

# 오류역전파 신경망을 이용한 인산형 연료전지 공정의 전산모사

이원재, \*김성준, 설용건, 이태희  
연세대학교 공과대학 화학공학과

## A Simulation Study of Phosphoric Acid Fuel Cell Process Using Back-propagation Neural Network

Won-Jae Lee, \*Sung-Joon Kim, Yong-Gun Shul and Tae-Hee Lee  
Dept. of Chemical Engineering, Yonsei University

### 요 약

오류역전파 신경망을 인산형 연료전지의 조업변수인 산소 및 수소 유량, 작동온도에 대하여 학습시켜 연료전지 모델을 구성하였다. 또한 구성된 모델을 이용하여 다양한 조업조건에서의 단위전지 성능을 예측하여 이를 실험결과와 비교하였으며, 학습된 신경망을 ASPEN PLUS의 단위공정으로 도입하여 50kW 출력의 연료전지 공정을 구성한 후 조업변수에 대한 영향을 살펴보았다.

3개의 층으로 구성된 오류역전파 신경망은 학습단계상수와 모멘텀이 각각 0.7 및 0.9인 경우 단위전지 성능곡선을 가장 정확히 학습하였으며, 이에 의하여 구성된 신경망 모델은 수소 및 산소의 유량, 온도의 변화에 따른 단위전지 성능곡선의 변화를 정확히 예측하였다.

연료전지 전체공정의 모사에서는 개질기의 경우 600°C의 상압에서 수증기/탄화수소 비율이 2.6일 때, 연료전지의 경우 작동온도가 190~200°C일 때 연료전지의 출력이 최대값을 나타내었으며, 단위전지의 전기화학적 효율은 약 45%, 수소이용률은 약 61%, 발전시스템 전체의 효율은 18%이었다.

### 1. 서론

연료전지에 있어서 단위전지의 성능이 전체 공정의 성능을 좌우하게 되며, 이에 대한 이해와 다양한 조업조건에서의 성능 예측이 중요하다. 그러나 연료전지 공정의 성능은 전극제조과정과 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 현재 수많은 분야에서 응용되고 있으며, 특히 화학공학에 있어서는 공정의 모델링, 비선형공정의 예측제어, 공정의 이상진단, 최적화 등에 적용하기 위한 연구가 활발히 진행되고 있다. 그 중 오류역전파 신경망은 입력자료의 규칙을 학습에 의하여 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.

본 연구에서는 오류역전파 신경망으로 연료전지 모델을 구성하고 다양한 조업조건에서의 단위전지 성능을 예측하며 이를 실험결과와 비교하여 신경망 모델의 적용가능성을 검토하고자 한다. 또한 단위전지 규모의 실험자료로 학습된 신경망을 ASPEN PLUS의 단위공정으로 도입하여 전체 연료전지 공정에 대한 모사를 수행하고자 한다.

## 2. 연료전지 공정

인산형 연료전지 발전시스템은 연료처리장치, 연료전지본체 및 전력변환장치 등으로 구성되어 있다. 연료처리장치는 연료로부터 수소와 일산화탄소를 제조하는 개질기, 그리고 일산화탄소를 이산화탄소로 만드는 일산화탄소 전환기 등으로 이루어진다. 연료전지본체는 연료전극, 산화전극 및 이온전도체인 전해액을 다공성 재질에 흡수시킨 전해질 상으로 이루어진 단위전지를 적층한 집합전지(stack)로 구성된다. 집합전지는 연료순환장치와 반응열을 제거하여 일정한 온도를 유지하기 위한 냉각장치를 포함하고 있다. 본체에서 발생된 직류는 전력변환장치에 의하여 교류로 변화시킨다. Fig. 1은 이러한 연료전지 공정을 나타낸 것이다.

## 3. 신경망 이론

신경망은 들어오는 모든 입력신호를 가중치(weight)와 곱하여 더한 후 이를 활성화 함수(activation function)에 의하여 처리한 후 다음 층의 각 노드로 신호를 전달하게 된다.

