Overview of Physics-Informed Machine Learning

2026년 05월 15일

장성호

발표자 소개

❖ **장성호 (Seongho Jang)**
- 고려대학교 산업경영공학과 박사과정 재학
- Data Mining & Quality Analytics Lab. (김성범 교수님)

❖ **Research Interest**
- Reinforcement learning
- Physics-informed machine learning
- Physical AI

❖ **Contact**
- jsh01@korea.ac.kr

Content

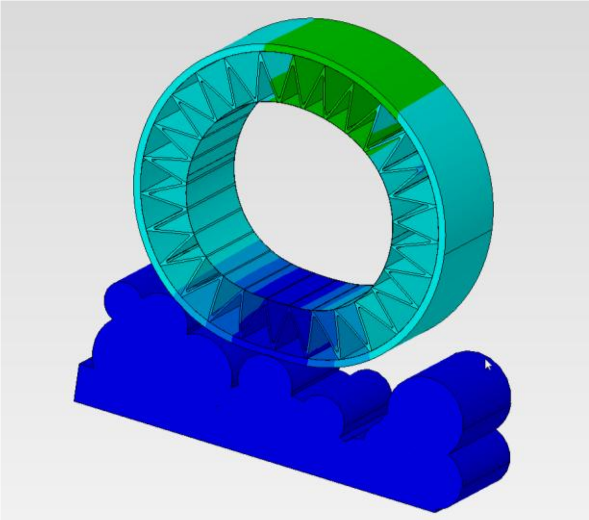
- **Background**
- **Physics-Informed Learning**
  - Physics-Informed Neural Networks (PINNs)
  - Physics-Guided Neural Networks (PGNNs)
- **Neural Operators**
  - Learning parametric PDE mappings
- **Surrogate Modeling**
  - Replacing Computational Fluid Dynamics / Finite Element Method
  - Advanced applications and future directions

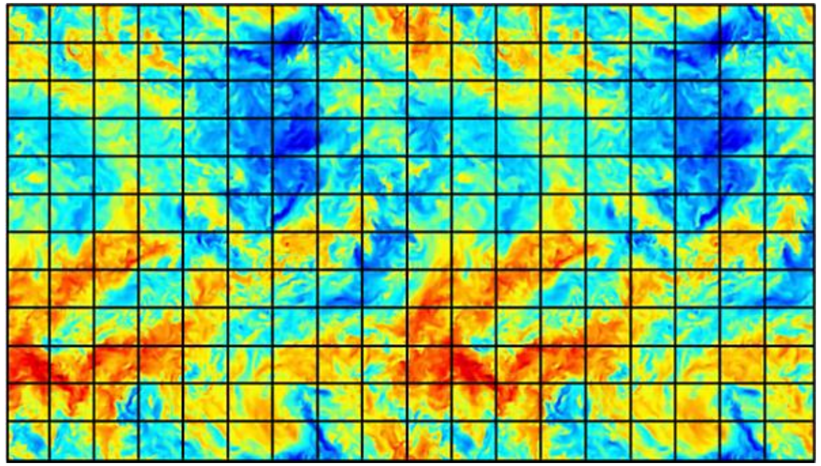
Background

Physics-based simulation and surrogate modeling

❖ Why Physics-Based Simulation?

- 공학/과학 문제는 대부분 물리 법칙 기반으로 해석됨
  - CFD (computational fluid dynamics) / FEM (finite element method) / FEA (finite element analysis)
- 하지만 정밀 시뮬레이션의 비용은 매우 비쌈
- 설계 조건, 재료, 경계조건, 파라미터가 바뀔 때마다 반복 계산 필요





https://devpost.com/software/finite-element-analysis
https://www.ansys.com/ko-kr/simulation-topics/what-is-computational-fluid-dynamics

Background

Physics-based simulation and surrogate modeling

❖ Why Machine Learning?

- ML은 데이터로부터 빠른 예측 모델을 만들 수 있음
- 기존 시뮬레이터를 대체하거나 보조하는 surrogate model로 활용 가능
- Neural operator 계열은 PDE 하나가 아니라 여러 파라미터 조건의 solution mapping을 학습하는 방향으로 발전함

PDE 초기조건

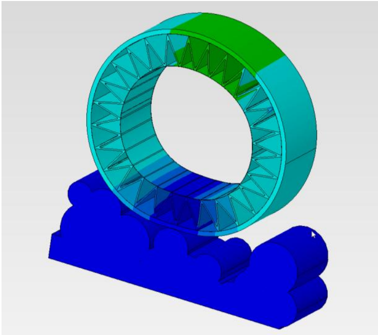
Input
function space

Initial & Boundary conditions

Surrogate model

Neural network

Solution



과학적 모순 발생

Background

Physics-based simulation and surrogate modeling

❖ Why Physics-Informed?

- 순수 data-driven 모델은 데이터가 부족하거나 OOD 조건에서 불안정할 수 있음
- 물리 법칙, 제약조건, 시뮬레이션 결과를 학습에 넣으면 일반화와 해석 가능성을 높일 수 있음
- PINN은 PDE residual을 loss에 반영하고, PGNN은 물리 모델 출력/물리 loss를 NN에 결합하는 더 유연한 방향으로 볼 수 있음

PDE 초기조건

Input function space

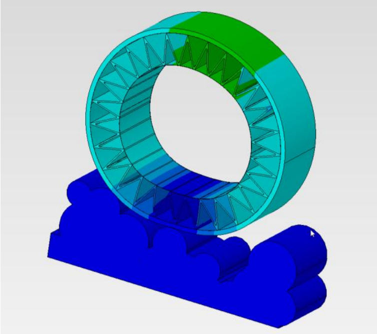
Initial & Boundary conditions

Surrogate model

Neural network

+ physics constraint

Solution



Background

Physics-based simulation and surrogate modeling

❖ What is a Differential Equation?

- Differential Equation은 시스템의 상태가 어떻게 변화하는지를 설명하는 수학적 규칙
- 값 자체보다 변화율을 이용해 다음 상태를 설명하는 것
    - ODE (ordinary differential equation): 시간에 따른 변화
    - PDE (partial differential equation): 시간과 공간에 따른 변화

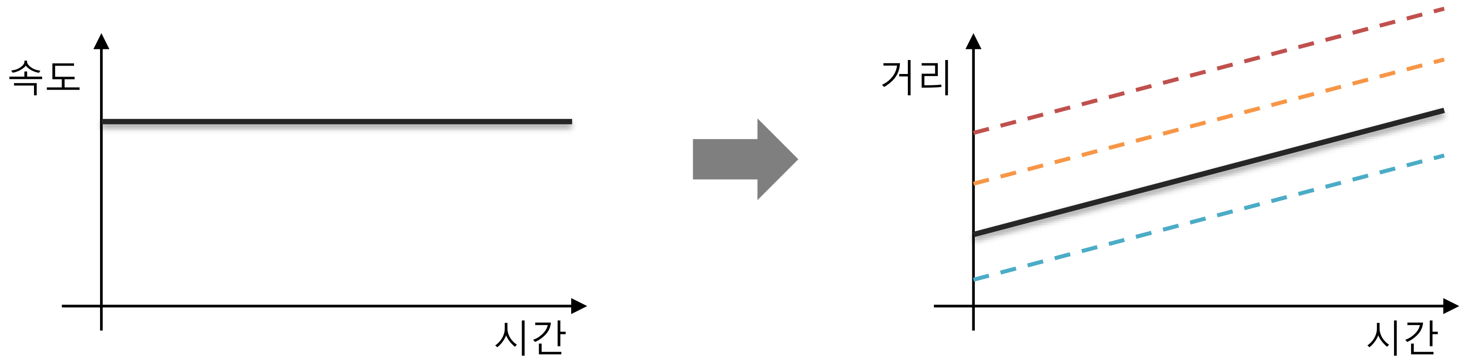
Background

Physics-based simulation and surrogate modeling

❖ What is a Differential Equation?

- 자동차의 위치 $x(t)$를 예측하고 싶다고 가정
  - 속도 v(t)는 위치의 변화율
  - 가속도 a(t)는 속도의 변화율

  - **현재 위치 + 속도 × 시간 = 다음 위치**



같은 속도 규칙
→ 초기 위치 $x(0)$에 따라 결과가 달라짐
➔ 초기조건

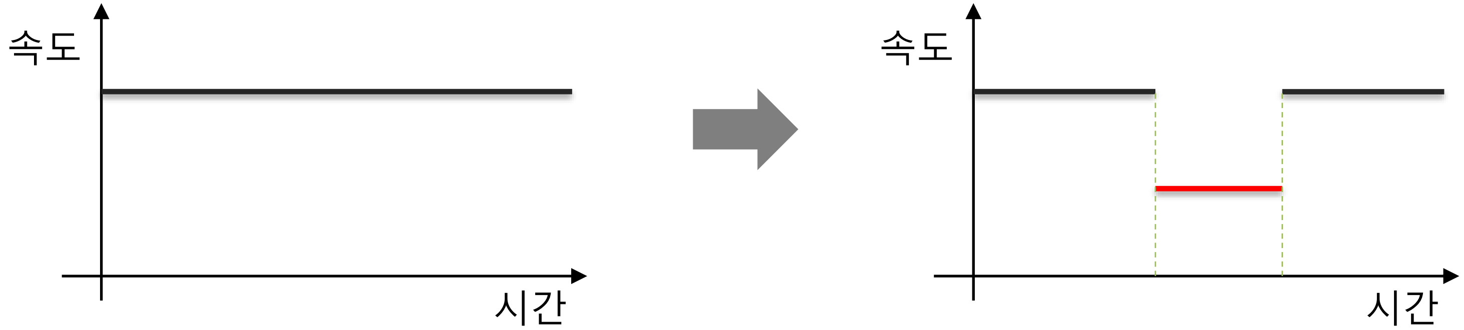
Background

Physics-based simulation and surrogate modeling

❖ What is a Differential Equation?

- 자동차의 위치 $x(t)$를 예측하고 싶다고 가정
  - 속도 v(t)는 위치의 변화율
  - 가속도 a(t)는 속도의 변화율

  - **현재 위치 + 속도 × 시간 = 다음 위치**



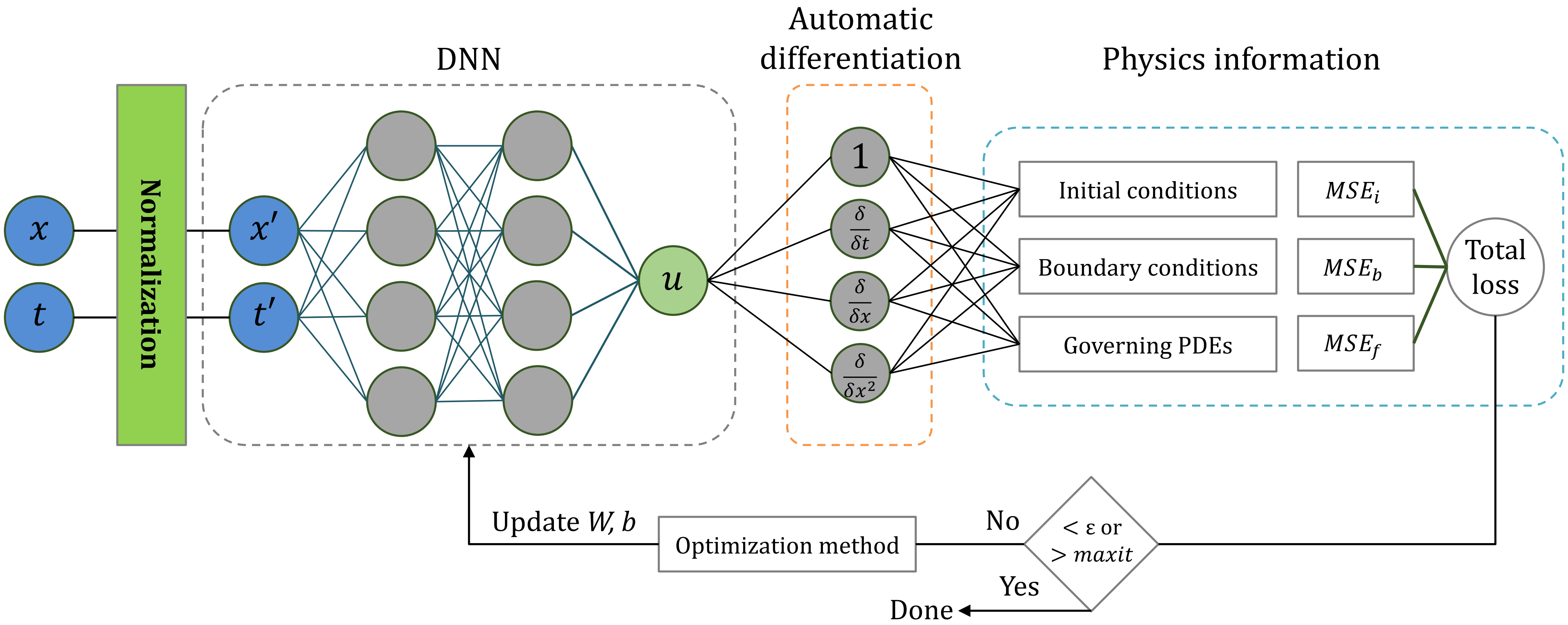
특정 위치에서 속도 값이 정해질 수 있음
→ 특정 공간 위치에서 만족해야 하는 조건
➔ 경계조건

Physics-Informed Learning

Physics-Informed Neural Networks (PINNs)

❖ **PINN (forward problem)**: Journal of Computational Physics(2019, sites: 23,243)

- 신경망이 해 $u(x,t)$를 학습하면서 자동 미분을 통해 PDE를 만족하도록 학습됨
- 데이터뿐 아니라 물리 제약식(PDE, 초기/경계조건)을 함께 만족하도록 최적화



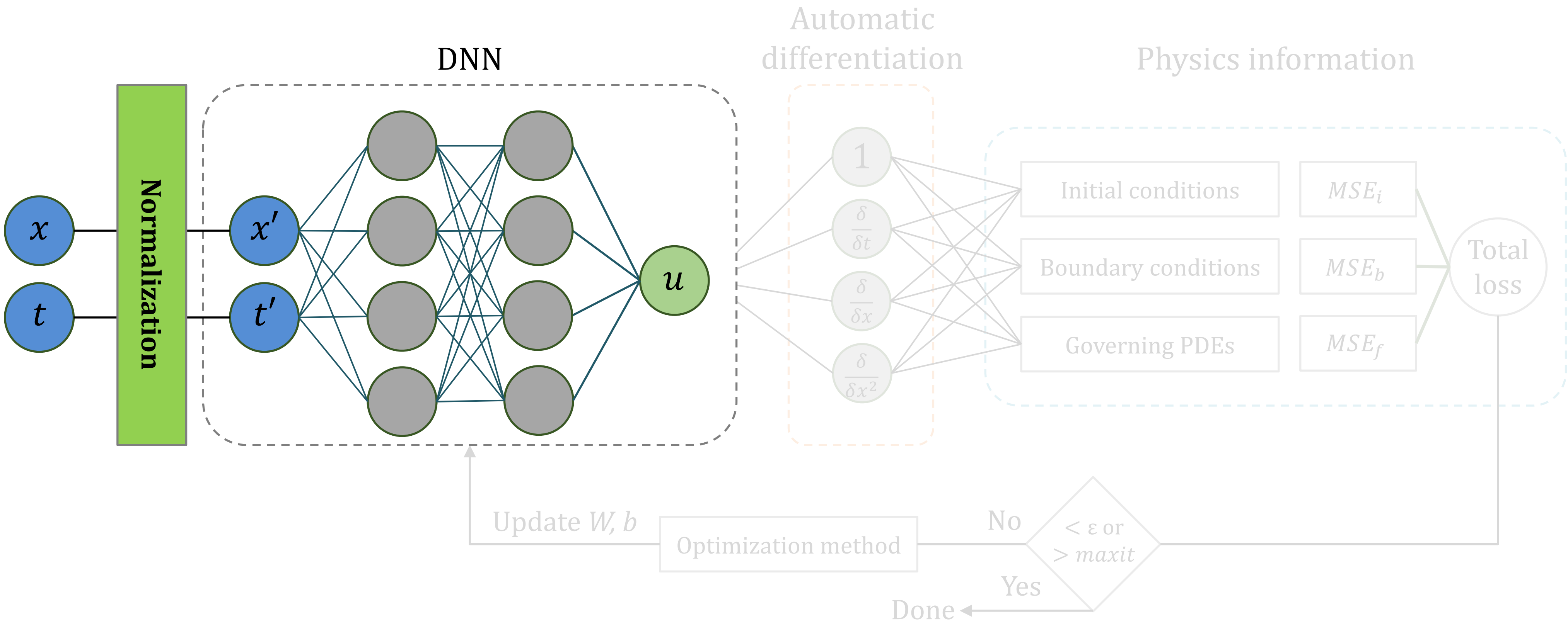
[1] Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. Journal of Computational physics, 378, 686-707.

