

채널 단면형상 변화에 따른 PEMFC 성능 수치 연구

최치환, 문정은, 이규정*

고려대학교 기계공학과 대학원, *고려대학교 기계공학과

Numerical Study on the Performance of PEMFC with Various Cross Sections of Channel

Chi-Hwan Choi, Chung-Eun Moon, Kyu-Jung Lee*

Graduate School of Mechanical Engineering, Korea University, Seoul 136-701, Korea |

*Department of Mechanical Engineering, Korea University, Seoul 136-701, Korea

ABSTRACT:

A numerical study on the performance of a PEMFC was performed by using a CFD-ACE+ commercial program. The effects of width, height and shape of channel cross section and mass flow rate were investigated. In order to check the validity of the simulation, comparisons were carried out between predictions and experimental data available in the literature and shows the reasonable agreement. It is found that only the width of channel is strongly related to the performance of a PEMFC, while other factors have no marked effects.

Key words: fuel cell(연료전지), simulation (수치해석), aspect ratio (종횡비), polarization curve (분극곡선)

기 호 설 명

- U : 속도벡터 [m/s]
- ρ : 밀도 [kg/m³]
- p : 압력 [Pa]
- μ : 점성계수 [kg/m-s]
- Re : Reynolds 수, $\frac{UL}{\nu}$
- j_T : 교환전류 [A]
- j_0 : 개로전압 [V]
- ϵ : 기공율
- M : 혼합물질 분자량 kg/kmol

하첨자

- F : 고체물질
- S : 액체

용어 해설

종횡비 : 채널 단면 폭 길이에 대한 높이의 비

1. 서 론

급등하는 석유 값과 화석연료 사용에 따른 대기오염 및 지구온난화현상이 최근 큰 사회적 문제로 대두되고 있다. 이러한 어려움을 타파하기 위한 풍력, 조력, 파력, 태양열, 지열 등 신재생에너지, MDH발전, 연료전지 등 고효율 발전장치 등 새로운 에너지원에 대한 여러 연구가 각국에

† Corresponding author

Tel.: +82-2-3290-3359; fax: +82-2-928-9768

E-mail address: kjlee@korea.ac.kr

서 활발히 이루어지고 있다. 이 중 화학에너지를 전기에너지로 직접 변환하는 장치인 연료전지는 높은 효율과 공해물질 배출이 없는 장점을 가지고 있다. 따라서 화석연료를 대체할 수 있는 차세대 에너지원으로 각광 받고 있으며 이에 대한 많은 연구가 진행 되어 왔다. 주요한 연구들을 살펴보면, T. E. Springer et al.⁽¹⁾는 Nafion[®] 117을 membrane으로 사용하여 실험을 하였고 전해질막(membrane) 안에서의 전기삼투(electro-osmotic drag) 현상과 여러 특징들을 측정하였다. 이 실험값을 기초로 가슴이 일정할 때 전해질막(membrane)의 여러 성질들을 수식으로 제시하였다. S. srivnivasan et al.⁽²⁾은 적은 양의 백금(Platinum)을 이용하여 전극을 제조하는 방법과 전해질막과 전극의 최적화 접합방법인 Hot Pressing을 제시하였다. Dilip Natarajan et al.⁽³⁾은 이상 유동을 고려한 연료전지의 유동에 대한 전산해석 방식을 제시하였고, 이를 바탕으로 한 수치해석으로 가스 확산층(GDL, Gas Diffusion Layer)이 얇을수록 공극률이 높을수록(higher porosity) 연료전지 성능이 향상됨을 보였다. A. Su, et al.⁽⁴⁾은 2종류의 PEMFC 채널 패턴에 대하여 3차원 전산해석과 실험 통해 연료전지성능을 분석 하였다. 직관 채널 패턴 보다는 S자 모양의 꾸불꾸불한(serpentine) 채널 패턴이 더 높은 물질 전달 성능을 나타냄을 보였다. N. Pekula et al.⁽⁵⁾는 연료전지 내부 2상유동을 볼 수 있는 neutron imaging 장치를 제작하여 내부 물 유동을 실험을 통해 알아내었다. Xianguo Li et al.⁽⁶⁾은 여러 회사와 연구기관에서 만든 채널 패턴을 소개하였다. 각 채널 패턴에 대한 문제점과 최적화를 위한 여러 방안 제시 하였고, 분리판 디자인 발전이 연료전지 상용화의 중요한 도움이 될 것이라 주장하였다.

