

2차원 정상상태 모델을 이용한 고분자전해질형 연료전지의 모사

정현석 · 하태정 · 김효원 · 한종훈[†]

서울대학교 화학생물공학부
151-742 서울시 관악구 신림동 산56-1
(2007년 12월 20일 접수, 2008년 6월 25일 채택)

Simulation of PEM Fuel Cell with 2D Steady-state Model

Hyunseok Chung, Taejung Ha, Hyowon Kim and Chonghun Han[†]

School of Chemical and Biological Engineering, Seoul National University, San 56-1, Shinlim-dong, Gwanak-gu, Seoul 151-742, Korea
(Received 20 December 2007; accepted 25 June 2008)

요 약

고분자전해질형 연료전지의 구조 및 구성품의 물성에 따른 성능 및 물이동 현상에 관해서 많은 연구가 진행되고 있다. 이들 연구는 대체적으로 연료 전지의 BOP(Balance of plant)를 포함하는 연료전지 시스템에 관한 연구 보다는 단위 전지 및 스택에 관한 연구에 국한되어 왔다. 연료전지의 시스템에 관한 연구들 또한 세부적인 연료전지 내부의 거동에 대해서는 고려하지 않고 있었다. 이는 연료전지의 상세 모델을 이용해 연료전지 시스템에 대해 접근하기 보다는 시스템의 성능 및 동특성에 대한 연구가 주를 이루었기 때문으로 생각된다. 본 연구에서는 연료전지 음극의 수소 배출 가스를 재순환할 경우 연료전지 내부에서의 거동에 미치는 영향에 대해 2차원 정상상태 모델을 이용하여 분석해 보았다. 이를 위해 2차원 정상상태 모델을 개발하였고 이를 실험을 통해 검증하는 작업을 수행하였다. 시뮬레이션은 모델 식의 수정이 자유롭도록 상용패키지를 사용하지 않고 직접 구성한 알고리즘을 통해 수행되었다. 이는 여러 하이브리드 자동차용 연료전지 시스템이 연료전지 배출가스의 재순환을 고려하고 있는 상황에서 연료전지 작동 조건에 관련된 정보를 제공할 수 있다는 의의를 가진다.

Abstract – In most PEM fuel cell research, effects of cell geometry, physical properties of component such as membrane, carbon cloth, catalyst, etc. and water transport phenomena are key issues. The scope of these research was limited to single cell and stack except BOP(Balance of plant) of fuel cell. The research focused on the fuel cell system usually neglect to consider detailed transport phenomena in the cell. The research of the fuel cell system was interested in a system performance and system dynamics. In this paper, the effect of the anode recirculation is calculated using the 2D steady-state model. For this work, 2D steady-state modeling and experiments are performed. For convenience of modifying of model equation, not commercial package but the in-house algorithm was used in simulation. For an vehicle industry, the analysis of the anode recirculation system helps the optimization of operating condition of the fuel cell.

Key words: PEMFC, Modeling, Steady-State Model, Simulation Algorithm

1. 서 론

연료 전지는 다른 에너지 발전 장치에 비해 에너지 밀도 및 효율이 높고 유해한 배출 물질이 없어 친환경적인 차세대 에너지 발전원으로 각광받고 있다. 특히 내연기관에 비해 높은 에너지 효율 때문에 내연기관과 이차전지를 이용하는 하이브리드 자동차 이후의 차세대 운송용 발전원으로서의 사용에 대한 관심이 높아지고 있다. 연료 전지를 구성하는 부품 및 소재에 관련된 분야는 비약적으로 발전하고 있으며 이에 따라 연료전지 시스템의 설계에 대한 관심도 높아지고 있다. 본 연구에서는 연료 전지 내부에서 일어나는

여러 가지 전달 현상 및 전기화학 현상에 대한 물리적 모델을 개발하고 이를 시뮬레이션 결과와 실험 결과 비교를 통해 검증한다. 또한 수소 재순환을 고려한 연료 전지 시스템 모델을 구성하고 이를 이용해 수소 재순환이 연료 전지의 성능에 끼치는 영향에 대해 분석해 본다.

2. 실험 및 모델 개발

본 연구에서 초점을 맞추고 있는 연료 전지 시스템에서 수소 재순환의 영향에 대한 분석하기 위해 연료 전지 시스템을 구성하였고, 연료 전지 2차원 정상상태 모델 및 시스템 모델을 개발하였다.

[†]To whom correspondence should be addressed.
E-mail: chhan@snu.ac.kr

2-1. 실험

실험은 자체 제작한 단위 전지를 통해 이루어 졌다. MEA (Membrane/Electrode Assembly)는 고어(Gore)사의 PRIMeA를 사용하였고, 유로 형상은 평사형(parallel serpentine) 구조이다. 단위 전지의 크기는 7 cm×7 cm로 총 50 cm²이며, 가슴을 위해서 퍼마 퓨어(Perma Pure)사의 가슴기를 사용하였다.

