



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2020-0119602
(43) 공개일자 2020년10월20일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
H01M 8/04298 (2016.01) G06F 17/11 (2006.01)
(52) CPC특허분류
H01M 8/04305 (2013.01)
G06F 17/11 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2019-0041991
(22) 출원일자 2019년04월10일
심사청구일자 없음

(71) 출원인
인하대학교 산학협력단
인천광역시 미추홀구 인하로 100(용현동, 인하대학교)
(72) 발명자
주현철
인천광역시 연수구 해돋이로 107, 5006호 (송도동, 송도 더샵 퍼스트월드)
이재승
경기도 오산시 운암로 89, 203동 802호 (오산동, 오산운암2단지 주공아파트)
(74) 대리인
특허법인태백

전체 청구항 수 : 총 1 항

(54) 발명의 명칭 키르히호프 변환을 이용한 상경계의 효율적 예측 방법

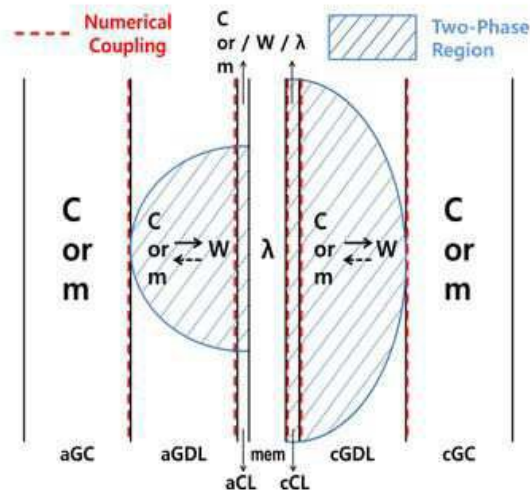
(57) 요약

본 발명은 키르히호프 변환을 이용한 상경계의 효율적 예측 방법에 대한 것이다.

본 발명에 따른 키르히호프 변환을 이용한 상경계의 효율적 예측 방법을 포함한다.

이와 같이 본 발명에 따르면, 현재까지 개발된 수많은 연료전지 이상(two-phase)모델이 가지고 있는 고질적인 문제점을 해결함으로써 연료전지 이상(two-phase) 시뮬레이션을 통한 실제적인 물 분포 예측을 가능하게 할 뿐만 아니라, 더 나아가 변수의 급격한 불연속성, phase boundary, 이동경계문제(moving boundary problem)를 갖는 다양한 분야의 전산 해석에도 응용될 수 있다.

대표도 - 도1



이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호	1415159317
부처명	산업통상자원부
과제관리(전문)기관명	한국에너지기술평가원
연구사업명	신재생에너지핵심기술개발
연구과제명 (2차년도)	고분자연료전지 시스템의 내구성 향상을 위한 스마트 고장진단 및 처리기술 개발
기 여 율	1/1
과제수행기관명	한국에너지기술연구원
연구기간	2018.07.01 ~ 2019.04.30

명세서

청구범위

청구항 1

키르히호프 변환(Kirchhoff transformation)을 이용한 상경계의 효율적 예측 방법.

발명의 설명

기술 분야

- [0001] 본 발명은 키르히호프 변환을 이용한 균일하고 성긴(coarse) 수치도메인 격자상에서 상경계의 효율적 예측 방법에 관한 것으로서, 더욱 상세하게는 키르히호프 변환(Kirchhoff transformation)을 이용하여 연료전지 이상(two-phase) 시뮬레이션을 통한 실질적인 물 분포 예측을 가능하게 하는 키르히호프 변환을 이용한 상경계의 효율적 예측 방법에 관한 것이다.

배경 기술

- [0002] 연료전지 주요 컴포넌트들의 소재 및 디자인 최적화연구를 좀 더 체계적으로 수행하기 위해서, 연료전지 작동 시 발생하는 물리적 현상들과 복잡한 물 및 열 전달 메커니즘을 여러 가지 실험기법들을 이용해 측정하고, 이를 바탕으로 연료전지 성능 및 내구성 예측 모델을 개발하여 해석 및 최적화 시뮬레이션 수행하는, 즉 이론연구를 병행하는 과정이 반드시 필요하다.
- [0003] 이러한 근본에 바탕을 둔 체계적인 연구가 고효율 고성능 연료전지를 개발하기 위한 독자적인 기술을 확보하는데 가장 중요한 핵심 요소가 될 것이며 연료전지 핵심부품 관련 해외의 독점 공급 업체들의 영향력에서 벗어 날 수 있는 원동력이 될 것이다.
- [0004] 특히, 연료전지의 저 가습운전(low-humidity operation)은 플러딩을 최소화하고 BOP(Blance of Plant)의 부담을 덜어주기 위해 실제 연료전지 시스템에서 주로 사용되고 있는 작동조건이지만, 저가습조건에서 운전 시 연료전지의 반응가스들은 단상(single-phase)에서 이상(two-phase) 유동으로의 변이(transition)가 반드시 일어나게 되기 때문에 연료전지 모델 시뮬레이션을 통한 이상 유동으로의 변이의 정확한 예측은 연료전지 성능 및 내구성 향상이라는 연료전지 물관리의 궁극적인 목표를 수행하기 위한 필수조건이다.
- [0005] 하지만 상경계의 예측은 수치적으로 많은 어려움을 내포하고 있다. 즉, 단상지역과 이상지역의 경계면(phase-boundary)에 '수 order of magnitude'의 불연속성(discontinuity)이 존재하는데, 이러한 급격한 확산계수의 불연속성은 이상(two-phase) CFD 모델 시뮬레이션을 통해 근을 찾는 과정에서 oscillation을 유발하며 수렴을 막을 뿐만 아니라, phase-boundary 주변에 매우 조밀한 격자를 요구한다.
- [0006] 또한, 상경계 면의 위치는 연료전지의 작동 변수 및 디자인에 따라 변하므로 연료전지 수치도메인 격자를 상경계 부근에서 선택적으로 조밀하게 만들 수 없으며 고정되고 균일한 격자 상에서 상경계 물 분포를 성공적으로 예측해야 한다. 이와 같은 연료전지 시뮬레이션에서 이상 유동(two-phase flow)의 상경계 예측 문제는 전산유체역학(Computational Fluid Dynamics, CFD)분야에서 이동경계문제(moving boundary problem)와 같은 범주에 속한다고 말할 수 있다.
- [0007] 그러므로 효율적인 열 및 물 관리를 위한 연료전지 주요 컴포넌트(component)들의 소재/디자인 최적화에 필요한 연료전지 전산모사는 플러딩(flooding)이 예측 가능한 이상(two-phase)모델링이 필수적이다.
- [0008] 본 발명의 배경이 되는 기술은 대한민국 등록특허공보 제10-1584728호(2016. 01. 21. 공고)에 개시되어 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

- [0009] 본 발명이 이루고자 하는 기술적 과제는 키르히호프 변환(Kirchhoff transformation)을 이용하여 연료전지 이상(two-phase) 시뮬레이션을 통한 실질적인 물 분포 예측을 가능하게 하는 키르히호프 변환을 이용한 상경계의 효

유효적 예측 방법을 제공하기 위한 것이다.

과제의 해결 수단

[0010] 이러한 기술적 과제를 이루기 위한 본 발명의 실시예에 따른 키르히호프 변환을 이용한 상경계의 효율적 예측 방법을 포함한다.

발명의 효과

[0011] 이와 같이 본 발명에 따르면, 현재까지 개발된 수많은 연료전지 이상(two-phase)모델이 가지고 있는 고질적인 문제점을 해결함으로써 연료전지 이상(two-phase) 시뮬레이션을 통한 실제적인 물 분포 예측을 가능하게 할 뿐만 아니라, 더 나아가 변수의 급격한 불연속성, phase boundary, 이동경계문제(moving boundary problem)를 갖는 다양한 분야의 전산 해석에도 응용될 수 있다.

[0012] 또한 본 발명에 따르면, 효율적인 물관리가 필요한 다양한 형태의 저온형 연료전지들, 즉 자동차용 고분자전해질연료전지, 개질가스를 이용한 주거용 연료전지, 메탄올을 직접 사용하는 휴대용 직접메탄올연료전지 핵심부품 소재, 디자인 및 작동변수 최적화를 위해 직접적으로 사용될 수 있다.

[0013] 또한 본 발명에 따르면, 기계, 화공, 환경 등 다양한 시스템의 고 정밀 해석 및 평가를 통한 효율적인 설계 자료를 제공할 수 있으며 다 학제간의 복합기술로 인한 학문 발달에 기여 할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0014] 도 1은 본 발명의 실시예에 따른 키르히호프 법칙을 적용한 연료전지 수치 도메인을 나타낸 것이다.

도 2는 본 발명의 실시예에 따른 3차원 연료전지 CFD 모델 지배식과 생성항을 나타낸 것이다.

도 3은 본 발명의 실시예에 따른 W-equation 및 키르히호프 변환 유도에서 γ 와 W 사이의 관계식을 나타낸 그래프이다.

도 4는 본 발명의 실시예에 따른 인버스 키르히호프 변환 방법론 유도에서 $D_{cap}(s)$ 그래프를 나타낸 것이다.

도 5 및 도 6은 본 발명의 실시예에 따른 $W_{s,poly}(s, \nu^g, \nu^l)$ 와 s_i vs $W_{s,i}$ 그래프를 각각 나타낸 것이다.

도 7은 본 발명의 실시예에 따른 가스 채널과 확산층 경계에서 수치 격자를 나타낸 것이다.

도 8은 본 발명의 실시예에 따른 증발전선의 개략도를 나타낸 것이다.

도 9는 본 발명의 실시예에 따른 증발전선에서 발생하는 얇은 이상역역의 개략도이다.

도 10은 본 발명의 실시예에 따른 증발전선영역의 공기극 채널과 확산층 경계에서 수치 격자를 나타낸 도면이다.

