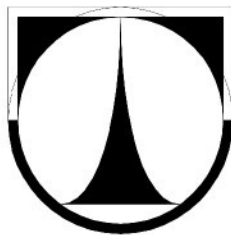


TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI

**Fakulta mechatroniky, informatiky a
mezioborových inženýrských studií**



AUTOREFERÁT DISERTAČNÍ PRÁCE

Liberec 2008

Richard Charvát

Technická univerzita v Liberci

**Fakulta mechatroniky, informatiky a
mezioborových inženýrských studií**

Studijní program: P3901 Aplikované vědy v
inženýrství

**Počítačové modelování dýchajících fasád
s důrazem na vizualizaci**

Computer modelling of breathing facades
with a view to visualization

Autoreferát disertační práce

Autor:	Ing. Richard Charvát
Vedoucí práce:	Prof. RNDr. David Lukáš, CSc.
Konzultant:	Doc. Ing. Jan Krňanský, CSc.

Abstrakt

Multidisciplinárně zaměřená disertační práce nazvaná Počítačové modelování dýchajících fasád s důrazem na vizualizaci, se zabývá metodikou počítačového modelování transportních vlastností tzv. difúzně otevřených obalových stavebních konstrukcí s důrazem kladeným na vizualizaci a optimalizaci vědeckotechnických dat.

Nejprve klasickým fenomenologickým modelem transportu řešeným pomocí metody konečných prvků. Vizualizace dat probíhá v prostředí podobném herní aplikaci, takže zde lze využít pokročilých způsobů zobrazování v reálném čase. Výsledkem je testovací modul programu pro fyzikálně korektní návrh fasád a rovněž vizualizace, které pomohly lépe pochopit zejména jejich akumulační vlastnosti. Fasády typu diffu navrhované podle nové metodiky jsou v současné době již certifikovány a uvedeny do praxe.

Dále pak nástinem simulace konvekce plynu v pórém prostředí pomocí metody buněčné automatizace. Nanovláknový materiál je zde uvažován vzhledem k případné možnosti využití jeho vlastností při navrhování dýchajících fasád. Je rovněž představeno otevřené programové prostředí pro vizuální prototypování simulací tohoto typu.

Abstract

Multidisciplinary oriented Computer modelling of breathing facades with a view to visualization deals with computer modelling of transport properties of breathing facades with a view to visualization and optimisation of scientific data.

In the beginning there's used finite element method solver and realtime environment like game engine for advanced visualization. Testing modul for facade prototyping was done and so helpful visualizations of its accumulation properties. Facades under the moniker diffu are certified and produced now.

In the next there's used discrete model based on the idea of cellular automaton. It's interesting think about material made from nanofibers in the context of breathing facades design in near future.

Úvod

Domy si stavíme či rekonstruujeme především proto, abychom si v nich zajistili pohodlné a trvale zdravotně nezávadné vnitřní prostředí. Vlastností, která může výrazně napomoci k zajištění kvalitního, zdravého prostředí v interiérech staveb, je určitá prodyšnost jejich obvodových stěn a konstrukcí podkroví. Hermeticky utěsněné objekty s malou nebo žádnou výměnou vzduchu jsou ze zdravotního hlediska značně rizikové. Vnitřní prostředí utěsněných staveb s malou výměnou vzduchu také obvykle obsahuje zvýšené koncentrace chemických látek, těkajících z předmětů a chemických prostředků používaných při provozu domácností. Stručně řečeno, hermeticky utěsněné a málo větrané objekty jsou v přímém rozporu s požadavky na zdravé prostředí v interiérech staveb. Ukazuje se, že slepá snaha po dosažení energeticky úsporných řešení staveb bez ohledu na kvalitu vnitřního prostředí může vést k velmi problémovým výsledkům. Aby bylo možné budovat domy se zdravým vnitřním prostředím, je nutné používat vhodné materiály a požadavku zdravého vnitřního prostředí podříditi návrh stavební konstrukce.

V zahraničí se touto problematikou zabývá více subjektů. Jednou ze známých institucí zaměřených na výzkum v této oblasti je Fraunhofer Institute für Bauphysik.

Stávající konstrukční koncept

Základní premisy, které stojí v pozadí navrhování, lze shrnout do následujících pravidel:

- a. Nelze připustit vstup vodní páry do konstrukce, z tohoto důvodu se ze strany interiéru do konstrukce vkládá parozábrana.
- b. Nosná stěna se konstruuje jako symetrická krabicová konstrukce.
- c. Co dílčí požadavek (teplo, vlhkost, statika, akustika, estetika), to specializovaná vrstva.
- d. Co nejnížší cena konstrukce.

Tradiční nedostatky staveb:

- malá tepelná stabilita interiérů (léto),
- mizivá regenerace při vlhkostní havárii (parozábrana),
- konstrukčně nestabilní řešení (závislost spolehlivosti celé konstrukce na neporušení parozábrany),
- malá vlhkostní stabilita interiérů (parozábrana),
- nízká zvukoizolační schopnost (vzduchová neprůzvučnost),
- konkurenčně chabé požární vlastnosti (velké odstupové vzdálenosti objektů).

Nový konstrukční koncept

Vhodným řešením se ukazuje využití konstrukčního konceptu difúzně otevřených konstrukcí. Další ilustrace bude provedena na chráněném konstrukčním řešení typu diffuwall®.

Pro řešení difúzně otevřeného obvodového a střešního pláště byla zvolena následující východiska:

- Povolit v rozumné míře průběh „přirozených“ přenosových dějů na rozhraní interiér/exteriér, tj. především odstranit parozábranu.
- Důsledně využívat zdravotně nezávadné materiály
- Položit důraz na tepelně a vlhkostně akumulční vlastnosti pláštů (stabilita vnitřního klimatu).
- Pro asymetrické prostředí působení obalových konstrukcí zvolit rovněž asymetrické řešení konstrukce.
- Maximálně zjednodušit konstrukci samu (minimalizace počtu vrstev a materiálových bází).

Problémy, které se dají od zvolených východisek očekávat, spočívají v oblasti materiálů.

Přehled dosažených technických vlastností

Nově navržená konstrukce prokázala, že je možné za současného stavu materiálové základny takové stavební pláště konstruovat.

Difuzní otevřenost

Skladby konstrukcí neobsahují žádné parozábrany, které by bránily prostupu vodních par a suchého vzduchu stěnou či střechou. Tento fakt pozitivně ovlivňuje kvalitu vnitřního mikroklimatu ze zdravotního hlediska a umožňuje určité „dýchání“ konstrukcí stěn a střešních plášťů.

Energetická úspornost

Vynikající tepelně izolační vlastnosti používaných materiálů umožňují vytvářet objekty a konstrukce s minimálními energetickými ztrátami. Podle volitelných variant tloušťek jednotlivých vrstev konstrukcí je možné dosáhnout parametrů nízkoenergetického až pasivního domu.

Tepelná stabilita

Díky užití desek, které mají značně vysokou tepelně akumulční schopnost, nedochází k letnímu přehřívání objektů. Fázový posuv teplotního kmitu dosahuje hodnot 7 až 13 hodin.

Požární odolnost

Používané materiály mají značnou požární odolnost. Při hoření jejich povrch zuhelnatí a zamezí tak rychlému šíření požáru do nitra konstrukcí. Výsledkem je nadstandardní požární odolnost konstrukcí, která dosahuje hodnot 90 minut z interiéru a 120 minut z exteriéru.

Zvukoizolační schopnost

Plošná hmotnost konstrukcí v systémech „diffu“ je vlivem jejich skladeb a použitých materiálů vyšší, než je tomu u běžných dřevostaveb. Z toho plyne i vyšší zvukoizolační schopnost. Objekty proto lépe izolují proti hluku ve vnějším prostředí staveb.

Regenerační schopnost

Difúzně otevřená konstrukce má schopnost zbavit se případné nadměrné vlhkosti. Difúzně otevřená konstrukce v mrazivém počasí automaticky vysychá.

Ekologie

Konstrukce v systémech „diffu“ mohou být realizovány výhradně s použitím zdravotně nezávadných materiálů. Proto jsou tyto konstrukce šetrné k životnímu prostředí a vytvářejí zdravé prostředí uvnitř staveb.

Ověřená řešení a certifikace

Inovativní koncept konstrukce vyvolal paradoxně potřebu úplné certifikace především z toho důvodu, aby byla překonána nedůvěra projektantů a realizačních firem. V současnosti je to jediná certifikovaná difúzně otevřená konstrukce v ČR a je chráněna užitným vzorem a obchodní značkou diffuwall®.

Zjednodušení technologie výroby

Použití konceptu difúzně otevřené konstrukce vede na snížení počtu vrstev obalových konstrukcí. To má přirozeně dopad i do zmenšení počtu výrobních operací a tedy i snížení nákladů na výrobu.

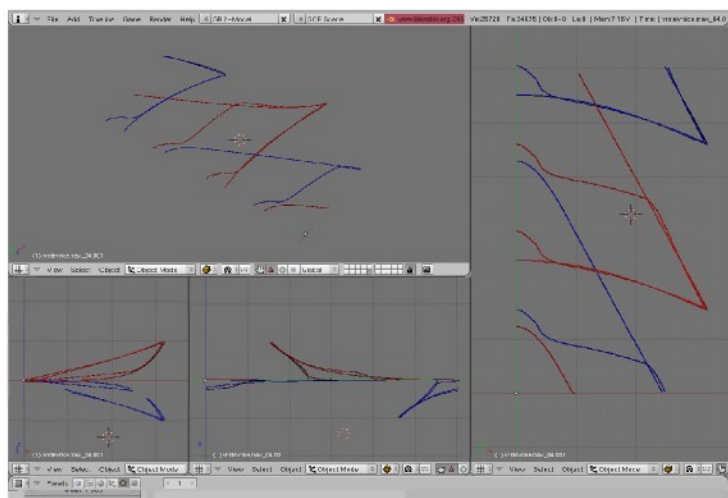
Odpadají zde dva technologické kroky, a to montáž vnější nosné desky a zejména problematická montáž (i funkce) parozábrany.

Chování konstrukce z pohledu počítačové grafiky

Vizualizace transportních jevů, které přímo souvisí s fyzikálně korektním návrhem fasád lze provádět s minimální odezvou vzhledem k reálnému času výpočtu, což vede ke zrychlení cyklu návrhu konstrukce.

Akumulace stěny

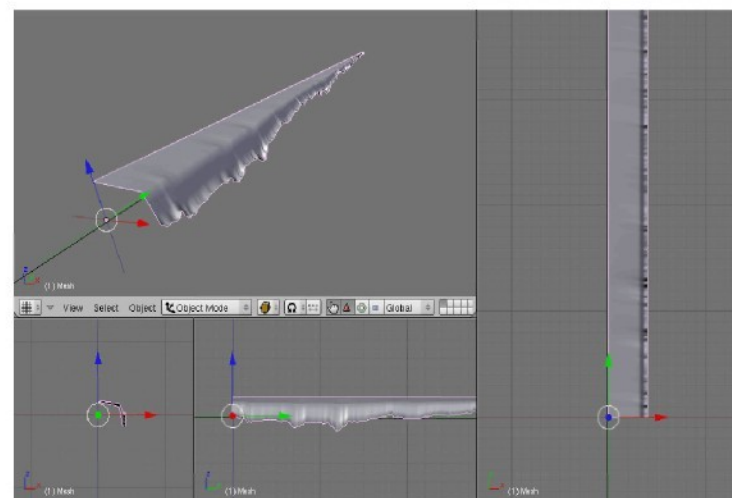
U stěn resp. podkroví se oproti běžné konstrukci stěny prodlouží fázový posuv běžně 2-2,5 krát, tj. na 10-12 hodin. Akumulační schopnost tak výrazně přispívá k teplotnímu komfortu v interiéru budovy zejména v extrémních klimatických situacích.



Obr.1. Zobrazení teplotních minim a maxim průchodu sinusové tepelné vlny obvodovým pláštěm

Celoroční bilance

Jako velmi zajímavé se jeví prostorové zobrazení teplotních či vlhkostních polí získaných na základě výpočtů zohledňujících dlouhodobě monitorovaná meteorologická data v dané stavební lokalitě. Tak je možné interaktivně ověřovat chování konstrukce v průběhu delších časových intervalů, tj. zaznamenat život fasády např. během celého kalendářního roku.



Obr.2. Roční bilance pro danou kontrolní oblast spočtenaná na základě dat z Českého hydrometeorologického ústavu

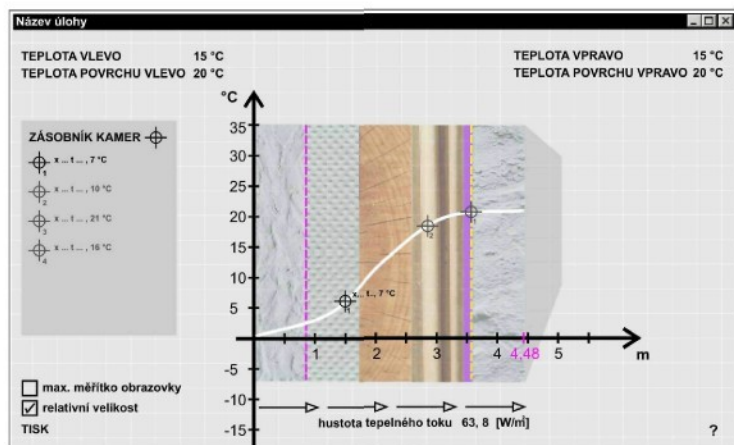
Metodika výpočtu a vizualizace chování fasády

Na základě úvah zpřístupnit návrhový systém diffu pro uživatele s potřebou řešit úlohy stavební fyziky, byl vytvořen testovací modul dle následujícího schematu:

Zadání úlohy

Řešič (Metoda konečných prvků)

Vizualizační modul (Herní prostředí)



Obr.3. Ilustrace vizualizace v reálném čase s možností interaktivního záznamu hodnot z grafu pomocí kamer

Údaje získané z „kamer“ mohou být zpětně načteny do části zadávání úlohy ke korekci návrhu.

Pro načtení dat z řešiče a následnou realtime vizualizaci byl zvolen volně šiřitelný 3D program se zabudovaným herním prostředím známý pod označením

Blender,

který využívá grafickou knihovnu *OpenGL* a jehož programovatelné rozhraní je obslouženo přes integrovaný interpreter volně šiřitelného programovacího jazyka, známého jako

Python.

Mocným nástrojem pro vizualizaci rozsáhlých souborů vědecko-technických dat je možnost propojení s dalším volně šiřitelným programovým řešením

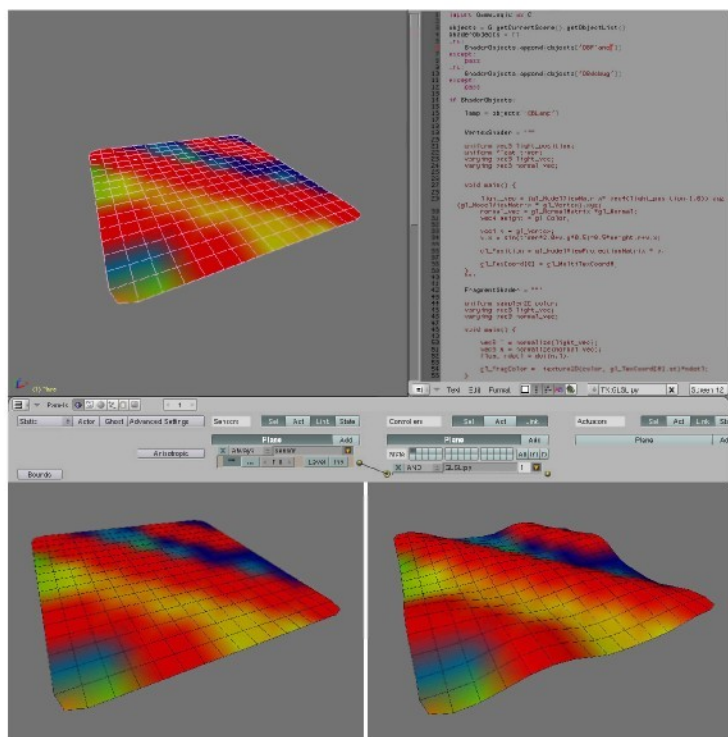
VTK (Vizualizační knihovny),

prostřednictvím pythonského modulu *VTKBlender* vytvořeného pro tento účel na University of Alberta k tvorbě fyzikálně korektních vizualizací.

Herní prostředí rovněž umožňuje využití pokročilých výpočtů na grafických akcelerátorech, zejména nVidia, pomocí python skriptů obsahujících kód pro volání vertex a pixel resp. fragment shader programů v jazyce *GLSL*.

Zápis vertex shaderu pro modelovou situaci s vážením pomocí sinusové vlny pak vypadá následovně:

```
vec4 v = gl_Vertex;
vec4 weight = gl_Color;
v.x = sin(timer)*weight.r+v.x;
gl_Position = gl_ModelViewProjectionMatrix * v;
```



Obr.4. Ilustrace vizualizačního prostředí se zobrazením modelování nestacionárního skalárního pole pomocí vertexshaderu

Nanomateriál v konceptu dýchající fasády

Jednou z budoucích možných oblastí aplikací technologie nanovláken je bezesporu stavebnictví. Textilie na bázi nanovláken dokáží jak známo účinně regulovat toky plynů a par a do určité míry jsou rovněž schopné bránit průniku vody jako kapaliny.

Pro účely regulace průniku plynů a kapalin konstrukcemi se již dnes technické textilie (převážně netkané) ve stále větší míře využívají. Jde zejména o aplikace při tvorbě skladeb obvodových a střešních plášťů budov a dále o geotechnické aplikace.

Je tedy nasnadě, že jednou z nadějných aplikací nanovláken ve stavebnictví je tvorba nové generace těchto textilních materiálů. Významnou aplikací netkaných textilií je zejména oblast dřevostaveb a oblast konstrukcí šikmých střech.

Podle funkce a vlastností se textilie používané ve stavebnictví označují různě: větrové (konvektivní) zábrany, parobrzdy, difúzní fólie, pojistné hydroizolace.

Typické aplikace ve stavebních konstrukcích

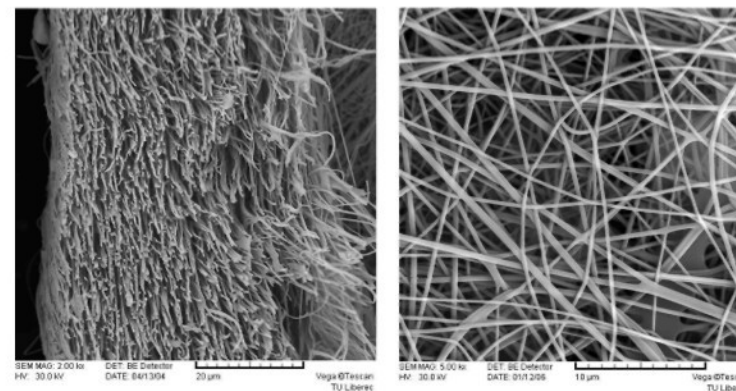
Konvektivní toky jsou v konstrukcích většinou nežádoucí, neboť vedou často na nekontrolovatelný transport vlhkosti do konstrukce nebo na vznik velkých tepelných ztrát objektů.

Difúzní toky často připouštíme, chceme však regulovat množství par vstupujících do konstrukce, abychom omezili vznik rizik spojených s vlhkostí, např. velkou kondenzací. Z těchto úvah vyplývají i hlavní typy textilních membrán používaných při tvorbě obvodových a střešních pláštů:

větrová zábrana: difúzně propustná membrána, která má za úkol zabránit proudění vzduchu v konstrukcích vlivem externího tlaku/sání větru. Důležitým parametrem větrové zábrany je její maximální difúzní propustnost a naopak co nejmenší propustnost pro konvekci. Někdy se požaduje rovněž hydrofobnost.

parobrzdá: difúzně propustná membrána, která má za úkol regulovat množství páry, která prochází konstrukcí. S ohledem na celoroční koncentrační profily vodní páry se umísťuje co nejvíce k líci interiéru. Důležitým parametrem parobrzdě je míra její propustnosti pro vodní páru.

podstřešní membrána: membrána, která se používá do šikmých střeš, umísťuje se pod krytinu buď kontaktně nebo nekontaktně na tepelnou izolaci. V konstrukci musí plnit několik funkcí: musí propouštět páru, zamezit infiltraci vzduch a musí zabránit pronikání vody do konstrukce střechy.



Obr.5. Na příčném řezu nanotextilií je vidět hustá paralelní struktura vláken, která je skutečným původcem bariérových efektů

Provedené experimenty ukazují na mimořádné konvektivní bariérové schopnosti a měkké difúzní vlastnosti nanotextilií. To je optimální kombinace například pro konstrukci staveb bez použití parozábran.

Textilie na bázi nanovláken se svým charakterem z pohledu stavebnictví řadí mezi vysoce difúzně otevřené membrány.

Dále se ukazuje, že v porovnání s podobnými materiály vykazují menší (řádově 10x) konvektivní permeabilitu. Tento fakt znamená, že materiály budou i při malých gramážích vysoce účinné jako větrové zábrany, a to při zachování vysoké difuzivity.

Materiály s takovými vlastnostmi lze použít pro všechny dříve zmíněné účely, jako větrové (konvektivní) zábrany, jako parobrzdy i jako podstřešní membrány:

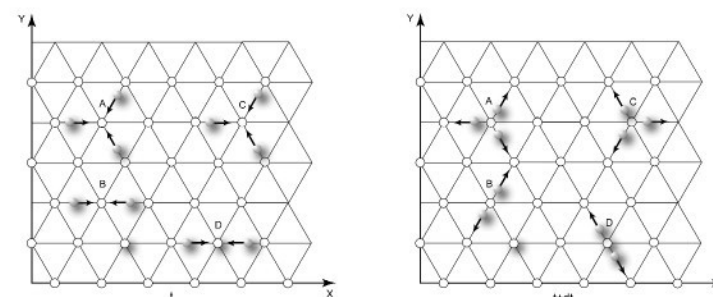
- sama účinná vrstva nanovláken může být extrémně tenká (malé gramáže), výrobně relativně laciná
- při vysoké difúzní permeabilitě má v porovnání se srovnatelnými materiály významně nižší konvektivní permeabilitu
- difúzní permeabilita jen málo závisí na gramáži nanovláknenné textilie.

Model transportních vlastností nanomateriálu

Metody buněčné automatizace jsou příkladem opačného přístupu, než jak tomu bylo u řešení pomocí metody konečných prvků. Zde začínáme s diskrétním mikroskopickým modelem, který svojí konstrukcí zachovává požadované kvantify. Tyto modely jsou bezpodmínečně stabilní. Derivace odpovídajících makroskopických rovnic ovšem vyžaduje škálování.

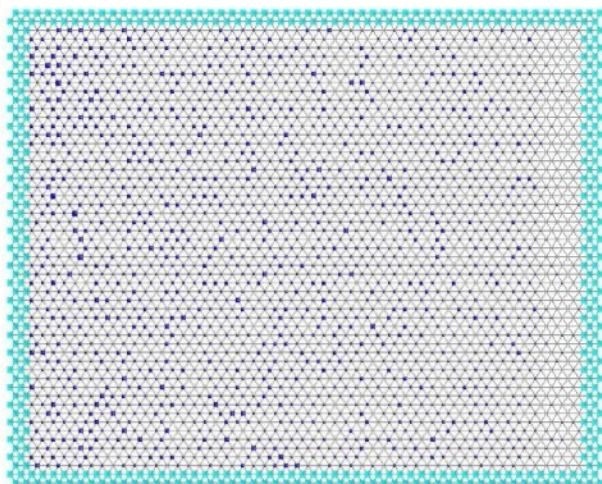
Mřížový plynový automat (LGA:lattice gas automaton)

Relativně nová metoda pro numerické řešení fyzikálních jevů tradičně popisovaných nelineárními parciálními diferenciálními rovnicemi. Vznik této metody se datuje do roku 1986 (Frisch, Hasslacher, Pomeau). Tito autoři ukázali, že jistý druh kulečnickové hry s kolizemi zachovávajícími hmotnost a hybnost v makroskopickém měřítku vede na parciální rovnice, pokud mříž vykazuje dostatečnou symetrii (hexagonální ve 2D).



Obr. 6. Typické dvou a tříčásticové kolize u modelu FHP-1

Mřížový plynový automat se podřizuje zákonům zachování a obnova je rozdělena na lokální kolize a propagace nejbližších sousedů. Toto rozdělení činí snadnějším konstrukci modelu s požadovanými makroskopickými vlastnostmi.



Obr.7. Simulační oblast - síť plynového automatu s uzly a pevnými okrajovými podmínkami danými ohraničením

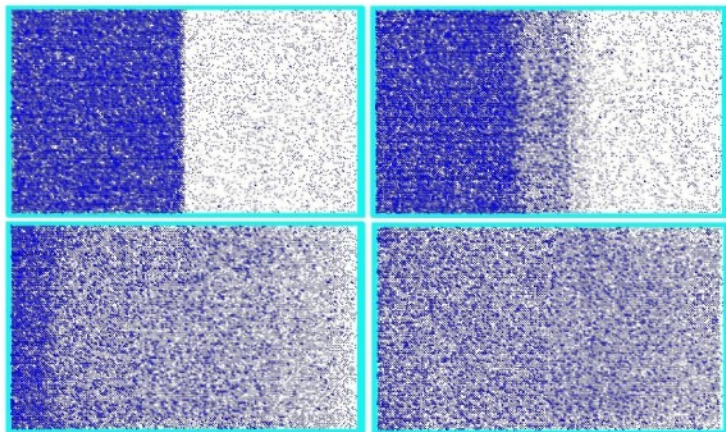
Simulační experiment s mřížovým modelem plynu

Na základě podkladů poskytnutých pro algoritmizaci mřížového modelu plynu FHP-1 byl pro testovací účely kód prototypován. Na rozdíl od předchozího schematu u *Metody konečných prvků*, zde vše probíhá v jednom cyklu interpretováno s odezvou v reálném, či téměř v reálném čase podle velikosti sítě a počtu uzlů v ní obsažených.

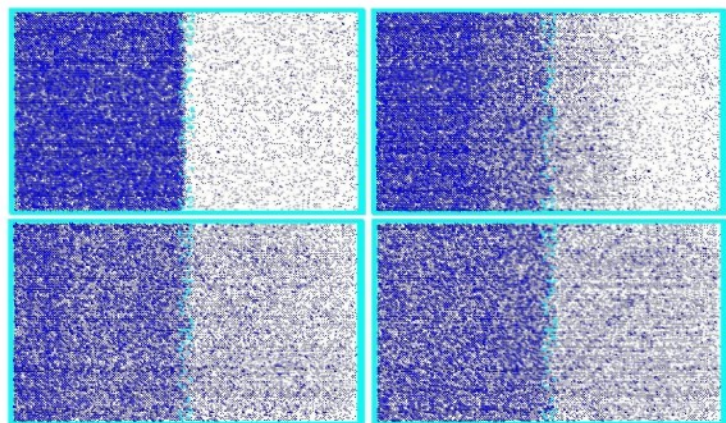
Prototypování aplikace

Zde použité prototypovací programovací prostředí známé jako Processing je rovněž distribuováno v rámci otevřené license. Processing byl vytvořen zejména pro použití v oblasti multimédií a interaktivních instalací.

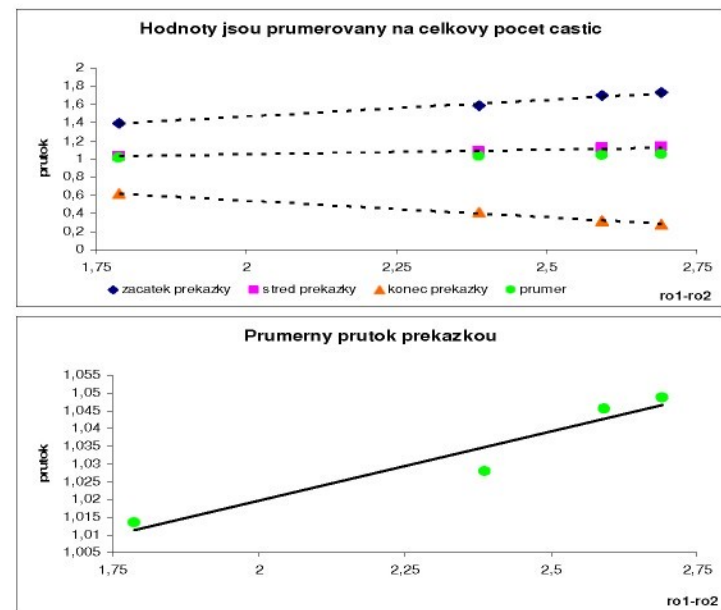
Vykreslení stavu simulace na obrazovku probíhá spolu s výpočtem v jednom cyklu a zároveň jsou některá data potřebná pro analýzu ukládána do souborů pro další statistické vyhodnocení.



Obr.8. Časový vývoj modelu plynového automatu FHP-1 v prostředí bez pórzní překážky



Obr.9. Časový vývoj modelu plynového automatu FHP-1 v prostředí s pseudonáhodně generovanou pórzní překážkou



Obr.10. Střední průtoky částic v různých místech pseudonáhodně generované překážky a celkový průměrný průtok pórzní překážkou

Závěr

V multidisciplinárně zaměřené disertační práci nazvané Počítačové modelování dýchajících fasád s důrazem na vizualizaci, je nahlíženo na téma počítačového modelování difuzně otevřených fasád z pohledu vymezení fyzikálně-stavební problematiky a metodického využití výpočetních modelů schopných popisu transportních vlastností dýchající konstrukcí v běžném i nano měřítku a především pak způsoby jak efektivně tyto procesy vizualizovat.

fenomenologický model -> diskretizace

Metoda konečných prvků a její modifikace jsou v současnosti již klasickými metodami používanými široce v inženýrské praxi.

diskrétní model -> škálování

Metoda buněčných automatů a její varianty jsou oproti tomu relativně novými metodami, vhodnými svojí podstatou pro simulace v molekulárním měřítku.

Hlavním přínosem práce je vypracování nové metodiky progresivní vizualizace dat ve spojitosti s problematikou návrhu difuzně otevřených obalových stavebních konstrukcí.

Výsledkem první fáze vizualizace, založené na výpočtu pomocí modifikace *Metody konečných prvků*, je testovací modul programu pro fyzikálně korektní návrh fasád a rovněž vizualizace, které pomohly lépe pochopit zejména jejich akumulační chování. Fasády typu diffu navrhované podle nové metodiky jsou v současné době již certifikovány a uvedeny do praxe.

Výsledkem druhé fáze vizualizace, založené na výpočtu pomocí modifikace *Mřížového plynového automatu*, je diskrétní model pro vizualizaci transportu média v nanovlákněném prostředí. Dále jsou zde zmíněny možnosti optimalizace simulačního a vizualizačního modelu v rámci jednoho prototypu spolu s diskusí o pravděpodobných možnostech začlenění nanomateriálu do kontextu návrhu dýchající fasády.

Vzhledem k tomu, že lze tuto metodiku vizualizace vědeckých dat využít pro široký rozsah úloh s relativně pružnou modifikovatelností, je jejím volným pokračováním právě probíhající spolupráce v rámci týmu zabývajícího se vývojem pro firmu Cummins, zaměřená převážně na modelování filtračních vlastností nanovlákněných materiálů.

Všechna zvolená programová prostředí použitá v průběhu celé práce byla založena na bázi otevřené license.

Literatura

L.Očeretna,P:Mikeš,R.Charvát,D.Lukáš: Multi Scale Modeling of Fluid Transport in Fibrous Materials, Computational Fluid and Solid Mechanics, 1st Cummins Filtration Workshop, Warsaw, Poland, September 21 - 23, 2008.

C.Reas,B.Fry:Processing A Programming Handbook for Visual Designers and Artists, 2007.

J.Krňanský: Nano aplikace ve stavebním průmyslu, příspěvek: konference ITW, Praha, 2007.

J.Krňanský,P.Kubů: Difuzně otevřené konstrukce dřevostaveb, příspěvek: seminář Dřevostavby, Volyně, 2007.

N.Pan,P.Gibson: Thermal and Moisture Transport in Fibrous Media, Woodhead Publishing Ltd, Cambridge, 2006 (D.Lukáš, L.Ocheretna: The Cellular Automata Lattice Gas Approach for Fluid Flows in Porous Media).

W.Schroeder,K.Martin,B.Lorensen: VTK An Object-Oriented Approach to 3D Graphics, Kitware Publishing, Colombia, 2006.

R.Charvát: série článků Architektura z Mixéru, odborný časopis Fórum architektury a stavitelství, ročník 2003.

R.Charvát: Architektura coby herní aplikace, příspěvek: konference Visions In Design, Praha, 2003.

T.Roosendaal,C.Wartmann: Blender Gamekit, Stichting Foundation, Netherlands, 2002.

S.Wolfram: A New Kind of Science, Wolfram Media, 2002.

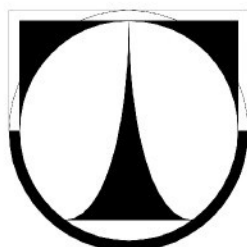
Franz J.Vesely: Computational Physics, Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York-London, 2001.

Dieter A.Wolf-Gladrow: Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models, Springer, Berlin, 2000.

O.Jirsák,D.Lukáš,R.Charvát: A 2-dimensional model of the mechanical properties of textiles. In: J.Text.Institute, 1993.

TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI

Fakulta mechatroniky a mezioborových inženýrských studií



DISERTAČNÍ PRÁCE

Liberec 2008

Richard Charvát

Technická univerzita v Liberci
Fakulta mechatroniky a mezipřechodových inženýrských studií

Studijní program: P3901 - Aplikované vědy v inženýrství

**Počítačové modelování dýchajících fasád
s důrazem na vizualizaci**

Computer modelling of breathing facades
with a view to visualization

Disertační práce

Autor:	Richard Charvát
Vedoucí práce:	Prof. RNDr. David Lukáš, CSc.
Konzultant:	Doc. Ing. Jan Krňanský, CSc.

V Liberci, Prosinec 2008

Anotace:

Tato multidisciplinárně zaměřená práce se zabývá metodikou počítačového modelování transportních vlastností tzv. difuzně otevřených obalových stavebních konstrukcí s důrazem kladeným na vizualizaci a optimalizaci vědeckotechnických dat.

Nejprve klasickým fenomenologickým modelem transportu řešeným pomocí metody konečných prvků. Vizualizace dat probíhá v prostředí podobném hernímu, tudíž lze využít pokročilých způsobů zobrazování v reálném čase. Výsledkem je testovací modul programu pro fyzikálně korektní návrh fasád a rovněž vizualizace, které pomohly lépe pochopit zejména jejich akumulární vlastnosti. Fasády typu diffu navrhované podle nové metodiky jsou v současné době již certifikovány a uvedeny do praxe.

Dále je pak nástin možnosti simulace konvekce plynu v pórém prostředí pomocí metod buněčné automatizace. Nanovláknenný materiál je zde uvažován vzhledem k případné možnosti využití jeho vlastností při navrhování dýchajících fasád. Je rovněž představeno programové prostředí pro vizuální prototypování simulací tohoto typu.

Nakonec je třeba zmínit důsledné využívání neproprietárních programových řešení v souladu s přesvědčením a působením autora na akademickém pracovišti.

Annotation:

This multidisciplinary oriented work deals with computer modelling of transport properties of breathing facades with a view to visualization and optimisation of scientific data.

In the beginning there's used finite element method solver and realtime environment like game engine for advanced visualization. Testing modul for facade prototyping was done and so helpful visualizations of its accumulation properties. Facades under the moniker diffu are certified and produced now.

In the next there's used discrete model based on the idea of cellular automaton. It's interesting think about material made from nanofibers in the context of breathing facades design.

At last I want to mention here using of open source software solutions entirely.

Poděkování:

V první řadě děkuji Prof. RNDr. Davidu Lukášovi, CSc. za odborné vedení a přínosné konzultace ohledně problematiky nanomateriálů a metod buněčné automatizace.

Dále potom děkuji Doc. Ing. Janu Krňanskému, CSc. za cenné konzultace ohledně stavebně-fyzikální problematiky a uvedení do metody konečných prvků.

Věnování:

Tuto práci věnuji svému otci RNDr. Bohuslavu Charvátovi

Obsah

1. Úvod	1
2. Trendy ve stavebnictví a realita	2
3. Pojem difuzně otevřená konstrukce	4
4. Vymezení problematiky dýchajících fasád	5
5. Nový koncept aneb návrh a realizace dýchajících fasád	6
5.1. Experimentální ověření	8
5.2. Přehled dosažených technických vlastností	9
6. Chování konstrukce z pohledu počítačové grafiky	13
7. Metodika výpočtu a vizualizace chování fasády	15
7.1. Otevřené programové prostředí pro vizualizaci	16
7.2. Vizualizační knihovny	20
7.3. Výpočty na grafické kartě	24
8. Nanomateriál v konceptu dýchající fasády	27
9. Modelování transportních vlastností nanomateriálu	33
10. Simulační experiment s mřížovým modelem plynu	43
11. Závěr	51
Literatura	52
Odkazy na Internetu	53
Přílohy	
A. Zadání úlohy	54
B. Metoda konečných prvků	57
C. Implementace modelu plynu	64
D. Demonstrace prototypu	69

1. Úvod

Domy si stavíme či rekonstruujeme především proto, abychom si v nich zajistili pohodlné a trvale zdravotně nezávadné vnitřní prostředí. Vlastností, která může výrazně napomoci k zajištění kvalitního, zdravého prostředí v interiérech staveb, je určitá prodyšnost jejich obvodových stěn a konstrukcí podkroví. Hermeticky utěsněné objekty s malou nebo žádnou výměnou vzduchu jsou ze zdravotního hlediska značně rizikové: vytvářejí podmínky pro vznik povrchových plísní v interiérech staveb, jsou příznivým prostředím pro růst a šíření kolonií bakterií a dalších mikrobiologických kultur (např. spór hub). Vnitřní prostředí utěsněných staveb s malou výměnou vzduchu také obvykle obsahuje zvýšené koncentrace chemických látek, těkajících z předmětů a chemických prostředků používaných při provozu domácností. Stručně řečeno, hermeticky utěsněné a málo větrané objekty jsou v přímém rozporu s požadavky na zdravé prostředí v interiérech staveb. Ukazuje se, že slepá snaha po dosažení energeticky úsporných řešení staveb bez ohledu na kvalitu vnitřního prostředí může vést k velmi problémovým výsledkům. Aby bylo možné budovat domy se zdravým vnitřním prostředím, je nutné používat vhodné materiály a požadavku zdravého vnitřního prostředí podřídít návrh stavební konstrukce.

Difúzně otevřená konstrukce souvisí s obalovými konstrukcemi stavby, tedy s obvodovým pláštěm a pláštěm podkroví. Jde o konstrukce, které umožňují prostup plynů difúzí, tedy molekulárním přenosem. V konstrukcích proto nejsou použity parotěsné zábrany. Difúze probíhá u směsí plynů, ve stavebnictví konkrétně ve směsi suchý vzduch – vodní pára a její hnací silou je v tomto případě rozdíl hmotových podílů. Platí, že kolik vodní páry difunduje z objektu ven, tolik suchého vzduchu proudí dovnitř. V moderních dřevostavbách se difúzně otevřené konstrukce používají 10 až 15 let spolu s nástupem nových materiálů, především konstrukčně-izolačních desek na bázi dřevěných vláken. Tento princip je opakem dokonalého utěsňování objektů a má tedy příznivější vliv na vývoj vnitřního klimatu staveb, kde tak v podstatě nehrozí riziko vzniku plísní a hub a bydlení v takových objektech je zdravější. Pro konstrukce stěn jsou navíc používány zdravotně nezávadné a obnovitelné materiály. Ve správně provedené difúzně otevřené stěně dochází k vysušování konstrukce, a to i v zimě. Využitím vhodných materiálů, především konstrukčně-izolačních dřevovláknitých desek, a jejich správným spojením s konstrukcí se zlepšují akumulární schopnosti stavby, požární odolnost a zlepšují se i zvuko-izolační vlastnosti. Je možné používat také méně vrstev obalových konstrukcí, což vede ke snížení výrobních nákladů.

V zahraničí se touto problematikou zabývá více subjektů. Jednou ze známých institucí zaměřených na výzkum v této oblasti je Fraunhofer Institute für Bauphysik.

2. Trendy ve stavebnictví a realita

Trendy současného moderního stavebnictví je možné ve zkratce popsat následujícími „hesly doby“:

- trvale udržitelný rozvoj ve stavebnictví, obnovitelné surovinové zdroje,
- zdravé vnitřní prostředí budov, ekologické stavění,
- ochrana tepla, energeticky úsporné budovy.

Je evidentní, že materiálovou bází, reflektující všechny výše uvedené proklamace, je dřevo, jeho deriváty a ostatní hmoty na biologické bázi. V souvislosti se současným způsobem využitím těchto materiálů lze konstatovat:

- současný konstrukční koncept plášťů dřevostaveb nesplňuje výše zmíněné požadavky
- i za současného stavu materiálové základny lze pláště dřevostaveb v duchu zmíněných atributů konstruovat
- oprostíme-li se od problematiky dřevostaveb, pak je principiálně možné pláště na bázi dřeva aplikovat i na zděné, betonové či ocelové primární nosné konstrukce

Ideje trvale udržitelného rozvoje ve stavebnictví by tak mohly ve velmi krátké době nalézt reálnou a značně širokou základnu pro své uplatnění.

