

고체고분자전해질형 연료전지의 유로형상에 따른 성능의 비교

이건주
상지대학교 환경공학과

The Comparison of Proton Exchange Membrane Fuel Cell According to Flow Field Design

KEON JOO LEE
Departments of Environmental Engineering, Sangji University

요 약 본 연구에서는 3차원 전산유체역학 (3-D computational fluid dynamics, CFD)을 이용하여 고체고분자전해 질형연료전지 (proton exchange membrane fuel cell, PEMFC)의 기체유로에 대한 성능에 관한 전산모사를 실시하였다. 또한 이 전산모사를 통하여 유체의 농도와 압력분포, 그리고 전류밀도의 분포 등 각종 분포에 관하여 연구를 진행하였다. 본 논문에서는 단일유로와 5개의 유로를 비교분석 하였다. 그 결과 5개의 유로가 단일유로에 비하여 각종 분포들이 균일하였고, 성능 또한 월등하였다. 특히 단일유로에서는 물질전달에 의한 성능저하 영역에서 매우 낮은 성능을 확인할 수 있었고 반면 5개의 유로에서는 이 부분을 극복하여 보다 높은 성능을 확인할 수 있었다.

주제어 : 고체고분자전해질형연료전지, 전산유체역학, 유로형상, 수소에너지, 수소전기자동차

Abstract In this study, the performance and distribution of fluid concentration, pressure, and current density of a proton exchange membrane fuel cell was investigated. In this paper, the two different types of flow field design were compared, single channel and 5-channels. As a result, the 5-channels of flow field showed the better performance than that of single channel. Especially, the single channel showed better performance in terms of mass transfer loss area.

Key Words : PEMFC, CFD, flow field design, hydrogen energy, hydrogen electric vehicle

1. 서론

1.1 연구배경

현재의 주된 에너지원인 화석연료는 매장량의 제한으로 인하여 각종 분쟁의 원인이 되어왔고, 공급량이 수요를 따라가지 못하기 때문에 경제적인 문제도 야기해 오고 있다. 또한, 이산화탄소와 같은 온실가스를 배출하기 때문에 기상이변 등의 여러 가지 문제를 야기해오고 있다. 이에 우리의 에너지소비체제도 많은 변화를 요구하고

있다. 각종 신재생에너지의 필요성이 대두되고 있지만, 그 중에서도 공해가 거의없고 친환경적인 수소에너지의 필요성이 대두되고 있다. 현재 일반적으로 수소의 사용은 연료전지를 통해 전기를 발전시켜 그 에너지원으로 사용하고 있다. 연료전지는 연료의 산화에 의한 화학에너지를 전기화학적으로 변환시켜 전기를 발생하는 장치로서 그 사용범위는 수 W에서부터 MW단위까지 그 폭이 매우 넓다. 또한, 연료전지는 효율이 타 에너지원에 비하여 30-40%로 매우 높고, 그 부산물로서는 이론적으로 순수

*본 연구는 2021년도 상지대학교 연구년제 연구비 지원에 의해 수행되었으며 이에 감사를 드립니다.

*Corresponding Author : KEON JOO LEE(kjoolee@sangji.ac.kr)

Received March 23, 2021

Accepted May 20, 2021

Revised May 4, 2021

Published May 28, 2021

한 수분만을 배출하는 장치로서 SOx, NOx 등의 대기오염을 유발하는 성분을 전혀 배출하지 않는다.

그 중 수소전기차에 사용되는 연료전지는 고체고분자 전해질형 연료전지로서 현재 그 기술의 성숙도가 매우 높고, 80℃ 이하의 그리 높지 않은 온도에서 작동하기 때문에 자동차용 연료전지에 사용된다. 자동차용 연료전지는 일반적으로 승용차 및 소형 SUV기준으로 약 80~120kW의 출력영역에서 사용되고 있으며 현재 국내에서는 현대자동차가 NEXO를 상용화하여 출시하고 있고, 외국의 경우에는 토요타와 혼다가 각각의 모델인 미라이와 Clarity를 시판하여 판매하고 있다. 또한, 현대자동차의 경우에는 유럽의 유수의 자동차메이커들에게 자사의 개발품인 스택의 납품을 요구받고 있는 실정이다.

