

<학술논문>

DOI:10.3795/KSME-B.2009.33.9.688

고분자 전해질형 연료전지의 가스 채널 최적화를 위한 수치적 연구 (II)

- 가스 채널 치수가 온도와 액체포화 분포에 미치는 영향성 -

주 현 철* · 남 진 무*

(2009년 2월 3일 접수, 2009년 8월 8일 수정, 2009년 8월 8일 심사완료)

Numerical Study of Land/Channel Flow-Field Optimization in Polymer Electrolyte Fuel Cells (PEFCs) (II)

- The Effects of Land/Channel Flow-Field on Temperature and Liquid Saturation Distributions -

Hyunchul Ju and Jinmoo Nam

Key Words: Temperature Distribution(온도분포), Liquid Saturation(액체포화), Heat Pipe Effect(히트파이프효과), Gas Channels(가스채널), Diffusion Media, DM(확산미디어), Polymer Electrolyte Fuel Cell, PEFC(고분자 전해질형 연료전지)

Abstract

Using the multi-dimensional, multi-phase, nonisothermal Polymer Electrolyte Fuel Cell (PEFC) model presented in Part I, the effects of land/channel flow-field on temperature and liquid saturation distributions inside PEFCs are investigated in Part II. The focus is placed on exploring the coupled water transport and heat transfer phenomena within the nonisothermal and two-phase zone existing in the diffusion media (DM) of PEFCs. Numerical simulations are performed varying the land and channel widths and simulation results reveal that the water profile and temperature rise inside PEFCs are considerably altered by changing the land and channel widths, which indicates that oxygen supply and heat removal from the channel to the land regions and liquid water removal from the land toward the gas channels are key factors in determining the water and temperature distributions inside PEFCs. In addition, the adverse liquid saturation gradient along the thru-plane direction is predicted near the land regions by the numerical model, which is due to the vapor-phase diffusion driven by the temperature gradient in the nonisothermal two-phase DM where water evaporates at the hotter catalyst layer, diffuses as a vapor form and then condenses on the cooler land region. Therefore, the vapor phase diffusion exacerbates DM flooding near the land region, while it alleviates DM flooding near the gas channel.

기호설명

I : 전달전류밀도 (A/m^2)

† 책임저자, 회원, 인하대학교 기계공학과
E-mail : hcju@inha.ac.kr
TEL : (032)860-7312 FAX :(032)868-1716
* 인하대학교 대학원 기계공학과

k : 열전도도 ($W \cdot m/K$)
 K : 투과성 (m^2)
 P : 압력 (Pa)
 RH : 입구상대습도
 R_e : 전기접촉저항 ($m\Omega \cdot cm^2$)
 R_t : 열접촉저항 ($cm^2 \cdot K/W$)
 s : 액체포화도
 T : 온도 (K)

V	: 체적 (m^3)
V_{cell}	: 셀 퍼텐셜 (V)
ε	: 다공도
θ	: 접촉각, contact angle ($^\circ$)

상첨자

g	: 가스
l	: 액체

하첨자

a	: 음극
BP	: 분리판
c	: 양극
CL	: 촉매층
DM	: 확산미디어
GC	: 가스 채널
in	: 채널입구
mem	: 멤브레인

1. 서 론

본 논문의 초점은 고분자 전해질형 연료전지 (Polymer Electrolyte Fuel Cell, PEFC) 분리판 내부 가스 채널(gas channel)과 랜드(land)의 치수 및 비율이 PEFC 성능에 미치는 영향성을 기존에 개발된 다차원 이상(two-phase) 수치 연료전지모델들을 이용해 연구/분석하는 것이다.⁽¹⁻¹¹⁾ 이미 출판된 논문 (I)에서는 가스 채널 치수가 전류밀도와 셀 내부저항, 즉 HFR(high frequency resistance) 분포에 미치는 영향성에 초점을 맞추어 연구/분석되었고, 본 논문 (II)에서 다루질 내용은 가스 채널 치수가 열 및 이상 물(two-phase water) 전달 그리고 플러딩(flooding) 현상에 미치는 영향성에 대해 논의될 예정이다.⁽¹²⁾

PEFC의 성능과 내구성 향상을 위해서는 적절한 열 및 물관리가 필수적이라는 것은 이미 널리 알려진 사실이다. 그렇기 때문에 현재까지 많은 연구가 PEFC 내부의 열 및 물 전달 현상 연구에 초점을 맞추어 수행되어 왔다. 먼저 연료전지 내부의 열전달 현상 연구와 관련해서는, Ju 등^(2,8-10)이 비등온 연료전지모델을 개발하고, 실험데이터와 비교분석 및 파라미터 영향성 연구 등과 같은 다각도의 수치 시뮬레이션을 수행함으로써, 연료

전지 내부 열 생성 및 열전달 메커니즘에 대한 이론적인 토대를 정립하였다. 이런 연구들을 통해 그들은 현재까지 개발된 여러 비등온 연료전지 모델들에서 자주 간과되어 왔던 엔트로피 열(entropic heat) 효과의 중요성을 강조하며, 연료전지 작동 시 방출되는 열의 30% 이상은 엔트로피 열 효과에 의해 생성된다는 사실을 이론적으로 증명하였다. 아울러, 음극 촉매층(cathode catalyst layer)에서 일어나는 산소환원반응(oxygen reduction reaction)에 의한 비가역 열(irreversible heat)과 엔트로피 열이 연료전지의 전체 열 생성의 80-90%를 차지한다는 사실과 그로 인한 연료전지 내부의 셀 두께방향으로 최고온도점은 음극촉매층(cathode catalyst layer)에 위치한다는 것도 수치시뮬레이션을 통해 증명하였다. 또한, 연료전지 내부 전기화학반응에 의해 생성된 열의 대부분은 확산미디어(diffusion media)의 측면 열전도(lateral heat conduction)에 의해 분리판을 거쳐 분리판 내부에 설치되어있는 냉각수를 통해 최종적으로 연료전지스택 밖으로 제거되는 열전달 메커니즘을 수치적으로 보이면서 분리판 내 가스채널과 랜드의 치수 및 비율이 연료전지 내부 온도분포에 큰 영향을 준다는 사실을 입증하였다. Ju⁽¹¹⁾는 최근에 확산미디어의 이방성(anisotropy)이 연료전지의 열전달 현상 및 성능에 미치는 영향성을 분석하기 위해 3차원, 이상, 비등온, 이방성, 연료전지 모델(a three-dimensional, two-phase, nonisothermal, anisotropic fuel cell model)을 개발하였다. 그는 확산미디어의 이방성이 연료전지 내부의 온도 및 수분 분포뿐만 아니라 멤브레인 내부의 전류밀도 분포 및 성능에도 큰 영향을 준다는 사실을 수치시뮬레이션을 통해 이론적으로 증명하였다.

