

# ΠΡΟΜΗΘΕΑΣ



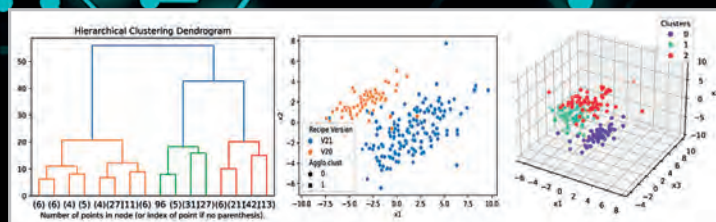
ΔΙΜΗΝΙΑΙΑ ΕΦΗΜΕΡΙΔΑ ΤΟΥ ΕΘΝΙΚΟΥ ΜΕΤΣΟΒΙΟΥ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟΥ ΤΕΥΧΟΣ 20 | ΜΑΡΤΙΟΣ-ΑΠΡΙΛΙΟΣ 2022

## Τεχνητή Νοημοσύνη Μία «επανάσταση» στις επιστήμες των μηχανικών

### ARTIFICIAL INTELLIGENCE



2-5 | ΔΙΕΘΝΗ  
Σύμπραξη EULIST για  
Ευρωπαϊκό Πανεπιστήμιο



5-16 | ΑΦΙΕΡΩΜΑ  
Τεχνητή Νοημοσύνη



## Το ΕΜΠ στην εποχή της Τεχνητής Νοημοσύνης και των Μεγάλων Δεδομένων: Δράσεις και Προκλήσεις στην Έρευνα και την Εκπαίδευση

**Ο ΤΙΤΛΟΣ ΕΙΝΑΙ ΤΟΥ ΔΙΑΔΙΚΤΥΑΚΟΥ ΣΕΜΙΝΑΡΙΟΥ ΣΤΟ ΕΜΠ,** του Ιου «οριζόντιου», με σκοπό την παρουσίαση, σε ενδεικτική έκταση, της ερευνητικής και εκπαιδευτικής δραστηριότητας στο Ίδρυμα και την ανάδειξη των προκλήσεων που συνδέονται με AI\_ML\_DS – Artificial Intelligence/Τεχνητή Νοημοσύνη, Machine Learning/Μηχανική Μάθηση, Data Science/Επιστήμη Δεδομένων.

Στις 13 Απριλίου 2022, 5:00-7:30 μ.μ., καθηγητές του ΕΜΠ καλύπτουν περιεκτικά, στο 1<sup>ο</sup> μέρος του σεμιναρίου, εφαρμογές ML και DS: από Μαθηματικά-Αλγόριθμους και Σχεδιασμό Κατασκευών μέχρι Χημική Μηχανική και Παρατήρηση Γης. Η συζήτηση, στο 2<sup>ο</sup> μέρος, τροφοδοτείται με σύντομες παρεμβάσεις συναδέλφων από το ΕΜΠ και συμμετεχόντων από άλλα Πανεπιστήμια και τη βιομηχανία, καθώς και μεταπτυχιακών φοιτητών.

Το παρόν τεύχος του Προμηθέα είναι αφιερωμένο στο ίδιο θέμα και περιέχει σύντομα ενημερωτικά άρθρα από τις δραστηριότητες ερευνητικών ομάδων του ΕΜΠ.

Το σεμινάριο και το συγκεκριμένο τεύχος αποσκοπούν κυρίως στη σηματοδότηση της εκκίνησης συγκροτημένης προσπάθειας να έρθει στο προσκήνιο η νέα πραγματικότητα των AI\_ML\_DS. Οι φοιτητές μας, ενώ βομβαρδίζονται από πολλές πλευρές (διεθνή και εγχώρια προγράμματα προπτυχιακών και μεταπτυχιακών σπουδών, προκηρύξεις διδακτορικών διατριβών, επιστημονικές δημοσιεύσεις, social media) με την καταγιστική ανάπτυξη στο πεδίο AI\_ML\_DS, εύλογα αναζητούν να εντοπίσουν αντίστοιχες συγκεκριμένες εξελίξεις στο ΕΜΠ. Είναι, λοιπόν, σημαντικό με κινήσεις όπως αυτές –σεμινάρια, ενημερωτικά άρθρα και άλλες που θα ακολουθήσουν– να διαπιστώνουν τις εξελίξεις και να προσβλέπουν σε περισσότερες και ουσιαστικότερες.

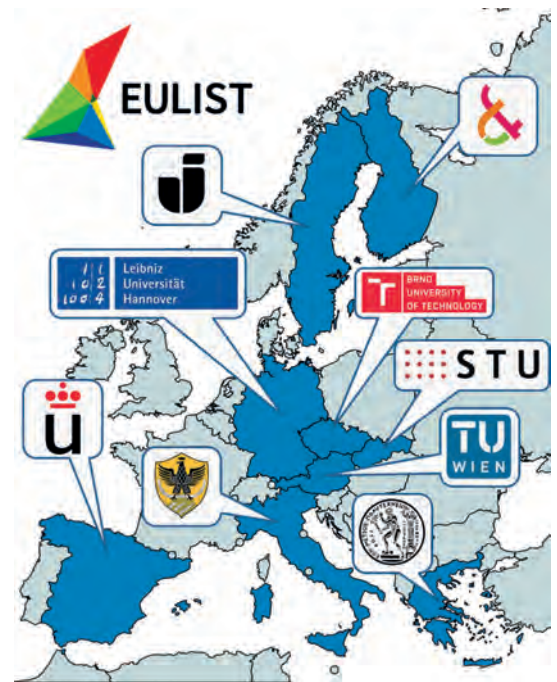
Πριν από 25 περίπου χρόνια, στο ΕΜΠ σήμανε, με καθυστέρηση, «συναγερμός» για την ανάγκη εισαγωγής, από τα πρώτα εξάμηνα σπουδών των μηχανικών, της υπολογιστικής εκπαίδευσης στα Υπολογιστικά Εργαστήρια των Σχολών (PC-labs), με απαραίτητο μάθημα πρώτου εξαμήνου τον Προγραμματισμό Υπολογιστών. Τώρα, μια άλλη σημαντική προτεραιότητα έχει αναδυθεί, αυτή των AI\_ML\_DS. Κοινό χαρακτηριστικό και των δύο είναι, πέραν της έδρασής τους σε υπολογιστές και κυρίως λόγω αυτού, η οριζόντια διείσδυσή τους σε όλες τις ειδικότητες μηχανικών και τις επιστήμες ζωής μέχρι τις οικονομικές και ανθρωπιστικές επιστήμες. Όπως πριν από 25 χρόνια, έτσι και τώρα, το ζητούμενο δεν είναι η ένταξη μερικών εισαγωγικών σχετικών μαθημάτων σε 1-2 εξάμηνα, όπου ίσως η Python συνυπάρξει ή ανταγωνιστεί με τη Matlab, αλλά η διείσδυση των νέων εξελίξεων και «κεργαλείων» στα μαθήματα επιστήμης όλων των μηχανικών, και όχι μόνο των μηχανικών της επιστήμης υπολογιστών. Αυτή η αναγκαιότητα υποδεικνύει αλλαγές σε προγράμματα σπουδών. Η εμπειρία του αντίστοιχου εγχειρήματος που ξεκίνησε προ 25-ετίας δείχνει δυσπραγία σε τέτοιες αλλαγές, δηλαδή οι σπουδές των μηχανικών δεν έχουν ακόμη αποκτήσει την προστιθέμενη αξία μιας σύγχρονης ισχυρής υπολογιστικής συνιστώσας. Αφενός, το τρίπτυχο θεωρία-πείραμα-υπολογισμοί παραμένει η βάση των σπουδών των μηχανικών στα καλά σχολεία, όπως το ΕΜΠ. Αφετέρου, όμως, η συνύπαρξη των τριών πτυχών, υπό τους ρεαλιστικούς περιορισμούς του πεπερασμένου σε διάρκεια και απαιτητικού σε συνεκτικότητα προγράμματος σπουδών, απαιτεί βελτιστοποίηση, δεδομένης της ραγδαίας εξέλιξης της υπολογιστικής ισχύος. Η ραγδαία εξέλιξη προσκρούει, αναπόφευκτα, στο «χάσμα γενεών», δηλαδή στη δυσκολία συντονισμού, λόγω ημερολογιακής και συνακόλουθα ακαδημαϊκής ηλικίας και κουλτούρας, του ακαδημαϊκού προσωπικού. Για να επιτευχθεί η ζητούμενη διείσδυση των νέων πεδίων, απαιτείται κυρίως «νέο αίμα» στα πανεπιστήμια, δηλαδή επιστήμονες που λόγω της εκπαίδευσης και της δουλειάς τους είναι σε θέση να «σύρουν το χορό». Είναι, και γι αυτό το λόγο, σημαντικό πλήγμα για τα πανεπιστήμια η στενότητα στο άνοιγμα νέων θέσεων που επιβάλλεται από την Πολιτεία. Πρέπει, όμως, να είναι σημαντική προτεραιότητα των Σχολών η προκήρυξη νέων θέσεων με στόχευση στην κάλυψη περιοχών όπου οι εξελίξεις καλπάζουν και κυριαρχούν. Αυτές οι περιοχές, όπως AI\_ML\_DS, επειδή είναι οριζόντιες μπορεί να υπηρετηθούν από ευρεία γκάμα γνωστικών αντικειμένων, αρκεί οι επιλεγόμενοι να φέρουν «την αύρα» των σύγχρονων εξελίξεων που θα μπορούν να τις υπηρετήσουν τόσο ερευνητικά όσο, και κυρίως, εκπαιδευτικά.

ΑΝΔΡΕΑΣ ΜΠΟΥΝΤΟΥΒΗΣ, Πρύτανης ΕΜΠ

Το Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο από το Νοέμβριο του 2020 αποτελεί εταίρο στη Συμμαχία εννέα ευρωπαϊκών Ανώτατων Εκπαιδευτικών Ιδρυμάτων, τα οποία συνεργάζονται για την ανάπτυξη μιας κοινής στρατηγικής για την Εκπαίδευση, την Έρευνα, την Εξωστρέφεια και τη συνεργασία του Πανεπιστημίου με την Κοινωνία με στόχο την ένταξη της Συμμαχίας στην πρωτοβουλία των Ευρωπαϊκών Πανεπιστημίων.

Το κοινό όραμα αυτής της Συμμαχίας με τίτλο EULIST “European Universities Linking Society and Technology” είναι να αποτελέσει έναν πόλο παραγωγής γνώσης και εκπαίδευσης για τους Ευρωπαίους επιστήμονες που θα λειτουργήσουν ως παράγοντες αλλαγής για την αντιμετώπιση και επίλυση παγκόσμιων προκλήσεων. Το ακαδημαϊκό οικοσύστημα που θα δημιουργηθεί, εμπνευσμένο από τη συνεργασία και τη δημιουργική ανάδραση μεταξύ κοινωνίας και τεχνολογίας, θα ενσωματώνει καινοτόμες εκπαιδευτικές μεθόδους και διεπιστημονική έρευνα, με εξωστρέφεια προς μια Ευρωπαϊκή Πανεπιστημιακή Κοινότητα δίχως σύνορα.

Τα εννέα Πανεπιστήμια που έχουν ήδη ενώσει τις δυνάμεις τους για την επίτευξη αυτού του οράματος είναι το Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο (Ελλάδα), University L’Aquila (Ιταλία), Slovak University of Technology Bratislava (Σλοβακία), Brno University of Technology (Τσεχία), Leibniz University Hannover (Γερμανία), Jönköping University (Σουηδία), Lappeenranta-Lahti University of Technology LUT (Φινλανδία), University Rey Juan Carlos of Madrid (Ισπανία) και Technical University of Vienna (Αυστρία).



Οι τέσσερις βασικοί πυλώνες για την επίτευξη των παραπάνω στόχων, με επίκεντρο τους σπουδαστές, είναι η Πανεπιστημιούπολη (Campus), η Εκπαίδευση και Διδασκαλία (Studying & Teaching), η Έρευνα (Research), και η Εξωστρέφεια (Outreach, Engagement and Transfer).

ΕΚΔΟΤΗΣ: ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΔΙΕΥΘΥΝΤΗΣ: Δρόσος Γκιντιδής | ΑΡΧΙΣΥΝΤΑΚΤΗΣ: Άγγελος Σιάλας

ΣΥΝΤΑΚΤΙΚΗ ΕΠΙΤΡΟΠΗ: Βάλια Γρίβα, Σωτήρης Κάτσενος, Γιώργος Σιάλας | ΜΕΛΗ ΣΧΟΛΩΝ: εκπρόσωποι από τις κοσμητείες όλων των Σχολών

ΕΠΙΜΕΛΕΙΑ ΚΕΙΜΕΝΩΝ: Ελένη Γιαννακοπούλου | ΣΕΛΙΔΟΠΟΙΗΣΗ: GA+S Graphic Arts & Spot Ltd

www.ntua.gr/promitheas | email: promitheas@central.ntua.gr



# Σύμπραξη EULIST για την εκπαίδευση, την έρευνα και την εξωστρέφεια



University Alliance EULIST "Linking society and technology to shape sustainable futures"

Το ΕΜΠ έχει έναν ιδιαίτερα ενεργό ρόλο στη Συμμαχία EULIST. Ο Πρύτανης του ΕΜΠ, Καθηγητής Ανδρέας Μπουντουβής, έχει ομόφωνα εκλεγεί Co-Chair του EULIST Presidents' Board, στο οποίο συμμετέχει και ο Αντιπρύτανης Ακαδημαϊκών Υποθέσεων του ΕΜΠ, Καθηγητής Δρόσος Γκιντίδης. Συντονίστρια της Ομάδας ΕΜΠ είναι η Καθηγήτρια ΣΜΜΜ Κατερίνα Αδάμ, ενώ το ΕΜΠ έχει παράλληλα αναλάβει και το συντονισμό της Θεματικής Ενότητας Έρευνας από τον Καθηγητή ΣΜΜ Σωτήρη Καρέλλα.

Αφού προσδιορίστηκαν τα σημεία συνεργασίας και αναπτύχθηκε κοινό μακροπρόθεσμο όραμα, οι Πρυτάνεις και οι Πρόεδροι των Πανεπιστημίων της Συμμαχίας δεσμεύτηκαν, μέσω Συμφώνου Συνεργασίας, για την κοινή αποστολή και στρατηγική προς την υλοποίηση του Ευρωπαϊκού Πανεπιστημίου EULIST.

Για την ενίσχυση της συνεργασίας μεταξύ των Πανεπιστημίων της Συμμαχίας έχουν ήδη διεξαχθεί και προγραμματίζονται κοινές δράσεις σε θέματα Εκπαίδευσης, Έρευνας και βιώσιμης Πανεπιστημιούπολης, όπου το ΕΜΠ συντόνισε ή/και συμμετείχε ενεργά στις εξής δράσεις:

- Κοινή Συμφωνία ERASMUS+, η οποία υπογράφηκε από όλα τα μέλη της Συμμαχίας για την ενίσχυση

της κινητικότητας σπουδαστών και προσωπικού.

- Ευρωπαϊκή Διαδικτυακή Ημερίδα για την εξ αποστάσεως Εκπαίδευση, "What is the New Normal in Distance Learning in European Universities" στις 10 Ιουνίου 2021, <http://dlworkshop.ntua.gr/>, η οποία περιγράφεται αναλυτικά στην επόμενη ενότητα.
- Διαδικτυακό Εργαστήριο Φοιτητών EULIST: "Showcasing the EULIST Virtual Sustainable Campus" στις 11 Ιουνίου 2021, όπου παρουσιάστηκαν οι εργασίες προπτυχιακών και μεταπτυχιακών φοιτητών και συζητήθηκε το πλαίσιο ανάπτυξης συνεργασίας μέσα από εναλλακτικές, ψηφιακές προσεγγίσεις για μία βιώσιμη Πανεπιστημιούπολη.
- Ημερίδα στο πλαίσιο της ερευνητικής δράσης "Research Fridays" στις 22 Οκτωβρίου 2021, όπου παρουσιάστηκαν οι ερευνητικές δραστηριότητες των Πανεπιστημίων της Συμμαχίας σε θέματα αιχμής, με σκοπό την προετοιμασία κοινών ερευνητικών προτάσεων EULIST, και την υποβολή για χρηματοδότηση.
- Διαδικτυακό Εργαστήριο για τις βέλτιστες πρακτικές υποστήριξης εισερχομένων σπουδαστών και προσωπικού, «EULIST best practice

workshop on support services for international students and staff», που οργανώθηκε από την Ομάδα της Πανεπιστημιούπολης, Campus, στις 24-25 Νοεμβρίου 2021.

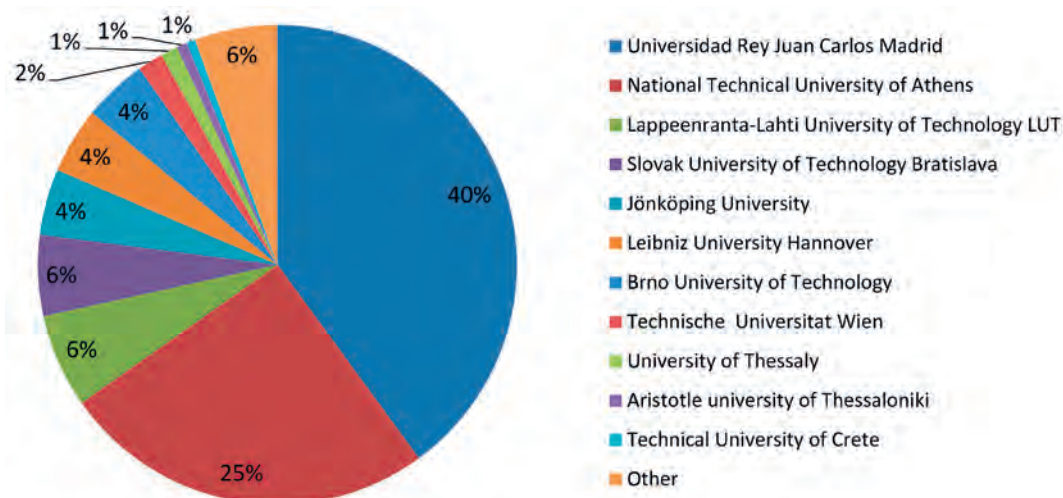
- Προγραμματίζεται για τις 6-11 Ιουνίου το θερινό Σχολείο EULIST Summer School "You Promised me a City", που βασίζεται στον Στόχο Βιώσιμης Ανάπτυξης 11, Βιώσιμες Πόλεις και Κοινότητες και χρηματοδοτείται από το πρόγραμμα κινητικότητας Erasmus+ <https://youpromisedmeacity.de>.

Παράλληλα, στο πλαίσιο της διαμόρφωσης κοινού σχεδίου δραστηριοτήτων της Συμμαχίας EULIST, αποφασίστηκε πρόσφατα η προετοιμασία πρότασης για χρηματοδότηση της Συμμαχίας από το Πρόγραμμα Erasmus+ στο πλαίσιο προκήρυξης για την ένταξη νέων θεσμικών συμμαχιών στο θεσμό των Ευρωπαϊκών Πανεπιστημίων, θεσμό στρατηγικής σημασίας για την Ανώτατη Εκπαίδευση στην Ευρώπη.

