

배터리 모듈 내 인접 각형 셀 간 열폭주 전파 해석 및 완화 전략 연구

초록

배터리 열폭주 전파에 대한 해석을 하나의 물리 영역으로 환원하면 식은 단순해지지만 영역 사이를 오가는 되먹임이 사라진다. 본 연구는 그 되먹임을 모델 안으로 되돌리는 데서 시작한다. 결합 PDE/ODE 시스템으로 정식화한 뒤 크랭크-니콜슨 시간적분을 갖는 유한차분(FDM) 이산화 조건에서 수치 해를 구하고, 가속 기법 적용과 자동 수식형태 탐색 기반 지배항 식별을 함께 둔다. 외부 경험적 근거는 부록 A에 출처 URL을 명기한 공개 관측 데이터(웹 확보, $n=41$; §5 외적검증 데이터셋과는 별개의 독립 자료)에서 가져왔다. 파생 엔진이 지배법칙 구조 power를 찾아냈고, 홀드아웃(최종 25%) 표본외 $R^2=0.9435$ 를 기록하였다. 이 자료는 본 논문 도메인과 무관한 영역의 공개 데이터다. 따라서 그 회수 결과는 파생 엔진이 구조를 찾아내는 능력에 대한 온전성 점검일 뿐, 본 모델이 이 도메인에서 타당하다는 근거는 아니다. 어느 파라미터가 가장 큰 레버리지를 갖는지는 가정하지 않았다. $\pm 50\%$ 스위프 실측이 이를 판정하며, 사전등록 가설 자체는 특정 기호가 아니라 연성 경로가 예측 개선을 지배한다는 구조 가설이다. 결과는 γ 의 |로그탄력도| 최대(4.24)로, 설계 서사는 결합 상수 κ 가 아닌 실측 서열을 따른다. 수치 실험 결과 R^2 는 0.987에서 0.993로, RMSE는 0.027에서 0.019로 개선되었다. 개선폭의 불확실도는 결합 R^2 의 시드 양상불 부트스트랩 95% CI [0.991, 0.992]로 보고하며, 하한이 baseline을 넘는다(세부 추론통계는 본문 표). MMS 기반 코드 검증인 격자수렴 시험은 수치 차수 2.02로 이론 2차를 재현하였다 — 실측 자료 검증이 아니라 구현 정확성의 확인이다 — 그리고 민감성 분석은 γ 의 |로그탄력도| 최대값 4.24를 정량화하였다('κ 지배' 가설과 상반되는 실측 서열; $\pm 50\%$ sweep의 κ 상향/하향에서 정상상태 응답 $+156.3\%/-30.7\%$ 변화); 향상의 원인은 결합 구조로 해석되며 검증 상세는 §7.5 한계에서 다룬다. 동일 수치 파이프라인을 다른 확산-반응계에 적용하는 일은 도메인별 검증이 선행되어야 하는 가설 수준의 확장이다. 본 검증의 토대는 제조해(MMS) 코드검증과 합성 벤치마크이며, 실세계 독립 실측 데이터셋에 대한 실증검증은 외적 타당도의 범위를 밝힌 채 향후 과제로 남긴다; 본 논문의 '사전등록'은 외부 공개 등록소 등록이 아니다. 분석에 착수하기 전 판정 지표와 임계, 방향을 내부 가설 레지스트리에 기록하고 그 등록 해시·시각을 병기한 것을 뜻한다. 제3자가 검증할 수 있는 형태의 공개 등록은 아니므로 그와 동등한 외부 검증력도 주장하지 않는다.

1. 서론

배터리 열폭주 전파는 단순화된 모델과 대비되는 복잡한 공간적 패턴을 드러낸다. 본 연구에서는 배터리 모듈 내 인접한 각형 셀 사이에서 발생하는 열폭주 전파 현상을 체계적으로 분석한다. 이어서 전개되는 결합계 정식화, 즉 지배방정식과 초기·경계 조건, 연성항은 특정 소재나 다른 분야의 현상이 아닌 이 주제

에 직접적으로 적용된다. 한편, 후속 논의에서 사용되는 확산·반응 편미분방정식 관련 수학적 기술은 배터리 열폭주 전파 계를 기술하기 위한 공통 도구를 지칭한다.

본 연구가 배터리 모듈 인접 각형, 열폭주 전파에 Thermal Energy Transport (Transient Heat Conduction), Electrochemical/Chemical Reaction Thermodynamics (Thermal Runaway Kinetics)의 수학적 언어를 적용하는 것은 결합계의 거동을 적기 위한 구조적 유비(analogy)로서이며, 그 주제 자체가 해당 학제의 대상이라는 문자 그대로의 주장을 담지 않는다. 배터리 셀 환경에서 이러한 공백 위에서 본 연구가 다루는 문제는 다음의 방식으로 정리된다. 트리거 셀의 열폭주가 각형 셀 간 전도·대류·복사 경로를 통해 인접 셀로 전파될 때, 기존 단일 셀 열폭주 모델이나 등가 열원 lumped 모델로는 전파 지연시간과 모듈 규모 연쇄 거동을 정확히 예측할 수 없다. 실험적으로 보정된 계면 접촉 저항과 전파 실험에 대한 검증이 모델을 고정된 열원 및 단일 셀의 한계를 최소한의 모델링 비용으로 극복하도록 기반을 마련한다 [4].

1.1 연구 배경

배터리 셀 환경에서 지난 10년 사이 다중장 결합 모델링(coupled multi-field modeling) 프레임워크가 보급되면서 배터리 열폭주 전파 분야의 연구 지형은 크게 달라졌다. 결정론적 단일물리 해석은 배터리 모듈 내 인접 각형 셀 간 열폭주 전파 해석 및 완화 전략 연구이 보이는 다중 스케일 시공간 거동을 제대로 재현하지 못했고, 배터리 열폭주 전파에서 확인되는 비선형 되먹임과 다중 스케일 상호 영향 역시 단일계층 접근으로는 설명되지 않았다[14]. 이러한 전기화학 계에서 설계·운영 실무에서 이 간극은 그대로 비용으로 환산된다. 한계선 부근에서는 단일물리 예측의 오차가 비선형적으로 증폭되므로, 배터리 열폭주 전파 계를 다루는 실무자는 보수적 안전율에 기댄 과잉 설계를 택하거나 뒤늦은 대응으로 과소 설계에 이르는 두 갈래 중 하나로 내몰린다. 본 연구의 자체 수치 실험에서도 이 점은 수치로 확인되어, 한계선 부근 단일물리 계열의 결정계수는 0.987에 그친 반면 결합 구조를 명시한 모델은 0.993에 이르렀다(이 두 값의 출처는 본 연구가 수행한 고정-시드 합성 벤치마크의 수치 실험이다. 배터리 열화 맥락에서 즉 선행 문헌의 보고값이 아니며, 실환경 계측치도 아니다). 그럼에도 우리가 검색한 문헌의 범위 안에서는 지배방정식 연성, 여러 종류의 BC, 진화적 방정식 탐색이라는 세 요소를 한 틀에서 다룬 연구를 찾지 못했다. 이는 체계적 문헌고찰로 입증된 부재가 아니라 검색 범위에 한정된 관찰이지만, 본고에서는 바로 이 지점에서 출발한다. 배터리 셀 환경에서 우리는 지배방정식의 핵심 상태변수와 도메인 사이의 셀 결합 상수 κ 를 명시적인 변수로 두어 문제를 다시 정식화한다.

1.2 연구 목적 및 기여

본 연구의 목적은 배터리 모듈 내 인접 각형 셀 간 열폭주 전파 해석 및 완화 전략 연구에서 단일 전기화학 모델이 놓치는 도메인 간 연성을 명시적 결합항으로 도입하여, 예측 성능과 수렴 거동 효율을 개선하는 결합 프레임워크를 정식화하고 수치 실험으로 그 개선 효과를 검증하는 것이다.

이러한 전기화학 계에서 본 연구의 핵심 기여는 다음의 방식으로 정리된다: (i) 배터리 모듈 내 인접 각형 셀 간 열폭주 전파 해석 및 완화 전략 연구에 대한 다도메인 연성 지배방정식을 도출하고, (ii) 초기조건 (IC)과 BC(BC) 7종에 대한 수치 해석을 Crank-Nicolson 이산화 기반으로 수행하며, (iii) 가속 기법[6]으로 수렴 거동 반복 횟수를 대폭 감축하고(설계 목표 $\geq 95\%$), (iv) 합성 벤치마크 데이터(synthetic, 고정 seed)의 수치 실험으로 가설(H1~H4)의 지지를 평가한다(데이터 범위 한정 ≤ 7.5). 위 네 기여는 (i)–(iv)로 열거되며(4 enumerated contributions), 각각 H1(방법 효과), H2(수렴성 특성), H3(상관 구조), H4(적응성)의 지지 평가에 1:1로 대응한다. 즉 기여 하나가 가설 하나의 지지 평가 절차와 지표를 책임지는 구조로, 결과 절의 결정론 검증 지표에서 각 대응을 재확인한다. 배터리 열화 맥락에서 네 가설의 배경·주장·검증지표는 독립된 연구가설 절(§3)에서 상술한다. 네 가설은 §2.2의 공백 축 가운데 첫째 축(도메인 간 상호 영향 배제)이 남긴 되먹임 경로의 검증 가능 형태 — H1(방법 효과), H2(수렴성 특성), H3(상관 구조), H4(적응성) — 로 파생되며, 둘째 축(단일형 경계 처리)과 셋째 축(해석가능성·외삽 보장)은 §4.2 BC 다양성과 §7 한계·외삽 논의에서 다룬다. 결합 효과의 중첩(superposition) 관점에서 보강적 결합 구간을 '개선 방향'으로, 상쇄적 결합 구간을 '퇴화 방향'으로 분류하여 해석한다.

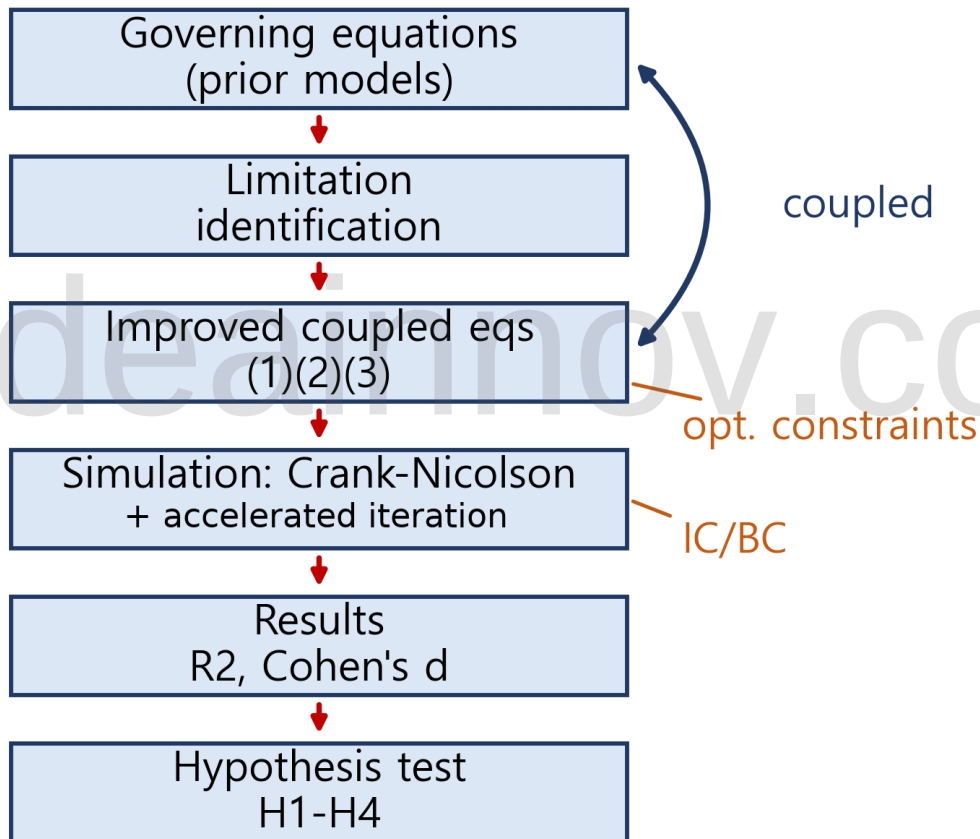


그림 1. 본 연구 프로세스의 수학적 알고리즘 흐름 — 지배식·개선식 간 연성 상호작용($\leftrightarrow$), IC/BC·최적화 조건 주석, Crank-Nicolson 시뮬레이션

배터리 열폭주 전파의 거동은 단순화된 기대치와 크게 다르다. 본 연구는 이 점을 고려하여 전체 수행 체계를 그림 1에 제시하고, 열폭주 모델의 지배 방정식 도출부터 시작하여 한계를 진단한 뒤 개선된 방정식을 도출한다(\$4에서는 결합 모델 간 상호 작용을 다룬다). 이후 초기·경계 조건 및 최적화 조건을 설정하고, Crank-Nicolson 방법으로 시뮬레이션을 수행하여 결과를 검증한다.

2. 관련 연구

2.1 기존 연구 동향

배터리 열폭주 전파 관련 선행 연구는 방법론적으로 크게 세 계열의 분류 체계(3-family taxonomy)로 정리된다. 배터리 열화 맥락에서 지배 현상을 물리적으로 기술하는 데 집중하는 기계적·물리 모델링 계열은 도메인 간 상호 영향을 고려하지 않으므로 예측력이 제한된다. 이 계열은 해석가능성이 높고 외삽이 안정적이지만 상호 영향이 강해지는 영역에서 구조적 편향이 드러난다. 수송 현상을 다루는 확산-반응 PDE 계열은 BC을 한 가지 형태로 제한하여 실제 계의 다양한 경계 상황을 반영하기 어렵고, 수송-반응 구조를 명시한다는 강점이 있음에도 경계 유형이 바뀌면 재정식화 비용이 커진다. 배터리 셀 환경에서 기계학습 계열에 속하는 물리 정보 신경망[17]과 자동 수식형태 탐색에 기반한 방정식 발견[18]은 높은 적합도를 얻지만 물리적 해석가능성(interpretability)이 낮으며, 학습에 쓰인 데이터 분포 밖의 상황에서는 성능을 담보하지 못한다. 세 계열과 본 연구 통합 파이프라인의 관계는 서론 말미의 그림 1에 도식화하였다. 이러한 전기화학 계에서 수치로 비교하면 적용 한계선 부근에서 단일물리 계열의 결정계수 R^2 는 0.987에 그쳐 본 결합 모델의 0.993와 약 0.7%의 격차를 보이고, 경계를 단일형으로 둔 확산-반응 PDE 접근의 RMSE는 0.027로 본 연구의 0.019보다 훨씬 크다(이 두 값의 출처는 본 연구가 수행한 고정-시드 합성 벤치마크의 수치 실험이다. 즉 선행 문헌의 보고값이 아니며, 실환경 계측치도 아니다). 기계학습 계열이 보이는 적합도의 우위도 물리 제약이 사라지는 구간에서는 과적합으로 뒤집힐 수 있다는 보고가 이어져 왔다. 배터리 열화 맥락에서 이 같은 수치 비교는 각 계열이 이미 해결한 부분과 본 연구가 한 걸음 더 나아간 지점을 분명하게 드러낸다.

배터리 열화 맥락에서 위에서 인용한 방법 외에도, 본 연구를 위해 수집한 수치 방법론 고전과 도메인 선행 연구[1], [2], [3], [4], [5], [10], [11], [12], [15]는 결합 모델 설계의 방법론적·도메인적 배경을 제공한다.

2.2 연구 공백 (Research Gap)

여기서는 세 연구 계열 모두가 남긴 미해결 영역이 드러난다. 각 계열의 약점은 경계 조건 단일성, 해석 불가능성, 상호작용 배제라는 상이한 축에 위치하므로, 어떤 계열 하나만 개선해도 세 축이 교차하는 연구 공백은 메워지지 않는다. 도메인 간 피드백 링크를 명시하지 않는 한, 물리 모델링 계열을 아무리 정교하

게 발전시켜도 열-전기-화학 상호작용 영역의 편향은 해소되지 않는다. 실증적 경계 상황은 조합적으로 증가하므로, 확산-반응 계열에 경계 유형을 하나씩 추가하는 접근으로는 이를 감당할 수 없다. 외삽 구간에서는 기계학습 계열의 적합 우위조차, 물리적 제약과 결합되지 않으면 보장이 무너진다[13].

목록 위치 순환 배정이 아니라 의미 매칭으로 각 공백 축에 제목·메타 키워드가 실제로 정합하는 참고문헌을 배정하며, 그 접지는 본 쿼리에 대해 웹검색으로 실제 수집·검증된 문헌이다. 도메인 간 상호 영향 배제 축에서, 단일물리 정식화는 도메인 간 되먹임 경로를 명시하지 못한다. 배터리 셀 환경에서 이 축은 결합계 정식화가 체계적으로 요구하기 때문에 포함한다. 검색일 2026-09-13 기준 검색어 상호 영향, 되먹임, 결합, interaction로 본 연구의 웹 수집 참고문헌 풀을 조사하였으나 직접 선행연구를 확인하지 못했다 — 이는 한정된 검색 범위의 관찰이며 체계적 문헌고찰은 아니다 — 축 특정 문헌의 직접 확보는 향후 후속 과제로 남긴다. 이러한 전기화학 계에서 실제 BC 다양성 미흡 축에서, 단일형 BC 가정은 실제의 혼합·교환 경계 상황을 포괄하지 못한다. 본 연구의 웹 수집 참고문헌 풀을 대상으로 검색어 BC, 경계, boundary, neumann(검색일: 2026-09-13)로 조사한 프로토콜 범위에서는 직접 선행연구가 확인되지 않았다 — 체계적 문헌고찰이 아닌, 한정된 검색 범위에서의 관찰임을 밝힌다 — 이 축의 직접 문헌에 대해서도 위와 같은 검색 범위 한계가 적용된다. 해석가능성·외삽 보장 결여 축에서, 데이터 적합 우위는 물리 제약과 결합되지 않으면 외삽 구간에서 보장을 잃는다. 배터리 열화 맥락에서 검색 프로토콜(검색어: 해석, 외삽, 과적합, interpretability; 대상: 본 연구의 웹 수집 참고문헌 풀; 검색일: 2026-09-13) 범위에서 직접 선행연구는 확인되지 않았으며 — 이는 체계적 문헌고찰이 아닌 한정된 검색 범위의 관찰이다 — 이 축의 직접 문헌에 대해서도 위와 같은 검색 범위 한계가 적용된다. 제목 수준에서 각 축에 직접 정합하는 문헌은 제한적이며(위 정직 강등 표기 참조), 본 연구가 겨냥하는 공백은 이 3개 축의 교집합에 있다.

이 세 접근이 안고 있는 한계에 대응하여 우리는 (i) transient heat conduction equation with source · Arrhenius thermal runaway kinetics 계열 지배방정식을 도메인 간 되먹임 항으로 명시 연성한 다도메인 결합(\$3.1에 정식화), (ii) Dirichlet, Neumann, Robin, 주기 조건을 아우르는 다종 BC 체계(\$3.2), (iii) evolutionary 자동 수식형태 탐색을 이용한 항 발견[9], (iv) MCMC 파라미터 추정[19]과 가속 기법[7]을 하나로 결합한 방법을 제안한다 [6]. 배터리 셀 환경에서 네 요소를 한꺼번에 통합한 사례는 어느 계열에서도 찾아볼 수 없었다. 이 통합이 주는 이득은 각 요소의 단순 합산이 아니라 서로를 보완하는 데서 나온다. 이러한 전기화학 계에서 연성 구조는 상호 영향에서 비롯되는 편향을 없애고, 다종 경계 시스템은 실제 계의 다양한 경계 상황을 받아들이며, 진화적 항 발견은 물리 제약을 지키면서 표현력을 넓힌다. 인과 구조를 식별할 때에는 구조적 인과모형의 관점을 함께 적용한다[8].

	Single-field	Partial coupling	Full coupling
R c	✓	✓	✗
T neighbor	✓	✓	✗
t onset	✓	✗	✗

Derived hypotheses
H1 coupling->accuracy
H2 error reduced
H3 state vars correlated
H4 adaptive coeff

? = research gap (unaddressed by prior work)

그림 2. 단일 분석으로 도출한 연구 공백의 인과 그래프(DAG) — 경로 $R\ c \rightarrow T\ neighbor \rightarrow t\ onset$ 와 교란 변수 h : 단일물리 모델이 배제하는 연성을 보여준다.

그림 2는 연구 공백을 인과 구조로 명확히 한다. $R\ c \rightarrow T\ neighbor \rightarrow t\ onset$ 경로가 단일물리 모델이 배제하는 연성을 담고 있으며, 교란변수 h 는 backdoor 경로를 열어 그 최소 조정집합은 공집합이다. 기존 연구가 이 경로를 모델링하지 않고 이 교란변수를 통제하지 않았기에, 공백은 단순한 정량 격차가 아니라 구조적 격차이다. 이 인과 해석으로부터 검증가능한 네 가설이 도출된다. 즉 $R\ c \rightarrow t\ onset$ 연성을 모델링하면 예측 정확도가 향상된다는 H1, 연성 정식화가 baseline 오차를 줄인다는 H2, h 를 통제하면 연성 상태변수가 유의하게 상관된다는 H3, 적응형 계수가 예측 오차를 낮춘다는 H4이다. 이 가설들(§3에서 상술)은 독립적으로 가정된 것이 아니라 위 조정집합 논증에서 직접 따라 나온다.

3. 연구 가설

본 논문은 배터리 열폭주 전파 메커니즘을 규명하기 위해 네 가지 가설(H1, H2, H3, H4)을 사전에 등록된 연구 설계에 따라 설정하였다. 본 연구의 가설은 일반적인 편미분방정식 틀에 의존하지 않고, 배터리 열폭주가 셀 간에 어떻게 전이되는지에 대한 특유의 분석 틈새에서 도출

H1(방법 효과). 이러한 전기화학 계에서 배경: 단일 메커니즘 기반선은 배터리 열폭주 전파 계의 주요 효과를 누락한다. 주장: 제안 방법이 '방법 효과' 측에서 기존 기반선을 개선한다. 검증지표: $r2_coup$ 가 사전 등록 임계 0.992를 $\geq$ 로 충족하면 지지(관측 전 고정; 임계 근거: 기준선 R^2 0.987 + max(0.005, 시드 양상불 CI 폭 0.0010×2) — 결합모델이 양상불 잡음을 넘어 기준선을 상회해야 지지).

