

การผลิตแก๊สสังเคราะห์จากเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็ง
แบบนำโปรตอนสำหรับการผลิตเมทานอล

SYNTHESIS GAS PRODUCTION FROM A PROTON-CONDUCTING SOLID
OXIDE ELECTROLYSIS CELL FOR METHANOL PRODUCTION



วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี

คณะวิศวกรรมศาสตร์

สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

พ.ศ. 2559

KMITL-2016-EN-M-220-063

การผลิตแก๊สสังเคราะห์จากเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็ง
แบบนำโปรตอนสำหรับการผลิตเมทานอล

SYNTHESIS GAS PRODUCTION FROM A PROTON-CONDUCTING SOLID
OXIDE ELECTROLYSIS CELL FOR METHANOL PRODUCTION



วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต
สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี
คณะวิศวกรรมศาสตร์
สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง
พ.ศ. 2559

KMITL-2016-EN-M-220-063

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

SYNTHESIS GAS PRODUCTION FROM A PROTON-CONDUCTING SOLID
OXIDE ELECTROLYSIS CELL FOR METHANOL PRODUCTION



A THESIS SUBMITTED IN PARTIAL FULFILLMENT
OF THE REQUIREMENT FOR THE DEGREE OF
MASTER OF ENGINEERING IN CHEMICAL ENGINEERING
FACULTY OF ENGINEERING
KING MONGKUT'S INSTITUTE OF TECHNOLOGY LADKRABANG
2016

KMITL-2016-EN-M-220-063

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



COPYRIGHT 2016

FACULTY OF ENGINEERING

KING MONGKUT'S INSTITUTE OF TECHNOLOGY LADKRABANG

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

คณะวิศวกรรมศาสตร์
สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง
ใบรับรองวิทยานิพนธ์

หัวข้อวิทยานิพนธ์ : การผลิตแก๊สสังเคราะห์จากเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอน
สำหรับการผลิตเมทานอล

Thesis Title : Synthesis Gas Production from a Proton-Conducting Solid Oxide Electrolysis Cell for Methanol Production

นักศึกษา : นายลวิตร นามวงษ์

รหัสประจำตัว : 58601269

ปริญญา : วิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชา : วิศวกรรมเคมี

อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ : ผศ.ดร.ญาณิพร พ็ชรวรโชติ

หมายเลขวิทยานิพนธ์ : KMITL-2016-EN-M-220-063

คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์		ลายมือชื่อ
ผศ.ดร.พรสวรรค์	อัครแสงรัตน์	ผศ.ดร.พรสวรรค์
ดร.ธนาวรรณ	พิณรัตน์	ดร.ธนาวรรณ
ผศ.ดร.อมรชัย	อาภรณ์วิชานพ	ผศ.ดร.อมรชัย
ผศ.ดร.วลัยรัตน์	จันทร์อัมพร	ผศ.ดร.วลัยรัตน์
ผศ.ดร.ญาณิพร	พัชรวรโชติ	ผศ.ดร.ญาณิพร

วัน / เดือน / ปี ที่สอบ วันพฤหัสบดีที่ 7 กรกฎาคม พ.ศ. 2559 เวลา 09.00-11.00 น.
สถานที่สอบ ณ อาคาร A ชั้น 5 ห้องประชุม 3

สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง
KING MONGKUT'S INSTITUTE OF TECHNOLOGY LADKRABANG

คณะวิศวกรรมศาสตร์ รับรองแล้ว

(รองศาสตราจารย์ ดร. คมสัน มาลีสี)

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของลิขสิทธิ์ทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

วันที่ 7 กรกฎาคม พ.ศ. 2559

หัวข้อวิทยานิพนธ์	การผลิตแก๊สสังเคราะห์จากเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์ แข็งแบบนำโปรตอนสำหรับการผลิตเมทานอล
นักศึกษา	นายลวิตร นามวงษ์
รหัสประจำตัว	58601269
ปริญญา	วิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต
สาขาวิชา	วิศวกรรมเคมี
พ.ศ.	2559
อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์	ผศ.ดร.ญานีพร พ็ชรวรโชติ

บทคัดย่อ

เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนเป็นหนึ่งในเทคโนโลยีที่มีความหวังที่สุดซึ่งสามารถใช้คาร์บอนไดออกไซด์ในการผลิตแก๊สสังเคราะห์ ในงานวิจัยนี้ แบบจำลองไฟฟ้าเคมีถูกพัฒนาขึ้นเพื่อทำนายพฤติกรรมของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนและพิสูจน์สมมติฐานที่ว่า แก๊สสังเคราะห์ถูกผลิตผ่านปฏิกิริยาอวอเทอร์แก๊สซิฟท์แบบย้อนกลับ ผลการจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนที่ได้จากแบบจำลองที่พิจารณาศักย์ไฟฟ้าสูญเสียทั้งหมด (ได้แก่ ศักย์ไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากความต้านทานไฟฟ้า ศักย์ไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมี และศักย์ไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากความเข้มข้น) ถูกเปรียบเทียบกับข้อมูลการทดลองเพื่อประมาณค่าพารามิเตอร์ที่ไม่ทราบค่า แบบจำลองที่พัฒนาถูกใช้เพื่อศึกษาโครงสร้างและภาวะดำเนินงาน ซึ่งพบว่า เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนที่รองรับด้วยขั้วแคโทดเป็นโครงสร้างที่ดีที่สุด เนื่องจากต้องการศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ต่ำที่สุด เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนควรดำเนินงานที่อุณหภูมิสูงและความดันต่ำ และยังพบว่าอัตราส่วนเชิงโมลของไอน้ำต่อคาร์บอนไดออกไซด์ที่เหมาะสมมีค่าประมาณ 3.9 ที่อุณหภูมิและความดันคงที่ 650 องศาเซลเซียส และ 1 บรรยากาศ ตามลำดับ นอกจากนี้วิธีพื้นผิวตอบสนองถูกนำมาใช้เพื่อหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมสำหรับเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอน ซึ่งทำให้ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์น้อยที่สุดและอัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์มากที่สุด ซึ่งพบว่า เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนควรดำเนินงานที่อัตราการไหลของไอน้ำ 7.71 กิโลโมลต่อชั่วโมง อุณหภูมิ 650 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ ซึ่งทำให้ผลิตแก๊สสังเคราะห์ได้ 5.12 กิโลโมลต่อชั่วโมง

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

Thesis	Synthesis Gas Production from a Proton-Conducting Solid Oxide Electrolysis Cell for Methanol Production
Student	Mr. Lawit Namwong
Student ID.	58601269
Degree	Master of Engineering
Program	Chemical Engineering
Year	2016
Thesis Advisor	Asst. Prof. Dr. Yaneeporn Patcharaworachot

ABSTRACT

A proton-conducting solid oxide electrolysis cell (SOEC-H⁺) is one of the most promising technologies that can utilize carbon dioxide to produce syngas. In this work, a detailed electrochemical model is developed to predict the behavior of SOEC-H⁺ and prove the assumption that the syngas is produced through reversible water gas-shift (RWGS) reaction. The simulation results obtained from the model, which takes into account all cell voltage losses (i.e., ohmic, activation, and concentration losses), are validated with the experimental data to evaluate the unknown parameters. The developed model is employed to examine the structural and operational parameters. It is found that the cathode-supported SOEC-H⁺ is the best configuration because it requires the lowest cell potential. SOEC-H⁺ is found to operate favorably at high temperatures and low pressures. Furthermore, the simulation result reveals that the optimal steam to carbon dioxide molar ratio for syngas production, which has the potential for methanol synthesis, is approximately 3.9 at constant temperature and pressure of 650 °C and 1 atm, respectively. In addition, the SOEC-H⁺ is optimized using a response surface methodology, which is used to determine optimal operating conditions for minimizing cell potential and maximizing carbon dioxide flow rate. It is found that the SOEC-H⁺ should be operated at a steam flow rate of 7.71 kmol/h, 650 °C, and at 1 atm. At this condition, syngas is produced 5.12 kmol/h.

กิตติกรรมประกาศ

ขอขอบพระคุณ ผศ.ดร.ญาณิพร พัทรวรโชติ อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ที่ให้คำปรึกษาทางด้านวิชาการและคำแนะนำในการแก้ไขปัญหาต่างๆ ตลอดจนให้การสนับสนุนในทุกๆ ด้านจนทำให้วิทยานิพนธ์ฉบับนี้สำเร็จลุล่วงเป็นอย่างดี

ขอขอบพระคุณ ผศ.ดร.อมรชัย อารณวิธานพ อาจารย์ประจำภาควิชาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ที่ให้ความอนุเคราะห์โปรแกรม Aspen Plus ในการทำวิทยานิพนธ์ฉบับนี้

สุดท้ายนี้ กราบขอบพระคุณ บิดา มารดา อาจารย์ และผู้มีพระคุณทุกท่านที่กล่าวนามและไม่ได้กล่าวนามที่อบรมสั่งสอน ให้การสนับสนุน และเป็นกำลังใจตลอดมา หากวิทยานิพนธ์ฉบับนี้มีข้อผิดพลาดประการใด ข้าพเจ้าขอน้อมรับและขอภัยไว้ ณ ที่นี้ คุณความดีที่จะเกิดจากงานนี้ ขอมอบแต่ผู้มีพระคุณทุกท่าน

ลวิตร นามวงษ์



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สารบัญ

	หน้า
บทคัดย่อภาษาไทย.....	I
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ.....	II
กิตติกรรมประกาศ.....	III
สารบัญ.....	IV
สารบัญตาราง.....	VI
สารบัญรูป.....	VII
สัญลักษณ์.....	VIII
บทที่ 1 บทนำ.....	1
1.1 ที่มาและความสำคัญ.....	1
1.2 วัตถุประสงค์.....	3
1.3 ขอบเขตของงานวิจัย.....	3
1.4 ประโยชน์ที่ได้รับ.....	4
บทที่ 2 ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง.....	5
2.1 เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็ง.....	5
2.2 แบบจำลองไฟฟ้าเคมี.....	5
2.2.1 สมมติฐาน.....	5
2.2.2 ศักย์ไฟฟ้าผันกลับได้.....	6
2.2.3 ศักย์ไฟฟ้าสูญเสียผันกลับไม่ได้.....	7
2.2.4 กราฟสมรรถนะของเซลล์อิเล็กโทรไลซิส.....	11
2.3 การตุลมวลและพลังงาน.....	12
2.4 การออกแบบการทดลอง.....	15
2.4.1 แนวทางการออกแบบการทดลอง.....	15
2.4.2 ประเภทของการออกแบบการทดลอง.....	17
2.4.3 วิธีการพื้นผิวตอบสนอง.....	18
2.4.4 การหาค่าที่เหมาะสม.....	21
2.5 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง.....	23
2.5.1 แบบจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำออกไซด์ไอออน.....	23
2.5.2 แบบจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอน.....	25

เอกสารนี้เป็นเอกสารลิขสิทธิ์ของมหาวิทยาลัยเทคโนโลยีพระจอมเกล้าธนบุรี (25 คำ) ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2.5.3 การออกแบบการทดลอง	25
บทที่ 3 วิธีการดำเนินงาน	27
3.1 การจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอน	27
3.1.1 การผลิตไฮโดรเจน	27
3.1.2 การผลิตแก๊สสังเคราะห์	28
3.1.3 การเปรียบเทียบผลการจำลองกระบวนการกับข้อมูลการทดลอง	29
3.2 การศึกษาผลกระทบของปัจจัยต่างๆ	33
3.3 การหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมด้วยวิธีพื้นผิวตอบสนอง	34
บทที่ 4 ผลและการอภิปรายผลการจำลองกระบวนการ	37
4.1 ผลการเปรียบเทียบผลการจำลองกระบวนการกับข้อมูลการทดลอง	37
4.2 บทบาทของโครงสร้างรองรับ	39
4.3 ผลของภาวะดำเนินงานของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอน	41
4.3.1 ผลของอัตราส่วนไอน้ำต่อคาร์บอนไดออกไซด์	41
4.3.2 ผลของอุณหภูมิดำเนินงาน	43
4.3.3 ผลของความดันดำเนินงาน	44
4.4 แบบจำลองถดถอยและภาวะดำเนินงานที่เหมาะสม	46
4.4.1 แบบจำลองถดถอย	46
4.4.2 กราฟปัจจัยหลักและกราฟอันตรกิริยา	48
4.4.3 ภาวะดำเนินงานที่เหมาะสม	51
4.4.4 ผลการตรวจสอบแบบจำลองถดถอยลดรูป	52
บทที่ 5 สรุปผลการดำเนินงานและข้อเสนอแนะ	53
5.1 สรุปผลการดำเนินงาน	53
5.2 ข้อเสนอแนะ	54
เอกสารอ้างอิง	55
ภาคผนวก	60
ภาคผนวก ก รหัสคำสั่งในกล่องการคำนวณของโปรแกรม Aspen Plus	61
ภาคผนวก ข ผลการจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอน	65
ประวัติผู้เขียน	76

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สารบัญตาราง

ตารางที่	หน้า
2.1 ค่าคงที่สำหรับการคำนวณสัมประสิทธิ์การแพร่ประสิทธิผล	10
4.1 สัมประสิทธิ์เลขชี้กำลังและพลังงานก่อกัมมันต์ของความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าแลกเปลี่ยน	37
4.2 ตัวแปรขาเข้าของแบบจำลองและภาวะดำเนินงาน	39
4.3 ปัจจัยและระดับของการทดลองแบบส่วนผสมกลาง	46
4.4 การทดลองแบบส่วนผสมกลางและผลการจำลองกระบวนการ	46
4.5 การวิเคราะห์ความแปรปรวนสำหรับแบบจำลองถดถอยของสองผลตอบแทน.....	47
4.6 แบบจำลองถดถอยของสองผลตอบแทน	48
ข.1 ผลการเปรียบเทียบกับข้อมูลการทดลองสำหรับการผลิตไฮโดรเจน.....	66
ข.2 ผลการเปรียบเทียบกับข้อมูลการทดลองสำหรับการผลิตแก๊สสังเคราะห์.....	67
ข.3 ผลของโครงสร้างเซลล์ต่อศักย์ไฟฟ้าของเซลล์	68
ข.4 ผลของอัตราส่วนไอน้ำต่อคาร์บอนไดออกไซด์ต่อศักย์ไฟฟ้าของเซลล์และปริมาณสัมพัทธ์.....	68
ข.5 ผลของอัตราการไหลของไอน้ำและคาร์บอนไดออกไซด์ต่อปริมาณสัมพัทธ์	69
ข.6 ผลของอุณหภูมิต่อศักย์ไฟฟ้าของเซลล์	73
ข.7 ผลของอุณหภูมิต่ออัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์.....	73
ข.8 ผลของความดันต่อศักย์ไฟฟ้าของเซลล์.....	74
ข.9 ผลของความดันต่ออัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์.....	74
ข.10 ผลการตรวจสอบแบบจำลองถดถอยด้วยโปรแกรม Aspen Plus	75

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สารบัญรูป

รูปที่	หน้า
1.1 เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็ง ก) แบบนำออกไซด์ไอออน ข) แบบนำโปรตอน	2
2.1 กราฟความสัมพันธ์ระหว่างความหนาแน่นกระแสไฟฟ้ากับศักย์ไฟฟ้า	11
2.2 รูปแบบการทดลองของวิธีการพื้นผิวตอบสนองที่เป็นไปได้	16
2.3 กราฟพื้นผิวตอบสนองระหว่างอัตราการไหลและอุณหภูมิดำเนินงานต่อศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ ...	19
2.4 พื้นผิวตอบสนองและคอนทัวร์ของพื้นผิวที่มีค่าสูงที่สุด	20
2.5 พื้นผิวตอบสนองและคอนทัวร์ของพื้นผิวที่มีค่าต่ำที่สุด	20
2.6 พื้นผิวตอบสนองและคอนทัวร์ของพื้นผิวที่มีลักษณะเป็นอานม้า	20
2.7 ฟังก์ชันความพึงพอใจของแต่ละผลตอบสนอง	23
3.1 เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนสำหรับการผลิตไฮโดรเจน	27
3.2 เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนสำหรับการผลิตแก๊สสังเคราะห์	29
3.3 ขั้นตอนการเปรียบเทียบแบบจำลองกับข้อมูลการทดลอง	31
3.4 ขั้นตอนการหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมด้วยวิธีพื้นผิวตอบสนอง	36
4.1 ผลการเปรียบเทียบผลการจำลองกระบวนการกับข้อมูลการทดลอง	38
4.2 ผลของโครงสร้างรองรับต่อศักย์ไฟฟ้าของเซลล์	40
4.3 ผลของอัตราส่วนไอน้ำต่อคาร์บอนไดออกไซด์ต่อศักย์ไฟฟ้าของเซลล์และปริมาณสัมพันธ์	41
4.4 ผลของอัตราการไหลเข้าของไอน้ำและคาร์บอนไดออกไซด์ต่อปริมาณสัมพันธ์	42
4.5 ผลของอุณหภูมิดำเนินงานต่อศักย์ไฟฟ้าของเซลล์	43
4.6 ผลของอุณหภูมิดำเนินงานต่ออัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์	44
4.7 ผลของความดันดำเนินงานต่อศักย์ไฟฟ้าของเซลล์	45
4.8 ผลของความดันดำเนินงานต่ออัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์	45
4.9 กราฟปัจจัยหลักของศักย์ไฟฟ้าของเซลล์	49
4.10 กราฟอันตรกิริยาของศักย์ไฟฟ้าของเซลล์	50
4.11 กราฟปัจจัยหลักของอัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์	50
4.12 กราฟอันตรกิริยาของอัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์	51
4.13 กราฟภาวะดำเนินงานที่เหมาะสม	52

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สัญลักษณ์

สัญลักษณ์	คำจำกัดความ	หน่วย
A	พื้นที่ผิวของเซลล์	m^2
d_i	ฟังก์ชันความพึงพอใจของแต่ละผลตอบสนอง	-
D_i	ฟังก์ชันความพึงพอใจรวม	-
D_i^{eff}	สัมประสิทธิ์การแพร่ประสิทธิผลขององค์ประกอบ i	m^2/s
$D_{i,j}$	สัมประสิทธิ์การแพร่ระหว่างสารสององค์ประกอบ i และ j	m^2/s
$D_{i,K}$	สัมประสิทธิ์การแพร่ในรูพรุนขององค์ประกอบ i	m^2/s
E	ศักย์ไฟฟ้าผันกลับได้	V
E^0	ศักย์ไฟฟ้ามาตรฐาน	V
E_{anode}	พลังงานก่อกัมมันต์ของความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าแลกเปลี่ยนที่ขั้วแอโนด	kJ/mol
$E_{cathode}$	พลังงานก่อกัมมันต์ของความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าแลกเปลี่ยนที่ขั้วแคโทด	kJ/mol
F	ค่าคงที่ของ Faraday	C/mol
G	พลังงานอิสระของ Gibb	J/mol
G^0	พลังงานอิสระของ Gibb มาตรฐาน	J/mol
j	ความหนาแน่นกระแสไฟฟ้า	A/m^2
$j_{0,anode}$	ความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าแลกเปลี่ยนที่ขั้วแอโนด	A/m^2
$j_{0,cathode}$	ความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าแลกเปลี่ยนที่ขั้วแคโทด	A/m^2
k_B	ค่าคงที่ของ Boltzmann	J/K
k_{anode}	สัมประสิทธิ์เลขชี้กำลังของความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าแลกเปลี่ยนที่ขั้วแอโนด	$\Omega^{-1} m^{-2}$
$k_{cathode}$	สัมประสิทธิ์เลขชี้กำลังของความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าแลกเปลี่ยนที่ขั้วแคโทด	$\Omega^{-1} m^{-2}$
M_i	มวลโมเลกุลขององค์ประกอบ i	g/mol
N_{cell}	จำนวนเซลล์	cells
n_e	จำนวนอิเล็กตรอนในปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมี	electrons
\dot{n}_i	อัตราการไหลเชิงโมลขององค์ประกอบ i	$kmol/h$
P	ความดันดำเนินงาน	atm
P_i	ความดันย่อยขององค์ประกอบ i	atm
P_i^{TPB}	ความดันย่อยที่รอยต่อระหว่างขั้วอิเล็กโทรดกับอิเล็กโทรไลต์ขององค์ประกอบ i	atm
\dot{Q}_{OVP}	ความร้อนจากศักย์ไฟฟ้าสูญเสียผันกลับไม่ได้	kJ/h
\dot{Q}_{ex}	ความร้อนภายนอก	kJ/h
R	ค่าคงที่สากลของแก๊ส	$J/mol \cdot K$ และ $L \cdot atm/mol \cdot K$

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สัญลักษณ์	คำจำกัดความ	หน่วย
r	รัศมีรูพรุนเฉลี่ย	m
S	ค่าปริมาณสัมพันธ์	-
T	อุณหภูมิดำเนินงานสมบูรณ์	K
U_s	อัตราการใช้น้ำ	-
V	ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์	V

สัญลักษณ์กรีก	คำจำกัดความ	หน่วย
Ω_D	ผลรวมการชนกันเนื่องจากการแพร่	-
ξ	ความพรุนของขั้วอิเล็กโทรด	-
$\eta_{act,anode}$	ศักย์ไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมีที่ขั้วแอโนด	V
$\eta_{act,cathode}$	ศักย์ไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมีที่ขั้วแคโทด	V
$\eta_{conc,anode}$	ศักย์ไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากความเข้มข้นที่ขั้วแอโนด	V
$\eta_{conc,cathode}$	ศักย์ไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากความเข้มข้นที่ขั้วแคโทด	V
η_{ohm}	ศักย์ไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากความต้านทานไฟฟ้า	V
$\rho_{electrode}$	ค่าการนำไฟฟ้าที่ขั้วอิเล็กโทรด	$\Omega^{-1} m^{-1}$
$\rho_{electrolyte}$	ค่าการนำไฟฟ้าที่อิเล็กโทรไลต์	$\Omega^{-1} m^{-1}$
σ_i	ความยาวคุณลักษณะขององค์ประกอบ i	Å
$\sigma_{i,j}$	ความยาวคุณลักษณะเฉลี่ยขององค์ประกอบ i และ j	Å
τ_{anode}	ความหนาของขั้วแอโนด	m
$\tau_{cathode}$	ความหนาของขั้วแคโทด	m
$\tau_{electrolyte}$	ความหนาของอิเล็กโทรไลต์	m
v_i	สัมประสิทธิ์ปริมาณสัมพันธ์ขององค์ประกอบ i	-
ϕ	ความคดเคี้ยวของขั้วอิเล็กโทรด	-

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

บทที่ 1

บทนำ

1.1 ที่มาและความสำคัญ

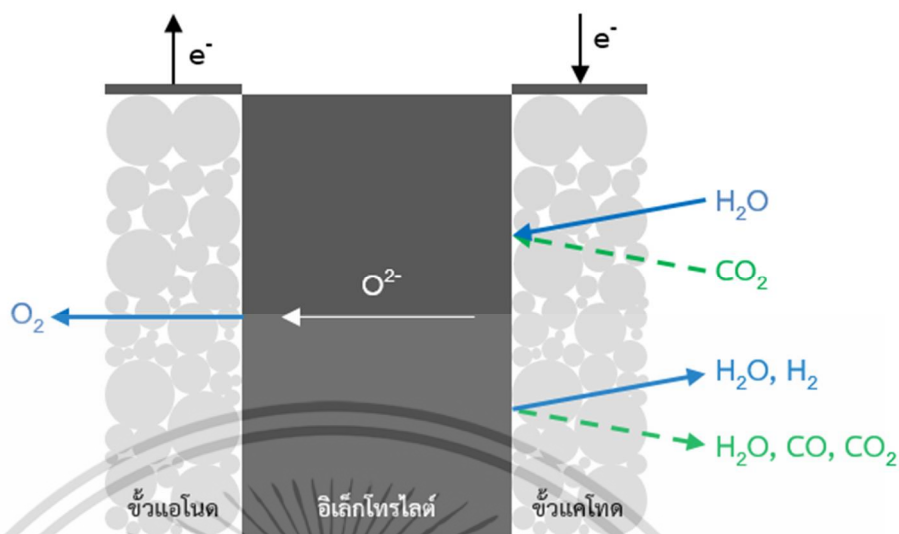
การปลดปล่อยแก๊สเรือนกระจกถือได้ว่าเป็นปัญหาที่คนทั่วโลกให้ความสำคัญ ซึ่งสามารถเกิดได้จากทั้งภาคครัวเรือน ภาคการขนส่ง และภาคอุตสาหกรรม เพื่อจำกัดปริมาณคาร์บอนไดออกไซด์ซึ่งเป็นสาเหตุหลักของภาวะเรือนกระจก จึงนิยมเปลี่ยนคาร์บอนไดออกไซด์เป็นสารเคมีชนิดอื่นที่มีมูลค่าเพิ่ม [1] ตัวอย่างเช่น ไดมethylคาร์บอนเอท โอเลฟิน กรดฟอร์มิก และแก๊สสังเคราะห์ [2-5]

ในอุตสาหกรรมปัจจุบัน แก๊สสังเคราะห์ถือได้ว่าเป็นสารมัธยันตร์ (Intermediate) ที่สำคัญซึ่งสามารถเกิดปฏิกิริยาต่อเป็นเชื้อเพลิงไฮโดรคาร์บอนหลากหลายชนิด เช่น มีเทน เมทานอล เอทานอล และดีเซลสังเคราะห์ เนื่องจากแก๊สสังเคราะห์เป็นแก๊สผสมระหว่างไฮโดรเจนและคาร์บอนมอนอกไซด์ ดังนั้นอัตราส่วนของผลิตภัณฑ์ที่ต่างกันจึงเหมาะสำหรับการใช้งานที่ต่างกัน ซึ่งสามารถแสดงด้วยค่าปริมาณสัมพันธ์ (Stoichiometric number) ปัจจุบัน การผลิตเมทานอลจากแก๊สสังเคราะห์ได้รับความสนใจเป็นอย่างมากเนื่องจากเมทานอลเป็นหนึ่งในโมเลกุลที่ถูกบริโภคมากที่สุดในโลก ด้วยความต้องการสูงถึง 61.4 ล้านตัน [6] นอกจากนี้ เมทานอลยังเป็นเชื้อเพลิงที่มีความน่าสนใจทางด้านเศรษฐศาสตร์ มีความเป็นพิษต่ำ อีกทั้งง่ายและปลอดภัยต่อการเก็บอีกด้วย [7] ในการผลิตเมทานอล ค่าปริมาณสัมพันธ์ควรมีค่าเท่ากับหรือมากกว่า 2 เล็กน้อย [8]

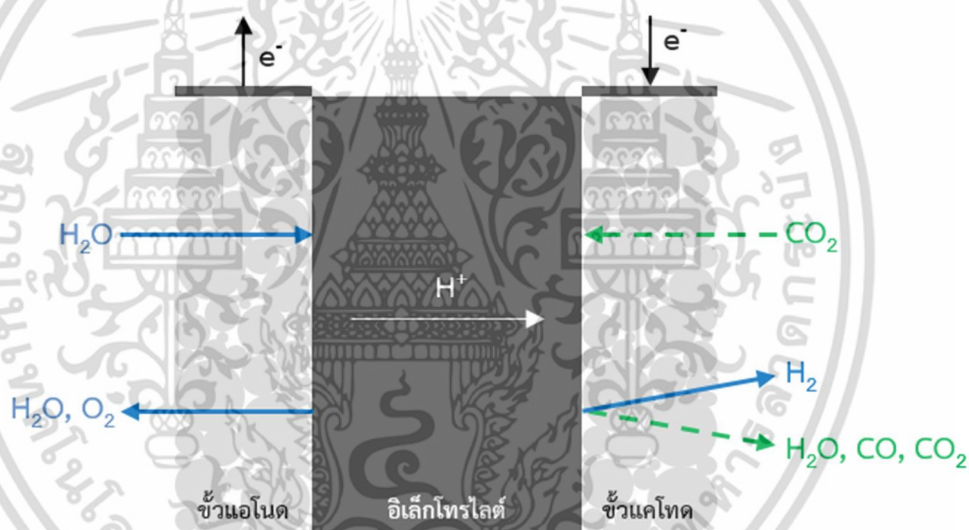
นอกจากกระบวนการผลิตแก๊สสังเคราะห์ที่ใช้ในปัจจุบัน ตัวอย่างเช่น กระบวนการรีฟอร์มมิ่ง กระบวนการออกซิเดชันบางส่วน และกระบวนการโอโตเทอร์มัลรีฟอร์มมิ่ง เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็ง (Solid oxide electrolysis cell, SOEC) ก็เป็นหนึ่งในกระบวนการผลิตแก๊สสังเคราะห์ เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งคืออุปกรณ์ที่เปลี่ยนรูปพลังงานไฟฟ้าเป็นพลังงานเคมี ซึ่งไม่เพียงแต่ผลิตไฮโดรเจนจากการแยกไอน้ำเท่านั้น แต่สามารถผลิตแก๊สสังเคราะห์ได้ เมื่อป้อนไอน้ำร่วมกับคาร์บอนไดออกไซด์ ปัจจุบันมีความสนใจในการผลิตแก๊สสังเคราะห์โดยใช้เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งเพิ่มมากขึ้น ทั้งนี้เนื่องจากไม่จำเป็นต้องใช้เชื้อเพลิงถ่านหิน ซึ่งเป็นทั้งการลดและนำคาร์บอนไดออกไซด์กลับมาใช้ใหม่ไปในตัว นอกจากนี้ หากพลังงานไฟฟ้าที่ใช้มาจากพลังงานทดแทน (Renewable energy) หรือพลังงานนิวเคลียร์ เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งจะกลายเป็นอุปกรณ์ที่เป็นมิตรต่อสิ่งแวดล้อมในการผลิตแก๊สสังเคราะห์ โดยปกติ เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งสามารถแบ่งตามชนิดของอิเล็กโทรไลต์ได้ 2 ประเภท ได้แก่ เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำออกไซด์ไอออน (Oxide-ion-conducting solid oxide electrolysis cell, SOEC-O²⁻) และแบบนำโปรตอน (Proton-conducting solid oxide electrolysis cell, SOEC-H⁺) ซึ่งมีลักษณะดังรูปที่ 1.1

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ก)



ข)



รูปที่ 1.1 เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็ง ก) แบบนำออกไซด์ไอออน ข) แบบนำโปรตอน

แม้ว่าเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำออกไซด์ไอออนจะถูกใช้ในอุตสาหกรรมอย่างแพร่หลายเนื่องจากน้ำขาเข้าจะลดความดันย่อยขององค์ประกอบอื่นที่ซ้ายแคโทด ส่งผลให้ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ลดลง แต่อย่างไรก็ตาม ผลิตรถยนต์ที่ได้จากเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนจะไม่ถูกเจือจางด้วยไอน้ำขาเข้าเหมือนกับเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำออกไซด์ไอออน [9] กล่าวคือ ผลิตรถยนต์ที่ได้จะเพิ่มมากขึ้น นอกจากนี้เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนนำไอออนได้ดีกว่าที่อุณหภูมิปานกลาง (300 - 700 องศาเซลเซียส) [9-10] ทำให้สามารถเลือกใช้วัสดุได้หลากหลายมากขึ้น

ปัจจุบัน งานวิจัยส่วนมากให้ความสำคัญกับการปรับปรุงสมรรถนะของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนโดยการพัฒนาวัสดุที่ใช้ทำขั้วอิเล็กโทรดและอิเล็กโทรไลต์ แต่การศึกษาเอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

เกี่ยวกับแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ซึ่งเป็นเครื่องมือที่จำเป็นสำหรับการออกแบบ การวิเคราะห์ และการหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสม ยังมีจำนวนน้อย นอกจากนี้ สำหรับการผลิตแก๊สสังเคราะห์ แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ส่วนใหญ่เป็นแบบจำลองของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำออกไซด์ไอออน [11-15] แต่ไม่มีงานวิจัยใดศึกษาจำลองของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนสำหรับการผลิตแก๊สสังเคราะห์ ดังนั้นในงานวิจัยนี้ จึงสนใจศึกษาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนเพื่อหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมสำหรับการผลิตแก๊สสังเคราะห์ที่มีศักยภาพในการผลิตเมทานอล

