

## 고분자 전해질 연료전지용 분리판 최적 설계

한 인수<sup>1)</sup>, 정 지훈<sup>2)</sup>, 임 종구<sup>3)</sup>, 임 찬<sup>4)</sup>, 정 광섭<sup>5)</sup>

### Optimal Design of Bipolar-Plates for a PEM Fuel Cell

In-Su Han<sup>1)</sup>, Jeehoon Jeong<sup>2)</sup>, Jongkoo Lim<sup>3)</sup>, Chan Lim<sup>4)</sup>, and Kwang Sup Jung<sup>5)</sup>

**Key words** : Bipolar-Plate(분리판), CFD(전산유체역학), PEMFC(고분자전해질 연료전지), Fuel Cell Simulation(연료전지 모사), Bipolar-Plate Design(분리판 설계)

**Abstract** : Optimal flow-field design of bipolar-plates for a commercial class PEM(polymer electrolyte membrane) fuel cell stack was carried out on the basis of three-dimensional computational fluid dynamics(CFD) simulation. A three-dimensional CFD model, originally developed by Shimpalee et al.<sup>1)</sup>, has been utilized for performing large-scale simulation of a single fuel cell consisting of bipolar-plates, gas diffusion layers, and a membrane-electrode-assembly(MEA). The CFD model is able to predict the current density, pressure drops, gas velocities, vapor and liquid water contents, temperature distributions, etc. inside a single fuel cell. Depending on simulation results from the CFD modeling of a PEM fuel cell, several flow-fields of bipolar-plates were designed and verified. The final design of the bipolar-plate has been chosen from the simulations and experimental tests and showed the best performance as expected from the simulation results under a normal operating condition. Thus, the CFD simulation approach to design the optimal flow-field of the bipolar-plates was successful. The final design was adopted as the best flow-field to build a commercial scale PEM fuel cell stack, the performance of which shows about 42% higher than that of the older bipolar-plate design.

#### Nomenclature

$I_0$  : Exchange current density, A/m<sup>2</sup>  
 $T_{cell}$  : Cell temperature, °C  
 $\lambda_{H_2}, \lambda_{O_2}$  : Hydrogen and oxygen stoichiometry

#### 1. 서론

고체 고분자 연료전지(Polymer Electrolyte Fuel Cell)의 분리판(bipolar-plate)은 연료전지 셀스택(cell stack)을 구성하는 각 단위셀(unit cell)로부터 집전된 전자를 이동시킴과 동시에 anode와 cathode에 각각 연료가스와 산화제를 공급하고, 반응에 의하여 생성된 물을 제거하기 위한 통로를 제공하는 중요한 역할을 한다. 분리판의 양극에 형성된 유로(flow-field)의 형상은 연료가스 및 산화제가 반응에 충분히 사용되도록 설계되어야 하며, 특히 cathode의 경우 생성된 물이 잘 제거되어 flooding에 의한 연료전지의 성능저하가 없도록

설계해야 한다. 고체고분자 연료전지의 개발 초기에는 직선형(straight)의 여러 채널을 평행(parallel)하게 배치한 채널을 갖는 유로가 사용되었으나, 주어진 활성면적에서 충분한 압력강하를 얻을 수 없어 일반적으로 높은 전류밀도를 얻을 수 없는 낮은 단점이 있다. 반면에 현재 분리판 양극의 채널구조 설계에 가장 많이 채용되고 있는 평형-서

- 1) GS칼텍스 신에너지연구센터  
 E-mail : c15833@gsclttx.co.kr  
 Tel : (042)866-1768 Fax : (042)866-1766
- 2) GS칼텍스 신에너지연구센터 연료전지 Stack 개발팀  
 E-mail : c15935@gsclttx.co.kr  
 Tel : (042)866-1749 Fax : (042)866-1766
- 3) GS칼텍스 신에너지연구센터 연료전지 Stack 개발팀  
 E-mail : chaoslim@gsclttx.co.kr  
 Tel : (042)866-1803 Fax : (042)866-1766
- 4) GS칼텍스 신에너지연구센터 연료전지 Stack 개발팀  
 E-mail : c.lim@gsclttx.co.kr  
 Tel : (042)866-1800 Fax : (042)866-1766
- 5) GS칼텍스 중앙기술연구소  
 E-mail : c1cj13@gsclttx.co.kr  
 Tel : (042)866-1603 Fax : (042)863-6104

펜타인(parallel-serpentine)형의 채널은 평행한 수개의 채널을 지그재그 형태로 배치하는 구조로 채널의 수와 turn 수를 조절함으로써 가스의 공급 및 생성된 물을 제거하기 위한 충분한 압력 조절이 가능해 직선형 채널에 비하여 보다 향상되고 균일한 전류밀도를 얻을 수 있는 장점이 있다. 최근 수년간에 걸쳐 비교적 값싼 비용으로 수십 대의 컴퓨터를 하나로 묶어 병렬연산을 가능하게 하는 클러스터링(clustering) 기술과 전산유체역학(CFD: Computational Fluid Dynamics) 기술의 비약적인 발전으로 연료전지 내에서 일어나는 물리화학적 현상을 보다 엄밀하게 모사하는 것이 가능하게 됨에 따라, 이를 연료전지를 구성하는 각 부품 내에서 일어나는 현상을 보다 깊게 이해하고 스택 구조를 포함한 분리판 설계에 적용하는 연구가 활발히 진행되고 있다<sup>1,2)</sup>.

