



ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská



Hledání optimálního tvaru stěn matematického modelu proudění krve v problematice úplného kavopulmonárního cévního napojení

Optimal shape design of walls of blood flow mathematical model focusing on the total cavopulmonary connection

Soutěžní práce
SVOČ 2023

| | |
|----------------|-------------------------------------|
| Autor: | Bc. Jan Bureš |
| Vedoucí práce: | doc. Ing. Radek Fučík, Ph.D. |
| Konzultant: | Ing. Pavel Eichler |

Poděkování:

Chtěl bych zde poděkovat především svému školiteli doc. Ing. Radku Fučíkovi, Ph.D. za nesmírnou pečlivost, ochotu, trpělivost a odborné zázemí při vedení této práce. Dále děkuji svému odbornému konzultantovi Ing. Pavlu Eichlerovi za rady, cenné poznámky a především za zájem o dané téma. V neposlední řadě mé díky patří MUDr. Mgr. Radomíru Chabiniokovi, Ph.D. za odborné připomínky týkající se medicínské problematiky této práce.

Čestné prohlášení:

Prohlašuji, že jsem tuto práci vypracoval samostatně a uvedl jsem všechnu použitou literaturu.

V Praze dne 27. dubna 2023

Jan Bureš

Obsah

| | |
|---|-----------|
| Úvod | 6 |
| 1 Matematický model proudění krve | 8 |
| 1.1 Dynamika tekutin | 8 |
| 1.1.1 Tenzor napětí a silové působení | 9 |
| 1.1.2 Turbulence a Reynoldsův rozklad | 10 |
| 1.2 Popis cévního proudění | 11 |
| 1.3 Předpoklady matematického modelu v této práci | 13 |
| 2 Mřížková Boltzmannova metoda | 14 |
| 2.1 Bezrozměrnost a diskretizace | 15 |
| 2.1.1 Přejít k bezrozměrným jednotkám | 15 |
| 2.1.2 Výpočetní oblast a diskrétní mřížka | 16 |
| 2.1.3 Diskrétní Boltzmannova transportní rovnice | 17 |
| 2.1.4 Makroskopické veličiny | 18 |
| 2.2 Algoritmus LBM | 18 |
| 2.3 Kolizní operátory | 18 |
| 2.4 Počáteční a okrajové podmínky | 20 |
| 2.4.1 Počáteční podmínka | 20 |
| 2.4.2 Okrajové podmínky | 21 |
| 2.5 Výpočet síly v LBM | 25 |
| 2.6 Poznámky k implementaci LBM | 25 |
| 3 Generování geometrie | 27 |
| 3.1 Struktura generovaných dat | 27 |
| 3.2 Výpočet normálového vektoru | 28 |
| 3.3 Výpočet interpolačního parametru | 28 |
| 3.4 Struktura kódu a poznámky k implementaci | 29 |
| 4 Matematická optimalizace | 31 |
| 4.1 Základní optimalizační úloha | 31 |
| 4.2 Řešení úlohy bez vazeb | 32 |
| 4.2.1 Davidonův-Fletcherův-Powellův algoritmus | 32 |
| 4.2.2 Broydenův-Fletcherův-Goldfarbův-Shannoův algoritmus | 33 |
| 4.3 Řešení úlohy s vazbami | 33 |
| 4.3.1 Penalizační metody | 33 |
| 4.3.2 Bariérová metoda | 34 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 4.4 | Black-box optimalizace | 36 |
| 4.4.1 | Heuristické metody | 37 |
| 4.4.2 | Metody přímého vyhledávání | 39 |
| 4.4.3 | Optimalizace s využitím náhradního modelu | 39 |
| 4.5 | Popis optimalizačního rámce | 40 |
| 5 | Numerické výsledky | 42 |
| 5.1 | Úlohy s jedním optimalizačním parametrem | 42 |
| 5.1.1 | Definice parametrů úlohy | 42 |
| 5.1.2 | Rotující elipsa bez překážky | 43 |
| 5.1.3 | Rotující elipsa s překážkou | 48 |
| 5.1.4 | Shrnutí výsledků úloh s jedním parametrem | 51 |
| 5.2 | Úloha s dvěma optimalizačními parametry | 52 |
| 5.2.1 | Shrnutí výsledků úlohy s dvěma parametry | 56 |
| 5.3 | Úloha s třemi optimalizačními parametry | 57 |
| 5.3.1 | Shrnutí výsledků úlohy s třemi parametry | 62 |
| | Závěr | 63 |

Úvod

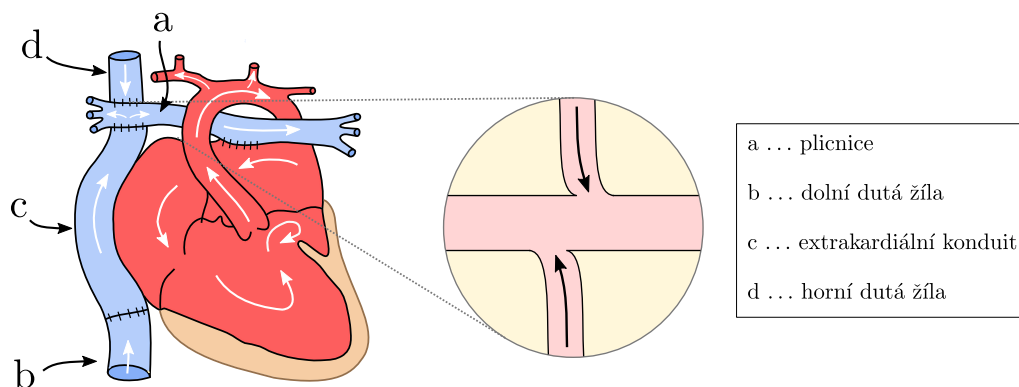
Tato práce se zabývá matematickým modelováním proudění tekutin se zaměřením na hledání optimálního tvaru stěn zejména v problematice úplného kavopulmonárního cévního napojení. V mnoha inženýrských odvětvích jako je např. automobilový nebo letecký průmysl je zapojení procesu optimalizace pro nalezení optimálního tvaru zkoumaného objektu běžnou praxí. V oblasti klinické medicíny však obecně z řady důvodů využití optimalizačních technik stále není tak obvyklé. Pro získání relevantních výsledků je totiž potřeba co nejpřesněji modelovat komplexní proudění krve uvnitř mnohdy složitých geometrií za použití důkladně otestovaných metod. Validace výsledků numerických simulací vůči naměřeným datům je pak také často složitá, jelikož provádění experimentů *in vivo* (v živém organismu) je z přirozených důvodů velmi obtížné, někdy až nemožné.

Přesto však proces optimalizace tvarů může zejména v kardiochirurgii a cévní chirurgii nacházet velký potenciál [1, 2, 3]. Vyvinutí optimalizačního procesu použitelného v medicínském prostředí by pro lékaře představovalo *in vitro* (mimo živý organismus) způsob, jak posuzovat chirurgický zákrok v rámci geometrie specifické pro daného pacienta. Navrhování a implantování objektů jako je stent či umělá chlopeň by pak bylo přizpůsobené přímo anatomii pacienta, což může vést ke zlepšeným klinickým výsledkům, ke snížení rizika pooperačních komplikací a k obecnému zlepšení kvality života pacienta po zákroku [3].

Příkladem konkrétního chirurgického zákroku, kde může proces optimalizace tvaru stěn najít své uplatnění, je tzv. úplné kavopulmonální spojení (anglicky *total cavopulmonary connection*, dále jen TCPC). TCPC se provádí u dětí, u nichž je diagnostikována tzv. funkčně jediná komora, tj. u pacientů se závažnou vrozenou srdeční vadou, kvůli které je jejich srdce schopno efektivně využít pouze jednu funkční komoru, a u nichž nelze chirurgicky zajistit fungující dvoukomorovou cirkulaci [4]. Jedná se o operaci, při které je horní dutá žíla (*vena cava superior*, ozn. *d* na obr. 1) chirurgicky napojena na plicnici. Také dolní dutá žíla (*vena cava inferior*, ozn. *b* na obr. 1) je napojena přímo na plicnici (*arteria pulmonalis*, ozn. *a* na obr. 1) a to zpravidla pomocí tzv. extrakardiálního konduitu (ozn. *c* na obr. 1), neboli mimosrdečního kanálu, vytvořeného z cévní protézy [5, 6].

TCPC umožňuje vytvořit funkční oběh krve, vzniklý systém cirkulace je však specifický a je citlivý na vícero faktorů, které nežádoucím způsobem přispívají ke ztrátě energie v systému. To postupně vede k celkovému selhání systému. Jedná se zejména o vlivy turbulentního proudění a kolize proudů, ke kterým dochází například ve vyústění horní a dolní duté žíly do plicnice. Právě problematika optimálního napojení extrakardiálního konduitu za účelem minimalizace ztráty energie či minimalizace namáhání tkáně může být předmětem procesu optimalizace [4, 7, 8]. Existuje řada studií zabývajících se návrhem optimálního tvaru napojení konduitu, často se však opírají pouze o metodu "pokus-omyl" a metody optimalizace nepoužívají [9, 10, 11].

Pro vytvoření optimalizačního rámce použitelného pro kardiochirurgii při simulování proudění krve je nutné použít k výpočtu hodnot účelové funkce, jež je předmětem minimalizace, efektivní a spolehlivou numerickou metodu. V rámci této práce využijeme k numerickým výpočtům mřížkovou Boltzmannovu metodu (anglicky *lattice Boltzmann method*, dále jen LBM). Poznamenejme, že pro metodu LBM byl



Obrázek 1: Schéma úplného kavopulmonálního spojení. Zvětšená část zobrazuje místo napojení mimosrdečního kanálu.

použit kód, který je vyvíjený na katedře matematiky FJFI ČVUT v Praze a který byl dle potřeb této práce upraven. Hlavní výhodou LBM je možnost masivní paralelizace na GPU (grafických procesorech), díky čemuž výpočty trvají řádově kratší dobu, než u standardních numerických metod využívaných k modelování proudění tekutin [12, 13].

Struktura práce je následující. První kapitola se zaměřuje na matematický model proudění tekutin s důrazem na model proudění krve v cévách. Druhá kapitola podrobně rozebírá použitou numerickou metodu LBM. V třetí kapitole je dále rozebrán nástroj vyvinutý pro efektivní parametrizaci a následné automatické generování geometrie. Čtvrtá kapitola obsahuje teorii matematické optimalizace a optimalizační metody použité v této práci, dále je v této kapitole představen navržený použitý optimalizační rámec. Poslední kapitola představuje výsledky provedených numerických simulací. Nejdříve je otestována funkčnost použitého optimalizačního rámce na sérii navržených testovacích úloh s jedním optimalizačním parametrem. Dále je optimalizace testována na složitějších úlohách s více optimalizačními parametry a je mimo jiné zkoumán vliv použité optimalizační metody a volby počátečního odhadu řešení. Jedna ze složitějších úloh zahrnuje zjednodušený 2D model cévní křižovatky vznikající při úplném kavopulmonálním napojení.

Kapitola 1

Matematický model proudění krve

V této kapitole popíšeme základní vztahy týkající se dynamiky kontinua relevantní pro tuto práci. Představíme rovnice popisující proudění ve volném prostředí. Popíšeme turbulentní chování a Reynoldsoův rozklad. Dále uvedeme některé z charakteristik důležité pro popis proudění krve v cévách. Na závěr shrneme předpoklady, které jsou dále kladeny na matematický model použitý v této práci.

1.1 Dynamika tekutin

Budeme považovat zkoumanou tekutinu za kontinuum, tedy ji budeme považovat za dokonale spojitou strukturu. Rovnice popisující dynamiku kontinua lze jednoznačně odvodit ze zákonů zachování hmoty, hybnosti a energie. Dále jsou tyto rovnice spjaty s fyzikálními vlastnostmi zkoumaného prostředí a materiálu.

V izotermálním systému lze proudění tekutiny vyjádřit pomocí soustavy parciálních diferenciálních rovnic ve tvaru

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (1.1a)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = \nabla \cdot \mathbf{T} + \rho \mathbf{g}, \quad (1.1b)$$

kde symbol \otimes značí vnější součin definovaný po složkách jako $(\mathbf{u} \otimes \mathbf{u})_{ij} = u_i u_j$, $i, j \in \{1, 2, 3\}$ [14]. Veličiny v (1.1) značí postupně

| | |
|--|---------------------------------|
| ρ [kg m ⁻³] | hustotu tekutiny, |
| \mathbf{u} [m s ⁻¹] | vektor makroskopické rychlosti, |
| \mathbf{T} [kg m ⁻¹ s ⁻²] | úplný tenzor napětí, |
| \mathbf{g} [m s ⁻²] | vektor zrychlení vnějších sil. |

Všechny veličiny v (1.1) jsou obecně funkcemi času t [s] a polohy \mathbf{x} [m].

Izotermální systém lze doplnit o stavovou rovnici ideálního plynu ve tvaru

$$p = c_s^2 \rho, \quad (1.2)$$

kde p [Pa] značí tlak a c_s [m s⁻¹] je rychlost zvuku v dané tekutině [15]. V tomto případě (1.1) společně s (1.2) tvoří uzavřený systém, který lze řešit bez použití zákona zachování energie.

1.1.1 Tenzor napětí a silové působení

Dynamický tenzor napětí budeme značit $\mathbf{T}_\mu = (\sigma_{ij}^\mu)$ [kg m⁻¹ s⁻²], kde $i, j \in \{1, 2, 3\}$. Pro newtonovské tekutiny platí, že složky dynamického tenzoru napětí jsou lineárně závislé na prostorových derivacích rychlosti. Tekutiny, které tuto lineární závislost nesplňují, se nazývají nenewtonovské. Pro složky dynamického tenzoru napětí newtonovských tekutin platí, že [16]

$$\sigma_{ii}^\mu = \lambda \nabla \cdot \mathbf{u} + 2\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_i}, \quad i \in \{1, 2, 3\}, \quad (1.3a)$$

$$\sigma_{ij}^\mu = \sigma_{ji}^\mu = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad i, j \in \{1, 2, 3\}, \quad i \neq j, \quad (1.3b)$$

kde μ [kg m⁻¹ s⁻¹] označuje dynamickou viskozitu a λ [kg m⁻¹ s⁻¹] je tzv. druhý viskózní koeficient [17]. Pro newtonovské tekutiny je \mathbf{T}_μ zjevně symetrický tenzor. Zavedeme-li dále tenzor rychlosti deformace \mathbf{D} [s⁻¹] vztahem

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T], \quad (1.4)$$

lze dynamický tenzor napětí ekvivalentně přepsat do tvaru

$$\mathbf{T}_\mu = 2\mu \mathbf{D} + \left(\lambda + \frac{2}{3}\mu \right) (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I}, \quad (1.5)$$

kde \mathbf{I} je jednotkový tenzor odpovídajícího rozměru. S použitím Stokesovy hypotézy, $\lambda = -\frac{2}{3}\mu$ [14], dávající do souvislosti dynamickou viskozitu a druhý viskózní koeficient, přejde vztah (1.5) do tvaru

$$\mathbf{T}_\mu = 2\mu \mathbf{D}. \quad (1.6)$$

Pomocí \mathbf{T}_μ můžeme dále úplný tenzor napětí pro newtonovskou tekutinu psát ve tvaru

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + \mathbf{T}_\mu, \quad (1.7)$$

kde \mathbf{I} je opět jednotkový tenzor odpovídajícího rozměru [17].

Tenzor rychlosti deformace se dále používá pro definici smykové rychlosti $\dot{\gamma}$ [s⁻¹] (anglicky *shear rate*) [17] vztahem

$$\dot{\gamma} = \sqrt{2} \|\mathbf{D}\|_F, \quad (1.8)$$

kde $\|\cdot\|_F$ značí Frobeniovu maticovou normu definovanou pro obecnou matici \mathbf{A} s rozměry $m \times n$ s prvky a_{ij} jako

$$\|\mathbf{A}\|_F := \sqrt{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^2}. \quad (1.9)$$

Je-li předmětem zkoumání silové působení tekutiny na hranici objektu $\partial\Omega$, můžeme s využitím (1.7) vyjádřit složky celkové síly působící na $\partial\Omega$ jako

$$F_i = \int_{\partial\Omega} (\mathbf{T}\mathbf{n})_i dS, \quad i \in \{1, 2, 3\}, \quad (1.10)$$

kde \mathbf{n} značí normálový vektor hranice $\partial\Omega$. Takto vyjádřená síla představuje součet působení tlakových a viskózních sil.

Pro popis interakce tekutiny s překážkou se dále často používá smykové napětí působící na stěně (anglicky *wall shear stress*) [18], které budeme značit τ_w [$\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-2}$] a které je ve 2D definované vztahem

$$\tau_w = \mathbf{T} \cdot \mathbf{t}, \quad (1.11)$$

kde \mathbf{t} značí jednotkový vektor tečný na stěnu v daném bodě.

1.1.2 Turbulence a Reynoldsův rozklad

Turbulentním budeme nazývat takové proudění, které je v čase i prostoru neuspořádané. Směr a velikost rychlosti turbulentního proudění se neustále mění, dochází k obecně nepravidelným fluktuacím. Proudění vykazuje náhodný a nestabilní charakter.

Turbulentní proudění je možné pozorovat při vyšších hodnotách Reynoldsova čísla, což je bezrozměrná veličina definovaná jako

$$\text{Re} = \frac{l_0 u_0}{\nu} = \frac{l_0^2}{t_0 \nu}, \quad (1.12)$$

kde ν je kinematická viskozita, dále l_0 [m], t_0 [s] a u_0 [m s^{-1}] jsou po řadě charakteristická délka, charakteristický čas a charakteristická rychlost specifické pro zkoumanou úlohu [19].

Z popsaných vlastností turbulentního proudění je patrné, že jeho popis je obtížný. Jedním z přístupů, jak turbulentní proudové pole popsat, je pomocí statistického přístupu, Reynoldsova průměrování veličin [20], při kterém dochází k dekompozici dané veličiny ψ na její střední hodnoty $\bar{\psi}$ (tento symbol bude dále značit středování v čase) a fluktuace ψ'

$$\psi = \bar{\psi} + \psi'. \quad (1.13)$$

Střední hodnotu můžeme získat

- středováním v čase, tj.

$$\bar{\psi}_T(\mathbf{x}) = \lim_{T \rightarrow +\infty} \frac{1}{T} \int_t^{t+T} \psi(\mathbf{x}, \tau) d\tau,$$

- středováním v prostoru,

$$[\psi_V(t)] = \lim_{|V(\mathbf{x})| \rightarrow +\infty} \frac{1}{|V(\mathbf{x})|} \int_{|V(\mathbf{x})|} \psi(\xi, t) d\xi,$$

kde $\mathbf{x} \in V(\mathbf{x})$,

- středováním přes statistický soubor (N opakováním identického procesu),

$$\{\psi_N(\mathbf{x}, t)\} = \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N} \sum_{k \in N} \psi(\mathbf{x}, t).$$

Zdůrazněme, že ψ v tomto případě představuje libovolnou skalární veličinu, za kterou můžeme volit např. složky rychlosti \mathbf{u}_i , tlak p či hustotu ρ [20]. Dále podotkneme, že v praxi je důležité, aby časový interval pro průměrování, resp. kontrolní objem, měl řádově větší velikost než je tomu u časového, resp. prostorového měřítka turbulentních jevů, které chceme popisovat [20].

Omezíme-li se nyní na Reynoldsův rozklad rychlostního pole $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ ve smyslu průměrování v čase, můžeme zavést turbulentní kinetickou energii T_{turb} [$\text{m}^2 \text{s}^{-2}$] vztahem

$$T_{\text{turb}} = \frac{1}{2} (\overline{(u'_1)^2} + \overline{(u'_2)^2} + \overline{(u'_3)^2}) = \frac{1}{2} (\overline{(u'_1)^2} + \overline{(u'_2)^2} + \overline{(u'_3)^2}), \quad (1.14)$$

kde jsme použili pravidla pro aritmetiku při používání Reynoldsova rozkladu [20].

1.2 Popis cévního proudění

Z důvodu přítomnosti řady fyzikálních, chemických a fyziologických procesů představuje cévní proudění velmi komplexní proces. V mnoha případech však postačí k jeho popisu zjednodušený model zanedbávající některé z charakteristik [21]. V této sekci krátce popíšeme některé z aspektů, u nichž lze za vhodných předpokladů uvážit zjednodušený model.

Elasticita stěn

Interakce elastického tělesa, tedy tělesa s pohyblivou hranicí, lze při modelování realizovat např. použitím metody vnořené hranice (anglicky *immersed boundary method*) [22]. V mnoha případech však můžeme elasticitu stěn překážky zanedbat a uvažovat pouze rigidní geometrii. Zejména v oblasti menší cév se ukazuje, že zanedbání elasticity cévních stěn nemá významný efekt na výsledek. [23] To však neplatí vždy, jelikož např. v oblasti aorty byly při uvažování rigidní geometrie pozorovány výraznější nezanedbatelné vlivy na celkovou chybu výsledku. [24]

Poznamenejme, že pro zahrnutí elasticity cévních stěn do uvažovaného modelu je potřebné vhodně stanovit podmínky interakce s tekutinou, což je v rámci cévního proudění obecně obtížný úkol mnohdy závisející na správném vyhodnocení *in vivo* měření. Kromě toho při onemocněních jako je arterioskleróza¹ ztrácí cévy u řady pacientů svou pružnost, tedy zahrnutí elasticity do modelu nutně nemusí korektně reflektovat fyziologický stav cév [21].

Viskozita krve

Pro matematický model je důležité správně volit hodnoty viskozity tak, aby v sobě zahrnovaly případné nenewtonovské chování zkoumané tekutiny. Většinou se krev považuje za newtonovskou tekutinu. Nicméně existují situace, kdy je newtonovské chování krve porušeno. Na jednu stranu v případech, kdy je rychlost proudění krve velmi malá, se červené krvinky mohou hromadit a v důsledku toho viskozita krve vzrůstá. Oblasti s takto pomalým prouděním lze najít např. v oblastech aneurysmatické dilatace². Na druhou stranu viskozita krve výrazně klesá v oblastech, kde krev teče skrz velmi úzké cévy, to zejména skrze cévy na úrovni měřítka arteriol či kapilár [21].

Existují modely viskozity, které se snaží přesněji zachytit fyzikální popis a chování viskozity krve [21, 27, 28]. Nejjednodušší je tzv. mocninný model (anglicky *Power-Law model*) [29]. Mocninný model předepíše pro viskozitu

$$\mu_{PL}(\dot{\gamma}) = K_p \dot{\gamma}^{n_1 - 1}, \quad (1.15)$$

kde K_p [kg m^{-1}] a n_1 [–] jsou konstanty. Dalším modelem je Cassonův model [28] splňující

$$\mu_{CA}(\dot{\gamma}) = \frac{1}{\dot{\gamma}} \left[k_0 + k_1 \sqrt{\dot{\gamma}} \right]^2, \quad (1.16)$$

kde k_1 [$\text{kg}^2 \text{m}^{-2}$] a k_2 [$\text{kg}^2 \text{m}^{-2}$] jsou konstantní parametry určené empiricky. Hlavní výhodou těchto základních modelů to, že v určitých geometriích a za konkrétních daných podmínek jsou pro ně k dispozici exaktní řešení, což např. poskytuje referenční hodnoty pro numerické simulace. Zjevnou nevýhodou těchto modelů je jejich omezená použitelnost, jelikož pro hodnoty smykové rychlosti blízké se nule selhávají [28].

¹ Arterioskleróza je onemocnění, při němž dochází ke zvětšení tloušťky stěn tepen a k jejich následné ztrátě elasticity [25].

² Aneurysmatickou dilatací se rozumí onemocnění, při kterém dochází k lokálnímu rozšíření cévy [26].

Mezi komplexnější modely lze řadit Crossův model [29], v definovaný vztahem

$$\mu_{CR}(\dot{\gamma}) = \frac{\mu_0 - \mu_\infty}{1 + (k\dot{\gamma})^{n_2}} + \mu_\infty, \quad (1.17)$$

kde k [s] a n_2 [–] jsou konstanty a dále platí

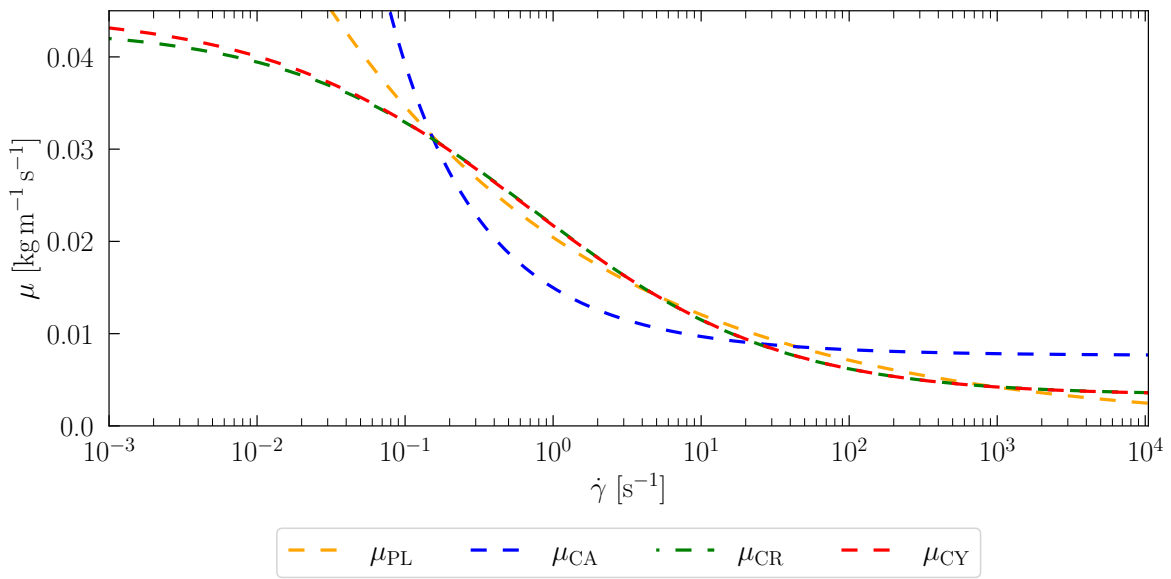
$$\mu_0 = \lim_{\dot{\gamma} \rightarrow 0^+} \mu(\dot{\gamma}), \quad \mu_\infty = \lim_{\dot{\gamma} \rightarrow \infty} \mu(\dot{\gamma}). \quad (1.18)$$

Posledním zmíněným modelem je Carreaův-Yassudův model [28] splňující

$$\mu_{CY}(\dot{\gamma}) = \mu_\infty + (\mu_0 - \mu_\infty) [1 + (\varepsilon\dot{\gamma})^a]^{\frac{n_3-1}{a}}, \quad (1.19)$$

kde ε [s], a [–] a n_3 [–] jsou opět empiricky určené konstantní parametry, které ovlivňují chování modelu mezi hraničními hodnotami viskozity. Pro μ_0 a μ_∞ opět platí (1.18).

Srovnání všech zmíněných modelů je k nahlédnutí na obr. 1.1, hodnoty parametrů byly převzaty z [27].



Obrázek 1.1: Srovnání nenewtonovských modelů viskozity, konkrétní hodnoty parametrů byly převzaty z [27]. Popisy jednotlivých modelů odpovídají definujícím vztahům (1.15), (1.16), (1.17) a (1.19)

Turbulentní proudění

Proudění krve je ve většině případů aproximovatelné pomocí laminárního proudění [29]. V některých případech však v cévním proudění dochází k výskytu turbulencí a chaotického chování [30]. Jedna z oblastí, kde lze turbulence pozorovat, je oblast nacházející se za cévní stenózou³ [32]. Rychlost proudění krve ve zúžené oblasti může výrazně vzrůstat, zmenšení průměru cévy však zajistí, že proudění setrvá v této části zúžení laminární [29]. Avšak bezprostředně za zúžením rychlost proudění zůstává zvýšená i v oblasti s původním průměrem, což může vést ke vzniku vírů a změně režimu proudění [21, 33].

