KONTINUUMIMEKANIIKAN LASKENNALLISET HAASTEET

MIKA MALINEN

CSC

KONTINUUMIMEKANIIKAN LASKENNALLISET HAASTEET

Mika Malinen

Tieteen tietotekniikan keskus CSC

© CSC – Tieteellinen laskenta Oy
2003

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

Esipuhe

Opetusministeriön omistama tieteen tietotekniikan keskus CSC selvitti kontinuumimekaniikan alalla Suomessa toimivien tutkijoiden suurteholaskennan tarpeita sekä laskennallisesti haastaviin ongelmiin liittyviä erityisongelmia. Tiedot kerättiin syksyllä 2003 tutkijoille suunnatun verkkokyselyn avulla. Tämä raportti kokoaa yhteen kyselyn tulokset.

CSC:n toimenkuvaan kuuluu yliopistoissa, tutkimuslaitoksissa ja yrityksissä eri aloilla tehtävän laskennallisen tutkimuksen tukeminen sekä yhteistyön edistäminen. CSC myös tarjoaa tieteen asiantuntijapalveluita ja suurteholaskentaan soveltuvia tietokoneresursseja. Yksi toiminnan perusideoista on asiakaslähtöisyys tarkoittaen toiminnan kehittämistä asiakkaiden tarpeiden mukaisesti.

Haluan kiittää kaikkia kyselyyn vastanneita. Vastauksenne auttavat CSC:n palveluiden edelleen kehittämisessä ja toiminnan suuntaamisessa.

Esitän kiitokset Esko Järviselle, Reijo Lindgrenille ja Ilari Hänniselle kyselyn valmistelussa saamastani avusta. Lisäksi kiitän Juha Haatajaa ja Peter Råbackia avustamisesta raportin oikolukemisessa.

Espoossa 12.11.2003

Mika Malinen

Sisältö

Esipuhe **5**

1 Johdanto **7**
1.1 Selvityksen tavoitteet 7
1.2 Kyselyn toteutus 8
1.3 Muita CSC:n selvityksiä 8

2 Kyselyn tuloksia **9**
2.1 Yleistä 9
2.2 Laskennalliset haasteet 11
2.3 Ohjelmistot ja tietokoneresurssit 13
2.4 Uudet haasteet 14

3 Johtopäätökset **16**

Liitteet **19**

A Kontinuumimekaniikan laskennalliset haasteet -kysely **20**

B Kyselyyn vastanneet yksiköt **23**

Kirjallisuutta **25**

1 Johdanto

Jatkuvan aineen mekaniikka — vaihtoehtoisesti kontinuumimekaniikka pitäen sisällään sellaiset haarat kuin virtaus- ja kiinteän aineen mekaniikka sekä rakenneanalyysi — on perinteisesti ollut keskeinen tietokonelaskentaa merkittävästi hyödyntävä tieteen ala. Tietokoneiden ja laskentamenetelmien kehittymisen myötä rutiininomaisesti ratkaistavissa olevien ongelmien kirjo ja kokoluokka ovat kasvaneet merkittävästi saman kehityksen jatkuessa edelleen nopeana. Monet aiemmin suurteholaskentaa vaatineet analyysit voidaankin nykyisin tehdä varsin nopeasti tavallisilla pöytäkoneilla.

Toisaalta suurteholaskentaa vaativat kohteet ovat muuttuneet entistä monimutkaisemmiksi mm. käytettävien mallien monimutkaisuuden ja tarkasteltavien ilmiöiden moniskaalaisuuden lisääntyessä. Tyypillisesti laskennallisesti haastavat ongelmat vaativat yhä useammin myös monifysikaalista mallinnusta ja tällaiseen mallinnukseen soveltuvia ohjelmistoja.

Monitieteisen mallinnuksen mahdollisuuksien lisääntyessä on odotettavissa, että myös kontinuumimekaniikkaan liittyvä mallinnusosaaminen saa käyttökohteita uusilta sovellusalueilta. Näyteikkunan laskennallisen kontinuumimekaniikan kansainväliseen tutkimukseen tarjoavat esimerkiksi konferenssijulkaisut [Bat01] ja [Bat03]. Kansallisella tasolla alan tutkijat ovat kokoontuneet mm. Suomen mekaniikkapäiville [RSS03].

1.1 Selvityksen tavoitteet

Tieteen tietotekniikan keskuksen CSC:n toimenkuvaan kuuluu yliopistoissa, tutkimuslaitoksissa ja yrityksissä eri aloilla tehtävän laskennallisen tutkimuksen ja tuotekehityksen edistäminen. CSC myös tarjoaa suurteholaskentaan soveltuvia tietokoneresursseja ja tieteen asiantuntijapalveluita.

Kontinuumimekaniikan alueella CSC tarjoaa sekä asiantuntijatukea että ohjelmistoja. Palveluidensa kehittämiseksi ja toimintansa suuntaamiseksi CSC kartoitti kontinuumimekaniikan alalla Suomessa toimivien tutkijoiden suurteholaskennan tarpeita sekä laskennallisesti haastaviin ongelmiin liittyviä erityisongelmia. Tiedot kerättiin verkkokyselyn avulla syksyllä 2003.

