

대면적 고분자전해질연료전지의 병렬계산 시뮬레이션

곽건희*, 푸루소타마*, 강경문*, 주현철*[†]

*인하대학교 기계공학과

Parallel Computing Simulation of Large-Scale Polymer Electrolyte Fuel Cells

GEONHUI GWAK*, PURUSHOTHAMA CHIPPAR*, KYUNGMIN KANG*, HYUNCHUL JU*[†]

*School of Mechanical Engineering, Inha University, 253 Yonghyun-dong,
Nam-gu, Incheon, 402-751, Korea

ABSTRACT

This paper presents a parallel computing methodology for polymer electrolyte fuel cells (PEFCs) and detailed simulation contours of a real-scale fuel cell. In this work, a three-dimensional two-phase PEFC model is applied to a large-scale 200 cm² fuel cell geometry that requires roughly 13.5 million grid points based on grid-independence study. For parallel computing, the large-scale computational domain is decomposed into 12 sub-domains and parallel simulations are carried out using 12 processors of 2.53 GHz Intel core i7 and 48GB RECC DDR3-1333. The work represents the first attempt to parallelize a two-phase PEFC code and illustrate two-phase contours in a representative industrial cell.

KEY WORDS : Polymer electrolyte fuel cell, PEFC(고분자전해질연료전지), Two-phase(2상) Large-scale (대면적), Parallel computation(병렬계산)

Nomenclature

a	: water activity or effective catalyst area per unit of the total volume, m ² /m ³	I	: operating current density, A/m ²
A	: area, m ²	\vec{j}	: transfer current density, A/m ³
C	: molar concentration, mol/m ³	\vec{j}	: diffusive mass flux of the phase, kg/m ² ·s
D _i	: mass diffusivity of species i, m ² /s	J	: Leverett function
EW	: equivalent weight of a dry membrane, kg/mol	K	: hydraulic permeability, m ²
F	: faraday constant, 96487 C/mol	M	: molecular weight, kg/mol
		n	: number of electrons in the electrochemical reaction or the diffusivity correction factor
		n _c	: catalyst coverage coefficient
		n _d	: electro-osmotic drag coefficient
		P	: pressure, Pa
		P _c	: capillary pressure, Pa

[†]Corresponding author : 208185@inha.ac.kr

[접수일 : 2011.10.5 수정일 : 2011.12.6 게재확정일 : 2011.12.27]

R_u : universal gas constant, 8.314 J/mol·K
 s : stoichiometry coefficient in electrochemical reaction or liquid saturation
 S : source term in transport equation
 T : temperature, K
 \vec{u} : fluid velocity and superficial velocity in a porous medium, m/s
 U_o : thermodynamic equilibrium potential, V
 V : volume, m³
 V_{cell} : cell potential, V

avg : average value
 BP : bipolar plate
 c : cathode
 CL : catalyst layer
 GDL : gas diffusion layer
 H_2 : hydrogen
 i : species index
 in : channel inlet
 m : mass equation
 mem : membrane
 O_2 : oxygen
 ref : reference value
 u : momentum equation
 w : water
 Φ : potential equation
 0 : standard condition, 298.15K, and 101.3kPa(1 atm)

Greek symbols

α : transfer coefficient
 ϵ : volume fraction of the gaseous phase in the porous region
 γ : advection correction factor
 λ : membrane water content, molH₂O/molSO₃⁻
 λ^α : relative mobility of phase α
 Φ : phase potential, V
 η : overpotential, V
 θ : contact angle, °
 μ : viscosity, kg/m·s
 ρ : density, kg/m³
 ρ^{mem} : dry membrane density, kg/m³
 ν : kinematic viscosity, m²/s
 σ : surface tension, N/m or electronic conductivity, S/m
 τ : viscous shear stress, N/m²
 κ : ionic conductivity, S/m
 ξ : stoichiometry flow ratio

Superscripts

eff : effective value in the porous region
 mem : membrane
 g : gas
 l : liquid
 ref : reference value
 s : solid
 sat : saturation value
 K : Knudsen diffusion

Subscripts

a : anode

1. 서 론

최근 친환경 에너지의 필요성이 대두되면서 연료전지에 대한 관심이 집중되고 있다. 특히, 연료전지 분야 가운데 고분자 전해질 연료전지(polymer electrolyte fuel cell, PEFC)는 다른 형태의 연료전지보다 저온의 작동조건(주로 100°C 이하의 온도)에서 높은 출력전류밀도를 갖고 있다. 또한 운영비, 배기가스, 소음이 적은 장점이 있어 가정용발전설비, 차세대 차량용 동력원 등 다양한 산업에 적용하기 위한 연구가 활발히 진행 중이다. 이러한 연료전지가 다양한 산업에 적용 가능하기 위해서는 연료전지 작동 시 발생하는 물리적 현상들을 이해하고 연료전지 주요 컴포넌트(component)들의 소재 및 디자인의 설계를 최적화해야 한다. 따라서 연료전지 내에서 발생하는 여러 가지 물리적 현상들을 규명할 수 있는 이론 연구가 우선적으로 수행되어야 하고 연료전지의 컴포넌트들을 최적화할 수 있는 정확한 정보를 제공해야 한다.

