

고체고분자형 연료전지 내의 이동현상에 대한 수치해석

박 찬 국*¹NUMERICAL ANALYSIS OF TRANSPORT PHENOMENA
IN POLYMER ELECTROLYTE FUEL CELLSC.G. Park*¹

A three dimensional numerical model to predict the flow and transport of mixtures and also the electrochemical reactions in polymer electrolyte membrane (PEM) fuel cells is developed. The numerical computation is base on vorticity-velocity method. Governing equations for the flow and transport of mixtures are coupled with the equations for electrochemical reactions and are solved simultaneously including production and condensation of vapor. Fuel cell performance predicted by this calculation is compared with the experimental results and reasonable agreements are achieved.

Key Words : 고체고분자형 연료전지(PEM Fuel Cell), 수소(Hydrogen), 전산유체역학(CFD), 혼합기체 유동(Flow of Gas Mixture), 와도-속도 방법(Vorticity-Velocity Method)

1. 서 론

자동차에서 생성되는 배기가스, 원자력 폐기물 등에 의한 환경오염은 날로 증가하고 있으며 이 에 따라 대체에너지 및 청정에너지로서의 연료전지에 대한 관심은 더욱 증가하고 있다. 연료전지는 연료와 산화제가 가지고 있는 화학적 에너지를 직접 전기에너지로 변환시키며 카르노 효율(Carnot efficiency)의 범위에 구속되지 않고 또한 폭발을 야기할 수 있는 가열의 문제점 및 기계적인 손실을 유발할 수 있는 운동부분을 포함하지 않는다는 이점도 가지고 있다.

고체고분자형 연료전지(polymer electrolyte membrane fuel cell)는 고분자 막의 양측에 각각 촉매와 다공성 기체 확산전극(GDE, gas diffusion electrode)이 샌드위치형식으로 결합되어 있는 MEA(membrane electrolyte assembly)로 만들어져 있으며 MEA의 양측 바깥쪽으로 전류가 통하는 전도체(graphite bipolar plate)가 접착되어 있다. 이 전도체에는 기계적으로 가공된 홈 또는 공간이 조성되어 있으며 이 홈을 통하여 양극

(anode) 편에서는 연료(수소), 또 음극(cathode) 편에서는 산화제(산소 및 공기)가 공급된다. 수소가 연료로서 공급되는 PEM형의 연료전지 즉 수소연료전지는 90 ℃이하의 저온에서도 높은 효율을 나타내며 특히 무공해의 수증기만을 발생하기 때문에 차세대 전기자동차의 구동을 위한 전원으로 크게 기대되고 있다.

PEM연료전지의 원활한 운용을 위해서는 연료전지내의 습도의 조절이 필수적인 요소이다. 고분자막의 습도가 충분하지 않으면 막을 통과하는 양자의 수송에 많은 저항이 발생하며 또한 너무 높은 습도에 의하여 기체확산층에 액체 상태의 물이 발생하면 연료 및 산화제의 유동에 장애요소가 될 수 있다. 특히 반응의 결과에 의하여 음극(cathode)에서는 물이 생성되고 또한 전기적 삼투현상(electro-osmotic drag)에 의하여 물이 양극(anode)으로부터 음극으로 이송되기 때문에 음극에서 이러한 현상은 두드러지게 나타난다. 최근 수치해석 방법을 이용하여 연료전지 내의 습도 변화를 파악함과 더불어 연료전지의 성능을 예측하여 그 효율을 증대시키려는 연구가 많은 학자들에 의하여 수행되고 있다. 고분자막의 수직방향만의 변화를 고려하여 1차원 모형을 개발한 Verbrugge[1] 와 Springer 등[2]부터 시작하여 2차원 유동을 고려한 Um 등[3]의 연구가 수행되었으며 최근에는 3차원 유동모형들이 개발되고

접수일: 2006년 8월 19일, 심사완료일: 2007년 1월 19일.

1 정회원, 전남대학교 공과대학 기계시스템공학부

* E-mail: cgpark@chonnam.ac.kr

있다[4-11]. 특히 You 등[5]과 Hu 등[11]은 3차원모형과 더불어 2상 유동을 고려하고 있다. 또한 Jen 등[7]은 유동방향의 와도(vorticity)와 속도를 병합한 와도-속도의 방법으로 비교적 쉬운 방법으로 유동에 대한 지배방정식을 구성한 후 전기화학방정식과 연립하여 혼합기체의 유동 및 연료전지의 성능을 예측하고 있다. 다만 생성된 물은 증기의 상태로서만 취급하여 응축 및 물의 유동에 대한 사항은 전혀 고려하지 않고 있다.

