

연료전지 수소 재순환 시스템의 유동해석

김재춘* · 이용택* · 정진택** · 김용찬** · 황인철***

Flow analysis of the Hydrogen Recirculation System for Fuel Cells

Jae Choon Kim*, Yongtaek Lee*, Jin Taek Chung**, Yongchan Kim**,
Inchul Hwang***

Key Words : Fuel cell(연료전지), Hydrogen recirculation(수소재순환), Two-phase flow(이상유동), Multi-component(혼합물), Recirculation Blower(재순환 블로어)

ABSTRACT

In this paper, numerical analysis of hydrogen recycle system has been conducted in order to enhance the efficiency of automotive fuel cell. Generally, the excess hydrogen is provided in the automotive fuel cell. Since the non-reaction hydrogen reduces automotive fuel cell efficiency, reuse of the non-reaction hydrogen can be helpful to improve the fuel cell performance. In case of PEM FC, the water vapor is provided to hydrogen from the cathode so that the mixture experiences phase change depending on the changes of pressure and temperature. The internal flow of the mixture in the hydrogen recirculation system of fuel cell was investigated for real flow conditions. The variation of performance, properties and mass fractions of mixture, hydrogen and water-vapor were investigated. This study was performed based on 80KW level automotive fuel cell's recycling system.

1. 서론

1.1 연구의 필요성

연료전지는 연료내에 저장되어있는 에너지를 전기화학적 반응에 의하여 전력으로 변환해 주는 장치이다. 연료전지 시스템은 자동차용 엔진과 마찬가지로 여러 가지 운전조건에 따라서 성능이 변화하기 때문에 이에 대한 구체적인 고찰이 필요하다. 연료전지는 수소극에서 공급되는 연료인 수소와, 공기극에서 공급되는 공

기의 당량비 (Stoichiometry)가 항상 1보다 큰 값을 유지한다. 따라서 수소극에서 배출되는 수소중에서 반응하지 않은 미반응수소에 대한 재활용이 필요하게 되었다. 이로 인해서 Fig. 1에서 보여지는 것처럼 미반응 수소를 재순환하여 스택으로 공급시키는 재순환 시스템이 적용되고 있으나 최적의 효율과 성능을 위한 운전조건에 대한 연구는 미비한 상태이다.

한편, 고분자 전해질 연료전지는 전해질의 특성상 가습이 반드시 필요하기 때문에 수소극에서 배출되는 수소에는 일정량의 수증기가 포함되게 된다. 그리고 공기극에서 발생된 물이 수소극 쪽으로 역확산(back diffusion)하기 때문에 수소 재순환 시스템 내에서 물의 응축에 의한 이상유동(two-phase flow)이 발생하게 된다. 따라서 본

* 고려대학교 대학원 기계공학과
E-mail : nemo1905@korea.ac.kr

** 고려대학교 기계공학과
E-mail : jchung@korea.ac.kr

*** 현대 기아 연구개발본부 연료전지 개발팀

연구에서는 재순환 블로어를 사용하는 수소 재순환 시스템에 있어서 수소와 수증기 및 응축수의 이상유동특성을 파악하고 운전조건의 변화에 따른 재순환 시스템의 성능평가를 하고자 한다. 그리고 재순환 블로어 매칭 분석을 통하여 시스템의 성능을 향상시키고, 시스템을 최적화하는 것을 목적으로 한다.

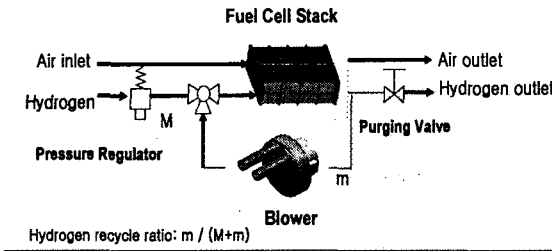


Fig. 1 Schematic of the performance evaluation apparatus of a hydrogen recirculation system

1.2 관련연구동향

단위 연료전지에서의 내부적 반응 및 유동에 관한 연구와 더불어 연료전지를 적용한 시스템의 최적설계와 관련된 연구도 점차 확대되어 가고 있다.

