

# 유체역학과 컴퓨터 시뮬레이션의 융합을 통한 연료전지의 분석

김세현

상지대학교 신에너지자원공학과

## Convergence of Fluid Dynamics and Computer Simulation for the Internal Investigation of Fuel Cell

Se Hyun Kim

Dept. of New Energy & Resource Engineering, Sangji University

요 약 3차원 모델링을 이용하여 연료전지의 유로형상과 유체의 흐름 방향에 따른 연료전지의 성능에의 영향성을 분석을 수행하였다. 본 연구에서 연료전지 내부의 각 유로형상과 유동장의 변화에 전류밀도와 온도의 분포가 어떻게 이루어져 있는지를 분석하였고, 연료전지 단위셀의 전체적인 성능을 분석하였다. 3차원 모델링을 수행하기 위하여 Navier-Stokes 방정식을 전산유체역학을 이용하여 풀었다. 전산유체역학에 전기화학반응의 모델을 융합하여 계산을 수행하였다. 또한, 본 연구에서는 직선유로와 실제 사용되는 형태인 직사각형 모양의 유로형태를 모사하여 유로구조의 영향성을 분석하였다. 그리고 유체의 유동장을 변형시켜 그 영향성과 결과를 비교해 보았다. 본 전산모사 연구를 통하여 연료가 풍부한 부분보다는 산소가 풍부한 부분에서 전류밀도가 보다 높은 것을 확인할 수 있었다. 또한 전반적으로 전류밀도가 높은 곳에서 온도가 높은 것으로 확인할 수 있었다. 본 연구를 통하여 온도의 분포와 유로형상과 유동장 그리고 전류밀도의 연관성을 확인할 수 있었다.

주제어 : 연료전지, 유체역학, 전산유체역학, 융합, 유로형상

**Abstract** A numerical model is developed to predict distributions of current density and temperature. Also the complete fuel cell performances were compared. In this study the effect of flow field design and flow direction on current density and temperature distribution as well as full cell performance. The complete three-dimensional Navier-Stokes equations were solved with convergence of electro-chemical reactions terms. In this paper, the two different flow field design were simulated, straight channel and rectangular serpentine flow channel, which is commonly used. The effect of flow direction, co-flow and counter-flow, was also analyzed. The current density and temperature is higher with abundant oxygen not fuel. Also, temperature distribution was able to be drawn by using computer simulation. In this paper, the relationship among flow pattern, flow field design and current density distribution.

**Key Words** : Fuel Cell, Fluid Mechanics, Computational Fluid Dynamics, Convergence, Flow Field Design

\* 본 논문은 2012년 상지대학교 연구년 학술연구비에 의하여 지원되었음

Received 26 April 2016, Revised 28 May 2016

Accepted 20 June 2016, Published 28 June 2016

Corresponding Author: Se Hyun Kim

(Dept. of New Energy & Resource Engineering, Sangji University)

Email: shkim@sangji.ac.kr

© 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.

ISSN: 1738-1916

## 1. 서론

연료전지는 수소와 산소의 산화반응을 전기화학적으로 유도하여 전기를 생산해내는 장치이다. 연료전지의 원리는 이미 1839년에 영국의 William Grove 경에 의하여 물이 전기 분해되는 현상의 역반응이 가능함을 알게 되면서 최초로 알려졌다. 그 이후 연료전지는 여러 사람들의 연구에 의해 새로운 에너지원으로서의 가능성을 보여주었다. 하지만 기존의 에너지원이었던 내연기관의 지속적인 발전으로 인해 큰 주목을 받지는 못했다. 그러던 중, 1960년대 미국의 NASA는 우주개발 프로그램을 추진하면서 우주선 내의 동력원으로 연료전지를 선택하게 되는데 작은 크기로 설계상의 잇점을 가지고 있었으며 전기효율도 높고, 여타의 부속장치가 적은 장점으로 인하여 연료전지가 우주선의 보조전원으로 사용되었다. 이러한 NASA의 계획에 의해 연료전지에 관련된 연구가 이때부터 본격적으로 이루어지기 시작했다. 연료전지는 자체의 고효율성과 무공해의 차세대 에너지원으로 주목 받고 있으며 에너지 혁명을 촉발할 실용적인 연료전지 개발과 응용이 선진업체를 중심으로 이루어지고 있다. 연료전지 개발을 위한 선진업체들의 발걸음이 갈수록 빨라지고 있다. 최근의 기술 진보와 이에 따른 가격 하락 추세를 고려할 때 연료전지 시장의 본격적인 형성도 그리 멀지 않을 것으로 예상된다. 현재 연료전지는 저용량부터 고용량까지의 발전 설비 분야와 그에 따른 Zero Emission 자동차개발 그리고 캠코더나 노트북, 핸드폰 등에 이용되는 휴대용 소형 전지 분야 등에 적용하여 상용화를 위한 활발한 연구가 진행 중이다.