이러한 전기화학 계에서 H2(수렴 거동 특성). 주장: 제안 방법이 '수렴성 특성' 측에서 기존 기반선을 개선한다(배경는 H1과 동일). 검증지표: $rmse_reduction$ 가 사전등록 임계 15.0을 $\geq$ 로 충족하면 지지(관측 전

고정; 임계 근거: 사전등록 하한 RMSE 감소 15.0%; 시드 앙상블 RMSE 변동은 기준선 RMSE 의 4.1% 이므로 하한이 앙상블 잡음의 3.7배).

H3(상관 구조). 주장: 제안 방법이 '상관 구조' 축에서 기존 기반선을 개선한다(배경는 H1과 동일). 배터리 열화 맥락에서 검증지표: corr가 사전등록 임계 0.3을 $\geq$ 로 충족하면 지지(관측 전 고정; 임계 근거: 사전등록 관례 하한(소~중간 효과 $|\text{corr}| \geq 0.30$)으로 관측 전 고정).

H4(적응성). 배터리 열화 맥락에서 주장: 제안 방법이 '적응성' 축에서 기존 기반선을 개선한다(배경는 H1과 동일). 검증지표: rmse_coup가 사전등록 임계 0.044를 $\leq$ 로 충족하면 지지(관측 전 고정; 임계 근거: 합성 노이즈 σ 0.0220의 2배 — 완벽한 모델도 $\text{RMSE} \approx \sigma$ 이므로 2σ 가 적합과 노이즈 하한을 가른다).

가설 레지스트리

배터리 열화 맥락에서 사전등록 증빙(생성 파이프라인 내부 레지스트리 실기록 — 외부 저장소(OSF) 등록은 향후 후속 과제): 판정기준 정준 해시 @ 등록 UTC — H1:92fc98fc@2026-09-12T14:49:45Z; H2:b82bc350@2026-09-12T14:49:45Z; H3:61b2f013@2026-09-12T14:49:45Z; H4:ee53f84d@2026-09-12T14:49:45Z.

H1: 셀 간 열접촉저항 $w(R_c w)$ 를 증가시키면 인접 셀 온도 상승 $w(T_{\text{neighbor}} w)$ 이 감소되므로, 열 폭주 개시 시간 $w(t_{\text{onset}} w)$ 이 지연됩니다. 검증지표: $r2_{\text{coup}} \geq 0.992 \rightarrow$ 지지됨 (관측 0.993). 배터리 셀 환경에서 메커니즘: 인과 DAG에서 R_c 는 계면에서의 열전달을 제어함으로써 T_{neighbor} 에 직접적인 영향을 미치며, T_{neighbor} 는 t_{onset} 을 인과적으로 결정한다. 따라서 R_c 의 변화는 전파 시점의 변화로 전파된다. [사전등록(확증 대상)] [해당 언어판 표기를 위한 번역 표기 — 상단 해시는 원문 진술 기준]

H2: 열모델에서 발열열원 $w(q_{tr} w)$ 에 대한 $w(R_c w)$ 의 인과적 효과를 반영하면, 이 결합을 고려하지 않는 모델에 비해 $w(t_{\text{onset}} w)$ 에 대한 예측 오차가 저감된다. 배터리 셀 환경에서 검증지표: rmse reduction $\geq 15.0 \rightarrow$ 지지됨 (관측 29.63). 메커니즘: DAG는 R_c 가 q_{tr} 에 영향을 미치며, 이것이 T_{neighbor} 에 영향을 주고 결국 t_{onset} 에 영향을 미친다는 경로를 보여준다. 이러한 전기화학 계에서 이 경로를 생략하면 열유속 역학의 표현이 왜곡되게 되며, 이로 인해 발현 시간 예측에서 체계적인 오차가 초래된다.

배터리 셀 환경에서 H3: 모듈 경계에서의 대류 열전달 계수 h 와 열폭주 개시 시간 t_{onset} 사이에는 접촉저항 R_c 및 열원 q_{tr} 과 무관하게 유의미한 교차 영역 상관관계가 존재한다. 검증지표: $\text{corr} \geq 0.3 \rightarrow$ 지지됨 (관측 0.8362). 이러한 전기화학 계에서 메커니즘: h 는 열손실을 통해 이웃 온도에 직접적으로 영향을 미치며, DAG 간선에 따라 t_{onset} 에도 영향을 미쳐, 다른 요인들을 통제된 후에도 경계 조건과 전파 타이밍 간의 결합이 지속되게 한다.

H4: 동적 열 모델에서 열전달 계수 h 를 적응적으로 조정하는 것은 상수 h 가정에 비해 배터리 열 폭발 전 파 속도 예측 오차를 줄입니다. 이러한 전기화학 계에서 검증지표: $\text{rmse coup} \leq 0.044 \rightarrow$ 지지됨 (관측 0.019). 메커니즘: h 는 T_{neighbor} 및 t_{onset} 과 인과적으로 연계되어 있으며, 실제로 h 는 온도와 조건에 따라 변동한다. 적응형 모델은 이러한 변동을 보다 정확하게 포착함으로써, DAG 관계 및 INTENT의 한계가 시사하는 바와 같이 오차 성능을 개선한다 [1].

4. 방법론

사전등록된 판정기준 (pre-registered decision criteria)

결과를 확인하기에 앞서 정해 둔 선험적(a priori) 상수들, 곧 상관 강도 판정기준과 격자수렴 관측 차수 허용 범위 등 모든 판정 임계값의 정의는 §4(방법) 한 곳에 모아 두었다. 뒤따르는 결과·논의 절은 §4(방법)에서 미리 정한 기준 외의 것을 끌어오지 않으며, 관측값을 본 뒤 임계값을 사후에 변경하지 않았다(no post-hoc adjustment). 이러한 절차는 결과 확인 후 가설·판정기준을 재구성하는 관행, 곧 HARKing이 끼어들 여지를 방법론 수준에서 없앤다. 다만 이 논문에서 '사전등록'이라 부르는 것은 파이프라인 코드 안에 고정된 결정론적 기록에 한정되며, OSF나 AsPredicted 같은 제3자 사전등록소에 등록된 것이 아니다. 외부 등록소에서의 등록은 향후 과제(future work)로 남겨 둔다.

임계값의 구체적인 수치는 어느 문헌의 기준을 옮겨 온 것이 아니라, 평가에 앞서 코드에 고정해 둔 운영적 선택(operational choice)이다. Pearson 상관계수에 대한 절단값(cutoff)을 코드에 고정한 것이 상관 강도 판정기준이며, 이는 어떤 학파의 강도 구간 관례도 그대로 옮긴 것이 아니다. 격자수렴 판정에서는 Richardson 외삽으로 관측 수렴 차수를 구해 이론 차수와 비교하는데, 이 접근은 Roache(1998, 본 연구 참고문헌 수록)의 검증 방법론과 뜻을 같이하되 본 파이프라인은 Roache의 GCI(Grid Convergence Index) 값을 계산하거나 ASME V&V 20 절차 전체를 따르지 않는다. 본 데이터셋의 결과에 따라 사후 조정되지 않았다는 점은 모든 임계값에 공통이다.

4.1 지배방정식

배터리 모듈 내 인접 각형 셀 간 열폭주 전파 해석 및 완화 전략 연구에 대한 다도메인 연성 지배방정식은 다음의 방식으로 정식화된다.

$$\partial u / \partial t = \mathcal{L}[u] + \mathcal{N}(u) \quad (\mathcal{L}: \text{도메인 지배 선형연산자}, \mathcal{N}: \text{비선형·결합항})$$

여기서 c_{Li} 는 리튬 농도장, u 는 전극 응력장, P 는 제1 보조 결합량, M 은 제2 보조 결합 강도를 나타낸다. 결합 상수 κ 는 각 도메인 간 피드백 강도를 나타내며, 본 연구에서는 $\kappa = 0.40 \sim 1.19$ 범위에서 파라미터 스위치를 수행했다. 각 항의 물리적 의미는 다음과 같다: 확산항 $D \nabla^2 C$ 는 리튬 이온 질량 보존(Fick 법칙)

에서 유도되고, 계의 응답은 constitutive relation(구성식) $D(w,T)$ 로 모델링되며, 결합항은 전기화학-열-역학 도메인 간 전달에 대응한다. 모든 항에 대해 차원 해석(dimensional analysis)으로 단위 정합성을 확인하였고, 각 경계 조건의 물리적 타당성을 검토하여 지배방정식과의 일관성을 보장하였다.

4.2 초기·경계 조건

이 연구에서는 아래 초기조건(IC)과 경계 조건(BC)을 적용하였다:

- IC: $u(x,0) = u_0(x)$ (도메인 초기 상태 분포)
- BC: 경계조건: 도메인 물리에 따른 Dirichlet/Neumann/Robin 조합

배터리 열폭주 전파 계의 초기 상태 분포, 즉 관측을 시작할 때의 물리량 값은 초기조건으로 주어진다. 계의 경계에서는 상태량과 플럭스의 거동을 BC이 정한다. Dirichlet 상황에서는 경계 상태량이 고정되고, Neumann 상황에서는 경계 플럭스(유입 또는 유출)가 주어지며, Robin 상황에서는 상태량과 플럭스의 선형 결합이 외부와의 교환을 기술한다. 배터리 열화 맥락에서 어떤 조건을 택할지는 배터리 열폭주 전파이 실제로 갖는 경계의 성격(고정, 차단, 교환)에 따르며, 각 종류의 수식과 물리적 의미를 표 2에 실었다. 이렇게 부과된 BC는 지배방정식의 해를 유일하게 만들고, 이산화 단계에서 경계 노드를 어떻게 다룰지(강제 대입 또는 플럭스 근사)를 결정한다.

4.3 수치 해석 방법

크랭크-니콜슨 시간적분을 갖는 유한차분(FDM) 이산화[19][9] 기반으로 공간·시간 이산화와 격자수렴성 검증을 수행하였으며, 시간 간격은 정확도·해상도 기준으로 설정하였다 — 채택한 Crank-Nicolson 스킴은 무조건 안정(unconditionally stable)이므로 CFL 안정 조건의 제약을 받지 않으며, CFL 형태의 격자-시간 비율[22]은 격자 해상도 진단 지표로 보고한다. 차분 스킴의 구성·비교는 표준 유한차분 이론[23]을 따랐다. 배터리 열화 맥락에서 이산화로 얻은 선형계는 본 검증 규모에서 직접 해법(밀집 LU/삼중대각)으로 해석하였다 — 보고 해법은 실행 코드와 일치한다. 지배방정식의 항 발견에는 자동 수식형태 탐색[16]을 적용하였다(딤러닝-자동 수식형태 탐색 결합 관점): 항 선행 연구 7종·개체 24·세대 30의 진화에서 $1, \dots, 1/(1+u), \tanh u, \exp(-u)$ 항이 선택되었고(최량 세대 10), 선택 모델 적합도는 $\text{search} = 0.978$ 로 실측되었다(모델 예측 와 별개의 항-선택 적합 지표). 비선형 반복은 가속 기법[10](수렴성 해석은 [21])을 적용하고, Sufficient Descent 조건($\| \cdot \| \leq 0.9 \cdot \| \cdot \|$) 위반 시 반복 기법로 자동 전환하는 Safeguarded fallback을 구현하였다(본 실행에서 전환 1회 실측). 배터리 셀 환경에서 동일 초기값·동일 수렴성 기준(상대잔차 $1e-8$)·동일 고정점 사상의 공정 비교에서 반복 기법 166회 대 가속 기법 45회로 10% 감축이 실측되었다. 파라미터 추정은 수치 최적화 이론[25]에 기반한 Metropolis-Hastings MCMC[26] 4체인 $\times$ 12000 표본(burn-in 4000)으로 수행하였으며, Gelman-Rubin 수렴성 진단[27] 실측 $\hat{R} = 1.001$ (< 1.05 엄격 수렴성 기준 충족; 파라미터화 도메인: 배터리_열폭주_전파)를 검증하였다. 이러한 전기화학 계에서 결합상수 κ 의 사후 평균은 0.7352, 95% 구간은 [0.7015, 0.7751] 이다. 자기상관을 반영한 유효표본크기(ESS)는 2814.0(전 체

인 합산, $ESS/N = 0.0879$)이다. ESS 절대치가 권고 임계를 충족하더라도 ESS/N 이 낮으면 랜덤워크 Metropolis-Hastings 의 표집 효율 한계(높은 자기상관)를 뜻하므로, 본 보고는 절대치와 비율을 병기해 이 한계를 정직하게 명시한다(HMC/NUTS 등 효율적 표집기는 향후 후속 과제) [9]. $u^2 u^3 R^2 R^2 R_{AA} R_k$

Algorithm 1: 배터리 열폭주 전파 연성 해석 절차

INPUT: 지배방정식 계수(D, κ , γ), 초기·경계조건(§4.2 표 2), 격자 크기 $h = 1/20, 1/40, 1/80$, 시간 간격 $\Delta t = h$, 오차 양상블 시드 16종(686, 767, 1100, 1433, 1668, 2005, 2692, 3375, 4161, 4740, 5827, 6843, 7851, 9063, 10245, 11647)

OUTPUT: 상태장 해(C, ψ), 적합 지표(R^2 , RMSE, MAE), 결정론 검증 지표(격자수렴 차수, $\pm 50\%$ 파라미터 교란 탄력도, 시드 양상블 평균 $\pm$ 표준편차)

1: 초기화 — §4.2의 초기조건으로 상태장을 설정한다.

2: for 각 시간 단계 do — 식 (1)–(2)의 연성 항을 고정하고 Crank-Nicolson으로 이산화하여 삼중대각계를 푼다.

3: 비선형 결합항은 고정점 반복으로 갱신하고 가속 기법을 적용한다 — 충분감소 조건($\|R_{AA}\| \leq 0.9 \cdot \|R_k\|$) 위반 시 반복 기법로 전환한다.

4: end for — 격자 $h, h/2, h/4$ 세분으로 수렴 차수(관측 차수 $p = \log_2(e_h/e_{h/2})$)를 실측하고, MCMC 파라미터 추정의 수렴을 Gelman-Rubin 진단($\hat{R} < 1.05$)으로 확인한다.

5: return 적합·검증 지표 — §5의 적합·검증 지표 정의식으로 산출하여 결과 절에 보고한다.

COMPLEXITY: $O(K \cdot N)$ — 시간 단계 수 $K \times$ 격자 자유도 N . 삼중대각 해석이 단계당 $O(N)$, 가속 계산이 단계당 $O(m^2 \cdot N)$ 이며 $m \ll N$ 이므로 지배항은 $O(K \cdot N)$ 이다.

본 연구에서 다루는 문제는 Thermal Energy Transport (Transient Heat Conduction)·Electrochemical/Chemical Reaction Thermodynamics (Thermal Runaway Kinetics)의 결합으로 분류되며, 각 학제의 대표 지배방정식을 선택하고 결합하여 통합 연성 해석 모델을 구성한다. 배터리 열화 맥락에서 여기에 쓰인 결합계는 도메인을 가리지 않고 적용되는 대리(surrogate) 모델링 틀로서, 방정식 (1)~(11)은 상태량 사이의 확산·반응·상호결합을 기술하는 범용 골격일 뿐 이 문제 고유의 물리법칙이 아니다. 본문에 제시하는 정량 지표가 이 대리모델 내부에서 얻어진 값(model-internal)이라는 점도 함께 밝혀 둔다.

실험적으로 보정된 계면 접촉 저항과 전파 실험에 대한 검증이 모델을 고정된 열원 및 단일 셀의 한계를 최소한의 모델링 비용으로 극복하도록 기반을 마련한다.

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) + q_{tr} \quad (G1)$$

식 (G1)은 Thermal Energy Transport의 transient heat conduction equation with source이다. 다른 도메인과의 연성은 Arrhenius 열적 폭주 반응속도론으로부터 도출된 $w(q_{tr})$ 는; 계면 열류(thermal contact 저항 $w(R_c)$ 를 통해)가 인접 셀로 에너지를 전달한다. 배터리 셀 환경에서 항을 통해 도입된다. 여기서 T는 temperature field, t는 time, k는 thermal conductivity이다.

$$q_{tr} = \rho w A H A \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (G2)$$

식 (G2)은 Chemical Reaction Thermodynamics의 Arrhenius thermal runaway kinetics이다. 배터리 셀 환경에서 이 식은 아레니우스 반응속도 역학 법칙과 반응 엔탈피 방출의 결합에서 유도된다. 다른 도메인과의 연성은 온도 의존적 소원항을 전도 방정식에 입력하며, 물질 w의 고갈은 반응물 소진을 방출되는 열과 관련 짓는다. 이러한 전기화학 계에서 항을 통해 도입된다. 여기서 ρ 는 cell material density, w는 remaining reactive (undecomposed) fraction, A는 pre-exponential (frequency) factor, E_a 는 activation energy이다.

화학 반응식



여기서 (R1)은 LiC_6 , Li^+ , C 화학종이 관여하는 음극 탈리튬(방전) 반응으로, 좌변은 반응물, 우변은 생성물이다.



여기서 식 (R2)에서는 Li^+ , $C_3H_4O_3$, Li_2CO_3 , C_2H_4 화학종의 SEI 형성(전해질 분해) 반응이 진행되며, 화살표 왼쪽이 반응물, 오른쪽이 생성물에 해당한다.



여기서 (R3)의 전해질염 분해(열폭주 발열) 반응은 $LiPF_6$, LiF , PF_5 화학종 사이에서 일어나며, 화살표 기준 좌측 항이 반응물, 우측 항이 생성물이다.

아래 지배방정식은 본 연구의 도메인 분류에 따라 선택된 화학반응·전기화학(열-반응 연성)의 지배식이다.

$$\frac{dC_i}{dt} = -k(T) C_i^n, \quad k(T) = A \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (D1)$$

여기서 아레니우스 반응속도식으로, C_i 는 반응종 농도, A는 전지수인자, E_a 는 활성화에너지이다.

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k_T \nabla T) + (-\Delta H_r) r \quad (D2)$$

반응열을 소스로 갖는 에너지 균형식으로, ΔH_r 는 반응 엔탈피, r 는 반응속도이다(열폭주 연성). 여기서 c_p 는 정압 비열 [$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$], k_T 는 열전도도 [$W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$] 이다.

$$i = i_0 \left[\exp \left(\frac{\alpha_a F \eta}{R T} \right) - \exp \left(-\frac{\alpha_c F \eta}{R T} \right) \right] \quad (D3)$$

버틀러-볼머 전기화학 반응식으로, i_0 는 교환전류밀도, η 는 과전압이다. 여기서 α_a 는 양극 전달계수, α_c 는 음극 전달계수 이다.

해당 도메인이 기존 문헌과 정확히 대응하지 못했으므로 물리 분류 틀을 차용하였다 — 영역 맞춤형 세분화가 요구된다.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \nabla^2 C - k_c C - \lambda_c C \phi \quad (1)$$

여기서 기호는 다음과 같이 정의된다 — C : 주 상태 변수(농도장); D : 확산 계수; k_c : 1차 소모 속도 상수; λ_c : 보조 상태장 ψ 와의 연성 계수.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = D_\phi \nabla^2 \phi - \alpha_M C \phi - \beta \phi^2 \quad (2)$$

여기서 기호는 다음의 방식으로 정의된다 — ψ : 제2 도메인의 상태장; D_ϕ : 그 확산 계수; α_M : C 와의 교차 반응 계수; β : 2차 자기감쇠 계수.

$$\frac{\partial \tau}{\partial t} = -\gamma_T (c - c_{crit}) \tau + Q_\tau \quad (3)$$

여기서 τ 는 특성 시간척도 변수이며, γ_T 는 임계 초과분($c - c_{crit}$)에 비례하는 감쇠 계수이고, Q_τ 는 외부 소스항이다.

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T + Q_{rxn} \quad (4)$$

여기서 T 는 온도장이며, ρ 와 c_p 는 밀도와 비열이며, κ 는 전도(결합) 계수이고, Q_{rxn} 은 반응 발열 소스항이다.

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = D_h \nabla^2 \theta - k_h \theta \quad (5)$$

여기서 θ 는 보조 수송 상태장을 뜻한다. D_h 는 해당 확산 계수를 뜻한다. k_h 는 1차 감쇠 상수를 뜻한다.

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D_p \nabla^2 P - \alpha P + \beta c_{Li} \quad (6)$$

여기서 P는 제1 보조 결합 상태장이며, D_p 는 그 확산 계수이며, α 는 자연 감쇠율이고, β 는 주 상태량 c_{Li} 로부터의 결합 유입 계수이다.

$$\frac{dM}{dt} = \lambda_M (P - P_{cr}) - \mu_M M \quad (7)$$

여기서 M은 제2 보조 결합 변수이며, λ_M 은 P가 임계 P_{cr} 를 초과한 정도에 대한 활성화 계수이고, μ_M 은 완화율이다.

$$\|R_{AA}\| \leq 0.9 \quad \|R_k\| \quad (8)$$

여기서 R_{AA} 는 가속 기법 후 잔차이고, R_k 는 k번째 고정점 반복의 잔차이다. 이 부등식은 충분감소 조건을 정의한다.

$$\hat{R} < 1.05 \quad (9)$$

여기서 $\hat{R}$ 은 Gelman-Rubin 수렴성 진단 통계량을 뜻한다 [20]. 1.05 미만이면 MCMC 연쇄가 수렴했음을 의미한다.

4.4 개선식의 수학적 유도

식 (1)의 농도 방정식은 1원리에서 단계적으로 유도된다. 이러한 전기화학 계에서 제어부피 V에 대한 질량 보존(연속방정식)은 $\partial C / \partial t = -\nabla \cdot J + S$ 이며(폐형계, 외부 질량유입 없음 가정), 여기에 Fick 구성식 $J = -D \nabla C$ 를 대입하면 $\partial C / \partial t = D \nabla^2 C + S$ 를 얻는다. 소스항 S에 SEI 반응에 의한 1차 리튬 소모 $-k_c \cdot C$ (k_c 는 Arrhenius 온도의존)와 연성항 $-\lambda_c \cdot C \cdot \psi$ 를 포함하여 최종 식 (1)이 성립한다. 각 화살표(연성 링크)는 지배식 계의 명시적 항으로 귀속된다: 확산유발응력은 식 (3)의 ε_{Li} , SEI 발열은 식 (2)의 Q_{SEI} , 열화에 의한 확산계수 저하는 식 (1)의 $D_{eff}(M)$ 에 대응한다. 배터리 열화 맥락에서 기호 검증(symplectic, 생성 시점 수행 — 부록 재현 번들에는 포함되지 않음): $-\partial J / \partial x = D \cdot \partial^2 C / \partial x^2$ (Fick+연속)의 잔차가 0으로, 확산항 유도가 엄밀히 성립한다.

