

Narava, inženirji in numerične simulacije

Nature, engineers and numerical simulations



Najbrž si ni težko zamisliti, o čem razmišlja pilot vesoljskega plovila tik pred vstopom v zgornje plasti atmosfere. Verjetno je naučen slediti natančnemu protokolu in z robotsko natančnostjo izvajata vnaprej do potankosti izdelan postopek vrnitve plovila na Zemljo. Skoraj gotovo mu misli ne uidejo na skupino inženirjev in znanstvenikov, ki je plovilo načrtovala in predvsem z uporabo numeričnih simulacij predvidela obnašanje plovila pri vrnitvi na Zemljo.

It is probably not hard to imagine what the thoughts of a pilot of a space vehicle just before re-entry into the atmosphere are. He is most likely trained to follow a precise protocol, which he carries out with robotic precision. He does not think on the group of scientists and engineers, who designed the vehicle and by relying heavily on computer simulations, foresaw the behaviour of the vehicle during re-entry.

Vstop plovila skozi atmosfero pri povratku na Zemljo je morda najbolj očiten primer inženirskega problema, pri katerem si načrtovalci pri razvoju plovila ne morejo pomagati z izvajanjem velikega števila poizkusov. Uporabljajo rezultate numeričnih simulacij, ki posnemajo naravo in procese v njej do takšne mere, da omogočajo napovedovanje obnašanja plovila pri najrazličnejših pogojih.

V zadnji polovici prejšnjega stoletja je prišlo do bistvenega napredka v znanosti in tehniki. Vsak izmed nas je v vsakdanjem življenju močno odvisen od novih tehnologij. Dandanes narodi in velike korporacije izvajajo projekte, katerih velikost in kompleksnost presejata sanje prejšnje generacije. Rutinsko uporabljamo naprave, ki jih naši stari starši primerjajo s čudeži. Hkrati od trga zahtevamo izključno ekološko sprejemljive izdelke z vedno boljšim izkoristkom, uporabnostjo in varnostjo za manjši strošek.

Pretekle generacijam je zadostoval proces razvoja s poskušanjem in učenjem na napakah. Glede na zapletenost, velikost in ceno današnjih naprav je razvoj z izdelavo in preizkušanjem pomanjšanih modelov nemogoč. Preizkušanje in učenje na pravi napravi je velikokrat predrago, vzame preveč časa in je preveč zapleteno, da bi bilo praktično. Potreba po napovedovanju delovanja naprav in možnost izboljšav delovanja za zagotavljanje večje varnosti, kvalitete in nižje cene je postala ključna za uspešno industrijsko proizvodnjo in reševanje okoljskih problemov. Raziskave in razvoj na področju matematičnega modeliranja in simuliranja

