

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ЦЕНТР
КОГНИТИВНЫХ РАЗРАБОТОК
УНИВЕРСИТЕТА ИТМО

НЦКР

ДУМАТЬ ЧТОБЫ ДЕЙСТВОВАТЬ

Цифровая трансформация научной деятельности: что такое перспективные технологии eScience

Александр Валерьевич Бухановский

Санкт-Петербург, 2021

Приоритет 20А Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации – Указ Президента Российской Федерации от 01.12.2016 № 642

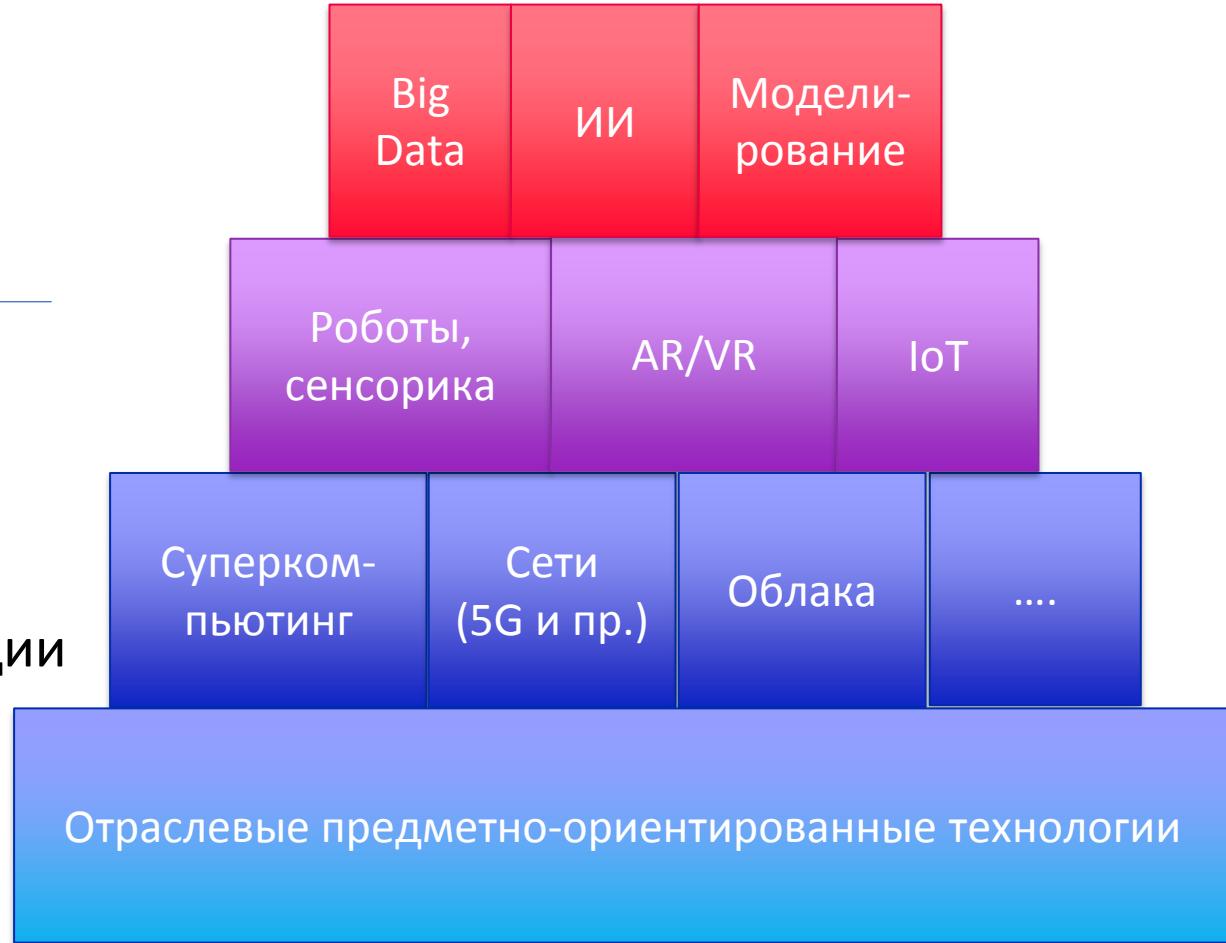
Переход к передовым цифровым, интеллектуальным производственным технологиям, роботизированным системам, к новым материалам и способам конструирования, создание систем обработки больших объемов данных, машинного обучения и искусственного интеллекта:

- ❖ Системная и нетравматичная цифровая трансформация реального сектора отечественной экономики
- ❖ Повышение производительности труда за счет комплексного использования цифровых технологий
- ❖ Повышение отдачи от капитальных вложений в развитие производства за счет перехода к цифровым технологиям организации производства
- ❖ Повышение устойчивости отечественной экономики за счет обеспечения превентивности управления ею на основе цифровых технологий
- ❖ Обеспечение прозрачности социально-экономических процессов за счет их перевода в цифровую форму, и оптимизация систем управления разных уровней
- ❖ Обеспечение цифрового равенства и цифровой конкурентоспособности граждан

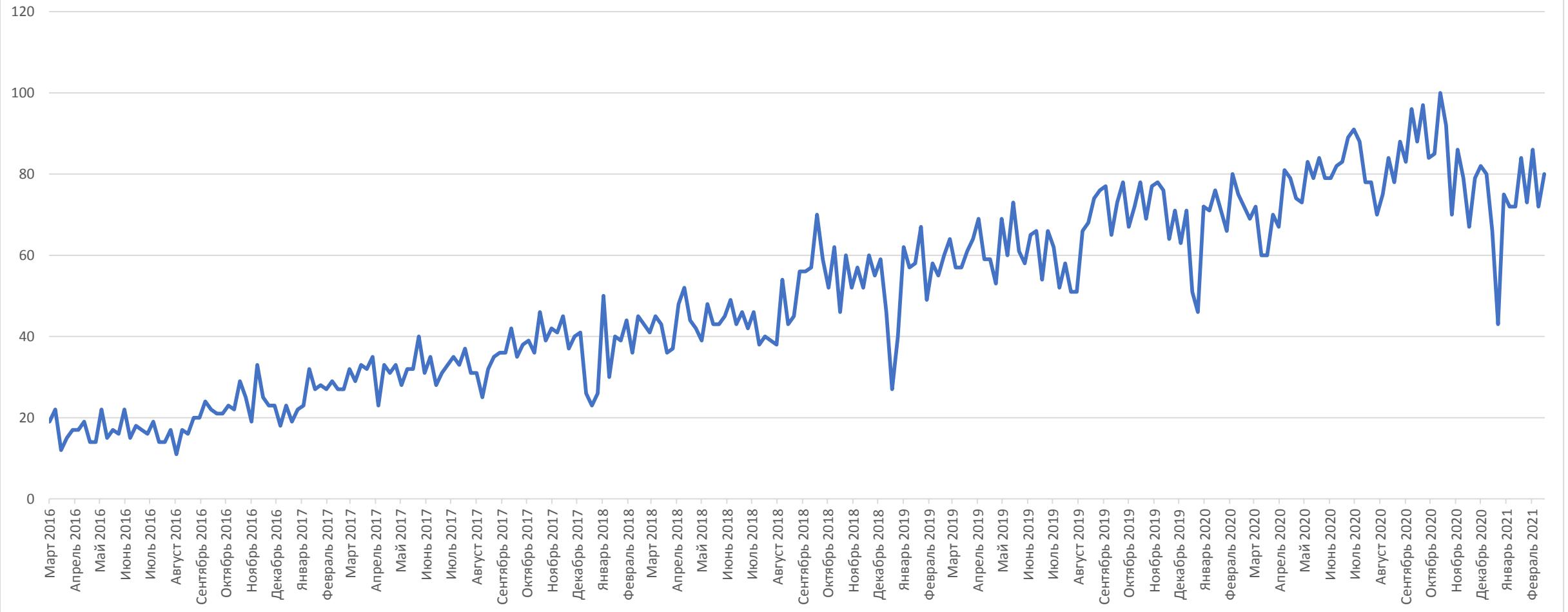
Процесс **глубокого преобразования** всех аспектов жизни человека с помощью цифровых технологий, приводящий к кардинальным изменениям технологий, культуры, операций и принципов создания новых продуктов и услуг, а также рынка труда

- 1) Взрывное развитие средств сбора и хранения данных
- 2) Виртуализация бизнес-процессов
- 3) Ускорение процессов принятия решений
- 4) Невозможность содержательной интерпретации цифровых объектов (сложность)
- 5) Распространение информации со скоростью выше скорости интерпретации человеком
- 6) Порождение новых форм социальной деятельности в цифровом виде

«Пищевая пирамида» технологий цифровой трансформации



Цифровая трансформация: (По всему миру)



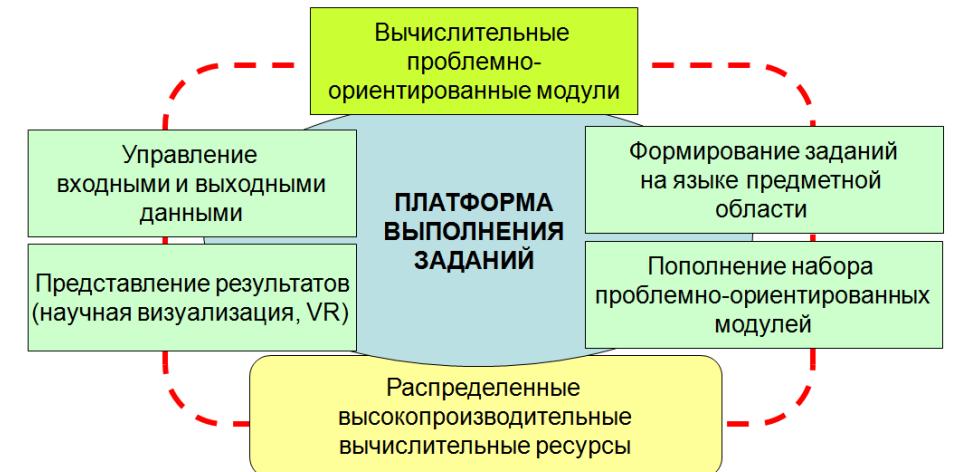
А как это касается ученых мужей? (особенно тех, кто и так занимается «цифрой»)

eScience («электронная» наука), или «киберинфраструктура»

Обобщенное определение eScience - John Taylor, 1999:

*The term **e-Science** (or **eScience**) is used to describe computationally intensive science that is carried out in highly distributed network environments (научные исследования с большим объемом вычислений в распределенных системах), or science that uses immense data sets (большие массивы данных) that require grid computing; (грид-вычисления) the term sometimes includes technologies that enable distributed collaboration (технологии объединения распределенных электронных ресурсов)*

PSE (Problem Solving Environment) – «интегрирующая» технология eScience, ориентированная на использование высокопроизводительных вычислительных ресурсов



Поколение I - цифровые средства коллективного доступа "в ручном режиме" к разнообразным вычислительным ресурсам, сервисам, ПО, базам данных, библиотекам, лабораторному оборудованию и пр. (90е XX века)

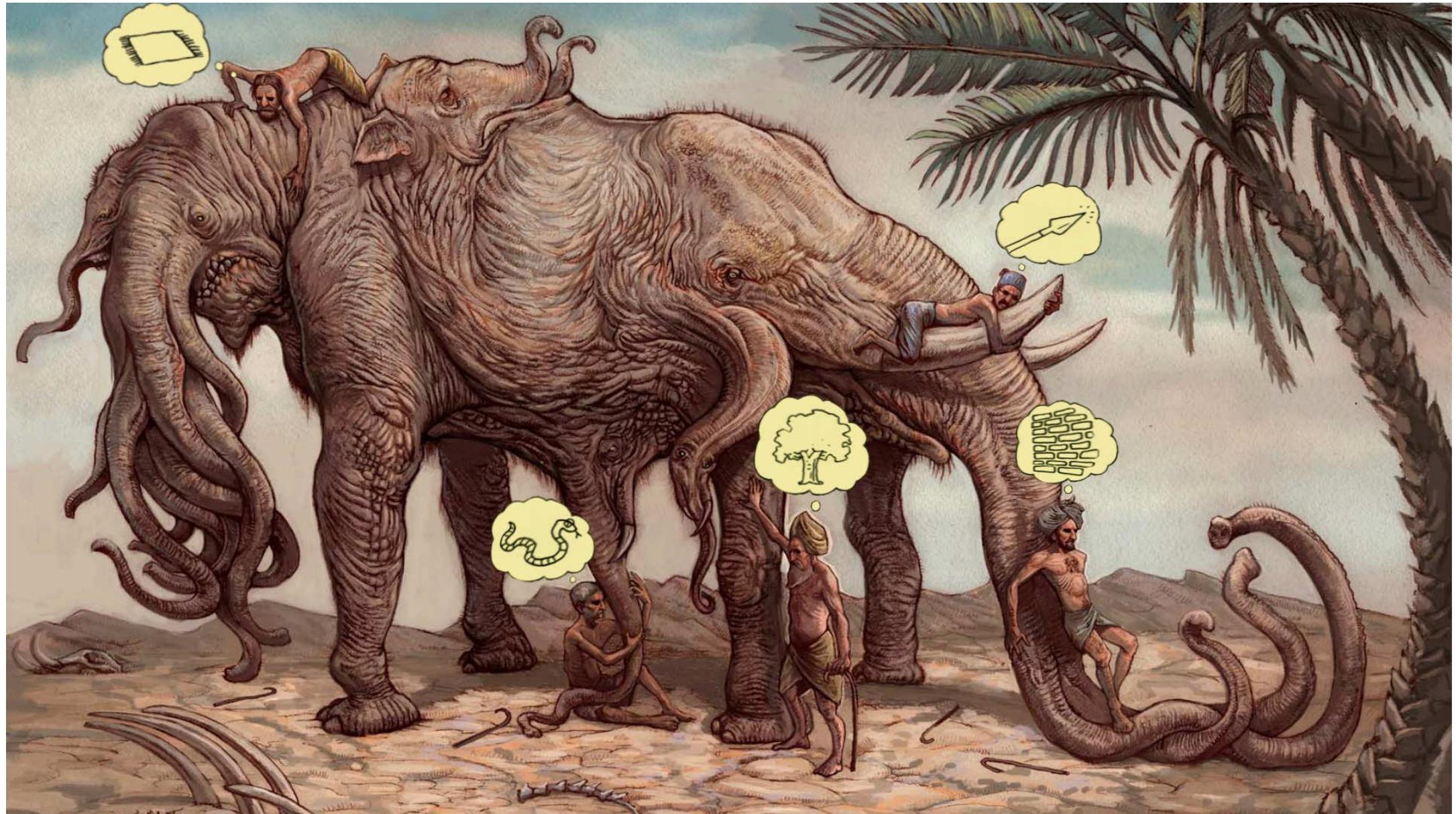
Поколение II - механизмы бесшовной агломерации объектов коллективного доступа (в том числе, на основе интеллектуальных технологий), облегчающие процессы взаимодействия между пользователями и совместного использования ресурсов для решения собственных задач (WMS, семантические сервисы, облачные планировщики и пр.). (2000е)

Поколение III - механизмы, реализующие логику т.н. "4-й парадигмы науки" - автоматизация процессов получения новых знаний на основе данных (извлекаемых или синтезируемых на решениях I и II поколения) (2010е).

Поколение IV – механизмы цифровой трансформации научной деятельности посредством интеллектуальных технологий (2020е).

Как отличить цифровую трансформацию от обычной автоматизации в науке?

(трансформируется ли подход к исследованию vs. есть ли ИИ+?)



