

Aspen Plus 프로그램에 의한 장갑차량용 고온고분자전해질 연료전지 기반 보조전원장치 성능 시뮬레이션 분석

유민규^{*,1),2)} · 박지일³⁾ · 권혁상¹⁾

¹⁾ 한국과학기술원 신소재공학과

²⁾ 육군 교육사령부

³⁾ 육군사관학교 기계공학과

Analysis for Performance of the HT-PEFC based Auxiliary Power Unit by Aspen Plus Software

Minkyu Yu^{*,1),2)} · Ji-il Park³⁾ · Hyuksang Kwon¹⁾

¹⁾ Department of Materials Science and Engineering, Korea Advanced Institute of Science and Technology, Korea

²⁾ Army Training & Doctrine Command, Korea

³⁾ Department of Mechanical Engineering, Korea Military Academy, Korea

(Received 16 September 2015 / Revised 11 January 2016 / Accepted 25 March 2016)

ABSTRACT

The fuel cell based auxiliary power unit (APU) is promising for power source of armed vehicles due to its silence and high efficiency. Especially, the on board hydrogen generation and fed to fuel cell system was core technology of this power system. In this study, we analyzed the performance of the Auto thermal reactor (ATR) that produce the hydrogen from the fuel, integrated High temperature polymer electrolyte fuel cell (HT-PEFC) by Aspen plus software. The fuel was designed as a n-dodecane for analysis of military fuel (JP-8).

Key Words : Aspen Plus, HT-PEFC, APU, ATR, n-dodecane

1. 서 론

보조전원장치는 엔진의 구동없이 전기를 생산하여 차내에 공급하는 일종의 보조발전장치로, 엔진의 수명 향상 및 연료소모 절감에 효과가 크다고 보고되고 있

다¹⁾.

특히 연료전지를 기반으로 한 보조전원장치 시스템은 높은 발전효율과 무소음 특성으로 군용물자로서 높은 관심을 받고 있다²⁻⁴⁾. 이러한 연료전지 기반 보조전원장치 시스템의 차량 적용을 위해서는 차내 수소생산장치가 필수적이다. 이러한 차내 수소생산장치는 발열반응과 흡열반응을 결합하여 차량의 연료 내 탄화수소를 수소로 변환시키는 Auto thermal reaction(ATR)

* Corresponding author, E-mail: c14015@kaist.ac.kr

Copyright © The Korea Institute of Military Science and Technology

장치가 널리 사용되고 있다^[5-7]. 이 과정에서 부산물로 생기는 일산화탄소(CO)를 제거하기 위한 Water gas shift(WGS), Catalytic burner(CAB) 등의 장치가 시스템화되어 운영된다. 이러한 ATR, WGS, HT-PEFC, CAB 장치들은 main components로 subcomponents인 pump, compressor, fan 등과 결합되어 APU 시스템을 구성한다. Aspen plus software 는 화학공정을 묘사하고 시뮬레이션하는 프로그램으로, 개질에 의한 수소생산공정 분석^[8-10] 및 수소생산장치와 결합된 연료전지 시스템의 성능분석^[11,12]등에 주로 사용되고 있다. Aspen plus software를 이용한 PEFC 기반의 APU 성능분석은 주로 diesel, gasoline, kerosene 등이 연구되었으나, 미 육군 장갑차량의 연료체계인 JP-8과 관련된 연구보고는 없었다. 또한 미 육군은 현재 에이브람스 전차의 APU로 사용하기 위하여 2009년부터 JP-8 Fuel을 이용하는 ATR integrated HT-PEFC 기반의 APU에 대한 연구개발을 진행하고 있다^[1]. 한편 ATR integrated HT-PEFC 기반 APU 시스템의 내부소모전력 분석에 대한 연구보고 역시 부족한 실정이다. 따라서 본 논문에서는 ATR, WGS, HT-PEFC, CAB등을 시스템화하여 보조전원장치로 설계하고 군용 연료인 JP-8 연료 중 가장 높은 비율을 차지하고 있는 n-Dodecane(C₁₂H₂₆)^[13]을 연료로 하여 수소로 생산하고 이를 전기로 변환하는 과정을 Aspen plus 소프트웨어를 통하여 구현하고 그 발전 성능 및 내부소모 전력을 분석하였다.

