SILLANRAKENNUKSESTA LÄÄKEAINESUUNNITTELUUN

Matemaattinen mallintaminen suomalaisissa yliopistoissa

SILLANRAKENNUKSESTA LÄÄKEAINESUUNNITTELUUN

Matemaattinen mallintaminen suomalaisissa yliopistoissa

Juha Haataja, Jari Järvinen ja Yrjö Leino

CSC – Tieteellinen laskenta Oy

© CSC – Tieteellinen laskenta Oy
2000

ISBN 952-9821-70-0

http://www.csc.fi/raportit/mallinnus/

Esipuhe

Tämä matemaattista mallintamista käsittelevä raportti on kirjoitettu CSC – Tieteellinen laskenta Oy:ssä. Raportin pohjana on kysely, jossa selvitettiin matemaattisen mallintamisen valmiuksia suomalaisissa yliopistoissa.

Tämä raportti täydentää osaltaan aiempia selvityksiä ja niiden pohjalta käynnistettyjä toimenpiteitä. Matemaattis-luonnontieteellisten alojen koulutusta ja osaamista ovat aktiivisesti edistäneet muun muassa Opetusministeriö, Opetushallitus, Suomen Akatemia ja Tekes lukuisten toimenpideohjelmien ja hankkeiden avulla. Esimerkkejä tästä toiminnasta ovat koulujen LUMA-talkoot sekä Suomen Akatemian MaDaMe-tutkimusohjelma. Lisäksi matematiikan teemavuonna 2000 saatiin valmiiksi Suomen Akatemian teettämä suomalaisen matematiikan evaluointi.

Opetusministeriön omistama CSC on kansallinen tieteen tietotekniikan keskus, jonka toimenkuvaan kuuluu laskennallisen tieteen tukeminen ja yhteistyön edistäminen. Kyselyn tuloksia käytetään CSC:n palveluiden kehittämiseen ja toiminnan suuntaamiseen.

Haluamme esittää lämpimät kiitokset kaikille kyselyyn vastanneille. Vastauksenne edistävät matemaattista mallintamista Suomessa ja varmistavat, että CSC palvelee tutkimusyhteisöä parhaalla mahdollisella tavalla.

Haluamme kiittää Juhani Käpyahoa, joka antoi taustatukea kyselyn suunnittelussa ja toteutuksessa sekä raportin kirjoittamisessa. Lisäksi kiitämme raporttia oikolukeneita työtovereitamme: Anu Kärkkäinen, Outi Loimaranta, Mikko Lyly ja Kari Vasko.

Espoossa 13.11.2000

Tekijät

Tiivistelmä

CSC – Tieteellinen laskenta Oy (CSC) on opetusministeriön omistama tieteen tietotekniikan keskus, joka edistää yliopistoissa, tutkimuslaitoksissa ja yrityksissä tehtävää tutkimusta ja tuotekehitystä.

Tämän raportin pohjana on tekemämme kysely, jossa selvitimme matemaattisen mallintamisen ja numeeristen menetelmien käyttöä ja osaamista suomalaisissa yliopistoissa. Kysyimme myös, missä vaiheessa ryhmät joutuvat käyttämään ulkopuolista apua tutkimuksessaan. Tutkimme samalla mallinnusprojektin uutuusarvoa. Lisäksi selvitimme tietokoneohjelmistojen ja rinnakkaislaskennan käyttöä sekä tyytyväisyyttä CSC:n palveluihin.

Toimenpide-ehdotukset

Koulutus ja osaamisen kehittäminen

- Samoja mallinnusmenetelmiä ja mallinnuksen perusteita opetetaan monilla laitoksilla samankin yliopiston sisällä. Opetusta on järkevöitettävä päällekkäisyyksiä vähentämällä ja yhteistyötä lisäämällä. Opetuksessa on huomioitava eri alojen opiskelijoiden erilaiset pohjatiedot ja tarpeet.
- Matemaattisen mallintamisen osaamista tulee aktiivisesti tarjota ja siirtää niille alueille, joilla on tarvetta näiden menetelmien käyttöön muttei vielä tarpeeksi omaa osaamista.
- On tuettava matemaattisen tai tilastotieteellisen koulutuksen saaneiden ihmisten siirtymistä muille aloille soveltamaan tietojaan.
- Tutkijoiden pitää pyrkiä soveltamaan mahdollisimman luotettavia ja tehokkaita laskentamenetelmiä. Tulosten oikeellisuuden varmistamiseen on syytä panostaa. CSC:n tulee kertoa asiakkailleen luotettavista ja tehokkaista menetelmistä sekä opastaa niiden käytössä. Varsinainen numeriikan ja ohjelmoinnin perusteiden opetus on yliopistojen tehtävä.
- Monet tutkijat kaipaavat enemmän apua tulosten visualisointiin. CSC:n on tarjottava aktiivisesti visualisointipalveluitaan tutkijoille ja selvitettävä, minkälaisiin tehtäviin apua tarvitaan.

Yhteistyön edistäminen

- Tutkimustyön tehostamiseksi on tuettava yhteistyötä eri ryhmien välillä. Erityisesti on rohkaistava poikkitieteellisiä hankkeita.
- Suomalaisten tutkimusryhmien tyypillisesti pieni koko korostaa yhteistyön tärkeyttä. CSC:n tulee toiminnallaan tukea yliopistoissa toimivien tutkimusryhmien yhteistyötä ja kannustaa eri alojen osaajia löytämään toisensa.
- CSC:n tulee huolehtia siitä, että laskennallista huipputehoa tarvitsevat tutkijat saavat riittävät resurssit käyttöönsä. Myös yliopistojen ja laitosten paikallista atk-tukea tulisi olla saatavilla.
- Matemaattisen mallintamisen osaamista on siirrettävä yliopistoista yritysmaailmaan. CSC:n on edistettävä yliopistojen ja yritysten välistä yhteistyötä ja osallistuttava mahdollisuuksien mukaan yritysten ja yliopistolaitosten kanssa tehtävään tutkimustoimintaan. Lisäksi CSC:n on pyrittävä yhteistyöhön yliopistoihin perustettujen mallinnusryhmien kanssa.

Kyselyn tuloksia

Lähetimme kyselylomakkeen 512:lle suomalaisten yliopistojen tutkijalle. Vastauksia tuli 141 — kaikista yliopistoista ja monelta tieteenalalta. Vastanneiden asema vaihteli jatko-opiskelijasta tutkijaprofessoreihin.

Yleisin mallinnustekniikka on tavallisten tai osittaisdifferentiaaliyhtälöiden käyttö. Muita yleisiä menetelmiä ovat erilaiset simulaatiomenetelmät, aikasarja-analyysit, optimointi, tilastolliset menetelmät, neuroverkot ja MCMC-menetelmät (Markov Chain Monte Carlo).

Tulosten perusteella oli selkeästi nähtävissä mallinnusperinteiden vaikutus eri tiedealoilla. Biotieteilijät sanoivat muiden tiedealojen tutkijoita useammin käyttävänsä kokonaan uusia lähestymistapoja. Biotieteissä myös kehitettiin runsaasti omia ohjelmakoodeja. Toisaalta kemistit ja insinöörit kertoivat yleensä käyttävänsä tunnettuja menetelmiä suurimmaksi osaksi tunnettuihin tehtäviin vain joitakin parametreja muuttaen. Kemistit ja insinöörit olivat myös tyytyväisiä olemassaoleviin (kaupallisiin) ohjelmistoihin.

Ulkopuolista tukea tarvittiin erityisesti laskentakapasiteetissa ja erilaisissa visualisointi- ja etäkonferenssitekniikoissa. Jossain määrin tarvittiin apua myös ohjelmoinnissa, numeeristen menetelmien käytössä sekä varsinaisessa mallintamisessa.

Tärkein tiedon lähde oli tieteellinen kirjallisuus. Myös ulkomaiset tutkimusryhmät ja konferenssit olivat merkittäviä tekijöitä.

CSC:n useimmat palvelut olivat tuttuja 60–70 %:lle vastanneista. Tosin Funet-tietoverkkoa eivät monetkaan sanoneet käyttävänsä, vaikka yliopistojen verkkoyhteydet rakentuvat Funetin varaan.

Summary in English

CSC carried out during the summer 2000 an inquiry about the use of mathematical modeling in the Finnish universities. The goal was to find out if there are emerging areas of computational science with urgent need for support in modeling, and if the efforts in any particular field should be increased. This inquiry was also motivated by our need to know whether our services correspond to the demands of our customers.

At the same time, another study about the utilization of mathematical models in Finnish industrial companies was done in cooperation by University of Jyväskylä, Lappeenranta University of Technology and CSC.

Recommendations

Developing modeling skills

- In a single university, several institutes organize introductory courses on mathematical modeling. In order to rationalize university-level teaching, duplicate courses should be avoided and the teaching should be based on joint effort instead. At the same time, the courses should take into account the different backgrounds and needs of the students in different fields.

- Expertise on mathematical modeling should be actively offered and transferred to those disciplines, who need these skills but do not yet have sufficient skills themselves.

- Students with a background in mathematics or statistics should be encouraged to move to other disciplines, where they can apply their skills.

- Researchers should apply as reliable and efficient computational methods as possilble. The correctness of the results should be verified. CSC must inform the researchers about reliable and efficient methods and offer help in their use. Of course, the teaching of numerical methods and programming is, in the first hand, the responsibility of the universities.

- Many researchers need help in visualizing their results. CSC should actively market the visualization services based on the needs of the researchers.

Promotion of co-operation

- The universities and decision-makers should support and encourage co-operation between research groups, especially in multi-disciplinary projects.
- CSC should encourage co-operation between the research groups in universities. The aim should be to help in the problems caused by the small size of many groups.
- CSC has to provide sufficient resources for the researchers who need peak computational capacity. Also, there should be sufficient local support in information technology.
- Modeling skills should be transferred from the universities into the industrial sector. To support this transfer, CSC should take part, when possible, in research projects between universities and industry. CSC should also co-operate with the modeling groups of universities.

Results of the inquiry

We sent a questionnaire to 512 researchers in all the major universities in Finland. The academic positions of the recipients varied from post-graduate students to research professors.

We received 141 answers. These covered all universities and quite a few fields of science.

As expected, the use of mathematical models is still most frequent in engineering, physics and chemistry. However, there are already several groups in Finland (Turku, Helsinki and Jyväskylä) using increasingly complicated techniques in various biological problems. Also economists in Helsinki, Turku and Oulu are actively taking advantage of models and computer simulations, even with parallelized algorithms.

By far the most popular modeling method is to write down a set of (ordinary or partial) differential equations describing the dynamics of the system under study. Other common techniques are various simulation strategies, time series, optimization problems, statistical methods and also neural networks and MCMC (Markov Chain Monte Carlo).

When asked about the novelty of the models and the use of computer programs, the tradition of applying mathematical models in a specific area was clear in the answers. Biologists felt more often than other scientists that their models involved totally new ideas. They were also the most active group to write their own computer codes. On the other hand, chemists and engineers

usually stated that they are mostly applying well-known methods to either partly new or essentially old problems with just parameters changed. They were also content with the existing (commercial) programs.

Two items rose clearly above others among the needs for external support: computing capacity and visualization help. The latter concept may comprise several things such as 3D presentations of data or video editing for conferences. To a lesser extent, help from outsiders was also necessary for problems concerning programming, numerical methods, and the actual process of creating a model.

Scientific literature and journals proved to be the most important sources of modeling knowledge. Two other significant sources were foreign research groups and conferences.

Most of the services provided by CSC are known to or are used by 60–70 % of those who returned the questionnaire. However, for some reason the Funet network was known by only a few of the groups, although Funet is responsible for organizing the fast connections between the universities and the rest of the world.

About the inquiry

The mailing of the questionnaires was preceded by a careful search through the web pages of research groups in all laboratories and departments that could possibly have applications in mathematical modeling. This means not only the self-evident computational physics and CFD (computational fluid dynamics) groups, but also teams in fields as varied as forestry, veterinary and corporate finance. Most of the groups who claimed to apply mathematical models were included in our mailing list. Besides this web-based search, we decided to add groups which probably use modeling even though they did not mention it in their presentations.

In addition to questions about mathematical techniques and numerical methods, we asked the scientists about the computer programs they use, at which stages of their modeling work they have had to resort to expert knowledge outside their own group and about the novelty of their project with regard to modeling. We also inquired about their familiarity with parallel programming and their satisfaction with CSC services.

About CSC

CSC – Scientific Computing Ltd. is a non-profit organization for high-performance computing and networking in Finland. CSC is owned by the Ministry of Education. CSC runs a national large-scale facility for computational science and engineering and supports the university and research community. CSC is also responsible for the operations of the Finnish University and Research Network (Funet).

CSC not only provides high performance computing but also maintains a user-friendly environment through which scientists can find a large selection of application software and scientific databases and gain easy access to national and international networks. CSC staff includes about 90 experts representing various fields of science, technology and information technology.

One of the main concerns at CSC is to support research groups in selecting the best technology for solving scientific problems. CSC arranges several courses every year on computing technology, information services, scientific computing, and visualization of research results. CSC also publishes journals, report series and guides dealing with these topics.

CSC is located on the premises of TietoEnator in Otaniemi, Espoo. To obtain the most recent information on CSC services, refer to the www pages at

`http://www.csc.fi/`

Sisältö

Esipuhe **5**

Tiivistelmä **6**

Summary in English **8**

1 Johdanto **14**
1.1 Raportin tavoitteet 14
1.2 Terminologiasta 14
1.3 Raportin taustalla olleen kyselyn toteutus 15
1.4 Raportin sisältö 15
1.5 Muut selvitykset 15

2 Johdatus matemaattiseen mallintamiseen **18**
2.1 Tieteen kolme tutkimusmenetelmää 18
2.2 Ongelmasta ratkaisuun kuudessa vaiheessa 20
2.3 Matemaattisten mallien tarve ja hyödyt 21
2.4 Mallien luotettavuus 22
2.5 Numeeristen menetelmien käyttö 23
2.6 Numeerisen ratkaisemisen luotettavuus 23
2.7 Mallintamisen mahdollisuudet ja rajoitukset 23

3 Mallinnus suomalaisissa yliopistoissa **25**
3.1 Mallien käytön yleistyminen yksittäisen tieteen sisällä . . 25
3.2 Kyselyn vastauksista yleensä 28
3.3 Mallinnusprojektien uutuusarvo 29
3.4 Differentiaaliyhtälöt merkittävin mallinnustekniikka . . . 30
3.5 Mallinnusosaamisen lähteet 32
3.6 Rahoitus 32
3.7 Tutkimusprojektien kestoajat 32
3.8 Alueet, joilla tarvitaan lisää tukea 33
3.9 Yliopistojen tarjoamat laskennalliset palvelut 34
3.10 Rinnakkaislaskenta 35
3.11 Joitain ilmenneitä ongelmia 35
3.12 Joitakin tieteenalakohtaisia huomioita 36
3.13 Tyypillisiä mallinnustehtäviä 37

4 Mallinnusohjelmistot tutkijoiden käytössä **40**
4.1 Erilaisten ohjelmistojen käyttö 40
4.2 Ohjelmistojen käyttö tieteenaloittain 41

4.3 Yleisimmät ohjelmistot 42

5 Mallinnusosaamisen opetuksesta Suomessa 44
5.1 Opetuksen tarjonta ja tarve 44
5.2 Opiskelijoiden valmiudet 45
5.3 Mallinnusopetuksen järjestäminen 45

6 CSC:n palvelut tutkijoille 47
6.1 Neuvontaa ja yhteistyötä 47
6.2 Esimerkkejä yhteistyöstä 48
6.3 Kyselyn tuloksia CSC:n palvelujen osalta 49

7 Toimenpide-ehdotukset 51
7.1 Yliopistojen osaamisen kehittäminen 51
7.2 Uusien menetelmien käyttö 51
7.3 Mallinnuksen opetuksen kehittäminen 52
7.4 CSC:n toiminnan kehittäminen 52
7.5 CSC:n rooli yhteistyön järjestelijänä 53

8 Yhteistyötä edistäviä organisaatioita ja tutkimuskonsortioita 54
8.1 Lisää yhteistyötä mallintamisessa 54
8.2 Rolf Nevanlinna -instituutti 54
8.3 Center for Mathematical and Computational Modeling . 55
8.4 Suomen Akatemian MaDaMe-tutkimusohjelma 55
8.5 Matemaattista mallinnusta hyödyntävät huippuyksiköt . . 56
8.6 Mathematics, Computing and Simulation for Industry . . 58

9 Kansainvälisiä yhteyksiä 59
9.1 Matemaattiset yhteisöt 59
9.2 Tutkimuskeskukset 59

Liitteet 61

A Kysely matemaattisesta mallinnuksesta 62

B Kyselyyn vastanneet yksiköt 66

C Käytännön ohjeita mallintamiseen 70

D Sanasto 73

E Tietoa CSC:stä 79

Kirjallisuutta 81

Hakemisto 82

1 Johdanto

CSC – Tieteellinen laskenta Oy (CSC) on opetusministeriön omistama tieteen tietotekniikan keskus, joka edistää yliopistoissa, tutkimuslaitoksissa ja yrityksissä tehtävää tutkimusta ja tuotekehitystä. CSC tarjoaa asiakkailleen tieteen asiantuntijapalveluja ja suurteholaskennan palveluja sekä ylläpitää Suomen tutkimuksen tietoverkkoa (Funet).

1.1 Raportin tavoitteet

Eräs merkittävimmistä CSC:n toimintaan vaikuttavista mekanismeista on asiakkailta ja viiteryhmiltä saatava palaute. CSC saa valtaosan palautteesta tutkijoiden kanssa tehtävän tutkimusyhteistyön kautta. Myös erilaisilla kyselyillä on keskeinen rooli CSC:n toimintojen suuntaamisessa.

CSC on viime vuosina tehnyt useita asiakkaille suunnattuja kyselyjä muun muassa bio- ja geotieteissä, kemiassa sekä sähkömagnetiikassa. Myös uusia suurteholaskennan laskentapalvelimia hankittaessa CSC on poikkeuksetta kartoittanut asiakkaiden sen hetkisiä ja etenkin tulevia tarpeita [Järv90, TLP92, CSC97, RK99, KF00].

Käsillä oleva raportti pyrkii selvittämään matemaattisen mallinnuksen käyttöä suomalaisissa yliopistoissa eri tieteenaloilla. Raportti tuo esille mallinnuksen laaja-alaista käyttöä sekä pyrkii edistämään mallinnuksen asemaa opetuksessa, tutkimuksessa ja tuotekehityksessä.

Raportti esittää toimenpide-ehdotuksia mallinnuksen kehittämiseksi kansallisella tasolla. CSC:ssä raportin tuloksia tullaan hyödyntämään kehitettäessä matemaattisia mallinnuspalveluja.

Raportissa on rajoituttu tarkastelemaan mallinnuksen käyttöä suomalaisissa yliopistoissa. Tutkimuslaitokset ja yritykset on jätetty tämän tarkastelun ulkopuolelle.

1.2 Terminologiasta

Liitteenä D (sivu 73) on sanasto, josta löytyvät selitykset tässä raportissa käytetyille matemaattiseen mallintamiseen ja numeerisiin menetelmiin liittyville termeille.

Suomessa käytetään jopa samassa yliopistossa mallintamisesta eri termejä. Yleisimmät näyttävät olevan (suosituimmuusjärjestyksessä): mallintaminen, mallinnus, mallittaminen ja mallitus. Tässä raportissa käytetään näistä kahta ensimmäistä toistensa synonyymeinä.

1.3 Raportin taustalla olleen kyselyn toteutus

Raportissa esiintyvät tulokset pohjautuvat eri yliopistolaitoksille lähetettyyn kyselyyn. Kyselyjä (liite A) postitettiin CSC:stä 512 kappaletta, joista täytettyinä palautettiin takaisin 141 (liite B). Yliopistolaitoksista, niiden erillisistä tutkimusryhmistä ja jopa yksittäisistä tutkijoista pyrittiin kyselyssä huomioimaan ne, jotka ilmoittivat tekevänsä tutkimusta tai opetusta matemaattisen mallinnukseen liittyen. Eri tahojen kartoitus tehtiin käyttäen tietoverkosta löytyviä kotisivuja. Lisäksi kartoituksessa hyödynnettiin CSC:n asiantuntijoiden kontaktiverkostoja. Kyselyssä pyrittiin mahdollisimman suureen kattavuuteen käymällä läpi nimenomaisesti eri tieteenaloja eikä pelkästään aloja, joissa matemaattisella mallinnuksella on vankat perinteet.

Kyselyssä tiedusteltiin niitä mallinnustekniikoita, joita tutkijat työssään käyttävät. Lisäksi pyydettiin raportoimaan mallinnuksessa käytettävistä ohjelmistoista, ohjelmoinnin roolista tutkimustyössä sekä rinnakkaislaskennan käytöstä. Vastauksissa toivottiin otettavan kantaa myös tutkimuksen laajuuteen ja kestoon, tutkimusyhteistyöhön sekä mallinnuksen opetukseen.

1.4 Raportin sisältö

Raportti keskittyy selvittämään matemaattisen mallinnuksen ja mallinnusohjelmistojen käyttöä sekä mallinnuksen opetusta suomalaisissa yliopistoissa. Raportti tarjoaa myös johdatuksen matemaattisen mallinnukseen sekä evästää muutamin ohjein selviytymään mallinnukseen liittyvistä käytännön ongelmista. Raportin loppuun on koottu joukko matemaattisen mallinnuksen yhteistyötä edistäviä organisaatioita ja tutkimuskonsortioita sekä lista kansainvälisistä yhteyksistä.

Selvityksessä on esimerkinomaisesti tuotu esille, mikäli tarpeen, mallinnuksen parissa työskenteleviä tutkimusryhmiä ja heidän tutkimusaiheitaan. Liitteeseen B on listattu raportin pohjana olleeseen kyselyyn vastanneet tutkimusaloittain jaoteltuina.

1.5 Muut selvitykset

1.5.1 Suomen Akatemia

Suomen Akatemian raporteissa *Suomen tieteen tila ja taso* sekä *Evaluation of Finnish Mathematics* [Lip00, HKP00] tehdään katsaus suomalaisen matematiikan tutkimukseen ja sen toimintaympäristöön. Sovelletusta matematiikasta

ja mallinnuksesta raportit tuovat esille muun muassa seuraavia huomioita ja suosituksia:

- Talouden voimakkaan kasvun ja suomalaisten yritysten menestyksen ansiosta matematiikan soveltaminen on saanut jalansijaa bioinformatiikassa, elektroniikassa, vakuutus- ja finanssialalla sekä tietotekniikassa.
- Soveltavan matematiikan kehitystä ovat edesauttaneet Suomen Akatemian tutkimusohjelmat Tieto I, Matematiikan ja luonnontieteiden osaaminen vuonna 2002 sekä Matemaattisten menetelmien ja mallien kehittäminen eri tieteenaloilla (MaDaMe-tutkimusohjelma).
- Suomessa vuonna 1995 käynnistetystä tutkijakoulujärjestelmästä löytyy kolme matematiikan tutkijakoulua sekä neljä monitieteistä tutkijakoulua, joiden toiminnassa matematiikalla on keskeinen rooli.
- Suomesta löytyy erittäin vahvoja tutkimusryhmiä tietyillä soveltavilla aloilla, kuten biologisten prosessien mallintamisessa.
- Soveltavan matematikan tutkimusta on edelleen tuettava (rahoitus).
- IT-teollisuuden tarpeisiin pohjautuvaa soveltavan matematiikan tutkimusta on edelleen kehitettävä.
- Tutkijaryhmien kansainvälistymiseen on panostettava.