Искусственный интеллект – ЭТО:

цифровое воспроизведение процессов **сознательной активности** человека и социума в целом

в части **творческой** обработки и рассуждений на основе нетривиально формализуемой информации

в условиях временных и ресурсных **ограничений неопределенности и неполноты** исходных данных,

создающее кибернетические объекты, способные самостоятельно **ставить цели и их достигать** с качеством не ниже среднего специалиста,

способное в перспективе **заменить** существующие виды деятельности и профессии

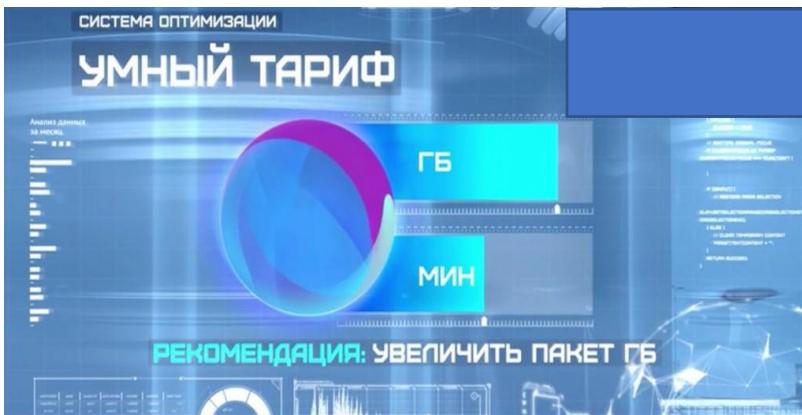
Он нужен Для:

- 1) освобождение человека от рутинных действий (**нет сил**);
- 2) поддержка принятия решений в экстремальных условиях (**нет времени**);
- 3) устранение коммуникационных барьеров (**нет понимания**);
- 4) автоматизация получения новых фундаментальных знаний (**нет... ума...**).

ИИ = «сознание» + «цели» + «неопределенность» + «творчество»

ИИ = «сознание» + «цели» + «неопределенность» + «творчество»

Системы на основе
формальной обработки
данных

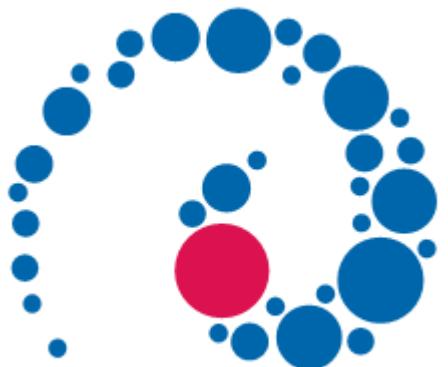


А ГДЕ ТВОРЧЕСТВО?

Системы на основе
математического
моделирования

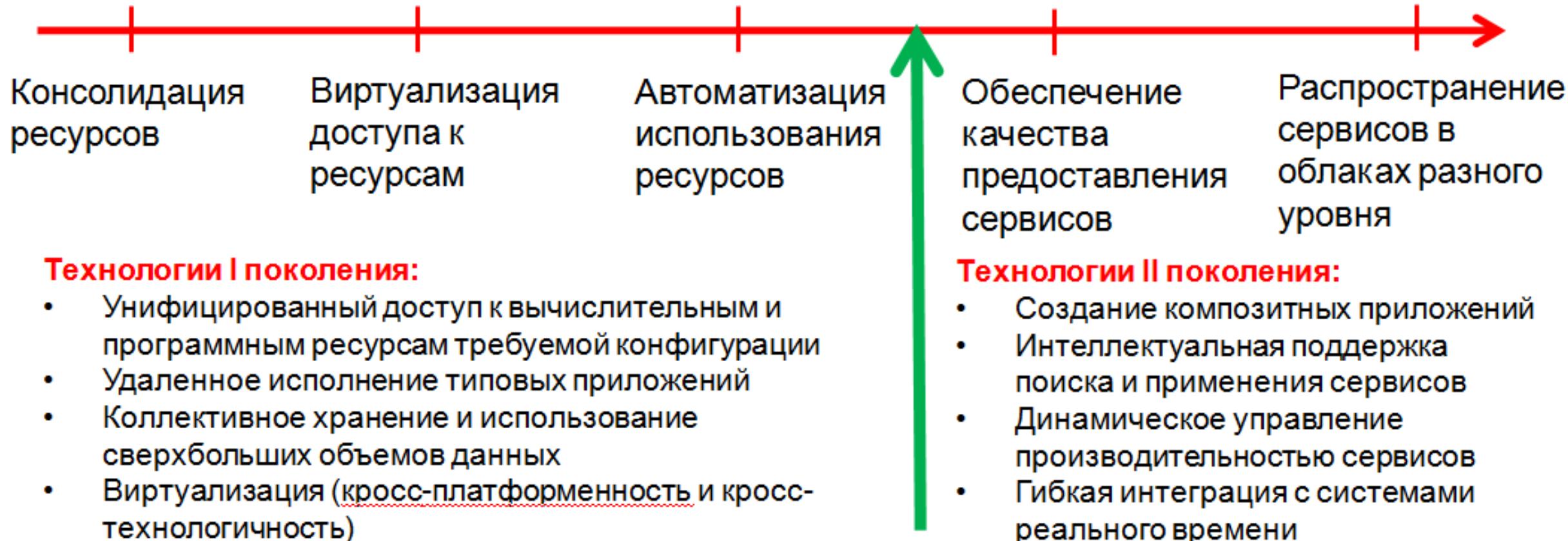


ИИ работает с задачами, для которых **не придуманы** формальные алгоритмы решения!



ТРАНСФОРМАЦИЯ ПРОЦЕССА РАБОТЫ С ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ИНФРАСТРУКТУРОЙ

Cloud Computing Maturity Model – ССММ



Организация взаимодействия через систему управления потоками заданий (Workflow Management Service)

Формально основой традиционной WMS является НАГ (направленный ациклический граф), хотя в настоящих решениях существуют циклы и условные блоки.

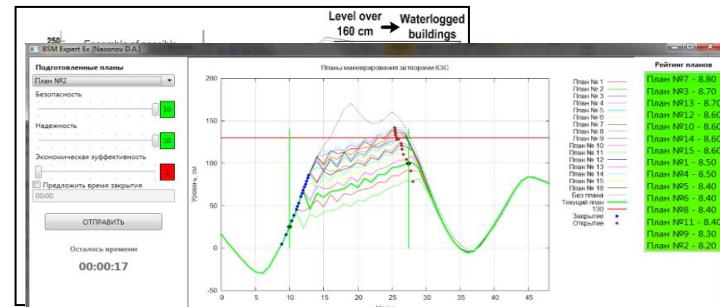
Благодаря обширной разработке механизмов планирования, проблема оптимизации ориентированных на работу приложений для ресурсоемких (по данным) вычислений также успешно решается.

- Сенсоры данных

- Маска с шумом накладывается на скорость ветра, инициализируя ансамбль моделирования ветровых волн и уровней воды в Балт. море.

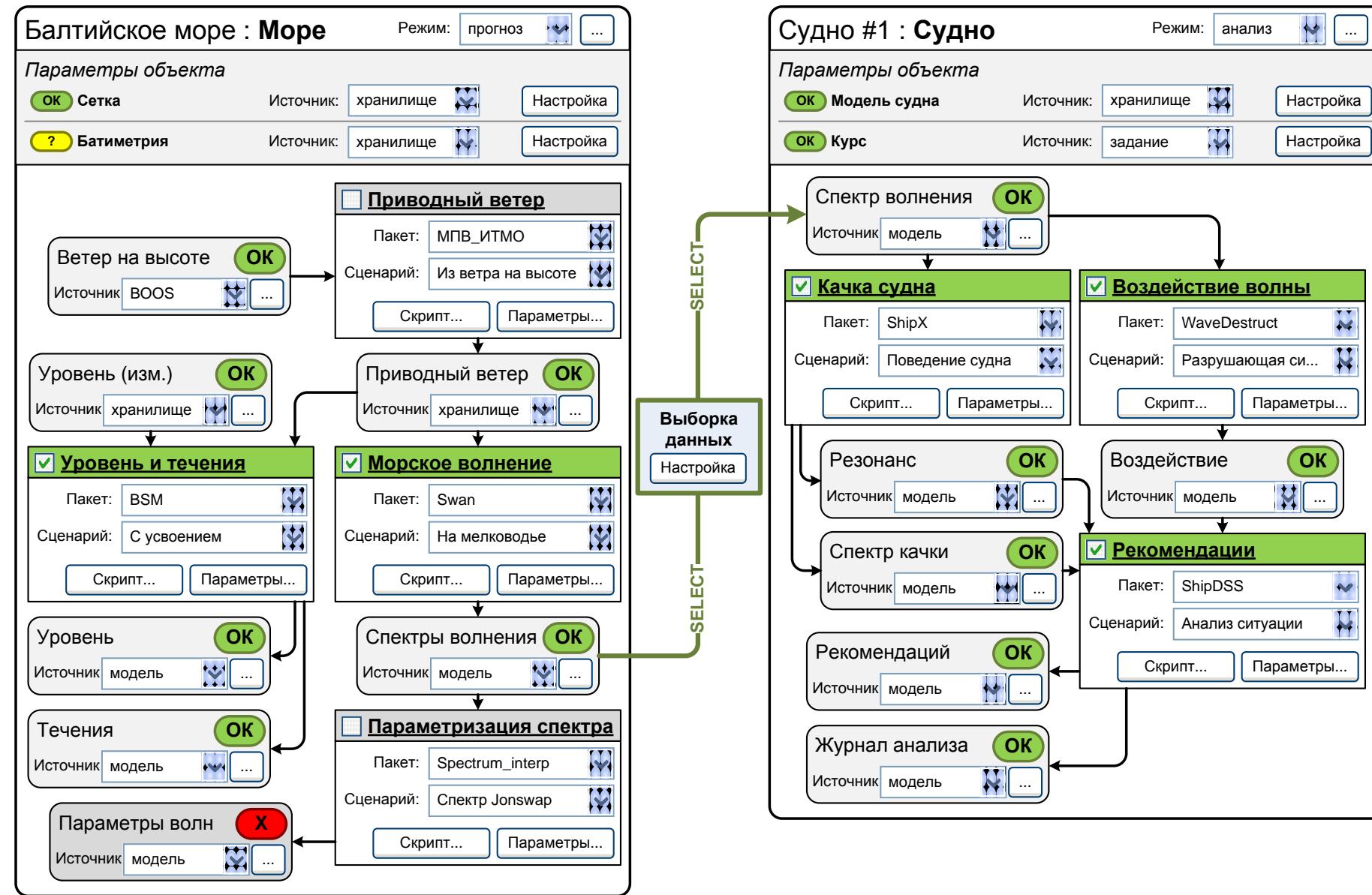
- Первые результаты агрегации и визуализации. Выполнение процедуры принятия решения по плану закрытия ворот.

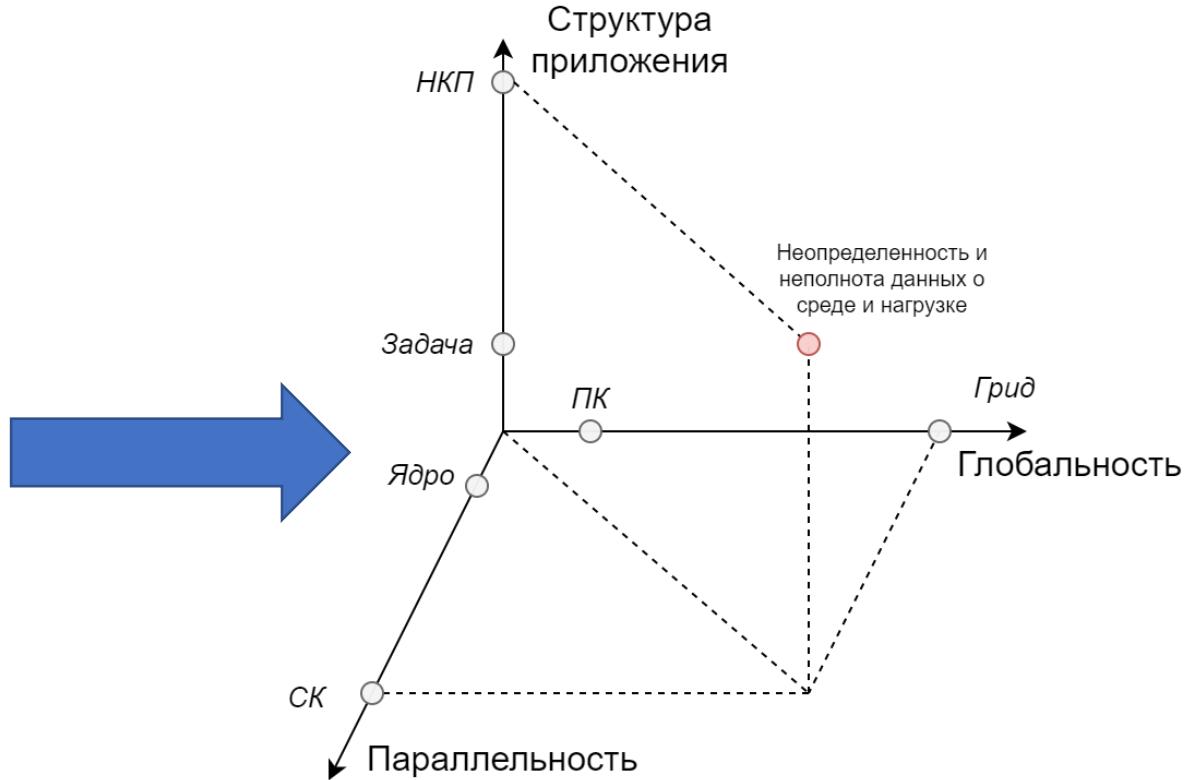
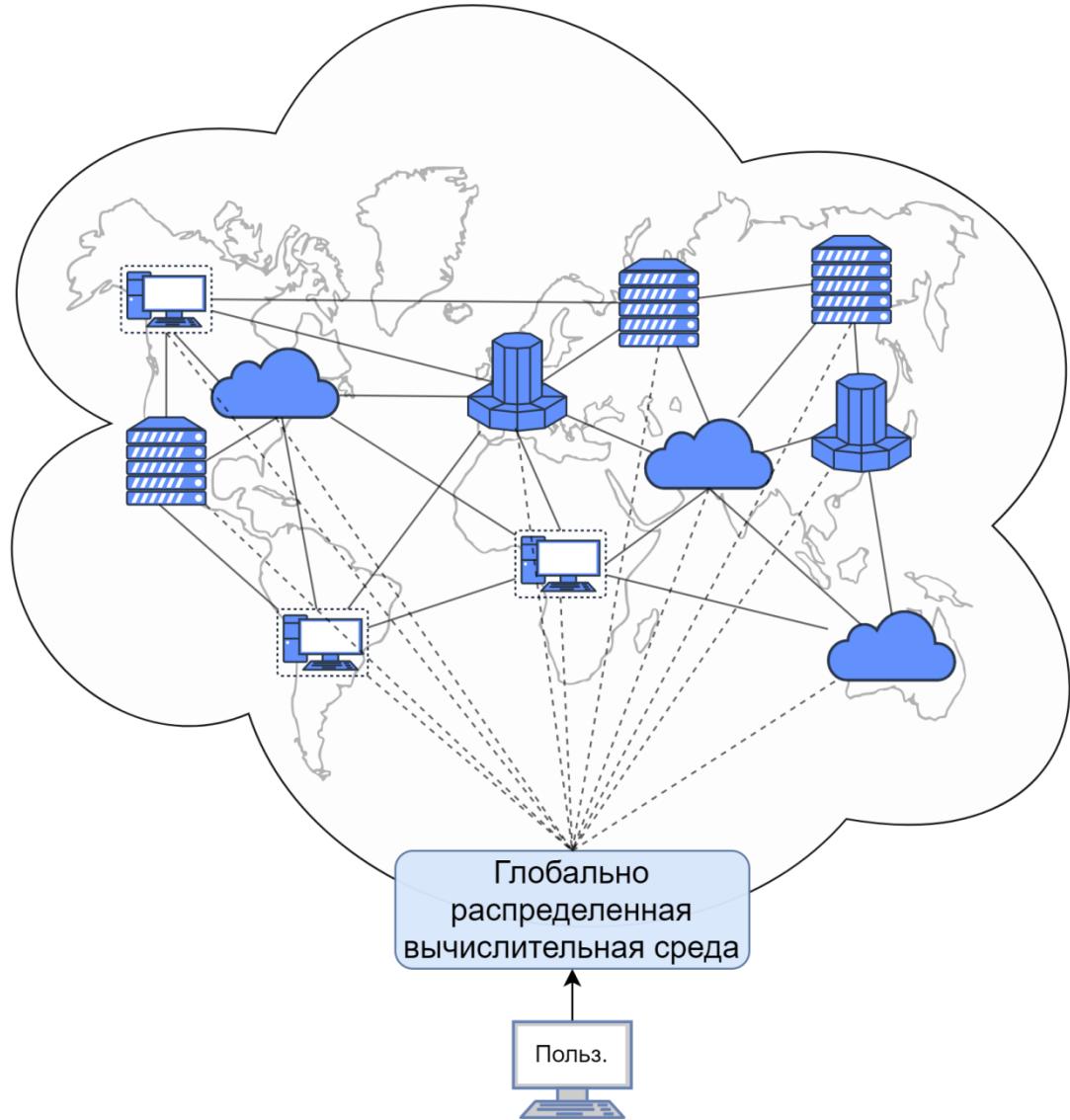
- Генерация окончательного плана:



Виртуальные моделирующие объекты в платформе CLAVIRE:

- No-code-формирование цифровых объектов
- Автогенерация мета-WF
- Автогенерация конкретного WF
- Обеспечение процесса исполнения приложения в распределенной среде





Неопределенность и неполнота данных о работе облачной среды возникает при усложнении или увеличении:

- Глобальности;
- Параллельности;
- Масштаба приложения.

