



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2013년12월27일
(11) 등록번호 10-1345795
(24) 등록일자 2013년12월20일

- | | |
|---|---|
| <p>(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
H01M 8/04 (2006.01) H01M 8/10 (2006.01)
G06F 17/00 (2006.01)</p> <p>(21) 출원번호 10-2012-0080514</p> <p>(22) 출원일자 2012년07월24일
심사청구일자 2012년07월24일</p> <p>(56) 선행기술조사문헌
논문1 (2008.02.14)
논문2 (2001)
논문3 (2010)
논문4 (2008)</p> | <p>(73) 특허권자
인하대학교 산학협력단
인천광역시 남구 인하로 100, 인하대학교 (용현동)</p> <p>(72) 발명자
주현철
인천광역시 남구 용현동 253 인하대학교 기계공학과 2호관 2N265A</p> <p>고요한
인천광역시 서구 연희동 태영아파트 3동 1303호</p> <p>(74) 대리인
이원희</p> |
|---|---|

전체 청구항 수 : 총 4 항

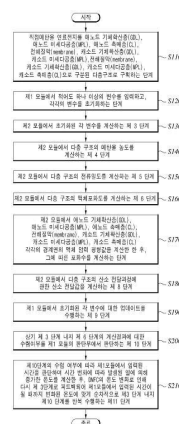
심사관 : 조기운

(54) 발명의 명칭 1차원 비 정상 및 비 등온 수치코드를 기반으로 하는 직접메탄올 연료전지의 성능예측 방법

(57) 요약

1차원 비 정상 및 비 등온 수치코드를 기반으로 하는 직접메탄올 연료전지의 성능예측 방법 을 개시한다. 상기 직접메탄올 연료전지의 성능예측 방법은 1차원 수치코드의 계산 알고리즘을 통해 직접메탄올 연료전지의 성능을 예측하는 예측시스템으로서, 변수를 입력하는 제1 모듈, 상기 제1 모듈에 입력된 변수를 계산 및 계산된 결과값을 출력하는 제2 모듈을 포함하는 직접메탄올 연료전지의 성능예측 시스템을 이용하여, 기체확산층, 촉매층 및 멤브레인 영역으로 고려된 직접메탄올 연료전지의 성능을 예측하는 방법에 있어서, 상기 직접메탄올 연료전지를 애노드 기체확산층(GDL), 애노드 미세다공층(MPL), 애노드 촉매층(CL), 전해질막(membrane), 캐소드 기체확산층(GDL), 캐소드 미세다공층(MPL), 캐소드 촉매층(CL)으로 구분된 다층구조로 구현하는 제1 단계; 상기 제1 모듈에서 적어도 하나 이상의 변수를 입력하고, 각각의 상기 변수를 초기화하는 제 2 단계; 상기 제2 모듈에서 초기화된 각 변수를 계산하는 제 3 단계; 상기 제2 모듈에서 상기 다층 구조의 메탄올 농도를 계산하는 제 4 단계; 상기 제2 모듈에서 상기 다층 구조의 전류밀도를 계산하는 제 5 단계; 상기 제2 모듈에서 상기 다층 구조의 액체포화도를 계산하는 제 6 단계; 및 상기 제2 모듈에서 상기 애노드 기체확산층(GDL), 애노드 미세다공층(MPL), 애노드 촉매층(CL), 전해질막(membrane), 캐소드 기체확산층(GDL), 캐소드 미세다공층(MPL), 캐소드 촉매층(CL) 각각의 경계면의 액체 압력 평형값을 계산한 후 후그에 따른 포화수를 계산하는 제7 단계; 상기 제2 모듈에서 상기 다층 구조의 산소 전달과정에 관한 산소 전달값을 계산하는 제 8 단계; 상기 제1 모듈에서 초기화된 각 변수에 대한 업데이트를 수행하는 제 9 단계; 상기 제 3 단계 내지 제 6 단계의 계산결과에 대한 수렴여부를 상기 제1 모듈의 판단부에서 판단하는 제 10 단계; 및 상기 제10단계의 수렴여부에 따라, 상기 제1모듈에서 입력된 시간을 판단하며 시간 변화에 따라 발생된 열에 의해 증가한 온도를 계산한 후, DMFC의 온도 변화로 인해 다시 제 3단계로 피드백되어 상기 제1모듈에서 입력된 시간이 될 때까지 변화된 온도에 맞게 순차적으로 상기 제3 단계 내지 제10 단계를 반복 수행하는 제11 단계를 포함한다.

대 표 도 - 도5



특허청구의 범위

청구항 1

1차원 정상 및 등은 수치코드를 기반으로 하는 직접메탄을 연료전지의 성능예측 시스템으로서, 변수를 입력하는 제1 모듈, 상기 제1 모듈에 입력된 변수를 계산 및 계산된 결과값을 출력하는 제2 모듈을 포함하는 직접메탄을 연료전지의 성능예측 시스템을 이용하여, 기체확산층, 촉매층 및 멤브레인 영역으로 고려된 직접메탄을 연료전지의 성능을 예측하는 방법에 있어서,

상기 직접메탄을 연료전지를 애노드 기체확산층(GDL), 애노드 미세다공층(MPL), 애노드 촉매층(CL), 전해질막(membrane), 캐소드 기체확산층(GDL), 캐소드 미세다공층(MPL), 캐소드 촉매층(CL)으로 구분된 다층구조로 구현하는 제1 단계;

상기 제1 모듈에서 적어도 하나 이상의 변수를 입력하고, 각각의 상기 변수를 초기화하는 제 2 단계;

상기 제2 모듈에서 초기화된 각 변수를 계산하는 제 3 단계;

상기 제2 모듈에서 상기 다층 구조의 메탄을 농도를 계산하는 제 4 단계;

상기 제2 모듈에서 상기 다층 구조의 전류밀도를 계산하는 제 5 단계;

상기 제2 모듈에서 상기 다층 구조의 액체포화도를 계산하는 제 6 단계; 및

상기 제2 모듈에서 상기 애노드 기체확산층(GDL), 애노드 미세다공층(MPL), 애노드 촉매층(CL), 전해질막(membrane), 캐소드 기체확산층(GDL), 캐소드 미세다공층(MPL), 캐소드 촉매층(CL) 각각의 경계면의 액체 압력 평형값을 계산한 한 후그에 따른 포화수를 계산하는 제7 단계;

상기 제2 모듈에서 상기 다층 구조의 산소 전달과정에 관한 산소 전달값을 계산하는 제 8 단계;

상기 제1 모듈에서 초기화된 각 변수에 대한 업데이트를 수행하는 제 9 단계;

상기 제 3 단계 내지 제 6 단계의 계산결과에 대한 수렴여부를 상기 제1 모듈의 판단부에서 판단하는 제 10 단계; 및

상기 제2 모듈의 판단부에서 온도변화에 따른 온도 데이터의 입력여부를 판단하는 제 11 단계;를 포함하는 것을 특징으로 하는 1차원 정상 및 등은 수치코드를 기반으로 하는 직접메탄을 연료전지의 성능예측 방법.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 제7단계는,

제1 알고리즘 및 제2 알고리즘을 이용하여 상기 액체 압력 평형값을 계산하는 단계인 것을 특징으로 하는 1차원 정상 및 등은 수치코드를 기반으로 하는 직접메탄을 연료전지의 성능예측 방법.