Η προετοιμασία της κοινής πρότασης εννέα Πανεπιστημίων, η οποία υποβλήθηκε στις 22 Μαρτίου 2022, ήταν μια διαδικασία σύνθετη, απαιτητική αλλά πρωτίστως πολύ δημιουργική, με καταλυτική παρουσία της Ομάδας του ΕΜΠ στην προετοιμασία των επί μέρους εργασιών και των πακέτων εργασίας. Η κοινή πρόταση, με επίκεντρο για την επόμενη τετραετία την πράσινη τεχνολογία και τις δράσεις για την κλιματική αλλαγή, περιλαμβάνει τη χρήση νέων παιδαγωγικών εργαλείων, συνεργατικής έρευνας και πρωτοβουλιών καινοτομίας με ανοικτά εργαστήρια living labs. Η ενιαία βιβλιοθήκη τεχνικών θεμάτων και δεδομένων, καθώς και τα κοινά μαθήματα και προγράμματα πρακτικής και συνεχιζόμενης εκπαίδευσης που προγραμματίζεται να αναπτυχθούν από τα Πανεπιστήμια Μέλη της Συμμαχίας, αξιοποιώντας εργαλεία τεχνητής νοημοσύνης, μέσα σε μία σύγχρονη, πολυπολιτισμική πανεπιστημιούπολη, αποσκοπούν να προσφέρουν στους φοιτητές τα μέσα για την αντιμετώπιση των μεγάλων προκλήσεων σε ευρωπαϊκό και παγκόσμιο επίπεδο.

## Ευρωπαϊκή Διαδικτυακή Ημερίδα για την εξ αποστάσεως Εκπαίδευση

Το ΕΜΠ, ως μέλος της Συμμαχίας Πανεπιστημίων EULIST, πρότεινε τη διεξαγωγή και συντόνισε, σε συνεργασία

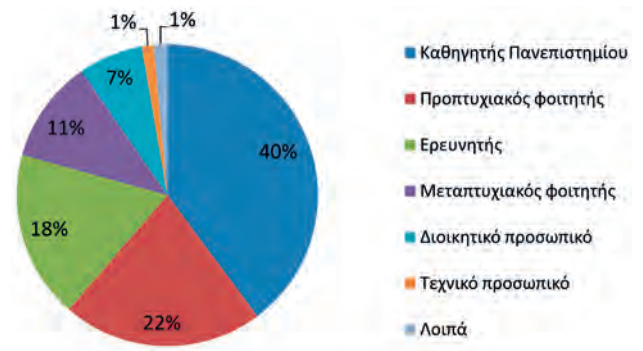


Σχήμα 1: Προέλευση συμμετεχόντων στη διαδικτυακή ημερίδα για την εξ αποστάσεως εκπαίδευση της Ευρωπαϊκής Σύμπραξης Πανεπιστημίων EULIST. Συντονιστής οργάνωσης ΕΜΠ, 10 Ιουνίου 2021

με τα άλλα συμμετέχοντα Πανεπιστήμια, την Ευρωπαϊκή Διαδικτυακή Ημερίδα με τίτλο “What is the New Normal in Distance Learning in European Universities”, που πραγματοποιήθηκε στις 10 Ιουνίου 2021. Η Ημερίδα φιλοξενήθηκε από το ΕΜΠ με οργανωτική ευθύνη του Πρύτανη του ΕΜΠ, Καθηγητή Ανδρέα Μπουντουβή, και της Προέδρου της Οργανωτικής Επιτροπής, Καθηγήτριας Κατερίνας Αδάμ, με τη συμβολή του ΕΔΥΤΕ και την τεχνική υποστήριξη από ομάδα του ΕΜΠ, υπό το συντονισμό της Επίκουρης Καθηγήτριας Ιωάννας Ρουσάκη και τον τεχνικό σχεδιασμό από τον Ιωάννη Τζιγκουνάκη, ΕΤΕΠ. Στις συζητήσεις

συμμετείχαν επίσης ο Καθηγητής ΣΠΜ Χρήστος Μακρόπουλος και ο φοιτητής ΣΧΜ Ηλίας Βάσσος.

Κατά τη διάρκεια της Ευρωπαϊκής Διαδικτυακής Ημερίδας, καθηγητές, φοιτητές και ειδικοί πληροφορικής από τα Πανεπιστήμια της Σύμπραξης EULIST συζήτησαν και αντάλλαξαν απόψεις για την εξ αποστάσεως Εκπαίδευση ως μια νέα μαθησιακή προσέγγιση, τόσο κοινωνικά και τεχνικά, όσο και παιδαγωγικά. Οι εμπειρίες και τα συμπεράσματα από την εξ αποστάσεως Εκπαίδευση στην εποχή της πανδημίας εξετάστηκαν με στόχο την αναγνώριση ευκαιριών και προκλήσεων προς την ανάπτυξη βιώσι-



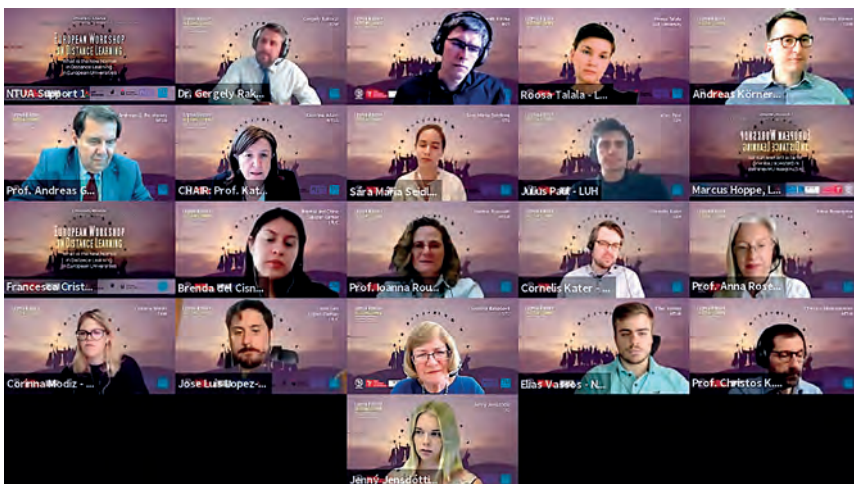
**Σχήμα 2: Ιδιότητες συμμετεχόντων στη διαδικτυακή ημερίδα για την εξ αποστάσεως εκπαίδευση της Ευρωπαϊκής Σύμπραξης Πανεπιστημίων EULIST**



**Σχήμα 3: Καταγραφή απόψεων στο ερώτημα «Ποιες είναι οι τρεις κυριότερες προκλήσεις για τους σπουδαστές στην εξ αποστάσεως εκπαίδευση», σε σύνολο εκατόν σαράντα συμμετεχόντων στη δημοσκόπηση**



**Σχήμα 4: Καταγραφή απόψεων στο ερώτημα, «Ποιες είναι οι τρεις κυριότερες προκλήσεις για τους διδάσκοντες στην εξ αποστάσεως εκπαίδευση», σε σύνολο εκατόν σαράντα έξι συμμετεχόντων στη δημοσκόπηση**



μων λύσεων για την Ανώτατη Εκπαίδευση στην Ευρώπη.

Η απήχηση της ημερίδας ήταν ιδιαίτερα μεγάλη σε διεθνές επίπεδο. Οι εγγεγραμμένοι, προπτυχιακοί και μεταπτυχιακοί φοιτητές, ερευνητές, μέλη ΔΕΠ, διοικητικό προσωπικό από τα συμμετέχοντα ΑΕΙ, από Ελλάδα, Τσεχία, Σλοβακία, Γερμανία, Φινλανδία, Σουηδία, Αυστρία, Ισπανία αλλά και από Ιταλία, Γαλλία, από το Ηνωμένο Βασίλειο, Πολωνία και Τουρκία έφθασαν στους επτακόσιους (Σχήμα 1), ενώ οι ενεργά συμμετέχοντες ξεπέρασαν τους τριακόσιους τριάντα. Η ιδιότητα των συμμετεχόντων παρουσιάζεται στο Σχήμα 2.

Κατά την εναρκτήρια συνεδρία, ο Πρύτανης του ΕΜΠ, Καθηγητής Ανδρέας Μπουντουβής, χαιρετίζοντας την ημερίδα υπογράμμισε τη σημασία της αποτίμησης της πρόσφατης εμπειρίας της εξ αποστάσεως εκπαίδευσης που επιβλήθηκε λόγω της πανδημίας. Στη συνέχεια η Προεδρεύουσα του Presidents' Board της Συμμαχίας EULIST, Αντιπρόεδρος του Πανεπιστημίου Leibniz του Αννόβερου, LUN, Καθηγήτρια Christina von Haaren, παρουσίασε τους στόχους της σύμπραξης.

Ακολούθησε η κεντρική ομιλία από τον προσκεκλημένο ομιλητή, Αντιπρύτανη του Πανεπιστημίου της Murcia, Pedro M. Ruiz-Martinez, με θέμα “A strategic view on the future of higher education online learning”.

Ακολούθως συζητήθηκαν σε τρεις παράλληλες συνεδρίες οι βασικές ευκαιρίες που προσδιορίζονται, αλλά και οι προκλήσεις που αντιμετωπίζονται κατά την εξ αποστάσεως Εκπαίδευση, με στόχο βιώσιμες λύσεις για την Ανώτατη Εκπαίδευση στην Ευρώπη.

Στην πρώτη παράλληλη συνεδρία, στα προβλήματα και στις αρνητικές συνέπειες της εξ αποστάσεως εκπαίδευσης κατά την περίοδο της πανδημίας αναφέρθηκαν μεταξύ άλλων η έλλειψη αλληλεπίδρασης των φοιτητών, από την Καθηγήτρια Julia Gillen, Αντιπρόεδρο του Πανεπιστημίου LUN, η καταστρατήγηση της οργάνωσης του χρόνου σπουδών και του ελεύθερου χρόνου διδασκόντων και σπουδαστών, από τον Δρ. Andreas Körner από το Τεχνικό Πανεπιστήμιο Βιέννης, TUW, αλλά και η δυσκολία προγραμματισμού των εξεταστικών

περιόδων από τη ξαφνική μετάβαση στην εξ αποστάσεως εκπαίδευση, όπως τόνισε η φοιτήτρια Brenda del Cisne Salazar-Lamar, από το Πανεπιστήμιο Rey Juan Carlos της Μαδρίτης, URJC. Παράλληλα, η υπεύθυνη εκπαιδευτικής τεχνολογίας του Πανεπιστημίου Τεχνολογίας Lappeenranta-Lahti LUT, Marjaana Kareinen, επεσήμανε τη δυνατότητα αξιοποίησης της μεικτής εξεταστικής διαδικασίας με την ένταξη ψηφιακών εξετάσεων πέρα από την παραδοσιακή γραπτή εξέταση.

Κατά τη δεύτερη παράλληλη συνεδρία, ο συντονιστής, Αναπληρωτής Καθηγητής Ondřej Ryšavý, από το Πανεπιστήμιο Τεχνολογίας του Μπρνο, BUT, σημείωσε τη δυνατότητα αξιοποίησης της εξ αποστάσεως εκπαίδευσης ως ευέλικτου, υποστηρικτικού εργαλείου των διά ζωής μαθημάτων, ενώ η Πρόεδρος της Παιδαγωγικής Ομάδας του Πανεπιστημίου Jönköping, JU, Αναπληρώτρια Καθηγήτρια Anna Rosengren, τόνισε την σημασία της ενσωμάτωσης της καινοτομίας στην εκπαιδευτική διαδικασία. Αντίστοιχα, ο επικεφαλής του e-learning του Πανεπιστημίου LUH, Cornelis Kater, τοποθετήθηκε υπέρ του συνδυασμού διαφορετικών εργαλείων, αναφέροντας ενδεικτικά τις εκπαιδευτικές πλατφόρμες, στο πλαίσιο ενός διαπανεπιστημιακού δικτύου όπως το EULiST, λαμβάνοντας υπόψη τις διαφορετικές ανάγκες των επί μέρους προγραμμάτων σπουδών.

Κατά την τρίτη παράλληλη συνεδρία, ο συντονιστής, Δρ. Gergely Rakoczi, επικεφαλής του Κέντρου Στρατηγικής Ανάπτυξης Εκπαίδευσης του TUW, αναφέρθηκε στα προβλήματα που απορρέουν από τις διαφο-

ρές στις ψηφιακές δεξιότητες διδασκόντων και σπουδαστών και στο χειρισμό ψηφιακών εκπαιδευτικών εργαλείων. Στη συνέχεια, η Επίκουρος Καθηγήτρια ΣΗΜΜΥ ΕΜΠ Ιωάννα Ρουσσάκη σημείωσε ότι στα μεγάλα ακροατήρια οι δυνατότητες άμεσης επικοινωνίας που επιτρέπουν εργαλεία εξ αποστάσεως καταγραφής των απόψεων των συμμετεχόντων (rolls) και συζητήσεων (chat) διευκολύνουν την ενεργή συμμετοχή των φοιτητών στην εκπαιδευτική διαδικασία. Στα προβλήματα που συνδέονται με την εξ αποστάσεως εκπαίδευση, η φοιτήτρια Αρχιτεκτονικής του Πανεπιστημίου Τεχνολογίας της Μπρατισλάβα, STU, Sára Mária Seidlóná, ανέφερε ότι η διακοπή της καθημερινής ανταλλαγής απόψεων στον ακαδημαϊκό χώρο λόγω της πανδημίας υπονομεύει τον ρόλο της εκπαίδευσης στην υπηρεσία της κοινωνίας.

Στις κοινές συνεδρίες και τις τρεις παράλληλες συζητήσεις της διαδικτυακής ημερίδας παρουσιάσαν τις θέσεις τους είκοσι έξι ομιλητές, ενώ κατά τη διάρκεια των συζητήσεων υπήρξε ιδιαίτερα έντονη ανταλλαγή απόψεων του κοινού με τους ομιλητές. Παράλληλα, καταγράφηκαν οι απόψεις μεγάλου αριθμού συμμετεχόντων, σπουδαστών και διδασκόντων για καίρια θέματα της εξ αποστάσεως εκπαίδευσης με τη διεξαγωγή δημοσκοπήσεων (Σχήματα 3 και 4).

Στην καταληκτική συνεδρία, η Καθηγήτρια Κατερίνα Αδάμ συνόψισε τα κυριότερα συμπεράσματα της ημερίδας, με τη μεγάλη συμμετοχή του κοινού, ενώ η Καθηγήτρια Julia Gillen ενσωμάτωσε τα πορίσματα της συζήτησης στο πλαίσιο της Συμμαχίας

EULiST, αναδεικνύοντας τη σημασία της συνεργασίας πανεπιστημίων για την Ευρωπαϊκή Εκπαίδευση.

Τα επόμενα βήματα για τη δημιουργική αξιοποίηση της εξ αποστάσεως εκπαίδευσης στη διδασκαλία με φυσική παρουσία παρουσιάστηκαν από την Αναπληρώτρια Καθηγήτρια Monika Bakošová, από το Πανεπιστήμιο Τεχνολογίας της Μπρατισλάβα. Εργαλεία όπως ψηφιακές πλατφόρμες κατάλληλες για την υποστήριξη της εκπαιδευτικής διαδικασίας, οργάνωση διαδικτυακών ή μεικτών μαθημάτων μέσω διαπανεπιστημιακών συνεργασιών, χρήση σύγχρονης και ασύγχρονης διδασκαλίας, συμμετοχή προσκεκλημένων εμπειρογνομόνων σε στενή συνεργασία της ακαδημαϊκής με την επιστημονική κοινότητα και τη βιομηχανία, επιλογή κατάλληλων εργαλείων για την ανάπτυξη ψηφιακών και παιδαγωγικών δεξιοτήτων των διδασκόντων και των διδασκόμενων, διεξαγωγή αδιάβλητων εξ αποστάσεως εξετάσεων, προσελκύοντας παράλληλα την ενεργή και δημιουργική συμμετοχή των σπουδαστών στη διάρκεια των μαθημάτων.

Κλείνοντας την ημερίδα, ο Πρύτανης του ΕΜΠ, Καθηγητής Ανδρέας Μπουντουβής, διατύπωσε την αισιοδοξία του για την αξιοποίηση της εμπειρίας από την εξ αποστάσεως εκπαίδευση σε μία νέα, βελτιωμένη εκπαίδευση με τη φυσική παρουσία των μελών της Πανεπιστημιακής Κοινότητας.

Περισσότερες λεπτομέρειες και υλικό για την Ευρωπαϊκή Διαδικτυακή Ημερίδα για την εξ αποστάσεως Εκπαίδευση στην ιστοσελίδα <http://dlworkshop.ntua.gr/> ■

## Μαθηματικά και Αλγόριθμοι Ανηγμένων Αναπαραστάσεων στην εποχή των Μεγάλων Δεδομένων και της Μηχανικής Μάθησης

Ε. Γεωργούλης<sup>1,2,4</sup>, Μ. Λουλάκης<sup>1,2,3</sup>, Α. Παπαπαντολέων<sup>1,2,5</sup>, Α. Τσιούρβας<sup>6</sup>, Δ. Φουσκάκης<sup>1,2,3</sup>, Κ. Χρυσάφινος<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Τομέας Μαθηματικών, Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών, ΕΜΠ

<sup>2</sup> FEMO Lab: Εργαστήριο Οικονομικών Μαθηματικών και Μαθηματικής Βελτιστοποίησης, ΣΕΜΦΕ, ΕΜΠ

<sup>3</sup> STATS Lab: Εργαστήριο Στατιστικής, ΣΕΜΦΕ, ΕΜΠ

<sup>4</sup> School of Computing and Mathematical Sciences, University of Leicester, Ηνωμένο Βασίλειο

<sup>5</sup> Delft Institute of Applied Mathematics, TU Delft, Ολλανδία

<sup>6</sup> MIT Operational Research Center, Massachusetts Institute of Technology, Ηνωμένες Πολιτείες Αμερικής

Χρηματοδότηση: Α) ΕΛ.ΙΔ.Ε.Κ.: κωδ 3270 (Ε. Γεωργούλης και Κ. Χρυσάφινος), κωδ 1034 (Μ. Λουλάκης) και κωδ 2152 (Α. Παπαπαντολέων και Ε. Γεωργούλης). 2) Π.Ε.Β.Ε.: κωδ 65228500 (Δ. Φουσκάκης). 3) The Leverhulme Trust, UK: κωδ RPG-2015-306 και RPG-2021-238 (Ε. Γεωργούλης)

Η σύγχρονη ψηφιακή εποχή επιτρέπει την παρατήρηση και καταγραφή της ανθρώπινης δραστηριότητας μέσα από έξυπνες συσκευές και μοντέρνους, συνεχώς εξελισσόμενους αισθητήρες. Οι νέες δυνατότητες επεξεργασίας και χρήσης εξαιρετικά μεγάλων όγκων δεδομένων αφενός απαιτούν νέες αναπαραστάσεις για τα δεδομένα αυτά, αφετέρου αναδεικνύουν νέες δυνατότητες προτυποποίησης φαινομένων

και διαδικασιών απ' ευθείας από τα δεδομένα. Ταυτόχρονα, η πολυπλοκότητα πολλών φαινομένων και διαδικασιών, που χρήζουν προτυποποίησης σε εφαρμογές αιχμής, καθιστά την προσομοίωσή τους από τον υπολογιστή εξαιρετικά δυσχερή ή και αδύνατη.