본 연구에서는 연료전지시스템의 심장부라 할 수 있는 연료전지스택을 위한 모델링을 실시한다.

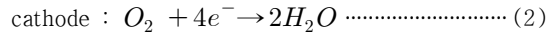
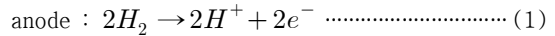
과거의 연구에서는 전산유체역학이 아닌 방식을 이용하여 연료전지의 성능을 비교하는 결과들이 있었다 [1-5]. 그러나 이런 연구들은 과거의 컴퓨터의 성능이 현재처럼 발달하지 못한 경우에 1차원의 방정식을 이용하여 그 결과를 해석한 것이므로 그 결과는 현재의 전산유체역학에 기초를 주었지만 그 이상의 발전은 어렵다고 할 수 있다. 또한 연료전지 내부에서 벌어지는 현상들을 분리되어진 전극들을 이용하여 내부의 전류밀도의 분포를 실험적으로 확인하려는 시도도 있었다 [6,7].

또한 과거의 전산유체역학으로 연료전지의 성능을 평가하려는 시도도 있었다 [8-15]. 하지만 앞선 연구는 10cm² 미만의 매우 작은 유효면적을 가지는 연료전지의 전산모사를 이룬 것으로서 상대적인 대면적 연료전지의 모사는 이루지 못한 것으로 판단된다. 이에 본 연구에서는 25cm²의 비교적 대면적을 가지는 연료전지를 모사하여 상용화된 연료전지의 해석에 있어서 진행되어질 발판을 마련한다.

2. 수소연료전지의 유동 이론

2.1 연료전지의 전기화학반응

고체고분자전해질형연료전지는 양쪽 전극 사이에 수소이온교환막을 배치하고 anode에 수소를, cathode에 산소(공기)를 흘려주어 전기를 생산하는 전기화학적 장치이다. 고체고분자전해질형 연료전지는 전기화학적으로 수소를 산화시키고 산소를 환원시키는데 그 원리는 다음과 같이 설명할 수 있다.



여기서 수소의 산화가 이루어지는 anode 와 산소의 환원이 이루어지는 cathode 두 전극에서 발생하는 전기는 연료전지 구성파트의 상태에 따라 그 성능을 결정하게 된다. 본 연구에서는 그 중에서도 기체를 공급하는 유로의 형상에 따른 성능에의 영향성을 연구하여 그 결과를 제공하였다. 이에 관련되어지는 유로는 단일유로와 5개의 유로를 가진 두 가지의 단위전지를 비교하여 그 결과를 분석하였다. 본 연구에서는 다음과 같은 지배방정식을 풀고 또한, 전기화학적 반응을 설명하였다.

2.2 지배방정식

고체고분자전해질형연료전지의 유동에 관한 지배방정식은 식 (3)의 연속방정식(질량보존의 법칙)과 식(4-6)에 소개된 운동량방정식으로 구성되며 그 구체적인 식들은 Table 1 에 자세히 나타냈다.

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = S_m \dots\dots\dots (3)$$

$$u \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + v \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + w \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = \dots\dots\dots (4)$$

$$- \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial z} \right) + S_{px}$$

$$u \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + v \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + w \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = \dots\dots\dots (5)$$

$$- \frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial z} \right) + S_{py}$$

$$u \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + v \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + w \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = \dots\dots\dots (6)$$

$$- \frac{\partial P}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial z} \right) + S_{pz}$$

또한, 각 형태의 전기화학적 식은 아래와 같이 정의할 수 있다.

