

고분자 전해질막 연료전지의 기체확산층 내부 잔류수 모델링 및 성능변화해석

장지원 · 김준범[†]

울산대학교 화학공학부
(2023년 11월 6일 접수, 2023년 12월 21일 수정, 2023년 12월 26일 채택)

Modeling Residual Water in the Gas Diffusion Layer of a Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell and Analyzing Performance Changes

Jiwon Jang and Junbom Kim[†]

School of Chemical Engineering, University of Ulsan, Ulsan 44610, Korea
(Received November 6, 2023; Revised December 21, 2023; Accepted December 26, 2023)

초 록

고분자전해질막 연료전지는 작동온도가 낮아, 다른 종류의 연료전지에 비해 빠른 시동과 응답 특성을 가진다는 장점이 있다. 시뮬레이션 연구는 비용과 시간 측면에서 이점이 있어 활발하게 연구되고 있다. 본 연구에서는 기존의 수식에 단위전지의 기체확산층에 잔류하는 물의 저항을 추가하여 실제 데이터와 모델데이터를 비교했다. 실험은 25 cm² 단위 전지로 진행됐으며, 1차 임피던스 측정, 활성화, 분극곡선 데이터 획득 후 정지 시간을 0, 10, 60분으로 가지는 샘플로 나눠 실험했다. 이는 기체확산층 내부의 잔류 중인 물이 증발할 시간을 0분, 10분, 60분 부여했다고 볼 수 있다. 휴식시간을 가지지 않는 경우, 같은 전위 및 같은 유량에서 성능 향상의 폭은 큰 차이를 보이지 않았으나, 휴식시간을 가진 막전극 집합체의 경우 임피던스 측정 시 성능 향상이 확인되었다. 저항 감소크기를 과전압으로 바꿔, 연료전지 모델에 잔류수가 존재할 경우와 존재하지 않을 경우의 전압 차이를 비교했으며 그 결과로 농도손실이 주를 이루는 고전류밀도 영역의 오차율이 줄어든 것을 확인하였다.

Abstract

Polymer electrolyte membrane fuel cells have the advantage of low operating temperatures and fast startup and response characteristics compared to others. Simulation studies are actively researched because their cost and time benefits. In this study, the resistance of water residual in the gas diffusion layer (GDL) of the unit cell was added to the existing equation to compare the actual data with the model data. The experiments were conducted with a 25 cm² unit cell, and the samples were separated into stopping times of 0, 10, and 60 minutes following primary impedance measurement, activation, and polarization curve data acquisition. This gives 0, 10, and 60 minutes for the residual water in the GDL to evaporate. Without the rest period, the magnitude of the performance improvement was not significantly different at the same potential and flow rate, but the rest period did improve the performance of the membrane electrode assembly when measuring impedance. By changing the magnitude of the resistance reduction to an overvoltage, the voltage difference between the fuel cell model with and without residual water was compared, and the error rate in the high current density region, which is dominated by concentration losses, was reduced.

Keywords: Polymer electrolyte membrane fuel cell, Residual water, Modeling

1. 서 론

고분자 전해질 연료전지(polymer electrolyte membrane fuel cell, PEMFC)는 고분자로 이루어진 막을 사용하며, 전력밀도가 높고 다른 연료전지에 비해 비교적 저온에서 작동가능하다[1-3]. 이산화탄소 배

출을 줄이고 탄소중립 시대를 맞이하기 위해서는 재생에너지로 만들어진 전기에너지를 저장하기 용이하며, 필요할 때 발전을 할 수 있고, 높은 효율을 가지는 연료전지 기술의 발전은 필수불가결하다[4-6].

연료전지는 승용 및 상용차량, 수소트램과 드론 등 다양한 분야에서 활용되면서 동시에 수소 인프라를 구축함으로써 수소시대를 열기위한 준비를 진행하고 있다[7-9]. 하지만 PEMFC가 상용화되기엔 아직 비용적인 부분이 단점으로 작용하고 있다. PEMFC의 구성요소는 크게 flow field plate, gas diffusion layer (GDL), membrane electrode assembly (MEA)로 이루어지며, 이 중에서 MEA의 주성분은 탄소 담지 백금으로 고분자전해질 연료전지의 높은 가격의 원인이 된다[10,11]. 미국 에너

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

지성(DOE)에서는 MEA에 사용되는 백금의 양을 2025년까지 0.1 g/kW 이하로 낮추는 것을 목표로 하고 있다[12]. MEA에 사용되는 백금의 양을 줄이기 위해 수많은 새로운 시도와 실험이 진행 중에 있다[13,14].

실험에 사용되는 탄소담지 백금의 양을 줄이면서 동시에 실험기간을 단축시키기 위해서 고분자전해질 연료전지의 모델링과 시뮬레이션에 관한 연구가 다방면으로 수행되고 있다[15-17]. PEMFC를 모델링하는 방법 중 경험적(empirical) 접근법으로 모델링하는 실험이 다수 존재하였고[18,19], 본 연구에서 또한 경험적 접근법으로 연구를 진행하였다. empirical equation은 기존에 실험으로 얻은 데이터를 기반으로 실험조건 일부의 값을 바꾼 경우의 성능을 예측할 수 있다. PEMFC의 empirical equation에 대한 연구는 Kim으로부터 발전되었고, 활성화 손실, 저항손실과 물질전달 손실을 고려하여 Kim's model(1)에 포함시켰다[20].

$$E = E_0 - b \log i - Ri - m \exp(ni) \quad (1)$$

하지만 연료전지가 높은 전류밀도로 작업을 수행할수록 많이 생성되는 물이 전지 내부에서 빠져나오지 못하는 경우[21]에 관한 모델은 거의 작업이 진행되지 않아 잔류수에 관한 연구의 필요성이 요구되고 있다.