Selvityksen tekemisen taustalla on CSC:n pyrkimys edistää suurteholaskennan käyttöä etenkin alueilla, joilla suurteholaskennan käyttö on aiemmin ollut vähäistä. Perinteisesti suurteholaskentaa on sovellettu laskennallisessa fysii-

kassa ja kemiassa. CSC:n asiakkailleen tarjoamasta laskenta-ajasta fysiikan ja kemian käyttämä osuus oli 84% vuonna 2002 [KHF+03].

Kyselyn avulla pyrittiin selvittämään etenkin seuraavia seikkoja tai kysymyksiä koskien Suomessa tehtävää kontinuumimekaniikkaan liittyvää tutkimusta:

- Jatkuvan aineen mekaniikkaan liittyvien suurteholaskentaa vaativien sovelluskohteiden kartoittaminen sekä mahdollisten uusien tällaisten kohteiden tunnistaminen.
- Mitkä ovat laskennallisesti haastaviin ongelmiin liittyviä pullonkaulatekijöitä, siis seikkoja, jotka tekevät ongelmista haastavia?
- Avainmenetelmien ja -tutkimuskohteiden identifiointi.

1.2 Kyselyn toteutus

Selvitys toteutettiin verkkokyselyn avulla. Asetetut kysymykset on esitetty tämän raportin liitteessä A.

Kysely suunnattiin korkeakouluissa ja tutkimuslaitoksissa työskenteleville tutkijoille. Pyyntö vastata verkkokyselyyn lähetettiin sähköpostitse vuonna 2003 Suomen mekaniikkapäiville [RSS03] osallistuneille korkeakouluissa ja tutkimuslaitoksissa työskenteleville henkilöille. Tämän lisäksi osoitetietoja kerättiin CSC:ssä käytössä olevilta postituslistoilta sekä julkisista lähteistä. Vastauspyynnön yhteydessä alaa tuntevia pyydettiin tiedottamaan kyselystä myös muille.

Monitieteisen mallinnuksen ollessa yhä tärkeämpää kyselyä ei haluttu suunnata pelkästään puhtaan virtaus- tai kiinteän aineen mekaniikan alalla toimiville henkilöille, vaan myös poikkitieteellisten sovellusten parissa työskenteleviä rohkaistiin vastaamaan kyselyyn.

1.3 Muita CSC:n selvityksiä

Samanaikaisesti tässä raportissa käsiteltävän selvityksen kanssa CSC selvitti laskennallisia haasteita sähkömagnetiikan alalla [Hän03]. Aiemmista CSC:n selvityksistä käsillä olevaa asiaa on sivunnut mm. Jussi Raholan ja Kimmo Kosken tekemä selvitys [RK99]. Moniskaalaista mallinnusta ja matemaattista mallintamista koskevien selvitysten [Pus03] ja [HJL00] tieteeenalakohtaisissa osuuksissa käsitellään myös virtaus- ja kiinteän aineen mekaniikkaan liittyviä kysymyksiä.

2 Kyselyn tuloksia

Verkkokyselyyn saatiin vastauksia yhteensä 39 kappaletta. Vastaajat edustivat 29 eri laitosta tai laboratoriota. Laitokset ja laboratoriot on luetteloitu liitteessä B.

2.1 Yleistä

Tutkimusalan mukaan jaoteltuna saatujen vastausten lukumäärä jakaantui seuraavasti:

- virtausmekaniikka 7 vastausta
- kiinteän aineen mekaniikka tai rakenneanalyysi 16 vastausta
- sekä virtaus- että kiinteän aineen mekaniikka koskeva ala 6 vastausta
- poikkitieteellinen tai monifysikaalinen ala tai jokin muu vakiintunut tieteenhaara kuin virtaus- tai kiinteän aineen mekaniikka 9 vastausta
- muu ala 2 vastausta (vastaukset olivat biomekaniikan/mikromekaniikan sekä elektroniikan puolijohteiden mallintamisen aloilta).

Siis selkeä enemmistö vastaajista työskenteli perinteisen kontinuumimekaniikan piiriin kuuluvilla alueilla (virtaus- tai kiinteän aineen mekaniikka mukaanlukien rakenneanalyysi). Näiden vastaajien osuus oli karkeasti kolme neljäsosaa kaikista kyselyyn osallistuneista.

Tyypillisimmin vastaajat tekivät joko soveltavaa tai perustutkimusta. Toiminnan laatuna mainittiin soveltava tutkimus 28 vastauksessa ja vastaavasti perustutkimus 22 vastauksessa. Puhtaaksi perustutkimukseksi työnsä arvioi 7 vastaajaa. Tuotekehitys mainittiin 8 kertaa ja opetus vastaavasti 6 kertaa.

