Journal of the Korean Electrochemical Society
Vol. 18, No. 4, 2015, 172-181
http://dx.doi.org/10.5229/JKES.2015.18.4.172

pISSN 1229-1935
eISSN 2288-9000

평판형 고체산화물 연료전지의 CFD 성능해석에서 공기유량변화의 영향

김단비 · 한경호 · 윤도영*

광운대학교 화학공학과

(2015년 9월 1일 접수 : 2015년 10월 7일 수정 : 2015년 10월 21일 채택)

Effect of Air Flow Rate on the Performance of Planar Solid Oxide Fuel Cell using CFD

Danbi Kim, Kyoungho Han, and Do-Young Yoon*

Department of Chemical Engineering, Kwangwoon University, Seoul 139-701, Korea

(Received Septmeber 1, 2015 : Revised October 7, 2015 : Accepted October 21, 2015)

초 록

고체산화물 연료전지는 다양한 응용분야에서 대체에너지로서 각광받고 있다. 본 논문은 평판형 anode 전극으로 들어가는 공기유량에 따른 SOFC의 I-V 그래프 특성에 대해 연구하였다. 본 연구를 위해, Butler-Volmer 반응속도 식이 상용 CFD코드인 FLUENT에 적용되었다. CFD로부터 얻어진 결과값은 문헌으로부터 참고한 실험데이터와 0.4 V ~ 1 V 범위에서 I-V 분극곡선이 잘 맞는 것을 보여줌으로써 그 유효성을 확인하였다. 연료전지의 수치적 계산은 각각 다른 유량조건 하에서 3D 구조를 이용하여 수행하였다. 결과는 수소, 산소 그리고 물의 농도 분포의 항목으로 제시하였다. 전산모사와 그 결과들은 Butler-Volmer 방정식을 사용자 정의 함수로 적용한 CFD 기법이 공기 유량과 비표면적에 대한 조건을 확인하는데 사용될 수 있고, 작동조건 연구를 위한 지침이 됨으로써 연료전지 시스템의 성능을 향상시킬 수 있음을 보여준다.

Abstract : Solid Oxide Fuel Cells (SOFC) continue to be among the most promising alternative energy devices. This paper addresses i-V characteristics of SOFC with a focus on air flow rate along the planar anode electrodes. To address this, detailed Butler-Volmer kinetics are implemented in a general-purpose CFD code FLUENT. The numerical results were validated against experimental data from the literature showing excellent match with i-V polarization data ranging 1V-0.4V. Numerical calculations of fuel cell operation under different flow rare conditions were performed in three-dimensional geometries. Results are presented in terms of concentration distribution of hydrogen, oxygen, and water. The simulations and results indicate that advanced CFD with UDF(User-Defined Function) of Butler-Volmer kinetics can be used to identify the conditions leading to air flow rate and specific surface area and guide development of operating conditions and improve the fuel cell system performance.

Keywords : SOFC, CFD, electrochemistry, flow rate, concentration loss

*E-mail: yoondy@kw.ac.kr

1. 서 론

화석연료의 연소로 인해 배출되는 배기가스는 온실효과, 산성비, 스모그 현상 등 대기 오염 문제를 발생하는 주된 원인으로 작용하고 있다. 환경오염 문제가 대두되면서 온실가스 배출을 줄일 수 있는 다양한 기술들이 개발되어 신 재생 에너지 관련 연구에 관심이 집중되고 있다. 이러한 상황에서 가장 주목 받고 있는 에너지원 중 하나는 연료전지이다.[1)]

연료전지는 기존의 발전기가 연료의 연소과정을 통해 전기를 생산하는 것과 달리, 수소와 산소의 전기화학적인 반응을 통해 공해 없이 전기 및 열로 직접 변환시켜 열효율이 높을 뿐만 아니라 대기오염, 진동, 소음 등의 환경문제를 유발 하지 않는 친환경 신 재생 에너지원이다.[2)]

연료전지는 작동온도와 전해질의 종류에 따라 분류된다. 1세대 연료전지로 알려진 고분자 전해질 연료전지(PEMFC, Proton Exchange Membrane Fuel Cell)는 작동온도가 80ºC로 저온형에 속한다. 이는 주로 휴대용, 자동차용, 가정용 등에 사용되어 사용화가 되어있다. 단점은 백금 촉매를 사용하기 때문에 발전용과 같은 대형 시스템 구성 시 비용 많이 상승하여 부담이 크다. 2세대 연료전지인 용융탄산염 연료전지(MCFC, Molten Carbonate Fuel Cell)는 작동온도가 650ºC로 고온형에 속하며 대형 발전용에 사용하기 위해 개발된 연료전지이다. 단점은 고온에서 작동하기 때문에 장시간 사용시 전해질 소재가 휘발되어 수명이 저하되는 문제가 있다. 3세대 연료전지인 고체 산화물 연료전지(SOFC, Solid Oxide Fuel Cell)는 작동온도가 600~1000ºC로 높아 고온형에 속하며, MCFC의 수명문제를 보완하기 위해 전해질을 세라믹 소재를 사용하여 만든 연료전지이다.[1-3)]

Fig. 1에 지지체 종류에 따른 SOFC를 나타내었다. 지지체의 종류에 따라 전해질 지지형, 음극 지지형, 양극 지지형으로 분류된다. SOFC개발 초반에는 전해질 지지형으로 개발되었다. 전해질의 두께가 최소 200 μm 이상이기 때문에 내부 전기저항을 낮추기 위해서 900ºC 이상의 고온에서 작동해야 한다. 산화-환원 사이클에 크게 손상을 받지 않는 장점 때문에 현재까지도 많이 사용하고 있는 디자인이다.[4-16)] 이러한 연료전지의 성능을 향상시키고 평가하기 위한 연구가 많이 진행되고 있다. 연료전지 연구 수행방법에는 실험과 병행하여 연료전지의 성능 해석을 위해서 CFD (Computational Fluid Dynamics)기법을 많이 사용하고 있다. 이런 CFD기법을 이용하면, 성능 예측을 하는데 필요한 물리량들의 모사를 적절하게 할 수 있게 되어 연료전지의 성능을 예측함에 있어 시간적, 경제적으로 비용을 감소시키면서 수월하게 성능평가를 할 수 있게 된다.

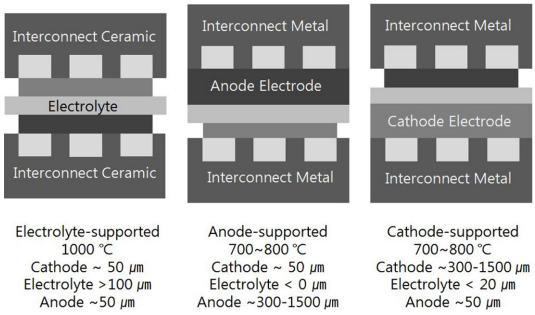

Fig. 1. Type of Supported SOFC.

