

작동조건을 고려한 자동차용 PEM 연료전지 시스템 성능 시뮬레이션 (1)

방정환*·김한상*·이동훈*·민경덕*·김민수**·조영만**

The Simulation of PEMFC System Performance for Automotive Application (1)

Jung-hwan Bang, Han-sang Kim, Dong-hun Lee,
Kyongdoug Min, Min-soo Kim, Youngman Cho

Key Words: PEM Fuel cell(고분자 전해질 연료전지), Simulation(시뮬레이션)

Abstract

The modeling of PEM (Proton Exchange Membrane) fuel cell system consisting of fuel cell stack and BOP (Balance of Plant) is presented in this paper. The effects of temperature, pressure (air, hydrogen), and humidity on the fuel cell system performance were mainly investigated using thermo-dynamical and electro-chemical equations. To understand the power distribution characteristics of fuel cell system, the effects of operating temperature and air pressure on maximum power and system power were also demonstrated. Through this study, we can get the basic insight into the fuel cell stack and BOP component sizing and it can be used effectively for the optimization of the practical fuel cell systems in purpose.

1. 서론

기호설명

F	: 페러데이 상수 (= 96485 Coulombs)
g_f	: 깁스 생성 자유 에너지 (Gibb's free energy of formation)
T_{fc}	: 연료전지 작동 온도
t_m	: 전해질막 두께
σ_m	: 전해질막 전도율
λ_m	: 전해질막 수분 함유량 (0~14)
λ	: 산소 과급비(Oxygen excess ratio)
p	: 가스 분압

연료전지는 촉매에 의해 수소와 산소를 전기 화학적으로 반응시켜 전기를 얻어내는 장치이다. 이는 기존의 에너지원보다 효율이 높고 유해 배 출물이 적어 미래의 새로운 에너지원으로 각광받고 있다. 단위 셀 (Unit cell)로 이루어진 연료전지에서 약 0.7V의 전압과 500mA/cm²의 전류 밀도를 얻을 수 있으며 이를 적층하여 실제 제품에서 사용 가능한 전력을 생산해낼 수 있다. 여러 형태의 연료전지 중 PEMFC (Proton Exchange Membrane Fuel Cell)는 중량이 가볍고 고효율, 고출력, 낮은 작동온도로 자동차와 휴대용 기기들의 동력원으로 쓰이고 있다. 국내외에서 많은 실험적인 방법으로 연료전지의 특성과 작동 조건을 설명하고 있으나 이는 비용과 시간 측면에서 경제적이지 않기 때문에 주로 연료전지의 단위 셀과 스택에 대한 시뮬레이션 연구가 집중되어 왔다.⁽¹⁻⁸⁾

* 서울대학교 기계항공공학부 대학원

† 책임저자, 서울대학교 기계항공공학부

E-mail : kadmin@snu.ac.kr

TEL : (02)880-1661 FAX : (02)874-2001

** 서울대학교 기계항공공학부

연료전지 특성은 단위 셀의 전압과 연료전지 전류 밀도간의 관계에서 알 수 있으며 이것이 성능에 직결되는 인자이다. 전류 밀도가 증가함에 따라 활성화 손실(Activation loss), 저항 손실(Ohmic loss), 농도 손실(Concentration loss) 등의 손실이 일어나 전압이 감소하기 때문에 이에 대한 해석이 필요하다.^(7,8,13)

이 논문에서는 시스템 해석 프로그램인 Matlab/Simulink 환경에서 위의 손실들을 고려하여 연료전지 단위 셀 전압과 전류 밀도 간의 관계를 시뮬레이션하고 Fig. 1과 같이 스택과 주변 장치를 구성하여 연료전지시스템 각 장치의 용량 매치와 출력의 분포를 파악한다.

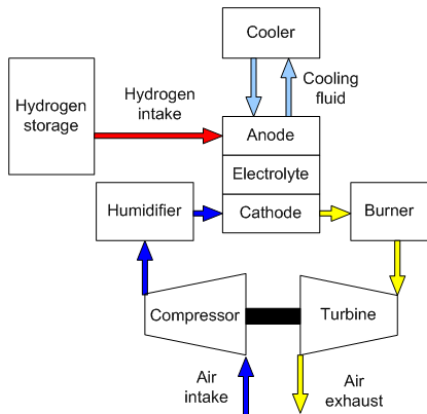


Fig. 1 Schematic of fuel cell system

2. 연료전지 모델링

2.1 연료전지 모델의 가정

연료전지 모델에서 가정은 다음과 같다.⁽⁷⁾

- 수소와 산소는 연료전지 유로 입구 이전에 습도가 조절되어 유입된다.
- 전해질막에는 습도차가 존재하며 산소극에서 수소극으로의 물의 확산이 존재한다.
- 수소 이온의 확산율과 농도는 전해질막의 습도의 함수이며 습도는 작동 전류와 작동 온도의 함수이다.