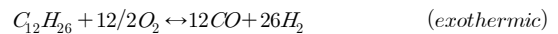
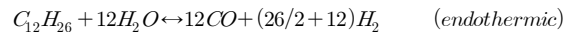
2. 실험 방법

HT-PEFC 기반 APU 시스템 모델링은 독일 울리히 연구소(Forschungszentrum Juelich)에서 실제 운용되고 있는 ATR integrated 5 kW HT-PEFC 장비의 실제 운용 데이터를 기반으로 설계하였으며(유효면적 : 320.13 cm² 셀 : 70개, 스택 내 수소이용률 : 83 %, ATR 내부 H₂O ratio : 1.9, O₂C ratio : 0.47, Cathode air ratio : 2, CAB air ratio : 1.05), 기존 디젤 공급용 모델 기본 구조^[14,15]를 바탕으로 연료를 n-Dodecane으로 변경하고, 이에 따른 화학반응식 및 모델링을 수정 및 보완하여 그 발전성능을 분석하였다. HT-PEFC 기반 APU 시스템에 공급될 연료는 모델링 Properties에서 components를 n-Dodecane(C₁₂H₂₆)으로 설정 및 적용(Fig. 1)하였으며, 모델링 설계시 최초 연료공급 Stream에서 C₁₂H₂₆로 설정, Design spec에서 fuel stream을 역시 C₁₂H₂₆로 변

경하였다. Design spec 부분에서 H₂O/C 및 O₂/C 계산식에서 C number를 12로 수정하여 계산식을 개선하고, 이 계산식을 통하여 최종 발전성능을 계산하였다.

Fig. 2는 실험에 사용된 HT-PEFC 기반 보조전원장치 시스템 디자인의 개략도이다. 본 시스템의 생산공정은 다음과 같다. 공기와 물을 이용 고온의 증기(Steam)를 만들어 장갑차량의 연료와 화학반응을 통하여 탄화수소내의 수소를 분리 추출(ATR stage)한 후, 발생한 일산화탄소(CO)를 고온과 저온 2단계의 WGS(HTS, LTS)공정을 통해 제거한다. CO가 제거된 Stream은 연료전지의 anode 로 공급이 되고, 공기는 cathode로 공급하여 연료전지내에서 화학반응을 일으킨다. 연료전지에서 발생한 off-gas는 CAB에서 이산화탄소와 물로 변환되어 배출된다. 시스템 내부 온도 조절은 Oil cooler에 의해 유지되며, ATR 및 WGS 단계에서 요구되는 물은 연료전지 반응을 통해 생성된 물이 Water tank를 통해 순환하며 추가 공급없이 운용된다. 모든 reactor는 Gibbs energy minimization의 원리 하에 Gibbs reactor로 설계되었다. 이 공정의 각 단계를 화학반응식으로 표현하면 아래와 같다^[16].

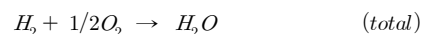
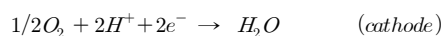
ATR (Auto thermal reaction)



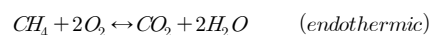
WGS (Water Gas shift)



HT-PEFC



CAB (Catalytic burner)



