



ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská



Matematické modelování transportu a přestupu kontrastní látky v problematice perfuze myokardu

Mathematical modeling of transport and transfer of contrast agent in myocardial perfusion problems

Bakalářská práce

Autor: **Lenka Horvátová**
Vedoucí práce: **doc. Ing. Radek Fučík, Ph.D.**
Akademický rok: 2021/2022

ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

Student:	Lenka Horvátová
Studijní program:	Aplikace přírodních věd
Studijní obor:	Matematické inženýrství
Studijní zaměření:	Matematické modelování
Název práce (česky):	Matematické modelování transportu a přestupu kontrastní látky v problematice perfuze myokardu
Název práce (anglicky):	Mathematical modeling of transport and transfer of contrast agent in myocardial perfusion problems

Pokyny pro vypracování:

- 1) Seznamte se s matematickým modelováním transportu a přestupu kontrastní látky v problematice perfuze myokardu.
- 2) Navrhněte a formulujte zjednodušený matematický model transportu a přestupu kontrastní látky mezi intravaskulárním a extravaskulárním prostředím.
- 3) Prozkoumejte možnosti numerického řešení daného modelu a navrhněte vhodné numerické schéma.
- 4) Pokuste se implementovat numerické schéma z bodu 3, přičemž můžete využít dostupné numerické knihovny.

Doporučená literatura:

- 1) A. N. Cookson, et al., A spatially-distributed computational model to quantify behaviour of contrast agents in MR perfusion imaging. Medical image analysis 18.7, 2014, 1200-1216.
- 2) E. Vitásek, Numerické metody. SNTL-Nakladatelství technické literatury, 1987.
- 3) Ch. S. Peskin, The immersed boundary method. Acta numerica 11, 2002, 479-517.
- 4) T. Krüger, et al., The lattice Boltzmann method. Springer International Publishing 10.978-3, 2017, 4-15.
- 5) X. Wang, et al., An immersed boundary method for mass transfer through porous biomembranes under large deformations. Journal of Computational Physics 413, 2020, 109444.
- 6) X. Gong, Z. Gong, H. Huang, An immersed boundary method for mass transfer across permeable moving interfaces. Journal of Computational Physics 278, 2014, 148-168.

Jméno a pracoviště vedoucího bakalářské práce:

Ing. Radek Fučík, Ph.D.

Katedra matematiky, FJFI ČVUT v Praze, Trojanova 13, 120 00 Praha 2

Jméno a pracoviště konzultanta:

Datum zadání bakalářské práce: 31.10.2021

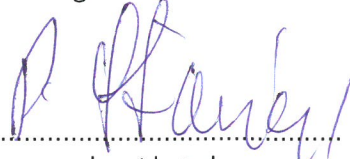
Datum odevzdání bakalářské práce: 7.7.2022

Doba platnosti zadání je dva roky od data zadání.

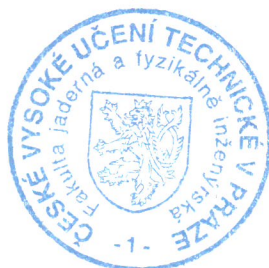
V Praze dne 21. října 2021



.....
garant oboru



.....
vedoucí katedry




.....
děkan

Poděkování:

Chtěla bych zde poděkovat především svému školiteli doc. Ing. Radku Fučíkovi, Ph.D. za pečlivost, ochotu, vstřícnost, cenné rady a odborné i lidské zázemí při vedení mé bakalářské práce. Mé poděkování patří také mé rodině a příteli za jejich trpělivost a dosavadní podporu při studiu.

Čestné prohlášení:

Prohlašuji, že jsem tuto práci vypracovala samostatně a uvedla jsem všechnu použitou literaturu.

V Praze dne 10. června 2022

Lenka Horvátová

Název práce:

Matematické modelování transportu a přestupu kontrastní látky v problematice perfuze myokardu

Autor: Lenka Horvátová

Obor: Matematické inženýrství

Zaměření: Matematické modelování

Druh práce: Bakalářská práce

Vedoucí práce: doc. Ing. Radek Fučík, Ph.D., Katedra matematiky, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, České vysoké učení technické v Praze, Trojanova 13, 120 00, Praha 2

Abstrakt: Tato práce se zabývá matematickým modelováním situací vznikajících při perfuzi myokardu pomocí vpuštění kontrastní látky. Popis transportu a přestupu kontrastní látky z cévy do mimocévního prostředí je rozdělen do dvou úloh. Nejdříve je céva uvažována jako bod a mimocévní prostředí představuje jednorozměrnou oblast, a poté se zaměříme na jednorozměrnou cévu a dvourozměrné mimocévní prostředí. Pro tento matematický model uvažujeme nestlačitelnou newtonovskou tekutinu, na kterou nepůsobí žádné vnější síly. Mimocévní prostředí uvažujeme porézní a rigidní. Hlavním cílem této práce je řešení úlohy transportu a přestupu kontrastní látky v jednorozměrné a dvourozměrné oblasti za použití metody konečných diferencí. Přestup kontrastní látky z cévy do mimocévního prostředí a naopak bude modelován pomocí metody vnořené hranice.

Klíčová slova: advekčně-difuzní rovnice, Diracova delta funkce, metoda konečných diferencí, metoda vnořené hranice, perfuze myokardu, porézní prostředí

Title:

Mathematical modeling of transport and transfer of contrast agent in myocardial perfusion problems

Author: Lenka Horvátová

Abstract: This bachelor thesis deals with mathematical modeling of problems arising during myocardial perfusion using the contrast agent. The description of the transport and transfer of the contrast agent from the vessel to the extravascular environment is divided into two tasks. First, the vessel is considered as a point and the extravascular environment represents a one-dimensional domain and then we focus on the one-dimensional vessel and the two-dimensional extravascular environment. For this mathematical model, the fluid is considered as Newtonian incompressible fluid and the extravascular environment is considered as porous and rigid. The main goal of this thesis is to solve the problem of transport and transfer of the contrast agent in one-dimensional and two-dimensional domains using the finite difference method. The transfer of the contrast agent from the vessel to the extravascular environment and back will be modeled by immersed boundary method.

Key words: advection-diffusion equation, Dirac's delta function, finite difference method, immersed boundary method, myocardial perfusion, porous media

Obsah

Úvod	7
1 Matematický model	9
1.1 Porézní prostředí	9
1.2 Advektivně-difuzní rovnice	10
1.2.1 Model transportu v tkáni	10
1.3 Přestup kontrastní látky skrz stěnu	10
1.4 Bezrozměrné veličiny	11
1.5 Metoda vnořené hranice	11
1.6 Formulace úlohy v 1D	13
1.7 Formulace úlohy ve 2D	13
2 Numerické metody	15
2.1 Úloha 1D	15
2.1.1 Diskretizace mimocévního prostředí	15
2.1.2 Diskretizace diferenciálních výrazů	16
2.1.3 Bodový zdroj	16
2.1.4 Numerická stabilita	16
2.1.5 Numerická konvergence	18
2.2 Úloha 2D	19
2.2.1 Diskretizace cévního a mimocévního prostředí	19
2.2.2 Diskretizace diferenciálních výrazů	20
2.2.3 Zdrojové členy	20
2.2.4 Numerická stabilita	21
3 Výsledky	22
3.1 Porovnání numerického a analytického řešení v 1D	22
3.1.1 Čistě difuzní úloha	22
3.1.2 Advektivně-difuzní úloha	24
3.2 Časový průběh koncentrace v mimocévním prostředí v 1D	26
3.2.1 Porovnání spojitých aproximací Diracovy delta funkce	26
3.2.2 Čistě difuzní úloha	29
3.2.3 Advektivně-difuzní úloha	31
3.2.4 Rezervoár	33
3.3 Časový průběh koncentrace ve 2D	36
Závěr	42