Physics-Informed Learning

Physics-Informed Neural Networks (PINNs)

❖ PINN (forward problem)

- 특정 위치 x와 시간 t를 입력 받아 해당 지점의 물리량을 예측하는 함수로 신경망을 사용함
- 즉, 전체 시공간을 격자로 계산하는 대신, 위치와 시간을 넣으면 값을 바로 출력하는 연속 함수를 학습하는 것이 목표



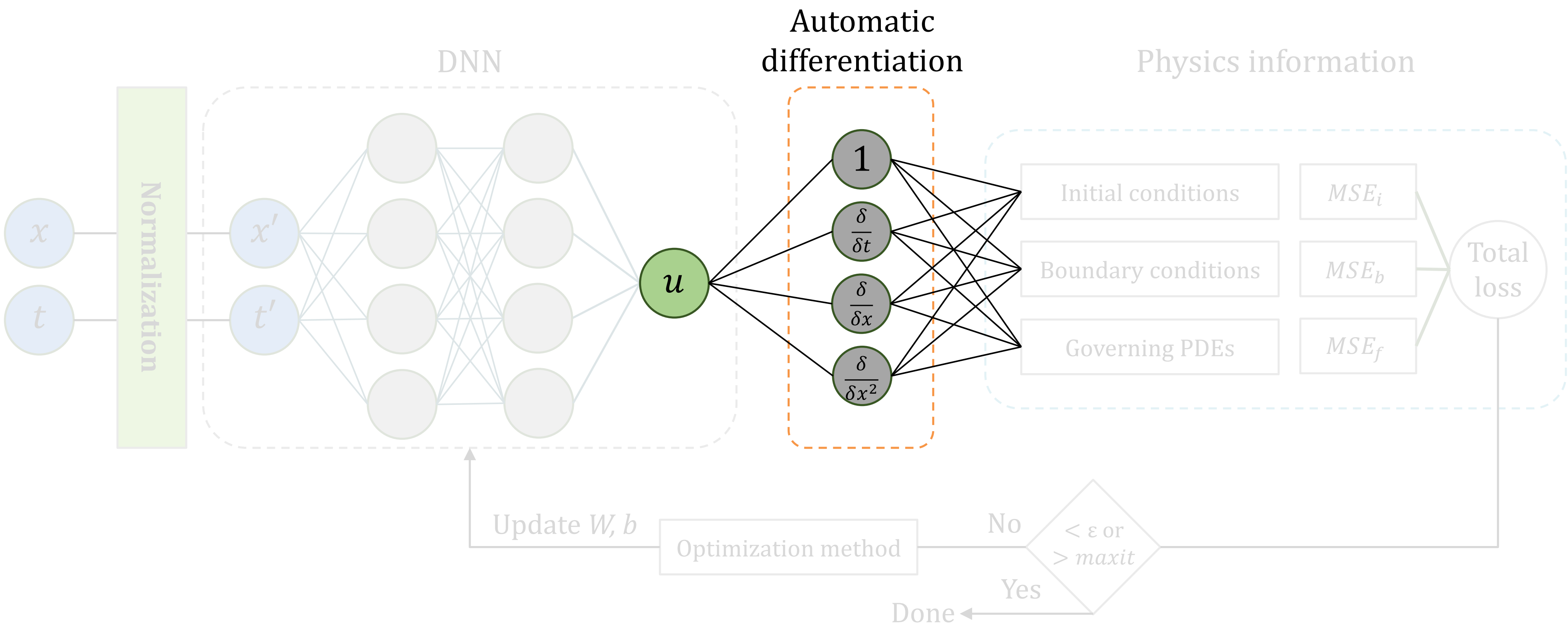
[1] Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. Journal of Computational physics, 378, 686-707.

Physics-Informed Learning

Physics-Informed Neural Networks (PINNs)

❖ PINN (forward problem)

- 물리 법칙은 값 자체뿐 아니라, 시간과 공간에 따라 얼마나 변화하는지(변화율)로 표현함
- 따라서 신경망의 출력값을 미분하여, 그 결과를 물리 방정식(PDE)에 대입하여 사용함



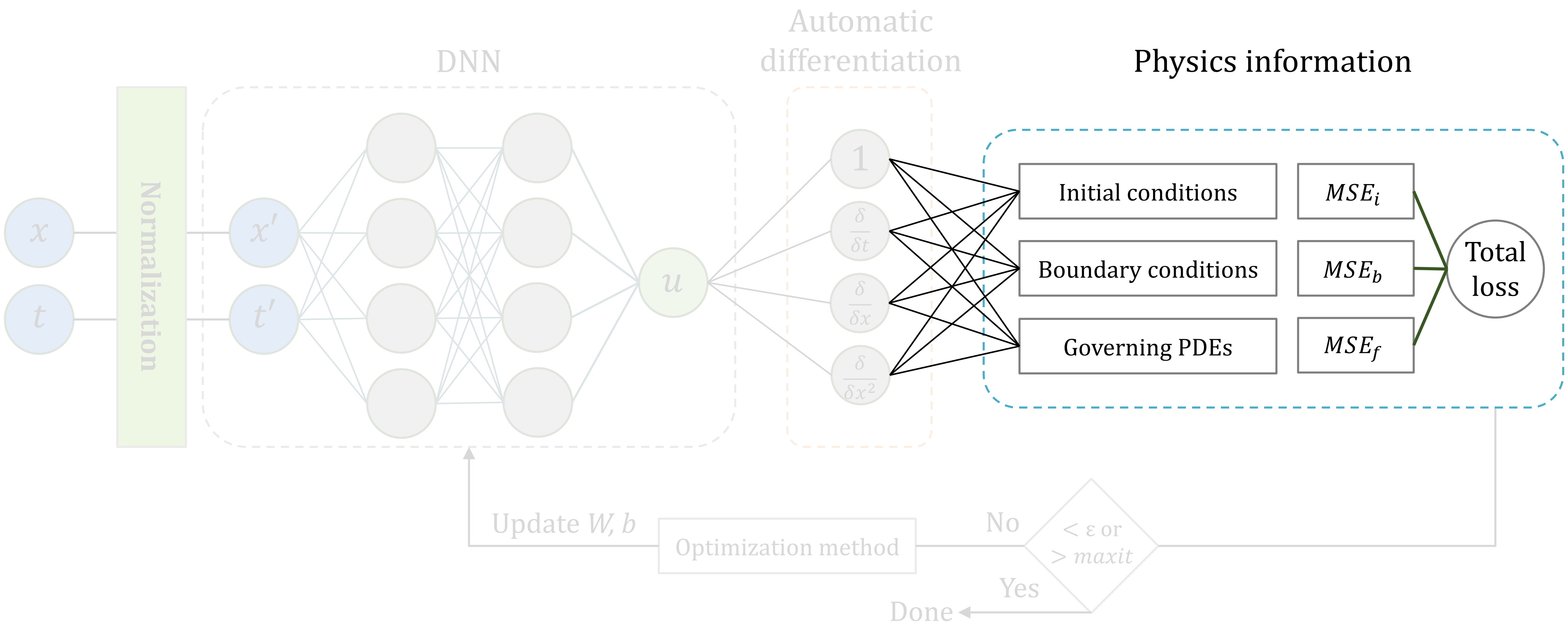
[1] Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. Journal of Computational physics, 378, 686-707.

Physics-Informed Learning

Physics-Informed Neural Networks (PINNs)

❖ **PINN (forward problem)**

- 모델이 예측한 값이 물리 법칙을 얼마나 위반했는지를 loss로 계산함
- 초기조건(처음 상태)과 경계조건(벽/경계에서의 조건)을 함께 만족하도록 학습



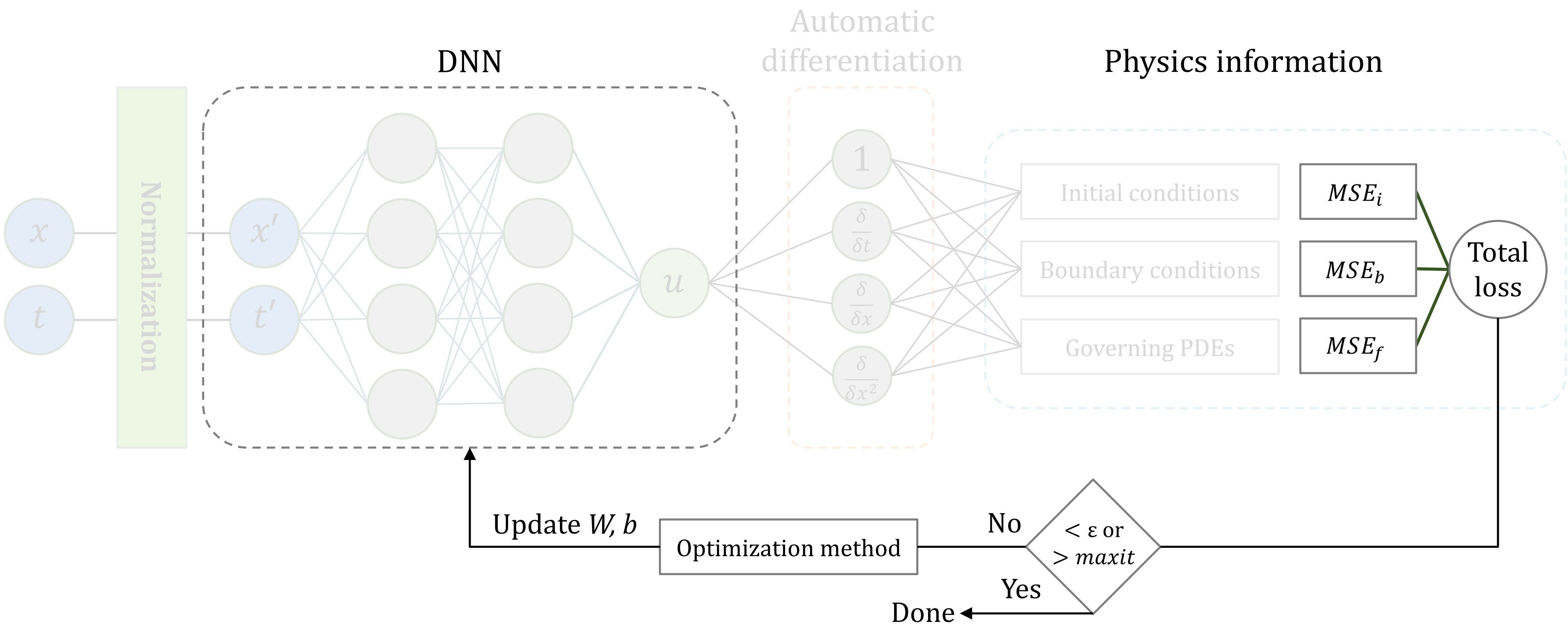
[1] Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. Journal of Computational physics, 378, 686-707.

Physics-Informed Learning

Physics-Informed Neural Networks (PINNs)

❖ PINN (forward problem)

- 물리 방정식을 잘 만족하지 못하면 loss(PDE residual)가 커지고, 이를 줄이도록 신경망을 반복적으로 업데이트
- 즉, PINN은 어떤 위치와 시간에서도 물리 법칙을 만족하는 값을 예측하도록 설계함



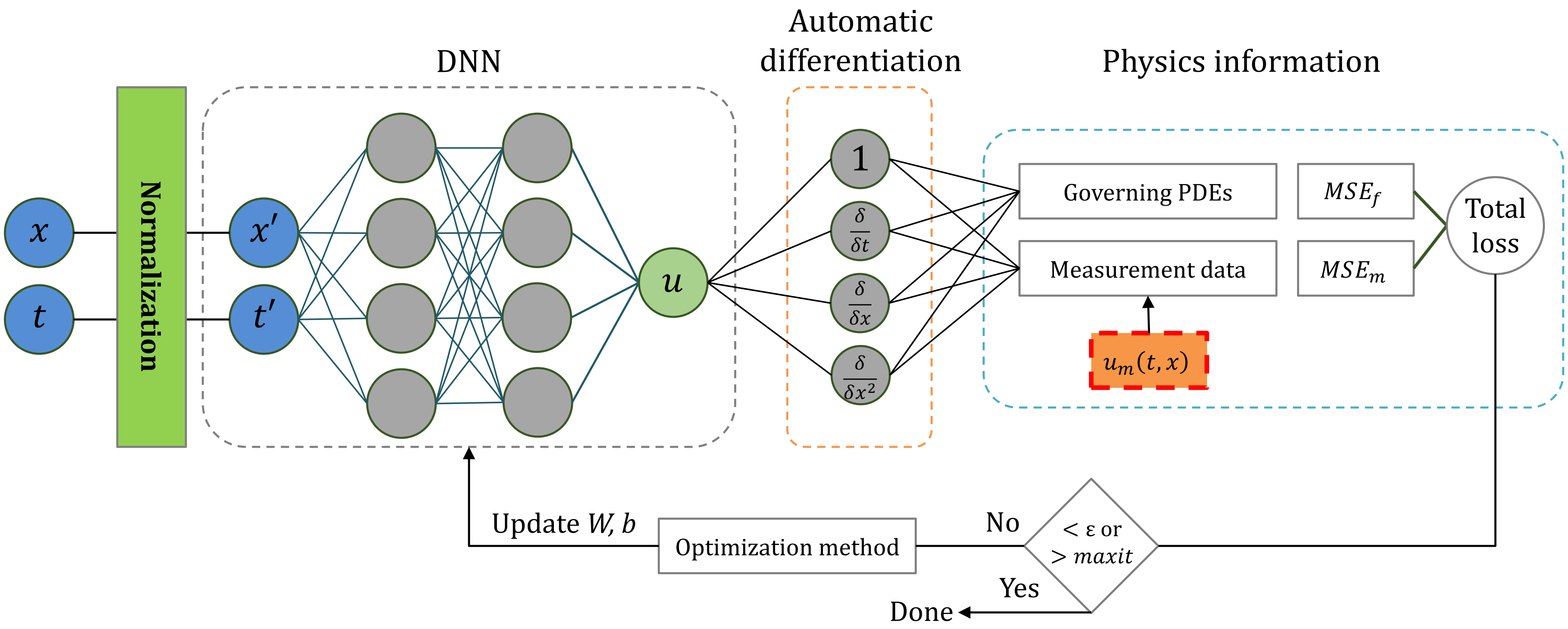
[1] Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. Journal of Computational physics, 378, 686-707.

Physics-Informed Learning

Physics-Informed Neural Networks (PINNs)

❖ **Inverse PINN (Inverse problem)**

- 일부 관측 데이터가 주어졌을 때, PDE 내부의 미지 물리 파라미터 λ를 신경망과 함께 학습함
- 즉, 데이터와 물리 방정식을 동시에 만족하도록 학습하여 시스템의 숨겨진 물리 특성을 추정함



[1] 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.