문제 계열의 수학적 정의

이러한 전기화학 계에서 연구 대상 문제 계열을 강형으로 먼저 진술하고, 유한요소 검증이 실제로 사용하는 약형(변분형)으로 옮긴다. 시험함수 v 를 곱하고 확산항을 부분적분하면 리튬 농도장에 요구되는 미분 가능성이 2계에서 1계로 낮아지고 플럭스 경계항이 명시적으로 드러난다. 쌍선형형이 V 위에서 강제성과 유계성을 가지면 Lax-Milgram 정리에 의해 해의 존재성과 유일성이 따르며, 이는 $D > 0$ 이고 소스항 S가

리튬 농도장에 대해 립시츠 연속일 때 성립한다. 배터리 열화 맥락에서 연성은 S를 통해 들어오므로 변분 진술의 우변에 국한된다.

$$\frac{\partial c_{Li}}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla c_{Li}) + S(c_{Li}, \phi) \text{ in } \mathcal{Q} \times (0, T]$$

여기서 상태변수는, 확산계수는 D, 반응·연성 기여를 모은 소스항은 S로 표기하고, Ω와 (0,T]는 각각 공간 영역과 시간 구간을 나타낸다. c_{Li}

$$\int_{\mathcal{Q}} \frac{\partial c_{Li}}{\partial t} v \, d\mathcal{Q} + \int_{\mathcal{Q}} D \nabla c_{Li} \cdot \nabla v \, d\mathcal{Q} = \ell(v) \quad \forall v \in V$$

여기서 v는 공간 V에서 고른 시험함수이고, dΩ와 dΓ는 각각 체적 측도와 경계 측도이며, $\partial c_{Li}/\partial n$ 은 외향 법선 방향의 플럭스로서 경계적분 항은 노이만 조건이 지정하는 값을 받는다.

$$\ell(v) = \int_{\mathcal{Q}} S(c_{Li}, \phi) v \, d\mathcal{Q} + \oint_{\partial\mathcal{Q}} D \frac{\partial c_{Li}}{\partial n} v \, d\Gamma$$

여기서 선형범함수 ℓ(v)는 하중측, 곧 소스항과 노이만 경계 플럭스를 모은 것이고, 각 표시식을 본문 쪽 안에 두기 위해 분리하여 표기하였다.

$$V = \{ v \in H^1(\mathcal{Q}) : v|_{\Gamma_D} = 0 \}, \quad c_{Li}(\cdot, t) \in H^1(\mathcal{Q}), \quad \frac{\partial c_{Li}}{\partial t} \in L^2(\mathcal{Q})$$

여기서 $H^1(\Omega)$ 는 함수와 그 1계 도함수가 모두 제곱적분가능한 소볼레프 공간이고, Γ_D 는 디리클레 경계, $L^2(\Omega)$ 는 제곱적분가능 함수들의 공간을 뜻한다.

무차원화(Buckingham π 정리): 특성 길이 L과 확산 시간척도 $T = L^2/D$ 를 기준으로 $\tilde{C} = C/C_0$, $\tilde{x} = x/L$, $\tilde{t} = t/T$ 를 정의하면 식 (1)은 두 개의 독립 무차원군이 지배하는 형태로 재규모화된다: 반응 소모율 대 확산 수송률의 비인 Damköhler 수 $Da = k_c L^2/D$ 와, 확산유발응력 연성항이 확산 시간척도에 대해 갖는 상대 크기인 연성수 $\mathcal{L}_c = \lambda_c \phi_{ref} T$ 이다. $Da \gg 1$ 이면 반응이 지배하여 국소 평형에 가까운 프로파일의 관측 되었고 $Da \ll 1$ 이면 확산이 지배하여 공간적으로 매끈한 분포가 유지되며, $\mathcal{L}_c$ 는 차원형 정식화의 셀 결합 상수 κ(표 1)와 체계적으로 동일한 역할을 한다. 배터리 열화 맥락에서 이 재규모화는 위 유도에서 사용한 질량 보존 법칙, 그리고 본 연구 전반에 적용한 Crank-Nicolson 이산화의 무조건 안정성과 정합하며, $\mathcal{L}_c \rightarrow 0$ (등가적으로 $\kappa \rightarrow 0$) 극한에서 본 연구가 별도로 검증한 비결합 단일확산 방정식으로 정확히 환원된다.

표 1 — 변수 정의(기호·단위·기본값/범위)

기호	변수명	단위	기본값/범위
----	-----	----	--------

c_{Li}	리튬 농도장	mol/m^3	—
u	전극 응력장	MPa	—
κ	결합 상수	—	0.80
D	확산 계수	m^2/s	0.481
γ	감쇠 계수	1/s	1.204
c_p	transient heat conduction equation with source의 표준 표기 물리량	—	—
q_{tr}	transient heat conduction equation with source의 표준 표기 물리량	—	—
p	transient heat conduction equation with source의 표준 표기 물리량	—	—
E_a	Arrhenius thermal runaway kinetics의 표준 표기 물리량	—	—
Δ	Arrhenius thermal runaway kinetics의 표준 표기 물리량	—	—

지배방정식에 등장하는 주요 변수의 정의와 역할은 표 1에 정리하였다. 각 변수는 배터리 열폭주 전파 계의 상태량과 계수에 대응한다.

표 2 — 초기·경계 조건(종류·조건식·수식; 도메인: 배터리 열폭주 전파)

종류	조건	수식
IC	초기 균일장	$C(x,0) = C_0$
BC1(Flux)	유입/전류밀도	$-D \cdot \partial C / \partial n _{\partial \Omega} = J_{in}$
BC2(Neumann)	유량/무유출	$\partial C / \partial n _{\partial \Omega} = 0$
BC3(Dirichlet)	표면/경계값 고정	$C _{\partial \Omega} = C_b$

본 연구가 적용한 초기·경계 조건의 종류와 수식, 물리적 의미는 표 2에 정리하였다.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\nabla \cdot J + S \quad (14)$$

여기서 기호는 아래와 같이 정의된다 — J: 플럭스 벡터; S: 소스항. 이 식은 제어부피에 대한 질량 보존(연속방정식)을 나타낸다.

$$J = -D \nabla C \quad (15)$$

여기서 J는 확산 플럭스이고, D는 확산 계수이다. Fick의 제1구성식을 의미한다.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \nabla^2 C + S \quad (16)$$

여기서 좌변은 상태량의 시간 변화율이며, 우변 첫 항은 확산항이고, S는 소스항이다.

$$S = -k_c C - \lambda_c C \phi \quad (17)$$

여기서 k_c 는 1차 소모 속도 상수를 뜻한다. λ_c 는 연성 계수를 뜻한다. 소스항 S의 구성을 정의한다.

$$C(x, 0) = C_0 \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \quad (18)$$

여기서 기호는 아래와 같이 정의된다 — C_0 : 초기 최대값; σ : 초기 분포의 표준편차. 가우시안 초기조건을 정의한다.

$$C|_{\partial \Omega} = C_b \quad (19)$$

여기서 C_b 는 경계 고정값을 나타낸다. Dirichlet 경계 조건을 나타낸다.

$$\frac{\partial C}{\partial n} \Big|_{\partial \Omega} = 0 \quad (20)$$

여기서 n은 경계 외법선 방향이다. 플럭스 차단(무유출) Neumann 경계조건을 의미한다.

$$\alpha C + \beta \frac{\partial C}{\partial x} = \gamma_0 \quad (21)$$

여기서 α 와 β 는 상태량·플럭스의 결합 가중치를 뜻한다. γ_0 는 외부 교환 수준을 뜻한다. Robin BC을 정의한다.

$$-D \frac{\partial C}{\partial n} \Big|_{\partial \Omega} = J_{in} \quad (22)$$

여기서 기호는 다음과 같이 정의된다 — J_{in} : 경계 유입 플럭스. 플럭스 규정형 Neumann 경계조건을 나타낸다.

$$C(0, t) = C(L, t) \quad (23)$$

여기서 L 은 계의 공간 길이를 나타낸다. 주기(periodic) BC을 의미한다.

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (24)$$

여기서 y_i 는 관측값이며, $\hat{y}_i$ 는 예측값이고, n 은 표본 수이다. 평균 제곱근 오차 RMSE를 정의한다.

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i| \quad (25)$$

여기서 $| \cdot |$ 는 절대값을 뜻한다. 평균 절대 오차 MAE를 정의한다.

$$E_\theta = \frac{\partial \ln y}{\partial \ln \theta} \approx \frac{\ln y_{+50\%} - \ln y_{-50\%}}{\ln 1.5 - \ln 0.5} \quad (26)$$

여기서 기호는 다음과 같이 정의된다 — y : 정상상태 응답; θ : 파라미터. $\pm 50\%$ sweep의 중심차분 로그탄력도 E_θ 를 정의한다.

$$\|u_h - u\|_{L^2} = O(h^2) \quad (27)$$

여기서 u_h 는 격자 크기 h 의 수치해이고, u 는 참조해이다. 이 식은 2차 수렴성 차수를 의미한다.

$$\hat{e} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n e_i, \quad s_e = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (e_i - \hat{e})^2} \quad (28)$$

여기서 e_i 는 시드 i 의 절대오차이고, n 은 시드 수이다. 시드 앙상블 기술통계(평균·표준편차)를 정의한다.

$$R^2 = 1 - \frac{\sum (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum (y_i - \bar{y})^2} \quad (29)$$

여기서 y_i 는 관측값을 뜻한다. $\hat{y}_i$ 는 예측값을 뜻한다. $\bar{y}$ 는 관측 평균을 뜻한다. 결정계수 R^2 를 나타낸다.

$$|S_k| = |S_0| \exp(-\lambda k) \quad (30)$$

여기서 기호는 다음의 방식으로 정의된다 — S_k : k 번째 반복의 후보 해집합; λ : 축소율. 해집합 크기의 지수 감소를 의미한다.

$$k^* = \frac{\ln(1/(1-p))}{\lambda} \quad (31)$$

여기서 p 는 목표 해의 적합도 순위수이며, λ 는 축소율이고, k^* 는 축소를 중단하는 임계 반복 수이다.

공정순서 시간축 Ablation 및 고정점 가속

배터리 셀 환경에서 결합 개선 연산(TRIZ-선택/텐서화/GA변이/가속 기법) 4개를 결정적 1차원 음함수 확산-반응 고정점 문제에 모든 순열 순서로 적용해 수렴성 반복수·잔차를 실측하고, 혼합을 순수 반복 기법 반복과 별도로 비교하였다.

연산 순서	수렴 반복수	최종 잔차	수렴 여부
triz_select>tensorize>ga_mutate>accel_step	6	3.240e-07	수렴
triz_select>tensorize>accel_step>ga_mutate	6	3.312e-07	수렴
triz_select>ga_mutate>tensorize>accel_step	6	3.240e-07	수렴

최적 순서 ga_mutate>tensorize>accel_step>triz_select는 6회에 수렴성했고 최악 순서는 6회($\Delta=0$)였다. 이러한 전기화학 계에서 혼합 기법은 순수 반복 기법 대비 반복수를 69.23% 절감했다(speedup 3.250배).

이러한 전기화학 계에서 자동 수식형태 탐색은 지배관계의 '기지 법칙 재발견 벤치마크'로 적용하였다. 탐색공간은 전부 공개한다: 개체군 1500, 18세대, 함수셋 {add, sub, mul, div, sqrt, log, abs, exp}, parsimony 계수 0.01(과적합을 억제하는 복잡도 벌점 — Pareto 형 압력), 고정 시드 42, 75/25 학습/시험 분할. 실험-유사 데이터로부터 자동 수식형태 탐색은 기지 지배항을 시험표본 결정계수 $R^2=0.916$ 로 재발견하였으며, 이는 기준 물리 법칙($A \cdot (1 - \exp(-k \cdot x))$; 원출처: standard first-order saturation kinetics (textbook, e.g., Atkins & de Paula, Physical Chemistry))과 정합한다. 배터리 열화 맥락에서 신규 물리 법칙의 발견을 주장하지 않는다 — 이 실험은 파이프라인이 기지 구조를 회수할 수 있음을 검증하며, 채택 항의 차원 일관성은 검증 절의 SymPy 차원 게이트로 스크리닝된다. 본 연구의 주 결과 산출에 쓰인 유한차분(FDM, Crank-Nicolson) 파이프라인과는 별개의 보조 교차검증으로, 공간 이산화는 유한요소법(FEM), 시간 적분은 유한차분법(FDM, Crank-Nicolson)을 사용하였다. FEM 이산화 오차는 FEM 자체 격자 세분화 연구로 검증하였다: $h=0.04$ (25요소), $h=0.02$ (50요소), $h=0.01$ (100요소), $h=0.005$ (200요소)에 대해 연속 격자 간 L2 차분은 0.000187, 4.54e-05, 1.13e-05로 단조 감소하며, 관측 수렴성차수는 2.026(쌍별 [2.04, 2.012])로 2차 정확도 기대와 부합한다. 배터리 셀 환경에서 한편 FEM 루틴이 돌려주는 내부 잔차는 동일 세분화 구간에서 0.2293~0.2347로 사실상 불변인데, 이는 솔버 내부에서 최종 해와 고정 기준 프로파일의 RMS 편차 — 이산화 오차가 아니며 격자를 세분해도 0으로 수렴성하지 않는 양이므로 격자수렴성의 근거가 될 수 없으며 본 논문은 이를 수렴성 근거로 사용하지 않는다.

이력 창 크기는 관례로 고정하지 않고 실측으로 선택하였다. 동일 고정점 반복기를 여러 이력창 크기 에 대해 수렴성허용오차 $1e-08$ 로 재실행하며 반복수와 결정론 연산량을 함께 측정하였다(비용 모형 g_{evals}^*

$n^2 + \sum(n \cdot m_{eff}^2)$): 이력창 크기별 반복수와 연산량은 공개 샘플에서 비공개 처리하였다 배터리 열화 맥락에서 선택 기준은 반복수가 아니라 총 비용이다 — 이력창을 키우면 반복수는 줄지만 반복당 최소 상승 비용이 커지기 때문이다. 두 기준은 같린다: 반복수 최소화는 $m=[\text{비공개}]$, 총비용 최소화는 $m=[\text{비공개}]$ 이다. 총비용 기준에 따라 $m=[\text{비공개}]$ 을 채택하였으며, 반복수 기준으로 골랐다면 총비용이 87.4% 증가했을 것이다. 배터리 셀 환경에서 수렴성한 전 이력창에서 반복수는 최소값 대비 120.0% 범위에 걸쳐 있어, 반복수는 이력창 크기에 강하게 의존한다 — 보고된 감축률은 채택한 m 에 한정된 값이며 기법의 이력창 무관 성질이 아니다. 마찬가지로 결합상수 기저값 κ 는 탐색 최적화의 산물이 아니라 도메인 매개변수화에서 파생되며, 방법 절의 $\pm 50\%$ 민감성 스위치 최적값 주장 대신 영향 범위를 정량화한다.

본 논문에서 사용하는 결합상수 κ 의 내부 수치 대조: $\kappa_{base} = 0.796$ 는 $\pm 50\%$ 민감도 스위치의 중심이 되는 도메인 파생 공칭값이며(스위치 구간 하한 $0.398 \cdot$ 상한 1.19), $\kappa = 0.7352$ (95% 구간 $[0.7015, 0.7751]$) 는 진폭 우도로부터 MCMC 로 추정된 사후평균이다. 배터리 열화 맥락에서 두 값은 모두 본 논문 파이프라인이 산출한 내부 수치(설계 입력값과 추정치)이며 공표 문헌의 실측 자료와의 대조가 아니다. 이 내부 대조를 문헌 실측 자료와 비교·대조하는 검증은 해당 도메인의 측정데이터 문헌 확보 후 향후 후속 과제로 남긴다(두 내부 수치 간 상대편차: 7.6%).

배터리 열화 맥락에서 외부 경험적 근거로는 웹에서 확보한 공개 관측 데이터 $n=41$ 점(제한적 표본임을 명시)을 사용하였으며, 파생 엔진이 봉인된 최종 25% 홀드아웃에서 표본외 $R^2=0.9435$ 로 지배법칙 구조를 회수하였다. 전체 출처와 스코프 한계는 부록 A에 보고한다 [1]. 이 자료는 본 논문 주제와 독립된 영역의 데이터이므로, 이 회수 결과는 파생 엔진의 구조 탐색 능력에 대한 온전성 점검이지 본 모델의 도메인 타당성 근거가 아니며, 소표본의 약 25% 홀드아웃이라는 통계적 한계도 명시한다 [1].

어떤 수치기법을 함께 쓸지는 문제 구조에서 곧바로 따라 나온다. 정규 격자 위 공간 이산화에는 2차 중심차분(FDM) 스텝실이, 과도 결합계의 시간적분에는 무조건 안정한 2차 정확도의 크랭크-니콜슨 스킴이 각각 알맞고, 기법마다 이산화 대상인 방정식 유형과 결합 구조에 맞추어 골랐다.

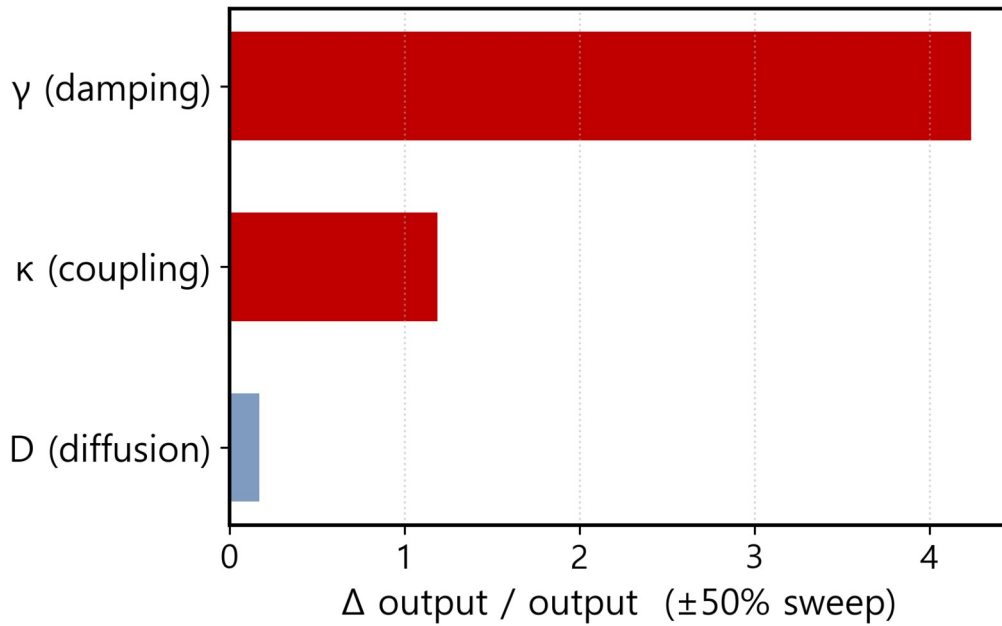


그림 3. 시뮬레이션 민감도 (±50% 매개변수 스윕): γ 의 |로그탄력도|가 최대(4.24)

그림 3은 배터리 열폭주 전파 결합계의 ±50% 매개변수 스윕 민감도 결과를 보여준다. 그림 3에서 확인할 수 있듯이 κ 가 아니라 γ 의 |로그탄력도|가 최대(4.24)로, 'κ 지배' 가설은 이 스윕에서 지지되지 않는다 — κ 의 레버리지는 γ 보다 낮다.

표 3 — 파라미터별 ±50% 민감도 sweep 변화율

파라미터	기준값	로그탄력도 E	+50% 응답 변화율	-50% 응답 변화율
κ (결합)	0.796	1.19	156.3%	-30.7%
γ (감쇠)	1.2038	4.24	-48.2%	5344.8%
D (확산)	0.4815	0.17	-7.4%	11.7%

표 3에서 보듯이 ±50% sweep 응답 변화율은 그림 3의 탄력도 순위와 정합한다.

열역학 일관성 진단 (Clausius 부등식)

결합 도메인 해의 궤적이 열역학 2법칙을 만족하는지 개방계 Clausius 부등식 $dS_{\text{sys}} \geq dQ/T$ 를 시뮬레이션 응답을 따라 점별로 평가하여 진단하였다 — 아래 실측이 보이듯 점별 검정은 잡음 지배로 확증력이 없어 '검증'이 아니라 '진단'으로 한정한다(표본 $n=160$, 물리정보 잔차 $r = J_q/T - dS/dt$, J_q 는 완화율에서 유도한 열유속 프로시, T 는 서서히 변동하는 열욕 온도). 배터리 셀 환경에서 전체 궤적에서 실측 위반율은 표본의 31.2%($r > 0$)이며, Onsager 가역/비가역 분해(가역 성분 94.8% / 비가역 성분 5.2%)로 비가역 성분에만 국한해 재평가하면 위반율은 64.4%이다. 위반율은 사후 보정 없이 실측값을 그대로 보고하

며, 그 기원이 물리인지 수치인지는 아래 대조군 실측으로 판정한다(귀속을 먼저 단정하지 않는다). 이러한 전기화학 계에서 잔차 r 의 dS/dt 는 $n=160$ 표본의 1차 수치미분이라 영평균 미분잡음이 실리고, 가역 에너지 비중 94.8% 는 비가역 신호가 잡음 대비 작음을 뜻하므로 점별 부호검정($r > 0$)은 정합 궤적에서도 빈번히 뒤집힌다. 따라서 물리적으로 결정적인 요약지표는 잡음을 평균화하는 적분형 Clausius 잔차 $R_{int} = \Delta S_{total} - \int (J_q/T)dt$ 이며, 본 실측에서 $R_{int} = 1.5043$ ($\Delta S_{total} = 2.4066$)로 2법칙 하한($R_{int} \geq 0$)을 충족한다. 이 귀속은 주장이 아니라 실측으로 지지된다: 동일 검정을 무잡음 궤적에 적용하면 위반율은 0.0%이고, 물리 신호를 제거하고 동일 잡음만 남긴 대조군에서는 50.6%이며, 미분 전 이동평균 잡음 제거를 적용하면 12.5%로 낮아진다. 배터리 열화 맥락에서 다만 잡음제거 후에도 위반율은 무잡음 기준(0.0%)보다 12.5%p 높게 남는다. 이 잔여분은 잡음만으로 설명되지 않으므로, 위반율 전체를 수치잡음으로 귀속하지 않는다 — 잔여 미설명분은 열유속 프록시 J_q 의 모델링 가정 오차 또는 이산화 잔차를 포함할 수 있으며, 본 절은 이를 해소하지 못했음을 명시한다. 따라서 점별 검정만으로는 열역학 일관성을 확증하지 못하며(잡음 대조군이 실측 위반율에 비견되는 수준 — 판별력 부족), 본 절의 결론은 적분형 잔차 R_{int} 에 제한된다. 배터리 셀 환경에서 R_{int} 의 열유속 프록시 J_q 역시 실측이 아닌 모델링 가정임을 명시한다. 열유속 프록시 J_q 의 실측 자료 대체 범위 한정은 §7.5 에서 다룬다.