Η προτυποποίηση και υπολογιστική προσομοίωση φυσικών, μηχανικών, χημικών, χρηματοοικονομικών και άλλων φαινομένων και διαδικασιών συνήθως

κατηγοριοποιείται ως προτυποποίηση και προσομοίωση μικρών, μεσαίων και μεγάλων κλιμάκων (micro, meso, macro-scale modelling). Τα πρότυπα μεγάλων κλιμάκων είναι σε πολλές περιπτώσεις απλούστερα, γι' αυτό προτιμούμε να προσφεύγουμε σε αυτά όπου είναι εφικτό. Η πρόοδος πολλών επιστημονικών περιοχών αιχμής όμως, όπως τα υλικά (πολυμερή, υπεραγωγοί, υπερ-ελαστικότητα, αυτο-θεραπευόμενες δομές κ.ά.),

η χημεία μεγάλων μορίων, αλλά και τα μοντέρνα χρηματοοικονομικά και κοινωνικά/πληθυσμιακά/οικολογικά μοντέλα (προτυποποίηση κοινωνικών δικτύων, οικουστημάτων, κ.ά.) δημιουργούν νέες προκλήσεις, καθώς η πολυπλοκότητα των φαινομένων αυτών απαιτεί τη μετάβαση σε προτυποποίηση και προσομοίωση μεσαίων και μικρών κλιμάκων. Ταυτόχρονα, η μοντέρνα βιομηχανική θεώρηση της υλοποίησης των επονομαζόμενων ψηφιακών διδύμων (digital twins) για εξοπλισμό και μηχανές υψηλού κόστους, απαιτεί την αλληλεπίδραση διεργασιών μεγάλης πολυπλοκότητας η καθεμία.

Τα παραπάνω καθιστούν σαφές ότι ταυτόχρονα με την ταχύτατη πρόοδο στον κατασκευαστικό και βιομηχανικό στίβο, αντίστοιχη πρόοδος είναι απαραίτητη και σε επίπεδο αλγορίθμων και μεθόδων προσομοίωσης. Ένα σημαντικό μέρος της έρευνας στα εργαστήρια FEMO και STATS του Τομέα Μαθηματικών της Σ.Ε.Μ.Φ.Ε. εστιάζει ακριβώς σε αυτό το πεδίο.

Η πολυπλοκότητα εκφράζεται ως επί το πλείστον στην προτυποποίηση και προσομοίωση με την παρουσία πολλών (ευκλείδειων) διαστάσεων. Στα μαθηματικά ως διάσταση ορίζουμε το πλήθος των όρων (συντεταγμένων) που χρειάζονται για να εκφράσουμε αμφιμονοσήμαντα ένα σημείο ή μια κατάσταση. Για να αναδείξουμε τις απαιτούμενες τάξεις μεγέθους για προσομοίωση πολυδιάστατων φαινομένων και διαδικασιών, ας θεωρήσουμε ότι το ζητούμενο είναι η κατάσταση  $U$  της φυσικής/χημικής/μηχανικής/χρηματοοικονομικής διαδικασίας που μας απασχολεί, η οποία έχει ως εισαγόμενο ένα διάνυσμα  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ , όπου  $d$  η «φυσική» διάσταση. Με άλλα λόγια, χρειαζόμαστε έναν τρόπο να υπολογίσουμε την  $U(\mathbf{x})$  για κάθε πιθανό  $\mathbf{x}$ . Στην πράξη ικανοποιούμε με την προσέγγιση της ζητούμενης κατάστασης  $U$  σε ένα πεπερασμένο πλήθος σημείων ή ως (γραμμικό ή μη γραμμικό) ανάπτυγμα γνωστών, στοιχειωδών συναρτήσεων (σειρών Fourier, πολυωνύμων, wavelets, αρχιτεκτονικών νευρωνικών δικτύων κτλ.). Αν, παραδείγματος χάριν, για μια αξιόπιστη προσέγγιση της  $U$  χρειαζόμαστε 10 τιμές ανά κατεύθυνση, τότε συνολικά πρέπει να υπολογίσουμε  $10^d$  τιμές. Στην περίπτωση αυτή η διάσταση του υπολογιστικού μοντέλου είναι  $10^d$ . Αν  $d=3$ , χρειαζόμαστε χίλιες, αν όμως  $d=12$ , απαιτούνται ένα τρισεκατομμύριο τιμές. Μερικές φορές η κάθε τέτοια τιμή είναι αποτέλεσμα άμεσου και πεπερασμένου υπολογισμού. Πολλές φορές όμως, η φύση των φαινομένων καλεί για πεπλεγμένες υπολογιστικές διαδικασίες, όπως π.χ. αριθμητικής επίλυσης μεγάλων συστημάτων διαφορικών ή και μερικών διαφορικών εξισώσεων, οι οποίες είναι υπολογιστικά δύσκολο ή

αδύνατο να εκτελεστούν ακόμα και με τους σημερινούς υπερυπολογιστές.

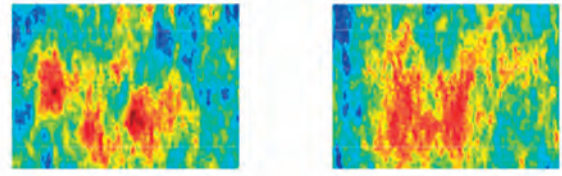
Παρατηρούμε λοιπόν ότι η δυσκολία προσομοίωσης αυξάνεται πολλές φορές εκθετικά με τη «φυσική» διάσταση του προβλήματος. Η παραπάνω σκιαγράφηση της έκρηξης της υπολογιστικής πολυπλοκότητας γνωστών μεθόδων για συνεχώς αυξανόμενες διαστάσεις είναι γνωστή και ως *μάστιγα της διαστατικότητας* (curse of dimensionality), όρος που εισήγαγε ο Bellman στα μέσα του 20ού αιώνα [Bell]. Κεντρική πρόκληση λοιπόν είναι η *κατασκευή και μελέτη αλγορίθμων ικανών να παράγουν αξιόπιστες και ακριβείς προσομοιώσεις για ουσιωδώς πολυδιάστατα προβλήματα*. Για να είναι δυνατή η μελέτη και η προβλεψιμότητα της συμπεριφοράς τους, είναι θεμιτό οι αλγόριθμοι αυτοί να προέρχονται από αυστηρώς ορισμένες μαθηματικές μεθοδολογίες. Η γενική ιδέα πίσω από πολλούς από τους αλγορίθμους αυτούς είναι η «έξυπνη» μείωση της διάστασης, δηλαδή η αναγωγή του προβλήματος σε έναν υπόχωρο ή κατάλληλη πολλαπλότητα, χωρίς να μειώνεται σημαντικά η ποιότητα της προσέγγισης. Τέτοιες διαδικασίες ονομάζονται πολλές φορές *ανηγμένες* (ή και *μειωμένες/ελαττωμένες*) μέθοδοι ή αναπαραστάσεις (reduced representations).

Ως πρώτο παράδειγμα αναφέρουμε το πρόβλημα της αξιόπιστης και ακριβούς προσομοίωσης φαινομένων διάχυσης και αγωγιμότητας σε υλικά πολλαπλών κλιμάκων με μικροδομές (multiscale materials with microstructures). Έστω ότι σκοπός μας είναι να υπολογίσουμε την  $\varphi$  ως λύση της μερικής διαφορικής εξίσωσης

$$-\nabla \cdot (K \nabla \varphi) = f$$

σε ένα χωρίο  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  μαζί με κατάλληλες συνοριακές συνθήκες, π.χ.,  $\frac{\partial \varphi}{\partial n} + \gamma \varphi = g$  ορισμένες στο σύνορο του χωρίου  $\partial \Omega$  για κάποιο συντελεστή  $\gamma$  και  $n$  το μοναδιαίο διάνυσμα κάθετο στο σύνορο. Η άγνωστη λύση  $\varphi$  μπορεί να προτυποποιεί την πίεση σε μια ροή σε πορώδες μέσο ή το ηλεκτρικό πεδίο σε ένα υλικό κτλ. Η  $f$  προτυποποιεί τις εξωτερικές δυνάμεις/φορτίσεις του συστήματος και  $K$  είναι ο συντελεστής διάχυσης ή αγωγιμότητας του υλικού αντίστοιχα. Το πρόβλημα αυτό είναι εξαιρετικής σημασίας, καθώς απαντάται στην προτυποποίηση και πολλών άλλων διαδικασιών.

Η λύση  $\varphi$  εξαρτάται ουσιωδώς από τη μορφή των  $K, f, \gamma$ : αν οι  $K, f$  περιέχουν και μη περιοδικές ή και τυχαίες μικροδομές, τότε αντίστοιχες μικροδομές αναμένονται και στη λύση  $\varphi$ . Σκοπός μας είναι η επίλυση του προβλήματος για πληθώρα  $K, f, \gamma$ , δηλαδή η εύρεση της απεικόνισης  $U(K, f, \gamma) = \varphi$  με εισαγόμενα τα  $K, f, \gamma$  και εξαγόμενο τη λύση  $\varphi$ . Η επίλυση της εξίσωσης με συνήθεις μεθόδους, π.χ., πεπερασμένα



(a) SPE11,  $\alpha_{max}/\alpha_{min} = 6.1765e - 5$ . (b) SPE21,  $\alpha_{max}/\alpha_{min} = 5.0193e - 5$

Σχήμα 1. Δεδομένα για 2 διαπερατότητες  $K$  από τη συλλογή της Society of Petroleum Engineers (<https://www.spe.org>)

στοιχεία, ακόμα για και ένα μόνο ( $K, f, \gamma$ ), είναι ουσιαστικά αδύνατη, καθώς απαιτείται η επίλυση όλων των κλιμάκων των  $K$  και  $f, \gamma$  οι οποίες μπορεί να είναι πολλές τάξεις μεγέθους μικρότερες των φυσικών διαστάσεων.

Με τη συμβολή μας στην κατασκευή και μελέτη μιας νέας αλγοριθμικής διαδικασίας, της Τοπικής Ορθογώνιας Παραγοντοποίησης (Local Orthogonal Decomposition, LOD) [MP,EGMP,EGM], το παραπάνω πρόβλημα έχει καταστεί υπολογιστικά προσπελάσιμο για μεγάλο εύρος ( $K, f, \gamma$ ) και είμαστε σε θέση να εκτιμήσουμε την ποιότητα και αξιοπιστία των παραγόμενων αποτελεσμάτων. Για παράδειγμα, έστω ότι μελετούμε την πίεση της ροής αργού πετρελαίου σε ένα πορώδες κοίτασμα διαπερατότητας  $K$  της μορφής του Σχήματος 1(a) ή (b). Η προσαρμοστική μέθοδος LOD μπορεί να παράγει αποτελέσματα σφάλματος μικρότερου του 5% σε έναν προσωπικό υπολογιστή (Σχήμα 2). Η μέθοδος LOD έχει μετέπειτα εφαρμοστεί σε προβλήματα μεγάλου όγκων δεδομένων, για παράδειγμα στην εύρεση του συνολικού  $U$  για ολόκληρες κλάσεις προβλημάτων με τυχαίους συντελεστές [FP].

Εξίσου σημαντικό είναι και το «αντίστροφο» πρόβλημα, κατά το οποίο οι συντελεστές  $K$  ή/και  $\gamma$  είναι επίσης άγνωστοι και καλούμαστε να τους εκτιμήσουμε μέσω πειραματικών ή άλλων δεδομένων, ορίζοντας έτσι προβλήματα καταναμημένου ελέγχου με περιορισμούς ΜΔΕ. Μετασχηματίζοντας το αντίστροφο πρόβλημα σε πρόβλημα καταναμημένου ελέγχου με περιορισμούς ΜΔΕ, είναι εφικτή η υπολογιστική του μελέτη σε γεωμετρικώς πολύπλοκα χωρία. Αντίστροφα προβλήματα αυτής της μορφής είναι υψίστης σημασίας σε εφαρμογές υπολογιστικής τομογραφίας για την ακριβή αναπαράσταση των ανθρώπινων ιστών. Μοντέρνες υπολογιστικές μέθοδοι για τα προβλήματα αυτά συνήθως χαρακτηρίζονται από εξαιρετικά υψηλές διαστάσεις σε επίπεδο προσομοίωσης. Για το σκοπό αυτό μελετούμε τη μείωση των διαστάσεων της προσέγγισης με χρήση προσαρμοστικών αλγορίθμων, στηριζόμενων σε μαθηματικώς αυστηρές εκ των υστέρων εκτιμήσεις σφαλμάτων [CGP].

Μια άλλη κατηγορία ερευνητικής δραστηριότητας είναι η χρήση αναπτυγμάτων βαθιών νευρωνικών δικτύων

(deep neural networks) για την επίλυση προβλημάτων μερικών διαφορικών εξισώσεων εξελικτικού τύπου σε δεκάδες φυσικές διαστάσεις. Παραδείγματα αυτής της μορφής προέρχονται τόσο από την κινητική θεώρηση φαινομένων διάχυσης και αλληλεπίδρασης σωματιδίων, όσο και από προσεγγίσεις μοντέρνων χρηματοοικονομικών μοντέλων. Στην πρόσφατη εργασία μας [GLT] αναπτύσσουμε μια νέα μεθοδολογία προσέγγισης λύσεων εξελικτικών ΜΔΕ, χρησιμοποιώντας νέα συναρτησιακά ελαχιστοποίησης από τη μοντέρνα θεωρία των ροών κλίσης (gradient flows), αντί για τα συνήθη συναρτησιακά κόστους/απώλειες (loss functionals) των ελαχίστων τετραγώνων των χωροχρονικών υπολοίπων που απαντώνται στη πρόσφατη βιβλιογραφία των εξαιρετικά διαδεδωμένων physics informed neural networks/deep Galerkin μεθοδολογιών [SS,RPK]. Η νέα μέθοδος χρησιμοποιεί χωρικές προσεγγίσεις από αρχιτεκτονικές βαθιών νευρωνικών δικτύων υπολοίπου (ResNETs) και χρονικό βηματισμό με πεπλεγμένες μεθόδους πεπερασμένων διαφορών. Καθώς, λοιπόν, η εκμάθηση του ResNET πραγματοποιείται σε κάθε χρονικό βήμα, αυξάνεται σημαντικά ο ρυθμός εκμάθησης, καθώς ως αρχικές τιμές των παραμέτρων στο επόμενο βήμα λαμβάνουμε τις τιμές στο προηγούμενο. Η νέα αυτή μεθοδολογία ροών κλίσης βαθιών νευρωνικών δικτύων εφαρμόστηκε για την προσέγγιση λύσεων κινητικών μοντέλων διάχυσης σε  $d$  χωρικές διαστάσεις ( $d=2$  έως 50). Στο Σχήμα 3 παραθέτουμε μερικά αποτελέσματα από τη χρήση του συναρτησιακού των Jordan, Kinderlehrer και Otto (JKO), ως συναρτησιακού απώλειας, για το πρόβλημα θερμότητας σε  $d$  φυσικές χωρικές διαστάσεις. Για την προσέγγιση της λύσης 300d τυχαία σημεία χρησιμοποιήθηκαν για κάθε χρονικό βήμα.

Το συναρτησιακό JKO εμπλέκει την έννοια απόστασης του Wasserstein με την εντροπία του Boltzmann, οι οποίες απαντώνται στη στατιστική θεωρία των ρευστών. Σημειώνουμε ότι το ίδιο πρόβλημα δεν κατέστη δυνατό να προσομοιωθεί με τη ίδια ακρίβεια με άλλες γνωστές μεθοδολογίες από τη βιβλιογραφία για  $d>10$ . Τρέχουσα ερευνητική δραστηριότητα [GP] περιλαμβάνει την εφαρμογή της νέας αυτής μεθοδολογίας ροών κλίσης βαθιών νευρωνικών δικτύων στο πρόβλημα κοστολόγησης χρηματοοικονομικών προϊόντων χρησιμοποιώντας το μοντέλο "rough Heston" [GJR], καθώς και την τιμολόγηση παραγώγων υπό την παρουσία προσαρμογών αποτίμησης (valuation adjustments). Τα προβλήματα αυτά απαιτούν την επίλυση συστημάτων γραμμικών ή μη-γραμμικών εξελικτικών ΜΔΕ μεγάλης διάστασης. Παράλληλα, νέες τεχνικές μας

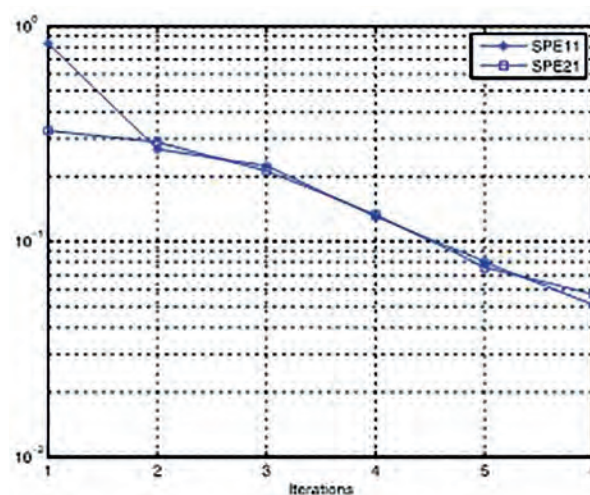
επιτρέπουν να εξάγουμε συμπεράσματα σχετικά με το εύρος των τιμών πολυδιάστατων παραγώγων χρησιμοποιώντας έμμεσες χρηματοοικονομικές πληροφορίες, χωρίς την υπόθεση κάποιου μοντέλου [NPX].

Πηγαίνοντας, τώρα, ένα βήμα πίσω στη λογική διαδικασία της προτυποποίησης, ξεκινούμε πολλές φορές από ακατέργαστα δεδομένα/μετρήσεις. Ο τεράστιος όγκος των ακατέργαστων διαθέσιμων δεδομένων σε μοντέρνες εφαρμογές καθιστά την άμεση χρήση τους από μεθόδους προτυποποίησης, όπως οι παραπάνω, εξαιρετικά δύσκολη ή και αδύνατη. Άρα η αναγωγή/μείωση των ακατέργαστων μεγάλων όγκων δεδομένων με χρήση στατιστικών μοντέλων είναι απαραίτητη. Υπό την Μπεϋζιανή οπτική, η επιλογή πρότερων κατανομών για τις παραμέτρους του κάθε, υπό σύγκριση, μοντέλου είναι καίριας σημασίας. Οι πρότερες κατανομές συρρίκνωσης έχουν ως στόχο να επιτύχουν τη συρρίκνωση των μη επιθυμητών επιδράσεων στο μηδέν, ενώ ταυτόχρονα να διατηρούν τις επιθυμητές επιδράσεις. Χρησιμοποιώντας τη μεθοδολογία των δυναμικά-μεταγενέστερων-αναμενόμενων εκ των προτέρων κατανομών [FND, FN], δημιουργήθηκε μια νέα κλάση, μη πληροφοριακών, πρότερων κατανομών συρρίκνωσης [TFN]. Οι νέες αυτές μέθοδοι υπερτερούν στη μείωση διάσπαρτων δεδομένων μεγάλου όγκου σε σχέση με υπάρχουσες μεθοδολογίες και αναμένουμε ότι θα είναι χρήσιμες σε πληθώρα εφαρμογών.

