

# 상용 모사기를 이용한 고체 고분자 전해질 연료전지 공정의 최적 설계

\*김성준 · 설용건 · 이태희

연세대학교 공과대학 화학공학과

## An Optimal Design of Solid Polymer Electrolyte Fuel Cell Process Using Commercial Simulator

Sung-Joon Kim, Yong-Gun Shul and Tae-Hee Lee

Dept. of Chemical Engineering, Yonsei University, Seoul 120-749, KOREA

### 요 약

상용 모사기인 ASPEN PLUS를 이용하여 매탄올을 원료로 한 고체 고분자 전해질 연료전지 발전 시스템의 정상상태 전산 모사를 실시하여 최적의 설계를 시도하였다. 연료전지 본체의 모사를 위하여 USER block과 FORTRAN block을 작성하였으며, 다른 공정은 ASPEN PLUS에서 제공되는 모델을 사용하였다. 모사 결과, 실제 경우와 근사한 값을 얻었으며, 이를 근거로 하여 조업조건에 따른 출력의 변화를 살펴봄으로써 효율을 최대로 하는 각 단위공정의 최적 조업조건을 찾아 내었다. 이로부터 향후 실용화될 국내의 고체 고분자 전해질 연료전지 발전 시스템에 대한 기본 자료를 제시할 수 있으며, 개발되는 공정은 고온으로 조작되는 개질기의 열을 효율적으로 회수하여 이용함으로써 공정의 에너지 효율을 높이도록 하여야 한다.

### 1. 서 론

고체 고분자 전해질(SPE:solid polymer electrolyte) 연료전지 혹은 수소 교환막(PEM: proton-exchange membrane) 연료전지는 단위 무게 당 에너지 출력이 커서 수송용, 군사용, 우주선 등의 특수 용도로 개발되고 있으며, 특히 최근에 환경오염이 심각해지고 전기자동차의 개발이 가속화됨에 따라 수송용 전 원으로서의 고체 고분자 전해질 연료전지의

개발이 활발히 진행되고 있는 실정이다.

연료전지 발전기술은 크게 연료전지 본체를 제작하는 기술과, 주변기와 연료전지 본체를 종합하는 시스템 기술로 나눌 수 있으며, 이 중 시스템 기술에는 개발 목적에 부합되고 최대의 효율을 가지는 발전 시스템 개발을 위한 플랜트 구성 기술과 전체 시스템의 최적화 기술이 있다. 연료전지 발전 시스템은 사용목적, 연료의 종류, 규모에 따라 높은 효율이 얻어질 수 있도록 시스템이 구성

되어야 한다[1].

따라서 본 연구에서는 최근 각광받고 있는 상용 모사기인 ASPEN PLUS를 이용하여 현재 개발되어 있는 고체 고분자 전해질 연료 전지 공정을 기초로 열 및 물질수지를 취하여 조업조건에 따른 출력변화를 알아보고, 이 결과로부터 더 높은 효율을 얻을 수 있는 시스템의 구성에 대하여 살펴보고자 하였다.

## 2. 시스템 구성 및 모사방법

### 2-1. 시스템 구성

연료전지 발전 시스템은 연료처리장치, 연료전지 본체 및 전력변환장치 등으로 구성되어 있다. 연료처리장치는 원료로부터 수소와 일산화탄소 등을 생성시키는 개질기(refomer)와 일산화탄소를 이산화탄소로 전환시키는 일산화탄소 제거기(CO remover) 등으로 이루어진다.

연료전지 본체는 연료전극(anode), 산화전극(cathode) 및 전해물질인 고분자막으로 구성된 단위전지를 쌓은 적층(stack)으로 이루어진다. 그리고 고분자 전해질 재료의 특성상 요구되는 습도유지를 위한 증습기(humidifier)가 설치되어 있다. 적층은 연료전지 내의 반응이 발열반응이므로 적층 내의 온도를 일정하게 유지하기 위하여 냉각수나 냉각공기의 공급이 가능하도록 되어 있다. 일반적으로 전지에서 발생된 직류는 전력변환장치를 통하여 교류로 바꾸어 사용한다. 이상과 같은 발전 시스템의 구성을 Fig. 1에 나타내었다 [2,3,4].

### 2-2. 모사방법

각 단위공정은 ASPEN PLUS에서 적절한 모델을 취하여 모사하였으며, 연료전지 본체는 실제 실험결과와 회귀분석을 통한 식으로부터 USER block과 FORTRAN block을 이

용하여 간단한 algorithm으로 작성하였다. 이에 대한 block diagram은 Fig. 2와 같으며, 여기에 각 block의 이름과 ASPEN PLUS의 모델명 그리고 각 흐름의 이름과 연결상태를 나타내었다.

전체 시스템에 대한 열 및 물질수지를 고려한 후 각 단위공정 및 총괄적인 타당성 검증을 거쳐 ASPEN PLUS의 SENSITIVITY ANALYSIS로 여러 변수의 영향을 살펴보았다. 아울러 기존 공정과 개선된 공정과의 효율을 비교하여 상대적으로 효율이 높은 시스템 구성이 이루어질 수 있는가에 대하여 고찰하여 보았다.

