

캐소드 유로에서 블록과 서브 채널의 고분자 전해질 연료전지의 성능에 관한 전산해석 연구

조성훈 · 김준범[†]

울산대학교 화학공학부
(2021년 9월 16일 접수, 2021년 10월 22일 수정, 2021년 10월 22일 채택)

Numerical Study on Performance of PEMFC with Block and Sub-channel of Cathode Flow Field

Seonghun Jo and Junbom Kim[†]

School of Chemical Engineering, University of Ulsan, Ulsan 44610, Korea
(Received September 16, 2021; Revised October 22, 2021; Accepted October 22, 2021)

초 록

고분자 전해질 연료전지의 유로 형상은 내부 유동의 균일성에 영향을 주는 변수이다. 유로 내에서 반응물 분포가 균일하지 않을 경우, 지속적인 운전 과정에서 촉매의 열화 및 고분자 막의 기계적 손상이 야기되며 연료전지의 내구 수명 저하로 이어진다. 연료전지에서 원활한 반응물 공급과 균일한 농도 분포를 위하여 유로 형상에 관한 연구들이 활발히 진행되고 있다. 유로의 배플은 유체의 강제 대류를 야기해 연료전지의 성능을 개선할 수 있고, 유로 중간에 새로운 반응물 공급 통로(서브 채널)를 만들어 반응물 농도 증가와 원활한 물 배출로 물질 전달 손실을 감소시킬 수 있다. 본 연구에서는 전산 유체 계산을 통하여 블록과 서브 채널을 적용한 유로가 연료전지의 전류밀도와 산소 농도에 미치는 영향을 분석하였다. 블록과 서브 채널이 유로에 구성되었을 때, 한계전류밀도가 증가하였고 블록 후단의 산소 농도가 회복되었다. 블록이 2개 이상 있을 때 블록 사이에 서브 채널을 배치할 경우 전류밀도 증가 폭이 더욱 커졌다. 또한 추가 공급되는 공기의 공급 위치에 따른 산소 농도를 분석하여 서브 채널이 블록 후단의 낮아진 산소 농도를 회복할 수 있었다.

Abstract

A flow channel shape of PEMFC has an influence on the internal flow uniformity. If the reactant distribution in a flow path is not uniform during operation, both catalyst deactivation and mechanical damage of membrane could occur resulting in decreasing the membrane electrode assembly (MEA) durability. Numerous studies concerning flow design have been conducted to make smooth supply and uniform distribution of reactants in fuel cells. The baffle of flow path could improve fuel cell performance through the forced convection effect. A sub-channel, as an additional air flow path, could increase the reactant concentration and reduce the mass transfer loss via a smooth water discharge. In this study, computational fluid dynamics (CFD) was used to analyze the effect of blocks and sub-channels on the current density and oxygen concentration of the fuel cell. As a result, the limit current density and oxygen concentration at a rear block increased when using blocks and sub-channels in a flow channel. In particular, the current density increased significantly when the sub-channel was placed between two blocks. Also, the sub-channel position was optimized by analyzing the oxygen concentration, and the oxygen concentration was recovered at a rear block in the fuel cell.

Keywords: PEMFC, Numerical analysis, Baffle blockage, Sub-channel, Oxygen concentration

1. 서 론

연료전지는 전기화학반응을 통하여 에너지를 생산하는 장치이며

작동 중에 대기 오염 물질이나 온실 가스를 배출하지 않기 때문에 내연기관을 대체하는 차세대 동력원이나 발전원으로 주목받고 있다. 여러 종류의 연료전지 중에서도 특히 고분자 전해질 연료전지 (Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell, PEMFC)는 낮은 작동 온도와 높은 전력 밀도의 특징을 갖기 때문에 수송용의 동력원으로 적합하다[1]. 고분자 전해질 연료전지는 크게 촉매와 전해질막이 결합된 막전극접합체(membrane electrode assembly, MEA), 반응 유체와 전자 전달을 매개하는 기체확산층(gas diffusion layer, GDL), 분리판(bipolar plate,

[†] Corresponding Author: University of Ulsan
School of Chemical Engineering, Ulsan 44610, Korea
Tel: +82-52-259-2833 e-mail: jbkim@ulsan.ac.kr

BP) 등으로 구성된다. 그 중에서 분리판은 반응 유체가 촉매의 전기 화학반응 지점까지의 이동할 수 있는 경로인 유로를 제공한다. 분리판의 유로는 반응 유체가 촉매의 모든 활성 면적에서 균일하게 분포될 수 있도록 설계되어야 한다[2-4]. 이러한 사항이 면밀히 고려되지 못한 분리판 유로를 사용할 경우, 불균일한 반응물 분포로 인하여 연료전지 내의 국부 지점에서 생성물과 열의 축적을 야기하기 때문에 결과적으로 연료전지의 내구성을 감소시킨다.

실험적으로 연구되는 연료전지 분리판의 주요한 3가지 유로에는 사형(serpentine) 구조, 평행(parallel) 구조, 인터디지테이트(interdigitated) 구조가 있다[5]. 사형 구조는 연료전지에서 찾을 수 있는 가장 일반적인 분리판 형태이며 하나의 유로로 입출구가 연결되기 때문에 반응으로 생성된 액상의 물을 강제 배출할 수 있다[6]. 다만 평행 구조와 상반되는 유로의 형태에 의해 입출구의 큰 압력 강하가 수반된다[7]. 연료전지에서 압력 강하는 주변 장치(balance of plant, BOP), 특히 공기공급계 중의 컴프레서의 전력 요구량을 증가시킬 수 있다. 평행 구조는 입출구를 잇는 유로가 여러 평행한 세부 유로로 분기된 형태를 띤다. 때문에 낮은 압력 강하로 인하여 주변 장치의 요구 동력이 낮다는 장점을 갖지만, 매니폴드(manifold) 구조에 따라 균일하지 못한 유체 흐름이 야기될 수 있다는 단점이 있으므로 평행 유로 구조에 균일하게 반응물을 공급할 수 있는 적절한 설계가 필요하다. 인터디지테이트 구조는 입구와 출구의 유로가 서로 깎지를 낀 형태이며, 입구와 출구가 직접적으로 연결되어 있지 않다. 따라서 공급된 반응 유체는 낮은 압력의 출구 방향으로 이동하기 위하여 기체확산층을 반드시 통과해야 하는데 이 때 촉매층으로 많은 양의 반응 유체가 흘러 들어간다. 이 과정을 통해 전기 화학 반응 지점에서의 반응물 물질 전달이 보다 용이하며 유체의 전단력으로 인한 물의 제거 능력 또한 높일 수 있다. 앞서 설명한 평행과 사형 구조는 반응물이 유로에서 기체확산층 표면으로 이동하기 위해 유동 방향에 수직으로 확산되어야 하지만, 인터디지테이트 구조는 강제 대류 효과를 통해 보다 효율적인 반응물 전달을 가능하게 한다[8]. 앞서 언급한 3 가지 유로 구조 이외에도 메시(mesh), 생체 모방(biomimicry) 구조 등이 있으며 분리판 유로 구조 설계는 다음의 항목을 만족시키는 방향으로 설계되어야 한다[9].

