단위 용융탄산염 연료전지(MCFC) 내 가스유로의 수치모사

유민정, 김인구, 정귀영*, 남석우[1], 임태훈[1], 홍성안[1], 이충곤[2], 임희천[2]
홍익대학교, [1]KIST, [2]한국전력연구원
(gychung@hongik.ac.kr*)

Numerical studies of the gas channels in the molten carbonate fuel cell

min-jung, Yoo, in-gu, Kim, Gui-young, Chung*, seok-woo, Nam[1],
tae-hoon, Lim[1], sung-ahn, Hong[1] choong-gon, Lee[2], hee-chun, Lim[2]
Department of Chemical Engineering, Hongik University,
[1]KIST, [2]Korea Electronics
(gychung@hongik.ac.kr*)

1. 서론

MCFC의 실용화로서 분산형 전원 및 중앙 공급형 발전 목적으로 대형 MCFC 발전 시스템이 연구되고 있다. 그런데 기본 단위의 MCFC 대형화는 단위전지 전극 면적의 확대 및 단위전지의 적층을 통하여 이루어진다. 지금까지 단위 및 스택 전지의 성능 예측을 위한 연구가 진행되어 왔다. 전지의 치수나 반응조건들이 변화되었을 때의 전지의 성능을 예측함으로써 여러 가지 변수의 영향들을 직접 실험을 하지 않고도 예측 가능하였다. 그러나 가스유로 내에서 운동량수지로부터 계산될 수 있는 압력 분포나 농도분포를 얻는 가스 채널 내의 상세한 유체역학적 측면은 그다지 연구가 많이 이루어지지 않았다. 본 연구에서는 상용의 CFD(전산유체역학) 팩키지 프로그램인 Phoenics를 이용한 가스 채널의 수치모사를 시도하였다.

2. 실험방법

단순형태의 연료전지 수치모사에 사용된 변수 값들이 Table 1, 2에 있다. 일반적으로 단위전지의 수소 이용율(U_{H2})은 0.4이고, 적층전지에서의 효율은 0.75 정도이다. 따라서 본 단위 전지모델링에서, H_2의 이용율이 40%라고 가정하였다. 이때의 anode와 cathode에서의 다른 가스성분들의 이용율이 다음과 같이 계산되었다. anode에서 H_2의 입구 조성 0.68에서 40%가 이용되었으므로, 0.27이 소모되어 출구에서 H_2의 양은 0.41이 된다. 그리고 전기화학 반응계수의 비율대로 CO_2와 H_2O는 생성되어 그 양이 증가한 것을 고려하여 다시 몰조성을 계산한 것이 Table 2에 있다. 반면에 cathode에서는 CO_2와 O_2가 소모된다. anode의 수소 소모량에 대응하는 양(0.27)이 소모된다고 가정한 후, anode와 cathode의 몰유속의 비(250/850)로 조정하면 0.08(=0.27*250/850)이 소모량이 된다. CO_2와 O_2의 변화량을 고려하여 다시 계산한 출구 분율이 Table 2에 있다.

Table 1. Flow rates and the compositions of the cathode gas and the anode gas.

anode gas	Q = 250 (cm^3/hr)	v = 0.19 (m/s)
	compositions : H_2 = 0.68, CO_2 = 0.18, H_2O = 0.14	
cathode gas	Q = 850 (cm^3/hr)	v = 0.64 (m/s)
	compositions : O_2 = 0.15, CO_2 = 0.30, N_2 = 0.55	

Table 2. Values of the expected exit compositions of the anode and cathode gases in the unit fuel cell.

anode		cathode	
H_2	0.68 (1 - 0.4) / 1.27 = 0.32	CO_2	(0.3 - 0.08) / 0.88 = 0.25
CO_2	(0.18 + 0.27) / 1.27 = 0.36	O_2	(0.15 - 0.04) / 0.88 = 0.125
H_2O	(0.14 + 0.27) / 1.27 = 0.32	N_2	(0.55 - 0) / 0.88 = 0.625

3. 결과 및 고찰

3-1. 가스채널내의 조성분포

기준이 되는 운전조건에서 anode와 cathode에서의 조성분포를 나타낸 그래프가 Fig. 1 이다. anode에서는 조성이 각각 0.1정도씩 증가함을, cathode에서는 각각의 조성이 0.05씩 감소함을 알 수 있었다.