อย่างไรก็ตาม ในงานวิจัยนี้ วัตถุประสงค์สำหรับการหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมมี 2 ประการ ได้แก่ การใช้พลังงานไฟฟ้าให้น้อยที่สุดและการใช้ปริมาณคาร์บอนไดออกไซด์ให้มากที่สุด วิธีพื้นผิวตอบสนองซึ่งเป็นวิธีการออกแบบการทดลองทางสถิติถูกใช้ในการออกแบบการทดลองและสร้างแบบจำลองสำหรับการหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสม เนื่องจากการออกแบบการทดลองให้ผลลัพธ์เป็นแบบจำลองและภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมซึ่งง่ายต่อการนำไปใช้ อย่างไรก็ตาม เพียงแค่ข้อมูลผลการทดลองของงานวิจัยที่ผ่านมาไม่เพียงพอต่อการศึกษาดังวิธีนี้ ดังนั้นจึงต้องสร้างแบบจำลองของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนจากโปรแกรม Aspen Plus ก่อน จากนั้นจึงนำแบบจำลองที่ได้ใช้ในการศึกษาผลของปัจจัยต่างๆ ด้วยการออกแบบการทดลองต่อไป นอกจากนี้จากงานวิจัยที่ผ่านมา พบว่า ไม่มีงานวิจัยใดที่ศึกษาแบบจำลองของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนจากโปรแกรม Aspen Plus ร่วมกับการออกแบบการทดลอง

1.2 วัตถุประสงค์

พัฒนาแบบจำลองไฟฟ้าเคมีสำหรับเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนสำหรับการผลิตแก๊สสังเคราะห์ที่มีศักยภาพในการผลิตเมทานอล และหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมซึ่งทำให้ใช้พลังงานไฟฟ้าน้อยที่สุด ในขณะที่ลดปริมาณคาร์บอนไดออกไซด์ให้ได้มากที่สุด

1.3 ขอบเขตของงานวิจัย

1.3.1 พัฒนาแบบจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนสำหรับการผลิตไฮโดรเจนและแก๊สสังเคราะห์ด้วยโปรแกรม Aspen Plus และเปรียบเทียบผลการจำลองกระบวนการกับข้อมูลการทดลองเพื่อตรวจสอบความถูกต้องของแบบจำลอง

1.3.2 ศึกษาอิทธิพลของภาวะดำเนินงานต่างๆ ที่มีต่อสมรรถนะของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอน โดยมีรายละเอียดดังนี้

- 1) โครงสร้างรองรับ: รองรับด้วยขั้วแอโนด ขั้วแคโทด และอิเล็กโทรไลต์
- 2) อัตราส่วนไอน้ำต่อคาร์บอนไดออกไซด์: 1 2 3 และ 4
- 3) อุณหภูมิดำเนินงาน: 550 600 และ 650 องศาเซลเซียส
- 4) ความดันดำเนินงาน: 1 5 และ 10 บรรยากาศ

1.3.3 สร้างแบบจำลองถดถอยและหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมซึ่งทำให้เซลล์อิเล็กโทรไลซิสใช้พลังงานไฟฟ้าน้อยที่สุด ในขณะที่สามารถลดปริมาณคาร์บอนไดออกไซด์ให้ได้มากที่สุดโดยใช้วิธีพื้นผิวตอบสนองด้วยโปรแกรม Minitab

1.4 ประโยชน์ของงานวิจัย

1.4.1 สามารถออกแบบและจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนได้

1.4.2 ทราบภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมซึ่งทำให้เซลล์อิเล็กโทรไลซิสใช้พลังงานไฟฟ้าน้อยที่สุด ในขณะที่สามารถลดปริมาณคาร์บอนไดออกไซด์ให้ได้มากที่สุดได้



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

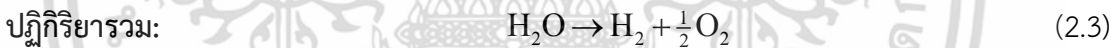
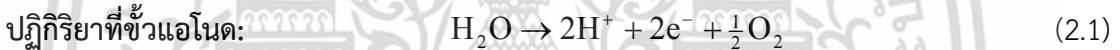
บทที่ 2

ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

2.1 เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็ง

เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งเป็นกระบวนการย้อนกลับของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดออกไซด์แข็ง ซึ่งเป็นเทคโนโลยีสำหรับการผลิตไฮโดรเจนผ่านปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมี (Electrochemical reaction) ของไอน้ำที่อุณหภูมิดำเนินงานสูง [16] อย่างไรก็ตาม สำหรับเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนถูกพัฒนาเพื่อให้สามารถดำเนินงานในอุณหภูมิที่ปานกลางได้ ทำให้ไม่จำเป็นต้องใช้วัสดุที่ต้องทนอุณหภูมิสูงได้ ช่วยลดค่าใช้จ่ายในการสร้างเซลล์อิเล็กโทรไลซิส อีกทั้งยังสามารถนำไปประยุกต์ใช้งานได้หลากหลายมากขึ้น

โครงสร้างของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนแสดงดังรูปที่ 1.1x ไอน้ำถูกป้อนเข้าที่ขั้วแอโนดซึ่งจะถูกออกซิไดซ์ (Oxidized) กลายเป็นออกซิเจน โปรตอน และอิเล็กตรอน โดยโปรตอนจะเคลื่อนที่ผ่านอิเล็กโทรไลต์จนถึงขั้วแคโทดซึ่งจะรวมตัวกันเป็นไฮโดรเจน ดังแสดงในสมการที่ (2.1) - (2.3)



อย่างไรก็ตาม หากคาร์บอนไดออกไซด์ถูกป้อนเข้าที่ขั้วแคโทด คาร์บอนไดออกไซด์จะทำปฏิกิริยา วอเตอร์แก๊สชิฟต์แบบย้อนกลับ (Reverse water gas shift) กับแก๊สไฮโดรเจนที่ผลิตได้กลายเป็นแก๊สสังเคราะห์

2.2 แบบจำลองไฟฟ้าเคมี

2.2.1 สมมติฐาน

งานวิจัยนี้เลือกใช้โปรแกรม Aspen Plus ในการสร้างแบบจำลอง ซึ่งอาศัยหลักการทางอุณหพลศาสตร์ในการคำนวณสมดุลเคมีแทนการคำนวณจลนพลศาสตร์ของปฏิกิริยา ทั้งนี้เนื่องจากค่าคงที่จลนพลศาสตร์สำหรับวัสดุที่ใช้ไม่เคยถูกศึกษาในงานวิจัยที่ผ่านมา สมมติฐานของแบบจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนมีดังนี้

- 1) แบบจำลองคำนวณแบบไร้มิติ (Zero dimension)
- 2) แบบจำลองพิจารณาที่สภาวะคงตัว (Steady state)
- 3) แก๊สมีพฤติกรรมแบบแก๊สอุดมคติ (Ideal gas)
- 4) ความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าแลกเปลี่ยนขึ้นกับชนิดของขั้วอิเล็กโทรดเท่านั้น

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

- 5) อัตราการเกิดปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมีอธิบายด้วยกฎของ Faraday ดังสมการที่ (2.4) ซึ่งประสิทธิภาพกระแสไฟฟ้าสมมติให้มีค่า 100 เปอร์เซ็นต์ [17]

$$r_{\text{electrochemical}} = \frac{j}{n_e F} \quad (2.4)$$

เมื่อ j = ความหนาแน่นกระแสไฟฟ้า

n_e = จำนวนอิเล็กตรอนในปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมี ซึ่งในที่นี้มีจำนวน 2 อิเล็กตรอน

F = ค่าคงที่ของ Faraday

- 6) คาร์บอนมอนอกไซด์ผลิตจากปฏิกิริยาเวอเตอร์แก๊สชิฟท์แบบย้อนกลับดังสมการที่ (2.5) เท่านั้น ไม่เกี่ยวข้องกับปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมี



2.2.2 ศักย์ไฟฟ้าผันกลับได้ (Reversible potential)

งานที่น้อยที่สุดที่ต้องใช้ในปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมี (W_{\min}) คือการเปลี่ยนแปลงพลังงานอิสระของ Gibb ของปฏิกิริยา (ΔG) ซึ่งสัมพันธ์กับศักย์ไฟฟ้าผันกลับได้ (E) ดังสมการที่ (2.6)

$$W_{\min} = -\Delta G = n_e F E \quad (2.6)$$

โดยปกติ การเปลี่ยนแปลงพลังงานอิสระของ Gibb สัมพันธ์กับแอกทिवิตี แต่สำหรับแก๊สอุดมคติ สัมประสิทธิ์ฟูกาซีเป็น 1 และฟูกาซีที่ภาวะมาตรฐานมีค่าเป็น 1 บรรยากาศ [18] ดังนั้นแอกทिवิตีจะสามารถเขียนในรูปของความดันย่อยได้ ซึ่งแสดงดังสมการที่ (2.7)

$$\Delta G = \Delta G^0 + RT \ln \left(\frac{\prod P_{\text{products}}^{\nu_i}}{\prod P_{\text{reactants}}^{\nu_i}} \right) \quad (2.7)$$

เมื่อ ΔG^0 = การเปลี่ยนแปลงพลังงานอิสระของ Gibb มาตรฐาน

R = ค่าคงที่สากลของแก๊ส

T = อุณหภูมิดำเนินงานสัมบูรณ์

P = ความดันย่อยขององค์ประกอบ i

ν_i = สัมประสิทธิ์ปริมาณสัมพันธ์ขององค์ประกอบ i

เมื่อแทนสมการที่ (2.7) ลงในสมการที่ (2.6) สามารถจัดรูปได้ดังสมการที่ (2.8) ซึ่งแสดงความสัมพันธ์ของศักย์ไฟฟ้าผันกลับได้ที่ขึ้นกับความดันย่อยของสาร

$$E = -\frac{\Delta G^0}{2F} - \frac{RT}{2F} \ln \left(\frac{\prod P_{\text{products}}^{\nu_i}}{\prod P_{\text{reactants}}^{\nu_i}} \right)$$

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

$$E = E^0 + \frac{RT}{2F} \ln \left(\frac{\prod P_{\text{reactants}}^{\nu_i}}{\prod P_{\text{products}}^{\nu_i}} \right) \quad (2.8)$$

เมื่อ E^0 = ศักย์ไฟฟ้ามาตรฐาน

จากสมมติฐานที่กล่าวว่า ปฏิกิริยาอวอเตอร์แก๊สซิฟท์แบบย้อนกลับไม่เกี่ยวข้องกับปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมี ดังนั้น ศักย์ไฟฟ้าผันกลับไม่ได้จึงพิจารณาเฉพาะปฏิกิริยาในสมการที่ (2.3) เท่านั้น จะเห็นได้ว่า สารตั้งต้นประกอบด้วยไอน้ำ และผลิตภัณฑ์ประกอบด้วยไฮโดรเจนและออกซิเจน ดังนั้นสมการที่ (2.8) สามารถจัดรูปใหม่ได้เป็นสมการที่ (2.9) เรียกว่าสมการของ Nernst

$$E = E^0 + \frac{RT}{2F} \ln \left(\frac{P_{\text{H}_2} P_{\text{O}_2}^{1/2}}{P_{\text{H}_2\text{O}}} \right) \quad (2.9)$$

สมการของ Nernst แสดงศักย์ไฟฟ้าที่ต่ำที่สุดซึ่งใช้ในการแยกน้ำที่องค์ประกอบและอุณหภูมิหนึ่งๆ ซึ่งศักย์ไฟฟ้ามาตรฐานแสดงดังสมการที่ (2.10)

$$E^0 = 1.253 - 0.00024516T \quad (2.10)$$

อย่างไรก็ตาม ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ต้องมากกว่าศักย์ไฟฟ้าผันกลับได้ เนื่องจากเกิดศักย์ไฟฟ้าสูญเสียผันกลับไม่ได้ขึ้น

2.2.3 ศักย์ไฟฟ้าสูญเสียผันกลับไม่ได้ (Irreversible overpotentials)

ศักย์ไฟฟ้าสูญเสียผันกลับไม่ได้ประกอบด้วย ศักย์ไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากความเข้มข้น (Concentration overpotentials, η_{conc}) ศักย์ไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมี (Activation overpotentials, η_{act}) และศักย์ไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากความต้านทานไฟฟ้า (Ohmic overpotential, η_{ohm}) ดังนั้น ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์สามารถคำนวณจากสมการที่ (2.11)

$$V = E + \eta_{\text{conc, anode}} + \eta_{\text{conc, cathode}} + \eta_{\text{act, anode}} + \eta_{\text{act, cathode}} + \eta_{\text{ohm}} \quad (2.11)$$

ความต้านทานการไหลของแก๊สจากพื้นผิวภายนอกขั้วอิเล็กโทรดถึงรอยต่อระหว่างขั้วอิเล็กโทรดกับอิเล็กโทรไลต์ (Triple phase boundary, TPB) ส่งผลให้เกิดศักย์ไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากความเข้มข้น ซึ่งสามารถคำนวณได้จากความแตกต่างของสมการที่ (2.9) ระหว่างพื้นผิวภายนอกขั้วอิเล็กโทรดและรอยต่อระหว่างขั้วอิเล็กโทรดกับอิเล็กโทรไลต์ สมการที่ (2.12) - (2.13) แสดงศักย์ไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากความเข้มข้นที่ขั้วแอโนดและขั้วแคโทด ตามลำดับ

$$\eta_{\text{conc, anode}} = \frac{RT}{2F} \ln \left[\left(\frac{P_{\text{H}_2\text{O}}}{P_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{TPB}}} \right) \left(\frac{P_{\text{O}_2}^{\text{TPB}}}{P_{\text{O}_2}} \right)^{1/2} \right] \quad (2.12)$$

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

$$\eta_{\text{conc, cathode}} = \frac{RT}{2F} \ln \left(\frac{P_{\text{H}_2}^{\text{TPB}}}{P_{\text{H}_2}} \right) \quad (2.13)$$

การหาค่าความดันย่อยที่รอยต่อระหว่างขั้วอิเล็กโทรดกับอิเล็กโทรไลต์เกี่ยวข้องกับการแพร่ของสาร ดังนั้นแบบจำลองการแพร่จึงจำเป็นสำหรับการคำนวณ โดยทั่วไป แบบจำลองการแพร่ที่นิยมใช้ได้แก่ 1) แบบจำลองของ Fick 2) แบบจำลองของ Stefan-Maxwell และ 3) แบบจำลองดัสตีแก๊ส (Dusty gas model) แต่อย่างไรก็ตาม งานวิจัยส่วนใหญ่นิยมใช้แบบจำลองของ Fick ซึ่งกำหนดให้ฟลักซ์เชิงโมล (Molar flux) เป็นสัดส่วนโดยตรงกับเกรเดียนต์ของความเข้มข้นต่อองค์ประกอบของสาร [19] ดังสมการที่ (2.14) - (2.16) เนื่องจากเป็นแบบจำลองที่ไม่ซับซ้อน อีกทั้งยังอธิบายปรากฏการณ์การขนส่งของแก๊สได้อย่างมีประสิทธิภาพ

$$P_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{TPB}} = P_{\text{H}_2\text{O}} - \frac{RT\tau_{\text{anode}}}{2FD_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{eff}}} j \quad (2.14)$$

$$P_{\text{O}_2}^{\text{TPB}} = P_{\text{O}_2} + \frac{RT\tau_{\text{anode}}}{4FD_{\text{O}_2}^{\text{eff}}} j \quad (2.15)$$

$$P_{\text{H}_2}^{\text{TPB}} = P - (P - P_{\text{H}_2}) \exp \left(-\frac{RT\tau_{\text{cathode}}}{2FD_{\text{H}_2}^{\text{eff}}} j \right) \quad (2.16)$$

เมื่อ τ_{anode} = ความหนาของขั้วแอโนด

τ_{cathode} = ความหนาของขั้วแคโทด

D_i^{eff} = สัมประสิทธิ์การแพร่ประสิทธิผล (Effective diffusion coefficient) ขององค์ประกอบ i

P = ความดันดำเนินงาน

สัมประสิทธิ์การแพร่ประสิทธิผลสามารถคำนวณผ่านสมการของ Bosanquet ดังสมการที่ (2.17)

$$\frac{1}{D_i^{\text{eff}}} = \phi \left(\frac{1}{D_{i,j}} + \frac{1}{D_{i,K}} \right) \quad (2.17)$$

เมื่อ ϕ = ความคดเคี้ยว (Tortuosity) ของขั้วอิเล็กโทรด

ξ = ความพรุน (Porosity) ของขั้วอิเล็กโทรด

$D_{i,j}$ = สัมประสิทธิ์การแพร่ระหว่างสารสององค์ประกอบ (Binary diffusion coefficient)

$D_{i,K}$ = สัมประสิทธิ์การแพร่ในรูพรุน (Knudsen diffusion coefficient)

จากงานวิจัยของ Xie [12] ความคดเคี้ยวสามารถคำนวณได้จากสมการที่ (2.18)

$$\phi = \left(\frac{3 - \xi}{2} \right)^{1/2} \quad (2.18)$$

สมการที่ (2.19) แสดงสัมประสิทธิ์การแพร่ระหว่างสารสององค์ประกอบบนพื้นฐานแก๊สอุดมคติ [20]

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

$$D_{i,j} = \frac{0.00266T^{3/2}}{PM_{i,j}^{1/2}\sigma_{i,j}^2\Omega_D} \quad (2.18)$$

เมื่อ $M_{i,j}$ นิยามตามสมการที่ (2.19)

$\sigma_{i,j}$ = ความยาวคุณลักษณะเฉลี่ย (Mean characteristic length) ขององค์ประกอบ i และ j

Ω_D = ผลรวมการชนกันเนื่องจากการแพร่ (Diffusion collision integral)

ความยาวคุณลักษณะเฉลี่ยและผลรวมการชนกันเนื่องจากการแพร่สามารถคำนวณได้จากสมการที่ (2.20) - (2.22) ตามลำดับ

$$M_{i,j} = 2 \left(\frac{1}{M_i} + \frac{1}{M_j} \right)^{-1} \quad (2.19)$$

$$\sigma_{i,j} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2} \quad (2.20)$$

$$\Omega_D = \frac{1.06036}{\Gamma^{0.15610}} + \frac{0.19300}{\exp(0.47635\Gamma)} + \frac{1.03587}{\exp(1.52996\Gamma)} + \frac{1.76474}{\exp(3.89411\Gamma)} \quad (2.21)$$

$$\Gamma = \frac{k_B T}{(\varepsilon_i \varepsilon_j)^{1/2}} \quad (2.22)$$

เมื่อ M_i = มวลโมเลกุลขององค์ประกอบ i

σ_i = ความยาวคุณลักษณะขององค์ประกอบ i

k_B = ค่าคงที่ของ Boltzmann

ค่าของ σ_i และ ε_i/k_B สรุปในตารางที่ 2.1 และสุดท้าย สัมประสิทธิ์การแพร่ในรูปพหุนามจากทฤษฎีจลนศาสตร์ของแก๊ส [19] ดังสมการที่ (2.23) เมื่อ r คือรัศมีพหุนามเฉลี่ย

$$D_{i,K} = \frac{2}{3} \left(\frac{8RT}{\pi M_i} \right)^{1/2} r \quad (2.23)$$

ศักย์ไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมีสัมพันธ์กับจลนศาสตร์ของปฏิกิริยาสามารถคำนวณผ่านสมการของ Butler-Volmer ดังสมการที่ (2.24) แต่อย่างไรก็ตาม สมการนี้ยากต่อการคำนวณ จึงถูกจัดรูปใหม่ในรูปของไฮเพอร์โบลิกไซน์ (Hyperbolic sine) เมื่อกำหนดให้ $\alpha = 0.5$ และ $n_e = 2$ [21] จะได้ดังสมการที่ (2.25)

$$j = j_{0,\text{electrode}} \left[\exp\left(\frac{\alpha n_e F}{RT} \eta_{\text{act,electrode}}\right) - \exp\left(-\frac{(1-\alpha) n_e F}{RT} \eta_{\text{act,electrode}}\right) \right] \quad (2.24)$$

$$\eta_{\text{act,electrode}} = \frac{RT}{F} \sinh^{-1}\left(\frac{j}{2j_{0,\text{electrode}}}\right) \quad (2.25)$$

เมื่อ $j_{0,\text{electrode}}$ = ความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าแลกเปลี่ยนที่ขั้วอิเล็กโทรด

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 2.1 ค่าคงที่สำหรับการคำนวณสัมประสิทธิ์การแพร่ประสิทธิผล [18]

	H ₂ O	H ₂	O ₂	CO	CO ₂
σ_i (Å)	2.641	2.827	3.467	3.690	3.941
ϵ_i/k_B (K)	809.1	59.7	106.7	91.7	195.2

สมการที่ (2.25) สามารถจัดในรูปลอการิทึมฐานธรรมชาติ (Natural logarithm) ได้ ซึ่งแสดงดังสมการที่ (2.26) - (2.27)

$$\eta_{\text{act, anode}} = \frac{RT}{F} \ln \left(\frac{j}{2j_{0, \text{anode}}} + \sqrt{\left(\frac{j}{2j_{0, \text{anode}}} \right)^2 + 1} \right) \quad (2.26)$$

$$\eta_{\text{act, cathode}} = \frac{RT}{F} \ln \left(\frac{j}{2j_{0, \text{cathode}}} + \sqrt{\left(\frac{j}{2j_{0, \text{cathode}}} \right)^2 + 1} \right) \quad (2.27)$$

โดยปกติ สมการเอกซ์โพเนนเชียลของ Arrhenius [22] ถูกใช้สำหรับการอธิบายความสัมพันธ์ระหว่างความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าแลกเปลี่ยนกับอุณหภูมิดังแสดงในสมการที่ (2.28) - (2.29)

$$j_{0, \text{anode}} = \frac{RT}{2F} k_{\text{anode}} \exp\left(-\frac{E_{\text{anode}}}{RT}\right) \quad (2.28)$$

$$j_{0, \text{cathode}} = \frac{RT}{2F} k_{\text{cathode}} \exp\left(-\frac{E_{\text{cathode}}}{RT}\right) \quad (2.29)$$

เมื่อ k_{anode} = สัมประสิทธิ์เลขชี้กำลังของความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าแลกเปลี่ยนที่ขั้วแอโนด

k_{cathode} = สัมประสิทธิ์เลขชี้กำลังของความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าแลกเปลี่ยนที่ขั้วแคโทด

E_{anode} = พลังงานก่อกัมมันต์ของความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าแลกเปลี่ยนที่ขั้วแอโนด

E_{cathode} = พลังงานก่อกัมมันต์ของความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าแลกเปลี่ยนที่ขั้วแคโทด

พารามิเตอร์เหล่านี้ไม่ทราบค่าแต่สามารถหาค่าจากการทดลอง ความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าแลกเปลี่ยนสำหรับการผลิตไฮโดรเจนและแก๊สสังเคราะห์ไม่ควรมีค่าต่างกันเนื่องจากสมมติฐานซึ่งกำหนดให้ปฏิกิริยาอวอเทอร์แก๊สซิฟิแคชันแบบย้อนกลับไม่เกี่ยวข้องกับปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมี

ความต้านทานไฟฟ้าผ่านขั้วอิเล็กโทรดและความต้านทานไอออนผ่านอิเล็กโทรไลต์ส่งผลให้เกิดศักย์ไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากความต้านทานไฟฟ้า ซึ่งสามารถคำนวณผ่านกฎของ Ohm ดังสมการที่ (2.30) - (2.31) โดยปกติ การนำไฟฟ้าที่ขั้วอิเล็กโทรดมีค่ามากเมื่อเทียบกับการนำไอออนที่อิเล็กโทรไลต์ ดังนั้นพจน์การนำไฟฟ้าที่ขั้วอิเล็กโทรดในสมการที่ (2.31) จึงถูกละทิ้ง

$$\eta_{\text{ohm}} = j \times R_{\text{ohm}} \quad (2.30)$$

$$R_{\text{ohm}} = \frac{\tau_{\text{electrode}}}{\rho_{\text{electrode}}} + \frac{\tau_{\text{electrolyte}}}{\rho_{\text{electrolyte}}} \approx \frac{\tau_{\text{electrolyte}}}{\rho_{\text{electrolyte}}} \quad (2.31)$$

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

เมื่อ $\rho_{\text{electrode}}$ = ค่าการนำไฟฟ้าที่ขั้วอิเล็กโทรด
 $\rho_{\text{electrolyte}}$ = ค่าการนำไฟฟ้าที่อิเล็กโทรไลต์

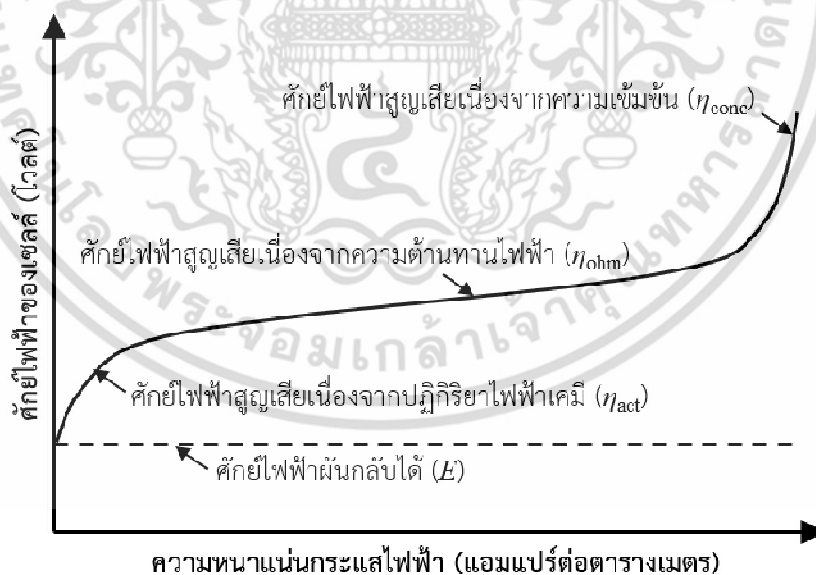
2.2.4 กราฟสมรรถนะของเซลล์อิเล็กโทรไลซิส

สมรรถนะของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสศึกษาได้จากกราฟความสัมพันธ์ระหว่างความหนาแน่นกระแสไฟฟ้า (Current density) กับศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ (Cell potential) ดังรูปที่ 2.1 เส้นประแสดงศักย์ไฟฟ้าผันกลับได้ ซึ่งเป็นศักย์ไฟฟ้าที่ต่ำที่สุดที่ต้องใช้ในปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมี ส่วนเส้นทึบแสดงศักย์ไฟฟ้าจริง

ความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าสามารถแสดงถึงอัตราการใช้อิน้ำ (Steam utilization factor, U_s) ได้ดังสมการที่ (2.32) กล่าวคือ เมื่อป้อนกระแสไฟฟ้าเพิ่มขึ้น อัตราการใช้อิน้ำจะเพิ่มขึ้นเป็นเชิงเส้นเทียบกับความหนาแน่นกระแสไฟฟ้า อิน้ำที่สายขาออกจะเหลือน้อยลง

$$U_s = \frac{jAN_{\text{cell}}}{2F\dot{n}_{\text{H}_2\text{O},\text{in}}} \tag{2.32}$$

เมื่อ A = พื้นที่ผิวของเซลล์
 N_{cell} = จำนวนเซลล์
 \dot{n}_i = อัตราการไหลเชิงโมลขององค์ประกอบ i



รูปที่ 2.1 กราฟความสัมพันธ์ระหว่างความหนาแน่นกระแสไฟฟ้ากับศักย์ไฟฟ้า (ดัดแปลงจาก [23])

จากรูปที่ 2.1 จะเห็นได้ว่า เมื่อป้อนกระแสไฟฟ้าเพิ่มขึ้นจะทำให้เซลล์ต้องการศักย์ไฟฟ้าเพิ่มขึ้นเช่นกัน ซึ่งการเพิ่มขึ้นของศักย์ไฟฟ้าสามารถแบ่งออกเป็น 3 ส่วนหลัก คือ ช่วงแรกปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมียังเกิดน้อย ขึ้นกำหนดอัตรา (Rate limiting step) จึงพิจารณาจากอัตราการเกิดปฏิกิริยา เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่นิยมนำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ไฟฟ้าเคมี (Rate reaction limit) ทำให้ศักย์ไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมีส่งผลกระทบต่อในช่วงนี้มากที่สุด ช่วงถัดมาเกิดขึ้นเมื่อป้อนกระแสไฟฟ้ามากขึ้น ซึ่งเซลล์อิเล็กโทรไลซิสสูญเสียศักย์ไฟฟ้าส่วนใหญ่ไปกับการเคลื่อนที่ของไอออนภายในอิเล็กโทรไลต์ ดังนั้นศักย์ไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากความต้านทานไฟฟ้าจึงส่งผลกระทบต่อในช่วงนี้มากที่สุด และช่วงสุดท้าย ปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมีเกิดขึ้นมากจนทำให้ความเข้มข้นของไอน้ำเหลืออยู่น้อยมาก ขึ้นกำหนดอัตราจึงพิจารณาจากอัตราการแพร่ของสาร (Mass transfer limit) ดังนั้นศักย์ไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากความเข้มข้นจะส่งผลกระทบต่อในช่วงนี้มากที่สุด

2.3 การดุลโมลและพลังงาน (Mole and energy balances)

ในที่นี้ จะพิจารณาการดุลโมลและพลังงานที่เกี่ยวข้องกับปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมีเป็นหลัก จากสมการดุลโมลรูปทั่วไป [24] ดังสมการที่ (2.33)

$$\frac{dn_j}{dt} = \dot{n}_{j,\text{in}} - \dot{n}_{j,\text{out}} + \int r_j dA \quad (2.33)$$

เมื่อ n_j = จำนวนโมลขององค์ประกอบ j จากสมมติฐาน แบบจำลองคำนวณแบบปริมาตร หรืออาจกล่าวได้ว่า อัตราการเกิดปฏิกิริยาไม่ขึ้นกับพื้นที่ของเซลล์อิเล็กโทรไลซิส พจน์อินทิเกรตจึงสามารถถอดออกมาด้านนอกได้ นอกจากนี้ แบบจำลองพิจารณาที่ภาวะคงตัว พจน์ด้านซ้ายมือจึงสามารถละทิ้งได้ ดังนั้นจะสามารถจัดรูปสมการที่ (2.33) ใหม่ได้ดังสมการที่ (2.34)

$$\dot{n}_{j,\text{in}} - \dot{n}_{j,\text{out}} + r_{\text{electrochemical}} AN_{\text{cell}} = 0 \quad (2.34)$$

เมื่อพิจารณาองค์ประกอบ j เป็นไอน้ำ จะได้

$$\dot{n}_{\text{H}_2\text{O},\text{in}} - \dot{n}_{\text{H}_2\text{O},\text{out}} = -r_{\text{electrochemical}} AN_{\text{cell}} \quad (2.35)$$

แทนค่า $r_{\text{electrochemical}}$ จากสมการที่ (2.4) ลงในสมการที่ (2.35) ทั้งนี้จะสังเกตได้ว่า $r_{\text{electrochemical}}$ ในสมการที่ (2.4) แสดงอัตราการเกิดของไฮโดรเจน ดังนั้นอัตราการใช้ของไอน้ำจึงมีเครื่องหมายตรงข้าม

$$\dot{n}_{\text{H}_2\text{O},\text{in}} - \dot{n}_{\text{H}_2\text{O},\text{out}} = \frac{jAN_{\text{cell}}}{2F} \quad (2.36)$$

แทนค่าอัตราการไหลของไอน้ำขาออกด้วยพจน์ของค่าการผันแปลงทางเคมี (Conversion, X) จะได้

$$\begin{aligned} \dot{n}_{\text{H}_2\text{O},\text{in}} - \dot{n}_{\text{H}_2\text{O},\text{in}}(1 - X) &= \frac{jAN_{\text{cell}}}{2F} \\ X &= \frac{jAN_{\text{cell}}}{2F\dot{n}_{\text{H}_2\text{O},\text{in}}} \end{aligned} \quad (2.37)$$

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

จากสมการที่ (2.32) และสมการที่ (2.37) จะเห็นได้ว่า ค่าการผันแปลงทางเคมีสามารถแทนได้ด้วยอัตราการใช้ไอน้ำ ซึ่งจะถูกใช้สำหรับการตั้งค่าในโปรแกรม Aspen Plus ต่อไป

ในมุมมองด้านพลังงาน จากสมการดุลพลังงานรูปทั่วไป [24] ดังสมการที่ (2.38)

$$\frac{dE_{\text{sys}}}{dt} = \dot{Q} - \dot{W} + \sum_{i=1}^n \dot{n}_i E_i \Big|_{\text{in}} - \sum_{i=1}^n \dot{n}_i E_i \Big|_{\text{out}} \quad (2.38)$$

เมื่อ E_{sys} = พลังงานสะสมในระบบ

Q = ความร้อนถ่ายเทเข้าระบบ

W = งานที่กระทำโดยระบบ

E_{in} = พลังงานขาเข้า

E_{out} = พลังงานขาออก

โดยปกติ งานประกอบด้วยงานจากการไหล (Flow work, W_f) และงานจากการหมุนของเพลลา (Shaft work, W_s) ดังสมการที่ (2.39)

$$\dot{W} = \dot{W}_f + \dot{W}_s = \sum_{i=1}^n \dot{n}_i P \tilde{V}_i \Big|_{\text{out}} - \sum_{i=1}^n \dot{n}_i P \tilde{V}_i \Big|_{\text{in}} + \dot{W}_s \quad (2.39)$$