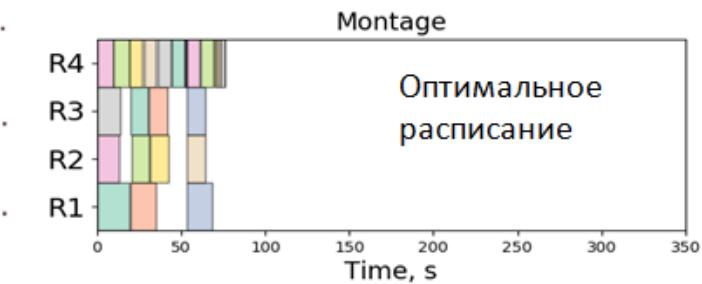
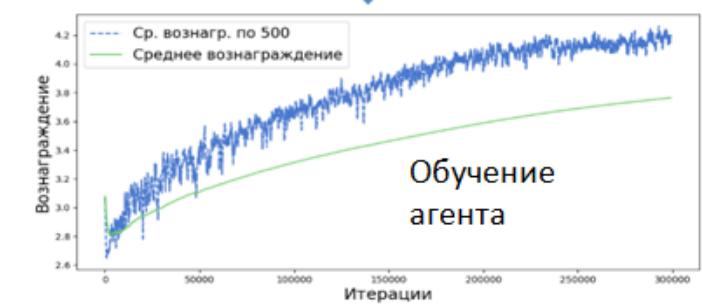
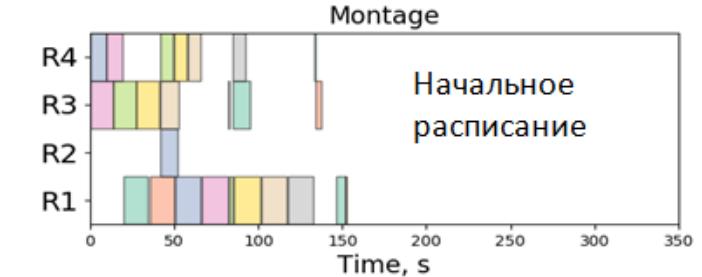
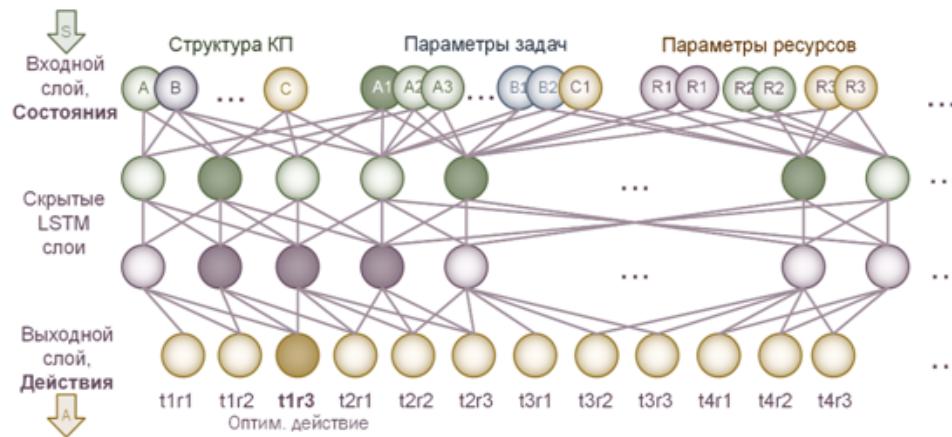
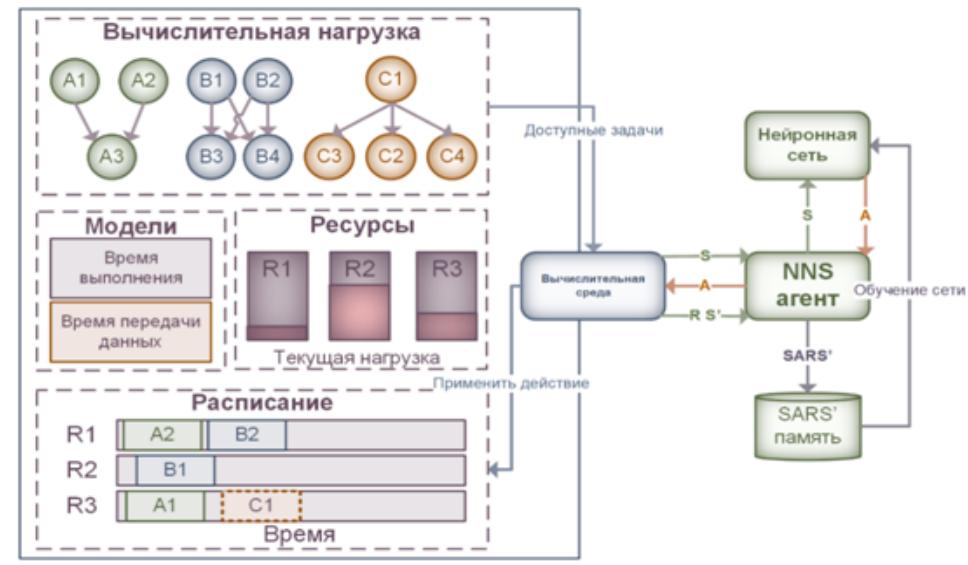
Задача: решение проблемы оптимального распределения вычислительной нагрузки по вычислительным ресурсам

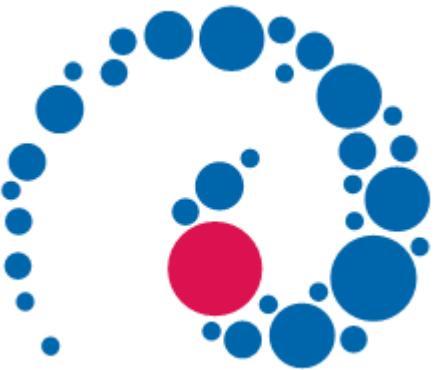
Решение: создание «планировщика» композитных приложений

Алгоритм использует:

- Принцип обучения с подкреплением (SARSA агент, Q-Learning)
- Нейронные сети в качестве функции полезности

Результат: Достижение производительности, эффективности, масштабируемости и адаптивности алгоритма планирования

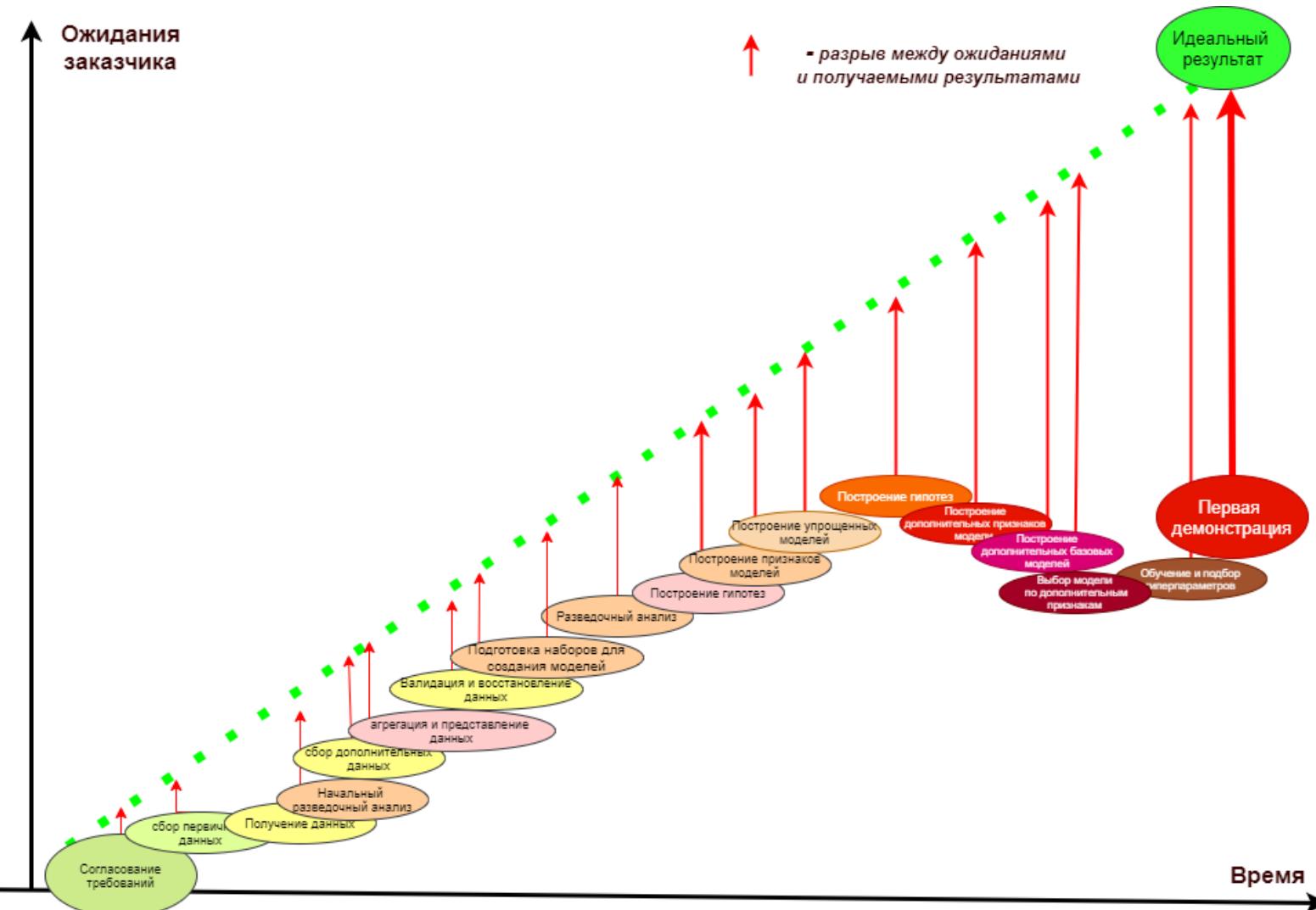




ТРАНСФОРМАЦИЯ ПРОЦЕССА КОЛЛЕКТИВНОЙ РАБОТЫ С ДАННЫМИ И МОДЕЛЯМИ

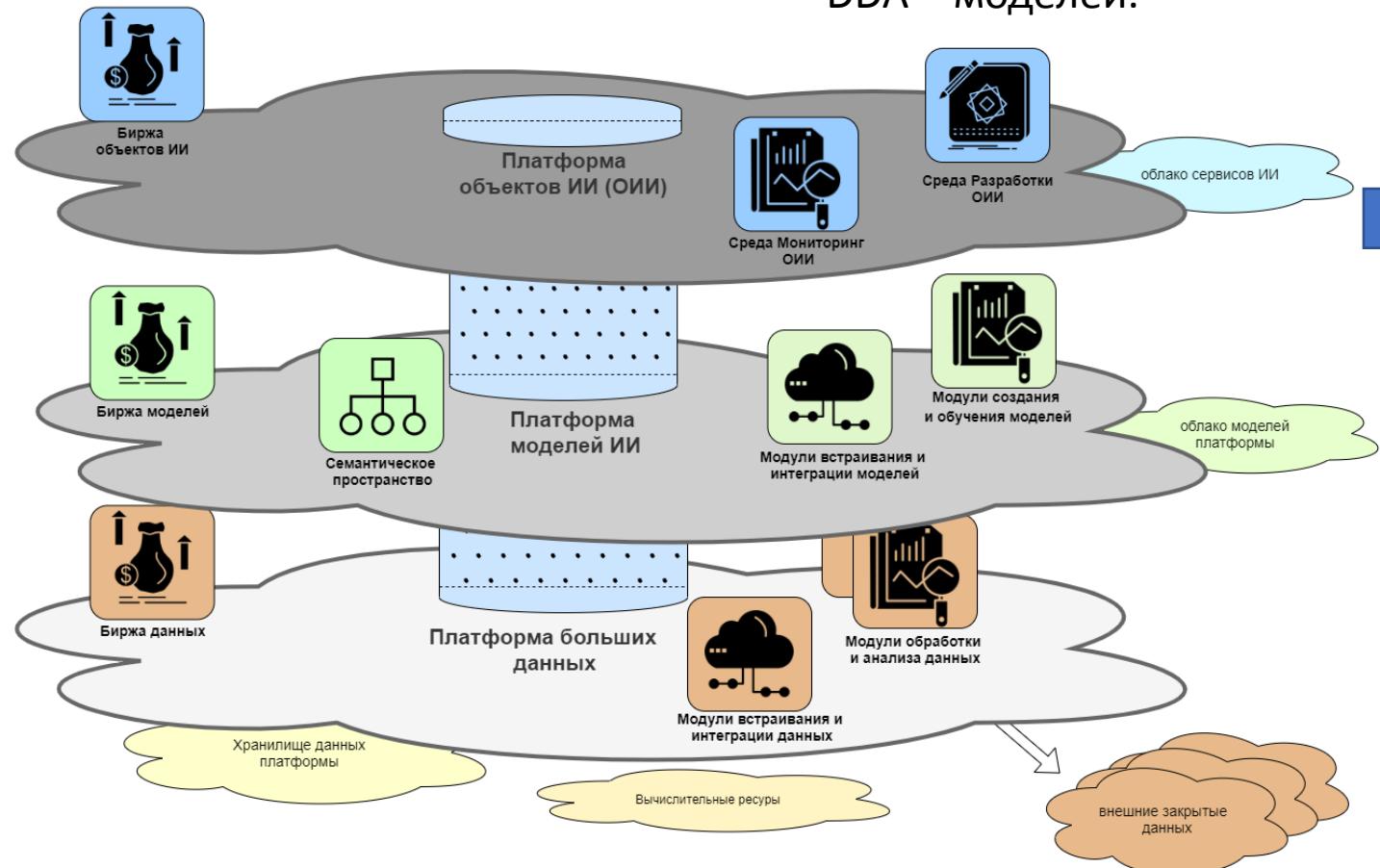
Риски в реализации проектов Data Science

1. Быстрые проекты - нет деления на разведочный и основной проекты.
2. Отсутствие предметной квалификации команды исполнителей.
3. Отсутствие данных или возможность создать корректные наборы данных.
4. Дорогие вычислительные ресурсы и ресурсы память.
5. Неопределенность в данных и закономерностях, что являются основой в построении моделей МО.
6. Неопределенность в качестве, как построения так и использования моделей.
7. Отсутствия единых практик процесса формирования, разработки и эксплуатации моделей МО.
8. Отсутствие коллабораций и механизмов переиспользования знаний, генерируемых артефактов.