1. 모든 촉매층에 균일한 반응물 공급
2. 높은 전기전도도를 위한 충분한 릫(rib) 면적
3. 산소(공기)의 낮은 압력 강하
4. 간단하고 효과적인 액상 물 제거
5. 캐소드 전류 부하를 만족시킬 수 있는 충분한 공기 공급 속도

많은 연구자들이 위 항목을 만족시킬 수 있는 분리판 유로를 설계하고 있는데[10-17], 분리판 유로 설계는 유체 역학과 물질 전달, 열 전달 등의 학문과 밀접한 연관이 있기 때문에 대부분의 연구가 컴퓨터 이용 공학(computer aided engineering, CAE)을 활용한 전산 해석으로 수행되는 편이다. Yin[18]은 연료전지 유로 내에 관형 장애물이 연료전지 성능과 물질 전달 특성에 미치는 영향에 대한 연구를 전산 해석적으로 수행하였다. 관형 장애물은 장애물 근처에 존재하는 반응물의 국부 유속을 빠르게 하고 이를 통해 반응물의 물질 전달 속도와 액상의 물의 제거를 빠르게 할 수 있다고 보고하였다. 결과적으로 다공성 기체확산층에서의 반응물 농도가 상승하였으며 농도 과전압을 감소할 수 있었다. Soong[19]은 관형 장애물의 간격, 기체확산층 기공율, 레이놀즈 수를 연구의 매개 변수를 설정하여 변수들이 수분 응축, 압력 강하에 미치는 영향을 연구하였다. 이처럼 연료전지 유로에 효

과적인 물질 전달을 위해 배치한 장애물은 배플 블록(baffle blockage) 또는 블록으로 불리며 많은 변주 형태로 적용된 연구가 수행되고 있다. 다만 유로에 배치된 블록은 마치 인터디지테이트 구조처럼 유로의 일부 또는 전체를 막고 있기 때문에 연료전지의 큰 압력 강하를 야기할 수 있으며 후단의 산소 농도가 급격하게 감소하여 블록 후단의 유로 상황에 부정적인 영향을 끼칠 수 있다.

따라서 본 논문에서는 연료전지 유로에서의 효과적인 물질 전달을 위해 배치한 블록이 블록 후단의 산소 농도에 미치는 영향을 알아보고자 하였다. 블록의 수를 달리하였을 때의 성능 변화와 유로의 산소 농도 분포를 먼저 확인하였다. 이후 블록 후단의 낮아진 산소 농도를 극복하기 위하여 블록 후단에 가습 공기를 추가로 공급하는 서브 채널을 배치하였다. 블록과 서브 채널에 의한 연료전지의 성능 및 산소 농도 분포가 개선되는지 전산 해석 연구를 통하여 수행하였다.

2. 실험

2.1. 지배방정식

반응이 존재하는 시스템의 연속 방정식(continuity equation)은 식 (1)과 같이 나타낼 수 있다.

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i \vec{v}_i) = S_i \quad (1)$$

식 1에서 ρ 는 밀도, \vec{v} 는 유체의 속도, S 는 근원 항(source term)으로 화학종 i 의 반응으로 인한 생성과 소모를 의미한다. 연료전지 내의 반응에서는 소모되는 화학종으로 수소와 산소, 생성되는 화학종으로는 물이 식 (1)에 적용된다.

유체의 거동을 나타내는 운동량 보존 방정식(momentum conservation equation)은 다음 식 (2-1)과 (2-2)로 표현된다.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\bar{\tau}) + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (2-1)$$

$$\bar{\tau} = \mu \left[(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} \right] \quad (2-2)$$

식 (2-1)에서 p 는 정압(static pressure), $\bar{\tau}$ 는 스트레스 텐서, μ 와 I 는 각각 유체의 점도와 단위 텐서를 의미하며 $\rho \vec{v}$ 는 유체에 작용하는 중력 항, \vec{F} 는 다공성 매질(porous media)을 통과하는 유체에 대한 운동량 손실 벡터이다. 스트레스 텐서는 식 (2-2)로 표현할 수 있다.

반응 유체인 수소와 산소는 유로를 통해 흐르며 확산(diffusion) 메커니즘으로 다공성의 기체확산층을 통과하여 전극에 도달한다. 이 때, 유체는 수소, 산소, 질소와 수증기 등의 다성분(multicomponent) 유체이기 때문에 다 성분 확산을 고려한 물질 전달 방정식인 Maxwell-Stefan 방정식으로 해석에 적용되며 식 (3-1)으로 표현된다.

$$\sum_{j=1}^N \frac{X_i X_j}{D_{ij}} (\vec{v}_j - \vec{v}_i) = \vec{a}_i - \frac{\nabla T}{T} \sum_{j=1}^N \frac{X_i X_j}{D_{ij}} \left(\frac{D_{Tj}}{\rho_j} - \frac{D_{Ti}}{\rho_i} \right) \quad (3-1)$$

위 식에서 X 는 화학종에 대한 몰 분율(mole fraction)이며 \vec{v} 는 확산 속도(diffusion velocity), D_{ij} 는 2성분 확산계수(diffusion coefficient), D_T 는 열 확산 계수(thermal diffusion coefficient), T 는 절대 온도로 정의된다. 이상 기체의 경우에 Maxwell 확산 계수는 2성분 확산 계수와

같다. 만약 외력(external force)이 모든 화학종에 동일하게 적용되어 압력에 대한 확산이 무시될 수 있다면, $\vec{d}_i = \nabla X_i$ 로 표현될 수 있다. 질량 플럭스 벡터(diffusive mass flux vector)는 $\vec{j}_i = \rho_i \vec{v}_i$ 이므로 몇 가지 수학적 조작을 통해 식 (3-1)을 다음으로 간략히 표현할 수 있다.

$$\vec{j}_i = -\sum_{j=1}^{N-1} \rho D_{ij} \nabla Y_j - D_{T,i} \frac{\nabla T}{T} \quad (3-2)$$

