

PEM 연료전지 유로에서 물의 거동에 대한 CFD 해석

김 현일¹⁾, 남 진현²⁾, 신 동훈²⁾, 정 태용²⁾, 김 영규³⁾

CFD analysis on the behavior of liquid water in flow channel of PEM fuel cell

Hyun-il Kim, Jin Hyun Nam, Donghoon Shin, Tae-Yong Chung and Young-Gyu Kim

Key words : PEMFC(고분자전해질연료전지), CFD(전산유체역학), Steady state(정상상태), Transient(과도상태), CHP(열병합발전)

Abstract : Liquid water in flow channel is an important factor that limits the steady and transient performance of PEM fuel cells. A computational fluid dynamics study based on the volume-of-fluid (VOF) multi-phase model is conducted to understand the transport behavior of liquid water in flow channel. The liquid water transport in 180° bends is investigated and the effect of chamfering is discussed. The effect of wall adhesion is also considered by varying the contact angle of channel surfaces. The result of this study is believed to provide a useful guideline for design optimization of flow patterns or channel configurations of PEM fuel cells.

Nomenclature

I : current , A
F : Faraday number, C/mol

abbreviation

PEM : proton exchange membrane
MEA : membrane electrode assembly
VOF : volume of fluid
CHP : combined heat and power generation
CFD : computational fluid dynamics

1. 서론

화석연료 자원의 한계와 동력발전 시 부산물로 생성되는 온실가스로 인한 기후변화 그리고, 환경오염의 심화로 인해 화석연료를 대체할 수 있는 에너지원에 대한 연구가 활발히 진행 중이다. 수소는 친환경적이고 재생 가능한 특성으로 인해 가장 유력한 미래의 연료로 각광 받고 있다.

연료전지는 수소를 기반으로 하는 경제체제에서 가장 효율적이고 친환경적인 동력발전장치이다. 특히 PEMFC는 현재 가장 진보된 형태의 연료전지로서 차량용 동력원과 가정용 열병합(CHP) 발전시스템에 적용하는 연구가 활발히 진행 중이다. PEMFC의 스택은 긴 유로와 큰 열용량을 가지

고 있기 때문에 부하의 변동과 같은 운전 조건의 변화 시에 스택온도와 수분함량이 매우 느리게 변화한다. 따라서, PEMFC 스택의 출력특성도 스택온도와 수분함량의 변화에 따라 긴 시간에 걸쳐 정상상태에 도달하게 되며, 실제로 연료전지의 핵심 부분인 고분자전해질막(PEM), 확산층, 촉매층을 결합한 MEA에서의 수분 함량에 의해 PEMFC의 성능은 크게 좌우된다.

또한, 공기극(Cathode) 유로에서 수분 정체나 체류시간이 길어짐에 따라 유로내의 수분량이 증가하여 공기의 흐름을 방해함으로써 연료전지의 성능을 저하시키는 원인이 된다. 또한, 연료전지의 경우 작동 온도가 상승하여 스택내의 물이 마르는 현상(Dry-out)의 문제도 발생되지만, 물이 과도하게 생성되는 현상(Flooding)으로 인해 연료전지의 효율이 저하된다.⁽¹⁻³⁾