³Stenóza cévy je onemocnění, při němž dochází k jejímu lokálnímu zúžení [31].

Výskyt turbulentního proudění je z fyziologického hlediska nežádoucí, jelikož je často doprovázen značnou disipací kinetické energie, kvůli níž mohou být části oběhové soustavy více namáhány. Mimoto cévní oblasti s výskytem turbulencí vykazují zvýšenou námahu na stěny cév, což může vyústit až k narušení tkáně a k nemocem jako je např. arterioskleróza. Je tedy žádoucí turbulence v proudění krve minimalizovat [21, 34].

1.3 Předpoklady matematického modelu v této práci

Na závěr shrneme, jaké dodatečné předpoklady budeme uvažovat v našem systému. Díky těmto předpokladům se řešení systému (1.1) zjednoduší. Konkrétně budeme v rámci této práce uvažovat pouze izotermální systém (tj. jeho teplota je v čase konstantní), na který nepůsobí žádné vnější síly. Uvažovaná tekutina je dále nestlačitelná, newtonovská a s konstantní dynamickou viskozitou.

Rovnice (1.1) se s uvažovanými předpoklady redukuje na [16]

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1.20a)$$

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \mu \Delta \mathbf{u}, \quad (1.20b)$$

kde jsme využili zápisu pomocí operátoru materiálové derivace

$$\frac{D}{Dt} := \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla. \quad (1.21)$$

Rovnice (1.20) jsou dále doplněny počátečními a okrajovými podmínkami, které jsou dále diskutovány v sekci 2.4.

Kapitola 2

Mřížková Boltzmannova metoda

Tekutinu můžeme považovat za kontinuum a využít makroskopického popisu, tedy nahlížet na tekutinu jako na celek a využívat ke stavovému popisu makroskopické veličiny jako je hustota, rychlost proudění nebo tlak, řídicími je rovnicemi je pak (1.1). Dále naopak můžeme popisovat dynamiku každé z částic v daném objemu a využít tak mikroskopického popisu. Popsat dynamiku částice na mikroskopickém měřítku není obtížné, avšak značným nedostatkem tohoto přístupu je jeho zjevná výpočetní náročnost, která je přímo úměrná počtu zkoumaných částic.

Mezistupněm mezi výše zmíněnými popisy je popis mezoskopický, který je založen na kinetické teorii. Tekutina je popsána pomocí jednočásticových pravděpodobnostních distribučních funkcí hustoty $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ [$\text{kg s}^3 \text{m}^{-6}$], popisujících systém v prostoru souřadnic \mathbf{x} , mikroskopických rychlostí $\boldsymbol{\xi}$ a čase t . Distribuční funkce f udávají hustotu částic vyskytujících se v okolí \mathbf{x} , v čase t mající mikroskopickou rychlost $\boldsymbol{\xi}$.

Jednočásticové distribuční funkce splňují Boltzmannovu transportní rovnici [13]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \xi_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + \sum_{i=1}^3 g_i \frac{\partial f}{\partial \xi_i} = C(f), \quad (2.1)$$

kde \mathbf{g} [m s^{-2}] je vektor zrychlení působení vnějších sil a $C(f)$ [$\text{kg s}^2 \text{m}^{-6}$] je kolizní operátor, který bude více rozebrán později v sekci 2.3.

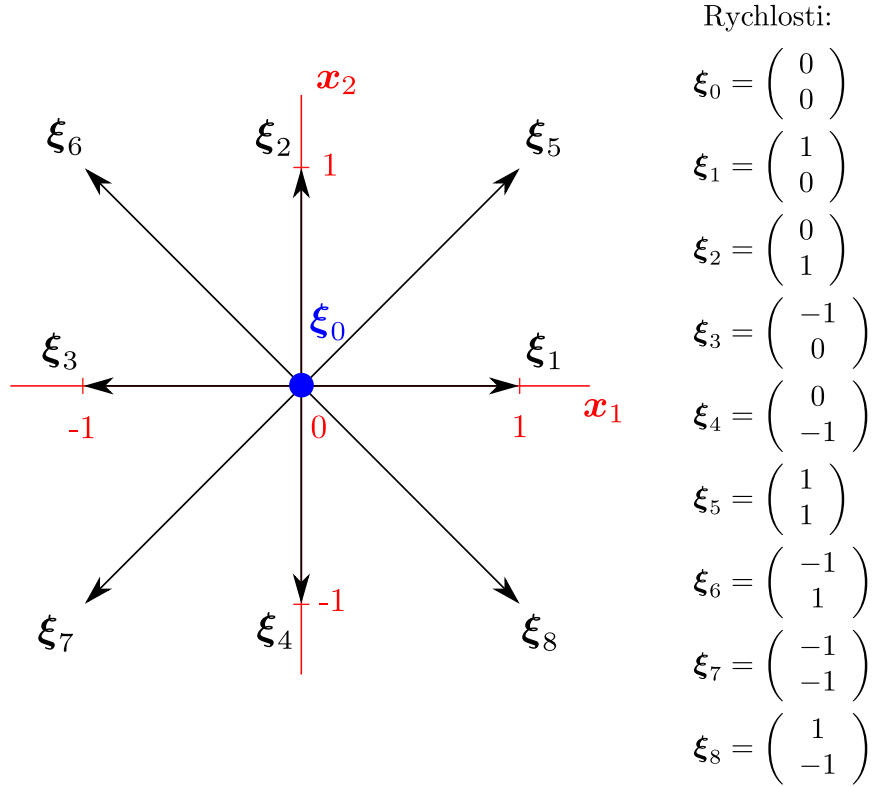
Pomocí distribučních funkcí f lze vyjádřit některé makroskopické veličiny jako statistické momenty [13], platí např.

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}, \quad (2.2a)$$

$$\rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \boldsymbol{\xi} d\boldsymbol{\xi}. \quad (2.2b)$$

Mřížková Boltzmannova metoda (LBM) je numerická metoda vyvinutá na konci dvacátého století, která je založená na mezoskopickém popisu tekutiny. Numerické schéma LBM lze odvodit diskretizací (2.1). V rámci LBM je diskretizace prostoru realizována diskrétní ekvidistantní mřížkou (anglicky *lattice*) a diskretizace prostoru rychlostí pomocí konečné množiny mikroskopických rychlostí. Zavádíme rychlostní modely označované $DdQq$, kde d , resp. q , značí dimenzi uvažovaného prostoru, resp. počet různých směrů, kterými se můžeme po mřížce z každého uzlového bodu pohybovat.

V rámci této práce uvažujeme rychlostní model D2Q9, schematicky je tento rychlostní model k nahlédnutí na obr. 2.1.



Obrázek 2.1: Geometrické znázornění rychlostního modelu D2Q9.

2.1 Bezrozměrnost a diskretizace

Dále představíme převodní vztahy při přechodu k bezrozměrnému systému jednotek. Definujeme výpočetní oblast společně s její diskretizací a popíšeme diskretizovanou Boltzmannovu transportní rovnici.

2.1.1 Přechod k bezrozměrným jednotkám

V rámci LBM je z hlediska použitelnosti a numerické přesnosti výhodné uvažovat všechny veličiny jako bezrozměrné, jak je diskutováno v [13]. Přejdeme od fyzikálních jednotek k bezrozměrným mřížkovým jednotkám. Fyzikální principy zůstávají platné nezávisle na volbě soustavy jednotek. Přechod mezi soustavami jednotek lze provést s použitím zákona podobnosti pro dynamiku tekutin, v kterém je pro ekvivalenci soustav požadováno, aby hodnota relevantních bezrozměrných veličin zůstala zachována [13]. Takovou bezrozměrnou veličinou, kterou lze při přechodu mezi soustavami využít, je např. Reynoldsovo číslo (1.12).

V následujících konverzních vztazích jsou všechny veličiny v mřížkových jednotkách označeny pra-

vým horním indexem L . Lze ukázat, že platí

$$l_0^L = \frac{l_0}{\Delta l}, \quad (2.3)$$

$$t_0^L = \frac{t_0}{\Delta t}, \quad (2.4)$$

$$\nu^L = \nu \frac{\Delta t}{\Delta l^2}, \quad (2.5)$$

$$u_i^L = \frac{\Delta t}{\Delta l} u_i, \quad i \in \{1, 2, 3\}. \quad (2.6)$$

Hodnoty těchto veličin volíme v souladu s danou fyzikální úlohou. Jako l_0 nejčastěji volíme rozměr výpočetní oblasti nebo překážky. Details odvození konverzních vztahů lze najít v [13].

Podotkněme, že z konverzního vztahu pro kinematickou viskozitu můžeme vidět, že pro danou síť s prostorovým krokem Δl je časový krok Δt svázán s hodnotou ν^L .

Pro jednoduchost budeme v rámci této práce pro prostorový krok Δl^L a časový krok Δt^L v mřížkových jednotkách uvažovat $\Delta l^L = \Delta t^L = 1$. Zdůrazněme, že v této kapitole budeme dále pracovat výhradně s veličinami v mřížkových jednotkách, upustíme tedy od rozlišování pomocí speciálního označení a nebudeme používat horní index L , ačkoliv budeme dále bezrozměrný popis uvažovat.

2.1.2 Výpočetní oblast a diskrétní mřížka

V rámci této práce bude výpočetní oblast označena $\Omega \subset \mathbb{R}^2$. Uvažujeme vždy oblast Ω obdélníkového tvaru s rozměry $(0, L_1) \times (0, L_2)$, kde L_1, L_2 jsou zadané velikosti stran specifické pro danou úlohu. Tuto oblast diskretizujeme pomocí ekvidistantní mřížky

$$\hat{\Omega} = \{\mathbf{x}_{i,j} = (i\Delta l, j\Delta l)^T \mid i \in \{1, \dots, N_1 - 1\}, j \in \{1, \dots, N_2 - 1\}\}, \quad (2.7a)$$

$$\bar{\hat{\Omega}} = \{\mathbf{x}_{i,j} = (i\Delta l, j\Delta l)^T \mid i \in \{0, \dots, N_1\}, j \in \{0, \dots, N_2\}\}, \quad (2.7b)$$

kde $N_1 [-]$, resp. $N_2 [-]$, značí počet uzlových bodů ve směru x_1 , resp. ve směru x_2 .

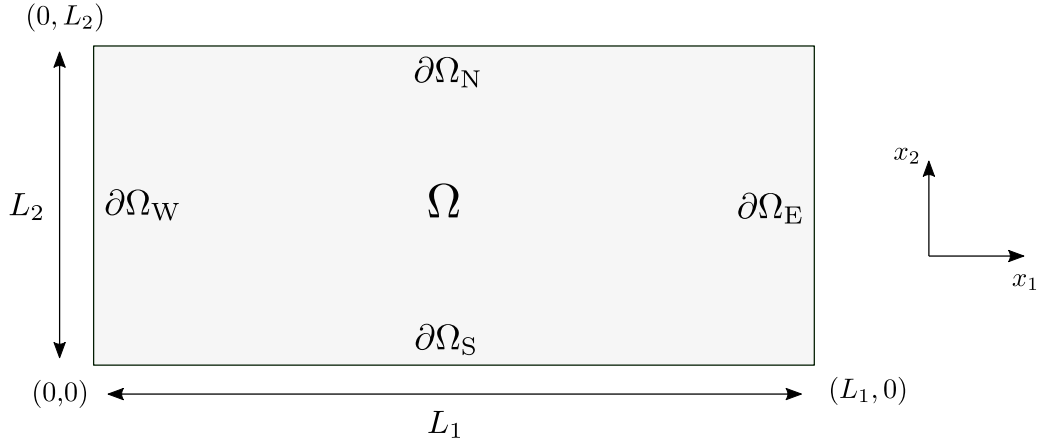
Hranici oblasti Ω budeme značit $\partial\Omega$ a budeme ji chápat jako uzávěr disjunktčního sjednocení jednotlivých částí

$$\partial\Omega = \overline{\partial\Omega_W \cup \partial\Omega_E \cup \partial\Omega_N \cup \partial\Omega_S}, \quad (2.8)$$

kde významy $\partial\Omega_W, \partial\Omega_E, \partial\Omega_N$ a $\partial\Omega_S$ jsou znázorněny na obr. 2.2. Dále budeme uvažovat diskretizaci hranice výpočetní oblasti jako

$$\partial\hat{\Omega} = \bar{\hat{\Omega}} \setminus \hat{\Omega}, \quad (2.9)$$

přičemž odpovídající části diskrétní hranice budeme značit $\partial\hat{\Omega}_W, \partial\hat{\Omega}_E, \partial\hat{\Omega}_N$ a $\partial\hat{\Omega}_S$.



Obrázek 2.2: Schematické znázornění výpočetní oblasti Ω a její hranice $\partial\Omega$. Význam disjunktních částí hranice $\partial\Omega$ je určen přiřazením daných označení k části hranice oblasti tak, jako je tomu na obrázku.

Časový interval, na kterém budeme danou úlohu vyšetřovat, budeme značit \mathcal{I} , přičemž $\mathcal{I} = \langle 0, T \rangle$, kde $T > 0$. Interval \mathcal{I} diskretizujeme jako

$$\hat{\mathcal{I}} = \left\{ t_i = i \frac{T}{N_t} \mid i \in \{0, \dots, N_t\} \right\}, \quad (2.10)$$

kde N_t představuje počet diskrétních časových kroků určených pro diskretizaci intervalu \mathcal{I} .

2.1.3 Diskrétní Boltzmannova transportní rovnice

Podotkněme, že při použití modelu D2Q9 budeme dále pracovat se sadou distribučních funkcí

$$\{f_k(\mathbf{x}, t) \mid k = 0, 1, \dots, 8\}, \quad \forall \mathbf{x} \in \hat{\Omega}, \quad \forall t \in \hat{\mathcal{I}}, \quad (2.11)$$

kde indexy odpovídají označení směrů u mikroskopických rychlostí v obr. 2.1.

Lze ukázat, že diskretizací rovnice (2.1) dostaneme tvar

$$f_k(\mathbf{x} + \Delta t \boldsymbol{\xi}_k, t + \Delta t) = f_k(\mathbf{x}, t) + C_k(\mathbf{x}, t) + \mathcal{S}_k(\mathbf{x}, t), \quad k \in \{0, \dots, q-1\}, \quad \forall \mathbf{x} \in \hat{\Omega}, \quad \forall t \in \hat{\mathcal{I}}, \quad (2.12)$$

kde C_k představuje diskrétní kolizní operátor a \mathcal{S}_k je diskrétní silový člen, jejichž podoba závisí na zvoleném typu mřížkové Boltzmannovy metody a je dále diskutována v sekci 2.3. Detaily odvození diskrétní formy Boltzmannovy transportní rovnice jsou k nahlédnutí v [13].

Dále můžeme zavést tzv. postkolizní distribuční funkce f_k^* vztahem

$$f_k^*(\mathbf{x}, t) = f_k(\mathbf{x}, t) + C_k(\mathbf{x}, t) + \mathcal{S}_k(\mathbf{x}, t), \quad k \in \{0, \dots, q-1\}, \quad \forall \mathbf{x} \in \hat{\Omega}, \quad \forall t \in \hat{\mathcal{I}}. \quad (2.13)$$

Pomocí f_k^* můžeme vyjádřit (2.12) ve tvaru

$$f_k(\mathbf{x} + \Delta t \boldsymbol{\xi}_k, t + \Delta t) = f_k^*(\mathbf{x}, t), \quad k \in \{0, \dots, q-1\}, \quad \forall \mathbf{x} \in \hat{\Omega}, \quad \forall t \in \hat{\mathcal{I}}, \quad (2.14)$$

což lze vnímat jako explicitní předpis pro výpočet distribučních funkcí.

2.1.4 Makroskopické veličiny

Na závěr uvedeme vztahy pro výpočet některých makroskopických veličin. Některé z těchto vztahů lze odvodit s pomocí procesu diskretizace z obecných vztahů 2.2 [13]. Vztah pro výpočet hustoty, hybnosti a tlaku má tvar

$$\rho = \sum_{k=0}^{q-1} f_k, \quad (2.15a)$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_{k=0}^{q-1} f_k \xi_k + \rho \frac{\Delta t}{2} \mathbf{g}, \quad (2.15b)$$

$$p = p_0 + c_s^2(\rho - \rho_0), \quad (2.15c)$$

kde p_0 [–] je bezrozměrná referenční hodnota tlaku, c_s [–] je bezrozměrná (mřížková) rychlost zvuku a ρ_0 je bezrozměrná referenční hodnota hustoty. Pro c_s v použitém modelu D2Q9 platí $c_s = \frac{1}{\sqrt{3}}$. Dále uvažujeme volbu $\rho_0 = 1$. Podrobný popis výpočtu makroskopických veličin je uveden v [13].

2.2 Algoritmus LBM

Algoritmus LBM lze shrnout do několika bodů:

1. **Inicializace** počátečních podmínek v mřížce, diskutováno v sekci 2.4.
2. **Cyklus** končící splněním podmínky ukončení, která je zadána uživatelem.
 - (a) **Šíření** (anglicky *streaming*) postkolizních distribučních funkcí f_k^* v příslušných směrech ξ_k .
 - (b) **Výpočet makroskopických veličin** pomocí vztahů (2.15).
 - (c) **Kolize** (anglicky *collision*), kdy dochází k výpočtu postkolizního stavu distribuční funkce pomocí (2.14) a **vyřešení okrajových podmínek** diskutovaných v sekci 2.4.
3. **Konec algoritmu.**

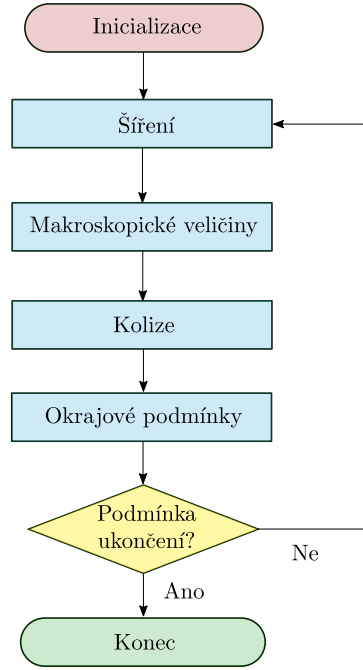
Vývojový diagram LBM je k nahlédnutí na obr. 2.3.

2.3 Kolizní operátory

V diskretizované Boltzmannově transportní (2.12) rovnici vystupuje diskrétní kolizní operátor C_k , jehož zvolená podoba určuje různé typy LBM. Existuje více možností volby C_k , můžeme pak rozlišit např. varianty SRT-LBM [35], MRT-LBM [36], CLBM [37], ELBM [38] nebo CuLBM [35]. V této práci se omezíme pouze na využití typu Centrálního LBM (CLBM, anglicky *Central LBM*), který popíšeme v rámci naší uvažovaného rychlostního modelu D2Q9.

Definujeme nejdříve diskrétní centrální momenty jako

$$K_{(\alpha_1, \alpha_2)} = \sum_{k=0}^8 f_k (\xi_{k,1} - u_1)^{\alpha_1} (\xi_{k,2} - u_2)^{\alpha_2}, \quad (2.16)$$



Obrázek 2.3: Vývojový diagram algoritmu LBM.

kde $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2) \in \mathbb{N}_0^2$. Za předpokladu $\mathbf{g} = \mathbf{0}$ zjevně platí

$$k_{(0,0)} = \rho, \quad (2.17a)$$

$$k_{(1,0)} = \sum_{k=0}^8 f_k(\xi_{k,1} - u_1) = 0, \quad (2.17b)$$

$$k_{(0,1)} = \sum_{k=0}^8 f_k(\xi_{k,2} - u_2) = 0. \quad (2.17c)$$

Kolizní krok zmíněný v sekci 2.2 je v rámci CLBM realizován v prostoru diskretních centrálních momentů distribučních funkcí, což zlepšuje numerickou stabilitu tohoto schématu. CLBM využívá pro D2Q9 devět relaxačních časů, které označíme jako τ_0, \dots, τ_8 . S pomocí těchto relaxačních časů definujeme diagonální matici

$$\mathbf{S} = \text{diag}\left(\frac{\Delta t}{\tau_0}, \frac{\Delta t}{\tau_1}, \dots, \frac{\Delta t}{\tau_8}\right) \quad (2.18)$$

a vektor $\mathbf{f} = (f_0, f_1, \dots, f_8)^T$. Kolizní operátor má pak tvar

$$\mathbf{C}_k = \mathbf{K}^{-1} \mathbf{S} (\boldsymbol{\kappa}^{\text{eq}} - \boldsymbol{\kappa}), \quad (2.19)$$

kde \mathbf{K} je matice přechodu z prostoru distribučních funkcí do prostoru centrálních momentů, $\boldsymbol{\kappa}$ je vektor centrálních momentů splňující $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{K} \mathbf{f}$ a $\boldsymbol{\kappa}^{\text{eq}}$ je vektor představující rovnovážné centrální momenty distribučních funkcí [37]. Matici přechodu \mathbf{K} volíme tak, aby vektor $\boldsymbol{\kappa}$ splňoval

$$\boldsymbol{\kappa} = (k_{(0,0)}, k_{(1,0)}, k_{(0,1)}, k_{(1,1)}, k_{(2,0)} + k_{(0,2)}, k_{(2,0)} - k_{(0,2)}, k_{(2,1)}, k_{(1,2)}, k_{(2,2)})^T, \quad (2.20)$$

a aby platilo

$$\boldsymbol{\kappa}^{\text{eq}} = (\rho, 0, 0, 0, 2\rho c_s^2, 0, 0, 0, \rho c_s^4)^T. \quad (2.21)$$

Platí, že ν je závislá na relaxačních parametrech τ_4 a τ_5 . S využitím předpokladu izotropie viskozity můžeme volit

$$\tau_4 = \tau_5 = \tau, \quad (2.22)$$

kde hodnota τ splňuje

$$\nu = c_s^2 \left(\tau - \frac{\Delta t}{2} \right). \quad (2.23)$$

Další relaxační parametry lze volit ke zlepšení numerické stability a volíme je dle [37] jako

$$\tau_3 = \tau_6 = \tau_7 = \tau_8 = 1, \quad (2.24)$$

přičemž na hodnotách τ_0 , τ_1 a τ_2 z důvodu (2.17) nezáleží.

2.4 Počáteční a okrajové podmínky

Vhodná volba počátečních a okrajových podmínek, která je v souladu se zkoumanou úlohou, je nedílnou součástí následné numerické simulace. Z důvodu specifického mezoskopického popisu tekutiny v rámci LBM je volbě počátečních a okrajových podmínek později použitých v praktické části práce nutné věnovat zvýšenou pozornost, a proto jsou dále použité počáteční a okrajové podmínky podrobněji popsány.

2.4.1 Počáteční podmínka

Uvažujme nyní oblast definovanou vztahy (2.7). K nastavení počáteční podmínky využijeme rovnovážnou distribuční funkci f^{eq} , která má tvar

$$f_k^{\text{eq}} = \rho w_k \left(1 + \frac{\xi_k \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\xi_k \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}{2c_s^2} \right), \quad k \in \{0, \dots, q-1\}, \quad (2.25)$$

kde w_k představují váhy specifické pro vybraný rychlostní model, přičemž pro použitý model D2Q9 platí [13]

$$\begin{aligned} w_0 &= \frac{4}{9}, \\ w_1 &= w_2 = w_3 = w_4 = \frac{1}{9}, \\ w_5 &= w_6 = w_7 = w_8 = \frac{1}{36}. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Počáteční rozložení ρ , resp. \mathbf{u} , definujeme jako ρ_{ini} , resp. \mathbf{u}_{ini} . Poté pro každý uzel $\mathbf{x} \in \hat{\Omega}$ v čase $t = 0$ bude platit

$$f_k(\mathbf{x}, 0) = f_k^{\text{eq}}(\rho_{\text{ini}}(\mathbf{x}), \mathbf{u}_{\text{ini}}(\mathbf{x})), \quad k \in \{0, 1, \dots, q-1\}. \quad (2.27)$$

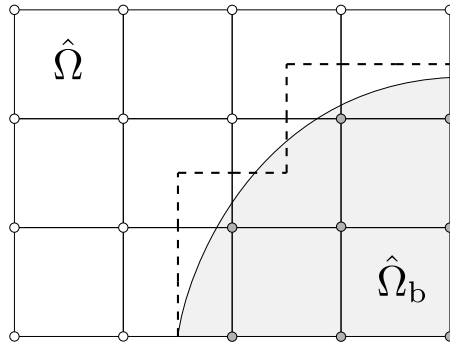
V rámci tohoto přístupu nastavení počáteční podmínky předpokládáme, že nerovnovážná část distribučních funkcí $f_k^{\text{neq}} = f_k - f_k^{\text{eq}}$ může být zanedbána a distribuční funkce mohou tak být aproximovány svou rovnovážnou částí. Značnou výhodou této volby aproximace počáteční podmínky je její následná jednoduchá implementace, a proto je v rámci této práce použita, byť existují i jiné, sofistikovanější, volby, viz např. [12].

2.4.2 Okrajové podmínky

2.4.2.1 Bounce-back okrajová podmínka

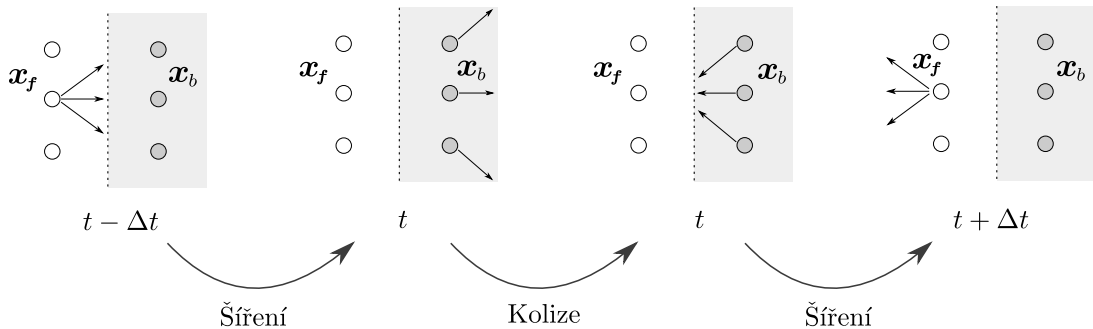
První zmíněnou okrajovou podmínkou je bounce-back okrajová podmínka, konkrétně její varianta *fullway*. Bounce-back okrajová podmínka se typicky používá na rozhraní tekutiny a pevné látky. Její výhoda je, že na rozhraní splňuje neklouzavou (anglicky *no-slip*) okrajovou podmínku a že její implementace je přímočará. Princip bounce-back okrajové podmínky je takový, že na rozhraní dojde k myšlenému odrazu distribučních funkcí odpovídajících částicím s mikroskopickou rychlostí ξ_k zpět do směrů, ze kterých se do daného uzlu dostaly s rychlostí $\xi_k = -\xi_k$.

Při použití této okrajové podmínky se rozhraní nachází v polovině vzdálenosti mezi uzly tekutiny a tělesa. Tato skutečnost nepůsobí problémy při modelování proudění okolo rovných zdí, které jsou rovnoběžné s použitou mřížkou. Pro zakřivené hranice nerovnoběžné s mřížkou však metoda bounce-back dává za vznik "schodovitý" tvar hranice, a tedy neposkytuje vhodnou aproximaci skutečné pozice rozhraní, viz obr. 2.4.



Obrázek 2.4: "Schodovitý" tvar hranice vznikající při použití bounce-back okrajové podmínky.

Fullway varianta bounce-back okrajové podmínky vyžaduje ke své realizaci a odrazení hypotetických částic dva časové kroky. Během nich doputují částice až do uzlů pevné látky, kde je jejich směr následně v dalším kroku šíření obrácen, jak je schematicky znázorněno na obr. 2.5.