Physics-Informed Learning

Physics-Informed Neural Networks (PINNs)

❖ Forward vs Inverse Problems (PINN)

- Forward 문제는 물리 파라미터가 주어졌을 때, 시스템의 응답 $y(t)$를 계산하는 문제
- Inverse 문제는 관측된 데이터 $y(t)$와 물리 방정식을 이용해 미지의 물리 파라미터 (m, μ, k)를 추정하는 문제

$$(m, \mu, k) \rightarrow my'' + \mu y' + ky = 0 \rightarrow y(t)$$

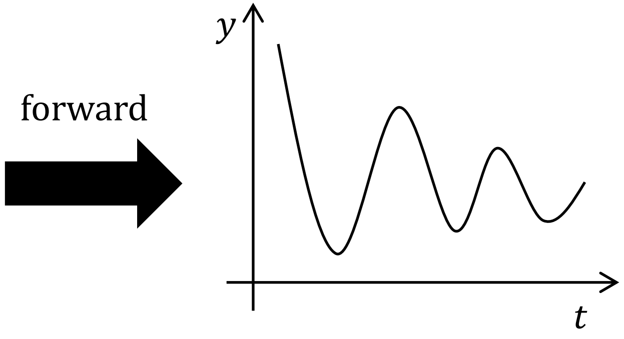
$$Data\ y(t) + (my'' + \mu y' + ky = 0) \rightarrow (m, \mu, k)$$

m, μ, k

(mass m, damping μ, stiffness k)

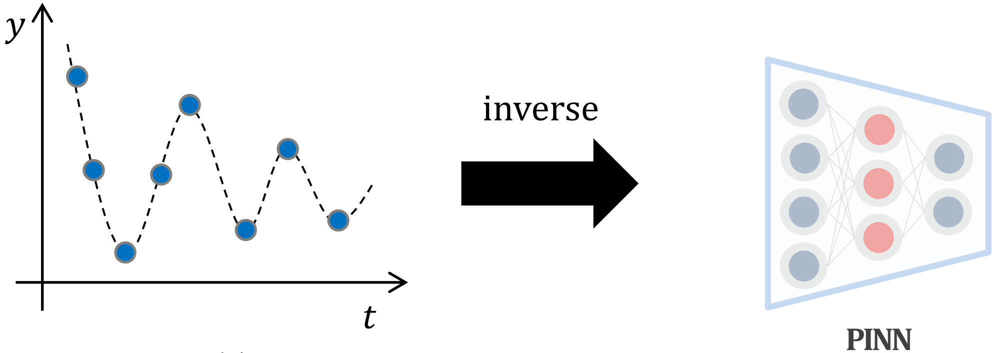
$$m\frac{d^2y}{dt^2} + \mu\frac{dy}{dt} + ky = 0$$

forward



Output: $y(t)$

Forward PINN



$y(t)$

PINN

(m, μ, k estimate)

Inverse PINN

Physics-Informed Learning

Physics-Informed Neural Networks (PINNs)

❖ Forward vs Inverse Problems (PINN)

- Forward 문제는 물리 파라미터가 주어졌을 때, 시스템의 응답 $y(t)$를 계산하는 문제
- Inverse 문제는 관측된 데이터 $y(t)$와 물리 방정식을 이용해 미지의 물리 파라미터 (m, μ, k)를 추정하는 문제

$$(m, \mu, k) \to my'' + \mu y' + ky = 0 \to y(t)$$

$$Data\ y(t) + (my'' + \mu y' + ky = 0) \to (m, \mu, k)$$

PINN은 PDE residual, IC, BC를 loss로 직접 사용

➔ 지배방정식이 비교적 잘 알려져 있고 미분 가능한 형태로 쓸 수 있을 때 강점

실제 문제에서는 물리식이 불완전, 일부 현상만 알려져 있음

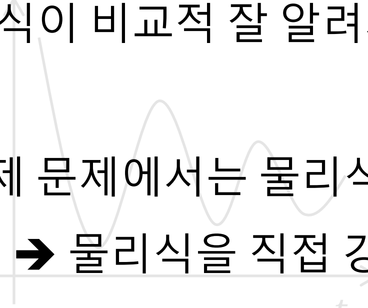
➔ 물리식을 직접 강제하지 않고 유연하게 결합하자

m, μ, k

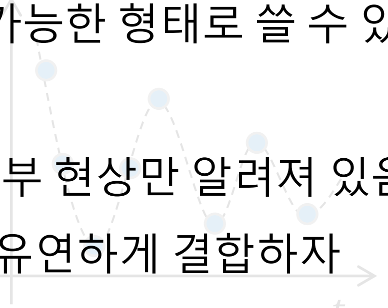
(mass m, damping μ, stiffness k)

$$m\frac{d^2y}{dt^2} + \mu\frac{dy}{dt} + ky = 0$$

forward



Output: $y(t)$



$y(t)$

inverse

PINN
(m, μ, k estimate)

Forward PINN

Inverse PINN

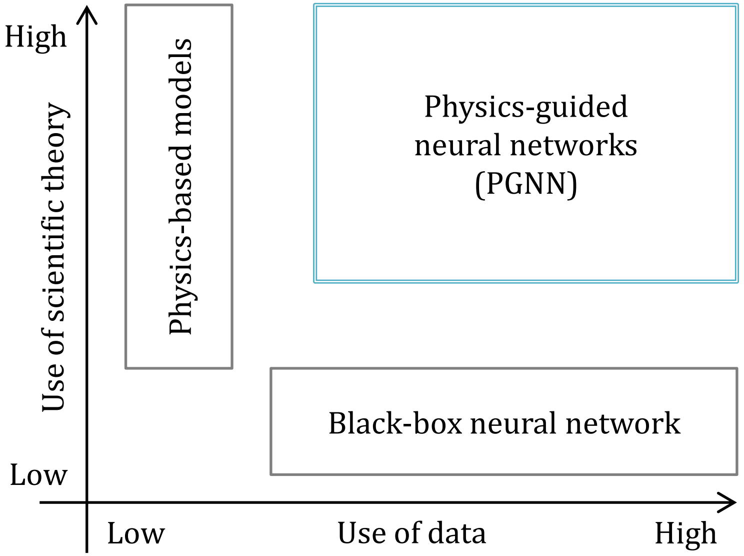
[1] Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. Journal of Computational physics, 378, 686-707.

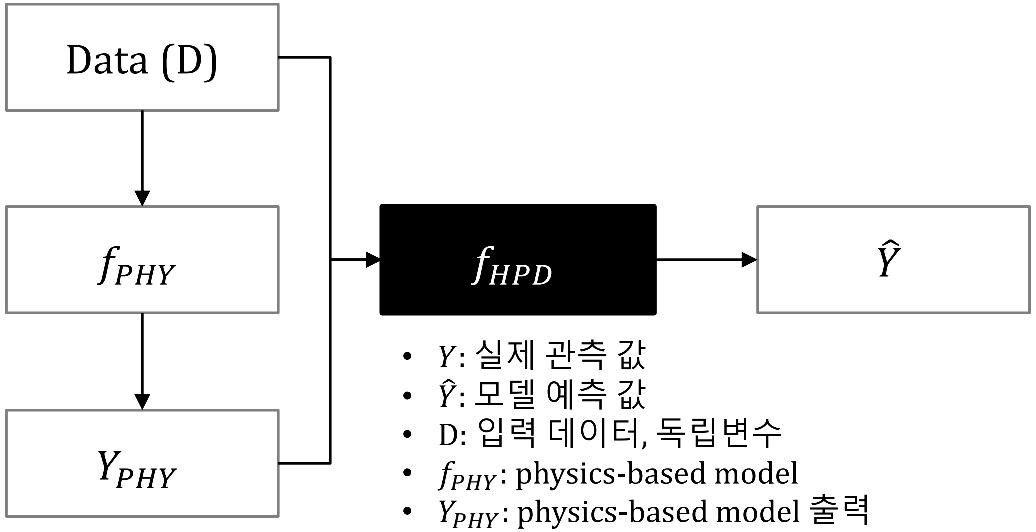
Physics-Informed Learning

Physics-Guided Neural Networks (PGNNs)

❖ **Physics-guided Neural Networks (PGNN): An Application in Lake Temperature Modeling** (2021, sites: 1098)

- 물리 기반 모델은 상대적으로 정확하지만 유연성이 부족하고, 순수 데이터 기반 모델은 데이터에 의존적
- PGNN은 두 모델을 결합하여 물리 지식과 데이터를 함께 활용하는 hybrid 모델





- Y: 실제 관측 값
- $\hat{Y}$: 모델 예측 값
- D: 입력 데이터, 독립변수
- f_{PHY}: physics-based model
- Y_{PHY}: physics-based model 출력
- f_{HPD}: hybrid-physics data model

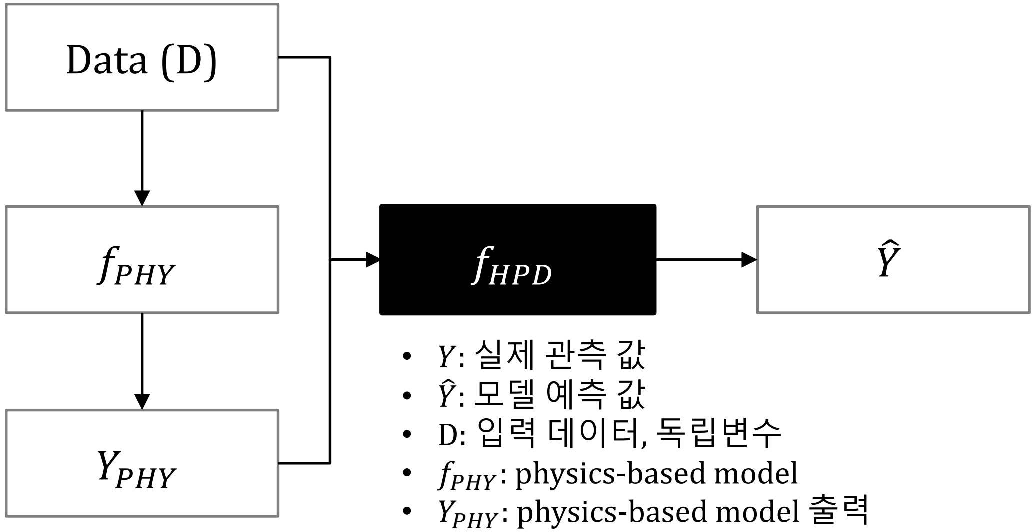
[2] Daw, A., Karpatne, A., Watkins, W. D., Read, J. S., & Kumar, V. (2022). Physics-guided neural networks (pgnn): An application in lake temperature modeling. In Knowledge guided machine learning (pp. 353-372). Chapman and Hall/CRC.

Physics-Informed Learning

Physics-Guided Neural Networks (PGNNs)

❖ How to incorporate physics (PGNN)

- Physics as input (Feature)
  - 물리 모델의 출력이나 물리적으로 의미가 있는 변수를 입력 feature로 함께 사용함
- Physics as loss (constraint)
  - 모델 예측이 물리 법칙을 얼마나 위배하는지를 loss로 정의하여 학습에 반영함
  - 데이터뿐 아니라 물리 방정식도 같이 만족하도록 모델 학습



- Y: 실제 관측 값
- $\hat{Y}$: 모델 예측 값
- D: 입력 데이터, 독립변수
- f_{PHY}: physics-based model
- Y_{PHY}: physics-based model 출력
- f_{HPD}: hybrid-physics data model

$$f_{HPD}: X = [D, Y_{PHY}] \rightarrow Y$$

물리 정보를 입력 feature으로 활용

[2] Daw, A., Karpatne, A., Watkins, W. D., Read, J. S., & Kumar, V. (2022). Physics-guided neural networks (pgnn): An application in lake temperature modeling. In Knowledge guided machine learning (pp. 353-372). Chapman and Hall/CRC.

Physics-Informed Learning

Physics-Guided Neural Networks (PGNNs)

❖ How to incorporate physics (PGNN)

- Physics as input (feature)
  - 물리 모델의 출력이나 물리적으로 의미가 있는 변수를 입력 feature로 함께 사용함
- Physics as loss (constraint)
  - 모델 예측이 물리 법칙을 얼마나 위배하는지를 loss로 정의하여 학습에 반영함
  - 데이터뿐 아니라 물리 방정식도 같이 만족하도록 모델 학습

$$\arg\min_f Loss(\hat{Y}, Y) + \lambda R(f)$$

$$\mathcal{G}(Y, Z) = 0,$$
$$\mathcal{H}(Y, Z) = 0$$

$$Loss.PHY(\hat{Y}) = \|\mathcal{G}(\hat{Y}, Z)\|^2 + ReLU\left(\mathcal{H}(\hat{Y}, Z)\right)$$

$$\arg\min_f Loss(\hat{Y}, Y) + \lambda R(f) + \lambda_{PHY} Loss.PHY(\hat{Y})$$

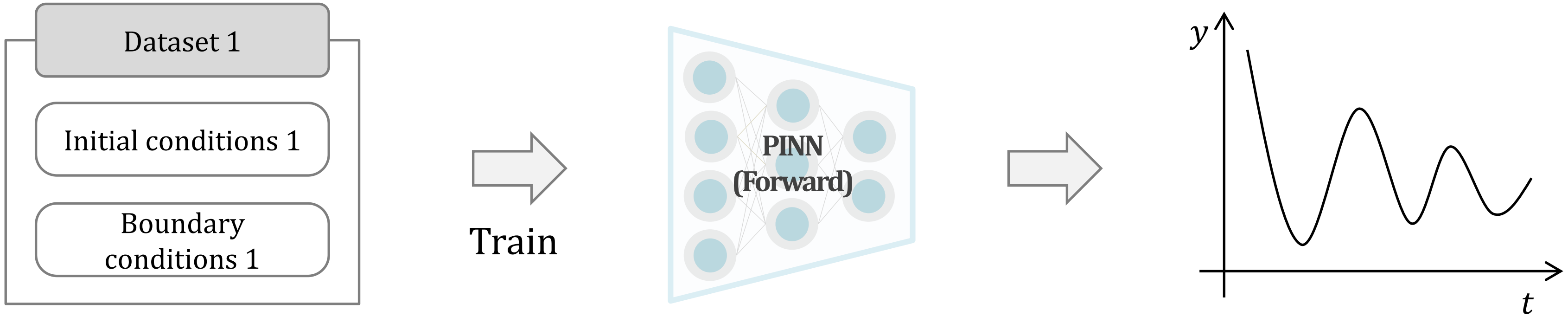
[2] Daw, A., Karpatne, A., Watkins, W. D., Read, J. S., & Kumar, V. (2022). Physics-guided neural networks (pgnn): An application in lake temperature modeling. In Knowledge guided machine learning (pp. 353-372). Chapman and Hall/CRC.

Physics-Informed Learning

Limitation of PINN and PGNN

❖ Difficulty in handling multiple physical parameters

- PINN은 주어진 PDE와 **특정 초기/경계조건**에 대해 해를 찾는 방식
  - 물리 파라미터나 조건이 바뀌면 새로운 문제로 다시 학습해야 함
- PGNN은 물리 모델 출력이나 physics-based loss를 활용
  - 여러 물리 파라미터·조건이 섞인 데이터에서는 어떤 물리 정보를 어떻게 반영해야 하는지 설계가 어려움

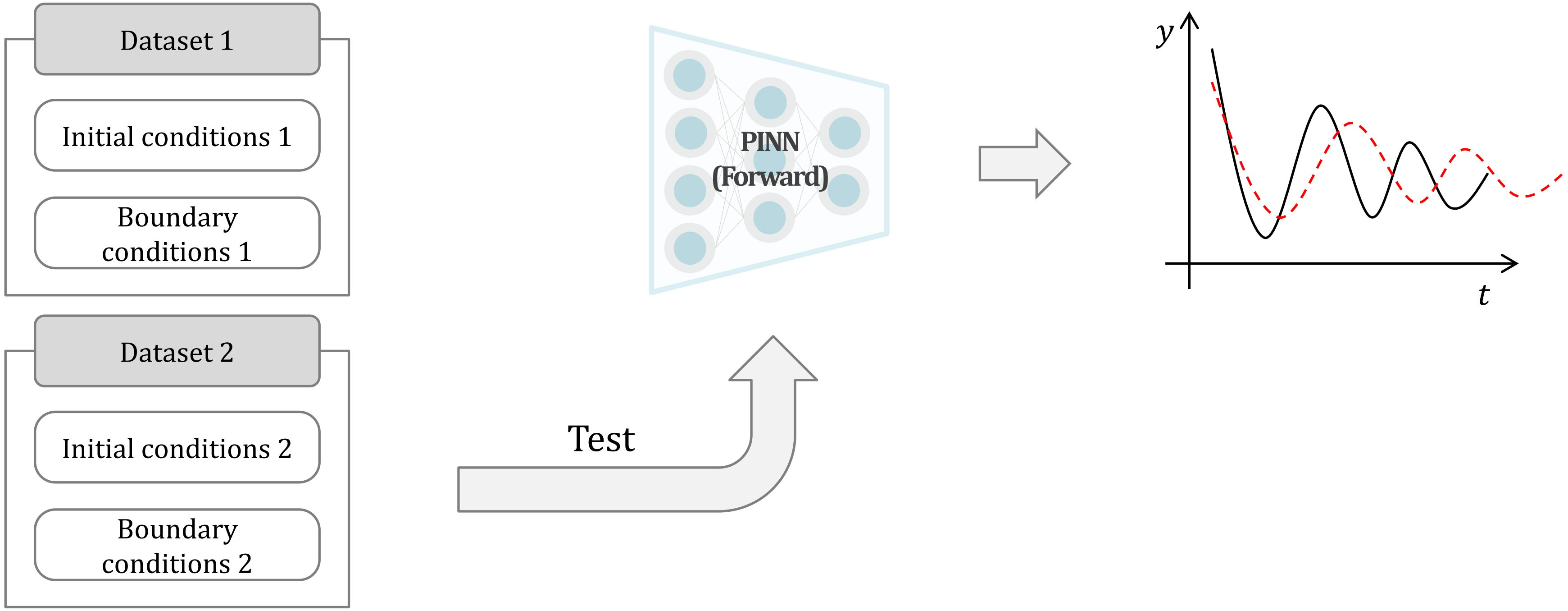


Physics-Informed Learning

Limitation of PINN and PGNN

❖ Difficulty in handling multiple physical parameters

- PINN은 주어진 PDE와 **특정 초기/경계조건**에 대해 해를 찾는 방식
  - 물리 파라미터나 조건이 바뀌면 새로운 문제로 다시 학습해야 함
- PGNN은 물리 모델 출력이나 physics-based loss를 활용
  - 여러 물리 파라미터·조건이 섞인 데이터에서는 어떤 물리 정보를 어떻게 반영해야 하는지 설계가 어려움



Neural Operators

Learning parametric PDE mappings

❖ What Does Neural Operator Learn?