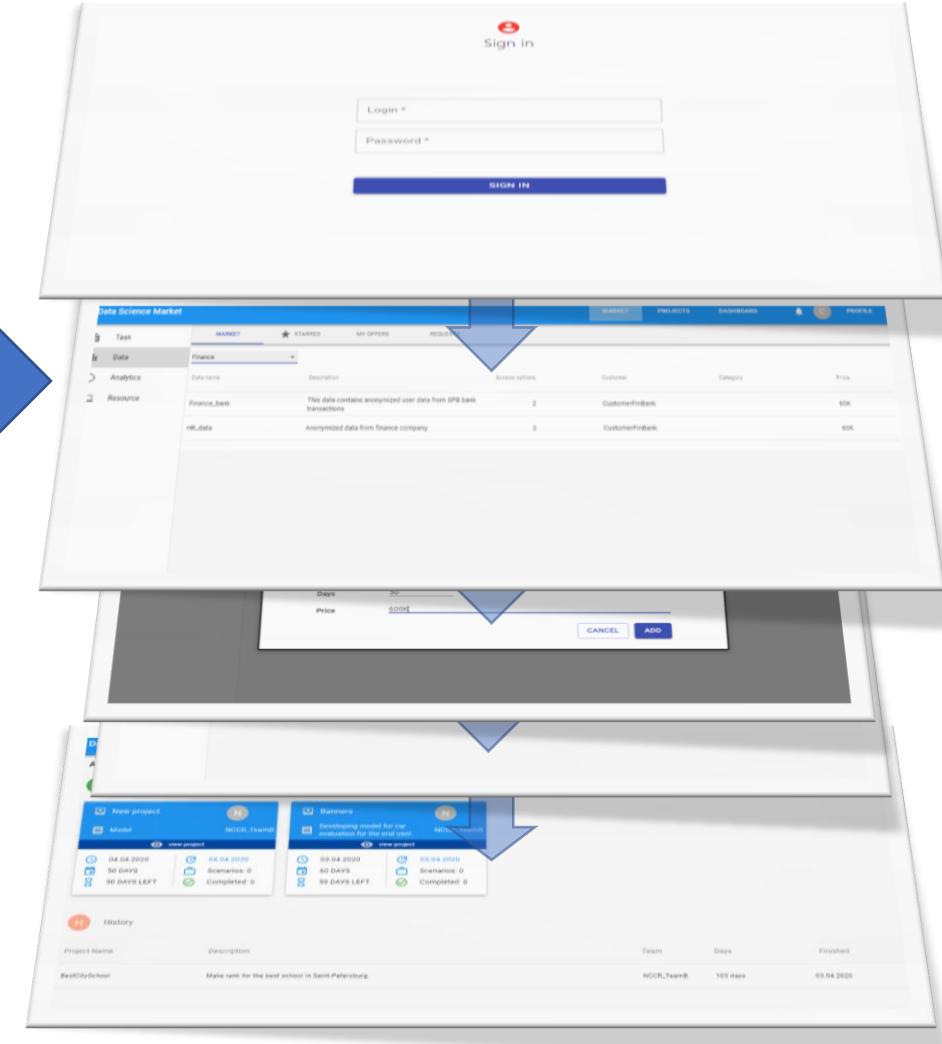
Уровни реализации платформы:

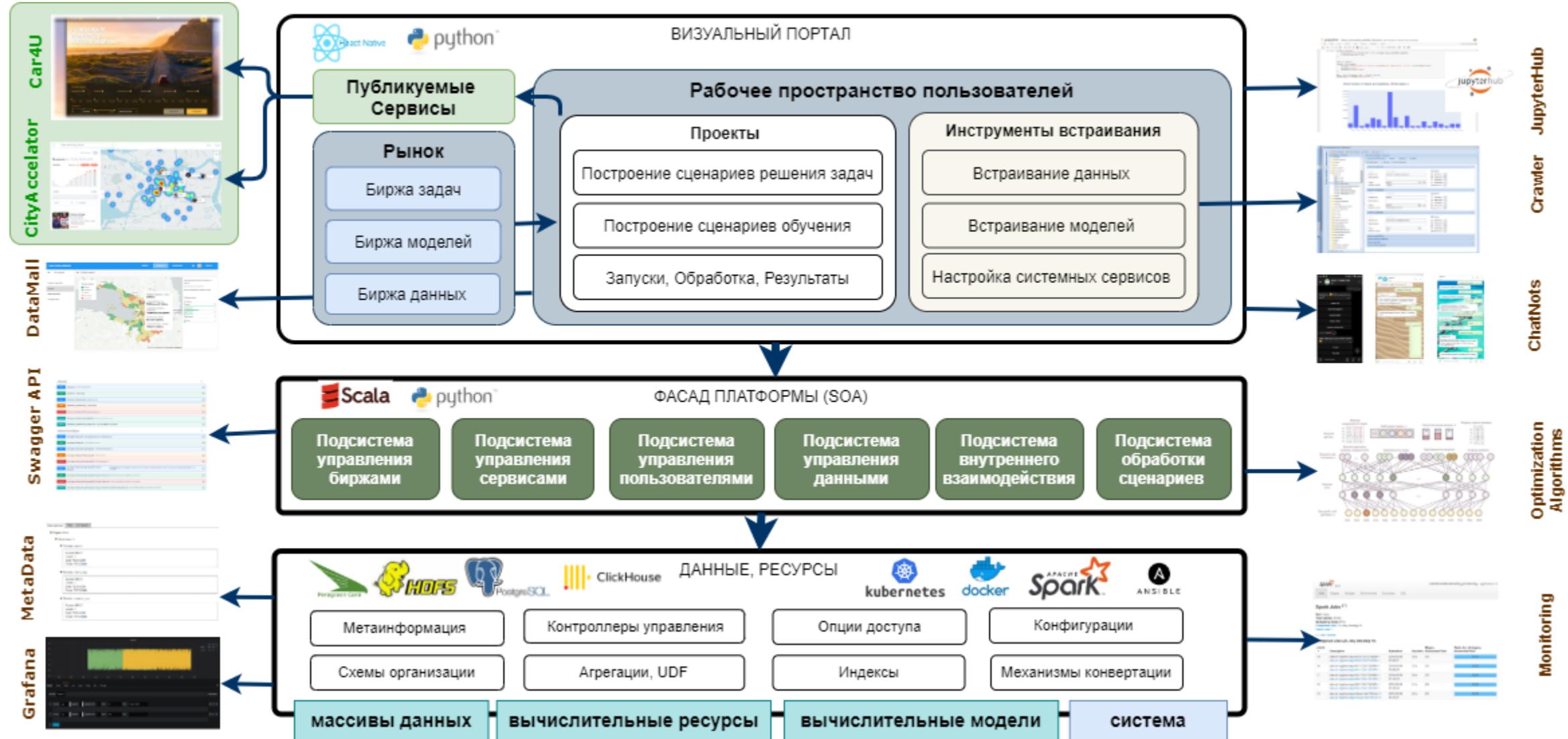
- уровень данных;
- уровень моделей;
- уровень готовых объектов.



Направления использования:

- платформа колабораций;
- биржа данных, артефактов;
- вычислительная платформа DDA – моделей.

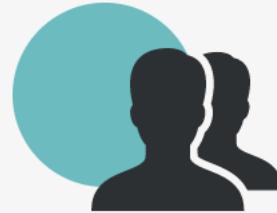




DataMall сейчас:

- механизм бирж;
- МО проекты на базе с JupyterHub;
- краулинг данных более 20 источников;
- вычислительная инфраструктура на базе Kubernetes, Spark, HDFS и ClickHouse;
- более 15 проектов*.

СЕРВИС



Платформа как сервис

– оказываем услуги по использованию готовой платформы на всех уровнях функционирования

Аудитория, сообщество, подписки.

Семейство производных платформы на общем лицензионном ядре – реализуем ВБС проекты под каждую задачу

Скорость, эффективность, надежность.

СЕМЕЙСТВО



ОТКРЫТЫЙ КОД



Ядро платформы в открытый доступ

– реализуем поддержку производных платформ

Сообщество, бренд, узнаваемость.

Ядро платформы крупному интегратору на его мощностях, работаем в рамках партнерства или субподряда

Потенциал, формирование новых рынков и возможностей.



ПАРТНЕРСТВО

Data Science Market

MARKET PROJECTS DASHBOARD PROFILE

All projects Scenario results

Project Scenarios Results Resource links Configuration

Уровень жизни

- Высокий
- Комфортный
- Средний
- Допустимый
- Проблемный

Roschino Sertolovo Kolpino Kirovsk Mga Krashenskoye Selo Sovnovy Bor

Подробная информация по району Колпино

Упоминаний Зеленых зон Нейтральный уровень

Жалоб на грязь и трафик Высокий уровень

Упоминаний полиции и пожарных Средний уровень

Карта удовлетворенности жизнью в районе демонстрационный прототип Больше информации о районе по клику

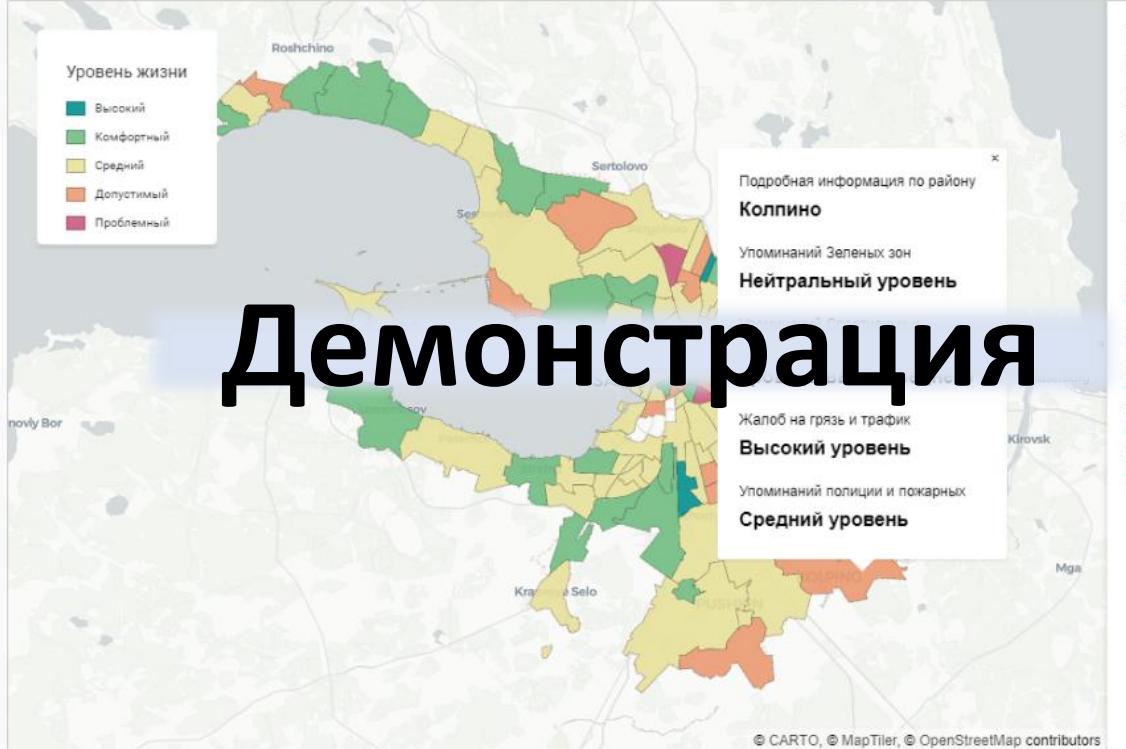
Уровень жизни

All selected

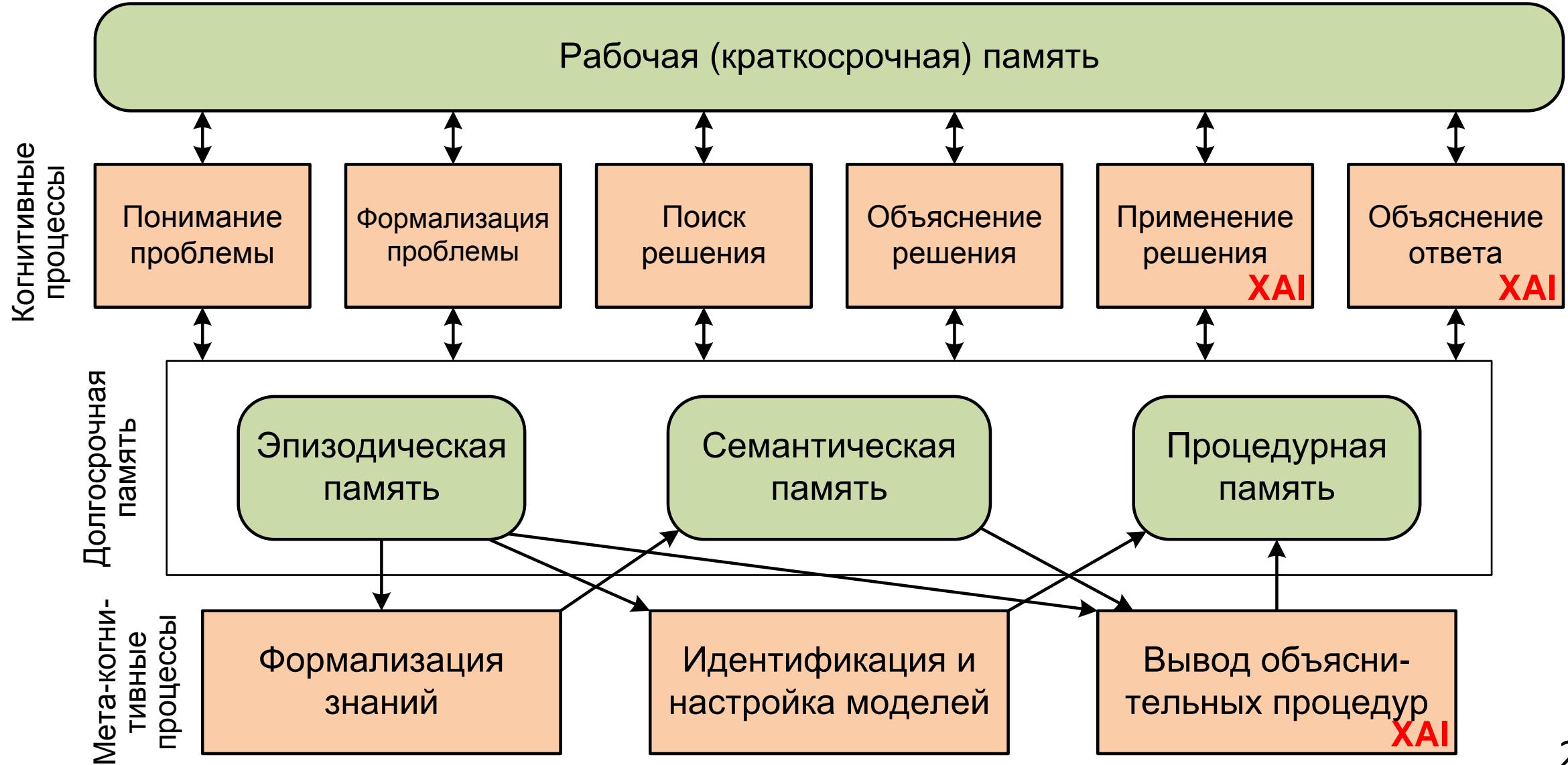
Средний	59
Комфортный	27
Допустимый	16
Проблемный	3
Высокий	2

