

오류역전파 신경망 이론을 이용한 인산형 연료전지 공정의 전산모사

이원재 · 김성준 · 설용건 · 이태희†

연세대학교 공과대학 화학공학과
(1995년 3월 29일 접수, 1995년 6월 13일 채택)

A Simulation Study of Phosphoric Acid Fuel Cell Process Using Error Back-Propagation Neural Network

Won-Jae Lee, Sung-Joon Kim, Yong-Gun Shul and Tae-Hee Lee†

Dept. of Chemical Engineering, Yonsei University, Seoul, Korea
(Received 29 March 1995; accepted 13 June 1995)

요 약

오류역전파 신경망을 인산형 연료전지의 조업변수인 산소 및 수소 유량, 작동온도에 대하여 학습시켜 연료전지 성능예측모델을 구성하였다. 또한 구성된 모델로 다양한 조업조건에서의 단위전지 성능을 예측하여 이를 실험과 비교하였으며, 학습된 신경망을 상용 공정모사기인 ASPEN PLUS의 단위공정으로 도입하여 50 kW 출력의 연료전지 공정을 구성한 후 조업변수에 대한 영향을 살펴보았다. 3개의 층으로 구성된 오류역전파 신경망은 학습단계상수와 모멘텀이 각각 0.7 및 0.9인 경우 단위 전지의 성능곡선을 가장 정확히 학습하였으며, 신경망모델은 수소 및 산소의 유량, 온도의 변화에 따른 단위전지 성능곡선의 변화를 정확히 예측하였다. 연료전지 전체공정의 모사 결과, 개질기의 경우 600°C, 상압에서 수증기/탄화수소 비율이 2.6일 때 최대 출력을 나타내었으며, 연료전지 본체의 작동온도를 190°C 정도로 하는 것이 적절함을 알 수 있었다.

Abstract—A performance modeling of phosphoric acid fuel cell was constructed using error back-propagation neural network with generalized delta rule. The network was trained to produce the performance curve according to cell temperatures, H₂ flow rates and O₂ flow rates. The reliability of performance prediction was verified by comparing the experimental data of unit cell. The three layered error back-propagation network learned exactly the performance curve of unit cell when the step size coefficient was 0.7 and the momentum was 0.9. It offered reasonable prediction for various O₂ and H₂ flow rates and temperatures. This neural network combined to commercial process simulator ASPEN PLUS as a unit for fuel cell stack. In this process simulation, 50 kW PAFC system was selected, and the effects of operating variables on the performance of the system were also investigated. The maximum power of fuel cell was achieved when the reformer temperature was 600°C at 1 atm, and steam-carbon ratio was 2.6. It is proper to maintain the operating temperature of fuel cell at 190°C.

1. 서 론

연료전지는 카르노효율의 제한을 받던 기존의 발전

방식과는 달리 연료의 화학에너지를 전기화학반응에 의하여 직접 전기에너지로 변환시키는 장치이다. 따라서 높은 열효율을 얻을 수 있으며, 저공해 발전설비라는

장점을 가진다. 연료전지는 전해질의 종류에 따라서 알칼리, 인산, 고체 산화물 전해질, 고체 고분자 전해질, 용융 탄산염 연료전지 등으로 나뉘며 작동 온도에 따라서 저온형, 중온형, 고온형 연료전지 등으로 나뉘는데 실용화 단계에 있는 연료전지는 인산형 연료전지이다. 연료전지 전체 공정은 연료인 수소를 얻기 위한 연료처리장치, 연료전지 본체, 전력변환설비, 제어설비로 구성되어 연료전지 본체는 양극, 음극 그리고 전해질상으로 이루어진 단위전지를 적층하여 구성하게 된다. 그러므로 단위전지의 성능이 전체 공정의 성능을 좌우하게 되며 단위전지의 운전 특성에 대한 이해와 다양한 조업 조건에서의 성능 예측이 중요하다[1-4]. 그러나 연료전지 공정의 성능은 전극의 제조과정과 적층과정에서의 비이상성 때문에 예측이 어렵다. 따라서 연료전지 공정의 모사를 위하여는 제작된 전지의 성능을 실제에 가깝게 모사할 수 있는 도구가 필요하며 신경망은 이에 대한 해결책의 하나가 될 수 있다.

신경망은 인공지능 구현을 위한 기법의 하나로, 1949년 Hebb에 의하여 처음 제안되어 Minsky, Rosenblatt, Widrow 등에 의하여 퍼셉트론(perceptron)이라 불리는 단일층의 구조를 가지는 인공 신경을 구현하였으나 선형적으로 분리 가능한 문제에 국한되었다. 그 후 1970년대와 1980년대를 거치면서 수학적 기초가 다져지고 다층의 신경망이 개발되면서 연구가 급속도로 확산되었다[5-7]. 현재는 전기공학, 전자공학 분야에서 주로 화상처리, 문자인식, 전문가 시스템, 신호처리 및 병렬 처리 컴퓨터 등에 응용되나, 적용가능한 범위가 넓어서 다양한 분야에서의 연구사례가 발표되고 있다[8,9]. 특히 화학공학 분야에서는 화학공정의 모델링, 비선형 공정의 예측제어, 공정의 이상진단, 최적화 등에 적용하기 위한 연구들이 활발히 진행되고 있다[10-14]. 그 중 오류역전파와 신경망은 입력자료의 규칙을 학습을 통하여 찾을 수 있고, 일단 학습된 신경망은 입력자료의 변화에 따른 변화를 예측할 수 있다. 따라서 보다 실제에 근접한 공정모델을 제공할 수 있으며 지속적인 학습을 통한 모델의 개선이 가능하다.

연료전지 공정의 모사를 위하여 ASPEN PLUS와 같은 상용 모사기를 이용할 경우, 대부분의 단위장치는 적절한 모델을 선택하여 사용할 수 있으나 연료전지 자체에 대한 모델은 제공되지 않으므로 사용자가 직접 모델을 구성하여 다른 모델과 연결하여 사용하여야 한다. 이러한 사용자 모델을 구축함에 있어 여러 가지 방법으로 연료전지의 성능을 예측할 수 있으나 현재까지 정확히 성능을 예측할 수 있는 모델식은 알려져 있지 않은 상황이다. 대부분의 모델식은 실험식이고, 이론적인 식의 경우는 예측범위가 극히 제한적이며 많은 경

우에 실험자료를 회귀분석하여 사용하고 있는 실정이다.

