

# 고분자 전해질 연료전지의 유동 및 전기 화학적 모델 수치해석

## Numerical Analysis of Flow and Electrochemical Model for a Polymer Electrolyte Fuel Cell

정혜미\*, 이원용, 박정선\*, 김창수

한국에너지기술연구원 연료전지연구센터, \*한국항공대학교 항공우주 및 기계공학부

### 1. 서론

고분자 전해질 연료전지는 저온에서 연료(수소) 및 산소가 가지고 있는 화학에너지를 전기화학반응에 의해 용이하게 전기에너지로 변환시킬 수 있는 소형 발전 설비로, 짧은 시동 시간에 고출력을 낼 수 있고 전류밀도가 높기 때문에 저공해 자동차 동력원이나 가정용 cogeneration 시스템으로 개발이 활발히 이루어지고 있다.

연료전지의 개발과 성능 분석을 하기 위해서는 주로 실험적인 방법을 사용하여 단위 전지나 스택에 대한 종합적인 성능을 파악하고 있다. 그러나 이와 같은 실험적인 방법으로는 연료전지를 구성하고 있는 분리판 내 채널의 유동장, MEA(Membrane Electrode Assemblies), 확산층(porous media) 등의 구성 요소가 갖는 특성이 단위 전지 또는 스택에 미치는 효과를 파악하기가 쉽지 않다. 이를 보완하기 위해서 분리판 유동장, MEA, 확산층 등과 같은 구성 요소가 전체 성능에 미치는 영향에 대한 이론적인 접근 방법이 필요하다. 연료전지에 대한 이론적 접근 방법은 연료전지의 성능에 영향을 주는 다양한 성능변수들을 고려해야 하기 때문에 정밀한 성능을 예측하기는 매우 어렵다. 그러나 이론적 접근 방법은 모델을 통하여 연료전지 내에서 변수들의 직접적인 상관관계를 이론적으로 규명할 수 있다는 장점을 갖고 있기 때문에 실험방법과 병행하여 연구가 진행되고 있다.

본 연구는 고분자 전해질 연료전지의 유동 및 전기 화학적 특성에 대한 수치 해석을 통하여 온도, 압력, 수소 및 공기의 농도 변화(이용률 고려)에 따른 단위 전지의 성능을 분석하기 위한 것이다. 특히 전기 화학적 특성을 해석함에 있어서 실험식(empirical equation)을 사용하였기 때문에 실제 모델과 가까운 결과를 도출해 내고 있다. 본 연구의 결과는 고분자 전해질 연료전지의 유동장 설계 및 MEA 성능 개선을 위한 자료는 물론 가스 공급 및 냉각 설비의 설계를 위한 자료로 유용하게 활용할 수 있을 것이다.

### 2. 본문

#### 2.1 해석 모델 및 경계 조건

해석을 위해서 사용한 단위 전지 구조는 그림 1과 같다. 단위 전지는 여덟 개의 영역(the anode gas channel, the anode gas diffusion layer, the anode catalyst layer, membrane, the cathode catalyst layer, the cathode gas diffusion layer, the cathode gas channel and cooling channel)으로 구성되어 있다. 또한 단위 전지는 100cm<sup>2</sup>의 활성면적을 갖는 Nafion 115 멤브레인을 전해질막으로 사용하였다. 단위 전지 내부에 포함되어 있는 수소판, 공기판,

냉각판의 채널 형상은 그림 2와 같다. 수소 및 공기, 냉각판의 채널(channel) 폭은 1.2mm, 리브(rib)는 1mm이다.

본 해석은 분리판 채널 내부의 수소 및 공기가 전 구간에 걸쳐 균일하게(homogeneously) 분포되어 있다고 가정하고 정상상태(steady-state)에서 해석을 수행하였다. 모델의 입구경계 조건은 수소의 질량유량이  $7.5 \times 10^{-7}$  [kg/s], 공기의 질량유량이  $4.462 \times 10^{-5}$  [kg/s]이다. 이 경우 수소의 이용률은 0.7, 산소의 이용률은 0.4로 보았다. 그리고 단위 전지의 전압은 0.65V로 해석하였다.