$$E = E^o + \Delta E_S + \Delta E_C \dots\dots\dots (7)$$

$$\Delta E_S = \frac{1}{nF} \int_{T_o}^T \Delta \hat{S}(T) dT \dots\dots\dots (8)$$

$$= \frac{\Delta T}{nF} \sum_i \Delta \hat{S}(T_i)$$

$$\Delta E_C = \frac{RT}{nF} \ln \left[\left(\frac{C_{H_2}}{C_{H_2}^o} \right) \left(\frac{C_{O_2}}{C_{O_2}^o} \right)^{0.5} \right] \dots\dots\dots (9)$$

$$v(j) = E_{OC} - \Delta v_{a-} - \Delta v_{a+} \dots\dots\dots (10)$$

$$- \Delta v_{c-} - \Delta v_{c+} - \Delta v_m$$

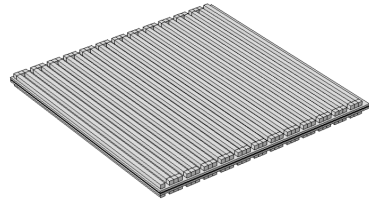
$$j_i = j_0 \left[\frac{C_R}{C_R} e^{\alpha f \Delta v_{a/T}} - \frac{C_P}{C_P} e^{-(1-\alpha) f \Delta v_{c/T}} \right] \dots\dots\dots (10)$$

$$j_0 = j_0^* \exp \left[\frac{W_j}{R} \left(\frac{1}{T^*} - \frac{1}{T} \right) \right] \dots\dots\dots (11)$$

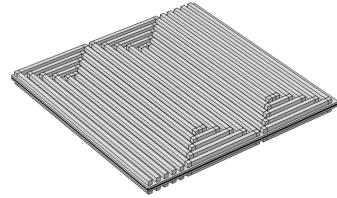
$$\Delta v_m = j d_m / \gamma \dots\dots\dots (12)$$

$$j_{cr} = j_{crd} + j_{cre} \dots\dots\dots (13)$$

할 기능을 이용하였다.



(a)



(b)

Fig. 1. Flow field design (a) 1-channel (b) 5-channel

3. 수치해석 및 유로형상

3.1 수치해석방법

유로형상에 따른 고체고분자전해질형연료전지의 성능의 영향성의 분석에 관하여는 2 가지의 다른 유로형상을 이용하였다. 그 형상은 Fig. 1에 나타내었다. (a)는 단일 유로 형태이고 (b)는 5개의 평행되어진 유로형태이다. 단일유로형태는 Fig. 1 (a)에서 보이는 바와 같이 하나의 입구에서 흘러들어가서 전체의 길이가 긴 형태이고, 5개의 유로의 경우에는 Fig. 1 (b)에서 보이는 바와 같이 5개의 입구와 5개의 출구로서 각각의 유로의 길이는 단일 유로의 경우에 비하여 짧고 그로 인하여 전체적인 입출구단의 압력차이는 상대적으로 5개의 유로형태쪽이 적다. 또한 각각의 유로는 모두 단면적은 모두 가로 1.0mm 세로 0.1mm로 모두 같은 단면적으로 구성된다. 또한, 각 유로에 공급되는 기체의 유속은 모두 균일하다. 그리고 anode와 cathode의 형태는 모두 MEA를 기준으로 대칭의 모습을 가지고 있다. 이는 Fig. 1에 나타난 것과 같다. 또한, MEA와 GDL은 두 유로형상 모두 같은 물성치를 가지고 있다. Table 2 에는 고체고분자전해질형연료전지의 구성품에 관한 물성치를 정리하였다. 이 물성치를 이용하여 유동해석을 하기 위하여 상용 수치해석 소프트웨어인 COMSOL multiohysics® 의 자동요소분

Table 1. Physical parameters

Parameter name	Value	Unit
Membrane thickness	100	um
Membrane thickness	400	um
Electrode thickness	50	um
GDL conductivity	222	S/m
GDL porosity	0.4	
GDL permeability	1.18×10^{-12}	m ²
Temperature	60	°C
Membrane conductivity	9.825	S/m
Catalyst permeability	2.36×10^{-12}	m ²
Catalyst layer porosity	0.3	

3.2 수치해석결과

유로형상에 따른 고체고분자전해질형연료전지의 성능의 영향성은 Fig.2 와 같은 전류밀도 (current density) 대 셀전압의 형태로 그 결과를 설명하였다. Fig.2 에서는 전류의 변화에 따른 전압의 값으로 그 성능을 비교할 수가 있는데, 동일전류에서 보다 높은 전압이 나오는 경우가 더 우수한 성능을 보인다고 할 수 있다. 본 모델링을 통하여 성능의 비교를 확인할 수 있었는데 5개의 유로형태가 (5-channel) 단일유로 (1-channel)의 경우에 비하여 높다는 것을 Fig. 2에서 그 성능을 확인할 수 있었다.