본 연구의 목적은 고분자 전해질 연료전지에 대한 3차원 전산유체역학 기술을 활용하여 분리판, 기체확산층(gas diffusion layer) 및 막전극접합체(MEA: membrane-electrode-assembly)로 구성된 대면적 단위전지의 성능을 예측함으로써 최적의 분리판 설계를 얻고, 이를 5 ~ 30kW급의 상업용 규모 셀스택에 적용하여 검증하는데 있다.

## 2. 전산유체역학 모델 검증

분리판, 기체확산층 및 막전극접합체로 구성된 단위전지에 대한 3차원 CFD 해석을 위해서 대면적을 갖는 연료전지의 전류밀도분포, 반응기체의 속도분포, 압력분포, 수증기 및 액상의 물 분포, 온도 분포의 예측이 가능한 모델을 도입하였다<sup>1,2)</sup>. 먼저, CFD 모델을 검증하기 위하여 50cm<sup>2</sup> 크기의 단위전지에 대하여 여러 운전조건에서 얻은 실험결과와 CFD 모사로부터 얻은 결과를 비교하였다. 초기 CFD 모사 결과 실험으로부터 얻은 polarization (*I*-*V*) 곡선을 잘 설명하지 못하였으나, 전기화학 반응에 관련된 모델 파라미터인 anode 와 cathode의 전류교환밀도(*I*<sub>0</sub>)와 운동전달계수(*a*)를 조절함으로써 Fig.1에 보인 바와 같이 비교적 낮은 오차 범위(<3.1%)에서 CFD 모사 결과와 실험결과를 일치시킬 수 있었다.

최적의 모델 파라미터를 얻기 위해서는 같은 형상의 연료전지 모델에 대하여 CFD 모사를 수십에서 수백번 반복 수행해야 하며, 파라미터 추정 알고리즘을 적용함으로써 보다 체계적이고 전역해(global solution)에 근접한 파라미터 추정이 가능하다. 본 연구에서는 12개의 Intel Xeon 3.6GHz CPU를 갖는 Linux 클러스터를 사용하여 파라미터 추정 및 대면적 연료전지 모사를 수행하였다. Fig. 2.는 CPU 개수의 증가에 따른 클러스터의 성능을 보여주고 있으며, Table 1에 최종적으로 추정한

모델 파라미터 값들을 정리하였다.

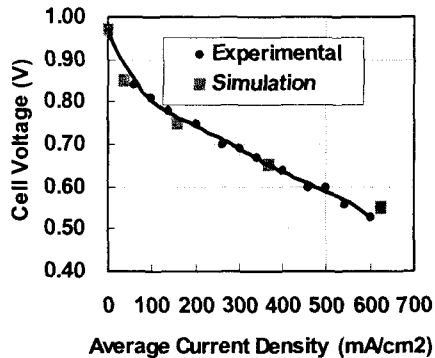


Fig. 1 Comparison between the simulation results and the experimental ones ( $H_2$ /Air Operation,  $\lambda_{H_2} = 1.2$  and  $\lambda_{O_2} = 2.0$ , and  $T_{cell} = 70^\circ C$ ).

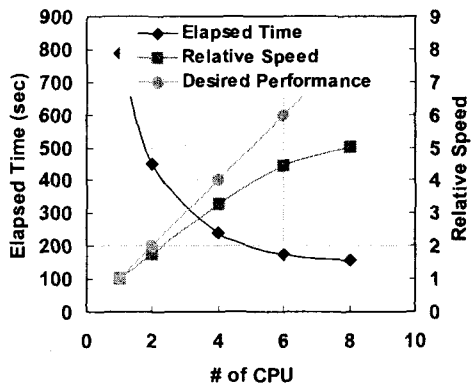


Fig. 2 Computational performance of the cluster used for CFD simulations of a PEM Fuel Cell.

