

전산유체역학 (CFD)을 이용한 PEMFC의 성능분석

김선회*

상지대학교 신에너지·자원공학과*

Performance Analysis of PEMFC Using Computational Flow Dynamics (CFD)

Sunhoe Kim*

Dept. of New Energy & Resource Engineering*

요약 단순한 모델링이 아닌 3차원의 정밀한 모델링을 이용하여 연료전지 내부에서의 상황을 모사하였다. 자동차 엔진, 비행기 등의 설계에 있어서 실제 실험의 횟수를 줄여주기 위하여 매우 정밀한 전산유체역학(CFD)이 사용된다. 본 연구에서는 CD-ADAPCO사의 STAR-CD를 이용하여 고체고분자전해질형 연료전지(PEMFC)의 성능을 분석하였다. PEMFC 단위전지의 형상과 유로의 흐름의 변화에 따른 성능의 영향성을 분석하였다. 그 결과 rectangular cell의 성능이 square cell보다 높게 나타났으며 유체흐름의 방향은 성능에 큰 영향을 미치지 못했다. 또한 공기의 과잉률에 따른 전체적인 연료전지의 성능을 비교하였으며, 또한 PEMFC 내부에서의 전류밀도의 분포에 관한 분석을 실시하여 그 결과를 비교, 분석하였다. 그 결과 flip-flow의 경우가 co-flow의 경우에 비하여 최대치와 최소치의 값의 편차가 작은 것으로 확인되어 보다 균일한 분포를 가지는 것을 확인할 수 있었다.

주제어 : 수소에너지, 전산유체역학, 고체고분자전해질형 연료전지, 수소자동차, 연료전지 유로설계

Abstract Computational fluid dynamics (CFD) is used to reduce number of experiments. The CFD tools are widely used for engine design and flow pattern analysis to reduce experiments. In this study the performance of a PEMFC single cell was analyzed by using STAR-CD, product of CD-ADAPCO. The effect of cell design and flow pattern on the performance of a PEMFC was analyzed with the 3-D simulation. As a result the performance of rectangular cell was the higher than that of square cell, while the flow direction scarcely affected on the performance of a PEMFC. Also the current density according to different excess ratio of air flow rate was compared and analyzed. The difference between maximum and minimum current density of flip-flow was lower than that of co-flow.

Key Words : Hydrogen Energy, computational flow dynamics, PEMFC, hydrogen vehicle, fuel cell flow design

1. 서론

최근 화석연료의 사용에 의한 온실가스의 발생으로

인한 대기오염 및 지구온난화로 인하여 친환경적인 에너지원으로서 신·재생에너지가 주목을 받고 있다. 여러 종류의 신·재생에너지 중 연료전지가 가장 각광을 받고

* 본 논문은 2010년 상지대학교 교내연구비에 의하여 지원되었음

Received 9 July 2013, Revised 30 July 2013

Accepted 20 August 2013

Corresponding Author: Sunhoe Kim (The Society of Digital Policy)

Email: sunhoekim@sangji.ac.kr

ISSN: 1738-1916

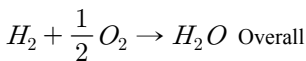
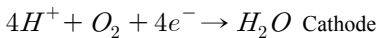
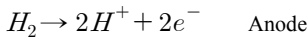
© The Society of Digital Policy & Management. All rights reserved. This is an open-access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0/>), which permits unrestricted non-commercial use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

있는데 연료전지란 수소와 산소의 전기화학반응을 통하여 전기를 생산하는 발전장치 중 하나이다. 연료전지는 배터리와 같은 전기화학장치와는 달리 반응물질을 연속적으로 공급받아 발전하는 장치이므로 오랜시간을 충전해야 하는 일반적인 배터리와는 달리 충전시간이 필요없고 연료가 지속적으로 공급되는 한 계속적으로 발전이 가능하기 때문에 발전용과 수송용에서 매우 각광을 받고 있는 기술이다.

연료전지는 고효율인 동시에 무공해에너지원으로서 주목받고 있으며 에너지혁명을 촉발할 수 있는 실용적인 연료전지 개발과 응용이 선진업체를 중심으로 이루어지고 있으며 그 속도는 점차적으로 가속화되고 있다. 최근의 기술 진보와 이에 따른 가격하락의 추세를 고려한다면 연료전지의 상용화는 매우 가까울 것으로 예상된다.

