

## 수치모사를 이용한 CDI Unit Cell 내부의 유로성능 평가

손 덕 영,<sup>1</sup> 최 윤 호,<sup>\*2</sup> 박 대 옥,<sup>3</sup> 정 총 효<sup>4</sup>

### COMPUTATIONAL STUDY FOR PERFORMANCE EVALUATION OF FLOW CHANNELS INSIDE CDI UNIT CELL

D.Y. Sohn,<sup>1</sup> Y.H. Choi,<sup>\*2</sup> D.W. Park<sup>3</sup> and C.H. Jung<sup>4</sup>

*In the present study, computations for flow fields inside the CDI unit cells with electrodes and spacers have been made to evaluate their performance. Three types of unit cells that include a planar type, a serpentine channel type, and a spiral wound type were considered and their flow characteristics were compared. From the computational results, it is found that the serpentine channel type has a large flow resistance and can not guarantee the outflow flux for industrial applications. On the other hand, the planar type can sustain a large enough outflow flux but its efficiency is low for the electrode-use because of the non-uniform velocity distribution inside the cell and dead zones in every corner. Finally, The spiral wound type has not only a large outflow flux as much as the planar type has, but also a high efficiency for the electrode-use because of uniform velocity distribution. From this comparison, we can expect that the spiral wound type of CDI unit cell would have a high performance deionization capability.*

**Key Words :** 축전탈이온화(Capacitive Deionization), 유동특성(Flow Characteristics), 전산유체역학(CFD), 다공성 전극(Porous Electrode)

### 1. 서 론

물은 공기와 함께 생명과 직결되는 매우 중요한 자원이다. 이러한 물은 시간이 흐를수록 인구증가와 생활수준의 향상, 과학과 산업발달에 따라 그에 대한 수요가 많아지고 있는 실정이다. 그러나, 최근 세계적인 기상이변과 자연환경의 훼손 등으로 인해 물의 공급이 부족해지고 있을 뿐만 아니라 산업 활동의 증가에 따라 환경에 방출되는 유독 화학물질이나 인간 활동 및 농업 활동의 증가에 따른 생물성 폐기물에 의한 물의 오염 역시 심각해지고 있다. 또한, 식수의 질적 욕구에

따른 정수기에 대한 관심이 증가하고 세탁기나 오븐과 같은 가전기기에 급수되는 물 역시 경도성분으로 인한 스케일형성 방지와 세탁성능 향상을 위한 연수처리가 요구되고 있으며, 물 부족 현상을 해결하기 위한 해수의 담수화 및 반도체 제조 등의 산업에서 필요로 하는 고순도 물에 대한 요구가 증대됨에 따라 순수한 물의 제조방법에 대한 관심이 높아지고 있다.

CDI(Capacitive deionization) 공정은 고체와 액체 두 상이 접하는 면에 전기장을 가할 때 생성되는 전기이중층의 흡착 원리를 이용하는 방식으로, 비표면적이 넓은 다공성 전극의 적층에 이온수를 통과시켜 이온성 불순물을 제거하는 방식이다. 현재 순수한 물을 제조하기 위한 수처리 방법으로는 증발법, 역삼투법, 이온교환법, 전기투석법, 역전기투석법 등이 사용되고 있다. 그러나 이러한 방법들은 고에너지 소비 및 처리 비용에 따른 경제성, 폐기물 생성, 관리의 어려움, 적용범위의 한계 등으로 인한 문제점 및 개선사항들을 많이 가지고 있다 [1-3]. 이에 반해 CDI 공정은 물이 분해되지 않은 1.2V 이하의 낮은 전압을 사용하기 때문에 전력 소비가 적고, 방전으로

접수일: 2009년 12월 14일, 수정일: 2010년 1월 27일,  
게재확정일: 2010년 2월 5일.

1 정희원, 아주대학교 대학원 기계공학과

2 정희원, 아주대학교 기계공학과

3 삼성전자 DMC 연구소

4 삼성전자 종합기술원

\* Corresponding author, E-mail: ychoi@ajou.ac.kr

전극을 간단하게 재생할 수 있어 2차 폐기물이 발생하지 않아 친환경적이고, 사용편리성을 높일 수 있는 차세대 수처리 기술이다. 또한, 이 공정은 운전 및 관리가 용이하다는 장점도 있다[4]. 실제로 염분을 제거하는 경우 CDI 공정의 에너지 소비량은 증발법의 1/32, 역삼투법의 1/3 정도로 환경친화적 기술이라고 할 수 있다[5].

