

# 1D와 CFD(Computational fluid dynamic) 시뮬레이션을 통한 PEMFC(Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell) 성능 비교

전원우\* · 안세현\*\* · 양재완\* · 이지원\* · 조현빈\* · 염은섭†

## Comparison of Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell performance obtained by 1D and CFD simulations

Wonwoo Jeon\*, Schyeon An\*\*, Jaewan Yang\*, Jiwon Lee\*, Hyunbin jo\*, Eunseop Yeom†

**Abstract** The Polymer electrolyte membrane fuel cell (PEMFC) operates at ambient temperature as a low-temperature fuel cell. During its operation, voltage losses arise due to factors such as operating conditions and material properties, effecting its performance. Computational simulations of fuel cells can be categorized into 1D simulation and CFD, chosen based on their specific application purposes. In this study, we carried out an analysis validation using 1D geometry and compared its performance with the results from 2D geometry analysis. CFD allows for the representation of pressure, velocity distribution, and fuel mass fraction according to the geometry, enabling the analysis of current density. However, the 1D simulation, simplifying governing equations to reduce time cost, failed to accurately account for fuel distribution and changes in fuel concentration due to fuel cell operations. As a result, it showed unrealistic results in the cell voltage region dominated by concentration loss compared to CFD.

**Key Words** : PEMFC (고분자 전해질 연료전지), Flow path (유로), Anode (연료극), Cathode(공기극), 전류밀도 (Current density)

### 1. 서론

환경 규제가 증가함에 따라 친환경적인 에너지 소스에 대한 연구가 점점 중요해지고 있다. 특히, 연료전지는 전기화학적 반응을 이용해 환

경 친화적인 방식으로 전기 에너지를 생성하는 장치로 주목받고 있다. 그 중에서도 고분자 전해질 연료전지(PEMFC; Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell)는 그 작동 온도의 특성상 자동차산업을 비롯한 다양한 분야에서 활용의 잠재력이 크다. PEMFC의 성능은 기압, 온도, 상대습도 등 작동환경에 영향을 받는다.<sup>(1-3)</sup> 또한 연료전지는 셀 내부 유동에 의한 연료 분포가 성능에 영향을 미치며 CFD(Computational fluid dynamic)를 이용한 유로 최적화에 대한 연구가 진행되어 왔다.<sup>(4,5)</sup> 이외에도 수소와 산소의 유동 방향이 Co-

---

† School of Mechanical Engineering, Pusan National University (PNU), Associate Professor  
E-mail: esyeom@pusan.ac.kr

\* School of Mechanical Engineering, PNU, student

\*\* School of Mechanical Engineering, PNU, MS student.

---

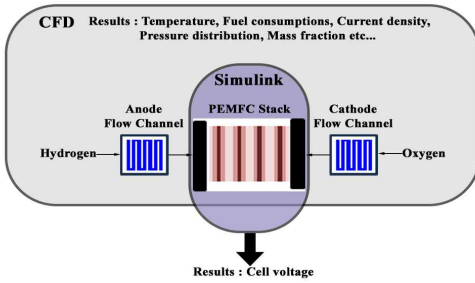


Fig. 1. Difference between CFD and 1D Simulink simulation

유동, Counter-유동, Cross-유동으로 변화함에 따라 성능이 변하는 것을 확인할 수 있다.<sup>(6-8)</sup> CFD는 높은 계산 정확도를 가지고 연료의 유동 속도, 압력 구배 등을 Contour로 나타낼 수 있으나 Time cost 등의 이유로 Unit cell, Stack 단위 연구에서 적합하다. PEMFC의 System 단위 연구에서는 다양한 구성 부품으로 인해 CFD가 아닌 상관식을 활용하여 값을 얻는 1D 시뮬레이션이 진행되어왔다.<sup>(9-11)</sup> 그러나 정확도를 개선하기 위해 1D 시뮬레이션과 CFD를 접목시키기 위한 연구도 진행되어왔다.<sup>(12)</sup> 1D 시뮬레이션과 CFD 해석을 위한 지배방정식은 서로 다르다.<sup>(10)</sup> 1D 시뮬레이션은 Time cost를 줄이기 위하여 지배방정식을 간략화 하였다.<sup>(10)</sup> 위와 같은 이유로 유로 형상, 작동 환경 등이 바뀔에 따라 실험을 통한 피팅을 진행하여 계수들을 구해야 하는 점과 유로 Serpentine, Parallel 등의 유로 형상을 반영하지 못하며 예측 값으로 출력 전압 만 얻을 수 있다.<sup>(10)</sup> Fig.1 은 이를 간략하게 나타낸 것이다. 본 연구에서는 1D, CFD 해석의 검증을 단순한 1D 채널에 대해 사전 연구와 비교하여 진행하고,<sup>(13)</sup> 3D 단일 셀 내부 형상에 대한 영향을 보기 위해 I-V curve를 통해 두 시뮬레이션을 비교하였다.

