

DLR-IB-AS-BS-2024-154

**Abschlussbericht Projektgruppe:
Maschinelles Lernen und
Quantencomputing –
Digitalisierung der
Luftfahrzeugentwicklung 2.0**

Forschungsbericht

Autor
Stefan Langer



DLR

**Deutsches Zentrum
für Luft- und Raumfahrt**

DLR-IB-AS-BS-2024-154

**Maschinelles Lernen und Quantencomputing –
Digitalisierung der Luftfahrzeugentwicklung 2.0**

Stefan Langer

Herausgeber:

Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V.
Institut für Aerodynamik und Strömungstechnik
Lilienthalplatz 7, 38108 Braunschweig

ISSN 1614-7790

Stufe der Zugänglichkeit: 1
Braunschweig, im September 2024

Institutsdirektor:
Prof. Dr.-Ing. Kai Richter

Verfasser:
Stefan Langer

Abteilung: Center of Computer Applications in
Aerospace Science and Engineering

Abteilungsleiter:
Prof. Dr. S. Görtz

Der Bericht enthält:

18 Seiten
8 Bilder
0 Tabellen
5 Literaturstellen

Dokumenteigenschaften

Titel	Abschlussbericht der Projektgruppe Maschinelles Lernen und Quantencomputing – Digitalisierung der Luftfahrzeugentwicklung 2.0
Betreff	Darstellung der Ergebnisse für DLR Bereichsvorstand Luftfahrt
Institut	Institut für Aerodynamik und Strömungstechnik
Erstellt von	Stefan Langer
Geprüft von	Prof. Dr. Stefan Görtz
Freigabe von	Prof. Dr. Stefan Görtz
Datum	16.08.2024
Version	1.0

Dokumenteigenschaften	5
1. Beteiligte Institute	7
2. Motivation, Darstellung der Themen	8
3. Weitere Aktivitäten der Projektgruppe	14
4. Abschluss und zukünftige Aktivitäten	16

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1 Schematische Darstellung des Lösens einer partiellen Differentialgleichung mit einem PINN	9
Abbildung 2 Darstellung der Simulation der Umströmung eines Ellipsoids mit Hilfe eines PINNs und Vergleich mit einem Finite Volumen Verfahren.....	10
Abbildung 3 Darstellung des Trainings und des Anwendens einer Grobgitterkorrektur.....	11
Abbildung 4 Korrektur eine Grobgitterlösung	11
Abbildung 5 Schematische Gegenüberstellung eines PINN und eines PIQC Algorithmus	12
Abbildung 6 Beispiele von Differentialgleichungen, die mit einem PIQC gelöst wurden	13
Abbildung 7 Lösungen für die Beispiele aus Abbildung 6 und Vergleich mit einer Lösung aus einem PINN	13
Abbildung 8 Zeitliche Entwicklung der DLR geförderten Projekte für die Nutzbarmachung von Quantencomputer im Bereich der CFD	16

1. Beteiligte Institute

Projektgruppenleiter:

Name: PD Dr. habil. Stefan Langer
Adresse: Lilienthalplatz 7, 38108 Braunschweig
E-Mail: stefan.langer@dlr.de

Name der DLR Einrichtung: Institut für Aerodynamik und Strömungstechnik
Einrichtungsleiter: Prof. Dr.-Ing. Kai Richter
Adresse: Lilienthalplatz 7, 38108 Braunschweig
E-Mail: kai.richter@dlr.de

Organisationseinheit: Center for Computer Applications in Aerospace Science and Engineering
Abteilungsleiter: Prof. Dr. Stefan Görtz
Adresse: Lilienthalplatz 7, 38108 Braunschweig
E-Mail: stefan.goertz@dlr.de

Liste weiterer beteiligter Einrichtungen:

Name der DLR Einrichtung: Institut für Softwaretechnologie
Einrichtungsleiter: Prof. Dr. Michael Felderer
Adresse: Linder Höhe, 51447 Köln
E-Mail: Michael.Felderer@dlr.de

Name der DLR Einrichtung: Institut für Softwaremethoden zur Produkt-Virtualisierung
Einrichtungsleiter: Prof. Dr. Sabine Roller
Adresse: Zwickauer Straße 46, 01069 Dresden
E-Mail: sabine.roller@dlr.de

2. Motivation, Darstellung der Themen

Das virtuelle Produkt hat im DLR eine zentrale und wichtige Bedeutung im übergeordneten Kontext der Digitalisierung der Luftfahrt. Es zielt darauf ab, Luftfahrzeuge umfassend im Computer zu simulieren und zu entwerfen. Zur Umsetzung bedarf es einer fortdauernden Weiterentwicklung moderner Methoden und Algorithmen, die auch das Potential aufweisen, auf Hardware der Zukunft (z.B. Quantencomputer) effizient umgesetzt werden zu können.

