

암모니아 연료 SOFC 스택의 동적 거동 예측을 위한 Hybrid LSTM Data-Driven 모델

잡반티엔¹ · 쿠엔¹ · 이동근^{2†}

¹하노이 베트남 국립대학교 국제학부 공학기술학과, ²한국기계연구원 무탄소발전연구실

A Hybrid LSTM Data-Driven Model for Predicting the Dynamic Behavior of an Ammonia-Fueled Solid Oxide Fuel Cell Stack

VAN-TIEN GIAP¹, THAI-QUYEN QUACH¹, DONGKEUN LEE^{2†}

¹Faculty of Engineering and Technology, International School, Vietnam National University, Hanoi (VNU-IS), 144 Xuan Thuy, Hanoi 100000, Vietnam

²Department of Carbon-free Power Generation, Korea Institute of Machinery & Materials (KIMM), 156, Gajeongbuk-ro, Yuseong-gu, Daejeon, 34103, Korea

[†]Corresponding author :
keun5832@kimm.re.kr

Received 10 June, 2026

Revised 7 July, 2026

Accepted 9 July, 2026

Abstract >> This study proposes a data-driven model based on a long short-term memory (LSTM) neural network for prediction of the dynamic behavior of an ammonia-fueled solid oxide fuel cell (SOFC) stack. An in-house Simulink dynamic model was used as the data source. A four dimensional full grid sweep over the cathode and anode flow factors, temperature, and the inlet ammonia mole fraction produced a time series dataset of 10,000 operating cases. A hybrid LSTM architecture was developed by combining a two layer LSTM branch for the single channel input time series with a fully connected branch for the six constant inputs. The model was trained to simultaneously regress three time series outputs, namely the anode and cathode temperature, and voltage. On a held out test set of 1,500 cases, the model achieved coefficients of determination of 0.974 and 0.975 for the two outlet temperatures and 0.994 for the stack voltage, corresponding to a mean absolute percentage error of about 1.8%. These results demonstrate that a single data-driven surrogate model can faithfully reproduce the dynamic behavior of an SOFC stack.

Key words : Ammonia SOFC(암모니아 고체산화물 연료전지), LSTM(장단기 메모리), Data-driven model(데이터 구동 모델), Dynamic behavior(동적 거동), Simulation dataset(시뮬레이션 데이터)

1. 서론

산업화 이후 가속된 화석연료 사용은 대기 중 이산화탄소 축적과 기후변화 위기를 초래하였으며, 이에 따라 전 세계 주요국은 탄소중립을 정책 목표로 설정하고 무탄소 에너지원으로의 전환을 추진하고 있다. 이러한 흐름 속에서 수소는 단위 질량당 높은 에너지 밀도와 연소 시 이산화탄소를 배출하지 않는 특성으로 인해 미래 핵심 에너지 매체로 주목받고 있으며, 발전·운송·산업 전 분야에서 활용 방안이 활발히 모색되고 있다¹⁾.

그러나 수소는 표준 조건에서 매우 낮은 밀도와 극저온 액화 요건을 가지므로 장거리 운반과 대용량 저장에 본질적인 어려움이 있다. 이러한 한계를 보완하는 수소 캐리어의 한 축으로 암모니아가 부상하고 있다. 암모니아는 분자 내 수소 함량이 17.7 wt%로 높고 상온에 가까운 조건에서 액화가 가능하며, 기존 천연가스 액화·수송 인프라와 유사한 형태로 대량 취급이 가능하다는 장점이 있다¹⁾. 국내에서도 청정 수소 발전입찰 시장의 출범과 함께 암모니아 혼소·전소 발전 기술이 정책적 관심사로 부상하였다.

암모니아는 고온 연료전지인 고체산화물 연료전지(SOFC, Solid Oxide Fuel Cell)에서 직접 연료로 활용될 수 있다. SOFC의 작동 온도(약 650~850°C)에서는 암모니아가 스택 내부 또는 전단의 부분 분해 단계에서 자발적으로 수소와 질소로 분해되며, 분해된 수소가 전기화학 반응에 참여한다²⁾. 이러한 직접 활용 방식은 외부 개질 시스템을 배제함으로써 시스템의 효율과 경제성을 동시에 개선할 수 있다³⁾. SOFC가 갖는 높은 전기효율(스택 효율 약 60% 이상)과 분산발전 가능성은 암모니아 연료 SOFC를 무탄소 분산전원의 유망 기술로 부각시켰다⁴⁾.

분산발전·하이브리드 발전·시스템 통합·전력망 연계 등 실제 응용 환경에서는 정상 운전점에 대한 정적 성능뿐만 아니라 시동, 정지, 부하 추종과 같은 다양한 동적 거동에 대한 정확한 예측 모델이 필수적이다. 이에 따라 SOFC 시스템의 동특성 모델은 시스템 설계, 제어기 튜닝, 운전 안정성 평가의 핵심 도구로 자리잡아 왔

다. 국내외 다수의 연구에서 Matlab/Simulink, Aspen, Ebsilon 등 시뮬레이션 플랫폼을 활용한 SOFC 및 연료전지 시스템의 동특성 모델이 보고되었다^{4~7)}.

그러나 1차원 또는 다차원 물리방정식에 기반한 동특성 모델은 정확성 측면에서 검증된 도구임에도 다음과 같은 실용적 한계를 갖는다. 첫째, 전기화학·열·물질 수지 방정식의 강한 비선형성으로 인해 단일 운전 케이스의 시뮬레이션에도 상당한 계산 시간이 요구된다. 둘째, 이로 인해 제어기·전력관리 시스템과의 실시간 연계가 어려워 실시간 운전 환경에서의 활용이 제한된다. 셋째, 계산량 절감을 위해 축소 차원 또는 lumped 모델을 채택하면 시계열의 정확도가 크게 손상된다⁷⁾. 따라서 광역의 운전조건을 포괄하면서 실시간 추론이 가능한 대안적 모델링 기법의 필요성이 제기되어 왔다.

데이터 구동 모델은 위 한계를 극복할 수 있는 유력한 대안으로 부상하였다. 특히 장단기 기억(LSTM, Long Short-Term Memory) 신경망은 시계열의 장기 의존성을 학습할 수 있는 메모리 셀 구조를 가지므로 동특성 시스템의 시간 영역 모사에 적합하다⁸⁾. 학습이 완료된 LSTM 모델의 추론 계산은 단순한 행렬 연산으로 환원되므로 GPU 또는 임베디드 가속기에 서 실시간 수준의 응답을 제공할 수 있다.