CDI와 관련된 연구는 많은 시간에 걸쳐 국내외적으로 꾸준히 진행되어 왔었다. 그러나 이는 대부분 탄소나노물질과 같은 전극 재료에 대한 것이 대부분이었고 CDI 공정 자체에 대한 연구는 크게 부족한 실정이다. 특히 상용화 단계의 CDI 공정에 수치해석을 적용하여 각종 설계방안에 따른 성능예측을 국내에서 수행한 경우는 진무한 상태이다. 이에 본 연구에서는 CDI의 성능예측을 위한 첫 단계로 다양한 type의 CDI unit cell의 유로 설계에 필요한 유동특성 및 토출가능 유량을 고찰하고자 한다.

## 2. 지배 방정식 및 수치해석 기법

본 연구에서는 지배 방정식으로 다음과 같은 비압축성 유체의 정상상태 연속 방정식과 운동량 방정식을 고려한다.

$$\rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

$$\rho \frac{\partial}{\partial x_j} (u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \right\} \quad (2)$$

본 연구의 수치해석을 위해서는 FLUENT 코드가 사용되었다. 본 코드는 범용 유동해석 코드로서 Patankar의 제어체적 방법을 기본으로 하여 이산화하였으며, 대류항에 대한 차분기법으로서는 power law 기법을 사용하고, 운동량 방정식에 나타난 속도와 압력의 관계는 압력을 추정하여 속도를 보정하는 방법인 SIMPLER 알고리즘을 사용한다. 또한 해의 수렴조건 및 안정성을 위하여 하향이완법을 적용한다.

본 연구에서 적용한 다공성매질은 위의 Navier-Stokes 방정식에 다음과 같은 운동량 소멸항(sink)을 추가함으로써 모델링할 수 있다.

$$S_i = \sum_{j=1}^3 D_{ij} \mu u_j + \sum_{j=1}^3 C_{ij} \frac{1}{2} \rho |u_j| u_j \quad (3)$$

위 식에서 첨자  $i$ 는 각각  $x$ ,  $y$ ,  $z$  방향의 운동량 방정식에

대한 운동량 소멸항을 나타낸다. 우변의 첫 번째 항은 Darcy's law에 따른 점성 손실항이고, 두 번째 항은 관성 손실항이다.  $D_{ij}$ 와  $C_{ij}$ 는 각각  $a$ ,  $C_2$ 로 이루어진 행렬이며, 여기서  $a$ 는 다공성 매질의 투과율을 나타내고,  $C_2$ 는 관성저항인자이다. 본 연구에서는 CDI unit cell의 전극 및 spacer를 다공성 매질로 모델링하였으므로 매질 내부에서는  $i=1$ 인  $x$  방향과  $i=2$ 인  $y$  방향의 유동만 존재한다고 볼 수 있다. 따라서  $x$ ,  $y$  방향의 운동량 소멸항만이 고려되었고, 이 때 운동량 소멸항은 다음과 같이 된다.

$$\begin{aligned} S_x &= \frac{\mu}{\alpha} u + C_2 \frac{1}{2} \rho |u| u \\ S_y &= \frac{\mu}{\alpha} v + C_2 \frac{1}{2} \rho |v| v \end{aligned} \quad (4)$$

이러한 운동량 소멸항은 다공성 매질 내에서 속도 또는 속도의 제곱에 비례하는 압력강하를 발생시키게 되며, 실험을 통해  $a$ 와  $C_2$ 를 결정하게 되면 다공성 매질내의  $x$ ,  $y$  방향의 속도  $u$ ,  $v$ 에 따른 압력강하량을 다음과 같이 표현할 수 있게 된다.

$$\begin{aligned} \Delta p_x &= \frac{\mu}{\alpha} u \Delta n_x + C_2 \frac{1}{2} \rho |u| u \Delta n_x \\ \Delta p_y &= \frac{\mu}{\alpha} v \Delta n_y + C_2 \frac{1}{2} \rho |v| v \Delta n_y \end{aligned} \quad (5)$$

여기서  $\Delta n_x$ ,  $\Delta n_y$ 는 각각  $x$ ,  $y$  방향의 다공성 매질의 두께이다.