연료전지에는 그 응용분야와 용량에 따라 달라지는데 직접메탄올연료전지(Direct Methanol Fuel Cell: DMFC), 고체산화물연료전지(Solid Oxide Fuel Cell: SOFC), 용융탄산염연료전지(Molt Carbonate Fuel Cell: MCFC) 등의 여러 가지의 종류가 있으나, 그 중 90°C 이하의 낮은 작동온도와 빠른 기동시간 그리고 현재까지의 가장 높은 기술적 완성도 등의 장점으로 인하여 고체고분자형연료전지(Proton Exchange Membrane Fuel Cell, PEMFC)가 수송 분야 및 가정용 발전 분야에서 주목을 받고 있다.

연료전지를 자동차의 동력원으로 사용하고자 한 시도는 80년대 말부터 시작되었으며 선진 자동차업체 들은 2003년 미국 California주의 Zero Emission 규제의 실용

화를 배경으로 가장 현실성 있는 대처 방안을 연료전지 자동차에서 찾고 있다. 연료전지는 연소를 기반으로 하는 내연기관과는 달리 무연소 에너지 발생장치 이므로 연소 시 발생하는 유해한 배기가스가 없이 순수한 물만을 부산물로 배출 한다. 따라서 연료전지는 환경 친화적인 동력 발생장치이며 효율도 내연기관에 비해 월등히 높다. 미국, 캐나다, 독일, 일본 등에서는 이러한 무공해 연료전지 자동차개발의 실용화를 위해 엄청난 국가적인 지원 하에 수준 높은 연구를 진행 하고 있다.

연료전지를 탑재한 대중버스는 이미 미국, 캐나다의 도심지에서 운행 중이다. Daimler-Chrysler, Ford, General Motors, Toyota 등 여러 대형 자동차 제조업체 들은 소형 연료전지 자동차를 개발하였고 2003년 내에 생산할 계획을 발표하였다. 소형 연료전지 자동차가 상용화되기 위해서는 가격, 수소저장 및 공급 시스템 등 보강 되어야 할 문제가 있으나 2015년경의 상업화를 목표로 활발한 연구개발이 진행되고 있으며, 그 목표의 달성이 가시권 안에 있다고 판단된다.

Lee 등은 연료전지의 운전에 있어서 기체확산층의 압착정도와 기체확산층의 종류의 연료전지의 성능에의 영향에 관하여 연구하였다[1]. 또한 연료전지의 비정상상태의 운전에 관한 연구도 진행된 바 있다[2,3,4,5,6,7,8,9,10]. 하지만 상기 열거된 결과는 실험적인 결과로서 연료전지 단위셀 내부에 어떤 현상이 이루어지는지에 관하여는 보고되지 않았다. 여기에 Reshetenko 등은 segment 연료전지 단위셀을 이용하여 각 부위의 성능과 전기화학적 특성을 연구하였다[11]. 여기에는 실험적인 결과로서 유로의 형상변화 등에 있어서 제작비용과 실험에 많은 노력이 필요하다. 여기에 실험적인 노력을 줄이기 위하여 연료전지의 모델링을 도입하게 된다.