2.2 개회로 전압 (Open Circuit Voltage)

고분자 전해질 연료전지의 반응 후 기스 생성 자유 에너지 변화는 식 (1)과 같다.⁽¹³⁾

$$\Delta g_f = \Delta g_f^0 - RT_{fc} \ln \left[\frac{P_{H_2} P^{1/2} O_2}{P_{H_2O}} \right] \quad (1)$$

전기적인 일은 식 (2)와 같다.

$$Electrical\ work\ done = -2FE \quad (2)$$

전기적인 일과 기스자유에너지가 같으므로 개회로 전압은 식 (3), (4)와 같이 유도할 수 있다.

$$E = \frac{-\Delta g_f}{2F} = \frac{-\Delta g_f^0}{2F} + \frac{RT_{fc}}{2F} \ln \left[\frac{P_{H_2} P^{1/2} O_2}{P_{H_2O}} \right] \quad (3)$$

$$\frac{-\Delta g_f^0}{2F} = 1.229 + (T_{fc} - T_0) \left(\frac{\Delta S^0}{2F} \right) \quad (4)$$

2.3 활성화 손실 (Activation loss)

활성화 손실은 연료전지의 수소극과 산소극에서 전자의 이동, 또는 화학적인 결합을 끊거나 연결하는 데 사용된 에너지이다.⁽¹³⁾

$$v_{act} = a \ln \left(\frac{i}{i_0} \right) \quad (5)$$

a 와 i_0 는 상수이며 식 (6)과 같이 근사할 수 있다.⁽¹⁶⁾

$$v_{act} = v_0 + v_a (1 - e^{-c_1 i}) \quad (6)$$

2.4 저항 손실 (Ohmic loss)

전극과 양극판의 저항의 영향으로 저항 손실이 존재하며 옴의 법칙 (Ohm's law)를 이용해 나타낸다.

$$v_{ohm} = i R_{ohm} \quad (7)$$

R_{ohm} 은 전해질막의 습도와 연료전지의 온도의 함수이다. 따라서 전해질막의 전도율의 함수로 나타낼 수 있다.

$$R_{ohm} = \frac{t_m}{\sigma_m} \quad (8)$$

$$\sigma_m = (b_1 \lambda_m - b_2) \exp \left(b_3 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T_{fc}} \right) \right) \quad (9)$$

b_1, b_2, b_3 는 상수이며 실험적으로 구한다.⁽³⁾

2.5 농도 손실 (Concentration loss)

전류밀도가 늘어남에 따라 반응은 빨리 일어나고 반응에 참여하는 수소와 산소의 분압이 떨어져 농도가 감소하게 된다. 이에 따라 연료전지의 전압이 점차 떨어지는 현상을 농도 손실이라 한다. 분압이 전류밀도의 한계치인 i_l 이후 선형적으로 감소한다고 가정한 후, P_1 을 전류밀도가 0

일 때의 수소의 분압이라 하고 P_2 를 특정 전류 밀도의 수소의 분압이라 하면 수소에 대한 농도 손실은 식 (10)과 같다.⁽¹³⁾

$$\Delta V = \frac{RT}{2F} \ln\left(\frac{P_2}{P_1}\right) = \frac{RT}{2F} \ln\left(1 - \frac{i}{i_l}\right) \quad (10)$$

같은 방법으로 산소에 대한 농도 손실은 식 (11)과 같다.

$$\Delta V = \frac{RT}{4F} \ln\left(1 - \frac{i}{i_l}\right) \quad (11)$$

식 (10)과 식 (11)을 합한 것이 총 시스템의 농도 손실이다. 이를 근사하면 식 (12)와 같다.⁽¹⁶⁾

$$U_{conc} = i \left(c_2 \frac{i}{i_l} \right)^{c_3} \quad (12)$$

c_2 , c_3 , i_l 은 연료전지 온도와 반응 가스 분압의 함수이며 실험적으로 구할 수 있다.