하지만 기존에 개발된 대부분의 해석 모델들은 활성 면적이 작은 단위전지(3×3cm², 5×5cm²) 수준의 현상을 모사하는데만 적용되고 있다. 실제 산업 용에 적용되는 연료전지의 크기(100cm² 이상)를 해

석하기 위해서는 많은 수의 격자(mesh)가 필요하며, 빠르고 효율적인 결과물을 도출하기 위해서는 컴퓨터 계산 효율이 중요한 요소가 된다. 따라서 대면적 연료전지의 전산모사는 컴퓨터의 병렬 계산이 적용되어 수행되어야 한다.

Hua Meng 등은¹⁾ 3차원 단상(single-phase)등온모델을 이용하여 대면적 PEFC의 병렬계산을 처음으로 제시하였다. 그들은 5개의 사형유로 채널(serpentine flow channel)을 가진 PEFC로 공급되는 가스의 가습조건에 따라 셀 성능의 변화를 분석하였다. 이러한 결과는 10개의 CPU를 사용하여 시뮬레이션을 수행하였을 때 기존의 컴퓨터보다 7배가 빠른 계산 결과를 얻을 수 있다고 설명하였다. Y. Wang 등은²⁾ 200cm²면적의 PEFC 단위전지 전산해석을 위해 Hua Meng 등이 수행한 격자수보다 10배가 많은 23.5백만개의 격자수를 사용하였다. 그들은 32개의 컴퓨터 클러스터를 이용하여 PEFC 단상(single-phase) 모델 시뮬레이션을 수행하였으며, 대략 20시간의 계산시간을 보고하였다.

지금까지 수행된 연료전지 병렬계산은 단상모델에 한정되어 있으며 플러딩(flooding) 현상을 예측할 수 있는 2상 연료전지 모델에 적용한 사례는 아직까지 보고되고 있지 않다. 본 연구에서는 좀 더 복잡한 지배방정식과 관련식들로 구성되어 있는 2상

연료전지 모델을 실제 상업적으로 사용되고 있는 200cm²면적의 PEFC 단위전지에 적용하여 병렬계산을 수행하였다. 여기서 특히 강조되어야 할 부분은 연료전지 내부의 플러딩 현상을 정확히 예측하기 위해서는 반드시 실제크기의 대면적 PEFC 전산해석이 필요하다는 사실이다. 이는 PEFC 내부 물분포와 그에 따른 플러딩 및 연료전지성능은 채널들 사이의 압력차에 의한 bypass에 의해 큰 영향을 받고, 그 bypass 현상은 간소화된 소면적 PEFC에서는 예측이 불가능하기 때문이다. 전산해석 결과물은 실제 대면적 연료전지에서의 압력강하, 수소 및 산소 농도, 액체포화도(liquid saturation), 전류밀도(current density) 분포들을 보여주며, 이를 통해 관련 현상에 대한 기본적 지식을 제공한다. 2상 모델은 단상모델보다 PEFC내에서 발생하는 물리적 현상을 더욱 정확하게 모사할 수 있다. 본 연구를 통해 개발된 2상 PEFC 병렬계산용 전산코드는 대면적 연료전지 구성부품의 소재/디자인 및 작동조건 등을 최적화하는데 유용하게 사용될 수 있을 것이다.

2. 연료전지 수치모델

본 연구에서 이용될 다차원(multi-dimensional), 다상(multi-phase) PEFC모델은 기존에 Wang과 Cheng³⁾

Table 1 Two-phase steady-state fuel cell model

Governing equations	
Mass	$\nabla \cdot (\rho \vec{u}) = S_m$ (1)
Momentum	Flow channels (Navier - Stokes equation): $\left(\frac{1}{\epsilon^2}\right) \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = -\nabla P + \nabla \cdot \tau$ (2)
	Porous media (Darcy's equation): $\vec{\rho} u = -\left(\frac{K}{\nu}\right) \nabla P$ (3)
Species	Flow channels and porous media: $\nabla \cdot (\gamma_i \rho m_i \vec{u}) = \nabla \cdot [\rho^g D_i^{g,eff} \nabla (m_i^g)] + \nabla \cdot [(m_i^g - m_i^l) \vec{j}] + S_i$ (4)
	Water transport in the membrane: $\nabla \cdot \left(\left(\frac{\rho^{mem}}{EW} \right) D_w^{mem} \nabla \lambda \right) M_w - \nabla \cdot \left(n_d \left(\frac{I}{F} \right) M_w \right) + \nabla \cdot \left[\left(\frac{K^{mem}}{J} \right) \nabla P^l \right] = 0$ (5)
Charge	Proton transport: $\nabla \cdot (k^{eff} \nabla \Phi_e) + S_\phi = 0$ (6)
	Electron transport: $\nabla \cdot (\sigma^{eff} \nabla \Phi_s) - S_\phi = 0$ (7)

