4주차 읽기자료: 물리 제약과 투영

1. 정상상태 수지에서 합 등식 유도하기

A → B → C의 1차 연속반응에서 정상상태는 r_A = r_B = r_C = 0입니다. A 수지를 먼저 풀고 그 결과를 B, C 순서로 대입하면:

$$C_A = \frac{C_{\mathrm{Af}}}{1 + k_1\tau}$$

$$C_B = \frac{k_1\tau C_A}{1 + k_2\tau}, C_C = k_2\tau C_B$$

B 수지에서 $k_1\tau C_A = (1 + k_2\tau)C_B$이므로 $C_B + C_C = k_1\tau C_A$입니다. A 수지의 $C_{Af} = (1 + k_1\tau)C_A$와 결합하면 세 농도의 합이 C_{Af}가 됩니다.

확인: 330 K, τ = 5 min, C_{Af} = 1.2 mol/L이면 [0.6, 0.4, 0.2]입니다.

2. Soft penalty의 정지점

J(z) = ½(z − a)² + ½λ(z − b)², λ ≥ 0에서 dJ/dz = (z − a) + λ(z − b)입니다. 2차 미분은 1 + λ > 0이므로 정지점이 유일한 최소점입니다.

$$z_* = \frac{a + \lambda b}{1 + \lambda}$$

$$z_* - b = \frac{a - b}{1 + \lambda}$$

연습: a = 1.4, b = 1.2에서 λ = 1, 9의 해와 residual을 구합니다.

답 확인: 해는 1.30, 1.22이고 residual은 0.10, 0.02입니다. 학습이 정확히 최소점에 도달해도 유한한 penalty가 등식을 정확히 맞추지 않는 예입니다.

미분식을 모으면 (1+λ)z=a+λb입니다. a=1.4,b=1.2,λ=9에서는 10z=12.2로 z=1.22를 얻습니다. 데이터 방향 미분은 −0.18, 벌점 방향 미분은 9×0.02=+0.18로 서로 상쇄되지만 등식 residual 0.02는 남습니다.

3. Equality QP와 KKT 유도

B ∈ $\mathbb{R}^{mxn}$, rank(B) = m, d ∈ $\mathbb{R}^{m}$로 둡니다. 입력과 raw 예측을 고정하고 다음 QP를 풉니다.

$$y_p = \text{argmin}_z \frac{1}{2}\left\| z - \hat{y} \right\|^2 \text{subject to} Bz = d\,(x)$$

$$z - \hat{y} + B^T\lambda = 0, Bz = d$$

첫 식에서 z = ŷ − B^Tλ입니다. 두 번째 식에 대입하면 BB^Tλ = Bŷ − d입니다. BB^T가 가역이므로 λ가 유일하고, z도 유일하게 정해집니다. 등식은 convex 집합이며 목적함수의 Hessian은 I입니다.

4. 등식 보장과 projector의 성질

$$G = BB^T, G\lambda = B\hat{y} - d$$
$$y_p = \hat{y} - B^T G^{-1}\left(B\hat{y} - d\right)$$

B를 곱하면 보정항이 정확히 원래 residual을 제거합니다.

$$By_p = B\hat{y} - GG^{-1}\left(B\hat{y} - d\right) = d$$

$P = I - B^T(BB^T)^{-1}B$는 $P^T = P$, $P^2 = P$, $BP = 0$을 만족합니다. P는 B의 null space로 투영합니다. 이미 가능한 $\hat{y}$는 보정량이 0이고, 한 번 투영한 값을 다시 투영해도 바뀌지 않습니다.

5. 손계산: 보정량과 오차 변화

$$B = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}, d = 1.2$$

$$y_p = \begin{bmatrix} .70 \\ .45 \\ .25 \end{bmatrix} - \frac{.20}{3}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} .633333 \\ .383333 \\ .183333 \end{bmatrix}$$

기준 [0.6, 0.4, 0.2]에 대한 raw 제곱오차 합은 0.015 (mol/L)²입니다. 보정량의 제곱 norm은 0.04/3, 투영 후 제곱오차 합은 1/600 ≈ 0.001667입니다.

성분별로는 A 오차가 +0.10에서 +0.033333으로 바뀝니다. B와 C는 +0.05에서 −0.016667로 바뀝니다. 전체 오차와 개별 오차를 각각 계산하는 연습입니다.

합 잔차에서 투영된 출력까지

원시 출력은 [0.70,0.45,0.25], 목표 합은 1.20 mol/L입니다. 세 수정량을 Δ로 같게 두면 1.40−3Δ=1.20이므로 Δ=0.20/3입니다.