Obrázek 2.5: Schématické znázornění fullway bounce-back okrajové podmínky. Šipky představují směr šíření hypotetické částice, oblast s šedou barvou představuje pevné těleso a čárkovaná hranice odpovídá pozici rozhraní.

Podotkněme, že dále existuje *halfway* varianta bounce-back okrajové podmínky, která ke své realizaci potřebuje pouze jeden časový krok, detaily lze najít např. v [13]. Nicméně v rámci této práce se omezíme pouze na využití varianty *fullway*.

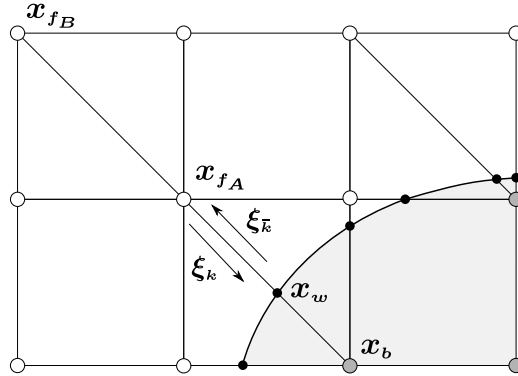
2.4.2.2 Interpolační okrajové podmínky

Jak již bylo zmíněno, bounce-back okrajová podmínka nereflektuje správným způsobem zakřivenou hranici tělesa. Vhodnější volbou okrajové podmínky pro rozhraní tekutiny a tělesa se zakřivenou hranicí jsou tzv. interpolační okrajové podmínky.

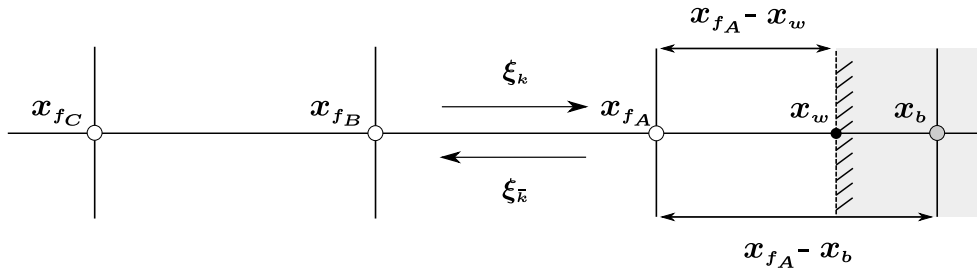
Obě dále zmíněné interpolační okrajové podmínky využívají k výpočtu distribučních funkcí lineární nebo kvadratickou interpolaci, při níž je použit bezrozměrný parametr Θ definovaný vztahem

$$\Theta = \frac{\|\mathbf{x}_{f_A} - \mathbf{x}_w\|}{\|\mathbf{x}_{f_A} - \mathbf{x}_b\|}, \quad (2.28)$$

kde \mathbf{x}_{f_A} je uzel tekutiny na hranici, $\mathbf{x}_b = \mathbf{x}_{f_A} + \Delta t \boldsymbol{\xi}_k$ je uzel pevné překážky, dále \mathbf{x}_w se nachází na skutečné hranici objektu tak, jak je ilustrováno na obr. 2.6a. Pro pozdější využití navíc dále zavádíme body $\mathbf{x}_{f_B} = \mathbf{x}_{f_A} + \Delta t \boldsymbol{\xi}_{\bar{k}}$ a $\mathbf{x}_{f_C} = \mathbf{x}_{f_A} + 2\Delta t \boldsymbol{\xi}_{\bar{k}}$, kde index \bar{k} splňuje $\boldsymbol{\xi}_{\bar{k}} = -\boldsymbol{\xi}_k$. Jejich význam je společně s významem vzdáleností použitých ve výpočtu parametru Θ znázorněn na obr. 2.6b. Podotkněme, že na hranici tělesa dále uvažujeme no-slip podmínku.



(a) Ilustrace významu bodů \mathbf{x}_{f_A} , \mathbf{x}_w , \mathbf{x}_b . Černé body na skutečné hranici tělesa představují pozice všech bodů \mathbf{x}_w , které slouží k výpočtu parametru Θ pro různé body tekutiny \mathbf{x}_{f_A} pro různé směry.



(b) Ilustrace významu bodů \mathbf{x}_{f_B} a \mathbf{x}_{f_C} a vzdáleností vyskytujících se ve výpočtu parametru Θ .

Obrázek 2.6: Schématické znázornění významu členů využitých v rámci interpolačních okrajových podmínek. Šedá oblast představuje oblast tělesa.

Jako první představíme interpolační okrajovou podmínku navrženou M. Bouzidim a kol. (dále jen Bouzidiho okrajová podmínka) v [39]. Popíšeme proces využitý k odvození jejího tvaru při lineární interpolaci.

Uvažujme nejdříve $\Theta \geq \frac{1}{2}$, tedy případ, kdy se skutečná hranice nachází blíže bodu \mathbf{x}_b . Myšlená částice v \mathbf{x}_{f_A} pohybující se s rychlostí ξ_k v čase t se od stěny odrazí v čase $t + \Theta\Delta t$ v hraničním bodě \mathbf{x}_w s opačnou rychlostí $\xi_{\bar{k}}$. Po uplynutí dalšího časového úseku $(1 - \Theta)\Delta t$, tj. v čase $t + \Delta t$ se částice bude nacházet v bodě \mathbf{x}_t , pro který platí

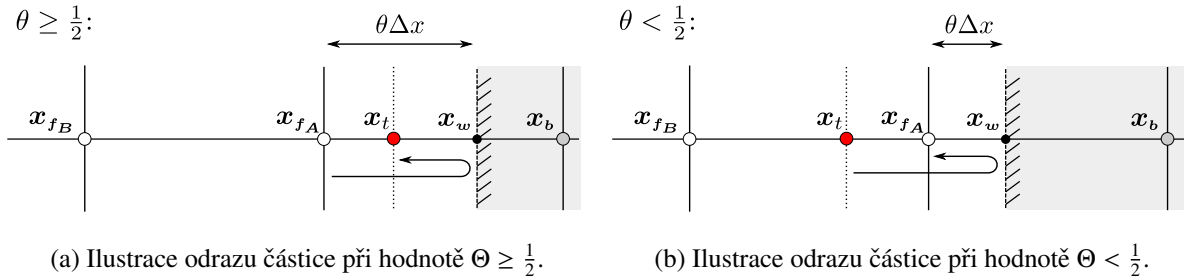
$$\mathbf{x}_t = \mathbf{x}_f + (2\Theta - 1)\Delta t \xi_k. \quad (2.29)$$

Platí tedy $f_{\bar{k}}(\mathbf{x}_t, t + \Delta t) = f_k^*(\mathbf{x}_{f_A}, t)$. Schéma tohoto odrazu je k nahlédnutí na obr. 2.7a. Hodnota $f_{\bar{k}}(\mathbf{x}_t, t + \Delta t)$ společně se známou hodnotou $f_{\bar{k}}(\mathbf{x}_{f_B}, t) = f_k^*(\mathbf{x}_{f_A}, t)$ je pak lineárně interpolována a tím je získána hodnota $f_{\bar{k}}(\mathbf{x}_{f_A}, t + \Delta t)$.

Dále uvažujme $\Theta < \frac{1}{2}$, tedy případ, kdy se skutečná hranice nachází blíže bodu \mathbf{x}_{f_A} . Pro interpolaci využijeme bod

$$\mathbf{x}_t = \mathbf{x}_f + (1 - 2\Theta)\Delta t \xi_k. \quad (2.30)$$

Myšlená částice v \mathbf{x}_t pohybující se s rychlostí ξ_k v čase t se od stěny odrazí v čase $t + (1 - \Theta)\Delta t$ v bodě \mathbf{x}_w s opačnou rychlostí $\xi_{\bar{k}}$. Za další časový úsek $\Theta\Delta t$ se bude vyskytovat v bodě \mathbf{x}_{f_A} . Platí tedy $f_k^*(\mathbf{x}_t, t) = f_{\bar{k}}(\mathbf{x}_{f_A}, t + \Delta t)$. Schéma tohoto odrazu je k nahlédnutí na obr. 2.7b. Hodnotu $f_k^*(\mathbf{x}_t, t)$ získáme lineární interpolací hodnot $f_k^*(\mathbf{x}_{f_A}, t)$ a $f_k^*(\mathbf{x}_{f_B}, t)$.



Obrázek 2.7: Schématické znázornění konstrukce použité při odvození Bouzidiho okrajové podmínky za použití lineární interpolace.

Shrňme-li výsledky lineární interpolace pro oba zmíněné případy hodnoty parametru Θ , má Bouzidiho okrajová podmínka tvar

$$\begin{aligned} \Theta < \frac{1}{2} : \quad f_{\bar{k}}(\mathbf{x}_{f_A}, t + \Delta t) &= 2\Theta f_k^*(\mathbf{x}_{f_A}, t) + (1 - 2\Theta) f_k^*(\mathbf{x}_{f_B}, t), \\ \Theta \geq \frac{1}{2} : \quad f_{\bar{k}}(\mathbf{x}_{f_A}, t + \Delta t) &= \frac{1}{2\Theta} f_k^*(\mathbf{x}_{f_A}, t) + \frac{2\Theta - 1}{2\Theta} f_k^*(\mathbf{x}_{f_A}, t). \end{aligned} \quad (2.31)$$

Jak bylo zmíněno, k odvození lze použít i kvadratickou interpolaci. Při použití kvadratické interpolace má Bouzidiho okrajová podmínka tvar

$$\begin{aligned} \Theta < \frac{1}{2} : \quad f_{\bar{k}}(\mathbf{x}_{f_A}, t + \Delta t) &= \Theta(1 + 2\Theta) f_k^*(\mathbf{x}_{f_A}, t) + (1 - 4\Theta^2) f_k^*(\mathbf{x}_{f_B}, t) - \Theta(1 - 2\Theta) f_k^*(\mathbf{x}_{f_C}, t), \\ \Theta \geq \frac{1}{2} : \quad f_{\bar{k}}(\mathbf{x}_{f_A}, t + \Delta t) &= \frac{1}{\Theta(2\Theta + 1)} f_k^*(\mathbf{x}_{f_A}, t) + \frac{2\Theta - 1}{\Theta} f_k^*(\mathbf{x}_{f_A}, t) - \frac{2\Theta - 1}{2\Theta + 1} f_k^*(\mathbf{x}_{f_B}, t). \end{aligned} \quad (2.32)$$

Bouzidiho interpolační schéma používá dva různé vzorce na základě hodnoty parametru Θ . V [40] však bylo odvozeno interpolační schéma, které oba případy sjednocuje v jeden společný tvar pro všechny hodnoty Θ . Okrajovou podmínku využívající toto schéma nazýváme sjednocená okrajová podmínka (anglicky *unified interpolation scheme*). Opět lze pro její odvození využít lineární nebo kvadratickou interpolaci. Při použití lineární interpolace má sjednocená okrajová podmínka tvar

$$f_k(\mathbf{x}_{f_A}, t + \Delta t) = \frac{1}{1 + \Theta} \left[\Theta f_k(\mathbf{x}_{f_A}, t) + (1 - \Theta) f_k(\mathbf{x}_{f_B}, t) + \Theta f_k(\mathbf{x}_{f_A}, t) \right]. \quad (2.33)$$

Použitím kvadratické interpolace získáme pro sjednocenou okrajovou podmínku tvar

$$f_k(\mathbf{x}_{f_A}, t + \Delta t) = \frac{1}{(1 + \Theta)(2 + \Theta)} \left[\Theta(1 + \Theta) f_k(\mathbf{x}_{f_A}, t) + 2(1 - \Theta^2) f_k(\mathbf{x}_{f_B}, t) - \Theta(1 - \Theta) f_k(\mathbf{x}_{f_C}, t) + 2\Theta(2 + \Theta) f_k(\mathbf{x}_{f_A}, t) - \Theta(1 + \Theta) f_k(\mathbf{x}_{f_B}, t) \right]. \quad (2.34)$$

2.4.2.3 Rovnovážná okrajová podmínka

Jednou z možností jak aproximovat neznáme hodnoty distribučních funkcí v krajních uzlových bodech oblasti je pomocí rovnovážné distribuční funkce jako

$$f_i(\mathbf{x}, t) = f_i^{(\text{eq})}(\rho(\mathbf{x}, t), \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)), \quad \forall k \in \{0, \dots, q-1\}, \forall t \in \hat{I}. \quad (2.35)$$

Výhodou této aproximace je její snadná implementace, nevýhodou je zanedbání nerovnovážné části distribuční funkce.

2.4.2.4 Momentová okrajová podmínka

Momentová okrajová podmínka (anglicky *moment-based boundary condition*) představuje způsob, jak na hranicích oblasti předepsat okrajovou podmínku na základě znalosti příslušných makroskopických momentů, s pomocí nichž a známých hodnot distribučních funkcí jsou zbylé, neznámé, distribuční funkce jednoznačně vyjádřitelné. Detaily odvození této okrajové podmínky lze najít v [12].

Při použití momentové okrajové podmínky je předpokládána znalost diskrétních obecných momentů definovaných jako

$$m_{(\alpha_1, \alpha_2)} = \sum_{k=0}^{q-1} f_k \xi_{k,1}^{\alpha_1} \xi_{k,2}^{\alpha_2}, \quad (2.36)$$

kde $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2) \in \mathbb{N}_0^2$.

Podobně jako tomu bylo pro centrální momenty v sekci 2.3, lze zavést matici přechodu z prostoru distribučních funkcí do prostoru obecných momentů. Tuto matici budeme značit \mathbf{M} , její konkrétní podobu lze najít např. v [41]. Jelikož je \mathbf{M} regulární, lze na základě obecných momentů a známých hodnot distribučních funkcí vyjádřit libovolný počet neznámých distribučních funkcí. Pro výpočet hustoty lze využít hodnot známých distribučních funkcí a zadané rychlosti, naopak pro výpočet rychlosti použijeme známe distribuční funkce a zadanou hustotu.

Podotkněme, že z charakteru momentové okrajové podmínky vyplývá, že vztahy pro výpočet neznámých distribučních funkcí musí být odvozeny zvlášť pro každou požadovanou množinu těchto neznámých - v rámci modelu D2Q9 to znamená odvození pro 4 různé strany obdélníkové oblasti a 4 zbývajících navzájem různých rohů této oblasti. Konkrétní vztahy pro každou tuto neznámou množinu distribučních funkcí jsou k nahlédnutí v [12].

2.5 Výpočet síly v LBM

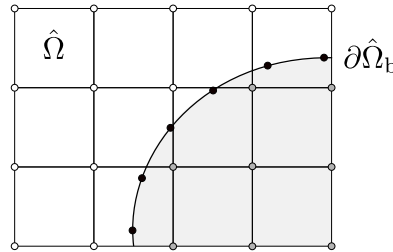
Existují dva standardní způsoby výpočtu síly v rámci LBM - metoda výměny hybnosti a metoda integrace tenzoru napětí, viz [42]. Zde popíšeme pouze metodu integrace tenzoru napětí, detaily ohledně metody výměny hybnosti lze najít např. v [42]. Dále uvažujme oblast Ω , těleso $\Omega_b \subset \Omega$ a zkoumejme sílu, kterou tekutina v oblasti působí na těleso.

Metoda integrace tenzoru napětí (anglicky *stress integration method*) je přímo založena na vztahu (1.10). Zapišeme-li tento vztah v diskrétním tvaru, integrál přejde v sumu přes konečný počet bodů a pro i -tou složku síly \mathbf{F} dostaneme vztah ve tvaru

$$F_i(t) = \sum_{\mathbf{x} \in \partial\hat{\Omega}_b} \Delta s(\mathbf{x}) \sum_{j=1}^2 \sigma_{ij}(\mathbf{x}, t) n_j(\mathbf{x}), \quad i \in \{1, 2\}, \quad (2.37)$$

kde $\Delta s(\mathbf{x})$ představuje náhradu diferenciálu dS (viz (1.10)) v bodě \mathbf{x} , $\sigma_{ij}(\mathbf{x}, t)$ představuje složky diskrétního úplného tenzoru napětí v bodě \mathbf{x} a v čase t , dále pak $\mathbf{n}(\mathbf{x})$ představuje jednotkový vnější normálový vektor hranice tělesa v bodě $\mathbf{x} \in \partial\hat{\Omega}_b$. Upozorníme, že body z $\partial\hat{\Omega}_b$, tj. body diskretizující hranici obtékaného tělesa, se nemusí obecně nacházet na diskrétní mřížce $\hat{\Omega}$, a tedy musí být hodnota tenzoru napětí v těchto bodech extrapolována z okolních bodů mřížky. Obecně totiž hranici obtékaného tělesa parametrizujeme množinou lagrangeovských bodů, které, jak bylo zmíněno, nemusí nutně ležet v $\hat{\Omega}$. Vztah bodů diskretizujících hranici obtékaného tělesa a uzlů mřížky je schematicky znázorněn na obr. 2.8. Popis hranice objektů je podrobněji rozebrán v kapitole 3.

K výpočtu hodnoty σ_{ij} v bodech mřížky lze využít aproximace pomocí konečných diferencí nebo explicitní vztahy pro lokální výpočet, jak bylo zkoumáno v předchozí bakalářské práci [43].



Obrázek 2.8: Schématické znázornění rozdílu mezi uzly mřížky a body diskretizujícími hranici obtékaného tělesa, které jsou vyznačeny černou barvou.

2.6 Poznámky k implementaci LBM

Jak již bylo zmíněno v úvodu práce, pro numerické řešení pomocí LBM byl využit kód vyvíjený na katedře matematiky (dále jen KM) FJFI ČVUT v Praze, který slouží k řešení Navierových-Stokesových rovnic pro newtonovskou nestlačitelnou tekutinu. Program je implementovaný v jazyce C++ a využívá paralelizace na GPU s využitím platformy CUDA. V kódu je pro model D2Q9 implementována použitá varianta mřížkové Boltzmannovy metody CLBM.

Pro účely této práce byl rozšířen kód vzniklý v rámci předchozí bakalářské práce [43], v kterém byla oproti vyvíjenému kódu na KM FJFI provedena řada úprav, zejména:

- implementace metody integrace tenzoru napětí pro výpočet síly pomocí difference,
- implementace různých způsobů lokálního výpočtu tenzoru napětí,

- implementace interpolačních okrajových podmínek,
- výpočet sledovaných veličin a jejich následný výpis do souborů.

V kódu byl pak v rámci této práce implementován výpočet zkoumaných účelových funkcí a také momentová okrajová podmínka. Pro implementaci momentové okrajové podmínky pro model D2Q9 byl využit generátor vytvořený Ing. Pavlem Eichlerem implementovaný v C++ využívající knihovnu GiNaC [44], umožňující provádět symbolické matematické operace.

Kapitola 3

Generování geometrie

V této práci budeme v rámci všech numerických simulací předpokládat rigidní geometrii. To nám umožní před spuštěním numerické simulace vygenerovat všechny potřebné objekty, které lze během numerické simulace použít. Konkrétně je mimo jiné možné před začátkem numerických výpočtů určit, v jakých bodech diskretní mřížky se bude nacházet překážka, vypočítat hodnoty parametru Θ ze sekce 2.4.2.2 a jaké budou tvary normálových vektorů v bodech, které jsou použity pro výpočet síly, jak bylo popsáno v sekci 2.5.

V této sekci popíšeme použitý proces generování geometrie použitý v rámci této práce. Jelikož v rámci této práce využijeme k numerickým simulacím mřížkovou Boltzmannovu metodu (viz kapitola 2), je tomu proces generování geometrie uzpůsoben a jeho cílem je připravit data tak, aby pak mohla být vhodně využita v rámci diskretní ekvidistantní mřížky použité v LBM.

3.1 Struktura generovaných dat

Výsledná vygenerovaná geometrie je na závěr exportována jako datový soubor, který lze v rámci numerické simulace načíst. Nejdříve tedy popíšeme strukturu exportovaného souboru. Jak již bylo zmíněno, hlavním cílem generátoru je popsat jednotlivé body mřížky použité v LBM.

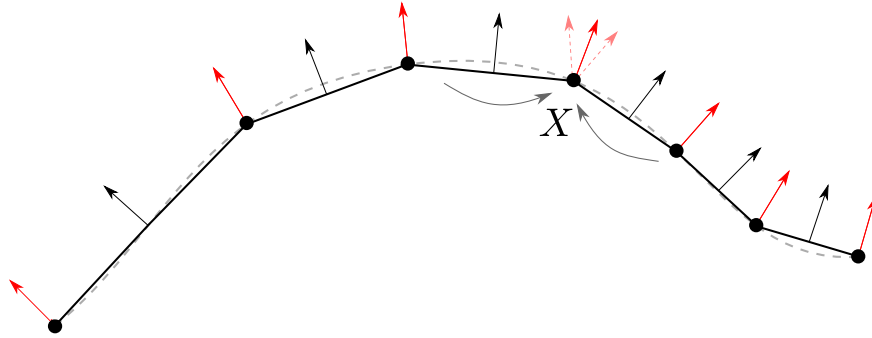
U každého bodu mřížky lze jednoznačně určit jeho souřadnice na mřížce a zda se v něm nachází překážka. Dále můžeme v každém bodu určit hodnoty interpolačních parametrů Θ pomocí (2.28) - pokud se v okolí bodu v daném směru nenachází hranice žádného objektu, definujeme z implementačních důvodů hodnotu příslušného interpolačního parametru jako -1 . Výpočet interpolačního parametru bude podrobněji rozebrán později.

V každém z bodů můžeme tedy určit souřadnice x a y , informaci o přítomnosti překážky a dále celkem 8 různých hodnot interpolačního parametru. Při použití diskretní mřížky ve tvaru (2.7) exportovaný soubor tedy obsahuje matici rozměru $c \times 11$, kde c označuje kardinalitu množiny $\hat{\Omega}$ z (2.7).

Podotkneme, že pokud je předmětem zkoumání síla působící na obtékaný objekt, je nutné mimo právě popsaný exportovaný soubor předat dále také pole obsahující informaci o normálových vektorech v lagrangeovských bodech, které diskretizují hranici objektu. Výpočet normálových vektorů na hranici je podrobněji popsán dále. Jelikož v této práci není zkoumáno silové působení, uvažujeme pouze export souboru popsaného výše.

3.2 Výpočet normálového vektoru

V případě, kdy je přímo zadán analytický předpis hranice diskretizovaného objektu, lze hodnoty normálového vektoru v každém z bodů diskretizujících hranici jednoduše nalézt pomocí metod matematické analýzy. Pokud nemáme k dispozici analytický popis hranice, můžeme hranici po částech lineárně aproximovat spojením sousedních lagrangeovských bodů úsečkou. Normálové vektory v jednotlivých bodech pak můžeme aproximovat průměrem normálových vektorů ze sousedních bodů. Schematicky je tato konstrukce vyobrazena na obr. 3.1.



Obrázek 3.1: Ilustrace konstrukce normálových vektorů u obecné křivky bez zadaného analytického předpisu. X představuje jeden z lagrangeovských bodů diskretizujících hranici. Tvar hranice, která je po částech lineárně nahrazena, je znázorněn čárkovaně.

3.3 Výpočet interpolačního parametru

Pro výpočet interpolačního parametru Θ nyní opět předpokládáme, že máme k dispozici analytický popis křivky popisující hranici nebo využijeme již zmíněné po částech lineární aproximace. To jednoznačně určuje vazbu $\phi = 0$ určující tvar spojitě hranice objektu.

Parametr Θ je nutné vypočítat pro každý ze směrů možného šíření kromě směru odpovídajícímu ξ_0 . V rámci modelu D2Q9 tedy celkem určujeme 8 hodnot pro každý bod hranice, označme je $\Theta_1, \Theta_2, \dots, \Theta_8$, kde číslo indexu odpovídá příslušnému směru, viz obr. 2.1. Použijeme-li značení z obr. 2.6a, tak můžeme vidět, že průsečík \mathbf{x}_w s hranicí nemůže existovat pro každý ze směrů. Jak již bylo zmíněno, z implementačních důvodů pro tyto směry pokládáme $\Theta_i = -1$, přičemž Bouzidiho interpolační podmínka v těchto směrech není použita.

Interpolační parametr získáme vypočtením průsečíku hranice a úsečky ve směru ξ_i . Opět s použitím značení z obr. 2.6a parametrizujeme úsečku spojující body $\mathbf{x}_{f_A} = (x_{f_A}, y_{f_A})$ a $\mathbf{x}_b = (x_b, y_b)$ jako

$$\begin{aligned} x &= s x_{f_A} + (1 - s) x_b, \\ y &= s y_{f_A} + (1 - s) y_b, \end{aligned} \tag{3.1}$$

kde $s \in \langle 0, 1 \rangle$. Dále dosazením (3.1) do rovnice vazby ϕ získáme obecně nelineární rovnici pro s . Tuto rovnici řešíme v rámci generátoru pomocí Powellovy hybridní metody [45], která je dostupná v rámci knihovny SciPy implementované v jazyce Python. Je snadné nahlédnout, že získaná hodnota s pak odpovídá hledané hodnotě parametru Θ_i , a není tedy nutné explicitně počítat souřadnice bodu \mathbf{x}_w a používat vztah (2.28). Podotkněme, že v rámci tohoto kroku předpokládáme, že řešení výše zmíněné nelineární

rovnice bude nejvýše jedno, což však nepředstavuje výrazné omezení pro tvary objektů, které můžeme použít.

3.4 Struktura kódu a poznámky k implementaci

Generátor 2D geometrie použitý v rámci této práce byl objektově implementovaný v programovacím jazyce Python s využitím volně dostupných knihoven. Celý generátor tvoří samostatný balík jménem `meshgenerator`. V této sekci krátce popíšeme strukturu a fungování tohoto balíku sestávajícího ze tří hlavních částí. Struktura a propojení tříd v rámci balíku `meshgenerator` je znázorněna na obr. 3.3.

První část obsahuje pomocné funkce a pomocnou třídu `Point`, která reprezentuje jeden bod na mřížce, tedy mezi její atributy patří souřadnice, informace o přítomnosti překážky a hodnoty interpolačních parametrů.

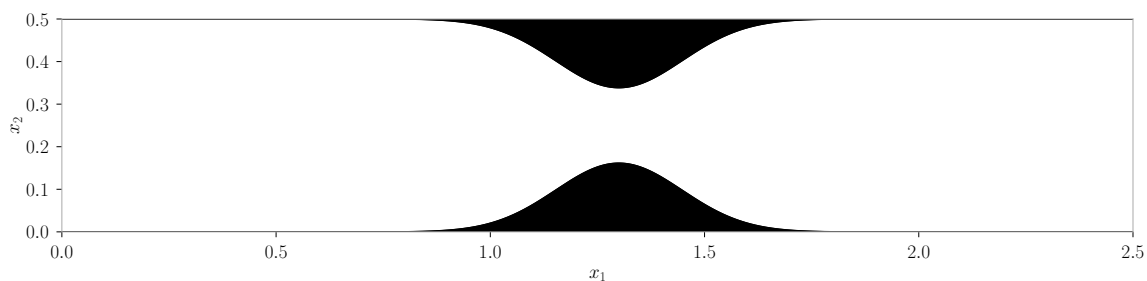
Druhá část se skládá z jednotlivých modulů, které obsahují třídy a podtřídy reprezentující jednotlivé objekty, které lze v rámci simulace použít. Potomkem rodičovské třídy `GeneralObject`, která zastřešuje veškeré použitelné objekty, je třída `ClosedObject`, resp. `OpenObject`, reprezentující objekty s definovaným vnitřkem, resp. objekty bez jednoznačně definovaného vnitřku. Třída `OpenObject` tedy navíc obsahuje atribut nesoucí informaci o orientaci objektu v oblasti, díky němuž lze pak jednoznačně objekt vymežit. Ze třídy `ClosedObject` jsou pak dále odvozené třídy `Polygon` (reprezentuje objekty ve tvaru mnohoúhelníka) a `Implicit` (reprezentuje objekty, které jsou definovány pomocí implicitního vztahu). Pro následné zjednodušení práce s konkrétními implicitně zadanými objekty byly definovány třídy `Circle` (reprezentuje objekty ve tvaru kružnice), `Ellipse` (reprezentuje objekty ve tvaru elipsy) a `CassiniOval` (reprezentuje objekty ve tvaru Cassiniho oválu¹). Ze třídy `OpenObject` jsou odvozené třídy `FunctionCurve` (reprezentuje objekty zadané pomocí explicitního funkčního předpisu) a `SVGCurve` (reprezentuje křivku, která byla vytvořena ve formátu SVG [46]). Pro případné jednodušší generování zúžených cév pak byla implementována třída `Exponential`, která je potomkem třídy `FunctionCurve`. Model stenózy cévy vzniklý použitím instancí třídy `Exponential` je prezentován na obr. 3.2. Podotkněme, že všechny implementované objekty byly vybrány tak, aby byly lehce popsateľné pomocí několika parametrů a byly tak vhodné pro využití v rámci optimalizace, která je předmětem této práce. Výjimku tvoří třída `SVGCurve`, která vznikla v rámci předchozí bakalářské práce a která nevyužívá k vytvoření objektu žádného parametru a nelze ji tak v rámci optimalizace použít.