단일층 신경망의 경우 학습에 따른 제한이 있으므로 다층의 신경망을 구성하여 이 문제를 해결하게 된다. 다층 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(hidden layer)으로 구분된다. 각 층의 노드들은 노드 사이의 관계를 수치적으로 표현한 가중치로 서로 연결되어 있다.

오류역전파 신경망은 일반화된 델타법칙을 이용하여 신경망의 출력을 얻기 위한 순차진행(feed-forward)과 가중치 변화를 위한 오류역진행(error-back-propagation)을 반복적으로 수행함으로써 각 노드간의 가중치를 얻게 된다. 일반적인 오류역전파 신경망의 학습법칙은 적용범위가 넓은 반면 학습속도가 느리므로 학습속도의 개선을 위하여 다음과 같은 가중치 변화방법이 제안되었다.

$$\Delta w_{p_q}(new) = \eta \delta_{p_q} y_{q_i} + \alpha \Delta w_{p_q}(old)$$

이 방법의 가중치 변화는 앞서의 반복에서 계산된 가중치 변화를 부가적으로 더하여 줌으로써 변화의 경향을 유지하고 수렴속도를 증가시킨다.

이와 같은 학습법칙을 구현하기 위하여는 상수 및 가중치의 초기치 설정이 필요한데 가중치의 경우 충분히 작은 값을 무작위로 설정한다. 만약 가중치의 초기 설

정값이 모든 노드에 대하여 같거나 큰 값일 경우 학습이 되지 않을 수 있다. 모멘텀  $\alpha$ 는 0.9 근처의 값으로 설정하며, 학습 단계상수  $\eta$ 는 0에서 1 사이의 값으로 설정하고 학습이 진행되면 감소시키는 것이 일반적이다. 이와 같은 상수는 학습대상에 따라 경험적으로 결정한다. Fig. 2는 다층으로 구성된 오류역전파 신경망의 구조와 원리를 나타낸 것이다.

#### 4. 실험방법 및 모사방법

##### 4.1 단위전지

백금담체로는 카본블랙을 사용하였고 콜로이드 방법으로 10wt.% 담지시켜 촉매 분말을 제조하였다. 제조한 분말은 발수제 및 결합제 역할을 하는 테프론을 첨가하여 반죽형태로 만들어 탄소종이에 연신하였다. 이를 300℃ 수소 분위기에서 소결하였고, 350℃의 10kg/cm<sup>2</sup> 조건에서 고온압착한 후 절단하여 전극으로 사용하였다.

다공성 전해질 지지체인 매트릭스는 SiC Fiber와 SiC 분말을 600℃의 공기 분위기에서 5시간 동안 가열하여 SiC 중의 유기물과 수분을 제거하고, 1:1의 비율로 섞어 물을 넣고 계면활성제를 넣은 후 SiC에 대하여 25wt.%의 테프론을 첨가하였다.

이를 교반기로 30분간 교반하고, 1wt.%의 polyethylene oxide를 물에 녹여 넣은 후 30분간 재교반하였다. 현탁상태의 용액을 100℃에서 교반하면서 남아있는 수분을 제거하고, 입자를 잘게 부순 후 isopropyl alcohol과 증류수를 1:1로 혼합한 용액을 넣고, 연신하여 0.2mm 두께의 매트릭스 박막을 제조하였다.

제조한 박막을 공기분위기에서 300℃, 1시간 동안 열처리하여 남아있는 polyethylene oxide를 제거하였고, 350℃의 10kg/cm<sup>2</sup> 조건에서 10분간 고온압착하여 매트

릭스의 구조를 강화한 후 서서히 식혀 매트릭스를 완성하였다.

제조한 전극과 매트릭스로 단위전지를 구성하였으며 테프론 sheet로 밀봉한 후 분위기로에서 온도 및 유량을 변화시켜가며 성능을 측정하였다.

##### 4.2 신경망 학습 및 전체공정 모사

신경망은 일반화된 델타법칙을 사용한 오류역전파 신경망으로 구성하였고, 자승평균 오차 0.001까지 반복 학습하였다. 연료전지 전체공정 모사를 위하여 각각의 단위공정은 ASPEN PLUS에서 적절한 모델을 취하였으며, 연료전지본체는 구성된 신경망을 단위전지 실험자료로 학습시켜 ASPEN PLUS의 USER 모델로 도입하였다. 구성된 전체공정에 대하여 SENSITIVITY 기능을 이용하여 조업변수의 영향을 살펴보았다.