청구항 3

제2항에 있어서,

상기 제1 알고리즘은,

임의 중심값을 선택한 후, 임의의 제1 설정값 및 제2 설정값을 정의하는 a) 단계;(여기서, 제1 설정값 * 제2 설정값 < 0)

$f[(\text{제1 설정값} + \text{제2 설정값})/2]$ 를 계산하는 b) 단계;

상기 b) 단계의 결과값이 0 미만 또는 0 이상의 값을 갖으면 상기 b) 단계로 피드백되며, 상기 b) 단계의 결과

값이 0이면 다음 단계로 진행하는 c) 단계;

상기 c) 단계 이후, 상기 결과값의 수렴조건이 상대오차보다 작을 때까지 상기 a) 단계 내지 상기 b) 단계를 반복하는 d) 단계로 이루어지는 것을 특징으로 하는 1차원 정상 및 등온 수치코드를 기반으로 하는 직접메탄올 연료전지의 성능예측 방법.

$$e_a = \left| \frac{x_r^{new} - x_r^{old}}{x_r^{new}} \right| \cdot 100\%$$

여기서, e_s : 수렴조건, e_a : 상대오차 [%]이며,

인 것을 특징으로 한다.

청구항 4

제3 항에 있어서,

상기 제2 알고리즘은,

Newton-Raphson 방법을 이용하여 임의의 함수 $g(x)=f'(x)$ 를 정의하여 $f(x)$ 의 최적값을 도출하는 도출 단계를 포함하며, 상기 도출 단계는 $x_{i+1} = x_i - f'(x)/f''(x)$ 인 수학식을 이용하는 단계인 것을 특징으로 하는 1차원 정상 및 등온 수치코드를 기반으로 하는 직접메탄올 연료전지의 성능 예측 방법.

명세서

기술분야

[0001] 본 발명은 직접메탄올 연료전지의 성능을 예측하는 방법에 관한 것으로, 보다 상세하게는, 1차원 비 정상 및 비 등온 수치코드를 이용하여 직접메탄올 연료전지(DMFC)의 정확한 성능예측 및 크로스오버 현상을 예측할 수 있는 1차원 비 정상 및 비 등온 수치코드를 기반으로 하는 직접메탄올 연료전지의 성능예측 방법에 관한 것이다.

배경기술

[0002] DMFC는 1990년대가 되어서 개발하기 시작한 새로운 타입의 연료전지이다. 고체고분자형 연료전지(PEFC)가 완성되고 나서 1/4 세기가 지나 출현되었다. DMFC는 메탄올과 물을 주입하는 것만으로 실온에서 발전하게 된다. 수소용 압력용기나 가스 유량 제어기가 필요하지 않기 때문에, 구조가 간단하며 초소형 발전장치도 만들 수 있다.

[0003] DMFC는 도 1과 같은 전극반응에 의해 발전한다. 연료극(음극)에서는 메탄올과 물분자가 반응하여 CO₂와 H⁺가 생성되며, 공기극(양극) 반응은 PEFC와 같다. 메탄올 1분자에서 6개의 전자를 빼낼 수 있으며, 게다가 표준전극전위가 수소와 거의 동일하기 때문에 이론적으로는 에너지밀도가 높은 연료전지를 만들 수 있어야 하지만 아직은 미해결 문제가 존재하고 있다.

[0004] 제1의 문제는 연료극(음극)에서의 반응속도가 느리다는 점이다. 도 2는 음극의 손실(과전압)을 PEFC와 비교한 도면을 나타낸다.

[0005] PEFC는 양극의 과전압이 가장 크지만, DMFC는 음극 과전압이 한층 더 크다는 것을 알 수 있다. 촉매를 Pt에서 Pt-Ru로 바꾸면 과전압이 꽤 낮아지기는 하지만, 그래도 수소의 경우를 따라가지는 못한다. 그 이유는 도 1의 메탄올분자의 반응이 느리기 때문이다. 이 반응은 다음과 같이 분해하여 쓸수 있는데, 반응은 메탄올이 Pt 표면에 흡착하여, 하기의 분자식(1)에서 (3) 또는 (4)까지 진행하게 된다.

[0006] (1) $CH_3OH \rightarrow CH_2OH + H^+ + e^-$

[0007] (2) $CH_2OH \rightarrow CHOH + H^+ + e^-$

[0008] (3) $CHOH \rightarrow CHO + H^+ + e^-$

- [0009] (4) $\text{CHO} \rightarrow \text{CO} + \text{H}^+ + \text{e}^-$
- [0010] 실제로 반응은 여기서 진행되지 않게 된다. 그 이유는 Pt 표면에 강하게 흡착되어 있는 CO 쉽게 산화되지 않기 때문에, Pt 표면의 활성점이 모두 CO로 점유되어 버리기 때문이다. 그러나 촉매를 Pt와 Ru의 합금으로 하면, Ru가 효과적인 작용을 한다. Ru는 물을 분해하고, OH를 흡착한다.
- [0011] $\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{Ru} - \text{OHad} + \text{H}^+ + \text{e}^-$
- [0012] 여기서 ad란 흡착을 의미하며, 이 OH가 근방의 Pt에 흡착되어 있는 CO를 CO2로 산화시키게 된다.
- [0013] $\text{Pt} - \text{COad} + \text{Ru} - \text{OHad} \rightarrow \text{Pt} + \text{Ru} + \text{CO}_2 + \text{H}^+ + \text{e}^-$
- [0014] 생성된 CO2는 Pt에 흡착하지 않으므로 Pt 표면으로부터 떨어져 나가고, 다시 메탄올이 Pt에 흡착하여 (1)식에서 (4)까지의 반응이 진행되므로, 연속적으로 전류를 얻을 수 있다. 다만, 이경우에도 식 (5)와 (6)의 반응이 빠르지 않으므로, 수소와 비교하면 과전압이 커지게 된다. 따라서, DMFC를 실용화하기 위해서는 Pt 표면에 흡착한 CO에 산소원자를 고효율로 전해 주는 고성능 촉매가 필요하다는 것을 알 수 있다.
- [0015] 한편, DMFC의 성능을 향상시키기 위해서는 이외에도 메탄올 크로스오버(methanol crossover)를 해결하지 않으면 안된다. 메탄올 크로스오버는 연료층의 미반응 메탄올이 전해질막을 투과하여 양극에 도달해서 여러가지 장애를 일으키는 것을 말한다. 투과한 메탄올은 양극 근방에 존재하는 산소와 직접 반응하여 물과 CO2로 된다. 메탄올이 발전에는 기여하지 않고 타 버리게 되므로, 연료를 헛되게 낭비하는 일이 된다. 또한 이 때문에 양극의 산소 농도가 저하되어, 전위가 낮아지게 되므로 이것도 손실이 된다.
- [0016] DMFC는 음극의 반응이 느리기 때문에, 메탄올의 농도를 높여서 전류를 많이 얻어 내고 싶지만, 그렇게 되면 메탄올 투과가 증가하게 된다. 전해질막 또한 이온전도의 저항을 낮추기 위해 얇게 하고 싶지만 이것 또한 메탄올의 투과를 증대시키는 것이 된다. 이 메탄올 크로스오버는 H+만을 통과시키고 메탄올을 통과시키지 않는 전해질막이 개발된다면, 단번에 해결할 수 있기 때문에 현재 많은 연구가 진행되고 있다.
- [0017] 중요한 사항은 물에 있다. 지금 사용되고 있는 전해질막은 물을 대량으로 함유하고 있고, 이것은 물분자의 연쇄(클러스터)를 사용하여 H+ 고효율로 전도하는 그로투스 메커니즘(Grotthus mechanism, 수중에서 일어나는 프로톤 전도에 대한 그로투스의 이론)을 이용하고 있기 때문이다. 그러나 물이 있으면, 여기에 녹는 메탄올은 용이하게 막 사이를 이동할 수 있게 된다.
- [0018] 물분자와 메탄올분자는 크기가 별로 다르지 않기 때문에, 분자채(선택 투과막)를 사용하여 메탄올의 이동을 방지할 수도 없다. 그러므로 물을 사용하지 않으며, H+를 포섭할 수 있는 사이트를 고분자 중에 촘촘히 나열해 두고, 거기를 H+가 점프하며 이동하는 전해질막 재료를 제안하고 있는 그룹도 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