본 연구에서는 단면채널에 따른 연료전지 성능 변화를 알아보기 위하여 사각 단면채널의 폭과 높이, 중횡비를 변화시켜 계산을 하였으며, 유량을 변화시켜 그 성능을 평가 하였다. 또한 실제 유로의 여러 단면적형상을 고려하여 연료전지의 성능을 평가하였다.

2. 실험장치 및 방법

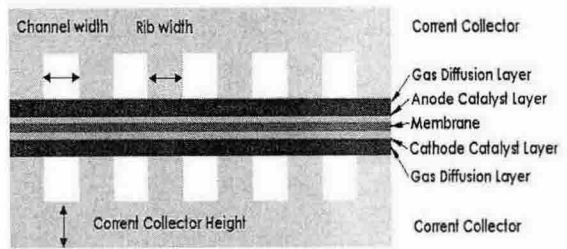


Fig. 1 Schematic diagram of rectangular channels

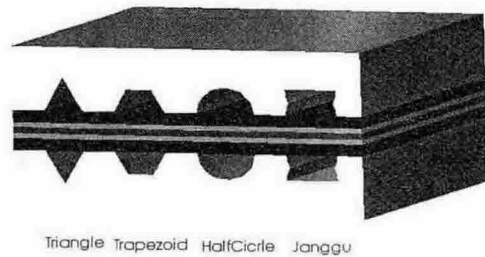


Fig. 2 Schematic diagram of various cross sections of channel

2. 1 해석 모델

채널 단면 형상에 따른 연료전지의 성능을 평가하기 위해 Fig. 1과 같이 해석모델을 구성하였다. 각 모델은 전해질막(Membrane)을 중심으로 촉매층(catalyst layer), 가스 확산층(Gas Diffusion Layer), 유로판(Flow field or current collector plate)을 적층하여 연료전지를 형상화 하였고, 채널 단면이 정삼각형, 사다리꼴, 반원, 장구형인 3차원 단위 연료전지는 Fig. 2와 같이 모델을 구성했다.

채널 단면형상에 따른 성능을 평가하기 위해 채널 사각 단면 폭을 0.25mm에서 4mm까지, 높이를 0.25mm에서 3mm까지 변화하여 형상화 하였고, 채널 형상이 삼각형, 사다리꼴, 반원, 장구형 연료전지는 채널 밑면과 가스 확산층이 만나는 넓이가 같도록 모델을 구성하였다.

본 연구에서 다음과 같은 가정 하에 전산해석을 하였다.

1. 정상상태이며, 중력영향은 무시하였다.

Table 1 Boundary conditions

Boundary condition	Temperature	Pressure	Mass flow	Chemistry	Voltage
Fuel inlet	323K	303975 Pa	0.23 m/s	H2 : 0.73, H2O : 0.27	Fixed current 0
Fuel outlet	323K	303975 Pa		H2 : 0.73, H2O : 0.27	Fixed current 0
Air inlet	323K	506625 Pa	0.23 m/s	N ₂ : 0.75, O ₂ : 0.235, H ₂ O : 0.015	Fixed current 0
Air outlet	323K	506625 Pa		N ₂ : 0.75, O ₂ : 0.235, H ₂ O : 0.015	Fixed current 0
Current Collector Top wall	323K				0
Current Collector Top wall	323K				Over potential
Side wall	323K				Fixed current 0

2. 층류이며, 비압축성 유체이다.
3. 연료전지 벽면의 온도는 일정하다.
4. 모든 기체는 이상기체로 가정하고 상변화는 없는 것으로 하였다.
5. 확산층, 촉매층, 전해질막은 등방성이며 균일하다.
6. 전해질막은 완전가습된 것으로 하였다.

해석 방법은 범용 CFD solver인 CFD-ACE+(2004)를 이용하여 해석모델의 각 영역에 물성치와 경계조건을 지정한 후 SIMPLEC algorithm을 이용하여 유동해석을 한다. 유동해석으로 얻어진 각 변수들을 에너지보존방정식, 전기화학반응에 관련된 식에 대입하여 순차적으로 푼다. 값이 수렴할 때까지 해석하여 결과 값을 얻었다. 경계조건은 Table 1에 표시하였다.