연료전지 분야에 LSTM을 적용한 선행 연구에서는 고분자 전해질막 연료전지(PEMFC, Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell)의 전압 열화 예측, 잔여수명(RUL, Remaining Useful Life) 추정, SOFC 시스템 효율 예측 등에 LSTM 및 CNN-LSTM 계열 신경망을 활용한 사례가 보고되었다^{9~14)}. 그러나 기존 연구와는 다음과 같은 점에서 본 연구가 차별된다. 첫째, 기존 연구의 다수는 PEMFC를 대상으로 하며 암모니아 연료 SOFC의 광역 동특성을 일괄적으로 다룬 사례는 매우 제한적이다. 둘째, 기존 연구의 학습 데이터는 운전조건 범위가 협소하여 실제 시스템의 광역 부하·조성 변동에 일반화되기 어렵다. 셋째, 단일 출력(전압 또는 RUL 지표)에 집중하는 사례가 많으며, 연료극·공기극 출구 온도와 전압을 동시에 회귀하는 다중 출력 예측 사례는 상대적으로 적다.

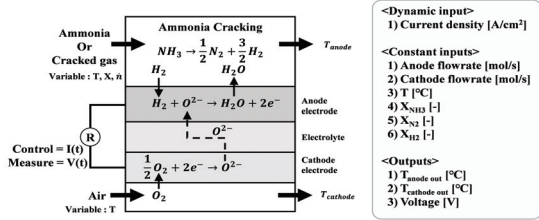


Fig. 1. Input and output configuration of the ammonia-fueled SOFC stack

본 연구에서는 위 한계를 극복하기 위해 다음의 네 가지 기여를 제시한다. 첫째, 자체 개발 Matlab/Simulink 동특성 모델로부터 공기·연료 유량 인자, 온도, 연료극 입구 암모니아 물분율의 4개 운전조건 측에 대한 완전 격자(full grid) sweep을 수행하여 총 10,000개 운전 케이스의 시계열 데이터셋을 구성하였다. 둘째, 1차원 시계열 입력과 6차원 상수 입력을 동시에 처리하는 Hybrid LSTM 구조를 제안하여 광역 운전조건 동특성을 단일 모델로 학습하였다. 셋째, 본 모델은 연료극·공기극 출구 온도와 스택 전압의 3개 출력을 동시에 예측하며, 시험 split에서 전압 R^2 0.994, 두 온도 R^2 0.974 및 0.975의 일치치를 달성하였다. 넷째, 학습된 모델의 추론 비용이 실시간 수준이므로 향후 제어기·전력관리 시스템과의 in-the-loop 연계 기반을 확보하였다.

본 논문의 구성은 다음과 같다. 2장에서는 암모니아 SOFC 시뮬레이션 모델과 광역 운전조건 데이터셋의 구성을 기술한다. 3장에서는 Hybrid LSTM 모델의 구조와 학습 절차를 제시한다. 4장에서는 시험 split에 대한 학습 수렴 거동, 출력별 예측 정확도, 시계열 재현성, 잔차 분포의 물리적 타당성을 분석한다. 5장에서는 본 연구의 결과를 요약하고 향후 연구 방향을 제시한다.

2. 암모니아 SOFC 시뮬레이션 모델 및 데이터 구성

2.1 시스템 구성과 입출력 정의

대상 시스템은 외부 가열로에서 부분 분해된 NH₃ 혼합 가스를 연료극으로, 공기를 공기극으로 공급받

는 평판형 SOFC 스택이다. Fig. 1에 시스템의 입출력 구성을 도식적으로 나타내었다.

입력 변수는 시간에 따라 변화하는 동적 입력 1개와 운전 케이스별로 고정되는 상수 입력 6개로 구성된다. 동적 입력은 스택에 부하되는 전류밀도이며, 상수 입력은 연료극·공기극 입구 몰유량, 스택 온도, 그리고 연료극 입구 가스의 물분율(X_{NH_3} , X_{N_2} , X_{H_2})로 구성된다. 출력 변수는 연료극 출구 온도, 공기극 출구 온도, 스택 전압이며, 모두 시계열로 산출된다. 입출력 변수의 정의와 단위를 Table 1에 정리하였다.

2.2 암모니아 SOFC 동적 모델

본 시뮬레이션 모델은 SOFC 시스템의 동적 거동을 모사하기 위한 본 연구실에서 자체 개발한 모델이다. 모델은 Matlab/Simulink 환경에서 구현되었으며, 스택의 전기화학적 반응식과 1차원 열·물질 수지를 결합한 lumped-parameter 형태로 구성된다. 모델의 상세 수식과 매개변수 동정 절차는 본 연구의 범위를 벗어나므로 본 절에서는 개략적인 구조만 기술하고, 세부 사항은 별도의 선행연구를 인용한다⁴⁾.

본 모델의 정합성은 별도의 단위 셀 및 스택 시험 데이터를 통해 검증되었다. Fig. 2에 750°C에서 사전 분해 가스(cracked NH₃)와 직접 암모니아(direct NH₃) 두 연료 조건에 대한 스택 전압의 시간 응답을 실험값과 비교하여 나타내었다. 시뮬레이션은 두 조건의

Table 1. Definitions and units of the input/output variables of the hybrid LSTM model

Category	Variable (symbol)	Description	Unit
Dynamic input	I(t)	Stack load current density	A/cm ²
	Q _{CAT}	Cathode inlet molar flow rate	mol/s
Constant input	Q _{AN}	Anode inlet molar flow rate	mol/s
	T	Stack temperature	°C
	X _{NH3}	Anode inlet NH ₃ mole fraction	—
	X _{N2}	Anode inlet N ₂ mole fraction	—
	X _{H2}	Anode inlet H ₂ mole fraction	—

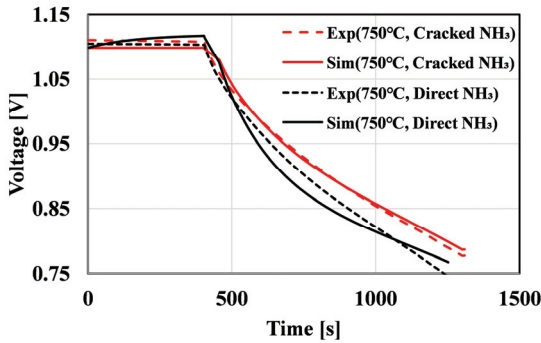


Fig. 2. Validation of ammonia-fueled SOFC model

전압 거동을 시간에 따라 잘 재현하였으며, 전압 기준 결정계수 R^2 는 약 0.98이었다. Fig. 2는 전압 응답에 대한 검증을 제시하며, 동특성 모델의 온도 거동을 포함하여 선행 연구에서 동적으로 검증된바 있다⁴⁾.

본 연구에서는 위 모델을 가상의 데이터 생성기로 활용하여, 단일 실험 장치로는 확보가 어려운 광역 운전조건의 시계열 데이터를 일괄 생성하였다. 시뮬레이션 결과는 시계열의 일관성과 검증된 정합성을 동시에 만족하므로 데이터 구동 모델 학습에 적합한 자료원이라 할 수 있다.

2.3 운전조건 sweep 및 데이터셋 구성

데이터셋은 4개 운전조건 축의 완전 격자 sweep으로 구성하였다. 공기극과 연료극 유량, 스택 온도, 연료극 암모니아 물분율을 대면적 단위셀에서 작동 가능한 범위를 선정하여 운전조건의 경계값으로 활용하였으며, sweep 범위를 Table 2에 정리하였다.