1.5.2 Tekes

Lappeenrannan teknillinen korkeakoulu, CSC ja Jyväskylän yliopisto selvittävät Tekes-rahoitteisessa TÄSMÄ-projektissa, miten ja minkälaisia matemaattisia menetelmiä ja malleja suomalaisessa teollisuudessa hyödynnetään. Selvityksen pohjaksi tehty kysely ”Laskennallinen mallinnus teollisuudessa” kattaa keskeiset suomalaiset yritykset elektroniikka,- kemia-, paperikone-, automaatio- sekä energiateknologiateollisuudesta. Tavoitteena on löytää kohteita, joissa matemaattisen mallinnuksen käytöllä voitaisiin tehostaa yritysten suunnittelutyötä. Kyselyn tuloksista ilmestyy raportti.

TÄSMÄ-projektissa kartoitetaan myös, kuinka paljon yritykset tekevät yhteistyötä esimerkiksi yliopistojen kanssa. Projekti pyrkii vaikuttamaan myös siihen, että tulevaisuudessa riittää sekä matemaattisten menetelmien osaajia että koulutustarjontaa. Projekti on esiselvitys, jolla kartoitetaan laskennallisen tutkimuksen tarvetta elinkeinoelämässä ja tunnistetaan teknologiahankkeiden mahdollisuuksia.

Projektilla on läheinen liittymä Suomen Akatemian MaDaMe-ohjelmaan ja Euroopan Unionin rahoituksella käynnistettyyn MACSINET-hankkeeseen, jotka molemmat pyrkivät edistämään matemaattisten menetelmien käyttöä.

TÄSMÄ-projektin selvitysraportti valmistuu vuoden 2001 alussa. Projektin verkkosivut löytyvät osoitteesta

`http://www.it.lut.fi/fac/mat/tasma/`

1.5.3 Yliopistot

Jyväskylän yliopiston yhteydessä toimiva matemaattisen ja laskennallisen mallintamisen tutkimusyksikkö CMCM (Center for Mathematical and Computational Modeling) on tehnyt selvityksen matemaattisen mallintamisen sovellusmahdollisuuksista ja tarpeista Jyväskylän yliopistossa ja Jyvässeudun yrityksissä [Kat00]. Selvitys tarjoaa kuvan yliopistossa meneillään olevista mallinnusprojekteista, mallinnuksen tutkimuksesta, yliopiston eri laitosten sovellusmahdollisuuksista ja tarpeista mallintamisen eri osa-alueilla sekä mallinnusprojektien kokonaisvolyymista. Yritysten osalta raportti tuo esille yritysten mallinnustarpeita ja toivottavia yhteistyömuotoja yliopiston mallinnusosaajien kanssa.

Selvitys pohjautuu yliopiston toimesta tehtyihin haastatteluihin ja kirjallisiin kyselyihin. Yritysten kartoituksessa on hyödynnetty Jyväskylän teknologiakeskuksen kontakteja.

CMCM-tutkimusyksikön raportti löytyy www-osoitteesta

`http://www.math.jyu.fi/research/cmcm/selvitys/ensim6b.html`

1.5.4 CSC:n aiemmat selvitykset

CSC on selvittänyt aiemmin muun muassa suuria laskennallisia haasteita Suomessa sekä suurteholaskennan tarpeita eri tiedealueilla. Seuraavassa on lista laskennalliseen tieteeseen ja mallintamiseen liittyvistä selvityksistä:

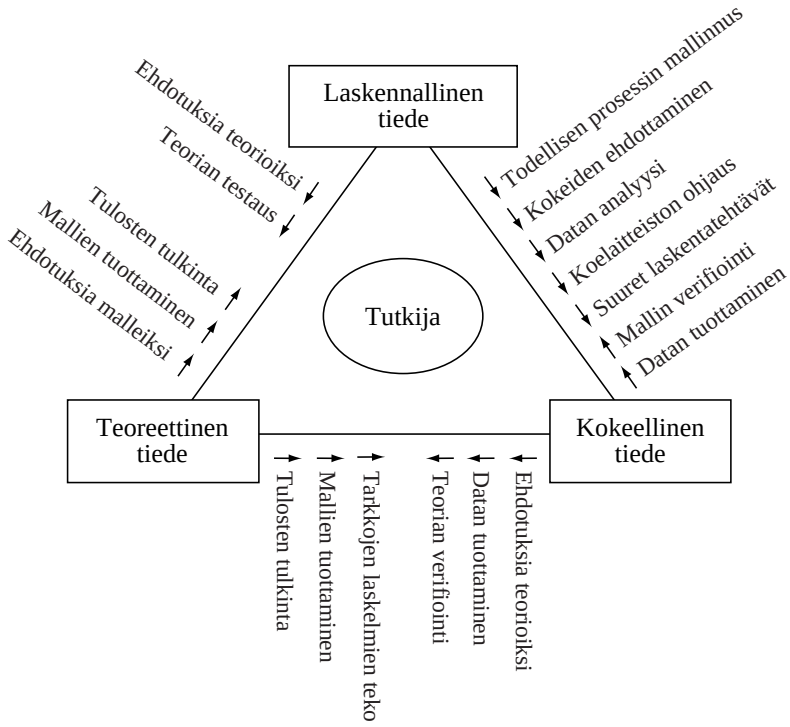
- *Suurteholaskennan toimenpideohjelma 1997–2001* [CSC97]
- *Tieteen tietokantojen toimenpideohjelma 1998–2001* [CSC98]
- *Suuret laskennalliset haasteet Suomessa* [RK99]
- *Kielitieteiden atk-tarpeet* [CSC00]
- *Final Report of the Pilot Project for PC Clusters* [KF00].

2 Johdatus matemaattiseen mallintamiseen

2.1 Tieteen kolme tutkimusmenetelmää

Tieteellinen tutkimus kehittyy kohti yhä haastavampia tehtäviä. Tyypillistä on monitieteisten ongelmien käsittely [HKP00, RK99, MLHH99].

Tutkimuksessa käytetään kokeellisen ja teoreettisen lähestymistavan lisäksi *laskennallista* lähestymistapaa, johon kuuluu oleellisena osana matemaattinen mallintaminen. Kuva 2.1 esittää menetelmien välisiä vuorovaikutuksia.



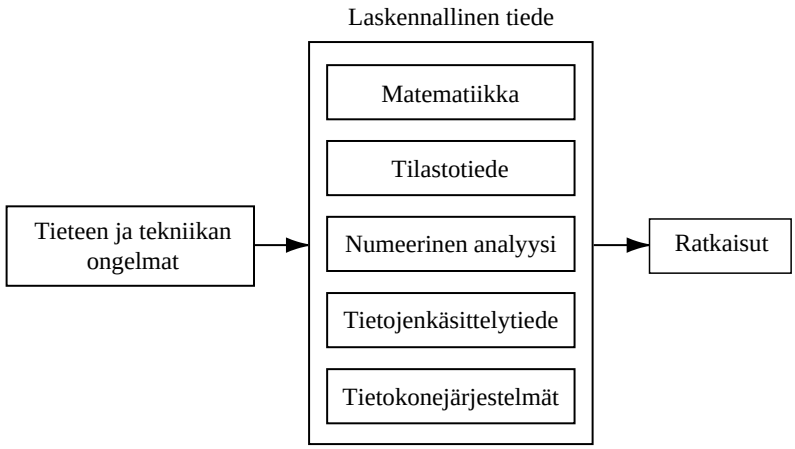
Kuva 2.1: Tieteen kolme tutkimusmenetelmää.

Nämä tieteen kolme tutkimusmenetelmää ovat käytännön tutkimuksessa usein

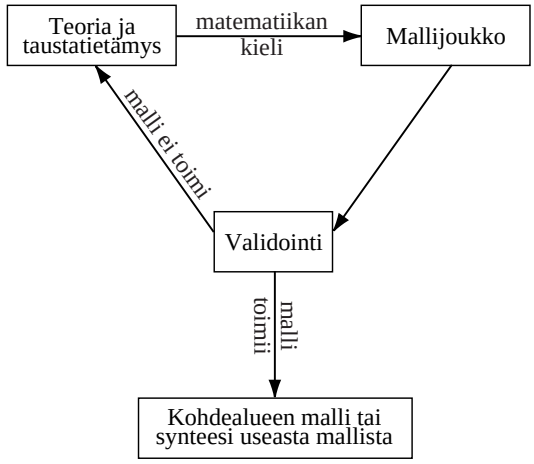
sidoksissa keskenään, joten niitä on vaikea erottaa toisistaan. Esimerkiksi mittauslaitteiden ohjaukseen voidaan tarvita kehittyneitä laskennallisen tieteen menetelmiä, joita laitetta käyttävä tutkija ei välttämättä tunne.

Mallintaminen auttaa ymmärtämään, mitä tapahtuu ja miksi tapahtuu. Esimerkiksi fysiikassa luonnonilmiöitä voidaan kuvata toisiinsa kytketyillä malleilla, jotka kuvaavat vaikkapa virtauksia, lämmönsiirtoa, säteilyä, sähkömagneettisia kenttiä ja rakenteiden mekaniikkaa. Mallintamisessa on tyypillistä myös monitieteisen osaamisen tarve. Esimerkiksi biotieteissä saatetaan joutua käyttämään muun muassa kemian, tietojenkäsittelytieteen ja tilastotieteen menetelmiä ilmiöiden mallintamisessa ja mallien ratkaisemisessa.

Kuva 2.2 havainnollistaa välineitä, joita tarvitaan ongelman ratkaisussa laskennallisen tieteen menetelmin.



Kuva 2.2: Ongelmasta ratkaisuun: kaaviossa on esitelty laskennallisen tieteen käyttämiä välineitä ongelmien ratkaisemiseksi.



Kuva 2.3: Matemaattisen mallintamisen vaiheita.

2.2 Ongelmasta ratkaisuun kuudessa vaiheessa

Laskennallisen tieteen tutkimusmenetelmä voidaan jakaa kuuteen vaiheeseen:

1. Ilmiön mallintaminen

Aluksi tutkittavasta ilmiöstä muodostetaan malli. Useimmiten mallin määrittelyyn käytetään jonkin tyyppistä matemaattista esitystapaa. Malli sisältää kuvauksen esimerkiksi ilmiöön sisältyvien tutkimuskohteen rakenteesta ja eri osasten vuorovaikutuksista.

Mallintamisessa käytetyt menetelmät vaihtelevat suuresti eri sovelluksissa ja eri tiedealoilla. Mallintamista on havainnollistettu kuvassa 2.3. Mallin pohjana käytetään useimmiten teoreettisesta tai kokeellisesta tutkimuksesta peräisin olevaa tietämystä ja dataa. Lähtötietoina voi olla esimerkiksi mitattua tietoa kemiallisten yhdisteiden ominaisuuksista. Tarvittavia tietoja löytyy esimerkiksi kemian tietokannoista. Tältä pohjalta voi luoda mallin, joka pyrkii kuvaamaan mitattua tietoa. Palaamme mittauksiin myös vaiheessa 6, jolloin on tarpeen varmistaa mallin antamat tulokset kokeiden avulla.

2. Ratkaisumenetelmän kehitys

Jos tehtävälle ei ole olemassa valmista ratkaisumenetelmää, joudutaan menetelmä suunnittelemaan. Apuna voi käyttää esimerkiksi numeerisen lineaarialgebran operaatioita tai tietojenkäsittelytieteen kehittämiä algoritmeja.

Ratkaistavana tehtävänä voi olla esimerkiksi verrata omaa tietoa eri tietokantojen sisältämiin tietoihin. Tämän tehtävän ratkaisemiseksi tarvitaan hakualgoritmeja, joilla eri lähteiden tietoja voidaan mielekkäästi verrata ja yhdistellä.

Toisen tyyppisen esimerkin tarjoavat insinööritieteiden mallintamistehtävät, joissa esiintyy usein monifysikaalisia ilmiöitä. Malli voi sisältää esimerkiksi sähkömagnetiikkaa yhdistettynä virtausten ja rakenteiden välisiin vuorovaikutuksiin. Tällaisen tehtävän ratkaiseminen voi vaatia uusien menetelmien kehittelyä.

3. Ratkaisumenetelmän toteutus

Jos käytettävissä on luotettava ja tehokas ratkaisumenetelmä, joka on toteutettu joko ajettavana ohjelmana tai lähdekielisenä ohjelmakoodina, kannattaa sitä käyttää. Jos ratkaisumenetelmää ei ole valmiiksi ohjelmoitu tai valmista ohjelmakoodia ei ole mahdollista käyttää, täytyy menetelmä toteuttaa itse ohjelmoimalla.

Menetelmän toteutuksessa on syytä kiinnittää suurta huomiota ohjelman luotettavuuteen. Ohjelmasta tulee todennäköisemmin luotettava, kun se suunnitellaan, toteutetaan ja testataan huolella.

4. Ilmiön tutkiminen tietokoneessa

Vaiheiden 1–3 jälkeen käytössä on ohjelma, jolla tutkittavaa ilmiötä voidaan tarkastella tietokoneessa. Tässä vaiheessa voi käydä ilmi, että

malli on väärä, ratkaisumenetelmä on epäluotettava tai tehoton tai ohjelma ei toimi oikein. Virhetilanteissa voi olla syytä kysyä neuvoa ohjelman kehittäjältä, numeeristen menetelmien asiantuntijoilta tai verrata tuloksia muualla julkaistuihin.

Jos tietokoneen teho ei riitä, voi olla syytä muuttaa mallia helpommin ratkaistavaksi tai ratkaisualgoritmia tehokkaammaksi. Myös rinnakkaislaskennasta voi olla apua hyvin suurten tehtävien ratkaisemisessa.

5. Tulosten esitys

Tietokoneella saatujen tulosten esittämiseen voidaan käyttää monenlaisia tekniikoita, jotka perustuvat usein tilastotieteen menetelmiin tai graafiseen esitystapaan.

Tietokonepohjaisen visualisoinnin avulla matemaattista mallia ja taustalla olevaa dataa voidaan verrata keskenään. Mahdollista on myös tehdä animaatio tietokonesimulaatiossa lasketuista arvoista. Tällöin ilmiön käyttäytymistä voi tarkastella ajan funktiona.

6. Tulosten tulkinta ja arviointi

Kun mallin antamat tulokset on saatu, on niitä verrattava mittaustuloksiin ja aiemmin julkaistuihin tuloksiin, jotta tulosten oikeellisuus saadaan varmistettua. Myös vertaaminen teoreettisista laskelmista saatuihin tuloksiin on usein hyödyllistä. Tässä vaiheessa saatetaan havaita, että mallia ja ratkaisumenetelmää on parannettava, jotta tulokset saadaan vastaamaan asetettuja vaatimuksia.

Tämän raportin pohjana olevassa kyselyssä on selvitetty erityisesti laskennallisen tutkimuksen vaiheen 1 osaamista suomalaisissa yliopistoissa. Jossain määrin on tutkittu myös vaiheisiin 2–6 liittyviä aiheita.

2.3 Matemaattisten mallien tarve ja hyödyt

Mallintaminen ei ole uusia asia. Prototyyppejä ja pienoismalleja on tehty niin kauan kuin tutkimusta on ollut olemassa, kivikirveistä ja bumerangeista alkaen. Matemaattisessa mallintamisessa on merkittävää mallien siirrettävyys, muokattavuus ja uudelleen käytettävyys. Jos auton kolarisimulaatio tehdään prototyypillä tai pienoismallilla, on seuraavaa koetta varten valmistettava uusi koeauto. Matemaattista mallia sen sijaan voidaan käyttää uudestaan ja uudestaan. Ja jos kokeessa menee jokin vikaan — esimerkiksi haluttua suuretta ei huomata mitata — voidaan mallia muuntaa ja tehdä simulaatio nopeasti uudestaan.

Matemaattisessa mallissa esitetään tutkittavat ilmiöt matemaattisten lausekkeiden avulla. Mallien avulla löydetään systeemin oleelliset piirteet ja voidaan ennustaa systeemin käyttäytymistä. Mallien avulla voimme siis saada

tutkimuksen kohteesta sellaista ymmärrystä, jota kokeiden avulla ei saavuteta. Erityisesti insinööritieteissä pyritään usein myös mallinnettavan systeemin optimointiin, esimerkiksi löytämään geometria, joka minimoi tai maksimoi jonkin mallinnettavan suureen.

Realistisen eli riittävän tarkasti todellisuutta kuvaavan tietokonemallin luominen ei ole triviaali tehtävä. Yleensä kyse on monista toisiinsa kytketyistä ilmiöistä, joiden vuorovaikutuksien vahvuutta on vaikea ennakkoon arvioida. Mallin rakenne on usein monimutkainen, joten mallintaja joutuu pohtimaan eri yksityiskohtien merkitystä: vastaavatko simulaatiosta saatavat tulokset todellisuutta, jos malliin ei sisällytetä kaikkia detaljeja? Mitä monimutkaisempi malli, sitä haastavampaa on mallin käsittely tietokoneessa.

Toisinaan tutkittava ilmiö on niin hankala, että mallintamalla pystytään tuottamaan vain kvalitatiivista tietoa. Tällöin mallintamisella kuitenkin saadaan tietoa tutkittavan ilmiön likimääräisestä käyttäytymisestä. Toisinaan mallintaminen voi puolestaan olla niin tarkkaa, että simuloimalla saadut tulokset yhtyvät mittaustuloksiin kymmenen desimaalin tarkkuudella.

Teollisuuden tuotekehityksessä matemaattinen mallintaminen ja tietokonepohjainen simulointi auttavat sekä idean kehittelyssä toimivaksi tuotteeksi että olemassaolevan tuotteen ominaisuuksien parantamisessa. Näin on mahdollista parantaa yrityksen kilpailukykyä ja lyhentää uusien innovaatioiden matkaa ideasta markkinoille. Käyttämällä matemaattista mallintamista ja tietokonesimulointia on esimerkiksi mahdollista parantaa prosessin energiataloutta. Laskennallisin menetelmin voimme vaikkapa kehittää tehokkaampia moottoreita ja samalla vähentää päästöjä.

2.4 Mallien luotettavuus

Matemaattisen mallin muodostamisessa ongelmia tuotavat esimerkiksi seuraavat tekijät:

- Mallissa käytetyt vakiot tai lähtödata tunnetaan epätarkasti tai mittaukset on tehty systemaattisesti virheellisesti.
- Mallia luotaessa on tehty liian suuria yksinkertaistuksia, eikä se enää kuvaa tarkasteltavaa ilmiötä riittävän hyvin (oletetaan homogeeninen materiajakautuma tms.).
- Malli kuvaa periaatteessa hyvin tarkasteltavaa ilmiötä, mutta sitä ei pystytä — ainakaan nykyisin tietokonein — ratkaisemaan edes numeerisesti.
- Ongelma on ylipäänsä huonosti asetettu. Muodostetulla mallilla ei ole yksikäsitteistä ratkaisua tai lopputulos on erittäin herkkä pienillekin muutoksille lähtötiedoissa.

Tilastollisten mallien luotettavuutta on arvioitava käyttämällä tehtävään soveltuvia validointimenetelmiä (esimerkiksi riistiinvalidointia). Mahdollisuuk-

sien mukaan kannattaa verrata eri menetelmien ja lähestymistapojen antamia tuloksia toisiinsa.

2.5 Numeeristen menetelmien käyttö

Fysikaaliset ilmiöt ja insinöörien suunnittelemat laitteet ovat käytännössä aina niin monimutkaisia, etteivät laskut ole suoritettavissa kynällä ja paperilla, vaan on käytettävä apuna tietokoneita.

Numeeriset menetelmät ovat väline matemaattisten mallien käsittelyyn ja ratkaisuun tietokoneessa [HHL+99]. Ratkaistavat matemaattiset mallit kuvaavat usein jatkuvia ilmiöitä. Koska tietokoneessa ei voi laskea äärettömän tarkasti eikä äärettömän monessa pisteessä, joudumme käyttämään likiarvoja.

Mallin tarkkuuden valinnassa tutkija joutuu jatkuviin kompromisseihin: mitä suurempi on esimerkiksi laskentapisteiden lukumäärä, sitä suurempi on myös tietokoneen vaatima laskenta-aika. Toisaalta resoluution kasvaessa myös laskennan tarkkuus yleensä kasvaa.

2.6 Numeerisen ratkaisemisen luotettavuus

Matemaattisten ongelmien ratkaiseminen tietokoneella on vaativa tehtävä. Virheitä syntyy matemaattisen mallin muodostamisessa, mallin sovittamisessa tietokoneen ymmärtämään muotoon, mallin numeerisessa käsittelyssä sekä tulosten analysoinnissa. Myöskään tietokoneet eivät ole erehtymättömiä. Virheen syy saattaa siis olla laiteviassa, kääntäjissä, ohjelmiston virheessä, laskentamenetelmässä tai matemaattisessa mallissa.

Matemaattisia malleja muodostettaessa ja niitä numeerisesti ratkaistaessa on pyrittävä arvioimaan ratkaisun tarkkuutta ja luotettavuutta. Algoritmit eivät toimi kaikissa tilanteissa. Esimerkiksi huono alkuarvaus voi johtaa tilanteeseen, jossa algoritmi ei suppene eli emme löydä ratkaisua tehtävälle.

2.7 Mallintamisen mahdollisuudet ja rajoitukset

Tietokoneita hyväkseen käyttävä matemaattinen mallintaminen on tullut koko ajan suositummaksi useasta eri syystä. Ehkä merkittävin tekijä on ollut tietokoneiden muistien koon ja laskentatehon eksponentiaalinen kasvu: nämä ominaisuudet ovat kaksinkertaistuneet keskimäärin 18 kuukauden välein. Tämän kehityksen voi olettaa jatkuvan ainakin jonkin aikaa. Toisaalta tietokoneohjelmistot ovat kehittyneet monipuolisemmiksi ja ehkä myös helppokäyttöisemmiksi. Monet ohjelmistot toimivat myös mikrotietokoneissa, joten niiden käyttöönotto ei ainakaan alussa vaadi laiteinvestointeja.

Tulevaisuudessa mallintamisella ja laskennalla on edessään kasvavia haasteita. Vaikka tietokoneiden kehitys jatkuu huimaa vauhtia, ei läheskään kaikkia ongelmia voida vielä ratkaista tehokkaimmillakaan tietokoneilla. Keskei-

nen resurssi on tutkijoiden kasvanut osaaminen. Matemaattisten mallien räätälöinnillä ja laskenta-algoritmien tehostamisella saavutetaan kertaluokkien säästöjä laskenta-ajoissa.

Mallintamisen tehokkuuteen ja luotettavuuteen liittyy toisinaan myös liiallista optimismia. Yleensä malleja työssään käyttävät ihmiset ovat varsin hyvin perillä mallien rajoituksista. Kuitenkin sellaisilla aloilla, joilla mallintamisen perinne on lyhyt, voi esiintyä sekä liiallista optimismia että tämän aiheuttamia vastareaktioita: ”Mitä oikein luulette malleillanne laskevanne?” Onkin tärkeää löytää toimiva tasapaino kokeellisen, teoreettisen ja laskennallisen menetelmän välillä.

Mallintamisen ja laskennan käyttöönotto vaatii paljon koulutukselta. Parasta olisi totuttaa opiskelijat menetelmien käyttöön jo opintojen alkuvaiheissa. Monella alalla näin jo tapahtuukin. Luku 5 käsittelee mallintamisen opetusta yliopistoissa. Liitteessä C on esitetty mallintamiseen liittyviä käytännön ohjeita.

Mitä paremmin uusien menetelmien mahdollisuudet ja rajoitukset opitaan, sitä paremmin niitä myös osataan jatkossa soveltaa käytäntöön.

