



고분자전해질막 연료전지의 공기유로 내에서의 다중 액적 거동에 대한 수치적 연구

최 지 영,¹ 손 기 현^{*2}

NUMERICAL STUDY OF MULTIPLE DROPLET DYNAMICS IN A PEMFC AIR FLOW CHANNEL

J.Y. Choi¹ and G. Son^{*2}

The water droplet motion and the interaction between the droplets in a PEMFC air flow channel with multiple pores, through which water emerges, is studied numerically by solving the equations governing the conservation of mass and momentum. The liquid-gas interface is tracked by a level set method which is based on a sharp-interface representation for accurately imposing the matching conditions at the interface. The method is modified to implement the contact angle conditions on the walls and pores. The dynamic interaction between the droplets growing on multiple pores while keeping the total water flow rate through pores constant is investigated by conducting the computations until the droplet motion exhibits a periodic pattern. The numerical results show that the droplet merging caused by increasing the number of pores is not effective for water removal and that the contact angle of channel wall strongly affects water management in the PEMFC air flow channel.

Key Words : 접촉각(Contact angle), 액적 유동(Droplet dynamics), Level set 방법(Level set method), 고분자전해질막 연료전지 (PEM fuel cell)

1. 서 론

수소와 산소의 전기화학적 반응을 통해서 전기를 생산하는 고분자전해질막 연료전지(PEMFC)는 전기를 생산하는 과정에서 부산물로서 액체 상태의 물을 만들어낸다. 이 물은 주로 공기극(Cathode)에서 생성되며, 공기 채널을 통해 공급되는 산소가 기체확산층(Gas Diffusion Layer)을 지나 막전극 어셈블리(Membrane Electrode Assembly)에서 수소와 반응하여 만들어진다. 또한 산소 공급을 위한 공기 채널은 생성된 물의 이동 통로로도 사용된다. 이때, 생성된 물이 적절하게 제거되지 않으면, 이 적체된 물이 산소의 공급로인 GDL의 기공뿐 아니라 더 나아가 공기 채널까지 막을 수 있다. 이런 일련의 과정이 많은 실험을 통하여 관찰되고 있다[1,2]. 또한 최근 Kandlikar[3]는 고분자전해질막 연료전지의 적절한 성능 유지

에 있어 물 관리(Water Management)의 중요성을 자세히 설명했다. 본 연구는 GDL의 표면과 기공을 포함한 고분자전해질막 연료전지의 공기 채널에서의 물의 이동 및 액적간 또는 액적과 벽 사이의 상호작용에 초점을 두었다

최근 공기 채널 내에서의 액적 거동을 명확히 하기 위한 수치적 연구들이 수행되고 있다. Cai[4] 등은 차분화된 검사체적 내의 액상의 체적비로 정의된 함수를 사용하는 Volume of Fluid(VOF)방법을 사용하여 고분자전해질 막 연료전지의 공기 채널에서의 액적 이동 및 액적과 벽과의 상호작용을 수치적으로 계산하였다. 이들은 채널의 접촉각에 따른 액적 거동을 조사하였으나, 그 결과는 GDL의 기공을 통해 성장하며 공기 흐름에 의해 주기적으로 기공으로부터 떨어져 나가는 실제 고분자전해질 막 연료전지 공기 채널에서의 액적 거동과는 거리가 있다. 또한 액적과 벽 사이의 상호작용을 명확히 설명하지 못했다

Mukherjee와 Kandlikar[5]는 1mm×1mm 사각 공기 채널 내에서의 액적 성장을 level set (LS) 방법을 이용하여 수치적으로 해석하였다. LS 방법에서는 상경계면으로부터 거리로 정의된 함수가 상경계면을 추적하는데 사용된다 연속적인 LS