도 11은 본 발명의 실시예에 따른 공기극 확산층과 미세다공층 경계에서 수치 격자를 나타낸 도면이다.

도 12 내지 도 17은 본 발명의 실시예에 따른 half-cell 수치도메인에서 시뮬레이션 결과를 나타낸 도면이다.

도 18 내지 도 23은 본 발명의 실시예에 따른 모세관 확산계수가 액체포화도에 의해 변할 때, 물 양의 영향을 나타낸 시뮬레이션 결과이다.

도 24 내지 도 28은 본 발명의 실시예에 따른 3차원 공기극 half-cell 모델을 적용하여 모세관 확산계수가 액체포화도에 의해 계산될 때, 액체포화도 및 공기농도 분포를 나타낸 시뮬레이션 결과이다.

도 29 내지 도 34는 본 발명의 실시예에 따른 캐소드 half-cell 모델을 적용하여 모세관 확산계수가 액체포화도에 의해 변하고 MPL 모델을 적용하였을 때, 캐소드 입구의 상대습도의 영향을 나타낸 시뮬레이션 결과이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0015] 이하 첨부된 도면을 참조하여 본 발명에 따른 바람직한 실시예를 상세히 설명하기로 한다. 이 과정에서 도면에 도시된 선들의 두께나 구성요소의 크기 등은 설명의 명료성과 편의상 과장되게 도시되어 있을 수 있다.

[0016] 또한 후술되는 용어들은 본 발명에서의 기능을 고려하여 정의된 용어들로서, 이는 사용자, 운용자의 의도 또는 관례에 따라 달라질 수 있다. 그러므로 이러한 용어들에 대한 정의는 본 명세서 전반에 걸친 내용을 토대로 내려져야 할 것이다.

[0017] (1) W-equation 및 키르히호프 변환(Kirchhoff transformation) 유도

[0018] M^2 (Multi-phase Mixture)이론을 기반으로 한 이상(two-phase)연료전지 모델의 물 지배방정식은 다음의 수학적 1과 같이 질량분율, 'm' 또는 몰농도, 'C'의 형태로 표현된다.

수학적 1

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\gamma \rho u \vec{m}) &= \nabla \cdot (\rho \Gamma \nabla m) + S \quad \text{for mass fraction basis} \\ \nabla \cdot (M \gamma u \vec{C}) &= \nabla \cdot (M \Gamma \nabla C) + S \quad \text{for molar concentration basis} \\ \text{where } \Gamma &= \begin{cases} D^g & \text{for single-phase region} \\ D_{cap} & \text{for two-phase region} \end{cases} \end{aligned}$$

[0019]

[0020] 단상지역(single-phase region)에서의 가스확산계수, D^g 는 가스의 온도와 압력의 함수이며 물의 질량분율이나 몰농도에 무관한 반면, 캐필러리 확산계수, D_{cap} 은 다음의 수학적 2에 표현된 것처럼 물의 체적분율, 즉 liquid saturation(s) 값에 의해 크게 변한다.

수학적 2

$$D_{cap}(s) = \left(\frac{C_{sat} M}{\rho^l} - 1 \right) \left(\frac{1}{\rho^l - C_{sat} M} \right) \sigma \cos(\theta_c) (K\epsilon)^{1/2} \frac{\lambda^g \lambda^l}{\nu} \frac{dJ}{ds}$$

[0021]

[0022] 키르히호프 변환을 적용하기 위하여 다음의 수학적 3과 같이 키르히호프 변환의 변수(W)가 새롭게 정의되어야 한다.

수학적 3

$$W(C) = \frac{M}{\rho^g D^g} \int_0^C \Gamma(s) ds \quad \left[i.e., \nabla W = \frac{M}{\rho^g D^g} \Gamma \nabla C \right]$$

[0023]

[0024] 키르히호프 변환의 변수 W는 water flux의 0부터 주어진 몰농도 C까지의 적분값에 물의 분자량, M과 가스밀도와 확산계수의 곱, 즉 비의 곱으로서 표현된다.

[0025] 상기의 수학적 3을 이용하여 물 지배방정식을 변수 W로서 다시 표현하면 다음의 수학적 4와 같이 표현된다.

수학적 4

$$\nabla \cdot (\gamma_W \rho u \vec{W}) = \nabla \cdot (\rho^g D^g \nabla W) + S$$

[0026]

[0027] 상기의 수학적 4에서 변수 'W' 관련 확산항의 확산계수로서 크기는 물의 몰농도 C의 변화에 대해서 대략 10-5 m²/s로 일정하다. 그러므로 수학적 1의 변수 'm' 또는 'C'의 확산계수와 비교할 때 확산계수의 불연속성 문제가 키르히호프 법칙을 도입함으로써 해결되었음을 알 수 있다.

[0028] 상기의 수학적 4와 수학적 1의 대류항을 변환하기 위하여 다음의 수학적 5와 같이 정의될 수 있다.

수학식 5

$$\gamma_{II}(s) = \frac{M_w \gamma_c(s) C(s)}{\rho(s) W(s)}$$

[0029]

[0030] 단상영역 ($C \leq C_{sat}$)에서 $\gamma_{II} = 1.0$ 이며, 이상영역 ($C > C_{sat}$)에서 γ_{II} 는 1과 0.2 사이에서 도 3과 같이 부드럽게(smooth) 변한다. 이때 γ_{II} 가 1보다 작기 때문에 변환된 식에서 확산항이 지배적이며, 따라서 수치적으로 계산이 수행되기 용이하다.

[0031] (2) 인버스 키르히호프 변환(inverse Kirchhoff transformation) 방법론 유도

[0032] 변수 W 로 표현된 상기의 수학식 4는 수치적으로 근이 W 의 형태로 구해지면 인버스 키르히호프 법칙을 적용하여 계산된 W 로부터 물리적으로 의미 있는 변수인 m (mass fraction) 또는 C (molar concentration)로 변환해야 한다.

[0033] 상기 수학식 1에 나타난바와 같이 단상지역(single-phase region)에서 Γ 는 liquid saturation, s 에 무관한 가스확산계수, D^g 이므로 상기 수학식 3을 이용하면, 적분항이 쉽게 적분되며 결과적으로 W 는 물의 질량분율이 상기 수학식 5와 같이 표현되며, 수학식 5를 이용하여 인버스 키르히호프 변환을 취하면, 다음의 수학식 6 및 7과 같이 주어진 W 에 대한 C 값이 쉽게 얻어진다.

수학식 6

$$W(C) = \begin{cases} \frac{M_w C}{\rho^g} & \text{if } C \leq C_{sat} \\ \frac{M_w C_{sat}}{\rho^g} + \frac{M_w}{\rho^g} \frac{D_{cap}}{D_{eff}^g} (C - C_{sat}) & \text{if } C > C_{sat} \end{cases}$$

[0034]

수학식 7

$$C = \begin{cases} \frac{\rho^g W}{M} & \text{if } W \leq W_{sat} = \frac{M}{\rho^g} C_{sat} \\ C_{sat} \frac{\rho^g}{M} \frac{W - W_{sat}}{D_{cap}/D_{eff}^g} & \text{if } W > W_{sat} = \frac{M}{\rho^g} C_{sat} \end{cases}$$

[0035]

[0036] 이상 지역(two-phase region)에서 Γ 는 liquid saturation, s 의 함수인 캐필러리 확산계수, D_{cap} 이기 때문에 확산계수가 단상지역의 경우처럼 적분항 밖으로 나올 수 없다. 즉 계산된 수치도메인 격자상의 local W 값에 대해 상기 수학식 3의 적분항이 일일이 계산되어야 하며 다시 인버스 키르히호프 변환을 통하여 격자상의 local m 또는 C 값이 구해져야 한다.

[0037] 이러한 과정은 복잡하고 긴 수치계산 과정을 동반해야 함을 암시하므로 캐필러리 확산계수, D_{cap} 을 n 차 다항식으로 변환함으로써 인버스 키르히호프 변환 과정을 용이하게 하였다.

[0038] 즉 수학식 2의 캐필러리 확산계수, D_{cap} 은 다음의 수학식 8에 표현된 것처럼 liquid saturation dependent 항(fs)과 나머지 항(fp)으로 분리하였다.

수학식 8

$$D_{cap}(s) = \left[\left(\frac{C_{sat}M}{\rho^l} - 1 \right) \left(\frac{1}{\rho^l - C_{sat}M} \right) \sigma \cos(\theta_c) (K\epsilon)^{1/2} \right] \cdot \left[\frac{\lambda^q \lambda^l}{\nu} \frac{dJ}{ds} \right]$$

$$= f_p(\rho^l, C_{sat}, \theta_c, K, \epsilon) \cdot f_s(s, \nu^l, \nu^l)$$

[0039]

[0040] 다음의 표 1은 이상 유동(two-phase flow) 파라미터 식을 나타낸 것이다.

표 1

parameters	equation
Liquid Saturation	$s = \frac{C - C_{sat}}{\rho^l / M_w - C_{sat}}$
Relative Permeabilities	$k_r^l(s) = s^3$ $k_r^g(s) = (1 - s)^3$
Kinetic Viscosity	$\nu(s, \nu^g, \nu^l) = \frac{1}{(k_r^l / \nu^l) + (k_r^g / \nu^g)}$
Relative Mobilities	$\lambda^l(s, \nu^g, \nu^l) = \frac{k_r^l}{\nu^l} \nu(s, \nu^g, \nu^l)$ $\lambda^g(s, \nu^g, \nu^l) = 1 - \lambda^l(s, \nu^g, \nu^l)$
Leverett Function	$J(s) = \begin{cases} -1.263s^3 + 1.579s^2 - 0.786s + 0.47 & \text{if } \theta < 90^\circ \\ 1.263s^3 - 2.120s^2 + 1.417s & \text{if } \theta > 90^\circ \end{cases}$

[0041]

[0042] 상기 수학식 8을 상기 수학식 3에 대입하면, 다음의 수학식 9와 같이 정리할 수 있다.