Table 2 Two-phase steady-state fuel cell model

Source/Sink terms	
Mass	In the CLs: $S_m = \sum_i S_i + M_w \nabla \cdot \left(D_w^{mem} \left(\frac{\rho^{mem}}{EW} \right) \nabla \lambda \right)$ (8)
Species	For water in CLs: $S_i = M_i \left[-\nabla \cdot \left(\left(\frac{n_d}{F} \right) I \right) - \left(\frac{s_i j}{nF} \right) \right]$ (9)
	For other species in CLs: $S_i = -M_i \left(\frac{s_i j}{nF} \right)$ (10)
Charge	In the CLs: $S_\phi = j$ (11)

에 의해 개발된 다상혼합(multi-phase mixture, M^2) 모델을 기반으로 한다. 이러한 M^2 모델을 기초로 한 연료전지 해석모델의 지배방정식(governing equation) 및 생성항(source term)과 전기화학반응 관련식들은 Table 1, Table 2, Table 3에 각각 요약되어 있다. 또한 코딩(coding), 격자생성(grid generation) 및 수렴조건과 같은 수치시뮬레이션에 필요한 전반적인 사항들은 Ju의 논문⁴⁾에서 자세히 설명되었기 때문에 본 논문에서 이들에 대한 언급은 생략한다^{3,5-12)}.

2.1 모델 시뮬레이션

본 연구에서 사용된 연료전지 모델은 상용 STAR-CD ver 3.26 전산유체(computational fluid dynamics, CFD) 패키지를 이용하여 실행되었으며, 질량(mass), 운동량(momentum), 화학종(chemical species), 전하(charge) 보존방정식들(conservation equation) 및 관련된 생성항(source term)들을 유저 코드(user code) 기능을 이용해 코드화 되었다.

한편 대면적 PEFC 해석을 위하여 약 13.5백만개

Table 3 Electrochemical correlations

<p>Electrochemical reactions:</p> $\sum_k s_i M_i^e = n e^- \quad , \quad \text{where} \quad \begin{cases} M_i = \text{chemical formula of species } i \\ s_i = \text{stoichiometry coefficient} \\ n = \text{number of electrons transferred} \end{cases}$ (12)
<p>Hydrogen Oxidation Reaction (HOR) in the anode side:</p> $H_2 - 2H^+ = 2e^-$ <p>Transfer current density, $[A/m^3]$:</p> $j = \alpha_{0,a}^{ref} (1-s)^{n_c} \left(\frac{C_{H_2}}{C_{H_2,ref}} \right)^{1/2} \left(\frac{\alpha_a + \alpha_c}{R_u T} F \eta \right), \quad \text{where } \alpha_{0,a}^{ref} = 1.2 \times 10^{10} \text{ A/m}^3, C_{H_2,ref} = 40.88 \text{ mol/m}^3, \alpha_a = \alpha_c = 1$ (13) <p>Surface over-potential, [V]: $\eta = \phi_s - \phi_e$</p>
<p>Oxygen Reduction Reaction (ORR) at the cathode side:</p> $2H_2O - O_2 - 4H^+ = 4e^-$ <p>Transfer current density, $[A/m^3]$:</p> $j = -\alpha_{0,c}^{ref} (1-s)^{n_c} \left(\frac{C_{O_2}}{C_{O_2,ref}} \right)^{3/4} \exp\left(-\frac{\alpha_c}{R_u T} F \eta\right), \quad \text{where } \alpha_{0,c}^{ref} = 4.0 \times 10^3 \text{ A/m}^3, C_{O_2,ref} = 40.88 \text{ mol/m}^3, \alpha_c = 1$ (14) <p>Surface over-potential, [V]: $\eta = \phi_s - \phi_e - U_0$</p> <p>Thermodynamic equilibrium potential:</p> $U_0 = 1.23 - 0.9 \times 10^{-3} (T - 298.15)$