2-2. 모델링

많은 연구자들에 의해 고분자 전해질형 연료전지의 설계에 초점을 맞춘 모델링이 수행되어 왔다[1]. 특히 2차원 정상상태 모델을 통한 내부의 단위전지의 모델링이 활발히 이루어져왔다[2, 3]. 이후 보다 정밀한 모델들이 개발되어 이해하기 어려운 현상까지 분석이 가능해졌으나[4, 5] 계산량이 방대하기 때문에 본 연구에서는 기본적으로 2차원 평면상에서 정상상태임을 가정한 모델을 사용하였다. 유로 내부의 유동은 유선형 흐름으로 가정하였다. 본 연구에서 대상으로 하는 2차원 연료전지의 구조도는 Fig. 1에 나타내었다. 단위전지를 총 7개의 단으로 나누고 전체를 하나의 도메인으로 구성하였다. 1번 단은 음극의 유로로 가슴된 수소 기체가 자유 유로로 흐르게 된다. 2번 단은 음극의 가스확산층으로 1번 단의 가슴된 수소 기체가 확산과 대류 현상으로 3번 촉매 단으로 전달시키는 역할을 한다. 3번 음극 촉매층에서는 2번 단을 통해 전달된 수소가 양성자와 전자로 쪼개지게 반응이 일어나게 된다. 여기서 생성된 전자는 외부 회로를 통해 5번 양극 촉매층으로 이동한다. 4번 멤브레인 단에서는 3번 음극 촉매층의 반응으로 생성된 양성자만을 5번 양극 촉매층으로 선택적으로 투과시키는 전달 현상이 일어나게 된다. 7번 양극 유로에는 가슴된 공기가 흐르게 된다. 여기서 흐르는 가슴된 공기는 확산과 대류 현상에 의해 6번 가스확산층을 통해 5번 양극 촉매층으로 전달된다. 5번 양극 촉매층에서는 멤브레인 단을 통해 전달된 양성자와 외부 회로를 통해 전달된 전자 그리고 양극 기체확산층을 통해 전달된 산소가 물을 생성하는 반응이 일어난다. 모델을 여러 개의 도메인으로 구성하는 경우도 있지만 이는 시뮬레이션 수행 시 들어가는 계산 작업량이 과도하다는 단점이 있어 본 연구에서는 하나의 도메인으로 전체의 모델식을 포함하도록 구성하여 전체 단을 동시에 계산하였다[3].

모델의 지배 방정식은 기본적으로 무차원 전달현상식을 이용하였고 각 단의 특성에 따라 나비에-스톡스(Navier-Stokes) 식에 생성항을 추가하는 방식으로 모델을 구성하였다. 일례로 기체 유로 내에서의 유동에 대한 속도, 농도 및 전위 분포 현상은 다음과 같은 지배방정식으로 표현되었다[6, 7].

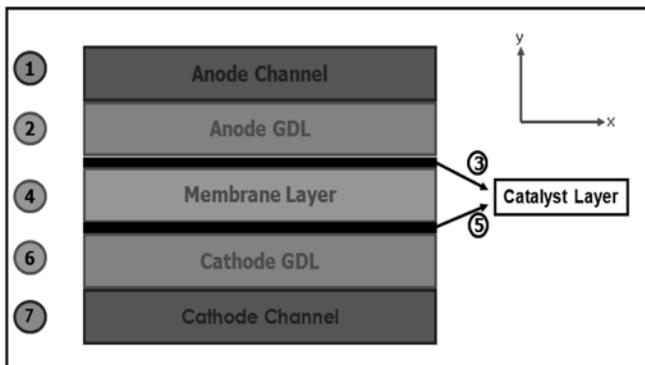


Fig. 1. Structure of the 2D model.

연속 방정식

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0$$

- x: 수평 방향 축
- y: 수직 방향 축
- u: 수평 방향 속도(m/s)
- v: 수직 방향 속도(m/s)

운동량 보존 방정식

$$\frac{1}{\varepsilon} \rho \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{\varepsilon} \rho \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) = -\varepsilon \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + S_x$$

- ε: 공극률
- p: 압력(kPa)
- S_i: 생성항

성분 보존 방정식

$$\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial X_k}{\partial t} + \frac{1}{\varepsilon} \left(u \frac{\partial X_k}{\partial x} + v \frac{\partial X_k}{\partial y} \right) = \varepsilon D_k \left(\frac{\partial^2 X_k}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 X_k}{\partial y^2} \right) + S_k$$

- X_i: 성분 i의 몰 분율
- D_k: 확산 계수

전하량 보존 방정식

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\sigma_m \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\sigma_m \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) + S_\phi = 0$$