수학식 9

$$W(C) = \frac{M}{\rho^l} C_{sat} + \frac{M}{\rho^l D^a} \int_{C_{sat}}^C D_{cap}(s) dC$$

$$= \frac{M}{\rho^l} C_{sat} + \frac{M}{\rho^l D^a} \left(\frac{\rho^l}{M} - C_{sat} \right) \int_0^s D_{cap}(s) ds$$

$$= \frac{M}{\rho^l} C_{sat} + \frac{M}{\rho^l D^a} \left(\frac{\rho^l}{M} - C_{sat} \right) f_p(\rho^l, C_{sat}, \theta_c, K, \epsilon) \int_0^s f_s(s, \nu^l, \nu^l) ds$$

[0043]

[0044] 여기서 적분항의 fs함수를 n차 다항식으로 interpolation을 취하면 다음의 수학식 10과 같이 정리할 수 있다.

수학식 10

$$\int_0^s f_s(s, \nu^l, \nu^l) ds = \int_0^s \sum_{i=0}^n (a_i s^i) ds = \sum_{i=0}^n \left(\frac{1}{i+1} a_i s^{i+1} \right)$$

[0045]

[0046] 결과적으로 적분항은 상기의 수학식 9와 같이 쉽게 계산될 수 있으며 W식이 다음의 수학식 11과 같이 얻어진다.

수학식 11

$$W(C) = \frac{M}{\rho^g} C_{sat} + \frac{M}{\rho^g D_{eff}^g} \left(\frac{\rho^l}{M} - C_{sat} \right) f_p(\rho^g, C_{sat}, \theta_c, K, \epsilon) \sum_{i=0}^n \left(\frac{1}{i+1} a_i s^{i+1} \right)$$

상기의 수학식 10을 이용하여 기준 W 값에 대해 s와 C 값을 lookup table 형태로 table화함으로써 쉽게 인버스 키르히호프 변환을 수행할 수 있다. 상기의 수학식 11을 다시 정리하면 다음의 수학식 12와 같이 나타낼 수 있다.

수학식 12

$$\begin{aligned} W(C) &= \frac{M}{\rho^g} C_{sat} + \frac{M}{\rho^g D_{eff}^g} \int_{C_{sat}}^C D_{cap}(c) dc \\ &= \frac{M}{\rho^g} C_{sat} + \frac{M}{\rho^g D_{eff}^g} \left(\frac{\rho^l}{M_w} - C_{sat} \right) f_p(\rho^g, C_{sat}, \theta_c, K, \epsilon) W_s(s, \nu^g, \nu^l) \\ \text{where, } W_s(s, \nu^g, \nu^l) &= \int_0^s f_s(t, \nu^g, \nu^l) dt \end{aligned}$$

ν^g 와 ν^l 을 상수로 가정하여 상기 수학식 12의 $F_s(t, \nu^g, \nu^l)$ 을 다항식으로 나타낼 수 있으며 이에 대한 적분식 또한 다음의 수학식 13 및 도 5와 같이 항식 형태로 표시된다.

수학식 13

$$\begin{aligned} f_{s, poly}(s, \nu^g, \nu^l) &= \sum_{n=0}^{15} a_n s^n \\ W_{s, poly}(s, \nu^g, \nu^l) &= \int_0^s f_{s, poly}(s, \nu^g, \nu^l) dt = \frac{1}{n+1} \sum_{n=0}^{15} a_n s^{n+1} \end{aligned}$$

상기의 수학식 13으로부터 W를 다시 정리하면 다음의 수학식 14와 같이 정리할 수 있다.

수학식 14

$$\begin{aligned} W_s(s, \nu^g, \nu^l) &= \frac{W - W_{sat}}{\frac{M_w}{\rho^g D_{eff}^g} \left(\frac{\rho^l}{M_w} - C_{sat} \right) f_p(\rho^g, C_{sat}, \theta_c, K, \epsilon)} \\ s &= \frac{W_{s,i+1} - W_s}{W_{s,i+1} - W_{s,i}} s_i + \frac{W_s - W_{s,i}}{W_{s,i+1} - W_{s,i}} s_{i+1} \end{aligned}$$

Bisection법과 Newton법을 상기 수학식 14에 적용하여 구간 사이에서 liquid saturation s를 구하면 도 6과 같다.

(3) 확산층에서의 키르히호프 변환 모델과 가스채널에서의 질량분율 식의 연결

확산층에서의 키르히호프 변환 모델은 물 전달식의 생성항인 다음의 수학식 15를 이용하여 가스채널에서의 질량분율 식과 연결하였고 도 7에 나타난 수치 격자에 적용하기 위해서 수학식 15를 이산화하여 다음의 수학식 16과

같이 나타내었다.

수학식 15

$$S = -\nabla \cdot [(\rho D)_{int} \nabla m_{H_2O}] + S_{int,dif}$$

[0057]

수학식 16

$$S = \left[-(\rho D)_{int} \frac{m_1 - W_2}{\Delta x} + M_W \Gamma_{int} \frac{C_1 - C_2}{\Delta x} \right] \frac{\Delta A}{\Delta V}$$

$$\text{where } (\rho D)_{int} = \frac{\rho_1 D_1 \rho_2 D_2 (\Delta x_1 + \Delta x_2)}{(\rho_1 D_1 \Delta x_2 + \rho_2 D_2 \Delta x_1)} \text{ and}$$

$$\Gamma_{int} = \frac{\Gamma_{int} (\Delta x_1 + \Delta x_2)}{(\Gamma_1 \Delta x_2 + \Gamma_2 \Delta x_1)}$$

[0058]

[0059] 유동방향에 따라 확산층에서 dry-to-wet transition의 상 경계를 condensation front와 evaporation front로 정의 하였다. 가스채널과 확산층 경계 근처의 evaporation front에서 발생하는 얇은 이상영역은 액체포화도가 약 10^{-5} 의 값을 갖기 때문에 수치적 문제를 발생시킨다. 따라서 다음과 같은 방법을 적용하여 얇은 이상영역을 예측할 수 있다. 다음의 수학식 17은 도 8에 도시된 바와 같이 얇은 이상영역이 존재하는 채널과 확산층 경계에서 질량 보존식을 나타내며, 과포화된 채널영역에서 가스상의 농도는 일정하므로 J_g^1 은 0의 값을 갖고, 얇은 이상영역에서 액체포화도 값이 낮기 때문에 J_1^2 은 0의 값을 갖게 되어, 다음의 수학식 18과 같이 나타낼 수 있다.

[0060] 그리고 J_1^1 은 계산하기 어렵지만, J_g^2 는 다음의 수학식 19와 같이 계산될 수 있다. 이와 같이 도출된 수학식 19를 이용하여 $C_1 > C_{sat}$ 고 $C_2 < C_{sat}$ 일 때, 얇은 이상영역의 생성향을 다음의 수학식 20에 나타내었고 이를 이용하여 확산층의 키르히호프 변환 모델과 가스채널에서의 질량분율 식에 연결하였다.

수학식 17

$$J_g^1 + J_1^1 = J_g^2 + J_1^2$$

[0061]

수학식 18

$$J_1^1 = J_g^2, J_g^1 = J_1^2 = 0$$

[0062]

수학식 19

$$J_1^1 = J_g^2 = M_{H_2O} \Gamma_2 \frac{C_{sat} - C_2}{\Delta x_2 / 2} \Delta A$$

[0063]

수학식 20

$$S = \left[-(\rho D)_{int} \frac{m_1 - W_2}{\Delta x} \right] \frac{\Delta A}{\Delta V} + J_s^* \frac{1}{\Delta V}$$

$$= \left[-(\rho D)_{int} \frac{m_1 - W_2}{\Delta x} + M_w \Gamma_2 \frac{C_{sat} - C_2}{\Delta x_2/2} \right] \frac{\Delta A}{\Delta V}$$

[0064]

[0065]

(4) Interfacial Coverage (IC) model

[0066]

가스채널과 확산층 경계에서 물 생성항인 상기 수학식 16에 Interfacial liquid coverage model을 적용하면 다음의 수학식 21과 같이 나타낼 수 있다.

수학식 21

$$S_{IC} = \left[-(\rho D)_{int} \frac{m_1 - W_2}{\Delta x} + M_w \Gamma_{int} \frac{C_{int} - C_2}{\Delta x_2/2} \right] \frac{\Delta A}{\Delta V}$$

where, $C_{int} = s_{int} \frac{\rho^j}{M_w} + (1 - s_{int}) C_{sat}$ and $\Gamma_{int} = (m_w^e - 1) \frac{\lambda^j \lambda^e \sigma \cos(\theta_c)}{\nu} (\epsilon K)^{1/2} \frac{dJ}{ds} \frac{1}{\rho^j - C_{sat} M_w}$

[0067]

[0068]

(5) 확산층/미세다공층 Saturation Jump model

[0069]

확산층과 미세다공층 경계에서는 액체포화도의 불연속성이 나타난다. 이를 해결하기 위해 확산층과 미세다공층 경계에서 생성항인 수학식 27이 적용되며, 도출하는 과정은 다음과 같다.

[0070]

확산층과 미세다공층 경계에서 모세관압력은 연속성을 나타내므로 다음의 수학식 22와 같이 나타낼 수 있다.