단계	값
Bŷ−d	1.40−1.20=0.20
G=BB^{T}	$1^2+1^2+1^2=3$
Gλ=잔차	λ=0.0666667
출력별 수정	[−0.0666667,−0.0666667,−0.0666667]
보정 출력	[0.6333333,0.3833333,0.1833333]

균등 보정의 거리 제곱은 $3\times(0.20/3)^2=0.013333$입니다. A에서만 0.20을 빼도 합은 맞지만 거리 제곱은 0.04로 더 큽니다. 같은 가중치의 Euclidean 거리에서 균등 보정이 선택되는 이유입니다.

독립 등식 두 개의 투영 계산

출력 합 1.2에 더해 A−B=0.2를 요구하는 선형 예제입니다. B의 행을 [1,1,1]과 [1,−1,0], 우변을 [1.2,0.2]로 두고 원시 출력 [0.70,0.45,0.25]를 보정합니다.

단계	계산 결과
두 잔차 $B\hat{y}-d$	[0.20,0.05]
$G=BB^{T}$의 대각 원소	첫 행 제곱합 3, 둘째 행 제곱합 2
G의 비대각 원소	1×1+1×(−1)+1×0=0
$G\lambda$=잔차	λ=[0.20/3,0.05/2]
$B^{T}\lambda$	[0.091667,0.041667,0.066667]
보정 출력	[0.608333,0.408333,0.183333]

합은 1.2이고 A−B=0.2입니다. 두 등식이 독립이어서 두 종류의 잔차를 따로 제거합니다. 두 번째 행이 첫 행의 두 배이면 G의 역행렬이 없어 같은 계산을 할 수 없습니다.

여기서 B는 제약 행렬의 이름이며 제품 성분 B와 구별합니다. 추가한 A−B 등식은 이 선형 계산 예제의 조건입니다.

6. 파라미터와 입력에 대한 chain rule

J_f,θ는 raw 출력의 파라미터 Jacobian입니다. A·B·b가 고정이면:

$$\nabla_\theta L = {J_{f,\theta}}^T P^T \nabla_{y_p} L$$

$$\frac{\partial y_p}{\partial x} = P\frac{\partial f_\theta}{\partial x} - B^T G^{-1} A$$

입력 gradient에는 d(x) = b − Ax의 직접 경로도 포함됩니다. B가 입력에 따라 달라지면 P도 입력에 의존하므로 추가 미분항이 필요합니다. 고정 projector 식을 그대로 사용하면 안 됩니다.

확인: upstream [1, 0, 0]에 B = [1, 1, 1]을 사용하면 [2/3, −1/3, −1/3]이 전달됩니다.

7. 표준화 좌표의 등식과 거리

$$y = \mu + Dz, BDz = d - B\mu$$
$$D = \mathrm{diag}\left(s_1, \ldots, s_n\right)$$

z 공간의 Euclidean 투영은 y 공간에서 $\|D^{-1}(y - \hat{y})\|^2$를 최소화합니다. 성분별 제곱 보정량에는 $1/s_j^2$의 가중치가 적용됩니다.

예: raw [0.70, 0.45, 0.25], 합 1.20, s = [0.2, 0.5, 0.1]이면 z 공간 투영을 복원한 결과는 [0.673333, 0.283333, 0.243333]입니다. 보정량은 s_j^2에 비례합니다.

두 방법 모두 합을 맞춥니다. 서로 다른 단위의 출력을 함께 투영할 때에는 물리 Euclidean 거리 자체에도 단위 선택이 영향을 주므로 metric을 설계해야 합니다.

투영 거리와 성분별 수정량

scale=[0.2,0.5,0.1]인 표준화 좌표에서 거리를 최소화하면 물리 단위 수정량은 scale의 제곱에 비례합니다. 총 잔차 0.20을 0.04:0.25:0.01로 나눕니다.

성분	scale² / 합	빼는 농도	보정 결과
A	0.04/0.30	0.026667	0.673333
B	0.25/0.30	0.166667	0.283333
C	0.01/0.30	0.006667	0.243333

```
scales = np.array([0.2, 0.5, 0.1])
raw = np.array([0.70, 0.45, 0.25])
weights = scales**2 / np.sum(scales**2)
projected = raw - (raw.sum() - 1.2) * weights
```

B는 표준편차가 커 같은 농도 수정이 표준화 거리에서 덜 비쌉니다. 따라서 더 많이 바뀝니다. 합 1.20만 확인하면 두 거리 정의의 차이가 보이지 않습니다.