1 서강대학교 대학원 기계공학과

2 정회원, 서강대학교 기계공학과

* Corresponding author, E-mail: gihun@sogang.ac.kr

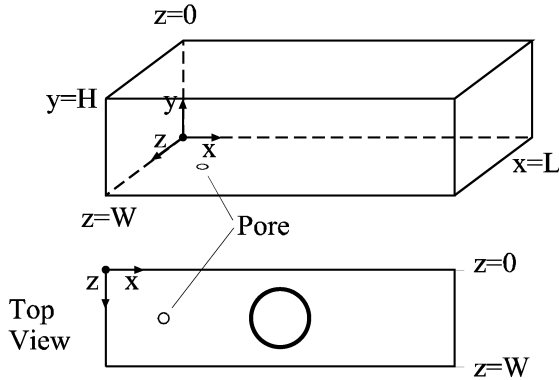


Fig. 1 Computational domain

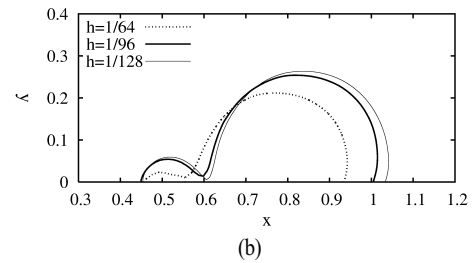
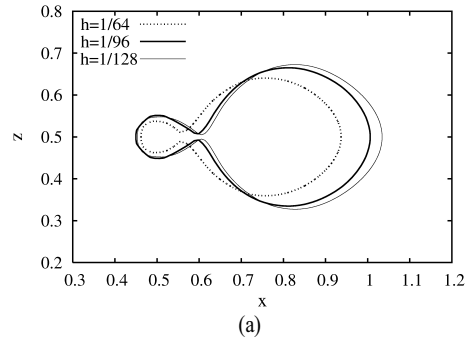
함수를 이용함으로써 상경계면에서의 곡률 및 표면장력을 비연속적인 VOF 방법보다 더 정확히 계산할 수 있다. Mukherjee 와 Kandlikar는 공기의 속도, GDL로부터 흘러나오는 물의 속도, 접촉각에 따른 액적의 성장 및 기공으로부터 분리되는 액적의 크기를 계산하였다. 하지만 이들의 결과는 Kandlikar[3]의 실험 데이터보다 상당히 작은 크기의 액적 분리를 보여준다. Zhu[6] 등은 공기 채널에서의 GDL의 기공을 통한 액적 성장에 대한 좀 더 종합적이고 명확한 계산을 수행하였다. VOF 방법을 사용하여 $0.25\text{mm} \times 0.25\text{mm}$ 사각 채널에서의 접촉각, 공기의 속도, GDL로부터 흘러나오는 물의 속도, 기공의 크기에 따른 액적 제거 효과를 정량화했다.

본 연구에서는 마이크로채널 내에서, 바닥면의 기공에서 스며나오는 전체 물의 유량이 일정하게 유지되는 상태에서 다수의 기공에서 성장하는 액적 간의 상호작용을 알아보기 위한 수치모사가 이루어졌다. 또한 채널 내에서의 액적 거동 및 액적 제거에 기공 간의 거리 및 벽의 접촉각이 미치는 효과를 조사하였다.

2. 수치해석방법

본 연구에서 사용된 수치해석 방법은 sharp-interface 구현을 위한 LS 방법을 기반으로 하였다. Fig. 1은 본 연구에서 사용된 계산 영역이다. 기상-액상의 상경계면은 기상에서 음의 값 액상에서 양의 값을 가지는 거리함수로 정의된 LS 함수, ϕ 에 의해 계산된다. 기상, 액상 영역 모두에 적용될 수 있는 운동량 및 질량 보존식과 LS 함수를 지배하는 방정식은 아래와 같이 표현된다.

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

Fig. 2 Droplet shape at detachment from a pore at the cross-section of (a) $y=0$ and (b) $z=0.5$

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \rho \mathbf{g} - \sigma \kappa \nabla \alpha + \nabla \cdot \mu [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] \quad (2)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = 0 \quad (3)$$

여기서 α , 상경계면의 곡률(κ)은 다음과 같이 계산된다.

$$\kappa = \nabla \cdot (\nabla \phi / |\nabla \phi|)$$

$$\alpha = 1 \quad \text{if } \phi > 0$$

$$= 0 \quad \text{if } \phi \leq 0$$

위의 식에서 α 는 액상-기상을 구분하는 불연속적인 계단 함수이며, κ 는 거리 함수로 정의된 연속적인 LS 함수에 의해 계산된다.

