<학술논문>

DOI:10.3795/KSME-B.2009.33.8.604

가습조건이 사형유로를 채택한 고분자 전해질 연료전지의 성능에 미치는 영향에 대한 전산유체역학 해석 연구

오규환^{*} • 이규진[†] • 남진현^{**} • 김찬중^{*} (2009년 4월 24일 접수, 2009년 7월 1일 수정, 2009년 7월 8일 심사완료)

Computational Fluid Dynamics Study on Performance Variation of PEMFC with Serpentine Flow Fields According to Humidity Condition

Gyu Hwan Oh, Kyu-Jin Lee, Jin Hyun Nam and Charn-Jung Kim

Key Words: PEMFC(고분자 전해질 연료전지), Relative Humidity(상대습도), Serpentine Flow Field(사형유로), Current Density Distribution(전류밀도 분포)

Abstract

Water management has been recognized as a crucial factor for achieving better performance and stability in polymer electrolyte membrane fuel cells (PEMFCs). Proper water management should provide favorable water conditions, including the local humidity, membrane water content, and liquid water saturation in PEMFCs, thereby leading to more uniform electrochemical reaction and current generation. In this study, computational fluid dynamics (CFD) simulation was conducted to investigate the effects of the cathode relative humidity (RH) on the performance of a 3 by 3 cm² PEMFC with serpentine flow fields. The CFD results showed that the best performance of the PEMFC was obtained for the cathode RH of 80%, but the performance variation was small for the cathode RH range of 60~100%. However, the loss of the PEMFC performance was significant when the cathode RH was reduced below 40%. The reason for such performance variation was investigated through the detailed inspection of ohmic loss, activation and concentration overpotential, and water and current distributions.

| 기호설명 | $mass_n$ | : 화학종 <i>n</i> 의 질량, kg |
|---|---------------|--|
| A : 반응면적 | p_i | : 화학종 <i>i</i> 의 압력, Pa |
| F : Faraday 상수, 96.485 C/mol | s | : 생성항 |
| h : 엔탈피, J | T | : 온도, K |
| <i>h_{fg}</i> : 잠열, J | 그리스语 | 문자 |
| ${\it \Delta} h_{form}$: 반응엔탈피 | α | : 유효 전기삼투계수 |
| <i>I</i> : 전류밀도, A/cm ² | ε | : 공극률 |
| J _i : 화학종 <i>i</i> 의 질량플럭스, kg/m ² -s | η | : 과전압, V |
| <i>K</i> : 투과율, m ² | σ_m | : 전해막 이온 전도율, S/m |
| M_i : 화학종 i의 분자량, kg/mol m_i : 화학종 i의 질량분율 | 상/하첨 a/c | 자 기호 · 여료금/공기금 |
| ♦ 책임저자, 회원, 서울대학교 기계항공공학부 | $\frac{u}{v}$ | · 근묘 (/ 0 /) (·) (·) (·) (·) (·) (·) (·) |
| E-mail : tick2@snu.ac.kr TEL : (02)880-1656 FAX : (02)883-0179 * 서울대학교 기계항공공학부 ** 국민대학교 기계차동차공학부 | e/p sat | 경계면/도메인내부 포화상태 |
| | | |

1. 서 론

연료전지는 고효율, 친환경, 무소음의 장점을 가진 에너지 변환장치로 전세계적으로 다양한 연 구와 개발이 진행되고 있다. 특히 고분자 전해질 연료전지(PEMFC)는 현재 가장 발전된 연료전지 기술의 하나로 자동차용 및 휴대용 전원으로서 적용이 활발히 연구되고 있다. 수소이온 전도도 를 가지는 고분자막(PEM)에 기초한 고분자 전해 질 연료전지는 연료극(anode)과 공기극(cathode)에 공급된 수소와 산소를 전기화학 반응을 통해 직 접 결합시켜 전기를 생산하며 부산물로는 단지 열과 물을 배출한다.^(1,2)

전기화학 반응으로 생성된 수분은 가습을 통해 고분자막의 이온전도도를 증가시키며 그 결과 연 료전지의 성능을 향상시키는 효과를 가진다. 그 러나 수분생성량이 많은 고전류밀도 운전조건에 서는 촉매층(CL), 확산층(GDL) 및 유로에 액상의 물이 과도하게 존재하여 물질전달을 방해하는 등 연료전지 성능을 저해하는 효과가 나타내기도 한 다. 따라서 적절한 수분관리(water management)는 고분자 전해질 연료전지의 출력 및 성능 향상을 위해 해결해야 할 중요한 문제로서 현재 이슈가 되고 있다.^(3,4)