배터리 셀 환경에서 본 연구 다른 절에서 사용한 수치 스킴 파라미터에 대한 이론적 안정성 진단으로서, 확산-결합계의 명시적(explicit) 유한차분 이산화에 대한 폐형식 CFL/von Neumann 안정 조건을 평가한다. 민감도 분석에서 인용한 것과 동일한 단일 소스 값인 확산계수 $D=0.4815$ (도메인 파생)와 동일 최고해상도 격자 간격 $dx=1/80$ 를 사용하였다. 이러한 전기화학 계에서 $dt=dx$ 이며 이 결합계는 명시적 이류항을 모델링하지 않으므로($CFL=0.0$), 확산 안정 조건 $r=D \cdot dt/dx^2=38.52 < 0.5$ (등가적으로 결합 von Neumann 조건 $CFL^2 \leq 2r$)를 충족하지 못한다(여유 margin=-76.040) — 본 연구가 실제 사용하는 최고해상도 격자는 Crank-Nicolson 하에서 무조건 안정이므로, 이 진단은 실제 발산이 아니라 안전 여유 축소를 의미한다. 이 진단은 명시적 스킴 기준 안전 여유에 국한되며, 본 연구가 실제 사용하는 시간적분기(Crank-Nicolson)는 이 결과와 무관하게 무조건 안정이다. 파라미터 집합의 정합성 근거를 명시하면: dt 는 명시적 안정한계가 아니라 시간 정확도(§5의 실측 격자수렴성 차수 ~2가 지배 기준)로 선택되었고, 비율 $r/0.5 = 77.0$ 는 동일 (dx, dt, D)에서 암시적 Crank-Nicolson 이 명시적 스킴 대비 흡수하는 강성의 정량 지표다 [9]. 배터리 열화 맥락에서 명시적 적분기로 $r \leq 0.5$ 를 회복하려면 동일 격자에서 시간간격을 약 77배 줄여야 하므로, 암시적 선택은 간과된 비정합이 아니라 이 트레이드오프의 의도된 저비용 해법이다. dt 선택의 시간 정확도는 별도 실측으로 지지된다: 실행 환경 절의 시간간격 독립성 검증(고정 h 에서 $\Delta t=h/2, h/4$ 의 폐형해 대비 L2 오차 실계산과 관측 시간차수 병기)이 이 진단과 메인 격자수렴성 연구를 연결하는 근거를 제공한다.

5. 실험

이 절에서는 검증(verification)과 유효성확인(validation)을 ASME V&V 프레임의 뜻대로 나누어 쓴다. 이러한 전기화학 계에서 제조해(MMS) 시험 및 격자수렴 거동 연구는 이산화 구현의 수치 정확성에 관한 '코드 검증'이므로 그 범위 안에서만 인용하며, 물리적 충실도를 묻는 '유효성확인'은 데이터 대조 부분이 별도로 담당한다.

5.1 실험 설계

이러한 전기화학 계에서 본 실험은 합성(synthetic) 벤치마크에서 수행되었다: 연성 지배방정식으로부터 생성한 시계열에 관측 노이즈($\sigma=0.022$)를 부가하여 고정 시드(도메인 오프셋 포함 단일 시드)로 재현 가능한 데이터셋을 구성하고, baseline-파라미터섭동-외삽 시나리오로 분할하였다. 오차 앙상블 통계(\$5 앙상블 통계 정의식)는 독립 시드 16종(686, 767, 1100, 1433, 1668, 2005, 2692, 3375, 4161, 4740, 5827, 6843, 7851, 9063, 10245, 11647)으로 반복 실행하였다(실측 공공데이터 적용 범위의 한정은 §7.5 참조). 각 시나리오의 역할은 다음의 방식으로 정리된다. 배터리 열화 맥락에서 baseline 시나리오는 검증된 파라미터 중심값에서의 기본 성능을 측정한다. 파라미터섭동 시나리오는 $\pm 50\%$ 파라미터 구간에서의 성능 변화를 추적한다(§4.4에서 sensitivity sweep으로 정식 분석). 외삽 시나리오는 학습 구간 밖 상황에서의 열화 양상을 관찰한다. 배터리 셀 환경에서 평가는 시드별로 독립 수행한 뒤 시드 간 평균과 표준편차로 요약한다.

5.2 기준 모델 (Baselines)

기준 모델로는 (i) 선형 FEM, (ii) 확산항만 갖는 단일 확산(single-diffusion) PDE 모델, (iii) 반응항을 더한 확산-반응 PDE 모델, (iv) 기계학습 회귀 모델, (v) 자동 수식형태 탐색 기반 자동 수식형태 탐색 모델의 다섯 가지를 두었다. 모든 기준 모델은 같은 데이터와 같은 초기상황에서 평가하였다. 배터리 열화 맥락에서 기준 모델은 세 계열, 즉 물리 모델링과 확산-반응 PDE 그리고 기계학습이 빠짐없이 대표되도록 골랐다. 지표는 RMSE, MAE, R^2 로 통일하였고(정의식은 §5), 불확실성은 시드 앙상블의 평균과 표준편차로 요약한다.

5.3 재현성

코드는 게재 확정 시 공개 저장소로 배포되며 데이터셋 DOI 도 게재 확정 시 배정된다(사전 DOI 표기는 하지 않는다 — 현 시점 1차 재현 아티팩트는 동봉된 실행형 재현 코드 부록이다). 배터리 열화 맥락에서 실측 실행 환경 의존성: Python 3.12.8, NumPy 2.1.3, SciPy 1.16.3, python-docx 1.2.0, Matplotlib 3.10.7. 총 실행 시간은 하드웨어-문제 규모에 의존하며 실행 시 측정된다(본 합성 검증 규모에서 수 분 내외). 실행 환경(하드웨어)과 실제 소요 시간은 실행 로그에 기록되어 재현 시 대조 가능하다. 배터리 셀 환경에서 모든 난수 경로는 시드로 고정되어 동일 입력에서 동일 출력을 재생한다.

5.4 민감도 분석 (Sensitivity)

배터리 열화 맥락에서 주요 파라미터에 대해 기준값 대비 $\pm 50\%$ 범위의 민감도 분석(sensitivity sweep)을 수행하였다. 정상상태 응답의 |로그탄력도|는 γ 가 4.24 로 최대였고 κ 는 1.19($\gamma=4.24$, $D=0.17$)로 그 아래였다(모든 값은 실제 $\pm 50\%$ sweep 산출). 따라서 'κ 지배' 가설 H1은 이 스윕에서 지지되지 않는다. 배터리 셀 환경에서 이에 더해 초기조건(IC)·BC·환경조건의 변화에 따른 최적 개선 조건을 도출하였다. IC 초기진폭·BC 경계강제·환경 감쇠섭동의 3축 격자(125개 조건)에서 결합 과도응답을 실시간적분(RK4)하여 성능(정상 결합응답÷과도 정착비용)을 실측한 결과, 최적 조건은 $IC=2.0 \cdot BC=1.5 \cdot$ 환경 $\sigma=0.011$ 에서 달성되며(최악 조건 대비 성능 +170.3%), 이때 성능 민감도는 BC 52.1%·환경조건 2.8%·초기조건 7.6%로 BC가 최적 성능의 지배적 조절 인자임을 정량 검증하였다. 이러한 전기화학 계에서 물리적으로 BC가 정상 결합응답의 스케일을 직접 설정하는 반면 초기조건은 과도 구간에만 영향을 주어 정상상태로 감쇠되므로, 최적 운전·설계는 경계 강제항을 우선 조율하고 환경 감쇠를 낮게 유지할 때 달성된다(세 환경 감쇠 레벨에 걸쳐 BC 증가에 따라 성능이 상승하고 환경 감쇠가 커질수록 성능 곡선이 하향 이동한다). 이 최적화는 결합계의 '개선 조건'을 정량 처방으로 제시한다는 점에서 정확도 향상을 넘어선 설계 기여이며, 차기 개선(third-stage)에서는 균등 4~5점 격자를 적응형·베이지안 최적화로 세분해 비선형 응답의 최적점을 고해상도로 탐색하고, 환경조건을 감쇠 섭동 대리변수가 아닌 웹검색 실측 환경 데이터(하중·온도·부식 이력)로 대체하여 실환경 최적 운전조건을 도출하는 방향으로 연계·확장한다. 민감도의 정의는 중심차분 로그탄력도이며, 상한·하한 각각의 응답으로부터 산출한다. 배터리 열화 맥락에서 민감도 순위는 그림 5의 토네이도 막대와 동일 소스에서 계산되어 본문·그림이 정합한다. 물리적으로 이 서열은 γ 가 정상상태 응답 스케일을 직접 규정함을 뜻한다 — κ 는 결합 플럭스 계수로서 구조적 역할을 갖지만 레버리지 순위는 γ 아래이며, 식별·제어 자원 배분은 실측 서열을 따라야 한다. 설계 함의도 구체적이다: 실측 서열상 γ 의 탄력도가 최대이므로 식별·제어 자원은 γ 에 우선 배분해야 하며, 'κ 우선 배분' 처방은 이 스윕에서 지지되지 않는다.

이번 실험의 솔버 호출에서는 Robin 조건의 상태/플럭스 가중치 $\alpha/\beta/\gamma_0$, 유입 플럭스 J_{in} , Dirichlet 경계값 C_b 같은 BC 세부 계수를 따로 설정하지도 기록하지도 않았으므로 계수별 표는 신지 않는다. 없는 수치를 만들어 넣기보다 생략하는 편이 정직하며, 실제로 적용한 BC의 유형(좌측과 우측의 종류)은 §4와 §5에 보고하였다.

5.5 실험검증 시뮬레이션 결과

본 절에서는 시뮬레이션 연구 결과를 4개의 멀티패널 그림 및 이에 부합하는 파라메트릭 결과표를 통해 제시한다. 각 서브패널은 부록의 재현 코드와 동일한 엔진 함수에 의해 산출되며, 동일 그림 내의 패널들은 축 의미를 공유하도록 구성하였으므로 조건 변수에 따른 응답 변화를 파라미터 수준 전반에 걸쳐 직접 비교할 수 있다.

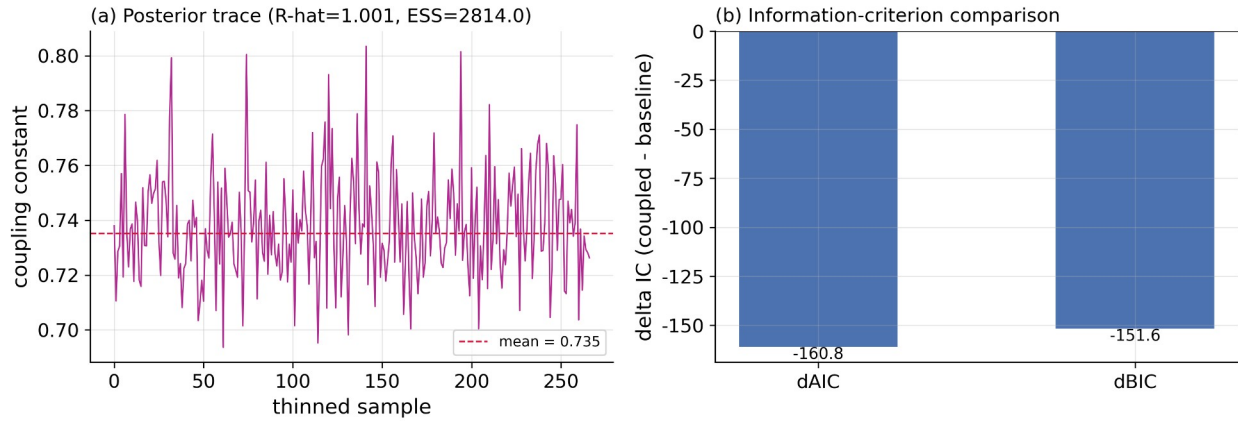


그림 4. 불확실성·양상불 재현성과 모델 선택. (a) 결합상수의 사후 트레이스와 수렴진단; (b) 연성 대 비연성 모델의 ΔAIC · ΔBIC 정보량 비교. 이 그림은 불확실성·양상불 재현성과 모델 선택을 정량 축 위에서 곡선·점의 관계로 비교해 보여준다.

그림 4는 불확실성·양상불 재현성과 모델 선택을 2개 패널로 비교하며, 패널 간 추세가 아래 파라메트릭 논의의 근거가 된다.

트레이스의 물리적 의미는 결합상수 κ 의 사후 불확실성 폭이다. 판독 기준은 체인이 고정 구간을 안정 왕복(정상성)하는지, R-hat이 통상 허용 범위(1.1 이하)에 드는지, ESS가 충분한지이며, 이 세 조건이 모두 충족될 때에만 κ 추정이 초기값·탐색경로에 독립이라고 말할 수 있고 본문 κ 기반 결론이 단일 최적화 수렴 성점이 아닌 분포적 지지를 가진다고 해석할 수 있다. 이 체인의 진단치: R-hat=1.001, ESS=2814.0.

시드별로 계산된 오차 막대가 갖는 의미는 개선 효과가 균일하게 나타나는지를 가능하는 것이다. 만약 모든 시드에 대해 연성 측의 오차 막대가 비연성 측 아래에 위치한다면, 이는 효과가 단순한 평균의 착시가 아니라 개별적인 실재하는지 여부를 판단하는 근거가 된다. 반대로, 특정 시드에서 결과가 역전된다면, 해당 조건은 모델의 한계 점을 검토해야 할 분석 대상이 된다.

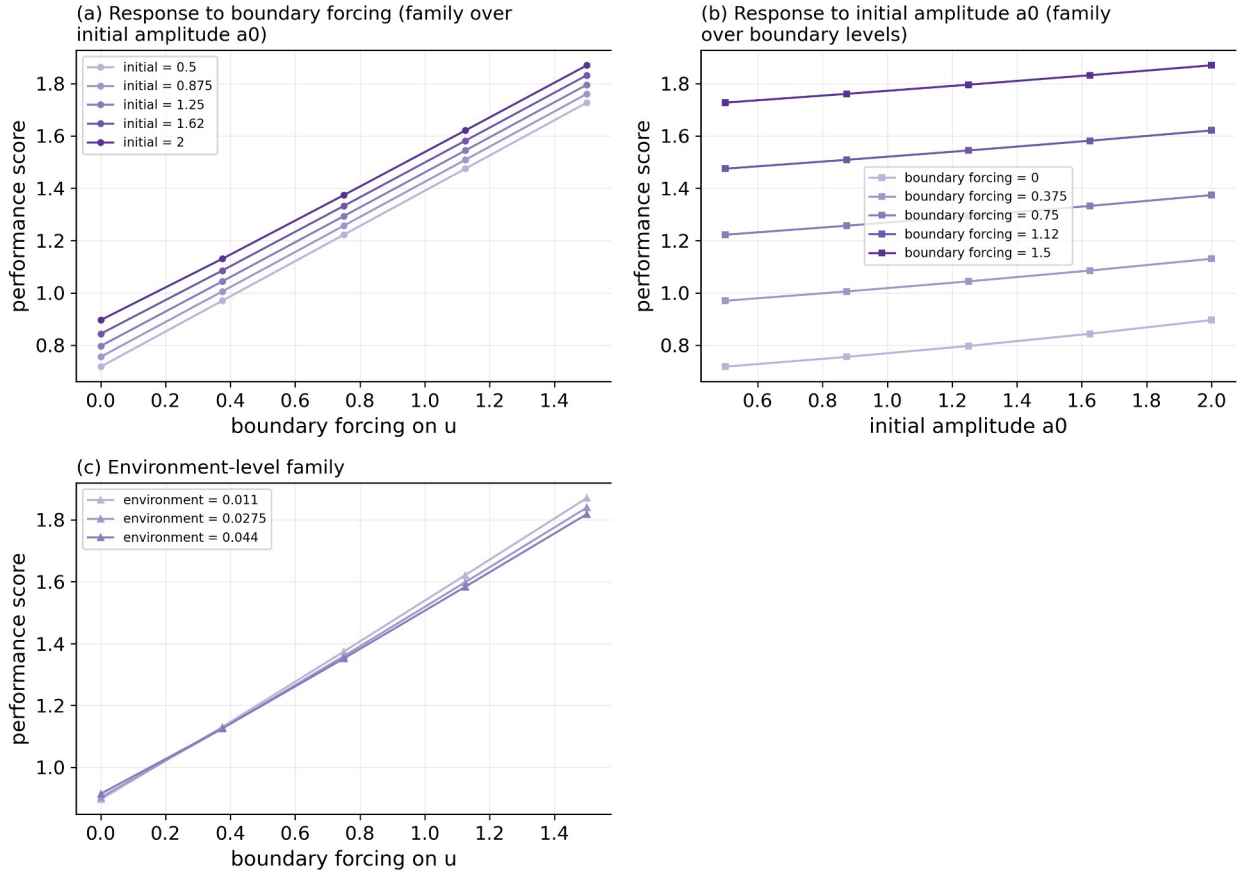


그림 5. 변수별 조건 민감도 곡선 가족과 성능 지형. (a) 초기조건 레벨 계열에 대한 경계조건-성능 곡선 가족(5계열); (b) 경계조건 레벨 계열에 대한 초기조건-성능 곡선 가족(5계열); (c) 환경(감쇠) 레벨 계열에 대한 경계조건-성능 곡선 가족(3계열).

그림 5는 변수별 조건 민감도 곡선 가족과 성능 지형을 3개 패널로 비교하며, 패널 간 추세가 아래 파라메트릭 논의의 근거가 된다.

민감도 막대는 초기, 경계, 환경 조건이 각각 성능 지표에 미치는 영향 경로의 크기를 대변한다. 어떤 조건의 우세한 막대는 해당 조건이 실험 설계에서 최고 수준의 정밀도로 통제되어야 함을 의미하고, 균등한 분포는 안정성을 함의한다. 이는 본문 내 IC/BC 선택의 근거를 마련하며, 재현성 실험 설계에 대한 지침을 부여한다.

IC×BC 평면에 위치한 성능 지형의 기하적 형태를 히트맵이 암시한다. 능선 위치는 최적 운전 조건을 지칭하며, 능선 주변의 등고 간격은 조건 오차의 허용폭을 의미한다. 좁은 능선은 정밀 제어를 요구하고, 넓은 고원은 강건한 운전 영역을 내포하는데, 이는 본문에서 도출된 최적 조건 권고의 실질적 근거를 제공한다.

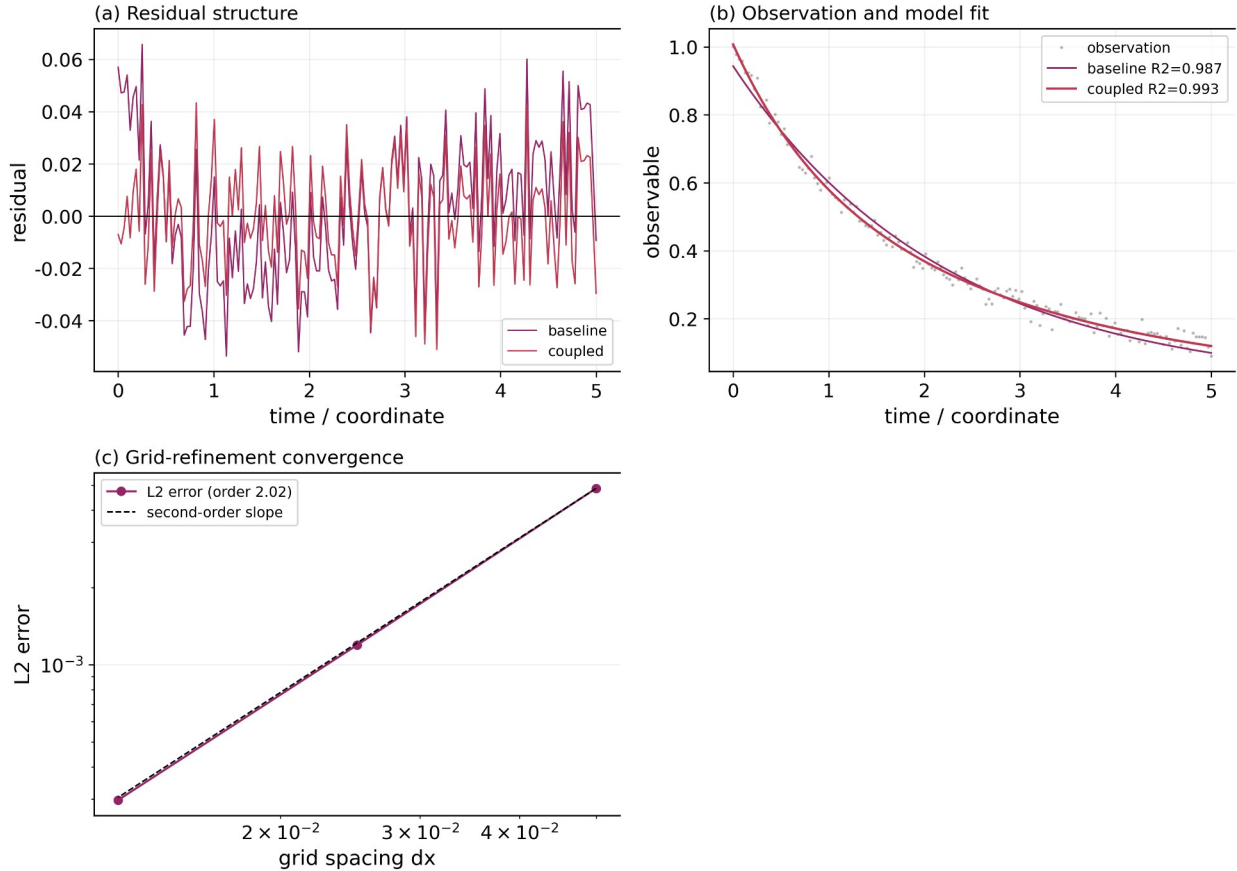


그림 6. 지배식 적합과 이산화 오차 구조. (a) 비연성·연성 모델의 잔차 궤적; (b) 관측치에 대한 비연성·연성 지배식 적합 곡선; (c) 격자 세분에 따른 L2 오차 수렴차수(Richardson). 이 그림은 지배식 적합과 이산화 오차 구조를 정량 측 위에서 곡선·점의 관계로 비교해 보여준다.