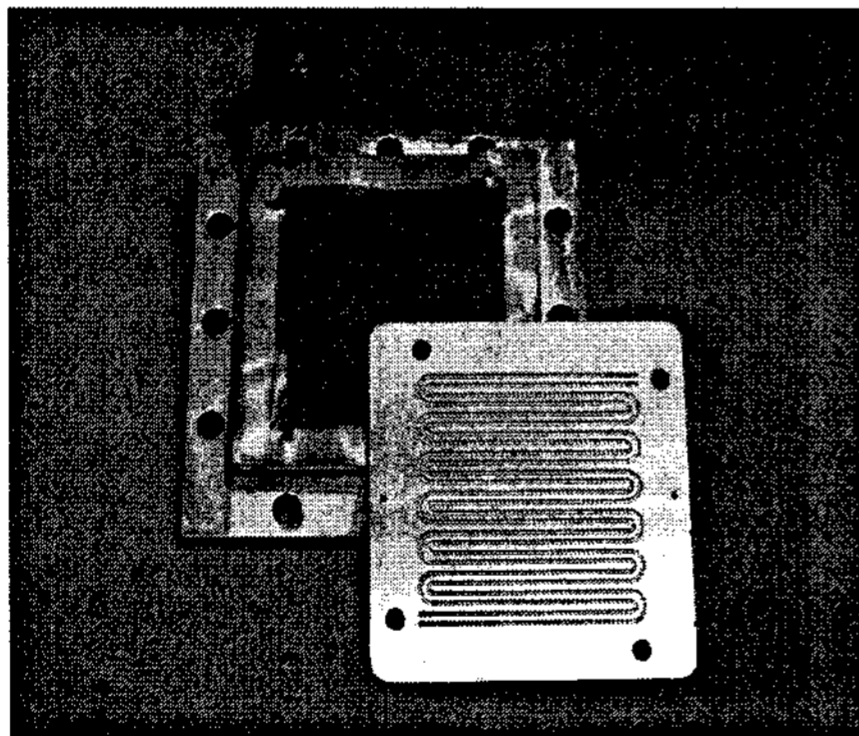
본 논문에서는 공기극 유로 내에서의 물의 거동을 파악하며, 유로 내의 수분량과 수분의 정체를 파악한다. 실제 연료전지 작동에 있어서 연료

-
- 1) 국민대학교 대학원 기계공학과
E-mail : resume79@kookmin.ac.kr
Tel : (02)910-5036 Fax : (02)910-4839
 - 2) 국민대학교 기계자동차공학부
E-mail : akko2@kookmin.ac.kr
Tel : (02)910-4858 Fax : (02)910-4839
 - 3) 한국가스안전공사
E-mail : ygkim@kgs.or.kr
Tel : (031)310-1430

전지 효율을 저하시키는 원인들은 많이 있다. 화학적으로는 활성화 손실, 저항손실 및 농도 손실이 있으며, 물리적으로는 분리판 손실, 유동 손실 등이 있을 것이다. 본 논문에서는 연료전지 유로 내에서의 물과 공기의 유동 해석을 통해 연료전지의 효율을 저하시키는 원인을 찾아내어 이를 해결하기 위한 방법의 하나로 유로의 형상 변화에 따른 물의 거동 특성을 파악하기 위하여 CFD (전산유체역학) 해석을 수행하였다.

2. 해석 대상

본 연구는 PEMFC 스택 단전지 유로의 형상 변화에 따른 물의 거동 특성을 파악하기 위해 세 가지의 유로 형상 변화를 주었다. 첫 번째로 직각 유로에서의 시뮬레이션을 수행하였으며, 두 번째에는 바깥쪽의 유로 형상에만 곡률(curvature)을 주는 형상으로 해석을 하였고, 마지막 해석 대상은 바깥쪽과 안쪽 모두 곡률을 주어 유로의 형상을 다양하게 하였다. 본 모델의 형상은 $10 \times 10 \text{ cm}^2$ 유로의 형상에서 물의 정체가 가장 많이 나타날 것으로 예상되는 마지막 굴절 부분에 대하여 상용 CFD 코드인 FLUENT 6.2를 사용하여 전산 해석을 수행하였다. 아래의 Pic. 1은 실제 전산 해석 모델의 형상 사진이다. 본 모델의 경우 곡선의 유로 형상이 2개의 path-line을 갖고 있다.



Pic. 1 Sample of flow channel

2.1 전산 해석

본 연구는 PEMFC 스택의 단전지에서 공기극 유로에서의 물의 거동 특성을 파악하기 위해 CFD를 이용하여 전산해석을 수행하였다. 공기극에서의 유동은 기상(phase-1)과 액상(phase-2)에 대하여 각각 Navier-Stokes 방정식과 액체 및 고체(wall)에서 계면의 표면장력(surface tension) 및 접촉각(contact angle)의 조건을 고려하여 표현하였다.⁽⁴⁾

$$\frac{1}{\rho_q} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) \right] = 0 \quad (1)$$