연료전지의 전기화학반응에 의해 생성되는 물의 분포는 연료전지의 성능과 내구성에 큰 영향을 미친다는 사실도 여러 이론 및 실험적 연구를 통해 입증되었다. 특히 연료전지에서 생성된 물이 응축되어 발생하는 플러딩(flooding) 현상은 연료전지의 성능과 내구성에 큰 악영향을 주는 것으로 유명하다. 현재까지 연료전지 내부의 플러딩 현상을 측정하기 위해 여러 실험기법들을 도입되어왔다. 가스채널에서의 플러딩 현상은 주로 투명한 분리판을 설치하고 카메라 또는 캠코더를 사용해 시각적으로 측정하였으며,⁽¹³⁻¹⁶⁾ 확산미디어 내부의 수분분포는 중성자 방사선 기법을 이

용해 예측하고 있다.⁽¹⁷⁻²⁰⁾ 여러 실험결과들을 종합해 볼 때, 연료전지의 각 내부 컴포넌트(component)에서의 플러딩 정도는 가스확산층 및 미세다공층(Micro-Porous Layer, MPL)의 디자인 및 습윤성뿐만 아니라 가스채널의 습윤성과 치수에도 큰 영향을 받은 다는 사실을 알 수 있다. 한편 연료전지 내부 수분분포를 결정짓는 물의 기화 및 응축 현상은 연료전지의 온도분포와도 밀접한 관련이 있다. 이러한 온도 및 물 분포의 복잡한 상호작용은 비등온(nonisothermal) 이상(two-phase) 연료전지 모델개발 및 시뮬레이션을 통해서 이론적으로 연구되고 있다.^(2,5,8-11) 특히 Wang 등⁽⁵⁾은 이상(two-phase) 물 전달현상 중 온도구배에 비례하여 생기는 증기확산(vapor phase diffusion) 효과와 이상 열 전달현상에서 히트파이프(heat pipe) 메커니즘의 중요성을 처음으로 소개하였다. 그들은 이상 상태에서 이러한 새로운 열 및 물 전달 메커니즘은 연료전지 내부의 온도 및 수분 분포에 큰 영향을 미친다는 사실을 비등온 이상 수치 시뮬레이션을 통해 입증하였다.

지금까지 언급된 연료전지 물 및 열관리와 관련된 선행연구들을 종합해 보면, 분리판 내 가스 채널(gas channel)과 랜드(land)의 치수와 비율은 전기화학반응에 의해 생성되는 연료전지 내부의 열 과 물을 효과적으로 제어하기 위한 중요한 최

적화 변수임이 분명하다. 본 논문의 목적은 가스 채널의 치수가 PEFC 내부의 열 및 물 전달 현상에 미치는 영향성을 기존에 소개된 이상(two-phase) 연료전지모델⁽¹⁻¹¹⁾을 이용하여 연구/분석함으로써 분리판 내 가스채널 최적화에 의한 적절한 열 및 물 관리 기법을 개발을 위해 필요한 전반적인 지식을 제공하는데 있다.

2. 연료전지 수치모델

본 연구에서 이용될 다차원(multi-dimensional), 다상(multi-phase), 비등온(nonisothermal), PEFC 모델은 기존에 Wang 과 Cheng⁽¹⁾에 의해 개발된 다상혼합 (Multi-phase Mixture, M²) 모델을 기반으로 한다. 이러한 M² 모델을 기초로 한 연료전지 해석모델의 지배방정식(governing equations) 및 생성항(source terms)과 전기화학반응 관련식들은 Table 1, Table 2, Table 3에 각각 요약되어 있다. 또한 코딩(coding), 격자생성(grid generation) 및 수렴조건과 같은 수치시뮬레이션에 필요한 전반적인 사항들은 이미 논문 (I)⁽¹²⁾에서 자세히 설명되었으므로 본 논문에서 이들에 대한 언급은 생략하기로 한다.

Table 1 Two-phase steady-state PEFC model: governing equations

Governing equations	
Mass	$\nabla \cdot (\rho \vec{u}) = S_m$ (1)
Momentum	Flow channels (Navier-Stokes Eqs.): $\frac{1}{\varepsilon^2} \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau$ (2)
	Porous Media (Darcy's Eqs.): $\rho \vec{u} = -\frac{K}{\nu} \nabla p$ (3)
Species	Flow channels and porous media: $\nabla \cdot (\gamma_i \rho m_i \vec{u}) = \nabla \cdot [\rho^g D_i^{g:eff} \nabla (m_i^g)] + \nabla \cdot [(m_i^g - m_i^l) \vec{j}] + S_i$ (4)
	Water transport in the membrane: $\nabla \cdot \left(\frac{\rho^{mem}}{EW} D_w^{mem} \nabla \lambda \right) M_w - \nabla \cdot \left(n_d \frac{1}{F} \right) M_w + \nabla \cdot \left(\frac{K^{mem}}{\nu^l} \nabla P^l \right) = 0$ (5)
Charge	Proton transport: $\nabla \cdot (k^{eff} \nabla \Phi_e) + S_\Phi = 0$ (6)
	Electron transport: $\nabla \cdot (\sigma^{eff} \nabla \Phi_s) - S_\Phi = 0$ (7)
Energy	$\nabla \cdot (\rho \vec{u} C_p^g T) = \nabla \cdot (k^{eff} \nabla T) + \nabla \cdot (h_{fg} \rho^l \vec{u}^l) + S_T$ (8)

