

신경망 모델에 의한 고분자 전해질 연료전지 시스템 해석

Neural Network Based Fuel Cell Modelling and simulation

이원용, 이상일, 양태현, 김창수

한국에너지기술연구원

1. 서론

최근 고분자 전해질 연료전지를 이용하는 전기자동차와 소형 발전 설비에 대한 연구 개발이 활발히 이루어지고 있다. 자동차와 소형 발전 설비에서 에너지절약, 환경공해와 지구 온난화 문제 등을 해결하기 위해서는 동력원의 성능향상, 대체연료 이용 및 공해물질의 저감기술이 필요하다. 연료전지를 동력원으로 적용할 경우 기존의 내연기관에 비해 에너지 변환 효율을 2배이상 이상 향상시킬 수 있으며 공해 발생도 거의 없는 장점이 있다. 또한 다양한 대체 연료를 사용할 수 있어 석유에너지 절감과 대체 에너지 개발에 기여할 수 있다는 장점이 있다.

선진국의 주요 자동차 제작사와 부품회사들이 2003-2004년에 연료전지 자동차의 상용화의 실현을 위한 연구와 개발에 박차를 가하고 있으며, 소형 연료전지 코제너레이션 시스템도 미국과 일본을 중심으로 상용화 연구가 마무리 단계에 접어들고 있다. 가정용 연료전지에도 필요한 조건이지만 자동차용 연료 전지는 높은 동력밀도와, 낮은 작동온도 그리고 빠른 시동특성 등을 구비하여야 한다. 이 조건에 가장 적합한 것이 고분자 연료전지(Polymer Electrolyte Fuel Cell, PEFC)로 연료전지 자체의 연료 변환 효율은 약 40~60% 정도이며, 부속 설비의 동력 등을 고려할 경우에도 효율이 약 30% 이상이어서 기존의 내연기관에 비해 성능이 우수하다.

국내의 연료전지발전 시스템에 대한 연구는 주로 연료전지 본체 등 요소 기술을 중심으로 이루어지고 있으며, 실제 시스템의 종합 구성과 운전에 필요한 연료전지 전체 설비의 설계 및 해석 연구와 시스템의 운전 제어에 대한 연구는 거의 이루어지지 않고 있다. 연료전지 시스템은 기본적으로 연료전지 본체, 급기설비, 연료공급 설비, 냉각설비, 가습설비와 전력변환 설비로 구성되어 있으며 전체 시스템의 해석을 통해 시스템의 최적 설계와 최적 운전 조건을 예측할 수 있다. 시스템 해석을 위해서는 각 부품, 특히 연료전지 본체의 성능을 나타낼 수 있는 모델식이나 자료가 필요하며 이를 위해 이론적으로 유도된 물리식을 우선적으로 고려할 수 있는데 이와 같은 식들은 가정을 통해 시스템을 단순화시켜 유도하기 때문에 실제 성능에 미치는 모든 운전 조건에 대한 효과를 표현하기가 어렵다. 또한 컴퓨터를 이용한 수치 해석 방법으로 연료전지 본체의 유동장과 전기특성을 해석하는 시도가 이루어지고 있으나 정밀성에 비해 해석을 위한 시간이 많이 소요되는 단점이 있다. 이와 같은 단점을 보완하기 실제 실험자료를 이용하여 유도한 실험식을 사용하는 방법이 있다. 실험식으로는 다항식 형태의 일반적인 회귀식보다는 활성, 저항 등의 분극 특성을 표현할 수 있는 실험식의 상수나 계수를 실험자료를 통해 구하여 사용하고 있으며, 이렇게 구한 실험식은 주어진 운전

조건에서 전류에 따른 전압특성을 매우 정확하게 예측하고 있다[1]. 실제 연료전지의 전압특성은 전류뿐만 아니라 작동온도, 산화제와 연료가스의 압력 및 이용율에 영향을 받으므로 연료전지 시스템을 해석하기 위해서는 이와 같은 공정 상태 변화에 따른 연료전지 특성을 해석할 수 있는 모델식이 필요하다

본 논문에서는 해석적으로 특성을 구하기 어려운 연료전지 본체의 모델식을 신경망(Artificial Neural Network)을 이용한 실험식으로 유도하였으며 이식을 이용하여 급기설비와 냉각설비 등이 포함된 직접 수소사용 50kW급 종합 연료전지 시스템의 성능을 해석하였다. 50kW급 연료전지 시스템은 미국 에너지성이 주도하는 PNGV(Partnership of New Generation Vehicle) 계획의 목표 시스템이다[2].