Im Rahmen der vom DLR-Institut für Aerodynamik und Strömungstechnik geleiteten DLR-Projektgruppe „Maschinelles Lernen und Quantencomputing – Digitalisierung der Luftfahrzeugentwicklung 2.0“ wurde untersucht, ob und wie mit Hilfe von innovativen Methoden aus dem Bereich des maschinellen Lernens aerodynamische Simulationen durchgeführt und verbessert und wie diese Verfahren auch auf Quantencomputern umgesetzt werden können.

Innerhalb der Projektgruppe wurden unter anderem neuartige Simulationsalgorithmen basierend auf neuronalen Netzen entwickelt und auf kompressible, strömungsmechanische Probleme angewendet. Diese so genannten Physik-kennenden neuronalen Netze (engl. physics-informed neural networks, PINNs) lassen sich mit gewissen Anpassungen auf GPUs und perspektivisch auch auf Quantencomputer übertragen. Im Gegensatz zu etablierten finite-Volumen Verfahren, bei denen im Allgemeinen nur eine gegebene, spezielle Simulation durchgeführt werden kann, eröffnet diese neuartige Vorgehensweise die Möglichkeit, verschiedene Parameter wie Objektform oder Strömungsbedingungen als Variablen in die Simulation zu integrieren. Nachdem ein neuronales Netz antrainiert wurde, lassen sich so sehr viele verschiedene Simulationsergebnisse unter Variation der Parameter effizient erzeugen. Bisher wurde parametrische PINNs zur Lösung der kompressiblen Eulergleichungen für die Strömung um Ellipsen und 2D Profile erfolgreich demonstriert.

Ferner wurde im Rahmen der Projektgruppe untersucht, auf welche Weise insbesondere die oben genannten PINN Ansätze genutzt werden können, um diese perspektivisch auch auf Quantencomputern umsetzen zu können. Analog zu PINNs wurden hierzu sog. Physics-Informed Quantum Circuits (PIQCs) entwickelt und Quantensimulatoren genutzt, um das Lösen von Differentialgleichungen unter dem Einsatz von PIQCs zu simulieren. Hierbei konnten erste Erkenntnisse z.B. über die Anzahl benötigter Qubits und die Genauigkeit solcher Verfahren gewonnen werden.

Ein weiteres Forschungsgebiet der Projektgruppe befasste sich mit der Fragestellung, wie maschinelles Lernen genutzt werden kann, um die Auflösung von relativ ungenauen Simulationsergebnissen, die auf groben Diskretisierungen beruhen, zu verbessern. Ergebnisse, die im Rahmen der Projektgruppe erzielt werden konnten, zeigen, dass Verfahren aus der Bildbearbeitung genutzt und so weiterentwickelt werden können, dass mit Hilfe neuronaler Netze Korrekturen von Strömungssimulationen möglich sind. Da grobe Diskretisierungen auf einer

signifikanten Reduktion der Freiheitsgrade einer Simulation beruhen, kann perspektivisch dadurch die Effizienz von sehr zeitaufwändigen Simulationen verbessert werden.

2.1 Ergebnisse: Maschinelles Lernen zum Lösen partieller Differentialgleichungen

In den vergangenen fünfzehn bis zwanzig Jahren wurde Deep Learning mit künstlichen neuronalen Netzwerken (KNN) in verschiedenen Anwendungen sehr effektiv eingesetzt. Trotz dieses bemerkenswerten Erfolgs ist diese Herangehensweise im Bereich des wissenschaftlichen Rechnens und speziell in der Aerodynamik und Luftfahrt auch heute noch nicht sehr verbreitet. In jüngerer Zeit wurden mit dieser Strategie jedoch erfolgreich partielle Differentialgleichungen gelöst, sowohl durch deren Darstellung in differentieller Form als auch in Integralform. Für diese Anwendung hat sich Deep Learning unter dem Namen Scientific Machine Learning (SciML) etabliert.

Grundlegende Idee der Verfahren ist es, traditionelle numerische Diskretisierungsmethoden durch ein künstliches neuronales Netzwerk zu ersetzen, mit dessen Hilfe eine Lösung einer partiellen Differentialgleichung approximiert werden kann.