따라서 본 연구에서는 이에 관한 해결책으로서 오류역전파와 신경망으로 연료전지 모델을 구성하고 다양한 조업조건에서의 단위전지 성능을 예측하며 이를 실험과 비교하여 신경망 모델의 적용가능성을 검토하고자 하였다. 또한 단위전지 규모의 실험자료로 학습된 신경망을 상용 공정모사기인 ASPEN PLUS의 단위공정으로 도입하여 전체 연료전지 공정에 대한 모사를 수행하였다.

2. 인산형 연료전지 공정과 신경망 이론

2-1. 인산형 연료전지 공정

인산형 연료전지 발전시스템은 연료처리장치, 연료전지 본체 및 전력변환장치 등으로 구성되어 있다. 연료처리장치는 연료로부터 수소와 일산화탄소를 제조하는 개질기, 그리고 일산화탄소를 이산화탄소로 만드는 일산화탄소 전환기 등으로 이루어진다. 연료전지 본체는 연료전극, 산화전극 및 이온전도체인 전해액을 다공성 재질에 흡수시킨 전해질상으로 이루어진 단위전지를 적층한 적층전지(stack)로 구성된다. 적층전지는 연료 순환장치와 반응열을 제거하여 일정한 온도를 유지하기 위한 냉각장치를 포함하고 있다. 본체에서 발생된 직류는 전력변환 장치에 의하여 교류로 변화시킨다[1-4]. Fig. 1은 전형적인 인산형 연료전지 공정을 나타낸 그림이다.

실제로 전지를 운전하여 전류를 방출시키려면 작동 전압이 기전력보다 과전압만큼 낮아지게 된다. 이 과전압은 활성화 과전압, 저항 과전압, 그리고 물질전달 과전압의 합으로 나타낼 수 있는데, Fig. 2는 이를 도식적으로 나타낸 것이다[1-3].

2-2. 신경망 이론

2-2-1. 신경망의 구조

신경망은 인체의 신경 세포에 대응하는 노드(node)들이 서로 복잡하게 연결되어 있는 구조를 가지며, 하나의 노드는 Fig. 3에 보인 바와 같이 들어오는 모든 입력신호를 가중치(weight)와 곱하여 더하고 이를 활성화함수(activation function, squashing function)에 의하여 처리한 후 신호를 다음 층의 각 노드들로 전달하게 된다. 이를 수식으로 나타내면 다음과 같다[5-7].

$$y_j = f\left(\sum_{i=1}^n x_i w_{ij}\right) \quad (1)$$

여기서 x_i 는 입력신호이며, w_{ij} 는 가중치이다.

활성함수는 일반적으로 다음의 S자 형태의 함수(sig-

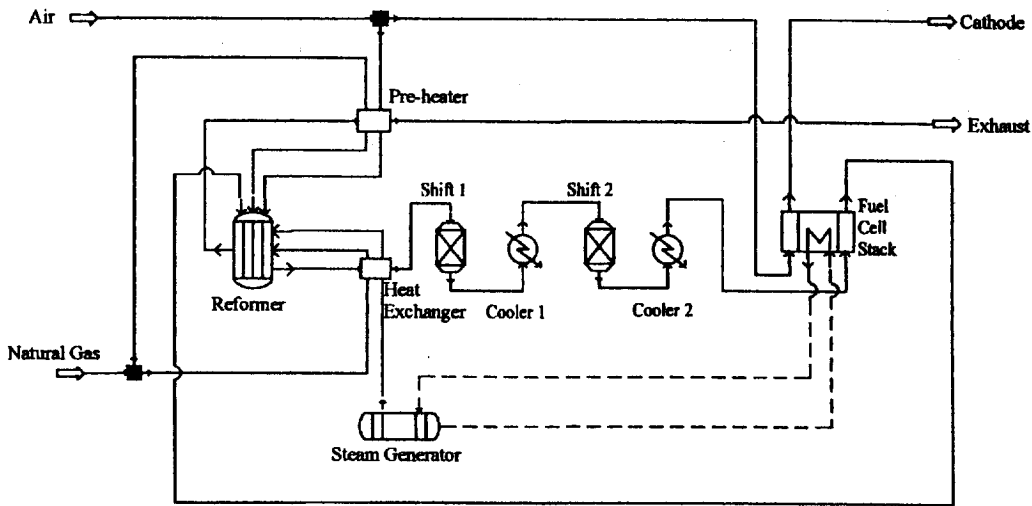


Fig. 1. PAFC power generation process.

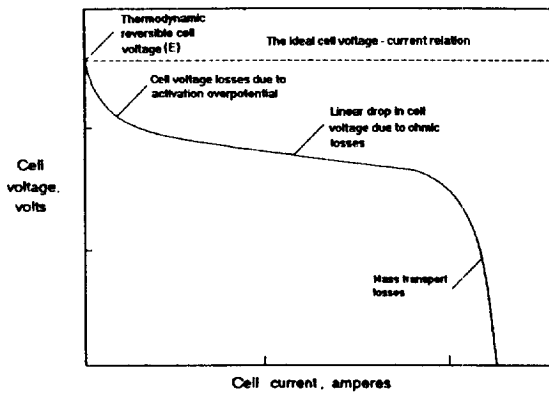


Fig. 2. Performance curve with various cell over voltage losses.

modal function)를 사용하며 hyperbolic tangent 함수를 사용하기도 한다.

$$y = \frac{1}{1 + e^{-SUM}} \quad (2)$$

이 함수의 미분은 다음과 같은 간단한 형태이다.

$$\frac{\partial y}{\partial x} = y(1 - y) \quad (3)$$

다층의 신경망은 노드의 집합체인 층(layer)으로 구성되며, 층은 입력을 받아들이기 위한 입력층(input layer)과 출력을 위한 출력층(output layer), 그리고 두 층 사이의 감추어진 중간층(middle layer, hidden la-

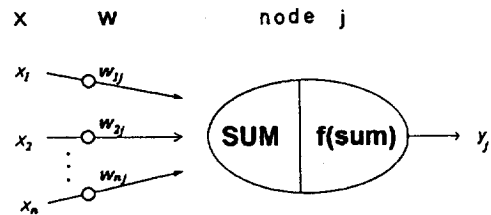


Fig. 3. Artificial neuron with activation function.

yer)으로 구분된다. 각 층의 각 노드들은 노드 사이의 관계를 수치적으로 표현한 가중치로 서로 연결된다. 입력층의 노드는 입력신호를 다음 층의 노드들로 전달하는 역할만을 하며 신호의 처리는 수행하지 않는다.

