

고온열을 이용한 고온수증기전기분해장치(HTSE)에 의한 수소생산 특성에 관한 전산유체해석적 연구

한원희* · 최정식** · 윤석훈*** · 윤두호**** · 최재혁****†

* 목포해양대학교 기관시스템공학부, ** 한국해양대학교 대학원,

*** 한국해양대학교 기관시스템공학부, **** 한국폴리텍 VII대학 부산캠퍼스 컴퓨터응용금형과

A CFD Analysis Study on the Characteristics of Hydrogen Production by High Temperature Steam Electrolysis(HTSE) Using High Temperature Heat

Won-Hui Han* · Jung-Sik Choi** · Seok-Hun Yoon*** · Doo-Ho Yoon**** · Jae-Hyuk Choi****†

* Division of Marine Engineering System Mokpo National Maritime University, Mokpo, Korea

** Graduate School of Marine System Engineering Korea Maritime University, Busan, Korea

*** Division of Marine System Engineering Korea Maritime University, Busan, Korea

**** Busan Campus of Korea Polytechnics VII, Busan, Korea

요 약 : 고온수증기전기분해(HTSE) 장치의 수소생산 및 열·화학적 특성을 파악하고자 COMSOL Multiphysics®를 사용해 2차원 정상상태 수치해석을 실시하였다. 계산을 위한 주요 파라미터로는 작동전압, ASR(Area-specific Resistance) 및 유입가스의 온도와 압력 등이다. 해석결과 1.2454 V에서 Thermal-neutral Voltage가 나타나고, 작동 전압이 증가함에 따라 Cell의 내부 온도가 단조 증가하는 것이 아니라 Thermal-neutral Voltage를 기준으로 낮은 전압에서는 Cell의 온도가 감소하고, 높은 전압에서는 Cell의 온도가 증가하였다. 또한, ASR 값이 증가함에 따라 Cell 내부의 온도는 하강하고, 수소생산율도 낮아지는 경향을 보였다.

핵심용어 : 고온수증기전기분해장치, 수소생산, 면적비저항, 전산유체해석, 콤포스

Abstract : The characteristics for hydrogen production and the thermochemical properties of high temperature steam electrolysis(HTSE) device have been numerically analyzed in a two-dimension, steady-state with using the COMSOL Multiphysics®. The main parameters for the calculation are applied voltage, ASR(Area-specific Resistance), temperature and pressure of the inlet gas flow. The results showed that thermal-neutral voltage was 1.2454 V and rather than the cell temperature increases or decreases with increasing applied voltage by thermal-neutral voltage starting this voltage the temperature in high voltage tended to rise and temperature in the low voltage tended to fall. And with, increasing the values of ASR, temperature inside the cell and the hydrogen production rate were decreased.

Key Words : HTSE, Hydrogen production, ASR(Area-specific Resistance), CFD, 1.2454

1. 서 론

1.1 연구의 배경

고온열을 이용한 수소생산 방법에는 사용하는 에너지의 형태(전기, 열) 및 고온열의 온도 수준 등을 고려한 다양한 종류가 있으며 실용화 시기, 에너지 이용 효율, 생산 비용 등에 따른 각각의 특징 및 장·단점이 존재한다(한 등, 2010).

미국과 일본을 비롯한 세계 여러 나라에서 궁극적인 개발 목표로 삼고 있는 것은 물을 원료로, 고온열을 이용한 열화학 분해법이다. 이 외에도 전기분해법, 고온수증기전기분해법, 원자로의 열을 이용한 천연 가스 수증기 개질법 등 여러 가지 방법이 제안, 연구·개발되고 있다.

열화학 분해법에 의한 수소생산효율은 45%~52%를 달성할 수 있으나 대부분의 열화학 프로세스들이 900℃~1000℃의 높은 온도를 필요로 하고, 이로 인해 각종 설비에 심각한 부식 현상을 초래할 수 있다(O'Brien et al., 2004a).

일반적으로 상온에서 물을 전기분해하여 수소를 생산할 경

* 대표저자 : 종신회원, winhan@mmu.ac.kr, 061-240-7224

† 교신저자 : 종신회원, choi_jh@hhu.ac.kr, 051-410-4257

우 분해 전압이 떨어지고 동시에 전극에서의 과전압이 저하하며 이로 인해 수소의 생산 효율은 24%~32%로 매우 낮은 편이다. 이에 반해 고온열을 생산할 수 있는 초고온가스원자로(Very High Temperature Reactor, VHTR)에 고온수증기전기 분해장치(HTSE)를 연계하여 수소를 생산할 경우 45%~55%의 매우 높은 수소 생산효율을 가질 수 있을 뿐만 아니라 열화학 분해법에 의한 부식현상이 발생하지 않는다. 또한, 화석연료를 이용하지 않으므로 탄화수소(Hydrocarbon)의 방출이 없어 온실가스 배출규제, 지구 온난화 및 각종 환경문제 등의 감소에도 일조할 수 있으며, 이와 같은 특징으로 인해 고온수증기전기 분해는 수소 생산효율 향상에 있어 매우 매력적인 기술이다.

1.2 연구의 동향

최근 고온수증기전기 분해장치에 관한 연구가 여러 나라에서 이루어지고 있으나, 현재까지의 성과는 극히 제한적이다.

독일의 Dornier사는 실용적인 전해요소를 만들어 997 °C 에서 6.8NL/h의 수소를 생산함과 동시에 이 전해요소를 다수 합한 전해모듈을 만들었다(W. Doenitz et al., 1980; W. Dönitz and Erdle, 1985).

일본의 원자력연구소(JAEA)에서는 두께 3mm의 얇은 Yttria-Stabilized Zirconia를 전해질로 한 평판형 전기분해 셀을 가공하여 850 °C의 조건에서 실험, 2.4NL/h의 수소를 생산하였다. 이 실험에서 평판형 전기분해 셀의 수소생산 능력이 기존의 튜브형12 Cells 전기분해장치보다 우수하다는 것을 증명하였다(日野 龍太郎 and 宮本 喜晟, 1995).

