

물리정보 DeepONet의 이해

이상민

한국과학기술정보연구원 국가슈퍼컴퓨팅본부

Understanding on Physics-Informed DeepONet

Sang Min Lee

National Suupercomputing Division, Korea Institute of Science and Technology Information

요약 편미분방정식(PDE)은 과학 및 공학의 모든 분야에 걸쳐 복잡한 동적 프로세스의 수학적 분석과 모델링에서 중심적인 역할을 한다. 최근 몇 년 동안 머신러닝 기법은 PDE를 시뮬레이션하는 새롭고 효과적인 방법으로 각광받고 있다. 이 중 대표적인 방법으로 현재 많은 관심을 끌고 있는 물리정보 신경망(Physics-Informed Neural Networks, PINN)을 대표적인 예로 들 수 있다. PINN은 심층 단일 신경망을 사용하여 관측 데이터를 물리 시스템의 전체 시공간에서 PDE와 함께 학습하여 매우 빠르게 솔루션을 구할 수 있다. PINN은 종종 초기 또는 경계 조건, 다른 입력 조건 등에 따라 아주 많은 비용 뿐만 아니라 매우 어려운 분석 또는 계산 등이 필요할 수 있다. PINN의 한계인 비선형 문제에 대한 해결력을 강화하기 위하여 물리정보 심층 연산자 신경망(Deep Operator Networks, DeepONet)이 제안되었다. 본 논문에서는 쌍으로 구성된 입력력 훈련 데이터가 없는 경우에도 임의의 PDE의 솔루션 연산자를 학습하기 위해 고안된 딥러닝 프레임워크인 물리정보 DeepONet를 소개한다. 제안된 프레임워크가 기존 PDE 솔버에 비해 매우 빠르게 다양한 유형의 매개 변수 PDE의 솔루션을 신속하게 예측할 수 있으며, 과학 및 공학에서 비선형 및 비평형 프로세스의 모델링 및 시뮬레이션을 위한 이전에 탐구되지 않은 패러다임을 설정하는 데 효과적임을 여러 사례 연구를 통해 확인해 볼 수 있다.

Abstract Partial differential equations (PDEs) play a pivotal role in mathematical analysis and modeling of dynamic processes across various disciplines of science and engineering. Machine learning (ML) techniques have emerged as a promising new approach to solving PDEs. Among them, Physics-Informed Neural Networks (PINNs) have garnered significant attention in numerous scientific and engineering studies. PINNs employ a single deep neural network to assimilate observational data with PDEs across the entire space-time of a physical system, subsequently yielding rapid solutions. However, a PINN may entail intricate analyses or computations and can be cost-intensive, depending on initial or boundary conditions and other input parameters. To address the limitations of the PINN, especially concerning resolution for nonlinear problems, the Physical-Informed Deep Operator Network (DeepONet) is introduced in this paper. The Physics-Informed DeepONet is a deep learning framework crafted to discern solution operators for any given PDEs, even in scenarios lacking paired input/output training data. The proposed framework is able to predict solutions for various types of parameterized PDEs much faster than conventional PDE solvers. Several cases confirm that this approach is effective in establishing previously unexplored paradigms for modeling/simulating nonlinear and non-equilibrium processes in science and engineering.

Keywords : Artificial Intelligence, Deep Learning, Computational Science, Differential Equations, Dynamical Systems

이 논문은 2023년도 한국과학기술정보연구원(KISTI)의 기본사업으로 수행된 연구입니다(과제번호: K-23-L05-C02-S09).

*Corresponding Author : Sang Min Lee(Korea Institute of Science and Technology Information)

email: smlee@kisti.re.kr

Received October 26, 2023

Revised November 23, 2023

Accepted January 5, 2024

Published January 31, 2024

1. 서론

일반적으로 시간 의존적 상미분 또는 편미분 방정식(ODE/PDE)으로 표현되는 진화 방정식은 유체 역학에서 전자기학, 양자역학 및 고체역학에 이르기까지 다양한 과학 영역에 걸쳐 복잡한 동적 시스템의 분석, 모델링 및 시뮬레이션에서 중요한 역할을 한다[1]. 이러한 미분방정식을 시뮬레이션하기 위한 전통적인 접근 방식은 흔히 알려지지 않은 솔루션의 이산적이고 유한한 차원의 표현(일반적으로 다항식, 삼각 함수 등과 같은 고정된 특징의 선형 조합으로 매개 변수화함)을 가정하여 해를 구한다[2]. 이러한 기법은 지난 수십 년 동안 철저히 연구되어 현대 컴퓨터를 활용하는 과학 및 공학의 주요 작업에 핵심적인 역할을 하는 유한 요소 방법[3] 및 룬지-쿠타법[4]와 같은 강력하고 입증 가능하게 정확한 기술로 이어졌다. 그러나 진화 방정식의 복잡성이 증가함에 따라 시뮬레이션 비용도 증가한다. 전통적인 수치해석 기법의 한계성을 인식하고 새로운 방법으로 시뮬레이션을 가속화 하는 연구가 진행되었다.

