

# ***Delo opravljeno v LSNM do konca 2011***

## *Poročilo*

*Verzija 0.0, 2012.*

Moderator: Igor Grešovnik

Božidar Šarler  
Igor Grešovnik  
Katarina Mramor  
Tadej Kodelja

## ***Vsebina:***

<b>1</b>	<b><i>Uvod</i></b>	<b>1</b>
<b>1.1</b>	<b>Opravljenno delo po ljudeh</b>	<b>1</b>
1.1.1	Božidar Šarler	1
1.1.1.1	Priprava načrtov za reaktor za sintezo fulerenov	1
1.1.2	Igor Grešovnik	1
1.1.2.1	Načrt za razvoj skupnega simulacijskega ogrodja	1
1.1.2.2	Tečaj naprednega programiranja v C#	2
1.1.2.3	Predlog modela razvoja softvera v akademskem in komercialnem okolju	2
1.1.2.4	Vizija timskega dela v skupini	2
1.1.2.5	Prototip simulacijskega ogrodja	2
1.1.2.6	Analiza dveh možnosti za osnovo platformo pri razvoju numeričnega modela celice za proizvodnjo ogljikovih nanomaterialov	3
1.1.2.7	Vpeljava delovnega okolja za razvoj numeričnih aplikacij	3
1.1.2.8	Načrt razvoja splošnih modulov za zapis in branje vhodnih podatkov in rezultatov numeričnih analiz	3
1.1.2.9	Načrt razvoja učinkovitih optimizacijskih postopkov za uporabo v projektih COBIK in LVP	3
1.1.2.10	Priprava osnove za razvoj za aplikacij s področja optimizacije in umetnih nevronske mreže	4
1.1.2.11	Razvoj knjižnic in aplikacije za nevronske mreže	4
1.1.3	Tadej Kodolja	4
1.1.3.1	Uvajanje v koncepte softvera za nevronske mreže	4
1.1.3.2	Razvoj in preverjanje aproksimacijskih modelov na podlagi nevronske mreže	4
1.1.3.3	Program za testiranje in raziskavo lastnosti aproksimacijskih modelov na podlagi nevronske mreže	5
1.1.4	Katarina Mramor	5
1.1.4.1	Pregled literature	5
1.1.4.2	Izdelava fizikalnih modelov	5
1.1.4.3	Model kemijske kinetike	5
1.1.4.4	Numerični model	5

# 1 UVOD

## *1.1 Opravljeno delo po ljudeh*

Ker je delo med člani skupine precej razdeljeno, je spodaj navedeno opravljeno delo po ljudeh.

### **1.1.1 Božidar Šarler**

#### **1.1.1.1 Priprava načrtov za reaktor za sintezo fulerenov.**

### **1.1.2 Igor Grešovnik**

#### **1.1.2.1 Načrt za razvoj skupnega simulacijskega ogrodja**

Osnovna ideja pri pripravi načrta je bila, da bi razvoj numeričnih simulacij temeljili na skupnem simulacijskem ogrodju, ki bi ga razvili za potrebe Laboratorija za večfazne procese Univerze v Novi Gorici ter Laboratorija za sisteme z naprednimi materiali COBIK. S tem bi dosegli večjo sinergijo med delom obeh skupin, zmanjšali podvajanje dela, povečali pretok znanja med člani skupine, vzpostavili dobro okolje za uvajanje novih sodelavcev v razvoj numeričnih aplikacij, povečali prepoznavnost skupine pri nastopanju navzven.

Pri pripravi načrta so vbili podrobneje obdelani številni ključni aspekti, med drugim:

- Izbira primerne platforma. Narejen je bil pregled možnosti, ki bi prišle v poštev, ter analiza prednosti in slabosti posameznih možnosti.
- Načrt razvoja z dolgoročno vizijo, kako naj bi se takšno ogrodje razvijalo in uporabljalo.
- Zagon in vodenje projekta, alokacija virov ter motivacija razvijalcev.
- Scenarij prehoda na novo razvojno platformo. Ker so bile v LVP v uporabi že razvite preizkušene rešitve (npr. simulator ulivanja), je bil predviden scenarij, da se te rešitve prenesejo na novo ogrodje čez daljše obdobje in se v prehodnem obdobju nadaljuje razvoj na obstoječih rešitvah.

- Kakšen bi bil režim izkoriščanja ogrodja v različne namene, npr. za izdelavo doktorskih disertacij, izvedbo bazičnih in aplikativnih raziskovalnih projektov ter izdelavo komercialnih aplikacij.