수학식 22

$$P_c = P^a - P^i = \sigma \cos(\theta) \left(\frac{\epsilon}{K} \right)^{1/2} J(s), \text{ where } J(s) = \begin{cases} -1.263s^3 + 1.579s^2 - 0.786s + 0.47 & \text{if } \theta < 90^\circ \\ 1.263s^3 - 2.120s^2 + 1.417s & \text{if } \theta > 90^\circ \end{cases}$$

$$P_{c,MPL} = P_{c,DM} = \sigma \cos(\theta_{MPL}) \left(\frac{\epsilon_{MPL}}{K_{MPL}} \right)^{1/2} J(s_{int,MPL}) = \sigma \cos(\theta_{DM}) \left(\frac{\epsilon_{DM}}{K_{DM}} \right)^{1/2} J(s_{int,DM})$$

$$J(s_{int,MPL}) = \frac{\cos(\theta_{DM})}{\cos(\theta_{MPL})} \left(\frac{\epsilon_{DM}}{\epsilon_{MPL}} \frac{K_{MPL}}{K_{DM}} \right)^{1/2} J(s_{int,DM}) = \beta J(s_{int,DM})$$

[0071]

[0072]

확산층과 미세다공층의 Leverett 함수식을 이용하여 확산층과 미세다공층 경계에서 $s_{int,MPL}$ 은 아래의 수학식 23과 같이 나타낼 수 있고 $s_{int,DM}$ 은 선형 외삽을 이용하여 아래의 수학식 24와 같이 나타낼 수 있다.

[0073]

그리고 물 농도는 액체포화도의 함수이기 때문에, 확산층과 미세다공층에서 물의 확산 계수는 아래의 수학식 25과 같다. 따라서 추가적인 확산층과 미세다공층 경계에서 물 생성항은 아래의 수학식 26과 같이 적용된다. 도 11에 나타난 수치격자에 적용하기 위해서 아래의 수학식 26은 이산화되어 아래의 수학식 27과 같이 나타내었다.

수학식 23

$$J(s) = as^3 + bs^2 + cs + d$$

$$s_{int,MPL} = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{\left(\frac{q}{2}\right)^2 + \left(\frac{p}{3}\right)^3}} + \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{\left(\frac{q}{2}\right)^2 + \left(\frac{p}{3}\right)^3}} - \frac{b}{3a}, \text{ where } p = -\frac{b^2}{3a^2} + \frac{c}{a}, q = \frac{2b^3}{27a^3} - \frac{bc}{3a^2} + \frac{d}{a} - \frac{\beta J(s_{int,DM})}{a}$$

[0074]

수학식 24

$$\frac{s_E - s_{int,DM}}{\Delta x_E/2} = \frac{s_{EE} - s_E}{\Delta x_E/2 + \Delta x_{EE}/2} \rightarrow s_{int,DM} = \frac{\Delta x_E}{\Delta x_E + \Delta x_{EE}} (s_E - s_{EE}) + s_E$$

수학식 25

$$\begin{aligned} N_{\omega, W} &= -D_{cap, W} \frac{C_{\omega}(s_{int, W}) - C_{\omega}(s_W)}{\Delta x_W/2} \\ &= N_{\omega, E} = -D_{cap, E} \frac{C_{\omega}(s_E) - C_{\omega}(s_{int, E})}{\Delta x_W/2} \\ &= \frac{C_{\omega}(s_E) - C_{\omega}(s_W) + C_{\omega}(s_{int, W}) - C_{\omega}(s_{int, E})}{\Delta x_W/2 D_{cap, W} + \Delta x_E/2 D_{cap, E}} \quad \text{where, } \Gamma_{int} = \Delta x \left(\frac{\Delta x_W}{2D_{cap, W}} + \frac{\Delta x_E}{2D_{cap, E}} \right)^{-1} \\ &= -\Gamma_{int} \frac{C_{\omega}(s_E) - C_{\omega}(s_W) + C_{\omega}(s_{int, W}) - C_{\omega}(s_{int, E})}{\Delta x_W/2 + \Delta x_E/2} = N_{mpi} \end{aligned}$$

수학식 26

$$S_{mpi} = \begin{cases} 0 & \text{for single phase} \\ -\nabla \cdot \left(\rho \frac{\rho^s D_{\omega}^{eff}}{\rho} \nabla W \right) + M_{\omega} \nabla \cdot (-N_{mpi}) & \text{for two phase} \end{cases}$$

수학식 27

$$S_{mpi} = \left[-(\rho D)_{int} \frac{W_E - W_W}{\Delta x} + M_{H_2O} \Gamma_{int} \frac{C_{\omega}(s_E) - C_{\omega}(s_W) + C_{\omega}(s_{int, W}) - C_{\omega}(s_{int, E})}{\Delta x} \right] \frac{\Delta A}{V}$$

$$\text{where, } (\rho D)_{int} = \frac{\rho_1^2 D_1 \rho_2^2 D_2 (\Delta x_1 + \Delta x_2)}{(\rho_1^2 D_1 \Delta x_2 + \rho_2^2 D_2 \Delta x_1)}$$

(6) 캐소드 half-cell 모델 시뮬레이션

상기에서 도출한 캐소드 half-cell model을 이용하여 다양한 연료전지 작동조건(전류밀도, 저가습 입구공기 조건 등)에서 시뮬레이션을 수행하여 단상 및 이상 경계면과 수치시뮬레이션과의 효율성/안정성과의 상관관계를 확인하였다. 시뮬레이션 케이스는 다음의 표 2에 나타내었다.

표 2

Cases	I (A/cm ²)	RH _c	Γ _c [m ² /s]	IC model	MPL model
2D Case 1	1.0	50%	Const (=8.2×10 ⁻¹⁰)	X	X
2D Case 2	1.5	50%	Const (=8.2×10 ⁻¹⁰)	X	X
2D Case 3	1.5	50%	Variable	X	X
2D Case 4	1.0	50%	Variable	X	X
3D Case 1	1.5	50%	Variable	X	X
2D Case 5	1.5	100%	Variable	O	O
2D Case 6	1.5	50%	Variable	O	O

2D Case 1, 2에서는 모세관 확산계수가 일정할 때, half-cell 수치도메인에서 도 12 내지 도 17와 같은 시뮬레

이션을 수행하였다.

- [0083] 여기서 도 12는 2D Case 1의 각 iteration 당 수렴도를 나타낸 것이고, 도 13은 2D Case 1에서 밀도분포를 나타낸 것이고, (a)는 이상 혼합, (b)는 가스를 의미하며, 도 14는 2D Case 1에서 (a) 확산층에서 액체포화도, (b) 가스채널에서 상대습도를 나타낸 것이다.
- [0084] 그리고 도 15는 2D Case 2의 각 iteration 당 수렴도를 나타낸 것이고, 도 16은 2D Case 2에서 밀도분포 (a) 이상 혼합, (b) 가스를 나타낸 것이고, 도 17은 2D Case 2에서 (a) 확산층에서 액체포화도, (b) 가스채널에서 상대습도를 나타낸 것이다.
- [0085] 도 14a와 도 17a의 액체포화도 분포에 나타난 것처럼, 주요 변수(밀도, 액체포화도, 상대습도)의 분포와 수렴경향을 살펴볼 때 가스확산층의 성긴 격자에서도 상경계(phase boundary)가 효과적으로 예측되었음을 알 수 있다.
- [0086] 또한 도 12 와 도 15에 나타난 것처럼 두 경우 모두 1200 iteration 이내에서 10^{-6} 이하로 수렴하였으며 이는 연구목표치(3000 iteration 이내)를 초과 달성한 결과이다.
- [0087] 2D Case 3, 4에서는 모세관 확산계수가 액체포화도에 의해 변할 때, 물 양의 영향을 나타내었다. 3000 iteration 이내에 10^{-6} 이하로 수렴하였으며 결과는 도 18 내지 도 23과 같다.
- [0088] 여기서, 도 18은 2D Case 3의 각 iteration 당 수렴도를 나타낸 것이고, 도 19는 2D Case 3에서 밀도분포 (a) 이상 혼합, (b) 가스를 나타낸 것이며, 도 20은 2D Case 3에서 (a) 확산층에서 액체포화도, (b) 가스채널에서 상대습도를 나타낸 것이다.
- [0089] 그리고 도 21은 2D Case 4의 각 iteration 당 수렴도를 나타낸 것이고, 도 22는 2D Case 4에서 밀도분포 (a) 이상 혼합, (b) 가스를 나타낸 것이고, 도 23은 2D Case 4에서 (a) 확산층에서 액체포화도, (b) 가스채널에서 상대습도를 나타낸 것이다.
- [0090] 실제 액체포화도의 함수로 변하는 모세관 확산계수가 사용될 때 수렴속도는 상수인 경우보다 느려졌지만 2200 iteration 내에서 10^{-6} 이하로 수렴하였으며, 이는 연구목표치(3000 iteration 이내)를 초과달성한 경우이다.
- [0091] 또한 가스확산층에서 상경계 또한 효과적으로 예측되었음을 도 23a, 도 23b를 통해서도 확인할 수 있다.
- [0092] 3D Case 1에서는 3차원 공기극 half-cell 모델을 적용하여 모세관 확산계수가 액체포화도에 의해 계산될 때, 액체포화도 및 공기농도 분포를 알아보았다. 1500 iteration 이내에 10^{-6} 이하로 수렴하였으며 결과는 도 24 내지 도 28과 같다.
- [0093] 여기서 도 24는 3D Case 1의 각 iteration 당 수렴도를 나타낸 것이고, 도 25는 3D Case 1에서 밀도분포 (a) 이상 혼합, (b) 가스를 나타낸 것이며, 도 26은 3D Case 1에서 액체포화도 (a) $z/L_{chan}=0.5$, (b) $z/L_{chan}=0.5$ 를 나타낸 것이고, 도 27은 3D Case 1에서 액체포화도 공기극 입구 기준 (a) $y/L=0.5$, (b) $y/L=0.9$ 를 나타낸 것이고, 도 28은 3D Case 1에서 산소농도 공기극 입구 기준 (a) $y/L=0.5$ (b) $y/L=0.9$ 를 나타낸 것이다.
- [0094] 2D Case 5, 6에서는 캐소드 half-cell 모델을 적용하여 모세관 확산계수가 액체포화도에 의해 변하고 MPL 모델을 적용하였을 때, 캐소드 입구의 상대습도의 영향을 나타내었다. 2000 iteration 이내에 10^{-6} 이하로 수렴하였으며 결과는 도 29 내지 도 34와 같다.
- [0095] 여기서 도 29는 2D Case 5의 각 iteration 당 수렴도를 나타낸 것이고, 도 30은 2D Case 5의 확산층에서 (a) 액체포화도 (b) W 를 나타낸 것이며, 도 31은 2D Case 5의 채널에서 상대습도를 나타낸 것이다.
- [0096] 그리고, 도 32는 2D Case 6의 각 iteration 당 수렴도를 나타낸 것이고, 도 33은 2D Case 6의 확산층에서 (a) 액체포화도 (b) W 를 나타낸 것이고, 도 34는 2D Case 6의 채널에서 상대습도를 나타낸 것이다.
- [0097] 상술한 바와 같이, 본 발명의 실시예에 따른 키르히호프 변환을 이용한 상경계의 효율적 예측 방법은 현재까지 개발된 수많은 연료전지 이상(two-phase)모델이 가지고 있는 고질적인 문제점을 해결함으로써 연료전지 이상(two-phase) 시뮬레이션을 통한 실제적인 물 분포 예측을 가능하게 할 뿐만 아니라, 더 나아가 변수의 급격한 불연속성, phase boundary, 이동경계문제(moving boundary problem)를 갖는 다양한 분야의 전산 해석에도 응용될 수 있다.
- [0098] 또한 본 발명의 실시예에 따르면, 효율적인 물관리가 필요한 다양한 형태의 저온형 연료전지들, 즉 자동차용 고분자전해질연료전지, 개질가스를 이용한 주거용 연료전지, 메탄올을 직접 사용하는 휴대용 직접메탄올연료전지

