



Diplomová práce

Jan Bureš, Radek Fučík, Radomír Chabiniok

Katedra matematiky Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská České vysoké učení technické v Praze

29. ledna 2025

Přehled

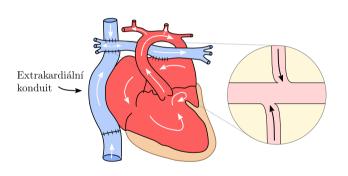


1. Motivace

- 2. Optimalizační rámec
- 3. Výsledky

Motivační úloha





Optimalizační úloha:

Nalézt minimum

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{X}} f(\mathbf{x}),$$

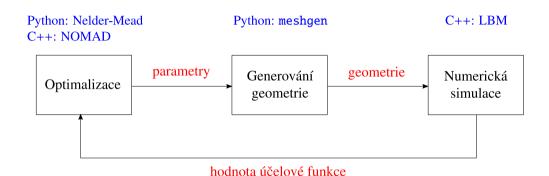
kde $f(\mathbf{x})$ je účelová funkce.

Charakterizace:

- nelineární
- s vazbami

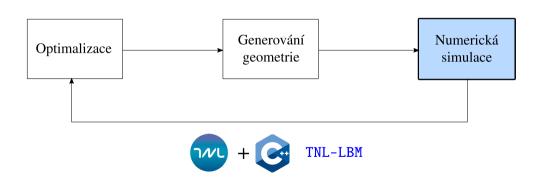
Rámec





Rámec





Mřížková Boltzmannova metoda



LBM: - KM FJFI

rychlostní model D3Q27, CuLBM

$$\rho = \sum_{k=1}^{27} \varphi_k$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_{k=1}^{27} \varphi_k \boldsymbol{\xi}_k + \frac{\Delta t}{2} \rho \mathbf{g}$$

Okrajové a počáteční podmínky:

- konstatní přítok a free outflow OP
- ullet hranice objektu o bounce-back
- rovnovážná počáteční podmínka

Rovnice dynamiky tekutin:

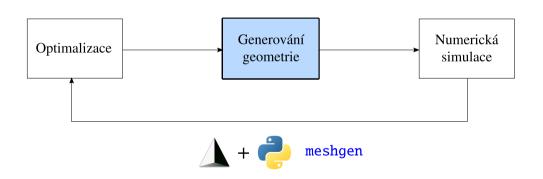
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0$$
$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = \nabla \cdot \mathbf{T} + \rho \mathbf{g}$$

Předpoklady:

- izotermální systém bez vnějších sil
- nestlačitelná newtonovská tekutina

Rámec

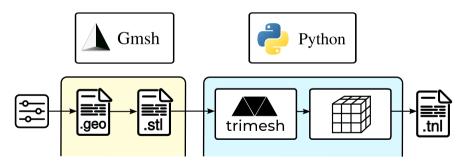




Generování geometrie



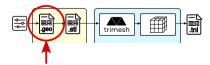
 balík vytvořený pro účely parametrického generování geometrie a následné voxelizace



Generování geometrie - šablona

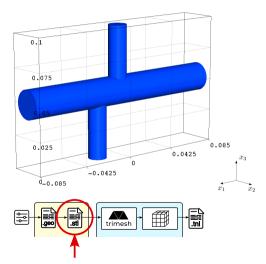


```
8 // Cylinder dimensions
LOWER LENGTH = 0.05: // Length of the lower cylinder in meters
LOWER_RADIUS = 0.007; // Radius of the lower cylinder in meters
UPPER_LENGTH = 0.05: // Length of the upper cylinder in meters
UPPER RADIUS = 0.007: // Radius of the upper cylinder in meters
MIDDLE LENGTH = 0.17: // Length of the middle cylinder in meters
MIDDLE RADIUS = 0.011: // Radius of the middle cylinder in meters
15 // Offset for positioning along the X-axis
OFFSET = DEFINE_OFFSET;
18 ///// First Cylinder - Lower /////
// Define points along the axis of the lower cylinder
Point(1) = {OFFSET, 0.0, LOWER_LENGTH, h}:
Point(2) = {OFFSET, 0.0, 0.0, h}:
22 // Create line and wire for lower cylinder extrusion
_{23} Line(1) = {2, 1}:
^{24} Wire(2) = {1}:
25 // Disk representing the base of the lower cylinder
26 Disk(1) = {OFFSET, 0.0, LOWER_LENGTH, LOWER_RADIUS};
// Extrude the surface to form the first cylinder volume
28 Extrude { Surface{1}: } Using Wire {2}
```



