Workshop Data Science - Frühlingssemester 2025

Vertiefung Data Science

Studiengang Informatik

Simon Felix, Michael Graber, Martin Melchior

Zielsetzung

- Selbständiges Erarbeiten eines aktuellen Themas in der wissenschaftlichen Forschung im Gebiet Data Science
- Austausch mit Mitstudierenden und Fachexperten

Zielsetzung

- Selbständiges Erarbeiten eines aktuellen Themas in der wissenschaftlichen Forschung im Gebiet Data Science
- Austausch mit Mitstudierenden und Fachexperten

- Wissenschaft als diskursiven, gemeinschaftlichen Prozess erleben
- Freude am wachsenden Verständnis und am Austausch mit Peers

Arbeitsmittel / Vorgehen

- Einarbeitung in Literatur
- Auseinandersetzung mit Konzepten und Methoden mit Betreuer und Mitstudierenden
- Formulieren von Hypothesen zu Wirkungszusammenhängen im Kontext der betrachteten Methoden
- Konzeption und Umsetzung von Experimenten zur Untersuchung der Hypothesen
- Erarbeitung von konzisen Grafiken zur Vermittlung von Methoden (Schemata) und Resultaten (Plots)

Erwartungen / Wünsche

- Selbständige, (selbst-)kritische und transparente Auseinandersetzung mit dem Themengebiet
- Verständlicher und präziser Ausdruck in der gemeinsamen Auseinandersetzung
- Aktives Mitdenken und Teilnehmen an Diskussionen und Präsentationen

Leistungsbeurteilung

Kriterien

- Lernerfolg / Durchdringung des Themas
- Methodik und Vorgehen
- Arbeitseinsatz und -haltung
- Präsentationen

2/3 Gewicht beim Hauptbetreuer

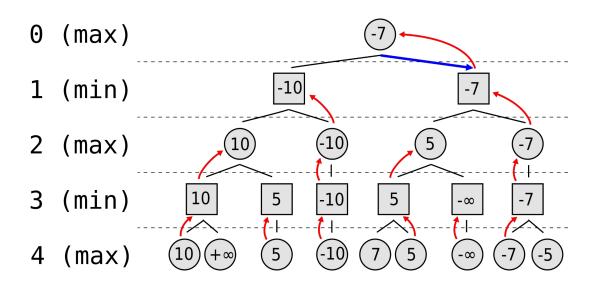
Feedbackgespräch mit dem Hauptbetreuer

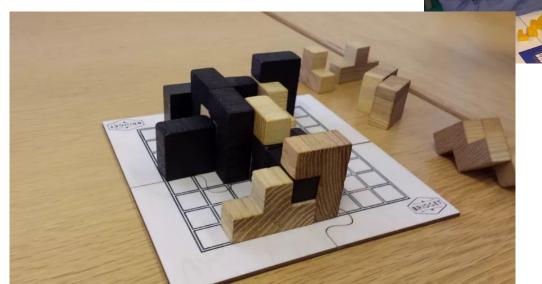
Termine

- Kick-Off: Montag, 17. Februar 2025, 09:15 11:00 Uhr
- Journal Club-Session: Montag, 17. März 2025, 08:15 11:00 Uhr
- 3-Slides-Session: Montag, 14. April 2025, 08:15 11:00 Uhr
- Abschlusspräsentationen: Montag, 2. Juni 2025, 08:15 11:00 Uhr

Themen

Thema 1: The History Heuristic and Alpha-Beta Search Enhancements in Practice & A New Paradigm for Minimax Search