- [0019] 본 발명이 해결하고자 하는 과제는 기존의 DMFC 1D 코드의 경우 기체확산층(gas diffusion layer; GDL), 촉매층(catalyst layer, CL), 전해질막(membrane)으로 이루어진 5층 구조를 고려하였으나, 촉매층의 경우 기체확산층, 전해질막에 비해 매우 얇다는 가정 하에 직접적인 계산을 하지 않았다. 반면에 본 발명에서는 기체확산층(gas diffusion layer; GDL), 촉매층(catalyst layer, CL), 전해질막(membrane) 외에 GDL과 CL 사이의 미세다공층(MPL)을 추가로 고려한 7층에 대한 해석을 수행함으로써 고농도 메탄올 연료의 활용을 가능하게 해줄 수 있는 차원 비정상 및 비비 등은 수치코드를 기반으로 하는 직접메탄올 연료전지의 성능예측 방법을 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

- [0020] 상기 과제를 해결하기 위한 본 발명의 실시 예에 따른 1차원 비 정상 및 비 등은 수치코드를 기반으로 하는 직접메탄올 연료전지의 성능예측 방법은 1차원 수치코드의 계산 알고리즘을 통해 직접메탄올 연료전지의 성능을 예측하는 예측시스템으로서, 변수를 입력하는 제1 모듈, 상기 제1 모듈에 입력된 변수를 계산 및 계산된 결과값을 출력하는 제2 모듈을 포함하는 직접메탄올 연료전지의 성능예측 시스템을 이용하여, 기체확산층, 촉매층 및

멤브레인 영역으로 고려된 직접메탄올 연료전지의 성능을 예측하는 방법에 있어서, 상기 직접메탄올 연료전지를 애노드 기체확산층(GDL), 애노드 미세다공층(MPL), 애노드 촉매층(CL), 전해질막(membrane), 캐소드 기체확산층(GDL), 캐소드 미세다공층(MPL), 캐소드 촉매층(CL)으로 구분된 다층구조로 구획하는 제1 단계; 상기 제1 모듈에서 적어도 하나 이상의 변수를 입력하고, 각각의 상기 변수를 초기화하는 제 2 단계; 상기 제2 모듈에서 초기화된 각 변수를 계산하는 제 3 단계; 상기 제2 모듈에서 상기 다층 구조의 메탄올 농도를 계산하는 제 4 단계; 상기 제2 모듈에서 상기 다층 구조의 전류밀도를 계산하는 제 5 단계; 상기 제2 모듈에서 상기 다층 구조의 액체포화도를 계산하는 제 6 단계; 및 상기 제2 모듈에서 상기 애노드 기체확산층(GDL), 애노드 미세다공층(MPL), 애노드 촉매층(CL), 전해질막(membrane), 캐소드 기체확산층(GDL), 캐소드 미세다공층(MPL), 캐소드 촉매층(CL) 각각의 경계면의 액체 압력 평형값을 계산한 한 후 그에 따른 포화수를 계산하는 제7 단계; 상기 제2 모듈에서 상기 다층 구조의 산소 전달과정에 관한 산소 전달값을 계산하는 제 8 단계; 상기 제1 모듈에서 초기화된 각 변수에 대한 업데이트를 수행하는 제 9 단계; 상기 제 3 단계 내지 제 6 단계의 계산결과에 대한 수렴여부를 상기 제1 모듈의 판단부에서 판단하는 제 10 단계; 상기 제10단계의 수렴여부에 따라, 상기 제1모듈에서 입력된 시간을 판단하며 시간 변화에 따라 발생된 열에 의해 증가한 온도를 계산한 후, DMFC의 온도 변화로 인해 다시 제 3 단계로 피드백되어 상기 제1모듈에서 입력된 시간이 될 때까지 변화된 온도에 맞게 순차적으로 상기 제3 단계 내지 제10 단계를 반복 수행하는 제11 단계를 포함한다.

[0021] 상기 제7단계는 제1 알고리즘 및 제2 알고리즘을 이용하여 상기 액체 압력 평형값을 계산하는 단계인 것을 특징으로 한다.

[0022] 상기 제1 알고리즘은 임의 중심값을 선택한 후, 임의의 제1 설정값 및 제2 설정값을 정의하는 a) 단계;(여기서, 제1 설정값 * 제2 설정값 < 0) $f[(\text{제1 설정값} + \text{제2 설정값})/2]$ 를 계산하는 b) 단계; 상기 b) 단계의 결과값이 0 미만 또는 0 이상의 값을 갖으면 상기 b) 단계로 피드백되며, 상기 b) 단계의 결과값이 0이면 다음 단계로 진행하는 c) 단계; 상기 c) 단계 이후, 상기 결과값의 수렴조건이 상대오차보다 작을 때까지 상기 a) 단계 내지 상기 b) 단계를 반복하는 d) 단계로 이루어지는 것을 특징으로 한다.

$$e_a = \left| \frac{x_r^{new} - x_r^{old}}{x_r^{new}} \right| \cdot 100\%$$

[0023] 여기서, e_s : 수렴조건, e_a : 상대오차 [%]이며, 이다.

[0024] 상기 제2 알고리즘은 Newton-Raphson 방법을 이용하여 임의의 함수 $g(x)=f'(x)$ 를 정의하여 $f(x)$ 의 최적값을 도출하는 도출 단계를 포함하며, 상기 도출 단계는 $x_{i+1} = x_i - f'(x)/f''(x)$ 인 수학식을 이용하는 단계인 것을 특징으로 한다.