แต่ในที่นี้ ไม่มีงานจากการหมุนของเพลลา ดังนั้นสมการที่ (2.39) จึงสามารถลดรูปได้เป็น

$$\dot{W} = \sum_{i=1}^n \dot{n}_i P \tilde{V}_i \Big|_{\text{out}} - \sum_{i=1}^n \dot{n}_i P \tilde{V}_i \Big|_{\text{in}} \quad (2.40)$$

พลังงาน (E) ประกอบด้วยพลังงานภายใน (Internal energy, U) พลังงานจลน์ (Kinetic energy, E_k) และพลังงานศักย์ (Potential energy, E_p) ดังสมการที่ (2.41)

$$E = U + E_k + E_p \quad (2.41)$$

อย่างไรก็ตาม ผลของพลังงานจลน์และพลังงานศักย์มีผลน้อยเมื่อเทียบกับพลังงานภายใน จึงสามารถประมาณพลังงานเป็นพลังงานภายในได้ ดังสมการที่ (2.42)

$$E \approx U \quad (2.42)$$

แทนค่างานจากสมการที่ (2.40) ลงในสมการ (2.38) จะได้

$$\frac{dE_{\text{sys}}}{dt} = \dot{Q} + \dot{n}_{\text{in}} (U_{\text{in}} + P_{\text{in}} \hat{V}_{\text{in}}) - \dot{n}_{\text{out}} (U_{\text{out}} + P_{\text{out}} \hat{V}_{\text{out}}) \quad (2.43)$$

จากสมมติฐาน แบบจำลองพิจารณาที่ภาวะคงตัว พจน์ด้านซ้ายมือจึงสามารถละทิ้งได้ ดังนั้นจะสามารถจัดรูปสมการที่ (2.43) ใหม่ได้ดังสมการที่ (2.44)

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

$$\begin{aligned}\dot{Q} + \dot{n}_{in}(U_{in} + P_{in}\hat{V}_{in}) - \dot{n}_{out}(U_{out} + P_{out}\hat{V}_{out}) &= 0 \\ \dot{Q} + \dot{n}_{in}H_{in} - \dot{n}_{out}H_{out} &= 0 \\ \dot{Q} &= \dot{n}_{out}H_{out} - \dot{n}_{in}H_{in}\end{aligned}\quad (2.44)$$

ผลการจำลองกระบวนการด้วยโปรแกรม Aspen Plus สามารถคำนวณพจน์ด้านขวามือซึ่งแสดงถึงความร้อนของปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมีได้ แต่อย่างไรก็ตาม พจน์ความร้อนจะต้องถูกระบุเพื่อที่จะดุลพลังงาน ซึ่งต้องพิจารณาจากตลอดทั้งเซลล์ โดยมีรายละเอียดดังนี้

- 1) ความร้อนของการแยกไฮโดรเจนออกจากไอน้ำและออกซิเจน - ไฮโดรเจนที่ถูกแยกออกจากไอน้ำและออกซิเจนผ่านอิเล็กโทรไลต์จะดูดความร้อนเล็กน้อย สามารถคำนวณได้จากโปรแกรม Aspen Plus
- 2) ความร้อนจากปฏิกิริยาอวอเตอร์แก๊สซิฟท์แบบย้อนกลับ - ปฏิกิริยาอวอเตอร์แก๊สซิฟท์แบบย้อนกลับเป็นปฏิกิริยาดูดความร้อน ซึ่งมีความร้อนของปฏิกิริยาที่ภาวะมาตรฐาน (ΔH_{rxn}^0) 41.2 กิโลจูลต่อโมล [25] อย่างไรก็ตาม ความร้อนของปฏิกิริยาสามารถคำนวณได้จากโปรแกรม Aspen Plus
- 3) ความร้อนจากศักย์ไฟฟ้าสูญเสียผันกลับไม่ได้ (\dot{Q}_{OVP}) - ศักย์ไฟฟ้าสูญเสียผันกลับไม่ได้ถือได้ว่าเป็นหนึ่งในความต้านทานทางไฟฟ้า ซึ่งสามารถเปลี่ยนรูปเป็นพลังงานความร้อนได้ดังสมการที่ (2.45)

$$\dot{Q}_{OVP} = 2F\dot{n}_{H_2, out}(\eta_{conc, anode} + \eta_{conc, cathode} + \eta_{act, anode} + \eta_{act, cathode} + \eta_{ohm}) \quad (2.45)$$

- 4) ความร้อนภายนอก (\dot{Q}_{ex}) - เมื่อพิจารณาความร้อนที่กล่าวข้างต้นทั้งหมดอาจแบ่งกรณีที่สามารถเกิดขึ้นได้ 3 กรณี คือ กรณีที่ความร้อนมากกว่าความร้อนที่ใช้ในปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมี ($\dot{Q} > \Delta iH$) ซึ่งจะทำให้อุณหภูมิของเซลล์อิเล็กโทรไลต์สูงขึ้น เรียกการดำเนินงานนี้ว่า การดำเนินงานแบบคายความร้อน (Exothermic operation) ในกรณีที่ความร้อนเท่ากับความร้อนที่ใช้ในปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมี ($\dot{Q} = \Delta iH$) เรียกการดำเนินงานนี้ว่า การดำเนินงานแบบสมดุลความร้อน (Thermo-neutral operation) ในทางปฏิบัติการดำเนินงานแบบสมดุลความร้อนจะยากต่อการควบคุมเนื่องจากการเปลี่ยนแปลงของความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าเพียงเล็กน้อยสามารถเปลี่ยนรูปแบบของการดำเนินงานได้ ดังนั้นจึงควรดำเนินงานแบบดูดความร้อน (Endothermic operation) แทน ซึ่งเป็นกรณีที่ความร้อนน้อยกว่าความร้อนที่ใช้ในปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมี ($\dot{Q} < \Delta iH$) อุณหภูมิของเซลล์อิเล็กโทรไลต์จะต่ำลง อย่างไรก็ตาม เพื่อให้ความร้อนเพียงพอต่อความร้อนที่ใช้ในปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมี จึงต้องป้อนความร้อนจากภายนอกเข้าเซลล์อิเล็กโทรไลต์โดยคำนวณจากสมการที่ (2.46) ทั้งนี้อาจมาจากความร้อนเหลือทิ้งจากกระบวนการอื่น [17]

$$\dot{Q}_{ex} = \Delta iH - \dot{Q} \quad (2.46)$$

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2.4 การออกแบบการทดลอง (Design of experiment)

การออกแบบการทดลอง หมายถึง กระบวนการการวางแผนการทดลองเพื่อที่จะรวบรวมและวิเคราะห์ข้อมูลด้วยวิธีการทางสถิติ เพื่อให้ได้ผลสรุปที่ตรงตามวัตถุประสงค์ ซึ่งวัตถุประสงค์ที่สำคัญแบ่งเป็น 4 ประเภท ได้แก่ หาปัจจัยที่มีอิทธิพลต่อผลลัพธ์มากที่สุด หาค่าของปัจจัยที่ทำให้ผลลัพธ์มีค่าใกล้เคียงกับค่าเป้าหมายที่ต้องการมากที่สุด หาค่าของปัจจัยที่ทำให้ความแปรปรวนของผลลัพธ์น้อยที่สุด และหาค่าของปัจจัยที่มีผลต่อปัจจัยที่ควบคุมไม่ได้ให้น้อยที่สุด [26]

แนวคิดพื้นฐานของการออกแบบกระบวนการประกอบด้วย การควบคุม (Control) การทำซ้ำ (Replication) และการสุ่ม (Randomization) [27] การควบคุมหมายถึงการทดลองจะต้องถูกจัดการในวิธีการที่เป็นระบบ แทนที่จะใช้วิธีการลองผิดลองถูก (Trial and error) ในการทดลองทางกายภาพ การทำซ้ำสามารถกล่าวได้ว่าเป็นแนวทางที่ทำให้มีข้อมูลเพียงพอสำหรับการทดสอบสมมติฐานอย่างมีประสิทธิภาพ (Hypothesis test) ในช่วงความเชื่อมั่นที่จำกัด (Confidence interval) และการสุ่มเป็นการลดผลกระทบของปัจจัยภายนอกที่อาจเกิดขึ้น อย่างไรก็ตาม เมื่อออกแบบการทดลองร่วมกับการจำลองกระบวนการ การทำซ้ำและการสุ่มจะไม่มีผลต่อผลลัพธ์ที่ได้เหมือนกับการทดลองทางกายภาพดังที่กล่าวข้างต้น

2.4.1 แนวทางการออกแบบการทดลอง

เพื่อให้ผลที่ได้จากวิธีการทางสถิติในการออกแบบและวิเคราะห์การทดลองน่าเชื่อถือ จำเป็นต้องทราบเป้าหมายของการศึกษา ผลลัพธ์ที่สนใจ วิธีการเก็บและวิเคราะห์ข้อมูล ซึ่งแนวทางที่จะนำเสนอนี้สามารถศึกษาอย่างละเอียดได้จากงานวิจัยของ Coleman และ Montgomery [28]

1) การศึกษาปัญหา (Recognition of and statement of the problem)

ในขั้นตอนนี้จะต้องตระหนักว่าปัญหาคืออะไรและต้องการหาข้อมูลจากแหล่งใดบ้าง เพื่อกำหนดเป้าหมายของการศึกษาที่ชัดเจน การศึกษาในขั้นตอนนี้บ่อยครั้งพบว่ามีส่วนทำให้เข้าใจกระบวนการได้ดียิ่งขึ้นและนำไปสู่แนวทางการแก้ปัญหาในที่สุด

2) การกำหนดตัวแปรตอบสนอง (Selection of the response variable)

ในขั้นตอนนี้จะต้องกำหนดตัวแปรตอบสนองหรือผลลัพธ์ที่มีประโยชน์ต่อกระบวนการที่ศึกษา แต่ทั้งนี้ต้องมั่นใจว่า ระบบการวัดมีความสามารถเพียงพอ เนื่องจากระบบการวัดที่ไม่มีความสามารถจะทำให้การบ่งชี้ปัจจัยที่ส่งผลต่อผลลัพธ์ไม่ชัดเจน

3) การกำหนดปัจจัย ระดับ และขอบเขต (Choice of factors, levels, and range)

ในขั้นตอนนี้จะต้องเลือกปัจจัยที่คาดว่าจะมีผลต่อผลลัพธ์ พร้อมทั้งระดับและขอบเขตของปัจจัย ซึ่งต้องสอดคล้องกับการดำเนินงาน อาจใช้ข้อมูลจากผู้เชี่ยวชาญหรือประสบการณ์ทำงานที่เกี่ยวข้องกับกระบวนการ หากการกำหนดปัจจัยและขอบเขตของปัจจัยไม่ครอบคลุมจะทำให้ผลการทดลองไม่สามารถใช้ในการแก้ปัญหาได้อย่างมีประสิทธิภาพ ในขณะที่ หากกำหนดมากเกินไปจะส่งผลต่อต้นทุนและระยะเวลาในการทดลอง อย่างไรก็ตาม ในกรณีที่มีจำนวนปัจจัยที่เกี่ยวข้องจำนวนมาก อาจคัด

กรองปัจจัย (Factor screening) เบื้องต้นก่อน การคัดกรองปัจจัยมีหลายวิธี แต่แผนผังสาเหตุและผล (Cause-and-effect diagram) เป็นวิธีการที่มีประสิทธิภาพและถูกใช้อย่างแพร่หลาย

4) การกำหนดรูปแบบการทดลอง (Choice of experimental design)

การกำหนดรูปแบบการทดลองเกี่ยวข้องกับการพิจารณาขนาดของตัวอย่าง จำนวนการทำซ้ำ และการกำหนดลำดับการทดลองที่เหมาะสม ปัจจุบันโปรแกรมสำเร็จรูปต่างๆ อำนวยความสะดวกในการกำหนดรูปแบบการทดลอง ยกตัวอย่างเช่น โปรแกรม Minitab มีตารางสรุปขนาดของตัวอย่างเมื่อเลือกรูปแบบการทดลองแบบต่างๆ สำหรับวิธีการพื้นผิวตอบสนอง ดังรูปที่ 2.2

Design		Continuous Factors								
		2	3	4	5	6	7	8	9	10
Central composite full	unblocked	13	20	31	52	90	152			
	blocked	14	20	30	54	90	160			
Central composite half	unblocked				32	53	88	154		
	blocked				33	54	90	160		
Central composite quarter	unblocked						90	156		
	blocked						90	160		
Central composite eighth	unblocked									158
	blocked									160
Box-Behnken	unblocked		15	27	46	54	62		130	170
	blocked			27	46	54	62		130	170

รูปที่ 2.2 รูปแบบการทดลองของวิธีการพื้นผิวตอบสนองที่เป็นไปได้

การกำหนดรูปแบบการทดลองเกี่ยวข้องกับการเลือกแบบจำลองอย่างง่ายเพื่อที่จะอธิบายผลลัพธ์เช่นกัน ซึ่งเป็นความสัมพันธ์ทางปริมาณ (Quantitative relationship) ระหว่างผลลัพธ์กับปัจจัยที่มีนัยสำคัญ ในหลายกรณี แบบจำลองพหุนามอันดับต่ำ (Low-order polynomial model) เหมาะสำหรับการอธิบายกระบวนการที่สนใจ ยกตัวอย่างเช่น แบบจำลองอันดับหนึ่งที่อธิบายผลของ k ปัจจัย แสดงดังสมการที่ (2.47)

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \varepsilon \quad (2.47)$$

เมื่อ y = ผลลัพธ์

x = ปัจจัย

β = พารามิเตอร์ไม่ทราบค่าซึ่งสามารถหาค่าได้จากข้อมูลการทดลอง

ε = ความคลาดเคลื่อนสุ่มซึ่งแสดงถึงความคลาดเคลื่อนของการทดลองในกระบวนการที่ศึกษา สมการที่ (2.47) บางครั้งถูกเรียกว่า แบบจำลองผลกระทบหลัก (Main effects model) ซึ่งใช้อย่างแพร่หลายในการคัดกรองปัจจัย อย่างไรก็ตามแบบจำลองอันดับหนึ่งสามารถขยายเพิ่มพจน์อันตรกิริยา (Interaction term) ได้ดังสมการที่ (2.48)

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i < j} \sum_{i=1}^k \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon \quad (2.48)$$

เมื่อ $x_1 x_2$ แสดงอันตรกิริยาระหว่าง 2 ปัจจัย นอกจากนี้ยังมีแบบจำลองอันดับสองดังสมการที่ (2.49) ซึ่งนิยมใช้ในการหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสม

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j} \sum_{i=1}^k \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon \quad (2.49)$$

5) การทดลอง (Performing the experiment)

เมื่อเริ่มต้นการทดลอง จะต้องควบคุมการทดลองให้เป็นไปตามแผนที่วางไว้ ความผิดพลาดทั้งจากการทดลองและการเก็บข้อมูลจะส่งผลให้การทดลองไม่น่าเชื่อถือและไม่สามารถวิเคราะห์ผลได้

6) การวิเคราะห์ทางสถิติของข้อมูล (Statistical analysis of data)

วิธีการทางสถิติถูกใช้ในการวิเคราะห์ข้อมูลเพื่อผลลัพธ์และข้อสรุปจะได้เป็นไปตามวัตถุประสงค์ แทนที่จะให้เป็นไปตามธรรมชาติ ซึ่งสามารถวิเคราะห์ด้วยการวิเคราะห์ความแปรปรวน (Analysis of variance, ANOVA) วิเคราะห์ด้วยกราฟ และวิเคราะห์ด้วยสมการถดถอยทั้งแบบเชิงเส้นและไม่เป็นเชิงเส้น ในการวิเคราะห์ปัจจุบันมีโปรแกรมสำเร็จรูปมากมายช่วยในการวิเคราะห์ อย่างไรก็ตาม เพื่อการแปรความหมายอย่างถูกต้อง จึงควรมีความเข้าใจในหลักการทางสถิติด้วย

7) การสรุปผลและข้อเสนอแนะ (Conclusions and recommendations)

หลังจากทราบผลการวิเคราะห์ ผลสรุปทางปฏิบัติเกี่ยวกับผลลัพธ์และข้อเสนอแนะจะต้องถูกเขียนขึ้น ซึ่งอาจแสดงใช้รูปอธิบายความสัมพันธ์ต่างๆ ทั้งนี้ควรมีการทดลองเพื่อยืนยันข้อเสนอแนะอีกครั้งหนึ่งก่อนการนำไปใช้ นอกจากนี้ควรติดตามผลการปรับปรุงด้วยเครื่องมือที่เหมาะสมต่อไป

2.4.2 ประเภทของการออกแบบการทดลอง

การออกแบบการทดลองที่นิยมใช้ประกอบด้วย 3 ประเภท คือ การออกแบบการทดลองแบบแฟกทอเรียล (Factorial design) การออกแบบการทดลองแบบทาคุชิ (Taguchi design) และวิธีการพื้นผิวตอบสนอง (Response surface methodology, RSM)

การออกแบบการทดลองแบบแฟกทอเรียล [29] ใช้สำหรับการทดลองที่มีปัจจัยตั้งแต่ 2 ปัจจัยขึ้นไป เหมาะสำหรับการศึกษาอันตรกิริยาของแต่ละปัจจัย สำหรับปัญหาที่พิจารณามี 3 ปัจจัย (A B และ C) อันตรกิริยาที่เป็นไปได้ได้แก่ AB BC AC และ ABC ผลที่ได้จะถูกใช้เพื่อประมาณและเปรียบเทียบผลกระทบของแต่ละปัจจัย ประโยชน์หลักของการออกแบบการทดลองแบบแฟกทอเรียลคือสะดวกต่อการประเมินผลกระทบของอันตรกิริยา นอกจากนี้ผลที่ได้สามารถนำไปใช้งานในช่วงที่กว้างกว่าขอบเขตของปัจจัยที่ทดลองได้ แต่อย่างไรก็ตาม ขนาดของตัวอย่างที่ใช้ในการทดลองอาจจะมีสูงมาก โดยปกติ การออกแบบการทดลองนี้มีประสิทธิภาพในการหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสม

น้อยกว่าวิธีการพื้นผิวตอบสนอง

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

การออกแบบการทดลองแบบทากูชิ [29] ถูกนำเสนอโดย Genichi Taguchi ซึ่งใช้กราฟช่วยวิเคราะห์สำหรับการเลือกรูปแบบการทดลองที่เหมาะสม นอกจากนี้ยังพัฒนาอัตราส่วนสัญญาณต่อสัญญาณรบกวน (Signal-to-noise ratios, SN) ใช้ในการออกแบบการทดลองนี้ การวิเคราะห์นี้จะให้ผลที่แม่นยำเมื่อทราบแบบจำลองความแปรปรวน (Variation model) กล่าวคือ วัตถุประสงค์ของการศึกษาคือเพื่อหาปัจจัยของแบบจำลองสำหรับการตอบสนองที่เหมาะสมไม่ใช่เพื่อหาแบบจำลองที่แสดงความสัมพันธ์ระหว่างปัจจัยกับผลตอบสนองเหมือนการออกแบบการทดลองแบบแฟกทอเรียลดังที่กล่าวข้างต้น

วิธีการพื้นผิวตอบสนอง [29] เป็นการออกแบบการทดลองซึ่งมีจุดมุ่งหมายเพื่อพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของกระบวนการเพื่อหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมและสามารถควบคุมได้อย่างมีประสิทธิภาพ วิธีการพื้นผิวตอบสนองสมมติให้ความแปรปรวนของการทดลองเป็นค่าคงที่ตลอดช่วงของการทดลองและผลกระทบของอันดับที่น้อยกว่า 3 มีนัยสำคัญ ดังนั้นจึงเห็นได้ว่าวิธีการนี้เป็นเครื่องมือที่มีประสิทธิภาพสูง เมื่อเปรียบเทียบกับการออกแบบการทดลองแบบทากูชิ [30] พบว่าวิธีการพื้นผิวตอบสนองให้ผลที่ดีกว่าเนื่องจากความคลาดเคลื่อนเฉลี่ยระหว่างแบบจำลองและข้อมูลการทดลองมีค่าน้อยมาก นอกจากนี้ เกณฑ์ความพอใจ (Desirability criterion) ในวิธีการพื้นผิวตอบสนองช่วยให้ผู้ใช้สามารถหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมได้ง่ายมากขึ้น

จากการออกแบบการทดลองทั้งหมดที่กล่าวข้างต้น จะเห็นได้ว่า วิธีการพื้นผิวตอบสนองมีความเหมาะสมมากที่สุดในการหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสม ดังนั้นในงานวิจัยนี้จึงเลือกใช้วิธีการพื้นผิวตอบสนองในการศึกษาต่อไป

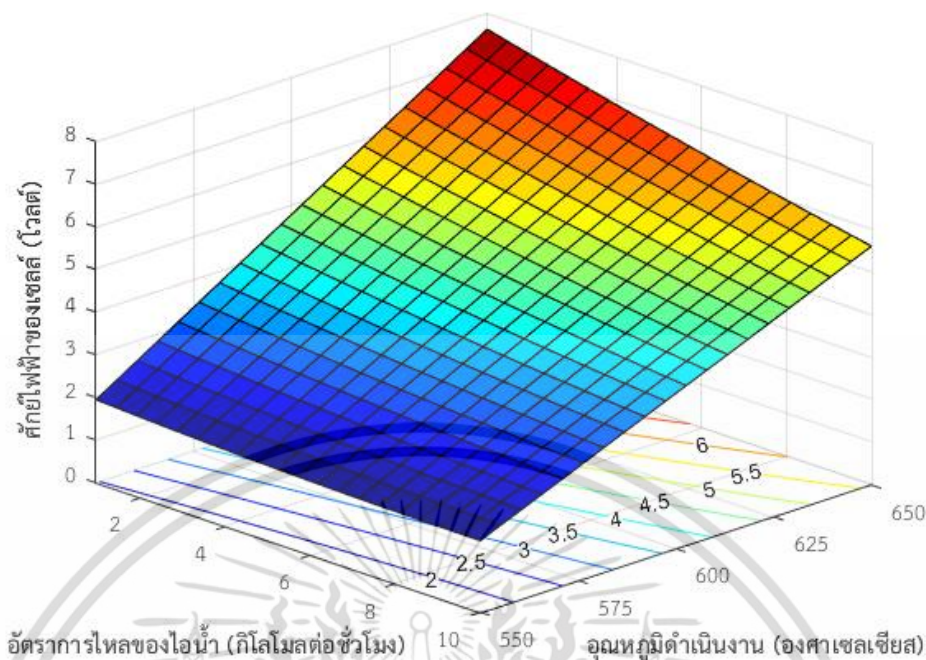
2.4.3 วิธีการพื้นผิวตอบสนอง

วิธีการพื้นผิวตอบสนองคือการรวบรวมกลวิธีทางคณิตศาสตร์และทางสถิติที่มีประโยชน์สำหรับการจำลองและการวิเคราะห์ปัญหาซึ่งผลตอบสนองเป็นผลมาจากปัจจัยที่หลากหลายและมีวัตถุประสงค์เพื่อหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมสำหรับผลตอบสนองนั้น [26] ตัวอย่างเช่น ต้องการหาอัตราการไหลของไอน้ำ (x_1) อุณหภูมิดำเนินงาน (x_2) และความดัน (x_3) ที่มีผลให้ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ (y) มีค่าน้อยที่สุด ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ที่สัมพันธ์กับอัตราการไหลของไอน้ำ อุณหภูมิดำเนินงาน และความดัน สามารถเขียนได้ดังสมการที่ (2.50) - (2.51)

$$y = f(x_1, x_2, x_3) + \varepsilon \quad (2.50)$$

$$\eta = f(x_1, x_2, x_3) \quad (2.51)$$

เมื่อ ε แทนสัญญาณรบกวนหรือความคลาดเคลื่อนที่สังเกตได้ในผลตอบสนอง y และ η เรียกว่าพื้นผิวตอบสนอง โดยปกติ กราฟพื้นผิวตอบสนองจะแสดงในรูป 3 มิติ อย่างไรก็ตามเพื่อให้เห็นภาพชัดเจนยิ่งขึ้น อาจมีคอนทัวร์ (Contour) ฉายบนระนาบแกนนอน ดังรูปที่ 2.3

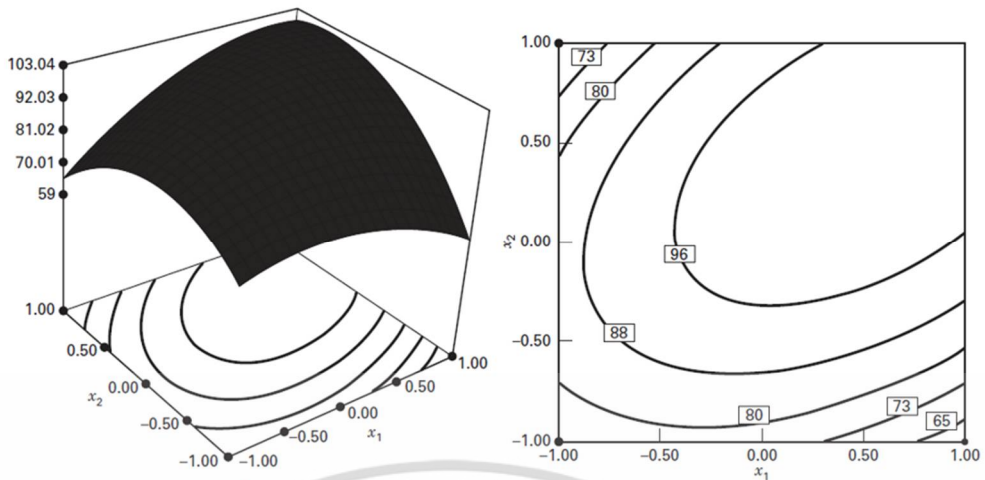


รูปที่ 2.3 กราฟพื้นผิวตอบสนองระหว่างอัตราการไหลและอุณหภูมิดำเนินงานต่อคักย์ไฟฟ้าของเซลล์

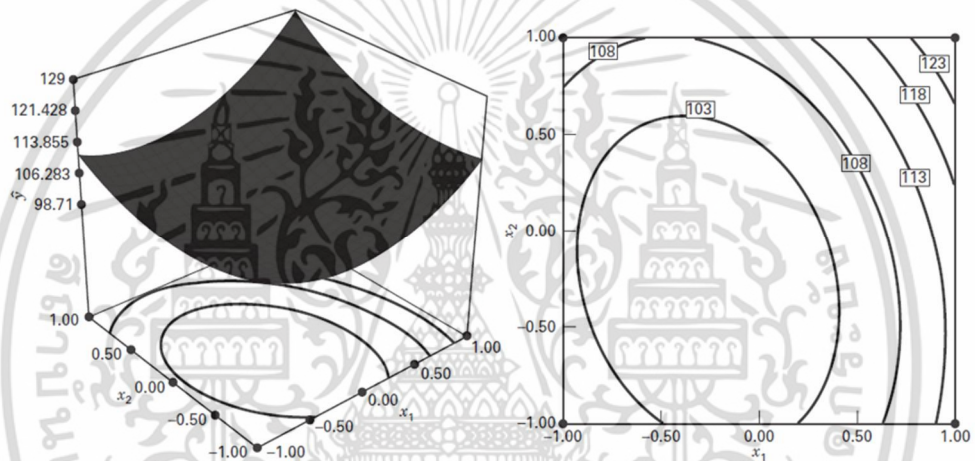
ปัญหาวิธีการพื้นผิวตอบสนองส่วนใหญ่ มักไม่ทราบรูปแบบของความสัมพันธ์ระหว่างผลตอบสนองและตัวแปรอิสระ (Independent variables) ดังนั้นอันดับแรกจะต้องหาการประมาณที่เหมาะสมสำหรับความสัมพันธ์จริงระหว่างผลตอบสนองและตัวแปรอิสระ โดยปกติจะใช้แบบจำลองพหุนามอันดับต่ำ ไม่ว่าจะเป็นแบบจำลองอันดับหนึ่งหรือแบบจำลองอันดับสองดังที่กล่าวข้างต้น ซึ่งวิธีกำลังสองน้อยที่สุด (Method of least squares) ถูกใช้ในการประมาณพารามิเตอร์ (β)

บ่อยครั้งที่ขอบเขตของภาวะดำเนินงานที่เลือกเริ่มต้นห่างจากภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมอย่างมาก ดังนั้นก่อนการหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสม วัตถุประสงค์แรกคือเพื่อย้ายขอบเขตที่สนใจให้ครอบคลุมภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมอย่างรวดเร็วและมีประสิทธิภาพมากที่สุด โดยปกติมักจะใช้วิธีการก้าวที่ชันที่สุด (Method of steepest ascent) [26] อย่างไรก็ตาม ในงานวิจัยนี้ศึกษาปัจจัยต่างๆ ด้วยการจำลองกระบวนการในโปรแกรม Aspen Plus ก่อนที่จะหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมด้วยวิธีการทางสถิติ จึงทำให้สามารถเลือกขอบเขตของภาวะดำเนินงานได้อย่างใกล้เคียง หลังจากนั้นเมื่อขอบเขตที่สนใจครอบคลุมภาวะดำเนินงานที่เหมาะสม เพื่อที่จะสามารถหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสม แบบจำลองที่ใช้จะต้องรวมผลกระทบของความโค้งด้วย ซึ่งนิยมใช้แบบจำลองอันดับสอง ผลลัพธ์ที่ได้คือชุดของ x_1, x_2, \dots, x_k ที่ทำให้ $dy/dx_1 = dy/dx_2 = \dots = dy/dx_k = 0$ จุดนี้เรียกว่าจุดนิ่ง (Stationary point) เขียนแทนด้วย $x_{1,s}, x_{2,s}, \dots, x_{k,s}$ ซึ่งอาจแสดงผลตอบสนองที่สูงที่สุด ผลตอบสนองที่ต่ำที่สุด หรือจุดอานม้า (Saddle point) ดังรูปที่ 2.4 - 2.6 คอนทัวร์มีบทบาทสำคัญในการศึกษาพื้นผิวตอบสนองอย่างมาก การสร้างคอนทัวร์ของพื้นผิวตอบสนองด้วยโปรแกรมในคอมพิวเตอร์จะทำให้แสดงลักษณะของพื้นผิวและตำแหน่งที่เหมาะสมได้อย่างแม่นยำ

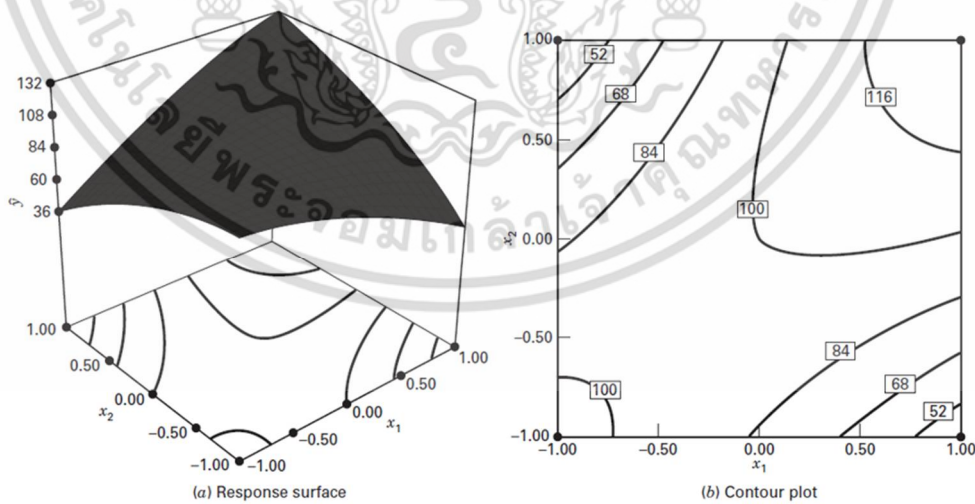
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ 2.4 พื้นผิวตอบสนองและคอนทัวร์ของพื้นผิวที่มีค่าสูงที่สุด [26]



รูปที่ 2.5 พื้นผิวตอบสนองและคอนทัวร์ของพื้นผิวที่มีค่าต่ำที่สุด [26]



รูปที่ 2.6 พื้นผิวตอบสนองและคอนทัวร์ของพื้นผิวที่มีลักษณะเป็นอานม้า [26]

ผลการจำลองทางคณิตศาสตร์ที่จุดนิ่ง สามารถเขียนแสดงด้วยแบบจำลองอันดับสองในรูปเมทริกซ์ (Matrix) ได้ดังสมการที่ (2.52)

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

$$y = \beta_0 + \mathbf{x}'\mathbf{b} + \mathbf{x}'\mathbf{B}\mathbf{x} \quad (2.52)$$

เมื่อ

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \end{bmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_k \end{bmatrix} \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} \beta_{11} & \frac{\beta_{12}}{2} & \dots & \frac{\beta_{1k}}{2} \\ \frac{\beta_{21}}{2} & \beta_{22} & \dots & \frac{\beta_{2k}}{2} \\ & & \ddots & \\ \frac{\beta_{k1}}{2} & \frac{\beta_{k2}}{2} & \dots & \beta_{kk} \end{bmatrix}$$