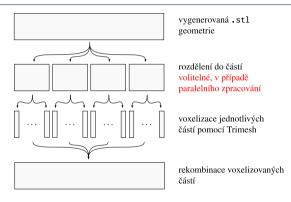
Generování geometrie - STL

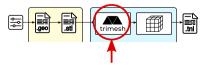




Generování geometrie - voxelizace

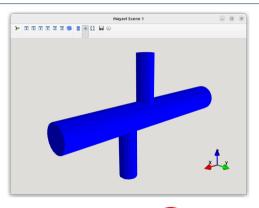


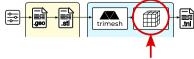




Generování geometrie - výsledek

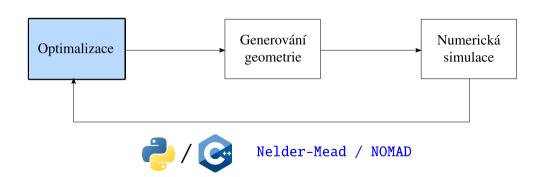






Rámec





Optimalizace



- Předchozí práce (VÚ) ⇒ bezgradientní metody
- Úloha s vazbami ⇒ extrémní bariérová metoda
- Vyčíslení f(x) pomocí LBM \Rightarrow výpočetně i časově náročné
- Algoritmy:
 - Nelderova-Meadova metoda vlastní implementace podporující paralelizaci
 - Mesh Adaptive Direct Search (NOMAD [1])

[1] C. Audet, et al. (2022), Algorithm 1027: NOMAD version 4: Nonlinear optimization with the MADS algorithm., DOI: 10.1145/3544489

Výsledky



- Použití balíku meshgen, řešení netriviálních úloh
- Reynoldsův rozklad:

$$\mathbf{u}(x, y, z, t) = \overline{\mathbf{u}(x, y, z)} + \mathbf{u}'(x, y, z, t)$$

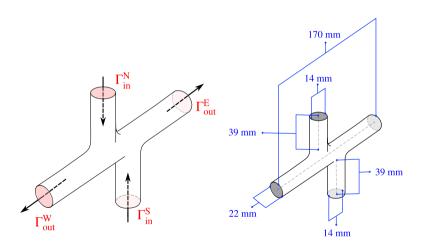
Účelové funkce: turbulentní kinetická energie a smyková rychlost

$$T_{\text{turb}} = \frac{1}{2} (\mathbf{u}'(x, y, z, t))^2, \quad \dot{\gamma} = \sqrt{2} ||\mathbf{D}||_F$$

• Nestlačitelná newtonovská tekutina, 3D

Idealizovaný model TCPC

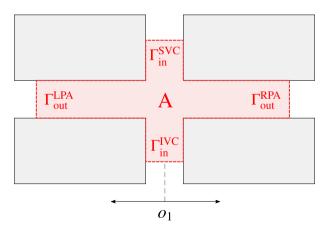




1 parametr - posun IVC



• Posun osy IVC, ozn. o_1 , je jediný optimalizační parametr

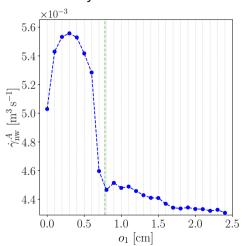


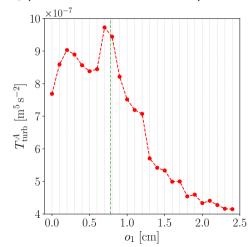
1 parametr - účelové funkce



13/16

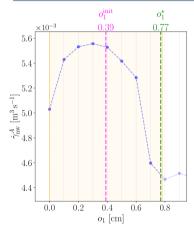
• Účelových funkce v závislosti na posunu o_1 (vazba určená dělením IVC proudění)