2. 2 지배방정식

연료전지 내에서의 물리, 화학, 전기적 현상을 나타낼 수 있도록 아래와 같은 지배방정식을 적용 계산을 수행하였다.

유동 및 물질의 확산을 나타내기 위하여 식(1) 질량보존 방정식과 식(2)의 운동량 보존 방정식을 적용하였다.

질량보존 방정식

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon\rho) + \nabla \cdot (\epsilon\rho U) = 0 \quad (1)$$

운동량 보존 방정식

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\epsilon\rho U) + \nabla \cdot (\epsilon\rho UU) = & -\epsilon\nabla p + \nabla \cdot (\epsilon\tau) \\ & + \epsilon B + \frac{\epsilon^2 \mu U}{k} \end{aligned} \quad (2)$$

식(2) 오른쪽 마지막 항은 다공성 매체(porous media) 내에서 유체 유동 및 확산에 관련된 반응물의 속도와 내부압력변화를 나타내는 Darcy's law이다.

연료전지 내의 전기화학반응에 대한 반응물과 생성물 및 질량분률(mass fraction)은 다음과 같은 식(3) 물질수지(mass conservation equation)를 이용하여 계산하였다.

물질수지

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon\rho Y_i) + \nabla \cdot (\epsilon\rho U Y_i) = \nabla \cdot J_i + \dot{\omega}_i \quad (3)$$

여기서 Y_i 는 i번째 물질의 질량분률, $\dot{\omega}_i$ 는 i번째 물질생성율(production rates of the ith species in the gas phase), J_i 는 확산흐름(diffusive flux) 나타내고 J_i 는 식(4)와 같이 나타낸다.

$$\begin{aligned} J_i = & \rho D_i \nabla Y_i + \frac{\rho Y_i}{M} D_i \nabla M - \rho Y_i \sum_j D_j \nabla Y_j \\ & - \rho Y_i \frac{\Delta M}{M} \sum_j D_j Y_j \end{aligned} \quad (4)$$

D_i 는 유효질량확산계수(Effective mass diffusion coefficient of species)이고 D_i 는 식(5)와 같다.

$$D_i = D_{i,FS} \tau \quad (5)$$

여기서 $D_{i,FS}$ 는 i번째 자유확산계수(Free stream diffusion coefficient of ith species) 이고, τ 는 굴곡도(Tortuosity of medium)을 나타낸다.

해석 모델을 전기적 중성을 가정하고 전류 보존식 식(6)만을 이용하여 계산을 수행하였다. 연료전지의 전극은 다공성 물질이어서 전류가 고체와 유체를 따라 다르다. 이에 고체로 흐르는 전류와 액체로 흐르는 전류 두 가지 전류를 고려한 식(7)을 적용하였다.

전류 보존식

$$\nabla \cdot i = 0 \quad (6)$$

$$\nabla \cdot i_F + \nabla \cdot i_S = 0 \quad (7)$$

여기서 위의 두 종류의 전류는 독립적이며, 두 상 사이에 전기화학적 반응에 의하여 서로 작용할 수 있는데 이 때 두 상 상이에서 교환되는 전류를 교환전류(j_T)라 하고 (8)과 (9)에 의하여 주어진다.

$$-\nabla \cdot i_F + \nabla \cdot i_S = j_T \left[\frac{S}{V} \right]_{eff} = \left[\frac{S}{V} \right]_{eff} \sum_{j=1}^{N_{steps}} j_{Tj} \quad (8)$$

$$\nabla \cdot (\sigma_F \nabla \Phi_F) = \nabla \cdot (\sigma_S \nabla \Phi_S) = j_T \left[\frac{S}{V} \right]_{eff} \quad (9)$$

여기서 $[S/V]_{eff}$ 는 유효 부피에 대한 면적비 (effective surface to volume ratio)이고, Φ_F 과 Φ_S 은 ionic과 electronic phases의 전압이다.

연료전지 내에서 전기화학 반응 Volumetric production rate는 식 (10)과 같이 나타낸다.

$$\omega_i = (a''_i - a'_i) \frac{j_T}{F} \quad (10)$$

여기서 a''_i 와 a'_i 는 생성물과 반응물의 stoichiometric coefficients 이다.