연료전지의 모델링은 과거에도 시도되었다. Nguyen과 White는 Runge-Kutta방식을 이용하여 연료전지의 모델을 실시하였다[12]. 그리고 Fuller 와 Newman 은 전해질막을 통하는 수분의 확산에 관한 계산식을 정립하였다[13]. 하지만 상기의 연구는 1차원 모델링에 국한되어 있다. Shimpalee 등은 Fluent를 이용하여 3차원 모델링을 실시하였다[14,15]. 여기서는 직선유로를 모사하였다. 본 연구에서는 실제 사용되는 serpentine 유로를 이용하여 유체의 흐름을 변형시키고, 유체역학과 전기화학을 융합한 3차원 모델링을 이용하여 보다 심도 있는 시뮬레

이션을 통한 분석을 실시하도록 한다.

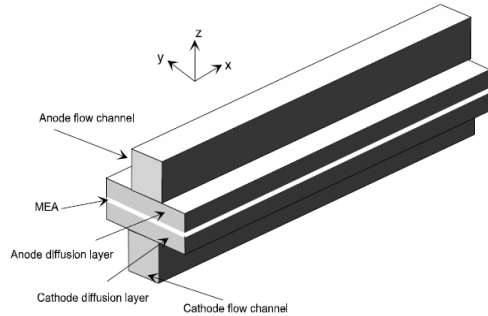
연료전지의 설계와 운전에 있어서 국부적인 연료농도, 온도, 전류밀도 그리고 압력 등의 분포는 매우 중요한 인자라고 할 수 있다. 예를 들어, 국부적인 온도의 상승이 있게 된다면 전해질막의 건조가 이루어지고 이는 전해질막의 손상을 초래하여 연료전지의 고장을 일으킬 수 있는 위험을 가지고 있다. 하지만, 실험적으로 국부적인 각종 분포를 알아보는 것은 매우 어렵고 또한 고가의 장비와 번거롭고 복잡한 실험을 수반하여 비용과 노력의 낭비가 있을 것으로 판단된다. 그러므로 큰 비용과 노력이 들지 않는 전산모사를 이용한 예측을 통하여 실험의 횟수를 줄일 수 있는 모델을 제시하려 한다. 본 연구에서는 연료전지의 모델링을 위하여 기존의 Navier-Stock 방정식을 풀이에 전기화학적 서브루틴을 융합하여 전산모사를 진행하도록 한다.

## 2. Model development

본 연구의 수행에 있어서 질량보존의 법칙, 에너지보존의 법칙 등으로 지배방정식을 설명하는데, 그 방정식들은 다음과 같이 정리할 수 있다. 그리고 본 연구를 위한 모델링의 가정은 정상상태, 기체만의 단일상계, 단열 그리고 3차원 물질전달 모델이다. [Fig. 1]에서는 연료전지의 구조가 자세히 설명되어 있다. 그림의 위쪽의 anode flow channel에는 연료인 수소가 흐르고 있고, 아래쪽의 cathode flow channel에는 공기가 흐르고 있다. 그리고 양쪽 flow channel에서 흐르고 있는 기체는 각각 anode diffusion layer와 cathode diffusion layer를 통하여 가운데의 MEA에 도달하여 이 곳에서 전기화학 반응을 일으켜 전기를 생산하게 된다. 본 연구에 사용되는 방정식은 Navier-Stoke 방정식으로써 참고문헌 [14,15]에 정리되어 있다.

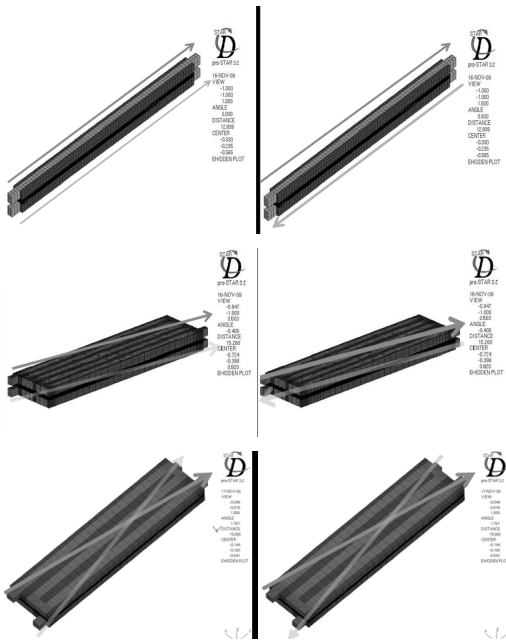
컴퓨터를 이용한 연료전지관련 연구는 six-sigma를 이용한 실험계획법을 이용하여 연료전지용 수소생산장치인 reformer의 운전에서 중요부품의 온도 등의 운전인자가 원치 않는 부산물인 CO의 생성에 있어서 중요한 인자가 어떤 것인지에 관한 분류가 진행되었다[16]. 또한 연료전지의 성능에 컴퓨터 시뮬레이션을 이용한 연구는 참고문헌 [17]에 선행되어 있다. 과거에는 3차원 시