Table 4 Cell dimensions and operating conditions

Description	Value
Anode/Cathode channel/rib width	$1 \times 10^{-3} / 1 \times 10^{-3}$ m
Cathode channel depth	0.8×10^{-3} m
Anode channel depth	0.6×10^{-3} m
Thickness of the anode/cathode GDLs (δ_{GDL})	0.25×10^{-3} m
Thickness of the anode/cathode CLs (δ_{CL})	0.01×10^{-3} m
Thickness of the membrane (δ_{mem})	0.03×10^{-3} m
Anode inlet pressure (P_a)	Atmospheric
Anode stoichiometry (ξ_a)	1.33 (30% H_2)
Cathode inlet pressure (P_c)	Atmospheric
Cathode stoichiometry (ξ_c)	2.0 (Air)
RH of the anode inlet (RH_a)	100%
RH of the cathode inlet (RH_c)	100%
Cell operating temperature	60°C
Porosity GDLs (ϵ_{GDL})	0.6
Porosity CLs (ϵ_{CL})	0.6
Volume fraction of ionomers in CLs (ϵ_{mc})	0.23
Permeability of GDLs (κ_{GDL})	1×10^{-12} m ²
Permeability of CLs (κ_{CL})	1×10^{-12} m ²
Dry membrane density (ρ^{mem})	1980 kg/m ³
Equivalent weight of the electrolyte in the membrane (EW)	1.1 kg/mol
Hydraulic permeability of the membrane (κ^{mem})	5×10^{-19} m ²
Contact angle of the GDLs and CLs (θ)	92°
Effective electronic conductivity in the CLs (σ_{CL})	1000 S/m
Effective electronic conductivity in the GDL (σ_{GDL})	10000 S/m
Effective electronic conductivity in the BP (σ_{BP})	20000 S/m
Surface tension (σ)	0.0625 N/m
Liquid water density ($\rho^l(80^\circ C)$)	972 kg/m ³
Liquid water viscosity (μ^l)	3.5×10^{-4} N·S/m ²

의 격자가 200cm²의 기하학적 형상에 적용되었다. 그리고 대면적 연료전지 시뮬레이션을 진행하기 위하여 사용된 병렬 컴퓨터의 주 모듈은 12개의 PC프로세서(인텔® 코어 TM i7 2.53GHz)와 48GB 램(RAM, RECC DDR3-1333)으로 구성되어 있고 이더넷 네트워크(ethernet network) 시스템에 의해 1Gbps의 속도로 정보를 주고받는다. 이 때, 병렬계산효율은 70%이상을 나타내었다.

2.2 경계 조건(Boundary condition)

연료극, 공기극 채널(channel)로 유입되는 속도는 식 (15)~(16)와 같이, 각각의 양론계수(stoichiometric ratio)의 함수로써 표현되었다.

$$u_{in,a} = \frac{\xi_a (I/2F) A_{mem} M_{H_2}}{\rho_{H_2} A_a} \quad (15)$$

$$u_{in,c} = \frac{\xi_c (I/4F) A_{mem} M_{O_2}}{\rho_{O_2} A_c} \quad (16)$$

여기서, I는 PEFC 작동 전류밀도, A_a 및 A_c 는 가스채널의 단면적, ρ 는 각각 수소와 공기 밀도를 나타낸다. 그리고 온도 계산을 위해 분리판(bipolar plate, BP)의 외부는 등온(60°C) 경계조건이 적용되었다.

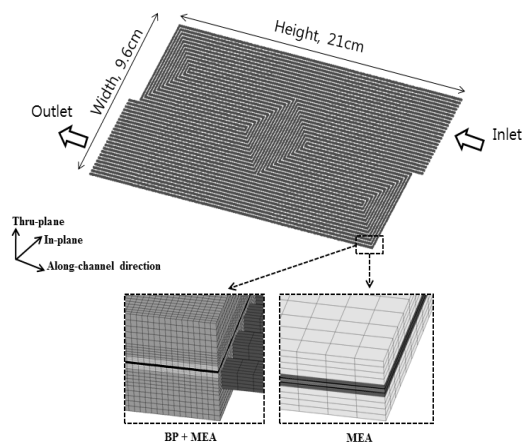


Fig. 1 Computation domain and mesh configuration of 200 cm² PEFC

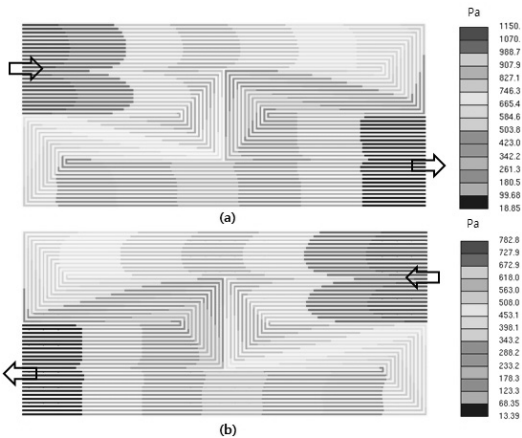


Fig. 2 Pressure contours in the anode channel (a) and the cathode channel (b)

