

유로형상 변화에 따른 고분자 전해질 연료전지의 성능 및 전달특성에 대한 3차원 수치해석적 연구

이 필형¹⁾, 조 선아²⁾, 최 성훈³⁾, 황 상순⁴⁾

Three Dimensional Computational Study on Performance and Transport Characteristics of PEMFC by Flow Channel Patterns

Pilhyong Lee, Sonah Cho, Seonghun Choi, Sangsoon Hwang

Key words : PEMFC(고분자전해질 연료전지), Parallel flow channel(평행류채널), Interdigitated flow channel(Interdigitated 유동채널), Electrochemical reaction(전기화학반응), Stoichiometric number(이론공연비 수)

Abstract : Selection of flow channel in the separation plate of PEMFC is very important parameter to improve its performance and reduce parasite loss. Flow patterns in the channel have great influence on the transport of hydrogen and air and water generated from electrochemical reaction in diffusion layer. In this study, fluid flow in flow channel with parallel and interdigitated patterns are simulated three dimensionally on full flow domain including anode and cathode electrode together. The numerical results show that the fuel cell with interdigitated flow channel represents better performance than that with parallel flow channel due to its strong convective transport across the gas diffusion layer. But the pressure drop in parallel flow channel is much more than that in interdigitated flow channel. The effect of temperature and stoichiometric number on performance can be calculated and analyzed as well.

1. 서 론

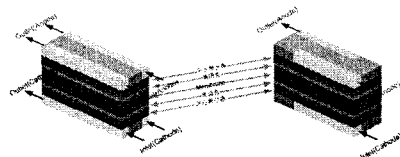
고분자 전해질 연료전지(Proton Exchange Membrane Fuel Cell : PEMFC)는 낮은 작동온도와 빠른 시동성등을 가지고 있어 내연기관을 대체하여 적용될 수 있는 높은 가능성을 가지고 있다.¹⁻³⁾

고분자 전해질 연료전지의 유동채널의 설계는 공급되는 연료와 산화제의 공급과 배출, 고전압밀도에서 전기화학 반응으로 생성된 Cathode채널의 물의 이동에 직접적인 영향을 주어 연료전지를 설계하는 중요한 변수가 된다.

지금까지의 유동채널의 연구의 대부분은 Serpentine유동채널과 Parallel유동채널에 대한 물질 전달을 주로 연구하였으며 Serpentine유동채널이 Parallel유동채널보다 물질전달 측면에서 효율적인 구조임을 보여주었다.⁴⁻⁹⁾

하지만 단위면적당 전기화학반응을 통하여 생산되는 출력의 향상을 위하여 1996년 Trung와 V.Nguyen에 의하여 Interdigitated유동채널이 제안되었다.

Fig.1은 Parallel유동채널과 Interdigitated유동채널을 보여준다.



a)Parallel유동채널 b)Interdigitated유동채널
Fig.1 Parallel유동채널과 Interdigitated유동채널 형상

- 1) 인천대학교 기계공학과 대학원
E-mail : meman80@incheon.ac.kr
Tel : (032)770-4371 Fax : (032)770-8410
- 2) 인천대학교 기계공학과 대학원
E-mail : chosona@nate.com
Tel : (032)770-4371 Fax : (032)770-8410
- 3) INNOfLOW
E-mail : shchoi@innoflow.co.kr
Tel : (02)575-3001 Fax : (02)6008-3075
- 4) 인천대학교 기계공학과
E-mail : hwang@incheon.ac.kr
Tel : (032)770-8417 Fax : (032)770-8410

Fig.1-a)의 Parallel유동채널에 공급되는 가스는 공급되는 방향의 수직방향으로 확산을 통하여 기체확산층(GDL)을 통과하여 촉매층에 전달되어진다. 하지만 그림 Fig.1-b)의 Interdigitated형식의 유동채널에 공급되는 가스는 확산에 의한 물질전달보다 인접한 채널간 기체확산층을 통한 대류에 의한 물질전달을 하는 형태로서 연료/산화제 물질 전달에 보다 효율적인 것으로 알려져 있다.

지금까지의 대부분의 Interdigitated유동채널에 대한 연구는 주로 Cathode에서의 물질전달 현상만을 다루었다. 하지만 본 연구에서는 Cathode와 Anode를 포함한 3차원의 고분자 전해질 연료전지 모델을 적용하여 Cathode와 Anode의 유동의 상호 연관성을 알아보고자 하였다. 이를 위하여 상용코드인 Fluent®(Version 6.2)를 본 연구에 맞게 개조하여 3차원의 고분자 전해질 연료전지 수치해석 모델을 개발하였으며, 이 모델을 적용하여 Interdigitated 유동채널과 Parallel유동채널의 물질전달 특성과 Anode에 공급되는 연료의 가습도 변화, 작동 온도, Stoichiometric number 변화에 따른 고분자 전해질 연료전지의 성능변화를 비교 분석하였다.