뮬레이션을 이용하여 i-V곡선만을 모사하였다. 하지만 본 연구에서는 연료전지의 성능 및 내구성에 큰 영향을 미치는 국부적인 온도변화에 관하여 그 결과를 도출하여 보았다.



[Fig. 1] The details of fuel cell structure and grid arrangement used in this paper[15]

앞서 설명한 지배방정식을 3차원으로 설정하고 유체의 유동, 유량 온도 등의 경계조건을 설정하여 방정식을 풀었다. 첫 번째 설정으로서 모든 유로는 직선이라고 가정하고 계산을 수행했다. 직선 유로는 현실적으로 힘든 형상이며 본 연구에 있어서는 가장 단순한 형태로서 모델링의 적합성 판별을 위하여 실시하였다. 그리고 실제로 사용하고 있는 모양인 직사각형 모델을 유동장에 변형을 가한 직사각형 플립구조유로의 세 가지의 경우를 비교해 보았다. 직사각형 유로는 거울을 보듯이 포개어져 있는 형태이지만 직사각형 플립유로는 오른쪽 왼쪽이 서로 뒤 바뀐 형태로 반대로 포개진 형태를 하고 있다. 그리고 유체의 흐름은 anode와 cathode의 두 개의 흐름을 같은 방향으로 흐르는 co-flow와 반대방향으로 흐르는 counter-flow의 두 가지를 놓고 비교해 보았다. [Fig. 2]에 유로형상과 유체의 흐름에 관한 설명이 되어있다. 최적화된 유로의 설계를 찾기 위한 과정으로서 본 연구를 진행하였다. 각각의 모든 경우에서 동일한 운전조건 하에서의 모델링을 수행하였다. 그 운전조건으로서 다음과 같이 설정하였다; 셀의 온도는 70°C, anode와 cathode의 상대습도는 모두 100%, 수소와 공기의 양론 비는 각각 1.2, 2.0으로 설정하였다. 여기서 양론비란 수소의 경우 20%과잉으로 공급하고 공기의 경우 100%과잉으로 공급함을 의미한다. 단위전지 내부에서의 전기적 접촉저항은 없다고 가정하고 계산을 수행하였다.



[Fig. 2] Straight channel(top), rectangular channel (middle) and rectangular flip channel (bottom) and co-flow(left) and counter-flow(right).

### 3. 토의 및 고찰

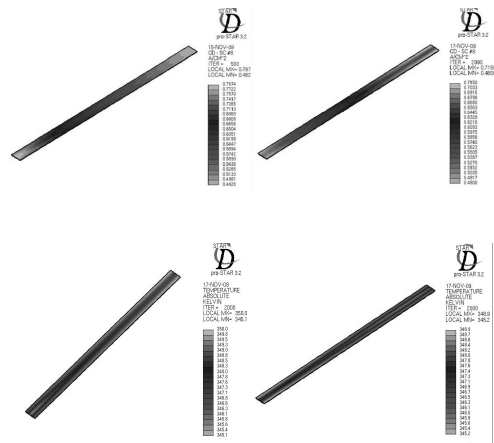
전반적인 모델링의 결과를 <Table 1>에 나타내었다. 세 가지의 다른 유로형상과 유체의 흐름 방향에 따른 결과로서 가장 우수한 성능을 나타낸 것은 직선유로 counter-flow로서 단위전지 전압 0.588V에서 전류밀도 0.61477A/cm<sup>2</sup>을 나타내었다. 또한 가장 낮은 성능을 내는 것은 직사각형 counter-flow로서 0.588V에서 0.57833A/cm<sup>2</sup>을 나타냈다.