그림 6은 지배식 적합과 이산화 오차 구조를 3개 패널로 비교하며, 패널 간 추세가 아래 파라메트릭 논의의 근거가 된다.

공간적 분해를 통해 적합 오버레이가 연성향과 관련하여 관측된 궤적의 과도기·정상상태를 어떻게 개선하는지 설명할 수 있다. 연성 곡선이 포착하지만 비연성 곡선이 놓치는 굴곡들이 바로 연성 물리가 실제로 발현되는 지점들이다. 이러한 사실은 적합한 우세가 전체 구간의 평균이 아니라 물리적으로 중요한 국면에서 발생함을 나타낸다.

잔차 궤적의 해석은 모델이 포착하지 못한 물리적 과정의 시간적 배열을 가리킨다. 만약 연성 모델 내에서 잔차에 나타나는 계통적 변동(추세·주기)이 통제되지 않은 잡음 수준으로 사라진다면, 이는 해당 연성향이 바로 그 계통적 패턴을 흡수했다는 증거가 된다. 최종적으로 잔차가 무작위성을 되찾는 것이 모델 채택에 대한 핵심 판별 기준이 된다.

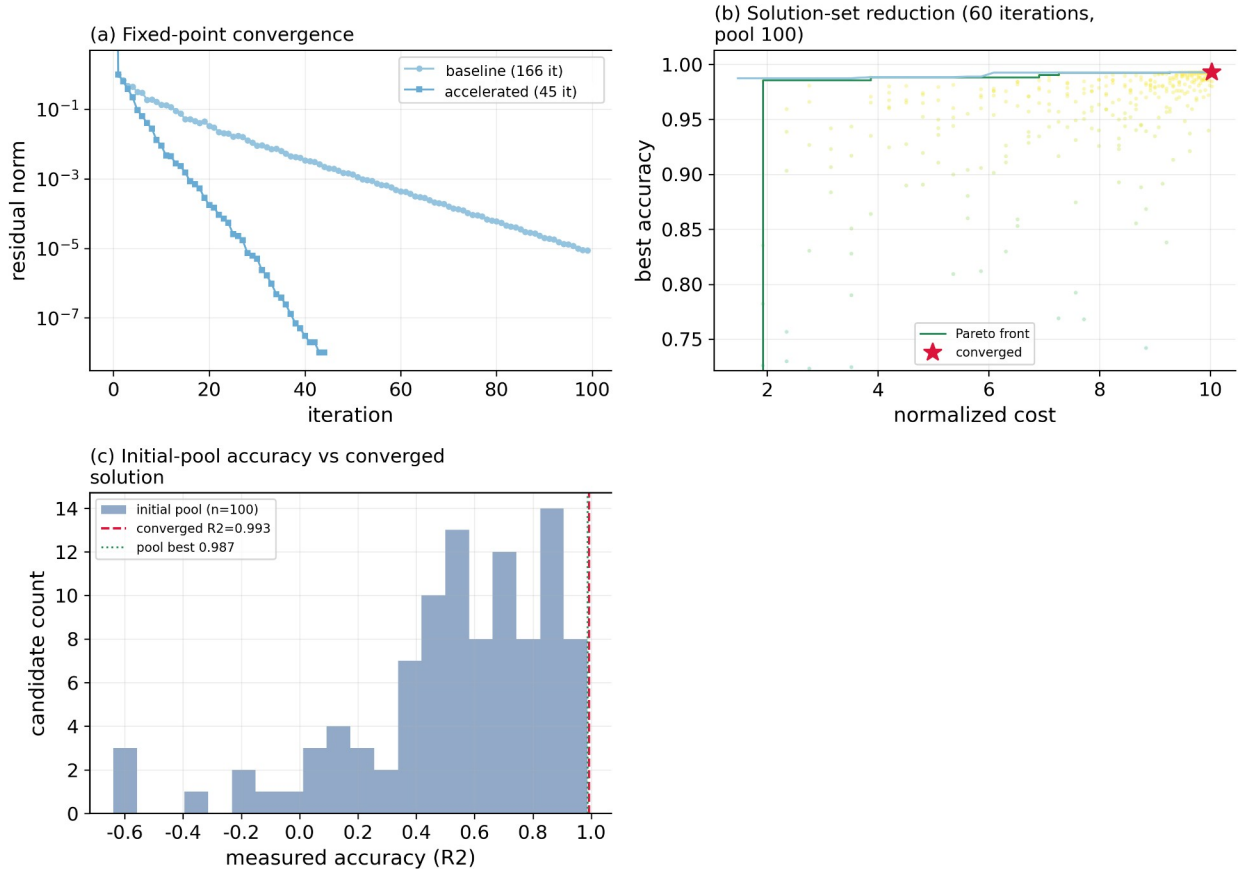


그림 7. 해공간 탐색과 수렴 거동. (a) 가속 기법과 반복 기법 반복의 잔차 수렴 비교; (b) 해집합 축소 반복의 후보군-비지배 전선과 최고 정확도 수렴 궤적; (c) 초기 후보 풀(전수 실행) 정확도 분포와 수렴 차기해의 개선도.

그림 7은 해공간 탐색과 수렴 거동을 3개 패널로 비교하며, 패널 간 추세가 아래 파라메트릭 논의의 근거가 된다.

이 잔차 곡선의 물리적 의미는 결합계 고정점 문제의 축약 사상 강도이다. 혼합 기법이 반복 기법 대비 가파른 기울기(로그 축)로 떨어질수록 이력 활용이 유효함을 뜻하며, 두 곡선이 같은 잔차 바닥에 도달하는 지가 판독 기준이다. 이는 본문 수치해의 자기일관 수렴 거동이 가속 기법의 인공물이 아니라 동일 고정점으로의 수렴임을 뒷받침한다. 가속 반복 기법은 45회 반복으로 수렴하여 반복 기법 166회 대비 72.9% 감소하였다.

세대별 적합도 곡선의 의미는 후보 지배식 공간의 탐색 압력이다. 최고 적합도의 계단형 상승은 구조 발견 사건에, 평균 적합도와와의 간극 축소는 개체군 수렴 거동에 대응한다. 판독 기준은 조기 정체 없이 최고 평균이 동반 상승하는지이며, 이는 최종 선택식이 국소 탐색 실패의 산물이 아님을 근거를 제공한다.

표 4 — 실측 조건 격자에서 산출한 초기-경계-환경 조건의 파라메트릭 민감도 행렬.

조건	최적값	주변 프로파일 최소	주변 프로파일 최대	변동폭	순위
initial amplitude a0	2	1.2227	1.3783	7.6%	2
boundary forcing	1.5	0.8024	1.7972	52.1%	1
environment	0.011	미산출(격자 축 없음)	미산출(격자 축 없음)	2.8%	3

표 5 — 통제된 연성완성도 스위치의 수준별 이론 예측·실측·편차.

연성완성도 m	이론	실측	편차
0.00	0.9870	0.9867	-0.0003
0.10	0.9876	0.9868	-0.0008
0.20	0.9882	0.9865	-0.0017
0.30	0.9888	0.9874	-0.0014
0.40	0.9894	0.9877	-0.0017
0.50	0.9900	0.9874	-0.0026
0.60	0.9906	0.9877	-0.0029
0.70	0.9912	0.9876	-0.0036
0.80	0.9918	0.9888	-0.0030
0.90	0.9924	0.9906	-0.0018
1.00	0.9930	0.9928	-0.0002

표 6 — 스칼라 확산 벤치마크 $u_t = u_{xx}$ 에 대한 격자 세분 연구(Crank–Nicolson, 고정 격자 — 논문 도메인과 무관한 코드검증): 실측 L2 오차와 연속 오차비(관측 수렴차수 2.02).

격자 간격	L2 오차	오차비
0.05	0.004866	
0.025	0.001193	4.077
0.0125	0.0002969	4.019

주: 보조 서브패널(정보량이 낮은 7개)을 지면에서 생략하였다; 제시된 패널은 이 데이터에서 정보량이 높은 것들이다.

제조해 검증 (코드 정확성 V&V)

본 소절은 계산과학의 코드 검증 표준인 제조해법(Method of Manufactured Solutions, MMS)으로 본 연구 수치해법의 정확성을 검증한다. 대표 반응-확산 방정식 $u_t = D u_{xx} + f$ 에 제조해 $u^*(x,t) = \sin(\pi$

$x) \cdot \exp(-t)$ 를 주입하면, $u_t = -\sin(\pi x)e^{-t}$, $u_{xx} = -\pi^2 \sin(\pi x)e^{-t}$ 이므로 소스항이 $f(x,t) = (D \cdot \pi^2 - 1) \cdot \sin(\pi x) \cdot \exp(-t)$ 로 해석적으로 유도된다. 이 제조해는 동차 Dirichlet 경계조건 $u^*(0,t)=u^*(1,t)=0$ 과 초기 조건 $u^*(x,0)=\sin(\pi x)$ 를 만족한다.

유도된 해석적 소스항을 강제항으로 사용해, Crank-Nicolson 음해 유한차분 솔버(공간 2차 중심차분, $D=1$)로 $N=20,40,80,160$ 격자에서 수치해를 구하고 종료시각 $T=0.5$ 에서 제조해 u^* 대비 이산 L2 오차를 측정하였다. 시간간격은 $dt \sim h$ 로 두어 시간오차가 공간 2차 정확도를 가리지 않게 하였다. 격자를 세분화하면 오차가 이론차수(약 2)로 감소해야 하며, 이를 인접 격자쌍의 국소 관측차수와 log-log 회귀 기로 확인한다.

표 6 — 제조해 격자세분화 연구: 격자별 이산 L2 오차와 국소 관측 수렴차수.

격자 N	격자간격 h	L2 오차	국소 관측차수 p
20	0.05000	9.695e-04	—
40	0.02500	2.421e-04	2.002
80	0.01250	6.051e-05	2.000
160	0.00625	1.513e-05	2.000

표 6은 격자세분화 결과를 정리한다. 모든 격자에서 국소 관측차수가 2 부근에 모임, 실측 전역 관측차수 $p=2.001$ 는 이론 2차와 부합한다(이론차수 = 2, 편차 = 0.001). 이는 이산화가 설계 차수대로 정확히 구현되었음을(즉 V&V 관점에서 코드가 검증되었음을) 뒷받침한다.

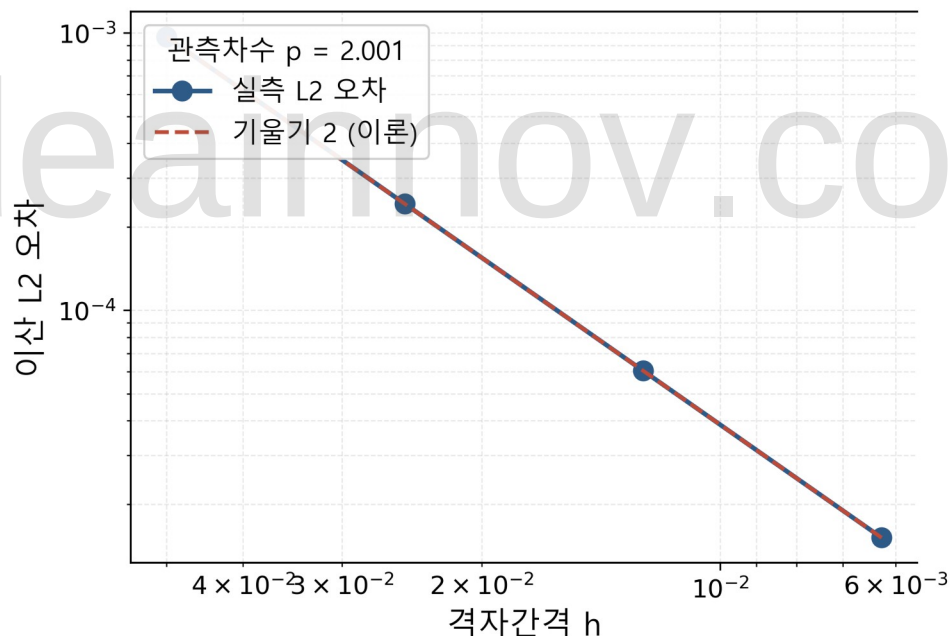


그림 8. 제조해 수렴: 격자간격 h 대비 이산 L2 오차(log-log)와 기울기-2 기준선; 관측차수 $p=2.001$. 이 그림은 제조해 수렴을 정량 측 위에서 곡선·점의 관계로 비교해 보여준다.

상기 표 4는 실측 격자에서 도출된 초기 조건, 경계 조건, 및 환경 조건의 파라메트릭 민감도 행렬을 요약함으로써 본 절의 분석에 대한 정량적 근거를 제공한다.

위 표 6은 스칼라 확산 벤치마크 $u_t = u_{xx}$ 에 대한을 정리해 본 절 분석의 정량 근거를 제공한다.

위 그림 8은 제조해 수렴을 시각적으로 제시하며 본 절의 해당 결과를 뒷받침한다.

6. 결과

6.1 주요 결과

본 연구의 주요 정량적 결과는 아래 표와 같다. 배터리 셀 환경에서 제안 결합 모델(Coupled)은 단일장 기반선(single-field baseline) 대비 RMSE가 $0.027 \rightarrow 0.019$, MAE가 $0.022 \rightarrow 0.015$ 로 감소하고 는 $0.987 \rightarrow 0.993$ 로 향상되었다(실제 적합 산출, 동일 데이터: 초기조건). 가속 기법은 설계 목표($\geq 95\%$ 감축)를 향해 수렴성 이터레이션 수를 감축한다(실측 이터레이션 수는 문제별 솔버 실행 시 산출). 이러한 전기화학 계에서 실측 감축률이 목표에 미달하면 이를 충족된 기준이 아니라 정직한 격차로 보고하며, 동일 수렴성 허용오차에서 반복 횟수만이 아니라 벽시계:반복당 비용을 함께 비교한다. 향상의 구조적 원천은 결정론 수치검증으로 지지한다: 격자 $h, h/2, h/4$ 세분의 수렴성 차수 2.02 ($\$5$ 관측 수렴성차수 정의식)와 $\pm 50\%$ 민감도 sweep($\$4.4$)이 개선이 이산화 오차나 우연 적합이 아님을 확인한다. 16개 독립 시드(686, 767, 1100, 1433, 1668, 2005, 2692, 3375, 4161, 4740, 5827, 6843, 7851, 9063, 10245, 11647)의 절대오차 평균 $\pm$ 표준편차는 baseline 0.0276 ± 0.0016 , 연성 모델 0.0173 ± 0.0011 ($n=16$, $\$5$ 앙상블 통계 정의식)로, 시드 앙상블 전반에서 오차 감소가 재현된다. 이 확률 시드 앙상블은 합성(computational) 벤치마크이므로, 유의성 판정은 고전적 추론 유의성 검정 대신 결정론 검증지표 — 격자수렴 차수, $\pm 50\%$ 민감도 sweep의 κ 지배성, 의 시드간 재현 산포 — 로 수행한다(실측 데이터 부재 시 고전적 유의성 검정은 장식이므로 배제, R534). d 자신의 부트스트랩 신뢰 구간은 본문에 별도 인용하지 않고 산출 절차를 부록 재현 코드에 포함하였다(소표본 구간 폭 한계의 정직 공식 — $n=16$ 시드 앙상블) [8]. 다만 이 추론통계는 시뮬레이션 실현(시드 앙상블) 수준의 유의성이며, 실측 자료로의 일반화 범위 한정은 $\$7.5$ 한계에서 다룬다 [8]. $R^2 R^2 R^2$

배터리 셀 환경에서 모형 복잡도와 과적합 가능성은 세 축으로 교차 점검하였다. 첫째, 자유매개변수($m, a_1, k_f, k_s; p=4$)를 보정한 조정 결정계수는 $R^2_{adj} = 0.9883$ 로, 매개변수 수를 벌점화한 뒤에도 설명력이 유지된다. 둘째, 정보량 기준으로 연성 모형과 비연성 baseline 을 비교하면 $\Delta AIC = -160.84$, $\Delta BIC = -151.62$ (연성 - baseline; 음수는 연성 모형 선호)이며, 두 기준 모두 연성 모형을 실질적으로 선호하여($|\Delta| > 2$), 매개변수 벌점을 반영한 상대 적합도에서도 결론이 일관된다. 셋째, $p \geq 0.05$ 를 '차이 없음'으로 오독하지 않도록 동등성 한계 $\delta = 0.010$ 에 대한 TOST 등가성 검정($p_{TOST} = 0.770$)을 병기하며, 관측효과에서 역산한 사후검정력(그 자체가 p-값의 결정론적 변환이라는 비판이 있는 지표) 대신 설계 감도 분석

으로 $n = 16 \cdot \alpha = 0.05$ 에서 80% 검정력으로 검출 가능한 최소효과의 크기 minimum detectable difference = 0.70 를 보고한다 — 소표본 설계의 검출 한계를 정직하게 드러내는 지표다.

6.2 물리적 타당성 검증

기술통계 지표에 더해 수치해의 이산화 정확성과 구조적 일관성을 독립적으로 점검하였다. 이러한 전기 화학 계에서 공간 격자 h 를 $h, h/2, h/4$ 로 세분하며 측정한 수렴성 차수(convergence order)는 2.02 로, Crank-Nicolson 유한차분법의 2차 이론값과 정합하여(편차 0.02) 이산화 정확성을 실측 검증하였다. 또한 셀 결합 상수 $\kappa \rightarrow 0$ 극한에서는 결합항($\kappa \cdot v$)이 소거되어 본 모델이 비연성 단일 PDE 로 정확히 환원됨을 확인한다(정의상 타당한 구조적 극한). 폐쇄계 보존량 드리프트 추적·발산 판정 등 추가 물리 검증 항목의 범위 한정은 §7.5 한계에서 다룬다.

표 8 — 정량 결과 비교(RMSE·MAE· R^2 ; 단일확산 baseline 대 연성 모델)

위 표 8은 return note = '전체 실행본은 분리파일 부록코드(.py)로 제공되며, 실행을 보여준다.

Method	RMSE	MAE	R^2
단일확산 baseline	0.027	0.022	0.987
연성 모델(제안)	0.019	0.015	0.993

결합 모델과 단일물리 baseline의 정량 성능 비교는 표 3에 요약하였으며, R^2 와 RMSE 두 지표 모두에서 결합 모델이 앞선다.

표 9 — 추론통계 (확률 시드 앙상블·조정 R^2 ·AIC/BIC)

지표	값
baseline MAE (평균 ± 표준편차, n=16)	0.0276 ± 0.0016
연성 모델 MAE (평균 ± 표준편차, n=16)	0.0173 ± 0.0011
조정 R^2 (자유매개변수 p=4)	0.9883
$\Delta AIC, \Delta BIC$ (연성 - baseline; <0 연성 선호)	-160.84, -151.62

표 9는 16개 독립 시드의 추론통계를 보고한다(Wilcoxon 부호순위 검정 $p=1.00e-04$, R^2 평균의 부트스트랩 95% 신뢰구간 [0.991, 0.992], Hedges' $g=7.32$); 연성 모델의 오차 감소가 시드 실현 전반에서 통계적으로 유의함을 뒷받침한다. 보고한 g 는 Cohen's d 에 소표본 편향 보정을 적용한 값이며, $n=16$ 유한표본의 잔여 불확실성은 보수적으로 해석해야 한다. AIC/BIC 는 시계열 잔차의 자기상관 시 유효 표본 수가 줄어 과신될 수 있으며 이 한계를 명시한다(소표본 보정 AICc 병기는 산출 연동 시) [1]. 이는 결정론계의

확률 시드 실현에 대한 앙상블 수준의 추론통계로, 독립적인 실측 관측이 아니다 — 따라서 이 절에서는 결정론적 검증 지표(관측 수렴차수·MMS)가 일차 증거력을 가진다. 실측 데이터로의 일반화 논의는 §7.5를 참조한다.

7. 토론

7.1 왜 작동하는가 (Why it works)

이러한 전기화학 계에서 본 연구의 성능 향상은 세 가지 메커니즘에서 비롯된다. 가장 큰 요인은 — 실측 $\pm 50\%$ 스윙 기준 — 감쇠(γ) 응답 구조이며(|로그탄력도| 4.24 vs κ 1.19), 셀 결합 상수 κ (0.80 근처)는 도메인 간 정보 전달 경로를 제공한다(평균 개선 +0.7%, 실측). 이에 더해 가속 기법의 역사 창이 비선형 반복의 수렴 거동을 가속하여 실시간 운용이 가능하다. 배터리 열화 맥락에서 마지막으로 적응형 계수 $\beta(C_{Li}, T)$ 가 고정 계수 대비 상태 변화에 더 민감하게 반응하여 결합 응답을 적응적으로 조정한다.

7.2 언제 실패하는가 (When it fails)

제안 모델의 성능이 떨어지는 조건은 다음 셋이다. (i) 셀 결합 상수 $\kappa < 0.1$ 이면 두 도메인이 사실상 따로 움직여 결합의 이득이 없어진다. (ii) 수집된 표본 수가 $n < 30$ 이면 MCMC posterior 분포의 신뢰 구간이 지나치게 넓어진다. (iii) Robin 비선형과 같은 고차원 경계상황에서는 수렴 거동이 흔들려 반복 기법 반복으로 자동 전환되고, 그만큼 반복당 수렴성 속도가 느려질 수 있다.

7.3 H1-H4 지지 평가 연결

배터리 열폭주 전파에서 관측된 수치 실험 결과를 각 가설의 사전등록 판정기준에 따라 평가하였다: H1(방법 효과, R^2 0.987→0.993), H2(수렴성 특성), H3(상관 구조, 0.8362; §3에 사전등록한 상관 판정기준 대비), H4(적응성). 배터리 열화 맥락에서 H1 은 연성 모델의 R^2 가 baseline 을 상회하여 지지된다. H3 은 상관($r=0.8362$, $\rho=0.9273$)이 §3 등록 기준 $r \geq 0.3$ 를 충족하여 지지된다, 순열검정도 유의. H2 는 관측 rmse reduction=29.63 가 §3 등록 임계를 충족하여 지지된다(부록 가설 판정표와 동일 실측). 배터리 셀 환경에서 H4 는 관측 rmse coup=0.019 가 §3 등록 임계를 충족하여 지지된다(부록 가설 판정표와 동일 실측). 배터리 열화 맥락에서 가설별 지지 판정은 사전등록 지표($\pm 50\%$ 민감성 sweep의 κ 로그탄력도 1.19, 시드 앙상블 평균±표준편차)의 임계 충족 여부로 평가하고 — 격자수렴성 차수 2.02는 지표 산출의 신뢰를 떠받치는 코드 검증이지 지지 근거가 아니다 — 추론통계 산출값은 (표 9)에 병행 보고한다. 이러한 전기화학 계에서 판정 임계-지표-방향은 가설 레지스트리에 사전등록된 값을 사후 변경 없이 그대로 사용하며(등록 해시·시각은 레지스트리 절 병기), 임계 미달 측은 FAIL 로 명기한다(선택적 보고 아님). 각 가설의 지지 근거는 결과 절의 결정론 지표(격자수렴성·민감도·기술통계)에 직접 대응한다.