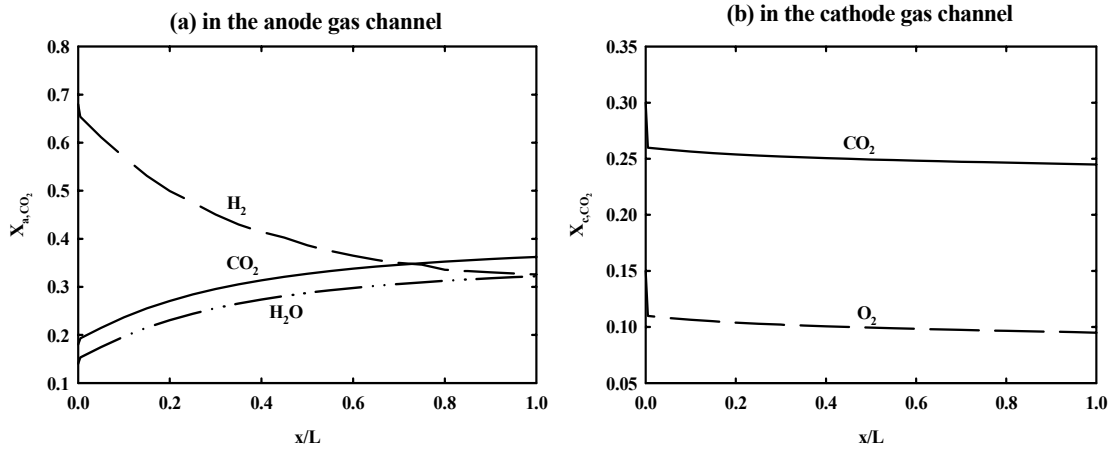

Fig. 1. Distributions of mole fraction of all gases at the reference conditions.

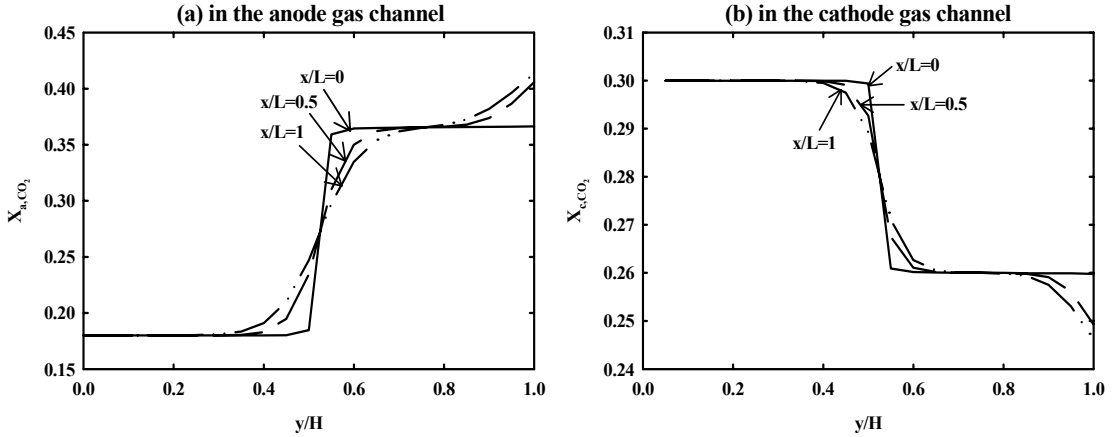

Fig. 2. Distributions of mole fraction of CO_2 along the height in the gas channel.

3-2. 채널높이에 따른 영향

cathode에서는 반응가스 진행방향으로 CO_2가 감소하고, anode에서는 증가하고 있다. Fig. 3은 표준상태에서 y-방향에 따른 속도의 변화를 나타낸 그래프이다. Fig. 4는 v가 일정할 때와 Q를 일정하게 했을 때 anode gas channel에서 나타나는 농도의 변화를 나타낸 그래프이다. v가 일정할 때 채널높이에 따른 결과가 Q가 일정할 때보다 큼을 알 수 있다.

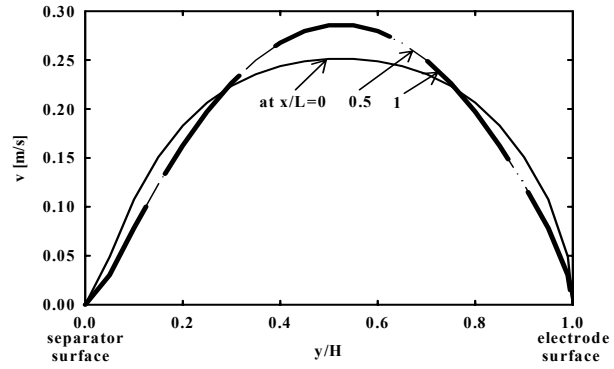

Fig. 3. The distributions of the velocity of anode gas along the y-direction.

