

용융탄산염연료전지 및 주변기기의 동적시뮬레이션[§]

성 태 홍* · 김 경 천**

* 부산대학교 기계공학부

Dynamic Simulation of Molten Carbonate Fuel Cell and Mechanical Balance of Plant

Taehong Sung* and Kyung Chun Kim**

* School of Mechanical Engineering, Pusan Nat'l Univ.

(Received May 28, 2013 ; Revised November 11, 2013 ; Accepted November 20, 2013)

Key Words: Molten Carbonate Fuel Cell Modeling(용융탄산염연료전지 모델링), Mechanical Balance of Plant(기계적 주변기기), Dynamic Simulation(동적 시뮬레이션)

초록: 본 연구의 목적은 용융탄산염연료전지와 같은 고온연료전지에 동반하는 기계적 주변기기의 타당성을 검토할 수 있는 동적 시뮬레이션 모델을 개발하는 것이다. 연료전지를 운송수단과 같은 독립적인 동력기관에서 사용하기 위해서는 동반하는 기계적 주변기기를 최적화 및 소형화할 필요가 있다. 본 연구에서는 유입가스의 조성, 압력, 유량 및 스택의 온도에 따른 용융탄산염연료전지 내부의 화학반응의 동적 모델링을 구현하고 정상상태 시뮬레이션을 수행하여 실험결과와 비교 분석하였다. 또 연료전지의 전류밀도 제어에 따른 on/off 시뮬레이션을 수행하여 동적 시뮬레이션 모델의 타당성을 분석하였다.

Abstract: This study aims to develop a simulation bed for the mechanical balance of plants of high temperature fuel cells such as molten carbonate fuel cells. For using fuel cells in transportation, the optimization of the balance of plants should be considered. In this study, the dynamic model of a molten carbonate fuel cell and the model's responses to inlet gas composition, pressure, flow rate, and stack temperature were analyzed. On/off simulation was performed for testing the dynamic model's feasibility. The simulation results are in reasonable agreement with the experimental results from published literatures.

- 기호설명 -

α, λ : 매개 변수

A_r : 연료전지의 유효반응면적

C_p : 연료전지 스택의 비열 (kJ/kg)

E : 깁스 자유에너지 상수

E^0 : 전압 포텐셜

F : Faraday 상수

\bar{h} : 단위몰당 엔탈피

i : 연료전지 전류밀도 (A/cm²)

k : 개질반응 상수

K_{Meq} : 개질반응 평형상수

M : 연료전지 스택의 무게 (kg)

N : 기체의 몰량 유량 (mol/s)

P : 연료전지의 압력 (kg/(ms²))

P_x : 부분압력

P_{dc} : 연료전지의 출력 (W)

Q : 개질반응의 질량작용

Q_l : 연료전지의 열손실 (W)

R : 기체상수

R_x : 기체의 생성 반응속도 행렬 (mol/s)

r : 화학반응의 반응속도 (mol/s)

T : 온도 (K)

X : 몰분율 행렬

x : 기체의 몰 분율

V : 연료전지 내부 공간의 부피 (m³)

V_{cell} : 연료전지의 출력 전압 (V)

ν : 화학반응의 화학량론 계수 행렬

μ : 발생하는 화학반응의 총 수

[§] 이 논문은 대한기계학회 2013년도 부산지회 춘계 학술대회(2013.05.03., 한국해양대학교) 발표논문임.

[†] Corresponding Author, kckim@pusan.ac.kr

© 2014 The Korean Society of Mechanical Engineers

ξ : 공급 가스의 수

상첨자

in : 유입 가스

s : 연료전지 스택

하첨자

a : 연료극

c : 공기극

i : 입구

o : 출구

t : 전체

1. 서 론

최근 고온형 연료전지의 한 종류인 용융탄산염 연료전지(MCFC, molten carbonate fuel cell)가 분산형 전력발전 분야에서 수백 kW 수준의 상용화가 이루어지면서 고온형 연료전지를 기차,⁽¹⁾ 비행기,⁽²⁾ 선박⁽³⁾과 같은 화석 연료를 사용하는 기관에 적용하여 연료전지의 고효율 친환경성을 이용하려는 연구가 큰 관심을 받고 있다. 그러나 현재까지 고온연료전지의 상업화는 기존의 전력시스템에 연동 가능하고 주변기기(BOP, balance of plants)의 공간제한이 상대적으로 적은 육상용 발전 분야에 국한 되어 있다.

이러한 용융탄산염 연료전지의 운송기관 적용에는 두 가지 중대한 문제가 존재한다. 한 가지는 연료전지의 낮은 on/off 내구성이고 다른 한 가지는 연료전지에 동반하는 주변기기 시설의 규모 문제이다. 용융탄산염연료전지의 상용화는 분산형 전력발전과 같이 on/off 수요가 적은 분야에 적용하면 내구성 문제를 회피할 수 있다. 마찬가지로 연료전지의 운송기관 적용에서도 상시 수요의 기저전력을 목표로 연료전지를 적용하면 친환경성과 고효율의 동력 시스템으로 사용할 수 있다. 한편 거대한 연료전지 주변기기 문제는 특수한 주변기기를 도입한다면 무게와 부피 문제를 해결 할 수 있다.