2. 지배방정식과 수치해석 모델

2.1 지배방정식

지배방정식은 질량보존방정식과 화학종보존방정식, 운동량보존방정식으로 구성되면 다음과 같은 가정을 한다.

- (1) 온도는 일정하게 유지된다.
- (2) 비압축성, 층류유동을 한다.
- (3) 이상가스의 유동이다.
- (4) Membrane, 촉매층, 확산층은 다공성의 크기가 같다.

1) 질량보존 방정식

$$\nabla \cdot (\epsilon \rho \mathbf{u}) = S_m \quad (1)$$

여기에서 ϵ 은 다공성물질의 Porosity이고, ρ 는 밀도를 나타낸다. S_m 은 Anode와 Cathode에서의 수소와 산소의 생성량을 나타내며, Cathode에서는 H_2O 의 생성량을 나타내며 다음과 같이 표현된다.

$$S_m = S_{H_2} + S_{aw} : \text{Anode측}(2)$$

$$S_m = S_{O_2} + S_{cw} : \text{Cathode측}(3)$$

2) 운동량 보존 방정식

$$\nabla(\epsilon \rho \vec{u}) = -\epsilon \nabla p + \nabla(\epsilon \mu \nabla \vec{u}) + S_u \quad (4)$$

여기서 μ 는 점성계수이며, S_u 는 다음과 같다.

$$S_{ux} = -\frac{\mu u}{\beta_x}, S_{uy} = -\frac{\mu v}{\beta_y}, S_{uz} = -\frac{\mu w}{\beta_z} \quad (5)$$

3) 화학종 보존방정식

$$\nabla(\epsilon \vec{u} C_k) = \nabla(D_k^{eff} \nabla C_k) + S_k \quad (6)$$

여기서 D_k^{eff} 는 확산계수이고 생성항 S_k 는 다음으로 표현한다.

$$S_k = \begin{cases} -\frac{I(x,y)}{2F} M_{H_2} A_{cv} & : \text{수소의소비량} \\ -\frac{\alpha(x,y)}{F} I(x,y) M_{H_2} A_{cv} & : \text{anode에서 물의소비량} \\ -\frac{I(x,y)}{4F} M_{O_2} A_{cv} & : \text{산소의소비량} \\ \frac{1+2\alpha(x,y)}{2F} I(x,y) M_{H_2} A_{cv} & : \text{cathode에서의 물의생산량} \end{cases} \quad (7)$$

여기서 $I(x,y)$ 는 전류밀도로서,

$$I(x,y) = \frac{\sigma}{t_m} \{E - V_c - n(x,y)\} \quad (8)$$

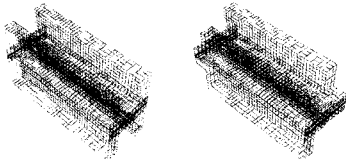
로 표시된다.

$\alpha(x,y)$ 는 Anode에서 Cathode로 보내지는 물의 양을 말하며, 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\alpha(x,y) = nd - \frac{F}{I(x,y)} D_w(x,y) \frac{C_{w,c} - C_{w,e}}{t_m} \quad (9)$$

2.2 수치해석모델

수치해석은 Fig.2와 같은 Parallel채널과 Interdigitated채널의 격자형상에서 이루어졌고 두 채널의 반응면적을 동일하게 만들기 위하여 동일한 면적의 MEA를 사용하였으며 두 개의 기체확산층과 두 개의 촉매층을 이용하여 Anode와 Cathode를 구성하였다. 채널의 입구와 출구의 단면적은 $0.0762 \text{ (cm)} \times 0.0762 \text{ (cm)}$ 이 길이는 4 (cm) 이다. 가스확산층의 두께는 0.0254 (cm) 며 촉매층 두께는 0.00287 (cm) 이다. 채널의 길이방향 중앙을 대칭 경계조건으로 사용하여 계산하였다.



(a) Parallel유동채널 (b) Interdigitated유동채널
Fig.2 Parallel 채널과 Interdigitated 채널의 격자구조

수치해석프로그램은 Fluent® (version 6.2)를 연구에 맞게 UDF 파일을 작성하여 적용하였다.¹¹⁻¹²⁾ 격자의 개수는 12× 32× 40이며 입구에서의 경계조건은 질유량으로 설정하였고 출구에서의 경계조건은 압력조건으로 설정하였다.