## 3. 해석 조건

본 연구의 해석 대상인 CDI unit cell은 한 쌍의 전극과 그 사이에 위치하는 spacer, 그리고 이들을 덮고 있는 집전체의 층상 구조로 이루어져 있다. 이 중 집전체는 물이 흐를 수 없는 고체 영역으로 간주되어 본 계산영역에서 제외된다. 전극은 일반적으로 흡착면적이 매우 큰 탄소섬유 등의 다공성 물질로 구성되며, spacer 역시 다공성 매질로 대체할 수 있는 메쉬 형태로 이루어져 있다. 즉 unit cell 내에서는 다공성 매질인 전극과 spacer를 통해서만 물이 흐를 수 있는 유로가 형성된다. 계산에 이용된 입출구 경계조건은 모두 압력조건을 사용하였으며, 일반 가정에서의 수압 범위인 0.5~2.5 bar와 대기압을 입구와 출구조건으로 각각 설정하였다. 계산에 사용된 격자의 수는 serpentine channel type과 planar type인 경우 각각 101,269 cell과 403,548 cell이며, spiral wound type의 계산에는 47,040 cell의 축대칭 2차원 격자가 사용되었다.

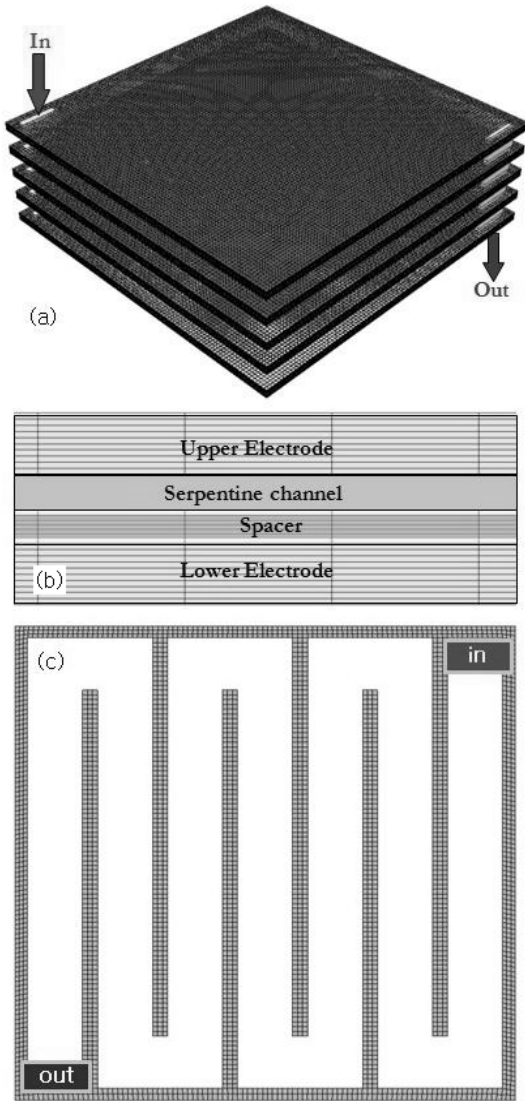


Fig. 1 Serpentine channel type unit cell structure (a) Unit stack structure (b) Unit cell layer structure (c) Serpentine channel structure

Fig. 1은 serpentine channel type의 cell 구조를 보여주고 있다. 이 구조는 전극 사이에 존재하는 2장의 spacer 중 한 장의 spacer 내에 serpentine channel을 만들어 유동패스를 보다 길게 유도하여 이온의 제거율이 높아질 수 있도록 고안된 구조이다. 이 구조는 긴 유동패스로 인해 보다 높은 이온 제거율을 기대할 수 있으나, 제작단계에서 cell의 측면과 케이스 사이의 기밀성을 확보하기 어렵다는 단점이 있다. Cell 측면과 케이스 사이의 실링에 누수가 생기게 되면 이온수가 CDI cell을 거치지 않은 채 바로 토출되게 되어 이온 제거율이 오히려