본 연구에서는 anode supported planar SOFC의 전극 물성과 gas의 유량에 대한 성능평가를 하고자 하였다. SOFC에 사용되는 다공성 전극의 전기적, 전기화학적, 물리적 특성에 따라 그 성능은 확연히 차이를 보이게 된다. 또한 CFD를 이용한 SOFC의 모델링에서도 적절한 전극의 특성 값을 입력하여야 그 유효성을 확인할 수 있다. 일반적으로, 전극의 전기적 특성인 전기전도도(electrical conductivity)와 전기화학적 특성인 교환전류밀도(exchange current density), 그리고 물리적 특성인 투과율(permeability)과 공극률(porosity)은 많은 3D 모델링에서 매개변수(parameter)로 사용된다. 그러나 비표면적(specific active surface area)은 상대적으로 잘 고려되지 않는다. 이에 따라 본 논문에서는 이론적 데이터와 잘 맞는 투과율과 비표면적을 설정하여 공기극의 유량변화에 따른 SOFC 성능변화를 I-V 곡선으로부터 해석하였으며, 실험데이터 및 이론적 해와 결과를 비교함으로써 SOFC해석모델의 신뢰성 확보를 위한 연구를 진행하였다.

2. 형상 및 작동조건

2.1 음극지지 평판형 SOFC

평판형 SOFC는 제작단가가 낮고, 전류가 셀에 수직한 방향으로 흐르기 때문에 저항으로 인한 손실이 작다. 그리하여 SOFC중에서 planar형을 많이 사용하는데, Fig. 2와 같이 anode-supported planar SOFC는 anode, electrolyte 그리고 cathode가 쌓인 적층구조이다. anode-supported planar SOFC는 이름에서 보여지듯이 anode층이 지지체 역할을 한다. Anode의 두께가 두껍지만, 그에 비해 상대적으로 electrolyte의 두께가 얇아지기 때문에 electrolyte에서 주로 발생하는 ohmic overpotential이 적게 발생한다. 단일 cell의

SOFC는 여러 개의 채널로 분리판이 구성되어 있지만, 모든 채널에 동일한 유량으로 연료와 공기가 유입된다고 가정하면, 각각의 채널에 대하여 동일한 결과를 기대할 수 있다. 따라서 본 연구에서는 단일 채널에 대한 co-flow 성능해석을 진행하고자 한다.

일반적인 SOFC는 산소 이온전도성 electrolyte와 그 양면에 anode 및 cathode로 이루어져있다. 수소가 anode쪽의 유로로 공급되면 anode catalyst layer를 통해 electrolyte쪽으로 확산이 일어난다. 이와 마찬가지로 Cathode쪽의 유로로 공기가 들어가면 electrolyte쪽으로 확산이 일어난다. 이 산소는 anode로부터 공급된 전자와 환원반응에 의해 생성된 산소이온을 발생시키고 electrolyte를 통해 anode쪽으로 이동하여, anode에 공급된 수소와 반응함으로써 수증기와 전자를 생성하게 된다. 이 과정들을 화학반응식으로 나타내면 다음과 같다.

$$\text{Anode: } H_2 + I^{2-} \rightarrow H_2O + 2e^- \quad (2.1\,a)$$

$$\text{Cathode: } \frac{1}{2}O_2 + 2e^- \rightarrow O^{2-} \quad (2.2\,b)$$

$$\text{Overall: } H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow H_2O + electricity + heat \quad (2.3\,c)$$

Fig. 2에 본 연구에서 사용된 SOFC 모델의 개략도를 나타내었다. Anode catalyst layer가 cell을 전반적으로 지지하고 있는 anode-supported SOFC이다. Table 1에 단일 채널형상에 대한 길이정보를 정리하였다. Anode와 cathode, electrolyte의 두께는 각각 0.75 mm, 0.05 mm, 0.01 mm이다. 분리판 rib두께는 0.5 mm이고, 유로의 깊이 또한 0.5 mm이다. 단일 채널 폭의 길이는 4 mm, 총 길이는 100 mm이다.

SOFC는 700°C의 등온으로 운전되며 cell내부 압력은 1atm이다. CFD해석을 위해 필요한 SOFC의 운전조건과 전극의 물성을 Table 2에 나타내었다.[10]

2.2 지배방정식

2.2.1 질량 보존 방정식(Mass conservation equation)

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = S_m \quad (2.2)$$

식2.2의 좌변 첫번째 항은 SOFC내부의 시간에 대한 밀도변화를 나타내는 항이며, SOFC내부로 유입되는 가스를 비압축성 유체로 가정함으로써 소거 될 수 있다. 좌변의 두번째 항은 SOFC 내부로 유입되어 외부로 나가는 질량을 나타낸다. 우변은 SOFC 전극에서 전기화학반응에 의해 수소와 산소가 소모되거나 물이 생성되는 항을 나타낸다. 좌변의 첫번째 항을 생략하여 다음과 같이 간략하게 나타낼 수 있다.[17]

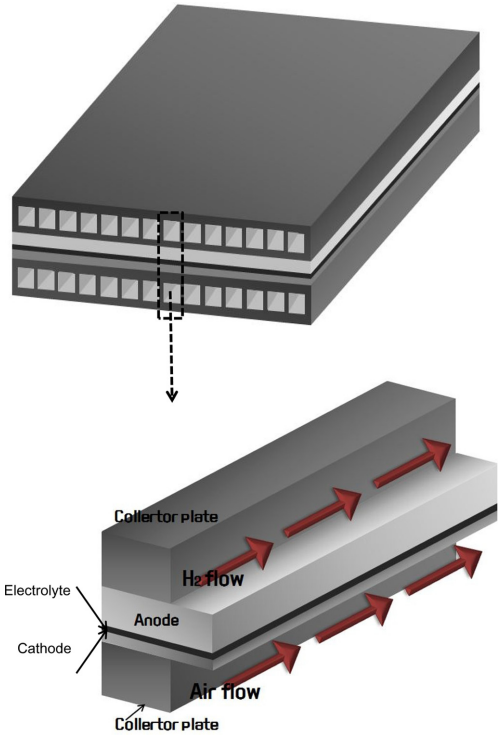

Fig. 2. Single cell unit of a planar SOFC stack, co- flow.