Pri zasnovi je avtor izhajal iz dolgoletnih praktičnih izkušenj in teoretičnega znanja na področju vodenja razvoja zahtevnih tehnoloških aplikacij, predvsem na področju numeričnih simulacij in optimizacijskega softvera. Pri razvoju načrta je upošteval specifičnosti dela v Laboratoriju za večfazne procese ter znanje, izkušnje in poglede sodelavcev laboratorija. Organiziral je zbiranje predlogov in pripomb o osnovni razvojni platformi za ogrodje.

#### **1.1.2.2 Tečaj naprednega programiranja v C#**

Konec 2010 je bil pripravljen in izveden tečaj naprednega programiranja v C# .NET. Tečaj je bil prilagojen skupinam, ki se ukvarjajo z razvojem tehničnih aplikacij. Tečaj je bil odprt in so ga obiskovali tudi udeleženci z Inštituta za materiale in tehnologije ter z Inštituta Jožef Stefan. Gradivo pripravljeno za tečaj je bilo kasneje razširjeno in postavljeno na SVN strežnik, da se lahko uporablja pri uvajanju sodelavcev, ki začenjajo s programiranjem v C#.

#### **1.1.2.3 Predlog modela razvoja softvera v akademskem in komercialnem okolju**

Predlagan je bil model sodelovanja pri razvoju softvera, ki omogoča uporabo skupne kodne baze v raziskovalne namene in pri komercialnih projektih. Model omogoča hiter prenos znanja iz akademskega v komercialno okolje na večji skali, ne omejuje svobode razpolaganja z rezultati bazičnih raziskav in njihove diseminacije, ki je v interesu akademskega okolja, hkrati pa tudi ne posega v interese komercialnih naročnikov (zagotavlja ustrezno zaščito industrijske intelektualne lastnine in poslovnih skrivnosti, predvideva zaščito rezultatov, ki jih naročniki smatrajo kot bistvene za ohranjanje konkurenčne prednosti).

Model je zasnovan tako, da preferira doseganje "win-win" situacij pred pogajalskimi strategijami, ki so naravnane k maksimalnemu izkupičku v scenarijih, ko vsaka od pogajalskih strani zastopa svoje parcialne interese. Upošteva kompleksnost interakcij med akademskim in komercialnim okoljem, ki je na področju razvoja programske opreme dobro znana na primer po primerih nezdržljivosti razvoja odprtokodnih in komercialnih rešitev.

#### **1.1.2.4 Vizija timskega dela v skupini**

V povezavi z idejo o skupnem simulacijskem ogrodju je avtor v skupini predstavil vizijo organizacije timskega dela v skupini. V okviru vizije je predstavil razloge za prehod na bolj povezano timsko delo, potrebne prilagoditve ter koristi za posamezne člane ter celotno skupino.

Predstavljena vizija temelji na motiviranju za produktivno in ustvarjalno delo, vzpodbujanju tesnejšega sodelovanja pri delu, uvajanju učinkovitih sodobnih načinov vodenja razvoja softvera, skrbi za transparentnost ter čimvečji pretok informacij, znanja in idej znotraj skupine.

#### **1.1.2.5 Prototip simulacijskega ogrodja**

V sodelovanju z dr. Robertom Vertnikom iz LVP je bilo zečeto delo na pripravi testnega simulacijskega ogrodja v okolju .NET. Robert Kot del izvedljivostne študije je Robert Vertnik najprej pripravil program za izračun prevajanja toplote na pravokotnem območju z brez mrežno metodo in radialnimi baznimi funkcijami v jeziku C#.NET. S tem smo preverili možne omejitve pri prenosu obstoječih rešitev v uporabi na platformo .NET. Sledila je podrobnejša diskusija o programskih konceptih za splošno simulacijsko ogrodje, ki bi jih bilo potrebno uvesti, da bi pravilno vzpostavili razvoj širšega simulacijskega ogrodja. Nato sta Vertnik in Grešovnik začela

prototipni razvoj osnovnega ogrodja, kjer je bil cilj predvsem postaviti splošno strukturo softvera, ki bi bila primerna za nadaljnji razvoj. Izdelava je bila ukinjena po odločitvi, da pri izdelavi simulatorjev ostanemo na več vzporednih razvojnih poteh.

#### **1.1.2.6 Analiza dveh možnosti za osnovo platformo pri razvoju numeričnega modela celice za proizvodnjo ogljikovih nanomaterialov**

Po odločitvi, da se softver za različne numerične modele razvija neodvisno, sta se oblikovala dva predloga za razvoj modela celice za proizvodnjo ogljikovih nanomaterialov. Po prvem predlogu naj bi bil razvoj potekal v C++ ter izhajal iz softvera, ki ga je v okviru izdelave doktorske disertacije razvil dr. Gregor Kosec. Alternativen predlog je predvideval razvoj modela v C# na osnovi knjižnic IGLib. V podporo odločitvi je bila narejena analiza prednosti in slabosti obeh predlogov.