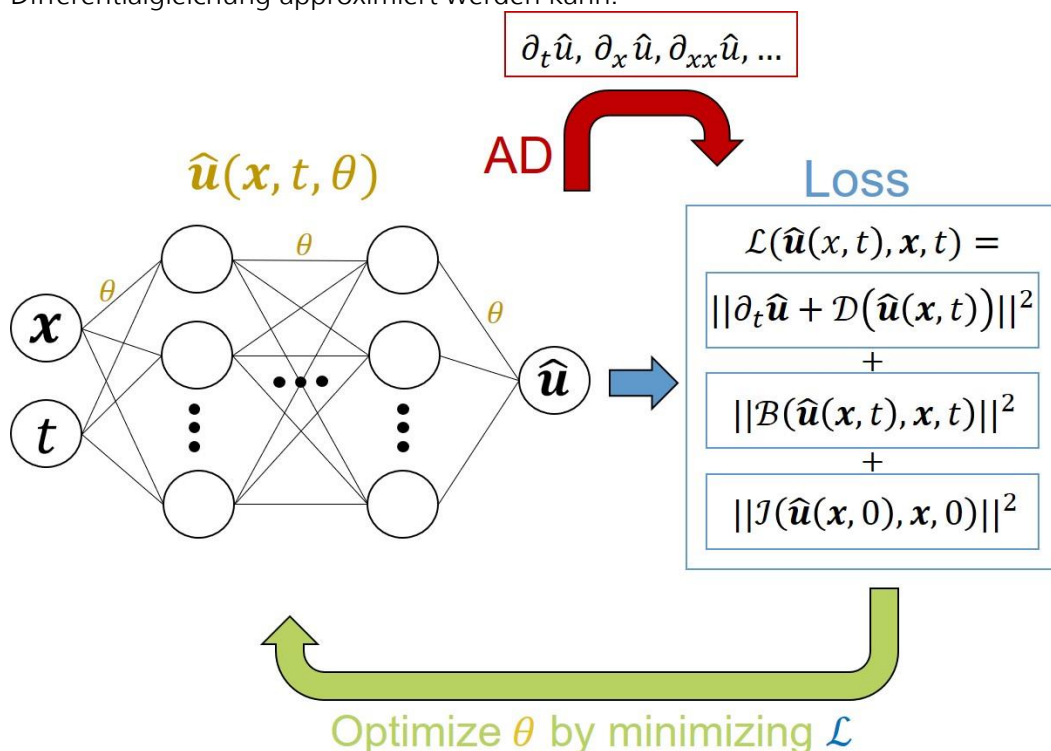


Abbildung 1 Schematische Darstellung des Lösen einer partiellen Differentialgleichung mit einem PINN

Um eine Approximation an eine Lösung durch Deep Learning zu bestimmen, ist das neuronale Netzwerk so zu konstruieren, dass es eine auf die partielle Differentialgleichung bezogene Zielfunktion minimiert. Dieses ist in Abbildung 1 schematisch dargestellt. Die partielle Differentialgleichung, die das physikalische Modell repräsentiert, wird in ein Loss-Funktional umformuliert, welches minimiert wird. Dadurch erhält man ein neuronales Netz dessen Auswertung eine Lösung des physikalischen Modell repräsentiert. Für die Umsetzung können Gradienten und Ableitungen mit Hilfe von automatischer Differentiation (AD) bestimmt werden.

Im Rahmen der Projektgruppe wurden verschiedene Ansätze untersucht. Approximative Lösungen basierend auf diesen Methoden wurden mit solchen aus klassischen Verfahren wie Finite-Differenzen-Methode oder Finite-Elemente-Methode verglichen, mit vielversprechenden Resultaten. Exemplarisch ist in Abbildung 2 ein Vergleich der Ergebnisse einmal erzeugt mit dem neu entwickelten parametrischen PINN-Ansatz und einem finite-Volumen Verfahren dargestellt.