<Table 1> Current density comparison for various flow field design and flow direction

	co-flow	counter-flow
Straight	0.61109	0.61477
Rectangular	0.58030	0.57833
Rectangular Flip	0.58995	0.58725

### 3.1 직선유로

[Fig. 3]은 직선유로에서의 co-flow 와 counter-flow의 전류밀도를 비교하고 있다. 두 가지의 흐름을 비교한 결과 표 1에서 보듯이 평균 전류밀도는 큰 차이를 보이지 않지만, 전류밀도의 분포는 판이한 모습을 보여주고 있다. co-flow에서의 부위별 전류밀도의 최대치가 0.7874A/cm<sup>2</sup> 이고 최저치가 0.4828A/cm<sup>2</sup> 이고 counter-flow에서 최대치가 0.7150A/cm<sup>2</sup>이고, 최저치가 0.4800A/cm<sup>2</sup>로서 counter-flow의 경우가 최대치와 최소치의 차이가 적다. counter-flow의 경우가 보다 고른 전류밀도를 나타내고 있다. 온도분포의 경우 co-flow에서 온도의 최대 수치는 350.0k 최저 수치는 345.1k이다. counter-flow에서 온도의 최대 수치는 348.9k 최저 수치는 345.2k이다. 수치의 차이는 비슷하나 온도 분포는 판이하다. 위에 그림에서 보이듯이 co-flow는 시작지점에서 hot spot이 형성되어 손상으로 이어질 수 있다. 이에 반해 counter-flow 경우에는 온도가 고르게 분포하고 있음을 확인할 수 있다.

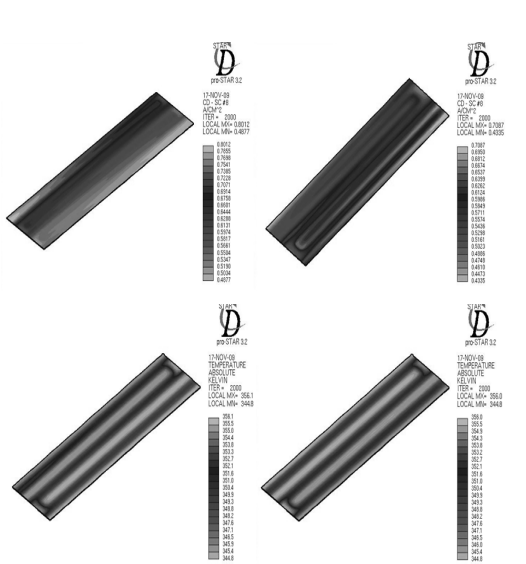


[Fig. 3] Current density distribution(top) and temperature distribution(bottom) for straight channel, co-flow(left) and counter-flow(right).

### 3.2 직사각형유로

[Fig. 4]는 직사각형유로의 전산모사 결과를 보여주고 있다. 이역시 <Table 1>에서 보듯이 평균 전류밀도의 차이는 크지 않다고 할 수 있다. co-flow 경우 최대전류밀도와 최저 전류밀도는 각각 0.8012A/cm<sup>2</sup>, 0.4877A/cm<sup>2</sup>이

고 counter-flow 경우 전류밀도 최대 전류밀도와 최저 전류밀도는 각각  $0.7087A/cm^2$   $0.4335A/cm^2$  이다. 수치적으로 차이는 적으나 이 그림에서 나타난 대로 전류밀도 분포는 큰 차이를 보여준다. 즉, counter-flow의 경우가 보다 고른 전류밀도의 분포를 보여주고 있다. 온도분포의 경우에는 co-flow에서 최고온도와 최저온도가 각각 356.1K 344.8K이다. counter-flow에서는 최고온도와 최저온도가 각각 356.0K, 344.8K 이다. 직선 유로와는 달리 직사각형유로에서의 온도분포는 큰 차이가 없다.