미국의 INL(Idaho National Laboratory)에서는 HTSE의 기술상향과 관련한 연구프로그램이 진행되고 있으며, 단셀(Single-cell)에 관한 성능 등의 실험적 결과들이 발표되었다(Matt Richards et al., 2006; IAEA, 1999; O'Brien et al., 2005).

Fig. 1은 실험을 위해 사용된 SOEC(Solid Oxide Electrolysis Cell)의 Stack을, Fig. 2는 Interconnect Plate와 전기분해 Cell을 나타낸다. 10개의 Cell이 하나의 Stack을 이루고 있는 것으로 Steam/hydrogen의 흐름과 Air의 흐름은 Cross 형태로 흐르면서 반응한다. Stack의 전체 면적은 10 cm × 10 cm 이고, 유효면적은 64 cm²이다. 이러한 단셀 실험을 통해 이론적인 값에 가까운 수소 생산 결과를 나타낼바 있다. 또한, Stephen Herring et al.(2007)은 10-Cell 평판형 전기분해 스택(Stack)의 실험결과와 비교하기 위해 상용프로그램(FLUENT)를 이용해 3차원 수치해석을 행하여 여러 조건에서 각 Cell의 상세한 온도 분포 및 Nernst Potential, Operating Potential, Current Density, 수소생산량 등을 조사하였다.

Youngjoon et al.(2007)은 수소를 생산하기 위해 HTGR(High Temperature Gas Reactor)에 연계된 HTSE의 열효율과 전기에너지의 평형(Balance of electricity)에 관하여 평가하였으며, 열효율과 전기에너지의 평형을 위해 중요한 요소로는 고체산화물 Cell의 효율이라는 것을 증명하였다.

1.3 연구방법 및 목적

앞에서 살펴본 고온수증기전기 분해장치에 관한 실험 및 계산들은 1기압 하에서 이루어졌으며 특히, 수치계산의 경우 각 Cell의 채널에 고온의 수증기가 일정하게 유입되어 반응이 일어나는 것으로 가정하였다.

하지만 실제 VHTR과 연결된 HTSE의 경우 5MPa 이상의 수증기가 유입되며, 각 Cell 및 Cell의 Channel에 유입되는 수증기의 조건은 일정하지 않을 것으로 생각된다.

본 연구에서는 고온수증기전기 분해장치(HTES)에 대한 열·화학 특성 및 수소 생산능력을 조사하기 위해 전산유체해석을 행하였으며, 계산을 위해 사용된 프로그램은 상용 FEM Code인 COMSOL Multiphysics[®]이며, 2차원 정상상태 수치해석을 행하였다(Pryor, 2009).

수치해석에는 INL의 실험 시 사용된 Cell을 기준으로 하여 하나의 Cell에 존재하는 32 Channels 전부에 대해 수치계산을 실시하였으며, 실제 VHTR과 연결된 HTSE의 조건과 동일하도록 850 °C, 5 MPa, 95% H₂O + 5% H₂가 HTSE 내부로 유입되는 조건을 설정하였고, 작동 전압에 따른 현상의 차이를 알아보기 위해 여러 전압에서 Cell의 열·화학특성, Cell의 압력, ASR(Area Specific Resistance)의 변화 및 가스의 유입 온도에 따른 특성을 조사하였다.

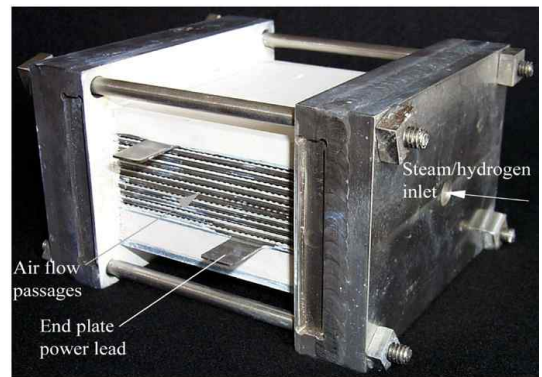


Fig. 1. Detail of SOEC stack.

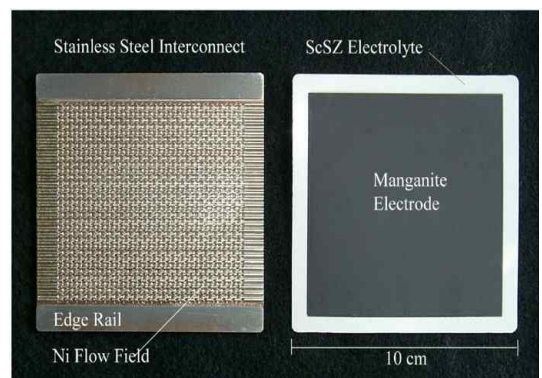


Fig. 2. Interconnect plate and single electrolysis cell.

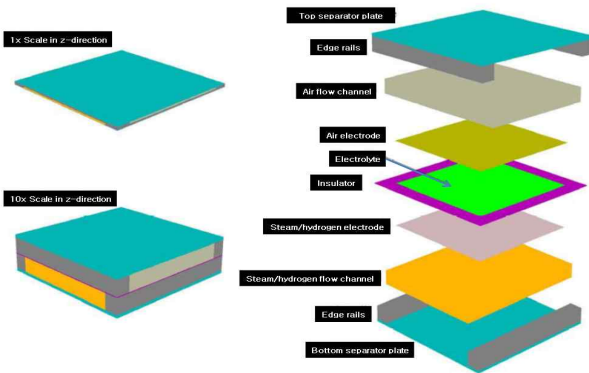
2. 전산유체해석 모델

2.1 단셀(Single-cell) SOEC 모델

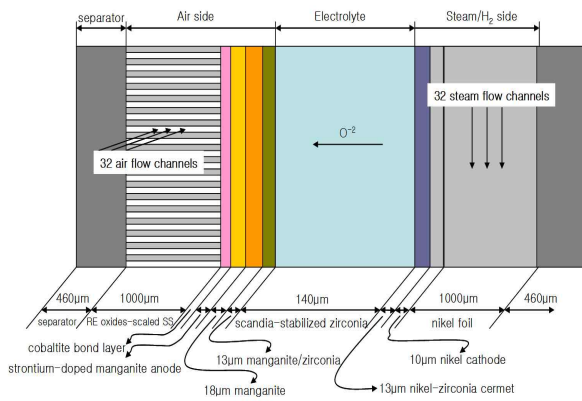
Fig. 3은 Stephen Herring et al.(2007) 에 의해 계산된 SOEC의 개략도이다.

