

PEM 연료전지 공기극 유로에서 물의 거동에 대한 CFD 해석

김현일*, 남진현, 신동훈, 정태용, 김영규

CFD Analysis on Two-phase Flow Behavior of Liquid Water in Cathode Channel of PEM Fuel Cell

Hyun-il Kim*, Jin Hyun Nam, Donghoon Shin, Tae-Yong Chung and Young-Gyu Kim

Abstract Liquid water in flow channel is an important factor that limits the steady and transient performance of PEM fuel cells. A computational fluid dynamics study based on the volume-of-fluid (VOF) multi-phase model was conducted to understand the two-phase flow behavior of liquid water in cathode gas channels. The liquid water transport in 180° bends was investigated, where the effects of surface characteristics (hydrophilic and hydrophobic surfaces), channel geometries (rectangular and chamfered corners), and air velocity in channel were discussed. The two-phase flow behavior of liquid water with hydrophilic channel surface and that with hydrophobic surface was found very different; liquid water preferentially flows along the corners of flow channel in hydrophilic channels while it flows in rather spherical shape in hydrophobic channels. The results showed that liquid water transport was generally enhanced when hydrophobic channel with rounded corners was used. However, the surface characteristics and channel geometries became less important when air velocity was increased over 10m/s. This study is believed to provide a useful guideline for design optimization of flow patterns or channel configurations of PEM fuel cells.

Key words PEM fuel cell(고분자 전해질 연료전지), CFD(전산 유체역학), Two-phase flow(이상유동), Flow channel(유로), Hydrophobic(소수성)

* 국민대학교 대학원 기계공학과 석사과정

■ E-mail : resume79@kookmin.ac.kr ■ Tel : (02)910-5036 ■ Fax : (02)910-4839

Nomenclature

I : current, A
 F : Faraday number, 96485 C/mol
 Q : flow rate, m³/s
 f_v : volume of fluid of -phase
 θ_w : contact angle, °

M : molecular weight, kg/mol
 ρ : density, kg/m³
 α : effective electro-osmosis coefficient
 λ_{air} : excess air ratio

1. 서론

화석연료 자원의 고갈과 연소 부산물로 생성되는 온실가스로 인한 기후변화, 환경오염의 심화로 인해 화석연료를 대체할 수 있는 에너지원에 대한 연구가 활발히 진행 중이다. 수소는 친환경적이고 재생 가능한 특성으로 인해 가장 유력한 미래의 연료로 각광받고 있다. 이러한 수소를 기반으로 하는 경제체제에서 연료전지는 효율적이고 핵심적인 동력발생장치가 될 것으로 기대되고 있다. 현재 PEM 연료전지는 가장 진보된 형태의 연료전지로서 차량용 동력원과 가정용 열병합(CHP) 발전시스템에 적용되고 있다.

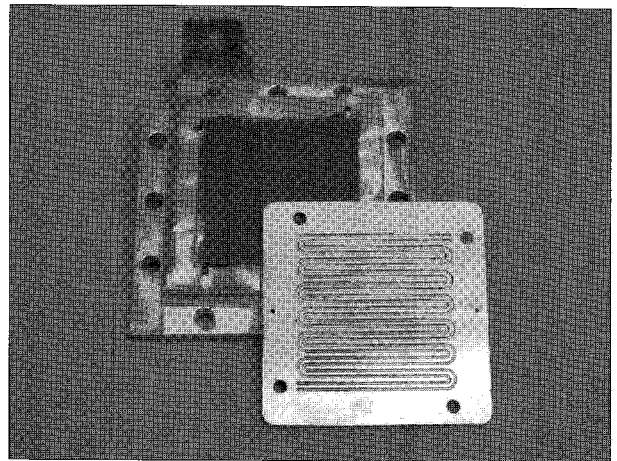
PEM 연료전지 스택은 긴 유로와 큰 열용량으로 인하여 부하의 변동이나 운전 조건의 변화에 따라 스택의 온도와 수분함량이 느리게 변화한다. 그 결과로 PEM 연료전지 스택의 출력 특성도 긴 시간에 걸쳐 정상상태에 도달하게 되어 동적 출력특성이 중요한 분야에서 문제가 된다. 실제 PEM 연료전지의 핵심 부분인 고분자 전해질막(PEM), 확산층, 촉매층을 결합한 전극전해막(MEA)에서의 수분 함량에 의해 연료전지의 성능은 크게 좌우된다.

