                 /* total cell length ,(cm) */
```

```
                yabulk          = 0,            /* mol. fraction of gas A at Bulk phase */
                ybbulk          = 0,                    /* mol. fraction of gas B at Bulk phase */
                yAr             = 0,            /* Mole fraction of Ar in System */
                ytpb            = 0,                    /* mol. fraction of gas A at TPB */
                RDeep           = 0.005;                /* Thickness of reaction zone ,(cm) */
        float   NT      = 0     ,               /* Total mol in the system ,(mol/s) */
                molAold = 0.0008        ,                       /* mol A  at operate start
process ,(mol/s) */
                molBold = 0.0002        ,               /* mol B  at operate start process ,(mol/s)
*/
                molAr   = 0     ,               /* mol Ar at operate start process ,(mol/s) */
                Pa      = 0     ,               /* Partial Pressure A ,(atm) */
                Panew   = 0     ;

        float   y       = 0     ,               /* operate Raya of cell ,(cm) */
                ynext   = 0.1   ;               /* move the y ,(cm) */
/****** Open White Code File and Clrscr Screen Output *******/
        clrscr();
        super=fopen("C:\\PROJECT3\\DATA\\FTMHJ05.txt","w+");
        power=fopen("C:\\PROJECT3\\DATA\\FTMHJ05C.txt","w+");
/* Set operating variable */
        NT = molAold+molBold+molAr;
        yabulk = molAold/NT;
        ybbulk = molBold/NT;
        yAr = 1-(yabulk+ybbulk);
        Pa  = yabulk*Pop;
/***************************/
/********* Start Show The Data Setup The System ************/
        fprintf(super,"+++++++Start Show The Data Setup The System+++++++");
        fprintf(super,"\nCurent Dencity                         : %f (A/cm2)",J);
        fprintf(super,"\nTemperature operation                  : %f (K)",Top);
        fprintf(super,"\nPressure operation             : %f (atm)",Pop);
        fprintf(super,"\ndepth of chanel fuel cell (z1)         : %f (cm)",z1);
        fprintf(super,"\ndepth of Anode fuel cell  (z2)         : %f (cm)",z2);
        fprintf(super,"\nMol. fraction of gas A at Bulk phase   : %f ",yabulk);
```

```
fprintf(super,"\nMol. fraction of gas B at Bulk phase   : %f ",ybbulk);
fprintf(super,"\nMole fraction of Ar in System          : %f ",yAr);
fprintf(super,"\nMole A Feed at Bulk phase              : %f ",molAold);
fprintf(super,"\nMole B Feed at Bulk phase              : %f ",molBold);
fprintf(super,"\nMole Ar Feed at Bulk phase             : %f ",molAr);
fprintf(super,"\nTotal of mol in the system             : %f ",NT);
fprintf(super,"\nPartial Pressure A                     : %f (atm)",Pa);
fprintf(super,"\nThickness of reaction zone             : %f (cm)",RDeep);
fprintf(power,"Data Cut of : ");
fprintf(power,"\nRaya\t     nub-
loop\tJ(A/cm2)\tPa(atm)\t\tyabulk\t\tVmax(cm/s)\tyAtpb\t\tnconc");
/****** Run Code *******/
Daeff = DiffusCoeff(Top,Pop,yAr);
y = y+ynext;
while(y<=celllength)
{
    fprintf(super,"\n\n\n\n\n\n\n********************Raya y : %f cm to y : %f
cm**********************************",y-ynext,y);
    fprintf(super,"\n\nData in This Loop nub : %d",nub+1);
    fprintf(super,"\n\nCerrent density (J) : %f A/cm2",J);
    fprintf(super,"\nyAbulk : %f ",yabulk);
    fprintf(super,"\nyBbulk : %f ",ybbulk);
    fprintf(super,"\nMole fraction of Ar in System          : %f ",yAr);
    fprintf(super,"\nPartial Pressure A             : %f (atm)",Pa);
    keep[0] = y;
    keep[1] = J;
    keep[2] = Pa;
    keep[3] = yabulk;
    keep[10]= ynext;
    ytpb = Molfrac(J,Top,Pop,Daeff,z1,yabulk,RDeep,z2);
    keep[5] = ytpb;
    ConvMolf(ytpb, yabulk, Daeff, Pop, Top, z1, z2, ynext, wt, molAold, NT, Pa);
    temp[4] = J;
    J = CerrentChange(NT,yabulk,F,ynext,wt,Top,Daeff,Pop,z1,z2);
```

```
                    yabulk = temp[0];
                    Panew  = temp[1];
                    molAold= temp[2];
                    ybbulk = temp[3];
                    VeloPro(Pa,Panew,um,ynext,z1,y);
                    Pa = Panew;
                    y += ynext;
                    printKeep();
          }
          avgsum();
          getch();
          fclose(super);
          fclose(power);
}
float DiffusCoeff(float Top, float Pop, float yAr)
{
/******* Variable Show That : recive value of Calculate *******/
          float     ea        = 0,                          /* Collision diameter of A */
                    eb        = 0,                /* Collision diameter of B */
                    eab       = 0,                /* Collision diameter of binary A and B */
                    Tn        = 0,
                    Dd1       = 0,
                    Dd2       = 0,
                    Dab       = 0,                /* diffusion coefficient of A&B , (cm2/s) */
                    Dik       = 0,                /* Knudsen diffusion coefficient, (cm2/s) */
                    DTeff     = 0,                /* Ternary effective diffusion coefficient ,(cm2/s) */
                    DaAr      = 0,               /* diffusion coefficient of A&Ar , (cm2/s) */
                    eAr       = 0,               /* Collision diameter of Ar */
                    eaAr      = 0;               /* Collision diameter of binary A and Ar */
/******* Variable Show That : Fix of System Binary Diffusion  *******/
          float     Tca       = 33.2,                       /* Critical Temperature of A. ,(K) */
                    Tcb       = 647.1,                      /* Critical Temperature of B. ,(K) */
                    k         = 1.38*pow(10,-16),           /* Boltzmann Constant ,(ergs/K) */
                    Treff     = 293,                        /* Pressure reffernce for cal Dab, (atm) */
                    Preff     = 1.0,              /* Temperature refference For cal. Da1 and Dab , (K) */
```

```
                    Dabref   = 0.850,                      /* diffusion coefficient of A&B at Treff=293
K,Preff=1atm , (cm2/s) */
                    dp       = 2.6*pow(10,-4),             /* Average pore size ,(cm) */
                    Ma       = 2,                  /* Molecula wight of Hydrogen,(g/mol) */
                    e        = 0.46,                       /* Porosity (%/100) */
                    t        = 4.5,                /* Tortuosity dimensionless */
                    TcAr     = 150.8,               /* Critical Temperature of Ar. ,(K) */
                    DaArref = 0.794;            /* diffusion coefficient of A&Ar at Treff=293 K,Preff=1atm ,
(cm2/s) */
/******* RUN CODE *******/

        /* Calculation The Knudsen diffusion */
        Dik = 4850*dp*pow((Top/Ma),0.5);
        printf("\n\n Dik : %f cm2/s",Dik);
        /* Calculation The D12 binary diffusion */
        ea = 0.77*Tca*k;
        eb = 0.77*Tcb*k;
        eab= pow((ea*eb),0.5);
        Tn = k*Top/eab;
        printf("\n\n Tn of eab at Top : %f K",Tn);
        Dd2 = (1.06036/pow(Tn,0.15610)) + (0.193/exp(0.47635*Tn)) +(1.03587/exp(1.52996*Tn)) +
(1.76474/exp(3.89411*Tn)) ;
        printf("\n\n Dd2 of Dab : %f egsd",Dd2);
        Tn = k*Treff/eab;
        printf("\n\n Tn of eab at Treff : %f K",Tn);
        Dd1 = (1.06036/pow(Tn,0.15610)) + (0.193/exp(0.47635*Tn)) +(1.03587/exp(1.52996*Tn)) +
(1.76474/exp(3.89411*Tn)) ;
        printf("\n\n Dd1 of Dab : %f egsd",Dd1);
        Dab = Dabref*(Preff/Pop)*pow((Top/Treff),1.5)*(Dd1/Dd2);
        printf("\n\n Dab : %f cm2/s",Dab);
        /* Calculation The B1Ar of innert gas Vs. Fuel gas Diffusion */
        eAr = 0.77*TcAr*k;
        eaAr= pow((ea*eAr),0.5);
        Tn = k*Top/eaAr;
        printf("\n\n Tn of eAr at Top : %f K",Tn);
```

```
Dd2 = (1.06036/pow(Tn,0.15610)) + (0.193/exp(0.47635*Tn)) +(1.03587/exp(1.52996*Tn)) +
(1.76474/exp(3.89411*Tn)) ;
printf("\n\n Dd2 of DaAr : %f egsd ",Dd2);
Tn = k*Treff/eaAr;
printf("\n\n Tn of eab at Treff : %f K",Tn);
Dd1 = (1.06036/pow(Tn,0.15610)) + (0.193/exp(0.47635*Tn)) +(1.03587/exp(1.52996*Tn)) +
(1.76474/exp(3.89411*Tn)) ;
printf("\n\n Dd1 of DaAr : %f egsd",Dd1);
DaAr = DaArref*(Preff/Pop)*pow((Top/Treff),1.5)*(Dd1/Dd2);
printf("\n\n DaAr : %f cm2/s",DaAr);
/**********Calculation The ternary diffusion coefficient **********/
DTeff = (e/t) * (1/((1/Dik) + (1/DaAr) + (((1/Dab) - (1/DaAr))*(1-yAr)) ));
DTeff = (e/t)* pow(((1/Dab)+(1/Dik)),-1);
/**********Show Data Result of Diffusion***************************/
printf("\n\n\n\nShow the result of Ternary Diffusion ");
printf("\n\nDTeff : %f cm2/s",DTeff);
/**********Show Data Base Subport of Diffusion***************************/
fprintf(super,"\n\n***Data Base Subport***");
fprintf(super,"\nAverage pore size              : %f (cm)",dp);
fprintf(super,"\nMolecula wight of Hydrogen : %f (g/mol)",Ma);
fprintf(super,"\nCritical Temperature of A.     : %f (K)",Tca);
fprintf(super,"\nCritical Temperature of B.     : %f (K)",Tcb);
fprintf(super,"\nCritical Temperature of Ar.    : %f (K)",TcAr);
fprintf(super,"\ndiffusion coefficient of A&B  at Treff= %f (K), Preff= %f (atm) : %f
(cm2/s)",Treff,Preff,Dabref);
fprintf(super,"\ndiffusion coefficient of A&Ar at Treff= %f (K), Preff= %f (atm) : %f
(cm2/s)",Treff,Preff,DaArref);
/**********Show Data Result of Diffusion***************************/
fprintf(super,"\n\n***Data of The System H2-H2O-Ar***");
fprintf(super,"\nKnudsen diffusion               : %f cm2/s",Dik);
fprintf(super,"\nH2O-H2 diffusion                : %f cm2/s",Dab);
fprintf(super,"\nH2-Ar diffusion                 : %f cm2/s",DaAr);
fprintf(super,"\nPorosity (e/100)                : %f",e);
fprintf(super,"\nTortuosity dimensionless        : %f",t);
fprintf(super,"\n\nH2O-H2-Ar Diffusion effective    : %f cm2/s",DTeff);
```