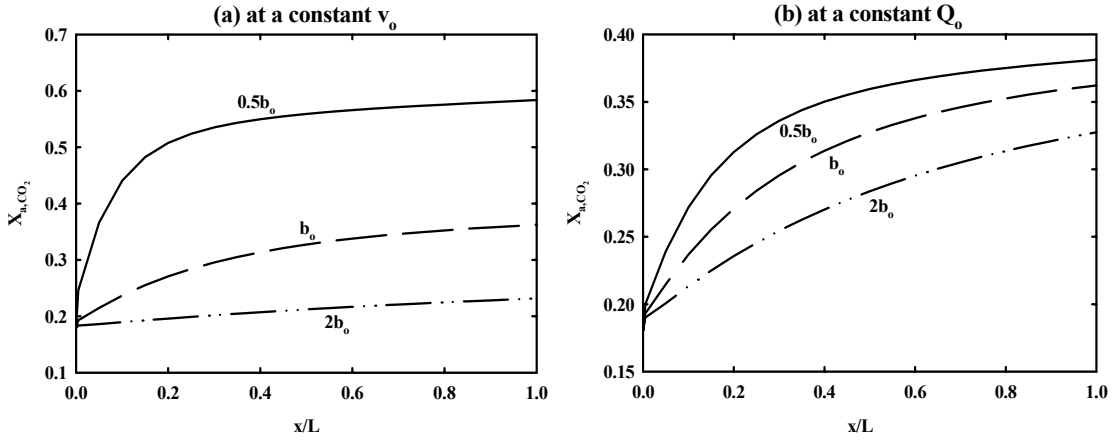

Fig. 4. Distributions of the mole fraction of CO_2 (a) in the anode gas channel at a constant v_o and (b) at a constant Q_o. b_o is the reference height of the gas channel, 0.17cm.

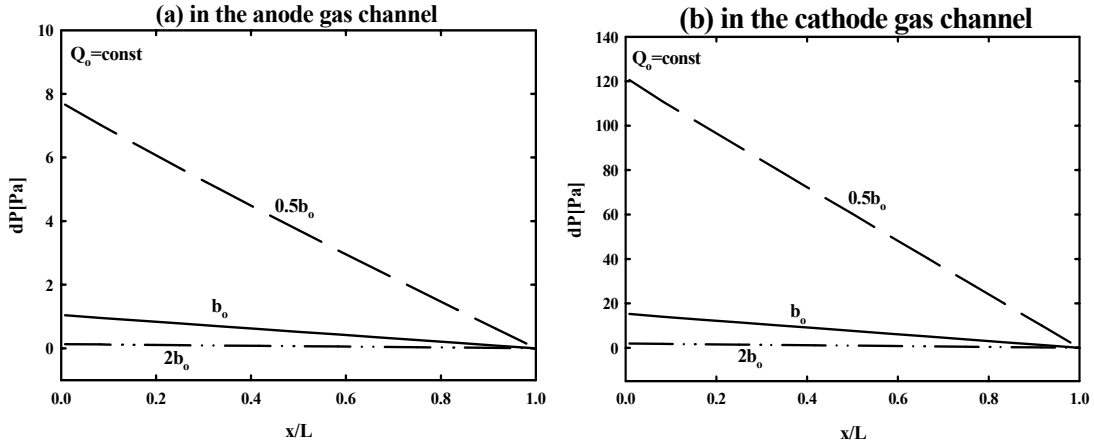

Fig. 5. Distributions of the mole fraction of CO_2 in the gas channels for different heights of gas channel at a constant volumetric flow rate of gas.

3-3. cell의 길이에 따른 영향

Fig. 6은 cell의 길이를 반으로 하였을 때 v와 Q가 일정하다고 각각 가정하고 채널높이에 따른 CO_2의 농도의 변화에 대한 결과를 나타낸 그래프이다. Fig. 7은 진행방향에 따른 CO_2농도를 나타낸 그래프이다. 반쪽 cell을 지나는 가스유량 (Q)도 반으로 줄어서 Q/2로 하고, v_o를 각각 반으로 하여 CO_2농도를 계산하였다.