발명의 효과

[0025] 본 발명의 1차원 비 정상 및 비 등온 수치코드를 기반으로 하는 직접메탄올 연료전지의 성능예측 방법에 따르면, 기존의 DMFC 1D 코드의 경우 기체확산층(gas diffusion lwyer; GDL), 촉매층(catalyst layer, CL), 전해질막(membrane)으로 이루어진 5층 구조를 고려하였으나, 촉매층의 경우 기체확산층, 전해질막에 비해 매우 얇다는 가정 하에 직접적인 계산을 하지 않았다. 반면에 본 발명에서는 기체확산층(gas diffusion lwyer; GDL), 촉매층(catalyst layer, CL), 전해질막(membrane) 외에 GDL과 CL 사이의 미세다공층(MPL)을 추가로 고려한 7층에 대한 해석을 수행함으로써 고농도 메탄올 연료의 활용을 가능하게 해줄 수 있으며(기존기술; 0.5 ~ 3M 메탄올 수용액, 다층구조: 8M, 10M 이상의 고농도 메탄올 수용액) 또한 이러한 고농도 메탄올을 활용한 DMFC 성능예측이 가능하다는 이점을 가지고 있다.

[0026] 또한 본 발명의 경우 다층구조의 경계면에서 나타나는 압력평형을 계산하여 포화수의 불연속현상을 예측함에 따라 기존 발명보다 정확한 포화수 분포 예측이 가능해질 수 있다는 이점이 있다.

도면의 간단한 설명

- [0027] 도 1은 DMFC의 발전원리와 전극반응을 나타낸 예시도이다.
- 도 2는 PEFC와 DMFC의 각 전극의 전류전위 곡선의 비교를 나타낸 그래프이다.
- 도 3은 기존 DMFC 성능 예측 FORTRAN CODE의 해석 도메인을 나타낸 예시도이다.
- 도 4는 본 발명의 1차원 비 정상 및 비 등온 수치코드를 기반으로 하는 직접메탄올 연료전지의 성능예측 방법에 따른 FORTRAN CODE의 해석 도메인을 나타낸 예시도이다.
- 도 5는 본 발명의 1차원 비 정상 및 비 등온 수치코드를 기반으로 하는 직접메탄올 연료전지의 성능예측 방법을 나타낸 플로우 차트이다.
- 도 6은 기존의 DMFC 1D 코드를 통한 메탄올 농도분포 예측 곡선을 나타낸 그래프이다.
- 도 7은 기존 DMFC 1D 코드를 이용한 공기극 기체확산층의 산소농도분포도 예측 곡선을 나타낸 그래프이다.
- 도 8는 본 발명의 DMFC 1D 코드를 이용한 반응물 농도분포 예측 곡선을 나타낸 그래프이다.
- 도 9은 기존 DMFC 1D 코드를 이용한 포화수 분포 예측 곡선을 나타낸 그래프이다.
- 도 10은 본 발명의 DMFC 1D 코드를 이용한 포화수 분포 예측 곡선을 나타낸 그래프이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0028] 이하, 본 발명의 바람직한 실시 예의 상세한 설명은 첨부된 도면들을 참조하여 설명할 것이다. 하기에서 본 발명을 설명함에 있어서, 관련된 공지 기능 또는 구성에 대한 구체적인 설명이 본 발명의 요지를 불필요하게 흐릴 수 있다고 판단되는 경우에는 그 상세한 설명을 생략할 것이다.
- [0029] 본 발명의 개념에 따른 실시 예는 다양한 변경을 가할 수 있고 여러 가지 형태를 가질 수 있으므로 특정 실시 예들을 도면에 예시하고 본 명세서 또는 출원에 상세하게 설명하고자 한다. 그러나, 이는 본 발명의 개념에 따른 실시 예를 특정한 개시 형태에 대해 한정하려는 것이 아니며, 본 발명의 사상 및 기술 범위에 포함되는 모든 변경, 균등물 내지 대체물을 포함하는 것으로 이해되어야 한다.
- [0030] 어떤 구성요소가 다른 구성요소에 "연결되어" 있다거나 "접속되어" 있다고 언급된 때에는, 그 다른 구성요소에 직접적으로 연결되어 있거나 또는 접속되어 있을 수도 있지만, 중간에 다른 구성요소가 존재할 수도 있다고 이해되어야 할 것이다. 반면에, 어떤 구성요소가 다른 구성요소에 "직접 연결되어" 있다거나 "직접 접속되어" 있다고 언급된 때에는, 중간에 다른 구성요소가 존재하지 않는 것으로 이해되어야 할 것이다. 구성요소들 간의 관계를 설명하는 다른 표현들, 즉 "~사이에"와 "바로 ~사이에" 또는 "~에 이웃하는"과 "~에 직접 이웃하는" 등도 마찬가지로 해석되어야 한다.
- [0031] 본 명세서에서 사용한 용어는 단지 특정한 실시예를 설명하기 위해 사용된 것으로, 본 발명을 한정하려는 의도가 아니다. 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다. 본 명세서에서, "포함하다" 또는 "가지다" 등의 용어는 실시된 특징, 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부분품 또는 이들을 조합한 것이 존재함을 지정하려는 것이지, 하나 또는 그 이상의 다른 특징들이나 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부분품 또는 이들을 조합한 것들의 존재 또는 부가 가능성을 미리 배제하지 않는 것으로 이해되어야 한다.
- [0032] 먼저, 본 발명의 1차원 비 정상 및 비 등온 수치코드를 기반으로 하는 직접메탄올 연료전지의 성능예측 방법은 하기에 따른 가정을 갖는다.
- [0033] 첫째, 기체 상태로 존재하는 경우에는 이상기체법칙을 따른다.
- [0034] 둘째, 멤브레인의 경우 완전히 수화(hydrated)되었다고 가정한다. 이에 따라 물 함유량이나, 이온전도도는 일정

한 값을 사용한다.