위 식 (1)은 VOF 모델에서의 질량보존에 대한 연속 방정식이며, 아래의 식 (2)는 표면장력과 접

촉각을 고려한 혼합유체의 운동량 방정식이다.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) \\ = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T)] + \rho \vec{g} + \vec{F} \end{aligned} \quad (2)$$

본 해석 모델의 경우 접촉각이 달라짐에 따라 친수성과 소수성으로 나누어 전산 해석을 수행하였으며, 이에 따라 경계면에서의 물과 벽면의 접촉각은 달라지게 된다. 액체방울이 고체 표면과 더불어 형성하는 각이 접촉각이며, 일반적으로 접촉각이 90도 이하일 때는 친수성 재질이며, 90도 이상일 때는 소수성 재질이다. 이를 고려하여 전산 해석을 수행하였다. 아래의 Fig. 1에서 접촉각을 나타내었다.⁽⁹⁻¹¹⁾

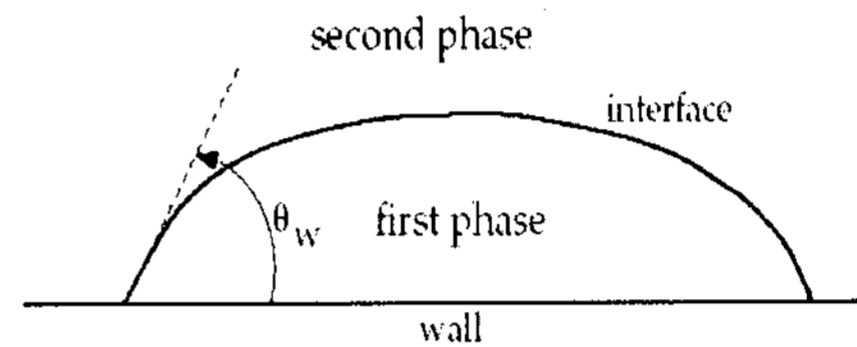


Fig. 1 Measuring the contact angle

2.1.1 물의 유량 선정

연료전지는 MEA내에서의 수소와 산소의 화학 반응 시 물이 발생하게 되는데, 유로에서의 물의 거동을 해석하기 위해 아래의 식 (3)을 이용하여 유량을 계산하였다.

$$Q_{H_2O} = \frac{M_{H_2O}}{\rho_{H_2O}} \times \frac{I}{2F} (1 + 2\alpha) \quad (3)$$

F 는 $1.6 \times 10^{-19} \text{ C/개} \times 6.02 \times 10^{23} \text{ 개/mol}$ 이며, α 는 유효 전기삼투(electro-osmosis)로서 연료전지에 맞게 0.5로 선정하였다. I 는 유로의 끝단에서 해석을 가정하여 60 A으로 계산하였으며, 식 (3)에 의해 생성되는 물의 양은 $1.1 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$ 이다.

2.1.2 유입 공기

공기극 유로에서는 유입되는 공기의 속도나 양에 따라서 물의 거동 특성에 많은 영향을 미치게 된다. 이에 따라 유입되는 공기의 유량과 속도를 수소와 잘 반응할 수 있게 맞추어 줘야 한다. 식 (4)에 의해 유입 공기의 유량 및 속도를 선정하였다.⁽⁵⁾

$$Q_{O_2} = \frac{M_{O_2}}{\rho_{O_2}} \times \frac{I}{4F} \times \frac{1}{x_{O_2}} \times \lambda_{air} \quad (4)$$

해석된 PEMFC의 작동조건에 해당하는 65°C , 1기압에서 완전 포화된 공기에 대해 x_{O_2} 는 약

0.16 이며, M_{O_2}/ρ_{O_2} 는 27.7 l/mol이다. 유로를 따라서 산소가 소모되는 것을 감안하여 공기 과잉률 λ_{air} 를 3으로 설정하였다. 유입 공기의 유량은 0.00008169 m³/s이며, 1 mm × 1 mm 정사각형 유로로의 공기의 유입 속도는 81.69 m/s이다. 하지만, 실제 유로의 경우 path-line이 2개에서 6개 정도를 만들어지며, 이에 따라 속도는 적정 수준인 15 m/s로 선정하여 전산 해석을 수행하였다.