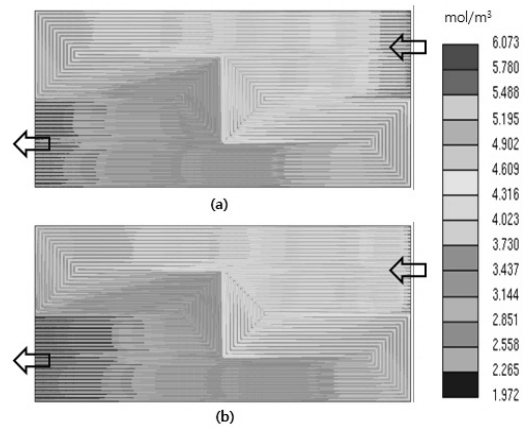


Fig. 4 Oxygen concentration distributions in the cathode gas diffusion layer (a) and catalyst layer (b)

그리고 연료전지에 공급되는 수소의 몰농도(molar concentration)는 개질 후 30%의 농도로 공급된다고 가정하였으며 나머지 70%의 가스는 반응하지 않은 불활성 질소 기체로 가정하였다.

3. 결과 및 고찰

본 연구에 사용된 PEFC 모델의 연료극(anode)과 공기극(cathode)에는 각각 30%의 수소와 공기가 공급되었으며, 셀의 물성치와 작동조건은 Table 4에

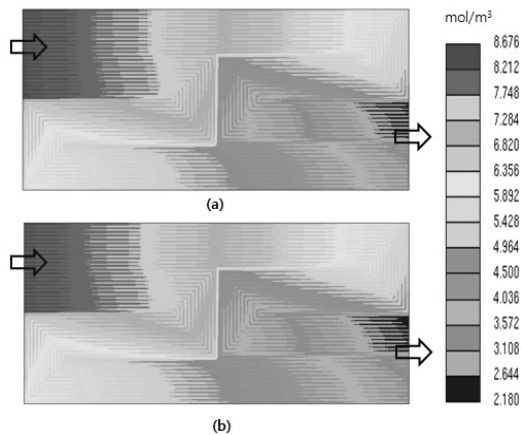


Fig. 3 Hydrogen concentration distributions in the anode gas diffusion layer (a) and catalyst layer (b)

나열되어 있다. 또한, 본 시뮬레이션에 적용된 물질 전달 변수는 Ju^4 의 연구에서 사용된 것들과 동일하며 Table 5에 요약되어 있다. 그리고 PEFC의 기하학적 형상과 치수는 Fig. 1에 나타내었다.

Fig. 2는 BP 내부 채널에서의 연료극과 공기극에서의 압력강하(pressure drop)를 보여주는 그림이다. 연료극과 공기극의 입·출구 형상은 직사각형 형상으로 모두 동일하지만 공기극에서보다 연료극에서 압력강하가 더 크게 나타나는 것을 볼 수 있다. 이는 연료극 채널면적이 공기극 채널면적보다 적으며(Table 1 참고), 연료극 채널로 30%의 수소만이 공급되어 PEFC에서 일정 전류를 생산해 내기 위해 연료극에서의 반응물의 유량이 더 많이 공급되어야 하기 때문이다. 즉 식 (15)와 (16)으로부터 계산된 연료극과 공기극의 입구속도는 각각 3.80m/s, 3.06m/s이며 이를 통해 더 큰 압력강하가 연료극 채널에서 일어난다.

Fig. 3은 연료극의 가스확산층(gas diffusion layer, GDL), 촉매층(catalyst layer, CL)에서의 수소 농도의 분포를 나타내었고, 공기극내부 GDL, CL에서의 산소 농도 분포는 Fig. 4에 나타내었다. 각각의 그림에서 연료극에서는 수소산화반응(hydrogen oxidation reaction, HOR)으로 인하여 수소가 소비되어 입구에서 출구까지 수소의 농도가 감소하게 되고 공기