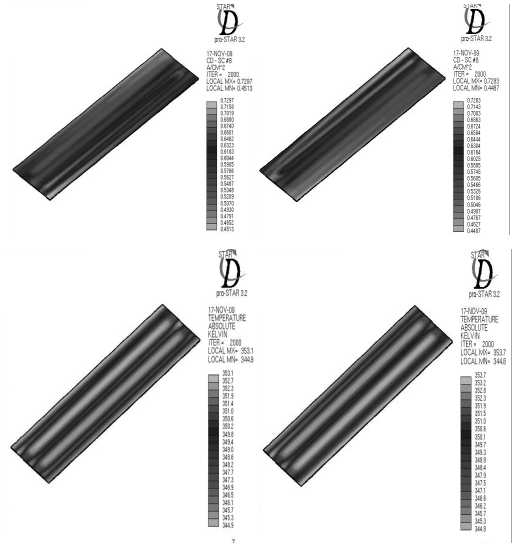


[Fig. 4] Current density distribution(top) and temperature distribution(bottom) for rectangular channel, co-flow(left) and counter-flow(right).

### 3.3 직사각형 플립유로

[Fig. 5]는 직사각형플립유로에서의 전류밀도 분포를 보여주고 있다. co-flow에서의 최대전류밀도와 최소전류밀도는 각각  $0.7297A/cm^2$  과  $0.4513A/cm^2$ 이고 counter-flow의 경우는 최대전류밀도와 최소전류밀도의 값이 각각  $0.7283A/cm^2$ ,  $0.4487A/cm^2$ 이다. <Table 1>에 나타났듯이 전류밀도의 평균치의 차이는 크지 않다. 하지만 이 그림에서 전류밀도의 분포가 co-flow일 때보다 counter-flow의 밀도 분포도가 약 한 개의 채널이 더 있어 보이는 정도로 차이가 크다. 이것은 평균전류밀도의 수치는 co-flow가 더 좋으나 counter-flip의 경우가 전류밀도의 분포는 더 고르다는 차이를 보여주고 있다. 또한

온도분포를 보면 co-flow에서의 온도의 최대치는 353.1K 최저치는 344.9K 이고 counter-flow일 때 최대치 353.7K 이고 최저치 344.8K 이다. 여기서는 위에 것들과 다르게 counter-flow의 경우에 온도가 상대적으로 높은 것이 특징이다. 이것은 위에 설명한 전류밀도에서 약 한 개의 구간이 더 많았던 것이 반응을 일으킬 때 내어진 열에 의한 것으로 이로 인하여 더 많은 열이 counter-flow 쪽에서 나온 것으로 볼 수 있다.



[Fig. 5] Current density distribution(top) and temperature distribution(bottom) for rectangular flip channel, co-flow(left) and counter-flow(right).

### 4. 결론

3차원 전산모사를 통하여 연료전지의 구조적인 부분을 모사해왔다. 그 결과 여러 가지 유로의 형상에 대한 영향성을 분석을 할 수 있었다. 뿐만 아니라 반응 기체의 흐름 방향의 영향성에 대해서도 분석을 할 수 있었다. 많은 가정을 두고 단순화 시켜서 한 모델링 이지만 이런 과정을 통하여 실험을 줄일 수 있는 정밀한 모델링에 초석을 다졌다고 볼 수 있다. 지금까지 계산해 본 결과로 미루어 연료전지 내부에서 벌어지고 있는 물리적 현상을 고찰할 수 있었다. 그 예로서 전류밀도와 온도 분포에 관한 여러 가지 분석이 가능하였다. 본 연구에서는 비록 많

은 경우에 수를 다루어 보지는 못했으나 실험이 아닌 전산모사만으로 보다 정밀하고 신뢰할 수 있는 결과를 도출했다고 자부할 수 있다. 향후에는 앞에서 주었던 가정들을 좀 더 줄이고 더 많은 변수를 고려할 수 있는 보다 정밀한 모델링을 수행할 계획이다. 아울러 실험치와 직접적으로 비교할 수 있는 모든 조건을 맞추어 실험과 모델링을 병행 할 수 있는 과제로 이끌어갈 계획이다.

## ACKNOWLEDGMENTS

This research was supported by the Sangji University Research year 2012.