```
            getch();
            return(DTeff);
}
float Molfrac(float J, float Top, float Pop, float Daeff, float z1, float yabulk, float RDeep, float z2)
{
/******* Variable Show That : Operate Program  *******/
            float       i             = 0,
                        znext       = 0.01;
/******* Variable Show That : recive data of Calcuate  *******/
            float   ya = 0,                     /* mol. fraction of gas A */
                        yatpb       = 0,        /* mol. fraction of gas A at TPB. */
                        nconc       = 0,        /* concrntration overpotential */
                        F             = 96485.3,          /* Faraday Constant */
                        R1           = 82.057,            /* Gas constant. (cm3*atm/mol/K) */
                        R2           = 8.3143;            /* Gas constant. (J/mol/K) */
/******* Run Code *******/
            i=z1+znext;
            fprintf(super,"\n\nStart ya,bulk : %f at Z : %f",yabulk,z1);
            printf("Start ya,bulk : %f at Z : %f",yabulk,z1);
            while(i<=z2)
            {
                        ya = (J*R1*Top/(2*F*Daeff*Pop)*(z1-i)) + yabulk;
                        fprintf(super,"\nZ : %f cm.\tya : %f",i,ya);
                        printf("\nZ : %f cm.\tya : %f",i,ya);

                        i=i+znext;
            }
            yatpb = (J*R1*Top / (2*F*Daeff*Pop)*(z1-z2))+yabulk;
            nconc = (-1) * (R2*Top) / (2*F) * log(yatpb*(1-yabulk)/yabulk/(1-yatpb));
            keep[6] = nconc;
            sum += nconc;
            nub++;
            fprintf(super,"\n\nZ : %f cm. \tya,TPB : %f",z2,yatpb);
            fprintf(super,"\n\nThe Concentration Overpotential : %f V. at Reaction Deep : %f
cm.",nconc,RDeep);
```

```
        printf("\n\nZ : %f cm. \tya,TPB : %f",z2,yatpb);
        printf("\n\nThe Concentration Overpotential : %f V. at Reaction Deep : %f
cm.",nconc,RDeep);
        return(yatpb);
}
void ConvMolf(float ytpb, float yabulk, float Daeff, float Pop, float Top, float z1, float z2, float ynext,
float wt, float molAold, float NT, float Pa)
{
        float   R = 82.057 ;    /* Gas Constant ,cm3.atm/mol/K */
        float  Na               ,
                molAuse         ,
                yabnew          ,
                ybbnew          ,
                Panew           ,
                molAoldnew      ;
        Na = (ytpb-yabulk)*Daeff*Pop/(R*Top)/(z1-z2);
        molAuse = Na * (ynext*wt);
        yabnew = (molAold - molAuse)/NT;
        ybbnew = (1-yabnew);
        Panew = Pa*(molAold-molAuse)/molAold;
        molAoldnew = molAold-molAuse;
        temp[0] = yabnew;
        temp[1] = Panew;
        temp[2] = molAoldnew;
        temp[3] = ybbnew;
        fprintf(super,"\n\n\nData of function Mol. Convers");
        fprintf(super,"\n\nmolAuse : %.10f mol",molAuse);
        fprintf(super,"\nmolAold : %.10f mol",molAold);
        fprintf(super,"\nmolAnew for next element : %.10f mol",molAoldnew);
        fprintf(super,"\nPressure A old : %f atm",Pa);
        fprintf(super,"\nPressure A new : %f atm",Panew);
        fprintf(super,"\nyAbulk new : %f",yabnew);
        fprintf(super,"\nyBbulk new : %f",ybbnew);
}
```

```
float CerrentChange(float NT, float yabulk, float F, float ynext, float wt, float Top, float Daeff, float Pop,
float z1, float z2)
{
	float Jnew = 0;			/* Cerrent Dencity for new calculate */
	float R = 82.057;	/* Gas Constant cm3.atm/(mol.K) */
	Jnew = NT*yabulk*2.0*F / (ynext*wt) / (1.0 - (NT*R*Top/(ynext*wt)/Daeff/Pop*(z1-z2)));
	Jnew = temp[4] * (temp[0]/yabulk);
	printf("\n\ntemp[4] : %f",temp[4]);
	printf("\ntemp[0] : %f",temp[0]);
	printf("\nyabulk : %f",yabulk);
	printf("\n Jnew : %f A/cm2",Jnew);
//	getch();
	fprintf(super,"\n\nFunction *** CerrentChange ***");
	fprintf(super,"\n\nNew Cerrent density (Jnew) for next Loop (nub : %d) : %f
A/cm2",nub+2,Jnew);
	return(Jnew);
}
void VeloPro(float Pa, float Panew, float um, float ynext, float z1, float y)
{
	float	zu   = 0  , /* operate z direcsion ,cm */
		vmax = 0	, /* max verocity ,cm/s */
		v    = 0  ; /* vorocity cal profile ,cm/s */
	float	znext = 0.01	; /* znext for operate ,cm */
	fprintf(super,"\n\n\nFunction VeloPrp *****************************");
	vmax = (Pa - Panew)/2.0/um/ynext * (z1*z1/4.0) * (1.013*pow(10,5.0));
	keep[4] = vmax;
	fprintf(super,"\n\nRaya in Y Direction %f to %f cm",y-ynext,y);
	fprintf(super,"\n\nRaya %f cm\tVmax : %f cm/s\n",z1/2,vmax);
	while(zu<=z1)
	{
		v = 4.0*(zu/z1) * vmax * (z1 - zu)/z1;
		fprintf(super,"\nRaya : %f cm\t\tv : %f cm/s",zu,v);
		printf("\nRaya : %f cm\t\tv : %f cm/s",zu,v);
		zu += znext;
	}
```

```
}
void avgsum()
{
        float    ans = 0  ;
        ans = sum/nub;
        fprintf(super,"\n\n\nResult of Concentration Overpotential : ");
        fprintf(super,"\n\nSum of Concentration Overpotential : %f V",sum);
        fprintf(super,"\namonut of Loop in system : %d times",nub);
        fprintf(super,"\n\nAvg. of concentration ov. : %f V",ans);
        fprintf(power,"\n\n\n\nAvg. of concentration ov. : %f V",ans);
        printf("\n\n\nAvg. of concentration ov. : %f V",ans);
}
void printKeep()
{
        fprintf(power,"\n%.2f-%.2f\t%d\t%f\t%f\t%f\t%f\t%f\t%f",keep[0]-
keep[10],keep[0],nub,keep[1],keep[2],keep[3],keep[4],keep[5],keep[6]);
}
```

ค-6 แสดงรหัสโปรแกรม FTMHJ03.CPP

```
#include<stdio.h>
#include<conio.h>
#include<math.h>
#include<stdlib.h>
/***** Cal. Fick's Model Ternary Diffusion Hydrogen fuel System Version 1 ******/
float DiffusCoeff(float Top, float Pop ,float yAr);
float Molfrac(float J, float Top, float Pop, float Daeff, float z1, float yabulk, float RDeep, float z2);
void  ConvMolf(float ytpb, float yabulk, float Daeff, float Pop, float Top, float z1, float z2, float ynext,
float wt, float molAold, float NT, float Pa);
float CerrentChange(float NT, float yabulk, float F, float ynext, float wt, float Top, float Daeff, float Pop,
float z1, float z2);
void  VeloPro(float Pa, float Panew, float um, float ynext, float z1, float y);
void  avgsum();
void  printKeep();
float     sum = 0;          /* Sumasion of concentration overpotential ,(v)*/
int       nub = 0;      /* Count of loop in calculation process , (times)*/
float     temp[10];     /* Temp of transfer data of function */
float     keep[25];         /* keep in data for printf in file of power */
FILE *super;
FILE *power;
void main()
{
/******* Variable Show That : Fix system *******/
          float   J              = 1.0,                  /* Curent Dencity ,(A/cm2) */
                  F              = 96485.3,              /* Faraday Constant */
                  Top            = 1023.15,              /* Temperature operation ,(K) */
                  Pop            = 1.0,           /* Pressure operation ,(atm) */
                  um             = 20.4597925,           /* Viscousity of A. , (Pa/s) */
                  Daeff          = 0,             /* effective diffusion coefficient ,(cm2/s) */
                  z1             = 0.2,           /* depth of chanel fuel cell, (cm) */
                  z2             = 0.395,                /* depth of Anode fuel cell, (cm)*/
                  wt             = 0.1,                  /* whild of chanel fuel cell, (cm)*/
                  celllength   = 2.01,                   /* total cell length ,(cm) */
```

```
                    yabulk          = 0,            /* mol. fraction of gas A at Bulk phase */
                    ybbulk          = 0,                    /* mol. fraction of gas B at Bulk phase */
                    yAr             = 0,            /* Mole fraction of Ar in System */
                    ytpb            = 0,                    /* mol. fraction of gas A at TPB */
                    RDeep           = 0.005;                /* Thickness of reaction zone ,(cm) */
          float     NT      = 0     ,           /* Total mol in the system ,(mol/s) */
                    molAold = 0.0008        ,                   /* mol A  at operate start
process ,(mol/s) */
                    molBold = 0.0002        ,           /* mol B  at operate start process ,(mol/s)
*/
                    molAr   = 0.007 ,           /* mol Ar at operate start process ,(mol/s) */
                    Pa      = 0     ,           /* Partial Pressure A ,(atm) */
                    Panew   = 0     ;

          float     y       = 0     ,           /* operate Raya of cell ,(cm) */
                    ynext   = 0.1   ;           /* move the y ,(cm) */
/****** Open White Code File and Clrscr Screen Output *******/
          clrscr();
          super=fopen("C:\\PROJECT3\\DATA\\FTMHJ03.txt","w+");
          power=fopen("C:\\PROJECT3\\DATA\\FTMHJ03C.txt","w+");
/* Set operating variable */
          NT = molAold+molBold+molAr;
          yabulk = molAold/NT;
          ybbulk = molBold/NT;
          yAr = 1-(yabulk+ybbulk);
          Pa  = yabulk*Pop;
/***************************/
/********* Start Show The Data Setup The System ************/
          fprintf(super,"+++++++Start Show The Data Setup The System+++++++");
          fprintf(super,"\nCurent Dencity                           : %f (A/cm2)",J);
          fprintf(super,"\nTemperature operation                    : %f (K)",Top);
          fprintf(super,"\nPressure operation               : %f (atm)",Pop);
          fprintf(super,"\ndepth of chanel fuel cell (z1)           : %f (cm)",z1);
          fprintf(super,"\ndepth of Anode fuel cell  (z2)           : %f (cm)",z2);
          fprintf(super,"\nMol. fraction of gas A at Bulk phase   : %f ",yabulk);
```