Table 5 Mass transfer correlations

Gas transport	
Species diffusivity in the gas mixture ¹³⁾ $D_i^g = \frac{1 - \chi_i}{\sum_{j \neq i} \frac{\chi_j}{D_{i,j}}}, \text{ where } D_{i,j} = \frac{1.013 \times 10^{-7} \times T^{1.75}}{P(\chi_i^{1/3} + \chi_j^{1/3})^2} \left(\frac{1}{M_i} + \frac{1}{M_j} \right)^{1/2}$ $\chi_{H_2} = 7.07, \chi_w = 12.7, \chi_{N_2} = 17.9, \chi_{O_2} = 16.6$	(17)
Knudsen diffusion coefficient for a porous medium $D_i^K = \frac{2}{3} \left(\frac{8R_u T}{\pi M_i} \right)^{1/2} r_p$	(18)
Effective species diffusivity ¹⁴⁾ $D_i^{g,eff} = [\epsilon(1-s)]^n (1/D_i^g + 1/D_i^K)^{-1}$	(19)
Two-phase transport	
Diffusive mass flux of the liquid phase ³⁾ $\vec{j} = \rho^l \vec{u} - \lambda^l \rho u = \frac{K}{\nu} \lambda^l \lambda^g \nabla P_c, \text{ where } \sigma = 0.0625 \text{ N/m}$	(20)
Capillary pressure $P_c = P^g - P^l = \sigma \cos \theta (\epsilon/K)^{1/2} \mathcal{J}(s)$	(21)
Leverett function $\mathcal{J}(s) = \begin{cases} 1.417(1-s) - 2.120(1-s)^2 + 1.263(1-s)^3 & \text{if } \theta_c < 90^\circ \\ 1.417s - 2.120s^2 + 1.263s^3 & \text{if } \theta_c > 90^\circ \end{cases}$	(22)
Advection correction factor ³⁾ $\gamma_i = \frac{\rho(\lambda^l m_i^l + \lambda^g m_i^g)}{(s\rho^l m_i^l + (1-s)\rho^g m_i^g)}$	(23)
Transport in electrolyte phase	
Electro-osmotic drag coefficient ¹⁵⁾ $n_d = \frac{2.5\lambda}{22}$	(24)
Proton conductivity in the membrane ¹⁵⁾ $\kappa = (0.5139\lambda - 0.326) \exp[1268(1/303 - 1/T)]$	(25)
Water diffusion coefficient in the membrane ¹⁶⁾ $D_w^{mem} = \begin{cases} 2.692661843 \times 10^{-10} & \text{for } \lambda \leq 2 \\ \{0.87(3-\lambda) + 2.95(\lambda-2)\} \times 10^{-10} e^{\left(7.9728 - \frac{2416}{T}\right)} & \text{for } 2 < \lambda \leq 3 \\ \{2.95(4-\lambda) + 1.642454(\lambda-3)\} \times 10^{-10} e^{\left(7.9728 - \frac{2416}{T}\right)} & \text{for } 3 < \lambda \leq 4 \\ (2.563 - 0.33\lambda + 0.0264\lambda^2 - 0.000671\lambda^3) \times 10^{-10} e^{\left(7.9728 - \frac{2416}{T}\right)} & \text{for } \lambda > 4 \end{cases}$	(26)
Water content of the membrane ¹⁵⁾ $\lambda = \begin{cases} \lambda^g = 0.043 + 17.81a - 39.85a^2 + 36.0a^3 & \text{for } 0 < a \leq 1 \\ \lambda^l = 22 & \end{cases}$	(27)
Water activity ¹⁵⁾ $a = \frac{C_w^g R_u T}{P_{sat}}$	(28)

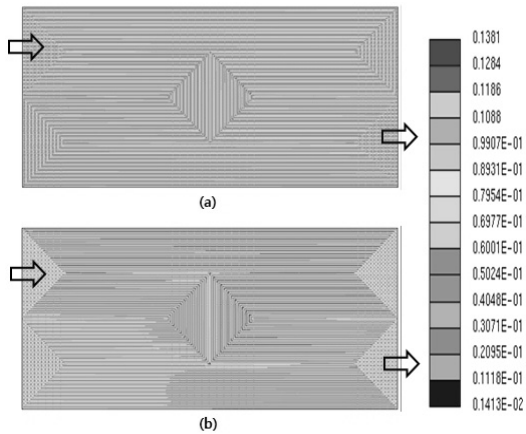


Fig. 5 Liquid saturation contours in the anode gas diffusion layer (a) and catalyst layer (b)

극에서는 산소환원반응(oxygen reduction reaction, ORR)으로 인하여 산소가 소비되어 출구지역에서 산소의 농도가 감소한다. 그리고 양극(兩極)의 GDL과 CL에서는 분리판 채널과 맞닿아 있는 부근에서 각각 수소 및 산소의 농도가 랜드(land)부분보다 높게 나타난다. 이것은 반응물이 확산되는 거리가 채널부근보다 랜드부분이 더 길기 때문이다. 그리고 랜드부근에서 물의 축적이 더 용이하기 때문에 반응가스의 확산을 위한 저항이 커지는 것도 수소 및