- σ_m: 전해질막의 양성자 전도도(1/Ω · m)
- Φ: 전기화학 퍼텐셜(V)

연속 방정식과 운동량 보존 방정식은 속도 분포에 대한 정보를 제공한다. 성분 보존 방정식은 조성에 대한 정보를 제공하고, 전하량 보존 방정식을 통해 전위 분포를 계산한다. 연속 방정식을 제외

Table 1. Source terms for the governing equations

	S _x	S _y
Channel	0	0
GDL	$-\frac{\mu}{K} \varepsilon^2 u$	$-\frac{\mu}{K} \varepsilon^2 v$
CL	$-\frac{\mu}{K_p} \varepsilon_c u + E_\phi \frac{\partial \Phi}{\partial x}$	$-\frac{\mu}{K_p} \varepsilon_c u + E_\phi \frac{\partial \Phi}{\partial y}$
Membrane	$-\frac{\mu}{K_p} \varepsilon_m u + E_\phi \frac{\partial \Phi}{\partial x}$	$-\frac{\mu}{K_p} \varepsilon_m u + E_\phi \frac{\partial \Phi}{\partial y}$
	S _k	S _φ
Channel	0	0
GDL	0	0
	For H ₂ $-\frac{j_a}{2F c_{total}}$	
CL	For H ₂ O $-\frac{j_c}{2F c_{total}}$	For Anode j _a For Cathode j _c
	For O ₂ $-\frac{j_c}{4F c_{total}}$	
Membrane	0	0

한 각 방정식의 마지막 항은 생성항으로 각 단의 특성을 반영하도록 구성한 것으로 Table 1에 정리하였다.

위의 지배방정식들이 모두 풀리게 되면 지역 전류 밀도를 아래 식을 통하여 구할 수 있다.

$$i(x) = \sigma_m \frac{\partial \Phi_e}{\partial x} \Big|_{\text{경계면}}$$

i: 전류(A)

평균 전류 밀도를 구하는 식은 다음과 같다.

$$i_{avg} = \frac{1}{L} \int_{mem} i(x) dx$$

L: 유로길이(m)

전압은 이상적인 상태의 열역학적으로 구할 수 있는 전압값에서 다음의 전압강하 요인들을 고려하여 계산한다.

활성에 의한 전압 강하:

$$\nabla V_{act,c} = E_{r,c} - E_c = \frac{RT}{\alpha_c F} \ln\left(\frac{i}{i_{o,c}}\right)$$

$$\nabla V_{act,a} = E_a - E_{r,a} = \frac{RT}{\alpha_a F} \ln\left(\frac{i}{i_{o,a}}\right)$$

α : 전이 계수

저항에 의한 전압 강하:

$$\Delta V_{ohm} = iR_i$$

R_i : 총 내부 저항(Ω)

물질 전달에 의한 전압 강하:

$$\Delta V_{conc} = \frac{RT}{nF} \ln\left(\frac{i_L}{i_L - i}\right)$$

R: 기체상수(L · atm/mol · K)

T: 단위전지 온도(K)

F: 패러데이 상수(C/mol)

i_L : 한계 전류(A)

최종적으로 단위전지의 전압은 다음 식에 의해 계산된다.

$$V_{cell} = E_r - (\Delta V_{act} + \Delta V_{conc})_a - (\Delta V_{act} + \Delta V_{conc})_c - \Delta V_{ohm}$$

모델링에 사용한 파라미터들은 Table 2에 정리하였다.

연료전지 시스템 모델의 구성도는 Fig. 2에 나타내었다.

연료전지 시스템 모델은 연료전지 정상상태 구동 시 각 흐름별 유량과 구성 성분비를 계산하도록 되어 있다. 배출되는 음극의 배출가스는 전부 재순환하는 것으로 가정하였다. 연료전지 시스템 모델에 사용된 수치식은 다음과 같다.

단위전지 운전 전류 밀도를 계산하고,

$$i = \frac{j \times A_{cell}}{i_{conv}}$$

A_{cell} : 단위전지 면적(m^2)