Table 2 Two-phase steady-state PEFC model: source/sink terms

Source/sink terms	
Mass	In the CLs: $S_m = \sum_i S_i + M_w \nabla \cdot \left(D_w^{mem} \frac{\rho^{mem}}{EW} \nabla \lambda \right)$ (9)
Species	For water in CLs: $S_i = M_i \left[-\nabla \cdot \left(\frac{n_d}{F} I \right) - \frac{s_{ij}}{nF} \right]$ (10)
	For other species in CLs: $S_i = -M_i \frac{s_{ij}}{nF}$ (11)
Charge	In the CLs: $S_\phi = j$ (12)
Energy	In the CLs: $S_T = j \left(\eta + T \frac{dU_o}{dT} \right) + \frac{I^2}{k^{eff}}$ (13)
	In the membrane: $S_T = \frac{I^2}{k^{eff}}$ (14)

Table 3 Electrochemical correlations

Electrochemical reactions:	
$\sum_k s_i M_i^z = n e^-$, where	$\begin{cases} M_i \equiv \text{chemical formula of species } i \\ s_i \equiv \text{stoichiometry coefficient} \\ n \equiv \text{number of electrons transferred} \end{cases}$ (15)
Hydrogen Oxidation Reaction (HOR) in the anode side:	
$H_2 - 2H^+ = 2e^-$	(16)
Transfer current density, [A/m ³]:	
$j = (1-s)^{n_c} a_{i,o,a}^{ref} \left(\frac{C_{H_2}}{C_{H_2,ref}} \right)^{1/2} \left(\frac{\alpha_a + \alpha_c}{R_u T} F \eta \right)$	(17)
Surface over-potential, [V]: $\eta = \phi_s - \phi_e$	
Oxygen Reduction Reaction (ORR) in the cathode side:	
$2H_2O - O_2 - 4H^+ = 4e^-$	(19)
Transfer current density [A/m ³]:	
$j = -(1-s)^{n_c} a_{i,o,c}^{ref} \left(\frac{C_{O_2}}{C_{O_2,ref}} \right)^{3/4} \exp \left(-\frac{\alpha_c}{R_u T} F \eta \right)$	(20)
Surface over-potential, [V]: $\eta = \phi_s - \phi_e - U_o$	
Thermodynamic equilibrium potential:	
$U_o = 1.23 - 0.9 \times 10^{-3} (T - 298.15)$	(22)
Temperature dependence of the ORR kinetic parameter:	
$a_{i,o,c}^{ref}(T) = a_{i,o,c}^{ref}(353K) \cdot \exp \left[-\frac{E_a}{R_u} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{353.15} \right) \right]$	(23)

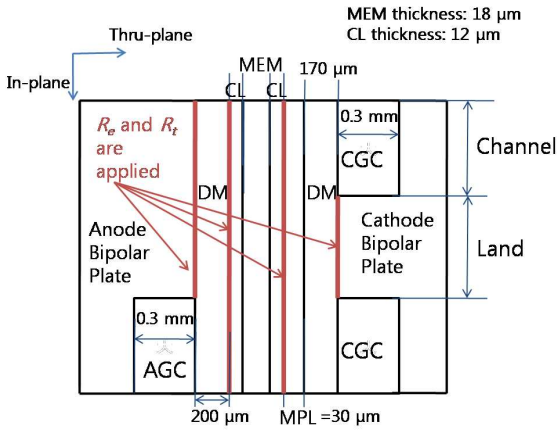


Fig. 1 Dimension of the PEFC geometry where the electronic contact resistances are applied at the DM/CL interfaces and bipolar plate/DM interfaces⁽¹²⁾

3. 결과 및 고찰

3.1 모델 시뮬레이션

가스 채널 치수가 열 및 이상 물(two-phase water) 전달현상에 미치는 영향성 조사를 위한 수치시뮬레이션의 입력(input) 파라미터(parameter)들은 모두 논문 (I)⁽¹²⁾경우와 동일하지만 본 논문에서 다시 한 번 요약정리 되었다. 셀 프라퍼티(property)들과 작동조건들은 Table 4에 정리되어 있으며 PEFC 기하학적 형상과 치수(dimension)들은 Fig. 1에 나타나 있다. 또한 논문 (I)⁽¹²⁾경우와 동일하게 본 연구에서도 연료전지의 작동온도가 70°C로 가정되었기 때문에 70°C의 등온 경계 조건(isothermal boundary condition)이 Fig. 1의 음극(anode)과 양극(cathode) 분리판 끝에 적용되었으며 전자접촉저항(electronic contact resistance, R_e)과 열 접촉저항(thermal contact resistance, R_t)이 분리판과 DM 사이 그리고 DM와 CL (음극 쪽)사이 또는 MPL과 CL사이 (양극 쪽) 에서 각각 고려되었다. 또한 채널(channel) 쪽과 접한 DM/CL(음극 쪽) 또는 DM/MPL (양극 쪽) 접촉면에서의 접촉 저항은 셀 조립(cell assembling)과정 중 압축압력(compression pressure)이 채널(channel) 부근에서 적게 적용된다는 사실을 고려하여 식 (24)와 같이 in-plane 방향으로 랜드(land) 부근에 비하여 지수함수형태로 증가한다고 가정하였다.