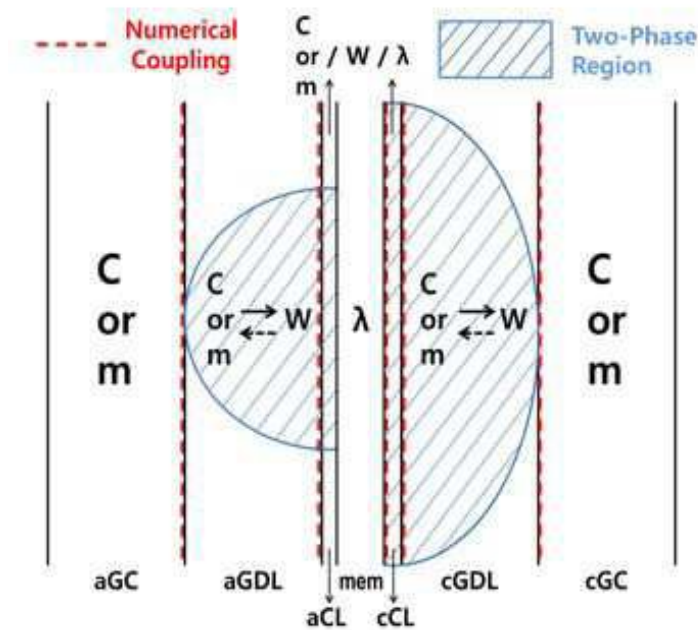
핵심부품 소재, 디자인 및 작동변수 최적화를 위해 직접적으로 사용될 수 있다.

[0099] 또한 본 발명의 실시예에 따르면, 기계, 화공, 환경 등 다양한 시스템의 고 정밀 해석 및 평가를 통한 효율적인 설계 자료를 제공할 수 있으며 다 학제간의 복합기술로 인한 학문 발달에 기여 할 수 있다.

[0100] 본 발명은 도면에 도시된 실시예를 참고로 하여 설명되었으나 이는 예시적인 것에 불과하며, 당해 기술이 속하는 분야에서 통상의 지식을 가진 자라면 이로부터 다양한 변형 및 균등한 타 실시예가 가능하다는 점을 이해할 것이다. 따라서 본 발명의 진정한 기술적 보호범위는 아래의 특허청구범위의 기술적 사상에 의하여 정해져야 할 것이다.

도면

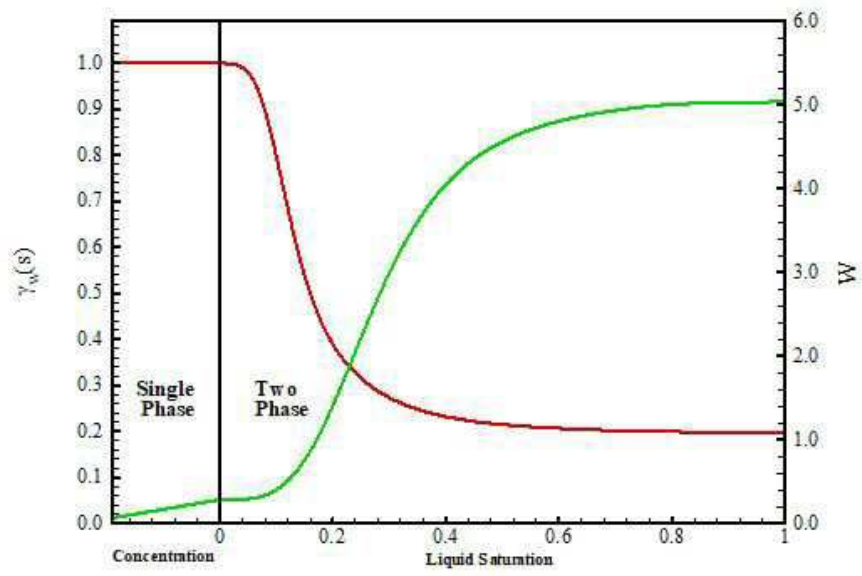
도면1



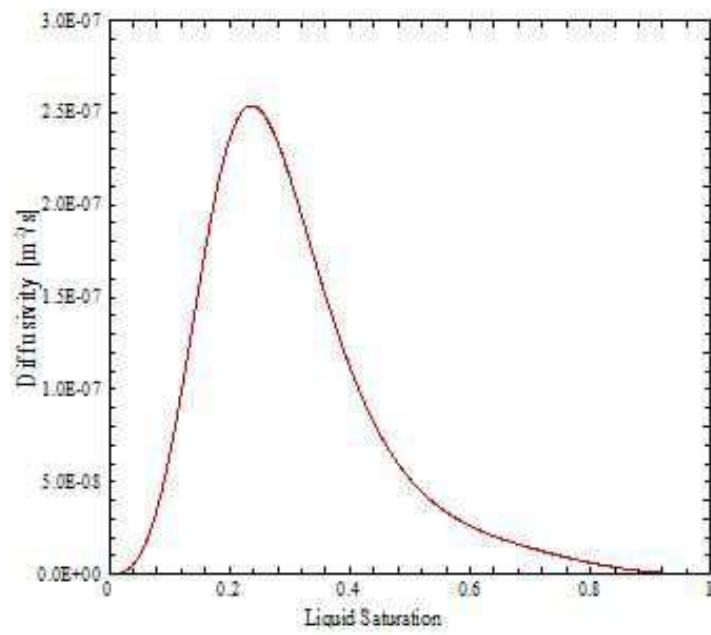
도면2

	Conservation Equations	Source Terms		
		Diffusion Layers	Catalyst Layers	Membrane
Mass	$\frac{\partial(\rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = S_m$		$S_m = \sum_k M_k S_k + M_w \nabla \cdot \left(D_w^{mem} \frac{\rho^{mem}}{EW} \nabla \lambda \right)$	
Momentum	$\frac{1}{c} \left[\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{1}{c} \nabla \cdot (\rho u \vec{u}) \right] = -\nabla p + \nabla \cdot \tau$	$S_u = -\frac{\mu}{K} \vec{u}$	$S_u = -\frac{\mu}{K} \vec{u}$	$\vec{u} = 0$
Species	$\frac{\partial(\rho m_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\gamma_k \rho m_k \vec{u}) = \nabla \cdot [\rho D_k^{eff} \nabla (m_k^c)] - \nabla \cdot [(m_w^i - m_w^o) \vec{j}] + M_k S_k$		$S_k = -\nabla \cdot \left(\frac{n_d}{F^2} i_g \right) - \frac{s_k j}{nF}$	$S_k = -\nabla \cdot \left(\frac{n_d}{F^2} i_g \right)$
Charge	$\nabla \cdot (k^{eff} \nabla \phi_k) + S_k = 0$ $\nabla \cdot (s^{eff} \nabla \phi_s) - S_s = 0$		$S_s = j$	
Heat	$\frac{\partial[(1-c)\rho^s h^s + c \sum_k s_k^o \rho^o h^o]}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u C_p^s T)$ $= \nabla \cdot (k^{eff} \nabla T) + \nabla \cdot (h_{ref}^o \rho^o \vec{u}) + S_T$		$S_T = j(n + T \frac{dU_0}{dT}) + \frac{i_g^2}{\kappa^{eff}}$	$S_T = \frac{c_p}{\kappa^{eff}}$
Electrochemical Reaction : $\sum_k s_k M_k = n e^-$ In PEM fuel cells, there are : (Anode) $H_2 - 2H^+ = 2e^-$ (Cathode) $2H_2O - O_2 - 4H^+ = 4e^-$		where	M_k = chemical formula of species k s_k = stoichiometry coefficient n = number of electrons transferred	

