

CHEM-C3310 - Prosessiteollisuuden matemaattiset ja tilastolliset menetelmät

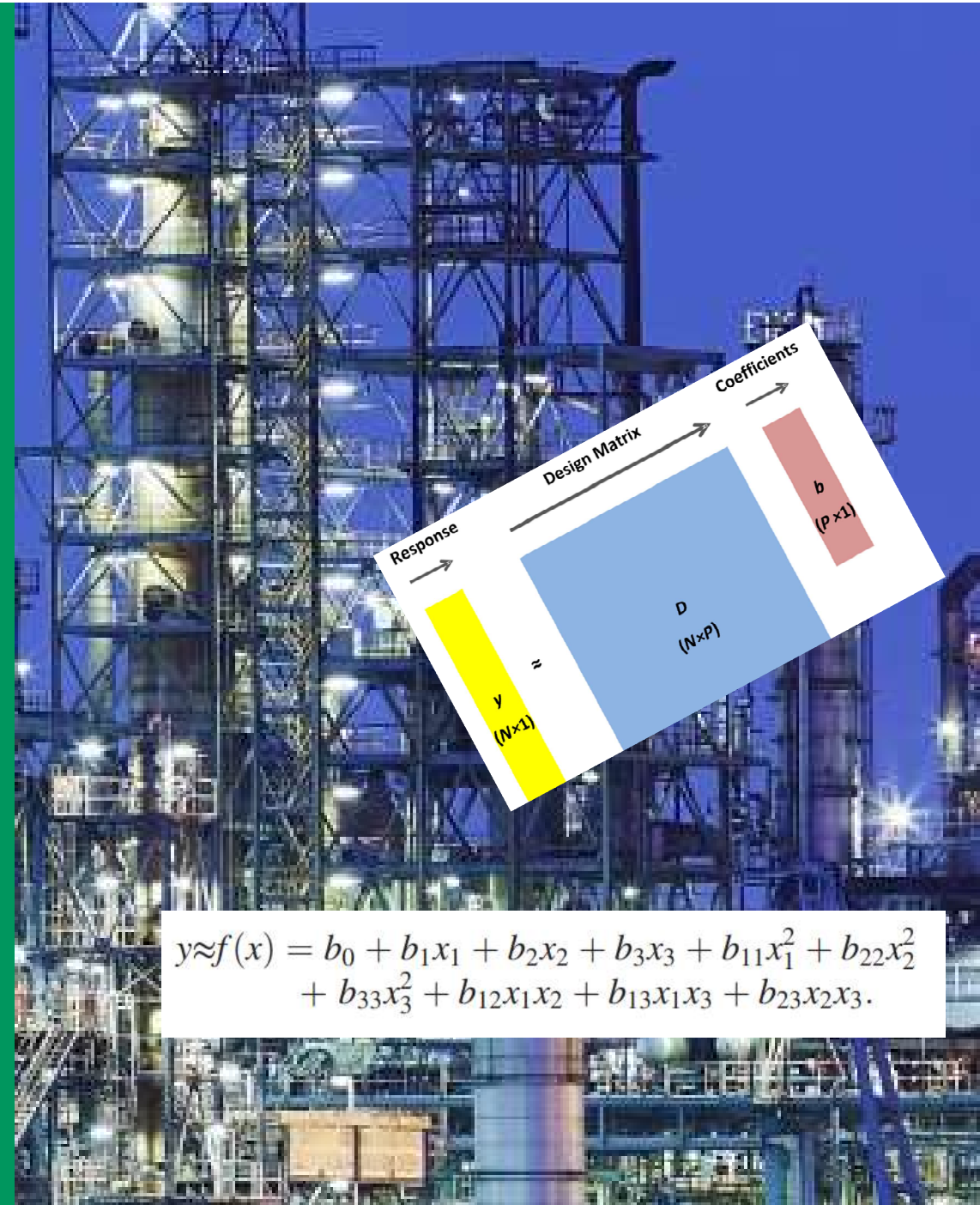
Ohjelmistoista

J. Paltakari

23.9.2021



Aalto University
School of Chemical
Engineering



$$y \approx f(x) = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + b_{33}x_3^2 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3.$$

Osaamistavoitteet 23.9.2021

Luennon jälkeen opiskelija:

- Tietää eri ohjelmistojen eri kategoriat**
- Tunnistaa näihin kategorioihin kuuluvia ohjelmistoja**

Ohjelmistoista (sisältö):

Esimerkkejä koesuunnitteluun, tilastolliseen analyysiin, visualisointiin sekä simulointiin käytettävistä ohjelmistoista ja ympäristöistä:

- **Matemaattiset laskentaohjelmistot**
- **Tilastoanalyysiohjelmistot (ml. koesuunnittelu ja visualisointi)**
- **Simulointi**
- **Taulukkolaskentaohjelmistot**

Matemaattiset laskentaohjelmistot

- Maple
- Mathematica
- Matlab



“MATLAB® combines a desktop environment tuned for iterative analysis and design processes with a programming language that expresses matrix and array mathematics directly. It includes the Live Editor for creating scripts that combine code, output, and formatted text in an executable notebook.”

MATLAB on The MathWorks -yhtiön ylläpitämä numeeriseen laskentaan tarkoitettu tietokoneohjelmisto sekä siinä käytettävä ohjelmointikieli.

<https://www.mathworks.com/products/matlab.html>



Maple on symbolinen ja numeerinen tietokoneella käytettävä ammatti- ja opiskelukäyttöön suunniteltu kaupallinen matematiikkaohjelma, jota alettiin kehittää vuonna 1981 Waterloon yliopistossa Kanadassa. Vuodesta 1988 Maplea on kehittänyt kaupallinen yritys nimeltä Maplesoft.

“Maple is a symbolic and numeric computing environment as well as a multi-paradigm programming language. It covers several areas of technical computing, such as symbolic mathematics, numerical analysis, data processing, visualization, and others.”

<https://www.maplesoft.com/MapleEducation>

System and automation simulations (process data analysis)

<https://www.maplesoft.com/Engineering>

Mathematica



"Mathematica on useille alustoille saatava laskentaohjelmisto. Sen kehittämisen aloitti Stephen Wolfram. Mathematica on ensisijaisesti symbolilaskentaohjelma, mutta sillä suoritetaan myös numeerista laskentaa. Lisäksi sitä käytetään 2- ja 3-ulotteisen datan visualisoimiseen."

Wolfram Mathematica is a technical computing system covering most areas of technical computing including e.g. neural networks, machine learning, image processing, geometry, data science, visualizations. It is used in many technical, scientific, engineering, mathematical, and computing fields. Development started by Stephen Wolfram.

<https://www.wolfram.com/mathematica>

Tilastanalyysiohjelmistot

(ml. koesuunnittelu ja visualisointi)

- **IBM SPSS (Statistics, Amos and Modeler)**
- **Minitab**
- **Origin (Lab/Pro)**
- **Stata (Software for Statistics and Data Science)**
- **Statistix**
- **Wedge (prosessidata)**

IBM SPSS (Statistics, Amos and Modeler)

SPSS on tilastotieteelliseen analyysiin suunniteltu ohjelmisto, josta julkaistiin ensimmäinen versio 1968. PSPP on GNU-projektin avoimen lähdekoodin vastine SPSS:lle. SPSS on myös ohjelmaa kehittävän ja toimittavan yrityksen nimi.

“SPSS Software is an integrated family of products that primarily consists of SPSS Statistics, SPSS Modeler and SPSS Amos. Both SPSS Statistics and Modeler enable users to build predictive models and execute other analytics tasks. Both applications were built to help business users perform complex statistical analysis to solve business and research problems quickly and efficiently.”

<https://www.ibm.com/analytics/spss-statistics-software>



Stata

Stata on tilastojen käsittelyyn tarkoitettu tietokoneohjelma. Stataa kehittää yhdysvaltalainen yritys nimeltä StataCorp. Statan käyttöliittymä on sen sisältämä komentorivi, jolle kirjoitetaan komennot, joita ohjelman halutaan suorittavan.

“Stata statistical software provides everything you need for data science and inference—data manipulation, exploration, visualization, statistics, reporting, and reproducibility.”

<https://www.stata.com/features/>

<https://www.stata.com/>

<https://www.stata.com/how-do-you-stata/>

Statistix

“Statistix offers powerful data manipulation tools, import/export support for Excel and text files, linear models (including linear regression, logistic regression, Poisson regression, and ANOVA), nonlinear regression, nonparametric tests, time series, association tests, survival analysis, quality control, power analysis, and more.”