Εν κατακλείδι, οι μοντέρνες απαιτήσεις προσομοίωσης δημιουργούν την ανάγκη για την κατασκευή και μελέτη νέων μαθηματικών αλλά και, κυρίως, αλγορίθμων αναγωγής/μείωσης, ξεκινώντας από την εκκαθάριση ακατέργαστων μεγάλων όγκων δεδομένων μέχρι και την αντιμετώπιση της μόστιγας της διαστατικότητας, στις διάφορες εκφάνσεις της. Η μαθηματική θεμελίωση των νέων αυτών υπολογιστικών μεθόδων είναι υψίστης σημασίας, καθώς είναι ο μόνος τρόπος να εγγυηθεί κανείς την καλή τους συμπεριφορά και ακρίβεια.

### Βιβλιογραφία:

- [Bell] R. Bellman. 'Dynamic programming'. Reprint of the 1957 edition. Princeton University Press, 2010. xxx+340 pp.
- [CGP] K. Chrysafinos, E.H. Georgoulis, and V. Papadopoulos. 'Adaptivity for a Robin coefficient inverse problem', In preparation (2022).
- [EGMP] D. Elfverson, E.H. Georgoulis, A. Målqvist, and D. Peterseim. 'Convergence of a discontinuous Galerkin multiscale method'. SIAM J. Numer. Anal. 51(6), 3351--3372, (2013).
- [EGM] D. Elfverson, E.H. Georgoulis, and A. Målqvist. 'An adaptive discontinuous Galerkin multiscale method for elliptic problems'. Multiscale Model. Simul. 11(3), 747--765, (2013).
- [FP] M. Feischl and D. Peterseim. 'Sparse compression of expected solution operators'. SIAM J. Numer. Anal. 58(6), 3144--3164, (2020).
- [FND] D. Fouskakis, I. Ntzoufras and D.



Σχήμα 2. Σύγκλιση της επαναληπτικής προσαρμοστικής μεθόδου LOD: σφάλμα στην ενεργειακή νόρμα ως προς το πλήθος των επαναλήψεων [EGM]

Dimension	L2 Relative Error	Maximum Error	Mean Error
2	8.7e-2	1.0e-1	8.5e-2
3	1.7e-1	4.8e-1	1.3e-1
5	8.6e-2	4.2e-1	5.3e-2
10	8.2e-3	3.9e-2	6.8e-3
20	4.0e-3	6.8e-3	4.0e-3
40	2.1e-3	4.2e-3	1.9e-3
50	2.5e-3	1.6e-2	2.5e-3

Σχήμα 3. Σύγκλιση της μεθόδου ροών κλίσης αρχιτεκτονικών ResNET για το συναρτησοειδές των Jordan, Kinderlehrer και Otto σε διάφορες διαστάσεις και έννοιες σφάλματος.

- Draper. 'Power-Expected-Posterior Priors for Variable Selection in Gaussian Linear Models', Bayesian Analysis, 10, 75--107, (2015).
- [FN] D. Fouskakis and I. Ntzoufras. 'Power-Expected-Posterior Priors as Mixtures of g-Priors', Bayesian Analysis (accepted) (2022).
- [GJR] J. Gatheral, T. Jaisson, M. Rosenbaum. 'Volatility is rough', Quantitative Finance, 18, 933-949, (2018)
- [GLT] E.H. Georgoulis, M. Loulakis, A. Tsiourvas. 'Discrete gradient flow approximations of high dimensional evolution partial differential equations via deep neural networks', Submitted for publication, (2022).
- [GP] E.H. Georgoulis and A. Papantoleon. 'Rough Heston approximation via high dimensional evolution PDEs discretized by deep neural networks', In preparation (2022).
- [MP] A. Målqvist and D. Peterseim. 'Localization of elliptic multiscale problems'. Math. Comp. 83 (290), 2583--2603, (2014).
- [NPX] A. Neufeld, A. Papantoleon, and Q. Xiang. 'Model-free bounds for multi-asset options using option-implied information and their exact computation'. Management Science (forthcoming) (2022).
- [RPK] M. Raissi, P. Perdikaris, and G. E. Karniadakis. 'Physics-informed neural networks: a deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations'. J. Comput. Phys. 378, 686--707 (2019).
- [SS] J. Sirignano and K. Spiliopoulos. 'DGM: A deep learning algorithm for solving partial differential equations', J. Comput. Phys., vol. 375, pp. 1339--1364, (2018).
- [TFN] G. Tzoumerkas and D. Fouskakis, I. Ntzoufras. 'Power-Expected-Posterior Prior in Shrinkage Regression: Problem Formulation and Preliminary Results', Submitted for publication, (2022). ■

# Η Μηχανική Μάθηση στην επιστήμη της Χημικής Μηχανικής

Του Καθηγητή **Χαράλαμπος Σαρίμβης**, Τομέας Ανάλυσης, Σχεδιασμού και Ανάπτυξης Διεργασιών και Συστημάτων, Σχολή Χημικών Μηχανικών, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

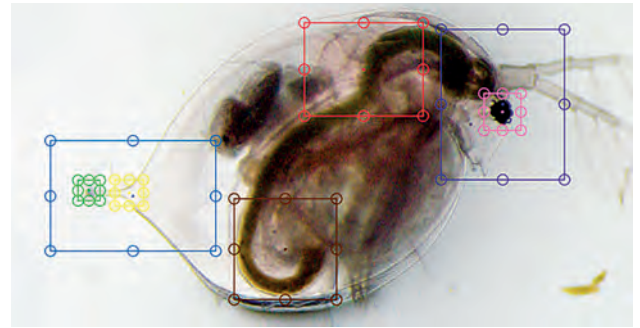
Η επιστήμη της χημικής μηχανικής βασίζεται σε μεγάλο βαθμό στην ανάπτυξη μαθηματικών μοντέλων για το σχεδιασμό, την αριστοποίηση και τη ρύθμιση των σύνθετων συστημάτων που θεραπεύει. Για την ανάπτυξη των μοντέλων αυτών χρησιμοποιούνται κυρίως τεχνικές που βασίζονται σε θεμελιώδεις εξισώσεις και νόμους (physics-based modelling), όπως οι νόμοι διατήρησης και μεταφοράς μάζας και ενέργειας και οι νόμοι της θερμοδυναμικής. Οι μεθοδολογίες μηχανικής μάθησης που βασίζονται σε δεδομένα (data-driven modelling) έχουν αποτελέσει πεδία έρευνας και εφαρμογής για περισσότερα από 30 χρόνια [1], χωρίς όμως να καταφέρουν για μεγάλο χρονικό διάστημα να ενταχθούν στον πυρήνα των εργαλείων στα οποία εκπαιδεύονται και τα οποία χρησιμοποιούν οι χημικοί μηχανικοί. Τα τελευταία όμως χρόνια, η αυξανόμενη διαθεσιμότητα υπολογιστικών πόρων, η συστηματική καταγραφή και αποθήκευση μεγάλων όγκων δεδομένων, και η συνεχής βελτίωση των αλγόριθμων επεξεργασίας των δεδομένων έχουν οδηγήσει σε ραγδαία αύξηση της έρευνας και των εφαρμογών της μηχανικής μάθησης στην επιστήμη της χημικής μηχανικής [2].

Η υπολογιστική νοημοσύνη και η μηχανική μάθηση αποτελούν κεντρικά πεδία ερευνητικής δραστηριότητας της Μονάδας Αυτόματης Ρύθμισης και Πληροφορικής (ΜΑΡΠ) ([https://www.chemeng.ntua.gr/labs/control\\_lab/](https://www.chemeng.ntua.gr/labs/control_lab/)), η οποία εδρεύει στον Τομέα Ανάλυσης, Σχεδιασμού & Ανάπτυξης Διεργασιών και Συστημάτων της Σχολής Χημικών Μηχανικών ΕΜΠ. Ενδεικτικά αναφέρονται οι πρωτότυποι αλγόριθμοι εκπαίδευσης μοντέλων νευρωνικών δικτύων ακτινικής συνάρτησης βάσης (Radial Basis Function Neural Networks, RBFNN) που προτάθηκαν από τη μονάδα, χρησιμοποιώντας στοιχεία ασαφούς λογικής και μεθόδους στοχαστικής βελτιστοποίησης [3]. Παρουσιάστηκαν επίσης καινοτόμες μεθοδολογίες ανάπτυξης εμπειρικών μοντέλων για συστήματα κατανεμημένων παραμέτρων (Distributed Parameter Systems, DPS), δηλαδή για συστήματα τα οποία μεταβάλλονται συναρτήσει του χρόνου αλλά και του χώρου. Συστήματα κατανεμημένων παραμέτρων χρησιμοποιούνται για τη δυναμική μοντελοποίηση ποικίλων διεργασιών χημικής μηχανικής όπως είναι οι αυλωτοί αντιδραστήρες εμβολικής ροής, συστήματα πολυμερισμού, συστήματα παραγωγής αεροδιαλύματος, βασισμένα ή συστήματα μεταφοράς θερμότητας. Τα εμπειρικά μοντέλα χρησιμοποιήθηκαν για την αυτόματη ρύθμιση των συστημάτων κατανεμημένων παραμέτρων και πιο συγκεκριμένα ενσωματώθηκαν σε μεθόδους προβλεπτικού ελέγχου

(Model Predictive Control, MPC), που η λειτουργία του βασίζεται στην επαναλαμβανόμενη διαμόρφωση και επίλυση ενός προβλήματος μαθηματικής βελτιστοποίησης σε πραγματικό χρόνο [4].

Τα τελευταία χρόνια η ΜΑΡΠ δραστηριοποιείται σε αναδυόμενους κλάδους της πληροφορικής που σχετίζονται με τις επιστήμες της Χημικής Μηχανικής, της Χημείας και της Βιολογίας και πιο συγκεκριμένα στις περιοχές της χημειοπληροφορικής, της νανοπληροφορικής και της φαρμαπληροφορικής. Οι στόχοι της εφαρμογής της μηχανικής μάθησης σε αυτές τις περιοχές είναι η ανάπτυξη μοντέλων για την υπολογιστική (in-silico) πρόβλεψη ιδιοτήτων χημικών ουσιών, φαρμάκων και υλικών και στη συνέχεια ο σχεδιασμός χημικών δομών ώστε να αριστοποιούνται οι επιθυμητές ιδιότητες και να ελαχιστοποιούνται οι ανεπιθύμητες ιδιότητες, όπως η τοξικότητα. Ως παράδειγμα, αναφέρονται τα μοντέλα πρόβλεψης της τοξικότητας υπερπαραμαγνητικών νανοσωματιδίων οξειδίου του σιδήρου (superparamagnetic iron oxide nanoparticles, SPIONs), που αναπτύχθηκαν με εφαρμογή της μεθόδου λογιστικής παλινδρόμησης (logistic regression) σε πειραματικά δεδομένα, δίνοντας έμφαση στη χρήση των συγκεκριμένων νανοσωματιδίων ως σκιαγραφική μέσα σε διαδικασίες απεικόνισης μαγνητικού συντονισμού (MRI) για τη μη εμβατική επισήμανση και παρακολούθηση βλαστοκυττάρων [5]. Επίσης αναφέρεται η διαδικτυακή εφαρμογή Nanopot (<https://nanopot.cloud.nanosolveit.eu/>), που αναπτύχθηκε στο πλαίσιο του έργου H2020 NanoSolveIT, η οποία περιλαμβάνει μοντέλα μηχανικής μάθησης (extra trees, XGBoost) για την πρόβλεψη ιδιοτήτων νανοσωματιδίων χρυσού (logP, δυναμικό ζήτη, πρόσληψη στην κυτταρική σειρά A549). Οι περιγραφείς (descriptors) που χρησιμοποιήθηκαν ως μεταβλητές εισόδου στα μοντέλα μηχανικής μάθησης υπολογίστηκαν με εφαρμογή της μεθοδολογίας τριγωνοποίησης Delaunay στην τρισδιάστατη κρυσταλλογραφική δομή των νανοσωματιδίων, λαμβάνοντας υπόψη 14 φυσικοχημικές ιδιότητες για κάθε άτομο (ατομικός αριθμός, ατομική ακτίνα, ατομικό βάρος, ατομικός όγκος, σημείο βρασμού, πυκνότητα, ικανότητα πόλωσης, διπόλων, θερμότητα εξάτμισης, θερμότητα σύντηξης, ραδιενέργεια, σταθερά πλέγματος, θερμική αγωγιμότητα, ειδική θερμότητα και ηλεκτρωνητικότητα).

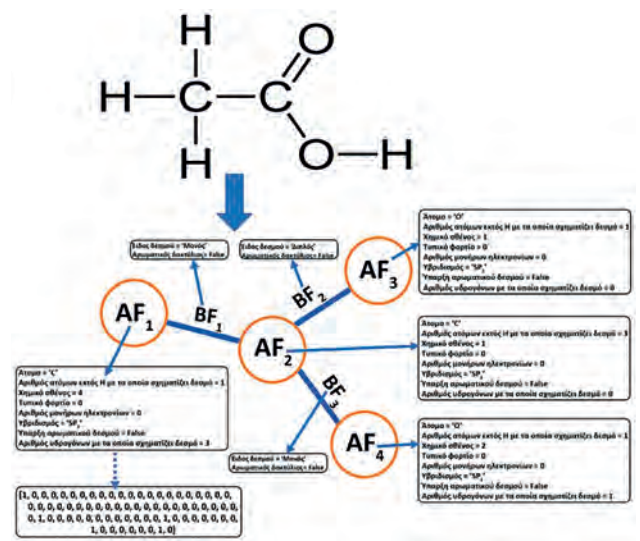
Στην εποχή της βαθιάς μάθησης (deep learning), η ΜΑΡΠ παρουσιάζει έντονη δραστηριότητα στην ανάπτυξη συστημάτων αυτομάτου ελέγχου με βάση μεθοδολογίες βαθιάς ενισχυτικής μάθησης (deep reinforcement



**Εικόνα 1:** Εικόνα δαφνιδίου και περιοχές ενδιαφέροντος που χρησιμοποιούνται για την ταξινόμηση των δυσπλασιών που οφείλονται στην έκθεση σε νανοσωματίδια (κεφαλή: μωβ πλαίσιο, μάτι: ροζ πλαίσιο, καρδιά: κόκκινο πλαίσιο, κοιλιά: καφέ πλαίσιο, ουρά: μπλε πλαίσιο, ουρά-άκρο: πράσινο πλαίσιο, βάση ουράς: κίτρινο πλαίσιο).

learning), το σχεδιασμό υπολογιστικών ροών για την εξαγωγή συμπερασμάτων από την αυτοματοποιημένη ανάλυση ψηφιακών εικόνων και την ανάπτυξη ολοκληρωμένων συστημάτων για το σχεδιασμό φαρμάκων, χημικών δομών και νανοδομών που ανταποκρίνονται στις απαιτήσεις για ασφάλεια, δραστηριότητα και αποτελεσματικότητα.

Για παράδειγμα, η μεθοδολογία DeepDaph και η αντίστοιχη διαδικτυακή εφαρμογή (<https://deepdaph.cloud.nanosolveit.eu/>) που αναπτύχθηκε στο πλαίσιο του έργου H2020 NanoSolveIT αυτοματοποιεί τη διαδικασία προσδιορισμού των ανεπιθύμητων επιπτώσεων που επιφέρει σε περιβαλλοντικούς μικροοργανισμούς όπως οι *Daphnia Magna* η



**Εικόνα 2:** Γράφος που απεικονίζει τη δομή του μορίου του οξικού οξέος. Τα χαρακτηριστικά των ατόμων (κόμβων) συμβολίζονται με AF (Atom Features) και τα χαρακτηριστικά των δεσμών (ακμών) με BF (Bond Features). Για τα χαρακτηριστικά του πρώτου ατόμου AF<sub>1</sub> παρατίθεται και το διάνυσμα που προκύπτει με one-hot κωδικοποίηση και χρησιμοποιείται σε εφαρμογές υπολογιστικής ανάλυσης γράφων.



έκθεση σε νανοσωματίδια αργύρου και οξειδίου του τιτανίου. Η μεθοδολογία βασίζεται σε συνδυασμό αρχιτεκτονικών βαθιών νευρωνικών δικτύων. Συγκεκριμένα η αρχιτεκτονική ανιχνευτή απλής λήψης (single shot detector, SSD) χρησιμοποιήθηκε για την ανίχνευση και την απομόνωση συγκεκριμένων περιοχών ενδιαφέροντος σε ψηφιακές εικόνες των μικροοργανισμών και συγκεκριμένα την κεφαλή, το μάτι, την καρδιά, την κοιλιά, την ουρά, το άκρο της ουράς και τη βάση της ουράς (εικόνα 1). Στη συνέχεια η αρχιτεκτονική των συνελκτικών νευρωνικών δικτύων (Convolutional Neural Networks, CNNs) χρησιμοποιήθηκε για την ανάπτυξη μοντέλων ταξινόμησης των περιοχών της καρδιάς και της κοιλιάς με βάση τη συγκέντρωση σε λιπίδια. Το σύνολο των αποτελεσμάτων και η σύγκριση με την ανάλυση εικόνων δαφνιδίων που δεν έχουν εκτεθεί σε νανοσωματίδια (controls) επιτρέπει την εκτίμηση της βαρύτητας των επιπτώσεων της έκθεσης σε νανοσωματίδια [6].

Η αρχιτεκτονική των νευρωνικών δικτύων γράφων (Graph Neural Networks) προσφέρει εξαιρετικές δυνατότητες μοντελοποίησης χημικών δομών, φαρμάκων και υλικών, καθώς οι γράφοι μπορούν να αναπαραστήσουν λεπτομερώς και με τρόπους που είναι κατανοητοί από τις μηχανές τις δομές αυτές. Στην εικόνα 2 παρουσιάζεται πιο αναλυτικά ως παράδειγμα η αναπαράσταση του μορίου του οξικού οξέος (CH<sub>3</sub>COOH) με τη μορφή γραφήματος. Τα άτομα του μορίου με εξαίρεση τα άτομα υδρογόνου (Hydrogen-suppressed graph) αποτελούν τους κόμβους του γράφου, τα χαρακτηριστικά των ατόμων κωδικοποιούνται σε μορφή διανυσμάτων, ενώ οι δεσμοί μεταξύ των ατόμων αυτών αποτελούν τις ακμές του γράφου. Η αρχιτεκτονική αυτή εφαρμόστηκε για την ανάπτυξη νευρωνικού δικτύου γράφου που προβλέπει τη συγγένεια πρόσδεσης (binding affinity) στους υποδοχείς οιστρογόνων (endocrine receptors), με στόχο τον προσδιορισμό μορίων που δρουν ως ενδοκρινικοί διαταράκτες (endocrine disruptors) [7]. Ολοκληρώνεται επίσης η ανάπτυξη δικτύου γράφου για την πρόβλεψη της διαπερατότητας PAMPA υποψηφίων αντιικών φαρμάκων για την αντιμετώπιση του κορονοϊού SARS-CoV-2, που αποτελεί συνέχεια προηγούμενης εργασίας όπου εφαρμόστηκαν συμβατικοί αλγόριθμοι μηχανικής μάθησης (random forest, k-nearest neighbors, XGBoost) σε χημικούς περιγραφείς που υπολογίστηκαν με βάση την κωδικοποίηση SMILES [8].