공기극 입구 몰유량은 $1.60 \times 10^{-3} \sim 8.02 \times 10^{-3}$ mol/s 범위에서 등간격으로 변화하며, 연료극 입구 몰유량은 연료극 입구 조성에 따라 $2.69 \times 10^{-4} \sim 1.62 \times 10^{-3}$ mol/s 범위에서 변화한다. 연료극 입구 조성은 암모니아 물분율 X_{NH_3} 만을 독립 변수로 두고, 잔여 분율은 아래 암모니아 분해 화학량론의 식들에 따라 계산하였다.

Table 2. Operating condition sweep ranges and grid

Operating conditions	Symbol	Range	No. of grid
Cathode flow	Q_{CAT}	$1.60 \times 10^{-3} \sim 8.02 \times 10^{-3}$ mol/s	10
Anode flow	Q_{AN}	$2.69 \times 10^{-4} \sim 1.62 \times 10^{-3}$ mol/s	10
Stack temperature	T	650–850°C	10
Anode inlet NH_3 mole fraction	X_{NH_3}	0–1	10
Total operating cases	–	$10 \times 10 \times 10 \times 10$	10,000

$$X_{N_2} = \frac{1 - X_{NH_3}}{4} \quad (1)$$

$$X_{H_2} = \frac{3(1 - X_{NH_3})}{4} \quad (2)$$

4개 축의 격자점 곱은 총 $10 \times 10 \times 10 \times 10 = 10,000$ 개 운전 케이스에 해당한다. 각 케이스에 대해 동일한 시동 프로파일로부터 Simulink 모델을 정지시간 3,600 s까지 가변 시간간격 솔버로 적분한 뒤, 학습 자료의 시간 축을 통일하기 위해 0.1 s 등간격으로 재샘플링

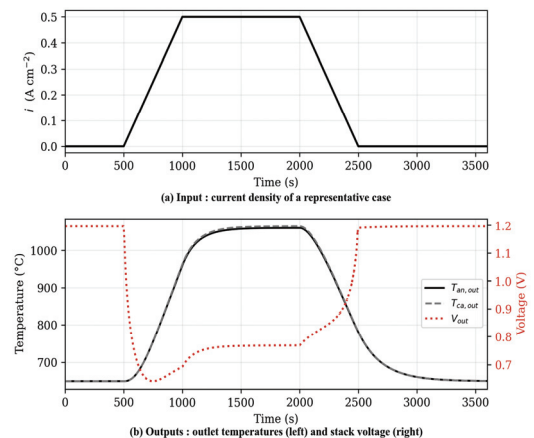


Fig. 3. Input and output time series of a representative case: (a) input current density; (b) three output channels (anode/cathode outlet temperatures and stack voltage)

하여 케이스당 36,001개 시간 스텝(0–3,600 s)의 시계열로 저장하였다.

Fig. 3에 대표 1개 케이스의 입출력 시계열을 도시하였다. (a)는 입력 전류밀도이며, (b)는 그에 대응하는 연료극·공기극 출구 온도와 스택 전압의 원시 시계열이다. 단 하나의 시계열 입력인 전류밀도가 스택의 열·전기화학 동특성을 유발하는 본 데이터셋의 구조를 확인할 수 있다. 본 데이터셋에서 동적 입력인 전류밀도 프로파일은 모든 케이스에 동일한 형상으로 인가하였으며(Fig. 3(a)), 운전조건의 변화는 6개 상수 입력 축의 sweep으로만 부여하였다. 따라서 본 데이터셋은 단일 전류 프로파일에 대한 광역 운전조건의 동적 응답을 포괄한다.

시계열 데이터셋은 학습용 7,000 케이스, 검증용 1,500 케이스, 시험용 1,500 케이스로 무작위 분할하였다. 분할은 케이스 단위로 수행하였으므로, 동일 케이스의 시계열이 두 split에 동시에 포함되는 자료 누설은 발생하지 않는다.

학습에 사용한 시퀀스는 각 케이스의 시계열을 길이 60 스텝, 이동 간격 30 스텝의 슬라이딩 윈도우로 생성하였으며, 윈도우는 케이스 경계를 넘지 않도록 제한하였다. 입력 정규화는 학습 split에서 무작위로 추출한 2,000개 케이스의 통계량을 사용하여 표준 정규화(StandardScaler) 방식으로 적합한 뒤, 학습·검증·시험 split 전체에 동일하게 적용하였다.

본 절에서 정의한 데이터셋은 단일 SOFC 스택의 광역 운전조건에 대한 시계열을 균일한 격자로 포괄한다는 점에서, 기존 연구에서 보고된 협소한 운전조건 범위의 데이터셋과 차별된다.

3. LSTM 기반 데이터 구동 모델

3.1 Hybrid LSTM 구조

2장에서 정의한 데이터셋을 학습 자료로 활용하는 Hybrid LSTM 회귀 모델은 시간에 따라 변화하는 1차원 시계열 입력과 케이스별로 고정되는 6차원 상수 입력을 동시에 처리하여 3개 출력 채널을 동시에

회귀하도록 설계하였다.

본 연구에서 제안하는 모델은 두 갈래의 입력 분기와 하나의 출력 분기로 구성된 hybrid 회귀 모델이다. 시계열 분기는 길이 60 스텝, 1채널의 입력 시퀀스를 두 층의 LSTM 셀(은닉 차원 256)로 처리한다. 각 LSTM 층 다음에는 Dropout(비율 0.2)과 Batch Normalization을 순차적으로 적용하여 과적합 억제와 학습 안정화를 도모하였다. LSTM 커널 및 순환가중치에는 L_1L_2 혼합 정규화($L_1=1\times 10^{-5}$, $L_2=1\times 10^{-4}$)를 부여하였다. 상수 분기는 6차원 상수 입력을 Dense (128, ReLU)+Batch Normalization+Dropout (0.2) 순의 단층으로 사전 변환한 뒤 시계열 분기의 최종 은닉 상태와 연결(concatenate)한다. 결합 이후에는 Dense (128, ReLU)+Dropout+Batch Normalization, Dense (64, ReLU)+Dropout+Batch Normalization의 두 완전연결층을 거쳐 3차원 선형 출력층으로 회귀된다. 완전연결층의 커널에도 동일한 L_1L_2 정규화를 적용하였다. 본 모델의 구조를 Fig. 4에 도시하였으며, 전체 학습 가능 파라미터 수는 851,715개이다.

