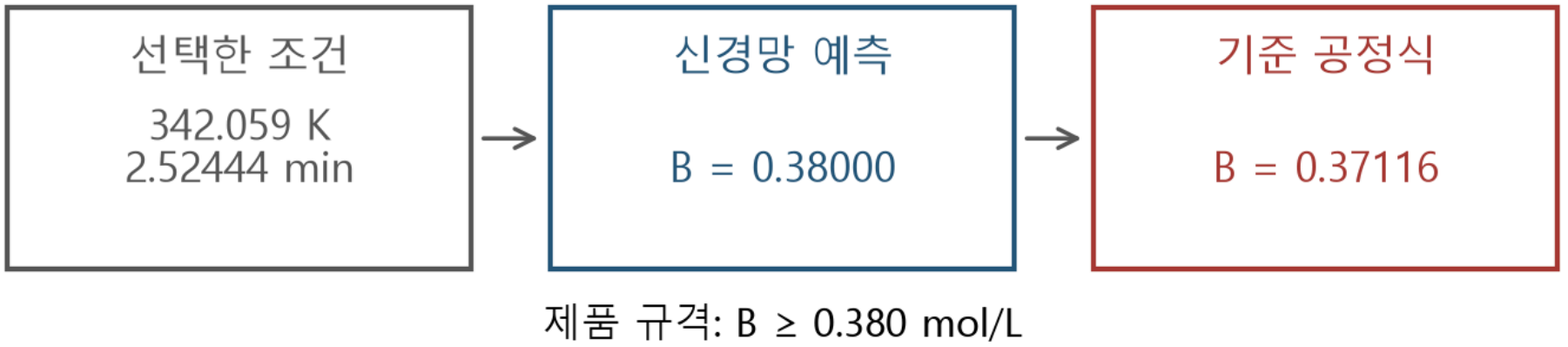
8주차: 운전 조건 선택과 공정 모델 재검증

제품 규격과 최적 조건의 재검증

최적화 결과의 제품 농도는 규격 0.380 mol/L를 맞췄습니다. 그런데 같은 조건을 공정식에 넣으면 0.371 mol/L가 나옵니다. 이 조건을 채택해도 될까요?



선택한 조건을 재검증하고, 채택할 후보와 다음에 계산할 데이터를 결정합니다.

예측 검증과 의사결정 검증

독립 평가 데이터의 평균 오차는 입력 영역 전반의 예측 품질을 요약합니다. 최적화는 그중 비용이 낮고 제약 경계에 가까운 일부 지점을 선택

따라서 선택 지점에서 제품 규격, 물리적 일관성, 비용을 다시 계산합니다. Solver가 학습 모델을 정확히 풀었는지도 별도로 검사합니다.

이번 주에는 6주차의 고정 네트워크를 그대로 사용해 이 차이를 추적합니다.

학습 목표와 최종 보고서

1. 예측 오차, 정식화 오차, 공정 제약 위반을 구분
2. 기준 공정 모델에서 feasible한 후보의 비용을 비교
3. Margin과 국소 데이터 보정의 효과를 재검증
4. 모델·데이터·solver·후보 선택을 재현 가능한 기록으로 남깁니다.

최종 보고서는 채택한 후보, 기각한 이유, 남은 검증 항목과 추가 데이터 위치를 포함합니다.

반응기 모델의 가정과 변수

기준 공정: A → B → C의 연속 1차 반응, 이상적인 정상상태 등온 CSTR. 유입 농도: A 1.2 mol/L, B·C 0. 밀도·유량: 일정

온도 T는 310-350 K, 체류시간 τ는 2-10 min입니다. 유량 F = 1 L/min를 고정하므로 V = Fτ이고, τ는 반응기 크기도 바꾸는 설계변수입니다.

이미 크기가 정해진 설비에서 τ를 바꾸려면 유량 등 다른 조건을 바꿔야 합니다. 그 경우 비용식과 공정 문제를 다시 정합니다.