α 와 κ 를 정확하게 계산하기 위해 LS 함수를 거리함수가 되도록 수정해주는 다음의 방정식을 추가하였다

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} = S(\phi)(1 - |\nabla \phi|) \quad (4)$$

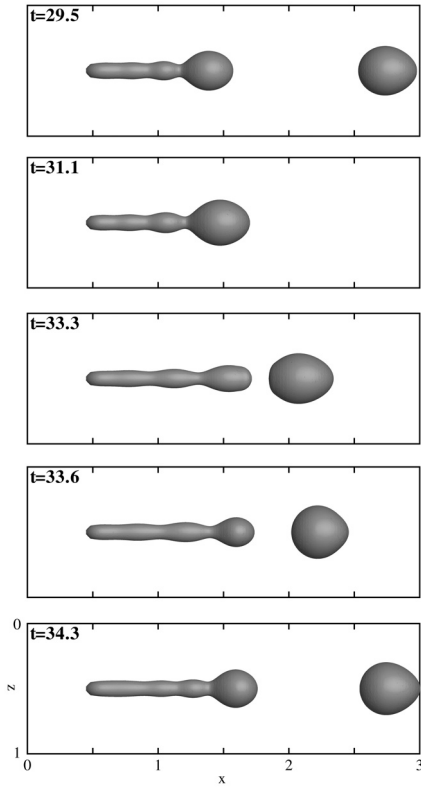


Fig. 3 Droplet growth and sliding pattern for $N_{pore}=1$, $u_a=3$ and $v_w=0.75$

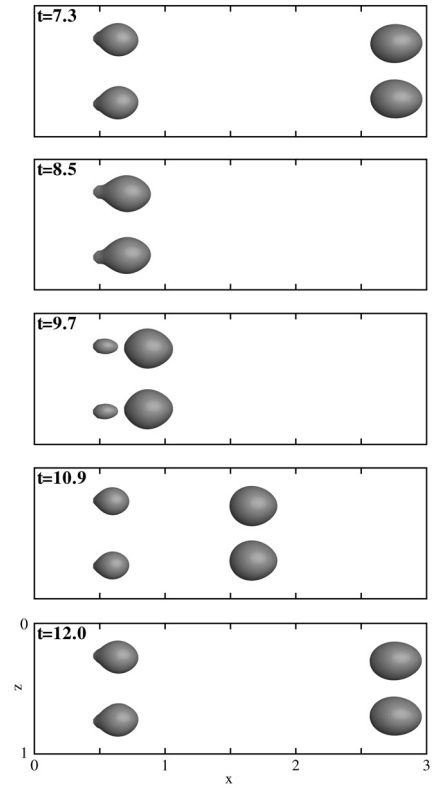


Fig. 5 Droplet growth and sliding pattern for $N_{pore}=2$, $u_a=3$ and $v_w=0.375$

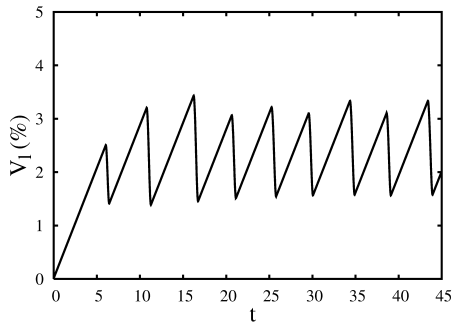


Fig. 4 Time variation of the liquid volume fraction for $N_{pore}=1$, $v_w=0.75$

여기서,

$$S(\phi) = 0 \quad \text{if } |\phi| \leq h/2$$

$$= \frac{\phi}{\sqrt{\phi^2 + h^2}} \quad \text{otherwise} \quad (5)$$

여기서, h 는 격자간격이다. 상경계면 주위에서 0이 될 때까지 제한하는 반복단계를 의미한다

본 연구에서 사용된 경계조건은 다음과 같다(Fig. 1 참조).