본 연구는 시계열 입력과 고정 운전조건을 분리 처리하기 위해 hybrid 구조를 채택하였다. 단순 완전연결 모델은 시간 의존적 동특성 재현에 한계가 있으며, 고정 운전조건을 모든 시점에 반복 입력할 경

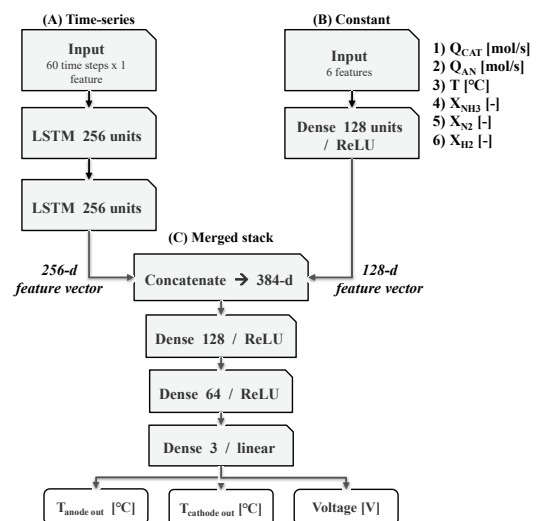


Fig. 4. Hybrid LSTM architecture

우 시변 신호 학습이 저해될 수 있다. 이에 본 구조는 시변 입력과 고정 운전조건을 각각 LSTM 분기와 완전연결 분기에서 인코딩한 뒤 결합하도록 설계하였다.

시계열 분기에는 **bidirectional** 구조와 **attention** 기구를 사용하지 않았다. 본 연구의 데이터는 정상 운전 영역의 동특성을 좌에서 우 방향의 단조로운 시간 흐름으로 담고 있으며, 출력은 입력 시계열의 중점 근방 거동에 의해 지배되는 특성을 가지므로 단방향 LSTM이 모델의 복잡도와 예측 정확도 사이에서 합리적인 절충안을 제공한다고 판단하였다. 완전연결층의 활성화 함수로는 ReLU를 사용하였다.

3.2 정규화 및 시퀀스 구성

입력 시계열 1채널, 상수 입력 6채널, 출력 3채널은 모두 학습 안정성과 손실 함수의 균형을 위해 정규화하였다. 정규화에는 평균 0·표준편차 1 변환을 수행하는 표준 정규화(StandardScaler; scikit-learn)를 사용하였으며, 세 채널군에 대해 각각 별도의 StandardScaler를 적합하였다. 정규화 통계량은 학습 split에서 무작위로 선택한 2,000개 케이스의 데이터를 사용하여 적합하였고, 산출된 평균과 표준편차는 학습·검증·시험 모든 split에 동일하게 적용하였다. 출력 변수 또한 동일 절차로 정규화하였으며, 학습 손실은 정규화 단위에서 계산하였으나 정량 지표는 정규화 단위와 물리 단위를 함께 제시하였다.

시퀀스 입력은 각 케이스의 정규화된 시계열로부터 길이 60 스텝의 윈도우를 30 스텝 간격으로 추출하여 구성하였다(0.1 s 샘플 기준 각각 6 s, 3 s에 해당). 윈도우는 케이스 경계를 넘지 않도록 제한하였으며, 이를 통해 학습·검증·시험 split 간의 시계열 자료 누설 가능성을 차단하였다.

3.3 학습 절차

손실함수로는 출력 3채널의 평균제곱오차(MSE)의 평균을 사용하였으며, 최적화 알고리즘으로는 Adam

을 사용하였다. 초기 학습률은 2×10^{-3} 으로 설정하였고, 학습률 스케줄러로 ReduceLROnPlateau (decay factor 0.5, patience 3 epochs)를 적용하여 검증 손실의 정체 시 학습률을 자동으로 절반으로 감소시켰다. 최대 학습 횟수는 30 epoch, 배치 크기는 2,048로 두었다. 학습의 재현성을 위해 무작위 seed는 42로 고정하였다.

학습은 NVIDIA RTX 6000 Ada (VRAM 48 GB) GPU 1기를 갖춘 워크스테이션(CPU: AMD Threadripper PRO 9965WX 24 core, RAM: 256 GB)에서 수행하였으며, 학습 속도 향상을 위해 XLA JIT 컴파일을 활성화하였다.

3.4 평가 지표

검증·시험 split에 대한 모델의 예측 성능은 출력 채널별로 결정계수 R^2 , MAE, 평균제곱근오차(RMSE), 평균절대백분율오차(MAPE) 4종 지표를 사용하여 정량화하였다.

R^2 는 척도 불변 지표이므로 정규화·물리 단위에서 동일한 값을 가지며, MAE·RMSE·MAPE는 정규화 단위와 물리 단위(°C, V)를 함께 산출하였다. 다만 MAPE는 분모에 실측값이 위치하므로, 정규화로 인해 분모가 0 근방으로 형성되는 출력 변수에 대해서는 정규화 단위에서 비정상적으로 큰 값으로 산출된다. 따라서 상대 오차의 해석은 물리 단위 MAPE를 기준으로 한다. 본 연구에서는 정량 비교의 1차 기준을 척도 불변인 R^2 로 두되, 절대 오차 규모는 물리 단위 MAE·RMSE로, 상대 오차는 물리 단위 MAPE로 계산한다.

4. 결과 및 고찰

4.1 학습 수렴 거동

Fig. 5에 학습·검증 손실의 에포크별 변화 곡선을 도시하였다. 학습 손실은 1 epoch에서 0.151로 시작하여 단조 감소하였으며, 검증 손실도 학습 손실과

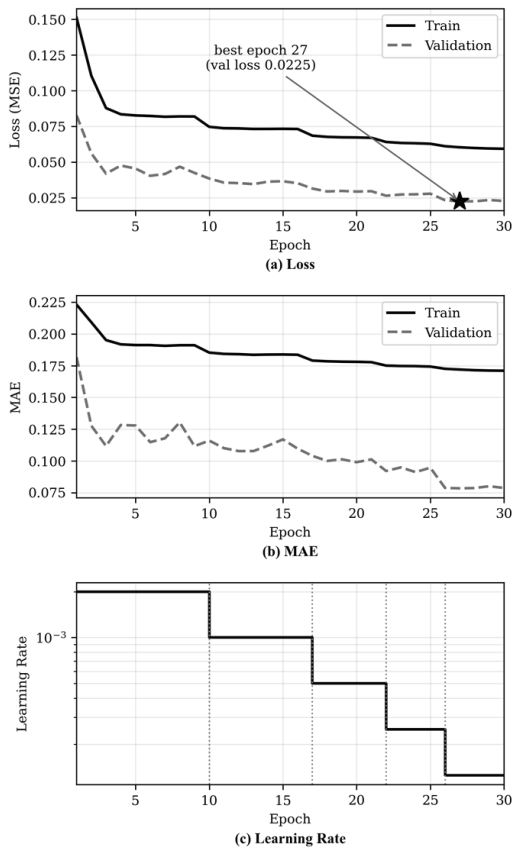


Fig. 5. Training convergence: (a) train/validation loss; (b) train/validation MAE; (c) learning-rate schedule

동조하여 감소하는 거동을 보였다. 전 구간에서 검증 손실이 학습 손실을 반등시키는 과적합 신호는 나타나지 않았다.