다양한 실험적, 해석적 연구들이 향상된 고분 자 전해질 연료전지의 수분관리를 위하여 수행되 었다. Jeong 등⁽⁵⁾은 공기극 입구에서의 상대습도 (relative humidity)를 변화시킴으로써 전기화학반 응으로 생성된 수분의 효과를 조절하는 실험적 연구를 진행하였다. Owejan 등⁽⁶⁾은 기체 유로 및 확산층의 특성이 고분자 전해질 연료전지 내의 수분 축적에 미치는 영향을 연구하였다. 또한 Weng 등⁽⁷⁾은 저가습 조건이 연료전지 성능 및 출 력 안정성에 미치는 영향을 실험적으로 연구하였 다. 해석적 연구로 Shimpalee 등⁽⁸⁾은 상용 크기의 대면적 고분자 전해질 연료전지에서의 물과 전류 밀도 분포를 전산유체역학(CFD) 툴을 이용하여 고찰한 바 있다. 이동율 등⁽⁹⁾은 평행유로(parallel flow field)를 가진 고분자 전해질 연료전지의 가 습조건이 성능에 미치는 영향을 연구하였으며, Ferng과 Su⁽¹⁰⁾는 사형유로(serpentine flow field)를 채택한 고분자 전해질 연료전지가 평행유로를 채 택한 경우 보다 성능이 향상됨을 전류밀도, 농도 분포의 CFD 해석결과를 통해 보였다.

Table 1 Geometrical parameters.

| Parameters | Value |
|------------------|---------------------------|
| Channel width | 1 mm |
| Channel height | 0.8 mm |
| Rib width | 1 mm |
| Active area | $3 \times 3 \text{ cm}^2$ |
| GDL thickness | 250 μm |
| GDL porosity | 0.7 |
| GDL permeability | $1 \times 10^{-12} m^2$ |
| PEM thickness | 50 μm |
| | |



Fig. 1 The single serpentine flow field for both anode and cathode in the present PEMFC model





본 연구에서는 공기극 입구 상대습도가 사형유 로를 채택한 고분자 전해질 연료전지에 미치는 영향을 CFD 해석을 통하여 고찰하였다. 반응면 적을 3 cm × 3 cm의 정사각형 영역으로 설정하