- Operator은 다양한 초기/경계조건, 물리 파라미터에 대한 해의 변화를 한 번에 예측
- DeepONet/FNO는 여러 시뮬레이션 데이터로부터 입력 함수/조건 (λ, u_0, BC)와 해 $u(x,t)$사이의 mapping을 학습
- 따라서 기본 형태는 data-driven surrogate이지만, 학습 대상은 하나의 값이 아니라 함수 전체를 변환하는 operator

Neural Operators

Learning parametric PDE mappings

❖ Can Neural Operators Use Physics?

- 기본 Neural operator는 시뮬레이션 데이터 기반으로 학습하지만, PDE residual이나 boundary condition loss를 추가하면 physics-informed operator
- 즉, Neural operator는 physics-free model이 아니라, data-driven과 physics-informed를 모두 포함할 수 있는 surrogate modeling framework

Neural operator

Data-driven operator learning

- ✓ Input: condition(IC/BC/parameter/forcing) → solution
- ✓ Loss: prediction error

Physics-informed operator learning

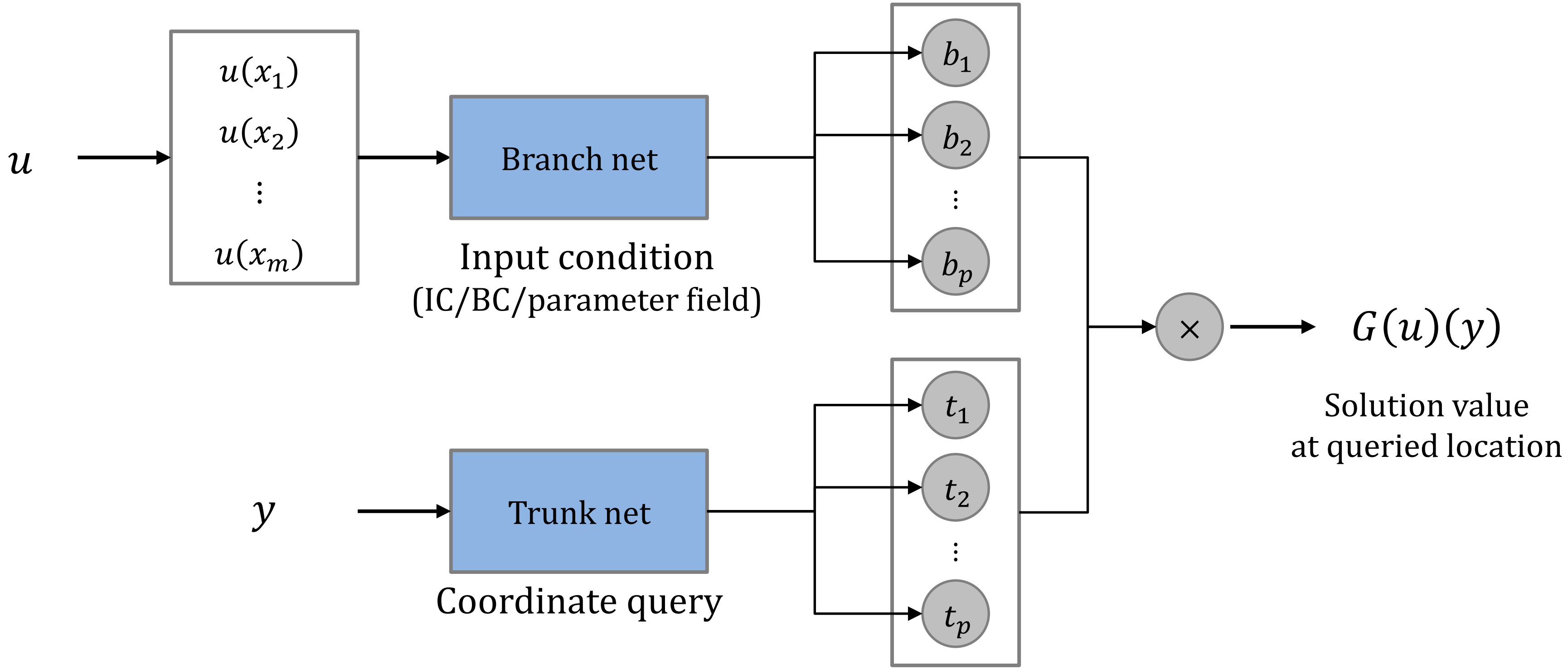
- ✓ Input: condition(IC/BC/parameter/forcing) → solution
- ✓ Loss: prediction error + PDE residual / physics constraint

Neural Operators

Learning parametric PDE mappings

❖ **DeepONet** (deep operator network): nature machine intelligence, (2021, sites: 4,485)

- DeepONet은 PDE parameter, 초기/경계조건과 같은 문제 설정과 좌표 정보를 분리하여 학습하는 operator learning 모델
- Branch network는 문제 조건을 표현하고, Trunk network는 좌표별 해 표현을 생성하며, 두 정보를 결합하여 최종 해를 예측



[3] Lu, L., Jin, P., Pang, G. et al. Learning nonlinear operators via DeepONet based on the universal approximation theorem of operators. Nat Mach Intell 3, 218–229 (2021). https://doi.org/10.1038/s42256-021-00302-5

Neural Operators

Learning parametric PDE mappings

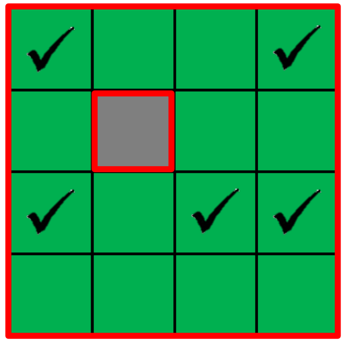
❖ DeepONet: Branch network

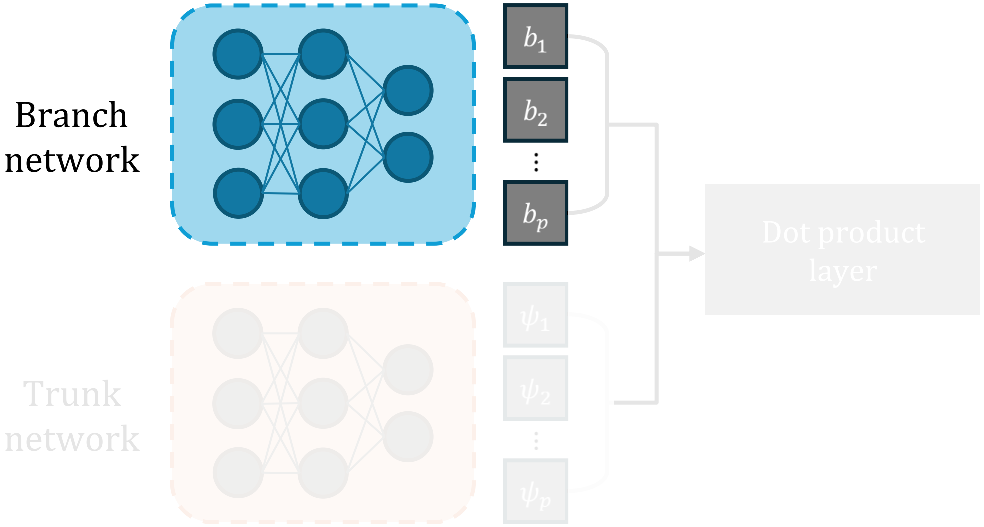
- Branch network는 PDE parameter, 초기조건, 경계조건과 같은 문제 설정 정보를 입력으로 받음
- 이를 통해 현재 문제의 전체적인 해 특성을 표현하는 coefficient vector를 생성

Branch network inputs

parameter: k, A, μ_1, μ_2

BC:
domain geometry:





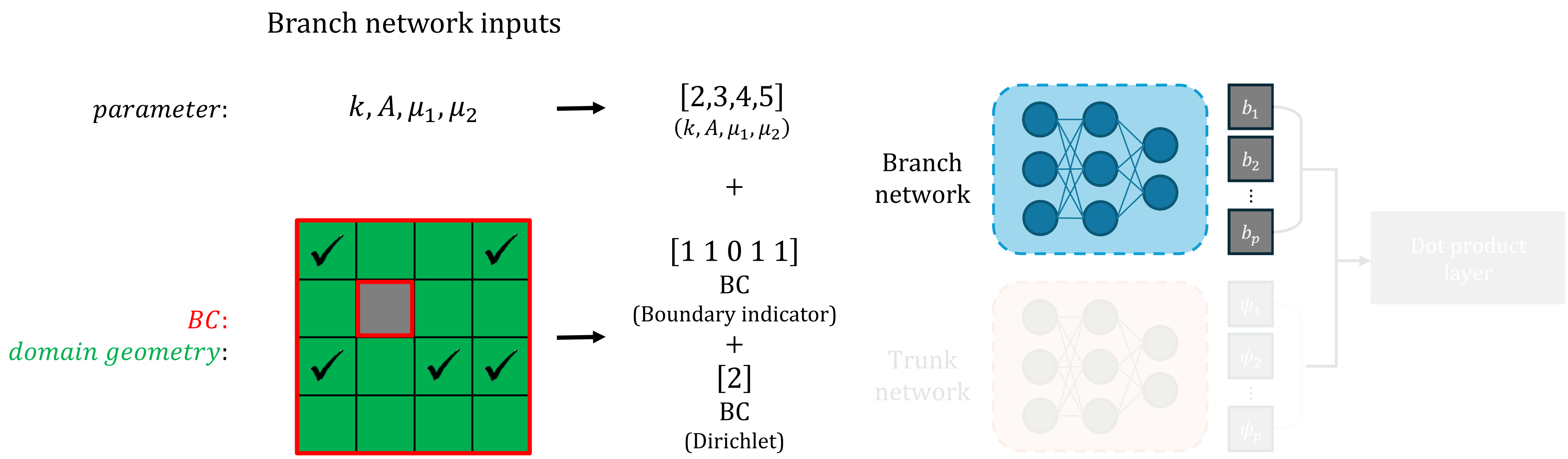
[3] Lu, L., Jin, P., Pang, G. et al. Learning nonlinear operators via DeepONet based on the universal approximation theorem of operators. Nat Mach Intell 3, 218–229 (2021). https://doi.org/10.1038/s42256-021-00302-5

Neural Operators

Learning parametric PDE mappings

❖ DeepONet: Branch network

- Branch network는 PDE parameter, 초기조건, 경계조건과 같은 문제 설정 정보를 입력으로 받음
- 이를 통해 현재 문제의 전체적인 해 특성을 표현하는 coefficient vector를 생성



[3] Lu, L., Jin, P., Pang, G. et al. Learning nonlinear operators via DeepONet based on the universal approximation theorem of operators. Nat Mach Intell 3, 218–229 (2021). https://doi.org/10.1038/s42256-021-00302-5

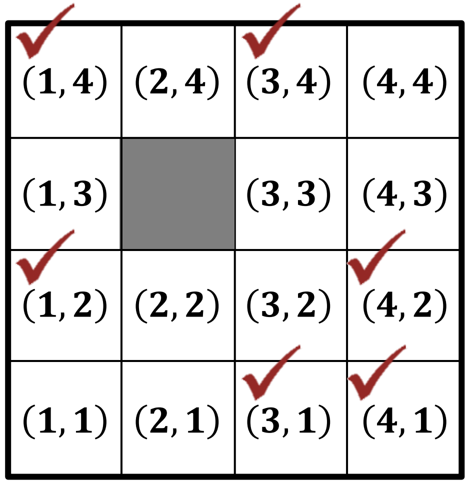
Neural Operators

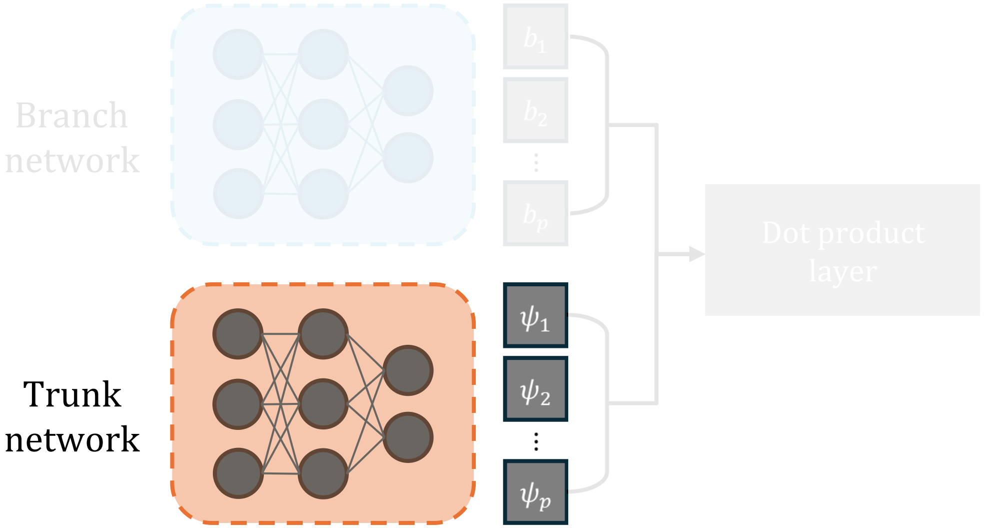
Learning parametric PDE mappings

❖ DeepONet: Trunk network

- Trunk network는 특정 위치 (x, y, t)와 같은 coordinate query를 입력으로 받음
- 이를 통해 각 좌표 위치에서의 해 표현(spatial basis representation)을 생성함

Trunk network inputs





[3] Lu, L., Jin, P., Pang, G. et al. Learning nonlinear operators via DeepONet based on the universal approximation theorem of operators. Nat Mach Intell 3, 218–229 (2021). https://doi.org/10.1038/s42256-021-00302-5