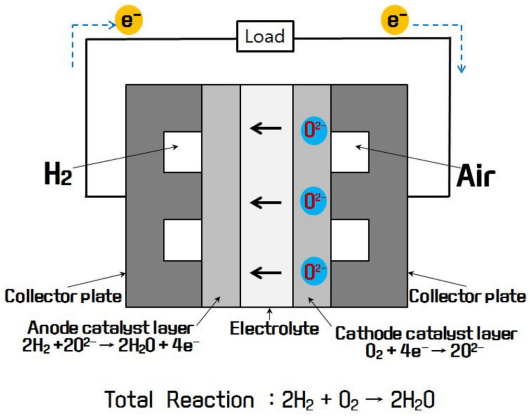

Fig. 3. Operating structure of SOFC.

Table 1. SOFC Geometry.

	Thickness (mm)	Width (mm)
Cathode	0.05	4.0
Electrolyte	0.01	4.0
Anode	0.75	4.0
Separator	0.5	0.5
channel	1.5	3.0
Cell length	100 (mm)	

Table 2. SOFC parameter.[10)]

parameter	Values
Anode porosity	0.38
Cathode porosity	0.3
Operation temperature (K)	973
Inlet fuel/air pressure, P_{atm}(Pa)	1.013×10^5
Oxygen molar fraction in air	0.21
Hydrogen molar fraction in fuel	0.97
Anode conductivity (sm^{-1})	$3.356\times10^4\exp(1392/T)$
Cathode conductivity (sm^{-1})	$1.223\times10^4\exp(-600/T)$
Electrolyte conductivity (sm^{-1})	$3.34\times10^4\exp(-10{,}300/T)$
Knudsen diffusion coefficient of H_2 (m^2s^{-1})	4.37×10^{-4}
Knudsen diffusion coefficient of H_2O (m^2s^{-1})	1.46×10^{-4}
Knudsen diffusion coefficient of O_2 (m^2s^{-1})	8.17×10^{-4}
Knudsen diffusion coefficient of N_2 (m^2s^{-1})	1.013×10^{-4}
Exchange current density (anode) (Am^{-2})	4280
Exchange current density (cathode) (Am^{-2})	1070
Open circuit voltage (V)	1.07
Anode mass flow rate (kgs^{-1})	1.549×10^{-6}
Cathode mass flow rate (kgs^{-1})	1.929×10^{-5}

$$\nabla\cdot(\rho\vec{u}) = S_m \tag{2.3}$$

2.2.2 **운동량 보존 방정식**(Momentum equation)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\vec{u})+\nabla\cdot(\rho\vec{u}\vec{u}) = -\nabla p+\nabla\cdot(\mu\nabla\vec{u})+\rho\vec{g}+\vec{F} \tag{2.4}$$

2.4는 SOFC의 유로에서 유체의 운동량을 표현한 식이며, 우변의 마지막 항은 유체가 다공성 전극으로 흐르면서 발생하는 저항에 대한 운동량이다. 외부에서 시간에 따라 유입되거나 유출되는 운동량이 없고, 중력의 영향이 크지 않다고 가정하면 아래와 같은 식으로 간략히 표현 할 수 있다. 우변의 마지막 항은 식 2.4의 $\vec{F}$에 대한 항이며, k는 투과도(permeability)이다. k 값이 작아질수록 다공성 물질에서의 저항은 증가하고, 커질수록 저항이 작아진다.

$$\nabla\cdot(\rho\vec{u}\vec{u}) = -\nabla p+\nabla\cdot(\mu\nabla\vec{u})-\frac{\mu}{k}\vec{u} \tag{2.5}$$

2.2.3 **물질 전달 방정식**(Mass transport equation)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i)+\nabla\cdot(\rho\vec{u}Y_i) = -\nabla\cdot\vec{J}_i+R_i-S_i \tag{2.6}$$

비압축성 유체로써 정상상태로 가정하여 반응을 하였고, 물질전달이 Laminar flow로 일어나고, 화학반응으로 인한 i의 순수생성속도가 없다고 가정하면,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) = 0 \tag{2.7}$$

$$-\nabla\cdot\vec{J}_i = -\rho D_{i,m}\nabla Y_i \tag{2.8}$$

$$R_i = 0 \tag{2.9}$$

위의 식들을 대입하여, 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\nabla\cdot(\rho\vec{u}Y_i) = -\rho D_{i,m}\nabla Y_i+S_i \tag{2.10}$$

식 2.10의 물질확산계수인 $D_{i,m}$는 Knudsen 확산계수를 적용하였으며, 그 이유는 산화극과 환원극의 촉매기공이 매우 작아 기체분자가 확산될 때 기공벽과 자주 충돌한다는 가정을 따르기 때문이다.

2.2.4 **전기화학 방정식**(Electrical potential equation)

본 연구에서는 전극의 비표면적을 보정하여 전산해석을 수행하였으며, 이에 사용된 식은 Butler-Volmer 식으로 아래와 같이 나타낸다.[18)]

$$j_{an} = (\varsigma_{an}j_{an}^{ref})\left(\frac{[A]}{[A]_{ref}}\right)^{\gamma_{an}}(e^{\alpha_{an}F\eta_{an}/RT}-e^{-\alpha_{cat}F\eta_{cat}/RT}) \tag{2.11}$$

$$j_{cat} = (\varsigma_{cat}j_{cat}^{ref})\left(\frac{[C]}{[C]_{ref}}\right)^{\gamma_{cat}}(-e^{\alpha_{an}F\eta_{an}/RT}+e^{-\alpha_{cat}F\eta_{cat}/RT}) \tag{2.12}$$

SOFC에서 발생하는 전류는 산화극과 환원극의 전류밀도인 j_{an}와 j_{cat}로 나타낸다. $[C]$, $[C]_{ref}$는 SOFC 촉매표면에서의 가스농도와 기준농도를 나타낸다. ς는 교환전류밀도이며, γ는 비표면적을 나타낸다. α은 농도계수, η는 전달계수이다. $\eta(V)$는 집전판과 전해질 사이의 전위차로 표현되는 전기화학적 과전압이며 아래와 같이 표현된다.