3. 전산 해석 결과

세 가지의 유로 형상에 대해 소수성 ($\theta_w = 150^\circ$)과 친수성 ($\theta_w = 30^\circ$)으로 나누어 전산 해석을 수행하였으며, 각 경우마다 약 2만개의 격자를 가지고 있다. 아래 Fig. 2에서는 실제 해석된 유로 형상 변화에 따른 검사체적 내부에 축적된 물의 양을 나타내고 있다.

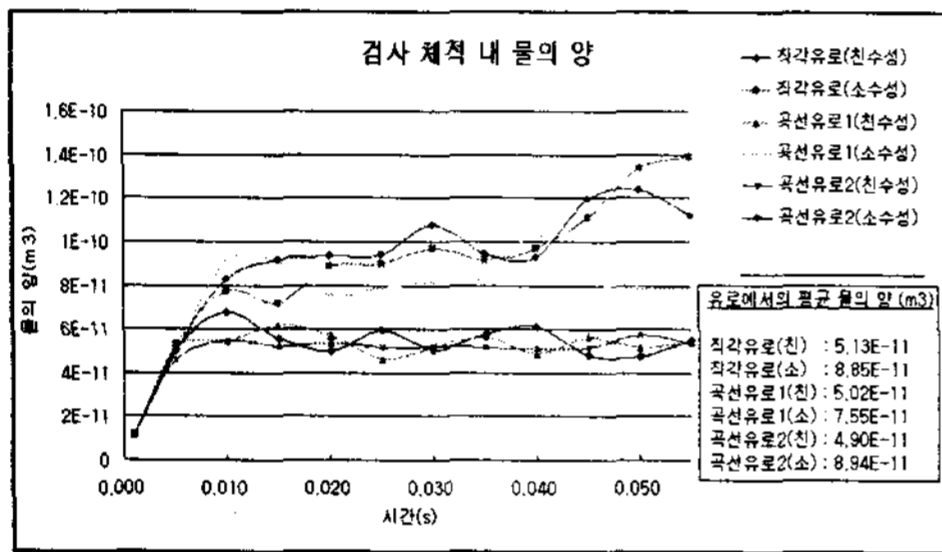


Fig. 2 changed flux in flow channel

유로 내 축적된 물의 양을 보면, 직각유로에서 축적된 양이 많을 것을 볼 수 있으며, 소수성 재질에서 많아지는 것을 볼 수 있었다. 이는 유로의 형상도 물의 거동에 많은 영향을 주지만, 유로의 재질 또한, 물의 거동에 있어서 중요한 인자임을 알 수 있었다.

3.1 직각 유로

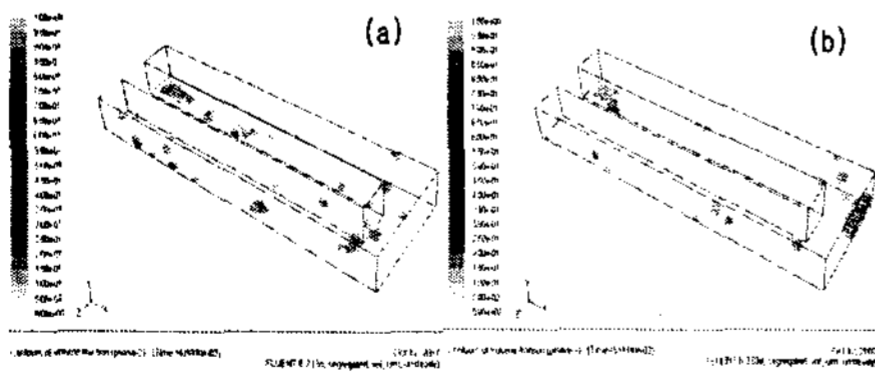


Fig. 3 liquid water performance in flow channel (a) hydrophilic (b) hydrophobic

Fig. 3에서는 직각유로에서 물의 거동을 나타내고 있다. 전산 해석 결과에서 보듯이 Fig. 3(a)의 경우에는 벽면에 붙어서 물이 이동하는 것을 볼 수 있었으며, Fig. 3(b)의 경우에는 벽면에 붙어서 이동은 하지 않지만, 공기의 유입 속도에 의해 굴절 부분까지 물이 빠르게 이동을 하여 물의 정체가 발생하였으며, 검사 체적내의 물의 유량도 증가하였다.