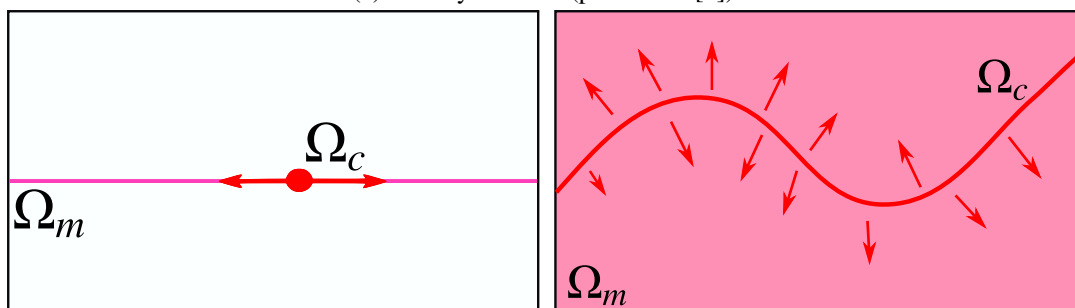
Úvod

Tato bakalářská práce se věnuje matematickému modelování proudění tekutin, transportu kontrastní látky (KL) a jejímu přestupu v porézním prostředí, což je prostředí, které obsahuje póry vyplněné tekutinou. V této práci budeme modelovat situace, které vznikají při perfuzi myokardu za pomoci vpuštění KL. Po celou dobu budeme za porézní prostředí uvažovat myokard, jehož řez je zobrazen na obrázku 1a. Na tomto obrázku je znázorněna céva Ω_c , kterou přichází KL, a okolí cévy uvažované jako mimocévní prostředí Ω_m .

Úlohu proudění a transportu KL rozdělíme na 2 části. Nejprve se budeme zabývat úlohou 1D vyobrazenou na obrázku 1b, ve které céva Ω_c představuje bod a mimocévní prostředí znázorňuje křivku. Poté se budeme zabývat úlohou 2D (obrázek 1c) ve dvourozměrném mimocévním prostředí s jednorozměrnou cévou. V obou úlohách vpustíme KL do oblasti Ω_c , a poté budeme zkoumat transport a přestup KL do oblasti Ω_m . Poznamenejme, že vstupní koncentrace KL je časově proměnná inspirovaná průběhem při klinickém vyšetření perfuze myokardu na magnetické rezonanci.



(a) Řez myokardem (převzato z [9]).



(b) 1D model.

(c) 2D model.

Obrázek 1: Ilustrace řezu myokardem 1a a uvažovaných zjednodušených reprezentací matematickým modelem 1b v 1D a 1c ve 2D.

Po celou dobu budeme předpokládat, že na prostředí nepůsobí žádné vnější síly a budeme uvažovat nestlačitelnou newtonovskou tekutinu. Dále předpokládáme platnost Darcyho zákona pro proudění tekutin v porézním prostředí s konstantní rychlostí. V této práci budeme v mimocévním prostředí používat advekčně-difuzní rovnici v 1D a čistě difuzní rovnici ve 2D. V případě jednorozměrného cévního prostředí budeme v oblasti Ω_c řešit advekčně-difuzní rovnici. Přestup KL mezi Ω_c a Ω_m bude řešen pomocí metody vnořené hranice.

V první kapitole popíšeme matematické modely úloh 1D a 2D. Dále se budeme zabývat numerickými metodami, které jsou využité k řešení těchto úloh. Konkrétně se bude jednat o metodu konečných diferencí (MKD) implementovanou v jazyce C++ pro jednorozměrný a dvourozměrný systém. Na konci poslední kapitoly jsou shrnuty výsledky numerických metod, kde nejdříve ověříme, zda-li implementovaná metoda dává správné nebo očekávané výsledky. Poté porovnáme jednorozměrnou MKD pro různá nastavení sítě a různé aproximace pravé strany advekčně-difuzní rovnice. Následně budeme zkoumat nastavení numerické metody na řešení úloh při pevné síti a pevně zvolené aproximaci Diracovy delta funkce.

Ve výsledcích budeme sledovat vliv diskretizace oblastí Ω_c a Ω_m a vliv použití spojitě aproximace Diracovy delta funkce.

Kapitola 1

Matematický model

V první kapitole nejprve popíšeme proudění tekutin v porézním prostředí bez zdrojů a bez vnějšího silového působení (např. gravitace). Dále uvedeme rovnici popisující transport kontrastní látky a aproximujeme zdrojový člen z této rovnice. Postupně zavedeme zbylé potřebné pojmy pro následující kapitoly. Nakonec zformulujeme úlohu v jedné a ve dvou dimenzích.

Předpokládejme, že Ω_m je oblast v \mathbb{R}^{dim} , kde dim značí dimenzi prostoru, a v ní je vnořen bod (pro $dim = 1$), resp. křivka Ω_c (pro $dim = 2$) reprezentující cévu (zdroj KL). Dále uvažujme časový interval $I = (0, T)$.

1.1 Porézní prostředí

Porézní prostředí se skládá z pevného skeletu a volného prostoru pórů, který je vyplněn jednou nebo více tekutinami. Jako porézní prostředí lze uvažovat lidskou tkáň, konkrétněji myokard. V této práci budeme předpokládat, že skelet je vyplněn právě jednou tekutinou, takový systém nazýváme jednofázový.

Dále budeme zkoumat proudění tekutin v porézním prostředí z hlediska makroskopického měřítka, které je popsáno po řadě rovnicí kontinuity a Darcyho zákonem, viz [2],

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}) = 0 \quad \text{v } \Omega_m \times I, \quad (1.1a)$$

$$\mathbf{u} + \frac{1}{\mu} \mathbb{K} \nabla p = 0 \quad \text{v } \Omega_m \times I, \quad (1.1b)$$

kde výše zapsané veličiny jsou funkcemi od polohy \mathbf{x} [m] a času t [s] a mají následující význam:

ρ	[kg m ³]	hustota tekutiny,
\mathbf{u}	[m s ⁻¹]	Darcyho makroskopická rychlost tekutin,
μ	[kg m ⁻¹ s ⁻¹]	dynamická viskozita tekutiny,
\mathbb{K}	[m ²]	tenzor propustnosti,
ϕ	[-]	porozita.

Dále budeme předpokládat, že modelujeme proudění newtonovské nestlačitelné kapaliny ($\rho = konst$), a že porézní prostředí je izotropní, tj. $\mathbb{K} = K\mathbb{I}$, kde K [m²] je koeficient propustnosti. Tyto dodatečné předpoklady umožní přeformulovat rovnice (1.1) do tvaru

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad \text{v } \Omega_m \times I, \quad (1.2a)$$

$$\mu\mathbf{u} + K\nabla p = 0 \quad \text{v } \Omega_m \times I. \quad (1.2b)$$

1.2 Advektivně-difuzní rovnice

Proces transportu KL je v obecné oblasti $\Omega \subset \mathbb{R}^{dim}$ popsán advektivně-difuzní rovnicí

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c\mathbf{u}) = \nabla \cdot (D\nabla c) + f \quad \text{v } \Omega \times I, \quad (1.3)$$

kde veličiny mají následující význam:

c	[kg m ⁻³]	koncentrace KL,
D	[m ² s ⁻¹]	difuzní koeficient KL,
f	[kg m ⁻³ s ⁻¹]	zdrojový člen.

Člen $\nabla \cdot (c\mathbf{u})$ v rovnici (1.3) představuje advektivní část a člen $\nabla \cdot (D\nabla c)$ difuzní část. V kapitole 2 se nejdříve zaměříme na případ, kdy advektivní člen bude nulový, a poté na situaci při které budeme naopak advektivní člen převládat. K porovnávání těchto dvou členů se používá bezrozměrné Pécletovo číslo definované jako poměr rychlosti advekce a rychlosti difuze vztahem, viz [3],

$$Pe = \frac{L\mathbf{u}}{D}, \quad (1.4)$$

kde L [m] je charakteristická délka, například jeden z rozměrů uvažované oblasti. Pokud $Pe < 1$ převládá difuze a naopak advekce.