Současný konstrukční koncept

Z pohledu konstrukčního uspořádání dnes drtivou většinu dřevostaveb tvoří dřevěná rámová konstrukce. Základní premisy, které stojí v pozadí navrhování, lze shrnout do následujících pravidel:

- a. Nelze připustit vstup vodní páry do konstrukce. Důvodem tohoto pravidla je obava z biologické degradace dřeva v důsledku nadměrného hromadění vlhkosti. Proto se ze strany interiéru do konstrukce vkládá parozábrana (zpravidla PE fólie).
- b. Nosná stěna se konstruuje jako symetrická „krabicová“ konstrukce (oboustranně plášťovaný rám). Důvodem tohoto pravidla je představa, že symetrická nosná stěna je ze statického hlediska optimálním řešením.
- c. Návrhová filosofie: co parciální požadavek (ochrana tepla, vlhkost, statika, akustika, estetika), to specializovaná vrstva. Toto pravidlo je důsledkem požadavků, kladených na obvodové pláště a nedostatečné nabídky materiálů.
- d. Co nejnížší cena konstrukce. Toto pravidlo je přirozeným důsledkem tržního prostředí, vede však ve svém výsledku na řešení, kdy báze dílčích materiálů jsou nesourode s povahou dřeva.

Kritika stávajícího konceptu

Právě uvedený koncept konstruování je možné úspěšně kritizovat z pohledu výše citovaných hesel doby.

- Hovoříme-li o obnovitelných zdrojích a ekologických materiálech, jistě lze těžko souhlasit s používáním plastových fólií, pěnového polystyrénu, formaldehydových lepidel a podobných hmot.
- Máme-li na mysli energetickou úspornost, je třeba se pozastavit nad chováním dřevostaveb v letním období. Tyto objekty mají díky malé plošné hmotnosti pláště malou tepelnou kapacitu. To vede v letním období k přehřívání staveb. Protože náklady na chlazení jsou 2-3x vyšší než na vytápění, jsou v tomto smyslu současné dřevostavby energeticky náročné.
- Patrně nejdůležitější otázkou je kvalita vnitřního prostředí. Vlivem zásady zamezení vniku vlhkosti do konstrukce užíváme ze strany interiéru parozábranu. Interiér tak vlastně obaluje neprodyšný, hermeticky uzavřený „vak“, prolomený občas stejně kvalitními, tj. hermeticky těsnícími okny či dveřmi. O kvalitě tohoto prostředí lze jistě s úspěchem pochybovat. Používání umělého větrání je řešením problému jen do té míry, do jaké jsme schopni trvale zaručit mikrobiologickou čistotu vzduchotechnických rozvodů.

Tradiční nedostatky staveb

Vedle právě zmíněných problémů koncepčního typu existují rovněž objektivní technické příčiny snížené konkurenceschopnosti stávajících staveb vůči tradičním silikátovým technologiím. Patří mezi ně zejména:

- malá tepelná stabilita interiérů (léto),
- mizivá regenerace při vlhkostní havárii (parozábrana),
- konstrukčně nestabilní řešení (závislost spolehlivosti celé konstrukce na neporušení parozábrany),
- malá vlhkostní stabilita interiérů (parozábrana),
- nízká zvukoizolační schopnost (vzduchová neprůzvučnost),
- konkurenčně chabé požární vlastnosti (velké odstupové vzdálenosti objektů).

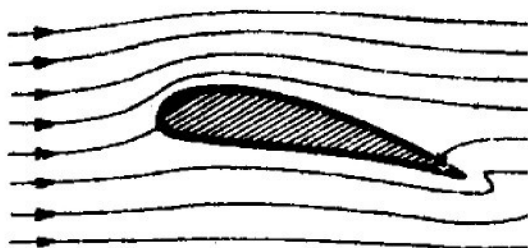
Tyto nedostatky jsou dlouhodobě všeobecně známé.

3. Pojem difúzně otevřená konstrukce

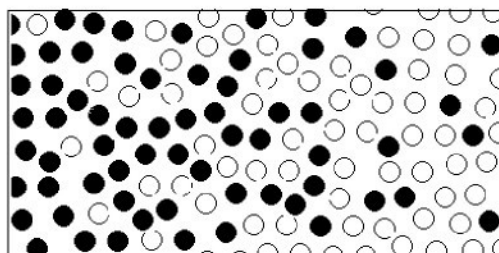
Pojem difúzně otevřených konstrukcí se zavádí zejména v souvislosti s obalovými konstrukcemi (obvodové pláště a pláště podkroví). Jde o takové konstrukce, které umožňují prostup plynů mechanismem molekulárního přenosu, označovaného běžně jako difúze. Znamená to tedy, že v konstrukcích nepoužíváme parotěsné zábrany.

Plyny se obecně mohou šířit dvěma mechanismy:

- konvekcí (prouděním), což je objemový tok, jehož hnací silou je rozdíl tlaků
- kondukcí (molekulárním tokem), což je difúze

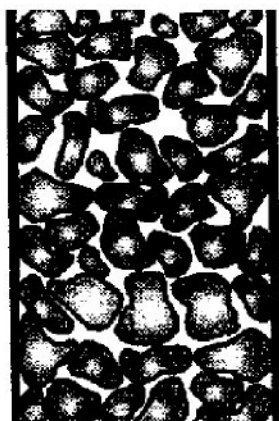


Obr.1. Ilustrace konvekce

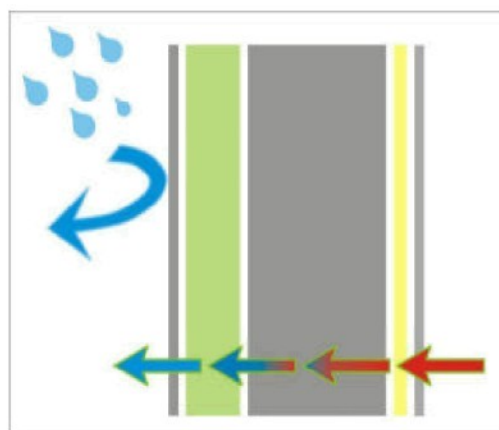


Obr.2. Ilustrace kondukce

Difúzně otevřenou konstrukcí se vesměs rozumí takové uspořádání obalové konstrukce, které umožňuje konduktivní přenos, avšak znemožňuje přenos konvektivní. Přesně vzato tento ideální případ nemůže nastat, a to jak v důsledku existence nestacionárních teplotních polí, tak i v důsledku velmi omezené vzduchové permeability některých konstrukčních vrstev. Zkušenosti ovšem ukazují, že je možné přiblížit se uspokojivě skutečnou konstrukcí výše uvedené definici.



Obr.3. Ilustrace pórovitosti



Obr.4. Ilustrace funkce fasády

Difúzně otevřená konstrukce využívá přirozené pórové systémy v materiálech k transportu plynů a par. Kromě toho musí plnit ostatní požadavky kladené na obalové konstrukce (tepelně izolační schopnost, hydrofobii povrchů, atd)

4. Vymezení problematiky dýchajících fasád

Syndrom nemocných budov:

- nepropustné oddělení vnitřního a vnějšího prostředí budovy
- použití nezdravých materiálů

Difuzně otevřené konstrukce (dýchající fasády):

- nejsou vzduchotěsné
- používají zdravotně nezávadné materiály

Správný návrh difuzně propustné fasády znamená řešit stavebně-fyzikální problémy spojené s problematikou transportních procesů. Rozhodnutí otevřít obvykle vrstvenou strukturu obvodového pláště pro difuzi par znamená vědět, že v zimním období nedojde k jejich kondenzaci a následnému zmrznutí, což by mohlo vést k poškození pláště.

Pro hodnocení otázky migrace vodních par v obvodových pláštích je třeba mít použitelný a pro dané účely dostatečně výstižný model, schopný v hlavních rysech postihnout otázky migrace kvalitativně i kvantitativně, postačující pro správný návrh dýchající fasády. Obecně platný model pro difuzi par pórovým prostředím stavebních materiálů pravděpodobně neexistuje.

Když se podíváme na naznačené otázky a souvislosti, objeví se za nimi vznikající rozpor, jež se v konstrukci obvodových plášťů a budov obecně objevuje. Požadavky jednotlivých dílčích odborností, např. tepelné techniky, na konstrukce plášťů se průběžně stupňují. Stále rostou požadavky na tepelně izolační schopnost obalových konstrukcí z energetických důvodů, což vede od určitého okamžiku ke zhoršování kvality mikroklimatu budovy.

Problém dýchajících fasád je součástí obecnějšího problému, který spočívá v nalezení rovnováhy mezi často protichůdnými požadavky, jenž jsou na obalové konstrukce kladené.

Z uvedeného vyplývá potřeba

- konstrukčních doporučení pro tvorbu difuzně propustných fasád budov
- laboratorního ověření zvolených řešení
- výpočetního modelu a metodiky výpočtu pro posuzování difuzně otevřených fasád

Problematika difúzně otevřených fasád a podkroví je spojená s pochopením určitých fyzikálních souvislostí. Praktickou realizaci difúzně otevřených konstrukcí je užitečné spojit s některými novými nebo nově modifikovanými materiály, které přinášejí do konceptu tvorby staveb nové kvality.

5. Nový koncept aneb návrh a realizace dýchajících fasád

V souvislosti s úvodními úvahami se jeví jako vhodný směr pro řešení pokusit se využít konstrukční koncept difúzně otevřených konstrukcí. Úvahy budou dále ilustrovány na chráněném konstrukčním řešení typu diffuwall®.

Pro řešení difúzně otevřeného obvodového a střešního pláště byla zvolena následující východiska:

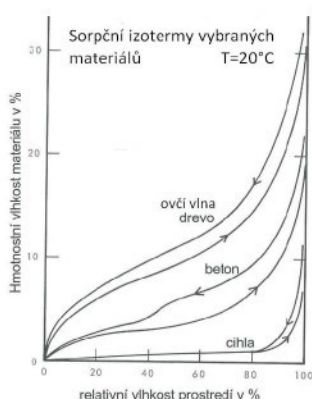
- Povolit v rozumné míře průběh „přirozených“ přenosových dějů na rozhraní interiéru/exteriéru, tj. především odstranit parozábranu.
- Důsledně využívat zdravotně nezávadné biomateriály nebo recyklované materiály
- Položit důraz na tepelně a vlhkostně akumulční vlastnosti plášťů (stabilita vnitřního klima).
- Pro asymetrické prostředí působení obalových konstrukcí zvolit rovněž asymetrické řešení konstrukce.
- Maximálně zjednodušit konstrukci samu (minimalizace počtu vrstev a materiálových bází).

Problém, který se dal od zvolených východisek očekávat, spočíval v oblasti materiálů

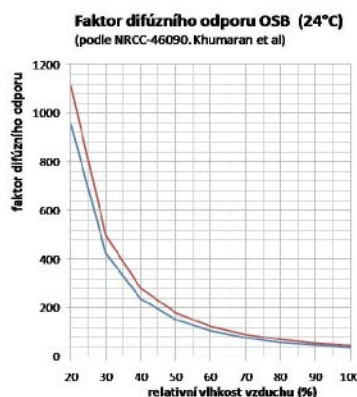
Vlhkostní režim plášťů

Pro řešení problematiky vlhkosti byla přijata následující východiska:

- docílit maximální difúzní přenos plochou stěny nebo střešního pláště, ovšem za současného splnění podmínky, že nebude docházet ke kondenzaci,
- lokální rizika kondenzace, kterým není možné se vyhnout zejména při tvorbě detailů, zvládnout pomocí sorpční schopnosti materiálů,
- vysokou sorpci vlhkosti, typickou pro biomateriály, využít ke stabilizaci vlhkostního klima v interiérech.



Graf 1. Sorpční izotermie



Graf 2. Faktor difúzního odporu

Specifická potíž, typická pro hutné materiály na bázi dřeva (cca od objemové hmotnosti 500 kg/m^3), je dramatická závislost faktoru difúzního odporu na vlhkosti

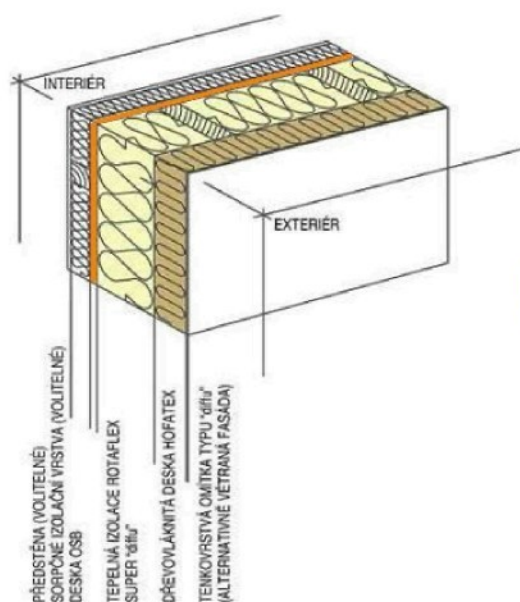
prostředí. Jeden a týž materiál má jiné charakteristiky v interiérové a exteriérové aplikaci.

Skladby konstrukce diffuwall® jako systémové řešení

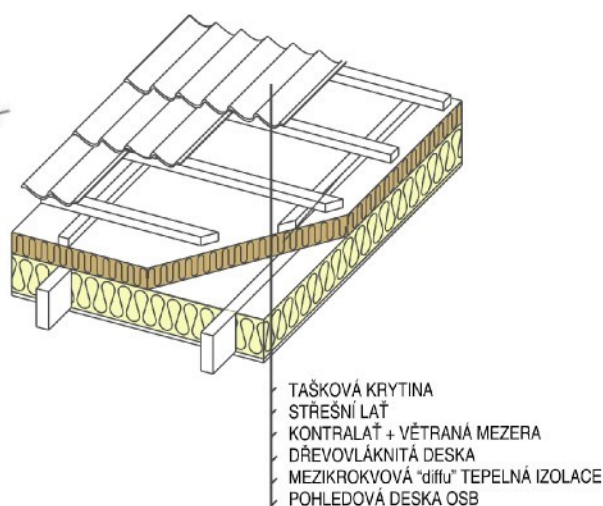
Po zapracování výše zmíněných požadavků a východisek byla metodami kvantitativní analýzy ověřena základní skladba konstrukce. Přitom, s ohledem na co nejširší možnosti aplikace, byla konstrukce koncipována jako systémové řešení, tedy jako dostatečně flexibilní z pohledu možností určitých modifikací. Jako proměnné parametry byly přednostně uvažovány:

- energetické vlastnosti (ochrana tepla); volbou tloušťek příslušných vrstev je možné dosáhnout parametrů, odpovídajícím plášťům pasivních budov,
- interiérové a exteriérové úpravy (interiérové předstěny, exteriérové tenkovrstvé omítky či nekontaktní provětrávané systémy).

Základní skladba, která tvoří systémové jádro pláště a je garantem požadavků kladených na konstrukci, je třívrstvý sendvič.



Obr.5. Ilustrace uspořádání obvodového pláště



Obr.6. Ilustrace uspořádání střešní konstrukce

Z požadavku multifunkčního působení jednotlivých vrstev (synergické efekty) a z rámcové znalosti proměny komplexu fyzikálních vlastností dřeva (v závislosti na objemové hmotnosti) byla nakonec pomocí kvantitativní analýzy navržena následující skladba:

- 1) interiérová tuhá deska ($\approx 600-700 \text{ kg/m}^3$); požadované funkce: primární statika, parobrzda, akumulace vlhkosti, akustika

- 2) měkká výplňová izolace ($\approx 20\text{-}50 \text{ kg/m}^3$); požadované funkce: tepelná izolace, parobrzd, sorpce vlhkosti
- 3) Exteriérová polotuhá deska ($\approx 220\text{-}270 \text{ kg/m}^3$); požadované funkce: malá statika, tepelná izolace, parobrzd, sorpce vlhkosti při kondenzaci, tepelná kapacita, hydrofobita

5.1. Experimentální ověření

Po získání potřebných konstrukčních materiálů a ověření jejich specifických vlastností bylo možné přistoupit k ověření vlastností pláště jako celku.

Oblasti experimentu:

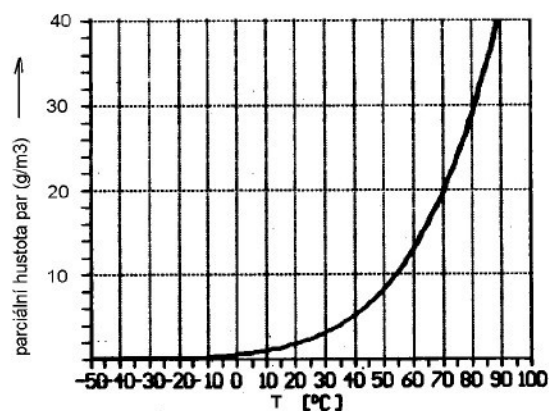
- stavebně-fyzikální ověření (prostup tepla, vlhkostní chování)
- požárně statické ověření (požární zkouška obvodového panelu pod statickým zatížením).

Stavebně-fyzikální ověření vlastností bylo prováděno na CSI Praha ve velké klimatické komoře (vzorek stěny o velikosti $2,2 \times 2,5 \text{ m}$). Zkouška trvala 14 dní a potvrdila výpočty predikované vlastnosti konstrukce (resp. prokázala vlastnosti lepší, než které kvantitativní analýza předvíдалa). V komoře byl vytvořen ustálený teplotní a vlhkostní stav, teplota a rh „interiéru“ $20^\circ\text{C} / 65\%$, teplota a rh exteriéru $-15^\circ\text{C} / 50\%$ (prakticky suchý vzduch).

Jedním z nejzajímavějších výsledků experimentu byl efekt zimního vysušování. Vzorek byl do klimatické komory vložený s hmotnostní vlhkostí rámoviny na úrovni asi 12-14% (běžná hodnota, typická pro konstrukční dřevo). Po krátké době však čidla prokázala pokles hmotnostní vlhkosti na 6-7%. Tedy v podmínkách, kdy bychom měli očekávat v konstrukci kondenzaci par nebo alespoň rostoucí hmotnostní vlhkost materiálů (sorpce), konstrukce naopak dramaticky vyschla. Tento efekt je neobyčejně důležitý zejména s ohledem na potřebnou regenerační schopnost konstrukcí v případě havarijní vlhkosti.



Obr.7. Zkušební komora



Graf 3. Parciální hustota par v závislosti na teplotě

Požárně-statické ověření proběhlo ve zkušebně PAVUS ve Veselí nad Lužnicí. V nejslabší konfiguraci stěny prokázala konstrukce pod statickým zatížením požární odolnost interier / exteriér hodnotami 90 / 120 minut, což je na dřevěnou konstrukci odolnost velmi dobrá.



Obr.8. Zkušební zařízení



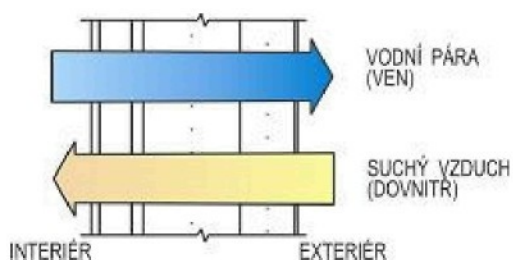
Obr.9. Zkouška požární odolnosti

5.2. Přehled dosažených technických vlastností

Navržená konstrukce prokázala, že je možné za současného stavu materiálové základny pláště dřevostaveb v duchu zásad moderního stavitelství konstruovat. Následující výčet dosažených vlastností toto tvrzení dokládá.

Difuzní otevřenost

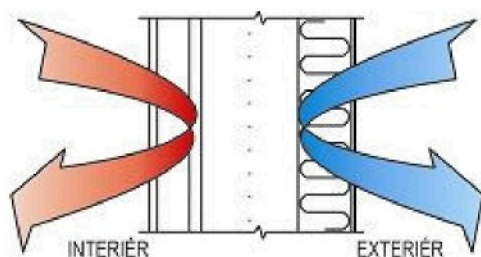
Skladby konstrukcí neobsahují žádné parozábrany, které by bránily prostupu vodních par a suchého vzduchu stěnou či střechou. Tento fakt pozitivně ovlivňuje kvalitu vnitřního mikroklimatu ze zdravotního hlediska a umožňuje určité „dýchání“ konstrukcí stěn a střešních plášťů.



Obr.10. Ilustrace difuzní otevřenosti

Energetická úspornost

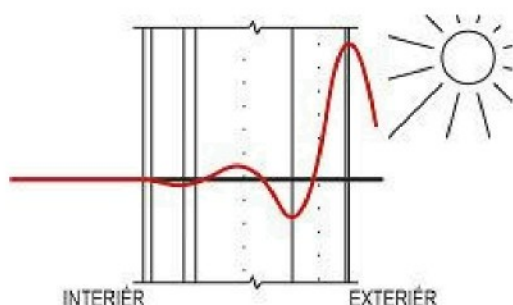
Vynikající tepelně izolační vlastnosti používaných materiálů umožňují vytvářet objekty a konstrukce s minimálními energetickými ztrátami. Podle volitelných variant tloušťek jednotlivých vrstev konstrukcí je možné dosáhnout parametrů nízkoenergetického až pasivního domu.



Obr.11. Ilustrace energetické úspornosti

Tepelná stabilita

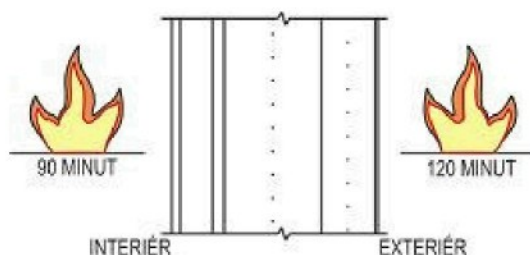
Díky užití dřevovláknitých desek, které mají značně vysokou tepelně akumulaci schopnost, nedochází k letnímu přehřívání objektů. Odstraňuje se tak jedna z mála nevýhod dřevostaveb, tj. jejich malá tepelná stabilita (zejména s ohledem na letní období). Fázový posuv teplotního kmitu dosahuje hodnot 7 až 13 hodin.



Obr.11. Ilustrace tepelné stability

Požární odolnost

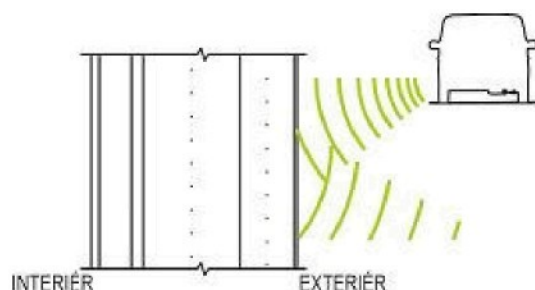
Používané materiály mají značnou požární odolnost. Při hoření jejich povrch zuhelnatí a zamezí tak rychlému šíření požáru do nitra konstrukcí. Výsledkem je nadstandardní požární odolnost konstrukcí, která dosahuje hodnot 90 minut z interiéru a 120 minut z exteriéru.



Obr.12. Ilustrace požární odolnosti

Zvukoizolační schopnost

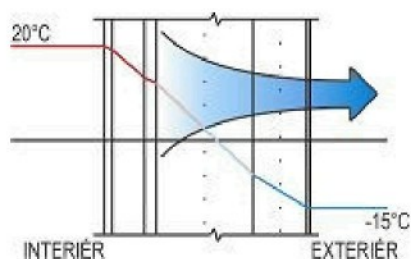
Plošná hmotnost dřevěných konstrukcí v systémech „diffu“ je vlivem jejich skladeb a použitých materiálů vyšší, než je tomu u běžných dřevostaveb. Z toho plyne i vyšší zvukoizolační schopnost. Objekty proto lépe izolují proti hluku ve vnějším prostředí staveb.



Obr.13. Ilustrace zvukoizolační schopnosti

Regenerační schopnost

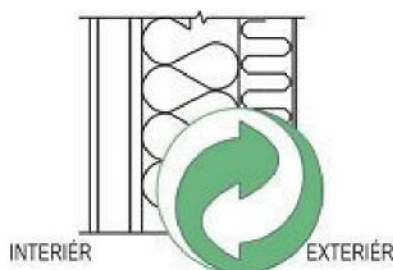
Difúzně otevřená konstrukce má schopnost zbavit se případné nadměrné vlhkosti. Ta se v konstrukci může objevit, dojde-li například k uzavření nadměrné vlhkosti během výstavby nebo dojde-li k havarijní situaci (kapající rozvody vody, poškození konstrukce apod.). Difúzně otevřená konstrukce v mrazivém počasí automaticky vysychá.



Obr.14. Ilustrace regenerační schopnosti

Ekologie a zdravotní nezávadnost

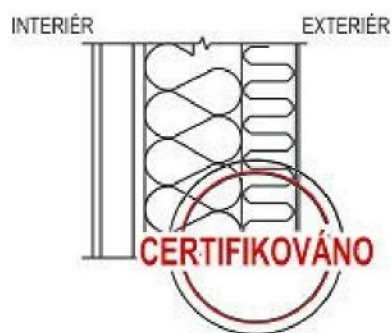
Konstrukce v systémech „diffu“ mohou být realizovány výhradně s použitím ekologických, zdravotně nezávadných materiálů. Proto jsou tyto konstrukce šetrné k životnímu prostředí a vytvářejí zdravé prostředí uvnitř staveb.



Obr.15. Ilustrace zdravotní nezávadnosti

Ověřená řešení a certifikace

Inovativní koncept konstrukce vyvolal paradoxně potřebu úplné certifikace především z toho důvodu, aby byla překonána nedůvěra projektantů a realizačních firem. V současnosti je to jediná certifikovaná difúzně otevřená konstrukce v ČR a je chráněna užitným vzorem a obchodní značkou diffuwall®.



Obr.16. Ilustrace užitého vzoru

Zjednodušení technologie výroby

Použití konceptu difúzně otevřené konstrukce vede na snížení počtu vrstev obalových konstrukcí. To má přirozeně dopad i do zmenšení počtu výrobních operací a tedy i snížení nákladů na výrobu.

běžná stěna

vnitřní nosná deska
parozábrana
tepelná izolace
vnější nosná deska
tepelná izolace
vnější povrchová úprava

diffuwall®

vnitřní nosná deska
tepelná izolace
vnější konstrukčně-izolační deska
vnější povrchová úprava

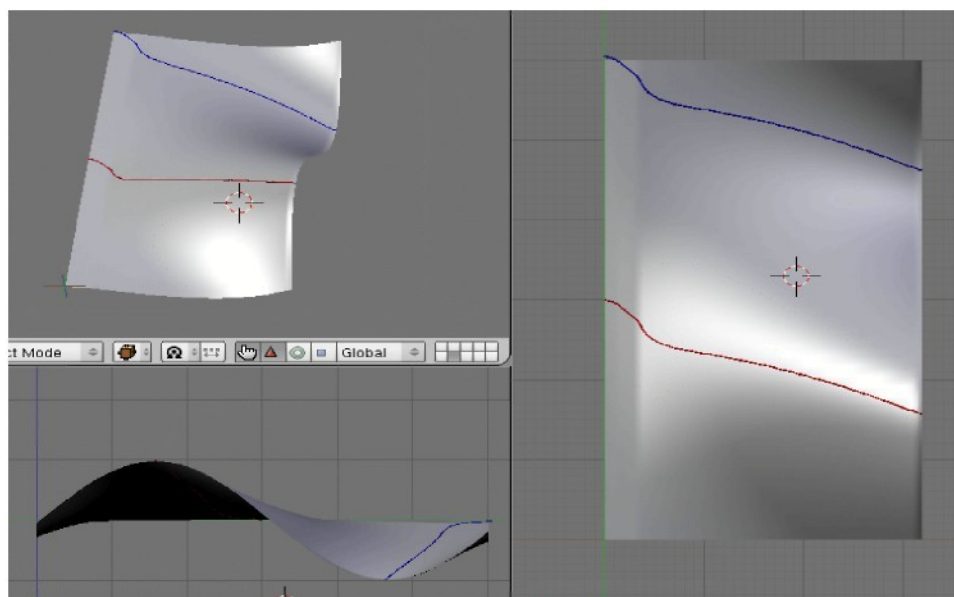
Nový koncept ušetří dva technologické kroky, a to montáž vnější nosné desky a zejména problematickou montáž (i funkci) parozábrany.

6. Chování konstrukce z pohledu počítačové grafiky

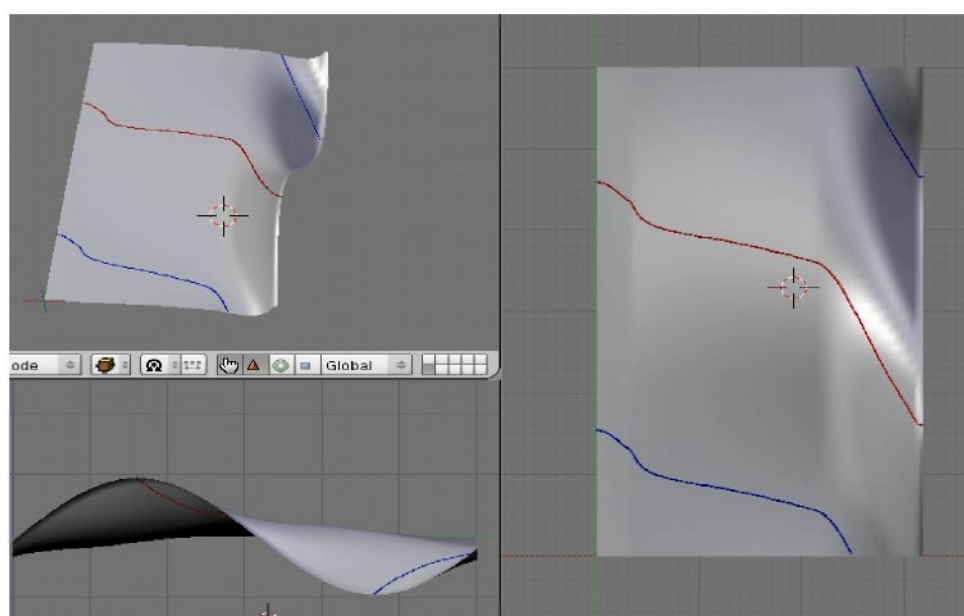
Vzhledem k možnostem moderní počítačové grafiky lze obecně konstatovat, že vizualizace transportních jevů, které přímo souvisí s fyzikálně korektním návrhem fasád je možné provádět s minimální odezvou vzhledem k reálnému času výpočtu, což umožňuje zkvalitnit cyklus návrhu konstrukce.

Akumulace stěny

U stěn resp. podkroví se oproti běžné konstrukci stěny prodlouží fázový posuv běžně 2-2,5krát, tj. na 10-12 hodin. Akumulační schopnost tak výrazně přispívá k teplotnímu komfortu v interiéru budovy zejména v extrémních klimatických situacích.

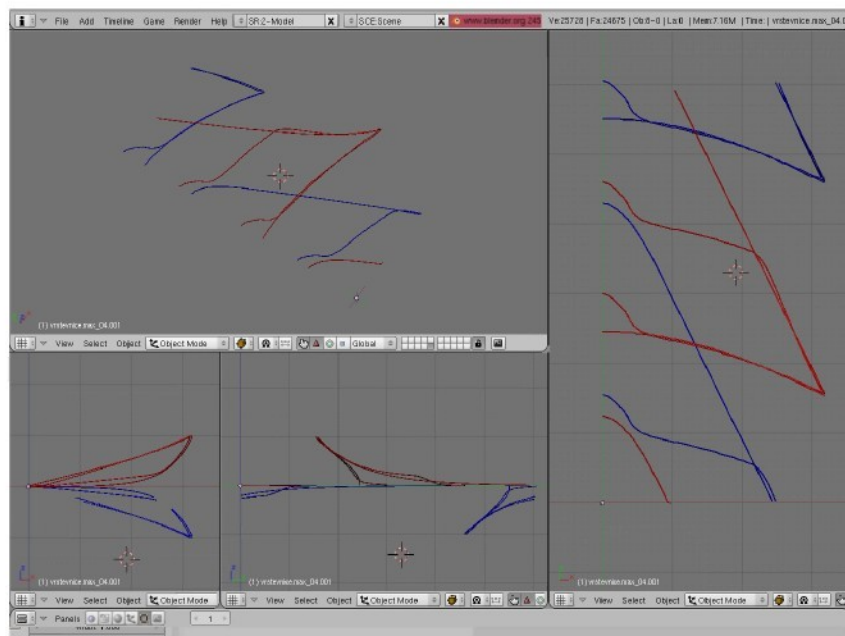


Obr.17. Průchod sinusové tepelné vlny tradiční konstrukcí obvodového pláště dřevostavby (lehké tepelné izolace, krabicová nosná konstrukce).



Obr.18. Průchod sinusové tepelné vlny obvodovým pláštěm systému diffuwall®

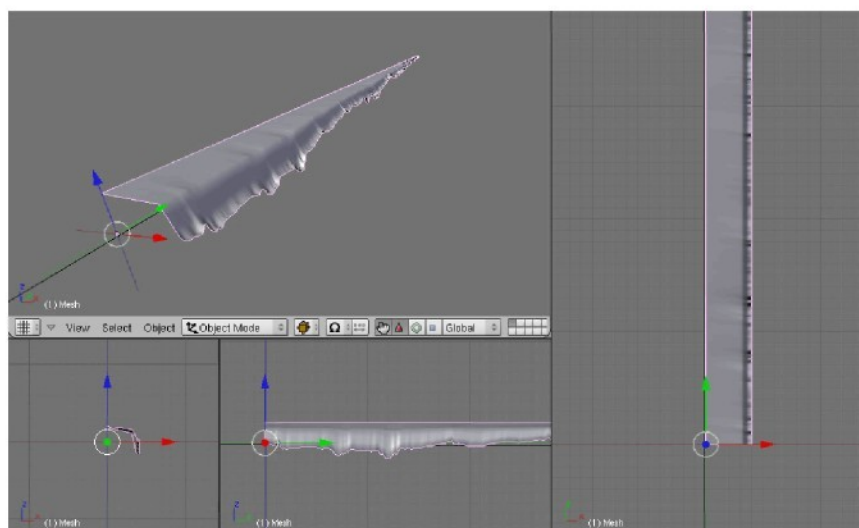
Zobrazení průchodu sinusové tepelné vlny obvodovým pláštěm ve všech pohledech (názor, bokorys, půdorys a perspektiva). Minima jsou značena modře a maxima červeně.



Obr.19. Zobrazení teplotní minim a maxim průchodu sinusové tepelné vlny obvodovým pláštěm

Celoroční bilance aneb ze života fasády

Jako velmi zajímavé se jeví prostorové zobrazení teplotních či vlhkostních polí získaných na základě výpočtů zohledňujících dlouhodobě monitorovaná meteorologická data v dané stavební lokalitě. Tak je možné interaktivně ověřovat chování konstrukce v průběhu delších časových intervalů, tj. zaznamenat život fasády např. během celého kalendářního roku.



Obr.20. Roční bilance pro danou kontrolní oblast spočtenaná na základě dat z Českého hydrometeorologického ústavu

7. Metodika výpočtu a vizualizace chování fasády

Současné počítače mají díky novým procesorům a grafickým akceleratorům výkonnost v oblasti interaktivní 3D grafiky, která ještě před pár lety byla výsadou specializovaných grafických stanic. Vývoj nových technologií jde stále kupředu a ceny počítačů a jejich komponent klesají i při zachování jejich stávajících parametrů.

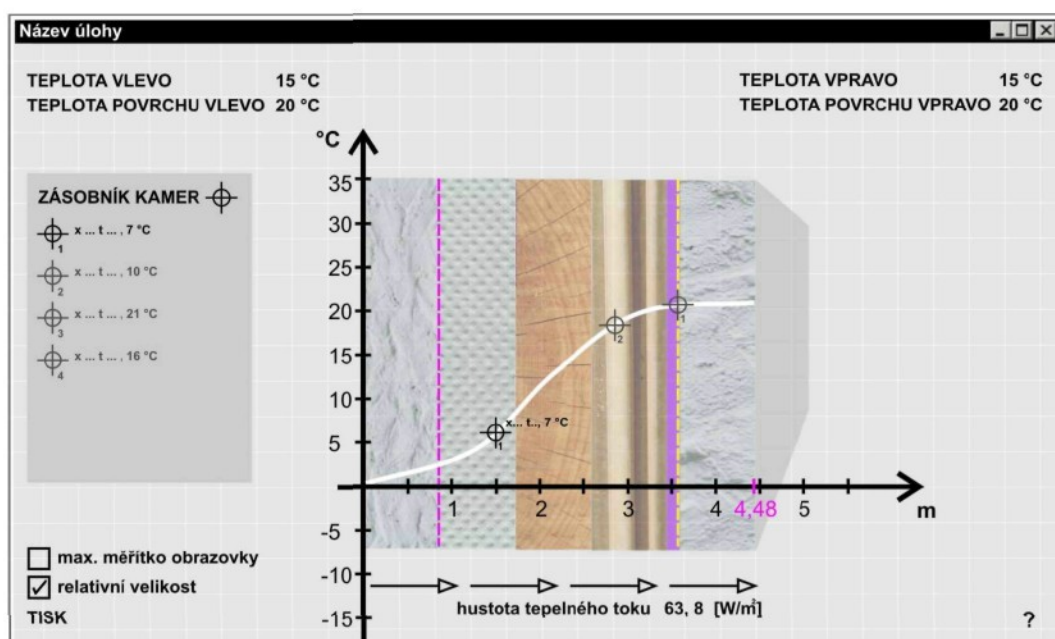
Na základě úvah zpřístupnit návrhový systém diffu pro běžného uživatele ze stavební praxe, který potřebuje řešit úlohy stavební fyziky, byl týmem na Fakultě architektury v Liberci pod vedením Doc. Krňanského učiněn pokus o naprogramování testovacího modulu.

U zde uvedeného příkladu je použito standardní schéma řešení, které probíhá následovně:

Preprocesor více viz. příloha A. *Zadání úlohy (str.54)*

Procesor více viz. příloha B. *Metoda konečných prvků (str.57)*

Postprocesor aneb *Vizualizační modul*



Obr.21. Vizualizace v reálném čase s možností interaktivního záznamu hodnot z grafu pomocí kamer

Údaje získané z tzv. kamer mohou být zpětně načteny do preprocesoru ke korekci návrhu.

Na tomto testovacím modulu se ukázalo, že úspěšně dořešit programový balík uzpůsobený potřebám běžného uživatele ze stavební oblasti v rozumném časovém horizontu přesahuje možnosti zainteresovaného akademického kolektivu.

7.1. Otevřené programové prostředí pro vizualizaci

Pro načtení dat z řešiče a následnou vizualizaci byl zvolen volně šiřitelný program známý pod označením:

BLENDER

Jedná se o modelovací a animační 3d program. Méně známé a používané jsou jeho nástroje pro editaci logiky a herní engine (GE). Komplexnost propojení standardních nástrojů s GE nabízí rozšíření možností interaktivní 3d grafiky.

Blender je plně integrovaná aplikace pro tvorbu 3d grafiky. Má všechny potřebné nástroje pro tvorbu lineární animace a nelineární (interaktivní) 3d grafiky. Všechny vlastnosti jsou dostupné v rámci jedné aplikace a umožňují plynulý přechod od návrhu k modelování, animaci a publikování 3d obsahu.

GE je program simulující část reality. Skrze toto rozhraní lze provádět interakci s 3d světem s odezvou v reálném čase, kontrolovat objekty ve scéně, které mohou mít vzájemné interakce mezi sebou. GE je srdcem aplikace a skládá se z několika částí. Jedna část se stará o vykreslování scény a objektů v ní obsažených, další se zabývá rozhodováním (game logic) a jiná simulací fyzikálních procesů.

Blender GE je jedním z prvních svého druhu, ve kterém je začleněna herní logika pomocí uživatelského grafického rozhraní (GUI), což předurčuje jeho použití pro prototypování aplikací a zároveň je zde možnost zasáhnout během návrhu aplikace do kódu pomocí zde integrovaného skriptovacího jazyka Python.

Tato relativní snadnost použití umožňuje další inovace. Technicky vzato je GE rámec s kolekcí modulů pro interaktivní účely jako jsou fyzika, grafika, logika, zvuk a síťové prostředky. Funkčně GE provádí virtuální realitu sestávající z obsahu a chování. Elementy tohoto virtuálního světa se chovají autonomně na základě nastavení logických vazeb a vlastností.

Progresivní je modul Realtime, v němž lze scénu a objekty v ní obsažené logicky editovat pomocí tzv. Logic Bricks (logické cihly). Herní logika sestává ze senzorů, kontrolérů a aktuátorů. Editace a vizualizace zde probíhá bez nutnosti kompilace. Kontroléry mohou být snadno řízeny pomocí výrazů, nebo skriptů.

Dále je výhodné použití tzv. Templates (šablony), což v praxi znamená, že uživatel v plné míře využívá předem definovaného chování objektů ve scéně a při interakci s nimi.

Proto tento produkt může být zajímavou volbou pro vědecko-technické vizualizace. Jedná se o prostředí, které je otevřené pro tvorbu aplikací počítačové grafiky obecně.