시스템 수준의 타당성 분석을 위한 연료전지의 동특성 연구는 질량 보존, 모멘텀 보존, 전기화학 반응, 화학반응 및 열전달을 고려하는 연구부터 스택의 형상을 모델링하여 분석하는 전산해석까지 다양한 스케일에서 이루어지고 있다. Lukas

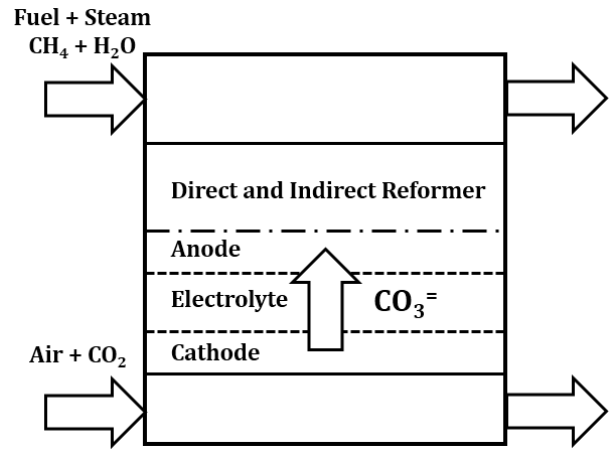


Fig. 1 Schematics of MCFC stack

등⁽⁴⁻⁶⁾은 Fuel Cell Energy 사의 용융탄산염연료전지를 대상으로 연료전지 내부의 전기화학반응을 모델링하였다. Brouwer 등⁽⁷⁾은 부하변동에 대응하는 용융탄산염연료전지의 동적 모델링을 수행하고 실험결과와 비교하였다.

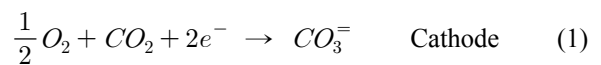
이 연구에서는 동적 용융탄산염 연료전지 모델을 기초로 MATLAB/Simulink 패키지를 이용하여 운송기관용 기계적주변기기의 타당성을 검토할 수 있는 시뮬레이션 모델을 구축하고 제안된 기계적주변기기 모델에 대해 on/off 모드의 응답특성에 대한 동적시뮬레이션을 수행하였다. 이 연구를 통하여 얻은 결과는 향후 선박 적용을 포함한 다양한 운송기관의 연료전지적용 연구에서 특수한 주변기기의 타당성 평가 연구에 사용할 수 있을 것으로 기대된다.

2. 시스템 모델링

2.1 연료전지 모델링

용융탄산염 연료전지는 Fig. 1과 같이 음극, 양극, 내부개질기, 전해질의 4가지 부분으로 구성되어 있다.^(8,9)

양극에서는 식 (1)과 같이 산소와 이산화탄소가 반응하여 탄산 이온을 생성한다.



생성된 탄산 이온은 식 (2)와 같이 전해질을 통과한 다음 수소와 반응하여 물과 이산화탄소를 생성한다.

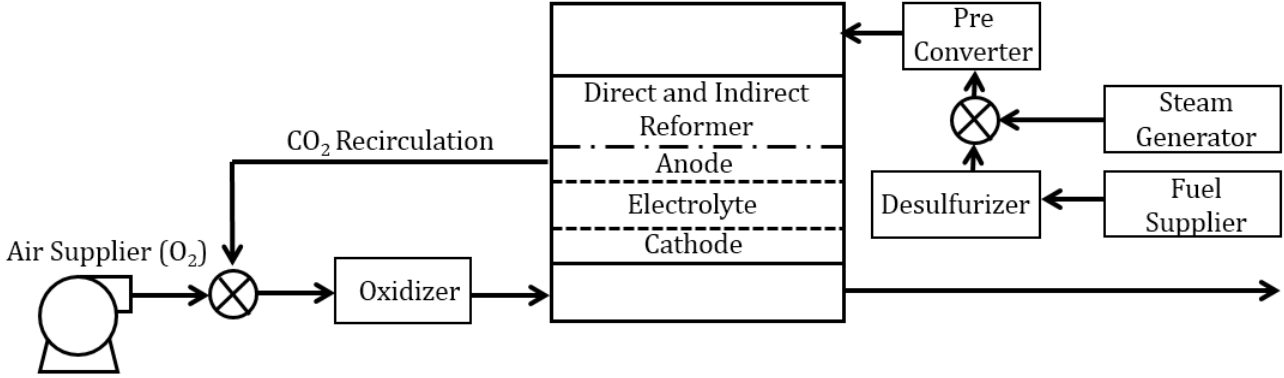
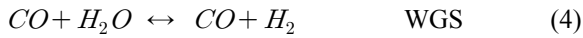
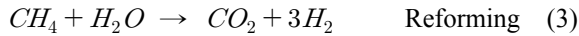


Fig. 2 Schematics of mechanical balance of plants for internal reforming high temperature fuel cells



연료개질과정에서는 식 (3)과 같이 메탄의 개질 반응과 식 (4)와 같이 수성가스전환(Water-Gas Shift) 반응이 발생한다.