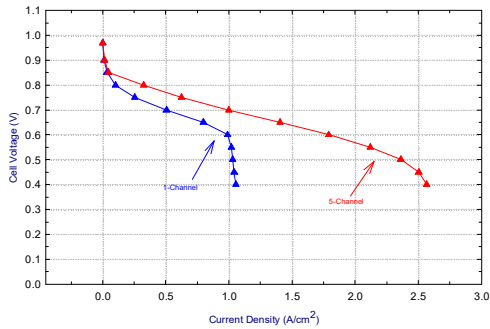


Fig. 2. Fuel cell performance comparison @ cell voltage of 0.4V between 1-channel and 5-channel

Fig. 3에서는 유로의 형상에 따른 수소농도의 분포를 확인할 수 있다. 그림 상에 붉은색으로 표시된 것이 수소농도가 높은 쪽이고 푸른색으로 표시된 것이 점차적으로 수소농도가 낮은 것이다. 이 비교는 여러 전압에서 비교한 데이터가 있지만 많은 데이터를 보인 것보다 그 효과가 두드러지게 보이는 셀전압 0.4V에서 비교하였다. 이때 두 형상의 유로 모두에서 전반적인 수소농도의 분포는 큰 차이를 보이지는 않지만, 5-채널의 유로형상의 단위전지에서의 수소농도의 분포가 단일유로 형상의 그것에 비하여 약간은 고르게 분포하는 것을 확인할 수 있다.

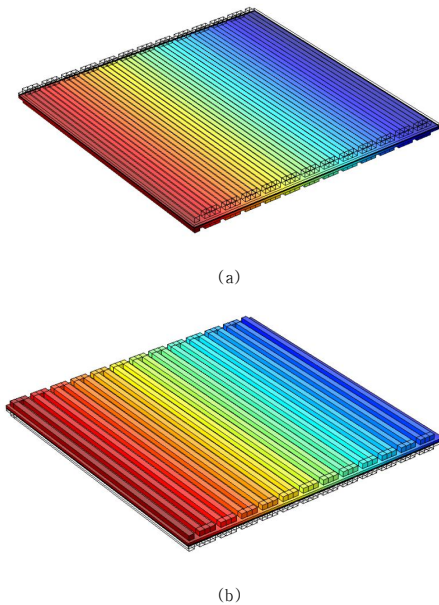


Fig. 3. Comparison of hydrogen concentration distribution between (a) 1-channel and (b) 5-channel

Fig. 4에서는 유로의 형상에 따른 산소농도의 분포를 확인할 수 있다. Fig. 3의 경우와 마찬가지로 셀전압 0.4V에서 비교하였고, 그림 상에 나타난 붉은색으로 표시된 것이 산소농도가 높은 쪽이고 푸른색으로 표시된 것이 점차적으로 산소농도가 낮은 것이다. 앞서 Fig. 3의 수소농도의 분포와는 달리 전반적인 산소농도는 두 형상에서 큰 차이를 보인다. 단일유로의 경우에는 산소농도가 입구쪽과 출구쪽의 차이가 매우 큰 것으로 보이지만 5개의 유로를 가진 형상의 단위전지에서는 단일유로와는 달리 상대적으로 고르게 분포하는 것을 확인할 수 있다.