2-2-2. 델타법칙

신경망이 대상 시스템을 표현하기 위하여는 가중치를 수정하여 대상 시스템에 적합한 가중치를 찾아야 한다. 이와 같은 가중치 수정방법을 학습법칙(learning rule)이라고 한다. 델타법칙은 Widrow-Hoff 법칙 또는 최소자승법칙(least mean squared rule)이라고도 부르며, j 노드의 입력신호를 x_i , 가중치를 w_{ij} 라 하면 출력신호는

$$y_j = \sum_{i=1}^n x_i w_{ij} \quad (4)$$

가 되고 목표치(desired output)와 비교하여 오차 δ 를 계산한다.

$$\delta = d_j - y_j \quad (5)$$

이 오차에 의하여 가중치를 다음과 같이 변화시킨다

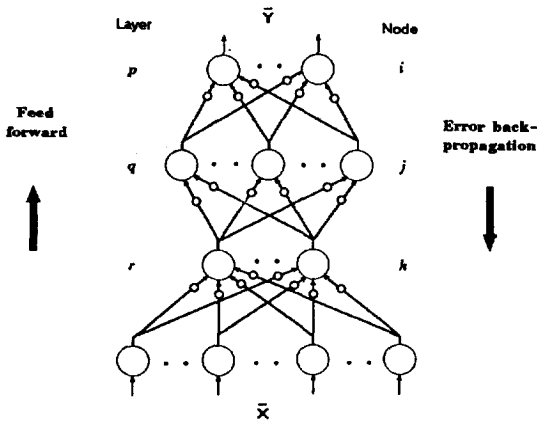


Fig. 4. Three-layer back propagation network.

[15].

$$\bar{w} = \bar{w}(\text{old}) + \frac{\eta \delta \bar{x}}{|\bar{x}|^2} \quad (6)$$

여기서 η 는 0과 1 사이의 학습상수이다. 식 (5)에서 오차계산을 위한 목표치에 대한 정보가 필요하며 이러한 형태의 학습법칙을 지도학습(supervised learning)이라 한다. 그러나 델타법칙에 의한 단일층 신경망은 exclusive-or 문제를 학습할 수 없는 제한을 가지게 된다. 즉, 단일층의 신경망에 있어서 활성화함수를 상수라 할 때 분리가능한 영역은 직선에 의하여 표시되며, 이 때 분리할 수 없는 경우가 발생한다[5]. 이러한 제한은 다층의 신경망을 구성함으로써 해결된다.

2-2-3. 오류역전과 신경망과 일반화된 델타법칙

델타법칙의 경우 다층의 신경망에서 중간층의 가중치 수정을 위한 δ 값을 얻을 수 없으나, 일반화된 델타법칙은 출력층의 δ 값을 이용하여 중간층의 δ 값을 얻을 수 있다. 오류역전과 신경망은 일반화된 델타법칙을 이용하여 신경망의 출력을 얻기 위한 순차진행(feed-forward)과 가중치 변화를 위한 오류역전행(error-back-propagation)을 반복적으로 수행함으로써 각 노드간의 가중치를 얻게 된다[16, 17]. 먼저 순차진행일 경우 Fig. 4에서 q층-j노드의 출력은 다음과 같이 얻는다.

$$\text{SUM}_{qj} = \sum_k x_{rk} w_{qkj} \quad (7)$$

$$y_{qj} = \frac{1}{1 + e^{-\text{SUM}_{qj}}} \quad (8)$$

여기서 y_{rk} 는 r층-k노드의 출력이고, 노드 w_{qkj} 는 r층-k노드와 q층-j노드 간의 가중치이다.

역전행의 경우, 출력층과 중간층에 대하여 각각 다

음과 같이 가중치 수정을 위한 δ 값을 얻는다.

$$\text{Output layer } \delta_{pi} = y_{pi}(1 - y_{pi})(d_i - y_{pi}) \quad (9)$$

$$\text{Hidden layer } \delta_{qj} = y_{qj}(1 - y_{qj})(\sum_i \delta_{pi} w_{pij}) \quad (10)$$

얻어진 δ 에 의한 가중치의 변화는 다음과 같다.

$$\text{Output layer } \Delta w_{pij} = \eta \delta_{pi} y_{qj} \quad (11)$$

$$\text{Hidden layer } \Delta w_{qjk} = \eta \delta_{qj} y_{rk} \quad (12)$$

이와 같은 오류역전과 신경망의 학습법칙은 적용범위는 넓은 반면 학습속도가 느려 학습속도의 개선을 위하여 Rumelhart, Hinton, Williams에 의하여 다음과 같은 가중치 변화방법이 제안되었다[5, 17].

$$\Delta w_{pij}(\text{new}) = \eta \delta_{pi} y_{qj} + \alpha \Delta w_{pij}(\text{old}) \quad (13)$$

따라서, 이 방법의 가중치의 변화는 앞서의 반복에서 계산된 가중치 변화를 부가적으로 더하여 줌으로써 변화의 경향을 유지하고 수렴속도를 증가시킨다. 이같은 특성때문에 α 를 모멘텀이라고 한다.

이와 같은 학습법칙을 구현하기 위하여는 상수 및 가중치의 초기치 설정이 필요한데 가중치의 경우 충분히 작은 값을 무작위로 설정한다. 만약 가중치의 초기 설정치가 모든 노드에 대하여 같거나 큰 값일 경우 학습이 되지 않을 수 있다. α 는 0.9 근처의 값으로 설정하며, η 는 0에서 1 사이의 값으로 설정하고 학습이 진행되면 감소시키는 것이 일반적이다. 이와 같은 상수는 학습 대상에 따라 경험적으로 결정한다[5, 10].

3. 실험 및 모사방법

3-1. 단위전지

단위전지 구성을 위한 전극 및 매트릭스의 제조방법과 구성된 단위전지의 성능 측정방법은 각각 다음과 같다.

3-1-1. 전극 제조

백금 담체로는 카본블랙을 사용하였고 콜로이드 방법으로 10 wt%로 담지시켜 촉매분말을 제조하였다[18, 19]. 제조한 분말에 발수제 및 결합제의 역할을 하는 테프론(PTFE, Du pont Co., 60 wt%)을 첨가하여 반죽형태로 제조한 후 탄소종이에 연신하였다. 이를 300°C 수소 분위기에서 소결하였고, 350°C, 10 kg/cm²의 조건에서 고온압착한 후 이를 절단하여 전극으로 사용하였으며, 면적은 4 cm²로 하였다.