산화극: $\eta_{an} = \phi_{sol}-\phi_{mem}$ (2.13)

환원극: $\eta_{cat} = \phi_{sol}-\phi_{mem}-\phi_{ideal}$ (2.14)

위의 식에서 ϕ_{sol}은 양극의 집전판에 인가되는 전압을 나타내며, ϕ_{mem}은 전류가 흐를 때 전해질에서 발생하는 전압이다. ϕ_{ideal}은 평형전위로서 다음과 같이 표현된다.

$$\phi_{ideal} = \phi^{o}+\frac{RT}{2F}\ln\frac{p_{H_2}p_{O_2}^{\frac{1}{2}}}{p_{H_2O}} \tag{2.15}$$

전기화학반응은 양극의 평형전위(Nernst potential)로부터 차이가 생기게 될 경우 발생하며, 평형전위에 있을 경우 전류는 흐르지 않는다. ϕ^o 는 표준상태에서의 평형전위이다.

$$V_{Cell} = \phi_{ideal} + \phi_{ohm} + \phi_{an} + \phi_{cat} \quad (2.16)$$

식 2.16은 SOFC에 인가되는 총 전압을 나타낸다. Cell 내부로 전류가 흐르게 되면 전압 손실이 발생하게 되는데, 활성화 손실(η_{an}, η_{cat}), 저항 손실(ϕ_{ohm}), 물질전달 손실이 있다.

활성화 손실은 전극 표면에서 수소 혹은 산소가 반응할 때 필요한 에너지에 의해 발생한다. 그렇기 때문에 평형전위로부터 많이 차이가 나지 않는 전압에서 활성화 손실의 영향이 뚜렷하게 나타난다. 저항손실은 SOFC의 구성요소들이 고유하게 가지고 있는 저항에 의해 발생하며, 그 크기는 ohm의 법칙을 따라 다음과 같이 표현된다.

$$\phi_{ohm} = j \times R_T \quad (2.17)$$

j는 SOFC에 흐르는 전류의 크기이며, R_T는 SOFC가 가지고 있는 총 저항 값이다. 이 값은 주로 전해질에서 발생하는 ϕ_{mem} 의 영향을 많이 받게 된다.

물질전달 손실은 전극표면에서 기체의 농도가 충분하지 않을 때 발생하게 되는데 표면에서의 반응속도보다 기체의 확산속도가 더 느릴 경우 발생한다. 이러한 이유로 물질전달 손실은 전류가 높은 영역에서 그 영향이 크다. 물질전달손실은 식2.11과 식2.12에 촉매표면에서의 기체농도 항으로 나타나 있으며, 본 연구에서는 η_{an}, η_{cat} 에 양극에서의 물질전달 손실의 영향이 함께 포함되어 있다.

2.3 전산유체역학

전산유체역학은 유체 현상을 기술한 방정식 등을 사용하여 수치기법의 알고리즘을 이용해 유체유동 문제를 풀고 해석하는 것이다. 우선적으로 해석하고자 하는 대상의 기하구조(geometry)를 모델링하고, 수치해석기법을 적용하기 위한 계산격자(mesh)를 구성한다. SOFC의 성능해석에서 계산격자가 구성된 모델에 CFD기법을 적용하기 위한 계산 순서는 다음 Fig. 4와 같다. Fluent에서 지배방정식을 계산하여 나온 가스의 농도분포를 이용하여 다시 전기화학식을 계산하는 알고리즘으로 되어 있다.

3. 결과 및 검토

3.1 실험데이터 및 이론데이터 분석

Fig. 5는 700°C SOFC에서의 이론값[10]과 실험값[15]

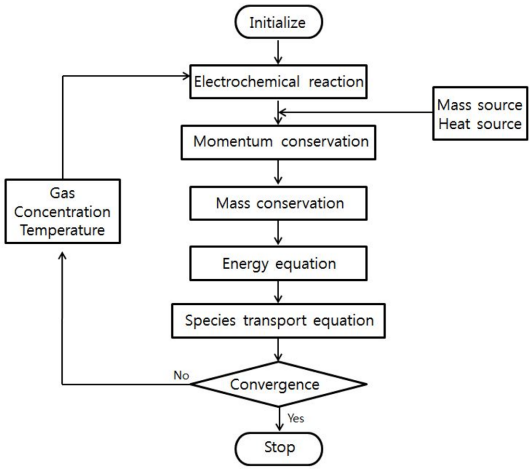

Fig. 4. Algorithm of CFD calculation.

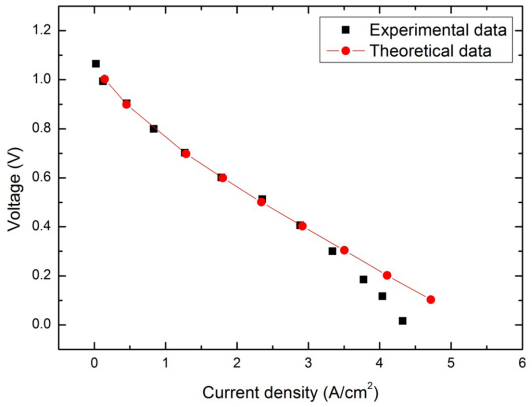

Fig. 5. Theorical data and experimental data.

을 비교한 그림이다. 약 1.1 V에서 0.4 V까지는 실험값과 이론값이 잘 맞는 것을 확인할 수 있지만 0.4 V이후부터 이론값이 잘 맞지 않는 경향을 보인다. 실험값에서 0.4 V부터 I-V 곡선의 기울기가 변하는 것을 볼 수 있는데 이것은 SOFC 전극표면에서 연료(H_2)혹은 산소(O_2)의 농도가 충분하지 않을 때 나타나는 물질전달 저항에 의한 현상이다. 농도가 낮을 경우, 전류가 증가할수록 전극표면에서의 반응속도가 증가하기 때문에 전극표면에서 연료나 산소의 고갈이 일어나게 된다. 이러한 현상을 실험데이터와 잘 맞추기 위해서는 기체의 유량이나 다공성 전극의 물리적 특성을 고려함으로써 해결할 수 있다. 본 연구에서는 낮은 전압에서 SOFC의 실험데이터에 잘 부합하는 전산모사 결과를 얻기 위해 투과도와 비표면적을 보정하고 공기극의 유량에 대한 영향을 알아보고자 한다. Table 3, 4에 본 연구에서 사용된 전극의 투과도 및 비표면적과

공기의 유량에 대한 값을 나타내었다. 초기에 설정한 공기의 유량은 이론적 데이터와 비교하기 위해 물질 전달 저항이 발생하지 않는 값으로 가정하였으며, 실험데이터와 비교하기 위해 공기의 유량을 변화시켜 연구를 진행하였다. 투과도에 대한 값은 Shixue Liu등이 연구한 내용에서 참고하였다.[10)]