Cell 당 Active-area는 64 cm^2 , 구성은 Top/bottom separators, Air flow channel, Air electrode, Electrolyte, Steam/hydrogen electrode, Steam/hydrogen flow channel로 되어있다.

Nickel재질의 Steam/hydrogen 와 Ferritic stainless steel 재질의 Air-flow channel의 두께는 각각 $1000 \mu\text{m}$ 이며, 전해질(Electrolyte)은 $140 \mu\text{m}$ 두께의 Scandia Stabilized Zirconia로 만들어졌다. Cell 당 32 Channels로 구성되어 있으며 채널의 폭과 높이는 1.019 mm 이다. Steam/hydrogen electrode(Cathode)는 $10 \mu\text{m}$ 의 Nickel로 되어 있고, Air electrode(Anode)는 Strontium-doped Lanthanum Manganite(LSM)으로 되어 있다.



(a) Layout of single-cell SOEC



(b) Components of Single-cell SOEC

Fig. 3. Single-cell SOEC model.

2.2 수치해석 모델

Fig. 4는 고온수증기전기분해장치(HTSE)의 개략적인 모습으로 이 연구의 수치해석 모델이며, 앞서 살펴본 단셀 SOEC를 기준으로 간결하고 효율적인 수치해석을 위해 Steam/hydrogen

(Cathode) side에 대해서만 계산을 수행하였다.

수치해석 모델의 입구와 출구의 폭은 각각 10 mm , 각 채널의 폭은 1 mm , 길이는 80 mm 이며, 총 32개의 Channels이 있다.

유입되는 가스의 질량유량은 $8.053 \times 10^{-6} \text{ kg/s}$, 유입가스의 온도는 1123 K 이며, 계산 압력은 5 MPa , Cell 당 Active-area는 64 cm^2 이다.

$95\% \text{ H}_2\text{O} + 5\% \text{ H}_2$ 로 유입된 가스는 각 Channel 부분에서만 반응하며, 생성되는 O_2 는 전부 Air side로 전달되는 것으로 가정하였다.

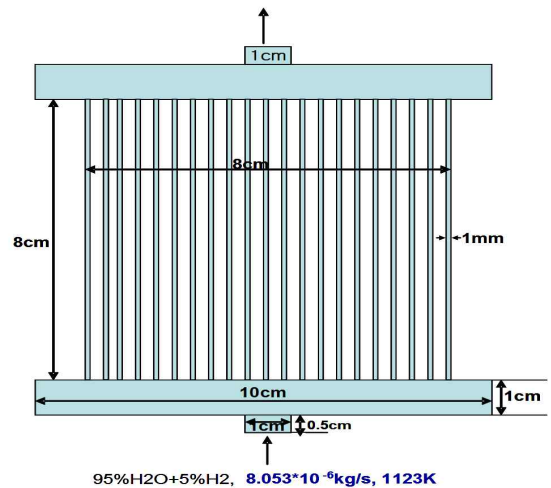


Fig. 4. A schematic of HTSE.

3. 전산유체해석 방법 및 조건 모델

3.1 격자(Mesh) 생성

Fig. 5는 계산시 사용된 Mesh구조를 나타낸다.

COMSOL Multiphysics[®]에서는 격자 생성을 위해 2가지 형태를 제공한다. Free Mesher(Triangles) 및 Mapped Mesher(Quads)로 각각 장·단점을 가지고 있다.

Free Mesher(Triangles)는 격자 생성 및 격자 크기의 변경이 용이하나 해석시간이 길고, 많은 기억용량을 요구한다.

Mapped Mesher(Quads)는 균일한 격자 생성 및 적용이 용이하나 복잡한 형상에의 적용이 어렵다.

이에 이 연구에서는 Free Mesher(Triangles)을 이용하여 입구/출구 영역과 반응이 있어나는 채널 내부 영역으로 나누어 격자를 생성하였으며, 접촉면에서는 보다 조밀하게 배치하여 해석결과의 정확도를 높이고자 하였으며, 반응이 일어나는 채널에서의 Maximum mesh size는 $5.0 \text{ E-}04 \text{ m}$ 이다.

3.2 경계조건 및 해석조건

유동장 해석을 위한 경계조건으로 입구조건은 속도 조건으로, 출구조건은 압력 조건을 사용하였다.

내부의 경계조건으로는 연속조건을 사용하였으며, Symmetry

Table 1. Property of substance

Symbol	Property	Value	Symbol	Property	Value	Symbol	Property	Value
ρ_{inlet}	Mixture Density	0.186539	F	Faraday Constant	96487	m_{h_2}	H ₂ Mass	2
v_1	Inlet Velocity	0.549665	$h_{2o_{ent}}$	H ₂ O Formation Entalphy	2.41827	m_{n_2}	N ₂ Mass	28
p_1	HTE Pressure	5×10 ⁶	T_{bc}	Inlet Steel Boundary Temperature	1123	pre_{exp}	Pre-exponential Factor	145
T_0	Initial Temperature	1123	T_{bc-out}	Outlet Steel Boundary Temperature	1123	E	Activation Energy	15000
T_{inlet}	Inlet Temperature	1123	$m_{h_2,0}$	H ₂ O Mass	18	ks_{h_2o}	Steam Electrical Conductivity	1.129×10 ⁻⁵

와 No slip 조건을 사용 하였으며, 질량보존식과 운동량 보존식은 채널을 비롯한 모든 영역의 해석에 사용되었다.

화학종 보존식 해석을 위한 경계조건으로 채널 입구에서 농도조건을 설정하였고, 채널 출구에는 대류조건(Convective flow)으로 가정하였다. 또한, 화학 반응은 각 채널에서 일어나는 것으로 가정하였고, 반응에 의해 생성된 O₂는 전부 Anode side로 유입되는 것으로 가정하였으며, 입구/출구에서는 반응이 일어나지 않는 것으로 설정 하였다.

