

인산형 연료전지 스택에 대한 3차원 모델링 및 모사

안 현 식 · 김 호

서울시립대학교 화학공학과
(2000년 2월 1일 접수, 2000년 3월 6일 채택)

Three-Dimensional Modeling and Simulation of a Phosphoric Acid Fuel Cell Stack

Hyun-shik An and Hyo Kim

Dept. of Chemical Engineering, University of Seoul
(Received 1 February 2000 ; Accepted 6 March 2000)

요 약

연료전지는 일정하게 유지되는 전극-전해질계의 공정에 의해 연료와 산화제의 화학에너지를 전기에너지로 끊임없이 전환시킬 수 있는 전기화학장치이다. 인산형 연료전지는 전해질로 진한 인산염을 사용한다. 연료전지 시스템에서 가장 중요한 부분인 스택은 연료의 산화가 일어나는 anode, 산화물의 환원이 일어나는 cathode, 그리고 anode와 cathode를 분리시키고 이온을 전도시키는 전해질로 이루어져 있다. 연료전지의 성능은 시스템의 환경에 따른 작동 및 디자인 변수들에 의해 좌우된다. 따라서 연료전지의 핵심부분이라 할 수 있는 스택의 성능향상을 위하여 전산유체역학 코드를 이용한 스택에 대한 3차원적 모델링 및 전기화학반응이 포함된 모사를 수행하였다. 이로부터 산화제의 유량변화에 따른 스택 내부에서의 연료, 산화제 및 생성물의 농도, 그리고 반응에 의해 생성된 열의 전달에 의한 스택의 온도 분포 및 변화를 전산유체 코드인 FLUENT를 이용하여 계산하였다.

Abstract - A fuel cell is an electrochemical device continuously converting the chemical energy in a fuel and an oxidant to electrical energy by going through an essentially invariant electrode-electrolyte system. Phosphoric acid fuel cell employs concentrated phosphoric acid as an electrolyte. The cell stack in the fuel cell, which is the most important part of the fuel cell system, is made up of anode where oxidation of the fuel occurs cathode where reduction of the oxidant occurs; and electrolyte, to separate the anode and cathode and to conduct the ions between them. Fuel cell performance is associated with many parameters such as operating and design parameters associated with the system configuration. In order to understand the design concepts of the phosphoric fuel cell and predict it's performance, we have here introduced the simulation of the fuel-cell stack which is core component and modeled in a 3-dimensional grid space. The concentration of reactants and products, and the temperature distributions according to the flow rates of an oxidant are computed by the help of a computational fluid dynamic code, i.e., FLUENT.

Key words : fuel cell stack, three-dimensional modeling, simulation, performance.

1. 서론

연료전지는 1839년 영국의 William R. Grove 경에 의해 처음으로 고안되었고, 천연

가스, 메탄올, 석탄 등의 연료를 개질하여 얻은 수소와 공기중의 산소의 화학에너지를 직접 전기에너지로 변환하는 발전장치이다[1]. 연료전지는 발전효율이 40~60%에 이르며,

질소산화물이나 황산화물이 거의 없어 환경 오염이 적고, 설치가 용이한 장점을 가지고 있다. 인산형 연료전지는 주로 메탄을 개질시킨 수소와 공기중의 산소를 이용하여, 150~200°C, 1~3atm의 온도, 압력에서 작동되며 전압은 100~400mA/cm²의 전류밀도에서 0.55~0.65volt의 크기를 갖는다.

연료전지 발전시스템의 성능은 전극, 촉매, 전해질 등의 부품 자체의 성능과 스택 제조, 그리고 연료의 조성 및 온도, 압력 등의 운전 조건에 따라 크게 변한다. 특히, 스택은 연료전지 시스템의 주요 부분으로 셀의 성능, 수명, 그리고 신뢰도를 만족시켜야 한다. 스택내의 온도분포는 스택의 성능에 가장 중요한 영향을 미치는 인자로, 스택내의 전류밀도의 분포 및 스택내 구성 성분들의 열팽창성, 부식성, 그리고 스택내의 국부적 온도차에 의한 전해질의 증발 등에 큰 영향을 미친다 [2,3]. 연료전지 내에서 전기가 발생하는 동안 전해질에서 이온 저항, 전극에서의 전기저항, 그리고 전기화학반응에 의한 생성열로 인해 셀 온도는 증가하게 된다. 셀 온도 증가는 전기화학반응을 가속하는 등의 전지 성능을 증가시키지만 촉매의 퇴화 등의 셀의 수명을 단축시키는 역효과가 따른다. 따라서 스택내의 적정 온도의 유지가 필요하게 된다.