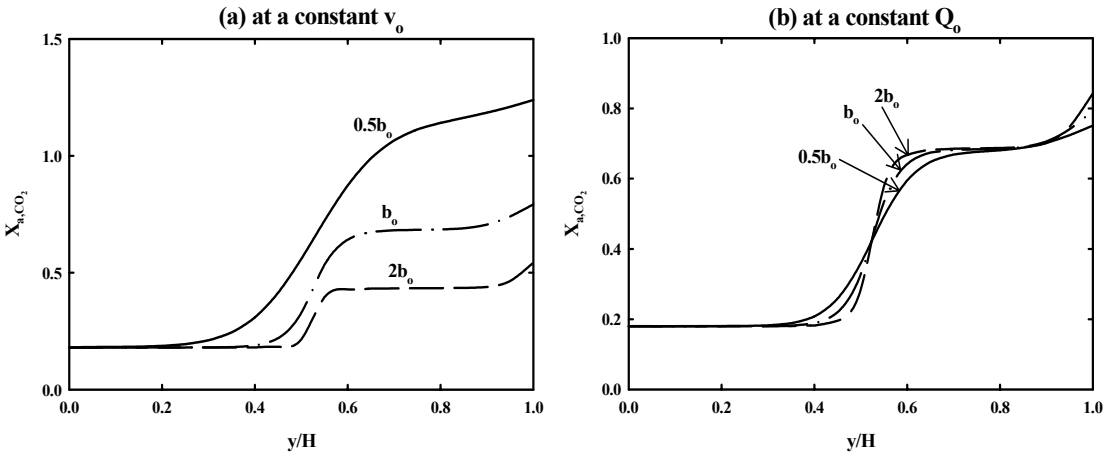

Fig. 6. Effects of channel height(b_o) on the y-directional distributions of the mole fraction of CO_2 in the anode gas channel at x=0.5L.

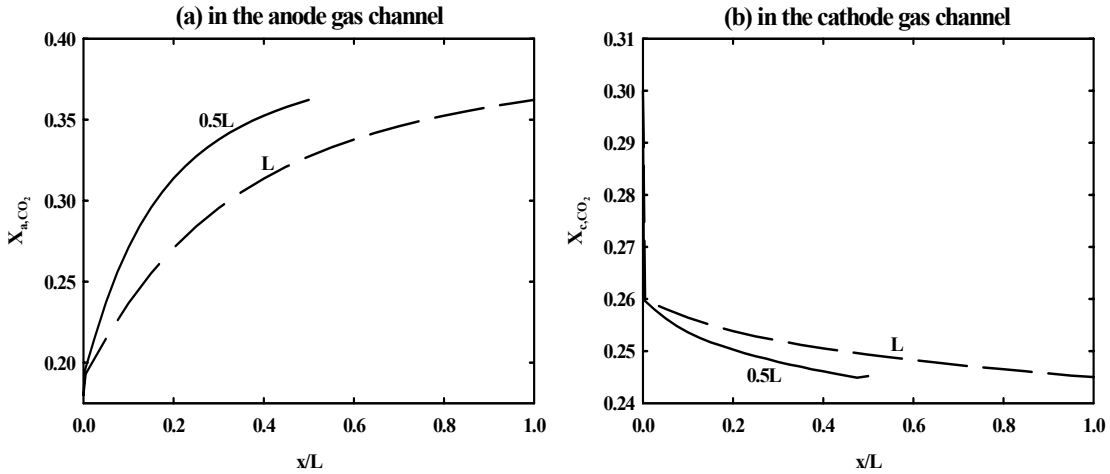

Fig. 7. Distributions of the mole fraction of CO_2 in the gas channels for different lengths of the gas channel.

4. 결론

용융탄산염 연료전지 내에서 전극반응에 관여하는 것은 전하 담체가 되는 탄산이온(CO_3^{2-})이다. 양극에서 만들어진 CO_3^{2-}는 전해질을 통해 확산, 전달되어 음극반응에 참여하고, 산화에 의해 음극에서 생성된 전자는 외부회로를 통해 양극으로 전달되어 환원반응에 참여한다는 사실을 기초로 수치모사가 수행되었다. 전해질을 중심으로 CO_2가 생성 및 소멸되는 간단한 단위연료전지 모델링을 수행하였다.

anode 가스채널의 높이(b_o)와 길이(L)에 변화를 줌에 따라 가스 진행 방향에 따른 CO_2 농도의 변화가 계산될 수 있었다.

참고문헌

1. W. Sampath, A.F. Sammells and J.R. Selman. J. Electrochem. Soc., 127(1), 79(1980).
2. T.L. Wolf and G. Wilemski, J. Electrochem. Soc., 130(1), 49(1983).
3. Wei He. "Dynamic simulations of molten carbonate fuel-cell system", Delft Univ. Press, 2-3(2000).
4. M. H. Kim, H. K. Park, G. Y. Chung and S. A. Hong. J. Power source, 103, 245-252(2002).
5. H. K. Park, Y. R. Lee, G. Y. Chung and S. A. Hong. J. Power source, 104, 140-147(2002).
6. Leo J. M., Bolmen J. and Mugerwa M. N. : "Fuel Cell System", Plenum Press, 345(1992).