1.2.1 Model transportu v tkáni

Pomocí rychlosti získané z rovnice (1.2) můžeme dosazením do (1.3) popsat transport KL v porézním prostředí. V cévách Ω_c je transport KL popsán advektivně-difuzní rovnicí (1.5a) s konstantní rychlostí \mathbf{u}_c a v mimocévním prostředí Ω_m uvažujeme pouze difuzní úlohu popsanou rovnicí (1.5b)

$$\frac{\partial c_c}{\partial t} + \nabla \cdot (c_c\mathbf{u}_c) = \nabla \cdot (D_c\nabla c_c) - g + f \quad \text{v } \Omega_c \times I, \quad (1.5a)$$

$$\phi_m \frac{\partial c_m}{\partial t} = \phi_m \nabla \cdot (D_m\nabla c_m) + \phi_m g \quad \text{v } \Omega_m \times I, \quad (1.5b)$$

kde g [kg m⁻³ s⁻¹] charakterizuje přestup KL mezi cévou a mimocévním prostředím a Ω_m považujeme za rigidní, tj. $\phi_m = konst.$

1.3 Přestup kontrastní látky skrz stěnu

Zdrojový člen g v rovnicích (1.5) propojuje rovnice (1.5a) a (1.5b). V makroskopickém měřítku uvažujeme tok g v následujícím tvaru, viz [4],

$$g = k(c_c - c_m), \quad (1.6)$$

kde k je koeficient přestupu popisující propustnost cévní stěny vzhledem ke KL. Rovnice (1.5a) a (1.5b) lze pomocí vztahu (1.6) přepsat do následujícího tvaru

$$\frac{\partial c_c}{\partial t} + \nabla \cdot (c_c\mathbf{u}_c) = D_c \Delta c_c - k(c_c - c_m) + f, \quad (1.7a)$$

$$\frac{\partial c_m}{\partial t} = D_m \Delta c_m + k(c_c - c_m). \quad (1.7b)$$

1.4 Bezrozměrné veličiny

Nyní přejdeme k bezrozměrnému tvaru rovnic (1.7), který zjednoduší analýzu jejich řešení. Pro převod do bezrozměrného tvaru zavedeme následující bezrozměrné veličiny s dolním indexem d (z angl. *dimensionless*), viz [4],

$$c_c = c_0 c_{c,d}, \quad (1.8a)$$

$$c_m = c_0 c_{m,d}, \quad (1.8b)$$

$$\mathbf{u}_c = u_0 \mathbf{u}_{c,d}, \quad (1.8c)$$

$$x = l_0 x_d, \quad (1.8d)$$

$$t = t_0 t_d, \quad (1.8e)$$

kde u_0 [m s^{-1}] je charakteristická rychlost, c_0 [kg m^{-3}] je charakteristická koncentrace KL, t_0 [s] je charakteristický čas a l_0 [m] je charakteristická délka. Dále budeme používat pouze bezrozměrné veličiny, a proto už nebudeme psát dolní index d .

1.5 Metoda vnořené hranice

Nechť vektor $\mathbf{x} \in \Omega_m$ je eulerovská prostorová souřadnice a vektor $\mathbf{X} \in \Omega_c$ je lagrangeovský bod popsáný parametrickou souřadnicí $s \in M$. Zavedeme skalární funkci w a definujeme funkce w^E a w^L po řadě popsáné eulerovsky a lagrangeovsky. Nyní zavedeme vztahy mezi těmito funkcemi, viz [11],

$$w^E(\mathbf{x}, t) = \int_{\Omega_c} w^L(\mathbf{X}(s, t), t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s, t)) ds \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_m, \forall t \in I, \quad (1.9)$$

$$w^L(\mathbf{X}(s, t), t) = \int_{\Omega_m} w^E(\mathbf{x}, t) \delta(\mathbf{X}(s, t) - \mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad \forall s \in M, \forall t \in I. \quad (1.10)$$

V rovnicích (1.9) a (1.10) symbol δ označuje Diracovu delta funkci. Poznamenejme, že oba dva integrály z výše zapsaných rovnic jsou pouze formální a první integrál (1.9) představuje konvoluci δ a nějaké spojitě funkce s kompaktním nosičem na Ω_m a integrál v rovnici (1.10) představuje jednoduchou vrstvu na Ω_c .

Diracovu delta funkci v kapitole 2 aproximujeme spojitou distribucí Ψ navrženou C. Peskinem [7], která je definována vztahem

$$\Psi(\mathbf{z}) = \prod_{k=1}^{\dim} \frac{1}{h} \psi\left(\frac{z_k}{h}\right), \quad (1.11)$$

kde z_k je k -tá složka vektoru \mathbf{z} a ψ je spojitá 1-dimenzionální aproximace Diracovy delta funkce. Podle [7] budeme o funkci ψ předpokládat, že

1. $\psi(r)$ je spojitá $\forall r \in \mathbb{R}$,
2. $\psi(r) = 0 \quad \forall r \in \mathbb{R}, |r| \geq 2$,
3. $\sum_{j \text{ liché}} \psi(r-j) = \sum_{j \text{ sudé}} \psi(r-j) = \frac{1}{2} \quad \forall r \in \mathbb{R}$,
4. $\sum_j (r-j)\psi(r-j) = 0 \quad \forall r \in \mathbb{R}$,
5. $\sum_j (\psi(r-j))^2 = \text{konst} \quad \forall r \in \mathbb{R}$,

kde r označuje $\frac{zk}{h}$. V této práci budeme používat a vyhodnocovat 4 tvary aproximace Diracovy delta funkce ψ , viz [11],

$$\psi_2(r) = \begin{cases} 1 - |r| & \text{pro } |r| \leq 1, \\ 0 & \text{pro } |r| \geq 1, \end{cases} \quad (1.12a)$$

$$\psi_3(r) = \begin{cases} \frac{1}{3}(1 + \sqrt{1 - 3r^2}) & \text{pro } |r| \leq \frac{1}{2}, \\ \frac{1}{6}(5 - 3|r| - \sqrt{-2 + 6|r| - 3r^2}) & \text{pro } |r| \in (\frac{1}{2}, \frac{3}{2}), \\ 0 & \text{pro } |r| \geq \frac{3}{2}, \end{cases} \quad (1.12b)$$

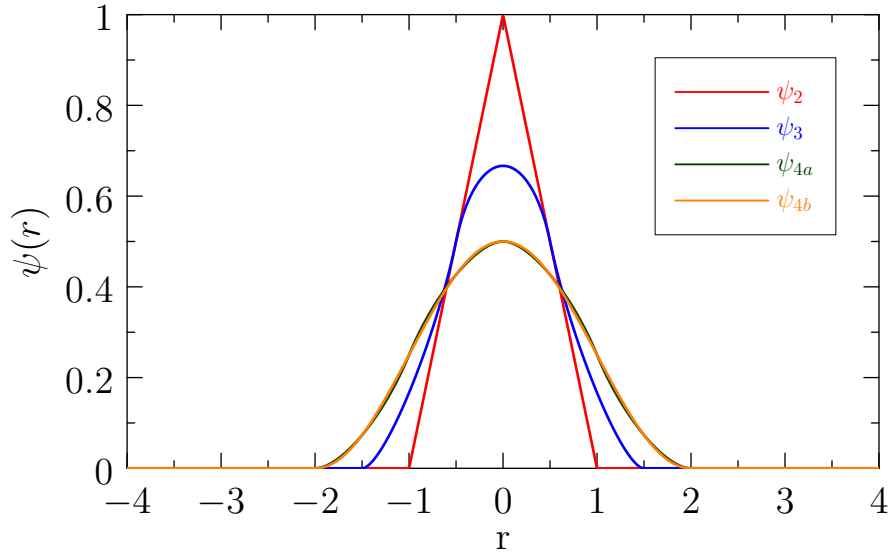
$$\psi_{4a}(r) = \begin{cases} \frac{1}{8}(3 - 2|r| + \sqrt{1 + 4|r| - 4r^2}) & \text{pro } |r| \leq 1, \\ \frac{1}{8}(5 - 2|r| - \sqrt{-7 + 12|r| - 4r^2}) & \text{pro } |r| \in (1, 2), \\ 0 & \text{pro } |r| \geq 2, \end{cases} \quad (1.12c)$$

$$\psi_{4b}(r) = \begin{cases} \frac{1}{4}(1 + \cos \frac{\pi r}{2}) & \text{pro } |r| \leq 2, \\ 0 & \text{pro } |r| \geq 2, \end{cases} \quad (1.12d)$$

kde dolní index u funkcí definovaných vztahy (1.12) odpovídá šířce jejich nosiče. Všechny tyto funkce splňují následující vztah, který vyplývá z předpokladu 3

$$\sum_{j \in \mathbb{Z}} \psi(r - j) = 1 \quad \forall r \in \mathbb{R}. \quad (1.13)$$