온도와 반응물의 분압, 그리고 Over potential 관계는 Butler-Volmer식 식(11)을 이용하여 계산하였다.

$$j_{Tj} = \frac{j_{0i}}{\prod_{k=1}^N [A_{k,ref}]^{\alpha_{ki}}} \left[\exp\left(\frac{\alpha_{aj}F}{RT}\eta\right) - \exp\left(\frac{\alpha_{cj}F}{RT}\eta\right) \right] \times \prod_{k=1}^N [A_k]^{\alpha_{kj}} \quad (11)$$

j_0 는 open circuit voltage

α_{aj}, α_{cj} 는 kinetic constants

$[A]$ 는 반응 면 근처의 반응물질의 molar concentration

N 반응물질의 수

α_{kj} 는 concentration exponents 이다.

3. 실험결과 및 고찰

3. 1 해석 모델의 정확성

3. 1. 1 분극곡선

사각단면 채널 연료전지에 Over potential을 변화시키며 연료전지 전류를 계산하였다. Fig. 3은 S. Srivnivasan⁽²⁾의 실험운전조건과 동일한 조건을 수치해석에서 설정하여 계산된 분극곡선이다. Fig. 3에서 볼 수 있듯이 실험값과 실험치 값이 일치함을 알 수 있다.

3. 1. 2 격자 밀도(Mesh Density)

또한 3차원 연료전지 모델 격자수를 70,000개에서부터 250,000개 까지 변화하며 계산을 수행하였다. Fig. 4는 격자수를 변화 시켜가며 전류 밀도를 계산한 값을 나타낸 것이다.

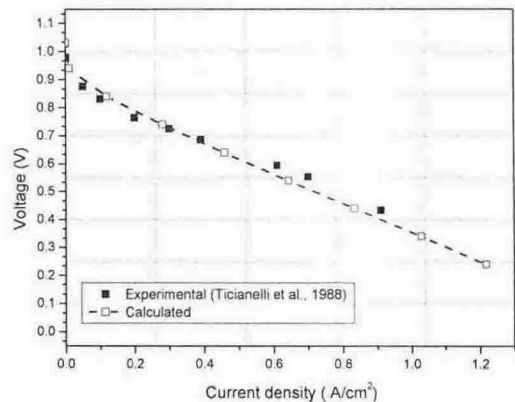


Fig. 3 Polarization curve of PEMFC

그림에서 볼 수 있듯이 70,000-250,000 격자사이의 모델은 Mesh Density의 영향을 받지 않고 일정한 계산 값을 갖는다.

본 연구에서는 시간과 효율성, 정확성을 고려하여 격자밀도에 따라 계산 값이 변하지 않는 70,000개의 격자를 가지는 모델을 이용 계산을 수행하였고 이는 위의 Fig 3. 과 Fig. 4의 계산 결과에 통해 모델 설정이 적절하고 그 값을 신뢰할 수 있음을 알 수 있다.

3.2 유량 변화에 따른 전류밀도

유량에 따른 연료전지 성능을 알아보기 위해 단면적이 정사각형(1mm×1mm)인 채널 연료전지 모델의 유량을 변화 하여 성능을 계산하였다.

Fig 5는 유량(Re 0.6 ~ 38)을 변화시키며 연료전지 전류밀도를 계산한 값을 나타낸 그림이다. 유량이 낮은 영역에서는 낮은 전류밀도를 나타내고 유량이 높은 영역(Re 10 이상)에서는 전류밀도가 같은 값을 가지는 것을 Fig. 5에서 볼 수 있다. 유량이 적은 상태에서 낮은 성능이 나타나는 이유는 공급된 연료와 산소가 채널 입구에서 반응에 의해 많은 양이 소모가 되어 채널 뒤까지 충분한 양이 공급이 되지 않기 때문에 일어나는 현상이라 판단된다. 반면 Re가 높은 구간에서는 Re 변화가 성능에 크게 영향을 주지 않았다. 이는 채널 뒷부분까지 충분히 연료와 공기가 전달되는 경우 유량증가와 감소가 성능에

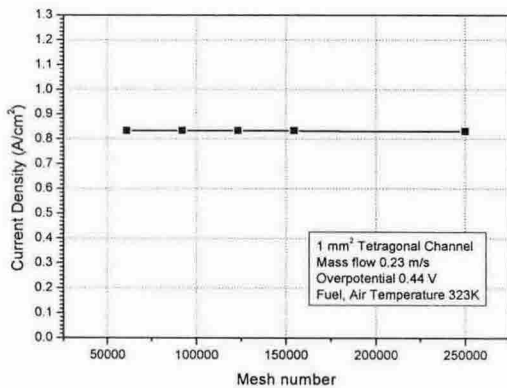


Fig. 4 Variation of Current density for different Mesh Numbers

영향을 주지 않음을 알 수 있다.