Třetí část balíku `meshgenerator` pak definuje třídu `NumSimProblem`, která souhrnně definuje celou úlohu, jež je dále numericky řešena. Pomocí konfiguračního souboru, v kterém jsou definovány uživatelem požadované parametry výpočetní oblasti, je inicializována datová struktura popsaná v sekci 3.1 obsahující veškeré body diskrétní mřížky použité v LBM. Konstruktoru třídy `NumSimProblem` jsou dále předány všechny instance podtříd třídy `GeneralObject`, které tvoří celkovou požadovanou geometrii a které jsou dále využity pro aktualizaci informací o jednotlivých bodech mřížky. Vygenerovaná datová struktura je pak exportována a dále využita v rámci numerické simulace.

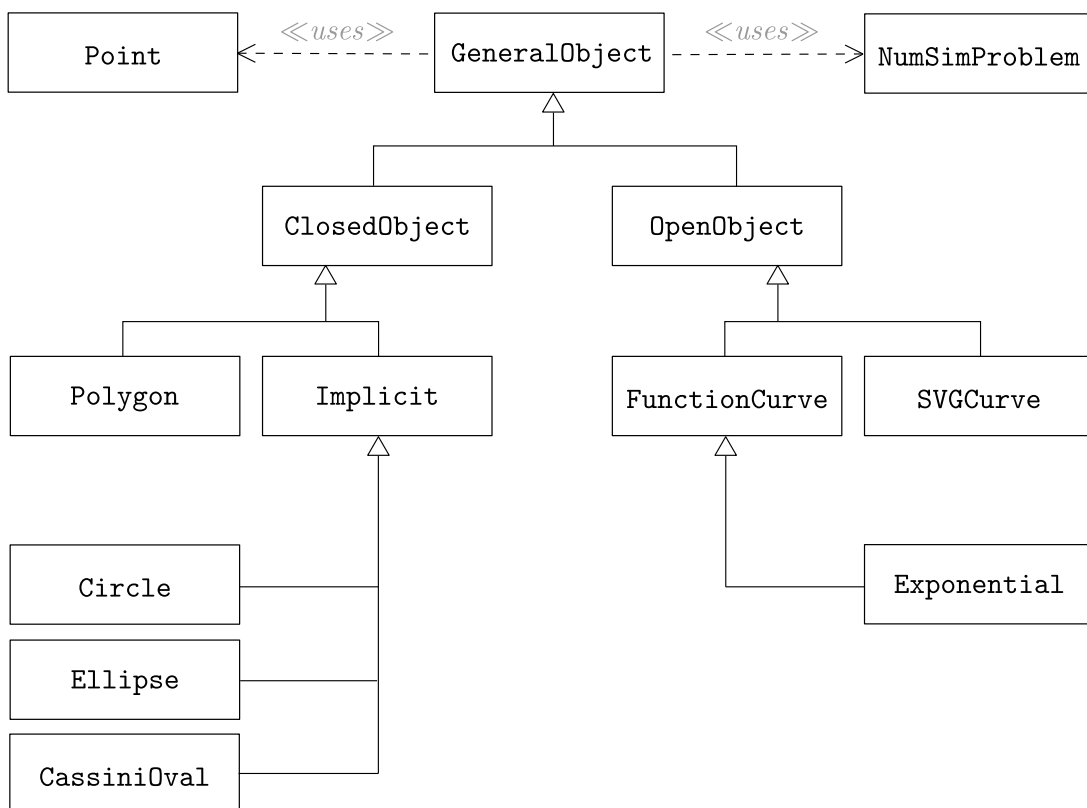
¹Cassiniho ovál je křivka pojmenovaná po Giovannim Cassinim. Jsou-li P_1 a P_2 dva pevné body v rovině a $b > 0$, pak je Cassiniho ovál formálně definován jako množina

$$\{ P \mid |PP_1| \cdot |PP_2| = b^2 \},$$

tedy množinou bodů, jejichž součin vzdáleností od P_1 a P_2 je konstantní.



Obrázek 3.2: Model stenózy cévy vzniklý použitím instancí třídy `Exponential`.



Obrázek 3.3: Diagram znázorňující strukturu a využití tříd v rámci balíku `meshgenerator`.

Kapitola 4

Matematická optimalizace

Matematická optimalizace (jinak také matematické programování) je rozsáhlý obor zahrnující řadu disciplín, mezi které patří např. lineární a nelineární optimalizace, konvexní programování, celočíselné programování a jiné [47]. Cílem této kapitoly bude shrnout základní koncepty a techniky relevantní pro tuto práci. Nejprve představíme základní úlohu zkoumanou v rámci optimalizace, dále popíšeme některé z technik řešení úloh bez vazeb a s vazbami. Poté rozebereme optimalizaci úloh, v nichž obecně není známý předpis účelové funkce. Na závěr popíšeme celkový optimalizační rámec aplikovaný na optimalizaci úloh v této práci.

4.1 Základní optimalizační úloha

Bud' $m, n, q \in \mathbb{N}$. Dále necht' jsou definovány spojité funkce $f : \mathbf{D} \rightarrow \mathbb{R}$, $\mathbf{g} : \mathbf{D} \rightarrow \mathbb{R}^m$, $\mathbf{h} : \mathbf{D} \rightarrow \mathbb{R}^q$, kde $\mathbf{D} = \text{Dom}(f) \cap \text{Dom}(\mathbf{g}) \cap \text{Dom}(\mathbf{h})$, tj. jde o průnik definičních oborů daných funkcí. Definujme množinu

$$\mathbf{X} = \{\mathbf{x} \in \mathbf{D} \subseteq \mathbb{R}^n \mid \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0} \wedge \mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}\}, \quad (4.1)$$

kde funkční nerovnost $\mathbf{g} \leq \mathbf{0}$ je chápána po složkách. Obecně je pak cílem matematické optimalizace řešit úlohu

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbf{X}} f(\mathbf{x}). \quad (4.2)$$

Minimalizovanou funkci f nazýváme účelová funkce, množinu \mathbf{D} nazýváme definiční obor úlohy, \mathbf{X} se nazývá množina přípustných řešení [47].

Při klasifikaci optimalizačních problémů hovoříme o tzv. vazbách. Ty jsou určeny definicí množiny \mathbf{X} , tj. rovnostními a nerovnostními podmínkami pro funkce \mathbf{g} a \mathbf{h} , a tvarem množiny \mathbf{D} . V případě podmínek definovaných $\mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0} \wedge \mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ hovoříme o explicitních vazbách, naopak omezení definovaná definičním oborem úlohy \mathbf{D} nazýváme implicitní.

Prvek $\mathbf{x}^* \in \mathbf{X}$ budeme nazývat optimálním řešením úlohy (4.2) za předpokladu, že

$$\mathbf{x}^* = \operatorname{argmin}_{\mathbf{x} \in \mathbf{X}} f(\mathbf{x}). \quad (4.3)$$

Podotkněme, že optimální řešení nemusí být dáno jednoznačně a množinu všech optimálních řešení úlohy nazveme optimální množina. Je důležité zmínit, že hledání optimálního řešení lze ekvivalentně formulovat také jako hledání maxima z funkce $-f$ přes stejnou množinu \mathbf{X} , což umožňuje řešit problémy maximalizace pomocí stejných technik, které budou představeny dále [47, 48].

4.2 Řešení úlohy bez vazeb

V této sekci rozebere řešení úlohy bez vazeb, tj. v úloze (4.2) budeme předpokládat $\mathbf{X} = \mathbb{R}^n$. Popíšeme pouze část metod, které lze pro řešení optimalizačních úloh bez vazeb použít. Konkrétně se zaměříme na tzv. kvazinewtonovské metody. Detailní popis metod pro řešení úloh bez vazeb lze najít např. v [48].

Kvazinewtonovské metody jsou třídou gradientních metod. Mezi gradientní metody dále patří např. metoda největšího spádu nebo metoda konjugovaných gradientů. Dále popsané algoritmy slouží k nalezení stacionárního bodu účelové funkce f , tedy bodu \tilde{x} takového, že $\nabla f(\tilde{x}) = 0$. Za dodatečného předpokladu splnění vhodných podmínek lze pak usoudit, zda se jedná o hledaný globální extrém účelové funkce [47, 48].

Kvazinewtonovské metody jsou iterativní a jejich hlavní myšlenkou je, že v každé iteraci používají k určení směru spádu zlepšující se aproximace inverze Hessovy matice $(\nabla^2 f(\mathbf{x}))^{-1}$ založeném na algoritmu pro výpočet inverzní matice. K této aproximaci je v každé iteraci potřeba znalost gradientu účelové funkce. Výpočetní složitost kvazinewtonovských metod je obecně $O(n^2)$, což poskytuje vylepšení ve srovnání s Newtonovou metodou, jejíž výpočetní složitost je $O(n^3)$ [48]. Dále se zaměříme na dva konkrétní používané kvazinewtonovské algoritmy.

4.2.1 Davidonův-Fletcherův-Powellův algoritmus

První představenou kvazinewtonovskou metodou je Davidonův-Fletcherův-Powellův (dále jen DFP) algoritmus [49]. Dále budeme značit H_k aproximaci inverze Hessovy matice v k -té iteraci, na začátku inicializujeme $H_0 = I$. Algoritmus DFP lze pak shrnout v následujících krocích:

1. **Inicializace:** Volba $\mathbf{x}_0 \in \mathbf{X}$ a následné vypočtení $\mathbf{g}_0 = \nabla f(\mathbf{x}_0)$. Nastavení hodnot $k = 0$ a $H_0 = I$.
2. **Cyklus** končící splněním podmínky ukončení, která je zadána uživatelem. Z důvodu konečné strojové přesnosti typicky požadujeme, aby vypočtená hodnota gradientu byla menší než požadovaný parametr $\varepsilon > 0$.
 - (a) **Vypočtení směru hledání** jako $\mathbf{d}_k = -H_k \mathbf{g}_k$.
 - (b) **Jednorozměrná minimalizace**, při které najdeme $\alpha_k = \operatorname{argmin}_{\alpha \geq 0} f(\mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{d}_k)$.
 - (c) **Vypočtení a nastavení hodnot:**

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k, \quad (4.4a)$$

$$\mathbf{g}_{k+1} = \nabla f(\mathbf{x}_{k+1}). \quad (4.4b)$$

- (d) **Aproximace inverze Hessovy matice:**

$$\mathbf{p}_k = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k, \quad (4.5a)$$

$$\mathbf{q}_k = \mathbf{g}_{k+1} - \mathbf{g}_k, \quad (4.5b)$$

$$H_{k+1} = H_k - \frac{1}{\mathbf{q}_k^T H_k \mathbf{q}_k} (H_k \mathbf{q}_k)(H_k \mathbf{q}_k)^T + \frac{1}{\mathbf{p}_k^T \mathbf{q}_k} (\mathbf{p}_k \mathbf{p}_k^T). \quad (4.5c)$$

3. **Konec algoritmu.**

Posloupnost vektorů \mathbf{x}_k v algoritmu konverguje k řešení úlohy. Jedním z teoretických výsledků týkajících se DFP algoritmu je fakt, že pro f konvexní konverguje ke stacionárnímu bodu pro libovolnou volbu počátečního vektoru \mathbf{x}_0 [48].

4.2.2 Broydenův-Fletcherův-Goldfarbův-Shannoův algoritmus

Druhou kvazinevtonovskou metodou, kterou popíšeme, je Broydenův-Fletcherův-Goldfarbův-Shannoův (dále jen BFGS) algoritmus [50]. BFGS algoritmus je modifikací DFP algoritmu, s kterým sdílí všechny jeho kroky, jedinou jeho odlišností je využití jiné aproximace inverze Hessovy matice. BFGS algoritmus nahrazuje rovnici (4.5c) vztahem

$$H_{k+1} = H_k - \frac{1}{\mathbf{p}_k^T \mathbf{q}_k} \left[\mathbf{p}_k^T (H_k \mathbf{q}_k)^T + (H_k \mathbf{q}_k) \mathbf{p}_k^T - \left(1 + \frac{\mathbf{q}_k^T H_k \mathbf{q}_k}{\mathbf{p}_k^T \mathbf{q}_k} \right) (\mathbf{p}_k \mathbf{p}_k^T) \right]. \quad (4.6)$$

Z hlediska konvergence se dá BFGS algoritmus považovat za lepší než DFP. Za zmínění stojí modifikace BFGS algoritmu jménem L-BFGS (nebo LM-BFGS, z anglického *limited-memory BFGS*), která pracuje pouze s omezeným množstvím počítačové paměti a je vhodná pro úlohy s větší dimenzí [51].

4.3 Řešení úlohy s vazbami

Budeme nyní uvažovat úlohu 4.2 z úvodu kapitoly, kde množina přípustných řešení má tvar 4.1. V této sekci popíšeme, jak tuto úlohu řešit převedením na posloupnost optimalizačních úloh bez vazeb, jejichž řešení bylo diskutováno v sekci 4.2. Opět existuje více způsobů, jak úlohy s vazbami řešit, zde však popíšeme pouze řešení pomocí penalizačních a bariérových metod.

4.3.1 Penalizační metody

Jak již bylo řečeno, penalizační metody převádí řešení omezených úloh na úlohy bez omezení. Základním principem penalizačních metod je zohlednění podmínek vymezujících množinu přípustných řešení tak, že k účelové funkci přidáme penalizační člen, který reflektuje míru překročení daných podmínek. Jako penalizační funkci budeme označovat spojitou skalární funkci na \mathbb{R}^n splňující

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}) &= 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbf{X}, \\ p(\mathbf{x}) &> 0, \quad \text{jinak.} \end{aligned} \quad (4.7)$$

Typickou volbou penalizační funkce je např.

$$p(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^m \left(\max \{ g_j(\mathbf{x}), 0 \} \right)^2 + \sum_{j=1}^q h_j(\mathbf{x})^2. \quad (4.8)$$

Pomocí penalizační funkce p dále sestrojíme modifikovanou účelovou funkci

$$\phi(\mathbf{x}, r) = f(\mathbf{x}) + rp(\mathbf{x}), \quad (4.9)$$

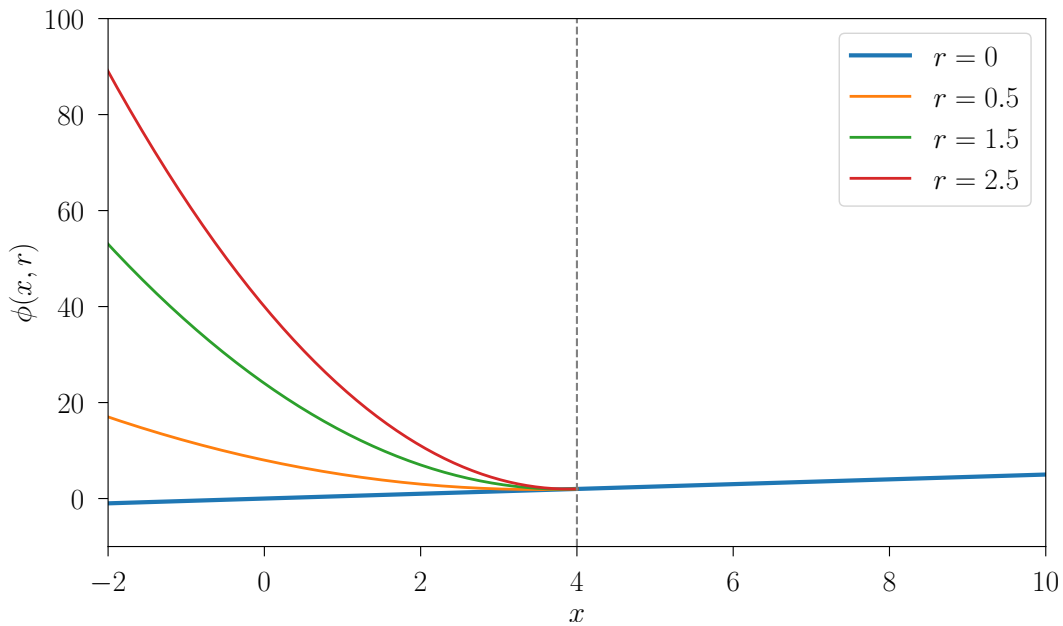
kde $r > 0$ nazýváme penalizační parametr. Z definice penalizační funkce můžeme vidět, že hodnoty modifikované účelové funkce $\phi(\mathbf{x}, r)$ jsou různé od původní funkce f pouze pro taková \mathbf{x} , kdy je porušena zadaná zohledněná podmínka.

Pro řešení úlohy s vazbami budeme v každé iteraci konstruovat nový člen ostře rostoucí posloupnosti penalizačních parametrů r_1, r_2, \dots , pro který budeme řešit optimalizační úlohu bez vazeb pro modifikovanou funkci $\phi(\mathbf{x}, r_k)$. Optimální řešení \mathbf{x}_k této úlohy bez vazeb (nalezené např. technikami popsány v sekci 4.2) využijeme jako počáteční bod pro další iteraci. Toto opakujeme dokud není splněna podmínka $r_k p(\mathbf{x}_k) < \varepsilon$ pro zvolené $\varepsilon > 0$, při splnění této podmínky lze \mathbf{x}_k považovat za postačující aproximaci

řešené úlohy s vazbami. Podotkněme, že penalizační metody umožňují hledat optimální řešení během jednotlivých iterací mimo množinu přípustných řešení [48].

Konstrukce posloupnosti penalizačních parametrů a princip penalizační metody je znázorněn na obr. 4.1 na triviálním příkladu minimalizace funkce $f(x) = 0,5x$ s podmínkou $g(x) = 4 - x \leq 0$. Modifikovaná účelová funkce má v tomto případě tvar

$$\phi(x, r) = 0,5x + r(\max\{4 - x, 0\})^2. \quad (4.10)$$



Obrázek 4.1: Ilustrace penalizační metody použité pro minimalizaci funkce $f(x) = 0,5x$ s podmínkou $g(x) = 4 - x \leq 0$. Barevně jsou odlišeny různé tvary modifikované účelové funkce $\phi(x, r)$ v závislosti na hodnotě penalizačního parametru r . Podmínka vymezující množinu přípustných řešení je vyznačena šedě čárkovaně. Množina přípustných řešení se nachází v polovině napravo od této šedé čárkované osy.

4.3.2 Bariérová metoda

Bariérová metoda využívá podobného principu jako penalizační metody, jejím hlavním rozdílem však je, že při iterativním hledání optimálního řešení úlohy s vazbami je garantováno, že odhady řešení vždy budou prvky vnitřku přípustné množiny, který má tvar

$$\mathbf{X}^o = \{\mathbf{x} \in \mathbf{D} \subseteq \mathbb{R}^n \mid \mathbf{g}(\mathbf{x}) < \mathbf{0}\}. \quad (4.11)$$

Metody splňující tuto podmínku se obecně nazývají metody vnitřního bodu.

Opět zohledníme podmínky vymezující množinu přípustných řešení tak, že k účelové funkci přidáme nový člen, který reflektuje míru jejich překročení. Jako bariérovou funkci B budeme chápat spojitou skalární funkci na \mathbf{X}^o splňující podmínku

$$(\exists j \in \{1, 2, \dots, m\})(\lim_{\substack{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y} \\ \mathbf{x} \in \mathbf{X}^o}} g_j(\mathbf{x}) = 0) \Rightarrow \lim_{\substack{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y} \\ \mathbf{x} \in \mathbf{X}^o}} B(\mathbf{x}) = +\infty. \quad (4.12)$$

Typickou volbou bariérové funkce je např. logaritmická bariérová funkce

$$B(\mathbf{x}) = - \sum_{j=1}^m \ln(-g_j(\mathbf{x})), \quad (4.13)$$

nebo dále např. reciproká bariérová funkce

$$B(\mathbf{x}) = - \sum_{j=1}^m \frac{1}{g_j(\mathbf{x})}. \quad (4.14)$$

Pomocí bariérové funkce B , podobně jako u penalizačních metod, sestojíme modifikovanou účelovou funkci

$$\phi(\mathbf{x}, r) = f(\mathbf{x}) + rB(\mathbf{x}), \quad (4.15)$$

kde $r > 0$ je volený parametr [48].

Pro řešení úlohy s vazbami pomocí bariérové metody budeme v každé iteraci konstruovat nový člen kladné ostře klesající posloupnosti parametrů r_1, r_2, \dots , pro který budeme řešit optimalizační úlohu bez vazeb pro modifikovanou funkci $\phi(\mathbf{x}, r_k)$. Vektor $\mathbf{x}_k = \operatorname{argmin}_{\mathbf{x} \in \mathbf{X}^0} (f(\mathbf{x}) + r_k B(\mathbf{x}))$ určený optimalizací úlohy bez vazeb využijeme jako počáteční bod pro další iteraci. Toto opakujeme dokud není splněna podmínka $r_k < \varepsilon$ pro zvolené $\varepsilon > 0$, při splnění této podmínky \mathbf{x}_k považujeme za postačující aproximaci řešení úlohy s vazbami.

Dále zmíníme volbu bariérové funkce B_∞ využívané k definici tzv. extrémní bariérové funkce (anglicky *extreme barrier function*), jak se nazývá modifikovaná účelová funkce při této volbě [52]. Tato bariérová funkce kopíruje asymptotické chování výše zmíněných bariérových funkcí a má tvar

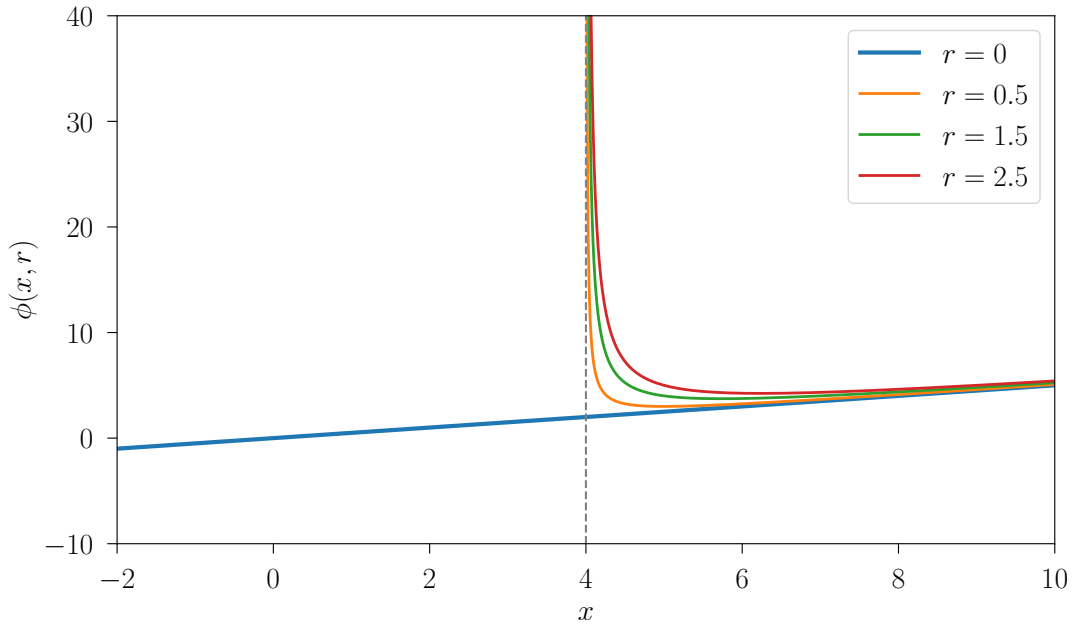
$$\begin{aligned} B_\infty(\mathbf{x}) &= 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbf{X}, \\ B_\infty(\mathbf{x}) &= +\infty, \quad \text{jinak.} \end{aligned} \quad (4.16)$$

Modifikovaná účelová funkce (extrémní bariérová funkce) má pak tvar

$$\begin{aligned} f_\infty(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbf{X}, \\ f_\infty(\mathbf{x}) &= +\infty, \quad \text{jinak.} \end{aligned} \quad (4.17)$$

Konstrukce posloupnosti parametrů $(r_k)_{k \in \mathbb{N}}$ a princip bariérové metody je znázorněn na obr. 4.2 opět na příkladu minimalizace funkce $f(x) = 0,5x$ s podmínkou $g(x) = 4 - x \leq 0$ a volbou reciproké bariérové funkce. Modifikovaná účelová funkce má tvar

$$\phi(x, r) = 0,5x - \frac{r}{4 - x}. \quad (4.18)$$



Obrázek 4.2: Ilustrace bariérové metody použité pro minimalizaci funkce $f(x) = 0,5x$ s podmínkou $g(x) = 4 - x \leq 0$. Barevně jsou odlišeny různé tvary modifikované účelové funkce $\phi(x, r)$ v závislosti na hodnotě penalizačního parametru r . Podmínka vymežující množinu přípustných řešení je vyznačena šedě čárkovaně. Množina přípustných řešení se nachází v polorovině napravo od této šedě čárkované osy.

4.4 Black-box optimalizace

V praxi je běžné setkat se s případy, kdy je nutné v rámci řešení úlohy optimalizovat účelovou funkci f , jejíž analytický předpis stejně jako předpis pro výpočet derivace není známý. Tento problém je typický např. pro výsledky numerických simulací, kdy účelovou funkci dokážeme pouze vyčíslit v konkrétním bodě a získat tak požadovanou funkční hodnotu. Často pak v praxi také samotné vyčíslení funkce v bodě může představovat problém a může být např. velmi časově nebo výpočetně náročné. Zjevně pro řešení problémů tohoto charakteru není vhodné použít výše zmíněné standardní optimalizační algoritmy.

Řešením úloh, v kterých je účelová funkce (popř. i zadané vazby) dána pomocí tzv. black-boxu¹, se zabývá disciplína jménem black-box optimalizace (dále jen BBO). V rámci BBO typicky není předpokládáno, že by účelová funkce byla spojitá nebo diferencovatelná [52, 53, 54].

Zmíníme, že v literatuře se často black-box optimalizace zaměřuje s bezgradientní optimalizací (anglicky *derivative-free optimization*, dále jen DFO), která zahrnuje metody a techniky pro účelové funkce, jejichž derivace není známa či je obtížné ji vypočítat [52, 53, 55]. Tyto dvě disciplíny sdílí řadu společných vlastností, liší se však zejména v tom, že v rámci DFO může být předpis pro výpočet derivace účelové funkce známý. Dále BBO v sobě zahrnuje i heuristické metody, zatímco DFO se zaměřuje zejména na metody, které mohou být spolehlivě matematicky analyzovány z hlediska konvergence a stanovení zastavovací podmínky. Proto ačkoliv, jak bylo zmíněno, se pojmy BBO a DFO často zaměňují, v rámci této práce je budeme chápat jako dvě rozdílné disciplíny [52].