연료전지의 스택 내부에는 7 종류의 가스가 존재할 수 있고 다음 식 (5)와 같은 순서의 행렬로 나타낸다.

$$S = [H_2 \ CH_4 \ CO \ CO_2 \ H_2O \ N_2 \ O_2] \quad (5)$$

Lukas 등의 연구 결과⁽⁵⁾에 따르면 연료전지에 공급된 기체가 식 (1-4)의 반응을 거치면서 물분율이 변화하는 과정과 스택 내부의 압력 변화는 연료전지의 화학반응에 참가하는 기체에 대해서 생성 및 소모에 대한 화학반응식을 전개하여 미분방정식을 유도할 수 있다. 가스의 물분율 변화는 연료전지의 몰수지(Mole balance)에 따라서 식 (6)과 같이 나타낸다.

$$\frac{dx_{ai}}{dt} = \frac{RT}{P_a V_a} [N_{ta}^{in}(x_{ai}^{in} - x_{ai}) - x_{ai} \sum_{i=1}^{\xi} R_{ai} + R_{ai}]$$

$$\frac{dx_{ci}}{dt} = \frac{RT}{P_c V_c} [N_{tc}^{in}(x_{ci}^{in} - x_{ci}) - x_{ci} \sum_{i=1}^{\xi} R_{ci} + R_{ci}] \quad (6)$$

각 화학반응과 가스에 대한 화학반응 속도 행렬 R_i 는 식 (7)과 같이 나타낼 수 있다.

$$R_i = \sum_{j=1}^{\mu} \nu_{ij} r_j \quad (7)$$

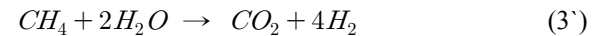
연료전지에서 발생하는 화학반응 속도는 Faraday의 전기분해에 관한 법칙에 따라서 식 (8)과 같이 표현할 수 있다. r_1 과 r_2 는 각각 식 (1), (2)의 반응 속도를 나타낸다.

$$r_1 = r_2 = - \frac{A_r n_{cell} n_{stack} i}{2F} \quad (8)$$

식 (4)의 수성가스전환 반응은 빠른 속도로 평형상태에 도달하기 때문에 식 (9)와 같은 평형방정식으로 표현할 수 있다.

$$\frac{x_{CO_2} x_{H_2}}{x_{CO} x_{H_2O}} = e^{(E_3 + E_4 / T^*)} \quad (9)$$

이를 반영한 식 (3)의 메탄 개질반응은 식 (3')와 같이 나타낸다.



이에 따른 식 (3')의 메탄 개질반응속도는 식 (10)과 같이 나타낸다.

$$r_{3'} = k P_{CH_4} [(1 - Q) / K_{M_{q3}}] \quad (10)$$

연료전지에서 발생하는 화학반응, 음극에서 발생하는 연료의 개질반응, 양극에서 발생하는 화학반응에 대한 기체의 반응속도 행렬은 식 (11-13)과 같이 나타낸다.

$$\nu_2 = [1 \ 0 \ -1 \ 1 \ -1 \ 0 \ 0]' \quad (11)$$

$$\overline{R}_a = [-r_1 + 3r_3 \ -3r_3 \ r_3 \ r_1 \ r_1 - r_3 \ 0 \ 0]' \quad (12)$$

$$\overline{R}_c = [0 \ 0 \ 0 \ -r_1 \ 0 \ 0 \ -\frac{1}{2}r_1]' \quad (13)$$

스택, 음극 가스, 양극 가스의 엔탈피는 식 (14)

와 같이 나타낼 수 있다.

$$\bar{h}^s = \begin{bmatrix} \bar{h}_1^s \\ \vdots \\ \bar{h}_7^s \end{bmatrix}, \quad \bar{h}_a^{in} = \begin{bmatrix} \bar{h}_{a1}^{in} \\ \vdots \\ \bar{h}_{a7}^{in} \end{bmatrix}, \quad \bar{h}_c^{in} = \begin{bmatrix} \bar{h}_{c1}^{in} \\ \vdots \\ \bar{h}_{c7}^{in} \end{bmatrix}$$

$$\Delta \bar{h}_a \equiv \bar{h}_a^{in} - \bar{h}_a^s, \quad \Delta \bar{h}_c \equiv \bar{h}_c^{in} - \bar{h}_c^s \quad (14)$$

기체의 엔탈피는 식 (15)와 같이 비열 다항식을 적분하여 계산한다.

$$\bar{h}_i = \bar{h}_i^{ref} + \int_{T_{ref}}^T c_{p,i}(u) du \quad (15)$$

음극과 양극의 몰분율은 식 (16)과 같은 행렬의 형태로 나타낼 수 있다.

$$\bar{X}_a^{in} = \begin{bmatrix} \bar{x}_{a1}^{in} \\ \vdots \\ \bar{x}_{a7}^{in} \end{bmatrix}, \quad \bar{X}_c^{in} = \begin{bmatrix} \bar{x}_{c1}^{in} \\ \vdots \\ \bar{x}_{c7}^{in} \end{bmatrix} \quad (16)$$