3.3 동일 반응 면적 시 채널 높이 변화에 따른 연료전지 성능 비교

채널 형상에 따른 연료전지 성능을 해석하기 위하여 직사각형 채널 폭 1000 μ m, 집전체기둥 폭 250 μ m, 채널 길이 50000 μ m 로 일정하게 고정하고 채널 높이만을 250 μ m ~ 3000 μ m 변화시키며 계산하였다. 밑면적이 일정하므로 종횡비가 커지면 단지채널의 높이가 높아지는 것을 나타낸다. 종횡 비가 0.5에서 가장 높은 값을 보이고 0.5 보다 낮으면 급격하게 전류밀도가 낮아지고 0.5 보다 높은

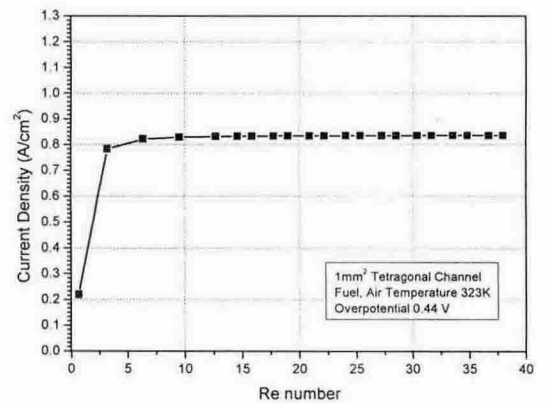


Fig. 5 Current density curve for different Re numbers

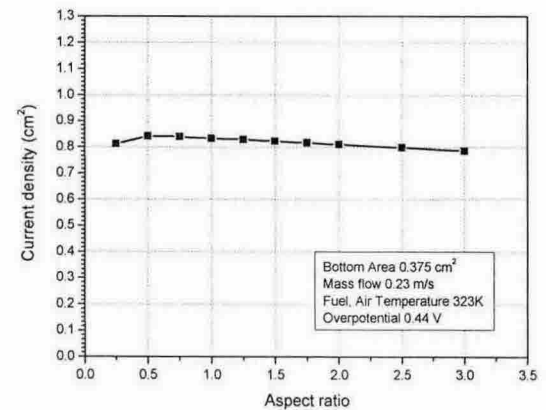


Fig. 6 Current density curve for different aspect ratios

중횡비 구간에서는 조금씩 전류밀도가 낮아짐을 Fig. 6를 통해 알 수 있다. 중횡비가 0.25 일 때 성능이 낮은 이유는 다음과 같다. 채널 높이가 낮아 채널 안의 모든 기체가 쉽게 전극으로 확산된다. 그래서 입구영역 부분의 반응만으로도 빠르게 채널 안의 연료와 산소의 물분율이 감소하게 된다. 이러한 채널 안에서의 연료, 산소의 물분율 감소가 채널 전체의 연료, 산소의 부족으로 이어져 성능이 하락되는 것으로 판단된다. 반면 중횡비가 큰 구간에서는 채널의 높이가 높아 모든 채널 구간에 반응에 필요한 충분한 연료와 공기를 공급하게 되며 반응물 부족에 의한 전류밀도 감소가 일어나지 않는다. 중횡비가 높아짐에 따라 성능이 조금씩 떨어지는 것은 연료 농도 영향이 아닌 연료전지 구성 재료의 저항 때문으로 전류가 긴 집전체기둥을 지나면서 전류가 손실되기 때문이라 판단된다.