연료전지 스택에 대한 수치해석 모사는 전극수준(미시적 모델링), 셀 수준, 그리고 스택 수준(거시적 모델링)으로 모델링을 나눌 수 있다. 미시적 모델링은 미세공정 연구를 통하여 더 나은 전극을 만드는 것을 목표로 하며, 거시적 모델링은 주어진 전극과 전해질의 전기화학적 성능을 알고 있을 경우 그 디자인을 최적화 시키고 운전의 효율성 제고를 위하여 수행한다[2,3].

Lee와 Lalk[4]는 연료전지 스택과 모델링 기술을 간단히 설명하였고 이를 고분자전해질 연료전지(PEMFC, Proton Exchange Membrane Fuel Cells) 스택에 적용하여 연료전지 성능을 정확하게 예측하는데 이용할 수 있음을 검증하였다. He와 Chen[2]는 전산유체역학(Computational Fluid Dynamics, CFD) 프로그램인 PHOENICS를 이용하여 용융탄산염 연료전지(Molten Carbonate Fuel Cells, MCFC) 스택에 대한 모사를 수행하여 전압 변화에 따른 스택에서 전류밀도와 온도 분포를 계산하였다. 그 밖에 용융탄산염 연료전지에 대한 모사는 Bosio 등[5], Hel[6], Kobayashi 등[7,8]과 같이 여러 연구[2,3,9-13]가 이루어지고 있다. 또한 고체산화물 연료전

지 스택에 대한 모사는 Achenbach[14,15], Boersma 등[16,17], Fergyson 등[18]에 의해 연구되어 왔다.

특히, 용융탄산염 연료전지(MCFC)에 대한 거시적 모델링의 경우, Wolf와 Wilemski [9]에 의해 개발된 2차원 수치모델은 셀 단계의 가장 정교한 연료전지 모델중의 하나이다. 그러나 여전히 스택 단계의 모델은 거의 없으며, 일반적으로 셀을 스택의 성능을 나타내는데 이용되고 있다. 고체산화물 연료전지(Solid Oxide Fuel Cells, SOFC)의 경우 Achenbach [14]에 의해 도입된 스택 모델은 스택에 대한 3차원적 전류와 온도 분포를 고려하였다. 그러나 스택의 방향에 대해 물질의 분포는 균일하다는 가정을 설정한 반면, 보고된 실험적 결과는 스택의 방향에 따라 물질 흐름속도에 대한 충분한 불균일성을 나타내고 있으며, 이는 스택의 높이에 따라 그리고 운전 압력에 따라 증가한다. 이는 스택을 나타내는 2차원 셀 모델의 이용과 스택에 따른 물질 분포가 균일하다는 가정은 스택의 길이가 높은 경우와 고압에서 운전되는 스택에 대해서는 더 이상 적절하지 못하다[3].

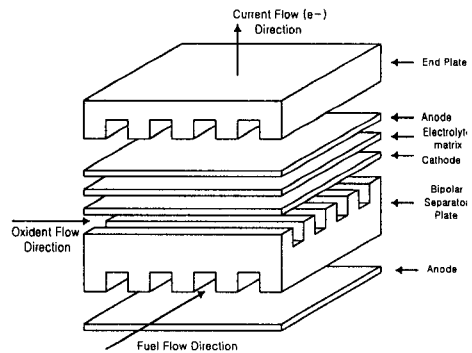


Fig. 1. Exploded view of basic fuel cell structure.

따라서, 연료전지에 대한 스택 모델은 스택 내의 물리적, 화학적 현상을 처리할 수 있어야 하고, 스택의 방향에 따라 물질 분포를 계산할 수 있어야 한다. 이러한 영향을 계산하기 위해 3차원적 모사 모델이 필요하다. 이 논문에서는 연료전지의 셀 수준의 거시적 모델링을 나타내었으며, 전산유체역학 코드를 이용하여 연료전지 스택을 모델링하고 반응물과 생성물의 농도 및 전기화학반응이 포함된 온도 분포를 계산하였다. 또한 반응물의

유량 변화에 따른 생성물의 유량 및 온도, 그리고 스택의 온도 변화를 계산하였다.

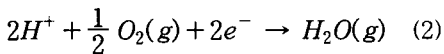
II. 스택 모델

인산형 연료전지 스택은 Fig. 1에 나타낸 것과 같이 anode, cathode, 전해질층, 그리고 연료와 산화제가 흐르는 채널을 분리시키는 바이폴라분리판으로 이루어져 있다. anode과 cathode는 모두 다공성 촉매 입자 덩어리가 teflon으로 결합되어있는 확산전극형태로서 다공성의 전기전도도가 뛰어난 전도판으로 지지 받고 있다. 연료전지의 원리는 Fig. 2에 나타낸 것과 같이 연료는 스택의 anode로 유입되어 연료중의 수소는 수소이온과 전자를 생성하고, 이온화된 수소는 전해질을 통하여 스택의 cathode로 이동하고 전자는 외부 회로를 통하여 cathode로 이동한다. 스택의 cathode로 유입된 공기중의 산소와 수소이온 및 전자가 반응하여 물과 열을 생성하고 전기를 발생하게 된다. 생성된 물은 공기 채널을 통하여 외부로 방출된다. 실제 전기 화학 반응이 일어나는 곳은 전극으로 다공성 지지체와 촉매로 이루어져 있으며 화학 반응은 다음과 같다.