3-1-2. 매트릭스 제조

다공성의 전해질 지지체인 매트릭스의 재료인 5-15

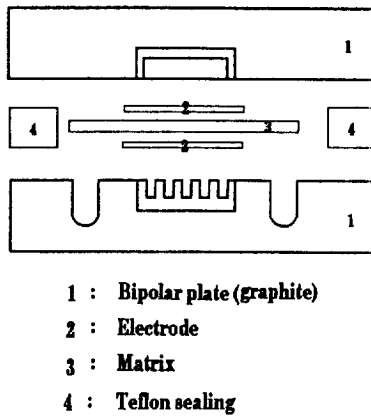


Fig. 5. The unit cell assembly for the performance test.

μm 의 SiC Fiber(Tokai Carbon Co.)와 $1\mu\text{m}$ 의 입경을 가진 SiC분말(Lonza Co., UF-15)을 600°C 의 공기 분위기에서 5시간 동안 가열하여 SiC 중의 유기물과 수분을 제거하고 이를 1:1의 비율로 섞어 물을 넣고, SiC와 테프론의 혼합을 위하여 계면활성제(Triton X-100)를 2-3방울 넣은 후 SiC에 25 wt%의 테프론(Du pont Co., 60 wt%)을 첨가하였다.

이를 교반기로 30분간 교반하고, SiC간의 결합과 인산의 함침을 위한 친수성 수지로서 1 wt%의 polyethylene oxide를 물에 녹여 넣은 후 30분간 다시 교반하였다. 현탁상태의 용액을 100°C 에서 교반하면서 남아있

는 수분을 제거하고, 입자를 잘게 부순 후 isopropyl alcohol과 증류수를 1:1로 혼합한 용액을 넣고, 연신하여 0.2 mm두께의 매트릭스 박막을 제조하였다[20].

제조한 박막을 공기분위기에서 300°C , 1시간 동안 열처리하여 남아있는 polyethylene oxide를 제거하였고, 350°C , 10 kg/cm^2 의 조건에서 10분간 고온압착하여 매트릭스의 구조를 강화한 후 서서히 식혀 매트릭스를 완성하였다[21].

3-1-3. 단위전지 제작 및 성능 측정

제조한 전극과 매트릭스로 Fig. 5와 같이 단위전지를 구성하였다. 유로는 1 mm 간격으로 골을 내었으며 음극과 양극의 유로는 직각으로 교차시켰다. 기체 누출을 방지하기 위하여 테프론 sheet를 이용하여 단위전지와 같은 두께로 밀봉한 후 분위기로부터 온도 및 유량을 변화시키면서 성능을 측정하였다.

수소는 산소 제거기를 거쳐 도입하였고, 산소는 수분 제거기를 거치도록 하였다. 유량은 유량계(Teledyne Hastings-Raydist Co. 200A)를 사용하여 조절하였고, 온도조절을 위한 분위기로 및 성능 측정을 위한 battery tester(IMACE Co. MRV-345A)를 사용하였다. 각각에서의 신호는 PC를 사용하여 출력하였다.

3-2. 신경망 학습 및 전체공정의 모사

신경망은 일반화된 델타법칙을 사용한 오류역전파 신경망으로 구성하였고, 이 신경망을 통하여 PC에서 실험자료를 학습하였다. 학습은 자승평균 오차(mean

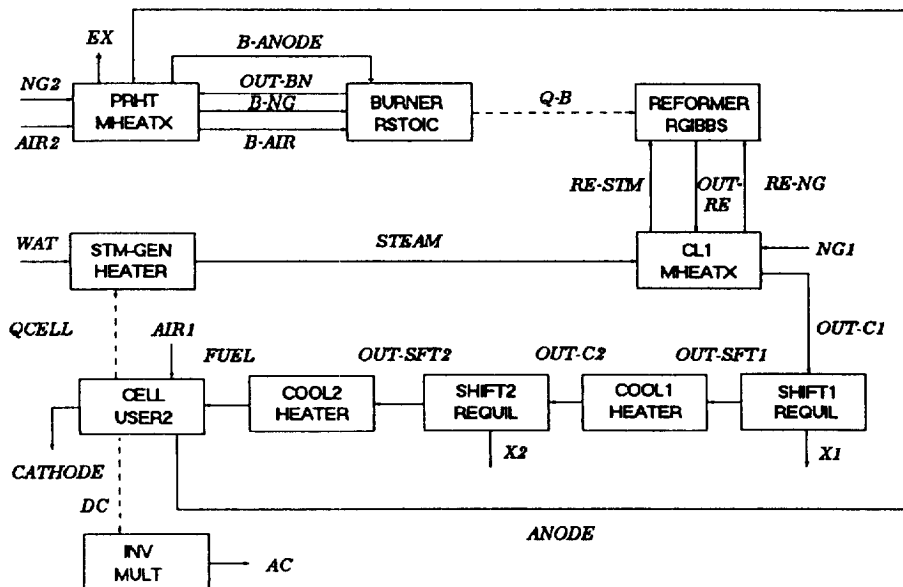


Fig. 6. ASPEN PLUS block diagram of PAFC process.

Table 1. Conditions of each block

PRHT : MHEATX		CL1 : MHEATX	
Cold side outlet temperature(°C)	600	Hot side outlet temperature(°C)	247
Cold side outlet pressure(atm)	2	Hot side outlet pressure(atm)	1
BURNER : RSTOIC		REFORMER : RGIBBS	
Outlet temperature(°C)	800	Outlet temperature(°C)	700
Outlet pressure(atm)	1	Outlet pressure(atm)	1
		Water to methanol ratio	2.8
CO CONVERTER(High temp.) : REQUIL		CO CONVERTER(Low temp.) : REQUIL	
Reaction :	$\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$	Reaction :	$\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$
Outlet temperature(°C)	350	Outlet temperature(°C)	200
Outlet pressure(atm)	1	Outlet pressure(atm)	1
COOLER1 : HEATER		COOLER2 : HEATER	
Outlet temperature(°C)	165	Outlet temperature(°C)	190
INVERTER : MULT		STEAM GENERATOR : HEATER	
Efficiency(%)	98	Saturated pressure(atm)	2
FUEL CELL STACK : USER2			
Reaction :	$\text{H}_2 + 1/2 \text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}$		
Outlet temperature(°C)	190		

square error) 0.001까지 반복하였다. 학습된 신경망을 이용하여 VAX-6420/VMS 환경에서 Fig. 1과 같은 연료전지 공정에 대하여 모사를 실시하였다. 각 단위공정은 ASPEN PLUS에서 적절한 모델을 취하여 모사하였으며, 연료전지 본체에 대하여는 구성된 신경망을 단위전지 실험자료로 학습시켜 ASPEN PLUS의 USER 모델로 구성하였다. 이에 대한 block diagram을 Fig. 6에 나타내었으며, 각 단위공정의 조작조건과 반응 및 ASPEN PLUS 모델은 Table 1에 나타내었다[4]. 구성된 전체 공정에 대하여 ASPEN PLUS의 SENSITIVITY 기능을 이용하여 조업변수의 영향을 살펴보았다.