입구에서 ($x = 0$),

$$u = u_a, \quad v = w = 0, \quad \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \quad (6)$$

출구에서 ($x = L$),

$$p = 0, \quad \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} = \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \quad (7)$$

벽에서 ($y = 0, H$ or $z = 0, W$),

$$\mathbf{u} = 0, \quad \mathbf{n}_w \cdot \nabla \phi = \cos \varphi \quad (8)$$

바닥면의 기공에서는 항상 액상으로 채워져 있다고 가정하여, $\phi \geq 0$ 의 조건을 추가적으로 적용하였다

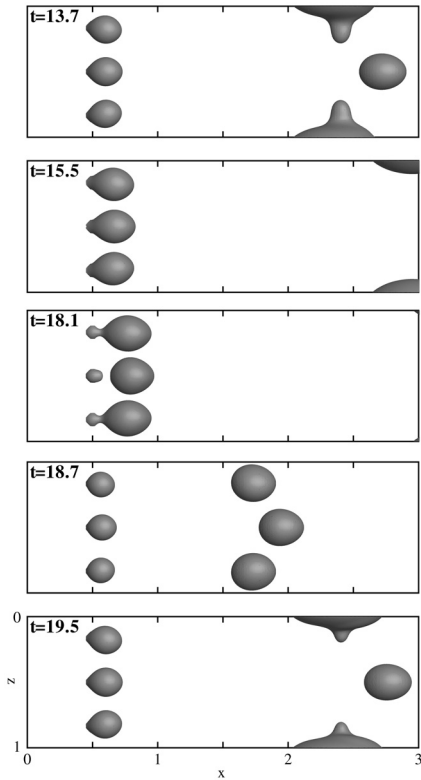


Fig. 6 Droplet growth and sliding pattern for $N_{pore}=3$, $u_a=3$ and $v_w=0.25$

3. 계산결과 및 검토

바닥면에 기공을 포함한 채널 내에서의 액적 거동에 대한 계산을 수행하였다. 본 연구에서 중력의 효과는 무시되었다.

계산에 사용되는 지배방정식은 기준길이 1mm, 기준시간 1ms, 기준속도 1m/s를 이용하여 무차원화 하였다. 계산영역은 Fig. 1과 같으며, 1×0.5 의 단면과 3의 길이를 갖는다. 채널의 단면은 Zhang[1] 등의 고분자전해질형 연료전지 실험과 같은 크기이다. 기공의 지름 $D_p=0.1$ 이며, 기공의 위치는 $x=0.5$, $z=0.5$ 이고, 바닥면의 접촉각은 $j_b=110^\circ$, 나머지 벽들의 접촉각은 $j_s=j_r=40^\circ$ 로 고정시켰으며, 공기의 입구 속도는 $u_a=3$, 기공을 통과하는 물의 속도는 $v_w=0.15\sim 0.75$ 의 범위에서 일정한 유량이 유지되도록 기공 수에 따라 유속을 선택하였다.

우선, 격자 수렴성 검사를 위하여 격자간격 $h=1/64$, $h=1/96$, $h=1/128$ 의 세가지 경우에 대하여 $j_b=110^\circ$, $j_s=j_r=40^\circ$, $u_a=3$, $v_w=0.25$ 로 계산하였다. 그 결과는 Fig. 2와 같으며, 각각의 액체-기체 상경계면(액적의 모양)은 액적이 기공에서 분리되기 직전의 것이다. 격자간격이 좁아질수록 상경계면의 차이가 줄

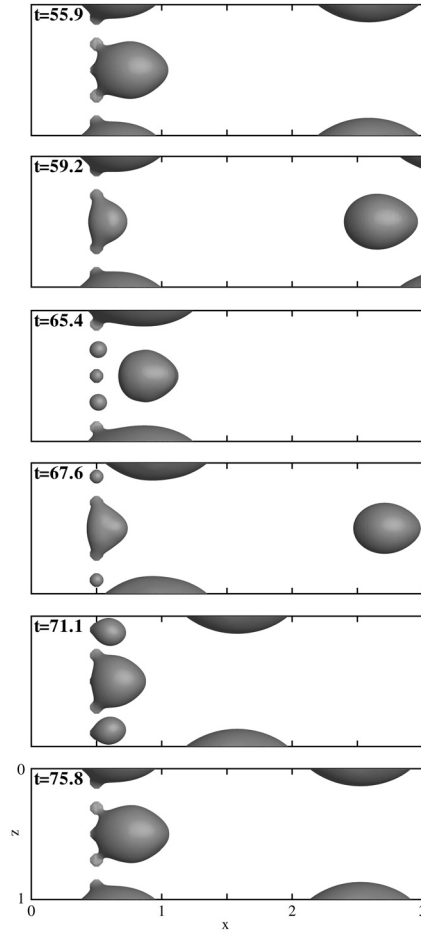


Fig. 7 Droplet growth and sliding pattern for $N_{pore}=5$, $u_a=3$, $v_w=0.15$ and $j_s=40^\circ$