N 은 화학종의 수, Y_j 는 화학 종 j 의 질량 분율로 정의된다. 다른 항은 다음으로 표현된다.

$$D_{ij} = [D] = [A]^{-1}[B] \quad (3-3)$$

$$M_{w,m} = \left(\sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{M_{w,i}} \right) \quad (3-4)$$

$$A_{ii} = -\left(\frac{X_i M_{w,m}}{D_{iN} M_{w,N}} + \sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{X_j M_{w,m}}{D_{ij} M_{w,i}} \right) \quad (3-5)$$

$$A_{ij} = X_i \left(\frac{1}{D_{ij}} \frac{M_{w,m}}{M_{w,i}} + \frac{1}{D_{iN}} \frac{M_{w,m}}{M_{w,N}} \right) \quad (3-6)$$

$$B_{ii} = -\left(X_i \frac{M_{w,m}}{M_{w,N}} + (1 - X_i) \frac{M_{w,m}}{M_{w,i}} \right) \quad (3-7)$$

$$B_{ij} = X_i \left(\frac{M_{w,m}}{M_{w,j}} - \frac{M_{w,m}}{M_{w,N}} \right) \quad (3-8)$$

$[A]$ 와 $[B]$ 는 $(N - 1) \times (N - 1)$ 크기의 행렬이다. $[D]$ 는 일반화된 Fick의 법칙의 확산 계수 D_{ij} 에 대한 행렬이며 $(N - 1) \times (N - 1)$ 의 크기를 갖는다. M_w 는 분자량이며 하 첨자 m 은 혼합물에서의 평균 분자량을 의미한다.

연료전지 해석에서 전기화학반응에 대한 모델은 가장 중요하게 고려된다. 각 전극에서 일어나는 산화환원반응의 구동력(driving force)은 고체상 전위(ϕ_{sol})와 전해질막 전위(ϕ_{mem})의 전위차인 표면 과전압(surface overpotential)이다. 따라서 전체 연료전지 모델을 해석하려면 고체 물질, 집전판(current collector), 다공성 기체확산층으로의 전자 전달 방정식과 전해질 막에서의 양성자 이동 방정식이 요구되며 식 (4-1)과 (4-2)로 표현할 수 있다.

$$\nabla \cdot (\sigma_{sol} \nabla \phi_{sol}) + R_{sol} = 0 \quad (4-1)$$

$$\nabla \cdot (\sigma_{mem} \nabla \phi_{mem}) + R_{mem} = 0 \quad (4-2)$$

위 식에서 σ 는 전기전도도, ϕ 는 전위, R 은 체적 전류 전류(volumetric transfer current)이다. 전류 근원 항 R 은 촉매층에서 0이 아니며 교환 전류 밀도(exchange current density)라고 불린다. 이 때 해당 항을 식 (4-3)과 (4-4)의 Butler-Volmer 방정식으로 표현할 수 있다.

$$R_{an} = (\zeta_{an} j_{an}^{ref}) \left(\frac{[A]}{[A]_{ref}} \right)^{\gamma_{an}} (e^{\alpha_{an} F \eta_{an} / RT} - e^{-\alpha_{cat} F \eta_{an} / RT}) \quad (4-3)$$

$$R_{cat} = (\zeta_{cat} j_{cat}^{ref}) \left(\frac{[C]}{[C]_{ref}} \right)^{\gamma_{cat}} (-e^{\alpha_{an} F \eta_{cat} / RT} + e^{-\alpha_{cat} F \eta_{cat} / RT}) \quad (4-4)$$

2.2. PEMFC 형상 격자 및 경계 조건

본 연구는 직선 유로를 갖는 단 채널 연료전지의 전산 해석을 통해 진행되었다. 연료전지 모델의 실 반응 면적은 1.5 cm^2 이고 애노드와

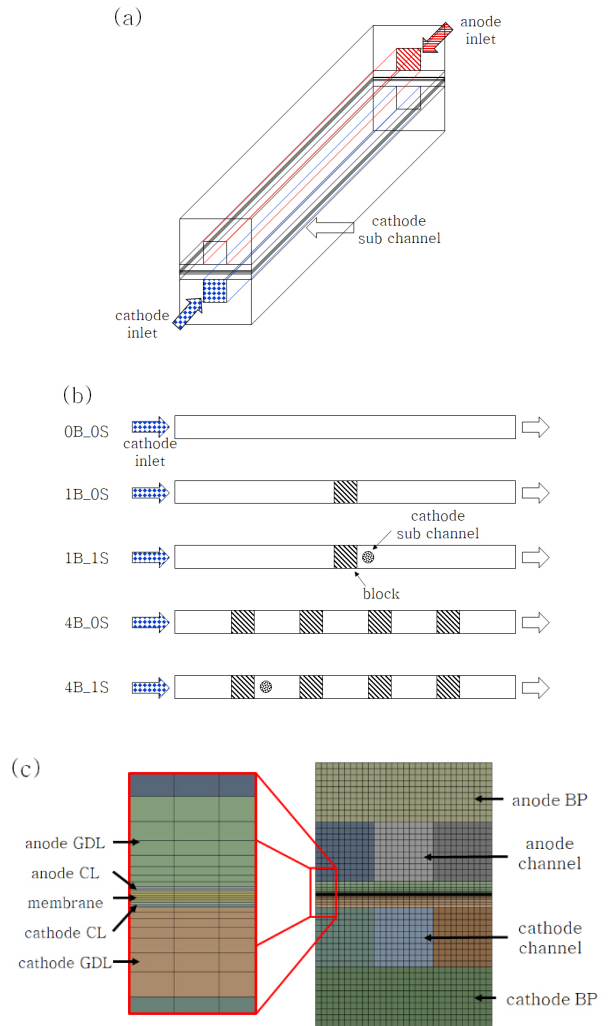


Figure 1. Schematic of (a) domain geometry, (b) block and sub-channel configuration, (c) cross-section mesh.

캐소드는 흐름이 서로 교차하는 항류(countercurrent flow)로 설정하였으며 해당 형상을 figure 1(a)에 표현하였다. 블록의 개수, 서브 채널의 유무에 따른 총 5 가지의 해석 형상들을 figure 1(b)에 나타내었다. 유로 0B_0S는 블록과 서브 채널이 없는 일반적인 유로 구조이다. 유로 1B_0S는 유로 중앙에 하나의 블록을 배치한 구조이며, 유로 1B_1S에는 유로 중앙에 배치한 1개의 블록 뒤에 1개의 서브 채널을 추가하였다. 유로 4B_0S는 4개의 블록을 1 mm 간격으로 배치한 구조이다. 유로 4B_1S는 유로 4B_0S의 첫 번째 블록 뒤에 1개의 서브 채널을 추가한 구조이다. 블록은 채널의 전체 부분을 막는 크기로 구성하였으며, 원형의 입구를 가진 서브 채널은 첫 번째 블록에서 0.25 mm 떨어진 곳에 위치해 측면에서 가습된 공기가 공급되도록 하였다. Table 1에는 전산 해석에 사용된 5가지 유로를 측면에서 바라본 모습을 나타내었다.

