

Konvergenz von numerischer Simulation und maschinellem Lernen

Beschreibung Maschinelle Lernverfahren, wie beispielsweise neuronale Netze, werden oft eingesetzt, wenn es um schnelle Entscheidungen geht. Dabei sind Fehlentscheidungen bis zu einem bestimmten Grad akzeptiert und eingeplant, obwohl diese potentiell auch katastrophal sein können, weil Fehlergrenzen kaum beweisbar eingehalten werden können.

Ganz anders verhalten sich numerische Simulationen auf Basis mathematischer Modelle. Hier wird zwar auch ein gewisses Maß an Approximationsfehlern in Kauf genommen, diese sind aber genau beherrschbar und steuerbar. Im Gegenzug benötigen solche Simulationen oft hohe Rechenleistungen und viel Zeit zur Fertigstellung.

Dieses Projektes versucht die Vorteile beider Methoden zu kombinieren und dabei die Nachteile möglichst beherrschbar zu halten. Daraus ergeben sich interessante Fragestellungen wie beispielsweise **Lassen sich Lernverfahren nutzen, um Ergebnisse numerischer Simulationen vorherzusagen?** Dies kann dann sinnvoll sein, wenn die Modellparameter nicht von Beginn an vollständig klar sind, aber die notwendigen Ressourcen (Zeit, Geld, Rechenleistung, ...) nicht vorhanden sind, um mehrere Simulationen zu erstellen. Das Lernverfahren soll dann eine grobe Vorhersage treffen, wie sich die Simulation mit bestimmten Parametern verhalten könnte, um so den idealen Parametersatz für die fertige Simulation zu bestimmen. Auf welcher Basis das Lernverfahren seine Vorhersage trifft, ist dabei völlig offen. Beispielsweise können die bereits feststehenden Modellparameter genutzt werden, aber auch Bilddaten, die aus ersten Simulationsschritten heraus erzeugt wurden.

Eine weitere Fragestellung könnte formuliert werden durch **Lassen sich numerische Methoden nutzen, um Lehrverfahren effizienter oder genauer zu gestalten?** Kann man beispielsweise Layer eines neuronalen Netzes durch mathematische Funktionen ersetzen, die schneller oder aber auch genauer auszuwerten sind? Dies kann zu völlig neuen Ansätzen für die Konstruktion solcher Lernverfahren führen, die mit Eigenschaften wie erhöhter Zuverlässigkeit oder auch justierbarer Genauigkeit ausgestattet werden können.

Projektdetails Im Rahmen des Projektes kann auf die fertigen Beispielsimulationen von HiFlow³, eine Bibliothek zum Lösen partieller Differentialgleichungen auf Basis der Finiten Elemente, zugegriffen werden, um die nötigen Lern- und Testdaten zu erzeugen. Da diese Bibliothek sehr modular verwendbar ist, kann die Richtung der genauen Aufgabenstellung sehr frei bestimmt werden. Ein tiefes Einarbeiten in die Methode der Finiten Elemente kann ebenso forciert werden, wie eine Fokussierung auf Bildauswertung mittels maschineller Lernverfahren. Zentrale mathematische Kenntnisse im Bereich der Modellbildung werden im Rahmen des Projektes durch den Projektbetreuer vermittelt und sind daher nicht Voraussetzung zur Teilnahme.

Je nach Ausrichtung des Themas kann die verwendete Hardware ebenfalls frei bestimmt werden, beginnend mit klassischen CPU- und GPU-Architekturen

aber auch FPGAs oder modernen Testsystemen, wie beispielsweise der Intel HARP-Architektur. In bestimmten Fällen ist die Architektur jedoch durch die Themenausrichtung festgelegt.

Voraussetzungen Folgende Qualifikationen werden vorausgesetzt:

- Programmierkenntnisse in einer objektorientierten Programmiersprache

Willkommene Zusatzqualifikationen:

- Erste Erfahrungen in der Parallelisierung (Beispielsweise mit OpenMP, MPI, Cuda oder OpenCL)
- Vorkenntnisse in den Bereichen Maschinelles Lernen und Numerik

Kontakt Arbeitsgruppe: ITEC / CAPP / Prof. Karl
Ansprechpartner: Markus Hoffmann, Technologiefabrik B314.1,
markus.hoffmann@kit.edu