

## 알칼라인 수전해 Custom Model을 이용한 그린수소 생산 공정 시뮬레이션

신용범, 오종연, 서혜원, 신동일†

명지대학교 화학공학과

(dongil@mju.ac.kr†)

에너지원으로써 수소는 친환경적이지만, 대부분의 수소는 생산과정에서 온실가스를 배출하는 천연가스 개질 방식으로 생산되는 그레이수소로, 탄소중립을 위해서는 생산과정에서 온실가스 배출이 없는 그린수소생산이 필수적이다. 하지만 그린수소의 생산비용은 그레이수소 대비 약 3~7배 높아, 그린수소의 가격경쟁력 확보를 위해 수전해 설비비 절감과 효율 향상을 위한 소재 및 운전기술 개발이 필요하다. 본 연구는 알칼라인 수전해 stack의 custom model들과 생성된 수소의 분리 및 저장공정을 gPROMS를 이용하여 모델링하였으며, 이를 통합한 그린수소생산 공정 시뮬레이션을 개발하였다. 알칼라인 수전해 stack의 custom model들은 기존 문헌의 모델들을 수집 및 수정하여 수전해 시스템의 전압, 온도변화, 수소생산량, 효율 등의 성능을 예측하는 모델들로 구성하였으며, 직접 실험 데이터를 통해 모델의 파라미터를 튜닝할 수 있지만, 각 현상에 기여하는 소재의 물리, 화학적 특성을 입력하여 시뮬레이션을 수행할 수 있도록 시스템을 구성하였다. 개발된 시뮬레이션 시스템은 운전 효율 개선에 활용될 수 있을뿐만 아니라 새로 개발된 전극 및 분리막 소재의 실제 적용 이전 성능 검증에 활용되어, 소재 개발시간을 가속화 할 수 있다. 이후 소재 설계 AI 시스템과의 결합을 통한 알칼라인 수전해 시스템의 소재 개발 자동화 시스템으로의 발전이 가능하다.