4. 결과 및 고찰

4-1. 성능곡선의 학습

신경망의 구조를 결정하기 위하여, 실험결과 중 알맞은 성능곡선을 선정하고 중간층을 달리하여 학습시킨 결과는 Fig. 7과 같다. 학습은 같은 가중치에서 시작하였고, 학습단계상수 α 와 모멘텀 η 는 각각 0.5로 하였다. 신경망의 중간층을 각각 세개, 네개, 다섯개의 층으로 구성한 경우에 대하여 50,000회를 반복 실행하여 학습자료에 대한 학습결과의 자승평균오차가 10^{-3} 이하가 되도록 한 결과, 층수가 학습 결과에 미치는 영향이 적은 것을 알 수 있었다.

Fig. 8은 중간층을 셋으로 하고 학습단계상수와 모멘텀을 각각 0.7, 0.9로 하였을 경우, 반복회수에 따른 신경망의 출력 결과이다. 여기서 학습단계상수와 모멘텀을

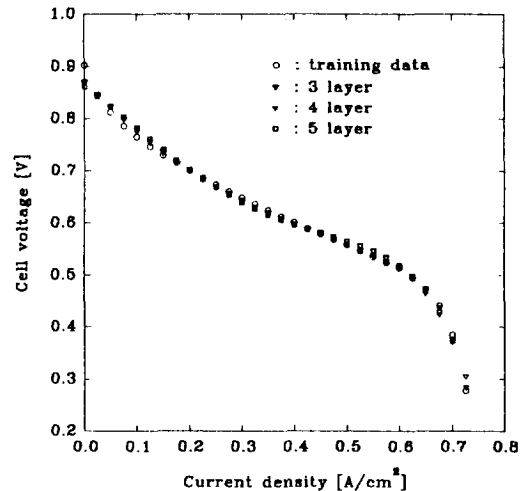


Fig. 7. Training data recall for various number of layers.

각각 0.7, 0.9로 한 것은 학습단계상수와 모멘텀을 달리하여 50,000회 반복시킨 결과, 학습단계상수와 모멘텀이 각각 0.7, 0.9일 때 가장 작은 오차를 보였기 때문이다. 이 때의 자승평균오차는 3.4084×10^{-4} 이었다. 100회 반복에서는 전류밀도의 최대치, 최저치의 결과가 학습자료에 접근하였으나 전체적으로는 성능곡선의 경향을 제대로 학습하지 못하였다. 반복회수가 증가함에 따라 오차가 점차 감소하였으며 10,000회 이상을 반복함에 따라 성능곡선의 경향을 제대로 학습할 수 있었다.

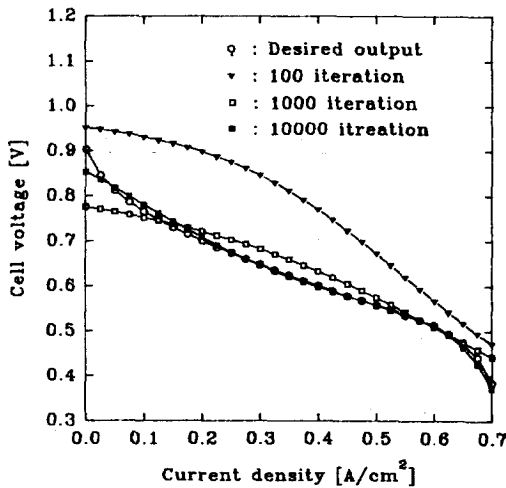


Fig. 8. Performance curve regeneration during the training ($\alpha : 0.9$, $\eta : 0.7$).

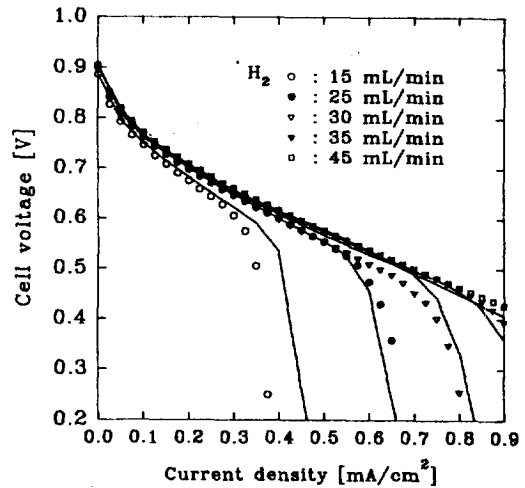


Fig. 10. Estimation of performance curves for various H_2 flow rates.

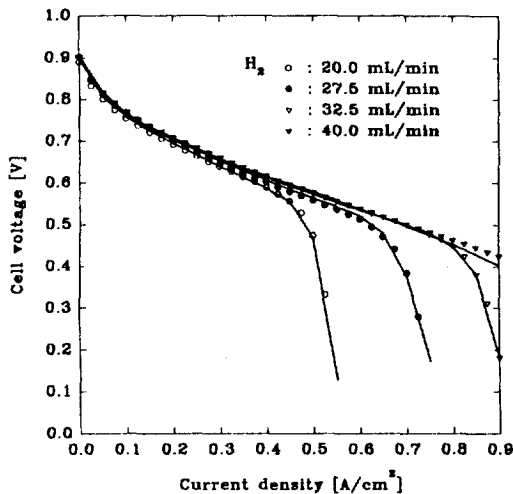


Fig. 9. Training data recalls for H_2 flow rates.

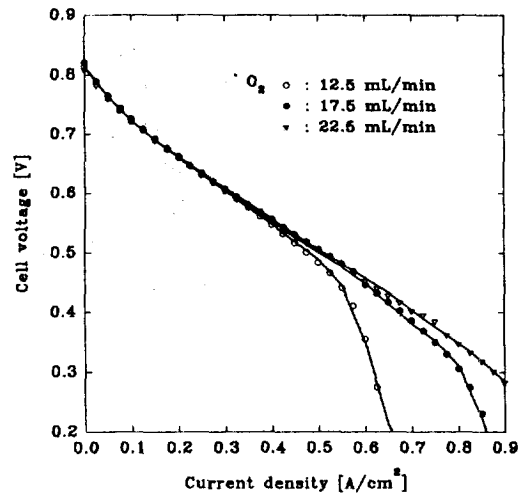


Fig. 11. Training data recalls for O_2 flow rates.