PEM 연료전지의 작동에 있어서 물은 매우 중요한 요소이다. PEM 연료전지 내의 물의 양이 충분치 않은 경우 고분자 전해질막으로부터 수분의 증발이 심화되고, 그 결과 수소이온 전도도가 낮아져 성능이 저하되는 Dry-out 결함이 발생한다. 반대로 물의 양이 너무 많은 경우, 특히 물이 지속적으로 생성되는 공기극에서 확산층이나 촉매층에서의 확산을 저해하거나 유로에서 공기의 흐름을 방해함으로써 연료전지의 성능을 저하시키는 Flooding 결함이 발생한다.⁽¹⁻³⁾

본 논문에서는 공기극 유로내의 평균 수분량과 수분의 정체 및 거동을 연구하기 위하여, 유로 내에서의 물의 거동에 대한 VOF 이상유동 모델과 접촉각을 고려하여 표면장력을 처리하는 wall adhesion 모델을 사용하여 CFD 해석을 수행하였다. 본 해석을 통하여 연료전지 유로 내에서의 물의 배출에 미치는 유로 형상, 표면 재질 및 공기 속도의 영향에 대하여 연구하였으며, 이를 통해 물의 원활한 배출과 연료전지 효율 향상을 위한 최적의 유로 설계의 기본 자료를 제시한다.

2. 해석

본 연구는 PEM 연료전지 스택 단전지 유로의 형상 및 재질에 변화를 주며, 공기의 유입 속도를 다르게 하여 모델의 다양화를 통한 전산 해석을 수행하였다. 본 모델은 확산층에서 물이 생성된다. 이에 따라 전산 해석 수행 시에 바닥면은 소수성 재질을 가지며, 벽면의 재질을 변화시켰다. 첫 번째 해석 모델의 경우는 직각 유로의 형상을 가지며, 재질은 친수성과 소수성으로 재질의 변화를 주었다. 두 번째 모델의 경우는 유로 형상에 곡률(curvature)을 주어 해석을 하였으며, 곡선 유로를 가지는 해석 모델의 경우에는 공기 유입 속도를 15m/s, 10m/s, 5m/s 로 각각 다르게 하여 본 전산해석을 수행하였다. 본 모델의 형상은 10×10cm² 유로의 형상에서 물의 정체가 가장 많이 나타날 것으로 예상되는 마지막 굴절 부분에 대하여 상용 CFD 코드인 FLUENT 6.2를 사용하여 전산 해석을 수행하였다. 아래의 Pic. 1은 실제 전산 해석 모델의 형상 사진이다.



Pic. 1 Sample of flow channel

2.1 지배방정식

본 연구는 PEM 연료전지 스택의 단전지에서 공기극 유로에서의 물의 거동 특성을 파악하기 위해 CFD를 이용하여 전산 해석을 수행하였다. 공기극에서의 유동은 기상(phase-1)과 액상(phase-2)에 대하여 각각 Navier-Stokes 방정식과 액체 및 고체(wall)에서 계면의 표면장력(surface tension) 및 접촉

각(contact angle)의 조건을 고려하여 표현하였다.⁽⁴⁾

$$\frac{1}{\rho_q} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{u}_q) \right] = 0 \quad (1)$$

위 식 (1)은 VOF 모델에서의 질량보존에 대한 연속 방정식이며, 아래의 식 (2)는 표면장력과 접촉각을 고려한 혼합유체의 운동량 방정식이다.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{u}) + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) \\ & = -\nabla_p + \nabla \cdot [\mu(\vec{\nabla} \vec{u} + \vec{\nabla} \vec{u}^T)] + \rho \vec{g} + \vec{F} \end{aligned} \quad (2)$$