| Governing equations | Mathematical expressions | |
|-----------------------|--|-----|
| Mass conservation | $\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = s_m, \text{ where } s_m = s_{\mathrm{H}_2}(\mathrm{or}s_{\mathrm{O}_2}) + s_{\mathrm{H}_2\mathrm{O},v}^p + s_{\mathrm{H}_2\mathrm{O},v}^e.$ | (1) |
| Momentum conservation | $ \begin{split} u \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + v \frac{\partial(\rho u)}{\partial y} + w \frac{\partial(\rho u)}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z}\right) + s_{px}, \\ u \frac{\partial(\rho v)}{\partial x} + v \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + w \frac{\partial(\rho v)}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial z}\right) + s_{py}, \\ u \frac{\partial(\rho w)}{\partial x} + v \frac{\partial(\rho w)}{\partial y} + w \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial z}\right) + s_{pz}, \text{ where} \\ s_{px} = -\frac{\mu}{K} u, \ s_{py} = -\frac{\mu}{K} v, \text{ and } s_{pz} = -\frac{\mu}{K} w \text{ for GDL regions.} \end{split} $ | (2) |
| Species conservation | $ \begin{aligned} u \frac{\partial(\rho m_i)}{\partial x} + v \frac{\partial(\rho m_i)}{\partial y} + w \frac{\partial(\rho m_i)}{\partial z} &= \frac{\partial(J_{x,i})}{\partial x} + \frac{\partial(J_{y,i})}{\partial y} + \frac{\partial(J_{z,i})}{\partial z} + s_i, \text{ where} \end{aligned} \tag{3} \\ s_{\mathrm{H_2}} &= -\frac{I(x,y)}{2F} M_{\mathrm{H_2}} A_{cv} \text{ at anode GDL/MEA interface, and} \\ s_{\mathrm{O_2}} &= -\frac{I(x,y)}{4F} M_{\mathrm{O_2}} A_{cv} \text{ at cathode GDL/MEA interface.} \\ s_{\mathrm{H_2O,v}} &= s_{\mathrm{H_2O,v}}^p + s_{\mathrm{H_2O,v}}^e, \text{ where} \\ s_{\mathrm{H_2O,v}}^e &= \frac{\alpha(x,y)}{F} I(x,y) M_{\mathrm{H_2O}} A_{cv} \text{ at anode GDL/MEA interface, and} \\ s_{\mathrm{H_2O,v}}^e &= \frac{1 + 2\alpha(x,y)}{2F} I(x,y) M_{\mathrm{H_2O}} A_{cv} \text{ at anode GDL/MEA interface, and} \\ s_{\mathrm{H_2O,v}}^e &= \frac{1 + 2\alpha(x,y)}{2F} I(x,y) M_{\mathrm{H_2O}} A_{cv} \text{ at cathode GDL/MEA interface, and} \\ s_{\mathrm{H_2O,v}}^e &= \frac{1 + 2\alpha(x,y)}{2F} I(x,y) M_{\mathrm{H_2O}} A_{cv} \text{ at cathode GDL/MEA interface, and} \\ s_{\mathrm{H_2O,v}}^e &= \frac{1 - 2\alpha(x,y)}{2F} I(x,y) M_{\mathrm{H_2O}} A_{cv} \text{ at cathode GDL/MEA interface, and} \\ s_{\mathrm{H_2O,v}}^e &= \frac{1 - 2\alpha(x,y)}{2F} I(x,y) M_{\mathrm{H_2O}} A_{cv} \text{ at cathode GDL/MEA interface, and} \\ s_{\mathrm{H_2O,v}}^e &= \frac{1 - 2\alpha(x,y)}{2F} I(x,y) M_{\mathrm{H_2O}} A_{cv} \text{ at cathode GDL/MEA interface, and} \\ s_{\mathrm{H_2O,v}}^e &= \frac{1 - 2\alpha(x,y)}{2F} I(x,y) M_{\mathrm{H_2O}} A_{cv} \text{ at cathode GDL/MEA interface, and} \\ s_{\mathrm{H_2O,v}}^e &= \frac{1 - 2\alpha(x,y)}{2F} I(x,y) M_{\mathrm{H_2O}} A_{cv} \text{ at cathode GDL/MEA interface, and} \\ s_{\mathrm{H_2O,v}}^e &= \frac{1 - 2\alpha(x,y)}{2F} I(x,y) M_{\mathrm{H_2O}} A_{vv} \text{ at cathode GDL/MEA interface, and} \\ s_{\mathrm{H_2O,v}}^e &= \frac{1 - 2\alpha(x,y)}{2F} I(x,y) M_{\mathrm{H_2O}} A_{vv} \text{ at cathode GDL/MEA interface, and} \\ s_{\mathrm{H_2O,v}}^e &= \frac{1 - 2\alpha(x,y)}{2F} I(x,y) M_{\mathrm{H_2O}} A_{vv} \text{ at cathode GDL/MEA interface, and} \\ s_{\mathrm{H_2O,v}}^e &= \frac{1 - 2\alpha(x,y)}{2F} I(x,y) M_{\mathrm{H_2O}} A_{vv} \text{ at cathode GDL/MEA interface, and} \\ s_{\mathrm{H_2O,v}}^e &= \frac{1 - 2\alpha(x,y)}{2F} I(x,y) M_{\mathrm{H_2O}} A_{vv} \text{ at cathode GDL/MEA interface, and} \\ s_{\mathrm{H_2O,v}}^e &= \frac{1 - 2\alpha(x,y)}{2F} I(x,y) M_{\mathrm{H_2O}} A_{vv} \text{ at cathode GDL/MEA interface, and} \\ s_{\mathrm{H_2O,v}}^e &= \frac{1 - 2\alpha(x,y)}{2F} I(x,y) M_{\mathrm{H_2O}} A_{vv} \text{ at cathode GDL/MEA interface, and} \\ s_{\mathrm$ | |
| Energy conservation | $ \begin{split} \frac{\partial(\rho uh)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho vh)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho wh)}{\partial z} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) + s_k^e + s_k^p, \text{ where} \\ s_k^e &= I(x,y) \left[\frac{\Delta h_{form}}{2F} - V \right] A_{cv} \text{ at cathode GDL/MEA interface, and} \\ s_k^p &= s_{\mathrm{H}_2\mathrm{O},l} \times h_{fg} \text{ for fluid regions.} \end{split} $ | (4) |

Table 2 Governing equations and source terms.

고 단일 경로의 사형유로가 그 반응면적을 통과 하도록 고분자 전해질 연료전지의 형상모델을 구 성하였다. CFD 해석결과로 얻어진 전류-전압 성 능곡선과 전류밀도, 농도, 과전압 등의 분포곡선 을 통하여 공기극 입구 상대습도가 연료전지의 성능 및 수분관리에 미치는 영향을 분석하였다. 또한 고분자 전해질 연료전지의 내구성에 영향을 미치는 전류밀도와 수분함량의 균일도(uniformity) 를 고찰하였다.