3 Mallinnus suomalaisissa yliopistoissa

Tutkijoille lähetettyä kyselyä varten seuloimme yliopistojen Internet-sivuilta ryhmät, jotka mainitsivat hyödyntävänsä mallinnusta työssään. Jo tässä vaiheessa kävi ilmi, että matemaattista malliajattelua ja ongelmien laskennallista ratkaisua ei enää käytetä pelkästään insinööritieteissä ja fysiikassa, vaan yhä useammin myös lääketieteessä, biologiassa ja taloustieteissä. Viimeksi mainituilla aloilla on toki pitkät perinteet mallien käytöstä ja mallinnustekniikoiden kehittämisessäkin (Malthus, Lotka, Volterra; Pareto, Nash, Black, Sholes), mutta vasta suhteellisen äskettäin on päästy tilanteeseen, jossa laskennallista lähestymistapaa sovelletaan laajamittaisesti kvantitatiivisten tulosten tuottamiseen eikä ainoastaan teoreettisissa tarkasteluissa ja pitkälle idealisoiduissa tilanteissa. Laskentakapasiteetin ja -menetelmien kehittyminen kasvattaakin ratkaistavissa olevien tehtävien määrää jatkuvasti kaikilla aloilla.

3.1 Mallien käytön yleistyminen yksittäisen tieteen sisällä

Eri tieteet ovat (ainakin Suomessa) erilaisessa kehitysvaiheessa mallien soveltamisessa. Tästä syystä luonnollisesti myös tutkijoiden tarpeet ja osaamisen taso vaihtelevat alasta toiseen. Raportissa esitettäviä vertailuja ei siis pidä tulkita minkään yksittäisen tieteen arvosteluksi. Luontevin mittatikku oman ryhmän tutkimuksen laadulle on varmaankin vertailu muihin saman alan ryhmiin kotimaassa ja ennen kaikkea ulkomailla.

Karkeasti kuvattuna tutkimuksen alat voidaan jaotella kolmeen luokkaan sen mukaan kuinka kauan tai kuinka laajasti vaativia, laskennallisesti intensiivisiä mallinnusmenetelmiä on sovellettu:

1. Tieteet, joissa kvantitatiivinen mallinnus on vähäistä

Näiden alojen tutkijat ovat joutuneet omaksumaan mallinnustekniikat yleensä jostain muualta kuin oman alansa oppikirjoista. Helpoimmat tekniikat ovat joskus niin ilmeisiä, että ne keksitään alan sisällä itsenäisesti. Tästä syystä esimerkiksi yksinkertaisilla differenssimenetelmillä on usein omat nimensä soveltavissa tieteissä. Malleja on myös mahdollisesti osattu konstruoida jo hyvinkin kauan, mutta vain jotkin

alkeistapaukset on saatu ratkaistua analyyttisesti, ja realistiset, numeerista ratkaisua vaativat tehtävät ovat saaneet odottaa riittävän tehokkaiden tietokoneiden saapumista markkinoille.

Etenemisvauhti on ripeä monesti kehityksen alkuvaiheissa. Jos laskennallinen lähestymistapa on uusi, aiemmin ratkaisemattomia tehtäviä on paljon. Ensin pyritään selviämään helpoista perustehtävistä, ja samalla opitaan lisää. Tieteellisesti avoin kenttä houkuttelee usein lukuisia kilpailevia ryhmiä samojen ongelmien pariin. Luottamus laskennan tarjoamiin mahdollisuuksiin on toisinaan ylioptimistinen.

Kehitystä nopeuttavat muilta, mallinnusta pidempään harjoittaneilta aloilta siirtyneet asiantuntijat. Siirtymistä voi tapahtua joko yksittäisten tutkijoiden tasolla tai peräti kokonaisten tutkimusryhmien muodossa.

Kaupallisia ohjelmistoja ei ole käytössä, vaan tarvittavat ohjelmat kirjoitetaan tutkimusryhmissä ja niitä vaihdetaan ryhmien kesken. Myös ohjelmointia varten voidaan ryhmiin palkata oman alan ulkopuolisia asiantuntijoita. Joillakin aloilla jo pelkkä tietokoneen käyttö tuottaa vaikeuksia.

Muutosprosesseihin kuuluva vastarinta voi näkyä laskennallisesti saavutettujen tulosten vähättelynä. Matemaattisten mallien käyttö ei vielä kuulu alan peruskoulutukseen kaikissa yliopistoissamme, vaan siihen perehtyneet ovat yleensä jatko-opiskelijoita.

2. Tieteet, joissa matemaattinen mallinnus kasvaa voimakkaasti

Näillä aloilla mallinnusopetuksesta huolehditaan jo itsenäisesti, vaikka kaikki opiskelijat eivät välttämättä kohtaa matemaattisia malleja opiskelunsa missään vaiheessa. Laskennallinen lähestymistapa siirtyy vähitellen kokeiluista normaaliksi työskentelymenetelmäksi. Samalla käsitys laskennallisten tekniikoiden mahdollisuuksista muuttuu realistisemmaksi.

Valmiita akateemisia ohjelmia on jo runsaasti, ja kaupallisiakin tuotteita alkaa ilmestyä markkinoille. Ohjelmat soveltuvat useimpien alan perustehtävien ratkomiseen. Ohjelmiin sisällytetään jatkuvasti tehokkaampia numeerisia menetelmiä, sillä laskentanopeus voi olla ratkaiseva tekijä, kun tutkijat kilpailevat kuka ehtii ensimmäisenä julkaista tuloksensa. Yleensä tässä vaiheessa tarvittava numeriikka on valmiina matematiikan oppikirjoissa.

Samalla kun kehittyvät ohjelmistot muuttavat helpompien tehtävien ratkaisun rutiinityöksi, alan pioneerit huomaavat kohtaavansa yhä haastavampia ongelmia. Koska oman tieteen piirissä ei vielä ole ehditty kouluttaa riittävää määrää laskennallisesti suuntautuneita huippuosaajia, realistisempien mallien kehitystyö voi hetkellisesti hidastua.

3. Tieteet, joissa laskentaintensiivinen mallinnus on laajaa

Laskennallinen lähestymistapa on vakiinnuttanut asemansa kokeellisen ja teoreettisen tieteenharjoittamisen rinnalla. Parhaimmillaan mallit ovat erittäin tarkkoja, ja keskimäärinkin riittävän luotettavia esimer-

kiksi teolliseen tuotekehittelyyn tai yhteiskunnallisen päätöksenteon tukemiseen.

Kaikki alan opiskelijat tutustuvat malliajatteluun jo perusopinnoissaan ja ymmärtävät laskennallisten tulosten merkityksen. Myös jatkokoulutus on laajaa, mikä takaa sen, että yhä vaikeampia — ja realistisempia — ongelmia pystytään ratkomaan aktiivisen ja riittävän suuren tutkijakunnan voimin.

Kaupallisten ohjelmistojen taso on noussut huomattavasti samalla kun kilpailu on vähentänyt ohjelmistojen lukumäärää. Kilpailuvalttina ohjelmistoilla on nyt monipuolisuus: yleensä ne tarjoavat ratkaisuja kaikkiin perustehtäviin ja myös näiden tehtävien yhdistely on tehty mahdolliseksi (monifysikaaliset tehtävät). Lisäksi ohjelmistopaketteihin kuuluu erilaisia esi- ja jälkikäsittelytyökaluja, joilla helpotetaan datan siirtoa formaatista toiseen tai tuotetaan julkaisukelpoisia visualisointeja laskennan tuloksista. Monet ohjelmat toimivat tehokkaasti henkilökohtaisissa tietokoneissa. Superkoneita tarvitsevat hyvin suuria malleja työssään hyödyntävät ryhmät.

Omia tai muiden tutkijoiden kirjoittamia ohjelmia käyttävät ryhmät, jotka etsivät täysin uusia mallinnus- tai laskentamenetelmiä. Tehokkaat ratkaisualgoritmit vaativat usein erityistarpeisiin suunniteltua monimutkaista numeriikkaa ja nykyään myös rinnakkaislaskentaa. Alan tutkimusryhmissä onkin huippuluokan numeriikan ja ohjelmointitekniikan asiantuntijoita.

Yllä esitetty jaottelu on tietysti karkea, ja samankin tieteenalan sisällä matemaattisten mallien käyttö voi vaihdella paljon. Monet asiat vaikuttavat mallinnuksen leviämiseen. Jos tieteen tutkimat ilmiöt ovat luonteeltaan deterministisiä ja niihin liittyvät suureet ovat mitattavissa, malleja on helppo muodostaa. Matematiikka on tällöin luonnollinen kieli mallien ilmaisemiseen ja siten kynnys laskennallisten menetelmien käyttöön on matala. Näillä aloilla mallien avulla ennustetut tulokset voivat edistää huomattavasti koko tieteen kehitystä.

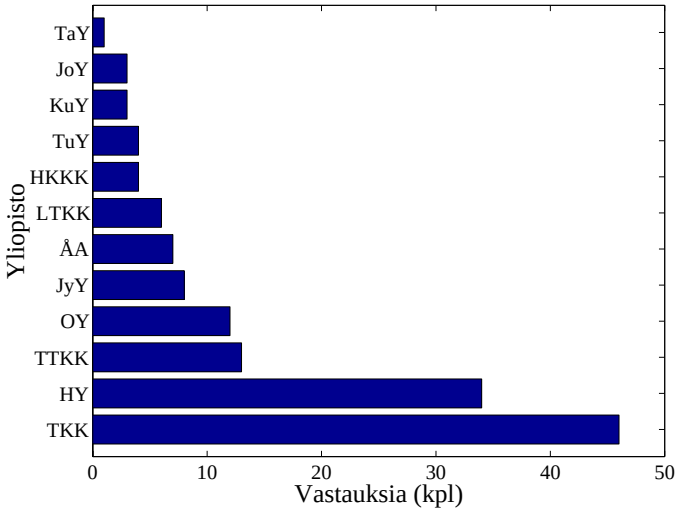
Jos tutkimuksen kohteena olevat ilmiöt ovat stokastisia, käyttökelpoisten mallien muodostaminen on hankalampaa. Ilmiöiden täsmällinen määrittely on vaikeaa tai ilmiöillä ei ole eksaktisti mitattavia ominaisuuksia. Pienten mallien ennustusarvo on tällöin olematon. Jos parametrien lukumäärää kasvatetaan tai malliin lisätään esimerkiksi satunnaisuutta, mallin ratkaiseminen käy hyvin työlääksi.

Myös alalla vallitseva suhtautuminen tutkimustyöhön vaikuttaa. Tutkimusryhmät eivät saavuta kriittistä massaa, jos jatko-opiskelijoita ei pystytä houkuttelemaan riittävästi, vaan työelämä akateemisen maailman ulkopuolella vie kaikki perustutkinnon suorittaneet. Tällöin kehitys helposti hidastuu, sillä mallinnuksessa tarvittavaa ohjelmointityötä tekevät tyypillisimmin juuri jatko-opiskelijat.

3.2 Kyselyn vastauksista yleensä

Kyselylomakkeita postitettiin 512 kappaletta, joista 141 palautettiin täytettynä. Moniin tutkimusryhmiin ja laboratorioihin lähetettiin useita lomakkeita, jotta kyselyn ajankohdasta huolimatta (kesäkuu) mahdollisimman monen tutkimusryhmän edustaja olisi saavutettu. Toisaalta samassakin laboratoriossa tutkitaan usein eri aiheita, joten tuloksissa ei liene huomattavia päällekkäisyyksiä — ainakaan vastauksista päätellen.

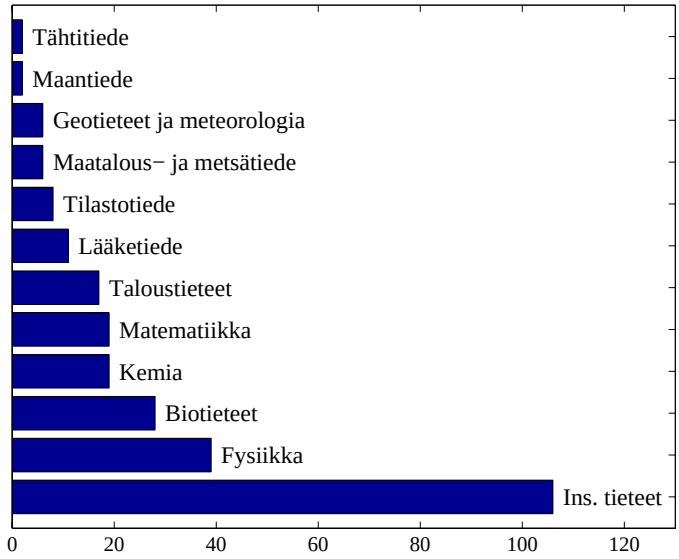
Vastaajien jakauma yliopistoittain käy ilmi kuvasta 3.1. Kuvassa 3.2 on esitetty tutkimuskohteet tieteenaloittain.



Kuva 3.1: Kyselyyn lähetetyt vastaukset yliopistoittain (N=141).

Kyselyymme tulleissa vastauksissa mainittin 261 tutkimusaihetta, joista yli 100 oli tekniikan alalta, 40 fysiikasta ja 30 biotieteistä. Näiden osalta otosta voitaneen pitää edustavana, joskaan ei kattavana. Taloustieteisiin, kemiaan ja matematiikkaan liittyviä teemoja oli noin 20 kultakin alalta. Loput vastaukset edustivat lääketiedettä, meteorologiaa ja muita geotieteitä, metsätiedettä, tilastotiedettä, maantiedettä ja tähtitiedettä. Lisäksi vastanneiden joukossa oli tietojenkäsittelytieteen edustajia, jotka sovelsivat erilaisia malleja useilla aloilla. Monet tutkimusprojektit olivat poikkitieteellisiä, kuten biologian, virtauslaskennan ja lääketieteen rajoilla liikkuva ihmisen verenkiertoelimistön mallinnus tai liiketaloustiedettä ja matematiikkaa yhdistävät peliteoreettiset päätöksentekomallit.

Vastausten jakauma on luonnollisesti korkeintaan suuntaa antava. Erityisesti rajankäynti kemian, fysiikan ja tekniikan välillä on vaikea määritellä. Monilla aloilla tehdään merkittävää mallinnukseen perustuvaa tutkimustyötä myös yliopistojen ulkopuolisissa yksiköissä (VTT, Metsäntutkimuslaitos, Maatalouden tutkimuskeskus, Geodeettinen laitos, Ilmatieteen laitos), joita ei otettu mukaan tähän kartoitukseen.



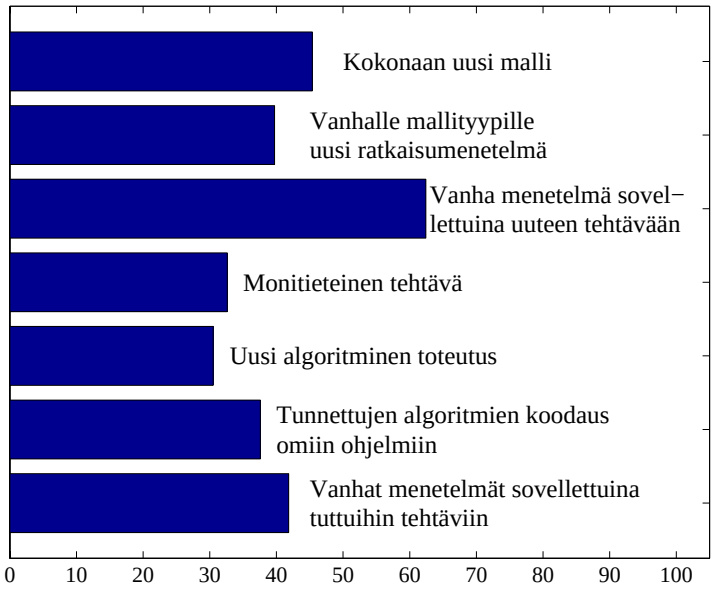
Kuva 3.2: Vastanneiden ryhmien tutkimuskohteet tieteenaloittain.

CSC:n vuonna 1999 tarjoamasta suurteholaskenta-ajasta akateemisten käyttäjien osuudet jakautuivat seuraavasti: fyysikot 52 %, kemistit 21 %, insinöörit 8 %, biotieteilijät 5 % ja muut 2 % (Ilmatieteen laitoksen osuus oli 11 %). Tämä jakauman erilaisuus verrattuna vastausten tutkimusalojen jakaumaan johtuu siitä, että monet insinööritieteissä käytettävät laskennalliset ohjelmistot toimivat riittävän hyvin tutkijoiden omissa työasemakoneissa. Mallinnusmenetelmästä ja sovellusalueesta riippuen ratkaisun laskentaintensiivisyys vaihtelee huomattavasti. Fysiikan ja kemian perustutkimuksessa ratkotaan usein tehtäviä, jotka vaativat erittäin suurta laskentatehoa ja suurta muistia.

3.3 Mallinnusprojektien uutuusarvo

Kyselylomakkeessa oli lueteltu erilaisia vaihtoehtoja, joilla pyrittiin kartoittamaan mallinnustyöhön sisältyvää uutuusarvoa (kuva 3.3). Vastaajat saivat valita näistä yhden tai useamman, jotka osuvimmin kuvasivat heidän projektiaan. Selvästi yleisintä (62 %) oli entuudestaan tunnettujen menetelmien soveltaminen johonkin uuteen tehtävätyyppiin. Kuten akateemiselle tutkimukselle sopiikin, vastaajista 45 % ilmoitti suunnittelevansa kokonaan uusia malleja ja 40 % kehitti uusia ratkaisumenetelmiä vanhoihin malleihin.

Enemmän rutiininomaista työtä edustivat tunnettuihin algoritmeihin perustuvien tietokoneohjelmien kirjoittaminen (38 %) ja tunnettujen menetelmien soveltaminen käytännön ongelmiin, joissa muuttuvat lähinnä tehtävän parametrit ja geometria (41 %). Näistä vaihtoehdoista edellinen liittyy tyypillisesti oman ohjelmiston ylläpitoon ja laajentamiseen, ja jälkimmäinen viittaa tavallisesti ulkopuoliselle taholle (teollisuuskumppanille) tehtyyn tilaustutki-



Kuva 3.3: Mallinnustutkimukseen sisältyvä uutuusarvo (%).

mukseen.

3.4 Differentiaaliyhtälöt merkittävin mallinnustekniikka

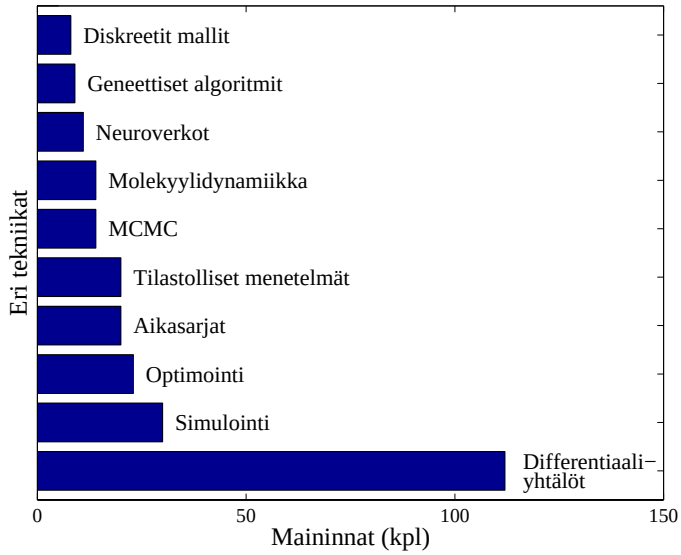
Vastauksissa mainituista mallinnustekniikoista erilaiset differentiaaliyhtälöihin pohjautuvat mallit olivat ylivoimaisesti suosituimpia (kuva 3.4). Tähän ryhmään kuuluvat paitsi tavalliset ja osittaisdifferentiaaliyhtälöt myös yhtälöryhmät, joissa on sekä algebrallisia että differentiaaliyhtälöitä.

Differentiaaliyhtälöt sopivat kuvaamaan erityisesti luonnontieteiden ja tekniikan tutkimia systeemejä. Ratkaisuun tarvittavia numeerisia menetelmiä on kehitetty paljon pitkän ajan kuluessa (osin jo huomattavasti ennen kuin tietokoneita oli olemassa). Näitä menetelmiä myös parannetaan jatkuvasti.

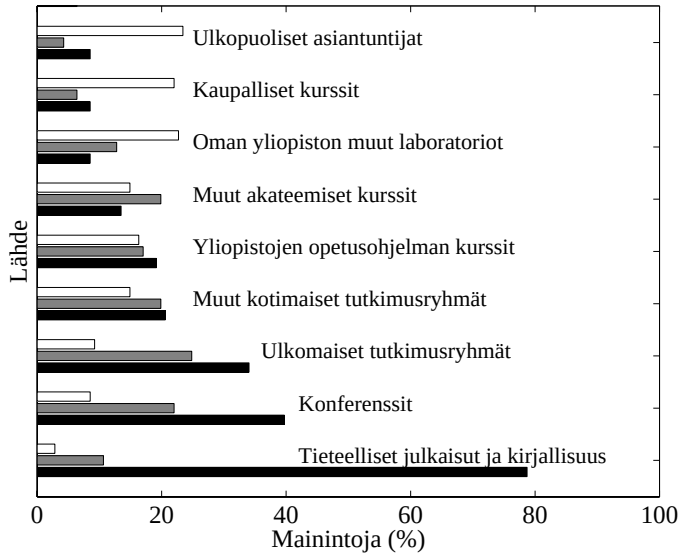
Muita paljon käytettyjä menetelmiä olivat erilaiset diskreetit mallit, simuloinnit, optimointitehtävät, aikasarjamallit, MCMC-mallit (Markov Chain Monte Carlo), tilastolliset menetelmät ja neuroverkot. Tämän ryhmän menetelmistä osa on suhteellisen äskettäin kehitettyjä ja niille keksitään jatkuvasti uusia sovelluksia, joten niiden merkitys mallinnuksessa tulee kasvamaan. Osa taas on jo vakiinnuttanut asemansa mallinnuksen perustyökalujen joukossa.

Lisäksi mainittiin muutamia tekniikoita, jotka soveltuvat hyvin spesifeihin ongelmiin: peliteoria, sumea logiikka ja signaalikäsittelytekniikat.

Stokastiset differentiaaliyhtälöt ja aallokeanalyysi (wavelets) ovat menetelmiä, joista Suomessa on kyllä teoreettista tietämystä, mutta joita voisi soveltaa nykyistä laajemminkin.



Kuva 3.4: Suosituimmat mallinnustekniikat.



Kuva 3.5: Mallinnustiedon lähteet. Kunkin lähteen kohdalla alin (tummin) pylväs osoittaa niiden vastaajien määrän, jotka pitivät kyseistä lähdettä erittäin tärkeänä. Vastaavasti ylin pylväs kertoo vastaajien mielestä vähemmän tärkeästä lähteestä, jota kuitenkin on käytetty jossain vaiheessa hyväksi.

3.5 Mallinnusosaamisen lähteet

Selvästi tärkein oman ryhmän ulkopuolinen mallinnustiedon lähde suomalaisille tutkijoille on tieteellinen kirjallisuus ja aikakausjulkaisut (kuva 3.5). Muita tärkeitä kanavia ovat ulkomaiset oman alan tutkijaryhmät ja tieteelliset konferenssit.

Monille tutkimustyötä tekeville (jatko-)opiskelijoille luonnollisesti myös yliopistojen kurssitarjonta on merkittävä tapa lisätä tietämystä mallinnuksesta.