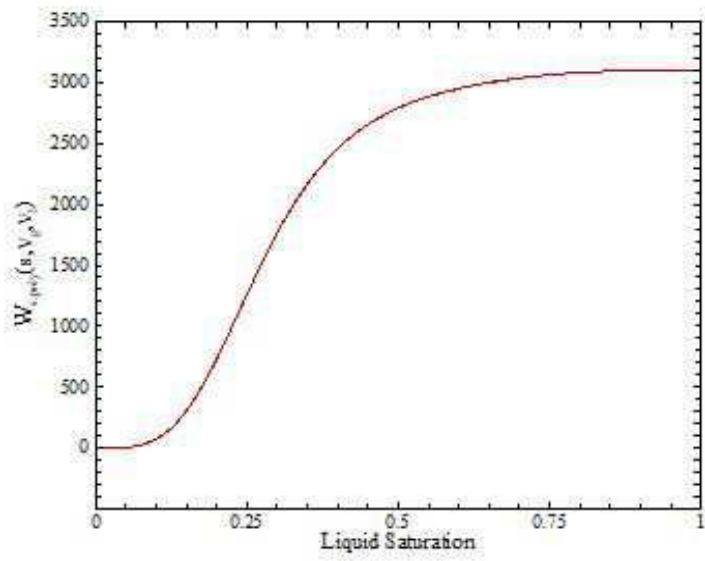
도면3



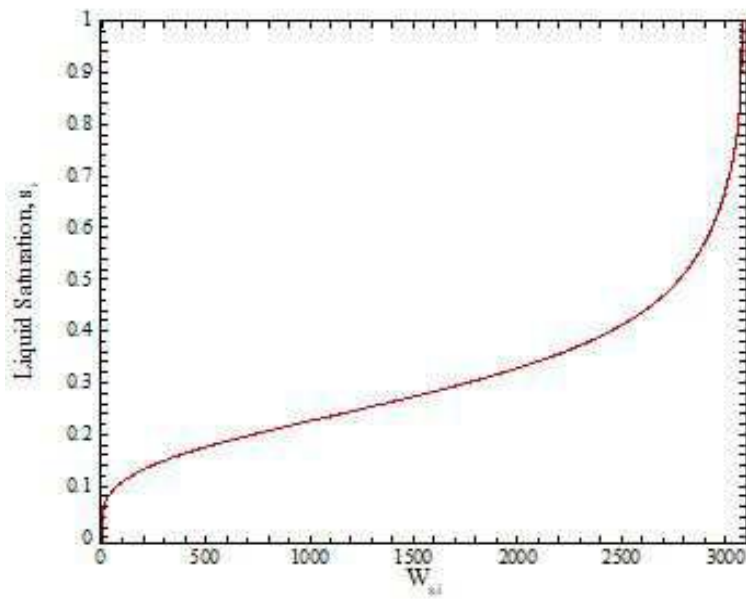
도면4



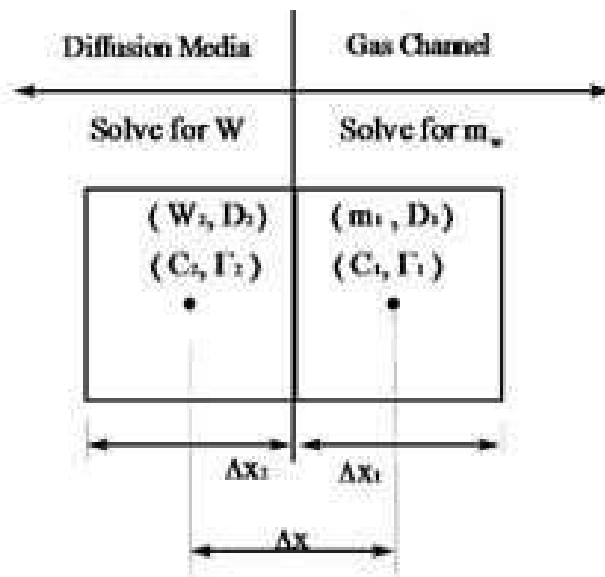
도면5



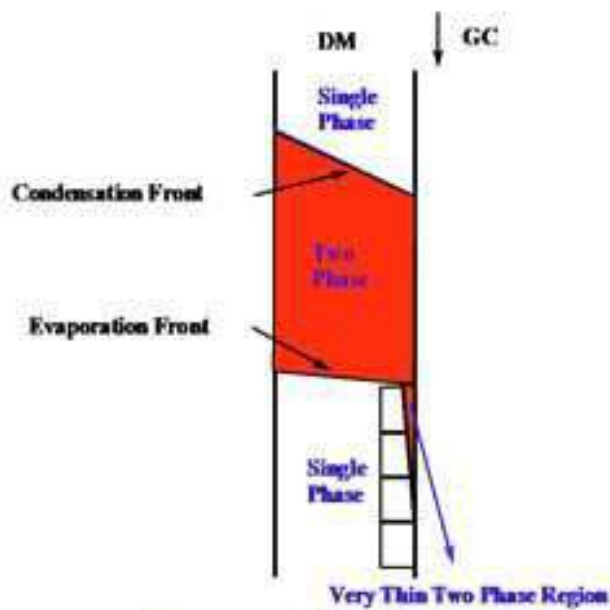
도면6



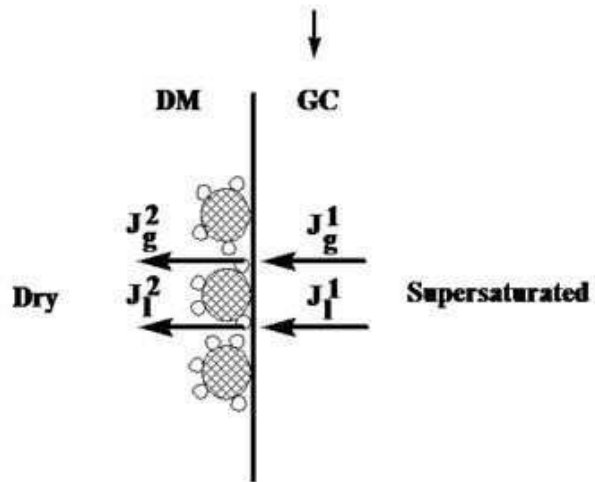
도면7



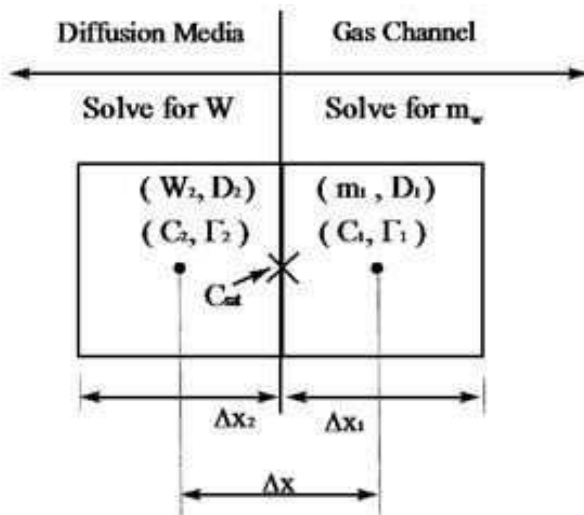
도면8



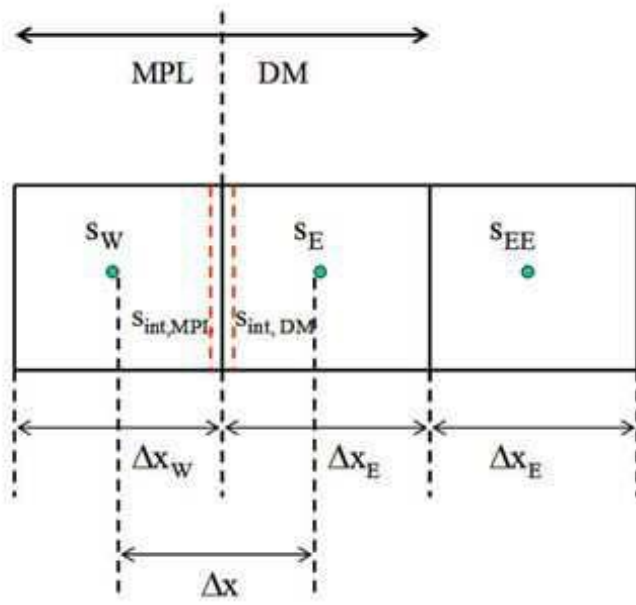
도면9



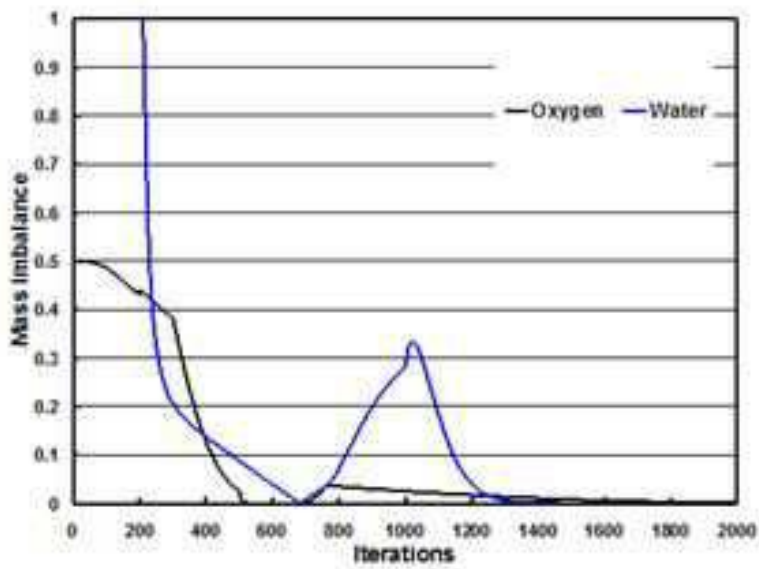
도면10



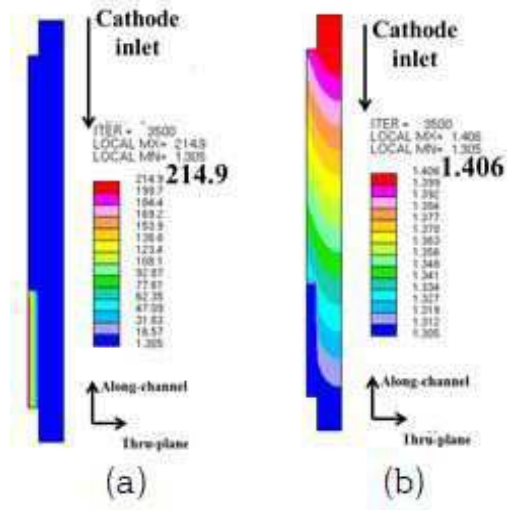
도면11



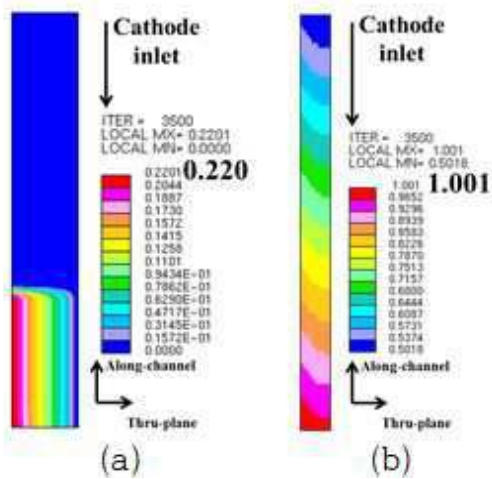
