

연료전지(PAFC) 입력 변화에 따른 구성 UNIT의 상태량에 대한 전산 모사

안현식, 김 영 수, 김 효
전진석*, 조영아*, 김기동*, 최동수*
서울시립대 화학공학과
* 한국가스공사 연구개발원

The Simulation of the Property Change of the Structure Unit with the Change of Input of Fuel Cell(PAFC)

Hyun Shik An, Young Soo Kim, Hyo Kim
Jin Seok Jeon*, Young Ah Cho*, Ki Dong Kim*, Dongsoo Choi*
Dept. of Chemical Engineering, University of Seoul
*R & D Center, Korea Gas Corporation

서론

연료전지는 일정하게 유지되는 전극-전해질 계의 등온과정 속에서 연료와 산화제의 화학에너지가 전기에너지로 끊임없이 변환되는 장치로 정의할 수 있다. 연료전지 발전시스템은 3가지의 구성요소를 가지고 있다. 즉, 천연연료(1차연료)를 공급받아 전지에 공급할 수 있는 수소가 풍부한 연료로 개질시키는 연료개질 공정, 기체연료가 가지고 있는 화학에너지를 직류전력으로 전환시켜 주는 전력발생장치, 그리고 발생된 직류전압을 교류전압으로 변환시켜 주는 전력변환장치로 구성되어 있다.

연료전지는 연소장치가 아니기 때문에 NO_x나 CO와 같은 불완전 연소된 배기물이 없어 심각한 공해문제를 야기하지 않는다. 또한 단일 연료전지는 일반적으로 거의 0.5 - 1 volt의 전압을 발생시키기 때문에 원하는 전압을 얻기 위해서 여러 개를 연속해서 연결해 사용할 수 있다. 그리고 열기관의 최대 실질이론효율은 40% ~50%이지만 연료전지는 온도의 변화없이 에너지를 카르노이론에 제약을 받지 않고 화학에너지를 최대한 전기에너지로 전환시켜주기 때문에 효율이 매우 높다. 따라서 본 연구의 목적은 그 동안 우리나라에서는 처음으로 천연가스를 이용하여 운전되어온 200kW급 PC25 인산형 연료전지 발전시스템을 분석하기 위하여 연료전지 시스템의 각 구성장치간의 에너지 및 물질변환 관계로부터 전산 프로그램을 작성하여 연료전지 입력변화에 따른 구성 UNIT의 상태량 계산과 그 결과를 분석하는데 있다.

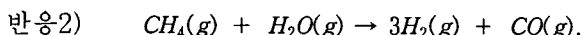
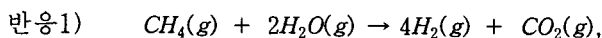
시스템 표현

<Fig.1>은 전체 시스템을 보여주는 PFD(Process Flow Diagram)이다. 이 PFD에 보여지는 숫자들 중 첫 번째 숫자는 라인에서의 흐름유체의 종류를 의미하며, 0번은 Natural gas 라인, 1번은 Air 라인, 3번은 H₂ 라인, 4번은 Cooling 라인, 5번은 Steam 라인, 8번은 폐열처리 라인, 그리고 9번은 Gas 라인이다. 나머지 숫자는 특정흐름라인 안에서 각 노드 및 장치를 거치면서 매겨지는 일련번호이다. 검은색 원들은 각 라인의 노드를 나타내준다. 유체의 몰유속을 표현하기 위해 정의한 배열 FL(k,l,i)는 k라인의 l번 흐름에 있는 i성분의 몰수를 나타내며 성분 i는 1번부터 8번까지 각각 CH₄, H₂, CO₂, CO, H₂O(g), H₂O(l), O₂, N₂로 정의하였다.

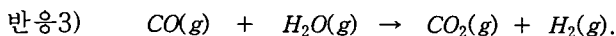
에너지 및 물질수지 계산

계산의 기준으로 메탄가스의 몰유속 FCH₄(1 mol/hr)와 온도 T_{ref}(298.15K)를 사용하였다. 에너지 및 물질수지 계산은 FPS(Fuel Processing System)의 HTX1(Integrated Heat Exchanger), HTX2, 개질기(Reformer) & 가스버너(Gas-Burner), HTSC(High Temperature Shift Converter), LTSC(Low Temperature Shift Converter), 노드2(n2)와 PPS(Power Section System)의 셀스택과, HTX3, HTX4, HTX5, 냉매축적기, WTS(Water Treatment System), 노드5(n5), 노드8(n8)의 14개 부분을 이용하여 라인 006, 103, 301, 303, 403, 415, 416, 503, 804, 905, 906 온도(T006, T103, T301, T303, T403, T415, T416, T503, T804, T905, T906)와 라인404, 410, 801의 유량(FL(4,4,6), FL(4,10,6), FL(8,1,6))의 14개의 미지변수에 대한 수치식으로부터 수치해석방법을 이용하여 계산하였다.