- [0035] 셋째, 채널상의 각 화학종들의 농도는 일정하다고 가정한다. 그리고 멤브레인에 대해 시뮬레이션을 수행한다.
- [0036] 넷째, 고려된 모델링 영역은 기체확산층과 촉매층, 그리고 멤브레인에 대해 두께가 없는 무한히 얇은 면으로 가정한다.
- [0037] 다섯째, 멤브레인을 투과한 메탄올은 공기극 촉매층에서 완전히 반응을 일으키는 것으로 가정한다. 따라서 공기극에서 메탄올 농도는 0을 가정한다.
- [0038] 이러한 가정하에 본원 발명에서 제시하는 1차원 비 정상 및 비 등은 수치코드를 기반으로 하는 직접메탄올 연료전지의 성능예측 방법은 수행된다.
- [0039] 도 3은 본 발명의 실시 예에 따른 1차원 비 정상 및 비 등은 수치코드를 기반으로 하는 직접메탄올 연료전지의 성능예측 방법을 나타낸 플로우 차트이다.
- [0040] 도 3에 도시된 바와 같이, 본 발명의 1차원 비 정상 및 비 등은 수치코드를 기반으로 하는 직접메탄올 연료전지의 성능예측 방법은 제1 단계(S110) 내지 제11 단계(S210)를 포함한다.
- [0041] 여기서, 상기 각 단계들은 직접메탄올 연료전지의 성능예측 시스템을 이용하여 수행되며, 상기 직접메탄올 연료전지의 성능예측 시스템은 변수를 입력하는 제1 모듈, 상기 제1 모듈에 입력된 변수를 계산 및 계산된 결과값을 출력하는 제2 모듈을 포함한다.
- [0042] 상기 제1 단계(S110)는 상기 직접메탄올 연료전지를 애노드 기체확산층(GDL), 애노드 미세다공층(MPL), 애노드 촉매층(CL), 전해질막(membrane), 캐소드 기체확산층(GDL), 캐소드 미세다공층(MPL), 캐소드 촉매층(CL)으로 구분된 다층구조로 구현하는 단계일 수 있다.
- [0043] 상기 제2 단계(S120)는 상기 제1 모듈에서 적어도 하나 이상의 변수를 입력하고, 각각의 상기 변수를 초기화하는 단계일 수 있다.
- [0044] 상기 제3 단계(S130)는 상기 제2 모듈에서 초기화된 각 변수를 계산하는 단계일 수 있다.
- [0045] 상기 제4 단계(S140)는 상기 제2 모듈에서 상기 다층 구조의 메탄올 농도를 계산하는 단계일 수 있다.
- [0046] 상기 제5 단계(S150)는 상기 제2 모듈에서 상기 다층 구조의 전류밀도를 계산하는 단계일 수 있다.
- [0047] 상기 제6 단계(S160)는 상기 제2 모듈에서 상기 다층 구조의 액체포화도를 계산하는 단계일 수 있다.
- [0048] 상기 제7 단계(S170)는 상기 제2 모듈에서 상기 애노드 기체확산층(GDL), 애노드 미세다공층(MPL), 애노드 촉매층(CL), 전해질막(membrane), 캐소드 기체확산층(GDL), 캐소드 미세다공층(MPL), 캐소드 촉매층(CL) 각각의 경계면의 액체 압력 평형값을 계산한 한 후그에 따른 포화수를 계산하는 단계일 수 있다.
- [0049] 상기 제8 단계(S180)는 상기 제2 모듈에서 상기 다층 구조의 산소 전달과정에 관한 산소 전달값을 계산하는 단계일 수 있다.
- [0050] 상기 제9 단계(S190)는 상기 제1 모듈에서 초기화된 각 변수에 대한 업데이트를 수행하는 단계일 수 있다.
- [0051] 상기 제10 단계(S200)는 상기 제 3 단계 내지 제 6 단계의 계산결과에 대한 수렴여부를 상기 제1 모듈의 판단부에서 판단하는 단계일 수 있다.
- [0052] 상기 제11 단계(S210)는 상기 제10단계의 수렴 여부에 따라, 상기 제1모듈에서 입력된 시간을 판단하며 시간 변화에 따라 발생된 열에 의해 증가한 온도를 계산한 후, DMFC의 온도 변화로 인해 다시 제 3단계로 피드백되어 상기 제1모듈에서 입력된 시간이 될 때까지 변화된 온도에 맞게 순차적으로 상기 제3 단계 내지 제10 단계를 반복 수행하는 제11 단계일 수 있다.
- [0053] 보다 구체적으로, 상기 제7단계(S170)는 제1 알고리즘 및 제2 알고리즘을 이용하여 상기 액체 압력 평형값을 계산하는 단계를 포함하며, 상기 제1 알고리즘은 a) 단계 내지 d) 단계를 포함한다.
- [0054] 상기 a) 단계는 임의 중심값을 선택한 후, 임의의 제1 설정값 및 제2 설정값을 정의하는 단계;(여기서, 제1 설

정값 * 제2 설정값 < 0) 일 수 있다.

[0055] 상기 b) 단계는 $f[(\text{제1 설정값} + \text{제2 설정값})/2]$ 를 계산하는 단계일 수 있다.

[0056] 상기 c) 단계는 상기 b) 단계의 결과값이 0 미만 또는 0 이상의 값을 갖으면 상기 b) 단계로 피드백되며, 상기 b) 단계의 결과값이 0이면 다음 단계로 진행하는 단계일 수 있다.

[0057] 상기 d) 단계는 상기 c) 단계 이후, 상기 결과값의 수렴조건이 상대오차보다 작을 때까지 상기 a) 단계 내지 상기 b) 단계를 반복하는 d) 단계일 수 있다.

$$e_a = \left| \frac{x_r^{new} - x_r^{old}}{x_r^{new}} \right| \cdot 100\%$$

[0058] 여기서, e_s : 수렴조건, e_a : 상대오차 [%]이며, 로 나타낼 수 있다.

[0059] 상기 제2 알고리즘은 Newton-Raphson 방법을 이용하여 임의의 함수 $g(x)=f'(x)$ 를 정의하여 $f(x)$ 의 최적값을 도출하는 도출 단계를 포함하며, 상기 도출 단계는 $x_{i+1} = x_i - f'(x)/f''(x)$ 인 수확식을 이용하는 단계를 포함한다.

[0060] 기존의 DMFC 1D 코드의 경우 앞서 설명한 바와 같이 촉매층 두께가 없다고 가정하였기 때문에 연료극 기체확산층(anode GDL)에서의 메탄올 농도분포 및 공기극 기체확산층(cathode GDL)의 산소농도분포만 예측이 가능함.(도 6 및 도 7을 참조)

[0061] 반면 신규 DMFC 1D 코드의 경우(도 8을 참조) 서로 다른 다층에 대하여 적용이 가능하며, 각 층별로 다른 기울기를 지닌 것을 확인할 수 있다.

[0062] 이는 각 층들의 서로 다른 특성이 반응물의 분포에 미치는 영향의 차이(기공도, 투과도, 접촉각 등) 때문이며, 따라서 정확한 시뮬레이션 결과를 위하여 각 층들을 실제로 고려할 필요가 있다. 특히 그래프에 나타난 바와 같이 고농도 메탄올(8M case)에서도 적용이 가능함을 알 수 있다.

[0063] 기존의 DMFC 1D 코드의 경우, 도 9를 참조, 왼쪽의 그래프와 같이 포화수의 분포가 연속적이며, 직선에 가깝게 나타남을 알 수 있다. 이는 앞서 설명한 바와 같이 촉매층 두께가 없다고 가정하여 기체확산층에서의 분포만 예측이 가능하기 때문이었다.

[0064] 반면 신규 DMFC 코드의 경우, 도 10를 참조하면, 각 층들의 서로 다른 특성(기공도, 투과도, 접촉각 등)으로 인하여 포화수의 분포가 층별로 불연속적으로 다르게 나타나며, 특히 층간의 불연속적 포화수 분포를 예측하기 위하여 추가적인 수치해석기법(root finding method 중 bisection method와 newton method)을 이용하였다.