본 연구에서는 Jen 등이 사용한 와도-속도의 방법을 채용하며 동시에 양극에서 생성된 수증기의 응축을 고려하여 혼합기체의 유동 및 전류의 생성에 대하여 수치해석을 수행하려 한다.

2. 수치해석

2.1 지배방정식

2.1.1 유동방정식

Fig. 1과 같은 연료전지 내의 이동현상 및 전기화학적 반응의 수치해석은 기본적으로 3차원 해석이며 산소와 질소, 수소 및 수증기를 포함하는 혼합기체의 유동, 열과 질량의 수송 현상을 포함하고 있으며 기하학적으로는 다공층 내에서 이루어진다. 이 계산과정에서 연료전지 내부의 온도는 일정하게 유지되는 것으로 하였으며 유동은 정상상태로 계산을 하였다. 다만 혼합기체의 확산방정식은 비정상상태로 계산하였으며 이에 따라 유동을 계산할 때에 유체는 비압축성으로 간주하였으며 일차 계산을 한 후 혼합기체의 확산방정식을 계산한 결과에 따라 밀도를 수정하여 다시 계산하는 방법을 택하였다. 축방향의 확산, 점성소산 등은 무시하였다.

한편 압력의 축방향의 변화는 다음식과 같이 나타난다.

$$\frac{\partial p}{\partial z} = \frac{\partial p_z}{\partial z} + \frac{\partial p'}{\partial z} \quad (1)$$

여기에서 p_z 는 축방향의 각 위치에서 기준 압력이며 p' 은 x 및 y 방향의 압력변화이다. $\partial p_z / \partial z \gg \partial p' / \partial z$ 을 고려하여

$$\frac{\partial p}{\partial z} = \frac{\partial p_z}{\partial z} = f(z) \quad (2)$$

로 쓸 수 있다.

위와 같은 계산을 위한 연속방정식, 운동량방정식, 농도방정식 등 지배방정식은 다음 식 (3-7)과 같이 표현된다.

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (3)$$

$$\frac{1}{\epsilon^2} \rho (u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z}) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\mu}{\epsilon} (\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}) - \frac{\mu}{\kappa} u \quad (4)$$

$$\frac{1}{\epsilon^2} \rho (u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z}) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\mu}{\epsilon} (\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2}) - \frac{\mu}{\kappa} v \quad (5)$$

$$\frac{1}{\epsilon^2} \rho (u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z}) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\mu}{\epsilon} (\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2}) - \frac{\mu}{\kappa} w \quad (6)$$

$$\rho \frac{\partial X}{\partial t} + \frac{\rho}{\epsilon} (u \frac{\partial X}{\partial x} + v \frac{\partial X}{\partial y} + w \frac{\partial X}{\partial z}) = \rho D (\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 X}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 X}{\partial z^2}) + S_\phi \quad (7)$$

위 식에서 ϵ 은 개공도(porosity)이며 $\mu V / \kappa$ 는 개공도가 1이 아닌 확산 층 및 촉매 층에만 적용된다. 또한 X 는 질량비(mass fraction)이며 D 는 물질 확산계수, S_ϕ 는 전기화학 반응 및 전기적 삼투현상(electro-osmotic drag)에 의한 산소, 수소 및 수증기의 증감에 의한 나타나는 원천 항이다. 한편 밀도 ρ 는 산소, 질소, 수소 및 수증기 등 혼합기체의 평균밀도이며 응축된 물이 발생하였을 경우 물의 밀도도 포함한다. u, v, w 는 혼합기체의 속도이며 응축된 물은 기체와 동일한 속도를 갖는 것으로 하였다.

혼합기체는 벽체를 통과하지 못하므로 벽면에서 속도는 0으로 하였다. 한편 음극 축과 양극 축에 공급되는 공기 및 수소의 유량은 다음과 같은 식을 이용하였다.

$$q_c = \zeta_c \frac{IA}{4F} \frac{RT_c}{p_c X_{O_2}} \quad (8)$$

$$q_a = \zeta_a \frac{IA}{4F} \frac{RT_a}{p_a X_{H_2}} \quad (9)$$

위 식에서 q_c, q_a 는 각각 공기와 수소의 유량이며 A 는 전극의 표면 면적, R 과 F 는 만능기체상수와 Faraday상수이다. 또한 p 는 압력, T 는 온도, X 는 산소 및 수소의 몰 함량비(mole fraction)이다. ζ 는 양론 비로 계산된 유량(stoichiometric flow rate)으로 계산에 이용된 ζ_c, ζ_a 는 각각 3.0이다. 한편 I 는 전류밀도로서 식 (8)과 (9)에서는 $I = 1A/cm^2$ 을 기준으로

이용하였다. 위에서 계산된 유량은 입구에서 균일한 속도로 유입된다.