어드는 것을 확인할 수 있다. 기공에서 분리된 액적의 지름은 각각 0.287, 0.335, 0.348으로 가장 좋은 결과를 낸 $1/128$ 과 3.7%의 차이를 보인 $h=1/96$ 으로 본 연구의 계산을 수행함으로써 결과의 정확성을 잃지 않으면서 계산 시간을 단축하도록 하였다. 이어지는 내용은 기공의 개수를 늘려가면서 액적 간의 상호작용을 조사하였으며, 기공의 개수는 N_{pore} 로 표시하였다. 각 계산은 기공 수에 따른 물의 속도를 조절하여 5.9×10^{-9} 의 일정한 유량을 유지하였다.

Fig. 3은 일정한 유량의 물이 하나의 기공으로부터 스며나오는 액적 거동을 계산한 결과로 $v_w=0.75$ 이다. $t=31.3$ 에서 공기의 속도에 의한 항력과 공급되는 유량이 많음으로서 기인하는 표면장력 때문에 기공과 분리되지 않고 액적이 길게 늘어지게 된다. 그러다가 잠시 후인 $t=33.3$ 에는 하나의 액적이 늘어진 액적으로부터 분리되어 따로 이동하는 것을 볼 수 있

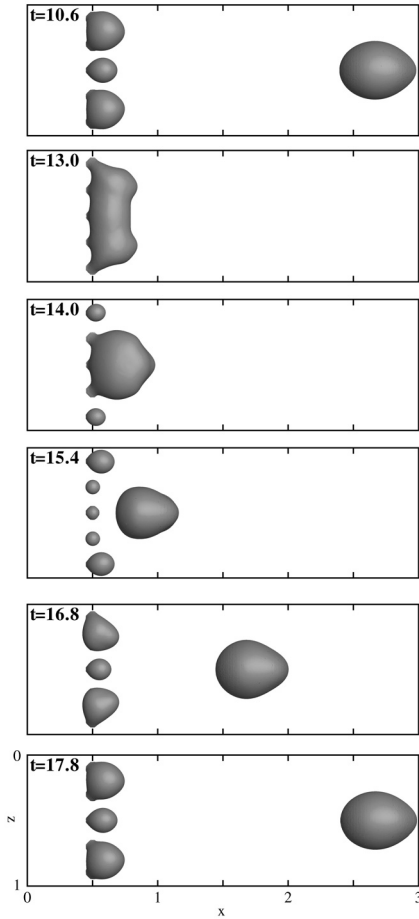


Fig. 8 Droplet growth and sliding pattern for $N_{pore}=5$, $u_a=3$, $v_w=0.15$ and $j_s=110o$

다. 기공에서 나온 액적은 바닥면의 접촉각(110°)을 만족하며 거동하고, 분리된 액적은 $t=34.3$ 에 다시 첫 그림($t=29.5$)와 같이 $x=3$ 에 도달한다. 따라서, 액적의 성장 및 기공으로부터의 분리, 이동은 $29.5 \leq t \leq 34.3$ 의 그림처럼 주기적으로 반복된다. Fig. 4는 채널에서 액적이 차지하는 전체 부피(V_l)를 시간에 따라 나타낸 그래프이다. Fig. 3은 V_l 이 일정한 변화를 보이는 한 구간의 거동을 선택하여 나타낸 것이다. 그래프에

Table 1 Comparison of characteristic variables

N_{pore}	ϕ_s	$V_{l,av}(\%)$	$A_{l,av}(\%)$	τ_p
1	40°	2.41	8.23	4.8
2	40°	2.13	6.65	4.7
3	40°	2.77	7.62	5.8
5	40°	5.50	9.95	20.1
5	110°	3.07	8.30	7.2