2.6 총 전압 모델링

지금까지 식들을 종합하여 단위 셀 연료전지의 전압은 식 (13)과 같이 나타낼 수 있다.

$$\begin{aligned} U &= E - U_{act} - U_{ohm} - U_{conc} \\ &= E - (U_0 + U_a(1 - e^{-c_1 i})) - (iR_{ohm}) - \left(i \left(c_2 \frac{i}{i_l} \right)^{c_3} \right) \end{aligned} \quad (13)$$

자동차용 연료전지 시스템의 특성을 분석하기 위해 100kW급(50kW×2)의 스택을 모델링하였다.

3. 연료전지 시스템 주변장치 모델링

3.1 압축기 (Compressor)

연료전지 스택에 유입되는 공기나 연료를 압축하여 더 높은 출력을 얻기 위해 압축기를 사용한다. 모델에 쓰인 가정은 다음과 같다.⁽¹³⁾

- 등엔트로피 과정으로 작동한다.
- 열전달은 무시한다.
- 가스의 운동에너지는 무시하거나 적어도 변화를 무시한다.
- 유입가스는 완전기체라 가정한다.

등엔트로피 과정에서 온도와 압력은 다음과 같은 관계가 있다.

$$\frac{T_2}{T_1} = \left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \quad (14)$$

압축기 효율은 실제 쓰여진 일과 등엔트로피

과정 일의 비이다.

$$\eta_c = \frac{c_p(T_2' - T_1)m}{c_p(T_2 - T_1)m} = \frac{T_2' - T_1}{T_2 - T_1} \quad (15)$$

식 (14)를 식 (15)에 대입하여 식 (16), (17)을 얻을 수 있다.

$$\eta_c = \frac{T_1}{(T_2 - T_1)} \left(\left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} - 1 \right) \quad (16)$$

$$\Delta T = T_2 - T_1 = \frac{T_1}{\eta_c} \left(\left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} - 1 \right) \quad (17)$$

식 (17)로부터 압축비에 따른 압축기의 출력을 얻을 수 있다.

$$Power = c_p \frac{T_1}{\eta_c} \left(\left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} - 1 \right) \cdot \dot{m} \quad (18)$$

압축기 효율은 압축기 성능 선도에서 구하였다.

3.2 터빈 (Turbine)

압축기의 동력을 전달하기 위해 터빈을 사용한다. 터빈의 모델 가정은 압축기 모델과 동일하다. 터빈 효율과 출력은 식 (19)와 식 (20)에 나타내었다.

$$\eta_c = \frac{T_1 - T_2}{T_1 - T_2'} = \frac{T_1 - T_2}{T_1 \left(1 - \left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \right)} \quad (19)$$

$$Power = c_p \eta_c T_1 \left(\left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} - 1 \right) \dot{m} \quad (20)$$

터빈 효율은 터빈 성능 선도를 이용하였다.

3.3 버너 (Burner)

쓰이지 않고 배출되는 수소를 연소하여 터빈 입구로 들어가는 공기 온도를 높이기 위해 버너가 사용된다. 모델에 쓰인 가정은 다음과 같다.

- 공급 수소량 중 10%가 배출된다.
- 수분은 응축기에 의해 모두 걸러진다.
- 수소를 태운 발열량(HHV)은 모두 공기를 데우는데 쓰인다.

$$HHV_{H_2} \cdot \dot{m}_{H_2} = \dot{m}_{air} \cdot C_p \cdot \Delta T \quad (21)$$

3.4 습도조절기 (Humidifier)

유입되는 공기와 수소의 습도를 조절하기 위해 습도조절기가 사용된다. 습도는 전해질막에서

수소이온의 전도율에 중요한 인자이다. 전해질막의 수분이 포화된 상태의 경우 연료전지는 가장 효율적으로 작동되며 전해질막 내부에서 전류의 흐름을 막는 저항이 가장 낮다. 그렇지만, 너무 많은 수분이 함유될 경우 수분이 다공성 전극을 막는 Water flooding 현상이 일어나므로 적당히 습도를 조절해야 한다.^(6,13) 산소극과 수소극에 필요한 물의 양은 다음과 같이 모델링하였다.

$$\dot{m}_{w,r1} = \frac{18.016}{28.97} \times \dot{m}_{air} \times \frac{P_w}{P_a} \times (H_{a,o} - H_{a,i}) \times \frac{1}{100} \quad (22)$$

$$\dot{m}_{w,r2} = \frac{18.016}{2.02} \times \dot{m}_{H_2} \times \frac{P_w}{P_{H_2}} \times (H_{G_{2o}}) \times \frac{1}{100} \quad (23)$$

4. 결과

4.1 단위 셀 시뮬레이션

Table 1과 같은 조건으로 산소와 수소의 압력, 연료전지의 온도를 입력으로 하여 시뮬레이션하였다. 각 인자들 중 어느 것이 가장 연료전지의 성능에 영향을 미치는지 파악하기 위해 3가지 변수 중 하나만을 바꾼 결과를 제시하였다.