도면12



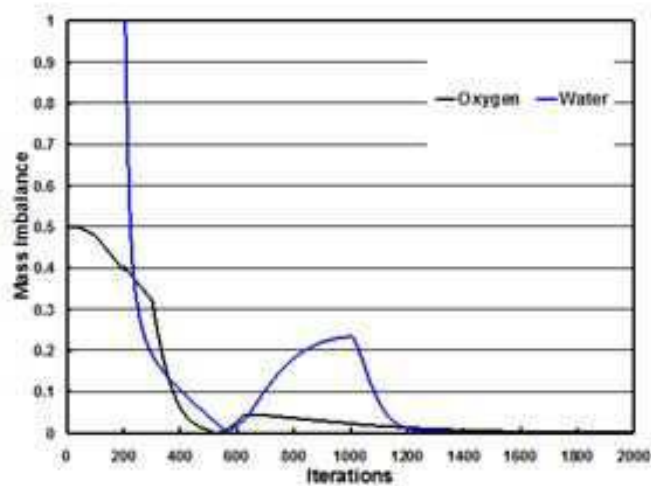
도면13



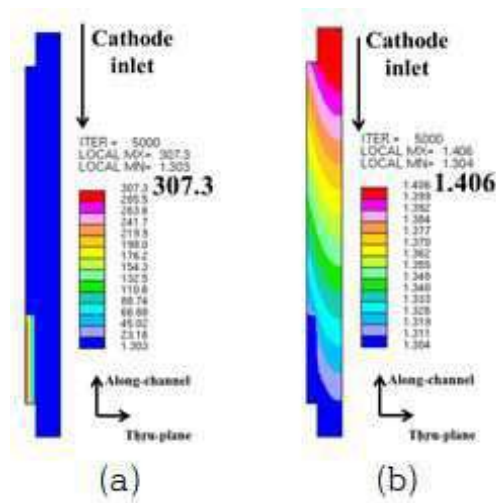
도면14



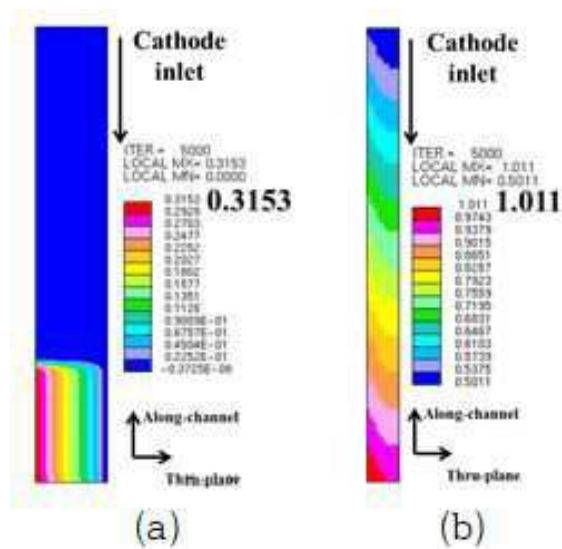
도면15



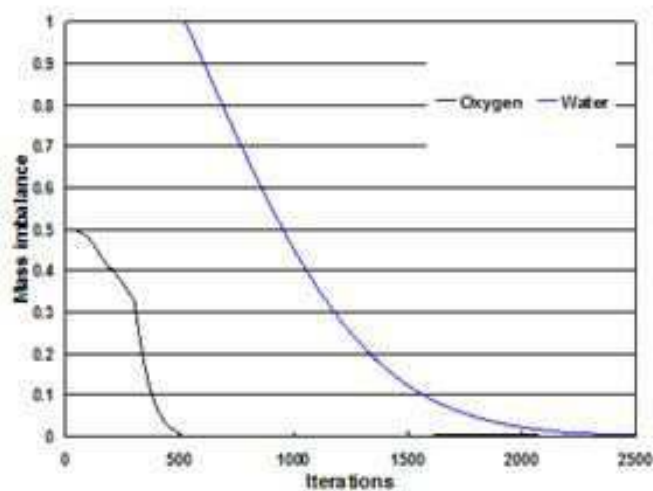
도면16



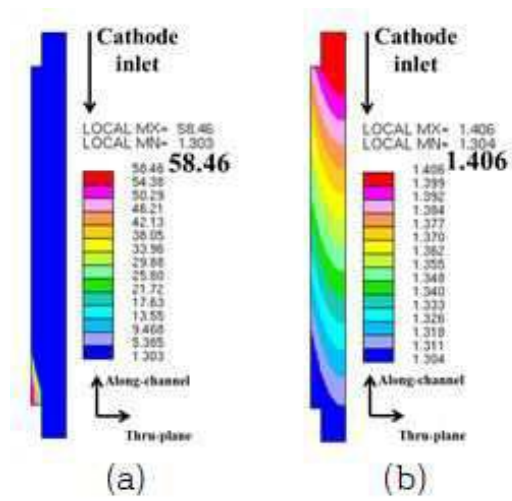
도면17



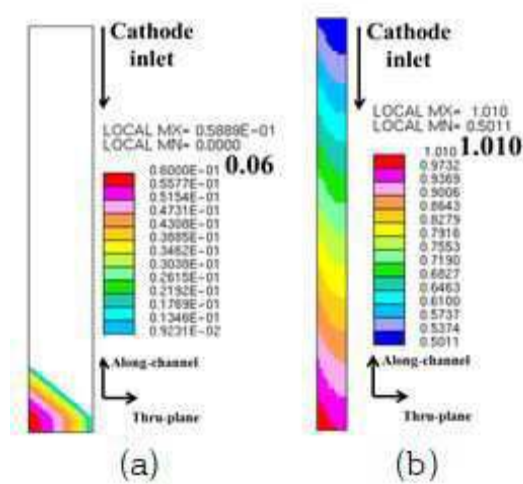
도면18



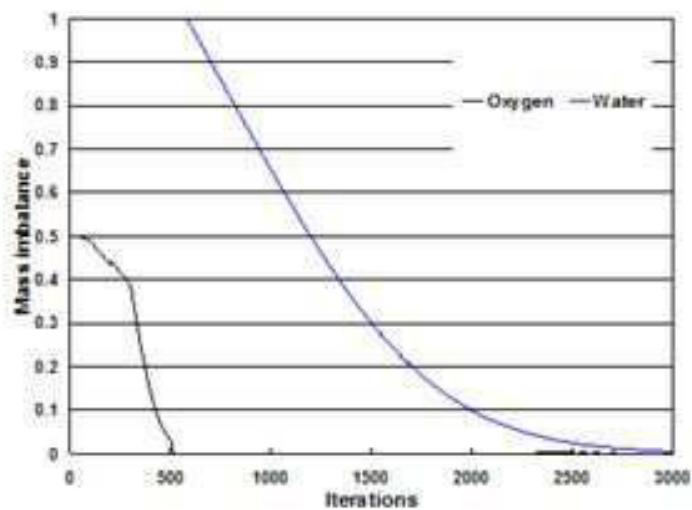
도면19



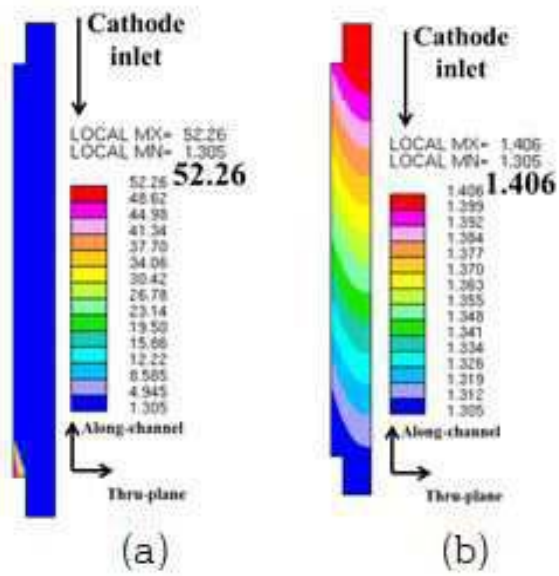
도면20



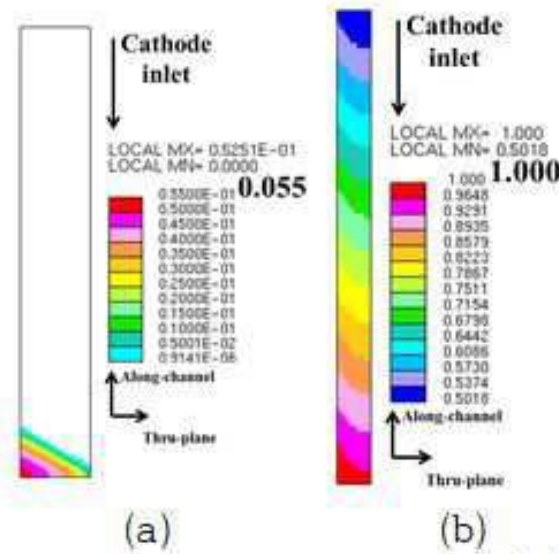
도면21



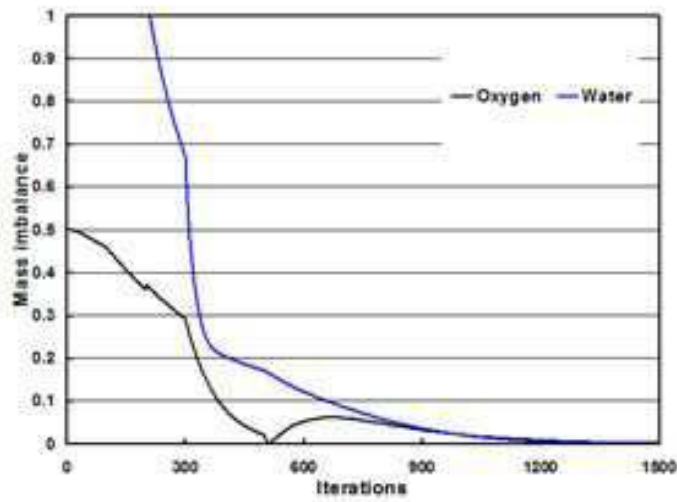