## 2. 연구 내용

### 2.1 1D 시뮬레이션 해석 조건

1D 시뮬레이션을 진행하기 위하여 블록코딩 프로그램(MATLAB Simulink, MathWorks, Inc, USA)를 사용하였다. 각 기체 성분의 분압과 전

류 밀도 등을 입력 값으로 사용한다. 이러한 값을 얻기 위해 CFD를 통해 얻은 양극, 음극 채널의 density와 기체 성분의 Mass fraction을 이상기체방정식에 대입하여 Input value를 위한 분압을 계산한다.

Ideal gas law

$$pV = mRT \quad (1)$$

$p$ 는 기체 성분의 분압[Pa],  $V$ 는 채널의 부피 [ $m^3$ ],  $m$ 은 채널 내부 기체 성분의 질량[kg],  $R$ 은 특정 기체 상수[J/g · K],  $T$ 는 기체의 온도[K]를 의미한다.

전류 밀도를 변경시켜가며 Cell voltage를 출력한다. 이를 순서도로 표시하면 Fig. 2. (b)와 같다. Nernst equation, Activation, Ohmic, Concentration losses를 계산하고 이를 통하여 Cell voltage를 구한다. 사용된 지배방정식은 아래와 같다.

Nernst equation

$$E = 1.229 - 0.85 \times 10^{-3} (T_{fc} - 298.15) + 4.3085 \times 10^{-5} T_{fc} \left[ \ln(p_{H_2}) + \frac{1}{2} \ln(p_{O_2}) \right] \quad (2)$$

$T_{fc}$ 는 연료전지의 온도[K],  $p_{H_2}$  [atm]는 수소의 분압,  $p_{O_2}$ 는 산소의 분압[atm]을 의미한다.

Activation loss

$$v_{act} = v_0 + v_a (1 - e^{-c_1 i}) \quad (3)$$

$i$ 는 전류 밀도[A/cm<sup>2</sup>]를 의미한다.  $c_1$ 은 실험적으로 결정되는 상수이다.

Ohmic loss

$$v_{\Omega} = i \cdot R_{\Omega} \quad (4)$$

$$R_{\Omega} = \frac{t_m}{\sigma_m} \quad (5)$$

$t_m$ 은 Membrane thickness를 의미한다.

$$\sigma_m = b_1 \exp\left(b_2 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T_{fc}}\right)\right) \quad (6)$$

$$b_1 = (b_{11} \lambda_m - b_{12}) \quad (7)$$

$\lambda_m$ 는 Membrane 내부의 수분 함유량,  $b_{11}$ ,  $b_{12}$ ,  $b_2$ 는 실험적으로 결정되는 상수이다.

Concentration loss

$$v_{conc} = i \left( c_2 \frac{i}{i_{max}} \right)^{c_3} \quad (8)$$

$c_2$ ,  $c_3$ ,  $i_{max}$ 는 실험적으로 결정되는 상수이다.

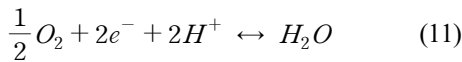
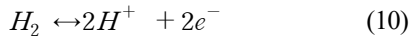
Cell voltage

$$v_{fc} = E - v_{act} - v_{\Omega} - v_{conc} \quad (9)$$

## 2.2 CFD 해석 조건

본 연구를 진행하기 위하여 사용한 수치해석 프로그램은(Fluent 2022R1, Ansys, Inc, USA)이다. 연료전지 Electrolyte layer내부의 기체 확산 및 전기 화학적 반응 등을 고려하기 위하여 Fluent 내 “The fuel cell and electrolysis module”을 사용하였다.