온도에 따른 반응속도

$$k_1\left(T\right) = .2\exp\left[\frac{40000}{8.314}\left(\frac{1}{330} - \frac{1}{T}\right)\right]$$
$$k_2\left(T\right) = .1\exp\left[\frac{50000}{8.314}\left(\frac{1}{330} - \frac{1}{T}\right)\right]$$

k의 단위는 min^{-1}, 활성화에너지는 J/mol, R = 8.314 J/(mol·K). 330 K에서 $k_1 = 0.2$, $k_2 = 0.1$

온도는 외부에서 유지된다고 가정하며 에너지 수지나 냉각 한계는 이 모델에 포함하지 않습니다.

1~4주차의 온도 민감도 6000 K,5000 K와 달리 이번 기준식은 E/R=40000/8.314,50000/8.314 K를 사용합니다. 330 K에서는 두 모델의 기준 속도가 같지만 다른 온도에서는 다릅니다. 6주차 가중치를 사용할 때는 6~8주차 기준식으로 재검증합니다.

기준 공정식과 제품 규격

$$C_A = \frac{1.2}{1 + k_1\tau}$$

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

규격은 $C_B \geq 0.38$, $C_C \leq 0.25$ mol/L. 모든 농도는 0 이상이고 합은 1.2 mol/L여야 합니다.

이 공정식으로 재검증한 결과는 해당 가정 아래의 계산입니다. 실제 설비에서는 동특성·열관리·계측 오차 등 추가 조건을 확인해야 합니다.

A를 먼저 구한 뒤 A에서 B로 넘어간 양과 B의 유출·추가 반응을 계산합니다. C는 B에서 생성된 양으로 정해집니다. 같은 T,τ에 이 순서를 적용해야 신경망과 기준 공정의 차이를 비교할 수 있습니다.

비용 기준과 비교 대상

$$J(T,\tau) = 12\tau + .24(T - 310)$$

J의 단위는 $/h입니다. 부피 비용은 12 $/(L·h), 가열 비용 계수는 고정 유량에서 0.24 $/(K·h)로 가정합니다. F = 1이므로 부피 항을 12τ로 계산합니다.

이 비용은 제품 규격을 만족하는 설계의 비교용입니다. 판매 수익과 실제 설비 견적은 포함하지 않습니다.

기준 후보: T = 330 K, τ = 6 min. 비용: 76.80 $/h

유량 1 L/min에서 τ=6 min은 부피 6 L입니다. 부피 비용 12×6=72 $/h, 온도 비용 0.24×(330−310)=4.8 $/h를 더하면 76.8 $/h입니다. 이 기준안은 비용뿐 아니라 제품 규격도 확인된 비교 출발점입니다.

서로게이트 최적화 문제

$$\min_{T,\tau} J\left(T,\tau\right)$$

$$\hat{\mathrm{C}} = f_\theta\left(T,\tau\right)$$

$$\hat{\mathrm{C}}_B \geq .38, \hat{\mathrm{C}}_C \leq .25, \hat{\mathrm{C}} \geq 0$$

입력 범위와 scaling은 6주차 모델과 같습니다. 목적함수는 6주차 비용 지표의 12배이므로 무보정 모델의 최적 입력도 같습니다.

5·6주차의 ReLU MILP를 사용합니다. 농도 제약에는 7주차 비용 epigraph LP를 자동으로 적용하지 않습니다.

모든 후보의 목적값에 양수 12를 곱하면 비용 순서는 유지됩니다. 그래서 6주차와 최적 입력이 같고 비용 단위만 바뀝니다. 제품 규격은 신경망 예측에 걸려 있으므로 그 순서가 실제 가능해의 비용 순서를 보장하지는 않습니다.

오차와 종료 상태의 구분

검사	비교 대상
정식화 오차	MILP 출력과 같은 입력의 신경망 forward 출력
예측 오차	신경망 출력과 기준 공정 출력
제약 위반	기준 공정 출력과 제품 규격
최적화 gap	학습 모델의 incumbent와 유효 bound

이번 무보정 풀이의 MILP·forward 차이는 10^{-12} mol/L보다 작습니다. 그래도 기준 공정의 제품 농도는 규격에 못 미칩니다.

평균 예측 오차와 선택 지점 오차

학습에 사용하지 않은 997개 입력을 전체 box에서 균등하게 생성했습니다. RMSE는 A 0.00535, B 0.00439, C 0.00527 mol/L입니다.