## 3. 결과 및 논의

### 3-1. 단위공정 및 전체 시스템 모사결과

개질기에 있어서 온도에 따른 조성변화 및 메탄을 전화율 등을 문헌치와 비교한 결과 근사함을 알 수 있었으며[3,5], 이를 근거로 모사한 결과, 물 대 메탄을 비에 대한 반응물의 조성변화를 살펴볼 수 있었고, 필요 이상으로 고온에서 작업할 필요가 없으며 상압에서의 작업이 타당함을 확인할 수 있었다.

연료전지 본체의 경우, 성능곡선의 식 및 전류밀도에 따른 물의 이동곡선이 실험치와 잘 맞는 것을 확인하였고[4,6], 이로부터 온도 변화에 따른 출력의 증가정도와 수소 대 공기 분압의 비에 따른 출력의 감소정도를 알 수 있었다.

또한 전체 공정에 대하여 물 대 메탄을의 비를 조절하여 본 결과 출력이 최대가 되는 지점이 나타났으며, 이를 Fig. 3에 도시하였다.

### 3-2. 효율개선

모사결과 얻은 최적의 조업조건과 이에 따른 효율을 Table 1과 2에 나타내었다. 개질기

Table 1. The simulated operating conditions and results for original process.

Temperature	(Reformer) 250 °C (Cell) 80 °C
Pressure	(Reformer) 1 atm (Cell) 3 atm for anode / 5 atm for cathode
W/M	0.91
-----	
Voltage	0.57 V
Current density	0.71 A/cm <sup>2</sup>
Generated power	52.5 kW
Cell efficiency	33.7 %
Total efficiency	23.6 %

Cell efficiency  
=  $\eta_r \eta_u$

Total efficiency  
= (AC power + cogeneration heat) / methanol HHV

Table 2. Heat duty of each unit for original process.

BLOCK	HEAT DUTY(Btu/hr)	T (°C)	P (atm)
REFORM	- 415,160 (48.23%)	250	1
CO-REM	- 285,270 (33.14%)	50	1
PEM	- 160,360 (18.63%)	80	3:5
Total	- 860,790		

배열의 온도와 전체 배열 중의 비율을 고려해 볼 때 개질기에서 가장 효과적인 열회수가 가능하며, 여러가지 개선 가능한 공정 중의 한 예를 Fig. 4에 block diagram으로 나타내었다. 이 공정에 대한 효율을 Table 3에 나타내었으며, 앞의 공정과 비교해 볼 때 어느 정도 효율을 높일 수 있음을 알 수 있다.

#### 4. 결 론

메탄올을 원료로 하는 고체 고분자 전해질

Table 3. Heat duty on each unit and total efficiency for modified process.

BLOCK	HEAT DUTY(Btu/hr)	T (°C)	P (atm)
REFORM	- 371,383 (45.46%)	250	1
CO-REM	- 285,270 (34.92%)	50	1
PEM	- 160,360 (19.63%)	80	3:5
Total	- 817,013		
Total efficiency			29.4 %

연료전지 발전 시스템을 상용모사기인 AS-PEN PLUS를 이용하여 모사한 결과 다음과 같은 결론을 얻었다.

(1) 모사 결과 문헌 및 실제 외국에서 개발된 공정과 근사한 값을 얻었으며, 이로부터 향후 실용화될 국내의 고체 고분자 전해질 연료전지 발전 시스템에 대한 기본 자료를 제시할 수 있다.

(2) 앞으로 개발되는 공정은 고온으로 조작되는 개질기의 배열을 효율적으로 회수하여 이용함으로써 공정의 에너지 효율을 높일 수 있다.

#### 참고문헌

1. 홍성안 외 ; "연료전지 기술개발 현황 및 전망," 화학공업과 기술, 11(2), 65 (1993).
2. Seymour, C.M. et al.; Fuel Cell Seminars - Program and abstracts, 446, Tucson, AZ (1992).
3. Amphlett, J.C. et al.: The Canadian J. of Chem. Eng., 59, Dec. (1981).
4. Ticianelli, E.A. et al.: J. Electroanal. Chem, 251 (1988).