학습률 스케줄러는 검증 손실 정체 시 학습률을 절반으로 감소시키는 방식으로 작동하였으며, 본 학습에서는 10, 17, 22, 26번째 epoch에서 총 4회의 학습률 감소가 발생하여 초기 학습률 2×10^{-3} 이 최종적으로 1.25×10^{-4} 까지 낮아졌다. 학습률이 감소할 때마다 검증 손실이 추가로 개선되는 계단식 거동이 관찰되었으며, 이는 학습률 스케줄러가 후반부 미세조정에 기여하였음을 뒷받침한다.

검증 손실의 최저값은 27번째 epoch에서 0.02250 (MAE 0.0783)을 기록하였고, 이후 epoch 28~30에서 검증 손실은 0.0235~0.0228의 좁은 대역에 머물

렀다. 본 학습은 조기 종료 기준에 도달하기 전인 30 epoch에서 최대 학습 횟수 한도로 자연 종료되었으며, 최종 epoch과 최저 검증 손실 사이의 차이는 약 1% 수준에 불과하므로 학습이 수렴 영역에 충분히 도달한 것으로 판단된다.

4.2 출력별 예측 정확도

시험 split 1,500 케이스 전체에 대한 출력 채널별 정량 예측 성능을 Table 3에 정리하였다. 본 절의 지표는 학습에 사용한 스케일러·split을 그대로 적용한 독립 재추론을 통해 산출하였으며, 재추론 결정계수 (R^2 0.9744/0.9751/0.9938)가 학습 시점의 보고값과 일치함을 확인하여 모델·스케일러·데이터 분할의 재현성을 검증하였다. 세 출력 모두에서 R^2 0.97 이상의 높은 일치를 나타내었으며, 특히 스택 전압에서는 R^2 0.994의 높은 일치를 달성하였다.

R^2 는 척도 불변이므로 정규화·물리 단위에서 동일한 값을 가지며, MAE·RMSE는 출력 변수의 표준편차를 곱하여 물리 단위로 환산한 값을 함께 제시하였다. 물리 단위 기준으로 두 출구 온도의 RMSE는 각각 20.94°C, 21.21°C (MAE 약 12.3°C), 스택 전압의 RMSE는 0.0196 V (MAE 0.0139 V)로, 650~850°C에 이르는 광역 온도 범위와 1 V 내외의 전압 범위에 비추어 작은 오차 수준임을 확인하였다.

두 출구 온도의 RMSE 약 21°C는 650~850°C의 작동 범위와 운전 중 1,000°C 부근까지 상승하는 출구 온도 변동폭에 비추어 상대오차 약 1.8%(물리 단위 MAPE)에 해당하며, 빠른 동특성 대리모델로서

Table 3. Prediction performance of the hybrid LSTM model on the test split (1,500 cases), in normalized and physical units

Output	Unit	MAE	RMSE	R^2	MAPE[%]
T_{anode}	Normalized	0.0928	0.1576	0.9744	79.56
T_{anode}	Physical [°C]	12.33	20.94	0.9744	1.77
T_{cathode}	Normalized	0.0903	0.1555	0.9751	112.88
T_{cathode}	Physical [°C]	12.31	21.21	0.9751	1.78
Voltage	Normalized	0.0549	0.0777	0.9938	20.52
Voltage	Physical [V]	0.0139	0.0196	0.9938	1.86

운전점 탐색·시스템 수준 해석·에너지 관리 시스템 연계의 목적에서는 허용 가능한 수준으로 판단된다. 다만 스택 내부의 열용량·국부 열구배·내구성 평가와 같이 온도 정밀도가 본질적으로 요구되는 용도에서는 21°C 수준의 오차가 유의미할 수 있으므로, 그러한 용도에는 무부하 구간의 보강 학습이나 물리 모델과의 잔차 보정을 통한 정밀도 향상이 필요하다.

MAPE의 경우 정규화 단위에서는 세 채널이 각각 79.6%, 112.9%, 20.5%로 크게 산출되나, 이는 정규화로 인해 분모(실측값)가 0 근방으로 형성되는 구간에서 백분율 오차가 비정상적으로 증폭된 결과이며 예측 정확도의 저하를 의미하지 않는다. 동일 지표를 물리 단위에서 산출하면 세 채널의 MAPE는 각각 1.77%, 1.78%, 1.86%로 모두 약 1.8% 수준으로 수렴하였다. 물리 단위 기준의 상대 오차는 세 출력에서 일관되게 2% 미만이며, 본 연구에서는 정량 비교의 1차 기준을 척도 불변인 R^2 로 두되 물리 단위 MAE·RMSE·MAPE를 함께 보고하여 절대 오차 규모를 명확히 한다.

Anode와 cathode 스택 출구 온도는 거의 동일한 R^2 (0.974, 0.975)와 MAE를 보였으며, 이는 본 SOFC 스택의 연료극·공기극 출구 온도가 동일한 lumped 열용량 모델에 의해 강하게 결합되어 있음을 반영한다. 한편 전압은 두 온도에 비하여 약 4×10^{-3} 만큼 높은 R^2 를 나타내었는데, 이는 본 데이터셋에서 전압이 전류밀도 시계열 입력에 직접적이고 즉각적으로 반응하는 변수인 반면, 온도는 시정수가 큰 응답을 보이기 때문으로 판단된다.

4.3 예측-실측 산점도 및 시계열 동적 응답

Fig. 6에 시험 split 1,500 케이스 전체에 대한 예측-실측 산점도(parity plot)를 출력 채널별로 도시하였다. 세 출력 모두에서 점군이 1:1 대각선에 밀접하게 정렬되어 있으며, 광역의 운전조건에서도 모델이 일관된 정확도를 유지함을 확인하였다.

Fig. 7에 시험 split에서 추출한 대표 케이스에 대한 출력 시계열의 예측-실측 비교 곡선을 도시하였

다. 부하가 인가되는 활성 구간에서는 세 출력 모두에서 예측 곡선이 시뮬레이션 시계열의 부하 변동·정상 운전 거동을 시간적 지연 없이 추종하는 것을 확인하였다.