에너지 보존식 해석을 위한 경계조건으로 입구조건은 초기 온도조건을, 출구조건은 Convective flux 조건을 사용하였으며, 대류와 전도의 효과를 고려한 열 전달 방정식을 사용하였고, 복사 열전달에 의한 효과는 고려하지 않았다.

연속방정식, 운동량방정식, 화학종 보존방정식 및 에너지 보존방정식을 연계하여 수치해석을 행하여, 오차범위 10⁻⁶이내에서 결과를 얻었다.

계산을 위해 사용된 프로그램은 상용 FEM Code인 COMSOL Multiphysics[®]로 2차원 정상상태 수치해석을 행하였으며, Direct Solver 및 Iterative Solver를 사용하여 물성치를 구하였다.

Table 1에는 모델링에 사용된 물성값을 정리하였다.

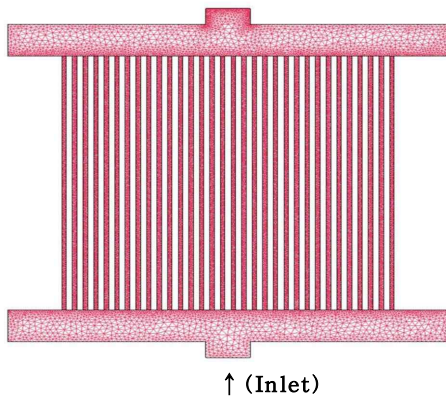


Fig. 5. Mesh structure of HTSE.

3.3 HTSE 반응유도

Open-cell potential은 보통 모든 가스의 경우 Nernst 방정식에 의해 예상 되어질 수 있는데, Hydrogen/oxygen/steam의 system의 경우 식(1)과 같이 나타낼 수 있다.

$$E = \frac{-\Delta g_f^o}{2F} - \frac{R_u T}{2F} \ln \left[\left(\frac{y_{H_2O}}{y_{H_2} y_{O_2}^{1/2}} \right) \left(\frac{P}{P_{std}} \right)^{-1/2} \right] \quad (1)$$

(여기서, g_f 는 Gibbs Energy, F 는 Faraday Constant, R_u 는 Gas Constant, T 는 Temperature, P 는 Cell Pressure, P_{std} 는 0.1 MPa(표준대기압)를, y_{H_2O} , y_{H_2} , y_{O_2} 는 각각 Water-vapor, Hydrogen, Oxygen의 Molar-fraction 을 나타낸다.)

Stack의 경우 potential은 일반적으로 식(2)로 나타낸다.

$$E = N_{cells} E \quad (2)$$

식(1)에서 y_{H_2O} 는 식(3)과 같이 분압으로 나타낼 수 있다.

$$y_{H_2O} = \frac{P_{H_2O}}{P} \quad (3)$$

입구에서의 수증기(H₂O)의 생성량은 입구의 질소와 수소의 몰 유량의 합에 비례하므로 식(4)와 같이 나타낼 수 있다.

$$\dot{N}_{H_2O,i} = \frac{(\dot{N}_{N_2} + \dot{N}_{H_2,i}) y_{H_2O,i}}{1 - y_{H_2O,i}} \quad (4)$$

식(4)가 유도되면 입구에서의 $y_{H_2,i}$ 는 아래와 같이 나타낼 수 있다.

$$y_{H_2,i} = \frac{(1 - y_{H_2O,i}) \dot{N}_{H_2,i}}{\dot{N}_{H_2,i} + \dot{N}_{N_2}} \quad (5)$$

고온열을 이용한 고온수증기전기분해장치(HTSE)에 의한 수소생산 특성에 관한 전산유체해석적 연구

$$\dot{N}_{N_2} = Q_{s,N_2} \frac{P_{std}}{R_u T_{std}} \quad (6)$$

$$\dot{N}_{H_2,i} = Q_{s,H_2} \frac{P_{std}}{R_u T_{std}} \quad (7)$$

(Q는 체적유량(cm³/min)을 나타낸다.)

따라서 수소의 생산량과 수증기의 소비량은 식(8)과 같이 결정되어진다.

$$\Delta \dot{N}_{H_2} = -\Delta \dot{N}_{H_2O} \quad (8)$$

Stack에 대한 수소 생산량 및 수증기 소비량은 식(9)와 같이 나타내어진다.

$$\Delta \dot{N}_{H_2} = \frac{I}{2F} N_{cells} = -\Delta \dot{N}_{H_2O} \quad (9)$$

고온전기분해의 성능에서 중요한 파라미터 중의 하나가 ASR (Area Specific Resistance)이다. 일반적으로 ASR은 식(10)과 같이 나타낼 수 있다.

$$ASR = \frac{E - E_{OCV}}{i} \quad i = \frac{I}{A_{cell}} \quad (10)$$

(여기서, E 는 Working Voltage, I 는 Current Density(A/cm²), E_{OCV} 는 Open-cell potential, A_{cell} 은 Active-area를 나타낸다.)

Thermal-neutral Voltage는 식(11)로 유도할 수 있다.

$$V_m = \frac{\Delta h_R}{2F} \quad (11)$$

(여기서, h_R 은 Enthalpy Change in Reaction(J/mol)을 나타낸다.)

4. 해석결과 및 고찰

4.1 작동전압에 따른 속도분포

Fig. 6은 입구의 가스온도가 1123 K, 압력이 5 MPa일 때 작동 전압(E)이 1.400 V에서의 속도 분포를 나타낸다. 압력에 의한 밀도의 변화가 매우 큰 관계로 속도는 대체적으로 느린 경향을 나타낸다. 그림에서 알 수 있듯이 최대 속도는 출구 부분에서 0.0167 m/s를 보이고 있으며, 양쪽 사이드로 갈수록 속도는

늦어지며, 이에 따라 양 사이드 채널에서의 속도가 가장 느린 것을 알 수 있다. 이것은 가스가 Stack으로 유입될 경우 일정한 속도 값을 가지지 않는다는 것을 의미한다. 많은 수의 Cell을 가진 Stack인 경우 그 차이는 더욱 클 것이다. 또한, 이에 따른 온도 및 농도분포도 변화하여 Cell내부의 성능에도 차이가 있을 것으로 생각되며, 이를 고려하여 전기분해장치를 설계할 필요가 있을 것으로 사료된다.