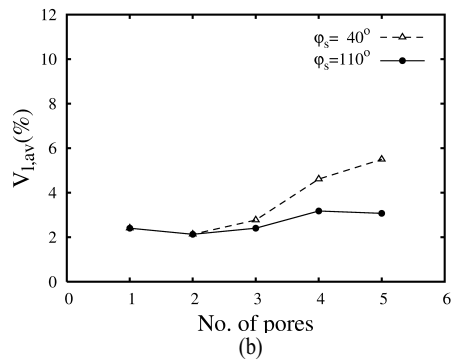
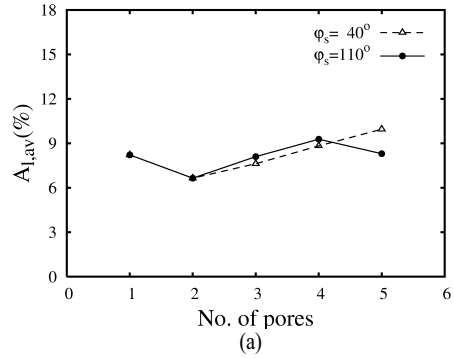


Fig. 9 Dependence of the liquid fractions on the number of pores and side wall contact angle : (a) A_l and (b) V_l

서 볼 수 있듯이 $t=25$ 이 후부터 일정한 주기를 보이며 이때 액적이 차지하는 부피의 평균값($V_{l,av}$)은 2.41%이고 액적이 덮는 전체 바닥면 넓이의 평균값($A_{l,av}$)은 8.23%이다. 일정한 양상을 보이는 구간 내에서 주기의 최고점이 두 개 존재한다. 이는 전체적인 액적 거동에는 영향을 미치지 않지만 분리되는 액적의 크기는 변화시킨다.

Fig. 5는 $N_{pore}=2$ 로 늘어나고, v_w 는 유량을 유지하기 위하여 0.375로 낮추어 계산한 결과를 보여준다. 기공 간의 간격(d_p)은 옆벽과 기공 간의 거리가 균일하도록 $d_p=0.5$ 로 배치하였다. 기공이 하나일 때와는 달리 액적이 길게 늘어나지 않고 어느 정도 성장한 액적은 기공에서 바로 분리된다. 분리되는 액적은 일정한 지름을 갖으며, 4.7의 주기(τ_p)를 보인다. 기공의 수 증가에 따라 더 작은 액적이 더 빠르게 배출되는 것을 확인할 수 있다. 또한, $V_{l,av}$, $A_{l,av}$ 는 Table 1에서 확인할 수 있듯이 각각 11.6, 19.2% 감소했다. 동일한 유량이지만 액적이 성장하는 기공의 수를 늘림으로서 유도된 결과이다.

$N_{pore}=3$ 으로 증가하면 액적은 이동 중에 옆벽과 만나게 된다. 그 결과는 Fig. 6에서 확인할 수 있으며, $u_w=0.25$, $d_p=0.33$ 이다. 액적의 성장과 기공으로부터 분리될 때까지는 옆벽과의 상호작용이 없지만, 채널의 끝 부분에서 접촉각이 작은 옆벽



($j_s=40^\circ$)에 붙어 이동하게 된다. 이로 인하여 $V_{l,av}$ 가 $N_{pore}=1$ 일 때보다 14.9%증가한 값을 보이며, $\tau_p=5.8$ 이다. 액적이 접촉각이 작은 옆벽과 만나면서 액적의 이동속도가 감소하여 액적이 채널 내에 머무는 시간이 증가하여 나타난 결과이다