연료전지 스택의 온도는 출입 가스의 시스템의 에너지 보존 및 질량 보존을 이용하여 계산한다. 스택의 에너지 변화는 연료전지에 유입된 기체의 입출구 엔탈피 변화, 연료전지에서 발생한 기체의 엔탈피 및 연료전지의 출력으로 나타내며 식 (17)과 같다.

$$M^s C_P \frac{dT^s}{dt} = N_a^{in} \left[\sum_{i=1}^{\xi} x_{ai}^{in} (\bar{h}_{ai}^{in} - \bar{h}_i^s) \right] - \sum_{i=1}^{\xi} \bar{h}_i^s R_{ai}$$

$$+ N_c^{in} \left[\sum_{i=1}^{\xi} x_{ci}^{in} (\bar{h}_{ci}^{in} - \bar{h}_i^s) \right] - \sum_{i=1}^{\xi} \bar{h}_i^s R_{ci} - Q_l$$

$$- P_{dc} \quad (17)$$

상기 서술한 방정식을 각 가스에 대해서 연립하여 풀면 시간에 따른 가스의 몰분율 변화식을 유도할 수 있다. 최종적으로 유도되는 식을 간략히 나타내기 위해 식 (18-25)와 같은 변수를 정의한다.

$$\alpha_1 \equiv x_{CO}^s \left[\frac{1}{x_{CO}^s} + \frac{1}{x_{CO_2}^s} + \frac{1}{x_{H_2}^s} + \frac{1}{x_{H_2O}^s} \right] \quad (18)$$

$$\alpha_2 \equiv - \frac{V_a P_a^s x_{CO}^s E_2 (\bar{h}^s \cdot \nu_2)}{(T^s)^3 R M^s C_P} \quad (19)$$

$$\alpha_3 \equiv N_{ta}^{in} + r_1 + r_3 \quad (20)$$

$$\alpha_4 \equiv \frac{RT^s}{V_a P_a^s} \quad (21)$$

$$\alpha_5 \equiv \frac{RT^s}{V_c P_c^s} \quad (22)$$

$$\lambda_1 \equiv \frac{1}{\alpha_1 + \alpha_2} \quad (23)$$

$$\lambda_2 \equiv \frac{E_2 x_{CO}^s}{(T^s)^2 M^s C_P} [N_{ta}^{in} (\Delta \bar{h}_a \cdot X_a^{in}) + N_{tc}^{in} (\Delta \bar{h}_c \cdot X_c^{in}) - (\bar{h}^s \cdot \bar{R}_a) - (\bar{h}^s \cdot \bar{R}_c) + (\bar{h}^s \cdot \nu_2)$$

$$\cdot [\alpha_3 x_{CO}^s - N_{ta}^{in} x_{CO}^{in} - r_3] - P_{dc}] - \alpha_4 x_{CO}^s$$

$$[[\frac{1}{x_{CO_2}^s} [\alpha_3 (x_{CO_2}^s + x_{CO}^s) - N_{ta}^{in} \cdot (x_{CO_2}^{in} + x_{CO}^{in}) - r_1 - r_3] + [\frac{1}{x_{H_2}^s} [\alpha_3 (x_{H_2}^s + x_{CO}^s)$$

$$- N_{ta}^{in} \cdot (x_{H_2}^{in} + x_{CO}^{in}) + r_1 - 4r_3] - [\frac{1}{x_{H_2O}^s} [\alpha_3 (x_{H_2O}^s + x_{CO}^s) - N_{ta}^{in} \cdot (x_{H_2O}^{in} + x_{CO}^{in}) - r_1 + 2r_3]]] \quad (24)$$

$$\lambda_3 \equiv \frac{1}{M^s C_P} [N_{ta}^{in} (\Delta \bar{h}_a \cdot X_a^{in}) + N_{tc}^{in} (\Delta \bar{h}_c \cdot X_c^{in}) - (\bar{h}^s \cdot \bar{R}_a) - (\bar{h}^s \cdot \bar{R}_c) + (\bar{h}^s \cdot \nu_2) \cdot$$

$$[\frac{\lambda_1 \lambda_2}{\alpha_4} + \alpha_3 x_{CO}^s - N_{ta}^{in} x_{CO}^{in} - r_3] - P_{dc}] \quad (25)$$

음극에 출입하는 각 기체의 시간에 따른 몰분율 변화는 식 (26-31)과 같이 유도된다.