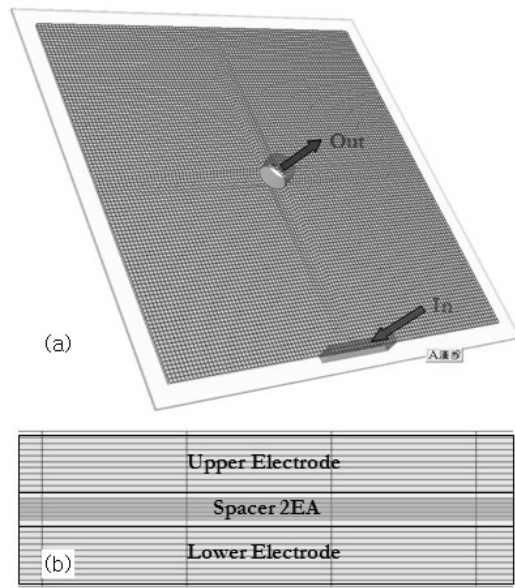


Fig. 2 Planar type unit cell structure (a) Unit cell flow channel structure (b) Unit cell layer structure

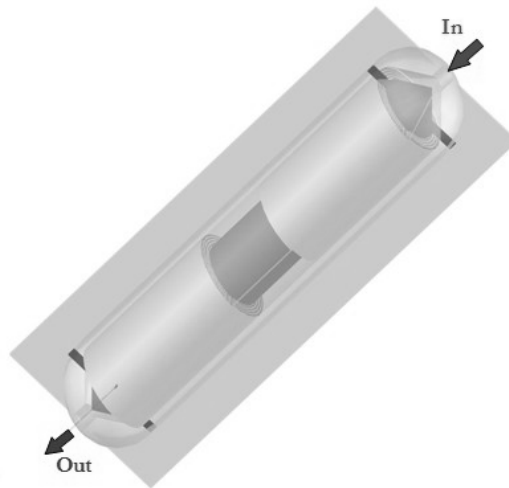


Fig. 3 Spiral wound type unit stack structure

크게 낮아질 수 있다.

Fig. 2는 planar type의 unit cell 구조를 보여준다. 이 구조는 현재 상용 CDI의 개발 단계에서 많이 고려되고 있는 구조로 이온수가 cell 측면과 케이스 사이의 유로를 통해 cell의 사방에서 유입된 후 cell 중앙의 출구를 통해 토출된다. 이러한 구조는 짧은 유동패스로 인해 높은 제거율을 기대하기 어려운