최적 후보에서는 B를 0.00884 mol/L 높게 예측합니다. B의 예측값이 바로 규격 경계에 있으므로 이 정도의 오차도 위반으로 이어집니다.

최적 후보에서의 오차와 독립 평가 평균을 함께 보고해야 선택 지점의 규격 위반을 놓치지 않습니다.

최적화는 규격 여유를 줄여 비용을 낮추는 경향이 있어 예측 B가 하한에 닿습니다. 그 점에서는 작은 과대 예측도 바로 규격 위반이 됩니다. 전체 영역 평균 RMSE와 별개로 선택점의 오차 방향과 규격 여유를 계산합니다.

무보정 후보의 기준 공정 재검증

항목	값
T / τ	342.0593 K / 2.52444 min
예측 B / 기준 B	0.380000 / 0.371157 mol/L
기준 C	0.178136 mol/L
B 규격 부족량	0.008843 mol/L
계산 비용	37.9875 $/h

이 후보는 제품 규격을 위반하므로 채택 목록에서 제외합니다. 비용이 낮다는 이유로 feasible 기준 후보보다 낫다고 평가하지 않습니다.

B 하한에서 예측 여유가 0인데 과대 예측이 0.008843이므로 실제 여유는 −0.008843입니다. C는 0.25−0.178136=0.071864 mol/L의 여유가 남습니다. 한 규격만 실패해도 후보 전체는 받아들일 수 없습니다.

입력 영역과 데이터 지원

후보가 training box 안에 있어도 주변 데이터가 적거나 응답이 빠르게 변하면 오차가 커질 수 있습니다. Box 내부라는 사실만으로 내삽의 정확성을 보장하지는 않습니다.

입력별 범위, 정규화 좌표, 가까운 학습점까지의 거리와 경계 부근 오차를 확인. 범위를 넓힌 최적화는 별도의 모델 검증이 필요합니다.

정식화의 유효 bounds도 새 영역에 맞게 다시 계산

물리적 일관성과 제품 feasibility

$$r_{bal} = \left| \hat{C}_A + \hat{C}_B + \hat{C}_C - 1.2 \right|$$

$$v_B = \max\left(0, .38 - C_B\right)$$

$$v_C = \max\left(0, C_C - .25\right)$$

농도 합, 음의 농도와 제품 규격을 따로 기록합니다. 합이 정확해도 B가 낮을 수 있고, 모든 농도가 양수여도 C 규격을 넘을 수 있습니다.

4주차의 등식 projection은 지정된 선형 등식을 맞춥니다. 제품 규격이나 비선형 공정 응답의 정확성까지 보장하지는 않습니다.

한쪽 방향 오차를 이용한 margin

$$\hat{C}_B \geq .38 + \delta_B$$
$$\hat{C}_C \leq .25 - \delta_C$$

규격 위반 위험 방향: B 과대예측, C 과소예측. 별도 calibration grid의 오차로 δ_B = 0.02130, δ_C = 0.01305 mol/L를 계산

961개 점에서 관측한 최대 오차입니다. 전체 연속 영역의 오차 상한을 증명한 값은 아니므로 새 후보를 다시 공정식에 넣습니다.

B는 많이 나와야 하므로 모델이 실제보다 높게 말하는 오차를 막아야 합니다. C는 적게 나와야 하므로 모델이 실제보다 낮게 말하는 오차를 막아야 합니다. 두 규격의 방향이 달라 margin을 더하는 쪽과 빼는 쪽도 달라집니다.

한쪽 방향 margin의 계산

오차를 e=예측−기준으로 정의합니다. B에서는 e가 양수일 때, C에서는 e가 음수일 때 위험한 방향입니다.

항목	B 하한	C 상한
원래 규격	기준 $B \geq 0.38$	기준 $C \leq 0.25$
적용 margin	$\delta_B = 0.02130$	$\delta_C = 0.01305$
예측에 요구할 값	$\hat{B} \geq 0.40130$	$\hat{C} \leq 0.23695$
오차가 가정한 한계일 때	$0.40130 - 0.02130 = 0.38$	$0.23695 + 0.01305 = 0.25$

이 마지막 행은 오차 한계가 그 입력에서 성립할 때의 계산입니다. calibration 961점의 최대값은 보지 않은 모든 점의 한계를 증명하지 않습니다. 그래서 margin을 넣은 다음 후보도 기준 공정으로 다시 계산합니다.