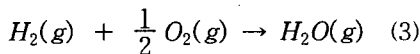
1) Anode



2) Cathode



3) Overall



일정한 온도, 압력에서 운전되는 연료전지에서 얻을 수 있는 최대 전기적인 일(W_{el})은 전기화학반응의 Gibbs 자유에너지(ΔG)로부터 계산된다.

$$W_{el} = \Delta G = -nFE \quad (4)$$

여기서 F 는 Faraday 수로 96481.3 J/V-gmol 이고, E 는 Gibbs 에너지로부터 얻을 수 있는

최대 전압이다.

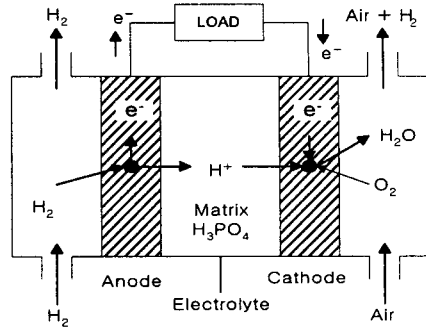


Fig. 2. Principle of operation of a fuel cell.

비가역 전지전압으로 불리는 단일 연료전지에서 얻을 수 있는 최대 전압(E)은 Nernst 식으로부터 계산된다. 여기서 y 는 각 성분의 몰분율을 나타낸다.

$$E = E^o - \frac{RT}{2F} \ln \frac{y_{H_2O}}{y_{H_2} y_{O_2}^{1/2}} + \frac{RT}{4F} \ln p \quad (5)$$

전체 반응에 대해서, 셀의 전압은 반응물의 활동도가 증가할수록, 그리고 생성물의 활동도가 감소할수록 증가한다. 그러나, 연료전지에 대한 작동 전압은 실제 연료전지 내에서 비가역적 손실로 인하여 Nernst 전압 보다 더 낮다.

연료전지에서 열 발생은 두 가지 형태로 나누어진다. 하나는 비가역 셀 반응에 관계된 열이고, 다른 하나는 전류 흐름에 대한 저항에 의해 생성된 열이다. 일반적인 외부에서 개질되는 천연가스를 이용하여 운전되는 인산형 연료전지의 경우 190℃를 유지하기 위해 열을 충분히 제거해주어야 한다. 연료전지에서 anode측에서의 연료가스, 전극, 전해질층, 그리고 cathode측의 산화가스 사이의 전도, 대류 그리고 복사 열전달 현상이 있으며, 또한 연료 가스와 산화 가스에서 물질전달에 의한 열전달이 존재한다.

III. 지배방정식

3.1. 화학성분에 대한 보존 방정식

m_a 가 성분 a 의 질량 분율일 때, 속도장

u_i 에서 m_a 의 보존 방정식은 다음과 같다.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho m_a) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i m_a) = \frac{\partial}{\partial x_i} J_{a,i} + R_a \quad (6)$$

여기서 R_a 은 화학반응에 의해 생성되는 단위 부피당 성분 a 의 생성 속도를 나타내고, $J_{a,i}$ 는 m_a 의 차이에 따른 diffusion flux를 나타내며 다음 식으로 표현된다. 여기서 $D_{a,m}$ 은 혼합물에서 성분 a 의 확산계수를 나타낸다.

$$J_{a,i} = -\rho D_{a,m} \frac{\partial m_a}{\partial x_i} \quad (7)$$

3.2. 운동량 보존 방정식

뉴턴 유체 및 층류 흐름에 대한 i 방향에 대한 운동량 보존 방정식은 다음과 같이 표현된다.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j u_i) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + F_i \quad (8)$$

여기서 p 는 압력을 나타내고, F_i 는 i 방향에서의 external body force로 porous media 모델에서 source term을 나타낸다. τ_{ij} 는 stress tensor를 나타낸다.