본 연구의 해석 도메인은 모든 요소가 육면체로 구성되는 간단한 구조이기 때문에 육면체 격자를 적용하였다. 기체확산층과 막전극접합체를 제외한 도메인 단면의 격자는 크기가 0.1 mm인 정사각형으로 설정하였으며 해석 형상의 단면에 대한 격자의 정보를 figure 1(c)에 나타내었다. 전산 해석에서 인접한 격자의 급격한 크기 변화는 수렴

Table 1. Geometry Information of PEMFC Model

Geometry	value	Unit	Mesh layer
Channel			
Length × height × width	50 × 1 × 1	mm	10
Block			
Length × height × width	1 × 1 × 1	mm	10
Bipolar plate			
Thickness	1	mm	10
Gas diffusion layer			
Thickness	200	mm	7
Catalyst layer			
Thickness	10	mm	2
Membrane			
Thickness	25	mm	5
Sub-channel			
diameter	0.5	mm	-

Table 2. PEMFC Analysis Parameters and Operating Conditions

Property	value	Unit
Operating condition		
temperature	65	°C
pressure	1	atm
anode relative humidity	0	%
cathode relative humidity	100	%
anode mass flow rate	3.73×10^{-8}	kg s ⁻¹
cathode mass flow rate(main inlet)	1.72×10^{-6}	kg s ⁻¹
cathode sub-channel mass flow rate	8.6×10^{-7}	kg s ⁻¹
Membrane		
Equivalent weight, EW	1100	-
Proton conduction coefficient, β_{mem}	1	-
Proton conduction exponent, ω_i	1	-
Water diffusivity coefficient, η_λ	1	-
Absolute permeability, K	1×10^{-18}	m ²
Gas diffusion layer		
Porosity, ϵ	0.6	-
Absolute permeability, K	3×10^{-12}	m ²
Contact angle	110	deg
Water removal coefficient	5×10^{-5}	s/m
Catalyst layer		
Porosity, ϵ	0.2	-
Absolute permeability, K	2×10^{-13}	m ²
Surface to volume ratio, ζ	2×10^5	m ² Pt m ⁻³
Contact angle	95	deg
Reaction parameters		
Anode reference exchange current density, J_a^{ref}	10000	A m ⁻²
Cathode reference exchange current density, J_c^{ref}	10	A m ⁻²
Anode reference concentration, $[H_2]_{ref}$	1	kmol m ⁻³
Cathode reference concentration, $[O_2]_{ref}$	1	kmol m ⁻³
Anode concentration exponent, γ_a	1	-
Cathode concentration exponent, γ_c	1	-
Anode transfer coefficient, α_{an}	1	-
Cathode transfer coefficient, α_{cat}	1	-

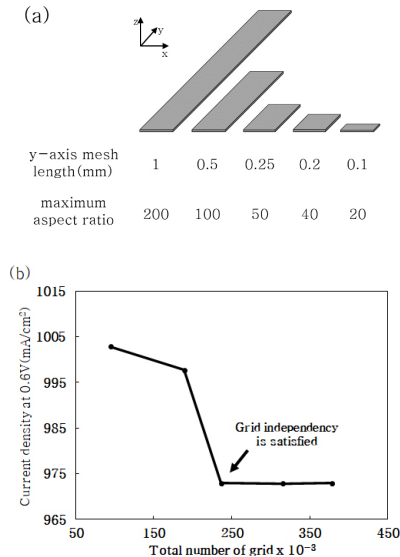


Figure 2. Aspect ratio and number of grid effect (a) maximum aspect ratio with y-axis mesh length, (b) number of grid effect.

성을 방해하는 요인이다. 해당 연구에서 사용된 연료전지 형상은 각각 두께가 다른 부품을 포함하고 있으며, 분리판-유로와 촉매층의 두께는 1000배의 차이가 난다. 두 경계면을 모두 접하는 부품인 기체확산층의 격자가 급격하게 변하지 않도록 하기 위해 격자의 크기를 점진적으로 증가 또는 감소시키는 bias factor를 기체확산층의 격자 조건에 적용하였으며 그 값은 5로 설정하였다. Bias factor bf 와 격자 성장률 r , 격자의 개수 n 의 관계식은 식 (5)과 같이 표현된다.

$$bf = r^{n-1} \tag{5}$$

전산 해석에서는 사용되는 격자의 개수가 많을수록 해석의 정확도가 증가하지만 해석 시간이 크게 늘어날 수 있다. 그러므로 격자 생성 과정에서 해석 형상에 대한 최적의 격자 수를 구하기 위해 격자 독립

성 평가를 진행한다. 본 연구에서는 해석 형상의 격자의 개수를 조절하기 위하여 해석 형상의 y축 격자 길이(유체 흐름 방향)를 줄이면서 특정 해석 조건에서 값이 변하지 않는 격자 설정을 찾아보았다. 형상의 y축 격자 길이는 각각 1 mm, 0.5 mm, 0.25 mm, 0.2 mm, 0.1 mm로 모두 5 가지로 설정하였으며 이에 대한 형상의 총 격자 수는 94,500, 189,000, 236,250, 315,630, 378,000 개이다. 다만, 해석의 수렴성을 위해 ZY평면 형상 격자에 대한 최대 중횡비(maximum aspect ratio)가 200을 넘어가지 않도록 하였다. 격자 설정 길이에 대한 형태와 최대 중횡비를 figure 2(a)에 나타내었다. Figure 2(b)는 유로 A의 유로 구조에서 연료전지 셀 전압을 0.6 V로 설정하였을 때 계산된 총 전류밀도 값이다. 격자 수가 증가할수록 동일 조건에 대한 총 전류밀

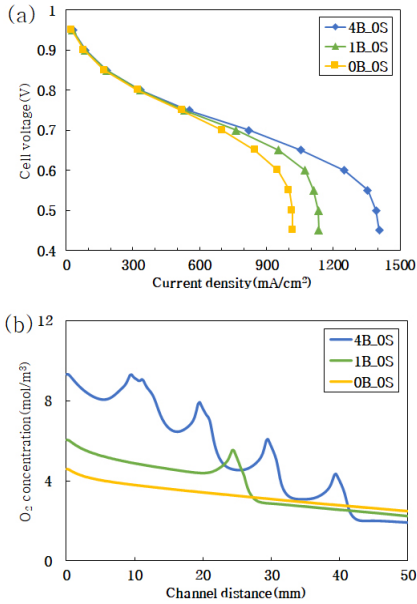


Figure 3. Cell performance and oxygen distribution on cathode flow field with a block (a) effect of block on polarization curve, (b) effect of block on oxygen molar concentration at 0.45 V.