© CARTO, © MapTiler, © OpenStreetMap contributors

Демонстрация

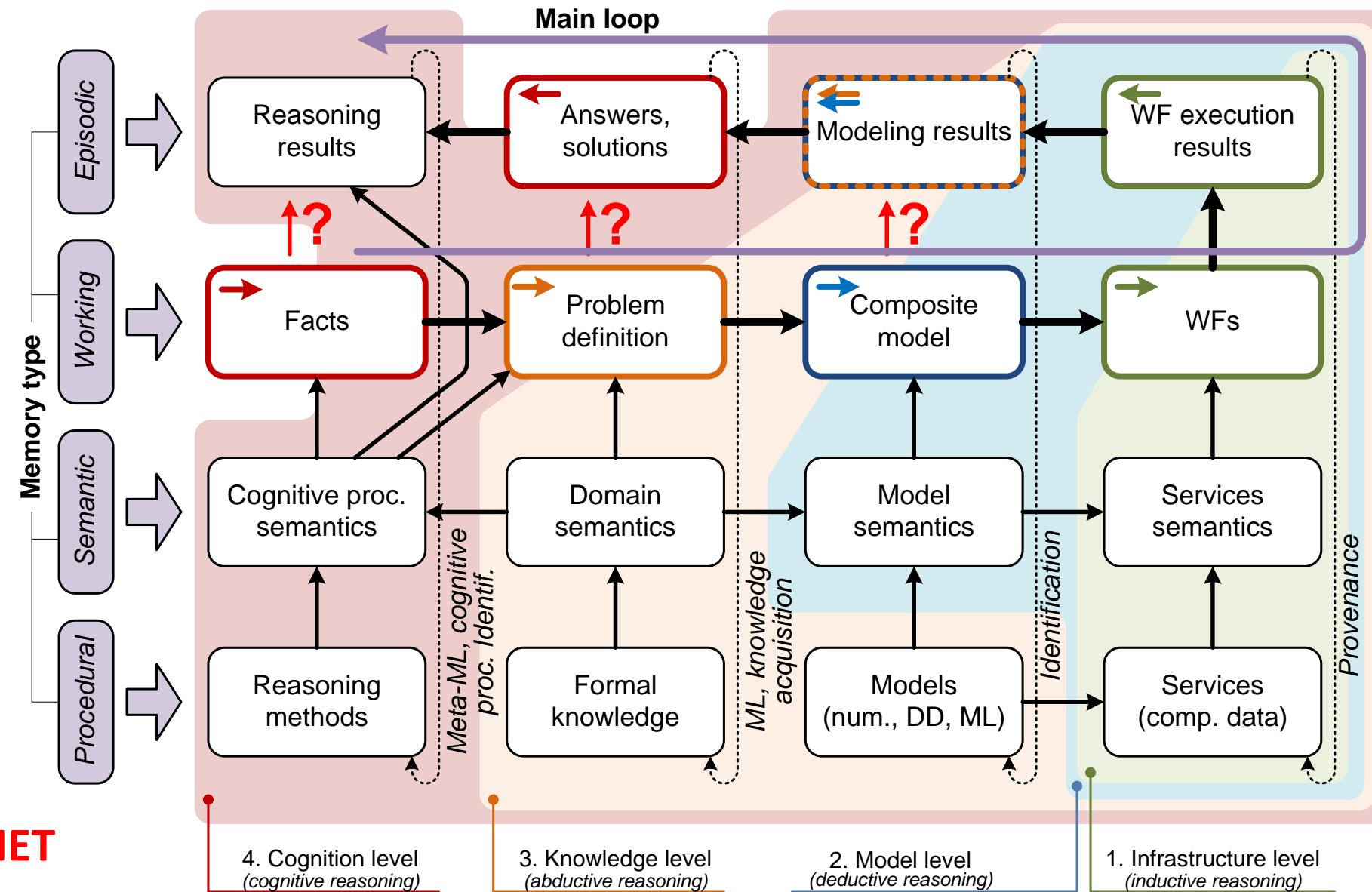


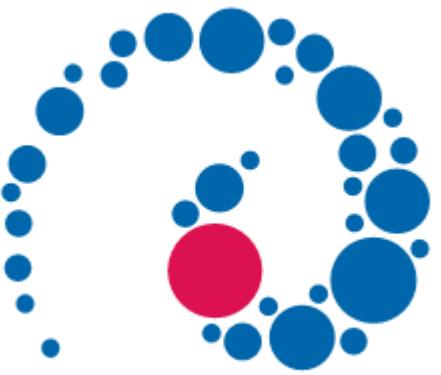
<https://actcognitive.org/platformy/datamall-platforma-podderzhki-zhiznennogo-tsikla-intellektualnykh-obektov-na-osnove-bolshikh-dannikh>



- Расширение принципов и подходов eScience на уровень когнитивной ОС
- Основной цикл – решение проблемы
- ИИ должен пройти путь от верхних уровней к нижним

CLAVIRE/CLEVERNET





ТРАНСФОРМАЦИЯ ПОДХОДА К СОЗДАНИЮ ЦИФРОВЫХ ОБЪЕКТОВ

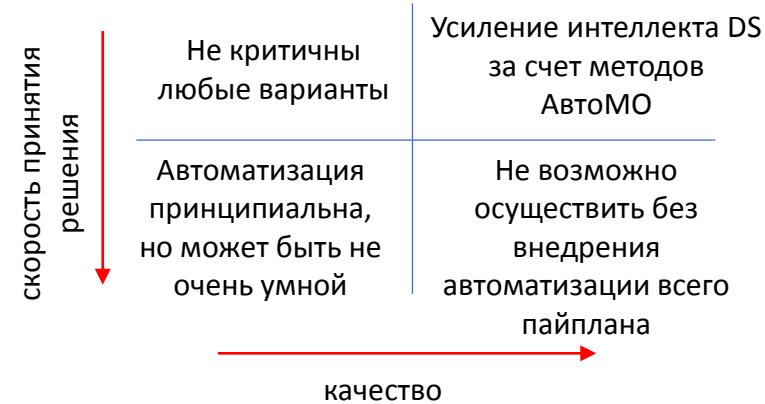
1. Данные обновляются быстро и значительно (по номенклатуре и/или вероятностным характеристикам).



В чем специфика?

- Если данные обновляются «пакетно» с большими интервалами, то их обработку может выполнять специалист.
- Если данные обновляются непрерывно или «мини-пакетно», однако основные вероятностные характеристики меняются плавно, то подойдет классическое дообучение.
- Если характеристики данных меняются значительно, то потребуются структурные изменения в модели или во всем пайплайне решения.**

2. Много мелких задач, решения для которых нужно делать быстро с фиксированным качеством.



В чем специфика?

- Степень автоматичности МО решений может быть различной, важно не обмануться.
- В треугольнике «время-деньги-ошибки» можно выйти за границы привычной эффективности только с применением инновационных решений, основывающихся на серьезной автоматизации процессов.

3. Задача не решается «стандартной» последовательностью шагов и нужен компьютерный интеллект для поиска вариантов.

Или проблема DS с низкой или средней квалификацией.

В чем специфика?

- Нужны мощные инструменты, которые позволяют покрывать действительно огромное количество возможных сценариев и эффективно искать наиболее подходящие варианты.
- Требуются мощные вычислительные ресурсы.
- Требуются DS с высокой квалификацией, которые могут эффективно управлять инструментами АвтоМО, но в значительно меньшем количестве.

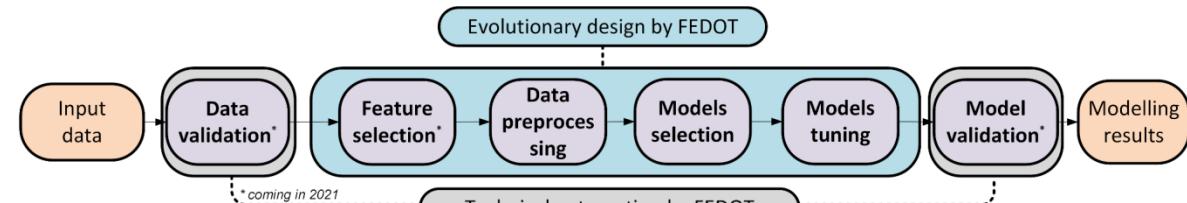
Особенности фреймворка:

- Variable Structure Pipelines
- Основа алгоритма - GP
- Поддержка Tabular, Timeseries данных
- Поддержка гибкой модификации и расширения модулей фреймворка

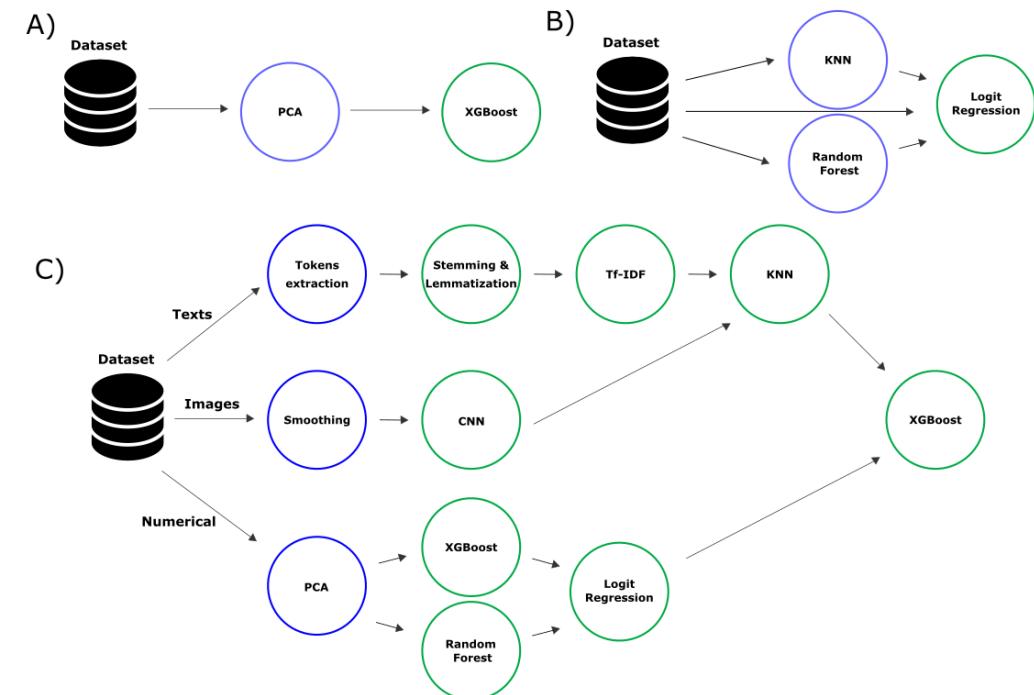
Основная идея: (а) поддержка широкого набора задач и типов данных и (б) возможность замены отдельных модулей

В разработке:

- Многокритериальная оптимизация
- Расширенная предобработка данных
- Поддержка NLP и CV задач
- Preset-ы для определенных типов задач
- WebGUI
- Масштабирование вычислений



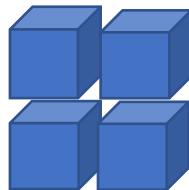
FEDOT в контексте classic ML-pipeline



Типы пайплайнов, поддерживаемые FEDOT

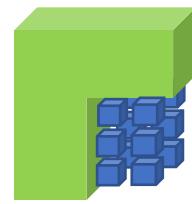
Концепция гибкого управления сборкой модели

*Низкоуровневая
сборка структуры
из неспецифичных
блоков*



**«Чистые» модели
на данных**

*Возможность
частичной сборки*



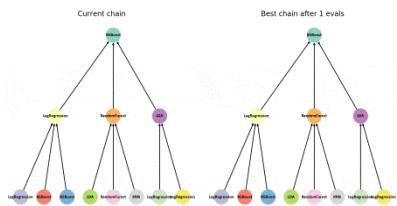
**Модели с
гибкой
структурой**

*Настройка только
числовых
параметров*

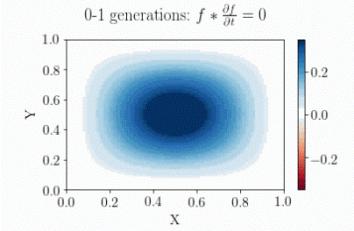


**Классические
модели**

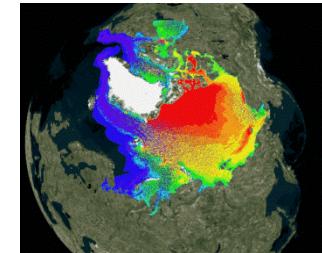
Основные возможности фреймворка:



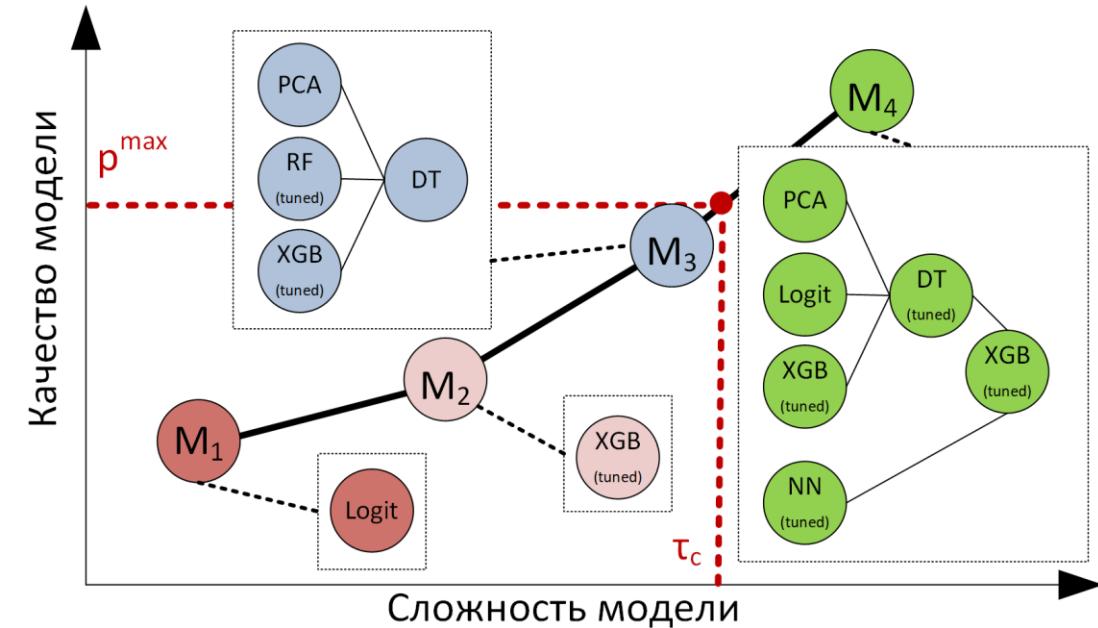
**Сложная структура
моделей**



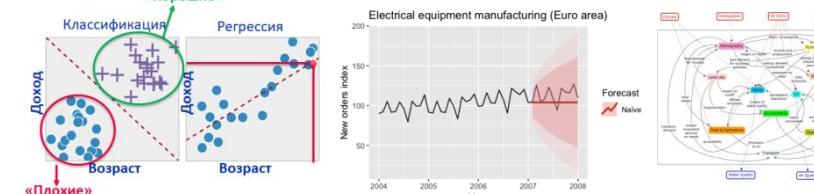
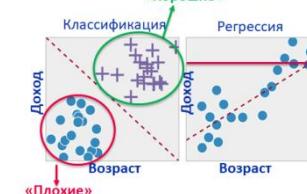
**Построение
интерпретируемых моделей**