3.3. 에너지 보존 방정식

에너지 보존 방정식은 다음 형태로 나타낼 수 있다.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j h) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_i} - \sum_a h_a J_a \right) + S_h \quad (9)$$

여기서 k 는 열 전도도이고, J_a 은 성분 a 의 diffusion flux 이다. h 는 이상기체에 대한 엔탈피이고, S_h 는 화학반응열에 의한 energy source이다.

$$S_h = \sum_a \frac{h_a^o}{m_a} + \int_{T_{ref,a}}^{T_{ref}} C_{P,a} dT R_a \quad (10)$$

여기서 h_a^o 는 성분 a 의 생성 엔탈피이고, R_a 은 성분 a 의 단위부피당 생성속도이다. 또한 solid 영역에서 전도에 의한 에너지 전달 방정식은 다음과 같다.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) \quad (11)$$

IV. 모사 방법

연료전지 스택을 모사하기 위한 모델은 Fig. 3에 나타내었으며 바이폴라분리판, 가스 채널 그리고 전해질 층으로 이루어진 단위 전지 2개로 구성되고 8.4mm×8.4mm×7.8mm의 크기를 갖는 3차원 구조로 이루어져 있다. x 방향은 수소채널방향, y 방향은 공기 채널방향, 그리고 z 방향은 스택 적층방향을 나타낸다. 계산을 위한 스택 모델에 대한 mesh 셀의 수는 68796개이다.

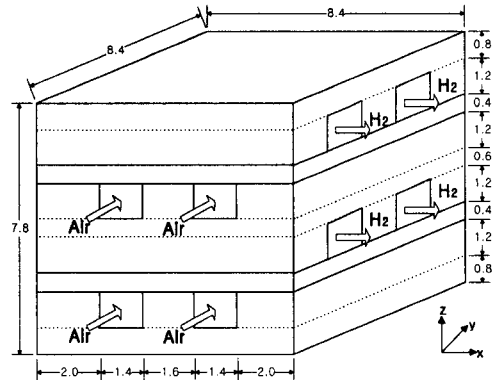


Fig. 3. Schematic of the fuel cell stack.

다공성 전극, 전해질 그리고 다공성 촉매로 이루어진 전해질 층은 porous media로 처리하여 계산하였다. 즉 수소 채널을 통과하는 수소와 공기 채널을 통과하는 산소는 각각 전해질 층으로 확산되어 반응한 후 생성된 물은 공기 채널을 통하여 공기와 함께 빠져 나간다. 외부 wall boundary는 단열로 설정하였다. 또한 셀에서 생성되는 전압은 0.6V 즉, 셀의 전기에너지로의 전환효율을 47.87%

로 일정하게 설정하였다. 수소채널로 유입되는 가스는 100%의 수소로 1m/s 속도와 443K의 온도로 유입되고, 공기 채널로 유입되는 공기(산소 21%, 질소 79%)는 443K의 온도로 0.1m/s부터 1 m/s까지 0.1m/s씩 유속을 변화시켜 유입시켰다. 스택 내의 온도 분포 계산은 전류 흐름에 대한 저항에 의해 생성된 열의 영향은 무시하고, 반응에 의한 반응열에 대한 영향만을 고려하여 계산하였다.

화학성분의 화학반응이 포함된 스택 내에서 가스의 유동과 반응열에 의한 가스의 열전달 및 스택 자체의 열전달에 따른 온도 분포를 계산하기 위하여 유한체적법(Finite Volumetric Method, FVM)을 이용하는 상용 전산유체역학(Computational Fluid Dynamic, CFD) 코드인 FLUENT v5.0을 이용하였다.

V. 결 과

수소와 공기채널로 유입되는 가스의 온도는 443K로 일정하고, y 방향으로 흐르는 채널인 공기 채널로 유입되는 공기는 스택 내에서 수소와 공기중의 산소가 반응하여 물과 전기 그리고 열을 발생하여 생성된 열의 일부는 스택으로 이동되어 x 방향으로 흐르는 채널인 수소채널을 통하여 빠져나가고, 나머지 열은 생성된 물과 함께 공기채널로 빠져나가게 된다. 수소채널의 수소 유속을 1 m/s로 일정하게 하고 공기의 유입 유량을 변화시킬 때 수소와 반응하는 산소의 양에 따라 반응에 의해 생성되는 열이 변하게 되므로 스택의 온도가 달라지게 된다.

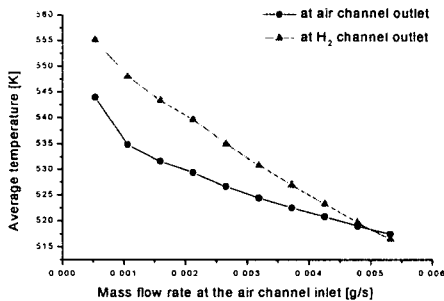


Fig. 4. Average temperature at the channel outlets according to mass flow rates at the air channel inlet.