Melko paljon käytettyjä, mutta vähemmän tärkeiksi luokiteltuja mallinnusavun lähteitä ovat kaupalliset kurssit, kotimaiset tutkimusryhmät (omalta tai joltain muulta alalta) ja ulkopuoliset asiantuntijat.

3.6 Rahoitus

Matemaattista mallinnusta käytetään yhä enemmän myös teollisuuden tuotekehityksessä. Riittävän luotettavien tulosten tuottamiseen tarvitaan asiantuntevaa henkilöstöä ja isoja tietokoneohjelmia. Jos yrityksellä ei ole varaa perustaa omaa laskennallisen tutkimuksen osastoa, yhteistyöhankkeet yliopistojen kanssa ovat houkutteleva vaihtoehto.

Vastausten perusteella yliopistot jakautuvat karkeasti ottaen kahteen luokkaan sen mukaan, miten mallinnusprojektien rahoitus on järjestetty. Teknillisissä korkeakouluissa akateemisen rahoituksen osuus on keskimäärin 60–70 %, muissa yliopistoissa 90–100 %. Åbo Akademi sijoittuu näiden kahden luokan välimaastoon 80 % akateemisella rahoitusosuudella.

Muutama yksittäinen ryhmä sai jopa 90 % rahoituksestaan tilaustutkimuksesta, ja kaikkiaan runsas viidennes vastaajista ilmoitti rahoittavansa vähintään puolet mallinnusprojekteistaan akateemisen maailman ulkopuolisista lähteistä. Noin puolet ryhmistä toimi puhtaasti akateemisen rahoituksen varassa.

On varmasti arvioitava tieteenaloittain mikä on toimiva suhde yliopistolta tulevan ja tilaustutkimuksesta saatavan rahoituksen välillä. Ongelmia ei synny niin kauan kuin laboratorio pystyy täyttämään velvollisuutensa perustutkimuksen ja opetuksen suhteen. Nimenomaan lyhytkestoiset tilaustutkimukset kuitenkin harvoin palvelevat perustutkimusta. Parhaimmillaan yhteistyö ulkopuolisen tahon kanssa jatkuu vuosia vaatien jatkuvasti syvempää osaamista ja edistää siten myös tieteellistä toimintaa.

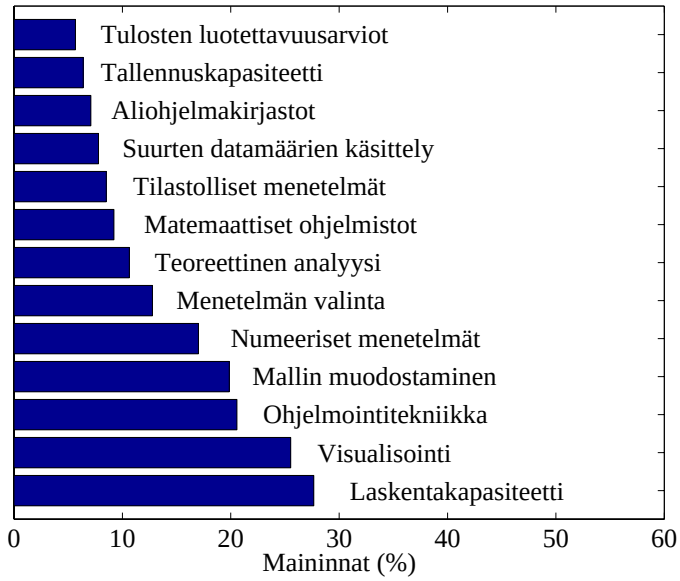
3.7 Tutkimusprojektien kestoajat

Tutkimusprojektin kestoa koskevaan kysymykseen tulleet vastaukset vaihtelivat huomattavasti vastaajan aseman mukaan: perusopiskelija tähtää puolen vuoden projektissaan loppututkintoon, jatko-opiskelijan väitöskirjatutkimus vie useamman vuoden ja laitoksen esimies näkee edustavansa mahdollisesti

jo edeltäjänsä aloittamaa vuosikymmenien pituista tutkimushanketta. Enemmistö ilmoitti kuitenkin projektien tyypilliseksi kestoksi kahdesta kolmeen vuotta.

3.8 Alueet, joilla tarvitaan lisää tukea

Kyselylomakkeessa oli nimetty useita mallinnusprojektin vaiheita alkaen mallin muodostuksesta ja menetelmän valinnasta ja päätyen tulosten käsittelyyn. Kahdella osa-alueella toivotaan selvästi lisää tukea: riittävä laskentakapasiteetti erittäin suuriin tehtäviin ja tulosten visualisointi. Jonkin verran vähemmän apua tarvitaan mallin muodostamisessa, numeeristen menetelmien käytössä ja ohjelmointiteknisissä asioissa.



Kuva 3.6: Mallinnuksen eri osa-alueilla tarvittu oman tutkimusryhmän ulkopuolinen tuki.

3.8.1 Laskentateho

Laskennallisen tieteen luonteeseen näyttää kuuluvan, että tietokoneiden teho ja muistikapasiteetti on aina riittämätön. Yleensä kilpailu tutkijaryhmien välillä johtaa jonkinlaiseen tasapainotilanteeseen: toisaalta jokainen ryhmä haluaa ensimmäisenä julkaista tulokset, toisaalta ei ole mielekästä laskea liian suurta tehtävää kuukausia tehottomassa koneessa. Tämän vuoksi haastavimpia ongelmia ryhdytään ratkomaan niin pian kuin kulloinkin käytettävissä olevat tietokoneet pystyvät selviytymään laskuista ajassa, joka on selvästi lyhyempi kuin mitä kuluu seuraavan tietokonesukupolven tuloon. Suurimmat

käytännössä ratkottavat tehtävät vaativat tavallisesti viikkojen laskutyön, joten tutkijat havaitsevat hyvin konkreettisesti laskentakapasiteetin rajallisuuden.

3.8.2 Visualisointi

Visualisointityökalut ovat nykyään oleellinen osa monessa ohjelmistopaketissa. Niinpä tavanomainen julkaisutason kuvien tuottaminen on vähitellen siirtynyt graafisen alan asiantuntijoilta paljolti tutkijoiden itsensä tehtäväksi. Samaan aikaan kuitenkin esimerkiksi konferensseissa käytettävät esitystekniikat (kolmiulotteinen visualisointi, videoesitykset, äänen käyttäminen tulosten esityksessä) vaativat yhä monimutkaisempia laitteistoja. Visualisointipalvelujen tukea tarvitsevat myös tutkijat, jotka edustavat mallinnuksen uudehkoja sovellusaloja (esimerkiksi lääketiede).

3.8.3 Muut tarpeet

Uuden mallin muodostamisvaiheessa syntyviin ongelmiin voi olla vaikea löytää oman tutkimusryhmän ulkopuolista apua. Saman alan tutkijat ovat periaatteessa kilpailijoita, ja muiden alojen asiantuntijat taas eivät välttämättä ymmärrä tarkasteltavaa ilmiötä riittävän hyvin. Mallin muodostaminen onkin oikeastaan juuri sellainen asia, johon laskennallista tiedettä harjoittavan tutkijan on annettava oma luova panoksensa.

Numeerisiin menetelmiin ja ohjelmointiin liittyvien neuvojen hankkiminen on suoraviivaisempaa. Yleensä ongelma on hyvin määritelty ja asiantuntija osaa kysyttäessä kertoa miten ongelma ratkeaa tai ainakin mistä on saatavissa aiheeseen liittyvää lisätietoa.

Numeeristen tulosten luotettavuuden arviointiin ei ole juurikaan kaivattu ulkopuolista apua. Joko suomalaiset tutkijat tuntevat käyttämänsä menetelmät hyvin tai uskovat liian herkästi algoritmien oikeellisuuteen ja tietokoneiden virheettömyyteen.

3.9 Yliopistojen tarjoamat laskennalliset palvelut

Yliopistojen omat atk-osastot ja laskentakeskukset tukevat tutkijoiden työtä paikallisesti. Taulukossa 3.1 on esitetty tavallisimpien tukimuotojen yleisyys.

Tukipalvelujen laajuus vaihteli jonkin verran yliopistojen välillä. Åbo Akademissa 86 % vastanneista oli saanut yliopistoltaan apua laitehankinnoissa, kun Teknillisessä korkeakoulussa vastaava osuus oli alle 40 % ja muissa yliopistoissa noin 60 %.

Helsingin ja Jyväskylän yliopistoissa ja Åbo Akademissa noin 80 % ryhmistä on saanut yliopistoltaan apua laitteistojen ylläpidossa. Teknillisessä korkeakoulussa ja Oulun yliopistossa ryhmät vastaavat suurimmaksi osaksi itse tietokoneidensa ylläpidosta (yliopiston tuki alle 40 %).

Tuen muoto	*Osuus tutkijoista*
Tietokoneiden hankinta	53 %
Tietokoneiden ylläpito	52 %
Ohjelmistotuki	36 %
Neuvontapalvelut	37 %
Suuri laskentakapasiteett	28 %

Taulukko 3.1: Yliopistojen tutkijoille tarjoama atk-tuki. Kohta ”Osuus tutkijoista” tarkoittaa niiden vastanneiden prosenttiosuutta, jotka ovat saaneet tukea.

Yleisen neuvonnan ja suuren laskentakapasiteetin järjestämisessä yliopistojen väliset erot eivät olleet järin suuria lukuunottamatta Jyväskylän yliopistoa, jossa yksikään vastaajista ei katsonut saaneensa näitä palveluja.

3.10 Rinnakkaislaskenta

Vaikka tietokoneisiin on saatavilla jatkuvasti yhä tehokkaampia prosessoreita, superkoneiden laskentatehon kasvaminen perustuu nykyään ennen kaikkea rinnakkaislaskentaan. Parin viime vuoden aikana yksittäiset laitokset ovat hankkineet myös mikrotietokoneista tai työasemista koottuja klusterikoneita.

Kyselyyn vastanneista noin neljännes oli joko itse rinnakkaistanut ohjelmansa tai käyttänyt valmista rinnakkaisohjelmaa. Eniten kokemusta rinnakkaislaskennasta oli kemisteillä, fyysikoilla ja tekniikan alan tutkijoilla. Geotieteissä rinnakkaislaskennalla on jo pitkät perinteet.

Ainakaan toistaiseksi valmiiden tietokoneohjelmien rinnakkaistus ei onnistu automaattisesti kuin erikoistapauksissa. Tutkijat, jotka ratkovat suurta laskentatehoa vaativia ongelmia, joutuvat siis usein itse kirjoittamaan algoritmit uudelleen rinnakkaiskoneita varten. Tämä luonnollisesti vähentää rinnakkaislaskennan käyttäjiä. Osa vastaajista ilmoittikin saavansa enemmän hyötyä tehostamalla vanhaa, yhdellä prosessorilla toimivaa ohjelmaansa.

3.11 Joitain ilmenneitä ongelmia

Tutkijat toivat esille myös ongelmia, joita kyselylomakkeessa ei ollut etukäteen ennakoitu. Monilla aloilla vallitsee selvästi pula ihmisistä, joilla on mallinnustyöhön riittävä matemaattinen (ja tietotekninen) osaaminen. Ongelma johtunee sekä osaajien pienestä tarjonnasta koulutuspuolella että tämänhetkisestä kysynnästä teollisuudessa.

Toinen monen tutkijan esittämä puute on tutkimusryhmien pienuus, minkä johdosta yksittäinen tutkija joutuu varsinaisen tutkimustyön ohella esimerkiksi ylläpitämään tietokonelaitteistoja. Vastanneista ryhmistä 58 % koostui

korkeintaan viidestä henkilöstä, ja vastaavasti 13 % ryhmistä oli kooltaan vähintään 15 hengen suuruisia.

3.12 Joitakin tieteenalakohtaisia huomioita

Kuten edellä on jo mainittu, kuusi useimmin vastauksissa nimettyä tieteenalaa olivat biotieteet, kemia, taloustieteet, matematiikka, fysiikka ja tekniikka. Näillä aloilla harjoitetaan sekä täysin uusien mallien kehitystä että vanhempien menetelmien suoraviivaista soveltamista. Erot ovat tutkimuksen painopisteissä. Differentiaaliyhtälöt ovat kaikissa nimetyissä tieteissä suosituin mallinnusmenetelmä, joten alla on mainittu lähinnä vivahde-erot tähän pääsääntöön. Edelleen lähes tutkimuskohteesta riippumatta laskentakapasiteetin rajallisuus koettiin suurimmaksi ongelmaksi.

Seuraavassa listassa on lyhyesti esitetty, mitkä piirteet kunkin tieteenalan kohdalla eroavat kyselyn yleisistä tuloksista.

- **Biotieteet**
  - Paljon kokonaan uusia malleja.
  - Differentiaaliyhtälöiden lisäksi sovellettu paljon aikasarjoja ja stokastisia prosesseja.
  - Suuri akateemisen rahoituksen osuus (97 %).
- **Fysiikka**
  - Tunnettujen menetelmien soveltamista uusiin tehtäviin. Paljon monifysikaalisia probleemoja.
  - Differentiaaliyhtälöiden lisäksi simulointitekniikoita.
  - CSC:n palvelujen käyttö aktiivista.
  - Akateemisen rahoituksen osuus 82 %.
- **Kemia**
  - Mallinnusmenetelmät paljolti tunnettuja. Sovelluskohteena sekä täysin uudentyyppiset tehtävät että tutut tehtäväluokat, joissa muutetaan ainoastaan parametreja.
  - Molekyylidynaamiset menetelmät luonnollisesti suosittuja.
  - CSC:n palvelujen käyttö hyvin aktiivista.
  - Akateemisen rahoituksen osuus 87 %.
- **Matematiikka**
  - Tutkimuksen painopiste täysin uusissa malleissa ja uusien ratkaisumenetelmien kehittämisessä.
  - Testitehtävät useimmiten muiden alojen sovelluksista.
  - Akateemisen rahoituksen osuus 81 %.

- **Taloustieteet**
  - Uusien menetelmien kehitystä, mutta myös vanhoja menetelmiä uusiin tehtäviin.
  - Aikasarjat, optimointi ja simulaatiot paljon käytettyjä menetelmiä.
  - Tukea tarvittu erityisesti ohjelmointiteknisissä asioissa.
  - CSC:n palvelujen käyttö vähäistä.
  - Akateemisen rahoituksen osuus 92 %.
- **Tekniikka**
  - Paljon rutiiniluonteista tunnettujen menetelmien soveltamista tuttuihin tehtävätyyppeihin (tilaustutkimus), mutta myös paljon monifysikaalisia malleja ja niiden kehitystä.
  - Differentiaaliyhtälöt ovat vielä keskimääräistäkin suositumpi mallinnusmenetelmä.
  - Tukea tarvitaan mallin muodostamisvaiheessa ja numeeristen menetelmien käytössä.
  - Suhteellisen pieni akateemisen rahoituksen osuus (65 %).

3.13 Tyypillisiä mallinnustehtäviä

Lopuksi esitetään tiivis luettelo erilaisista aiheista, joista suomalaisissa yliopistoissa tehdään matemaattiseen mallinnukseen perustuvaa tutkimusta. Aiheet on pyritty ryhmittelemään eri tieteenalojen mukaisesti, ei sen mukaan, minkä nimisessä laboratoriossa tutkimusta tehdään. Monet kohteet kuuluvat usean eri tieteen tutkimuksen piiriin, ja lisäksi esimerkiksi matemaatikot ja tietojenkäsittelijät hakevat sopivia mallitehtäviä melkein alalta kuin alalta.

- **Biotieteet**
  - populaatiodynamiikka
  - evoluutio
  - rakennebiologia (molekyylirakenteet)
  - biomekaniikka ja -dynamiikka
  - aineenvaihdunta
- **Fysiikka**
  - materiaalitutkimus: puolijohteet, polymeerit, kiderakenteet, supranesteet, epäjärjestyneen aineen fysiikka, paperifysiikka
  - sähkömagnetiikka
  - spektroskopia, laserfysiikka, optiikka
  - avaruusfysiikka

  - atomitason fysiikka, ydinfysiikka, hiukkasfysiikka
  - koelaitteiden simulointi
  - ympäristöfysiikka

- **Geotieteet**
  - laattatektoniikka
  - inversio-ongelmat
  - geosähköiset ilmiöt ja niihin perustuvat syvärakennetutkimukset
  - kallioperä, seismiset luotaukset
  - malmiesiintymät
  - lumen ja jään mallit
  - sääennusteet, ilmastomallit

- **Kemia**
  - molekyylitason ilmiöiden mallinnus
  - proteiinin laskostuminen
  - suhteellisuusteoreettiset efektit atomitasolla
  - kvanttikemia
  - reaktiokemia

- **Lääketiede**
  - tautien leviäminen
  - perinnölliset sairaudet
  - verenkiertoelimistö ja erityisesti sydän
  - lääketieteelliset kuvantamismenetelmät
  - lääkesuunnittelu
  - lääkeaineiden vaikutusmekanismit
  - aivotoiminta

- **Maatalous -ja metsätieteet**
  - metsäsuunnittelu, metsän kasvu, metsien harvennus
  - yksittäisen puun kasvu
  - eläinjalostus

- **Matematiikka**
  - menetelmäkehitystä: osittaisdifferentiaaliyhtälöt, inversio-ongelmat optimointi, lineaariset yhtälöryhmät, epälineaariset tehtävät
  - dynaamiset systeemit
  - koodaus, kryptografia
  - lukuteoria
  - peliteoria
  - säätöteoria

- **Taloustieteet**
  - kansantalous, verotus
  - mikrotalousmallit, yrityssimuloinnit
  - osakemarkkinat, sijoitustoiminta
  - vakuutusmatematiikka
  - puutavaran kaupankäynti
  - päätöksentekoprosessit
- **Tekniikka**
  - tietoliikenneverkot
  - elektroniset laitteet
  - virtauslaskenta
  - lujuuslaskenta, rakenneanalyysi, värähtelyanalyysi
  - LVI-suunnittelu
  - liikenteen suunnittelu
  - akustiikka
  - valuprosessit
  - paloprosessit, polttomoottorit
  - prosessiteollisuuden ohjausjärjestelmät
  - erilaiset energiantuotantomenetelmät
  - materiaalien tutkimus
  - koneiden suunnittelu
- **Tietojenkäsittely**
  - data-analyysi, datan pakkaus
  - kuvankäsittely
  - heuristiset algoritmit
- **Tähtitiede**
  - tähtien synty ja kehitys
  - maailmankaikkeuden kehitys
  - tähtienvälinen aine
  - tähti- ja planeettajärjestelmät, ratalaskut
  - planeettojen pinnan mallinnus
  - valon heijastuminen partikkeleista

4 Mallinnusohjelmistot tutkijoiden käytössä

Ylivoimainen enemmistö kyselyyn vastanneista tutkijoista etsi malleihinsa numeerisia ratkaisuja, sillä yleensä analyyttisesti ratkeavat mallit ovat liian triviaaleja tutkittavan ilmiön kunnolliseen kuvaamiseen. Tällainen tilanne syntyy monesti esimerkiksi typistettäessä aidosti kolmiulotteinen lähtökohtatilanne yksi- tai kaksiulotteiseksi malliksi. Aloilla, joissa matemaattisia malleja on käytetty kauan, analyyttisesti ratkeavat probleemat ovat siirtyneet oppikirjojen esimerkeiksi ja tieteellisesti kiinnostavat ongelmat vaativat numeerista lähestymistä.

4.1 Erilaisten ohjelmistojen käyttö

Numeerisia tuloksia voidaan hakea joko tutkimusryhmässä itse kirjoitetuilla ohjelmilla tai valmiilla ohjelmistoilla. Jos tutkimuksen tarkoituksena on tuottaa uusia tehokkaita ratkaisumenetelmiä, omien ohjelmien käyttö on miltei välttämätöntä, sillä valmisohjelmistojen sisältämät tekniikat ovat yleensä 5–10 vuotta kehityksen kärjestä jäljessä.

Itse tehdyn ohjelman mahdollisuudet ja rajoitukset ovat käyttäjälle tutumpia kuin muualta hankitun ohjelmiston. Tämä pätee ainakin niin kauan kuin ohjelman kirjoittaneet henkilöt jatkavat samassa työryhmässä. Oman ohjelman kehittäminen voi olla hyödyllistä myös oppimisen kannalta: ongelma ja sen ratkaisuun käytettävä menetelmä on pakko ymmärtää, jotta ohjelma toimisi luotettavasti ja oikein.

Valmiiden ohjelmistojen laatu vaihtelee paljon. Pitkälle kehitellyissä tuotteissa on varsinaisten numeeristen ratkaisijoiden lisäksi erilliset aliohjelmat tehtävien syöttämiseen ja hyvinkin näyttävät visualisointimahdollisuudet tulosten havainnollista esittämistä varten. Valmisohjelmistojen etuihin kuuluu nykyään ainakin kaupallisten tuotteiden osalta kattava dokumentaatio niin perinteisessä kirjallisessa muodossa kuin Internet-sivujen välityksellä.

Monia ohjelmistoja uudistetaan ja laajennetaan jatkuvasti, joten ne seuraavat kohtuullisen hyvin alan yleistä kehitystä. Tosin viime vuosina on trendiksi noussut mammuttimaisten ohjelmistojen pilkkominen useampaan osaan, joista jokaisesta laskutetaan erikseen.

Numeeristen aliohjelmakirjastojen (NAG, IMSL) käyttö on eräs tapa yhdistää itse kirjoitettujen ja valmiiden ohjelmien parhaat puolet. Tällöin tutkija voi keskittää tarmonsa omalta kannaltaan kiinnostavimpaan puoleen työtä. Numeriikan asiantuntijoiden kirjoittamat ja testaamat aliohjelmat huolehtivat algoritmin rutiininomaisista osista. Usein aliohjelmakirjastoista on vielä käytössä tietokonekohtaisesti optimoidut nopeat versiot.

Olipa ohjelma itse tehty tai muualta saatu, sen tuottamien tulosten oikeellisuutta pitää pystyä arvioimaan eri tilanteissa. Tulokset voivat olla vääriä joko suoranaisten ohjelmointivirheiden vuoksi tai yksinkertaisesti sen takia, että valittu numeerinen menetelmä ei pysty ratkaisemaan ongelmaa tarkasti. Omaa tietokonekoodia voi aina korjailla, mutta valmiin ohjelmiston käyttäjä joutuu luottamaan muiden huolellisuuteen.

Numeerisista menetelmistä syntyviä virheitä on vaikea arvioida, ellei menetelmää ole lainkaan esitelty dokumentaatiossa. Joissain uusissa ohjelmistoissa on mahdollista pyytää tulosten virherajoja, mutta ainakin toistaiseksi näihin kannattaa suhtautua varovasti. Arviot tulosten luotettavuudelle eivät välttämättä ole yleispäteviä, vaan toimivat ainoastaan sopivien ehtojen toteutuessa.

4.2 Ohjelmistojen käyttö tieteenaloittain

Kaikista vastanneista hiukan yli puolet (56 %) ilmoitti hyödyntävänsä mallinnustyössä merkittävästi valmisohjelmistoja ja kaksi kolmasosaa (67 %) kirjoitti tärkeimmät ohjelmat itse. Huomattava osa katsoi saavansa molemmin tavoin oleellisia ohjelmia käyttöönsä, minkä vuoksi prosenttilukujen summa on yli 100 %.

Oman tutkimusryhmän ulkopuolella tuotettujen (joko kaupallisten tai akateemisten) mallinnusohjelmistojen käyttö vaihtelee huomattavasti tieteenalasta riippuen. Taulukossa 4.1 on tulokset eräiden alojen osalta.