Table 4 Cell properties, and operating conditions

Description	Value
Thermal conductivity for CL, k_{CL}	1.0 W/m·K
Thermal conductivity for MPL, k_{MPL}	1.0 W/m·K
Thermal conductivity for DM, k_{DM}	5.0 W/m·K
Thermal conductivity for BP, k_{BP}	10.0 W/m·K
Thermal conductivity for membrane, k_{mem}	1.0 W/m·K
Thermal contact resistance between BP and DM, $R_{t,BP}$	0.75 cm ² ·K/W
Electronic contact resistance between BP and DM, $R_{e,BP}$	5.3 mΩ·cm ²
Contact angle of DM and MPL, θ	110°
Permeability of anode and cathode DM, K_{DM}	1.0·10 ⁻¹² m ²
Permeability of MPL, K_{MPL}	1.0·10 ⁻¹³ m ²
Porosity of anode and cathode DM, ε_{DM}	0.6
Porosity of MPL, ε_{MPL}	0.5
Relative entry pressure for MPL, P_{entry}	5000 Pa
Hydraulic permeability of membrane, K_{mem}	5.0·10 ⁻²⁰ m ²
Anode and Cathode inlet pressure, P_{in}	1.5 atm
Operating current density, I	1.5 A/cm ²
Operating temperature, T	70°C
Anode/cathode inlet humidification at 70°C, RH_a/RH_c	100%/100%
Anode/cathode stoichiometry, ζ_a/ζ_c	2/2

$$R_{chan} = R_{land} \cdot e^{3.5x} \tag{24}$$

여기서 x 는 랜드/채널(land/channel)의 가장자리(edge)부터 채널(channel)방향으로의 거리를 나타낸다. 전자 및 열 접촉저항에 대한 보다 자세한 설명은 논문 (I)⁽¹²⁾을 참조하기 바란다.

3.2 최적화 시뮬레이션 결과 및 토의

본 논문에서 다루어질 가스 채널의 최적화연구에서는 Fig. 1에서처럼 in-plane방향으로의 채널 폭(channel width)과 랜드 폭(land width)의 변화가 PEFC 내부의 열 및 물 전달 현상에 미치는 영향성에 대해 분석해나갈 것이다.

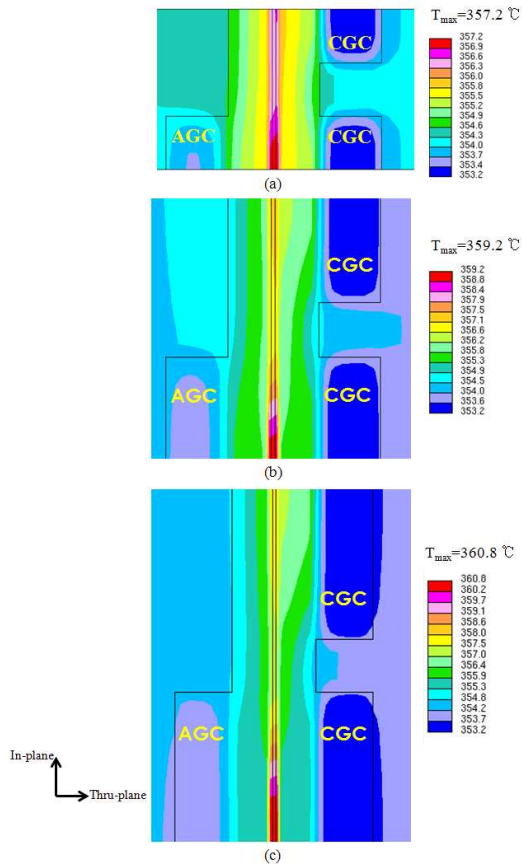


Fig. 2 Channel width effect on temperature contours in the cross-section of the PEFC geometry at $I=1.5 \text{ A/cm}^2$ with Land width=0.25 mm ; (a) Channel width=0.5 mm, (b) Channel width=1.0 mm, (c) Channel width=1.5 mm

Fig. 2에서는 랜드(land)폭이 0.25mm로 일정할 때 채널(channel) 폭의 변화가 PEFC 내부의 온도 분포에 미치는 영향성을 나타낸다. 먼저 PEFC 내부 막-전극접합체(MEA) 온도는 AGC(anode gas channel)/CGC(cathode gas channel)이 접한 쪽이 가장 높은 반면 랜드(land)쪽으로 갈수록 감소하는 경향을 보여준다. 이러한 온도분포를 나타내는 이유에는 두 가지 원인이 있다. 첫 번째는 서론에서 이미 언급되었듯이, 채널(channel)에 흐르는 가스유동에 의한 대류(advection)효과는 채널 내 유속이 느리기 때문에 미미하며, PEFC 내부에서 생성된 열의 대부분은 확산매체(diffusion media)의 측면 열전도(lateral heat conduction)에 의해 분리판 방향으로 제거되기 때문이다. 두 번째는 식 (24)에서 가정한 것처럼 접촉저항의 분포

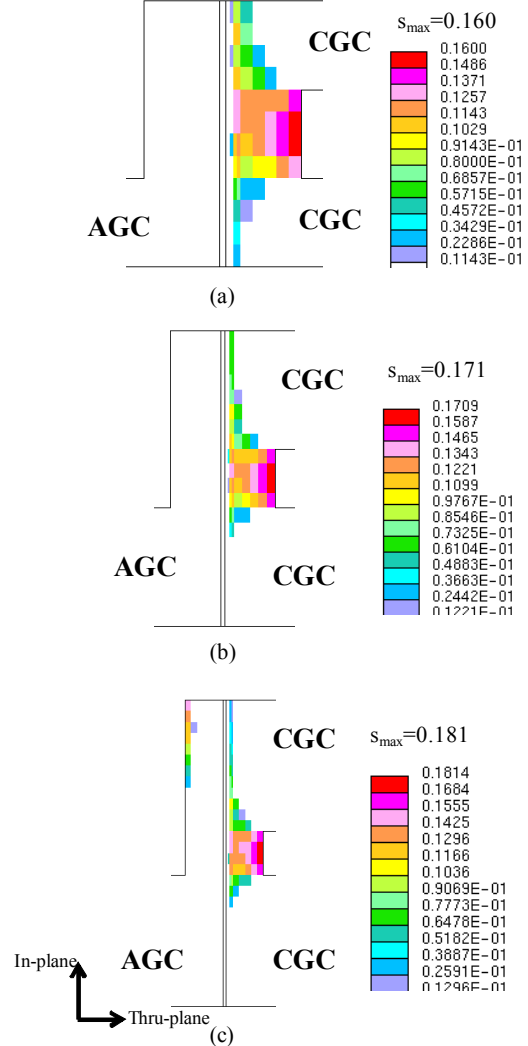


Fig. 3 Channel width effect on liquid saturation contours in the cross-section of the anode/cathode DMs at $I=1.5 \text{ A/cm}^2$ with Land width=0.25 mm ; (a) Channel width=0.5 mm, (b) Channel width=1.0 mm, (c) Channel width=1.5 mm