도면22



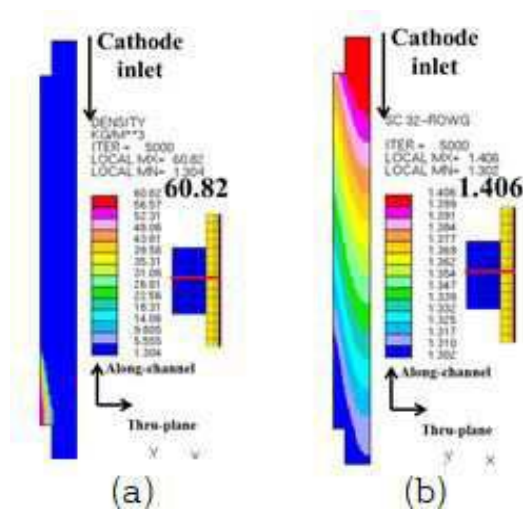
도면23



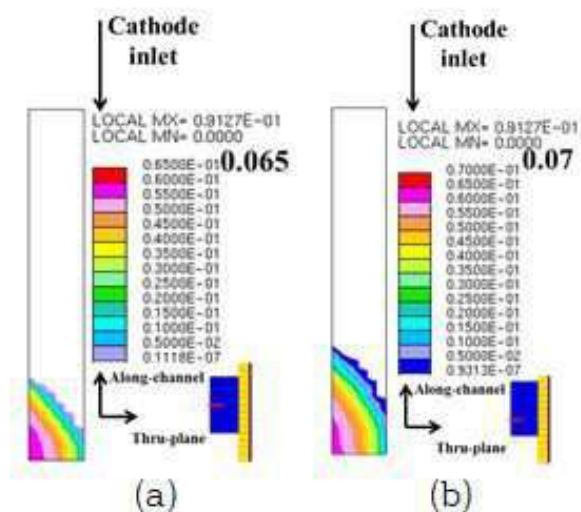
도면24



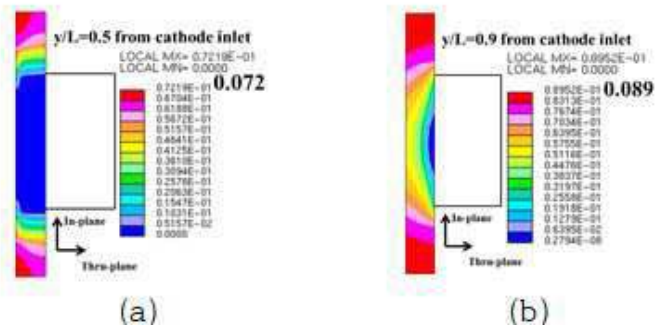
도면25



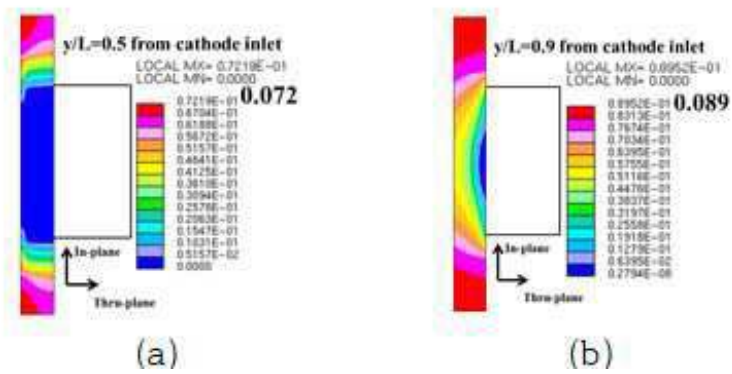
도면26



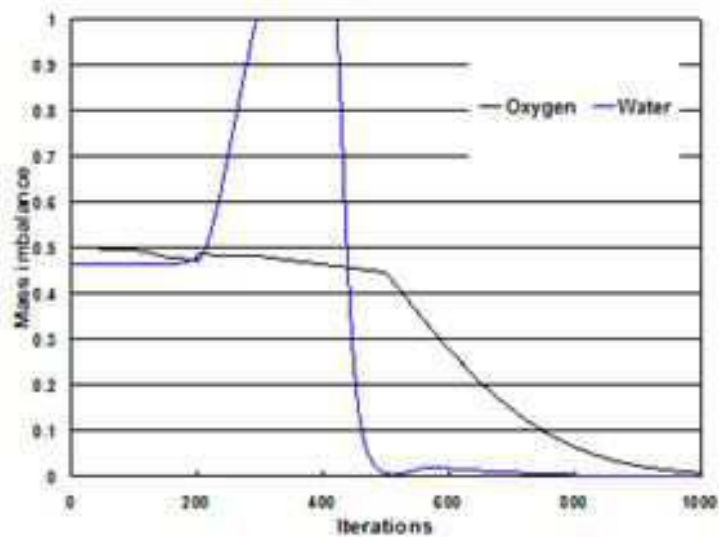
도면27



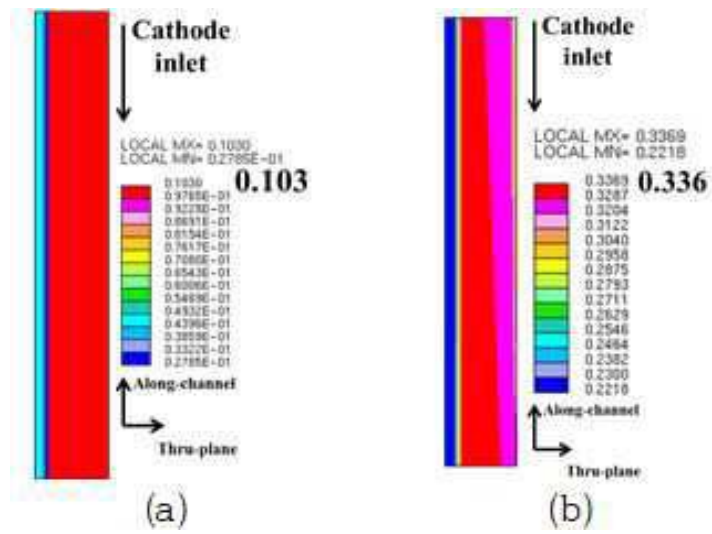
도면28



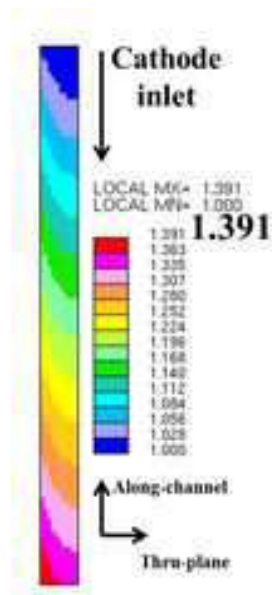
도면29



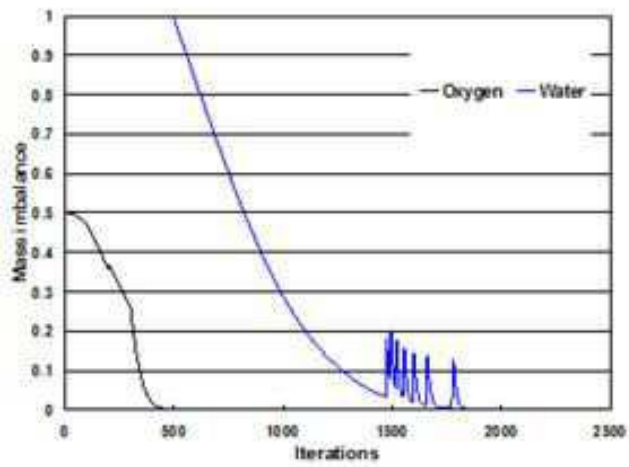
도면30



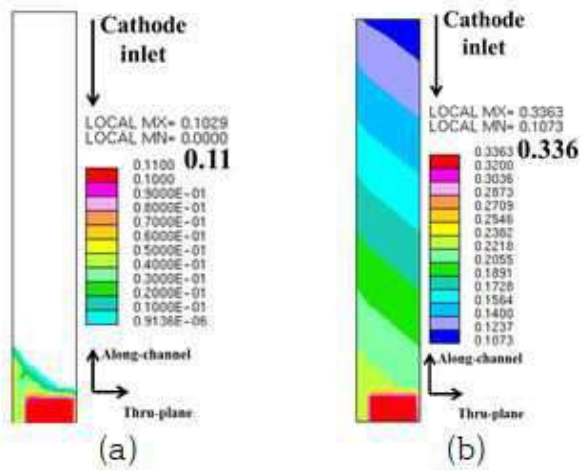
도면31



도면32



도면33



도면34