일반적으로 연료전지는 NOx 및 SOx를 전혀 배출하지 않고, 부산물로서 순수한 물만을 배출시키는 청정 에너지원으로서의 연료전지는 청정성 뿐 아니라 전기효율이 30-40%로서 매우 높고, 뿐만 아니라 발생열을 회수하는 시스템의 경우에는 총효율 70-80%의 매우 우수한 기술이라고 할 수 있다.

연료전지의 종류에는 여러 가지가 있는데, 그 중 고체 고분자전해질형연료전지 (proton exchange membrane fuel cell, PEMFC) 는 기술의 성숙도와 높은 효율 그리고 낮은 작동온도 등의 장점으로 인하여 연료전지 종류 중에서 가장 상용화에 근접한 기술이라고 할 수 있다. 연료전지의 전기화학 반응은 아래와 같다:[1]



연료전지의 중간에는 전기화학반응이 진행되고 있는 전해질막과 촉매가 합쳐진 막전극접합체 (membrane electrode assembly, MEA)가 있으며 이 MEA에 양쪽의 극에서 (anode, cathode) 반응가스가 기체확산층(gas diffusion layer, GDL)을 통하여 공급된다. Anode는 수소가 공급되어 수소이온과 전자로 갈라지게 된다. 전자는 외부 회로를 통하여 반대편극 (cathode)으로 이동하게 되

고, 또한 수소이온은 전해질막을 통과하여 cathode로 이동하게 된다. cathode에서는 앞서 언급한 전자와 수소이온이 유로를 통하여 공급된 산소와 만나 순수한 물을 생성하게 된다. 연료전지는 이런 일련의 과정을 통하여 전기를 생성하게 된다.

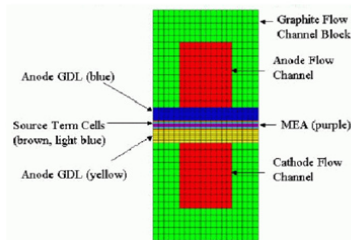
연료전지의 3차원 모델링 이전의 연구에는 유로를 직선이라고 가정한 1차원 방정식의 시도가 있었다. [2,3] Anode 와 cathode 양쪽에서 공급되는 기체의 경우에는 그 유로의 형상이 연료전지의 성능 및 내구성에 지대한 영향을 끼치게 된다. 이런 유로의 설계를 위하여 여러 가지의 실험이 요구된다. 하지만, 모든 과정을 실험하기에는 비용과 시간이 매우 많이 소모되기 때문에 실험의 횟수를 줄여줄 수 있는 simulation이 이용된다. 과거에는 이런 simulation이 매우 어려웠으나, 최근에는 컴퓨터의 발달로 인하여 이런 복잡한 계산이 가능해졌다. 이런 simulation을 가능하게 한 기술 중 전산유체역학 (computational flow dynamics, CFD)의 도움을 통하여 3차원 방정식의 풀이가 가능해져 있다. CFD는 Navier-stock 방정식을 여러 가지의 기법을 이용하여 이산화하여 대수방정식으로 변환하고 이를 수치기법 (numerical method)의 알고리즘을 이용하여 유체유동 문제를 해석한다. 특히 CFD는 3차원으로 풀이가 가능하여 복잡한 유동의 해석이 가능하고, 단상 및 다상유동 (single or multi phase flow), 연소 및 여러 가지의 화학 반응을 동반하는 유동의 해석까지 가능하다. 일반적인 전산유체의 해석방법에는 난류유동에 있어서는 격자를 이용하여 계산하거나 층류 유동의 경우에는 방정식을 단순화하여 계산하기도 한다. CFD용 소프트웨어들은 STAR-CD, Ansys, CEMS, XFOILNX 그리고 Thermal-flow 등이 있다.

연료전지의 성능을 향상시키기 위하여 온도, 가습, 압력, 유량 등의 운전과 설계상의 인자들 간의 최적화가 이루어져야 하지만, 모든 경우의 수를 실험하게 된다면 비용과 시간이 막대하게 필요하기 때문에 실험의 숫자를 줄이기 위하여 본 연구를 실시하였다. 본 연구에서는 STAR-CD의 모듈인 espemfc를 이용하여 연료전지의 성능에 중요한 영향을 미치는 유로의 설계에 관련된 3차원 해석을 통하여 연료전지 설계의 핵심 인자를 도출하였다. [4,5,6,7,8]

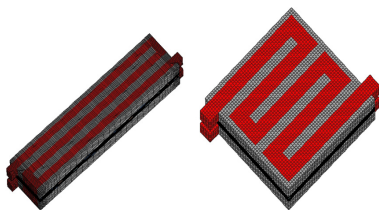
2. 지배방정식

본 연구에 사용되는 물리적 법칙은 질량보존의 법칙, 에너지보존의 법칙, 수분의 이동 그리고 열의 전달방정식 등으로 지배방정식을 설정하였다. 그 방정식들은 참고문헌 [9]에 명시되어 있다.