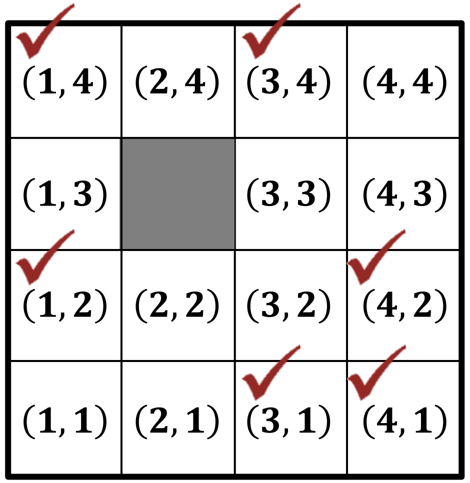
Neural Operators

Learning parametric PDE mappings

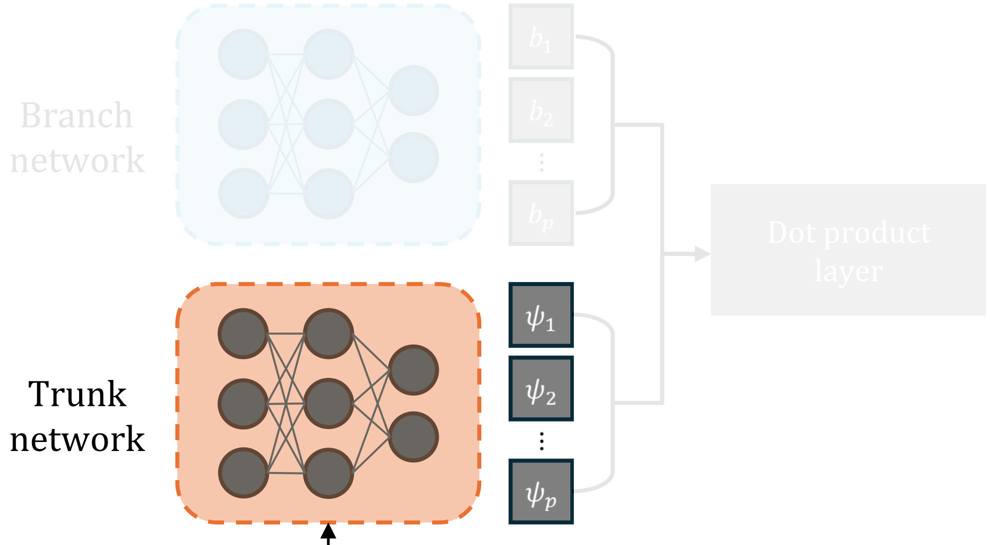
❖ DeepONet: Trunk network

- Trunk network는 특정 위치 (x, y, t)와 같은 coordinate query를 입력으로 받음
- 이를 통해 각 좌표 위치에서의 해 표현(spatial basis representation)을 생성함

Trunk network inputs



[(1,2), (1,4), (3,1), (3,4), (4,1), (4,2)]



[3] Lu, L., Jin, P., Pang, G. et al. Learning nonlinear operators via DeepONet based on the universal approximation theorem of operators. Nat Mach Intell 3, 218–229 (2021). https://doi.org/10.1038/s42256-021-00302-5

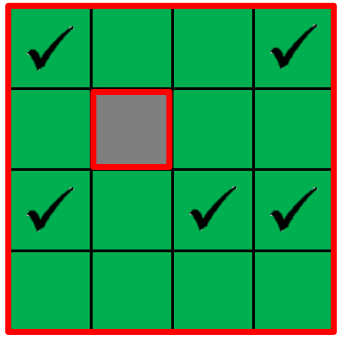
Neural Operators

Learning parametric PDE mappings

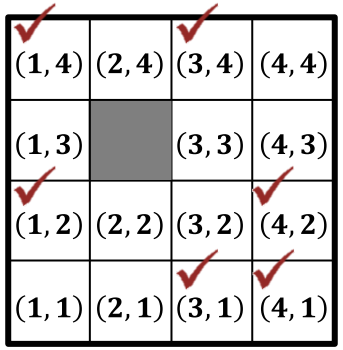
❖ DeepONet Summary: Universal Approximation of Operators

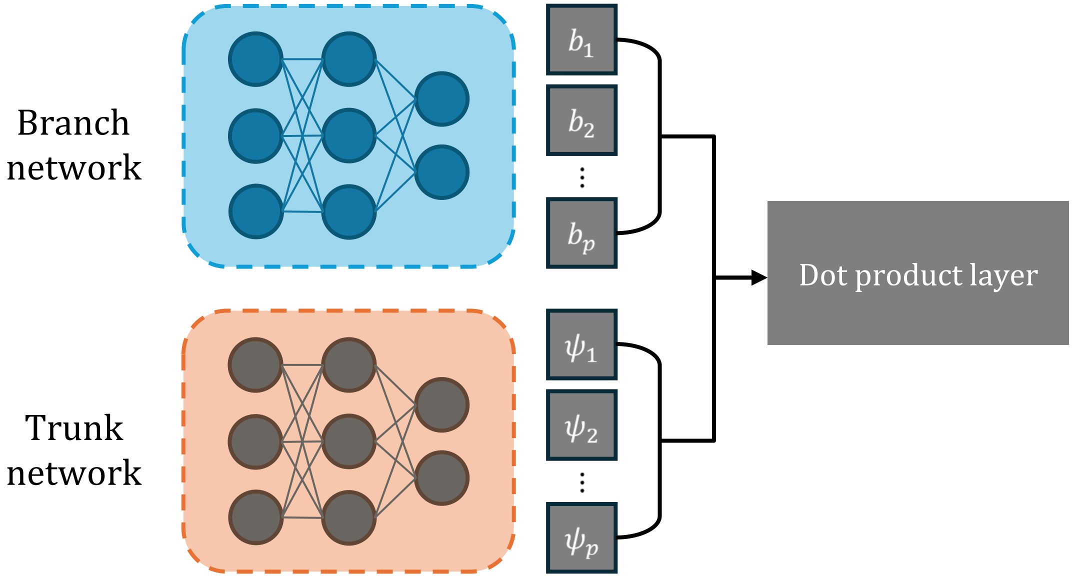
- DeepONet은 입력 함수/조건 a가 주어졌을 때 해 함수 u를 생성하는 operator $\mathcal{G}: a \rightarrow u$를 근사함
- Branch network은 입력 함수/조건을 sensor point에서 관측하여 문제 특성을 요약
- Trunk network는 임의의 좌표 query에서 해를 평가할 수 있도록 하여 grid-free prediction이 가능

Branch network input sampling
→ 입력 함수/조건을 요약



Trunk network input sampling
→ 해 예측과 loss 계산을 위한 query points





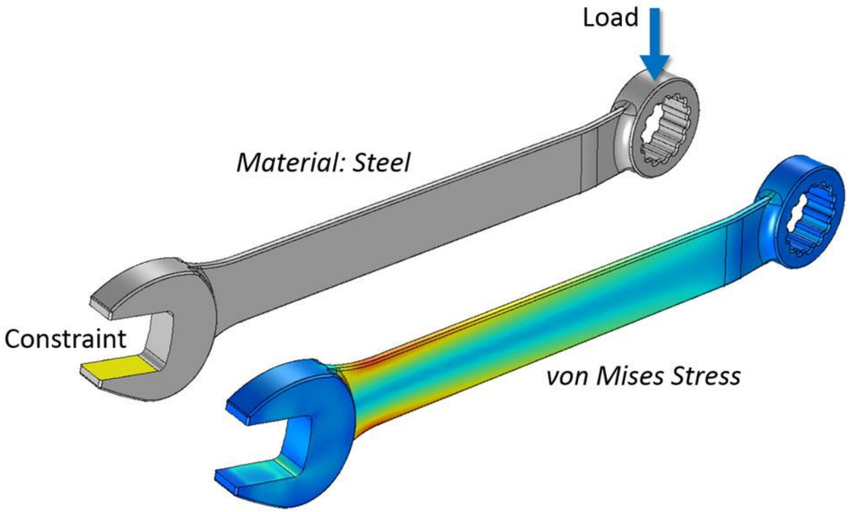
[3] Lu, L., Jin, P., Pang, G. et al. Learning nonlinear operators via DeepONet based on the universal approximation theorem of operators. Nat Mach Intell 3, 218–229 (2021). https://doi.org/10.1038/s42256-021-00302-5

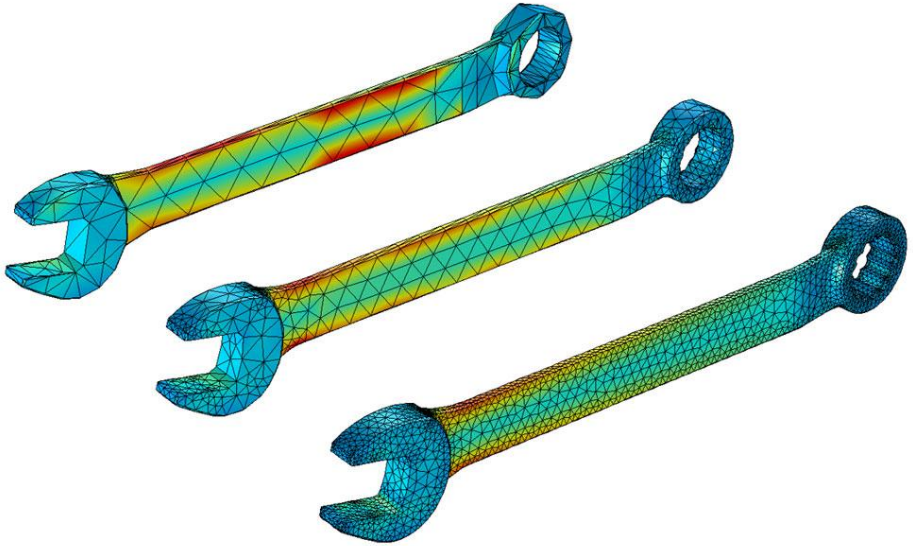
Surrogate Modeling

Replacing Computational Fluid Dynamics / Finite Element Method

❖ Why Surrogate Modeling?

- CFD, FEM, FEA와 같은 시뮬레이션은 형상, 재료 특성, 초기/경계조건을 입력으로 받아 물리 현상을 계산함
- 입력 조건이 바뀔 때마다 시뮬레이션을 처음부터 다시 수행해야 하므로 많은 계산 시간이 필요함
- Surrogate modeling은 이러한 입력과 결과의 관계를 학습하여 새로운 조건에서도 결과를 빠르게 예측하는 방법



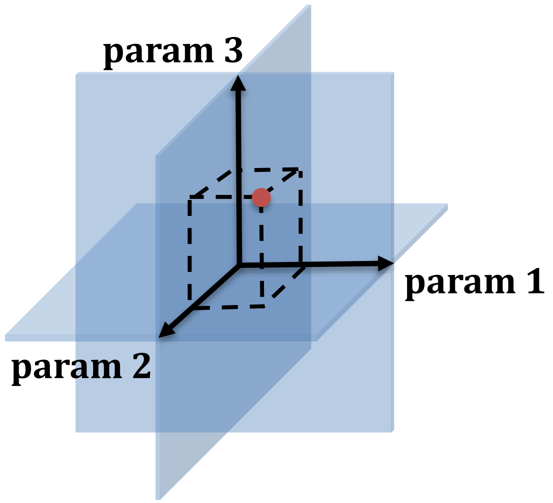


Surrogate Modeling

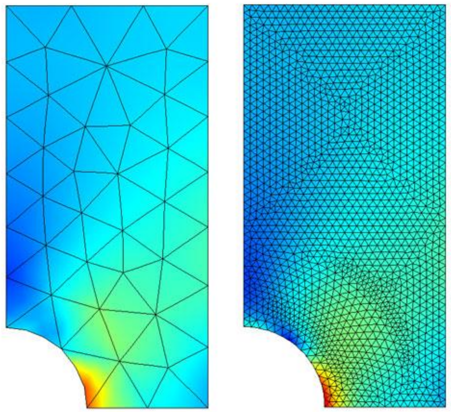
Replacing Computational Fluid Dynamics / Finite Element Method

❖ Research Directions in Surrogate Modeling

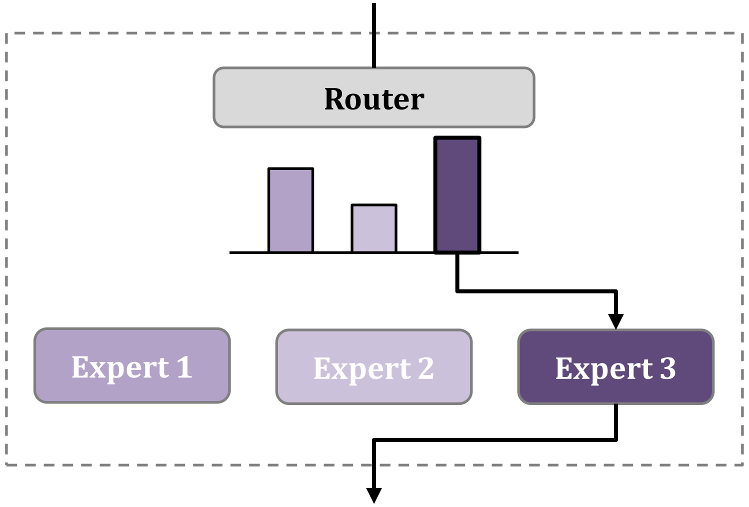
- Surrogate modeling 목표는 시뮬레이션 결과를 정확하고 빠르게 예측하는 것
- 이를 위해 어떤 조건에서 데이터를 생성할지, 어떤 해상도로 계산할지, 어떤 모델 구조를 사용할지 함께 고려함
  - 어떤 조건에서 데이터를 생성할 것인가? (Sequential sampling / DoE)
  - 어디를 더 정밀하게 계산할 것인가? (Adaptive mesh refinement)
  - 어떤 모델 구조를 사용할 것인가? (Neural operators, MoE, Foundation models)



Data sampling strategy



Adaptive mesh refinement



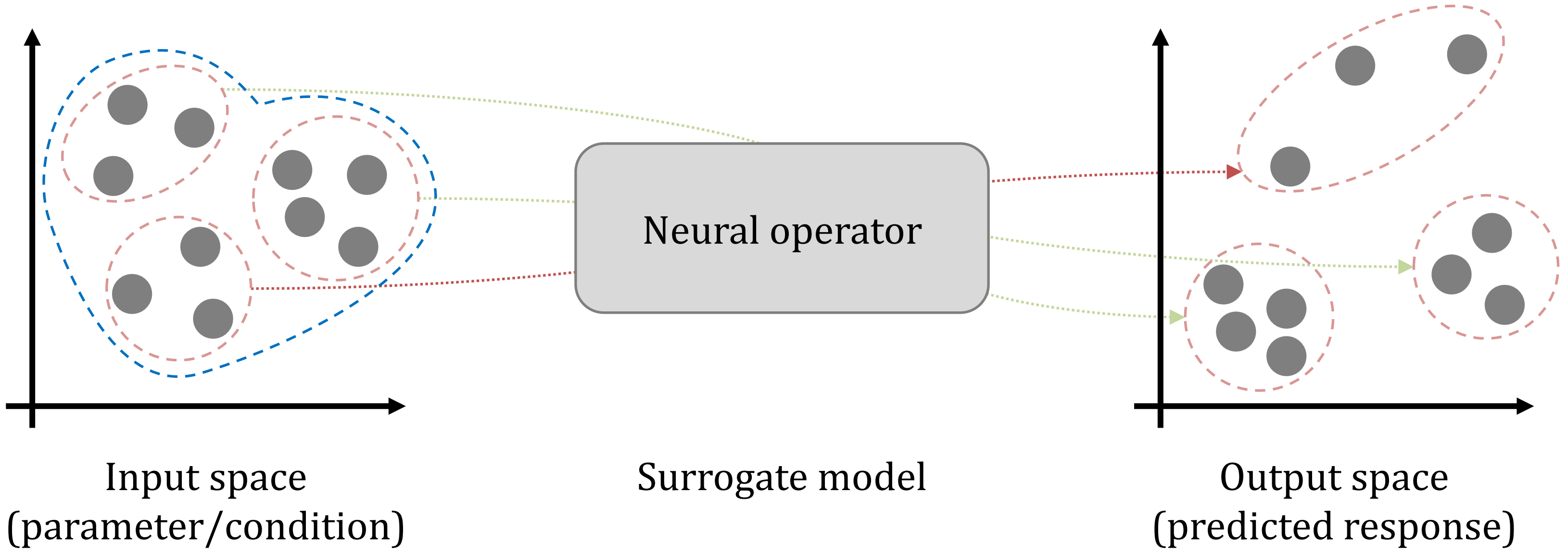
Model architecture design (MoE)

Surrogate Modeling

Data Sampling Strategy

❖ **Thompson Sampling in Function Spaces via Neural Operators: NeurIPS (2025)**

- CFD, FEM, climate simulation과 같은 고정밀 시뮬레이션은 한 번 수행하는 데 많은 시간이 필요함
- 따라서 가능한 모든 조건을 계산하는 대신, 가장 informative한 조건을 선택하여 데이터를 생성함
- Thompson sampling은 현재 surrogate가 가장 유망하다고 판단하는 조건을 선택하여 exploration과 exploitation을 동시에 수행함