นั่นคือ \mathbf{b} = เวกเตอร์ขนาด $k \times 1$ ของสัมประสิทธิ์ถดถอยอันดับหนึ่ง

\mathbf{B} = เมทริกซ์ขนาด $k \times k$ ซึ่งมีแนวเส้นทแยงมุมหลักเป็นสัมประสิทธิ์อันดับสองบริสุทธิ์ (Pure quadratic coefficients, β_{ii}) และนอกแนวเส้นทแยงมุมหลักเป็นสัมประสิทธิ์อันดับสองผสม (Mixed quadratic coefficients, β_{ij})

ดังนั้นอนุพันธ์ของ y เทียบกับเวกเตอร์ \mathbf{x} เท่ากับ 0 จะได้

$$\frac{\partial y}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{b} + 2\mathbf{B}\mathbf{x} = 0 \quad (2.53)$$

เมื่อแก้สมการที่ (2.53) จะได้ว่า จุดนี้มีค่าดังสมการที่ (2.54)

$$\mathbf{x}_s = -\frac{\mathbf{B}^{-1}\mathbf{b}}{2} \quad (2.54)$$

เมื่อแทนสมการที่ (2.54) ลงในสมการที่ (2.52) จะสามารถทำนายผลตอบสนองที่จุดนี้ได้ดังสมการ

$$y_s = \beta_0 + \frac{\mathbf{x}'_s\mathbf{b}}{2} \quad (2.55)$$

2.4.4 การหาค่าที่เหมาะสม

โดยทั่วไป สมการวัตถุประสงค์จะถูกสร้างเป็นอันดับแรก ประกอบด้วย วัตถุประสงค์ซึ่งสามารถเป็นได้ทั้งการหาค่าที่สูงที่สุดหรือการหาค่าที่ต่ำที่สุด เงื่อนไขที่เท่ากัน (Equality constraint) และ/หรือ เงื่อนไขที่ไม่เท่ากัน (Inequality constraint) [31] ดังนี้

$$\begin{array}{ll} \text{maximize/ minimize} & f(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} = [x_1 \ x_2 \ \dots \ x_n]^T \\ \text{subject to} & h_i(\mathbf{x}) = b_i \quad i = 1, \dots, n \\ & g_j(\mathbf{x}) \leq c_j \quad j = 1, \dots, m \end{array}$$

จากนั้นใช้ระเบียบวิธีเชิงตัวเลข (Numerical method) ในการแก้ปัญหาต่อไป เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนลิขสิทธิ์ไว้เพื่อใช้ในการศึกษาเท่านั้น เมื่อผู้เห็นได้เห็นไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

แต่อย่างไรก็ตาม Derringer และ Suich [32] ได้นำเสนอวิธีการที่ง่ายและมีประโยชน์มากสำหรับการหาค่าที่เหมาะสม ซึ่งใช้ฟังก์ชันความพึงพอใจ (Desirability function) ในการพิจารณาหาค่าที่เหมาะสม ในขั้นแรก ผลตอบสนอง y_i จะถูกเปลี่ยนให้อยู่ในรูปฟังก์ชันความพึงพอใจของแต่ละผลตอบสนอง (Individual desirability function, d_i) ซึ่งมีค่าอยู่ระหว่าง 0 ถึง 1 ถ้าหากผลตอบสนอง y_i อยู่ที่เป้าหมาย d_i จะมีค่าเท่ากับ 1 ในทางตรงกันข้าม ถ้าผลตอบสนองไม่อยู่ในช่วงที่ยอมรับได้ d_i จะมีค่าเท่ากับ 0 ซึ่งสามารถได้แบ่งเป็น 3 ประเภท ดังนี้

1) ค่าเป้าหมาย T สำหรับผลตอบสนอง y เป็นค่าที่มากที่สุด ดังรูปที่ 2.7ก

$$d = \begin{cases} 0 & y < L \\ \left(\frac{y-L}{T-L}\right)^r & L \leq y \leq T \\ 1 & y > T \end{cases} \quad (2.56)$$

2) ค่าเป้าหมาย T สำหรับผลตอบสนอง y เป็นค่าที่น้อยที่สุด ดังรูปที่ 2.7ข

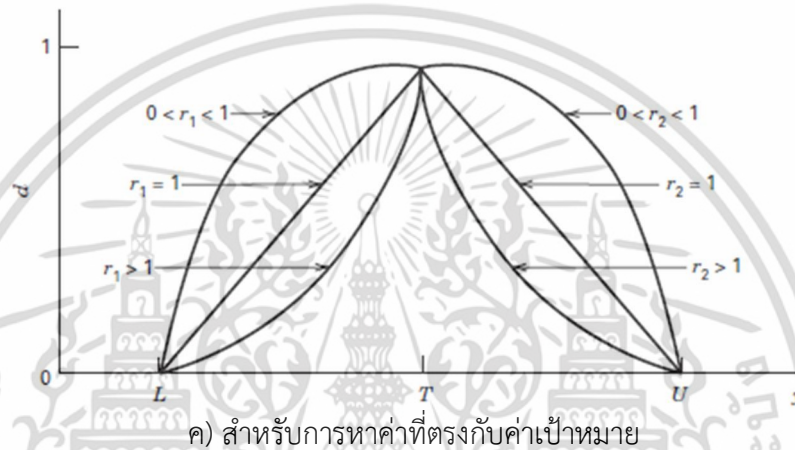
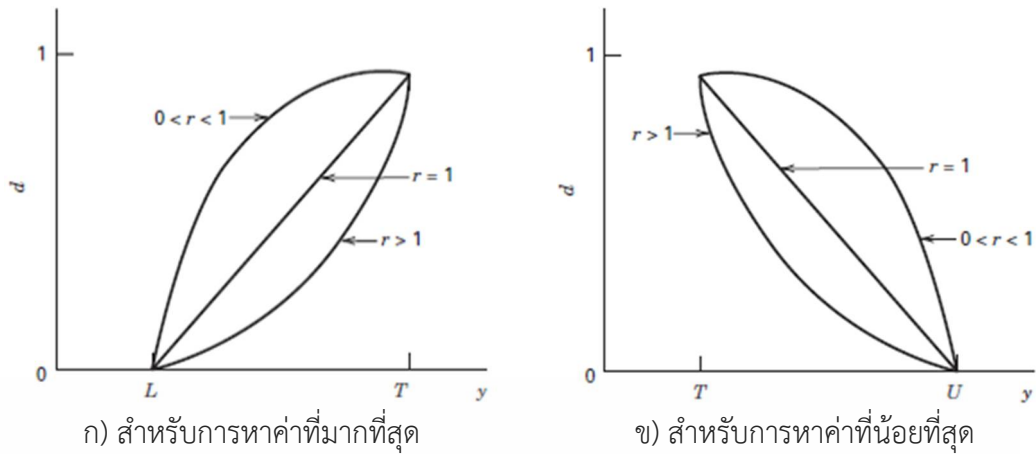
$$d = \begin{cases} 1 & y < T \\ \left(\frac{U-y}{U-T}\right)^r & T \leq y \leq U \\ 0 & y > U \end{cases} \quad (2.57)$$

3) ค่าเป้าหมาย T สำหรับผลตอบสนอง y อยู่ระหว่างขอบเขตล่าง L และขอบเขตบน U ดังรูปที่ 2.7ค

$$d = \begin{cases} 1 & y < L \\ \left(\frac{y-L}{T-L}\right)^{r_1} & L \leq y \leq T \\ \left(\frac{U-y}{U-T}\right)^{r_2} & T \leq y \leq U \\ 0 & y > U \end{cases} \quad (2.58)$$

เมื่อ r = น้ำหนัก (Weight)

หากน้ำหนัก r มีค่าน้อยกว่า 1 แสดงว่าให้ความสำคัญกับเป้าหมายน้อย ดังนั้นค่าผลตอบสนองที่ไกลจากเป้าหมายอาจจะมีฟังก์ชันความพึงพอใจของแต่ละผลตอบสนองที่สูงได้ ในทางตรงกันข้าม หากน้ำหนัก r มีค่ามากกว่า 1 แสดงว่าให้ความสำคัญกับเป้าหมายมาก ฟังก์ชันความพึงพอใจของแต่ละผลตอบสนองจะมีค่าสูงก็ต่อเมื่อค่าผลตอบสนองเข้าใกล้เป้าหมาย อย่างไรก็ตาม หากน้ำหนัก r มีค่าเท่ากับ 1 แสดงถึงการให้ความสำคัญระหว่างเป้าหมายกับขอบเขตเท่ากัน ดังนั้นฟังก์ชันความพึงพอใจของแต่ละผลตอบสนองจึงเป็นเส้นตรง ดังรูปที่ 2.7



รูปที่ 2.7 ฟังก์ชันความพึงพอใจของแต่ละผลตอบแทน [26]

จากที่กล่าวข้างต้น จะเห็นได้ว่า ฟังก์ชันความพึงพอใจของแต่ละผลตอบแทนสามารถมีได้หลายค่าขึ้นอยู่กับจำนวนผลตอบแทน เพื่อให้สามารถตัดสินใจเลือกค่าที่เหมาะสมได้สะดวกยิ่งขึ้น จึงต้องรวมฟังก์ชันความพึงพอใจของแต่ละผลตอบแทนแสดงในรูปของฟังก์ชันความพึงพอใจรวม (Overall desirability function, D_i) ดังสมการที่ (2.59)

$$D = (d_1 \times d_2 \times \dots \times d_m)^{1/m} \quad (2.59)$$

เมื่อ m คือจำนวนผลตอบแทนทั้งหมด

2.5 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

2.5.1 แบบจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำออกไซด์ไอออน

Ni และคณะ [33] ศึกษาผลกระทบของโครงสร้างและภาวะดำเนินงานที่มีอิทธิพลต่อประสิทธิภาพของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำออกไซด์ไอออน พบว่า เซลล์ที่รองรับด้วยขั้วแอโนดเป็นการออกแบบที่ดีที่สุดภายใต้วัสดุชนิดเดียวกันที่อุณหภูมิ 1,000 องศาเซลเซียส และอัตราส่วนเชิงโมลของไอน้ำ 60 เปอร์เซ็นต์โดยโมล เนื่องจากความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าจำกัด (Limiting

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

current density) ของศักย์ไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากความเข้มข้นที่ขั้วแคโทดมีค่ามาก กล่าวคือสามารถเลือกใช้ความหนาแน่นกระแสในช่วงที่กว้างกว่า ดังนั้นในงานวิจัยจึงเลือกใช้โครงสร้างรองรับนี้ในการศึกษา ซึ่งเป็นผลทำให้ศักย์ไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากความต้านทานไฟฟ้าส่งผลต่อศักย์ไฟฟ้าสูญเสียผันกลับไม่ได้มากที่สุด นอกจากนี้ยังศึกษาผลของความพรุนของขั้วอิเล็กโทรดและขนาดของรูพรุนซึ่งพบว่า เมื่อความพรุนของขั้วอิเล็กโทรดและขนาดของรูพรุนมากขึ้น จะทำให้ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ลดลงหรือกล่าวได้ว่า ประสิทธิภาพของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำออกไซด์ไอออนเพิ่มขึ้น เช่นเดียวกับการศึกษาภาวะดำเนินงาน ซึ่งประกอบด้วย อัตราส่วนเชิงโมลของไอน้ำ ความดันดำเนินงาน และอุณหภูมิดำเนินงาน ผลการศึกษาพบว่า เมื่อภาวะดำเนินงานที่ศึกษาทั้งหมดเพิ่มขึ้น จะส่งผลให้ประสิทธิภาพของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำออกไซด์ไอออนเพิ่มขึ้น โดยเฉพาะอย่างยิ่ง อุณหภูมิดำเนินงานซึ่งส่งผลอย่างมีนัยสำคัญ

ผลของงานวิจัยของ Udagawa และคณะ [17] ยืนยันผลกระทบของอุณหภูมิดำเนินงานที่มีต่อประสิทธิภาพของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำออกไซด์ไอออนเช่นเดียวกับงานวิจัยของ Ni และคณะ กล่าวคือ เมื่ออุณหภูมิดำเนินงานเพิ่มสูงขึ้น (600 - 1,000 องศาเซลเซียส) ทำให้ประสิทธิภาพของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำออกไซด์ไอออนเพิ่มขึ้น นอกจากนี้ยังพบว่า เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำออกไซด์ไอออนสามารถดำเนินงานได้ 3 ลักษณะ คือการดำเนินงานแบบดูดความร้อน การดำเนินงานแบบคายความร้อน และการดำเนินงานแบบสมดุลความร้อน ซึ่งเป็นเหตุผลให้เกิดการศึกษาการควบคุมอุณหภูมิของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำออกไซด์ไอออนด้วยอัตราการไหลของอากาศที่ป้อนที่ขั้วแอโนดในปีถัดมา [34]

อย่างไรก็ตาม เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งใช้พลังงานไฟฟ้าในปริมาณมาก ทำให้ค่าใช้จ่ายในการดำเนินงานสูง Arashi และคณะ [35] จึงศึกษาประสิทธิภาพของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสที่ดำเนินงานที่อุณหภูมิสูงร่วมกับเซลล์แสงอาทิตย์ (Solar cell) สำหรับการผลิตไฮโดรเจน จากผลการศึกษาพบว่า มีประสิทธิภาพโดยรวมประมาณ 20 - 28 เปอร์เซ็นต์ ต่อมา Houcheng และคณะ [36] ศึกษาประสิทธิภาพของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสที่ดำเนินงานที่อุณหภูมิสูงร่วมกับลำแสงอาทิตย์เข้มข้นซึ่งถูกแยกด้วยระบบอุปกรณ์ที่ออกแบบพบว่า ประสิทธิภาพสูงสุดขึ้นกับความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าที่เหมาะสม นอกจากนี้ อัตราส่วนความร้อนต่อพลังงานไฟฟ้าเป็นอีกปัจจัยที่สำคัญ

นอกจากเซลล์อิเล็กโทรไลซิสที่ใช้ไอน้ำเป็นสารตั้งต้นเพียงอย่างเดียวตามที่กล่าวมาข้างต้น หลายงานวิจัยพิจารณาเซลล์อิเล็กโทรไลซิสร่วม (Co-electrolysis cell) ซึ่งป้อนไอน้ำและคาร์บอนไดออกไซด์เป็นสารตั้งต้น และได้ผลิตภัณฑ์เป็นแก๊สสังเคราะห์ Ni [11] ได้พัฒนาแบบจำลองไฟฟ้าเคมีของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสร่วมชนิดออกไซด์แข็งแบบนำออกไซด์ไอออนและเปรียบเทียบกับข้อมูลการทดลอง ผลการจำลองกระบวนการพบว่า ให้ผลสอดคล้องกับข้อมูลการทดลอง นอกจากนี้ อัตราการเกิดปฏิกิริยาอวตอร์แกนิคแบบย้อนกลับขึ้นกับอุณหภูมิและองค์ประกอบของแก๊ส

Li และคณะ [13] ศึกษาแบบจำลอง 1 มิติ ของปฏิกิริยาในเซลล์อิเล็กโทรไลซิสร่วมชนิด

ออกไซด์แข็งแบบนำออกไซด์ไอออน โดยเปรียบเทียบกับข้อมูลการทดลองปฏิกิริยาอิเล็กโทรไลซิสของเอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ไอน้ำ ปฏิกริยาอิเล็กโทรไลซิสของคาร์บอนไดออกไซด์ และปฏิกริยาอิเล็กโทรไลซิสร่วมของไอน้ำและคาร์บอนไดออกไซด์ ที่อุณหภูมิ 700 องศาเซลเซียส ผลการจำลองกระบวนการพบว่า อันดับของอัตราการดูดซับและคายซับเป็นดังนี้ การคายซับของไฮโดรเจน > การดูดซับของไอน้ำ > การดูดซับของคาร์บอนไดออกไซด์ ~ อัตราการคายซับของคาร์บอนมอนอกไซด์ เมื่อเพิ่มศักย์ไฟฟ้าของเซลล์จะทำให้ความเข้มข้นที่พื้นผิวของ H(Ni) และ CO(Ni) เพิ่มขึ้น ในขณะที่ความเข้มข้นที่พื้นผิวของ (Ni) O(Ni) OH(Ni) H₂O(Ni) และ CO₂(Ni) ลดลง นอกจากนี้ปฏิกริยาเนื้อผสม (Heterogeneous reaction) สามารถเข้าสู่สมดุลได้เมื่อชั่วแคโทดหนา 200 ไมโครเมตร และปฏิกริยาไฟฟ้าเคมีเกิดขึ้นที่รอยต่อระหว่างขั้วอิเล็กโทรดกับอิเล็กโทรไลต์ เมื่อชั่วแคโทดมีความหนามากกว่า 400 ไมโครเมตร พื้นที่ที่เกิดปฏิกริยาไฟฟ้าเคมีจะเกิดขึ้นห่างจากพื้นที่ที่เกิดปฏิกริยาเนื้อผสม ความเข้มข้นของแต่ละองค์ประกอบจะไม่ส่งผลกระทบต่อประสิทธิภาพทางไฟฟ้าเคมีของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำออกไซด์ไอออน ในทางตรงข้ามเมื่อชั่วแคโทดมีความหนาน้อยกว่า 400 ไมโครเมตร พื้นที่หลักที่เกิดปฏิกริยาไฟฟ้าเคมีและปฏิกริยาเนื้อผสมจะซ้อนทับกัน ความเข้มข้นที่พื้นผิวของ O(Ni) จะเพิ่มขึ้น ในขณะที่ (Ni) ลดลง ซึ่งเป็นเหตุให้ศึกษาพื้นที่หลักสำหรับปฏิกริยาเนื้อผสมและปฏิกริยาไฟฟ้าเคมีอย่างละเอียดใน 2 ปีถัดมา [14]

2.5.2 แบบจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอน

Ni และคณะ [37] พัฒนาแบบจำลองไฟฟ้าเคมีอธิบายความสัมพันธ์ระหว่างกระแสไฟฟ้าและศักย์ไฟฟ้าของเซลล์สำหรับเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนสำหรับการผลิตไฮโดรเจน ผลการจำลองกระบวนการสอดคล้องกับข้อมูลการทดลองอย่างดี ซึ่งพบว่า การดำเนินงานที่อุณหภูมิสูงและอัตราส่วนไอน้ำสูงจะทำให้เซลล์ใช้ศักย์ไฟฟ้าน้อยลง นอกจากนี้เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนควรรองรับด้วยขั้วแคโทด ซึ่งตรงข้ามกับเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำออกไซด์ไอออนดังที่กล่าวข้างต้น

Dumortier และคณะ [38] ศึกษาปรากฏการณ์ขนส่ง (Transport phenomena) ภายในเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งโดยใช้แบบจำลองคัสติแกสในการอธิบายการแพร่ผ่านรูพรุนและจำลองกระบวนการด้วยโปรแกรม COMSOL Multiphysics 4.1TM ผลการจำลองกระบวนการพบว่าสัมประสิทธิ์ความเข้มข้นในสมการของ Butler-Volmer และความเร็วขาเข้าเป็นพารามิเตอร์สำคัญซึ่งต้องมากพอที่จะหลีกเลี่ยงการใช้ไอน้ำจนหมดและหลีกเลี่ยงการแพร่ของออกซิเจนที่ผลิตได้กลับเข้าสู่ทางเข้า อย่างไรก็ตาม อัตราการระหว่างสภาพการนำไอออนและความดันไม่ถูกพิจารณา นอกจากนี้ผลกระทบทางความร้อนก็ไม่ได้ถูกศึกษา ซึ่งถูกศึกษาในงานวิจัยปีต่อมา [39]

2.5.3 การออกแบบการทดลอง

Kahveci และ Taymaz [40] ใช้วิธีการพื้นผิวตอบสนองในการศึกษาปัจจัยที่มีอิทธิพลต่อการควบคุมน้ำและความร้อนของเซลล์เชื้อเพลิงชนิดเยื่อแลกเปลี่ยนโปรตอน (Proton exchange membrane fuel cell) เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

membrane fuel cell, PEMFC) และหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมด้วยโปรแกรม Design Expert 8.0 ซึ่งปัจจัยที่ศึกษาประกอบด้วย อุณหภูมิของสารขาเข้า อุณหภูมิของเซลล์ อัตราการไหลของไฮโดรเจน และอัตราการไหลของออกซิเจน ผลการดำเนินงานพบว่า อุณหภูมิของสารขาเข้าและอุณหภูมิดำเนินงานมีผลต่อความหนาแน่นกำลังไฟฟ้าอย่างมีนัยสำคัญ ในขณะที่อัตราการไหลของออกซิเจนไม่มีนัยสำคัญต่อความหนาแน่นกำลังไฟฟ้า ซึ่งความหนาแน่นกำลังไฟฟ้าสูงสุดคือ 241.977 มิลลิวัตต์ต่อตารางเซนติเมตร

Basak และคณะ [41] ศึกษาปัจจัยที่มีอิทธิพลต่อการผลิตไฮโดรเจนจากการหมักด้วยแสง (Photofermentation hydrogen production) จาก *Rhodobacter sphaeroides* O.U. 001 ในเครื่องปฏิกรณ์ทรงกระบอกขนาด 1 ลิตร ปัจจัยที่ศึกษา ได้แก่ ความเข้มข้นของกรดมาลิก ความเข้มข้นของกรดแกลูตามิก (L-glutamic acid) และอุณหภูมิ กราฟพื้นผิวและกราฟคอนทัวร์ของแบบจำลองถดถอยแสดงให้เห็นว่า อัตราการผลิตไฮโดรเจนมากที่สุด 7.97 มิลลิลิตรของไฮโดรเจนต่อลิตรของสารละลายต่อชั่วโมง ที่ความเข้มข้นของกรดมาลิกเป็น 2.012 กรัมต่อลิตร ความเข้มข้นของกรดแกลูตามิก 0.297 กรัมต่อลิตร และอุณหภูมิ 32 องศาเซลเซียส ซึ่งเมื่อเปรียบเทียบกับภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมกับการทดลอง ผลการทดลองพบว่า ได้อัตราการผลิตไฮโดรเจน 7.92 มิลลิลิตรของไฮโดรเจนต่อลิตรของสารละลายต่อชั่วโมง ซึ่งแม่นยำถึง 99.36 เปอร์เซ็นต์

Eppinger และคณะ [42] ศึกษาปฏิกิริยาออกซิเดชันของมีเทนในเครื่องปฏิกรณ์แบบเบดนิ่งบนพื้นฐานจลนศาสตร์ของปฏิกิริยาของ Stansch และคณะ [43] ด้วยการออกแบบการทดลองร่วมกับการจำลองกระบวนการด้วยกลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณ (Computational fluid dynamics, CFD) ชั้นแรกปัจจัยต่างๆ ซึ่งประกอบด้วย เวลาการเกิดปฏิกิริยา อุณหภูมิ อัตราส่วนมีเทนต่อออกซิเจน อัตราส่วนเชิงโมลของไนโตรเจน และอัตราส่วนเจือจาง (Dilution ratio) ถูกคัดกรองด้วยวิธีการออกแบบการทดลองแบบ Plackett-Burman พบว่า มีเพียงเวลาการเกิดปฏิกิริยา อุณหภูมิ และอัตราส่วนมีเทนต่อออกซิเจน เท่านั้นที่มีนัยสำคัญ จากนั้นผลการดำเนินงานที่ได้ถูกศึกษาต่อและหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมด้วยวิธีพื้นผิวตอบสนอง พบว่า เวลาการเกิดปฏิกิริยา 61 กิโลกรัมวินาทีต่อลูกบาศก์เมตร อุณหภูมิ 801.5 องศาเซลเซียส และอัตราส่วนมีเทนต่อออกซิเจน 2 ทำให้ร้อยละผลได้ของเอทิลีนมากที่สุดซึ่งมีค่าประมาณ 14 เปอร์เซ็นต์

บทที่ 3

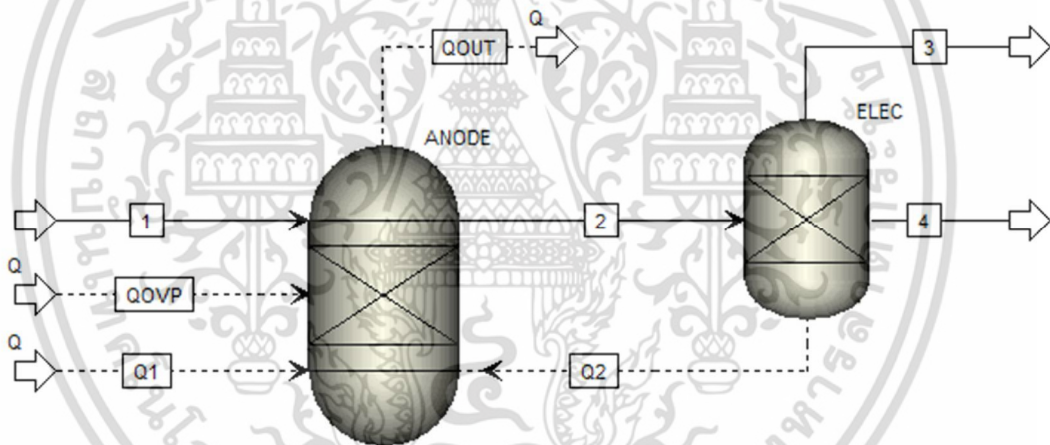
วิธีการดำเนินงาน

งานวิจัยนี้แบ่งวิธีการดำเนินงานออกเป็น 3 ส่วน ได้แก่ การสร้างแบบจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนสำหรับการผลิตไฮโดรเจนและแก๊สสังเคราะห์ด้วยโปรแกรม Aspen Plus ซึ่งแสดงในหัวข้อ 3.1 การศึกษาผลของปัจจัยต่างๆ ซึ่งแสดงในหัวข้อ 3.2 และการหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมด้วยวิธีพื้นผิวตอบสนองผ่านโปรแกรม Minitab ซึ่งแสดงในหัวข้อ 3.3

3.1 การจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอน

3.1.1 การผลิตไฮโดรเจน

แผนภาพ (Flowsheet) ของแบบจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนสำหรับการผลิตไฮโดรเจน แสดงดังรูปที่ 3.1 ซึ่งมีรายละเอียดดังนี้



รูปที่ 3.1 เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนสำหรับการผลิตไฮโดรเจน

1) สารตั้งต้น - เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนใช้น้ำเป็นสารตั้งต้นสำหรับปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมี ดังนั้นสายการไหลที่ 1 (Stream 1) จึงมีน้ำเป็นองค์ประกอบหลัก อย่างไรก็ตาม ไฮโดรเจนจะถูกป้อนเป็นสารตั้งต้นร่วมด้วยเพื่อลดความดันย่อยของเซลล์ ซึ่งส่งผลให้ใช้พลังงานไฟฟ้าในการเกิดปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมีสูง ในที่นี้ องค์ประกอบของสายการไหลที่ 1 ได้แก่ ไอน้ำ 95 เปอร์เซ็นต์โดยโมล และไฮโดรเจน 5 เปอร์เซ็นต์โดยโมล ดังนั้นเมื่ออัตราการไหลของสายการไหลที่ 1 เป็น 1 กิโลโมลต่อชั่วโมง ไอน้ำจะไหลด้วยอัตราการไหล 0.95 กิโลโมลต่อชั่วโมง และไฮโดรเจนจะไหลด้วยอัตราการไหล 0.05 กิโลโมลต่อชั่วโมง

2) ขั้วแอโนด - ปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมีของน้ำในเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนเกิดขึ้นที่ขั้วแอโนด (ANODE) ซึ่งไฮโดรเจนและออกซิเจนจะถูกผลิตขึ้นแสดงในสายการไหลที่ 2 (Stream 2) ในการจำลองกระบวนการ เครื่องปฏิกรณ์แบบ RStoic ถูกใช้แทนขั้วแอโนดเนื่องจาก

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนลิขสิทธิ์ไว้เพื่อการศึกษาเท่านั้น เมื่ออนุญาตให้เผยแพร่โดยไม่เสียค่าใช้จ่าย
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นไม่สามารถเกิดขึ้นเองตามธรรมชาติ (Nonspontaneous reaction) นอกจากนี้ยังทราบค่าการผันแปลงทางเคมี ซึ่งสัมพันธ์กับความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าและอัตราการไหลของไอน้ำขาเข้าดังสมการที่ (2.37) เมื่อพิจารณาการดูลพลังงานของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนสำหรับการผลิตไฮโดรเจน ความร้อนของการแยกไฮโดรเจนออกจากไอน้ำและออกซิเจน (Q2) ความร้อนจากศักย์ไฟฟ้าสูญเสียผันกลับไม่ได้ (QOVP) และความร้อนภายนอก (Q1) รวมกันต้องมีค่าเท่ากับความร้อนของปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมี อย่างไรก็ตาม ความร้อนของการแยกไฮโดรเจนออกจากไอน้ำและออกซิเจนขึ้นกับภาวะดำเนินงานของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอน นอกจากนี้ความร้อนจากศักย์ไฟฟ้าสูญเสียผันกลับไม่ได้สามารถคำนวณได้จากสมการที่ (2.45) แต่ความร้อนภายนอกเป็นตัวแปรอิสระ (Independent variable) กล่าวคือไม่สามารถคำนวณจากข้อมูลภายในระบบได้ ดังนั้นจึงต้องหาความร้อนภายนอกจากฟังก์ชันข้อกำหนดการออกแบบ (Design spec) ในโปรแกรม Aspen Plus โดยปรับความร้อนภายนอก (Q1) จนกระทั่งความร้อนขาออก (QOUT) มีค่าเป็น 0

- 3) อิเล็กโทรไลต์ - ไฮโดรเจนจะถูกแยกออกจากออกซิเจนและไอน้ำ (Stream 3) ที่อิเล็กโทรไลต์ (ELEC) ซึ่งจำลองกระบวนการด้วยหน่วยแยก Sep ได้เป็นไฮโดรเจนบริสุทธิ์ (Stream 4) ซึ่งถูกส่งไปยังขั้วแคโทดต่อไป

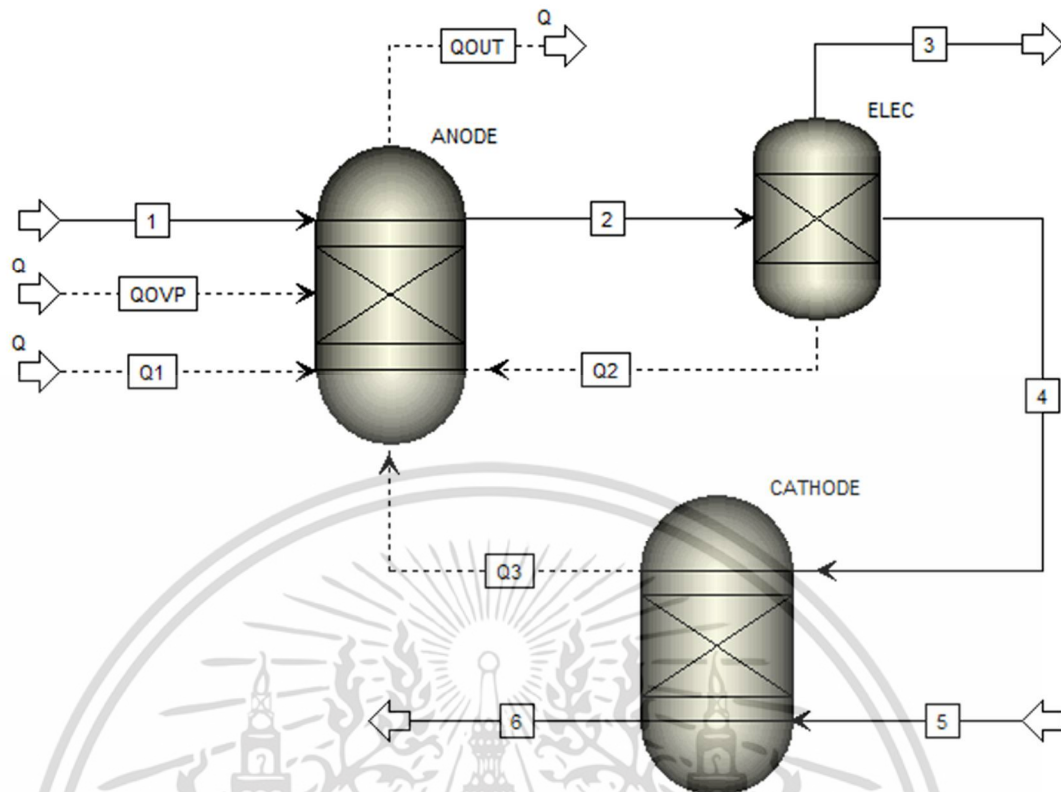
นอกเหนือจากการตั้งค่าของโปรแกรมดังที่กล่าวข้างต้น สมการสถานะ (Equation of state) จะต้องถูกเลือกเพื่อใช้ในการคำนวณทางอุณหพลศาสตร์ แต่แก๊สมีพฤติกรรมคล้ายแก๊สอุดมคติเมื่อดำเนินงานที่อุณหภูมิสูงและความดันต่ำ ดังนั้นสมการสถานะของแก๊สอุดมคติ (IDEAL) จึงถูกใช้เป็นสมการสถานะ นอกจากนี้ เพื่อที่จะศึกษาผลของศักย์ไฟฟ้าผันกลับได้และศักย์ไฟฟ้าสูญเสียผันกลับไม่ได้ทั้งหมด สมการที่ (2.9) - (2.31) จะถูกเขียนเพิ่มในกล่องการคำนวณ (Calculation block) โดยใช้ภาษา FORTRAN ดังแสดงในภาคผนวก ก