J. Scholta et al. (2004)은 10kW 규모의 스택을 적용한 시스템으로 대기압 조건에서 성능을 평가하였다. 소량의 셀을 적층한 스택에서는 가스 확산층과 전류 콜렉터의 최적화가 중요인자이며 적층된 셀이 많아지면 가스확산층의 최적설계가 중요하다고 하였다. 또 R. Eckl et al.(2004)은 300W규모의 스택을 이용하여 내부가습을 중요 파라미터로 연구하였다. 특히 높은 온도와 낮은 전류밀도 조건에서 MEA가 건조되는 것을 심각한 문제점으로 제시하면서 역확산에 의하여 공기극의 물이 수소극으로 이동하는 것을 언급하였다. 하지만 수소 재순환시스템 내에서 수소와 수증기 혼합물의 거동과 이상유동, 그리고 블로어의 매칭성능 등에 관한 연구는 미비한 편이다.

본 연구에서는 수소 재순환시스템내의 유동해석과 실험을 통하여 혼합물의 단상 및 이상유동에서 유량, 압력, 재순환유량 등의 운전조건의 변화가 시스템 전체의 성능에 미치는 영향을 살펴보고 이를 통하여 시스템을 최적 설계하고자 한다.

1.3 연구목적

본 연구의 목적은 다음과 같다.

1) 재순환 영역의 유동장을 해석

재순환 영역의 해석을 위해서 실제 자동차에 적용된 재순환 시스템의 형상을 모델링하고 단상 및 이상유동에 대하여 상용코드를 사용하여 해석한다.

2) 재순환 시스템의 성능평가

수소재순환의 적용에 의한 전체 시스템의 성능 및 효율향상을 실험을 통하여 검토하고 운전 조건에 따른 변화를 관찰한다.

3) 수소 재순환 시스템의 최적 설계조건 설정

수소재순환을 적용한 시스템이 각 운전조건에서 최적의 효율 및 성능을 발휘할 수 있도록 재순환 시스템을 최적 설계한다.

이 논문에서는 먼저 상변화가 일어나지 않는 조건에서 수소 재순환 시스템 내 유동해석 및 성능 평가에 대한 내용을 다루었다.

2. 관련이론

2.1 단일물질 (Pure Component)

재순환 시스템 내에서 수소와 수증기가 항상 균일하게 섞여 있지 않으므로 하나의 물질 (Single Component)로 가정할 수 없다. 따라서 각 상태량(Properties)을 계산할 때 상태량을 구하는 식에 따라 단일물질일 때와 혼합물질일 때를 나누어서 계산을 해 주어야 한다. 상태량들은 연속방정식, 에너지방정식, 난류방정식, 성분전달방정식, 확산방정식 등을 계산하기위해 사용되므로 정확한 값을 구해야 할 필요가 있다. 물질량 (Molecular weight)을 제외하고 밀도, 점도, 비열, 열전도율은 모두 온도에 따라 변하기 때문에 상태량을 계산하기 위해 함수를 대입하였다.

점도의 경우는 식(1)와 같이 Surtherland Law를 사용하여 단일물질의 값을 계산한 뒤 식(4)를 이용하여 혼합물의 상태량을 구하였다.

열전도율과 비열 역시 Carl L. Yaws (2001) 가 제시한 자료를 식(2)의 형태 온도에 따른 5차 다항식을 만들어 단일물질의 값을 계산한 뒤 역시 식(5)와 식(6)을 아용하여 혼합물의 값을 계산하였다.

$$\mu = \mu_0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2} \frac{T_0 + S}{T + S} \quad (1)$$

$$C_p(T) = A_1 + A_2T + A_3T^2 + A_4T^3 + A_5T^4 \quad (2)$$

2.2 혼합물질 (Mixture)

혼합물질의 상태량 계산은 단일물질에서 계산된 결과값을 이용하여 계산을 하거나 단일물질들의 질량비율을 이용해서 계산하게 된다. 혼합물의 밀도는 식(3)의 Incompressible Ideal Gas Law 를 사용하여 계산하였다.