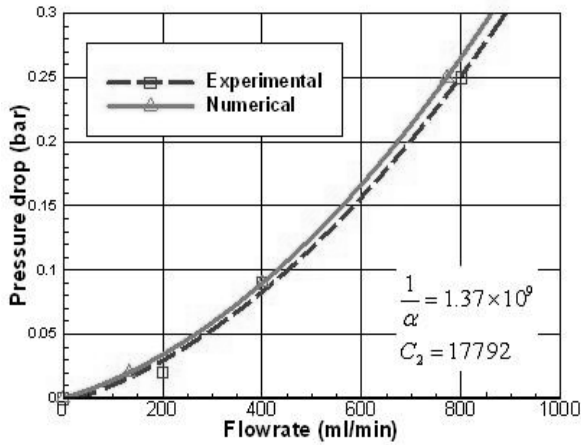


Fig. 4 Viscous resistance and inertial resistance of CDI unit cell

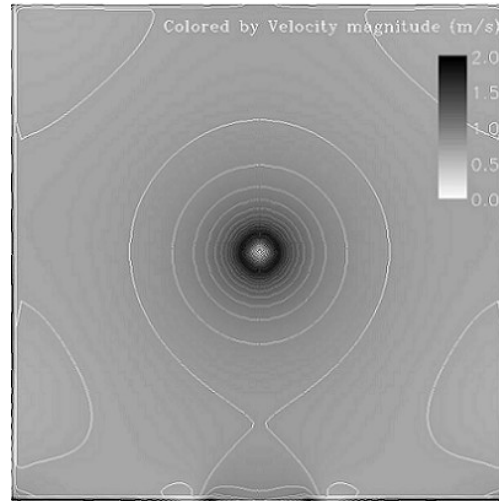


Fig. 6 Velocity contours on the center plane of planar type unit cell

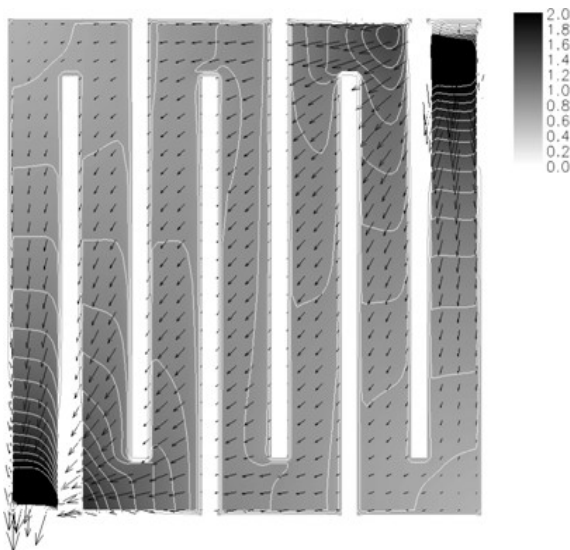


Fig. 5 Velocity vectors and contours in the serpentine channel

반면, 비교적 큰 유량을 토출할 수 있고, cell 측면과 케이스 간의 실링이 필요없게 되어 serpentine type에 비해 제작이 용이한 장점이 있다.

Fig. 3은 spiral wound type으로 이는 unit cell의 집적을 통해 구현되는 stack의 형상이 공간 활용 측면에서 유리하고, 전극 전체에 균일한 유속이 분포되어 보다 효율적인 cell type이 될 수 있을 것으로 기대된다. 또한, cell의 병렬구조 및 직렬 구조를 stack 내에서 비교적 간단하게 구현할 수 있는 장점이 있는 반면, cell을 균일하게 감는 기술을 확보해야 하는 등의 제작상 어려움이 존재한다.

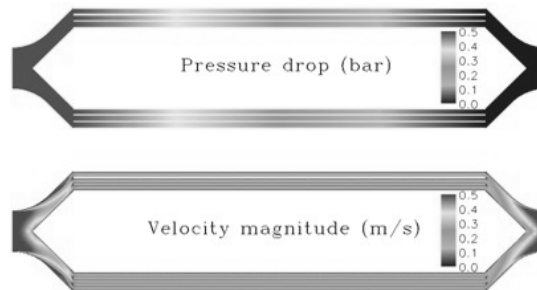


Fig. 7 Pressure and velocity contours on the cross section of spiral wound type unit cell

### 3. 결과 및 검토

실험을 통해 얻어진 속도에 따른 압력 강하량과 식 (5)를 이용하면 CDI unit cell과 유사한 특성을 갖는 다공성 매질의 투과율( $\alpha$ )과 관성저항인자( $C_2$ )를 결정할 수 있다. Fig. 4는 이와 같이 결정된 투과율 및 관성저항인자를 갖는 다공성 매질의 압력 강하량을 본 연구에서 사용된 CDI cell의 압력강하량과 비교한 결과이다. 유량에 따른 압력강하량이 실험 결과와 비교적 잘 일치하고 있으므로, CDI 내부 유동 계산에 사용된 다공성 매질의 특성값이 충분히 타당하다는 것을 알 수 있다.

#### 4.1 Serpentine channel type

Fig. 5는 serpentine channel type unit cell의 단면 중 serpentine channel에서의 속도분포를 나타내고 있다. 본 결과