본 연구에서는 기존 연료전지 모델을 보완하기 위해 잔류수 손실을 추가하여 새로운 모델을 제작하였고, 분극곡선과 연료전지 구동 중에 생기는 물이 기체확산층(GDL)에서 빠져나가지 못하는 물에 대한 저항(잔류수 손실)으로 확인하여 기존모델과 새로운 모델 간 정확도를 비교하였다.

2. 실험

2.1. 잔류수 실험

본 실험에서 사용하는 평가장치는 Figure 1처럼 이루어져 있으며, 단위전지는 채널의 너비와 높이가 각 1 mm인 5 채널 사형유로 분리판을 사용하였다. 실험 순서는 첫 번째 임피던스 및 활성화 작업 후 분극 곡선 측정, 두 번째 임피던스 측정, 일정 시간이 지난 후 세 번째 임피던스 및 순환전류전압그래프 측정 순으로 진행하였으며, 두 번째와 세 번째 임피던스 측정 사이에 일정주기의 시간을 두거나 없이 하여 진행했다. 활성화작업은 OCV에서 0.4 V 사이를 순환하며 진행했으며 20 cycle 반복하였다. 셀의 휴식 시간을 주지 않은 경우와 10 min, 60 min 씩 준 경우를 각각 S1, S2, S3로 칭하였다. 전기화학 임피던스 분광법(EIS)을 측정할 때는 bio-logic SA의 VSP, VMP3 booster를 사용하였으며, 0.1~10,000 Hz 범위의 주파수에서 수소와 공기를 각각 500 sccm, 1660 sccm씩 공급하여 측정하였다. 분극곡선의 경우는 1.5 / 2.0 (anode/ cathode)의 화학양론비로 공급하여 측정하였고, setting value들은 Table 1에 나타내었다.

2.2. PEMFC 모델링

연료전지의 막전극접합체는 수소의 산화반응이 일어나는 양극(anode)과 수소이온이 이동하는 고분자전해질 막(membrane), 그리고 산소의 환원반응이 일어나는 음극(cathode)으로 이루어지며, 양극과 음극의 반응 및 전체반응식은 식 (2)-(4)와 같다.

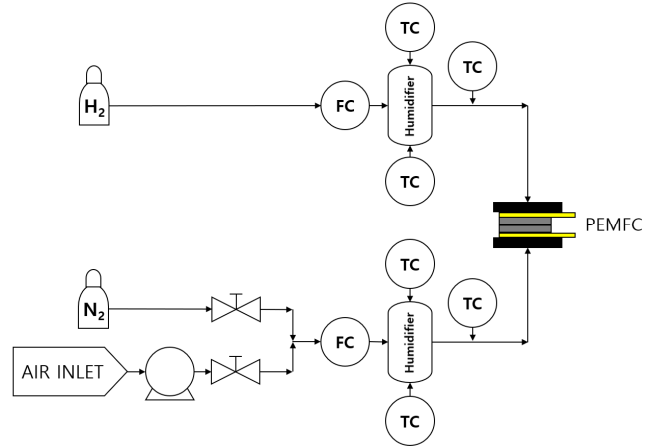
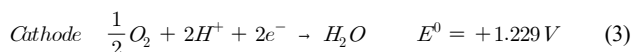


Figure 1. Polymer electrolyte membrane fuel cells experiment flowchart.

Table 1. Unit Cell Operating Conditions

Parameters	Value
MEA	NR212 (CNL)
Gasket thickness	150 μm
GDL	JNT20-A3 (JNTG)
Tightening torque	80 kgf · cm
Cell temperature	80 °C
Gas temperature	80 °C
Relative humidity of H ₂ /Air	100%
H ₂ /Air Pressure	Ambient pressure



PEMFC의 실제 출력전압(V)은 열역학적으로 계산되는 가역전압(E_{thermo})에서 활성화손실(η_{act}), 저항손실(η_{ohmic}), 농도손실(η_{conc})을 뺀 값으로 계산되며 식 (5)와 같이 표현할 수 있다[22].

$$V = E_{thermo} - \eta_{act} - \eta_{ohmic} - \eta_{conc} \quad (5)$$

2.2.1. 연료전지의 가역전압(E_{thermo})

고분자전해질 연료전지의 가역전압은 표준전극전위에 온도와 압력에 따른 가역전압의 변화를 고려해 주어야하며, 이는 Nernst 식 (6)으로 나타낼 수 있다[23].

$$E = E^0 + \frac{\Delta \hat{s}}{nF} (T - T_0) - \frac{RT}{nF} \ln \left(\frac{a_{H_2O}}{a_{H_2}^{0.5} a_{O_2}} \right) \quad (6)$$

여기서 E 는 가역전압, E^0 는 표준상태(298.15 K, 1 atm)에서 PEMFC의 가역전압(1.229 V)을, $\Delta \hat{s}$ 는 수증기생성 엔트로피(-44.34 J/mol · K), n 는 반응에 참여하는 전자의 수를, F 는 페러데이 상수(96,485 C/mol)를, T 는 작동온도(K)를, T_0 는 표준온도(298.15 K)를, R 는 기체상수(8.314 J/mol · K)를, a 는 수소, 산소, 물의 활동도를 무차원화된 분압으로 대체한 것을 의미한다.