Toiminnan yleisistä puitteista voidaan sanoa, että tutkimusta tehdään tyypillisesti varsin pienissä ryhmissä. 26 vastaajaa toimi korkeintaan viidestä henkilöstä muodostuvassa ryhmässä ja 10 näistä vastaajista teki itsenäistä työtä. Kymmenestä tai useammasta henkilöstä muodostuvaa ryhmää edusti 5 vastaajaa.

Tutkimuksen sisältöön liittyen vastaajat kertoivat mm. seuraavista laskennallisesti haastavista ongelmakentistä (alla käytetty aiheenmukainen jaottelu ei ole kaikilta osin yksikäsitteinen):

Virtausmekaniikka

- turbulenssin mallintaminen
- polttoaineen palaminen ja ruiskutus sekä pisaroituminen.

Kiinteän aineen mekaniikka tai rakenneanalyysi

- rakenteiden ominaisuuksien monitavoitteinen optimointi
- epälineaarinen 3D-rakenneanalyysi (joko materiaalinen tai geometrinen epälineaarisuus).

Sekä virtaus- että kiinteän aineen mekaniikka

- kontaktimekaniikkaan liittyvien ilmiöiden mallintaminen, esimerkiksi metallien muovausprosessit
- virtaavan aineen ja rakenteen vuorovaikutus
- materiaalien käyttäytymistä kuvaavien konstitutiivisten mallien kehittely laskennallisin keinoin.

Erilaiset monifysikaaliset mallinnusongelmat

- metallurgiset prosessit, esimerkiksi jatkuvavalu ja sulaprosessit
- geotekninen mallintaminen
- monifaasimallinnus
- mikrofluidistiikka
- elektroniikan puolijohteiden mallinnus
- pietsosähköisten materiaalien mallinnus
- magnetiikan ja mekaniikan ilmiöiden yhtäaikainen mallinnus
- biologisten systeemien mallintaminen.

Laskennallisten haasteiden luonteesta kerrotaan tarkemmin seuraavassa luvussa.

Vajaa kolmannes vastaajista (12 vastaajaa) arvioi suurteholaskennan soveltamisen oman tutkimusaiheensa kannalta tarpeettomana. Enemmistö näistä vastaajista työskenteli kiinteän aineen mekaniikan tai rakenneanalyysin alalla (9 vastausta). Näihin sovelluskohteisiin mahdollisesti liittyvät ongelmat eivät ole luonteeltaan laskennallisia, vaan vaikeutena voi olla jokin muu mallinnukseen liittyvä seikka, esimerkiksi materiaalidatan puute. Tyypillisiä kohteita, joihin liittyen ei todettu suurteholaskennan tarpeita, olivat tavanomainen rakenneanalyysi ja ajoneuvojen dynaamisten ominaisuuksien simulointi käyttäen yksinkertaistettua jäykän kappaleen approksimaatioon perustuvaa mallia.

2.2 Laskennalliset haasteet

Laskennallisen tieteen käyttämä tutkimusmenetelmä voidaan yleisesti ottaen jakaa kuuteen vaiheeseen [HJL00]:

1. Ilmiön mallintaminen
2. Ratkaisumenetelmän kehitys
3. Ratkaisumenetelmän toteutus
4. Ilmiön tutkiminen tietokonetta käyttäen
5. Tulosten esitys
6. Tulosten tulkinta ja arviointi

Käytännössä tällaisen jaottelun tekeminen ei ole yksikäsitteistä, sillä asioita voidaan tulkita monin eri tavoin ja toisaalta vaiheet voivat liittyä läheisesti toisiinsa vaikeuttaen jaottelun tekemistä. Etenkin tapauksissa, joissa mallinnus pääosin perustuu tarjolla oleviin valmiisiin ohjelmistoihin (valmisohjelmistojen käyttö oli keskeisessä osassa suurimman osan vastaajista kohdalla), voi asioita tulkita monin tavoin. Tulkinnallisuudestaan huolimatta jaottelu on otettu lähtökohdaksi jäsenneltäessä vastaajien esille tuomia laskennallisia haasteita ja erityisongelmia.

Vastaajien kuvaamat mallinnuksessa kohtaamat pullonkaulatekijät voidaan kategorisoida kuuluvan etenkin vaiheisiin *ilmiön mallintaminen (1), ratkaisumenetelmän kehitys (2), ilmiön mallintaminen tietokonetta käyttäen (4)* sekä *tulosten tulkinta ja arviointi*. Seuraavassa on käsitelty kaikkein useimmin vastauksissa esille tulleita seikkoja.

Ilmiön mallintaminen

Kontinuumimekaniikan tapauksessa vaihe ilmiön mallintaminen tyypillisimmin sisältää ongelman matemaattisen muotoilemisen osittaisdifferentiaaliyhtälösysteemin muotoon. Matemaattisesti muotoillun ongelman pitäisi luonnollisesti olla hyvin aseteltu ja sen ratkaisun antaa tarpeisiin nähden riittävän tarkkoja ennustuksia kuvattavasta ilmiöstä. Ideaalisesti matemaattisen mallin kelvollisuus tulisikin vahvistaa sekä matemaattisen analyysin että kokeellisen tutkimuksen keinoin. Kontinuumimekaniikan alalla mallin teoreettinen analyysi on usein tapahtunut viiveellisesti — usein varsin pitkänkin ajan jälkeen siitä, kun mallin varsinainen käyttö on alkanut. Näin ollen mallin kokeellisella validioinnilla on edelleen korostuneen keskeinen rooli.