Η πιο πρόσφατη δραστηριότητα της MAPΠ που σκιαγραφεί και τους μελλοντικούς ερευνητικούς στόχους της μονάδας στην περιοχή της μηχανικής μάθησης είναι η δημιουργία και η ανάλυση γράφων γνώσης που μπορούν δι-ασυνδέσουν μεγάλους όγκους δεδομένων από ετερογενείς πηγές δεδομένων και η ανάπτυξη υπολογιστικών ροών και μοντέλων που να είναι σε θέση να προβλέψουν ιδιότητες των κόμβων η συνδέσεις μεταξύ κόμβων που δεν προκύπτουν άμεσα από τα δεδομένα. Ως χαρακτηριστικό παράδειγμα τέτοιων γράφων γνώσης αναφέρεται ο γράφος Hetionet, που είναι ένα ολοκληρωμένο δίκτυο βιοϊατρικής γνώσης, το οποίο έχει κατασκευαστεί με τη δια-

σύνδεση 29 διαφορετικών βάσεων δεδομένων γονιδίων, φαρμάκων και ασθενειών και που έχει εφαρμοστεί μεταξύ άλλων στο πρόβλημα της επαναστόχευσης φαρμάκων (drug repurposing) [9].

Με πρωτοβουλία του ΥΔ Π. Καρατζά και σε συνεργασία με τον Παγκόσμιο Οργανισμό Υγείας (World Health Organisation, WHO) η MAPΠ ανέπτυξε γράφο γνώσης για την αποτύπωση της δημοσιευμένης πληροφορίας για τη δημόσια υγεία των μετακινούμενων πληθυσμών, με επεξεργασία περισσότερων των 4000 επιστημονικών δημοσιεύσεων. Η εξαγωγή της πληροφορίας από τις δημοσιεύσεις έγινε με αλγορίθμους και μοντέλα νευρωνικών δικτύων. Συγκεκριμένα, μοντέλα αναδρομικών νευρωνικών δικτύων (Recurrent Neural Networks, RNNs) που έχουν προεκπαιδευτεί για την επεξεργασία κειμένων φυσικής γλώσσας και για την εξαγωγή ονομαστικών οντοτήτων (named entity extraction) προσαρμόστηκαν στην ανάλυση των συγκεκριμένων δημοσιεύσεων και εξήγαγαν 45.339 κόμβους, οι οποίοι κατατάσσονται στους ακόλουθους τύπους (οντότητες): "Country", "Event", "Faculty", "Language", "Law", "Location", "Nationality", "Product", "Paper", "Region", "Organization", "WorkOfArt", "Biological Importance". Οι κόμβοι αυτοί συνδέθηκαν με 832.556 συνδέσεις τεσσάρων κατηγοριών. Με κατάλληλα ερωτήματα ("queries") ο χρήστης μπορεί να εξαγάγει από το γράφο γνώσης τις πληροφορίες που τον ενδιαφέρουν. Μπορεί για παράδειγμα να πληροφορηθεί για την κατάσταση της έρευνας σε συγκεκριμένα αντικείμενα, να διαπιστώσει τα κενά γνώσης και να διαμορφώσει αντίστοιχες δράσεις. Στην εικόνα 3 φαίνεται ένα μικρό μέρος του γράφου που απαντά σε ερώτημα σχετικό με τα δημοσιευμένα στοιχεία που αφορούν στην κάλυψη του παγκόσμιου πληθυσμού από εμβολιαστικά προγράμματα.

Σημειώνεται ακόμη ότι στο πλαίσιο της δραστηριοποίησης σε Ευρωπαϊκά Ερευνητικά προγράμματα, η MAPΠ έχει αναπτύξει τη διαδικτυακή πλατφόρμα Jaqpot (<https://www.jaqpot.org/>, <https://app.jaqpot.org/>) που παρέχει υπηρεσίες Modelling as a Service (MaaS), οι οποίες περιλαμβάνουν την εκπαίδευση, μεταφόρτωση, αποθήκευση, χρήση, αξιολόγηση και διαμοιρασμό μοντέλων μηχανικής μάθησης αλλά και άλλων τύπων μοντέλων, όπως για παράδειγμα βιοκινητικά μοντέλα. Τα παραγόμενα μοντέλα είναι διαθέσιμα μέσω διαπεφών προγραμματισμού εφαρμογών (Application Programming Interfaces, APIs) αλλά και φιλικών διεπαφών χρήστη (Graphical User Interfaces, GUIs) που δημιουργούνται με αυτοματοποιημένο τρόπο και περιλαμβάνουν πλήθος μεταδεδομένων και υλικό τεκμηρίωσης, όπως πληροφορίες για τον αλγόριθμο ή τη ροή εργασίας που χρησιμοποιήθηκε για την ανάπτυξη του μοντέλου, τον ορισμό της περιοχής εφαρμογής του μοντέλου (domain of applicability), οντολογικές πληροφορίες για τις μεταβλητές που χρησιμοποιούνται στο μοντέλο κ.λπ.

Στη MAPΠ δραστηριοποιούνται σήμερα οι Φίλιππος Δογάνης (ΕΔΙΠ), Αθανάσιος Νικολακόπουλος (ΕΔΙΠ), Χριστιάννα Γουσιάδου (Post-Doc), Παντελής Καρατζάς (ΥΔ), Περικλής Τσίρος (ΥΔ), Ιάσων Σωτηρόπουλος (ΥΔ), Μάριος Στογιάννος (ΥΔ), Γιάννης Καλο-

γερόπουλος (ΥΔ), Αργυρώ Καρδαμάκη (ΥΔ), Νικολέττα-Μαρία Κουτρούμπα (ΥΔ), Βασιλής Μηναδάκης (Ερευνητής), Ελένη Στρομπούλα (Ερευνήτρια). Εκφράζονται θερμές ευχαριστίες σε όλους τους ερευνητές και συνεργάτες που συνεισέφεραν στις δραστηριότητες της MAPΠ στην επιστημονική περιοχή της μηχανικής μάθησης.

- [1] D. R. Boughman, Y. A. Liu, Neural Networks in Bioprocessing and Chemical Engineering, 1995, Academic Press.
- [2] M. R. Dobbelaere, P. P. Plehiers, R. V. de Vijver, C. V. Stevens, K. M. Van Geem, Machine Learning in Chemical Engineering: Strengths, Weaknesses, Opportunities, and Threats, Engineering, 2021, 7, 1201-1211, <https://doi.org/10.1016/j.eng.2021.03.019>
- [3] A. Alexandridis, E. Chondrodima, H. Sarimveis, Radial basis function network training using a nonsymmetric partition of the input space and particle swarm optimization, IEEE transactions on neural networks and learning systems, 2012, 24, 219-230, DOI <https://ieeexplore.ieee.org/document/6395832>
- [4] E. Aggelogiannaki, H. Sarimveis, Nonlinear model predictive control for distributed parameter systems using data driven artificial neural network models, Computers & Chemical Engineering, 2008, 32, 1225-1237, DOI <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2007.05.002>
- [5] M. Kotzabasaki, I. Sotiropoulos, H. Sarimveis, QSAR modeling of the toxicity classification of superparamagnetic iron oxide nanoparticles (SPIONs) in stem-cell monitoring applications: an integrated study from data curation to model development, RSC Adv., 2020,10, 5385-5391, DOI <https://doi.org/10.1039/C9RA09475J>
- [6] P. Karatzas, G. Melagraki, L.J. A. Ellis, I. Lynch, D.-D. Varsou, A. Afantitis, A. Tsoumanis, P. Doganis, H. Sarimveis, Development of Deep Learning Models for Predicting the Effects of Exposure to Engineered Nanomaterials on Daphnia magna. Small, 2020, 16(36), 2001080, <https://doi.org/10.1002/sml.202001080>
- [7] X. Ζαχαρόπουλος (διπλωματική εργασία), Ανάπτυξη μαθηματικών μοντέλων πρόβλεψης ιδιοτήτων χημικών ουσιών με τεχνικές βαθιάς μηχανικής μάθησης, <https://dspace.lib.ntua.gr/xmlui/handle/123456789/54295>
- [8] C. Gousiadou, P. Doganis, H. Sarimveis, Development of QSAR ensemble models for predicting the PAMPA Effective Permeability of new, non-peptidic leads with potential antiviral activity against the coronavirus SARS-CoV-2, BEILSTEIN ARCHIVES, 2021, <https://www.beilstein-journals.org/xiv/download/pdf/202122-pdf>
- [9] D.S. Himmelstein, A. Lizee, C. Hessler, L. Brueggeman, S.L. Chen, D. Hadley, A. Green, P. Khankhanian, S.E. Baranzini, Systematic integration of biomedical knowledge prioritizes drugs for repurposing, 2017, eLife, 6:e26726, <https://doi.org/10.7554/eLife.26726.001>



**Εικόνα 3:** Μέρος γράφου γνώσης για την κάλυψη από εμβολιαστικά προγράμματα που απεικονίζει τις χώρες με πορτοκαλί κόμβους, τις περιοχές με ροζ κόμβους, τις εθνικές με μωβ κόμβους, τους οργανισμούς με μπλε κόμβους, τις δημοσιεύσεις με κόκκινους κόμβους, τις οντότητες με βιολογικό ενδιαφέρον με μεζέ κόμβους και τις συνδέσεις μεταξύ των κόμβων.

# Ερμηνεύσιμη Τεχνητή Νοημοσύνη

Ε. Ντερβάκος, Ο. Μενής-Μαστρομιχαλάκης, Ι. Λιάρτης, Γ. Φιλανδριανός, Α. Χορταράς, Γ. Στάμου

Εργαστήριο Συστημάτων Τεχνητής Νοημοσύνης και Μάθησης, Σχολή Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και Μηχανικών Υπολογιστών, ΕΜΠ

Οι εφαρμογές της τεχνητής νοημοσύνης (artificial intelligence) διευρύνθηκαν σημαντικά τα τελευταία χρόνια, κυρίως λόγω των πρόσφατων τεχνολογικών εξελίξεων που οδήγησαν στην ανάπτυξη ισχυρών μοντέλων μηχανικής μάθησης (machine learning). Ειδικότερα, τα μοντέλα βαθιάς μάθησης (deep learning) είναι ιδιαίτερα αποτελεσματικά σε εργασίες πρόβλεψης και ταξινόμησης, αλλά και στην επίλυση μεγάλου φάσματος προβλημάτων. Από την άλλη πλευρά, καλλιεργείται -όχι παράλογα- ένας σκεπτικισμός στην υιοθέτηση συστημάτων βαθιάς μάθησης σε εφαρμογές της πραγματικής ζωής που επηρεάζουν κρίσιμα τη ζωή των ανθρώπων, όπως τα ιατρικά ή δικαστικά συστήματα υποστήριξης αποφάσεων. Ο σκεπτικισμός αυτός πηγάζει κυρίως από ένα σημαντικό λειτουργικό χαρακτηριστικό που εγείρει ηθικά ζητήματα στη χρήση της σύγχρονης τεχνητής νοημοσύνης: τα μοντέλα βαθιάς μάθησης είναι γενικά *αδιαφανή* (opaque) και αδυνατούν να δώσουν *επεξηγήσεις* (explanations) για τις αποφάσεις που λαμβάνουν («φαινόμενο μαύρου κουτιού»). Από ηθικής πλευράς, είναι σημαντικό κάθε αλγοριθμικό σύστημα λήψης κρίσιμων αποφάσεων να παρέχει στον χρήστη τη δυνατότητα αιτιολόγησης ή εξήγησης της απόφασής του, ιδανικά να παρέχει την κρίσιμη αλυσίδα συλλογισμών που οδήγησαν στην απόφαση, περιλαμβάνοντας αναφορές σε πραγματικά δεδομένα και συσχετίσεις που είναι κατανοητές στον άνθρωπο. Αυτό είναι σημαντικό τόσο για την αποφυγή ακούσιων, ακόμη και κακόβουλων επιπτώσεων από τη χρήση της τεχνητής νοημοσύνης που μπορεί να οδηγήσει σε υλική ή άυλη ζημία, όσο και για τη διασφάλιση της προστασίας των ανθρωπίνων δικαιωμάτων. Ακόμα και σε καθημερινές εφαρμογές της τεχνητής νοημοσύνης που δεν επηρεάζουν κρίσιμα τη ζωή των ανθρώπων, οι επεξηγήσεις είναι χρήσιμες και επιθυμητές, όπως για παράδειγμα στα συστήματα συστάσεων. Τα συστήματα συστάσεων έχουν αναπόφευκτα εισβάλει στην καθημερινότητά μας, λόγω της ανάγκης σταχυολόγησης των τεράστιων ποσοτήτων πληροφοριών που παράγονται, δεδομένων μάλιστα των εκ των πραγμάτων περιορισμένων ανθρωπίνων δυνατοτήτων κατανάλωσης πληροφοριών.

Είτε πρόκειται για σύσταση για αγορά ενός βιβλίου, για ακρόαση μουσικής, κινηματογραφικών ταινιών ή για ανάγνωση μιας είδησης, είναι σημαντικό ο χρήστης να αισθάνεται ότι μπορεί να εμπιστευτεί το σύστημα τεχνητής νοημοσύνης που φιλτράρει και προτείνει, γνωρίζοντας ότι επιλέγει σύμφωνα με κριτήρια που ικανοποιούν τις ανάγκες του και δεν προσπαθεί να τις χειραγωγήσει.

Η ανάγκη για επεξήγηση των συστημάτων τεχνητής νοημοσύνης οδήγησε στο πεδίο έρευνας της ερμηνεύσιμης τεχνητής νοημοσύνης (eEXplainable AI-XAI) [2,4,5]. Εδώ, ο ρόλος των συμβολικών συστημάτων τεχνητής νοημοσύνης που χρησιμοποιούν αναπαράσταση γνώσης (με βάση κανόνες) και αυτοματοποιημένη συλλογιστική (με βάση τη λογική) φαίνεται να είναι σημαντικός. Όπως αναφέρεται στη Λευκή Βίβλο της Ευρωπαϊκής Επιτροπής «Σχετικά με την τεχνητή νοημοσύνη – Η ευρωπαϊκή προσέγγιση της αριστείας και της εμπιστοσύνης» [1]: «ο συνδυασμός συμβολικής συλλογιστικής με βαθιά νευρωνικά δίκτυα μπορεί να μας βοηθήσει να βελτιώσουμε την επεξήγηση των αποτελεσμάτων της τεχνητής νοημοσύνης». Πράγματι, μια μεγάλη πρόκληση είναι η χρήση σύγχρονης συμβολικής αναπαράστασης γνώσης και συλλογιστικής για την παροχή του υποκείμενου πλαισίου για την εκ των υστέρων ερμηνευσιμότητα των συστημάτων βαθιάς μάθησης.

Οι πρόσφατες εξελίξεις στον τομέα της συμβολικής αναπαράστασης γνώσης και αυτόματης συλλογιστικής, απαντώντας στην ανάγκη για αναπαράσταση και χρήση της γνώσης στον παγκόσμιο ιστό, οδήγησαν στην ανάπτυξη των *γράφων γνώσης* (knowledge graphs) [3], ως εξέχον παράδειγμα τυπικής αναπαράστασης γνώσης σε μεγάλη κλίμακα. Ένας γράφος γνώσης είναι μια βάση γνώσης που αναπαριστά σε μορφή γράφου γενικές ή συγκεκριμένες πληροφορίες για τα αντικείμενα, τις έννοιες και τις σχέσεις ενός πεδίου αναφοράς. Οι κόμβοι του γράφου συνήθως περιγράφουν αντικείμενα ή έννοιες και οι ακμές περιγράφουν σχέσεις μεταξύ τους, παρέχοντας ένα πλαίσιο για υπηρεσίες αυτόματης συλλογιστικής, όπως η εξαγωγή υπονοούμενης γνώ-

**Η χρήση σύγχρονης συμβολικής αναπαράστασης γνώσης και συλλογιστικής για την παροχή του υποκείμενου πλαισίου για την εκ των υστέρων ερμηνευσιμότητα των συστημάτων βαθιάς μάθησης είναι μια μεγάλη πρόκληση**

σης. Η χρήση των γράφων γνώσης σε συστήματα συστάσεων είναι ιδιαίτερα διαδεδομένη τα τελευταία χρόνια. Στηρίζεται στα *ανοιχτά συνδεδεμένα δεδομένα* (linked open data) που κωδικοποιούνται με τεχνολογίες σημασιολογικού ιστού (semantic web), αποτελώντας ένα πεδίο παγκόσμιας γνώσης που περιλαμβάνει: γενική γνώση (π.χ. Wikidata, DBpedia), γεωγραφική γνώση (π.χ. Geonames, Getty GTN), γλωσσική γνώση (π.χ. Wordnet), αλλά και γνώση πεδίου όπως η ιατρική γνώση (π.χ. SNOMED CT, MeSH) κ.λπ. Με τον τρόπο αυτό έχει δημιουργηθεί ένα κοινό έδαφος για κοινή κατανόηση μεταξύ ανθρώπων και μηχανών τεχνητής νοημοσύνης, δεδομένου ότι ένας γράφος γνώσης είναι μια τυπική και δομημένη αναπαράσταση ενός πεδίου, που βασίζεται στον τρόπο με τον οποίο οι άνθρωποι αντιλαμβάνονται τον κόσμο [2,6]. Η πρόκληση στο σημείο αυτό είναι να αντιληφθούμε τη λειτουργία ενός μοντέλου βαθιάς μάθησης στη βάση ενός γράφου γνώσης, παρέχοντας σημασιολογικές επεξηγήσεις του μοντέλου βαθιάς μάθησης στους όρους της υποκείμενης γνώσης που καταγράφεται στο γράφο γνώσης.

Στο παραπάνω πλαίσιο, ερευνητές του Εργαστηρίου Τεχνητής Νοημοσύνης και Συστημάτων Μάθησης της ΣΗΜΜΥ ΕΜΠ, μελετούν, προτείνουν και εφαρμόζουν νέες μεθόδους ανάπτυξης ερμηνεύσιμης τεχνητής νοημοσύνης, συνδυάζοντας την εμπειρία και τα ερευνητικά αποτελέσματά τους τόσο στην περιοχή της βαθιάς μάθησης, όσο και στην περιοχή των γράφων γνώσης. Συγκεκριμένα, έχοντας προτείνει καινοτόμες μεθοδολογίες αναπαράστασης σημασιολογικών δεδομένων και χρήσης συλλογιστικών υπηρεσιών για πρόσβαση σε δεδομένα με όρους γνώσης (π.χ. [7, 16]), αλλά και νέες μεθόδους ανάπτυξης συστημάτων βαθιάς μάθησης και εφαρμογές στην ανάλυση και σύνθεση μουσικής, την ταξινόμηση πολιτιστικού περιεχομένου, την ανάλυση εικόνας κ.λπ. (π.χ. [14,15]), στην παρούσα φάση ορίζουν και μελετούν αντίστροφα προβλήματα αυτόματης συλλογιστικής για γράφους γνώσης, προκειμένου να εξάγουν εκ των υστέρων επεξηγήσεις για τη λειτουργία μοντέλων βαθιάς μάθησης.