2.2.2. 활성화 손실(η_{act})

활성화 손실을 계산하기 위해서 Butler-Volmer 식 (7)을 사용한다.

$$j = j_0 \left(\frac{c_R^*}{c_R^{0*}} e^{\alpha n F \eta_{act} / (RT)} - \frac{c_P^*}{c_P^{0*}} e^{-(1-\alpha)n F \eta_{act} / (RT)} \right) \quad (7)$$

$$\eta_{act} = \frac{RT}{\alpha n F} \ln \left(\frac{j}{j_0} \right) \quad (8)$$

j 는 전류밀도, j_0 는 교환전류밀도, α 는 전달계수, c_R^* 은 반응물의 실제 표면농도, c_R^{0*} 은 반응물의 농도, c_P^* 은 생성물의 표면 농도, c_P^{0*} 은 생성물의 농도를 의미한다. PEMFC는 보통 낮지 않은 전류밀도영역에서 운전을 하기에, 모델에서는 Tafel 식 (8)을 적용하였다[23].

2.2.3. 저항 손실(η_{ohmic})

저항손실을 계산하기 위해서 선형적으로 계산되어야 할 것이 있다. Nafion의 물 함량(λ)과 Nafion의 물 확산도(D_λ)이다. 식은 각각 (9)와 (10)을 적용하여 구할 수 있다[23].

$$\lambda = 0.043 + 17.18a_w - 39.85a_w^2 + 36.0a_w^3 \quad (9)$$

$$D_\lambda = (2.563 - 0.33\lambda + 0.0264\lambda^2 - 0.000671\lambda^3) \times 10^{-6} \times e^{\left(2416 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T}\right)\right)} \quad \text{for } \lambda > 4 \quad (10)$$

a_w 는 수증기의 활동도로 상대습도와 같은 의미이며, T 는 스택의 온도(K)를 의미한다. Nafion의 물의 함량을 전해질 막의 두께(z)에 대해서 해석하게 된다면 다음과 같은 식 (11)로 나타낼 수 있다[23].

$$\lambda(z) = \frac{11q}{n_{drag}^{sat}} + C e^{\left(\frac{jM_m n_{drag}^{sat}}{(22F\rho_{dry}D_\lambda)}\right)} \quad (11)$$

식 (11)에서 n_{drag}^{sat} 는 Nafion막이 완전 수화 시 전기 삼투견인계수로 2.5를 나타내며, q 는 수소분자 하나당 움직이는 물 분자의 개수, C 는 상수, j 는 전류밀도, M_m 는 Nafion의 등가중량(kg/mol), ρ_{dry} 는 건조상태 Nafion의 밀도, z 는 전해질 막의 두께를 의미한다. 경계조건을 이용하여 q 와 C 를 구하고 나면, 전해질 막 두께에 따른 Nafion의 물 함량 식인 $\lambda(z)$ 식을 얻을 수 있다. $\lambda(z)$ 를 식 (12)에 대입하면 Nafion의 전도도를 구할 수 있다.

$$\sigma(T, \lambda) = (0.005193\lambda - 0.00326) \exp\left(1268 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T}\right)\right) \quad (12)$$

막의 총 저항(ASR_m)은 식 (13)을 사용하여 막의 두께만큼 적분하면 계산할 수 있다.

$$ASR_m = \int_0^z \frac{dz}{\sigma[\lambda(z)]} \quad (13)$$

위 식에서 계산한 ASR_m 을 전류밀도(j)와 곱하면 옴의 법칙 식 (14)에 의해 η_{ohmic} 을 구할 수 있다.

$$\eta_{ohmic} = j ASR_m \quad (14)$$

2.2.4. 농도 손실(η_{conc})

Butler-Volmer equation을 기반으로 한계전류 밀도(j_L) 및 전달계수를 이용하여 표현했으며, 일반적으로 사용되는 농도손실에 관한 식 (15)는 아래와 같다[23].

$$\eta_{conc} = \eta_{conc, Nernst} + \eta_{conc, BV} = \left(\frac{RT}{nF}\right) \left(1 + \frac{1}{\alpha}\right) \ln \frac{j_L}{j_L - j} \quad (15)$$

2.2.5. 잔류수 손실($\eta_{stagnant\ water}$)

화학반응 후 cathode에서 생성된 물이 기체확산층(GDL)을 빠져나오지 못하고 갇혀서 산소가 전극으로 원활히 흐르는 것을 방해하는 저항이다. 물은 온도가 높으면 증발을 잘하며, 분리판과 GDL이 강하게 접촉하고 있는 부분은 잔류수가 잘 빠져나가지 못하는 현상이 있다. 따라서 식 (15)를 식 (16)과 같이 수정하였다[24-28].

$$\eta_{conc} = \eta_{conc, Nernst} + \eta_{conc, BV} = (2 - \beta) \left(\frac{RT}{nF}\right) \left(1 + \frac{1}{\alpha}\right) \ln \frac{j_L^\beta}{j_L^\beta - j} \quad (16)$$

$$\beta = 1 - \frac{j}{j_L} \left(c \times C_{comp} \times (1 - C_{poro}) \times \frac{T \times Area_{touch}}{T_{100} \times Area_{all}} \right)$$

c 는 보정계수, C_{comp} 는 GDL의 압축률, C_{poro} 는 GDL의 공극률, T_{100} 은 373.15K, $Area_{all}$ 는 전극면적, $Area_{touch}$ 는 분리판이 GDL에 닿는 면적을 의미한다[29].