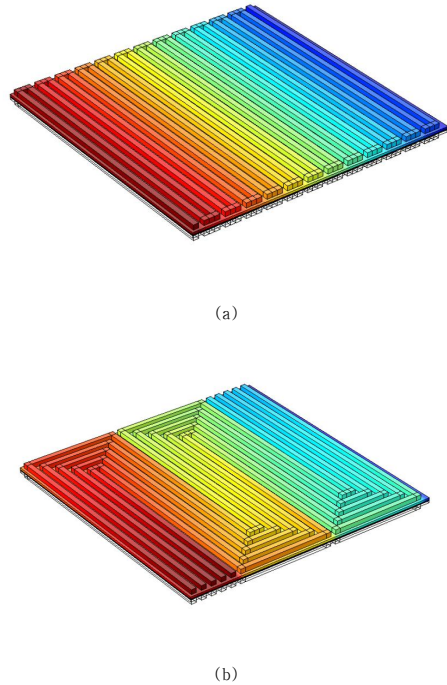
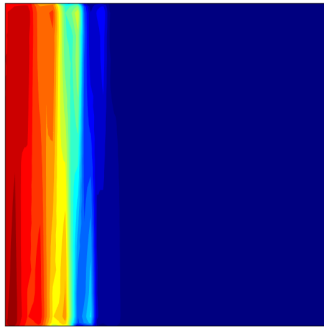


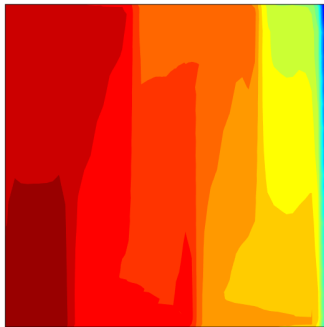
Fig. 4. Comparison of oxygen concentration distribution @ cell voltage of 0.4V between (a) 1-channel and (b) 5-channel

Fig. 5에서는 유로의 형상에 따른 전류밀도의 분포를 확인할 수 있다. 앞선 경우와 마찬가지로 그림 상에 붉은색으로 표시된 것이 전류밀도가 높은 쪽이고 푸른색으로 표시된 것이 전류밀도가 낮은 것이다. 그리고 이 역시 앞선 그림들과 마찬가지로 셀전압 0.4V에서 비교가 이루어졌다. Fig. 5의 경우를 보면 Fig. 2에서 표시되어진 전반적인 성능의 차이를 확인할 수 있는 그림이라 할 수 있

다. 이 경우에는 단일유로의 경우가 5개의 유로형상의 단위전지에 비하여 매우 불균형한 전류밀도의 분포를 확인할 수 있다. 이는 산소농도의 분포에 따른 것으로 판단된다.



(a)



(b)

Fig. 5. Comparison of current density distribution @ cell voltage of 0.4V between (a) 1-channel and (b) 5-channel

4. 결과 및 검토

유로형상에 따른 고체고분자전해질형연료전지의 성능의 영향성의 분석을 전산유체역학을 통해 이루어졌다. 연료전지 내부의 구조적인 모사를 통하여 유로의 형상에 따른 성능의 영향성을 확인할 수 있었는데 과거의 연구에 비하여 비교적 대면적이라 할 수 있는 25cm²의 유효면적을 가지는 연료전지의 전산모사를 성공하였다. 본 연구에서는 수소와 산소의 농도분포를 확인할 수 있었으며, 그에 따른전류밀도의 분포를 확인할 수 있었다. 연료전지의 내부에서 일어나는 현상들은 전산모사를 통하여 확인할 수 있었고, 여러 가지의 가정을 이용하여 모델링을 단

순화할 수 있었다. 본 과정을 통하여 실험을 줄일 수 있고 나아가 상용화되어질 대면적 연료전지의 모델링에 있어서 초석을 다진 연구라고 할 수 있다.

그 결과를 분석해보면, 단일유로의 경우가 5개의 유로를 가진 단위전지에 비하여 보다 균일한 전류밀도의 분포를 확인할 수 있었고 그 원인은 수소농도의 분포에 비하여 산소농도의 분포 때문인 것으로 판단되었다. 전반적인 수소밀도의 분포는 두 유로형상 모두 큰 차이를 보이지 않았으나, 산소농도의 분포는 그 차이를 볼 수 있었으며, 그에 따라 연료전지의 성능은 5개의 유로를 가진 형상에서 보다 높은 것으로 확인되었다.