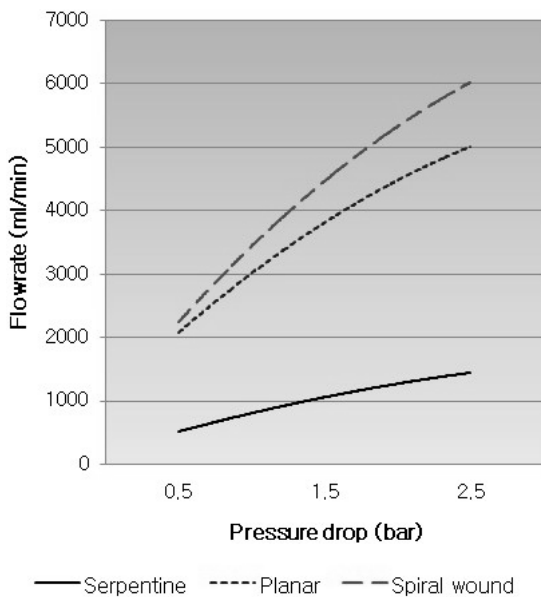


Fig. 8 Flowrate comparison for the three types of CDI unit cell

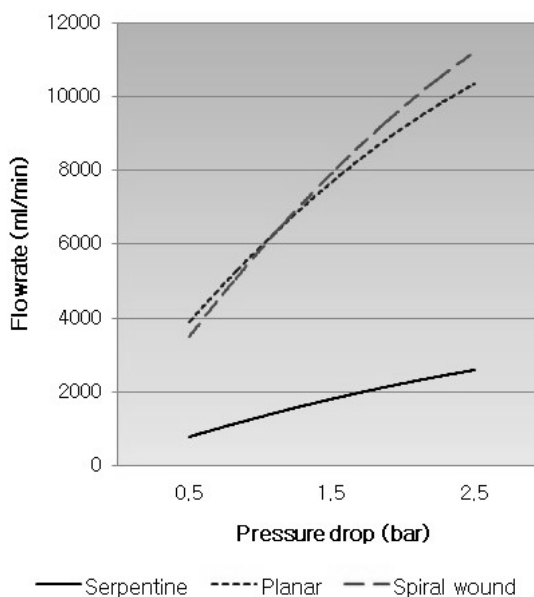


Fig. 9 Flowrate comparison for the three types of CDI system

에 의하면 의도했던 serpentine 흐름이 serpentine channel 단면에서조차 나타나지 않고 있다. 이렇듯 이온수의 흐름이 channel을 따라 흐르지 않는 것은 serpentine channel 뿐만 아니라 다공성 매질인 spacer 및 전극으로 물이 흐를 수 있기 때문에 serpentine channel의 존재가 설계 의도대로 이온수의 흐름을 유도하고 있지 못하기 때문이다. 그러나, 양 모서리에 있는 입출구로 인해 다공성 매질을 통과하는 비교적 긴 유동패스가 형성되어 의도했던 이온 제거율의 향상은 어느정도 기대할 수 있을 것이다. 물론, 이와 같이 긴 유동패스는 비교적 높은 압력손실을 동반하기 때문에 본 연구의 주안점인 토출유량 측면에서는 불리한 type이 될 것으로 판단된다.

4.2 Planar type

Fig. 6은 planar type unit cell의 중간층인 spacer에서의 속도 분포를 보여주고 있다. Cell의 사방에서 유입된 이온수가 중앙 토출구로 이동하면서 유로면적의 감소로 인한 가속이 이루어지고 있다. 또한, cell 모서리 부분에서 매우 낮은 속도가 나타는데, 이는 대각선 방향의 유로가 다른 유로에 비해 상대적으로 긴 유동패스를 갖게 되어 유동저항이 증가되기 때문이다. Cell 내부의 유속은 이온 제거율과 밀접한 관계를 가지고 있으므로 이러한 불균일 유속분포는 전극 사용의 효율성을 저하시키게 된다. Cell의 형상을 사각형이 아닌 원형으로 구성하게 된다면, 지금과 같은 모서리의 dead zone을 제거할 수 있게 될 것이다.

4.3 Spiral wound type

독립된 unit cell을 층상구조로 집적하여 stack을 구성하는 일반적인 type과 달리 spiral wound type은 하나의 긴 unit cell을 원형으로 감아 stack을 구성하게 된다. 이러한 경우에는 이온수가 cell의 한쪽 측면으로 균일하게 유입하고 반대쪽 측면으로 동일하게 유출되므로, cell 전체에 걸쳐 간결하면서도 균일한 속도분포를 얻을 수 있다. Fig. 7은 이러한 spiral wound type의 중앙 수직단면에서의 유동 분포를 보여주고 있다. 원주방향의 분포는 모두 축대칭으로 동일하며 그 단면에서 역시 0.5bar의 입구압력에 대해 전체적으로 0.1 m/s의 균일한 속도분포를 나타낸다.

4.4 토출 유량 비교

Fig. 8은 본 연구에서 수행된 계산결과를 이용하여 cell type에 따른 토출유량을 일반 가정의 수압조건하에서 비교한 것이다. 최저 수압인 0.5 bar에서의 토출유량은 planar type과 spiral wound type이 약 2000 ml/min 이상으로 비교적 유사한 결과를 보여주는 반면, serpentine type은 큰 유동저항으로 인해 약 500 ml/min의 유량만을 토출한다.

CDI unit cell의 압력에 따른 토출유량의 계산결과를 이용하면, unit cell의 집적체인 stack 및 이들을 직렬, 혹은 병렬로 연결하여 구성된 전체 시스템의 토출유량을 예측할 수 있다. Fig. 9는 총 1 m<sup>2</sup>의 전극이 사용된 가상 CDI 시스템의 토출유량을 예측하여 비교한 도표이다. 이 시스템은 병렬연결된

5개의 stack으로 구성되고, 각각의 stack은 2겹의 unit cell로 구성된 double unit cell 5개가 직렬유로를 형성할 수 있도록 적층된다고 가정하였다. Planar type과 spiral wound type의 CDI 시스템은 최저 수압에서 4000 ml/min의 유량을 토출할 수 있어 일반 가전기에 응용하는 데 무리가 없을 것으로 판단된다. 이에 반해, serpentine type의 CDI 시스템은 같은 조건에서의 토출유량이 1000 ml/min 이하가 될 것으로 예상되어 상용화를 위한 개발 단계에서 어려움이 있을 것으로 예상된다.