2. 해석 모델

본 연구의 CFD 해석은 상용 코드인 Star-CD (CD-Adapco)를 이용하여 수행되었다. Star-CD에서 제공하는 ES-PEMFC 모듈은 고분자 전해질 연료 전지의 해석을 위한 전문가 시스템으로서 다양한

해석에 적용되어 그 효용성이 검증된 바 있 다.^(11,12) ES-PEMFC 모듈은 고분자 전해질 연료전 지 내부에서 일어나는 유체유동, 열전달, 물질전 달 및 전기화학반응 등 다양한 현상을 해석하기 위하여 에너지보존, 질량보존, 전하보존과 관련된 지배방정식들을 연립하여 계산한다.

본 해석 모델에서는 연료극, 공기극의 혼합기 체를 이상기체(ideal gas)로 가정하되, 수분에 대 해서는 수분활성도(water activity) 1.0을 기준으로 수분의 증발/응축을 고려하는 이상유동 모델을 사용하였다. 확산층에 존재하는 액상수분에 의한 물질전달 저항은 ES-PEMFC 모듈에서는 전해막 표면의 얇은 수분막(water film)으로 모델링되며, 수분막으로의 기체의 용해는 Henry의 법칙을 통 해 계산된다.

2.1 형상모델

본 논문에서 고려한 사형유로의 형상은 Fig. 1 에서 보여진 것처럼 하나의 입구와 출구를 갖는 단일 경로로 구성되어 있다. 고분자 전해질 연료 전지의 CFD 해석에 사용된 격자계가 분리판, 유 로, 전극전해막(MEA), 확산층으로 구분되어 Fig. 2에 제시되어 있다. 보다 상세한 형상조건 및 치 수는 Table 1에 정리하였다. 실제 계산에 사용된 총 격자수는 약 300,000개로, 유로에 약 70,000개, 확산층과 전해막에 약 140,000개, 분리판에 약 90,000개가 배치되었다. 복잡한 연료전지 계산으 로 인해 하나의 운전조건에 대한 CFD 해석에는, 듀얼코어 1.86GHz의 CPU 컴퓨터로 평균 10시간 의 계산시간이 소요되었다.

2.2 지배방정식

고분자 전해질 연료전지의 해석에 사용된 주요 한 지배방정식이 Table 2에 정리되어 있다. 식 (1)과 (2)는 CFD에서 기본적으로 고려되는 연속 방정식과 운동량방정식이며, 식 (3)은 질량분율 m_i 의 변수로 정리된 각각의 화학종의 보존방정 식이다. 이상의 지배방정식은 전해막과 분리판을 제외한 모든 유체영역에 적용된다. 이에 추가하 여 대류, 전도 및 열생성을 고려한 에너지방정식 인 식 (4)가 모든 영역에서 고려된다. Table 2에 는 또한 각각의 지배방정식에서 필요한 생성항 *s* 가 정리되어 있다. 전기화학반응에 의한 질량의 생성/소멸은 전해막의 표면에서 정의된다.

고분자 전해질 연료전지의 출력전압 V는 다음 과 같이 결정된다.

$$V = V^{ocv} - IR(x, y) - \eta(x, y)$$
(5)

즉, 개회로 전압 V^{ocv} 에서 저항손실 IR(x,y)과 활성화손실과 농도손실을 합한 과전압 $\eta(x,y)$ 를 제하여 출력전압 V를 결정한다.

고분자 전해질 연료전지에서 저항손실의 대부 분은 전해막에서 발생하며, 따라서 다음과 같이 전해막의 이온전도도 σ_m 의 함수로 표현된다.

$$IR(x,y) = I(x,y)\frac{t_m}{\sigma_m(x,y)}$$
(6)

여기서 t_m 은 전해막의 두께를 의미한다. 식 (6)은

| Table 3 Operation co | onditions |
|----------------------|-----------|
|----------------------|-----------|

| Temperature | 70°C |
|--------------------------------|-----------------------------------|
| Pressure | 1 bar |
| Cathode gas | |
| Relative humidity | 100, 80, 60, 40, 20% |
| O ₂ mass fraction | 0.183, 0.194, 0.205, 0.215, 0.224 |
| H ₂ O mass fraction | 0.215, 0.168, 0.119, 0.079, 0.040 |
| Stoichiometric flow rate | 1.2 A/cm^2 |
| Inlet temperature | 70°C |
| Dew point | 70, 65, 58, 50, 37°C |
| Anode gas | |
| Relative humidity | 100% |
| H ₂ mass fraction | 0.115 |
| H ₂ O mass fraction | 0.885 |
| Stoichiometric flow rate | 2.4 A/cm^2 |
| Inlet temperature | 80°C |
| Dew point | 80°C |

저항손실이 전해막 내 전류의 분포 *I*(*x*,*y*)에 비 례하고 동시에 이온전도도의 분포 σ_m(*x*,*y*)에 반 비례함을 의미한다.

