물리정보 신경망과 응용 연구

이 상민
한국과학기술정보연구원 국가슈퍼컴퓨팅본부
e-mail: smlee@kisti.re.kr

Physics-Informed Neural Networks and its Applications

Sang Min Lee
National Supercomputing Division
Korea Institute of Sciece & Technology Information

요 약

물리정보 신경망(Physics-Informed Neural Networks, PINN)은 편미분방정식(Partial Differential Equations, PDE)과 같은 모델 방정식을 신경망 자체의 구성 요소로 인코딩하는 신경망(Neural Networks, NN)이다. PINN은 정통적인 편미분방정식 해법인 FDM(Finite Difference Methods), FEM(Finite Element Methods) 등의 방법으로는 해결이 어렵거나 불가능한 문제들을 풀 수 있는 새로운 수치해석 방법으로 다양한 PDE, 분수 방정식 그리고 적분 미분방정식을 푸는 데 사용된다. 인공지능 딥러닝 기술이 자연어처리, 빅데이터 분석 등에서 성공적인 성과를 보고 있다. PINN은 딥러닝의 탁월한 학습 능력을 미분방정식 풀이에 적용하여 수치해석 분야의 새로운 방법으로 인식되고 있다. PINN은 딥러닝의 핵심 요소인 인공 신경망과 역전파 이론(Back-propagation theory) 그리고 자동미분(Automatic Differentiation) 등을 핵심 요소로 구성된다. 이 논문은 PINN에 대한 제반 특성과 광범위한 응용 사례들을 소개하여 PINN의 유용성에 대한 이해를 높이고자 하였다. PINN의 다양한 응용 프로그램에도 불구하고, FEM과 같은 고전적인 수치 기술보다 일부 문제에서는 더 나은 해법을 제공하기 때문에 여전히 진보 가능성이 있음을 제안한다.

1. 서론

지난 50년 동안 지구 물리학에서 생물 물리학에 이르기까지 다양한 응용 분야에서 다중 규모 물리학(Multi-scale physics)을 이해하는 데 엄청난 진전이 있었다. 유한 차분(Finite Difference Method, FDM), 유한 요소(Finite Element Method, FEM), 스펙트럼 및 메쉬 없는 방법 등을 사용하여 편미분방정식(Partial Differential Equations, PDE)를 수치적으로 해를 구하여 방법을 지속적으로 연구하고 있다. 그러나 이러한 수치해석법의 끊임없는 발전에도 불구하고 비균질 매질에서의 비선형 다중 규모 시스템의 진화를 모델링하고 예측하는 데에 있어서 고전적인 분석 또는 계산 도구를 사용하면 필연적으로 심각한 문제에 직면하고 엄청난 비용과 다양한 불확실성의 원인이 되고 있다. 역 문제(inverse problems)를 푸는 것은 종종 엄청나게 비싸고 복잡한 공식, 새로운 알고리즘 및 정교한 컴퓨터 코드가 필요하는 상황이다. 아울러, 가장 심각한 것은 전통적인 방식을 통해 경계 조건에 누락(missing), 갭(gappy) 또는 노이즈(noise) 데이터가 있는 경우, 즉 실제 물리적 문제에서는 흔히 발생하지만 전통적인 수치해석법으로는 해석이 불가능하다는 점이다.

심층 신경망(Deep Learning Neural Networks)은 컴퓨터 비전, 자연어 처리, 게임 이론과 같은 작업에서 성공했다. 딥러닝(Deep Learning, DL)은 분류, 패턴 인식 및 회귀 작업이 다양한 애플리케이션 도메인에서 수행되는 방식을 변화시켰다. 심층 신경망은 기계 학습과 인공지능 접근법을 활용한 편미분방정식(PDE)과 같은 고전적인 응용 수학 문제를 해결하기 위해 점점 더 많이 사용되고 있는 추세이다. 예를 들어, 비선형성 또는 대류 지배성 등이 매우 큰 문제에 대한 PDE는 표준적인 수치 접근법을 사용하여 해를 얻기는 매우 어렵기로 알려져 있다. 딥러닝은 신경망의 보편적인 근사치와 훌륭한 표현력 덕분에 과학적 기계학습(Machine Learning, ML)의 새로운 분야로 부상하고 있다. 특히, 기계학습 기반 알고리듬으로 PDE를 해결하는 방법이 제안되었다[1].

