# 단순형태 및 접형 단위연료전지에 대한 수치모사 비교

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

# Comparisons of the butterfly-type unit cell with the general unit cell by the mathematical modeling

Min-Jung, Yoo, Gui-Yung, 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]KEPRI
(gychung@hongik.ac.kr*)

## 서론

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. 이 때 수치모사가 필요하게 되며 이에 연료전지 시스템과 연계되는 모사 프로그램을 개발하여 MCFC가 실용화 되었을 때 운전 시 전지 내의 상태를 파악하거나 운전조건의 빠른 결정을 위해 수치모사를 통한 예측이 가능하게 된다. 본 연구에서는 Phoenics를 이용하여 단순형 단위연료전지 내의 변수들에 대한 수치모사 및 접형 단위연료전지에 대한 수치모사를 시도하였다.

## 본론

1. 연구내용

수치모사를 수행하여 원료가스가 전지 중심부에서 공급되는 경우의 냉각 효과가 있는지를 점검하였다. 단순형 단위연료전지와 접형 단위연료전지와 비교하였다. 이때의 수소 이용율($U_{H2}$)은 0.4로 계산하였으며, 접형 단위연료전지는 가스진행 방향 길이가 L/2(60cm)인 단순형태 연료전지가 양쪽으로 배치되어 있는 것으로 가정하였다.

2. 계산조건

계산조건은 다음의 Table 1과 2에 있다.

Table 1. Rates and the compositions of the cathode gas and the anode gas.

| | flow rate ($Q_o$, $v_o$) | compositions at the entrance | |
|---|---|---|---|
| anode gas | 21500 ($cm^3$/hr) , 0.19 (m/s) | $H_2$ | 0.68 |
| | | $CO_2$ | 0.18 |
| | | $H_2O$ | 0.14 |
| cathode gas | 26000 ($cm^3$/hr) , 0.64 (m/s) | $O_2$ | 0.15 |
| | | $CO_2$ | 0.30 |
| | | $N_2$ | 0.55 |

Table 2. Dimensions of the Molten Carbonate Fuel Cell used in the mathematical modeling.

| | | | |
|---|---|---|---|
| Length | ($L_x$) | : | 120 cm (Half cell : 60 cm) |
| Width | ($L_z$) | : | 50 cm |
| Thickness | ($L_y$) | : | 0.99 cm |
| upper Separator | ($b_{us}$) | : | 0.2 cm |
| anode gas channel | ($b_g$=$b_o$) | : | 0.17 cm |
| electrode matrix | ($b_{ea}$) | : | 0.25 cm |
| cathode gas channel | ($b_{cg}$=$b_o$) | : | 0.17 cm |
| lower Separator | ($b_{ls}$) | : | 0.2 cm |

## 결과

단순형 및 접형 단위연료전지일 경우를 각각 수치모사를 하여 그 결과를 그래프로 비교하여 보았다.

### 1. Results of the general unit cell

#### a. 조성, 온도, 전류밀도 분포

$CO_2$와 $H_2$분율 변화에 관한 그래프는 아래의 Fig. 1와 Fig. 2와 같다. anode 가스채널에서는 전기화학반응에 의해 $H_2$의 전환이 일어나고 $CO_2$가 생성된다. 그리고 cathode 가스채널에서는 $CO_2$의 전환이 일어나 이에 대한 x-방향에 따른 분포변화를 알 수 있다.