<https://www.statistix.com>



Aalto University
School of Chemical
Engineering

Origin (Lab/Pro)



Origin on Windows-pohjainen ohjelmisto numeerisen tietoaineiston analysoimiseen ja visualisointiin. Origin kykenee muun muassa tekemään annetusta datasta tilastollista analyysiä ja sovittamaan pisteisiin käyriä ja pintoja.

“Origin is a versatile data analysis and graphing software.”

<https://www.originlab.com/origin>

Minitab



”MINITAB sisältää lähes kaiken, mitä esimerkiksi datan tilastollisessa analyysissä, mittaussysteemin analysoinnissa, prosessin ohjauksessa tai koesuunnittelussa tarvitaan. Ohjelmistoa voi täydentää Excel makroilla tai Minitab Quality Companion ohjelmalla.”

“Minitab Statistical Software can look at current and past data to find trends and predict patterns, uncover hidden relationships between variables, visualize data interactions and identify important factors to answer even the most challenging of questions and problems. Visualizations are good, but pair them with analytics to make them great.”

<https://www.minitab.com/en-us/products/minitab/>



Aalto University
School of Chemical
Engineering

Wedge



Erityisesti tehdasdatan analysointiin soveltuva järjestelmä. Joko on-line tai historiatiedon laajaan monimuuttuja-, pääkomponentti-analyysiin, aikasarja-analyysiin, visualisointiin ja raportointiin.

“Wedge is powerful process data-mining software that enables you to improve industrial plant efficiency with ease. Wedge digests all the process data, from multiple sources, for analysis and diagnosis. It uncovers and suggests possible root causes and consequences of process events before they escalate into big problems. Wedge is the perfect data-analysis toolbox to maximize your productivity! “

<https://wedge.trimble.com/>

Simulointiohjelmistoja

Eräs suhteellisen kattava listaus erilaisista simulointiohjelmistoista.

https://fi.qwe.wiki/wiki/List_of_computer_simulation_software

Seuraaviin kalvoihin on poimittu muutamia esimerkkejä simulointiohjelmistoista.

Ansys Fluent



Laskennalliseen virtausdynamiikan ilmiöiden mallintamiseen ja tarkasteluun soveltuva ympäristö, jossa myös lämmön- ja aineensiirron sekä monifaasisysteemien mahdollisuudet.

“Fluid simulation software used to predict fluid flow, heat and mass transfer, chemical reactions and other related phenomena. Known for delivering the most accurate solutions in the industry without compromise, Fluent’s advanced physics modeling capabilities include cutting-edge turbulence models, multiphase flows, heat transfer, combustion, shape optimization, multiphysics and much more.”

<https://www.ansys.com/products/fluids/ansys-fluent>



**Aalto University
School of Chemical
Engineering**

Aspen



“ASPEN is a process simulation software package widely used in industry today. Given a process design and an appropriate selection of thermodynamic models, ASPEN uses mathematical models to predict the performance of the process, e.g. in the separation of non-ideal mixtures. ASPEN can handle very complex processes, including multiple-column separation systems, chemical reactors, distillation of chemically reactive compounds, and even electrolyte solutions like mineral acids and sodium hydroxide solutions.”

<https://www.aspentech.com/en/products/engineering/aspen-hysys>



Aalto University
School of Chemical
Engineering

Balas

“BALAS simulation tool is an effective way to obtain information on the behaviour of an existing process and get a deeper understanding of the interactions in the process. Built-in link to MS Excel enables easy transfer and customised visualisation of simulation data. Model hierarchy, extensive unit operation, and chemical component libraries in connection with effective mathematical solvers make BALAS the solution for simulation of steadystate and tank dynamics, optimisation, and parameter estimation for pulp and paper processes. BALAS is developed and owned by VTT.”

<https://www.simulationstore.com/balas>

Apros - Dynamic Process Simulation

“Apros is simulation software for full-scale modelling and dynamic simulation of industrial processes. The applications include nuclear and thermal power plants, pulp and paper mills, and a wide variety of other systems, where dynamics of material and energy flows, automation and electrical systems are of interest.”

<https://www.simulationstore.com/apros>

COMSOL Multiphysics



COMSOL Multiphysics on simulointiohjelmisto, joka soveltuu erityisesti fysiikan ja insinööritieteiden ongelmien simulointiin sekä analysointiin.