PEMFC에서 발생하는 전기화학적 반응은 아래와 같다.



양극 삼상계면에서  $H_2$ 가 산화 되고 Electrolyte layer를 통해 음극 삼상계면에 전달되어 화학적 결합을 하게 되고 물을 생성하게 된다.  $H_2$ 가 산화되기 위해서는 물이 필요하기 때문에 삼상계면에서의 Water Content가 클수록 전기화학적

반응이 많아지게 되고 연료전지의 성능이 향상된다. Water Content는 아래와 같다.

$$\begin{aligned} \lambda &= 0.043 + 17.18a + -39.58a^2 + 36a^3 (a < 1) \\ \lambda &= 14 + 1.4(a - 1) (a > 1) \end{aligned} \quad (12)$$

$a$ 는 Water activity로써 증기압과 포화압력에 영향을 받는 무차원수이다.

연료전지 해석에 있어 Electrolyte layer의 Mesh layer를 각각 5개의 층으로 구성하였다 (Fig. 2a). 1D 형상에서 사용한 Inlet boundary condition은 Table. 1과 같다. 양극 채널의 inlet을 통하여 수소 연료가 공급된다. 음극 채널의 inlet을 통하여 산소가 포함되어 있는 공기가 공급된다. 각 유동 채널의 Outlet boundary condition은 Pressure-outlet으로, Gauge pressure를 0Pa로 설정하여 대기압과 같이 설정하였다.

Table 1. Inlet boundary conditions for CFD

	Mass flow rate [kg/s]	Temperature [K]	Relative humidity
양극 inlet	$1.86 \times 10^{-6}$	343.15	100%
음극 inlet	$4.26 \times 10^{-5}$	343.15	100%

해석에 사용된 지배방정식은 아래와 같다.

Mass conservation equation

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V) = 0 \quad (13)$$

$\rho$ 는 밀도[kg/s],  $t$ 는 시간[s],  $V$ 는 속도 벡터 [m/s]를 의미한다.

Momentum conservation equation

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho V) + \nabla \cdot (\rho VV) = -\nabla p + \nabla \cdot (\xi) + \rho g + F \quad (14)$$

$p$ 는 압력[Pa],  $\xi$ 는 응력 텐서[Pa],  $g$ 는 중력가속도[m/s<sup>2</sup>],  $F$ 는 다공성물질을 투과하며 발생하는 운동량 손실벡터를 의미한다.