Useat vastaajat mainitsivat yhdeksi mallinnukseen liittyväksi pullonkaulatekijäksi itse mallin luomisen vaikeuden tai sen, että käytetyn matemaattisen mallin käyttöaluetta ei tarkasti tunneta. Tunnettu esimerkki tällaisesta ongelmasta on turbulenssin kuvaaminen käyttäen tätä varten erityisesti johdettuja turbulenssimalleja. Myös palamisen ja monifaasivirtausten mallinnukseen

liittyvien matemaattisten mallien luotettavuus tai käyttöalue mainittiin olevan osittain avoin kysymys.

Toinen useassa vastauksessa mainittu ongelma oli mikrorakenteiden huomioiminen suurempaa kokonaisuutta mallinnettaessa. Mikrorakenteen huomioiminen sellaisenaan voi johtaa epäkäytännöllisen suuriin laskentatehtäviin, mutta käyttämällä esimerkiksi homogenisointia saadaan ongelma helpommin lähestyttävään muotoon. Aiheella on kirjava joukko sovelluksia sekä virtaus- että kiinteän aineen mekaniikan alalla.

Ratkaisumenetelmän kehitys

Luotettavan ja laskennallisesti tehokkaan mallinnuksen kannalta onnistuneesti suunniteltu ratkaisumenetelmä on ensisijaisen tärkeä. Tässä vaiheessa tehdyt valinnat (numeeriset menetelmät, algoritmit jne.) määräävät etupäässä sen, kuinka suuria ongelmia voidaan käytössä olevien tietokoneresurssien puitteissa ratkoa soveltaen lähtökohdaksi otettua matemaattista mallia.

Käytettyjen numeeristen menetelmien suhteen kyselyyn saadut vastaukset eivät tuoneet yllätyksiä: keskeiset menetelmät ovat elementtimenetelmä, differenssimenetelmät ja kontrollitilavuusmenetelmä. Joitakin näistä poikkeaviakin menetelmiä mainittiin käytettävän. Näitä olivat reunaelementtimenetelmä, niin sanotut verkottomat menetelmät (Reproducing Kernel Particle Method), hila-Boltzman -menetelmä ja neuroverkkomenetelmät. Molekyylidynamiikkasimulointeja tarvitsi kaksi vastaaja. Mainittakoon, että virtausten simuloinnissa kontrollitilavuusmenetelmä on edelleen dominoiva menetelmä, kun taas kiinteä aineen mekaniikan alalla elementtimenetelmä on säilyttänyt keskeisen asemansa.

Kontinuumimekaniikkaan liittyen laskennallisesti haastavat ongelmat lähes poikkeuksetta edellyttävät suurten lineaaristen yhtälösysteemien ratkaisemista iteratiivisia algoritmeja käyttäen. Ei lainkaan yllättäen suuri tietokonemuistin tarve sekä yhtälöryhmien ratkaisemiseen tarvittava pitkä laskentaaika mainittiin kaikkein useimmin pullonkaulaksi. Ongelmaan ei ole kuitenkaan odotettavissa yleisratkaisua, sillä esimerkiksi iteratiivisten algoritmien suppenemista nopeuttavien pohjustimien kehittely on tällä hetkellä enemmän tai vähemmän ongelmakohtaista. Toisaalta suurimman osan vastaajista tehdessä mallinnusta käyttäen kaupallisia ohjelmistoja on ratkaisualgoritmit kehitettävä ohjelmistoissa tarjolla olevista lineaarialgebran menetelmistä. Syntyvien systeemien kokoa voidaan yrittää pienentää myös esimerkiksi jakamalla alkuperäisen mallin ratkaiseminen pienempiin mutta toisiinsa kytkettyihin osaongelmiin.

Keskeinen ongelma on myös epälineaaristen kytkettyjen ongelmien — kuten kontaktimekaniikan ongelmat — ratkaisemiseen soveltuvien menetelmien kehittäminen. Tällaisilla ratkaisumenetelmillä on paljon käytännöllisiä sovelluksia esimerkiksi prosessi- ja paperiteollisuuden ongelmien mallinnuksessa.

Ratkaisumenetelmän kehitykseen liittyvänä seikkana on mainittava lisäksi ratkaisumenetelmien kehittäminen ohuiden rakenteiden mekaanista käyttäy-

tymistä kuvaaville malleille. Laskennallisesti tehokkaan ja luotettavan numeerisen menetelmän kehittäminen joillekin ohuiden rakenteiden malleille on edelleen avoin kysymys. Vastaajien joukossa oli tällä alalla perustutkimusta tekeviä tutkijoita. Toisaalta etenkin monimutkaisiin ongelmiin (esimerkiksi kontaktin huomioiminen) sovellettavissa olevien dimensioreduktiomallien jatkokehittelylle on vastausten valossa edelleen tarvetta.