Tieteenala	*Valmisohjelmistot*	*Omat ohjelmistot*
Kemia	88 %	38 %
Taloustiede	77 %	62 %
Tekniikka	61 %	63 %
Fysiikka	39 %	71 %
Matematiikka	31 %	88 %
Biotieteet	27 %	87 %
Kaikki	56 %	67 %

Taulukko 4.1: Mallinnusohjelmistojen käyttö eri tieteenaloilla.

Kemiassa on jo melko pitkät perinteet laskennallisten menetelmien käytölle, joten uutuudesta johtuvaa kynnystä valmisohjelmien käytölle ei ole. Käytettävissä on suuri määrä hyviä ohjelmistokokonaisuuksia. Kuvaavaa on, että vaikka kemian alalta nimettiin kaikkein eniten ohjelmistoja, ainoastaan

Gaussianilla ja MSI:n paketilla oli huomattava määrä käyttäjiä. Kemian alalla ratkottavat ongelmat edustavat usein jotain hyvin tunnettua tehtäväluokkaa, jonka käsittelyyn on olemassa valmiit työkalut, joten ei ole syytä keksiä pyörää uudelleen.

Varsinaisten mallinnusohjelmien lisäksi kemistit käyttävät paljon tietokantoja, mitä ei kuitenkaan tässä selvityksessä kartoitettu tarkemmin.

Tekniikka on kemian tavoin mallinnuksen suhteen pääosin kypsä tiede, jossa tutkimuksen painopiste on osittain sovelluksissa, joten omien ohjelmien kehittämiseen ei aina tarvitse eikä kannata uhrata resursseja. Menetelmäkehitys on kuitenkin edelleen aktiivista, koska yhä mutkikkaampia ongelmia halutaan ratkoa numeerisesti. Erityisen laajoja ohjelmistoja on lujuuslaskennan, rakenneanalyysin ja virtauslaskennan tutkijoiden käytössä.

Joillakin tekniikan alueilla tietokoneiden kehitys on tehnyt laskennallisista menetelmistä käyttökelpoisen vaihtoehdon vasta viimeisen vuosikymmenen aikana. Tällaisissa tapauksissa valmiita ohjelmia ei välttämättä ole saatavissa.

Fyysikoilla on perinteisesti maine aktiivisina omien ohjelmien kirjoittajina, ja tämän kyselyn tulos vahvistaa käsitystä. Lisäksi fyysikot vaihtavat paljon ohjelmia keskenään, joten taulukossa mainittu valmisohjelmistojen 39 prosentin osuus ei koostu pelkästään kaupallisista ohjelmista. Fyysikot toimivat usein aloitteentekijöinä laskennallisten menetelmien käytössä myös muilla tieteenaloilla tuottamalla ohjelmia ja laskutekniikoita, joita voidaan soveltaa esimerkiksi kemian, biologian tai taloustieteen ongelmien ratkaisuun.

Mallinnusta harjoittavat matemaatikot keskittyvät paljolti kokonaan uusien menetelmien kehittämiseen tai vanhojen hiomiseen, joten valmisohjelmistoista ei läheskään aina ole hyötyä muuten kuin vertailutuloksia laskettaessa tai ideoiden testausvaiheessa.

Biotieteissä mallinnuksen soveltaminen erilaisiin ongelmiin yleistyy ripeästi. Tässä vaiheessa kehitystä valmiita ohjelmia ei kuitenkaan aina ole olemassa, joten omien koodien kirjoittaminen on usein välttämätöntä.

4.3 Yleisimmät ohjelmistot

Selvästi suosituimmaksi ohjelmistoksi erottautui alunperin numeeriseen lineaarialgebraan suunniteltu Matlab lisäpaketteineen. Vaikka Matlabilla on mahdollista ratkoa lukuisia valmiita tehtävätyyppejä, sen ilmeinen vahvuus on kuitenkin helppokäyttöisyys erilaisten kokeiluluontoisten mallien luomisessa. Matlabissa selviää usein yksinkertaisella funktiokutsulla tehtävistä, jotka korkean tason ohjelmointikielillä (Fortran, C) kirjoitetussa koodissa vaativat joko erillisen aliohjelmakirjaston käyttöä tai kymmenien rivien pituisia silmukkarakenteita.

Matlabin viimeisimmissä versioissa on kehitetty huomattavasti grafiikkaominaisuuksia, joten Matlabilla laskettuja tuloksia ei tarvitse siirtää visualisointia varteen toiseen ympäristöön.

Matlabin heikkous on sen hitaus. Kun mallien kokoa kasvatetaan realistisiin mittoihin, Matlab jää auttamatta jälkeen varsinaisilla ohjelmointikielillä kirjoitetuista koodeista.

Myös toiseksi useimmin mainittu ohjelmisto Mathematica on yleiskäyttöinen matemaattinen työkalu. Mathematican vahva puoli on sen kyky suorittaa symbolisia manipulaatioita. Ohjelmointityökaluna Mathematica on kehittyneempi ja monipuolisempi kuin Matlab, mutta samalla selvästi vaativampi. Useimmat mallintajat ovat ensisijaisesti oman sovellusalansa huippuosaajia eivätkä välttämättä ole perehtyneet ohjelmointiteknisiin hienouksiin, joten Mathematica voi tuntua hankalalta.

Ohjelmisto	*Sovellusala*	*Mainintoja*
Matlab	Numeriikka, lineaarialgebra	39 %
Mathematica	Matematiikka	15 %
MSI:n ohjelmat	Kemia	9 %
ANSYS	Rakenneanalyysi	7 %
Abaqus	Rakenneanalyysi	6 %
Gaussian	Kemia	6 %
Maple	Matematiikka	6 %
Phoenics	Virtauslaskenta	6 %
NAG	Numeriikka	5 %

Taulukko 4.2: Yleisimmät mallinnusohjelmistot.

Lyhenne MSI viittaa molekyylilaskennan ohjelmiin Cerius2, Insight II ja Quanta, jotka on tuonut markkinoille Molecular Simulations Inc.

ANSYS ja Abaqus ovat elementtimenetelmään perustuvia ohjelmia, jotka on alunperin suunniteltu rakenneanalyysin tehtäviin. Vähitellen niitä on kuitenkin kehitetty yhä monipuolisemmiksi, ja nykyään niillä pystytään käsittelemään muun muassa sähkömagneettisia kenttiä ja lämmösiirtymistä.

Gaussian on suosittu kemian ohjelmisto, jolla voi laskea erilaisia molekyylien ominaisuuksia. Maple puolestaan on yleiskäyttöinen matematiikan työkalu, joka suoriutuu niin symbolisesta ja numeerisesta laskennasta kuin grafiikan tuottamisestakin. Phoenics oli kyselyn suosituin virtauslaskentaohjelmisto, ja ainoa ohjelma käytetyimpien joukossa, jota ei ole asennettu CSC:n koneille.

NAG edustaa tässä listassa numeerisia aliohjelmakirjastoja. Todennäköisesti NAGin käyttö on ilmoitettua laajempaa, sillä omia ohjelmia kirjoittava tutkija ei välttämättä miellä käyttävänsä valmisohjelmistoa lisätessään Fortran-koodiin NAG-aliohjelmakutsun.

5 Mallinnusosaamisen opetuksesta Suomessa

5.1 Opetuksen tarjonta ja tarve

Suomalaisissa yliopistoissa on kyselyn tulosten perusteella sangen paljon mallinnusopetusta. Vastaajista 65 % prosenttia ilmoitti, että heidän ryhmänsä on vastannut jonkin opetusohjelmaan kuuluvan mallinnusta käsittelevän kurssin luennoinnista. Vastaavasti 42 % ryhmistä oli järjestänyt asiaan liittyvän seminaarin ja 22 % oli organisoinut mallinnusaiheisen kesäkoulun.

Huolimatta näennäisestä tarjonnan runsaudesta moni vastaaja kaipasi kommenteissaan enemmän mallinnuksen ja laskennallisten menetelmien opetusta.

Ristiriitaisen vaikutelman taustalla lienee mallinnusopetuksen hajaantuneisuus: yliopistoissa useat laitokset järjestävät oman tieteenalansa numeerisista menetelmistä omat kurssinsa. Tällöin tietysti opetuksesta vastaavat henkilöt ymmärtävät mallinnettavat ilmiöt hyvin ja osaavat valita kursseille sovelluksia silmällä pitäen oleellisimmat asiat. Tieteenalan kehityksen kannalta on hyvä asia, että myös sen käyttämästä matematiikasta pystyy luennoimaan joku alan oma edustaja.

Tällä käytännöllä on kuitenkin myös heikkoutensa. Se johtaa ainakin osittain päällekkäiseen opetukseen, kun samoja mallinnuksen ja numeriikan perustekniikoita käydään läpi monen laitoksen kursseilla. Toisaalta niillä laitoksilla, joilla ei ole omia mallinnuskursseja, opiskelijoilla on valittavana joko osallistuminen jonkin toisen laitoksen tai osaston kursseille tai ilmoittautuminen paikallisen matematiikan laitoksen mallinnusseminaariin. Molemmissa tapauksissa osallistumiskynnys voi olla korkea. Aktiivisimmat opiskelijat kuitenkin hakeutuvat päättäväisesti jopa naapuriyliopiston kursseille, kun haluavat lisätietoa.

Lisäksi oman tieteenalan sisällä järjestetty koulutus painottuu helposti menetelmien mekaaniseen soveltamiseen. Edistyneimpien mallinnusmenetelmien ymmärtäminen ja edelleen kehittäminen vaatii usein syvällistä teoreettista tietämystä. Tämän vuoksi ainakin joidenkin mallinnustutkimusta harjoittavien opiskelijoiden olisi saatava laajempaa matematiikan opetusta.

5.2 Opiskelijoiden valmiudet

Joissakin laboratorioissa oltiin tyytymättömiä opiskelijoiden matemaattisiin perusvalmiuksiin ja laskentatekniikoiden tuntemukseen. Esimerkkinä mainittakoon differentiaaliyhtälöt, jotka monella alalla ovat yleisin mallinnusmenetelmä. Niiden sujuva käyttöönotto ja numeeristen ratkaisumenetelmien ymmärtäminen edellyttävät vähintään lukion laajan matematiikan oppimäärän hyvää osaamista.

Yliopiston kursseilla joudutaan kuitenkin usein lähtemään liikkeelle niin alkeelliselta tasolta, että oleellista sisältöä joudutaan karsimaan. Tämä puolestaan näkyy mallinnusta soveltavissa laboratorioissa, joissa joudutaan täydentämään perusopetusta omilla kursseilla.

Teknillisissä korkeakouluissa opiskelijoiden edellytykset ryhtyä soveltamaan matemaattisia malleja ovat periaatteessa paremmat kuin perinteisissä monitieteellisissä yliopistoissa, sillä kaikki opiskelijat suorittavat useita matematiikan ja tietotekniikan kursseja. Lisäksi fysiikan perusteiden opiskelu tarjoaa valmiin esimerkin pitkälle kehitellystä matemaattisesta mallista, jonka avulla pystytään tarkasti kuvailemaan hyvinkin monimuotoisia ilmiöitä.

5.3 Mallinnusopetuksen järjestäminen

Eräs esille tullut ongelma on malliajattelun ja numeeristen menetelmien opettamisen sopivin ajankohta opinnoissa. Osa opiskelijoista osaa arvostaa teoreettisilta tuntuvia matematiikan kursseja vasta siinä vaiheessa, kun joutuu mahdollisesti itse soveltamaan laskennallisia menetelmiä tutkinnon loppuvaiheessa. Toisaalta taas opettajakunta toivoo, että perusasiat olisi omaksuttu ennen syventäviä opintoja, joissa olisi sitten mahdollista keskittyä oman alan erityiskysymyksiin ja tieteellisesti kiinnostavampiin ongelmiin.

Teknillisessä korkeakoulussa numeriikan alkeet on sisällytetty muuhun matematiikan perusopetukseen, jolloin opiskelijat tottuvat alusta asti ajatukseen, että tehtävät voi ratkaista myös numeerisesti.

Uutena suuntauksena laskennallisten menetelmien opetuksessa on eri alojen opiskelijoille yhteiseksi tarkoitettujen opintokokonaisuuksien kehittäminen. Tähän on ryhdytty ainakin Teknillisessä korkeakoulussa Otaniemessä ja Jyväskylän yliopistossa. Periaatteessa näissä molemmissa yritetään ainakin osittain kayttää hyväksi jo olemassa olevaa kurssitarjontaa tiivistämällä yhteistyötä eri laitosten välillä.

Teknillisen korkeakoulun Laskennallisen tieteen ja tekniikan (LTT) opintosuunta sisältää matemaattisen analyysin ja numeriikan lisäksi muun muassa neuraalilaskentaa, rinnakkaislaskentaa ja visualisointia. Kurssit yritetään jossain määrin räätälöidä siten, että mahdollisimman monen osaston opiskelijat pystyvät sujuvasti osallistumaan opetukseen. Vaikka ohjelmaan pyritään kahden vuoden perusopintojen jälkeen, opiskelijoita kannustetaan alusta pitäen tähtäämään jatkotutkinnon suorittamiseen. Opintosuunta on usean eri osaston ja laboratorion yhteishanke.

Jyväskylässä on jo vuoden verran toiminut CMCM-tutkimusyksikkö (Center for Mathematical and Computational Modeling), jonka tarkoituksena on siirtää mallinnus- ja laskentaosaamista matemaatikoilta ja tietojenkäsittelijöiltä edelleen yliopiston muiden laitosten opiskelijoille ja tutkijoille sekä myös teollisuuteen. Normaalien kurssien lisäksi CMCM järjestää seminaareja, joihin kutsutaan eri alojen huippuasiantuntijoita kertomaan mallien soveltamisesta.

6 CSC:n palvelut tutkijoille

Opetusministeriö (OPM) rahoittaa CSC:n palveluja keskitetysti, joten yliopistojen tutkijat voivat käyttää CSC:n asiantuntijapalveluja veloituksetta. CSC:n laskentaresursseja jaetaan tutkimusprojektien käyttöön tutkimuksen tieteellisten ansioiden perusteella. CSC:n resurssien käyttöä valvovat CSC:n hallitus sekä OPM:n nimittämä Tutkimuksen ja opetuksen tietotekniikan asiantuntijaryhmä.

6.1 Neuvontaa ja yhteistyötä

CSC avustaa tutkijoita matemaattisessa mallintamisessa, numeeristen menetelmien käytössä, ohjelmankehityksessä sekä tulosten visualisoinnissa ja analyysissä. CSC:n laitteistoilla on lisäksi Suomen laajin tieteellistekninen ohjelmisto- ja tietokantavalikoima.

Tutkija voi saada tukea CSC:n julkaisujen (www, lehdet, oppaat) sekä CSC:n järjestämien kurssien ja muiden tilaisuuksien kautta. Tutkijaa neuvotaan myös henkilökohtaisesti puhelimitse, sähköpostitse, asiakkaan luona tai CSC:ssä.

Sovellusalojen asiantuntijat koordinoivat tieteenalaansa liittyviä projekteja ja ylläpitävät CSC:n tietokoneilla sovellusohjelmistoja ja tietokantoja. Menetelmistä ja ohjelmistoista annetaan neuvontaa tietokoneympäristöstä riippumatta (Unix-tietokoneet, mikrotietokoneet). Lisäksi CSC järjestää vuosittain useita kymmeniä kursseja ja tilaisuuksia laskennallisesta tieteestä ja tekniikasta. Näihin tilaisuuksiin osallistuu noin tuhat tutkijaa ja opiskelijaa vuosittain.

CSC:n www-palvelujen osoite on

```
http://www.csc.fi
```

CSC:n eri sovellusalojen asiantuntijat osallistuvat laskennalliseen tieteen tutkimusprojekteihin tietotekniikan ja tieteellisen laskennan menetelmien tuntijoina. Asiantuntijoilla on tutkimustausta, mikä helpottaa keskustelua saman alan tutkijoiden kanssa. Tutkija voi näin keskittyä omaan erityisalaansa tietoteknisten tai numeeristen yksityiskohtien sijasta. Tällaisesta laajemmasta neuvonnasta ja yhteistyöstä sovitaan erikseen CSC:n ja tutkimusryhmän välillä.

CSC:n asiakkaan oppaassa [FHK00] on esitelty CSC:n tarjoamat palvelut. CSC:n asiakkaiden tekemästä tutkimuksesta saa lisätietoja raporteista *CSC Report on Scientific Computing 1997–1998* [Haa99] ja *Suuret laskennalliset haasteet Suomessa* [RK99].

6.2 Esimerkkejä yhteistyöstä

CSC on mukana useissa matemaattiseen mallintamiseen liittyvissä yhteistyöprojekteissa. Seuraavassa on lueteltu näistä muutamia. CSC on myös koordinoinut muun muassa Tekesin virtausdynamiikan teknologiaohjelmaa [Järr00].

DynAMo: ihmiskehon dynaaminen ja adaptiivinen mallinnus

Tämä on tutkimushanke SA:n MaDaMe-tutkimusohjelmassa. Tutkimuksessa ovat mukana TKK, TTKK ja CSC. Lisätietoja: `http://www.tut.fi/dynamo/`.

MIKSU: mikrosysteemien ja komponenttien suunnittelujärjestelmän kehittäminen

Tutkimushanke sisältyy Tekesin PRESTO-teknologiaohjelmaan. Mukana ovat Aplac Solutions, Nokia, TKK, Vaisala, VTI Hamlin ja CSC. Lisätietoja: `http://www.csc.fi/miksu/`.

ELMER-ohjelmiston kehittäminen

ELMER-ohjelmistoa kehitetään opetuksen, tutkimuksen ja tuotekehityksen apuvälineeksi. Kehitysprojekti on osa MIKSU-projektia. Lisätietoja: `http://www.csc.fi/elmer/`.

Piikiteen kasvatuksen mallinnus

Tutkimushanke pyrkii parantamaan Czochralski-menetelmällä kasvatettavien piikiteiden laatua. Mukana ovat Okmetic, TKK ja CSC.

CFD-OPT: virtauslaskentaan pohjautuva automaattinen muodon ja säädön optimointi

Tässä Tekes-rahoitteisessa hankkeessa ovat mukana Kemira, Process Flow, Valmet ja CSC.

TÄSMÄ: selvitys matemaattisen mallinnuksen käytöstä suomalaisissa yrityksissä

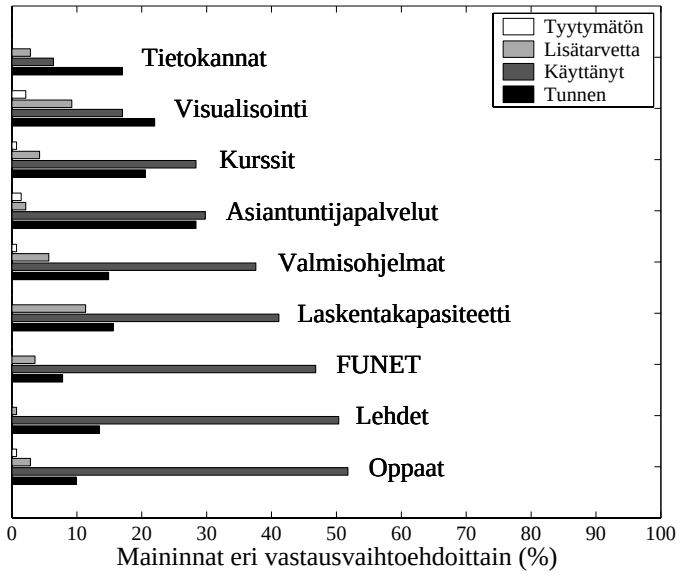
Tässä Tekes-rahoitteisessa hankkeessa ovat mukana Lappeenrannan teknillinen korkeakoulu, Jyväskylän yliopisto ja CSC.

MACSINET: eurooppalainen matemaattisen mallinnuksen verkosto

Tässä EU-rahoitteisessa hankkeessa on mukana 20 eurooppalaista matemaattisen mallinnuksen keskusta ja noin 100 eurooppalaista jäsenorganisaatiota.

6.3 Kyselyn tuloksia CSC:n palvelujen osalta

Kyselyssä halusimme myös selvittää, kuinka tunnettuja CSC:n palvelut ovat ja millaisia kokemuksia tutkijoilla on niiden käytöstä. Vastaajia pyydettiin arvioimaan jokaista palvelumuotoa neliportaisella asteikolla (tunnen palvelun / olen käyttänyt palvelua / minulla on lisätarvetta palvelulle / olen tyytymätön palveluun). Jos vastaaja oli jonkin palvelun kohdalla valinnut näistä useamman kuin yhden, tuloksiin otettiin mukaan lähimpänä listan loppupäätä oleva vaihtoehto. Niinpä todellinen palveluita käyttäneiden lukumäärä on kolmen viimeisen vaihtoehdon summa. Tulokset on esitetty kuvassa 6.1.



Kuva 6.1: Tutkijoiden kokemuksia CSC:n palveluista

Suosituimpia CSC:n palvelumuotoja ovat tämän kyselyn perusteella laskentakapasiteetin lisäksi oppaat ja lehdet sekä Funet-verkkopalvelu, joita ilmoittaa käyttävänsä yli puolet yliopistoissa mallinnustyötä tekevistä tutkijoista. Funetin kohdalla kyse on rankasta aliarvioinnista, sillä todellisuudessa Funet vastaa kaikkien yliopistojen verkkoyhteyksistä. Toisaalta yksittäisen tutkijan kannalta pääasia lienee moitteettomasti toimivat verkkoyhteydet, ei niinkään yhteyksistä huolehtivan organisaation nimi.

Tehokkaan laskentakapasiteetin kohdalla oli myös eniten lisätarvetta, mikä täsmää aiemmin esitettyjen tulosten kanssa (katso kappaletta 3.9). Viidesosa CSC:n koneilla ohjelmiaan ajavista tutkijoista toivoi nopeampia tai isommalla muistilla varustettuja koneita.

Toinen yleinen ongelmakohta mallinnustyön tekijöille on ollut tulosten visualisointi. Vaikka vastanneista vain 28 % oli hyödyntänyt CSC:n visualisointiasiantuntijoita, näistä edelleen kolmasosa kaipasi enemmän visualisointiapua tai oli peräti tyytymätön visualisointipalveluihin. Noin puolet tutkijoista ei tiennyt lainkaan, että CSC ylipäänsä tarjoaa tukea visualisointitehtäviin.

Selvästi heikoimmin tunnettu palvelumuoto oli CSC:n ylläpitämät tietokannat, joita oli käyttänyt ainoastaan kymmenesosa vastaajista. Tämä johtuu luonnollisesti pääasiassa siitä, että tietokannoista on ylipäänsä hyötyä vain niille tutkijoille, joiden alalta tietokantoihin on talletettu aineistoa.

Eri tieteenalojen edustajat hyödynsivät CSC:n palveluja suurin piirtein tasapuolisesti. Merkittävimmän poikkeuksen muodostivat taloustieteilijät, joista vain viidesosa kertoi ylipäänsä tuntevansa CSC:n tarjoamat mahdollisuudet. CSC:n kannalta näkyvin asiakaskunta koostuu kemisteistä ja fyysikoista, jotka tuntevat eri palvelumuodot ja käyttävät niitä aktiivisesti hyväkseen.

7 Toimenpide-ehdotukset

7.1 Yliopistojen osaamisen kehittäminen

Monet mallinnustutkimusta harjoittavat ryhmät ovat kooltaan pieniä (2–3 henkeä), ja tutkijat joutuvat käyttämään aikaansa esimerkiksi tietokoneiden ylläpitoon. Tutkimustyön tehostamiseksi on järjestettävä yhteistyötä eri ryhmien välillä.