전기화학적 반응에 의한 산소와 수소의 결합은 물을 생성한다. 이외에 음극 측과 양극 측의 수증기의 농도 및 압력의 차에 의한 물의 이동이 발생하고 또한 전기적 삼투현상에 의하여 양극 측의 물이 음극 측으로 이동하게 되며 이들의 이동은 혼합기체의 확산방정식의 음극 측과 양극 측에 원천 항으로 가해진다. 양극에서 음극으로 이동하는 물의 양 m_w 는 다음과 같이 계산된다.

$$m_w = M_w \left(n_d \frac{i}{F} - D_w \frac{dX_w}{dy} - X_w \frac{K}{\mu} \frac{dp_w}{dy} \right) \quad (10)$$

여기에서 M_w 는 물의 분자량, F 는 Faraday상수, i 는 국소 전류밀도이다. n_d , X_w , D_w 는 각각 전기적 삼투현상에 의한 이동을 계산하기 위한 계수, 수증기의 물 농도, 수증기의 농도 차에 의하여 이동되는 물의 양을 계산하기 위한 확산계수이며 n_d 와 D_w 는 다음 식을 이용하였다.

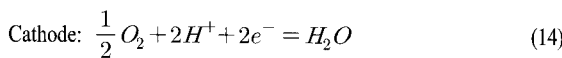
$$n_d = \lambda \frac{2.5}{22} \quad (11)$$

$$D_w = 3.1 \times 10^{-7} a (e^{0.28a} - 1) e^{-2346/T} \quad (12)$$

위 식에서 λ 와 a 는 각각 식 (24)과 (25)와 같이 정의되는 함수율과 물의 활성도이다.

2.1.2 전기화학반응 해석

고체고분자형 연료전지는 수소 등의 연료가 공급되는 양극 (Anode)과 산화제인 공기가 공급되는 음극(Cathode)의 사이에 고체고분자의 막이 있다. 이 고분자 막을 통하여 프로톤 (Proton)이 양극에서 음극으로 이동되며 음극에서 이온화되어 있는 산소이온과 결합하여 물을 형성함으로써 전기를 발생하게 된다. 각각의 극에서의 이온화는 다음과 같다.



위와 같은 반응의 속도는 아래와 같이 주어진다.

$$j_a = a_a^{ref} \left(\frac{C_{H_2}}{C_{H_2}^{ref}} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\alpha_a + \alpha_c}{RT} F \eta_a \right) \quad (15)$$

$$j_c = -a_c^{ref} \left(\frac{C_{O_2}}{C_{O_2}^{ref}} \right) \exp\left(-\frac{\alpha_c}{RT} F \eta_c\right) \quad (16)$$

위의 식에 나타난 변수들은 다음과 같으며 이용한 수치는 Table 2에 나타낸다.

j_a : 양극 측의 전류밀도

j_c : 음극 측의 전류밀도

α_a^{ref} : 양극 측의 기준교환전류밀도

(reference exchange current density of anode)

α_c^{ref} : 음극 측의 기준교환전류밀도

(reference exchange current density of anode)

C_{H_2} : 수소농도

$C_{H_2}^{ref}$: 기준수소농도

C_{O_2} : 산소농도

$C_{O_2}^{ref}$: 기준산소농도

α_a, α_c : 이동상수(transfer coefficient)

η_a, η_c : 활성화 과전압 (overpotential)

F : Faraday 상수

위의 식 (15)과 (16)은 양극 측에서는 반응이 매우 빠르므로 선형적인 반응 비율을 보임으로서 낮은 과전압을 나타내며 이와 반대로 음극에서는 상대적으로 반응속도가 느리다는 사실을 전체로 Butler-Volmer 식으로부터 유도된 것이다[2]. 같은 조건에서 활성화 과전압은 다음과 같다.