3.1.2 การผลิตแก๊สสังเคราะห์

แผนภาพของแบบจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนสำหรับการผลิตแก๊สสังเคราะห์ แสดงดังรูปที่ 3.2

แบบจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนสำหรับการผลิตแก๊สสังเคราะห์จะมีลักษณะคล้ายกับแบบจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนสำหรับการผลิตไฮโดรเจน แต่ไฮโดรเจนบริสุทธิ์ที่ถูกแยกออกมาจากอิเล็กโทรไลต์จะทำปฏิกิริยากับคาร์บอนไดออกไซด์ (Stream 5) ที่ขั้วแคโทด (CATHODE) เปลี่ยนเป็นแก๊สสังเคราะห์ (Stream 6) เนื่องจากแก๊สสังเคราะห์เป็นแก๊สผสมซึ่งอัตราส่วนองค์ประกอบของผลิตภัณฑ์ที่ต่างกันจะเหมาะสมสำหรับการใช้งานที่ต่างกัน ดังนั้นค่าปริมาณสัมพันธ์ (S) จึงถูกคำนวณเพิ่มเติมเพื่อใช้ในการพิจารณาการประยุกต์ใช้แก๊สสังเคราะห์ ดังสมการที่ (3.1)

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ 3.2 เซลล์อิเล็กโทรไลต์ออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนสำหรับการผลิตแก๊สสังเคราะห์

$$S = \frac{\dot{n}_{\text{H}_2} - \dot{n}_{\text{CO}_2}}{\dot{n}_{\text{CO}} + \dot{n}_{\text{CO}_2}} \quad (3.1)$$

เครื่องปฏิกรณ์แบบ RGibbs เหมาะสมมากที่สุดสำหรับการใช้แทนขั้วแคโทด เนื่องจากไม่มีข้อมูลค่าคงที่ของการเกิดปฏิกิริยาสำหรับตัวเร่งปฏิกิริยาที่เป็น Pt ในงานวิจัยใดเลย ดังนั้นจึงไม่สามารถจำลองกระบวนการด้วยเครื่องปฏิกรณ์แบบ RCSTR ได้ นอกจากนี้ เนื่องจากไม่ทราบความสัมพันธ์ของค่าแปลงผันทางเคมี (Conversion) จึงไม่เหมาะสมที่จะจำลองกระบวนการด้วยเครื่องปฏิกรณ์แบบ RStoic เช่นเดียวกัน งานวิจัยนี้จึงเลือกจำลองกระบวนการด้วยเครื่องปฏิกรณ์แบบ RGibbs ซึ่งคำนวณองค์ประกอบของผลิตภัณฑ์ที่ภาวะสมดุลโดยอาศัยหลักการพลังงานอิสระของ Gibbs ที่น้อยที่สุด (Gibbs free energy minimization)

3.1.3 การเปรียบเทียบผลการจำลองกระบวนการกับข้อมูลการทดลอง

หลังจากสร้างแบบจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลต์ออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนสำหรับการผลิตไฮโดรเจนและแก๊สสังเคราะห์แล้ว ผลของแบบจำลองสำหรับการผลิตไฮโดรเจนจะถูกเปรียบเทียบข้อมูลการทดลองของ Stuart และคณะ [44] ซึ่งใช้ $\text{BaCe}_{0.9}\text{Y}_{0.1}\text{O}_{3-\delta}$ (BCY10) หนา 450 ไมโครเมตร เป็นอิเล็กโทรไลต์ และใช้ Pt เป็นขั้วอิเล็กโทรด เพื่อที่จะประมาณค่าความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าแลกเปลี่ยนของขั้วอิเล็กโทรด ซึ่งจากสมมติฐานที่ว่า ความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าแลกเปลี่ยน

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ขึ้นกับชนิดวัสดุของขั้วอิเล็กโทรดเท่านั้น ดังนั้นผลของแบบจำลองสำหรับการผลิตแก๊สสังเคราะห์จึงควรให้ผลตรงกับข้อมูลการทดลองของ Ruiz-Trejo และ Irvine [45] ซึ่งใช้ Pt หนา 100 ไมโครเมตร เป็นขั้วอิเล็กโทรดเหมือนกัน แต่อิเล็กโทรไลต์ใช้เป็น $\text{BaCe}_{0.5}\text{Zr}_{0.3}\text{Y}_{0.16}\text{Zn}_{0.04}\text{O}_{3-\delta}$ (BCZYZ) หนา 200 ไมโครเมตร

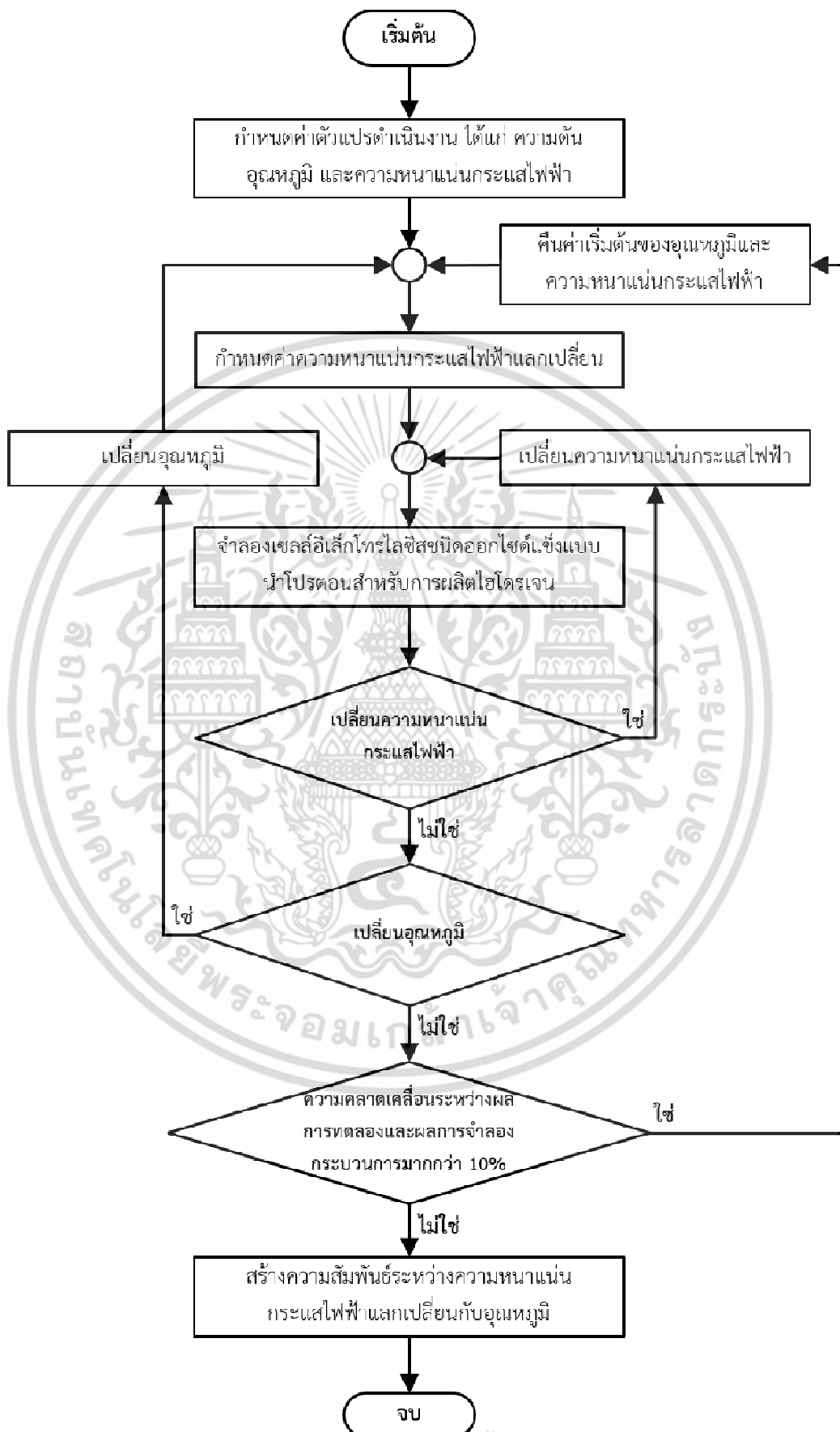
ขั้นตอนการเปรียบเทียบแบบจำลองกับข้อมูลการทดลองสรุปดังรูปที่ 3.3 ซึ่งขั้นตอนแรกทำการเปรียบเทียบผลการจำลองกระบวนการกับข้อมูลการทดลองสำหรับการผลิตไฮโดรเจนก่อน ดังรูปที่ 3.3ก โดยมีรายละเอียดดังนี้

- 1) กำหนดความดันดำเนินงานเป็น 1 บรรยากาศ
- 2) กำหนดอุณหภูมิดำเนินงานเป็น 600 องศาเซลเซียส
- 3) กำหนดความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าแลกเปลี่ยนของขั้วแอโนดและขั้วแคโทด
- 4) กำหนดความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าเป็น 0 แอมแปร์ต่อตารางเมตร
- 5) จำลองกระบวนการด้วยแบบจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลต์ชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนสำหรับการผลิตไฮโดรเจน โดยใช้ค่าการนำไฟฟ้าที่อิเล็กโทรไลต์จากงานวิจัยของ Stuart และคณะ [44] และใช้ความดันย่อยของไอน้ำ ออกซิเจน และไฮโดรเจน จากสายการไหลที่ 3 3 และ 4 ตามลำดับในการคำนวณศักย์ไฟฟ้าของเซลล์
- 6) ทำซ้ำขั้นตอนที่ 5) แต่เปลี่ยนความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าเป็น 200 400 600 800 และ 1,000 แอมแปร์ต่อตารางเมตร ตามลำดับ
- 7) เปรียบเทียบผลการจำลองกระบวนการกับข้อมูลการทดลองของ Stuart และคณะ [44] ถ้าหากมีความคลาดเคลื่อนมากกว่า 10 เปอร์เซ็นต์ ให้กำหนดความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าแลกเปลี่ยนของขั้วแอโนดและขั้วแคโทดค่าใหม่และทำซ้ำขั้นตอนที่ 4) - 6)
- 8) ทำซ้ำขั้นตอนที่ 3) - 7) แต่เปลี่ยนอุณหภูมิดำเนินงานเป็น 650 องศาเซลเซียส
- 9) หาค่าคงที่ของความสัมพันธ์ระหว่างความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าแลกเปลี่ยนของขั้วแอโนดและแคโทดซึ่งสัมพันธ์กับอุณหภูมิตามสมการเอกซ์โพเนนเชียลของ Arrhenius โดยใช้วิธีกำลังสองน้อยที่สุด (Least mean square)

หลังจากได้ความสัมพันธ์ระหว่างความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าแลกเปลี่ยนกับอุณหภูมิในขั้นตอนแรกแล้ว ความสัมพันธ์นี้จะถูกนำไปใช้ในการเปรียบเทียบผลการจำลองกระบวนการกับข้อมูลการทดลองสำหรับการผลิตแก๊สสังเคราะห์ต่อไป ดังรูปที่ 3.3ข โดยมีรายละเอียดดังนี้

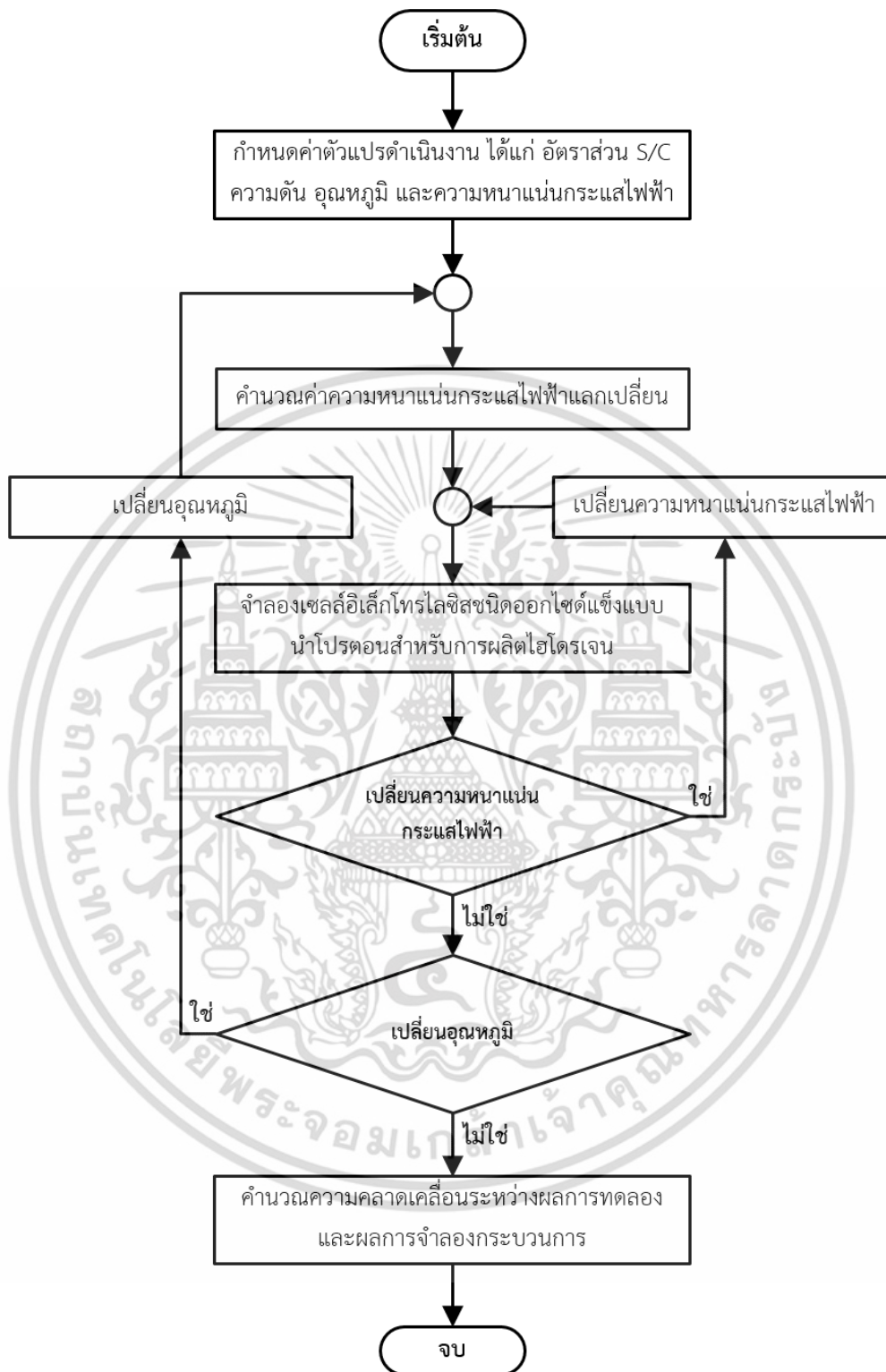
- 1) กำหนดอัตราส่วนไอน้ำต่อคาร์บอนไดออกไซด์เป็น 1 และความดันดำเนินงานเป็น 1 บรรยากาศ
- 2) กำหนดอุณหภูมิดำเนินงานเป็น 550 องศาเซลเซียส
- 3) คำนวณความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าแลกเปลี่ยนของขั้วแอโนดและขั้วแคโทดจากความสัมพันธ์ที่ได้
- 4) กำหนดความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าเป็น 0 แอมแปร์ต่อตารางเมตร

ก)



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ข)



รูปที่ 3.3 ขั้นตอนการเปรียบเทียบแบบจำลองกับข้อมูลการทดลองสำหรับ ก) การผลิตไฮโดรเจน
ข) การผลิตแก๊สสังเคราะห์

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

- 5) จำลองกระบวนการด้วยแบบจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนสำหรับการผลิตไฮโดรเจน โดยใช้ค่าการนำไฟฟ้าที่อิเล็กโทรไลต์จากงานวิจัยของ Ruiz-Trejo และ Irvine [45] และใช้ความดันย่อยของไอน้ำ ออกซิเจน และไฮโดรเจน จากสายการไหลที่ 3 3 และ 6 ตามลำดับ ในการคำนวณศักย์ไฟฟ้าของเซลล์
- 6) ทำซ้ำขั้นตอนที่ 5) แต่เปลี่ยนความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าเป็น 200 400 600 และ 800 แอมแปร์ ต่อตารางเมตร ตามลำดับ ขึ้นกับข้อมูลการทดลองของ Ruiz-Trejo และ Irvine [45]
- 7) ทำซ้ำขั้นตอนที่ 3) - 6) แต่เปลี่ยนอุณหภูมิดำเนินงานเป็น 600 และ 650 องศาเซลเซียส
- 8) เปรียบเทียบผลการจำลองกระบวนการกับข้อมูลการทดลองของ Ruiz-Trejo และ Irvine [45]

3.2 การศึกษาผลกระทบของปัจจัยต่างๆ

เมื่อแบบจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนสำหรับการผลิตแก๊สสังเคราะห์มีความน่าเชื่อถือแล้ว ขั้นตอนต่อไปคือการศึกษาปัจจัยที่คาดว่าจะส่งผลต่อประสิทธิภาพของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็ง ซึ่งได้แก่ โครงสร้างรองรับ อัตราส่วนไอน้ำต่อคาร์บอนไดออกไซด์ อุณหภูมิดำเนินงาน และความดันดำเนินงาน โดยมีรายละเอียดดังนี้

- 1) **โครงสร้างรองรับ** - โครงสร้างรองรับแบ่งเป็น 3 ประเภทคือ รองรับด้วยอิเล็กโทรไลต์ รองรับด้วยขั้วแอโนด และรองรับด้วยขั้วแคโทด ซึ่งแตกต่างกันที่ความหนาของแต่ละโครงสร้างของเซลล์ ในที่นี้ ความหนาของแต่ละโครงสร้างของเซลล์อ้างอิงจากงานวิจัยของ Ruiz-Trejo และ Irvine [45]
 - เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนที่รองรับด้วยอิเล็กโทรไลต์ จะมีขั้วแอโนดและขั้วแคโทดหนา 100 ไมโครเมตร ส่วนอิเล็กโทรไลต์หนา 200 ไมโครเมตร
 - เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนที่รองรับด้วยขั้วแอโนด จะมีขั้วแคโทดและอิเล็กโทรไลต์หนา 100 ไมโครเมตร ส่วนขั้วแอโนดหนา 200 ไมโครเมตร
 - เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนที่รองรับด้วยขั้วแคโทด จะมีขั้วแอโนดและอิเล็กโทรไลต์หนา 100 ไมโครเมตร ส่วนขั้วแคโทดหนา 200 ไมโครเมตร
- 2) **อัตราส่วนไอน้ำต่อคาร์บอนไดออกไซด์** - อัตราส่วนไอน้ำต่อคาร์บอนไดออกไซด์ที่ศึกษามี 4 กรณีคือ 1 2 3 และ 4 โดยเปลี่ยนทั้งอัตราการไหลไอน้ำและคาร์บอนไดออกไซด์ ดังนั้นกรณีศึกษาทั้งหมดจึงมีทั้งสิ้น 7 กรณี ดังนี้
 - อัตราส่วนไอน้ำต่อคาร์บอนไดออกไซด์ 1 ประกอบด้วย อัตราการไหลของไอน้ำ 0.95 กิโลโมลต่อชั่วโมง และอัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์ 0.950 กิโลโมลต่อชั่วโมง
 - อัตราส่วนไอน้ำต่อคาร์บอนไดออกไซด์ 2 ประกอบด้วย อัตราการไหลของไอน้ำ 1.90 กิโลโมลต่อชั่วโมง และอัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์ 0.950 กิโลโมลต่อชั่วโมง
 - อัตราส่วนไอน้ำต่อคาร์บอนไดออกไซด์ 3 ประกอบด้วย อัตราการไหลของไอน้ำ 0.95 กิโลโมลต่อชั่วโมง และอัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์ 0.475 กิโลโมลต่อชั่วโมง

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

- อัตราส่วนไอน้ำต่อคาร์บอนไดออกไซด์ 3 ประกอบด้วย อัตราการไหลของไอน้ำ 2.85 กิโลโมลต่อชั่วโมง และอัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์ 0.950 กิโลโมลต่อชั่วโมง
- อัตราส่วนไอน้ำต่อคาร์บอนไดออกไซด์ 3 ประกอบด้วย อัตราการไหลของไอน้ำ 0.95 กิโลโมลต่อชั่วโมง และอัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์ 0.316 กิโลโมลต่อชั่วโมง
- อัตราส่วนไอน้ำต่อคาร์บอนไดออกไซด์ 4 ประกอบด้วย อัตราการไหลของไอน้ำ 0.95 กิโลโมลต่อชั่วโมง และอัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์ 0.950 กิโลโมลต่อชั่วโมง
- อัตราส่วนไอน้ำต่อคาร์บอนไดออกไซด์ 4 ประกอบด้วย อัตราการไหลของไอน้ำ 3.80 กิโลโมลต่อชั่วโมง และอัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์ 0.238 กิโลโมลต่อชั่วโมง

3) **อุณหภูมิดำเนินงาน** - อุณหภูมิดำเนินงานที่ศึกษามี 3 กรณี คือ 550 600 และ 650 องศาเซลเซียส ในที่นี้ อุณหภูมิดำเนินงานหมายความรวมถึงอุณหภูมิของทั้งเซลล์ ดังนั้นการปรับอุณหภูมิจึงต้องปรับอุณหภูมิทั้ง 4 จุดพร้อมกัน คือ อุณหภูมิของสายการไหลที่ 1 อุณหภูมิที่ซิวแอโนด อุณหภูมิของสายการไหลที่ 5 และอุณหภูมิที่ซิวแคโทด

4) **ความดันดำเนินงาน** - ความดันดำเนินงานที่ศึกษามี 3 กรณี คือ 1 5 และ 10 บรรยากาศ เช่นเดียวกับอุณหภูมิดำเนินงาน การปรับความดันจะต้องปรับความดันทั้ง 4 จุดพร้อมกัน คือ ความดันของสายการไหลที่ 1 ความดันที่ซิวแอโนด ความดันของสายการไหลที่ 5 และความดันที่ซิวแคโทด

3.3 การหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมด้วยวิธีพื้นผิวตอบสนอง

ก่อนที่จะสามารถหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมด้วยวิธีพื้นผิวตอบสนองได้ แบบจำลองถดถอย (Regression model) จะต้องถูกสร้างขึ้นก่อน ซึ่งมีขั้นตอนการหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมด้วยวิธีพื้นผิวตอบสนองดังรูปที่ 3.4 โดยมีรายละเอียดดังนี้

1) **เลือกชนิดของวิธีการออกแบบการทดลอง** - วิธีการออกแบบการทดลองแต่ละชนิดจะเหมาะกับลักษณะงานที่แตกต่างกัน ในที่นี้ เลือกวิธีการออกแบบการทดลองดังนี้

- การทดลองแบบส่วนผสมกลาง (Central composite design, CCD) เนื่องจากสามารถศึกษาผลของปัจจัยสูงสุดถึงอันดับที่สองทำให้เหมาะสมสำหรับการหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมมากที่สุด ซึ่งแตกต่างจากการออกแบบการทดลองแบบแฟกทอเรียลที่ศึกษาผลของปัจจัยได้เพียงอันดับที่หนึ่งและอันตรกิริยาเท่านั้น เช่นเดียวกันกับการออกแบบการทดลองแบบทากูชิ
- α แบบ Face-centered ($\alpha = 1$) เนื่องจากข้อจำกัดของภาวะดำเนินงาน ซึ่งจะมีค่าติดลบเมื่อใช้ α แบบปกติคือ 1.682 ที่คำนวณจากสมการที่ (3.2) [26]

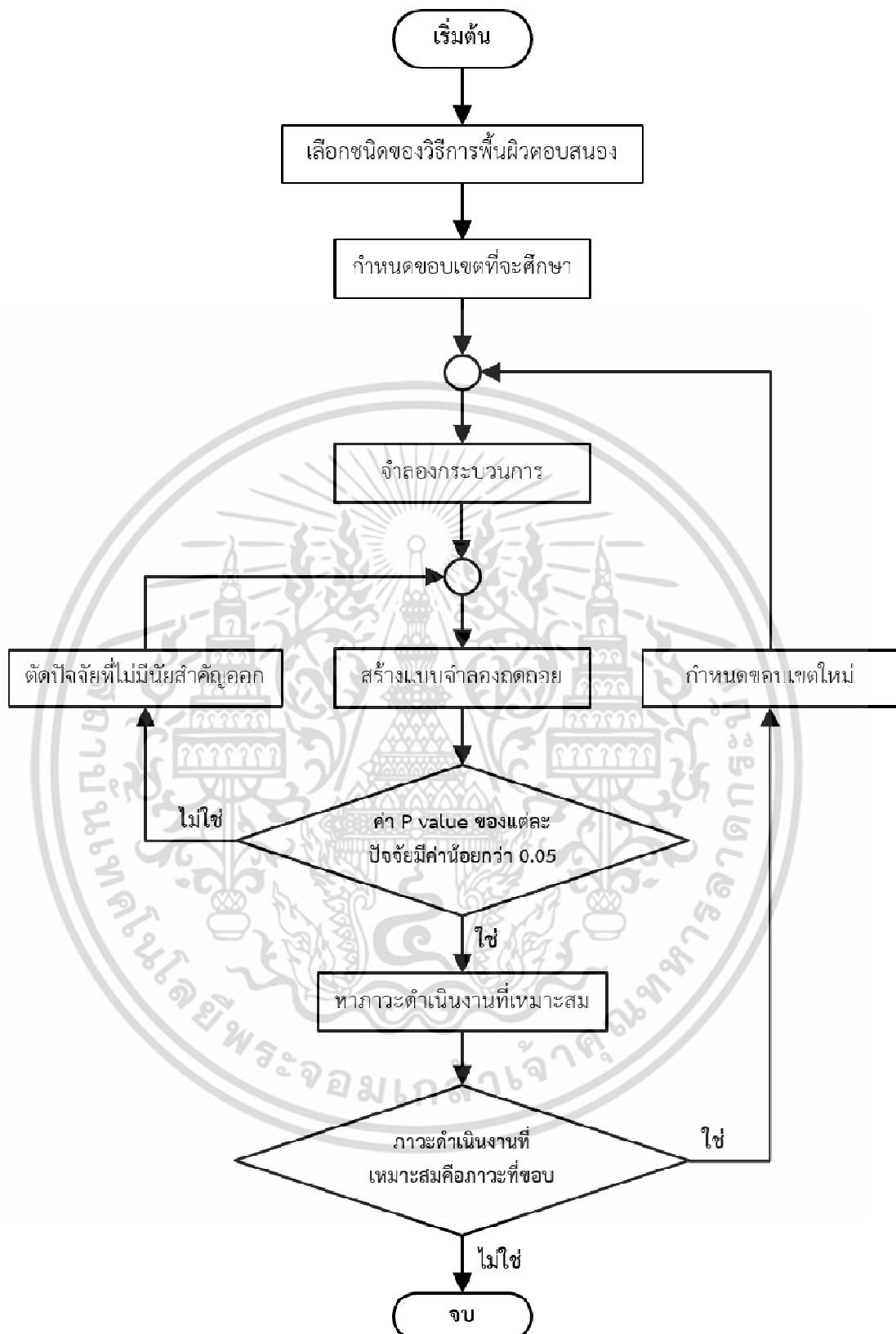
$$\alpha = \sqrt[n_F]{n_F} \quad (3.2)$$

เมื่อ n_F คือจำนวนของการทดลองที่มุม (Corner point)

- ไม่มีการทำซ้ำ เนื่องจากการจำลองกระบวนการถูกใช้ในศึกษา ซึ่งผลการจำลองกระบวนการจะเหมือนกันที่ภาวะดำเนินงานเดียวกัน

ดังนั้นเมื่อปัจจัยที่ศึกษามีจำนวน 3 ปัจจัย จะได้จำนวนการทดลองทั้งหมด 15 การทดลอง ได้แก่ 8 การทดลองที่มุม (Corner point) 6 การทดลองที่แนวแกน (Axial point) และ 1 การทดลองที่จุดกึ่งกลาง (Center point)

- 2) **กำหนดขอบเขตที่จะศึกษา** - การกำหนดขอบเขตของปัจจัยที่ศึกษาเป็นเรื่องสำคัญมาก หากกำหนดกว้างเกินไป อาจทำให้แบบจำลองถดถอยที่ได้มีโอกาสเกิดความผิดพลาดมากยิ่งขึ้น ในทางตรงข้าม หากกำหนดแคบเกินไป ขอบเขตที่ศึกษาอาจจะไม่ครอบคลุมภาวะดำเนินงานที่เหมาะสม ในที่นี้ จะใช้ผลการจำลองกระบวนการในหัวข้อ 3.1 เป็นตัวช่วยในการกำหนดขอบเขตที่จะศึกษา
- 3) **จำลองกระบวนการ** - หลังจากผ่าน 2 ขั้นตอนข้างต้น โปรแกรม Minitab จะออกแบบตารางซึ่งแสดงลำดับการทดลองและภาวะดำเนินงานที่ต้องทดลอง แต่ในที่นี้ จะจำลองกระบวนการโดยใช้แบบจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนสำหรับการผลิตแก๊สสังเคราะห์ผ่านโปรแกรม Aspen Plus แทนการทำการทดลองที่ภาวะดำเนินงานที่กำหนด
- 4) **สร้างแบบจำลองถดถอย** - ในขั้นต้น แบบจำลองอันดับสองจะถูกใช้เป็นแบบจำลองถดถอย ดังสมการที่ (2.49) ซึ่งโปรแกรม Minitab จะคำนวณค่า P value แสดงอยู่ในตารางการวิเคราะห์ความแปรปรวน ค่า P value แสดงถึงนัยสำคัญของแต่ละปัจจัย เมื่อกำหนดร้อยละความเชื่อมั่นเป็น 95 เปอร์เซ็นต์ ปัจจัยที่จะมีนัยสำคัญต่อผลตอบสนองหนึ่งๆ คือปัจจัยที่มีค่า P value น้อยกว่า 0.05 นอกจากนี้ โปรแกรมจะแสดงค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอยที่ได้พร้อมกับค่า R^2
- 5) **ตรวจสอบค่า P value ของแต่ละปัจจัย** - จากผลของการสร้างแบบจำลองถดถอย บางครั้งจะพบว่า บางปัจจัยมีค่า P value มากกว่า 0.05 ซึ่งแสดงว่า ปัจจัยนั้นไม่เกี่ยวข้องกับผลตอบสนองที่กำลังพิจารณา ดังนั้นจึงควรตัดปัจจัยที่ไม่เกี่ยวข้องทิ้งและสร้างแบบจำลองถดถอยใหม่ ซึ่งเรียกว่าแบบจำลองลดรูป (Reduced model)
- 6) **หาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสม** - การหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมจะใช้หลักการของฟังก์ชันความพึงพอใจในการพิจารณา ในที่นี้ ภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมคือภาวะดำเนินงานที่ทำให้เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนสำหรับการผลิตแก๊สสังเคราะห์ใช้พลังงานไฟฟ้าน้อยที่สุด ในขณะที่บริโภคน้ำคาร์บอนไดออกไซด์มากที่สุด ซึ่งความสำคัญของทั้งสองวัตถุประสงค์มีค่าพอๆ กัน ดังนั้นน้ำหนัก r จึงกำหนดให้มีค่าเป็น 1 ทั้งสองวัตถุประสงค์
- 7) **ตรวจสอบค่าภาวะดำเนินงานที่เหมาะสม** - สุดท้าย เมื่อได้ภาวะดำเนินงานที่เหมาะสม หากพบว่า ภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมเป็นค่าขอบเขตที่กำหนดในหัวข้อที่ 2) อาจสรุปได้ 2 กรณี คือ ภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมเป็นค่าที่ขอบเขตพอดี หรือภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมอยู่นอกขอบเขตที่กำหนด ดังนั้นเมื่อเกิดกรณีเช่นนี้ ควรจะกำหนดขอบเขตใหม่เพื่อยืนยันผลอีกครั้งหนึ่ง