Table 1 Simulation condition

Input parameter	Simulation condition
Temperature (°C)	50, 60, 70, 80, 90
H ₂ pressure (bar)	1, 2, 3, 4
Air pressure (bar)	1, 2, 3, 4

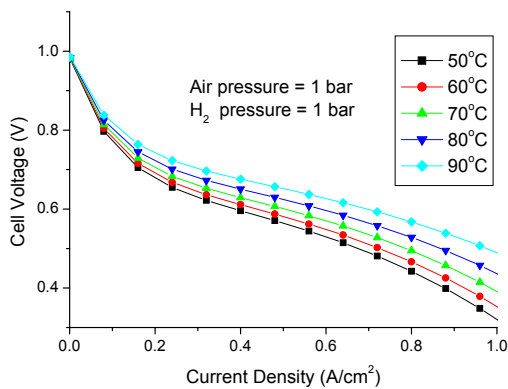


Fig. 4 Effect of temperature on PEMFC cell performance

Fig. 4는 온도에 따른 연료전지 전압-전류밀도 곡선이다. 전류밀도가 낮은 점에서는 비슷한 전압값을 보이지만 전류밀도가 높아질수록 많은 전압값 차이를 나타내고 있다. 일반적인 연료전지 작동 영역에서 작동 온도 50°C인 경우가 90°C인 경우에 비해 전압은 약 10~30 % 감소함을 알 수 있다.

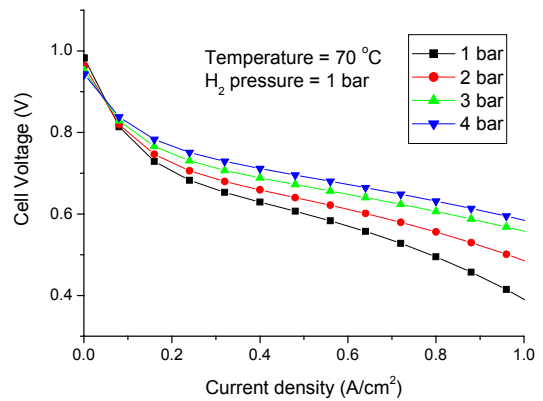


Fig. 5 Effect of air pressure on PEMFC cell performance

Fig. 5는 온도와 수소 압력을 고정했을 때 공기 압력 변화에 따른 연료전지 전압-전류밀도 곡선이다. 공기 압력이 1 bar인 경우 전압이 4 bar 보다 낮으며 전류 밀도가 높은 부분(0.8~1.0 A/cm²)에서 농도 손실이 더 크게 발생하여 전압이 30~40 % 감소하는 것을 확인할 수 있었다.

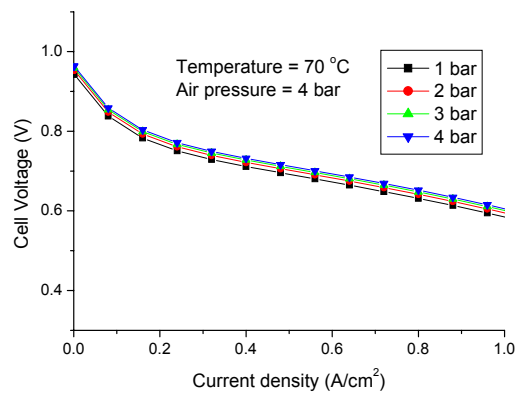


Fig. 6 Effect of hydrogen pressure on PEMFC cell performance

Fig. 6은 공기 압력과 온도를 고정하고 수소 압

력을 변화했을 때 연료전지의 전압-전류밀도 곡선이다. 압력 변화에 따른 곡선 형태는 거의 같음을 알 수 있다. 수소 압력이 1 bar와 4 bar인 경우를 비교했을 때 전압차는 5% 내외이다.