4-2. 단위전지 조업변수의 학습

4-2-1. 수소유량 변화

단위전지의 수소유량을 각각 20.0, 27.5, 32.5, 40.0 mL/min로 변화시켜가며 학습시킨 결과를 Fig. 9에 나타내었다. 학습은 자승평균오차(mean square error) 10^{-3} 까지 반복하였다. 활성화 과전압에 따른 손실과 저항 과전압에 따른 손실은 정확히 학습되었고, 물질전달에 따른 손실도 비교적 정확히 학습되었다. 수소유량이 40 mL/min인 경우에만 0.8 mA/cm^2 이상의 높은 전류밀도에서만 약간의 오차가 발생하였을 뿐 전체적인 자승평균오차는 10^{-2} 미만으로 학습이 잘 진행되었음을

보이고 있다.

Fig. 10은 단위전지의 수소유량이 각각 15, 25, 30, 35, 45 mL/min인 경우에 대하여, 앞에서 학습된 신경망으로 예측한 결과를 실험결과와 비교한 것이다. 수소유량이 25, 30, 35 mL/min인 경우는 비교적 예측결과와 실험결과가 비슷하지만, 수소유량이 각각 15, 45 mL/min인 경우는 상대적으로 오차가 크게 나타났다. 전체적으로 물질전달저항에 따른 성능저하영역을 제외한 성능곡선은 실험과 거의 일치하며 실제 조업영역인 0.7 V 부근의 저항과전압 지배영역의 예측에는 사용이 가능한 것을 알 수 있다. 학습자료의 영역인 20-40 mL/min 범위 내

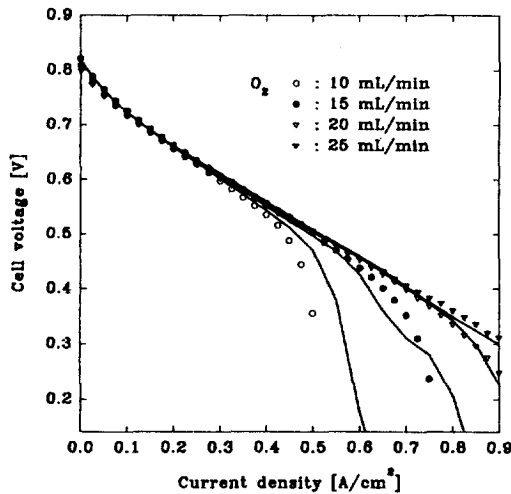


Fig. 12. Estimation of performance curves for various O_2 flow rates.

에서의 예측은 비교적 정확하나 영역 바깥에서의 예측치는 상대적으로 오차가 커짐을 알 수 있다. 학습자료의 영역 내에서는 자승평균오차가 10^{-2} 미만이므로 비교적 잘 맞는다고 할 수 있다.

4-2-2. 산소유량 변화

단위전지의 산소유량을 각각 12.5, 17.5, 22.5 mL/min으로 변화시켜가며 학습시킨 결과를 Fig. 11에 나타내었는데, 모든 자료를 거의 완벽하게 학습함을 확인할 수 있다. 산소유량이 22.5 mL/min인 경우 높은 전류밀도에서 실험의 결과가 일반적인 성능곡선의 경향을 다소 벗어났으나 신경망의 학습결과는 성능곡선의 경향을 유지하였다.

Fig. 12는 앞에서 학습된 신경망으로 예측한 결과와 실험결과를 비교한 것으로, 산소유량은 각각 10, 15, 20, 25 mL/min로 하였다. 전반적으로 예측결과와 실험결과가 유사하게 나타났으나, 산소 유량이 낮은 10 mL/min와 15 mL/min인 경우, 물질전달영역에서 약간의 오차가 발생하였으나 평균오차가 10^{-2} 미만으로 예측치가 실험치를 크게 벗어나지는 않았다. 전반적으로 산소유량 변화에도 물질전달에 따른 손실 영역에서만 약간의 차를 보였을 뿐 활성화 과전압 및 저항 과전압에 따른 손실은 정확히 예측하였다.

4-2-3. 온도 변화

단위전지의 온도를 170, 190, 210°C로 변화시켜가며 학습시킨 결과를 Fig. 13에 나타내었다. 전 범위에 걸쳐 학습자료를 확실하게 재현할 수 있음을 확인할 수 있다. Fig. 14는 이로부터 학습된 신경망을 이용하여 단위전지의 온도가 180, 200°C인 경우의 성능곡선을 예측한

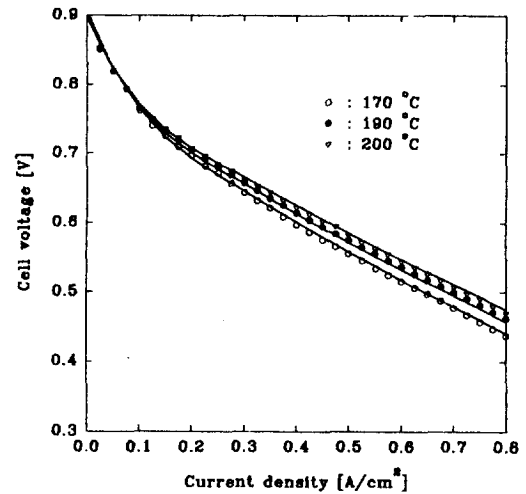


Fig. 13. Training data recalls for operating temperatures.

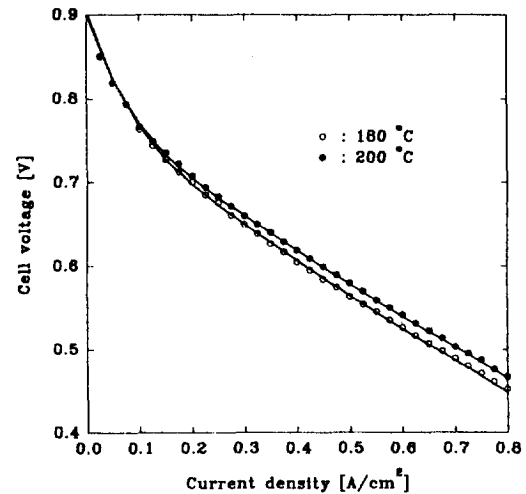


Fig. 14. Estimation of performance curves for operating temperatures.

