

“AI, 실험 대신 계산으로 고차원 물리 문제 해결”

GIST, 고차원 물리 문제도

안정적으로 푸는 AI 학습 기술 개발

세계 최고 권위의 AI 학회 ‘뉴립스(NeurlPS) 2025’

상위 3.5% 이내 ‘스포트라이트(Spotlight)’ 논문 선정

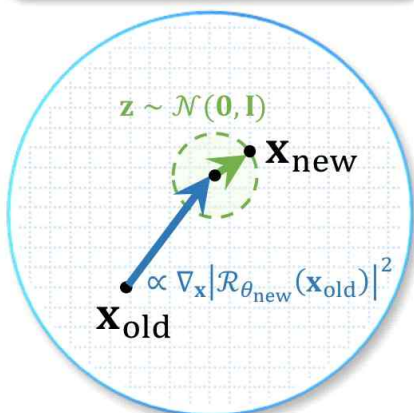
- 전기전자컴퓨터공학과 황의석 교수팀, 물리정보 신경망(PINN) 학습 불안정성 해결하는 ‘적응형 샘플링 프레임워크(LAS)’ 개발... AI가 오차가 큰 영역과 복잡한 구간 탐색하며 학습 효율과 안정성 높여
- 1~8차원 고차원 편미분방정식 문제에서 기존 기법 대비 정확성과 안정성 확보... 유체 역학, 열전달, 교통·전력망 등 다양한 공학 분야 적용 가능, 산업계 시뮬레이션 비용 절감에도 기여 기대



▲ (왼쪽부터) 전기전자컴퓨터공학과 황의석 교수, 서기업 박사과정 학생, 정민석 석사 졸업생

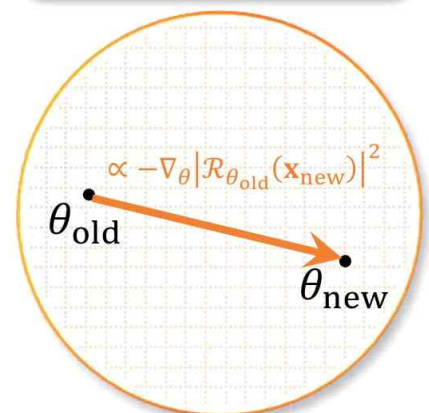
광주과학기술원(GIST, 총장 임기철)은 전기전자컴퓨터공학과 황의석 교수 연구팀이 편미분방정식(PDE)*을 푸는 물리정보 신경망(PINN)* 학습에서 발생하는 불안정성을 해결할 새로운 적응형 샘플링 기법을 개발했다고 밝혔다.

Langevin Dynamics in
PDE Domain Ω



$$\begin{aligned} & \nabla_{\theta} |\mathcal{R}_{\cdot}(\mathbf{x}_{\text{new}})|^2 \\ & \cdots \longrightarrow \\ & \longleftarrow \cdots \\ & \nabla_{\mathbf{x}} |\mathcal{R}_{\theta_{\text{new}}}(\cdot)|^2 \end{aligned}$$

Gradient Descent in
Parameter Space Θ



▲ **LAS 프레임워크 구조**: (그림 왼쪽에서 오른쪽 순서로 설명) 하나의 축에서는 Langevin dynamics 기반으로 collocation points가 업데이트되며, 다른 축에서는 gradient descent 방식으로 신경망의 파라미터가 학습된다.

이번 연구 성과는 기존 방식보다 정확도와 안정성은 높이고 계산 비용은 줄인 것이 특징으로, 다양한 과학·공학 문제에 폭넓게 활용될 것으로 기대된다.

* **편미분방정식(Partial Differential Equation, PDE)**: 여러 변수로 이루어진 함수와 그 변수들의 변화율(미분)을 함께 포함한 방정식으로, 시간과 공간에 따라 변하는 온도, 압력, 유체 흐름, 전자기장 등 다양한 물리 현상을 수학적으로 표현한다.

* **물리정보 신경망(Physics-Informed Neural Network, PINN)**: 딥러닝 신경망에 물리 법칙을 직접 반영하여 학습하는 기법이다. 단순히 데이터를 학습하는 데 그치지 않고, 미분방정식으로 표현되는 초기 조건·경계 조건·물리 제약을 손실 함수에 포함시켜 해를 구한다.

