

Verstas-projekti, Numerrin-esittely 23.9.2002

Raportti

Tämä on lyhyt raportti tilaisuudesta, jossa Raino Mäkinen esitteli Verstas-projektiryhmälle Numerrin-alisovellusten käyttöä nykyisessä muodossaan. Raportissa on yritetty välttää päällekkäisyyttä muissa dokumenteissa esille tuleviin asioihin (projektin taustasta, simuloinnin yleiskuvasta, jne) ja keskittyä siihen 1) mitä tehtiin ja 2) mitä ryhmä tästä päätteli.

1 Esittelyn kulku

Simulointia demonstroitiin käytännön esimerkin avulla. Kyseessä oli oppikirjamainen esimerkki osittaisdifferentiaaliyhtälön (ODY) ratkaisemisesta elementtimenetelmällä (FEM).

1.1 Fyysinen ongelma ja mallintaminen

Ajatellaan, että tuotekehittelyn tarkoituksena on kehittää optimaalinen "pytty" tai sylinteri, jonka sisällä tulee vallitsemaan ylipaine. Halutaan tietää, minkä muotoiseksi sylinteri on rakennettava, että se kestää mahdollisimman paljon räsitusta. Kiinnostavia seikkoja tutkijan kannalta ovat:

- millainen jännitys sylinterin seinän mihinkin kohtaan kohdistuu
- kuinka paljon jostakin tietyistä materiaalista tehty sylinteri muuttaa muotoaan paineen vaikutuksesta
- viime kädessä: Minkä muotoiseksi sylinteri kannattaa tehdä, että räsitus jakaantuu tasaisesti joka puolelle materiaalia

Kysymykset esitettyään tutkija yleensä seuraavaksi tutustuu lähdemateriaaliin (ammatti- tai oppikirjallisuus). Esimerkiksi lujuusopin kirjasta löydetään tähän tarkasteluun valmis matemaattinen malli, joka on eräs 2-ulotteisen avaruuden *osittaisdifferentiaaliyhtälöryhmä*. ODY:llä sinänsä on äärettömän paljon ratkaisuja. Niinpä tiettyyn tarkasteluun liittyvä erityisratkaisu kiinnitetään *reunaehdoilla*.

1.2 Laskentaohjelman valitseminen

Joillekin tarkasteluille on ajan mittaan tehty lähes sellaisenaan kelpaavat fortran-ohjelmat. Kuitenkin eksoottisemman mallinnustilanteen tapauksessa käyttäjä saattaa joutua etsiskelemään mallinsa toteutusta tai tekemään kokonaan uuden toteutuksen (tyhjältä pohjalta tai jotakin vastaavaa ohjelmaa muuttelemalla). Sylinteriongelmaan nyt löytyi valmis ohjelma.

1.3 Geometrian luominen

Sylinteri on symmetrinen kappale keskiakselinsa suhteen, joten tässä tapauksessa tehdään 2-ulotteinen malli: Sylinteri kuvataan läpileikkauksena keskiakselista ulospäin. *Genesis*-alisovellusta käyttäen mallintaja voi piirtää läpileikkauksen.

1.4 Verkon luonti

Ratkaisemista varten geometriasta täytyy muodostaa *laskentaverkko*. Genesis tekee tämän valikkokomennon antamisen jälkeen. Genesis käyttää tässä erillistä alisovellusta (*verkkogeneraattori*), joka lukee geometriatiedot ja tallentaa halutunlaisen verkon. Verkkoa voidaan tarkastella visuaalisesti *Plot*-ohjelman avulla ja jos se on jotenkin huono, mallintaja muokkaa sitä kunnes on tyytyväinen.

1.5 Reunaehtojen ja parametrien asettaminen

Fortran-koodi on matemaattisen mallin toteutus, joka sisältää reunaehtojen (virtausten suunnat) käsittelyn. Käyttäjän täytyy varmistaa, että hänen luomansa geometrian reunat on numeroitu oikein suhteessa koodin toteutukseen.

Mallintaja saattaa joutua *editoimaan fortran-koodia* saadakseen aikaan tarvittavat muutokset yhtälössä.

Tulokset riippuvat valituista *fysikaalisista vakioista* (materiaalin ominaisuudet). Nämä mallintajan täytyy kuvata erillisessä parametritiedostossa, jonka laskentaohjelma lukee syötteenään.

Valmistelun jälkeen fortran-koodi käännetään *make*-komennolla *Makefile'n* avulla.