3. 3 반응면적에 따른 Current Density 변화

반응면적에 따른 연료전지 성능을 비교하기 위해 채널 폭 넓이를 250 ~ 4000 μm 변화하며 계산을 수행 하였다. 각 Case의 연료전지 채널 모델 높이는 5000 μm , 집전체기둥의 폭 길이는 500 μm , 채널 길이는 50000 μm 로 고정하여 계산하였다. Fig. 7은 면적 변화에 따른 단위 채널당 전류(A)와 전류밀도(A/cm²)를 나타낸 것이다. 밀면적이 증가하면 단위 면적당 전류밀도가 줄어들고 밀면적이 감소하면 전류밀도가 늘어남을 Fig. 7을 통해 알 수 있다.

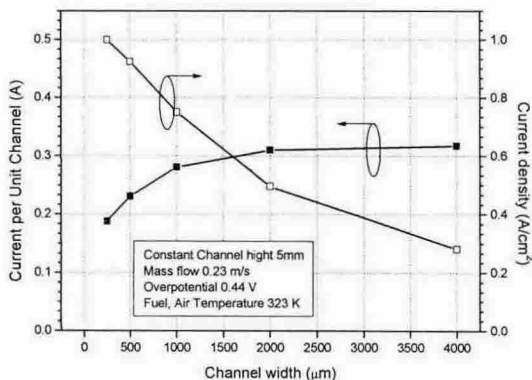


Fig. 7 Current density curve for different channel widths with fixed height

채널 폭이 넓어지면 면적당 확산층과 집전체기둥 등의 단면이 만나는 부분이 줄어들게 되고 연료와 공기가 반응하는 면적이 상대적으로 넓어지게 된다. 이는 단위 면적당 반응면적이 넓어지는 것을 의미한다. 채널 폭이 증가하면 한개 채널당 전류가 증가하는 것을 Fig. 7에서 볼 수 있다.

하지만, 전류밀도는 반응면적이 커짐에도 불구하고 급격히 떨어진다. Dilip Natarajan⁽³⁾는 이러한 이유를 전극에서 생성된 전류가 바로 집전체기둥을 따라 밖으로 전도되어 나가지 못하고 상대적으로 저항이 높은 MEA와 가스 확산층의 긴 통로를 지나면서 전류를 손실했기 때문이라 하였다.

3. 4 Aspect Ratio 변화에 따른 연료전지 성능 변화

채널 단면적은 1mm²(반응채널의 단면적 일정)이고, 채널 길이 50000 μm , 집전체기둥 폭 250 μm , 집전체의 두께(채널 윗면에서 집전체 윗면 까지 길이) 750 μm 로 일정하게 고정하고 채널의 중횡비를 변화시키며 해석을 수행 하였다.

Fig. 8은 중횡비 변화에 따른 성능을 비교한 것이다. 중횡비가 증가함에 따라 전류밀도가 증가하는 것을 Fig. 8을 통해 알 수 있다. 중횡비가 낮으면 옆으로 납작한 형태의 채널이 된다. 이는 단위면적당 채널이 가스 확산층과 만나는 면적은 증가하고 집전체기둥과 가스 확산층과 만나는 면적이 감소함을 뜻한다. 중횡비가 낮으면 위의 3. 2의 결과와 같이 낮은 채널 높이 때문에 연료와 공기의 충분한 공급이 이루어지지 않는다. 또한 3. 3의 결과에서와 같이 생성된 전류가 긴 전기

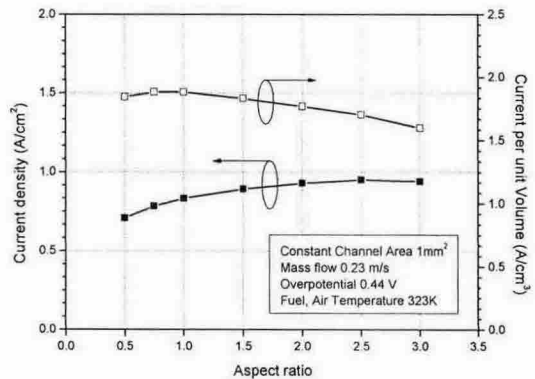


Fig. 8 Current density curve for different aspect ratios

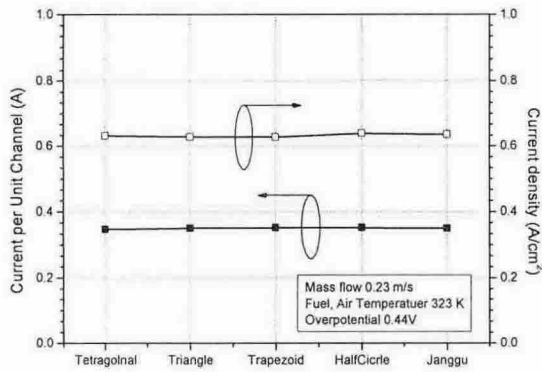


Fig. 9 Comparison of 5 different Channel shape

통로에서 전류를 소모하게 된다. 이러한 이유로 낮은 종횡비에서 낮은 전류밀도가 높은 종횡비에서 높은 전류밀도가 나온다.