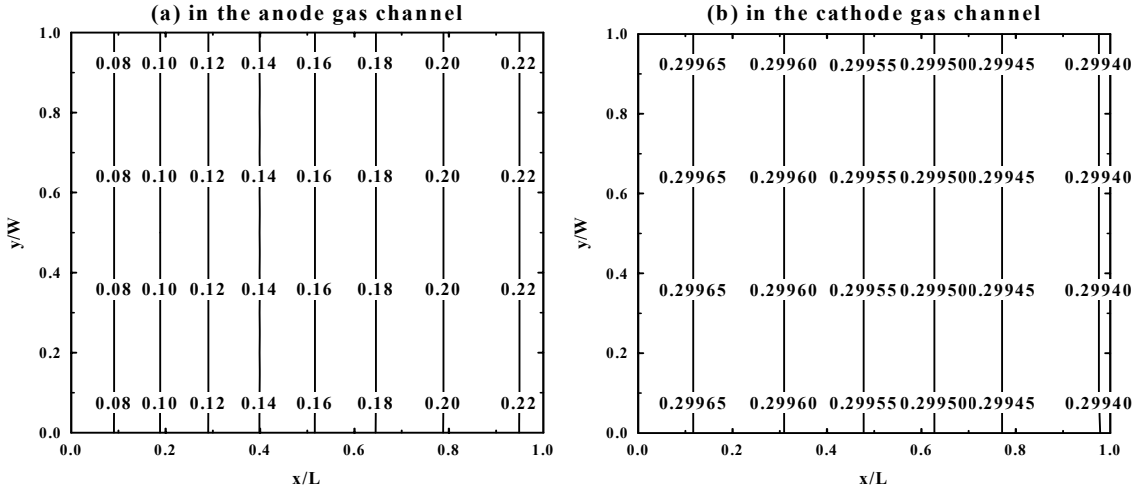


Fig. 1. The contour graphs of the fraction of $CO_2$ in the anode and the cathode gas channels in the unit cell

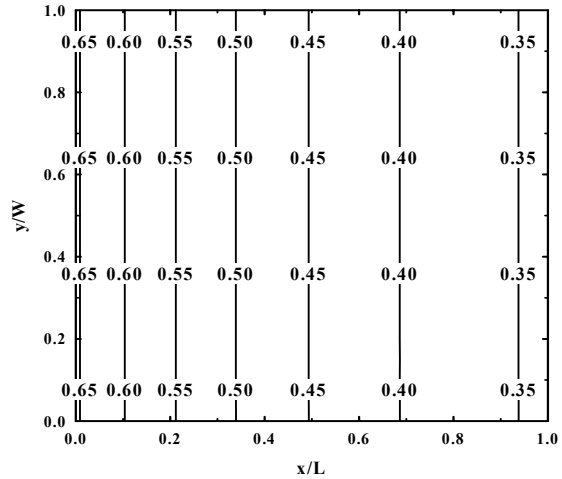


Fig. 2. The contour graphs of the fraction of $H_2$ in the anode gas channel in the unit cell

앞의 $CO_2$분율 분포가 전기화학 반응의 결과이듯이 온도분포도 마찬가지 반응열에 기인한다. 온도분포도 Fig. 3 (a)와 같이 입구에서 상승했다가 x-방향을 따라 점차 낮아지고, 이는 x-방향을 따라 가스가 유입되면서 주입된 연료의 전환율이 높아지게 됨에 따라 농도가 줄면서 반응양이 줄어 점차 온도가 떨어지기 때문이다. 단위 연료전지에서의 x-방향에 따른 전류밀도분포는 아래의 Fig. 3 (b)과 같이 연료가스는 수성가스 전이반응에 의해 상평형에 빨리 도달하게 된다. 연료가스가 소모됨에 따라 점차 전기화학 반응양이 줄고, 따라서 전류밀도도 줄고 있다. 입구에서 0.09, x-방향에 따라 전류밀도값이 점차 낮아져 출구에서는 0.055[A/cm$^2$]까지 낮아졌다. 전류밀도의 등고선 그래프에서 출구 쪽으로 갈수록 등고선 간격이 넓어지고 있다. 이는 전류밀도 변화가 약간 완만해짐을 의미한다.