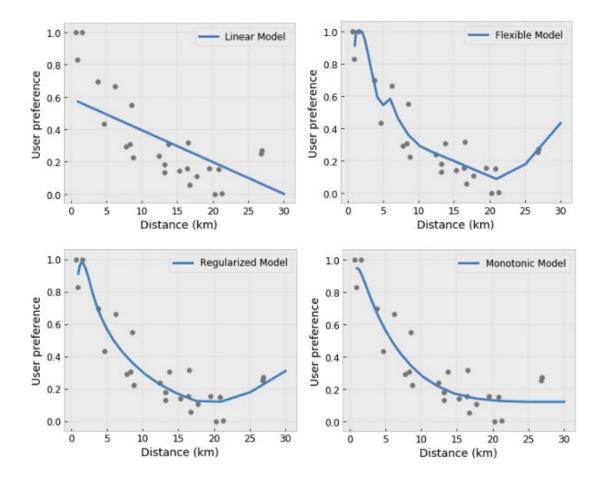




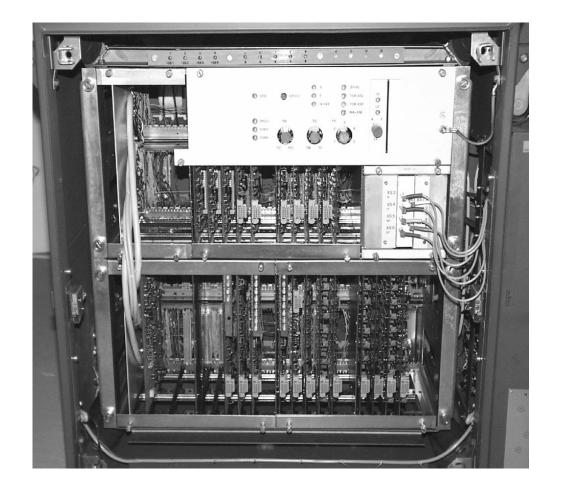
Thema 2: Vertex Block Descent

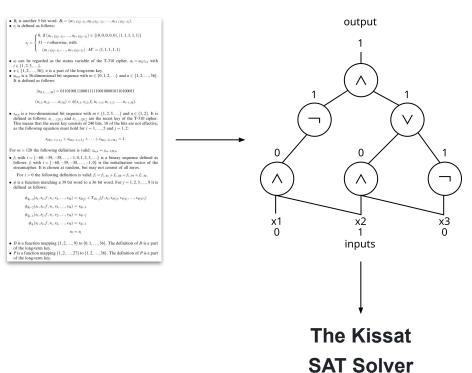


Thema 3: Constrained Optimization



Thema 4: The East German encryption machine T-310 and the algorithm it used







Thema 5: Ein-Schritt Diffusion für Bildgenerierung

(Martin Melchior)

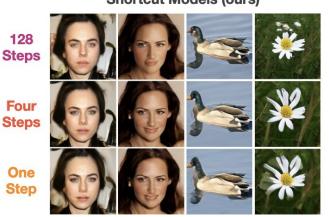
Diffusionsmodelle (wie in Stable Diffusion, Dall-E, ImageGen) sind rechnerisch teuer beim Generieren der Bilder.

Mit dem im Paper <u>One Step Diffusion via Shortcut</u> <u>Models</u> (ICLR 2025) vorgestellten Ansatz, wird dieses Problem behoben.

Die Idee ist, die Modelle auf die Schrittweite konditioniert zu trainieren.

Flow Matching 128 Steps Four Steps One Step

Shortcut Models (ours)



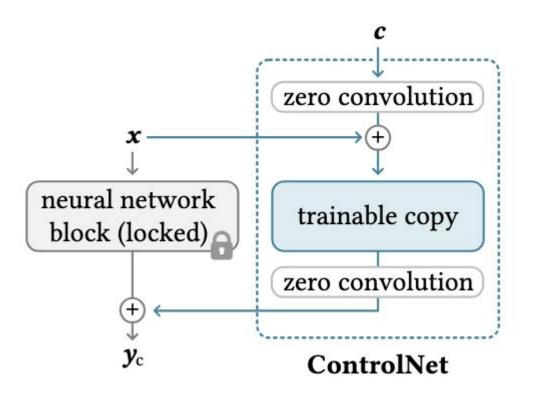
Thema 6: Zusätzliches Prompting für Text-to-Image Diffusionsmodelle

(Martin Melchior)

Paper Adding Conditional Control to Text-to-Image
Diffusion Models (ICCV 2023)

Methode zum "Finetunen" eines vortrainierten Diffusionsmodells (wie z.B. Stable Diffusion), so dass zusätzliche Prompts fürs Conditioning übergeben werden können:

Das wird mit einer geeigneten Modell-Architektur erreicht ("ControlNet").