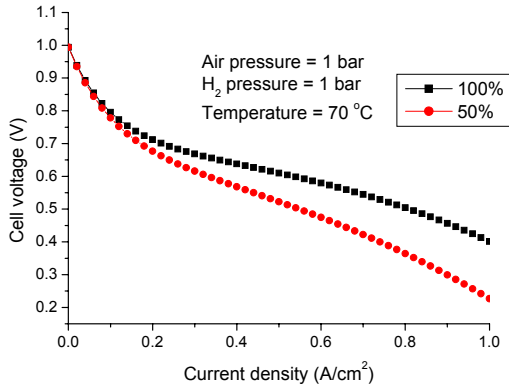


Fig. 7 Effect of membrane humidity on unit cell performance

Fig. 7은 전해질막의 습도에 따른 연료전지의 전압-전류밀도 곡선이다. 습도 100%인 경우에 비해 50%인 경우의 전압이 30~40% 감소한다.

연료전지의 성능은 온도와 공기의 압력에 주로 영향을 받는다. 그렇지만, 연료전지의 작동온도와 공기 압력을 증가시키기 위해 주변 장치에서 소모되는 일이 필요하므로 연료전지 시스템의 성능을 떨어뜨리는 요인이 된다. 따라서 주변장치들과 연료전지 스택의 특성을 동시에 시뮬레이션하는 것이 필요하다. (8,9,12,14)

4.2 연료전지 시스템 시뮬레이션

Table 1 Effect of air pressure on Power distribution (Temperature 70 °C, H₂ pressure 1 bar)

Air pressure (bar)	2.0	2.5	3.0	3.5	4.0
BOP component loss ratio(%)	11.5	15.2	18.7	23.2	28.7
Turbine power ratio (%)	3.9	6.2	10.3	10.4	10.1

Table 1은 고속, 고부하 조건에서 공기의 압력에 따른 시스템의 동력분배를 나타낸 표이다. 주변장치 손실비와 터빈 출력비는 스택 출력을 기준으로 산출하였다. 공기 압력이 증가할수록 주

변 장치의 소모 동력이 증가함을 확인할 수 있었다.

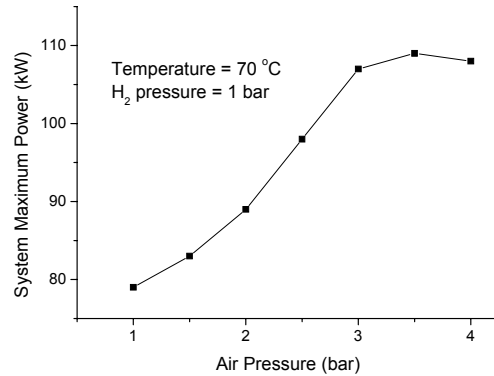


Fig. 8 Effect on air pressure on system power

Fig. 8은 공기의 압력에 따른 시스템 최대 출력 그래프이다. 1~3 bar 에선 공기의 압력이 증가함에 따라 시스템 출력이 증가하지만 3 bar 이상의 압력에서는 과도한 압축일로 인해 최대 출력이 감소하는 경향을 보인다.

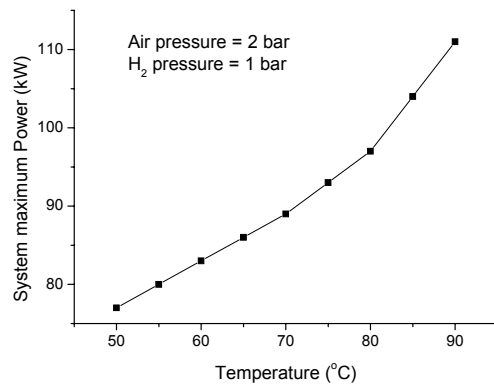


Fig. 9 Effect of operating temperature on maximum power of fuel cell system

Fig. 9는 온도 변화에 따른 시스템의 최대 출력을 비교한 그래프이다. 온도가 증가함에 따라 시스템의 최대 출력이 증가하는 경향을 보인다.

4. 결론

시스템적인 해석 기법으로 연료전지 시스템을 모델링하였다. 각기 다른 온도, 공기와 수소의 압력, 습도 등을 입력 조건으로 하여 해석한 결과 다음과 같은 결론을 얻을 수 있었다.