3. 결과 및 고찰

3.1. 실험 데이터 분석

Nyquist Plot에서 x축의 왼쪽 접점은 ohmic resistance를, 오른쪽 접점은 ohmic resistance와 charge transfer resistance의 합을 나타낸다.

Figure 2는 sample마다 0.2 A/cm² 전류밀도 영역의 Nyquist Plot이다. Sample별 ohmic resistance는 실험에 따라 좌측으로 이동하는 경향을 보였으며, S1은 0.159 Ω · cm²에서, 0.142 Ω · cm²로, S2는 0.144 Ω · cm²에서 0.134 Ω · cm², 0.131 Ω · cm²로, S3의 경우는 0.144 Ω · cm²에서 0.134, 0.130 Ω · cm²로 변화하였다. 활성화 전 ohmic resistance는 전해질 막의 수화가 충분히 이루어지지 못해 다른 데이터에 비하여 값이 높게 측정된 것으로 고려된다.

이러한 양상은 0.8 A/cm² 전류밀도 영역에서 측정된 Figure 3에서 또한 동일하게 나타났으며 S1은 0.157 Ω · cm²에서 0.142 Ω · cm²으로 S2는 0.145 Ω · cm²에서 0.134, 0.1318 Ω · cm²로, S3는 0.145 Ω · cm²에서 0.134, 0.132 Ω · cm²로 변화하였고, Figure 4에 각 sample의 ohmic resistance를 정리하여 나타내었다.

Charge transfer resistance의 경우 cathode의 산화 환원 반응에 대한 저항이 주를 이루며, 값의 변화량이 결국 산소의 산화 환원 반응의 저항크기 변화와 동일하다. Before activation 저항 데이터의 경우 연료 전지를 체결 및 전지의 온도만 올려주는 작업을 진행한 후 바로 측정된 임피던스 데이터이며, 이때 GDL에 남아있는 물은 없다고 볼 수 있다. After activation 저항 데이터는 MEA의 활성화 및 분극곡선 측정을 완료한 후 바로 측정된 임피던스 데이터로 GDL에 잔류수가 남아 있을 가능성이 높다고 생각되는 부분은 물이 전부 남아있다고 가정한다. 고전류 밀도 부분인 0.8 A/cm² 영역에서 S1, S2, S3 모두 before

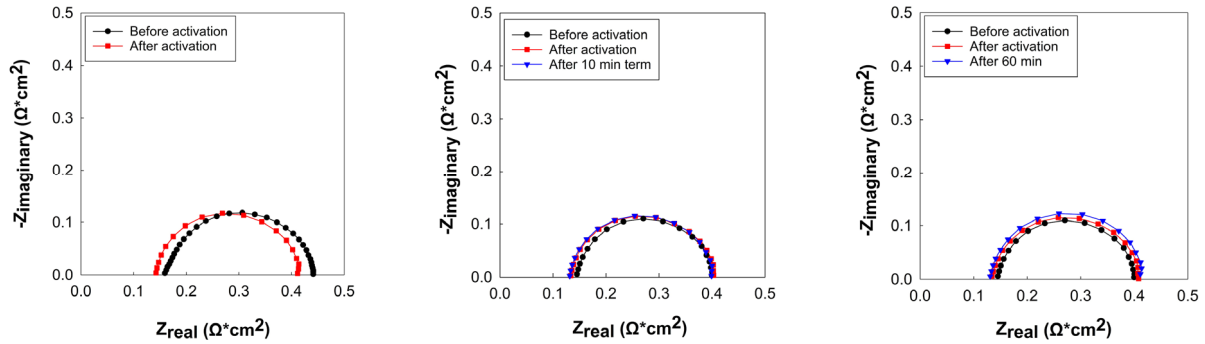


Figure 2. Nyquist plot of (a) S1, (b) S2, (c) S3 at 0.2 A/cm².

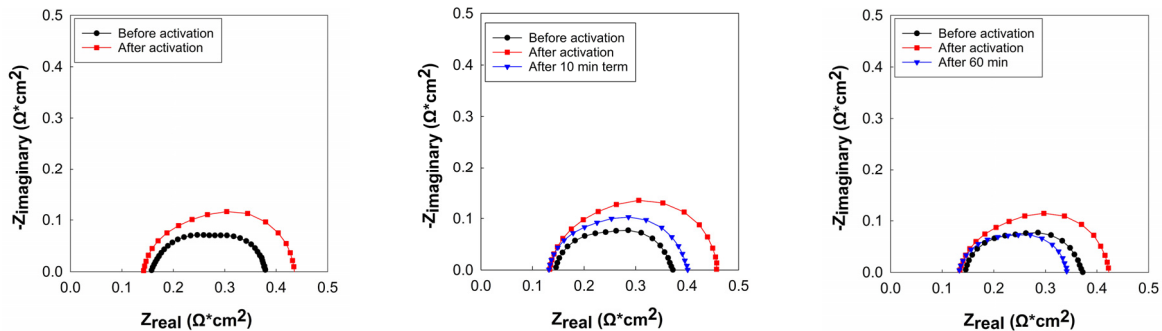


Figure 3. Nyquist plot of (a) S1, (b) S2, (c) S3 at 0.8 A/cm².