여기에 설명되어진 지배방정식의 풀이를 그림 2와 같은 단면적 구조를 설정하고 그림 3과 같은 전체적인 유로의 설계를 모사하였다. 그림 3의 경우 사용되고 있는 연료전지의 단위전지 설계의 일반적인 형상이다. 본 연구에서는 앞서 나열한 지배방정식을 3차원모델링 도구인 CD ADAPCO 사의 STAR-CD와 그에 적용되고 있는 연료전지 모듈인 espemfc를 이용하여 Fig. 1과 같은 고체와 유체의 유동, 그리고 그의 실제 형상인 Fig. 2 왼쪽의 직사각형 단위전지와 Fig. 2 오른쪽의 정사각형 단위전지의 성능을 비교 분석하였고, 그 전산모사의 결과로서 단위전지 내의 전류밀도, 압력 그리고 온도 등의 분포를 살펴보았다.



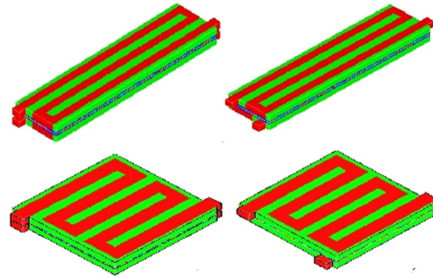
[Fig. 1] The computational domain and grid arrangement used in this model



[Fig. 2] The details of flow field design, rectangular single cell (left) square single cell (right)

Fig. 2는 실제로 사용되고 있는 serpentine 구조를 가

지는 연료전지의 기체의 유로의 일반적인 형상이다. 본 연구에서는 CFD 모델링의 도구 중 하나인 CD-adapco 사의 STAR-CD의 연료전지용 모듈인 espemfc를 이용하여 그 결과를 비교하였다.



[Fig. 3] The flow direction: co-flows of rectangular and square(left upper and left lower, respectively) and flip-flows of rectangular and square(right upper and right lower, respectively)

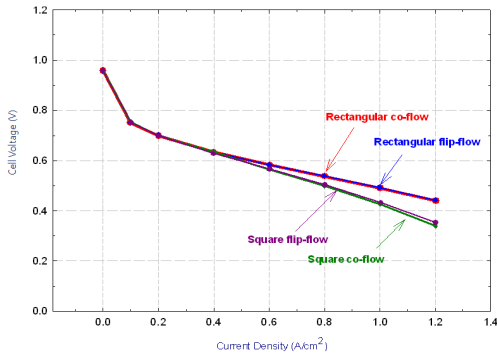
또한 유체의 흐름에 변화를 주어 그 결과를 분석하였다. Fig. 3 에 그에 대한 설명이 되어있다. Fig. 3 의 왼쪽 위쪽과 아래쪽은 각각 rectangular cell과 square cell 의 co-flow를 설명하였다. anode와 cathode에서 기체는 같은 방향으로 흐르게 된다. 반면 fig. 3의 오른쪽 위쪽과 아래쪽은 각각 rectangular cell과 square cell 의 flip-flow를 의미한다. Anode 와 cathode의 기체는 각각 반대방향으로 입장하여 상호 교차하면서 역방향으로 흐르는 형상이다.

본 연구에 있어서 운전조건에 있어서 연료전지 단위전지의 온도는 70℃로 설정하였다. 또한 anode 와 cathode의 가습은 모두 상대습도 100% 로 맞추어 놓았으며, anode 에서의 수소의 유량은 필요량에 대비하여20% 과량을 공급 하였으며 cathode의 공기는 100% 과량 그리고 200% 과량으로 공급하여 그 결과를 비교 하였다. 본 연구에서 는 steady state에서 전산모사가 이루어졌다.