Table 2. The Parameters used in the PEMFC modeling

Parameter	Symbol	Value	Unit
Channel length	L_{CHL}	42	cm
Channel height	H_{CHL}	0.1	cm
Channel width	W_{CHL}	0.3	cm
GDL thickness	t_{GDL}	0.025	cm
Catalyst layer thickness	t_{CTL}	0.005	cm
Membrane thickness	t_{MEM}	0.025	cm
Air pressure	P_c	1	atm
Fuel pressure	P_a	1	atm
Relative humidity of inlet fuel	ϕ_c	100	%
Relative humidity of inlet air	ϕ_a	100	%
Anode temperature	T_a	353.15	K
Cathode temperature	T_c	353.15	K
Viscosity	μ	1.0e-4	g/cm·sec
Oxygen diffusivity in gas	$D_{O_2, gas}$	1.0e-5	cm ² /sec
Hydrogen diffusivity in gas	$D_{H_2, gas}$	2.63e-2	cm ² /sec
Vapor H ₂ O diffusivity in gas	$D_{H_2O vap, gas}$	6.0e-2	cm ² /sec
Dissolved oxygen diffusivity in active layer and membrane	$D_{O_2, elec}$	1.0e-5	cm ² /sec
Dissolved hydrogen diffusivity in active layer and membrane	$D_{H_2, elec}$	2.59e-6	cm ² /sec
Dissolved vapor water diffusivity in active layer and membrane	$D_{H_2O vap, elec}$	2.0e-5	cm ² /sec
Porosity in GDL	ϵ_{GDL}	0.4	-
Porosity in catalyst layer	ϵ_{CTL}	0.28	-
Anodic transfer coefficient in anode	α_a^a	0.5	-
Cathodic transfer coefficient in anode	α_a^c	0.5	-
Anodic transfer coefficient in cathode	α_c^a	0	-
Cathodic transfer coefficient in cathode	α_c^c	1	-

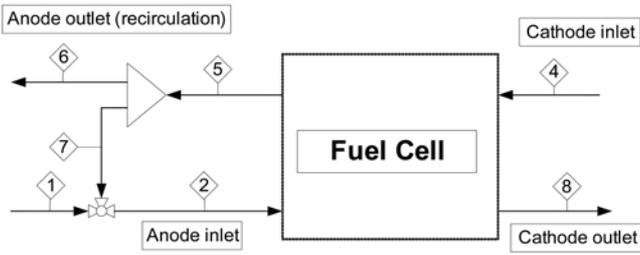


Fig. 2. Structure of the PEMFC system model.

다음 식을 사용해 각 기체의 부피 유량을 계산한다.

$$v_{in,H_2,a} = \frac{R \times T_{air}}{P_{atm}} \left(\frac{i}{n(H_2)F} \right) \times \text{Stoic}_a$$

$$v_{in,air,c} = \frac{R \times T_{air}}{P_{atm}} \left(\frac{i}{n(O_2)F} \right) \times \text{Stoic}_c \times \text{Stoic}_{air,O_2}$$

Stoic_i: 양론비

음극과 양극의 수증기 질량 유량 계산은 다음과 같다.

$$\dot{m}_{in,vapor,a} = \frac{P_{atm} \times M_w(H_2O) \times v_{in,vapor,a}}{R \times (T_{in,a} + 273.15)}$$

$$\dot{m}_{in,vapor,c} = \frac{P_{atm} \times M_w(H_2O) \times v_{in,vapor,c}}{R \times (T_{in,c} + 273.15)}$$

M_w: 분자량

단위 전지 부피 유량 계산은 다음과 같다.

$$v_{vapor,cell} = \frac{P_{atm} \times T_{cell}}{\left(\frac{P_{atm}}{P_{kPa}} + \frac{P_{vapor,c}}{P_{kPa}} \right)} \times \left(\frac{i}{n(H_2)F} \right)$$

이외에도 물질 수지를 기반으로 하는 식들로 연료전지 시스템 모델을 구성하였다[8].

2-3. 시뮬레이션

이상 개발한 모델을 계산하기 위해 전산유체동역학(CFD) 시뮬레이션을 수행하였다. 전산유체동역학 시뮬레이션을 위해서 유한체적법에 기반한 계산 알고리즘을 개발하였고 그 내용은 부-알고리즘과 주-알고리즘의 순서로 설명한다.

2D 정상상태 이론 모델식들은 하나의 편미분 방정식 군(set)이다. 이의 계산을 위해서는 starCD, Fluent package for PEMFC, COMSOL Multiphysics 등의 상용 소프트웨어를 사용하는 방법과 독자적인 수치해석 기술을 바탕으로 코드를 개발하는 두가지 방법이 있다. 상용 소프트웨어를 사용해 편미분방정식들을 풀 경우 연구 대상이 되는 모델의 수정이 어렵고 정확도 또한 보장하기 힘들다. 따라서 본 연구에서는 독자적인 알고리즘을 개발하여 개발한 2D정상상태 이론 모델식을 시뮬레이션 하였다. 알고리즘 개발에 앞서 여러 가지 방법으로 선행 계산을 해 본 결과 유한차분법(Finite-Difference Method)만으로는 대상 PDE set를 완벽하게 풀기 어렵다는 결론을 얻었다. 이에 유한체적법(Finite-Volume Method)를 기반으로 하는 SIMPLE 알고리즘을 개선해 대상 PEMFC 모델식을 시뮬레이션하기 위한 알고리즘을 다음과 같이 개발하였다[9].