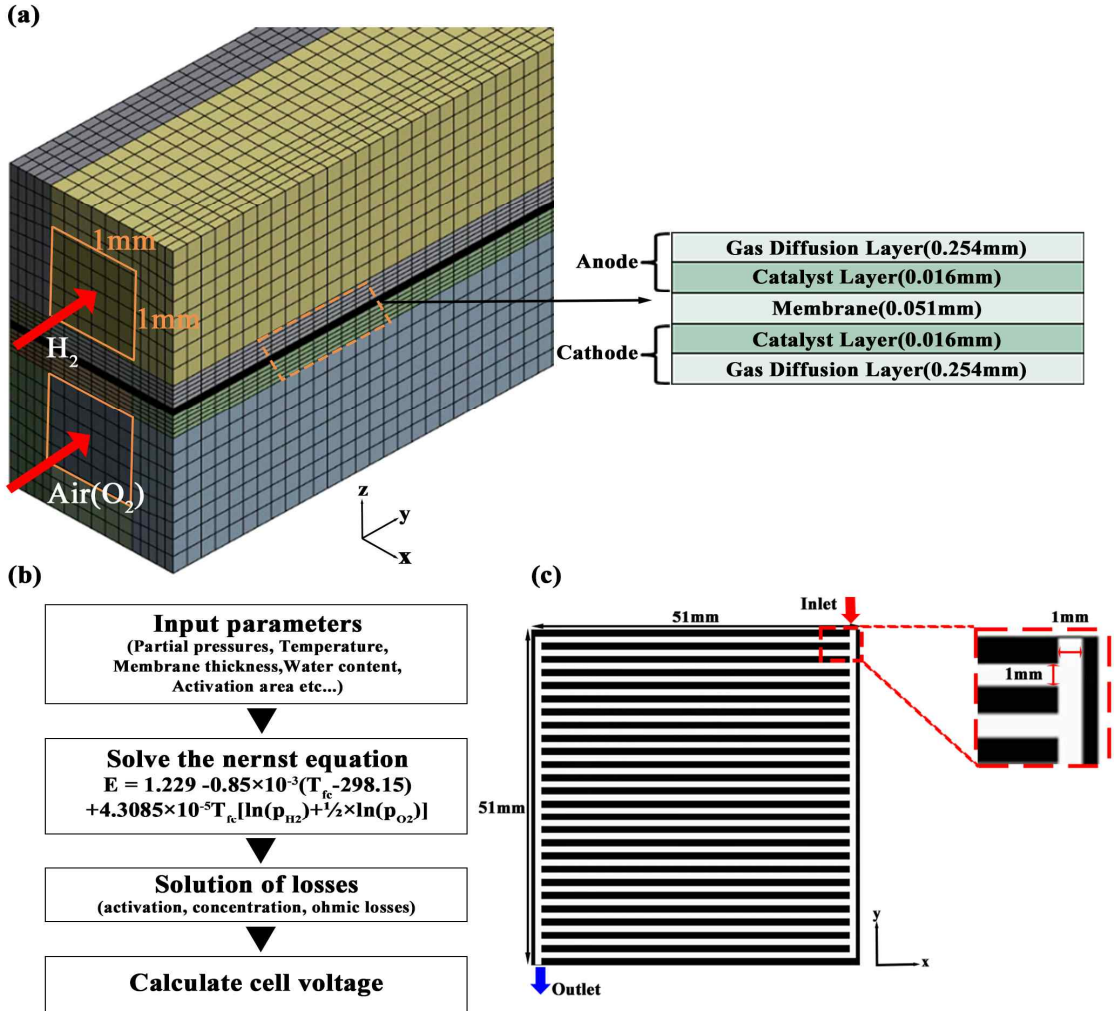


Fig. 2. (a) hexagonal mesh generated for numerical simulation; (b) Calculation process of Simulink simulation; (c) Geometry of 2D parallel model

Heat Source

$$S_h = h_{react} - R_{an,cat} \eta_{an,cat} + I^2 R_{\Omega} + h_L \quad (15)$$

$h_{react}$  는 화학적 반응이 발생할 때 변하는 엔탈피의 총 변화량[kJ],  $R_{an,cat}$  는 양, 음극에서 발생하는 전기화학적 저항[Ω],  $\eta_{an,cat}$  는 양극, 음극 삼중점에서의 과전위[V],  $I$  는 전류[A],  $R_{ohm}$  는 전기화학 시스템의 옴 저항[Ω],  $h_L$  은 물의 상변화 과정에서 엔탈피 변화[kJ]를 나타낸다.

해당 지배식의 결과값을 이용하여 셀 내부 압력, 연료 농도 및 I-V curve를 얻을 수 있다.

### 2.3 1D, 2D 형상

본 연구를 위해 설정한 1D geometric properties 는 Fig. 2. (a)와 같이 구성된다. 폭과 높이가 각각 1mm로 설정된 직사각형의 채널을 통해 공급되는 연료와 산소는 동축류(co-flow)로 유동하며 채널의 길이는 70mm이다. Electrolyte layer를 구성하는 Gas diffusion layer, Catalyst layer, Membrane의 Thickness는 각각 0.254mm, 0.016mm, 0.051mm이다. 각 Layer의 두께는 참조 논문에서 사용한 수치를 인용하였다.<sup>(13)</sup>

2D 형상은 Parallel configuration으로 Fig. 2. (c)와 같다. 너비와 폭이 각각 51mm로, Active area가 2501mm<sup>2</sup>로 설정되었다. Rib의 폭, 유동 채널의 폭, 높이를 1mm로 설정하였다. Inlet, Outlet 채널 feed의 길이는 50mm이다. 연료가 유입되면 채널 feed를 통해 유동하며 각 채널로 분배된다.