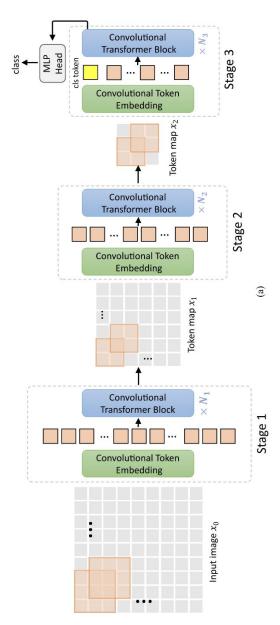
Thema 7: Convolutions und Transformer kombiniert

(Martin Melchior)

Paper "<u>Attention is All You Need</u>" (NIPS 2017, 150k+ Citations): Transformer Architektur basierend auf Attention Mechanismus und MLPs. Im Computer Vision Bereich: <u>ViT</u> (ICLR 2020).

Convolutions dennoch interessant: Lokale Features werden effizient gelernt (Parameter-Sharing, Translationseigenschaften).

Kombination im Paper <u>CvT: Introducing Convolutions to Vision</u> <u>Transformers</u> (ICCV 2021).



Thema 8: Knowledge Distillation, Self-Distillation

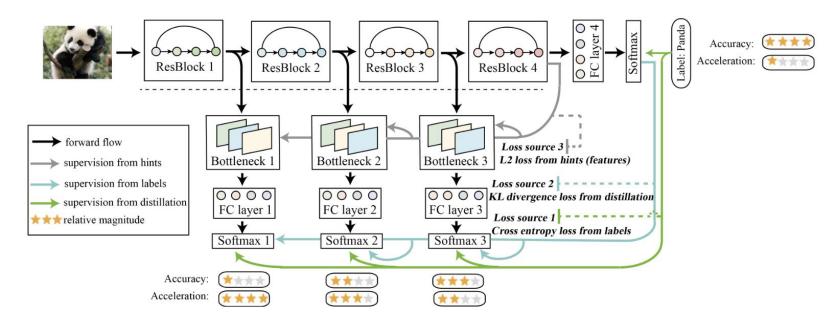
(Martin Melchior)

Knowledge Distillation bedeutet, dass antrainiertes Wissen von einem grossen Modell (Teacher) auf ein kleineres Modell (Student) übertragen wird. Das Student-Modell ist dann kompakter manchmal sogar mit besserer Performance als der Teacher.

Braucht es den Teacher überhaupt noch? Kann das Prinzip direkt als Teil des Trainings eingebaut sein?

Paper:

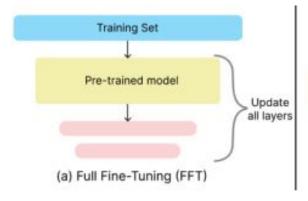
Be Your Own Teacher:
Improve the Performance of
Convolutional Neural
Networks via Self Distillation
(ICCV 2019)

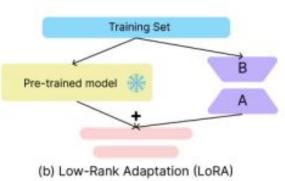


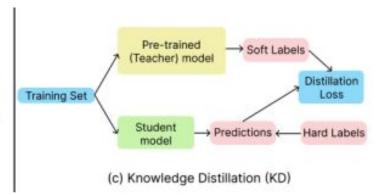
Thema 9: KD-LoRA / PC-LoRA

(Michael Graber)