기본적으로 알고리즘은 부-알고리즘과 주-알고리즘으로 구성되

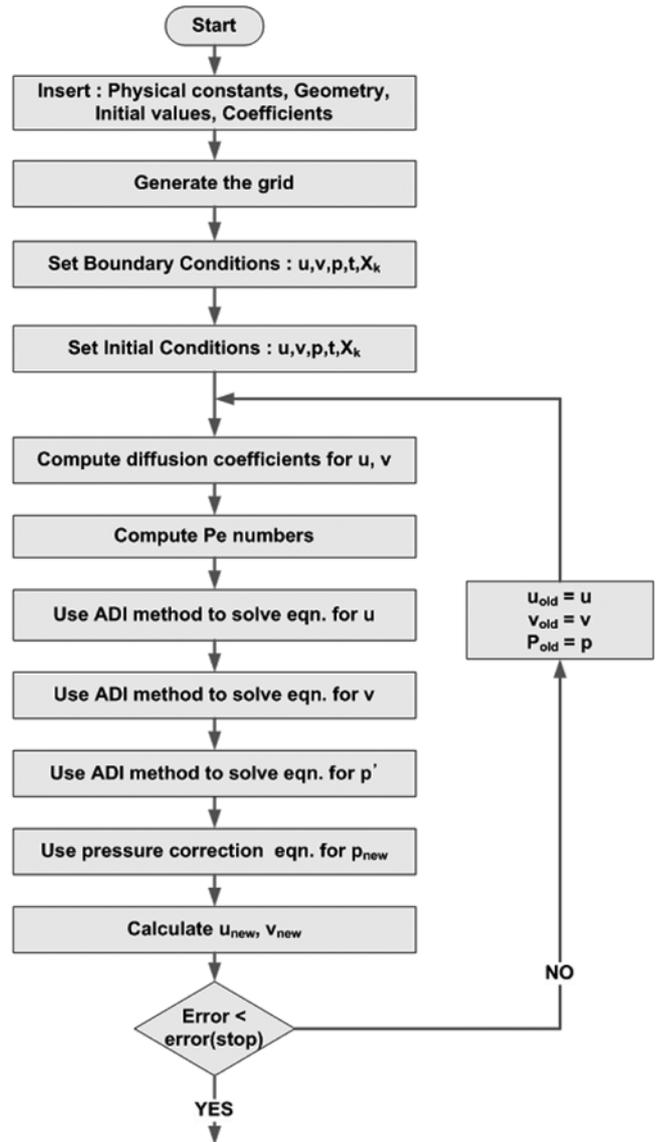


Fig. 3. Structure of the main-algorithm.

어 있고, 이 중 주-알고리즘은 Fig. 3과 같다.

주-알고리즘은 처음에 주요 물리적 상수와 구조에 대한 정보, 초기값, 주요 계수값들을 넣어 준 후 유한체적법을 사용할 수 있도록 주요 격자점과 격자구조를 만들게 된다. 이 후 경계 조건과 입력 조건을 설정하고 운동량식을 풀어 속도장과 압력장에 대한 정보를 계산한다. 다음으로 물질식과 전하식을 푸는 작업을 반복하며 수렴된 해를 얻도록 구성되어 있다. 부-알고리즘은 Fig. 4와 같다

부-알고리즘은 ADI(Alternating-Direction Implicit) 방법을 기반으로 하여 운동량식과 물질식을 x축과 y축에 따라 번갈아 가며 implicit하게 계산을 하게 되어 있고, 반복 계산을 수행하다 계산 에러가 중단 기준(stopping criteria)로 설정해 놓은 에러 수치가 10⁻⁴ 이하의 값을 가질 경우 수렴으로 판단하여 반복 계산을 멈추도록 구성되어 있다.

3. 결과 및 토의

단위전지 모델의 시뮬레이션 결과는 실험이 가능한 성능 곡선에

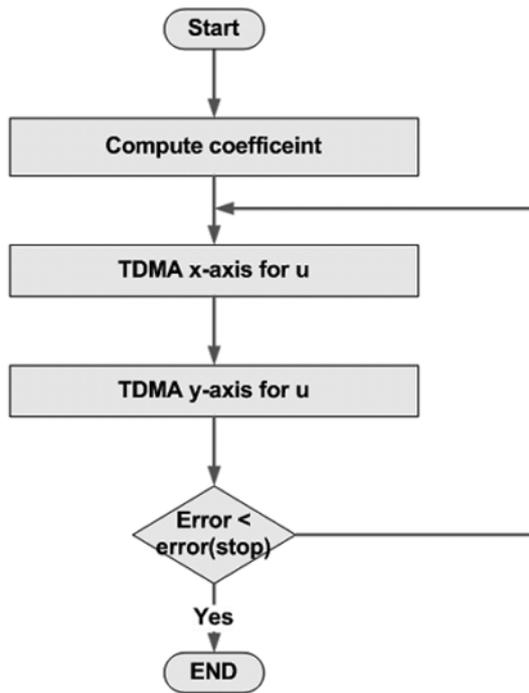


Fig. 4. Structure of the sub-algorithm using ADI method.