**Встраивание предметных
моделей**

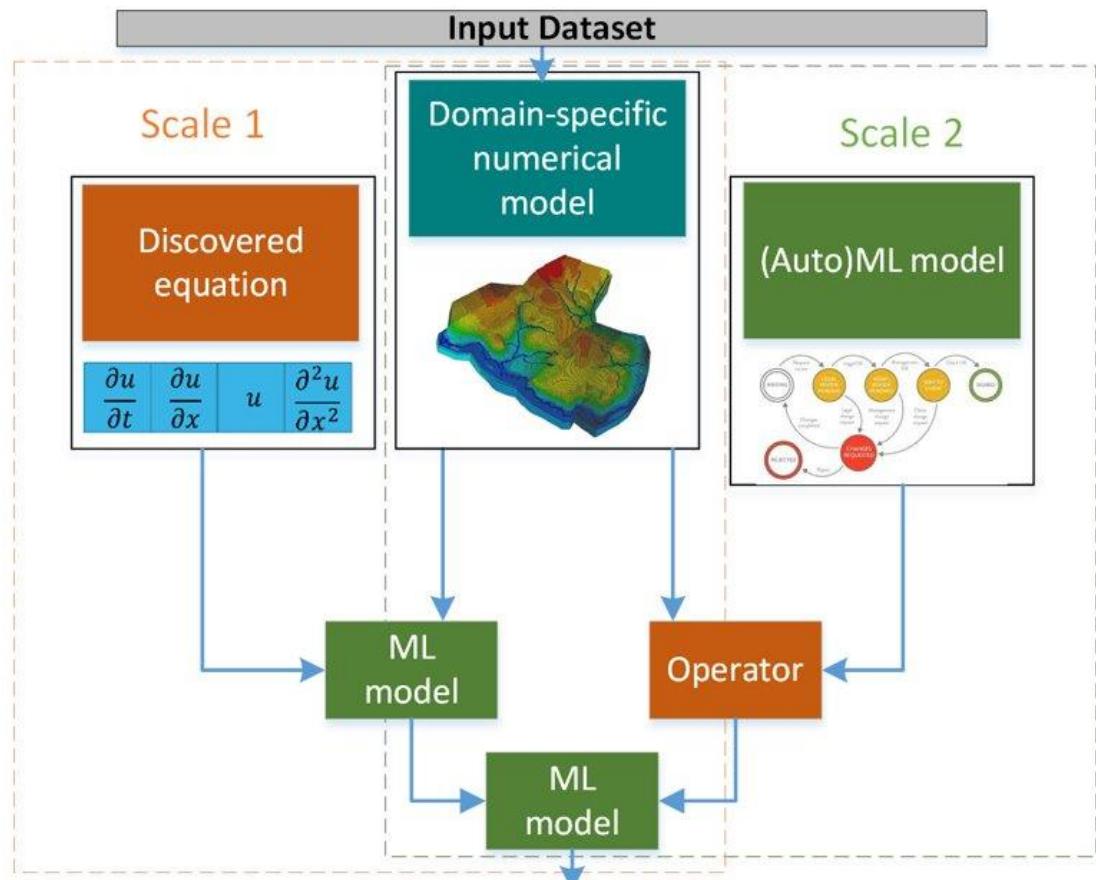


**Управлением поиском компромисса
между качеством и сложностью модели**

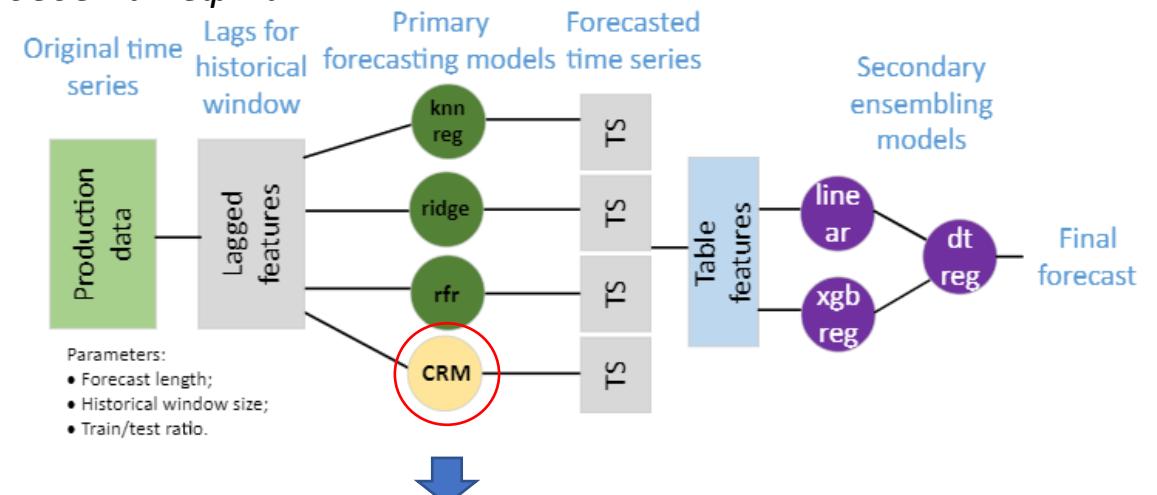


Применимость для различных задач

Можно ли применить ИИ для соединения всего самого лучшего, доставшегося от разных поколений?



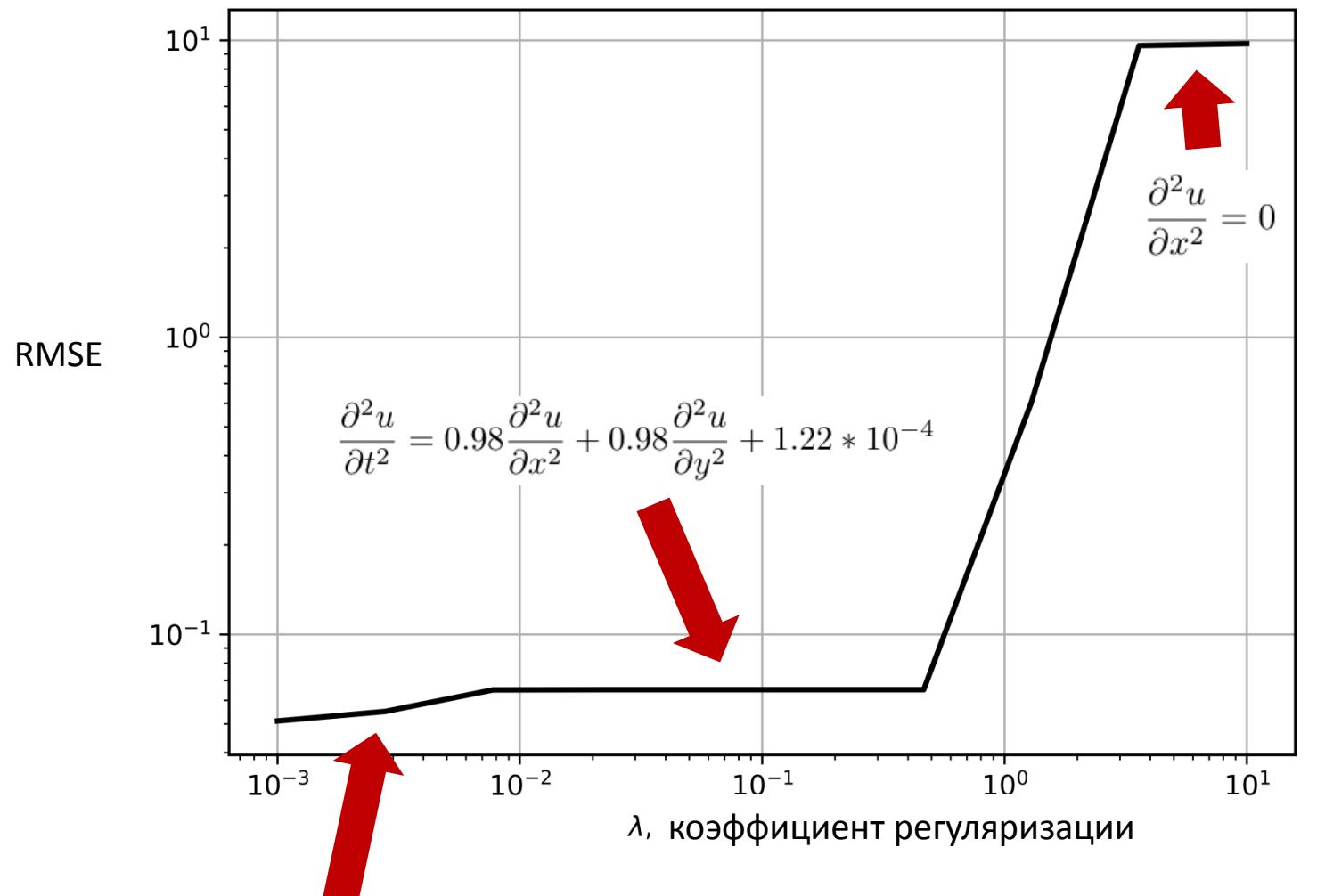
Структура гибридной модели для прогнозирования дебета нефти:



Формулировка CRM модели:

$$\begin{cases} c_t V_p \frac{d\bar{p}}{dt} = I(t) - q(t) & \text{уравнение материального баланса} \\ q(t) = J(\bar{p} - p_w) & \text{уравнение Дюпюи} \end{cases}$$

$$\frac{dq(t)}{dt} + \frac{q(t)}{\tau} = \frac{I(t)}{\tau} - J \frac{dp_w}{dt}, \quad \tau = \frac{c_t V_p}{J}$$



Пример применения алгоритма к данным, описывающим волновое уравнение:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$$

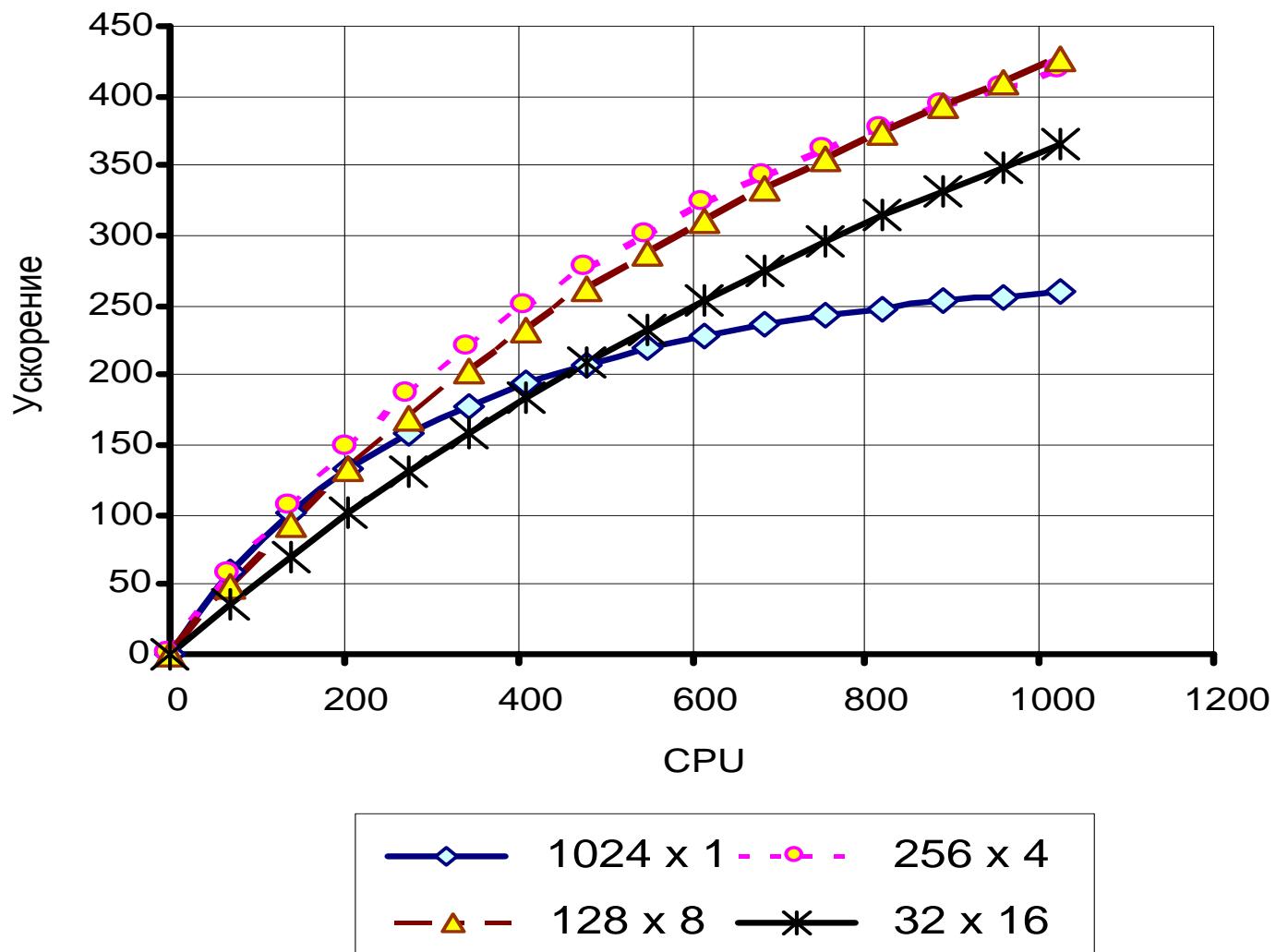
Коэффициент регуляризации, являющийся основным гиперпараметром алгоритма, определяет число слагаемых в полученном уравнении:

- при низких значениях мы получаем переобученную модель, воспроизводящую погрешности в данных: обычно – набор слагаемых из корректного уравнения + лишние;
- оптимальные значения – получаем уравнение, наиболее близкое к реальности;
- завышенные значения – неполная структура уравнения.

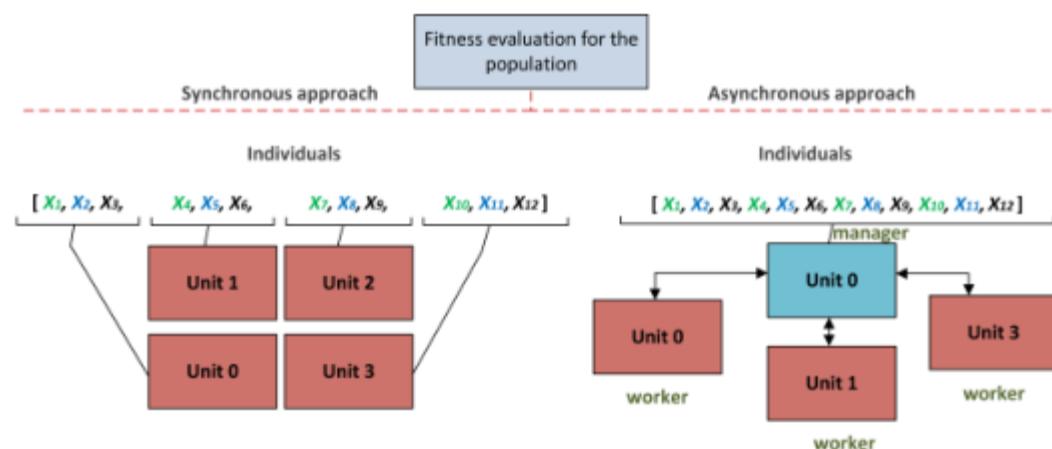


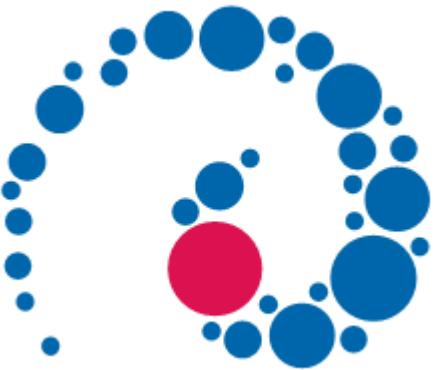
1. Что мы восстанавливаем: само уравнение или его дискретный аналог?
2. Чувствительность к способу численной реализации PDE: не всегда существуют критерии сходимости
3. Порядок производных: одно уравнение или системы нормальных уравнений?
4. Существование решения для всех особей из популяции
5. Единственность решения в динамике (бифуркации, перескоки между решениями)
6. А как быть с шумами и представлением производных?
7. А если мы разберемся с п. (1-6) – сможем ли мы получить количественный ответ за разумное время?