Ilmiön tutkiminen tietokonetta käyttäen

Etenkin monifysikaalisten ongelmien tapauksessa tyypillinen vaikeus liittyen ilmiön tutkimiseen tietokoneessa on se, että koko simuloinnin tekemiseksi joudutaan yhdistelemään useiden eri ohjelmistojen käyttöä. Esimerkkinä tällaisesta alueesta mainittakoon metallurgian prosessien mallinnus, jossa on tarpeen yhdistellä esimerkiksi termodynaamista mallinnusta, reaktiokinetiikkaa, virtausmallinnusta ja lämmönsiirron mallinnusta. Ohjelmistoihin liittyviä seikkoja käsitellään tarkemmin ohjelmistoja ja tietokoneresursseja koskevassa luvussa 2.3.

Useassa vastauksessa mainittiin myös monimutkaisten geometrioiden käsittelemiseen liittyvä vaivalloisuus. Laskentaverkon luominen saattaakin olla monesti kaikkein eniten henkilötyötä vaativa osuus tietokonelaskennan valmistelusta.

Tulosten tulkinta ja arviointi

Kuten edellä jo mainittiin on matemaattisten mallien kokeellisella validioinnilla keskeinen rooli. Useat vastaajat tekivät myös kokeellista tutkimusta mallinnuksella saatujen tulosten oikeellisuuden arvioimiseksi. Kokeelliseen tutkimukseen liittyvänä pullonkaulana mainittiin tähän vaiheeseen käytettävissä olevien resurssien vähäisyys.

2.3 Ohjelmistot ja tietokoneresurssit

Virtauslaskentaan ja rakenneanalyysiin on tarjolla useita mallinnusmahdollisuuksiltaan monipuolisia kaupallisia ohjelmistoja, joista monet ovat pitkän kehitystyön tuloksia. Lähes kaikki vastaajat käyttivätkin kaupallisia tai vapaasti saatavilla olevia ohjelmistoja (34 vastaajaa). Tavallista on myös se, että ohessa tehdään omaa ohjelmistokehitystä, sillä yli puolella vastaajista oli omaa ohjelmistokehitystä (23 vastaajaa). Puhtaasti oman ohjelmistokehityksen varassa mallinnusta teki 3 vastaajaa (tutkimuksen liittyessä turbulenssin mallintamiseen ja monifaasivirtauksiin). Muiden saman alan tutkimusryhmien tai yhteistyökumppaneiden kehittämiä ohjelmistoja käytti 6 vastaajaa.

Kaikkiin esille tulleisiin tutkimuskohteisiin kaupalliset tai vapaasti saatavilla olevat ohjelmistot eivät kuitenkaan tarjoa riittäviä mallinnusmahdollisuuksia

(ilman kaupallisiin tai vapaasti saatavilla oleviin ohjelmistoihin turvautumista toimi 5 vastaajaa). Tyypillisesti näihin kohteisiin liittyvät ongelmat ovat monifysikaalisia. Ongelmakentistä, joihin ei tällä hetkellä ollut käytettävissä tyydyttäviä valmiita ohjelmistoja, mainittakoon pietsosähköisten materiaalien sekä magnetiikan ja mekaniikan ilmiöiden välisen kytkennän mallinnus ja mikrofluidistiikka.

Laskennallisesti haastavien ongelmien nopea ratkaiseminen perustuu nykyisin ennen kaikkea rinnakkaislaskentaa hyödyntäviin tietokoneisiin, joissa laskentatehtävä jaetaan eri prosessoreilla suoritettaviin osiin. Tällaisen ratkaisutekniikan hyödyntäminen edellyttää myös rinnakkaislaskentaan soveltuvia ohjelmistoversioita.

Rinnakkaislaskentaa kertoi tällä hetkellä käyttävänsä 11 vastaajaa, joista 8 käytti myös CSC:n tietokoneita rinnakkaislaskentaan. Enemmistö rinnakkaislaskentaa käyttävistä vastaajista (7 vastaajaa) arvioi käytössään olevat tietokoneresurssit riittäviksi. Rinnakkaislaskentaa sovellettiin turbulenssin, palamisprosessien, metallien muovausprosessien, metallurgisten prosessien, elektroniikan puolijohteiden, biologisten systeemien ja geoteknisten ilmiöiden mallinnuksessa sekä monifaasivirtausten simuloinnissa.

