

Σύντομη περίληψη:

Η ενσωμάτωση της Μηχανικής Μάθησης (ML) στην επιστήμη των υλικών έχει επιφέρει σημαντικές προόδους, από υπολογιστικές μεθόδους έως την πειραματική ανάλυση και πρόβλεψη. Οι μέθοδοι ML αποτελούν ένα ισχυρό εργαλείο για την πρόβλεψη των ιδιοτήτων των υλικών με βάση πειραματικά ή υπολογιστικά δεδομένα, προσφέροντας ιδιαίτερα πολύτιμες λύσεις όταν οι περαιτέρω πειραματικές ή υπολογιστικές διαδικασίες απαιτούν σημαντικούς οικονομικούς και χρονικούς πόρους. Οι μέθοδοι ML περιλαμβάνουν ένα ευρύ φάσμα αλγορίθμων, όπως νευρωνικά δίκτυα, δέντρα αποφάσεων, μηχανές υποστήριξης διανυσμάτων (SVM) και συμβολική παλινδρόμηση (Symbolic Regression-SR).

Ενώ οι περισσότερες μέθοδοι επικεντρώνονται στην ακρίβεια πρόβλεψης, συχνά λειτουργούν ως «μαύρα κουτιά» χωρίς να παρέχουν φυσική ερμηνεία των αποτελεσμάτων. Αντίθετα, η συμβολική παλινδρόμηση προσφέρει ένα ιδιαίτερο πλεονέκτημα: παράγει αναλυτικές αθηματικές εκφράσεις που είναι κατανοητές και επαληθεύσιμες από τους ερευνητές. Έτσι διασφαλίζεται ότι οι προτεινόμενες σχέσεις δεν παραβιάζουν τους φυσικούς νόμους και μπορούν να ενσωματωθούν αρμονικά σε θεωρητικά ή υπολογιστικά μοντέλα.

Στο πλαίσιο της διάλεξης, θα παρουσιαστούν βασικές έννοιες Μηχανικής Μάθησης καθώς και εισαγωγή στη μέθοδο της συμβολικής παλινδρόμησης (SR). Επιπλέον, θα παρουσιαστούν παραδείγματα εφαρμογής της μεθόδου SR σε δεδομένα ιδιοτήτων μεταφοράς ρευστών, όπως ο συντελεστής διάχυσης, το ιξώδες διάτμησης και η θερμική αγωγιμότητα που προέρχονται από προσομοιώσεις και βάσεις δεδομένων. Οι συμβολικές εκφράσεις που παράγονται μέσω SR επιτυγχάνουν χαμηλή πολυπλοκότητα και σφάλμα, χωρίς να παραβιάζουν τους φυσικούς νόμους, προσφέροντας αποτελέσματα συγκρίσιμα (ή και καλύτερα) από γνωστές μικροσκοπικές και εμπειρικές εκφράσεις. Τέλος, θα συζητηθούν προοπτικές εφαρμογές της μεθόδου, η ενσωμάτωσή της στις προσομοιώσεις, και οι δυνατότητες που προσφέρει για ταχύτερο και πιο αποδοτικό σχεδιασμό υλικών καθώς και για διερεύνηση σχέσεων και νόμων σε περίπτωση νέων υλικών.