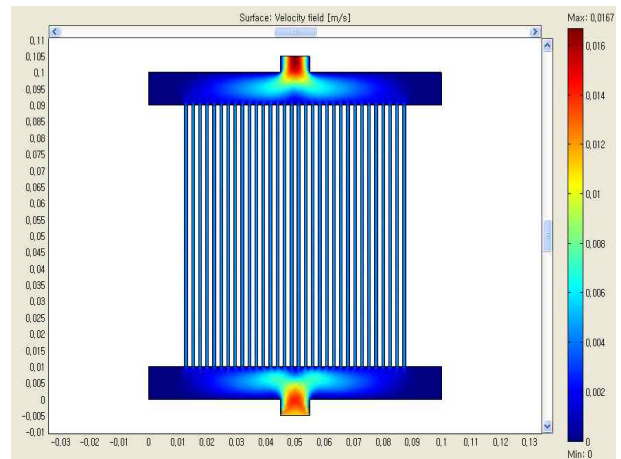


Fig. 6. Velocity distribution.

4.2 작동전압에 따른 채널의 평균온도 분포

Fig. 7은 작동전압에 따른 채널의 평균온도를 나타낸 그래프이다. 그래프에서 보듯이 작동전압(E) 1.2454 V 부근까지는 평균온도의 분포가 거의 일정하다가 1.2454 V를 기점으로 작동전압(E)이 증가함에 따라 평균온도의 변화가 크게 나타나는 것을 알 수 있다.

즉, 작동전압(E) 1.2454 V 부근에서 Cell에 요구되는 흡열 반응열과 Ohmic 열 생성이 Balance를 갖는 Thermal-neutral Voltage에 근접했음을 의미한다.

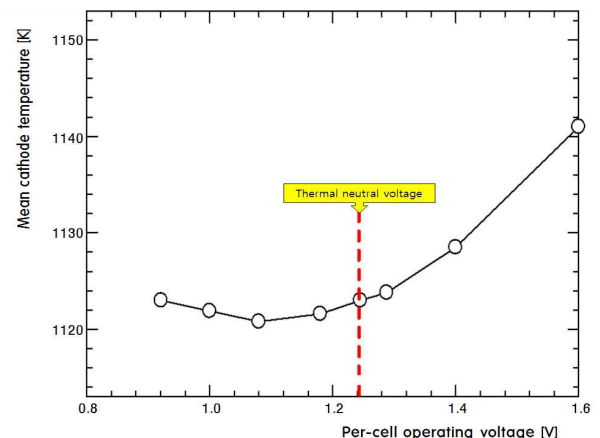
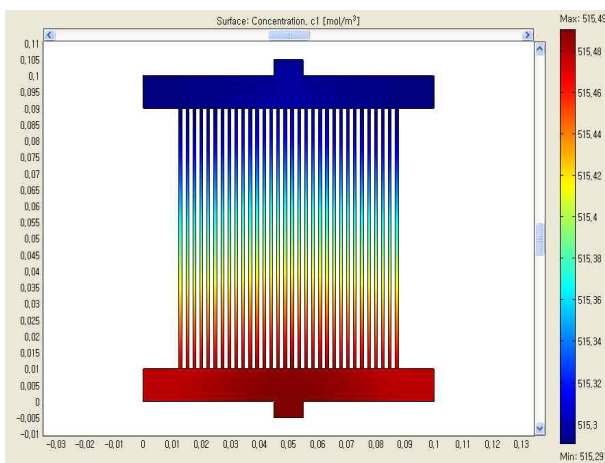


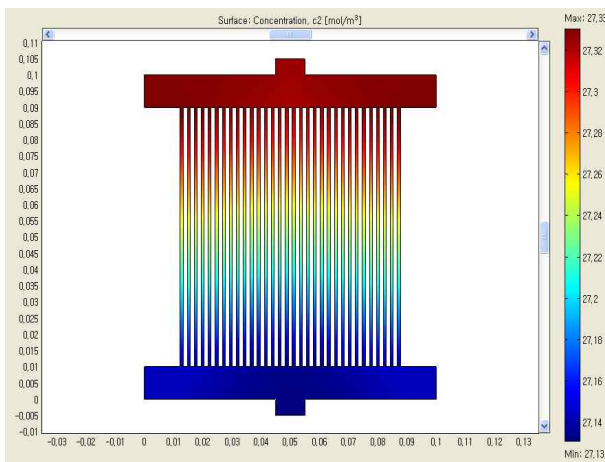
Fig. 7. Mean cathode temperature for applied voltages.

4.3 수증기(H₂O) 및 수소(H₂)의 농도분포

Fig. 8은 입구의 가스온도가 1123 K, 압력이 5 MPa, 작동 전압이 1.400 V에서의 수증기(H₂O)와 수소(H₂)의 농도 분포를 나타낸다. 수증기는 515.49 mol/m³에서 515.291 mol/m³으로 감소하고, 수소는 27.131 mol/m³에서 27.33 mol/m³으로 증가하고 있는 것을 알 수 있다. 여기서 흥미로운 점은 그 분포를 살펴보면 가운데 채널에서 빠른 수증기의 감소와 수소의 증가를 보이고 양 사이드로 갈수록 낮은 속도로 수증기가 감소하고 수소가 증가하고 있다는 것을 알 수 있다. 이것은 가스의 분포가 전체의 채널에서 일정하게 증가하고 감소하지 않는다는 것을 의미한다. 이러한 현상은 많은 Cell을 가진 스택의 경우 그 차이는 더욱 클 것이라 생각된다.



(a) H₂O concentration



(b) H₂ concentration

Fig. 8 Concentrations of H₂O and H₂

4.4 작동전압에 따른 온도분포

Fig. 9 (a)~(f)는 입구의 가스온도가 1123 K, 압력이 5 MPa 일 때 작동 전압(E)이 0.921 V~1.600 V에서의 온도 분포를 나타낸다.