기계학습(Machine Learning, ML) 혁명이 과학의 모든 분야에 지속적으로 영향을 미치면서 ODE 및 PDE의 시뮬레이션을 가속화하기 위한 새로운 기술들이 제안되고 있다. 신경망 기법[5]은 선형적으로 결정된 일련의 고정된 기능을 사용하여 목표 솔루션을 표현하는 대신, 기본 진화 법칙에 적응된 효과적인 표현을 학습할 수 있는 기능을 제공한다. 대표적인 예는 관측된 데이터에 맞도록 단일 심층 신경망을 사용하여 PDE 시스템의 전체 시공간 솔루션을 표현하도록 선택하는 물리정보 신경망 프레임워크이다[6]. 이러한 접근법의 매력적인 특성은 더 이상 PDE를 공간적 또는 시간적 이산화할 필요하지 않거나 외부 훈련 데이터 조차 필요하지 않다는 것이다. 또한 네트워크[6]가 훈련되면 전체 글로벌 솔루션을 빠르게 얻을 수 있다. 그러나 이러한 혁신성은 종종 정확도가 떨어지는 대가가 뒤따른다. 그럼에도 불구하고, PINN[7], 변형 PINN[8-10], 생체공학[11], 재료[12] 및 금융[13] 등을 포함한 다양한 응용 분야에서 현재 활발히 사용되고 있다. 그러나 ML 기반 접근법[14]의 부정확성은 여전히 해결되지 않은 문제로 남아 있으며 기존 문헌에서는 대체로 간과되어 왔다.

PINN은 기존의 수치 해석 방법에 비해 빠르고 정확한 해를 얻을 수 있지만, 훈련 데이터가 충분하지 않으면 정확한 해를 얻기 어렵고, 물리 법칙의 미분 방정식을 직접 학습하기 때문에 비선형 문제 또는 복잡한 물리 시스

템 등을 해결하기에는 한계가 있다. 그러나 데이터에만 의존한 해석에 물리적인 제한조건을 포함함으로써 구해지는 해에 물리적 타당성이 부여되어 해에 대한 과학적 신뢰성을 확보한다는 측면에서 새로운 기계학습의 장, 즉 “물리정보 기계학습(Physics-Informed ML, PIML)”을 여는 첫 시도인 점에서 매우 의미있는 연구이다.

보편적 근사 정리(Universal Approximation Theorem) [15]를 기반의 깊은 연산자 네트워크(Deep Operator Network, DeepONet)는 물리 법칙을 데이터에 맞춰 학습하는 물리 정보 신경망(PINN)의 한계를 극복하기 위해 개발되었다[16]. 물리정보 DeepONet은 비선형 문제 또는 복잡한 물리 시스템을 해결하기 위해, 물리 법칙의 미분방정식을 직접 학습하거나 솔루션을 직접 모델링하기보다는 연산자 자체를 학습한다. 이렇게 함으로써, 매개변수 PDE 해석에 매우 빠른 해석이 가능해진다. 일단 주어진 연산자를 학습하면, DeepONet은 연산(학습)을 완료하면 다른 신경망보다 더 빨리 예측을 할 수 있다.

본 논문은 다음과 같이 구성되어 있다. 2절에서는 Raissi 등[6]이 제시한 PINN과 PINN의 개선 방법으로 DeepONet 프레임워크의 개요를 살펴본다. 3절에서는 DeepONet의 주요 응용 분야에서의 적용 사례들을 살펴본다. 마지막 4절에서는 본 연구에서의 주요 발견, 잠재적 함정 및 단점에 대한 논의뿐만 아니라 향후 연구 방향 제시로 마무리된다.