“COMSOL Multiphysics® is a general-purpose simulation software for modeling designs, devices, and processes in all fields of engineering, manufacturing, and scientific research. In addition to using multiphysics modeling for your own projects, you can also turn your models into simulation applications and digital twins for use by other design teams, manufacturing departments, test labs, customers, and more.”

<https://www.comsol.com/products>

Simulia/Abacus (FEA)



Elementtimenetelmälaskenta ja simulointiohjelmisto (Finite element analysis (FEA))

“The Abaqus Unified FEA product suite offers powerful and complete solutions for both routine and sophisticated engineering problems covering a vast spectrum of industrial applications. In the automotive industry engineering work groups are able to consider full vehicle loads, dynamic vibration, multibody systems, impact/crash, nonlinear static, thermal coupling, and acoustic-structural coupling using a common model data structure and integrated solver technology.”

<https://www.3ds.com/products-services/simulia/products/abaqus>



Aalto University
School of Chemical
Engineering

Taulukkolaskentaohjelmistot

- Taulukkolaskentaohjelmistot on otettu tähän erikseen, koska ne muodostavat tärkeän työvälineen päivittäisessä toimistokäytössä ja insinöörityössä laajalla toimialueiden kentällä.
- Taulukkolaskentaohjelmat taipuvat hyvin monipuoliseen laskentaan, datan käsittelyyn, taulukointiin, visualisointiin, jne.

MS Excel

Eniten käytetty kaupallinen Microsoftin taulukkolaskentaohjelmisto.

”Ohjelma on suunniteltu toteuttamaan kaikki toimistotyössä tarvittavat laskentaa ja tilastointia vaativat tehtävät. Ohjelmalla on kätevää tehdä kuvaajia ja taulukoita ja niiden jakaminen Microsoftin pilvipalvelussa on nopeaa ja kätevää. Valmiiden pohjien ja mallien avulla käyttäjä voi rakentaa monipuolisia kuvia ja diagrammeja ja liittää ne osaksi muita Office 365 tuotteita, kuten Microsoft Word, Microsoft PowerPoint, Microsoft Sway ja Microsoft Teams.”

Avoimen ja vapaan lähdekoodiympäristön taulukkolaskentaohjelmistot

- **OpenOffice Calc**
- **LibreOffice Calc**

**Excelin kaltaiset avoimen ja vapaan lähdekoodiympäristön
taulukkolaskentaohjelmistot. Vanhemman formaatin Excel-
yhteensopivat import- ja export toiminnot.**

Ohjelmistot kotikoneisiin

**Aalto-yliopisto**
Download.aalto.fi

ETUSIVU OHJEITA AALTO IT KIRJAUDU ULOS

Download.aalto.fi

Download.aalto.fi on palvelu Aalto-yliopiston työntekijöille ja opiskelijoille. Palvelun kautta Aalto IT jakaa ohjelmistoja, joista on hankittu yliopiston laajuisia lisenssejä kotikäyttöoikeudella.

Pääsy palveluun edellyttää, että olet työsopimussuhteessa Aalto-yliopistoon tai sinulla on opinto-oikeus Aalto-yliopistossa. Pääsyoikeudet päivittyvät automaattisesti yliopiston henkilöstö- ja opintotietojärjestelmästä. Palveluun kirjaudutaan Aalto-yliopiston tunnuksilla.

Huomioitavaa on, että ohjelmistojen kotikäyttöoikeus on pääsääntöisesti sidottu opiskeluoikeuteen tai työsuhteeseen. Kun opiskeluoikeus tai työsuhde päättyy, on ohjelmat poistettava kotikoneelta ellei lisenssiehdoissa erityisesti ole toisin mainittu. Henkilö sitoutuu edellämainittuihin ehtoihin hyväksyessään Aalto-yliopiston käyttäjätunnuksen käyttöehdot.

Saatavilla olevat ohjelmistot löytyvät alla olevien linkkien kautta. (Alasivut ovat ylläpidollisista syistä osittain englanniksi.)

- Ohjelmistot opiskelijoiden kotikoneisiin
- Ohjelmistot työntekijöiden kotikoneisiin
- Asennusmediat Aalto-yliopiston omistamiin työasemiin

<https://download.aalto.fi/>