```
		fprintf(super,"\nMol. fraction of gas B at Bulk phase	: %f ",ybbulk);
		fprintf(super,"\nMole fraction of Ar in System		: %f ",yAr);
		fprintf(super,"\nMole A Feed at Bulk phase		: %f ",molAold);
		fprintf(super,"\nMole B Feed at Bulk phase		: %f ",molBold);
		fprintf(super,"\nMole Ar Feed at Bulk phase		: %f ",molAr);
		fprintf(super,"\nTotal of mol in the system		: %f ",NT);
		fprintf(super,"\nPartial Pressure A			: %f (atm)",Pa);
		fprintf(super,"\nThickness of reaction zone		: %f (cm)",RDeep);
		fprintf(power,"Data Cut of : ");
		fprintf(power,"\nRaya\t	nub-
loop\tJ(A/cm2)\tPa(atm)\t\tyabulk\t\tVmax(cm/s)\tyAtpb\t\tnconc");
/****** Run Code *******/
		Daeff = DiffusCoeff(Top,Pop,yAr);
		y = y+ynext;
		while(y<=celllength)
		{
			fprintf(super,"\n\n\n\n\n\n\n*********************Raya y : %f cm to y : %f
cm***********************************",y-ynext,y);
			fprintf(super,"\n\nData in This Loop nub : %d",nub+1);
			fprintf(super,"\n\nCerrent density (J) : %f A/cm2",J);
			fprintf(super,"\nyAbulk : %f ",yabulk);
			fprintf(super,"\nyBbulk : %f ",ybbulk);
			fprintf(super,"\nMole fraction of Ar in System		: %f ",yAr);
			fprintf(super,"\nPartial Pressure A		: %f (atm)",Pa);
			keep[0] = y;
			keep[1] = J;
			keep[2] = Pa;
			keep[3] = yabulk;
			keep[10]= ynext;
			ytpb = Molfrac(J,Top,Pop,Daeff,z1,yabulk,RDeep,z2);
			keep[5] = ytpb;
			ConvMolf(ytpb, yabulk, Daeff, Pop, Top, z1, z2, ynext, wt, molAold, NT, Pa);
			temp[4] = J;
			J = CerrentChange(NT,yabulk,F,ynext,wt,Top,Daeff,Pop,z1,z2);
			yabulk = temp[0];
```

```
                Panew  = temp[1];
                molAold= temp[2];
                ybbulk = temp[3];
                VeloPro(Pa,Panew,um,ynext,z1,y);
                Pa = Panew;
                y += ynext;
                printKeep();
        }
        avgsum();
        getch();
        fclose(super);
        fclose(power);
}
float DiffusCoeff(float Top, float Pop, float yAr)
{
/******* Variable Show That : recive value of Calculate *******/
        float   ea      = 0,                    /* Collision diameter of A */
                eb      = 0,            /* Collision diameter of B */
                eab     = 0,            /* Collision diameter of binary A and B */
                Tn      = 0,
                Dd1     = 0,
                Dd2     = 0,
                Dab     = 0,            /* diffusion coefficient of A&B , (cm2/s) */
                Dik     = 0,            /* Knudsen diffusion coefficient, (cm2/s) */
                DTeff   = 0,            /* Ternary effective diffusion coefficient ,(cm2/s) */
                DaAr    = 0,            /* diffusion coefficient of A&Ar , (cm2/s) */
                eAr     = 0,            /* Collision diameter of Ar */
                eaAr    = 0;            /* Collision diameter of binary A and Ar */
/******* Variable Show That : Fix of System Binary Diffusion  *******/
        float   Tca     = 33.2,                 /* Critical Temperature of A. ,(K) */
                Tcb     = 647.1,                /* Critical Temperature of B. ,(K) */
                k       = 1.38*pow(10,-16),     /* Boltzmann Constant ,(ergs/K) */
                Treff   = 293,                  /* Pressure reffernce for cal Dab, (atm) */
                Preff   = 1.0,          /* Temperature refference For cal. Da1 and Dab , (K) */
```

```
                    Dabref   = 0.850,                         /* diffusion coefficient of A&B at Treff=293
K,Preff=1atm , (cm2/s) */
                    dp       = 2.6*pow(10,-4),                /* Average pore size ,(cm) */
                    Ma       = 2,                    /* Molecula wight of Hydrogen,(g/mol) */
                    e        = 0.46,                          /* Porosity (%/100) */
                    t        = 4.5,                  /* Tortuosity dimensionless */
                    TcAr     = 150.8,                 /* Critical Temperature of Ar. ,(K) */
                    DaArref = 0.794;              /* diffusion coefficient of A&Ar at Treff=293 K,Preff=1atm ,
(cm2/s) */
/******* RUN CODE *******/
        /* Calculation The Knudsen diffusion */
        Dik = 4850*dp*pow((Top/Ma),0.5);
        printf("\n\n Dik : %f cm2/s",Dik);
        /* Calculation The D12 binary diffusion */
        ea = 0.77*Tca*k;
        eb = 0.77*Tcb*k;
        eab= pow((ea*eb),0.5);
        Tn = k*Top/eab;
        printf("\n\n Tn of eab at Top : %f K",Tn);
        Dd2 = (1.06036/pow(Tn,0.15610)) + (0.193/exp(0.47635*Tn)) +(1.03587/exp(1.52996*Tn)) +
(1.76474/exp(3.89411*Tn)) ;
        printf("\n\n Dd2 of Dab : %f egsd",Dd2);
        Tn = k*Treff/eab;
        printf("\n\n Tn of eab at Treff : %f K",Tn);
        Dd1 = (1.06036/pow(Tn,0.15610)) + (0.193/exp(0.47635*Tn)) +(1.03587/exp(1.52996*Tn)) +
(1.76474/exp(3.89411*Tn)) ;
        printf("\n\n Dd1 of Dab : %f egsd",Dd1);
        Dab = Dabref*(Preff/Pop)*pow((Top/Treff),1.5)*(Dd1/Dd2);
        printf("\n\n Dab : %f cm2/s",Dab);
        /* Calculation The B1Ar of innert gas Vs. Fuel gas Diffusion */
        eAr = 0.77*TcAr*k;
        eaAr= pow((ea*eAr),0.5);
        Tn = k*Top/eaAr;
        printf("\n\n Tn of eAr at Top : %f K",Tn);
```

```
Dd2 = (1.06036/pow(Tn,0.15610)) + (0.193/exp(0.47635*Tn)) +(1.03587/exp(1.52996*Tn)) +
(1.76474/exp(3.89411*Tn)) ;
printf("\n\n Dd2 of DaAr : %f egsd ",Dd2);
Tn = k*Treff/eaAr;
printf("\n\n Tn of eab at Treff : %f K",Tn);
Dd1 = (1.06036/pow(Tn,0.15610)) + (0.193/exp(0.47635*Tn)) +(1.03587/exp(1.52996*Tn)) +
(1.76474/exp(3.89411*Tn)) ;
printf("\n\n Dd1 of DaAr : %f egsd",Dd1);
DaAr = DaArref*(Preff/Pop)*pow((Top/Treff),1.5)*(Dd1/Dd2);
printf("\n\n DaAr : %f cm2/s",DaAr);
/**********Calculation The ternary diffusion coefficient **********/
DTeff = (e/t) * (1/((1/Dik) + (1/DaAr) + (((1/Dab) - (1/DaAr))*(1-yAr)) ));
/**********Show Data Result of Diffusion***************************/
printf("\n\n\n\nShow the result of Ternary Diffusion ");
printf("\n\nDTeff : %f cm2/s",DTeff);
/**********Show Data Base Subport of Diffusion***************************/
fprintf(super,"\n\n***Data Base Subport***");
fprintf(super,"\nAverage pore size              : %f (cm)",dp);
fprintf(super,"\nMolecula wight of Hydrogen : %f (g/mol)",Ma);
fprintf(super,"\nCritical Temperature of A.     : %f (K)",Tca);
fprintf(super,"\nCritical Temperature of B.     : %f (K)",Tcb);
fprintf(super,"\nCritical Temperature of Ar.    : %f (K)",TcAr);
fprintf(super,"\ndiffusion coefficient of A&B  at Treff= %f (K), Preff= %f (atm) : %f
(cm2/s)",Treff,Preff,Dabref);
fprintf(super,"\ndiffusion coefficient of A&Ar at Treff= %f (K), Preff= %f (atm) : %f
(cm2/s)",Treff,Preff,DaArref);
/**********Show Data Result of Diffusion***************************/
fprintf(super,"\n\n***Data of The System H2-H2O-Ar***");
fprintf(super,"\nKnudsen diffusion                : %f cm2/s",Dik);
fprintf(super,"\nH2O-H2 diffusion                 : %f cm2/s",Dab);
fprintf(super,"\nH2-Ar diffusion                  : %f cm2/s",DaAr);
fprintf(super,"\nPorosity (e/100)                 : %f",e);
fprintf(super,"\nTortuosity dimensionless         : %f",t);
fprintf(super,"\n\nH2O-H2-Ar Diffusion effective    : %f cm2/s",DTeff);
getch();
```