다만 Fig. 7의 음영 구간에서 보이듯, 시동 전 예열 구간과 부하 제거 이후 전류밀도가 0인 구간에서

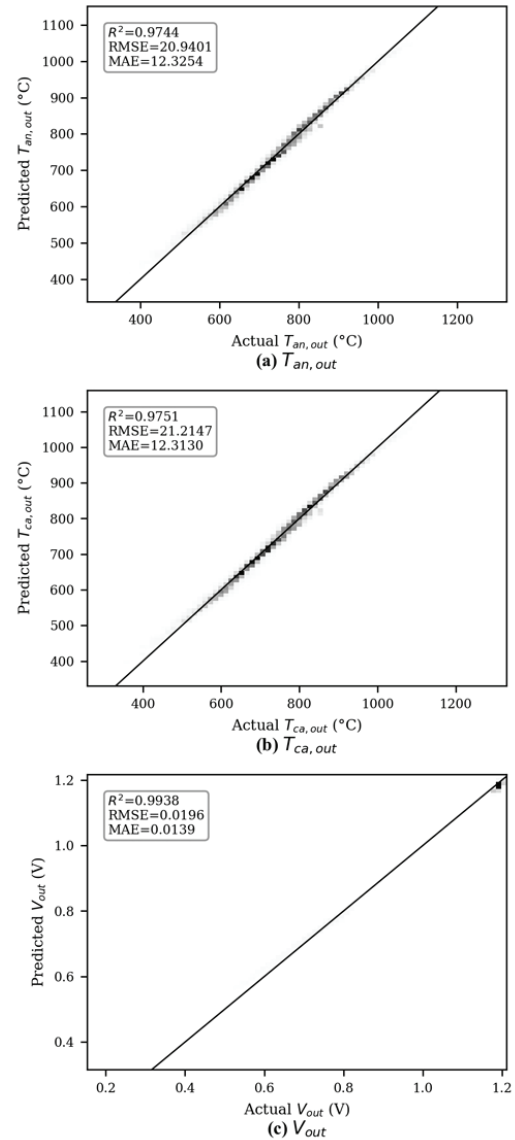


Fig. 6. Prediction-measurement parity plots for the test set (1,500 cases): (a) anode outlet temperature, (b) cathode outlet temperature, and (c) cell voltage

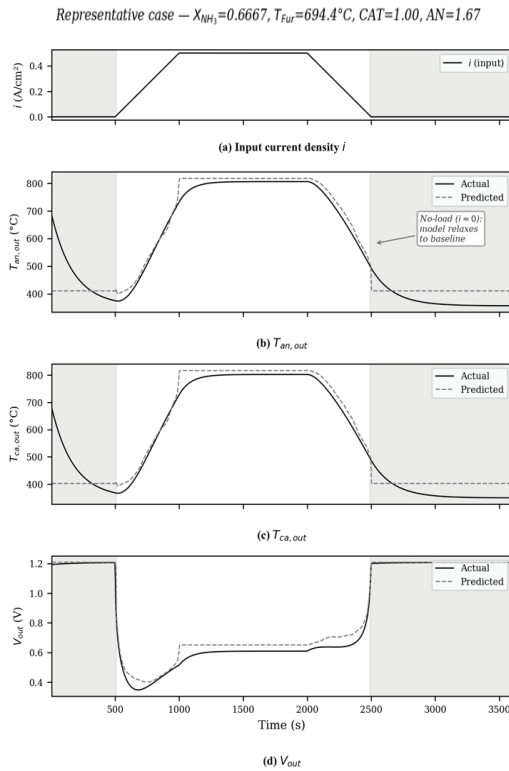


Fig. 7. Time-series input and dynamic responses for a representative case: (a) applied current-density profile, (b) anode outlet temperature, (c) cathode outlet temperature, and (d) cell voltage. Shaded regions indicate no-load operation

는 예측 곡선이 실측의 절대 온도·전압 거동을 추종하지 못하고 일정한 베이스라인으로 수렴하는 거동이 관찰되었다. 이는 본 모델의 유일한 동적 입력이 전류밀도이기 때문이다. 전류밀도가 0인 구간에서는 시간에 따라 변하는 입력 정보가 존재하지 않으므로, 모델은 입력 시퀀스로부터 시간적 변화를 충분히 식별할 수 없어 시동 직후의 고온 상태와 운전 종료 후 냉각 상태처럼 서로 다른 열 상태를 구분하지 못한 채 상수 베이스라인으로 회귀한다.

4.4 오차 분포 및 일반화 검토

Fig. 8에 출력 채널별 잔차의 분포를 도시하였다. 세 출력 모두의 잔차 분포는 0을 중심으로 거의 대칭이며, 정규분포에 근접한 형태를 보였다.

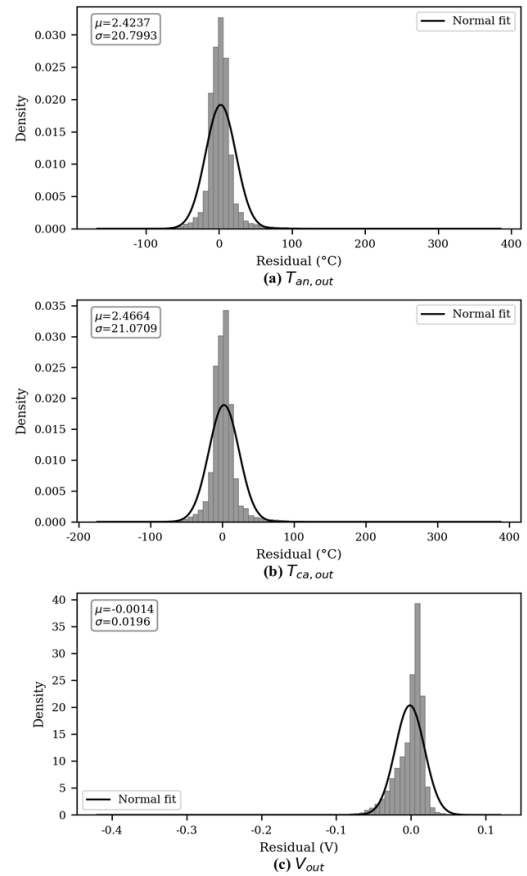


Fig. 8. Residual distributions for each output variable: (a) anode outlet temperature, (b) cathode outlet temperature, and (c) cell voltage

잔차 분포의 평균은 세 출력 모두에서 0 근방으로 나타났으며, 이는 모델 예측이 평균적으로 편향을 갖지 않음을 의미한다. 잔차 분포의 표준편차는 Table 3의 RMSE에 대응하며, 두 온도 채널이 거의 동일한 분포 폭(정규화 단위 약 0.156, 물리 단위 약 21°C)을 보이고 전압 채널이 가장 좁은 분포 폭(정규화 단위 약 0.078, 물리 단위 약 0.020 V)을 나타내었다.

광역 운전조건 전 영역에 걸친 일반화 성능을 확인하기 위해, 시험 split 1,500 케이스 각각의 케이스 평균 RMSE를 온도와 연료극 입구 암모니아 몰분율 X_{NH_3} 축에 대해 정리하여 Fig. 9에 나타내었다. 케이스 평균 RMSE의 중앙값은 운전조건 전 구간에서 안정적으로 유지되었으며, 단일 모델이 4차원 운전조

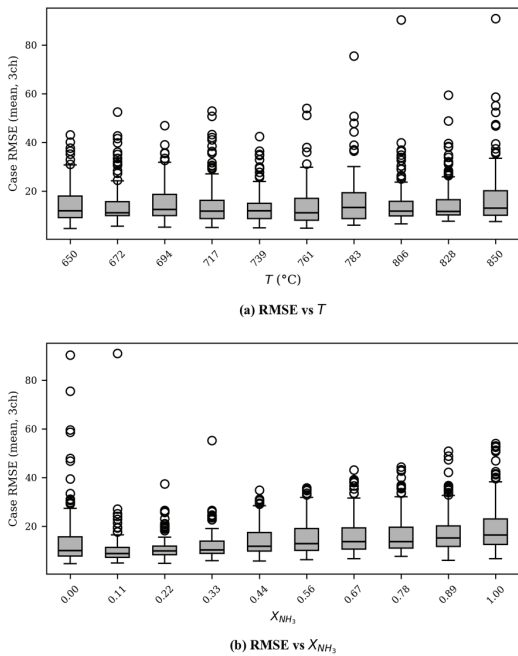


Fig. 9. Generalization performance across operating conditions: RMSE distributions as functions of (a) stack temperature and (b) ammonia mole fraction

건 격자의 다양한 동특성을 일관되게 재현함을 정량적으로 확인하였다. 다만 X_{NH_3} 에 대해서는 암모니아 물질량이 증가할수록 케이스 평균 RMSE가 완만하게 증가하는 경향이 관찰되었는데, 이는 암모니아 분율이 높을수록 분해 흡열 및 조성 변화에 따른 동특성이 복잡해지기 때문으로 판단된다.