표본에서 margin을 구하는 연산은 $\delta_B = \max(0, \max_i e_{B,i})$, $\delta_C = \max(0, \max_i(-e_{C,i}))$입니다. B 오차 $[-0.003, 0.008, 0.002]$라면 0.008, C 오차 $[0.004, -0.006, -0.001]$라면 0.006을 사용합니다. 절댓값 최대와 달리 규격을 위반시키는 쪽만 선택합니다.

Margin 후보의 비용과 규격

항목	결과
T / τ	329.1148 K / 4.66529 min
기준 B / C	0.392935 / 0.174547 mol/L
기준 공정 feasibility	규격 충족
비용	60.5710 $/h
기준 후보 대비 절감	16.2290 $/h

전체 영역의 큰 오차를 margin으로 사용하면 일부 지역에서는 비용을 많이 늘릴 수 있습니다. Margin 크기와 실제 선택 지점의 오차를 함께 비교합니다.

기준안과 비교한 절감은 76.8000−60.5710=16.2290 $/h입니다. B 여유 0.012935, C 여유 0.075453 mol/L가 모두 양수인지 먼저 확인한 뒤 절감을 계산합니다.

추가 데이터 위치의 선택

무보정 후보 주변의 정규화 좌표에서 각 축으로 −0.06, 0, +0.06을 이동한 3 × 3 격자를 계산. 원래 입력 box로 잘라낸 뒤 공정 출력 9개를 얻습니다.

데이터 용도: 후보 주변의 잔차 보정. 최종 평가용 997개 입력과 별도 구성

새 점은 제약 경계·현재 후보·오차 방향을 확인하도록 고릅니다. 실제 실험이라면 접근 가능한 조건과 실험 비용도 제한에 포함합니다.

국소 잔차 모델과 제한 영역

$$x_1 = \frac{T - 310}{40}, x_2 = \frac{\tau - 2}{8}$$

$$C^{corr}\left(x\right) = f_\theta\left(x\right) + \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2$$

9개 점의 기준 출력과 예측 출력 차이에 affine 모델을 맞춥니다. 최적화 입력은 그 격자의 box로 제한하고, 양쪽 제품 제약에 0.002 mol/L margin을 사용

이 margin은 휴리스틱 값입니다. Affine 보정은 MILP 구조를 유지하지만 잔차의 균일한 오차 상한을 제공하지는 않습니다.

보정값은 기준−예측입니다. 모델이 B를 0.008843 높게 예측한 점에서는 보정 방향이 −0.008843입니다. 부호를 반대로 두면 이미 높은 B 예측을 더 올리므로, 한 점에서 보정 전후 출력을 직접 확인합니다.

국소 데이터의 좌표와 회귀 행렬

후보 (342.0593 K,2.52444 min)의 scaled 좌표는 [(342.0593−310)/40,(2.52444−2)/8]≈[0.80148,0.06556] 입니다.

축	scaled offset	물리 단위 offset
온도	±0.06	±2.4 K
체류시간	±0.06	±0.48 min

```
design = np.column_stack((np.ones(len(x_local)), x_local))
residual = reference_y - network_y
beta = np.linalg.lstsq(design, residual, rcond=None)[0]
corrected_y = network_y + design @ beta
```

9개 입력의 design은 (9,3), 세 성분 residual도 (9,3), beta는 (3,3)입니다. design의 한 행 $[1,x_1,x_2]$와 beta를 곱하면 세 성분의 보정값이 나옵니다. 이 회귀가 본 범위 안으로 다음 최적화 영역을 제한하되, 남은 오차는 새 후보에서 확인합니다.

학습된 보정 계수의 수치 대입

제공 실행의 B 보정 계수는 [−0.0160962605,0.0074357617,0.0823403944]입니다. 국소 후보 (339.815193 K,2.870934 min)의 좌표는 x_1=0.745379824,x_2=0.108866748입니다.