```
            return(DTeff);
}

float Molfrac(float J, float Top, float Pop, float Daeff, float z1, float yabulk, float RDeep, float z2)
{
/******* Variable Show That : Operate Program  *******/
            float       i           = 0,
                        znext       = 0.01;
/******* Variable Show That : recive data of Calcuate  *******/
            float   ya = 0,                 /* mol. fraction of gas A */
                        yatpb       = 0,        /* mol. fraction of gas A at TPB. */
                        nconc       = 0,        /* concrntration overpotential */
                        F           = 96485.3,          /* Faraday Constant */
                        R1          = 82.057,           /* Gas constant. (cm3*atm/mol/K) */
                        R2          = 8.3143;           /* Gas constant. (J/mol/K) */
/******* Run Code *******/
            i=z1+znext;
            fprintf(super,"\n\nStart ya,bulk : %f at Z : %f",yabulk,z1);
            printf("Start ya,bulk : %f at Z : %f",yabulk,z1);
            while(i<=z2)
            {
                        ya = (J*R1*Top/(2*F*Daeff*Pop)*(z1-i)) + yabulk;
                        fprintf(super,"\nZ : %f cm.\tya : %f",i,ya);
                        printf("\nZ : %f cm.\tya : %f",i,ya);
                        i=i+znext;
            }
            yatpb = (J*R1*Top / (2*F*Daeff*Pop)*(z1-z2))+yabulk;
            nconc = (-1) * (R2*Top) / (2*F) * log(yatpb*(1-yabulk)/yabulk/(1-yatpb));
            keep[6] = nconc;
            sum += nconc;
            nub++;
            fprintf(super,"\n\nZ : %f cm. \tya,TPB : %f",z2,yatpb);
            fprintf(super,"\n\nThe Concentration Overpotential : %f V. at Reaction Deep : %f
cm.",nconc,RDeep);
            printf("\n\nZ : %f cm. \tya,TPB : %f",z2,yatpb);
```

```
	printf("\n\nThe Concentration Overpotential : %f V. at Reaction Deep : %f
cm.",nconc,RDeep);
	return(yatpb);
}
void ConvMolf(float ytpb, float yabulk, float Daeff, float Pop, float Top, float z1, float z2, float ynext,
float wt, float molAold, float NT, float Pa)
{
	float	R = 82.057 ;	/* Gas Constant ,cm3.atm/mol/K */
	float	Na		,
		molAuse		,
		yabnew		,
		ybbnew		,
		Panew		,
		molAoldnew	;
	Na = (ytpb-yabulk)*Daeff*Pop/(R*Top)/(z1-z2);
	molAuse = Na * (ynext*wt);
	yabnew = (molAold - molAuse)/NT;
	ybbnew = (1-yabnew);
	Panew = Pa*(molAold-molAuse)/molAold;
	molAoldnew = molAold-molAuse;
	temp[0] = yabnew;
	temp[1] = Panew;
	temp[2] = molAoldnew;
	temp[3] = ybbnew;
	fprintf(super,"\n\n\nData of function Mol. Convers");
	fprintf(super,"\n\nmolAuse : %.10f mol",molAuse);
	fprintf(super,"\nmolAold : %.10f mol",molAold);
	fprintf(super,"\nmolAnew for next element : %.10f mol",molAoldnew);
	fprintf(super,"\nPressure A old : %f atm",Pa);
	fprintf(super,"\nPressure A new : %f atm",Panew);
	fprintf(super,"\nyAbulk new : %f",yabnew);
	fprintf(super,"\nyBbulk new : %f",ybbnew);
}
float CerrentChange(float NT, float yabulk, float F, float ynext, float wt, float Top, float Daeff, float Pop,
float z1, float z2)
```

```
{
        float Jnew = 0;                 /* Cerrent Dencity for new calculate */
        float R = 82.057;       /* Gas Constant cm3.atm/(mol.K) */
        Jnew = NT*yabulk*2.0*F / (ynext*wt) / (1.0 - (NT*R*Top/(ynext*wt)/Daeff/Pop*(z1-z2)));
        Jnew = temp[4] * (temp[0]/yabulk);
        printf("\n\ntemp[4] : %f",temp[4]);
        printf("\ntemp[0] : %f",temp[0]);
        printf("\nyabulk : %f",yabulk);
        printf("\n Jnew : %f A/cm2",Jnew);
//      getch();
        fprintf(super,"\n\nFunction *** CerrentChange ***");
        fprintf(super,"\n\nNew Cerrent density (Jnew) for next Loop (nub : %d) : %f
A/cm2",nub+2,Jnew);
        return(Jnew);
}
void VeloPro(float Pa, float Panew, float um, float ynext, float z1, float y)
{
        float   zu   = 0  , /* operate z direcsion ,cm */
                vmax = 0        , /* max verocity ,cm/s */
                v    = 0   ; /* vorocity cal profile ,cm/s */
        float   znext = 0.01        ; /* znext for operate ,cm */
        fprintf(super,"\n\n\nFunction VeloPrp ******************************");
        vmax = (Pa - Panew)/2.0/um/ynext * (z1*z1/4.0) * (1.013*pow(10,5.0));
        keep[4] = vmax;
        fprintf(super,"\n\nRaya in Y Direction %f to %f cm",y-ynext,y);
        fprintf(super,"\n\nRaya %f cm\tVmax : %f cm/s\n",z1/2,vmax);
        while(zu<=z1)
        {
                v = 4.0*(zu/z1) * vmax * (z1 - zu)/z1;
                fprintf(super,"\nRaya : %f cm\t\tv : %f cm/s",zu,v);
                printf("\nRaya : %f cm\t\tv : %f cm/s",zu,v);
                zu += znext;
        }
}
void avgsum()
```

```
{
        float    ans = 0  ;
        ans = sum/nub;
        fprintf(super,"\n\n\nResult of Concentration Overpotential : ");
        fprintf(super,"\n\nSum of Concentration Overpotential : %f V",sum);
        fprintf(super,"\namonut of Loop in system : %d times",nub);
        fprintf(super,"\n\nAvg. of concentration ov. : %f V",ans);
        fprintf(power,"\n\n\n\nAvg. of concentration ov. : %f V",ans);
        printf("\n\n\nAvg. of concentration ov. : %f V",ans);
}
void printKeep()
{
        fprintf(power,"\n%.2f-%.2f\t%d\t%f\t%f\t%f\t%f\t%f\t%f",keep[0]-
keep[10],keep[0],nub,keep[1],keep[2],keep[3],keep[4],keep[5],keep[6]);
}
```

ค-7 แสดงรหัสโปรแกรม FTMHJ04.CPP

```
#include<stdio.h>
#include<conio.h>
#include<math.h>
#include<stdlib.h>
/***** Cal. Fick's Model Ternary Diffusion Hydrogen fuel System Version 1 ******/
float DiffusCoeff(float Top, float Pop ,float yAr);
float Molfrac(float J, float Top, float Pop, float Daeff, float z1, float yabulk, float RDeep, float z2);
void  ConvMolf(float ytpb, float yabulk, float Daeff, float Pop, float Top, float z1, float z2, float ynext,
float wt, float molAold, float NT, float Pa);
float CerrentChange(float NT, float yabulk, float F, float ynext, float wt, float Top, float Daeff, float Pop,
float z1, float z2);
void  VeloPro(float Pa, float Panew, float um, float ynext, float z1, float y);
void  avgsum();
void  printKeep();
float     sum = 0;          /* Sumasion of concentration overpotential ,(v)*/
int       nub = 0;      /* Count of loop in calculation process , (times)*/
float     temp[10];      /* Temp of transfer data of function */
float     keep[25];         /* keep in data for printf in file of power */
FILE *super;
FILE *power;
void main()
{
/******* Variable Show That : Fix system *******/
          float   J            = 0.1,              /* Curent Dencity ,(A/cm2) */
                  F            = 96485.3,          /* Faraday Constant */
                  Top          = 1023.15,          /* Temperature operation ,(K) */
                  Pop          = 1.0,          /* Pressure operation ,(atm) */
                  um           = 20.4597925,       /* Viscousity of A. , (Pa/s) */
                  Daeff        = 0,            /* effective diffusion coefficient ,(cm2/s) */
                  z1           = 0.2,          /* depth of chanel fuel cell, (cm) */
                  z2           = 0.395,            /* depth of Anode fuel cell, (cm)*/
                  wt           = 0.1,              /* whild of chanel fuel cell, (cm)*/
                  celllength   = 2.01,             /* total cell length ,(cm) */
```

```
                    yabulk          = 0,            /* mol. fraction of gas A at Bulk phase */
                    ybbulk          = 0,                    /* mol. fraction of gas B at Bulk phase */
                    yAr             = 0,            /* Mole fraction of Ar in System */
                    ytpb            = 0,                    /* mol. fraction of gas A at TPB */
                    RDeep           = 0.005;                /* Thickness of reaction zone ,(cm) */
          float     NT      = 0     ,               /* Total mol in the system ,(mol/s) */
          molAold = 0.0001          ,                       /* mol A  at operate start process
,(mol/s) */
                    molBold = 0.0009        ,               /* mol B  at operate start process ,(mol/s)
*/
                    molAr   = 0     ,               /* mol Ar at operate start process ,(mol/s) */
                    Pa      = 0     ,               /* Partial Pressure A ,(atm) */
                    Panew   = 0     ;
          float     y       = 0     ,               /* operate Raya of cell ,(cm) */
                    ynext   = 0.1   ;               /* move the y ,(cm) */
/****** Open White Code File and Clrscr Screen Output *******/
          clrscr();
          super=fopen("C:\\PROJECT3\\DATA\\FTMHJ04.txt","w+");
          power=fopen("C:\\PROJECT3\\DATA\\FTMHJ04C.txt","w+");
/* Set operating variable */
          NT = molAold+molBold+molAr;
          yabulk = molAold/NT;
          ybbulk = molBold/NT;
          yAr = 1-(yabulk+ybbulk);
          Pa  = yabulk*Pop;
/***************************/
/********* Start Show The Data Setup The System ************/
          fprintf(super,"+++++++Start Show The Data Setup The System+++++++");
          fprintf(super,"\nCurent Dencity                           : %f (A/cm2)",J);
          fprintf(super,"\nTemperature operation                    : %f (K)",Top);
          fprintf(super,"\nPressure operation               : %f (atm)",Pop);
          fprintf(super,"\ndepth of chanel fuel cell (z1)           : %f (cm)",z1);
          fprintf(super,"\ndepth of Anode fuel cell  (z2)           : %f (cm)",z2);
          fprintf(super,"\nMol. fraction of gas A at Bulk phase   : %f ",yabulk);
          fprintf(super,"\nMol. fraction of gas B at Bulk phase   : %f ",ybbulk);
```