$$\eta_a = -\Phi_e \quad (17)$$

$$\eta_c = V_{oc} - V_{cell} - \Phi_e \quad (18)$$

단 위 식에서 V_{cell} 은 연료전지의 출력전압이며 V_{oc} 는 음극 측의 개회로전압(open circuit voltage)으로 다음 식과 같이 온도 T 의 1차함수로 간단하게 나타낼 수 있다.

$$V_{oc} = 0.0025 T + 0.2329 \quad (19)$$

양극과 음극의 촉매 층에서 발생하는 전기화학적반응의 결과 기체의 성분들이 생성 또는 소멸되며 이들의 양은 다음 식으로 표현된다.

$$S_{H_2}^{anode} = -\frac{j_a}{2F} \quad (20)$$

$$S_{O_2}^{cathode} = \frac{j_c}{4F} \quad (21)$$

$$S_{H_2O}^{cathode} = -\frac{j_c}{2F} \quad (22)$$

여기에서 $S_{H_2}^{anode}$, $S_{O_2}^{cathode}$, $S_{H_2O}^{cathode}$ 는 각각 수소, 산소의 소비량 및 수증기의 생성량이다.

2.1.3 고체고분자막의 물성 모델

고체고분자형 연료전지에서 발전성능을 좌우하는 가장 큰 요소는 전해질 막(proton exchange membrane)의 이온 전도도이며 이온 전도도는 그 온도 및 수증기의 포화도에 의하여 결정된다. 본 연구에서는 Nafion계 전해질 막을 사용하였으며 이 전해질 막의 이온전도도는 Springer 등[2]의 실험식으로 다음과 같이 표현된다.

$$\sigma_e = \exp\left[1268\left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T}\right)\right](0.5139\lambda - 0.326) \quad (23)$$

$$\lambda = 0.43 + 17.81a - 39.85a^2 + 36.0a^3 \quad 0 \leq a \leq 1$$

$$\lambda = 14 + 1.49(a - 1) \quad 1 \leq a \leq 3 \quad (24)$$

$$a = \frac{p_{H_2O}}{p_{sat}} \quad (25)$$

위 식에서 변수의 기호는 다음과 같다.

- σ_e : 이온전도도
- λ : 함수율
- a : 물의 활성도(water activity)
- p_{H_2O} : 수증기 분압
- p_{sat} : 포화 수증기압

2.1.4 전하방정식

전기가 발생하는 과정에서 고분자막 및 촉매에 분포하는 전하 Φ_e 는 다음 식 (20)으로 구할 수 있다.

$$div(\sigma grad \Phi_e) + S_\Phi = 0 \quad (26)$$

여기에서 σ 는 각 영역에서의 전기전도도, S_Φ 는 원천항(source)이고 Table 1에 각층에서의 S_Φ 를 나타냈다. 본 연구에서는 기체 확산층 및 집전판에 나타나는 전기저항(Ohmic loss)은 무시하였으며 촉매층 및 고분자막에서 전자의 이동은 프로톤의 이송에 의하여 결정되므로 여기에서의 전기전도도는 고분자막의 물성모델에서 계산된 이온전도도를 이용하였다. 벽체로 구성된 경계에서 전하는 보존되는 조건을 병렬하여 식 (26)으로부터 전하 Φ_e 가 구해지면 국소전기밀도 및 평균 전기밀도는 다음과 같은 식으로 구한다.

$$i = -\sigma_e \frac{\partial \Phi_e}{\partial y} \Big|_{y=LF} \quad (27)$$

$$i_{avg} = \frac{1}{A} \iint idxdy \quad (28)$$

2.2 수치해석방법

이미 언급한 바와 같이 유동해석은 와도-속도의 병합방법을 사용하였다. 다음 식 (29)과 같이 정의된 축방향의 와도, ζ_z 를 사용하여 식 (30) 및 (31)을 유도할 수 있다.

$$\zeta_z = \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \quad (29)$$

$$\nabla^2 u = -\frac{\partial \zeta_z}{\partial y} - \frac{\partial^2 w}{\partial x \partial z} \quad (30)$$

$$\nabla^2 v = \frac{\partial \zeta_z}{\partial x} - \frac{\partial^2 w}{\partial y \partial z} \quad (31)$$

또한 x 방향과 y 방향의 운동량방정식인 식 (4)와 (5)로부터 다음과 같은 와도방정식을 유도할 수 있다.