activation 저항 데이터에 비해 after activation 저항 데이터 값들이 증가하는 현상을 보였으며 이에 대한 수치는 S1의 경우 0.373 Ω · cm²에서 0.436 Ω · cm²로, S2는 0.373 Ω · cm²에서 0.457 Ω · cm²로, S3의 경우 0.338 Ω · cm²에서 0.423 Ω · cm²로 각각 0.063, 0.084, 0.085 Ω · cm²만큼 저항 값이 변화였고, Figure 5에 각 sample의 charge transfer resistance를 정리하여 나타내었다. 이는 계산된 저항 값만큼 잔류수로 인해 전압강하가 일어난다고 볼 수 있고, 옴의 법칙을 사용하여 손실되는 전압을 계산하면 각각 S1은 0.050 V, S2와 S3는 0.068 V만큼 잔류수로 인해 전압강하가 일어난다고 판단된다.

3.2. 잔류수 저항 모델링

모델링은 MATLAB Simulink 프로그램을 사용했으며, 전체코드는 Figure 6과 같다. 코드는 좌측부터 온도 및 상대습도와 같은 다양한 조절 가능한 변수들로 시작되어 중간 계산과정을 거쳐 가역전압, 활성화손실, 저항손실, 농도손실을 고려한 model 1 경우와 추가로 잔류수 손실까지 고려한 model 2 경우를 동시에 보기 위해 그래프를 두 개를 연계 제작하였다. 농도손실의 한계전류밀도는 유로평균 반응물의 농도(c_R^0)와 전극 및 기체확산층의 두께(δ) 그리고 촉매 층에서의 유효 확산계수(D^{eff})로 이루어진다. 한계전류밀도는 유로 평균 반응물 농도를 높게, 촉매 층에서의 유효 확산계수 값을 크게, 그리고 전극 및 기체확산층의 두께가 작을수록 좋다. model 2는 그중 기체확산층의 영향이라고 볼 수 있는 공극률과 압축률 및 분리판이 기체확산층과 맞닿은 면적비를 고려하여, 다시 말해 D^{eff} 와 δ 를 고려하여 β 를 정의해주었다. 잔류수 손실은 MEA 제작 시 정해지는 한계전류밀도가 잔류수가 많이 존재하여 산소가 전극에 닿는 작업을 방해할 때 극대화되어 한계전류밀도에 영향을 미친다고 가정하고 한계전류밀도의 지수항과 잔류수 손실 계수로 추가해 주었다.

현재 PEMFC를 작동시키면 개방회로전압(open circuit voltage, OCV)

은 1 V를 넘기 힘들지만, 식 (5)를 그대로 적용하면 약 1.2 V로 계산된다. 따라서 그래프를 아래로 이동시켜줄 필요가 있고, 모델에서는 other resistance를 추가하여 0.23 V의 손실을 가해주었다. 모델에서 사용한 파라미터 값들은 Table 2에 나열하였고 계산된 분극곡선은 Figure 7(a)와 같다.

실험으로 얻은 분극곡선의 주요 전류밀도 데이터와 모델 계산결과의 오차율을 Figure 7(b)에 나타내었다. model 1(#1)의 계산 값과 비교했을 때 S1, S2, S3 전부 활성화 손실이 주를 이루는 저전류밀도 영역인 200 mA/cm² 이전에는 model 1과 model 2 그리고 실험데이터 모두 오차가 크게 없으나, 저항손실이 key factor로 작용하는 중전류 밀도, 농도손실이 key factor로 작용하는 고전류밀도 영역으로 갈수록 오차율이 커지는 경향을 보였으며, 1100 mA/cm²에서 model 1과 비교했을 때 S1, S2, S3 각각 89.98%, 71.54%, 58.86%의 오차율을 보였다. 이는 PEMFC를 model 1으로 모델링할 때 활성화 손실과 저항손실과 같은 경우는 정확도가 높게 모사되나, 저항 손실이 주를 이루는 중간전류 밀도 영역부터 오차율이 천천히 올라가며, 농도 손실이 주를 이루는 고전류밀도 영역에서는 오차율이 매우 높아지는 현상을 보인다. 반면에 model 2와 비교한 경우 9.83%, 0.83%, 8.16%의 오차율을 가지며, Table 3에 수치를 정리하였다. 가장 높은 오차율이 S1의 1000 mA/cm²에서 33.68%로 model 1의 57.07%보다 23.39% 줄어든 점을 확인할 수 있다. 또한 model 1의 분극곡선과 model 2의 분극곡선을 비교할 때 기준에 측정된 임피던스 데이터 중 고전류밀도 측의 0.8 A/cm²의 전류밀도 값을 가질 때 전압을 비교하면, 수식 상 0.038 V의 잔류수 손실이 발생했다고 할 수 있고, S1, S2, S3에서 각각 24.80%, 43.85%, 44.26%의 오차율을 가진다.