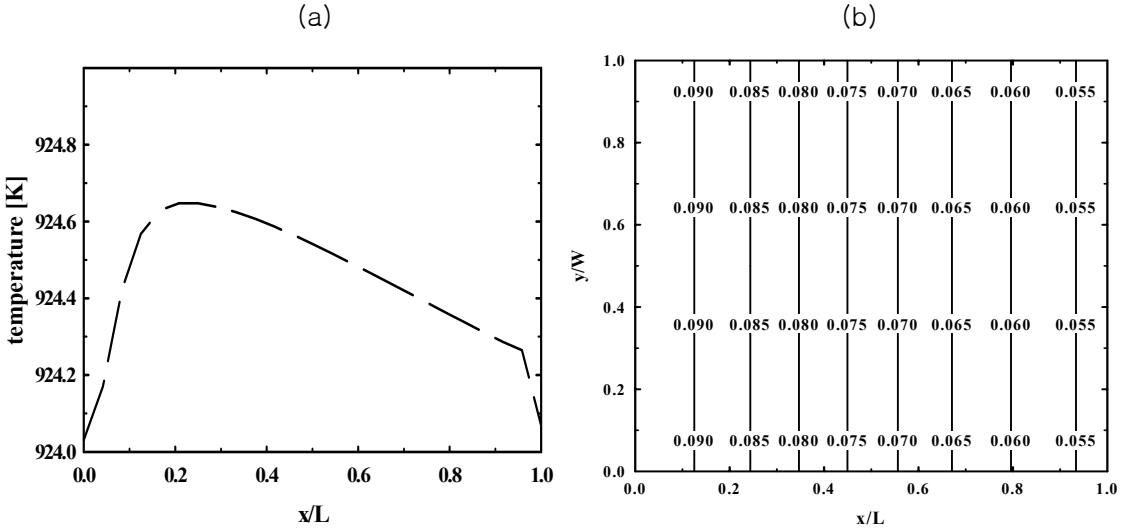


Fig. 3. (a) Distribution of the temperature at the electrode-electrolyte plate in the unit cell and (b) The contour graph of the current density distribution[A/cm$^2$] in the unit cell

## 2. Results of the butterfly-type unit cell

접형 단위연료전지에서 이용률($U_A$)이 각각 0.2, 0.3, 0.4, 0.6일 때 전류밀도분포와 $CO_2$분율 분포를 비교하였다. Fig. 4에서와 같이 $CO_2$의 분율은 수소이용율이 커짐에 따라 더 많은 전기화학 반응이 일어나므로 입출구의 차이가 더 크게 변화하고 있다.

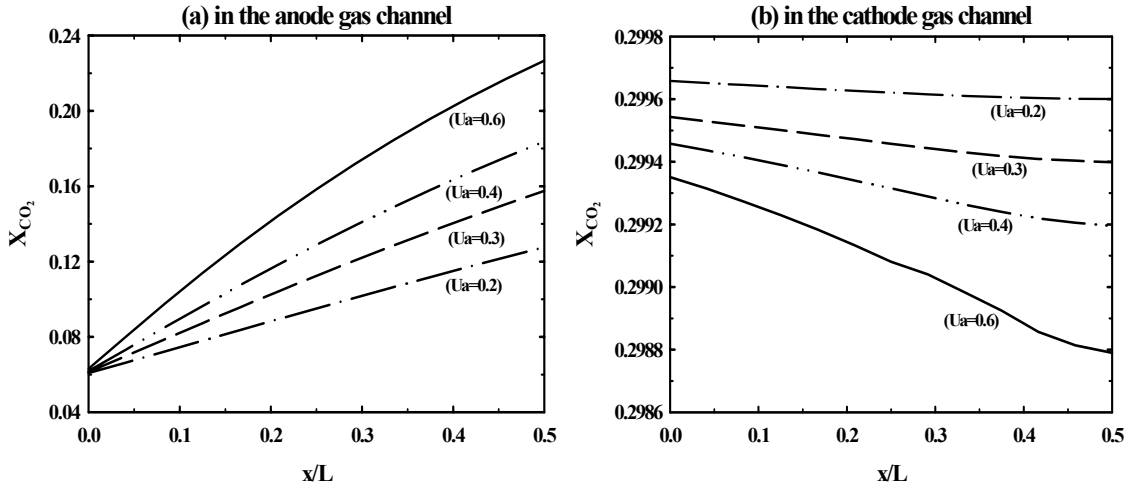


Fig. 4. Effects of the hydrogen utilization on the fraction of $CO_2$ (a) in the anode gas channel and (b) in the cathode gas channel in the butterfly-type unit cell

anode 가스채널에서의 $H_2$분율 분포 그래프가 Fig. 5이다. $CO_2$와 마찬가지로 이용률이 증가함에 따라 $H_2$분율의 소모량이 증가하여 입출구의 차이도 0.15, 0.20, 0.25, 0.30으로 일정하게 커졌

다.

단위연료전지에서의 이용률의 변화에 따른 전류밀도값의 분포를 나타낸 그래프가 Fig. 6이다. 마찬가지로 이용율이 커짐에 따라 입출구의 전류밀도 차이가 커지고 있다.