B 보정의 항	계산값 [mol/L]
절편	−0.0160962605
온도 좌표 항	0.0074357617×0.745379824=0.0055424667
체류시간 좌표 항	0.0823403944×0.108866748=0.0089641309
합	−0.0015896628

원래 신경망 B≈0.3835896628에 이 합을 더하면 보정 예측은 0.382000입니다. 같은 입력의 기준값 0.3768201356과 비교하면 오차 0.0051798644가 남습니다.

최소제곱은 아홉 점의 제곱오차 합을 줄입니다. 모든 점을 통과하는 보간 조건이나 새 후보에서 정확해야 한다는 제약은 없습니다. 회귀 계수의 계산이 맞아도 후보 재검증이 필요한 이유입니다.

국소 보정 후보의 재검증 실패

항목	결과
T / τ	339.8152 K / 2.87093 min
보정 예측 B	0.382000 mol/L
기준 B	0.376820 mol/L
B 규격 부족량	0.003180 mol/L
비용	41.6069 $/h

새 데이터 9개와 국소 영역 제한을 적용했어도 이 후보는 기각합니다. 보정 후의 오차가 margin 0.002보다 큽니다.

후보 지점의 새 잔차는 다음 보완 데이터가 됩니다. 기각된 후보의 비용을 실현한 절감액으로 보고하지 않습니다.

보정 모델은 0.382를 예측했지만 실제는 0.376820입니다. 오차 0.005180에서 확보한 여유 0.002를 빼면 부족량 0.003180이 남습니다. 새 데이터를 넣었다는 사실만으로 오차가 margin 안에 들어왔다고 가정할 수 없습니다.

기준 공정식을 이용한 후보 보완

기준식이 저렴하게 계산되는 이 예제에서는 T = 339.8152 K를 고정하고, B = 0.382를 만족하는 작은 쪽 τ를 직접 계산합니다. 원래 전체 입력 범위에서 계산하며 국소 보정 box에 묶지 않습니다.

τ = 3.08559 min에서 기준 C는 0.199530 mol/L이고 비용은 44.1828 $/h. 원래 규격을 모두 만족합니다.

이 후보의 규격 충족은 기준식으로 직접 확인한 결과이며, 국소 보정 모델의 보장 범위에는 포함되지 않습니다.

B 규격에서 체류시간 이차식으로

온도를 고정하면 k_1, k_2가 숫자로 정해집니다. 목표 B 농도를 b라 두고 농도식의 양의 분모를 곱합니다.

순서	관계식
B=b	$1.2k_1\tau = b(1+k_1\tau)(1+k_2\tau)$
분모 전개	$1.2k_1\tau = b[1+(k_1+k_2)\tau+k_1k_2\tau^2]$
한쪽으로 모으기	$bk_1k_2\tau^2+[b(k_1+k_2)-1.2k_1]\tau+b=0$

330 K에서 $b=0.4$이면 $0.008\tau^2-0.12\tau+0.4=0$이고, 0.008로 나누면 $(\tau-5)(\tau-10)=0$입니다. $B \ge 0.4$는 두 근 사이 $[5,10]$에서 성립합니다.

비용은 같은 온도에서 τ가 작을수록 낮으므로 5분을 먼저 확인합니다. 이때 $C=0.1\times5\times0.4=0.2\le0.25$입니다. 10분에서는 $C=0.4$로 상한을 위반하므로 B 조건만으로는 부족합니다.

작은 근의 계산과 후보 재검증

T=339.8152 K, b=0.382에서 $a=bk_1k_2$, $d=b(k_1+k_2)-1.2k_1$을 계산합니다. 판별식이 음수이면 이 온도에서 B=b인 실수 체류시간이 없습니다.

```
k1 = 0.2 * np.exp(40000 / 8.314 * (1/330 - 1/T))
k2 = 0.1 * np.exp(50000 / 8.314 * (1/330 - 1/T))
a = b * k1 * k2
d = b * (k1 + k2) - 1.2 * k1
disc = d*d - 4*a*b
tau = 2*b / (-d + np.sqrt(disc))
```

이 경우 $k_1\approx0.3047$, $k_2\approx0.1693$/min이고 $\tau\approx3.08559$ min입니다. 작은 근 식은 $a>0, d<0, \text{disc}\geq0$인 경우를 사용합니다. 후보마다 원래 τ 범위와 기준 B,C를 다시 검사합니다.