도가 감소하며 격자 수가 236,250개부터 특정 값에 수렴하였다. 따라서 본 연구에서는 격자 수가 236,250개일 때의 격자 구성(유체 흐름 방향의 격자 길이 0.25 mm)을 모든 해석 형상에 적용하였다.

해석을 위한 입력 매개변수와 경계 조건을 Table 2에 나타내었다. 본 연구는 상용 전산 해석 프로그램인 ansys fluent 2020의 연료전지 해석 모듈을 사용하였다. 해석은 정상 상태(steady-state), 층류 흐름(laminar flow), 비압축성 유동(incompressible flow) 조건에서 진행되었으며 열전달과 중력은 고려하지 않았다. 반복 계산에서의 잔차(residual)가 10^{-6} 이하일 때 해석이 수렴되었다고 판단하도록 하였으며 해석의 수렴성을 증가시키기 위하여 모멘텀과 압력, 화학 종, 수분 응축에 대한 감속완화계수(under relaxation factor)를 각각 0.3, 0.7, 0.95, 0.95로 설정하였다[22]. 애노드와 캐소드에 공급되는 수소와 공기의 질량 유량은 연료전지가 전기화학반응으로 1600 mA/cm^2 의 전류밀도를 출력할 수 있는 이론적 양에 양론 비율(stoichiometric ratio)을 각각 1.5, 2.0을 곱하여 입력하였다. 서브 채널에 공급되는 공기는 기존 캐소드 입구에 공급되는 공기의 50%가 공급되도록 하였으며 온도와 습도 등 물리적 변수를 동일하게 설정하였다. 본 논문에서 표현된 산소 농도 분포와 산소 질량 분율에 대한 그림은 모두 셀 전압 0.45 V의 조건에서 얻은 데이터이다.

3. 결과 및 고찰

3.1. 유로에 배치된 블록에 대한 영향

Figure 3(a)는 블록이 없는 직선 유로 0B_0S와 1개의 블록을 갖는 유로 1B_0S, 4개의 블록을 갖는 유로 4B_0S에 대한 전압-전류 곡선을 나타낸 것이다. 셀 전압 0.75 V보다 높은 전압 조건에서는 블록의 유무에 상관없이 3가지 유로에서 모두 동일한 전류밀도를 보이지만 0.75 V 보다 낮은 전압 조건에서는 블록의 유무와 개수에 따라서 다른 전류밀도를 보였다. Figure 3(a)에서 유로 0B_0S와 유로 1B_0S의

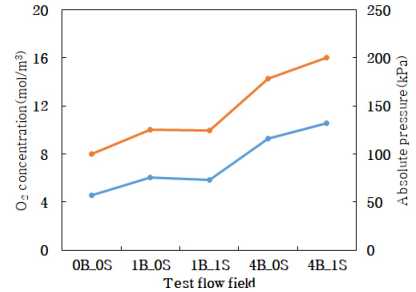


Figure 4. Oxygen concentration and pressure on cathode inlet at 0.45 V.

분극 곡선을 비교하여 볼 때, 유로에 1개의 블록이 추가될 경우에 셀 전압 0.45 V에서 전류밀도가 약 100 mA/cm^2 높게 계산되었다. 캐소드 유로에 블록과 같은 장애물이 있다면 캐소드 입구로 공급되는 반응 유체인 공기는 블록을 만난 후 다공성의 기체확산층 방향으로 향한다. 즉, 물질 전달 메커니즘 관점에서 느린 확산이 아니라 상대적으로 빠른 강제 대류로 반응 유체가 전달되며 결과적으로 물질 전달 영역에서 전류밀도의 증가가 이루어졌다고 판단할 수 있다. 블록의 개수에 대한 영향을 비교해보면, 4개의 블록을 가진 유로 4B_0S가 유로 1B_0S보다 셀 전압 0.45 V의 조건에서 약 250 mA/cm^2 높은 전류밀도를 보였기 때문에 블록 개수의 증가로 인하여 더 높은 전류밀도를 나타냄을 확인하였다.

셀 전압이 0.45 V 조건에서 채널의 길이에 따른 기체확산층과 촉매층의 계면에서의 산소 몰 농도를 Figure 3(b)에 표현하였다. 유로 입구 측의 산소 농도는 유로 0B_0S, 1B_0S, 4B_0S가 각각 4.6 mol/m^3 , 6.1 mol/m^3 , 9.3 mol/m^3 로 블록이 있는 유로는 그렇지 않은 유로에 비해서 입구 측의 산소 농도가 높았다. Figure 4는 해석된 모든 유로에 대하여 캐소드 입구 산소 농도와 압력을 표현한 것이다. 해당 그래프에서는 입구 산소 농도와 압력이 해석 형상에 따라 같은 경향성을 보인다. 따라서 블록 개수 증가로 인한 유로 내부 압력 증가가 높은 산소 농도를 야기한다고 판단하였다. 블록 전단의 산소 농도가 증가한 반면, 블록 구간에서의 산소 농도가 피크에 도달한 뒤 급격하게 감소하였다.

Figure 5(a)는 Figure 3의 3 가지 유로 형상에 대하여 기체확산층-촉매층 계면의 산소 농도 분포를 시각적으로 표현한 것이다. 유로 0B_0S의 산소 농도 분포인 Figure 5(a)와 유로 1B_0S, 4B_0S의 산소 농도 분포인 Figure 5(b), (c)를 비교해보면, 블록이 위치한 구간 주위에서 산소의 농도가 뚜렷하게 증가함을 확인할 수 있다. 유로 0B_0S는 블록이 없기 때문에 유로와 기체확산층이 직접적으로 접하는 계면에서만 높은 산소 농도를 보이고, 유로에 직접적으로 닿지 않는 계면(분리판과 접하는 기체확산층-촉매층 계면)에서는 상대적으로 산소 농도가 낮다. 반면, 블록이 있는 유로 1B_0S, 4B_0S는 블록을 중심으로 산소 농도가 증가하여 유로와 기체확산층이 직접적으로 접하지 않는 부분까지 산소 농도가 증가하였다. 유로와 기체확산층 내에서의 속도 유선(streamline)을 표현한 Figure 5(b)를 보면, 블록이 위치한 구역 주위에서 기체확산층 전반에 산소가 공급됨을 확인할 수 있다. 그러므로 블록이 연료전지 캐소드 유로에 위치할 때, 그렇지 않은 유로에 비해서 블록과 맞닿는 기체확산층 주위로 반응물인 산소를 원활히 공급할 수 있기 때문에 물질 전달 손실이 감소되었다고 해석할 수 있다.

