



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2022-0117035
(43) 공개일자 2022년08월23일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
H01M 8/04298 (2016.01) H01M 8/18 (2015.01)
(52) CPC특허분류
H01M 8/04305 (2013.01)
H01M 8/188 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2021-0020641
(22) 출원일자 2021년02월16일
심사청구일자 2021년02월16일

(71) 출원인
연세대학교 산학협력단
서울특별시 서대문구 연세로 50 (신촌동, 연세대학교)
한국전자기술연구원
경기도 성남시 분당구 새나리로 25 (야탑동)
(72) 발명자
최정일
경기도 고양시 일산서구 대산로 142, 307동 1302호(주엽동, 문촌마을3단지아파트)
하진호
서울특별시 서대문구 연희로16길 20, 204호(연희동)
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
민영준

전체 청구항 수 : 총 19 항

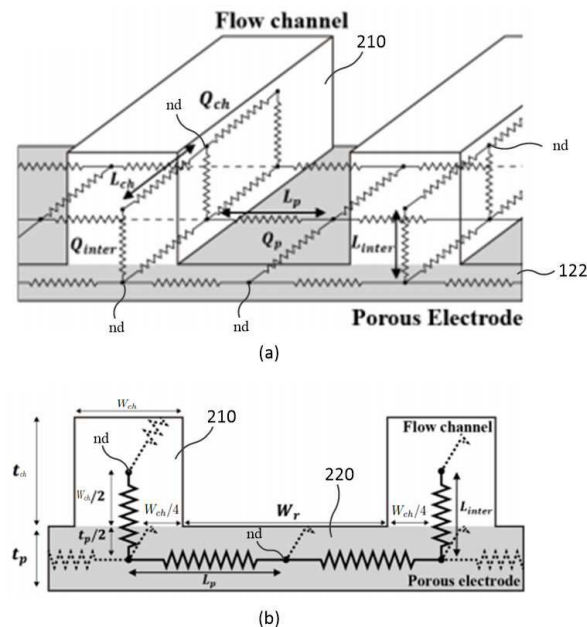
(54) 발명의 명칭 유동 채널과 다공성 전극을 갖는 흐름 전지 시뮬레이션 장치 및 방법

(57) 요약

본 발명은 흐름 전지 내에서 다공성 전극과 다공성 전극의 일 면상에 기지정된 패턴으로 구현되어 인가된 전해질을 다공성 전극으로 공급하는 유동 채널에 의해 형성되어 전해질이 전달되는 유동 경로의 유로 구조를 확인하고, 확인된 유로 구조에 따라 다공성 전극과 유동 채널 각각을 기지정된 거리 간격을 갖는 다수의 노드를 기준으로

(뒷면에 계속)

대표도 - 도6



구분하며, 구분된 다수의 노드 중 인접한 노드들이 전해질 유동을 방해하는 저항으로 연결되는 구조의 네트워크 모델을 생성하는 네트워크 모델 생성부, 및 네트워크 모델의 다수의 노드 각각에서 유입 및 유출되는 유량이 질량 보존 법칙을 만족하고, 다수의 노드 중 서로 인접한 노드를 연결하는 저항으로 이루어지는 폐루프에서의 압력 강하가 에너지 보존 법칙을 만족하도록, 네트워크 모델의 각 노드 사이의 유량 및 압력 강하를 계산하는 네트워크 해석부를 포함하여, 흐름 전지의 스택 내의 유동 상태를 낮은 계산 비용으로 빠르게 해석할 수 있는 흐름 전지 시뮬레이션 장치 및 방법을 제공할 수 있다.

(72) 발명자

최윤영

경기도 고양시 덕양구 화신로 311, 915동 404호(화정동, 별빛마을9단지아파트)

김영권

경기도 성남시 분당구 발이봉북로31번길 13, 101호(수내동)

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

| | |
|-------------|----------------------------------------------|
| 과제고유번호 | 1415168134 |
| 과제번호 | 20172420108640 |
| 부처명 | 산업통상자원부 |
| 과제관리(전문)기관명 | 한국에너지기술평가원 |
| 연구사업명 | 에너지기술개발사업 |
| 연구과제명 | 아연-브롬 흐름전지용 유로가 도입된 비대칭 복합 바이폴라전극 및 스택 기술 개발 |
| 기 여 율 | 1/1 |
| 과제수행기관명 | 한국전자기술연구원 |
| 연구기간 | 2020.03.01 ~ 2020.11.30 |

명세서

청구범위

청구항 1

흐름 전지 내에서 다공성 전극과 상기 다공성 전극의 일 면상에 기지정된 패턴으로 구현되어 인가된 전해질을 상기 다공성 전극으로 공급하는 유동 채널에 의해 형성되어 전해질이 전달되는 유동 경로의 유로 구조를 확인하고, 확인된 유로 구조에 따라 상기 다공성 전극과 상기 유동 채널 각각을 기지정된 거리 간격을 갖는 다수의 노드를 기준으로 구분하며, 구분된 다수의 노드 중 인접한 노드들이 전해질 유동을 방해하는 저항으로 연결되는 구조의 네트워크 모델을 생성하는 네트워크 모델 생성부; 및

상기 네트워크 모델의 다수의 노드 각각에서 유입 및 유출되는 유량이 질량 보존 법칙을 만족하고, 상기 다수의 노드 중 서로 인접한 노드를 연결하는 저항으로 이루어지는 페루프에서의 압력 강하가 에너지 보존 법칙을 만족하도록, 상기 네트워크 모델의 각 노드 사이의 유량 및 압력 강하를 계산하는 네트워크 해석부를 포함하는 흐름 전지 시뮬레이션 장치.

청구항 2

제1항에 있어서, 상기 네트워크 모델 생성부는

유동 경로를 구성하는 다공성 전극과 유동 채널의 유로 구조를 확인하고, 확인된 유로 구조에 따라 상기 유동 채널을 밴딩 또는 분기 위치를 기준으로 다수의 구간으로 분해하고, 구분된 구간 중 서로 평행하게 배치되는 다수의 구간을 다시 기지정된 채널 길이 단위로 구분하며, 상기 채널 길이와 서로 평행하게 배치된 다수의 구간 사이의 간격에 대응하여 설정되는 전극 길이에 따라 상기 다공성 전극의 영역을 구분하는 유동 경로 분해부; 및

상기 유동 경로 분해부에 의해 구분되는 위치 각각을 노드로 설정하고, 설정된 노드 중 인접한 노드 구간을 저항으로 모델링하여 상기 네트워크 모델을 획득하는 네트워크 모델 획득부를 포함하는 흐름 전지 시뮬레이션 장치.

청구항 3

제2항에 있어서, 상기 네트워크 모델 획득부는

상기 유동 채널에서 설정된 노드들은 상기 유동 채널이 형성된 패턴에 따라 저항으로 연결되는 흐름 전지 시뮬레이션 장치.

청구항 4

제3항에 있어서, 상기 네트워크 모델 획득부는

상기 유동 채널에서 설정된 노드들은 상기 다공성 전극에서 설정된 노드들 중 인접한 노드들과 저항으로 연결되는 흐름 전지 시뮬레이션 장치.

청구항 5

제2항에 있어서, 상기 네트워크 해석부는

다수의 페루프 각각에서 상기 질량 보존 법칙과 상기 에너지 보존 법칙이 만족되도록 상기 네트워크 모델에서 페루프의 유량 변화를 수학적

$$\Delta Q_j = \frac{\sum_{i=1}^4 \theta_{i,j} \Delta P_{i,j}}{\sum_{i=1}^4 \partial(\Delta P_{i,j}) / \partial Q_{i,j} |_{Q_{i,j}=Q_{i,j}^n}}$$

$$Q_{i,j}^{n+1} = Q_{i,j}^n - \theta_{i,j} \Delta Q_j \quad (i = 1, 2, 3, 4)$$

(여기서 j는 페루프 식별자, i는 페루프에서 저항 식별자, Q는 유량, ΔQ는 페루프의 저항에 의한 유량 변화,

θ 는 유동 방향(시계 방향은 1, 반시계 방향은 -1), ΔP 는 페루프의 저항에 의한 압력 강하, n 은 반복 계산 횟수를 나타낸다.)

에 따라 반복 계산하는 흐름 전지 시뮬레이션 장치.

청구항 6

제5항에 있어서, 상기 네트워크 해석부는

상기 유동 채널에서의 노드 사이에 연결된 저항에 의한 채널 압력 강하(ΔP_{ch})와 상기 다공성 전극에서의 노드 사이에 연결된 저항에 의한 전극 압력 강하(ΔP_p) 및 상기 유동 채널의 노드와 대응하는 다공성 전극의 노드 사이에 연결된 저항에 의한 내부 압력 강하(ΔP_{inter})를 구분하여 계산하는 흐름 전지 시뮬레이션 장치.

청구항 7

제6항에 있어서, 상기 네트워크 해석부는

상기 채널 압력 강하(ΔP_{ch})를 마찰 손실에 의한 압력 강하(ΔP_f)와 상기 유동 채널의 벤딩 또는 분기 구조에 의한 부손실에 의한 압력 강하(ΔP_{minor})의 합으로 계산하고,

상기 마찰 손실에 의한 압력 강하(ΔP_f)는 수학적식

$$\Delta P_f = \frac{1}{2} \rho \left(\frac{Q_f}{A_{ch}} \right)^2 \frac{4fL_{ch}}{D_{h,ch}}$$

(여기서 ρ 는 전해질 밀도, f 는 패닝 마찰 계수, Q_f 는 채널영역에서의 유량, L_{ch} , A_{ch} 및 $D_{h,ch}$ 는 각각 단위 채널 길이, 채널 단면적 그리고 유동 채널의 유압 직경)

으로 계산하며,

상기 부손실에 의한 압력 강하(ΔP_{minor})는 수학적식

$$\Delta P_{minor} = \frac{1}{4} \rho \left(\frac{Q_{ch}}{A_{ch}} \right)^2 K_b$$

(여기서 K_b 는 레이놀즈 수에 따라 결정되는 벤딩 손실)

으로 계산되는 흐름 전지 시뮬레이션 장치.

청구항 8

제7항에 있어서, 상기 네트워크 해석부는

상기 전극 압력 강하(ΔP_p)를 수학적식

$$\Delta P_p = \frac{\mu}{\kappa} \left(\frac{Q_p}{A_p} \right) L_p + \beta \left(\frac{Q_p}{A_p} \right)^2 L_p$$

(여기서 μ 는 전해질의 점도, κ 는 다공성 전극의 투과성(permeability), Q_p 및 A_p 는 각각 다공성 전극에서의 유량과 단면적을 나타내고, β 폴히하이머 계수를 나타낸다.)

에 따라 계산하는 흐름 전지 시뮬레이션 장치.

청구항 9

제8항에 있어서, 상기 네트워크 해석부는
상기 내부 압력 강하(ΔP_{inter})를 수학식

$$\Delta P_{inter} = \frac{1}{2} \rho \left(\frac{Q_{inter}}{A_{inter}} \right)^2 \frac{4f(t_{ch}/2)}{D_{h,inter}} + \frac{\mu}{\kappa} \left(\frac{Q_{inter}}{A_{inter}} \right) \frac{t_p}{2} + \beta \left(\frac{Q_{inter}}{A_{inter}} \right)^2 \frac{t_p}{2}$$

에 따라 계산하는 흐름 전지 시뮬레이션 장치.