3.2 곡선 유로1

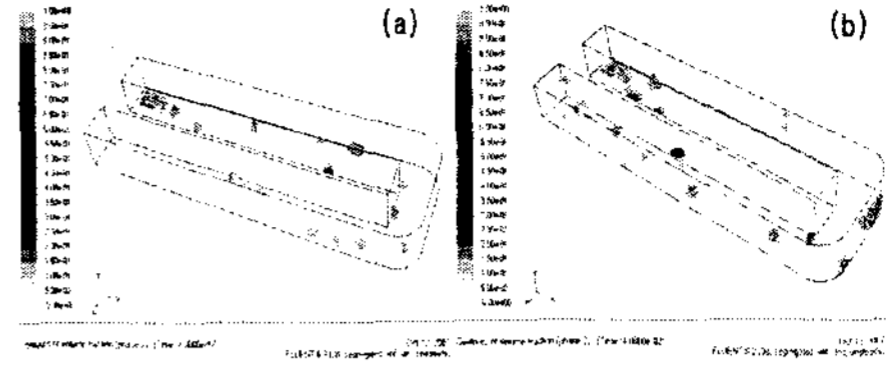


Fig. 4 liquid water performance in flow channel (a) hydrophilic (b) hydrophobic

Fig. 4에서는 바깥쪽에만 곡률을 가지는 곡선 유로1에서 물의 거동을 나타내었다. 결과에 보듯이 Fig. 4(a)의 경우에는 직각 유로에서와 비슷하게 벽면에 붙어서 물의 거동이 생겨났으며, Fig. 4(b)에서의 경우에는 물은 굴절 부분에서 빠르게 모여 물의 정체가 나타났다.

3.3 곡선 유로2

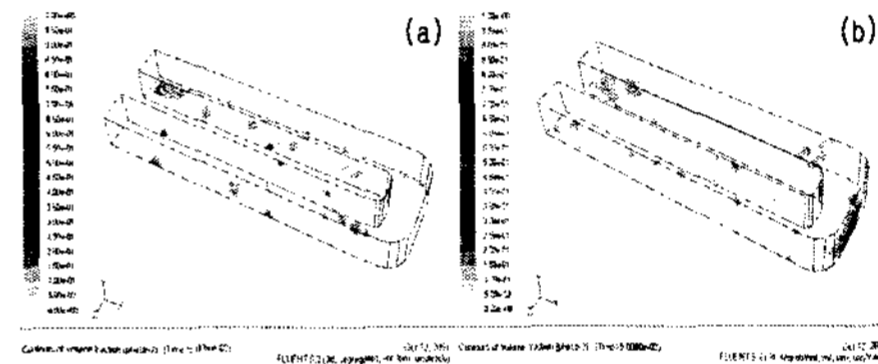


Fig. 5 liquid water performance in flow channel (a) hydrophilic (b) hydrophobic

Fig. 5에서 곡선 유로2의 경우는 굴절 부분의 형상이 모두 곡선의 형상을 가지고 있다. 일반적으로 곡선에서 물의 거동이 잘 될 것으로 생각하는데, 본 연구에서 수행되어진 모델의 형상은 매우 작은 검사 체적을 가지고 있으며, 소수성과 친수성의 재질 차이를 주었기 때문에, 곡선 유로에서도 재질의 차이가 물의 거동에 많은 영향을 미치는 것을 볼 수 있었다. 곡선 유로에서 친수성 재질을 가지고 있을 경우에 검사 체적 내 축적된 물의 양이 가장 적게 나타났으며, 물의 거동도 정체 없이 가장 잘 흐르는 것을 볼 수 있었다. 하지만, 소수성 재질을 가질 때 검사 체적 내의 축적된 물의 양이 가장 많이 나타났다. 이와 같은 결과는 공기의 유입 속도가 작은 검사체적에 비해 빠르다.