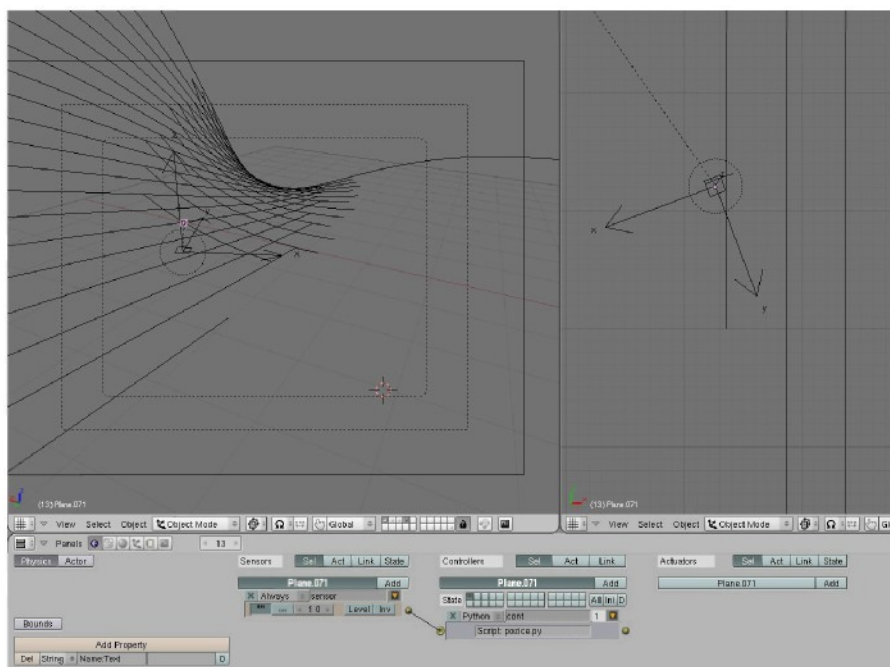
Blender využívá grafickou knihovnu OpenGL a jeho API rozhraní je obslouženo přes integrovaný interpreter volně šiřitelného programovacího jazyka, známého jako:

PYTHON

Dynamicky typovaný, objektově orientovaný, interpretovaný, interaktivní programovací jazyk vyšší úrovně, obsahující moduly, třídy, výjimky, dynamické datové typy a dynamické typování. Je rovněž použitelný jako rozšiřující jazyk pro aplikace vyžadující programovatelné rozhraní. Jeho implementace může být portována na všechny platformy na kterých je Blender provozován.

# skript pro výpis pozice objektu	poznámka
import GameLogic	import herního modulu
cont = GameLogic.getCurrentController()	ukazatel na funkci z herního modulu vykonávající skript přiřazující hodnotu proměnné
me = cont.getOwner()	vlastník herního objektu přiřazený herní logikou
print me.getPosition()	výpis pozice objektu na konzoli
print dir(me)	dokumentace

Například úlohu s kamerami viz. obr.21. na str.15 pro stacionární případ, tj. interaktivní odečítání hodnot z grafu je možné řešit pro nestacionární případ ve 3d herním prostředí Blenderu následovně:



Obr.22. Návrh za pomoci logiky a skriptů v herním prostředí programu Blender

Python skript pro výpis pozice objektu pohybujícího se po prostorové křivce:

```
import GameLogic

contr=GameLogic.getCurrentController()
owner=contr.getOwner()

owner.Text=owner.getPosition()
```

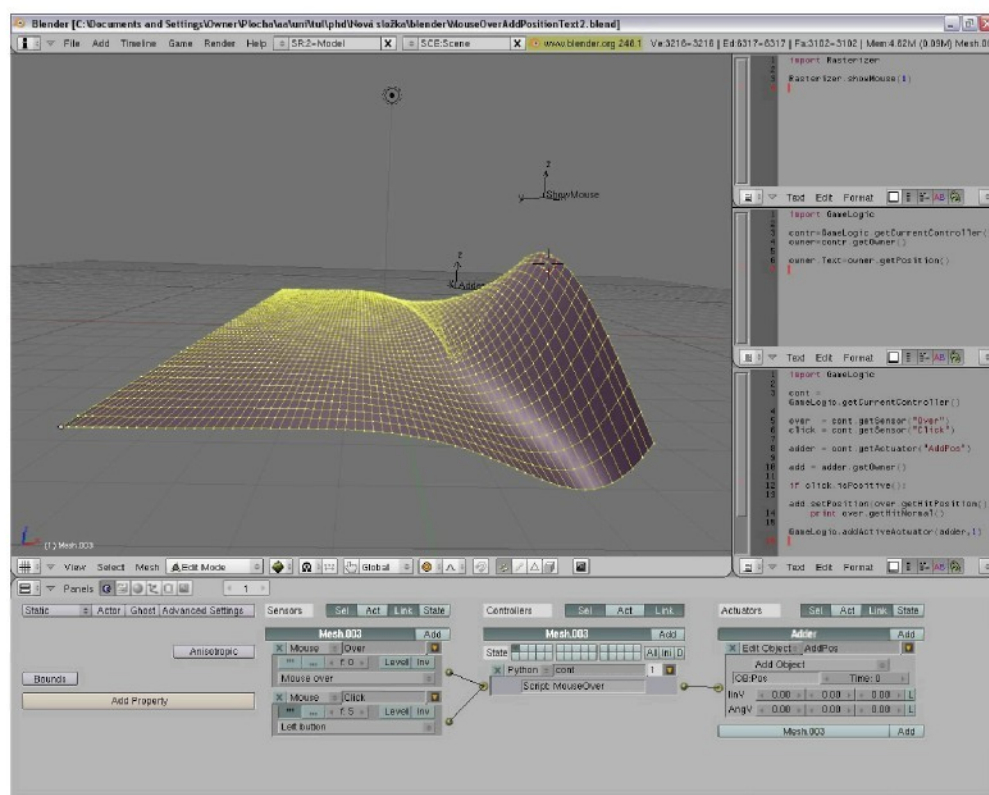
Python skript pro manipulaci s dynamickým objektem pohybujícím se po prostorové křivce, s možností záznamu a dodatečného přehrání trajektorie pohybu:

```
import GameLogic
controller = GameLogic.getCurrentController()
sensorlist = controller.getSensors()
raysensor = sensorlist[0]

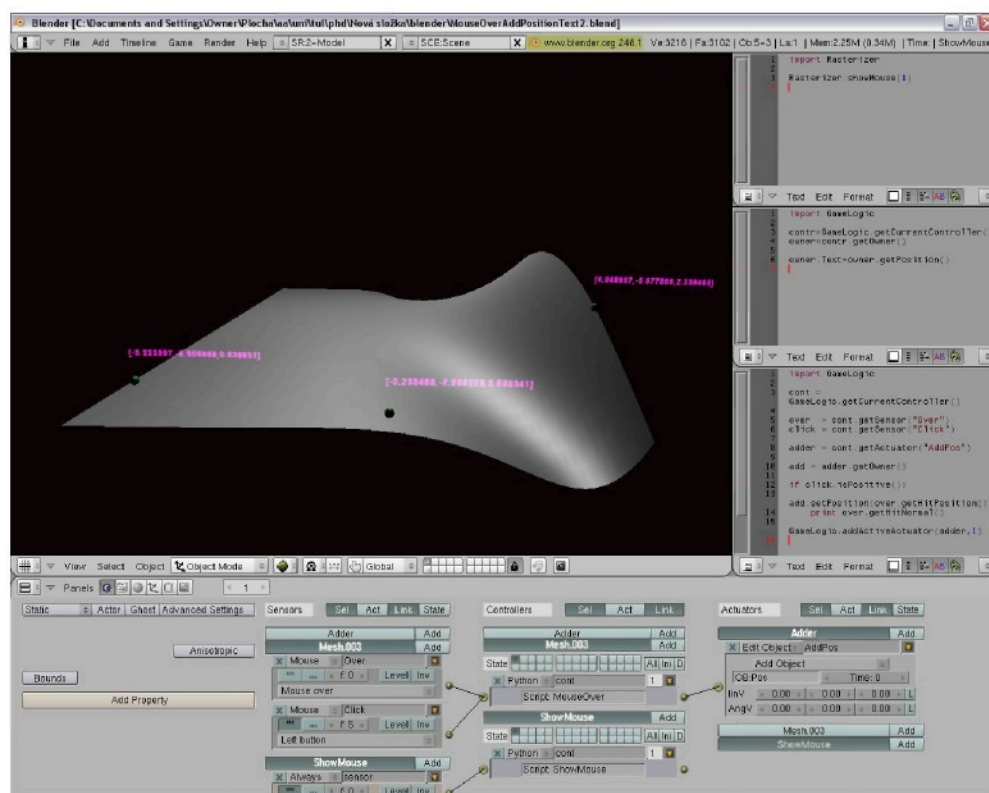
owner = controller.getOwner()

if owner.isPlayingback>0:
    if (owner.isPlayingback==2):
        owner.isPlayingback = 1
        owner.setVisible(0)
        owner.suspendDynamics()
    if owner.curframe < len(owner.hitlist):
        pos = owner.hitlist[owner.curframe]
        ori = owner.orilist[owner.curframe]
        owner.setPosition(pos)
        owner.setOrientation(ori)
    else:
        owner.isPlayingback = 0
        owner.setVisible(1)
        owner.restoreDynamics()
else:
    hitPosition = owner.getPosition()
    orientation = owner.getOrientation()
    if hasattr(owner,"hitlist"):
        owner.hitlist = owner.hitlist + [hitPosition]
        owner.orilist = owner.orilist + [orientation]
    else:
        owner.hitlist = [hitPosition]
        owner.orilist = [orientation]
```


Další možný způsob zápisu značek pozic na prostorové ploše:



Obr.23. Návrhové prostředí v přípravné fázi



Obr.24. Návrhové prostředí v průběhu ladění

Skript pro zobrazení kurzoru myši:

```
import Rasterizer
Rasterizer.showMouse(1)
Skript pro výpis textu:
```

```
import GameLogic
contr=GameLogic.getCurrentController()
owner=contr.getOwner()
owner.Text=owner.getPosition()
```

Skript pro zápis značek:

```
import GameLogic
cont = GameLogic.getCurrentController()
over = cont.getSensor("Over")
click = cont.getSensor("Click")
add = cont.getActuator("AddPos")
add = add.getOwner()
if click.isPositive():
    add.setPosition(over.getHitPosition())
    print over.getHitNormal()
GameLogic.addActiveActuator(add,1)
```

7.2. Vizualizační knihovny

Ještě mnohem mohutnějším nástrojem pro vizualizaci rozsáhlých souborů dat je možnost propojení Blenderu a dalšího volně šiřitelného programového nástroje VTK (vizualizační knihovny) k tvorbě korektní vizualizace přímo z vědeckých dat.

Počet podporovaných polygonů je více jak 2 biliony ve scéně. Ty mohou být složeny z quadrilaterálních, nebo triangulárních polygonů. Blender je propojen s VTK pomocí, jak již bylo dříve zmíněno, v něm integrovaném skriptování. Potřebné rozhraní pro color-per-vertex shading poskytuje možnost mapování skalárních hodnot získaných z dat na vertexy, či uzly polygonálních dat. V rámci volné license byl zpřístupněn Python modul VTKBlender, který se sám za běhu zkompiluje, naprogramovaný pro tento účel na University of Alberta (str.53)

VTK je další balík pro interaktivní prostorovou grafiku, image processing a vizualizaci, je to skutečný vizualizační program, což znamená, že neumožňuje pouze běžnou vizualizaci, ale má široký rozsah algoritmů obsahujících skalární, vektorové, tenzorové, texturovací a volumetrické metody. Rovněž umožňuje pokročilé modelovací techniky, jako implicitní modelování, polygonální redukci, vyhlazování geometrie, řezání, konturování, Delaunayovu triangulaci a mnohé další.

VTKBlender Python modul převádí vtkPolyDataMapper na polygonální objekt s color-per-vertex informací a zpětně umožňuje převádět objekt na vtkPolyData.

VTKBlender.PolyDataMapperToBlender(pmapper, me=None)

Jestliže běží pouze s jedním argumentem, pak tato funkce bere vtkPolyDataMapper pmapper a vrací nový objekt s převedenými polydaty. Druhý argument, který bere do úvahy předtím existující objekt, předpokládá přepsání již existujícího objektu polydaty, nový objekt není přidán okamžitě do scény, takže může být přidán až dodatečně:

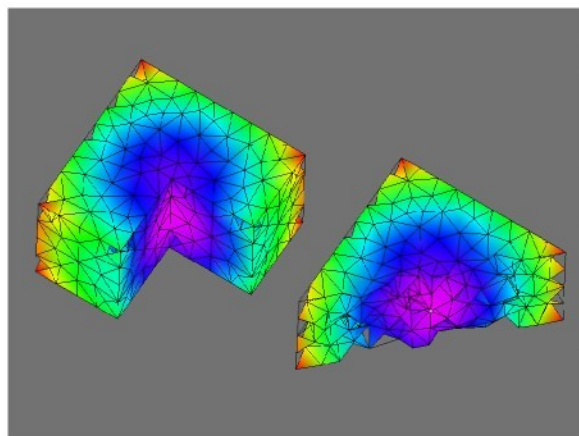
```
sc = Blender.Scene.GetCurrent()
ob = Blender.Object.New('Mesh')
ob.link(me)
sc.link(ob)
```

Důvodem, proč funkce bere vtkPolyDataMapper objekt jako argument namísto vtkPolyData objektu je ten, že může obsahovat rovněž vyhledávací tabulku potřebnou k obarvení dat.

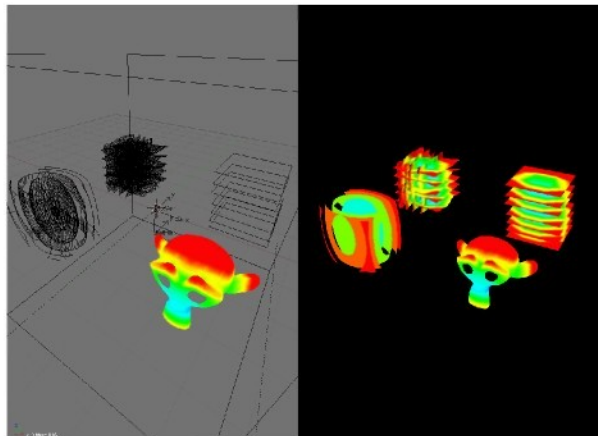
VTKBlender.BlenderToPolyData(me)

Tato funkce bere objekt a vrací vtkPolyData objekt obsahující geometrii uloženou v jeho struktuře.

Začlenění Python interpreteru do jádra Blenderu umožňuje naprogramování aplikačních rozhraní k různým typům dat, což jsou prostředky ke čtení a manipulaci s daty pokročilými způsoby vědecko-technických vizualizací.



Obr.25. Zobrazení hodnot skalárních polí na síti spočítané Metodou konečných prvků



Obr.26. Ukázka interaktivního zobrazení skalárních polí v rámci použití šablony

Ilustrace skriptování v prostředí programu Blender, v tomto případě za účelem komunikace s VTK pro import a rendering nestacionárních dat:

```
import os,sys,string
import Blender
from Blender.Scene import Render
```

```

try:
    import VTKBlender as VB
except:
    print 'import problem'
import vtk as V
from Xdmf import *
from XFrameWork.io import XdmfVtk as X

class Data:
    iteration = 0
    datadir = None
    name = None
    ext = None
    me = None
    ActiveScalar = ""
    location = [[0,0,0]]

    def __init__(self):
        pass

    def ComputeAverageDistance(self):
        x_vector = col
        dx = x_vector / step
        x = 0
        for i in range( step ):
            loc = [ x + dx, 0, 0]
            self.location.append( loc )
            x = x + dx
            del x_vector
            del dx

    def ImportTimesteps(self):
        print '%d files' % self.iteration
        if self.iteration != 0:
            self.XdmfDataFiles.sort()
            for file in self.XdmfDataFiles:
                path = self.datadir + '/' + file
                self.Import_Xdmf( self.XdmfDataFiles.index( file ), path )

    def Import_Xdmf(self, cntr, xdmf_file):
        Blender.Window.WaitCursor(1)
        reader = X.vtkXdmfReader()
        reader.SetFileName( xdmf_file )
        reader.UpdateInformation()
        reader.EnableAllGrids()
        reader.EnableAllArrays()
        reader.Update()

        surface = V.vtkDataSetSurfaceFilter()
        surface.SetInput( reader.GetOutput() )
        surface.SetPieceInvariant( 1 )
        surface.Update()

        cells = surface.GetOutput().GetNumberOfCells()

        lut = V.vtkLookupTable()
        lut.SetNumberOfColors( col )
        lut.SetHueRange( 0,0.0 )
        lut.Build()

        m = V.vtkPolyDataMapper()

```

```

m.SetInput( surface.GetOutput() )
m.SetScalarModeToUsePointData()
m.GetInput().GetPointData().SetActiveScalars( self.ActiveScalar )
min, max = m.GetInput().GetScalarRange()
if min < 0.0:
    min = 0.0
m.SetLookupTable( lut )
m.GetLookupTable().SetTableRange( min, max )
m.Update()
self.name,self.ext = os.path.splitext( os.path.basename( xdmf_file ) )
scn = Blender.Scene.GetCurrent()

if cntr == 0:
    self.me = VB.PolyDataMapperToBlender( m )
    ob = Blender.Object.New('Mesh', self.name)
    ob.link(self.me)
    scn.link(ob)
else:
    self.u_me = VB.PolyDataMapperToBlender( m, self.me )
    c_ob = scn.getActiveObject()
    scn.unlink( c_ob )
    ob = Blender.Object.New('Mesh', self.name)
    ob.link(self.u_me)
    scn.link(ob)

cam = Blender.Object.Get('Camera')
grp = Blender.Object.Get('Group')
lamp = Blender.Object.Get('Lamp')
ob.makeParent( [cam, grp, lamp] )
ob.setLocation( self.location[cntr] )
ob.sel = 1
ob.Layers = scn.Layers
scn.update()
Blender.Window.RedrawAll()
del scn

def RenderScene(self, cntr):

    context = Blender.Scene.GetCurrent().getRenderingContext()
    context.saveRenderedImage("%s.%04d.jpg" % ( self.ActiveScalar, cntr ) )
    context.setImageType(Render.*)
    context.enableExtensions(1)
    context.render()
    del context

def Main(self):
    self.ComputeAverageDistance()
    for i in range(1):
        file = '/' + str(i)
        self.Import_Xdmf( i, file )
        self.RenderScene( i )

if __name__=="__main__":
    d = Data()
    d.Main()

```

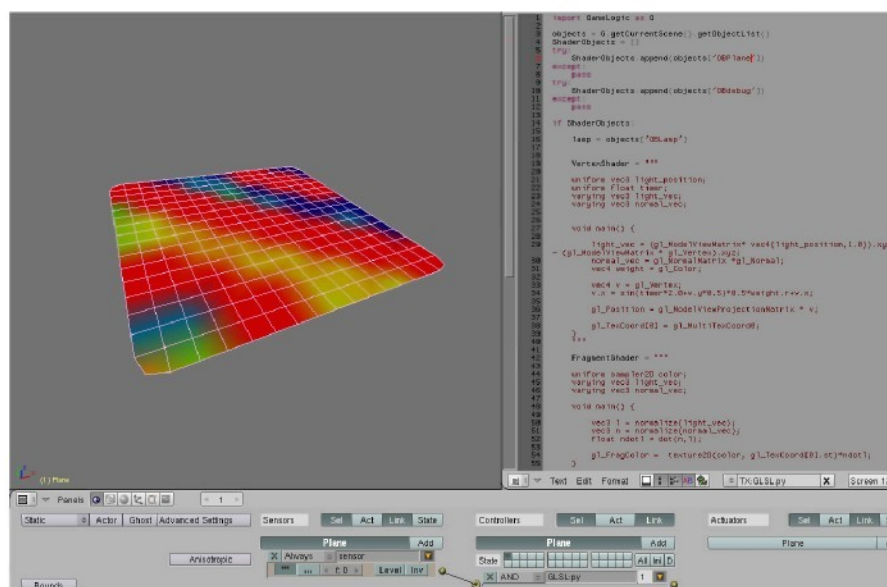

7.3. Výpočty na grafické kartě

Herní prostředí ale umožňuje rovněž využití výpočtů na grafických akcelerátorech, zejména nVidia, pomocí Python skriptů obsahujících kód pro vertex a pixel resp. fragment shader programy v jazyce GLSL (str.53)

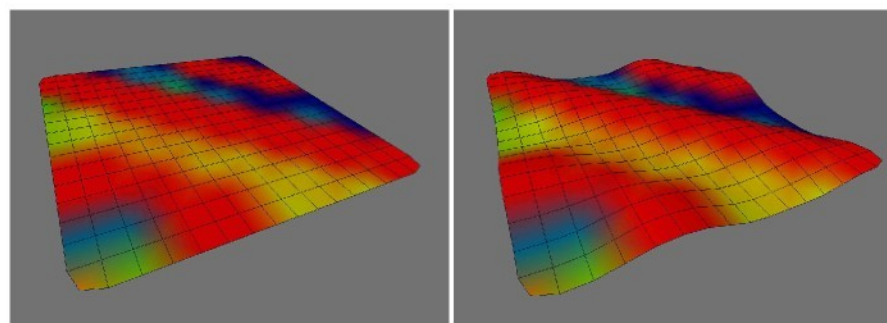
Proč použít vertex a pixel shadery pro vizualizaci vědecko-technických dat? Hlavním důvodem je obrovský výpočetní výkon GPU (grafická karta) přesahující běžné možnosti počítání na CPU (procesor). Pro ilustraci principu využití vizualizace vědeckotechnických dat pomocí GLSL v herním prostředí Blenderu je možné představit si polygonální plochu u které je využita metoda přímého kreslení na vertexy (vertex painting) k určení míry vlivu modelace plochy pro realtime animaci nestacionárních skalárních dat.

Zápis do vertex shaderu pro modelovou situaci s vážením pomocí sinusové vlny pak vypadá následovně:

```
vec4 v = gl_Vertex;
vec4 weight = gl_Color;
v.x = sin(timer)*weight.r+v.x;
gl_Position = gl_ModelViewProjectionMatrix * v;
```



Obr.26. Vizualizační prostředí s polygonální plochou na níž je metodou vertex paint naznačena míra vlivu změny polohy vertexů v reálném čase



Obr.27. Vývoj modelace plochy v čase, resp. animace vertexů pomocí vertexshaderu

Dále je uveden celý Python skript se začleněným GLSL kódem použitý pro volání v herním prostředí Blenderu:

```
import GameLogic as G

objects = G.getCurrentScene().getObjectList()
ShaderObjects = []
try:
    ShaderObjects.append(objects['OB'])
except:
    pass
try:
    ShaderObjects.append(objects['OBdebug'])
except:
    pass
if ShaderObjects:

    lamp = objects['OBlamp']

    VertexShader = """

    uniform vec3 light_position;
    uniform float timer;
    varying vec3 light_vec;
    varying vec3 normal_vec;

    void main() {

        light_vec = (gl_ModelViewMatrix* vec4(light_position,1.0)).xyz - (gl_ModelViewMatrix *
gl_Vertex).xyz;
        normal_vec = gl_NormalMatrix *gl_Normal;
        vec4 weight = gl_Color;

        vec4 v = gl_Vertex;
        v.x = sin(timer*2.0+v.y*0.5)*0.5*weight.r+v.x;

        gl_Position = gl_ModelViewProjectionMatrix * v;

        gl_TexCoord[0] = gl_MultiTexCoord0;
    }
    """
    FragmentShader = """

    uniform sampler2D color;
    varying vec3 light_vec;
    varying vec3 normal_vec;

    void main() {

        vec3 l = normalize(light_vec);
        vec3 n = normalize(normal_vec);
        float ndotl = dot(n,l);

        gl_FragColor = texture2D(color, gl_TexCoord[0].st)*ndotl;
    }
    """
    for obj in ShaderObjects:
        mesh_index = 0
        mesh = obj.getMesh(mesh_index)
```

for mat in mesh.materials:

```

    shader = mat.getShader()
    if shader != None:
        if not shader.isValid():
            shader.setSource(VertexShader, FragmentShader, 1)

        shader.setUniformfv('light_position', lamp.getPosition())
        shader.setSampler('color', 0)
        shader.setUniform1f('timer', (obj.timer))

```

Vzhledem k tomu, že existuje rovněž možnost přístupu přes Pythonské rozhraní k Nvidia CUDA paralelnímu programovacímu rozhraní (API) se nabízí do budoucna rovněž možnost využití možností z oblastí vysoce výkonného počítání HPC (High Performance Computing) na kartách podporujících tuto architekturu jako je GeForce, Quadro případně Tesla aj., více viz. (str. 53)

8. Nanomateriál v konceptu dýchající fasády

Jednou z budoucích možných oblastí aplikací technologie nanovláken je bezesporu stavebnictví. Textilie na bázi nanovláken dokáží jak známo účinně regulovat toky plynů a par a do určité míry jsou rovněž schopné bránit průniku vody jako kapaliny.

Pro účely regulace průniku plynů a kapalin konstrukcemi se již dnes technické textile (převážně netkané) ve stále větší míře využívají. Jde zejména o aplikace při tvorbě skladeb obvodových a střešních plášťů budov a dále o geotechnické aplikace.

Je tedy nasnadě, že jednou z nadějných aplikací nanovláken ve stavebnictví je tvorba nové generace těchto textilních materiálů. Významnou aplikací netkaných textilií je zejména oblast dřevostaveb a oblast konstrukcí šikmých střech.

Podle funkce a vlastností se textilie používané ve stavebnictví označují různě: větrové (konvektivní) zábrany, parobrzdy, difúzní fólie, pojistné hydroizolace.

Typické aplikace ve stavebních konstrukcích

Konvektivní toky jsou v konstrukcích většinou nežádoucí, neboť vedou často na nekontrolovatelný transport vlhkosti do konstrukce nebo na vznik velkých tepelných ztrát objektů.

Difúzní toky často připouštíme, chceme však regulovat množství par vstupujících do konstrukce, abychom omezili vznik rizik spojených s vlhkostí, např. velkou kondenzací. Z těchto úvah vyplývají i hlavní typy textilních membrán používaných při tvorbě obvodových a střešních plášťů:

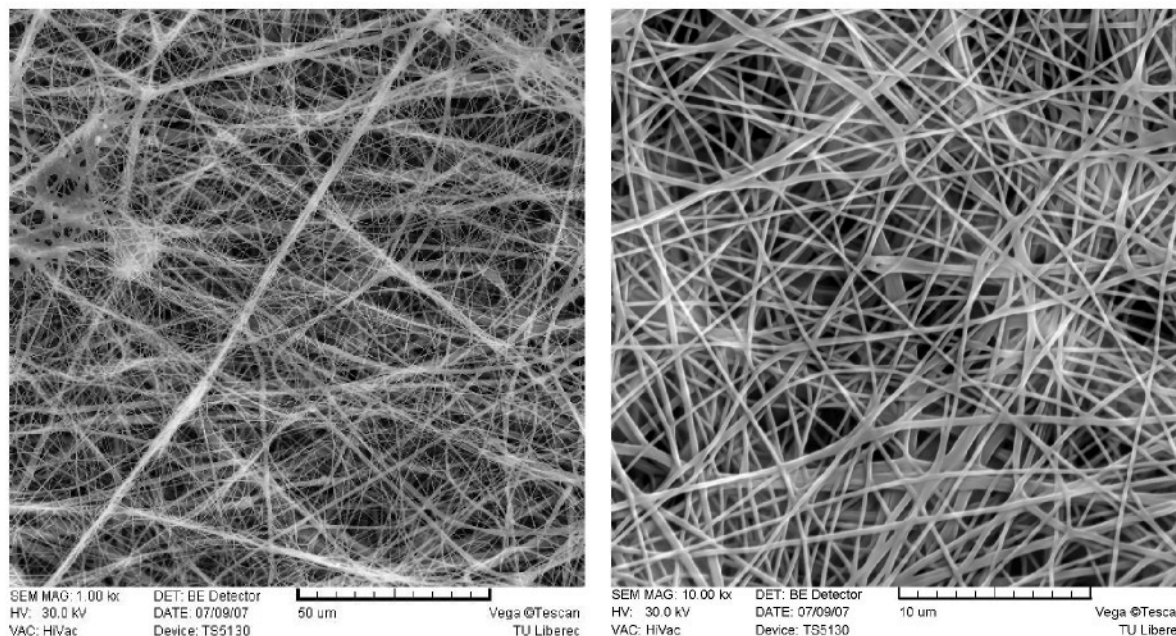
větrová zábrana: difúzně propustná membrána, která má za úkol zabránit proudění vzduchu v konstrukcích vlivem externího tlaku/sání větru. Důležitým parametrem větrové zábrany je její maximální difúzní propustnost a naopak co nejmenší propustnost pro konvekci. Někdy se požaduje rovněž hydrofobnost.

parobrzda: difúzně propustná membrána, která má za úkol regulovat množství páry, která prochází konstrukcí. S ohledem na celoroční koncentrační profily vodní páry se umísťuje co nejvíce k lici interiéru. Důležitým parametrem parobrzdy je míra její propustnosti pro vodní páru.

podstřešní membrána: membrána, která se používá do šikmých střech, umísťuje se pod krytinu buď kontaktně nebo nekontaktně na tepelnou izolaci. V konstrukci musí plnit několik funkcí: musí propouštět páru, zamezit infiltraci vzduch a musí zabránit pronikání vody do konstrukce střechy.

Geometrický obraz nanovláknenných materiálů

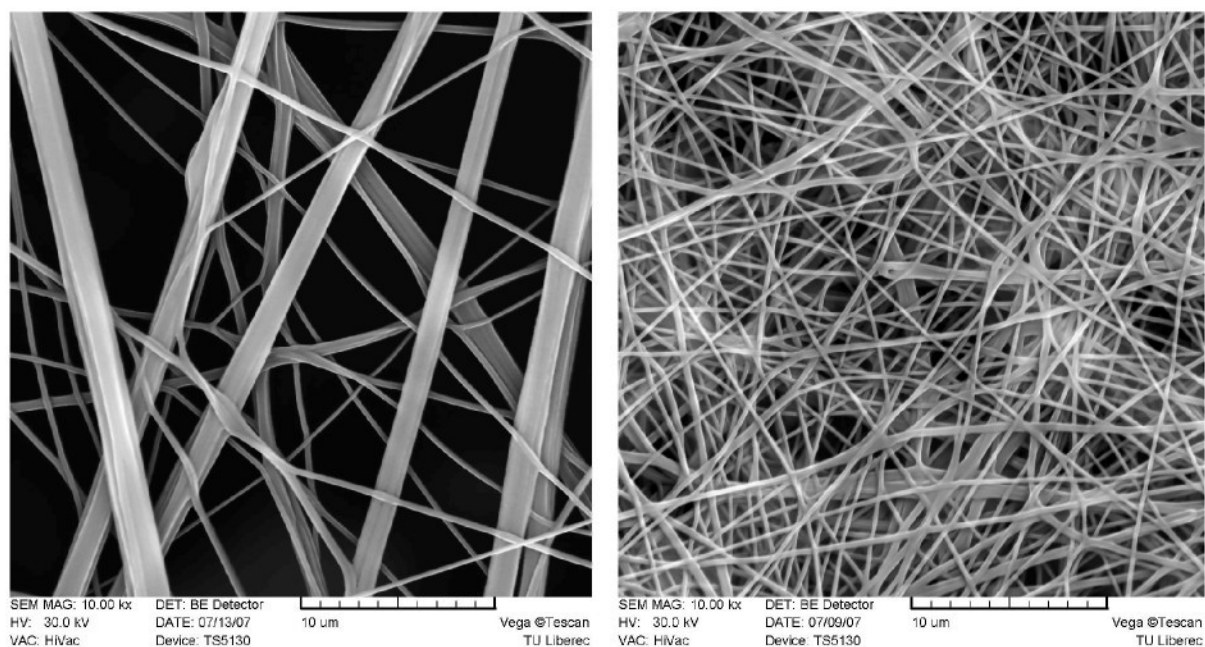
Výchozí materiály jsou většinou vodou rozpustné polymery: polyuretan (PUR), polyamid (PA) a polyvinylalkohol (PVA). Technologie Nanospider umožňuje výrobu vláken v rozsahu průměrů asi 100 - 500 nm, tj. 0,001 – 0,5 μm . Množství vláken na jednotce plochy se běžně udává v gramech na m^2 , obvykle se pohybuje v rozmezí 0,5-5 g/m^2 . Pro pochopení fyzikálních souvislostí bývá užitečná geometrická představa.



Obr.28. Struktura nanotextilie na bázi polyuretanu (průměr vlákna cca $d=0,2 \mu\text{m}$)

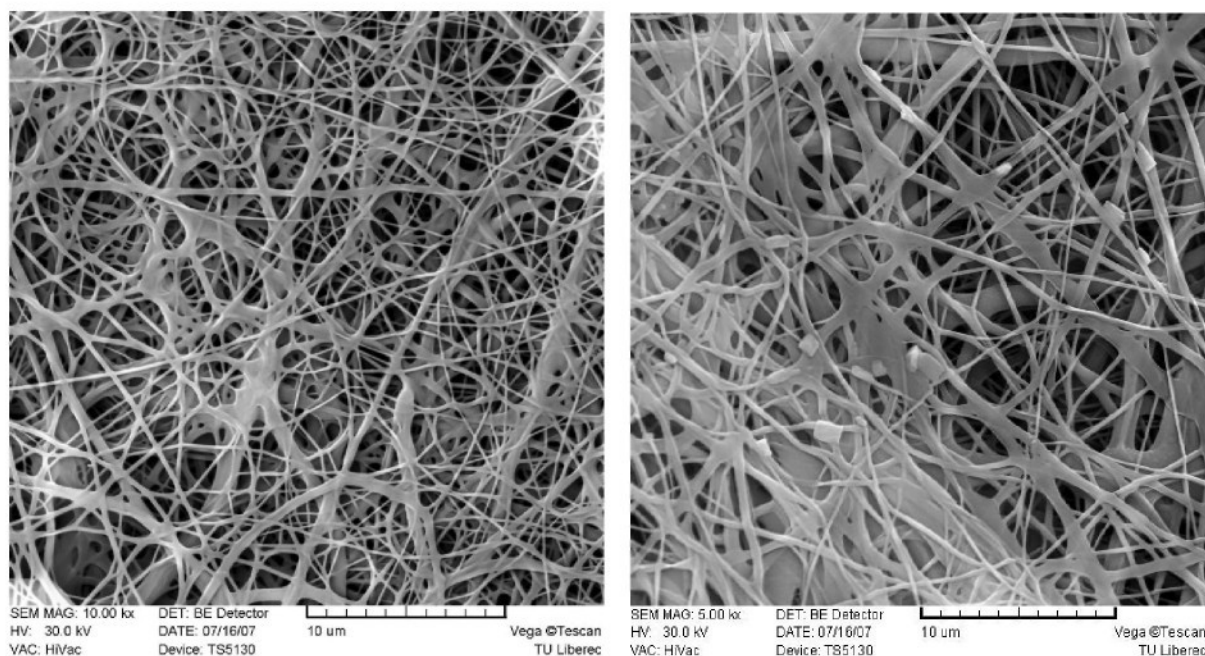
Střední průměr lidského vlasu je asi 70 μm . Na obrázcích je zobrazeno vlákno s průměrem asi 350 krát menším než je lidský vlas. Velmi přibližně předpokládáme, že střední hodnota velikosti D oka sítě, kterou vytváří křížící se vlákna, je desetinásobek průměru vlákna, tj. asi $D=10d$. Střední volná dráha molekuly suchého vzduchu λ_a je při teplotě 20 $^{\circ}\text{C}$ rovna asi $\lambda_a=6,45 \cdot 10^{-2} \mu\text{m}$, střední volná dráha molekuly vody je za stejných podmínek asi $\lambda_w=1,15 \cdot 10^{-1} \mu\text{m}$. Zhruba lze tedy říci, že střední průměr D oka je pro tento případ asi 20 větší než střední volná dráha molekuly vody. To ukazuje, že transport plynů v těchto strukturách již nebude pouze prostou Fickovou difúzí, ale že se nezanedbatelně uplatní i jiné mechanismy (Knudsenova difúze, povrchová migrace).

Nanovláknenné struktury budou svoje vlastnosti měnit podle množství, průměru a charakteru vláken na jednotce plochy. Protože tyto veličiny je možné v jistých mezích při výrobě měnit, lze očekávat možnost výroby nanotextilií se spojitou změnou transportních vlastností, opět v určitých mezích. Dolní mez je většinou dána možnostmi technologie udržet rovnoměrnost nanosení vláken na plochu, horní mez pak náklady na výrobu.

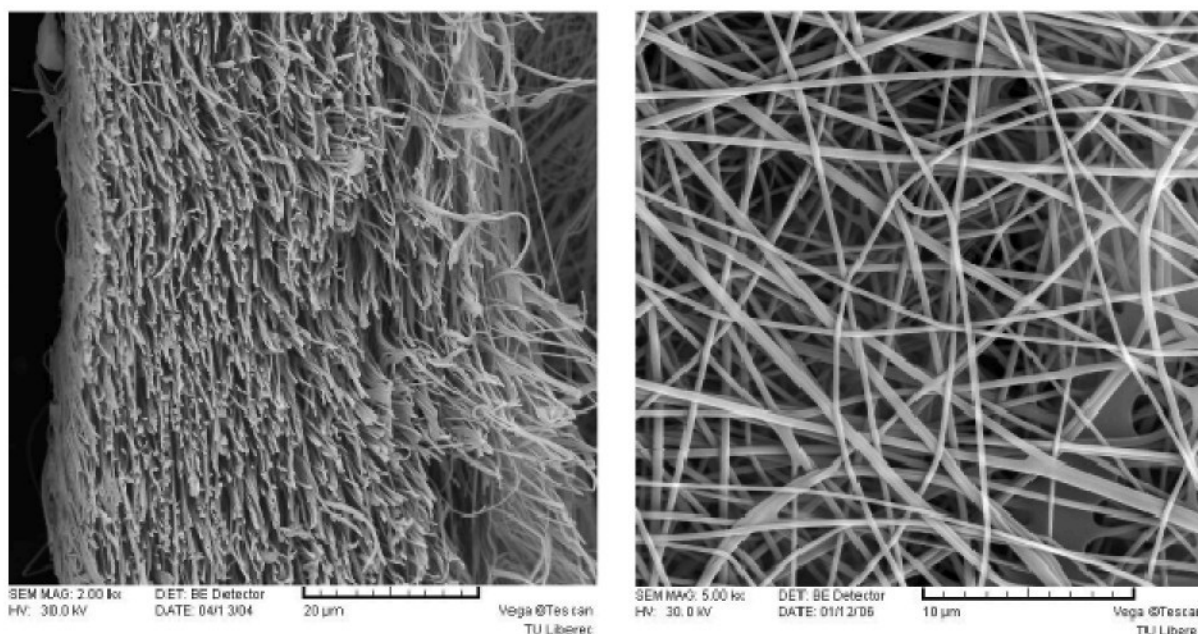


Obr.29. Nanovláknenné struktury, vzájemně se lišící plošnou hustotou vláken (PUR)

Ve smyslu výše uvedených fyzikálních požadavků lze obecně očekávat, že materiál vlevo bude mít spíše aplikaci jako větrová zábrana (konvektivní bariéra), materiál vpravo bude spíše vhodný pro použití jako účinná parobrzda (difúzní bariéra); jako konvektivní bariéra bude patrně fungovat automaticky.



Obr.30. Odlišnost tvarosloví, vlákna se také mohou lokálně slévat (PVA)



Obr.31. Na příčném řezu nanotextilií je vidět hustá planoparalelní struktura vláken, která je skutečným původcem bariérových efektů (PVA)

Pro dosažení povrchové hydrofobizace resp. vodonepropustnosti nanotextilních materiálů je možné využít plasmovou technologii.

Sama nanotextilie je nesmírně subtilní, tenká vrstva (řádově desítky mikrometrů), která nemá dostatečné mechanické parametry. Proto je vždy nanášena na nosnou netkanou textilií, která je jejím mechanickým nosičem a která přebírá veškerá mechanická namáhání membrány. Důležitým parametrem výroby je tedy mimo jiné i zajištění dostatečně velké adheze mezi nosnou textilií a samotnou nanovláknennou textilií. Nosná textilie bývá mnohonásobně silnější než nanovláknenná vrstva. S ohledem na mimořádně nízké gramáže (nanovrstva je někdy stěží viditelná) vykazuje skutečně mimořádně účinné bariérové efekty.

Dále je uveden stručný přehled fyzikálních vlastností, které mají vztah k transportním jevům:

Konvektivní permeabilita CP

Hnacím motorem konvektivního proudění je gradient tlaku plynu (resp. celkového tlaku směsi plynů). Vektor hustoty konvektivního toku j_c je obvykle popisován materiálovým vztahem

$$j_c = -k_v * \text{grad}p = -k_v * \frac{p_2 - p_1}{d} = -CP * (p_2 - p_1) \quad 8.3.1$$

kde CP je konvektivní permeabilita vrstvy. Ve stavebnictví se nejčastěji udává konvektivní tok j_c v (kg/m²s). Permeabilita se potom udává v (s). Čím vyšší permeabilita vrstvy, tím prodyšnější membrána je.

Difúzní permeabilita DP

Hnacím motorem difúzního toku je gradient parciální koncentrace složky směsi plynu. Pro vektor hustoty difúzního toku vodní páry j_D se obvykle používá konstitutivní materiálový vztah ve tvaru

$$j_D = -\frac{D}{\mu} * grad c = -\frac{D}{\mu} * \frac{c_2 - c_1}{d} = -\frac{D}{s_d} * (c_2 - c_1) = DP * (c_2 - c_1) \quad 8.3.2$$

kde s_d je difúzní tloušťka vrstvy. Ve stavebnictví se nejčastěji udává difúzní tok j_D v ($\text{kg/m}^2\text{s}$). Difúzní tloušťka s_d se potom udává v (m). Čím vyšší difúzní tloušťka vrstvy, tím menší difúzní propustnost vrstva má. DP je difúzní permeabilita vrstvy (analogicky k CP) a udává se v (m/s). Čím vyšší difúzní permeabilita vrstvy, tím vyšší je i difúzní propustnost membrány.