청구항 10

제9항에 있어서, 상기 네트워크 모델 획득부는

상기 유동 채널의 중심과 상기 다공성 전극의 두께의 중심에 상기 노드를 설정하고, 상기 전극 길이(L_p)는 상기 유동 채널의 유동 특성에 따라 수학식

$$L_p = W_{ch}/4 + W_r/2$$

(여기서 W_{ch} 는 유동 채널의 폭, W_r 은 유동 채널 중 서로 인접하여 평행하게 배치된 다수의 구간에서 서로 마주하는 채널 측면 사이의 거리)

으로 정의하는 흐름 전지 시뮬레이션 장치.

청구항 11

제2항에 있어서, 상기 유동 경로 분해부는

상기 유동 채널이 사형 유동 채널인 경우, 상기 유동 채널을 밴딩 위치를 기준으로 다수의 구간으로 분해하고, 구분된 다수의 구간 중 상대적으로 길이가 긴 구간을 상기 채널 길이 단위로 구분하는 흐름 전지 시뮬레이션 장치.

청구항 12

제2항에 있어서, 상기 유동 경로 분해부는

상기 유동 채널이 빗 형상으로 서로 분리 형성된 2개의 유동 채널을 갖는 깎지형 유동 채널인 경우, 2개의 유동 채널 각각에서 분기 위치를 기준으로 다수의 구간으로 구분하고, 구분된 다수의 구간 중 상대적으로 길이가 긴 구간을 상기 채널 길이 단위로 구분하는 흐름 전지 시뮬레이션 장치.

청구항 13

흐름 전지 내에서 다공성 전극과 상기 다공성 전극의 일 면상에 기지정된 패턴으로 구현되어 인가된 전해질을 상기 다공성 전극으로 공급하는 유동 채널에 의해 형성되어 전해질이 전달되는 유동 경로의 유로 구조를 확인하고, 확인된 유로 구조에 따라 상기 다공성 전극과 상기 유동 채널 각각을 기지정된 거리 간격을 갖는 다수의 노드를 기준으로 구분하며, 구분된 다수의 노드 중 인접한 노드들이 전해질 유동을 방해하는 저항으로 연결되는 구조의 네트워크 모델을 생성하는 단계; 및

상기 네트워크 모델의 다수의 노드 각각에서 유입 및 유출되는 유량이 질량 보존 법칙을 만족하고, 상기 다수의 노드 중 서로 인접한 노드를 연결하는 저항으로 이루어지는 페루프에서의 압력 강하가 에너지 보존 법칙을 만족하도록, 상기 네트워크 모델의 각 노드 사이의 유량 및 압력 강하를 계산하여 상기 네트워크 모델을 해석하는 단계를 포함하는 흐름 전지 시뮬레이션 방법.

청구항 14

제13항에 있어서, 상기 네트워크 모델을 생성하는 단계는

유동 경로를 구성하는 다공성 전극과 유동 채널의 유로 구조를 확인하고, 확인된 유로 구조에 따라 상기 유동 채널을 밴딩 또는 분기 위치를 기준으로 다수의 구간으로 분해하고, 구분된 구간 중 서로 평행하게 배치되는 다수의 구간을 다시 기지정된 채널 길이 단위로 구분하며, 상기 채널 길이와 서로 평행하게 배치된 다수의 구간

사이의 간격에 대응하여 설정되는 전극 길이에 따라 상기 다공성 전극의 영역을 구분하는 단계; 및

상기 유동 경로에서 구분되는 위치 각각을 노드로 설정하고, 설정된 노드 중 인접한 노드 구간을 저항으로 모델링하여 상기 네트워크 모델을 획득하는 단계를 포함하는 흐름 전지 시뮬레이션 방법.

청구항 15

제14항에 있어서, 상기 네트워크 모델을 획득하는 단계는

상기 유동 채널에서 설정된 노드들을 상기 유동 채널이 형성된 패턴에 따라 저항으로 연결하는 흐름 전지 시뮬레이션 방법.

청구항 16

제15항에 있어서, 상기 네트워크 모델을 획득하는 단계는

상기 유동 채널에서 설정된 노드들을 상기 다공성 전극에서 설정된 노드들 중 인접한 노드들과 저항으로 연결하는 흐름 전지 시뮬레이션 방법.

청구항 17

제14항에 있어서, 상기 네트워크 모델을 해석하는 단계는

다수의 페루프 각각에서 상기 질량 보존 법칙과 상기 에너지 보존 법칙이 만족되도록 상기 네트워크 모델에서 페루프의 유량 변화를 수학식

$$\Delta Q_j = \frac{\sum_{i=1}^4 \theta_{i,j} \Delta P_{i,j}}{\sum_{i=1}^4 \partial(\Delta P_{i,j}) / \partial Q_{i,j} |_{Q_{i,j}=Q_{i,j}^n}}$$

$$Q_{i,j}^{n+1} = Q_{i,j}^n - \theta_{i,j} \Delta Q_j \quad (i = 1, 2, 3, 4)$$

(여기서 j는 페루프 식별자, i는 페루프에서 저항 식별자, Q는 유량, ΔQ는 페루프의 저항에 의한 유량 변화, θ는 유동 방향(시계 방향은 1, 반시계 방향은 -1), ΔP는 페루프의 저항에 의한 압력 강하, n은 반복 계산 횟수를 나타낸다.)

에 따라 반복 계산하는 흐름 전지 시뮬레이션 방법.

청구항 18

제17항에 있어서, 상기 네트워크 모델을 해석하는 단계는

상기 유동 채널에서의 노드 사이에 연결된 저항에 의한 채널 압력 강하(ΔP_{ch})와 상기 다공성 전극에서의 노드 사이에 연결된 저항에 의한 전극 압력 강하(ΔP_p) 및 상기 유동 채널의 노드와 대응하는 다공성 전극의 노드 사이에 연결된 저항에 의한 내부 압력 강하(ΔP_{inter})를 구분하여 계산하는 흐름 전지 시뮬레이션 방법.

청구항 19

제18항에 있어서, 상기 네트워크 모델을 획득하는 단계는

상기 유동 채널의 중심과 상기 다공성 전극의 두께의 중심에 상기 노드를 설정하고, 상기 전극 길이(L_p)는 상기 유동 채널의 유동 특성에 따라 수학식

$$L_p = W_{ch}/4 + W_r/2$$

(여기서 W_{ch}는 유동 채널의 폭, W_r은 유동 채널 중 서로 인접하여 평행하게 배치된 다수의 구간에서 서로 마주하는 채널 측면 사이의 거리)

으로 정의하는 흐름 전지 시뮬레이션 방법.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 흐름 전지 시뮬레이션 장치 및 방법에 관한 것으로, 유동 채널과 다공성 전극을 갖는 흐름 전지 시뮬레이션 장치 및 방법에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 신재생 에너지의 수요 증가에 따라 이를 효율적으로 저장 및 관리할 수 있는 에너지 저장 시스템(Energy Storage System: 이하 ESS)에 대한 관심도 높아지고 있다. 기존의 ESS는 리튬이온 전지가 주로 이용되었으나, 인체 유해성이나 화재 위험성 등의 문제로 최근에는 바나듐 레독스 흐름 전지(Vanadium Redox Flow Battery: VRFB)나 연료 전지와 같은 흐름 전지로 대체하고자 하는 연구가 활발하게 수행되고 있다.

[0003] 리튬이온 전지와 달리, 바나듐 레독스 흐름 전지(Vanadium Redox Flow Battery: VRFB)나 연료 전지와 같은 흐름 전지는 전해질 저장소(Electrolyte reservoir)로 기능하는 탱크와 전극을 포함하는 스택으로 구분된 구조를 갖고, 탱크에 저장된 유체 또는 기체의 전해질(또는 활물질(Active material)이라 함)이 스택을 구성하는 적어도 하나의 전지 셀을 통해 순환하면서, 전지 셀 내부의 다공성 전극의 계면에서 화학 반응을 일으키는 방식으로 전력을 발생하게 된다. 이때 기존에는 전해질이 다공성 전극 전체를 통과하면서 반응을 일으키도록 전지 셀이 구성되었으나, 최근에는 다공성 전극 일측면에 형성된 유동 채널(Flow Channel)을 통해 흐르면서 다공성 전극으로 유입되는 전해질이 반응을 일으키도록 스택이 구성된다.

[0004] 이와 같이 유동 채널이 형성된 스택을 갖는 흐름 전지에서는 유동 채널을 따라 흐르는 유체 또는 기체 전해질의 상태를 확인하는 것이 요구된다. 즉 유동 채널과 다공성 전극을 갖는 흐름 전지에서 전해질의 유동 상태 해석이 매우 중요하다. 다만 활물질의 밀도나 점도 등과 같은 유체 특성이 매우 다양하고, 전지 셀의 크기와 내부 구조도 매우 다양하므로, 이용하고자 하는 흐름 전지에 적합한 유동 상태 해석을 수행해야 한다. 기존에는 유동 해석을 위해 상용 툴 기반의 전산 유체 역학(Computational Fluid Dynamics: 이하 CFD) 시뮬레이션을 주로 이용하였다. 그러나 CFD 시뮬레이션은 유한 차분법(Finite Difference Method: 이하 FDM) 또는 유한요소법(Finite Elements Method: 이하 FEM)을 기반으로 유동 채널과 다공성 전극에서 나비에 스톡스 방정식(Navier-Stokes equation)을 계산하는 방식으로 유동 해석을 수행하므로, 계산 비용이 매우 높아 고성능의 연산 장치와 긴 연산 시간을 소요하는 문제가 있다. 이에 낮은 계산 비용으로 통상의 연산 장치에서 빠르게 흐름 전지의 유동 특성을 해석할 수 있는 새로운 기법이 요구되고 있다.

선행기술문헌

특허문헌

[0005] (특허문헌 0001) 한국 등록 특허 제10-2144745호(2020.08.10 등록)

발명의 내용

해결하려는 과제

[0006] 본 발명의 목적은 유동 채널과 다공성 전극을 포함하는 흐름 전지의 전해질 유동 특성을 낮은 계산 비용으로 빠르게 계산할 수 있는 흐름 전지 시뮬레이션 장치 및 방법을 제공하는데 있다.

[0007] 본 발명의 다른 목적은 연산 성능이 높지 않은 통상의 배터리 관리 시스템에서 실행할 수 있도록 낮은 계산 비용을 갖는 흐름 전지 시뮬레이션 장치 및 방법을 제공하는데 있다.

과제의 해결 수단

[0008] 상기 목적을 달성하기 위한 본 발명의 일 실시예에 따른 흐름 전지 시뮬레이션 장치는 흐름 전지 내에서 다공성 전극과 상기 다공성 전극의 일 면상에 기지정된 패턴으로 구현되어 인가된 전해질을 상기 다공성 전극으로 공급하는 유동 채널에 의해 형성되어 전해질이 전달되는 유동 경로의 유로 구조를 확인하고, 확인된 유로 구조에 따라 상기 다공성 전극과 상기 유동 채널 각각을 기지정된 거리 간격을 갖는 다수의 노드를 기준으로 구분하며,

구분된 다수의 노드 중 인접한 노드들이 전해질 유동을 방해하는 저항으로 연결되는 구조의 네트워크 모델을 생성하는 네트워크 모델 생성부; 및 상기 네트워크 모델의 다수의 노드 각각에서 유입 및 유출되는 유량이 질량 보존 법칙을 만족하고, 상기 다수의 노드 중 서로 인접한 노드를 연결하는 저항으로 이루어지는 폐루프에서의 압력 강하가 에너지 보존 법칙을 만족하도록, 상기 네트워크 모델의 각 노드 사이의 유량 및 압력 강하를 계산하는 네트워크 해석부를 포함한다.