활성화손실과 농도손실을 포함한 과전압 η 는 전해막 표면에서의 반응속도에 비례하는 전류 I(x,y), 산소와 수소의 분압 $p_{O_2}(x,y)$ 와 $p_{H_2}(x,y)$ 의 함수로 다음과 같이 계산된다.

$$\eta(x,y) = \eta_c + \eta_a = \frac{RT(x,y)}{z_c F} ln \left[\frac{I(x,y)}{I_{c,0}} \frac{p_{O_2}(x,y)}{p_{O_2,\infty}} \right] \\ + \frac{RT(x,y)}{z_a F} ln \left[\frac{I(x,y)}{I_{a,0}} \frac{p_{H_2}(x,y)}{p_{H_2,\infty}} \right]$$
(7)

여기서 z_k 는 전기화학반응에 참여하는 전자수를 의미하며($z_c = 4$, $z_a = 2$), $I_{k,0}$ 는 공기극 및 연료 극의 교환전류밀도(exchange current density)를 의 미한다. 또한 $p_{O_2 \infty}$ 와 $p_{H_2 \infty}$ 는 공기극 및 연료극 유로 입구에서의 산소와 수소의 분압이며, R은 기체상수이다.

액상수분의 물질전달 저항효과를 고려하기 위 해 ES-PEMFC 모듈은 전해막 표면에 수분막의 존재를 가정한다. 즉, 확산층 내부에 존재하는 액 상수분의 총량과 동일한 수분막 두께 $t_{f,k}$ 를 다음



Fig. 3 Effects of cathode relative humidity on cell current-voltage performance of PEMFC

과 같이 계산한다.

$$t_{f,k} = \frac{m_{\mathrm{H}_{2}\mathrm{O},l}(\Sigma mass_{n})}{\varepsilon \rho_{\mathrm{H}_{2}\mathrm{O},l} A_{cv}}$$
(8)

식 (8)에서 A_{cv} 는 전해막 표면의 면적을 의미한 다. 따라서 식 (7)의 $p_{O_2}(x,y)$ 와 $p_{H_2}(x,y)$ 는 수분 막에 의한 저항을 고려하여 계산된 분압이다.

2.3 운전조건

해석에 사용된 고분자 전해질 연료전지의 운전 조건이 Table 3에 정리되어 있다. 연료극의 수소 기체의 경우 온도 80°C로 작동온도보다 10°C 높 게 설정하여, 수분이 부족하지 않도록 고려하였 으며 유량은 전류밀도 1.2 A/cm² 등가로 설정하 였다. 실제 연료전지의 작동 시에도 수소기체는 100% 이상으로 가습되어 공급되는 것이 일반적 이다. 공기극의 가습된 공기의 경우 온도는 70°C 로 유지하되 상대습도를 100%에서 20%까지 20% 씩 감소시켰으며, 유량은 전류밀도 2.4 A/cm² 등 가로 설정하였다. 고분자 전해질 연료전지의 냉 각을 고려하기 위하여 분리판 경계조건으로 70°C 의 등온 조건을 부여하였다.

3. 결과 및 토의

3.1 연료전지 성능에 미치는 영향

공기극 입구 상대습도가 고분자 전해질 연료전 지의 성능에 미치는 영향을 Fig. 3에서 검토하였 다. 공기극 입구 상대습도가 80%인 경우 성능이



Fig. 4 Effects of cathode relative humidity on (a) average ohmic loss, and (a) average ionic conductivity in PEM

가장 우수한 것을 확인할 수 있지만, 상대습도 60~100%의 범위에서 전류-전압 곡선의 차이는 매우 작은 것으로 나타났다. 반면에 공기극 입구 상대습도가 40% 이하로 낮아지는 경우 고분자 전해질 연료전지의 성능저하가 심화됨을 확인할 수 있다.

Fig. 3에서 확인한 공기극 입구 상대습도의 영 향을 보다 자세히 분석하기 위하여, 고분자 전해 질 연료전지의 출력전압에 영향을 미치는 저항손 실과 공기극에서의 과전압을 검토하였다. 우선 Fig. 4는 공기극 입구 상대습도에 따른 저항손실 및 고분자막의 이온전도도의 변화를 보여주고 있 는데, 제시된 값들은 전체 반응면적에 대한 평균 값이다. 공기극 상대습도가 증가할수록 고분자막 에서의 수분의 증발이 억제되고, 그 결과 보다 높은 이온전도도가 얻어진다. 따라서 저항손실은 공기극 입구 상대습도와 반비례하는 거동을 보이 게 된다. Fig. 4(b)에서 전류밀도가 높아질수록 이 가습조건이 사형유로를 채택한 고분자 전해질 연료전지의 성능에 미치는 영향에 대한 전산유체역학 해석 연구 609



Fig. 5 Effects of cathode relative humidity on (a) average cell overpotential, and (b) average oxygen mole fraction at cathode side of MEA

온전도도가 낮아지는 경향이 관찰되는데, 이는 전기삼투(electro-osmosis)의 증가에 의해 고분자막 의 연료극쪽이 건조해지는 효과 때문인 것으로 판단된다.