엄청난 경험적 성과와 일부의 성공에도 불구하고 현재 대부분의 ML 접근 방식은 방대하고 다양한 종류의 데이터에서 해석 가능한 정보와 지식을 추출하는 것은 불가능하다. 데이터 기반 모델은 관찰에 매우 잘 맞을 수 있지만, 잘못된 일반화로 이어질 수 있는 외삽(extrapolations) 또는 관찰 편향(observational biases)으로 인해 예측이 물리적으로 일관성이 없거나 타당하지 않을 수 있다. 따라서 물리적 규칙을 관리하는 ML 모델을 '가르쳐' 기본 물리 법칙과 도메인 지식을 통합해야 하는 시급한 필요성이 있다. 관찰적인 것 외에 강력한 이론적 제약과 귀납적 편향(inductive biases)이 포함되고, 이를 위해, 물리 기반 학습이 필요할 것이다. 이에 따라 관찰, 경험, 물리적 또는 수학적 이해에서 비롯된 사전 지식을 활용하여 개선할 수 있는 프로세스로 정의되는, 새로운 학습 철학이 반영된 ''물리 정보 신경망'(PINN)이 제안되었다[2]

물리 정보 신경망(PINN)은 편미분방정식의 해를 제공하

는 과학적 기계 학습 기술이다. PINN은 손실 함수(loss functions)를 최소화하기 위해 신경망을 훈련시켜 PDE 솔루션을 근사화한다. 여기에는 시공간 도메인의 경계를 따라 초기 및 경계 조건과 도메인 내에 선택된 지점('collocation points'이라 함)의 PDE 잔차를 반영하는 계산 항이 포함된다. PINN은 통합 도메인의 입력 지점이 주어지면 훈련 후 미분방정식의 해당 지점에서 추정된 솔루션을 생성하는 딥러닝 네트워크이다. 지배 물리학 방정식을 인코딩하는 잔류 네트워크를 통합하는 것은 PINN의 중요한 독창성이다. PINN 훈련의 기본 개념은 이전 시뮬레이션 또는 실험 결과와 같이 레이블이 지정된 데이터가 필요하지 않은 비지도 전략으로 생각할 수 있다. PINN 알고리듬은 지배 방정식을 직접 푸는 문제를 손실 함수 최적화 문제로 변환하여 PDE 솔루션을 찾는 본질적으로 메시 프리 기법이다. 수학적 모델을 네트워크에 통합하고 지배 방정식의 잔차 항(residual function)으로 손실 함수를 강화함으로써 작동한다.

PINN은 PDE와 그것의 초기/경계 조건을 훈련 손실 함수에 통합하고, 물리학적으로 제한된 NN, 즉 "데이터가 없는" NN은 훈련 손실에 PDE를 내장하면서 사용자 지정 NN 아키텍처를 통해 초기/경계 조건을 적용하여 시행한다. 이러한 기법은 "물리정보 신경망"(PINNs)이라는 용어가 만들어진 Raissi et al(2017a)에 의해 설명되어 있다.

