

Weiterentwicklung robuster Machine-Learning-Optimierer zum autonomen Design von Mikrostrukturen

Angebot für eine Projekt- oder Diplomarbeit

Für die simulations- und datenbasierte Beschleunigung der Materialentwicklung werden am IFKM Algorithmen entwickelt, welche Innovationen durch Materialien mit bestimmten Eigenschaften ermöglichen, indem der Zusammenhang zwischen der Mikrostruktur und den makroskopischen Eigenschaften des Materials autonom erkundet wird. Dazu werden Mikrostrukturen auf Graphikkarten auf dem Hochleistungsrechner synthetisch erzeugt und die interessierenden Eigenschaften numerisch simuliert. Die Mikrostrukturenrekonstruktion ist im hauseigenen Code als gradientenbasiertes Optimierungsproblem gelöst. Die Wahl des Optimierers ist also essenziell für die Geschwindigkeit des Algorithmus und somit für den Erfolg des gesamten datengetriebenen Frameworks.

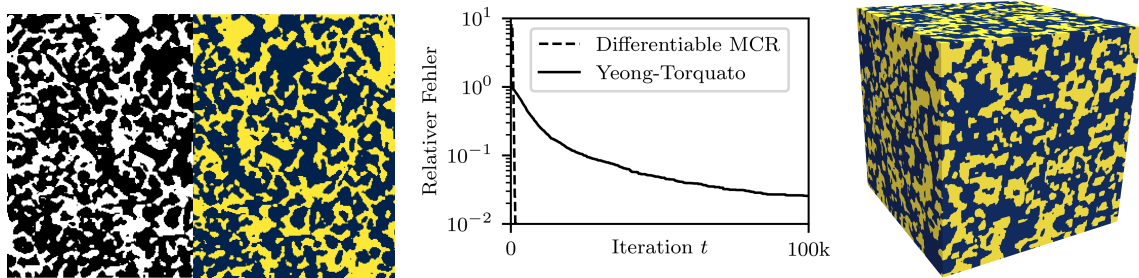


Abbildung 1: Illustrationen zur Rekonstruktion. Links: Ursprüngliche (schwarz-weiß) und rekonstruierte (blau-gelb) Mikrostruktur; Mitte: Geschwindigkeitsvergleich verschiedener Rekonstruktionsalgorithmen; Rechts: Erste Ergebnisse in 3D.

Klassische Quasinewtonverfahren wie L-BFGS-B konvergieren schnell, sind aber nicht robust genug für die Rekonstruktion einiger Mikrostrukturen. Auch das Trainieren neuronaler Netzwerke ist ein veräusertes Optimierungsproblem, wodurch Verfahren wie der ADAM-Optimierer entstanden sind. Diese Verfahren sind sehr robust, aber konvergieren langsamer. Daher wurden verschiedene robuste Varianten klassischer Quasinewtonverfahren entwickelt, die im Rahmen dieser Arbeit für die Mikrostrukturenrekonstruktion anzupassen und anzuwenden sind. Dazu sind folgende Aufgaben zu bearbeiten:

- Einarbeitung in die Mikrostrukturenrekonstruktion und gradientenbasierte Optimierung,
- Auswahl und Implementierung eines robusten Quasinewtonverfahrens auf Basis der Literatur zu Optimierern für das Maschinelle Lernen,
- Anpassung des Optimierers an bekannte Variationen der Kostenfunktion,
- systematischer Vergleich und Analyse bereits implementierter Optimierer zur Rekonstruktion mit der neuen Variante, sowie
- sorgfältige Dokumentation der Ergebnisse.

Voraussetzungen:

- Kenntnisse in der Programmierung
- schnelles Verständnis mathematischer Zusammenhänge

Ansprechpartner:

Dipl.-Ing. Paul Seibert
Zeunerbau Raum 350
Telefon: 0351/463-34388
Paul.Seibert@tu-dresden.de

Dr.-Ing. Marreddy Ambati
Zeunerbau Raum 350
Telefon: 0351/463-34388
Marreddy.Ambati@tu-dresden.de