```
            fprintf(super,"\nMole fraction of Ar in System              : %f ",yAr);
            fprintf(super,"\nMole A Feed at Bulk phase                  : %f ",molAold);
            fprintf(super,"\nMole B Feed at Bulk phase                  : %f ",molBold);
            fprintf(super,"\nMole Ar Feed at Bulk phase                 : %f ",molAr);
            fprintf(super,"\nTotal of mol in the system                 : %f ",NT);
            fprintf(super,"\nPartial Pressure A                         : %f (atm)",Pa);
            fprintf(super,"\nThickness of reaction zone                 : %f (cm)",RDeep);
            fprintf(power,"Data Cut of : ");
            fprintf(power,"\nRaya\t     nub-
loop\tJ(A/cm2)\tPa(atm)\t\tyabulk\t\tVmax(cm/s)\tyAtpb\t\tnconc");
/****** Run Code *******/
            Daeff = DiffusCoeff(Top,Pop,yAr);
            y = y+ynext;
            while(y<=celllength)
            {
                        fprintf(super,"\n\n\n\n\n\n\n\n*********************Raya y : %f cm to y : %f
cm***********************************",y-ynext,y);
                        fprintf(super,"\n\nData in This Loop nub : %d",nub+1);
                        fprintf(super,"\n\nCerrent density (J) : %f A/cm2",J);
                        fprintf(super,"\nyAbulk : %f ",yabulk);
                        fprintf(super,"\nyBbulk : %f ",ybbulk);
                        fprintf(super,"\nMole fraction of Ar in System              : %f ",yAr);
                        fprintf(super,"\nPartial Pressure A                 : %f (atm)",Pa);
                        keep[0] = y;
                        keep[1] = J;
                        keep[2] = Pa;
                        keep[3] = yabulk;
                        keep[10]= ynext;
                        ytpb = Molfrac(J,Top,Pop,Daeff,z1,yabulk,RDeep,z2);
                        keep[5] = ytpb;
                        ConvMolf(ytpb, yabulk, Daeff, Pop, Top, z1, z2, ynext, wt, molAold, NT, Pa);
                        temp[4] = J;
                        J = CerrentChange(NT,yabulk,F,ynext,wt,Top,Daeff,Pop,z1,z2);
                        yabulk = temp[0];
                        Panew  = temp[1];
```

```
                molAold= temp[2];
                ybbulk = temp[3];
                VeloPro(Pa,Panew,um,ynext,z1,y);
                Pa = Panew;
                y += ynext;
                printKeep();
        }
        avgsum();
        getch();
        fclose(super);
        fclose(power);
}
float DiffusCoeff(float Top, float Pop, float yAr)
{
/******* Variable Show That : recive value of Calculate *******/
        float   ea      = 0,                    /* Collision diameter of A */
                eb      = 0,            /* Collision diameter of B */
                eab     = 0,            /* Collision diameter of binary A and B */
                Tn      = 0,
                Dd1     = 0,
                Dd2     = 0,
                Dab     = 0,            /* diffusion coefficient of A&B , (cm2/s) */
                Dik     = 0,            /* Knudsen diffusion coefficient, (cm2/s) */
                DTeff   = 0,            /* Ternary effective diffusion coefficient ,(cm2/s) */
                DaAr    = 0,            /* diffusion coefficient of A&Ar , (cm2/s) */
                eAr     = 0,            /* Collision diameter of Ar */
                eaAr    = 0;            /* Collision diameter of binary A and Ar */
/******* Variable Show That : Fix of System Binary Diffusion  *******/
        float   Tca     = 132.9,                /* Critical Temperature of A. ,(K) */
                Tcb     = 304.2,                /* Critical Temperature of B. ,(K) */
                k       = 1.38*pow(10,-16),     /* Boltzmann Constant ,(ergs/K) */
                Treff   = 293.15,               /* Pressure reffernce for cal Dab, (atm) */
                Preff   = 1.0,          /* Temperature refference For cal. Da1 and Dab , (K) */
                Dabref  = 0.162,                /* diffusion coefficient of A&B at Treff=293
K,Preff=1atm , (cm2/s) */
```

```
dp      = 2.6*pow(10,-4),           /* Average pore size ,(cm) */
Ma      = 28.01,                    /* Molecula wight of Hydrogen,(g/mol) */
e       = 0.46,                     /* Porosity (%/100) */
t       = 4.5,          /* Tortuosity dimensionless */
TcAr    = 150.8,         /* Critical Temperature of Ar. ,(K) */
DaArref = 0.32115;        /* diffusion coefficient of A&Ar at Treff=293
K,Preff=1atm , (cm2/s) */
/******* RUN CODE *******/
    /* Calculation The Knudsen diffusion */
    Dik = 4850*dp*pow((Top/Ma),0.5);
    printf("\n\n Dik : %f cm2/s",Dik);
    /* Calculation The D12 binary diffusion */
    ea = 0.77*Tca*k;
    eb = 0.77*Tcb*k;
    eab= pow((ea*eb),0.5);
    Tn = k*Top/eab;
    printf("\n\n Tn of eab at Top : %f K",Tn);
    Dd2 = (1.06036/pow(Tn,0.15610)) + (0.193/exp(0.47635*Tn)) +(1.03587/exp(1.52996*Tn)) +
(1.76474/exp(3.89411*Tn)) ;
    printf("\n\n Dd2 of Dab : %f egsd",Dd2);
    Tn = k*Treff/eab;
    printf("\n\n Tn of eab at Treff : %f K",Tn);
    Dd1 = (1.06036/pow(Tn,0.15610)) + (0.193/exp(0.47635*Tn)) +(1.03587/exp(1.52996*Tn)) +
(1.76474/exp(3.89411*Tn)) ;
    printf("\n\n Dd1 of Dab : %f egsd",Dd1);
    Dab = Dabref*(Preff/Pop)*pow((Top/Treff),1.5)*(Dd1/Dd2);
    printf("\n\n Dab : %f cm2/s",Dab);
    /* Calculation The B1Ar of innert gas Vs. Fuel gas Diffusion */
    eAr = 0.77*TcAr*k;
    eaAr= pow((ea*eAr),0.5);
    Tn = k*Top/eaAr;
    printf("\n\n Tn of eAr at Top : %f K",Tn);
    Dd2 = (1.06036/pow(Tn,0.15610)) + (0.193/exp(0.47635*Tn)) +(1.03587/exp(1.52996*Tn)) +
(1.76474/exp(3.89411*Tn)) ;
    printf("\n\n Dd2 of DaAr : %f egsd ",Dd2);
```

```
Tn = k*Treff/eaAr;
printf("\n\n Tn of eab at Treff : %f K",Tn);
Dd1 = (1.06036/pow(Tn,0.15610)) + (0.193/exp(0.47635*Tn)) +(1.03587/exp(1.52996*Tn)) +
(1.76474/exp(3.89411*Tn)) ;
printf("\n\n Dd1 of DaAr : %f egsd",Dd1);
DaAr = DaArref*(Preff/Pop)*pow((Top/Treff),1.5)*(Dd1/Dd2);
printf("\n\n DaAr : %f cm2/s",DaAr);
/**********Calculation The ternary diffusion coefficient **********/
DTeff = (e/t) * (1/((1/Dik) + (1/DaAr) + (((1/Dab) - (1/DaAr))*(1-yAr)) ));
DTeff = (e/t)* pow(((1/Dab)+(1/Dik)),-1);
/**********Show Data Result of Diffusion***************************/
printf("\n\n\n\nShow the result of Ternary Diffusion ");
printf("\n\nDTeff : %f cm2/s",DTeff);
/**********Show Data Base Subport of Diffusion***************************/
fprintf(super,"\n\n***Data Base Subport***");
fprintf(super,"\nAverage pore size              : %f (cm)",dp);
fprintf(super,"\nMolecula wight of Hydrogen : %f (g/mol)",Ma);
fprintf(super,"\nCritical Temperature of A.     : %f (K)",Tca);
fprintf(super,"\nCritical Temperature of B.     : %f (K)",Tcb);
fprintf(super,"\nCritical Temperature of Ar.    : %f (K)",TcAr);
fprintf(super,"\ndiffusion coefficient of A&B  at Treff= %f (K), Preff= %f (atm) : %f
(cm2/s)",Treff,Preff,Dabref);
fprintf(super,"\ndiffusion coefficient of A&Ar at Treff= %f (K), Preff= %f (atm) : %f
(cm2/s)",Treff,Preff,DaArref);
/**********Show Data Result of Diffusion***************************/
fprintf(super,"\n\n***Data of The System CO-CO2***");
fprintf(super,"\nKnudsen diffusion              : %f cm2/s",Dik);
fprintf(super,"\nCO2-CO diffusion               : %f cm2/s",Dab);
fprintf(super,"\nCO2-Ar diffusion               : %f cm2/s",DaAr);
fprintf(super,"\nPorosity (e/100)               : %f",e);
fprintf(super,"\nTortuosity dimensionless       : %f",t);
fprintf(super,"\n\nCO-CO2 Diffusion effective    : %f cm2/s",DTeff);
getch();
return(DTeff);
```

```
}
float Molfrac(float J, float Top, float Pop, float Daeff, float z1, float yabulk, float RDeep, float z2)
{
/******* Variable Show That : Operate Program  *******/
        float   i       = 0,
                znext   = 0.01;
/******* Variable Show That : recive data of Calcuate  *******/
        float   ya = 0,         /* mol. fraction of gas A */
                yatpb   = 0,    /* mol. fraction of gas A at TPB. */
                nconc   = 0,    /* concrntration overpotential */
                F       = 96485.3,      /* Faraday Constant */
                R1      = 82.057,       /* Gas constant. (cm3*atm/mol/K) */
                R2      = 8.3143;       /* Gas constant. (J/mol/K) */
/******* Run Code *******/
        i=z1+znext;
        fprintf(super,"\n\nStart ya,bulk : %f at Z : %f",yabulk,z1);
        printf("Start ya,bulk : %f at Z : %f",yabulk,z1);
        while(i<=z2)
        {
                ya = (J*R1*Top/(2*F*Daeff*Pop)*(z1-i)) + yabulk;
                fprintf(super,"\nZ : %f cm.\tya : %f",i,ya);
                printf("\nZ : %f cm.\tya : %f",i,ya);
                i=i+znext;
        }
        yatpb = (J*R1*Top / (2*F*Daeff*Pop)*(z1-z2))+yabulk;
        nconc = (-1) * (R2*Top) / (2*F) * log(yatpb*(1-yabulk)/yabulk/(1-yatpb));
        keep[6] = nconc;
        sum += nconc;
        nub++;
        fprintf(super,"\n\nZ : %f cm. \tya,TPB : %f",z2,yatpb);
        fprintf(super,"\n\nThe Concentration Overpotential : %f V. at Reaction Deep : %f
cm.",nconc,RDeep);
        printf("\n\nZ : %f cm. \tya,TPB : %f",z2,yatpb);
        printf("\n\nThe Concentration Overpotential : %f V. at Reaction Deep : %f
cm.",nconc,RDeep);
```