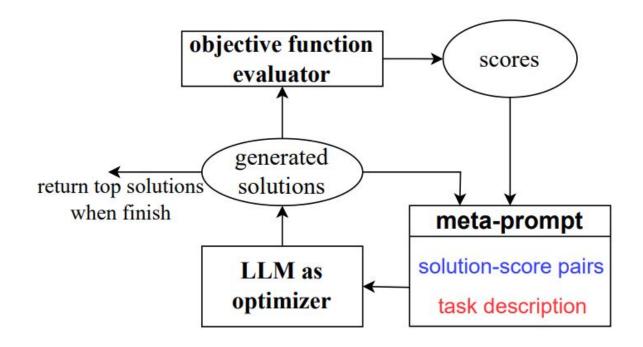




Azimi et al., KD-LoRA, 2024. Hwang et al., PC-LoRA, 2024.

Thema 10: Optimization by Prompting

(Michael Graber)



Thema 11: TabPFN

(Michael Graber)

Article

Accurate predictions on small data with a tabular foundation model

https://doi.org/10.1038/s41586-024-08328-6

Received: 17 May 2024

Accepted: 31 October 2024

Published online: 8 January 2025

Open access

Check for updates

Noah Hollmann^{1,2,3,7,∞}, Samuel Müller^{1,7,∞}, Lennart Purucker¹, Arjun Krishnakumar¹, Max Körfer¹, Shi Bin Hoo¹, Robin Tibor Schirrmeister^{4,5} & Frank Hutter^{1,3,6,∞}

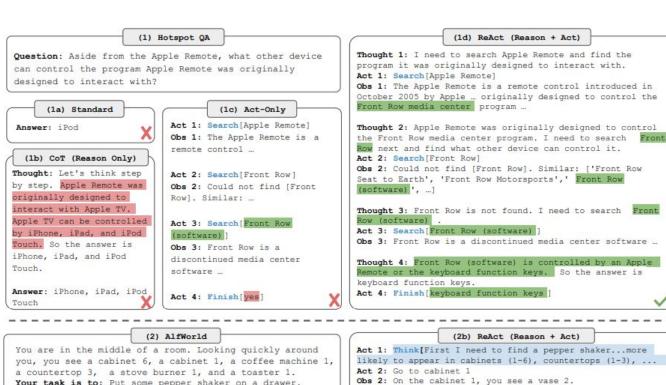
Tabular data, spreadsheets organized in rows and columns, are ubiquitous across scientific fields, from biomedicine to particle physics to economics and climate science^{1,2}. The fundamental prediction task of filling in missing values of a label column based on the rest of the columns is essential for various applications as diverse as biomedical risk models, drug discovery and materials science. Although deep learning has revolutionized learning from raw data and led to numerous high-profile success stories³⁻⁵, gradient-boosted decision trees⁶⁻⁹ have dominated tabular data for the past 20 years. Here we present the Tabular Prior-data Fitted Network (TabPFN), a tabular foundation model that outperforms all previous methods on datasets with up to 10,000 samples by a wide margin, using substantially less training time. In 2.8 s, TabPFN outperforms an ensemble of the strongest baselines tuned for 4 h in a classification setting. As a generative transformer-based foundation model, this model also allows fine-tuning, data generation, density estimation and learning reusable embeddings. TabPFN is a learning algorithm that is itself learned across millions of synthetic datasets, demonstrating the power of this approach for algorithm development. By improving modelling abilities across diverse fields, TabPFN has the potential to accelerate scientific discovery and enhance important decision-making in various domains.

member of swissuniversities

Thema 12: Prompting Strategies

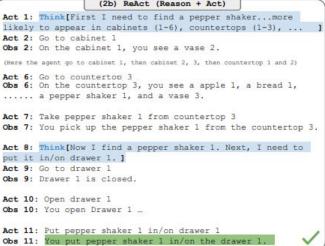
(Michael Graber)

Wei et al., Chain-of-thought prompting, 2022. Yao et al., React, 2022.