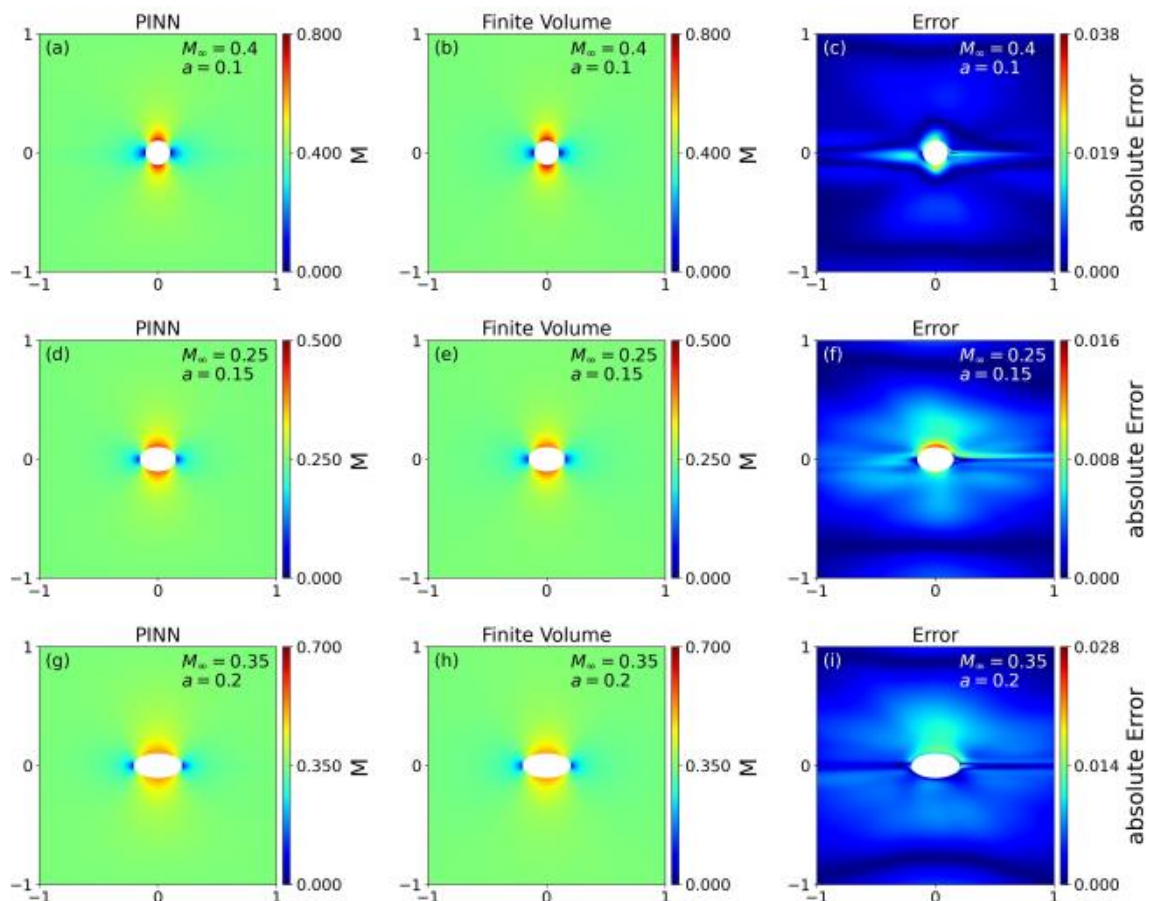


Abbildung 2 Darstellung der Simulation der Umströmung eines Ellipsoids mit Hilfe eines PINNs und Vergleich mit einem Finite Volumen Verfahren

Zukünftige Arbeiten in diesem Bereich sollen die PINN Verfahren auf viskose Strömungen bei hohen Reynoldszahlen erweitern.

2.2 Ergebnisse: Korrektur von groben Diskretisierungen mit Methoden des maschinellen Lernens

In diesen Arbeiten wurde untersucht, inwiefern Methoden des maschinellen Lernens genutzt werden können, um Lösungen, die aus groben Diskretisierungen und daher günstigen Verfahren resultieren, im Nachhinein durch ein antrainiertes Modell zu verbessern.