2. 물리정보 기계학습(PIML)

2.1 PINN

PINN는 머신러닝 기법을 활용하여 PDE를 푸는 최신의 방법이다. PINN은 입력-출력 데이터를 기반으로 지도학습 작업을 수행하도록 훈련되는데 그치지 않고, 일반적인 비선형 PDE로 표현되는 주어진 물리적 법칙을 준수하도록 훈련된다. 이 접근 방식은 명시적인 메쉬 생성 없이 복잡한 기하학을 다룰 수 있으며, 필요에 따라 데이터를 기반으로 솔루션을 구할 수 있는 장점이 있다. 그러나 PINN를 훈련하는 데는 상당한 계산 자원이 필요하며, 네트워크의 아키텍처와 하이퍼파라미터에 민감하다.

이 절에서는 시간 의존적 PDE를 해결하기 위한 물리정보 신경망에 대해 간략하게 살펴본다. 일반적인 미분 방정식의 형태를 아래와 같은 초기/경계값을 취하는 문제를 고려한다:

$$u_t + F_x[u] = 0, \quad x \in \Omega, t \in [0, T] \quad (1)$$

$$u(x, t) = g(x, t), \quad x \in \partial\Omega, t \in [0, T] \quad (2)$$

$$u(x, 0) = h(x), \quad x \in \Omega \quad (3)$$

여기서 x 와 t 는 각각 공간과 시간 좌표를 의미하고, F_x 는 미분방정식 연산자를 표시한다. 그리고 u 는 구하고자 하는 해를 뜻한다.

우리는 심층 신경망 $u_\theta(x)$ 에 의해 $u(x)$ 를 근사화함으로써 진행하는데, 여기서 θ 는 네트워크의 모든 훈련 가능한 매개 변수를 나타낸다. 그러면, 우리는 대응하는 PDE 잔차 $R_\theta(x, t)$ 를 다음과 같이 정의할 수 있다:

$$R_\theta(x, t) = \frac{\partial}{\partial t} u_\theta(x, t) + F_x[u_\theta(x, t)] \quad (4)$$

여기에서 공간 및 시간 좌표에 대한 신경망 표현의 부분 도함수는 신경망에서 자동 미분을 사용하여 쉽게 계산될 수 있다[17]. 물리정보 신경망은 다음과 같은 정의된 손실 함수를 최소화함으로써 훈련될 수 있다.

$$L(\theta) = w_R L_R(\theta) + w_{BC} L_{BC}(\theta) + w_{IC} L_{IC}(\theta) \quad (5)$$

여기서

$$L_R(\theta) = \frac{1}{N_R} \sum_{i=1}^{N_R} |R_\theta(x_{R_i}^i, t_{R_i}^i)|^2, \quad (6)$$

$$L_{BC}(\theta) = \frac{1}{N_{BC}} \sum_{i=1}^{N_{BC}} |u_\theta(x_{BC_i}^i, t_{BC_i}^i) - g(x_{BC_i}^i, t_{BC_i}^i)|^2, \quad (7)$$

$$L_{IC}(\theta) = \frac{1}{N_{IC}} \sum_{i=1}^{N_{IC}} |u_\theta(x_{IC_i}^i, 0) - h(x_{IC_i}^i)|^2 \quad (8)$$

그리고 N_R , N_{BC} , 그리고 N_{IC} 는 확률적 경사 하강법 (stochastic gradient descent algorithm, SGD)의 각 순환 과정에서 계산 영역, 경계 그리고 초기 조건에서 무작위로 선택된 훈련 데이터의 배치 크기를 의미한다. 또한 w_R , w_{BC} , 그리고 w_{IC} 는 각 손실함수에 대해 서로 다른 학습률을 효과적으로 할당할 수 있는 손실항의 가중치 계수에 해당한다. 이러한 가중치는 사용자가 지정하거나 네트워크 훈련 중에 자동으로 조정될 수 있다[18,19].

기존 PINN 방법론이 상대적으로 간단한 문제에 대한 좋은 모델을 학습할 수 있지만 일반적으로 물리적 현상을 학습하는 데 쉽게 실패할 수 있다. 예를들면 비선형 미분방정식(대류 방정식(convection PDE), 반응-확산 방정식(reaction-diffusion PDE), 확률미분방정식(stochastic differential equation) 등의 해석에는 큰 오류를 보인다.