Funkce (1.12) jsou vykresleny na obrázku 1.1. Dále je třeba zmínit, že funkce (1.12) nespĺňují všechny předpoklady zmíněné výše. Například předpoklad 4 není splněn funkcí ψ_{4b} a žádná z těchto funkcí nespĺňuje předpoklad 5, nicméně v kapitole 3 ukážeme, že i přesto metoda vnořené hranice bude dávat důvěryhodné výsledky.



Obrázek 1.1: Spojité aproximace Diracovy delta funkce.

1.6 Formulace úlohy v 1D

Necht' Ω_c označuje v jednorozměrné podobě bod, ve kterém uvažujeme časově proměnný profil koncentrace $c_c(t)$ daný následujícím vztahem

$$c_c(t) = \exp[-K_c(t - t_c)^2], \quad (1.14)$$

kde K_c a t_c jsou bezrozměrné konstanty určující po řadě časové škálování a posun v čase. Bod Ω_c uvažujeme vnořen do oblasti Ω_m , ale není vázán na diskretní eulerovskou mřížku, tj. jeho poloha vzhledem k diskretizaci je libovolná.

Dále necht' $\Omega_m = (0, L)$ je oblast s hranicemi Γ_{in} , Γ_{out} a $I = (0, T)$ je časový interval, kde $L, T \in \mathbb{R}^+$. Za předpokladu $u_m = konst$ převedeme transportní rovnice (1.5) pro $c_m = c_m(x, t)$ do jednorozměrné podoby

$$\frac{\partial c_m}{\partial t} + u_m \frac{\partial c_m}{\partial x} = D_m \frac{\partial^2 c_m}{\partial x^2} + g_m \quad \text{v } \Omega_m \times I \quad (1.15)$$

s počátečními a okrajovými podmínkami v mimocévním prostředí na množině $\overline{\Omega}_m \times \bar{I}$:

$$\text{Počáteční podmínka:} \quad c_m(x, 0) = c_m^{ini}(x) \quad \forall x \in \overline{\Omega}_m, \quad (1.16a)$$

$$\text{Dirichletovy o.p.:} \quad c_m(0, t) = c_{m,0} \quad \forall t \in I, \quad (1.16b)$$

$$c_m(L, t) = c_{m,L} \quad \forall t \in I,$$

$$\text{Neumannovy o.p.:} \quad \frac{\partial c_m}{\partial x}(0, t) = 0 \quad \forall t \in I, \quad (1.16c)$$

$$\frac{\partial c_m}{\partial x}(L, t) = 0 \quad \forall t \in I.$$

Zdrojový člen g_m je dán vztahem

$$g_m(x, t) = k(c_c^E(x, t) - c_m(x, t)) \quad \forall x \in \Omega_m, \forall t \in I, \quad (1.17)$$

kde k je koeficient přestupu daný (1.6) a $c_c^E(x, t)$ označuje koncentraci v cévě, která je popsána eulerovsky pomocí jednoduché vrstvy (1.9) ve tvaru

$$c_c^E(x, t) = \int_{\Omega_c} c_c(X, t) \delta(x - X) dX, \quad (1.18)$$

kde X označuje bod Ω_c .

1.7 Formulace úlohy ve 2D

V dvourozměrné úloze symbol Ω_c označuje úsečku o délce L_c . Dále necht' $\Omega_m = (0, L_{x_1}) \times (0, L_{x_2})$ je oblast s hranicemi Γ a $I = (0, T)$ je časový interval, kde L_{x_1} a L_{x_2} jsou délky stran oblasti Ω_m po řadě na ose x_1 a x_2 . Dále necht' dvourozměrná oblast Ω_m je popsána vektorem $\mathbf{x} = (x_1, x_2)^T$ a jednorozměrná oblast Ω_c je parametrizována množinou $\{X(s) \mid s \in M\}$, kde $M = \{s \mid s \in (0, L_c)\}$ je množina parametrů lagrangeovského popisu.

Nyní zformulujeme transportní rovnice (1.5) ve dvourozměrném tvaru pro $c_c = c_c(s, t)$ a $c_m = c_m(\mathbf{x}, t)$

$$\frac{\partial c_c}{\partial t} + u_c \frac{\partial c_c}{\partial s} = D_c \frac{\partial^2 c_c}{\partial s^2} + g_c \quad \text{v } M \times I, \quad (1.19a)$$

$$\frac{\partial c_m}{\partial t} = D_m \left(\frac{\partial^2 c_m}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 c_m}{\partial x_2^2} \right) + g_m \quad \text{v } \Omega_m \times I, \quad (1.19b)$$

kde předpokládáme konstantní rychlost u_c . Definujeme počáteční a okrajové podmínky této úlohy následovně

- Pro cévní prostředí:

$$\text{Počáteční podmínka:} \quad c_c(s, 0) = c_c^{ini}(s) \quad \forall s \in \overline{M}, \quad (1.20a)$$

$$\text{Dirichletova o.p.:} \quad c_c(0, t) = c_{c,0} \quad \forall t \in I, \quad (1.20b)$$

$$c_c(L_c, t) = c_{c,L} \quad \forall t \in I,$$

$$\text{Neumannova o.p.:} \quad \frac{\partial c_c}{\partial s}(0, t) = 0 \quad \forall t \in I, \quad (1.20c)$$

$$\frac{\partial c_c}{\partial s}(L_c, t) = 0 \quad \forall t \in I,$$

- Pro mimocévní prostředí:

$$\text{Počáteční podmínka:} \quad c_m(\mathbf{x}, 0) = c_m^{ini}(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \overline{\Omega}_m, \quad (1.21a)$$

$$\text{Dirichletovy o.p.:} \quad c_m(\mathbf{x}, t) = c_m^{\text{Dir}}(\mathbf{x}, t) \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_{\text{Dir}} \times I, \quad (1.21b)$$

$$\text{Neumannovy o.p.:} \quad \nabla c_m(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) = 0 \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_{\text{Neu}} \times I, \quad (1.21c)$$

kde $\mathbf{n}(\mathbf{x})$ je jednotkový vektor vnější normály hranice mimocévního prostředí Γ v bodě $\mathbf{x} \in \Gamma$ a hranice $\Gamma_{\text{Dir}}, \Gamma_{\text{Neu}}$ splňují

$$\Gamma_{\text{Dir}} \cap \Gamma_{\text{Neu}} = \emptyset, \quad (1.22a)$$

$$\overline{\Gamma_{\text{Dir}} \cup \Gamma_{\text{Neu}}} = \Gamma. \quad (1.22b)$$