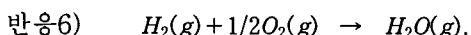
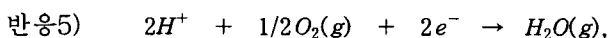
개질기에서의 반응식은 다음과 같다.



Shift converter에서의 반응식은 다음과 같다.



셀스택에서의 반응식은 다음과 같다.



수치해석 결과

연료전지시스템의 에너지 및 물질수지식을 이용하여 기존의 운전값들과 적절한 설정값들로부터 수치해석적인 방법을 통하여 전체라인에 걸친 물유속과 온도 분포를 구할 수 있게 된다. 설정값은 시스템의 운전조건과 에너지 및 물질수지식에 의한 관계를 이용하여 적당한 값을 시행오차법을 통하여 구하였다. 설정값은 개질기에서 반응1)의 메탄의 전화율, FCH41은 0.62, FCH42는 0.21, 셀스택에서 수소의 이용율, FH2는 0.70, 반응3)에 의한 일산화탄소의 전환율은 HTSC에서 FICO는 0.55, LTSC에서 F2CO는 0.5로 설정하였다. 메탄 1몰을 기준으로 한 운전값, 가정값 및 계산값은 <Table 1>에 나타내었다.

설정값 변화에 따른 구성 UNIT의 입출구 상태량 및 출력 변화

위의 설정값들을 변화시키면 각 UNIT의 입출구의 값과 출력값은 변하게 된다. 또한 이러한 설정값은 입출구 값에 서로 상호작용을 하는 것들도 있고 서로 독립적인 것도 있으며 어느 한쪽이 우세한 경우도 있다. 따라서 각각이 어떻게 영향을 미치는 지를 알아보기 위하여 다른 설정값들은 고정시키고 하나의 설정값만을 변화시킬 때 각 입출구에서의 값들의 계산을 진행시켰다. 변화시키는 설정값들은 각각 FCH41, FCH42이고 입출구에서의 변화량은 T006, T103, T301, T303, T403, T503, T905, T906, T415, T416, T804, FL(4,2,6), FL(4,4,6), FL(4,6,6), FL(4,9,6), FL(4,10,6), FL(4,12,6), FL(4,14,6), FL(5,1,5), FL(8,1,6) 그리고 전력량으로 하였다. 전력량 계산에서 셀스택에서 효율, η 는 0.65로 설정하여 다음 식으로부터 구하였다.

$$(1) \quad I = \Delta n |z| F / t$$

$$(2) \quad E = \frac{\Delta G}{nF} = \frac{\eta \Delta H}{nF}$$

$$(3) \quad P = EI$$

결과 및 토론

설정값의 증가에 따른 각 입출구에서의 계산값 및 출력값의 변화는 <Fig. 2>, <Fig. 3>에 나타내었다. 반응1), 2) 각각의 메탄의 전화율, FCH41와 FCH42를 각각 증가시킬 때 개질기에서 필요한 열량이 증가하므로 개질기 입구온도(T006)는 증가한다. 따라서 노드3의 온도(T503) 및 HTX3의 출구가스온도(T906)도 증가한다. 셀스택에서 발열반응이므로 메탄의 전화율이 증가함에 따라 수소량이 증가하여 반응하는 수소량이 증가하므로 생성되는 열을 제거하기 위해 냉각수의 양(FL(4,4,6))이 증가하게 된다. 노드3의 온도(T502)의 온도가 증가함으로 HTX1

의 라인403온도(T403)와 유량(FL(4,2,6))은 감소한다. 또한 FL(4,2,6)이 크게 감소함으로써 냉매축적기의 출구량(FL(4,10,6))이 감소하게 되며, 스택으로부터의 고온의 물이 냉매축적기로 유입됨으로써 증기로 배출하는 양((FL(5,1,5))이 증가하게 된다. 따라서 HTX3로 유입되는 증기의 양(FL(5,4,5))이 증가하게 됨으로써 HTX3에서 응축되어 나오는 물의 양(FL(4,6,6))이 증가하게 된다. WTS에서 배출되는 유량(FL(4,7,6))은 일정하므로 HTX5부터 냉각되어 나오는 물의 온도(T416)와 유량(FL(4,16,6))은 감소하게 된다. 전력량의 변화는 수소 소모량에 따라 변하므로 메탄의 전화율, FCH41, FCH42이 증가할수록 전력량은 증가한다. 이러한 결과들은 그 동안의 운전경험에 비추어 보아 그 타당성이 인정되며, 이로부터 PC25 인산형 연료전지 발전시스템을 개괄적으로 이해할 수 있으며 연료전지 효율 제고와 성능 예측을 쉽게 할 수 있게 되었다.

