

금속지지체형 고체산화물 연료전지의 열 및 물질전달 특성에 대한 전산해석

*박 준근¹⁾, 김 선영²⁾, **배 중면³⁾

Numerical Analysis of the Heat and Mass Transfer Characteristics in Metal-Supported Solid Oxide Fuel Cell

*Joonguen Park, Sunyoung Kim, **Joongmyeon Bae

Abstract : The metal-supported SOFC has been developed as a new concept of SOFC which has higher mechanical strength. However, the mass transfer rate in this type of SOFC may be decreased due to the contact layer and the support layer and that can cause the low performance. Therefore, numerical analysis of the heat and mass transfer characteristics in a metal-supported solid oxide fuel cell(SOFC) is studied in this paper. Governing equations and electrochemical equations are calculated simultaneously. And the numerical results are compared with the experimental results for the code validation. The current density, temperature, and pressure drop are suggested as numerical results.

Key words : solid oxide fuel cell(고체산화물연료전지), numerical analysis(전산해석), metal-supported SOFC(금속지지체형 고체산화물연료전지)

Nomenclature

E_a : activation energy, J/mol
 F : Faraday constant, 96485C/mol
 h : enthalpy, J/kg
 j : current density, A/m²
 J_0 : exchange current density, A/m²
 n : number of ion
 P_i : partial pressure of species i , bar
 R : gas constant, 8.314 J/mol · K
 S_e : energy source, J/m³/s
 S_m : momentum source, kg/m³/s
 t : thickness, m
 T : temperature, K
 u_i : surface velocity, m/s
 V : voltage, V
 Y_i : mass fraction of species i

Greek letters

Δg_f : gibbs free energy, J/mol
 ζ : tortuosity
 η_{act} : activation polarization, V
 η_{ohmic} : ohmic polarization, V
 ρ : density, kg/m³
 σ : ion conductivity, S/m
 χ : porosity

subscrip

a : anode
 c : cathode
 el : electrolyte

1. 서론

연료전지는 연료의 화학에너지를 전기에너지로 변환시키는 에너지변환장치로서 고효율, 친환경, 저소음 등의 장점을 가지고 있기 때문에 최근 저탄소 녹색성장을 위한 아이템으로 각광받고있다¹⁾. 다양한 연료전지 중 고체산화물 연료전지(Solid Oxide Fuel Cell, SOFC)는 세라믹을 기반으로 만들어지는 고온형 연료전지로서 이동형 전원장치부터 대형 발전소용까지 폭넓게 적용될 수 있다는 장점이 있다²⁾. 그러나 세라믹 재료는 충격에 약하기 때문에 기계적 강도의 향

-
- 1) 한국과학기술원 기계항공시스템학부
E-mail : joonguen@kaist.ac.kr
Tel : (042)350-3085 Fax : (042)350-8207
 - 2) 한국과학기술원 기계항공시스템학부
E-mail : aerobrain@kaist.ac.kr
Tel : (042)350-3085 Fax : (042)350-8207
 - 3) 한국과학기술원 기계항공시스템학부
E-mail : jmbae@kaist.ac.kr
Tel : (042)350-3045 Fax : (042)350-3210

상이 필요하다. 금속지지체형 SOFC는 금속과 세라믹을 접합시켜서 강도를 향상시킨 신개념 SOFC로서 국내외에서 활발히 연구되어 왔다³⁾. 그러나 유로와 연료극 사이에 존재하는 접합층과 금속지지체로 인해 물질전달 저항이 증가하고 이것은 SOFC의 성능감소로 이어진다. 그러므로 금속지지체형 SOFC 내부의 열 및 물질전달을 분석하고 이를 최적화하기 위한 연구가 필요하다.

본 논문에서는 열 및 물질전달 해석을 위해 전산해석 기법을 이용한다. SOFC는 밀폐형 구조이고 표면에 전류가 흐르기 때문에 내부 온도 및 가스조성을 측정하기 어렵다. 또한 유로의 가공 및 SOFC 스택 제작을 위해서는 많은 시간과 비용이 필요하다. 그러나 전산해석 기법을 이용하면 이러한 문제들을 극복할 수 있다. 이를 위해 지배방정식과 전기화학반응식을 함께 해석하는 시뮬레이터를 만들고 신뢰성 검증을 위해서 실험결과와 비교한다. 그리고 해석결과로서 전류밀도, 온도, 압력분포 등을 제시한다.