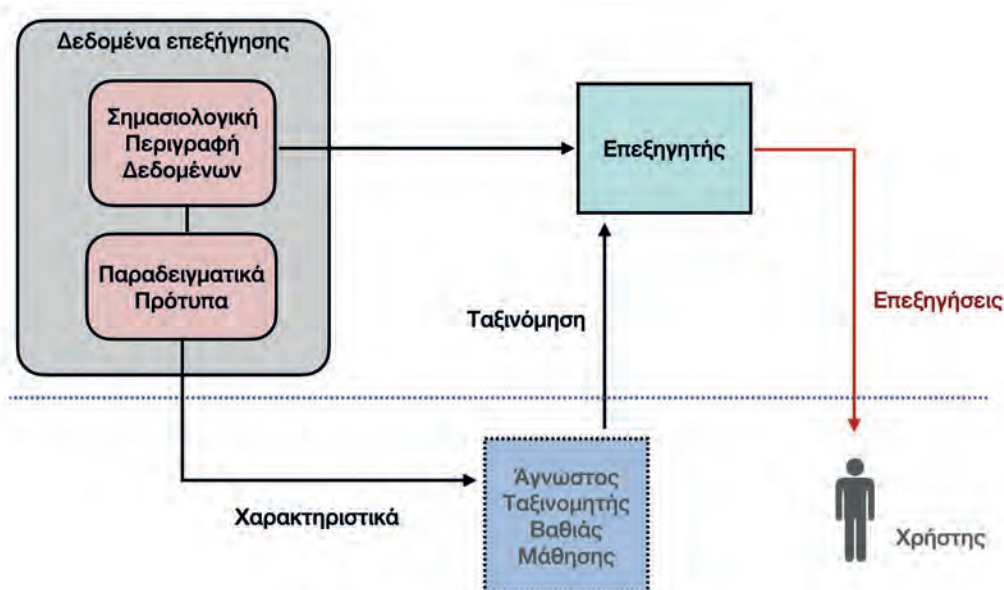
Στην Εικόνα 1 φαίνεται η μεθοδο-

λογική προσέγγιση της συγκεκριμένης έρευνας (για περισσότερες λεπτομέρειες [10,11]). Ο επεξηγητής (explainer) τροφοδοτεί τον άγνωστο ταξινομητή βαθιάς μάθησης με συγκεκριμένα δεδομένα, τα παραδειγματικά πρότυπα (exemplar data), που είναι αποθηκευμένα σε ένα σύνολο δεδομένων που ονομάζουμε σύνολο δεδομένων επεξήγησης (explanation dataset) και αναλύει την έξοδό του στα δεδομένα αυτά (τις κλάσεις στις οποίες τα ταξινομεί). Τα δεδομένα επεξήγησης καταγράφονται σε ένα γράφο γνώσης που κωδικοποιεί για κάθε στοιχείο (δεδομένο) τόσο τα χαρακτηριστικά του (features) που αποτελούν την είσοδο του ταξινομητή, όσο και τη σημασιολογική περιγραφή του σε όρους κατανοητούς για τον άνθρωπο. Για παράδειγμα, περιέχει το ηχητικό σήμα του βήχα ενός ασθενή, μαζί με σημασιολογικές περιγραφές του όπως «ξηρός βήχας» κ.λπ. Στη συνέχεια, για να αποκρυπτογραφήσει τη λειτουργία του άγνωστου ταξινομητή (να περιγράψει δηλαδή τα χαρακτηριστικά των στοιχείων που ταξινομούνται από αυτόν σε μία συγκεκριμένη κλάση), προσπαθεί να λύσει το εξής αντίστροφο πρόβλημα: βρες σημασιολογικά ερωτήματα (queries) που ανακτούν από το γράφο γνώσης ακριβώς αυτά τα στοιχεία που ταξινομούνται από τον ταξινομητή στη συγκεκριμένη κλάση. Στο πλαίσιο της έρευνάς μας, αποδεικνύουμε αρχικά ότι το πρόβλημα αυτό παρουσιάζει θεωρητικό ενδιαφέρον και είναι υπολογιστικά δύσκολο και στη συνέχεια το μελετάμε και δίνουμε μεθόδους προσεγγιστικής επίλυσής του. Τα αποτελέσματα από τις προσομοιώσεις των μεθόδων σε μεγάλα σύνολα δεδομένων που χρησιμοποιούνται για το σκοπό αυτό στη βιβλιογραφία είναι ιδιαίτερα ενθαρρυντικά. Επιπλέον, στην παρούσα φάση μελετάμε την εφαρμογή των μεθόδων σε σημαντι-

κές περιοχές της ερμηνεύσιμης τεχνητής νοημοσύνης, όπως η υποβοήθηση ιατρικής διάγνωσης και τα δημιουργικά συστήματα. Συγκεκριμένα, στο πλαίσιο του έργου smarty4covid<sup>1</sup> (σε συνεργασία με το Εργαστήριο Βιοϊατρικών Προσομοιώσεων και Απεικονιστικής Τεχνολογίας (BIOSIM) της ΣΗΜΜΥ ΕΜΠ), αναπτύσσουμε ένα σύνολο δεδομένων επεξήγησης για την εξαγωγή εκ-των-υστέρων επεξηγήσεων ταξινομητών βαθιάς μάθησης που αναλύουν σήματα βήχα, αναπνοής και ομιλίας στο πλαίσιο της δυνατότητας ανίχνευσης και παρακολούθησης κρουσμάτων κορωνοϊού. Στο πλαίσιο της ανάπτυξης συστημάτων αυτόματης σύνθεσης μουσικής, μελετάμε την ερμηνεύσιμτητα μοντέλων βαθιάς μάθησης που συνθέτουν αυτόματα μουσική, συσχετίζοντας το μουσικό σήμα με τη διάθεση και τη συναισθηματική κατάσταση του μουσικού και του ακροατή<sup>2</sup>, αλλά και τη γνώση μουσικής θεωρίας και αρμονίας [12,13].

Συμπερασματικά, η περιοχή της ερμηνεύσιμης τεχνητής νοημοσύνης παρουσιάζει μεγάλο ενδιαφέρον, τόσο από θεωρητική όσο και από πρακτική σκοπιά. Η παραγωγή θετικών θεωρητικών αποτελεσμάτων και η ανάπτυξη αποδοτικών συστημάτων εξαγωγής επεξηγήσεων ενδέχεται να περιορίσουν σημαντικά τον σκεπτικισμό απέναντι στις εφαρμογές της τεχνητής νοημοσύνης, ειδικά της βαθιάς μάθησης. Οι ερευνητές του Εργαστηρίου Τεχνητής Νοημοσύνης και Συστημάτων Μάθησης της ΣΗΜΜΥ ΕΜΠ θα συνεχίσουν να εργάζονται στην περιοχή, αναπτύσσοντας νέες μεθόδους και συστήματα, αλλά και εφαρμογές σε κρίσιμους τομείς, στους οποίους η ερμηνεύσιμη τεχνητή νοημοσύνη κρίνεται απαραίτητη.

<sup>1</sup> <https://www.smarty4covid.org>  
<sup>2</sup> <https://beam.ails.ece.ntua.gr>



Εικόνα 1. Εξαγωγή εκ-των-υστέρων επεξηγήσεων ταξινομητών βαθιάς μάθησης

**Έχει δημιουργηθεί ένα κοινό έδαφος για κοινή κατανόηση μεταξύ ανθρώπων και μηχανών τεχνητής νοημοσύνης, δεδομένου ότι ένας γράφος γνώσης είναι μια τυπική και δομημένη αναπαράσταση ενός πεδίου, που βασίζεται στον τρόπο με τον οποίο οι άνθρωποι αντιλαμβάνονται τον κόσμο**

#### Αναφορές

1. European Commission, White Paper: On Artificial Intelligence - A European approach to excellence and trust, Brussels, 2020, [https://ec.europa.eu/info/sites/info/files/commission-white-paper-artificial-intelligence-feb2020\\_en.pdf](https://ec.europa.eu/info/sites/info/files/commission-white-paper-artificial-intelligence-feb2020_en.pdf)
2. Matt Turek, Explainable Artificial Intelligence (XAI), DARPA, <https://www.darpa.mil/program/explainable-artificial-intelligence>
3. A. Hogan, E. Blomqvist, M. Cochez, C. d'Amato, G. de Melo, C. Gutierrez, J. E. Labra Gayo, S. Kirrane, S. Neumaier, A. Polleres, R. Navigli, A.-C. Ngonga Ngomo, S. M. Rashid, A. Rula, L. Schmelzeisen, J. Sequeda, S. Staab, A. Zimmermann, Knowledge Graphs, 2020, <https://arxiv.org/abs/2003.02320>
4. A. Barredo Arrieta, N. Diaz-Rodriguez, Javier Del Ser, A. Bennetotf, S. Tabik, A. Barbado, S. Garcia, Sergio Gil-Lopez, D. Molina, R. Benjamins, R. Chatila, F. Herrera, Explainable Artificial Intelligence (XAI): Concepts, Taxonomies, Opportunities and Challenges toward Responsible AI, 2019, <https://arxiv.org/abs/1910.10045>
5. W. James Murdoch, Chandan Singh, Karl Kumbier, Reza Abbasi-Asl, and Bin Yua, Interpretable machine learning: definitions, methods, and applications, 2019, <https://arxiv.org/abs/1901.04592>.
6. Tanguy Pommellet & Freddy Lecue (2019). Feeding Machine Learning with Knowledge Graphs for Explainable Object Detection. ISWC 2019.
7. D. Trivela, G. Stoilos, A. Chortaras, G. Stamou: Optimising resolution-based rewriting algorithms for OWL ontologies. J. Web Semant. 33: 30-49, 2015
8. N. Simou, A. Chortaras, G. Stamou, S. Kollias: Enriching and Publishing Cultural Heritage as Linked Open Data. Mixed Reality and Gamification for Cultural Heritage: 201-223, 2017
9. A. Chortaras, M. Giazitzoglou, G. Stamou: Inside the Query Space of DL Knowledge Bases. Description Logics 2019
10. Edmund Dervakos, Orfeas Menis-Mastromichalakis, Alexandros Chortaras, Giorgos Stamou: Computing Rule-Based Explanations of Machine Learning Classifiers using Knowledge Graphs. CoRR abs/2202.03971 2022
11. Jason Liartis, Edmund Dervakos, Orfeas Menis-Mastromichalakis, Alexandros Chortaras, Giorgos Stamou: Semantic Queries Explaining Opaque Machine Learning Classifiers. DAO-XAI 2021
12. Spyridon Kantarelis, Edmund Dervakos, Natalia Kotsani, Giorgos Stamou: Musical Harmony Analysis with Description Logics. Description Logics 2021
13. Edmund Dervakos, Giorgos Filandrianos, Giorgos Stamou: Heuristics for Evaluation of AI Generated Music. ICPR 2020: 9164-9171
14. Konstantinos Pyrovolakis, Paraskevi K. Tzouveli, Giorgos Stamou: Multi-Modal Song Mood Detection with Deep Learning. Sensors 22(3): 1065 (2022)
15. Orfeas Menis-Mastromichalakis, Natasa Sofou, Giorgos Stamou: Deep Ensemble Art Style Recognition. IJCNN 2020: 1-8
16. Alexandros Chortaras, Giorgos Stamou: Mapping Diverse Data to RDF in Practice. ISWC (I) 2018: 441-457

# Ανάλυση και Σχεδιασμός Κατασκευών οδηγούμενη από τα δεδομένα

Στέφανος Νικολόπουλος<sup>1</sup>, Στέφανος Πυριαλάκος<sup>1</sup>, Λεωνίδας Παπαδόπουλος<sup>1</sup>, Ιωάννης Καλογεράς<sup>1,2</sup>, Γεώργιος Σταυρούλακης<sup>1</sup>, Βησσαρίων Παπαδόπουλος<sup>1</sup>

<sup>1</sup> MGroup, Σχολή Πολιτικών Μηχανικών, ΕΜΠ

<sup>2</sup> CSELab, Department of Mechanical and Process Engineering, ETH Zürich

Η συστηματική συλλογή, ανάλυση και αξιοποίηση Μεγάλων Δεδομένων (Big Data) μέσω της Επιστήμης των Δεδομένων (Data Science) και του κλάδου της Μηχανικής Μάθησης (Machine Learning) έχει μπει τις τελευταίες δεκαετίες στο επίκεντρο της επιστημονικής και της βιομηχανικής έρευνας. Το εύρος των εφαρμογών που έχουν αναπτυχθεί με όχημα την εξαγωγή χρήσιμης πληροφορίας από μεγάλα δεδομένα είναι αχανές, και εκτείνεται σε μια πληθώρα πεδίων: από τα Οικονομικά και την Εκπαίδευση, μέχρι τον Τουρισμό και την Υγεία, σχεδόν κάθε πτυχή της ανθρώπινης δραστηριότητας έχει επηρεαστεί από την έλευση των τεχνικών και των αλγορίθμων της Μηχανικής Μάθησης και της Επιστήμης των Δεδομένων.

Ο τομέας των κατασκευών Πολιτικού Μηχανικού, αν και πρωτοστατεί στο χώρο των επιστημονικών και τεχνολογικών επιτευγμάτων, υστερεί, συγκριτικά με άλλους τομείς της βιομηχανίας, στην ενσωμάτωση και αξι-

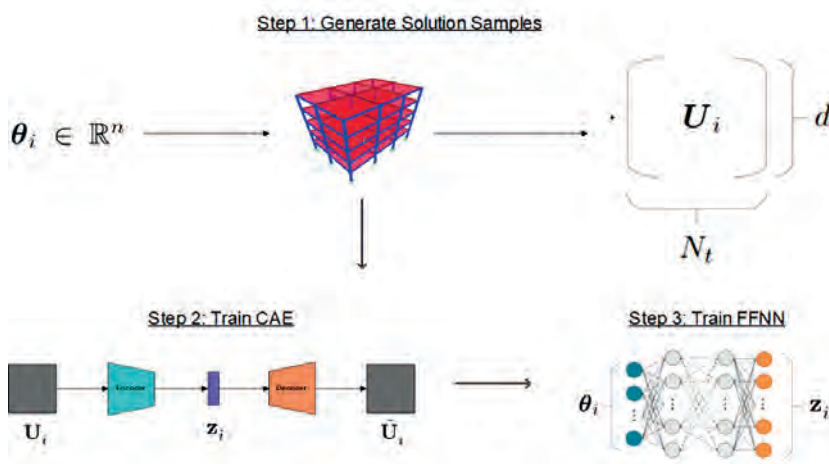
οποίηση των παραπάνω εργαλείων, τόσο κατά την ανάλυση και το σχεδιασμό (Structural Analysis and Design), όσο και κατά την κατασκευή και παρακολούθηση της λειτουργίας των κατασκευών στο χρόνο. Οι προκλήσεις του εν λόγω τομέα στη νέα αυτή πραγματικότητα και ειδικότερα στο σκέλος της ανάλυσης και του σχεδιασμού κατασκευών αποτελούν βασική στόχευση της ερευνητικής ομάδας MGroup (<http://mggroup.ntua.gr>) του Τομέα Δομοστατικής της Σχολής Πολιτικών Μηχανικών ΕΜΠ, υπό την καθοδήγηση του Καθηγητή Β. Παπαδόπουλου.

Ο σχεδιασμός και η ανάλυση των κατασκευών ασχολείται με τη μελέτη της σταθερότητας, της αντοχής και της λειτουργικότητας των κατασκευών, με σκοπό την δόμηση κατασκευών που αντέχουν στις δράσεις που τους επιβάλλονται χωρίς αστοχίες και αντεπεξέρχονται στις λειτουργικές απαιτήσεις του σχεδιασμού κατά τον προβλεπόμενο προσδόκιμο κύκλο ζωής τους. Στηρίζεται

**Ο ρόλος των CAEs είναι να εντοπίσουν ένα χώρο σημαντικά μικρότερης διάστασης και να μας εφοδιάσουν με μια απεικόνιση που θα εμφυτεύει τα πολυδιάστατα δεδομένα στο χώρο αυτό, δηλαδή θα τα συμπιέζει, αλλά και την αντίστροφη της που θα τα αποσυμπιέζει.**

στους κλάδους της εφαρμοσμένης μηχανικής, των εφαρμοσμένων μαθηματικών καθώς και της επιστήμης των υλικών και έχει ως στόχο την ανάπτυξη κατάλληλων μαθηματικών και υπολογιστικών μοντέλων, ικανών να προσομοιώσουν τη συμπεριφορά των κατασκευών με υψηλή ακρίβεια και αξιοπιστία. Έπειτα από δεκαετίες εξέλιξης τόσο σε θεωρητικό επίπεδο όσο και σε επίπεδο αρχιτεκτονικής υπολογιστικών συστημάτων, η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων, αναμφισβήτητο το πιο ισχυρό εργαλείο ανάλυσης που διαθέτει ο σύγχρονος ερευνητής/μελετητής, δύναται πλέον να περιγράψει σύνθετα προβλήματα. Η μη-γραμμική δυναμική συμπεριφορά τρισδιάστατων κατασκευών, τα σύνθετα καταστατικά μοντέλα υλικών και κατασκευαστικών συστημάτων, ή/και η ανάλυση και ο σχεδιασμός καινοτόμων σύνθετων υλικών (π.χ. ινοπλισμένα σκυροδέματα και πολυμερή) σε πολλαπλές κλίμακες και η μελέτη των κατασκευών τους είναι μερικά από αυτά. Προς αυτή την κατεύθυνση, το λογισμικό ανοικτού κώδικα MSolve (<https://github.com/mgrountua/MSolve>), το οποίο αναπτύσσεται από τα μέλη του MGroup, αποτελεί μια προσπάθεια υλοποίησης των πιο σύγχρονων μεθοδολογιών πεπερασμένων στοιχείων (XFEM, multiscale FE2, IGA κ.ά.) σε υπολογιστικά περιβάλλοντα υψηλών επιδόσεων (mpi, hybrid CPU/GPU architectures) και ελεύθερης διάθεσής τους στον ενδιαφερόμενο ερευνητή μηχανικό [1, 2, 3].

Από τις σύγχρονες ανάγκες στον κλάδο των κατασκευών, αλλά και της βιομηχανίας γενικότερα, προχωρώντας ένα βήμα παραπέρα, αναδύθηκε τα τελευταία χρόνια η τεχνολογία του λεγόμενου ψηφιακού διδύμου (digital twin). Τα digital twins αποτελούν ψηφιακές αναπαραστάσεις ενός φυσικού συστήματος και στηρίζονται αφ' ενός σε προχωρημένα υπολογιστικά μοντέλα υψηλής πιστότητας και αφ' ετέρου



**Σχήμα 1:** Η προτεινόμενη μεθοδολογία υποκατάστασης μοντελοποίησης: Βήμα 1-Επίλυση του συστήματος για διάφορες τιμές παραμέτρων και συλλογή των δεδομένων της απόκρισης υπό μορφή πινάκων. Βήμα 2-Εκπαίδευση ενός CAE ώστε να συμπιέζει και να αποσυμπιέζει τα δεδομένα με ελάχιστο σφάλμα. Βήμα 3-Εκπαίδευση ενός νευρωνικού δικτύου ώστε να απεικονίζει νέες τιμές των παραμέτρων στο χώρο μειωμένης διαστατικότητας.