$$\frac{1}{\epsilon^2} \rho \left(u \frac{\partial \zeta_z}{\partial x} + v \frac{\partial \zeta_z}{\partial y} + w \frac{\partial \zeta_z}{\partial z} \right) = \frac{\mu}{\epsilon} \left(\frac{\partial^2 \zeta_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \zeta_z}{\partial y^2} \right) - \frac{\mu}{\kappa} \zeta_z \quad (32)$$

일반적으로 속도를 계산하는 방법은 식 (3-7) 등 연속방정식과 u , v 와 w 에 대한 운동량방정식 전체를 연립하여 풀게 되며 특히 압력 p 의 처리가 수반된다. 이에 반하여 와도와 속도를 병행하는 방법은 식 (30-32)를 연립하여 u , v 를 구한 후 식 (6)에서 유량이 일정하다는 조건아래 주 유동방향의 속도성분인 w 를 구하게 된다. 2차원에서 정의된 와도 ζ_c 에 대한 방정식을 이용함으로써 압력 p 가 쉽게 처리되고 u , v 와 w 를 분리하여 계산하기 때문에 w 의 계산이 매우 용이하다.

Table 1 Source term of electron conserve equation.

Region	Source Term
Anode Catalyst Layer	j_a
Cathode Catalyst Layer	$-j_c$
Proton Exchange Membrane	0

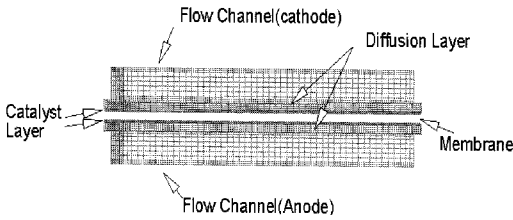


Fig.1 Computational grid.

다만 $x-y$ 2차원 평면상에서만 와도 ζ_c 를 정의함으로써 z 의 진행방향에 대하여 포물선 형태(parabolic type)의 편미분방정식으로 취하여야만 한다는 단점이 있다. 따라서 z 방향에 대해서는 후방차분을 적용하였다. 한편 x 및 y 등 횡 방향에 대해서는 중심차분법을 적용하였다.

수치해석계산과정을 나타내면 다음과 같다.

1. 식 (32)의 와도방정식을 푼다.
2. 식 (30), (31)의 u 및 v 를 반복법에 의하여 계산한다.
3. 축방향의 유량이 일정하다는 조건아래 식 (6)의 z 방향 운동량 방정식을 푼다.
4. 이들 계산은 z 방향으로 순서대로 계산되며 전 영역에 대한 계산이 완료되면 혼합기체확산방정식을 계산한다.
5. 혼합기체확산방정식에서 각 영역에서의 밀도가 결정되면 다시 1 - 5의 과정을 반복하며 각 반복계산에서 오차의 한계는 $|u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n|/|u_{i,j}^{n+1}| \leq 10^{-5}$ 으로 하였다.

Table 2 Physical parameters and properties at 353K.

Quantity	Value
Gas channel length	3.0 cm
Gas channel width	0.1 cm
Electrical collector width	0.1 cm
Gas channel depth	0.8 cm
Backing layer depth	0.0254 cm
Catalyst layer depth	0.00287 cm
Membrane depth	0.023 cm
Gas phase electrode porosity	0.4
Membrane porosity	0.28
Transfer coefficient, cathode side	2.0
Transfer coefficient, anode side	2.0
Ref. exchange current density, cathode side	$1.0 \times 10^2 \text{ A/m}^3$
Ref. exchange current density, anode side	$5.0 \times 10^8 \text{ A/m}^3$
O_2 stoichiometric flow ratio	3.0
H_2 stoichiometric flow ratio	3.0
Air side inlet pressure/fuel side inlet pressure	5.0/3.0 atm
Inlet nitrogen-oxygen mol fraction	0.79/0.21

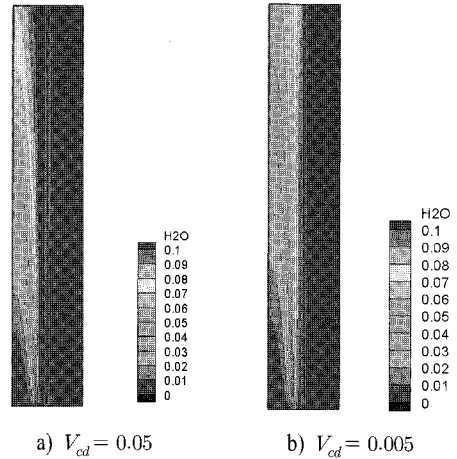


Fig. 2 Mole fraction of water depending on the rate of condensation.