### 3. 결과

위의 해석 조건들과 1D 형상을 이용하여 Experiment data<sup>(14)</sup>와 같이 해석의 Validation을 진행한다. CFD와 1D 시뮬레이션의 Validation 진행 결과는 Fig. 3과 같다. 해석 결과들의 전체적인 경향이 Experiment data를 잘 따라가고 있으며 Activation loss가 지배적인 낮은 전류 밀도 영역에서 두 해석 모두 10% 이내의 오차를 보이고 있으며 연료전지가 가장 많이 동작하고 Maximum power density가 나타나는 지점인 Cell voltage 0.5-0.6V 영역에서는 3% 이내의 오차를 보인다.

채널 형상의 영향을 파악하기 위해 유로가 2D 형상일 때의 결과를 비교하였다.

Fig. 4. (a)는 음극 유동 채널의 중간 지점에서 연료의 압력 분포를 나타낸 것이다. 채널의 입구부에서 2000Pa로 최대압력이 나타난다. 출구부에서는 1000Pa로 최저압력이 나타나는 것을 볼 수 있다. 이로 인해 Fig. 4. (b)와 같은 속도 분포가 나타나게 된다. 최대 속도는 입구부에서 30m/s로 나타나고 최저 속도는 각 채널들의 중

간에서 나타난다. 입구를 통해 유입된 공기는 유로 내부의 각 채널로 분배되고 출구에서 혼합되어 유로를 빠져나가게 된다. 유동하는 도중 발생하는 화학적 반응에 의해 유량이 감소하게 된다. CFD 해석은 비압축성 가정을 이용하였고 단면적이 일정하므로 속도 분포는 질량 유량과 비례한다고 할 수 있다. 이에 따라 연료가 채널 feed에서 속도가 감소하고 각 채널의 속도가 증가하는 것을 보아 연료가 채널 feed를 통해 각 채널로 분배되는 것을 알 수 있다. Fig. 4. (c)는 H<sub>2</sub>의 질량 분율을 나타낸 것이다. 최대 0.87의 값을 가지고 최소 0.75의 값을 나타낸다. H<sub>2</sub> 질량 분율이 낮다는 것은 해당 지점에서 화학적 반응이 많이 발생하였다는 것을 의미한다. 또한 채널 내부에 주변보다 질량 분율이 낮은 지역이 나타나는데 이 지역에서 H<sub>2</sub>의 질량 분율이 높게 나타났다. Fig. 4. (d)에서는 전류 밀도를 살펴보았다. 채널 feed 부분에서 최대 전류 밀도 8500 A/cm<sup>2</sup>로 나타났다. H<sub>2</sub> 질량 분율이 높음에도 불구하고 높은 질량 유량에 의하여 이 같은 현상이 발생한다. 흐르는 유량이 적은 채널 부분에서는 H<sub>2</sub> 질량 분율이 작을수록 전류 밀도가 증가하는 것을 볼 수 있다. 이는 화학적 반응에 의하여 H<sub>2</sub>가 소모되면서 전류 밀도가 증가하는 현상을 나타낸다.

위의 해석결과는 연료전지의 Unit Cell 유동 채널 내부에서 유체 흐름과 화학적 반응의 상호작용을 이해하는데 도움을 준다. 유동 채널의 형상이 유체의 분포에 영향을 주고 이에 따른 압력, 속도 분포가 발생한다. 이는 연료전지 내부 지점에서 화학적 반응 발생 정도의 차이를 만들어내게 되고 연료 소비와 전류 밀도 생성에 직접적인 관여를 하게 된다.

앞서 실제 PEMFC의 동작 과정에서는 유로 형상에 대한 연료의 분배가 발생하고 연료의 분배는 각 지점에서 화학적 반응이 발생하는 정도의 차이를 발생하게 만든다는 것을 알아보았다. Concentration loss는 반응이 진행함에 따라 연료와 산소의 농도가 감소하여 전압 손실이 발생하게 되는 것을 의미한다. CFD에서는 채널의 형상에 따른 연료의 이러한 분포를 반영할 수 있다.