[0065] 여기서, 기존의 DMFC 1D 코드의 경우 액체 압력은 $P'_{MPL} = P_{GDL}$ 로 하여 MPL 층과 GDL 층의 압력이 동일하다고 하였지만, 실제로 각 층들은 서로 다른 특성(기공도, 투과도, 접촉각 등)을 가지기 때문에 액체 압력은 MPL과 GDL 층의 압력은 같을 수 없다.

[0066] 이에 본 발명에서 제안하는 DMFC 코드인 경우 MPL과 GDL 층의 압력 관계를 다음의 식으로 나타내었다.

$$P'_{MPL} = P'_{c,MPL} + P'_{entry,MPL} = P'_{c,GDL} + P'_{entry,GDL} = P'_{GDL}, P_{c,MPL} + P'_{entry} = P'_{c,GDL}$$

[0068] 여기서, P'_{entry} 는 서로 다른 기공도의 구조와 습윤성(wettabilities)으로 인해 MPL 층과 GDL 층의 사이의 liquid-entry pressure 차이를 나타낸다.

[0069] 액체 압력의 보존 식은 가스 압력과 모세관 압력 측면에서 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$-P_{c,MPL} + P''_{MPL} + P'_{entry} = -P_{c,GDL} + P''_{GDL}$$

[0071] 가스 압력은 인터페이스에서 일정($P''_{MPL} = P''_{GDL}$)하기 때문에 $-P_{c,MPL} + P'_{entry} = -P'_{c,GDL}$ 이 되며, 모세관 압력식을 사용하여 나타내면, 다음의 수식으로 나타낼 수 있다.

$$-\sigma \cos(\theta_{MPL}) \left(\frac{\epsilon_{MPL}}{K_{MPL}} \right)^{1/2} J(s_{int,MPL}) + P'_{entry} = -\sigma \cos(\theta_{GDL}) \left(\frac{\epsilon_{GDL}}{K_{GDL}} \right)^{1/2} J(s_{int,GDL})$$

[0072]

[0073]

여기서, $S_{(int,MPL)}$ 와 $S_{(int,GDL)}$ 은 인터페이스에서 MPL과 GDL의 포화 수를 나타낸다.

[0074]

여기서, Leverett 함수 $J(s)$ 는 접촉각에 따라 다음과 같이 정의된다.

$$J(s) = \begin{cases} 1.417 \cdot (1-s) - 2.120 \cdot (1-s)^2 + 1.263 \cdot (1-s)^3 & \text{if } \theta_c < 90^\circ \\ 1.417 \cdot s - 2.120 \cdot s^2 + 1.263 \cdot s^3 & \text{if } \theta_c > 90^\circ \end{cases}$$

[0075]

[0076]

그러므로 위의 관계식에서 보이는 것처럼 MPL 층과 GDL 층의 액체 압력이 P'_{entry} 의 차이로 다르게 된다.

[0077]

본 발명에 따른 직접메탄올 연료전지의 1차원 수치코드를 이용한 성능예측 방법은 모든 방정식을 동시에 계산하는 것이 아니라, 질량 및 운동량 보존 방정식을 먼저 계산하여 수렴을 시킨 후 계산된 질량 및 운동량 결과를 이용하여 물질 및 전하 방정식을 계산하여 수렴을 시킨다. 이와 같이, 순차적인 계산을 통해 모든 방정식을 동시에 계산하는 경우보다 30% 정도의 계산 시간을 단축시킬 수 있는 특징이 있다.

[0078]

따라서 본 발명의 1차원 비 정상 및 비 등온 수치코드를 기반으로 하는 직접메탄올 연료전지의 성능예측 방법에 따르면, 기존의 DMFC 1D 코드의 경우 기체확산층(gas diffusion layer; GDL), 촉매층(catalyst layer, CL), 전해질막(membrane)으로 이루어진 5층 구조를 고려하였으나, 촉매층의 경우 기체확산층, 전해질막에 비해 매우 얇다는 가정 하에 직접적인 계산을 하지 않았다. 반면에 본 발명에서는 기체확산층(gas diffusion layer; GDL), 촉매층(catalyst layer, CL), 전해질막(membrane) 외에 GDL과 CL 사이의 미세다공층(MPL)을 추가로 고려한 7층에 대한 해석을 수행함으로써 고농도 메탄올 연료의 활용을 가능하게 해줄 수 있으며(기존기술; 0.5 ~ 3M 메탄올 수용액, 다층구조: 8M, 10M 이상의 고농도 메탄올 수용액) 또한 이러한 고농도 메탄올을 활용한 DMFC 성능예측이 가능하다는 이점을 가지고 있다.

[0079]

또한 본 발명의 경우 다층구조의 경계면에서 나타나는 압력평형을 계산하여 포화수의 불연속현상을 예측함에 따라 기존 발명보다 정확한 포화수 분포 예측이 가능해질 수 있다는 이점이 있다.

[0080]

DMFC는 작동하면서 발생하는 열에 의해 온도가 증가하게 되며, 이 증가된 온도에 영향으로 DMFC 물질 전달 능력이 증가하게 되어 DMFC 효율을 증가시키는 반면에 DMFC의 연료인 MeOH는 반응속도가 느려 MeOH의 크로스오버 또한 증가함으로써 DMFC 효율이 반감된다.

[0081]

따라서, 본 발명의 1차원 비 정상 및 비 등온 수치코드를 기반으로 하는 직접메탄올 연료전지의 성능예측 방법은 시간에 따른 온도 변화를 확인하여 DMFC의 발생하는 현상과 성능을 예측할 수 있다.

[0082]

상기 본 발명의 내용은 도면에 도시된 실시 예를 참고로 설명되었으나 이는 예시적인 것에 불과하며, 본 기술 분야의 통상의 지식을 가진 자라면 이로부터 다양한 변형 및 균등한 타 실시예가 가능하다는 점을 이해할 것이다. 따라서 본 발명의 진정한 기술적 보호 범위는 첨부된 특허청구범위의 기술적 사상에 의해 정해져야 할 것이다.