고분자 전해질 연료전지의 출력전압에 영향을 주는 다른 요소는 활성화 손실 및 농도 손실을 포함한 과전압이다. Figs. 5(a)와 5(b)는 입구 상대 습도에 따른 공기극의 과전압과 전극전해막 표면 에서의 산소농도의 변화를 보여준다. Fig. 4와 마 찬가지로 Fig. 5에서 제시된 값들은 전체 반응면 적에 대한 평균값이다. Fig. 5(a)에서 공기극 과전 압은 상대습도가 증가하면 함께 증가하는 경향을 보여주고 있다. 이러한 경향의 한 원인은 Fig. 5(b)에서 관찰되는, 상대습도 증가에 따른 전극전 해막 표면에서의 산소농도 감소와 연관될 수 있 다. 일반적으로 상대습도가 높아지면 수증기로 인한 회석효과로 인해 산소의 농도가 낮아지고,



Fig. 6 Current density distribution across PEM due to cathode relative humidity variation for Vof 0.6 V

그 결과 농도손실이 증가하는 경향을 보인다. 다
른 원인으로는 공기극 내부의 액상수분의 과다
(flooding)를 들 수 있다. 즉, 액상수분이 촉매층이
나 확산층 내에서 전기화학 반응과 기체확산을
방해하여 공기극의 과전압을 증가시킬 수 있다.

정리하면 공기극 입구 상대습도가 증가하는 경 우 고분자막의 이온전도도가 향상되며 이로 인해 저항손실은 감소한다. 반면에 공기극의 산소농도 감소 및 액상수분의 과다로 인해 과전압이 증가 하게 된다. 따라서 출력전압과 관련된 손실의 서 로 상반된 경향으로 인하여, 본 연구에서 고려한 사형유로를 채택한 고분자 전해질 연료전지는 약 80% 정도의 공기극 입구 상대습도에서 최대 성 능을 내는 것으로 예측되었다. 또한 공기극 입구 상대습도가 40% 이하인 조건에서는 이온전도도 의 감소로 인한 저항손실이 너무 커져 과전압의 감소에도 불구하고 성능은 저하됨을 확인할 수 있다.

3.2 전류밀도 균일도에 미치는 영향

내구성을 포함한 고분자 전해질 연료전지의 안 정적인 운전을 위해서는 반응면적에 걸쳐 보다



Fig. 7 Current density distribution in under-channel regions along the cell centerline for V of 0.6 V

균일한 전류밀도 분포가 바람직하다. 이는 연료 전지의 핵심 부품인 촉매층의 열화가 전류밀도가 높은 부분에서 더 빠르게 진행되기 때문이며, 또 한 불균일한 전류밀도에 의한 발열, 온도 편차에 의한 고분자막의 열화를 감소시킬 수 있기 때문 이다. 따라서 공기극 입구 상대습도가 고분자 전 해질 연료전지의 전류밀도 및 수분함량 분포의 균일도에 미치는 영향을 검토할 필요가 있다.

공기극 입구 상대습도를 변화시키면서 얻어진 고분자 전해질 연료전지의 고분자막을 통과하는 이온 전류밀도 분포를 Fig. 6에 나타내었다. 이 전류밀도 분포는 고분자막의 두께가 얇기 떄문에 공기극이나 연료극의 촉매층에서의 분포와 거의 동일하다고 볼 수 있다. Fig. 6에서 상대습도가 100%나 80%인 경우 전류밀도의 분포는 유로의 입구나 출구 간에 큰 편차를 보이지 않으며 비교 적 균일한 것으로 관찰된다. 그러나 공기극 입구 상대습도가 40%나 20%로 낮아지면 유로의 입구 에서는 전류밀도가 증가하고 반대로 출구에서는 감소하는 경향이 관찰되며, 그 결과 입구와 출구 간의 전류밀도의 편차가 커진다. 특히 상대습도 40%나 20%의 저가습 운전조건에서는 유로 길이 의 중간 이후에서는 낮은 전류밀도를 유지하는 현상이 관찰된다.