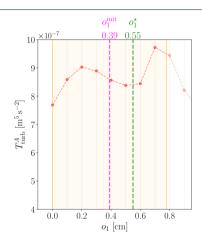


KM FJFI 2024





Metoda	Nelder-Mead	MADS
Výpočetní čas [h]	68.9	155.8

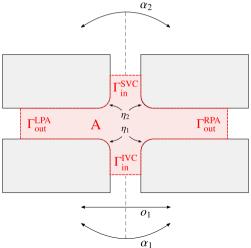


Metoda	Nelder-Mead	MADS	
Výpočetní čas $[h]$	44.7	150.1	

5 parametrů - model

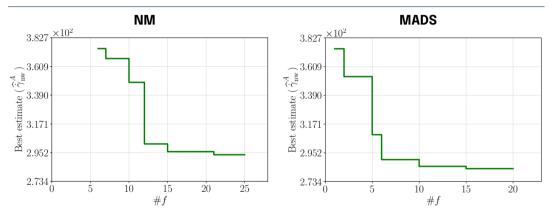


• Posun osy IVC, naklonění os dolního a horního kanálu, tvar napojení



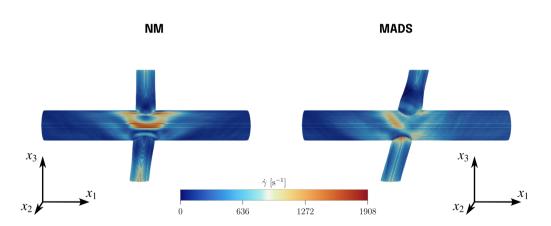
KM FJFI 2024 $lpha_1$ 14/16



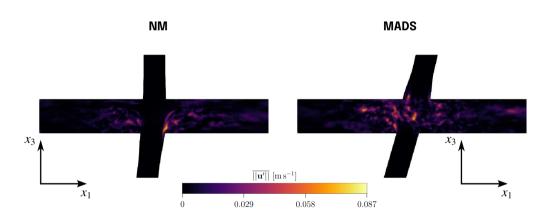


Řešení	Čas $[h]$	$o_1 [\mathrm{cm}]$	$\alpha_1[^\circ]$	$\alpha_2[^\circ]$	$\eta_1[\mathrm{cm}]$	$\eta_2[\mathrm{cm}]$
$\mathbf{x}_{\mathrm{NM}}^{\star}$	49.2	-0.139	6.8	-0.2	0.058	0.128
$\mathbf{x}_{\mathrm{MADS}}^{\star}$	144.2	0.1	16	13	0	0.25

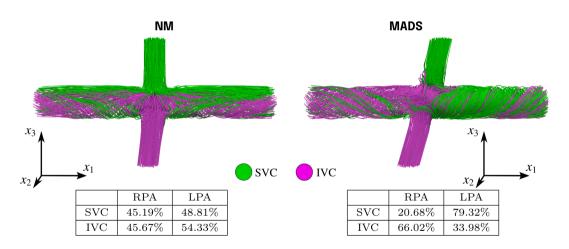




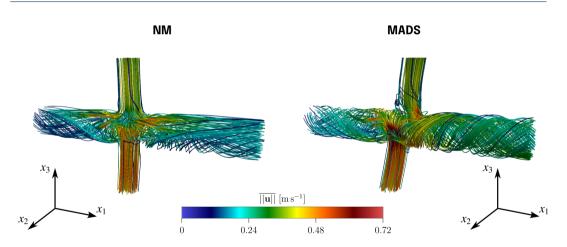












Shrnutí



- Vytvořen rámec pro generování a řešení netriviálních optimalizačních úloh s pomocí LBM
- Navrženy parametrické modely idealizovaného TCPC
- Plány do budoucna (PGS): zdokonalení rámce, reálná data, experimenty na MRI
- Publikace:
 - "Geometry optimization of idealized total cavopulmonary connection using a CFD-based framework," FIMH 2025, Dallas - podáno
 - Článek v přípravě

Děkuji za pozornost!

1. Hustota na přítoku OP



- Dotaz: Jak je nastavena/vypočítána hustota pro přítokovou okrajovou podmínku?
- Na přítoku je použita rovnovážná (equilibrium) okrajová podmínka, kde se hustota fixuje na referenční hodnotu ($\rho=1$ [-]), rychlost se předepisuje konstatní.

2. Kritérium zastavení simulace

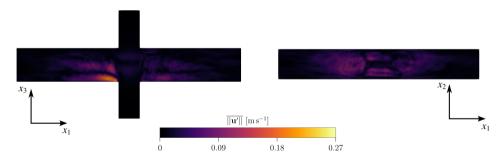


- Dotaz: Jaké je přesné kritérium pro zastavení simulace proudění v LBM?
- ullet Je specifikovaný charakteristický čas T stejný pro všechny simulace. Tento čas je volen tak, aby mohl být použit Reynoldsův rozklad.

3. Nesymetrie symetrické úlohy



- Dotaz: Co mohlo způsobit nesymetrii řešení jinak symetrické úlohy (je úloha opravdu symetrická i po diskretizaci?)
- Výpočty prováděny s jednoduchou strojovou přesností, vliv by tedy mohla mít numerická chyba. Projektovaná geometrie je i po diskretizaci symetrická.



4. Výpočet napětí na stěnách



 Dotaz: Dal by se pro výpočet napětí na stěnách použít takový algoritmus, který používá M. Matyka?

Wall orientation and shear stress in the lattice Boltzmann model

Maciej Matyka ^{a,*}, Zbigniew Koza ^a, Łukasz Mirosław ^{b,c}

^a Faculty of Physics and Astronomy, University of Wrocław, pl. M. Borna 9, 50-204 Wrocław, Poland

^b Institute of Informatics, Wrocław University of Technology, Poland

^c Vratis Ltd., Wrocław, Muchoborska 18, Poland

5. Urychlení rámce



- Dotaz: Dal by se optimalizační rámec více urychlit při zachování potřebného prostorového a časového rozlišení?
- Jistě je možné dále zefektivnit samotný použitý optimalizační algoritmus. Dále je zde potenciál projektovat perturbovanou geometrii přímo za běhu jedné simulace, což by značně mohlo zkrátit čas potřebný k vyčíslení účelové funkce.