Reilu kolmannes vastaajista (16 vastaajaa) ei käyttänyt rinnakkaislaskentaa vielä, mutta uskoi saavansa rinnakkaislaskentaan siirtymisestä merkittäviä hyötyjä. Puolet näistä vastaajista (8 vastaajaa) arvioi nykyiset tietokoneresurssinsa riittämättömiksi nykyisiin mallinnustarpeisiinsa nähden. Rinnakkaislaskennalla uskottiin olevan käyttöä mm. seuraavissa kohteissa: Navierin ja Stokesin virtausyhtälöiden ratkaisu, epälineaarinen 3D-rakenneanalyysi (esimerkiksi epälineaarinen materiaalimalli), biomekaniikka, monitavoitteinen rakenteiden optimointi, kontaktimekaniikka mukaanlukien rakenteen ja virtaavan aineen vuorovaikutus, materiaalivirtauksen simulointi muovausprosesseissa, monifaasimallinnus, magnetiikan ja mekaniikan ilmiöiden välisen kytkennän mallinnus, pietsosähköisten materiaalien mallinnus sekä monifysikaalinen mallinnus yleisesti.

Ohjelmistojen sopimattomuus rinnakkaislaskentaan ei ole mitenkään yleinen este rinnakkaislaskennan käyttämiselle. Ainoastaan 5 nykyisin rinnakkaislaskentaa käyttävistä tai rinnakkaislaskentaa mahdollisesti tulevaisuudessa käyttävistä vastaajista mainitsi, että jokin mallinnukseen käytetyistä ohjelmistoista ei tarjoa rinnakkaislaskentamahdollisuutta.

Kyselyyn osallistuneista 12 arvioi suurteholaskennan solveltamisen oman tutkimusaiheensa kannalta tarpeettomana. Nämä vastaajat olivat luonnollisesti tyytyväisiä nykyisin käytössään oleviin tietokoneresursseihin.

2.4 Uudet haasteet

Vastaajat kertoivat mm. seuraavista uusista laskennallisista haasteista:

- turbulenssin huomioiminen virtaussimuloinneissa, esimerkiksi palamisen simuloinnissa

- moniparametriset rakenteiden stabiiliusanalyysit
- ajoneuvotekniikkaan liittyen renkaiden mallintaminen
- rakenteen ja virtauksen vuorovaikutus (useita sovelluksia)
- prosessiteollisuuden monimutkaisten virtausten simulointi, esimerkiksi monifaasivirtaukset huokoisessa aineessa sekä kemian ja monifaasivirtausten yhdistäminen
- itseorganisoituvien (bio)rakenteiden dynamiikan tutkiminen sekä yleisesti biosysteemien dynaamisten ominaisuuksien tutkiminen
- elektroniikan ja optoelektroniikan yksittäiskiteisten materiaalien mallinnus
- molekyylidynamiikkasimuloinnin yhdistäminen jatkumomalleihin
- aikasarjasimuloinnin yhdistäminen monifysikaalisen ilmiön simulointiin
- todennäköisyyspohjaiset FE-analyysit
- yleisesti ottaen analyysit entistä monimutkaisemmissa geometrioissa ja mallien monifysikaalisuuden lisääminen.

Osaavan henkilöstön kouluttaminen ja rekrytointi nähtiin avainkysymyksenä tulevaisuuden kannalta. Tutkimusryhmien pienet koot saattavat osittain heijastella tarjolla olevien osaavien tekijöiden niukkuutta.

Grid-tekniikoiden kehittämisellä pyritään edistämään tietokoneiden globaalista etäkäyttöä ja hajautetun datan saatavuutta [Fos02]. Valtaosa kyselyyn vastanneista (31 vastaajaa) ei osannut arvioida grid-tekniikoiden mahdollista hyödyllisyyttä oman tutkimuksensa kannalta. Reilu puolet lopuista vastaajista (5 vastaajaa) arvio grid-tekniikoiden olevan mahdollisesti hyödyllisiä jäljelle jäävien arvioidessa grid-tekniikat todennäköisesti hyödyttömiksi.

3 Johtopäätökset

Tutkimustyön haasteet ja valmiudet suurteholaskentaan

Vastaajien useimmin kohtaamat vaikeudet liittyivät ilmiön mallintamiseen sekä ratkaisumenetelmän kehitykseen. On syytä kiinnittää erityistä huomioita matemaattisten mallien luotettavuuden ja käyttöalueen arvioimiseen sekä kokeellisin että teoreettisin keinoin.

Virtauslaskentaan ja rakenneanalyysiin on tarjolla useita monipuolisia kaupallisia tai vapaasti saatavilla olevia ohjelmistoja. Näitä ohjelmistoja käytetäänkin laajasti. Suurin osa vastaajien käyttämistä ohjelmistoista tarjosi rinnakkaislaskentamahdollisuuden, joten ohjelmistojen sopimattomuus rinnakkaislaskentaan ei ole yleinen este suurteholaskennan käyttämiselle.

Toisaalta kaikkiin vastauksissa esille tulleisiin ongelmiin ei ole saatavissa riittävän monipuolisia ohjelmistoja. Näihin kohteisiin liittyvät mallinnusongelmat ovat tyypillisesti monifysikaalisia. Monifysikaalisien ongelmien parissa työskentelevien tutkijoiden välistä yhteistyötä ja tiedonvaihtoa tulisi lisätä resurssien tehokkaaksi käyttämiseksi.