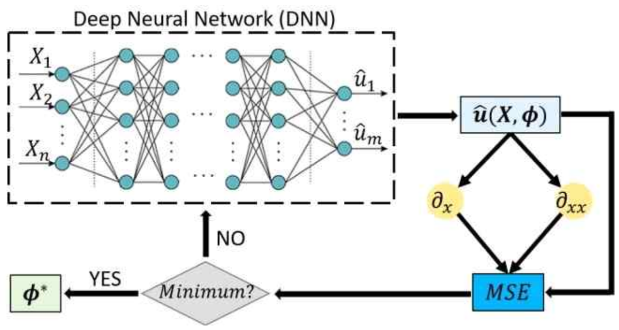
PINN은 많은 분야에서 기존의 수치 기술보다 더 나은 성능을 발휘하는 것으로 나타났다. PDE 근사치를 위한 수치 기술에는 유한 차분법(FDM), 유한 요소법(FEM), 유한 체적 및 스펙트럼 방법 등이 있다. 많은 고전적인 컴퓨팅 접근법과 달리, PINN의 계산 비용은 그리드 포인트의 수에 따라 증가하지 않는다. 또한 훈련된 PINN 네트워크는 재교육 없이 다양한 해상도의 시뮬레이션된 그리드에서 값을 예측하는 데 사용될 수 있다. FEM에서 솔루션은 알려지지 않은 포인트 값을 가진 조각별 다항식으로 근사되는 반면, PINN에서 대리모델은 가중치와 편향을 가진 신경망을 이용한다. 또한, FEM은 일반적으로 메시 생성을 필요로 하는 반면, PINN은 메시가 없으므로 그리드 또는 랜덤 포인트를 사용할 수 있다. 마지막으로, PINN은 함수와 그 파생물을 비선형적으로 근사하는 반면, FEM은 선형적으로 한다.

PINN은 미분방정식(순방향 문제)을 푸는 것 외에도, PINN은 센서 데이터로부터의 유체 흐름을 특성화하는 것과 같은 역문제를 해결하는 데 사용될 수 있다. 실제로 순방향 문제를 해결하는 데 사용되는 것과 동일한 코드를 사용하여 최소한의 수정으로 역방향 문제를 해결할 수 있다. 실제로 PINN은 기하학이 매우 복잡하거나 수치 시뮬레이션이 어려운 도메인 또는 매우 높은 차원의 PDE를 처리할 수 있으며 역문제 및 제한된 최적화 문제도 해결할 수 있다.

본 논문에서, PINN이 다양한 과학적 컴퓨팅 문제를 해결하기 위해 어떻게 사용되는지, PINN의 기본 개념과 구성 요소에 초점을 맞출 것이다. 주요 연구의 핵심 쟁점은 PINN이 무엇이고 PINN과 관련된 장점과 단점은 무엇인지를 확인하는 것이다.

2. PINN의 기본 개념과 주요 구성 요소

물리적 정보를 가진 신경망은 데이터가 거의 없는 문제를 해결할 수 있다. 일반 비선형 편미분방정식에 의해 지정된 주어진 물리 법칙을 준수하면서 알려진 데이터를 사용할 수 있기 때문에 PINN은 지도 학습 문제를 다루는 신경망으로도 간주된다. PINN은 일반적인 형태로 표현된 미분방정식 즉, 다양한 종류의 PDE, 즉 정수차 PDE[3] 적분-미분방정식[4], 분수 PDE[5] 또는 확률론적 PDE[6] 등에 적용할 수 있다.



[그림 1] PINN 구성도

$$\frac{\partial u}{\partial t} = F[u] \tag{1}$$

$$f(t,x) = \frac{\partial u}{\partial t} - F[u] = 0 \tag{2}$$

여기서 u를 미지의 해이며 F는 비선형 미분 연산자이고 f(t, x)는 방정식 (1)의 잔차항(PDE residual function)이다. 그리고 초기 조건은 실제로 시공간 영역에서 Dirichlet 경계 조건의 한 유형으로 간주될 수 있기 때문에, 문제와 관련된 임의의 초기 또는 경계 조건을 나타낼 수 있다. 여기서 경계 조건은 예를 들어 Dirichlet, Neumannn 또는 주기적 경계 조건 등일 수 있다. 순방향 문제의 목표는 모든 (x,t)에 대한 미지수 u를 찾는 것이다.

PINN 방법론에서 u(t,x)는 계산적으로 예측되어 근사치 NN을 생성한다:

$$NN(t,x) \approx u(t,x) \tag{3}$$

그러면 식(2)는 아래와 같은 관계로 바뀌게 된다:

$$f(t,x) \approx \frac{\partial NN}{\partial t} - F[NN] \tag{4}$$

만약 f(t,x)가 영(zero)으로 수렴한다면, 그때의 NN은 물리 법칙을 만족한다고 판단되는 것이다. 이제 다음 과정은 어떻게 f(t,x)를 영으로 수렴시키는가의 문제이다. 이는 우리가 딥러닝 학습에서 익히 알고 있는 방법을 적용할 수 있다.