## 2.2 지배방정식

본 해석은 질량 보존 방정식, 운동량 보존 방정식과 에너지 보존 방정식, 전기화학방정식 등의 지배방정식을 사용하여 유동특성과 전류밀도를 계산하였다. 채널의 각 격자에서 전류 밀도를 계산하기 위해서 가스 압력, 온도 그리고 수소 및 산소의 농도에 관한 함수로 표현된 실험식을 사용하였다. 분할된 MEA 상의 각 구간에서의 전류는 sub-routine program을 이용하여 계산하였다. 질량 보존 방정식은 식 (1)과 같다. 본 해석에서는  $s_m$ 의 mass source 항(전기 화학적 특성 포함)을 고려하여 계산하였다.

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \tilde{u}_j) = s_m \quad (1)$$

운동량 보존 방정식은 Darcy's law에 기초한 식으로 확산층에서의 물질전달과 관련된 항을 포함하고 있다.

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \tilde{u}_j u_i - \tau_{ij}) = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + s_i \quad (2)$$

각각의 화학 종들이 혼합되는 경우의 열전달은 엔탈피 보존 방정식의 heat source 항을 이용하여 계산하였다

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \tilde{u}_j h - F_{h,j}) = \tilde{u}_j \frac{\partial P}{\partial x_j} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + s_h \quad (3)$$