รูปที่ 3.4 ขั้นตอนการหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมด้วยวิธีพื้นผิวตอบสนอง

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

บทที่ 4

ผลและอภิปรายผลการจำลองกระบวนการ

ผลการจำลองกระบวนการเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนถูกแบ่งเป็น 4 ส่วนหลัก ได้แก่ ผลการเปรียบเทียบผลการจำลองกระบวนการกับข้อมูลการทดลองแสดงในหัวข้อ 4.1 บทบาทของโครงสร้างรองรับแสดงในหัวข้อ 4.2 ผลของภาวะดำเนินงานของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอน ซึ่งประกอบด้วยผลของอัตราส่วนไอน้ำต่อคาร์บอนไดออกไซด์ อุณหภูมิ ดำเนินงาน และความดันดำเนินงาน แสดงในหัวข้อ 4.3 และแบบจำลองถดถอยและภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมแสดงในหัวข้อ 4.4

4.1 ผลการเปรียบเทียบผลการจำลองกระบวนการกับข้อมูลการทดลอง

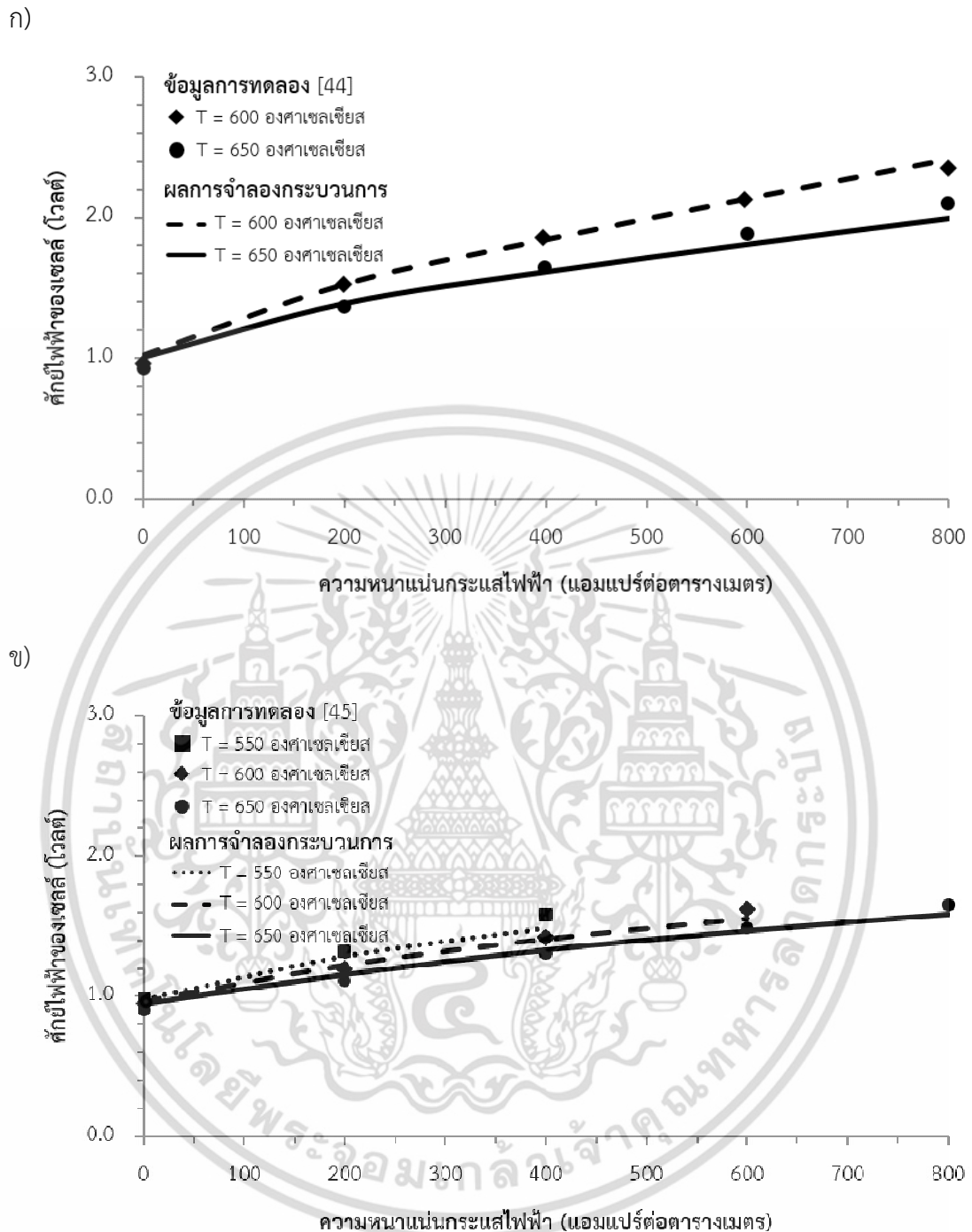
ผลการจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนสำหรับการผลิตไฮโดรเจน เปรียบเทียบกับการทดลองในงานวิจัยของ Stuart และคณะ [44] ซึ่งใช้ $\text{BaCe}_{0.9}\text{Y}_{0.1}\text{O}_{3-\delta}$ (BCY10) เป็นอิเล็กโทรไลต์หนา 450 ไมโครเมตร ใช้ Pt เป็นขั้วอิเล็กโทรด และไอน้ำที่เจือจางด้วย 5 เปอร์เซ็นต์ โดยโมลของ $\text{H}_2\text{-Ar}$ ถูกป้อนเข้าที่ขั้วแอโนด ที่อุณหภูมิ 600 และ 650 องศาเซลเซียส แสดงดังรูปที่ 4.1ก จะเห็นได้ว่า การทำนายของแบบจำลองแสดงผลสอดคล้องกับข้อมูลการทดลองของ Stuart และคณะ [44] ซึ่งคลาดเคลื่อนน้อยกว่า 10 เปอร์เซ็นต์ นอกจากนี้ ค่าคงที่ k และ E ของความสัมพันธ์ระหว่างความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าแลกเปลี่ยนที่ขั้วแอโนดและขั้วแคโทดกับอุณหภูมิตามสมการเอกซ์โพเนนเชียลของ Arrhenius ดังสมการที่ (2.28) - (2.29) ถูกแสดงในตารางที่ 4.1

ตารางที่ 4.1 สัมประสิทธิ์เลขชี้กำลังและพลังงานก่อกัมมันต์ของความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าแลกเปลี่ยน

k_{anode}	$2.802 \times 10^5 \Omega^{-1}\text{m}^{-2}$	E_{anode}	53.123 kJ/mol
k_{cathode}	$8.569 \times 10^5 \Omega^{-1}\text{m}^{-2}$	E_{cathode}	56.739 kJ/mol

ส่วนการเปรียบเทียบผลการจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนสำหรับการผลิตแก๊สสังเคราะห์กับงานวิจัยของ Ruiz-Trejo และ Irvine [45] ซึ่งใช้ BCZYC เป็นอิเล็กโทรไลต์หนา 200 ไมโครเมตร ใช้ Pt เป็นขั้วอิเล็กโทรดหนา 100 ไมโครเมตร และไอน้ำที่เจือจางด้วย 5 เปอร์เซ็นต์โดยโมลของ H_2 ถูกป้อนเข้าที่ขั้วแอโนด ที่อุณหภูมิ 550 600 และ 650 องศาเซลเซียส แสดงดังรูปที่ 4.1ข จะเห็นได้ว่า ผลการจำลองกระบวนการมีแนวโน้มเช่นเดียวกันกับข้อมูลการทดลองของ Ruiz-Trejo และ Irvine [45] ดังนั้นจึงสามารถสรุปได้ว่า ปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมีไม่เกี่ยวข้องกับการแปรผันของแก๊สสังเคราะห์ คาร์บอนไดออกไซด์ถูกเปลี่ยนเป็นคาร์บอนมอนอกไซด์ผ่านปฏิกิริยาวอเตอร์แก๊สชิฟต์แบบย้อนกลับตามสมมติฐาน ทั้งนี้เนื่องจากปฏิกิริยาวอเตอร์แก๊สชิฟต์แบบย้อนกลับสามารถเกิดขึ้นได้ง่ายกว่าปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมี

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ 4.1 ผลการเปรียบเทียบผลการจำลองกระบวนการกับข้อมูลการทดลอง ก) สำหรับการผลิตไฮโดรเจน ข) สำหรับการผลิตแก๊สสังเคราะห์

จากผลการเปรียบเทียบผลการจำลองกระบวนการกับข้อมูลการทดลอง จะเห็นได้ว่า ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์เปลี่ยนแปลงตามความหนาแน่นกระแสไฟฟ้า แต่อย่างไรก็ตาม เนื่องจากไม่มีข้อกำหนดในการเลือกค่าของความหนาแน่นกระแสไฟฟ้า ตัวแปรตัวอื่นจึงต้องถูกกำหนดเพื่อให้องศาเสรี (Degree of freedom) เป็น 0 ในงานวิจัยนี้เลือกกำหนดอัตราการใช้น้ำเนื่องจากสามารถคำนวณย้อนกลับเป็นความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าได้ตามสมการที่ (2.32) อย่างไรก็ตาม ยิ่งอัตราการใช้น้ำมีค่าน้อยเท่าไรยิ่งดีเท่าๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

แสดงถึงมูลค่าการลงทุนที่เกี่ยวข้องกับการเพิ่มอัตราการไหลที่ขั้วแอโนดจะสูงขึ้น [34] ดังนั้นจึงเลือกอัตราการใช้น้ำ 80 เปอร์เซ็นต์ [17] ตารางที่ 4.2 สรุปตัวแปรขาเข้าของแบบจำลองและภาวะดำเนินงานซึ่งจะถูกใช้ในหัวข้อต่อไป

ตารางที่ 4.2 ตัวแปรขาเข้าของแบบจำลองและภาวะดำเนินงาน

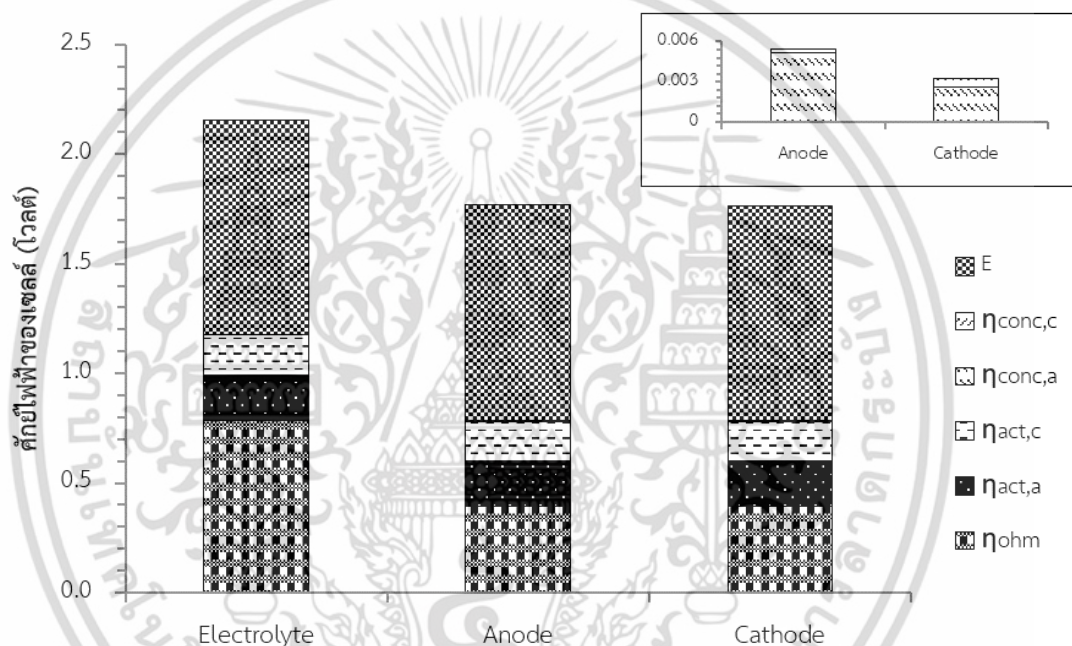
Active area of cell, A	0.04 m ²
Number of cell, N_{cell}	500 cells
Electrode pore radius, r	0.5 m
Electrode porosity, ζ	0.3
Electrode tortuosity [12], ϕ	$(1.5-0.5\zeta)^{1/2}$
Electrolyte conductivity, $\rho^{\text{electrolyte}}$	
for hydrogen production [44]	$\frac{7.66 \times 10^6}{T} \exp\left(-\frac{8.74 \times 10^3}{T}\right) \Omega^{-1}\text{m}^{-1}$
for syngas production [45]	$\frac{3.14 \times 10^4}{T} \exp\left(-\frac{3.86 \times 10^3}{T}\right) \Omega^{-1}\text{m}^{-1}$
Cathode thickness, τ_{cathode}	200×10^{-6} m
Electrolyte thickness, $\tau_{\text{electrolyte}}$	100×10^{-6} m
Anode thickness, τ_{anode}	100×10^{-6} m
Operating temperature, T	650 °C
Operating pressure, P	1 atm
Anode stream inlet composition	95 mol% H ₂ O/ 5 mol% H ₂
Cathode stream inlet composition	100 mol% CO ₂
Steam utilization factor, U_s	80 %

4.2 บทบาทของโครงสร้างรองรับ

รูปที่ 4.2 แสดงศักยภาพไฟฟ้าของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนที่โครงสร้างรองรับต่างๆ ซึ่งส่วนที่หนาที่สุดหนา 200 ไมโครเมตร และส่วนที่เหลือนหนา 100 ไมโครเมตร อุณหภูมิ 650 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ ภายใต้ภาวะดำเนินงานเดียวกันจะเห็นได้ว่า เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งที่รองรับด้วยอิเล็กโทรไลต์ต้องการศักยภาพไฟฟ้ามากที่สุดเปรียบเทียบกับเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งที่รองรับด้วยขั้วอิเล็กโทรด ทั้งนี้เนื่องจากการใช้อิเล็กโทรไลต์ที่หนาที่สุดจะทำให้ศักยภาพไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากความต้านทานไฟฟ้ามีค่ามากที่สุด ในกรณีเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งที่รองรับด้วยขั้วอิเล็กโทรด จากผลการจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนจะเห็นได้ว่า ศักยภาพไฟฟ้าของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งที่รองรับ

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ด้วยซ้ำแอนโตนีค่ามากกว่าศักย์ไฟฟ้าของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งที่รองรับด้วยซ้ำแคโทดเล็กน้อย ซึ่งความแตกต่างนี้เกิดขึ้นจากศักย์ไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากความเข้มข้นที่ซ้ำแอนโตนี เนื่องจากโมเลกุลของไอน้ำและออกซิเจนซึ่งมีขนาดใหญ่เคลื่อนที่ผ่านโครงสร้างรูพรุนที่ซ้ำแอนโตนี ในขณะที่ซ้ำแคโทดมีเพียงการแพร่ของไฮโดรเจนเท่านั้น ดังนั้นความแตกต่างของความหนาของซ้ำแคโทดจึงส่งผลต่อศักย์ไฟฟ้าของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนน้อยกว่าเมื่อเทียบกับซ้ำแอนโตนี สำหรับเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งที่รองรับด้วยซ้ำแอนโตนี ความหนาของซ้ำแอนโตนีที่มากกว่าจะยับยั้งการเคลื่อนที่ของโมเลกุลของไอน้ำและออกซิเจน ทำให้ศักย์ไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากความเข้มข้นที่ซ้ำแอนโตนีของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งที่รองรับด้วยซ้ำแอนโตนีค่ามากกว่าเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งที่รองรับด้วยซ้ำแคโทด



รูปที่ 4.2 ผลของโครงสร้างรองรับต่อศักย์ไฟฟ้าของเซลล์

นอกจากเหตุผลทางกายภาพ ความแตกต่างของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งที่รองรับด้วยซ้ำแอนโตนีและซ้ำแคโทดสามารถอธิบายในทางคณิตศาสตร์ได้ว่าเกิดจากความดันย่อยที่รอยต่อระหว่างซ้ำอิเล็กโทรดกับอิเล็กโทรไลต์ในศักย์ไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากความเข้มข้น ดังแสดงในสมการที่ (2.14) - (2.16) แม้ว่าศักย์ไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากความเข้มข้นจะมีผลเพียงเล็กน้อยต่อศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ แต่เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งที่รองรับด้วยซ้ำแคโทดมีศักย์ไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากความเข้มข้นมากกว่าเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งที่รองรับด้วยซ้ำแอนโตนีประมาณ 2 เท่า ดังนั้นจึงสามารถสรุปได้ว่าเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งที่รองรับด้วยซ้ำแคโทดเป็นโครงสร้างที่ดีที่สุดเนื่องจากต้องการศักย์ไฟฟ้าน้อยที่สุด ถึงแม้โดยภาพรวม เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งที่รองรับด้วยซ้ำแอนโตนีและเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งที่รองรับด้วยซ้ำแคโทดจะไม่มี

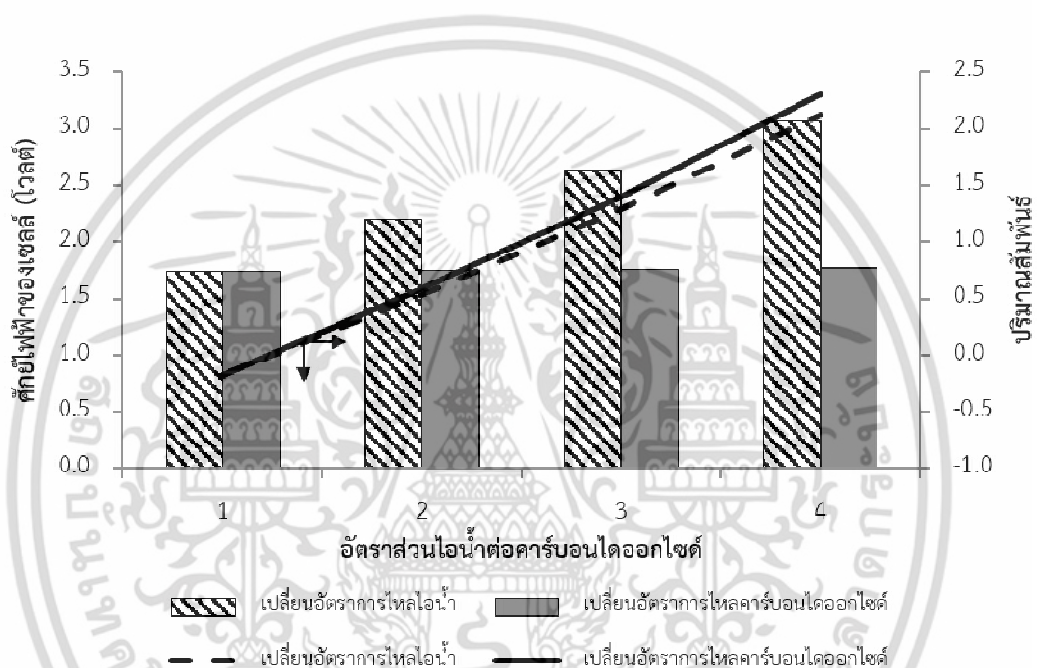
ความแตกต่างกันอย่างมีนัยสำคัญ และจะใช้เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งที่รองรับด้วยซ้ำแอนโตนีเป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

แคโทดในการศึกษาผลของภาวะดำเนินงานของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอน ในหัวข้อต่อไป

4.3 ผลของภาวะดำเนินงานของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอน

4.3.1 ผลของอัตราส่วนไอน้ำต่อคาร์บอนไดออกไซด์

รูปที่ 4.3 แสดงผลของอัตราส่วนไอน้ำต่อคาร์บอนไดออกไซด์ต่อศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ (แกนซ้าย) และปริมาณสัมพัทธ์ (แกนขวา) ที่อุณหภูมิ 650 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ ซึ่งผลของศักย์ไฟฟ้าแสดงในรูปกราฟแท่ง ส่วนกราฟเส้นแสดงผลของปริมาณสัมพัทธ์



รูปที่ 4.3 ผลของอัตราส่วนไอน้ำต่อคาร์บอนไดออกไซด์ต่อศักย์ไฟฟ้าของเซลล์และปริมาณสัมพัทธ์

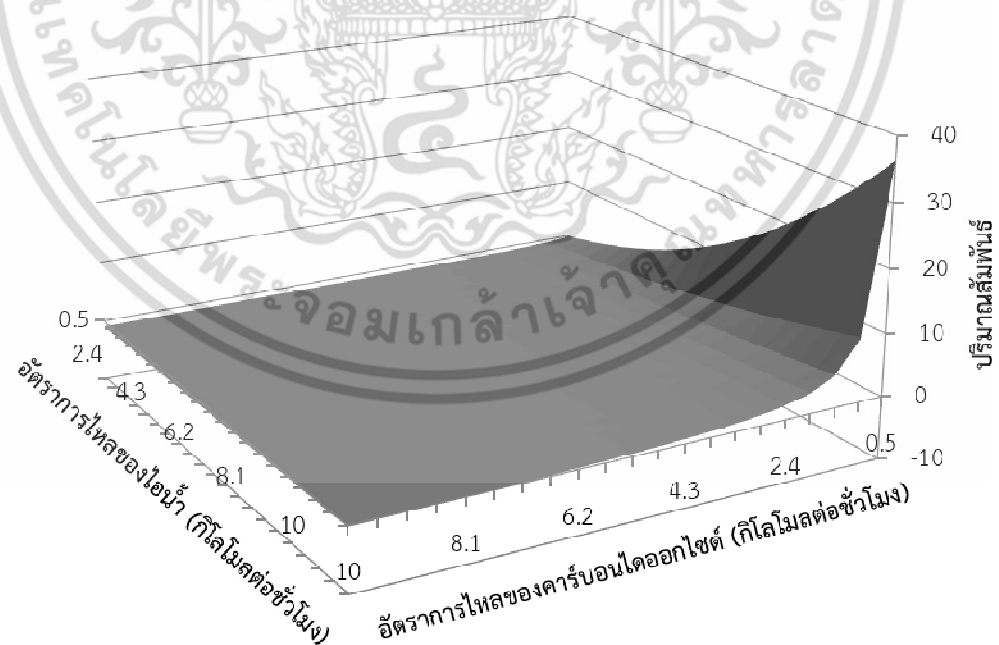
จากผลการจำลองกระบวนการ พบว่า อัตราส่วนไอน้ำต่อคาร์บอนไดออกไซด์จะไม่ส่งผลต่อศักย์ไฟฟ้า เมื่อเปลี่ยนอัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์ แต่ศักย์ไฟฟ้าจะเพิ่มขึ้นเมื่ออัตราการไหลของไอน้ำเพิ่มขึ้น จากสมการที่ (2.32) จะเห็นได้ว่า เพียงอัตราการไหลของไอน้ำเท่านั้นที่ส่งผลอย่างมีนัยสำคัญต่อการคำนวณความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าซึ่งถูกกำหนดโดยอัตราการใช้ไอน้ำ ความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าจะเพิ่มขึ้นเพื่อให้อัตราการใช้ไอน้ำเป็น 80 เปอร์เซ็นต์ ทำให้ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์สูงขึ้นตามไปด้วย ในทางกลับกัน ความหนาแน่นกระแสไฟฟ้าไม่ขึ้นกับอัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์ ดังนั้น ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์จึงมีค่าคงที่ นอกจากนี้ยังสามารถสรุปได้ว่า อัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์ไม่ได้ถูกพิจารณาในปฏิกิริยาไฟฟ้าเคมี เมื่อพิจารณาผลกระทบต่อปริมาณสัมพัทธ์ พบว่า ปริมาณสัมพัทธ์จะเพิ่มขึ้นเมื่อเพิ่มอัตราการไหลของไอน้ำ และ/หรือ ลดอัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์ เมื่อพิจารณาที่อัตราส่วนไอน้ำต่อคาร์บอนไดออกไซด์เป็น 1 จะเห็นได้ว่าปริมาณสัมพัทธ์มีค่าติดลบ ทั้งนี้เนื่องจากปริมาณของไอน้ำไม่เพียงพอที่จะทำปฏิกิริยากับคาร์บอนไดออกไซด์ปริมาณมาก ส่งผลเอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ให้คาร์บอนไดออกไซด์เหลือเป็นจำนวนมาก นอกจากนี้ ความชันของการเปลี่ยนอัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์มากกว่าการเปลี่ยนอัตราการไหลของไอน้ำ กล่าวคือ การเปลี่ยนอัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์มีนัยสำคัญมากกว่า

เพื่อที่จะหาอัตราส่วนไอน้ำต่อคาร์บอนไดออกไซด์ที่เหมาะสมต่อการใช้ผลิตเมทานอลต่อไป ผลของอัตราการไหลของไอน้ำและคาร์บอนไดออกไซด์ต่อปริมาณสัมพัทธ์ถูกวิเคราะห์เพิ่มเติม ดังรูปที่ 4.4 ซึ่งพบว่า เกรเดียนต์ของปริมาณสัมพัทธ์ต่ออัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์มากกว่าของอัตราการไหลของไอน้ำดังที่ได้กล่าวข้างต้น อย่างไรก็ตาม ความสัมพันธ์ที่ได้มีลักษณะไม่เป็นแผ่นเรียบเชิงเส้นดังที่สังเกตจากรูปที่ 4.3 จากผลการวิเคราะห์ สมการถดถอยซึ่งแสดงความสัมพันธ์ระหว่างอัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์และไอน้ำที่ทำให้ปริมาณสัมพัทธ์เป็น 2 แสดงดังสมการที่ (4.1)

$$\dot{n}_{\text{H}_2\text{O},\text{in}} = 3.9268\dot{n}_{\text{CO}_2,\text{in}} - 0.0639 \quad (4.1)$$

ดังนั้นอัตราส่วนไอน้ำต่อคาร์บอนไดออกไซด์ที่เหมาะสมสำหรับการประยุกต์ใช้แก๊สสังเคราะห์สำหรับการผลิตเมทานอลคือความชันของสมการที่ (4.1) ซึ่งมีค่าประมาณ 3.9 ทั้งนี้สมการนี้จะใช้ได้ก็ต่อเมื่ออุณหภูมิและความดันคงที่ อย่างไรก็ตาม เนื่องจากแก๊สสังเคราะห์ที่ผลิตมีวัตถุประสงค์เพื่อใช้สำหรับผลิตเมทานอลต่อ ดังนั้นปริมาณสัมพัทธ์จะต้องมีค่าเท่ากับ 2 ในการจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนส่วนต่อไปจึงใช้ฟังก์ชันข้อกำหนดการออกแบบ (Design spec) โดยปรับอัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์จนทำให้ปริมาณสัมพัทธ์มีค่าเป็น 2



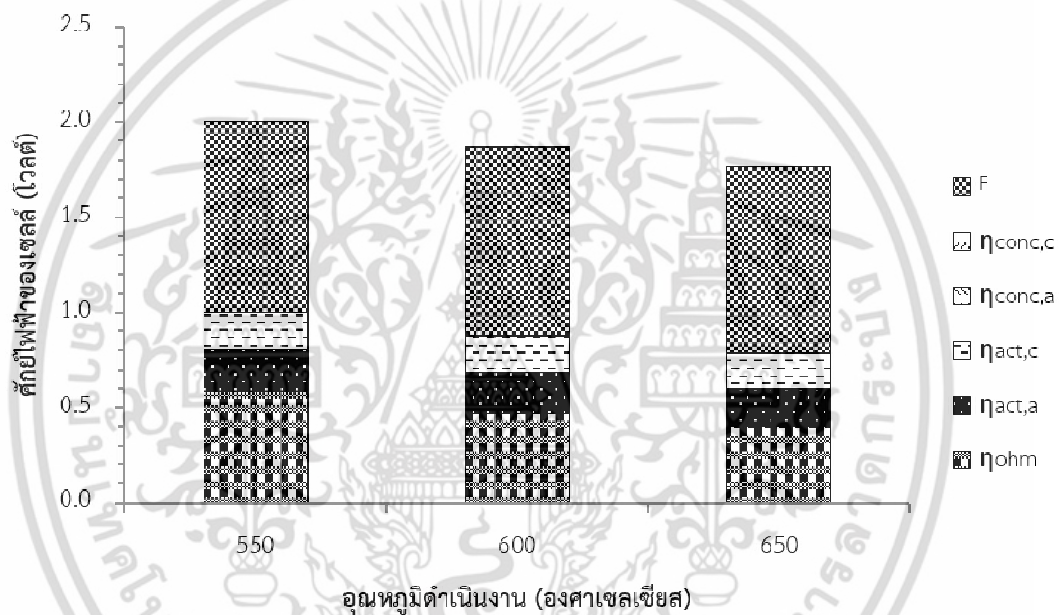
รูปที่ 4.4 ผลของอัตราการไหลขาเข้าของไอน้ำและคาร์บอนไดออกไซด์ต่อปริมาณสัมพัทธ์

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

4.3.2 ผลของอุณหภูมิดำเนินงาน

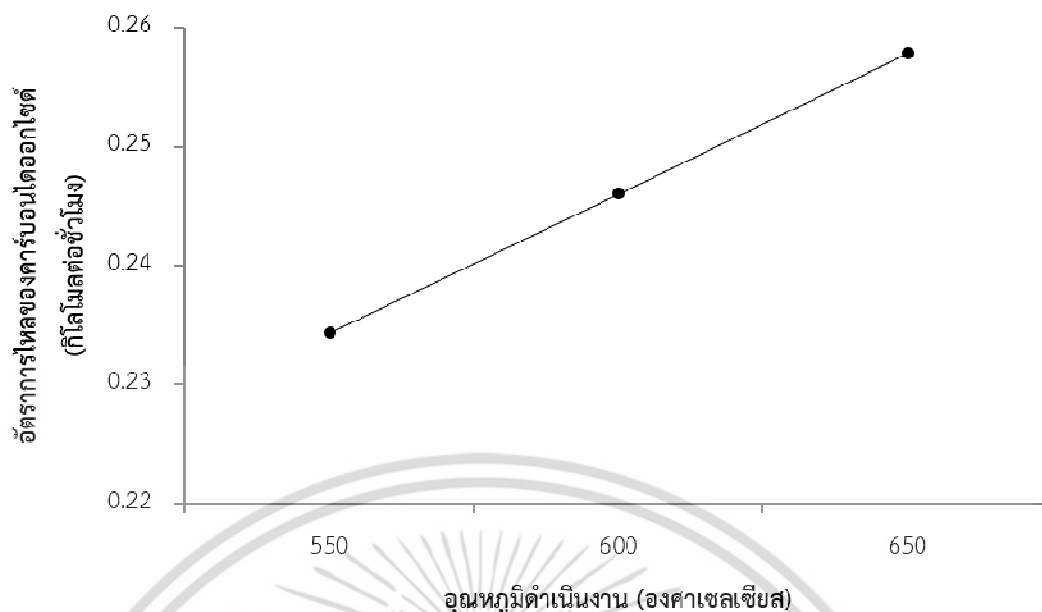
อุณหภูมิของเซลล์อิเล็กโทรไลต์ชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนถูกศึกษาในช่วง 550 ถึง 650 องศาเซลเซียส ผลการจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลต์ชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนแสดงให้เห็นว่า เมื่ออุณหภูมิดำเนินงานเพิ่มขึ้นจะส่งผลให้ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์มีค่าลดลง ดังแสดงในรูปที่ 4.5 จากสมการทางไฟฟ้าเคมี ทั้งศักย์ไฟฟ้าผันกลับได้และศักย์ไฟฟ้าสูญเสียผันกลับไม่ได้ทั้งหมดขึ้นกับอุณหภูมิดำเนินงานอย่างมาก ซึ่งเมื่ออุณหภูมิดำเนินงานสูงขึ้น ส่งผลให้

- 1) ศักย์ไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากความต้านทานไฟฟ้าลดลง เนื่องจากสภาพการนำโปรตอนมากขึ้น
- 2) ศักย์ไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากปฏิกิริยาเคมีลดลง เนื่องจากอัตราการเกิดปฏิกิริยาสูงขึ้น
- 3) ศักย์ไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากความเข้มข้นลดลง เนื่องจากแก๊สสามารถแพร่ได้ง่ายขึ้น