#### **1.1.2.7 Vpeljava delovnega okolja za razvoj numeričnih aplikacij**

Pripravlano je bilo podporno okolje za vodenje in razvoj zahtevnejše programske opreme po sodobnih standardih. Okolje je pripravljeno za uporabo v Laboratoriju za večfazne procese UNG ter v Laboratoriju za sisteme z naprednimi materiali COBIK.

Kot del okolja sta bila najprej vzpostavljena strežnika za hrambo in verzioniranje softvera (Subversion) ter za upravljanje z nalogami (Bugzilla – ta po odpovedi strežnika zaradi pomanjkanja interesa sicer ni bil ponovno vzpostavljen). Dodane so bile še ostale funkcionalnosti, ki so tudi v stalni uporabi pri razvoju, ki je vzpostavljen na platformi .NET. Okolje med drugim zajema naslednje komponente:

- Strežnik Subversion (SVN) za hrambo in verzioniranje izvorne kode ter dokumentacije.
- Standardi in vodila za razvoj aplikacij.
- Priporočila za dokumentiranje softvera.
- Programska podpora za izdelavo dokumentacije.
- Strežnik za poganjanje numeričnih izračunov.

Okolje je nepogrešljivo pri razvoju aplikacij, na katerih hkrati dela več ljudi, ter omogoča učinkovito podporo tudi v situacijah, ko se delo opravlja na oddaljenih lokacijah in je tesno povezano (npr. ko je veliko možnosti, da več ljudi hkrati dela na istih datotekah v izvorni kodi).

#### **1.1.2.8 Načrt razvoja splošnih modulov za zapis in branje vhodnih podatkov in rezultatov numeričnih analiz**

Po ohranitvi več vzporednih poti razvoja numeričnih simulacij je bila predstavljena ideja, da se za različne simulacijske aplikacije izdelajo skupni standardni formati za branje vhodnih podatkov ter za zapis rezultatov. V .NET naj bi se izdelal skupni prezentacijski modul za prikazovanje rezultatov. V zvezi s tem je bil pripravljen načrt razvoja vhodno izhodnih formatov ter ustreznih softverskih modulov.

#### **1.1.2.9 Načrt razvoja učinkovitih optimizacijskih postopkov za uporabo v projektih COBIK in LVP**

Narejen je bil okvirni načrt razvoja optimizacijskih postopkov, ki jih bomo lahko uporabili pri optimiranju proizvodne celice za izdelavo ogljikovih nanomaterialov ter za reševanje drugih optimizacijskih problemov, s katerimi se bomo srečali pri projektih Laboratorija za sisteme z naprednimi materiali in Laboratorija za večfazne procese. Načrt je usmerjen v izdelavo dovolj zmogljivih postopkov, da bodo za te vrste problemov uporabni v praksi.

---

#### **1.1.2.10 Priprava osnove za razvoj za aplikacij s področja optimizacije in umetnih nevronske mreže**

Pripravljena je bila osnova za razvoj numeričnih aplikacij. Osnovna platforma je .NET s programskim jezikom C#. Za kodno osnovo je uporabljena knjižnica IGLib, nad čemer je vzpostavljena hierarhična projektna struktura, ki omogoča organizacijo razvoja v skladu s potrebami projektov, ki vključujejo tesnejše sodelovanje akademskega okolja z industrijo. Struktura projektov je bila prilagojena načrtom za razvoj softvera za nevronske modele in optimizacijo ter na začetku tudi razvoju skupne simulacijske platforme.

#### **1.1.2.11 Razvoj knjižnic in aplikacije za nevronske mreže**

Narejena je bila osnova softvera za modeliranje procesov z nevronskimi mrežami z naslednjimi značilnostmi:

- Vsebuje različne podsisteme za uporabo v praksi in pri raziskavah
- Možnost vključevanja različnih knjižnic z nevronskimi mrežami
- Zgrajen na modularen način po sodobnih konceptih razvoja softvera
- Generični vhodno-izhodni modul
- Razrede za zapis in branje vseh podatkov, ki so v uporabi pri nevronskih modelih
- Vsebuje nastavke za povezovanje z optimizacijo – iterativno poganjanje nevronskega modela v optimizacijskih zankah
- Omogoča fleksibilno pripravo postopkov za preverjanje in filtriranje podatkov ter postopkov za učenje
- Zaradi premišljene hierarhije in modularne zgradbe je enostavna integracija z drugimi sistemi