물리정보 신경망은 물리 법칙을 신경망 학습 과정에 직접 반영하여, 기존의 수치해석법(유한차분법, 유한요소법* 등)에 비해 데이터 수집 비용을 줄이고 계산 효율성을 높이는 차세대 해석 방법으로 주목받고 있다.

그러나 기존의 잔차(오차)* 기반 샘플링 기법은, 학습 과정에서 편미분방정식의 일부 구간에서 오차가 커지면 그 부분에만 집중해 학습이 편향되는 문제가 있었다. 이로 인해 학습이 불안정해지고, 학습 속도(학습률)를 조금만 바꿔도 결과가 크게 달라지는 한계가 있다.

* **유한차분법(Finite Difference Method, FDM), 유한요소법(Finite Element Method, FEM)**: 모두 편미분방정식(PDE)이나 연속체 문제(연속적인 공간과 시간에서 정의되는 물리량으로 모델링)를 수치적으로 해결하는 대표적 방법이다.

* **잔차(residual)**: 예측한 값과 실제로 만족해야 하는 조건 사이의 차이를 의미한다. 예를 들어 물리정보 신경망(PINN)에서 편미분방정식을 풀 때, 신경망이 내놓은 해를 방정식에 대입하면 완벽히 성립하지 않고 오차가 발생하는데, 이 오차가 바로 잔차다. 잔차가 클수록 방정식을 잘 만족하지 못한다는 뜻이므로, 학습 과정에서는 잔차를 줄이는 방향으로 신경망을 최적화하게 된다.

연구팀은 이러한 문제를 해결하기 위해 ‘랑주뱅 동역학(Langevin dynamics, LD)’을 기반으로 한 새로운 ‘적응형 샘플링 프레임워크(Langevin Adaptive Sampling, LAS)’를 제안했다.

‘랑주뱅 동역학’은 원래 물리학·통계역학에서 입자의 무작위적 움직임(브라운 운동)을 설명하는 수학적 모델로, 입자가 단순히 무작위로 움직이는 것이 아니라 에너지 지형과 확률적 요인이 결합된 방식으로 움직이는 특징이 있다.

연구팀은 이 원리를 학습 과정에 적용해, 인공지능(AI)이 오차가 큰 영역이나 복잡한 경계 조건이 있는 구간을 스스로 더 자주 탐색하도록 유도했다. 즉, AI가 무작위 산책을 하듯 여러 구간을 탐색하면서도, 오차가 크거나 중요한 부분을 더 자주 들여다보며 스스로 학습 효율을 높이는 것이다.

‘적응형 샘플링 프레임워크(LAS)’의 핵심은 잔차 기반 확률 분포를 직접 추정하는 대신, 잔차의 변화 방향(기울기) 정보에 잡음(일정한 확률적 요인)을 주입하여 샘플링 과정을 동적으로 조정하는 것이다. 이를 통해 AI가 오차가 급격히 변하는 ‘날카로운’ 잔차 영역*보다 ‘완만한(flat)’ 영역을 선호하게 만들어, 학습 안정성을 크게 높였다.

그 결과, LAS는 다양한 학습 속도나 모델 구조가 달라져도 성능을 일관되게 유지했으며, 고차원 편미분방정식 문제에서도 기존 방법보다 더 안정적으로 끝까지 해답을 찾아가는 모습을 보였다.

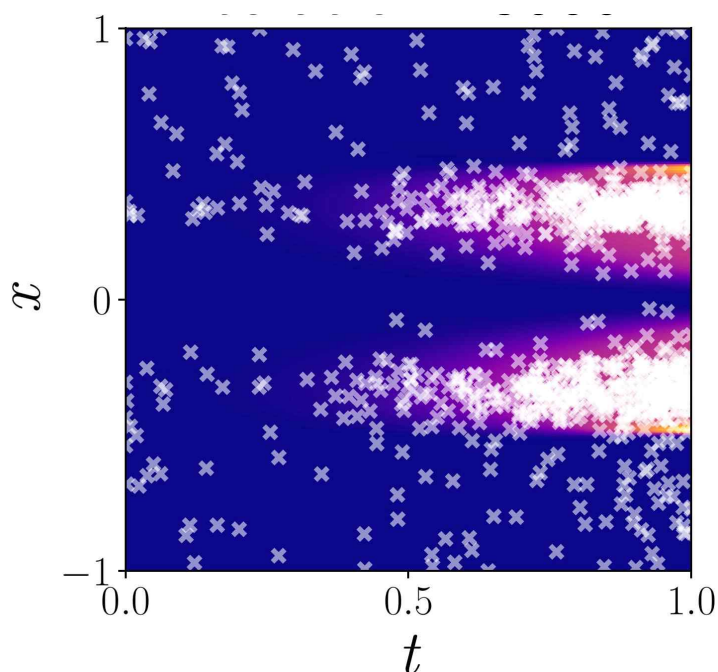
* 날카로운(high curvature) 잔차 영역: 모델이 예측한 값과 실제 관측값 사이의 오차, 즉 잔차가 공간적으로 급격히 변화하는 영역을 말한다.