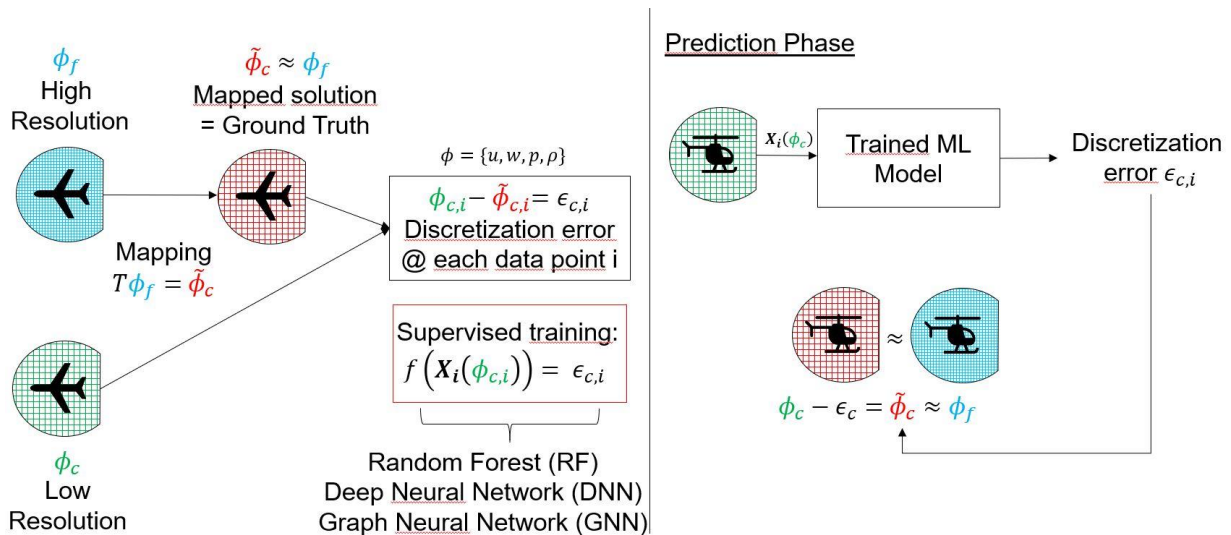


Abbildung 3 Darstellung des Trainings und des Anwendens einer Grobgitterkorrektur

Schematisch ist dieses in Abbildung 3 dargestellt. Die linke Seite stellt die Trainingsphase dar, bei der für verschiedene Konfigurationen eine Vorschrift erlernt wird, um Grobgitterdaten so zu modifizieren, dass diese nahe an Daten kommen, die eigentlich aus Feingitterrechnungen resultieren. Dieses erlernte Modell kann nun genutzt werden, um in der Vorhersagephase - dargestellt in Abbildung 3 auf der rechten Seite - auf Testfälle angewendet zu werden, die bisher nicht in den Trainingsdaten enthalten waren.

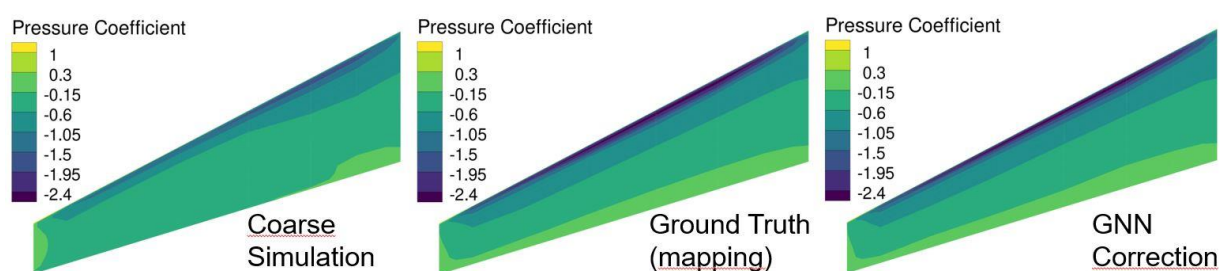


Abbildung 4 Korrektur eine Grobgitterlösung

Eine Anwendung der Methodik ist in Abbildung 4 gegeben. Hier wurde eine Grobgitterlösung erzeugt, und diese Lösung wurde mit Hilfe einer vorher erlernten Abbildung so korrigiert, dass diese möglichst die Eigenschaften einer Feingitterlösung wiedergibt. Wie der Vergleich zwischen

einer Referenzlösung (Ground Truth, Abbildung 4 mitte) und der korrigierten Grobgitterlösung (GNN Correction, Abbildung 4 rechts) zeigt, konnte diese Technik in ersten Beispielen erfolgreich eingesetzt werden.

Da die Simulation kompressibler Strömungen bei sehr hohen Reynoldszahlen für Luftfahrzeuge auch in Zukunft eine rechenintensive Aufgabe darstellen wird, verspricht diese Herangehensweise bei Weiterentwicklung der Technik eine interessante Alternative zu sein, um Rechenzeiten zu verringern.

2.3 Ergebnisse: Physics-Informed Quantum Circuits zum Lösen partieller Differentialgleichungen

Die Nutzung von Quantencomputern verspricht großes Potential, um die Simulation kompressibler turbulenter Strömungen bei hohen Reynoldszahlen zu beschleunigen. Da für den Zertifizierungs- und Zulassungsprozess neuer Luftfahrzeuge sehr viele solcher Simulationen benötigt werden, wurde sich aufbauend auf den Arbeiten mit PINNs damit beschäftigt, wie diese Verfahren evtl. auf Quantencomputern umgesetzt werden können.