Erityisesti on rohkaistava poikkitieteellisiä hankkeita ja matemaattisen tai tilastotieteellisen koulutuksen saaneiden ihmisten siirtymistä muille aloille soveltamaan tietojaan. Yliopistojen on avustettava pieniä ryhmiä paikallisten tietokonelaitteistojen ylläpidossa. Suurissa ryhmissä on usein palkattu erillinen vastuuhenkilö tähän tehtävään.

Mallinnustutkimuksen korkean tason takaamiseksi laboratorioiden tulee mahdollisuuksien mukaan värvätä Suomeen vierailevia tutkijoita kansainvälisistä huippuyksiköistä. Vastaavasti suomalaisia tutkijoita on kannustettava siirtymään uran eri vaiheissa joksikin aikaa hyvätasoisiin ulkomaisiin tutkimusryhmiin. Tutkimusten tulokset pitää pyrkiä saamaan arvovaltaisiin tieteellisiin julkaisuihin.

Vaikka laskentamenetelmien kehittyminen kasvattaa jatkuvasti tuotekehitykseen ja teollisuussovelluksiin kelpaavien projektien määrää, yliopistojen on kannettava vastuu perustutkimuksesta ja opetuksesta. Riittävällä akateemisella rahoituksella varmistetaan tutkimuksen pitkäjänteisyys.

7.2 Uusien menetelmien käyttö

Tutkijoiden pitää pyrkiä soveltamaan mahdollisimman luotettavia ja tehokkaita laskentamenetelmiä. Epäluotettavien menetelmien käyttö voi tuottaa virheellisiä tuloksia, joita ei heti huomata virheellisiksi. Tulosten oikeellisuuden varmistamiseen onkin syytä panostaa. Huonojen algoritmien käyttö on myös kalliiden laskentaresurssien tuhlausta ja siten hidastaa muiden tutkijoiden työtä.

Tulevaisuudessa yhä suurempi osa haastavien ongelmien ratkaisuun tarkoitetuista ohjelmista joudutaan rinnakkaistamaan. Tämä vaatii monenlaista osaamista: rinnakkaisohjelmoinnin lisäksi täytyy tuntea ratkaisumenetelmien toiminta sekä tutkittavan mallin fysikaalinen tausta. Ratkaisumenetelmä voi-

daan joutua toteuttamaan jopa kokonaan uudestaan, jotta se saadaan rinnakkaistumaan.

7.3 Mallinnuksen opetuksen kehittäminen

Mallinnusmenetelmien opetusta yliopistoissa on järkevöitettävä. Eri laitosten päällekkäistä opetusta voidaan osittain vähentää esittelemällä matemaattiseen mallinnuksen liittyvät perusasiat yhteisillä kursseilla. Samalla opetus tuodaan myös niiden opiskelijoiden ulottuville, joiden oma laitos ei ole aiemmin järjestänyt lainkaan aiheeseen liittyviä kursseja. Toisaalta opetuksen järjestelyissä on otettava huomioon eri alojen opiskelijoiden erilaiset pohjatiedot ja alat, joilla matemaattinen mallinnus edustaa uutta tutkimustapaa. Osa soveltavien alojen opiskelijoista tarvitsee laajan teoreettisen pohjakoulutuksen.

Sovellusaloittain tulisi selvittää tarpeet suomenkielisille perusteoksille matemaattisesta mallintamisesta ja numeerisista menetelmistä. Olemassaolevaa opetusmateriaalia kannattaa tarjota oman laitoksen ja yliopiston ulkopuolelle, sillä kysyntää on. Myös verkkopohjaista opetusmateriaalin jakelua ja tuotantoa voi hyödyntää.

7.4 CSC:n toiminnan kehittäminen

Tällä hetkellä CSC pystyy tukemaan melko hyvin tärkeimpiä mallinnustekniikoita soveltavia tutkijoita. Laskennallisten menetelmien yleistyminen biotieteissä, lääketieteessä ja taloustieteessä merkitsee, että CSC:n on lisättävä asiantuntemustaan näille aloille tyypillisissä menetelmissä ja huolehdittava, että tutkijat kaikissa maamme yliopistoissa saavat tietää CSC:n tarjoamista palveluista.

Kyselyn perusteella osalle tutkijoista on hyvin tärkeätä saada käyttöönsä suuri laskentakapasiteetti. Tästä asiasta huolehtiminen kuuluu CSC:n perustehtäviin. Vuoden 2000 keväällä toteutettu IBM SP -rinnakkaiskoneen hankinta myöhemmin tulevine laajennuksineen takaa suomalaisille tutkijoille ainakin muutamaksi vuodeksi eurooppalaisittain erittäin merkittävän laskentatehon. CSC:n tulee seurata aktiivisesti tietokoneteknologian kehitystä ja valmistautua ajoissa konekannan uudistuksiin. Hyvä laitteisto on myös merkittävä tekijä suomalaisten yliopistojen rekrytoidessa ulkomaisia tutkijoita.

Tietokoneiden tehokas käyttö edellyttää nopeiden ja luotettavien laskentamenetelmien soveltamista. CSC:n tulee kertoa asiakkailleen tällaisista menetelmistä ja opastaa niiden käytössä. Varsinainen numeriikan ja ohjelmoinnin perusteiden opetus on luonnollisesti yliopistojen tehtävä.

CSC tukee erityisesti omilla koneillaan tapahtuvaa laskentaa järjestämällä koulutusta rinnakkaislaskennasta, valmisohjelmistojen käytöstä, tietokannoista ja ohjelmointitekniikasta.

Riittävän osaamistason ylläpitämiseksi CSC:n asiantuntijoiden pitää osallistua vaativiin tutkimusprojekteihin.

Monet tutkijat kaipaavat enemmän apua tulosten visualisointiin. CSC:n on tarjottava aktiivisesti visualisointipalveluitaan tutkijoille ja selvitettävä minkälaisiin tehtäviin apua tarvitaan.

7.5 CSC:n rooli yhteistyön järjestelijänä

Opetusministeriön alaisena puoleettomana asiantuntijaorganisaationa CSC:n tulee edistää suomalaisissa yliopistoissa toimivien tutkimusryhmien yhteistyötä. Näin helpotetaan ryhmien pienuudesta johtuvia ongelmia.

Lisäksi CSC:n tulee edistää mallinnustietämyksen siirtymistä yliopistoista yritysmaailmaan järjestämällä sopivia seminaareja ja koulutustilaisuuksia. Tätä toimintaa varten CSC:n on pyrittävä aktiivisempaan vuorovaikutukseen yliopistojen yhteyteen perustettujen mallinnusta edistävien organisaatioiden kanssa ja osallistuttava mahdollisuuksien mukaan myös itse yritysten ja yliopistojen laitosten kanssa tehtävään tutkimustoimintaan.

8 Matemaattisen mallinnuksen yhteistyötä edistäviä organisaatioita ja tutkimuskonsortioita

8.1 Lisää yhteistyötä mallintamisessa

Matemaattisen mallintamisen hyväksikäyttö on merkittävästi lisääntynyt tieteessä, tekniikassa ja taloudessa [HKP00, RK99, HJKR00]. Käyttöä ovat edistäneet yliopistojen yhteyteen perustetut poikkitieteelliset tutkimuskonsortiot, matemaattisen mallintamisen verkostot, Suomen Akatemian huippuyksikkö- ja tutkijakoulujärjestelmät sekä Akatemian ja Tekesin tutkimus- ja teknologiaohjelmat.

Matemaattisten menetelmien käyttö eri toimialueilla on lisännyt yliopistojen, tutkimuslaitosten ja yritysten välistä yhteistyötä. Yhteistyö on tapahtunut kansallisella ja kansainvälisellä tasolla ja sillä on saavutettu muun muassa kansallisten ja kansainvälisten yhteyksien kehittymistä, osapuolien osaamisen kasvua sekä koulutetun työvoiman saannin osittaista helpottumista (tutkijavaihto).

Alla on nostettu esille kaksi Suomessa toimivaa mallinnusta eri tieteen alojen välillä edistävää keskusta. Lisäksi esittelemme Suomen Akatemian vuonna 2000 käynnistämän MaDaMe-tutkimusohjelman, matemaattista mallinnusta hyväksi käyttävät Suomen Akatemian huippuyksiköt sekä Euroopan Unionin rahoittaman matemaattisen mallinnuksen verkoston.

8.2 Rolf Nevanlinna -instituutti

Rolf Nevanlinna -instituutti on Helsingin yliopiston yhteydessä toimiva kansallinen matematiikan, tietojenkäsittelyn ja tilastotieteen tutkimuskeskus. Instituutin tutkimuksen painopistealueita ovat muun muassa informaatioteknologian matemaattiset menetelmät, laskennalliset algoritmit data-analyysissä, sähkömagneettisten kenttien matemaattinen teoria ja sovellukset sekä biometria.

Instituutin keskeisiin tehtäviin kuuluu tohtorien kouluttaminen. Instituutti

kouluttaa muun muassa kaikki Helsingin yliopiston biometriasta valmistuvat tohtorit.

Helsingin yliopiston sisällä instituutti edistää yhteistyötä matemaatikkojen, tietojenkäsittelijöiden, tilastotieteilijöiden sekä muiden tieteen alojen harjoittajien välillä. Kansallisella tasolla instituutilla on laaja yhteistyöverkosto muiden suomalaisten yliopistojen, tutkimuslaitosten ja yritysten kanssa.

Rolf Nevanlinna -instituutista löytyy lisätietoja www-osoitteesta

`http://www.rni.helsinki.fi/`

8.3 CMCM — Center for Mathematical and Computational Modeling

CMCM on monen tieteenalan keskittymä Jyväskylän yliopistossa. Keskuksen tehtävänä on edistää yhteistyötä niiden yliopiston tutkijoiden välillä, jotka työssään hyödyntävät matemaattista mallintamista ja laskennallisia menetelmiä.

Keskuksen edustamia tieteen aloja ovat muun muassa matematiikka, matemaattinen informaatioteknologia, tilastotiede, kemia, fysiikka sekä biologia ja ympäristötieteet. Keskuksessa yhdistyy matemaattisten ja laskennallisten menetelmien tietämys sovellusalakohtaiseen osaamiseen. Opiskelijoille keskus tarjoaa eri tieteen alojen kursseja, joissa voi painottaa matemaattisia menetelmiä.

Keskuksen www-sivut löytyvät osoitteesta

`http://www.math.jyu.fi/research/cmcm/`

Sivuston kautta löytyy myös selvitys matemaattisesta mallinnuksesta Jyväskylän yliopistossa ja Jyvässeudun yrityksissä. Www-osoite on

`http://www.math.jyu.fi/research/cmcm/selvitys/ensim6b.html`

8.4 Suomen Akatemian MaDaMe-tutkimusohjelma

Suomen Akatemia on käynnistänyt vuosiksi 2000–2003 MaDaMe-tutkimusohjelman, jonka eräs keskeisistä tavoitteista on edistää matematiikan, tietojenkäsittelyn ja tilastotieteen aloilla tapahtuvaa yhteistyötä. Alojen kehittyvää perustietämystä tullaan hyödyntämään muun muassa lääketieteessä, biolääketieteessä, ekologiassa, metsäntutkimuksessa, avaruusfysiikassa, geofysiikassa, bioprosessitekniikassa, prosessitekniikassa, taloustieteissä ja yhteiskuntatieteissä.

Tutkimusohjelma koostuu seitsemästä konsortiopohjaisesta tutkimushankkeesta ja seitsemästä yksittäisestä tutkimushankkeesta. Tutkimusohjelmassa tutkimushankkeita on pyritty luomaan nykyisten tieteenalojen rajapinnoille ja näin edistämään tieteiden välistä yhteistyötä.

Tutkimusohjelma pyrkii tukemaan myös kansainvälistä verkottumista. Ohjelman tarkoituksena on luoda kansainvälisiä yhteistyömahdollisuuksia ja siten edistää myös hankkeiden jatkorahoituksen saamista. Erilaisia rahoitus- ja yhteistyömahdollisuuksia tarjoavat esimerkiksi Euroopan tiedesäätiö ESF, European Cooperation in the Field of Scientific and Technical Research COST ja EU:n puiteohjelmat.

Lisätietoja MaDaMe-tutkimusohjelmasta löytyy www-osoitteesta

`http://www.utu.fi/ml/matlts/MaDaMe/indexfin.html`

8.5 Matemaattista mallinnusta hyödyntävät huippuyksiköt

8.5.1 Laskennallisen materiaalifysiikan tutkimusryhmä COMP

Huippuyksikön tutkimusalue on laskennallinen ja teoreettinen materiaalifysiikka. Yksikössä tutkitaan erilaisten materiaalien fysikaalisia ja kemiallisia ominaisuuksia matemaattisten mallien ja tehokkaiden tietokoneiden avulla. Tutkimus kohdistuu materiaalien sähköisten, optisten ja mekaanisten ominaisuuksien lisäksi niiden prosessointiin ja kokeellisen karakterisoinnin tulkintaan. Yhtenä tavoitteena on selvittää mikroskooppisten, atomitason ilmiöiden ja materiaalien makroskooppisten ominaisuuksien välisiä yhteyksiä. Tutkimus kohdistuu myös suurten, monimutkaisten järjestelmien epälineaarisuudesta aiheutuvaan erikoiseen käyttäytymiseen, erityisesti tietokonesimuloinnin keinoin.

Lisätietoja huippuyksikön toiminnasta löytyy osoitteesta

`http://www.fyslab.hut.fi/`

8.5.2 Laskennallisen tieteen ja tekniikan tutkimuskeskus

Huippuyksikkö keskittyy laskennallisen tieteen ja tekniikan tutkimukseen, käsittäen kompleksisten fysikaalisten, teknisten ja kognitiivisten prosessien ja järjestelmien mallinnuksen, analysoinnin ja visualisoinnin. Lisäksi yksikössä tehdään laskenta-algoritmien, graafisen visualisoinnin ja animaation sekä rinnakkaislaskennan menetelmäkehitystä moniin informaatioteknologisiin sovelluksiin. Yksikkö tekee tutkimusta kolmella toisiaan läheisesti tukevalla alalla, joita ovat laskennallinen materiaalitutkimus, laskennallisen informaatiotekniikka sekä kognitiivinen tiede ja teknologia.

Lisätietoja huippuyksikön toiminnasta löytyy osoitteesta

`http://www.lce.hut.fi/`

8.5.3 Metsäekologian ja metsänhoidon tutkimusyksikkö

Huippuksikön tavoitteena on syventää pohjoisen havumetsävyöhykkeen metsien ekologista tutkimusta ja parantaa valmiuksia hoitaa näitä metsiä kestävän metsätalouden periaatteita noudattaen. Tutkimus on monitieteistä, ja se

yhdistää perustutkimusta ja soveltavaa tutkimusta metsänhoitomenetelmien kehittämiseksi metsätalouden tarpeisiin.

Yksikön tutkimusryhmä ”Pohjoisten havumetsäekosysteemien toiminta- ja rakennedynamiikka sekä kestävä hoito ja hyväksikäyttö muuttuvassa ilmastossa” tutkii, miten metsäpuut sopeutuvat fysiologisesti ja ekologisesti muuttuvaan ilmastoon ja kohoavaan hiilidioksidipitoisuuteen. Tutkimusta tehdään sekä kokeellisesti että simulointimalleja hyväksi käyttäen. Mallit yhdistävät tutkimusryhmien tutkimusta ja tarjoavat työkaluja tutkia, miten metsiä tulisi hoitaa muuttuvissa ilmasto-oloissa kestävän metsätalouden periaatteita noudattaen.

Lisätietoja huippuyksikön toiminnasta löytyy osoitteesta

`http://www.joensuu.fi/forestcentre/`

8.5.4 Neuroverkkojen tutkimusyksikkö

Huippuyksikön keskeisenä tutkimusaiheena ovat yksikössä kehitetyt neuroverkkomenetelmät. Itseorganisoivalla kartalla on lukuisia sovelluksia muun muassa dokumenttien ja kuvien analyysissä, prosessitekniikassa, sähkötekniikassa, kemiassa, lääketieteessä, taloustieteissä ja lingvistiikassa. Toisen laajan tutkimusaiheen muodostavat uudet signaalinkäsittelymenetelmät, etenkin riippumattomien komponenttien analyysi, ja näiden sovellukset tietoliikenteessä, lääketieteessä ja kuvien käsittelyssä. Yksikössä kehitettyjä informaationkäsittelyn menetelmiä käytetään kotimaisessa teollisuudessa.

Lisätietoja huippuyksikön toiminnasta löytyy osoitteesta

`http://www.cis.hut.fi/`

8.5.5 Prosessikemian tutkimusryhmä

Huippuyksikkö muodostuu neljästä Åbo Akademin kemiallis-teknillisen tiedekunnan tutkimusryhmästä, joita ovat Pulp and Paper Chemistry, Process Analytical Chemistry, Kinetics and Catalysis ja Combustion and Materials Chemistry. Tutkimusryhmät tutkivat fysikaalis-kemiallisia prosesseja monimutkaisissa teollisuusympäristöissä. Tavoitteena on löytää uusia ratkaisuja teollisiin prosesseihin ja tuotteisiin.

Yksikön lähestymistavan, molekyyliprosessitekniikan avulla voidaan tunnistaa ja mallintaa kompleksisten heterogeenisten teollisten prosessien alkeisreaktioita ja vuorovaikutusta. Yksikkö tutkii teollisten prosessien kemiallisia ilmiöitä ja mekanismeja molekyylitasolla ja kehittää fysikaalis-kemiallisten prosessielementtien perusteelliselle ymmärtämiselle pohjautuvia kehittyneitä prosessimalleja. Lisäksi tavoitteena on kehittää teollisiin tuotteisiin sopivia molekyylirakenteita sekä tunnistaa ja karakterisoida teollisten prosessien tuottamien päästöjen ympäristöön vaikuttavia komponentteja.

Lisätietoja huippuyksikön toiminnasta löytyy osoitteesta

`http://www.abo.fi/instut/pcg/`

8.5.6 Signaalinkäsittelyn tutkimusryhmä

Signaalinkäsittelyn huippuyksikkö tekee tutkimusta epälineaarisen signaalin- ja kuvankäsittelyn aloilla. Yksikön tutkimus koostuu seuraavista tutkimushankkeista: datan pakkaustekniikat, erityisesti liittyen puheen- ja äänenkäsittelyyn, sisällön ymmärtämiseen perustuva informaation indeksointi ja haku, digitaaliset suodattimet ja suodatinpankit, spektri- ja algebralliset menetelmät signaalinkäsittelyssä sekä lääketieteellinen signaalinkäsittely.

Ryhmän tutkimustuloksilla on merkitystä telekommunikaation ja langattoman tiedonsiirron, multimedian ja puheen-, äänen-, kuvan- sekä videokuvan käsittelyn ja lääketieteellisten signaalien ja kuvien digitaalisen käsittelyn aloilla. Käytännön sovelluksista voidaan mainita erilaiset kompressiotekniikat, jotka mahdollistavat suurten tietomäärien siirron digitaalisissa verkoissa, digitaalinen radio ja TV, digitaaliset kirjastot, puhetta ymmärtävä matkapuhelin sekä EEG-signaalin automaattinen analysointi.

Lisätietoja huippuyksikön toiminnasta löytyy osoitteesta

`http://sigwww.cs.tut.fi/`

8.6 Mathematics, Computing and Simulation for Industry

Mathematics, Computing and Simulation for Industry (MACSINET) on Euroopan unionin rahoittama yhteistyöverkosto, joka pyrkii lisäämään yliopistojen ja yritysten välistä vuorovaikutusta

- tarjoamalla matemaattisten ja laskennallisten menetelmien osaamista (etenkin P&K-)yritysten käyttöön
- kasvattamalla yliopistojen tietämystä yritysten mallinnustarpeista.

Verkostossa tällä hetkellä mukana olevien eurooppalaisten yliopistojen ja yritysten lukumäärä on noin 100. Verkosto toimii kansallisten solmupisteiden kautta. Suomen solmupisteenä toimii Jyväskylän yliopiston tietotekniikan laitos.

MACSINET-verkoston toiminnasta löytyy lisätietoja www-osoitteesta

`http://www.macsinet.org/`

9 Kansainvälisiä yhteyksiä

Seuraavaan listaan on koottu ulkomaisia yhteisöjä ja tutkimusinstituutteja, joiden toiminnassa matemaattisella mallinnuksella ja laskennallisilla menetelmillä on keskeinen rooli. Lista ei ole kattava, mutta pyrkii tuomaan esille sekä eurooppalaisia että amerikkalaisia keskeisiä alan toimijoita.

9.1 Matemaattiset yhteisöt

- American Mathematical Society (AMS), `http://www.ams.org/`
- European Community on Computational Methods in Applied Sciences (ECCOMAS), `http://www.cimne.upc.es/eccomas/`
- European Consortium for Mathematics in Industry (ECMI), `http://www.ecmi.dk/`
- International Council for Industrial and Applied Mathematics (ICIAM), `http://www.iciam.org/iciamHome/iciamHome_tf.html`
- Mathematics, Computing and Simulation for Industry (MACSINET), `http://www.macsinet.org/`
- Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), `http://www.siam.org/`

9.2 Tutkimuskeskukset

- Center of Advanced European Studies and Research (Caesar), Bonn, `http://www.caesar.de/`
- Centre for Research on Computation and its Applications (CERCA), Montreal, `http://www.cerca.umontreal.ca/`
- Fraunhofer Institute for Industrial Mathematics (ITWM), Kaiserslautern, `http://www.itwm.uni-kl.de/`
- Institute for Mathematics and its Applications (IMA), Minneapolis, `http://www.ima.umn.edu/`

- Interdisciplinary Center for Scientific Computing (IWR), Heidelberg, http://www.iwr.uni-heidelberg.de/
- Mathematics of Information Technology and Complex Systems (MITACS), Toronto, http://www.mitacs.math.ca/
- Milan Research Center for Industrial and Applied Mathematics (MIRIAM), http://sauron.mat.unimi.it/~miriam/
- Pacific Institute for the Mathematical Sciences (PIMS), Vancouver, http://www.pims.math.ca/

Liitteet

A Kysely matemaattisesta mallinnuksesta

Pyrimme kartoittamaan kesän 2000 aikana matemaattisten mallinnusmenetelmien käyttöä Suomen yliopistoissa. Matemaattisilla mallinnusmenetelmillä tarkoitimme esimerkiksi differentiaaliyhtälöitä, simulaatioita, diskreettejä malleja, optimointia — ylipäänsä tilanteita, joissa reaalimaailman ilmiöitä ja vuorovaikutuksia tutkitaan rakentamalla niistä matematiikan avulla idealisoitu kuva.

Seuraavassa on kyselylomakkeessa esitetyt kysymykset. Joistakin aiheista pyydettiin myös laajempia lisätietoja.

1. Taustaa

1. Minkä alan ongelmiin olette soveltaneet mallinnusta? Vastaus voi olla yleinen tai yksityiskohtainen. Esimerkkejä: matemaattinen lujuuslaskenta / numeeriset lukkiutumisilmiöt ohuiden kuorirakenteiden muodonmuutosten elementtianalyysissa.
2. Mitä mallinnustekniikoita olette projekteissanne käyttäneet? Esimerkkejä: differentiaaliyhtälöt, simuloitu jäähdytys, aikasarjat, MCMC…
3. Etsittekö malleihinne pääasiassa numeerisia vai analyyttisiä ratkaisuja?
4. Kuinka monta henkilöä mallinnusprojekteihinne osallistuu?
5. Missä suhteessa tutkimuksenne jakautuu akateemiseen perustutkimukseen ja ulkopuolisille tahoille tehtävään tilaustutkimukseen?