본 해석 모델에서는 wall adhesion 모델을 사용하여 표면장력은 액상과 기상에 대해 일반적인 값인 0.07N/m을 사용하였다. 벽면과 액상의 각이 달라짐에 따라 친수성과 소수성으로 나누어 전산 해석을 수행하였으며, 이에 따라 경계면에서의 물과 벽면의 접촉각은 달라지게 된다. 액체방울이 고체 표면과 더불어 형성하는 각이 접촉각이며, 일반적으로 접촉각이 90도 이하일 때는 친수성 재질이며, 90도 이상일 때는 소수성 재질이다. 이를 고려하여 전산 해석을 수행하였다. 아래의 Fig. 1에서 소수성 ; Fig. 1(a)과 친수성 ; Fig. 1(b)에 대한 접촉각을 나타내었다.⁽⁹⁻¹⁰⁾

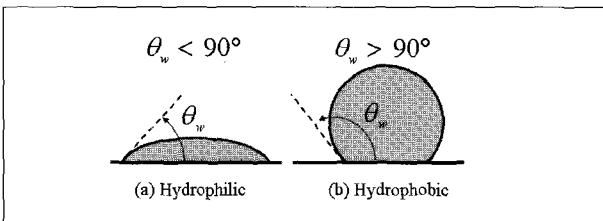


Fig. 1 Liquid water on top of (a) hydrophilic and (b) hydrophobic surfaces.

2.2 해석 모델

Fig. 2에서는 PEM 연료전지 스택 내 물의 양이 가장 많은 것으로 추정되는 유로의 끝단에서의 경계조건을 나타내었다.

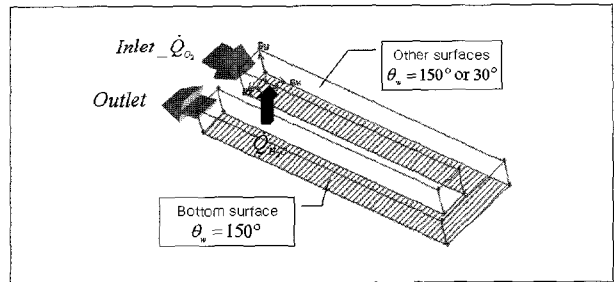


Fig. 2 Simulated flow field model with boundary conditions of air inlet and outlet, and water inlet.

바닥면은 실제 확산층의 재질과 같게 소수성($\theta_w=150^\circ$)으로 선정하였으며, 나머지 벽면들은 소수성과 친수성으로 재질의 변화를 주었다.

2.3 물의 유량

PEM 연료전지의 양극에서는 수소와 산소의 전기화학반응에 의해 수분이 발생하게 된다. 이러한 수분은 완전 기습 조건에서 액상의 물로 배출되며 양극에서의 유량을 결정할 필요가 있다. 유로에서의 물의 거동을 해석하기 위해 아래의 식 (3)을 이용하여 유량을 계산하였다.

$$Q_{H_2O} = \frac{M_{H_2O}}{\rho_{H_2O}} \times \frac{1}{2F} (1+2\alpha) \quad (3)$$

F 는 $1.6 \times 10^{-18} \text{ C} \times 6.02 \times 10^{23} \text{ mol}$ 이며, α 는 유효 전기삼투(electro-osmosis)계수로서 연료전지에 맞게 0.5로 선정하였다. I 는 유로의 끝단에서 해석을 가정하여 60 A으로 계산하였으며, 식 (3)에 의해 생성되는 물의 양은 $1.1 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$ 이다.

2.4 공기 유량

공기극 유로에서는 유입되는 공기의 속도나 양에 따라서 물의 거동 특성에 많은 영향을 미치게 된다. 이에 따라 유입되는 공기의 유량과 속도를 수소와 잘 반응할 수 있게 맞추어 줘야 한다. 식 (4)에 의해 유입 공기의 유량 및 속도를 선정하였다.⁽⁶⁾

$$Q_{O_2} = \frac{M_{O_2}}{\rho_{O_2}} \times \frac{I}{4F} \times \frac{1}{x_{O_2}} \times \lambda_{air} \quad (4)$$

해석된 PEMFC의 작동조건에 해당하는 65℃, 1기압에서 완

전 포화된 공기에 대해 x_{O_2} 는 약 0.16 이며, M_{O_2} / ρ_{O_2} 는 27.7 l/mol이다. 유로를 따라서 산소가 소모되는 것을 감안하여 공기 과잉률 λ_{air} 를 3으로 설정하였다. 유입 공기의 유량은 0.00008169 m³/s이며, 1 mm × 1 mm 정사각형 유로로 공기가 유입된다. 본 전산해석에서는 직각 유로에서 10m/s로 공기가 유입되며, 곡선 유로의 경우는 공기 유입 속도에 변화를 주어 전산해석을 수행하였다.

