Copyright ⓒ 2025 KSAE
25SKSAE_B021

물리 지식 기반 연산자 학습을 통한 연소 화학반응 예측

조 준 형[1] · 유 지 형[*2]

University of Illinois Urbana-Champaign Mechanical Science and Engineering[1]·한양대학교 미래자동차공학과[2]

Prediction of chemical reactions of combustion through physics-informed operator learning

Junhyoung Jo[1] · Jihyung Yoo[*2]

University of Illinois Urbana-Champaign[1], Hanyang University[2]

Key words : Combustion(연소), Machine learning(기계 학습), Physics-informed machine learning(물리 지식 기반 기계 학습)

교신저자, E-mail: jihyungyoo@hanyang.ac.kr

연소 전산 유체(combustion computational fluid dynamics)는 유체역학과 더불어 유체에서 작용하는 화학적인 반응을 포함하는 연산과정을 필요로 한다. 아울러 이러한 화학적인 반응을 모델링 하기 위한 정확한 화학반응 메커니즘 또한 중요하다. 하지만 이러한 화학반응 메커니즘들은 대개 수십 가지 이상의 다양한 화학종들과 더불어 수백 가지가 넘는 화학반응들을 내포하고 있다. 그 결과, 이러한 화학반응을 계산하기 위한 연산 복잡도가 기하급수적으로 증가한다. 이와 더불어 유체역학의 특성시간과 화학반응의 특성시간의 차이로 인해 추가적인 연산 복잡도 증가를 야기한다. 이를 위해 화학반응 계산을 간략화하는 다양한 방법들이 제시되어왔다. 본 연구는 이러한 연산 복잡도를 줄이기 위한 연구들의 일환으로 물리 지식 기반 연산자를 통한 화학반응 예측을 제시한다.

물리 지식 기반 연산자는 물리 지식 기반 기계학습의 일종이다. 물리 지식 기반 기계학습은 데이터를 통한 학습이 아닌, 물리 정보를 기반으로 하는 기계학습 방법이다. 지배 방정식들 또한 이러한 물리 지식에 포함되며, 이러한 지배 방정식들을 기계학습의 손실함수에 입력해 줌으로서 기계학습 모델이 지배 방정식에 부합하는 해를 예측하는 방법이다. 물리 지식 기반 학습 방법은 기존 데이터 기반 학습에 비해서 데이터를 필요로 하지 않거나, 필요한 데이터 수가 줄어드는 장점이 있다.

물리 지식 기반 연산자 학습은 물리 지식 기반 기계학습을 바탕으로 연산자 학습을 하는 기계학습이다. 이는 지배 방정식과 경계 및 초기조건에 해당하는 하나의 해가 아닌, 다양한 경계 및 초기조건에서의 해 예측을 가능하게 한다.

화학반응 메커니즘은 시간에 대한 일차 상미분방정식들로 모델링 가능하다. 이러한 상미분방정식들을 손실함수를 통해 학습함으로써 물리 지식 기반 연산자 모델을 학습할 수 있다. 이렇게 학습을 완료한 모델은 다양한 초기조건에서의 화학반응을 시간에 따른 함수로 예측할 수 있다.