3. 결과 및 고찰

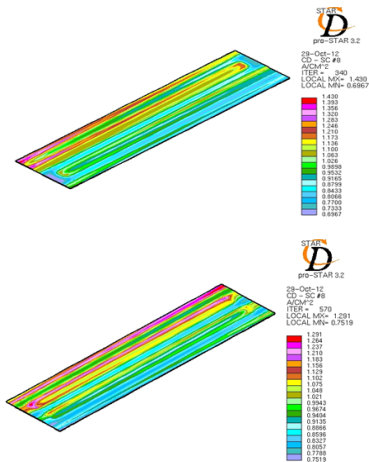
Fig. 4에서는 fig. 3 에서 설정한 4가지의 성능곡선이 나타나져 있다. 이 성능곡선에서는 anode 에서의 수소의

유량은 필요량에 20% 과량을 공급 하였으며 cathode의 공기는 100% 과량 공급하였다. 이 성능곡선에 따르면 rectangular cell 이 square cell 의 경우에 비하여 성능이 좋은 것으로 나타났다. 반면 co-flow 와 flip-flow 의 경우는 성능에 큰 영향을 미치는 것으로 판단되지는 않는다고 할 수 있다. 다만 square cell의 경우에는 그 효과가 조금 더 나타나는 것을 확인할 수 있다.

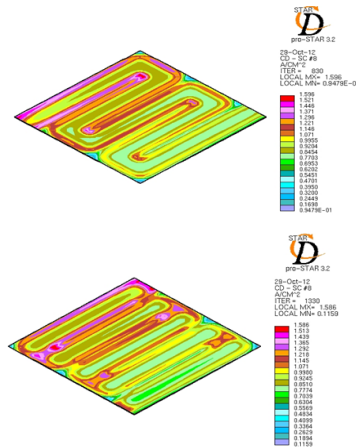


[Fig. 4] Performance comparison of flow field design and flow direction: co-flows of rectangular and square and flip-flows of rectangular and square cell. Excess ratio of anode and cathode were 20% and 100%, respectively.

Fig. 5 에는 fig. 4에서 나타난 성능곡선 중 rectangular cell 에서 평균 전류밀도 1.0 mA/cm²에서의 부위별 전류밀도의 분포를 나타내고 있다. 이 그림에서는 co-flow 와 flip-flow 의 전류밀도의 분포에 관한 비교가 나타나 있는데 두 가지의 흐름을 비교한 결과 평균 전류밀도의 차이는 크게 나지 않지만 이 그림에서 보여주는 전류밀도의 분포는 판이한 차이를 보인다. co-flow cell의 경우 국부적인 전류밀도의 최대치는 1.430 mA/cm²이고 최저치가 0.6967 mA/cm²이었다. 반면, flip-flow cell의 경우 최대치가 1.291 mA/cm²이고 최소치가 0.7519 mA/cm²로서 그 차이는 flip-flow cell의 경우가 전류밀도의 분포가 상대적으로 적으므로 전류밀도 분포는 flip-flow 가 보다 고르다고 볼 수 있다.



[Fig. 5] Current density distribution comparison of co-flow (upper) and flip-flow (lower) of rectangular cell at the average current density of 1.0 mA/cm². Excess ratio of anode and cathode were 20% and 100%, respectively.

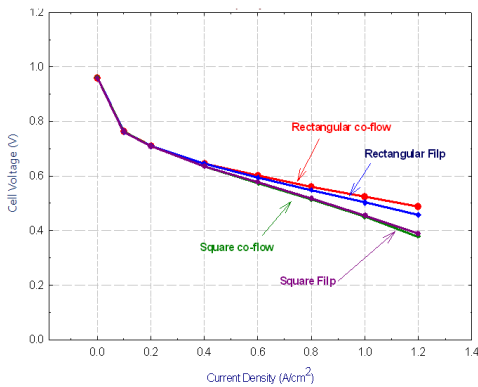


[Fig. 6] Current density distribution comparison of co-flow (upper) and flip-flow (lower) of square cell at the average current density of 1.0 mA/cm². Excess ratio of anode and cathode were 20% and 100%, respectively.