[0009] 상기 네트워크 모델 생성부는 유동 경로를 구성하는 다공성 전극과 유동 채널의 유로 구조를 확인하고, 확인된 유로 구조에 따라 상기 유동 채널을 밴딩 또는 분기 위치를 기준으로 다수의 구간으로 분해하고, 구분된 구간 중 서로 평행하게 배치되는 다수의 구간을 다시 기지정된 채널 길이 단위로 구분하며, 상기 채널 길이와 서로 평행하게 배치된 다수의 구간 사이의 간격에 대응하여 설정되는 전극 길이에 따라 상기 다공성 전극의 영역을 구분하는 유동 경로 분해부; 및 상기 유동 경로 분해부에 의해 구분되는 위치 각각을 노드로 설정하고, 설정된 노드 중 인접한 노드 구간을 저항으로 모델링하여 상기 네트워크 모델을 획득하는 네트워크 모델 획득부를 포함할 수 있다.

[0010] 상기 네트워크 모델 획득부는 상기 유동 채널에서 설정된 노드들은 상기 유동 채널이 형성된 패턴에 따라 저항으로 연결될 수 있다.

[0011] 상기 네트워크 모델 획득부는 상기 유동 채널에서 설정된 노드들은 상기 다공성 전극에서 설정된 노드들 중 인접한 노드들과 저항으로 연결될 수 있다.

[0012] 상기 네트워크 해석부는 다수의 폐루프 각각에서 상기 질량 보존 법칙과 상기 에너지 보존 법칙이 만족되도록 상기 네트워크 모델에서 폐루프의 유량 변화를 수학적

$$\Delta Q_j = \frac{\sum_{i=1}^4 \theta_{i,j} \Delta P_{i,j}}{\sum_{i=1}^4 \partial(\Delta P_{i,j}) / \partial Q_{i,j} |_{Q_{i,j}=Q_{i,j}^n}}$$

$$Q_{i,j}^{n+1} = Q_{i,j}^n - \theta_{i,j} \Delta Q_j \quad (i = 1, 2, 3, 4)$$

[0013]

(여기서 j는 폐루프 식별자, i는 폐루프에서 저항 식별자, Q는 유량, ΔQ는 폐루프의 저항에 의한 유량 변화, θ는 유동 방향(시계 방향은 1, 반시계 방향은 -1), ΔP는 폐루프의 저항에 의한 압력 강하, n은 반복 계산 횟수를 나타낸다.)에 따라 반복 계산 할 수 있다.

[0015] 상기 네트워크 해석부는 상기 유동 채널에서의 노드 사이에 연결된 저항에 의한 채널 압력 강하(ΔP_{ch})와 상기 다공성 전극에서의 노드 사이에 연결된 저항에 의한 전극 압력 강하(ΔP_p) 및 상기 유동 채널의 노드와 대응하는 다공성 전극의 노드 사이에 연결된 저항에 의한 내부 압력 강하(ΔP_{inter})를 구분하여 계산할 수 있다.

[0016] 상기 목적을 달성하기 위한 본 발명의 다른 실시예에 따른 흐름 전지 시뮬레이션 방법은 흐름 전지 내에서 다공성 전극과 상기 다공성 전극의 일 면상에 기지정된 패턴으로 구현되어 인가된 전해질을 상기 다공성 전극으로 공급하는 유동 채널에 의해 형성되어 전해질이 전달되는 유동 경로의 유로 구조를 확인하고, 확인된 유로 구조에 따라 상기 다공성 전극과 상기 유동 채널 각각을 기지정된 거리 간격을 갖는 다수의 노드를 기준으로 구분하며, 구분된 다수의 노드 중 인접한 노드들이 전해질 유동을 방해하는 저항으로 연결되는 구조의 네트워크 모델을 생성하는 단계; 및 상기 네트워크 모델의 다수의 노드 각각에서 유입 및 유출되는 유량이 질량 보존 법칙을 만족하고, 상기 다수의 노드 중 서로 인접한 노드를 연결하는 저항으로 이루어지는 폐루프에서의 압력 강하가 에너지 보존 법칙을 만족하도록, 상기 네트워크 모델의 각 노드 사이의 유량 및 압력 강하를 계산하여 상기 네트워크 모델을 해석하는 단계를 포함한다.

발명의 효과

[0017] 따라서, 본 발명의 실시예에 따른 흐름 전지 시뮬레이션 장치 및 방법은 흐름 전지에서 액체 또는 기체의 전해질이 흐르는 유동 경로 상의 각 구성을 유동에 대한 저항 요소로 모델링하여 간단한 구조의 유체동역학 네트워크 모델을 생성하고, 생성된 유체동역학 네트워크 모델을 기반으로 유동 상태를 낮은 계산 비용으로 빠르게 해석할 수 있다. 그러므로 고성능의 연산 장치가 요구되지 않아 기존의 일반적인 배터리 관리 시스템에서 저비용으로 실행할 수 있다.

도면의 간단한 설명

- [0018] 도 1은 흐름 전지 구성의 일 예를 나타낸다.
- 도 2는 유동이 다공성 전극으로 유입되는 방식에 따라 구분되는 전지 셀 구조의 예를 나타낸다.
- 도 3은 흐름 전지의 유동 채널 구조의 일 예를 나타낸다.
- 도 4는 도 3의 유동 채널 구조에 따른 유동 전송 경로를 나타낸다.
- 도 5는 본 발명의 흐름 전지 시뮬레이션 개념을 설명하기 위한 도면이다.
- 도 6은 본 실시예에 따른 다층 유체동역학 네트워크 모델을 생성하는 방식을 나타낸다.
- 도 7은 도 6의 다층 유체동역학 네트워크 모델의 유동 해석을 위해 설정되는 노드 위치를 설명하기 위한 도면이다.
- 도 8은 생성된 다층 유체 동역학 네트워크 모델의 일 예를 나타낸다.
- 도 9는 본 발명의 일 실시예에 따른 흐름 전지 시뮬레이션 장치의 개략적 구성을 나타낸다.
- 도 10 내지 도 12는 본 발명에 따른 흐름 전지 시뮬레이션 장치의 해석 성능을 나타낸다.
- 도 13은 본 발명의 일 실시예에 따른 흐름 전지 시뮬레이션 방법을 나타낸다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0019] 본 발명과 본 발명의 동작상의 이점 및 본 발명의 실시에 의하여 달성되는 목적을 충분히 이해하기 위해서는 본 발명의 바람직한 실시예를 예시하는 첨부 도면 및 첨부 도면에 기재된 내용을 참조하여야만 한다.
- [0020] 이하, 첨부한 도면을 참조하여 본 발명의 바람직한 실시예를 설명함으로써, 본 발명을 상세히 설명한다. 그러나, 본 발명은 여러 가지 상이한 형태로 구현될 수 있으며, 설명하는 실시예에 한정되는 것이 아니다. 그리고, 본 발명을 명확하게 설명하기 위하여 설명과 관계없는 부분은 생략되며, 도면의 동일한 참조부호는 동일한 부재임을 나타낸다.
- [0021] 명세서 전체에서, 어떤 부분이 어떤 구성요소를 "포함"한다고 할 때, 이는 특별히 반대되는 기재가 없는 한 다른 구성요소를 제외하는 것이 아니라, 다른 구성요소를 더 포함할 수 있는 것을 의미한다. 또한, 명세서에 기재된 "...부", "...기", "모듈", "블록" 등의 용어는 적어도 하나의 기능이나 동작을 처리하는 단위를 의미하며, 이는 하드웨어나 소프트웨어 또는 하드웨어 및 소프트웨어의 결합으로 구현될 수 있다.
- [0022] 도 1은 흐름 전지 구성의 일 예를 나타내고, 도 2는 유동이 다공성 전극으로 유입되는 방식에 따라 구분되는 전지 셀 구조의 예를 나타낸다.
- [0023] 도 1은 흐름 전지의 일 예로 바나듐 레독스 흐름 전지의 개략적 구조를 도시하였다. 도 1을 참조하면, 흐름 전지는 액체 상태의 양극 전해질인 양극액(Analyte)과 음극 전해질인 음극액(Catholyte)이 각각 저장되는 2개의 탱크(111, 112)와 2개의 탱크로부터 양극액과 음극액이 유입되어 화학 반응을 발생시켜 전력을 획득하는 스택(120), 충전 또는 방전 시에 2개의 탱크(111, 112) 중 대응하는 탱크에 저장된 양극액과 음극액을 스택(120)을 통해 순환시키는 2개의 펌프(113, 114) 및 방전 시에 스택(120)에서 발생된 전력을 사용하거나 충전시에 스택(120)으로 전력을 공급하여 충전시키는 부하/전원부(130)를 포함할 수 있다.
- [0024] 스택(120)은 선택적 투과성을 갖는 이온 교환막(Ion Exchange membrane 또는 이온 선택막(ion selective membrane))(121)과 이온 교환막(121)을 사이에 두고 양측에 위치하는 2개의 다공성 전극(122, 123) 및 스택(120) 내에서 발생된 전하를 수집하여 부하/전원부(130)로 공급하는 제1 및 제2 전극(124, 125)를 포함할 수 있다. 여기서 2개의 다공성 전극(122, 123)은 양극액 및 음극액과 산화/환원 반응을 일으키는 반응 전극으로, 전극의 계면에서 산화/환원 반응이 발생되므로, 반응 면적을 높이기 위해 다공성 전극(Porous Electrode)으로 구현된다. 여기서 양극액 및 음극액은 펌프(113, 114)에 의해 스택(120)과 2개의 탱크(111, 112)를 사이를 순환 하면서 다공성 전극(122, 123)과 반응하게 된다. 즉 양극액과 음극액은 스택(120)의 일단으로 유입되어 타단으로 방출된다.
- [0025] 여기서는 일 예로 하나의 전지 셀로 구현된 스택(120)을 도시하였으나, 스택(120)은 다수의 전지 셀을 포함하도록 구성될 수 있다.