Zdrojové členy g_c a g_m jsou dány vztahy

$$g_c(s, t) = k \left(c_m^L(s, t) - c_c(s, t) \right) \quad \forall (s, t) \in M \times I, \quad (1.23a)$$

$$g_m(\mathbf{x}, t) = k \left(c_c^E(\mathbf{x}, t) - c_m(\mathbf{x}, t) \right) \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \Omega_m \times I, \quad (1.23b)$$

kde členy c_c^E a c_m^L označují po řadě koncentraci v cévě popsanou eulerovsky a koncentraci v mimocévním prostředí popsanou lagrangeovsky. Pomocí konvoluce (1.9) a jednoduché vrstvy (1.10) můžeme tyto koncentrace vyjádřit následovně

$$c_c^E(\mathbf{x}, t) = \int_M c_c(s, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s)) ds \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_m, \forall t \in I, \quad (1.24a)$$

$$c_m^L(s, t) = \int_{\Omega_m} c_m(\mathbf{x}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s)) d\mathbf{x} \quad \forall s \in M, \forall t \in I. \quad (1.24b)$$

Kapitola 2

Numerické metody

Nyní se budeme zabývat popisem metody konečných diferencí pro advektivně-difuzní rovnici (1.15) v 1D, a poté pro rovnice (1.19) ve 2D. Kapitulu rozdělíme do dvou částí. V první části budeme uvažovat jednorozměrnou oblast Ω_m a Ω_c bude představovat bod. V druhé části oblast Ω_m bude znázorňovat čtverec a Ω_c křivku. V obou sekcích zavedeme diskretizaci oblasti Ω_m a množiny M parametrizující Ω_c , které budeme po řadě značit $\hat{\Omega}_m$ a \hat{M} , poté aproximuje zdrojový člen. Nakonec popíšeme, kdy je metoda numericky stabilní a budeme se zabývat zkoumáním konvergence numerické metody. V obou dvou částech se budeme zabývat časově explicitními schémata.

2.1 Úloha 1D

V této sekci popíšeme MKD pro úlohu (1.6).

2.1.1 Diskretizace mimocévního prostředí

Nyní zavedeme diskretizaci oblasti $\bar{\Omega}_m$ a časového intervalu \bar{I} , které označíme po řadě $\hat{\Omega}_m$ a \hat{I} . Tyto diskretizace jsou dány vztahy

$$\bar{\hat{\Omega}}_m = \{x_j = j\Delta x \mid j \in \{0, 1, \dots, N_x - 1\}\}, \quad (2.1a)$$

$$\hat{\Omega}_m = \{x_j = j\Delta x \mid j \in \{1, \dots, N_x - 2\}\}, \quad (2.1b)$$

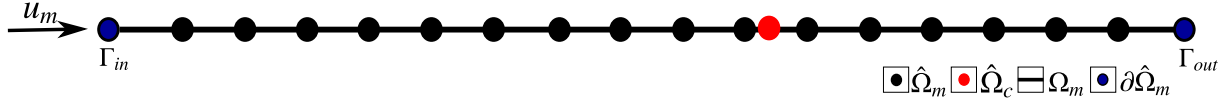
$$\partial\hat{\Omega}_m = \bar{\hat{\Omega}}_m \setminus \hat{\Omega}_m, \quad (2.1c)$$

$$\hat{I} = \{t_i = i\Delta t \mid i \in \{0, 1, \dots, N_t - 1\}\}, \quad (2.1d)$$

kde Δx je prostorový krok podél křivky Ω_m a Δt je časový krok. Dále N_x a N_t představují počet uzlů po řadě na ose x a t . Délku prostorové osy x označíme L a délku časové osy t budeme značit T . Pro tyto veličiny platí následující vztah

$$\Delta x = \frac{L}{N_x}, \text{ resp. } \Delta t = \frac{T}{N_t}. \quad (2.2)$$

Bod Ω_c je dále značen písmenem X z důvodu lepší přehlednosti.



Obrázek 2.1: Diskretizace křivky Ω_m a bodu Ω_c .

2.1.2 Diskretizace diferenciálních výrazů

Diferenciální výrazy z rovnice (1.15) nahradíme konečnými diferencemi následujícími vztahy, viz [1],

$$\frac{\partial c_m}{\partial t}(x_j, t_i) \approx \frac{c_{m,j}^{i+1} - c_{m,j}^i}{\Delta t}, \quad (2.3a)$$

$$u_m \frac{\partial c_m}{\partial x}(x_j, \cdot) \approx \begin{cases} u_m \frac{c_{m,j} - c_{m,j-1}}{\Delta x} & \text{pro } u_m \geq 0, \\ u_m \frac{c_{m,j+1} - c_{m,j}}{\Delta x} & \text{pro } u_m < 0, \end{cases} \quad (2.3b)$$

$$\frac{\partial^2 c_m}{\partial x^2}(x_j, \cdot) \approx \frac{c_{m,j+1} - 2c_{m,j} + c_{m,j-1}}{\Delta x^2}, \quad (2.3c)$$

kde časová derivace je nahrazena zpětnou časovou diferencí, první prostorová derivace je nahrazena upwindovou stabilizací 1. řádu a druhá prostorová derivace je nahrazena prostorovou centrální diferencí 2. řádu. Rovnice (2.3) jsou platné pro všechna $j \in \{1, \dots, N_x - 2\}$ a $i \in \{1, \dots, N_t - 2\}$. Horní a spodní indexy označují časový a prostorový index, tj. $c_{m,j}^i = c_m(x_j, t_i)$ a $g_{m,j}^i = g_m(x_j, t_i)$. Aplikací rovnic (2.3) na rovnici (1.15) dostáváme za předpokladu $u_m \geq 0$ následující tvar

$$\frac{c_{m,j}^{i+1} - c_{m,j}^i}{\Delta t} + u_m \frac{c_{m,j}^i - c_{m,j-1}^i}{\Delta x} = D_m \frac{c_{m,j+1}^i - 2c_{m,j}^i + c_{m,j-1}^i}{\Delta x^2} + g_{m,j}^i, \quad (2.4)$$

kde $j \in \{1, \dots, N_x - 2\}$ a $i \in \{1, \dots, N_t - 2\}$.

2.1.3 Bodový zdroj

V sekci (1.6) jsme zavedli koncentraci c_c^E popsanou lagrangeovskými pomocí jednoduché vrstvy (1.17). Za předpokladu, že Ω_c představuje bod, lze (1.17) zjednodušit na tvar

$$c_c^E(x, t) = \int_{\{s_0\}} c_c(X(s), t) \delta(x - X(s)) ds \quad \forall x \in \Omega_m, \forall t \in I, \quad (2.5)$$

kde $c_c(X(s), t) = c_c(t)$ (ze vztahu (1.14)) a $M = \{s_0\}$ je jediný bod $X = X(s_0)$. Jelikož se jedná o formální integrál přes jednobodovou množinu M , lze (2.5) aproximovat podle [11] následujícími vztahem

$$c_c^E(x, t) \approx c_c(t) \Psi(x - X) = c_c(t) \frac{1}{h} \psi\left(\frac{1}{h}(x - X)\right) \quad \forall x \in \Omega_m, \forall t \in I, \quad (2.6)$$

kde $h = \Delta x$ a ψ je definované v sekci (1.12).

2.1.4 Numerická stabilita

Stabilita numerického schématu je úzce spojena s numerickou chybou. Schéma konečných diferencí je stabilní, pokud chyby provedené v jednom časovém kroku výpočtu nezpůsobí zvětšení chyb při pokračujících výpočtech.

