포트란 프로그램을 이용한 단위 연료전지에 대한 수치모사

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

Studies on the Numerical modeling of the unit Molten Carbonate Fuel Cell and the butterfly-type unit cell using the fortran program

Min-jung, Yoo, 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]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. Scale-up된 형태 및 다양한 형태의 단위 연료전지의 수치모사 연구를 함에 있어서 전지의 규모가 커지면 연료전지 내에서 전기화학반응이 불균일하게 일어난다는 문제를 해결하기 위해 새로운 전지형태 등이 기대되게 된다. 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 FORTRAN을 이용하여 단위 용융탄산염 연료전지 내의 변수들에 대한 수치모사 및 형태를 변형시킨 접형 연료전지에 대한 수치모사를 시도하였다.

본론

1. 연구내용

수치모사를 수행하여 원료가스가 전지 중심부에서 공급되는 경우의 냉각 효과가 있는지를 점검하였다. 평행류 단위연료전지와 단순형태의 연료전지와 비교하였다. 수소 이용율(U_{H2})은 0.4이다. 수치모사는 dx와 dy의 값을 동일하게 하고 계산되었다. 접형연료전지는 가스진행 방향 길이가 L/2(60cm)인 단순형태 연료전지가 양쪽으로 배치되어 있는 것으로 가정하였다.

2. 계산조건

계산조건은 다음의 Table 1과 2에 있다.

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

anode gas	Q = 21500 (cm^3/hr)	compositions : H_2=0.68, CO_2=0.08, H_2O=0.12, CO= 0.12
cathode gas	Q = 26000 (cm^3/hr)	compositions : O_2 = 0.33, CO_2 = 0.67

Table 2. Dimensions of the molten carbonate fuel cell used in the mathematical modeling.

Length	(L)	:	120 cm (Half cell : 60 cm)
Width	(W)	:	50 cm
Thickness :			
Separator	(b_s)	:	0.2 cm
Gas channel	(b_g)	:	0.2 cm
Anode electrode	(b_{ea})	:	0.07 cm
Electrode plate	(b_{em})	:	0.1 cm
Cathode electrode	(b_{ec})	:	0.06 cm

결과

단위전지와 접형단위전지일 경우를 각각 수치모사를 하여 그 결과를 그래프로 비교하여 보았다.

1. Comparison the general unit cell with the butterfly-type unit cell

a. The distribution of current density

Fig. 1.에서와 같이 단위전지를 반으로 나누어 계산한 접형단위전지에서 가스 입구와 가스출구와의 전류밀도차가 더 적다. 접형단위전지일 때 그 차이는 0.02 A/cm^{2}이고, 일반 단위전지의 경우에는 0.18 A/cm^{2}이다. 접형 단위전지의 전류밀도값이 더 안정적임을 알 수 있다.

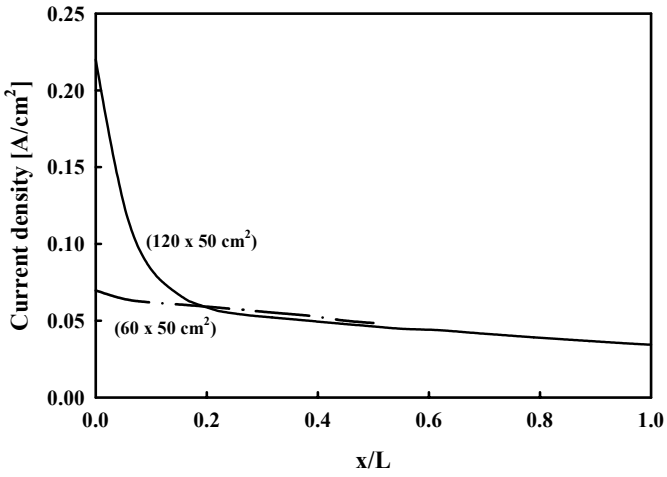

Fig. 1. The distribution of current density in the electrode-electrolyte plate with the change of the cell length.

b. Distributions of temperature

온도기울기도 전류밀도와 비슷한 경향을 보였다. Fig. 2에서 접형연료전지의 경우에는 가스 입구와 가스출구와의 온도차가 20 K내외인 반면, 기존의 일반 전지의 경우는 온도차가 160 K를 나타내고 있다.

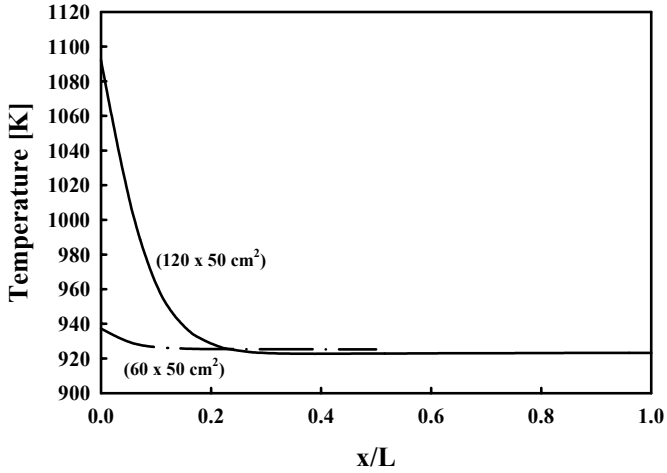

Fig. 2. Comparisons of the distribution of temperature along the direction of gas flow in the electrode-electrolyte plates of the general unit cell and the butterfly-type unit cell.