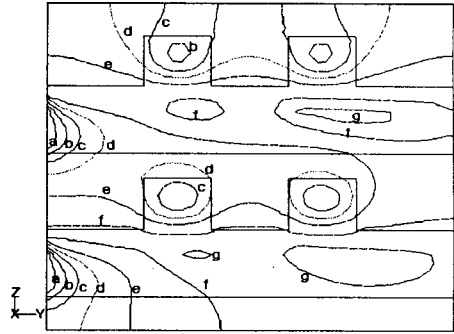


Fig. 5. Contours of Temperature[K] with the air inlet velocity of 0.1 m/s at $x = 0.27$ mm (a: 461, b: 479, c: 497, d: 515, e: 533, f: 551, g: 569).

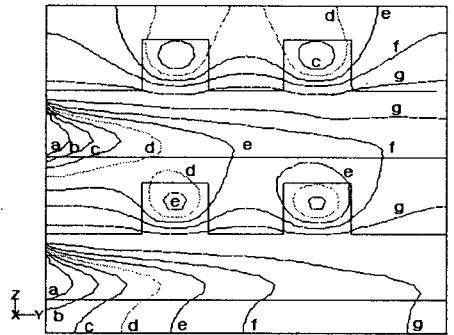


Fig. 6. Contours of Temperature[K] with the air inlet velocity of 0.5 m/s at $x = 0.27$ mm (a: 456, b: 469, c: 482, d: 495, e: 508, f: 521, g: 534).

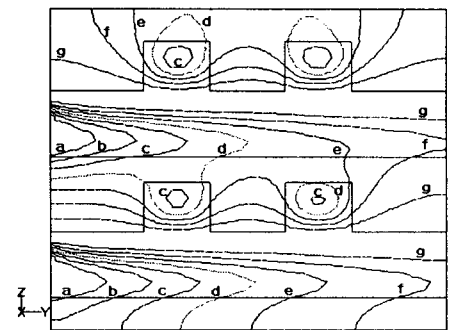


Fig. 7. Contours of Temperature[K] with the air inlet velocity of 1.0 m/s at $x = 0.27$ mm (a: 454, b: 465, c: 476, d: 486, e: 497, f: 508, g: 519).

Fig. 4는 공기채널로 유입되는 공기의 유량 변화에 따른 수소와 공기 채널 출구에서의 평균온도를 나타낸 그림으로, 공기의 유입유량을 증가시킬 경우 수소의 유입유량은 일정하고 수소와 반응하는 산소의 양은 한정되므로 증가된 공기 유량에 의해 스택을 냉각시키는 효과가 따른다. 따라서 공기의 유입되는 유량이 증가할수록 수소와 공기 채널 출구의 온도가 감소하게 된다.

Fig. 5, 6, 7은 각각 공기채널의 유입 유속이 0.1, 0.5, 1.0 m/s의 경우 $x = 2.7$ mm인 단면에서 온도 분포를 나타낸 그림으로 반응이 일어나는 스택의 전해질층의 온도가 가장 높게 나타났으며, 반응에 의해 생성된 물이 공기채널을 통하여 방출하므로 스택의 하부, 즉 공기채널이 위치한 스택의 아래 부분의 온도가 위 부분 보다 높은 온도로 분포하고 있다. 또한 스택 내의 최대온도는 공기 채널의 유입 유속이 높을수록 낮게 나타났다.

Fig. 8, 9, 10은 각각 공기채널의 유입 유속이 0.1, 0.5, 1.0 m/s의 경우 $z = 3.9$ mm인 단면, 즉 바이폴라 분리판의 중간 단면에서의 온도 분포를 나타낸 그림으로, 반응열에 의해 채널의 각 출구쪽의 온도가 높게 나타났으며, 공기채널의 유량이 증가할수록 공기에 의해 스택이 냉각되어 낮은 온도 분포를 나타내었다.

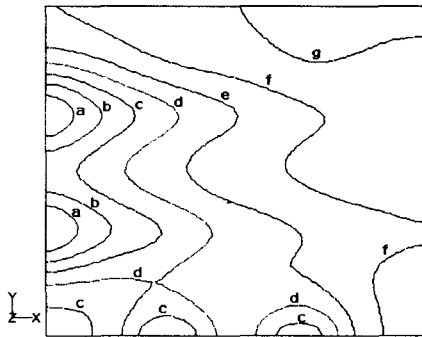


Fig. 8. Contours of Temperature[K] with the air inlet velocity of 0.1 m/s at $z = 0.39$ mm (a: 494, b: 503, c: 512, d: 521, e: 530, f: 538, g: 547).

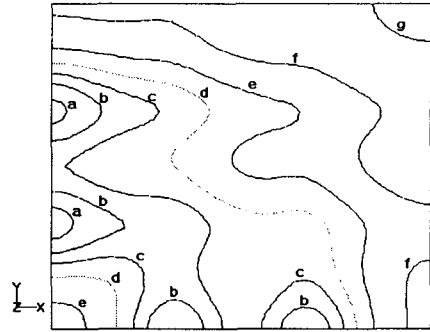


Fig. 9. Contours of Temperature[K] with the air inlet velocity of 0.5 m/s at $z = 0.39$ mm (a: 486, b: 494, c: 503, d: 511, e: 520, f: 528, g: 537).