3. 해석 결과

두 가지의 유로 형상에 대해 소수성($\theta_w=150^\circ$)과 친수성($\theta_w=30^\circ$)으로 나누어 전산 해석을 수행하였으며, 각 경우마다 약 2만개의 격자를 가지고 있다. 본 전산해석은 검사체적 내 물의 증가가 나타나는데 약 0.2초 이내에서 정상상태에 도달하게 된다. 아래 Fig. 3에서는 실제 해석된 유로 형상 변화에 따른 검사체적 내부에 축적된 물의 양을 나타내고 있으며, 물의 양을 총 체적 분율(%)로 나타내었다.

유로 내 축적된 물의 양을 보면 직각유로에서 축적된 물의 양이 증가하고, 친수성 재질에서 검사 체적 내 물의 양이 증가

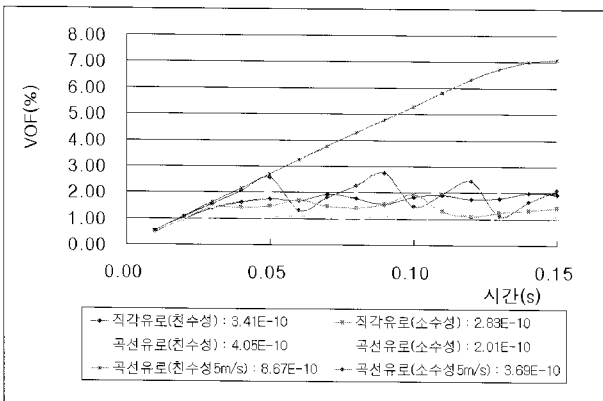


Fig. 3 evolution of total VOF contained in calculation domain

하는 것을 볼 수 있었다. 또한, 공기 유입 속도가 느려지면서 검사 체적 내 물의 양이 증가한다. 이는 유로의 형상도 물의 거동에 많은 영향을 주지만, 유로의 재질 또한 물의 거동에 있어서 중요한 인자라 사료된다. 하지만, 공기 유입 속도가 빠르게 되면 유로의 형상과 재질에는 큰 영향을 받지 않는 것을 알 수 있었다.⁽⁶⁻⁸⁾