다수의 블록을 유로에 배치하면 기체확산층으로의 강제 대류 횡수를 늘려 전기 화학 반응에 필요한 반응물을 확산보다 빠르게 전달할

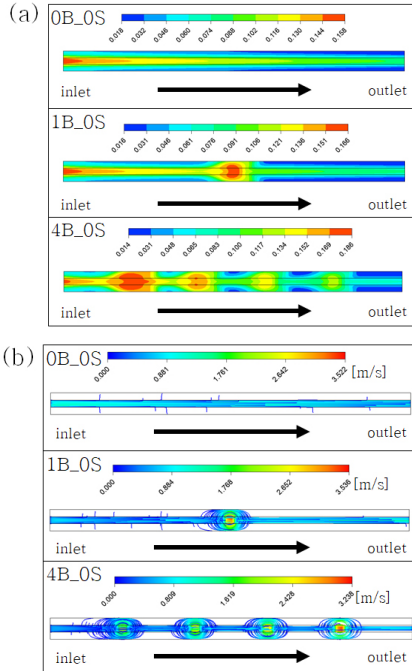


Figure 5. Block effect on flow field at 0.45 V (a) oxygen mass fraction at interface between GDL and catalyst layer, (b) velocity streamline on flow field.

수 있으므로 물질 전달 손실을 줄일 수 있는 장점이 있지만, 블록의 배치로 인하여 블록 후단에서의 산소 농도가 급격히 감소하였다. 이는 단채널 해석에는 크게 문제될 것이 없는 것처럼 보이나, 다채널 (multi-channel) 유동 및 스택에 블록을 배치되게 된다면 매니폴드 출구에 도달하기 전에 다수의 유로 후단에서 농도 불균형을 야기할 수 있다. 이러한 불균형은 전체 반응 면적에서 불균일한 물리 화학적 피로들을 발생시키기 때문에 이를 해결하기 위한 방안으로 후단의 서브 채널을 구성하여 추가적인 해석을 진행하였다.

3.2. 블록을 가진 유로에 배치된 서브 채널에 대한 영향

블록 후단의 낮아진 산소 농도를 극복하기 위하여 블록 후단에 가습 공기를 추가로 공급하는 서브 채널을 통해 블록 후단에 직접적으로 공기를 공급하여 해석을 수행하였다. 서브 채널은 첫 번째 블록에서 0.25 mm 떨어진 곳에서 배치하였으며, 0.5 mm의 직경을 갖는 원기둥 형태로 구성하였다. 유로 입구 유량 1.72×10^{-6} kg/s의 절반인 8.6×10^{-7} kg/s을 서브 채널로 공급하였으며 서브 채널로 공급되는 공기의 상대 습도 및 온도 등 모든 물리적 변수는 입구 유량과 동일하게 설정하였다. 서브 채널은 블록의 개수에 상관없이 모두 첫 번째 블록 이후에 배치하였다.

Figure 6에는 4 가지 유로 1B_OS, 1B_1S, 4B_OS, 4B_1S의 분극 곡선과 산소 농도 분포를 표현하였다. Figure 6(a)에서 유로 1B_OS와 1B_1S의 분극 곡선을 비교하였을 때, 전류밀도 1000 mA/cm² 이후부터 서브 채널이 있는 유로 1B_1S의 전류밀도가 전압이 0.45 V 조건에서 약 50 mA/cm² 높았다. 산소 농도는 서브 채널의 배치로 블록 후단의 영역에서 약 1 mol/m³ 증가한 것을 Figure 6(b)를 통해 확인하였다. Figure 6(a)의 유로 4B_OS와 4B_1S의 분극 곡선을 비교하면, 셀 전압 0.45 V 조건에서 서브 채널을 구성한 4B_1S가 120 mA/cm² 높은 전류 밀도를 나타내었다. 이는 블록이 한 개인 유로 1B_OS와 1B_1S의

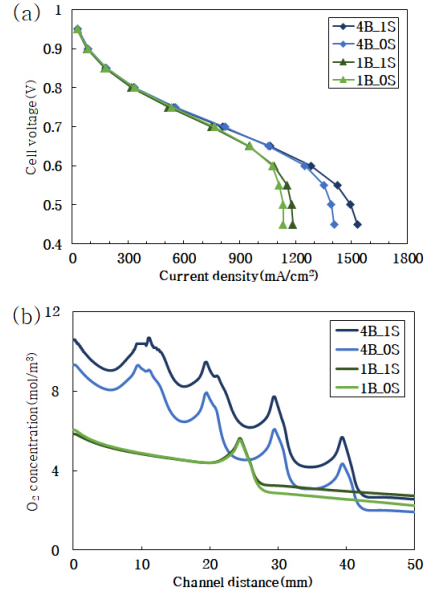


Figure 6. Cell performance and oxygen distribution on cathode flow field with a block and a sub-channel (a) effect of block on polarization curve, (b) effect of block on oxygen molar concentration at 0.45 V.

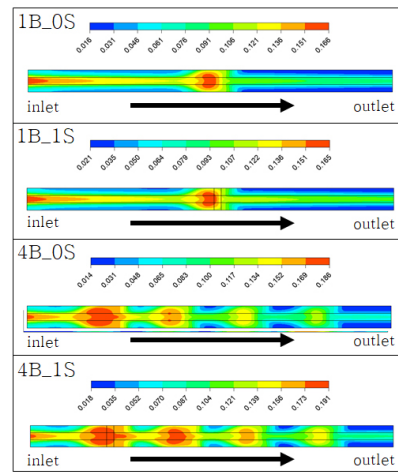


Figure 7. Block and sub-channel effect on oxygen mass fraction at interface between GDL and catalyst layer.