- [0026] 도 2를 참조하면, (a)는 양극액과 음극액이 다공성 전극 전체를 통과하여 순환되는 기존의 전지 셀 구조를 나타내고, (b)는 유동 채널이 형성된 전지 셀 구조를 나타낸다.
- [0027] (a)에 도시된 기존의 전지 셀 구조에서는 전해질이 다공성 전극 전체를 통과해야만 순환 가능한 구조이므로, 순환 방향에 따라 다공성 전극(122, 123)의 위치별 전해질의 공급이 불균일하고, 압력 강하가 너무 크게 발생하는 문제가 있다. 또한 다공성 전극(122, 123)의 두께가 두꺼워야만 하므로 옴저항이 증가되는 문제가 있다.
- [0028] 그에 반해 (b)의 전지 셀에서는 다공성 전극(122, 123)의 일측면을 따라 전해질이 용이하게 흐를 수 있는 유동 채널(126, 127)이 형성된다. (b)와 같은 전지 셀 구조에서는 활물질이 다공성 전극(122, 123)의 일측면을 따라 흐르면서 다공성 전극(122, 123)으로 유입되어 반응을 일으키게 된다. 따라서 전해질이 다공성 전극(122, 123)에 균일하게 공급될 수 있을 뿐만 아니라 압력 강하가 크게 발생되지 않는다. 여기서 유동 채널(126, 127)은 다공성 전극의 일측면과 제1 및 제2 전극(124, 125) 사이에 위치하는 바이폴라 플레이트(bipolar plate)(230)에 기지정된 패턴에 따라 식각된 형태로 형성될 수 있다.
- [0029] 도 3은 흐름 전지의 유동 채널 구조의 일 예를 나타내고, 도 4는 도 3의 유동 채널 구조에 따른 유동 전송 경로를 나타낸다.
- [0030] 도 3에서 (a)는 사형 유동 채널(Serpentine flow channel)(210)이 형성된 경우를 나타내고, (b)는 깎지형 유동 채널(Interdigitated flow channel)(221, 222)이 형성된 경우를 나타낸다. 그리고 도 4의 (a)는 사형 유동 채널(210)의 주입구(inlet)로 인가된 유동이 배출구(outlet)로 배출되는 동안 다공성 전극(122)을 통해 흐르는 경로를 나타내고, (b)는 유동 채널(221, 222)의 제1 유동 채널(221)의 주입구(inlet)로 인가된 유동이 제2 유동 채널(222)의 배출구(outlet)로 배출되는 동안 다공성 전극(122)을 통해 흐르는 경로를 나타낸다. 여기서는 설명의 편의를 위하여 이온 교환막(121)의 일 측에 위치하는 다공성 전극(122)과 유동 채널(210, 221, 222)만을 도시하였으나, 타 측에 위치하는 다공성 전극(123) 상에도 동일하게 유동 채널(210, 221, 222)이 형성된다.
- [0031] 도 3의 (a)에 도시된 바와 같이 사형 유동 채널(210)은 다공성 전극(122)의 일면상에 단일 채널이 반복적으로 벤딩된 지그재그 패턴으로 형성되며, 따라서 채널에서 일정 영역들이 서로 평행하게 위치한다. 그리고 다공성 전극(122)의 일면상에 형성되는 사형 유동 채널(210)의 주입구(inlet)로 인가된 유동이 형성된 채널 패턴을 따라 배출구(outlet)까지 흘러 배출되게 된다. 이때, 도 4의 (a)에 도시된 바와 같이, 사형 유동 채널(210)로 유입된 유동은 채널 패턴을 따라 흐를 뿐만 아니라, 서로 인접하여 위치하는 채널 영역 사이의 립(Rib) 구간에서 다공성 전극을 통해 흐르게 되어 유동 채널 상의 다른 영역으로도 전달될 수 있다.
- [0032] 그리고 도 3의 (b)에 도시된 바와 같이, 깎지형 유동 채널은 빗(comb) 형상의 패턴을 갖는 2개의 유동 채널(221, 222)이 서로 맞물리는 패턴으로 형성되어, 2개의 유동 채널(221, 222)의 빗 형상에서 빗살이 서로 교대하여 위치하는 패턴으로 구성된다. 여기서 제1 유동 채널(221)에는 주입구(inlet)가 형성되어 유동이 유입되고, 제2 유동 채널(222)에는 배출구(outlet)가 형성된다. 따라서 도 4의 (b)에 도시된 바와 같이, 제1 유동 채널(221)로 공급된 유동은 다공성 전극(122)을 통해 제2 유동 채널(222)로 공급되어 다시 배출된다.
- [0033] 따라서 사형 유동 채널(210)에서는 유동이 유동 채널(210)의 주입구로부터 배출구로 채널을 따라 흐르는 동안 다공성 전극(122)으로 유입되므로 일부 유동이 다공성 전극(122)으로 유입되는 반면, 깎지형 유동 채널(221, 222)에서는 주입구가 형성된 제1 유동 채널(221)과 배출구가 형성된 제2 유동 채널(222)이 분리된 구조를 가지고 있으므로, 유동은 다공성 전극(122)을 통해서 제1 유동 채널(221)로부터 제2 유동 채널(222)로 전달되는 구조를 갖는다.
- [0034] 도 5는 본 발명의 흐름 전지 시뮬레이션 개념을 설명하기 위한 도면이다.
- [0035] 도 5는 도 3의 (a)에 도시된 다공성 전극(122) 상에 사형 유동 채널(210)이 형성된 경우의 유동 해석을 위한 시뮬레이션 기법을 나타낸다. 그리고 도 5에서 (a)와 (b)는 기존의 CFD 시뮬레이션 기법에서의 유동 해석 방식의 일 예를 나타내고, (c) 및 (d)는 본 실시예에 따른 시뮬레이션 기법에서의 유동 해석 방식의 일 예를 나타낸다.
- [0036] (a) 및 (b)에 도시된 바와 같이, 기존의 CFD 시뮬레이션 기법에서는 유동 채널(210)의 구조와 다공성 전극(122)의 구조에 따라 유동의 경로에 각 영역에 수많은 개수(예를 들면 10만개 이상)의 격자를 설정하고, 설정된 격자 각각에서의 유동 상태를 계산하는 방식으로 수행되므로 계산 비용이 매우 높다.
- [0037] 그에 반해 본 실시예에서는 (c) 및 (d)에 도시된 바와 같이, 유동 경로 상의 구조물인 유동 채널(210)과 다공성 전극(122) 각각을 유동의 장애 요소인 저항으로 모델링하여 다층 유체동역학 네트워크 모델을 생성하여 해석한다. 즉 물리적으로 서로 다른 유동 특성이 나타나는 유동 채널(210)과 다공성 전극(122)을 서로 다른 층으로

구분하고, 구분된 각 층을 노드(nd)로 지정된 위치에 따라 다수의 영역으로 분리한 후, 분리된 각 영역을 인접한 노드(nd)들 사이에 연결된 저항으로 모델링하여 유동 상태 해석을 수행한다. 따라서 본 실시예에 따른 시뮬레이션 기법에서는 (a) 및 (b)에 도시된 기존의 시뮬레이션 기법의 격자수에 비해 노드 수가 1/1000 수준으로 줄어들게 되어 계산량을 크게 줄일 수 있도록 한다.

[0038] 도 6은 본 실시예에 따른 다층 유체동역학 네트워크 모델을 생성하는 방식을 나타내고, 도 7은 도 6의 다층 유체동역학 네트워크 모델의 유동 해석을 위해 설정되는 노드 위치를 설명하기 위한 도면이다.

[0039] 도 6의 (a)와 (b)를 참조하면, 본 실시예에 따른 다층 유체동역학 네트워크 모델을 생성하기 위해서는 우선 유동 채널(210)이 위치하는 채널층과 다공성 전극(122)이 위치하는 전극층을 구분한다. 이는 유동 채널(210)과 다공성 전극(122)에서의 유동 특성이 서로 매우 상이하게 나타나기 때문이다. 구분된 채널층과 전극층은 채널층의 중심과 전극층의 중심을 기준으로 내부 길이(L_{inter})만큼 이격된 것으로 볼 수 있다. 즉 내부 길이(L_{inter})는 채널층의 중심과 전극층의 중심 사이의 간격을 나타낸다.

[0040] 그리고 채널층에서는 유동 채널을 형성된 패턴에 따라 다수의 영역으로 구분한다. 이때 채널층에서는 기지정된 패턴으로 형성된 유동 채널(210)의 벤딩(bending) 위치 또는 분기 위치를 기준으로 구분할 수 있다. 도 3 및 도 4에 도시된 바와 같이, 기지정된 패턴으로 형성되는 유동 채널(210, 221, 222)은 "ㄷ"자형 또는 "ㄱ"자형으로 벤딩되거나 "T"자형으로 분기될 수 있으며, 이로 인해, 유동 채널(210, 221, 222)의 일부 구간이 서로 인접하여 평행하게 배치될 수 있다. 즉 유동 채널(210, 221, 222)은 다수의 벤딩 위치 또는 분기 위치를 중심으로 다수의 상대적으로 긴 길이의 구간과 짧은 길이 구간으로 구분될 수 있다.

[0041] 그리고 유동 채널(210, 221, 222)의 구분된 긴 구간을 기지정된 단위 길이로 구분할 수 있다. 여기서 긴 구간을 구분하는 단위 길이를 채널 길이(L_{ch})라 하며, 채널 길이(L_{ch})는 사용자에게 의해 미리 지정될 수 있다.

[0042] 한편, 전극층은 채널 길이(L_{ch})와 함께 벤딩된 패턴의 유동 채널(210, 221, 222)에 의해 평행하게 배치되는 채널 영역에서 서로 인접한 채널 영역의 중심 사이의 간격을 기반으로 미리 설정되는 전극 길이(L_p)에 따라 영역이 구분될 수 있다. 일 예로 도 3의 (a)와 같이 사형 유동 채널(210)에서는 인접한 채널 영역이 동일한 유동 채널의 구성이므로, 전극 길이(L_p)는 벤딩된 유동 채널의 짧은 구간에 대응할 수 있다. 반면, 2개의 유동 채널(221, 222)이 서로 맞물리는 구조의 깎지형 유동 채널(221, 222)에서는 인접한 채널 영역이 상대 유동 채널의 영역이므로 전극 길이(L_p)는 서로 다른 유동 채널(221, 222)에서 인접한 채널 영역 사이의 간격에 대응할 수 있다.

[0043] 이때 이후 계산의 용의성을 위하여 유동 채널(210, 221, 222)의 긴 구간이 채널 길이(L_{ch})의 정수배가 되도록 채널 길이(L_{ch})가 설정되는 것이 바람직하며, 유사하게 인접한 채널 영역 사이의 간격이 전극 길이(L_p)의 정수배가 되도록 전극 길이(L_p)가 설정되는 것이 바람직하지만 이에 한정되지 않는다.

[0044] 도 6에서는 일 예로 인접한 채널 영역 사이의 간격이 전극 길이(L_p)의 2배, 즉 전극 길이(L_p)가 인접한 채널 영역 사이의 간격의 1/2가 되도록 설정된 경우를 도시하였다.

[0045] 상기한 바와 같이, 채널층과 전극층의 각 영역이 구분되면 채널층의 중심과 전극층의 중심에서 채널 길이(L_{ch})와 전극 길이(L_p)로 구분되는 위치 각각을 노드(nd)로 설정하고, 각 노드(nd) 사이의 영역을 흐름을 방해하는 저항 성분으로 모델링할 수 있다. 그리고 본 발명에서는 기존의 격자를 대체하여 노드(nd)를 설정하고, 설정된 노드(nd)를 기준으로 유동 상태를 계산한다.

[0046] 도 6 및 도 7에서 Q_{ch} 와 Q_p 및 Q_{inter} 은 노드로 구분되어 모델링된 각 구역의 유량을 나타내고, t_f 와 t_p 는 각각 채널층인 유동 채널(210, 211, 212)과 전극층인 다공성 전극(122, 123)의 두께를 나타내며, W_{ch} 와 W_r 은 각각 유동 채널(210, 211, 212)의 폭과 인접한 채널 영역 사이의 립 간격을 나타낸다. 여기서 전극 길이(L_p)는 인접한 채널 영역의 중심을 기준으로 분할 설정된 거리를 나타내는 반면, W_r 은 인접한 채널 영역에서 서로 인접한 측면 사이의 거리를 나타낸다. 다만 유동 채널(210, 211, 212)의 폭이 W_{ch} 이므로, 유동 채널의 중심에 위치하는 노드(nd)로부터 채널의 측면까지의 거리는 $W_{ch}/2$ 가 되어야 하지만, 본 발명에서는 유동 특성을 고려하여 유동 채널의 물리적 폭(W_{ch})에 무관하게 노드(nd)로부터 유동 채널의 측면까지의 거리가 $W_{ch}/4$ 인 것으로 정의한다.