결과를 보면 모든 경우에서 반응항이 작용하는 채널에서 온

도의 변화가 일어나며 특히, 채널의 중앙부분에서 최소 및 최대 온도를 나타내면서 온도의 변화가 크게 나타난다. 또한, Cell의 최소온도를 나타내는 전압 E가 0.921 V가 아닌 Fig. 9(b)의 작동전압이 1.080 V인 것을 알 수 있다. 이 때, HTSE의 최소온도는 1120.494 K, 최대온도는 1123 K를 나타내고, 채널의 평균온도는 약 1121 K인 것을 알 수 있다. 또한, 1.2454 V일 때 채널의 온도가 거의 동일하여 Thermal-neutral Voltage에 근접하고 있다는 것을 알 수 있다. 이것은 O'Brien et al.(2004b) 연구에서는 Thermal-neutral Voltage가 1.287 V 인데 비해 다소 낮은 값이다.

Fig. 9(d) 1.288 V에서는 HTSE의 평균온도는 약 1123 K이나 반응이 일어나는 채널 중앙 부분에서 약간 증가하는 경향을 나타내고 있다. 즉, 이 연구의 대상인 HTSE의 경우 1.2454 V을 기준으로 낮은 전압에서는 온도가 낮아지면서 1.08 V에서 최소 값을 가지고 다시 커지는 현상을 나타내고 있으며, 1.2454 V 이상의 전압에서는 계속해서 상승하고 있는 것을 볼 수 있다.

Fig. 9(f)의 최대 작동 전압인 1.600 V에서는 최소온도가 1123 K, 최대온도가 1146.02 K이며, 채널의 평균온도가 약 1140 K 정도이다. 이러한 결과들은 다른 연구(O'Brien et al., 2005; Stephen Herring et al., 2007)들과 동일한 경향을 보이고 있는 것을 알 수 있다. 그러나 작동전압 1.2454 V를 기준으로 평균 온도의 감소와 증가하는 비율이 다른 연구에 비해 낮은 경향을 보이는데, 이것은 본 연구의 계산 조건으로 사용된 ASR의 값이 3으로 다소 큰 값을 사용한 것과, 5 MPa이라는 높은 압력 그리고 주위의 경계조건의 영향이 있었을 것으로 생각된다. 특히, 주위의 경계조건이 1123 K온도일정도로 설정하였는데, 이 조건으로 인해 반응이 일어나는 채널의 부분에 영향을 미쳐 낮은 작동 전압의 경우에는 채널의 온도를 다소 높이고, 높은 작동 전압의 경우에는 채널의 온도를 낮추는 조건이 되기 때문이라 사료된다.

4.5 ASR 값에 따른 온도분포

ASR은 식(10)에서 보는 바와 같이 전압 및 전류밀도에 따라 변화한다. 여기서 EOCV는 온도의 함수이므로 온도에 따라 변화한다고도 할 수 있다. 그러나 앞서 설명한 바와 같이 이 연구의 경우 ASR을 3으로 고정하여 계산을 수행하였다. 따라서 ASR의 변화에 따른 영향을 살펴볼 필요가 있다.

Fig. 10 (a)~(c)는 작동 전압이 1.400 V, 압력이 5 MPa, 입구의 가스온도가 1123 K, ASR이 각각 1 Ω·cm², 2 Ω·cm², 3 Ω·cm² 일 때 각각의 온도분포를 나타낸다. 온도분포는 세 경우 모두 채널의 중앙 부분이 높은 현상을 나타낸다. 그러나 ASR에 따른 최대 온도를 살펴보면, ASR이 1 Ω·cm² 인 경우 1144.36 K, ASR이 2 Ω·cm² 인 경우 1133.66 K, ASR이 3 Ω·cm² 인 경우 1130.08 K 로 ASR이 증가할수록 온도는 감소하는 것을 알 수 있다. 이렇게 온도 차이가 나는 것은 ASR이 증가함에 따라 전류밀도(A/cm²)가 감소하여 이에 따른 전류값(A)도 감소하고, 반응율을 감소시켜 온도의 생성항 값을 낮추기 때문이다.

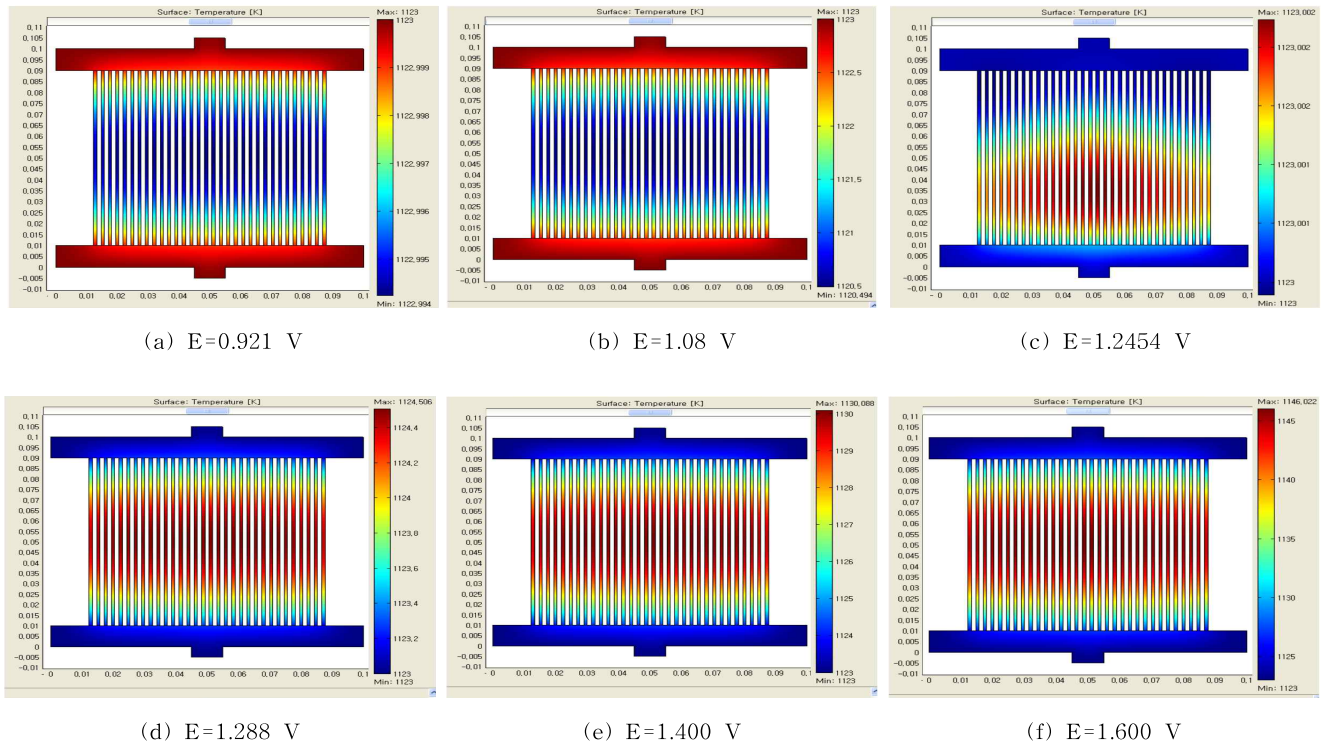


Fig. 9. Temperature distribution for various applied voltages.