   Akateeminen tutkimus _____ %

   Tilaustutkimus_____ %
6. Tutkimushankkeiden tyypilliset kestoajat?

2. Tutkimuksen uutuusarvo mallinnuksen kannalta

7. ☐ Kehitämme kokonaan uusia matemaattisia malleja.

8. ☐ Kehitämme uusia (numeerisia tai analyyttisiä) ratkaisumenetelmiä olemassaoleviin malleihin.
9. ☐ Sovellamme tunnettuja menetelmiä täysin uuteen ongelmatyyppiin, johon niitä ei ole aiemmin sovellettu.
10. ☐ Ratkomme monifysikaalisia malleja, joissa on yhdistetty samaan tehtävään useampia ilmiöitä, joista jokainen yksinään osataan ratkaista tunnetuilla menetelmillä.
11. ☐ Kehitämme uusia algoritmeja vanhojen ratkaisumenetelmien tehostamiseksi (esimerkiksi ohjelmakoodin rinnakkaistaminen).
12. ☐ Tuotamme omia tietokoneohjelmia, joihin on koottu alan kirjallisuudessa esitettyjä ratkaisumenetelmiä.
13. ☐ Sovellamme enimmäkseen tunnettuja menetelmiä käytännön ongelmiin. Tehtävissä muuttuvat lähinnä parametrit/geometria/alkuarvot tms.

3. Ohjelmistot ja rinnakkaislaskenta

14. Jos tehtävienne ratkaisu vaatii tietokoneilla tapahtuvaa laskentaa, käytättekö pääasiassa:

    ☐ ryhmässä itse kirjoitettuja ohjelmia

    ☐ valmiita ohjelmistoja (muiden tutkijoiden kirjoittamia tai kaupallisia)
15. Mitä valmiita ohjelmia olette käyttäneet mallinnusprojekteissanne?
16. Missä muodossa yliopistonne tarjoaa ryhmällenne atk-palveluiden tukea?

    (a) ☐ Mikrotietokoneiden/työasemien hankinta
    (b) ☐ Mikrotietokoneiden/työasemien ylläpito
    (c) ☐ Ohjelmistotuki
    (d) ☐ Neuvontapalvelut
    (e) ☐ Suuri laskentakapasiteetti vaativiin tehtäviin
17. Rinnakkaislaskenta: oletteko

    ☐ rinnakkaistaneet omia ohjelmianne

    ☐ käyttäneet valmiita rinnakkaisohjelmia?
18. Mitä rinnakkaisohjelmointityökaluja olette käyttäneet?

    (a) ☐ MPI
    (b) ☐ PVM
    (c) ☐ OpenMP
    (d) ☐ HPF
    (e) ☐ SHMEM
    (f) ☐ Säikeet (threads)
19. Millä laitteistoilla olette ajaneet rinnakkaisohjelmianne?

4. Ulkopuolisen tuen tarve mallinnuksessa

Missä mallinnusprojektin vaiheissa tarvitsette/olette tarvinneet oman tutkimusryhmän ulkopuolista asiantuntija-apua?

20. ☐ Mallinnusmenetelmän valinta
21. ☐ Mallin rakentaminen
22. ☐ Mallin teoreettinen analysointi
23. ☐ Numeeriset ratkaisumenetelmät
24. ☐ Ohjelmointitekniset asiat (esimerkiksi rinnakkaistaminen, ohjelmointikielet)
25. ☐ Aliohjelmakirjastojen käyttö (NAG, IMSL)
26. ☐ Matemaattiset ohjelmistot (Mathematica, Matlab)
27. ☐ Laskentakapasiteetti
28. ☐ Tulosten tallennuskapasiteetti

    Tulosten analysointi:
29. ☐ Tilastolliset menetelmät
30. ☐ Suurten datamäärien käsittely
31. ☐ Tulosten luotettavuuden arviointi
32. ☐ Visualisointi

5. Mallinnusosaamisen leviäminen

Mitä kautta olette hankkineet oman ryhmän ulkopuolista mallinnukseen liittyvää tietämystä? Merkitkää mielestänne tärkeimmät lähteet 1:llä, toissijaiset lähteet 2:lla ja oman ryhmänne mallinnusosaamisen kannalta vähiten merkitsevät lähteet 3:lla.

33. ☐ Yliopistojen koulutusohjelmaan kuuluvat kurssit
34. ☐ Muut akateemiset kurssit (esimerkiksi kesäkoulut)
35. ☐ Kaupalliset kurssit (esimerkiksi ohjelmistotalojen kurssit)
36. ☐ Oman yliopiston muut laboratoriot
37. ☐ Muut kotimaiset tutkimusryhmät
38. ☐ Ulkomaiset tutkimusryhmät
39. ☐ Kirjallisuus, tieteelliset aikakausjulkaisut
40. ☐ Konferenssit
41. ☐ Ryhmään palkatut oman tieteenalan ulkopuoliset mallinnuksen asiantuntijat.
42. ☐ Muualta:

Minkä tyyppistä mallinnusmenetelmien opetusta ryhmänne järjestää ?

43. ☐ Yliopiston opetusohjelmaan kuuluvat kurssit
44. ☐ Seminaarit/workshopit
45. ☐ Vierailuluennot muihin tiedekuntiin/yliopistoihiin
46. ☐ Kesäkoulut

Opetetaanko yliopistossanne riittävästi mallinnusta? Jos ei, niin mitä asioita pitäisi opettaa enemmän: mallien teoreettista analyysia, käytännön mallinnustekniikoita, numeerisia ratkaisumenetelmiä. . . ?

6. CSC:n palvelut

Mitä CSC:n palveluita tunnette? Mitä olette käyttänyt? Mille palveluille ryhmässänne olisi lisätarvetta? Oletteko tyytymätön johonkin CSC:n tarjoamaan palveluun?

	Tunnen	Käyttänyt	Lisätarvetta	Tyytymätön
Asiantuntijapalvelut	☐	☐	☐	☐
Kurssit	☐	☐	☐	☐
Laskentakapasiteetti	☐	☐	☐	☐
Valmisohjelmat	☐	☐	☐	☐
Visualisointi	☐	☐	☐	☐
Tietokannat	☐	☐	☐	☐
Oppaat	☐	☐	☐	☐
Lehdet	☐	☐	☐	☐
Funet-verkkopalvelut (internet-yhteydet)	☐	☐	☐	☐

B Kyselyyn vastanneet yksiköt

Seuraavat yliopistojen laitokset ja laboratoriot vastasivat kyselyyn. Suluissa oleva numero yksikön nimen perässä kertoo, kuinka monta lomaketta kyseisestä yksiköstä palautettiin.

Jyväskylän yliopisto

- Bio- ja ympäristötieteiden laitos
- Tilastotieteen laitos
- Tietotekniikan laitos (5)
- Kemian laitos

Oulun yliopisto

- Biologian laitos (2)
- Tähtitiede / Fysikaalisten tieteiden laitos (2)
- Geotieteiden laitos
- Kemian laitos
- Konetekniikan osasto
- Prosessimetallurgian laboratorio
- Systeemitekniikan laboratorio
- Matematiikan jaos / Sähkötekniikan osasto
- Tietoliikennelaboratorio
- Taloustieteen tiedekunta

Joensuun yliopisto

- Kemian laitos
- Matematiikan laitos (2)

Kuopion yliopisto

- Sovelletun fysiikan laitos
- Tietojenkäsittelytieteen ja sovelletun matematiikan laitos
- AIV-Instituutti

Tampereen teknillinen korkeakoulu

- Automaatio- ja säätötekniikan laitos (2)
- Ragnar Granit Instituutti
- Elektroniikan laitos
- Hydrauliikan ja automaation laitos
- Energia- ja prosessitekniikan laitos (3)
- Teknillisen mekaniikan laitos
- Kemian laitos
- Geoinformatiikan laboratorio
- Fysiikan laitos
- Matematiikan laitos

Tampereen yliopisto

- Lääketieteellisen teknologian instituutti

Turun yliopisto

- Kemian laitos
- Fysiikan laitos
- Sovelletun fysiikan laitos
- Matemaattisten tieteiden laitos
- Biologian laitos

Helsingin yliopisto

- Kansanterveystieteen laitos
- Ekologian ja systematiikan laitos
- Fysiikan laitos / Kiihdytinlaboratorio
- Fysiikan laitos / Molekyylifysiikan laboratorio
- Fysiikan tutkimuslaitos
- Fysiikan laitos
- Geofysiikan laitos (2)
- Rolf Nevanlinna Instituutti (7)
- Kemian laitos (3)
- Matematiikan laitos
- Meteorologian laitos (2)
- Tietojenkäsittelytieteen laitos (2)
- Kansataloustieteen laitos (3)
- Tilastotieteen laitos (2)
- Kasvintuotantotieteen laitos
- Metsäekologian laitos (2)
- Metsävarojen käytön laitos (2)

Teknillinen korkeakoulu

- Fysikaalisen kemian ja sähkökemian laboratorio (2)
- Kemian laitetekniikan ja tehdassuunnittelun laboratorio (2)
- Lujuusopin laboratorio
- Materiaalitekniikan laboratorio (2)
- Energiatekniikan ja ympäristönsuojelun laboratorio
- LVI-laboratorio (2)
- Sovelletun termodynamiikan laboratorio
- Fotogrammetrian ja kaukokartoituksen laboratorio
- Kartografian ja geoinformatiikan laboratorio
- Metallurgian laboratorio
- Materiaalien muokkauksen ja lämpökäsittelyn laboratorio
- Materiaalien valmistustekniikka
- Pohjarakennuksen ja maamekaniikan laboratorio
- Rakenteiden mekaniikan laboratorio (2)
- Teräsrakennetekniikan laboratorio
- Liikennelaboratorio (2)
- Vesitalouden ja vesirakennuksen laboratorio
- Akustiikan ja äänenkäsittelytekniikan laboratorio
- Elektronifysiikan laboratorio
- Laskennallisen tekniikan laboratorio
- Optoelektroniikan laboratorio
- Radiolaboratorio (2)
- Suurjännitetekniikan laboratorio
- Sähkömekaniikan laboratorio
- Sähköverkkolaboratorio
- Tehoelektroniikan laboratorio
- Teletekniikan laboratorio
- Tietoliikennelaboratorio
- Valaistuslaboratorio
- Fysiikan laboratorio (2)
- Matematiikan laboratorio (2)
- Mekaniikan laboratorio
- Systeemianalyysin laboratorio
- Teknillinen fysiikka, energiateknologiat (2)
- Informaatiotekniikan laboratorio
- Tietojenkäsittelyteorian laboratorio (2)
- Kylmälaboratorio

Helsingin kauppakorkeakoulu

- Liikkeenjohdon systeemit (2)
- Rahoitus (2)

Lappeenrannan teknillinen korkeakoulu

- Kemiantekniikan laboratorio
- Koneautomaation laboratorio
- Sähkömarkkinoiden laboratorio
- Sovelletun elektroniikan laboratorio
- Tietojenkäsittelytekniikan laitos
- Tietoliikennetekniikan laitos

Åbo Akademi

- Institutionen för fysikalisk kemi (2)
- Laboratoriet för oorganisk kemi
- Laboratoriet för papperskemi
- Matematiska institutionen
- Institutionen för redovisning
- Laboratoriet för anläggninsteknik

C Käytännön ohjeita mallintamiseen

Matemaattiseen mallintamiseen liittyy poikkeuksetta käytännön ongelmia, jotka tutkijan on mallinnuksen eri vaiheissa ratkaistava. Kuten niin monessa muussakin asiassa, käytäntö opettaa tässäkin. Kokenut mallintaja osaa ennalta varautua ongelmiin, mutta vasta-alkajalle nämä voivat muodostua aikaa vieviksi, turhauttaviksi ja jopa ylitsepääsemättömiksi. Alla on lueteltu joukko mallinnukseen liittyviä käytännön ongelmia ja niille mahdollisia ratkaisuvaihtoehtoja.

Mitä tehdä ennen varsinaiseen mallintamiseen ryhtymistä?

Matemaattista mallinnusta voi käyttää mitä moninaisimpien ilmiöiden tarkasteluun. Ilmiö voi liittyä vaikkapa luonnontieteisiin, tekniikkaan, biotieteisiin, taloustieteisiin tai kielitieteisiin.

Ennen varsinaisen mallintamisen aloittamista on perusteltua perehtyä itse ilmiöön ja sen luonteeseen. Mallintajan on syytä tarkastella, muuttuuko ilmiö esimerkiksi ajan suhteen, miten ympäristö vaikuttaa kyseiseen ilmiöön ja onko ilmiö jaettavissa mahdollisesti pienempiin (toisistaan riippuviin tai riippumattomiin) kokonaisuuksiin.

Miten lähteä rakentamaan matemaattista mallia?

Jos perusilmiöitä kuvaavia matemaattisia yhtälöitä ei ole tarpeen todentaa lähtien esimerkiksi fysiikan perusyhtälöistä, kannattaa turvautua kirjallisuudesta löytyviin yhtälöihin. On todennäköista, että kirjallisuudesta löytyy juuri kyseistä ilmiötä kuvaavia matemaattisia malleja, jotka pätevät jopa laajemmassakin kontekstissä kuin olisi ennalta käsin oman mallin kohdalla ajatellut.

Mallinnuksessa keskeistä on miettiä, mitä pitää mallintaa. Malliin kannattaa ottaa mukaan vain ne suureet, jotka ovat ilmiön ymmärtämisen tai ongelman ratkaisemisen kannalta oleellisia. Mallinnuksessa kannattaa edetä vaiheittain yksinkertaisesta mallista kohti monimutkaisempaa: mahdollisimman tarkasti ilmiötä kuvaavan mallin rakentaminen suoraan on tavallisesti hankalaa.

Mistä hakea apua mallin luontiin?

Yhteistyöllä saavutetaan monia etuja. Liian pitkäksi aikaa ei kannata omin toimin jäädä miettimään, vaan on syytä keskustella mallinnuksen ongelmista kollegojen kanssa.

Aina kollegoistakaan ei löydy apua, jolloin on turvauduttava laajempaan yhteistyöverkostoon. Tilanne on varmasti tuttu esimerkiksi niille tutkijoille, jotka työskentelevät monifysikaalisten ongelmien parissa. Samoin on laita, jos matemaattisen mallin implementointi tietokoneelle tuottaa ongelmia. Yhteistyön ei toki pidä rajoittua ainoastaan kotimaan rajojen sisäpuolelle, vaan tutkijan kannattaa pyrkiä hyödyntämään myös kansainvälisiä verkostoja (luku 8).

Miten matemaattisen mallin voi ratkaista?

Matemaattisen mallin ratkaiseminen riippuu pitkälti luodusta matemaattisesta mallista. Mitä monimutkaisempi matemaattinen malli on, sen työläämpi se on myös ratkaista. Varsin harvoissa tapauksissa malli ratkeaa analyyttisesti käyttäen kynää ja paperia. Usein mallin ratkaiseminen edellyttää tietokoneiden ja ilmiön ratkaisemiseen soveltuvien ohjelmistojen käyttöä.

Niin kuin matemaattisen mallin luonnissa, myös sen ratkaisussa kannattaa edetä vaiheittain: monimutkaisten mallien ratkaisua kannattaa lähestyä yksinkertaisten tehtävien kautta.

Miten analysoida matemaattisesta mallista saatuja tuloksia?

Matemaattisen mallin ratkaiseminen tietokoneella tuottaa numeerista dataa. Tiedon analysointi pelkkiä lukuja tarkastelemalla voi joskus olla perusteltua, mutta tavallisesti tietoa analysoidaan joko tätä varten erikseen kehitellyillä visualisointiohjelmistoilla tai sovelluskohtaisiin ohjelmistoihin liittyvillä visualisointimoduleilla. Myös numeerisesta datasta laskettavat johdannaissuureet, esimerkiksi tilastolliset jakaumat, ovat käytettyjä.

Visualisointityökalut on pyritty toteuttamaan niin, että numeeristen tulosten tarkastelu on käyttäjälle mahdollisimman informatiivista ja helppoa. Tietokoneen kuvaruudulle voi piirtää graafeja, pintakuvioita tai animaatioita. Myös äänen käyttö (esimerkiksi äänen voimakkuus) tulosten tulkinnassa on mahdollista. Nykyisellään myös CAVE-ympäristön avulla tapahtuva tulosten analysointi on suosittua [HJKR00].

Miten matemaattisen mallin ratkaisu kuvaa todellisuutta?

Verrattaessa matemaattisen mallin ratkaisua todelliseen ilmiöön on syytä pohtia ainakin seuraavia kysymyksiä:

- Miten hyvin matemaattinen malli vastaa todellisuutta? Rajoittavatko esimerkiksi mallin oletukset ja yksinkertaistukset mallin tarkkuutta?
- Millaisia virheitä syntyy ratkaistaessa mallia?
  - yksinkertaisilla malleilla ratkaisun virhe on todennäköisesti pieni
  - jos mallin ratkaisussa käytetään useita eri menetelmiä, tulisi näiden tuottamien virheiden olla samaa luokkaa
  - matemaattisten mallien ratkaiseminen numeerisesti tuottaa virhettä (on olemassa teoreettisia tarkasteluja, jotka antavat menetelmän virheelle ylärajan)
- Synnyttääkö mallin tietokonetoteutus virhettä?
  - laskenta-aritmetiikka (pyöristysvirheet)
  - ohjelmointivirheet
- Onko tulosten visualisoinnissa syntynyt virhettä?
- Onko syntyneet tulokset tulkittu oikein?

Mallin ratkaisu voidaan verifioida kirjallisuudesta löytyvin esimerkein tai ratkaisemalla malli käyttäen esimerkiksi vaihtoehtoista menetelmää (vaihtoehtoinen numeerinen menetelmä, toinen sovellusohjelma). Tällä tavalla on mahdollista selvittää, onko matemaattisen mallin ratkaisussa tehty virheitä.

Verifiointi mahdollistaa matemaattisen mallin ratkaisun todentamisen eri menetelmillä lähtien samoista lähtökohdista, ts. samasta matemaattisesta mallista. Tämä ei vielä takaa mallin ratkaisun hyvyyttä suhteessa todelliseen ilmiöön. Mallin ratkaisu on aina syytä validoida eli verrata ratkaisua kokeellisiin mittaustuloksiin. Tässä vaiheessa on siten mahdollista selvittää, miten hyvin matemaattinen malli vastaa todellisuutta olettaen, että kokeellisten mittaustulosten virheet on minimoitu.

D Sanasto

Seuraavaan sanastoon on poimittu termejä matemaattisesta mallintamisesta, numeerisista menetelmistä ja ohjelmankehityksestä. Sanastossa pyritään yleistajuisiin kuvauksiin eikä matemaattiseen eksaktiuteen, jotta raportti tavoittaisi mahdollisimman laajan lukijajoukon. Lisätietoja näistä aiheista löytyy muun muassa CSC:n julkaisemista oppikirjoista ja käsikirjoista.

Aikasarja (time series)

Aikasarja on jono dataa, joka on indeksoitu ajan suhteen. Peräkkäiset aikavälit ovat usein tasavälisiä.

Alkuarvotehtävä (initial-value problem)

Katso: reunaehdot.

Alkuehdot (initial conditions)

Katso: reunaehdot.

Algoritmi (algorithm)

Algoritmi on toimenpidesarja tai -ohje, joka johtaa alkutilasta lopputilaan eli haluttuun tavoitteeseen. Algoritmissa joskus hyvinkin monimutkainen matemaattinen ratkaisu on purettu hyvin määritellyssä järjestyksessä suoritettaviin yksinkertaisiin ja täsmällisiin askeliin. Algoritminen kuvaus on siten hyvä esiaste ratkaisun tietokonetoteutukselle. Esimerkki algoritmista on Gaussin eliminaatio lineaarisen yhtälöryhmän ratkaisemiseksi.

Bayesilainen tilastotiede (Bayesian statistics)

Bayesilaisessa tilastotieteessä on ratkaistavana *inversio-ongelma*

> Mikä on maailman mallin $\mathcal{M}$ todennäköisyys, kun ollaan havaittu asiaintilat $\mathcal{D}$,

kun osataan ratkaista *suora ongelma*

> Mikä on havaittujen asiaintilojen $\mathcal{D}$ todennäköisyys, jos maailman malli olisi $\mathcal{M}$.

Todennäköisyysteorian merkinnöiksi puettuna inversio-ongelma on ratkaista posterioritodennäköisyysjakauma $p(\mathcal{M}|\mathcal{D})$, kun suoran ongelman ratkaisu eli niin sanottu uskottavuusfunktio $p(\mathcal{D}|\mathcal{M})$ tunnetaan.

Posteriorijakaumalle saadaan esitys:

$$p(\mathcal{M}|\mathcal{D}) = \frac{p(\mathcal{M},\mathcal{D})}{p(\mathcal{D})} = \frac{p(\mathcal{M})p(\mathcal{D}|\mathcal{M})}{p(\mathcal{D})} \propto p(\mathcal{M})p(\mathcal{D}|\mathcal{M}).$$

Jakaumaa $p(\mathcal{M})$ kutsutaan prioritodennäköisyysjakaumaksi. Prioritodennäköisyysjakaumalla upotetaan taustatietämystä mallinnettavasta kohdealueesta todennäköisyysmallin kuvaukseen.

Biometria (biometrics, biostatistics)

Biometria on tilastotieteen erityisalue, jonka kohteena ovat biologia, lääketiede, terveystieteet sekä maatalous- ja metsäntutkimus.

Differentiaaliyhtälöt (differential equations)

Differentiaaliyhtälöissä tuntemattomia ovat funktiot. Yhtälöissä esiintyy tuntemattomien funktioiden derivaattoja. Katso: tavallinen differentiaaliyhtälö, osittaisdifferentiaaliyhtälö.

Diskreetti malli (discrete model)

Diskreetin mallin muuttujien arvojoukot ovat numeroituvia. Arvojoukko voi olla esimerkiksi kokonaislukujen joukko.

Epälineaarinen (nonlinear)

Epälineaarinen yhtälö sisältää muuttujista muitakin kuin ensimmäisen asteen termejä. Epälineaariset mallit voidaan linearisoida likimääräisen ratkaisun ympäristössä. Näin saadaan muutoksille lineaarinen yhtälö, jonka iteratiivisena ratkaisuna yleensä myös epälineaarinen yhtälö ratkeaa. Linearisointi perustuu yleensä Taylorin sarjoihin, jossa ensimmäisen asteen termit hallitsevat muutosten ollessa pieniä.

Geneettiset algoritmit (genetic algorithms)

Geneettiset algoritmit ovat satunnaisalgoritmeja. Niiden toimintaidea on luonteeltaan heuristinen ja perustuu darwinistiseeen luonnonvalintaan. Geneettisiä algoritmejä käytetään muun muassa optimointitehtävien ratkomisessa.

Hahmontunnistus (pattern recognition)

Hahmontunnistus tarkoittaa mittausten ja havaintojen tekemistä luonnollisista kohteista, näiden mittausten automaattista analyysiä ja kohteiden tunnistamista analyysin perusteella.

Heuristiset algoritmit (heuristic algorithms)

Heuristiset algoritmit ovat epämuodollisin menetelmin johdettuja tai kokemuksiin perustuvia ratkaisu- tai päättelymenetelmiä. Heuristisia algoritmeja käytetään yleensä silloin, kun tarkkaan määriteltyjä algoritmeja ei ole olemassa tai ne eivät sovellu tehtävään.