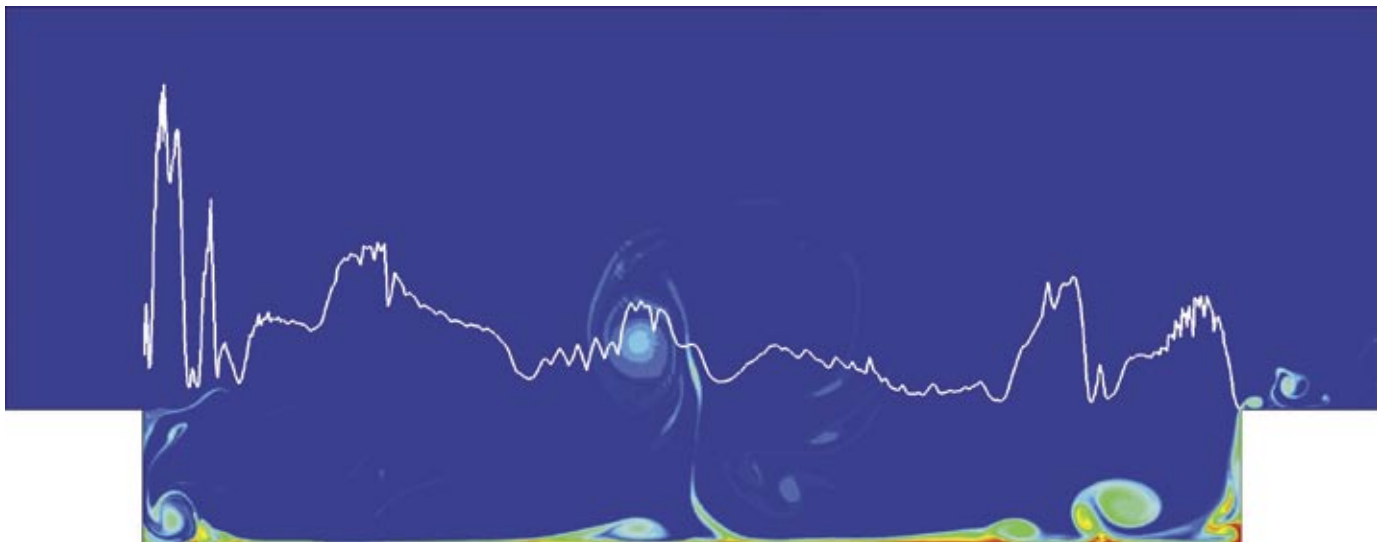
procesov v naravi so zato tako nujne.

Oglejmo si nekaj primerov uporabe numeričnega modeliranja v inženirstvu in naravoslovju. Najbolj očiten primer, ki zadeva prav vse nas, je napovedovanje vremena. Ne bom izgubljal preveč besed o tem, kako koristno je poznati vreme vnaprej. Marsikatero nevshečnost si prihranimo, če zvečer pogledamo vremensko napoved. Moram pa priznati, da bi bilo res lepo, ko načrtujem pomladanski izlet z jadrnico, če bi lahko vreme v času jadranja poznal kakšna dva meseca vnaprej, najraje takrat, ko plačujem izposojlo jadrnice. Razlog, zakaj ne napovedujemo vremena za dolga obdobja, je težko razložiti. Brez uporabe pojmov, kot so parcialne diferencialne enačbe, nelinearni sistemi, kaos, turbulenca, skorajda ne gre. Zato so v današnji družbi še vedno zelo priljubljene metode srednjeveškega tipa, ki po večini za napovedi uporabljajo zvezde ali pa pripisujejo velik pomen majhnim naravnim številom.

Prvi resni poskusi napovedovanja vremena segajo v čas, ko so se začele prve sistematične meritve vremenskih pogojev. Žal se je takoj pokazalo, da samo s sklepanjem na razvoj vremena od danes do jutri ne pridemo do kaj prida točnih napovedi. Morda je še najboljša napoved tista, ki pravi, da bo vreme jutri takšno, kot je danes. Statistika pravi, da boste v tem primeru dobrih sedem mesecev na leto imeli prav.

Če želimo vreme napovedati vnaprej, ga moramo simulirati. Procese, ki potekajo v naravi, opišemo z enačbami. Ker menda vsaka enačba v poljudnem besedilu prepolovi število bralcev, tu ne bom navedel prav nobene. Pa vendar je mogoče fizikalne lastnosti atmosfere, kot so tlak, vlažnost, hitrost vetra, gostota zraka, temperatura, sončno sevanje in čas, medsebojno povezati v sistem enačb. Določimo območje, v katerem bi radi simulirali razvoj vremena. Potrebujemo še začetno stanje v atmosferi, ki ga izmerimo. Predpišemo pogoje na robu območja in z eno izmed metod numerične matematike sistem časovno odvisno rešimo. Drugače povedano, na območju, ki smo ga izbrali, izračunamo časovno odvisno spreminjanje temperature, vlažnosti, hitrosti vetra itd. Podobno ravnamo pri simulaciji katerega koli problema: naravne zakonitosti zapišemo z matematično-fizikalnim modelom, ki ga ob poznavanju robnih in začetnih pogojev numerično rešimo.