Table 1. Setting variables and result data η

Line No.	Operating Data				Guessing Variables				Calculated Data			
	T001	293.0K	T003	293.0K								
0	T002	293.0K	T005	475.0K	T004	315.0K			T006	555.6K		
	T101	293.0K	T102	293.0K					T103	321.6K		
3	T302	694.0K	T304	467.6K					T301	648.9K	T303	482.4K
4	T401	433.2K	T404	433.2K	T406	400.0K	T410	443.0K	T403	434.4K	T416	305.4K
					T407	316.0K	T411	443.0K	T415	364.5K		
	T402	433.2K	T405	452.6K	T408	316.0K	T412	443.0K				
					T409	316.0K			FL(4,4,6)	3249(mol/hr)	FL(4,10,6)	4005(mol/hr)
5	T501	452.6K							T503	597.8K		
8	T801	290.0K			T802	291.0K	T803	412.0K	T804	489.7K	FL(8,1,6)	637(mol/hr)
9	T901	438.7K	T904	438.7K	T902	720.0K	T903	696.0K	T905	645.3K	T906	420.4K
					efficiency(η)		0.65		E	0.8164 (V)	Current(I)	122.80 (A)
									Power(P)		100.26 (watts)	

참고문헌

1. Handbook of Fuel Cell Performance, Prepared for the United States Department of Energy, Under Contract No. EC-77-C-03-1545, May 1980.
2. Maru, H. C. and Baker, B. S. , "Status of ERC's Phosphoric Acid Fuel Cell Technology." Paper presented at the Fuel Cell Workshop, Sarasota, Fla. ,

November 14-17, 1977.

- Johnson, W. H. , "Phosphoric Acid Technology Improvement Program." Paper presented at National Fuel Cell Seminar, San Francisco, July 11-13, 1978.

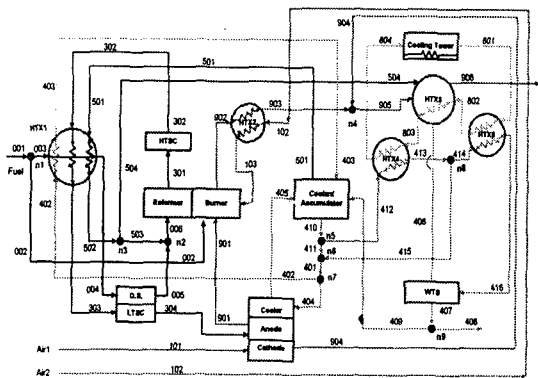


Fig. 1. Process flow diagram for PC25

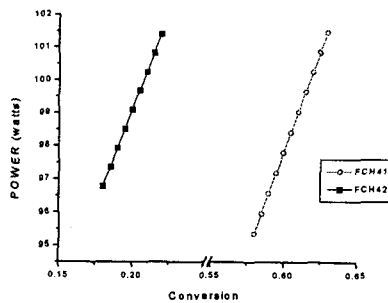
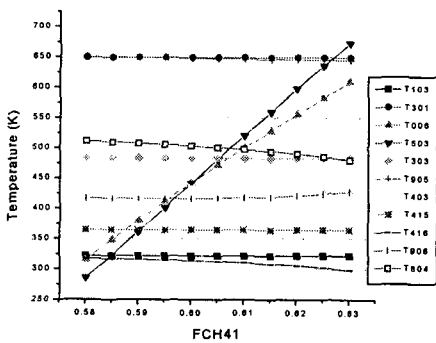
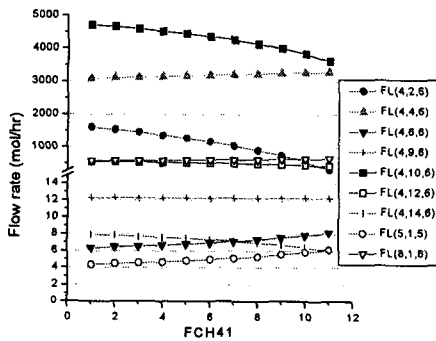


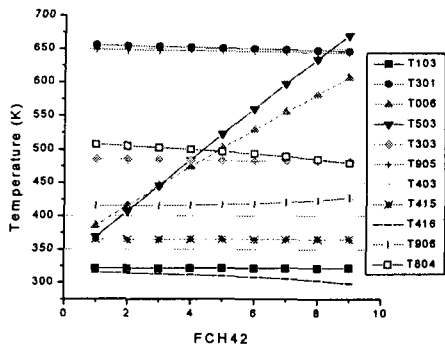
Fig. 2. The change of power with conversion; ○, FCH41; ■, FCH42.



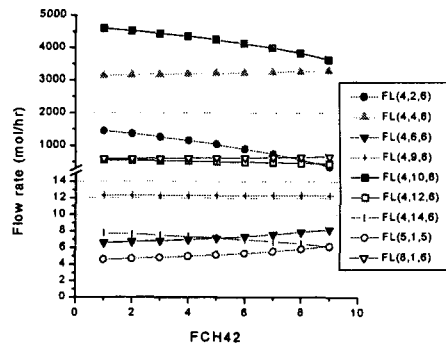
(a)



(b)



(c)



(d)

Fig. 3. The change of calculated values (a),(b)for FCH41, (c),(d)for FCH42.