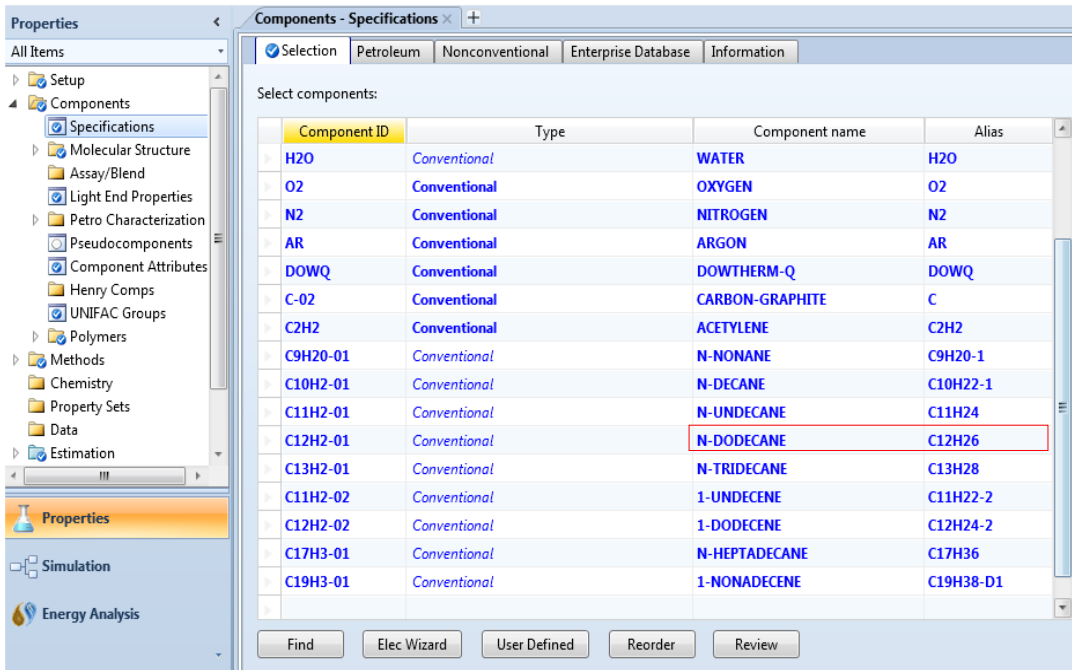


Fig. 1. Fuel properties on aspen plus software(N-DODECANE $C_{12}H_{26}$)