딥러닝에서 데이터를 학습할 때 우리는 손실함수(Loss function, *LF*)를 정의하여 이를 영으로 수렴하게 하면 목적를 달성하게 된다. PINN에서 손실함수 *LF*는 계산 영역 내에서의 연계좌표들(Collocation points)에서의 PDE의 잔차항에 대한 평균제곱오차(Mean Squared Error, MSE)

$$MSE_{PDE} = \frac{1}{N_f}\sum_{i=1}^{N_f}\left| \mathrm{f}\,(\mathrm{t}_{\mathrm{f}}^{\mathrm{i}}, \mathrm{x}_{\mathrm{f}}^{\mathrm{i}}) \right|^2$$

(5)

와 경계 및 초기 조건이 지정되는 좌표에서의 각 조건 값과 그 좌표에서의 NN 값의 차이에 대한 평균제곱오차

$$MSE_u = \frac{1}{N_u}\sum_{i=1}^{N_u}\left| u\,(t_u^i, x_u^i) - NN(t_u^i, x_u^i) \right|^2 \quad (6)$$

의 합인

$$LF = MSE_{PDE} + MSE_u \quad (7)$$

으로 정의할 수 있다(Raissi et al. 2019). 비선형 미분연산자 $F[\,]$에는 종속변수의 공간에 대한 미분항이 포함될 수 있다. 이는 딥러닝 신경망 구조에서 역전파 원리(back-propagation theory)에 따라 각 공간좌표에서의 미분값을 자동적으로 얻게 된다.

손실 함수의 최소화 과정을 훈련이라고 한다. 대부분의 PINN 문헌에서 손실 함수는 Adam과 준뉴턴 최적화 알고리듬인 제한된 메모리 Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno(L-BFGS) 알고리듬을 사용하여 최적화된다. 노이즈가 많은 데이터를 모니터링할 때 L-BFGS만으로 샘플 크기와 훈련을 증가시키는 것이 학습에 최적의 결과를 달성한다는 것이 알려져 있다.

PINN 기법은 손실 또는 NN에 포함된 문제에 대한 수학적 설명뿐만 아니라 모델을 훈련하는 데 사용되는 정보를 기반으로 하며, 훈련 지점의 형태를 취하고 예측의 품질에 영향을 미친다. PINN을 사용하여 작업하려면 해결해야 할 과제, 즉 핵심 구성 방정식에 대한 지식과 신경망 구축 경험이 필요하다.

그러나 문제의 기하학적 구조를 고려하는 것은 매우 쉽게 이루어질 수 있다. PINN은 고정 메시 또는 그리드가 필요하지 않으므로 복잡한 기하학적 영역에서 고차원 문제를 해결하는 데 더 큰 유연성을 제공한다. PINN에 대한 교육 포인트(도메인 내부 지역에 위치한다)의 분포는 PINN의 유연성에 영향을 미친다. 훈련 지점의 수를 늘리면 근사치가 확실히 개선되지만, 일부 응용 문제에서는 훈련 장소의 위치가 중요하다. 훈련 지점을 선택하는 다양한 방법은 격자 유사 샘플링(lattice-like sampling), 즉 등간격 샘플링(equalspaced)과 소볼 시퀀스(Sobol sequences) 또는 라틴 하이퍼큐브 샘플링(Latin hypercube sampling)과 같은 준 무작위 지정 방법들이 있다.

3. PINN 응용 분야와 라이브러리

PINN이 일상 생활에 가져올 수 있는 긍정적이고 혁신적인 효과를 중심으로 PINN의 실제 응용 분야 사례를 소개한다. 또한 PINN의 활용을 보다 편리하게 지원해 주는 각종 응용 라이브러리의 구현에 대해 살펴본다.