```
        return(yatpb);
}
void ConvMolf(float ytpb, float yabulk, float Daeff, float Pop, float Top, float z1, float z2, float ynext,
float wt, float molAold, float NT, float Pa)
{
        float   R = 82.057 ;      /* Gas Constant ,cm3.atm/mol/K */
        float  Na                 ,
               molAuse            ,
               yabnew             ,
               ybbnew             ,
               Panew              ,
               molAoldnew         ;
        Na = (ytpb-yabulk)*Daeff*Pop/(R*Top)/(z1-z2);
        molAuse = Na * (ynext*wt);
        yabnew = (molAold - molAuse)/NT;
        ybbnew = (1-yabnew);
        Panew = Pa*(molAold-molAuse)/molAold;
        molAoldnew = molAold-molAuse;
        temp[0] = yabnew;
        temp[1] = Panew;
        temp[2] = molAoldnew;
        temp[3] = ybbnew;
        fprintf(super,"\n\n\nData of function Mol. Convers");
        fprintf(super,"\n\nmolAuse : %.10f mol",molAuse);
        fprintf(super,"\nmolAold : %.10f mol",molAold);
        fprintf(super,"\nmolAnew for next element : %.10f mol",molAoldnew);
        fprintf(super,"\nPressure A old : %f atm",Pa);
        fprintf(super,"\nPressure A new : %f atm",Panew);
        fprintf(super,"\nyAbulk new : %f",yabnew);
        fprintf(super,"\nyBbulk new : %f",ybbnew);
}
float CerrentChange(float NT, float yabulk, float F, float ynext, float wt, float Top, float Daeff, float Pop,
float z1, float z2)
{
        float Jnew = 0;           /* Cerrent Dencity for new calculate */
```

```
            float R = 82.057;       /* Gas Constant cm3.atm/(mol.K) */
            Jnew = NT*yabulk*2.0*F / (ynext*wt) / (1.0 - (NT*R*Top/(ynext*wt)/Daeff/Pop*(z1-z2)));
            Jnew = temp[4] * (temp[0]/yabulk);
            printf("\n\ntemp[4] : %f",temp[4]);
            printf("\ntemp[0] : %f",temp[0]);
            printf("\nyabulk : %f",yabulk);
            printf("\n Jnew : %f A/cm2",Jnew);
//          getch();
            fprintf(super,"\n\nFunction *** CerrentChange ***");
            fprintf(super,"\n\nNew Cerrent density (Jnew) for next Loop (nub : %d) : %f
A/cm2",nub+2,Jnew);
            return(Jnew);
}
void VeloPro(float Pa, float Panew, float um, float ynext, float z1, float y)
{
            float       zu   = 0  , /* operate z direcsion ,cm */
                        vmax = 0        , /* max verocity ,cm/s */
                        v    = 0   ; /* vorocity cal profile ,cm/s */
            float       znext = 0.01        ; /* znext for operate ,cm */
            fprintf(super,"\n\n\nFunction VeloPrp ******************************");
            vmax = (Pa - Panew)/2.0/um/ynext * (z1*z1/4.0) * (1.013*pow(10,5.0));
            keep[4] = vmax;
            fprintf(super,"\n\nRaya in Y Direction %f to %f cm",y-ynext,y);
            fprintf(super,"\n\nRaya %f cm\tVmax : %f cm/s\n",z1/2,vmax);
            while(zu<=z1)
            {
                        v = 4.0*(zu/z1) * vmax * (z1 - zu)/z1;
                        fprintf(super,"\nRaya : %f cm\t\tv : %f cm/s",zu,v);
                        printf("\nRaya : %f cm\t\tv : %f cm/s",zu,v);
                        zu += znext;
            }
}
void avgsum()
{
            float       ans = 0  ;
```

```
        ans = sum/nub;
        fprintf(super,"\n\n\nResult of Concentration Overpotential : ");
        fprintf(super,"\n\nSum of Concentration Overpotential : %f V",sum);
        fprintf(super,"\namonut of Loop in system : %d times",nub);
        fprintf(super,"\n\nAvg. of concentration ov. : %f V",ans);
        fprintf(power,"\n\n\n\nAvg. of concentration ov. : %f V",ans);
        printf("\n\n\nAvg. of concentration ov. : %f V",ans);
}
void printKeep()
{
        fprintf(power,"\n%.2f-%.2f\t%d\t%f\t%f\t%f\t%f\t%f\t%f",keep[0]-
keep[10],keep[0],nub,keep[1],keep[2],keep[3],keep[4],keep[5],keep[6]);
}
```

ค-8 แสดงรหัสโปรแกรม SML03.CPP

```
#include<stdio.h>
#include<conio.h>
#include<math.h>
#include<stdlib.h>
float DiffusCoeff(float Top, float Pop,float dp,double e,float t);
float Molfrac(float J, float Top, float Pop, float Daeff, float z1, float yabulk, float RDeep, float z2,float
znext);
double Ltpb(double e,double fe,double fi,double Vt,double  ri,double re,double next);
FILE *super;
FILE *power;
void main()
{
/******* Variable Show That : Fix system *******/
        float   J       = 0.3,                  /* Curent Dencity ,(A/cm2) */
                Top     = 1023.15,              /* Temperature operation ,(K) */
                Pop     = 1.0,          /* Temperature operation ,(K) */
                Daeff   = 0,            /* effective diffusion coefficient ,(cm2/s) */
                z1      = 0.2,          /* depth of chanel fuel cell, (cm) */
                z2      = 0.395,                /* depth of Anode fuel cell, (cm)*/
                yabulk  = 0.64,                 /* mol. fraction of gas A at Bulk phase */
                RDeep   = 0.005;                /* Thickness of reaction zone ,(cm) */
        double  e = 0.1                 ,    /* Porosity (%/100) */
                fe= 0.5                 ,
                fi= 0.5                 ,
                Vt= 4.0*pow(10.0,-9.0)  ,
                ri= 1.0*pow(10.0,-6.0)  ,
                re= 1.0*pow(10.0,-6.0)  ;
        float   dp      = 0             ,       /* Average pore size ,(cm) */
                t       = 4.5;          /* Tortuosity dimensionless */
        float   znext   = 0.001         ;    /* Next step of function Molfrac */
        double  next    = 0.000001      ;       /* Next step of function Ltpb*/
        float   nconc   ;
        double  vLtpb   ;
```

```
/****** Run Code *******/
        clrscr();
        super=fopen("C:\\PROJECT3\\DATA\\SML04.txt","w+");
        power=fopen("C:\\PROJECT3\\DATA\\SML04C.txt","w+");
/********* Start Show The Data Setup The System ************/
        fprintf(super,"+++++++Start Show The Data Setup The System+++++++");
        fprintf(super,"\nCurent Dencity                          : %f (A/cm2)",J);
        fprintf(super,"\nTemperature operation                   : %f (K)",Top);
        fprintf(super,"\nPressure operation                : %f (atm)",Pop);
        fprintf(super,"\ndepth of chanel fuel cell (z1)          : %f (cm)",z1);
        fprintf(super,"\ndepth of Anode fuel cell  (z2)          : %f (cm)",z2);
        fprintf(super,"\nMol. fraction of gas A at Bulk phase   : %f ",yabulk);
        fprintf(super,"\nThickness of reaction zone        : %f (cm)",RDeep);
/****** Run Code *******/
        while(e<1)
        {
                dp = (ri+re)*e/(1.0-e) * (2.0 * 100.0) ;


                fprintf(super,"\n\n\n+++++++++++++++++ Cal. At Porosity :
%f++++++++++++++++++++++++++++++++++",e);
        fprintf(super,"\n+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
++++++++++++++++++++++++");
                Daeff = DiffusCoeff(Top,Pop,dp,e,t);
                nconc = Molfrac(J,Top,Pop,Daeff,z1,yabulk,RDeep,z2,znext);
                vLtpb = Ltpb(e,fe,fi,Vt,ri,re,next);
                fprintf(power,"\n\te : %f\tdp : %f\tDaeff : %f cm2/s\tnconc : %f V\tvLtpb : %lf
Gm/m3",e,dp,Daeff,nconc,vLtpb/(1*pow(10,12)));
                e = e+0.1;
        }
        fprintf(super,"\n\n++++++++++++++++++++++++++ E n d  O f  Cal.
++++++++++++++++++++++++");
        fprintf(super,"\n+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++++
+++++++++++++++++");
```

```
	printf("\n\n\n\n\n\n++++++++++++++++++++++++++++++ E N D  O f  C a
l.+++++++++++++++++++++++++++++++++");
	getch();
	fclose(super);
	fclose(power);
}
float DiffusCoeff(float Top, float Pop,float dp,double e,float t)
{
/******* Variable Show That : recive value of Calculate *******/
	float	ea	= 0,			/* Collision diameter of A */
		eb	= 0,		/* Collision diameter of B */
		eab	= 0,		/* Collision diameter of binary A and B */
		Tn	= 0,
		Dd1	= 0,
		Dd2	= 0,
		Dab	= 0,		/* diffusion coefficient of A&B , (cm2/s) */
		Dik	= 0,		/* Knudsen diffusion coefficient, (cm2/s) */
		Daeff	= 0;		/* effective diffusion coefficient ,(cm2/s) */
/******* Variable Show That : Fix of System Binary Diffusion  *******/
	float	Tca	= 132.9,		/* Critical Temperature of A. ,(K) */
		Tcb	= 304.2,		/* Critical Temperature of B. ,(K) */
		k	= 1.38*pow(10.0,-16.0), /* Boltzmann Constant ,(ergs/K) */
		Treff	= 293.15,		/* Pressure reffernce for cal Dab, (atm) */
		Preff	= 1.0,		/* Temperature refference For cal. Da1 and Dab , (K) */
		Dabref	= 0.162,		/* diffusion coefficient of A&B at Treff=293
K,Preff=1atm , (cm2/s) */
		Ma	= 28.01;		/* Molecula wight of Hydrogen,(g/mol) */
/******* RUN CODE *******/
	ea = 0.77*Tca*k;
	eb = 0.77*Tcb*k;
	eab= pow((ea*eb),0.5);
	Tn = k*Top/eab;
	printf("\n\n Tn of eab at Top : %f K",Tn);
```