Table 1. Estimated model parameters

Tuning Parameters	Anode	Cathode
Exchange Current Density ( $I_0, A/m^2$ )	240	2800
Kinetic Transfer Coefficient ( $a$ )	1.0	0.58

## 3. 분리판 설계 및 최적화

서펜타인형 유로를 갖는 분리판의 주요 디자인 파라미터는 채널의 폭(width) 및 깊이(depth), 림(rib)의 폭, 채널의 길이로 구성된다. 본 연구에서는 먼저 채널 디자인 파라미터를 달리하여 4가

지 유형의 분리판을 설계하였다. 설계된 4가지 유형의 유로는 분리판 채널을 통한 물질 및 에너지 수지식으로부터 각 채널의 압력강하, anode와 cathode 채널 출구에서 상대습도, 생성된 물에 의한 채널 도포 면적 등을 고려하여 얻어졌다. 설계한 각 분리판의 성능을 예측하기 위하여 200cm<sup>2</sup> 이상의 활성면적을 갖는 단위전지에 대하여 분리판 채널 형상의 복잡도에 따라 5백만개에서 1600만개의 격자수를 갖는 4개의 유한체적 (finite volume) 모델을 형성하였다<sup>6)</sup>. 각 모델의 해를 얻기 위해서 12개의 CPU를 갖는 Intel Xeon 3.6GHz 클러스터에서 계산을 수행하였으며, 모델의 규모에 따라 10시간에서 15시간의 계산시간이 소요되었다. 각각의 채널 디자인을 사용한 모델로부터 예측된 각 평균전류밀도 중 가장 높은 값으로 예측된 디자인을 최종 채널 디자인을 선정하였다. Fig. 3 - 6은 CFD 모사로부터 예측한 최종 채널 디자인에 대하여 전극과 채널 접면에서 전류밀도 분포, cathode 채널에서 압력분포, cathode 채널의 산소 및 액상으로 존재하는 물분포를 나타낸 것이다.

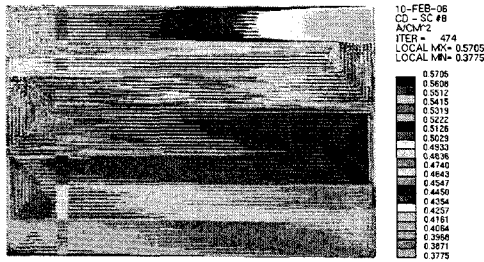


Fig. 3. Simulated current density distribution for the best bipolar-plate design.

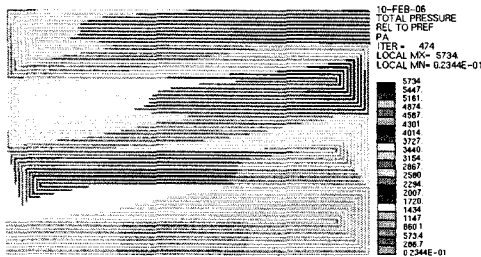


Fig. 4. Simulated cathode pressure distribution for the best bipolar-plate design.

최종적으로 선정된 분리판 유로 디자인을 사용하여 CFD 모사를 수행한 결과 Fig. 3에 나타낸 바와 같이 평균전류밀도가 0.65Volt에서 518mA/cm<sup>2</sup>로 가장 높은 모사 결과를 얻었으며, 분리판 전체

영역에 걸쳐서 매우 균일한 전류밀도 분포를 얻을 수 있었다. 채널을 통한 과도한 압력강하는 셀 스택에 연료가스 및 산화제를 공급하는 주변장치 (BOP: Balance of Plant)를 작동하는데 많은 에너지를 필요로 하게하여 연료전지 시스템의 총괄효율(overall efficiency)을 떨어뜨린다. 반면, 채널을 통한 압력강하가 너무 낮을 경우 전기화학 반응에 의하여 생성된 물을 배출 시킬 수 있는 충분한 에너지를 공급하지 못해 연료전지 스택의 성능을 떨어뜨린다. 따라서 위에서 설명한 두 가지 상충된 효과를 고려하여 적절한 채널 압력강하가 이루어지도록 채널을 설계해야 한다. Fig. 4에 보인 바와 같이 최종 분리판 유로 디자인의 cathode 채널을 통한 전체 압력 강하는 5734Pa 적절한 수준을 보여주고 있으며, 전체 면적에 걸쳐 매우 균일한 압력 강하를 나타내고 있다. 또한, 채널 출구 영역에서 다소 높은 액상의 물 농도 (1.0 ~ 1.8%)를 보여줄 뿐 채널 전체에 걸쳐 매우 낮은 물 농도로 우수한 성능을 나타내고 있다 (Fig. 6).

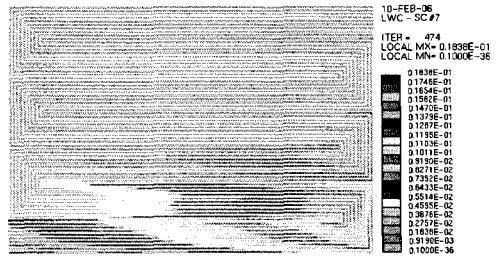


Fig. 5. Simulated oxygen concentration distribution for the best bipolar-plate design.