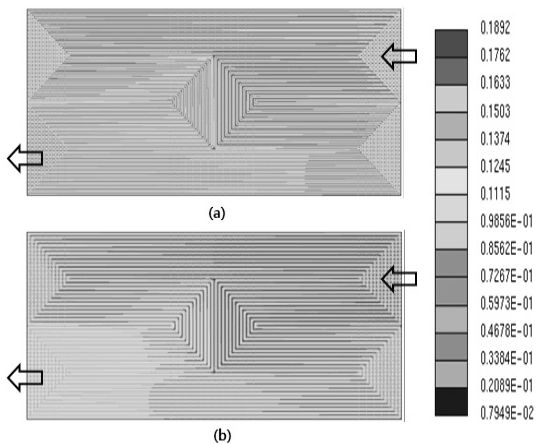


Fig. 6 Liquid saturation contours in the cathode gas diffusion layer (a) and catalyst layer (b)

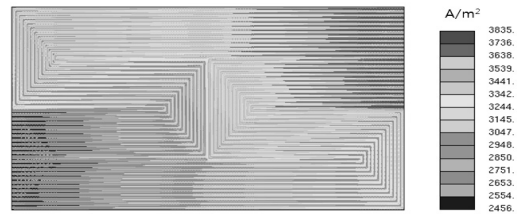


Fig. 7 Current density contours in the membrane

산소 농도가 랜드부근에서 낮게 관측되는 이유가 된다.

Fig. 5와 Fig. 6은 연료극과 공기극의 GDL과 CL에서의 액체포화도(liquid saturation)를 각각 보여주고 있다. 액체포화도는 PEFC 내부의 응축된 물이 확산매체의 기공부피(pore volume)를 차지하는 비율을 의미한다. Fig. 5와 Fig. 6에서 나타난 연료극과 공기극 내부 응축된 물의 양은 공기극 입구 부근에서 출구부근보다 더 높게 관측 된다. 이것은 산소농도가 충분히 높은 공기극 입구부근에서 산소환원반응(oxygen reduction reaction, ORR) 더 활발히 일어나 물 생성률이 높기 때문이다. 또한 응축된 물의 양은 랜드 부근에서 더 높게 나타남을 관측할 수 있다. 이는 PEFC 내부에 생성된 물은 채널을 통해서 제거되기 때문이며, 앞서 설명한 Figs. 3과 4의 수소 및 산소농도 분포경향성과도 일치한다. 마지막으로 연료극과 공기극의 액체포화도 크기를 비교해보면, 공기극에서 ORR 반응으로 인한 물 생성과 수소이온의 전도에 기인한 EOD(electro-osmotic drag) 효과로 인해 공기극의 물의 양이 연료극보다 더 높음을 알 수 있다.

Fig. 7의 연료극과 공기극 유로를 따라 전류밀도 분포(current density distribution)를 보여주는 그림이다. 입구에서 출구 쪽으로 갈수록 전류밀도가 감소한다. 이것은 출구부근으로 갈수록 산소농도가 감소하여 물질전달손실(mass transfer loss)이 증가하기 때문이다. 그리고 랜드 부근에서의 산소농도보다 채널에서의 산소농도가 높기 때문에 전류밀도 분포가 채널부근에서 더 높게 관측 된다.

4. 결 론

본 연구에서는 기존에 개발된 다차원, 2상 PEFC 모델을 병렬형태로 전환하여 대면적 연료전지형상에 적용하였다. 고려된 대면적 연료전지는 24개의 유로를 갖는 200cm² MEA면적의 PEFC로서, 대략 13.5백만개의 격자를 가지고 있으며, 12개의 PC 클러스터에 나누어 병렬계산이 수행되었다. 본 연구는 2상 연료전지 모델을 병렬계산에 적용한 첫 번째 사례이며 대면적 연료전지 내부의 물 분포 및 플러딩 예측을 가능하게 하였다. 2상 대면적 연료전지 시뮬레이션 결과물을 통해 도출된 결론을 정리하면 다음과 같다.

- 1) 고려된 연료극 입구 수소가스농도는 개질가스 기준으로 30%로 가정되었음에도 대면적 연료전지의 물 및 전류밀도분포는 공기극 산소가스농도 분포에 의해 결정됨을 해석결과를 통해 알 수 있다. 이는 수소의 확산속도 및 전기화학반응속도가 산소에 비해 매우 빠르게 때문이다.
- 2) 채널방향(along-channel direction)을 따라서 GDL 및 CL 내부 액체포화도는 전류밀도가 높은 지역에서 크게 나타났으며 이는 ORR에 의한 물 생성률이 GDL과 CL 기공을 차지하는 물의 양을 결정짓는 주요 인자임을 말해준다.
- 3) 하지만 in-plane 방향으로, 전류밀도는 채널부분이 높은 반면, GDL 및 CL 내부 액체포화도는 랜드부분이 높은 것으로 계산되었다. 이는 전류밀도는 산소농도에 의해 주로 결정되지만 GDL과 CL에 축적된 물의 양은 채널에 흐르는 가스를 통해 제거될 수 있는 거리에 비례함을 알 수 있다.