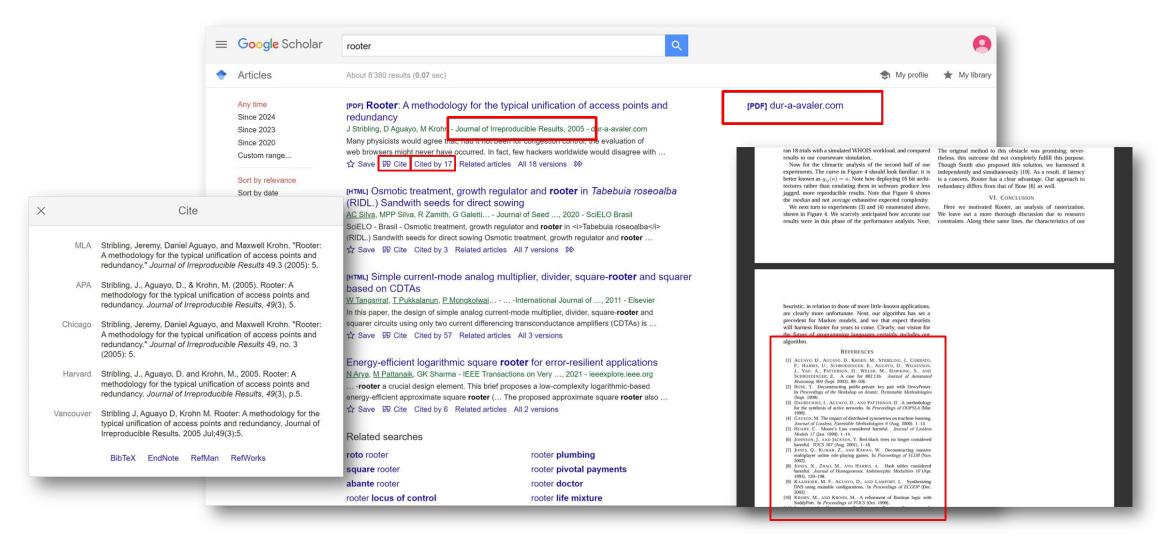


Your task is to: Put some pepper shaker on a drawer.

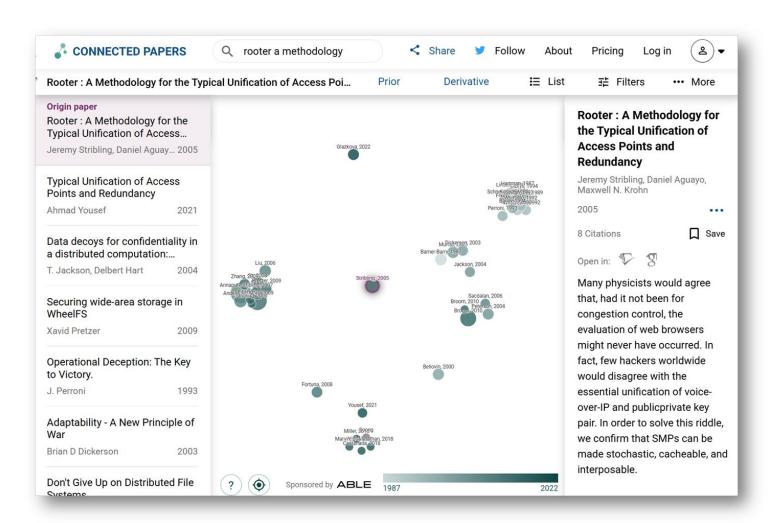
```
(2a) Act-Only
Act 1: Go to drawer 1
Obs 1: The drawer 1 is closed.
Act 2: Open drawer 1
Obs 2: You open the drawer 1. The drawer 1 is open. In it,
you see a dishsponge 2, and a spoon 1.
Act 3: Go to sinkbasin 1
Obs 3: On the sinkbasin 1, you see a dishsponge 3, a
spatula 1, and a spoon 2.
Act 4: Take peppershaker 1 from sinkbasin 1
Obs 4: Nothing happens.
Act 5: Take peppershaker 1 from sinkbasin 1
Obs 5: Nothing happens.
```