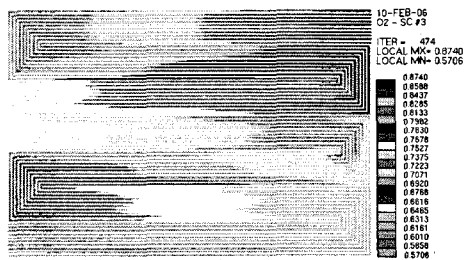


Fig. 6. Simulated liquid water concentration distribution for the best bipolar-plate design.

#### 4. 결과 및 토론

설계한 분리판 유로 디자인에 대한 성능을 검증하기 위하여 최종 분리판 유로 디자인을 적용하여 5kW급의 셀스택을 제작하였다. 셀스택은 200cm<sup>2</sup> 이상의 활성 면적에 60단 이상으로 구성

하였다. 제작한 셀스택의 성능을 평가하기 위하여 초기 활성화 후 수소이용율 83%, 공기이용율 50%, 셀온도 65°C에서 운전하였다. Fig.7은 셀스택의 초기 활성화 후 운전 성능을 기존 디자인의 분리판을 사용한 셀스택과 비교한 결과를 보여주고 있다. 그림에 나타내 바와 같이 기존 디자인과 비교하여 42%(@0.65V) 이상 향상된 성능을 나타내고 있어, CFD 모사로부터 얻어진 분리판 디자인이 매우 성공적임을 알 수 있다.

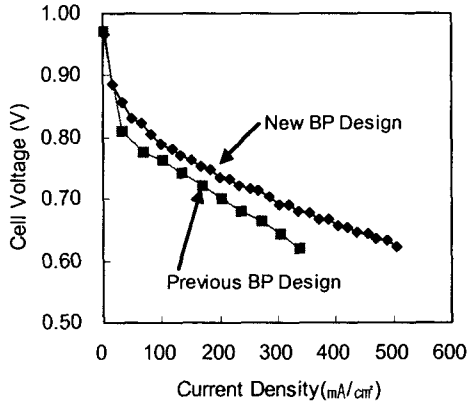


Fig. 7. Polarization curve of the 5 kW-class cell stack with a new bipolar-plate design ( $H_2$ /Air Operation,  $\lambda_{H_2} = 1.2$  and  $\lambda_{O_2} = 2.0$ , and  $T_{cell} = 65^\circ C$ ).

## 5. 결론

3차원 전산유체역학 기술을 활용하여 대면적 ( $200cm^2$  이상)의 활성면적을 갖는 상업용 규모의 고분자 전해질 연료전지의 분리판 유로를 설계하였다. 각 단위전지에 대한 물질 및 에너지 수지를 기반으로 채널 규격 (채널 폭 및 깊이, 립의 폭, 채널 길이)을 달리하여 여러 유형의 분리판을 설계한 후 CFD 모사를 통하여 성능을 예측 및 검증함으로써 최종 분리판 디자인을 결정하였다. 각 분리판 유로 디자인에 대하여 고분자 전해질 연료전지의 전극 및 채널 내에서 전류밀도분포, 압력분포, 온도분포, 수소 및 산소 기체의 농도 분포, 물분포를 예측함으로써 분리판 디자인의 성능의 적절성을 판단하였다. 설계한 최종 유로 디자인을 활용하여 상업용 규모의 셀스택 (5kW급) 제작에 적용한 결과 기존 디자인과 비교하여 약 42%의 성능 향상을 얻을 수 있었다.

## References

- [1] Shimpalee S. and Dutta S., "Numerical prediction of temperature distribution in PEMF fuel cells," *Numerical Heat Transfer, Part A*, **38**, 111-128, 2000.
- [2] Dutta S., Shimpalee S., and Van Zee J. W., "Three-dimensional simulation of straight channel PEM fuel cells," *J. App. Electrochemistry*, **30**, 135 - 145, 2000.
- [3] Jung H.-M., Lee W.-Y., Park J.-S., and Kim C.-S., "Numerical analysis of a polymer electrolyte fuel cell," *Int. J. Hydrogen Energy*, **29**, 945 - 954, 2004.
- [4] Meng H. and Wang C.-Y., "Large-scale simulation of polymer electrolyte fuel cells," *Chem. Eng. Sci.*, **59**, 3331 - 3343, 2004.
- [5] Natarajan D. and Van Nguyen T., "Three-dimensional effects of liquid water flooding in the cathode of a PEMF fuel cell," *J. Power Sources*, **115**, 66 - 80, 2003.
- [6] Versteeg H.K. and Malalasekera W. (1995). *An introduction to computational fluid dynamics*, Longman Group LTD., Malaysia.