Table 3. The conditions of an experiment

Temperature	353.15 K
Anode flow rate	0.456 lpm
Cathode flow rate	1.450 lpm
Anode stoic.	X 1.5
Cathode stoic.	X 2
Pressure	1 atm

기반하여 검증하였다. 시뮬레이션은 실험과 동일한 유량, 온도, 기압 조건하에서 수행되었고 실험 조건은 Table 3과 같다.

3-1. 모델 검증

전류-전압 곡선의 실험 결과와 시뮬레이션 결과의 비교는 Fig. 5에 나타내었다.

Fig. 5의 결과 비교를 보면 전류 밀도가 낮은 0.0~0.1 A/cm² 영역에서 전류 밀도가 증가함에 따라 전압이 급격하게 감소한다. 이는 전극 표면에서의 느린 반응에 의한 활성화손실(activation loss)이 크기 때문인데 이를 본 연구에서 개발한 모델이 잘 반영하고 있음을 볼 수 있다. 다음으로 전류 밀도 0.1~1.0 A/cm² 영역에서는 전극 및 전기 접촉 저항과 이온 저항의 합에 해당하는 음 저항에 의해 전류 밀도가 증가함에 따라 전압이 일정한 기울기를 가지고 감소하는 것을 볼 수 있다. 이 또한 본 연구에서 개발한 정상상태 이론 모델에 잘 반영되어 있음을 확인할 수 있다. 전류-전압 곡선의 실험 결과와 시뮬레이션 결과가 거의 일치하기 때문에 본 연구에서 개발한 정상상태 이론 모델이 높은 정확도를 가진다고 신뢰할 수 있다.

3-2. 기체 확산층 및 유로에서의 기체 분포

실험으로 측정이 불가능한 유로 내의 속도 분포, 압력 분포, 조성 분포에 대한 시뮬레이션 결과의 신뢰성은 전류-전압 곡선으로

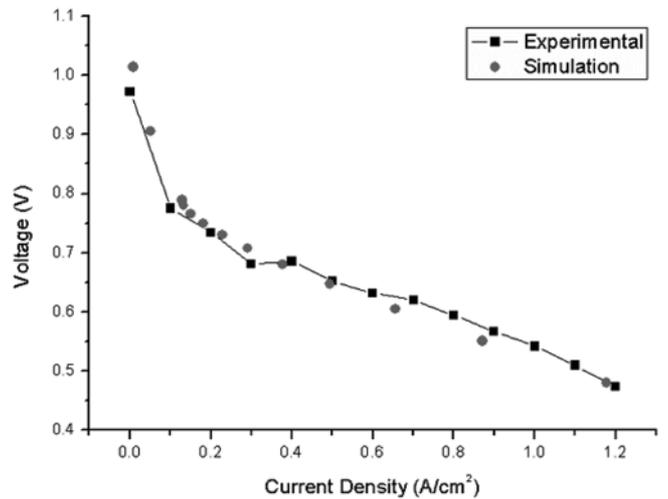


Fig. 5. Experimental polarization curve with simulation result.

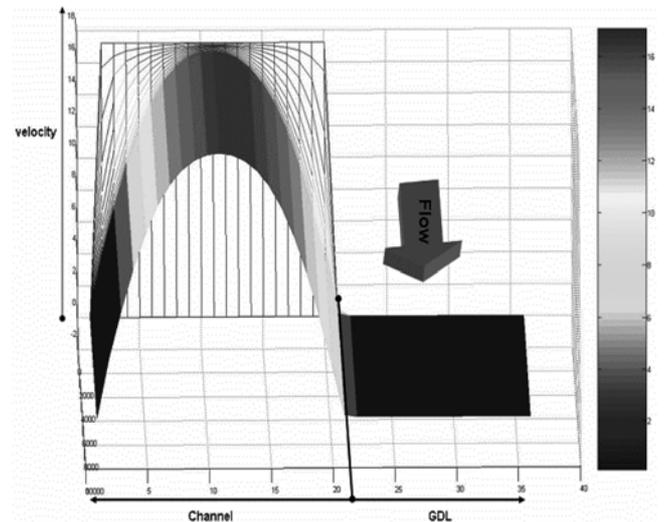


Fig. 6. Distribution of x-axis velocity through channel-GDL of anode.

검증된 모델의 신뢰성에 기반하여 판단한다. 음극 유로와 가스 확산층에서의 x-방향 속도에 대한 시뮬레이션 결과는 Fig. 6과 같다.

Fig. 6의 결과를 보면 음극 유로에서 속도 분포는 짧은 도입부를 지나면 충분히 전개되어 출구까지 거의 일정한 속도의 포물형(parabolic) 속도 분포를 가진다는 것을 알 수 있다.