Mějme advekčně-difuzní rovnici v jedné dimenzi v následujícím tvaru ((1.3) bez zdrojového členu)

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}. \quad (2.7)$$

Rovnici (2.4) diskretizující (2.7) bez zdrojového členu lze zapsat ve tvaru

$$c_j^{i+1} = A c_{j-1}^i + B c_j^i + C c_{j+1}^i \quad \forall j \in \{1, \dots, N_x - 2\}, \forall i \in \{1, \dots, N_t - 2\}, \quad (2.8)$$

kde jsme pro lepší zpracování zavedli konstanty A, B, C vztahy

$$A = D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} + u \frac{\Delta t}{\Delta x} > 0, \quad (2.9a)$$

$$B = 1 - 2D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} - u \frac{\Delta t}{\Delta x}, \quad (2.9b)$$

$$C = D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} > 0. \quad (2.9c)$$

Inverzní diskrétní Fourierovou transformací můžeme vyjádřit c_j^{i+1} následujícím způsobem, viz [8],

$$c_j^{i+1} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\frac{\pi}{\Delta x}}^{\frac{\pi}{\Delta x}} e^{ij\xi\Delta x} \hat{c}^{i+1}(\xi) d\xi \quad \forall j \in \{1, \dots, N_x - 2\}, \forall i \in \{1, \dots, N_t - 2\}. \quad (2.10)$$

Dosazením vztahu (2.8) do rovnice (2.3) získáme tvar

$$c_j^{i+1} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\frac{\pi}{\Delta x}}^{\frac{\pi}{\Delta x}} e^{ij\xi\Delta x} \hat{c}^i(\xi) [A e^{-i\Delta x \xi} + B + C e^{i\Delta x \xi}] d\xi \quad \forall j \in \{1, \dots, N_x - 2\}, \forall i \in \{1, \dots, N_t - 2\}. \quad (2.11)$$

Následným porovnáním rovnic (2.8) a (2.11) dostaneme

$$\hat{c}^{i+1} = [A e^{-i\Delta x \xi} + B + C e^{i\Delta x \xi}] \hat{c}^i \stackrel{\text{ozn.}}{\equiv} \zeta(\eta) \hat{c}^i \quad \forall i \in \{1, \dots, N_t - 2\}, \quad (2.12)$$

kde byla provedena substituce $\eta = \xi\Delta x$ pro budoucí zpracování, ζ nazýváme zesilující faktor a kvůli stabilitě metody požadujeme (viz [8]), aby $|\zeta(\eta)| \leq 1$, tj. $|\zeta(\eta)|^2 \leq 1$.

Nyní rozepíšeme levou stranu této podmínky za využití vzorce $|\zeta|^2 = (\text{Re}(\zeta))^2 + (\text{Im}(\zeta))^2$ a algebraických úprav následovně

$$|\zeta(\eta)|^2 = (A \cos \eta + B + C \cos \eta)^2 + (C \sin \eta - A \sin \eta)^2 = (A - C)^2 + B^2 + 4AC \cos^2 \eta + 2B(A + C) \cos \eta. \quad (2.13)$$

Pokud $B \geq 0$, pak v rovnici (2.13) lze odhadnout shora $\cos(\eta) \leq 1$ a dostaneme

$$|\zeta(\eta)|^2 \leq (A - C)^2 + B^2 + 4AC + 2B(A + C). \quad (2.14)$$

Nahrazením definičních vztahů konstant A, B a C v rovnici (2.14) dostaneme

$$\begin{aligned} |\zeta(\eta)|^2 &\leq u^2 \lambda^2 + (1 - 2D\mu^2 - u\lambda)^2 + 4(D\mu + u\lambda)D\mu + 2(1 - 2D\mu - u\lambda)(2D\mu + u\lambda) \\ &= u^2 \lambda^2 + (1 - 2D\mu - u\lambda)[4D\mu + 2u\lambda + 1 - 2D\mu - u\lambda] + 4(D\mu + u\lambda)D\mu \\ &= u^2 \lambda^2 + 1 - (2D\mu + u\lambda)^2 + 4D\mu(D\mu + u\lambda) = 1, \end{aligned} \quad (2.15)$$

kde pro jednodušší zápis jsme zavedli substituci

$$\lambda = \frac{\Delta t}{\Delta x}, \quad (2.16a)$$

$$\mu = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}. \quad (2.16b)$$

S volbou $B \geq 0$ je splněn požadavek na stabilitu metody a rozepsáním této volby dostaneme podmínku na časový krok následujícím způsobem

$$1 - 2D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} - u \frac{\Delta t}{\Delta x} \geq 0. \quad (2.17)$$

Z podmínky (2.17) dostaneme horní omezení na volbu časového kroku, kterou lze zapsat ve tvaru

$$\Delta t \leq \frac{1}{\frac{2D}{\Delta x^2} + \frac{u}{\Delta x}}, \quad (2.18)$$

přičemž v praxi používáme volbu

$$\Delta t = C \frac{1}{\frac{2D}{\Delta x^2} + \frac{u}{\Delta x}}, \quad (2.19)$$

kde C je Courantovo číslo [10] splňující $C < 1$ a v této práci volíme $C = 0.9$.

2.1.5 Numerická konvergence

Pro danou diskretizaci $\hat{\Omega}_m$ definujeme chybu aproximace E_p skalární veličiny $c = c(x, t)$ vztahem, viz [6],

$$E_p(\Delta x) = \|c^{(an)} - c_{\Delta x}^{(num)}\|_p, \quad (2.20)$$

kde $c^{(an)}$ (viz [5]) je analytické řešení rovnice (1.3), $c_{\Delta x}^{(num)}$ je numerické řešení získané z MKD na síti $\hat{\Omega}_m$ s prostorovým krokem Δx a $\|\cdot\|_p$ značí L_p normu. Na základě chyb získaných ze dvou různých sítí o prostorových krocích Δx_A a Δx_B je experimentální řád konvergence (EOC) dán vztahem, viz [6],

$$\text{EOC}_p = \frac{\ln E_p(\Delta x_A) - \ln E_p(\Delta x_B)}{\ln \Delta x_A - \ln \Delta x_B}. \quad (2.21)$$

2.2 Úloha 2D

V této sekci popíšeme MKD pro úlohu (1.7).

2.2.1 Diskretizace cévního a mimocévního prostředí

Nejdříve zavedeme diskretizaci oblasti $\bar{\Omega}_m$ a označíme ji $\hat{\Omega}_m$. Křivka Ω_c je popsána body $\mathbf{X} = \mathbf{X}(s)$ pro s z množiny $M = (0, L_c)$, proto diskretizaci $\bar{\Omega}_c$ provedeme pomocí diskretizace \hat{M} . Obě diskretizace jsou dány následujícími vztahy

$$\bar{\hat{\Omega}}_m = \{\mathbf{x}_{j,k} = (j\Delta x_1, k\Delta x_2)^T \mid j \in \{0, 1, \dots, N_{x_1} - 1\}, k \in \{0, 1, \dots, N_{x_2} - 1\}\}, \quad (2.22a)$$

$$\hat{\Omega}_m = \{\mathbf{x}_{j,k} = (j\Delta x_1, k\Delta x_2)^T \mid j \in \{1, \dots, N_{x_1} - 2\}, k \in \{1, \dots, N_{x_2} - 2\}\}, \quad (2.22b)$$

$$\partial\hat{\Omega}_m = \bar{\hat{\Omega}}_m \setminus \hat{\Omega}_m, \quad (2.22c)$$

$$\bar{\hat{M}} = \{s_\ell = \ell\Delta s \mid \ell \in \{0, 1, \dots, N_s - 1\}\}, \quad (2.22d)$$

$$\hat{M} = \{s_\ell = \ell\Delta s \mid \ell \in \{1, \dots, N_s - 2\}\}, \quad (2.22e)$$