3.1 직각 유로

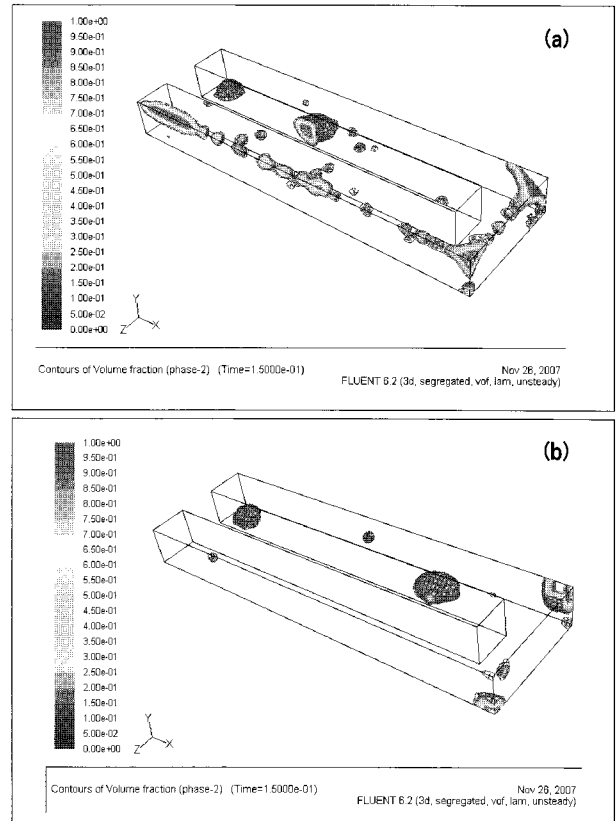


Fig. 4 liquid water performance in flow channel (a) hydrophilic (b) hydrophobic

Fig. 4에서는 직각유로에서 물의 거동을 나타내고 있다. 전산 해석 결과에서 보듯이 Fig. 4(a)의 경우에는 벽면의 재질이 친수성 재질이며, 유리판에서 물이 필름과 같이 얇게 퍼지는 현상과 같이 물은 벽면에 붙어 퍼지는 물의 거동을 볼 수 있다. Fig. 4(b)는 벽면은 소수성 재질로서 검사 체적 내 물의 양은 적지만, 물은 큰 물방울의 형태로 유로 내에서 거동을 하여 공기의 흐름을 방해할 것이라 사료된다.

3.2 곡선 유로

Fig. 5에서는 곡선 유로에서 물의 거동을 나타내었다. 결과에서 보듯이 Fig. 5(a)의 경우에는 직각 유로에서와 비슷하게 벽면에 붙어서 물의 거동이 나타났으며, Fig. 5(b)에서의 경우에는 물은 물방울의 형태로 물의 거동이 나타났다. 곡선 유로, 소수성 재질에서 검사 체적 내 물의 총 체적 분율은 0.97%

로 가장 적었다. 이와 같은 결과는 친수성 재질의 경우 물은 벽면에 붙어서 거동을 보이는 반면 소수성 재질에서는 물이 벽면에 붙지 않고 흐르기 때문이다.

지금까지의 전산 해석을 비교해 보았을 때, 물의 거동은 유로의 형상과 재질의 변화뿐만 아니라, 공기의 유입 속도에도 많은 영향을 받을 것이라 사료된다. 하지만, 연료전지 내 공기의 유입속도가 빠르게 되면 물의 정체는 적게 나타나겠지만, 공기를 유입시키기 위한 송풍기의 전력 소비가 커짐으로서 결과적으로 연료전지에서 발생하는 전기를 많은 부분 소비해야 할 것이다. 따라서 공기의 유입량을 크게 하면, 연료전지의 총 효율은 떨어지게 되므로 공기의 유량은 적정 수준으로 선정해야 하는 필요성이 있다. PEM 연료전지 내 공기의 유입 속도를 크게 하는 것은 연료전지의 효율을 떨어뜨리는 이유가 될 것이다.

위에서 언급한 바와 같이 공기의 유입 속도 역시 연료전지 스택 내 유로에서 물의 거동에 있어 중요한 인자일 것이다. 다음 해석 시에는 속도에 변화를 주어 전산 해석을 수행하였다.

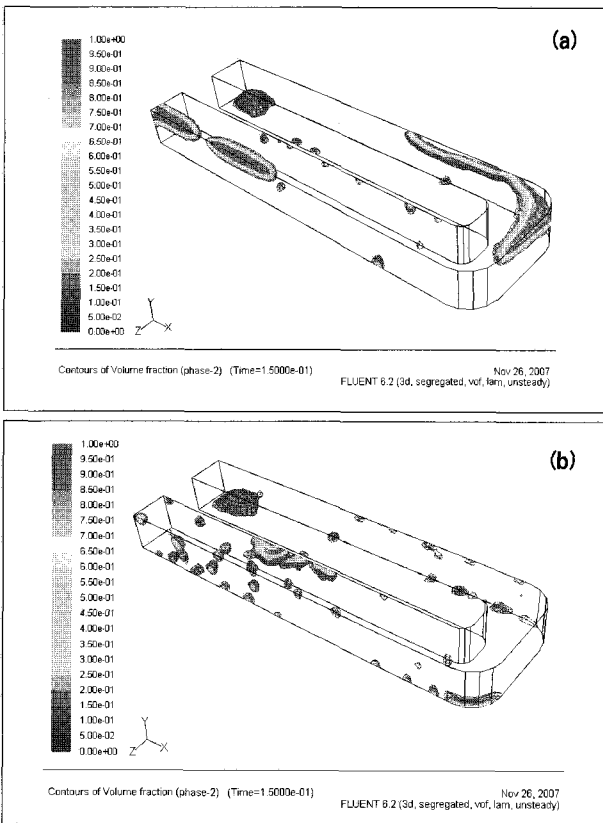


Fig. 5 liquid water performance in flow channel (a) hydrophilic (b) hydrophobic

3.3 곡선 유로(공기 속도 5 m/s)