가 AGC/CGC에서 최대가 되기 때문에 Fig. 2에서 처럼 AGC/CGC 근처의 막-전극접합체(MEA)의 온도가 랜드 주변보다 높은 온도분포를 가진다. 이러한 이유 때문에 채널 폭이 가장 좁은 경우(0.25 mm)가 가장 적은 온도증가($\Delta T=4^\circ\text{C}$)를 보인 반면 채널 폭이 1.0 mm 와 1.5 mm일 때 온도증가는 각각 6°C 와 7.6°C 로서 채널 폭이 PEFC 내부 온도증가에 큰 영향을 미친다는 사실을 Fig. 2를 통해 알 수 있다.

Fig. 3에서는 Fig. 2와 동일한 경우의 확산매체

어에서 액체포화(liquid saturation) 분포를 보여준다. 액체포화란 확산매체 전체 포어(pore)볼륨에 액체가 차지하는 볼륨비로 정의하며 다음과 같이 표현된다.

$$s = \frac{V^l}{V} \quad (25)$$

그러므로 확산매체에서의 액체포화는 PEFC 내부의 응축된 물이 확산매체 포어볼륨을 차지하는 비율을 의미한다. Fig. 3에서 확산매체에서 응축된 물의 양은 in-plane 방향으로 랜드근처가 채널근처보다 많게 예측되고 있는데 이러한 물 분포를 보이는 이유에는 두 가지 원인이 있다. 첫 번째는 PEFC 내부에 생성된 물은 채널을 통해서 제거되기 때문이고 두 번째 원인은 랜드근처에서의 온도가 채널근처보다 낮아 물의 응축이 그만큼 더 용이하기 때문이다. 채널부근 중에서 음극 및 양극 채널 (AGC/CGC)과 모두 접한 확산매체 부근이 양극채널(CGC) 부근보다 접촉저항의 영향에 기인한 높은 온도 분포 때문에 응축된 물의 양이 더 적게 예측되었다. 한편 thru-plane 방향으로 물 분포를 분석해보면, 확산매체의 온도구배에 비례하여 생기는 증기확산(vapor phase diffusion) 효과의 영향성이 잘 나타나 있다. 확산매체의 물 분포는 채널근처의 thru-plane 방향으로 막전극접합체에서 최댓값을 가지며 분리판 방향으로 점차적으로 감소하는 경향을 보이는 반면, 랜드와 접한 확산매체에서는 막전극접합체 내부에서 분리판 방향으로 오히려 증가하는 경향을 보이고 있다. 이렇듯 랜드근처의 확산매체에서 역방향의 물분포를 보이는 이유는 채널과 접한 고온의 확산매체에서 기화된 수증기가 상대적으로 온도가 낮은 랜드근처의 확산매체쪽으로 증기확산 및 히트파이프 효과에 의해 다시 응축되기 때문이다. 한편 채널(channel) 폭의 변화가 PEFC 내부의 물 분포에 미치는 영향성은 Fig. 2에서의 온도 분포에 미치는 영향성과 비교할 때 상대적으로 크지 않음을 Fig.3을 통해 알 수 있다. 최대 액체포화(liquid saturation) 값은 채널 폭에 비례하여 약간씩 증가하는 경향을 보이며 1.5mm의 채널 폭일 때가 18.1%로서 1.0mm의 17.1% 와 0.5mm의 16% 보다 약간씩 높게 예측되었다. 이러한 경향을 보이는 주된 이유는 Fig. 2에서 보였듯이 확산매체의 온도구배가 채널 폭이 증가할수록 커지기 때문에

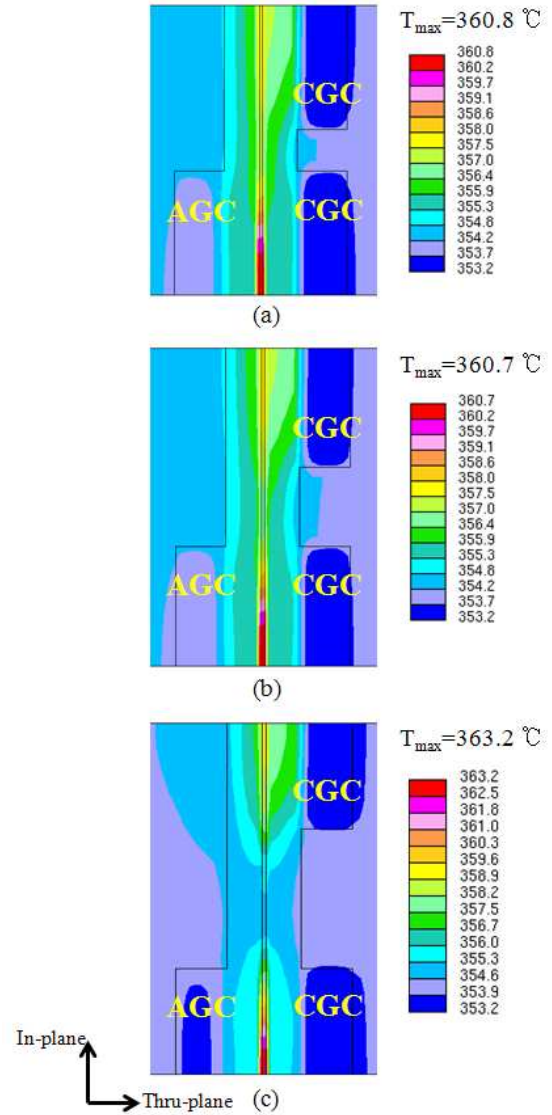


Fig. 4 Land width effect on temperature contours in the cross-section of the PEFC geometry at $I=1.5 \text{ A/cm}^2$ with Channel width=1.5 mm ; (a) Land width=0.25 mm, (b) Land width=0.5 mm, (c) Land width=1.0 mm

그와 관련된 증기확산(vapor phase diffusion) 효과가 커져 더 많은 양의 수증기가 랜드와 접한 확산매체에 응축되기 때문이다. 이러한 확산매체내 복잡한 물 분포는 이상(two-phase) 비등온(nonisothermal) 연료전지모델을 통해서만 예측가능하다.