$$\frac{dx_{H_2}^s}{dt} = -\alpha_4 [\alpha_3 (x_{H_2}^s + x_{CO}^s) - N_{ta}^{in} (x_{H_2}^{in} + x_{CO}^{in}) - 4r_3 + r_1] - \lambda_1 \lambda_2 \quad (26)$$

$$\frac{dx_{CH_4}^s}{dt} = -\alpha_4 [\alpha_3 x_{CH_4}^s - N_{ta}^{in} x_{CH_4}^{in} + r_3] \quad (27)$$

$$\frac{dx_{CO}^s}{dt} = \lambda_1 \lambda_2 \quad (28)$$

$$\frac{dx_{CO_2}^s}{dt} = -\alpha_4 [\alpha_3 (x_{CO_2}^s + x_{CO}^s) - N_{ta}^{in} (x_{CO_2}^{in} + x_{CO}^{in}) - r_1 - r_3] - \lambda_1 \lambda_2 \quad (29)$$

$$x_{H_2O}^s = \frac{x_{CO_2}^s x_{H_2}^s}{K_{seq} x_{CO}^s} \quad (30)$$

$$x_{N_2}^s = 1 - (x_{H_2}^s + x_{CH_4}^s + x_{CO}^s + x_{CO_2}^s + x_{H_2O}^s) \quad (31)$$

양극에 출입하는 각 기체의 시간에 따른 몰분율 변화는 식 (32-35)와 같이 유도된다.

$$\frac{dx_{H_2O}^s}{dt} = \alpha_5 [N_{tc}^{in}(x_{H_2O}^{in} - x_{H_2O}^s) + \frac{3x_{H_2O}^s r_1}{2}] \quad (32)$$

$$\frac{dx_{CO_2}^s}{dt} = \alpha_5 [N_{tc}^{in}(x_{CO_2}^{in} - x_{CO_2}^s) + \frac{3x_{CO_2}^s r_1}{2} - r_1] \quad (33)$$

$$\frac{dx_{N_2}^s}{dt} = \alpha_5 [N_{tc}^{in}(x_{N_2}^{in} - x_{N_2}^s) + \frac{3x_{N_2}^s r_1}{2}] \quad (34)$$

$$x_{O_2}^s = 1 - (x_{CO_2}^s + x_{H_2O}^s + x_{N_2}^s) \quad (35)$$

시간에 따른 스택의 온도 변화는 식 (36)과 같은 식으로 유도된다.

$$\frac{dT^s}{dt} = \lambda_3 \quad (36)$$

연료전지의 출력변화는 Nernst 방정식을 통해서 스택의 작동온도와 공급기체의 몰분율에 따른 전압변화를 포함하는 연료전지 내부의 손실을 계산하여 구한다.^(7,10,11)

$$V_{cell} = V_0 - \eta_{act} - \eta_{conc} - iz \quad (37)$$

$$V_0 = E^0 + \frac{RT}{2F} \ln \frac{P_{H_2,a} P_{O_2,c}^{0.5}}{P_{H_2O,a}} + \frac{RT}{2F} \ln \frac{P_{CO_2,c}}{P_{CO_2,a}} \quad (38)$$

2.2 연료전지주변기기의 모델링

연료전지에 동반하는 주변기기의 타당성은 스택을 출입하는 가스의 조성과 열역학적 상태량과 연료전지를 연동하여 시험할 수 있다.⁽¹²⁾ 연료전지의 기계적주변기기는 Fig. 2와 같이 음극과 양극에 공급되는 공기를 준비하는 기기로 구성되어 있다. 음극 공급 공기를 준비하는 기기에는 연료공급기, 스팀발생기, 전처리기, 열교환기, 블로워가 있고 양극 공급 공기를 준비하는 기기에는 음극 배기가스 재순환, 공기공급기, 촉매연소기, 전처리기, 블로워가 있다.

2.2.1 기계적주변기기 모델링

연료전지에 공급되는 연료의 종류에 따라 화학조성이 변화하여 연료전지의 성능에 영향을 미칠 수 있다. 또한 연료공급기의 제어를 통해서 연료의 온도, 압력, 몰량 유량을 제어할 수 있다. 스팀발생기는 스팀의 온도, 유량, 압력을 제어할 수 있다. 연료공급기와 스팀발생기를 제어하여 스팀 연료비를 제어할 수 있다. 각 요소를 직접 제어할 수 있도록 연료공급기와 스팀발생기를 모델링

하고 시뮬레이션에는 Brunei산 천연가스(메탄 0.91, 에탄 0.05, 프로판 0.02)를 적용하였다.

전처리기는 저온개질과정을 통해 연료에 존재하는 에탄과 프로판을 전환하는 장치이다. 전처리기에서 발생하는 에탄과 프로판의 개질과정은 즉시 완전 반응하여 전처리기를 통과한 기체에는 메탄을 제외한 고분자 탄화수소가 제거되도록 모델링하였다.

양극 산화기의 역할은 음극에서 재순환된 배기가스의 잔류 연료를 산화시키는 것이다. 전처리기와 마찬가지로 잔존 메탄이 산화기를 통과하는 과정에서 즉시 완전 반응하여 산화기 후단에는 탄화수소가 제거되도록 모델링하였다.

블로워는 연료전지의 압력을 일정하게 유지하는 역할을 한다. 제어에 따라서 양극과 음극에 일정한 압력을 공급하도록 모델링하였다.