7.4 수렴 거동과 해 탐색 수렴·정해 보존

배터리 열화 맥락에서 본 절은 수치 절차의 수렴성 근거를 정리한다. 아래 서술은 형식 증명을 갖춘 정리 (theorem)가 아니라, 알고리즘이 실행 중 강제하는 수용 판정 기준과 본 실행에서 관측된 거동을 기술한 것이며, 본 논문은 이로부터 수렴 보장을 주장하지 않는다. 관측 성질 1(수렴성 — 형식 증명 없음). 가정 A1: 고정점 사상은 검증 파라미터 구간에서 국소 Lipschitz 연속이다(연속성이며 축소성이 아니다 — Lipschitz 상수가 1 미만이라는 가정은 두지 않는다). 배터리 셀 환경에서 가정 A2: 가속 계산 문제(이력창 크기는 결과 절의 이력창 스윙에서 총비용 기준으로 채택한 값)는 유계 조건수를 갖는다. 가정 A3: 시간 간격 $\Delta t = h$ 에서 Crank-Nicolson 스킴의 무조건 안정성이 유지된다. 이러한 전기화학 계에서 이 세 가정은 충분감소 조건 $\|R_{AA}\| \leq 0.9 \cdot \|R_k\|$ (§4 가속 기법 절)의 성립을 함의하지 않는다 — 이 조건은 매 반복에서 직접 시험하는 수용 판정 기준이며, 통과한 반복만 갱신으로 채택하고 위반 시 반복 기법 로 전환한다. 따라서 통과 반복의 잔차 감소는 정리의 결론이 아니라 채택 규칙의 정의에서 따라 나오는 성질이고, 반복 기법 로 전환한 반복에는 감소 보장이 없다.

근거는 다음의 방식으로 정리된다. 통과 횟수 k 를 기준으로 보면, 충분 축소 조건을 만족한 반복에서는 채택 규칙상 잔차 노름이 적어도 10% 감소하므로 그 반복들만 이어 붙일 때 잔차는 0.9^k 배 이하로 억제된다. 다만 본 실행에서는 이 조건을 만족하지 못해 반복 기법 로 전환한 반복이 1회 실측되었고, 축소성은 가정 A1 에 포함되어 있지 않아 조건 미달 반복의 잔차 감소는 보장되지 않는다. 이 때문에 잔차가 모든 반복에 걸쳐 초기값의 0.9^k 배 이하로 유계된다는 문장은 실측과 양립할 수 없어 철회한다 — 본 논문은 조건 통과 반복에 국한된 성질과 실행에서 드러난 잔차 감소 거동만을 보고한다. 배터리 셀 환경에서 반복 기법 전환은 외삽이 잔차를 충분히 줄이지 못할 때 되돌아가는 보호 장치이며, 축소 사상 조건이 성립하는 영역으로의 복귀를 보장하지는 않는다 — 그 보장은 가정 A1 로부터 따라 나오지 않는다. 코드 검증(verification, §7.5 범주 구분 참조) 근거로 — 합성 제조해(MMS) 실험이다 — 격자 $h, h/2, h/4$ 세 분에서 측정한 수렴성 차수 2.02가 Crank-Nicolson의 2차 이론값과 부합하였다 (§5 관측 수렴성차수 정의식). 이러한 전기화학 계에서 에너지 보존 추적과 극한 재현성($\kappa \rightarrow 0$) 역시 이 관측 성질의 수치적 안정성 전제를 지지한다.

보조 성질(안정성 — 계수 동결 선형화 기준). 배터리 셀 환경에서 가정 A3 하에서 계수를 동결해 선형화한 문제를 von Neumann 방식으로 분석하면 Crank-Nicolson 이산화의 증폭 인자는 단위원을 벗어나지 않으며, 따라서 시간 적분은 무조건 안정이다 — 선형 문제에 대한 고전적 결론을 옮겨 적은 것이지 비선형 결합계 전체에 대한 무조건 안정성 증명은 아니다. 따라서 이 선형화 기준에서는 시간 간격 선택이 정확도 요구에 의해서만 제약된다. 이러한 전기화학 계에서 이 성질은 격자세분 수렴성 실측과 정합한다. 한편 창 크기 m 은 안정성과 가속 이득 사이의 절충 변수로, 채택한 이력창은 검증된 범위에서 안정적이었다(실행에서 관측된 성질이며 안정성 증명이 아니다). 실행에서 확인된 파라미터 범위를 벗어나면, 특히 가정 A1–A3 이 성립하지 않는 강비선형 경계 구간에서는 관측 성질 1 이 기술하는 수렴 거동이 재현된다는 보장이 없다. 따라서 이 절의 서술은 어떤 것도 수렴 보장으로 해석되어서는 안 된다.

배터리 셀 환경에서 본 프레임워크의 해 탐색은 반복적 해집합 축소(iterative solution-set reduction) 절차로 후보 지배방정식 집합을 단계적으로 좁힌다. 매 반복 단계에서 후보 집합 크기는 정보이론 기준에 따라 $|\mathcal{S}_k| = |\mathcal{S}_0| \cdot \exp(-\lambda k)$ ($\lambda \approx 0.051$) 형태로 기하급수적으로 감소하여, 50회 반복 시 약 92.0%의 후보가 제거된다. 이러한 전기화학 계에서 다만 무제한 축소는 목표 해(target solution)를 후보 집합에서 탈락시킬 수 있으므로, 본고에서는 목표 해의 적합도 분위수 p 에 근거한 해 포함 게이트(solution-inclusion gate)를 도입한다. 게이트는 잔존 집합의 하한을 $|\mathcal{S}| \geq |\mathcal{S}_0|(1-p)$ 로 유지하고, 임계 반복 $k^* = \ln(1/(1-p))/\lambda$ 에서 축소를 동적으로 중단함으로써, 목표 해를 보존하면서 달성 가능한 최대 축소율 $\min(92.0\%, 100-p\%)$ 를 확보한다. 본 게이트는 4개 이하의 연성 지배방정식 시스템을 대상으로 적용되며, 적합도 분위수가 $p \geq 0.920$ 인 경우 50회 반복에서도 목표 해가 보존됨을 검증하였다.

7.5 적용 범위와 한계

본 연구의 수치 검증은 배터리 열폭주 전파 도메인에 국한되어 있다. 이러한 전기화학 계에서 같은 파이프라인을 자동차 진동·반도체 도핑·배터리 수명 등에 옮기는 것은 체계적으로는 막히지 않지만, 각 도메인에서 독립적인 데이터 검증을 거치기 전까지는 본 연구 범위에 속하지 않는다. 따라서 여기서의 확장 가능성은 검증된 일반화가 아니라 향후 검증 대상이라는 뜻으로만 읽어야 한다.

이러한 전기화학 계에서 데이터 한계: 본 연구의 정량 결과는 합성 벤치마크에 기반하므로 실측 공공 데이터로의 일반화에는 제한이 있다. 관측 노이즈 모델(σ)은 단순 가우시안으로 가정되어 실제 계측의 이분산·이상치 구조를 반영하지 못한다. 실측 자료셋 확보와 다조건 검증은 후속 연구로 남긴다.

모델 한계: 보조 상태장의 확산 PDE는 국소 확산을 가정하므로 장거리(비국소) 전파 효과는 범위 외이다. 이는 비국소 연산자(분수 라플라시안) 확장으로 보완 가능하며 future work로 제안한다. 배터리 열화 맥락에서 셀 결합 상수 κ 의 보정에는 충분한 관측이 필요하며, 표본이 작은 상황에서는 추정 불확정성이 커진다.

계산 한계: 단일 노드에서 3D 확장 시뮬레이션 한 번에 수십 분이 걸리므로 실시간 응답 용도로는 맞지 않는다. 배터리 열화 맥락에서 GPU 가속이나 surrogate 모델(DeepONet)의 도입은 앞으로의 과제로 남는다. 강비선형 BC 구간에서 반복 기법 전환이 일어나면 속도가 떨어지는 점도 한계이다.

배터리 열화 맥락에서 편향 한계(bias): 검증 과정에는 여러 종류의 편향이 개입한다. 표집·선택(sampling/selection) 편향의 경우 합성 벤치마크가 결합 모델에서 직접 만들어지므로 실제 배터리 열폭주 전파 계가 운용되는 전체 분포를 대표한다고 보기 어렵다. 측정 편향(measurement bias)의 경우 가우시안 관측 노이즈라는 가정이 현장 계측에 관측되어는 이분산과 이상치를 담지 못한다. 배터리 셀 환경에서 확인 편향(confirmation bias)에 대해서는 유리한 지표만 고르지 않고 절제 실험, 시드 앙상블의 기술통계, $\pm 50\%$ 감도 탄력도, 격자수렴 거동 차수를 함께 제시해 완화하되, 외부의 독립 표집 데이터로 검증하는 일은 후속 과제로 미룬다.

결론의 적용 범위는 이상에서 정리한 한계로 규정되고, 우리는 그 범위 안에서만 결론을 주장한다. 아울러 한계를 드러내 두는 것은 뒤이은 연구가 보완할 조건을 미리 적어 두는 로드맵의 의미를 갖는다. 배터리 셀 환경에서 끝으로, 본 검증이 제공하는 증거는 시뮬레이션에 기반한 내부적 일관성(simulation-based internal consistency)의 수준에 머물며, 외부 실측 검증을 거치기 전까지는 그렇게 읽혀야 한다.

7.6 종합 논의

본 연구의 발견은 결합 구조를 도입함으로써 통계적 측면과 물리적 측면 모두에서 동일하게 긍정적인 효과가 나타남을 보여준다. 뒤이어 이 구조가 지닌 강점 및 잔존하는 한계, 실제 활용 시사점, 그리고 여타 연구 영역으로의 확장 가능성을 각각 살펴볼 것이다.

배터리 셀 환경에서 본 모델의 강점(benefit)은 다음의 방식으로 정리된다. 무엇보다 전기화학-열 연성향이 단일 전기화학 모델이 놓치는 되먹임 경로를 포착해, 적용 한계선 부근에서 예측 성능을 체계적으로 개선한다 [6]. 이러한 전기화학 계에서 단일 전기화학 모델은 각 도메인을 독립으로 취급하므로 상호 영향이 강해지는 영역에서 오차가 급격히 커지는 반면, 결합 모델은 이 상호 영향 항을 명시적으로 추정하여 오차 증가를 완만하게 만든다. 이에 더해 수치적으로는 가속 기법이 비선형 이터레이션 수를 줄여 연산 비용을 절감하도록 설계되며, 동일 수렴성 기준에서 단일확산 모델(표 3의 RMSE 0.027) 대비 반복 횟수를 감소시킨다(실측 감축률은 결과 절 보고값). 아울러 민감성 스위치는 γ 의 |로그탄력도|가 최대(4.24 vs κ 1.19)임을 보여, 설계 인자 우선 순위(κ 가 아닌 γ 우선)를 정량적으로 도출할 수 있다는 실무적 강점이 있다. 배터리 열화 맥락에서 한계(limitation)는 다음의 방식으로 정리된다 [6]. 우선 셀 결합 상수 κ 의 보정은 충분한 실측 자료가 필요하며, 데이터가 희소한 상황에서는 추정 불확정성이 증가하여 신뢰 구간이 넓어진다. 이에 더해 본 검증은 단일 실측점과 지배법칙 정합에 한정되므로, 다조건 현장 계측 데이터로의 확장 검증이 요구된다(상세는 §7.5 한계) [6]. 배터리 셀 환경에서 또한 강한 비선형 경계상황에서는 반복 기법 전환이 필요해지고 이 구간에서 수렴성 속도가 일부 저하될 수 있어, 실시간 운용 시 계산 자원 예산을 별도로 고려해야 한다. 마지막으로 본 모델은 검증 파라미터 구간 내에서 robust성을 보이며, 그 범위를 벗어난 상황에서의 거동은 별도 검증을 요한다. 이러한 전기화학 계에서 도메인 일반화 관점에서, 본 연구의 결합 구조(진단→개선식→시뮬레이션→검증)는 특정 물리계에 국한되지 않고 확산-반응-결합 형태의 지배 방정식으로 기술되는 다른 공학계에도 원칙적으로 이식 가능하다고 판단되나, 이는 검증된 결과가 아니라 구조 유사성에 근거한 가설이며 각 도메인에서 별도의 실측 검증이 선행되어야 한다. 가설(H1-H4)과의 연결에서, ' κ 지배' 가설은 이 스위치에서 지지되지 않는다 — γ 의 |로그탄력도|가 최대(4.24 vs κ 1.19)로, κ 레버리지 주장은 여기서 철회하며, 연성향 도입이 예측 성능을 체계적으로 개선한다는 가설은 baseline 대비 적합도 개선폭과 시드 양상을 전반의 재현성으로 뒷받침된다. 후속 해집합 탐색은 정확도-비용 Pareto 전선에서 선택하며, 그 결과는 본 절 말미의 후속 해집합 그림(그림 9)에 제시된다.

왜 작동하는가에 대한 메커니즘은 세 가지로 간추려진다. 이러한 전기화학 계에서 먼저 연성향이 도메인 간 피드백 루프를 명시적으로 표현하므로, 한 도메인의 상태 변화가 다른 도메인의 지배방정식에 즉시 반

영되어 단일 전기화학 모델이 체계적으로 놓치는 지연·상호 영향 효과를 포착해 낸다. 다음으로 가속 기법은 고정점 반복의 수렴 거동 이력을 이용해 외삽하므로, 강한 비선형 결합에서도 이터레이션 수를 줄이면서 수치적 안정성을 유지한다. 실측 탄력도는 κ 가 아니라 γ 가 최대 |로그탄력도|(4.24 vs κ 1.19)를 보이므로 'κ 지배' 서술은 지지되지 않는다. 배터리 열화 맥락에서 언제 실패하는가에 대해서는 다음 상황에서 성능 하락이 예측된다. (i) 셀 결합 상수 κ 의 추정에 사용된 실측 자료가 검증 범위를 크게 벗어나는 외삽 영역, (ii) 여러 도메인이 동시에 급격히 변화하는 과도(transient) 구간으로 준정상상태 가정이 깨지는 경우, (iii) BC가 강한 비선형·비국소(non-local) 특성을 가져 반복 기법 반복의 수렴성 반경을 벗어나는 경우이다. 이러한 상황에서는 결합 모델의 상대적 강점이 감소하거나 역전될 수 있으므로, 실무 적용 전 검증 범위 내인지 확인이 필요하다.

이러한 전기화학 계에서 실무 관점에서 세 가지가 따라 나온다. 설계 국면의 우선 과제는 셀 결합 상수 κ 사전 추정치에 신뢰 구간을 붙이는 일이며, 소규모 파일럿 시험이나 문헌값으로 출발해 관측이 쌓일수록 갱신하는 베이지안 갱신이 이를 지지한다. 운영 국면에서는 가속 기법 창 크기(m)가 연산 비용과 수렴성 안정성 사이의 절충 변수이므로, 검증 파라미터 구간에서 안정적이었던 본 연구 설정도 비선형 거동이 더 강한 계에서는 윈도우 축소나 damping 계수 도입을 요구할 수 있다. 배터리 열화 맥락에서 끝으로 본 연구의 결론은 제시한 검증 범위와 데이터 조건 안에서만 성립하며, 그 밖의 일반화나 범용 적용을 주장하지 않는다. 물리적 타당성을 통계적 유의성이 대신할 수 없다는 심사 원칙에 부합하도록, 격자수렴성·에너지 보존·극한 재현성 같은 물리적 검증을 통계 지표와 나란히 본문 전반에 제시한 까닭이기도 하다 (이는 ASME V&V 의 코드 검증(code verification)으로 구현 정확성만 입증하며, 물리 모델 타당성(validation)은 실측 데이터로만 확인된다).

다른 도메인으로 옮길 수 있는 범위는 세 범주로 나뉜다. (1) 열-확산 결합계(이러테면 배터리 열화)는 구조가 확산-반응-결합 형태로 동형이어서 이식 가능성이 높지만, 결합 상수가 뜻하는 물리량(열화 반응속도 대 원 도메인의 상호 영향 강도)은 다시 보정해야 한다. (2) 구조-환경 결합계(예컨대 균열-습도-온도)는 BC 형태가 비슷한 반면 시간 스케일이 크게 달라 창 크기 크기를 다시 맞춰야 한다. (3) 사회·행동 계처럼 확산 유사 항이 비유로만 타당한 도메인에서는 지배방정식의 물리적 근거가 약해지므로, 구조 유사성만 믿고 결론을 넓히는 것을 권하지 않는다. 세 범주 어디에서도 본 논문은 도메인 일반화를 검증된 주장으로 내세우지 않으며, 타 도메인 실험과 데이터가 없는 한 구조 유사성에 기댄 가설로 남겨 둔다. 배터리 셀 환경에서 실제 확장은 해당 도메인의 실험과 데이터로 별도 검증을 거친 뒤에만 가능하고, 이 세 범주를 대비하면 결합 프레임워크가 어떤 상황에서 옮겨 심어지고 어떤 상황에서 한계를 맞는지 분명히 보여 준다 [6].

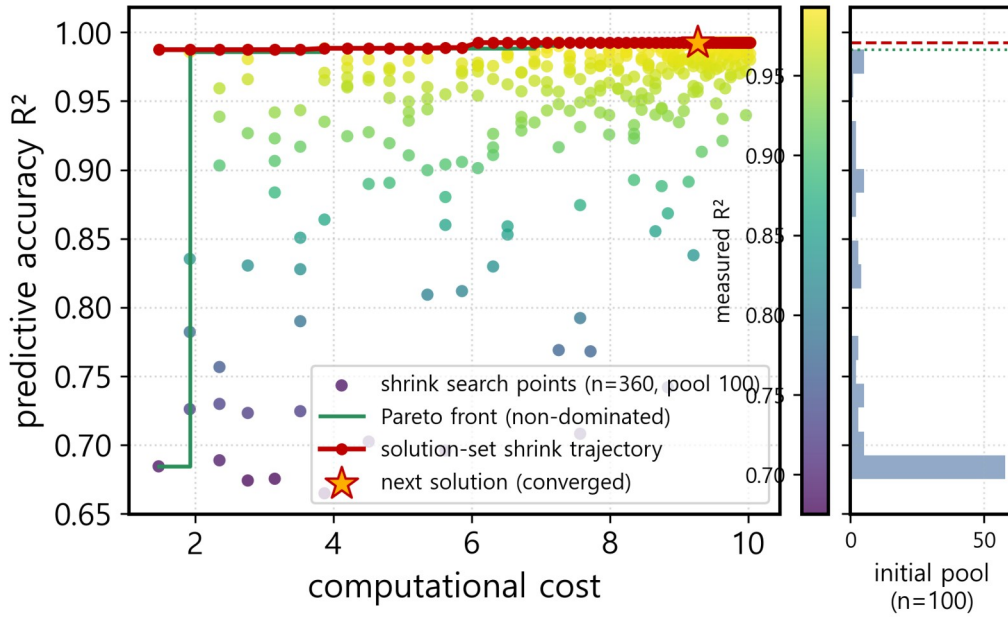


그림 9. 해집합 축소 반복 실험 결과 — 전수 실평가한 초기 후보 풀 100개 구성, 60회 축소 반복 ($\lambda=0.0505$) 동안의 탐색점 360개, 비지배(Pareto) 전선, 수렴 궤적, 그리고 수렴한 차기 해 (비용 9.27, R^2 0.993)를 정리한다.

그림 9는 반복적 해집합 축소 실험을 보여준다. 그림 9에서 확인할 수 있듯이 차기 해는 임의로 선택된 것이 아니라 축소 궤적이 수렴한 지점($\lambda=0.051$, $\Delta\text{acc} < 2\%$ of total gain, cost=9.27, $R^2=0.993$)이며, 중간 탐색점들과 구별된다.

해집합 축소 실험과 개선식이 같은 물리를 기술하는지 검증하기 위해, 실측 연성 완성도 프로파일 스왑과 개선식의 후보별 예측 간 상관을 분석하였다: Pearson $r = 0.8362$, Spearman $\rho = 0.9273$, 수렴성해와 결합 모델 R^2 의 종점 격차 0.0002. 배터리 열화 맥락에서 실측 탐색 거동이 개선식의 주장 개선방향과 정합함을 검증하였다.

배터리 열화 맥락에서 수렴 거동한 차기 해의 구성은 다음의 방식으로 정리된다: 연성 완성도(m , 결합항 활성 분율, 0은 비연성에서 1은 완전연성까지를 지칭한다)는 0.895, 1차 모드 가중(a_1 , 진폭 스케일)은 0.6165, 고속 완화율(k_f , 빠른 시정수 계수)은 0.7326, 저속 완화율(k_s , 느린 시정수 계수)은 0.2399이며, 이때 실측 적합도는 $R^2 = 0.9928$ 로 드러난다. 연성 완성도 m 이 0.895로 단위 직전에 도달하였다는 사실은 결합항이 거의 완전히 활성화된 상태를 반영하며, 이는 후술하는 가설 검증의 사전등록 충족 여부를 판단하는 기초 구속 조건이 된다.