Fig. 4에서는 채널(channel)폭이 1.5mm로 일정할 때 랜드(land) 폭의 변화가 PEFC 내부의 온도분포에 미치는 영향성을 보여준다. Fig.4의 PEFC

내부 온도분포는 Fig. 2의 경우와 같이 AGC/CGC 이 접한 쪽이 가장 높은 반면 랜드(land)쪽으로 갈수록 감소하는 경향을 보여준다. 랜드(land) 폭의 변화의 영향성을 살펴보기 위해, 우선 Fig. 4의 (a)와 (b)를 비교해 보면, 랜드 폭이 0.25mm에서 0.5 mm로 증가에 따른 온도증가율의 영향성은 적게 예측되었다(랜드 폭이 0.25mm일 때 $\Delta T=7.6^\circ\text{C}$, 0.5 mm일 때 $\Delta T=7.5^\circ\text{C}$). 이렇게 랜드 폭의 증가에 따른 냉각효과의 장점이 미세한 까닭은 랜드 폭의 증가로 인한 랜드 근처의 산소전달이 어려워져 그만큼 비가역적 손실이 커짐으로 작동 전압(operating voltage, V_{cell}) 낮아져 상대적으로 더 많은 열을 배출하기 때문이다(랜드 폭이 0.25mm일 때 $V_{cell}=0.608\text{V}$, 0.5 mm일 때 $V_{cell}=0.603\text{V}$). 이러한 효과는 랜드 폭이 1.0 mm로 증가할 때 현저하게 나타나서 랜드 폭이 1.0 mm로서 세 경우 중 냉각효과가 가장 큼에도 불구하고 산소전달의 어려움에 기인한 작동 전압이 0.558V 까지 낮아지게 된다. 그로인해 배출 되는 열 또한 가장 많기 때문에 온도증가가 10°C 로 가장 크게 예측되었다. 이러한 결과로부터 랜드 폭의 증가는 연료전지의 냉각효과를 향상시킬 수 있지만 양극 전기화학반응을 위해 필요한 산소공급의 문제점을 유발하며, 그 때문에 오히려 비가역적 열을 더 많이 배출하여 셀 내부 온도를 더 크게 증가시킬 수 있는 위험성이 있다는 것이 본 수치시뮬레이션을 통해 새로이 발견된 현상이다. Fig. 5는 Fig. 4와 동일한 경우의 확산미디어에서 액체포화(liquid saturation) 분포를 보여준다. 확산 미디어에 응축된 물의 양은 랜드의 폭이 증가함에 따라 점차적으로 커짐을 Fig. 5를 통해 알 수 있다. 이러한 경향을 보이는 가장 큰 원인은 랜드의 폭의 증가할 때 랜드 근처에서 응축된 물이 채널방향으로 제거되기가 랜드 폭의 증가로 그만큼 더 어렵기 때문이다. 랜드 폭이 가장 넓은 (c)의 경우(랜드 폭이 1.0 mm일 때) 셀 내부 온도증가가 모든 수치시뮬레이션 경우들 중 최대임에도 불구하고 응축된 물의 양을 나타내는 액체포화(liquid saturation)의 최댓값이 23.9%로 모든 시뮬레이션 경우들 중 최대인 것으로 예측되었다. (c)의 액체포화 최댓값이 (a)와 (b)의 경우들 보다 상대적으로 큰 또 다른 이유는 (c)의 큰 온도구배에 의한 증기확산(vapor phase diffusion) 효과가 가장 커져 그만큼 랜드 근처에서 응축되는

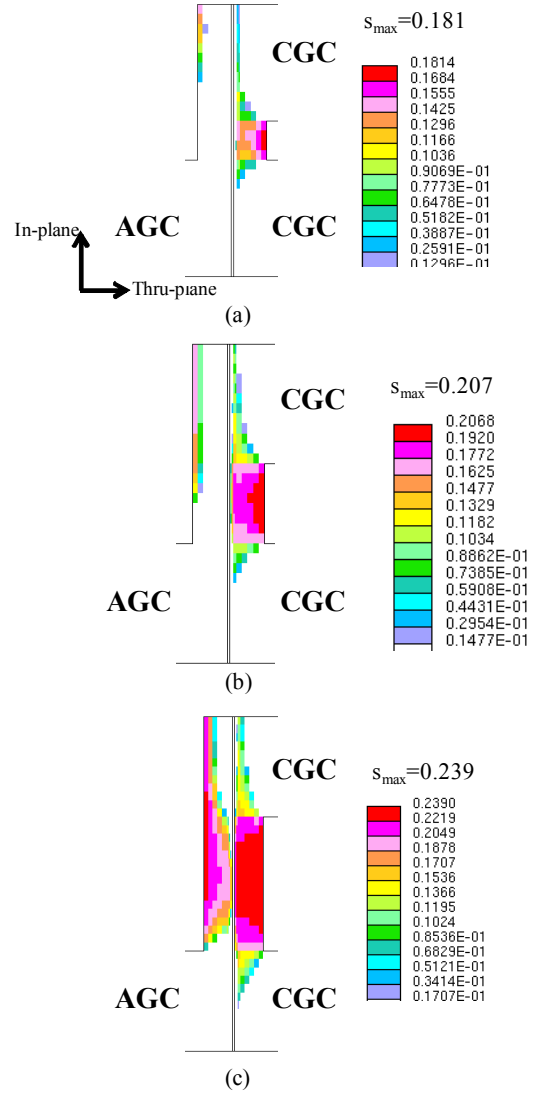


Fig. 5 Land width effect on liquid saturation contours in the cross-section of the anode/cathode DMs at $I=1.5 \text{ A/cm}^2$ with Channel width=1.5 mm ; (a) Land width=0.25 mm, (b) Land width=0.5 mm, (c) Land width=1.0 mm

물의 양이 많아지기 때문이다.