Fig. 6 에는 fig. 4에서 나타난 성능곡선 중 square cell 에서의 평균 전류밀도 1.0 mA/cm²에서의 부위별 전류밀도의 분포를 나타내고 있다. 이 그림에도 앞선 fig. 5 에서와 마찬가지로 co-flow 와 flip-flow 의 전류밀도의 분포에 관한 비교가 나타나 있다. 이 두 가지의 흐름을 비교한 결과 평균 전류밀도의 차이는 크게 나지 않지만 이 그림에서 보여주는 전류밀도의 분포는 판이한 차이를 보인다. co-flow cell의 경우 국부적인 전류밀도의 최대치는

1.596 mA/cm²이고 최저치가 0.0948 mA/cm²이었다. 반면, flip-flow cell의 경우 최대치가 1.586 mA/cm²이고 최소치가 0.1159 mA/cm²로서 그 차이는 flip-flow cell의 경우가 전류밀도의 분포가 상대적으로 적으므로 전류밀도 분포는 flip-flow 가 보다 고르다고 볼 수 있다.

Fig. 7에서는 fig. 3 에서 설정한 4가지의 성능곡선이 나타내져 있다. 이 성능곡선에서는 anode 에서의 수소의 유량은 필요량에 20% 과량을 공급 하였으며 cathode의 공기는 앞선 fig. 4와는 달리 cathode의 공기의 흐름에 200% 과량으로 공급하였다. 이 성능곡선에 따르면 앞선 fig. 4 에서와 마찬가지로 rectangular cell 이 square cell 의 경우에 비하여 성능이 좋은 것으로 나타났다. 반면 co-flow 와 flip-flow 의 경우는 성능에 큰 영향을 미치는 것으로 판단되지는 않는다고 할 수 있다. 앞선 fig. 4에서와는 달리 square cell의 경우에는 그 효과가 미약하였지만, rectangular cell의 경우에는 그 효과가 나타나는 것을 확인할 수 있다.

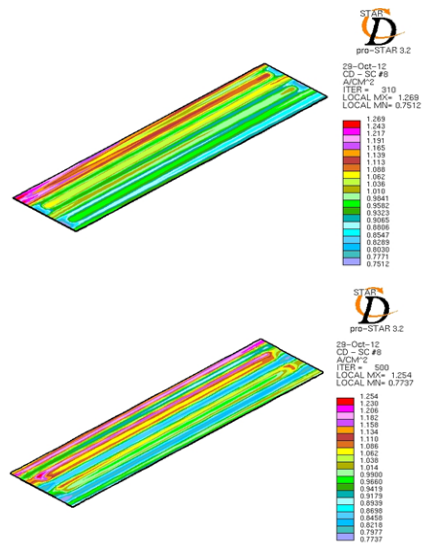


[Fig. 7] Performance comparison of flow field design and flow direction: co-flows of rectangular and square and flip-flows of rectangular and square cell. Excess ratio of anode and cathode were 20% and 200%, respectively.

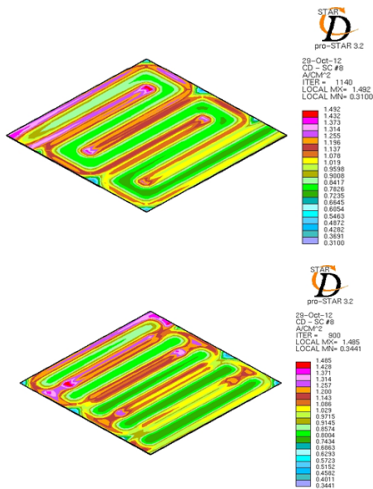
Fig. 8 에는 fig. 7에서 나타난 성능곡선 중 rectangular cell 에서 평균 전류밀도 1.0 mA/cm²에서의 부위별 전류밀도의 분포를 나타내고 있다. 이 그림에서는 co-flow 와 flip-flow 의 전류밀도의 분포에 관한 비교가 나타나 있는데 두 가지의 흐름을 비교한 결과 평균 전류밀도의 차이는 크게 나지 않지만 이 그림에서 보여주는 전류밀도

의 분포는 판이한 차이를 보인다. co-flow cell의 경우 국부적인 전류밀도의 최대치는 1.268 mA/cm²이고 최저치가 0.7512 mA/cm²이었다. 반면, flip-flow cell의 경우 최대치가 1.254 mA/cm²이고 최소치가 0.7737 mA/cm²로서 그 차이는 flip-flow cell의 경우가 전류밀도의 분포가 상대적으로 적으므로 전류밀도 분포는 fig. 5 에서와 마찬가지로 flip-flow 가 보다 고르다고 볼 수 있다.