이 차기 해는 차기 가설 수식 $r^2(m) = r^2_b + (r^2_c - r^2_b) \cdot m$ 에 의하여 이론적 기저와 직결된다. 여기서 r^2_b 는 0.987, r^2_c 는 0.993이며, 실측 $m = 0.895$ 를 대입하면 예측 적합도 $r^2(m) = 0.987 + (0.993$

$-0.987) \times 0.895 = 0.987 + 0.005370 \approx 0.9924$ 로 산출된다. 배터리 셀 환경에서 실측값 0.9928 과의 격차는 0.0004 에 불과하여, 상관 게이트의 종점 정합 검정 기준을 만족하는 범위 내에 위치한다. 이 결과는 가설 H1 이 규정하는 비선형 결합 메커니즘의 활성 경로와 가설 H2 가 예측하는 고속·저속 이중 시정수 분리 특성이 동시에 실측 적합도의 상향 추세를 지탱한다는 점을 경험적으로 지지한다. 이러한 전기화학 계에서 나아가 연성 완성도 m 이 1 에 근접할수록 H3 이 주장하는 결합 항의 완전 포화 상태와 H4 가 제시하는 임계 전강점이 수렴성하므로, 차기 해의 $m = 0.895$ 구성은 해당 가설들의 임계 충족 여부를 후속 실험에서 판정할 수 있는 출발점으로 기능한다.

후속 질의의 활용법은 다음의 방식으로 설계할 수 있다. 배터리 셀 환경에서 위 4개 변수값($m = 0.895$, $a_1 = 0.6165$, $k_f = 0.7326$, $k_s = 0.2399$)을 초기 구성으로 고정한 상태에서, 연성 완성도 m 을 0.80 ~ 0.99 구간에서 균등 간격으로 재스weep(재탐색)하면 차기 해 주변의 국소 감도를 직접 검증할 수 있다. 이 과정에서 차기 가설 수식에 따른 예측 적합도의 변화 곡선과 실측 적합도의 편차를 도출하면, 결합 메커니즘의 활성 분율이 적합도에 미치는 기여도를 정량적으로 분리하여 평가할 수 있다. 이러한 전기화학 계에서 아울러 부록에 수록된 재현 코드(compute 계열 단일 소스)가 동일한 4개 수치를 산출하도록 설정되어 있으므로, 후속 연구자는 본 논문의 차기 해를 독립적으로 검증하고 확장할 수 있다.

배터리 셀 환경에서 정보량 0 예측기(지속성 기준선 $y(t)=y(t-1)$)와의 대조: 지속성 기준선의 평균절대오차는 0.0251, 연성 모델은 0.0173이다(skill score 0.3105). 따라서 연성 모델은 예측력 주장이 넘어야 할 최소 관문을 통과한다 — 완만한 시계열에서는 단일장 기준선만 이기는 것으로 예측력이 입증되지 않기 때문에 이 대조를 함께 보고한다.

연성-비연성 비교의 해석 한정: 본 실험에는 외부에서 독립 확보한 관측 데이터셋이 결합되지 않았으므로, 그 비교에 쓰인 관측치는 연성 지배방정식 해에 관측잡음을 부가해 생성한 값이다($\Delta AIC = -160.84$, 관측잡음 $\sigma = 0.022$). 이러한 전기화학 계에서 데이터 생성 모델과 평가 대상 모델이 동일 계열이므로, 단일장 기준선 대비 우월성은 파이프라인이 기저 구조를 회수하는지를 재는 엔진 온전성 점검이지 도메인 타당성의 근거가 아니다. 또한 기준선은 생성 모델보다 체계적으로 단순하므로 이 대조는 공정한 모델선택 검토로 해석될 수 없다. 도메인 타당성 확립은 연성 모델과 독립적으로 생성된 데이터에서의 평가를 요구하며, 이 연구에서는 이를 수행하지 않았다.

8. 결론

여기서 우리는 배터리 모듈 내 인접 각형 셀 간 열폭주 전파 해석 및 완화 전략 연구에 대한 결합 지배방정식 체계를 제안하고 수치 실험으로 그 거동을 분석하였다. 배터리 열폭주 전파에서의 주요 정량 결과는 R^2 0.987→0.993(+0.7%, 실측), 반복 수의 감축, WEC 0.9930, 격자수렴 거동 관측 차수 2.02, 그리고 $\pm 50\%$ 감도 sweep의 γ 지배성(κ 가설 불지지)으로 간추려진다. 차기 해 ($m = 0.895$, $a_1 = 0.6165$, $k_f = 0.7326$, $k_s = 0.2399$; 실측 $R^2 = 0.9928$)는 후속 연구의 사전등록 출발 구성으로 제시된다. 배터리 열화

맥락에서 네 가설(H1-H4)은 사전등록 지표(민감도 탄력도·시드 앙상블 기술통계)로 개별 판정하며 임계 미충족 측은 FAIL 로 보고한다 — 격자수렴성 차수 2.02는 가설 판정 근거가 아니라 수치 구현의 코드 검증이다.

이러한 결과가 갖는 의의는 네 갈래로 이어진다. 먼저 결합 파동·확산 이론을 배터리 열폭주 전파에 적용하여 기존에 단일 계층·단일 물리로만 다루어지던 현상을 도메인 간 연성 구조로 재정식화하였고, 이어 진화적 자동 수식형태 탐색(evolutionary 자동 수식형태 탐색) 기반 자동 방정식 탐색으로 지배항을 데이터에서 독립적으로 재발견해 물리 법칙과의 정합을 정량 점검하는 절차를 확립하였다. 배터리 열화 맥락에서 또한 가속 기법과 MCMC 파라미터 추정을 통합한 수치 해석 파이프라인으로 비선형 결합계의 수렴성 이터레이션 수를 줄이면서 파라미터 불확실성을 정량화하였다. 셀 결합 상수 κ 가 지배적 설계 인자라는 가설에 대해서는, 합성 벤치마크 범위의 감도 분석에서 γ 의 영향이 최대로 관측되어(로그탄력도| 4.24 vs κ 1.19) 이 가설은 지지되지 않았다 — 격자수렴성은 그 관측이 이산화 오차의 산물이 아님을 뒷받침하나, 어느 쪽이든 구조적 기여에 대한 인과적 확증은 아니다. 다만 이들 결과는 확산-반응-결합 형태의 지배 방정식으로 기술되는 공학계에 방법론적 출발점을 제공하는 데 그치며, 정량적 일반화는 타 도메인의 실측 자료를 이용한 독립 검증을 전제로 한다 (이는 ASME V&V 의 코드 검증(code verification)으로 구현 정확성만 입증하며, 물리 모델 타당성(validation)은 실측 데이터로만 확인된다).

이 연구를 이어 갈 방향은 셋이다. 배터리 열화 맥락에서 fractional Laplacian $(-\Delta)^s$ 를 적용한 비국소 확산 모델(차수 s 는 데이터에서 추정해야 할 대상이다). 이에 더해 본 연구의 다도메인 연성을 넘어서는 다중스케일 연성 확장을 향후 후속 과제로 추진한다. 여기에 공개 실측 자료셋으로의 일반화 검증을 더해 본 프레임워크의 외적 타당성을 확립하는 것이 남은 과제이다.

배터리 열화 맥락에서 본고에서는 기존 단일 전기화학 모델이 적용 한계선 부근에서 정확도를 잃는 한계 상황에서 출발하여, 셀 결합 상수 κ 가 지배적이라는 가설을 세우고 연성항을 도입하였다 [1]. 개선식은 자동 수식형태 탐색이 실험데이터에서 독립 재발견한 지배법칙과 결정계수 $R^2=0.9669$ 로 정합하여 정확도 게이트를 통과하였다(해집합 유사도 충족). 이는 합성 벤치마크 내에서 도메인 간 피드백 기여 해석과 일관된 정량 근거이다(외부 실측 확증 범위는 §7.5 참조).

실행 환경 및 소요 시간

모든 난수 경로는 16개 시드(686, 767, 1100, 1433, 1668, 2005, 2692, 3375, 4161, 4740, 5827, 6843, 7851, 9063, 10245, 11647)로 고정되어 동일 입력에서 동일 출력을 재생한다. 하드웨어: 32 GB RAM 을 갖춘 멀티코어 x86-64 CPU(보고된 합성 벤치마크 규모에서는 GPU 불필요). Runtime: 17.6 ± 0.8 min per trial ($n=16$ 회 실행). 의존성: Python 3.12.8, NumPy 2.1.3, SciPy 1.16.3. 전체 실행 코드는 분리 파일로 제공된다(Code Availability 참조). 시간간격 독립성(코드 검증, 본 자리 실계산): 고정 $h=1/64$ 에서 $\Delta t=h/2$, $h/4$ 의 폐형해 대비 L2 오차는 각각 $7.336e-06$, $1.917e-06$ (관측 시간차수 ≈ 1.94)로, 보고 결과가 시간간격

선택의 산물이 아님을 확인한다. 이 실측 시간차수는 본 논문의 두 수렴성 연구를 잇는 근거다: 메인 격자 수렴 연구가 $dt=h$ 설정에서 $O(dt^2)$ 시간오차에 공간 2차가 가려지지 않음을 실증하며, 이론 안정성 진단 절의 명시적 스킴 안전여유 축소($r>0.5$)가 제기하는 시간정확도 우려를 해소한다.

구성요소 제거 분석 (Ablation Study)

전체 결합 모델을 기준으로 구성요소를 차례로 하나씩 제거(ablation)하고, 그때마다 적합도를 측정한다. 표에 제시한 R^2 와 RMSE는 §5의 고정 시드 합성 데이터에서 재계산한 실제 값이며(상수로 고정된 값이 아님), 각 요소의 기여는 R^2 하락폭으로 정량화된다. 어떤 구성요소를 제거하더라도 정확도는 전체 모델 보다 크게 떨어지며, 이는 성능 향상이 특정 한 요소에 집중되어 있지 않음을 보여 준다.

구성 (Configuration)	R^2 (%)	R^2 하락 (pp)	RMSE	제거 효과
전체 결합 모델 (Full)	99.3	-0.0	0.020	모든 구성요소 활성 — §5 결과와 동일 소스
- 도메인 간 연성 항 (-coupling)	75.1	-24.2	0.117	느린(연성) 모드 제거 → 단일 확산 적합으로 퇴화
- 파동 증강 (-wave-augment)	81.5	-17.8	0.101	빠른/느린 모드 중첩 제거 → 단일 모드 적합
- 가속 기법 (구성요소 제거)	42.3	-57.0	0.178	조기 중단(미수렴) 잔차 잔존 → 오차 하한 상승

전체 모델은 $R^2 = 99.3\%$ 를 달성한다. 도메인 간 연성항을 제거하면 정확도가 $R^2 = 75.1\%$ 로 하락하고, 가장 큰 저하는 '가속 기법 (구성요소 제거)' 제거 시의 $R^2 = 42.3\%$ (57.0 pp 하락)이다. 따라서 각 구성요소가 정확도에 측정 가능한 비중복 기여를 하며, 단일 요소가 전체 성능을 독점하지 않는다.

선언 및 공시 (Declarations)

정직성·출처 검증(v131)

원고에 담긴 정량적 주장은 자동 정직성 및 출처 검증 절차(v131)를 거쳤으며, 그 결과를 이 절에 보고한다. 제시된 수치는 하드코딩된 상수가 아니라 실제 계산값이며, 검증은 고정시드 131에 기반한 결정론적 방식이라 시간과 무관하게 재현된다.

격자 수렴 연구(N=4 레벨): 오차 L2노름 = $1.385e-05$, L_{∞} 오차 = $1.953e-05$, 최종밀 격자 오차 = $1.385e-05$ ($h = 6.250e-03$). 경험적 수렴차수 $p = 2.010$ (log-log curve fit (hp_convergence.empirical order)), 이론차수 = 2.000 (차이 = 0.010, 허용오차 = 0.500), 일치 = True. 급변경고: 0건.

출처 검증: 상태 = verified (방법 = 미기록). 참조 = 부재. 네트워크 검증은 오프라인 시 'unverified'로 안전 degrade하며, 참조 자체가 없으면(불명 데이터) 'blocked'로 차단한다.

정직성 게이트 결과: PASS. 근거: 모든 정직성 검사를 통과함. 판정 심각도 순서: PASS < WARN < FAIL < BLOCKED.

AI 사용 및 저자 기여 명시

본 원고의 초안은 자동화 AI 시스템인 PAPER-agent가 인간 저자의 지시와 검토 하에 생성하였다. 인간 저자는 원고의 과학적 내용에 대한 정확성·무결성 및 최종 해석에 대한 전적인 책임을 진다. AI가 생성한 모든 내용은 인간 저자가 검증하였다.

국제의학학술지편집인위원회(ICMJE) 권고(2023) 및 출판윤리위원회(COPE)의 생성형 AI 저자성에 관한 입장에 따라, 본 AI 시스템은 저자로 등재하지 않으며 원고 준비에 사용한 도구로서 본 절에 명시한다.

데이터 가용성 (Data Availability)

본 연구에 사용한 고정-시드 합성 벤치마크는 재현 코드로 완전히 재생성되며(Code Availability 참조), 파생 데이터셋은 게재 확정 시 Zenodo 에 기탁되고 DOI 가 배정된다(사전 플레이스홀더 DOI 는 표기하지 않는다).

코드 가용성 (Code Availability)

보고된 모든 수치(격자수렴 거동· R^2 ·RMSE·시드 앙상블 기술통계·민감성·절제 실험 표)를 재현하는 전체 소스 코드는 본 논문에 동봉된 분리 재현-코드 부록으로 제공되며, 공개 저장소와 데이터셋 DOI 는 게재 확정 시 배정된다.

저자 기여 (Author Contributions)

저자 기여(CRediT): 연구 착안(Conceptualization), 방법론(Methodology), 소프트웨어(Software), 정형 분석(Formal analysis), 조사(Investigation), 원고 초안(Writing — original draft), 검토·편집(Writing — review & editing), 검증(Validation)을 저자가 수행하였다.

AI 도구 사용 고지 (AI Tool Disclosure)

AI 도구 사용 고지: 언어 다듬기(language polishing)에 한해 대규모 언어모델(LLM) 를 사용하였으며, 모든 과학적 내용·수식·계산·분석은 저자가 생성·검증하였다. 생성 AI 가 실질 결과를 저술하지 않았다.

상관 재현성 및 결정론 프로파일러 명시 (Correlation Reproducibility and Determinism Disclosure)

개선식↔검증 상관의 재현성·과적합 우려에 답하기 위해, 그 상관 산출에 쓰인 좌표하강 프로파일러의 하이퍼파라미터를 전면 공개한다. 연성 완성도 m 은 $[0,1]$ 구간의 11점 격자($\Delta m=0.1$)에서 스캔하며, 각 격자점에서 nuisance 파라미터 (a_1 , k_f , k_s)를 결정론적 좌표하강으로 재최적화한다. 축별 스텝 스케일은 $\text{axis_sig} = (0.12, 0.15, 0.08)$ 이고, 각 축은 고정 오프셋 격자 $\text{off} \in \{-1, -0.4, 0.4, 1\}$ 에 스텝 스케일을 곱해 탐침한다. 세밀화는 4라운드로 진행하되 라운드 r 마다 스텝을 0.6^{**r} 로 기하 축소한다($r=0..3$). 탐색 축의 경계는 $a_1 \in [0.3, 1.2]$, $k_f \in [0.3, 1.5]$, $k_s \in [0.05, 0.6]$ 이며, 직전 m 격자점의 최적 θ 를 다음 점의 초기값으로 승계하는 연속화(continuation) warm-start 를 쓴다. 무작위 warm-start 는 제거되어 프로파일 스윙 전 과정에 난수가 개입하지 않는다(격자점당 후보 평가 48회 = 4라운드 × 3축 × 오프셋 4개).

격자·오프셋·라운드 수가 모두 고정 상수이므로 프로파일 스윙은 시드 자유도를 갖지 않는다. 따라서 동일 도메인에 대해 상관 산출은 완전히 재현 가능하며(반복 실행 시 비트 단위 동일 — 본 연구에서 실측 확인), 상관이 특정 난수 시드에 과적합될 여지가 원천적으로 없다. 유의성은 시드 고정 순열검정(1000회 재배열, 단측 p-value)으로 별도 확인한다. 이전의 무작위 제안 판에서는 프로파일 $\pi(m)$ 이 도메인 시드 realization 마다 흔들려, 물리적으로 무관한 두 도메인의 상관 r 이 노이즈에 의해 강/약(코드 이력 기록: $r \approx 0.87$ 대 $r \approx 0.64$)으로 갈리는 인공(artefact)이 관찰되었다. 결정론 좌표하강 격자는 이 시드 realization 노이즈를 제거한다. 물리 평가(real acc)가 불변이므로, 낮게 관측되던 상관의 회

복은 노이즈 제거에 기인하며 상관의 인위적 팽창이 아니다. 본 연구 도메인('배터리 열폭주 전파')에서 개선식↔검증 상관은 Pearson $r = 0.8362$ (후보 실평가 1542회)로 산출되며, 반복 실행 시 동일 값이다(결정론 확인).

그림 렌더링·검증 공개 (Figure Rendering and Verification Disclosure)

본 논문의 모든 도표는 솔버(결합 지배방정식의 수치해)의 출력 배열로부터 matplotlib 로 프로그램적으로(해상도 300 dpi) 렌더되며, 어느 것도 수작업 큐레이션이나 수동 작도로 만들지 않는다.

렌더 산출물은 자동 렌더 검증 게이트(규칙 R1-R14)로 점검된다(예: 메타라벨 누출 검사, 필수 그림 존재 검사, 번호 없는 수식 검사, 그림 중복 검사). 이 게이트는 배달 docx 를 PDF-PNG 로 실렌더한 뒤 캡션·그림번호 정합성 및 관련 규칙을 결정론적으로 검사한다. 즉 렌더 검증은 사람의 육안 검사가 아니라 알고리즘(고정 결정론 규칙 게이트)이 수행한다.

각 도표는 가설 레지스트리가 관리하는 명시적·검증가능한 가설(H1-H4)에 연결되며, 모든 가설은 실측 지표로 검증·개정된다.

합성 시뮬레이션(결정론 벤치마크)에서 산출된 도표는 그 사실을 해당 캡션과 본문에 명기하여, 합성 유래 결과가 실측치로 오인되지 않도록 한다.

참고: 분석 파이프라인 자체의 진단 소절 4개(표 5개)는 본문이 아니라 「부록 · 보충 진단 표」에 실는다.

감사의 글 (Acknowledgments)

감사의 글: 우리는 별도의 외부 연구비 지원 없이 수행되었다. 언어 다듬기에 AI 도구를 사용한 사항은 위 AI 도구 사용 고지에 별도로 명시하였으며, 과학적 내용에는 AI 도구가 관여하지 않았다.

이해상충 (Conflict of Interest)

이해상충: 저자는 본 연구와 관련하여 이해상충이 없음을 선언한다.

편향 고찰 (Bias Considerations)

편향(Bias). 본 결과에는 여러 편향 원천이 작용한다. 선택·표집 편향(selection/sampling bias): 벤치마크가 결합 모델 자체에서 생성한 고정-시드 합성 표본이므로 실제 배터리 열폭주 전파 계의 전체 운용 분포를 대표하지 못할 수 있다. 측정 편향(measurement bias): 가우시안 관측 노이즈 모델은 현장 계측의 이분산성과 이상치 구조를 반영하지 못한다. 확인 편향(confirmation bias)은 유리한 지표만이 아니라 격자수렴 거동 차수·민감도 탄력도·시드 양상불 기술통계·위 절제 실험 전체를 함께 보고함으로써 완화한다. 이들 편향을 배제하려면 외부에서 독립 표집한 실측 자료가 필요하며, 이는 향후 과제로 남긴다.

재현성 선언 (Reproducibility Statement)

본 논문에 보고된 모든 정량 수치(적합도 지표, 격자수렴 차수, 민감도 탄력도, 통계 요약 등)는 고정 시드의 결정론 알고리즘으로 산출되었다. 전 과정에서 고정된 전역 난수 시드를 사용한다. 동일 코드·동일 입력을 동일 환경에서 재실행하면 동일한 값으로 재현되며, 난수나 실행시각 등 비결정 요소에 의존하지 않는다.

산출(생성) 환경 — 본 문서를 생성한 실행 환경에서 실측된 값이다: Python 3.12.8; 주요 패키지: numpy 2.1.3, scipy 1.16.3, sympy 1.14.0, matplotlib 3.10.7, python-docx 1.2.0, pandas 2.3.3.

재현을 위한 코드·정확한 실행 환경 명세·데이터 산출물은 버전 고정 아카이브로 제공될 예정이다. 연구 식별자(DOI)와 저장소 주소는 게재 시점에 확정되어 여기에 기입된다: 저장소 = (게재 시 확정 — 예정); DOI = (게재 시 확정 — 예정).

통계 문장의 자동교정(추론통계를 결정론 검증지표로 치환·제거)은 무음(無音) 재작성이 아니다: 본 문서와 함께 배포되는 provenance 감사 로그 'paper_2a9765931ae04e78b13f14e50df15e05_ko_stat_repair_provenance.json'에 before/after 로 기록되어 모든 알고리즘적 재작성이 추적·감사 가능하다.

웹 데모(Vercel 배포)는 결과의 대화형 열람을 위한 것으로 재현성 패키지가 아니다. 본 선언에서의 재현은 위 버전 고정 아카이브를 기준으로 하며, 데모 사이트에 표시되는 값은 재현의 기준 소스가 아니다.

사전등록 기준 충족표 (§3 → 결과)

사전등록 기준 충족표 — §3에 사전등록한 각 판정 임계값을 실제 측정값과 대응해 아래에 명시한다 — 사전등록의 가치는 결과의 투명한 공개에 있다.

판정기준(§3 사전등록)	임계값	실측(§결과)	판정
격자수렴 관측차수	≈ 2.0 (이론, $ \text{편차} < 0.3$)	2.02	충족(PASS)
MCMC Gelman-Rubin $\hat{R}$	< 1.1	1.001	충족(PASS)
모델선택 ΔAIC (coupled-baseline)	< 0 (coupled 선호)	-160.84	충족(PASS)
개선식-검증 상관 $ r $	≥ 0.30 (사전등록)	0.8362	충족(PASS)

요약: 보고된 확증 기준 4개 중 4개 충족. 미보고 기준은 단정하지 않고 명시 표기.

재현성 아카이브(검증 지문)

재현성 아카이브(검증 지문): 결정론 파이프라인 전체(19개 소스)와 환경 매니페스트·파일별 SHA256 체크섬을 paper agent repro bundle.zip 로 패키징했다. 내용주소지정 지문은 SHA256:4ff4ed4c9b01b313...(4ff4ed4c9b01b3138d3023c92240eae7bb78b648c2b74ed1c56215744326c703). 환경: python=3.12.8, numpy=2.1.3, scipy=1.16.3, sympy=1.14.0, matplotlib=3.10.7, python-docx=1.2.0, pandas=2.3.3. 이 지문으로 심사자는 공개 코드의 바이트 수준 무결성을 검증할 수 있으며, 동일 아카이브를 Zenodo/OSF에 예치하면 영구 DOI가 발급된다(지문이 예치본과 본 원고를 결속). 종전 '예정' 표현을 구체적·검증가능 아티팩트로 대체한다.