3.2 투과도 및 비표면적의 영향

투과도(Permeability)는 물질의 구조가 통과나 침입을 허용하는 성질로, 식 2.5에 나와있듯이 투과도의 변화에 따라 다공성 물질 내부에서의 저항이 달라진다. 또한 비표면적은 전극의 활성도와 비례한다. 비표면적이 증가하게 되면 전극의 단위부피당 생성되는 전류량이 증가한다. 이것은 연료전지의 I-V 그래프 기울기에 전반적인 영향을 끼치게 되며 실험데이터와의 비교를 위해 반드시 고려되어야 한다. 본 연구에서는 문헌에서 주어진 투과도를 이용하여 비표면적을 보정하는 연구를 진행하였다.[19)] Fig. 5에서 보여지는 바와 같이 일정구간에서는 실험데이터와 이론적 데이터가 잘 부합한다. 시뮬레이션의 데이터 또한 이 구간에서 잘 맞는 결과를 내놓는다면 다른 운전조건에서의 신뢰성 있는 결과를 충분히 예측할 수 있다. 비표면적 보정으로부터 얻어진 결과를 실험데이터 및 이론적 데이터와 비교하여 Fig. 6에 나타내었다. Fig. 6는 시뮬레이션 데이터가 이론적 데이터와 매우 잘 맞는 경향을 보여준다. 시뮬레이션 결과로부터 비표면적의 보정이 잘 이루어졌음을 알 수 있고, SOFC의 성능에 중요한 요소로 작용하는 저 전류 구간에서의 활성화 저항과, 중간 전류 구간에서의 전도 저항에 대한 전산모사가 유효함을 확인하였다.

3.3 산소유량변화의 영향

연료전지 성능평가를 CFD기법으로 하는데 있어서 실험값과 비교해 보는 것은 중요한 일이다. 전산모사로부터 얻어진 가상의 결과는 신뢰성의 기준이 되는 실험 데이터가 반드시 필요하다. 이와 같은 이유로 CFD기법으로 얻어진 데이터를 실험값과 비교하여 신뢰성을 확보하여야 한다.

Table 3. Specific surface area and permeability[19)] for anode and cathode.

비표면적 (m^{-1})	Anode permeability (m^2)	Cathode permeability (m^2)
15000	1.7×10^{-10}	1.0×10^{-13}

SOFC의 성능을 증가하는데 있어서 연료와 공기의 유량은 그 시스템 안의 반응에 큰 영향을 미친다. 본 연구에서 참고한 실험데이터에는 기체의 유량데이터가 주어져 있지 않아 같은 온도조건에서 연료전지를 평가한 문헌의 유량 값을 참고하였다.[4)] Case 1에서 연료의 유량은 1.549×10^{-7} kgs^{-1}로 산소의 유량은 1.929×10^{-5} kgs^{-1}으로 설정하였다. Table 3 에서 cathode의 permeability가 더 작은 것으로 보아 cathode channel로 공급되는 산소의 유량이 anode channel로 공급되는 연료의 유량보다 연료전지의 성능에 더 큰 영향을 미칠 것으로 예측된다. 이에 따라 실험데이터에서 나타나는 물질전달 손실에 의한 영역을 해석하기 위해 Case 2, Case 3, Case 4, Case 5로 산소의 유량을 변화시켜 실험데이터와 비교하였다.

Fig. 7에 실험데이터와 비표면적 15000 m^{-1}하에서 Case 2, Case 3, Case 4, Case 5의 데이터를 비교하여 나타내었다. 0.4 V이상의 전압에서 비표면적 15000 m^{-1}일 때 데이터가 실험데이터와 비슷한 결과를 보이고 있다. 활성화 손실의 영역과 저항손실의 영역에서 매우 유사한 결과가 얻어진 것으로 보아, 전기화학적 매개변수인 교환전류밀도와 전기적 매개변수인 전기전도도가 유효하게 적용되었음을 나타낸다.

Fig. 8은 저 전압구간에서 Fig. 7의 결과를 자세히 해석하기 위해 전압의 범위를 0.01~0.4 V범위로 설정하여 비교한 그래프이다. Fig. 6에서 Case 1의 결과는 0.4 V이하의 전압에서 실험데이터와는 다르지만, 이론데이터와 유사한 선형그래프를 보였었다. Fig. 8에서 각 case의 결과들은 인가되는 전압이 더 낮아 질수록

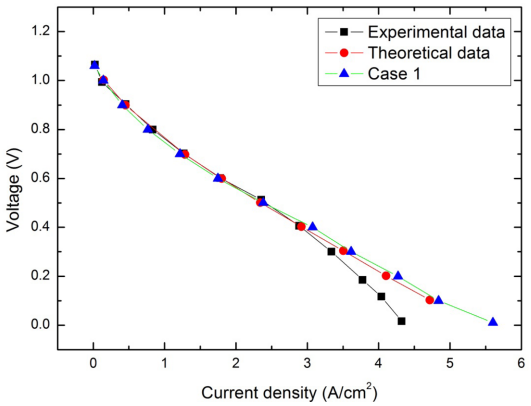

Fig. 6. Comparison of I-V curve of experimental data and theoretical data and simulation data (case 1).

Table 4. Case by O_2 flowrate (kg/s)

Case1	Case2	Case3	Case4	Case5
1.929×10^{-5}	5.70×10^{-6}	6.00×10^{-6}	6.30×10^{-6}	7.00×10^{-6}

물질전달 저항에 의한 경향성을 나타내며 실험데이터와 유사함을 보인다.

Case 2는 0.1~0.4 V에서 실험데이터와 매우 유사한 곡선그래프를 갖지만, 0.01 V에서 차이를 보여준다. 반면, Case 3는 Case 2와 비교하여 산소의 유량을 3.0×10^{-7} kgs^{-1}만큼 증가시켰는데, 0.1~0.4 V에서 실험데이터그래프보다 약간 높게 나왔지만 0.01 V에서는 거의 유사한 값을 나타내었다. Case 4는 Case 2보다 산소유량을 3.0×10^{-7} kgs^{-1}만큼 증가시켰는데 0.3 V이하의 영역에서 Case 2와 조금씩 차이를 벌이며 Case 2의 그래프보다 약간 상위에 위치한다. Case 2, Case 3, Case 4의 I-V curve가 곡선의 그래프를 나타내는 것과 달리 Case 5의 I-V curve는 선형의 그래프를 보여준다. Case 5에서 Case 2로 갈수록 곡선 형태의 그래프를 보이는 것은 산소유량 변화에 따른 물질전달 저항에 대한 경향을 나타나고 있다. 공기유량이 감소할수록 연료전지 화학반응에 필요한 산소의 공급속도가 화학반응에서의 산소소모속도보다 느려지기 때문에 물질전달 저항에 영향이 증가한 것을 알 수 있다. Anode와 cathode의 permeability에 따라 각 채널의 유입 유량을 증가시키면 연료전지의 성능을 향상시킬 수 있음을 암시한다.