3.1 실험에서의 after activation와 after time term 임피던스 데이터를 비교하면 S2 0.457 Ω · cm²에서 0.401 Ω · cm²로 0.056 Ω · cm²만큼 감소했으며, S3의 경우는 0.423 Ω · cm²에서 0.341 Ω · cm²로

Table 2. Parameter Setting Values

Parameter (unit)	Value
MEA size (cm ²)	25
Cell temperature (°C)	80
Air concentration (%)	21
Air pressure (bar)	3
Air relative humidity (%)	100
H ₂ concentration (%)	100
H ₂ pressure (bar)	3
H ₂ relative humidity (%)	100
Nafion density (kg/m ³)	1970
Nafion equivalent weight (kg/mol)	1
Membrane thickness (cm)	0.00508
Cathode transfer coefficient	0.3
Cathode exchange current density (A/cm ²)	0.0001
Anode transfer coefficient	0.1
Anode exchange current density (A/cm ²)	1
GDL porosity	0.75
GDL compressibility	0.4
Correction factor	2.65
Area of the bipolar plate touching the electrodes (cm ²)	12.5

0.082 Ω · cm²만큼 감소했다. 이는 S2의 경우 잔류수로 인한 저항이 66.11%만큼 처음 상태로 복구되었고, S3의 경우 잔류수로 인한 저항이 96.12%만큼 처음상태로 복구되었다. 이는 GDL 내부에 남아있는 잔류수가 시간이 지날수록 점차적으로 증발하거나 빠져나가기에 잔

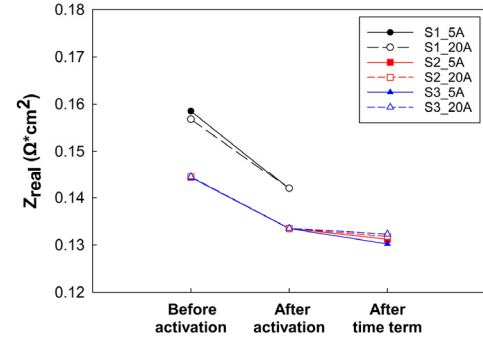


Figure 4. Change in ohmic resistance per sample graph.

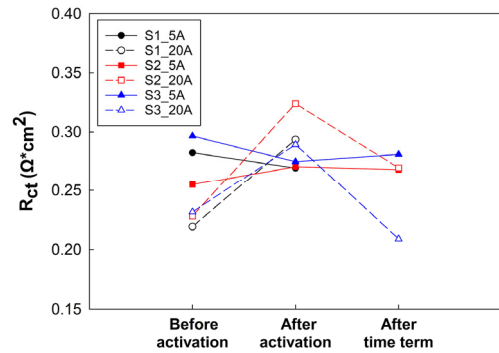


Figure 5. Change in charge transfer resistance per sample graph.

류수에 대한 손실이 줄어든다고 볼 수 있으며, 잔류수 존재 유무 및 잔량에 대해서 model에 적용시켜 나타낼 수 있음을 보였다.

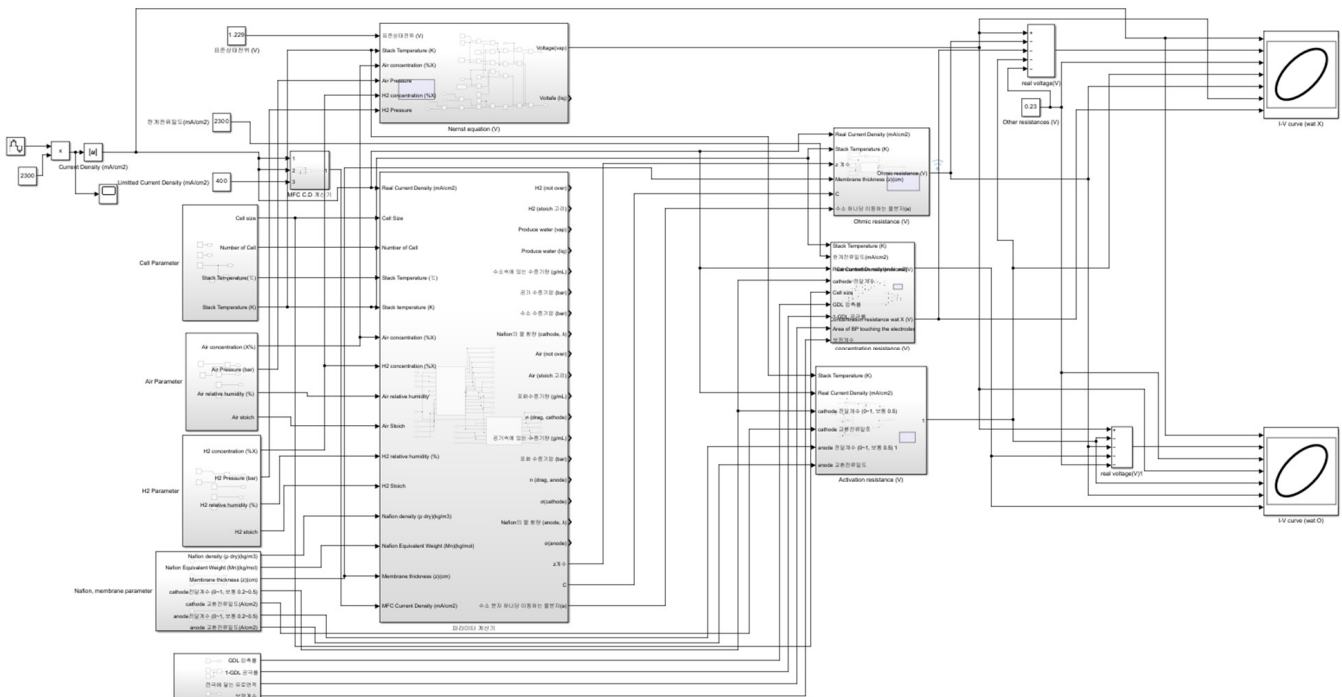


Figure 6. Matlab simulink full code.