3. 시뮬레이션

3.1 모델링 검증

모델링한 연료전지의 타당성을 검토하기 위하여 Table 1 과 같이 정상 작동 조건을 설정하여 시뮬레이션을 수행하고 산타클라라에서 수행한 2MW 연료전지 실험 데이터와 비교 검증하였다.⁽¹³⁾

Fig. 3과 Fig. 4는 각각 해당 작동 조건에서 음극과 양극의 몰분율 변화를 나타낸 것으로 연료전지의 초기 구동을 특성을 나타낸다. 연료전지의 화학 요소가 안정화되는 시간은 Lukas 등의 연구⁽¹²⁾와 FCE사의 연구⁽¹³⁾와 일치한다. Fig. 3의 N_2 몰분율 변화에서 시뮬레이션 초기에 높은 값이 발생하였다가 빠른 속도로 수렴하는 것을 확인할 수 있다. 또 Fig. 4의 O_2 몰분율 변화에서 시뮬레이션 초기 없었던 O_2 몰분율이 발생하여

Table 1 Design parameters

$T_{air,in}$	923	K
I	0.15	A/cm^2
P_a, P_c	3	bar
r_3	0.5	mol/s
C_P	0.45	J/gK
M_S	136000	g
V_a, V_c	0.24	m^3

Table 2 Anode Mole fraction comparison between simulation results and open literatures⁽¹³⁾

Anode	Data	Simulation	Difference
H ₂	0.0741	0.078	5%
CO	0.0462	0.0389	16%
CO ₂	0.4533	0.422	7%
H ₂ O	0.4245	0.4325	2%
N ₂	0	0	0%
O ₂	0	0	0%

Table 3 Cathode Mole fraction comparison between simulation results and open literatures⁽¹³⁾

Cathode	Data	Simulation	Difference
CO ₂	0.0476	0.0398	16%
H ₂ O	0.188	0.1674	11%
N ₂	0.6778	0.6952	3%
O ₂	0.0865	0.0976	13%

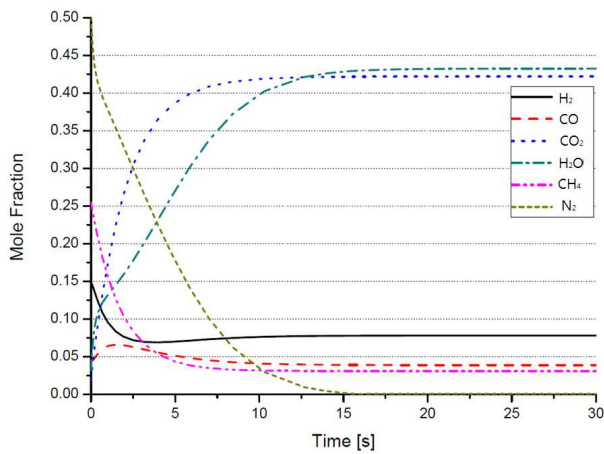


Fig. 3 Anode mole fraction dynamics of anode start-up operation

0.1수준에 수렴하는 것을 확인할 수 있다. 이러한 현상은 연료개질의 수성가스전환 반응속도를 화학평형방정식에서 유도하였기 때문이다.

음극과 양극의 물분을 평형 도달 값과 실험 결과 비교 값이 각각 Table 2와 Table 3에 나타나 있다. 시뮬레이션이 안정화된 이후 연료전지의 음극과 양극 출구의 화학 요소 조정의 실험값과 시뮬레이션 값의 차이는 최대 16% 이내인 것을 확인할 수 있다.