3.1 응용 분야

3.1.1 혈류역학

PINN을 응용하여 혈류의 3D 시뮬레이션에 대한 새로운 방법을 고안되었다[7]. PINN 방법론은 Navier-Stokes 방정식의 형태에 적용되며, 질량과 운동량 보존과 함께 혈액 속도와 단면적의 진화를 정의하는 접근법을 사용하였다. 의료 영상 데이터를 사용하여 압력을 추정하고 흐름 정보를 검색한다. 사전 훈련된 신경망 모델은 새로운 환자 상태로 빠르게 변경될 수 있다. 이를 통해 간단한 후처리 단계로 계산할 수 있으므로 보다 복잡한 모델을 보정하는 간단한 방법으로 가능해진다. 그리고 혈액 속도와 혈관벽 변위의 노이즈 측정을 처리함으로써 비침습적 MRI 흐름에서 직접 파생된 흐름과 압력파 전파에 대한 물리적으로 유효한 예측을 제시한다. 임상 데이터와 일치하는 출력을 제공하도록 신경망을 훈련시킴으로써 의료 현장에서 성공적인 효과를 가져오고 있다.

3.1.2 난류 해석

플라즈마의 부분 관측에서 관찰되지 않은 운동 물리량들을 추론하기 위해 비선형 편미분방정식을 유지하면서 학습 과제를 해결하도록 훈련된 PINN을 사용하는 방법은 자화 충돌 상황에서의 플라즈마 연구에 적용 가능하다. 이 방법론은 이전에 표준 분석 방법으로는 달성할 수 없었던 방식으로 실험과 시뮬레이션 모두에서 난류 모델의 직접 테스트를 개선할 수 있는 잠재력을 가지고 있다. 결과적으로, 난류장을 진단하기 위한 이 딥 러닝 기술은 간단히 이전할 수 있게 되었다. 그 결과, 추진 엔진과 천체물리학적 환경에서 자화 충돌 플라즈마의 학제간 연구(계산 및 실험 모두)에서 적용할 수 있다.

3.1.3 분자 동역학

PINN은 분자 동역학 시뮬레이션에서 매우 적은 수의 분자를 사용하여 광범위한 샘플 공간에서 나노 유체의 점도를 추정할 수 있게 한다. PINN은 깨지기 쉽고 재현 불가능한 입자를 재현할 수 있으며, 네트워크는 산란 이미지에서 나노 클러스터의 모양과 방향을 재구성한다. 그들은 또한 실험 산란 데이터를 정확하게 모방하는 새로운 기하학적 모양을 발견할 수 있다.

3.1.4 산업 응용 프로그램

윤활유 열화의 과정은 여전히 불분명하기 때문에 이에 대한 모델은 매우 큰 부정확성을 가지고 있다. 윤활유 열화의 정도에 대한 육안 검사를 통해서만 베어링 피로 손상 누적을 확인할 수 있기 때문에 PINN 방법이 도입되었다. 풍력터빈에 적용한 사례 연구를 살펴본 결과, 모델이 정확하고 오류가 없는 것으로 나타났다. 윤활유의 손상 축적 모델도 노이즈가 많은 육안 검사 데이터를 사용하여 교육하였다.

3.2 PINN 라이브러리

3.2.1 DeepXDE

DeepXDE[4]는 다양한 경계 조건을 결합하고 복잡한 기하학적 구조를 가진 도메인에서 문제를 해결할 수 있는 기능을

제공하여 높은 문제 해결 능력을 자랑한다. 또한 FEM 정제 접근법과 유사한 훈련 단계 동안 잔류 지점의 분포를 최적화하기 위한 전략인 잔류 기반 적응 정제법(residual-based adaptive refinement, RAR)을 제공한다. RAR은 PDE 잔차가 더 큰 위치에 점을 더 추가하고 평균 잔차가 임계값 한계보다 작을 때까지 점을 계속 추가하는 방식으로 작동합니다. DeepXDE는 또한 구성적 솔리드 지오메트리(CSG) 기술을 기반으로 한 복잡한 구조의 형상을 갖는 도메인을 지원한다.

3.2.2 NeuroDiffEq

NeuroDiffEq는 신경망으로 미분방정식을 풀기 위한 PyTorch 기반 라이브러리이다[8]. NeuroDiffEq는 엄격한 제약 조건, 즉 NN 구성을 통해 초기/경계 조건을 충족함으로써 기존의 PDE(열 방정식 및 포아송 방정식 등)를 2D로 해결하는 NN으로 만든다.