REFERENCES

- [1] T. V. Nguyen, & R.E. White, (1993) "A water and heat management models for PEMFC", *Journal of Electrochemical Society* (140), 2178-2186.
- [2] T. F. Fuller, & J. Newman, (1993) "Water and thermal management in solid polymer electrolyte fuel cells", *Journal of Electrochemical Society* (140), 1218-1225.
- [3] S. Dutta, S. Shimpalee, & J. W. Van Zee, (2000) "Three dimensional numerical simulation of straight channel PEM fuel cells", *Journal of Applied Electrochemistry* (135), 135-146.
- [4] J. S. Yi, & T. V. Nguyen. (1998) "An along-the-channel model for proton exchange membrane fuel cells" *Journal of Electrochemical Society* (145), 1149-1959.
- [5] J. S. Yi & T. V. Nguyen, (1999) "Multicomponent transport in porous electrodes of proton exchange membrane fuel cells using the interdigitated gas distributors", *Journal of Electrochemical Society* (146), 38-45.
- [6] Q. S., M. Hou, X. Yan, D. Liang, Z. Zang, L. Hao, Z. Shao, Z. Hou, P. Ming, & B. Yi., (2008) "The voltage characteristics of proton exchange membrane fuel cell (PEMFC) under steady and transient states", *Journal of Power Sources*, 179(1), 292-296.
- [7] T. V. Reshетенkoa, G. Bender, K. Bethunea, & R. Rocheleau (2013), "A segmented cell approach for studying the effects of serpentine flow field parameters on PEMFC current distribution", *Electrochimica Acta*, (88), 571-579.
- [8] S. Kim. (2013). "Performance analysis of PEMFC using computational flow dynamics (CFD)", *Journal of Digital Convergence*, 11(8), 199-204. DOI : 10.14400/JDPM.2013.11.8.199
- [9] S. Kim. (2016). Convergence of fluid dynamics and computer simulation for the internal investigation of fuel cell. *Journal of Digital Convergence*, 14(6),

245-251.

DOI : 10.14400/JDC.2016.14.6.245

- [10] S. Um & C. Y. Wang. (2004) "Three-dimensional analysis of transport and electrochemical reactions in polymer electrolyte fuel cells", *Journal of Power Sources*, 125(1), 40-51.
DOI : 10.1016/j.jpowsour.2003.07.007
- [11] D. Jeon, S. Greenway, S. Shimpalee & J. W. Van Zee, (2008) "The effect of serpentine flow-field designs on PEM fuel cell performance", *International Journal of Hydrogen Energy*, 33(3), 1052-1066.
DOI : 10.1016/j.ijhydene.2007.11.015
- [12] S. Um & C. Y. Wang. (2006) "Computational study of water transport in proton exchange membrane fuel cells", *Journal of Power Sources*, 156(2), 211-223.
DOI : 10.1016/j.jpowsour.2005.05.095
- [13] S. Dutta, S. Shimpalee & J. W. Van Zee. (2001), "Numerical prediction of mass-exchange between cathode and anode channels in a PEM fuel cell". *International Journal of Heat and Mass Transport*, 156(2), 211-223.
DOI : 10.1016/s0017-9310(00)00257-x
- [14] S. Shimpalee, U. Beuscher & J. W. Van Zee. (2006), "Investigation of gas diffusion media inside PEMFC using CFD modeling", *Journal of Power Sources*, 163(1), 480-489.
DOI : 10.1016/j.jpowsour.2006.09.038
- [15] V. Lilavivata, S. Shimpalee, J. W. Van Zee, H. Xu, & C. K. Mittelsteadt, (2015), "Current Distribution Mapping for PEMFCs". *Electrochimica ACTA*, 174, 1253-1260.
DOI : 10.1016/j.jpowsour.2006.09.038

이 건 주 (Keon Joo Lee)

[장학원]



- 1984년 2월 : 연세대학교 화학공학과 (화학공학사)
- 1990년 6월 : 일리노이대학교 화학공학과(화학공학석사)
- 1993년 6월 : 일리노이대학교 화학공학과(화학공학박사)
- 1996년 3월 ~ 현재 : 상지대학교 환경

공학과 정교수

- 관심분야 : 연료전지, 폐자원에너지, 신재생에너지,
- E-Mail : kjoolee@sangji.ac.kr