균일도를 정량적으로 평가하기 위하여 고분자 전해질 연료전지의 중심선(Fig. 1 참고)을 따라서 유로 아래(under-channel) 부분의 전류밀도를 Fig. 7에서 검토하였다. 여기서 리브 아래(under-rib) 부 분의 전류밀도는 나타내지 않았다. Fig. 7에서 공



Fig. 8 Water content distribution in under-channel regions along the cell centerline for V of 0.6 V

기극 입구 상대습도가 100%인 경우 전류밀도는 유로를 따라 완만하게 감소하는 경향을 확인할 수 있다. 또한 상대습도가 감소되어 60%까지는 이러한 경향이 유지되는 것으로 관찰된다. 그러 나 상대습도가 40%나 20%로 더욱 낮아지는 경 우, 전류밀도가 입구 근처에서 급격히 감소한 후 유로 길이의 중간 이후에서 일정한 낮은 값을 유 지하는 경향을 확인할 수 있다. Fig. 7에서 유로 아래 부분의 전류밀도의 최대 편차는 상대습도 100%에서 약 0.10 A/cm², 80%에서 0.11 A/cm², 60%에서 0.12 A/cm², 40%에서 0.15 A/cm², 20%에 서 0.20 A/cm²이다.

공기극 입구 상대습도가 낮아지는 경우에 관찰 되는 경향, 즉 입구와 출구간의 전류밀도 편차의 증가, 입구 근처에서의 급격한 전류밀도 감소 및 사형유로 길이의 후반부에서 낮은 전류밀도로 수 렴 등은 고분자막의 수분함량(water content)과 연 관되어 설명된다. 이를 위하여 Fig. 7에서와 같이 중심선을 따른 유로 아래 부분의 고분자막의 수 분함량을 Fig. 8에 나타내었다. Fig. 8에서 공기극 입구 상대습도가 60% 이상인 경우 수분함량은 유로 길이의 중간 이후에서 대략 11~13 정도로 높게 유지되는 것을 확인할 수 있다. 반면에 상 대습도가 40% 이하인 경우 수분함량은 입구 근 처에서는 상대습도가 높은 경우와 비슷하지만, 유로를 따라 급격히 감소하여 유로 길이의 중간 이후에서는 9를 넘지 못하는 것으로 나타났다.

유로의 입구 근처에서는 공급되는 수소의 충분 한 가습으로 인하여 비록 공기가 저가습 조건으

가습조건이 사형유로를 채택한 고분자 전해질 연료전지의 성능에 미치는 영향에 대한 전산유체역학 해석 연구 611

로 공급되어도 고분자막의 수분함량이 비교적 높 게 유지될 수 있다. 따라서 입구 근처에서는 저 항손실의 증가에 비하여 과전압 손실의 감소가 더 크므로 Fig. 7에서처럼 공기극 입구 상대습도 를 감소시키면 전류밀도는 향상되는 결과가 나타 난다.

그러나 고분자막을 통한 전기삼투 현상은 수분 을 연료극에서 공기극으로 지속적으로 이동시키 며 그 결과 연료극의 수분함량은 유로를 따라서 점차 낮아지게 된다. 특히, 공기극 입구 상대습도 가 낮게 유지되는 경우, 고분자막을 통한 공기극 에서 연료극으로의 수분의 역확산(back-diffusion) 이 억제되며 따라서 연료극의 수분함량은 유로를 따라서 급격히 감소한다. 이러한 경우 유로를 따 라 출구로 가면서 연료극측 고분자막의 건조에 의한 저항손실의 증가가 과전압의 감소를 압도하 게 되면서 전류밀도가 급격히 감소하는 결과가 나타난다. Fig. 8에서 유로 출구 근처에서 고분자 막의 수분함량이 증가하는 현상은 생성된 수분이 공기극에 충분해짐에 따라 역확산이 증가하고 반 면에 전류밀도의 감소로 인해 전기삼투가 완화되 어 생기는 것으로 판단된다.

4. 결 론

본 논문은 공기극 입구 상대습도가 사형유로를 채택한 고분자 전해질 연료전지의 성능에 미치는 영향을 CFD 해석을 통해 연구하였다. 본 모델에 서 고려한 사형유로 및 운전조건에서는 공기극 입구 상대습도가 80%로 유지될 때 고분자 전해 질 연료전지의 성능이 최대가 되는 결과를 얻었 다. 또한 공기극 입구 상대습도가 60% 이상인 경 우에 대한 성능의 차이는 그리 크지 않은 반면에 40% 이하에서는 성능이 크게 저하되는 것을 해 석을 통해 확인하였다.

이러한 결과의 설명을 위하여 공기극 입구 상 대습도가 저항손실 및 과전압에 미치는 영향에 대한 상세한 검토가 수행되었다. 그 결과 공기극 입구 상대습도가 높아질수록 저항손실은 감소하 고 반면에 과전압은 증가하는 거동을 확인하였 다. 따라서 저항손실과 과전압의 서로 상반된 거 동에 의하여 약 80%의 공기극 입구 상대습도에 서 최대 성능이 얻어진 것으로 판단된다. 그러나 공기극 입구 상대습도가 40% 이하로 낮아지는 경우 저항손실의 증가가 과전압의 감소를 압도하 여 성능저하가 큰 것으로 판단된다.