4.6 작동전압 및 ASR 값에 따른 수소생성 FLUX

Fig. 11 (a)~(c)는 작동 전압이 1.400 V, 압력이 5 MPa, 입구의 가스온도가 1123 K, ASR이 각각 $1 \Omega \cdot \text{cm}^2$, $2 \Omega \cdot \text{cm}^2$, $3 \Omega \cdot \text{cm}^2$ 일 때 각각의 수소 생성 Flux($\text{mol}/\text{m}^2 \cdot \text{s}$)를 나타낸다. ASR이 $1 \Omega \cdot \text{cm}^2$ 일 때 $0.463 \text{ mol}/\text{m}^2 \cdot \text{s}$, ASR이 $2 \Omega \cdot \text{cm}^2$ 일 때 $0.458 \text{ mol}/\text{m}^2 \cdot \text{s}$, ASR이 $3 \Omega \cdot \text{cm}^2$ 일 때 $0.455 \text{ mol}/\text{m}^2 \cdot \text{s}$ 로 ASR 증가할수록 값이 조금씩 감소하는 것을 알 수 있다. 이것은 ASR이 증가할수록 수소생산량(mol/s)도 감소한다는 것을 의미한다. 이러한 현상은 앞의 온도분포에서 알 수 있듯이 ASR이 증가할수록 Cell의 평균온도가 감소하여 그 만큼 수증기의 화학 반응율이 감소하기 때문이다.

Table 2 는 작동전압(E) 및 ASR에 따른 수소생산율을 정리한 것으로, 평균 수소생산율(mol/s)은 작동전압(E)이 일정한 경우, ASR 값이 증가할수록 평균 수소생산율(mol/s)은 감소하는 것을 알 수 있으며 많은 양의 수소 생산을 위해서는 ASR의 값을 낮게 해야 함을 알 수 있다.

Table 2. Hydrogen production rate for various units according to different ASR

ASR ($\Omega \cdot \text{cm}^2$)	E=1.2454 V			E=1.4000 V		
	mol/s	sccm	NL/hr	mol/s	sccm	NL/hr
1	1.0745E-04	144.41	8.66	1.598E-04	214.66	12.88
2	5.3775E-05	72.27	4.33	7.965E-05	107.05	6.423
3(reference)	3.586E-05	48.19	2.89	5.307E-05	71.31	4.279

5. 결론

이 연구에서는 고온수증기전기분해(High Temperature Steam Electrolysis, HTSE)장치에 관한 열·화학적 특성 및 수소 생산 능력을 파악하기 위해 COMSOL Multiphysics® 프로그램을 사용하여 2차원 정상상태 전산유체해석을 실시하였으며, 다음과 같은 결론을 얻었다.

1) Cell 내부에서의 수증기(H_2O)와 수소(H_2) 농도 분포 및 각 채널에서의 반응속도를 비교하였다. 그 결과 Cell의 입구에서 출구로 가스가 이동하면서 수소(H_2)의 농도는 증가하고, 수증기(H_2O)의 농도는 감소함을 확인하였다. 또한, Cell 중앙에 위치한 채널에서 수증기(H_2O)의 감소와 수소(H_2)의 증가(반응) 속도가 빠르게 나타난 반면, Cell의 양쪽 Side로 갈수록 채널에서의 반응속도가 현저히 느려짐을 확인하였다.

