

Multiscale modeling and simulation of direct methanol fuel cell

김홍성, 정일용, 문 일*

연세대학교

(idbioo@yonsei.ac.kr*)

본 연구에서는 직접메탄올연료전지(Direct Methanol Fuel Cell, DMFC)에 대한 3차원 모델링 및 모사를 수행하였다. CFD(Computational Fluid Dynamics) 모델링으로 이동현상을 3차원으로 해석함과 동시에 복잡한 비선형 대수방정식으로 표현되는 반응속도, 전기화학반응을 DAE(Differential & Algebraic Equation) solver로 계산하였다. 이렇게 본 연구에서 이용한 Multiscale 모델링 기법은 서로 다른 두 scale의 모델을 유기적으로 결합하여 모사 중간에 필요한 데이터 교환을 함으로써 정확한 모델링 및 전산모사 결과를 얻을 수 있다.

모델은 메탄올의 산화반응과 산소의 환원반응을 중심으로 MEA(Membrane Electrode Assembly)부분에서 물리·화학적, 전기적 현상 현상을 규명하고, 반응 메커니즘을 구성하였다. diffusion layer와 catalyst의 반응속도 및 전기화학반응을 수학적으로 모델링하였으며, MEA(Membrane Electrode Assembly)에서의 메탄올 crossover를 계산하도록 모델링하였다. DMFC의 운전조건은 대기압과 80°C로 가정하였으며 Tafel 방정식에서 사용되는 파라미터는 실험데이터를 통해 예측하였다. 본 연구에서 제시한 모델을 검증하기 위해 모사결과를 실험결과와 비교하였으며 잘 일치함을 알 수 있었다.