```
Dd2 = (1.06036/pow(Tn,0.15610)) + (0.193/exp(0.47635*Tn)) +(1.03587/exp(1.52996*Tn)) +
(1.76474/exp(3.89411*Tn)) ;
printf("\n\n Dd2 : %f egsd",Dd2);
Tn = k*Treff/eab;
printf("\n\n Tn of eab at Treff : %f K",Tn);
Dd1 = (1.06036/pow(Tn,0.15610)) + (0.193/exp(0.47635*Tn)) +(1.03587/exp(1.52996*Tn)) +
(1.76474/exp(3.89411*Tn)) ;
printf("\n\n Dd1 : %f egsd",Dd1);
Dab = Dabref*(Preff/Pop)*pow((Top/Treff),1.5)*(Dd1/Dd2);
printf("\n\n Dab : %f cm2/s",Dab);
Dik = 4850*dp*pow((Top/Ma),0.5);
printf("\n\n Dik : %f cm2/s",Dik);
Daeff = (e/t)*Dab;
printf("\n\n Daeff : %f cm2/s",Daeff);
//      getch();
/**********Show Data Result of Diffusion***************************/
printf("\n\n\n\nShow the result of Binary Diffusion ");
printf("\n\nDTeff : %f cm2/s",Daeff);
/**********Show Data Base Subport of Diffusion***************************/
fprintf(super,"\n\n***Data Base Subport***");
fprintf(super,"\nBlosmann Constand : %.18f ergs/K ",k);
fprintf(super,"\nAverage pore size              : %f (cm)",dp);
fprintf(super,"\nMolecula wight of Hydrogen             : %f (g/mol)",Ma);
fprintf(super,"\nCritical Temperature of A.     : %f (K)",Tca);
fprintf(super,"\nCritical Temperature of B.     : %f (K)",Tcb);
fprintf(super,"\ndiffusion coefficient of A&B  at Treff= %f (K), Preff= %f (atm) : %f
(cm2/s)",Treff,Preff,Dabref);
/**********Show Data Result of Diffusion***************************/
fprintf(super,"\n\n***Data of The System CO-CO2***");
fprintf(super,"\nKnudsen diffusion              : %f cm2/s",Dik);
fprintf(super,"\nCO-CO2 diffusion               : %f cm2/s",Dab);
fprintf(super,"\nPorosity (e/100)               : %f",e);
fprintf(super,"\nTortuosity dimensionless       : %f",t);
fprintf(super,"\n\nCO-CO2 Diffusion effective       : %f cm2/s",Daeff);
```

```
            return(Daeff);
}
float Molfrac(float J, float Top, float Pop, float Daeff, float z1, float yabulk, float RDeep, float z2,float
znext)
{
/******* Variable Show That : Operate Program  *******/
            float       i           = 0;

/******* Variable Show That : recive data of Calcuate  *******/
            float   ya = 0,                 /* mol. fraction of gas A */
                    yatpb     = 0,      /* mol. fraction of gas A at TPB. */
                    nconc     = 0,      /* concrntration overpotential */
                    F         = 96485.3,        /* Faraday Constant */
                    R1        = 82.057,         /* Gas constant. (cm3*atm/mol/K) */
                    R2        = 8.3143;         /* Gas constant. (J/mol/K) */
/******* Run Code *******/
            i=z1+znext;
            fprintf(super,"\n\nStart ya,bulk : %f at Z : %f",yabulk,z1);
            printf("Start ya,bulk : %f at Z : %f",yabulk,z1);
            while(i<=z2)
            {
                    ya = (J*R1*Top/(2*F*Daeff*Pop)*(z1-i)) + yabulk;
                    fprintf(super,"\nZ : %f cm.\tya : %f",i,ya);
                    printf("\nZ : %f cm.\tya : %f",i,ya);


                    i=i+znext;
            }
            yatpb = (J*R1*Top / (2*F*Daeff*Pop)*(z1-z2))+yabulk;
            nconc = (-1) * (R2*Top) / (2*F) * log(yatpb*(1-yabulk)/yabulk/(1-yatpb));
            fprintf(super,"\n\nZ : %f cm. \tya,TPB : %f",z2,yatpb);
            fprintf(super,"\n\nThe Concentration Overpotential : %f V. at Reaction Deep : %f
cm.",nconc,RDeep);
            fprintf(super,"\n\n\n\n************End of Calculate the concentration
overpotential******************");
```

```
        printf("\n\nZ : %f cm. \tya,TPB : %f",z2,yatpb);
        printf("\n\nThe Concentration Overpotential : %f V. at Reaction Deep : %f
cm.",nconc,RDeep);
        return(nconc);
}
double Ltpb(double e,double fe,double fi,double Vt,double  ri,double re,double next)
{
        double  M                       ,
                vLtpb                   ,
                Zie                     ,
                a                       ,
                OV      = 0.9           ,
                V1                      ,
                Zi                      ,
                Ze                      ,
                AL                      ,
                Ltpb                    ,
                f1                      ,
                f2                      ,
                r1                      ,
                r2                      ;
        double  temp                    ,
                temp1                   ,
                Answer                  ;

        int     num  = 0                ;

        double  Z = 6.0                 ,
                d = 0.9*(ri+re)     ;
/****************** CODE RUN ***********************/
        if(ri>re)
        {
                r1 = ri;
                r2 = re;
                f1 = fi;
```

```
                f2 = fe;
        }
        else
        {
                r1 = re;
                r2 = ri;
                f1 = fe;
                f2 = fi;
        }
        M = (f2/f1) * (pow(r1,3.0))/(pow(r2,3.0));
        printf("\n\n\tM : %lf",M);
//      getch();
        a = (1.0/(2.0*d)) * pow(((4.0*d*d*r1*r1) - pow((d*d* - r2*r2 - r1*r1),2.0)),0.5);
        printf("\n\ta : %lf",a);
//      getch();
        V1= (22.0/7.0) * pow((r1+r2-d),2.0)*(d*d + 2.0*d*r2 - 3.0*r2*r2 + 2.0*d*r1 + 6.0*r2*r1 -
3.0*r1*r1)/(12.0*d);
        printf("\n\tV1 : %.30lf m3",V1);
/*
        temp = (1.0-e)*Vt;
        printf("\n\ttemp : %.15lf \n",temp);
        getch();
        OV = 1.1;
        Answer = 0.0;
        while(temp>Answer)
        {
                OV   -= next;
                temp1 = ((4.0/3.0)*(22.0/7.0)*(r1*r1*r1 + M*r2*r2*r2)) - ((1-OV)*(1+M)*V1);
                Answer = ((1.0-e)*Vt*(1.0/temp1)*(4.0/3.0)*(22.0/7.0)*pow(r1,3.0)) + ((1.0-
e)*Vt*M*(1/temp1)*(4.0/3.0)*(22.0/7.0)*pow(r2,3.0)) + ((1.0-e)*Vt*(1.0+M)*(1/temp1)*(1-OV)*V1);
                printf("\n(1-e)Vt : %.12lf\tOV : %.7lf\tAnswer : %.15lf",temp,OV,Answer);
        }
        printf("\n\nFacsion Overlamp(OV) : %lf",OV);
        getch();
*/
```

```
            AL = ri/re;
            Zi = 3.0+((Z-3.0)*pow(AL,2.0)/(fe+fi*AL*AL));
            Ze = 3.0+((Z-3.0)/(fe+fi*AL*AL));
            Zie = fi+fe+Zi+Ze;
            printf("\n\n\tZi-e : %lf",Zie);
/*          getch();
            printf("\n\n Are You OK. about Value of Zi-e. (Yes=1,N0=0) : ");
            scanf("%d",&num);
            if(num==0)
            {
                        printf("\n\nEnter Your new Zi-e : ");
                        scanf("%lf",&Zie);
            }
            else
            {
                        printf("\n\nWe use Zi-e : %lf",Zie);
                        getch();
            }
*/
            vLtpb = (e*(1.0-e)*(1.0+M)*Zie*(2.0)*(22.0/7.0)*a) / (((4.0/3.0)*(22.0/7.0)*(r1*r1*r1 +
M*r2*r2*r2)) - ((1.0-OV)*(1.0+M)*V1));
            Ltpb = vLtpb*Vt;
/************ Show Result OUTPUT AT STDIO *******************************************/
            printf("\n\n\n\n************ Model of looking for vLtpb **************");
            printf("\n\nM  : %lf",M);
            printf("\na  : %lf m",a);
            printf("\nV1 : %lf m3",V1);
            printf("\nFacsion Overlamp(OV) : %lf",OV);
            printf("\nAL(ri/re) : %lf",AL);
            printf("\nZi  : %lf",Zi);
            printf("\nZe  : %lf",Ze);
            printf("\nZie : %lf",Zie);
            printf("\n\nvLtpb : %lf m/m3",vLtpb);
            printf("\nvLtpb : %lf Gm/m3",vLtpb/(1*pow(10,12)));
            printf("\n\nLtpb  : %lf m",Ltpb);
```