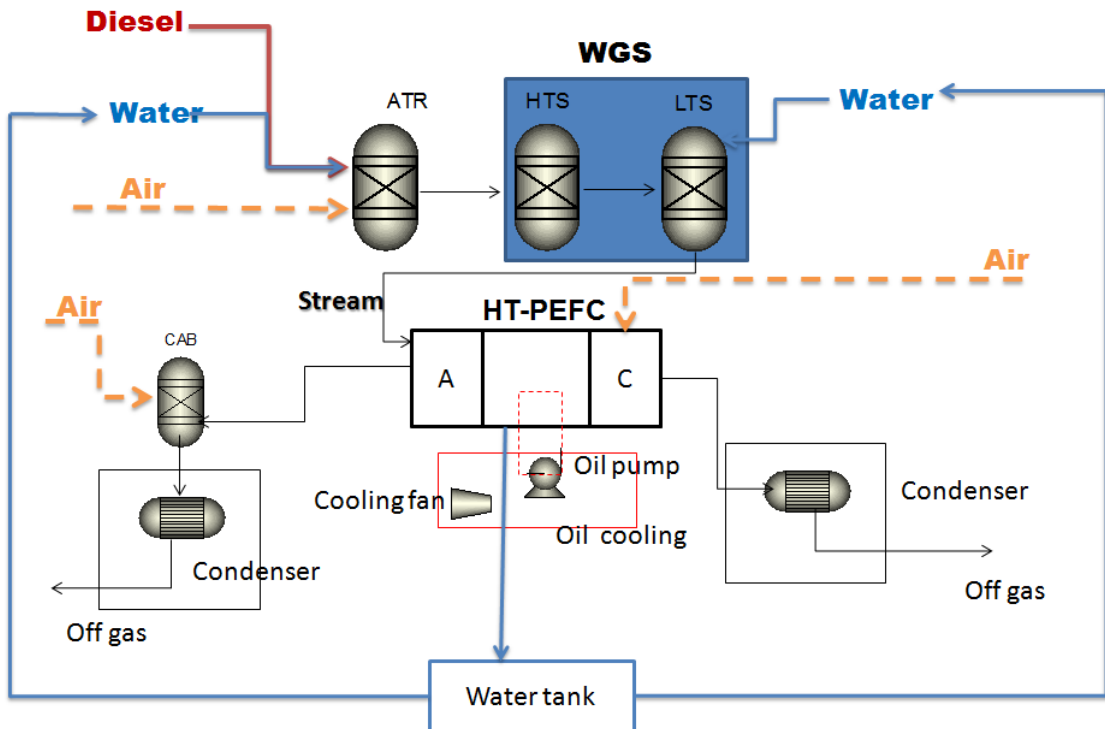


Fig. 2. Schematic design of HT-PEFC based APU system

Table 1은 HT-PEFC 기반 보조전원장치 시스템의 시뮬레이션을 위한 Parameters 이다. 이 시스템의 power는 5 kW 급으로 설계하였으며, 연료전지는 각각 320.13 cm² 면적을 갖는 70 개의 Cell로 구성되었다. 또한 실 운용 데이터에 근거하여 Anode를 통해 공급된 수소의 83 %가 연료전지 내에서 화학반응을 일으키는 것으로 가정하였다. ATR 단계에서 H₂O/C 및 O₂/C ratio는 실 운용데이터를 근거로 각각 1.9 및 0.47로 설정되었다. ATR mixing chamber 내부 온도는 420 °C, WGS의 저온 단계 water quenching 후 온도는 300 °C, 연료전지내부 및 CAB 이후 Steam 온도는 160 °C로 각각 설계하였다. 대기 온도 및 상대습도는 25 °C / 60 %로 계산하였으며, 실 장비 운용 데이터 및 동 실험장비를 활용한 발표논문^[15]을 근거로 compressor의 isentropic 효율 / 기계적 효율은 60 / 98 %, pump의 효율은 75 %로 계산하였다. ATR / WGS / Anode / Cathode / CAB 단계에서의 압력 drop은 각각 70 / 40 / 40 / 40 / 40 bar로 설정하였다. 또한 Fuel / ATR / WGS / Oil pump의 압력은 각각 60 / 40 / 40 / 2 bar로 설정하였다.

한편 발전성능 분석간 전류밀도는 Faraday 법칙에 근거하여 아래와 같이 계산하였다.

$$J = \frac{\text{Flowrate of } H_2(\text{mol/hr}) \times 2(\text{수소반응시 전자갯수}) \times C(\text{C/mol})}{\text{연료전지 Cell 면적}(cm^2)}$$

C : Faraday constant (96485)

또한 내부소모 전력 분석은 Aspen plus 매뉴얼에 의해 펌프류는 아래 계산식에 75 %를 적용하였으며,

$$P = \frac{\Delta p \times Q}{\eta} \tag{1}$$

P : 내부소모전력(W)

Δp : 펌프 유입전후 압력변화(Pa)

Q : 유체의 Volume flow rate(m³/s)

컴프레셔류는 아래 계산식에 기계적효율 98 %로 적용하여 계산하였다.

$$P = \frac{\Delta H}{\eta_m} \tag{2}$$

P : 내부소모전력(W)

ΔH : 컴프레서 통과 전후 엔탈피 변화

η_m : 컴프레서 기계적 효율

Table 1. Simulation parameters for HT-PEFC based APU system

Parameter	Value	Unit
Fuel	n-Dodecane	C ₁₂ H ₂₆
Fuel cell power	5	kW
Number of Cells	70	
Active area of each cell	320.13	cm ²
H ₂ utilization in the stack	83	%
H ₂ O ratio in ATR	1.90	
O ₂ C ratio in ATR	0.47	
Steam temp. at the inlet of ATR	420	°C
Reformat temp. at the inlet of LTS	300	°C
Steam temp. after CAB heat exchanger	160	°C
Cathode air ratio	2	
Inlet temp. of heat exchange for stack cooling	160	°C
Air ratio in the CAB	1.05	
Pressure drop(ATR/WGS/Anode/Cathode/CAB)	70/40/40/40/40	bar
Condensation temperature	45	°C
Ambient air temperature	25	°C
Ambient air relative humidity	60	%
Isentropic efficiency of compressors	60	
Mechanical efficiency of compressors	98	
Efficiency of pumps	75	
Pressure of pump (Fuel/ATR/WGS/Oil)	60/40/40/2	bar