수정량을 Δ_j라 두면 최소화할 거리는 $\tfrac{1}{2}\sum \Delta_j^2/s_j^2$이고 $\sum \Delta_j = -0.20$입니다. 정지조건 $\Delta_j/s_j^2+\lambda=0$에서 $\Delta_j=-\lambda s_j^2$를 얻고, 합 조건에 넣으면 $\lambda=0.20/\sum s_j^2$입니다. 따라서 각 수정량이 s_j^2에 비례합니다.

8. 중복 등식과 모순된 우변

$$B = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 2 \end{bmatrix}$$

두 번째 행은 첫 행의 두 배라 rank는 1입니다. d = [1.2, 2.4]이면 두 등식은 같은 집합을 나타냅니다. 독립 행 하나만 사용해도 됩니다.

d = [1.2, 2.5]이면 첫 식의 두 배와 두 번째 식이 모순됩니다. 가능한 출력이 없습니다. Pseudoinverse는 least-squares 결과를 반환할 수 있지만 모든 residual을 0으로 만들지는 못합니다.

작은 singular value를 버릴 때에는 제거된 식의 residual도 원래 단위로 다시 확인합니다.

9. 단위가 다른 residual의 무차원화

농도 합 residual의 단위는 mol/L이고 성분수지 residual의 단위는 mol/(L·min)입니다. 두 제곱값을 scale 없이 더하면 λ의 의미가 단위 선택에 따라 달라집니다.

예를 들어 기준 농도 c_*와 기준 시간 t_*를 정해 합 residual은 c_*로, 성분수지는 c_*/t_*로 나눕니다. 무차원화 후에도 loss 평균 방식과 λ는 명시해야 합니다.

실습은 합 penalty를 사용하며, 알려진 속도식을 성분수지 residual로 추가할 수 있습니다.

10. 정확도 보장의 조건과 잘못된 물리식

$$\left\|\hat{y} - y^*\right\|^2 = \left\|\hat{y} - y_p\right\|^2 + \left\|y_p - y^*\right\|^2$$

이 분해는 y^*가 같은 affine 집합에 있을 때 성립합니다. 보정 벡터는 집합의 normal 방향이고 y_p − y^*는 tangent 방향이라 내적이 0입니다.

참 합이 1.2인데 잘못된 등식이 합 1.1을 강제하면 참 출력은 집합 밖입니다. 세 성분의 보정 때문에 참 출력과의 최소 거리부터 0.1/√3 ≈ 0.057735 mol/L가 됩니다.

센서 편향·누락 성분·반응 화학양론 오류를 먼저 확인합니다. 잘못 지정한 등식도 투영은 그대로 강제합니다.

11. 비음수성과 농도 합의 동시 제약

등식 투영 후 음수를 clamp하면 합이 달라집니다. 합과 비음수성을 함께 요구하는 문제는:

$$\min_z \frac{1}{2}\left\| z - \hat{y} \right\|^2 \text{ s.t. } 1^T z = C_{\text{Af}}, z \geq 0$$

C_Af ≥ 0이면 가능한 simplex입니다. 활성집합이 고정된 구간에서는 affine 식으로 풀 수 있지만, 성분이 0이 되는 경계에서 미분을 주의해야 합니다.

필수 실습은 선형 등식 투영까지입니다. 이 부등식 확장을 적용했다면 결과와 gradient 확인을 별도로 보고합니다.

음수 성분을 포함한 투영의 재계산

원시 [0.02,0.90,0.50]에서 합 잔차 0.22를 균등하게 빼면 A가 음수가 됩니다. 합과 비음수 조건을 함께 요구하면 A=0인 경계에서 다시 계산합니다.

단계	계산
A를 0으로 고정	B+C=1.20
남은 원시 합	0.90+0.50=1.40
두 성분의 보정	(1.40−1.20)/2=0.10
결과	[0,0.80,0.40] mol/L

두 양의 성분에는 같은 0.10을 빼고, A는 0에서 멈춥니다. 이 결과는 원시 출력에 대한 simplex 투영입니다. 먼저 음수만 0으로 자르는 방식은 B와 C를 재조정하지 않아 합을 맞추지 못합니다.

원시 값이 변해 A가 다시 양수가 되는 경계에서는 활성 제약이 바뀝니다. 따라서 이 변환의 미분은 고정 선형 등식 투영처럼 전 구간에서 같은 행렬이 아닙니다.