Permeabilita pro vodu WP

Běžně se udává v mm H_2O , který membrána ještě nepropustí. Čím vyšší výška vodního sloupce, tím menší propustnost pro vodu.

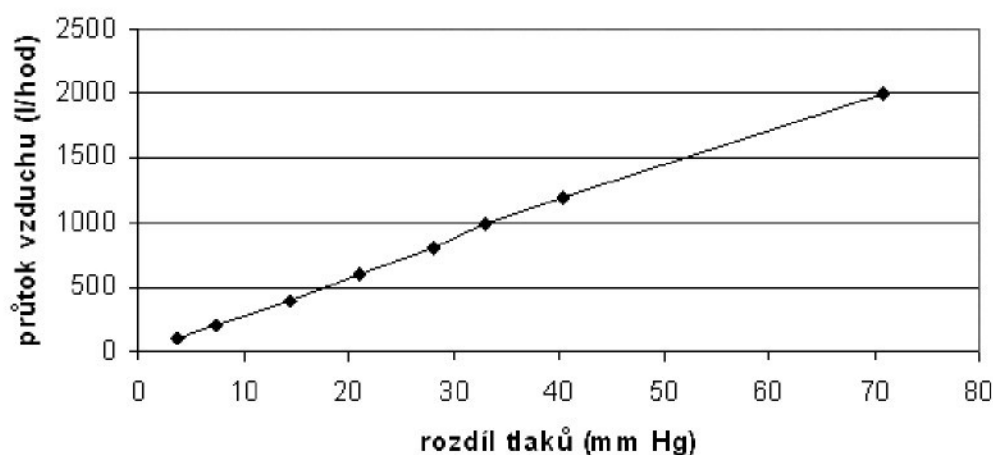
Výsledky měření a perspektivy použití

Zvolené gramáže materiálů:

PUR1 4,40 g/m^2	PVA1	3,16 g/m^2
PUR2 2,60 g/m^2	PVA2	2,44 g/m^2
PUR3 2,40 g/m^2	PVA3	2,72 g/m^2

Tab.1. Gramáže materiálů

Všechny vzorky nanotextilií byly připraveny jako monovrstvy (vrstva nanovláken byla nanášena jedním technologickým krokem)



Graf 4. Závislost průtoku vzduchu na rozdílu tlaků

Výsledky měření, prováděných na TUL ve spolupráci s CSI Praha, akreditovanou laboratoří pro stavebnictví. Hodnoty platí přesně pro teplotu 23 °C. (PUR a PVA báze)

materiál	CP(s)	DP(m/s)	s _d (m)	WP(mm)
PUR1	4,4	5,55E-08	65,12E-5	0,041
PUR2	2,6	8,83E-08	65,12E-5	0,041
PUR3	2,4	14,90E-08	102,60E-5	0,026
PVA1	3,16	6,71E-08	76,28E-5	0,035
PVA2	2,44	9,79E-08	76,28E-5	0,035
PVA3	2,72	3,55E-08	76,28E-5	0,035

Tab.2. Porovnání permeabilit konvektivní, difúzní a pro vodu

Porovnání materiálů z hlediska jejich bariérových vlastností s PVA1 nanotextilií o tloušťce 3 (g/m²). Tloušťka této nanovrstvy je přibližně v rozmezí 20-30 mikronů:

materiál	μ faktor	ekvivalentní tloušťka z hlediska difúze (mm)	ekvivalentní tloušťka z hlediska konvekce (mm)
hutný beton	30	1	22
polystyren	50	0,7	45
pórobeton	7	4,5	300
miner. vlákna	1,5	20	78 000

Tab.3. Porovnání bariérových vlastností materiálů

Tyto jednoduché příklady ukazují na mimořádné konvektivní bariérové schopnosti nanotextilií a měkké difúzní vlastnosti. To je optimální kombinace například pro konstrukci staveb bez použití parozábran.

Textilie na bázi nanovláken se svým charakterem z pohledu stavebnictví řadí mezi vysoce difúzně otevřené membrány.

Dále se ukazuje, že v porovnání s podobnými materiály vykazují menší (řádově 10x) konvektivní permeabilitu. Tento fakt znamená, že materiály budou i při malých gramážích vysoce účinné jako větrové zábrany, a to při zachování vysoké difuzivity.

Materiály s takovými vlastnostmi lze použít pro všechny dříve zmíněné účely, jako větrové (konvektivní) zábrany, jako parobrzdy i jako podstřešní membrány:

- sama účinná vrstva nanovláken může být extrémně tenká (malé gramáže), výrobně relativně laciná
- při vysoké difúzní permeabilitě má v porovnání se srovnatelnými materiály významně nižší konvektivní permeabilitu
- difúzní permeabilita jen málo závisí na gramáži nanovláknité textilie.

9. Modelování transportních vlastností nanomateriálu

Metody buněčné automatizace jsou příkladem opačného přístupu, než jak tomu bylo u řešení pomocí metody konečných prvků. Zde začínáme s diskrétním mikroskopickým modelem, který svojí konstrukcí zachovává požadované kvantity. Tyto modely jsou bezpodmínečně stabilní. Derivace odpovídajících makroskopických rovnic vyžaduje široký výpočet (multi-scale analýzu). Hlavním problémem je nalezení nepravých invariant, což je mimochodem podobný problémem jako u předešlého konvenčního přístupu (intuice).

Jednorozměrný buněčný automat

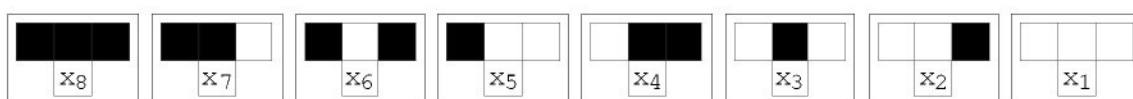
CA – cellular automaton (Wolfram)

parallelismus - nastavení jednotlivých buněk je prováděno nezávisle na ostatních a celkové nastavení je poté provedeno naráz

lokalita - když je buňka nastavena, její nová hodnota je odvozena z předchozí hodnoty a hodnot jejích nejbližších sousedů

homogenita - každá buňka je nastavena podle stejných pravidel

Předpokládejme základní buněčný automat. V takovém automatu má každá buňka přiřazenu jednu ze dvou barev a barva každé buňky v následujícím kroku výpočtu závisí na vlastní barvě buňky a barvě jejích nejbližších sousedů. Tím pádem je zde 8 dvouhodnotových prvků " x_1 ", " x_2 ", ..., " x_8 ", které musí být popsány k určení pravidla pro základní buněčný automat, to znamená, že je zde 8 možných kombinací barvy buňky a jejích nejbližších sousedů a pro každou z těchto kombinací musíme určit barvu x_i buňky v následujícím kroku výpočtu.



Obr.32. Pravidla pro rozvoj jednorozměrného buněčného automatu

Jestliže přiřadíme například bílé barvě hodnotu 0 a černé 1, potom seznam hodnot $\{x_8, x_7, x_6, x_5, x_4, x_3, x_2, x_1\}$ může být popsán jako dvojkový zápis čísla.

Takže přiřadíme číslo $n = x_8 2^7 + x_7 2^6 + x_6 2^5 + x_5 2^4 + x_4 2^3 + x_3 2^2 + x_2 2^1 + x_1 2^0$ odpovídajícímu buněčnému automatu. Potom je zde 256 osmimístných binárních čísel a každé z nich odpovídá právě jednomu základnímu buněčnému automatu popsanému touto formulací, z čehož lze usuzovat, že máme 256 základních buněčných automatů.

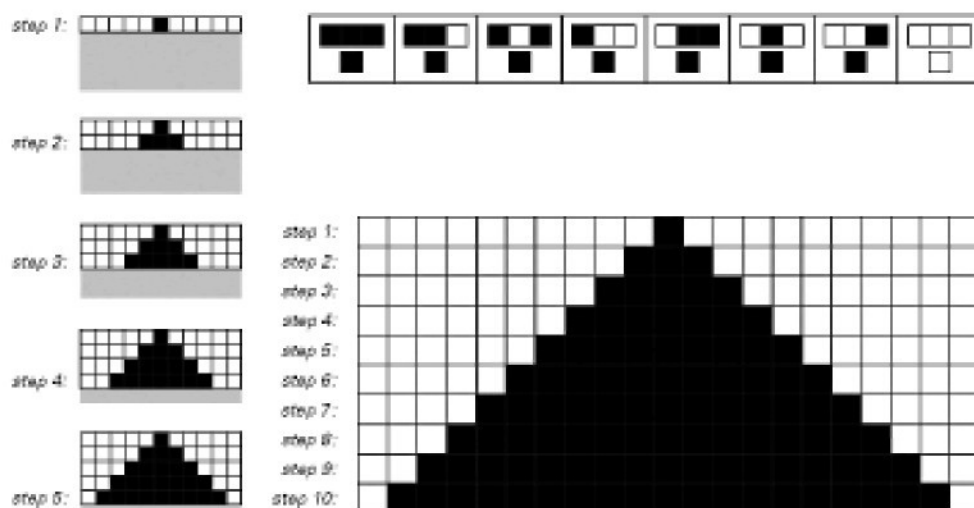
Matematický předpis rozvoje jednorozměrného buněčného automatu:

$$a_i^{(t)} = F[a_{i-r}^{(t-1)}, a_{i-r+1}^{(t-1)}, \dots, a_i^{(t-1)}, a_{i+r}^{(t-1)}]$$

$$a_i^{(t)} = f\left[\sum_{j=-r}^r \alpha_j a_{i+j}^{(t-1)}\right]$$

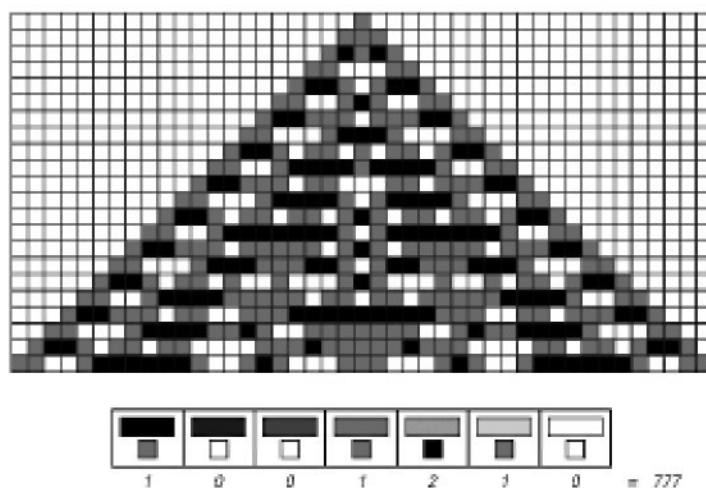
9.1.1

(stav buňky i v čase t , konečný počet možných stavů k , rozsah sousedů r , pravidlo $F \rightarrow f$, celočíselné konstanty alfa u rovnice 9.1.1)



Obr.33. Vývoj podle předpsaného pravidla jednorozměrného buněčného automatu v 10-ti krocích

Takto vypadá rozvoj CA, pokud do jeho pravidel zavedeme šedou škálu, difuzní rovnice (symetrická diskretizace reversibilní v čase):

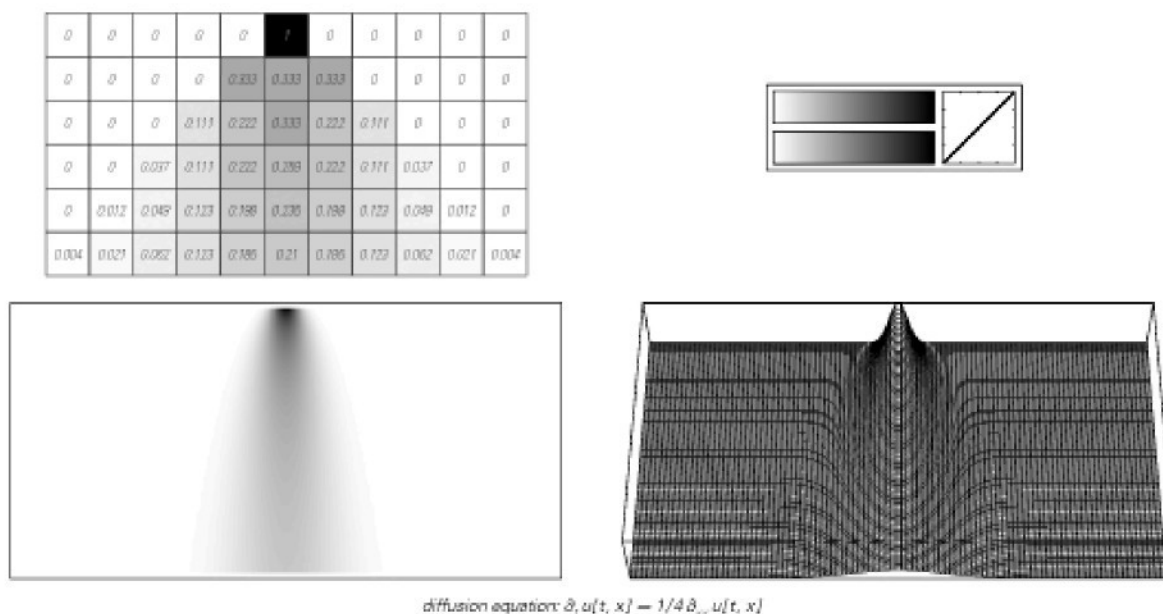


Obr.34. Vývoj podle pravidla odpovídajícího difuznímu chování

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

$$C_i^{(t)} = C_i^{(t-1)} + \frac{\Delta t \cdot \kappa}{(\Delta x)^2} [C_{i+1}^{(t-1)} - 2C_i^{(t-1)} + C_{i-1}^{(t-1)}] = \sum_{j=-1}^1 \alpha_j C_{i+j}^{(t-1)} = f\left[\sum_{j=-1}^1 \alpha_j C_{i+j}^{(t-1)}\right] \quad 9.1.2$$

U rovnice diskretizace 9.1.2 jsou koeficienty alfa reálná čísla, počet stavů je konečný, otázkou zde potom zůstává fyzikální platnost zákonů zachování:

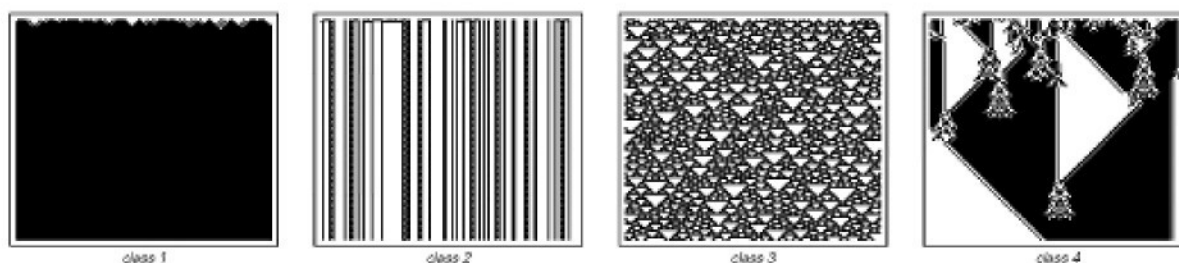


Obr.35. Vývoj podle pravidla srovnatelného s fenomenologickým přístupem vedoucím k řešení difúzní rovnice

Pouze speciální typy poskytují diskrétní modely pro parciální diferenciální rovnice.

Kvalitativní charakteristika CA:

1. konečná konfigurace je homogenní (limit point)
2. vývoj v čase vede k opakujícím se motivům (limit cycle)
3. generace chaotických vzorů (strange attractor)
4. vývoj v čase vede ke komplexním lokálním vzorům (není analogie)

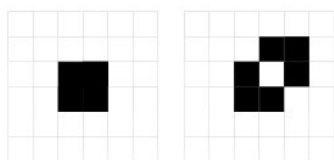


Obr.36. Třídy chování CA

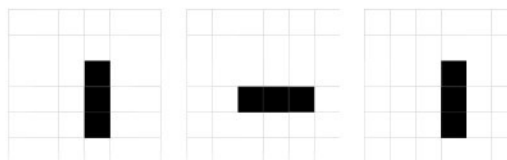
Mechanismy generování náhodnosti:

1. náhodnost z prostředí (stochastic)
2. náhodnost z počátečních podmínek (chaos)
3. skutečná náhodnost (intrinsic)

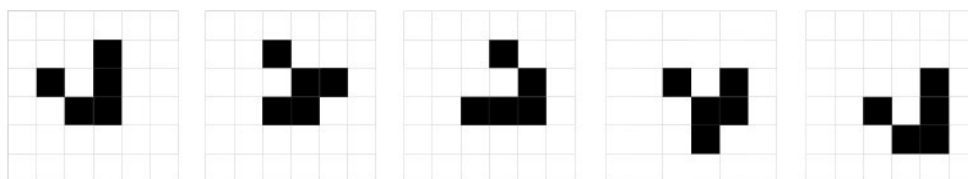
Typy konfigurací:



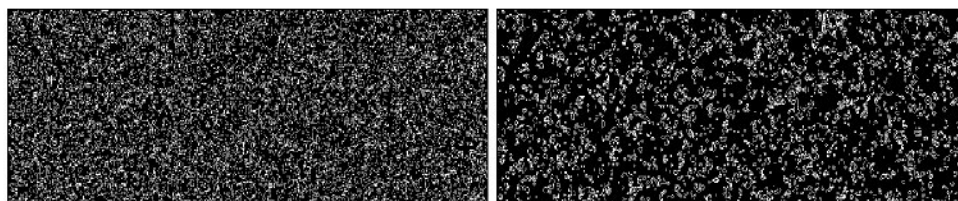
Obr.39. Stabilní konfigurace



Obr.40. Periodická konfigurace



Obr.41. Migrující konfigurace



Obr.42. Časový vývoj struktury kolonie generované pravidly 2D buněčného automatu

Mřížový plynový automat

LGA – lattice gas automaton viz. Příloha C. Implementace *modelu plynu* (str.64)

Relativně nová slibná metoda pro numerické řešení fyzikálních jevů tradičně popisovaných nelineárními parciálními diferenciálními rovnicemi. Vznik této metody se datuje do roku 1986 (Frisch, Hasslacher, Pomeau). Tito autoři ukázali, že jistý druh kulečnickové hry s kolizemi zachovávajícími hmotnost a hybnost v makroskopickém měřítku vedou na PDE, pokud pod tím ležící mříž má dostatečnou symetrii (hexagonální ve 2D).

CA nejsou obvykle omezena zákony zachování, což je vhodná vlastnost pokud se simulační proces vyvíjí. Územní propagace vlastností je částí lokálního obnovovacího pravidla.

V kontrastu s tím se LGA podřizuje zákonům zachování a obnova je rozdělena na lokální kolize a propagace nejbližších sousedů. Toto rozdělení činí snadnějším konstrukci modelu s požadovanými makroskopickými vlastnostmi.

Historicky první byl model HPP, ten ještě nebyl schopen odpovídajícím způsobem odrážet fyzikální realitu způsobem jako je tomu u modelu FHP. Rozdíl mezi selháním u HPP a úspěšností u FHP závisí na symetrii mříže.

LGA je simulační metoda poněkud odlišná od molekulární dynamiky (MD) na jedné straně a metod založených na diskretizaci PDE jako např. FEM na druhé straně.

Idea

Skutečnost, že různé mikroskopické interakce mohou vést ke shodnému způsobu makroskopických rovnic je počáteční východisko pro vývoj LGA. V návaznosti na skutečná média si lze představit umělé mikrosvěty částic žijících na mřížích s vzájemnými interakcemi, které respektují zákony zachování.

Mikrodynamika takových umělých mikrosvětů může být velmi prostá vzhledem k efektivnímu výpočtu pomocí počítače a sestává z opakování kolizní a propagační fáze. Makroskopické hodnoty hustot jsou počítány hrubozrně, tzv. coarse graining (výpočet středních hodnot přes široké oblasti od stovek po tisíce uzlů).

Třetí základní podmínkou spolu se zákony zachování je odpovídající uspořádání mříže, tak aby zaručila izotropii získanou z mřížových rychlostí.

Další podmínkou je rovněž, že mikrodynamika nesmí mít více invariant, než je potřeba požadovanými makroskopickými rovnicemi, protože takzvané nepravé invarianty mohou změnit makroskopické chování nefyzikálními omezeními.

LGA a MD

Jiným přístupem zdola nahoru je MD, kde je snaha simulovat makroskopické chování reality nastavením modelu, který popisuje mikroskopické interakce nejlépe jak je to možné (komplexita, univerzalita).

Lokální u CA (za jistých lokálních pravidel různé počáteční globální konfigurace mohou být převedeny na stejné konečné konfigurace, takže ne všechny možné globální konfigurace mohou být dosaženy během časového vývoje CA).

Nedosažitelné konfigurace mohou být pouze inicializovány. Platí zde princip nevratnosti a Pauliho vylučovací princip.

Liouvilův teorém (v reversibilním systému všechny konfigurace mají definovány následné a předchozí konfigurace. Tím pádem je počet dostupných konfigurací konstantní v čase a je roven počtu všech možných konfigurací).

Z toho vyplývá, že propojení mezi PDE a LGA není formální, ale má kořeny v zákonech zachování.

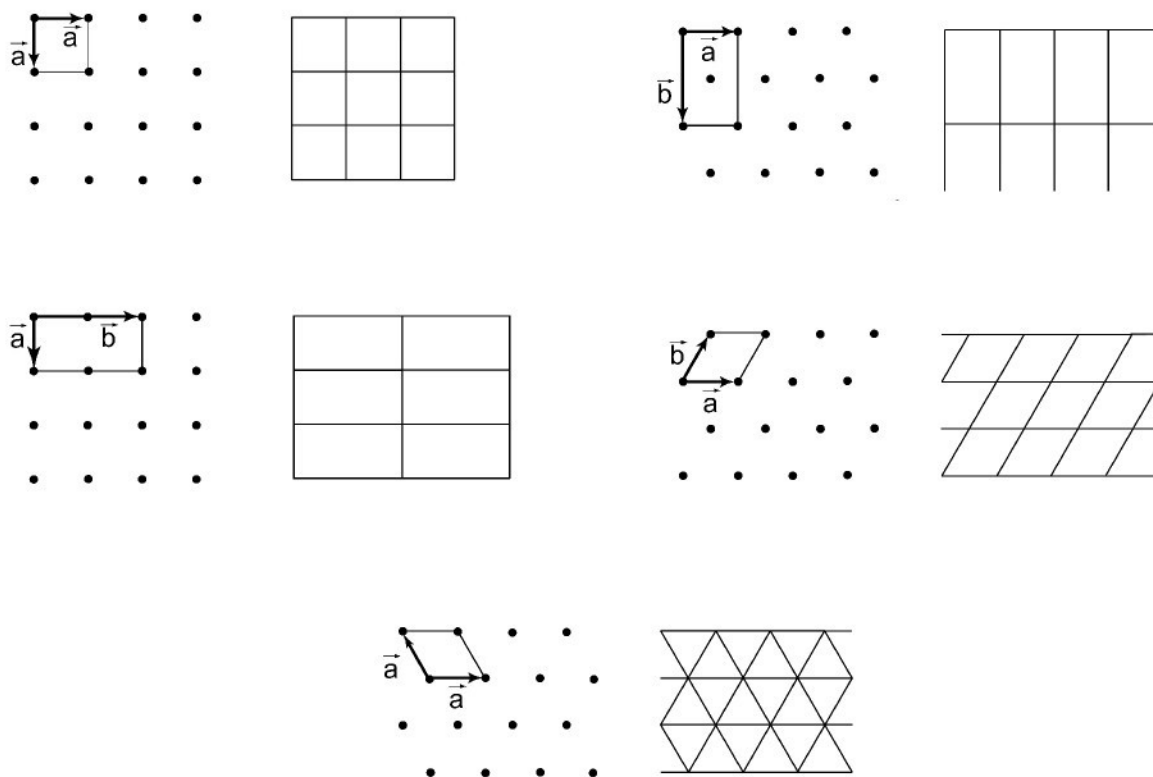
Mříž je homogenní a symetrická a na ní pak jsou diskrétní prostor, čas i veličiny:

B - konektivita (součet kanálů stýkajících se v uzlu)

$\mathbf{x}_i$ - představuje uzlový radius vektor

Δl - mřížová jednotka (vzdálenost mezi nejbližšími sousedy, jednotka - unit: 1.u.)

$\mathbf{e}_i$ - vektor (kanálový vektor spojující sousední uzly skrze kanál i , $\mathbf{e}_i \rightarrow \mathbf{e}_B$)



Obr.43. Možné konfigurace Bravaisových mříží ve 2D

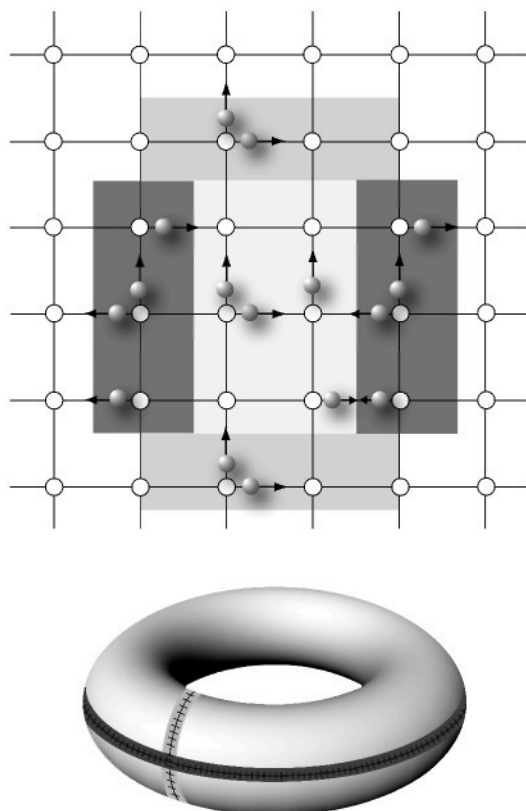
Zákony zachování jsou naplňovány střídáním dvou fází (propagace, kolize):

Propagační fáze

Částice je posunuta z uzlu do sousedního (kinetika)

$$t \rightarrow t + \Delta t \quad \mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} + \mathbf{v}_i \Delta t \quad (\mathbf{x} + \mathbf{e}_i)$$

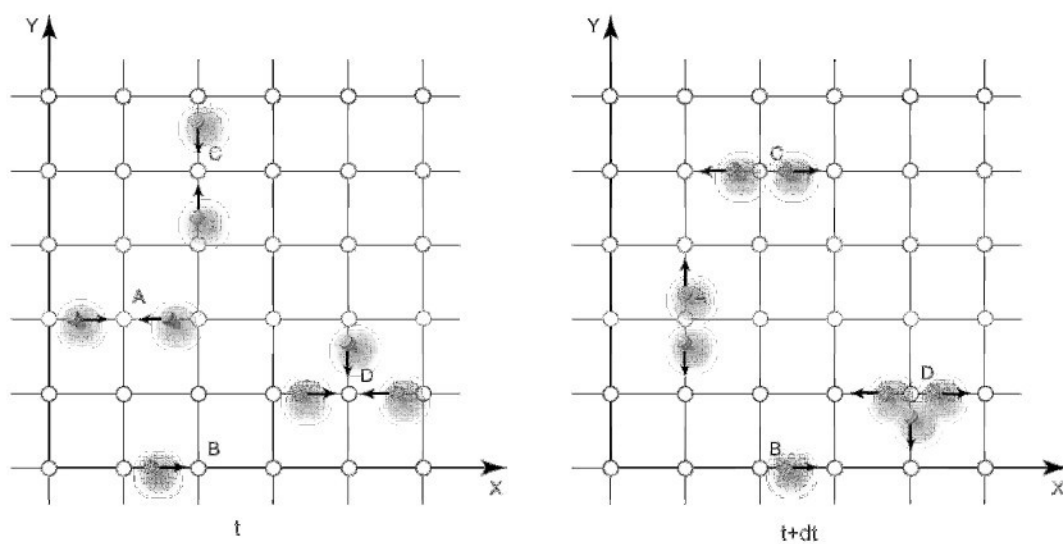
9.3.1



Obr.44. Periodické okrajové podmínky (HPP)

Kolizní fáze

V důsledku mikroreversibilní kolizní procesu jsou efektivní kolize A,C a v důsledku kolizní symetrie neefektivní kolize B,D.



Obr.45. Schématická reprezentace kolizních událostí (HPP)

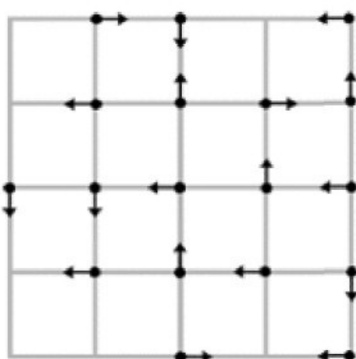
HPP model LGA (Hardy, Pazziz, Pomeau)

Jako prvním model LGA byl vyvinut model autorů HPP. Tento model byl později nahrazen vylepšeným modelem LGA autorů FHP, protože vykazoval jisté nedostatky v důsledku nedostatečné symetrie mříže.

$$B=4 \quad \Delta t = 1 \text{ l.u.} \quad v=1 \text{ l.u./t.u.} \quad m_i=1 \text{ m.u.} \quad \mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} + \mathbf{v}_i \Delta t$$

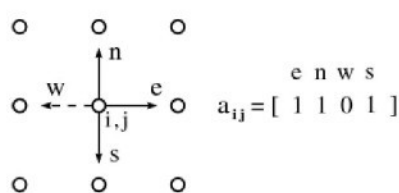
9.3.2

Konfigurační stavy: $b=2^4$, 2 efektivní



Obr.46. Schéma modelu HPP

Paměťový model pro 16 možných stavů a alternativní paměťový model pro matici 16×16 multi-spin kódování



$e_0 \ n_0 \ w_0 \ s_0$	$e_1 \ n_1 \ w_1 \ s_1$
$e_2 \ n_2 \ w_2 \ s_2$	$\dots$
	$\vdots$
$\vdots$	$\vdots$
	$\dots$
$e_{30} \ n_{30} \ w_{30} \ s_{30}$	$e_{31} \ n_{31} \ w_{31} \ s_{31}$

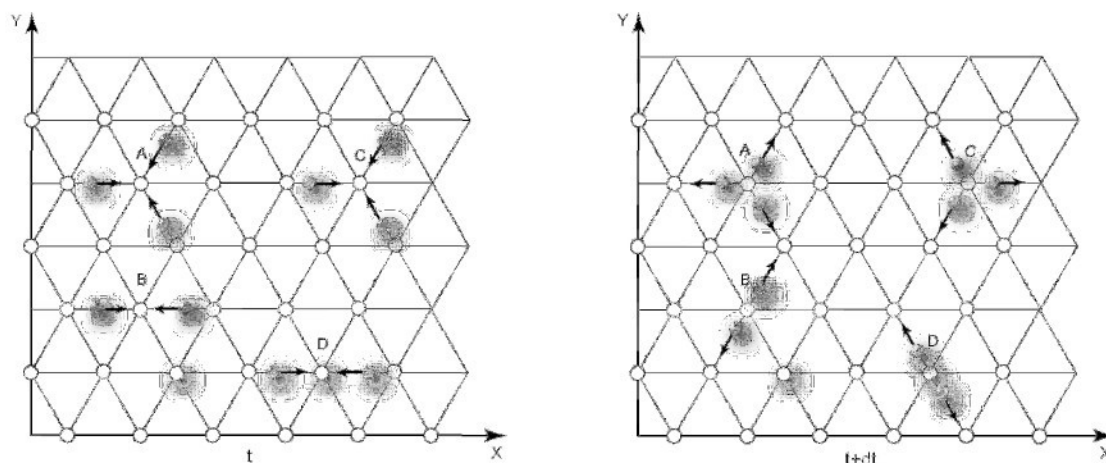
Obr.47. Kódování modelu HPP

FHP modely LGA (Frisch, Hasslacher, Pomeau)

Dvě varianty vylepšeného LGA modelu autorů FHP.

FHP-1

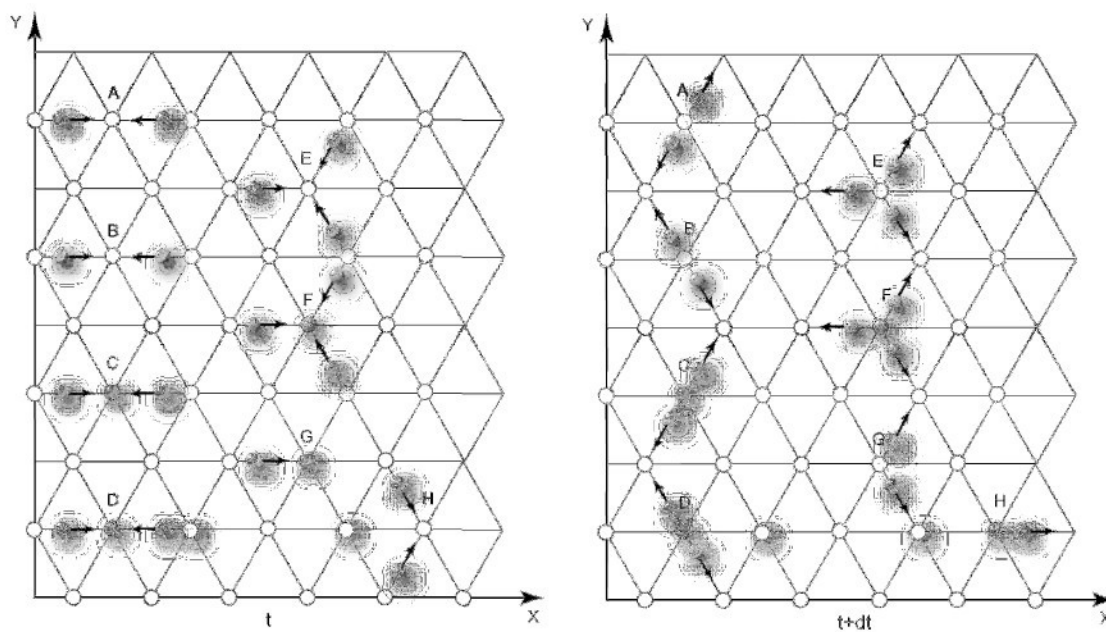
$B=6$, $m_i=1$ m.u., $b=2^6$, $3 \times 2 + 2 \times 3$ efektivní



Obr.48. Typické dvou a tříčásticové kolize (FHP-1)

FHP-2

$b=2^7$, 22 efektivní + možnost rezidentní částice v uzlu



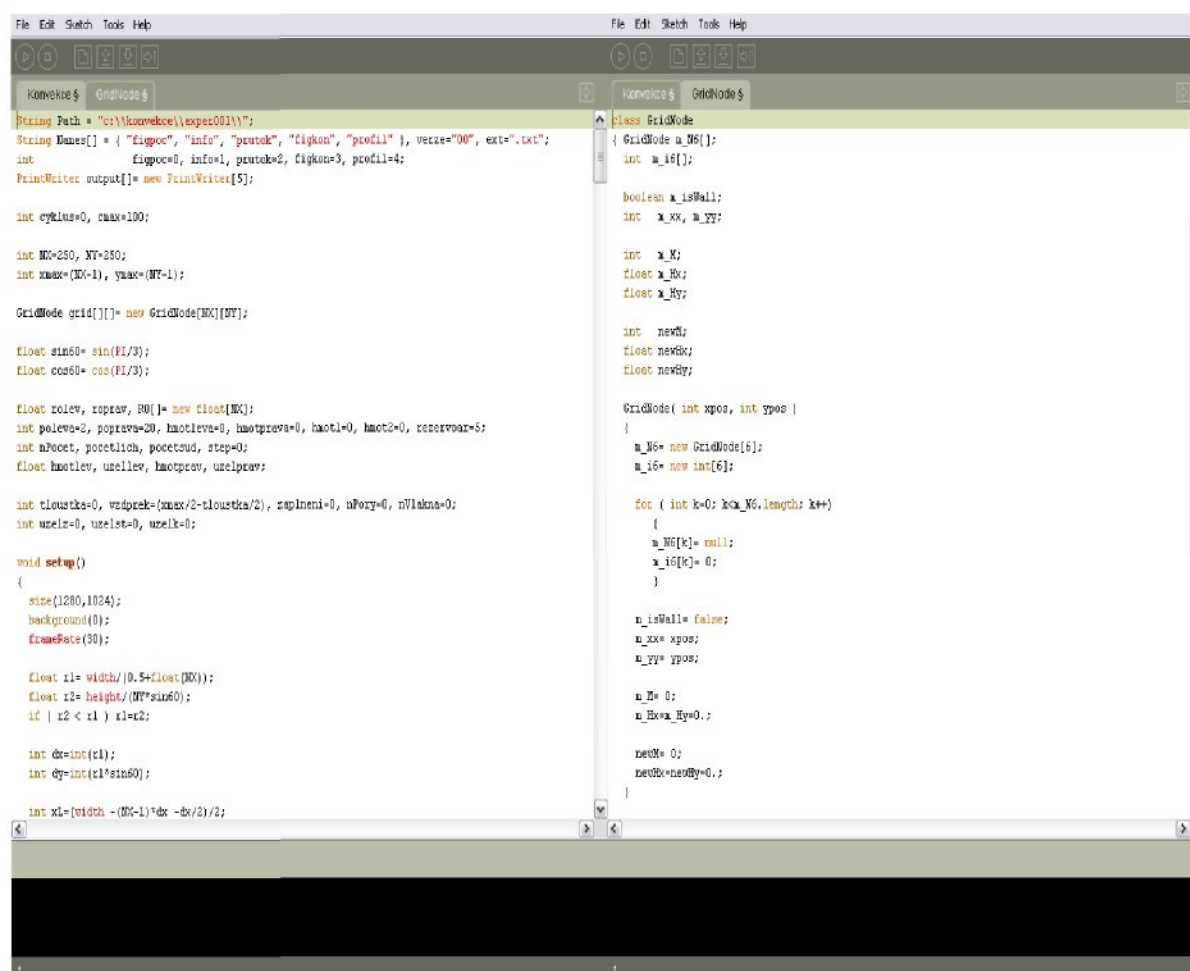
Obr.49. Typické dvou a tříčásticové kolize (FHP-2)

10. Simulační experiment s mřížovým modelem plynu

Na základě podkladů pro algoritmizaci LGA modelu FHP-1, laskavě poskytnutého Ing. L. Očeretnou byl pro testovací účely přepsán program do prostředí Processing. Na rozdíl od zmíněného předchozího způsobu FEM, zde vše probíhá v jednom cyklu interpretováno s odezvou v reálném, či téměř v reálném čase podle velikosti sítě a počtu uzlů v ní obsažených.

Prototypování aplikace

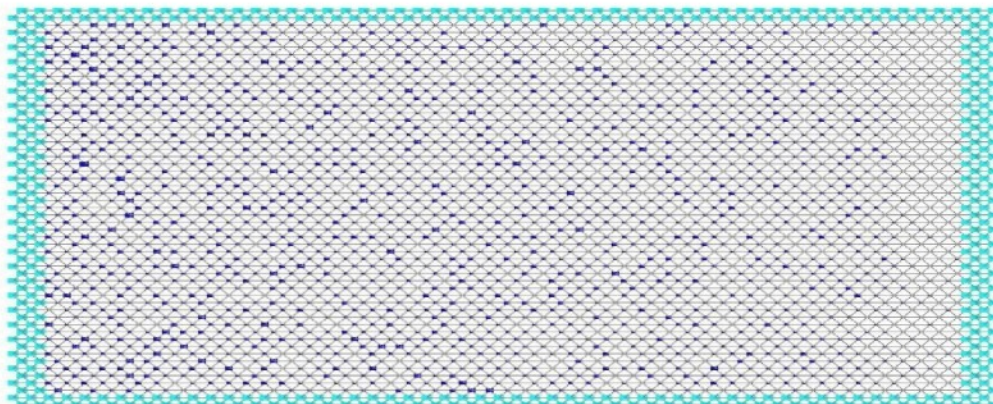
Processing je rovněž distribuován v rámci otevřené license. Je vhodný k prototypování aplikací. Byl vytvořen zejména pro použití v oblasti multimédií a interaktivních instalací a je navržen tak, aby byl co nejvíce srozumitelný a použitelný dokonce i pro umělce zabývajících se digitální tvorbou.