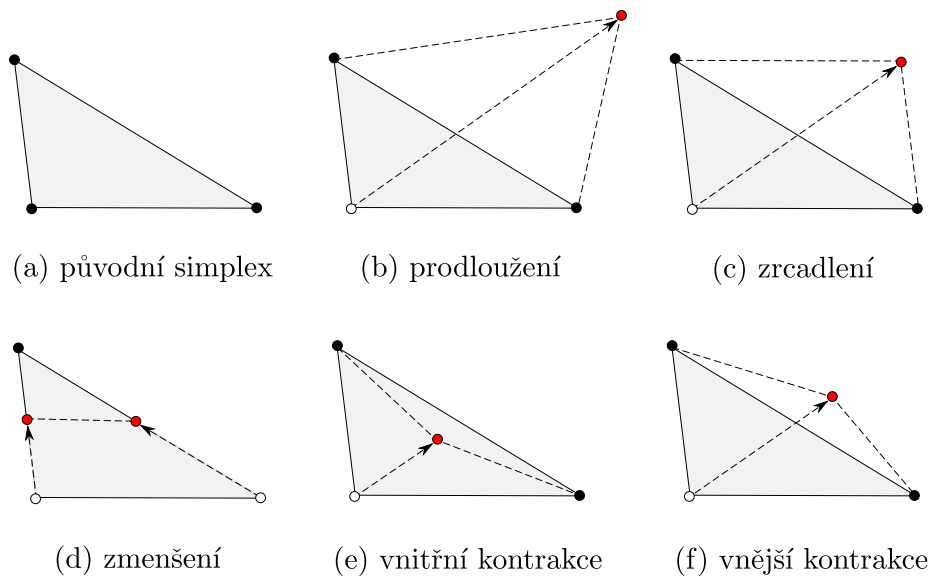
¹Jako black-box se v programování označuje systém, jehož vnitřní mechanismy nejsou uživateli známy. To znamená, že uživateli je přístupný obecně pouze vstup a výstup daného systému [52].

Dále podotkněme, že v literatuře lze najít různé klasifikace metod v rámci BBO. V rámci této práce se budeme držet klasifikace uvedené v [52] a budeme tedy odlišovat heuristické metody, metody přímého vyhledávání a metody založené na využití náhradního modelu. Každou z těchto tříd v této sekci krátce popíšeme.

4.4.1 Heuristické metody

Mezi heuristické optimalizační metody patří mimo jiné třída genetických algoritmů, která je blíže popsána v [52] společně s dalšími různými heuristickými metodami. V této sekci popíšeme jinou používanou heuristickou metodu, a to Nelderovu-Meadovu metodu, také někdy označovanou jako simplexová² metoda³[57].

Nelderova-Meadova metoda, využívá k optimalizaci iterativní konstrukci simplexů. Na jejím začátku je zvolen počáteční simplex a účelová funkce je vyčíslena v každém z vrcholů tohoto simplexu. V každé další iteraci algoritmu je daný simplex transformován tak, aby lépe odpovídal pozici hledaného stacionárního bodu účelové funkce. Transformace simplexu probíhá v každé iteraci manipulací jeho bodů pomocí operací prodloužení, zrcadlení, zmenšení a kontrakce (vnitřní a vnější), které jsou schematicky zobrazeny na obr. 4.3. Operace, které se provedou během iterace, jsou určeny porovnáním hodnot funkce ve vrcholech simplexu. Nově vzniklý simplex sdílí se simplexem z předchozí iterace buď právě jeden, nebo právě n vrcholů. Algoritmus pokračuje v iterativní transformaci simplexu, dokud není splněna podmínka ukončení, která musí být blíže specifikována uživatelem [52]. Detaily ohledně Nelderovy-Meadovy metody zahrnující popis algoritmu a volby podmínky ukončení jsou rozebrány např. v [52, 53, 57].

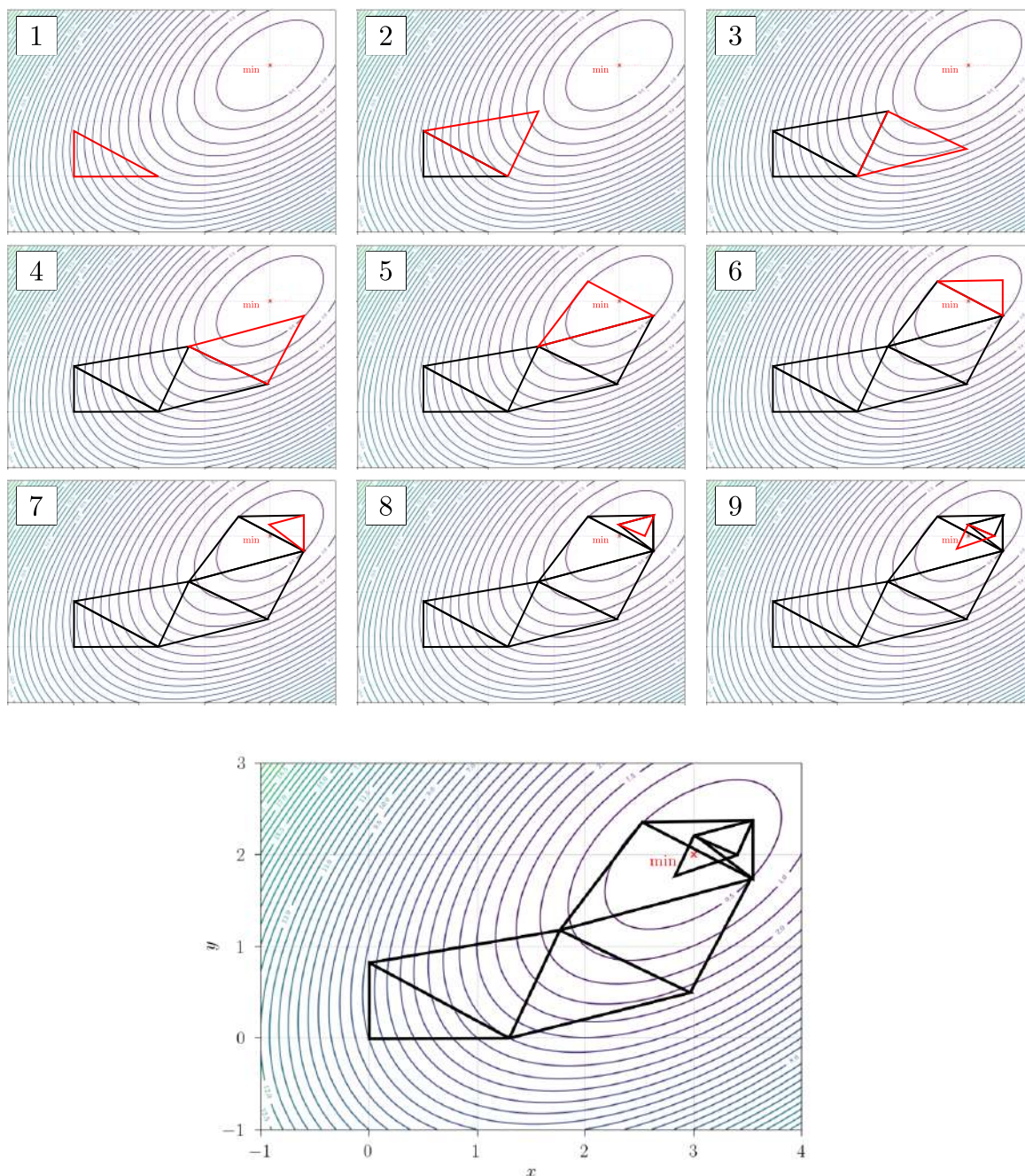


Obrázek 4.3: Schéma operací používaných k transformaci simplexů v rámci Nelderovy-Meadovy metody. Vrcholy vzniklé aplikací dané operace jsou vyznačeny červeně. Pro názornost jsou operace vyobrazeny v \mathbb{R}^2 .

²Simplexem v \mathbb{R}^n nazýváme omezený konvexní polytop (zobecnění mnohostěnu v libovolné dimenzi) s neprázdným vnitřkem a právě $n + 1$ vrcholy [52].

³Jako simplexová metoda je v rámci optimalizace častěji označován algoritmus sloužící pro nalezení optimálního řešení lineárního programování. Autorem tohoto algoritmu je George Dantzig [56].

Heuristický charakter Nelderovy-Meadovy metody vyplývá z toho, že její princip je postaven na do jisté míry náhodném prohledávání prostoru pomocí předem definovaných pravidel. Několik iterací prohledávání prostoru pomocí simplexů je pro konkrétní volbu počátečního simplexu a konkrétní funkci znázorněno na obr. 4.4. Je dokázána konvergence této metody, není však zaručeno, že metoda vždy nutně konverguje ke stacionárnímu bodu [52]. Podotkněme, že Nelderova-Meadova metoda je primárně odvozena pro optimalizaci úloh bez vazeb, lze však použít techniky popsané v sekci 4.2 a použít ji pro optimalizaci úloh s vazbami.



Obrázek 4.4: Několik iterací Nelderovy-Meadovy metody pro konkrétní volbu počátečního simplexu při minimalizaci funkce $x^2 - 4x + y^2 - y - xy + 7$ s minimem v bodě (3,2) znázorněným červeným křížkem.

4.4.2 Metody přímého vyhledávání

Z metod přímého vyhledávání popíšeme *generalised pattern search* (dále jen GPS) metodu [58] a krátce zmíníme také *mesh adaptive direct search* (dále jen MADS) metodu [59].

Pro popis algoritmu GPS je nutné definovat pojem síť, pomocí něhož je pak popsáno prohledávání prostoru v rámci GPS. Bud' $\mathbf{G} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ a $\mathbf{Z} \in \mathbb{Z}^{n \times p}$. Necht' každý vektor $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^n$ lze vyjádřit jako lineární kombinaci sloupců matice \mathbf{Z} (vnímaných jako vektory) tak, že všechny koeficienty v této lineární kombinaci jsou nezáporné. Dále označme $\mathbf{S} = \mathbf{GZ}$. Síť \mathbf{M} generovanou pomocí \mathbf{S} středovanou v bodě \mathbf{x} definujeme jako

$$\mathbf{M} = \{\mathbf{x} + \delta \mathbf{S} \mathbf{y} \mid \mathbf{y} \in \mathbb{N}^p\}, \quad (4.19)$$

kde δ je parametr, jenž budeme nazývat síťový krok [52, 58]. V jednotlivých iteracích algoritmu GPS se obecně mění tvar sítě, jelikož je vždy středována v bodě představující nejlepší odhad v dané iteraci, dále se také mění velikost síťového kroku. Označíme-li \mathbf{x}_k , resp. δ_k jako odhad řešení, resp. síťový krok v k -té iteraci, můžeme definovat síť v k -té iteraci označenou \mathbf{M}_k , tj.

$$\mathbf{M}_k = \{\mathbf{x}_k + \delta_k \mathbf{S} \mathbf{y} \mid \mathbf{y} \in \mathbb{N}^p\}. \quad (4.20)$$

Poznamenejme, že sloupce výše definované matice \mathbf{S} lze chápat jako možné směry, kterými lze v rámci GPS prohledávat prostor hodnot optimalizačních parametrů [52, 58].

Po inicializaci nutných počátečních parametrů je samotný algoritmus GPS v každé iteraci rozdělen do dvou hlavních kroků. Prvním krokem je tzv. hledání (anglicky *search step*). Během kroku hledání je pomocí strategie blíže specifikované uživatelem vybrána konečná množina kandidátních síťových bodů, v nichž je vyčíslena účelová funkce. Pokud žádná z vypočtených hodnot nepředstavuje zlepšení oproti hodnotě $f(\mathbf{x}_k)$, nastává krok průzkumu (anglicky *poll step*). V kroku průzkumu je účelová funkce vyčíslena ve všech sousedních síťových bodech bodu \mathbf{x}_k . V případě, že ani pak žádná z vypočtených hodnot nepředstavuje zlepšení oproti hodnotě $f(\mathbf{x}_k)$, nastavíme $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k$ a snížíme hodnotu síťového kroku, tedy $\delta_{k+1} < \delta_k$. Pokud však v kroku hledání nebo v kroku průzkumu najdeme takový bod, pro který dojde k vylepšení odhadu řešení, označíme tento bod jako \mathbf{x}_{k+1} a zvýšíme hodnotu síťového kroku, tedy $\delta_{k+1} > \delta_k$ [52, 58].

Výše popsané změny v každé iteraci vždy definují novou síť \mathbf{M}_k , která se během algoritmu GPS obecně mění. Algoritmus je ukončen, když je splněno $\delta_{k+1} < \varepsilon$ pro uživatelem specifikované $\varepsilon > 0$. Lze ukázat, že během GPS algoritmu konverguje krok sítě limitně k nule a za splnění vhodných předpokladů odhady řešení konvergují ke stacionárnímu bodu účelové funkce, details lze najít v [52]. Podotkněme, že konvergence GPS je dokázána pro úlohy bez vazeb [52].

Dále krátce zmíníme metodu MADS, která představuje vylepšení metody GPS. Narozdíl od metody GPS, algoritmus MADS umožní během kroku průzkumu obecně zkoumat hodnoty účelové funkce ve směrech, které tvoří hustou podmnožinu v \mathbb{R}^n [52, 53]. Toto zobecnění vylepšuje konvergenci algoritmu a umožňuje dokázat konvergenci MADS i pro úlohy s vazbami, kdy je účelová funkce modifikována na extrémní bariérovou funkci 4.17. Details týkající se algoritmu a fungování metody MADS lze najít např. v [52].

4.4.3 Optimalizace s využitím náhradního modelu

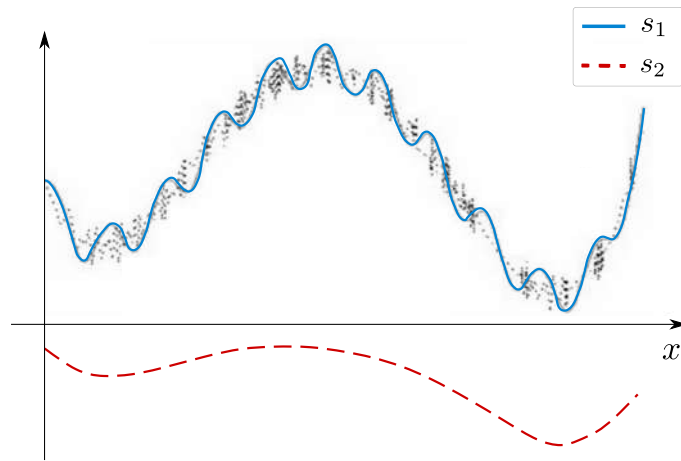
V případech, kdy je vyčíslení účelové funkce v konkrétním bodě časově nebo výpočetně náročné, je užitečné během optimalizace v nějaké formě využít náhradu účelové funkce. Definujeme náhradní model (anglicky *surrogate model*) zkoumané úlohy jako úlohu

$$\min_{\mathbf{x} \in \tilde{\mathbf{X}}} \tilde{f}(\mathbf{x}), \quad (4.21)$$

kde

$$\tilde{\mathbf{X}} = \{\mathbf{x} \in \mathbf{D} \subseteq \mathbb{R}^n \mid \tilde{\mathbf{g}}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0} \wedge \tilde{\mathbf{h}}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}\}, \quad (4.22)$$

přičemž funkce \tilde{f} , $\tilde{\mathbf{g}}$ a $\tilde{\mathbf{h}}$ mají podobný charakter, jako funkce f , \mathbf{g} a \mathbf{h} z původní úlohy. Charakter funkcí \tilde{f} , $\tilde{\mathbf{g}}$ a $\tilde{\mathbf{h}}$ je vymezen neurčitě, nicméně tento způsob definice odpovídá tomu, že po náhradním modelu nutně nepožadujeme, aby byl vhodným aproximativním modelem původní úlohy [54, 52, 55]. Dobrý aproximativní model totiž nemusí být z hlediska optimalizace vhodnou náhradou, tato situace je znázorněna na obr. 4.5.



Obrázek 4.5: Ilustrace dvou náhradních modelů s_1 a s_2 . Černě jsou vyznačeny hodnoty účelové funkce vykazující šum. Použití náhradního modelu s_1 představuje volbu lepší z hlediska aproximace funkce, pro optimalizaci však tato volba vhodná není, jelikož s_1 obsahuje mnoho nežádoucích stacionárních bodů, které původní účelová funkce nemá. Na druhou stranu náhradní model s_1 vhodně neaproximuje účelovou funkci ve smyslu funkčních hodnot, z hlediska optimalizace jde však o lepší volbu, jelikož stacionární body s_2 se nacházejí na téměř shodných pozicích, jako je tomu u optimalizované účelové funkce.

Využití náhradního modelu v rámci optimalizace je většinou dílčí částí jiné obecné optimalizační metody. Náhradní modely lze např. použít v rámci metod GPS a MADS popsaných v sekci 4.4.2, kdy při vyčíslování účelové funkce v kroku průzkumu nejdříve vyčíslíme v těch samých bodech náhradní funkci \tilde{f} , tyto hodnoty pak seřadíme, a již seřazenou množinu bodů použijeme k vyčíslení původní funkce f . To nám umožní potenciálně výrazně zkrátit čas, který je potřebný k provedení kroku průzkumu, jelikož seřazením bodů zvýšíme pravděpodobnost, že úspěšně najdeme lepší odhad řešení již pro jeden z prvních zkoumaných bodů [52]. Náhradní modely lze použít i v rámci jiných metod a urychlit tak jejich průběh, detailně je jejich použití rozebráno např. v [54, 52].

4.5 Popis optimalizačního rámce

Pro použití popsaných optimalizačních metod v rámci problematiky dynamiky tekutin a numerických simulací je potřeba vytvořit plně automatizovaný optimalizační rámec. Je vhodné navrhnout takový rámec, jehož jednotlivé části budou dostatečně modulární, tedy v případě potřeby může být pro vykonání specifického úkonu v rámci procesu optimalizace snadno použita jiná metoda. Celkový navržený rámec zahrnuje několik částí, které dále popíšeme:

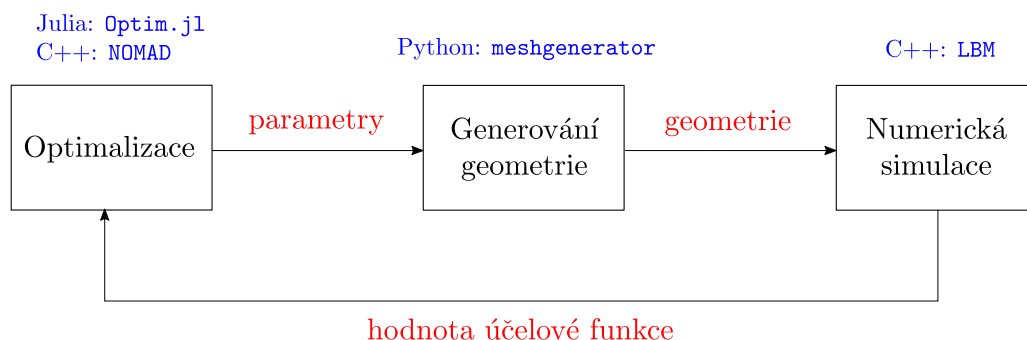
1. *Optimalizace*: První část zahrnuje samotnou použitou optimalizační metodu, která řídí celý další proces. V této části je definována řešená úloha společně s případnými požadovanými vazbami. Jak již bylo zmíněno, je vhodné, aby tato část byla co nejvíce nezávislá na ostatních částech popisovaného optimalizačního rámce. To nám dovolí použít různé metody implementované v jiných programovacích jazycích bez narušení chodu celkového procesu.

V této práci budeme pracovat s metodami L-BFGS (viz sekce 4.2.2) a Nelderovou-Meadovou metodou (viz sekce 4.4.1). Pro implementaci obou těchto metod použijeme volně dostupný balík `Optim.jl` [60] implementovaný v programovacím jazyce Julia. Pro zahrnutí vazeb použijeme v obou případech metodu transformující účelovou funkci na extrémní bariérovou funkci, která byla pro účely této práce implementována nad rámec použitého balíku. Pro výpočet gradientu v rámci metody L-BFGS použijeme automatickou diferenciaci, která je dostupná v rámci balíku `Optim.jl` a jejíž detaily jsou popsány v [60]. Metodu L-BFGS s toutou volbou výpočtu gradientu budeme dále značit L-BFGS(A).

Dále v rámci optimalizačního rámce zařazujeme metodu přímého vyhledávání MADS (viz sekce 4.4.2) implementovanou v programovacím jazyce C++ ve volně dostupné knihovně NOMAD [61]. Pro zahrnutí vazeb rovněž použijeme extrémní bariérovou funkci, která je v případě knihovny NOMAD její součástí. Podotkněme, že v rámci této práce metodu MADS nevyužijeme.

2. *Generování geometrie*: Optimalizační parametry, jejichž hodnota se v každé iteraci optimalizace mění, jsou předány do generátoru geometrie. Pro generování geometrie, která je dále využita v numerické simulaci, byl použit balík `meshgenerator` implementovaný v jazyce Python. Zmíněný balík vznikl pro účely této práce a je blíže popsán v kapitole 3.
3. *Numerická simulace*: Poslední částí optimalizačního rámce je řešič umožňující vyčíslení optimalizované účelové funkce. V rámci této práce se zabýváme pouze problémy týkajícími se dynamiky tekutin. Pro numerickou simulaci proudění byla použita metoda LBM, která je společně s implementačními poznámkami popsána v kapitole 2.

Schématicky je propojení jednotlivých částí optimalizačního rámce zobrazeno na obr. 4.6.



Obrázek 4.6: Schématické znázornění navrženého optimalizačního rámce. Šipkami je znázorněno propojení jednotlivých částí, nad šipkou je pak zdůrazněno, co jednotlivé části předávají v procesu dále.

Kapitola 5

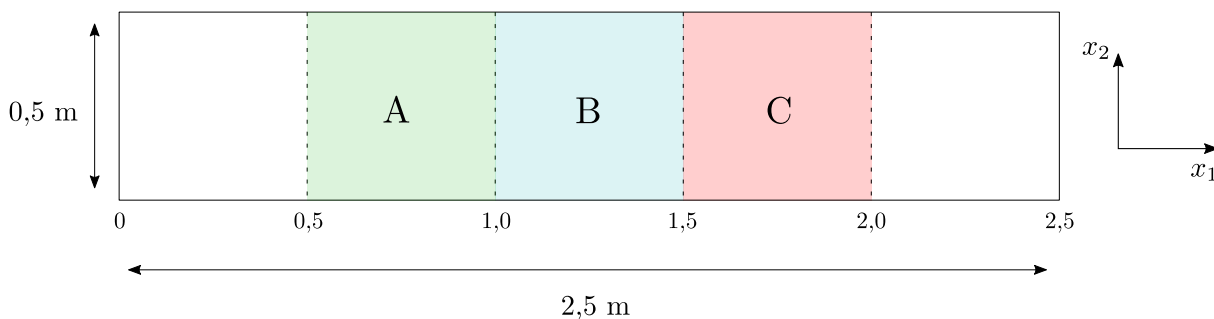
Numerické výsledky

V této kapitole uvedeme výsledky provedených numerických simulací. Bude k nim využita mřížková Boltzmannova metoda popsaná v kapitole 2 a bude uvažován matematický model pro nestlačitelnou tekutinu popsaný v kapitole 1. Hlavním cílem numerických simulací bude postupně ověřit fungování optimalizačního rámce popsaného v sekci 4.5 a prozkoumat fungování možných optimalizačních metod. Po ověření funkčnosti optimalizačního rámce je dále cílem demonstrovat možnost formulovat netriviální optimalizační úlohy a následně je řešit. Postupně budeme řešit úlohy s jedním, dvěma a třemi optimalizačními parametry vždy s různou uvažovanou geometrií, což bude demonstrovat možná použití balíku meshegenerator.

5.1 Úlohy s jedním optimalizačním parametrem

5.1.1 Definice parametrů úlohy

Uvažujeme dvourozměrnou oblast Ω s rozměry $(0; 5H) \times (0; H)$, kde $H = 0,5$ m. Tuto oblast dále rozdělíme na pět částí stejného rozměru - prostřední tři části označíme postupně A, B a C. V části B bude v rámci úloh vždy umístěn objekt, jehož geometrie se během procesu optimalizace mění. V části A bude dle potřeby umístěn objekt neměnný během procesu optimalizace, který bude sloužit k případnému vytvoření netriviálního rychlostního profilu v rámci oblasti. V části C pak bude vyhodnocována zvolená optimalizovaná účelová funkce. Definice a rozdělení výpočetní oblasti na části je znázorněno na obr. 5.1.



Obrázek 5.1: Schématické znázornění definice a rozdělení výpočetní oblasti.

Rychlost na vstupu budeme předepisovat parabolickým profilem ve tvaru

$$u_1(\mathbf{x}, t) = 4U_m \frac{x_2}{H} \left(1 - \frac{x_2}{H}\right), \quad u_2(\mathbf{x}, t) = 0, \quad \mathbf{x} \in \partial\hat{\Omega}_{in}, \quad (5.1)$$

kde U_m [ms^{-1}] je maximální požadovaná rychlost na parabolickém profilu.

5.1.2 Rotující elipsa bez překážky

ÚLOHA 5.1: ZÁKLADNÍ ÚLOHA ROTUJÍCÍ ELIPSY

Nastavení úlohy:

- $\Omega = (0; 2,5 \text{ m}) \times (0; 0,5 \text{ m})$
- $\nu = 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$

Nastavení v rámci LBM:

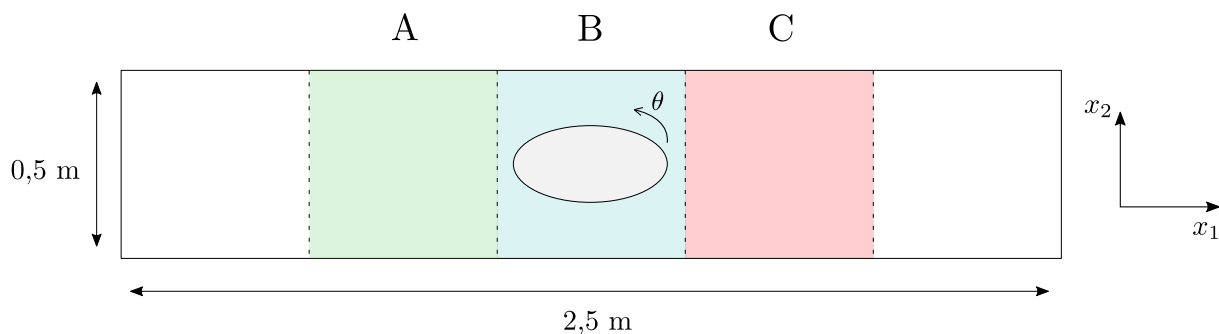
- Na $\bar{\Omega}$ volíme počáteční podmínku podle sekce 2.4.1.
- Na $\partial\hat{\Omega}_W$ volíme rychlost podle vztahu (5.1) s $U_m = 2,5 \text{ ms}^{-1}$.
- Na jednotlivých částech hranice $\partial\hat{\Omega}$ předepisujeme momentovou okrajovou podmínku popsanou v sekci 2.4.2.4. Na hranici obtékaného objektu v oblasti B předepisujeme Bouzidiho interpolační podmínku rozebranou v sekci 2.4.2.2.
- Mřížku volíme jako $\bar{\Omega} = N_x \times N_y$, $N_x = 1120$, $N_y = 224$,
- Kinematickou viskozitu v mřížkových jednotkách volíme $\nu^L = 10^{-3}$.

Použité objekty:

- V oblasti B je předepsán objekt třídy Ellipse popsáný v sekci 3.4.

Použité optimalizační metody:

- Použijeme L-BFGS(A) a Nelderovu-Meadovu metodu, obě metody jsou popsány v kapitole 4.