기준 $C\approx0.199530<0.25$이며 비용은 $12\times3.08559+0.24\times(339.8152-310)\approx44.1828$ \$/h입니다. 초기 기준안 대비 절감은 $76.8-44.1828=32.6172$ \$/h입니다.

작은 근 공식의 유리화

이차식 aτ²+dτ+b=0에서 D=d²−4ab입니다. a>0,d<0,D≥0이면 작은 근은 (−d−√D)/(2a)입니다. 분자·분모에 −d+√D를 곱합니다.

$$\frac{-d-\sqrt{D}}{2a}=\frac{d^2-D}{2a(-d+\sqrt{D})}=\frac{2b}{-d+\sqrt{D}}$$

d²−D=4ab를 약분한 결과입니다. 비슷한 두 양수 −d와 √D의 뺄셈을 합으로 바꿔 유효 숫자의 손실을 줄입니다.

330 K,b=0.4 예에서는 a=0.008,d=−0.12,D=0.0016,√D=0.04입니다. 작은 근은 0.8/(0.12+0.04)=5, 큰 근은 (0.12+0.04)/0.016=10 min입니다. 계산한 근을 다시 원래 B 식과 C 규격에 대입해야 후보 판정이 끝납니다.

기준 공정의 비교용 최적화

각 T에서 B = 0.38의 작은 쪽 τ를 이차방정식으로 구합니다. τ 범위와 C 규격을 확인한 뒤, 4,001개 온도 격자와 최선 격자점 주변의 1차원 탐색을 사용

비교용 후보: T = 344.9116 K, τ = 2.75110 min. 비용: 41.3920 $/h

이 계산은 feasible benchmark를 제공합니다. 연속 전체 영역의 전역 최적값에 대한 인증된 bound는 아니므로, 비용 차이를 관측된 benchmark 차이로 보고합니다.

온도 하나를 고정하면 비용은 τ에 대해 증가하므로 B 하한을 만족하는 가장 작은 τ부터 검사합니다. 다만 τ의 상하한과 C 규격이 남아 있습니다. 모든 온도의 작은 근이 곧 가능해인 것은 아닙니다.