부호의 설명

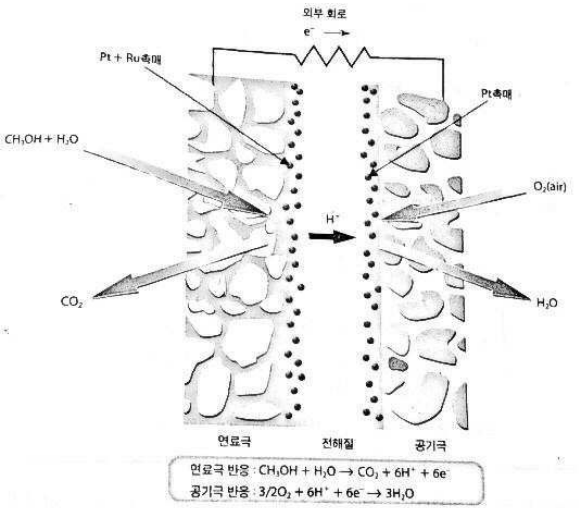
[0083]

S110: 제1 단계	S120: 제2 단계
S130: 제3 단계	S140: 제4 단계
S150: 제5 단계	S160: 제6 단계
S170 : 제7 단계	S180 : 제8 단계
S190 : 제9 단계	S200 : 제10 단계