Veliko osnovnih zakonov v fiziki, kemiji, biologiji in ekonomiji lahko zapišemo z diferencialnimi enačbami. Diferencialno enačbo v matematiki definiramo kot enačbo v kateri odvodi funkcije nastopajo kot spremenljivke. Med najbolj znane sodijo Maxwellove enačbe v elektromagnetizmu, Einsteinove enačbe v splošni relativnosti, Schrödingerjeva



Raziskujemo vpliv postavitve tokovnih ovir na robovih sončnega kolektorja na toplotne izgube. Slika prikazuje izolirane temperature nad kolektorjem ter s krivuljo toplotni tok iz kolektorja. Preko kolektorja širine 32 centimetrov piha veter s hitrostjo 8 m/s, kolektor je za 50 K toplejši od vetra. Simulacije na vseh slikah so izvedli sodelavci Inštituta za energetsko, procesno in okoljsko inženirstvo Fakultete za strojništvo na Univerzi v Mariboru.

enačba v kvantni mehaniki in Navier-Stokesove enačbe za dinamiko tekočin. Velikokrat se zgodi, da v različnih znanstvenih disciplinah pridemo do enačb enakega tipa. Na primer gostoto magnetnega polja in stacionaren električni tok povezuje enak sistem parcialnih enačb kot hitrostno in vrtilno polje pri toku nestisljive tekočine. Diferencialne enačbe delimo na več tipov – na navadne, parcialne, stohastične itd. Red diferencialne enačbe pa določimo z najvišjim redom odvoda v njej. Analitičnih rešitev diferencialnih enačb navadno ne poznamo. Obstajajo samo za zelo preproste primere v poenostavljenih pogojih. Utež na vrhovi za majhne odmike iz ravnovesne lege ob neupoštevanju upora in trenja niha sinusno. Ta rezultat lahko analitično izpeljemo iz diferencialne enačbe za nihanje nihala. Ko pa na utež pritrdimo še eno vrhovo z utežjo, je simulacija tako nastalega dvojnega nihala izredno težavna. Analitična rešitev ne obstaja, sistem je nelinearen in kot tak zelo občutljiv na začetne pogoje. Dvojno nihalo opišemo z navadno diferencialno enačbo. Simuliramo ga z metodo Runge Kutta, kjer od začetnega stanja z majhnim korakom napredujemo po času. Problemi ekološke narave so neprimerno bolj kompleksni. Razširjanje onesnaževal v podzemni vodi, gibanje aerosolov v mestnih središčih, gibanje delcev v izpuhu dizelskega motorja opišemo s parcialnimi diferencialnimi enačbami. Zaradi izredne zapletenosti in velikega števila medsebojno povezanih procesov, ki so značilni za okoljske probleme, pridemo do matematično fizikalnega zapisa s pomočjo predpostavk in poenostavitev. Vsi problemi so prostorske narave in zahtevajo simulacijo velikega območja. Navadno nas zanima razvoj glavnih spremenljivk, zato je rešitev potrebno iskati v daljšem časovnem obdobju. Metod reševanja sistemov parcialnih diferencialnih