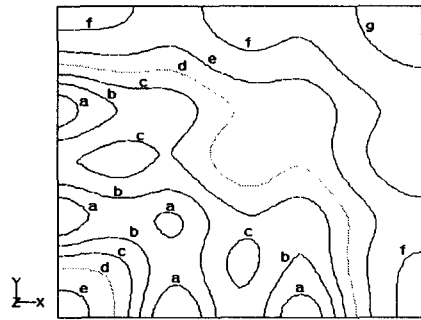


Fig. 10. Contours of Temperature[K] with the air inlet velocity of 1.0 m/s at $z = 0.39$ mm (a: 482, b: 489, c: 496, d: 502, e: 509, f: 516, g: 523).

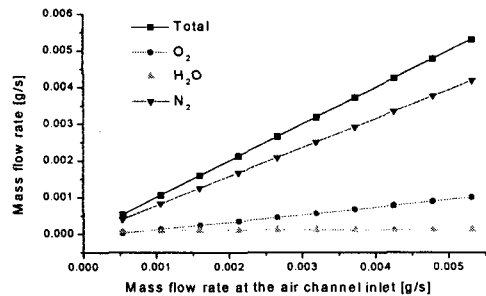


Fig. 11. Mass flow rates at the air channel outlet according to mass flow rates at the air channel inlet.

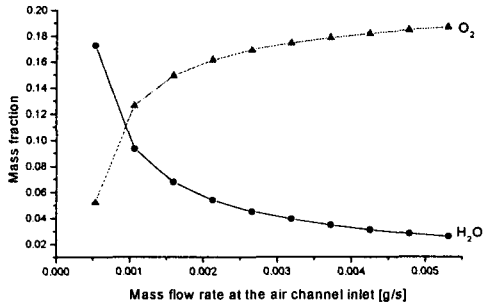


Fig. 12. Mass fractions at the air channel outlet according to mass flow rates at the air channel inlet.

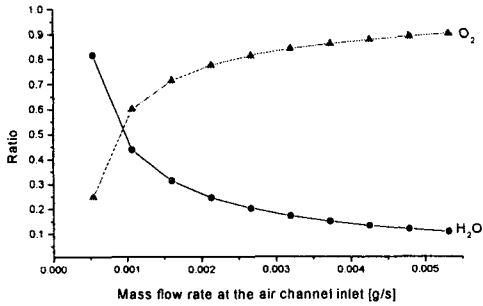


Fig. 13. Ratios of mass flow rate of H₂O and O₂ at the air channel outlet to that of O₂ at the air channel inlet according to mass flow rates at the air channel inlet.

수소채널의 수소 유속을 1 m/s로 일정하게 하고 공기의 유입 유량을 변화시키면 반응하는 수소와 산소의 양은 변하게 된다. Fig. 11은 공기채널에서 채널 입구로 유입되는 공기의 유량변화에 따른 채널 출구에서의 전체 유량과 산소, 질소, 물의 유량 변화를 나타낸 그림으로, 채널로 유입되는 유량이 증가함에 따라 반응에 의해 생성되는 물의 양은 증가함을 나타내고 있다. Fig. 12는 공기채널 유입 유량 변화에 따른 공기채널 출구에서의 산소와 물의 질량분율을 나타낸 그림이고, Fig. 13은 공기채널로 유입되는 산소 유량에

대한 공기채널 출구에서 반응 후 남은 산소 유량과 생성된 물의 유량 비를 나타낸 그림이다. 수소채널로 유입되는 수소유량이 일정하므로 공기의 유입 유량이 증가함에 따라 유입 산소유량이 적은 경우는 반응하는 산소 양은 유입되는 산소의 양에 크게 영향을 받지만 유입 산소유량이 많은 경우반응하는 수소의 양에 제한이 있으므로 반응하는 산소의 양은 크게 증가하지 않는다.

스택에서 $x = 2.7$ mm인 단면에 대한 공기채널의 유입 유속이 각각 0.1, 0.5, 1.0 m/s의 경우 산소의 질량 분율 분포는 Fig. 14, 15, 16에 나타내었고, 생성된 물의 질량 분율 분포는 Fig. 17, 18, 19에 나타내었다.