2.2 물리정보 DeepONet

최근에는 Lu et. al.[20]는 무한 차원 선형 위상공간의 함수를 매핑하는 추상 비선형 연산자를 학습하는 심층 연산자 네트워크를 제안했다. 본 논문에서는 시간 종속 PDE에 특별히 초점을 맞춘 물리정보 DeepONet를 간략하게 소개하고자 한다.

초기 조건 $h(x)$ 에서 관련 PDE 솔루션 $u(x, t)$ 을 구하기 위해 솔루션 연산자 G 를 학습하는 데 관심이 있다. 이를 위해 솔루션 연산자 G 를 DeepONet G_θ 로 나타낸다. Fig. 1에 표시된 것처럼 DeepONet 아키텍처는 각각 "가지망(branch networks)"과 "줄기망(trunk networks)"이라고 하는 두 개의 별도 신경망으로 구성된다. 가지망은 매개 변수 s 를 입력으로 받아 $[b_1, b_2, \dots, b_q]^T$ 를 출력으로 반환한다. 여기서 $u = [u(x_1), u(x_2), \dots, u(x_m)]^T$ 은 고정 위치 집합에서 구해진 함수 u 를 의미한다. 줄기망은 연속 좌표 (x, t) 를 입력으로 받아 $[t_1, t_2, \dots, t_q]^T$ 를 출력한다. DeepONet의 최종 출력은 내적(inner product, ' \cdot ')을 통한 분기망과 줄기망 출력을 병합하여 얻어진다. 보다 구체적으로, (x, t) 에서 평가된 입력 함수의 DeepONet G_θ 예측은 다음과 같이 표현될 수 있다:

$$G_\theta(u)(y) = \sum_{k=1}^q b_k(u(x_1), u(x_2), \dots, u(x_m)) t_k(y) \quad (9)$$

여기서 θ 는 가지 및 줄기 네트워크에서 훈련 가능한 모든 가중치와 편향의 집합을 나타낸다. DeepONet 모델의 출력은 쿼리 포인트 (x, t) 에 대해 지속적으로 미분 가능하므로 자동 미분[17]을 사용하여 관련 PDE 잔차를 계산할 수 있다:

$$R_\theta(u)(x, t) = \frac{\partial G_\theta(u)(x, t)}{\partial t} + N_x[G_\theta(u)](x, t) \quad (10)$$

그러면 다음과 같은 손실함수를 공식화하여 물리정보 DeepONet을 완성할 수 있다:

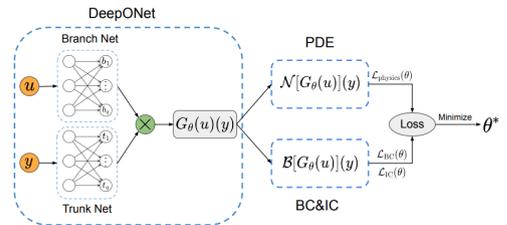


Fig. 1. Architecture of Physics-Informed DeepONet:

$$L(\theta) = L_{IC}(\theta) + L_{BC}(\theta) + L_R(\theta), \quad (11)$$

여기서

$$L_{IC}(\theta) = \frac{1}{NP} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^P |G_\theta(u^{(i)})(x_{IC,j}^i, 0) - u^{(i)}(x_{IC,j}^i)|^2 \quad (12)$$

$$L_{BC}(\theta) = \frac{1}{NP} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^P |G_\theta(u^{(i)})(x_{BC,j}^i, t_{BC,j}^i) - h(x_{BC,j}^i, t_{BC,j}^i)|^2 \quad (13)$$

$$L_R(\theta) = \frac{1}{NQ} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^Q |R_\theta[u^{(i)}](x_{R,j}^i, t_{R,j}^i)|^2. \quad (14)$$

제안된 물리정보 DeepONet 아키텍처는 Fig. 1에 요약되어 있다. DeepONet 아키텍처[16]는 두 개의 하위 네트워크, 즉 입력 함수의 잠재적 표현을 추출하기 위한 가지망과 출력 함수가 평가되는 입력 좌표의 잠재적 표현을 추출하기 위한 줄기망으로 구성된다. 출력 함수들은 내적을 통해 각각의 서브 네트워크에 의해 추출된 잠재 표현들을 병합함으로써 얻어진다. 그런 다음 자동 미분은 PDE의 주어진 시스템을 만족시키기 위해 DeepONet 출력들을 편향시키기 위한 적절한 정규화 메커니즘을 공식화하는데 사용된다.