Fig. 1은 계산을 위하여 구성된 유동 셀의 격자를 보여주고 있다. 그림에서 격자의 수는 $22 \times 42 \times 52$ 이다. 셀의 가운데 비어 있는 부분은 고분자막이며 고분자막에서는 기체의 유동이 없는 것으로 취급하고 있기 때문에 비어 있는 형태로 보이고 있다. 유동통로의 좌우측에 격자가 보이지 않는 부분은 전기 콜렉터이며 여기에서도 기체의 유동이 발생하지 않는다. 그러나 전기콜렉터 아래의 기체확산층과 촉매층에는 공기 및 연료가 공급되며 또한 전기화학적인 반응이 수반된다.

3. 결과 및 고찰

연료전지의 음극 측에는 화학반응의 결과 식 (22)와 같은 양의 물이 생성되며 또한 식 (10)같은 수증기의 농도, 전기적 삼투현상, 압력차에 의한 수증기의 이동이 음극과 양극사이에 발생하며 특히 전기적 삼투현상에 의한 효과가 큰 비중을 차지하여 수증기는 양극으로부터 음극으로 이동하는 결과가 된다. 이에 따라 음극에서는 많은 수증기가 발생되며 식 (23)에서 보는 바와 같이 촉매 및 고분자막 내의 이온전도도는 높아지게 된다. 따라서 수증기가 물로 액화되는 속도는 연료전지의 성능에 큰 영향을 미친다. Fig. 2는 수증기의 응축 속도에 따른 수증기의 농도를 나타낸 그림이다. 그림에서 온도는 $T = 353K$ 이며 전압은 $V = 0.54 V$, 전류는 $i = 1A/cm^2$ 이다. V_{cd} 는 한 계산시간(time step)동안에 파괴화된 수증기의 전량이 액화될 때 이를 1.0으로 하고 이에 대한 상대적인 값을 표시한 것이다. $T = 353K$ 일 때 수증기가 포화되는 물 농도는 약 0.093이며 그림의 a)에서 $V_{cd} = 0.05$ 이며 양극의 전 영역에서 수증기의 물농도는 0.1보다 낮은 값을 보이고 있다. 응축속도가 느려짐에 따라 수증기의 물농도는 점점 증

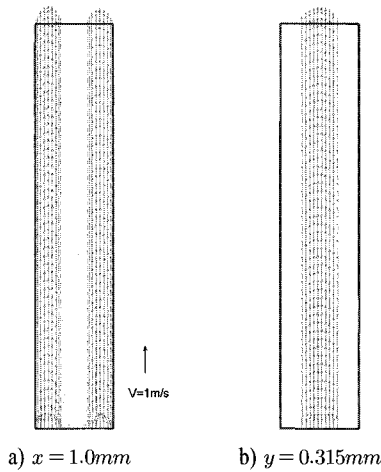


Fig. 3 Axial velocity.

가하게 되고 응축속도가 더욱 느린 $V_{cat} = 0.005$ 일 때에는 양극의 촉매층 부분에서는 수증기의 농도가 0.1보다 크게 나타나는 것을 보여주고 있다. 실제 연료전지의 내부에서 어떠한 현상으로 전개되는지는 알 수가 없으며 이에 대한 실험적 검증이 필요할 것으로 판단된다.

Fig. 3은 $x = 0.5mm$ 의 위치와 $y = 0.315mm$ 에서 보여준 z 방향의 속도 성분이다. 그림 a)에서 균일한 속도로 유입된 유동속도가 곧 포물선 형태를 갖는 것을 볼 수 있으며 기체확산 층과 촉매 층에서는 유동속도가 거의 없음을 볼 수 있다. 또한 그림에서 b)는 공기공급 층의 y 방향 단면에서 나타난 z 방향의 속도분포이다.