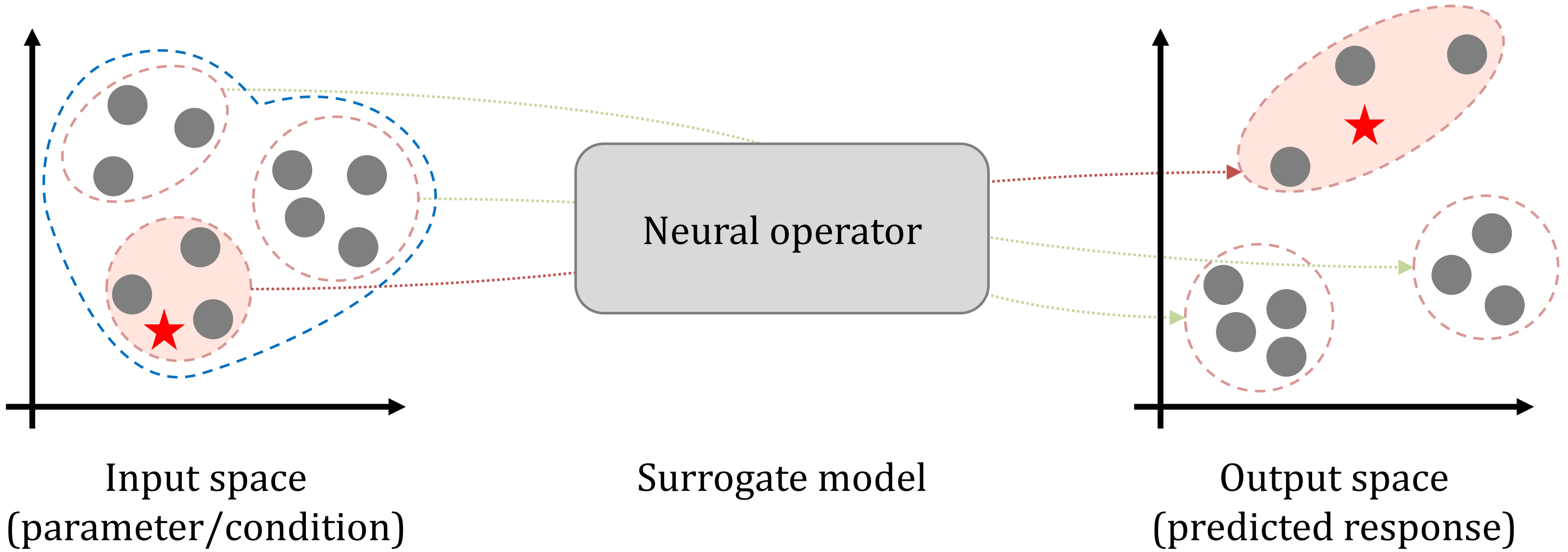
[4] Oliveira, R., Wang, X., Chai, K. M., & Bonilla, E. (2026). Thompson Sampling in Function Spaces via Neural Operators. Advances in Neural Information Processing Systems, 38, 32870-32905.

Surrogate Modeling

Data Sampling Strategy

❖ Thompson Sampling in Function Spaces via Neural Operators

- CFD, FEM, climate simulation과 같은 고정밀 시뮬레이션은 한 번 수행하는 데 많은 시간이 필요함
- 따라서 가능한 모든 조건을 계산하는 대신, 가장 informative한 조건을 선택하여 데이터를 생성함
- Thompson sampling은 현재 surrogate가 가장 유망하다고 판단하는 조건을 선택하여 exploration과 exploitation을 동시에 수행함



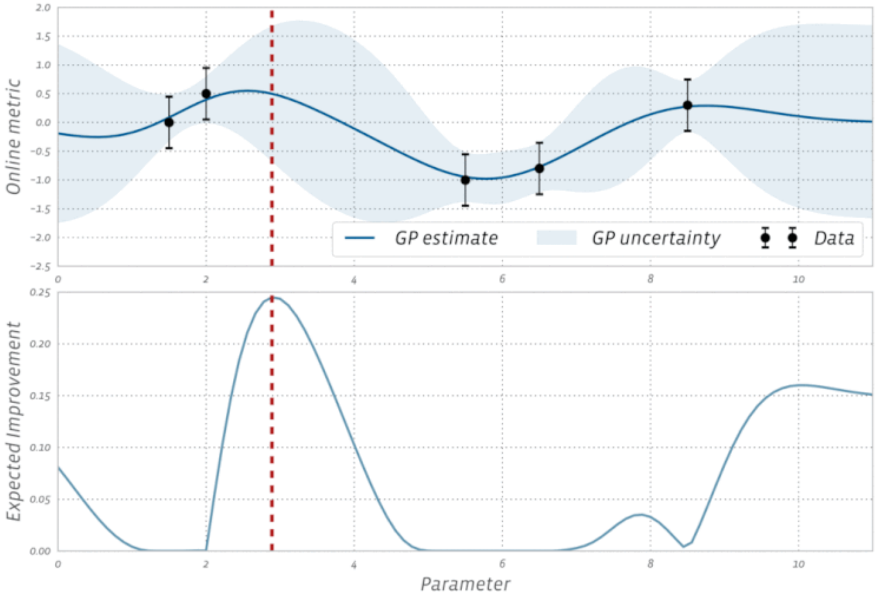
[4] Oliveira, R., Wang, X., Chai, K. M., & Bonilla, E. (2026). Thompson Sampling in Function Spaces via Neural Operators. Advances in Neural Information Processing Systems, 38, 32870-32905.

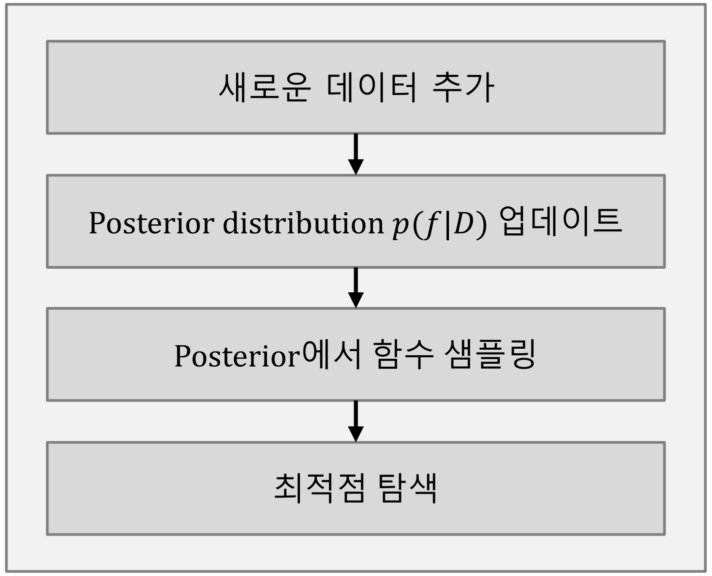
Surrogate Modeling

Data Sampling Strategy

❖ Thompson Sampling in Function Spaces via Neural Operators

- 기존 Gaussian process 기반 Thompson sampling
  - 관측 데이터를 이용하여 가능한 함수들의 posterior distribution을 추정
  - Posterior에서 하나의 함수를 샘플링하고, 그 함수가 가장 좋은 값을 가지는 입력 조건을 선택



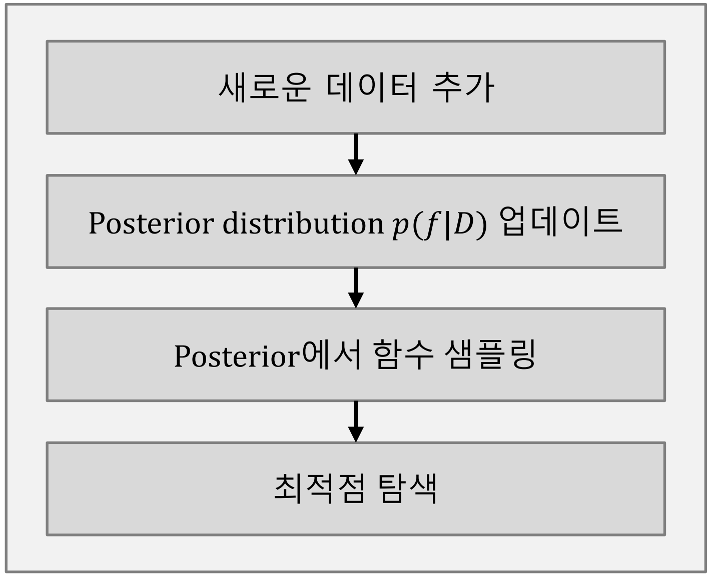


기존 방식
(Gaussian process)

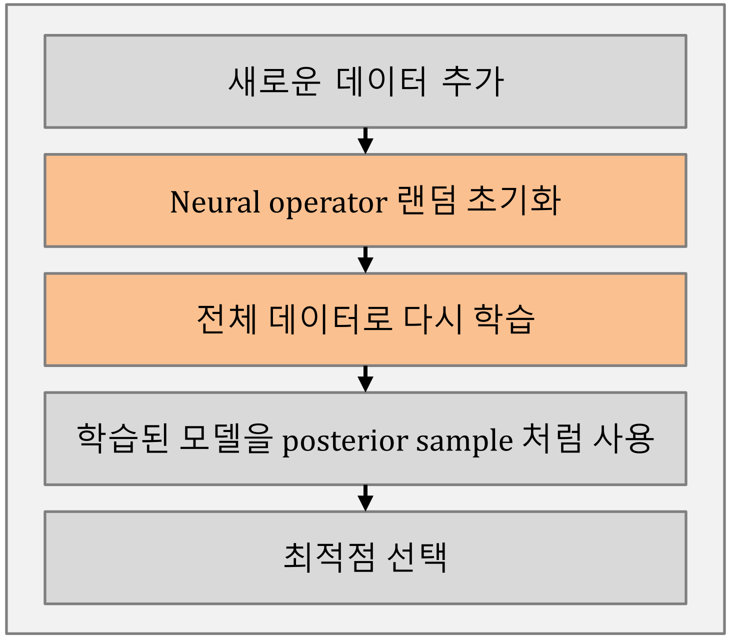
[4] Oliveira, R., Wang, X., Chai, K. M., & Bonilla, E. (2026). Thompson Sampling in Function Spaces via Neural Operators. Advances in Neural Information Processing Systems, 38, 32870-32905.

❖ Thompson Sampling in Function Spaces via Neural Operators

- Neural Operator Thompson Sampling(NOTS)
  - Gaussian process의 posterior distribution을 직접 계산하는 대신, neural operator를 랜덤 초기화한 뒤 현재까지의 데이터로 다시 학습
  - 학습된 neural operator 하나를 posterior sample의 근사로 활용하여 해당 operator의 arg max 조건을 기반으로 새로운 simulation 수행



기존 방식
(Gaussian process)



제안 방식
(NOTS)

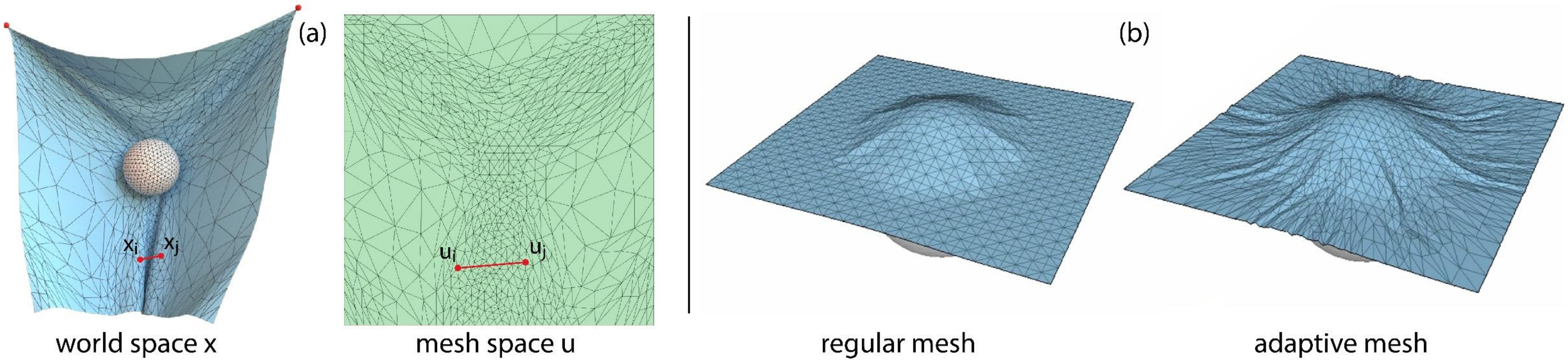
[4] Oliveira, R., Wang, X., Chai, K. M., & Bonilla, E. (2026). Thompson Sampling in Function Spaces via Neural Operators. Advances in Neural Information Processing Systems, 38, 32870-32905.

Surrogate Modeling

Adaptive Discretization

❖ **Learning Mesh-Based Simulation with Graph Networks: ICLR(2021, sites: 1706)**

- CFD/FEM에서는 전체 영역을 고해상도로 계산하면 계산 비용이 급격히 증가
- 따라서 변화가 큰 영역이나 물리적으로 중요한 영역에 mesh를 더 조밀하게 배치
- Adaptive mesh refinement(AMR)는 동일한 계산 예산에서 더 높은 정확도를 얻기 위한 전략



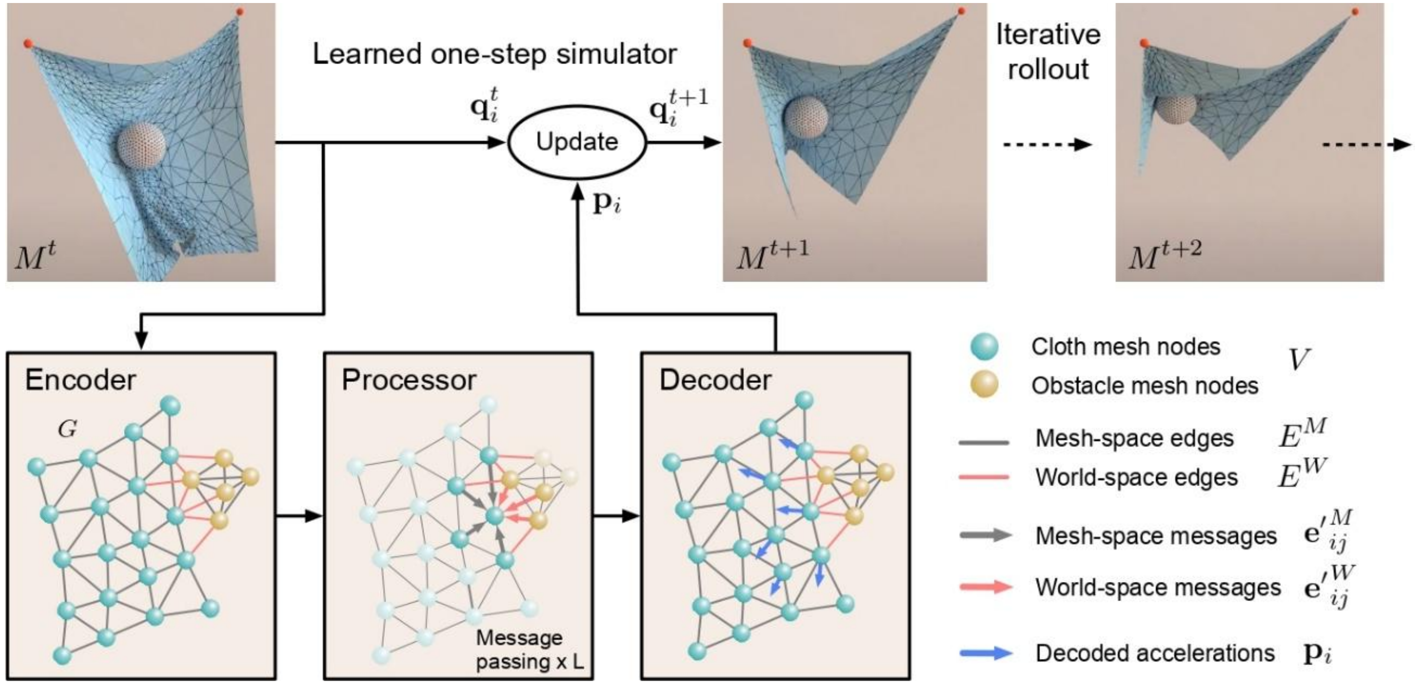
[5] Pfaff, T., Fortunato, M., Sanchez-Gonzalez, A., & Battaglia, P. Learning Mesh-Based Simulation with Graph Networks. In International Conference on Learning Representations.