이 아키텍처는 각각 "가지" 및 "줄기" 네트워크로 명명된 두 개의 신경망을 특징으로 하며, 이를 통해 임의의 PDE의 솔루션 연산자를 학습할 수 있다. 다음에서는 다양한 유형의 매개 변수 PDE를 해결하기 위한 일련의 포괄적인 수치 연구에 걸쳐 물리정보 DeepONet의 효과를 입증하고 있다.

3. 물리정보 DeepONet 적용사례

3.1 지진 진원 위치 특성화

인간의 활동에 의해 유도된 지진은 공공 안전에 상당한 위협이 되기 때문에, 정확하고 시기적절하게 지진의 진원을 위치를 찾는 것이 매우 중요하다. 실시간 지진 위치를 특정화할 수 있는 매개변수 편미분방정식의 솔루션 연산자를 학습하기 위해 DeepONet을 적용하였다[21]. DeepONet은 신경 연산자를 활용하여 지진 도달 시간 및 속도 모델의 정보를 통합하여 지진 소스와 관련된 이동 시간 필드를 추정하는 방법을 학습하였다. 결과는 이질적이고 복잡한 속도 모델에서도 지진 진원을 놀라운 정확도로 찾을 수 있다(Fig. 2 참조). 이 방법은 이동 시간 선택 오류 및 속도 모델 변동으로 인한 진원의 불확실성을 정량화하기 위한 계산적으로 효율적인 접근 방식을 제공한다.

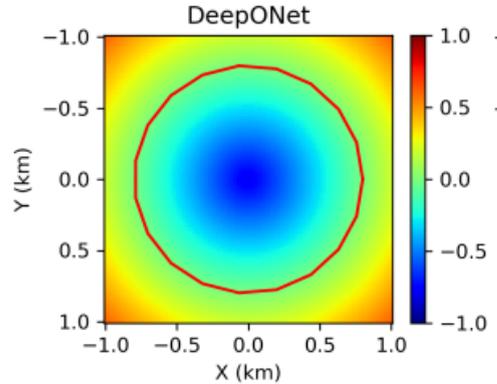


Fig. 2. A result of Physics-Informed DeepONet

3.2 리튬이온 배터리 열폭주 현상 예측

리튬이온 배터리의 열폭주 현상은 폭발 및 화염으로 인하여 인명사고를 유발할 수 있기 때문에 세심한 예측 및 관리가 필요하다. 다양한 열 운전조건 및 남용조건에서 배터리의 열폭주 현상(Fig. 3 참조)을 예측하기 위한 심층 연산자 네트워크를 이용하였다[22]. 구체적으로, 심층 연산자 네트워크는 배터리에 가해지는 다양한 열 운전조건에 대한 배터리의 온도와 양극, 음극, 전해질 그리고 고체 전해질 계면의 농도 변화에 대한 예측이 가능한 모델이다. 학습된 심층 연산자 네트워크는 실제 열폭주 실험결과 및 다양한 열 운전조건에서의 유한 요소 분석 결과를 통해 정확성과 견고성이 확인되었다.

3.3 첨단 재료 및 공정의 디자인 최적화

이 사례는 수치 집약적이고 도전적인 다중 물리학 설계와 첨단 재료 및 프로세스의 최적화를 위해 물리정보 DeepONet를 사용하였다[23]. DeepONet 네트워크는 가변 부하와 재료 특성을 가진 소성 변형 하에서 공간적으로 가변적인 열원과 고도의 비선형 응력 분포로 열전

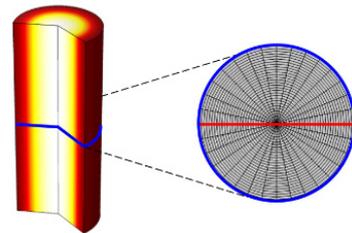


Fig. 3. Mechanical structure of the 1D finite element model

도 방정식(포아송 방정식)을 해결에 적용되었다(Fig. 4 참조). DeepONet은 다양한 형상과 프로세스의 매개변수 PDE를 학습할 수 있기 때문에 적절하게 훈련된 DeepONet은 재교육 및 학습과 고전적 수치 방법보다 몇 배 빠른 속도로 새로운 매개변수 입력에 대한 열 및 기계적 솔루션을 즉각적이고 정확하게 추론할 수 있다.