기체 확산층에서의 속도는 유로의 속도에 비해 절대값이 적어 거의 속도가 없는 것처럼 보이지만 실제로는 속도 분포를 가지고 있다.

기체 확산층에서의 속도 분포를 좀 더 확대한 결과는 Fig. 7과 같다.

Fig. 7의 결과를 보면 음극 유로에서 높은 값인 x-방향 속도가 다공성 중간체인 기체확산층으로 힘이 전달되면서 속도가 매우 급격하게 감소함을 알 수 있다.

양극에서의 압력 분포는 Fig. 8과 같다.

Fig. 8을 보면 양극 유로에서는 출구단까지 일정한 기울기를 가지고 감소하여 최종적으로는 약 2.5% 압력 강하가 있음을 알 수 있다. 반면 양극 유로에서 양극 기체확산층을 지나 양극 촉매층으로 갈수록 압력이 상대적으로 급격한 기울기로 감소함을 알 수

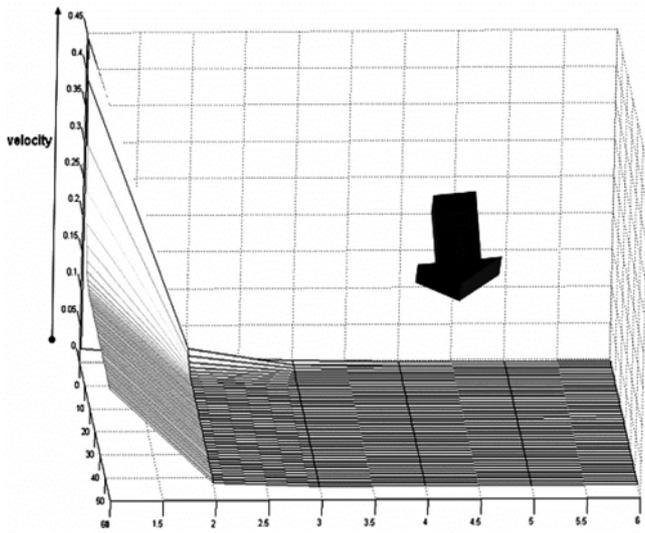


Fig. 7. Distribution of x-axis velocity at the entrance region of anode GDL.

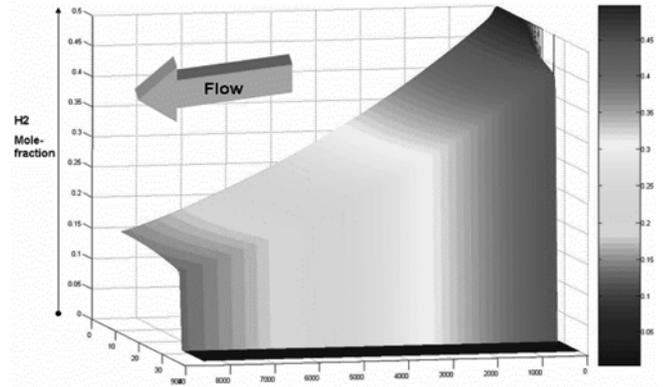


Fig. 9. Distribution of hydrogen fraction through channel-GDL of anode.

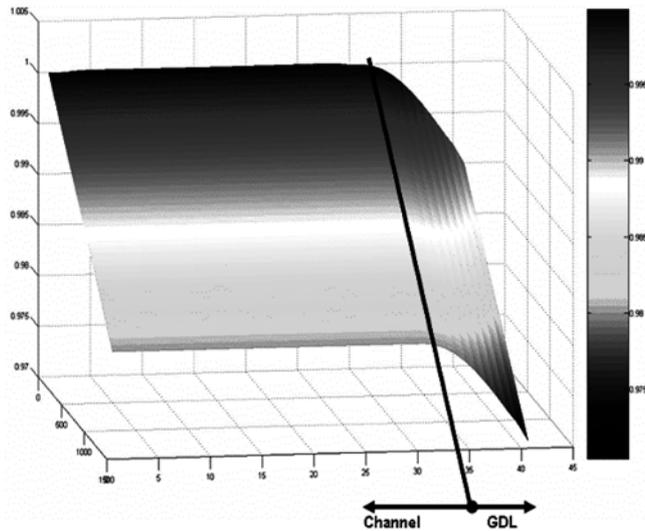


Fig. 8. Distribution of pressure through channel-GDL of cathode.