Pri razvoju so se pokazale prednosti naprednih konceptov razvoja zahtevne programske opreme, ki so bili razviti skozi leta izkušenj in udejanjeni v knjižnici IGLib. V zelo kratkem času, okrog 2 mesecih, je bil razvit celoten sistem za izdelavo modelov na podlagi umetnih nevronske mreže, z določenimi vhodnoizhodnimi formati, implementiranim shranjevanjem ter branjem vseh relevantnih podatkov. Sistem je razvit na pregleden, razširljiv način ter enostaven za vzdrževanje, ohranjanje kompatibilnosti ter nadgradnjo, ter je podrobno dokumentiran. Sistem razvit v tako kratkem času je v marsičem primerljiv s sistemi, ki so plod večletnega dela v uveljavljenih skupinah.

### **1.1.3 Tadej Kodelja**

#### **1.1.3.1 Uvajanje v koncepte softvera za nevronske mreže**

Tadej kodelja se je postopoma uvedel v softver za nevronske mreže, ki ga je zgradil Igor Grešovnik.

#### **1.1.3.2 Razvoj in preverjanje aproksimacijskih modelov na podlagi nevronske mreže**

- Študij lastnosti nevronske mreže in vpliva izbire topologije nevronske mreže ter parametrov učenja na natančnost rezultatov aproksimacijskih modelov
  - Razvoj metod za oceno in filtriranje podatkov
-

Narejenih je bilo več modelov na podlagi umetnih nevronske mreže s podatki iz procesa ulivanja in nadaljnje obdelave jekla iz podjetja Štore Steel. Modeli so bili med drugim namenjeni demonstraciji in preizkusu razvite programske opreme. Ena serija modelov je bila narejena na podlagi realnih podatkov iz industrijskega procesa, druga pa na podlagi podatkov generiranih z numerično simulacijo kontinuirnega ulivanja ter z izračunom snovnih lastnosti v programu JmatPro. Narejene so bile podrobne analize podatkov in rezultatov. V obeh primerih so bili podatki pomanjkljivi za dovolj natančen model, lahko pa smo demonstrirali uporabnost razvitih konceptov.

V prihodnje bo na podlagi izkušenj smiselno na področju nevronske mreže delo usmeriti predvsem v razvoj postopkov za analizo podatkov in odzivov ter v filtriranje podatkov.

#### **1.1.3.3 Program za testiranje in raziskavo lastnosti aproksimacijskih modelov na podlagi nevronske mreže**

Začet je razvoj programa za raziskavo lastnosti modelov z nevronske mreže.

S programom lahko preverjamo in primerjamo delovanje različnih knjižnic za nevronske mreže, postopke učenja, rezultate pri različnih kvalitetah podatkov, glede na kompleksnost aproksimiranega odziva in podobno. Program vsebuje grafični uporabniški vmesnik za izvajanje testov ter nazoren grafični prikaz rezultatov. Testi se izvajajo na analitičnih modelih.

### **1.1.4 Katarina Mramor**

#### **1.1.4.1 Pregled literature**

Narejen je bil pregled literature s področja fulerenov, ogljikovih nanocerk, proizvodnje fulerenov ter ogljikovih nanocerk in kemijske kinetike.

#### **1.1.4.2 Izdelava fizikalnih modelov**

Izdelava dveh fizikalnih modelov (preprosti (kvazi enodimenzionalni) model, zapleten (dvodimenzionalni aksisimetrični) model) za simulacijo rasti fulerenov in nanocerk v plazemski celici.

#### **1.1.4.3 Model kemijske kinetike**

Izdelava programa za izračun kemijske kinetike za tvorbo ogljikovih nanostruktur v programskem jeziku C++. Testiranje omenjenega programa na vrsti analitično rešljivih primerov ter in nadaljnji razvoj programa.

#### **1.1.4.4 Numerični model**

Začetek razvoja programa za izračun fizikalnih modelov na osnovi že obstoječega modula za izračun toka tekočin in segregacije v pravokotni votlini. Določitev parametrov.

***Reference:***

- [1] Introducing JSON. Electronic document at <http://www.json.org/> .
- [2] JSON on Wikipedia, <http://en.wikipedia.org/wiki/JSON>
- [3] I. Grešovnik. IoptLib – Investigative Optimization Library, library homepage located at <http://www2.arnes.si/~ljc3m2/igor/ioplib/> .
- [4] I. Grešovnik. IoptLib user's manual. Electronic document at <http://www2.arnes.si/~ljc3m2/igor/ioplib/doc/optlib.pdf>.
- [5] I. Grešovnik: Investigative Generic Library (IGLib), library homepage at <http://www2.arnes.si/~ljc3m2/igor/iglib/> .



---

---