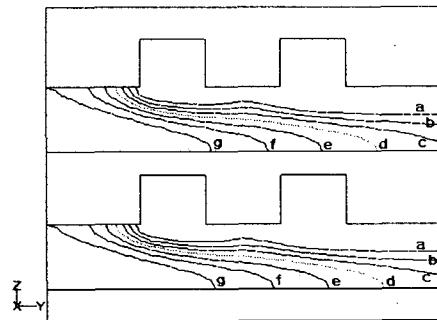


Fig. 14. Contours of mass fraction of O₂ with the air inlet velocity of 0.1 m/s at $x = 0.27$ mm (a: 0.026, b: 0.052, c: 0.079, d: 0.105, e: 0.131, f: 0.158, g: 0.184).

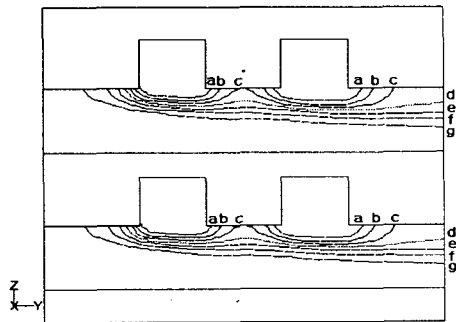


Fig. 15. Contours of mass fraction of O₂ with the air inlet velocity of 0.5 m/s at $x = 0.27$ mm (a: 0.026, b: 0.053, c: 0.079, d: 0.105, e: 0.131, f: 0.158, g: 0.184).

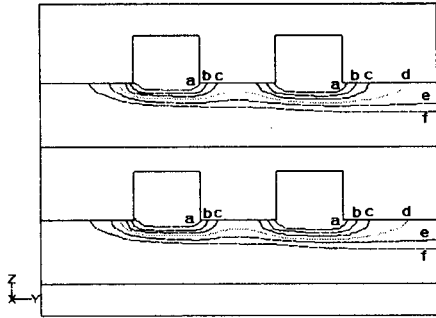


Fig. 16. Contours of mass fraction of O_2 with the air inlet velocity of 1.0 m/s at $x = 0.27$ mm (a: 0.030, b: 0.060, c: 0.090, d: 0.120, e: 0.150, f: 0.180).

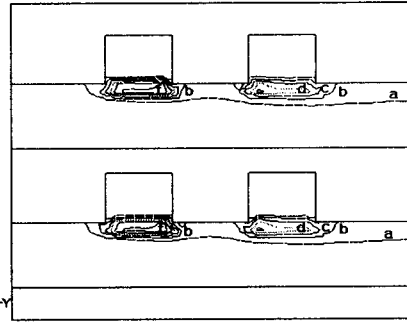


Fig. 19. Contours of mass fraction of H_2O with the air inlet velocity of 1.0 m/s at $x = 0.27$ mm (a: 0.076, b: 0.151, c: 0.227, d: 0.303, e: 0.378, f: 0.454).

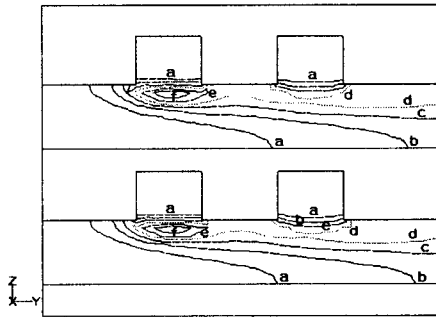


Fig. 17. Contours of mass fraction of H_2O with the air inlet velocity of 0.1 m/s at $x = 0.27$ mm (a: 0.060, b: 0.121, c: 0.181, d: 0.241, e: 0.302, f: 0.362).

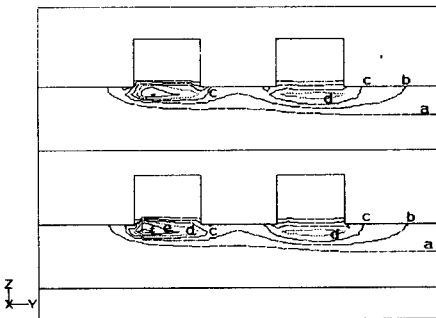


Fig. 18. Contours of mass fraction of H_2O with the air inlet velocity of 0.5 m/s at $x = 0.27$ mm (a: 0.069, b: 0.138, c: 0.207, d: 0.275, e: 0.344, f: 0.413).