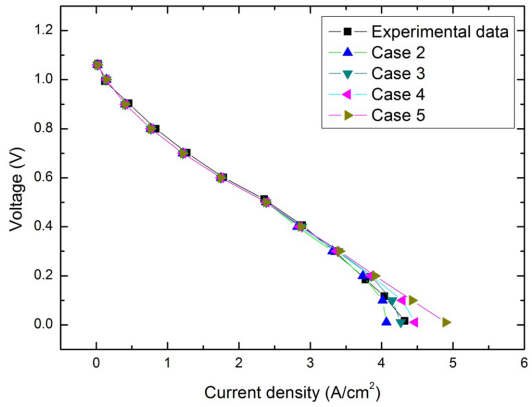

Fig. 7. Comparison of I-V curve of experimental data and simulation data (Case 2,3,4,5) in 0.01~1.06 V.

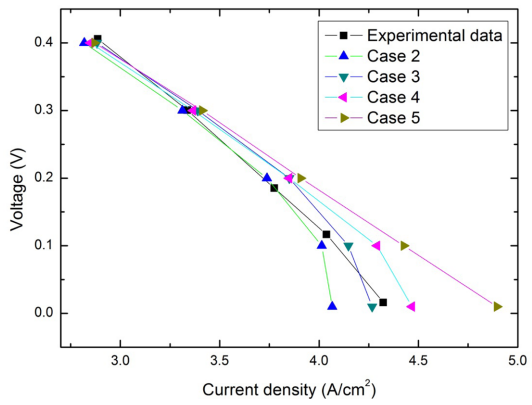

Fig. 8. Comparison of I-V curve of experimental data and simulation data (Case 2,3,4,5) in 0.01~0.4 V.

3.4 SOFC내부의 gas 농도분포

제 3.3절에서는 anode와 cathode의 permeability에 따른 연료 및 공기의 유량이 연료전지의 성능에 미치는 영향에 대해서 알아보았다. I-V curve를 통해 물질전달 영역에 의한 영향을 알아보았지만, O_2, H_2, H_2O의 농도분포를 통하여 연료전지 내부에서의 gas 유동을 보다 자세히 확인할 수 있다.

Fig. 9에서 anode channel의 H_2는 충분히 많이 공급되어 연료전지의 전기화학반응 이후에도 anode outlet에서 많은 양의 수소가 나오는 것을 볼 수 있다. 반면, O_2는 cathode 채널을 흐르는 과정에서 모두 반응하여 cathode outlet을 통해 연료전지 밖으로 나오는 것은 없다. H_2O는 산소이온이 cathode에서 anode 쪽으로 전해질을 통해 전달되면 anode 촉매표면에서

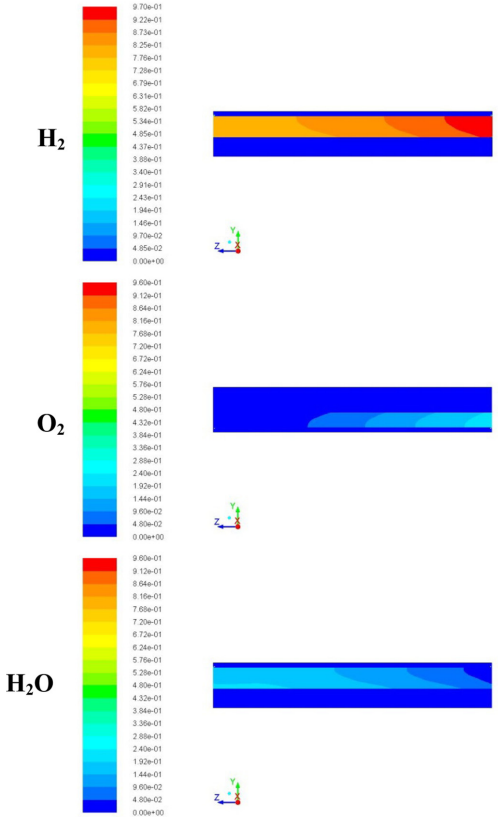

Fig. 9. Gas concentration distribution in 0.01 V (Case 4).