결과와 실험결과를 비교한 것이다. 단위전지의 온도는 다른 조작변수에 비하여 성능변화에 대하여 영향을 적게 미치고, 성능곡선 자체도 급격한 기울기 변화가 없으므로 다른 변수에 비하여 상대적으로 성능의 예측이 정확하였다.

4-3. 전체 공정의 모사

전체 공정의 모사를 위하여 신경망의 학습된 가중치를 ASPEN PLUS의 USER block에서 받아들여 공정 전체의 변수에 따라 성능을 나타낼 수 있도록 하였다. 실험자료의 학습과 성능예측에 따른 오차가 가장 작은

Table 2. LMS errors for various momentum and training step

		Training step(η)			
		0.1	0.3	0.7	0.9
Momen- tum(α)	0.1	3.5237E-2	1.7621E-2	2.3529E-3	1.6454E-3
	0.3	3.5276E-2	5.5402E-3	1.6897E-3	1.4347E-3
	0.7	3.6195E-2	2.4051E-3	4.9505E-4	4.3542E-4
	0.9	4.2547E-3	4.5955E-4	3.4084E-4	1.6931E-1

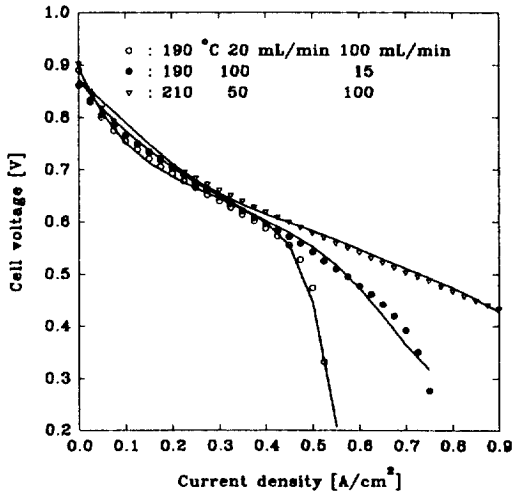


Fig. 15. Performance curves of simulations.

학습단계상수와 모멘텀은 각각 0.7, 0.9이었으며 이러한 결과를 Table 2에 나타내었다. 이를 사용하여 학습된 신경망의 성능곡선은 Fig. 15와 같다. 여기서는 학습범위를 크게 하기 위하여 비교적 극단적인 세 가지의 상황을 설정하였는데, 첫번째의 경우는 단위전지의 온도를 190°C로 하고, 수소유량과 산소유량은 각각 20과 100 mL/min로 하였다. 두번째의 경우는 단위전지의 온도를 190°C로 하고, 수소유량과 산소유량은 각각 100과 15 mL/min로 하였으며, 세번째의 경우는 단위전지의 온도를 210°C로 하고, 수소유량과 산소유량은 각각 50과 100 mL/min로 하였다. 학습자료는 단위전지 규모의 실험결과이므로 적층할 때 발생할 수 있는 성능저하는 무시하였으며, 전극면적이 1 m²인 14단의 적층전지로 가정하여 계산하였다. 이 때의 전체 학습평균오차는 10⁻³ 미만으로 사용자 모델로 사용하기에 충분한 신뢰성을 주고 있음을 확인할 수 있었다.

연료전지 시스템에 있어서 개질기의 조업 변수 중에서 수증기/탄화수소 비율(S/C ratio)의 변화에 따른 연료전지의 출력 변화의 모사결과는 Fig. 16과 같다. 수증기/탄화수소 비율을 1.0으로부터 4.0까지 변화시켜본

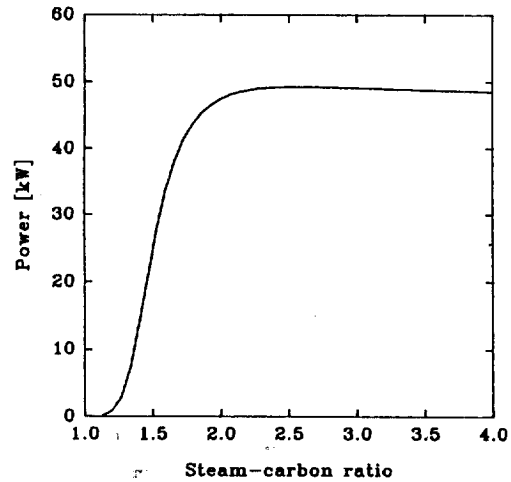


Fig. 16. Effect of S/C ratio on FC power generation.

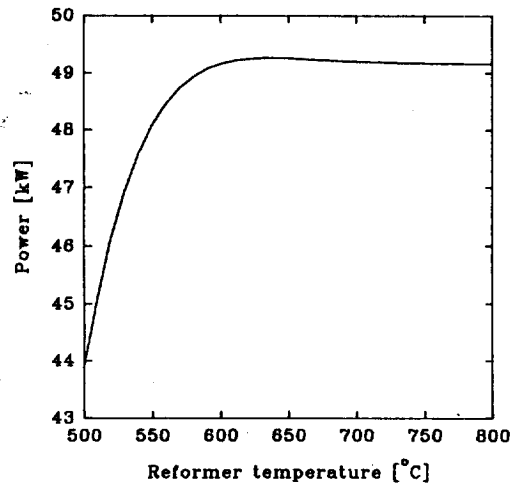


Fig. 17. Effect of reformer temperature on FC power generation.

경우, 초기에는 수증기/탄화수소의 비율이 2.0까지 증가함에 따라 연료전지의 출력은 급격히 증가하였으며 수증기/탄화수소 비율이 2.6일 때 최대치를 나타낸 이후 서서히 감소하였다. 따라서 수증기/탄화수소의 비율은 2.0 이상이 되어야 함을 확인할 수 있었다.

개질기의 온도 및 압력에 따른 연료전지의 출력 변화를 Fig. 17과 18에 나타내었다. 각각의 경우 600°C, 2.7 atm에서 최대의 출력을 보였으나, 압력은 1 atm에서의 출력이 약 49.18 kW이고 2.7 atm에서는 약 49.25 kW로 압력증가에 따른 출력증가는 무시할 정도로 미약하다. 반면 온도 증가에 따른 출력변화는 600°C까지 급격하여

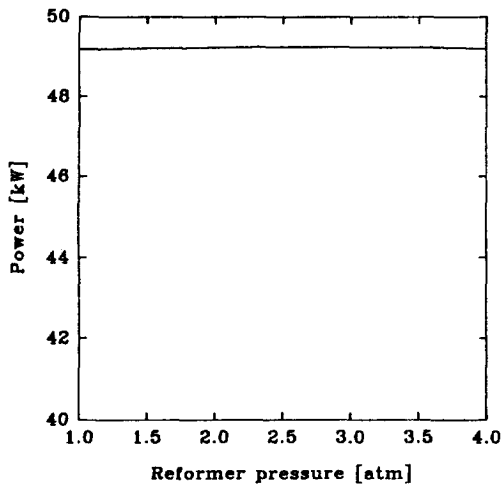


Fig. 18. Effect of reformer pressure on FC power generation.