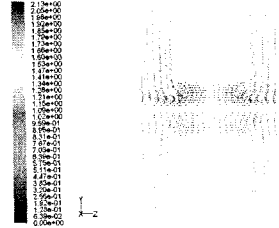
3. 결과 및 고찰

개발된 고분자 전해질 연료전지의 수치해석 모델을 사용하여 Interdigitated유동채널과 Parallel유동채널의 수치해석을 시행하였다. Fig.3에는 Parallel유동채널과 Interdigitated유동채널의 속도벡터를 나타낸다. 유동채널의 전압은 0.5V이며 각각의 유동채널의 전류밀도는 $0.97846 A/cm^2$ 와 $1.01685 A/cm^2$ 이다.

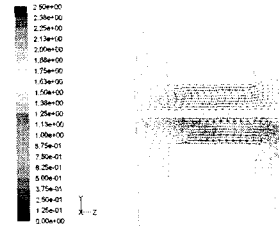
Fig.3-(a)의 Parallel유동채널의 속도분포를 보면 유동채널의 입구를 통하여 공급되어진 연료와 산화제가 가스채널을 지나면서 가스확산층을 통과하여 확산을 통하여 촉매층에 공급되는 것을 확인할 수 있다. 반면 Interdigitated유동채널에서는 연료와 산화제가 공급되어지는 채널에서 출구가 있는 채널로 유선을 형성하며 가스확산층을 통과함을 알 수 있다. 전체 속도벡터의 평균 크기로 본다면 Parallel유동채널에서보다 Interdigitate유동채널에서 약 2배정도 크다고 할 수 있다. 속도벡터형태를 살펴볼 때 Interdigitated유동채널에서의 가스공급형태는 Parallel유동채널과는 달리 확산에 의한 물질전달보다 대류에 의한 물질전달이 보다 큰 형태임을 알 수 있는데 이는 연료/산화제의 물질전달에 있어 보다 효율적인 것으로 판단된다. 각각의 유동채널에서의 효율을 비교하기 위하여 Fig.4에는 Interdigitated유동채널과 Parallel유동채널의 i-V비교곡선을 나타내었다. 그림을 보면 고전류밀도에서 Interdigitated유동채널의 성능이 뛰어난 것을 알 수 있다. 이것은 Parallel유동채널보다 가스확산층으로의 효과적인 대류전달에 의하여 Interdigitated유동채널에서는 농도분극이 작아지기 때문이라 판단된다.

고분자 전해질 연료전지의 작동온도 변화에 따른 성능곡선은 Fig.5에 나타나있다. 그림에서 보면 알 수 있듯이 작동온도가 상승하면 연료전지의 성능이 상승함을 알 수 있다. 이것은 고분자

전해질 연료전지의 성능은 Water Activity와 밀접한 관계를 가지고 있기 때문에 온도가 상승하면 고분자 전해질 연료전지의 효율이 높아지는 것이다.



(a) Parallel유동채널



(b) Interdigitated유동채널

Fig.3 Parallel 유동채널과 Interdigitated유동채널의 속도벡터

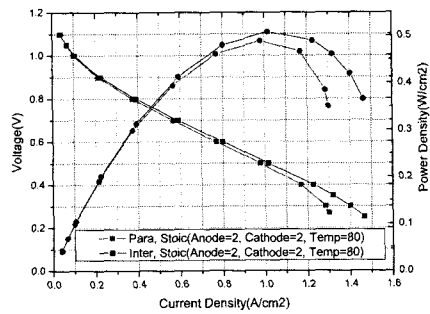


Fig.4 i-V 성능곡선(Stoic, Anode= 2, Cathode= 2, T=80°C)

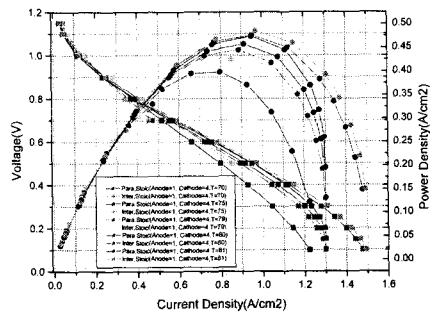


Fig.5 온도에 따른 i-V 성능곡선 (Stoic, Anode= 1, Cathode= 4)

또한 Fig.6의 가습도 변화에 따른 성능곡선의

경우 가습도가 상승하게 되면 효율이 상승하게 된다. 이것은 고분자 전해질 연료전지의 성능은 Membrane의 이온전도도와 직접적으로 연관이 되기 때문이다. 가습된 Anode의 연료는 Membrane에 수분을 공급하여 이온전도도를 상승시키고 이온 전도도가 상승하게 되면 Membrane을 통과하는 이온의 수가 많아지게 되어 결과적으로 고분자 전해질 연료전지의 효율이 증가하게 된다.