Surrogate Modeling

Adaptive Discretization

❖ Learning Mesh-Based Simulation with Graph Networks

- Mesh의 node와 edge를 그래프로 표현하고, 각 node의 위치·속도·물리량을 입력으로 사용하여 latent representation으로 변환
- Processor에서 message passing을 반복 수행하여 인접 node 간의 물리적 상호작용을 계산하고 시스템의 동역학 정보를 통합함
- Decoder가 각 node의 acceleration 또는 state update를 예측하고, 이를 적용하여 다음 time step의 mesh state를 생성함



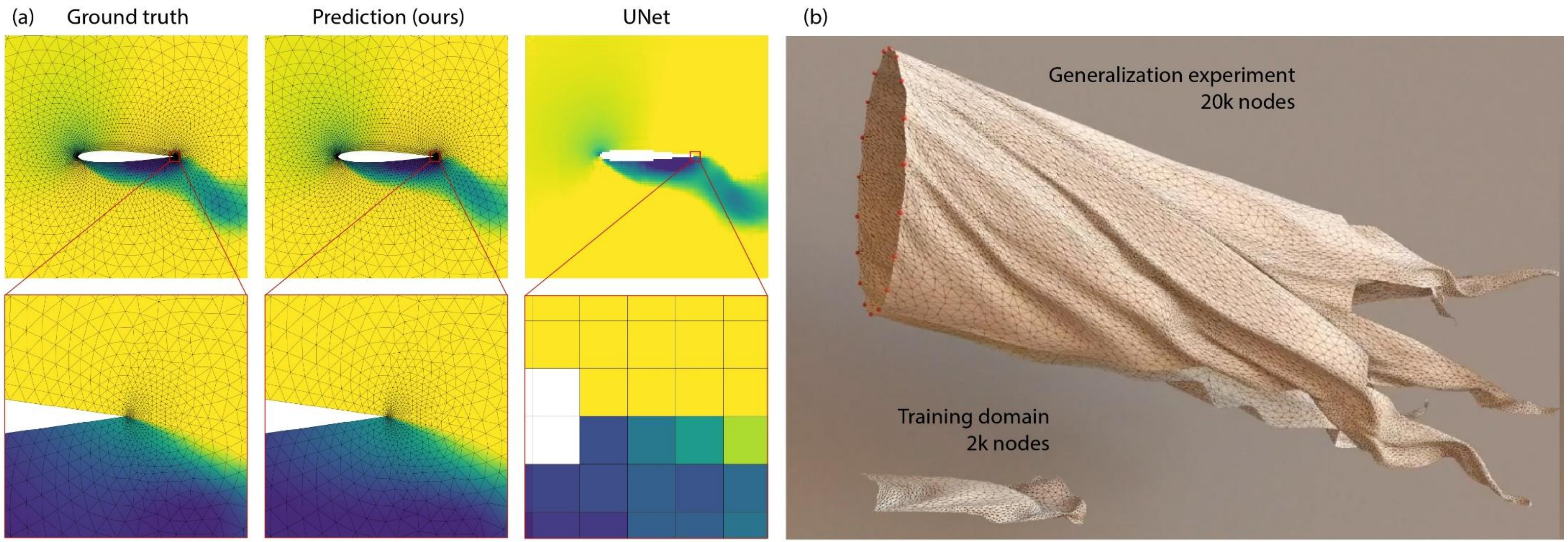
[5] Pfaff, T., Fortunato, M., Sanchez-Gonzalez, A., & Battaglia, P. Learning Mesh-Based Simulation with Graph Networks. In International Conference on Learning Representations.

Surrogate Modeling

Adaptive Discretization

❖ Learning Mesh-Based Simulation with Graph Networks

- Ground truth는 고정밀 CFD 시뮬레이터가 계산한 해이며, 예측 결과를 비교하기 위한 기준으로 사용됨
- 제안모델은 irregular triangular mesh를 직접 처리할 수 있어 wake region과 같은 복잡한 유동 구조를 보다 정밀하게 예측함
- 낮은 해상도로 학습한 모델을 더 높은 해상도에도 그대로 적용할 수 있어, 서로 다른 해상도에 대해 우수한 일반화 성능을 보임



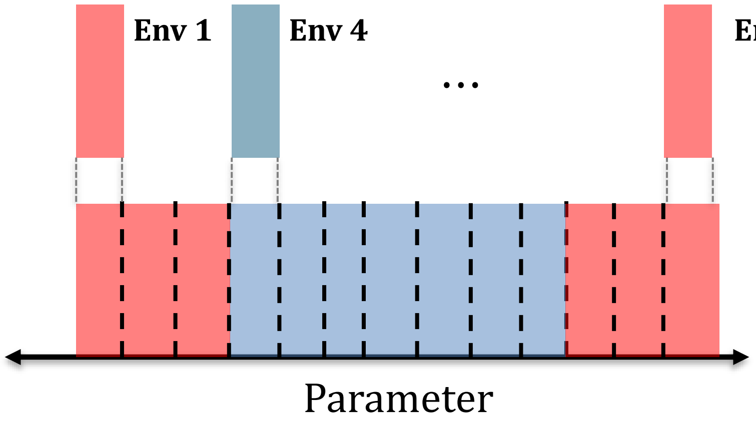
[5] Pfaff, T., Fortunato, M., Sanchez-Gonzalez, A., & Battaglia, P. Learning Mesh-Based Simulation with Graph Networks. In International Conference on Learning Representations.

Surrogate Modeling

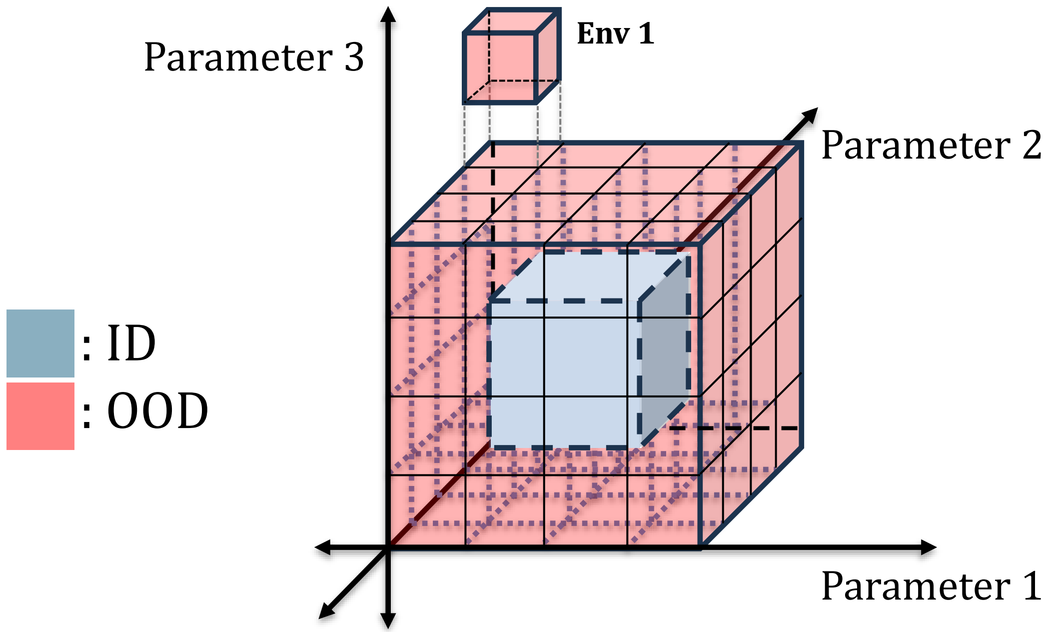
Model Architecture Design

❖ Towards Generalizable PDE Dynamics Forecasting Via Physics-Guided Invariant Learning: ICLR (2026, sites: 2)

- PDE surrogate modeling에서는 물리 파라미터 조합에 따라 서로 다른 동역학 환경이 형성
- 학습 중 보지 못한 새로운 parameter 조합(OOD)에서 생성된 데이터에 대한 예측 오차가 크게 증가할 수 있음



Navier-Stokes
(물리 파라미터 1개)



Diffusion-reaction
(물리 파라미터 3개)

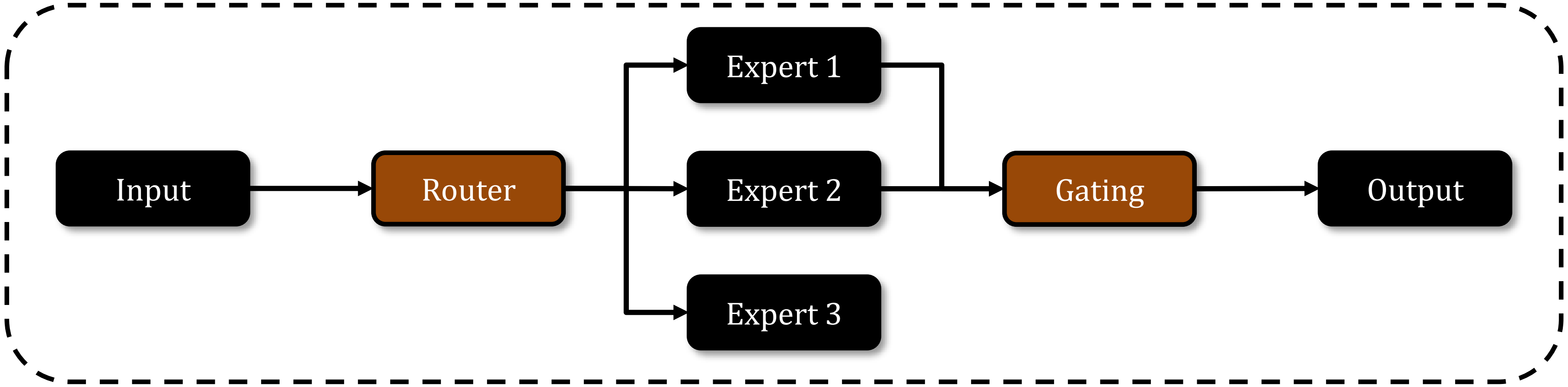
[6] Li, S., Chen, Y., Guo, Y., Huang, M., & Xiong, H. (2025). Towards Generalizable PDE Dynamics Forecasting via Physics-Guided Invariant Learning. arXiv preprint arXiv:2509.24332.

Surrogate Modeling

Model Architecture Design

❖ Towards Generalizable PDE Dynamics Forecasting Via Physics-Guided Invariant Learning

- MoE(mixture-of-experts)는 여러 expert model을 두고, 입력 조건이나 상황에 따라 일부 expert를 선택하거나 가중 결합하여 예측
- 일반적으로 expert는 서로 다른 데이터 분포, task, modality에 특화되도록 설계
- 해당 논문에서는 동일한 PDE stage를 서로 다른 물리 관점으로 변환하여 expert에 입력
  - State view: u
  - Gradient view: ∇u
  - Diffusion / Curvature view: $\nabla^2 u$



MoE structure

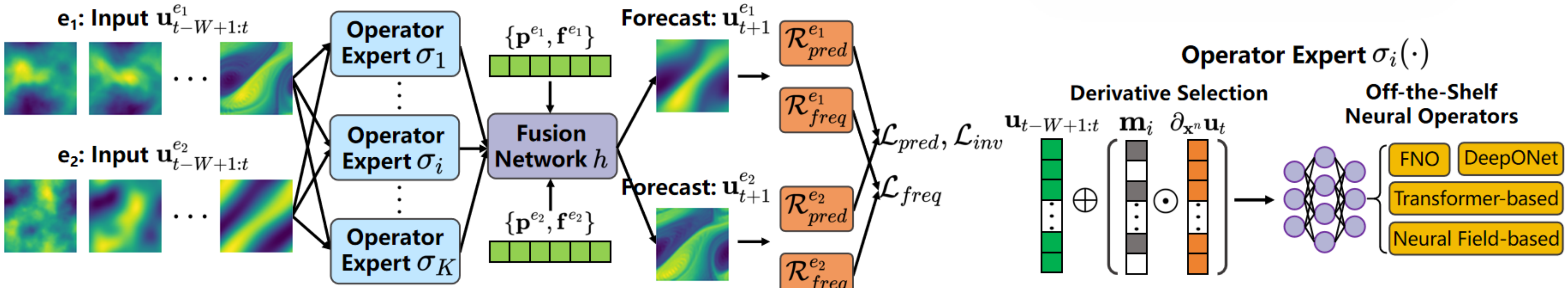
[6] Li, S., Chen, Y., Guo, Y., Huang, M., & Xiong, H. (2025). Towards Generalizable PDE Dynamics Forecasting via Physics-Guided Invariant Learning. arXiv preprint arXiv:2509.24332.

Surrogate Modeling

Model Architecture Design

❖ Towards Generalizable PDE Dynamics Forecasting Via Physics-Guided Invariant Learning

- 각 물리 파라미터 조합은 서로 다른 environment(domain)으로 간주됨
- Domain generalization은 모든 environment에서 공통적으로 유지되는 invariant pattern을 학습하는 것을 목표로 함
- V-REx는 environment별 loss의 분산을 최소화하여 특정 domain에 과적합되는 것을 방지함



(a) Overview of iMOOE framework. (b) Individual operator experts.

[6] Li, S., Chen, Y., Guo, Y., Huang, M., & Xiong, H. (2025). Towards Generalizable PDE Dynamics Forecasting via Physics-Guided Invariant Learning. arXiv preprint arXiv:2509.24332.

Surrogate Modeling

Model Architecture Design

❖ Towards Generalizable PDE Dynamics Forecasting Via Physics-Guided Invariant Learning

- 각 물리 파라미터 조합은 서로 다른 environment(domain)으로 간주됨
- Domain generalization은 모든 environment에서 공통적으로 유지되는 invariant pattern을 학습하는 것을 목표로 함
- V-REx는 environment별 loss의 분산을 최소화하여 특정 domain에 과적합되는 것을 방지함

Operator compatibility study on DR data with various OOD contexts

Operators	Variants	Env1	Env2	Env3	Env4	Env5
FNO	Naive	6.78e-2	8.80e-2	6.70e-2	6.00e-2	3.14e-2
	+MOOE	3.40e-2	6.00e-2	3.88e-2	3.28e-2	1.88e-2
	+iMOOE	3.19e-2	5.20e-2	3.12e-2	3.05e-2	1.41e-2
Operators	**Variants**	**Env6**	**Env7**	**Env8**	**Mean**	**Std**
FNO	Naive	6.77e-2	7.47e-2	5.31e-2	5.75e-2	1.01e-2
	+MOOE	4.78e-2	6.60e-2	5.03e-2	4.96e-2	7.12e-3
	+iMOOE	3.47e-2	3.65e-2	5.09e-2	**4.34e-2**	**6.18e-3**

OOD forecasting results on irregular spatial domains

Operators	Variants	nMSE	RMSE
VCNeF	Naïve	5.45×10^{-2}	2.22×10^{-1}
	+iMOOE	$\mathbf{5.08 \times 10^{-2}}$	$\mathbf{1.98 \times 10^{-1}}$
Geo-FNO	Naïve	5.15×10^{-2}	2.16×10^{-1}
	+iMOOE	$\mathbf{4.35 \times 10^{-2}}$	$\mathbf{1.88 \times 10^{-1}}$
OFormer	Naïve	4.95×10^{-2}	2.04×10^{-1}
	+iMOOE	$\mathbf{4.14 \times 10^{-2}}$	$\mathbf{1.79 \times 10^{-1}}$

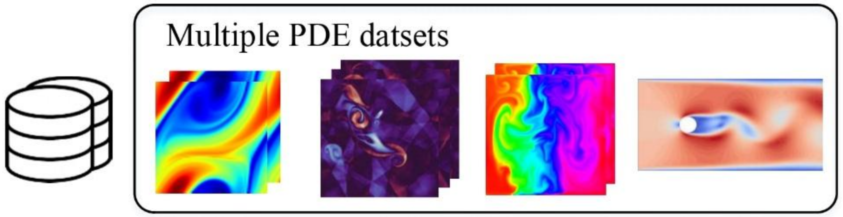
[6] Li, S., Chen, Y., Guo, Y., Huang, M., & Xiong, H. (2025). Towards Generalizable PDE Dynamics Forecasting via Physics-Guided Invariant Learning. arXiv preprint arXiv:2509.24332.