Obrázek 5.2: Schématické znázornění definice výpočetní oblasti v úloze 5.1.

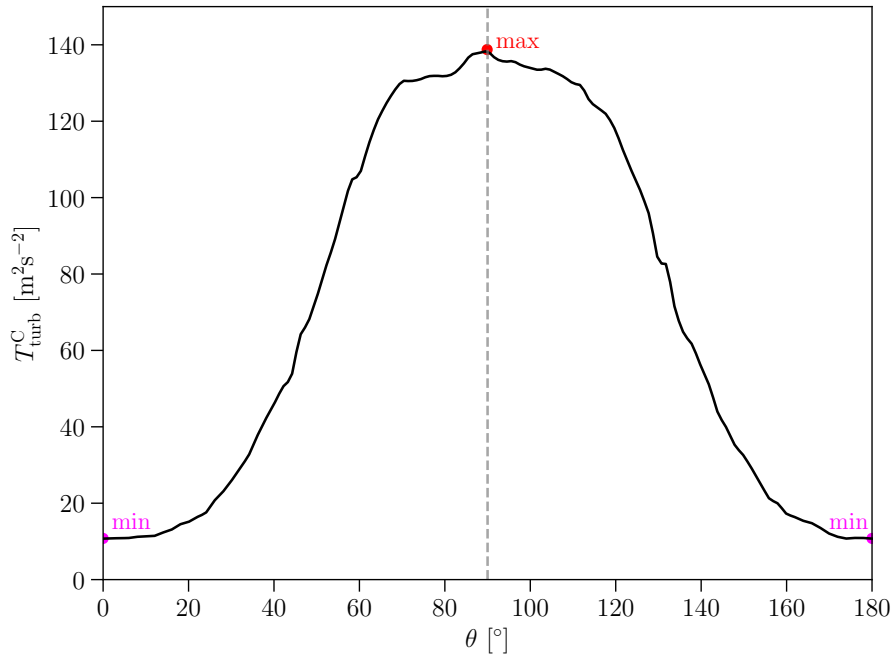
V této úloze bude naším cílem zejména ověřit funkčnost optimalizačního rámce. Do oblasti B umístíme elipsu popsanou rovnicí

$$\frac{(x - x_s)^2}{a^2} + \frac{(y - y_s)^2}{b^2} = 1, \quad (5.2)$$

kde $a = 0,21$, $b = 0,105$, $x_s = 1,25$ a $y_s = 0,25$. Umožníme definované elipse rotovat kolem svého středu v rozsahu úhlu $0^\circ \leq \theta \leq 180^\circ$, nastavení je schematicky znázorněno na obr. 5.2.

Označíme turbulentní kinetickou energii (definovanou pomocí (1.14)) v oblasti C závislou na úhlu θ jako $T_{\text{turb}}^C(\theta)$. Naším cílem bude maximalizovat, resp. minimalizovat $T_{\text{turb}}^C(\theta)$ za již zmíněného předpokladu $0^\circ \leq \theta \leq 180^\circ$.

Hodnoty účelové funkce jsou závislé na výsledku numerické simulace, tj. neznáme explicitní funkční předpis účelové funkce. Jedná se však o úlohu s pouze jedním optimalizačním parametrem na omezeném intervalu - můžeme definovat ekvidistatní dělení tohoto intervalu $k, k = 0, 1, \dots, 180$ a v dělicích bodech účelovou funkci pomocí numerických simulací vyčíslit. Tyto hodnoty můžeme pak lineárně interpolovat, díky čemuž získáme představu o průběhu účelové funkce na uvažovaném intervalu. Interpolované hodnoty jsou společně s jejich maximem, resp. minimem zobrazeny na obr. 5.3. Můžeme vidět, že maximum interpolované funkce je nabýváno při hodnotě $\theta = 90^\circ$ - tedy očekáváme, že k maximálním turbulencím za překážkou bude docházet v případě, kdy překážka (elipsa) v největší míře přehradí oblast. Naopak minimum se nachází v bodě $\theta = 0^\circ$, resp. $\theta = 180^\circ$ - tedy očekáváme, že k minimálním turbulencím za překážkou bude docházet v případě, kdy je překážka orientovaná ve směru proudění tekutiny. Podotkneme, že orientace elipsy je v těchto bodech stejná a tedy je stejná i hodnota interpolované funkce v těchto bodech.



Obrázek 5.3: Interpolované hodnoty pro úlohu 5.1 s vyznačeným maximem sloužící k následné jednodušší analýze výsledků.

Zdůrazňme, že v rámci optimalizace využíváme pouze hodnoty z numerických simulací pomocí LBM (tj. optimalizační algoritmus nemá přístup k interpolovaným hodnotám), interpolované hodnoty nám však pomohou s následnou analýzou výsledků.

Zaved' me množinu

$$L = \{30i \mid i = 0, 1, \dots, 6\}, \quad (5.3)$$

kteřá bude představovat počáteční body pro použité optimalizační metody. Záměrně mezi testované počáteční body zařazujeme i krajní hodnoty z intervalu přípustných řešení, abychom otestovali implementaci extrémní bariérové funkce. Prvky množiny L tedy představují počáteční body pro minimalizaci a maximalizaci.

Výsledky minimalizace, resp. maximalizace jsou k nahlédnutí v tabulce 5.1, resp. v tabulce 5.2, kde výsledný bod nalezený pomocí optimalizační metody značíme \mathbf{x}^* . Body nalezené minimalizací, resp. maximalizací jsou znázorněny mezi interpolovanými hodnotami na obr. 5.4a, resp. 5.4b. Z důvodu časové náročnosti numerických simulací je pro nás při posuzování vhodnosti použité metody stěžejní, kolikrát musela být během optimalizace vyčíslena účelová funkce - tuto hodnotu budeme značit $\#f$ a je rovněž uvedena v tabulkách 5.1 a 5.2. Dále je na obr. 5.5a, resp. 5.5b zobrazeno pole středních hodnot fluktuací pro případ s minimální, resp. maximální turbulentní kinetickou energií.

| Označení bodu | θ | $T_{\text{turb}}^C(\theta)$ |
|---------------|----------|-----------------------------|
| A_{\min} | 0,00 | 10,72 |
| B_{\min} | 180,00 | 10,72 |
| C_{\min} | 174,24 | 10,74 |

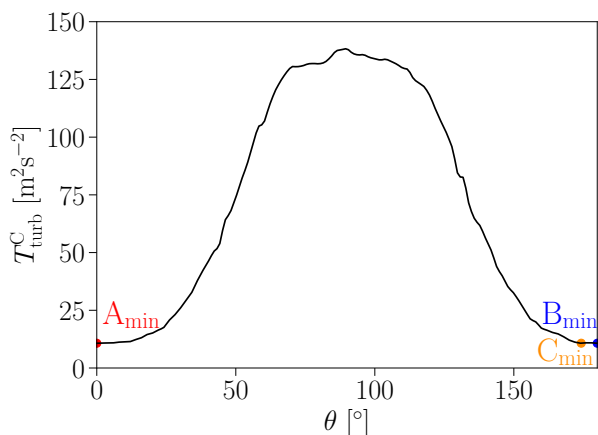
| | L-BFGS(A) | | NM | |
|----------------|----------------|-------|----------------|-------|
| \mathbf{x}_0 | \mathbf{x}^* | $\#f$ | \mathbf{x}^* | $\#f$ |
| 0° | A_{\min} | 41 | A_{\min} | 12 |
| 30° | A_{\min} | 41 | A_{\min} | 35 |
| 60° | A_{\min} | 58 | A_{\min} | 33 |
| 90° | B_{\min} | 31 | C_{\min} | 27 |
| 120° | B_{\min} | 41 | B_{\min} | 31 |
| 150° | B_{\min} | 37 | C_{\min} | 23 |
| 180° | B_{\min} | 77 | A_{\min} | 7 |

Tabulka 5.1: Výsledky pro minimalizační úlohu s použitím metod L-BFGS(A) a NM

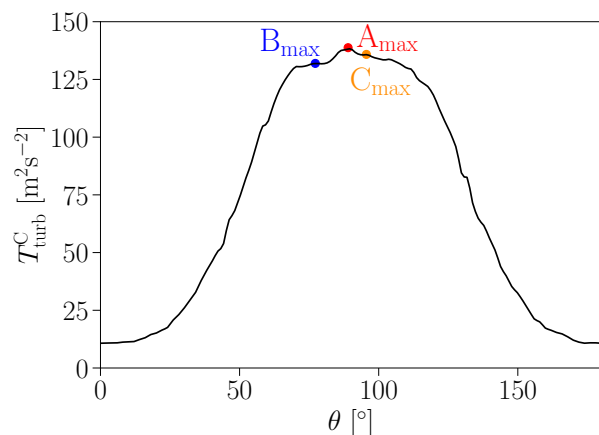
| Označení bodu | θ | $T_{\text{turb}}^C(\theta)$ |
|---------------|----------|-----------------------------|
| A_{\max} | 90,00 | 138,75 |
| B_{\max} | 77,21 | 131,94 |
| C_{\max} | 95,58 | 135,84 |

| | L-BFGS(A) | | NM | |
|----------------|----------------|-------|----------------|-------|
| \mathbf{x}_0 | \mathbf{x}^* | $\#f$ | \mathbf{x}^* | $\#f$ |
| 0° | B_{\max} | 98 | A_{\max} | 45 |
| 30° | A_{\max} | 42 | A_{\max} | 27 |
| 60° | A_{\max} | 33 | A_{\max} | 21 |
| 90° | A_{\max} | 9 | A_{\max} | 27 |
| 120° | A_{\max} | 39 | A_{\max} | 26 |
| 150° | A_{\max} | 36 | A_{\max} | 26 |
| 180° | C_{\max} | 122 | A_{\max} | 28 |

Tabulka 5.2: Výsledky pro maximalizační úlohu s použitím metod L-BFGS(A) a NM

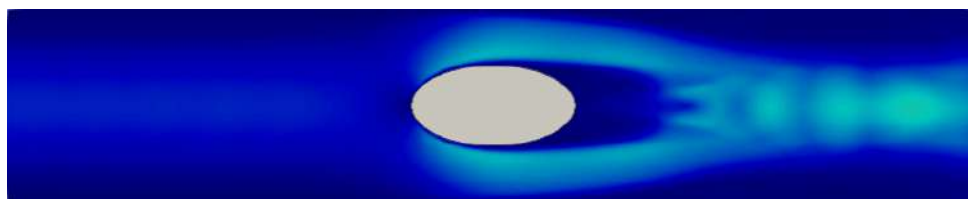


(a) Zobrazení bodů z tabulky 5.1 nalezených v rámci minimalizace účelové funkce v úloze 5.1.

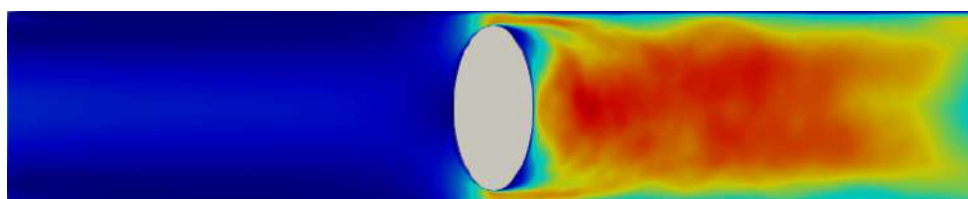


(b) Zobrazení bodů z tabulky 5.2 nalezených v rámci maximalizace účelové funkce v úloze 5.1.

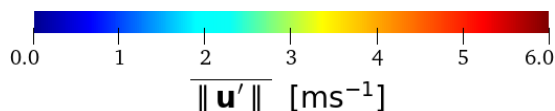
Obrázek 5.4: Zobrazení různých bodů nalezených v rámci minimalizace a maximalizace účelové funkce v úloze 5.1 pomocí optimalizačních metod.



(a) Pole velikosti středních hodnot fluktuací pro $\theta = 0^\circ$, tj. případ, kdy je T_{turb}^C minimální.



(b) Pole velikosti středních hodnot fluktuací pro $\theta = 90^\circ$, tj. případ, kdy je T_{turb}^C maximální.



Obrázek 5.5: Porovnání velikosti středních hodnot fluktuací v úloze 5.1 pro případ s minimální turbulentní kinetickou energií a pro případ, kdy je turbulentní kinetická energie v oblasti C maximální.

Minimum nalezené metodou L-BFGS(A) souhlasilo s očekávaným výsledkem (zjištěným z interpolovaných hodnot) ve všech případech počátečních bodů. Minimum nalezené Nelderovou-Meadovou metodou pak ve dvou případech neodpovídalo skutečnému minimu, nicméně funkční hodnotou i polohou téměř se mu blížilo.

Maxima nalezená metodou L-BFGS(A) ve většině případů souhlasila s očekávaným výsledkem, v případech, kdy počáteční body byly krajními hodnotami množiny přípustných řešení, však nalezené maximum mělo pouze lokální charakter a nesouhlasilo tak se skutečným globálním maximem. Maxima nalezená Nelderovou-Meadovou odpovídala globálnímu maximu ve všech případech.

Zejména u maximalizace můžeme pozorovat, že počet vyčíslení účelové funkce u metody L-BFGS(A) úzce souvisí s volbou počátečního bodu. V případech, kdy se počáteční bod blíží hledanému maximu, metoda konverguje při nižším počtu vyčíslení účelové funkce. U Nelderovy-Meadovy metody tuto závislost nepozorujeme. Můžeme vidět, že metoda L-BFGS(A) průměrně vyžaduje k nalezení řešení větší počet vyhodnocení účelové funkce, což je přirozeným důsledkem faktu, že v každé její iteraci je nutné numericky aproximovat gradient účelové funkce, což je realizováno pomocí schématu založeném na centrální diferenci.

5.1.3 Rotující elipsa s překážkou

ÚLOHA 5.2: ZÁKLADNÍ ÚLOHA ROTUJÍCÍ ELIPSY S PŘEKÁŽKOU

Nastavení úlohy:

- $\Omega = (0; 2,5 \text{ m}) \times (0; 0,5 \text{ m})$
- $\nu = 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$

Nastavení v rámci LBM:

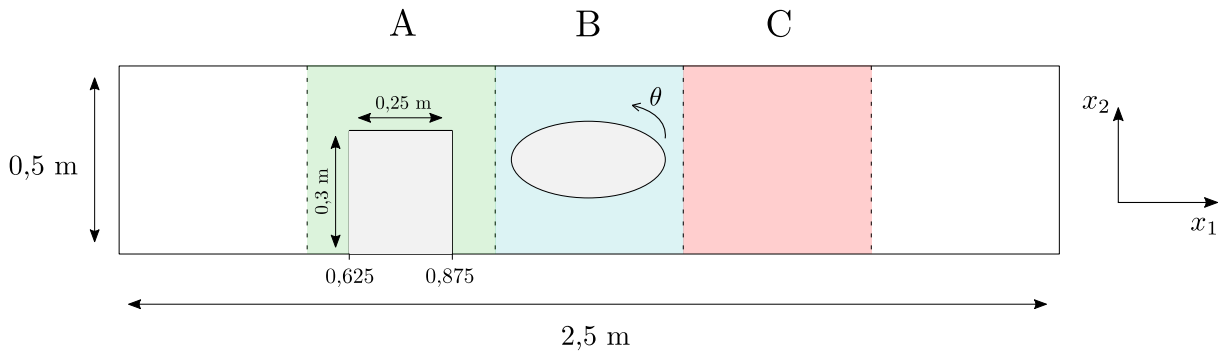
- Na $\bar{\Omega}$ volíme počáteční podmínku podle sekce 2.4.1.
- Na $\partial\hat{\Omega}_W$ volíme rychlost podle vztahu (5.1) s $U_m = 2,5 \text{ ms}^{-1}$.
- Na jednotlivých částech hranice $\partial\hat{\Omega}$ předepisujeme momentovou okrajovou podmínku popsanou v sekci 2.4.2.4. Na hranici obtékaného objektu v oblasti B předepisujeme Bouzidiho interpolační podmínku rozebranou v sekci 2.4.2.2. Na hranici překážky v oblasti A předepíšeme bounce-back okrajovou podmínku, viz sekce 2.4.2.1.
- Mřížku volíme jako $\bar{\Omega} = N_x \times N_y$, $N_x = 1120$, $N_y = 224$,
- Kinematickou viskozitu v mřížkových jednotkách volíme $\nu^L = 10^{-3}$.

Použité objekty:

- V oblasti B předepsán objekt třídy Ellipse popsáný v sekci 3.4. V oblasti A předepíšeme obdélník bez použití balíku meshgenerator.

Použité optimalizační metody:

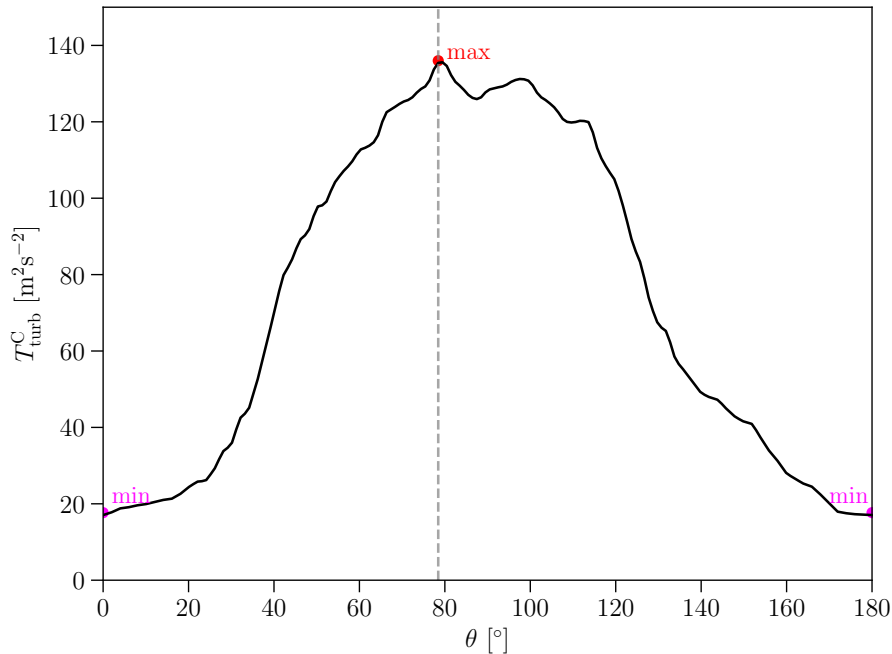
- Použijeme L-BFGS(A) a Nelderovu-Meadovu metodu, obě metody jsou popsány v kapitole 4.



Obrázek 5.6: Schématické znázornění definice výpočetní oblasti v úloze 5.2.

V této úloze bude naším cílem zejména ověřit funkčnost optimalizačního rámce. Do oblasti B umístíme elipsu, která může rotovat kolem svého středu v rozsahu úhlu $0^\circ \leq \theta \leq 180^\circ$ tak, jako tomu bylo v úloze 5.1. V oblasti A pak dále umístíme obdélník tak, jak je znázorněno na obr. 5.2. Naším cílem opět bude maximalizovat, resp. minimalizovat $T_{\text{turb}}^C(\theta)$ za již zmíněného předpokladu $0^\circ \leq \theta \leq 180^\circ$.

Analogicky jako v předchozí úloze definujeme ekvidistatní dělení $k, k = 0, 1, \dots, 180$ intervalu $0^\circ \leq \theta \leq 180^\circ$, v dělicích bodech účelovou funkci pomocí numerických simulací vyčíslíme a lineárně tyto hodnoty interpolujeme. Interpolované hodnoty jsou společně s jejich maximem, resp. minimem zobrazeny na obr. 5.7. Můžeme vidět, že maximum interpolované funkce je nabýváno při hodnotě $\theta = 79^\circ$. Minimum se nachází v bodě $\theta = 0^\circ$, resp. $\theta = 180^\circ$. Můžeme pozorovat, že tvar interpolované funkce se z důvodu umístění překážky v oblasti A změnil ve srovnání s úlohou 5.1. Interpolovaná funkce má nyní mimo globální maximum i další význaná lokální maxima.



Obrázek 5.7: Interpolované hodnoty pro úlohu 5.2 s vyznačeným maximem sloužící k následné jednodušší analýze výsledků.

Pro minimalizaci a maximalizaci opět použijeme prvky množiny L definované pomocí (5.3) jako počáteční body. Výsledky minimalizace, resp. maximalizace jsou k nahlédnutí v tabulce 5.3, resp. v tabulce 5.4, kde používáme stejné značení jako v předchozí úloze. Body nalezené minimalizací, resp. maximalizací jsou znázorněny mezi interpolovanými hodnotami na obr. 5.8a, resp. 5.8b. Na obr. 5.9a, resp. 5.9b je znázorněno pole středních hodnot fluktuací pro případ s minimální, resp. maximální turbulentní kinetickou energií.

| Označení bodu | θ | $T_{\text{turb}}^C(\theta)$ |
|---------------|----------|-----------------------------|
| A_{\min} | 0,00 | 17,05 |
| B_{\min} | 180,00 | 17,05 |
| C_{\min} | 87,08 | 125,69 |

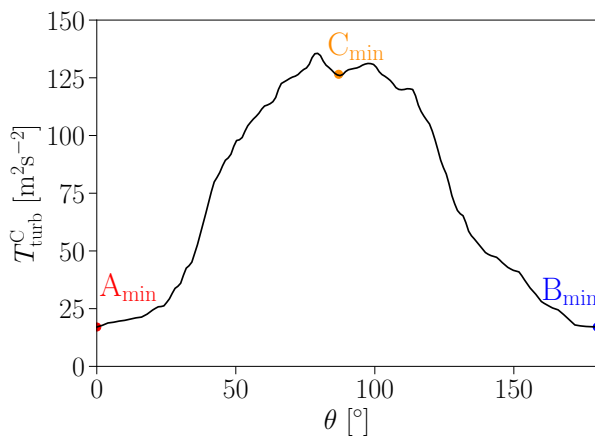
| | L-BFGS(A) | | NM | |
|----------------|----------------|-------|----------------|-------|
| \mathbf{x}_0 | \mathbf{x}^* | $\#f$ | \mathbf{x}^* | $\#f$ |
| 0° | A_{\min} | 32 | A_{\min} | 13 |
| 30° | A_{\min} | 53 | A_{\min} | 35 |
| 60° | A_{\min} | 44 | A_{\min} | 37 |
| 90° | C_{\min} | 12 | B_{\min} | 38 |
| 120° | B_{\min} | 41 | B_{\min} | 31 |
| 150° | B_{\min} | 25 | B_{\min} | 41 |
| 180° | B_{\min} | 68 | B_{\min} | 18 |

Tabulka 5.3: Výsledky pro minimalizační úlohu s použitím metod L-BFGS(A) a NM

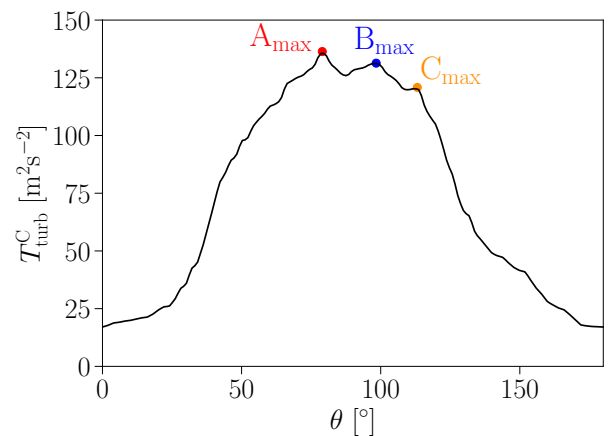
| Označení bodu | θ | $T_{\text{turb}}^C(\theta)$ |
|---------------|----------|-----------------------------|
| A_{\max} | 79,06 | 136,37 |
| B_{\max} | 98,37 | 131,34 |
| C_{\max} | 113,16 | 120,82 |

| | L-BFGS(A) | | NM | |
|----------------|----------------|-------|----------------|-------|
| \mathbf{x}_0 | \mathbf{x}^* | $\#f$ | \mathbf{x}^* | $\#f$ |
| 0° | A_{\max} | 107 | A_{\max} | 22 |
| 30° | A_{\max} | 36 | A_{\max} | 29 |
| 60° | A_{\max} | 72 | A_{\max} | 25 |
| 90° | B_{\max} | 27 | A_{\max} | 25 |
| 120° | A_{\max} | 30 | A_{\max} | 28 |
| 150° | C_{\max} | 45 | B_{\max} | 7 |
| 180° | A_{\max} | 106 | A_{\max} | 26 |

Tabulka 5.4: Výsledky pro maximalizační úlohu s použitím metod L-BFGS(A) a NM

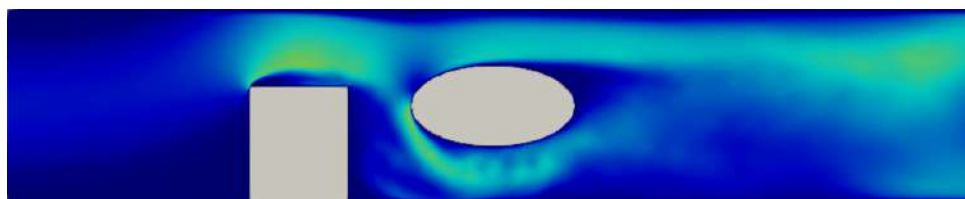


(a) Zobrazení bodů z tabulky 5.3 nalezených v rámci minimalizace účelové funkce v úloze 5.2.

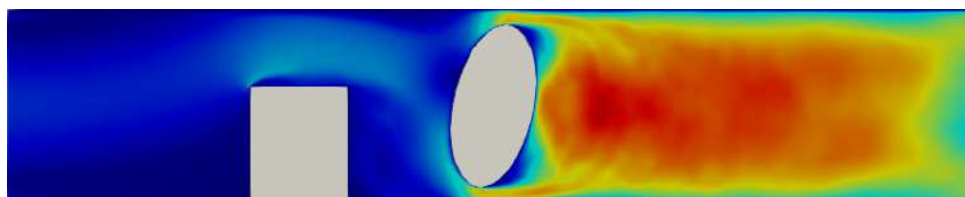


(b) Zobrazení bodů z tabulky 5.4 nalezených v rámci maximalizace účelové funkce v úloze 5.2.

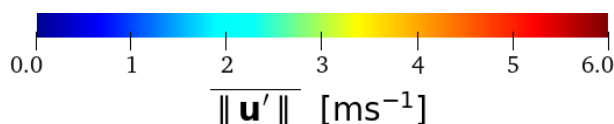
Obrázek 5.8: Zobrazení různých bodů nalezených v rámci minimalizace a maximalizace účelové funkce v úloze 5.2 pomocí optimalizačních metod.



(a) Pole střední velikosti fluktuací pro $\theta = 0^\circ$.



(b) Pole střední velikosti fluktuací pro $\theta = 79,06^\circ$ - případ, kdy je T_{turb}^C maximální.



Obrázek 5.9: Porovnání velikosti středních hodnot fluktuací v úloze 5.2 pro případ s minimální turbulentní kinetickou energií a pro případ, kdy je turbulentní kinetická energie v oblasti C maximální.

Minimum nalezené metodou L-BFGS(A) souhlasilo s očekávaným výsledkem (zjištěným z interpolovaných hodnot) ve většině případů počátečních bodů. V jednom případě byl výsledek pouze lokálním minimem a zcela neodpovídal hledanému globálnímu minimu. Minimum nalezené Nelderovou-Meadovou metodou pak ve všech případech odpovídalo hledanému globálnímu minimu.

Maxima nalezená metodou L-BFGS(A) opět ve většině případů odpovídala očekávanému výsledku, ve dvou případech však výsledek odpovídal lokálním maximům rozdílným od globálního maxima. Maxima nalezená Nelderovou-Meadovou odpovídala globálnímu maximu až na jeden případ, kdy bylo nalezeno rozdílné lokální maximum.