전류밀도 차이보다 약 70 mA/cm² 크다. 또한, 기체확산층-촉매층 계면에서의 산소 농도는 전체 유로 영역에서 최소 1.2 mol/m³, 최대 5.5 mol/m³ 증가하였다. 전류밀도 관점에서 보면, 유로 1B_1S와 4B_1S에서 서브 채널에 모두 동일한 유량을 추가함에도 불구하고 같은 셀 전압 조건에서 전류 밀도 증가 차이가 2배 이상이다. 이는 유로 4B_1S에서 서브 채널에 공급된 공기는 남은 3개의 블록을 거치며 기체확산층 방향으로의 강제 대류에 기여하기 때문으로 해석할 수 있다.

4가지 유로 1B_OS, 1B_1S, 4B_OS, 4B_1S의 산소 질량 분율을 Figure 7에 표현하였다. 첫 번째 블록을 지난 이후 두 번째 블록 근처의 산소 분율은 유로 4B_OS보다 유로 4B_1S가 더욱 높다. 따라서 서브 채널을 통해 추가적인 반응물을 공급한다면 블록으로 인해 순간적으로 낮아진 산소 농도를 증가시킬 수 있으며, 블록과 블록 사이에 서브 채널에 반응물을 공급한다면 서브 채널 이후의 블록 주위에서 강

Table 3. Additional Air Supply Position Effect on Mass Flow Rate

Case	Main inlet mass flow rate	Additional supplied air	
		Mass flow rate	Supply position
1B_0S	1.72×10^{-6} kg/s (100%)	0	-
1B_0S(150%)	1.72×10^{-6} kg/s (100%)	0.86×10^{-6} kg/s (50%)	main inlet
1B_1S	1.72×10^{-6} kg/s (100%)	0.86×10^{-6} kg/s (50%)	sub-channel

제 대류 영향을 줄 수 있기 때문에 더욱 낮은 물질 전달 손실을 보이는 것을 확인하였다.

3.3. 서브 채널의 공기 유량에 대한 영향

앞선 연구로 블록의 후단에 서브 채널을 배치하는 것이 유로 후단의 산소 농도를 증가시키고 물질 전달 손실을 줄여 연료전지 전체 성능을 올릴 수 있었다. 또한 블록과 블록 사이에 서브 채널을 배치하여 강제 대류 효과를 더욱 높일 수 있었다. 다만 서브 채널을 통해 반응물을 추가 공급하는 것은 서브 채널이 없는 경우와 동일한 반응물 유량을 공급했다고 하기 어렵다. 따라서 추가로 공급된 50% 유량의 공기가 기존의 캐소드 입구로 들어가는 경우와 서브 채널로 들어가는 경우의 비교 실험을 추가적으로 수행하였으며 실험 케이스를 Table 3에 표현하였다.

추가로 공급하는 공기의 위치에 따른 분극 곡선의 결과를 Figure 8(a)에 나타내었다. 유로 1B_0S의 캐소드 입구에 150%의 공기를 공급하였을 경우를 1B_0S(150%)라고 하였으며, 이 경우에 1B_0S의 전압-전류 곡선 데이터보다 셀 전압 0.45 V에서 전류밀도가 약 96 mA/cm² 증가하였다. 이는 동일한 해석 조건에서 1B_0S와 1B_1S의 전류밀도 차이가 51 mA/cm² 이기 때문에 캐소드 입구에 150%의 공기를 공급하는 것이 더 높은 전류밀도 증가를 보였음을 알 수 있다.

기체확산층-촉매층 계면 산소 농도를 Figure 8(b), (c)를 통해 표현하였으며, 공급 위치에 따른 해석의 결과를 두 개의 그래프로 비교하였다. Figure 8(b)는 1B_0S와 1B_1S에 대한 비교 그래프로 본 논문에서 배치한 서브 채널의 위치가 블록 후단이기 때문에 블록 전단의 산소 농도에는 변화를 주지 않고 후단에서의 산소 농도를 1.0 mol/m³ 높였다. 반면, 서브 채널 없이 공기 공급을 기존 입구에 추가한 경우를 비교한 Figure 8(c)를 보면, 산소 농도가 전체 영역에서 1.5 mol/m³ 높게 계산되었다. 따라서 서브 채널을 배플 후단에 구성하면 순간적으로 낮아진 산소 농도를 올릴 수 있는 반면, 동일한 유량을 기존의 입구에 추가적으로 공급할 때는 블록의 전 후단에서 모두 동일하게 산소 농도가 증가하였다. 결국 서브 채널을 배치하지 않으면 블록 전 후단의 산소 농도 차이가 유량에 상관없이 크기 때문에 다채널 유동 및 스택에서의 반응물 농도 불균형을 해결할 수 없다고 판단된다.

4. 결 론

본 연구에서는 단채널 유로에서 블록과 서브 채널이 연료전지의 분극 곡선과 채널 길이에 대한 산소 농도에 미치는 영향을 전산 해석으로 분석하였다. 1.5 cm² 반응 면적을 갖는 직선 유로에서 해석 변수는 블록의 유무와 개수, 서브 채널의 유무, 공급 공기 유량 등의 변수를 변경하여 평가하였다. 해석은 상용 전산 해석 프로그램인 ansys fluent 2020 r2의 PEMFC module이 사용되었다. 블록의 유무 및 개수에 대한

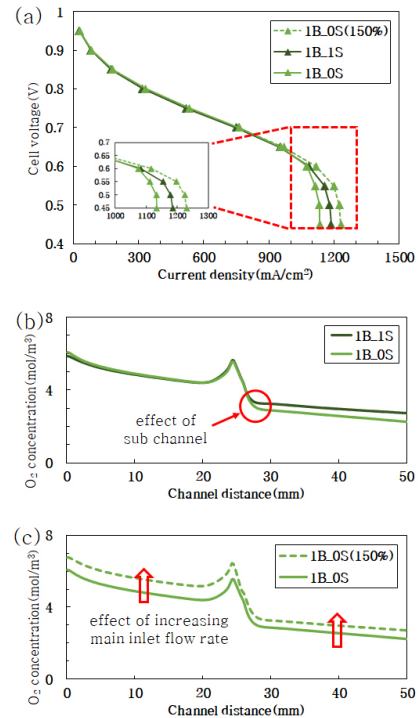


Figure 8. Air supply position effect on polarization curve and oxygen distribution (a) polarization curve, (b) oxygen molar concentration with sub-channel, (c) oxygen molar concentration with main cathode inlet.