enačb je zelo veliko. Med najbolj znane in največkrat uporabljene sodijo metoda končnih razlik, metoda končnih elementov, metoda končnih volumnov in metoda robnih elementov. Vse temeljijo na podobnem načelu. Območje izračuna napolnimo z elementi (tetraedri, heksaedri, prizme), ki imajo vozlišča. Parcialno diferencialno enačbo zapišemo v diskretno obliko za vozlišča elementov, potek neznanih funkcij znotraj elementov pa interpoliramo. Tako za vsako izmed vozlišč dobimo eno linearno enačbo. Ko sistem linearnih enačb za vozlišča rešimo, poznamo funkcijo, ki smo jo iskali, v vseh vozliščih. Več elementov uporabimo, več vozlišč imamo v območju in bolj natančna je rešitev. Natančnost rešitve ne smemo izbirati poljubno. Če je mreža vozlišč preredka, bo z njo nemogoče popolnoma opisati dogajanje in rešitev bo napačna. Če simuliramo gibanje aerosolov v zraku v mestnem središču, moramo prostor med stavbami opisati z dovolj velikim številom vozlišč, da bo vpliv stavb pravilno upoštevan. Drugače povedano, mreža vozlišč mora biti dovolj gosta, da na njej zapišemo vse fizikalne strukture, ki se lahko pojavijo. Ko piha veter preko stavb, se za njimi pojavijo vrtinci. Velikokrat se pokaže, da tudi najmanjše strukture vplivajo na celotno rešitev in jih ne smemo zanemariti. Tako nam velikost najmanjše strukture pri pojavu določa gostoto računske mreže. Izkaže se, predvsem pri turbulentnih tokovih, da je potrebno število računskih točk tako veliko, da presega zmogljivosti sodobnih računalnikov. Denimo, da želimo simulirati tok v reki. Morda z namenom umetnega ustvarjanja tokovnih razmer, ki zmanjšujejo erozijo. Naj bo reka globoka en meter, široka 100 metrov, simulirali pa bi radi en kilometrski odsek. Če teče reka dovolj hitro, da je tok turbulenten, lahko pričakujemo, da bodo najmanjši vrtinci v njej imeli premer reda velikosti en mili-



Slika prikazuje tokovno in temperaturno polje v zgovalni komori sežigalnice odpadkov. Ob odprtinah za dovod zraka, kjer je zgorevanje najintenzivneje, opazimo najvišje temperature.

meter. Za dostojen opis vrtinca v enem kubičnem milimetru potrebujemo sto vozlišč. V celotni prostornini reke, ki jo simuliramo, bomo torej imeli 10^{16} vozlišč. Če privzamemo, da bi v vsakem vozlišču radi poznali tlak in tri komponente vektorja hitrosti ter da vsako številko zapišemo s štirimi bajti, je potrebno shraniti 150 milijonov gigabajtov. Očitno preveč, celo za superračunalnike. Pomagamo si z modeliranjem vpliva struktur, ki jih zaradi predrde računske mreže ne simuliramo. Ker poznamo fiziko pojava, lahko ob vpeljavi poenostavitve in predpostavk najmanjše strukture opišemo z empiričnim modelom. Večkrat se zanašamo tudi na uporabo statističnih metod, kjer namesto trenutnih veličin simuliramo samo povprečne.

Ne glede na to, kakšen problem rešujemo, če želimo resnično simulirati procese v naravi, je računska zahtevnost izredno velika. Na eni strani računsko zahtevnost zmanjšujemo z vnašanjem poznavanja fizike v problem in ga tako poenostavljamo. Na drugi strani poskušajo raziskovalci razvijati nove numerične algoritme, ki z uporabo modernih matematičnih prijemov, kot je na primer valčna transformacija, dosegajo natančnejše rezultate v krajšem računskem času. Hkrati z uporabo vzporednega računanja na več računalnikih povečujemo računsko moč.

Superračunalniki predstavljajo levji delež računske moči za inženirske aplikacije. Nekdaj nedosegljivo dragi sistemi so danes na razpolago tako industrijskim uporabnikom kot raziskovalcem v več desetih centrih po svetu. V zadnjem času opažamo dve smeri izgradnje superračunalniških sistemov.