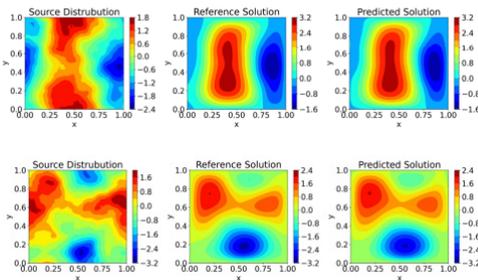


Fig. 4. Temperature distribution

4. 토의

본 논문은 비선형 연산자를 근사화하기 위한 새로운 딥러닝 프레임워크로 물리정보 DeepONet을 살펴보았다. 자동미분 기능을 활용하여 DeepONet의 출력을 물리적으로 일관된 예측하고, 간단하지만 효과적인 메커니즘을 제시하여 기존 연산자 학습 기술에 비해 예측 정확도, 일반화 성능 및 데이터 효율성을 크게 향상시킬 수 있었다. 더욱 흥미로운 사실은 물리정보 DeepONet가 쌍으로 구성된 입출력 훈련 데이터가 없는 경우에도 매개 변수 PDE의 솔루션 연산자를 학습할 수 있다는 것이다. 이 기능은 기존의 전통적인 해법에 비해 최소 수 천 배 더 빠른 속도로 과학과 공학의 다른 응용 분야에서 활용되고 있다.

복잡한 물리적 시스템의 수학적 분석, 모델링 및 시뮬레이션에서 PDE가 갖는 중요한 역할을 고려할 때, 물리정보 DeepONet 아키텍처는 유체 역학, 전자 광학, 양자 역학 및 재료공학 등을 포함한 다양한 문제 영역에 걸쳐 널리 사용될 수 있으므로 과학 및 공학 분야에서 널리 적용될 수 있을 것이다. 그러나 입증된 가능성에도 불구하고 수많은 기술적 난제들이 여전히 알려져 있어 추가 연구가 필요한 상황이다. 예를 들면, 1) DeepONet를 훈련하는 데 사용할 적절한 가중치를 결정하는 문제, 2) 훈련을 가속화하고 예측된 출력에서 정확성과 견고성을 보장하기 위한 효과적인 알고리즘에 대한 설계 문제 등이 있다.

5. 결론

신경망 은닉층의 폭과 깊이에 제약 없이 신경망이 임의의 정확도로 연속 함수를 근사할 수 있다는 “보편적 근사 정리”를 근거로 은닉층이 있는 신경망은 비선형 연속 함수 또는 비선형 연산자를 정확하게 근사할 수 있음을 알 수 있었다. 복잡한 형상, 알 수 없는 경계 조건 또는 고차원 문제의 경우 DeepONet은 매우 매력적인 접근법을 제공할 것이다. 인공지능 기반의 PDE 해법인 DeepONet은 과학 및 공학의 다양한 응용 분야에서 복잡하고 비선형적이며 멀티스케일 물리적 시스템을 모델링하고 시뮬레이션하는 방법에 패러다임 변화를 가져올 것이다.

물리정보 DeepONet를 다양한 응용 분야에 적용하기 위한 연구를 수행할 계획이다. 복잡한 현실적인 물리 시스템에 대한 효과적인 모델링 기법 연구, 다양한 물리적 조건에서의 일반화 연구, 제한된 물리 데이터에서 더 효과적으로 모델을 학습시키는 방법에 대한 연구 등은 DeepONet의 기능을 한층 높이는 계기가 될 것이다.

이 논문은 2023년도 한국과학기술정보연구원(KISTI)의 기본사업으로 수행된 연구입니다(과제번호: K-23-L05-C02-S09).