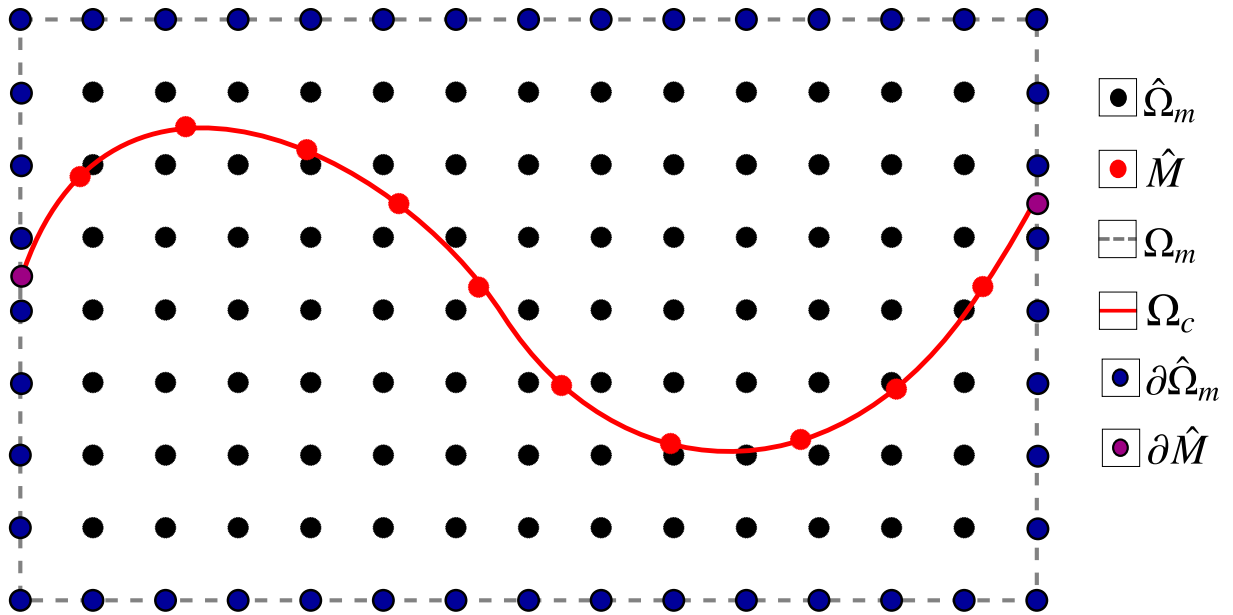
$$\partial\hat{M} = \bar{\hat{M}} \setminus \hat{M}, \quad (2.22f)$$

kde Δs je prostorový krok podél křivky Ω_c a $\Delta x_1, \Delta x_2$ jsou po řadě prostorové kroky ve směru os x_1, x_2 . Dále N_{x_1}, N_{x_2}, N_s představují po řadě počet uzlů na eulerovských osách x_1, x_2 a lagrangeovské ose s . V této práci budeme předpokládat stejnou vzdálenost mezi uzly na ose x_1 a x_2 , tedy $\Delta x_1 = \Delta x_2 \stackrel{\text{ozn.}}{\equiv} \Delta x$.

Dále zavedeme diskretizaci časového intervalu stejným způsobem jako pro úlohu 1D (2.1.1) vztahem

$$\hat{I} = \{t_i = i\Delta t \mid i \in \{0, 1, \dots, N_t - 1\}\}, \quad (2.23)$$

kde Δt je časový krok a N_t je počet uzlů na ose t .



Obrázek 2.2: Diskretizace oblasti Ω_m a křivky Ω_c .

2.2.2 Diskretizace diferenciálních výrazů

Diferenciální výrazy z rovnice (1.19) nahradíme následujícími vztahy, viz [1],

- Pro koncentraci $c_c(s_\ell, t_i) = c_{c,\ell}^i$:

$$\frac{\partial c_c}{\partial t}(s_\ell, t_i) \approx \frac{c_{c,\ell}^{i+1} - c_{c,\ell}^i}{\Delta t}, \quad (2.24a)$$

$$u_c \frac{\partial c_c}{\partial s}(s_\ell, \cdot) \approx \begin{cases} u_c \frac{c_{c,\ell} - c_{c,\ell-1}}{\Delta s} & \text{pro } u_c \geq 0, \\ u_c \frac{c_{c,\ell+1} - c_{c,\ell}}{\Delta s} & \text{pro } u_c < 0, \end{cases} \quad (2.24b)$$

$$\frac{\partial^2 c_c}{\partial s^2}(s_\ell, \cdot) \approx \frac{c_{c,\ell+1} - 2c_{c,\ell} + c_{c,\ell-1}}{\Delta s^2}, \quad (2.24c)$$

$$(2.24d)$$

kde časová derivace je nahrazena zpětnou časovou diferencí, první prostorová derivace je nahrazena upwindovou stabilizací 1. řádu a druhá prostorová derivace je nahrazena prostorovou centrální diferencí 2. řádu a $\ell \in \{1, \dots, N_s - 2\}$, $i \in \{1, \dots, N_t - 2\}$,

- Pro koncentraci $c_m(\mathbf{x}_{j,k}, t_i) = c_{m,j,k}^i$:

$$\frac{\partial c_m}{\partial t}(\mathbf{x}_{j,k}, t_i) \approx \frac{c_{m,j,k}^{i+1} - c_{m,j,k}^i}{\Delta t}, \quad (2.25a)$$

$$\Delta c_m(\mathbf{x}_{j,k}, \cdot) \approx \frac{c_{m,j+1,k} - 2c_{m,j,k} + c_{m,j-1,k}}{\Delta x^2} + \frac{c_{m,j,k+1} - 2c_{m,j,k} + c_{m,j,k-1}}{\Delta x^2}, \quad (2.25b)$$

$$(2.25c)$$

kde časová derivace je nahrazena zpětnou časovou diferencí a druhá prostorová derivace je nahrazena prostorovou centrální diferencí 2. řádu a $j \in \{1, \dots, N_{x_1} - 2\}$, $k \in \{1, \dots, N_{x_2} - 2\}$ a $i \in \{1, \dots, N_t - 2\}$.

Aplikací rovnic (2.24), (2.25) na rovnice (1.19) dostaneme za předpokladu $u_c \geq 0$ následující tvar numerického schématu

$$\frac{c_{c,\ell}^{i+1} - c_{c,\ell}^i}{\Delta t} + u_c \frac{c_{c,\ell}^i - c_{c,\ell-1}^i}{\Delta s} = D_c \frac{c_{c,\ell+1}^i - 2c_{c,\ell}^i + c_{c,\ell-1}^i}{\Delta s^2} + g_{c,\ell}^i, \quad (2.26a)$$

$$\frac{c_{m,j,k}^{i+1} - c_{m,j,k}^i}{\Delta t} = D_m \left(\frac{c_{m,j+1,k}^i - 2c_{m,j,k}^i + c_{m,j-1,k}^i}{\Delta x^2} + \frac{c_{m,j,k+1}^i - 2c_{m,j,k}^i + c_{m,j,k-1}^i}{\Delta x^2} \right) + g_{m,j,k}^i, \quad (2.26b)$$

kde $j \in \{1, \dots, N_{x_1} - 2\}$, $k \in \{1, \dots, N_{x_2} - 2\}$, $\ell \in \{1, \dots, N_s - 2\}$ a $i \in \{1, \dots, N_t - 2\}$.

2.2.3 Zdrojové členy

Integrály zformulované v rovnici (1.24) aproximujeme podle [11] vztahy

$$c_c^E(\mathbf{x}, t) = \int_M c_c(s, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s)) ds \approx \sum_{\ell=0}^{N_s-1} c_c(s_\ell, t) \Psi(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s_\ell)) \Delta s \quad \forall(\mathbf{x}, t) \in \Omega_m \times I, \quad (2.27a)$$

$$c_m^L(s, t) = \int_{\Omega_m} c_m(\mathbf{x}, t) \delta(\mathbf{X}(s) - \mathbf{x}) d\mathbf{x} \approx \sum_{j=0}^{N_{x_1}-1} \sum_{k=0}^{N_{x_2}-1} c_m(\mathbf{x}_{j,k}, t) \Psi(\mathbf{X}(s) - \mathbf{x}_{j,k}) \Delta x \quad \forall(s, t) \in M \times I. \quad (2.27b)$$

2.2.4 Numerická stabilita

Stejně jako v kapitole (2.1.4) se budeme zabývat numerickou stabilitou schématu (2.26). V případě advekčně-difuzního schématu pro cévní prostředí budeme klást požadavek na volbu časové kroku jako v rovnici (2.18), a to následující

$$\Delta t_c = C \frac{1}{\frac{2D_c}{\Delta s^2} + \frac{u_c}{\Delta s}}, \quad (2.28)$$

kde Δt_c je volba časového kroku dána cévním prostředím a v ryze difuzním mimocévním prostředím budeme uvažovat

$$\Delta t_m = C \frac{\Delta x^2}{2D_m}, \quad (2.29)$$

což je analogie (2.28) s nulovou rychlostí. Z těchto dvou voleb časových kroků Δt_c a Δt_m definujeme časový krok pro celou úlohu následovně

$$\Delta t = C \min\{\Delta t_c, \Delta t_m\}, \quad (2.30)$$

kde $C < 1$ je dříve zmíněné Courantovo číslo a v této části volíme $C = 0.5$.