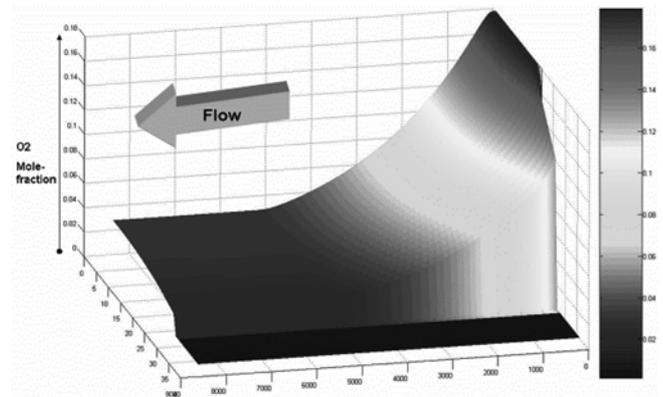


Fig. 10. Distribution of oxygen molar fraction through channel-GDL of cathode.

다. 이는 양극 촉매층에서 산소가 소모되는 데 반해 다공성 중간 체인 기체 확산층을 통한 산소의 공급 속도가 빠르지 못하기 때문 이라고 예상된다.

음극 유류와 음극 기체확산층에서의 수소 농도 분포는 Fig. 9에 나타내었다.

양극 유류와 양극 기체 확산층에서의 산소 기체 분포는 Fig. 10에 나타내었다.

Fig. 9와 Fig. 10을 비교해 보면 음극에서는 수소의 농도가 출구단까지 많이 감소하지 않는 데 반해 양극에서는 산소의 농도가 출구단으로 갈수록 감소하여 최종 출구에서는 초기 농도에 비해 매우 낮은 농도 분포를 가지게 됨을 알 수 있다. 이는 음극의 경우 가습된 수소가 들어가기 때문에 상대적으로 수소의 농도가 높는데 반해 양극의 산소의 경우 가습된 공기의 형태로 들어가기 때문에 산소는 반응에 의해 소모되고 반응에 참여하지 않는 질소는 양극 기체에서 차지하는 비율이 높아지기 때문이다.

4. 결 론

전류-전압 곡선의 결과 비교에서 보이듯이 본 연구에서 개발한 정상상태 이론 모델은 신뢰할 만한 수준이다. 이 모델은 연료 전지 내에서의 유동 현상 및 시스템 모델과의 연동이 가능하기 때문에 이를 이용하면 수소 재순환에 따른 연료전지 내부의 거동 변화 및 성능 변화에 대한 유용한 정보를 얻을 수 있다. 또한 하나의 도메인으로 구성된 일련의 편미분 방정식 군으로 이루어져 있는 모델을 계산할 수 있는 유한체적법에 근거한 알고리즘을 개발하였다. 이 연구 결과는 연료전지의 운전 조건 최적화에 필요한 동적 모델의 기반이 되고 기체-액상의 2상에 대한 모델로 수정될 경우 연료 전지의 설계에도 이용될 수 있다.

감 사

본 연구는 산업자원부 신재생에너지기술개발사업(2005-N-FC12-P-01-3-040-2007)과 산업자원부 국가청정생산지원센터(KNCPC)와 서울대학교 화공분야 연구인력양성 사업단(BK21), 한국과학기술 연구원(KIST), 에너지관리공단(KEMCO, 에너지 자원기술개발 사업), 한국과학재단 (KOSEF, 특정기초연구, R01-2004-000-10345-0), 한국과학재단 지정 포항공과대학교 차세대 바이오 환경기술연구센터(AEBRC, R11-2003-006)의 연구 지원으로 수행되었으며 이에 감사드립니다.

참고문헌

1. Springer, T. E., Zawodzinski, T. A. and Gottesfeld, S., "Polymer Electrolyte Fuel Cell Model," *J. Electrochem. Soc.*, **138**(8), 2334-2348(1991).
2. Nguyen, P. T., Berning, T. and Djilali, N., "Computational Model of a PEM Fuel Cell with Serpentine Gas Flow Channels," *J. Power Sources*, **130**, 149-157(2004).
3. Gurau, V., Liu, H. and Kakac, S., "Two-Dimensional Model for Proton Exchange Membrane Fuel Cells," *AIChE J.*, **44**(11), 2410-2422(1998).
4. Um, S. K., Wang, C. Y. and Chen, K. S., "Computational Fluid Dynamics Modeling of Proton Exchange Membrane Fuel Cells," *J. Electrochem. Soc.*, **147**(12), 4485-4493(2000).
5. Siegel, N. P., Ellis, M.W., Nelson, D. J. and Spakovsky, M. R. von, "Single Domain PEMFC Model Based on Agglomerate Catalyst Geometry," *J. Power Sources*, **115**, 81-89(2003).
6. Bird, R. B., Stewart, W. E. and Lightfoot, E. N., *Transport Phenomena*, John Wiley & Sons, Inc.(1960).
7. Sunden, B., Faghri, M., *Transport Phenomena in Fuel Cells*, WIT Press(2005).
8. Himmelblau, D. M., *Basic Principles and Calculations in Chemical Engineering*, Prentice-Hall International, Inc.(1996)
9. Patankar, S. V., *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere Publishing Corporation(1980).