[0047] 도 5의 (a) 및 (b)에 도시된 바와 같이 기존의 시뮬레이션 기법에서는 유동의 해석을 위해 유동 상태 변화에 비례하는 밀도로 매우 많은 격자를 설정하고, 각 격자에서의 유동 상태를 해석하였다. 그러나 실질적으로 유동 상태 해석은 흐름 전지 운용을 위해 전해질의 순환량을 조절하기 위해 이용되므로, 유동 채널(210, 211, 212)과 다공성 전극(122, 123)의 모든 위치에서의 유동 상태를 분석하는 것은 매우 비효율적이다. 이에 본 발명에서는 도 7에 도시된 바와 같이 위치별로 서로 다른 상태를 갖는 유동을 유동의 전달 경로를 고려하여 기지정된 간격 단위로 설정되는 노드(nd)를 중심으로 유동의 입출력과 유동의 흐름을 방해하는 저항으로 구성된 유체 동역학 네트워크 모델로 모델링하여 각 노드(nd)에서의 유량과 압력 강하를 해석하도록 함으로써 유동 해석의 계산을 간략화한다.

[0048] 이때, 전해질의 유동은 이상적으로 노드 사이로만 이동한다고 가정하며, 또한 층류(laminar flow), 비압축(incompressible flow) 및 정상 상태(steady state) 유동인 것으로 가정하여 해석한다.

[0049] 도 8은 생성된 다층 유체 동역학 네트워크 모델의 일 예를 나타낸다.

[0050] 도 8에서 (a)는 전극층에 대한 네트워크 모델을 나타내고, (b)는 채널 영역의 네트워크 모델을 나타내며, (c)는 다층 유체 동역학 네트워크 모델의 특정 노드(nd)에서의 유동 해석을 설명하기 위한 도면이다.

[0051] 도 6 내지 도 8을 참조하면, 우선 내부 길이(L_{inter})와 전극 길이(L_p)는 각각 수학적 식 1 및 2에 따라 계산될 수 있다.

수학적 식 1

[0052]
$$L_{inter} = (t_{ch} + t_p)/2$$

수학적 식 2

[0053]
$$L_p = W_{ch}/4 + W_r/2$$

[0054] 여기서 인접한 채널 영역 사이의 간격의 1/2가 되도록 설정된 전극 길이(L_p)가 $(W_{ch} + W_r)/2$ 가 아니라 수학적 식 2와 같이 계산되는 것은 상기한 바와 같이, 노드(nd)로부터 채널의 측면까지의 거리가 $W_{ch}/4$ 인 것으로 정의하였기 때문이다.

[0055] 그리고 채널 길이(L_{ch})는 기지정된 단위 채널 길이로 사용자에게 의해 미리 지정된다.

[0056] 유동 채널(210, 211, 212)에서 발생하는 유동의 채널 압력 강하(ΔP_{ch})는 마찰에 의해 발생하는 마찰 손실(frictional loss)(ΔP_f)과 유동 채널(210, 211, 212)의 벤딩 등의 구조에 의한 부손실(minor loss)(ΔP_{minor}) 요인에 의해 결정되므로 수학적 식 3으로 계산될 수 있다.

수학적 식 3

[0057]
$$\Delta P_{ch} = \Delta P_f + \Delta P_{minor}$$

[0058] 여기서 ΔP_f 는 마찰 손실에 의한 압력 강하를 나타내고, ΔP_{minor} 는 부손실에 의한 압력 강하를 나타낸다.

[0059] 수학적 식 3에서 마찰 손실에 의한 압력 강하(ΔP_f)는 달시-바이스바하(Darcy-Weisbach) 식에 따라 수학적 식 4로 계산될 수 있다.

수학식 4

$$\Delta P_f = \frac{1}{2} \rho \left(\frac{Q_f}{A_{ch}} \right)^2 \frac{4fL_{ch}}{D_{h,ch}}$$

[0060]

[0061] 여기서 ρ 는 전해질 밀도, f 는 패닝 마찰 계수(Fanning friction factor)를 의미하며, Q_f 는 채널영역에서의 유량, L_{ch} , A_{ch} 및 $D_{h,ch}$ 는 각각 단위 채널 길이, 채널 단면적 그리고 유동 채널의 유압 직경(hydraulic diameter of the flow channel)을 의미한다.

[0062] 그리고 유압 직경($D_{h,ch}$)은 수학식 5에 따라 계산되고, 패닝 마찰 계수(f)는 수학식 6에 따라 계산된다.

수학식 5

$$D_{h,ch} = \frac{4W_{ch}t_{ch}}{2(W_{ch} + t_{ch})}$$

[0063]

수학식 6

$$f = \frac{1}{Re} 13.84 + 10.84 \exp\left(-\frac{3.4}{a}\right)$$

[0064]

[0065] 여기서 a 는 채널 폭과 깊이의 종횡비(aspect ratio)이고, Re 는 레이놀즈 수(Reynolds number)이다.

[0066] 한편 부손실에 의한 압력 강하는 유동 채널의 벤딩 구조에 따라 수학식 7로 계산된다.

수학식 7

$$\Delta P_{minor} = \frac{1}{4} \rho \left(\frac{Q_{ch}}{A_{ch}} \right)^2 K_b$$

[0067]

[0068] 여기서 K_b 는 벤딩 손실(bend loss)로서 레이놀즈 수(Re)에 의해 수학식 8과 같이 결정될 수 있다.

수학식 8

For $Re < 100$,

$$K_b = 0$$

For $100 \leq Re < 1000$,

$$K_b = 0.4 (Re)^{\frac{1}{3}} (1 - 0.02a + 0.002a^2) \left(1 + 0.26 \left(\frac{L_s}{D_{h,ch}} \right)^{\frac{2}{3}} - 0.0018 \left(\frac{L_s}{D_{h,ch}} \right)^2 \right)$$

[0069]

[0070] 여기서 L_s 는 스페이서 길이(spacer length)를 나타낸다.

[0071] 한편 전극층에서의 다공성 전극에 의한 전극 압력 강하(ΔP_p)는 폴히하이머에 의해 수정된 달시의 법칙(correct

Darcy's law by Forchheimer)에 의해 수학식 9로 계산된다.

수학식 9

$$\Delta P_p = \frac{\mu}{\kappa} \left(\frac{Q_p}{A_p} \right) L_p + \beta \left(\frac{Q_p}{A_p} \right)^2 L_p$$

여기서 μ 는 전해질의 점도, κ 는 다공성 전극의 투과성(permeability), Q_p 및 A_p 는 각각 다공성 전극에서의 유량과 단면적을 나타내고, β 폴히하이머 계수를 나타낸다.

수학식 9의 폴히하이머 계수(β)는 수학식 10에 따라 획득될 수 있다.

수학식 10

$$\beta = \frac{1.75\rho}{\sqrt{\kappa\epsilon}}$$

여기서 ϵ 는 다공성 전극의 공극률(porosity)을 나타낸다.

또한 채널층과 전극층 사이의 영역에서 발생하는 내부 압력 강하(ΔP_{inter})는 유동이 유동 채널과 다공성 전극을 모두 흐르기 때문에 해당 길이에 대한 주손실(major loss)로 수학식 11로 계산된다.

수학식 11

$$\Delta P_{inter} = \frac{1}{2}\rho \left(\frac{Q_{inter}}{A_{inter}} \right)^2 \frac{4f(t_{ch}/2)}{D_{h,inter}} + \frac{\mu}{\kappa} \left(\frac{Q_{inter}}{A_{inter}} \right) \frac{t_p}{2} + \beta \left(\frac{Q_{inter}}{A_{inter}} \right)^2 \frac{t_p}{2}$$

그리고 도 8의 (c)를 참조하면, 생성된 네트워크 모델에서 각 노드(nd)에서는 유입되는 유량(Q'_p , Q''_p)과 유출되는 유량(Q_{inter} , Q_p , Q'''_p)이 수학식 12에 따른 질량 보존 방정식을 만족해야 한다.

수학식 13

$$Q'_p + Q''_p - (Q_{inter} + Q_p + Q'''_p) = 0$$

도 8의 (c)에서는 전극층에 위치하는 노드를 도시하였으나, 채널층에 위치하는 노드 또한 동일하게 질량 보존 방정식을 만족해야 한다.

한편 도 8의 (a)와 (b)에 나타난 바와 같이, 생성된 네트워크 모델에서 4개의 노드가 연결되어 구성되는 페루프 각각은 수학식 14의 에너지 보존 방정식을 만족해야 한다.

수학식 14

$$\sum_{i=1}^4 \theta_{i,j} \Delta P_{i,j} = 0$$

[0084] 여기서 θ 는 유동 방향(시계 방향은 1, 반시계 방향은 -1), j 는 페루프 식별자이고, i 는 페루프에서 저항 식별자를 나타낸다.

[0085] 생성된 다층 유체 동역학 네트워크 모델은 다수의 노드로 구성되는 다수의 페루프의 집합이므로, 네트워크 모델 내의 모든 노드와 모든 페루프는 수학적 식 13의 질량 보존 방정식과 수학적 식 14의 에너지 보존 방정식을 만족해야 한다. 이에 각 노드와 각 페루프에서 질량 보존 방정식과 에너지 보존 방정식을 만족하도록 하디 크로스(Hardy-Cross) 기법을 이용하여 수학적 식 15와 같이 반복 계산한다.

수학적 식 15

$$\Delta Q_j = \frac{\sum_{i=1}^4 \theta_{i,j} \Delta P_{i,j}}{\sum_{i=1}^4 \partial(\Delta P_{i,j}) / \partial Q_{i,j} |_{Q_{i,j}=Q_{i,j}^n}}$$

$$Q_{i,j}^{n+1} = Q_{i,j}^n - \theta_{i,j} \Delta Q_j \quad (i = 1, 2, 3, 4)$$

[0086]

[0087] 여기서 ΔQ_j 는 j 번째 루프에서의 유량 변화를 나타내고, n 은 반복 계산 횟수를 나타낸다.

[0088] 도 9는 본 발명의 일 실시예에 따른 흐름 전지 시뮬레이션 장치의 개략적 구성을 나타낸다.

[0089] 도 9를 참조하면, 본 실시예에 따른 흐름 전지 시뮬레이션 장치는 네트워크 모델 생성부(310)와 네트워크 해석부(320)를 포함할 수 있다. 네트워크 모델 생성부(310)는 흐름 전지에서 전해질이 전달되는 유동 경로에 따른 유로 구조로부터 다층 유체 동역학 네트워크 모델을 기지정된 방식에 따라 생성한다. 네트워크 모델 생성부(310)는 유로 구조 획득부(311), 유동 경로 분해부(312) 및 네트워크 모델 획득부(313)를 포함할 수 있다.

[0090] 유로 구조 획득부(311)는 해석되어야 하는 흐름 전지에서 전해질(또는 활물질)이 전달되는 유동 경로에 따른 유로 구조를 획득한다. 여기서 유로 구조에는 다공성 전극(122, 123)의 크기와 유동 채널(210, 212, 222)의 종류 및 형성 패턴 등이 포함된다.

[0091] 유로 구조 획득부(311)에서 유로 구조가 확인되면, 유동 경로 분해부(312)는 확인된 유로 구조로부터 다공성 전극(122, 123)과 유동 채널(210, 212, 222)의 구조를 확인하고 기지정된 방식으로 분해한다. 특히 유동 채널(210, 212, 222)이 형성된 패턴에 따라 유동 채널(210, 212, 222)과 다공성 전극(122, 123)을 다수의 영역으로 분해할 수 있다.