Моделирование полей морского волнения в
Каспийском море
5 лет, перекрытие 1 месяц



- 1) Дополнительные ограничения на структуру уравнений (например, запрет на перекрестные связи)
- 2) Варьирование параметрами распараллеливания (игра с моделями производительности)
- 3) «Запрещенный прием» – распараллеливание на уровне расчета целевой функции (функции приспособленности):



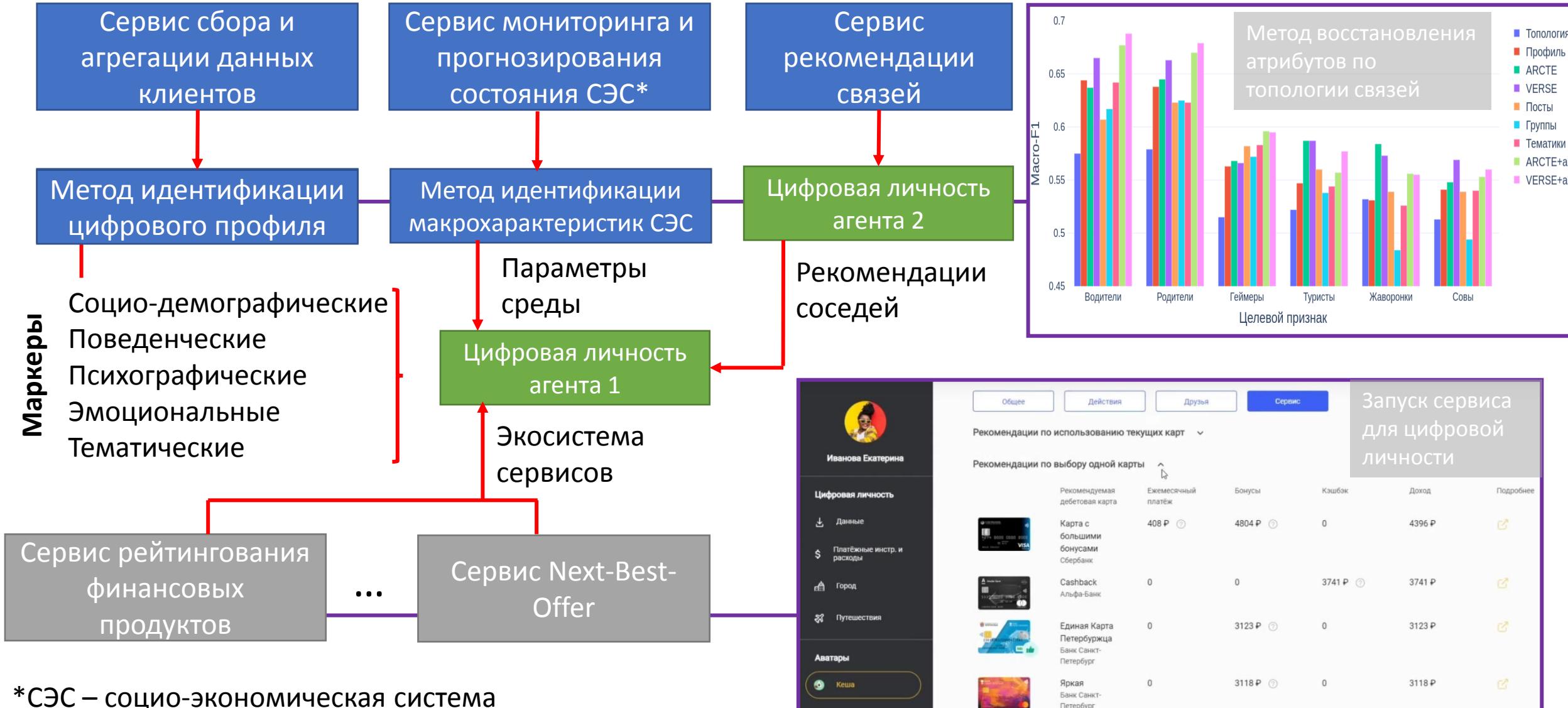


ТРАНСФОРМАЦИЯ МЕХАНИЗМОВ ОРГАНИЗАЦИИ ЭКСПЕРИМЕНТА

Экосистема цифровых личностей: аллегория



Шаг №1: голая имитация - цифровой клиент банка

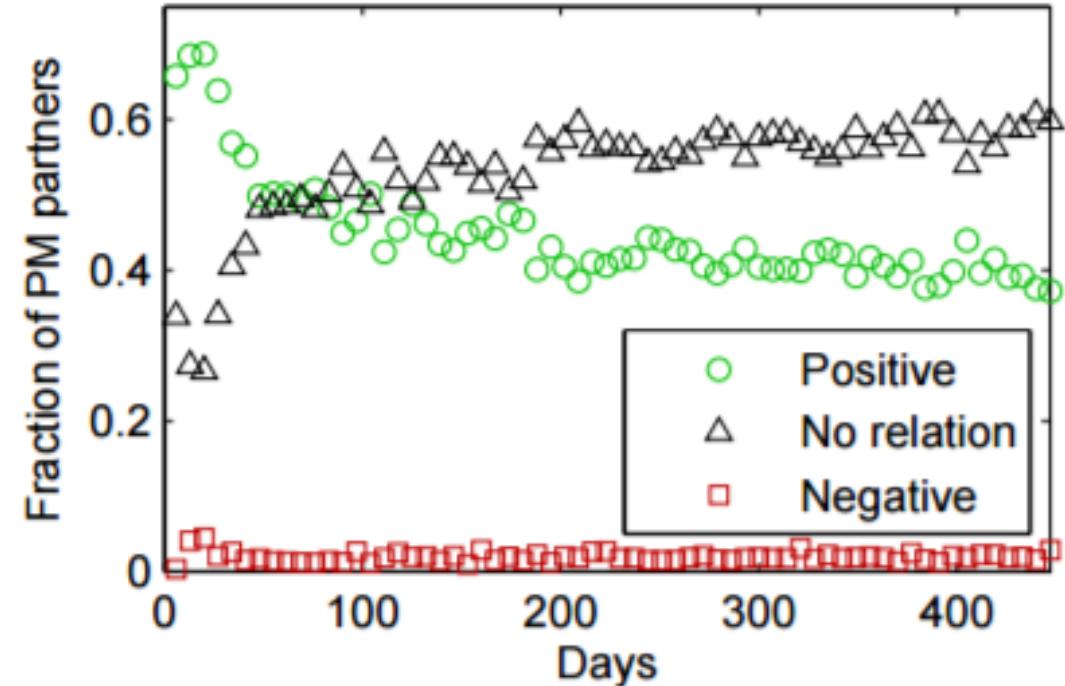
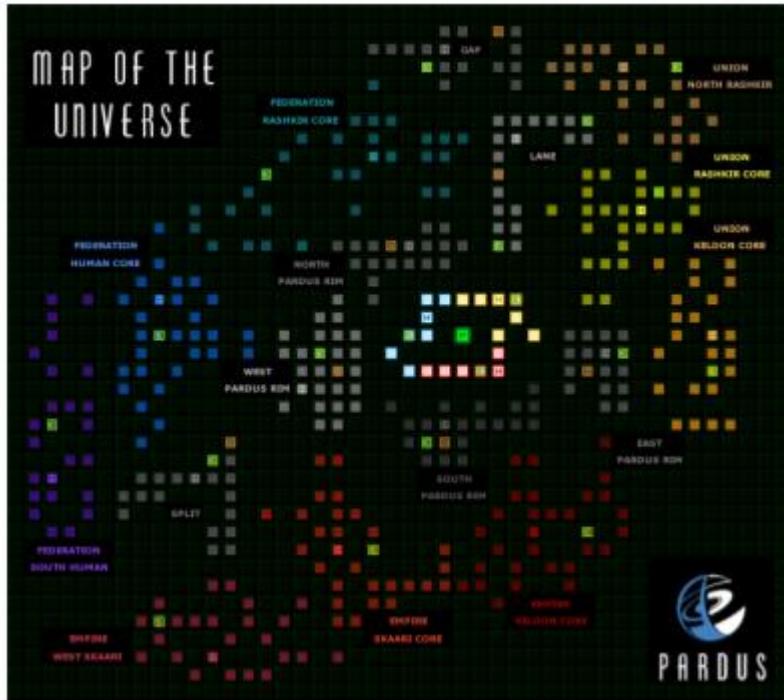


Изучение эффектов реального мира на игровых сообществах

Measuring social dynamics in a massive multiplayer online game.

Michael Szella , Stefan Thurner (2009)

Pardus (<http://www.pardus.at>), браузерный MMOG: 2005-2008



Все негодяи живут мало и дружить не умеют. У хороших людей это получается лучше 😊

Шаг №2: цифровой помощник «по жизни»

Цифровой Аватар -- это программа-помощник на персональном устройстве пользователя, являющаяся его делегатом в публичном кибер-пространстве.

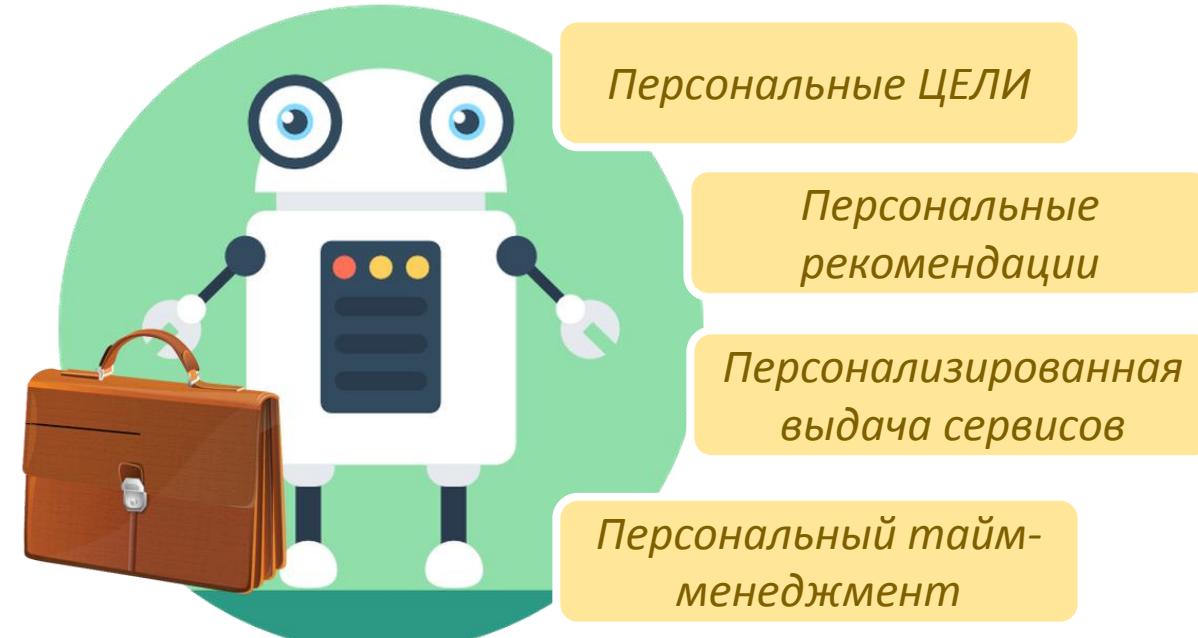
- Рефлексирует опыт пользователя
- Получает непрерывный фидбэк от хозяина
- Развивается вместе со своим хозяином
- Эффективно управляет временем
- Оценивает прогресс владельца в заданной системе ценностей
- Персонализированный подход к коммуникации, поддерживает взаимодействие на естественном языке

Владелец:

- разрешает Аватару пользоваться определенными видами своих данных
- формирует целеполагание и определяет ценности (стратегии действий аватара)

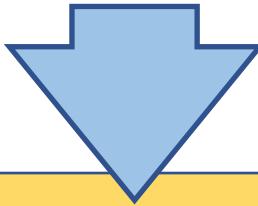
Аватар:

- помогает владельцу ориентироваться в потоках информации
- берёт на себя рутинные операции с этими потоками
- помогает принять решение в условиях неопределённости или недостатка времени



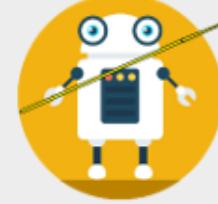
Экосистема Аватаров Университета ИТМО

- Упрощение взаимодействия студент-преподаватель
- Агрегирование и обобщение потребностей преподавателей, управление процессами
- Автоматизация администрат. деятельности



- ⑩ Увеличение эффективности сотрудников
- ⑩ Увеличение вовлеченности студентов
- ⑩ Персональная траектория развития в рамках ценностей университета

АВАТАР
ПРЕПОДАВАТЕЛЯ



- ✓ Оценка уровня знаний
- ✓ Получение фидбека
- ✓ Контроль выполнения заданий
- ✓ Консультации и колаборации
- ✓ Организация внеучебных активностей



АВАТАР
СТУДЕНТА

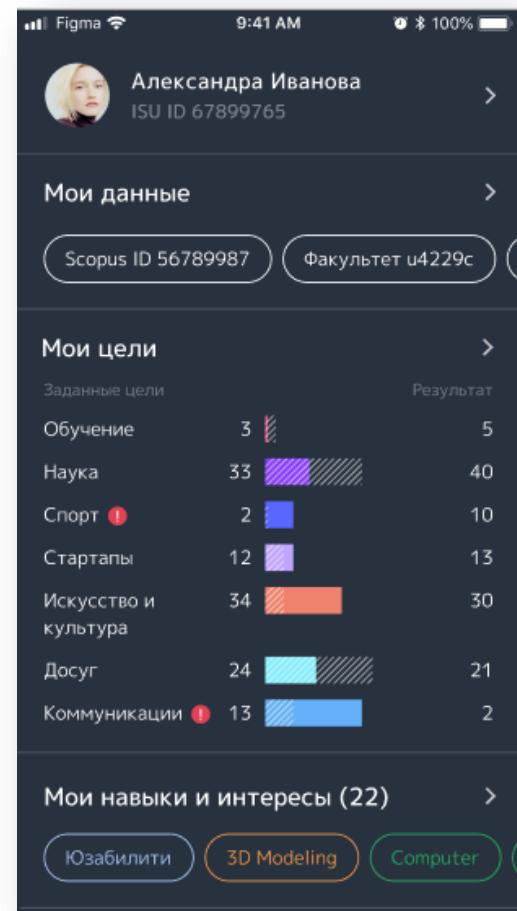
- ✓ Расписание и напоминание о событиях
- ✓ Непрерывный сбора фидбека по занятиям
- ✓ Мониторинг и учебная аналитика

Геймификация
Учебных процессов

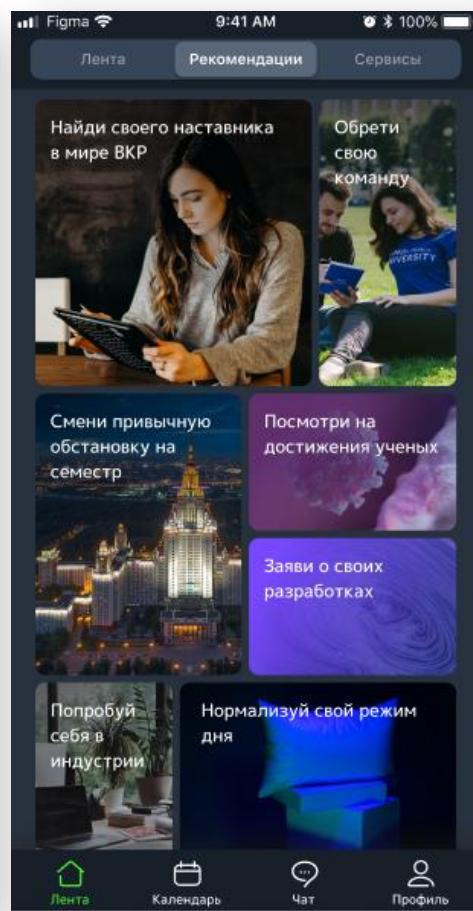


АВАТАР
АДМИНИСТРАТОРА

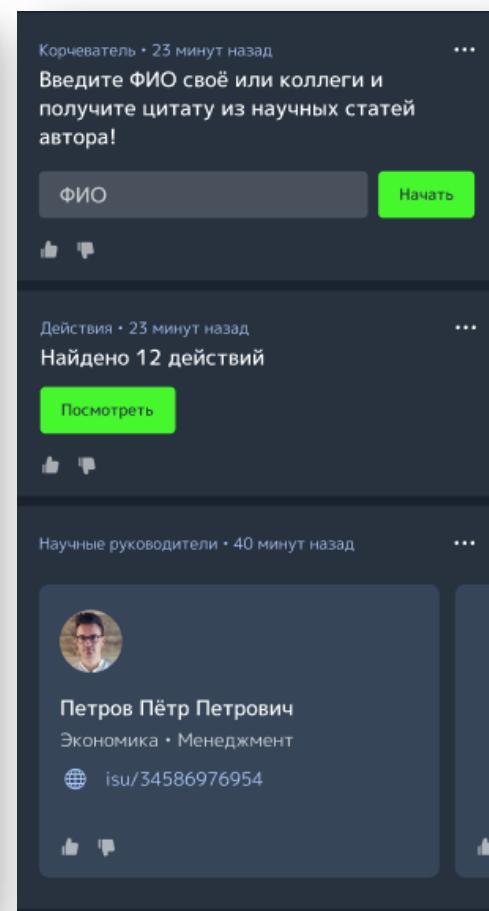
- ✓ Расписание и напоминание о событиях
- ✓ Автоматическое согласование расписания
- ✓ Фидбэк по учебным процессам
- ✓ Управление учебным процессом