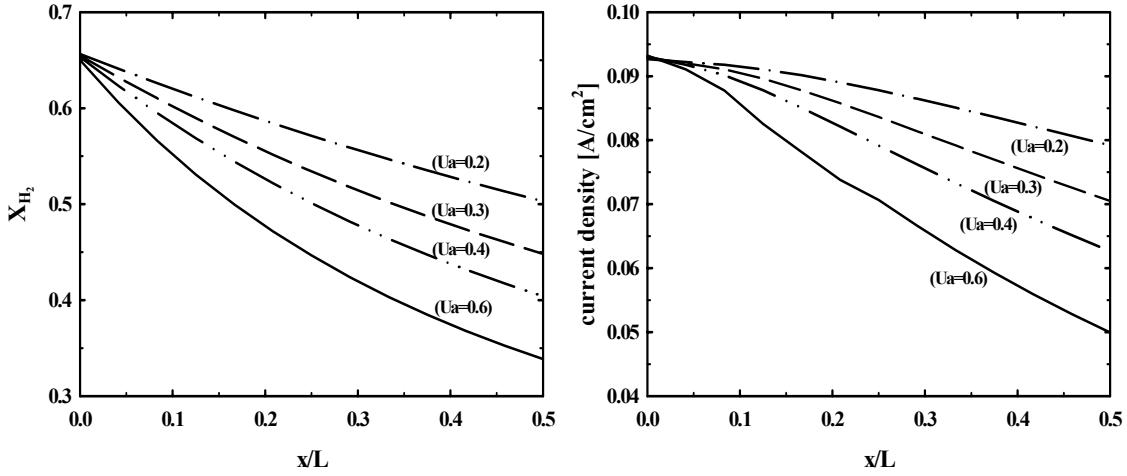


Fig. 5. (a) Effects of the hydrogen utilization on the fraction of $H_2$ in the anode gas channel in the butterfly-type unit cell and (b) The current density[A/cm$^2$] distributions according to the rate changes of the utilization in the butterfly-type unit cell

## 참고문헌

[1] C.G. Lee, B.S. Kang, H.K. Seo, H.C. Lim., "Effect of gas-phase transport in Molten Carbonate Fuel Cell" J. Electroanalytical Chemistry 540 (2003) 169.

[2] Sampath V., Sammels A.F., "A Performance and Current Distribution Model for Scaled-up Molten Carbonate Fuel Cells", *J. Electrochem. Soc.*, **127**, 79 (1980).

[3] Wolf T.L., Wilemski G., "Molten Carbonate Fuel Cell Performance Model", *J. Electrochem. Soc.*, **130**, 48 (1983).

[4] Wei He. Dynamic simulations of molten carbonate fuel-cell system, *Delft Univ. Press*, 2-3 (2000).

[5] Kim M.H., Park H.K., Chung G.Y., Lim H.C., Nam S.W., Lim T.H., Hong S.A., "Effects of water-gas shift reaction on simulated performance of a molten carbonate fuel cell" *J. Power Sources,* **103**, 245 (2002).

[6] Park H.K., Lee Y.R., Kim M.H., Chung G.Y., Nam S.W., Hong S.A., Lim T.H., Lim H.C., "Studies of the effects of the reformer in an internal-reforming molten carbonate fuel cell by mathematical modeling",*J. Power Sources,* **104**, 140 (2002).

[6] Leo J.M., Bolmen J., Mugerwa M.N., Fuel Cell Systems, *Plenum Press*, 345 (1992).

[7] Ahn Y.J., Chung G.Y., Ju J.B., Nam S.W., Oh I.H., Lim T.H., Hong S. A., "Prediction of Temperature Distributions from Mass and Energy Balances and Effects of Operating Parameters in Molten Carbonate Unit Fuel Cell" *HWAHAK KONGHAK,* **32(6)**, 830 (1994).

[8] Y.R. Lee, I.G. Kim, G.Y. Chung, C.G. Lee, H.C. Lim, T.H. Lim, S.W. Nam, and S.A. Hong, "Studies on the Initial Behaviors of the Molten Carbonate Fuel Cell" J. Power Sources, 137, 9 (2004).

[9] F. Yoshiba, T. Abe, T. Watanabe, "Numerical Analysis of Molten Carbonate Fuel Cell Stack Performance: Diagnosis of Internal Conditions using Cell Voltage Profile.", J. Power Sources, 87 (21) (2000).

[10] F. Yoshiba, N. Ono, Y. Izaki, T. Watanabe, T. Abe, "Numerical analysis of the internal conditions of a MCFC stack comparison of stack performances for various gas flow types.", J. Power Sources, 71 (328) (1998).