연구팀은 여러 실험을 통해 LAS의 높은 성능도 입증했다.

파동이나 화학 반응 등 1차원 편미분방정식 문제에서는 기존 방법보다 오차가 훨씬 작고, 학습 과정에서 결과가 일정하게 안정적으로 수렴했다.

더 복잡한 4~8차원 열전달 방정식 문제에서는 기존 기법들이 불안정해 제대로 학습하지 못한 반면, LAS만이 유일하게 안정적으로 답을 찾아냈다.

또한 신경망 구조를 복잡하게 만들거나 학습 속도를 빠르게 조정한 상황에서도 기존 기법은 불안정해졌지만, LAS는 넓은 조건에서도 안정성과 정확성을 유지했다. 계산 효율성도 우수해, 기존 방법과 비슷한 비용으로 더 빠르고 정확한 결과를 냈다.



▲ LAS 샘플링 점과 해 오차: 위 그림은 1차원 Allen-Cahn PDE의 해 오차(배경색)와 LAS를 통해 샘플링된 collocation points(흰색 마커)를 보여준다. 그림에서 알 수 있듯이, collocation points는 오차가 큰 영역에 더 집중적으로 배치되어, 모델이 어려운 영역을 효율적으로 학습하도록 돕는다.

※ 배경색 : (파랑→보라→분홍→노랑 순으로 높은 잔차에서 낮은 잔차를 나타냄)

이번 연구 성과는 물리정보 신경망의 활용 범위를 크게 넓힐 것으로 기대된다. 복잡한 다차원 물리 현상을 안정적으로 재현할 수 있어 유체 역학, 열전달, 재료 시뮬레이션, 교통·전력망 해석 등 다양한 공학 분야에서 활용 가능성이 크다. 특히 기존 수치해석법보다 계산 효율이 높고 데이터 활용도도 뛰어나, 산업계에서 시뮬레이션 비용을 줄이는 데에도 도움이 될 전망이다.

황의석 교수는 “이번 연구는 복잡한 모델에서도 안정적인 학습을 가능하게 하면서도 계산 비용을 줄일 수 있는 방법을 제시했다”며, “제조·공정, 에너지·발전, 환경·기후 등 고차원 편미분방정식에서 정확한 값에 가까운 계산 결과가 필요한 산업 전반에서 신뢰성 높은 AI 해법을 제공할 수 있을 것”이라고 말했다.

GIST 전기전자컴퓨터공학과 황의석 교수가 지도하고 서기업 박사과정생과 정민석 석사 졸업생이 수행한 이번 연구는 한국연구재단 중견연구자지원사업과 기초연구실지원사업의 지원을 받았다.

연구 결과는 AI 분야 세계 최고 권위의 학술대회인 ‘뉴립스(NeurlPS, Conference on Neural Information Processing Systems)’에 제출된 전체 논문 중 상위 약 3.5% 이내에 해당하는 ‘스포트라이트(Spotlight)’ 논문으로 선정됐다.

논문은 9월 18일 게재 승인을 받았으며, 오는 12월 2일부터 7일까지 미국 샌디에이고에서 열리는 ‘NeurIPS 2025’에서 발표될 예정이다.

한편 GIST는 이번 연구 성과가 학술적 의의와 함께 산업적 응용 가능성까지 고려한 것으로, 기술이전 관련 협의는 기술사업화센터(hgmoon@gist.ac.kr)를 통해 진행할 수 있다고 밝혔다.

논문의 주요 정보

1. 논문명, 저자정보

- 저널명 : Neurips 2025 (인공지능 최우수학술대회, h5-index: 371)
- 논문명 : Mitigating Instability in High Residual Adaptive Sampling for PINNs via Langevin Dynamics
- 저자 정보 : 서기업 (공동 제1저자, GIST 박사과정), 정민석 (공동 제1저자, GIST 석사 졸업), 황의석 (교신저자, GIST 전기전자컴퓨터공학과 교수)