รูปที่ 4.5 ผลของอุณหภูมิดำเนินงานต่อศักย์ไฟฟ้าของเซลล์

รูปที่ 4.6 แสดงผลของอุณหภูมิดำเนินงานต่ออัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์ที่อัตราการไหลของไอน้ำ 0.95 กิโลโมลต่อชั่วโมง และความดัน 1 บรรยากาศ ผลการจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลต์ชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนพบว่า อัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์จะเพิ่มขึ้นเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้น ทั้งนี้เนื่องจากความจริงที่ว่า ปฏิกิริยาอวอเทอร์แก๊สซิฟิ์แบบย้อนกลับเป็นปฏิกิริยาคูดความร้อน ซึ่งมี $\Delta H_{rxn}^\circ = +41.2$ กิโลจูลต่อโมล [25] ดังนั้นการเพิ่มขึ้นของอุณหภูมิทำให้สมดุลเลื่อนไปทางเพิ่มผลิตภัณฑ์ กล่าวคือ คาร์บอนไดออกไซด์จะถูกใช้มากขึ้นเพื่อเปลี่ยนเป็นคาร์บอนมอนอกไซด์ จึงสามารถสรุปได้ว่า การดำเนินงานที่อุณหภูมิสูงเป็นภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมเนื่องจากทำให้ใช้ศักย์ไฟฟ้าที่น้อยกว่า ในขณะที่ใช้ปริมาณคาร์บอนไดออกไซด์ที่มากกว่า



รูปที่ 4.6 ผลของอุณหภูมิดำเนินงานต่ออัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์

4.3.3 ผลของความดันดำเนินงาน

ผลของความดันที่มีต่อศักย์ไฟฟ้าของเซลล์แสดงดังรูปที่ 4.7 จากผลการจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนพบว่า การเปลี่ยนแปลงความดันไม่ส่งผลต่อศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ โดยปกติ การเพิ่มของความดันส่งผลให้ศักย์ไฟฟ้าผันกลับได้มีค่าเพิ่มขึ้น ในทางตรงข้าม ศักย์ไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากความเข้มข้นจะลดลงเนื่องจากแก๊สสามารถแพร่ได้ง่ายขึ้น อย่างไรก็ตาม การลดลงของศักย์ไฟฟ้าสูญเสียเนื่องจากความเข้มข้นมีค่าใกล้เคียงกับการเปลี่ยนแปลงของศักย์ไฟฟ้าผันกลับได้ ดังนั้นจึงดูเหมือนว่าความดันไม่ส่งผลต่อศักย์ไฟฟ้าของเซลล์

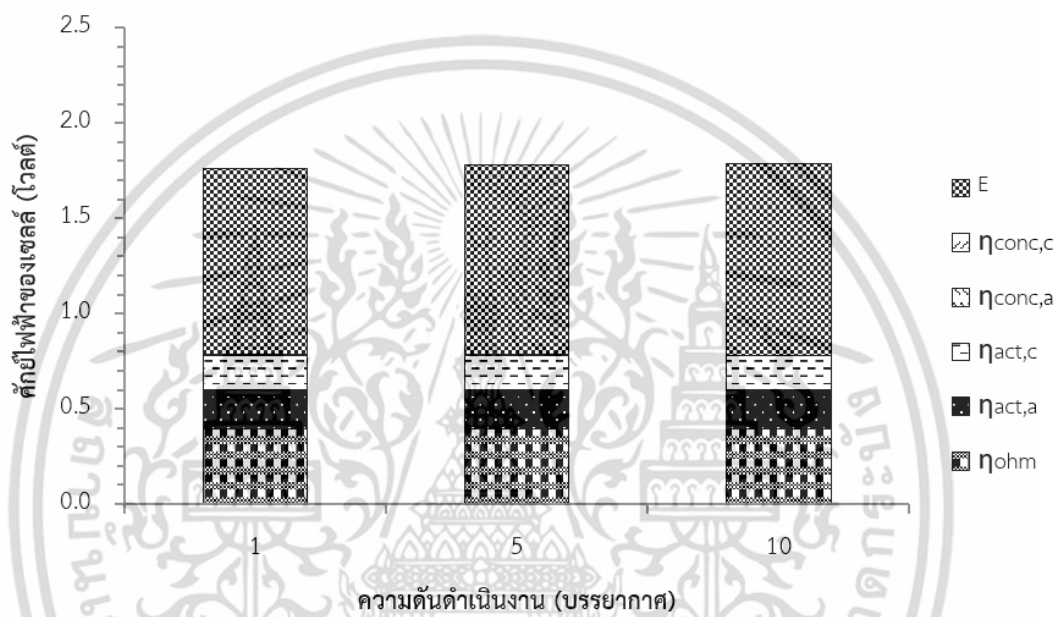
รูปที่ 4.8 แสดงผลของความดันดำเนินงานต่ออัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์ ซึ่งพบว่า อัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์แปรผกผันกับความดัน เนื่องจากปฏิกิริยาข้างเคียง (Side reaction) เช่น ปฏิกิริยาการผลิตมีเทน มีค่าการเลือก (Selectivity) มากกว่าปฏิกิริยาออกซิเดชันแก๊สซิฟิเคชันแบบย้อนกลับที่ความดันสูง ดังนั้นอัตราการไหลของไฮโดรเจนและคาร์บอนมอนอกไซด์ขาออกจึงน้อยลง แต่อัตราการไหลของมีเทนขาออกจะเพิ่มขึ้น อย่างไรก็ตาม การคำนวณปริมาณสัมพันธ์ไม่เกี่ยวข้องกับอัตราการไหลของมีเทน ปริมาณสัมพันธ์จึงมีค่าลดลง เพื่อให้ปริมาณสัมพันธ์มีค่าเป็น 2 ดังเดิม อัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์จึงมีค่าลดลง เพื่อลดปริมาณคาร์บอนไดออกไซด์ที่เหลือในสายผลิตภัณฑ์ขาออก

ในงานวิจัยนี้จะเริ่มพิจารณาที่ความดันดำเนินงาน 1 บรรยากาศ และศึกษาที่ความดันดำเนินงานเพิ่มขึ้นเป็น 5 และ 10 บรรยากาศ ทั้งนี้เนื่องจากการผลิตเมทานอลจะทำได้ดีที่ความดันสูง ดังนั้นจึงอาจมีโอกาสนำผลการจำลองของงานวิจัยนี้ไปใช้เพื่อศึกษาการผลิตเมทานอลภายในเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนต่อไป แต่อย่างไรก็ตาม จากผลการจำลองกระบวนการ

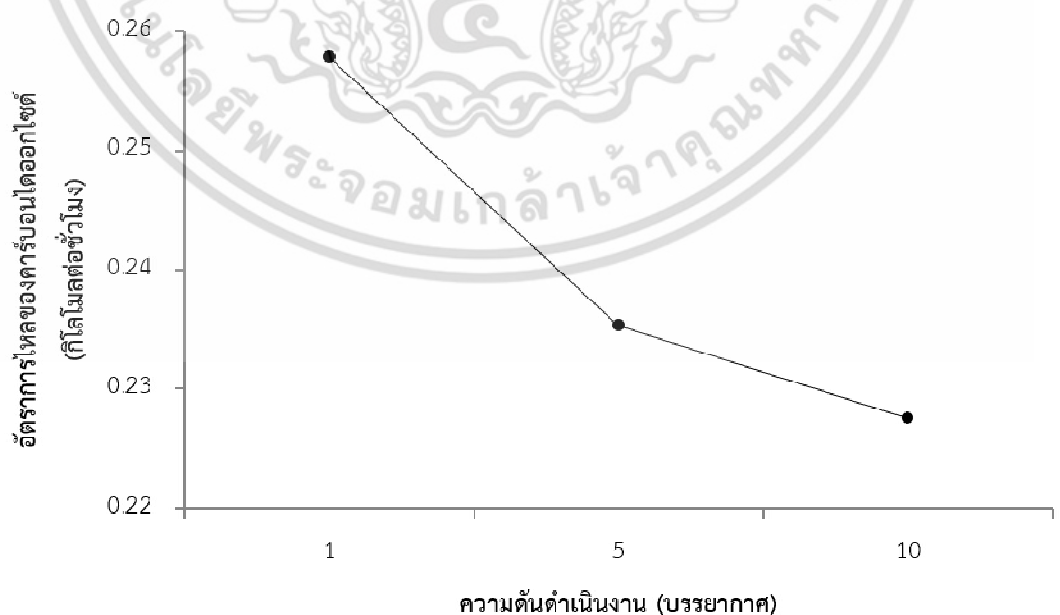
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

พบว่า ที่ความดันสูงไม่ทำให้เมทานอลในผลิตภัณฑ์มากขึ้น แต่กลับทำให้มีเทนมากขึ้นแทน ทั้งนี้ เนื่องจากการดำเนินงานที่อุณหภูมิสูงถึง 650 องศาเซลเซียส จึงทำให้ผลิตภัณฑ์ที่ชอบที่จะเป็นแก๊สดังเช่นมีเทนมากกว่าของเหลวดังเช่นเมทานอล

ในทางทฤษฎี ความดันดำเนินงานควรเป็น 1 บรรยากาศ เนื่องจากไม่จำเป็นต้องสูญเสียพลังงานในการเพิ่มหรือลดความดัน แต่ในมุมมองของการดำเนินงาน ผลิตภัณฑ์ต้องถูกส่งไปยังถังเก็บนั้นหมายความว่า ผลิตภัณฑ์ควรมีแรงขับเคลื่อน (Driving force) เพื่อที่จะดันให้ผลิตภัณฑ์เข้าสู่ถังเก็บได้ ดังนั้นความดันจึงควรมีค่ามากกว่า 1 บรรยากาศในทางปฏิบัติ



รูปที่ 4.7 ผลของความดันดำเนินงานต่อศักย์ไฟฟ้าของเซลล์



รูปที่ 4.8 ผลของความดันดำเนินงานต่ออัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สวอนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

4.4 แบบจำลองถดถอยและภาวะดำเนินงานที่เหมาะสม

4.4.1 แบบจำลองถดถอย

ในการดำเนินงานเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนสำหรับการผลิตแก๊สสังเคราะห์ที่ต้องการใช้ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์น้อยที่สุด แต่ใช้คาร์บอนไดออกไซด์มากที่สุด ดังนั้นในการหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสม ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ (V) และอัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์ (C) จึงเป็นผลตอบสนองที่ต้องพิจารณา ในขณะที่ปัจจัยที่พิจารณาคือภาวะดำเนินงานของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอน ซึ่งได้แก่ อัตราการไหลของไอน้ำ (W) อุณหภูมิดำเนินงาน (T) และความดันดำเนินงาน (P) จากการศึกษาภาวะดำเนินงานของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนจะสามารถเลือกขอบเขตของปัจจัยที่ศึกษาได้ ซึ่งสรุปดังตารางที่ 4.3

ตารางที่ 4.3 ปัจจัยและระดับของการทดลองแบบส่วนผสมกลาง

ปัจจัย	ระดับต่ำ (-1)	ระดับกลาง (0)	ระดับสูง (+1)
W : อัตราการไหลของไอน้ำ (กิโลโมลต่อชั่วโมง)	0.950	5.475	10.00
T : อุณหภูมิดำเนินงาน (องศาเซลเซียส)	550	600	650
P : ความดันดำเนินงาน (บรรยากาศ)	1.0	5.5	10

เมื่อการออกแบบการทดลองด้วยการทดลองแบบส่วนผสมกลางพบว่า จำนวนการทดลองเมื่อไม่ทำซ้ำมี 15 การทดลอง ผลการทดลองหรือผลการจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนทีภาวะดำเนินงานจากการทดลองแบบส่วนผสมกลางแสดงดังตารางที่ 4.4

ตารางที่ 4.4 การทดลองแบบส่วนผสมกลางและผลการจำลองกระบวนการ

Runs	W	T	P	V	C
1	0.950	550	1.0	2.00	0.23
2	10.00	550	1.0	7.74	2.33
3	0.950	650	1.0	1.76	0.26
4	10.00	650	1.0	5.72	2.56
5	0.950	550	10	2.02	0.22
6	10.00	550	10	7.73	2.14
7	0.950	650	10	1.79	0.23
8	10.00	650	10	5.72	2.26
9	0.950	600	5.5	1.88	0.22
10	10.00	600	5.5	6.56	2.24
11	5.475	550	5.5	4.91	1.20
12	5.475	650	5.5	3.80	1.28

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 4.4 การทดลองแบบส่วนผสมกลางและผลการจำลองกระบวนการ (ต่อ)

Runs	<i>W</i>	<i>T</i>	<i>P</i>	<i>V</i>	<i>C</i>
13	5.475	600	1.0	4.26	1.35
14	5.475	600	10	4.27	1.21
15	5.475	600	5.5	4.27	1.24

ตารางที่ 4.5 สรุปการวิเคราะห์ความแปรปรวนของแบบจำลองถดถอยซึ่งเป็นแบบจำลองอันดับสอง ตารางการวิเคราะห์ความแปรปรวนจำเป็นต่อการศึกษาปัจจัยที่มีนัยสำคัญต่อผลตอบสนอง หากค่า P value น้อยกว่า 0.05 แสดงว่าปัจจัยนั้นมีนัยสำคัญต่อผลตอบสนอง ในทางตรงข้าม ปัจจัยจะถูกละทิ้งเมื่อค่า P value มากกว่า 0.05

ตารางที่ 4.5 การวิเคราะห์ความแปรปรวนสำหรับแบบจำลองถดถอยของสองผลตอบสนอง

Source	DF	Cell potential		Carbon dioxide flow rate	
		SS	P-value	SS	P-value
Model	9	62.4958	0.000	10.8952	0.000
Linear	3	60.8826	0.000	10.8508	0.000
<i>W</i>	1	57.7297	0.000	10.7832	0.000
<i>T</i>	1	3.1527	0.000	0.0221	0.003
<i>P</i>	1	0.0002	0.764	0.0455	0.000
Square	3	0.0219	0.094	0.0059	0.151
<i>W</i> × <i>W</i>	1	0.0047	0.180	0.0000	0.938
<i>T</i> × <i>T</i>	1	0.0201	0.024	0.0000	0.831
<i>P</i> × <i>P</i>	1	0.0000	0.974	0.0043	0.057
2-way interaction	3	1.5912	0.000	0.0386	0.004
<i>W</i> × <i>T</i>	1	1.5909	0.000	0.0125	0.009
<i>W</i> × <i>P</i>	1	0.0003	0.734	0.0240	0.002
<i>T</i> × <i>P</i>	1	0.0000	0.895	0.0020	0.151
Error	5	0.0097		0.0036	
Total	14	62.5055		10.8988	

หมายเหตุ DF ย่อมาจาก Degrees of freedom และ SS ย่อมาจาก Sum of squares ซึ่งทั้งสองค่าใช้สำหรับการคำนวณ P-value เท่านั้น

จากตารางที่ 4.5 พบว่า ปัจจัยที่มีนัยสำคัญต่อศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ประกอบด้วย อัตราการไหลของไอน้ำ อุณหภูมิดำเนินงาน อุณหภูมิดำเนินงานกำลังสอง และอันตรกิริยาระหว่างอัตราการไหลของไอน้ำกับอุณหภูมิดำเนินงาน ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ไหลของไอน้ำกับอุณหภูมิดำเนินงาน ส่วนปัจจัยที่มีนัยสำคัญต่ออัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์ ประกอบด้วย อัตราการไหลของไอน้ำ อุณหภูมิดำเนินงาน ความดันดำเนินงาน อันตรกิริยาระหว่าง อัตราการไหลของไอน้ำกับอุณหภูมิดำเนินงาน และอันตรกิริยาระหว่างอัตราการไหลของไอน้ำกับความดันดำเนินงาน

เมื่อเปรียบเทียบแบบจำลองถดถอยเต็มรูปแบบกับแบบจำลองถดถอยลดรูปจะพบว่า เมื่อตัดปัจจัยที่ไม่มีนัยสำคัญออก แบบจำลองถดถอยลดรูปยังคงให้ระดับความเชื่อมั่นสูงถึง 99 เปอร์เซ็นต์ ซึ่งแทบไม่ต่างไปจากแบบจำลองถดถอยเต็มรูปดังตารางที่ 4.6

ตารางที่ 4.6 แบบจำลองถดถอยของสองผลตอบแทน

ปัจจัย	รูปแบบ	สมการ	R ²
ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์	เต็มรูป	$V = 14.29 + 1.738W - 0.0429T - 0.0028P - 0.00210W^2 + 0.000035T^2 - 0.00005P^2 - 0.001971W \cdot T - 0.000276W \cdot P + 0.000010T \cdot P$	99.98
	ลดรูป	$V = 11.80 + 1.7136W - 0.0344T + 0.000028T^2 - 0.00197W \cdot T$	99.98
อัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์	เต็มรูป	$C = 0.36 + 1.400W - 0.00142T - 0.0200P - 0.000066W^2 + 0.000001T^2 + 0.002023P^2 + 0.000175W \cdot T - 0.00269W \cdot P - 0.000071T \cdot P$	99.97
	ลดรูป	$C = 0.021 + 0.1393W - 0.000018T - 0.00026P + 0.000175W \cdot T - 0.00269W \cdot P$	99.89

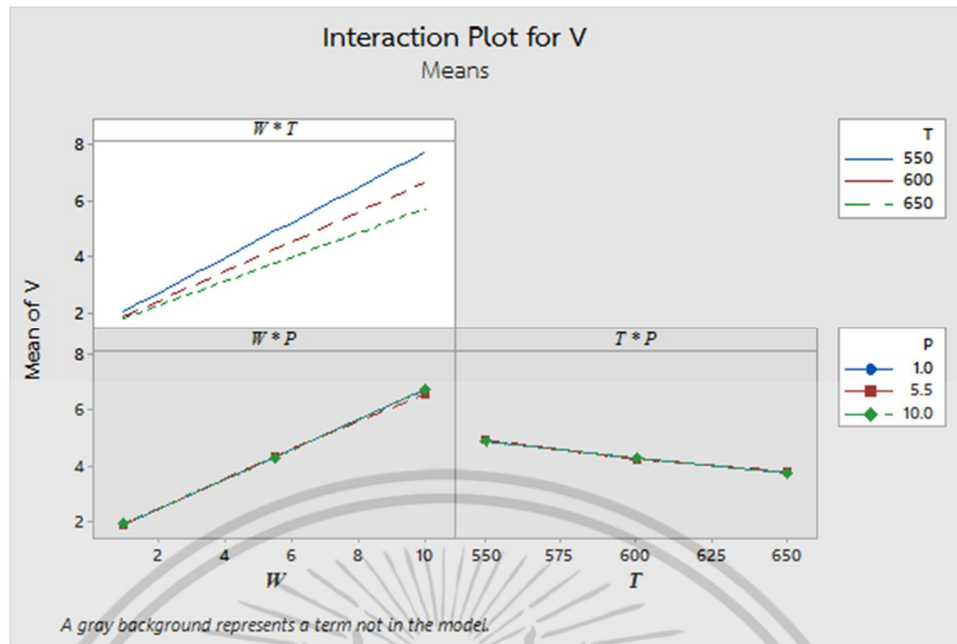
ดังนั้นแบบจำลองถดถอยลดรูปสำหรับศักย์ไฟฟ้าของเซลล์และอัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์ ดังสมการที่ (4.2) - (4.3) จะถูกนำไปใช้ในการศึกษาขั้นต่อไป

$$V = 11.80 + 1.7136W - 0.0344T + 0.000028T^2 - 0.00197W \cdot T \quad (4.2)$$

$$C = 0.021 + 0.1393W - 0.000018T - 0.00026P + 0.000175W \cdot T - 0.00269W \cdot P \quad (4.3)$$

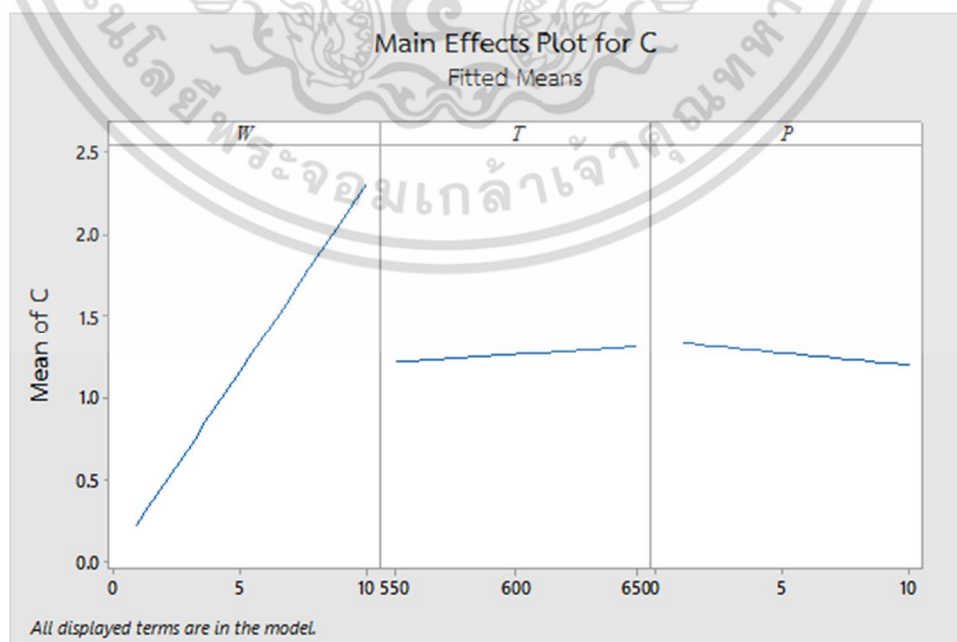
4.4.2 กราฟปัจจัยหลักและกราฟอันตรกิริยา

สัมประสิทธิ์ในแบบจำลองถดถอยลดรูปสามารถแสดงแนวโน้มของปัจจัยต่อผลตอบแทนได้ ยกตัวอย่างเช่น สัมประสิทธิ์หน้าพจน์อัตราการไหลของไอน้ำในสมการที่ (4.2) มีค่า +1.7136 ซึ่งหมายความว่า เมื่ออัตราการไหลของไอน้ำเพิ่มขึ้น 1 กิโลโมลต่อชั่วโมง จะทำให้ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์เพิ่มขึ้น 1.7136 โวลต์ ในทางตรงข้าม สัมประสิทธิ์หน้าพจน์อุณหภูมิดำเนินงานในสมการที่ (4.3) มีค่า -0.000018 หมายความว่า เมื่ออุณหภูมิดำเนินงานเพิ่มขึ้น 1 องศาเซลเซียส จะทำให้อัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์ลดลง 0.000018 กิโลโมลต่อชั่วโมง อย่างไรก็ตาม เพื่อให้เห็นภาพได้อย่างชัดเจน ควรวิเคราะห์ด้วยกราฟปัจจัยหลัก (Main effect plot) และกราฟอันตรกิริยา (Interaction plot) ซึ่งกราฟปัจจัยหลักและกราฟอันตรกิริยาของศักย์ไฟฟ้าของเซลล์แสดงดังรูปที่ 4.9 - 4.10 และกราฟปัจจัยหลักและกราฟอันตรกิริยาของอัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์แสดงดังรูปที่ 4.11 - 4.12 ตามลำดับ เมื่อกราฟที่มีพื้นหลังสีขาวคือปัจจัยที่อยู่ในแบบจำลองถดถอยลดรูป และกราฟที่มีพื้นหลังสีเทาคือปัจจัยที่ไม่อยู่ในแบบจำลองถดถอยลดรูป



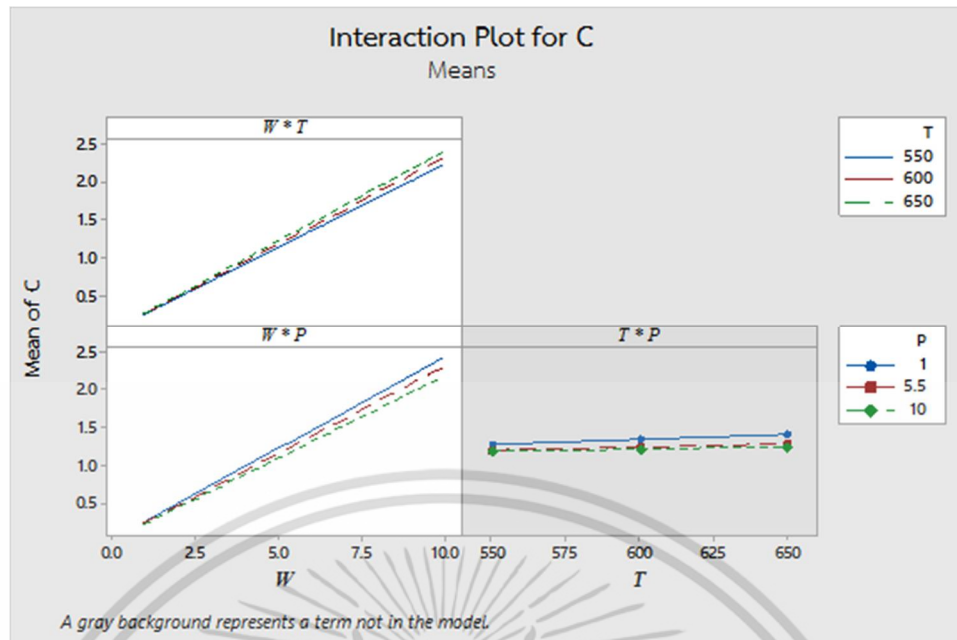
รูปที่ 4.10 กราฟอันตรกิริยาของศักย์ไฟฟ้าของเซลล์

จากรูปที่ 4.11 จะเห็นได้ว่า การเปลี่ยนแปลงอัตราการไหลของไอน้ำส่งผลอย่างมากต่ออัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์ ในขณะที่การเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิดำเนินงานและความดันดำเนินงานส่งผลน้อยกว่า ซึ่งให้ผลเช่นเดียวกับรูปที่ 4.12 กราฟอันตรกิริยาระหว่างอัตราการไหลของไอน้ำกับอุณหภูมิดำเนินงานและกราฟอันตรกิริยาระหว่างอัตราการไหลของไอน้ำกับความดันดำเนินงานมีค่าค่อนข้างใกล้เคียงกัน แต่อย่างไรก็ตาม อัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์มีค่าอยู่ระหว่าง 0 ถึง 2.5 ผลของการเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิดำเนินงานและความดันดำเนินงานซึ่งมีอันดับของขนาด (Order of magnitude) ประมาณ 10^{-1} จึงยังคงมีนัยสำคัญ



รูปที่ 4.11 กราฟปัจจัยหลักของอัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

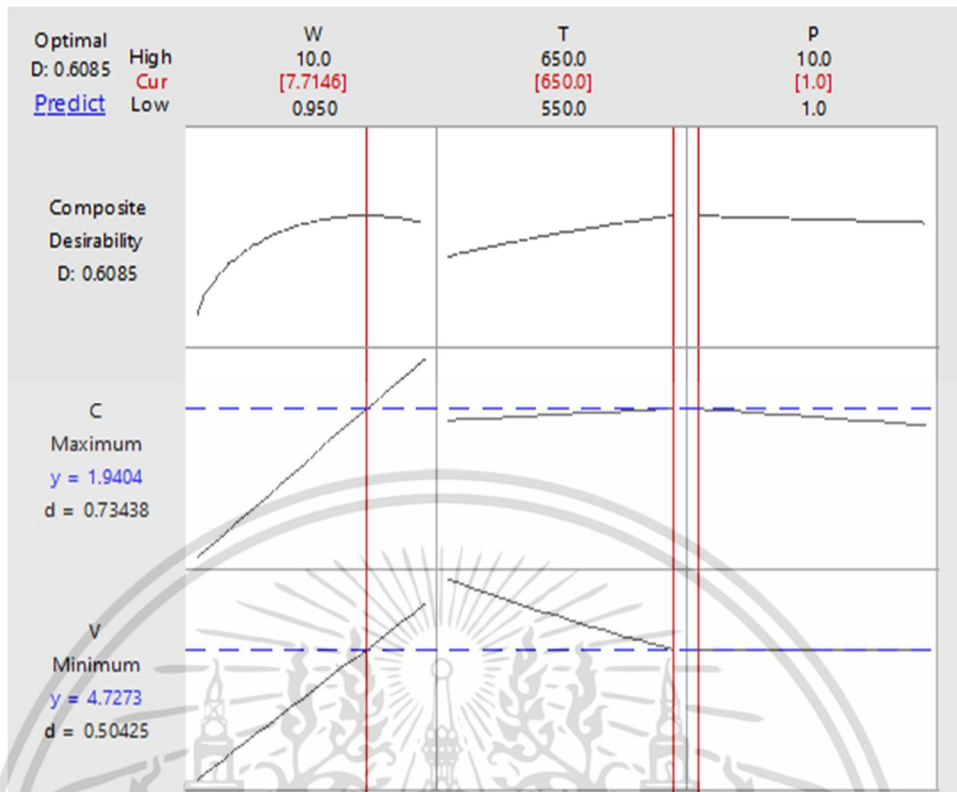


รูปที่ 4.12 กราฟอันตรกิริยาของอัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์

4.4.3 ภาวะดำเนินงานที่เหมาะสม

เพื่อที่จะหาภาวะดำเนินงานที่ทำให้ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์น้อยที่สุดและอัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์มากที่สุด แบบจำลองถดถอยลดรูปในสมการที่ (4.2) และ (4.3) ถูกใช้เป็นฟังก์ชันวัตถุประสงค์ (Objective function) จากกราฟภาวะดำเนินงานที่เหมาะสม (Optimization plot) ดังรูปที่ 4.13 พบว่า เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนควรดำเนินงานที่อัตราการไหลของไอน้ำ 7.71 กิโลโมลต่อชั่วโมง อุณหภูมิดำเนินงาน 650 องศาเซลเซียส และความดันดำเนินงาน 1 บรรยากาศ ซึ่งทำให้ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์เป็น 4.73 โวลต์ และใช้อัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์ประมาณ 1.94 กิโลโมลต่อชั่วโมง หรือเทียบเท่า 154 ลูกบาศก์เมตรต่อชั่วโมง

จากผลการหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสม พบว่า อุณหภูมิดำเนินงานที่ภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมเป็นค่าขอบเขตที่สูงที่สุด ซึ่งควรกำหนดขอบเขตของอุณหภูมิดำเนินงานและศึกษาใหม่ แต่อย่างไรก็ตาม การเลือกขอบเขตของอุณหภูมิดำเนินงานถูกจำกัดด้วยขอบเขตของแบบจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนซึ่งเปรียบเทียบกับข้อมูลการทดลองที่อุณหภูมิ 550 - 650 องศาเซลเซียส การนำไปใช้นอกขอบเขตอาจทำให้เกิดความผิดพลาดขึ้นได้ เช่นเดียวกับความดันดำเนินงานที่ภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมเป็นค่าขอบเขตที่ต่ำที่สุด แต่ในทางปฏิบัติ การดำเนินงานที่ต่ำกว่า 1 บรรยากาศ จะต้องสูญเสียพลังงานในการทำให้เป็นสุญญากาศซึ่งไม่ใช่ลักษณะที่พึงประสงค์ ดังนั้นจึงไม่มีการกำหนดขอบเขตของอุณหภูมิดำเนินงานและความดันดำเนินงานใหม่



รูปที่ 4.13 กราฟภาวะดำเนินงานที่เหมาะสม

เมื่อพิจารณาฟังก์ชันความพึงพอใจรวม (D) ซึ่งควรมีค่าเข้าใกล้ 1 แต่ในงานวิจัยนี้ฟังก์ชันความพึงพอใจรวมมีค่าเพียง 0.6085 ทั้งนี้เกิดจากผลของอัตราการไหลของไอน้ำต่อศักย์ไฟฟ้าของเซลล์และอัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์เป็นไปในทิศทางเดียวกัน ดังนั้นเมื่อต้องการให้ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์มีค่าต่ำที่สุด อัตราการไหลของไอน้ำควรจะมีค่าต่ำที่สุดด้วยซึ่งจะส่งผลให้ใช้อัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์น้อยเช่นกัน อย่างไรก็ตาม ที่อัตราการไหลของไอน้ำ 7.71 กิโลโมลต่อชั่วโมงทำให้ฟังก์ชันความพึงพอใจรวมของไอน้ำมีค่าสูงที่สุด ซึ่งสังเกตได้จากรูปที่ 4.13

4.4.4 ผลการตรวจสอบแบบจำลองถดถอยลดรูป

เพื่อเพิ่มความมั่นใจให้แบบจำลองถดถอยลดรูป ภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมที่ได้จากวิธีการพื้นผิวตอบสนองคือที่อัตราการไหลของไอน้ำ 7.71 กิโลโมลต่อชั่วโมง อุณหภูมิดำเนินงาน 650 องศาเซลเซียส และความดันดำเนินงาน 1 บรรยากาศ จะถูกตรวจสอบอีกครั้งโดยการจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนด้วยภาวะดำเนินงานที่ได้ ผลการจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนแสดงในภาคผนวก ข พบว่า ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์มีค่าเป็น 4.74 โวลต์ และใช้ปริมาณคาร์บอนไดออกไซด์ประมาณ 1.98 กิโลโมลต่อชั่วโมง ดังนั้นแบบจำลองถดถอยลดรูปทำนายศักย์ไฟฟ้าของเซลล์และอัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์คลาดเคลื่อน 0.21 และ 2.02 เปอร์เซ็นต์ ตามลำดับ

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สรุปผลการดำเนินงานและข้อเสนอแนะ