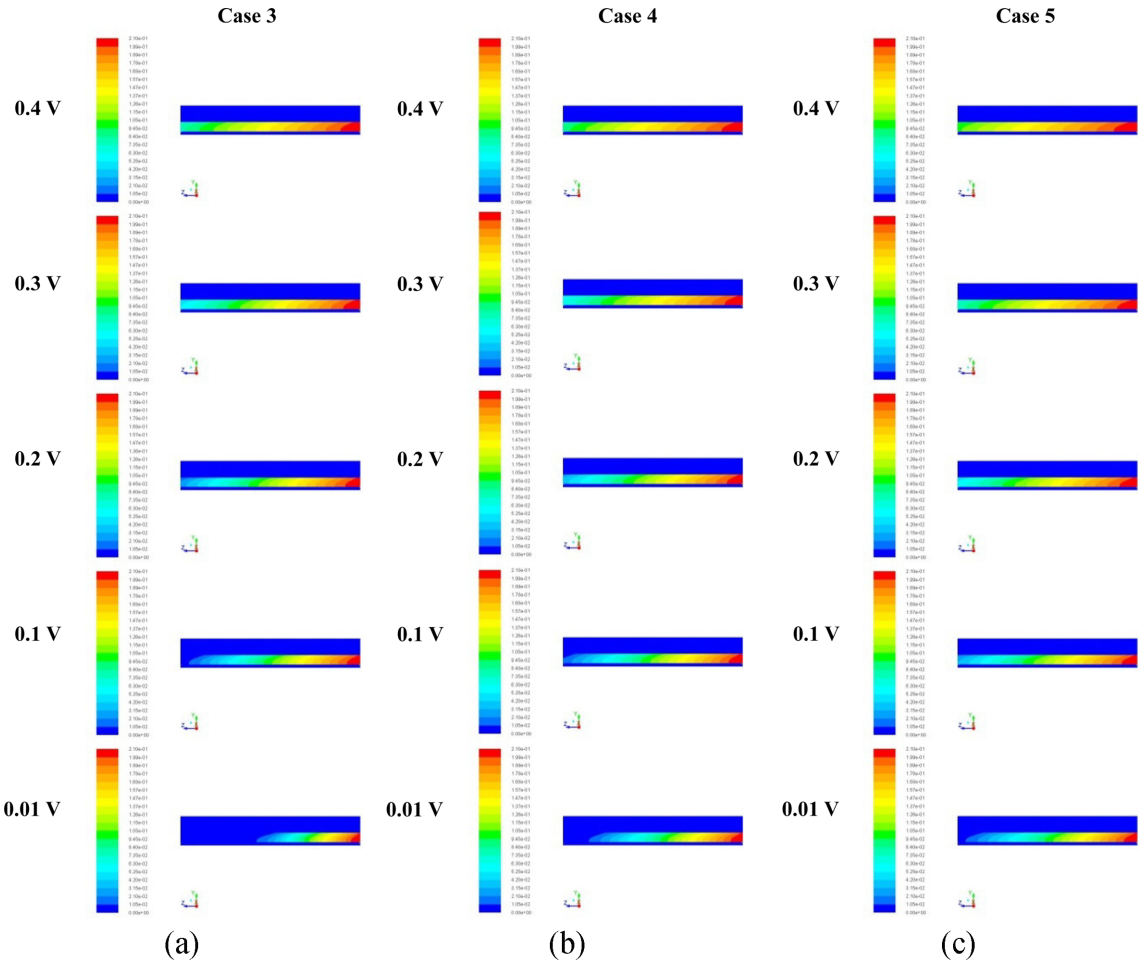

Fig. 10. (a) O_2 concentration distribution in 0.01~0.4 V (Case 3), (b) O_2 concentration distribution in 0.01~0.4 V (Case 4), (c) O_2 concentration distribution in 0.01~0.4 V (Case 5).

H^+와 반응하여 생성된다. SOFC 단일 유로에서 flow 방향에 따라 H_2와 O_2의 농도가 줄어드는 것에 비례하여 H_2O가 생성되는 것을 볼 수 있다. 채널 내부에서 O_2농도와 비교하여 H_2의 농도가 현저히 높으므로 O_2의 유량을 증가시켜주면 연료전지의 성능을 더욱 향상 시킬 수 있을 것으로 예측할 수 있다.

유량 변화에 따른 SOFC 내부에서의 O_2와 H_2O의 농도변화를 관찰하기 위해 Fig. 10-(1)~10-(3)과 Fig. 11-(1)~11-(3)에 Case 3, Case 4, Case 5의 결과를 각각 나타내었다. Fig. 8에서 H_2의 농도는 O_2와 H_2O에 비해 그 농도가 상당히 높았기 때문에 O_2와 H_2O의 농도 분포만을 고려하였다. Fig. 10-(1)~Fig. 11-(3)을 보면 인가된 전압이 0.01 V일 때, Case 5에서 Case 3으로 갈수록 cathode outlet 부근에서 O_2의 농도가 감소하고, 상대적으로 anode outlet 부근에서의 H_2O 농도는 점점 증가하는 경향을 보인다. 이로부터 SOFC 전극반응에 의한 물질수지식이 잘 적용되었음을 알 수 있다. 또한 산소유량의 증가는 더 많은 수소와 반응을 일으킬 수 있다는 것을 말하고, 실제로 Fig. 11에서 전기화학반응의 생성물인 H_2O가 더 많이 발생하는 것을 통하여 산소유량이 증가하면 연료전지의 성능이 증가한다는 것을 알 수 있다. 이와 같은 경향성은 0.01 V이상의 전압에서도 확인할 수 있다.

결 론

본 연구에서는 3차원 모델을 이용한 SOFC의 성능을 평가하기 위해 운동량 보존 방정식, 물질전달 방정식, 전기화학 반응식을 이용하여 CFD기법으로 그 결과를 분석하였다. 고체산화물 연료전지의 모델로는 연료극

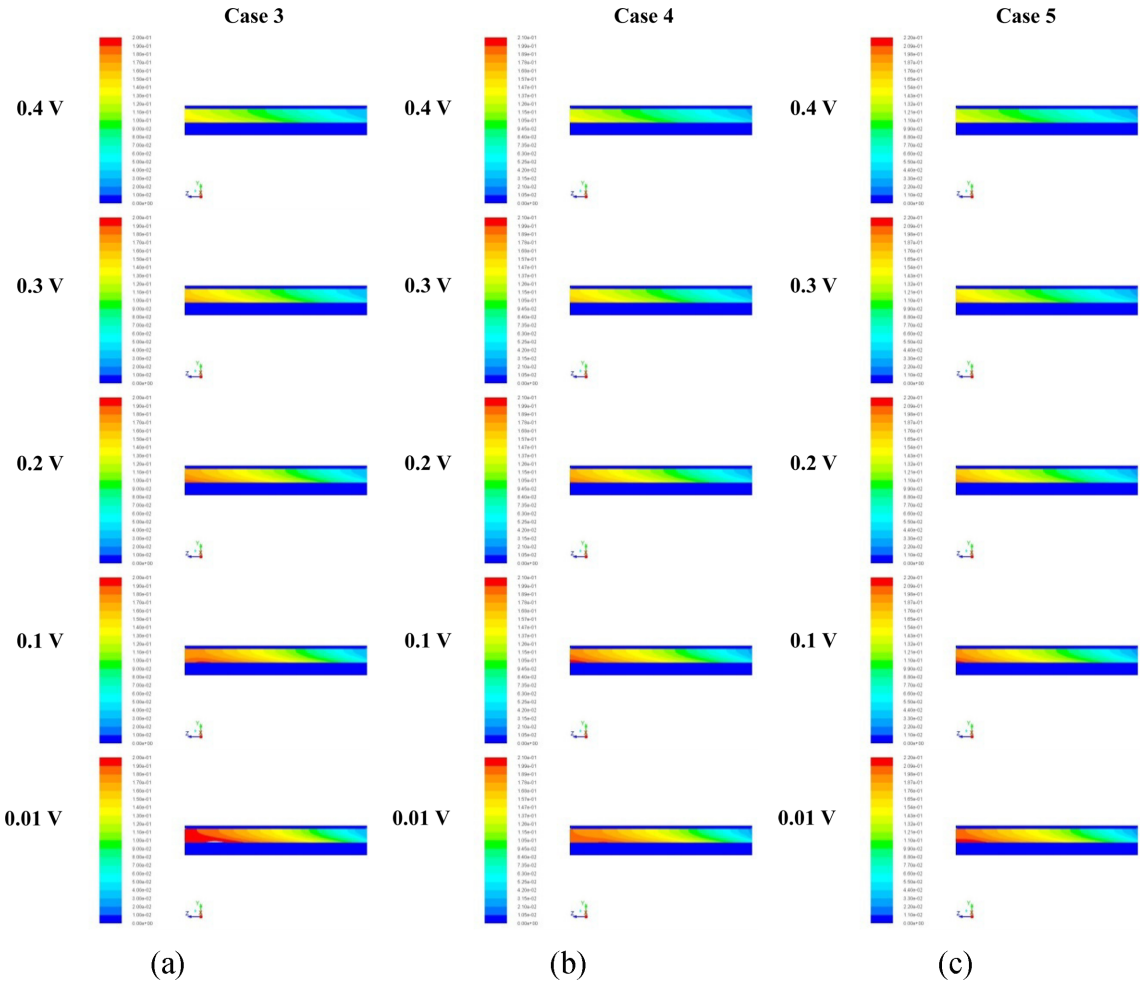

Fig. 11. (a) H_2O concentration distribution in 0.01~0.4 V (Case 3), (b) H_2O concentration distribution in 0.01~0.4 V (Case 4), (c) H_2O concentration distribution in 0.01~0.4 V (Case 5).