2. 지배방정식

지배방정식은 Eq.1-4와 같다. 연속방정식, 운동량보존 방정식, 에너지보존 방정식 및 종 방정식이 적용되었다. 전기화학반응으로 인한 발열량과 생성 및 소모되는 물질량을 모사하기 위하여 소스항이 계산된다. 그리고 SOFC의 전극은 다공성매질이다. 그러므로 다공성 매질 내부의 열 및 물질이동을 해석하기 위하여 Ergun equation (Eq.5)⁴⁾을 이용하였다.

Continuity equation

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j) = 0 \quad (1)$$

Momentum balance equation

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j u_i - \tau_{ij}) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + S_i \quad (2)$$

Energy balance equation

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho h u_j + F_{h,j}) = u_j \frac{\partial p}{\partial x_j} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + S_E \quad (3)$$

Species balance equation

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_m) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j Y_m + F_{m,j}) = S_S \quad (4)$$

$$\frac{dp}{dx_j} = -\frac{150\mu(1-\chi)^2 u}{\chi^3 D_p^2} - \frac{1.75\rho(1-\chi)u^2}{\chi^3 D_p} \quad (5)$$

3. 전기화학반응식

SOFC의 전압을 영향을 미치는 다양한 변수들이 존재하지만 일반적인 가정을 통하여 수치해석 모델을 단순화할 수 있다. 본 논문에서는 단전지의 전압을 계산하기 위하여 다음과 같은 식을 사용한다⁵⁾.

$$V = OCV - \eta_{act} - \eta_{ohmic} \quad (6)$$

개회로전압(Open Circuit Voltage, OCV)은 이론적인 최대 전압이며 Nernst 식을 통하여 계산할 수 있다⁶⁾.

$$E = \frac{-\bar{g}_f^0}{2F} + \frac{RT}{2F} \ln\left(\frac{p_{H_2} p_{O_2}^{1/2}}{p_{H_2O}}\right) \quad (7)$$

활성화 손실(Activation Loss, η_{act})을 계산하기 위해서 Chan의 모델(Eq.3)을 이용한다⁷⁾.

$$\eta_{act} = \frac{RT}{\alpha n_e F} \sinh^{-1}\left(\frac{j}{2j_0}\right) \quad (8)$$

전기저항손실은 전자가 전극을 통과하거나 이온이 전해질을 통과할 때 발생하는 전기적 저항이다. 전기저항손실은 전극 및 전해질에서 모두 발생할 수 있지만 전해질을 통과하는 이온으로 인한 저항이 전극을 통과하는 전자로 인한 저항보다 더 크기 때문에 본 논문에서는 이온전도에 의한 전기저항만을 고려한다⁸⁾. 전기저항손실은 식(10)을 통해 계산할 수 있다.

$$\eta_{ohm} = j \cdot \sum_k \frac{t_k}{\rho_k} \quad (9)$$

반응물이 다공성매질인 전극을 통과하기 때문에 전기화학반응이 일어나는 전극 및 전해질 경계면과 유로 사이에 농도차이가 발생한다. 그러므로 전기화학반응의 정확한 계산을 위하여 전극 및 전해질 표면에 도달하는 반응물의 분압을 계산해야한다. 반응물의 농도분포를 계산할 때 가장 중요한 영향을 미치는 변수는 확산계수(Diffusivity)이다. 유로에서의 확산계수를 계산하기 위해 Chapman-Enskog 이론을 적용한 Binary Diffusion 모델(Eq.6)을 이용한다⁹⁾.

$$D_{AB} = 1.853 \times 10^{-3} \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}\right)^{1/2} \frac{T^{3/2}}{p \sigma_{AB}^2 \Omega_{DAB}} \quad (6)$$

다공성매질에서의 확산계수를 계산하기 위해서 우선 Knudsen Diffusivity(Eq.7)를 계산해야한다.

$$D_{Ak} = 97.0\bar{v} \sqrt{\frac{T}{M_A}} \quad (7)$$

Binary Diffusivity와 Knudsen Diffusivity를 이용하여 Eq.8과 같이 다공성매질에서의 확산계수를 계산할 수 있다.