c. Distributions of conversion in the anode and the cathode gas channels

Fig. 3은 Anode가스채널과 cathode가스채널 내의 전환율 등고선 그래프이다. 길이(L)가 120cm인 일반단위연료전지에서는 출구전환율이 0.40 인 반면, 길이(L/2)가 60cm인 접형연료전지에서는 출구 가스전환율이 0.20 이다. 가스유로를 따라 전환율이 비례적으로 증가하고 있다.

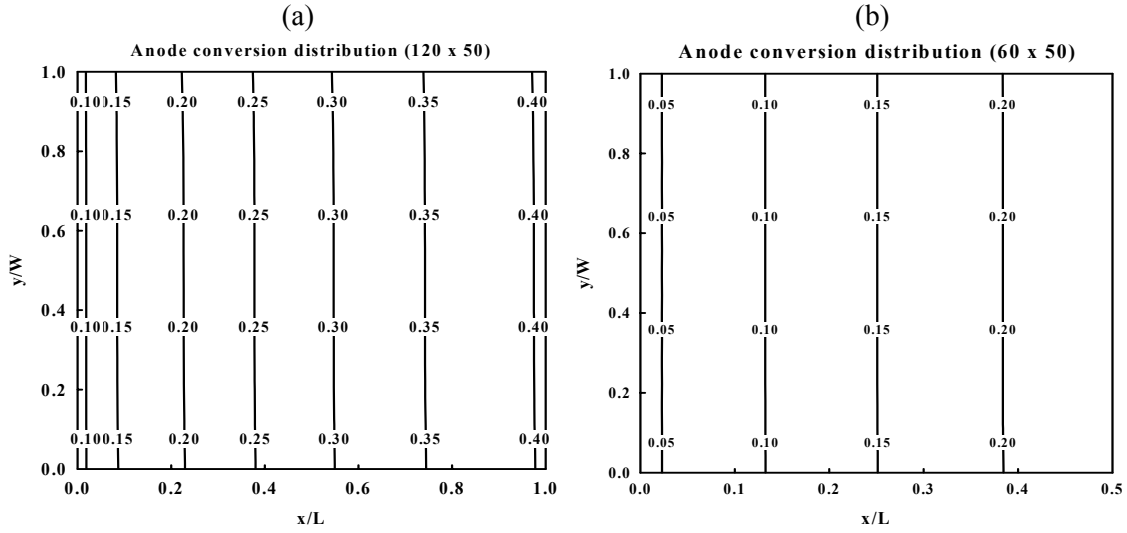

Fig. 3. The distribution of conversion in the unit cell (a) and the butterfly-type unit cell (b) with the change of the cell width using contour plots.

2. The effects of the hydrogen utilization(U_A) in the butterfly-type unit cell

접형단위전지에서 이용률(U_A)이 각각 0.2, 0.4, 0.6일 때 전류밀도분포, 온도분포를 비교하여 보았다.

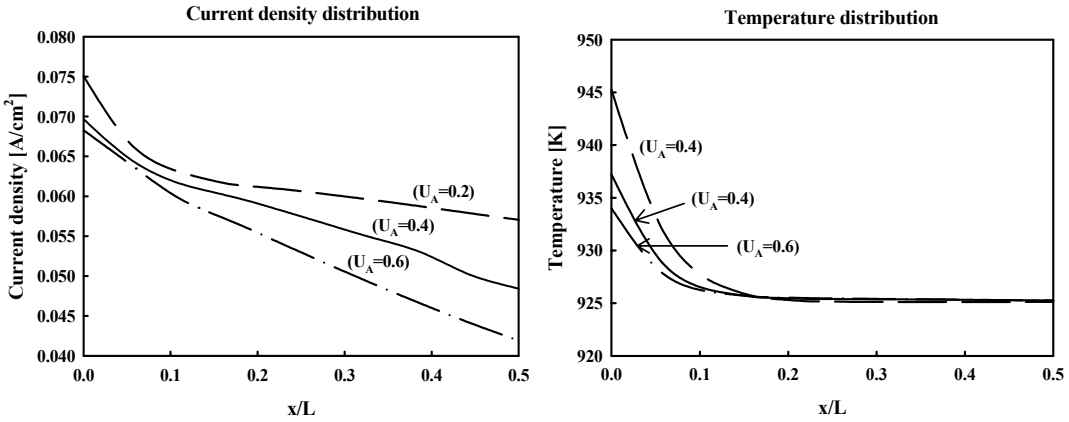

Fig. 4. Changes of current density and temperature in the electrode-electrolyte plate along the direction of gas flow at different hydrogen utilizations.

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).