VI. 결 론

본 연구에서는 연료전지 스택 내의 스택의 방향에 따라 물질 분포와 온도분포를 계산하기 위하여 전산유체역학 코드를 이용하여 연료전지 스택을 셀 수준의 3차원적 모델링을 수행하였고, 스택으로 유입되는 산화제의 유량 변화에 대한 반응물과 생성물의 농도 및 전기화학반응이 포함된 온도 분포를 계산하였다. 스택으로 유입되는 수소는 전해질층을 확산되어 공기채널로부터 확산되어 산소와 반응하여 열을 발생시켜 스택의 온도를 증가시켰고 반응에 의해 생성된 물은 공기채널을 통하여 빠져나갔다. 스택으로 유입되는 공기 유량의 증가에 따라 공기흐름에 의한 냉각효과로 인하여 스택의 온도가 감소하였다. 연료전지 스택 내에서 수소와 산소가 반응하여 전기와 열을 발생함으로써 스택의 온도를 상승시키게 되고, 온도의 상승으로 인해 스택내의 촉매의 퇴화, 전해질의 증발 등과 같은 역효과가 발생하여 스택의 수명을 단축하게 된다. 따라서 스택의 온도를 일정하게 유지하기 위해 스택을 냉각시키는 냉각 기술이 필요하다. 셀 자체와 가스 흐름간의 열전달, 전기화학반응으로부터의 벌크 흐름에 대한 에너지 전달, 그리고 셀 자체의 열전도를 통한 연료전지 셀의 성능을 예측함으로써 적정온도를 유지할 수 있는 연료전지 스택의 설계가 가능할 것이다.

사 용 기 호

- a : Chemical species
- $C_{p,a}$: Heat capacity [j/kg K]
- $D_{a,m}$: Molecular diffusivity [m^2/s]
- E : Maximum Potential [V]
- E° : Standard electrode Potential [V]
- F : Fadaday [J/V-gmol]f
- F_i : External body force [$kg\ m/sec^2$]
- ΔG : Gibbs free energy [J]
- h : Enthalpy [J]
- h_a : Enthalpy of formation of species [J]
- $J_{a,i}$: Diffusion flux [$kg/m^2\ sec$]
- k : Thermal conductivity [W/m K]
- m_a : Mass fraction of a chemical species
- p : pressure [atm]
- R : Universal gas constant [J/mol K]
- R_a : Rate of generation of the chemical species per unit volume [$kg/m^3\ sec$]
- S_h : Energy source [$kg/m^3\ sec$]
- T : Temperature[K]
- t : time [sec]
- u_i : Velocity [m/s]
- W_{el} : Maximum electric work [J]
- x : Coordinate[m]
- y : Mole fraction
- ρ : Density [kg/m^3]
- τ_{ij} : stress tensor [$kg/m\ sec^2$]

참 고 문 헌

1. A. J. Appleby and F. R. Foulkes, *Fuel Cell Handbook*, Van Nostrand Reinhold, New York, 1989.
2. W. He and Q. Chen, *J. Power Sources*, **73**, pp. 182-192, 1998.
3. W. He and Q. Chen, *J. Power Sources*, **55**, pp. 25-32, 1995.
4. J. H. Lee and T. R. Lalk, *J. Power Sources*, **73**, pp. 229-241, 1998.
5. B. Bosio, P. Costamagna and F. Parodi, "Modeling and experiment- ation of molten carbonate fuel cell reactors in a scale-up process,"

- Chemical Engineering Science*, **54**, pp. 2907-2916, 1999.
6. W. He, *J. Power sources*, **49**, pp. 283-290, 1994.
7. H. Fujimura, N. Kobayashi and K. Ohtsuka, *JSME International Journal. Series II*, **35**(1), pp. 82-88, 1992.
8. N. Kobayashi, H. Fujimura and K. Ohtsuka, *JSME International Journal. Series II*, **32**(3), pp. 420-427, 1989.
9. T. L. Wolf and G. Wilemski, "Molten carbonate fuel cell performance model," *Journal of the electrochemical society*, **130**(1), pp. 48-55, 1983.
10. V. Sampath and A. F. Sammells, *J. Eletrochem Soc.: Electrochemical Science and Technology*, **127**(1), pp. 79-85, 1980.
11. W. He and Q. Chen, *Proceeding of the ASME Advanced Energy Systems Division*, **37**, pp. 249-256, ASME 1997.
12. Watanabe, K. and Nikai, I., *Jpn. Soc. Mech. Eng.(in japanese)*, **B. 52**(481), pp. 3335-3340, 1986.
13. G. Wilemski, *J. Electrochem. Soc.*, **131**(1), pp. 117-121, 1983.
14. E. Achenbach, "Three-dimension and time-dependent simulation of a planar solid oxide fuel cell stack," *Journal of Power Sources*, **49**, pp. 333-348, 1994.
15. E. Achenbach, *Journal of Power sources*, **57**, pp. 105-109, 1995.
16. R. J. Boersma and N. M. Sammes, *J. Power Sources*, **63**, pp. 215-219, 1996.
17. R. J. Boersma and N. M. Sammes, *J. Power Sources*, **66**, pp. 41-45, 1997.
18. J. R. Fergyson, J. M. Fiard and R. Herbin, *J. Power Sources*, **58**, pp. 109-122, 1996.