#### 5. 결과 및 논의

##### 5.1 단위전지 성능곡선 및 조업변수의 학습

신경망 구조를 결정하기 위하여 실험결과와 알맞은 성능곡선을 선정하고 층을 달리하여 학습시켰다. 반복작업에 의하여 신경망 구조가 성능곡선의 경향을 적절히 나타낼 수 있음을 관찰하였다.

수소 유량 변화에 대한 학습 결과, 활성화 과전압, 저항 과전압, 그리고 물질전달 저항에 따른 손실을 정확히 학습함을 확인하였으며, 학습된 신경망으로 예측된 결과가 비교적 정확함을 볼 수 있었다. 산소 유량 변화에 따른 경우도 모든 자료를 완벽히 학습하였으며, 예측치도 실험치를 크게 벗어나지 않았다.

온도에 따른 성능변화는 전 범위에 걸쳐 학습자료를 재현할 수 있었으며, 이에 대한 예측결과는 다른 조작변수에 비하여

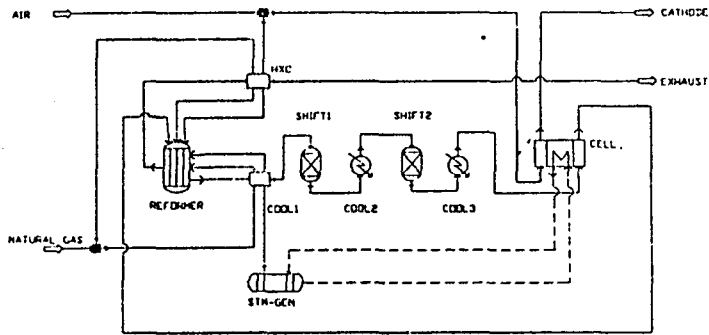


Fig. 1. PAFC power generation process.

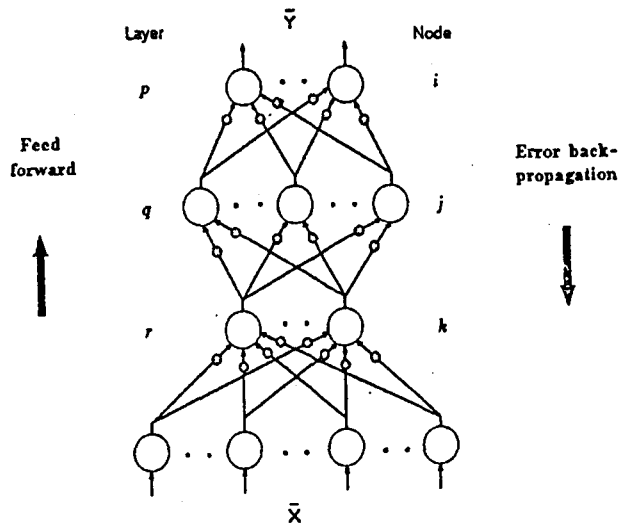


Fig. 2. Multi-layer back propagation network.

성능변화가 적고 급격한 기율기의 변화가 없으므로 상대적으로 예측이 정확하였다.

## 5.2 전체공정의 모사

전체공정의 모사를 위하여 신경망의 학습된 가중치를 ASPEN PLUS의 USER BLOCK에서 받아들여 공정 전체의 변수에 따라 성능을 나타낼 수 있도록 하였다. 학습된 신경망의 성능곡선을 Fig. 3에 나타내었다.

개질기의 수증기/탄화수소 비율의 변화에 따른 연료전지의 출력변화는 Fig. 4와 같으며, 이 비율이 증가함에 따라 연료전지의 출력이 초기에 급격히 증가하다가 2.6 정도에서 최대값을 나타내고 그 이상에서는 서서히 감소함을 볼 수 있다. 개질기의 온도와 압력에 따른 연료전지의 출력변화를 모사한 결과, 적절한 조업조건은 600°C, 1 atm 정도임을 알 수 있었다.