3.2.3 Neural PDE

Neural PDE는 과학적 기계 학습과 미분방정식 모델링을 위한 도구 모음인 SciML의 일부이다. 특히 SciML(Scientific Machine Learning)[9]은 물리 법칙과 과학 모델을 기계 학습 기술과 결합한 Julia어로 작성된 라이브러리이다.

3.2.4 ADME

ADME는 수치 기술을 개발하고 신경망에 연결하는 데 사용될 수 있다[10]. 특히 ADME는 텐서플로우의 기능을 확장하고 강화하여 개발되었다. ADME는 비선형 탄성, Stokes 문제, Burgers 방정식과 같은 다양한 예를 해결하는 데 사용된다. 또한, ADME는 신경망을 사용하여 확률 모델의 역문제를 해결하기 위해 사용된다.

4. 고찰

PINN의 능력을 향상시키기 위해 많은 연구가 진행되고 있으나, 아직도 실세계 상황에 대한 수많은 미해결 문제가 존재한다. 이는 보다 많은 이론적인 고려 사항(경계 조건 관리, 신경망 설계, 일반 PINN 아키텍처 설계 및 최적화 등)에서 연구 대상의 문제는 광범위하다.

이전에 물리학을 이용한 DL 방법은 물리학, 엔지니어링 및 금융에서 중요한 고차원 PDE를 해결하는 효과적인 방법이 될 수 있는 잠재력을 가지고 있다. 반면에 PINN은 특정 PDE를 위해 설계된 다른 수치 방법과 비교할 때 PDE의 솔루션을 정확하게 근사하는 데 어려움을 겪는다.

5. 결론

본 논문에서 우리는 Raissi et al.(2017)의 첫 번째 논문부터 시작하여 신경망에 대한 물리적 선행사항을 포함하는 연구를 살펴보았다. 초기 및 경계 조건을 포함한 손실과 신경망 구조에 인코딩된 경계 조건을 포함한 형태 버전의 PINN을 살펴보았다. 가장 주목할 만한 것은 수많은 이론적 문제들이 해결되지 않은 채로 남아 있고, PINN을 최적으로 훈련하고 여러 방정식을 해결하기 위해 PINN을 확장하는 데 여전히 개발 가능성이 있다. PINN의 개념이 나온지 이제 겨우 5년이 지나고 있다.

참고문헌

[1] Blechschmidt J, Ernst OG (2021) Three ways to solve partial differen┐tial equations with neural networks – A review. GAMM-Mitteilungen 44(2).

[2] Raissi M, Perdikaris P, Karniadakis GE (2017) Physics Informed Deep Learning (Part I): Data-driven Solutions of Nonlinear Partial Differen┐tial Equations. arXiv:171110561

[3] Raissi M, Perdikaris P, Karniadakis GE (2019) Physics-informed neural net┐works: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. Journal of Computational Physics 378:686–707.

[4] Lu L, Meng X, Mao Z, et al (2021b) DeepXDE: A deep learning library for solving differential equations. SIAM Review 63(1):208–228.

[5] Pang G, Lu L, Karniadakis GE (2019) fPINNs: Fractional Physics-Informed Neural Networks. SIAM Journal on Scientific Computing 41(4):A2603–A2626.

[6] Zhang R, Liu Y, Sun H (2020) Physics-informed multi-LSTM net┐works for metamodeling of nonlinear structures. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 369:113,226.

[7] Kissas G, Yang Y, Hwuang E, et al (2020) 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 358:112,623.

[8] Chen, F., Sondak, D., Protopapas, P., et al (2020). Neurodiffeq: A python package for solving differential equations with neural networks, J. Open Source Softw, 5(46), 1931.

[9] Rackauckas C, Ma Y, Martensen J, et al (2021) Universal Differential Equations for Scientific Machine Learning. arXiv:200104385.

[10] Xu, K. & Darve, E (2020). ADCME: Learning spatially-varying physical fields using deep neural networks. Preprint at arXiv: 11955.