또한 고분자 전해질 연료전지의 내구성에 영향 을 미치는 전류밀도 및 수분함량 분포의 균일도 를 검토하였다. 공기극 입구 상대습도가 60% 이 상인 경우에는 전류밀도와 고분자막의 수분함량 이 유로 길이를 따라 비교적 균일하게 유지됨을 확인하였다. 그러나 입구 상대습도가 40% 이하인 경우 유로 길이의 후반부에서 고분자막의 수분함 량 저하가 심화되면서 전류밀도가 크게 감소하는 것을 확인하였다. 이는 공기극 입구 상대습도가 낮은 경우 고분자막을 통한 수분의 역확산이 억 제되어 연료극이 수분부족 상태가 되어 생기는 현상으로 설명되었다.

후 기

본 연구를 위한 CD-Adapco Korea의 STAR-CD 및 ES-PEMFC 지원에 감사드립니다.

참고문헌

- (1) Larminie, J. and Dicks, A., *Fuel Cell Systems Explained*, John Wiley & Sons, Chichester, 2000.
- (2) O'Hayre, R.P., Cha, S.W., Colella, W. and Prinz, F.B., *Fuel Cell Fundamentals*, John Wiley & Sons, New York, 2006.
- (3) Li, H., Tang, Y., Wang, Z., Shi, Z., Wu, S., Song, D., Zhang, J., Fatih, K., Zhang, J., Wang, H., Liu, Z., Abouatallah, R. and Mazza, A., 2008, "A Review of Water Flooding Issues in the Proton Exchange Membrane Fuel Cell," *J. Power Sources*, Vol. 178, No. 1, pp. 103~117.
- (4) Yousfi-Steiner, N., Moçotéguy, Ph., Candusso, D., Hissel, D., Hernandez, A. and Aslanides, A., 2008, "A Review on PEM Voltage Degradation Associated with Water Management: Impacts, Influent Factors and Characterization," *J. Power Sources*, Vol. 183, No. 1, pp. 260~274.
- (5) Jeong, S.U., Cho, E.A., Kim, H.J., Lim, T.H., Oh, I.H. and Kim, S.H., 2006, "Effect of Cathode Open Area and Relative Humidity on the Performance of Air-Breathing Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cells," *J. Power Sources*, Vol. 158, No. 1, pp.

348~353.

- (6) Owejan, J.P., Trabold, T.A., Jacobson, D.L., Arif, M. and Kandlikar, S.G., 2007, "Effect of Flow Field and Diffusion Layer Properties on Water Accumulation in a PEM Fuel Cell," *Int. J. Hydrogen Energy*, Vol. 32, No. 17, pp. 4489~4502.
- (7) Weng, F.B., Jou, B.S., Li, C.W., Su, A. and Chan, S.H., 2008, "The Effect of Low Humidity on the Uniformity and Stability of Segmented PEM Fuel Cells," *J. Power sources*, Vol. 181, No. 2, pp. 251~258.
- (8) Shimpalee, S., Greenway, S., Spuckler, D. and Van Zee, J.W., 2004, "Predicting Water and Current Distributions in a Commercial-Size PEMFC," *J. Power Sources*, Vol. 135, No. 1-2, pp. 79~87.
- (9) Dong-ryul Lee, Joongmyeon Bae and Dewan Hasan Ahmed 2006, "Numerical Study for the Effect of

Inlet Humidity Condition at PEMFC Channel," *Trans. of the KSME B*, Vol. 30, No. 12, pp. 1228~1235.

- (10) Ferng, Y.M. and Su, A., 2007, "A Three-Dimensional Full-Cell CFD Model Used to Investigate the Effects of Different Flow Channel Designs on PEMFC Performance," *Int. J. Hydrogen Energy*, Vol. 32, No. 17, pp. 4466~4476.
- (11) Jeon, D.H., Greenway, S., Shimpalee, S. and Van Zee, J.W., 2008, "The Effect of Serpentine Flow-Field Designs on PEM Fuel Cell Performance," *Int. J. Hydrogen Energy*, Vol. 33, No. 3, pp. 1052~1066.
- (12) Lee, S., Jeong, H., Ahn, B., Lim, Y. and Son, Y., 2008, "Parametric Study of the Channel Design at the Bipolar Plate in PEMFC Performances," *Int. J. Hydrogen Energy*, Vol. 33, No. 20, pp. 5691~5696.

612