Fig. 9 에는 fig. 7에서 나타난 성능곡선 중 square cell 에서의 평균 전류밀도 1.0 mA/cm²에서의 부위별 전류밀도의 분포를 나타내고 있다. 이 그림에도 앞선 fig. 5 에서와 마찬가지로 co-flow 와 flip-flow 의 전류밀도의 분포에 관한 비교가 나타나 있다. 이 두 가지의 흐름을 비교한 결과 평균 전류밀도의 차이는 크게 나지 않지만 이 그림에서 보여주는 전류밀도의 분포는 판이한 차이를 보인다. co-flow cell의 경우 국부적인 전류밀도의 최대치는 1.492 mA/cm²이고 최저치가 0.3100 mA/cm²이었다. 반면, flip-flow cell의 경우 최대치가 1.485 mA/cm²이고 최소치가 0.3442 mA/cm²로서 그 차이는 flip-flow cell의 경우가 전류밀도의 분포가 상대적으로 적으므로 전류밀도 분포는 flip-flow 가 보다 고르다고 볼 수 있다.



[Fig. 8] Current density distribution comparison of co-flow (upper) and flip-flow (lower) of rectangular cell at the average current density of 1.0 mA/cm². Excess ratio of anode and cathode were 20% and 200%, respectively.



[Fig. 9] Current density distribution comparison of co-flow (upper) and flip-flow (lower) of square cell at the average current density of 1.0 mA/cm². Excess ratio of anode and cathode were 20% and 200%, respectively.

4. 결론

3차원 전산모사를 통하여 연료전지의 구조와 유동장에 따른 성능의 영향성을 조사하였다. 그 결과 여러 가지의 유동장의 형상에 따른 성능의 영향성을 확인할 수 있었고, 반응 가스의 흐름에 따른 연료전지의 성능의 영향성도 분석할 수 있었다. 이런 계산 과정을 통하여 연료전지 내부에서의 기체의 전류밀도의 분포를 분석하였다. rectangular cell 에서의 성능이 square 에서의 성능에 비하여 보다 높은 성능을 나타내었다. 비록 여러 가지의 가정을 동원하여 식을 단순화 하였으나, 본 연구의 결과를 통하여 시간과 비용이 많이 소모되는 실험을 줄일 수 있는 신뢰할 수 있는 전산모사의 결과를 도출하였다.

ACKNOWLEDGMENTS

This research was supported by Sangji University Research Fund, 2010

REFERENCES

- [1] R. O'Hayer, S. Cha, W. Colella and F. Prinz, fuel cell fundamentals. NJ: John Wiley & Sons Inc. 2005.
- [2] T. Fuller and J. Newman, Water and thermal management in solid-polymer-electrolyte fuel cells, J. Electrochem. Soc., Vol. 140, pp. 1218 - 1225, 1993.
- [3] T.V Nguyen and R. White, A water and heat management models for Proton Exchange Membrane fuel cells, J. Electrochem. Soc., Vol. 140, pp. 2178 - 2186, 1993.
- [4] espemfc tutorial manual. CD-ADAPCO, 2004.
- [5] S. Shimpalee, Numerical prediction of gas humidification effect on energy transfer in PEM fuel cells, Ph.D. dissertation, University of South Carolina. 2001.
- [6] J.Yi, T.V Nguyen, An along the channel model for proton exchange membrane fuel cells, J. Electrochem. Soc., Vol. 145, pp 1149-1159, 1998.
- [7] V. Gurau, H. Liu and S. Kakac, Two-dimensional model for proton exchange membrane fuel cells, AIChE Journal, Vol. 44, pp 2410 - 2422, 1998.
- [8] S. Dutta, S. Shimpalee and J. W Van Zee, Three-dimensional numerical simulation of straight channel PEM fuel cells, J. Appl. Electrochem., Vol. 30, pp. 135 - 146, 2000.
- [9] B. Bird, W. Stewart and E. Lightfoot, Transport Phenomena, NY: Wiley, 1960.
- [10] S.V. Patankar, Numerical Heat Transfer and Fluid Flow Hemisphere, NY: Wiley, 1980.

김 선 회(Kim, Sunhoe)



- 1996년 2월 : 단국대학교 화학공학과(공학사)
- 2004년 5월 : University of South Carolina, Department of Chemical Engineering(공학박사)
- 2004년 11월 ~ 2008년 2월 : LG전자 선임연구원

- 2008년 3월 ~ 현재 : 상지대학교 신에너지·자원공학과 교수
- 관심분야 : 모델링, 수치해석
- E-Mail : sunhoekim@sangji.ac.kr