**Задать цели и
отследить
движение к ним**



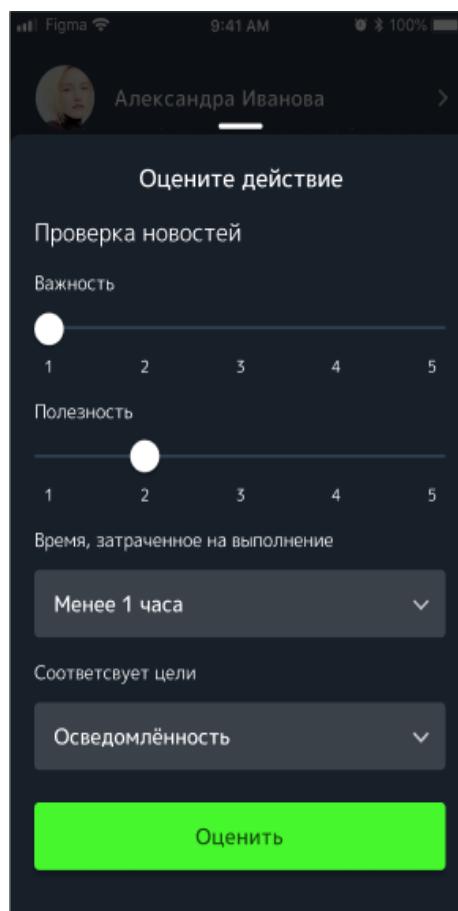
**Выбрать текущий
фокус развития**



**Получить
рекомендации от
сервисов**



**Заполнить карту
событий**



**Оценить
полезность
действий**

Как мотивировать студента использовать Аватар: Геймификация



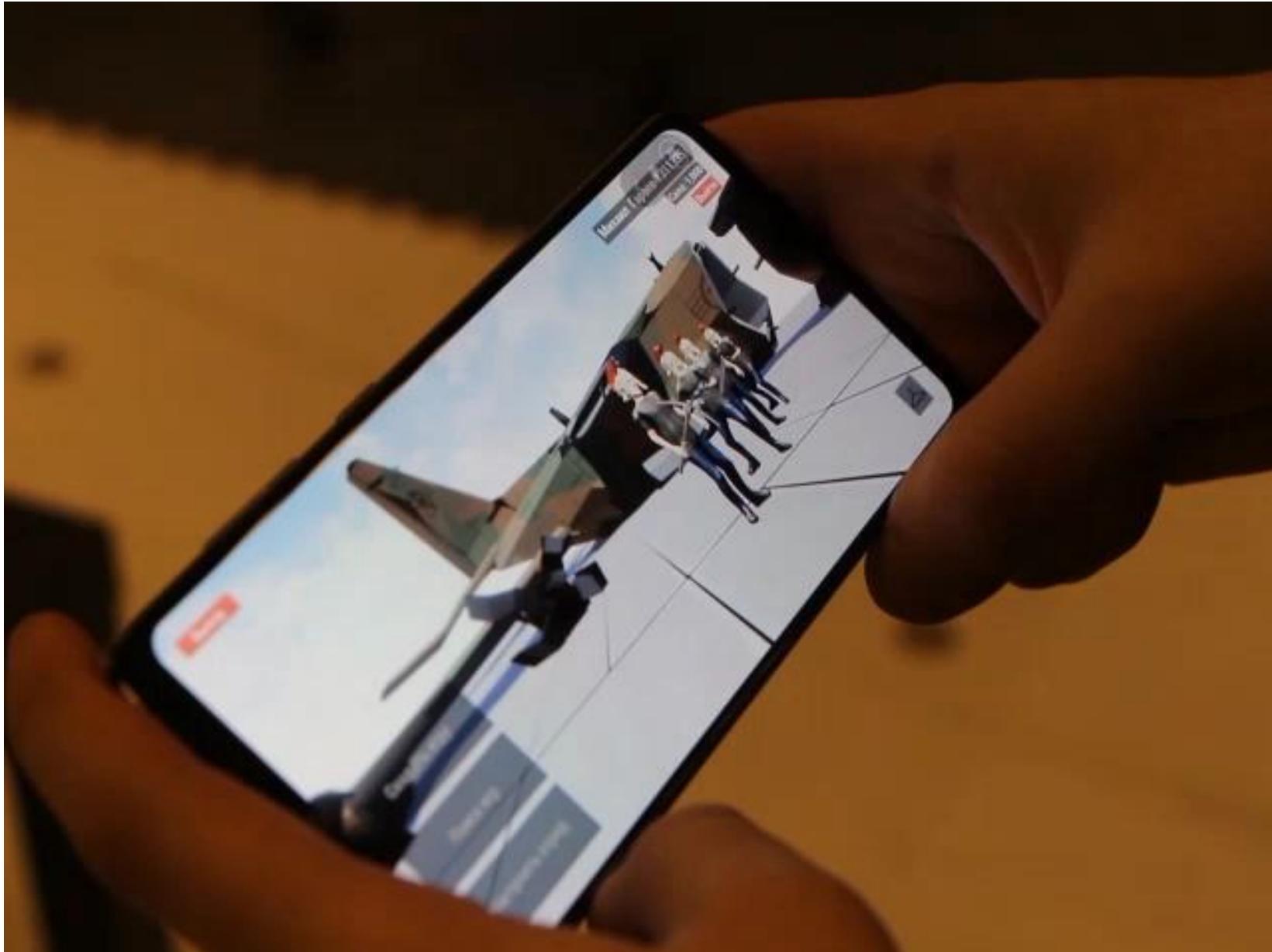
Отображение качества работы студента с аватаром в его игровые характеристики.

- успешный студент будет иметь более усовершенствованного персонажа в игровом мире
- Положительное подкрепление и мотивация к дальнейшему развитию.

Аватар транслирует фактические данные о студенте в игровые характеристики и систему гибкой двусторонней мотивации, прививая студентам на примере положительных и отрицательных сценариев ценности важные для университета.

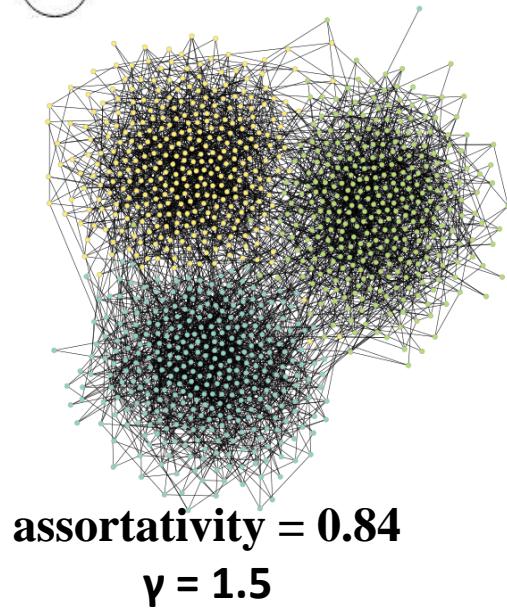
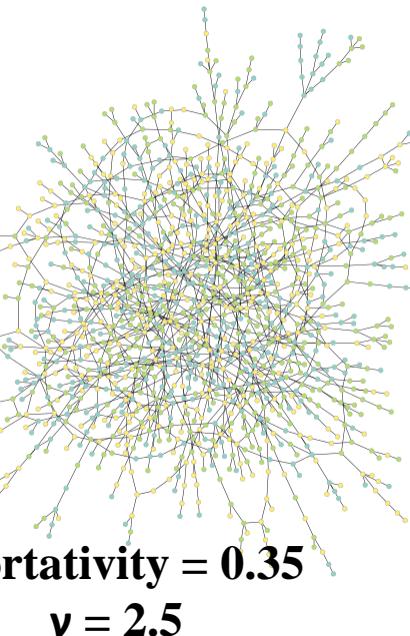
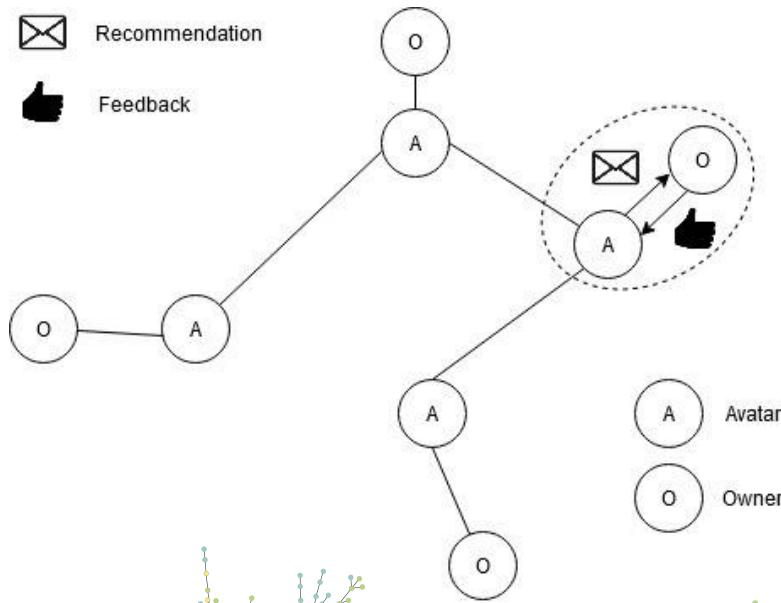
Unique Points:

- Единое виртуальное пространство для множества пользователей;
- Масштабирование идей под различные бизнес-задачи (например совещание с презентациями);
- Множество игровых сценариев – от головоломок до командных турниров. Персональные игровые аватары – отсканированные пользователи;
- Игра как внутри персонального девайса так и в дополненной реальности;
- Взаимодействие с реальным пространством и объектами окружения.



 Recommendation

 Feedback



Аватар выполняет рекомендации на основании баланса между мнениями владельца и соседей

$$Q_i(a) = (1 - \alpha) \cdot Q_i^{neighbor}(a) + \alpha \cdot Q_i(a)$$

α – коэффициент смещивания

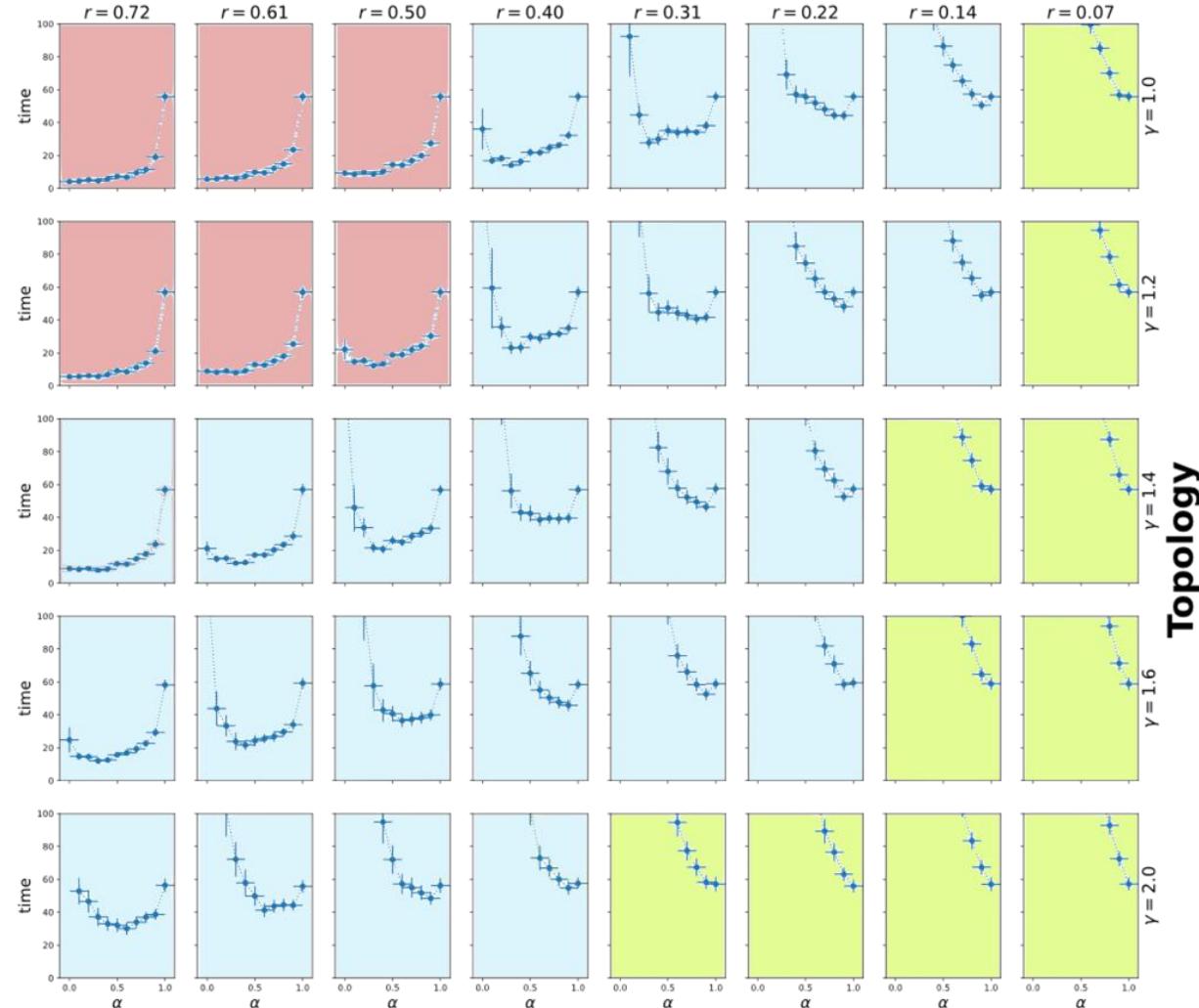
Оценивается:

- средняя удовлетворенность владельца по t итерациям
- скорость достижения порогового значения удовлетворенности

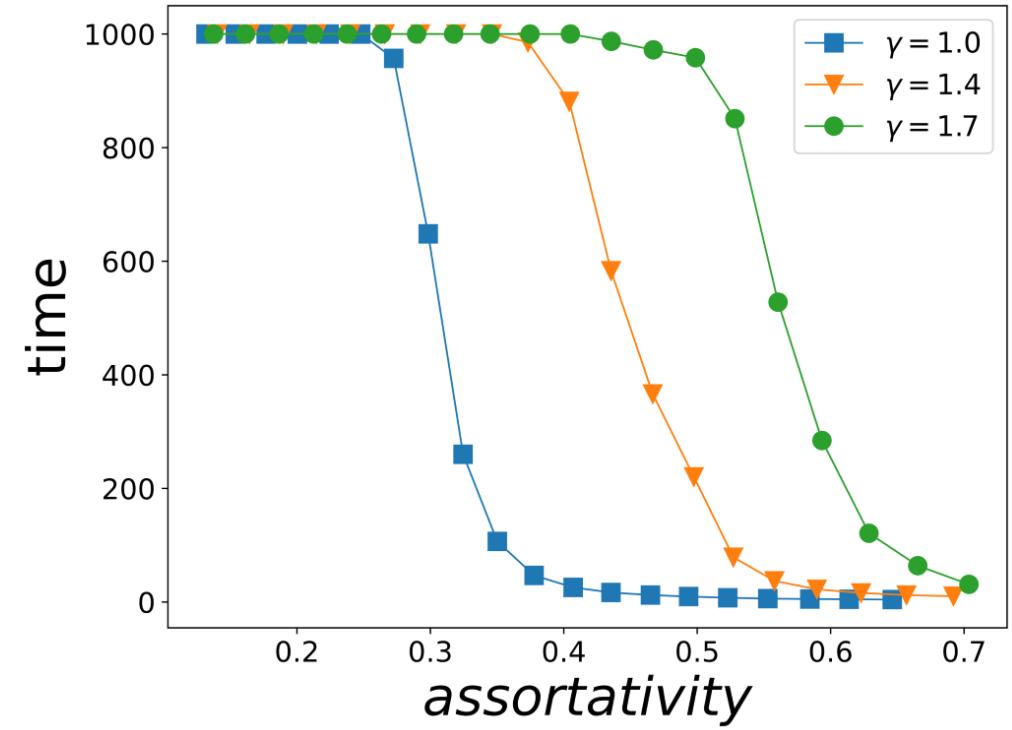
Для разных сетей и распределений атрибутов узлов варьируется скорость сходимости для фиксированного α

Три режима: (1) выгодно использовать информацию только от соседей; (2) выгодно смешивать информацию владельца и соседей; (3) выгодно использовать информацию только от владельца

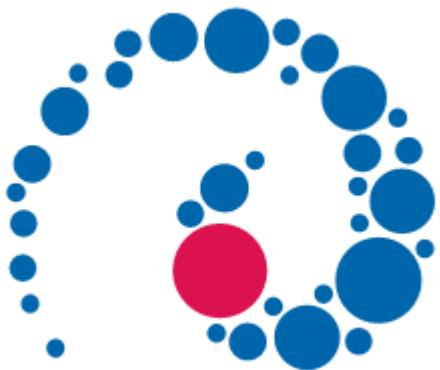
Assortativity



Topology



В ситуации абсолютного доверия соседям
существует критическое значение
(дис)ассортативности, после которого
резко замедляется сходимость



ВМЕСТО ЗАКЛЮЧЕНИЯ



Цифровая трансформация – не панацея, а хайп. Потому eScience «полетит» не здесь, и не сейчас. Однако ученым-предметникам от этого будет жить ощутимо легче... и веселее 😊