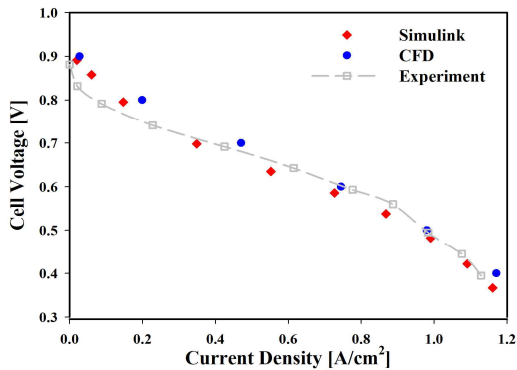


Fig. 3. Comparison of Simulink, CFD and experimental results in I-V plot

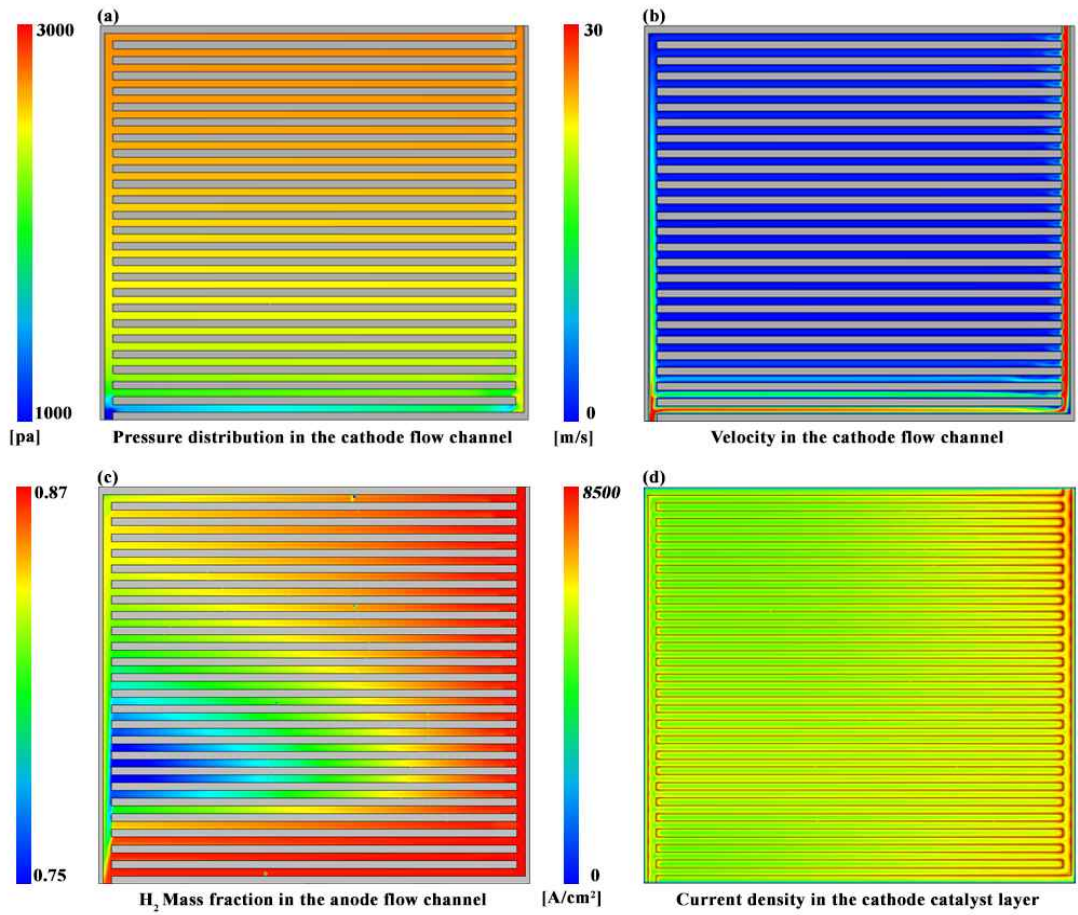


Fig. 4. Various distribution contour results using CFD

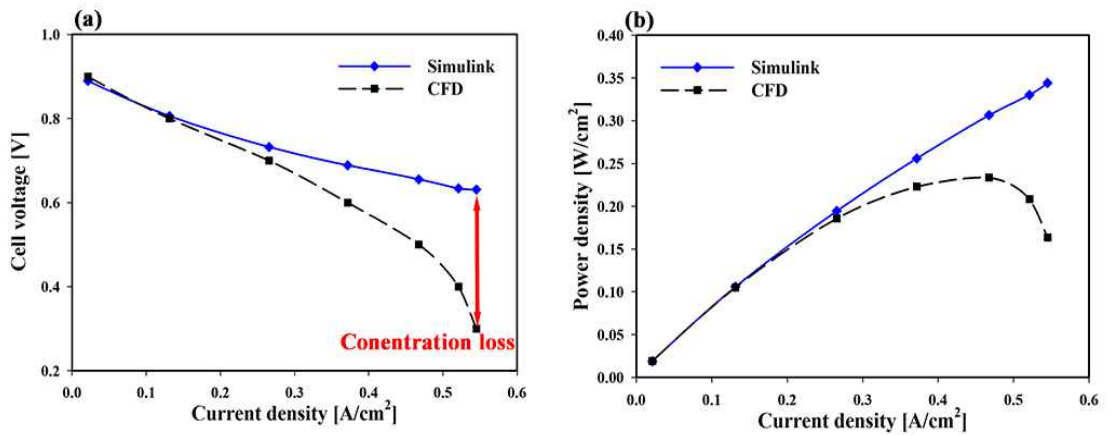


Fig. 5. Compared simulation results depending on simulation tools (a) I-V curves; (b) Power density curves



반면 1D 시뮬레이션에서는 채널의 기하학적 형상을 반영하지 않고 1D 형상과 같은 형상으로 가정한다. 이 때문에 Fig. 5의 I-V, I-Power density curve와 같은 성능 그래프에서 차이가 나타나게 된다.

#### 4. 결론

본 연구에서는 1D 형상을 이용하여 해석의 Validation을 수행하고 2D 형상 해석을 통해 CFD와 1D 시뮬레이션 해석 결과 간의 차이를 조사하였다. 연료전지의 성능에 영향을 미치는 여러 Loss 항목 중, 화학적 반응이 시작할 때 발생하는 Activation loss와 연료전지 내부의 전자 및 양성자의 이동 즉 전해질 막과 전극 등의 접촉 저항에 의해 발생하는 Ohmic loss를 일정하게 유지하기 위하여 Operating conditions와 연료전지를 구성하는 Electrolyte layers의 물성치를 고정하고 형상을 변화시켜 해석을 진행하였다.