지지체 평판형 모델을 사용하였으며, 투과도에 대한 촉매의 비표면적 보정으로부터 신뢰성을 확보하고자 하였다. 또한 산소유량을 변화시켜 연료전지의 성능에 미치는 영향을 I-V 그래프와 연료전지 내부의 농도분포를 통해 분석하였다. 실험 데이터 및 이론 데이터와의 비교로부터 CFD 모델링의 신뢰성을 확보한 뒤, 산소의 유량을 변화시켜 1.929×10^{-5}, 5.70×10^{-6}, 6.00×10^{-6}, 6.30×10^{-6}, 7.00×10^{-6} kg/s에서의 데이터를 각각 얻었다. 그 결과, 이론 데이터에는 나타나지 않은 물질전달 손실영역을 모사할 수 있었으며, case 3의 결과가 전반적으로 실험데이터와 가장 유사한 결과를 나타냈다. 이 결과로부터 case 3의 SOFC내 연료 및 공기의 기체분포도를 확인하면, 실제 시스템내부에서의 기체유동을 예측할 수 있다. Case 3의 산소농도분포도로부터 산소가 기체채널의 중간위치에서 거의 다 소모된 것을 확인하였다. 이러한 문제점을 해결하기 위한 방법을 제시하기 위해 case 4와 case5를 진행하였다. 그 결과 산소의 유량의 증가가 환원극에서의 물질전달 저항을 감소시켜 SOFC의 성능을 증가시킨다는 것을 확인하였다. 본 연구는 CFD를 이용한 SOFC 해석에서 실험데이터와 잘 부합하는 신뢰성 있는 모델연구에 대한 기초자료로 활용 될 수 있을 것으로 기대된다.

감사의 글

본 연구는 한국과학기술연구원 미래원천연구사업(과제번호 : 2E25412-15-121)과 광운대학교 2014년 교내학술연구비 지원에 의해 수행되었습니다.

참고문헌

1. Sung Ann Hong, 'Hydrogen fuel cell Present technology and Future', Journal of The Korean Society for New and Renewable Energy, **1**, 24 (2005).
2. In Woo Jang, 'Three-dimensional finite volume analysis for the anode-supported flat-tubular solid oxide fuel cell performance', M. D Dissertation, Korea Advanced Institute of Science and Technology, Daejeon, Korea (2012).
3. J.R Ferguson, J.M. Fiard, and R. Herbin, 'Three-dimensional numerical simulation for various geometries of solid oxide fuel cells', Journal of power Sources, **58,** 109 (1996).
4. Hun Kwan Park, 'Numerical Study on the performance of a planar Solid Oxide Fuel Cell' M. D Dissertation, Korea Advanced Institute of Science and Technology, Daejeon, Korea (2010).
5. Jinliang Yuan, Masoud Rokni, and Bengt Suden, 'Three-dimensional computational analysis of gas and heat transport phenomena in ducts relevant for anode-supported solid oxide fuel cells', International Journal of Heat and Mass Transfer, **46**, 809 (2003).
6. C.M. Huang, S.S.Shy, C.W.Chien, and C.H.Lee, 'Parametric study of anodic microstructures to cell performance of planar solid oxide fuel cell using measured porous transport properties', Journal of power Sources, **195,** 2260 (2010).
7. Chao-Yang Wang, 'Fundamental Models for Fuel Cell Engineering', Chemical Reviews, **104**, 4727 (2004).
8. Kun Yuan, Yan Ji, and J.N. Chung, 'Physics-based modeling of a low-temperature solid oxide fuel cell with consideration of microstructure and interfacial effects', Journal of power Sources, **194**, 908 (2009).
9. Seong-Soo Pyo .et, 'Recent R&D Trends of Solid Oxide Fuel Cell Power Generation System', Journal of the Korean Electrochemical Society, **12**, 119 (2009).
10. Shixue Liu, Wei Kong, and Zijing Lin, 'Three-dimensional modeling of planar solid oxide fuel cells and the rib design optimization' J. power Sources, **194**, 854 (2009).
11. Meng Ni, Michael K.H.Leung, and Dennis Y.C.Leung, 'Parametric study of solid oxide fuel cell performance', Energy Conversion and Management, **48,** 1525 (2007).
12. Yuzhang Wang, Fumihiko Yoshiba, Takao Watanabe, and Shilie Wang, 'Numerical analysis of electrochemical characteristics and heat/species transport for planar porous-electrode-supported SOFC', Journal of power Sources, **170,** 101 (2007).
13. C.M.Huang, S.S.Shy, H.H.Li, and C.H.Lee, 'The impact of flow distributors on the performance of planar solid oxide fuel cell', Journal of power Sources, 195, 6280 (2010).
14. S.S. Shy, C.M. Huang, H.H.Li, and C.H.Lee, 'The impact of flow distributors on the performance of planar solid oxide fuel cell-Part II: Electrochemical impedance measurements', Journal of power Sources, **196**, 7555 (2011).
15. Jai-Who Kim, Anil V.Virkar, Kuan-Zong Fung, Karun Mehta, and Subhash C. Sing hal, 'Polarization effects in intermediate temperature, anode-supported solid oxide fuel cells', Journal of The Electrochemical Society, **146,** 69 (1999).
16. Kyung Joung Yoon, J.H. Lee, J.W. Son, B.K. Kim, H.J. Jae, and H.W. Lee, 'The solid oxide fuel cell research and development technology trends', Journal of the Korean Ceramic Society, **15**, 7 (2012)
17. FLUENT, inc., 'FLUENT 6.3 User's Guide' (2006)
18. ANSYS, inc., 'ANSYS Fluent Fuel Cell Modules Manual' (2013)
19. Shixue Liu, Ce Song, and Zijing Lin, 'The effects of the interconnect rib contact resistance on the performance of planar solid oxide fuel cell stack and the design optimization', Journal of power Sources, **183**, 214 (2008).