본 연구를 통해 도출된 결론들은 실제 상업용 연료전지크기에서 발생하는 여러 현상들에 대해 포괄적인 이해를 제공하였다. 즉, 대면적 연료전지의 최적화 과정은 대면적 MEA 및 분리판 채널에서 발생하는 2상 유동 및 플러딩, 이에 따른 물질분포 영향성들이 종합적으로 고려되어서 진행되어야 할 것이다.

후 기

본 연구는 지식경제부 지정 ‘인하대학교 자동차동력계부품 지역혁신센터’의 지원에 의한 것입니다.

참 고 문 헌

- 1) Hua Meng and C. Y. Wang : “Large-scale simulation of polymer electrolyte fuel cells by parallel computing”, Chemical Engineering Science, Vol. 59, 2004, pp. 3331-3343.
- 2) Y. Wang and C. Y. Wang : “Ultra large-scale simulation of polymer electrolyte fuel cells”, Journal of Power Sources, Vol. 153, 2006, pp. 130-135.
- 3) C. Y. Wang and P. Cheng : “A Multiphase Mixture Model for Multiphase, Multicomponent Transport in Capillary Porous media-I. Model Development”, International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 39, 1996, pp. 3607-3618.
- 4) H. Ju : “Numerical Study of Land/Channel Flow-Field Optimization in Polymer Electrolyte Fuel Cells (PEFCs) (I) The Effects of Land/Channel Flow-field on Current Density and HFR Distributions”, Transaction of the KSME(B), Vol. 32, No. 9, 2008, pp. 683-694.
- 5) H. Ju, H. Meng and C. Y. Wang : “A Single-phase, Non-isothermal Model for PEM Fuel Cells”, International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 48, 2005, pp. 1303-1315.
- 6) G. Luo, H. Ju and C. Y. Wang : “Prediction of Dry-wet-dry Transition in Polymer Electrolyte Fuel Cells”, Journal of the Electrochemical Society, Vol. 154, No. 3, 2007, pp. B316-B321.
- 7) H. Ju, G. Luo, and C. Y. Wang : “Probing Liquid Water Saturation in Diffusion Media of Polymer Electrolyte Fuel Cells”, Journal of the Electrochemical Society, Vol. 154, No. 2, 2007,

- pp. B218-B228.
- 8) Y. Wang and C. Y. Wang : “A Nonisothermal, Two-phase Model for Polymer Electrolyte, Fuel Cells”, *Journal of the Electrochemical Society*, Vol. 153, No. 6, 2006, pp. A1193-A1200.
 - 9) H. Ju, Ph.D. Thesis. 2006 August : “Coupled Heat and Water Management in Polymer Electrolyte Fuel Cells”, The Pennsylvania State University, University Park.
 - 10) H. Ju and C. Y. Wang : “Experimental Validation of a PEM Fuel Cell Model by Current Distribution Data”, *Journal of the Electrochemical Society*, Vol. 151, 2004, pp. A1954-A1960.
 - 11) H. Ju, C. Y. Wang, S. Cleghorn and U. Beuscher : “Non-isothermal Modeling of Polymer Electrolyte Fuel Cells Part I: Experimental Validation”, *Journal of the Electrochemical Society*, Vol. 152, No. 8, 2005, pp. A1645-A1653.
 - 12) 최용준, 이기용, 강경문, 김환기, 주현철 : “분리관 분할을 통한 연료전지의 전류분포”, 한국수소 및 신에너지학회 논문집, Vol. 21, No. 1, pp. 1-11.
 - 13) R. B. Bird, W. E. Stewart and E. N. Lightfoot : “Transport Phenomena”, John Wiley & Sons, New York, 1960.
 - 14) R. E. Meredith and C. W. Tobias : “Conduction in Heterogeneous Systems, Advances in Electrochemistry and Electrochemical Engineering2”, John Wiley & Sons, New York, 1962, pp. 15-47.
 - 15) T. E. Springer, T. A. Zawodinski and S. Gottesfeld : “Polymer electrolyte fuel cell model”, *Journal of the Electrochemical Society*, Vol. 136, 1991, pp. 2334-2341.
 - 16) S. Motupally, A. J. Becker and J. W. Weidner : “Diffusion of Water in Nafion 115 Membranes”, *Journal of the Electrochemical Society*, Vol. 147, 2000, p. 3171.