액적 거동 및 배출에 대한 옆벽의 영향은 Fig. 7,8에서 더 명확히 확인할 수 있다. Fig. 7,8은 $N_{pore}=5$, $u_w=0.15$, $d_p=0.2$ 로 동일하며, 단지 옆벽의 접촉각 j_s 을 각각 40° 와 110° 로 설정하여 계산한 결과이다. $j_s=40^\circ$ 의 경우 매우 복잡한 액적 거동을 보인다. 중앙에 위치한 세 개의 기공에서는 액적 병합에 이은 이동을 볼 수 있는 반면, 옆벽 근처의 기공에서는 중앙의 병합되는 액적과는 별개로 접촉각이 작은 옆벽을 따라 넓게 퍼져서 이동한다. 이 옆벽의 액적은 중앙의 액적보다 이동 속도가 현저히 작다. 하지만 Fig. 8에서 볼 수 있듯이 j_s 가 110° 로 증가하면 액적 거동 및 이동 양상이 달라진다. 옆벽에 가까운 액적이 옆벽에 붙기 보다는 중앙의 액적과 병합하여 하나의 큰 액적을 형성하게 된다. 또한, 액적의 이동 및 배출 과정이 $j_s=110^\circ$ 에서 더 빠름을 알 수 있다.

지금까지의 결과는 Fig. 9에서와 같이 기공의 수와 옆벽의 접촉각에 따른 액적의 부피와 면적 비율로 정리할 수 있다. N_{pore} 이 2이하 일 때, 기공의 수가 증가함에 따라 $V_{l,av}$, $A_{l,av}$ 는 감소한다. 이는 기공의 증가가 물의 제거를 촉진한다는 것을 말해준다. 하지만, 기공의 수가 늘어남에 따라 액적 병합과 같은 액적간의 상호작용 및 옆벽의 영향으로 액적의 배출 정도가 감소한다. 또한, $V_{l,av}$ 의 변화를 보면 $j_s=110^\circ$ 에 비해 $j_s=40^\circ$ 의 기공 수의 증가에 따른 $V_{l,av}$ 의 증가가 확인함을 확인할 수 있다. 이는 친수성 옆벽이 채널 내의 물 제거에 효과적이지 않음을 보여준다.

4. 결 론

본 연구는 sharp-interface 접근법으로 명확한 상경계면이 구현되도록 개선되고, 벽과 기공에서 접촉각 조건을 만족시키도록 변형된 level set 방법을 사용하여 고분자 전해질막 연료전지의 공기 채널 내에서의 액적 거동에 대한 수치적 연구를

수행하였다. 계산 결과로부터, 기공으로부터 스며나오는 물의 유량이 일정하게 유지되면, 물 제거율은 액적간의 상호작용이 활발하지 않은 한 기공의 수가 증가할 수록 개선됨을 알 수 있었다. 하지만 기공 수가 늘어나면서 액적 병합과 같은 액적간의 상호작용 및 성장 혹은 이동 중인 액적이 친수성인 옆벽과 접촉할 때 액적의 이동 속도가 현저히 감소하고 채널 내의 물의 비율이 상승하는 옆벽의 영향이 발생함과 동시에 물 제거율은 감소했다. 또한, 물 제거에 소수성 벽이 친수성 벽에 비해 더 효과적임을 확인하였다.

참고문헌

- [1] 2006, Zhang, F.Y., Yang, X.G. and Wang, C.Y., "Liquid water removal from a polymer electrolyte fuel cell," *J. Electrochem. Soc.*, Vol.153, pp.A225-A232.
- [2] 2007, Ous, T. and Arcoumanis, C., "Visualisation of Water Droplets during the Operation of PEM Fuel Cells," *J. Power Sources*, Vol.173, pp.137-148.
- [3] 2008, Kandlikar, S.G., "Microscale and macroscale aspects of water management challenge in pem fuel cells," *Heat Transfer Engineering*, Vol.29, pp.575-587.
- [4] 2006, Cai, Y.H., Hu, J., Ma, H.P., Ui, B.L. and Zhang, H.M., "Effects of hydrophilic/hydrophobic properties on the water behavior in the micro-channels of a proton exchange membrane fuel cell," *J. PowerSources*, Vol.161, pp.843-848.
- [5] 2006, Mukherjee, A. and Kandlikar, S.G., "A numerical analysis of growing water droplet inside an air supply channel of a PEM fuel cell," *Proc. 2006ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition*, Chicago, IMECE2006 - 14807.
- [6] 2008, Zhu, X., Sui, P.C. and Djilali, N., "Three-dimensional numerical simulations of water droplet dynamics in a pem gas channel," *J. PowerSources*, Vol.181, pp.101-115.