Table 2. Simulation results for stream in each stage of HT-PEFC APU system

Mole Fraction	ATR IN	ATR OUT	HTS OUT	LTS OUT	ANODE IN	ANODE OUT
CO ₂		0.1059	0.1333	0.1474	0.1474	0.1972
CO		0.067	0.0396	0.0066	0.0066	0.0088
H ₂		0.2826	0.3101	0.3047	0.3047	0.0693
CH ₄		0.0027	0.0027	0.0024	0.0024	0.0032
H ₂ O		0.2285	0.2009	0.2602	0.2602	0.3482
O ₂		5.5299E-23	0	0	0	0
N ₂		0.3096	0.3096	0.2756	0.2755	0.3698
AR		0.0037	0.0037	0.0033	0.0033	0.0044
C ₁₂ H ₂₆	1					
Total Flow(kg/hr)	1.75	14.31	14.31	15.90	15.90	15.49
Temperature(°C)	26.24	469.02	498.68	332.97	160	160
Pressure(bar)	60	1.25	1.23	1.23	1.14	1.14

3. 실험 결과

Table 2는 HT-PEFC 기반 보조전원장치 시스템의 각 단계별 Stream의 화학조성, 압력, 온도 및 Flow rate의 변화를 시뮬레이션을 통해 나타낸 것이다. 최초 26.2384 °C의 C₁₂H₂₆ fuel이 1.75452 kg/hr의 속도로 ATR에 공급되고, ATR 공정을 마친 후에는 28 %의 H₂, 23 %의 H₂O, 10 %의 CO₂, 6.7 %의 CO로 구성되는 혼합기체(stream)이 생성된다. 이 stream은 다시 2단계의 물-가스 교환 공정(HTS(고온), LTS(저온))을 통하여 stream 내 CO는 3.9 %, 0.66 % 까지 감소하며, stream 내 H₂는 30.4 %를 차지하게 된다. HTS 공정이후의 stream의 온도는 498.7 °C, LTS 공정이후에는 333 °C가 된다. 연료전지의 애노드에 공급되는 Stream 내부의 수소는 30.4 % 이었으나, 연료전지 스택에서 83 %가 소모되어 애노드 off-gas 중에 수소는 6.9 %를 차지한다. 각 단계별 온도변화는 최초 연료는 상온(26.2384 °C) 상태에서 공급이 되고, ATR 공정을 거쳐 469 °C로 상승한 후 HTS 공정이후 498 °C, LTS 공정이후 333 °C로 유지되다가 HT-PEFC 운용온도인 160 °C 변화하게 된다. Stream 내 H₂O는 ATR 공정이후 28 %, WGS 공정이후 26 %, 연료전지 anode 배출시 35 %로 변화하였다. Table 3은 HT-PEFC 기반 보조전원장치 시스템의 발전 성능을 시뮬레이션한 결과를 보여준다. 시뮬레이션간 전류밀도는 Faraday 법칙에 의해 아래와 같이 계산하였다.

$$J = \frac{\text{Flow rate of } H_2 \times 1000 \times 2 \times 96485}{3600 \times 70 \times 320.13}$$

시뮬레이션 결과 C₁₂H₂₆ fuel을 이용하여 수소를 생산하고 0.2 kmol/hr의 속도로 공급하여 전류밀도 0.484 mA/cm², 전압 461 mV를 얻었다.

Table 3. Simulation results for performance of HT-PEFC based APU system

Parameter	Value	Unit
H ₂ Flow rate	0.20	kmol/hr
Current Density	0.48	mA/cm ²
Voltage	461.03	mV
Produced Power	5000	W
Net Power	4638.37	W
Internal Power Consumption	361.61	W
Cooling oil demand	1497.94	kg/hr
Fuel Demand	1.75	kg/hr
Water demand for ATR	4.28	kg/hr
Water demand for WGS	1.56	kg/hr
Water recovered at CAB	2.74	kg/hr
Water recovered at Cathode	3.96	kg/hr

Table 4. Simulation results for internal power consumption of HT-PEFC based APU system