[0092] 여기서는 도 3에 도시된 바와 같이, 스택의 전지 셀이 다공성 전극(122, 123)의 일면 상에 유동 채널(210, 212, 222)이 밀착되어 형성되어 전해질이 유동 채널(210, 212, 222)과 다공성 전극(122, 123)을 경유하는 것으로 가정한다. 따라서 유동 경로 분해부(312)는 전지 셀에서 유동 채널(210, 212, 222)과 다공성 전극(122, 123)을 분해한다. 유동 경로 분해부(312)는 우선 유동 채널(210, 212, 222)을 형성된 패턴의 벤딩 위치를 기준으로 분해하고, 분해된 패턴에서 긴 구간을 미리 지정된 채널 길이(L_{ch})에 따라 다시 구분한다. 그리고 다공성 전극(122, 123)을 채널 길이(L_{ch})와 함께 유동 채널(210, 212, 222)의 분해된 패턴에서 짧은 구간의 길이를 기반으로 지정되는 전극 길이(L_p)에 따라 다수의 사각형 영역으로 구분한다. 여기서 전극 길이(L_p)는 실제 유동 채널(210, 212, 222)의 단면적 구조에 무관하게 수학적 식 2와 같이 획득될 수 있다.

[0093] 유동 경로 분해부(312)에 의해 유동 경로의 유동 채널(210, 212, 222)과 다공성 전극(122, 123)이 분해되면, 유동 채널(210, 212, 222)과 다공성 전극(122, 123) 각각에서 분해되는 위치 각각 노드(nd)로 설정하고, 설정된 다수의 노드(nd)는 대응하는 영역에서 유동을 방해하는 저항으로 연결되도록 설정하여 네트워크 모델을 생성한다. 이때, 유동 채널(210, 212, 222)에서 설정된 노드들은 도 5의 (c) 및 (d)에 도시된 바와 같이, 유동 채널이 형성된 패턴에 따라 저항으로 연결되고, 다공성 전극(122, 123)에서 설정된 노드들은 인접한 노드들에 저항으로 연결된다.

[0094] 또한 유동 채널(210, 212, 222)에서 설정되는 다수의 노드(nd)와 다공성 전극(122, 123)에서 설정되는 대응하는 노드(nd) 사이의 영역 또한 내부 저항으로 연결되도록 설정된다.

[0095] 여기서 네트워크 모델은 스택 내의 유동 경로에 대한 유체 동역학을 해석하기 위한 유체 동역학 네트워크 모델

로 볼 수 있으며, 서로 다른 유동 특성을 갖는 유동 채널(210, 212, 222)과 다공성 전극(122, 123)이 서로 다른 층으로 구분되도록 생성되므로 다층 유체 동역학 네트워크 모델이라 할 수 있다.

[0096] 네트워크 해석부(320)는 네트워크 모델 생성부(310)에서 획득된 다층 유체 동역학 네트워크 모델을 기반으로 다수의 노드 각각 각각이 유량에 기초한 질량 보존 법칙을 만족하고, 다수의 페루프 각각이 압력 강하에 기초한 에너지 보존 법칙을 만족하도록 반복 계산함으로써, 유동 경로 상에서 구분된 영역별로 전해질의 유량과 압력을 해석한다.

[0097] 즉 네트워크 해석부(320)는 획득된 다층 유체 동역학 네트워크 모델에서 각 노드에 유입되는 유량과 유출되는 유량이 수학식 13과 같이 질량 보존 방정식을 만족해야 하고, 인접한 4개의 노드 사이를 잇는 저항으로 형성되는 다수의 페루프 각각에서는 압력 강하가 수학식 14와 같이 에너지 보존 방정식을 만족해야 하는 점에 기초하여, 각 노드와 페루프의 유량과 압력 강하를 수학식 15의 하디크로스 기법을 이용하여 반복 계산한다.

[0098] 여기서 반복 계산은 획득된 다층 유체 동역학 네트워크 모델의 모든 노드가 질량 보존 방정식을 만족하고, 모든 페루프는 에너지 보존 방정식을 만족할 때까지 이전 계산된 페루프의 유량과 압력을 인접한 페루프의 유량과 압력과 계산에 반영하는 업데이트하는 방식으로 수행될 수 있다.

[0099] 도 10 내지 도 12는 본 발명에 따른 흐름 전지 시뮬레이션 장치의 해석 성능을 나타낸다.

[0100] 도 10 및 도 11은 각각 사형 유동 채널과 깎지형 유동 채널이 형성된 경우의 내부 압력과 내부 유속에 대한 해석 결과를 나타내며, 도 10 및 도 11에서 (a)는 위치별 내부 압력 강하를 분석한 결과를 나타내고, (b)는 위치별 유속을 분석한 결과를 나타낸다. 또한 도 10 및 도 11의 (a) 및 (b)에서 왼쪽은 기존의 격자 기반 시뮬레이션 기법(여기서는 일 예로 COMSOL)에 따라 획득된 분석 결과를 나타내고, 오른쪽은 본 실시예에 따른 노드 기반 시뮬레이션 기법에 따라 획득된 분석 결과를 나타낸다. 그리고 도 12는 사형 유동 채널과 깎지형 유동 채널이 형성된 경우, 입력 유속에 따른 압력 강하를 계산한 결과를 나타낸다.

[0101] 한편 표 1은 기존의 격자 기반 시뮬레이션 기법(COMSOL)과 본 실시예에 따른 노드 기반 시뮬레이션 기법에 따른 유동 경로 내부를 따라 전송되는 전해질의 평균 유속을 계산한 결과를 나타낸다.

표 1

| Inlet flow rate [ml min ⁻¹] | Mean velocity[mm s ⁻¹]-Serpentine | | | Mean velocity[mm s ⁻¹]-Interdigitated | | |
|-----------------------------------------|-----------------------------------------------|-------|----------|---------------------------------------------------|-------|----------|
| | COMSOL | Model | Error[%] | COMSOL | Model | Error[%] |
| 10 | 1.37 | 1.54 | 12.4 | 0.267 | 0.288 | 7.99 |
| 20 | 2.84 | 3.12 | 9.93 | 0.533 | 0.577 | 8.25 |
| 40 | 6.07 | 6.50 | 6.97 | 1.07 | 1.15 | 8.03 |
| 60 | 9.71 | 10.0 | 3.15 | 1.60 | 1.73 | 7.83 |

[0102]

[0103] 도 10 내지 도 12 및 표 1에 나타난 바와 같이, 본 실시예에 따른 시뮬레이션 장치는 무수히 많은 개수(일반적으로 10만개 단위)의 격자를 이용하여 높은 계산 비용으로 계산해야 하는 기존의 시뮬레이션 기법에 비해, 매우 적은 개수(100개 단위)의 노드를 이용함에 따라 낮은 계산 비용으로 계산을 수행함에도 낮은 계산 오차(대략 10%)를 갖는 것을 알 수 있다. 이러한 오차 또한 실질적으로 본 실시예의 다층 유체 동역학 네트워크 모델이 적은 수의 노드를 기반으로 설정되어 각 영역에 대한 평균값으로 계산됨에 따른 오차로, 스택 내의 전체적인 유동 상태를 해석하는 경우, 무시할 수 있는 수준이다.

[0104] 도 13은 본 발명의 일 실시예에 따른 흐름 전지 시뮬레이션 방법을 나타낸다.

[0105] 도 13을 참조하면, 본 실시예에 따른 흐름 전지에서 전해질이 전달되는 유동 경로에 따른 유로 구조로부터 다층 유체 동역학 네트워크 모델을 생성하는 네트워크 모델 생성 단계(S10) 및 생성된 다층 유체 동역학 네트워크 모델을 기반으로 유동 경로 상의 유동 상태를 분석하는 네트워크 모델 해석 단계(S20)로 구성될 수 있다.

[0106] 네트워크 모델 생성 단계(S10)에서는 우선 해석대상이 되는 흐름 전지에서 전해질(또는 활물질)이 전달되는 유동 경로에 따른 유로 구조를 획득한다(S11). 그리고 유로 구조가 확인되면, 유로 구조에서 서로 다른 유동 특성을 갖는 유동 채널(210, 212, 222)에 대응하는 채널층과 다공성 전극(122, 123)에 대응하는 전극층을 분리한다(S12). 그리고 분리된 채널층과 전극층 각각을 기지정된 방식으로 영역 구분한다(S13). 이때 채널층에서는 유동 채널(210, 212, 222)을 형성된 패턴의 벤딩 위치를 기준으로 분해하고, 분해된 패턴에서 긴 구간을 미리

지정된 채널 길이(L_{ch})에 따라 다시 구분할 수 있다. 그리고 전극층에서는 다공성 전극(122, 123)을 채널 길이(L_{ch})와 함께 유동 채널(210, 212, 222)의 분해된 패턴에서 짧은 구간의 길이를 기반으로 지정되는 전극 길이(L_p)에 따라 다수의 사각형 영역으로 구분할 수 있다.