본 연구의 학습 자료는 전류밀도, 온도, 연료극 입구 가스 조성을 포함하는 광역 운전조건을 기반으로 구성되었다. 그럼에도 예측 잔차가 제한된 범위 내에서 안정적으로 분포하고, 세 출력 모두에서 높은 결정계수를 달성하였다는 점은 제안한 Hybrid LSTM 구조가 다양한 운전조건에서 나타나는 SOFC 스택의 동특성을 단일 모델로 효과적으로 일반화할 수 있음을 보여준다. 특히 전압뿐만 아니라 연료극 및 공기극 출구 온도를 동시에 예측함으로써, 본 모델은 단순한 전기적 성능 예측을 넘어 스택의 열적 거동까지 함께 재현할 수 있는 데이터 구동 대리모델로 활용될 가능성을 가진다.

이러한 다중 출력 예측 능력은 암모니아 연료 SOFC 시스템의 운전 및 제어 관점에서 중요하다. 실제 시스템에서는 부하 변화, 연료 조성 변화, 가열로 온도 조건에 따라 전압과 온도가 동시에 변화하며, 특히 출구 온도는 스택 내부 열구배와 열응력, 나아가 안전 운전 및 내구성과 직접적으로 관련된다. 따라서 전압만을 예측하는 모델보다, 전압과 주요 열적 상태를 함께 예측하는 모델이 상위 제어기나 에너지 관리 시스템에 더 유용하게 활용될 수 있다. 본 모델은 4차원 운전조건 격자에서 확보한 10,000개 케이스를 기반으로 학습되었기 때문에, 특정 운전점이나 단일 운전선에 국한되지 않고 넓은 운전영역에서의 스택 응답을 포괄할 수 있다는 장점을 가진다.

또한 학습된 모델은 낮은 추론 비용으로 시계열 출력을 계산할 수 있으므로, 향후 model-in-the-loop, hardware-in-the-loop, 또는 모델 예측 제어와 같은 실시간 응용에 적용될 수 있는 기반을 제공한다. 정량적으로, 단일 운전 케이스(0-3,600 s)에 대한 Simulink 계산은 수분이 소요되는 반면, 학습된 LSTM 모델은 동일 케이스의 시계열을 수초 이내에 추론하여 약 수십 배에 이르는 계산 시간 단축이 가능하다. 이러한 격차는 다중 스택·시스템 수준·장시간 시나리오로 확장될수록 더욱 커질 것으로 예상된다. 이는 고충실도 물리 기반 모델을 직접 반복 계산하기 어려운 제어 환경에서, 계산 효율성과 예측 정확도 사이의 실용적인 절충안을 제공한다는 점에서 의미가 있다.

다만 본 모델은 동적 입력이 전류밀도 1채널로 제한된다는 구조적 한계를 가진다. 전류밀도가 0인 무부하 구간에서는 시간에 따라 변화하는 입력 정보가 제공되지 않으므로, 입력 시퀀스만으로는 해당 시점이 시동 직후의 고온 상태인지, 운전 종료 후의 냉각 상태인지를 구분하기 어렵다. 그 결과 모델은 무부하 구간에서 절대 열 상태를 충분히 재현하지 못하고 일정한 베이스라인으로 수렴하는 경향을 보인다.

본 연구에서 보고한 높은 예측 성능은 주로 부하가 인가된 활성 운전 구간에서의 우수한 재현성을 반영한다. 따라서 제안 모델의 신뢰할 수 있는 적용 범위는 부하가 인가된 활성 운전영역의 동적 응답

예측이며, 시동 전 예열이나 부하 제거 이후 냉각과 같은 무부하 구간의 절대 열거동 예측에는 추가적인 보완이 필요하다. 이를 개선하기 위한 방안은 다음과 같다. 첫째, 직전 출구 온도·경과 시간·누적 부하·냉각 시간 등 열적 이력을 반영하는 상태 변수를 입력 구조에 추가하여, 무부하 구간에서도 절대 열 상태를 식별하도록 할 수 있다. 둘째, 전류밀도 외에 가열로 온도 스케줄이나 유량 프로파일 등 추가적인 시변 입력을 도입하여 무부하 구간에서도 시간에 따라 변하는 정보를 모델에 제공할 수 있다. 셋째, 부하 천이 직후와 무부하 구간에 대해 가중 손실 또는 표본 보강을 적용하여 해당 구간의 학습 비중을 높이는 방법이 있다. 넷째, 짧은 구간의 물리 모델 또는 잔차 학습(residual learning) 기법을 결합하여 데이터 구동 예측을 물리적으로 보정함으로써 개선이 가능하다.

5. 결 론

본 연구는 암모니아 연료 SOFC 스택의 동적 거동을 실시간 수준의 계산 효율로 예측하기 위해, 자체 개발 Matlab/Simulink 동적 모델을 자료원으로 활용한 Hybrid LSTM 데이터 구동 대리 모델을 제안하고 검증하였다. 데이터셋은 공기·연료 유량 인자, 온도, 연료극 입구 암모니아 몰분율의 4개 운전조건 축에 대한 완전 격자 sweep으로 구성되었으며, 총 10,000개 운전 케이스의 시계열을 포함한다. 이는 단일 SOFC 스택의 광역 부하·조성 변동에 균일한 격자로 포괄한다는 점에서 기존의 협소한 운전조건 기반 데이터셋과 차별된다.

제안 모델은 길이 60 스텝의 전류밀도 시계열 입력을 처리하는 2층 LSTM 분기와 6차원 상수 입력 분기를 결합하여, 연료극 출구 온도, 공기극 출구 온도, 스택 전압을 동시에 예측하는 hybrid 구조이다. 모델은 총 851,715개의 학습 가능 파라미터를 가지며, 단일 NVIDIA RTX 6000 Ada GPU에서 30 epoch 학습에 약 65분이 소요되었다.

시험 split 1,500 케이스에 대한 평가 결과, 세 출력 모두에서 R^2 0.97 이상의 높은 예측 정확도를 달

성하였으며, 스택 전압은 R^2 0.994를 보였다. 물리 단위 기준으로 두 출구 온도의 RMSE는 약 21°C, 스택 전압의 RMSE는 0.0196 V였고, 세 출력의 MAPE는 모두 약 1.8%로 2% 미만의 상대 오차를 유지하였다. 또한 동일한 스케일러와 split을 적용한 독립 재추론을 통해 보고된 성능이 재현됨을 확인하였다.