Fig. 6에서 곡선 유로에서 공기의 유입 속도는 5m/s로 선정하여 전산해석을 수행하였다. Fig. 6(a)의 경우는 공기의 유입속도가 느리며, 벽면은 친수성 재질을 가지고 있다. 체적 분율은 4.16%로서 검사 체적 내 가장 많은 물의 총 체적 분율을 나타내었다. Fig. 6(b)의 경우에서도 속도가 느림에 따라 검사 체적 내 물의 양은 증가하였다. 이와 같은 결과로 볼 때 공기의 유입속도가 물의 거동에 많은 영향을 미치는 것을 볼 수 있었다. 또한, 공기의 유입 속도가 느리면, 재질의 변화에 따라 검사 체적 내 물의 양의 변화가 큼을 확인할 수 있었다.

3.4 곡선 유로(공기 속도 15m/s)

Fig. 7에서는 공기의 유입 속도를 15m/s로 선정하여 전산해석을 수행하였다. 속도가 빠르게 되면, 재질의 영향은 크지 않았다. 하지만 PEM 연료전지 스택 내 공기의 유입 속도를 빠르게 선정하는 것은 송풍기의 전력 소모가 커지고, 이 결과 연료

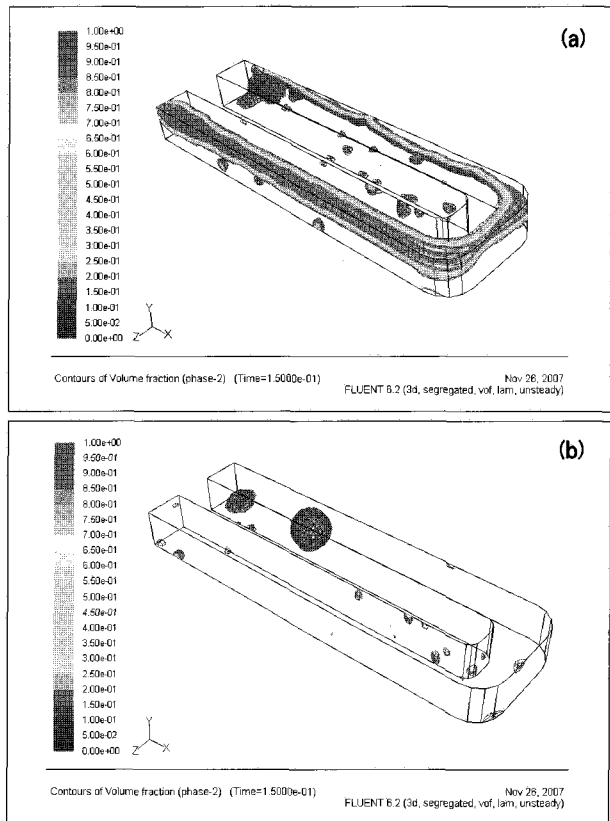


Fig. 6 liquid water performance in flow channel (a) hydrophilic (b) hydrophobic

전지의 총 효율은 저하된다.

정상상태에 도달하기 전까지는 재질의 변화에 영향을 많이 받는 것으로 선행 연구에서 확인하였다. 하지만, Fig. 7에서는 빠른 공기의 유입 속도 때문에, 물의 총 체적 분율은 약 0.5%정도로 적은 물의 양을 나타내었다.