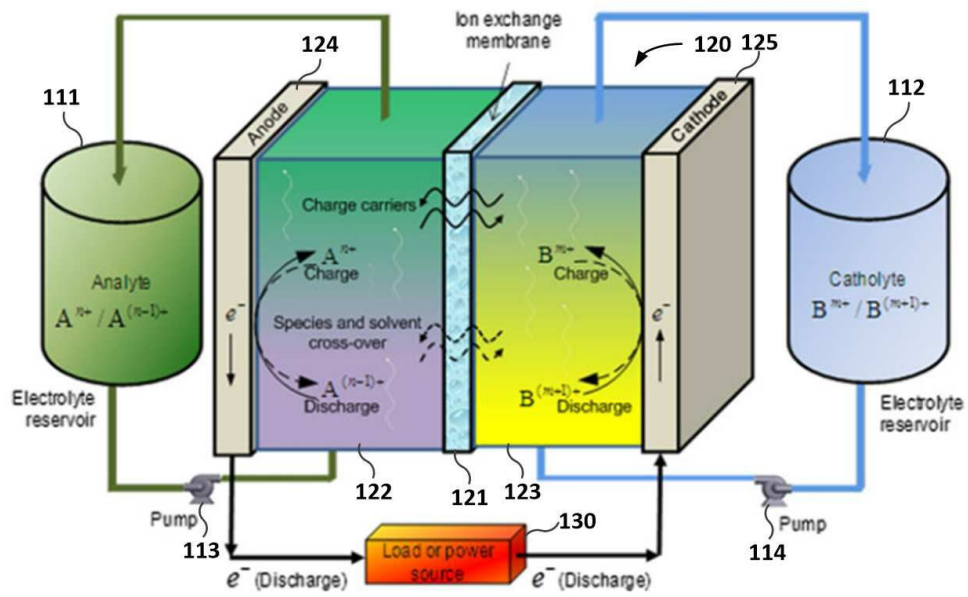
- [0107] 채널층과 전극층의 영역이 구분되면, 유동 채널(210, 212, 222)과 다공성 전극(122, 123) 각각에서 분해되는 위치 각각 노드(nd)로 설정한다(S14). 그리고 설정된 노드(nd)들 중 서로 인접한 노드들을 유동을 방해하는 저항으로 연결하여 다층 유체 동역학 네트워크 모델을 생성한다(S15).
- [0108] 다층 유체 동역학 네트워크 모델이 생성되면, 네트워크 모델 해석 단계(S20)에서는 생성된 네트워크 모델의 각 노드를 중심으로 각 위치별 유량을 계산한다(S21). 그리고 계산된 유량을 기반으로 인접한 4개의 노드 사이를 잇는 저항으로 형성되는 다수의 페루프에서 각 위치별 압력 강하를 계산한다(S22).
- [0109] 이후 계산된 위치별 유량이 질량 보존 법칙을 만족하고 위치별 압력 강하가 에너지 보존 법칙을 만족하는지 판별하고, 만족하지 않으면, 계산된 위치별 압력 강하를 반영하여 각 위치별 유량을 다시 반복 계산한다(S21). 만일 계산된 위치별 유량이 질량 보존 법칙을 만족하고 위치별 압력 강하가 에너지 보존 법칙을 만족하면 각 네트워크 모델의 각 위치별 압력과 유량이 모두 해석되었으므로 계산을 종료한다(S24).
- [0110] 상기에서는 설명의 편의를 위하여 스택이 하나의 전지 셀을 포함하는 경우를 가정하여 설명하였으나, 스택이 다수의 전지 셀을 포함하는 경우, 시뮬레이션 장치 및 방법은 각 전지 셀을 구분하여 다층 유체 동역학 네트워크 모델을 생성하고 생성된 다층 유체 동역학 네트워크 모델을 해석하도록 구성될 수 있다.
- [0111] 본 발명에 따른 방법은 컴퓨터에서 실행시키기 위한 매체에 저장된 컴퓨터 프로그램으로 구현될 수 있다. 여기서 컴퓨터 판독가능 매체는 컴퓨터에 의해 액세스 될 수 있는 임의의 가용 매체일 수 있고, 또한 컴퓨터 저장 매체를 모두 포함할 수 있다. 컴퓨터 저장 매체는 컴퓨터 판독가능 명령어, 데이터 구조, 프로그램 모듈 또는 기타 데이터와 같은 정보의 저장을 위한 임의의 방법 또는 기술로 구현된 휘발성 및 비휘발성, 분리형 및 비분리형 매체를 모두 포함하며, ROM(판독 전용 메모리), RAM(랜덤 액세스 메모리), CD(컴팩트 디스크)-ROM, DVD(디지털 비디오 디스크)-ROM, 자기 테이프, 플로피 디스크, 광데이터 저장장치 등을 포함할 수 있다.
- [0112] 본 발명은 도면에 도시된 실시예를 참고로 설명되었으나 이는 예시적인 것에 불과하며, 본 기술 분야의 통상의 지식을 가진 자라면 이로부터 다양한 변형 및 균등한 타 실시예가 가능하다는 점을 이해할 것이다.
- [0113] 따라서, 본 발명의 진정한 기술적 보호 범위는 첨부된 청구범위의 기술적 사상에 의해 정해져야 할 것이다.

부호의 설명

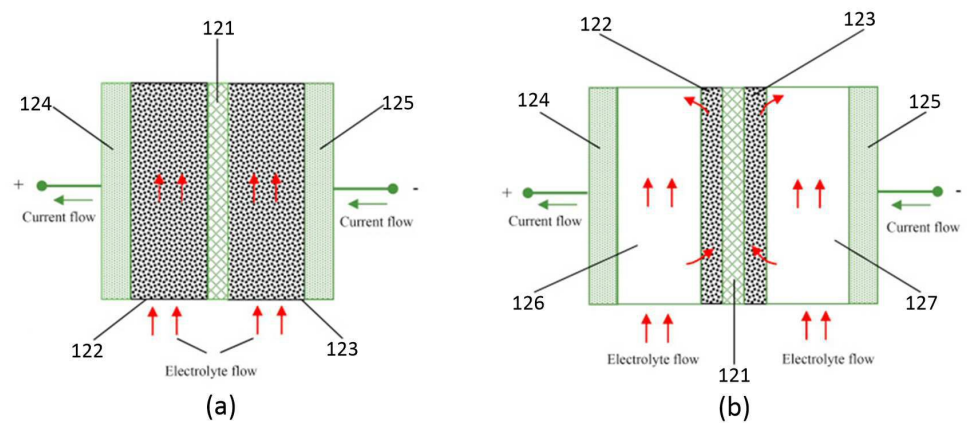
- [0114] 111, 112: 전해질 탱크 113, 114: 펌프
- 121: 이온 교환막 122, 123: 다공성 전극
- 124, 125: 제1 및 제2 전극 130: 부하/전원부
- 126, 127: 유동 채널 210: 사형 유동 채널
- 221, 222: 깎지형 유동 채널 310: 네트워크 모델 생성부
- 311: 유로 구조 획득부 312: 유동 경로 분해부
- 313: 네트워크 모델 획득부 320: 네트워크 해석부

도면

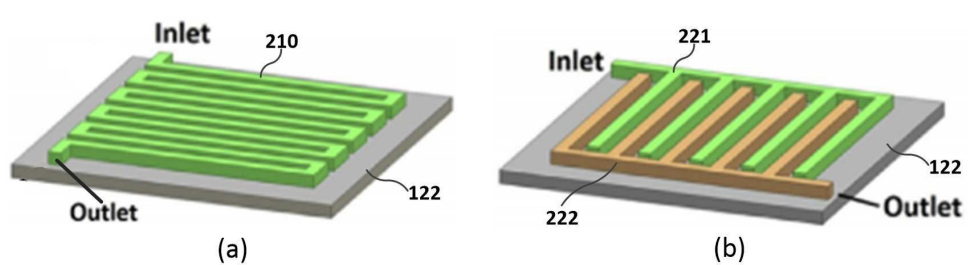
도면1



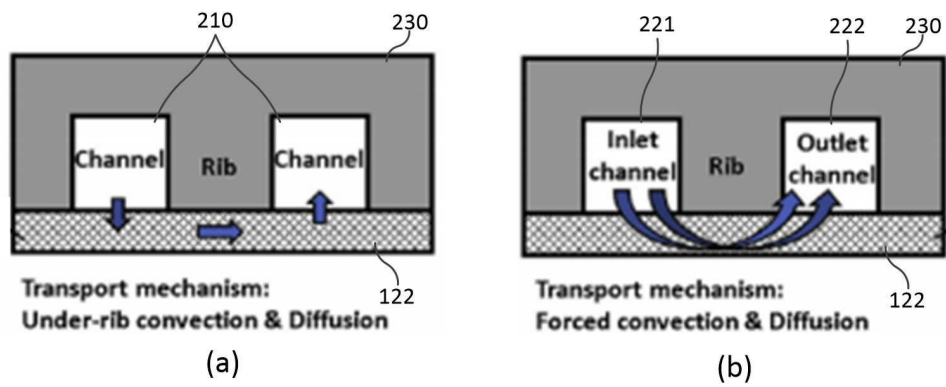
도면2



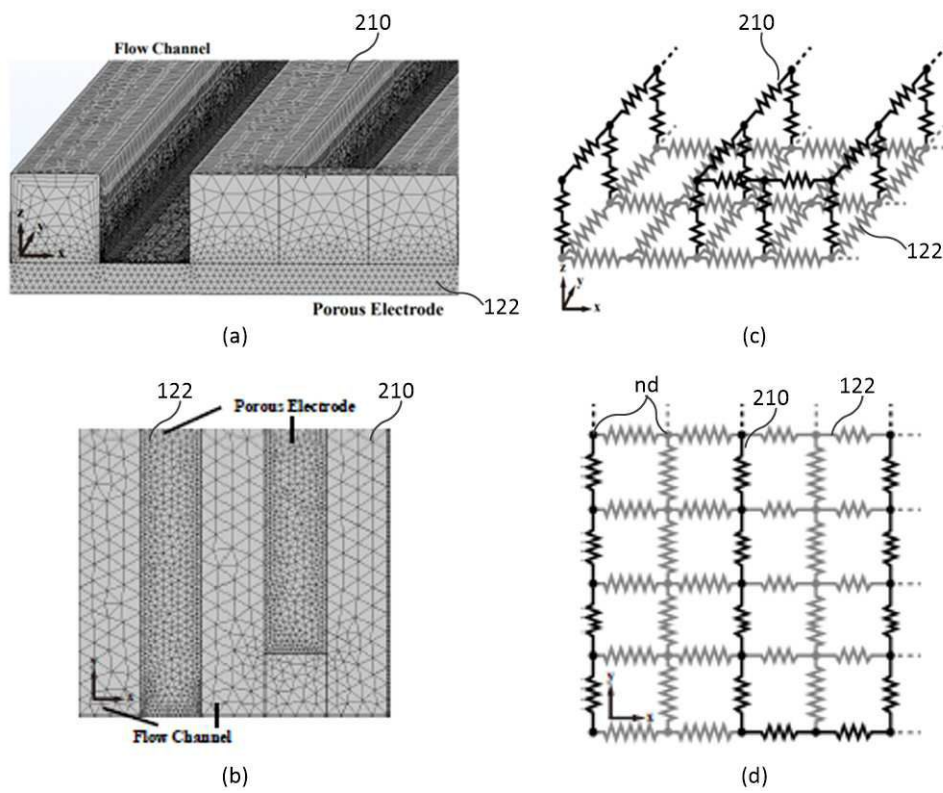
도면3



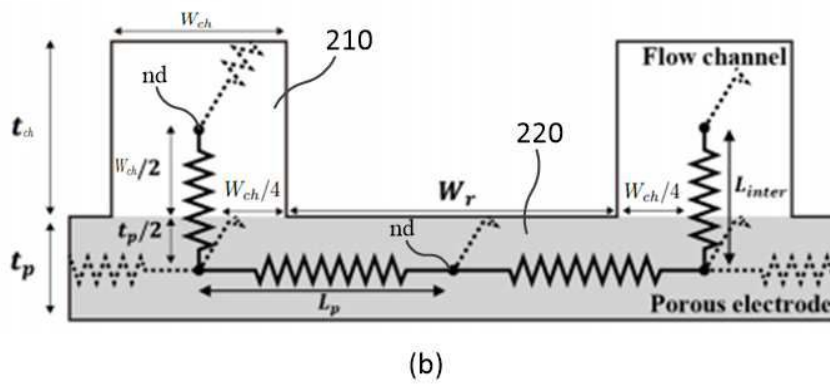
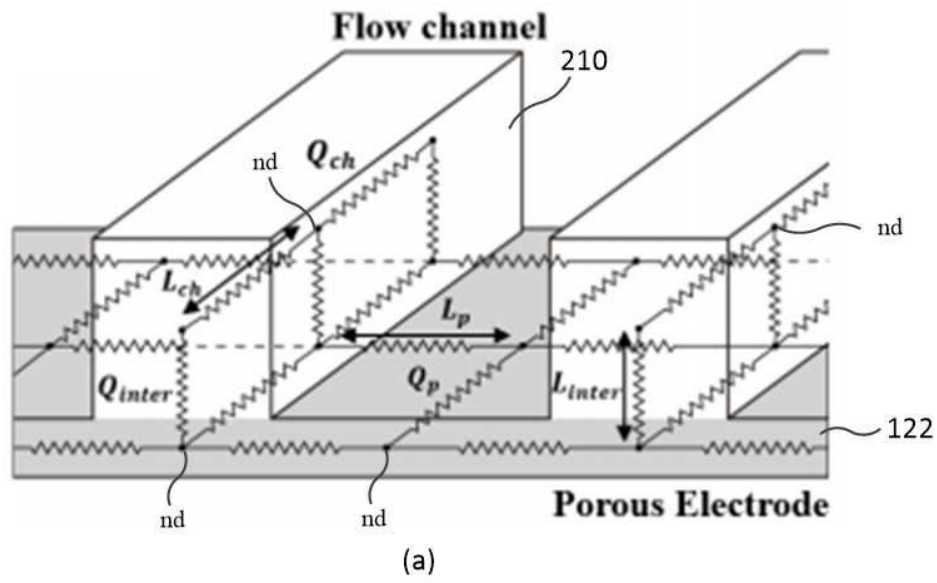
도면4