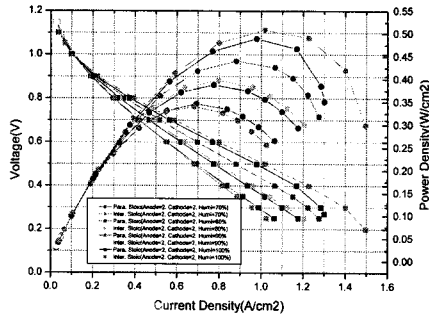


Fig.6 가습도 변화에 따른 i-V 성능곡선 (Stoic, Anode=2, Cathode=2)

4. 결론

Parallel유동채널과 Interdigitated유동채널을 가진 고분자 전해질 연료전지의 3차원 수치해석을 통하여 다음과 같은 결론을 도출 하였다.

1) 동일한 크기의 반응면과 동일한 가스확산층, 촉매층을 사용하는 고분자 전해질 연료전지에서는 Parallel유동채널보다 Interdigitated유동채널의 효율이 더 높다.

2) 동일한 크기의 반응면적을 가진 고분자 전해질 연료전지의 작동 온도를 상승시키면 연료전지의 효율이 증가함을 알 수 있다.

3) 동일한 크기의 반응면적을 가진 고분자 전해질 연료전지에서 Anode에 공급되는 연료의 가습도를 증가시켜주면(70-100%) Membrane의 Conductivity가 상승하여 연료전지의 효율이 증가함을 알 수 있다.

References

[1] A. Kazim, H.T.Liu, P. Forges, Modeling of performance of PEM fuel cells with conventional and interdigitated flow fields, *J. Appl. Electrochem.* 29 (1999) 1409-1416.
 [2] T.V. Nguyen, Modeling two-phase flow in the porous electrodes of proton exchange membrane fuel cells using the interdigitated flow fields, Presented at the 195th Meeting of Electrochemical

Society, 47 May 1999, Seattle.

[3] D.L. Wood, J.S. Yi, T.V. Nguyen, Effect of direct liquid water injection and interdigitated flow field on the performance of proton exchange membrane fuel cells, *Electrochem. Acta* 43 (1998) 3795-3809.

[4] T.E. Springer, T.A. Zawodzinski, S. Gottesfeld, Polymer electrolyte fuel cell model, *J. Electrochem. Soc.* 138(1991)2334-2342.

[5] T.F. Fuller, J. Newman, Water and thermal management in solid-polymer-electrolyte fuel cells, *J. Electrochem. Soc.* 140(1993)1218-1225.

[6] T.V. Nguyen, R.E. White, A water and heat management model for Proton-Exchange-Membrane fuel cells, *J. Electrochem. Soc.* 140(1993)2178-2186.

[7] J.S. Yi, T.V. Nguyen, A along the channel model for proton exchange membrane fuel cells, *J. Electrochem. Soc.* 145(1998)1149-1159.

[8] J.S. Yi, T.V. Nguyen, Multicomponent transport in porous electrodes of proton exchange membrane fuel cells using the interdigitated gas distributors, *J. Electrochem. Soc.* 146 (1999) 38-45.

[9] V. Gurau, H. Liu, S. Kakac, Two-dimensional model for proton exchange membrane fuel cells, *AIChE Journal* 44 (1998)2410-2422.

[10] Trung V. Nguyen, A gas distributor design for Proton exchange membrane fuel cell, *J. Electrochem. Soc.* 143(1996)L103-L105

[11] S. Um, Computational modeling of transport and electrochemical reaction in proton exchange membrane fuel cell. Ph.D. Thesis.

[12] S. Shimpalee, S. Dutta, W. K. Lee, J. W. Van Zee, Effect of humidity on PEM fuel cell performance part II - numerical simulation, *Proceeding of ASME IMECH*, Nashville, TN, HTD 364-1, pp.367-374(1999)

[13] W. K. Lee, J. W. Van Zee, S. Shimpalee, S. Dutta, Effect of humidity on PEM fuel cell performance part I - experiments, 1999 international mechanical engineering congress & exposition, nashville, TN - November 14