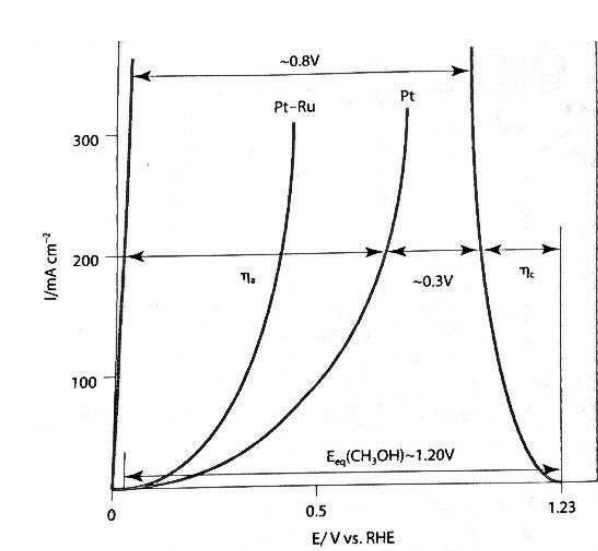
S210 : 제11 단계

도면

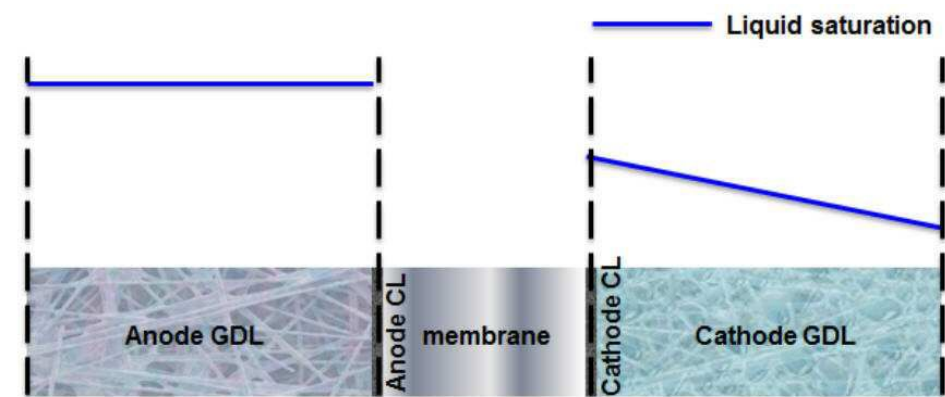
도면1



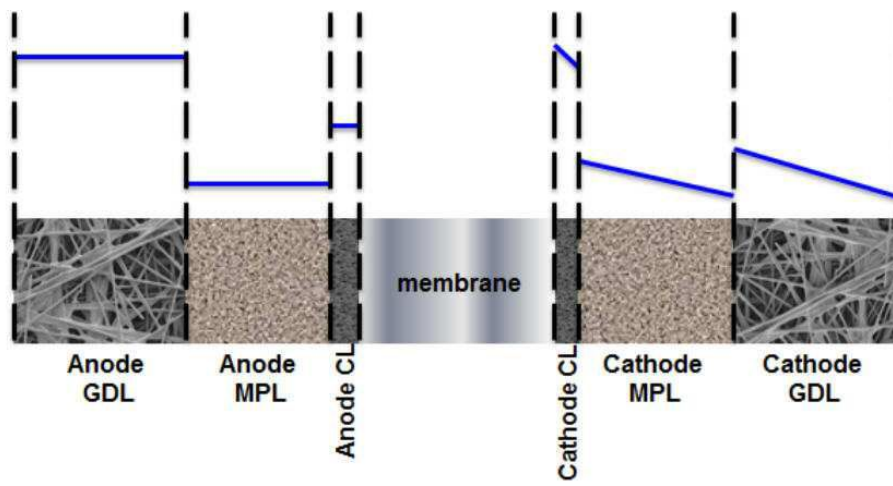
도면2



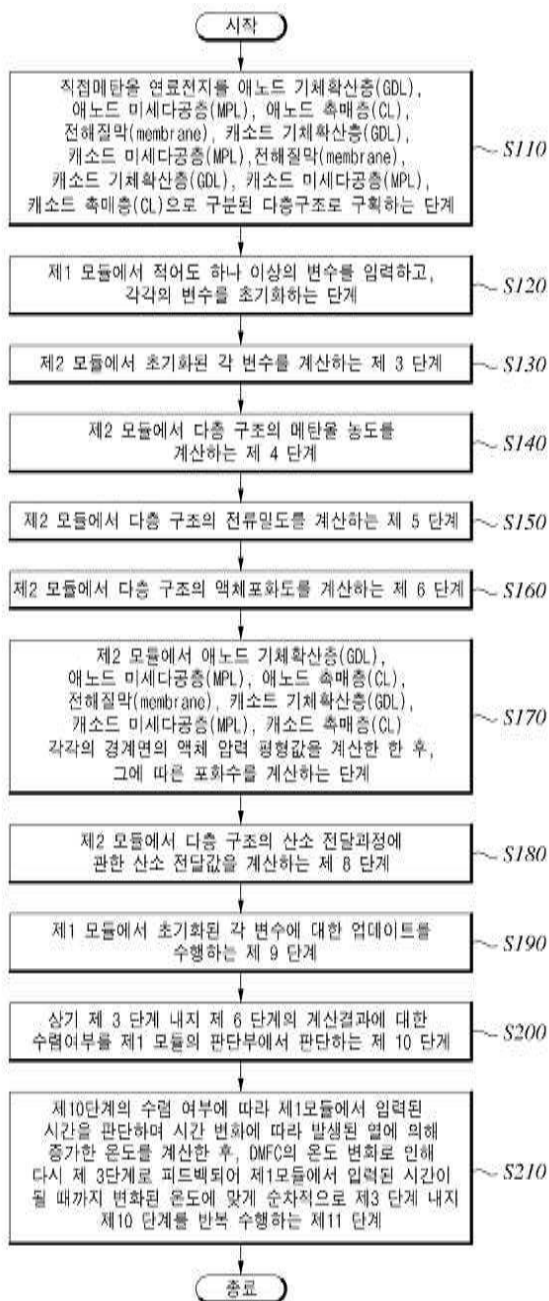
도면3



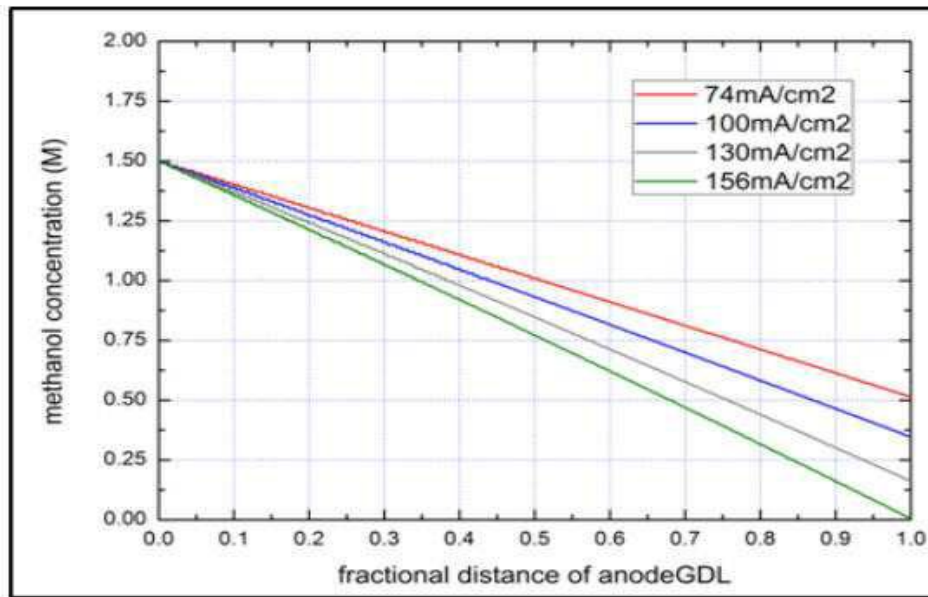
도면4



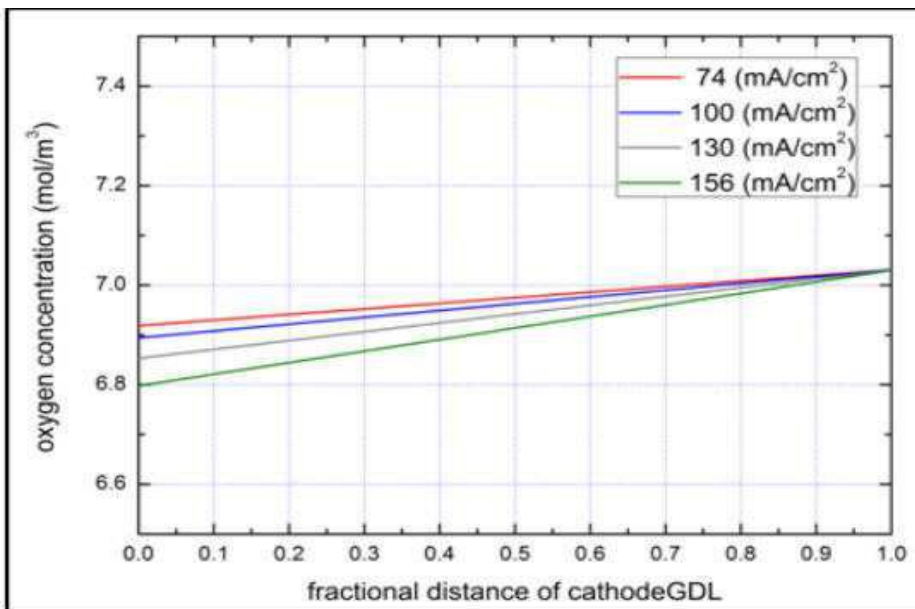
도면5



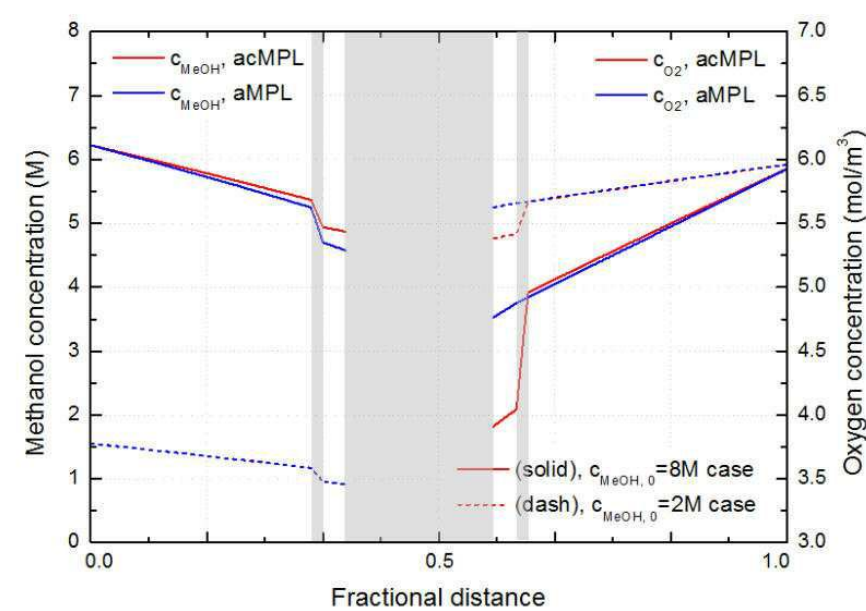
도면6



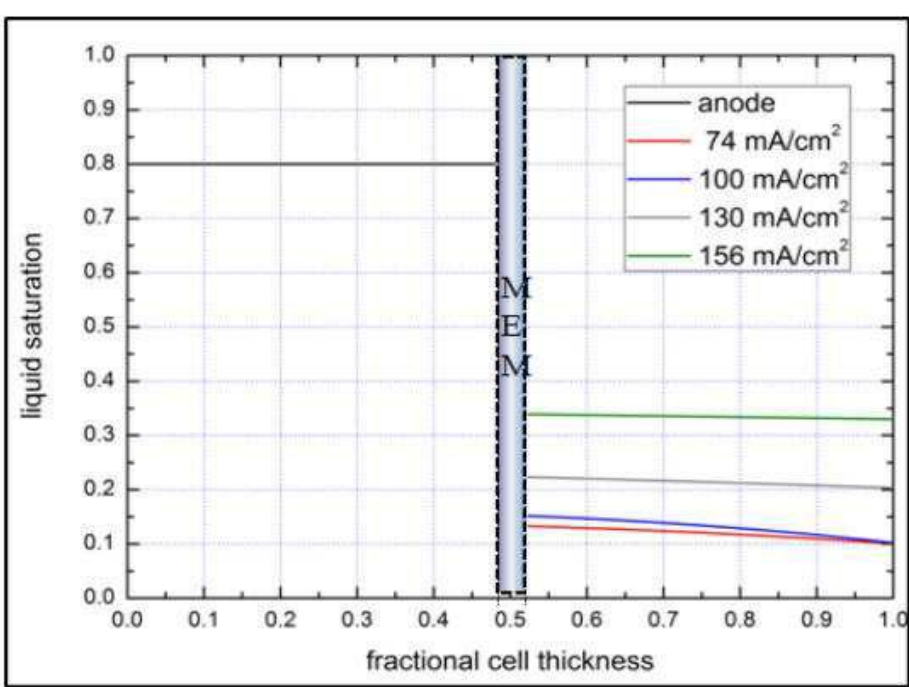
도면7



도면8



도면9



도면10