Power demand for Components (W)							Internal power demand (W)	Net Power (W)
Pumps	Cathode air condenser	Anode air condenser	Compressor to ATR	Blower to stack	Blower to CAB	Air cooling fan		
65.58	29.76	33.56	89.88	99.37	11.55	27.46	361.61	4638.37

이 시스템의 내부전력소모는 361.61 W 이었으며, 내부전력소모를 제외한 Net Power는 4638.37 W 이었다. 시스템 온도유지를 위한 Cooling oil은 1497.94 kg/hr가 소요되며, 4.6 kW 전력생산을 위한 연료는 시간당 1.75 kg이 소모되었다. ATR 및 WGS 공정을 위해 물은 각각 4.28 kg/hr 및 1.58 kg/hr가 필요하지만 이는 CAB와 연료전지 Cathode 부분에서 각각 2.74 kg/hr 및 3.95 kg/hr 만큼 보충되고 water pump를 통해 순환하기 때문에 추가로 물을 공급할 소모는 없다. Table 4는 5 kW 급 HT-PEFC 기반 보조전원장치 시스템 발전간 내부소모전력에 대한 시뮬레이션 분석결과이다. 시스템 내부에는 stream과 물, 연료, 공기등을 공급시에 필요한 pump, compressor 및 시스템 냉각을 위한 cooling fan 등 부속품이 존재하는데 이 부속품 운용에 필요한 전력이 소모되는 것을 시뮬레이션을 통해 분석하였다. Pump의 효율은 75 %, compressor의 isentropic 효율은 60 % 기계적 효율은 98 %로 계산하여 각 공간간 엔탈피 변화량을 효율로 나누어 계산하였다. 시뮬레이션 결과 pump류에 의한 전력소모는 65.58 W, Compressor 및 blower에 의한 전력소모(Anode air condenser + Compressor to ATR+Blower to stack + Blower to CAB)는 200 W, Air cooling fan에 의한 전력소모는 27.46 W로 총 361.61 W의 전력이 내부시스템 운영용으로 소모되었다. 시스템 내부에는 stream과 물, 연료, 공기등을 공급시에 필요한 pump, compressor 및 시스템 냉각을 위한 cooling fan 등 부속품이 존재하는데 이 부속품 운용에 필요한 전력소모는 식 (1)과 식 (2)의 계산식을 이용하여 발전환경에 적용하여 시뮬레이션을 통하여 계산하였다.

시뮬레이션 결과 pump류에 의한 전력소모는 65 W, Compressor 및 blower에 의한 전력소모는 200 W, Air cooling fan에 의한 전력소모는 27 W로 총 361 W의 전력이 내부시스템 운영용으로 소모되었다.

4. 결론

본 연구에서는 장갑차량 내부에 설치 가능한 고온고분자 전해질 연료전지 기반 보조전원장치의 발전성능을 Aspen plus software를 통해 모델링 및 시뮬레이션을 통해 분석해 보았다. 시스템은 차내 연료(탄화수소)를 물, 증기와 반응시켜 수소로 전환하는 장치(ATR), Stream 내 CO를 저감시켜주는 물-가스 변환장치(WGS), 연료전지 스택(HT-PEFC), Off-gas 내 CO를 제거하는 (CAB) 및 기타 pump, compressor, cooling fan 등으로 구성되었다. 시뮬레이션을 통해 JP-8 Fuel을 개질하여 0.67 %의 낮은 CO를 포함하는 Stream을 5 kW 급 HT-PEFC 기반 APU 장치에 공급하여 4.6 kW의 전력생산이 가능하다는 것을 확인하였다. 이 시스템은 시간당 1.75 kg의 연료를 필요로 하며, 시스템 유지를 위해 361.61 W의 내부소모 전력을 사전에 고려하여야 한다.

또한 본 시뮬레이션은 그동안 간과하였던 HT-PEFC 기반 APU 시스템의 내부소모전력에 대하여 계산 및 분석하여 subcomponent의 효율에 의한 내부소모전력 계산함으로써 시스템의 장기 운용간 발생할 수 있는 subcomponent의 효율 저하로 인한 APU 시스템의 발전 성능 저하를 사전 예측하고 분석하였다는 것에 그 의의가 있다.