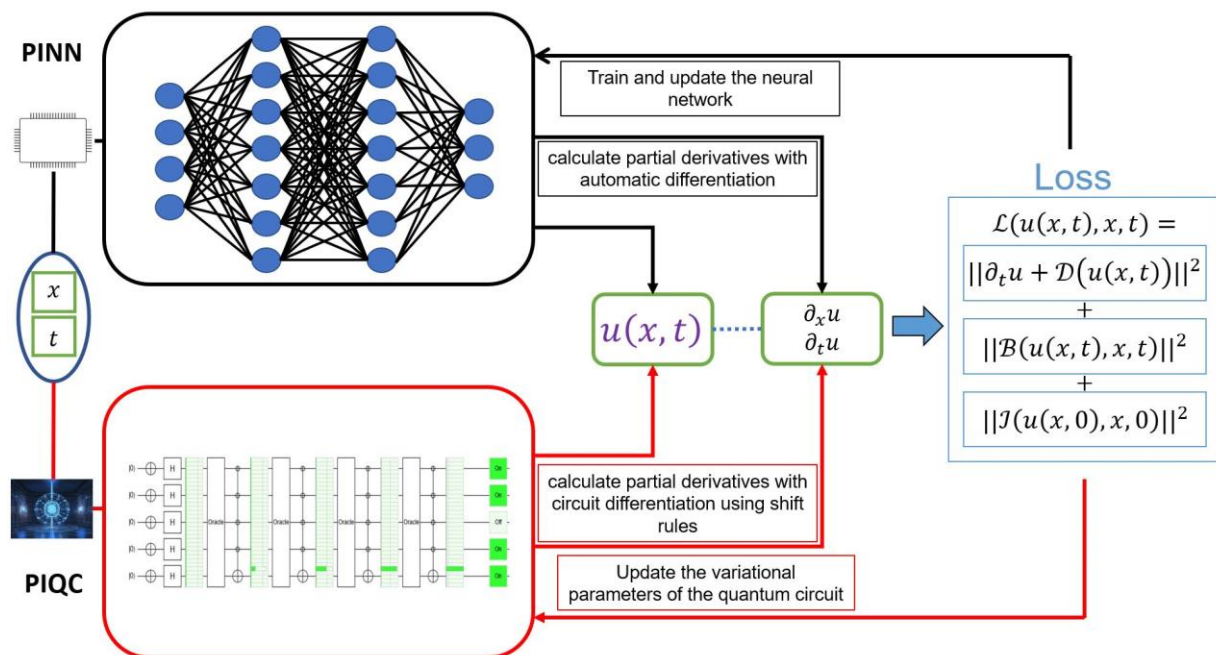


Abbildung 5 Schematische Gegenüberstellung eines PINN und eines PIQC Algorithmus

Die prinzipielle Vorgehensweise und Idee ist dabei in Abbildung 5 dargestellt. Das neuronale Netz, welches im PINN Ansatz zum Training und Darstellung einer Lösung genutzt wird, wird im PIQC durch einen Quantenschaltkreis ersetzt. Da für erste Anwendungen keine tatsächlichen

Quantencomputer zur Verfügung standen, wurden erste Rechnungen auf sog. Quantensimulatoren durchgeführt.

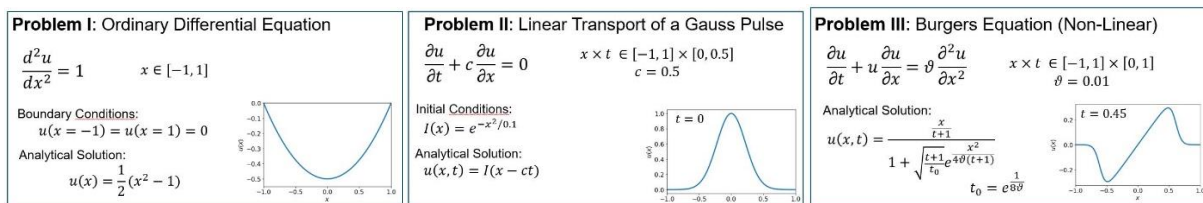


Abbildung 6 Beispiele von Differentialgleichungen, die mit einem PIQC gelöst wurden