Table 3. Error Rate Comparison at 1100 mA/cm² Current Density Per Sample

Sample	Model 1 (%)	Model 2 (%)
S1	89.97660	9.828090
S2	71.54415	0.827965
S3	58.86431	8.158356

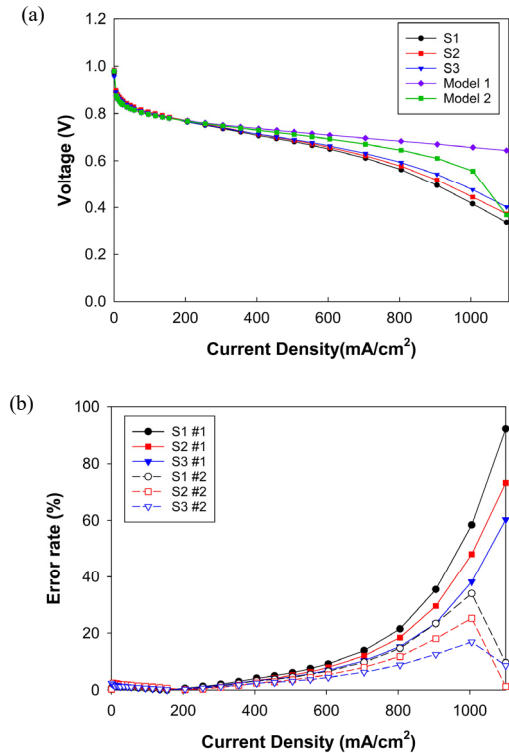


Figure 7. Graphs comparing model and experimental data (a) polarization curve for models and samples, (b) current density vs error rate graph.

4. 결 론

본 연구에서는 해석적으로 얻은 모델과 실제 실험으로 얻은 데이터 간에 차이가 있다는 것을 인지하여, 고분자전해질 연료전지 모델에서 고전류밀도 영역에 큰 영향을 미치는 농도손실에 잔류수 손실을 추가하여 모델과 실제 실험 데이터 간 오차를 줄이고자 하였다. 연료전지 구동 전/후로 임피던스 데이터를 획득하여 cathode 극에서 산소의 환원에 대한 저항의 크기를 비교하였으며, 구동 전/후로 임피던스를 측정 후 저항의 차이를 기체확산층 내의 물의 일부가 연료전지의 반응으로 생기고 빠져나가지 못한 물의 저항과 동일하다고 보았다. 일정 시간이 흐른 후 다시 임피던스를 측정하였을 때 시간이 길어질수록 전하전달저항의 임피던스가 초기에 임피던스를 측정하기 전의 수치로 돌아가려는 경향을 보였으며, 이러한 결과를 통해서 모델에 잔류수 손실을 추가했으며 영향을 미칠 수 있는 인자들을 잔류수 손실 식에 반영하였다. 이로 인해 고전류밀도 영역에서 model 1의 경우 오차율을 89.98%를 보였으나, 잔류수 손실을 추가한 model 2의 경우 정확도가 크게 향상되어 9.83%의 오차율을 보이며, model 1과 비교했을 때 약 80%의 오차율이 감소한 것이 확인됐다.

감 사

이 논문은 2023년 울산대학교 연구비에 의하여 연구되었음.