이 때문에 소수성 재질의 경우에 벽에 붙지 않고 부유하면서 굴절 부분에 물방울이 적층되어 정체를 이루고 물의 흐름에 방해가 주게 되는 것으로 사료된다.

4. 결론

본 연구에서는 PEMFC 스택에서의 단전지의 유로 형상 변화 및 재질의 변화를 주어 전산 해석을 수행하였다. 유로 형상의 경우 직각 유로와 곡선 유로로 형상을 다르게 하였으며, 재질의 경우 친수성 재질과 소수성 재질로 나누어 전산 해

석을 수행하였다. 본 해석을 통해 유로 내에서 물의 거동은 유로 형상에도 많은 영향을 받지만, 유로의 재질도 물의 거동에 있어서 많은 영향을 주는 것을 알 수 있었다. 곡선 유로에서의 경우 친수성 재질을 가지고 있을 때 유로 내 축적된 물의 양이 가장 적게 나타났으며, 물의 흐름 또한 원활하게 흐르는 것을 볼 수 있었다.

이 결과로서 연료전지 유로의 형상은 곡선, 재질은 친수성 재질일 때 물의 흐름이 가장 좋은 것으로 나타났다. 하지만, 긴 해석시간과 하드웨어의 한계로 인해 0.055초에 걸친 짧은 전산 해석을 수행하였기 때문에 시간이 지날수록 유로 내에는 더 많은 물이 축적될 것으로 사료되며, 결과적으로 물의 양의 증가에 의한 정체가 생겨날 것이다. 이는 공기의 흐름을 방해하고 전체적으로는 연료전지의 효율을 저하시키는 원인이 될 것으로 사료된다. 이에 따라 현재 긴 해석 시간을 가지는 전산 해석을 수행 중에 있다.

향후 연구에서는 유로의 형상을 더 다양화하고, 본 전산 해석의 결과를 실제 유로에서 물의 거동 특성 가치화 실험의 기초자료로 활용한다면, 연료전지 유로의 형상 및 재질을 최적화하는데 활용될 수 있을 것이다.

후 기

본 연구는 한국가스안전공사“가정용 연료전지 시스템 성능 평가 연구”의 일부분으로 수행되었으며 이에 감사드립니다.

References

- [1] Kordesch, K. and Simader, G., 1996, Fuel Cells and Their Applications, VCH.
- [2] Sammes, N., 2006, Fuel Cell Technology Reaching towards Commercialization, Springer.
- [3] Busby, R. L., 2005, Hydrogen and Fuel Cells: A Comprehensive Guide, PennWell.
- [4] Riley, N., 2006, The Navier-Stokes Equations: A Classification of flows and exact solutions", Cambridge.
- [5] Barbir, F., 2005, PEM Fuel Cells Theory and Practice, Elsevier.
- [6] Larminie, J. and Dicks, A., 2003, Fuel Cell Systems Explained, 2nd ed., Wiley.
- [7] Li. X., 2006, Principles of Fuel Cells, T&F Informa.
- [8] Ken, K., 2006, Keith, E., Fuel Cell Electronics Packaging, Springer.
- [9] Cai, Y. H., Hu, J., Ma, H. P., Yi, B. L., and Zhang, H. M., 2006, "Effects of hydrophilic/hydrophobic properties on the water behaviors in the micro-channels of a proton exchange membrane fuel cell", J. Power Sources, Vol. 161, pp. 843-848.
- [10] Kumbur, E. C., Sharp, K. V., and Mench, M. M., 2006, "Liquid droplet behavior and instability in a polymer electrolyte fuel cell flow channel",

J. Power Source, Vol. 161, pp. 333-345.

- [11] Quan, P., Zhou, B., Sobisiak, A., and Liu, Z. S., 2005, "Water behavior in serpentine micro-channel for proton exchange membrane fuel cell cathode", J. Power Sources, Vol. 152, pp. 131-145.