Concentration loss는 연료전지가 작동하며 내부 화학적 반응에서 연료와 산소의 농도가 낮아짐에 따라 발생하게 된다. Fig. 5. (a)는 CFD와 1D 시뮬레이션의 2D 형상해석 결과인 I-V curve를 나타낸 것이다. CFD에서는 채널의 형상에 따른 연료의 분배가 발생한다. 이를 통해 채널 내부에서는 연료 유동의 분포 차이가 발생하며, 이로 인해 연료 농도가 구역마다 다르게 나타났다. 이로 인해 CFD에서는 0.3V 구역부터 Concentration loss가 발생하는 것을 볼 수 있었다. 반면 1D 시뮬레이션에서는 고정된 Operating conditions와 물성치로 인해 Activation loss, Ohmic loss가 낮은 전류 밀도에서는 CFD와 비슷하게 나타나지만 Concentration loss가 발생하는 구역부터 그 Curve의 차이가 나타나게 되고 Concentration loss가 Dominant한 구역에서는 Cell voltage가 최대 0.2V의 차이가 관찰되었다.

1D 시뮬레이션은 CFD에 비해 변경되는 Operating conditions를 반영할 수 없고, 사용하는 연료전지가 변경되어 유로의 형상, 연료전지의 크기 등이 변경되게 되면 그 변경을 반영할 수 없게 된다. 이에 따라 전체 PEMFC System의 해석의 부

정확성을 초래하고 연료전지가 변경되면 실험과 CFD를 통한 계수 피팅의 재진행이 요구된다. 이 때문에 낮은 Time cost, 해석 환경을 요구에도 불구하고 사용에 제약이 있음을 확인하였다.