$$\rho = \frac{P}{RT \sum_i \frac{Y_i}{M_{w,i}}} \quad (3)$$

Y : mass fraction

i : species

$M_{w,i}$: molecular weight of species i

점도의 경우는 단일물질에 대해 계산된 값을 이용하여 식(4)과 같이 Ideal Gas Mixing Law 를 사용하여 혼합물의 값을 계산하였다.

$$\mu = \sum_i \frac{X_i \mu_i}{\sum_j X_j \Phi_{ij}} \quad (4)$$

$$\text{where } \Phi = \frac{[1 + (\frac{\mu_i}{\mu_j})^{1/2} (\frac{M_{w,j}}{M_{w,i}})^{1/4}]^2}{[8(1 + \frac{M_{w,j}}{M_{w,i}})]^{1/2}}$$

X : mole fraction

열전도율 역시 점도와 마찬가지로 단일물질에 대해 계산한 값을 이용하여 식(5)과 같이 Ideal Gas Mixing Law 를 사용하여 혼합물의 값을 계산하였다.

$$k = \sum_i \frac{X_i k_i}{\sum_j X_j \Phi_{ij}} \quad (5)$$

$$\text{where } \Phi = \frac{[1 + (\frac{\mu_i}{\mu_j})^{1/2} (\frac{M_{w,j}}{M_{w,i}})^{1/4}]^2}{[8(1 + \frac{M_{w,j}}{M_{w,i}})]^{1/2}}$$

혼합물의 비열 역시 단일물질에서 구한 비열 값을 이용하여 질량 값에 따라 값을 결정하는 Mixing Law를 사용하여 식(6)와 같이 계산하였다.

$$c_p = \sum_i Y_i c_{p,i} \quad (6)$$

3. 전산해석

3.1 전산해석 방법

본 연구에서는 재순환 시스템 내 3차원 유동에 대해 전산해석을 수행하였으며 난류 모델은 표준 k-ε 방정식을 사용하였고, 이산화 방정식은 second order upwind scheme을 사용하였다. 전산해석은 상용해석 프로그램인 Fluent 6.2를 사용하였다. 전산해석에 사용된 지배방정식은 다음과 같다.

연속방정식:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = S_m \quad (7)$$

운동량방정식:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\vec{\tau}) + \vec{\rho} g + \vec{F} \quad (8)$$

에너지방정식:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \nabla \cdot (\vec{v} (\rho E + p)) = \nabla \cdot (K_{eff} \nabla T - \sum_i h_i \vec{J}_i + (\vec{\tau}_{eff} \cdot \vec{v})) + S_h \quad (9)$$

k-ε 방정식:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \epsilon - Y_M + S_k \quad (10)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \epsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} (G_k + C_{3\epsilon} G_b) - C_{2\epsilon} \frac{\epsilon^2}{k} + S_\epsilon \quad (11)$$

$$\text{Where } \mu_t = \rho C_\mu \frac{K^2}{\epsilon}$$

성분 전달 방정식:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_i) = -\nabla \cdot \vec{J}_i + R_i + S_i \quad (12)$$

확산 방정식:

$$\vec{J}_i = -\left(\rho D_{i,m} + \frac{\mu}{sc_i}\right) \cdot \nabla Y_i - D_{T,i} \frac{\nabla T}{T} \quad (13)$$

$$\text{where } D_{i,m} = CT^{3/2} \frac{\sqrt{((M_1 + M_2)/M_1 M_2)}}{P \sigma_{12}^2 \Omega_D}$$

식(13)에서 확산계수에 대한 식은 Ross Taylor, R. Krishna, (1993)에서 사용된 두 혼합물에서 확산계수를 구하는 식이다. 이 식을 C언어를 이용하여 Programing하였으며 Program을 상용코드에 대입하여 혼합물의 확산계수를 계산할 수 있도록 하였다.