여기서 사용된 방법은 자동차용 연료전지 시스템의 해석은 물론 가정용 및 분산형 연료전지의 설계 및 해석에 효과적으로 이용될 수 있을 것이다.

2. 본론

2.1 시스템 구성 및 시스템 모델

해석을 위해 사용된 직접 수소 사용 고분자 전해질 연료전지 시스템은 그림 1과 같이 연료전지 스택을 포함하여 급기설비와 냉각설비, 연료 공급설비 그리고 전력변환설비로 구성되어 있다. 전체 효율을 위주로 전체 연료전지 시스템의 성능을 해석하기 위하여 동력이 주로 사용되는 압축기와 펌프를 위주로 부가 동력을 계산하였으며 부하에 따른 전력변환 설비의 효율도 고려하였다. 압축기와 펌프의 특성을 나타내기 위해서는 유량과 압력 동력 관계식은 다음과 같이 무차원 특성식을 사용하였다.

$$\Delta P_r / (\rho N^2 D^2) = F(Q / (N D^3)) \quad (1)$$

$$P_o / (\rho N^3 D^5) = F(Q / (N D^3)) \quad (2)$$

여기서 ΔP_r 은 압축기나 펌프 입출구 압력차이며 ρ 는 밀도 N 은 회전수, D 는 회전익의 직경, Q 는 유량, P_o 는 동력소모량이다. 특성식으로는 다항식을 사용하였으며 압축기를 위해서는 제작사에서 주어진 실험자료를 바탕으로 유도하였으며 펌프를 위해서는 실제 실험을 통해 구한 자료를 이용하였다[2].

전력변환기 역시 실험 자료를 바탕으로 입력에 대한 동력 자료와 손실을 산출하여 사용하였다.

$$P_{o, out, conv} = F(I, V) \quad (3)$$

$$P_{o, loss, conv} = P_{o, stack} - P_{o, out, conv} \quad (4)$$

여기서 $P_{o, out, conv}$ 는 전력변환기의 출력이며 연료전지 출력단의 전류, I 와 전압, V 의 함수로 결정된다. 전력변환기의 손실($P_{o, loss, conv}$)은 연료전지 출력($P_{o, stack}$)과 전력변환기 출력과의 차로

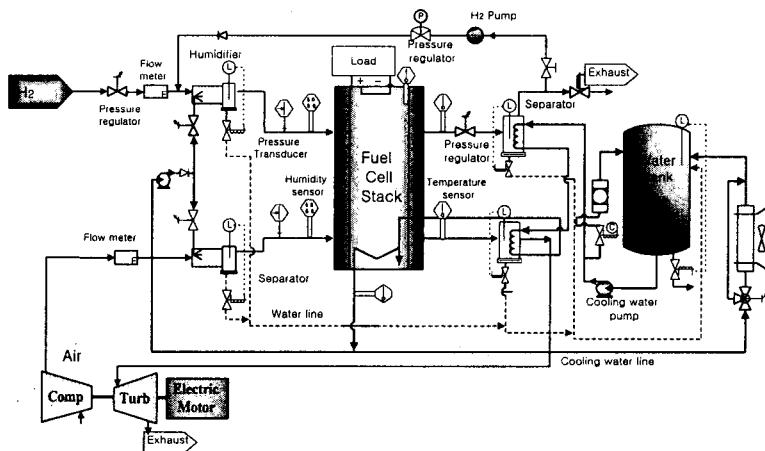


그림 1 고분자 전해질 연료전지 시스템

구하였다. 기타 냉각장치에 추가되는 냉각 송풍기와 가습 등을 위한 보조 펌프 등의 동력은 상대적으로 큰값이 아니므로 일정한 값으로 가정하였다.

2.2 신경망 모델식

인간의 인식 및 판단 능력을 좌우하는 뇌의 기능을 컴퓨터 등을 이용하여 실현시키려는 것이 인공지능 혹은 신경망으로 연속적인 비선형특성을 예측하는데 유용하게 사용되고 있다.