#### 후 기

이 성과는 정부(과학기술정보통신부)의 재원으로 한국연구재단의 지원을 받아 수행된 연구임(No. 2020R1A5A8018822).

#### REFERENCE

- 1) Cheng, S.-J., Miao, J.-M. and Wu, S.-J., 2012, "Investigating the Effects of Operational Factors on Pemfc Performance Based on Cfd Simulations Using a Three-Level Full-Factorial Design," *Renewable Energy*, Vol. 39, No. 1, pp. 250-260.
- 2) Salva, J. A., Iranzo, A., Rosa, F., Tapia, E., Lopez, E. and Isorna, F., 2016, "Optimization of a Pem Fuel Cell Operating Conditions: Obtaining the Maximum Performance Polarization Curve," *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 41, No. 43, pp. 19713-19723.
- 3) Zhang, G., Xie, X., Xie, B., Du, Q. and Jiao, K., 2019, "Large-Scale Multi-Phase Simulation of Proton Exchange Membrane Fuel Cell," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 130, No., pp. 555-563.
- 4) 김동우 and 염은섭, 2021, "Sofc 셀 성능 향상 및 수명 저하 방지를 위한 입구와 출구 2개의 유로 설계," *한국가시화정보학회지*, Vol. 19, No. 2, pp. 56-62.
- 5) Vazifeshenas, Y., Sedighi, K. and Shakeri, M., 2015, "Numerical Investigation of a Novel Compound Flow-Field for Pemfc Performance Improvement," *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 40, No. 43, pp. 15032-15039.
- 6) Gong, C., Tu, Z. and Chan, S. H., 2023, "A Novel Flow Field Design with Flow Re-Distribution for Advanced Thermal Management in Solid

- Oxide Fuel Cell," *Applied Energy*, Vol. 331, No., pp. 120364.
- 7) Lin, C., Yan, X., Wei, G., Ke, C., Shen, S. and Zhang, J., 2019, "Optimization of Configurations and Cathode Operating Parameters on Liquid-Cooled Proton Exchange Membrane Fuel Cell Stacks by Orthogonal Method," *Applied Energy*, Vol. 253, No., pp. 113496.
  - 8) 전지아, 이재준, 송영수, 김민수, 김건우, 나영승 and 리광훈, 2019, "전산 가시화를 통한 무인 항공기용 연료전지 양극 산소 유로 최적화 연구," *한국가시화정보학회지*, Vol. 17, No. 1, pp. 85-92.
  - 9) Doppler, C. and Lindner-Rabl, B., 2023, "Fuel Cell Trucks: Thermal Challenges in Heat Exchanger Layout," *Energies*, Vol. 16, No. 10, pp. 4024.
  - 10) Pukrushpan, J. T., Peng, H. and Stefanopoulou, A. G., 2004, "Control-Oriented Modeling and Analysis for Automotive Fuel Cell Systems," *J Dyn Sys, Meas, Control*, Vol. 126, No. 1, pp. 14-25.
  - 11) Xu, J., Zhang, C., Fan, R., Bao, H., Wang, Y., Huang, S., Chin, C. S. and Li, C., 2020, "Modelling and Control of Vehicle Integrated Thermal Management System of Pem Fuel Cell Vehicle," *Energy*, Vol. 199, No., pp. 117495.
  - 12) Chang, H., YU, X. and Lv, J. H., 2014, "Research on the Performance of Cooling Module with Fuel Cell Vehicle," *The Open Mechanical Engineering Journal*, Vol. 8, No. 1, pp.
  - 13) Mahmoudimehr, J. and Daryadel, A., 2017, "Influences of Feeding Conditions and Objective Function on the Optimal Design of Gas Flow Channel of a Pem Fuel Cell," *international journal of hydrogen energy*, Vol. 42, No. 36, pp. 23141-23159.
  - 14) Wang, L., Husar, A., Zhou, T. and Liu, H., 2003, "A Parametric Study of Pem Fuel Cell Performances," *International journal of hydrogen energy*, Vol. 28, No. 11, pp. 1263-1272.