또한 연료전지 본체의 조업변수 중 온도에 따른 영향을 고찰한 결과, 출력의 증가가 190°C 부근에서 둔화됨을 알 수 있었다.

이상과 같은 조업변수의 영향을 고려하여 조업변수를 조절한 결과, 전기화학적 효율은 약 45%, 수소 이용률은 약 61%, 발전 시스템 전체의 효율은 18% 정도로 계산되었다.

## 6. 결론

3개의 층으로 구성된 오류역전파 신경망은 학습단계상수와 모멘텀이 각각 0.7 및 0.9인 경우 단위전지의 성능곡선을 가장 정확히 학습하였으며, 이로부터 구성된 신경망 모델은 수소 및 산소의 유량, 온도의 변화에 따른 성능곡선의 변화를 정확히 예측하였다.

연료전지 전체공정을 모사한 결과, 개질기의 경우 600°C, 상압에서 수증기/탄화

수소의 비율이 2.6일 때, 연료전지의 작동 온도가 190~200°C일 때 최대 출력을 나타내었다.

## 참고문헌

1. Wasserman, P.D.: "Neural computing (Theory and Practice)," Van Nostrand Reinhold, N.Y. (1989).
2. Khanna, T.: "Foundations of neural networks," Addison-Wesley, N.Y.(1990).
3. Caudill, M. and Butler, C.: "Understanding Neural Network (Computer Explorations)," MIT Press, Mass. (1992).
4. Leonard, J.A. and Stearns, S.: *Computers Chem. Engng*, 14, 337 (1990).
5. Rumelhart, D.E., Hilton, G.E. and Williams, R.J.: "Parallel distributed processing," MIT, Cambridge, Mass. (1986).

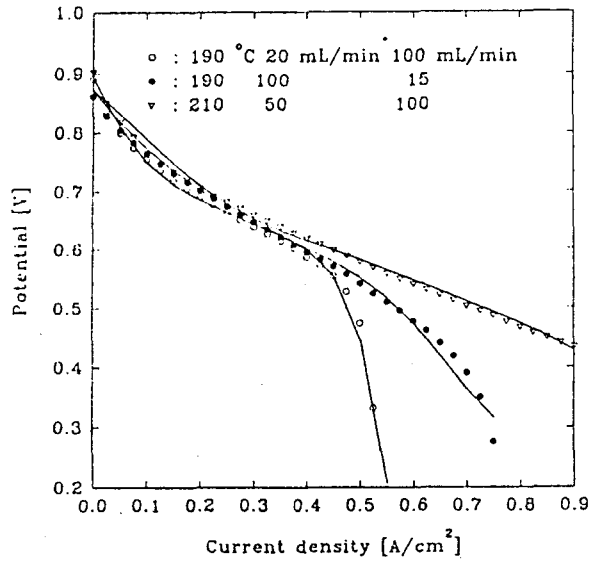


Fig. 3. Performance curves for simulation.

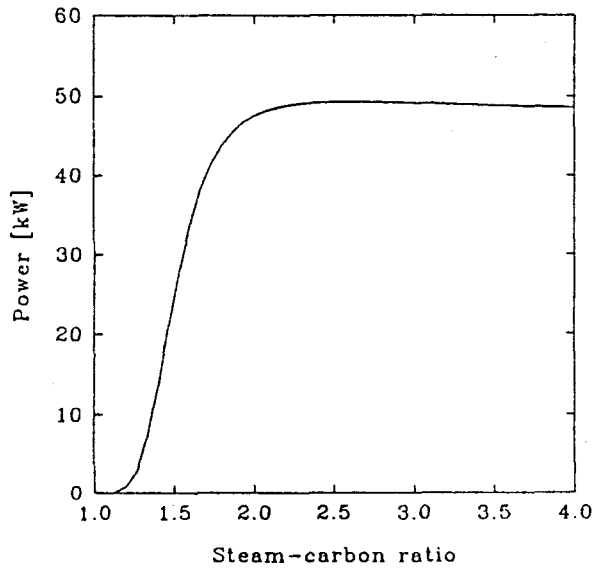


Fig. 4. Effect of S/C ratio on fuel cell power generation.