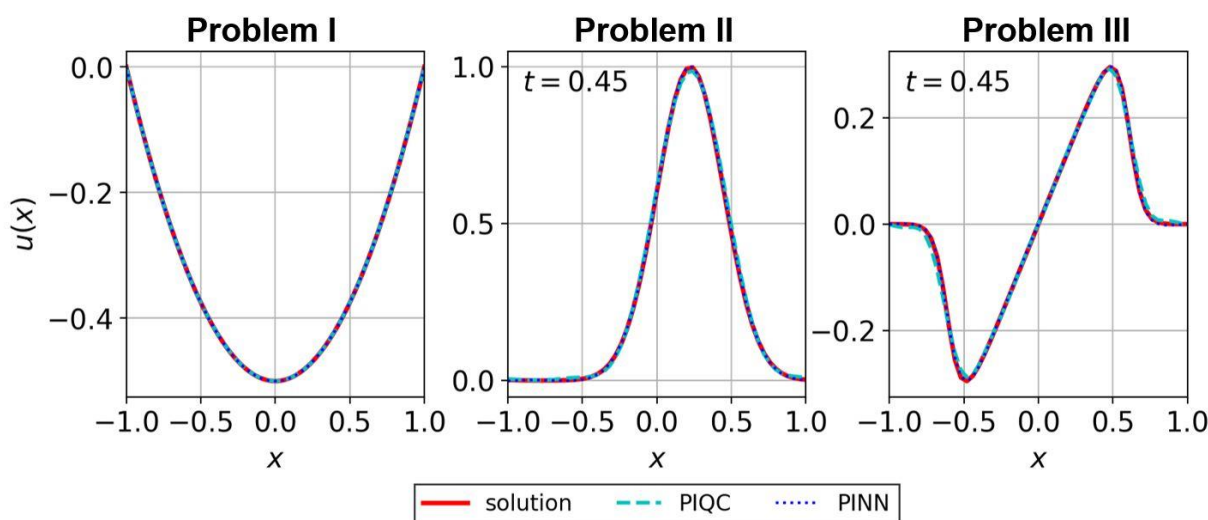


Abbildung 7 Lösungen für die Beispiele aus Abbildung 6 und Vergleich mit einer Lösung aus einem PINN

In Abbildung 6 sind drei Differentialgleichungen dargestellt, für die ein Vergleich der Anwendung eines PINNs und eines PIQCs durchgeführt wurde. Auch wenn für die Simulation mit einem PIQC nur wenige simulierte Qubits verwendet werden konnten, wird in Abbildung 7 gezeigt, dass das Lösen der Differentialgleichungen mit einem PIQC auf einem fehlerfreien Quantencomputer prinzipiell möglich ist.

2.4 Zusammenfassung

Im Rahmen der Arbeiten der Projektgruppe wurde demonstriert, dass Methoden des maschinellen Lernens und insbesondere die Nutzung neuronaler Netze für aerodynamisch motivierte Probleme angewendet werden können. Es konnten auch Ideen aufgezeigt werden, wie man diese Methoden nutzen kann, um neuartige Technologien, wie Quantencomputer, für die Simulation kompressibler Strömungen bei hohen Reynoldszahlen einzusetzen. Weitere Investitionen und zukünftige Arbeiten in diese Richtung scheinen lohnenswert, um die Synergieeffekte von Quantencomputern und KI Methoden zu heben, um diese auch für industrielle Anforderungen zugänglich zu machen.

3. Weitere Aktivitäten der Projektgruppe

- Konferenzteilnahmen
 - ECCOMAS 2022 (2x, Talk + Paper)
 - ODAS 2022 (3x Talk + 2x paper + best paper award) + Teil des Organisationskomittes
 - STAB 2022 (Talk + Paper)
 - AI4Aerospace 2023 (Talk)
 - DLRK 2023 (Talk + Paper + invitation to submit paper to CEAS Journal)
- Workshopeteilnahmen
 - 2nd workshop on Artificial Intelligence 2021 (2x Talk)
 - DLR WAW Machine Learning 8 2022 (Talk)
 - DLR WAW Machine Learning 9 2023 (2x Talk)
- Beitrag zum Senatsbericht 2023
- Auslandsaufenthalte
 - Aufenthalt bei der ONEARA (Paris): 2023-09 – 2023-11 (Anna Kiener)
- Journal articles
 - Computers & Fluids 2x, 1x submitted
 - Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical
 - CEAS Journal, 1x submitted

Literatur:

1. Pia Siegl, Simon Wassing, Markus Mieth, Stefan Langer, Philipp Bekemeyer: **Solving transport equations on Quantum Computers - Potential and limitations of Physics-Informed Quantum Circuits**, submitted to CEAS Journal (in revised version)
2. S. Langer: **Application of the iteratively regularized Gauss-Newton method to parameter identification problems in Computational Fluid Dynamics**, submitted to the Journal of Computers & Fluids (in revised version)
3. S. Wassing, S. Langer, P. Bekemeyer: **Physics-Informed Neural Networks for Parametric Compressible Euler Equations**, Journal of Computers & Fluids, 270:106164. 2024, <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2023.106164>
4. A. Kiener, S. Langer, P. Bekemeyer: **Data-Driven Correction of Coarse Grid CFD Simulations**, Journal of Computers & Fluids, 264: 105971, 2023, <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2023.105971>

5. T. Bode: **The two-particle irreducible effective action, for classical stochastic processes**, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 55 (2022) 265401, <https://doi.org/10.1088/1751-8121/ac73c6>

4. Abschluss und zukünftige Aktivitäten

Am 06. März 2024 fand die Abschlussveranstaltung der Projektgruppe am DLR Standort Braunschweig, Institut AS, statt.