다만 본 모델은 동적 입력이 전류밀도 1채널뿐이라는 구조적 한계를 가진다. 전류밀도가 0인 시동 전 예열 및 부하 제거 후 구간에서는 시간에 따라 변하는 입력 정보가 제공되지 않으므로, 모델이 시동 직후의 고온 상태와 운전 종료 후의 냉각 상태를 구분하지 못하고 상수 베이스라인으로 회귀하는 경향을 보였다. 따라서 본 연구의 높은 R^2 는 주로 부하·활성 구간에서의 우수한 예측 성능을 반영하며, 무부하 구간의 절대 열거동 예측에는 추가적인 입력 구조 개선이 필요하다.

본 연구는 Simulink 기반 광역 가상 데이터셋과 시계열·상수 입력을 결합한 Hybrid LSTM 구조를 통해, 다양한 부하 및 조성 조건에서의 SOFC 동특성을 단일 모델로 구동할 수 있음을 보였다. 그러나, 임의의 부하 추종까지 일반화하기 위해서는 다양한 전류 프로파일을 포함하도록 데이터셋을 확장하여 재학습이 필요하다. 또한, 학습된 모델의 추론 비용이 낮아 향후 제어기, EMS, HIL/MIL 환경과 연계한 실시간 응용 가능성을 확인하였다. 향후 연구에서는 직전 출력 온도, 경과 시간, 누적 부하 등 동적 상태 변수를 추가하여 무부하 구간 예측 한계를 개선하고, 실측 셀·스택 데이터 기반 fine-tuning, 대안 시계열 모델과의 비교, MPC 연계 및 장기 열화 예측으로 확장할 필요가 있다.

후 기

본 연구성과는 한국기계연구원 기관 기본사업(Project ID : NK262B)의 지원과 정부(과학기술정보통신부)의 재원으로 한국연구재단의 지원을 받아 수행된 연구이다(RS-2025-02220932).

References

1. G. Lee, S. Lee, S. Hong, H. Jung, and S. P. Jung, "Ammonia and liquid hydrogen as energy carriers: challenges and opportunities", *Journal of Korean Society of Environmental Engineers*, Vol. 46, No. 12, 2024, pp. 816-830, doi:<https://doi.org/10.4491/KSEE.2024.46.12.816>.
2. K. Lee, D. Chung, Y. Bae, and J. Bae, "Catalyst infiltration on anode of SOFC for direct utilization of ammonia", *Journal of Hydrogen and New Energy*, Vol. 35, No. 6, 2024, pp. 667-672, doi:<https://doi.org/10.7316/JHNE.2024.35.6.667>.
3. G. Kim, S. Kim, S. Park, and H. Kwon, "3E analysis of direct-ammonia solid oxide fuel cell based on green ammonia: energy, economic, and environment", *Journal of Hydrogen and New Energy*, Vol. 36, No. 2, 2025, pp. 99-108, doi:<https://doi.org/10.7316/JHNE.2025.36.2.99>.
4. D. Lee, T. Q. Quach, T. P. Israel, K. Y. Ahn, Y. Bae, and Y. S. Kim, "Analysis of start-up behavior based on the dynamic simulation of an SOFC-engine hybrid system", *Energy Conversion and Management*, Vol. 272, 2022, pp. 116384, doi:<https://doi.org/10.1016/j.enconman.2022.116384>.
5. J. Woo, Y. Kim, and S. Yu, "Analysis of dynamic characteristics of 20 kW hydrogen fuel cell system based on AMESet", *Journal of Hydrogen and New Energy*, Vol. 34, No. 5, 2023, pp. 465-477, doi:<https://doi.org/10.7316/JHNE.2023.34.5.465>.
6. W. Shin, D. Lee, J. Park, Y. Kim, S. Lee, and Y. Bae, "Operation strategy of pressurized solid oxide fuel cell system fueled by ammonia", *Journal of Hydrogen and New Energy*, Vol. 36, No. 5, 2025, pp. 535-541, doi:<https://doi.org/10.7316/JHNE.2025.36.5.535>.
7. Z. Wu, P. Zhu, Y. Huang, J. Yao, F. Yang, Z. Zhang, and M. Ni, "A comprehensive review of modeling of solid oxide fuel cells: from large systems to fine electrodes", *Chemical Reviews*, Vol. 125, No. 4, 2025, pp. 2184-2268, doi:<https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.4c00614>.
8. S. Hochreiter and J. Schmidhuber, "Long short-term memory", *Neural Computation*, Vol. 9, No. 8, 1997, pp. 1735-1780, doi:<https://doi.org/10.1162/neco.1997.9.8.1735>.
9. W. He, T. Liu, W. Ming, Z. Li, J. Du, X. Li, X. Guo, and P. Sun, "Progress in prediction of remaining useful life of hydrogen fuel cells based on deep learning", *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Vol. 192, 2024, pp. 114193, doi:<https://doi.org/10.1016/j.rser.2023.114193>.
10. Z. Salehi, M. Tofigh, A. Kharazmi, D. J. Smith, A. R. Hanifi, C. R. Koch, and M. Shahbakhti, "Transfer learning-based deep neural network model for performance prediction of hydrogen-fueled solid oxide fuel cells", *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 99, 2025, pp. 102-111, doi:<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.12.092>.
11. Y. Shi, H. Zheng, W. Jiang, M. Song, Y. Luo, X. Zhang, and S. T. Tu, "Hybrid neural network and dynamic decay model for life prediction of solid oxide fuel cell combined heat and power systems", *Journal of Power Sources*, Vol. 645, 2025, pp. 237165, doi:<https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2025.237165>.
12. Y. Ma, S. Li, S. Zhou, X. Wang, H. Yuan, G. Chang, J. Zhu, H. Dai, and X. Wei, "Performance degradation prediction of proton exchange membrane fuel cells based on CNN-LSTM network with squeeze-and-excitation attention mechanism", *Energy*, Vol. 335, 2025, pp. 138127, doi:<https://doi.org/10.1016/j.energy.2025.138127>.
13. M. Tofigh, Z. Salehi, A. Kharazmi, D. J. Smith, A. R. Hanifi, C. R. Koch, and M. Shahbakhti, "Transient modeling of a solid oxide fuel cell using an efficient deep learning HY-CNN-NARX paradigm", *Journal of Power Sources*, Vol. 606, 2024, pp. 234555, doi:<https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2024.234555>.
14. M. Li, J. Wu, Z. Chen, J. Dong, Z. Peng, K. Xiong, M. Rao, C. Chen, and X. Li, "Data-driven voltage prognostic for solid oxide fuel cell system based on deep learning", *Energies*, Vol. 15, No. 17, 2022, pp. 6294, doi:<https://doi.org/10.3390/en15176294>.