5.1 สรุปผลการดำเนินงาน

งานวิจัยนี้ศึกษาเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนสำหรับการผลิตแก๊สสังเคราะห์ที่มีศักยภาพในการผลิตเมทานอลโดยใช้โปรแกรม Aspen Plus ในการจำลองกระบวนการ และใช้โปรแกรม Aspen Plus ร่วมกับโปรแกรม Minitab ในการหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสม

แบบจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนถูกพัฒนาและเปรียบเทียบกับข้อมูลการทดลองของเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนสำหรับการผลิตไฮโดรเจนและแก๊สสังเคราะห์ ผลการเปรียบเทียบสรุปได้ว่า ปฏิกริยาอวตอร์แกซิฟแบบย้อนกลับไม่เกี่ยวข้อง กับปฏิริยาไฟฟ้าเคมี จากนั้นเมื่อศึกษาผลของโครงสร้างรองรับ พบว่า เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนที่รองรับด้วยซิวแคโทดต้องการศักย์ไฟฟ้าของเซลล์น้อยที่สุดเมื่อเปรียบเทียบกับเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนที่รองรับด้วยอิเล็กโทรไลต์และซิวแอโนด และการศึกษาผลของภาวะดำเนินงาน พบว่า อัตราส่วนไอน้ำต่อคาร์บอนไดออกไซด์ที่เหมาะสมสำหรับการผลิตแก๊สสังเคราะห์ที่มีศักยภาพในการผลิตเมทานอลคือประมาณ 3.9 ที่อุณหภูมิและความดันคงที่ นอกจากนี้ยังพบว่า เซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนชอบดำเนินงานที่อุณหภูมิสูงและความดันต่ำ

ผลการจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนในโปรแกรม Aspen Plus ถูกใช้ร่วมโปรแกรม Minitab เพื่อสร้างแบบจำลองถดถอยและหาปัจจัยที่มีนัยสำคัญด้วยวิธีพื้นผิวตอบสนอง ซึ่งพบว่า ปัจจัยที่มีนัยสำคัญต่อศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ประกอบด้วย อัตราการไหลของไอน้ำ อุณหภูมิดำเนินงาน อุณหภูมิดำเนินงานกำลังสอง และอันตรกิริยาระหว่างอัตราการไหลของไอน้ำกับอุณหภูมิดำเนินงาน ส่วนปัจจัยที่มีนัยสำคัญต่ออัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์ประกอบด้วย อัตราการไหลของไอน้ำ อุณหภูมิดำเนินงาน ความดันดำเนินงาน อันตรกิริยาระหว่างอัตราการไหลของไอน้ำกับอุณหภูมิดำเนินงาน และอันตรกิริยาระหว่างอัตราการไหลของไอน้ำกับความดันดำเนินงาน จากนั้นแบบจำลองถดถอยลดรูปทำนายภาวะดำเนินงานที่เหมาะสม คือที่อัตราการไหลของไอน้ำ 7.71 กิโลโมลต่อชั่วโมง อุณหภูมิดำเนินงาน 650 องศาเซลเซียส และความดันดำเนินงาน 1 บรรยากาศ ซึ่งทำให้ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์มีค่าเป็น 4.73 โวลต์ และอัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์เป็น 1.94 กิโลโมลต่อชั่วโมง เมื่อเปรียบเทียบกับผลการจำลองเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนในโปรแกรม Aspen Plus พบว่า แบบจำลองถดถอยลดรูปทำนายศักย์ไฟฟ้าของเซลล์และอัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์คลาดเคลื่อน 0.21 และ 2.02 เปอร์เซ็นต์ ตามลำดับ

5.2 ข้อเสนอแนะ

5.2.1 จากผลการหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสมพบว่า อุณหภูมิดำเนินงานที่เหมาะสมเป็นขอบเขตของภาวะดำเนินงานที่ใช้เปรียบเทียบกับข้อมูลการทดลอง ดังนั้นจึงควรศึกษาในขอบเขตที่กว้างมากขึ้น

5.2.2 ความร้อนจากภายนอกเซลล์อิเล็กโทรไลซิสชนิดออกไซด์แข็งแบบนำโปรตอนอาจเป็นอีกหนึ่งในวัตถุประสงค์สำหรับการพิจารณาหาภาวะดำเนินงานที่เหมาะสม



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

เอกสารอ้างอิง

- [1] Dominguez-Ramos A., Singh B., Zhang X., Hertwich E.G., Irabien A. “Global Warming Footprint of the Electrochemical Reduction of Carbon Dioxide to Formate.” **Journal of Cleaner Production**. Vol. 104, 2015. pp. 148-155.
- [2] Gonçalves M.R., Gomes A., Condeço J., Fernandes R., Pardal T., Sequeira C.A.C., Branco J.B. “Selective Electrochemical Conversion of CO₂ to C₂ Hydrocarbons.” **Energy Conversion and Management**. Vol. 51, 2010. pp. 30-32.
- [3] Whipple D.T., Kenis P.J.A. “Prospects of CO₂ Utilization via Direct Heterogeneous Electrochemical Reduction.” **Journal of Physical Chemistry Letters**. Vol. 1, 2010. pp. 3451-3458.
- [4] Arvidsson M., Morandin M., Harvey S. “Biomass Gasification-Based Syngas Production for a Conventional Oxo Synthesis Plant - Greenhouse Gas Emission Balances and Economic Evaluation.” **Journal of Cleaner Production**. Vol. 99, 2015. pp. 192-205.
- [5] Zhang M., Xiao M., Wang S., Han D., Lu Y., Meng Y. “Cerium Oxide-Based Catalysts Made by Template-Precipitation for the Dimethyl Carbonate Synthesis from Carbon Dioxide and Methanol.” **Journal of Cleaner Production**. Vol. 103, 2015. pp. 847-853.
- [6] María R.D., Díaz I., Rodríguez M., Sáiz A. “Industrial Methanol from Syngas: Kinetic Study and Process Simulation.” **International Journal of Chemical Reactor Engineering**. Vol. 11 (1), 2013. pp. 469-477.
- [7] Ganesh I. “Conversion of Carbon Dioxide into Methanol - a Potential Liquid Fuel: Fundamental Challenges and Opportunities.” **Renewable and Sustainable Energy Reviews**. Vol 31, 2014. pp. 221-257.
- [8] Olah G.A., et al. “Conversion of Carbon Dioxide to Methanol and/or Dimethyl Ether Using Bi-Reforming of Methane or Natural Gas.” U.S. Patent no. 7906559 B2, 2011.
- [9] Li H., Chen X., Chen S., Wu Y., Xie K. “Composite Manganate Oxygen Electrode Enhanced with Iron Oxide Nanocatalyst for High Temperature Steam Electrolysis in a Proton-Conducting Solid Oxide Electrolyzer.” **International Journal of Hydrogen Energy**. Vol. 40, 2015. pp. 7920-7931.

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

- [10] Bi L., Boulfrad S., Traversa E. “Steam Electrolysis by Solid Oxide Electrolysis Cells (SOECs) with Proton-Conducting Oxides.” **Chemical Society Reviews**. Vol. 43, 2014. pp. 8255-8270.
- [11] Ni M. “An Electrochemical Model for Syngas Production by Co-Electrolysis of H₂O and CO₂.” **Journal of Power Sources**. Vol. 202, 2012. pp. 209-216.
- [12] Xie Y. and Xie X. “Modeling of Solid Oxide Electrolysis Cell for Syngas Generation with Detailed Surface Chemistry.” **Solid State Ionics**. Vol. 224, 2012. pp. 64-73.
- [13] Li W., Shi Y., Luo Y., Cai N. “Elementary Reaction Modeling of CO₂/H₂O Co-Electrolysis Cell Considering Effects of Cathode Thickness.” **Journal of Power Sources**. Vol. 243, 2013. pp. 118-130.
- [14] Li W., Shi Y., Luo Y., Cai N. “Elementary Reaction Modeling of Solid Oxide Electrolysis Cells: Main Zones for Heterogeneous Chemical/Electrochemical Reactions.” **Journal of Power Sources**. Vol. 273, 2015. pp. 1-13.
- [15] Menon V. Fu Q., Janardhanan V. M., Deutschmann O. “A Model-Based Understanding of Solid-Oxide Electrolysis Cells (SOECs) for Syngas Production by H₂O/CO₂ Co-Electrolysis.” **Journal of Power Sources**. Vol. 274, 2015. pp. 768-781.
- [16] Millet P. and Grigoriev S. “Chapter 2 - Water Electrolysis Technologies.” **Renewable Hydrogen Technologies**. Amsterdam: Elsevier, 2013. pp. 19-41.
- [17] Udagawa J., Aguiar P., Brandon N.P. “Hydrogen Production Through Steam Electrolysis: Model-Based Steady State Performance of a Cathode-Supported Intermediate Temperature Solid Oxide Electrolysis Cell.” **Journal of Power Sources**. Vol. 166, 2007. pp. 127-136.
- [18] Waals S.M. **Phase Equilibria in Chemical Engineering**. Butterworth. 1985.
- [19] Fu Y., Jiang Y., Poizeau S., Dutta A., Mohanram A., Pietras J.D., Bazant M.Z. “Multi-component Gas Diffusion in Porous Electrodes.” **Journal of Electrochemical Society**. Vol. 162, 2015, pp. F613-F621.
- [20] Poling B.E., Prausnitz J.M., O’connell J.P. **The Properties of Gases and Liquids**. 5th Ed. New York: McGraw-Hill, 2011.
- [21] Noren D.A., Hoffman M.A. “Clarifying the Butler-Volmer Equation and Related Approximations for Calculating Activation Losses in Solid Oxide Fuel Cell Models.” **Journal of Power Sources**. Vol. 152, 2005. pp. 2305-2313.

- [22] Aguiar P., Adjiman C.S., Brandon N.P. “Anode-Supported Intermediate Temperature Direct Internal Reforming Solid Oxide Fuel Cell. I: Model-Based Steady-State Performance.” **Journal of Power Sources**. Vol. 138, 2004. pp. 120-136.
- [23] Stempien J.P., Sun Q., Chan S.H. “Solid Oxide Electrolyzer Cell Modeling: A Review.” **Journal of Power Technologies**. Vol. 93 (4), 2013. pp. 216-246.
- [24] Fogler H.S. **Elements of Chemical Reaction Engineering**. 4th Ed. 2006.
- [25] Pekrides G., Kalimeri K., Kaklidis N., Vakouftsi E., Iliopoulou E.F., Athanasiou C., Mernellos G.E. “Study of the Reverse Water Gas Shift (RWGS) Reaction over Pt in a Solid Oxide Fuel Cell Operating Under Open and Closed-Circuit Conditions.” **Catalyst Today**. Vol. 127, 2007. pp. 337-346.
- [26] Montgomery D.C. **Design and Analysis of Experiments**. New York: John Wiley and Sons, Inc, 2013.
- [27] Sanchez S.M. “Work Smarter, Not Harder: Guidelines for Designing Simulation Experiments.” **Proceedings of the 2005 Winter Simulation Conference**. 2005.
- [28] Coleman D.E., Montgomery D.C. “A Systematic Approach to Planning for a Designed Industrial Experiment.” **Technometrics**. Vol. 35, 1993. pp. 1-12.
- [29] Gruska G.F. and Heaphy M.S. “Designing Experiments - An Overview.” **ASQ Statistics Division Newsletter**. Vol. 19 (2), 2000. pp. 8-13.
- [30] Sivaraos, Milkey K.R., Samsudin A.R., Dubey A.K., Kidd P. “Comparison between Taguchi Method and Response Surface Methodology (RSM) in Modelling CO₂ Laser Machining.” **Jordan Journal of Mechanical and Industrial Engineering**. Vol. 8 (1), 2014. pp. 35-42.
- [31] Edgar T.F., Himmelblau D.M. **Optimization of Chemical Processes**. 2nd Ed. New York: McGraw-Hill, 2001.
- [32] Derringer G., Suich, R. “Simultaneous Optimization of Several Response Variables.” **Journal of Quality Technology**. Vol. 12 (4), 1980. pp. 214-219.
- [33] Ni M., Leung M.K.H., Leung D.Y.C. “Parametric Study of Solid Oxide Steam Electrolyzer for Hydrogen Production.” **International Journal of Hydrogen Energy**. Vol. 32 (13), 2007. pp. 4648-4660.
- [34] Udagawa J., Aguiar P., Brandon N.P. “Hydrogen Production Through Steam Electrolysis: Control Strategies for a Cathode-Supported Intermediate Temperature Solid Oxide Electrolysis Cell.” **Journal of Power Sources**. Vol. 180, 2008. pp. 354-

364.

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

- [35] Arashi H., Naito H., Miura H. "Hydrogen Production from High-Temperature Steam Electrolysis Using Solar Energy." **International Journal of Hydrogen Energy**. Vol. 16 (9), 1991. pp. 603-608.
- [36] Houcheng Z., Shanhe S., Xiaohang C. "Configuration Design and Performance Optimum Analysis of a Solar-Driven High Temperature Steam Electrolysis System for Hydrogen Production." **International Journal of Hydrogen Energy**. Vol. 38 (11), 2013. pp. 4298-4307.
- [37] Ni M., Leung M.K.H., Leung D.Y.C. "Electrochemical Modeling of Hydrogen Production by Proton-Conducting Solid Oxide Steam Electrolyzer." **International Journal of Hydrogen Energy**. Vol. 33, 2008. pp. 4040-4047.
- [38] Dumortier M., Sanchez J., Keddam M., Lacroix O. "Theoretical Considerations on the Modelling of Transport in a Three-Phase Electrode and Application to a Proton Conducting Solid Oxide Electrolysis Cell." **International Journal of Hydrogen Energy**. Vol. 37, 2012. pp. 11579-11594.
- [39] Dumortier M., Sanchez J., Keddam M., Lacroix O. "Energy Transport Inside a Three-Phase Electrode and Application to a Proton-Conducting Solid Oxide Electrolysis Cell." **International Journal of Hydrogen Energy**. Vol. 38, 2013. pp. 2610-2623.
- [40] Kahveci E.E., Taymaz I. "Experimental Investigation on Water and Heat Management in a PEM Fuel Cell Using Response Surface Methodology." **International Journal of Hydrogen Energy**. Vol. 39, 2014. pp. 10655-10663.
- [41] Basak N., Jana A.K., Das D. "Optimization of Molecular Hydrogen Production by *Rhodobacter sphaeroides* O.U.001 in the Annular Photobioreactor Using Response Surface Methodology." **International Journal of Hydrogen Energy**. Vol. 39, 2014. pp. 11889-11901.
- [42] Eppinger T., Wehinger G., Kraume M. "Parameter Optimization for the Oxidative Coupling of Methane in a Fixed Bed Reactor by Combination of Response Surface Methodology & Computational Fluid Dynamics." **Chemical Engineering Research and Design**. Vol. 92, 2014. pp. 1693-1703.
- [43] Stansch Z., Mleczko L., Baerns M. "Comprehensive Kinetics of Oxidative Coupling of Methane over the $\text{La}_2\text{O}_3/\text{CaO}$ Catalyst." **Industrial and Engineering Chemistry Research**. Vol. 36 (7), 1997. pp. 2568-2579.
- [44] Stuart P.A., Unno T., Kilner J.A., Skinner S.J. "Solid Oxide Proton Conducting Steam Electrolysers." **Solid State Ionics**. Vol. 179, 2008. pp. 1120-1124.

- [45] Ruiz-Trejo E., Irvine J.T.S. "Ceramic Proton Conducting Membranes for the Electrochemical Production of Syngas." **Solid State Ionics**. Vol. 216, 2012. pp. 36-40.



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



ภาคผนวก ก
รหัสคำสั่งในกล่อ่งการค้ำนวนของโปรแกรม Aspen Plus

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

CC

c ----- Constants ----- c

CC

$$F = 96485.3365$$

$$PI = 3.1415927$$

$$R1 = 8.3144621$$

$$R2 = 0.00008205736$$

CC

c ----- Operating parameters ----- c

CC

$$TK = T + 273.15$$

$$LA = 0.0001$$

$$LE = 0.0002$$

$$LC = 0.0001$$

c For validation

$$c \quad I = 1000$$

$$c \quad CONV = (3.6 * I * AREA * NCELL) / (2 * WIN * F)$$

c For simulation

$$I = (2 * WIN * CONV * F) / (3.6 * AREA * NCELL)$$

CC

c ----- Material properties ----- c

CC

$$RP = 0.0000005$$

$$PORSITY = 0.3$$

$$FEFF = PORSITY / ((3 - PORSITY) / 2) ** 0.5$$

$$COND = 31400 / TK * EXP(-3862 / TK)$$

c For hydrogen: $COND = 7665000 / TK * EXP(-8736 / TK)$

c For syngas: $COND = 31400 / TK * EXP(-3862 / TK)$

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

CC

c ----- Duffusion coefficients ----- c

CC

c Knudsen diffusion coefficients

$$DWK = (2*RP/3)*((8*R1*TK)/(PI*18))**0.5$$

$$DHK = (2*RP/3)*((8*R1*TK)/(PI*2))**0.5$$

$$DOK = (2*RP/3)*((8*R1*TK)/(PI*32))**0.5$$

c Water-oxygen binary diffusion coefficient

$$LWO = 3.0540$$

$$EKWO = 293.8213$$

$$MWWO = 23.04$$

$$TSWO = TK/EKWO$$

$$OHWO = (1.06036*(TSWO**(-0.1561)))$$

$$OHWO = OHWO+(0.193/EXP(0.47635*TSWO))$$

$$OHWO = OHWO+(1.03587/EXP(1.52996*TSWO))$$

$$OHWO = OHWO+(1.76474/EXP(3.89411*TSWO))$$

$$DWO = 0.000000266*(TK**1.5)/(P*(MWWO**0.5)*(LWO**2)*OHWO)$$

c Diffusion coefficients

$$DW = FEFF*DWK*DWO/(DWK+DWO)$$

$$DH = FEFF*DHK$$

$$DO = FEFF*DOK*DWO/(DOK+DWO)$$

CC

c ----- Pressure ----- c

CC

$$PW = XW*P$$

$$PH = XH*P$$

$$PO = XO*P$$

$$PWTPB = PW-((I*R2*TK*LA)/(2*F*DW))$$

$$PHTPB = P-(P-PH)*EXP((-I*R2*TK*LC)/(2*F*P*DH))$$

$$POTPB = PO+((I*R2*TK*LA)/(4*F*DO))$$

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ข.1 ผลการเปรียบเทียบเกี่ยวกับข้อมูลการทดลองสำหรับการผลิตไฮโดรเจน

อุณหภูมิ (องศาเซลเซียส)	ความหนาแน่นกระแสไฟฟ้า (แอมแปร์ต่อตารางเมตร)	ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์จาก การทดลอง (โวลต์)	ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์จาก การจำลองกระบวนการ (โวลต์)	ความลาดเคลื่อน (เปอร์เซ็นต์)
600	0	0.9657	1.0205	5.682131
	200	1.5283	1.5147	0.884449
	400	1.8542	1.8319	1.201835
	600	2.1311	2.1227	0.394055
	800	2.3535	2.4024	2.078072
	1,000	2.5705	2.6761	4.105264
650	0	0.9322	1.0072	8.049327
	200	1.3704	1.3811	0.785585
	400	1.6527	1.6048	2.899136
	600	1.8915	1.8007	4.802311
	800	2.1031	1.9849	5.620790
	1,000	2.3037	2.1626	6.126611

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
 ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ข.2 ผลการเปรียบเทียบข้อมูลการทดลองสำหรับการผลิตแก๊สสังเคราะห์

อุณหภูมิ (องศาเซลเซียส)	ความหนาแน่นกระแสไฟฟ้า (แอมแปร์ต่อตารางเมตร)	ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์จาก การทดลอง (โวลต์)	ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์จาก การจำลองกระบวนการ (โวลต์)	ความลาดเคลื่อน (เปอร์เซ็นต์)
550	0	0.9829	0.9789	0.410506
	200	1.3229	1.2871	2.704416
	400	1.5829	1.4877	6.015456
600	0	0.9464	0.9622	1.670918
	200	1.1944	1.2215	2.271270
	400	1.4184	1.4056	0.901058
650	600	1.6184	1.5524	4.076463
	0	0.8997	0.9474	5.301825
	200	1.1117	1.1553	3.924792
650	400	1.3077	1.3303	1.726345
	600	1.4877	1.4657	1.479159
	800	1.6517	1.5841	4.094700

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ข.3 ผลของโครงสร้างเซลล์ต่อศักย์ไฟฟ้าของเซลล์

โครงสร้างรองรับ	E (โวลต์)	$\eta_{\text{conc.a}}$ (โวลต์)	$\eta_{\text{conc.c}}$ (โวลต์)	$\eta_{\text{act.a}}$ (โวลต์)	$\eta_{\text{act.c}}$ (โวลต์)	η_{ohm} (โวลต์)
อิเล็กทรอนิกส์	0.978894	0.002608	0.00031	0.207683	0.18197	0.785628
ชีวแอนโนด	0.978894	0.005171	0.00031	0.207683	0.18197	0.392814
ชีวแคโทด	0.978894	0.002608	0.000616	0.207683	0.18197	0.392814

ตารางที่ ข.4 ผลของอัตราส่วนน้ำต่อคาร์บอนไดออกไซด์ต่อศักย์ไฟฟ้าของเซลล์และปริมาณสัมพัทธ์

อัตราส่วนน้ำต่อคาร์บอนไดออกไซด์	ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์ (โวลต์)		ปริมาณสัมพัทธ์	
	เปลี่ยนอัตราการไหลของไอน้ำ	เปลี่ยนอัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์	เปลี่ยนอัตราการไหลของไอน้ำ	เปลี่ยนอัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์
1	1.734708	1.734708	-0.177001	-0.177001
2	2.203281	1.753117	0.537329	0.584863
3	2.638849	1.761035	1.288736	1.393006
4	3.061767	1.765842	2.124327	2.299486

ตารางที่ ข.5 ผลของอัตราการไหลของน้ำและคาร์บอนไดออกไซด์ต่อปริมาณสัมพัทธ์

อัตราการไหลของน้ำ (กิโลเมตรต่อชั่วโมง)	อัตราการไหลของ คาร์บอนไดออกไซด์ (กิโลเมตรต่อชั่วโมง)	ปริมาณสัมพัทธ์	อัตราการไหลของน้ำ (กิโลเมตรต่อชั่วโมง)	อัตราการไหลของ คาร์บอนไดออกไซด์ (กิโลเมตรต่อชั่วโมง)	ปริมาณสัมพัทธ์
0.50	0.50	-0.1349	1.45	4.30	-0.7192
	1.45	-0.6960		5.25	-0.7698
	2.40	-0.8126		6.20	-0.8050
	3.35	-0.8657		7.15	-0.8308
	4.30	-0.8954		8.10	-0.8507
	5.25	-0.9143		9.05	-0.8663
	6.20	-0.9274		10.0	-0.8790
	7.15	-0.9371		0.50	2.9258
	8.10	-0.9444		1.45	0.2730
	9.05	-0.9503		2.40	-0.2065
1.45	10.0	-0.9550	2.40	3.35	-0.4221
	0.50	1.2539		4.30	-0.5461
	1.45	-0.1941		5.25	-0.6268
	2.40	-0.5018		6.20	-0.6833
	3.35	-0.6406		7.15	-0.7250

ตารางที่ ข.5 ผลของอัตราการไหลของน้ำและคาร์บอนไดออกไซด์ต่อปริมาณสัมพัทธ์ (ต่อ)

อัตราการไหลของน้ำ (กิโลเมตรต่อชั่วโมง)	อัตราการไหลของ คาร์บอนไดออกไซด์ (กิโลเมตรต่อชั่วโมง)	ปริมาณสัมพัทธ์	อัตราการไหลของน้ำ (กิโลเมตรต่อชั่วโมง)	อัตราการไหลของ คาร์บอนไดออกไซด์ (กิโลเมตรต่อชั่วโมง)	ปริมาณสัมพัทธ์
2.40	8.10	-0.7571	4.30	1.45	1.2410
	9.05	-0.7825		2.40	0.3578
	10.0	-0.8031		3.35	-0.0079
3.35	0.50	5.0247	5.25	4.30	-0.2149
	1.45	0.7443		5.25	-0.3501
	2.40	0.0771		6.20	-0.4459
	3.35	-0.2119		7.15	-0.5173
	4.30	-0.3780		8.10	-0.5726
	5.25	-0.4867		9.05	-0.6166
4.30	6.20	-0.5634	5.25	10.0	-0.6525
	7.15	-0.6203		0.50	10.774
	8.10	-0.6643		1.45	1.7742
	9.05	-0.6992		2.40	0.6421
	10.0	-0.7276		3.35	0.1933
	0.50	7.6222	4.30	-0.0556	

ตารางที่ ข.5 ผลของอัตราการไหลของน้ำและคาร์บอนไดออกไซด์ต่อปริมาณสัมพัทธ์ (ต่อ)

อัตราการไหลของน้ำ (กิโลเมตรต่อชั่วโมง)	อัตราการไหลของ คาร์บอนไดออกไซด์ (กิโลเมตรต่อชั่วโมง)	ปริมาณสัมพัทธ์	อัตราการไหลของน้ำ (กิโลเมตรต่อชั่วโมง)	อัตราการไหลของ คาร์บอนไดออกไซด์ (กิโลเมตรต่อชั่วโมง)	ปริมาณสัมพัทธ์
5.25	5.25	-0.2168	6.20	9.05	-0.4547
	6.20	-0.3309		10.0	-0.5049
	7.15	-0.4161		0.50	18.925
	8.10	-0.4822		1.45	2.9743
	9.05	-0.5351		2.40	1.2384
	10.0	-0.5782		3.35	0.5981
	0.50	14.528		4.30	0.2581
	1.45	2.3504		5.25	0.0430
	2.40	0.9346		6.20	-0.1073
	3.35	0.3946		7.15	-0.2191
6.20	4.30	0.1016	7.15	8.10	-0.3060
	5.25	-0.0861		9.05	-0.3755
	6.20	-0.2182		10.0	-0.4325
	7.15	-0.3168		0.50	23.999
	8.10	-0.3934		1.45	3.6497
				8.10	

ตารางที่ ข.5 ผลของอัตราการไหลของน้ำและคาร์บอนไดออกไซด์ต่อปริมาณสัมพัทธ์ (ต่อ)

อัตราการไหลของน้ำ (กิโลเมตรต่อชั่วโมง)	อัตราการไหลของ คาร์บอนไดออกไซด์ (กิโลเมตรต่อชั่วโมง)	ปริมาณสัมพัทธ์	อัตราการไหลของน้ำ (กิโลเมตรต่อชั่วโมง)	อัตราการไหลของ คาร์บอนไดออกไซด์ (กิโลเมตรต่อชั่วโมง)	ปริมาณสัมพัทธ์
8.10	2.40	1.5555	6.20	6.20	0.1111
	3.35	0.8056	7.15	7.15	-0.0277
	4.30	0.4151	8.10	8.10	-0.1349
	5.25	0.1713	9.05	9.05	-0.2205
	6.20	0.0023	10.0	10.0	-0.2906
	7.15	-0.1229	0.50	0.50	36.286
	8.10	-0.2199	1.45	1.45	5.1667
	9.05	-0.2975	2.40	2.40	2.2357
	10.0	-0.3611	3.35	3.35	1.2372
	0.50	29.778	4.30	4.30	0.7345
9.05	1.45	4.3796	5.25	5.25	0.4283
	2.40	1.8875	6.20	6.20	0.2196
	3.35	1.0184	7.15	7.15	0.0668
	4.30	0.5737	8.10	8.10	-0.0507
	5.25	0.2995	9.05	9.05	-0.1443
	6.20				
	7.15				
	8.10				
	9.05				
	10.0				

ตารางที่ ข.6 ผลของอุณหภูมิต่อค่าไฟฟ้าของเซลล์

อุณหภูมิ (องศาเซลเซียส)	E (โวลต์)	$\eta_{\text{conc.a}}$ (โวลต์)	$\eta_{\text{conc.c}}$ (โวลต์)	$\eta_{\text{act.a}}$ (โวลต์)	$\eta_{\text{act.c}}$ (โวลต์)	η_{ohm} (โวลต์)
550	0.999391	0.002214	0.000849	0.219072	0.198172	0.582258
600	0.990039	0.002409	0.000693	0.213439	0.190132	0.472112
650	0.978894	0.002608	0.000616	0.207683	0.18197	0.392814

ตารางที่ ข.7 ผลของอุณหภูมิต่ออัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์

อุณหภูมิ (องศาเซลเซียส)	อัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์ (กิโลโมลต่อชั่วโมง)
550	0.234312
600	0.246052
650	0.257844

ตารางที่ ข.8 ผลของความต้านต่อศักย์ไฟฟ้าของเซลล์

ความต้าน (บรรยากาศ)	E (โวลต์)	$\eta_{\text{conc.a}}$ (โวลต์)	$\eta_{\text{conc.c}}$ (โวลต์)	$\eta_{\text{act.a}}$ (โวลต์)	$\eta_{\text{act.c}}$ (โวลต์)	η_{ohm} (โวลต์)
1	0.978894	0.002608	0.000616	0.207683	0.18197	0.392814
5	0.999795	0.000631	0.000212	0.207683	0.18197	0.392814
10	1.006627	0.000381	0.000141	0.207683	0.18197	0.392814

ตารางที่ ข.9 ผลของความต้านต่ออัตราการไหลของการคายประจุของคาร์บอนไดออกไซด์

ความต้าน (บรรยากาศ)	อัตราการไหลของคาร์บอนไดออกไซด์ (กิโลโมลต่อชั่วโมง)
1	0.257844
5	0.235335
10	0.227525

ตารางที่ ข.10 ผลการตรวจสอบแบบจำลองถดถอยด้วยโปรแกรม Aspen Plus

สายการไหลที่	1	2	3	4	5	6
อุณหภูมิ (องศาเซลเซียส)	650	650	650	650	650	650
ความดัน (บรรยากาศ)	1	1	1	1	1	1
อัตราการไหลเชิงโมล (กิโลโมลต่อชั่วโมง)	7.765	10.85	4.629	6.222	1.982	7.651
H ₂ O	7.715	1.543	1.543			1.525
H ₂	0.050	6.222		6.222		4.145
O ₂		3.086	3.086			trace
CO						0.972
CO ₂					1.982	0.733
CH ₄						0.276
อัตราส่วนเชิงโมล						
H ₂ O	0.994	0.142	0.333			0.199
H ₂	0.006	0.573		1.000		0.542
O ₂		0.284	0.667			trace
CO						0.127
CO ₂					1.000	0.096
CH ₄						0.036

ประวัติผู้เขียน

ชื่อ-นามสกุล นายลวิตร นามวงษ์
 วัน เดือน ปีเกิด 29 มกราคม 2536
 ที่อยู่ 297/1 ถนนเทศบาลสาย 2 ตำบลขลุง อำเภอขลุง จังหวัดจันทบุรี 22110
 อีเมล lawit@bangchak.co.th โทรศัพท์ 09-8595-4456

ประวัติการศึกษา

พ.ศ. 2551-2553 มัธยมศึกษาตอนปลาย โรงเรียนเบญจมราชูทิศ จังหวัดจันทบุรี

พ.ศ. 2554-2557 ปริญญาตรี วิศวกรรมศาสตรบัณฑิต (เกียรตินิยมอันดับ 1) สาขาวิศวกรรมเคมี
 คณะวิศวกรรมศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

ประสบการณ์และผลงานวิจัย

ฝึกงานที่บริษัท สยามมิตรซุ่ย พีทีเอ จำกัด นิคมอุตสาหกรรมตะวันออก จังหวัดระยอง ในโครงการ
 SCG Excellent Internship Program ระหว่างวันที่ 17 มีนาคม ถึง 23 พฤษภาคม 2557

ทำงานวิจัยร่วมกับบริษัท ยูนิลีเวอร์ ไทย โฮลดิ้ง จำกัด ระหว่างวันที่ 1 มิถุนายน 2557 ถึง 31
 มีนาคม 2558

ฝึกงานที่บริษัท เทคนิป เอ็นจิเนียริง (ประเทศไทย) จำกัด ในโครงการ Power You Program
 ระหว่างวันที่ 7 พฤศจิกายน 2557 ถึง 30 เมษายน 2558

นำเสนอผลงานวิชาการหัวข้อ Modeling of Proton-Conducting Solid Oxide Electrolyzer
 ในงานประชุมวิชาการ The 5th TIChE International Conference 2015 ระหว่างวันที่ 8 ถึง 10
 พฤศจิกายน 2558

ผ่านการอบรมการใช้โปรแกรม Aspen Plus เรื่อง Heat exchanger network synthesis and
 preliminary equipment design ที่มหาวิทยาลัยศิลปากร ในวันที่ 15 ธันวาคม 2558

ตีพิมพ์ผลงานวิชาการเรื่อง Modeling and Optimization of Proton-Conducting Solid Oxide
 Electrolysis Cell: Conversion of CO₂ into Value-Added Products ในวารสารวิชาการ Journal
 of Power Resources ซึ่งปัจจุบันกำลังอยู่ในขั้นตอนการรีวิว

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
 ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้