5. Amphlett, J.C. et al.: The Canadian J. of Chem. Eng., 66, Dec. (1988).

6. Bernardi, D.M. et al.: "Mathematical Model of A Solid-Polymer-Electrolyte Fuel Cell," Michigan (1992).

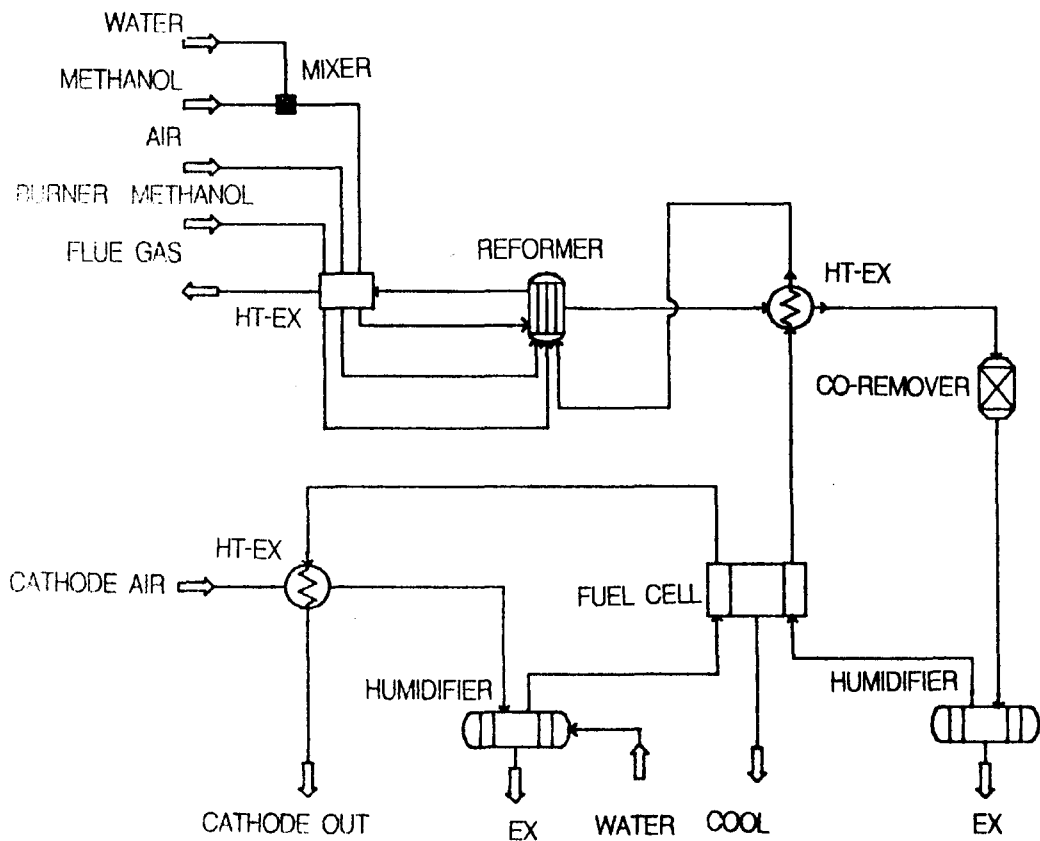


Fig. 1. Flow diagram of SPEFC process[2,3,4].

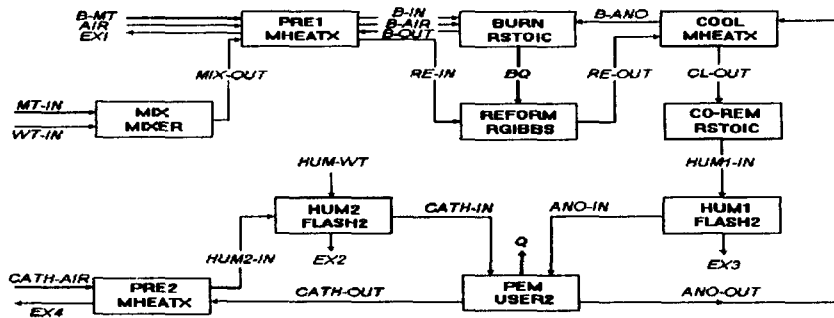


Fig. 2. ASPEN PLUS block diagram of SPEFC process.

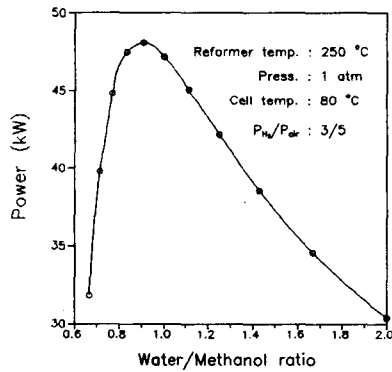


Fig. 3. Effect of water to methanol ratio on generating power in SPEFC process.

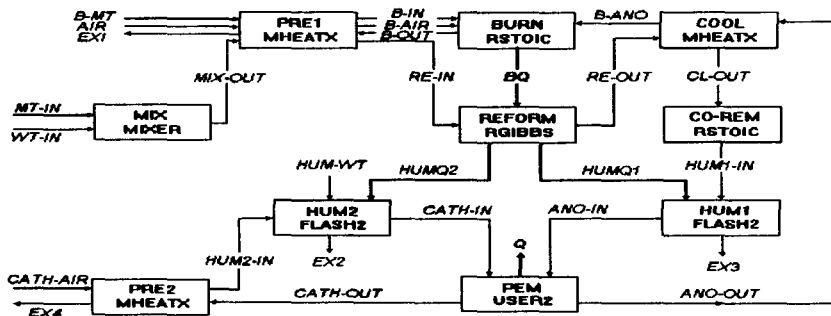


Fig. 4. Effective utilization of heat in SPEFC process.