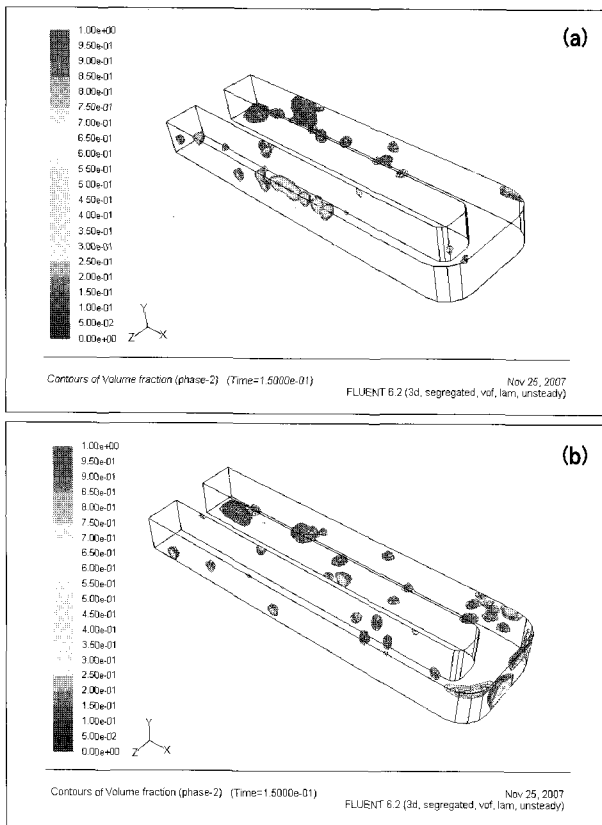


Fig. 7 liquid water performance in flow channel (a) hydrophilic (b) hydrophobic

4. 결론

본 연구에서는 PEM 연료전지 스택에서 단전지의 유로 형상 및 재질에 변화를 주었으며, 공기의 유입 속도를 다르게 하여 전산 해석을 수행하였다. 유로 형상의 경우 직각 유로와 곡선 유로로 형상을 다르게 하였으며, 재질의 경우 친수성 재질과 소수성 재질로 나누어 전산 해석을 수행하였다. 곡선 유로에서는 속도를 15m/s, 10m/s, 5m/s로 다양한 해석을 수행하였다. 본 전산해석을 통해 유로 내에서 물의 거동은 유로 형상에도 많은 영향을 받지만, 유로의 재질도 물의 거동에 있어서 많은

영향을 주는 것을 알 수 있었다. 본 전산해석은 약 0.2초 이내에서 정상상태에 도달하는 것을 볼 수 있었다.

본 연구에서는 직각 유로에서보다 곡선 유로일 때 검사 체적 내 물의 양이 적게 나타났으며, 곡선 유로에서의 경우 소수성 재질을 가지고 있을 때 유로 내 축적된 물의 양이 가장 적게 나타났다. 유로 벽면이 소수성 재질을 가지고 있을 때는 물은 물 방울의 형태로 물의 거동이 나타났으며, 친수성 재질에서는 유리판에서 물이 필름과 같이 넓게 퍼지는 현상처럼 물은 벽면에 넓게 퍼져 흐르는 물의 거동이 나타났다.

본 연구에 앞서 선행되어진 전산 해석에서는 0.05초의 짧은 시간에 걸쳐 물의 거동을 파악하였다. 해석 시간이 짧아서 정상상태에 이르지 못했지만, 본 전산해석은 약 0.2초 이내의 시간을 가지고 정상상태에 도달하는 것을 볼 수 있었다.

본 연구에서 연료전지 유로 내 물의 거동에 영향을 미치는 인자는 유로의 형상, 재질 및 공기의 유입 속도라 사료된다. 세 가지의 인자가 적절하게 선정될 때 연료전지의 효율이 향상될 수 있을 것임을 본 전산 해석을 통해 알 수 있었다. 유로의 형상이 곡선을 가지고 있어도 재질의 변화에 따라 많은 영향을 받으며, 속도에 의해서도 많은 영향을 받는다. 곡선 유로에서 친수성 재질을 가지고 있으며, 공기의 유입 속도가 5m/s일 때 체적 분율은 4.16%로서 가장 큰 물의 체적 분율을 가진다. 곡선 유로, 소수성 재질에서 공기의 유입 속도가 10m/s일 때 물의 체적 분율은 0.97%로서 가장 적은 양을 나타냈다.

이 결과로서 연료전지 유로의 형상이 곡선일 때, 재질은 소수성 재질이고 공기의 속도가 10m/s일 때 물의 흐름이 가장 좋은 것으로 나타났다. 다양한 전산해석을 통해 연료전지 유로 내 물의 양이 증가함에 따라 공기의 흐름을 방해하고 전체적으로는 연료전지의 효율을 저하시키는 원인이 될 것으로 사료된다.