Keskeiset tutkimuskohteet ja menetelmät

Huomioiden nykyiset tutkimusaiheet sekä esille tulleet uudet laskennallisesti haastavat kohteet voidaan joitakin tutkimusaiheita pitää keskeisinä. Näihin kuuluvat turbulenssin mallintaminen, monifaasimallinnus ja materiaalien käyttäytymistä kuvaavien konstitutiivisten mallien laskennallinen kehittely. Myös kontaktimekaniikan ilmiöiden mallintaminen mukaanlukien virtaavan aineen ja rakenteen vuorovaikutus on keskeinen aihe. Ratkaisumenetelmien osalta suurin osa vastaajista kehitti tai sovelsi alallaan vakiintuneita menetelmiä, kuten elementtimenetelmä, differenssimenetelmät ja kontrollitilavuusmenetelmä.

Mahdollisuudet poikkitieteellisyyden edistämiseen

Esille tulleiden tutkimuskohteiden joukossa oli joitakin epätyypillisiä aiheita, mutta valtaosa tutkimuskohteista oli perinteisen kontinuumimekaniikan piiristä. Kontinuumimekaniikkaan liittyvän mallinnusosaamisen laajamittainen vienti poikkitieteellisille sovellusalueille on vielä näkemättä.

Toimenpide-ehdotuksia koskien CSC:n toimintaa

Monifysikaalisen mallinnuksen tuki. Monifysikaalinen mallinnus on syytä pitää yhtenä toiminnan painopistealueena jatkossakin. Monifysikaalisien ongelmien parissa työskentelevien tutkijoiden yhteistyön ja tiedonvaihdon lisäämiseksi voitaisiin järjestää esimerkiksi monifysikaalisen mallinnuksen teemapäivä. Lisäksi Elmer-ohjelmiston tarjoamista mahdollisuuksista on aktiivisesti tiedotettava mahdollisille uusille käyttäjille.

Osaamisen kehittäminen. Osaamista tarvitaan etenkin mallinnuksen ydinalueilla, ilmiön mallintamisessa ja ratkaisumenetelmien kehityksessä. Keskeisiksi todetut tutkimusaiheet on huomioitava kehitettäessä CSC:n asiantuntijoiden osaamista ja arvioitaessa mahdollisten yhteistyöhankkeiden yleishyödyllisyyttä.

Ohjelmistot ja niiden käytön tuki. CSC:n ylläpitämien ohjelmistojen osalta voidaan jatkaa entiseltä pohjalta. Kyselyn yhteydessä esitetyt ohjelmistoja koskevat toiveet käsitellään.

Poikkitieteellisyyden edistäminen. Kontinuumimekaniikan mallinnusosaamista ei vielä sovelleta perinteisen kontinuumimekaniikan piirin ulkopuolella laajasti. Pioneeritoimintaa tarvitaan mallinnusosaamisen laajemman käytön edistämiseksi.

Liitteet

A Kontinuumimekaniikan laskennalliset haasteet -kysely

I Yhteystiedot

II Toiminnan yleiskuvaus

1. Mitä alaa toimintanne/tutkimuksenne edustaa?

   ☐ Virtausmekaniikka
   ☐ Kiinteän aineen mekaniikka tai rakenneanalyysi
   ☐ Tutkimus liittyy sekä virtaus- että kiinteän aineen mekaniikkaan
   ☐ Kyseessä on poikkitieteellinen/monifysikaalinen ala tai vakiintunut oma tieteen haaransa, johon liittyen tarvitaan myös virtaus- tai kiinteän aineen mekaniikkaan liittyvien ilmiöiden mallintamista (esim. akustiikkaan tai ympäristötieteisiin liittyvä tutkimus)
   ☐ Jokin muu ala: _____

2. Kuvailkaa toimintaanne/tutkimustanne yleistajuisesti. Mitä tutkitte, miksi ja miten tutkitte?
3. Tutkimustanne kuvaavia avainsanoja.
4. Tutkimuksenne laatu.

   ☐ Perustutkimus
   ☐ Soveltava tutkimus
   ☐ Tuotekehitys
   ☐ Opetus

5. Tutkimusryhmänne koko henkilöinä: _____
6. WWW-sivut, joilta saa lisätietoa liittyen tutkimukseenne.

III Käytettävät ohjelmistot ja tietokoneresurssit

1. Mikä tekee tutkimuskohteenanne olevasta ongelmasta laskennallisesti haastavan? Mitä pullonkauloja mallinnuksessa tai laskennassa on? Voitte vastata yksityiskohtaisesti.
2. Mitkä ovat keskeisimmät numeeriset menetelmät, joita käytätte tutkimuksessanne?
3. Kehitättekö itse tutkimuksessa sovellettavia ohjelmistoja?