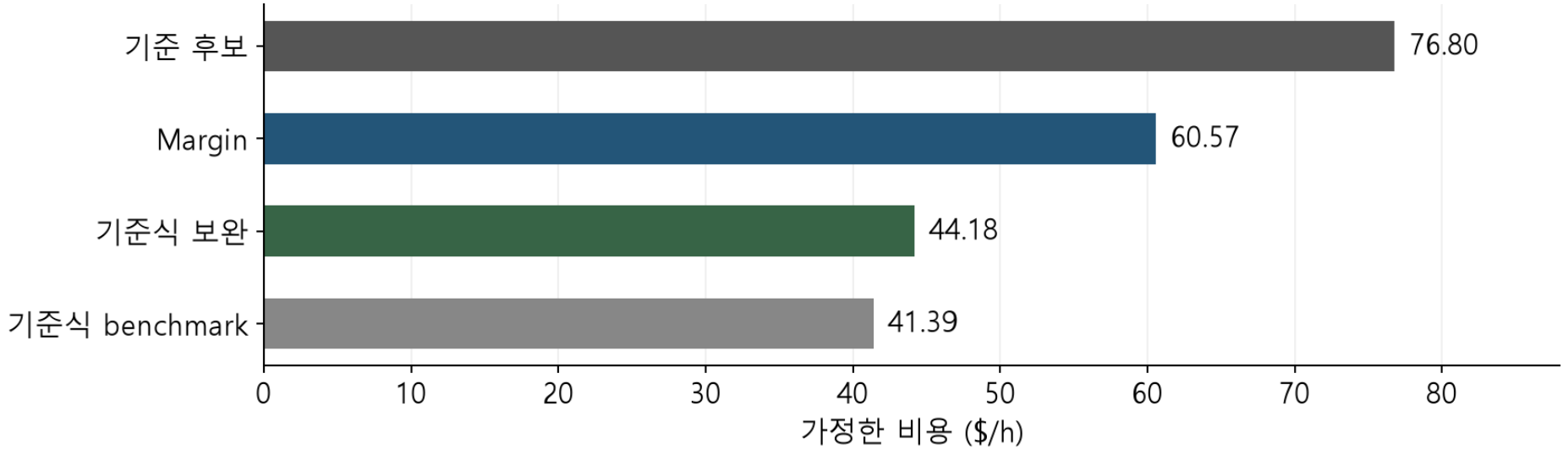
후보별 기준 공정 결과

후보	B (mol/L)	비용 ($/h)	규격
기준 후보	0.40909	76.800	충족
무보정 MILP	0.37116	37.988	위반
Margin MILP	0.39293	60.571	충족
국소 보정	0.37682	41.607	위반
기준식 보완	0.38200	44.183	충족
기준식 benchmark	0.38000	41.392	충족

표의 B는 모두 같은 기준 공정식으로 계산했습니다. 규격은 B·C·비음수 농도·농도 합을 함께 확인했습니다.

각 행의 규격 검사는 그 행의 기준 농도 전체를 사용합니다. B만 표에 보여도 C와 농도 합·비음수 조건을 함께 검사합니다. 실패한 행의 낮은 비용은 가능한 절감액 순위에 포함하지 않습니다.

Feasible 후보의 비용 비교



기준식 보완 후보는 초기 기준 후보보다 32.6172 $/h 낮습니다. 비교용 benchmark와의 차이는 2.7908 $/h

모든 값은 가정한 비용 계수에 대한 계산입니다. 기준식 호출 비용과 모델 학습·최적화 시간을 별도로 기록합니다.

기준 보완안 44.1828에서 비교 후보 41.3920을 빼면 2.7908 $/h입니다. 이 값은 두 확인된 후보 사이의 비용 차이입니다. 비교 후보가 전역 최적이라고 증명되지 않았으므로 전역 최적 대비 regret으로 이름 붙이지 않습니다.

반복 절차와 채택 기준

1. 학습 모델·domain·context·제품 규격·비용을 고정
2. 후보를 구하고 forward 일치와 solver 종료 상태를 검사
3. 기준 공정식에서 원래 제약을 확인합니다. 실패하면 feasible 기준 후보를 유지합니다.
4. 추가 데이터를 얻어 모델이나 영역을 조정한 뒤 새 후보를 재검증

Trust-region 방법의 수렴에는 모델 정확도와 수락 규칙 등의 조건이 필요합니다. 이번 국소 보정 절차에서는 이 조건을 확인하지 않았으므로 수렴을 보장하지 않습니다.

Alexandrov, Dennis, Lewis and Torczon, A trust-region framework for managing the use of approximation models in optimization (1998), author manuscript

최종 보고서의 재현 항목

구분	기록
모델·데이터	동결 가중치 hash, scaling, 학습·calibration·평가·보완 데이터
문제	입력 범위, 고정 context, 단위, 목적함수와 제약
계산	Solver·버전·종료 상태·gap·시간·forward 오차
결정	후보별 기준 출력·위반량·비용·채택 여부
남은 검증	기준 모델 가정, 동특성·열관리·실험 검증 필요 항목

실습 실행과 보고 과제

```
python -m pip install -r requirements.txt
python week08_lab.py --output-dir my-results
```

코드 묶음은 6주차의 고정 네트워크와 필요한 계산 함수를 포함합니다. 결과 JSON, 후보 비교 CSV, 독립 평가 데이터와 보완 데이터 9개를 저장

Margin 또는 국소 격자 폭을 한 번 변경해 새 후보를 계산하고, 원래 규격으로 재검증합니다. 데이터 수와 비용을 기록하고 채택·기각 이유를 설명합니다.

해설 자료와 원문

8주차 해설과 연습에서 정상상태 수지, margin의 방향, 기준식 후보 계산과 비용 비교를 유도합니다.

6주차 강의 · 6주차 실행 모델

Alexandrov, Dennis, Lewis and Torczon, A trust-region framework for managing the use of approximation models in optimization (1998), author manuscript

OMLT: Ceccon et al., JMLR 23(349), 2022 · HiGHS