본 연구에서 고려된 수치시뮬레이션의 모든 경우들의 성능(cell voltage, V_{cell})과 음극(anode) 및 양극(cathode) 확산미디어에서의 평균 액체포화값(각각 s_a , s_c) 그리고 확산미디어의 온도증가 (ΔT)가 Table 5에 각각 요약되어 있다. 랜드(land)와 채널(channel) 폭이 가장 조밀한 경우(land width=0.25mm, channel width=0.5mm)가 가장 우수한 성능과 상대적으로 균일한(uniform) 온도분

Table 5 Cell voltages V_{cell} , average liquid saturation for the anode DM, s_a and cathode DM, s_c , and the maximum temperature rise in DM, T_{max} for all simulation cases

Land width, [mm]	Channel width, [mm]	V_{cell} , [V]	s_a , [%]	s_c , [%]	ΔT [°C]
0.25	0.5	0.630	0.00	4.79	4.0
0.25	1.0	0.620	0.00	3.04	6.0
0.25	1.5	0.608	0.46	2.55	7.6
0.5	1.5	0.603	1.88	5.82	7.7
1.0	1.5	0.558	9.36	11.21	10.0

포 및 적은 물의 양을 가지는 것으로 예측되었으며 랜드(land)와 채널(channel)폭이 넓어짐에 따라 내부온도 및 응축된 물의 양 모두 대체적으로 증가하며 PEFC 성능은 감소하는 경향을 보여줬다. 이러한 성능저하의 주된 원인은 채널 폭이 커질 때는 MEA 온도 증가로 인한 음극(anode) 쪽 전해질의 탈수현상에 의한 ohmic 손실이 증가하기 때문이고 랜드의 폭이 커질 때는 양극(cathode)쪽의 DM에 축적된 물의 양의 증가와 랜드 근처에서 산소 고갈(depletion) 현상이 커지기 때문에 연료전지 성능이 크게 감소하고 그에 따른 셀 온도가 크게 증가함을 Table 5를 통해 알 수 있다. 수치시뮬레이션의 결과들을 종합해 볼 때 랜드 근처에서 심각한 산소 고갈(depletion)을 피하기 위해서는 랜드의 폭은 1 mm 이하 범위에서 디자인되어야 한다는 사실도 본 수치시뮬레이션을 통해 도출될 수 있는 결론이다.

4. 결 론

본 연구에서는 기존에 개발된 다차원(multi-dimensional), 다상(multi-phase), 비등온(nonisothermal), PEFC 모델을 이용해 가스 채널의 랜드(land)와 채널(channel)의 폭과 비율(ratio)을 변화시켜가며 연료전지의 성능과 내구성에 크게 영향을 미치는 열 및 이상 물(two-phase water) 전달 그리고 플러딩(flooding) 현상에 대한 영향성을 분석하는 최적화 연구를 수행하였다. 본 연구를 통해 얻어진 결론을 정리하면 다음과 같다.

(1) PEFC내부의 주요 열 및 물 전달 메커니즘은 셀 내부에서 생성되는 열의 대부분은 확산미디어의 측면 열전도 (lateral heat conduction)에 의해 분리관을 거쳐 제거되는 반면 연료전지 내부에 응축된 물은 가스채널을 통해 연료전지 밖으로 빠져나가는 형태이다. 이러한 열 및 물 전달 메커니즘을 고려한다면 랜드(land)폭이 일정한 상태에서 채널(channel)의 폭이 증가될 때 PEFC 내부의 온도는 증가하는 반면 확산미디어에 응축된 물의 양은 감소하는 경향을 보여야한다. 본 연구에서 수행된 수치시뮬레이션의 결과는 이러한 경향을 모두 성공적으로 예측하였다(Table 5 참조). 하지만 최대 응축된 물의 양은 증기확산(vapor phase diffusion) 효과의 영향으로 채널 폭이 증가할수록 오히려 증가하는 경향이 본 연구를 통해 예측되었다(Fig. 3 참조). 또한 이러한 증기확산 및 히트파이프 효과에 기인하여 랜드 근처에서 응축된 물의 양은 랜드 근처의 확산미디어에서 막-전극접합체(MEA)를 향하여 역방향의 물분포를 보인다는 사실이 본 수치시뮬레이션을 통해 새로이 밝혀졌다.

(2) 가스 채널의 랜드(land)의 폭이 커질 경우에는 산소고갈(oxygen depletion) 및 물 전달 현상이 연료전지 성능 및 온도 분포에 큰 영향을 미친다는 사실에 본 연구를 통해 입증되었다. 먼저 셀 온도는 랜드 근처에서 산소고갈 현상이 심각해질 때 크게 증가하였으며 이러한 심각한 산소고갈 현상을 피하기 위해서는 랜드의 폭은 반드시 1 mm 이하의 범위에서 최적화되어야 한다는 결론이 도출되었다. 또한 랜드의 폭이 커질 경우 랜드 근처에서 응축된 물의 양이 이 채널을 통해 제거되기가 그만큼 어렵기 때문에 랜드 근처의 물의 양이 랜드의 폭에 비례하여 증가한다는 사실도 본 수치시뮬레이션을 통해 예측되었다.