신경회로망은 병렬, 분산, 정보처리 구조를 가지며, 이 구조는 가중연결(Weighted connection)을 통해 많은 처리요소(Processing element)들이 상호 연결되어있다. 신경회로망에서 처리요소는 뉴우런(Neuron)이라 불린다.

i 번째 뉴우런에 대한 출력 \hat{Y}_i 는 다음과 같이 표현된다.

$$\hat{Y}_i = F \left(\sum_{j=1}^n w_{ij} X_j + b_i \right) \quad (5)$$

여기서, w_{ij} 는 i 번째 와 j 번째 뉴우런 사이의 연결 가중치이고, X_j 는 j 번째 입력, b_i 는 바이어스(bias)값이다. 전체 출력 \hat{Y}_i 와 입력 V_i 의 관계는 비선형, 연속, 미분 함수 특성을 갖는 활성화 함수(Activation function, Transfer function) F 에 의해 정해진다. 가장 간단한 예는 선형 유닛 활성화 함수로 다음과 같이 선형함수이다.

$$\widehat{Y}_i = f(V_i) = \omega X_i + b \quad (6)$$

자주 사용되는 함수 구조는 시그모이드 특성(sigmoid characteristic)으로 다음과 같이 표현된다.

$$\widehat{Y}_i = f(X_i) = \frac{1}{1 + e^{-\omega X_i + b}} \quad (7)$$

신경회로망에는 전향(Feedforward)모델과 귀환(Feedback)모델로 구분 될 수 있는데 본 연구에서는 전향모델이 사용되었으며, 그림 2와 같이 계층적으로 뉴런이 나열된다. 이런 신경망 모델을 흔히 다층 퍼셉트론(Perceptron)이라 한다. 각각의 입력은 입력계층에 적용되고, 출력은 출력계층으로부터 모아지게 되는데, 일반적으로 입력계층, 은닉(Hidden)계층, 출력계층으로 구성된 3계층 전향 신경회로망이 사용된다.

본 논문에서는 식(6)을 첫 번째 은닉층에 식(7)을 두 번째 은닉층에 사용하여 2개의 은닉층을 갖는 다단 신경망을 채용하였다.

신경망은 학습을 통해 계산된 연결 가중치를 사용함으로써 임의의 비선형 함수를 만들어 낼 수 있다. 본 연구에서는 신경망 학습을 위해 Levenburg-Marquardt 알고리즘을 사용하였다. 학습 과정에서 입력값들과 원하는 출력값들을 학습자료로 하여 주어진 신경망의 연결 가중치(weight)와 바이어스(bias)가 결정된다. 신경망을 학습할 때 최적화기준은 실제 출력과 신경망을 통한 예측 출력과의 차인 오차를 최소화시키는 것으로 목적함수로 평균자승 오차함수를 사용하였다.

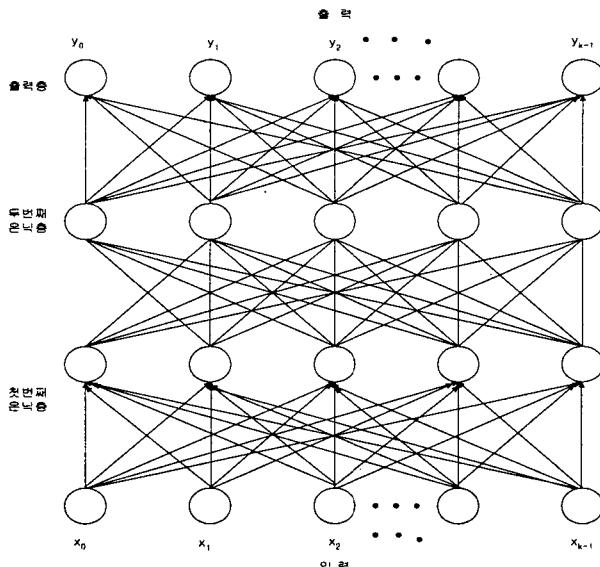


그림 2 다층 퍼셉트론 신경망 구조

2.3 시스템 해석

연료전지 시스템의 스택 출력과 부가 동력을 고려한 연료전지 시스템의 순동력(Net power), 연료전지 본체 효율, 그리고 시스템 효율은 각각 다음 식으로 계산하였다.

$$P_{o_system} = P_{o_stack} - P_{o_comp} - P_{o_pump} - P_{o_loss,conv} - P_{o_acc} \quad (8)$$

$$\eta_{stack} = \frac{P_{o_stack}}{H_{input}*LHV} \quad (9)$$

$$\eta_{system} = \frac{P_{o_system}}{H_{input}*LHV} \quad (10)$$

여기서 P_o 는 동력을, 하첨자는 각 부품을 나타내며, acc 는 기타 부속 설비를 나타낸다. 또한 η 는 효율을 H_{input} 수소공급량을 그리고 LHV는 수소의 저위 발열량을 각각 나타낸다.