σε δεδομένα από πειραματικές μετρήσεις στο σύστημα. Τα δεδομένα αυτά συνήθως λαμβάνονται από αισθητήρες και επεξεργάζονται με κατάλληλους αλγορίθμους σε πραγματικό χρόνο ώστε να ενημερώνουν το υπολογιστικό μοντέλο για να επιτευχθεί η καλύτερη δυνατή συμφωνία μεταξύ της πραγματικής συμπεριφοράς και της μέσω του μοντέλου προσομοίωσής της. Απώτερος σκοπός είναι η αντικατάσταση του φυσικού συστήματος με το 'ακριβές' ψηφιακό αντίγραφο του. Κατ' αυτό τον τρόπο, τα χρονοβόρα πειράματα δίνουν τη θέση τους σε 'φθηνές' προσομοιώσεις στον υπολογιστή. Επιπρόσθετα, ένα digital twin μπορεί να υποβληθεί σε ανάλυση πολλαπλών ερωτημάτων (multi-query problems), όπως για παράδειγμα ανάλυση βελτιστοποίησης, ποσοτικοποίηση της αβεβαιότητας, ανάλυση ευαισθησίας κ.ά., και να εξαχθούν συμπεράσματα χρήσιμα που θα οδηγήσουν στον τελικό σχεδιασμό του προϊόντος.

Η εφαρμογή των digital twins και η αξιοποίηση των καινοτομιών που δύνανται να επιφέρουν στο χώρο της έρευνας και της βιομηχανίας αντιμετωπίζει δύο σημαντικές προκλήσεις. Η πρώτη έχει να κάνει με τη διαχείριση του μεγάλου όγκου δεδομένων που έρχονται από τους αισθητήρες και το πώς αυτά θα αξιοποιηθούν για την ενημέρωση του υπολογιστικού μοντέλου. Η δεύτερη πρόκληση έχει να κάνει με το αυξημένο υπολογιστικό κόστος που απαιτεί προσομοίωση σε ένα λεπτομερές μοντέλο digital twin. Εδώ να τονίσουμε ότι τα multi-query προβλήματα, που έχουν ως στόχο της διερεύνηση της συμπεριφοράς του συστήματος σε διάφορα σενάρια και είναι απαραίτητα για τον βέλτιστο σχεδιασμό, επιλύονται, στην πλειοψηφία τους, κάνοντας ένα μεγάλο αριθμό (από μερικές χιλιάδες έως ακόμα και εκατομμύρια) προσομοιώσεις του προβλήματος για διαφορετικές τιμές παραμέτρων συστήματος/φόρτισης. Λαμβάνοντας υπόψη ότι το κόστος μιας προσομοίωσης μπορεί να κυμαίνεται από μερικά δευτερόλεπτα έως μερικές ώρες, εύκολα συμπεραίνει κανείς ότι τέτοιου τύπου προβλήματα είναι μη-διαχειρίσιμα ακόμα και από τα πιο σύγχρονα υπολογιστικά συστήματα.

Η ομάδα MGroup αναζητεί να δώσει λύσεις στα προαναφερθέντα προβλήματα αξιοποιώντας τις καινοτόμες ιδέες και σύγχρονες τεχνολογίες που μας είναι σήμερα διαθέσιμες από τον χώρο της Μηχανικής Μάθησης. Ειδικότερα, κεντρική στόχευση της ερευνητικής προσπάθειας είναι η ανάπτυξη κατάλληλων υποκατάστατων μοντέλων, ή αλλιώς μετα-μοντέλων (surrogate models, metamodels),

τα οποία θα παρουσιάζουν σχεδόν την ίδια συμπεριφορά με το λεπτομερές υπολογιστικό μοντέλο, με κόστος όμως επίλυσης σημαντικά μικρότερο και συγκριτικά αμελητέο.

Στο πλαίσιο της ανάλυσης των κατασκευών, συγκεκριμένα, αναπτύσσονται μεθοδολογίες βασισμένες στους Convolutional Autoencoders (CAEs) και τα feed-forward νευρωνικά δίκτυα (FNN) για την κατασκευή υποκατάστατων μοντέλων 3-D κατασκευών σε μη-γραμμικά δυναμικά προβλήματα [4]. Ο ρόλος των CAEs είναι να εντοπίσουν ένα χώρο σημαντικά μικρότερης διάστασης και να μας εφοδιάσουν με μια απεικόνιση που θα εμψυτεύει τα πολυδιάστατα δεδομένα στο χώρο αυτό, δηλαδή θα τα συμπιέζει, αλλά και την αντίστροφη της που θα τα αποσυμπιέζει. Με αυτό τον τρόπο μπορούμε να υπερβούμε την «κατάρα της διαστατικότητας» (curse of dimensionality) που πλήττει τους αλγορίθμους μηχανικής μάθησης σε χώρους μεγάλης διάστασης και να εκπαιδύσουμε ένα νευρωνικό δίκτυο που θα προβλέπει την απόκριση της κατασκευής στο χώρο μειωμένης διάστασης για οποιοδήποτε σενάριο φόρτισης ή οποιαδήποτε τιμή παραμέτρων του προβλήματος. Έπειτα, μέσω της αντίστροφης απεικόνισης του CAE μπορούμε να παίρνουμε την τελική λύση του προβλήματος στον πολυδιάστατο χώρο με ελάχιστο υπολογιστικό κόστος. Η ιδέα αυτή απεικονίζεται στο Σχήμα 1.

Όπως προαναφέρθηκε, για την πλήρη ανάπτυξη ενός digital twin πρέπει να αξιοποιούμε την πληροφορία που έρχεται από αισθητήρες σε διάφορα σημεία της κατασκευής ώστε να ενημερώνουμε το υπολογιστικό μοντέλο. Αυτό το πρόβλημα εντάσσεται στην ευρύτερη κατηγορία των λεγόμενων αντίστροφων προβλημάτων (inverse problems) και ένα από τα πιο ισχυρά μαθηματικά εργαλεία για την αντιμετώπισή του είναι οι Bayesian Inference Methods. Σε αυτό το πλαίσιο, οι βέλτιστες τιμές των παραμέτρων του υπολογιστικού μοντέλου, ώστε αυτό να συμφωνεί με τις πειραματικές μετρήσεις, θα προκύψουν μέσω μιας Markov Chain Monte Carlo simulation (ή κάποιας παραλλαγής αυτής), η οποία όμως απαιτεί και αυτή ένα μεγάλο αριθμό επιλύσεων του μοντέλου. Είναι προφανές ότι και αυτό το πρόβλημα μπορεί να ξεπεραστεί με ορθολογική χρήση υποκατάστατων μοντέλων. Σε μια πρόσφατη εργασία [5] αναπτύχθηκε το μαθηματικό και αλγοριθμικό πλαίσιο για την ενημέρωση των μηχανικών ιδιοτήτων σύνθετων υλικών, όπως είναι τα ενισχυμένα με νανοσωλήνες άνθρακα πολυμε-

**Με την τεχνολογία των CAEs μπορούμε να εκπαιδεύσουμε ένα νευρωνικό δίκτυο που θα προβλέπει την απόκριση της κατασκευής στο χώρο μειωμένης διάστασης για οποιοδήποτε σενάριο φόρτισης ή οποιαδήποτε τιμή παραμέτρων του προβλήματος. Έπειτα, μέσω της αντίστροφης απεικόνισης του CAE μπορούμε να παίρνουμε την τελική λύση του προβλήματος στον πολυδιάστατο χώρο με ελάχιστο υπολογιστικό κόστος.**

ρή, από μετρήσεις της συμπεριφοράς μιας κατασκευής αποτελούμενης από το εν λόγω υλικό σε μακροσκοπικό επίπεδο. Καταλυτικός ήταν και εδώ ο ρόλος των υποκατάστατων μοντέλων για την αντικατάσταση των κοστοβόρων μοντέλων πεπερασμένων στοιχείων της μικροδομής του υλικού με κατάλληλα εκπαιδευμένα νευρωνικά δίκτυα. Αυτή η ουσιαστική αλλαγή είχε ως αποτέλεσμα τη δραματική μείωση του υπολογιστικού κόστους της μιας προσομοίωσης, καθιστώντας έτσι το Bayesian Inference πρόβλημα υπολογιστικά διαχειρίσιμο.

Κλείνοντας, η περαιτέρω ανάπτυξη της χρήσης τεχνικών μηχανικής μάθησης και αποδοτικών αλγορίθμων για τη διαχείριση μεγάλων δεδομένων στο πεδίο της ανάλυσης και του σχεδιασμού των κατασκευών παραμένει μια ανοιχτή πρόκληση για τον σύγχρονο μηχανικό με συναρπαστικές προοπτικές για το μέλλον του κλάδου. Η δυνατότητα για 'in silico' μελέτη της συμπεριφοράς των κατασκευών θα ανοίξει το δρόμο για νέα σχεδιαστικά πρότυπα, χρήση καινοτόμων σύνθετων υλικών υψηλών επιδόσεων ως δομικών υλικών, αυτο-επισκευαζόμενες κατασκευές, οδηγώντας έτσι σε ανθεκτικότερες και ασφαλέστερες κατασκευές και συνεισφέροντας στη βελτίωση του τρόπου ζωής και του βιοτικού επιπέδου της κοινωνίας.

- [1] Bakalagos S., Kalogeris I. and Papadopoulos V. "An extended finite element method formulation for modeling multi-phase boundary interactions in steady state heat conduction problems". *Composite Structures*, vol. 258 (2021).
- [2] Papadrakakis M., Stavroulakis G., Karatazakis A. "A new era in scientific computing: Domain decomposition methods in hybrid CPU-GPU architectures". *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 200 (2011)
- [3] Sotiropoulos G., Papadopoulos V. "Non-linear multiscale modeling of thin composite shells at finite deformations". *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 391 (2022)
- [4] Nikolopoulos S., Kalogeris I. and Papadopoulos V., "Machine Learning Accelerated Transient Analysis of Stochastic Nonlinear Structures", *Engineering Structures*, (2022, to appear).
- [5] Pyrialakos S., Kalogeris I. and Papadopoulos V., "A neural network-aided Bayesian identification framework for multiscale modeling of nanocomposites". *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 384 (2021)

# Η Μηχανική Διεργασιών στην εποχή της Τεχνητής Νοημοσύνης

Ε. Δ. Κορωνάκη<sup>1,2</sup>, Π. Παπαβασιλείου<sup>1,2</sup>, S. P. A. Bordas<sup>2</sup>, Α. Γ. Μπουντουβής<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Σχολή Χημικών Μηχανικών, ΕΜΠ

<sup>2</sup> Faculté des Sciences, de la Technologie et de la Médecine, Université du Luxembourg

Η έλευση του Internet-of-things (IoT) στην καθημερινή πρακτική των βιομηχανικών διεργασιών έχει οδηγήσει στην εγκατάσταση ενός διασυνδεδεμένου πλέγματος αισθητήρων, ψηφιακού εξοπλισμού και κεντρικών μονάδων διαχείρισης δεδομένων που προέρχονται από διάφορα στάδια της παραγωγής [1]. Το ερώτημα/πρόκληση που αναδύεται είναι αν και πώς μπορεί ο συνεχώς αυξανόμενος όγκος δεδομένων να μετατραπεί σε χρήσιμη πληροφορία. Πώς μπορεί η πληθώρα των δεδομένων να φωτίσει τη διεργασία, να κάνει εφικτή την ακριβή πρόβλεψη και να εντατικοποιήσει την αυτοματοποίηση;

Οι προκλήσεις που προκύπτουν από την αξιοποίηση των δεδομένων στη βιομηχανία αποτελούν τα τελευταία 10 χρόνια τη βασική στόχευση της ερευνητικής ομάδας του Καθ. Α. Γ. Μπουντουβή, στη Μονάδα Υπολογιστικής Μηχανικής Διεργασιών (ΜΥΜΔ) της Σχολής Χημικών Μηχανικών του ΕΜΠ. Αυτή η ερευνητική περιοχή έρχεται ως φυσική συνέχεια μιας μακρόχρονης ενασχόλησης με την υπολογιστική ανάλυση διεργασιών με λεπτομερή μοντέλα. Οι βιομηχανικής κλίμακας διαδικασίες που προκύπτουν από τη σύνθεση διαφορετικών φυσικών και χημικών διεργασιών μελετώνται συστηματικά, τα τελευταία 20 χρόνια, με αξιοσημείωτη ακρίβεια με υπολογιστικές μεθόδους, κυρίως Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής (Computational Fluid Dynamics, CFD), επίλυσης μη γραμμικών διαφορικών εξισώσεων που διατυπώνουν ισοζύγιο μάζας, ενέργειας και ορμής, σε διάφορες τιμές των παραμέτρων λειτουργίας [1]. Πέραν της πρόβλεψης, διευκολύνουν την ανάλυση των κυρίαρχων μηχανισμών που διέπουν τη διεργασία, αναδεικνύουν και δια-

φωτίζουν τις συσχετίσεις των φαινομένων και συχνά δίνουν κατευθυντήριες γραμμές για τη σχεδίαση στοχευμένων πειραμάτων. Στο πλαίσιο της λεγόμενης Industry 4.0, τα υπολογιστικά μοντέλα αποτελούν ψηφιακά αντίγραφα (digital twins) σύνθετων διεργασιών.

Ωστόσο, η νέα πρόκληση για τους σύγχρονους μηχανικούς διεργασιών είναι η αποδοτική διαχείριση των δεδομένων που προκύπτουν από τη συστηματική καταγραφή και αποθήκευση ιστορικών δεδομένων των διεργασιών, κυρίως από in-situ αισθητήρες αλλά και από μετρήσεις ex-situ που αφορούν κυρίως στα ποιοτικά χαρακτηριστικά των προϊόντων. Οι σύγχρονες μεθοδολογίες της επιστήμης των δεδομένων, της μηχανικής μάθησης (Machine Learning, ML) και της τεχνητής νοημοσύνης (Artificial Intelligence, AI) είναι πλέον στη διάθεσή μας. Ωστόσο, η επιλογή του καταλληλότερου συνδυασμού μεθόδων ανά περίπτωση δεν είναι καθόλου προφανής. Η εφαρμογή των πιο αποδοτικών μεθόδων του AI και του ML είναι βασικό αντικείμενο της τρέχουσας ερευνητικής τροχιάς της ΜΥΜΔ. Στόχος είναι η κατάστρωση διαγραμμάτων ροής υπολογιστικών μεθόδων μηχανικής μάθησης που είναι κατάλληλα για τα διαθέσιμα δεδομένα και εξασφαλίζουν πρόβλεψη με ακρίβεια [2].

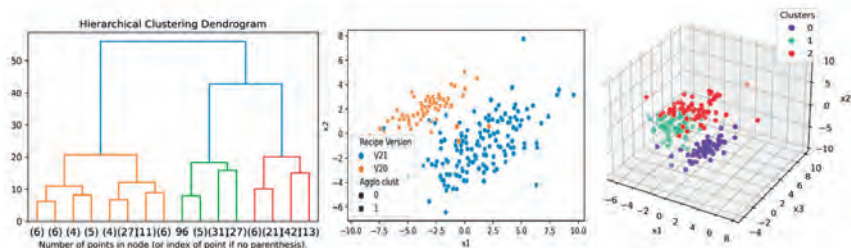
Σε αυτό το πλαίσιο εντάσσεται και η πρόσφατη ερευνητική δραστηριότητα, σε συνεργασία με το Πανεπιστήμιο του Λουξεμβούργου (Université de Luxembourg) και την εταιρία Ceratizit Sarl, η οποία είναι από τους πρωτόπρους παγκοσμίως στην παραγωγή κοπτικών εξοπλισμού και επιστρώσεων υψηλής αντοχής. Η Ceratizit χρησιμοποιεί για τη δημιουργία επιστρώσεων τη διεργασία της Χημικής Απόθε-

**Η επιλογή και εφαρμογή των πιο αποδοτικών μεθόδων τεχνητής νοημοσύνης (AI) και μηχανικής μάθησης (ML) είναι βασικό αντικείμενο έρευνας της Μονάδας Υπολογιστικής Μηχανικής Διεργασιών**

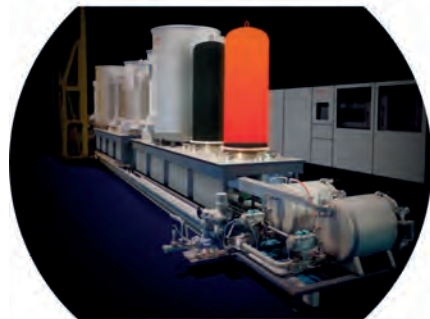
σης από Ατμό-ΧΑΑ (Chemical Vapor Deposition, CVD), με στόχο τη βελτίωση των ιδιοτήτων (αντοχή, σκληρότητα) του τελικού προϊόντος. Κατά την ΧΑΑ, ένα μείγμα αερίων εισέρχεται στον αντιδραστήρα, όπου μετά από μια σειρά χημικών αντιδράσεων, σε υψηλές θερμοκρασίες και χαμηλή πίεση, γίνεται η απόθεση μιας λεπτής επιστρώσεως στην επιφάνεια των κοπτικών εργαλείων. Κάθε παρτίδα της παραγωγής διαφέρει από την προηγούμενη τόσο ως προς το είδος των διαφορετικών εργαλείων που επικαλύπτονται, όσο και ως προς την σειρά κατά την οποία αυτά τοποθετούνται εντός του χημικού αντιδραστήρα. Παρ' όλες αυτές τις διαφορές όμως, η ομοιομορφία του πάχους των επιστρώσεων σε όλο τον αντιδραστήρα αλλά και από παρτίδα σε παρτίδα είναι εξαιρετικά σημαντική, καθώς αυτή διασφαλίζει την παρόμοια συμπεριφορά των κοπτικών εργαλείων κατά τη χρήση τους από τον τελικό χρήστη. Τυχόν ανομοιομορφία θα οδηγούσε σε άσχημες εκπλήξεις, καθώς θα σήμαινε ότι το ίδιο εργαλείο για την ίδια χρήση θα φθειρόταν πιο γρήγορα ή πιο αργά από παρτίδα σε παρτίδα.

Για τη διασφάλιση αυτής της ομοιομορφίας, είναι αναγκαία η ανάπτυξη ενός υπολογιστικού «εργαλείου» το οποίο θα επιτρέπει την πρόβλεψη του πάχους των παραγόμενων επιστρώσεων, δεδομένων των παραμέτρων της διεργασίας (θερμοκρασία, πίεση), αλλά και του setup του αντιδραστήρα (γεωμετρία των κοπτικών εργαλείων, σειρά τοποθέτησής τους εντός του αντιδραστήρα). Με αυτόν τον τρόπο, οι μηχανικοί της παραγωγής θα μπορούν να επιλέγουν τις κατάλληλες παραμέτρους για την κάθε παρτίδα και την κατάλληλη σειρά τοποθέτησης των κοπτικών εργαλείων εντός του αντιδραστήρα.