3.2 동적 시뮬레이션

모델 MBOP의 동적 시뮬레이션 가능성을 평가

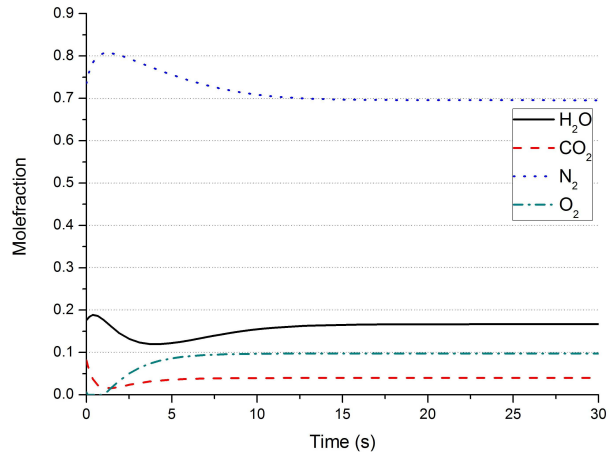


Fig. 4 Cathode mole fraction dynamics of anode start-up operation

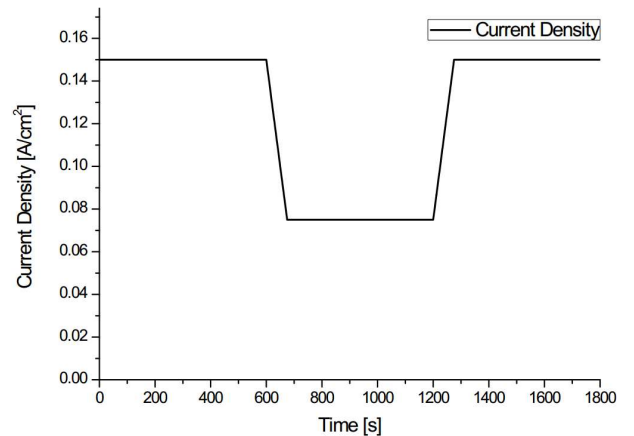


Fig. 5 Current density control for on/off simulation

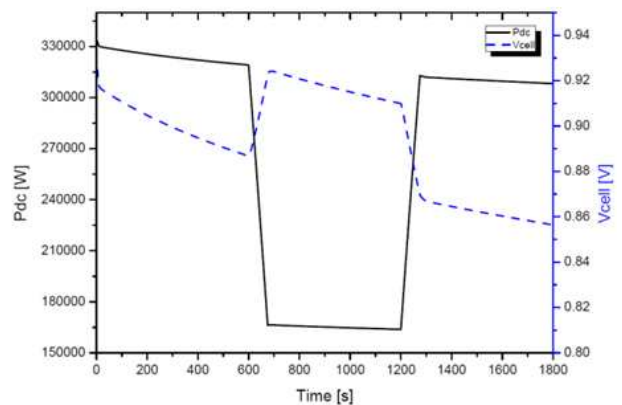


Fig. 6 Voltage and work output with response to on/off current density control simulation

하기 위하여 전류밀도 on/off 상황을 시뮬레이션 하였다. 시스템의 과도 응답 특성을 분석하기 위하여 Fig. 5와 같이 600초의 간격을 두고 전류밀도를 0.15 A/cm²에서 시작하여 초당 0.01 A/cm²의 전류밀도를 증감시켰다.

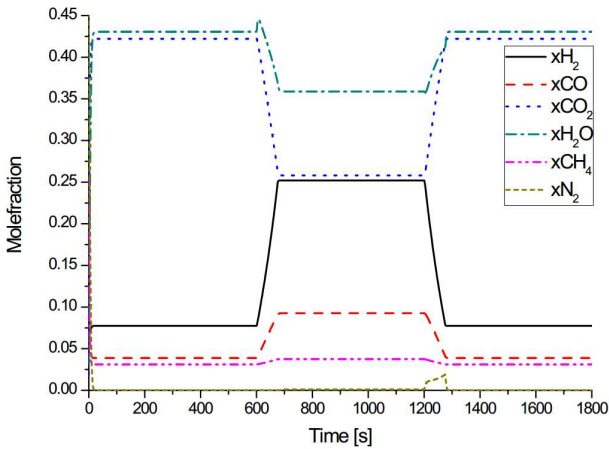


Fig. 7 Anode gas mole fraction with response to on/off current density control simulation

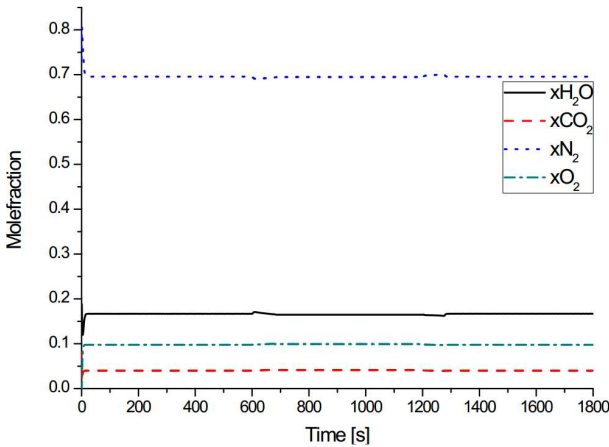


Fig. 8 Cathode gas mole fraction with response to on/off current density control simulation

Fig. 6은 on/off 시뮬레이션 시 스택 전압 및 출력 변화를 나타낸 것이다. 한편 시간이 경과함에 따라 연료전지의 전압과 출력이 감소하는 것을 확인할 수 있다. 이러한 현상은 해당 시뮬레이션 구간에서 연료전지의 온도가 변화하여 스택에서 출력되는 전압이 변화하였기 때문이다.

Fig. 7과 Fig. 8은 전류밀도 증감에 따른 음극과 양극의 화학 요소 몰분율 변화를 나타낸 것이다. Fig. 7을 보면 전류밀도의 증감에 따라서 음극 화학 요소의 몰분율 증감이 발생하는 한편 Fig. 8을 보면 양극 화학 요소는 전류밀도의 증감에 민감하게 반응하지 않는 모습을 확인할 수 있다. on/off 제어 시뮬레이션에서 양극 기체의 몰분율 변화가 작은 이유는 양극으로 공급되는 기체의 몰량 유량이 상대적으로 크기 때문이다. Fig. 8의 물의 몰분율 변화를 보면 CO₂가스의 순환과정에

따라서 음극에서 발생한 가스가 양극으로 유입됨에 따라서 변화한다. 결과적으로 Fig. 6에서 관찰할 수 있는 스택 전압의 변화는 음극 화학 요소의 몰분율 변화에 영향을 받아 발생한 것을 확인할 수 있다.