   ☐ Kyllä ☐ Ei

4. Käytättekö laskentaan muiden kehittämiä ohjelmistoja?

   ☐ Ei
   ☐ Kyllä, käytämme kaupallisia tai vapaasti saatavilla olevia ohjelmistoja: _____
   ☐ Kyllä, käytämme muiden saman alan tutkimusryhmien tai yhteistyökumppaneiden kehittämiä ohjelmistoja: _____

5. Käytössämme olevat tietokoneresurssit ovat riittävät nykyisiin mallinnustarpeisiin nähden.

   ☐ Kyllä ☐ Ei

6. Nykyisin suurin laskentateho saadaan rinnakkaislaskentaa hyödyntävistä koneista, joissa tehtävä jaetaan eri prosessoreilla suoritettaviin osiin. Mikä on tilanteenne rinnakkaislaskennan käytön suhteen?

   ☐ Emme käytä emmekä tarvitse rinnakkaislaskentaa
   ☐ Käyttämämme ohjelmisto ei tarjoa rinnakkaislaskentamahdollisuutta
   ☐ Emme käytä rinnakkaislaskentaa vielä, mutta uskomme, että rinnakkaislaskentaan siirtyminen voisi tuoda merkittäviä hyötyjä
   ☐ Käytämme rinnakkaislaskentaa
   ☐ Käytämme CSC:n koneita rinnakkaislaskentaan

7. Onko alallanne suurteholaskentaa soveltavia ulkomaisia ryhmiä, joiden kehittämää ohjelmistoa tai laskentamenetelmiä haluaisitte itse soveltaa tutkimuksessanne? Antakaa mielellään tutkimusryhmän ja/tai ohjelmiston nimi tai kotisivu.

IV Kehitysnäkymät ja tulevaisuuden haasteet

1. Millaisia uusia suurteholaskentaa vaativia tutkimuskohteita näette alallanne?

2. Viime aikoina on käynnistetty grid-hankkeita. Uskotteko, että jokin grid-tekniikka voisi hyödyttää omalla alallanne tehtävää tutkimusta?

   - ☐ Ei
   - ☐ Kyllä
   - ☐ En tunne grid-tekniikoita

V Muuta

Muita kommentteja tai palautetta.

B Kyselyyn vastanneet yksiköt

Seuraavat laitokset ja laboratoriot vastasivat kyselyyn.

Jyväskylän yliopisto

Fysiikan laitos

Oulun yliopisto

Mikroelektroniikan laboratorio
Teknillisen mekaniikan laboratorio

Tampereen teknillinen yliopisto

Elektroniikan laitos
Energia- ja prosessitekniikan laitos
Materiaaliopin laitos
Rakennetekniikan laitos
Teknillinen mekaniikka ja optimointi

Teknillinen korkeakoulu

Aerodynamiikan laboratorio
Autotekniikan laboratorio
Avaruustekniikan laboratorio
Elektroniikan valmistustekniikan laboratorio
Kevytrakennetekniikan laboratorio
Koneensuunnittelun laboratorio
Laivalaboratorio
Laskennallisen tekniikan laboratorio
Lujuusopin laboratorio
Metalli- ja materiaaliopin laboratorio
Metallurgian laboratorio
Mikroelektroniikkakeskus
Matematiikan laitos
Materiaalifysiikan laboratorio
Polttomoottorilaboratorio

Rakenteiden mekaniikan laboratorio
Sovelletun termodynamiikan laboratorio
Sähkömekaniikan laboratorio

VTT

Prosessit
Tuotteet ja tuotanto

Åbo Akademi

Värmeteknik

Kirjallisuutta

[Bat03] K.J. Bathe, toim. *Computational Fluid and Solid Mechanics 2003*. Elsevier, 2003.

[Bat01] K.J. Bathe, toim. *Computational Fluid and Solid Mechanics, Vol. 1–2*. Elsevier, 2001.

[Fos02] I. Foster. *The Grid: A New Infrastructure for 21st Century Science*. Physics Today, February 2002.

[HJL00] J. Haataja, J. Järvinen ja Y. Leino. *Sillanrakennuksesta lääkeainesuunnitteluun: Matemaattinen mallintaminen suomalaisissa yliopistoissa*. CSC, 2000. `http://www.csc.fi/raportit/mallinnus/`.

[Hän03] I. Hänninen. *Sähkömagnetiikan laskennalliset haasteet*. CSC, 2003. `http://www.csc.fi/raportit/smghaasteet/`.

[KHF+03] S. Kotila, J. Haataja, P.-L. Forsström, J. Ignatius, L. Jukka, M.M. Laine, N. Runeberg, P. Råback, V. Savolainen, toim. *CSC Report on Scientific Computing 2001-2003*. CSC, 2003. `http://www.csc.fi/reports/cr01-03/`.

[Pus03] L. Puska. *Moniskaalainen malllinnus eri tiedealoilla*. CSC, 2003. `http://www.csc.fi/raportit/moniskaala/`.

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

[RSS03] P. Råback, K. Santaoja, R. Stenberg. *VIII Suomen mekaniikkapäivät*. Teknillisen korkeakoulun lujuusopin laboratorion julkaisuja TKK-LO-36, 2003.