Huonosti asetettu (ill-posed)

Pienet muutokset hyvin asetetun tehtävän lähtöarvoissa aiheuttavat ainoastaan pienen muutoksen ratkaisussa. Huonosti asetetulle tehtävälle tämä ei päde. Esimerkki huonosti asetetusta tehtävästä on lineaarinen yhtälöryhmä, jonka häiriöalttius on suuri.

Iterointi (iteration)

Usein ratkaistava ongelma on niin mutkikas, että sen ratkaisua ei voida kirjoittaa suoraan auki. Iteratiivisia menetelmiä tarvitaan erityisesti epälineaaristen tehtävien ratkaisemisessa.

Tehtävän iteratiivisessa ratkaisussa likimääräistä ratkaisua hyödyntäen lasketaan uusia, entistä tarkempia arvioita ratkaisulle. Jos iteraatio suppenee, peräkkäiset arviot lähestyvät tiettyä raja-arvoa. Laskenta voidaan lopettaa, kun muutos on riittävän pieni. Iteraatio voi myös jäädä kiertämään useamman pisteen sykliä tai hajaantua. Iteraation hajaantuessa peräkkäiset arviot ratkaisulle poikkeavat toisistaan yhä enemmän ja ratkaisua ei siten löydetä. Vaikka yhtälölle olisi olemassa suorakin ratkaisumenetelmä, saattaa iteratiivinen ratkaisumenetelmä olla laskennallisesti tehokkaampi.

Kankea differentiaaliyhtälö (stiff differential equation)

Kankeassa differentiaaliyhtälössä vaaditaan tarkan ratkaisun sileyteen nähden hyvin lyhyt askelpituus stabiililla numeerisella menetelmällä. Kankea yhtälö syntyy usein tehtävissä, joissa esiintyy eri suuruusluokkaa olevia aikaskaaloja.

Kustannusfunktio (cost function)

Valittaessa parasta vaihtoehtoa lukuisista tapauksista tarvitaan jokin hyvyyden (tai huonouden) mitta, jonka avulla erilliset tapaukset voidaan järjestää paremmuusjärjestykseen. Optimoinnissa tätä kutsutaan kustannusfunktioksi. Optimaalinen vaihtoehto on silloin se, jonka kustannusfunktio on pienin mahdollinen.

Lineaarinen (linear)

Yhtälö on lineaarinen, mikäli se sisältää muuttujista vain ensimmäisen asteen termejä. Siten esimerkiksi yhtälö $y = ax + b$ on lineaarinen, samoin $y = c\,d^2y/dx^2$. Lineaariset yhtälöt ovat numeerisesti suoraviivaisia ratkaista.

LP, lineaarinen optimointi (linear programming, linear optimization)

Lineaarisessa optimointitehtävässä sekä kohdefunktio että rajoitteet ovat lineaarisia. Tehtävä voidaan ratkaista esimerkiksi ns. simplex-menetelmällä.

Mallinnus (modeling)

Malli on mallinnettavaan kohdealueeseen liittyvän tiedon ja epävarmuuden matemaattinen kuvaus, jolla pelkistetään (tiivistetään) tietämys mallinnettavasta kohdealueesta induktiiviseksi sääntöjoukoksi. Fy-

siikka on esimerkki tällaisesta eräästä reaalimaailmaa kuvaavasta mallista, jolla on empiiristen havaintojen nojalla erittäin suuri selitysvoima. Toisaalta on olemassa koko joukko mallinnettavia kohdealueita, joita ei osata kuvata yhtä suurella selitysvoimalla kuin fysiikka kuvaa luonnonilmiöiden lainalaisuuksia. Tällöin joudutaan muodostamaan tilastollinen malli.

Tilastollisen mallintamisen tavoitteena on etsiä epätriviaaleja kausaliteetteja ja ennustaa, mitä havaituista asiaintiloista todennäköisesti seuraa. Epävarmuuden kieli muutetaan numeeriseksi todennäköisyysteorian avulla. Mikäli sääntöjoukon oikeellisuudesta ei ole epäselvyyttä tai se on suurella todennäköisyydellä erittäin selitysvoimainen (kuten fysiikka), on deduktiivinen päättely todennäköisyysteoriaa soveliaampi lähestymistapa.

MCMC (Markov Chain Monte Carlo)

MCMC-menetelmissä etsitään numeeristen tehtävien likimääräisiä ratkaisuja simuloimalla tilastollista prosessia tavoitteena saada näytteitä prosessin rajajakaumasta. Ongelma voi olla esimerkiksi moniulotteinen integrointitehtävä tai kombinatorinen optimointitehtävä. Menetelmissä hyödynnetään tietokoneella generoituja pseudosatunnaislukuja.

Molekyylidynamiikka (molecular dynamics)

Molekyylidynamiikassa ratkaistaan useimmiten tietokoneessa hiukkasten välisten vuorovaikutusten aikaansaamia dynaamisia ilmiöitä. Aihetta tutkitaan fysiikassa ja kemiassa.

Monifysikaalinen (multi-physics)

Useista eri fysikaalisista komponenteista koostuva ilmiö. Mukana voi olla esimerkiksi virtauksia, sähkömagnetiikkaa, lämmönsiirtoa säteilemällä ja vuorovaikutuksia kiinteiden rakenteiden kanssa.

Neuroverkot (neural nets)

Neuroverkot koostuvat yksinkertaisista laskentaelementeistä eli neuroneista, joilla on monta syötettä ja yksi vaste. Neuroverkko muodostetaan kytkemällä useita neuroneita toisiinsa. Tällaisella järjestelmällä voidaan muun muassa paljastaa isoissa tietomassoissa olevia säännöllisyyksiä.

Numeeriset menetelmät (numerical methods)

Numeeriset menetelmät ovat väline matemaattisten mallien käsittelyyn ja ratkaisuun tietokoneessa. Koska tietokoneessa ei voi laskea äärettömän tarkasti eikä äärettömän monessa pisteessä, joudutaan käyttämään likiarvoja. Laskennassa on tärkeää luotettavuus ja tarkkuus sekä usein myös laskennan tehokkuus.

Osittaisdifferentiaaliyhtälö (partial differential equation)

Osittaisdifferentiaaliyhtälössä esiintyy usean muuttujan funktion osittaisderivaattoja. Katso: differentiaaliyhtälöt.

Optimointi (optimization)

Optimoinnilla pyritään rajallisten resurssien tehokkaaseen käyttöön. Optimointi on järjestelmällinen prosessi, jossa eri tapausten joukosta etsitään paras, tai ainakin kyllin hyvä ratkaisu. Optimoinnin osatehtäviä ovat ratkaisun hyvyyden arviointi kustannusfunktion avulla ja uusien, entistä parempien ratkaisuehdokkaiden löytäminen tunnettujen tapausten avulla.

Parametri (parameter)

Matemaattinen malli koostuu joukosta taustaoletuksia, vakioista ja parametreista. Parametrit ovat mallin muuttujia eli arvoja, jotka voivat vaihdella riippuen syötteenä annettavasta havaintoaineistosta. Parametrit voivat liittyä esimerkiksi laitteen mitoitukseen tai toimintapisteen valintaan. Suunnittelussa tavoitteena on usein löytää näille parametreille optimaalinen kombinaatio, jolla laitteen toiminta vastaa parhaiten sille asetettuja vaatimuksia. Toisaalta parametrit voivat olla esimerkiksi stokastisia muuttujia, joiden jakaumaa simuloidaan tilastollisessa mallissa.

Peliteoria (game theory)

Peliteoriassa etsitään optimaalisia strategioita tilanteissa, joissa ilmenee joko kilpailua tai vastakkaisia tavoitteita.

Reuna-arvotehtävä (boundary-value problem)

Katso: reunaehdot.

Reunaehdot ja alkuehdot (boundary conditions, initial conditions)

Matemaattiset mallit ovat usein osittaisdifferentiaaliyhtälöitä, jotka kertovat kuinka systeemin tila muuttuu ajan ja paikan suhteen. Sama malli kuvaa esimerkiksi veden liikettä joessa ja teekupissa. Reuna- ja alkuehdot tekevät ratkaisut yksikäsitteiseksi. Reunaehdot kertovat systeemin tilan laskenta-alueen reunoilla. Alkuehdot kertovat systeemin tilan ajasta riippuvassa tapauksessa laskennan alkuhetkellä.

Rinnakkaisohjelmointi (parallel programming)

Rinnakkaisohjelmoinnin avulla voidaan laskentatehtävä jakaa useammaksi osatehtäväksi suoritettavaksi usealla prosessorilla. Näin laskutehtävän ratkaisemiseen kuluvaa seinäkelloaikaa voidaan usein merkittävästi lyhentää.

Simulointi (simulation)

Simuloinnilla tarkoitetaan todellisuuden matkimista esimerkiksi laskennan tai virtuaalitodellisuuden keinoin. Simuloinnin etuna todellisuuteen on usein halvempi ja nopeampi toteutus. Simuloinnin avulla tutkittavasta kohteesta voidaan saada myös sellaista tietoa, jota todellisuudessa voi olla vaikea mitata. Kun tutkittava kohde on numeroina tietokoneen muistissa, on sitä helpompi tutkia ja analysoida.

Stokastinen (stochastic)

Satunnaismuuttujan avulla mallinnettavissa oleva ilmiö.

Suurin uskottavuus (maximum likelihood)

Menetelmässä etsitään ehdollisen todennäköisyyden maksimiarvoa käyttämättä prioritodennäköisyysjakaumaa. Vaihtoehto bayesiläiselle lähestymistavalle.

Symbolinen laskenta (symbolic computation)

Symbolisessa laskennassa tietokoneohjelmat käsittelevät symbolisessa muodossa esitettyjä suureita (numeerisen laskennan vastakohtana tai lisäksi).

Soluautomaatti (cellular automaton)

Soluautomaatti on diskreetti dynaaminen systeemi, jonka alkioilla on vain paikallisia vuorovaikutuksia keskenään.

Tavallinen differentiaaliyhtälö (ordinary differential equation)

Tavallisessa differentiaaliyhtälössä esiintyy yhden muuttujan funktion ensimmäisiä tai korkeampia derivaattoja.

Tilastolliset menetelmät (statistical methods)

Tilastollisia menetelmiä käytetään kvantitatiivisen ja kvalitatiivisen tiedon käsittelyyn.

Visualisointi (visualization)

Tiedon esittämistä esimerkiksi tietokoneen avulla kuvallisessa muodossa (yksittäisinä kuvina tai animaatioina).

E Tietoa CSC:stä

Yleistä tietoa CSC:stä

CSC – Tieteellinen laskenta Oy (CSC) on opetusministeriön omistama laskennallisen tieteen keskus. CSC:ssä on töissä noin 90 eri tieteenalojen ja tietotekniikan asiantuntijaa.

CSC tarjoaa laajoja palvelukokonaisuuksia tieteellistekniseen laskentaan. CSC:n asiantuntijat neuvovat esimerkiksi matemaattisten mallien ja numeeristen menetelmien käyttöön liittyvissä asioissa. CSC myös järjestää eri sovellusalojen koulutusta, esimerkiksi mallintamisesta, numeerisista menetelmistä, visualisoinnista ja ohjelmankehityksestä.

Lisätietoja CSC:stä saa www-osoitteesta `http://www.csc.fi/`.

CSC:n julkaisemia kirjoja

Edistääkseen matemaattisen mallintamisen, numeeristen menetelmien ja ohjelmankehityksen osaamista CSC on julkaissut useita numeerisia menetelmiä ja ohjelmistoja käsitteleviä oppikirjoja ja käsikirjoja. Näitä teoksia on käytetty korkeakoulutason kurssimateriaalina eri puolilla Suomea. Osa teoksista on saatavissa PDF-muodossa www:stä.

Seuraavat kaksi teosta johdattavat lukijan numeerisen laskennan ja laskennallisen tieteen pariin. Esitietoja aiheesta ei tarvita.

- *Alkuräjähdyksestä kännykkään — näkökulmia laskennalliseen tieteeseen* (Haataja, toim.; CSC, 2000)
- *Laskennallinen tuotekehitys: suunnittelun uusi ulottuvuus* (Haataja, Järvinen, Koponen ja Råback, toim.; CSC, 2000)

Lisäksi CSC on julkaissut seuraavat kuusi tieteellisen laskennan oppikirjoina ja käsikirjoina käytettyä teosta:

- *Datan käsittely* (Karttunen; CSC, 1994)
- *Elementtimenetelmä virtauslaskennassa* (Hämäläinen ja Järvinen; CSC, 1994)

- *Numeeriset menetelmät* (Haataja, Käpyaho ja Rahola; CSC, 1993)
- *Numeeriset menetelmät käytännössä* (Haataja, Heikonen, Leino, Rahola, Ruokolainen ja Savolainen; CSC, 2000)
- *Optimointitehtävien ratkaiseminen* (Haataja; CSC, 1995)
- *Tieteellinen visualisointi* (Ruokolainen ja Gröhn; CSC, 1996)

Numeeriseen laskentaan liittyviä ohjelmistoja on kuvattu seuraavissa teoksissa, jotka ovat saatavissa PDF-muodossa www:stä:

- *GAMS-ohjelmiston pikaopas* (Haataja; CSC, 1999)
  `http://www.csc.fi/oppaat/gams/`
- *Introduction to using Mathematica* (Haataja ja Savolainen; CSC, 1998)
  `http://www.csc.fi/math_topics/courses/ic98/mma-web.pdf`
- *Matemaattiset ohjelmistot* (Haataja, toim.; CSC, 1998)
  `http://www.csc.fi/oppaat/mat.ohj`
- *Ohjeita Mathematican käyttöön* (Haataja, toim.; CSC, 2000)
  `http://www.csc.fi/oppaat/mathematica/`
- *Ohjeita Matlabin käyttöön* (Haataja, toim.; CSC, 2000)
  `http://www.csc.fi/oppaat/matlab/`

CSC:llä on myös ohjelmointia ja ohjelmankehitystä käsitteleviä oppaita (osa teoksista on saatavissa www:stä):

- *CSC User's Guide* (Kupila-Rantala, toim.; CSC, 2000)
  `http://www.csc.fi/oppaat/cscuser/`
- *Final Report of the Pilot Project for PC Clusters* (Koski ja Fagerholm, toim.; CSC, 2000)
  `http://www.csc.fi/reports/pc-cluster/Finalreport.pdf`
- *Fortran 90/95* (Haataja, Rahola ja Ruokolainen; CSC, 1998)
- *Käytännön ohjeita ohjelmankehitykseen* (Haataja, toim.; CSC, 2000)
  `http://www.csc.fi/oppaat/ohjelmointi/`
- *Metakoneen käyttöopas* (Kupila-Rantala, toim.; CSC, 2000)
  `http://www.csc.fi/oppaat/metakone/`
- *Rinnakkaislaskennan perusteet PVM-ympäristössä* (Saarinen; CSC, 1995)
- *Rinnakkaisohjelmointi MPI:llä* (Haataja ja Mustikkamäki; CSC, 1997)

CSC:n oppaiden hintatiedusteluja ja tilauksia voi lähettää osoitteeseen

Paula Mäki-Välkkilä
CSC – Tieteellinen laskenta Oy
PL 405
02101 ESPOO

Sähköposti: `Paula.Maki-Valkkila@csc.fi`. Puhelin: (09) 457 2718. Telekopio: (09) 457 2302.

Kirjallisuutta

[CSC97] Suurteholaskennan toimenpideohjelma 1997–2001. CSC, 1997.

[CSC98] Tieteen tietokantojen toimenpideohjelma 1998–2001. CSC, 1998.

[CSC00] Kielitieteiden atk-tarpeet. CSC, 2000.

[FHK00] Juha Fagerholm, Juha Haataja ja Sirpa Kotila, toim. *CSC:n asiakkaan opas*. CSC, 2000. `http://www.csc.fi/oppaat/asopas/`.

[Haa99] Juha Haataja, toim. *CSC Report on Scientific Computing 1997–1998*. CSC, 1999. `http://www.csc.fi/reports/cr97-98/`.

[HHL+99] Juha Haataja, Jussi Heikonen, Yrjö Leino, Jussi Rahola, Juha Ruokolainen ja Ville Savolainen. *Numeeriset menetelmät käytännössä*. CSC, 1999.

[HJKR00] Juha Haataja, Jari Järvinen, Jari Koponen ja Peter Råback, toim. *Laskennallinen tuotekehitys: suunnittelun uusi ulottuvuus*. CSC, 2000.

[HKP00] Kai Husso, Sakari Karjalainen ja Tuomas Perkkari, toim. *Suomen tieteen tila ja taso*. Suomen Akatemia, 2000.

[Järv90] Esko Järvinen. Rinnakkaiset tietokoneet ja niiden potentiaalisia sovelluksia ja käyttäjiä suomessa. Tieteellisen laskennan palvelu, 1990.

[Järv00] Esko Järvinen, toim. *Virtausdynamiikan teknologiaohjelma 1995–1999*. TEKES, 2000. Teknologiaohjelmaraportti 8/2000. Loppuraportti.

[Kat00] Matti Katajisto. *Matemaattinen mallinnus Jyväskylän yliopistossa ja Jyvässeudun yrityksissä*. Jyväskylän yliopisto, 2000. `http://www.math.jyu.fi/research/cmcm/selvitys/ensim6b.html`.

[KF00] Kimmo Koski ja Juha Fagerholm, toim. *Final Report of the Pilot Project for PC Clusters*. CSC, 2000. `http://www.csc.fi/reports/pc-cluster/Finalreport.pdf`.

[Lip00] Marjo Lipponen, toim. *Evaluation of Finnish Mathematics*. Academy of Finland, 2000.

[MLHH99] Reijo Miettinen, Janne Lehenkari, Mervi Hasu ja Jukka Hyvönen. *Osaaminen ja uuden luominen innovaatioverkoissa. Tutkimus kuudesta suomalaisesta innovaatiosta*. Taloustieto Oy, 1999. Sitra 226.

[RK99] Jussi Rahola ja Kimmo Koski. *Suuret laskennalliset haasteet Suomessa*. CSC, 1999. `http://www.csc.fi/raportit/gc/`.

[TLP92] Superlaskennan kansallinen toimenpideohjelma. Tieteellisen laskennan palvelu, 1992.

Hakemisto

A
Abaqus, 43
aikasarja, 73
aikasarjat, 31
algorithm, 73
algoritmi, 73
alkuarvotehtävä, 73
alkuehdot, 73, 77
ANSYS, 43

B
Bayesian statistics, 73
bayesilainen tilastotiede, 73
biometria, 74
biometrics, 74
biostatistics, 74
biotieteet, 29, 36, 37
boundary conditions, 77
boundary-value problem, 77

C
cellular automaton, 78
Center for Mathematical and Computational Modeling, 17, 46, 55
CMCM, 17, 46, 55
COMP, 56
cost function, 75
CSC – Tieteellinen laskenta Oy, 14, 47, 79

D
differentiaaliyhtälöt, 30, 31, 74
differential equations, 74
discrete model, 74
diskreetit mallit, 31, 74

E
epälineaarinen, 74

F
Funet-verkkopalvelu, 49
fysiikka, 29, 36, 37

G
game theory, 77
Gaussian, 43
geneettiset algoritmit, 31, 74
genetic algorithms, 74
geotieteet, 29, 38

H
hahmontunnistus, 74
Helsingin kauppakorkeakoulu, 68
Helsingin yliopisto, 67
heuristic algorithms, 74
heuristiset algoritmit, 74
huippuyksiköt, 56
huonosti asetetut tehtävät, 75

I
ill-posed, 75
IMSL, 41
initial conditions, 73, 77
initial-value problem, 73
iteration, 75
iterointi, 75

J
Joensuun yliopisto, 66
Jyväskylän yliopisto, 66

K
kankeat differentiaaliyhtälö, 75
kemia, 29, 36, 38
kokeellinen tiede, 18
Kuopion yliopisto, 66
kustannusfunktio, 75
kysely
  lomake, 62
  toteutus, 15
  vastaukset, 28
kyselyyn vastanneet, 66

L
Lappeenrannan teknillinen korkeakoulu, 69
laskennallinen tiede, 18–20
Laskennallisen materiaalifysiikan tutkimusryhmä, 56

Laskennallisen tieteen ja tekniikan tutkimuskeskus, 56
lineaarinen, 75
lineaarinen optimointi, 75
linear, 75
linear optimization, 75
linear programming, 75
LP, 75
lääketiede, 29, 38

M
maantiede, 29
maatalous- ja metsätieteet, 29, 38
MACSINET, 16, 48, 58
MaDaMe, 16, 55
mallinnus, 15
mallinnustekniikat, 30
mallintaminen, 15, 19–21, 23, 75
  luotettavuus, 22
  ohjelmistot, 40, 41, 43
  opetus Suomessa, 44
  rajoitukset, 23
mallittaminen, 15
mallitus, 15
Maple, 43
Markov Chain Monte Carlo, 76
matemaattinen malli, 21
matemaattinen mallintaminen, 19
matematiikka, 19, 29, 36, 38
Mathematica, 43
Mathematics, Computing and Simulation for Industry, 58
Matlab, 43
maximum likelihood, 78
MCMC, 31, 76
meteorologia, 29
Metsäekologian ja metsänhoidon tutkimusyksikkö, 56
modeling, 75
molecular dynamics, 76
molekyylidynamiikka, 31, 76
monifysikaalinen, 76
monitieteiset ongelmat, 18
MSI, 43
multi-physics, 76

N
NAG, 41, 43
neural nets, 76
Neuroverkkojen tutkimusyksikkö, 57
neuroverkot, 31, 76
nonlinear, 74
numeerinen analyysi, 19
numeeriset menetelmät, 20, 23, 76
  luotettavuus, 23
numerical methods, 76

O
ohjelmistot, 40, 41, 43
opetus, 44
Opetusministeriö, 47
OPM, 47
optimization, 77
optimointi, 31, 77
ordinary differential equation, 78
osittaisdifferentiaaliyhtälö, 76
Oulun yliopisto, 66

P
parallel programming, 77
parameter, 77
parametri, 77
partial differential equation, 76
pattern recognition, 74
peliteoria, 77
Phoenics, 43
Prosessikemian tutkimusryhmä, 57
prototyyppi, 21

R
ratkaisumenetelmä, 20
reuna-arvotehtävä, 77
reunaehdot, 77
rinnakkaislaskenta, 21
rinnakkaisohjelmointi, 77

S
Signaalinkäsittelyn tutkimusryhmä, 58
simulaatio, 21
simulation, 77
simulointi, 31, 77
soluautomaatti, 78
statistical methods, 78
stiff differential equation, 75
stochastic, 78
stokastinen, 78
Suomen Akatemia, 15, 16, 55
suurin uskottavuus, 78
symbolic computation, 78
symbolinen laskenta, 78

T
taloustieteet, 29, 37, 39
Tampereen teknillinen korkeakoulu, 67
Tampereen yliopisto, 67
tavallinen differentiaaliyhtälö, 78
Tekes, 16
tekniikka, 29, 37, 39
Teknillinen korkeakoulu, 68
teoreettinen tiede, 18
tiede
  laskennallinen, 18–20
  tutkimusmenetelmät, 18

tietojenkäsittely, 39
tietojenkäsittelytiede, 19, 20
tietokonemalli, 22
tilastolliset menetelmät, 31, 78
tilastotiede, 19, 29
time series, 73
toimenpide-ehdotukset, 51
tuotekehitys, 22
Turun yliopisto, 67
tutkimusmenetelmät, 18
tähtitiede, 29, 39
TÄSMÄ-projekti, 16, 48

V
visualisointi, 21, 78
visualization, 78

Z
Åbo Akademi, 69