3.2 해석모델 및 격자생성

수소재순환 시스템내부에서 수소와 수증기 혼합물의 이상 유동을 해석하기 위한 사전 연구로 상변화를 고려하지 않았다. 상변화가 일어나지 않는 조건에 대해 먼저 수행한 뒤 추후에 수증기의 응축기 일어나는 이상유동특성을 고찰하기로 한다.

수소와 수증기의 혼합물에 대한 유동특성에서 특히 각 성분들의 확산을 고찰하기 위해 압력과 온도변화에 따른 혼합물의 확산계수 변화를 C언어를 이용하여 계산하였다.



Fig. 2 Hydrogen recirculation model

수소재순환 시스템의 형상모델은 Fig. 2에 나타난 것처럼 개발된 자동차에 사용되는 수소재순환

시스템을 그대로 사용하였다. 해석모델은 Fig. 3에 나타난 것처럼 재순환 시스템을 단순화시켰다. 연료전지스택(Stack)에서 반응하고 나온 미반응수소와 수증기의 혼합물이 들어가는 입구부분에서 시작하여, 블로어를 거쳐 승압된 혼합물이 새로 유입되는 수소와 만나 연료전지스택으로 들어가는 부분까지 해석구간으로 설정하였다. 그리고 블로어의 내부는 해석하지 않고 블로어 입출구의 압력차만을 계산에 고려하였다. 따라서 블로어를 하나의 면(Face)으로 두고 해석을 하였다. 격자모델은 Gambit을 이용하여 Fig. 4에 나와 있는 것처럼 만들었으며, 격자수는 모두 1,590,753개이다.

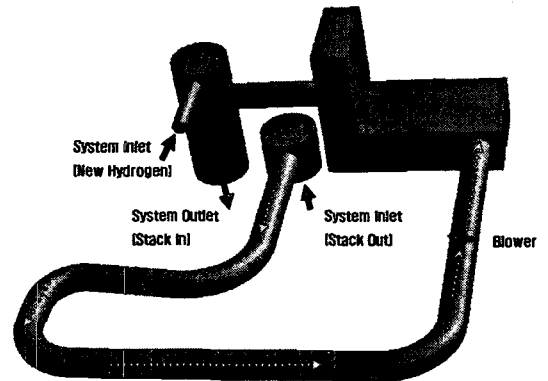


Fig. 3 Computational model

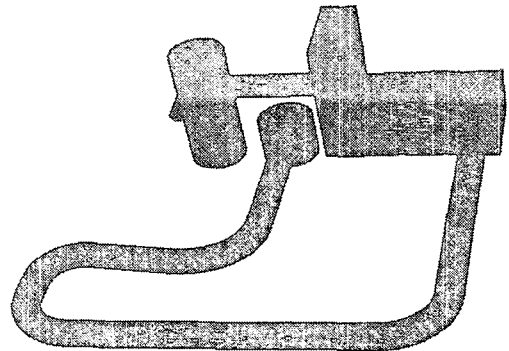


Fig. 4 Grid generation for hydrogen recirculation system

3.3 경계조건

혼합물의 상태량과 지배방정식의 해를 구하기

위해서는 물리적으로 타당한 경계조건들이 필요하다. 경계조건으로서 입구와 출구의 압력과 블로어에 의해 승압되는 압력 값을 사용하였다. 그리고 입구와 출구에서의 온도, 수소와 수증기의 유량과 질량비를 사용하였다. 또한 시스템 입구에서 수소와 수증기는 균일하게 섞여 있는 것으로 보았다. 모든 경계조건들은 개발된 80KW급 연료전지 자동차의 수소재순환 시스템에서 연료전지에서 생산되는 전력이 80KW일 때의 측정값들을 사용하였다.