## 5. 결 론

본 연구에서는 3가지 type의 CDI unit cell 내의 유동특성에 대한 수치해석을 수행하여 유동성능 및 토출 유량을 예측하였다. CDI 시스템의 성능을 좌우하는 요인은 크게 소비 에너지, 이온 제거율, 토출 유량으로 나눌 수 있다. 이들 중 이온 제거율은 cell 내의 이온수 속도분포와 밀접한 관계를 가지고 있으며, 속도분포의 균일성에 따라 전극의 이용효율도 달라지게 된다. 또한 토출유량은 상용화를 위한 설계단계에서 매우 중요한 요인이 된다. 각 type별 CDI unit cell의 해석결과는 다음과 같이 요약될 수 있다.

Serpentine type은 CDI 내부의 유동방향을 제어할 수 있어 이온 흡착 성능의 향상을 기대할 수 있으나, 유동방향 제어가 기대보다 어렵고 길어진 유선궤적에 의한 큰 유동저항으로 인해 실제 기기에 응용하기 위한 유량확보가 어렵다. 또한 전극내부에서의 속도편차가 매우 커 전극의 효율적인 활용이 어려워지며 이로 인한 흡착성능의 감소가 있을 수 있다.

Planar type은 반경방향으로의 속도편차 및 모서리 부분에서 발생하는 사영역으로 인해 전극 전면에 걸친 고른 흡착성능을 기대하기 어렵다. 그러나 전극으로의 유입에서 유출까지의 유선궤적이 비교적 짧기 때문에 보다 큰 유량을 확보할 수 있다.

Spiral wound type은 간결한 유로구조로 인해 압력손실이 상대적으로 적어 planar type만큼의 유량을 확보할 수 있음과 동시에 전극 전면에 걸친 고른 속도분포로 인해 효율적인 전

극 사용이 가능하여 보다 향상된 이온 제거 성능을 기대할 수 있다.

이상의 결과를 종합해 보면, 약 4l/min 정도의 적정 토출유량을 확보하는 측면에서는 planar type과 spiral wound type이 비슷한 수준의 성능을 보이지만, 현재로는 제작상의 이유로 spiral wound type에 비해 planar type을 선호할 수 밖에 없는 실정이다. 제작기술만 확보된다면 전극사용의 효율성과 이에 따른 높은 이온 제거율을 기대할 수 있는 spiral wound type이 보다 유리한 선택이 될 수 있을 것이다.

## 후 기

본 논문은 삼성 전자의 산학 협력 과제의 지원에 의하여 연구된 결과로 작성되었습니다.

## 참고문헌

- [1] 1996, Farmer, J.C., Fix, D.V., Mack, G.V., Pekala, R.W. and Poco, J.F., "Capacitive Deionization of  $\text{NH}_4\text{ClO}_4$  Solutions with Carbon Aerogel Electrodes," *J. Appl. Electrochemistry*, Vol.26-10, pp.1007-1018.
- [2] 1997, Farmer, J.C., Bahowick, S.M., Harrar, J.E., Fix, D.V., Martinelli, R.E., Vu, A.K. and Carroll, K.L., "Electrosorption of Chromium Ions on Carbon Aerogel Electrodes as a Means of Remediating Ground Water," *Energy and Fuels*, Vol.11-2, pp.337-347.
- [3] 1996, Farmer, J.C. and Joseph, C., "Capacitive Deionization of NaCl and  $\text{NaNO}_3$  Solutions with Carbon Aerogel Electrodes," *J. Appl. Electrochemistry*, Vol.143-1, pp.159-169.
- [4] 2004, 손정식, "전기이중층 모델을 이용한 이온의 전기흡착 거동 해석," 석사학위논문, 전남 대학교, 전남.
- [5] 2005, 전상훈, "탄소나노물질을 이용한 CDI 공정 모사," 석사학위논문, 아주 대학교, 수원.