Jako tomu bylo v úloze 5.1, i zde můžeme pozorovat, že metoda L-BFGS(A) průměrně vyžaduje k nalezení řešení větší počet vyhodnocení účelové funkce, přičemž tento počet je úzce spjat s volbou počátečního bodu. U Nelderovy-Meadovy metody jsme toto nepozorovali.

5.1.4 Shrnutí výsledků úloh s jedním parametrem

V rámci úloh 5.1 a 5.2 se podařilo úspěšně prokázat funkčnost navrženého optimalizačního rámce. Díky interpolovaným hodnotám získaným pomocí vyčíslení účelové funkce v dostatečně mnoho bodech diskretizující množinu přípustných řešení jsme mohli ověřit správnost výsledků získaných pomocí optimalizačních metod. Tyto výsledky v uspokojivé míře odpovídaly výsledkům očekávaným.

Již pro úlohu s jedním optimalizačním parametrem bylo možné pozorovat, že pro některé volby počátečních bodů může být metoda L-BFGS(A) časově mnohem náročnější, než Nelderova-Meadova metoda. Nelderova-Meadova metoda byla dále také v průměru úspěšnější v hledání správného řešení. Na základě výše zmíněného lze usuzovat, že Nelderova-Meadova metoda představuje lepší volbu v uvažovaném optimalizačním rámci.

5.2 Úloha s dvěma optimalizačními parametry

ÚLOHA 5.3: ROTUJÍCÍ CASSINIHO OVÁL S KONSTATNÍM OBSAHEM

Nastavení úlohy:

- $\Omega = (0; 2,5 \text{ m}) \times (0; 0,5 \text{ m})$
- $\nu = 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$

Nastavení v rámci LBM:

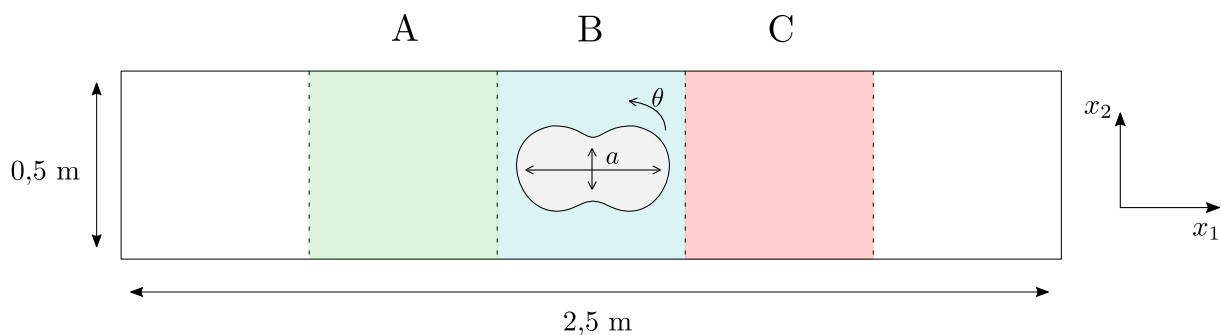
- Na $\bar{\Omega}$ volíme počáteční podmínku podle sekce 2.4.1.
- Na $\partial\hat{\Omega}_W$ volíme rychlost podle vztahu (5.1) s $U_m = 2,5 \text{ ms}^{-1}$.
- Na jednotlivých částech hranice $\partial\hat{\Omega}$ předepisujeme momentovou okrajovou podmínku popsanou v sekci 2.4.2.4. Na hranici obtékaného objektu v oblasti B předepisujeme Bouzidiho interpolační podmínku rozebranou v sekci 2.4.2.2.
- Mřížku volíme jako $\bar{\Omega} = N_x \times N_y$, $N_x = 1120$, $N_y = 224$,
- Kinematickou viskozitu v mřížkových jednotkách volíme $\nu^L = 10^{-3}$.

Použité objekty:

- V oblasti B předepsán objekt třídy CassiniOval popsaný v sekci 3.4.

Použité optimalizační metody:

- Použijeme L-BFGS(A) a Nelderovu-Meadovu metodu, obě metody jsou popsány v kapitole 4.



Obrázek 5.10: Schématické znázornění definice výpočetní oblasti v úloze 5.1.

V této úloze bude naším cílem formulovat a řešit úlohu s netriviálním tvarem účelové funkce. Výpočetní oblast opět rozdělíme na pět stejných částí se stejným značením jako tomu bylo v předchozích úlohách. Do oblasti B umístíme Cassiniho ovál popsany rovnicí

$$\left[(x - x_s)^2 + (y - y_s)^2 + a^2\right]^2 - 4a^2(x - x_s)^2 = b^4, \quad (5.4)$$

kde a a b jsou parametry a dále $x_s = 1,25$ a $y_s = 0,25$. Nastavení úlohy je schematicky znázorněno na obr. 5.10. Prvním stupněm volnosti bude podobně jako v předchozích úlohách možnost rotace oválu kolem svého středu. Umožníme rotaci v rozsahu úhlu $45^\circ \leq \theta \leq 125^\circ$. Dále připustíme různé hodnoty parametru a , konkrétně požadujeme $0,08 \leq a \leq 0,13$, čímž jsou určeny další nerovnostní vazby. Parametr a a úhel θ budou představovat optimalizační parametry. Pro optimalizaci využijeme metodu L-BGFS(A) a Nelderovu-Meadovu metodu.

Pro jednoznačné určení parametru b na základě hodnoty a budeme požadovat, aby měl ovál stále stejný obsah - konkrétně požadujeme zachování hodnoty obsahu $S = 0,0545$. Obsah Cassiniho oválu lze za zmíněných předpokladů vyjádřit rovnicí [62]

$$S = a^2 + b^2 E\left(\frac{a^2}{b^2}\right), \quad (5.5)$$

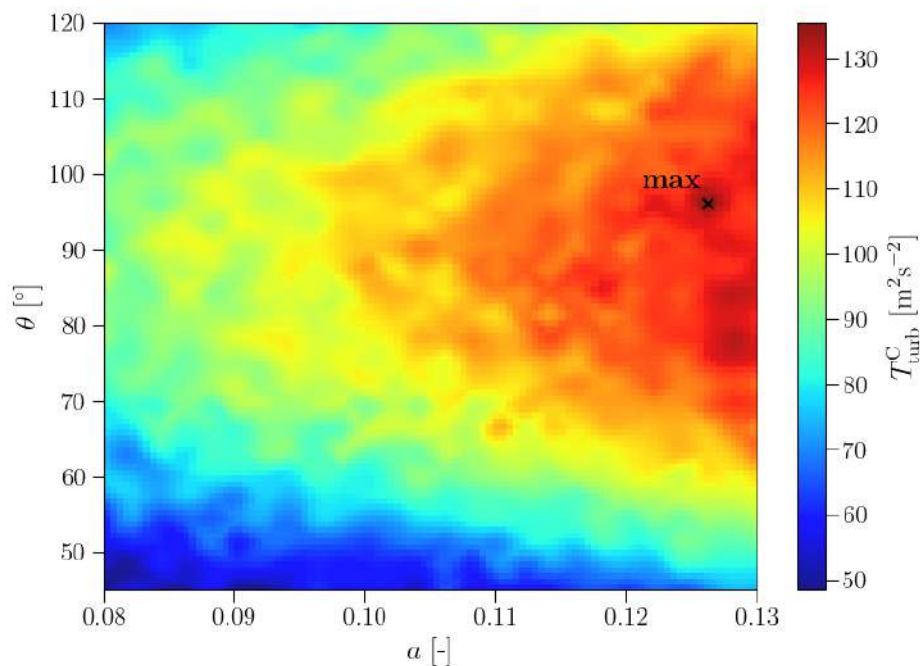
kde $E(x)$ značí eliptický integrál druhého druhu. V každé iteraci optimalizačního algoritmu tedy před generováním geometrie pro aktuální sadu hodnot optimalizačních parametrů numericky vyřešíme rovnici 5.5 pro neznámou hodnotu b pomocí Powellovy hybridní metody implementované ve volně dostupné knihovně SciPy.

Označíme turbulentní kinetickou energii v oblasti C závislou na úhlu θ a parametru a jako $T_{\text{turb}}^C(a, \theta)$. Naším cílem bude maximalizovat $T_{\text{turb}}^C(a, \theta)$ za zmíněných předpokladů $45^\circ \leq \theta \leq 120^\circ$ a $0,08 \leq a \leq 0,13$ při zachování obsahu $S = 0,0545$.

Zavedeme množinu bodů

$$M = \{(0,08 + 0,002i; 45 + 3j) \mid i, j = 0, 1, \dots, 25\}, \quad (5.6)$$

která diskretizuje prostor optimalizačních parametrů. V bodech množiny 5.6 vypočteme pomocí numerických simulací hodnoty účelové funkce $T_{\text{turb}}^C(a, \theta)$, které následně lineárně interpolujeme. Interpolované hodnoty jsou společně s jejich maximem, které je nabýváno při hodnotách $a = 0,126$ a $\theta = 96^\circ$, zobrazeny na obr. 5.11. Tyto hodnoty využijeme k následné snadnější analýze výsledků optimalizačních metod. Zdůrazněme, že v rámci optimalizace interpolované hodnoty nevyužíváme.



Obrázek 5.11: Interpolované hodnoty pro úlohu 5.3 s vyznačeným maximem sloužící k následné jednodušší analýze výsledků.

Použité počáteční body \mathbf{x}_0 a jejich označení je uvedeno v tabulce 5.5:

| Označení \mathbf{x}_0 | a | θ |
|-------------------------|-------|-------------|
| A_0 | 0,097 | 75° |
| B_0 | 0,084 | 115° |
| C_0 | 0,113 | 102° |

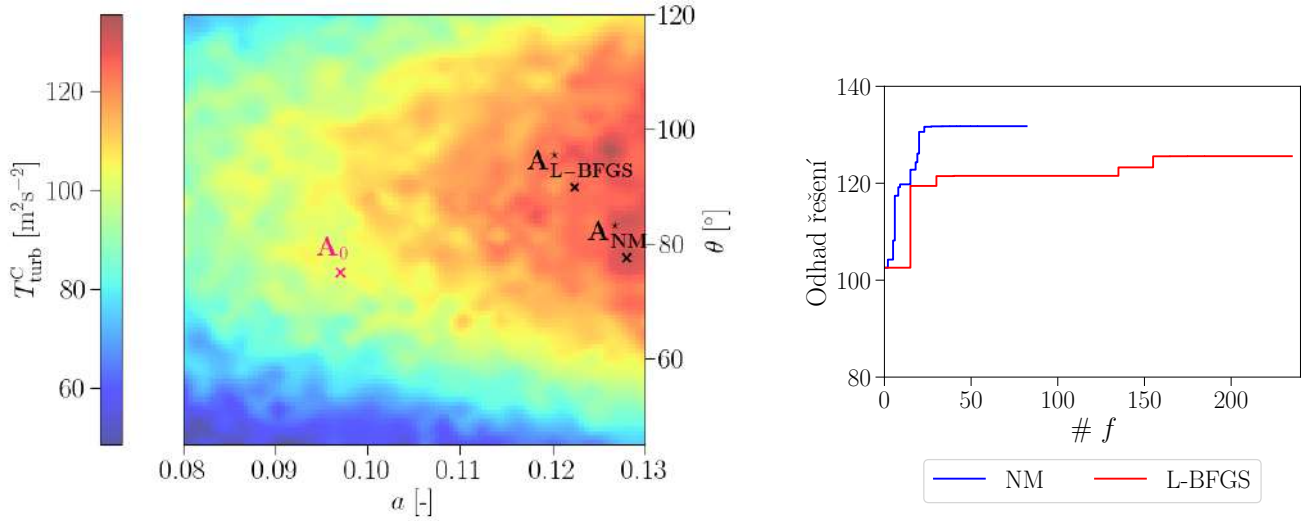
Tabulka 5.5: Počáteční body použité v úloze 5.3 a jejich označení.

Výsledné body nalezené pomocí optimalizačních metod budeme značit vždy písmenem příslušným použitému počátečnímu bodu, hvězdičkou v horním indexu a zkráceným názvem metody v dolním indexu. Výsledky získané pro jednotlivé počáteční body jsou k nahlédnutí v tabulce 5.6.

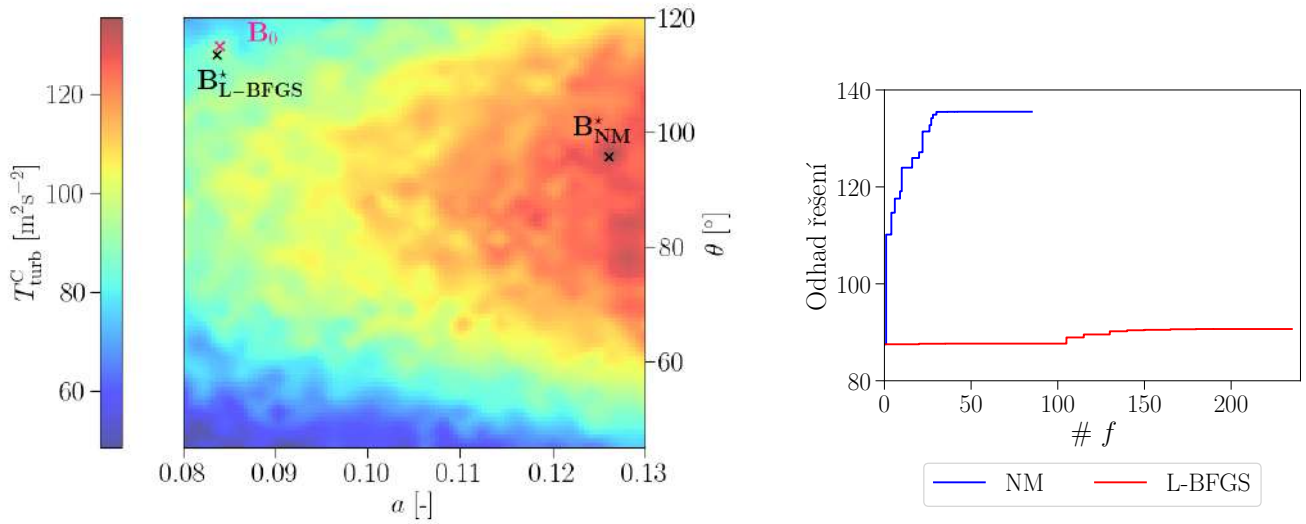
| | L-BFGS(A) | | | | NM | | | |
|----------------|-----------------------|-------|----------|--------------------------------|-------------------|-------|----------|--------------------------------|
| \mathbf{x}_0 | \mathbf{x}^* | a | θ | $T_{\text{turb}}^C(a, \theta)$ | \mathbf{x}^* | a | θ | $T_{\text{turb}}^C(a, \theta)$ |
| A_0 | $A_{\text{L-BFGS}}^*$ | 0,122 | 88,27 | 125,58 | A_{NM}^* | 0,128 | 77,66 | 131,76 |
| B_0 | $B_{\text{L-BFGS}}^*$ | 0,083 | 113,5 | 90,68 | B_{NM}^* | 0,126 | 95,73 | 135,51 |
| C_0 | $C_{\text{L-BFGS}}^*$ | 0,128 | 77,66 | 131,76 | C_{NM}^* | 0,127 | 90,06 | 128,25 |

Tabulka 5.6: Výsledky pro maximalizační úlohu s použitím metod L-BFGS(A) a NM

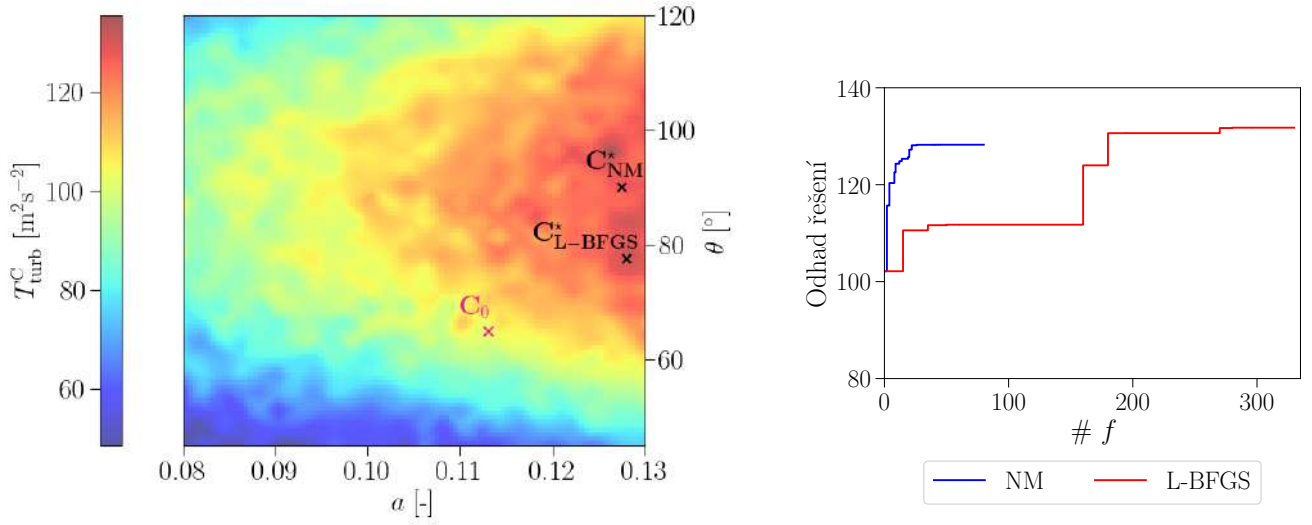
Pro každý z počátečních bodů dále zobrazíme výsledky optimalizačních metod mezi interpolovanými hodnotami. Pro počáteční body také porovnáme u obou metod rychlost konvergence k výsledku, tj. postupné zlepšování odhadu řešení v závislosti na počtu vyhodnocení účelové funkce. Zmíněné výsledky jsou k nahlédnutí na obr. 5.12.



(a) Výsledné nalezené body a graf rychlosti konvergence metod k řešení pro počáteční bod A_0 .



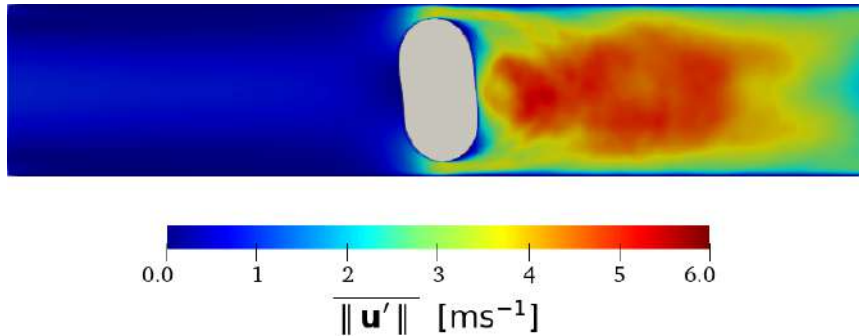
(b) Výsledné nalezené body a graf rychlosti konvergence metod k řešení pro počáteční bod B_0 .



(c) Výsledné nalezené body a graf rychlosti konvergence metod k řešení pro počáteční bod C_0 .

Obrázek 5.12: Zobrazení bodů nalezených v rámci maximalizace účelové funkce v úloze 5.3 pomocí optimalizačních metod a graf aktuálního odhadovaného řešení v závislosti na počtu vyčíslení účelové funkce pro počáteční body.

Pro srovnání s výsledkem maximalizace v úloze 5.1 uvádíme na obr. 5.13 pole středních hodnot fluktuací pro případ s maximální turbulentní kinetickou energií.



Obrázek 5.13: Pole střední velikosti fluktuací pro $a = 0,126$ a $\theta = 95,73^\circ$ - případ, kdy je T_{turb}^C maximální.

5.2.1 Shrnutí výsledků úlohy s dvěma parametry

V rámci úlohy 5.3 jsme demonstrovali možnost použití navrženého optimalizačního rámce na úlohy s komplexnější formulací. Získané výsledky pomocí optimalizace jsme porovnali s interpolovanými hodnotami nahrazujícími účelovou funkci, díky čemuž jsme mohli ověřit jejich správnost. Bylo možné pozorovat, že výsledky nalezené Nelderovou-Meadovou metodou odpovídaly správnému řešení nebo se mu blížily. K nalzení řešení navíc Nelderova-Meadova metoda potřebovala vždy méněkrát vyčíslení účelovou funkci, což je pro nás jedním ze stěžejních faktorů. Lze tedy opět usoudit, že Nelderova-Meadova metoda představuje lepší volbu v navrženém optimalizačním rámci.

5.3 Úloha s třemi optimalizačními parametry

ÚLOHA 5.4: ZJEDNODUŠENÝ MODEL TOTÁLNÍHO KAVOPULMONÁRNÍHO NAPOJENÍ (TCPC)

Nastavení úlohy:

- $\Omega = (0; L_1) \times (0; L_2)$, kde $L_1 = 4$ m, $L_2 = 2$ m
- $\nu = 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$

Nastavení v rámci LBM:

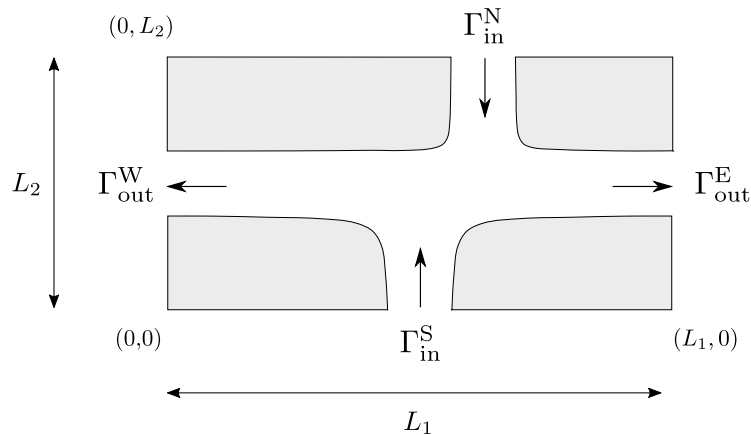
- Na $\bar{\Omega}$ volíme počáteční podmínku podle sekce 2.4.1.
- Na $\partial\hat{\Omega}$ zavedeme části $\Gamma_{\text{out}}^W, \Gamma_{\text{out}}^E, \Gamma_{\text{in}}^S, \Gamma_{\text{in}}^N$ podle obr. 5.14.
- Na Γ_{in}^S volíme parabolický profil rychlosti s maximální rychlostí $1,8 \text{ ms}^{-1}$. Na Γ_{in}^N volíme parabolický profil rychlosti s maximální rychlostí $1,5 \text{ ms}^{-1}$.
- Na $\Gamma_{\text{out}}^W, \Gamma_{\text{out}}^E$ předepisujeme rovnovážnou okrajovou podmínku popsanou v sekci 2.4.2.3. Na hranici obtékaných objektů předepisujeme Bouzidiho interpolační podmínku rozebranou v sekci 2.4.2.2.
- Mřížku volíme jako $\bar{\Omega} = N_x \times N_y$, $N_x = 448$, $N_y = 224$,
- Kinematickou viskozitu v mřížkových jednotkách volíme $\nu^L = 10^{-3}$.

Použité objekty:

- V oblasti předepíšeme čtyři objekty třídy FunctionCurve, která je popsána v sekci 3.4. Jako funkce volíme hyperboly.

Použité optimalizační metody:

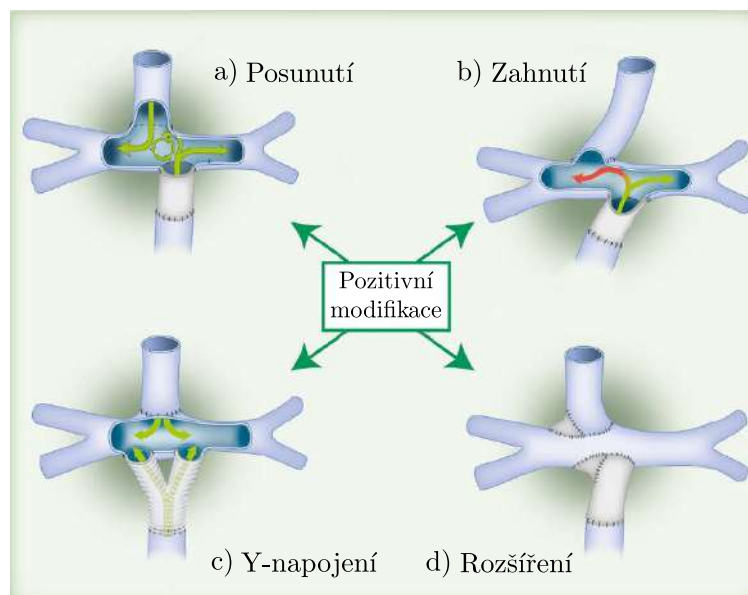
- Použijeme Nelderovu-Meadovu metodu popsanou v kapitole 4.



Obrázek 5.14: Schématické znázornění definované výpočetní oblasti s jejími rozměry a částí její hranice označenými $\Gamma_{\text{out}}^W, \Gamma_{\text{out}}^E, \Gamma_{\text{in}}^S, \Gamma_{\text{in}}^N$.

Cílem této úlohy je řešit úlohu zjednodušeného modelu inspirovaného geometrií TCPC ve 2D, která je znázorněna na obr. 1. S rozměry oblasti $\Omega = (0; 4 \text{ m}) \times (0; 2 \text{ m})$ a kinematickou viskozitou $\nu = 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ zjevně nastavení řešené úlohy neodpovídá reálným hodnotám fyzikálních parametrů úlohy TCPC. Použitím zákona podobnosti pro dynamiku tekutin (rovnost Reynoldsova čísla v obou systémech) lze však ukázat, že použité nastavení úlohy je ekvivalentní systému s hodnotami řádově odpovídajícími úloze TCPC. Podotkněme, že cílem této úlohy však není vytvořit přesný model systému s totálním kavopulmonárním napojením, ale spíše otestovat optimalizační rámec na úloze připomínající geometrii TCPC.

Při návrhu optimalizační úlohy byly zohledněny faktory, které lze kontrolovat v rámci geometrie TCPC a u kterých bylo prokázáno, že mají pozitivní vliv na minimalizaci ztrát energie v systému [9]. Možné modifikace napojení, které snižují ztráty energie a zajišťují lepší funkčnost systému jsou zobrazeny na obr. 5.15. Lze numericky simulovat případy takto modifikovaných geometrií a prokázat jejich vhodnost [9, 10, 63].



Obrázek 5.15: Schématické znázornění možných modifikací, kterými lze zmenšit ztráty energie v systému s TCPC a díky nimž lze zmenšit např. silové působení proudění na stěny v oblasti [9]. Schéma je převzato z [9], přičemž popisky jsou přeloženy.