12. 동적 총 농도 전이의 유도

동적 성분수지를 합하면 dS/dt = (C_Af − S)/τ입니다. 구간 안에서 C_Af와 τ가 일정하면 S − C_Af의 미분은 −(S − C_Af)/τ이므로:

$$S_{k+1} = C_{\mathrm{Af}} + \left(S_k - C_{\mathrm{Af}}\right) e^{-\frac{\Delta t}{\tau}}$$

연습: S_k = 1.0, C_Af = 1.2 mol/L, τ = 5 min, Δt = 0.2 min의 다음 합을 구합니다.

답 확인: 1.2 − 0.2 exp(−0.04) ≈ 1.007842 mol/L입니다. 정상상태 합을 즉시 강제하면 이 전이를 바꿔버립니다. Raw 다음 상태의 합을 이 우변으로 투영할 수 있습니다.

13. 일반 B의 구현과 gradient 확인

raw는 (batch, n), rhs는 (batch, m), B는 (m, n)입니다. B는 고정이며 행이 독립이어야 합니다.

```
def linear_project(raw, rhs, B):
    residual = raw @ B.T - rhs
    lam = torch.linalg.solve(B @ B.T, residual.T).T
    return raw - lam @ B

# Use float64 and independent inputs for finite differences.
assert torch.autograd.gradcheck(
    lambda a, d: linear_project(a, d, B), (raw, rhs)
)
```

검사할 raw와 rhs는 requires_grad=True로 만듭니다. 실습의 –check-only가 가능성·멱등성·Jacobian·표준화·반례까지 확인합니다.

첫 줄의 residual은 (batch,m)입니다. solve에는 우변을 (m,batch)로 전치해 여러 우변을 한꺼번에 풀고, 다시 (batch,m)으로 돌립니다. 마지막 lam @ B는 (batch,n)의 출력 수정량입니다. gradcheck는 입력 한 성분을 +ε와 −ε만큼 바꾼 두 출력의 차이를 2ε으로 나눈 중앙차분과 자동 미분값을 비교합니다.

14. 공정 비교 보고서의 계산 정의

성분 j의 RMSE는 test 행에서 (예측 − 기준)²의 평균에 제곱근을 취합니다. 전체 RMSE는 행과 성분을 모두 평균합니다. 합 MAE와 최대값은 합 residual의 절댓값에서 계산합니다.

합 residual의 절댓값이 10^{-6} mol/L보다 크면 위반으로, 예측 농도가 -10^{-8} mol/L보다 작으면 음수 항목으로 셉니다. 최소 예측 농도도 함께 보고합니다.

성분수지 RMS는 세 성분과 test 행 전체의 r_j^2를 평균한 제곱근입니다. 단위는 mol/(L·min)입니다. Test는 설정 선택에 사용하지 않고, 여러 seed의 분포는 별도 반복 실험으로 확인합니다.

15. 연습문제와 짧은 답 확인

1. $B = I_3$이면 학습할 수 있는 출력 방향이 몇 개일까요? 답: $P = 0$이므로 지정한 d로 출력이 고정되고 자유 방향은 0개입니다.
2. $B = [1, 1, 1]$이면 자유 방향은 몇 개일까요? 답: null space 차원은 $3 - 1 = 2$입니다.
3. 이미 합이 1.2인 raw 출력은 어떻게 바뀔까요? 답: residual이 0이므로 바뀌지 않습니다.
4. Hard 모델이 test에서 합 위반 0개이면 물리적으로 모두 가능한가요? 답: 음수 농도와 성분수지 위반을 따로 검사해야 합니다.
5. 후처리 투영이 모든 성분의 오차를 줄이나요? 답: 아닙니다. 가능한 기준값에 대한 동일 metric의 전체 제곱오차에만 비증가 성질이 있습니다.

16. 원문 읽기와 출처

Chen, H., Constante Flores, G. E., & Li, C. (2024). *Physics-informed neural networks with hard linear equality constraints*. C&CE 189, 108764. DOI · 공개 원고 · 저자 저장소. 3절의 고정 투영층과 가정을 대조하고 4절의 공정 사례 중 하나를 읽습니다.

Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). *Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations*. JCP 378, 686-707. DOI · 2017 Part I. 공개 Part I의 연속시간 residual과 좌표 자동미분을 읽습니다.

17. 수학과 구현을 확인할 원문

Boyd, S., & Vandenberghe, L. (2004). *Convex Optimization*. 공식 교재. 5.5.3절: KKT 조건. 10.1절: 등식 제약 최소화.

PyTorch: torch.linalg.solve는 역행렬을 명시적으로 만들지 않고 선형계를 풉니다. gradcheck는 자동미분과 유한차분을 대조하며 기본 tolerance는 double precision을 전제로 합니다.

강의노트로 돌아가기.