향후 연구에서는 물의 거동 가시화 및 검사 체적 내 물의 양을 측정하고 본 전산해석 결과와 실험 결과를 비교 검증하여, 연료전지 유로 형상 및 재질을 최적화하며 공기의 적절한 유입 속도를 결정하는데 있어서 기본 자료로 활용할 수 있을 것이다.

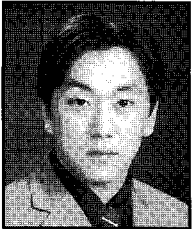
후기

본 연구는 국민대학교 교내 연구 지원비와 산업자원부 신재생에너지기술개발사업의 일환(2006-N-HY12-P-01)으로 수행되었습니다.

References

- (1) Kordesch, K. and Simader, G., 1996, Fuel Cells and Their Applications, VCH.
- (2) Sammes, N., 2006, Fuel Cell Technology Reaching towards Commercialization, Springer.
- (3) Busby, R. L., 2005, Hydrogen and Fuel Cells: A Comprehensive Guide, PennWell.
- (4) Riley, N., 2006, The Navier-Stokes Equations: A Classification of Flows and Exact Solutions, Cambridge.
- (5) Barbir, F., 2005, PEM Fuel Cells Theory and Practice, Elsevier.
- (6) Larminie, J. and Dicks, A., 2003, Fuel Cell Systems Explained, 2nd ed., Wiley.
- (7) Li, X., 2006, Principles of Fuel Cells, T&F Informa.
- (8) Ken, K., 2006, Keith, E., Fuel Cell Electronics Packaging, Springer.
- (9) Cai, Y. H., Hu, J., Ma, H. P., Yi, B. L., and Zhang, H. M., 2006, "Effects of hydrophilic/hydrophobic properties on the water behaviors in the micro-channels of a proton exchange membrane fuel cell", J. Power Sources, Vol. 161, pp. 843-848.
- (10) Kumbur, E. C., Sharp, K. V., and Mench, M. M., 2006, "Liquid droplet behavior and instability in a polymer electrolyte fuel cell flow channel", J. Power Source, Vol. 161, pp. 333-345.
- (11) Quan, P., Zhou, B., Sobisiak, A., and Liu, Z. S., 2005, "Water behavior in serpentine micro-channel for proton exchange membrane fuel cell cathode", J. Power Sources, Vol. 152, pp. 131-145.

김 현 일



2007년 국민대학교 기계자동차공학부 기계설계학과 공학사

현재 국민대학교 대학원 기계공학과 석사과정
(E-mail : resume79@kookmin.ac.kr)

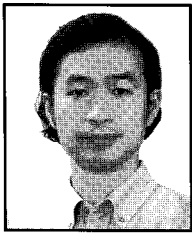
남 진 현



1996년 서울대학교 기계공학과 공학사
1998년 서울대학교 기계공학과 공학석사
2003년 서울대학교 기계항공공학부 기계공학과 공학박사

현재 국민대학교 기계자동차공학부 전임강사
(E-mail : akko2@kookmin.ac.kr)

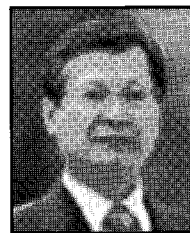
신 등 훈



1992년 한국과학기술원 기계공학과 공학사
1994년 한국과학기술원 기계공학과 공학석사
1998년 한국과학기술원 기계공학과 공학박사

현재 국민대학교 기계자동차공학부 조교수
(E-mail : d.shin@kookmin.ac.kr)

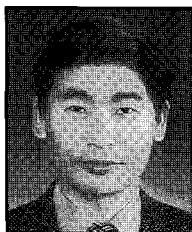
정 태 응



1973년 서울대학교 자동차공학과 공학사
1977년 서울대학교 자동차공학과 공학석사
1985년 인하대학교 기계공학과 공학박사

현재 국민대학교 기계자동차공학부 정교수
(E-mail : tychung@kookmin.ac.kr)

김 영 규



1988년 홍익대학교 기계공학과 공학사
1990년 홍익대학교 정밀기계 공학석사
1996년 홍익대학교 기계공학과 공학박사

현재 한국가스안전공사 가스안전연구원 수소DME 팀장
(E-mail : ygkim@kgs.or.kr)