Cílem této úlohy bude sledovat, zda výsledek optimalizační úlohy v systému s uvažovanou geometrií TCPC se stupni volnosti umožňujícími rošíření a posunutí dolního kanálu (body a) a d) na obr. 5.15) bude odpovídat výsledkům z dostupné literatury. Pro generování geometrie zvolíme objekty třídy `FunctionCurve`, která je popsána v sekci 3.4. Budeme volit čtyři hyperboly S_1 , S_2 , S_3 a S_4 v následujícím tvaru:

$$\begin{aligned}
S_1 : \quad y &= -\frac{1}{k_2[x - (o_2 + 0,25 + l_2)]} + h - 0,25, \quad x > o_2 + 0,25 + l_2, \\
S_2 : \quad y &= \frac{1}{k_1[x - (o_1 + 0,25)]} + h + 0,25, \quad x > o_1 + 0,25, \\
S_3 : \quad y &= -\frac{1}{k_1[x - (o_1 - 0,25)]} + h + 0,25, \quad x < o_1 - 0,25, \\
S_4 : \quad y &= \frac{1}{k_2[x - (o_2 - 0,25 - l_2)]} + h - 0,25, \quad x < o_2 + 0,25 + l_2,
\end{aligned} \tag{5.7}$$

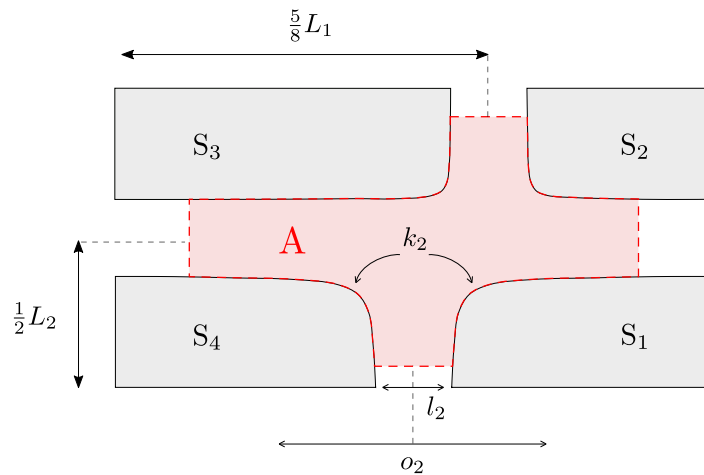
kde $h = 1$ m, $o_1 = 2,5$ m, $k_1 = 250$, a o_2, k_2 a l_2 jsou konstanty dále použité jako optimalizační parametry. Parametr o_2 odpovídá posunutí dolního kanálu, k_2 odpovídá rošíření části dolního kanálu, kde ústí do vodorovného kanálu, a parametr l_2 odpovídá modifikaci šířky dolního kanálu. Pro zmíněné parametry budeme předpokládat následující nerovnostní vazby:

$$1,25 \leq o_2 \leq 2,75, \tag{5.8a}$$

$$50 \leq k_2 \leq 200, \tag{5.8b}$$

$$-0,05 \leq l_2 \leq 0,05. \tag{5.8c}$$

Dále zavedeme podoblast $A = (0,50 \text{ m}; 3,50 \text{ m}) \times (0,36 \text{ m}; 1,64 \text{ m})$, na které budeme vyhodnocovat účelové funkce. Schématické znázornění definice geometrie, optimalizačních parametrů a podoblasti A je k nahlédnutí na obr. 5.16.



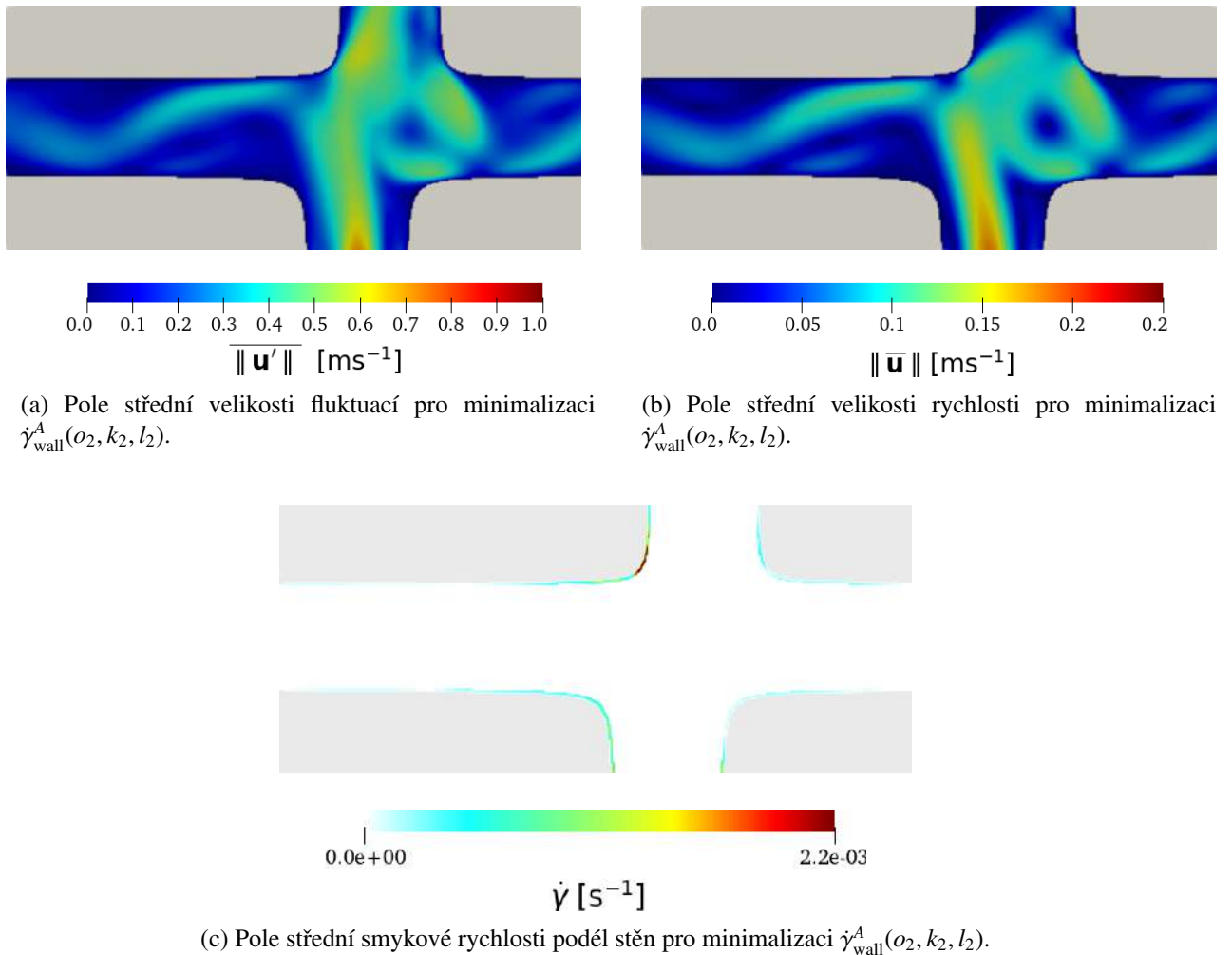
Obrázek 5.16: Význam optimalizačních parametrů a definice oblasti A, v níž je optimalizována účelová funkce.

Označíme $\dot{\gamma}_{\text{wall}}^A(o_2, k_2, l_2)$ smykovou rychlost (definovanou jako 1.8) podél stěn v oblasti A. Dále označíme $T_{\text{turb}}^A(o_2, k_2, l_2)$ turbulentní kinetickou energii v oblasti A. Tyto dvě účelové funkce budeme postupně v rámci této úlohy minimalizovat pomocí Nelderovy-Meadovy metody s počátečním bodem

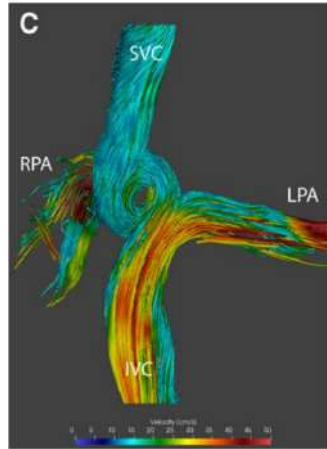
splňujícím $o_2 = 2,5$, $k_2 = 200$ a $l_2 = 0$, přičemž v rámci optimalizace předpokládáme nerovnostní vazby 5.8. Počáteční bod odpovídá situaci, kdy jsou oba kanály stejně široké a bez posunu, přičemž dlní kanál je mírně rozšířen ve svém ústí.

Výsledky pro minimalizaci $\dot{\gamma}_{\text{wall}}^A(o_2, k_2, l_2)$ jsou k nahlédnutí na obr. 5.17. Na obr. 5.17a je znázorněno pole střední velikosti fluktuací v oblasti A, na obr. 5.17b je znázorněno pole střední velikosti rychlosti v oblasti A a na obr. 5.17c je znázorněna střední smyková rychlost podél stěn v oblasti A.

Optimální řešení bylo nalezeno pro hodnoty $o_2 = 2,33$, $k_2 = 161$ a $l_2 = -0,004$, tedy při mírném posunutí a rozšíření ústí dolního kanálu do vodorovného. Dále pozorujeme vznik víru v oblasti cévní křižovatky. Vznik tohoto víru je popsán i na konkrétním případě pacienta s TCPC v [9]. Je zde popsán pozitivní vliv vzniku tohoto víru, díky němuž nedochází k přímé kolizi protisměrných proudů. Vír dále zmírňuje působení proudění na stěny cévy a pohání proudění ve směru pravé a levé plicní tepny. Vzniklý vír na konkrétním případě pacienta z [9] je zobrazen na obr. 5.18. Zmíněné projevy vzniku víru lze do jisté míry pozorovat i v systému, který odpovídá nalezenému optimálnímu řešení.



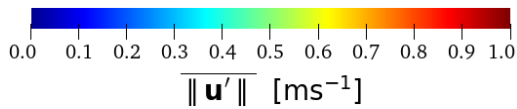
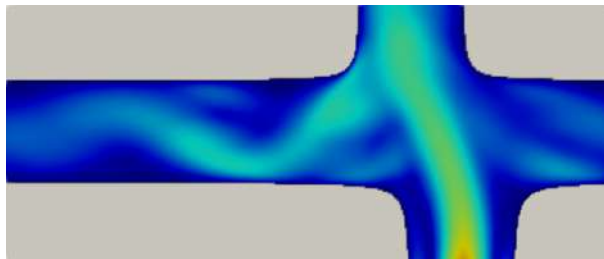
Obrázek 5.17: Výsledky pro minimalizaci $\dot{\gamma}_{\text{wall}}^A(o_2, k_2, l_2)$ v oblasti A, je znázorněna pouze oblast A v rámci výpočetní oblasti.



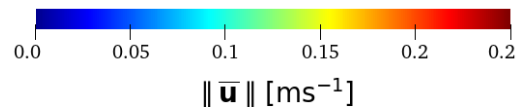
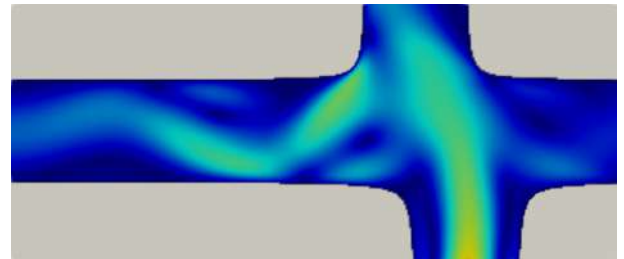
SVC - horní dutá žíla
IVC - dolní dutá žíla
LPA - levá plicní tepna
RPA - pravá plicní tepna

Obrázek 5.18: Vizualizovaná data z magnetické rezonance zobrazující TCPC osmnáctiletého pacienta s extrakardiálním konduitem (v dolní části, napojen na dolní dutou žílu) s posunem. Lze pozorovat vznik víru v centrální části oblasti, který pozitivně ovlivňuje proudění krve a minimalizuje ztráty energie. Převzato z [9], popisky přeloženy.

Výsledky pro minimalizaci $T_{\text{turb}}^A(o_2, k_2, l_2)$ jsou dále k nahlédnutí na obr. 5.19. Na obr. 5.19a je znázorněno pole střední velikosti fluktuací v oblasti A, na obr. 5.19b je znázorněno pole střední velikosti rychlosti v oblasti A a na obr. 5.19c je znázorněna střední smyková rychlost v oblasti A.

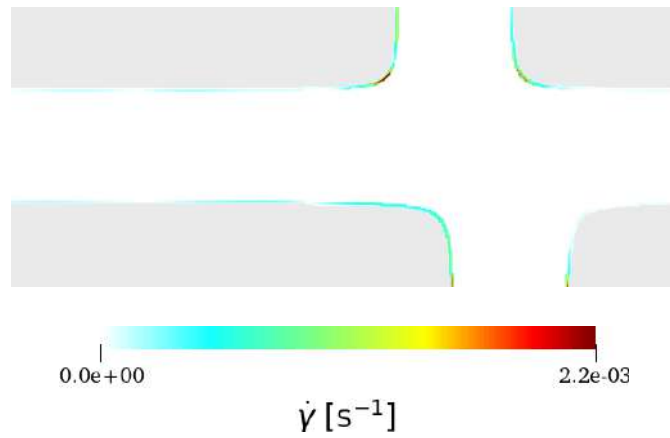


(a) Pole střední velikosti fluktuací pro minimalizaci $T_{\text{turb}}^A(o_2, k_2, l_2)$.



(b) Pole střední velikosti rychlostí pro minimalizaci $T_{\text{turb}}^A(o_2, k_2, l_2)$.

Optimální řešení bylo nalezeno pro hodnoty $o_2 = 2,75$, $k_2 = 167$ a $l_2 = 0,002$, tedy při maximálním posunutí dolního kanálu do pravé části a rozšíření jeho ústí do kanálu vodorovného. Výsledek se i přes použití stejné optimalizační metody a stejného počátečního bodu liší od výsledku pro minimalizaci γ_{wall}^A , což ukazuje vliv použité účelové funkce při optimalizaci. Na obr. 5.19a a 5.19c můžeme pozorovat, že ačkoliv se od předchozího případu zmenšily fluktuace v oblasti A, tak vzrostlo namáhání stěn zejména u horního kanálu.



(c) Pole střední smykové rychlosti podél stěn pro minimalizaci $T_{\text{turb}}^A(o_2, k_2, l_2)$.

Obrázek 5.19: Výsledky pro minimalizaci $T_{\text{turb}}^A(o_2, k_2, l_2)$ v oblasti A, je znázorněna pouze oblast A v rámci výpočetní oblasti.

5.3.1 Shrnutí výsledků úlohy s třemi parametry

V rámci úlohy 5.4 jsme demonstrovali použití optimalizačního rámce na zjednodušeného 2D modelu totálního kavopulmonárního napojení. Prokázali jsme závislost řešení optimalizační úlohy na použité účelové funkci. Při minimalizaci smykové rychlosti podél stěn jsme pozorovali vznik víru napomáhajícího k žádoucímu tvaru proudění v systému, což je v souladu s [9]. U obou výsledků se jako optimální projevilo řešení s mírným posunem a rozšířením v ústí dolního kanálu, což je popsáno i např. v [9, 10, 63]. U obou výsledků samotné rozšíření dolního kanálu řízené parametrem l_2 bylo pouze minimální a lze tedy usuzovat, že použití stejné šířky dolního kanálu bylo vhodnější než šířku kanálu měnit.

Závěr

Mezi cíle této práce patřilo studium a sestavení matematického modelu proudění krve v cévách a následný návrh a dále pak zejména implementace a otestování funkčnosti optimalizačního rámce na vhodně zvolených testovacích optimalizačních úlohách ve 2D.

První kapitola je věnována základním vztahům popisujícím dynamiku tekutin, dále jsou zde představeny základní poznatky týkající se sestavení matematického modelu proudění krve a jeho možného zjednodušení za vhodných předpokladů. Na závěr této kapitoly jsou definovány předpoklady, které v rámci této práce klademe na námi použitý model. V druhé kapitole je čtenáři představena použitá numerická metoda, tj. mřížková Boltzmannova metoda (LBM). Jsou zde rozebrány základní aspekty této metody, různé typy volby okrajových podmínek a výpočet silového působení v rámci LBM. V třetí kapitole je detailně popsán balík implementovaný v programovacím jazyce Python sloužící ke generování různých objektů, které lze následně využít v numerických simulacích. Čtvrtá kapitola se věnuje teorii matematického programování a shrnutí optimalizačních metod použitých v této práci. Na závěr této kapitoly je představen navržený optimalizační rámec.

V páté kapitole jsou postupně společně s jejich výsledky představeny všechny navržené úlohy na nichž je optimalizační rámec testován. Nejdříve je ověřena jeho funkčnost na testovacích úlohách s jedním optimalizačním parametrem, dále je pak formulována úloha s dvěma optimalizačními parametry. Je mimo jiné testován vliv volby optimalizační metody s ohledem na rychlost a kvalitu řešení. Na závěr této kapitoly je představen zjednodušený parametrizovaný model cévní křižovatky vznikající při provedení úplného kavopulmonárního spojení a je pozorováno, jaký vliv na řešení má volba optimalizované účelové funkce. Funkčnost navrženého optimalizačního rámce byla na výše zmíněných úlohách prokázána.

Práce z části navazuje a rozšiřuje předchozí bakalářskou práci [43] věnující se zejména silovému působení a neschodovitým okrajovým podmínkám v LBM. Přírozeným dalším krokem v budoucím výzkumu je rozšířit funkčnost optimalizačního rámce do trojrozměrného prostoru a řešit úlohy v rámci problematiky úplného kavopulmonárního spojení.

Literatura

- [1] F. Abraham, M. Behr a Matthias Heinkenschloss. „Shape optimization in steady blood flow: A numerical study of non-newtonian effects". *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*, 8(2):127–137, 2005.
- [2] J. C. Weddell, J. Kwack, P. I. Imoukhuede a Arif Masud. „Hemodynamic analysis in an idealized artery tree: Differences in wall shear stress between newtonian and non-newtonian blood models". *PLOS ONE*, 10(4), 2015.
- [3] A. L. Marsden, J. A. Feinstein a Ch. A. Taylor. „A computational framework for derivative-free optimization of cardiovascular geometries". *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197(21-24):1890–1905, 2008.
- [4] V. Chaloupecký. „Nemocný s funkčně jedinou srdeční komorou". FN Motol, Praha, 2004. <http://pelikan.lf2.cuni.cz/2003-2004/kveten-cerven2004-12roc-cl6.htm>
- [5] E. Rubtsova, A. Markov, S. Selishchev, J. H. Karimov a D. Telyshev. „Mathematical modeling of the fontan blood circulation supported with pediatric ventricular assist device". *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*, 24(6):653–662, 2021.
- [6] Y. Delorme, K. Anupindi, A.-E. Kerlo, D. Shetty, M. Rodefeld, J. Chen, S. Frankel. „Large eddy simulation of powered Fontan hemodynamics. Journal of Biomechanics". *Journal of Biomechanics*, 46(2):408–422, 2013.
- [7] T. M. J. van Bakel, K. D. Lau, J. Hirsch-Romano, S. Trimarchi, A. L. Dorfman a C. A. Figueroa. „Patient-specific modeling of hemodynamics: Supporting surgical planning in a fontan circulation correction". *Journal of Cardiovascular Translational Research*, 11(2):145–155, 2018.
- [8] C. Wang, K. Pekkan, D. de Zélicourt, M. Horner, A. Parihar, A. Kulkarni, A. P. Yoganathan. „Progress in the CFD modeling of flow instabilities in anatomical total cavopulmonary connections". *Annals of Biomedical Engineering*, 35(2):1840–56, 2007.
- [9] F. M. Rijnberg, et al. „Energetics of blood flow in cardiovascular disease". *Circulation*, 137(22):2393–2407, 2018.
- [10] A. Porfiryev, et al. „Fontan hemodynamics investigation via modeling and experimental characterization of idealized pediatric total cavopulmonary connection". *Applied Sciences*, 10(19):6910, 2020.
- [11] E. Tang, et al. „Geometric characterization of patient-specific total cavopulmonary connections and its relationship to hemodynamics". *JACC: Cardiovascular Imaging*, 7(3):215–224, 2014.

- [12] P. Eichler. Mathematical modeling of fluid flow using lattice boltzmann method. Dizertační práce, České vysoké učení technické v Praze, 2023.
- [13] T. Krüger, et al. *The Lattice Boltzmann Method*. Springer International Publishing, 2017.
- [14] J. D. Anderson. *Computational Fluid Dynamics*. McGraw-Hill series in mechanical engineering. McGraw-Hill Professional, New York, NY, 1995.
- [15] J. Latt. „Hydrodynamic limit of lattice boltzmann equations". Disertační práce, Université de Genève, 2007.
- [16] H. Schlichting a K. Gersten. *Boundary-layer theory*. Springer, Berlin, 9. edice, 2016.
- [17] Y. A. Cengel a J. M. Cimbala. *Fluid mechanics: Fundamentals and applications*. McGraw-Hill Education, Columbus, OH, 4. edice, 2017.
- [18] T. Papaioannou a Ch. Stefanadis. „Vascular wall shear stress: Basic principles and methods". *Hellenic journal of cardiology : HJC = Hellenike kardiologike epitheorese*, 46:9–15, 2005.
- [19] L. D. Landau a E. M. Lifshits. *Fluid Mechanics*. Elsevier Science, Londýn, Anglie, 2013.
- [20] Jurij Sodja. Turbulence models in CFD. Bakalářská práce, University of Ljubljana, 2023. 2007.
- [21] D. Saloner. „Computational fluid dynamics for evaluating hemodynamics". In *Vessel Based Imaging Techniques*, 331–347. Springer International Publishing, 2019.
- [22] Ch. S. Peskin. „The immersed boundary method". *Acta Numerica*, 11:479–517, 2002.
- [23] L. Dempere-Marco, et al. „CFD analysis incorporating the influence of wall motion: Application to intracranial aneurysms". *Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention – MICCAI 2006*, 438–445. Springer Berlin Heidelberg, 2006.
- [24] J. Lantz, et al. „Wall shear stress in a subject specific human aorta - Influence of fluid–structure interaction". *International Journal of Applied Mechanics*, 03(04):759–778, 2011.
- [25] M. C. Fishbein a G. A. Fishbein. „Arteriosclerosis: facts and fancy". *Cardiovascular Pathology*, 24(6):335–342, 2015.
- [26] M. Syed a M. Lesch. „Coronary artery aneurysm: A review". *Progress in Cardiovascular Diseases*, 40(1):77–84, 1997.
- [27] P. Eichler, et al. „Non-newtonian turbulent flow through aortic phantom: Experimental and computational study using magnetic resonance imaging and lattice boltzmann method". *Computers and Mathematics with Applications*, 136:80–94, 2023.
- [28] J. Boyd, J. M. Buick a S. Green. „Analysis of the casson and Carreau-Yasuda non-newtonian blood models in steady and oscillatory flows using the lattice Boltzmann method". *Physics of Fluids*, 19(9):093103, 2007.
- [29] A. Sequeira a J. Janela. „An overview of some mathematical models of blood rheology". *A Portrait of State-of-the-Art Research at the Technical University of Lisbon*, 65–87. Springer Netherlands.
- [30] K. M. Saqr, et al. „Physiologic blood flow is turbulent". *Scientific Reports*, 10(1), 2020.

- [31] B. A. Carabello a W. J. Paulus. „Aortic stenosis”. *The Lancet*, 373(9667):956–966, 2009.
- [32] K. Jain. „The effect of varying degrees of stenosis on transition to turbulence in oscillatory flows”. *Biomechanics and Modeling in Mechanobiology*, 21(3):1029–1041, 2022.
- [33] S. S. Varghese a S. H. Frankel. „Numerical modeling of pulsatile turbulent flow in stenotic vessels”. *Journal of Biomechanical Engineering*, 125(4):445–460, 2003.
- [34] M. V. Kameneva, et al. „Effects of turbulent stresses upon mechanical hemolysis: Experimental and computational analysis”. *ASAIO Journal*, 50(5):418–423, 2004.
- [35] M. Geier, M. Schönherr, A. Pasquali a M. Krafczyk. „The cumulant lattice boltzmann equation in three dimensions: Theory and validation”. *Computers and Mathematics with Applications*, 70(4):507–547, 2015.
- [36] D. D’Humières. „Generalized lattice-boltzmann equations”. In *Rarefied Gas Dynamics: Theory and Simulations*, pages 450–458. American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1994.
- [37] M. Geier, A. Greiner a J. G. Korvink. „Cascaded digital lattice boltzmann automata for high reynolds number flow”. *Physical Review E*, 73(6), 2006.
- [38] I. V. Karlin, A. Ferrante a H. C. Öttinger. „Perfect entropy functions of the lattice boltzmann method”. *Europhysics Letters (EPL)*, 47(2):182–188, 1999.
- [39] M. Bouzidi, M. Firdaouss a P. Lallemand. „Momentum transfer of a boltzmann-lattice fluid with boundaries”. *Physics of Fluids*, 13(11):3452–3459, 2001.
- [40] D. Yu, R. Mei a W. Shyy. „A unified boundary treatment in lattice boltzmann method”. In *41st Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*. American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2003.
- [41] R. Fučík, P. Eichler, J. Klinkovský, R. Straka a Tomáš Oberhuber. „Lattice Boltzmann method analysis tool (LBMAT)”. *Numerical Algorithms*, 2022.
- [42] R. Mei, D. Yu, W. Shyy a L.-S. Luo. „Force evaluation in the lattice boltzmann method involving curved geometry”. *Physical Review E*, 65(4), 2002.
- [43] J. Bureš. Matematické modelování proudění krve v cévách. České vysoké učení technické, Bakalářská práce, 2022.
- [44] J. Vollinga. „GiNaC—symbolic computation”. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 559(1):282–284, 2006.
- [45] M.J.D. Powell. „A hybrid method for nonlinear equations”. *Numerical Methods for Nonlinear Algebraic Equations*, 87–144, 1970.
- [46] J. D. Eisenberg. „SVG Essentials”. O’Reilly Media, Sebastopol, CA, 2002.
- [47] D. Bertsekas. „Nonlinear programming”. Athena Scientific, 2016.
- [48] D. G. Luenberger a Y. Ye. „Linear and nonlinear programming”. International series in operations research & management science. Springer, New York, NY, 3. edice, 2008.

- [49] R. Fletcher a M. J. D. Powell. „A rapidly convergent descent method for minimization". *The Computer Journal*, 6(2):163–168, 1963.
- [50] C. G. Broyden. „The convergence of a class of double-rank minimization algorithms". *IMA Journal of Applied Mathematics*, 6(3):222–231, 1970.
- [51] R. H. Byrd, P. Lu, J. Nocedal a C. Zhu. „A limited memory algorithm for bound constrained optimization". *SIAM Journal on Scientific Computing*, 16(5):1190–1208, 1995.
- [52] C. Audet a W. Hare. „*Derivative-free and blackbox optimization*". Springer Series in Operations Research and Financial Engineering. Springer International Publishing, Cham, Switzerland, 1. edice, 2017.
- [53] J. Larson, M. Menickelly a S. M. Wild. „Derivative-free optimization methods". *Acta Numerica*, 28:287–404, 2019.
- [54] S. Alarie, et al. „Two decades of blackbox optimization applications". *EURO Journal on Computational Optimization*, 9:100011, 2021.
- [55] O. Kramer, D. E. Ciaurri a Slawomir Koziel. „Derivative-free optimization". *Computational Optimization, Methods and Algorithms*, 61–83. Springer Berlin Heidelberg, 2011.
- [56] G. B. Dantzig. „Origins of the simplex method". *A history of scientific computing*, 141–151, 1990.
- [57] J. A. Nelder a R. Mead. „A simplex method for function minimization". *The Computer Journal*, 7(4):308–313, 1965.
- [58] Ch. Audet a J. E. Dennis. „Analysis of generalized pattern searches". *SIAM Journal on Optimization*, 13(3):889–903, 2002.
- [59] Ch. Audet a J. E. Dennis. „Mesh adaptive direct search algorithms for constrained optimization". *SIAM Journal on Optimization*, 17(1):188–217, 2006.
- [60] P. K. Mogensen a A. N. Riseth. „Optim: A mathematical optimization package for Julia". *Journal of Open Source Software*, 3(24):615, 2018.
- [61] C. Audet, S. Le Digabel, V. Rochon Montplaisir a C. Tribes. „Algorithm 1027: NOMAD version 4: Nonlinear optimization with the MADS algorithm". *ACM Transactions on Mathematical Software*, 48(3):35:1–35:22, 2022.
- [62] M. Karataş. „A multi foci closed curve: Cassini oval, its properties and applications". *Doğuş Üniversitesi Dergisi*, 14(2):231 – 248, 2013.
- [63] A. E. Ensley, et al.. „Toward designing the optimal total cavopulmonary connection: an in vitro study". *The Annals of Thoracic Surgery*, 68(4):1384–1390, 1999.