Fig. 4는 양극과 음극의 촉매 층에서 각 화학성분들의 질량비(mass fraction)를 나타낸 그림이다. 그림에서 아래쪽이 입구이다. 산소는 화학반응이 이루어짐에 따라 농도가 낮아지며 수증기의 농도는 점점 높아지는 것을 볼 수 있다. 특히 전류컬렉터의 아래 부분에서 산소의 농도는 낮게 나타나며 이는 유동통로부터의 산소공급이 어렵기 때문일 것이며 이에 반하여 전기화학적 반응에 의하여 발생된 수증기는 전류컬렉터의 방해로 확산이 어렵기 때문에 농도가 높게 나타나는 것으로 판단된다. 이와 같은 현상은 액화된 물의 경우에서도 비슷한 모양으로 나타나고 있다. 한편 양극 측의 수소는 유동이 진행됨에 따라 농도가 더욱 높아지고 있는데 이는 전기화학적 반응으로 소모되는 수소의 감소량에 비하여 물의 감소량이 상대적으로 많기 때문이며 물의 감소는 주로 전기적 삼투 현상에 의하여 음극으로 수송되는 현상에 의하여 발생한다. 그림 f)에서 전류밀도의 분포를 볼 수 있는데 연료와 공기의 입구에서 농도가 가장 높고 출구로 갈수록 낮아지는 것을 알 수 있다. 전류의 분포는 음극 측의 산소의 농도분포 및 양극 측의 수증기의 농도분포와 그 경향이 일치하고 있다. 따라서

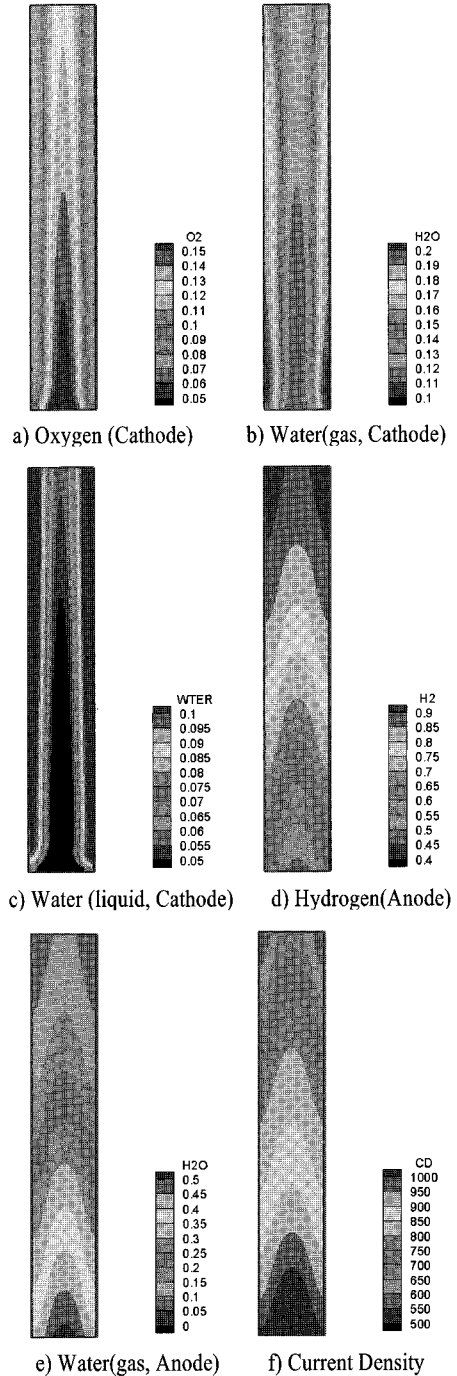


Fig. 4 Mass fraction of species and current density at catalyst layers. ($V_{cell} = 0.6 V$)

양극 측의 수증기 농도가 전류밀도의 분포에 강하게 영향을 미치고 있을 것으로 판단된다.

Fig. 5는 Ticianelli 등[12]가 실험으로 얻은 전압에 따른 전

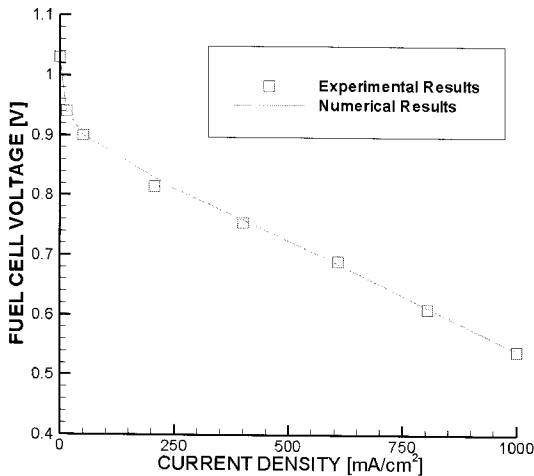


Fig. 5 Comparison of predicted and the measured cell polarization curves

류의 변화와 계산에서 얻은 결과를 비교한 것이다. 계산에서 응축속도 $V_{cd} = 0.005$ 를 사용하였으며 계산결과와 실험결과가 비교적 잘 일치하고 있음을 볼 수 있다.