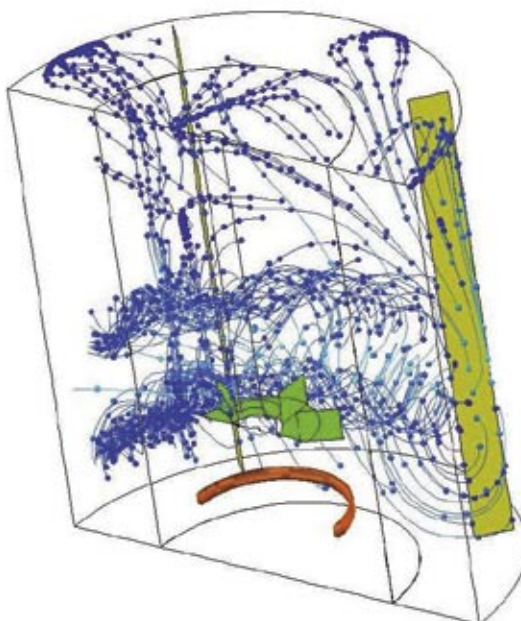
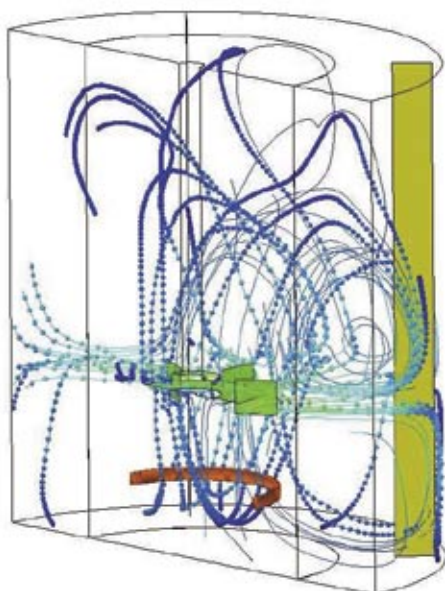
Klasičnim vektorskim računalnikom vedno bolj konkurirajo cenejši sistemi, sestavljeni iz gruč poceni računalnikov.

Vektorski računalniki imajo več procesorjev, ki hkrati dostopajo do skupnega pomnilnika. Vanje je vgrajenih zelo veliko število zelo majhnih pomnilniških čipov, kar omogoča procesorju zelo hiter dostop do podatkov v pomnilniku. Programer paralelizira predvsem zanke s posebnimi direktivami prevajalnika. Ko se na vektorskem računalniku paralelen program zažene, v začetku zaseda le en procesor. Ko pa je potrebno izvesti zanko, program uporabi ostale proste procesorje in mednje porazdeli delo. Ker vsi procesorji dostopajo do istega pomnilnika, komunikacija med njimi ni potrebna. Programer mora paziti le na to, da je izvajanje zanke neodvisno. Če na primer tretji procesor potrebuje podatek, ki ga prvi še ni izračunal, je seveda potrebno poskrbeti, da počaka na podatek.

Gruče poceni računalnikov, povezanih med seboj s hitro mrežno povezavo, so resen konkurent vektorskim superračunalniškimi sistemom. V tem primeru vsak procesor dostopa samo do svojega pomnilnika, pa še to zelo počasi. Izkaže se, da pri večini matematičnih operacij procesor potrebuje več časa, da pridobi potrebne podatke iz pomnilnika, kot pa da izvede samo operacijo. Hitrega predpomnilnika pa je odločno premalo, da bi vanj lahko zapisali vse podatke za resen izračun. Druga slabost gruč poceni računalnikov je prenos podatkov po mreži. Če želimo rešiti nek problem paralelno, je prej ali slej potrebno rezultate, ki jih je izračunal en procesor, sporočiti drugim. To pa je kljub hitrim mrežnim povezavam najožje grlo. Ob zagonu se zažene isti program na vseh procesorjih, ki jih nameravamo uporabiti, programer pa mora ročno poskrbeti za vso komunikacijo in sinhronizacijo med procesorji. Večina gruč deluje pod operacijskim sistemom Linux in za dodeljevanje procesorskega časa uporabnikom uporabljajo sistem vrst.