References

- [1] R. Courant and D. Hilbert. *Methods of Mathematical Physics: Partial Differential Equations*. John Wiley & Sons, 2008.
- [2] P. Moin. *Fundamentals of engineering numerical analysis*. Cambridge University Press, 2010.
- [3] T. JR Hughes. *The finite element method: linear static and dynamic finite element analysis*. Courier Corporation, 2012.
- [4] A. Iserles. *A first course in the numerical analysis of differential equations*. Number 44. Cambridge university press, 2009.
- [5] D. C. Psychogios and L. H. Ungar. “A hybrid neural network-first principles approach to process modeling”. *AIChE Journal*, 38(10):1499–1511, 1992.
- [6] M. Raissi, H. Babaee, and P. Givi. “Deep learning of turbulent scalar mixing”. *Physical Review Fluids*, 4(12):124501, 2019.
- [7] M. Raissi, P. Perdikaris, and G. E. Karniadakis. “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, 2019.
- [8] E. Kharazmi, Z. Zhang, and G. E. Karniadakis. "Variational physics-informed neural networks for solving partial differential equations". arXiv preprint arXiv:1912.00873, 2019.
- [9] A. D Jagtap and G. E. Karniadakis. "Extended physics-informed neural networks (XPINNs): A generalized space-time domain decomposition based deep learning framework for nonlinear partial differential equations". *Communications in Computational Physics*, 28(5):2002–2041, 2020.
- [10] X. Meng, Z. Li, D. Zhang, and G. E. Karniadakis. "PPINN: Parareal physics-informed neural network for time-dependent PDEs". *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 370:113250, 2020.
- [11] G. Kissas, Y. Yang, E. Hwuang, W. R. Witschey, J. A Detre, and P. Perdikaris. "Machine learning in cardiovascular flows modeling: Predicting arterial blood pressure from non-invasive 4D flow MRI data using physics-informed neural networks". *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 358:112623, 2020.
- [12] L. Lu, M. Dao, P. Kumar, U. Ramamurty, G. E. Karniadakis, and S. Suresh. "Extraction of mechanical properties of materials through deep learning from instrumented indentation". *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 117(13):7052–7062, 2020.
- [13] D. Elbrächter, P. Grohs, A. Jentzen, and C. Schwab. "Dnn expression rate analysis of high-dimensional PDEs: Application to option pricing". arXiv preprint arXiv:1809.07669, 2018.
- [15] K. Hornik, M. Stinchcombe, H. White. "Multilayer Feedforward Networks are Universal Approximators". *Neural Networks*. Vol. 2. Pergamon Press. pp. 359–366, 1989.
- [14] Y. Zhu, N. Zabaras, P.-S. Koutsourelakis, and P. Perdikaris. "Physics-constrained deep learning for high-dimensional surrogate modeling and uncertainty quantification without labeled data". *Journal of Computational Physics*, 394:56–81, 2019.
- [16] S. Wang, H. Wang, and P. Perdikaris. "Learning the solution operator of parametric partial differential equations with physics-informed DeepONet". arXiv preprint arXiv:2103.10974, 2021.
- [17] A. G. Baydin, B. A. Pearlmutter, A. A. Radul, and J. M. Siskind. "Automatic differentiation in machine learning: a survey". *Journal of machine learning research*, 18, 2018.
- [18] S. Wang, Y. Teng, and P. Perdikaris. "Understanding and mitigating gradient pathologies in physicsinformed neural networks". arXiv preprint arXiv:2001.04536, 2020.
- [19] S. Wang, X. Yu, and P. Perdikaris. "When and why PINNs fail to train: A neural tangent kernel perspective". arXiv preprint arXiv:2007.14527, 2020.
- [20] L. Lu, P. Jin, G. Pang, Z. Zhang, and G. E. Karniadakis. "Learning nonlinear operators via DeepONet based on the universal approximation theorem of operators". *Nature Machine Intelligence*, 3(3):218–229, 2021.
- [21] E. Haghighat, U. Waheed, G. Karniadakis, "A novel DeepONet model for learning moving-solution operators with applications to earthquake hypocenter localization", arXiv:2306.04096, <https://doi.org/10.48550/2023>.
- [22] J. H. Jeoung, E. J. Kwak, J. H. Kim, K. Y. Oh, "Deep Operator Network for Lithium-ion Batteries to Predict Thermal Runaways", *JKSNT*, 43, 2, 154-162, 2023.
- [23] S. Koric, D. W. Abueidda, "About Applications of Deep Learning Operator Networks for Design and Optimization of Advanced Material and Processes", *B&H Electrical Engineering*, Vol. 16, Special Issue, 1-6, 2022.

이 상 민(Sang Min Lee)

[정회원]



- 1989년 2월 : 서울대학교 자연과
학대학 천문학과 (이학사)
- 1993년 2월 : 서울대학교 자연과
학대학 천문학과 (이학석사)
- 2002년 2월 : 서울대학교 자연과
학대학 천문학과 (이학박사)

- 2016년 9월 ~ 2017년 9월 : 국가과학기술연구회 융합연
구본부 융합연구기획부 부장
- 2002년 2월 ~ 현재 : 한국과학기술정보연구원(KISTI) 책
임연구원

〈관심분야〉

천체물리학, 초고성능컴퓨팅, 인공지능