Fig. 7의 질소 몰분율 변화를 보면 전류변화가 있을 때 질소 몰분율이 발생하는 것을 확인할 수 있다. 질소의 몰분율은 시뮬레이션이 진행되면서 다시 감소한다. 이 변화는 물의 화학량 변화를 평형반응식과 그 평형 상수를 이용하여 계산하기 때문에 발생한다. 화학 평형반응식의 분모에 위치한 일산화탄소의 값이 매우 작을 때에는 물의 몰분율이 비정상적으로 작거나 큰 형태의 결과가 나온다. 시뮬레이션이 진행될수록 일산화탄소의 값이 피드백을 받아 질소의 몰분율이 사라진다.

4. 결론

본 연구에서는 연료전지 양극과 음극의 입구 공기의 조성비, 압력, 온도, 유량 변화에 따라 연료전지 출구 공기의 조성비, 출력 전압, 스택 온도, 압력 변화를 예측할 수 있는 동적 모델에 주요 연료전지 주변기기인 산화기, 스팀생성기, 블로워를 결합 및 시험할 수 있는 모델을 구현하였다. 구현된 시뮬레이션 모델을 이용하여 작동 변수가 스택에 미치는 영향을 시험하고 기존 연구 문헌의 자료와 비교 분석하였다. 또 구현된 시뮬레이션 모델의 on/off 시뮬레이션을 수행하였다. 개발된 시뮬레이션 모델을 이용하여 기계적 주변기기의 운송수단 적용 타당성은 물론, 화학 조성비와 온도 압력과 같은 열역학적 환경에 영향을 미치는 다양한 대기 및 해양 환경의 연료전지 적합성 평가에 사용할 수 있을 것으로 기대된다.

후 기

이 논문은 2013년도 정부(교육과학기술부)의 재원으로 한국연구재단의 지원(No. 2011-0030663, No. 2013044133)과 2013년도 지식경제부의 재원으로 한국에너지기술평가원(KETEP)의 지원을 받아 수행한 연구 과제임(No.20112010100030-12-2-300).

참고문헌

(1) Bensaid, S., Specchia, S., Federici, F., Saracco,

- G. and Specchia, V., 2009, "MCFC-Based Marine APU: Comparison Between Conventional ATR and Cracking Coupled with SR Integrated Inside the Stack Pressurized Vessel," *Int. J. Hydrogen Energ.*, Vol. 34, No. 4, pp. 2026~2042.
- (2) Rajashekara, K., Grieve, J. and Daggett, D., 2008, "Hybrid Fuel Cell Power in Aircraft," *IEEE Ind. Appl. Mag.*, Vol. 14, No. 4, pp. 54~60.
- (3) Martinez, A. S., Brouwer, J. and Samuelsen, G. S., 2012, "Feasibility Study for SOFC-GT Hybrid Locomotive Power Part II. System Packaging and Operating Route Simulation," *J. power sources*, Vol. 213, No. 1, pp. 358~374.
- (4) Lukas, M. D., Lee., K. Y. and Ghezal-Ayagh, H., 2002, "Modeling and Cycling Control of Carbonate Fuel Cell Power Plants," *Control. Eng. Pract.*, pp. 197~206.
- (5) Lukas, M. D., Lee., K. Y. and Ghezal-Ayagh, H., 2001, "An explicit dynamic model for direct reforming carbonate fuel cell stack," *IEEE T. Energy Convert.*, Vol. 16, No. 3, pp. 289-295.
- (6) Lukas, M. D., Lee., K. Y. and Ghezal-Ayagh, H., 1999, "Development of a Stack Simulation Model for Control Study on Direct Reforming Molten Carbonate Fuel Cell Power Plant," *IEEE T. Energy Convert.*, Vol. 14, No. 4, pp. 1651~1657.
- (7) Brouwer, J., Jabbari, F., Leal, E. M. and Orr, T., 2006, "Analysis of a Molten Carbonate Fuel Cell: Numerical Modeling and Experimental Validation," *J. Power Sources*, Vol. 158, No. 1, pp. 213~224.
- (8) Larminie, J. and Dicks, A. 2000, *Fuel Cell Systems Explained*, John Willey & Sons, Ltd.
- (9) Wolf, T. L. and Wilemski, G., 1983, "Molten Carbonate Fuel Cell Performance Model," *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 130, No. 1, pp. 48~55.
- (10) Jeong, Y. H. and Kim, T. S., 2003, "Performance Design Analysis of Hybrid Systems Combining Atmospheric Pressure Molten Carbonate Fuel Cell and Gas Turbine," *Trans. Korean Soc. Mech. Eng. B*, Vol. 27, No. 10, pp. 1361~1369
- (11) Yuh. C. Y. and Selman, J. R., 1991, "The Polarization of Molten Carbonate Fuel Cell Electrodes : I. Analysis of Steady-State Polarization Data," *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 138, pp. 3642~3648.
- (12) Sung, T. and Kim, K. C., 2013, "Design of Dynamic MCFC Simulation Bed for MBOP Feability Test of Marine Applications," *Appl. Mech. and Mater.*, Vol. 291-294, pp. 589~592.
- (13) Fuel Cell Engineering Corporation, 1997, "Santa Clara 2-MW Fuel Cell Demonstration Power Plant Test Report," prepared for EPRI, TR-108252, USA.