References

- [1] Dan Maslach, JP-8 Fuel Reforming APU for Military Vehicles, 2011 Fuel Cell Seminar, Orlando, 2011.
- [2] News, "US Army Test Fuel Cell APU for Abrams Tank," Fuel Cells Bulletin, Vol. 2010, Issue 7, p. 4, July 2010.

- [3] T. Aicher, B. Lenz, F. Gschnell, U. Groos, F. Federici, L. Caprile, L. Parodi, "Fuel Processors for Fuel Cell APU Applications," *J. Power Source*, Vol. 154, pp. 503-508, 2006.
- [4] C. Severin, S. Pischinger, J. Ogrzewalla, "Compact Gasoline Fuel Processor for Passenger Vehicle APU," *J. Power Source*, Vol. 145, pp. 675-682, 2005.
- [5] A. Ersoz, H. Olgun, S. Ozdogan, "Simulation Study of a Proton Exchange Membrane(PEM) Fuel Cell System with Autothermal Reforming," *Energy*, Vol. 31, pp. 1490-1500, 2006.
- [6] A. Ersoz, H. Olgun, S. Ozdogan, C. Gungor, F. Akgun, M. Tiris, "Autothermal Reforming as a Hydrocarbon Fuel Processing Option for PEM Fuel Cell," *J. Power Source*, Vol. 118, pp. 384-392, 2003.
- [7] X. Xu, P. Li, Y. Shen, "Small-Scale Reforming of Diesel and Jet Fuels to Make Hydrogen and Syngas for Fuel Cells: A Review," *Applied Energy*, Vol. 108, pp. 202-217, 2013.
- [8] Stephen G. Gopaul, Animesh Dutta, "Dry Reforming of Multiple Biogas Types for Syngas Production Simulated using Aspen Plus: The use of Partial Oxidation and Hydrogen Combustion to Achieve Thermo-Neutrality," *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 40, pp. 6307-6318, 2015.
- [9] Stephen G. Gopaul, Animesh Dutta*, Ryan Clemmer, "Chemical Looping Gasification for Hydrogen Production: A Comparison of Two Unique Processes Simulated using ASPEN Plus," *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 39, pp. 5804-5817, 2014.
- [10] L. Salemme, L. Menna, M. Simeone, "Analysis of the Energy Efficiency of Innovative ATR-based PEM Fuel Cell System with Hydrogen Membrane Separation," *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 34, pp. 6384-6392, 2009.
- [11] J. Pasel, J. Meißner, Z. Porš, R. C. Samsun, A. Tschauder, R. Peters, "Autothermal Reforming of Commercial JetA-1 on a 5 kWe Scale," *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 32, pp. 4847-4858, 2007.
- [12] Søren Juhl Andreassen*, Søren Knudsen Kær, "Modelling and Evaluation of Heating Strategies for High Temperature Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell Stacks," *International Journal of Hydrogen Energy* Vol. 33, pp. 4655-4664, 2008.
- [13] T. Tanim, D. J. Bayless, J. P. Trembly, "Modeling a 5 kWe Planar Solid Oxide Fuel Cell based System Operating on JP-8 Fuel and a Comparison with Tubular Cell based System for Auxiliary and Mobile Power Applications," *J. Power Source*, Vol. 245, pp. 986-997, 2014.
- [14] R. C. Samsun, J. Pasel, H. Janßen, W.r Lehnert, R. Peters, D. Stolten, "Design and Test of a 5 kWe High-Temperature Polymer Electrolyte Fuel Cell System Operated with Diesel and Kerosene," *Applied Energy*, Vol. 114, pp. 238-249, 2014.
- [15] R. C. Samsun, J. Pasel, R. Peters, D. Stolten, "Fuel Cell Systems with Reforming of Petroleum-based and Synthetic-based Diesel and Kerosene Fuels for APU Applications," *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 40, pp. 6405-6421, 2015.
- [16] J. Pasel, R. C. Samsun, R. Peters, D. Stolten, "Fuel Processing of Diesel and Kerosene for Auxiliary Power Unit Applications," *Energy and Fuels*, Vol. 27, pp. 4386-4394, 2013.