(3) 본 연구의 결과를 통해 이상 비등온 PEFC 확산미디어에서 일어나는 중요한 열 및 물 전달 메커니즘인, 증기확산(vapor phase diffusion) 및 히트파이프(heat pipe) 효과가 수치시뮬레이션을 통해 재조명되었다. 이러한 현상들에 기인하여, 셀 내부 온도증가가 큰 경우에도 랜드 근처의 응축된 물의 양은 크게 증가하는 현상이 예측되었으며, 이러한 새로운 열 및 물 전달 메커니즘은 채널근처의 확산미디어 플러딩(DM flooding) 현상을 완화시키지만 랜드 근처의 확산미디어 플러딩 현상은 오히려 악화시키는 결과를 초래한다는 사실

도 본 연구를 통해 도출된 결론이다.

참고문헌

- (1) Wang, C. Y. and Cheng, P., 1996, "A Multiphase Mixture Model for Multiphase, Multicomponent Transport in Capillary Porous Media-I. Model Development," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 39, pp. 3607~3618.
- (2) Ju, H., Meng, H., and Wang, C. Y., 2005, "A Single-Phase, Non-Isothermal Model for PEM Fuel Cells," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 48, pp. 1303~1315.
- (3) Ju, H., Luo, G., and Wang, C. Y., 2007, "Probing Liquid Water Saturation in Diffusion Media of Polymer Electrolyte Fuel Cells," *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 154, No. 2, pp. B218~B228.
- (4) Luo, G., Ju, H., and Wang, C. Y., 2007, "Prediction of Dry-Wet-Dry Transition in Polymer Electrolyte Fuel Cells," *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 154, No. 3, pp. B316~B321.
- (5) Wang, Y. and Wang, C. Y., 2006, "A Non-isothermal, Two-Phase Model for Polymer Electrolyte Fuel Cells," *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 153, No. 6, pp. A1193~A1200.
- (6) Ju, H., 2006, "Coupled Heat and Water Management in Polymer Electrolyte Fuel Cells," Ph.D. Thesis, The Pennsylvania State University, University Park.
- (7) Ju, H. and C.Y. Wang, 2004, "Experimental Validation of a PEM Fuel Cell Model by Current Distribution Data," *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 151, pp. A1954~A1960.
- (8) Ju, H., C. Y. Wang, S. Cleghorn, and U. Beuscher., 2005, "Non-Isothermal Modeling of Polymer Electrolyte Fuel Cells I, Experimental Validation," *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 152, No. 8, pp. A1645~A1653.
- (9) Ju, H., C. Y. Wang, S. Cleghorn, and U. Beuscher., 2006, "Non-Isothermal Modeling of Polymer Electrolyte Fuel Cells II, Parametric Study of Low-Humidity Operation," *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 153, No. 2, pp. A249~A254.
- (10) Ju, H. and C.Y. Wang, 2008, "Effects of Coolant Channels on Large-Scale Polymer Electrolyte Fuel Cells(PEFCS)," *International Journal of Automotive Technology*, Vol. 9, No. 2, pp. 225~232.
- (11) Ju, H., 2009, "Investigating the Effects of the Anisotropy of GDLs on Heat and Water Transport in Polymer Electrolyte Fuel Cells (PEFCs)," *Journal of Power Sources*, Vol. 191, pp. 259~268.
- (12) Ju, H., 2008, "Numerical Study of Land/Channel Flow-Field Optimization in Polymer Electrolyte Fuel Cells (PEFCs) (I) The Effects of Land/Channel Flow-field on Current Density and HFR Distributions," *Transactions of the KSME(B)*, Vol. 32, No. 9, pp. 683~694.
- (13) Tüber, K., D. Pócza, and C. Hebling, 2003, "Visualization of Water Buildup in the Cathode of a Transparent PEM Fuel Cell," *J. Power Sources*, Vol. 124, pp. 403~414.
- (14) Yang, X. G., F. Y. Zhang, A. L. Lubawy, and C. Y. Wang, 2004, "Visualization of Liquid Water Transport in a PEFC," *Electrochem. Solid-State Lett.*, Vol. 7, No. 11, pp. A408~A411.
- (15) Liu, X., H. Guo, and C. Ma, 2006, "Water Flooding and Two-Phase Flow in Cathode Channels of Proton Exchange Membrane Fuel Cells," *J. Power Sources*, Vol. 156, pp. 267~280.
- (16) Zhang, F. Y., X. G. Yang, and C. Y. Wang, 2006, "Liquid Water Removal from a Polymer Electrolyte Fuel Cell," *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 153, No. 2, pp. A225~232.
- (17) Satija, R., D. L. Jacobson, M. Arif, and S. A. Werner, 2004, "In situ Neutron Imaging Technique for Evaluation of Water Management Systems in Operating PEM Fuel Cells," *J. Power Sources*, Vol. 129, pp. 238~245.
- (18) Pekula, N., K. Heller, P. A. Chuang, A. Turhan, M. M. Mench, J. S. Brenizer, and K. Ünlü, 2005, "Study of Water Distribution and Transport in a Polymer Electrolyte Fuel Cell Using Neutron Imaging," *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research(A)*, Vol. 542, pp. 134~141.
- (19) Kramer, D., J. Zhang, R. Shimoï, E. Lehmann, A. Wokaun, K. Shinohara, and G. G. Scherer, 2005, "In situ Diagnostic of Two-Phase Flow Phenomena in Polymer Electrolyte Fuel Cells By Neutron Imaging-Part A. Experimental, Data Treatment, and Quantification," *Electrochimica Acta*, Vol. 50, No.

13, pp. 2603~2614.
(20) Zhang, J., D. Kramer, R. Shimoi, Y. Ono, E. Lehmann, A. Wokaun, K. Shinohara, and G. G. Scherer, 2006, "In situ Diagnostic of Two-Phase Flow

Phenomena in Polymer Electrolyte Fuel Cells by Neutron Imaging- Part B. Material Variations," *Electrochimica Acta*, Vol. 51, No. 13, pp. 2715~2727.