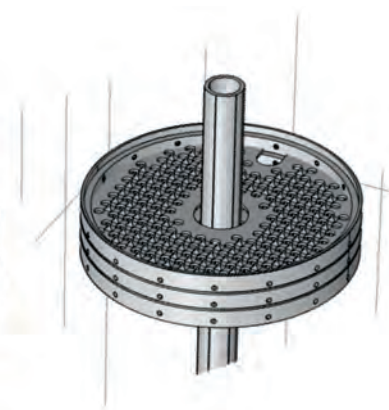
Η πρόβλεψη του πάχους των επιστρώσεων μπορεί να αντιμετωπιστεί με τη χρήση των δεδομένων της παραγωγής, καθώς στο φύλλο παραγωγής κάθε παρτίδας υπάρχουν διαθέσιμες μετρήσεις του πάχους των επιστρώσεων σε διάφορα σημεία εντός του αντιδραστήρα, καθώς και δεδομένα για τις παραμέτρους και το setup του αντιδραστήρα. Έτσι, διαθέτοντας μεγάλη ποσότητα δεδομένων από διάφορες χρονιές, μέσω



Εικόνα 1. Επεξεργασία δεδομένων της παραγωγής και συσχέτιση με τις παραμέτρους της διεργασίας.



Εικόνα 2. Βιομηχανική μονάδα Χημικής Απόθεσης από Ατμό



της χρήσης αλγορίθμων ML, μπορούμε να προβλέψουμε με ικανοποιητική ακρίβεια το αποτέλεσμα της διεργασίας [3]. Αξίζει να αναφερθεί ότι οι αλγόριθμοι αυτοί είναι πολύ πιο γρήγοροι από αυτούς της CFD που έχει αναπτυχθεί για την ίδια διεργασία, διότι απαιτούν πολύ λιγότερους υπολογιστικούς πόρους. Η χρήση δεδομένων από διάφορες χρονικές παραγωγής μας επιτρέπει επίσης τη διερεύνηση της επίδρασης των διαφόρων αλλαγών που έγιναν στη διεργασία στο τελικό προϊόν.

Η βασική συνεισφορά αυτής της ερευνητικής προσπάθειας είναι η πρόταση μιας ιεραρχίας από μεθόδους ML ανάλογα με το είδος, την ποσότητα και την ποιότητα των δεδομένων. Ξεκινώντας από μεθόδους που βασίζονται σε decision trees όπως τα random forests και ο αλγόριθμος gradient boosting, και φτάνοντας μέχρι τα νευρωνικά δίκτυα

(artificial neural networks-ANNs). Οι μέθοδοι πρόβλεψης που βασίζονται στα νευρωνικά δίκτυα συχνά παρουσιάζουν τη μεγαλύτερη ακρίβεια ανάμεσα στις μεθόδους ML, ωστόσο απαιτούν μεγάλο όγκο δεδομένων, σημαντικές υπολογιστικές υποδομές (τόσο για την αποθήκευση των δεδομένων όσο και για την εκπαίδευσή τους) και δεν προσφέρουν καμία εκτίμηση σχετικά με τη βαρύτητα κάθε μεταβλητής στην τελική πρόβλεψη. Αντιθέτως οι μέθοδοι που βασίζονται στα decision trees απαιτούν σημαντικά λιγότερους πόρους, επιτρέπουν μεγαλύτερα περιθώρια ερμηνείας των αποτελεσμάτων σε σχέση με τις παραμέτρους και μπορούν να διαχειριστούν αριθμητικές και κατηγορικές μεταβλητές (που συχνά απαντώνται στην πράξη). Ταυτόχρονα όμως υστερούν στην ικανότητα γενίκευσης και κατά συνέπεια στην ακρίβεια. Από τα παραπάνω προκύπτει ότι η

**Η βασική συνεισφορά της ερευνητικής προσπάθειας είναι η πρόταση μιας ιεραρχίας από μεθόδους ML ξεκινώντας από μεθόδους που βασίζονται σε decision trees όπως τα random forests και ο αλγόριθμος gradient boosting, και φτάνοντας μέχρι τα νευρωνικά δίκτυα**

επιλογή της κατάλληλης μεθόδου και κυρίως του κατάλληλου συνδυασμού από μεθόδους ML είναι συνάρτηση των διαθέσιμων δεδομένων και του στόχου του προβλεπτικού μοντέλου της βιομηχανικής διεργασίας.

Στο σταυροδρόμι του AI και του ML με τον σχεδιασμό αποδοτικών βιομηχανικών διεργασιών, οι προοπτικές και οι προκλήσεις για τον σύγχρονο Χημικό Μηχανικό είναι συναρπαστικές. Απαιτείται ευρύτητα γνώσεων που στηρίζονται σε δύο πυλώνες: τις αρχές της Χημικής Μηχανικής και την Επιστήμη των Δεδομένων. Αυτή η διεπιστημονικότητα είναι κοινό χαρακτηριστικό ανάμεσα στις εφαρμογές όλων των κλάδων Μηχανικών. Μάλιστα, τα δεδομένα και η διαχείρισή τους είναι μια διεπιφάνεια που ευνοεί την ώσμωση ιδεών και μεθοδολογιών μεταξύ των ειδικοτήτων και δημιουργεί τις προϋποθέσεις για αλματώδη πρόοδο.

- [1] E. D. Koronaki, G. P. Gakis, N. Cheimarios and A. G. Boudouvis "Efficient tracing and stability analysis of multiple stationary and periodic states with exploitation of commercial CFD software." *Chemical Engineering Science* **150**, 26 (2016).
- [2] E. D. Koronaki, A. M. Nikas and A. G. Boudouvis "A data-driven reduced-order model of nonlinear processes based on Diffusion Maps and Artificial Neural Networks." *Chemical Engineering Journal* **397**, Art. 125475 (2020).
- [3] L. H. Chiang, B. Braun, Z. Wang, I. Castillo "Towards AI at scale in the Chemical Industry." *AIChE J.*, in press, February 2022, doi:10.1002/aic.17644.

# Δεδομένα Παρατήρησης Γης και Επιστήμη Δεδομένων

Κωνσταντίνος Καραντζαλός

Εργαστήριο Τηλεπισκόπησης - Σχολή Αγρονόμων και Τοπογράφων Μηχανικών - Μηχανικών Γεωπληροφορικής - Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

Η ανάπτυξη δορυφορικών συστημάτων Παρατήρησης Γης (ΠΓ) τελευταίας γενιάς, τόσο από δημόσιους (π.χ. *EU Copernicus/ESA*, *USGS/NASA*) όσο και ιδιωτικούς (π.χ. *Maxar*, *Airbus*, *Planet*, *Spire*) φορείς, έχει οδηγήσει στη συλλογή ενός συνεχώς αυξανόμενου όγκου τηλεπισκοπικών δεδομένων, με σημαντική ταχύτητα ροής και ποικιλομορφία, δημιουργώντας αποθετήρια της τάξης των Exabyte. Η ταχύτητα της ανάπτυξης αυτής δεν έχει ιστορικό προηγούμενο τόσο στον τομέα της αξιοποίησης των δεδομένων (downstream), όσο και στον τομέα της κατασκευής/αποστολής (upstream) και επιχειρησιακής λειτουργίας (midstream) των δορυφορικών συστημάτων. Πρόσφατα επιτεύγματα σε σχέση με τον αριθμό (>100) των εκτοξευόμενων δορυφόρων από έναν και μόνο πύραυλο<sup>1</sup>,

την επαναχρησιμοποίηση διαστημικών πυραύλων<sup>2</sup>, την αύξηση της ισχύος των πυραύλων<sup>3</sup>, τα ήδη επιχειρησιακά δορυφορικά συστήματα μικρών δορυφόρων χαμηλού κόστους<sup>4</sup>, καθώς και η πρόοδος στην επικοινωνία μεταξύ δορυφόρων και σταθμών εδάφους<sup>5</sup> καταδεικνύουν την εκθετική, πλέον, διαθεσιμότητα των δεδομένων ΠΓ.

Αυτά τα νέα, με παγκόσμια χωρική κάλυψη, σύνολα τηλεπισκοπικών δεδομένων οδηγούν σε μια πολύ πιο ολοκληρωμένη εικόνα για την κατάσταση του πλανήτη μας. Αυτή η εικόνα εί-

1 <https://www.bbc.com/news/science-environment-55775977>

2 <https://www.space.com/spacex-starlink-21-internet-satellites-launch-rocket-landing-success>

3 <https://www.spacex.com/vehicles/falcon-heavy/>

4 π.χ. <https://www.planet.com/>, <https://spire.com/>, <https://www.iceye.com/>

5 <https://www.nature.com/articles/nphoton.2017.107>

ναί σήμερα ακόμη πιο περιεκτική και αναλυτική, καθώς συνδυάζεται και με ποικίλα ετερογενή δεδομένα που συλλέγονται από πολυάριθμους έξυπνους και διασυνδεδεμένους αισθητήρες σε επανδρωμένα ή μη επανδρωμένα εναέρια, επίγεια, θαλάσσια, υποθαλάσσια συστήματα λήψης. Τέτοιες ροές δυναμικών δεδομένων (ενδεικτικά: οπτικά, πολυφασματικά, υπερασματικά, θερμικά, ραντάρ, lidar, ακουστικά, πολυδισμικά ηχοβολιστικά) προσφέρουν νέες δυνατότητες στους επιστήμονες να μελετήσουν, κατανοήσουν, χαρτογραφήσουν, παρακολουθήσουν τους κκεανούς, την ατμόσφαιρα, τη γήινη επιφάνεια και τις αλληλεπιδράσεις τους.

Ειδικότερα, η πραγματικά μεγάλη αξία των δεδομένων ΠΓ προσδιορίζεται και περιορίζεται από τη δυνατότητα εξαγωγής πληροφορίας από αυτά. Παρά τη σημερινή άνευ προηγουμένου

1 <https://www.bbc.com/news/science-environment-55775977>

διαθεσιμότητα, η μαζική εκμετάλλευση και ερμηνεία των δεδομένων ΠΓ παραμένει μια κορυφαία επιστημονική και τεχνολογική πρόκληση.

Τα μεγάλα δεδομένα ΠΓ επιβάλλουν σήμερα μια διεπιστημονική προσέγγιση μακριά από παραδοσιακές μονολιθικές τακτικές τοπικής διαχείρισης, επεξεργασίας και ανάλυσης. Μηχανικοί με γνώσεις και δεξιότητες από τα, συχνά με επικαλύψεις, πεδία της γεωπληροφορικής, μαθηματικής ανάλυσης, στατιστικής, τεχνητής νοημοσύνης, όρασης υπολογιστών, μηχανικής μάθησης, διαχείρισης δεδομένων, παράλληλων και καταναμημένων συστημάτων κ.ά. καλούνται συνεργατικά να δώσουν τεχνικές και επιχειρησιακές λύσεις σε πολλαπλές προκλήσεις της επιστήμης –γεωχωρικών– δεδομένων (geospatial data science).

Προς την κατεύθυνση αυτή, τρεις βασικοί άξονες έρευνας και ανάπτυξης είναι:

- ✓ ο σχεδιασμός και η υλοποίηση μεθόδων εναρμόνισης δεδομένων (data harmonization) για την παραγωγή πολυδιάστατων χωρο-χρονικών φασματικών 'κύβων' (datacubes) και χρονοσειρών με γεωμετρική και ραδιομετρική πιστότητα – εδώ τεχνικές διαβαθμονόμησης (inter-calibration), συγκριτικής βαθμονόμησης (cross-calibration), αντιστοίχισης δεδομένων (data registration), ανίχνευσης αντικειμένων, ακραίων/ άτυπων τιμών, ανάλυση χρονοσειρών, παλινδρόμησης, συγχώνευσης δεδομένων (data fusion, super-resolution) κ.ά. παίζουν βασικό ρόλο στις επιμέρους λύσεις
- ✓ ο σχεδιασμός και η υλοποίηση μεθόδων πολυδιάστατης (χώρος, φάσμα, χρόνος) ανάλυσης, κατανόησης σκηνής, ανίχνευσης μεταβολών και εξαγωγής σημασιολογικής πληροφορίας από τα δεδομένα – εδώ κυριαρχούν τεχνικές μηχανικής μάθησης (supervised, semi-supervised, self-supervised, unsupervised) για την κατάτμηση και ταξινόμηση σημάτων, εικόνων, εικονοστοιχείων (scene classification, semantic segmentation), τον εντοπισμό αντικειμένων (object detection, instance segmentation) και μεταβολών (change detection) σε ακολουθίες εικόνων και δεδομένων με βαθιές αρχιτεκτονικές νευρωνικών

κών δικτύων (convolutional, recurrent, vision transformers κ.ο.κ.)

- ✓ ο σχεδιασμός και η υλοποίηση κλιμακώσιμων (scalable) λύσεων αποθήκευσης, διαχείρισης, επεξεργασίας και οπτικοποίησης γεωχωρικών δεδομένων και προϊόντων με ανοικτά γεωχωρικά πρότυπα, η αποτελεσματική αξιοποίηση υποδομών υπολογιστικού νέφους, παράλληλων και καταναμημένων συστημάτων, η αξιοποίηση εθνικών υπερυπολογιστικών υποδομών για κρίσιμες εφαρμογές ΠΓ μεγάλης κλίμακας

Η Ευρώπη ηγείται σήμερα στα δορυφορικά προγράμματα ΠΓ που προσφέρουν ανοικτά τηλεπισκοπικά δεδομένα μέσης και υψηλής χωρικής ανάλυσης μέσα από το πρόγραμμα Copernicus και την οικογένεια των δορυφόρων Sentinel. Ηγείται και στις πρωτοβουλίες για ανοικτές υποδομές (European Open Science Cloud). Παρ' όλα αυτά, μεγάλες ιδιωτικές εταιρίες (Google, Amazon, Microsoft), προσφέροντας τα πλουσιότερα σε όγκο και ετερογένεια αποθετήρια δεδομένων ΠΓ, μαζί με αποτελεσματικούς και ιδιαίτερα κλιμακώσιμους τρόπους αναζήτησης, διαχείρισης και επεξεργασίας δεδομένων, στέκονται κυρίαρχα στις επιλογές των χρηστών είτε αυτοί είναι εξειδικευμένοι χρήστες είτε ενδιάμεσοι είτε ακόμα και οι τελικοί. Σε αυτό το πλαίσιο, η μαζική και αποτελεσματική αξιοποίηση δεδομένων ΠΓ, συνδυαστικά με άλλα διαθέσιμα γεωχωρικά δεδομένα και δεδομένα από διασυνδεδεμένους αισθητήρες, δημιουργούν ευκαιρίες αλλά και προκλήσεις για μηχανικούς, ερευνητικές ομάδες, νεοφυείς και υψηλής έντασης γνώσης επιχειρήσεις.

Στο Εργαστήριο Τηλεπισκόπησης του ΕΜΠ γίνεται προσπάθεια σε ερευνητικό επίπεδο να μελετηθούν διάφορες πτυχές από τους παραπάνω βασικούς άξονες έρευνας και ανάπτυξης, ενώ σε εκπαιδευτικό επίπεδο, στα προπτυχιακά και μεταπτυχιακά μαθήματα, η ανανέωση της ύλης και των εργαστηριακών ασκήσεων είναι σχεδόν συνεχής. Πρόσφατες επιστημονικές δημοσιεύσεις, ενδεικτικά, μελετούν λύσεις για την αξιοποίηση των δεδομένων ΠΓ στην αποτελεσματική χαρτογράφηση της γήινης επιφάνειας σε πολυάριθμες θεματικές κατηγορίες [1] και στον εντοπισμό πλαστικών στην θάλασσα [2]. Στον πυρήνα των με-

**Οι τεράστιες ροές δυναμικών δεδομένων προσφέρουν νέες δυνατότητες στους επιστήμονες να μελετήσουν, κατανοήσουν, χαρτογραφήσουν, παρακολουθήσουν τους ωκεανούς, την ατμόσφαιρα, τη γήινη επιφάνεια και τις αλληλεπιδράσεις τους.**

θόδων αυτών βρίσκονται νευρωνικά δίκτυα βαθιάς μάθησης όπως αντίστοιχα και σε προβλήματα αυτόματου εντοπισμού μεταβολών από διαχρονικά δεδομένα [3] ή δεδομένα από ακολουθίες εικόνων και τροχιών για συγκοινωνιακές εφαρμογές [4]. Η διαχρονική παρακολούθηση αντικειμένων, θεματικών κατηγοριών και δυναμικών φαινομένων όπως συνδυαστικές μεταβολές στην επιφανειακή θερμοκρασία και τις δασικές εκτάσεις [5] ή η διαχρονική ποιοτική παρακολούθηση των καλλιεργειών [6] πραγματοποιείται με ανάλυση χρονοσειρών, για την οποία μέθοδοι συγχώνευσης πληροφορίας [7] ή εναρμονισμού ετερογενών διαχρονικών δεδομένων προσφέρουν την απαιτούμενη γεωμετρική και ραδιομετρική πιστότητα στις παρατηρήσεις [8]. Καθώς τα αποτελέσματα της χαρτογράφησης, του εντοπισμού αντικειμένων και της παρακολούθησης δυναμικών φαινομένων χρησιμοποιούνται σε διάφορα επίπεδα λήψης κρίσιμων αποφάσεων, τεχνικές ερμηνείας τεχνητής νοημοσύνης δίνουν τη δυνατότητα για μεγαλύτερη διαφάνεια και επεξηγήσεις για τις προβλέψεις και αποφάσεις που λαμβάνουν τα μοντέλα βαθιάς μάθησης που χρησιμοποιούνται [9].

Συμπερασματικά, οι συνεχώς αυξανόμενες προσδοκίες για διαχείριση και μαζική εκμετάλλευση των διαθέσιμων σήμερα ροών τηλεπισκοπικών δεδομένων απαιτεί καινοτόμες, διεπιστημονικές προσεγγίσεις, ευρεία γνώση και δεξιότητες στα πεδία της Παρατήρησης Γης και Επιστήμης Δεδομένων.

[1] Karakizi et al., 2018, Detailed Land Cover Mapping from Multitemporal Landsat-8 Data of Different Cloud Cover, Remote Sensing  
 [2] Kikaki et al., 2022, MARIDA: A benchmark for Marine Debris detection from Sentinel-2 remote sensing data, PLoS ONE.  
 [3] Papadomanolaki et al., 2021, A Deep Multi-Task Learning Framework Coupling Semantic Segmentation and Fully Convolutional LSTM Networks for Urban Change Detection, IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing.  
 [4] Psalta et al., 2020, Social Pooling with Edge Convolutions on Local Connectivity Graphs for Human Trajectory Prediction in Crowded Scenes, IEEE International Conference on Intelligent Transportation Systems.  
 [5] Andronis et al., 2022, Time Series Analysis of Landsat Data for Investigating the Relationship between Land Surface Temperature and Forest Changes in Paphos Forest, Cyprus, Remote Sensing  
 [6] Karantzas et al., 2017, Monitoring Crop Growth and Key Agronomic Parameters through Multitemporal Observations and Time Series Analysis from Remote Sensing Big Data, European Conference on Precision Agriculture  
 [7] Kremezi et al., 2021, Pansharpening PRISMA Data for Marine Plastic Litter Detection Using Plastic Indexes, IEEE Access  
 [8] Karantzas and Karmas, 2017, Scalable Cloud-based Computation of Consistent Surface Reflectance Mosaics at 10m from Sentinel-2 and Landsat-8 Missions, ESA Conference on Big Data from Space  
 [9] Kakogeorgiou I. and Karantzas K., 2021, Evaluating Explainable Artificial Intelligence Methods for Multi-label Deep Learning Classification tasks in Remote Sensing, International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation