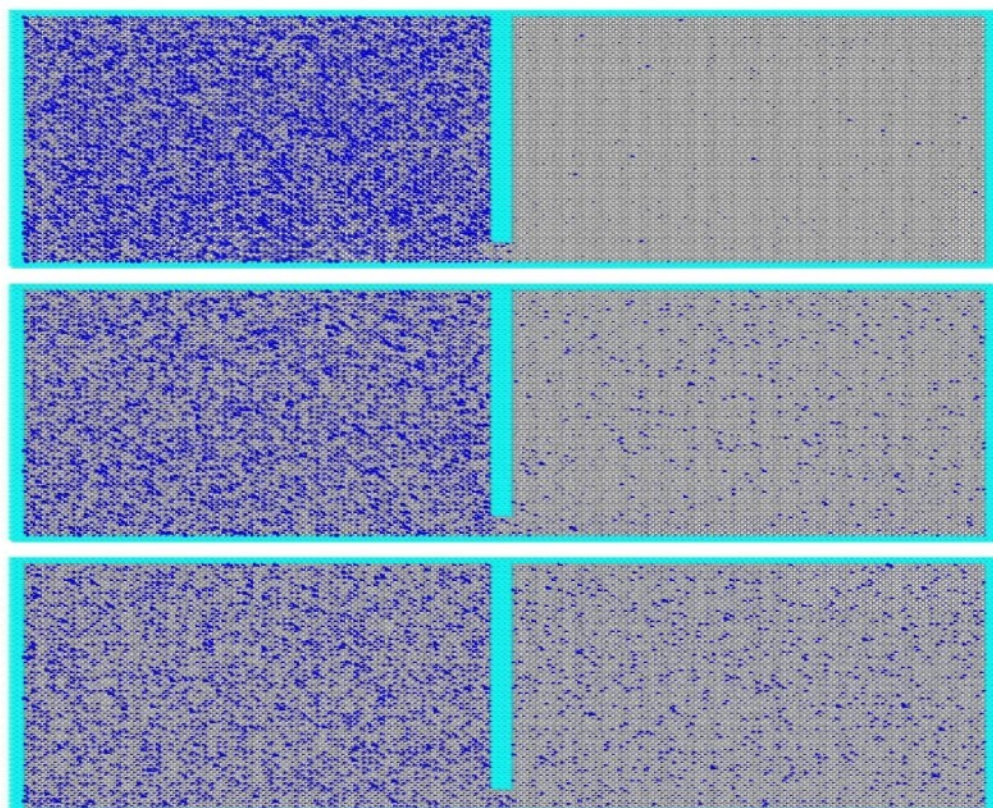
Obr.50. Prototypové prostředí Processing (nalevo část kódu programu FHP-1 Konvekce.pde, napravo třída GridNode.pde)

Program ke stažení viz. Příloha D. *Demonstrace prototypu (str.69)*

Vykreslení stavu simulace na obrazovku probíhá spolu s výpočtem v jednom cyklu a zároveň jsou některá data potřebná pro analýzu ukládána do souborů pro další statistické vyhodnocení.



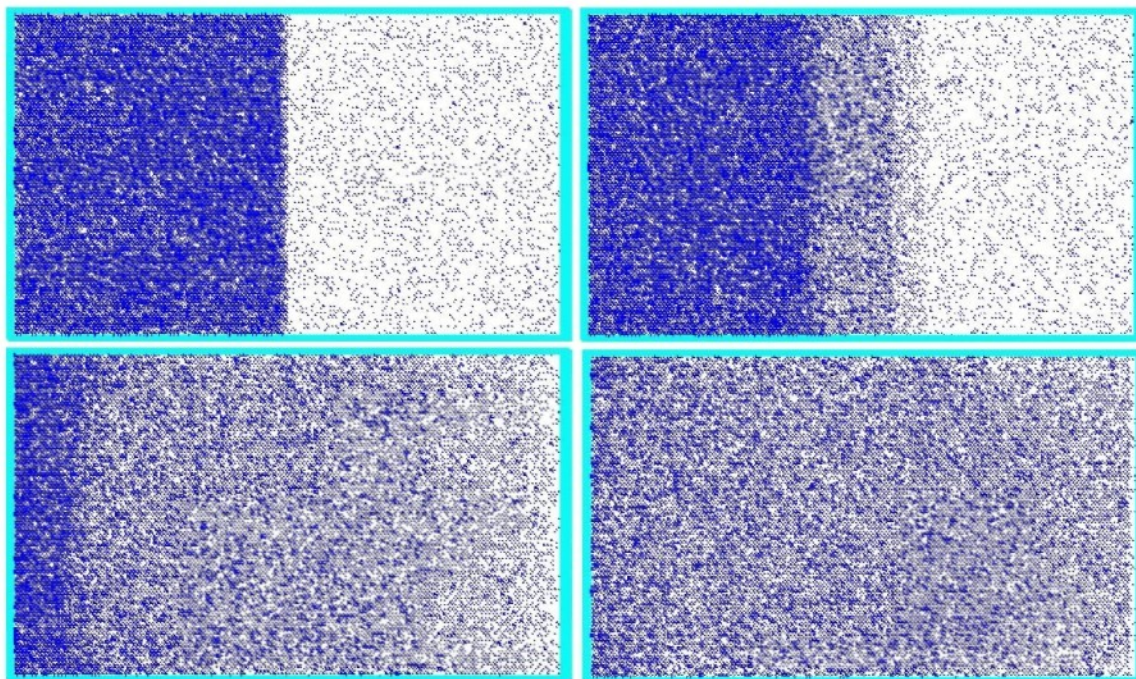
Obr.51. Simulační oblast, síť buněčného automatu s uzly a pevnými okrajovými podmínkami danými hranicemi simulační oblasti



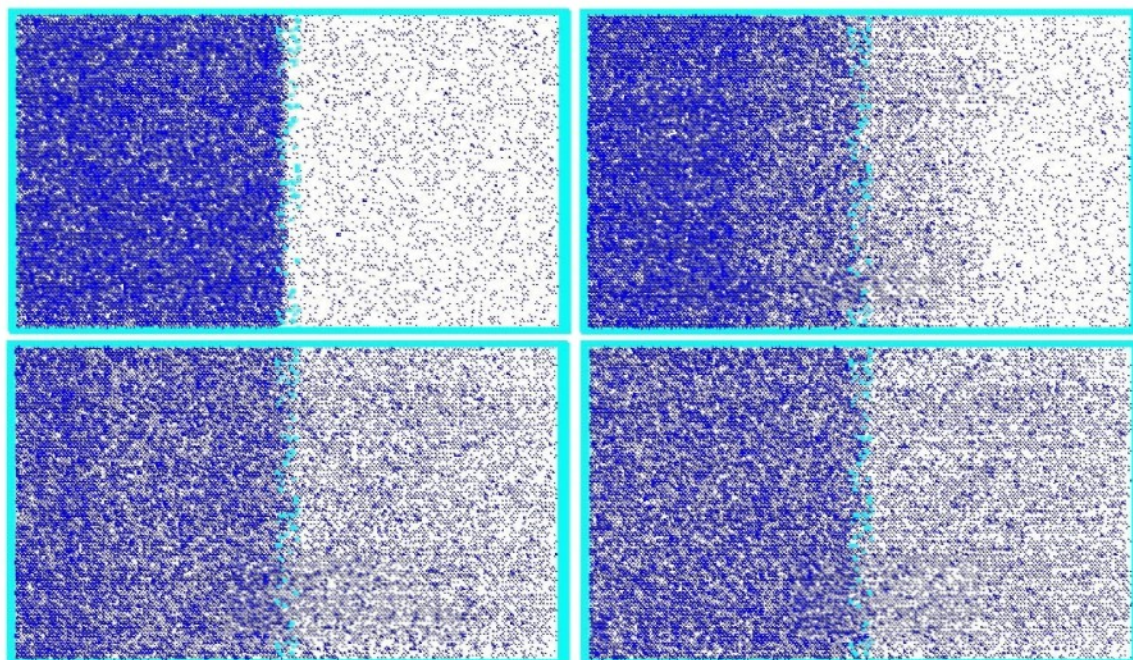
Obr.52. Ukázka vývoje buněčného automatu v čase, rozptyl částic za překážku za účelem vyrovnání tlakového spádu

Gradient tlaku je u tohoto konvektivního modelu dosažen rezervoáry na levé a pravé straně, nalevo jsou do systému částice dodávány a napravo jsou odebírány, přičemž je dbáno na zachování shodného počtu částic v simulační oblasti.

V obou případech se jedná o simulační sekvence zaznamenané ve shodných časových intervalech.

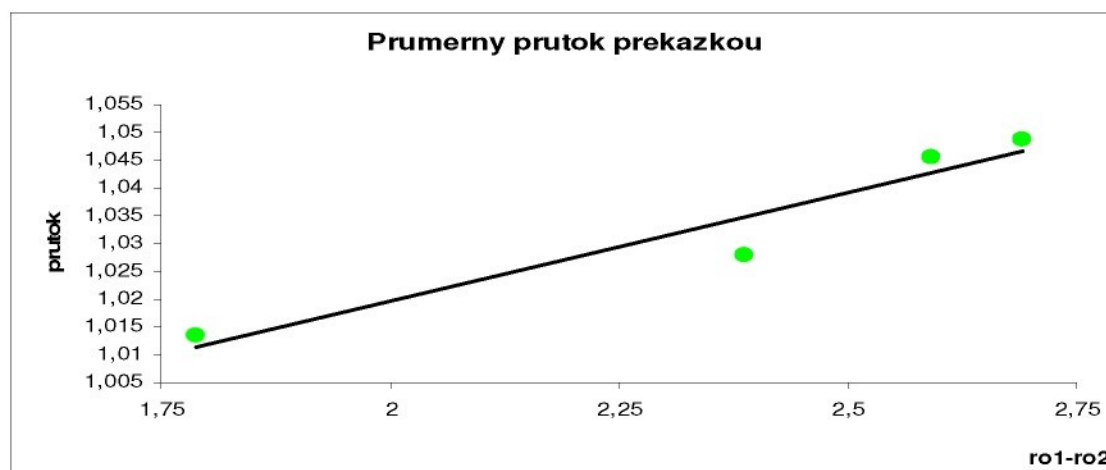
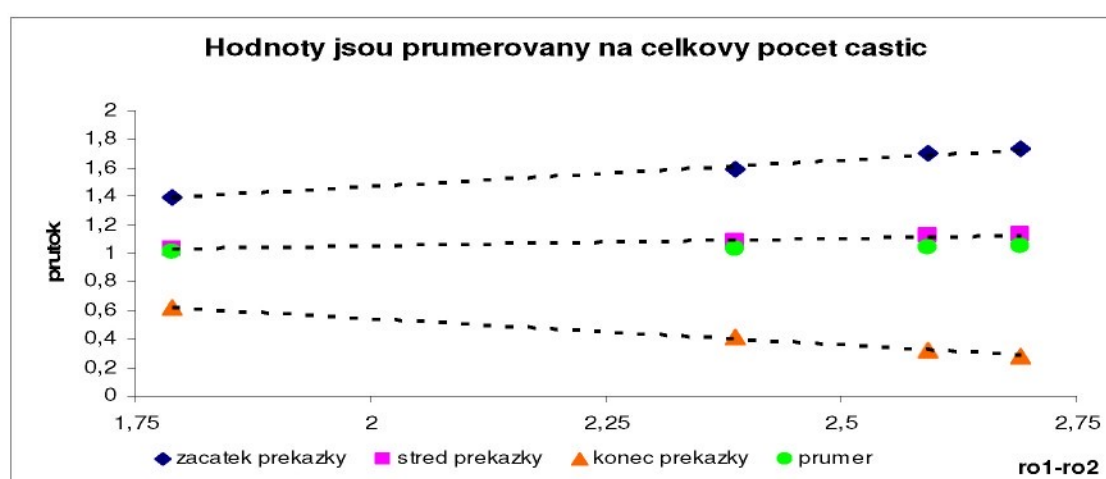
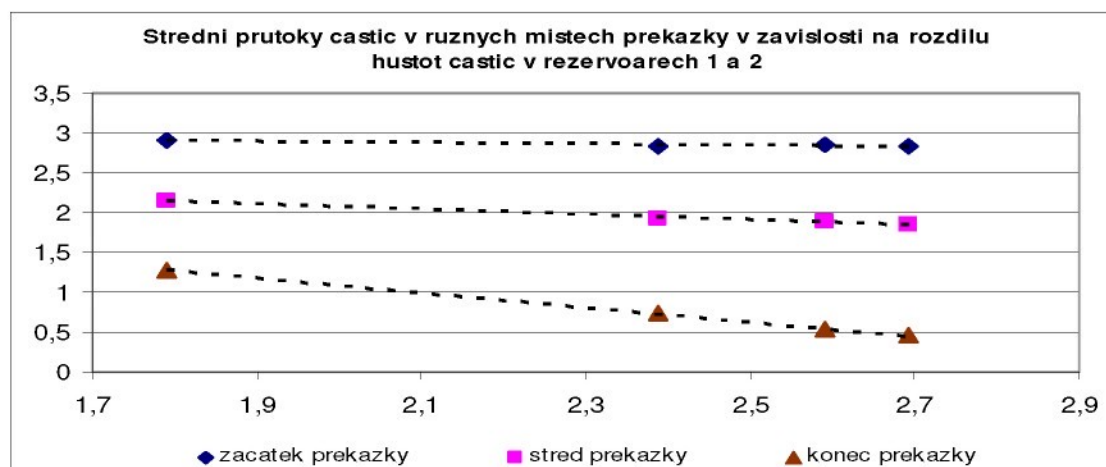


Obr.53. Časový vývoj buněčného automatu v prostředí bez pórzní překážky



Obr.54. Časový vývoj buněčného automatu v prostředí s pseudonáhodně generovanou pórzní překážkou

Statistické vyhodnocení simulačního experiment s modelem automatu FHP-1 odpovídá kvalitativně závislosti průtoku pórzní vrstvou, podobně jako tomu bylo u laboratorních měření.



Graf.4. Střední průtoky částic v různých místech pseudonáhodně generované pórzní překážky, celkový průměrný průtok překážkou

Optimalizace kódu

Abychom při částicové simulaci mohli zaznamenat projevy modelovaného jevu odrážející jeho reálné fyzikální chování, je třeba pracovat s dostatečně velkými simulačními oblastmi. Je zřejmé, že pro příliš velké simulační oblasti, kdy mříž obsahuje velmi mnoho uzlů, je třeba pokusit se najít způsoby jak urychlit výpočet a uvažovat tím pádem o možnostech optimalizace kódu programu.

Dále je uvedeno několik přístupů, které se dají kombinovat ke zefektivnění výpočtu v programovacím prostředí Processing.

Metoda přesouvání bitů (Bit-shifting)

U zobrazovaného pixelu

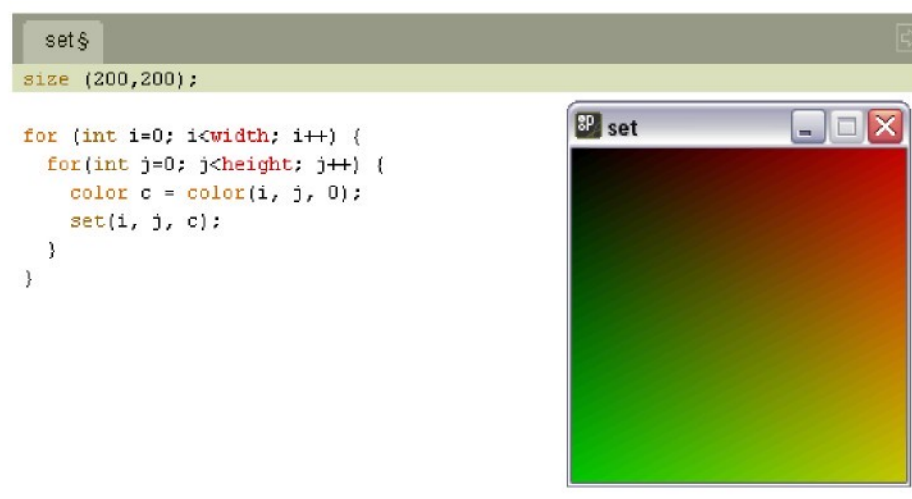
```
color c = color(r, g, b, a);
```

slouží pro reprezentaci barvy a viditelnosti komponenty

```
float r = (c >> 16) & 0xFF;    // r(c)
float g = (c >> 8) & 0xFF;     // g(c)
float b = c & 0xFF;             // b(c)
float a = (c >> 24) & 0xFF;    // a(c)
```

každá komponenta obsahuje 8bitů, které jsou uspořádány v pixelu následovně
 AAAAAAAAAARRRRRRRRRRGGGGGGGGBBBBBBBB, tudíž pokud je např. R komponenta posunuta o 16 do prava (>> 16), pak je hodnota pixelu nastavena na
 0000000000000000AAAAAAAAARRRRRRRRR.

Hexadecimální hodnota 0xFF znamená všech 8 bitů nastavených na 1 (odpovídá 255), bitový operátor AND je použit k odstranění ostatních bitů a ponechá pouze 8 bitů potřebných pro danou komponentu, takže výraz `red(color)` má ekvivalentní zápis `(color >> 16) & 0xFF` plus specifikace hodnoty komponenty s použitím hexadecimálního zápisu např. `#FFCC00`



Obr.55. Volání funkce `set()`

Metoda zamezení (Avoiding)

Použití pixels[] array

Funkce get(), set() se snadno používají, ale nejsou tak rychlé jako přímé adresování pixelů pomocí pixels[] array

Dále jsou uvedeny čtyři ilustrativní příklady jak přistupovat k datům pomocí pixels[] array:

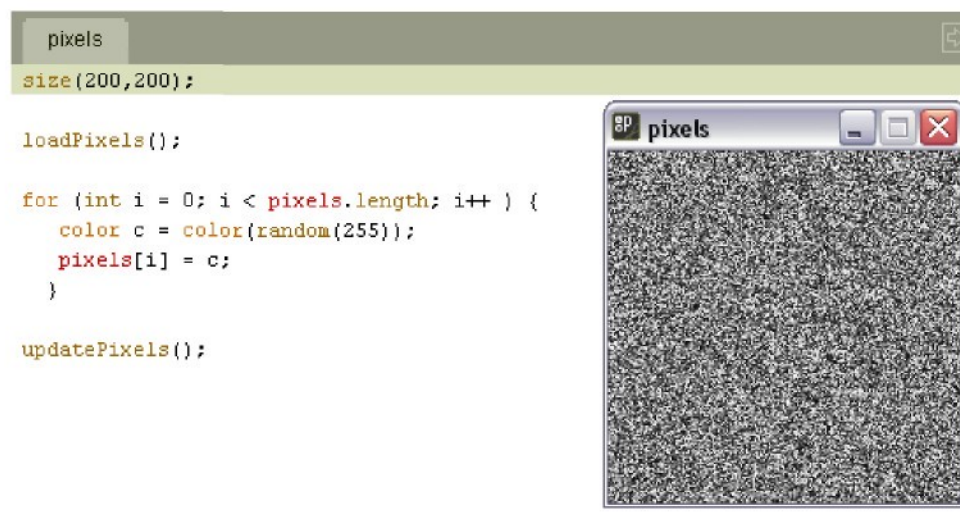
```
// konverze souřadnic na pozici v pixels[] array
loadPixels();
for (int y = 0; y < height; y++) {
  for (int x = 0; x < width; x++) {
    pixels[y*height + x] = color(102);
  }
}
updatePixels();
```

```
// nahrazení multiplikace adicí
int offset = 0;
loadPixels();
  for (int y = 0; y < height; y++) {
    for (int x = 0; x < width; x++) {
      pixels[offset + x] = color(102);
    }
    offset += width; // záměna
  }
updatePixels();
```

```
// výpočet y*height+width
int index = 0;
loadPixels();
for (int y = 0; y < height; y++) {
  for (int x = 0; x < width; x++) {
    pixels[index++] = color(102);
  }
}
updatePixels();
```

```
// polohy souřadnic
int wh = width*height;
loadPixels();
for (int index = 0; index < wh; index++) {
  pixels[index] = color(102);
}
updatePixels();
int wh = width*height;
color c = color(102);
loadPixels();
for (int index = 0; index < wh; index++) {
  pixels[index] = c;
}
updatePixels();
```

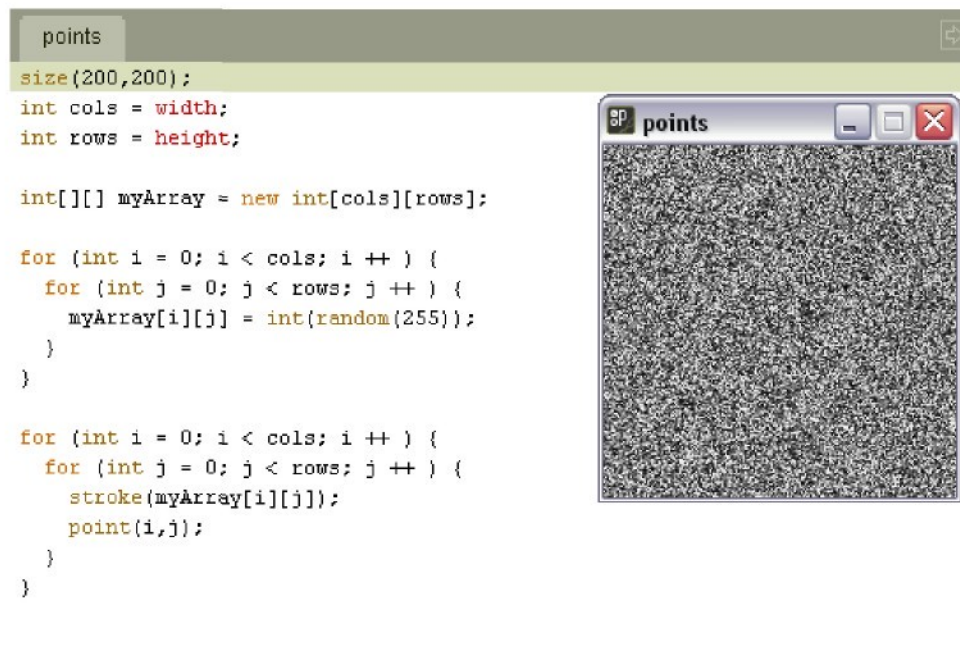

Při operacích s `pixels[]` se užívá funkcí `loadPixels()`, `updatePixels()`, které jsou volány Pouze jednou uvnitř bloku `draw()`



Obr.56. Přímá adresace pixelů

Práce s datovými poli

Přidání jedné hodnoty do pole je pomalejší, než zdvojnásobení velikosti pole, když se naplní, proto je výhodnější při kontinuálním přidávání dat na konec pole používat funkci `expand()` namísto `append()`. Funkce `arraycopy()` je nejrychlejší způsob kopírování dat z jednoho pole do jiného. Kopírování dat z pole do pole uvnitř for struktury je mnohem pomalejší, než kopírování dat z rozsáhlých polí. Pole jsou mnohdy mnohem rychlejší (2*) než třídy `ArrayList` a `Vector`.



Obr.57. Naplnění matice pomocí polí

Vyhledávací tabulky (Lookup tables)

Idea použití tabulky spočívá v rychlosti přístupu k uložené hodnotě uvnitř datové struktury (reference) namísto jejího počítání. Tímto způsobem lze měnit rozlišení změnou velikosti pole.

Testování rychlosti výpočtu

Test prokázal, že pro daný algoritmus buněčného automatu použití přímé adresace pixelů při shodné rychlosti výpočtu umožní narůst až o dva řády

Specifikace:

CPU: AMD Athlon64,2GHz,1GB
GPU: NVidia GF6600,128MB
OS: Windows XP
SW: Processing-144,1024MB,24fps

Uzly bez optimalizace:

500 x 500 = 250.000	2
1.000 x 500 = 500.000	4

Přímá adresace pixelů:

5.000 x 5.000 = 25.000.000	0,5
10.000 x 5.000 = 50.000.000	1

(velikost simulační oblasti výška x šířka = počet částic a časová prodleva nutná k překreslení obrazu v sekundách)

Začlenění do Eclipse (IDE)

Další pokročilou možností ladění a překlada kódu napsaného v prostředí Processing je použití profileru, debuggeru a compileru volně šiřitelného vývojového prostředí Eclipse.

11. Závěr

V této multidisciplinárně orientované práci je nahlíženo na téma počítačového modelování difuzně otevřených fasád z pohledu vymezení fyzikálně-stavební problematiky a seznámení se s teoretickým základem výpočetních metod potřebných k vytvoření odpovídajících modelů schopných popisu chování transportu difuzně otevřenou konstrukcí v běžném měřítku (FEM) a měřítku při použití nanovláknenných materiálů (LGA)

FEM: fenomenologický model -> diskretizace

Metoda konečných prvků je v současnosti již klasickou metodou používanou široce v inženýrské praxi. S ohledem na vymezenou problematiku byl vytvářen výpočetní model pro simulaci transportu difuzně otevřenými konstrukcemi s důrazem na vizualizaci.

LGA: diskrétní model -> škálování

Metoda buněčných automatů je oproti tomu relativně nová metoda, vhodná svojí podstatou k simulaci v molekulárním měřítku. Práce se zabývá diskrétním mřížovým modelem pro vizualizaci transportu média v pórzním prostředí a možností jeho další optimalizace. V této části je diskutována rovněž možnost začlenění nanovláknenného materiálu do kontextu návrhu tzv. dýchající fasády.

Hlavním přínosem práce je vypracování nové metodiky progresivní vizualizace dat ve spojitosti s problematikou návrhu difuzně otevřených obalových stavebních konstrukcí. Výsledkem je testovací modul programu pro fyzikálně korektní návrh fasád a rovněž vizualizace, které pomohly lépe pochopit zejména jejich akumulární vlastnosti. Fasády typu diffu navrhované podle nové metodiky jsou v současné době již certifikovány a uvedeny do praxe.

Vzhledem k tomu, že lze metodiku vizualizace vědeckých i technických dat využít pro široký rozsah úloh s relativně pružnou modifikovatelností, je jejím pokračováním právě probíhající práce v týmu Prof. Lukáše, zaměřená na modelování filtračních vlastností nanovláknenných materiálů (fa.Cummins).

Všechna zvolená programová prostředí použitá v průběhu celé práce jsou založena na bázi otevřené license.

Literatura

L.Očeretna,P:Mikeš,R.Charvát,D.Lukáš: Multi Scale Modeling of Fluid Transport in Fibrous Materials, Computational Fluid and Solid Mechanics, 1st Cummins Filtration Workshop, Warsaw, Poland, September 21 - 23, 2008.

C.Reas,B.Fry:Processing A Programming Handbook for Visual Designers and Artists, 2007.

J.Krňanský: Nano aplikace ve stavebním průmyslu, příspěvek: konference ITW, Praha, 2007.

J.Krňanský,P.Kubů: Difuzně otevřené konstrukce dřevostaveb, příspěvek: seminář Dřevostavby, Volyně, 2007.

J.Krňanský: Řešení difuzní rovnice respektive rovnice vedení tepla metodou konečných prvků, koncept, 2006.

N.Pan,P.Gibson: Thermal and Moisture Transport in Fibrous Media, Woodhead Publishing Ltd, Cambridge, 2006 (D.Lukáš, L.Očeretna: The Cellular Automata Lattice Gas Approach for Fluid Flows in Porous Media).

W.Schroeder,K.Martin,B.Lorensen: VTK An Object-Oriented Approach to 3D Graphics, Kitware Publishing, Colombia, 2006.

S.Zippe,R.Charvát: R-G-B, realtime počítačová projekce, výstava VŠUP, Praha, 2005.

R.Charvát: série článků Architektura z Mixéru, odborný časopis Fórum architektury a stavitelství, ročník 2003.

R.Charvát: Architektura coby herní aplikace, příspěvek: konference Visions In Design, Praha, 2003.

S.Wolfram: NKS, Wolfram Media, 2002.

T.Roosendaal,C.Wartmann: Blender Gamekit, Stichting Foundation, Netherlands, 2002.

Franz J.Vesely: Computational Physics, Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York-London, 2001.

Dieter A.Wolf-Gladrow: Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models, Springer, Berlin, 2000.

S.Zippe,R.Charvát: Laboratoř VR – koncept a realizace interaktivní velkoplošné stereoskopické projekce na základě grantu FRVŠ, 1999.

O.Jirsák,D.Lukáš,R.Charvát: A 2-dimensional model of the mechanical properties of textiles. In: J.Text.Institute, 1993.

Internetové odkazy

insowool.cz

ibp.fraunhofer.de

blender.org

python.org

vtk.org

<http://www.ualberta.ca/CNS/RESEARCH/Vis/VTKBlender/>

<http://www.lighthouse3d.com/opengl/glsl/>

tiker.net/doc/pycuda

processing.org

Příloha A. Zadání úlohy

D1D Builder

Projekt

Název

Komentář

Volba fyzikálního modelu

Ustálený stav

- ☒ teplota
- ☐ teplota, difuze
- ☐ teplota, difuze, adsorpce
- ☐ teplota, difuze, kondenzace
- ☐ teplota, difuze, kondenzace, adsorpce

Neustálený stav

- ☐ teplota
- ☐ teplota, difuze
- ☐ teplota, difuze, adsorpce
- ☐ teplota, difuze, kondenzace
- ☐ teplota, difuze, kondenzace, adsorpce

Zpět Pokračuj

Formulář F3: Název úlohy a volba fyzikálního modelu

Zadávání typu fyzikálního modelu

D1D Builder

Okraj levý Okraj pravý

Číslo vrstvy	Název materiálu	Tenká vrstva	Tloušťka [m]	Počet prvků	Délka prvku	Materiál vrstvy
1	zdivo z plných pálených cih	☐	0,05	10	0,005	...
2	beton hutný	☐	0,2	10	0,02	...
3	Folie	☒	BetaT: 1	BetaP: 1		
4	deska OSB	☐	0,05	15	0,0033	...
5	dřevo, tok kolmo k vl.	☐	0,05	5	0,01	...

Další vrstva

Vložit vrstvu

Kopírovat vrstvu

Vymazat vrstvu

Zpět Pokračuj

Formulář F4: Geometrie úlohy

Zadávání jednotlivých kompozit konstrukce

Formulář F4: Geometrie úlohy

Název: Tepelná vodivost:

Barva (textura): 

Poznámka:

OK Zpet

smazat materiál

Tenké vrstvy: **tenkovrstvé omítky**
 fólie
 nátěry
 betony
 malty
 omítky
 obklady
 dřevo
 zdivo
 sádra

sítčátové (minerální)
 sítčkonové
 akrylátové

Název
 beton hutný
 zdivo z plných pálených cihel
 Zdivo Porotherm Si
 dřevo, tok kolmo k vl.
 deska OSB
 deska Hofafest UD
 omítka vápenocementová
 deska sádrokartonová
 deska sádrovláknitá Rigidur
 pěnový polystyrén
 izolace z minerálních vláken
 izolace ze skleněných vláken

Databáze materiálů

Formulář F6: Zadání okrajových podmínek

Levý okraj

Teplotní pole
☒ Zadaný přestup tepla
☐ Zadaná povrchová teplota

Teplota: Součinitel alfa:

Pravý okraj

Teplotní pole
☐ Zadaný přestup tepla
☒ Zadaná povrchová teplota

Teplota:

Zpet Pokračuj

Zadávání okrajových podmínek

Okraj levý Okraj pravý

☒ Zdroje tepla

Prvek č.	Název	souřadnice uzlu		hustota tepelného zdroje		
		vlevo	vpravo	vlevo	vpravo	
21	delsi zdroj nazev jeho	0,25	0,25	5	10	Další zdroj Vložit zdroj Smazat zdroj

☒ Předepsané teploty

Číslo uzlu	Název	Souřadnice uzlu	Předepsaná teplota	
6	Teplota predepsana dlouha	0,025	10	Další teplota Vložit teplotu Smazat teplotu

Zpět Pokračuj

Formulář F7: Předepsané teploty a zdroje tepla

Zadávání předepsaných teplot a zdrojů tepla

Fyzikální model: ustálený stav, teplota

č.	název mat.	tloušťka	alfa
0	zdivo z plných pálených cihel	0,05	0,77
1	beton hutný	0,2	1,2
2	Folie	betaT = 1	
3	deska OSB	0,05	0,2
4	dřevo, tok kolmo k vl.	0,05	0,17

Leva hranice - Zadaný přestup tepla $T = 5$, $\alpha = 20$

Prava hranice - Zadaná povrchová teplota $T = 5$

Zdroje tepla

název zdroje	X-L	X-P	T-L	T-P
delsi zdroj nazev jeho	0,25	0,25	5	10

Předepsané teploty

název teploty	X	T
Teplota predepsana dlouha	0,025	10

Zpět Spocítej

Formulář F8: Rekapitulace zadání

Shrnutí zadání

Příloha B. Metoda konečných prvků

Za předpokladu izotropie materiálů lze psát

$$a(\mathbf{x}, t) \frac{\partial C(\mathbf{x}, t)}{\partial t} - \nabla [b(\mathbf{x}, t) \nabla C(\mathbf{x}, t)] - p(\mathbf{x}, t) = 0$$

a, b .. zadané funkce

$\mathbf{x}$.. souřadnice bodu (E3)

t .. čas

∇ .. gradient

C .. hledané skalární pole

p .. produkce hledané veličiny

řešení se hledá na oblasti Ω s hranicí Γ , tj. na uzávěru oblasti $\Omega \cup \Gamma = \bar{\Omega}$
pro zadané počáteční a okrajové podmínky

Počáteční podmínka $t = t_0$

$$C(\mathbf{x}, t_0) = C_0(\mathbf{x})$$

Okrajové podmínky $t > t_0$

podstatné (stabilní) předepisují přímo hodnoty C na Γ

$$C(\mathbf{x}, t) = \bar{C}(\mathbf{x}, t) \mid \Gamma$$

přirozené (nestabilní) předepisují hodnoty derivací C na Γ

$$-b(\mathbf{x}, t) \frac{\partial C}{\partial \mathbf{n}} \cdot \mathbf{n} = \bar{q} \mid \Gamma$$

$$\bar{q} = -\beta (C_E - C) \mid \Gamma$$

$\bar{q}$.. předepsaná hodnota

C_E .. známá hodnota daného pole vně oblasti

β .. koeficient přestupu hledané veličiny mezní vrstvou

$\mathbf{n}$.. jednotkový vektor vnější normály

Plochy fyzikálních nespojitostí (materiálová rozhraní)

Při rozboru transportních jevů v tělesech narazíme v praxi na případy, kdy je těleso tvořeno více materiály, jež jsou navzájem v těsném kontaktu. Styk mezi materiály je tvořen plochami fyzikální nespojitosti, na nichž se mohou předepsat podmínky průběhu transportních procesů

rovnost hodnot pole

$$C^I(\mathbf{M}) = C^P(\mathbf{M}) : \mathbf{M} \in \Gamma_{IP}$$

rovnost toků veličiny

$$-b_L(\Gamma_{LP}) \frac{\partial C}{\partial n} \Big|_L \rightarrow \Gamma_{LP} = -b_P(\Gamma_{LP}) \frac{\partial C}{\partial n} \Big|_P \Gamma_{LP}$$

Γ_{LP} .. plocha fyzikální nespojitosti

b_L, b_P .. vodivostní charakteristika materiálů L, P

Pro praktická zadání není řešení za podmínek v uzavřeném tvaru možné, proto je třeba tento problém řešit přibližně, užitím numerických metod.

Metoda vážených reziduí (WRM)

Jedná se o dobře algoritmizovatelnou metodu a na rozdíl od variačních metod u ní nemusí být známý příslušný funkcionál. Problematické je komplikovanější matematické zpracování a otázka konvergence řešení. Kromě toho je nutné zahrnout přirozené okrajové podmínky do formulace problému, zatímco u variačních metod jsou tyto podmínky implicitně součástí funkcionálu. Podstatné okrajové podmínky musejí být vždy splněny a priori, kdežto přirozené podmínky mohou být plněny pouze přibližně v rámci numerického řešení.

Podstata

Navržené přibližné řešení $C(\bar{x}, t)$ splňuje přesně podstatné okrajové podmínky, počáteční podmínku a rovněž má splňovat podmínky dané rovnicemi, takže po dosažení vznikne v důsledku přibližnosti řešení určité reziduum r , jež vyjadřuje míru nesplnění těchto podmínek

$$a \frac{\partial C}{\partial t} - \nabla(b \nabla C) - p = r_\Omega \quad | \quad \Omega$$

$$b \frac{\partial C}{\partial n} + q = r_\Gamma \quad | \quad \Gamma$$

Reziduum má jak geometrický, tak časový rozměr. Pro numerické řešení oddělíme řešení v prostoru od řešení v čase. Při dlouhých časových intervalech totiž může dojít k nárůstu počtu neznámých ve vzniklých soustavách lineárních algebraických rovnic, proto se řeší při pevném čase t , pouze s ohledem na geometrické proměnné. Výsledkem řešení je soustava obyčejných lineárních diferenciálních rovnic v časové proměnné, která už lze řešit běžnými metodami numerické matematiky.

Základní myšlenka spočívá v požadavku, aby součet reziduí na uzávěru oblasti byl nulový. Protože je nutné vyloučit případ prosté algebraické kompenzace reziduí, ovlivňujeme způsob sčítání reziduí na uzávěru oblasti pomocí speciálních váhových funkcí □

Základní rovnice metody vážených reziduí (při vyloučení času)

$$\int_{\Omega} r_\Omega \omega \, d\Omega + \int_{\Gamma} r_\Gamma \omega \, d\Gamma = 0$$

Formulace WRM na plochách fyzikální nespojitosti:

Pro kompozitní materiály je nutné uvedené doplnit ještě o další podmínky

Γ_r .. plocha fyzikální nespojitosti

r .. plocha nespojitosti

+, - .. příslušné hodnoty z obou stran

$$M_{\mathbf{r}} \in \Gamma_r \wedge \forall \mathbf{t} : \mathbf{C}(\mathbf{M}_{\mathbf{r}}) \Big|_{\Gamma_r} = \mathbf{C}(\mathbf{M}_{\mathbf{r}}) \Big|_{\Gamma_r}^+$$

$$M_{\mathbf{r}} \in \Gamma_r \wedge \forall \mathbf{t} : -\bar{\mathbf{b}}_r \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{\Gamma_r} = -\bar{\mathbf{b}}_r^+ \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{\Gamma_r}^+$$

Pokud považujeme za primární neznámé pouze hodnoty samotného pole $\mathbf{C}$, odpadá druhá podmínka, avšak potřebujeme-li zajistit i rovnost toků na plochách fyzikální nespojitosti, pak ještě k rovnicím přistupují podmínky

$$\mathbf{C}(\mathbf{M}_{\mathbf{r}}) \Big|_{\Gamma_r} - \mathbf{C}(\mathbf{M}_{\mathbf{r}}) \Big|_{\Gamma_r}^+ = \hat{\mathbf{r}}$$

$$-\bar{\mathbf{b}}_r \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{\Gamma_r} + \bar{\mathbf{b}}_r^+ \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{\Gamma_r}^+ = \tilde{\mathbf{r}}$$

a jejich zapsáním pro všechny plochy nespojitosti přejde na zobecněný tvar

$$\int_{\Omega} \mathbf{r}_{\Omega} \omega \, d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{r}_{\Gamma} \omega \, d\Gamma + \sum_{r=1}^R \left(\int_{\Gamma_r} (\hat{\mathbf{r}} + \tilde{\mathbf{r}}) \omega \, d\Gamma_r \right) = 0$$

Galerkinova metoda v konceptu WRM

Základní myšlenkou Galerkinovy metody je zvolit za váhovou funkci variaci hledaného skalárního pole $\square = \square \mathbf{C}$. Pokud $\mathbf{C}_1$ je skalární pole splňující na uzávěru oblasti předepsané podstatné okrajové podmínky a $\mathbf{C}$ je hledané skalární pole, pak variace skalárního pole je dána vztahem

$$\delta \mathbf{C} = \mathbf{C}_1 - \mathbf{C}$$

Je zřejmé, že i variace pole plní předepsané podstatné okrajové podmínky a kromě toho platí, že operace derivace a variace jsou záměnné

$$(\delta \mathbf{C})' = \mathbf{C}_1' - \mathbf{C}' = \delta \mathbf{C}'$$

Vzhledem k oddělení geometrického a časového řešení, bude zvolená variace pole isochronní, tj. pouze v souřadnicích, nikoliv v čase.

Galerkinova formulace WRM (základní rovnice pro formulaci řešení pomocí FEM):

$$\int_{\Omega} \left[\mathbf{a} \frac{\partial C}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{b} \nabla C) - \mathbf{p} \right] \delta C d\Omega + \int_{\Gamma} \left[\mathbf{b} \frac{\partial C}{\partial \mathbf{n}} - \beta (C_E - C) \right] \delta C d\Gamma = 0$$

za požadavku hladkosti a spojitosti pro funkce $\mathbf{f}, \mathbf{g}$ lze rovnici za použití Greenovy věty

$$\int_{\Omega} (\mathbf{f} \cdot \Delta \mathbf{g} + \nabla \mathbf{f} \cdot \nabla \mathbf{g}) d\Omega = \int_{\Gamma} \mathbf{f} \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{n}} d\Gamma$$

upravit na tvar

$$-\int_{\Omega} \nabla \cdot (\mathbf{b} \nabla C) \delta C d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{b} \nabla C \cdot \nabla \delta C d\Omega - \int_{\Gamma} \mathbf{b} \frac{\partial C}{\partial \mathbf{n}} \delta C d\Gamma$$

Tento tvar obsahuje pouze jednoduché působení operátoru nabla, tudíž jsou potřebné aproximační funkce se spojitou první derivací

$$\int_{\Omega} \left(\mathbf{a} \frac{\partial C}{\partial t} \delta C + \mathbf{b} \nabla C \cdot \nabla \delta C - \mathbf{p} \delta C \right) d\Omega - \int_{\Gamma} \beta (C_E - C) \delta C d\Gamma = 0$$

Metoda konečných prvků (FEM)

Klasické řešení Galerkinovou metodou vyžaduje volit aproximační funkci $C(\mathbf{x}, t)$ tak, aby vyhovovala na uzávěru oblasti $\bar{\Omega}$ podstatným okrajovým podmínkám. Takové funkce se často vůbec nedají najít. Proto byla vyvinuta numerická varianta této metody, metoda konečných prvků, která využívá aditivity integrálů v tom smyslu, že se nesnaží nalézt aproximační funkci na celé oblasti Ω resp. Γ (splňující přirozené okrajové podmínky), ale na disjunktních podoblastech

$$\bigcup_i \Omega_i = \Omega \text{ resp. } \bigcup_k \Gamma_k = \Gamma$$

$$\sum_{i=1}^n \left(\int_{\Omega_i} \left[\mathbf{a} \frac{\partial C}{\partial t} \delta C + \mathbf{b} \nabla C \cdot \nabla \delta C - \mathbf{p} \delta C \right] d\Omega_i \right) + \sum_{k=1}^K \left(\int_{\Gamma_k} \beta (C_E - C) \delta C d\Gamma_k \right) = 0$$

Lze očekávat, že při dostatečně malých rozměrech konečných prvků budou s dostatečnou přesností skutečný průběh skalárního pole C vystihovat i velmi jednoduché aproximační funkce.

Aproximační funkce na prvku:

Základní myšlenka aproximace přesného průběhu C v rámci jednoho prvku (např. m-tého) je vyjádřit $C^{(m)}$ jako lineární kombinaci aproximačních funkcí φ_i ve tvaru

$$C^{(m)}(\mathbf{x}, t) = \lambda_i(t) \varphi_i(\mathbf{x}) \quad i=1, \dots, S$$

který separuje časovou proměnnou do součinitelů lineární kombinace λ_i , jež jsou pro pevné t konstantami.

Aproximační funkce nemohou být voleny libovolně, ale musí splňovat následující kritéria, aby byla zaručena konvergence přibližného řešení k řešení přesnému

úplnost soustavy aproximačních funkcí na prvku (tento požadavek je odrazem vlastností báze prostoru funkcí). Je třeba volit takové funkce φ_i , aby jimi tvořená soustava $\beta(\varphi_i)$ byla bází prostoru funkcí ve kterém hledáme řešení. Pokud φ_i opravdu bázi tvoří, pak aproximace zaručuje konvergenci metody k přesnému řešení (funkce φ_i jsou lineárně nezávislé)

spojitost pole na hranicích ve styku prvků se zajišťuje užitím aproximačních funkcí, tzv. funkce tvaru (jelikož hledaná skalární pole jsou svojí fyzikální povahou spojitá)

- volba stejné báze aproximačních funkcí na všech konečných prvcích
- hodnota aproximovaného pole je vyjádřena jako funkce uzlových hodnot prvku (uzlová hodnota v místě styku konečných prvků je předepsána stejná pro všechny takové prvky)

Funkce tvaru na konečných prvcích:

Aproximační funkce na m-tém konečném prvku je vyjádřena pro pevné t ve tvaru lineární kombinace

$$c^{(m)}(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^s \lambda_i(t) \varphi_i(\mathbf{x}) = \{\lambda^{(m)}\}^T \{\varphi^{(m)}\}$$

Volíme konečný prvek libovolného tvaru, který má s uzlů a dále volíme bázi $\square$ prostoru funkcí, která je úplná, čímž jsme získali strukturu $\{\varphi^{(m)}\}$ a volíme prvních s členů báze

$$\{\varphi^{(m)}\}^T = \{ \dots \}$$

Úkolem je zajistit spojitost aproximace na celé oblasti, tj. vyjádřit aproximaci bází pomocí uzlových hodnot

$$\{\lambda^{(m)}\} = [S^{(m)}]^{-1} \{c^{(m)}\} \dots \text{součinitelé}$$

$[S^{(m)}]$.. tvořeno bázovými funkcemi s dosazenými souřadnicemi uzlových bodů

$\{c^{(m)}\}$.. uzlové hodnoty hledaného pole (koeficienty lineární kombinace) - časový rozměr

$$c^{(m)}(\mathbf{x}, t) = \{\varphi^{(m)}\}^T [S^{(m)}]^{-1} \{c^{(m)}\} = \{N^{(m)}\}^T \{c^{(m)}\}$$

$\{N^{(m)}\}$.. funkce tvaru - geometrický rozměr aproximace

Speciální vlastností funkce tvaru je, že má hodnotu v uzlu 1 a v ostatních uzlech je 0

Sestavení základních vztahů FEM (lokální analýza):

Variace hledaného pole na m-tém prvku

$$\delta \mathbf{C}^{(m)}(\mathbf{\hat{x}}, t) = \{\mathbf{N}^{(m)}\}^T \{\delta \mathbf{C}^{(m)}\}$$

$\{\delta \mathbf{C}^{(m)}\}$.. uzlové hodnoty, které nepodléhají integraci

lokální matice kapacity, $a = \text{konst.}$

$$\int_{\Omega_m} a \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t} \delta \mathbf{C} d\Omega_m \Rightarrow [\mathbf{A}^{(m)}] = a^{(m)} \int_{\Omega_m} \{\mathbf{N}^{(m)}\} \{\mathbf{N}^{(m)}\}^T d\Omega_m$$

lokální matice vodivosti, $b = \text{konst.}$

$$\int_{\Omega_m} b \nabla \mathbf{C} \nabla \delta \mathbf{C} d\Omega_m \Rightarrow [\mathbf{B}^{(m)}] = b^{(m)} \int_{\Omega_m} [\partial \mathbf{N}^{(m)}]^T [\partial \mathbf{N}^{(m)}] d\Omega_m$$

lokální vektor produkce, $p = \text{konst.}$

$$\int_{\Omega_m} p \delta \mathbf{C} d\Omega_m \Rightarrow \{\mathbf{P}^{(m)}\} = p^{(m)} \int_{\Omega_m} \{\mathbf{N}^{(m)}\} d\Omega_m$$

$$\sum_{m=1}^n \left(\int_{\Omega_m} [a \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t} \delta \mathbf{C} + b \nabla \mathbf{C} \nabla \delta \mathbf{C} - p \delta \mathbf{C}] d\Omega_m \right) = \sum_{m=1}^n \{\delta \mathbf{C}^{(m)}\}^T \left([\mathbf{A}^{(m)}] \left\{ \frac{d\mathbf{C}^{(m)}}{dt} \right\} + [\mathbf{B}^{(m)}] \{\mathbf{C}^{(m)}\} - \{\mathbf{P}^{(m)}\} \right)$$

lokální matice přestupu na hranici, $\beta = \text{konst.}$

$$\int_{\Gamma_k} \beta \mathbf{C} \delta \mathbf{C} d\Gamma_k \Rightarrow [\mathbf{S}_k^{(m)}] = \beta^{(m)} \int_{\Gamma_k} \{\mathbf{N}^{(m)}(\Gamma_k)\} \{\mathbf{N}^{(m)}(\Gamma_k)\}^T d\Gamma_k$$

lokální vektor vnějších hodnot pole, $\beta = \text{konst.}$

$$\int_{\Gamma_k} \beta \mathbf{C}_E \delta \mathbf{C} d\Gamma_k \Rightarrow \{\mathbf{E}_k^{(m)}\} = [\mathbf{B}_k^{(m)}] \{\mathbf{C}_{Ek}^{(m)}\}$$

$$\sum_{k=1}^K \left(\int_{\Gamma_k} \beta (\mathbf{C}_E - \mathbf{C}) \delta \mathbf{C} d\Gamma_k \right) = \sum_{k=1}^K \{\delta \mathbf{C}^{(m)}\}^T (\{\mathbf{E}_k^{(m)}\} - [\mathbf{S}_k^{(m)}] \{\mathbf{C}^{(m)}\})$$

$$\sum_{m=1}^n \{\delta \mathbf{C}^{(m)}\}^T \left([\mathbf{A}^{(m)}] \left\{ \frac{d\mathbf{C}^{(m)}}{dt} \right\} + [\mathbf{B}^{(m)}] \{\mathbf{C}^{(m)}\} - \{\mathbf{P}^{(m)}\} \right) + \sum_{k=1}^K \{\delta \mathbf{C}^{(m)}\}^T (\{\mathbf{E}_k^{(m)}\} - [\mathbf{S}_k^{(m)}] \{\mathbf{C}^{(m)}\}) = 0$$

Sestavení vztahů pro celou konstrukci (globální analýza):

proces lokalizace matic a vektorů z LSS do GSS

$$\{\delta \mathbf{C}\}^T \left([\mathbf{A}] \left\{ \frac{d\mathbf{C}}{dt} \right\} + [\mathbf{B}] \{\mathbf{C}\} + \{\mathbf{E}\} - [\mathbf{S}] \{\mathbf{C}\} - \{\mathbf{P}\} \right) = 0$$

základní rovnice globální analýzy konstrukce FEM

$$[\mathbf{A}] \left\{ \frac{d\mathbf{C}}{dt} \right\} + ([\mathbf{B}] - [\mathbf{S}]) \{\mathbf{C}\} + \{\mathbf{E}\} - \{\mathbf{P}\} = \{0\}$$

Numerické řešení soustavy rovnic v čase:

interval $\Delta t = t_i - t_{i-1}$

za předpokladu znalosti řešení $\{C_{i-1}\}$ v čase t_{i-1} lze zapsat lineární aproximaci ve tvaru

$$\{C(t)\} = (1 - \tau) \{C_{i-1}\} + \tau \{C_i\} \quad \tau \in (0; 1)$$

pro $\tau = \frac{1}{\Delta t} (t_i - t_{i-1})$

$$\{C(t)\} = \frac{t_i - t}{\Delta t} \{C_{i-1}\} + \frac{t - t_{i-1}}{\Delta t} \{C_i\}$$

$$\left\{ \frac{dC}{dt} \right\} = \frac{1}{\Delta t} (\{C_i\} - \{C_{i-1}\})$$

analogicky lze aproximovat časově proměnné vektory $\{E\}$ a $\{P\}$

Proměna vektorových veličin v čase fyzikálně znamená změnu pouze okrajových podmínek pro výpočet pole a produkce veličiny uvnitř oblasti. Vlastnosti samotného tělesa, ve kterém transport probíhá, se v čase nemění.

C-N schema

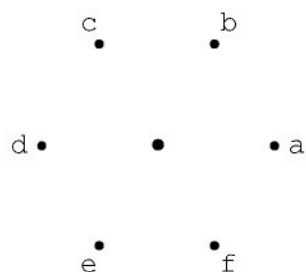
volba $\tau = \frac{1}{2}$

$$\left(\frac{1}{\Delta t} [A] + \frac{1}{2} ([B] + [S]) \right) \{C_i\} = \left(\frac{1}{\Delta t} [A] - \frac{1}{2} ([B] + [S]) \right) \{C_{i-1}\} + \frac{1}{2} (\{P_{i-1}\} + \{E_{i-1}\}) + \frac{1}{2} (\{P_i\} + \{E_i\})$$

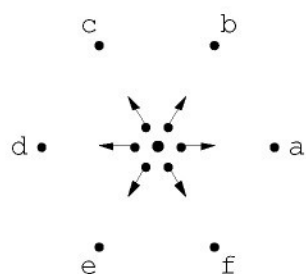
Příloha C. Implementace modelu plynu

Způsob možné algoritmizace mřížového plynového automatu (LGA)

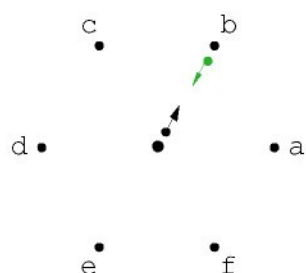
Každý uzel sítě vypadá spolu se svými šesti sousedy následovně



Může zde být částice pohybující se v každém ze šesti možných směrů z centrálního uzlu do uzlů označených "a" až "f". V každém směru se může pohybovat pouze jedna částice, takže tam je mezi nulou a šesti částicemi pohybujícími se z uzlu.

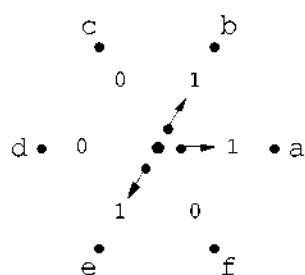


Ovšem sousedé jsou také uzly a jiné částice se mohou pohybovat směrem z nich.



Použitím šesti čísel, z nichž každé nabývá hodnoty 0 (neobsazeno) nebo 1 (obsazeno), lze popsat ve kterém směru se částice pohybuje.

Např. 010011 popisuje následující konfiguraci:

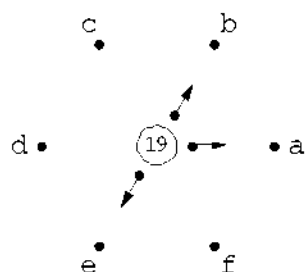


Čísla čteme z leva do prava, což odpovídá směru "f" až "a" (zpětné abecední uspořádání).

Těchto šest čísel může být reprezentováno jako šest bitů jednoho čísla zapsaného binárně.

Takové číslo potom nabývá hodnot mezi 0 a 63 ($63=2^{**6}-1$) a popisuje uzel kompletně.

Např. binární číslo 010011 je desítkově 19.



Tak víme, že potřebujeme číslo mezi 0 a 63 v každém uzlu, nebo jinými slovy každý uzel

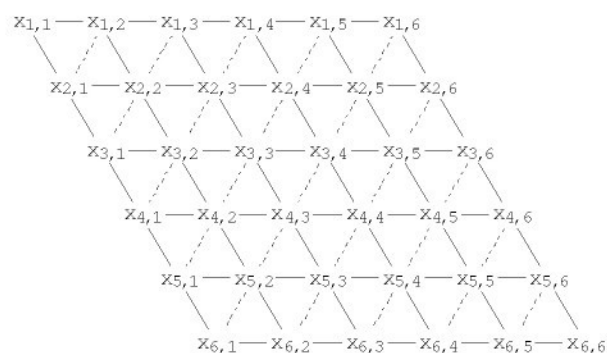
může nabývat 64 možných barev, případně odstínů šedi nebo velikostí bodu reprezentovaných v jednom barevném odstínu.

Celková mříž tvořená všemi uzly je potom dána maticí těchto čísel (multispin kódování)

$$\begin{pmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & x_{1,3} & x_{1,4} & x_{1,5} & x_{1,6} \\ x_{2,1} & x_{2,2} & x_{2,3} & x_{2,4} & x_{2,5} & x_{2,6} \\ x_{3,1} & x_{3,2} & x_{3,3} & x_{3,4} & x_{3,5} & x_{3,6} \\ x_{4,1} & x_{4,2} & x_{4,3} & x_{4,4} & x_{4,5} & x_{4,6} \\ x_{5,1} & x_{5,2} & x_{5,3} & x_{5,4} & x_{5,5} & x_{5,6} \\ x_{6,1} & x_{6,2} & x_{6,3} & x_{6,4} & x_{6,5} & x_{6,6} \end{pmatrix}$$

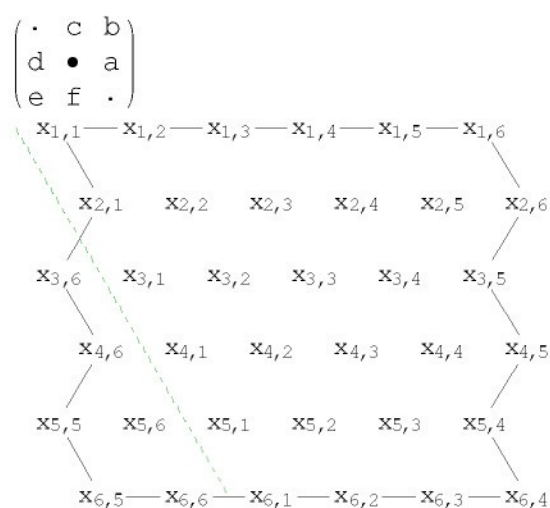
Pro realistickou simulaci by měla matice obsahovat nejméně 1000 řádků i sloupců, avšak počet řádků a sloupců se může lišit.

Prvky matice odpovídají následujícímu uspořádání



Plné linky odpovídají řádkům a sloupcům matice a čárkované pomáhají vykreslit vzor sítě.

Šest sousedů uzlu se tak nalézá v následujícím uspořádání (centrální uzel □)



Uzly nalevo od přerušované linky jsou otočeny okolo pro efektivní tvarovou reprezentaci, ale pod tím ležící data reprezentuje ta samá matice.

Nyní máme kompletní popis média v každém momentu.

Pravidlo LGA: jeden krok se skládá ze dvou částí (pohyb a kolize).

V jednom kroku se částice pohybují z jednoho uzlu do druhého, aby byly poté naráz vyhodnoceny jejich vzájemné interakce. V důsledku kolizí se částice pohybují různými směry. Podstatné je zda jsou vlákna mezi uzly obsazena částicemi či nikoliv, jinými slovy částice nemají svoji vlastní identifikaci.

Fáze pohybu sestává ze sběru odpovídajících hodnot ze sousedících uzlů. Kód pro pohyb částice vrací číslo reprezentující všechny částice přicházející do uzlu. V samotném centrálním uzlu je 0, protože částice se ze středu pohybují pryč a nuly pro dva maticové prvky, které nesousedí s centrálním uzlem.

Kolizní část pravidla jednoduše mění počet odpovídající přicházejícím částicím v jiný reprezentující odchozí částice, čímž to proběhne na každém jednotlivém uzlu samostatně.

Toto pravidlo má tři zajímavé vlastnosti. Za prvé, počet částic před kolizí a po ní je stejný (zachování hmoty). Za druhé, součet vektorů částic před kolizí a po ní je stejný (zachování momentu). Za třetí, pravidla mají tendenci způsobovat efekt změny směrů částic a dokonce tvořit náhodnost v malých měřících.

Definujeme funkci pro rotaci všech částic v uzlu po 60° .

Zde jsou pravidla pro interakce: $p[n]$ dává všechny případy odpovídající pro n částic. Konfigurace v těchto pravidlech byly nalezeny prostým výběrem možných stavů, ignorujíc shodné stavy nastávající v důsledku rotace. Většinou zde není možnost výběru při zápisu pravidel, protože podmínka zachování hmoty a momentu vymezuje co se stane.

Kompletní pravidlo, které mění matici sousedů v nový centrální uzel, provádí pohyb částice i její interakci. Konečnou matici obdržíme proběhnutím cyklu přes matici uzlů pro t kroků.

Další fyzikální efekty

Pevné objekty jako jsou stěny či překážky mohou být modelovány extra maticí, obsahující 0 (mezera) a 1 (zaplnění), stejného řádu jako matice média.

Interakce překážky a částice je zajišťována odrazem částice zpět směrem kterým se pohybovala před nárazem, tím získáme nulovou rychlost toku na hranici.

Implementace:

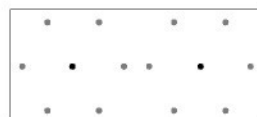
(1) před začátkem zajistíme, aby nebyly žádné částice média na uzlech reprezentujících překážku

(2) po jednom kroku, obnovíme médium jakoby bez překážek, ale potom změníme směr částic, které působí na uzly představující překážku, protože kolize s hranicemi zachovává počet částic, ale už ne jejich moment

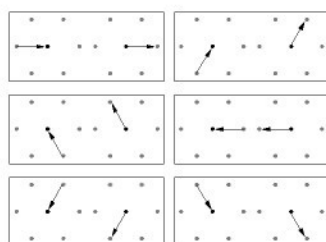
Obojího lze dosáhnout jednoduchou aritmetikou v uzlech a pravidlech pro odraz.

Tok média lze řídit kontinuálním vkládáním částic na jedné straně a odebráním částic na opačné straně. Začlenění vložených částic by nemělo ovlivnit makroskopické vlastnosti systému, zato mikroskopické procesy mohou vyvolat náhodné stavy lokální rovnováhy.

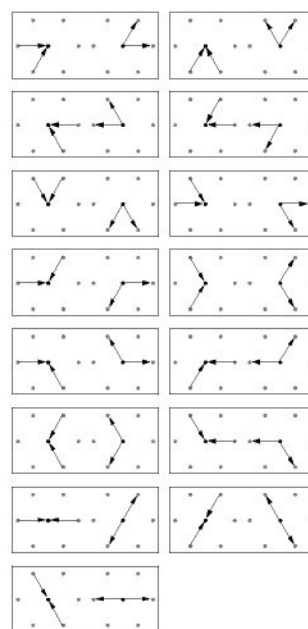
Všechny varianty kolizí částic pro daný model LGA :



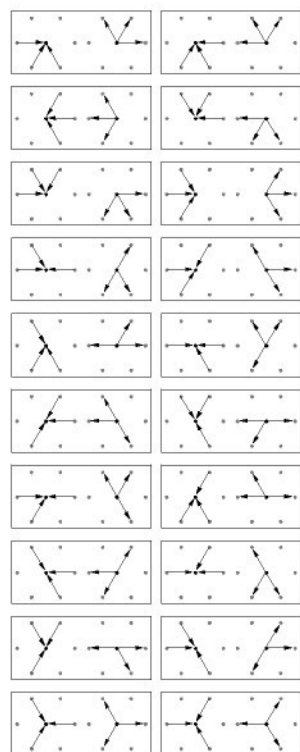
0 částic



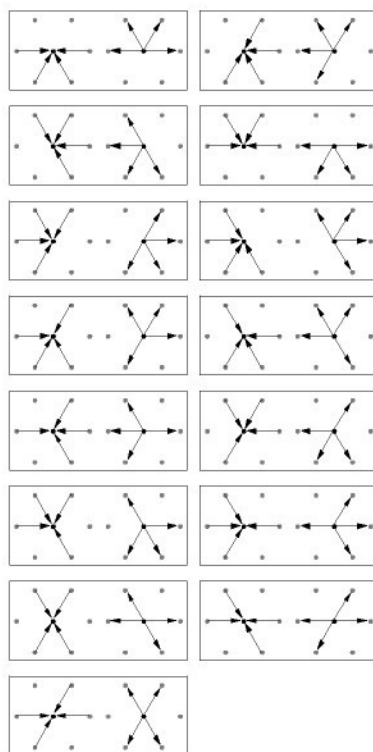
1 částice -
pouze udržuje daný směr



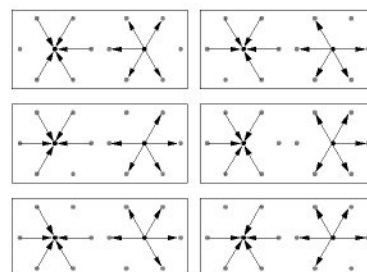
2 částice



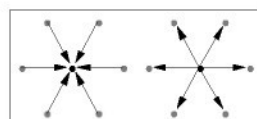
3 částice



4 částice



5 částic



6 částic

Příloha D. Demonstrace prototypu

Demonstrační program prototypovaný v programovacím prostředí Processing implementuje metodu mřížového plynového automatu pro simulaci transportních vlastností nanostruktur (FHP-1 model konvekce plynu) ke stažení na <http://aa.tul.cz/richard.charvat/lga.zip>

Řešení difuzní rovnice resp. rovnice vedení tepla pomocí FEM

Za předpokladu izotropie materiálů lze psát

$$a(\mathbf{x}, t) \frac{\partial C(\mathbf{x}, t)}{\partial t} - \nabla [b(\mathbf{x}, t) \nabla C(\mathbf{x}, t)] - p(\mathbf{x}, t) = 0$$

a, b .. zadané funkce

$\mathbf{x}$.. souřadnice bodu (E3)

t .. čas

∇ .. gradient

C .. hledané skalární pole

p .. produkce hledané veličiny

řešení se hledá na oblasti Ω s hranicí Γ , tj. na uzávěru oblasti $\Omega \cup \Gamma = \bar{\Omega}$
pro zadané počáteční a okrajové podmínky

Počáteční podmínka $t = t_0$

$$C(\mathbf{x}, t_0) = C_0(\mathbf{x})$$

Okrajové podmínky $t > t_0$

podstatné (stabilní) předepisují přímo hodnoty C na Γ

$$C(\mathbf{x}, t) = \bar{C}(\mathbf{x}, t) \mid \Gamma$$

přirozené (nestabilní) předepisují hodnoty derivací C na Γ

$$-b(\mathbf{x}, t) \frac{\partial C}{\partial \mathbf{n}} \mathbf{n} = \bar{q} \mid \Gamma$$

$$\bar{q} = -\beta (C_E - C) \mathbf{n} \mid \Gamma$$

$\bar{q}$.. předepsaná hodnota

C_E .. známá hodnota daného pole vně oblasti

β .. koeficient přestupu hledané veličiny mezní vrstvou

$\mathbf{n}$.. jednotkový vektor vnější normály

Plochy fyzikálních nespojitostí (materiálová rozhraní)

Při rozboru transportních jevů v tělesech narážíme v praxi na případy, kdy je těleso tvořeno více materiály, jež jsou navzájem v těsném kontaktu. Styk mezi materiály je tvořen plochami fyzikální nespojitosti, na nichž se mohou předepsat podmínky průběhu transportních procesů

rovnost hodnot pole

$$C \stackrel{L}{\rightarrow} (M) = C \stackrel{P}{\rightarrow} (M) : M \in \Gamma_{LP}$$

rovnost toků veličiny

$$-b_L(\Gamma_{LP}) \left. \frac{\partial C}{\partial n} \right| \stackrel{L}{\rightarrow} \Gamma_{LP} = -b_P(\Gamma_{LP}) \left. \frac{\partial C}{\partial n} \right| \stackrel{P}{\rightarrow} \Gamma_{LP}$$

Γ_{LP} .. plocha fyzikální nespojitosti

b_L, b_P .. vodivostní charakteristika materiálů L, P

Pro praktická zadání není řešení za podmínek v uzavřeném tvaru možné, proto je třeba tento problém řešit přibližně, užitím numerických metod.

Metoda vážených reziduí (WRM)

Jedná se o dobře algoritmizovatelnou metodu a na rozdíl od variačních metod u ní nemusí být známý příslušný funkcionál. Problematické je komplikovanější matematické zpracování a otázka konvergence řešení. Kromě toho je nutné zahrnout přirozené okrajové podmínky do formulace problému, zatímco u variačních metod jsou tyto podmínky implicitně součástí funkcionálu. Podstatné okrajové podmínky musejí být vždy splněny a priori, kdežto přirozené podmínky mohou být plněny pouze přibližně v rámci numerického řešení.

Podstata

Navržené přibližné řešení $C(\mathbf{r}, t)$ splňuje přesně podstatné okrajové podmínky, počáteční podmínku a rovněž má splňovat podmínky dané rovnicemi, takže po dosazení vznikne v důsledku přibližnosti řešení určité reziduum r , jež vyjadřuje míru nesplnění těchto podmínek

$$a \frac{\partial C}{\partial t} - \nabla \cdot (b \nabla C) - p = r_\Omega \quad | \quad \Omega$$

$$b \frac{\partial C}{\partial n} + q = r_\Gamma \quad | \quad \Gamma$$

Reziduum má jak geometrický, tak časový rozměr. Pro numerické řešení oddělíme řešení v prostoru od řešení v čase. Při dlouhých časových intervalech totiž může dojít k nárůstu počtu neznámých ve vzniklých soustavách lineárních algebraických rovnic, proto se řeší při pevném čase t , pouze s ohledem na geometrické proměnné. Výsledkem řešení je soustava obyčejných lineárních diferenciálních rovnic v časové proměnné, která už lze řešit běžnými metodami numerické matematiky.

Základní myšlenka spočívá v požadavku, aby součet reziduí na uzávěru oblasti byl nulový. Protože je nutné vyloučit případ prosté algebraické kompenzace reziduí, ovlivňujeme způsob sčítání reziduí na uzávěru oblasti pomocí speciálních váhových funkcí ω

Základní rovnice metody vážených reziduí (při vyloučení času)

$$\int_{\Omega} \mathbf{r}_{\Omega} \omega \, d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{r}_{\Gamma} \omega \, d\Gamma = 0$$

Formulace WRM na plochách fyzikální nespojitosti:

Pro kompozitní materiály je nutné uведенé doplnit ještě o další podmínky

$\Gamma_{\mathbf{r}}$.. plocha fyzikální nespojitosti

$\mathbf{r}$.. plocha nespojitosti

+, - .. příslušné hodnoty z obou stran

$$\mathbf{M}_{\mathbf{r}} \in \Gamma_{\mathbf{r}} \wedge \forall \mathbf{t} : \mathbf{C}(\mathbf{M}_{\mathbf{r}}) \mid \bar{\Gamma}_{\mathbf{r}} = \mathbf{C}(\mathbf{M}_{\mathbf{r}}) \mid \hat{\Gamma}_{\mathbf{r}}$$

$$\mathbf{M}_{\mathbf{r}} \in \Gamma_{\mathbf{r}} \wedge \forall \mathbf{t} : -\bar{\mathbf{b}}_{\mathbf{r}} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{n}} \mid \bar{\Gamma}_{\mathbf{r}} = -\hat{\mathbf{b}}_{\mathbf{r}} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{n}} \mid \hat{\Gamma}_{\mathbf{r}}$$

Pokud považujeme za primární neznámé pouze hodnoty samotného pole $\mathbf{C}$, odpadá druhá podmínka, avšak potřebujeme-li zajistit i rovnost toků na plochách fyzikální nespojitosti, pak ještě k rovnicím přistupují podmínky

$$\begin{aligned} \mathbf{C}(\mathbf{M}_{\mathbf{r}}) \mid \bar{\Gamma}_{\mathbf{r}} - \mathbf{C}(\mathbf{M}_{\mathbf{r}}) \mid \hat{\Gamma}_{\mathbf{r}} &= \hat{\mathbf{r}} \\ -\bar{\mathbf{b}}_{\mathbf{r}} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{n}} \mid \bar{\Gamma}_{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{b}}_{\mathbf{r}} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{n}} \mid \hat{\Gamma}_{\mathbf{r}} &= \tilde{\mathbf{r}} \end{aligned}$$

a jejich zapsáním pro všechny plochy nespojitosti přejde na zobecněný tvar

$$\int_{\Omega} \mathbf{r}_{\Omega} \omega \, d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{r}_{\Gamma} \omega \, d\Gamma + \sum_{\mathbf{r}=1}^{\mathbf{R}} \left(\int_{\Gamma_{\mathbf{r}}} (\hat{\mathbf{r}} + \tilde{\mathbf{r}}) \omega \, d\Gamma_{\mathbf{r}} \right) = 0$$

Galerkinova metoda v konceptu WRM

Základní myšlenkou Galerkinovy metody je zvolit za váhovou funkci variaci hledaného skalárního pole $\omega = \delta C$. Pokud C_1 je skalární pole splňující na uzavěru oblasti předepsané podstatné okrajové podmínky a C je hledané skalární pole, pak variace skalárního pole je dána vztahem

$$\delta C = C_1 - C$$

Je zřejmé, že i variace pole plní předepsané podstatné okrajové podmínky a kromě toho platí, že operace derivace a variace jsou záměnné

$$(\delta C)' = C_1' - C' = \delta C'$$

Vzhledem k oddělení geometrického a časového řešení, bude zvolená variace pole isochronní, tj. pouze v souřadnicích, nikoliv v čase.

Galerkinova formulace WRM (základní rovnice pro formulaci řešení pomocí FEM):

$$\int_{\Omega} \left[\mathbf{a} \frac{\partial C}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{b} \nabla C) - \mathbf{p} \right] \delta C d\Omega + \int_{\Gamma} \left[\mathbf{b} \frac{\partial C}{\partial n} - \beta (C_E - C) \right] \delta C d\Gamma = 0$$

za požadavku hladkosti a spojitosti pro funkce $\mathbf{f}, \mathbf{g}$ lze rovnici za použití Greenovy věty

$$\int_{\Omega} (\mathbf{f} \cdot \Delta \mathbf{g} + \nabla \mathbf{f} \cdot \nabla \mathbf{g}) d\Omega = \int_{\Gamma} \mathbf{f} \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial n} d\Gamma$$

upravit na tvar

$$-\int_{\Omega} \nabla \cdot (\mathbf{b} \nabla C) \delta C d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{b} \nabla C \cdot \nabla \delta C d\Omega - \int_{\Gamma} \mathbf{b} \frac{\partial C}{\partial n} \delta C d\Gamma$$

Tento tvar obsahuje pouze jednoduché působení operátoru nabla, tudíž jsou potřebné aproximační funkce se spojitou první derivací

$$\int_{\Omega} \left(\mathbf{a} \frac{\partial C}{\partial t} \delta C + \mathbf{b} \nabla C \cdot \nabla \delta C - \mathbf{p} \delta C \right) d\Omega - \int_{\Gamma} \beta (C_E - C) \delta C d\Gamma = 0$$

Metoda konečných prvků (FEM)

Klasické řešení Galerkinovou metodou vyžaduje volit aproximační funkci $C(\vec{x}, t)$ tak, aby vyhovovala na uzavěru oblasti $\bar{\Omega}$ podstatným okrajovým podmínkám. Takové funkce se často vůbec nedají najít. Proto byla vyvinuta numerická varianta této metody, metoda konečných prvků, která využívá aditivity integrálů v tom smyslu, že se nesnaží nalézt aproximační funkci na celé oblasti Ω resp. Γ (splňující přirozené okrajové podmínky), ale na disjunktních podoblastech

$$\bigcup_i \Omega_i = \Omega \text{ resp. } \bigcup_k \Gamma_k = \Gamma$$

$$\sum_{i=1}^n \left(\int_{\Omega_i} \left[a \frac{\partial C}{\partial t} \delta C + b \nabla C \nabla \delta C - p \delta C \right] d\Omega_i \right) + \sum_{k=1}^r \left(\int_{\Gamma_k} \beta (C_E - C) \delta C d\Gamma_k \right) = 0$$

Lze očekávat, že při dostatečně malých rozměrech konečných prvků budou s dostatečnou přesností skutečný průběh skalárního pole C vystihovat i velmi jednoduché aproximační funkce.

Aproximační funkce na prvku:

Základní myšlenka aproximace přesného průběhu C v rámci jednoho prvku (např. m -tého) je vyjádřit $C^{(m)}$ jako lineární kombinaci aproximačních funkcí φ_i ve tvaru

$$C^{(m)}(\vec{x}, t) = \lambda_i(t) \varphi_i(\vec{x}) \quad i=1, \dots, s$$

který separuje časovou proměnnou do součinitelů lineární kombinace λ_i , jež jsou pro pevné t konstantami.

Aproximační funkce nemohou být voleny libovolně, ale musí splňovat následující kritéria, aby byla zaručena konvergence přibližného řešení k řešení přesnému

úplnost soustavy aproximačních funkcí na prvku (tento požadavek je odrazem vlastností báze prostoru funkcí). Je třeba volit takové funkce φ_i , aby jimi tvořená soustava $\beta(\varphi_i)$ bylaází prostoru funkcí ve kterém hledáme řešení. Pokud φ_i opravdu bázi tvoří, pak aproximace zaručuje konvergenci metody k přesnému řešení (funkce φ_i jsou lineárně nezávislé)

spojitost pole na hranicích ve styku prvků se zajišťuje užitím aproximačních funkcí, tzv. funkce tvaru (jelikož hledaná skalární pole jsou svojí fyzikální povahou spojitá)

- volba stejné báze aproximačních funkcí na všech konečných prvcích
- hodnota aproximovaného pole je vyjádřena jako funkce uzlových hodnot prvku (uzlová hodnota v místě styku konečných prvků je předepsána stejná pro všechny takové prvky)

Funkce tvaru na konečných prvcích:

Aproximační funkce na m-tém konečném prvku je vyjádřena pro pevné t ve tvaru lineární kombinace

$$c^{(m)}(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^s \lambda_i(t) \varphi_i(\mathbf{x}) = \{\lambda^{(m)}\}^T \{\varphi^{(m)}\}$$

Volíme konečný prvek libovolného tvaru, který má s uzlů a dále volíme bázi β prostoru funkcí, která je úplná, čímž jsme získali strukturu $\{\varphi^{(m)}\}$ a volíme prvních s členů báze

$$\{\varphi^{(m)}\}^T = \{ \dots \}$$

Úkolem je zajistit spojitost aproximace na celé oblasti, tj. vyjádřit aproximaci bází pomocí uzlových hodnot

$$\{\lambda^{(m)}\} = [S^{(m)}]^{-1} \{C^{(m)}\} \text{ .. součinitelé}$$

$[S^{(m)}]$.. tvořeno bázovými funkcemi s dosazenými souřadnicemi uzlových bodů

$\{C^{(m)}\}$.. uzlové hodnoty hledaného pole (koeficienty lineární kombinace) - časový rozměr

$$c^{(m)}(\mathbf{x}, t) = \{\varphi^{(m)}\}^T [S^{(m)}]^{-1} \{C^{(m)}\} = \{N^{(m)}\}^T \{C^{(m)}\}$$

$\{N^{(m)}\}$.. funkce tvaru - geometrický rozměr aproximace

Speciální vlastností funkce tvaru je, že má hodnotu v uzlu 1 a v ostatních uzlech je 0

Sestavení základních vztahů FEM (lokální analýza):

Variace hledaného pole na m-tém prvku

$$\delta \mathbf{C}^{(m)}(\mathbf{x}, t) = \{\mathbf{N}^{(m)}\}^T \{\delta \mathbf{C}^{(m)}\}$$

$\{\delta \mathbf{C}^{(m)}\}$.. uzlové hodnoty, které nepodléhají integraci

lokální matice kapacity, a=konst.

$$\int_{\Omega_m} \mathbf{a} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t} \delta \mathbf{C} d\Omega_m \Rightarrow [\mathbf{A}^{(m)}] = \mathbf{a}^{(m)} \int_{\Omega_m} \{\mathbf{N}^{(m)}\} \{\mathbf{N}^{(m)}\}^T d\Omega_m$$

lokální matice vodivosti, b=konst.

$$\int_{\Omega_m} \mathbf{b} \nabla \mathbf{C} \nabla \delta \mathbf{C} d\Omega_m \Rightarrow [\mathbf{B}^{(m)}] = \mathbf{b}^{(m)} \int_{\Omega_m} [\partial \mathbf{N}^{(m)}]^T [\partial \mathbf{N}^{(m)}] d\Omega_m$$

lokální vektor produkce, p=konst.

$$\int_{\Omega_m} \mathbf{p} \delta \mathbf{C} d\Omega_m \Rightarrow \{\mathbf{P}^{(m)}\} = \mathbf{p}^{(m)} \int_{\Omega_m} \{\mathbf{N}^{(m)}\} d\Omega_m$$

$$\sum_{m=1}^n \left(\int_{\Omega_m} [\mathbf{a} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t} \delta \mathbf{C} + \mathbf{b} \nabla \mathbf{C} \nabla \delta \mathbf{C} - \mathbf{p} \delta \mathbf{C}] d\Omega_m \right) = \sum_{m=1}^n \{\delta \mathbf{C}^{(m)}\}^T \left([\mathbf{A}^{(m)}] \left\{ \frac{d\mathbf{C}^{(m)}}{dt} \right\} + [\mathbf{B}^{(m)}] \{\mathbf{C}^{(m)}\} - \{\mathbf{P}^{(m)}\} \right)$$

lokální matice přestupu na hranici, β =konst.

$$\int_{\Gamma_k} \beta \mathbf{C} \delta \mathbf{C} d\Gamma_k \Rightarrow [\mathbf{S}_k^{(m)}] = \beta^{(m)} \int_{\Gamma_k} \{\mathbf{N}^{(m)}(\Gamma_k)\} \{\mathbf{N}^{(m)}(\Gamma_k)\}^T d\Gamma_k$$

lokální vektor vnějších hodnot pole, β =konst.

$$\int_{\Gamma_k} \beta \mathbf{C}_E \delta \mathbf{C} d\Gamma_k \Rightarrow \{\mathbf{E}_k^{(m)}\} = [\mathbf{B}_k^{(m)}] \{\mathbf{C}_{Ek}^{(m)}\}$$

$$\sum_{k=1}^K \left(\int_{\Gamma_k} \beta (\mathbf{C}_E - \mathbf{C}) \delta \mathbf{C} d\Gamma_k \right) = \sum_{k=1}^K \{\delta \mathbf{C}^{(m)}\}^T (\{\mathbf{E}_k^{(m)}\} - [\mathbf{S}_k^{(m)}] \{\mathbf{C}^{(m)}\})$$

$$\sum_{m=1}^n \{\delta \mathbf{C}^{(m)}\}^T \left([\mathbf{A}^{(m)}] \left\{ \frac{d\mathbf{C}^{(m)}}{dt} \right\} + [\mathbf{B}^{(m)}] \{\mathbf{C}^{(m)}\} - \{\mathbf{P}^{(m)}\} \right) + \sum_{k=1}^K \{\delta \mathbf{C}^{(m)}\}^T (\{\mathbf{E}_k^{(m)}\} - [\mathbf{S}_k^{(m)}] \{\mathbf{C}^{(m)}\}) = 0$$

Sestavení vztahů pro celou konstrukci (globální analýza):

proces lokalizace matic a vektorů z LSS do GSS

$$\{\delta \mathbf{C}\}^T \left([\mathbf{A}] \left\{ \frac{d\mathbf{C}}{dt} \right\} + [\mathbf{B}] \{\mathbf{C}\} + \{\mathbf{E}\} - [\mathbf{S}] \{\mathbf{C}\} - \{\mathbf{P}\} \right) = 0$$

základní rovnice globální analýzy konstrukce FEM

$$[\mathbf{A}] \left\{ \frac{d\mathbf{C}}{dt} \right\} + ([\mathbf{B}] - [\mathbf{S}]) \{\mathbf{C}\} + \{\mathbf{E}\} - \{\mathbf{P}\} = \{\mathbf{0}\}$$

Numerické řešení soustavy rovnic v čase:

interval $\Delta t = t_i - t_{i-1}$

za předpokladu znalosti řešení $\{\mathbf{C}_{i-1}\}$ v čase t_{i-1} lze zapsat lineární aproximaci ve tvaru

$$\{\mathbf{C}(t)\} = (1 - \tau) \{\mathbf{C}_{i-1}\} + \tau \{\mathbf{C}_i\} \quad \tau \in \langle 0; 1 \rangle$$

pro $\tau = \frac{1}{\Delta t} (t_i - t_{i-1})$

$$\{\mathbf{C}(t)\} = \frac{t_i - t}{\Delta t} \{\mathbf{C}_{i-1}\} + \frac{t - t_{i-1}}{\Delta t} \{\mathbf{C}_i\}$$

$$\left\{ \frac{d\mathbf{C}}{dt} \right\} = \frac{1}{\Delta t} (\{\mathbf{C}_i\} - \{\mathbf{C}_{i-1}\})$$

analogicky lze aproximovat časově proměnné vektory $\{\mathbf{E}\}$ a $\{\mathbf{P}\}$

Proměna vektorových veličin v čase fyzikálně znamená změnu pouze okrajových podmínek pro výpočet pole a produkce veličiny uvnitř oblasti. Vlastnosti samotného tělesa, ve kterém transport probíhá, se v čase nemění.

C-N schema:

volba $\tau = \frac{1}{2}$

$$\left(\frac{1}{\Delta t} [\mathbf{A}] + \frac{1}{2} ([\mathbf{B}] + [\mathbf{S}]) \right) \{\mathbf{C}_i\} = \left(\frac{1}{\Delta t} [\mathbf{A}] - \frac{1}{2} ([\mathbf{B}] + [\mathbf{S}]) \right) \{\mathbf{C}_{i-1}\} + \frac{1}{2} (\{\mathbf{P}_{i-1}\} + \{\mathbf{E}_{i-1}\}) + \frac{1}{2} (\{\mathbf{P}_i\} + \{\mathbf{E}_i\})$$

Vyhodnocení výpočetních systémů

Úvod

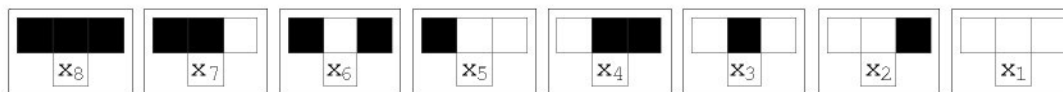
Často bývá zmiňováno, že Godelův teorém neúplnosti, publikovaný v roce 1931, se stal nejzajímavějším matematickým výsledkem 20. století. Klíčová myšlenka tohoto teorému byla, zda je možné srovnat čísla s podstatou jakéhokoliv jazyka, aby to vedlo k užití jazyka čísel popsat věci, které se nezadají mít něco společného s čísly.

Godelův teorém neúplnosti. Jakýkoliv systém pravidel, který deklaruje axiomata je neúplný ve smyslu definice aritmetiky, kterou axiomatický systém sám o sobě nemůže prokázat svými vlastními prostředky.

Vyhodnocení základních buněčných automatů

V kontextu NKS se obvykle zajímáme o vyhodnocení výpočetních systémů. Nejzřejmějším příkladem je vyhodnocení buněčného automatu.

Předpokládejme základní buněčný automat. V takovém automatu má každá buňka přiřazenu jednu ze dvou barev a barva každé buňky v následujícím kroku výpočtu závisí na vlastní barvě buňky a barvě jejích nejbližších sousedů. Tím pádem je zde 8 dvouhodnotových prvků " x_1 ", " x_2 ", ..., " x_8 ", které musí být popsány k určení pravidla pro základní buněčný automat, to znamená, že je zde 8 možných kombinací barvy buňky a jejích nejbližších sousedů a pro každou z těchto kombinací musíme určit barvu x_i buňky v následujícím kroku výpočtu.

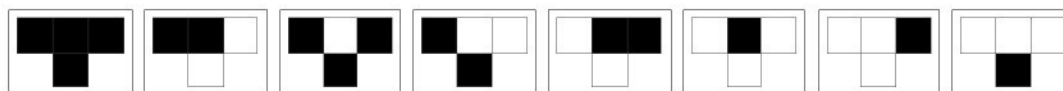


Jestliže přiřadíme například bílé barvě hodnotu 0 a černé 1, potom seznam hodnot

$\{x_8, x_7, x_6, x_5, x_4, x_3, x_2, x_1\}$ může být popsán jako dvojkový zápis čísla.

Takže přiřadíme číslo $n = x_8 2^7 + x_7 2^6 + x_6 2^5 + x_5 2^4 + x_4 2^3 + x_3 2^2 + x_2 2^1 + x_1 2^0$ odpovídajícímu buněčnému automatu. Potom je zde 256 osmimístných binárních čísel a každé z nich odpovídá právě jednomu základnímu buněčnému automatu popsanému touto formulací, z čehož lze usuzovat, že máme 256 základních buněčných automatů.

Například číslo 177 reprezentují číslice $\{1, 0, 1, 1, 0, 0, 0, 1\}$ binárně, tudíž pravidlo pro základní buněčný automat 177 je následující



NKS náhled a fyzika

Jednoduché programy mohou dělat komplikované věci

Tradiční fyzika je založena na PDR a spojitých systémech. NKS ukazuje, že jednoduché diskrétní systémy mohou činit totéž.

Skutečná náhodnost

pomáhá diskrétním systémům chovat se spojitě v širším měřítku.

Výpočetní nezvratnost

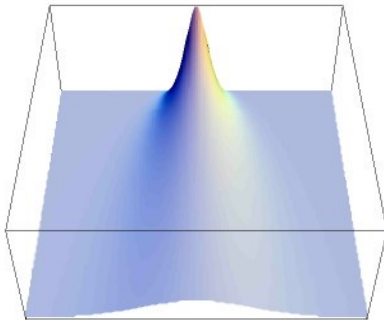
dává omezení ve která věříme a návody jak k věcem přistupovat. V mnoha případech pouze sledujeme vývoj systému, abychom zjistili co nastane.

Vyčerpávající vyhledávací pravidla

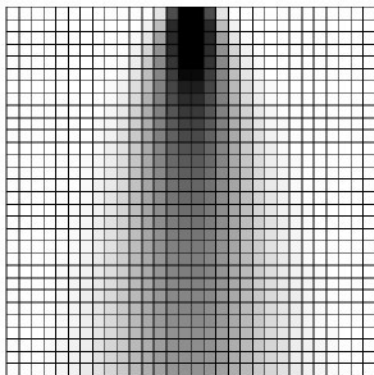
v jednoduchém rámci můžeme použít vyčerpávající hledání skrze všechna možná pravidla bez předchozího zadání co vlastně máme hledat (musí být zvolen odpovídající rámec)

NKS se zabývá jednoduchými programy a klíčovým pochopením je že jednoduchá pravidla mohou tvořit komplikované chování.

Difuzní rovnice $\partial_t f(\mathbf{x}, t) = \partial_{xx} f(\mathbf{x}, t)$ popisuje jak se $f(x, t)$ vyvíjí z počáteční podmínky $f(x, 0)$



Jak vypočítat, které funkce vyhovují rovnici? Jsou různé způsoby, ale neužívanější a zároveň nejjednodušší je diskretizace x a t směřů do buněk o velikostech Δx a Δt – tento tvar už může řešit počítač. Takto vypadá řešení znázorněné na síti:



Podobné jako buněčný automat: hodnota buňky v následujícím kroku závisí na hodnotě buňky v předešlém kroku a hodnotě jejích dvou sousedů. Jedná se zde o spojitý buněčný automat.

Buněčný automat je dokonce ještě jednodušší: $f(x,t)$ je dovoleno nabývat pouze několik málo hodnot (jako 0 nebo 1), a Δt spolu s Δx jsou fixní kvantify kterými se nezabýváme.

Počínaje jednoduchou rovnicí můžeme diskretizovat cokoli si zvolíme (prostor, čas, funkční hodnoty) a skončíme jednoduchou reprezentací. Tak se často vyhodnocují rovnice a podobně se chová i jednoduchý program.

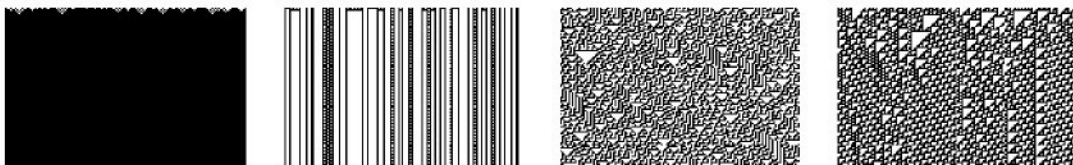
Chování jednoduchých programů (jejich výhodou je, že je zde vše diskrétní z podstaty věci)

- (1) Jednoduše spustitelné na počítači – nejsou potřeba žádné aproximace!
- (2) pouze konečný počet programů daného typu - lze je všechny vyzkoušet!

Příklady s jednoduchými počátečními podmínkami:



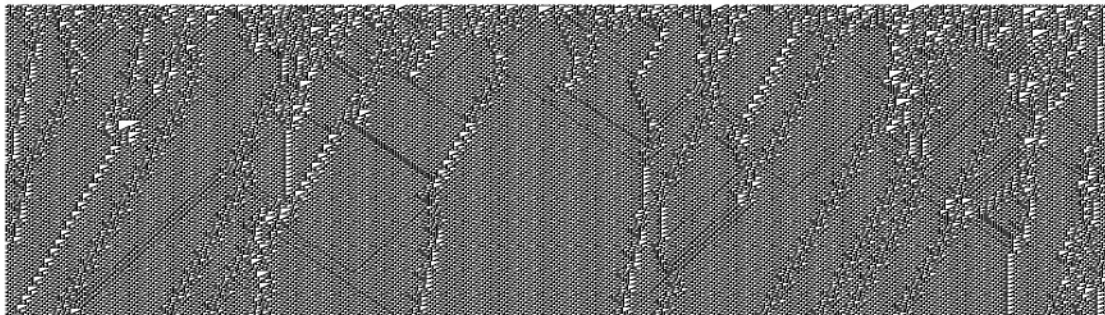
Příklady s náhodnými počátečními podmínkami:



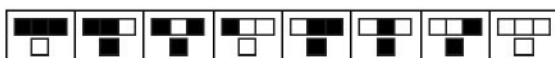
Systémy mohou být často klasifikovány jako **repetitivní**, **větvící se**, nebo **náhodné**.

NKS identifikuje rovněž další třídu chování: **komplexní (třída 4)**:

Jedná se zde o směs uspořádání a náhodnosti, typicky s interreagujícími strukturami:



A to vše vychází z jednoduchého pravidla:



Proč se zabývat jednoduchými programy?

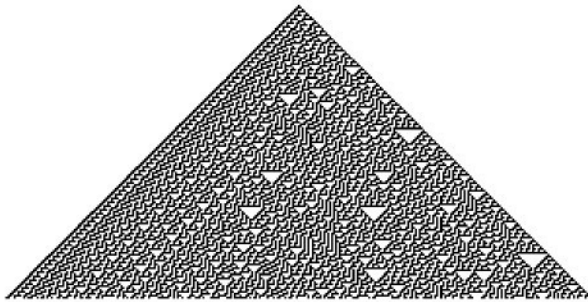
- (1) jejich komplexnost je udivující
- (2) porozumění jejich chování může pomoci pochopit podstatu přírodních jevů
- (3) mohou být použitelnou cestou dosahující různé cíle (v inženýrství a též umění).

Odlišujeme dva přístupy k jejich studiu:

- (1) pro jejich vlastní původ, kvůli porozumění jejich chování - základní výzkum
- (2) pro modelování přírodních jevů – aplikovaný výzkum

Skutečná náhodnost

pravidlo 30 začíná z jediné černé buňky:



Odkud se tato náhodnost bere a jak souvisí s náhodností pozorovanou v přírodě?

Některé jiné přístupy k vytváření náhodně vypadajícího chování:
v počátečních podmínkách s explicitními náhodnými vstupy
v počátečních podmínkách se vstupy reálných čísel
vlození náhodnosti v každém kroku

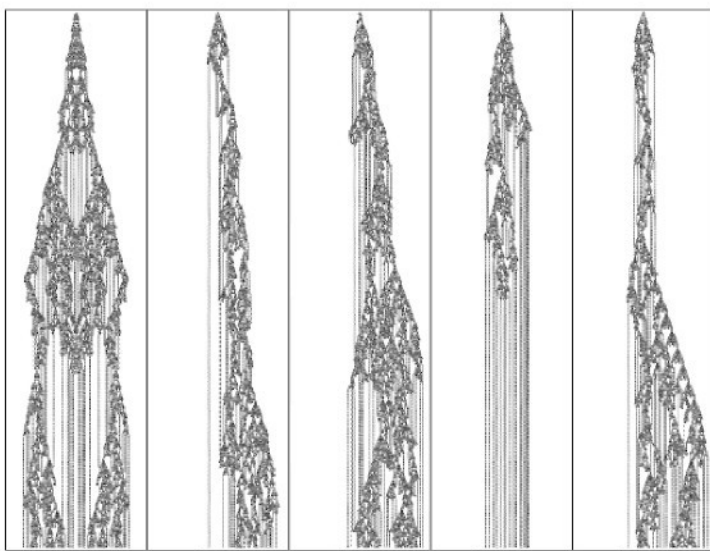
NKS přístup upřednostňuje modelování náhodně vypadajícího chování jako skutečné části deterministického chování jednoduchého systému.

Výpočetní nezvratnost

Kód 1599 (3-barevný totalistní) z jedné šedé buňky:



Lze nalézt způsob, jak předpovídat chování tohoto systému užitím zkratky?



Ve fyzice máme řadu zákonů se známými zkratkami, ale pro mnoho z těchto jednoduchých programů se zdá nepředstavitelné nalézt odpovídající zkratky.

Princip výpočetní nezvratnosti:

pro většinu systémů je problematické nalézt odpovídající zkratky toho co dělají.

Emulace a univerzalita

Ve skutečnosti lze počítat jakoukoliv výpočetní funkci s použitím buněčného automatu.

Je třeba:

- vybrat vhodné pravidlo
- nalézt odpovídající rámec
- volit korektní vstup

Dokonce lze počítat jakoukoliv výpočetní funkci užitím univerzálního pravidla 110.

Mnoho těchto závěrů plyne z toho, že

- digitální technologie může dělat to co analogová neumí
- nano-počítače mohou dělat to co počítače neumí
- komplexnost v přírodě může být založena na jednoduchých věcech

Princip výpočetní rovnosti

PCE = " téměř všechny procesy, které nejsou obvykle jednoduché mohou být nazírány jako výpočty odpovídající sofistikace "

nebo přesněji:

obnovovací procedura, která pokaždé dává jednoduché výsledky, může být použita k napodobení jakéhokoliv výpočtu skrze vhodný výběr počátečních podmínek.

NKS vyvozuje některé velmi silné závěry z tohoto principu:

- téměř každá věc má výpočetní složitost srovnatelnou s lidskou komplexností
- téměř každý axiomatický systém kóduje chování jakéhokoliv systému

NKS nabízí cestu výzkumu odlišnou od tradiční vědy.

Typický experiment v tradičním pojetí:

- 1) rozhodnout se jakou vlastnost systému studovat
- 2) vybudovat aparát s cílem studia v mysli
- 3) sebrat data
- 4) analyzovat data (statistické vyhodnocení)
- 5) učinit závěry, vypracovat intuice

Experiment v pojetí NKS:

- 1) vykonání mnoha jednoduchých vizuálních experimentů
- 2) vytříbit výsledky, vizuálně nebo algoritmicky
- 3) studium zajímavých rysů více uzavřeně nebo kvantitativně
- 4) analýza dat (výsledek je přesný)
- 5) učinit závěry, vypracovat intuice

Doporučení pro NKS výzkum:

- dělat základní experimenty: vzít jednoduchý systém a studovat jeho chování v detailu.
- přemýšlet o základních náhledech
 - v jakém jsou vztahu k různým přírodním fenoménům?
 - jak mohou pracovat pro jiné typy jednoduchých programů?

NKS a fyzika

V tradiční fyzice jsou většinovým nástrojem pro popis přírody parciální diferenciální rovnice (PDE).

Difuzní rovnice/rovnice vedení tepla: $\partial_t f(x, t) = C \partial_{xx} f(x, t)$

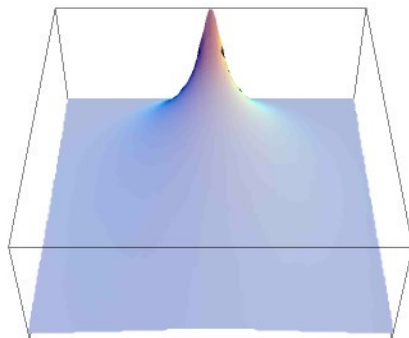
NKS v kontrastu užívá jednoduché programy. Jaký je rozdíl?

PDE je také jistý typ jednoduchého programu, jen s odejmutou většinou jednoduchosti.

Podívejme se, jak je PDE úzce svázána s CA.

PDE jako CA

Většinu PDE nelze řešit analyticky, takže používáme různé numerické techniky představující většinu času stráveného při jejich řešení. Například difuzní rovnice:



Nejjednodušší způsob řešení takové rovnice je užití diferenční metody, kde aproximujeme derivace použitím rozvoje funkcí v Taylorovu řadu:

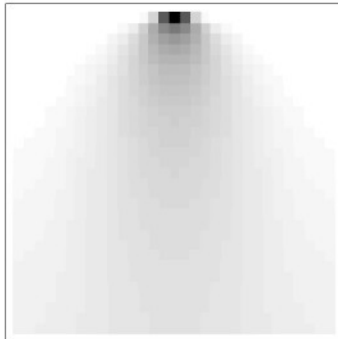
$$\partial_t f(x, t) \approx \frac{1}{\Delta t} (f(x, t + \Delta t) - f(x, t))$$

$$\partial_{xx} f(x, t) \approx \frac{1}{\Delta x^2} (f(x + \Delta x, t) + f(x - \Delta x, t) - 2f(x, t))$$

Nyní rozdělíme x - t prostor do buněk o velikosti $\Delta x \times \Delta t$. PDE se změní na tvar:

$$f(x, t + \Delta t) \approx \left(1 - 2\frac{\Delta t}{\Delta x^2}\right) f(x, t) + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} f(x + \Delta x, t) + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} f(x - \Delta x, t)$$

Hodnota buňky v příštím kroku závisí na hodnotě buňky v předchozím kroku plus hodnotě jejích dvou sousedů, což se shoduje s předpisem pravidla pro buněčný automat, takže lze řešit tuto PDE užitím CA příkazu $\mu = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$.



CA je jednodušší v tom, že $f(x, t)$ nabývá pouze hodnot 0 či 1, Δt a Δx jsou fixní kvantity, kterými se nemusíme zabývat.

Začneme-li jednoduchou PDE a diskretizujeme-li cokoliv (prostor, čas, funkční hodnoty), skončíme u něčeho relativně jednoduchého a to je jednoduchý program.

(1) CA je více obecný, než PDE kde nová buňka může záviset na 3 starých buňkách ve všech možných směrech (což omezuje hodnotu buňky na požadovanou hodnotu).

(2) po algoritimizaci do tvaru jednoduchého programu, lze vyhodnocovat a provádět vyčerpávající hledání skrze všechny programy jistého typu (jako u elementárního buněčného automatu).

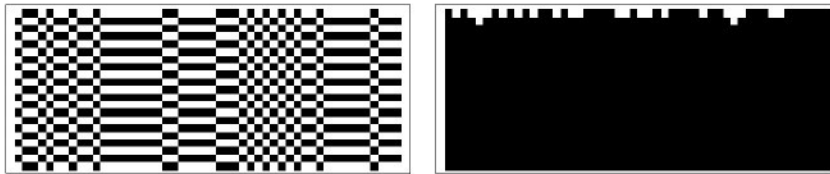
Reverzibilita buněčných automatů

Většina fyzikálních zákonů je zvrtná vzhledem k času. Systém lze spustit stejně dopředně nebo pozpátku z počáteční či konečné podmínky díky časově zvrtné symetrii.

Avšak naše každodenní zkušenost je jiná, snadno poznáme, zda se film pohybuje dopředu či nazpátek. Můžeme pozorovat podobné následky u jednoduchých programů?

Co znamená pro jednoduchý program, jako je buněčný automat, být zvrtný? Počínaje jakoukoliv počáteční podmínkou po vývoji několika kroků bychom měli být schopni použít pravidlo pro vystopování cesty zpět k začátku.

To platí např. pro základní pravidlo 51, ale není to možné u pravidla 254:

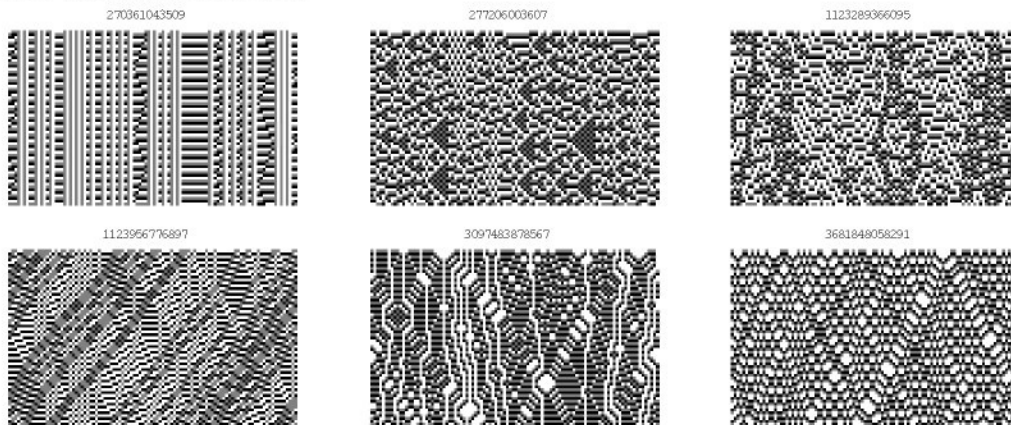


Zvratné buněčné automaty

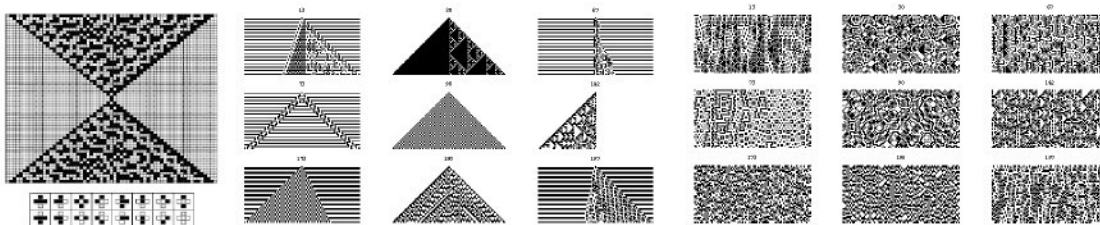
Pouze 6 ze 256 základních buněčných automatů je zvratných:



Pokud rozšíříme BA na 3-barevný, rozsahu-1, pak zde najdeme 1800 zvratných, z nichž některé vypadají komplexně:



Pro vhodnost, vybudujme typ CA který je jednoznačně zvratný. Lze to provést vzetím základního CA a přidáním závislosti na 4-té buňce, střední buňce v předešlém kroku. Pak je pravidlo explicitně reversibilní:

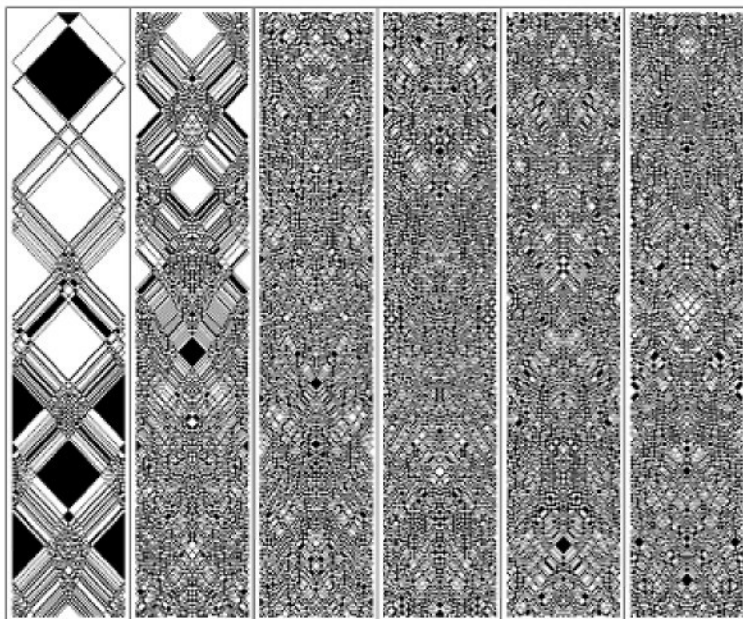


Druhý zákon termodynamiky

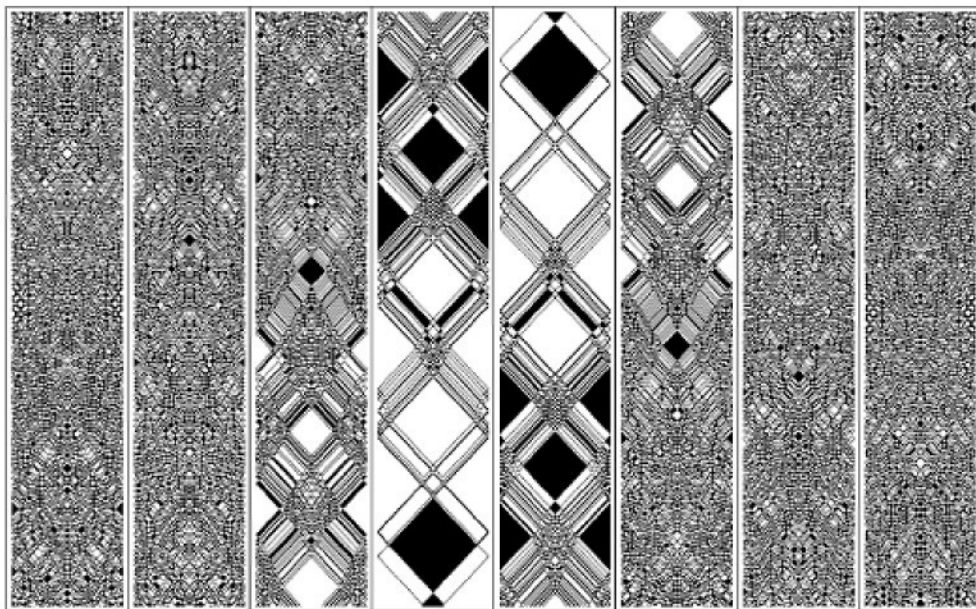
Jak může pod tím ležící zvratné pravidlo vést k nezvratnému vývoji, který často pozorujeme v přírodě?

Představme si například plyn v malé nádobě, kterou otevřeme v místnosti. Plyn se rozšíří náhodně po celé místnosti, namísto aby se někde koncentroval. Odkud taková náhodnost pochází?

Zvratný buněčný automat 122R vykazuje podobné chování:

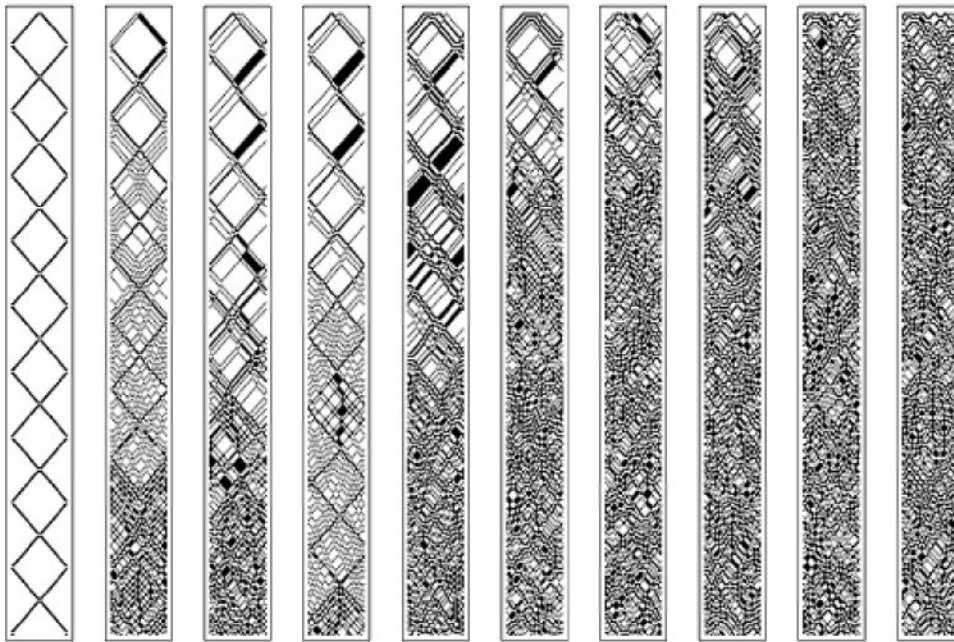


Uspořádané počáteční podmínky se vyvíjí do velmi náhodně vypadajícího stavu:

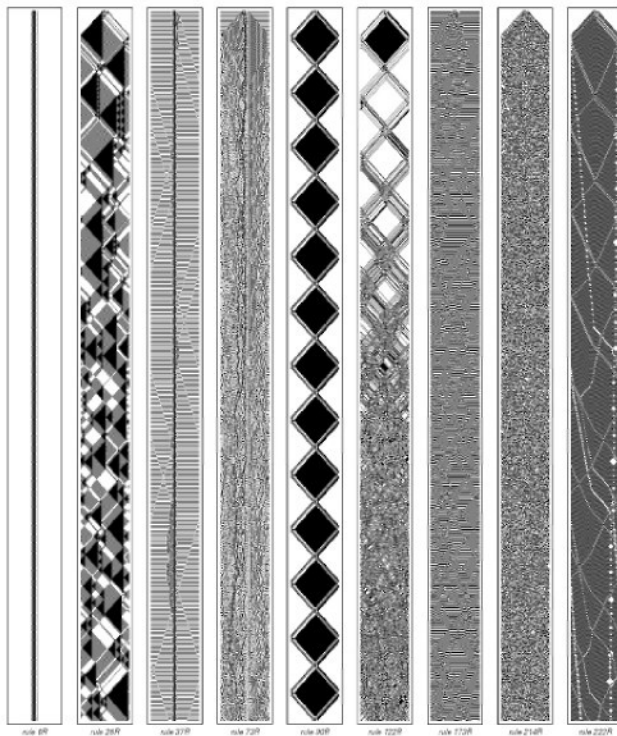


V případě tohoto pravidla víme odkud taková náhodnost pochází: skutečná náhodnost. Opatrným nastavením počáteční podmínky můžeme nalézt situaci, která se vyvíjí z náhodnosti do uspořádaného stavu. Proč takové chování nepozorujeme v přírodě? Protože vyžaduje mnoho výpočetního úsilí sestavit takovou počáteční podmínku a experimentální nastavení je omezeno podle principu výpočetní rovnocennosti (PCE) a výpočetní nezvratnosti (CI) nelze typicky zorganizovat nastavení takových počátečních podmínek dokonce ani v kontrolovaných experimentech.

Další příklad jak mohou různé počáteční podmínky vést na podobně vypadající výsledky, dokonce pro zvrtné pravidlo (opět pravidlo 122R).

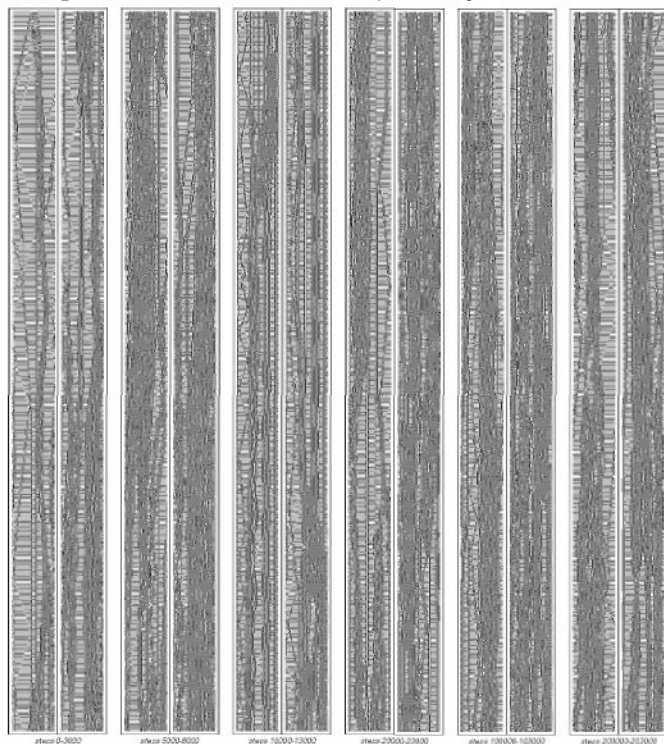


Zajisté jsou zde pravidla takového typu, která nevyhovují tomuto řádu -> náhodný vývoj, jak je popsán 2. zákonem termodynamiky:

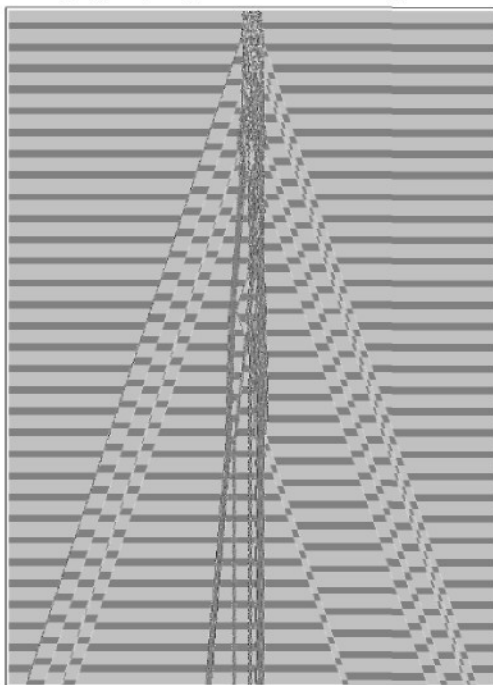


Jsou takové systémy v přírodě a je 2. zákon termodynamiky natolik obecně platný, jak se obvykle předpokládá?

37R je zvlášť překvapivý: jeho vývoj probíhá z uspořádanosti do náhodnosti a nazpět v rozporu s 2. zákonem termodynamiky



nebo případ, kdy se náhodnost v počátečních podmínkách vyvine do uspořádaného stavu

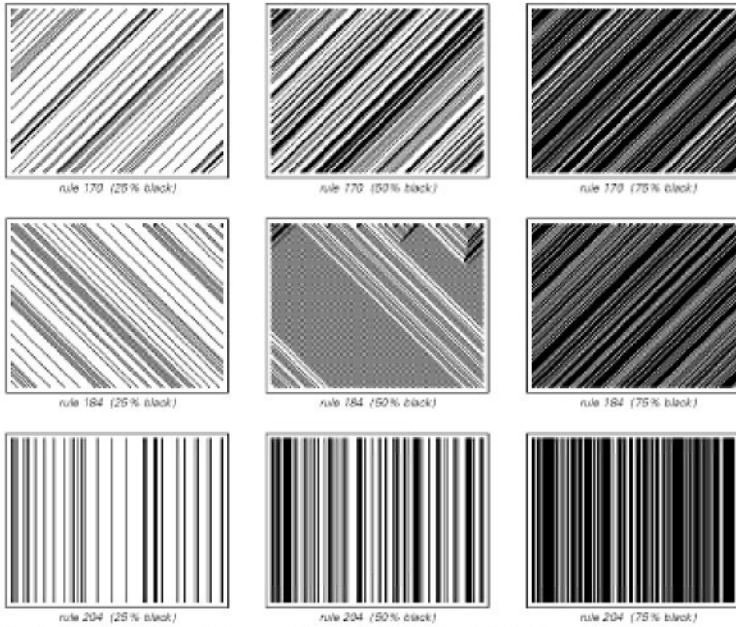


Zákony zachování veličin

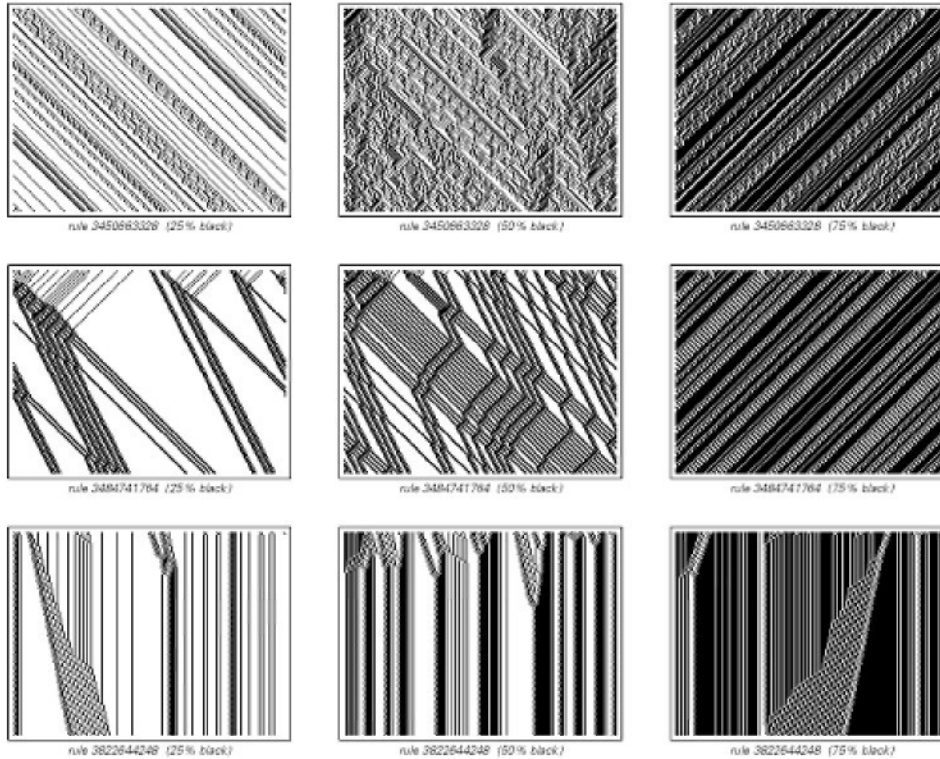
Mnoho fyzikálních zákonů zachovává veličiny jako jsou energie, moment atd.

Lze studovat jednoduché programy, které rovněž zachovávají veličiny.

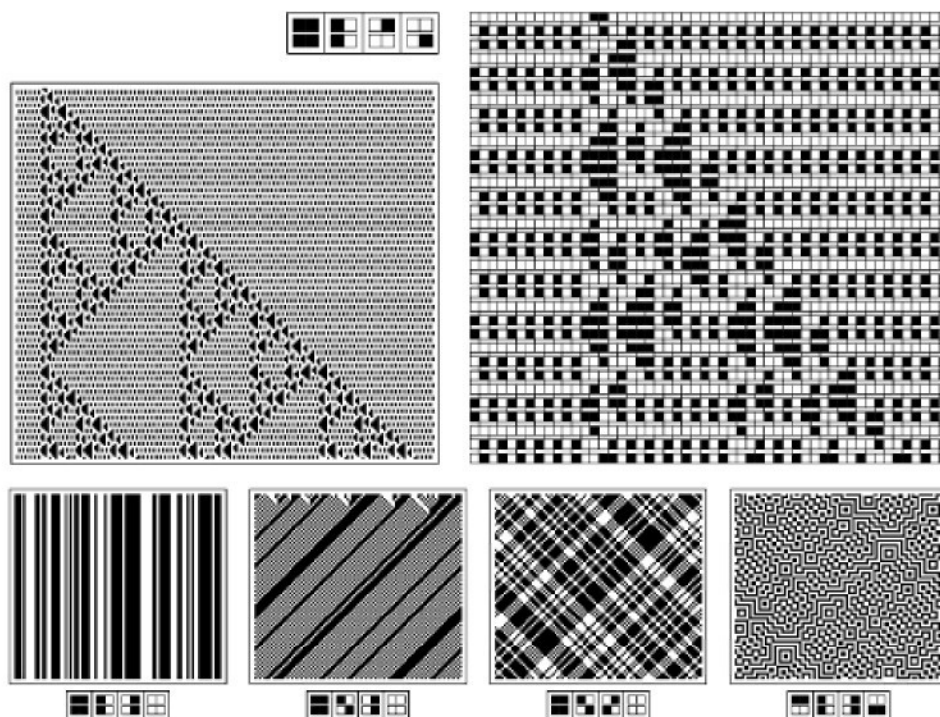
Některé jednoduché BA zachovávají počet buněk



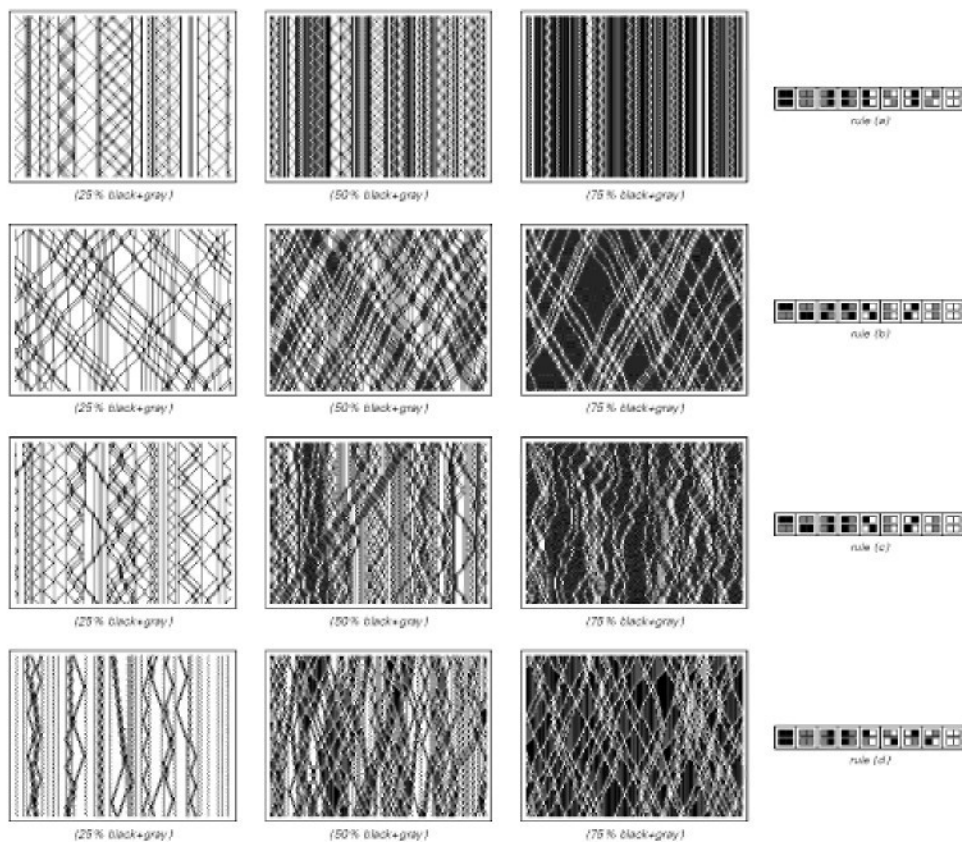
Pro BA rozsahu-2 lze nalézt složitější příklady

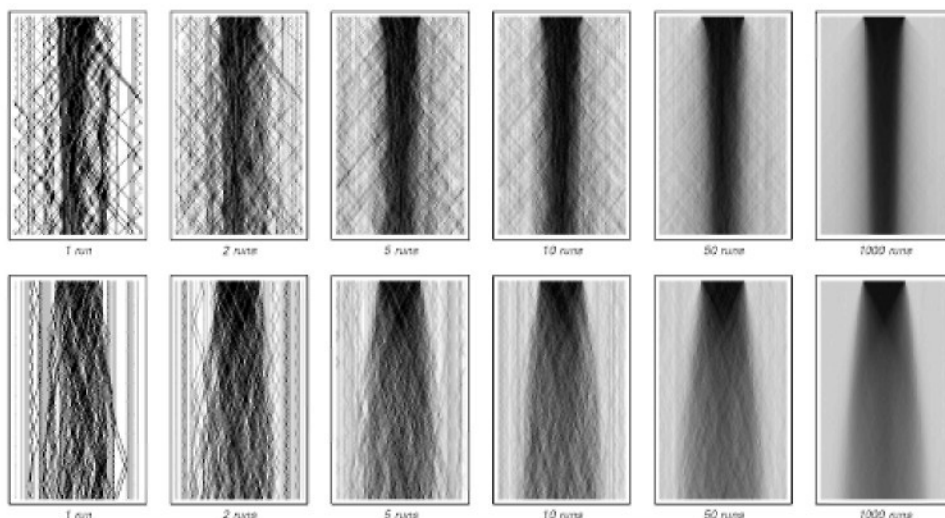


pro systematictější studium je lépe použít blokový BA



Blokový BA se zabývá 3-mi barvami (ve kterých je zachován počet buněk v celé šedé škále) a má mnoho zajímavých příkladů





Můžeme pozorovat komplexnost vycházející z jednoduchých pravidel a rovněž měkké difuzní chování.

Základní fyzika

Další diskuze bude převážně o použití jednoduchých programů pro modelování fyzikálních systémů. Jak formulovat stávající zákony fyziky v termínech jednoduchých programů? Jednoduché programy mohou zobrazovat natolik komplexní chování, jako cokoliv v přírodě.

Jednoduchý program může dělat složité věci

Tradiční fyzika je založena na PDR a spojitých systémech. Přístup NKS umožňuje, že jednoduchý, diskrétní systém může pracovat shodně.

Skutečná náhodnost

Pomáhá diskrétním systémům chovat se spojitě v širším měřítku. Může též pomoci v porozumění mystérií kvantové mechaniky.

Výpočetní nezvratnost

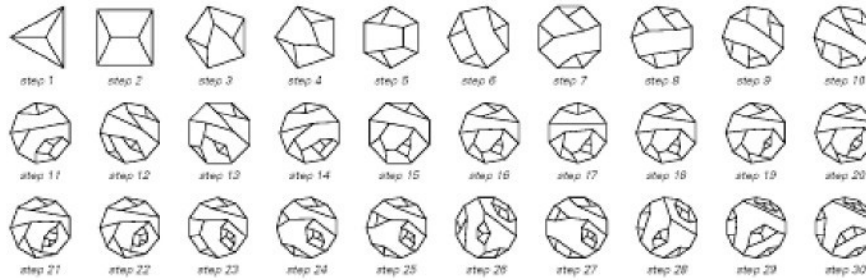
Určuje hranice možností a udává metodiku. V mnoha případech pouze sledujeme vývoj systému, abychom viděli co se děje.

Vyčerpávající vyhledávací pravidla

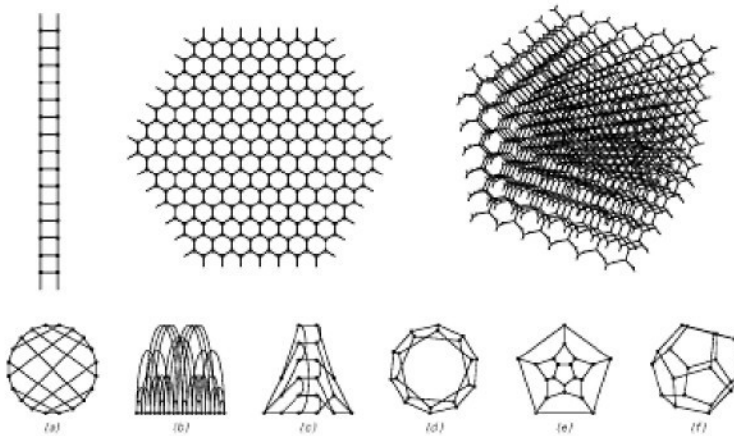
V jednoduchém rámci lze prohledávat skrze všechna možná pravidla bez předchozího vytýčení co vlastně hledáme (musí se jednat o odpovídající rámec!).

Sít'ové systémy

Lze si představit sít'ová pravidla výměny jako jednoduchý program. Sít' je souhrn uzlů a spojení a pravidla výměny berou část sítě kterou označují vzorem a přepisují ji do jiné sítě



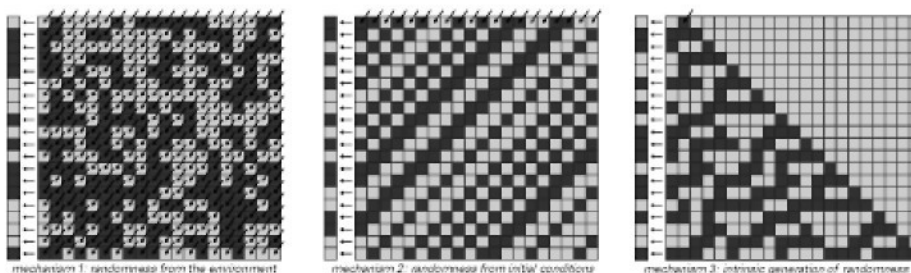
- Jednoduchost (jedna z nejjednodušších netriviálních struktur jaké si lze představit)
- Abstraktnost
- Flexibilita - lokalizované struktury (částice)



- Jednoduchá pravidla (s možností vyhledávání)

Náhodnost a spojitost

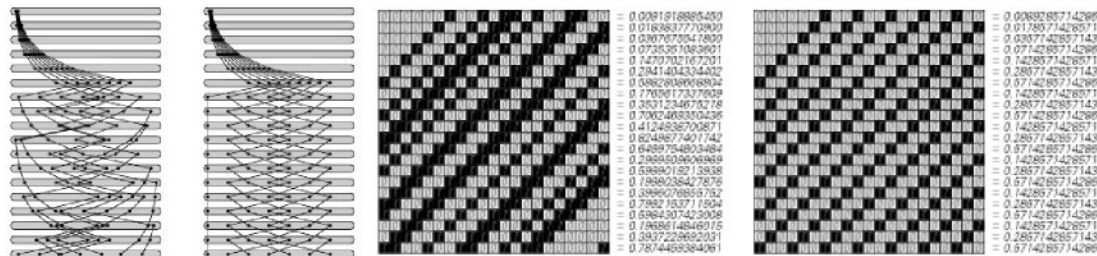
3 mechanismy náhodnosti, jaké lze pozorovat v přírodě



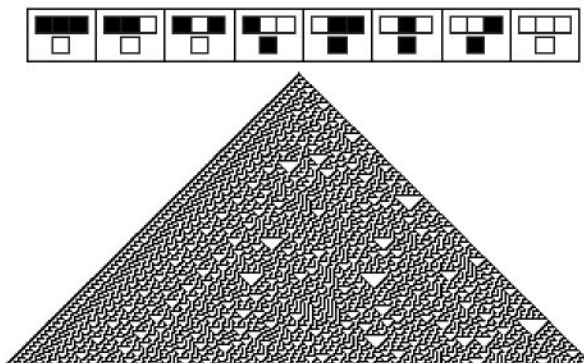
- 1) náhodnost z prostředí
- 2) náhodnost z počátečních podmínek
- 3) skutečně generovaná náhodnost

ad.1) náhodnost obsažená v části systému může být připsána vlivu náhodnosti z okolí ovlivňující samotný systém, např. Brownův pohyb, náhodný šum radiopřijímače atd

ad.2) tato je blízkce svázána s fenoménem teorie chaosu, kde jisté systémy vykazují extrémní citlivost na počáteční podmínky. Tento typ náhodnosti lze srovnat s komplexností sekvence čísel počáteční podmínky



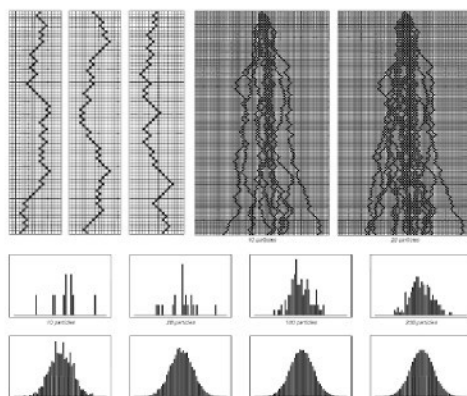
ad.3) pravidlo 30



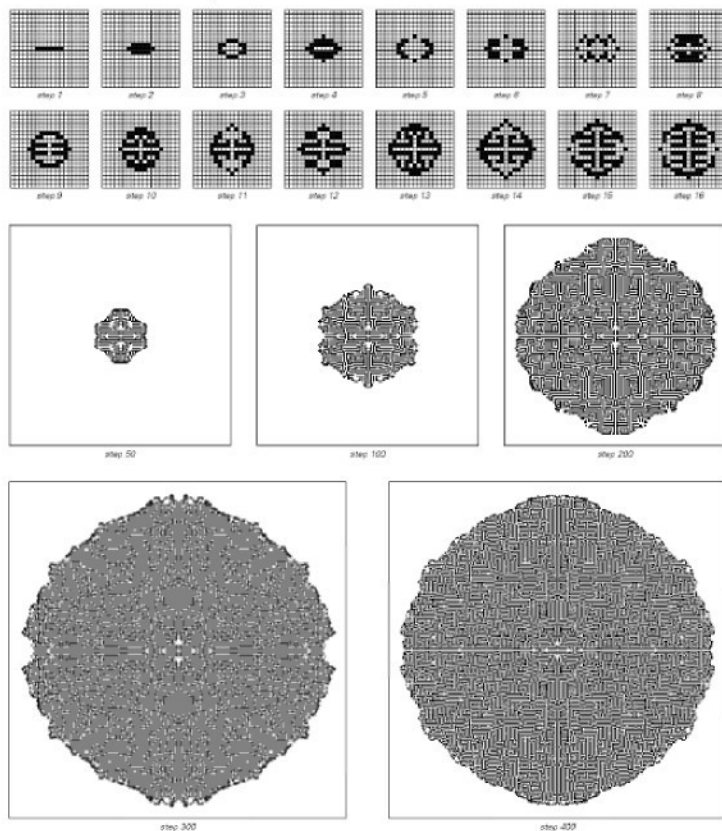
Můžeme hledat specifické korelace či relace mezi různými elementy sekvence. Měly by být nalezeny systematicky skryté vzory v sekvenci, nesnadno pozorovatelné, které lze detekovat pro predikci jak bude sekvence následovat.

Fenomén spojitosti

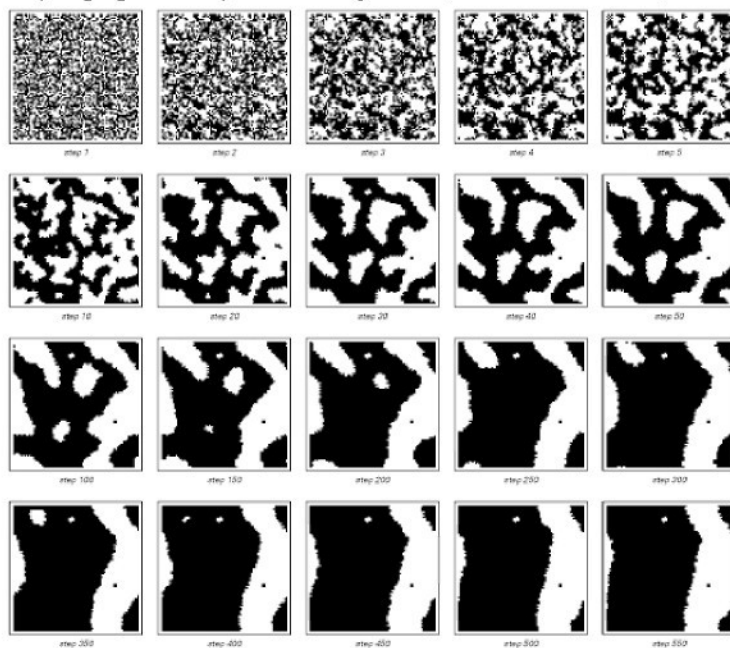
Lze si představit, že systémy v přírodě jsou řízeny jednoduchými diskrétními programy, např. vzduch a voda vypadají spojitě, ale my víme, že se skládají z jednotlivých atomů a molekul. Klíčovou příměsí je náhodnost



V těchto příkladech explicitně vnášíme náhodnost v každém kroku, ale fundamentálně může být náhodnost generovaná skutečně samotným systémem, jak se to děje např. u 2D BA (vnější totalistní kód 746)



Jiným případem vyhlazování je BA (totalistní kód 976)



Souhrnem

Pokud přemýšlíme o náhodném chování v systému, můžeme si představit tyto 3 možné mechanismy, jež lze považovat za základní pro generaci veškeré náhodnosti. Jak se ale nakonec ukazuje můžeme vše přisoudit skutečné náhodnosti generované skrze nějaký jednoduchý program.

Jestliže náhodnost pozorovaná během experimentu pochází ze skutečné náhodnosti, potom lze nalézt opakující se náhodnost pod identickými experimentálními podmínkami = předpověď! Náhodnost v malém měřítku je zajímavá pro rozostření diskrétních rysů mikroskopického systému, takže makroskopický systém se pak zdá být spojitý a hladký.

Systémy založené na reálných číslech

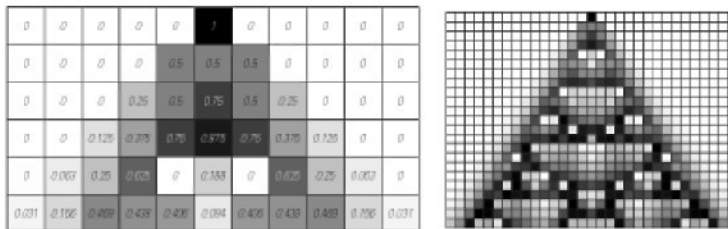
Základní BA je založen na binárních číslech 0 a 1, ale jiné systémy jsou založeny na celých nebo reálných číslech.

Reálná čísla jsou výhodná pro reprezentaci
hodnot buněk (spojité BA)
přechodů mezi buňkami (pravděpodobnostní BA)
tvaru prostoro-časové mříže (diferenciální rovnice)

Spojitý BA (SBA)

Hodnoty v buňkách mohou nabývat hodnot reálných čísel mezi 0 a 1.

Obnovovací funkce není konečný seznam, ale funkce např. $[(3/2)*(x+y+z)/3]$
vývoj SBA s násobením konstantou

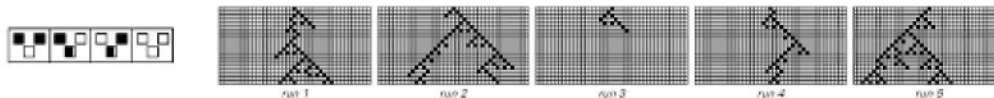


SBA mají všechny 4 třídy chování a jsou univerzální.

Pravděpodobnostní BA (PBA)

Hodnotami jsou obvykle černá a bílá

1-rozměrný

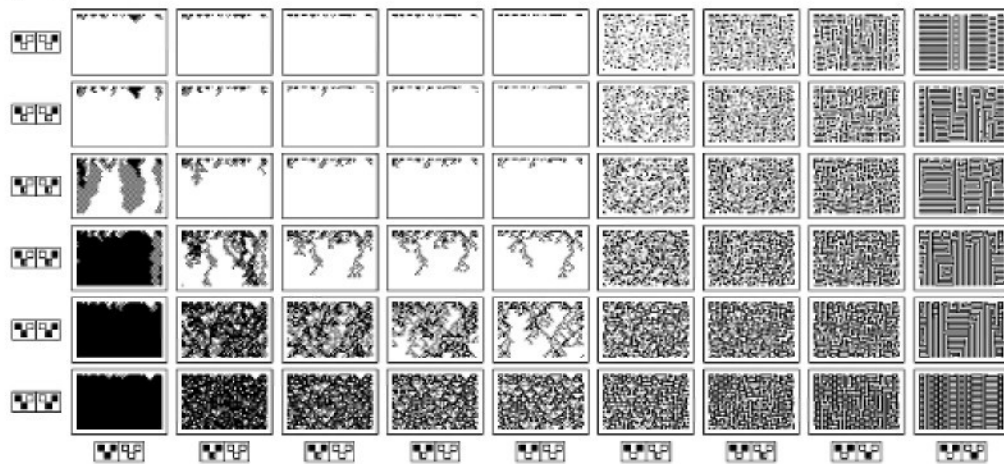


Obnovovací funkce je částečně náhodná, tj.:

jestliže má levý a pravý soused shodnou barvu -> pokaždé bílá

jestliže mají opačné barvy -> černá s pravděpodobností 75%

vývoj jednoduchého PBA



2-rozměrný

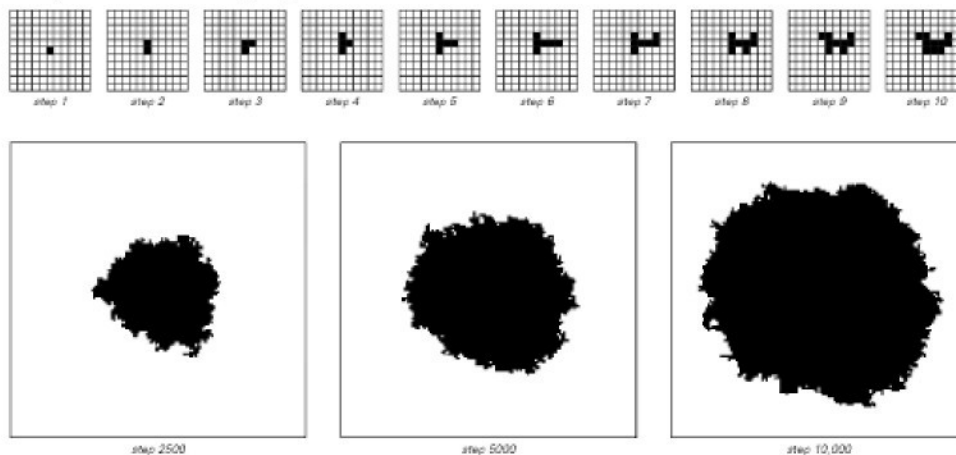
např.:

pokud je buňka černá, ponecháme ji černou

pokud je buňka bílá se všemi bílými sousedy, necháme ji bílou

pokud je buňka bílá s nějakými černými sousedy, učiníme ji černou $n\%$ z času

Mnoho matematických modelů užívá podobné náhodné obnovovací funkce
krok jednoduchého agregačního modelu



Z pohledu NKS je výhodnější používat deterministické modely.

- (1) Odkud se bere náhodnost? Je lepší vše generovat uvnitř modelu.
- (2) Deterministické BA mají komplexní chování, které obstojí u všech testů náhodnosti
- (3) Náhodnost inklinuje k tomu věci zamlžovat

Deterministické modely mají všechnu sofistikovanost která je potřeba a jsou jednodušší.

Obvyklé diferenciální rovnice (ODR)

Obvyklý způsob zacházení s částicovými jevy (diskrétnost)
Pravděpodobně jsou ODR univerzální z výpočetního hlediska.

Parciální diferenciální rovnice (PDR)

Obvyklý způsob zacházení s fyzikálními poli (spojitost)

Difuzní rovnice: $\partial_t u = c \partial_{xx} u$

Vývoj PDR je komplikovaný:

- u některých existují algoritmy pro výpočet jejich evoluce
- u většiny neexistují algoritmy pro výpočet jejich evoluce
- často je obtížné prokázat, že zde probíhá specifický vývoj

např.: pro základní rovnici dynamiky tekutin (Navier-Stokes) je problematické prokázat, že má specifický vývoj pro jakékoliv počáteční podmínky.

Diskrétnost za spojitostí

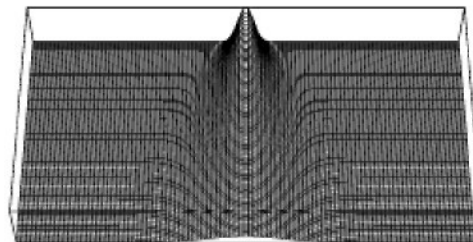
Co je základnější diskrétní či spojitý model?

Často jsou užívány diskrétní argumenty pro spojitě modely

např.: derivace difuzní rovnice:

PDE aproximace – CA může být nahlížen jako minimální diskrétní aproximace difuzní rovnice. Vývoj hustot ve střední hodnotě je analogický tradičnímu FEM přístupu s reálným číslem v každém místě. CA sám o sobě užívá ve skutečnosti distribuovanou reprezentaci hustoty.

Difuzní rovnice – v příslušném limitu hustoty distribuce pro CA vyhovují obvyklé difuzní rovnici zapsané ve tvaru $\partial_t f[x, t] = c \partial_{xx} f[x, t]$



diffusion equation: $\partial_t u[t, x] = 1/4 \partial_{xx} u[t, x]$

Řešení této rovnice s impulsní počáteční podmínkou je $\text{Exp}[-x^2/t]$ a v blokové formě od $-a$ do a
 $(\text{Erf}[(a-x)/\sqrt{t}] + \text{Erf}[(a+x)/\sqrt{t}])/2$

Derivace difuzní rovnice – s vhodnými předpoklady lze derivovat obvyklou difuzní rovnici přímo pomocí CA. Necht' hustota černých buněk na pozici x v čase t nabývá hodnoty $f(x, t)$ kde tato hustota může být snadno spočítána průměrováním přes instance systému. Jestliže předpokládáme, že hustota se pomalu mění s pozicí a časem, pak můžeme rozvinout v řadu $f[x+dx, t] = f[x, t] + \partial_x f[x, t] dx + 1/2 \partial_{xx} f[x, t] dx^2 + \dots$ kde jsou souřadnice měřítkovány tak, že sousední buňky leží na pozicích $x-dx$, x , $x+dx$ atd. Pokud považujeme za samozřejmost pod tím ležící náhodnost, pak hustota v místě je určena hodnotami hustot sousedů v předešlém kroku

$f[x, t + dt] = p_1 f[x - dx, t] + p_2 f[x, t] + p_3 f[x + dx, t]$ Z podmínky zachování hustoty platí $p_1 + p_2 + p_3 = 1$ a díky levo-pravé symetrii $p_1 = p_3$ z čehož plyne $f[x, t + dt] = c(f[x - dx, t] + f[x + dx, t]) + (1 - 2c)f[x, t]$ a po provedení rozvoje v řadu $f[x, t] + dt \partial_t f[x, t] = f[x, t] + c dx^2 \partial_{xx} f[x, t]$ což dává přesně obvyklou 1D difuzní rovnici $\partial_t f[x, t] = \xi \partial_{xx} f[x, t]$ kde ξ je difuzní koeficient daného systému.

Všechny výpočty jsou diskrétní!

V jednotlivosti jsou výpočty spojitého modelu založeny na diskrétních operacích. Takové výpočty jsou nepřesné a pokaždé zatíženy chybami.

Z pohledu NKS: lépe je použít diskrétní model, který lze počítat přesně.

Projev spojitosti má diskrétní základy.

Chování rozsáhlých diskrétních struktur v širokém měřítku je vždy hladké např.: tvar hranice tmavší/hustší světlejší/řidší oblasti, náhodnost (včetně skutečné náhodnosti) má sklon zvětšovat výskyt hladkosti.

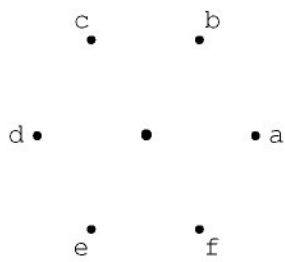
Spojitost a náhodnost činí vše obtížnější:

- vnímat komplexnost
- provádět výpočty
- objasnit oč tu běží

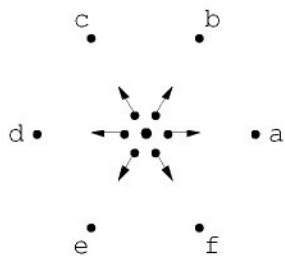
NKS: diskrétnost a determinismus jsou cesty po kterých bychom se měli ubírat!

LGCA - CA pro popis dynamiky média

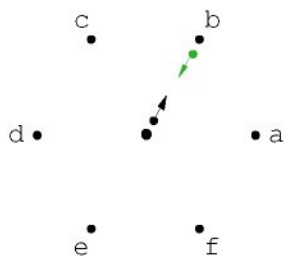
Každý uzel sítě vypadá spolu se svými šesti sousedy následovně



Může zde být částice pohybující se v každém ze šesti možných směrů z centrálního uzlu do uzlů označených "a" až "f". V každém směru se může pohybovat pouze jedna částice, takže tam je mezi nulou a šesti částicemi pohybujícími se z uzlu.

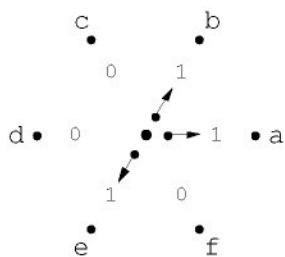


Ovšem sousedé jsou také uzly a jiné částice se mohou pohybovat směrem z nich.



Použitím šesti čísel, z nichž každé nabývá hodnoty 0 (neobsazeno) nebo 1 (obsazeno), lze popsat ve kterém směru se částice pohybuje.

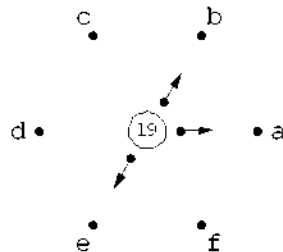
Např. 010011 popisuje následující konfiguraci:



Čísla čteme zleva doprava, což odpovídá směřům "f" až "a" (zpětné abecední uspořádání).

Těchto šest čísel může být reprezentováno jako šest bitů jednoho čísla zapsaného binárně. Takové číslo potom nabývá hodnot mezi 0 a 63 ($63=2^{**6}-1$) a popisuje uzel kompletně.

Např. binární číslo 010011 je desítkově 19.



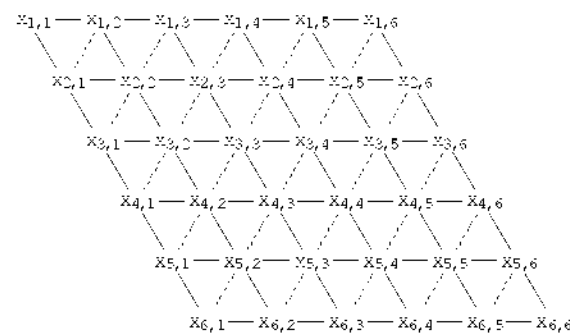
Tak víme, že potřebujeme číslo mezi 0 a 63 v každém uzlu, nebo jinými slovy každý uzel může nabývat 64 možných barev, případně odstínů šedi nebo velikostí bodu reprezentovaných v jednom barevném odstínu.

Celková mříž tvořená všemi uzly je potom dána maticí těchto čísel (multispin kódování)

$$\begin{pmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & x_{1,3} & x_{1,4} & x_{1,5} & x_{1,6} \\ x_{2,1} & x_{2,2} & x_{2,3} & x_{2,4} & x_{2,5} & x_{2,6} \\ x_{3,1} & x_{3,2} & x_{3,3} & x_{3,4} & x_{3,5} & x_{3,6} \\ x_{4,1} & x_{4,2} & x_{4,3} & x_{4,4} & x_{4,5} & x_{4,6} \\ x_{5,1} & x_{5,2} & x_{5,3} & x_{5,4} & x_{5,5} & x_{5,6} \\ x_{6,1} & x_{6,2} & x_{6,3} & x_{6,4} & x_{6,5} & x_{6,6} \end{pmatrix}$$

Pro realistickou simulaci by měla matice obsahovat nejméně 1000 řádků i sloupců, avšak počet řádků a sloupců se může lišit.

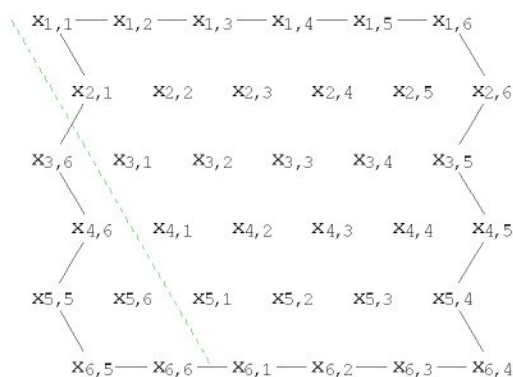
Prvky matice odpovídají následujícímu uspořádání



Plné linky odpovídají řádkům a sloupcům matice a čárkované pomáhají vykreslit vzor sítě.

Šest sousedů uzlu se tak nalézá v následujícím uspořádání (centrální uzel ●)

$$\begin{pmatrix} \cdot & c & b \\ d & \bullet & a \\ e & f & \cdot \end{pmatrix}$$



Uzly nalevo od přerušované linky jsou obtočeny okolo pro efektivní tvarovou reprezentaci, ale pod tím ležící data reprezentuje ta samá matice.

Nyní máme kompletní popis média v každém momentu.

Pravidlo LGCA: jeden krok se skládá ze dvou částí (pohyb a kolize).

V jednom kroku se částice pohybují z jednoho uzlu do druhého, aby byly poté naráz vyhodnoceny jejich vzájemné interakce. V důsledku kolizí se částice pohybují různými směry. Podstatné je zda jsou vlákna mezi uzly obsazena částicí či nikoliv, jinými slovy částice nemají svoji vlastní identifikaci.

Fáze pohybu sestává ze sběru odpovídajících hodnot ze sousedících uzlů. Kód pro pohyb částice vrací číslo reprezentující všechny částice přicházející do uzlu. V samotném centrálním uzlu je 0, protože částice se ze středu pohybují pryč a nuly pro dva maticové prvky, které nesousedí s centrálním uzlem.

Kolizní část pravidla jednoduše mění počet odpovídající přicházejícím částicím v jiný reprezentující odchozí částice, čímž to proběhne na každém jednotlivém uzlu samostatně.

Toto pravidlo má tři zajímavé vlastnosti. Za prvé, počet částic před kolizí a po ní je stejný (zachování hmoty). Za druhé, součet vektorů částic před kolizí a po ní je stejný (zachování momentu). Za třetí, pravidla mají tendenci způsobovat efekt změny směrů částic a dokonce tvořit náhodnost v malých měřítcích.

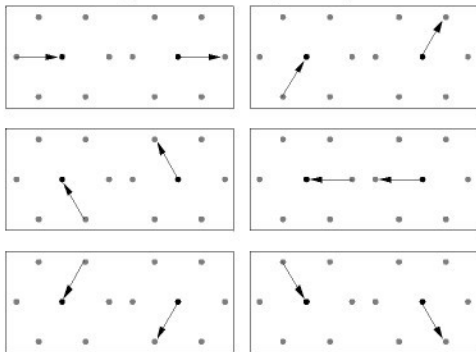
Definujeme funkci pro rotaci všech částic v uzlu po 60° .

Zde jsou pravidla pro interakce: $p[n]$ dává všechny případy odpovídající pro n částic. Konfigurace v těchto pravidlech byly nalezeny prostým výběrem možných stavů, ignorujíc shodné stavy nastávající v důsledku rotace. Většinou zde není možnost výběru při zápisu pravidel, protože podmínka zachování hmoty a momentu vymezuje co se stane.

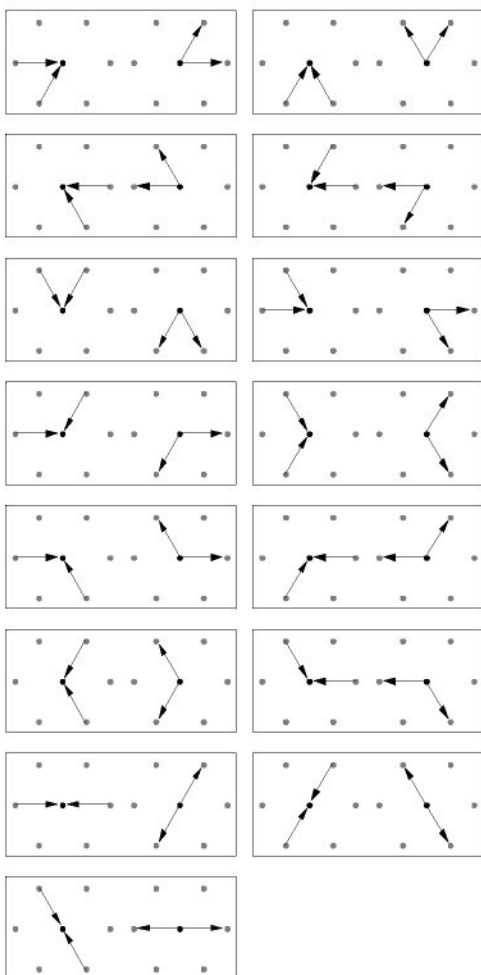
žádná částice



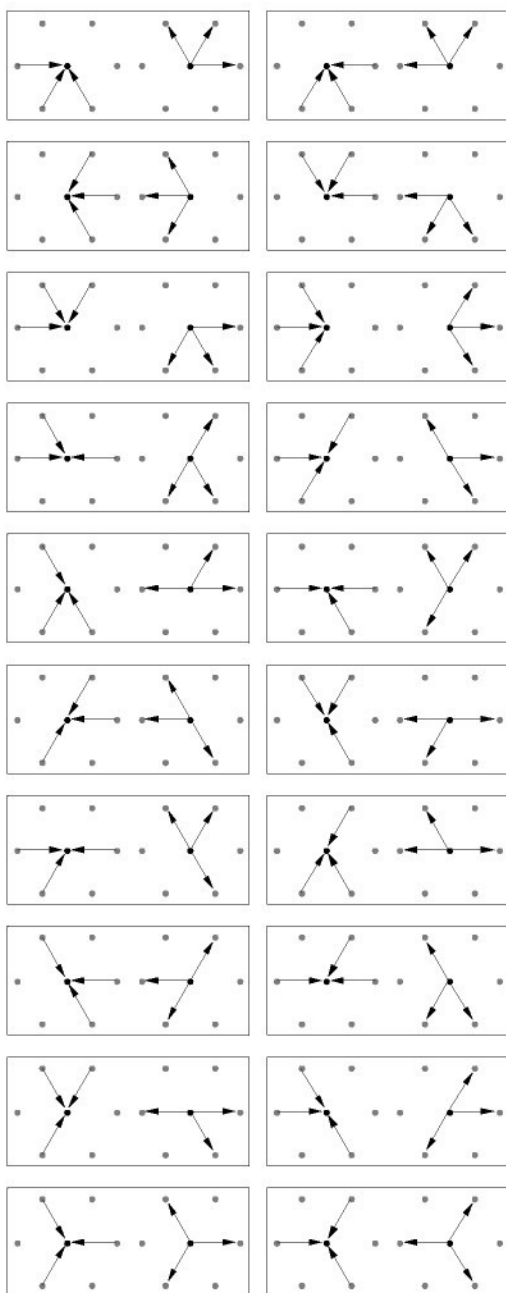
1 částice - pouze udržuje daný směr



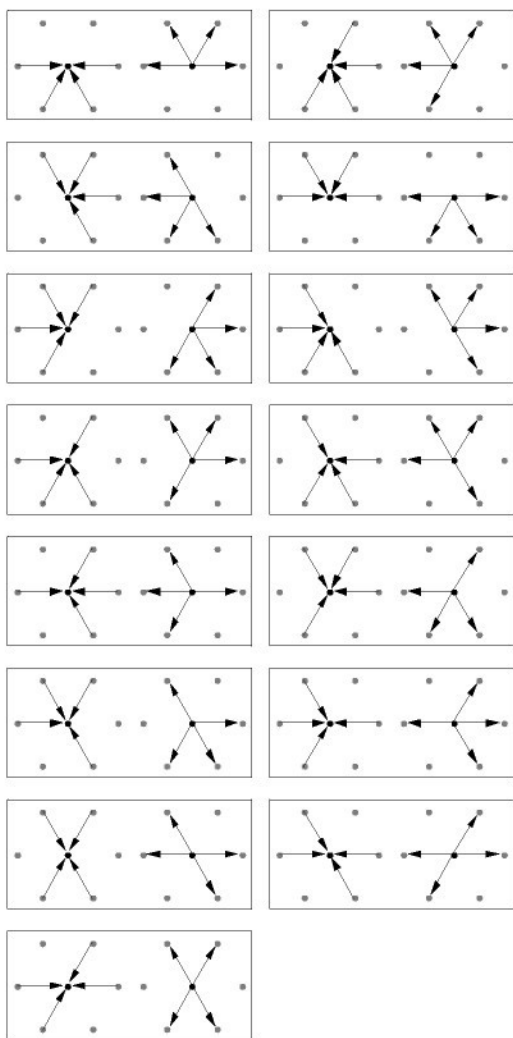
2 částice



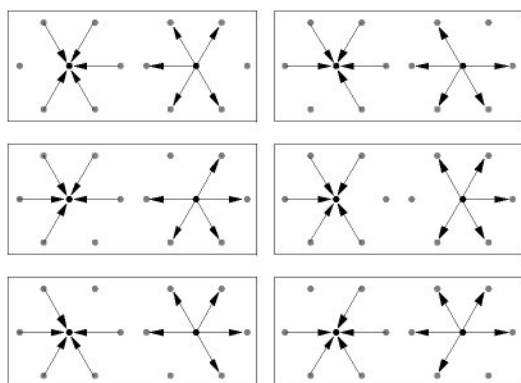
3 částice



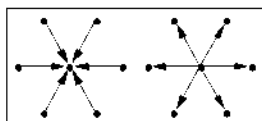
4 částice



5 částic



6 částic



Všechna pravidla:

{0→0,1→1,2→2,3→3,4→4,5→5,6→6,7→7,8→8,9→18,10→10,11→38,12→12,13→22,14→14,15→15,16→16,17→17,18→36,19→37,20→20,21→42,22→13,23→23,24→24,25→52,26→44,27→54,28→28,29→29,30→30,31→31,32→32,33→33,34→34,35→35,36→9,37→19,38→11,39→39,40→40,41→50,42→21,43→43,44→26,45→27,46→46,47→47,48→48,49→49,50→41,51→51,52→25,53→53,54→45,55→55,56→56,57→57,58→58,59→59,60→60,61→61,62→62,63→63}

Kompletní pravidlo, které mění matici sousedů v nový centrální uzel, provádí pohyb částice i její interakci. Konečnou matici obdržíme proběhnutím cyklu přes matici uzlů m pro t kroků.

Další fyzikální efekty

Pevné objekty jako jsou stěny či překážky mohou být modelovány extra maticí, obsahující 0 (mezera) a 1 (zaplnění), stejného řádu jako matice média.

Interakce překážky a částice je zajišťována odrazem částice zpět směrem kterým se pohybovala před nárazem, tím získáme nulovou rychlost toku na hranici.

Implementace:

(1) před začátkem zajistíme, aby nebyly žádné částice média na uzlech reprezentujících překážku

(2) po jednom kroku, obnovíme médium jakoby bez překážek, ale potom změníme směr částic, které působí na uzly představující překážku, protože kolize s hranicemi zachovává počet částic, ale už ne jejich moment

Obojího lze dosáhnout jednoduchou aritmetikou v uzlech a pravidlech pro odraz:

{0→0,1→8,2→16,3→24,4→32,5→40,6→48,7→56,8→1,9→9,10→17,11→25,12→33,13→41,14→49,15→57,16→2,17→10,18→18,19→26,20→34,21→42,22→50,23→58,24→3,25→11,26→19,27→27,28→35,29→43,30→51,31→59,32→4,33→12,34→20,35→28,36→36,37→44,38→52,39→60,40→5,41→13,42→21,43→29,44→37,45→45,46→53,47→61,48→6,49→14,50→22,51→30,52→38,53→46,54→54,55→62,56→7,57→15,58→23,59→31,60→39,61→47,62→55,63→63}

Tok média lze řídit kontinuálním vkládáním částic na jedné straně a odebráním částic na opačné straně. Začlenění vložených částic by nemělo ovlivnit makroskopické vlastnosti systému, zato mikroskopické procesy mohou vyvolat náhodné stavy lokální rovnováhy.