V tem numerično - matematično-fizikalnem pogledu se napovedovanje vremena prav nič ne razlikuje od simulacije vstopne trajektorije vesoljskega plovila. Prav tako so razširjanje hrupa, ki ga povzroča avtomobilsko ogledalo pri visokih hitrostih, ali pa tok podtalne vode okoli črpališča ali simulacija razmer v sežigalnici problemi enake narave in vsaj v načelu z enako rešitvijo. Fiziko problema opišemo z enačbami in jih z metodami numerične matematike rešimo. Naredimo mnogo poenostavitvev in predpostavk, enačbe rešujemo le približno. Dober inženir se jih zaveda in jih pri predstavitvi in uporabi rezultatov upošteva.

Naj se za konec vrnemo k dolgoročnemu napovedovanju vremena. Očitno je, da je stanje v atmosferi v prihodnosti odvisno od stanja danes. Ko z merilnimi inštrumenti izmerimo današnje, začetno stanje v atmosferi, naredimo majhno napako. Napake se ne moremo znebiti, tudi v principu ne. Eden izmed temeljev fizike je, da je hitrost in pol-

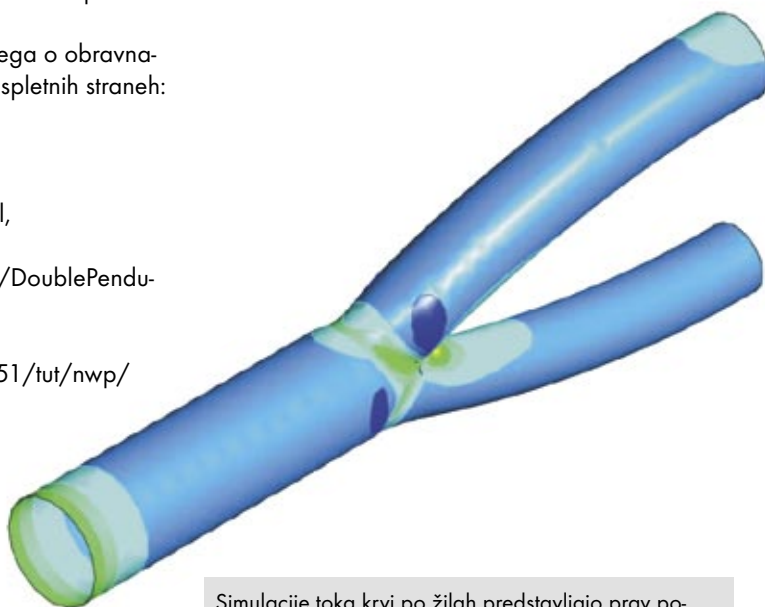


ožaj delca hkrati nemogoče natančno poznati. Sprijazniti se torej moramo z dejstvom, da je naše začetno stanje, ki smo ga izmerili, obremenjeno z napako. Sistem enačb, s katerim popišemo fiziko razvoja vremena, je nelinearen. Časovni razvoj nelinearnih sistemov je močno odvisen od začetnih pogojev, kar je za dolgoročno napovedovanje vremena pogubna značilnost. Zelo majhna razlika v začetnih pogojih dveh sicer enakih simulacij se po dovolj dolgem času poveča do takšne mere, da podobnosti med obema napovedma ni več. En sam utrip metulja s krili na enem koncu sveta lahko čez nekaj mesecev na drugem koncu sveta povzroči tornado.

Radoveden bralec lahko nekaj malega o obravnavanih temah prebere na naslednjih spletnih straneh:

iepoi.uni-mb.si,
www.modflow.com,
www.ansys.com,
www.wiz.uni-kassel.de/ecobas.html,
www.nr.com,
scienceworld.wolfram.com/physics/DoublePendulum.html,
order.ph.utexas.edu/chaos,
www.met.tamu.edu/class/ATMO151/tut/nwp/melmain.html.

Študija mešanja kapljevine in plina v posodi z mešalom. Na levi so prikazane poti tekočine, na desni poti plina.



Simulacije toka krvi po žilah predstavljajo prav poseben izziv. Snovske lastnosti krvi in elastičnost žil močno otežijo simulacijo. Slika prikazuje potek strižne napetosti po stenah karotide, ko se v vratu razcepi na dva dela.