## REFERENCES

- [1] W. K. Lee, C. Ho, J. W. Van Zee and M. Murthy, "The effects of compression and gas diffusion layers on the performance of a PEM fuel cell", *J. of Power Sources*, Vol. 84, pp. 45-51, 1999.
- [2] S-h. Kim, S. Shimpalee and J. W. Van Zee, "The effect of stoichiometry on dynamic behavior of a PEM fuel cell during load change", *J. of Power Sources*, Vol. 135, pp. 110-121, 2004.
- [3] S-h. Kim, S. Shimpalee and J. W. Van Zee, "The effect of reservoir and fuel dilution on the dynamic behavior of a PEM fuel cell", *J. of Power Sources*, Vol. 137, pp. 43-52, 2004.
- [4] S-h. Kim, S. Shimpalee and J. W. Van Zee, "The effect of flow field design and coltage range on the dynamic behavior of a PEMFC", *J. of Electrochem. Soc.*, Vol. 152, pp. A1265-A1271, 2005.
- [5] S. Kiattamong, Angkee Sripakagorn, "Effects of the Geometry of the Air Flowfield on the Performance of an Open-Cathode PEMFC - Transient Load Operation", *Energy Procedia*, Vol. 79, pp. 612-619, 2015.
- [6] B. Kim, D. Cha and Y. Kim, "The effects of air stoichiometry and air excess ratio on the transient response of a PEMFC under load change conditions", *Applied Energy*, Vol. 138, pp. 143-149, 2015.
- [7] J. Shan, R. Lin, S. Xia, D. Liu and Q. Zhang, "Local resolved investigation of PEMFC performance degradation mechanism during dynamic driving cycle", *Int. J Hyd. Energy*, Vol. 41, No. 7, pp. 4239-4250, 2016.
- [8] J. Shan, R. Lin, S. Xia, D. Liu and Q. Zhang, "Local resolved investigation of PEMFC performance degradation mechanism during dynamic driving cycle", *Int. J Hyd. Energy*, Vol. 41, No. 7, pp. 4239-4250, 2016.
- [9] S. M. Chang and H. S. Chu, "Transient behavior of a PEMFC", *J. of Power Sources*, Vol. 161, No 2, pp. 1161-1168, 2006.
- [10] Q. S., M. Hou, X. Yan, D. Liang, Z. Zang, L. Hao, Z. Shao, Z. Hou, P. Ming, B. Yi, "The voltage characteristics of proton exchange membrane fuel cell (PEMFC) under steady and transient states", *J. of Power Sources*, Vol. 179, No 1, pp. 292-296, 2008.
- [11] T. V. Reshetenko, G. Bender, K. Bethunea, R. Rocheleau, "A segmented cell approach for studying the effects of serpentine flow field parameters on PEMFC current distribution", *Electrochim. Acta*, Vol. 88, pp. 571-579, 2013.
- [12] T.V. Nguyen, R.E. White, "A water and heat management models for PEMFC", *J. Electrochem. Soc.* Vol. 140, pp. 2178-2186, 1993.
- [13] T. F. Fuller, J. Newman, "Water and thermal management in solid polymer electrolyte fuel cells", *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 140 pp. 1218-1225, 1993.
- [14] S. Shimpalee, D. Dutta, W. K. Lee and J. W. Van Zee, "Effect of humidity on PEM fuel cell performance Part II: Numerical Simulation", *Proc. of ASME IMECE*, Nashville, TN HTD 364-1, pp. 367-364, 1999.
- [15] S. Dutta, S. Shimpalee and J. W. Van Zee, "Three-dimensional numerical simulation of straight channel PEM fuel cells", *J. Appl. Electrochem.*, Vol.135 pp. 30-46. 2000.

- [16] K.-Y. Chung and S. Kim, "Optimization of fuel processing unit of fuel cell system using six-sigma technique", J. Digital Policy & Management, Vol. 10, No. 2, pp. 225-229. 2012.
- [17] S. Kim, "Performance Analysis of PEMFC Using Computational Flow Dynamics (CFD)", J. Digital Policy & Management, Vol.11 No. 8, pp. 199-204. 2013.

김 세 현(Kim, Se Hyun)



- 1984년 2월 : 고려대학교 지질학과 (이학석사)
- 1993년 2월 : 고려대학교 지질학과 (이학박사)
- 1985년 3월 ~ 현재 : 상지대학교 신 에너지자원공학과 교수
- 관심분야 : 친환경 에너지
- E-Mail : shkim@sangji.ac.kr