그러나 단위 체적당 전류 값은 약 0.75 ~ 1 의 종횡비에서 최고점이 됨을 볼 수 있다. 이는 종횡비가 낮으면 집전체의 부피가 커져 전체 채널의 부피가 커지고 반대로 종횡비가 높으면 집전체의 부피가 작아져서 전체 연료전지의 부피가 작아지기 때문이다.

3. 5 채널 단면형상에 따른 연료전지 성능해석

밀링을 이용 하여 만든 직사각형, 정삼각형, 사다리꼴과 등방식각으로 인하여 생기는 반원 및 장구형태 채널단면 연료전지의 성능을 해석하였다. 채널 밀면적 860 μm 이고, 집전체기둥의 폭 250 μm , 집전체의 두께 750 μm , 채널 길이 50000 μm 이다.

Fig. 9는 단면 형상에 따른 전류밀도를 나타낸 것이다. 채널 형상에 따라 전류밀도가 거의 차이가 없음을 알 수 있다. 이는 유로의 단면 형상보다 연료 및 공기가 가스 확산층에 접촉하는 면적에 대한 영향이 전류밀도에 밀접하게 연관되어 있음을 알 수 있다.

4. 결 론

상용 CFD 프로그램인 CFD-ACE+를 이용하여 PEMFC 연료전지 채널의 폭과 넓이, 유량, 단면 형상을 변화하며 성능을 계산 하였다. 유량이 일정량 이상 연료전지에 공급이 되면 성능에 크게

영향을 미치지 않으며, 채널 높이 또한 아주 낮은 종횡비 경우를 제외하고는 연료전지 성능에 크게 영향을 미치지 않았다. 그러나 채널 폭의 넓이는 넓을수록 점점 전류밀도가 낮아지는데 이것은 전극에서 생성된 전류가 MEA와 가스 확산층을 지나며 저항에 의해 전류를 손실되기 때문이다. 한편 채널 형상에 의한 연료전지 성능 변화는 미미 한 것을 계산을 통해 알 수 있었다. 계산 결과는 실험결과와 잘 일치하는 것을 데이터를 비교하여 알 수 있었으며, 채널의 연료전지에 미치는 영향을 제시함으로써 새로운 유로를 설계하는데 도움이 될 것으로 기대된다.

5. 참고문헌

1. T. E. Springer, T. A. Zawodzinski, and S. Gottesfeld, 1991, Polymer Electrolyte Fuel Cell Model, J. Electrochem. Soc., Vol. 138, pp. 2334-2342
2. S. Srivivasan, E. A. Ticianelli, C. T. Derouin and Aredondo, 1988, Advances in solid polymer electrolyte fuel cell Technology with low platinum loading electrodes, Journal of power sources, 22 pp. 359-375
3. Dilip Natarajan and Trung Van Nguyen, 2001, A Two-Dimensional, Two-Phase, Multicomponent, Transient Model for the Cathode of a Proton Exchange Membrane Fuel Cell Using conventional Gas Distributors, J. Electrochem. Soc., 148(12) pp. A1324-A1335(2001)
4. A. Su, Y. C. Chiu and F. B. Weng, 2005, The impact of flow field pattern on concentration and performance in PEMFC, Int. J. Energy Res. 29, pp. 409-425
5. N. Pekula, K. Heller, P. A. Chuang, A. Turhan, M.M. Mench, JS. Brenizer, K. Ünlü, 2005, Study of water distribution and transport in a polymer electrolyte fuel cell using neutron imaging, Nuclear Instruments and Methods in Physics A 542 pp. 134-141
6. Xianguo Li, Imran Sabir, 2005, Teview of Bipolar plates in PEM fuel cells : Flow-field designs, International Journal of Hydrogen energy 30 pp. 359-371