$$\frac{1}{D_{A,eff}} = \left(\frac{\epsilon}{\tau}\right) \left(\frac{1}{D_{AB}} + \frac{1}{D_{Ak}}\right) \quad (8)$$

3. 검증

금속지지체형 SOFC를 제작하여 IV curve를 측

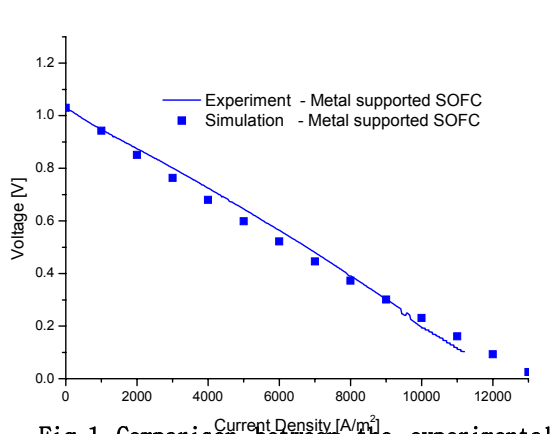


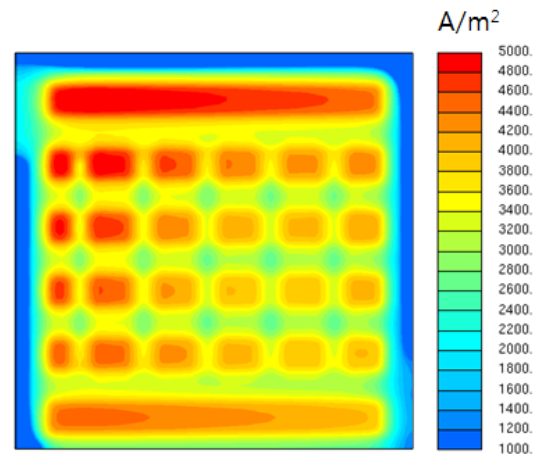
Fig.1 Comparison between the experimental results and the numerical results

정한다. 그리고 같은 작동조건에서 시뮬레이션을 수행하고 그 결과를 비교한다. 전체적으로 유사한 값과 경향을 보여주고 있다(Fig.1). 그러나 전반적으로 시뮬레이션의 전압이 낮아진다. 이것은 정확하지 못한 이온전도도의 사용으로 인해 전기저항손실 계산시 오차가 발생했기 때문이라고 생각된다.

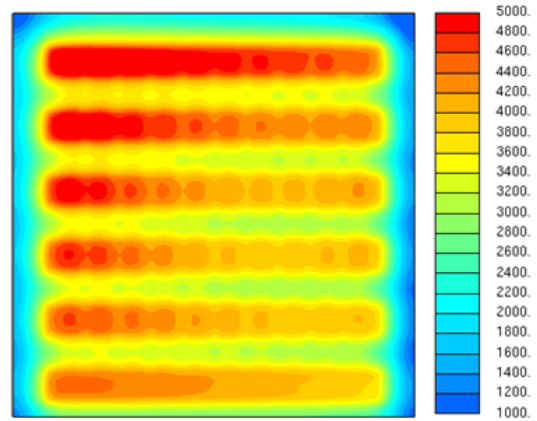
4. 결과

연료극 및 공기극 유로의 형상 변화에 따른 영향을 살펴보기 위해서 전류밀도를 비교하였다. Fig.2(a) 기본적인 금속지지체형 SOFC 해석 결과로서 상단 좌측에서 수소가 공급되며 하단 우측에서 산소가 공급된다. 연료로 사용되는 수소의 농도가 높을 수록 전류밀도가 높아지기 때문에 상단에서 높은 전류밀도가 나타난다. 그리고 연료극과 공기극의 유로가 교차하는 지점에서 전류밀도가 높고 유로의 벽이 있는 곳은 물질전달이 잘 일어나지 않기 때문에 전류밀도가 낮아진다. 그리고 가장자리 영역의 경우 산소 전달이 잘 일어나지 않기 때문에 전류밀도가 낮아진다. 이것은 공기극의 두께가 아주 얇기 때문에 발생하는 현상이다.