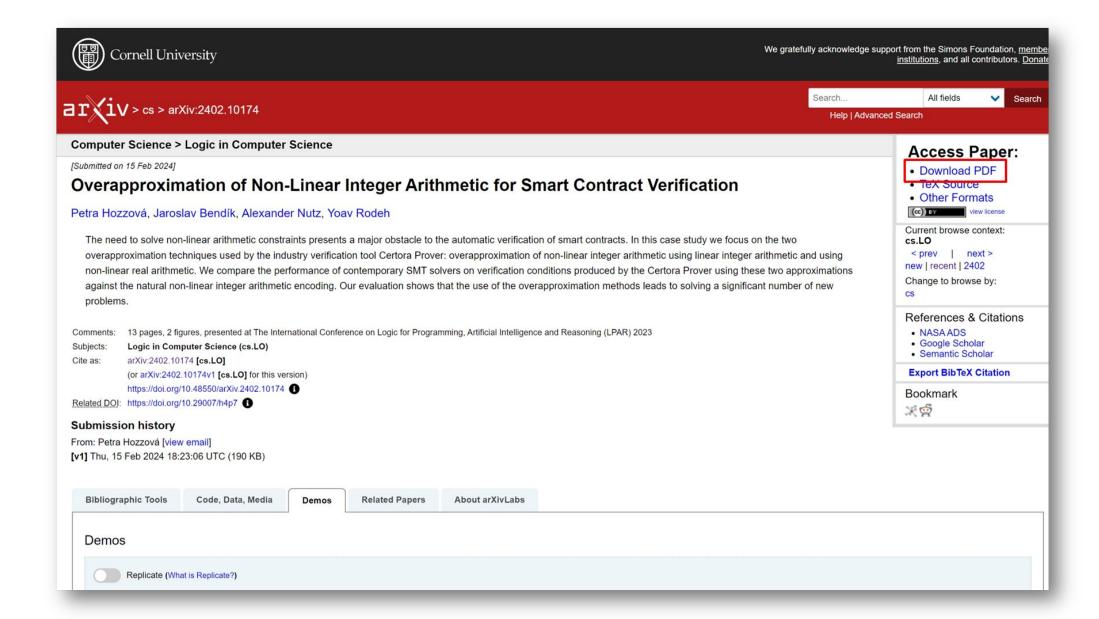
https://scholar.google.com/



https://www.connectedpapers.com/







Paper-Präsentation im Journal Club

1. Verstehe das Paper tiefgehend

- Lies es mehrmals und fokussiere dich auf Motivation, Methode, Experimente und Fazit.
- o Identifiziere den Hauptbeitrag und warum er relevant ist.

2. Fasse die Kernpunkte zusammen

- Wer sind die Autoren
- Problemstellung & Motivation: Warum wurde das Paper geschrieben?
- Methode: Erkläre den Ansatz verständlich mit Diagrammen.
- Ergebnisse: Zeige die wichtigsten Experimente und Erkenntnisse.
- Stärken & Schwächen: Was ist gut, wo gibt es Einschränkungen?

3. Nutze visuelle Hilfsmittel

- Weniger Text, mehr Diagramme zur Veranschaulichung.
- Falls sinnvoll, zeige Code-Beispiele oder Demos.

4. Mache es interaktiv

- 5. Üben & Timing beachten
 - Kurz halten (10-15 min), um Zeit für Fragen zu lassen.
 - Bereite dich auf kritische Fragen vor und überlege mögliche Antworten.