1.6 Ratkaisu käännetyllä simulointiohjelmalla

Nyt mallintaja *ajaa simulointiohjelman*, joka lukee syötteenään edellä luodun geometrian sekä parametrit. Ohjelma tulostaa vastauksena erinäisiä numeerisia tietoja. Laskenta saattaa kestää pitkäänkin, jos tarkastelu on monimutkainen.

1.7 Jälkikäsitteily

Numeeriset tulokset voidaan viedä *Plot*-ohjelmaan: Nyt mallintaja *tarkastelee* paine- ja rasituskenttää sekä materiaalin muodon muutoksia *visuaalisesti*. Jos tulokset näyttävät arveluttavilta, mallintaja etsii virheen lähteen (koodi, geometrian reunat, parametrit) ja suorittaa laskennan uudelleen.

1.8 Optimointi

Mallintaja tutkii saamiaan tuloksia ja niiden perusteella *muokkaa* Genesisillä tehtyä geometriaa: Sylinterin tapauksessa tutkija muuttaa suorat sisäkulmat hieman pyöreämmiksi. Hän *toistaa* verkon luonnin, mallin ratkaisun, tulosten tarkastelun ja geometrian muuntelun kunnes saavuttaa arvionsa mukaan riittävän hyvän sylinterin muodon.

2 Ryhmälle jääneet käsitykset

2.1 Mallinnusprosessista

- Simulointityö yleensä palautuu esittelyssä nähtyihin vaiheisiin pienin muutoksin
- Tarkastelussa käytetyn avaruuden dimensio voi vaihdella (2- tai 3-ulotteinen geometria ja laskentamalli)
- Jotkut vaiheet (esimerkiksi fortran-koodin editointi) saattavat jäädä pois riippuen mallintajan tarkoituksesta (mallien kehittäjä / peruskäyttäjä)

- Geometrian luonnissa käytettävä alisovellus vaihtelee dimension mukaan (Genesis/Exodus)
- Verkotuksessa käytettävä verkkogeneraattori vaihtelee dimension mukaan (2- tai 3-ulotteinen) ja verkon tyyppin mukaan (rakenteinen tai rakenteeton)
- Joskus voidaan käyttää AutoUI:ta parametrien asettamiseen
- Muut käytettävät alisovellukset (siis Plot) ovat poikkeuksetta samat

2.2 Alisovellusten taustasta

- Plot on ostettu Numerolan ulkopuoliselta kehittäjältä
- Genesis on alunperin tietotekniikan Cum-laude työprojektin tulos
- Exodus on alunperin tietotekniikan Cum-laude työprojektin tulos
- Verkkogeneraattorit on tehty Numerolassa
- Numerrin-ytimen FEM-ohjelmia on kehitetty Numerolan henkilökunnan voimin. Raino arveli tehneensä ensimmäiset versiot vuoden 1986 paikkeilla.

2.3 Malligallerian sisällöstä

- galleriassa olisi valmiita mallinnusesimerkkejä sisältäen fortran-koodit, makefilet, datatiedostot (geometriat, verkot, tulokset), selväkielinen (esimerkiksi ascii, ps, pdf, tex, ...) kuvaus esimerkistä
- esimerkit olisivat välittömästi ajettavissa "napin painalluksella"

2.4 Laskentavaiheesta

- Tarvittaisiin laskennan hallittu pysäytys siten, että välitulokset säilyvät tallessa. Tämän olisi oltava osa fortran-ohjelmaa, eikä ole selvää, kuinka fortran-ohjelma kommunikoi käyttöliittymän kanssa.
- Laskentaytimen täytyy joka tapauksessa olla irrallinen ehdottoman käyttöjärjestelmäriippumaton kokonaisuus, sillä se sisältää paljon ammattitaitoa ja tietämystä, jota ei haluta sitoa laitealustaan.

2.5 Parametrien asettamisesta

- Numerolassa on kehitetty AutoUI-niminen alisovellus, jolla voidaan asettaa graafisessa ikkunassa laskennan parametreja
- AutoUI:n käyttö edellyttää tietyn muotoista fortran-lähdekoodia
- Numerolassa ollaan tällä hetkellä epävarmoja siitä, kuinka AutoUI liittyisi Verstaaseen

2.6 Numertimen jatkokehityksestä

- Mahdollisesti halutaan automaattinen optimointi eli optimointityövaiheen “korvaaminen napin painalluksella”
- tässä vaiheessa automaattinen optimointi ei liene kriittinen, mutta kuinka siihen Verstaassa varaudutaan?
- todellisuudessa optimointi vaatii joka tapauksessa käyttäjältä suurta asiantuntemusta
- laskentaohjelmien kääntämiseksi käyttäjän täytyy pystyä hallitsemaan makefileja. Täytyisi pohtia makefilen tekemisen automatisointia.