1. 단위 셀의 성능은 작동 온도와 공기 압력에 주로 영향을 받는다.
2. 사용한 연료전지 시스템의 최대 출력은 온도 10℃ 상승함에 따라 약 5kW씩 증가한다.
3. 연료전지 시스템에서 공기 압력이 증가할수록 주변 장치 소모 동력이 증가하지만 스택 출력 역시 증가하여 시스템 출력에 최대값이 존재함을 확인할 수 있었다.
4. 추후 출력 최대화를 위해서는 연료전지 시스템 각 구성 요소에 대한 모델링 및 최적화 연구가 필요할 것으로 판단된다.

참고문헌

- (1) Dawn M. Bernardi, 1990, "Water-Balance Calculation for Solid-Polymer-Electrolyte Fuel Cells," *Journal of Electrochemical Society*, Vol. 137, No. 11, pp.3344-3350
- (2) Dawn M. Bernardi and Mark W. Verbrugge, 1991, "Mathematical Model of a Gas Diffusion Electrode Bonded to a Polymer Electrolyte," *AIChE Journal*, Vol. 37, No. 8, pp. 1151-1163
- (3) T.E. Springer, T.A. Zawodzinski, and S. Gottesfeld, 1991, "Polymer Electrolyte Fuel Cell Model," *Journal of Electrochemical Society*, Vol. 138, No. 8, 2334-2342
- (4) Dawn M. Bernardi and Mark W. Verbrugge, 1992, "A Mathematical Model of the Solid-Polymer-Electrolyte Fuel Cell," *Journal of Electrochemical Society*, Vol. 139, No. 9, pp 2477-2491
- (5) T.E. Springer, M.S. Wilson, and S. Gottesfeld, 1993, "Modeling and Experimental Diagnostics in Polymer Electrolyte Fuel Cells," *Journal of Electrochemical Society*, Vol. 140, No. 12, pp. 3513-3526
- (6) Trung V. Nguyen and Ralph E. White, 1993, "A Water and Heat Management Model for Proton-Exchange-Membrane Fuel Cells," *Journal of Electrochemical Society*, Vol. 140, No. 8, pp. 2178-2186
- (7) J.C. Amphlett, R.N. Baumert, R.F. Mann, B.A. Peppley, P.R. Roberge, A. Rodrigues, 1994, "Parametric modelling of the performance of a 5-kW proton-exchange membrane fuel cell stack," *Journal of Power Sources*, Vol.49, pp.349-356
- (8) J.C. Amphlett, R.M. Baumert, R.F. Mann, B.A. Peppley, and P. R. Roberge, 1995, "Performance Modeling of the Ballard Mark IV Solid Polymer Electrolyte Fuel Cell, I. Mechanistic Model Development," *Journal of Electrochemical Society*, Vol. 142, No. 1, pp.1-8
- (9) J.C. Amphlett, R.M. Baumert, R.F. Mann, B.A. Peppley, and P. R. Roberge, 1995, "Performance Modeling of the Ballard Mark IV Solid Polymer Electrolyte Fuel Cell, II. Empirical Model Development," *Journal of Electrochemical Society*, Vol. 142, No. 1, pp.9-15
- (10) James Howard Lee, 1996, "A Methodology for the Development of Mathematical Models for Simulation and Design of Fuel Cell Stacks," Ph. D. thesis, Texas A&M University
- (11) Jung S. Yi and Trung V. Nguyen, 1998, "An Along-the-Channel Model for Proton Exchange Membrane Fuel Cells," *Journal of Electrochemical Society*, Vol. 145, No. 4, pp. 1149-1159
- (12) J.H. Lee, T.R. Lalk, 1998, "Modeling fuel cell stack systems," *Journal of Power Sources*, Vol. 73, pp. 229-241
- (13) James Larminie, Andrew Dicks, 2000, *Fuel Cell Systems Explained*, John Wiley & Sons, LTD
- (14) D. Chu, R. Jiand and C. Walker, 2000, "Analysis of PEM fuel cell stacks using an empirical current-voltage equation," *Journal of Applied Electrochemistry*, Vol. 30, pp. 365-370
- (15) G. Maggio, V. Recupero, L. Pino, 2001, "Modeling polymer electrolyte fuel cells: an innovative approach," *Journal of Power Sources*, Vol. 101, pp. 275-286
- (16) Jay Tawee Pukrushpan, 2003, "Modeling and Control of Fuel Cell Systems and Fuel Processors," Ph. D. thesis, University of Michigan