```
        printf("\n\nLtpb  : %lf km",Ltpb/(1*pow(10,3)));
/************ Show Result OUTPUT AT FILE ********************************************/
        fprintf(super,"\n\n\n\n************ Model of looking for vLtpb**************");
        fprintf(super,"\n\nM  : %lf",M);
        fprintf(super,"\na  : %lf m",a);
        fprintf(super,"\nV1 : %.20lf m3",V1);
        fprintf(super,"\nFacsion Overlamp(OV) : %lf",OV);
        fprintf(super,"\nAL(ri/re) : %lf",AL);
        fprintf(super,"\nri  : %.8lf m",ri);
        fprintf(super,"\nre  : %.8lf m",re);
        fprintf(super,"\nfi  : %lf m",fi);
        fprintf(super,"\nfe  : %lf m",fe);
        fprintf(super,"\nZi  : %lf",Zi);
        fprintf(super,"\nZe  : %lf",Ze);
        fprintf(super,"\nZie : %lf",Zie);
        fprintf(super,"\nTotal Volume : %.15lf m3",Vt);
        fprintf(super,"\n\nvLtpb : %lf m/m3",vLtpb);
        fprintf(super,"\nvLtpb : %lf Gm/m3",vLtpb/(1*pow(10,12)));
        fprintf(super,"\n\nLtpb  : %lf m",Ltpb);
        fprintf(super,"\n\nLtpb  : %lf km",Ltpb/(1*pow(10,3)));
        return(vLtpb);
}
```

ค-9 ตัวอย่างรหัสโปรแกรม Maple สำหรับแก้สมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ สำหรับระบบสารสองององค์ประกอบ

> $fx := (1 - 0.665475\cdot y(z))\cdot\frac{d^2}{dz^2}y(z) - 0.665475\cdot\left(\frac{d}{dz}y(z)\right)^2 = 0$

$$(1 - 0.665475y(z))\left(\frac{d^2}{dz^2}y(z)\right) - 0.665475\left(\frac{d}{dz}y(z)\right)^2 = 0$$

$dsolve(fx);$

$$y(z) = \frac{40000}{26619} - \frac{1}{26619}\sqrt{1600000000 + 53238_C1\ z + 53238_C2}, y(z) = \frac{40000}{26619} + \frac{1}{26619}\sqrt{1600000000 + 53238_C1\ z + 53238_C2}$$

$ic := D(y)(0.2) = -0.3433459, y(0.2) = 0.8;$

$$D(y)(0.2) = -0.3433459, y(0.2) = 0.8$$

$fc := dsolve(\{fx, ic\});$

$y(z) = \frac{40000}{26619} - 1/$

16239052369406729404723766391122083404725807440177678
0624347828061479096145575427715972570350559758472208013
27844389623056777651680222603953652700936672127204606
52347511922400737729232795498241075000

(

52387261473570481117992184220279834880227413260839306
51998850976602132489409699301321841939088751804136386
45751961411902103831320797769837181007318047079595179
12647668166606694829481662828341010215924879417112332
42885130465381087451818463997486426832939836284881106
67703302834224682159109103595916547459842662197257994
99556688981806142824766762956903623572290495618859106
61250639772860910

− 341955873602467822353867592535468807375540022958060
79123878100177106244304969548980492372379092748635711
23848441617596135472368756223789952204928987322174242
622201599595133621542055852351333396817664802424046045
99746156245098417176000167963704485206326882481607269
55705601457706836301466275428674378221665304646839928
80377414593361439817031123999085845431314933740636937
24093245749864304550

− 509676926441142601208073484916979191341304746313131
67095602522120034138254657624631690939063630175526803
57074392595243135466441807877874693343339389065694624
37647645203633665230787437485962519141139329644159207
76450118731368579346046846631861116267711149987586364
60449125193272962105445053143912285644460347346859445
4371033817338512819156029985048856490

$\left(\left(-82230901613621464782818805580870746352741\right.\right.$

$\left.\left.+\,92058708609956478436647336325173831763705\, z)^{2}\right)^{1/2}\right)^{1/2}$

$z := 0.395;$

0.395

slove(*fc*);

slove(*y*(0.395) = 0.7359652463)

ค-10 ตัวอย่างรหัสโปรแกรม Maple สำหรับแก้สมการสเตฟาน-แม็คเวลล์ สำหรับระบบสารสามองค์ประกอบ

>

$$fx := \left(\left(\frac{\left(1 - y3 - \left(y(z)\cdot \alpha 1\right)\right)}{Dab} + \frac{\left(y3 + \left(y(z).\alpha 2\right)\right)}{Dac} \right) \cdot \left(\frac{d^2}{dz^2} y(z) \right) \right) \Big/ \left(\left(\frac{\left(1 - y3 - y(z)\cdot \alpha 1\right)}{Dab} + \frac{\left(y3 + y(z).\alpha 2\right)}{Dac} \right)^2 \right) + \frac{\left(\frac{\alpha 1}{Dab} \cdot \left(\frac{d}{dz} y(z) \right)^2 \right)}{\left(\frac{\left(1 - y3 - y(z)\cdot \alpha 1\right)}{Dab} + \frac{\left(y3 + y(z).\alpha 2\right)}{Dac} \right)^2} - \frac{\left(\frac{\alpha 2}{Dac} \cdot \left(\frac{d}{dz} y(z) \right)^2 \right)}{\left(\frac{\left(1 - y3 - y(z)\cdot \alpha 1\right)}{Dab} + \frac{\left(y3 + y(z).\alpha 2\right)}{Dac} \right)^2} = 0;$$

$$\frac{\frac{d^2}{dz^2} y(z)}{\frac{1 - y3 - y(z)\,\alpha 1}{Dab} + \frac{y3 + y(z).\alpha 2}{Dac}} + \frac{\alpha 1 \left(\frac{d}{dz} y(z) \right)^2}{Dab \left(\frac{1 - y3 - y(z)\,\alpha 1}{Dab} + \frac{y3 + y(z).\alpha 2}{Dac} \right)^2} - \frac{\alpha 2 \left(\frac{d}{dz} y(z) \right)^2}{Dac \left(\frac{1 - y3 - y(z)\,\alpha 1}{Dab} + \frac{y3 + y(z).\alpha 2}{Dac} \right)^2} = 0$$

dsolve(*fx*);

$$\int^{y(z)} e^{\int \left(-\frac{-Dac\,\alpha 1 + \alpha 2\,Dab}{Dac - Dac\,y3 - Dac\,_b\,\alpha 1 + Dab\,y3 + Dab\,(_b.\alpha 2)} \right) d_b}\, d_b - _C1\, z - _C2 = 0$$

y3 := 0.1;

$$0.1$$

$\alpha 1 := 0.666667;$

$$0.666667$$

$\alpha 2 := 0.333333;$

$$0.333333$$

$Dab := 0.743701;$

$$0.743701$$

$Dac := 0.26523;$

$$0.26523$$

$fx;$

$$\frac{\frac{d^2}{dz^2} y(z)}{1.587195018 + 0.3603515465\, y(z)} - \frac{0.3603515463 \left(\frac{d}{dz} y(z)\right)^2}{(1.587195018 + 0.3603515465\, y(z))^2} = 0$$

$dsolve(fx);$

$$\frac{5}{2} (3174390036 + 720703093\, y(z))^{\frac{2}{3603515465}} - _C1\, z - _C2 = 0$$

$ic := D(y)(0.2) = -0.815972, y(0.2) = 0.7;$

$$D(y)(0.2) = -0.815972, y(0.2) = 0.7$$

$fc := dsolve(\{fx, ic\});$

$$y(z) = -\frac{3174390036}{720703093} + \frac{1}{720703093} RootOf\Big(114965068784375000_Z^{\frac{2}{3603515465}} + 10199653678882201\,1^{\frac{2}{3603515465}}\, 10^{\frac{3603515463}{3603515465}}\, z - 114965068786414936788822011^{\frac{2}{3603515465}}\, 10^{\frac{3603515463}{3603515465}}\Big)$$

$z := 0.395;$

$$0.395$$

$fc;$

$$y(0.395) = -\frac{3174390036}{720703093} + \frac{1}{720703093} RootOf\Big(114965068784375000_Z^{\frac{2}{3603515465}} - 1.149650688\,10^{16}\, 36788822011^{\frac{2}{3603515465}}\, 10^{\frac{3603515463}{3603515465}}\Big)$$

$$R1 := RootOf\Big(448303904752500000_Z^{\frac{2}{2943151443}} - 4.483039048\,10^{16}\, 19924617989^{\frac{2}{2943151443}}\, 10^{\frac{2943151441}{2943151443}}\Big);$$

$$RootOf\left(448303904752500000_Z^{\frac{2}{2943151443}} - 4.48303904810^{16}\ 19924617989^{\frac{2}{2943151443}}\ 10^{\frac{2943151441}{2943151443}}\right)$$

ค-11 ตัวอย่างรหัสโปรแกรม Maple สำหรับแก้สมการการแพร่ของฟิค

$$> \ fx := 1 = \frac{1}{N \cdot R \cdot T}\left(-Da \cdot P \cdot \frac{\partial}{\partial z} y(z)\right)$$

$$1 = -\frac{Da\ P\left(\frac{d}{dz}\ y(z)\right)}{N\ R\ T}$$

$$fx := \frac{\partial}{\partial z} fx;$$

$$0 = -\frac{Da\ P\left(\frac{d^2}{dz^2}\ y(z)\right)}{N\ R\ T}$$

$$ic := D(y)(z1) = -\left(\frac{J}{2\,F}\right) \cdot \left(\frac{RT}{PDa}\right), y(z1) = yb;$$

$$D(y)(z1) = -\frac{1}{2}\ \frac{J\ RT}{F\ PDa}, y(z1) = yb$$

$$f1 := dsolve(\{fx, ic\}, y(z));$$

$$y(z) = -\frac{1}{2}\ \frac{J\ RT\ z}{F\ PDa} + \frac{1}{2}\ \frac{2\ yb\ F\ PDa + J\ RT\ z1}{F\ PDa}$$

$$ic := D(y)(z1) = \beta, y(z1) = yb;$$

$$D(y)(z1) = \beta, y(z1) = yb$$

$$dsolve(\{fx, ic\}, y(z))$$

$$y(z) = \beta\ z + yb - \beta\ z1$$

ประวัติผู้เขียนวิทยานิพนธ์

นาย ชาญวิทย์ จันสถิรพานิช เกิดเมื่อวันที่ 2 พฤษภาคม พ.ศ. 2530 ที่อำเภอหาดใหญ่ จังหวัดสงขลา สำเร็จการศึกษาระดับอนุบาลศึกษาจากโรงเรียนอนุบาลสอนสมบูรณ์ สำเร็จการศึกษาระดับประถมศึกษาจากโรงเรียนบางนราวิทยา สำเร็จการศึกษาระดับมัธยมจากโรงเรียนนราธิวาส จังหวัดนราธิวาส และสำเร็จการศึกษาระดับอุดมศึกษาจากภาควิชาวิศวกรรมเคมี (รุ่นที่ 12) คณะวิศวกรรมศาสตร์ (รุ่นที่ 44) สถาบันเทคโนโลยีพระ-จอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง จังหวัดกรุงเทพมหานคร หลังจากสำเร็จการศึกษาในระดับอุดมศึกษา ได้ศึกษาต่อในระดับบัณฑิตศึกษา ที่ภาควิชาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ในปีการศึกษา 2552 ภาคต้น

บทความนำเสนอที่ประชุมวิชาการ

ชาญวิทย์ จันสถิรพานิช และ วรัญ แต้ไพสิฐพงษ์ “การศึกษาการถ่ายเทและการเคลื่อนทีมวลสารที่มีผลต่อประสิทธิภาพของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็ง” การประชุมวิชาการวิศวกรรมเคมีและเคมีประยุกต์แห่งประเทศไทยครั้งที่ 20, กรุงเทพมหานคร, ประเทศไทย, 22-23 พฤศจิกายน 2553, หน้า: 63-68.

Chansatirapanich, Ch.; and Taepaisitphongse, V. “The study of relationship between concentration overpotential and triple-phase-boundary length on the anode performance” Proceedings of E-NETT 2011, Phuket, Thailand, 3-5 May 2011, pp: 543-548.