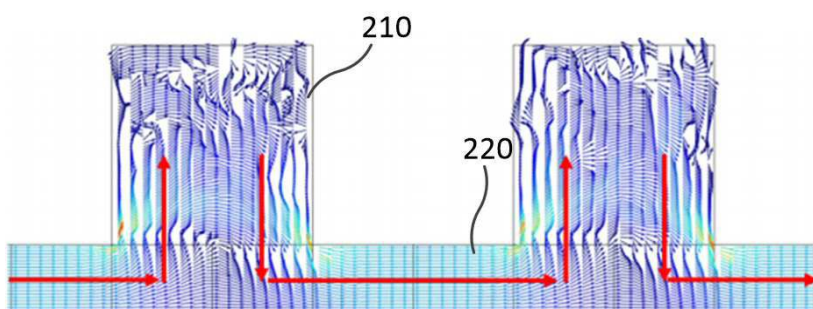
도면5



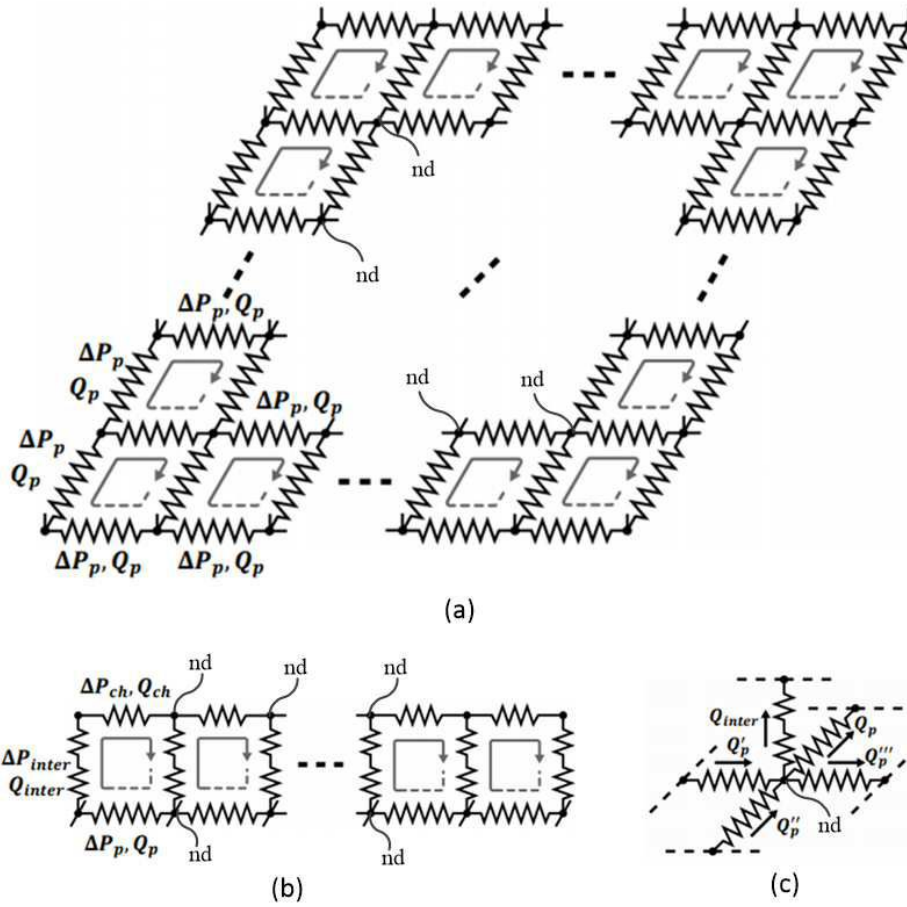
도면6



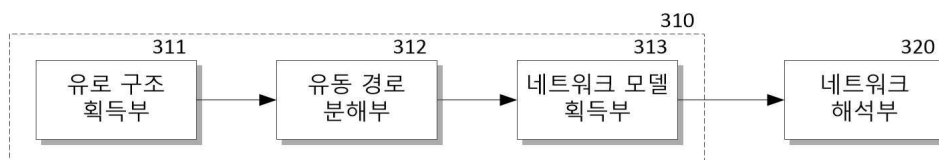
도면7



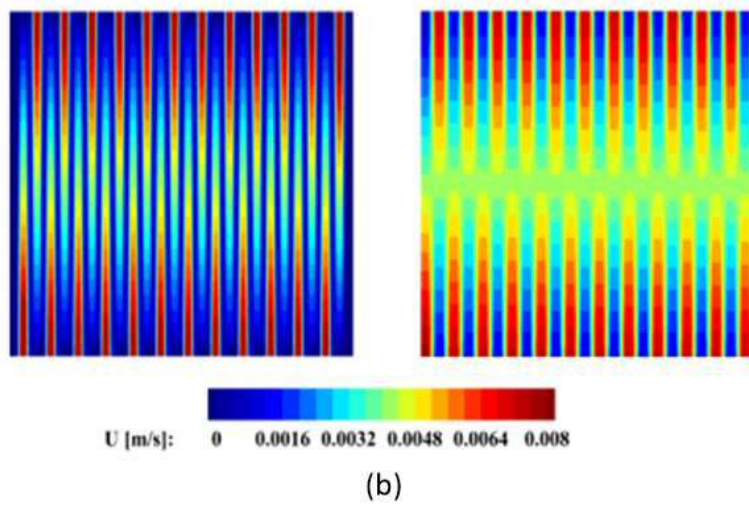
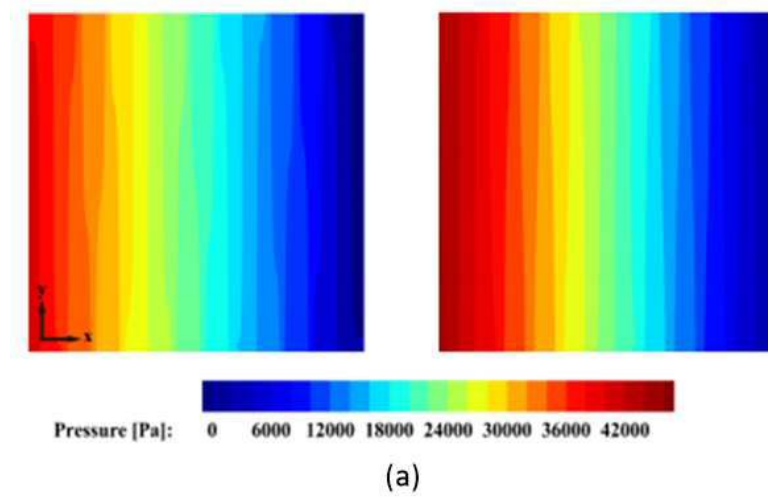
도면8



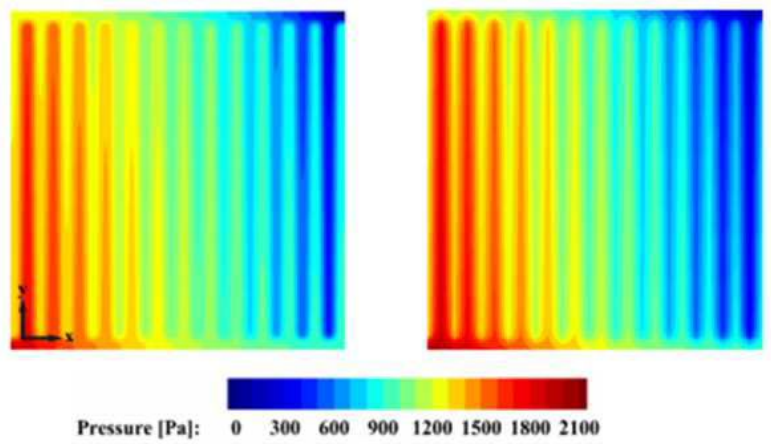
도면9



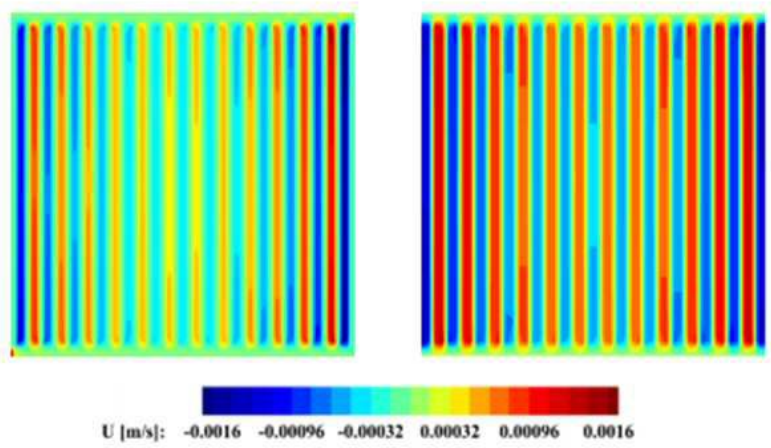
도면10



도면11

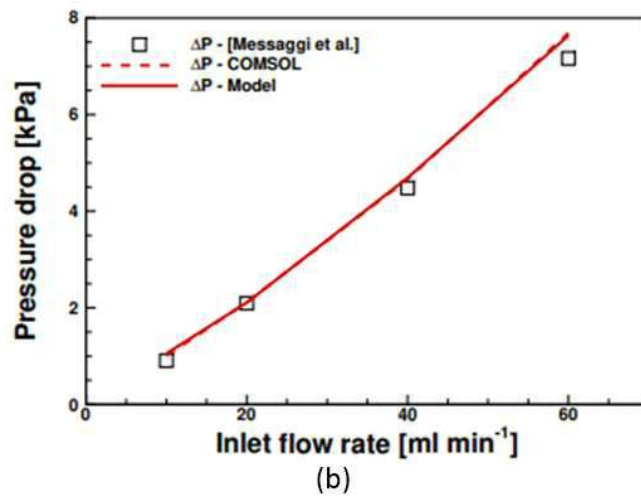
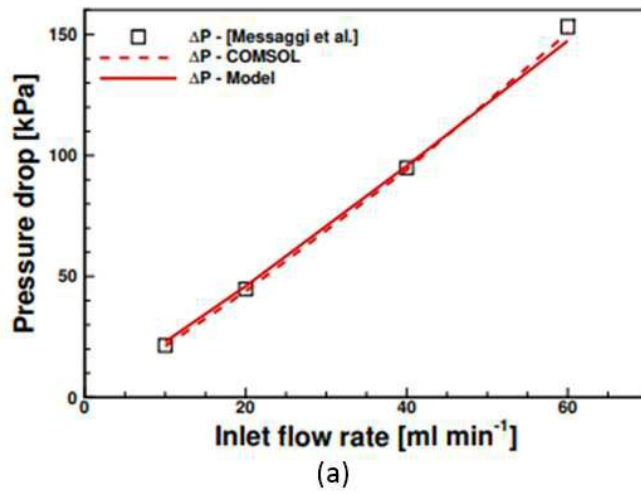


(a)



(b)

도면12



도면13