4. 결과 및 고찰

4.1 유동장해석

재순환 시스템 내에서 혼합물의 거동을 보기 위해 압력과 속도분포를 확인해 보았다. 시스템의 형상이 복잡하여 상대적으로 경계층의 영향이 적은 유로의 중심과 압력변화가 크게 일어나는 부분의 단면을 잘라서 결과를 표시하였다. Fig. 5는 연료전지가 80KW의 전력을 생산할 때의 수소

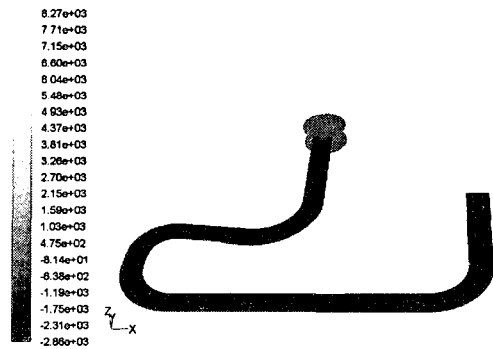


Fig. 5 Pressure of Mixture (Pa)

와 수증기 혼합물의 압력분포를 나타낸 것이다. 블로어를 경계로 큰 압력차가 생기는 것을 확인할 수 있는데 이는 블로어로 인한 압력차가 하나의 경계면에서 일어나기 때문이다. 곡관부분들에서 압력손실을 확인할 수 있으며 새로 유입되는 수소와 재순환 혼합물이 만나는 부분에서도 압력변화가 크게 일어남을 확인할 수 있다.

Fig. 6은 속도분포를 벡터로 표현한 그림이다. 블로어를 경계로 압력차는 크지만 속도분포는 질량유량이 일정하여 큰 차이를 보이지 않는다. 혼합물이 원형관에서 사각통으로 들어갔을 때 유로면적의 급격한 확대로 혼합물의 속도가 줄어

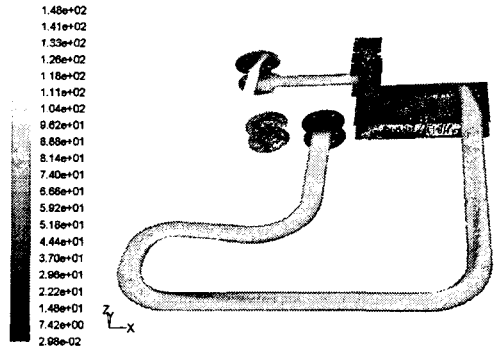


Fig. 6 Velocity vector of Mixture (m/s)

들을 확인할 수 있다. 그리고 새로운 수소와 재순환된 혼합물이 만나서 복잡한 유동을 보이며 재순환 시스템 출구로 빠져나가는 것을 확인하였다. 이를 통해 새로운 수소가 재순환 시스템으로 유입되지 않는 것을 확인할 수 있었다.

4.2 질량분율

재순환 시스템의 용도가 미반응수소를 다시 활용하기 위한 것이므로 시스템내부에서 수소의 거동을 고찰하는 것이 필요하다. Hong Sun, (2005)은 연료전지에 사용되는 수소와 수증기의 혼합물에서 하나의 물질의 거동을 보기 위해 그 물질의 질량과 혼합물의 질량분율을 보았다. Fig. 7은 연료전지가 80KW의 전력을 생산할 때의 수소재순환 시스템 내부의 수소 질량분율이다. 시스템 내부에서 압력의 변화가 있지만 입구에서 균일한 상태로 섞여있다고 가정하여서 계산격자마다 같은 질량분율로 계산되기 때문에 입구에서부터 새로운 수소가 들어오는 부분까지의 질량분율이 일정한 결과를 보인다. 그리고 재순환 시스템의 출구부분에서 새로운 수소의 유입으로 수소

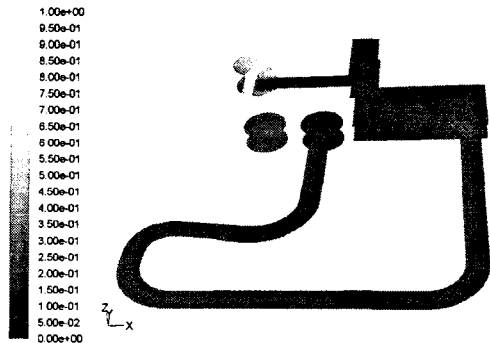


Fig. 7 Mass fraction of H₂

의 질량분율이 커짐을 볼 수 있다.