Surrogate Modeling

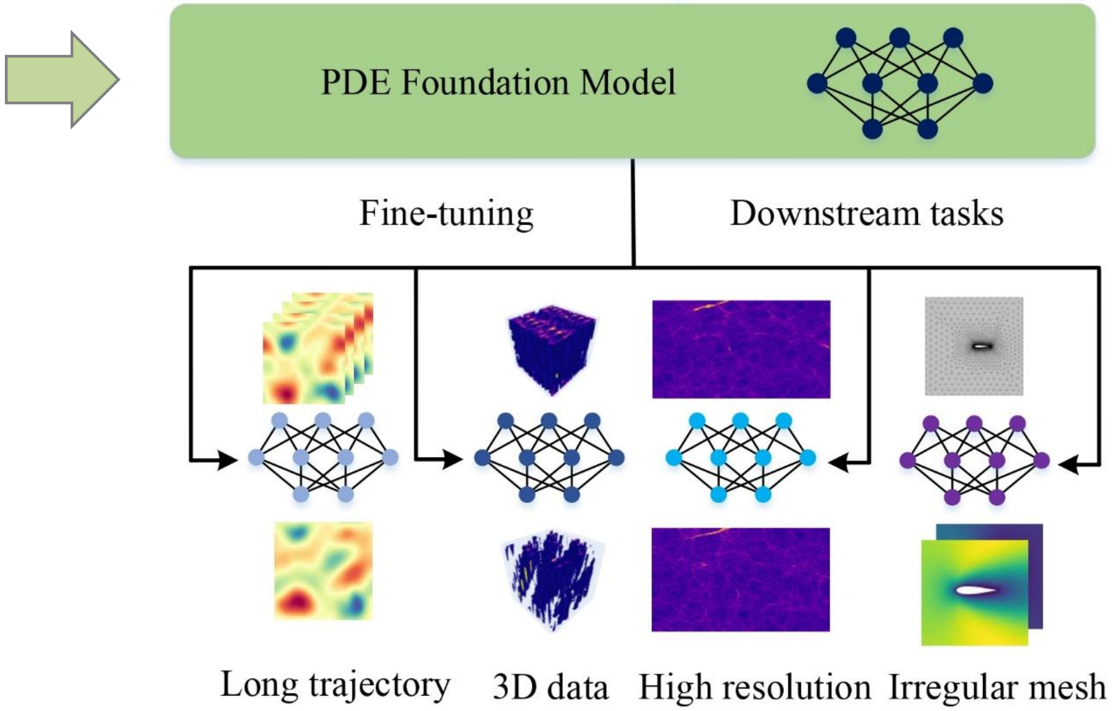
Model Architecture Design

❖ DPOT: Auto-Regressive Denoising Operator Transformer for Large-Scale PDE Pre-Training: ICML (2024, sites:132)

- 다양한 PDE 데이터를 통합하여 하나의 PDE foundation model을 대규모로 사전 학습함
- 사전학습된 모델은 fine-tuning을 통해 long trajectory, 3D data, high resolution, irregular mesh 등 다양한 downstream PDE 문제 적용



Navier–Stokes, Diffusion–Reaction,
Shallow-Water, Burgers etc.
10+ PDE datasets, 100K+ trajectories



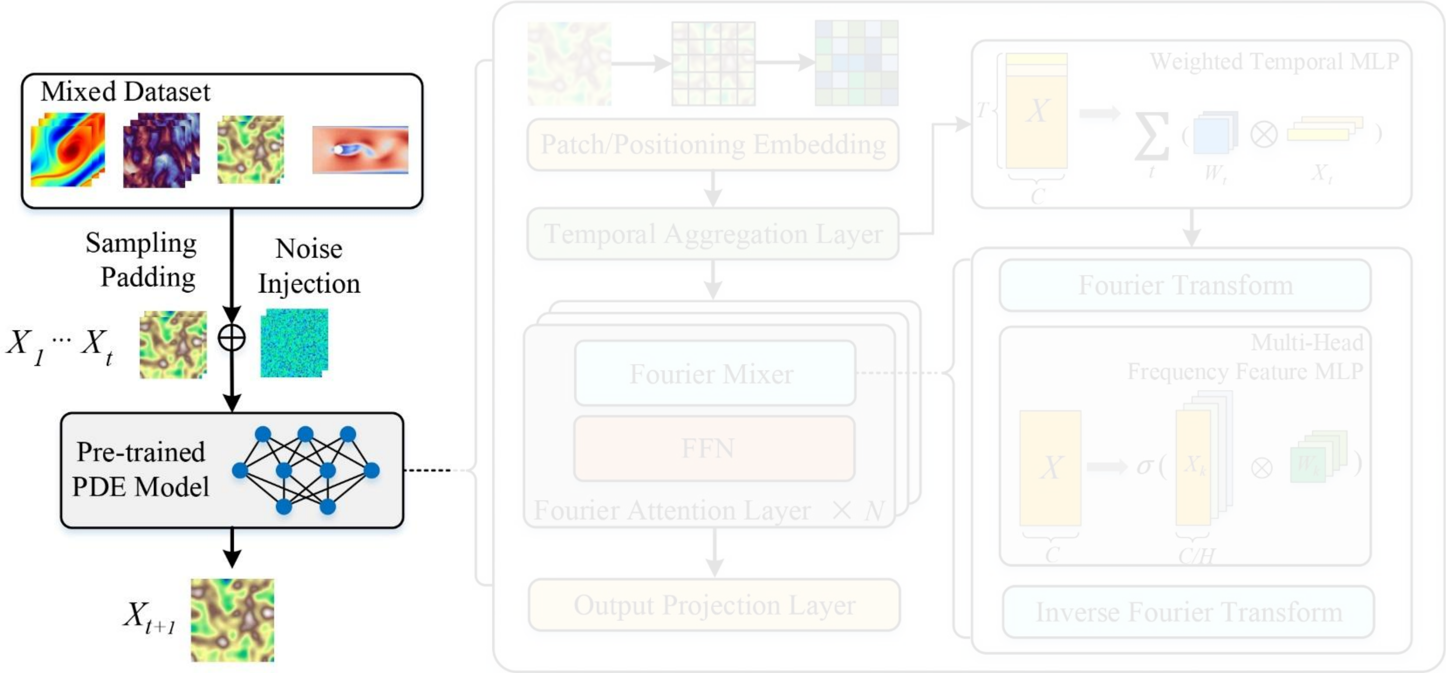
[7] Hao, Z., Su, C., Liu, S., Berner, J., Ying, C., Su, H., ... & Zhu, J. (2024). Dpot: Auto-regressive denoising operator transformer for large-scale pde pre-training. arXiv preprint arXiv:2403.03542.

Surrogate Modeling

Model Architecture Design

❖ DPOT: Auto-Regressive Denoising Operator Transformer for Large-Scale PDE Pre-Training

- Noise Injection and Denoising Training
  - 현재 상태 X_t에 Gaussian noise를 추가하여 corrupted input을 생성 이후, 모델은 noisy input으로부터 다음 시점 X_{t+1}을 예측함
  - 다양한 오차 상황을 학습하여 장기 rollout의 안정성을 향상함



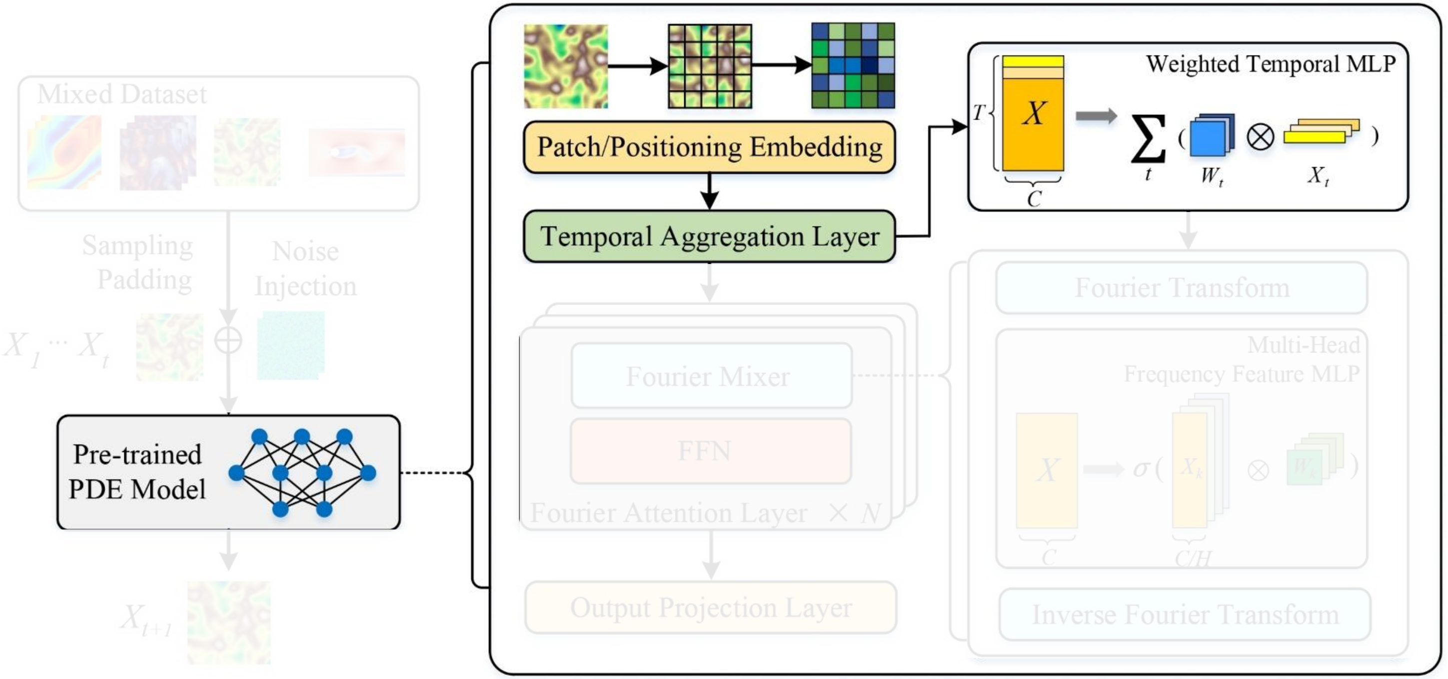
[7] Hao, Z., Su, C., Liu, S., Berner, J., Ying, C., Su, H., ... & Zhu, J. (2024). Dpot: Auto-regressive denoising operator transformer for large-scale pde pre-training. arXiv preprint arXiv:2403.03542.

Surrogate Modeling

Model Architecture Design

❖ DPOT: Auto-Regressive Denoising Operator Transformer for Large-Scale PDE Pre-Training

- Temporal Aggregation Layer
  - 입력 sequence의 각 time step을 patch embedding으로 변환함
  - 학습 가능한 weight를 이용해 시간 정보를 통합 → 더 중요한 시점에 더 큰 가중치



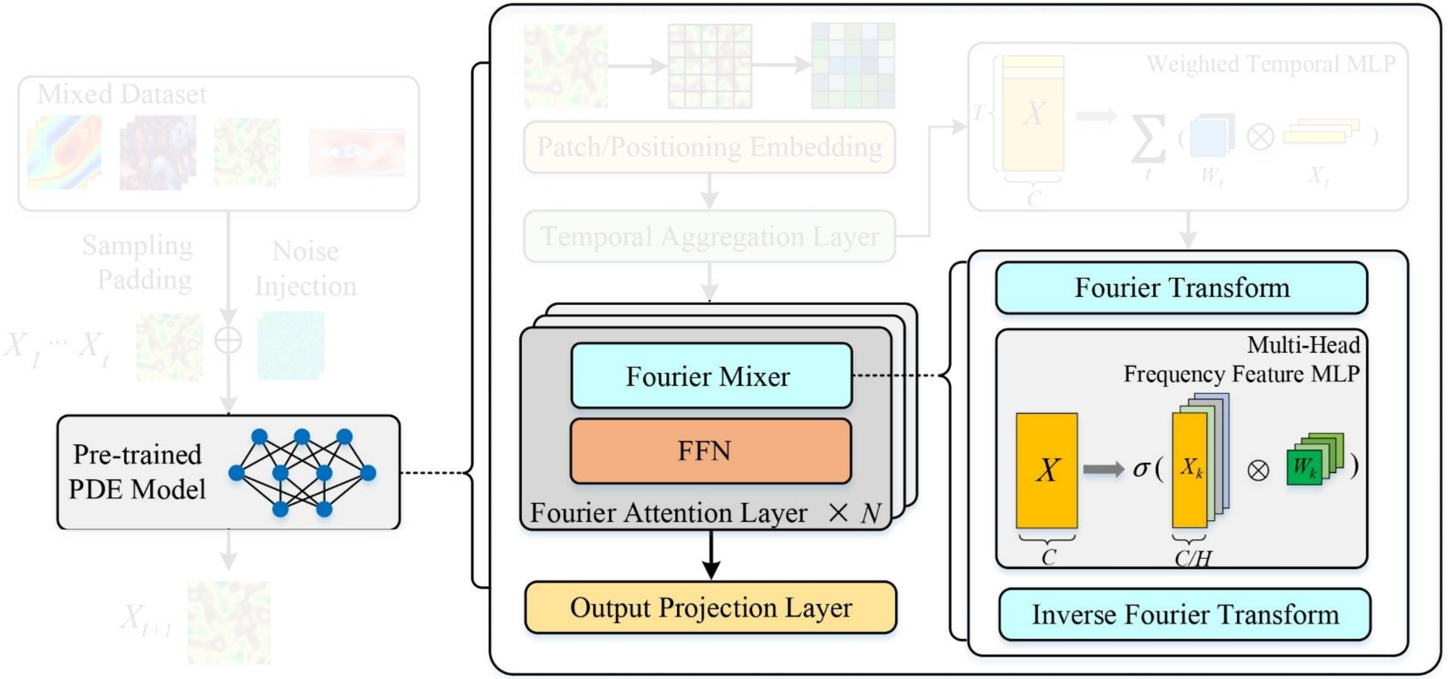
[7] Hao, Z., Su, C., Liu, S., Berner, J., Ying, C., Su, H., ... & Zhu, J. (2024). Dpot: Auto-regressive denoising operator transformer for large-scale pde pre-training. arXiv preprint arXiv:2403.03542.

Surrogate Modeling

Model Architecture Design

❖ DPOT: Auto-Regressive Denoising Operator Transformer for Large-Scale PDE Pre-Training

- Fourier Mixer / Fourier Attention
  - 주파수 변환을 통해 spatial field를 frequency domain으로 변환하고, 각 frequency band에 대해 learnable weighting multi-scale spatial pattern 학습
  - Inverse Fourier transform과 output projection을 통해 처리된 주파수 정보를 다시 공간 영역으로 변환하여 다음 PDE state를 생성함



[7] Hao, Z., Su, C., Liu, S., Berner, J., Ying, C., Su, H., ... & Zhu, J. (2024). Dpot: Auto-regressive denoising operator transformer for large-scale pde pre-training. arXiv preprint arXiv:2403.03542.

Conclusion

- Physics-based simulation은 높은 정확도를 제공하지만 반복 계산으로 인해 계산 비용이 매우 큼
- 이를 대체하기 위해 simulation 결과를 빠르게 근사하는 surrogate model 개념이 등장함

- 순수 data-driven surrogate model은 물리 법칙을 충분히 반영하지 못해 물리적으로 일관되지 않은 결과를 생성할 수 있음
- PINN은 PDE residual, 초기조건, 경계조건을 loss에 직접 반영하여 물리 법칙을 만족하도록 학습함
- PGNN은 물리 모델과 데이터를 보다 유연하게 결합하여, 불완전한 물리식이나 관측 노이즈가 존재하는 상황에도 적용 가능함

- 다양한 초기/경계조건, 물리 파라미터가 함께 작용하는 복잡한 시스템을 효율적으로 반영할 수 있는 보다 일반적인 모델이 필요함
- Neural operator는 다양한 조건에 대한 solution mapping을 학습하여 surrogate model을 구축함

- 최근에는 DoE, Foundation Models, Mixture of Experts, Reinforcement Learning과 결합되어 발전

Thank you