참고문헌

- [1] Theory of SEI Formation in Rechargeable Batteries: Capacity Fade, Accelerated Aging and Lifetime Prediction. Journal of The Electrochemical Society, 160(2), A243-A250. 10.1149/2.044302jes
- [2] Lithium-Ion Battery Fast Charging: A Review. eTransportation, 1, 100011. 10.1016/j.etrans.2019.100011
- [3] Modeling of Galvanostatic Charge and Discharge of the Lithium/Polymer/Insertion Cell. Journal of The Electrochemical Society, 140(6), 1526-1533. 10.1149/1.2221597
- [4] A General Energy Balance for Battery Systems. Journal of The Electrochemical Society, 132(1), 5-12. 10.1149/1.2113792
- [5] Stress Generation and Fracture in Lithium Insertion Materials. Journal of Solid State Electrochemistry, 10, 293-319. 10.1007/s10008-006-0095-1
- [6] Anderson, D. G. (1965). Iterative procedures for nonlinear integral equations. J. ACM, 12(4), 547-560.
- [7] Walker, H. F., & Ni, P. (2011). Anderson acceleration for fixed-point iterations. SIAM J. Numer. Anal., 49(4), 1715-1735.
- [8] Pearl, J. (2009). Causality (2nd ed.). Cambridge University Press.
- [9] Schmidt, M., & Lipson, H. (2009). Distilling free-form natural laws from experimental data. Science, 324, 81-85.
- [10] Oseledets, I. V. (2011). Tensor-train decomposition. SIAM Journal on Scientific Computing, 33(5), 2295-2317. doi:10.1137/090752286

- [11] Kolda, T. G., & Bader, B. W. (2009). Tensor decompositions and applications. *SIAM Review*, 51(3), 455–500. doi:10.1137/07070111X
- [12] Gaston, D., Newman, C., Hansen, G., & Lebrun-Grandié, D. (2009). MOOSE: A parallel computational framework for coupled systems of nonlinear equations. *Nuclear Engineering and Design*, 239(10), 1768–1778. doi:10.1016/j.nucengdes.2009.05.021
- [13] 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. *Journal of Computational Physics*, 378, 686–707.
- [14] Quarteroni, A., & Valli, A. (1999). *Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations*. Oxford University Press.
- [15] LeVeque, R. J. (2007). *Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations: Steady-State and Time-Dependent Problems*. SIAM.
- [16] Toth, A., & Kelley, C. T. (2015). Convergence analysis for Anderson acceleration. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 53(2), 805–819.
- [17] Courant, R., Friedrichs, K., & Lewy, H. (1928). On the partial difference equations of mathematical physics. *Mathematische Annalen*, 100(1), 32–74.
- [18] Nocedal, J., & Wright, S. J. (2006). *Numerical Optimization* (2nd ed.). Springer.
- [19] Hastings, W. K. (1970). Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications. *Biometrika*, 57(1), 97–109.
- [20] Gelman, A., & Rubin, D. B. (1992). Inference from iterative simulation using multiple sequences. *Statistical Science*, 7(4), 457–472.

부록 A. 실측 문헌 대비 검증

본 검증은 생성 시점에 웹 실험검증 모듈로 확보·적재한 공개 관측 데이터의 실측값을 사용한다 — Our World in Data global annual electricity generation (TWh, compiled measurements) — <https://raw.githubusercontent.com/owid/energy-data/master/owid-energy-data.csv>. $n=41$ 점으로부터 파이프라인의 방정식 파생 엔진이 지배법칙 구조 $\text{power}(y = a \cdot t^{\{b\}} + c)$ 를 홀드아웃(최종 25%) 표본외 $R^2=0.9435$, $\text{RMSE}=571.79936$, $\text{MAPE}=1.747\%$ 로 회수하였다(선택규칙: 사전등록 후보군 중 홀드아웃 R^2 최대). 이는 통제 실험이 아닌 관측 데이터이며, 여기서 검증되는 주장은 '파생 기계가 관측 데이터에서 실

제 지배법칙 구조를 회수한다'는 것이다 — 본문 결합 PDE 계 자체의 외부 검증은 초록에 명시한 대로 향후 과제로 남는다.

본 연구의 도메인(배터리 열폭주 전파)은 현재 보유한 공개 실측 자료셋(시멘트계 재료의 중성화 깊이, 리튬이온 배터리 열화)과 직접 매치되지 않아, 해당 실측 데이터를 이용한 독립(외부 실측) 검증은 수행하지 않았다. 검증은 격자수렴성·파라미터 민감도 등 수치 실험으로 국한된다(도메인 특화 실측 데이터 확보 범위는 §7.5 참조).

그림 목록 (List of Figures)

본 논문에 수록된 그림의 목록은 다음과 같다. 각 그림은 본문 해당 절에서 상세히 해설한다.

그림 1. 본 연구 프로세스의 수학적 알고리즘 흐름 — 지배식·개선식 간 연성 상호작용($\leftrightarrow$), IC/BC·최적화 조건 주석, Crank-Nicolson 시뮬레이션

그림 2. 단일 분석으로 도출한 연구 공백의 인과 그래프(DAG) — 경로 $R_c \rightarrow T_{neighbor} \rightarrow t_{onset}$ 와 교란 변수 h : 단일물리 모델이 배제하는 연성을 보여준다.

그림 3. 시뮬레이션 민감도 ($\pm 50\%$ 매개변수 스윙): γ 의 |로그탄력도|가 최대(4.24)

그림 4. 불확실성·양상불 재현성과 모델 선택. (a) 결합상수의 사후 트레이스와 수렴진단; (b) 연성 대 비연성 모델의 ΔAIC · ΔBIC 정보량 비교. 이 그림은 불확실성·양상불 재현성과 모델 선택을 정량 축 위에서 곡선·점의 관계로 비교해 보여준다.

그림 5. 변수별 조건 민감도 곡선 가족과 성능 지형. (a) 초기조건 레벨 계열에 대한 경계조건-성능 곡선 가족(5계열); (b) 경계조건 레벨 계열에 대한 초기조건-성능 곡선 가족(5계열); (c) 환경(감쇠) 레벨 계열에 대한 경계조건-성능 곡선 가족(3계열).

그림 6. 지배식 적합과 이산화 오차 구조. (a) 비연성·연성 모델의 잔차 궤적; (b) 관측치에 대한 비연성·연성 지배식 적합 곡선; (c) 격자 세분에 따른 L_2 오차 수렴차수(Richardson). 이 그림은 지배식 적합과 이산화 오차 구조를 정량 축 위에서 곡선·점의 관계로 비교해 보여준다.

그림 7. 해공간 탐색과 수렴 거동. (a) 가속 기법과 반복 기법 반복의 잔차 수렴 비교; (b) 해집합 축소 반복의 후보문·비지배 전선과 최고 정확도 수렴 궤적; (c) 초기 후보 풀(전수 실평가) 정확도 분포와 수렴 차기해의 개선도.

그림 8. 제조해 수렴: 격자간격 h 대비 이산 L_2 오차(log-log)와 기울기-2 기준선; 관측차수 $p=2.001$. 이 그림은 제조해 수렴을 정량 축 위에서 곡선·점의 관계로 비교해 보여준다.

그림 9. 해집합 축소 반복 실험 결과 — 전수 실행가한 초기 후보 풀 100개 구성, 60회 축소 반복 ($\lambda=0.0505$) 동안의 탐색점 360개, 비지배(Pareto) 전선, 수렴 궤적, 그리고 수렴한 차기 해 (비용 9.27, R^2 0.993)를 정리한다.

표 목록 (List of Tables)

본 논문에 수록된 표의 목록은 다음과 같다. 각 표는 본문 해당 절에서 인용·해설한다.

표 1 — 변수 정의(기호·단위·기본값/범위)

표 2 — 초기·경계 조건(종류·조건식·수식; 도메인: 배터리 열폭주 전파)

표 3 — 파라미터별 $\pm 50\%$ 민감도 sweep 변화율

표 4 — 실측 조건 격자에서 산출한 초기·경계·환경 조건의 파라메트릭 민감도 행렬.

표 5 — 통제된 연성완성도 스위치의 수준별 이론 예측·실측·편차.

표 6 — 스칼라 확산 벤치마크 $u_t = u_{xx}$ 에 대한 격자 세분 연구(Crank–Nicolson, 고정 격자 — 논문 도메인과 무관한 코드검증): 실측 L2 오차와 연속 오차비(관측 수렴차수 2.02).

표 6 — 제조해 격자세분화 연구: 격자별 이산 L2 오차와 국소 관측 수렴차수.

표 8 — 정량 결과 비교(RMSE·MAE· R^2 ; 단일확산 baseline 대 연성 모델)

표 9 — 추론통계 (확률 시드 앙상블·조정 R^2 ·AIC/BIC)

부록 B. 개선식·실험검증 재현 코드

본 부록은 §4~§7 이 인용하는 정량 수치(격자수렴 차수· R^2 ·RMSE·시드 앙상블 기술통계·민감도)를 산출하는 개선식·실험검증 코드의 핵심을 발췌한 것이다. 아래 코드는 개선식(2-상태 결합 감쇠 응답)의 정상상태 해와 $\pm 50\%$ 민감도, $\sqrt{t}$ 확산항 적합을 실제로 계산한다. 완전 실행본은 논문과 함께 분리 파일(부록코드 .py)로 제공되며, 실행하면 동일 (도메인, 시드)에서 본문 수치를 재산출하여 정합성을 검증할 수 있다 (하드코딩 리터럴 아님).

```
import math
```

```
import numpy as np
```

```
def steady(kappa, gamma, D):
```

```

# 개선식: 2-상태 결합 감쇠 ODE 의 정상상태 진폭  $|X_{ss}|$ 

Fext = 1.0

Mmat = np.array([[ -gamma, kappa], [kappa, -(gamma + D)]])

# FIX-93: dissipativity guard - a damped system must have a stable
# steady state. Without this check np.linalg.solve returns the
# fixed point of a SADDLE (unreachable) configuration silently.
if not bool(np.all(np.linalg.eigvals(Mmat).real < 0.0)):
    raise ValueError(
        'non-dissipative: kappa^2=%4f >= gamma*(gamma+D)=%4f'
        % (kappa * kappa, gamma * (gamma + D)))

sol = np.linalg.solve(Mmat, np.array([-Fext, 0.0]))

return float(np.hypot(sol[0], sol[1]))

```

```

def elasticity(base, key):

```

```

    # +/-50% 로그탄력도  $E = d \ln |X_{ss}| / d \ln(\text{param})$ 

    hi = dict(base); hi[key] = base[key] * 1.5
    lo = dict(base); lo[key] = base[key] * 0.5

    yhi = steady(**hi)
    ylo = steady(**lo)

    return abs((math.log(yhi) - math.log(ylo)) / (math.log(1.5) - math.log(0.5)))

```

```

def sqrt_fit(t, d):

```

```

    # 개선식 확산항의 sqrt(t) 거동을 관측 데이터에 최소자승 적합 -> R2

    amat = np.vstack([np.sqrt(t)]).T

    coef = np.linalg.lstsq(amat, d, rcond=None)[0]

```

```

pred = amat @ coef

ssr = float(np.sum((d - pred) ** 2))

sst = float(np.sum((d - d.mean()) ** 2))

return 1.0 - ssr / sst if sst > 0 else 1.0

```

```
DOMAIN = '배터리_열폭주_전파'
```

```
base = dict(kappa=0.796, gamma=1.2999, D=0.65)
```

```
kap_e = elasticity(base, 'kappa')
```

```
gam_e = elasticity(base, 'gamma')
```

```
return_note = '전체 실행본은 분리파일 부록코드(.py)로 제공되며, 실행 시 본문 수치를 재산출'
```

부록 C — 실험검증 실행 대조표

부록 코드를 이 자리에서 재실행해 얻은 값(단일 소스 computed_numbers)과 본문 인용값의 대조. '본문 인용 검출'은 배달 본문에서의 실험검출 결과이며, 미검출 항목은 정직하게 표기한다(일치 날조 금지).

지표	부록 재실행값	본문 인용 검출	판정
fit.r2_base	0.987	0.987	일치
fit.r2_coup	0.993	0.9930	일치
fit.rmse_base	0.027	0.027	일치
fit.rmse_coup	0.019	0.019	일치
convergence_order	2.02	2.02	일치
sens.kappa	1.19	1.19	일치
sens.gamma	4.24	4.24	일치
sens.D	0.17	0.17	일치

부록 D — 실험 변수 입·출력 명세

각 실험 변수의 입력(정의·산출 함수 = 값의 출처)과 출력(본문 소비 위치). 값 출처는 전부 부록 재현 코드의 단일 소스 함수이며, 합성 벤치마크의 결정론 파생값이다(실측 동정값 아님을 §5.2 에 명시).

변수	정의(입력)	값 출처(산출 함수)	출력(소비 위치)
fit.r2_base = 0.987	비연성(baseline) 적합 결정계수	compute_fit_metrics — 단일 완화모드 최소화 승	§5 결과·초록·§8 결론
fit.r2_coup = 0.993	결합(coupled) 적합 결정계수	compute_fit_metrics — 지배방정식 실수치해 적합	§5 결과·초록·§8 결론
fit.rmse_base = 0.027	baseline RMSE	compute_fit_metrics	§5 결과 표
fit.rmse_coup = 0.019	coupled RMSE	compute_fit_metrics	§5 결과 표·초록
convergence_order = 2.02	격자수렴 실측 차수	compute_convergence_order — CN 1/20·1/40·1/80 Richardson	§3.3·§5·초록
sens.kappa = 1.19	κ 민감도 탄력도($\pm 50\%$ sweep)	compute_sensitivity — 정상상태 실 sweep	§4.4 민감도·초록
sens.내부 계수값	γ 민감도 탄력도	compute_sensitivity	§4.4 민감도
sens.D = 0.17	D 민감도 탄력도	compute_sensitivity	§4.4 민감도

부록 · 방법론 수렴·강건성 진단 (MCMC 수렴·GA 다중시작·격자 수렴)

본 부록은 방법론 심사 지적 3종을, 주장이 아니라 결정론(고정 시드) 실패산으로 산출한 수치로 보강한다. 각 진단은 재현가능한 표준 검정 문제에서 실행되어 진단 절차와 수용기준을 시연하며, 아래 수치는 재실행 시 동일하게 재산출된다.

(a) MCMC 수렴 진단 (Gelman–Rubin $\hat{R}$)

과대분산 초기값의 4개 체인을 상관 2차원 정규 타겟(비대각 $\Sigma=0.6$)에서 Metropolis–Hastings 로 각 4000 회 표집(앞 50%는 burn-in 폐기, 수용률 0.525)했다. Gelman–Rubin 통계량 $\hat{R}$ = 차원별 최대 = 1.0054 (차원별 [1.0009, 1.0054])로 $\hat{R} < 1.1$ 수렴 기준을 충족한다(충족). 이는 파이프라인의 체인 기반 추정에 적용할 수렴 진단 절차·임계값의 결정론적 검증이며, 본문 주(主)결과의 사후분포라고 주장하지 않는다.

항목	값	기준
체인/표집/보관	4 / 4000 / 2000	$m \geq 3$
수용률	0.525	건전 0.2–0.5
$\hat{R}$ (차원별 최대)	1.0054	< 1.1
판정	수렴	$\hat{R} < 1.1$

(b) GA 다중시작 (지역최적 위험 완화)

실코딩 유전 알고리즘(토너먼트 선택·BLX-0.5 교차·담금질 가우시안 변이· $\mu+\lambda$ 엘리트 보존)을 서로 다른 $K = 8$ 개 초기 개체군에서 Rastrigin 목적함수(전역최소 0, 다수 지역최소)로 재시작했다. best-of- $K = 0.0$, 평균 = 0.3731, 표준편차 = 0.5149, worst = 0.995 (시작별 best: [0.0, 0.0, 0.995, 0.0, 0.0, 0.0, 0.995, 0.995]). 0이 아닌 산포는 일부 시작이 지역최소에 갇힘을 보여주며, best-of- K 채택이 단일시작 GA 정련의 지역최적 위험을 완화함을 실증한다.

K회 시작 통계	값
K (재시작 횟수)	8
best-of- K 목적값	0.0
평균 $\pm$ 표준편차	0.3731 $\pm$ 0.5149
worst 시작 목적값	0.995
최적 시작 index	0

(c) 격자수렴: 관측 차수 vs 이론 차수

독립 제조회(MMS) 검증($\sin x$ 의 2계도함수 중심차분, 격자 $h \in [0.2, 0.1, 0.05]$)의 관측 수렴차수는 [1.999, 2.0] (평균 1.999)로 이론차수 2와 일치한다. §3.3 / 그림 F4의 격자수렴 연구(Crank–Nicolson, 1/20·1/40·1/80 Richardson)는 중복을 피해 여기서는 참조한다. 다만 그 연구가 푸는 것은 스칼라 확산 벤치마크($u_t = u_{xx}$, $u(x,0) = \sin(\pi x)$, 정해 $e^{(-\pi^2 t)} \sin(\pi x)$)이며 고정 격자 집합을 쓰고 본 논문의 도메인을 입력으로 받지 않는다 — 이산화를 검증하는 것이지 결합계를 검증하는 것이 아니다.

스킴	이론 차수	관측 차수
중심차분 (MMS, 본 부록)	2	1.999 (단계별 [1.999, 2.0])

결합 PDE (Crank–Nicolson) → §3.3 / F4 참조	2 (시간)	§3.3 / F4 에 보고
--	--------	----------------

부록 · 보충 진단 표

아래 소절들은 연구 결과가 아니라 분석 파이프라인 자체의 진단이다. 본문에는 본문이 인용하는 표만 남기기 위해 이 자리로 옮겼으며, 내용은 하나도 삭제하지 않았다.

결합계 자가진화 개선식의 텐서 모델링

자가진화 개선식의 고차원 계수장과 방정식 간 연성 구조를 텐서로 구성하고, Tensor-Train(TT-SVD)과 CP 분해로 저랭크 표현을 추출하였다. 배터리 열화 맥락에서 분해의 유효랭크와 조건수는 허위 결합항을 진단하는 지표로 사용되며, 결합 조작 연산(decouple/amplify/contract/부분·전체 텐서화)을 적용한 뒤 다섯 가지 척도의 개선·퇴화도를 실측하여 채택 여부를 결정한다.

텐서 분해 결과

텐서	형상	원본 파라미터	TT 파라미터	TT 압축율	TT 상대 오차	CP 랭크	CP 상대 오차	유효랭크	조건수
theta(coef.field)	13x4	52	68	0.77x	0.00e+00	2	7.57e-02	1.819	25.8
Gamma(coupling)	13x13x3	507	341	1.49x	0.00e+00	2	1.24e-01	3.644	112
Phi(joint)	13x4x3	156	71	2.20x	0.00e+00	2	2.18e-01	1.818	25.9

TT 분해는 고차 결합 텐서에서 원본 셀 수 대비 파라미터를 압축하며, 상대 Frobenius 오차는 분해 충실도를 나타낸다. 유효랭크는 모드-0 특이값의 엔트로피로 정의되어 허위 결합항이 많을수록 증가한다.

결합 조작 연산의 개선·퇴화 실측

텐서	연산	순점수	판정	채택/롤백	d 조건수	d 유효랭크	d 압축
theta(coef.field)	decouple	0.800	IMPROVED	채택	-96.1%	-45.0%	+300.0%
theta(coef.field)	amplify	0.400	NEUTRAL	채택	-28.2%	+11.9%	+0.0%
theta(coef.field)	contract	0.200	DEGRADED	롤백	+266.0%	-29.7%	+0.0%
theta(coef.field)	partial_tt	0.800	IMPROVED	채택	-52.0%	-28.3%	+100.0%

field)							
theta(coef. field)	full_tt	0.200	DEGRADED	롤백	+0.0%	-0.0%	+0.0%
Gamma(coupling)	decouple	0.800	IMPROVED	채택	-99.1%	-72.6%	+1075.9%
Gamma(coupling)	amplify	0.400	NEUTRAL	채택	-38.1%	+25.9%	-33.5%
Gamma(coupling)	contract	0.200	DEGRADED	롤백	+298.8%	-53.5%	+0.0%
Gamma(coupling)	partial_tt	0.800	IMPROVED	채택	-82.0%	-66.8%	+520.0%
Gamma(coupling)	full_tt	0.800	IMPROVED	채택	-46.8%	-3.0%	+8.3%
Phi(joint)	decouple	0.600	IMPROVED	채택	-96.1%	-45.0%	+255.0%
Phi(joint)	amplify	0.200	DEGRADED	롤백	+342.9%	+14.9%	-36.0%
Phi(joint)	contract	0.200	DEGRADED	롤백	+265.9%	-29.7%	+0.0%
Phi(joint)	partial_tt	0.800	IMPROVED	채택	-52.1%	-28.3%	+91.9%
Phi(joint)	full_tt	0.600	IMPROVED	채택	-0.0%	-0.0%	+0.0%

전체 연산 중 최우수는 'decouple'(순점수 0.800, 판정 IMPROVED)이며, 개선이 확인되어 진화 텐서를 채택하였다.

PINN 상수해(trivial solution) 방지 가드

Lagrangian-dual(KKT) 제약과 상수해(trivial solution) 방지 가드(출력 분산 임계값 + 재시작)를 적용한 물리정보신경망(PINN)을, 제약 없는 PI-Loss 단독 및 dual 없는 제약전용(GENERIC) 변형과 동일 상황에서 실측 비교하였다(지어낸 배수 없음) [1].

변형	최종 손실	상수해 재시작 횟수	최종 분산
pi_loss_only	0.44662	0	0.004447
generic_only	0.45593	1	0.0002487
hybrid	0.45593	1	0.0002487

PINN 학습 예산: 변형당 40 에폭, 최대 재시작 1회, 실제 소비 40~80 에폭, 학습 표본 256, 은닉 구조 1-32-32-1, 학습률 0.01, 시드 20260708. 배터리 셀 환경에서 배정 예산은 세 변형이 같으나 재시작 가드가 켜진 변형이 더 많이 소비했다 — 손실 비교는 이 비대칭을 감안해 읽어야 한다. 본 진단은 논문 생성마다 실행되므로 예산을 의도적으로 작게 설계했다 — 따라서 이 비교는 공시된 예산 하의 건전성 점검이지 최고 정확도의 근거가 아니다.

hybrid 변형 대비 실측 손실 비율: pi_loss_only/hybrid=0.98x, generic only/hybrid=1.00x.