4. 결 론

본 연구에서는 와도와 속도를 병행하는 방법을 사용하여 연료전지 내의 혼합기체의 유동 및 전류의 생성에 대하여 수치해석을 수행하였다. 전기 화학적 반응을 통한 수증기의 생성과 수증기의 농도, 압력차 및 전기적 삼투압 등에 의한 수증기의 이송을 고려하였으며 과 포화된 수증기의 응축을 고려하였다. 응축속도에 따라 연료전지내의 수증기 농도분포는 매우 다르게 나타나며 정확한 모사를 위해서는 연료전지 내의 수증기 거동에 대한 실험적 관찰이 우선되어야 할 것으로 판단된다. 연료전지 내의 혼합기체의 속도 거동 및 화학성분들의 농도 분포에 대하여 합리적인 결과를 얻었으며 계산에서 얻은 전류에 대한 결과는 실험결과와 잘 일치하였다.

후 기

이 논문은 2004년도 전남대학교 학술연구비 지원에 의하여 연구되었습니다. 관계자여러분께 감사드립니다.

참고문헌

[1] Bernardi D.M., Verbrugge M.W., 1992, "A mathematical model of the solid-polymer-electrolyte fuel cell," *J. Electrochem.*

Soc., Vol.139, pp.2477-2491.

- [2] Springer T.E., Zawodzinski T.A., and Gottesfeld S., 1991, "Polymer electrolyte fuel cell model," *J. Electrochem. Soc.*, Vol.138, No.8, pp.2334-2342.
- [3] Um S., Wang C.Y., and Chen, 2000, "Computational Fluid dynamics modeling of proton exchange membrane fuel cells," *J. Electrochem. Soc.*, Vol.147, No.12, pp.4485-4493.
- [4] Berning T., Lu D.M., and Djilali, 2002, "Three dimensional computational analysis of transport phenomena in a PEM fuel cell," *J. of Power sources*, Vol.106, pp.284-294.
- [5] You Lixin, Liu Hongtan, 2003, "A two-phase flow transport model for the cathode of PEM fuel cells," *International J. of Heat and Mass Transfer*, Vol.45, pp.2277-2287.
- [6] Li Pei-Wen, Schaefer Laura, Wang Qing-Ming, Zhang tao, Chyu Minking, 2003, "Multi-gas transportation and electro-chemical performance of a polymer electrolyte fuel cell with complex flow channels," *J. of Power Sources*, Vol.115, pp.90-100.
- [7] Jen T., Yan T., and Chan S., 2003, "Chemical reacting transport phenomena in a PEM fuel cell," *Intern. J. of Heat and Mass Transfer*, Vol.46, pp.4157-4168.
- [8] Jung H.M., Lee W.Y., Park J.S., and Kim C.S., 2004, "Numerical analysis of a polymer electrolyte Fuel cell," *Intern. J. of Hydrogen Energy*, Vol.29, pp.945-954.
- [9] Koike G., Taninaka S., Tanaka Y., and Wakisaka T., 2004, "Modeling of a polymer electrolyte fuel cell for analyzing substance transfer and electro-chemical reaction," *日本機械學會 講演論文集*, No.44-1.
- [10] Um S. and Wang C.Y., 2004, "Three-dimensional analysis of transport and electrochemical reactions in polymer electrolyte fuel cells," *Journal of Power Sources*, Vol.125, pp.40-51.
- [11] Hu M., Gu A., Wang M., Zhu X., Yu L., 2004, "Three dimensional, two phase flow mathematical model for PEM fuel cell: Part I. Model development," *Energy Conversion and management*, Vol.45, pp.1861-1882.
- [12] Ticianelli E.A. et al, 1988, "Localization of platinum in Low catalyst loading electrodes to attain high power densities in SRE fuel cells," *J. Electroanal. Chem.*, Vol.251, pp.275-295.
- [13] Jen T.C., Lavine A.S., 1992, "Laminar heat transfer and fluid flow in the entrance region of a rotating duct with rectangular cross section: the effect of aspect ratio," *Transactions of the ASME*, Vol.114, pp.574-581.