그림 3은 신경망으로 연료전지의 전압 전류 특성을 예측한 예를 나타내고 있다. 그림 3에서 알 수 있는 바와 같이 실제값과 정확하게 일치하는 것을 알 수 있다. 신경망 학습을 위해서 실제값과 목표값의 차인 오차의 평균 자승 오차의 합이 0.0001이하가 되도록 하였다. 그림 4는 스택, 압축기/팽창기, 냉각시스템, 전력변환기 등으로 구성된 50kW급 연료전지 시스템의 동력과 효율을 해석한 예이다. 여기서 사용한 압축기와 터빈의 성능은 미국 PNGV 계획에 의해 50KW급 연료전지 시스템을 위하여 개발되고 있는 고효율 압축기 특성을 이용하였다. 펌프와 전력변환기 등의 특성은 에너지기술연구원에 설치된 10KW급 연료전지 실험장치에 구한 특성식을 용량에 맞게 수정하여 사용하였다. 그림 4에서 알 수 있는 바와 같이 각기 다른 3가지 압력 조건에 대하여 연료전지 종합시스템의 성능을 해석하였다. 공기 출구부에서 터빈에 의해 배출되는 공기 에너지를 회수하고 있지만 그림 3의 스택 성능으로는 가압을 위해 사용되는 압축기의 동력에 의해 전체 시스템의 효율이 크게 상승하지 않는 것을 알 수 있다. 연료전지 시스템의 성능은 사용되는 부품의 운전 성능에 따라 달라질 수 있으며 이와 같은 해석을 통하여 주어진 연료전지 용량과 특성에 따른 최적의 설계와 운전 조건을 도출할 수 있을 것이다.

3. 결 론

연료전지 종합시스템을 설계하고 이론적으로 해석하기 위해서는 연료전지에 대한 정확한 모델식이 필요하다. 이론적으로 유도된 물리적 방정식은 간이화된 가정에 의해 실제적인 특성을 나타내기가 어려우므로 전체 시스템 해석을 위해서는 실험식을 사용하는 것이 바람직하다. 연료전지의 특성은 온도, 압력 등의 운영조건과 스택내부의 유동채널과 전극 전해질 합성체의 특성에 따라 달라질 수 있으며 이들 조건에 따른 특성을 기준의 정형화된 실험식을 통하여 표현하기가 쉽지 않다. 따라서 본 논문에서는 주어진 연료전지의 운전조건에 대한 특성을 표현할 수 방법으로 비선형 시스템의 예측에 효과적인 신경망을 사용하였다. 연료전지

의 부속설비로 사용되는 압축기, 펌프 등은 유량, 압력, 회전수를 이용한 특성방정식을 이용하였다. 주요 부속설비의 특성식과 연료전지의 신경망 모델식을 이용하여 연료전지, 급기설비, 냉각설비, 연료공급설비, 전력변환설비 등으로 구성된 자동차용 직접 수소이용 연료전지 시스템의 동력과 시스템 효율을 구하였다. 본 연구에서 제안한 연료전지시스템 해석방법을 이용할 경우 연료전지 시스템의 설계와 운전을 위한 기본자료 산출에 도움이 될 수 있을 것이다.

참고 문헌

- [1] G. Squadrito, etc, "An empirical equation for polymer electrolyte fuel cell(PEFC) behavior, Journal of Applied Electrochemistry 29: 1499-1455,1999.
- [2] Steven Chalk, "1999 Annual Progress Report for Fuel Cell for Transportation" U.S. DOE, Oct. 1999,

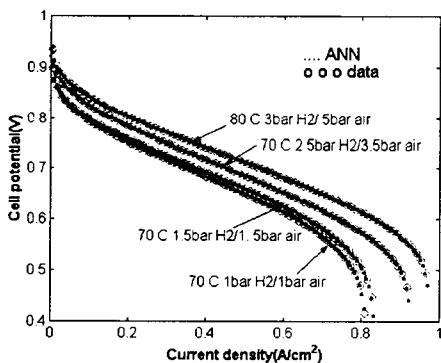


그림 3 신경망 예측 결과

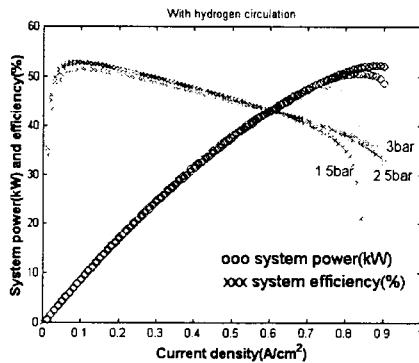


그림 4 시스템 해석 결과