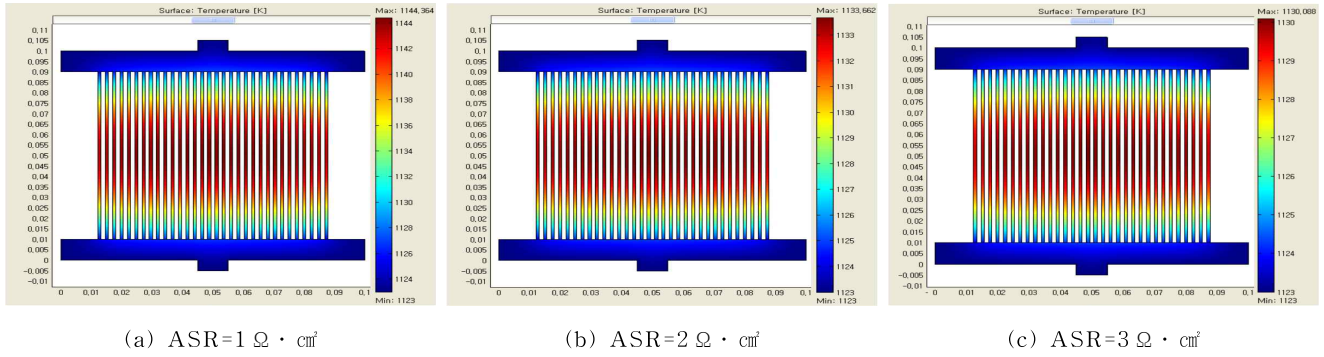


Fig. 10. Temperature distribution for different ASR

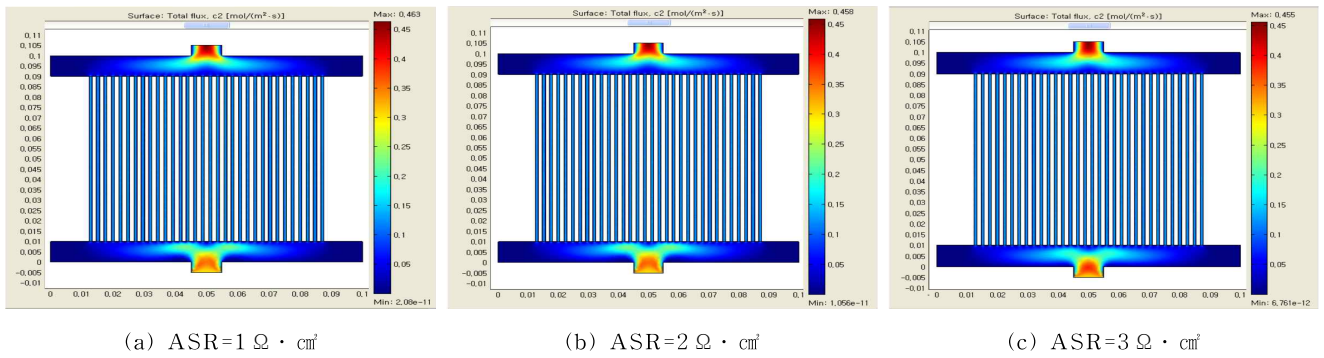


Fig. 11. Hydrogen production flux for different ASR

2) 작동전압(E)의 변화에 따른 Cell 내부의 온도분포에 관한 해석 결과를 선행 연구결과와 비교하였다. 그 결과 작동전압(E)이 증가함에 따라 온도가 일정하게 증가하거나 감소하는 것이 아니라, Cell에 요구되는 흡열 반응열과 Ohmic 열 생성이 평형을 이루는 Thermal-neutral Voltage 1.2454 V의 전압이 존재하여, 이 전압을 기점으로 높은 전압에서는 온도가 상승하고 낮은 전압에서는 온도가 하강하는 경향을 보였다.

3) 모든 해석조건이 동일한 경우 ASR 값이 Cell 내부의 온도분포에 미치는 영향을 파악하였다. 그 결과 ASR 값이 증가함에 따라 Cell 내부의 온도가 하강하여 수소생산 Flux 값도 감소하였다.

4) ASR 값이 수소생산율에 미치는 특성을 파악하였다. 그 결과 유입가스의 온도는 높을수록, ASR 값은 작을수록 수소생산량이 증가함을 확인하였다.

5) ASR이 $3 \Omega \cdot cm^2$ 이고, 1400 V 및 Thermal-neutral Voltage 인 1.2454 V의 전압을 가하였을 때, $8 cm \times 8 cm$ 단위 전해셀에서의 평균 수소생산량이 시간당 약 4.279 NL와 2.890 NL로 나타났으며 300 mol/s의 수소를 생산하기 위해 갖추어야 할 전해셀의 총 개수는 각각 5,652,312장과 8,365,868장에 이르며, 소모되는 전기에너지는 81,043 kJ/s 및 72,094 kJ/s로서 초고온가스로의 PCU(Power Conversion Unit) 효율을 0.48, AC/DC 전환 효율을 0.95로 상정했을 때 177,726 kJ/s와 158,101 kJ/s의 열에너지에 상당한다.

참 고 문 헌

- [1] 한원희, 최정식, 최재혁(2010), 수소에너지 기술 개발 현황과 선박적용 동향, 해양환경안전학회지, 제16권 제3호, pp. 313-320.
- [2] Doenitz, W., R. Schmidberger, E. Steinheil and R. Streicher(1980), International Journal of Hydrogen Energy Volume 5, Issue 1, pp. 55-63.
- [3] Dönitz, W. and E. Erdle(1985), International Journal of Hydrogen Energy Volume 10, Issue 5, pp. 291-295.
- [4] IAEA(1999), Hydrogen as an Energy Carrier and Its Production by Nuclear Power, IAEA-TECDOC-1085, pp. 174-181.
- [5] Matt Richards, A. S. Shenoy, L. C. Brown, R. T. Buckingham, E. A. Harvego, K. L. Peddicord, S. M. M. Reza and J.P. Coupey(2006), H2-MHR Pre-Conceptual Design Rep-ort: SI-Based Plant; HTE-Based Plant, GA-A25402, pp. 1-5.
- [6] O'Brien, J. E., C. M. Stoots, J. S. Herring and P. A. Lessing(2004a), Performance Measurements of Solid-Oxide Electrolysis Cells for Hydrogen Production from Nuclear Energy, Proceeding of ICONE 12, pp. 1-10.
- [7] O'Brien, J. E., C. M. Stoots, J. S. Herring and P. A. Lessing(2004b), Characterization of Solid Oxide

Electrolysis Cells for Hydrogen Production via High Temperature Steam Electrolysis, Proceedings of second international conference on fuel cell science engineering and technology Rochester NY, pp. 219-228.

- [8] O'Brien, J. E., C. M. Stoots, J. S. Herring, P. A. Lessing, J. J. Hartvigsen and S. Eleangovan(2005), Performance measurement of solid oxide electrolysis cells for hydrogen production from nuclear energy, Journal of Fuel Cell Sci. Tech. 2, pp. 156-163.
- [9] Roger, W. Pryor(2009), Multiphysics Modeling Using Comsol(A First Principles Approach), Jones & Bartlett Publishers, pp.1-600.
- [10] Shin, Youngjoon, Wonseok Park, Jonghwa Chang and Jongkuen Park(2007), Evaluation of the high temperature electrolysis of steam to produce hydrogen, International Journal of Hydrogen Energy, Volume 32, Issues 10-11, pp. 1486-1491.
- [11] Stephen Herring, J., E. James, O'Brien, Carl M. Stoots, G. L. Hawkes, Joseph J. Hartvigsen and Mehrdas Shahnam(2007), Progress in high temperature electrolysis for hydrogen production using planar SOFC technology, International Journal of Hydrogen Energy 32, pp. 440-450.
- [12] 日野 龍太郎, 宮本 喜晟(1995), “高温水蒸気電解法による水素製造-円筒型電解要素による試験結果”, 日本原子力學會誌, Vol. 37(11), pp. 1042-1049.

원고접수일 : 2011년 10월 05일

원고수정일 : 2011년 11월 03일

게재확정일 : 2011년 12월 26일