References

1. S. Mekhilef, R. Saidur, and A. Safari, Comparative study of different fuel cell technologies, *Renew. Sust. Energ. Rev.*, **16**, 981-989 (2012).
2. A. O. Odeh, P. Osifo, and H. Noemagus, Chitosan: A low cost material for the production of membrane for use in PEMFC—A review, *Energ. Source. Part A*, **35**, 152-163 (2013).
3. O. Z. Sharaf and M. F. Orhan, An overview of fuel cell technology: Fundamentals and applications, *Renew. Sust. Energ. Rev.*, **32**, 810-853 (2014).
4. E. Jannelli, M. Minutillo, and A. Perna, Analyzing microgeneration systems based on LT-PEMFC and HT-PEMFC by energy balances, *Appl. Energy*, **108**, 82-91 (2013).
5. H. Ishaq and I. Dincer, Comparative assessment of renewable energy-based hydrogen production methods, *Renew. Sust. Energ. Rev.*, **135**, 13 (2021).
6. M. Grätzel, Mesoscopic solar cells for electricity and hydrogen production from sunlight, *Chem. Lett.*, **34**, 8-13 (2005).
7. E. Hosseinzadeh and M. Rokni, Development and validation of a simple analytical model of the proton exchange membrane fuel cell (PEMFC) in a fork-lift truck power system, *Int. J. Green Energy*, **10**, 523-543 (2013).
8. L. Barelli, G. Bidini, and A. Ottaviano, Optimization of a PEMFC/battery pack power system for a bus application, *Appl. Energy*, **97**, 777-784 (2012).
9. Y. Feng and Z. Dong, Integrated design and control optimization of fuel cell hybrid mining truck with minimized lifecycle cost, *Appl. Energy*, **270**, 11 (2020).
10. N. G. Moreno, M. C. Molina, D. Gervasio, and J. Francisco Pérez Robles, Approaches to polymer electrolyte membrane fuel cells (PEMFCs) and their cost, *Renew. Sust. Energ. Rev.*, **52**, 897-906 (2015).
11. P. C. Okonkwo, O. O. Ige, E. M. Barhoumi, P. C. Uzoma, W. Emori, A. Benamor, and A. M. Abdullah, Platinum degradation mechanisms in proton exchange membrane fuel cell (PEMFC) system: A review, *Int. J. Hydrog. Energy*, **46**, 15850-15865 (2021).
12. U.S. Drive, Fuel cell technical team roadmap, New York: US Drive Partnership, 1-34 (2017).
13. X. Duan, F. Cao, R. Ding, X. Li, Q. Li, R. Aisha, S. Zhang, K. Hua, Z. Rui, Y. Wu, J. Li, A. Li, and J. Liu, Cobalt-doping stabilized active and durable sub-2 nm Pt nanoclusters for low-Pt-loading PEMFC cathode, *Adv. Energy Mater.*, **12**, 9 (2022).
14. J. P. Owejan, J. E. Owejan, and W. Gu, Impact of platinum loading and catalyst layer structure on PEMFC performance, *J. Electrochem. Soc.*, **160**, 824-833 (2013).
15. Q. Ye and T. Van Nguyen, Three-dimensional simulation of liquid water distribution in a PEMFC with experimentally measured capillary functions, *J. Electrochem. Soc.*, **154**, 1242-1251 (2007).
16. S. A. Atyabi and E. Afshari, A numerical multiphase CFD simulation for PEMFC with parallel sinusoidal flow fields, *J. Therm. Anal. Calorim.*, **135**, 1823-1833 (2019).
17. D. Chu and R. Jiang, Performance of polymer electrolyte mem-

- brane fuel cell PEMFC stacks Part I. Evaluation and simulation of an air-breathing PEMFC stack, *J. Power Sources*, **83**, 128-133 (1999).
18. R. F. Mann, J. C. Amphlett, M. A. I. Hooper, H. M. Jensen, B. A. Peppley, and P. R. Roberge, Development and application of a generalised steady-state electrochemical model for a PEM fuel cell, *J. Power Sources*, **86**, 173-180 (2000).
 19. M. Ceraolo, C. Miulli, and A. Pozio, Modelling static and dynamic behaviour of proton exchange membrane fuel cells on the basis of electro-chemical description, *J. Power Sources*, **113**, 131-144 (2003).
 20. J. Kim, S.-M. Lee, and S. Srinivasan, Modeling of proton exchange membrane fuel cell performance with an empirical equation, *J. Electrochem. Soc.*, **142**, 2670-2674 (1995).
 21. J. P. Owejan, T. A. Trabold, D. L. Jacobson, M. Arif, and S. G. Kandlikar, Effects of flow field and diffusion layer properties on water accumulation in a PEM fuel cell, *Proceedings of the Fifth International Conference on Nanochannels, Microchannels and Minichannels*. June 18-20, Puebla, Mexico (2007).
 22. A. Andronica, I. Stamatina, V. Girleanu, V. Ionescu, and N. Buzbuchi, Simplified mathematical model for polarization curve validation and experimental performance evaluation of a PEM fuel cell system, *Procedia Manuf.*, **32**, 810-819 (2019).
 23. R. O'Hayre, S.-W. Cha, W. G. Colella, and F. B. Prinz, *Fuel Cell Fundamentals*, 3rd ed, 29-258, hanteemedia, Korea (2017).
 24. R. Omrani and B. Shabani, Review of gas diffusion layer for proton exchange membrane-based technologies with a focus on unutilised regenerative fuel cells, *Int. J. Hydrog. Energy*, **44**, 3834-3860 (2019).
 25. K. Kim, Y.-J. Sohn, M. Kim, and W.-Y. Lee, Numerical study on the effects of GDL porosity on the PEMFC performance, *J. Mech. Sci. Tech.*, **33**, 1022-1030 (2009).
 26. J. Ge, A. Higier, and H. Liu, Effect of gas diffusion layer compression on PEM fuel cell performance, *J. Power Sources*, **159**, 922-927 (2006).
 27. X. Zhu, P. C. Sui, and N. Djilali, Dynamic behaviour of liquid water emerging from a GDL pore into a PEMFC gas flow channel, *J. Power Sources*, **172**, 287-295 (2007).
 28. J. Kim and J. Kim, Effect of gas diffusion layer compression and inlet relative humidity on PEMFC performance, *Appl. Chem. Eng.*, **32**, 68-74 (2021).
 29. Y. G. Yoon, W. Y. Lee, G. G. Park, T. H. Yang, and C. S. Kim, Effects of channel configurations of flow field plates on the performance of a PEMFC, *Electrochim. Acta*, **50**, 709-712 (2004).

Authors

Jiwon Jang; B.Sc., Graduate Student, School of Chemical Engineering, University of Ulsan, Ulsan 44610, Korea; skswkdwldnjs@naver.com
 Junbom Kim; Ph.D., Professor, School of Chemical Engineering, University of Ulsan, Ulsan 44610, Korea; jbkim@ulsan.ac.kr