성능 비교 실험에서 블록의 개수가 증가함에 따라 물질 전달 손실이 감소하였고, 낮은 셀 전압 조건에서 전류밀도가 증가하는 것을 확인하였다. 반응 유체를 기체확산층 방향으로 강제적으로 대류시킴으로써 물질 전달 메커니즘이 더 높은 전류밀도를 낼 수 있도록 개선되었다. 블록과 서브 채널에 대한 성능 비교 실험에서는 블록의 개수가 다른 유로에 대해 서브 채널이 산소 농도에 미치는 영향을 평가하였으며, 서브 채널을 거친 반응 유체가 다시 블록을 만나는 경우에 전류밀도가 더 많이 증가함을 확인하였다. 또한 블록과 블록 사이에 서브 채널이 존재하는 경우에는 서브 채널 후단의 블록 주위에서 강제 대류 영향을 추가적으로 줄 수 있기 때문에 더욱 낮은 물질 전달 손실을 보이는 것을 확인하였다. 마지막으로 추가 공기 공급 위치가 전류밀도와 산소 농도에 미치는 영향을 분석하였다. 서브 채널을 통해 공기를 추가 공급한 경우에 배플로 인해 순간적으로 낮아진 산소 농도를 올릴 수 있었지만, 동일한 유량을 캐소드 입구에 추가적으로 공급하는 경우에는 산소 농도를 올리지 못하였다. 따라서 서브 채널을 블록과 함께 연료전지 유로에 배치할 경우 강제 대류로 인하여 산소 농도

를 유지할 수 있었고, 결과적으로 전류밀도를 증가시킬 수 있었다.

감 사

이 논문은 산업통상자원부가 지원한 ‘이전공공기관연계 육성사업’으로 지원을 받아 수행된 연구 결과입니다[과제명: 전지·ESS기반 에너지산업 혁신생태계 구축사업(P0002068)].

References

1. R. O'Hayre, S. W. Cha, W. Colella, and F. B. Prinz, *Fuel Cell Fundamentals*, 3rd ed., 275-277, Wiley, NJ, USA (2016).
2. J. Wang, H. Wang, Flow-field designs of bipolar plates in PEM fuel cells: Theory and applications, *Fuel Cells*, **12**, 989-1003 (2012).
3. X. Li and I. Sabir, Review of bipolar plates in PEM fuel cells: Flow-field designs, *Int. J. Hydrogen Energy*, **30**, 359-371 (2005).
4. J. Wu, X. Z. Yuan, J. J. Martin, H. Wang, J. Zhang, J. Shen, S. Wu, and W. Merida, A review of PEM fuel cell durability: Degradation mechanisms and mitigation strategies, *J. Power Sources*, **184**, 104-119 (2008).
5. M. Marappan, K. Palaniswamy, T. Velumani, B. C. Kim, R. Velayutham, P. Shivakumar, and S. Sundaram, Performance studies of proton exchange membrane fuel cells with different flow field designs-review, *Chem. Rec.*, **21**, 663-714 (2021).
6. H. Li, Y. Tang, Z. Wang, Z. Shi, S. Wu, D. Song, J. Zhang, K. Fatih, J. Zhang, H. Wang, Z. Liu, R. Abouatallah, and A. Mazza, A review of water flooding issues in the proton exchange membrane fuel cell. *J. Power Sources*, **178**, 103-117 (2008).
7. A. P. Manso, F. F. Marzo, J. Barranco, X. Garikano, M. G. Mujika, Influence of geometric parameters of the flow fields on the performance of a PEM fuel cell. A review. *Int. J. Hydrogen Energy*, **37**, 15256-15287 (2012).
8. A. Kazim, H. T. Liu, and P. Forges, Modelling of performance of PEM fuel cells with conventional and interdigitated flow fields, *J. Appl. Electrochem.*, **29**, 1409-1416 (1999).
9. M. Sauermoser, N. Kizilova, B. G. Pollet, and S. Kjelstrup, Flow field patterns for proton exchange membrane fuel cells, *Front. Energy Res.*, **8**:13 (2020).
10. H. Heidary and M. J. Kermani, Performance enhancement of fuel cells using bipolar plate duct indentations, *Int. J. Hydrogen Energy*, **38**, 5485-5496 (2013).
11. S. H. Han, N. H. Choi, and Y. D. Choi, Simulation and experimental analysis on the performance of PEM fuel cell by wave-like surface design at the cathode channel, *Int. J. Hydrogen Energy*, **39**, 2628-2638 (2014).
12. M. Rahimi-Esbo, A. A. Ranjbar, A. Ramiar, E. Alizadeh, and M. Aghaee, Improving PEMfuel cell performance and effective water removal by using novel gas flow field, *Int. J. Hydrogen Energy*, **41**, 3023-3037 (2016).
13. E. Alizadeh, M. Rahimi-Ebso, S. M. Rahgoshay, S. H. M. Saadat, and M. Khorshidian, Numerical and experimental investigation of cascade type serpentine flow field of reactant gases for improving performance of PEM fuel cell, *Int. J. Hydrogen Energy*, **42**, 14708-14724 (2017).
14. M. Ghasabehi, M. Ashrafi, and M. Shams, Performance analysis of an innovative parallel flow field design of proton exchange membrane fuel cells using Multiphysics simulation, *Fuel*, **285**, 119194 (2021).
15. A. Azarafza, M. S. Ismail, M. Rezakazemi, and M. Pourkashanian, Comparative study of conventional and unconventional designs of cathode flow fields in PEM fuel cell, *Renew. Sustain. Energy Rev.*, **116**, 109420 (2019).
16. S. A. Atyabi and E. Afshari, Three-dimensional multiphase model of proton exchange membrane fuel cell with honeycomb flow field at the cathode side, *J. Clean. Prod.*, **214**, 738-748 (2019).
17. P. Wawdee, S. Limtrakul, T. Vatanatham, and M. W. Fowler, Water transport in a PEM fuel cell with slanted channel flow field plates, *Int. J. Hydrogen Energy*, **40**, 3739-3748 (2015).
18. Y. Yin, X. Wang, X. Shangguan, J. Zhang, and Y. Qin, Numerical investigation on the characteristics of mass transport and performance of PEMFC with baffle plates installed in the flow channel, *Int. J. Hydrogen Energy*, **43**, 8048-8062 (2018).
19. C. Y. Soong, W. M. Yan, C. Y. Tseng, H. C. Liu, F. Chen, and H. S. Chu, Analysis of reactant gas transport in a PEM fuel cell with partially blocked fuel flow channels, *J. Power Sources*, **143**, 36-47 (2005).

Authors

Seonghun Jo; B.Sc., Master Course, School of Chemical Engineering, University of Ulsan, Ulsan 44610, Korea; lightish96@mail.ulsan.ac.kr

Junbom Kim; Ph.D., Professor, School of Chemical Engineering, University of Ulsan, Ulsan 44610, Korea; jbkim@ulsan.ac.kr