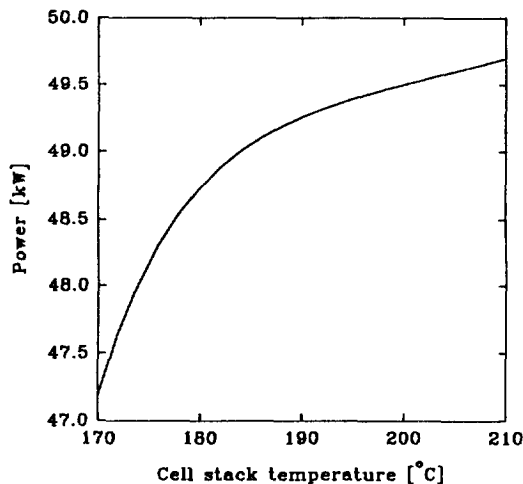


Fig. 19. Effect of FC temperature on power generation.

약 5 kW/100°C의 기울기를 가지고 그 이후는 포화됨을 보이고 있다. 따라서 개질기를 600°C, 1 atm 정도에서 수증기/탄화수소비를 2.0 이상으로 하여 조작하면 높은 출력을 얻을 수 있음을 알 수 있다.

연료전지 본체의 조업변수 중 출력에 대한 온도의 영향을 Fig. 19에 나타내었다. 출력의 증가에 대한 기울기는 190°C 전에서 급하고 그 이후에는 둔화하였으므로, 현재 운전되고 있는 연료전지 본체의 조업온도는 190°C 부근에서 성능의 변화가 급격함을 알 수 있다[1-4, 18, 20]. 따라서 운전온도는 190°C 부근에서의 유지가 유리하다고 판단된다. 반응온도가 더 증가될 경우는

성능의 향상보다는 고농도 인산에 의한 고온에서의 재료 부식 문제가 더 심각해지기 때문이다.

이상의 결과는 실제 조업변수의 영향이 수증기/탄화수소의 비>개질기의 온도>적층전지의 온도>개질기의 압력 순으로 감소하고 있음을 보이고 있다.

이로부터 ASPEN PLUS의 사용자 모델로 신경회로망을 구성한 것은 성공적이었으며, 이는 다른 형태의 연료전지 공정에도 응용이 가능하다는 것을 제시한다.

5. 결 론

인산형 연료전지의 단위전지 실험자료를 바탕으로 연료전지 공정에 대한 오류역전과 신경망 모델을 구성하였고 이를 ASPEN PLUS의 단위공정으로 도입하여 연료전지 전체공정에 대한 모사를 실시한 결과 다음과 같은 결론을 얻었다.

(1) 3개의 층으로 구성된 오류역전과 신경망은 학습 단계상수 η 와 모멘텀 α 가 각각 0.7 및 0.9인 경우 단위전지의 성능곡선을 가장 정확히 학습하였으며, 자승평균오차는 3.4084×10^{-4} 이었다.

(2) 신경망모델은 수소 및 산소의 유량, 온도의 변화에 따른 성능곡선의 변화를 정확히 예측하였으며, 이 경우 최대오차는 5% 미만이었다.

(3) 연료전지 전체공정의 모사 결과, 조업변수의 영향은 수증기/탄화수소의 비>개질기의 온도>적층전지의 온도>개질기의 압력 순으로 감소하였다.

사용기호

S/C : steam/carbon ratio [-]

w : weight [-]

x : input signal [-]

y : neuron output [-]

그리스 문자

α : training momentum constant [-]

δ : error between desired output and calculated output [-]

η : training step constant [-]

하첨자

i, j, k : node order

p, q, r : layer order

참고문헌

1. Bockris, J.O'M. and Srinivasan, S.: "Fuel Cells :

- Their Electrochemistry", McGraw-Hill Inc., NY (1969).
2. Berger, C.: "Handbook of Fuel Cell Technology", Prentice-Hall Inc., NJ(1968).
3. McDougall, S.: "Fuel Cells", John Wiley & Sons, NY(1976).
4. 서정원, 김성준, 설용건, 이태희: 에너지공학, 2(1), 75(1993).
5. Wasserman, P. D.: "Neural Computing(Theory and Practice)", Van Nostrand Reinhold, NY(1989).
6. Khanna, T.: "Foundations of Neural Networks", Addison-Wesley, NY(1990).
7. Caudill, M. and Butler, C.: "Understanding Neural Network(computer explorations), MIT Press(1992).
8. Cho, S. B. and Kim, J. H.: "International Joint Conference Neural Networks", San Diego, Vol. I, 345 (1990).
9. Kamimura, R.: "International Joint Conference Neural Networks", San Diego, Vol. I, 201(1990).
10. 송정준: 박사학위논문, 한국과학기술원, 대전(1993).
11. Ungar, L. H., Powell, B. A. and Kamens, S. N.: *Computers Chem. Engng*, 14, 561(1990).
12. Bhat, N. and McAvoy, T. J.: *Computers Chem. Engng*, 14, 573(1990).
13. Ydstie, B. E.: *Computers Chem. Engng*, 14, 583 (1990).
14. Psychogios, D. C. and Ungar, L. H.: *Ind. Eng. Chem. Res.*, 30, 2564(1991).
15. Widrow, B. and Stearns, S.: "Adaptive Signal Processing", Prentice-hall, Englewood cliffs, NJ(1985).
16. Leonard, J. A. and Kramer, M. A.: *Computers Chem. Engng*, 14, 337(1990).
17. Rumelhart, D. E., Hilton, G. E. and Williams, R. J.: "Parallel Distributed Processing", Cambridge, MA (1986).
18. 노용우: 박사학위논문, 연세대학교, 서울(1991).
19. Jalan, V. M. and Bushnell, C. L.: U. S. Patent 4,136, 059.
20. 이승훈: 석사학위논문, 연세대학교, 서울(1991).
21. 서동우: 석사학위논문, 연세대학교, 서울(1993).