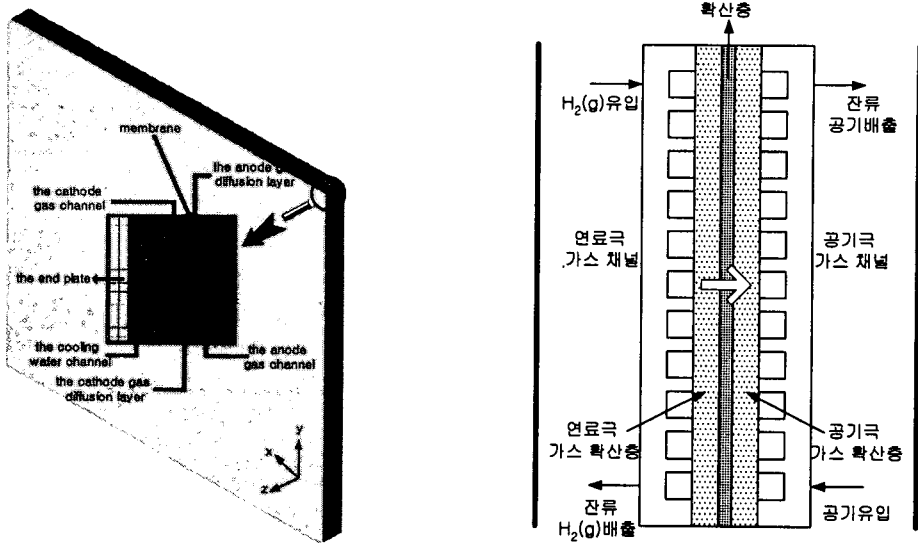


그림 1. 고분자 전해질 연료전지의 단위전지 해석모델

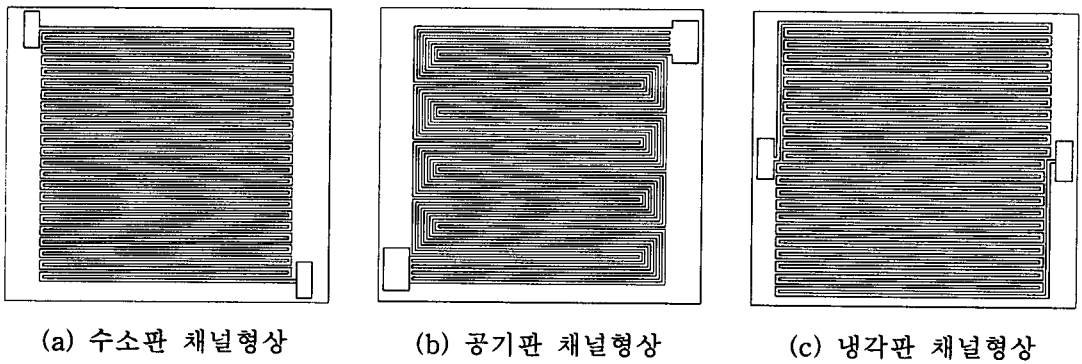


그림 2. 바이폴라 플레이트의 채널형상

단위 전지의 전압은 식 (4)와 같이 온도, 압력, 전류의 함수 관계를 갖는다. 본 계산에서 습도(humidity)는 포화되었다고 보았다.

$$V_i = F(T_i, P_i, m_i, I_i) \quad (4)$$

본 연구에서는 바이폴라 플레이트 유로의 유동 및 열전달 해석을 수행함에 있어서 범용 전산 유체 해석 코드인 STAR-CD를 이용하였다.

### 3. 해석 결과

그림 3은 단위 전지의 공기 압력과 전류분포 계산 결과의 한 예를 보여주고 있다. 그림 3에서 알 수 있는 바와 같이 산소가 소모됨에 따라 전류밀도는 감소한다. 공기 입구 압력을 상압으로 하였을 때, 공기 채널 전체의 압력 강하는 1270 Pa이다. 이 경우 수소 채널의 분압  $P_{H_2}$ 는 45~135 bar의 범위에 든다. 그리고 수소 채널 전체의 압력 강하는 1190 Pa이다. 전류밀도는 반응 기체의 부분압력(이용률)의 영향을 크게 받는다는 사실을 알 수 있다.

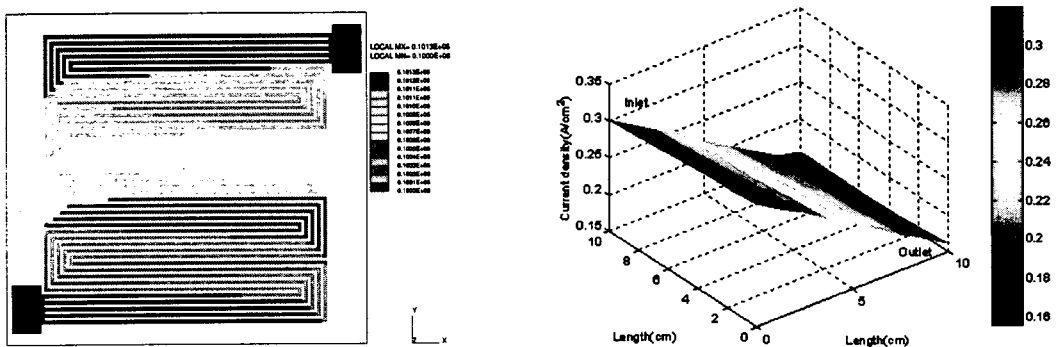


그림 3. 전류밀도 분포와 반응기체의 압력 계산결과

### 4. 결론

고분자 전해질 연료전지의 전기 특성은 분할된 MEA 상에서 공정조건을 변수로 하여 해석하였다. 해석 결과 MEA에서의 전류 특성은 온도, 압력, 수소 및 산소의 농도 분포에 크게 영향을 받았다. 본 계산 결과는 채널의 형상 및 MEA 설계를 위한 기초자료로 활용될 수 있다.

### 참고 문헌

- [1] J. H. Lee and T. R. Lark, J. Power Sources, 73 : 229-241 (1998).
- [2] J. H. Lee, T. R. Lark and A. J. Appleby, J. Power Sources, 70 : 258-268 (1998).