4.3 상태량

혼합물의 상태량은 혼합물의 거동을 계산하기 위해 필요한 값이다. 각각의 값은 앞의 관련이론을 통해 계산하였다. Fig. 7는 연료전지가 80KW의 출력을 낼 때의 수소재순환 시스템 내부의 혼합물의 밀도이다. 혼합물의 밀도는 질량비에 따라 달라지는 값으로 질량비와 같은 경향을 보인다. 그리고 시스템 출구부분에서 새로운 수소의 유입으로 인한 질량비의 변화와 온도의 변화가 밀도의 변화를 일으키는 것을 확인할 수 있다. 그리고 점도와 열전도율, 비열 또한 같은 이유로 비슷한 경향을 나타냄을 확인할 수 있었다.

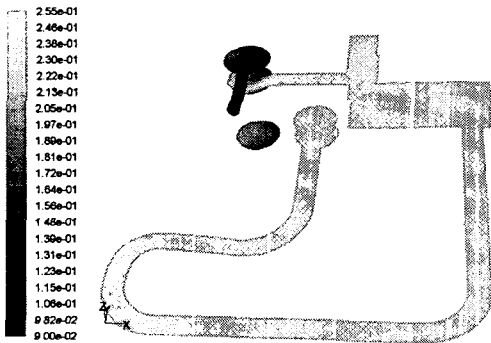


Fig. 7 Density of Mixture (kg/m^3)

5. 결론

자동차에 사용되는 연료전지의 수소재순환 시스템내부에서 수소와 수증기의 혼합물의 유동을 연료전지가 80KW의 전력을 생산할 때의 경계조건을 이용하여 전산해석 하였다. 이를 통하여 상변화가 없는 수소와 수증기의 혼합물에 대한 유동 특성을 고찰해 보았고 압력과 온도 그리고 물질의 질량비에 따라 변화하는 혼합물의 상태량을 확인할 수 있었다.

향후 전산해석과 실험을 통하여 연료전지의 출력이 2KW, 10KW, 40KW, 60KW, 80KW 일 때의 조건들에 대해 혼합물의 거동을 파악하고, 혼합물 중의 수증기가 압력과 온도에 따라 상변화하는 이상유동에 대하여 연구할 예정이다. 그리고 연료전지에서 배출되는 미반응 연료를 재순환 시켜서 시스템의 효율을 향상시키며 운전조건의 변화와 재순환 유량이 시스템의 효율 및 성능에 미치는 영향을 실험을 통해서도 관찰하고 이론적인 계산결과와 비교 검토할 예정이다.

6. 후기

본 연구는 산업자원부의 지원(과제번호 10016536 - 2004 -11)으로 수행되었으며 이에 감사를 드립니다.

참고문헌

- (1) Carl L. Yaws, 2001, "Matheson gas data book" pp436-442, 866-963.
- (2) Ross Taylor, R. Krishna, 1993, "Multicomponent Mass Transfer", pp.50-138.
- (3) E. L. Cussler, 1999, "Diffusion Mass Transfer in Fluid System", pp.101-206.
- (4) Pieter R. Wiederhold, 1997, "Water Vapor Measurement"
- (5) Federica Favari, Alberto Bertucco, Nicola Elvassore, Maurizio Fermeglia, 2000, "Multiphase Multicomponent equilibria for mixtures containing polymers by the perturbation theory", Chemical Engineering Science 55, pp.2379-2392.
- (6) James Larminie, Andrew Dicks, 2000, "Fuel Cell Systems Explained", pp.17-108.
- (7) J. Scholta, N. Berg, P. Wilde, L. Joerissen, J. Garche, 2004, "Development and performance of a 10kW PEMC stack", Journal of Power Sources 127, pp.206-212.
- (8) R. Eckl, W. Zehntner, C. Leu, U. Wagner, 2004. "Experimental analysis of water management in a self-humidifying polymer electrolyte fuel cell stack", Journal of Power Sources 138, pp.137-144.
- (9) Hong Sun, Hongtan Liu, Lie-Jin Guo, 2005, "FEM fuel cell performance and its two-phase mass transfer" Journal of Power Source 143 pp.123-135.