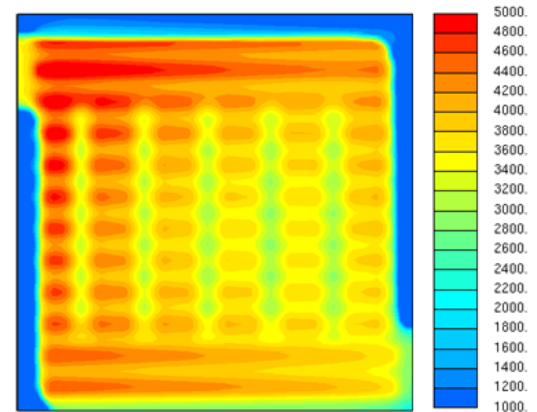
Fig.2(b)는 공기극 유로를 세분화한 경우의 결과이다. 이로 인해 산소전달이 잘 일어나기 때문에 가장자리 영역의 전류밀도가 높아진다. Fig.2(c)는 연료극 유로를 세분화한 경우의 결과이다. 수소 전달이 잘 일어나기 때문에 전류밀도가 전체적으로 높은 값을 나타낸다. 이를 통해 공기극 유로보다 연료극 유로의 변화 시 SOFC 전체성능을 향상시킬 수 있다는 것을 알 수 있다.



(a) Basic model



(b) Change of cathode channel design



(c) Change of anode channel design

Fig.2 Current density of metal supported SOFC

5. 결론

금속지지체형 SOFC의 열 및 물질전달을 분석하기 위해서 수치해석 기법을 이용한다. 지배방정식 및 전기화학반응을 함께 계산하고 해석결과를 실험결과와 비교하여 신뢰성을 검증한다. 해석결과 수소 농도에 따른 전류밀도의 분포를 확인할 수 있었으면 산소전달한계로 인한 가장자리 영역의 전류밀도 감소를 확인할 수 있었다. 또한 공기극 유속에 비해 연료극 유속 변화 시 전체적인 전류밀도가 향상된다는 것을 확인하였다.

후 기

본 연구는 지식경제부의 신재생에너지기술개발사업(2008-N-FC12-J-03-1-000)과 SOFC 원천기술연구센터 사업의 일환이며, KAIST EEWS 및 BK21 프로그램의 지원으로 수행되었습니다.

References

- [1] Bae, J., Lim, S., Jee, H., Kim, J., Yoo, Y.-S., T. Lee, 2007, "Small stack performance of intermediate temperature-operating solid oxide fuel cells using stainless steel interconnects and anode-supported single cell", *J. Power Sources*, Vol. 172, No. 1, pp. 100~107
- [2] Costamagna, P., Magistri, L., Massardo, A.F., 2001, "Design and part-load performance of a hybrid system based on a solid oxide fuel cell reactor and a micro gas turbine", *J. Power Sources*, Vol. 96, No. 1, pp. 352~368
- [3] Lee, C., Bae, J., 2007, "Fabrication and characterization of metal-supported solid oxide fuel cells", *J. Power Sources*, Vol. 176, No. 1, pp. 62-69
- [4] Niven, R.K., 2002, "Physical insight into the Ergun and Wen and Yu equations for fluid flow in packed and fluidised beds", *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 57, No. 3, pp. 527-534
- [5] Larminie, J., Dicks, A., 2003, *Fuel Cell Systems Explained, 2nd ed.*, WILEY, USA
- [6] O'Hayre, R., Cha, S.-W., Colella, W., Prinz, F.B., 2006, *Fuel Cell Fundamentals*, WILEY, USA
- [7] Chan, S.H., Khor, K.A., Xia, Z.T., 2001, "Complete polarization model of a solid oxide fuel cell and its sensitivity to the change of cell component thickness", *J. Power Sources*, Vol. 93, No. 1-2, pp. 130-140
- [8] Sundén, B., Faghri, M., 2005, *Transport Phenomena in Fuel Cells*, WIT press, USA
- [9] Bird, R.B., Stewart, W.E., Lightfoot, E.N., 2002, *Transport Phenomena, 2nd ed.*, WILEY, USA