Unter Berücksichtigung der in der Projektgruppe gewonnenen Erkenntnisse und Ergebnisse, wurde ein Projekt mit den Namen Towards Quantum Fluid Dynamics (ToQuaFlics) entworfen, welches erfolgreich eingebracht und nun aus Mitteln der DLR QCI finanziert wird.

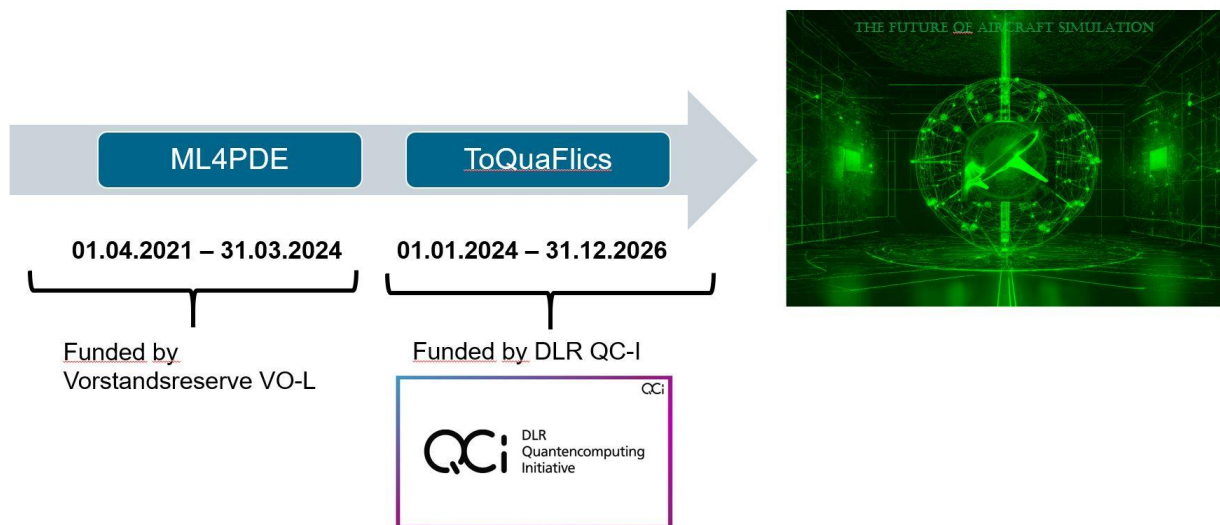


Abbildung 8 Zeitliche Entwicklung der DLR geförderten Projekte für die Nutzbarmachung von Quantencomputer im Bereich der CFD

Abbildung 8 zeigt schematisch den Verlauf der Projekte. Der Schwerpunkt des Projekts ToQuaFlics liegt nun deutlich auf der Nutzbarmachung von und Softwareentwicklung für Quantencomputer, beruhend auf den Erkenntnissen die im Rahmen der Projektgruppe für diese Technologie gewonnen wurden.

5. Abkürzungsverzeichnis

CFD	Computational Fluid Dynamics
PINN	Physics-Informed Neural Network
PIQC	Physics-Informed Quantum Circuit
SciML	Scientific Machine Learning

DLR-IB-AS-BS-2024-154

**Maschinelles Lernen und Quantencomputing – Digitalisierung
der Luftfahrzeugentwicklung 2.0**

Stefan Langer

Verteiler:

Institutsbibliothek AS	1 Exemplar
Verfasser/Co-Autoren	je 1 Exemplar
Institutsleitung	1 Exemplar
Abteilungsleitung	1 Exemplar
Deutsche Bibliothek in Frankfurt/Main	2 Exemplare
Niedersächsische Landesbibliothek Hannover	1 Exemplar
Techn. Informationsbibliothek Hannover (jeweilige Sekretariat)	1 Exemplar
Zentralbibliothek BS (jeweilige Sekretariat)	1 Exemplar
Zentralarchiv GÖ (jeweilige Sekretariat)	1 Exemplar