Kapitola 3

Výsledky

V této kapitole rozebereme výsledky numerických řešení úloh 1D a 2D metodou konečných diferencí popsanou v kapitole 2. V první části ověříme konvergenci numerické metody v 1D a následně budeme vyhodnocovat závislost koncentrace c_m a celkového množství látky v mimocévním prostředí Ω_m na volbě sítě a na volbě aproximace Diracovy delta funkce. Poté se zaměříme na jednu vybranou aproximaci Diracovy delta funkce ψ a jednu volbu počtu uzlů N_x na křivce Ω_m .

V druhé části se zaměříme na dvourozměrnou úlohu 2D, ve které budeme porovnávat vliv volby prostorového kroku v oblasti Ω_m a na křivce Ω_c s různými spojitými aproximacemi Diracovy delta funkce na celkové množství látky v Ω_c a Ω_m .

3.1 Porovnání numerického a analytického řešení v 1D

V této sekci se budeme zabývat konvergencí numerického schématu úlohy 1D pro případ čistě difuzní úlohy (bez advekce), a poté na advekčně-difuzním schématu s převažující advekcí. Necht' transportní rovnice pro $c_m = c_m(x, t)$ s konstantními koeficienty D_m a u_m má tvar

$$\frac{\partial c_m}{\partial t} + u_m \frac{\partial c_m}{\partial x} = D_m \frac{\partial^2 c_m}{\partial x^2}, \quad (3.1)$$

kde $t \in I$ a $x \in \Omega_m$. Rovnice (3.1) má analytické řešení $c^{(an)}$ (viz [5]) dané vztahem

$$c^{(an)}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{t - t_0}} \exp \left[-\frac{(x - u_m t - x_0)^2}{4D_m(t - t_0)} \right] \quad \forall (x, t) \in \hat{\Omega}_m \times \hat{I}, \quad (3.2)$$

kde x_0 a t_0 jsou volné parametry určující prostorový a časový posun řešení. Pomocí analytického řešení (3.2) jsme schopni určit experimentální řád konvergence EOC_p (viz (2.1.5)) uvažované metody konečných diferencí.

V podsekcích (3.1.1) a (3.1.2) si za počáteční podmínku zvolíme analytické řešení $c^{(an)}$ a budeme zkoumat vliv diskretizace metodou konečných diferencí na přesnost řešení rovnice (3.1). Následně vyhodnotíme experimentální řád konvergence. V obou sekcích ilustrujeme časový průběh v grafech.

3.1.1 Čistě difuzní úloha

Cílem této části bude prověřit konvergenci metody na čistě difuzní úloze. Konvergenci této metody vyhodnotíme v tabulce 3.1 pro $p = 2$ a ilustrujeme na obrázku 3.1. Níže specifikujeme nastavení této úlohy, kde počáteční podmínkou bude analytické řešení (3.2) s nulovou advekcí. Na okrajích úsečky Ω_m také předepíšeme analytické řešení jako Dirichletovu okrajovou podmínku (1.16b).

Úloha 1: Čistě difuzní úloha

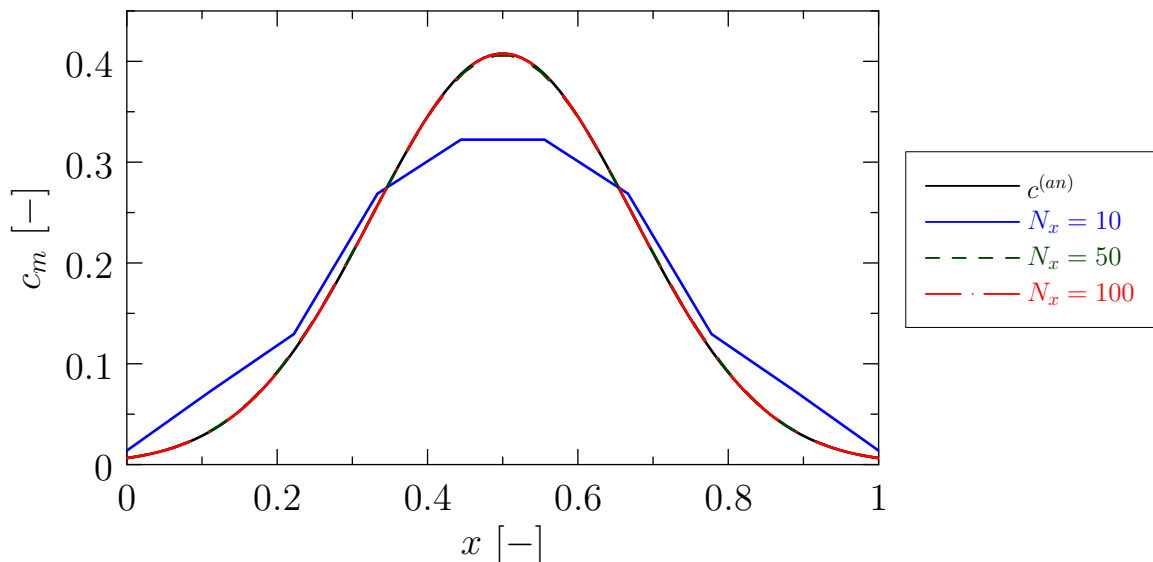
Uvažujme čistě difuzní úlohu (2.4), tedy necht' $u_m = 0$. Necht' nastavení úlohy je následovné:

- $L = 1$,
- $T = 5$,
- $N_x \in \{10, 50, 100\}$,
- $D_m = 0.0025$,
- $x_0 = 0.5$,
- $t_0 = -1$,
- $g_m(x, t) = 0 \quad \forall (x, t) \in \hat{\Omega}_m \times \hat{I}$,

s počáteční a okrajovými podmínkami:

$$\begin{aligned} c_m^{ini}(x, 0) &= c^{(an)}(x, 0) & \forall x \in \hat{\Omega}_m, \\ c_m(0, t) &= c^{(an)}(0, t) & \forall t \in \hat{I}, \\ c_m(L, t) &= c^{(an)}(L, t) & \forall t \in \hat{I}. \end{aligned}$$

Na obrázku 3.1 porovnáváme koncentraci c_m na třech různých sítích ($N_x = 10$, $N_x = 50$, $N_x = 100$) s analytickým řešením $c^{(an)}$. Můžeme zde vidět, že při nejhrubší volbě sítě (modrá křivka) se numerické řešení koncentrace c_m v oblasti Ω_m značně odlišuje od analytického řešení (černá křivka), ale pro síť o 50 uzlech a více se vizuálně tato dvě řešení neliší. V tabulce 3.1 můžeme vyčíst experimentální řád konvergence, který je řádu 2. Tabulku jsme vyhodnocovali pro více nastavení počtu uzlů než je vyobrazeno na obrázku 3.1, a to z důvodu ilustrování EOC na jemnějších sítích.



Obrázek 3.1: Srovnání numerických řešení úlohy 1 pro počet uzlů 10, 50 a 100 v čase $t = 5$ s analytickým řešením $c^{(an)}(\cdot, 5)$. Hodnoty EOC jsou vyobrazeny v tabulce 3.1.

N_x	E_2	EOC ₂
10	$6.036 \cdot 10^{-2}$	
50	$1.058 \cdot 10^{-3}$	2.386
100	$2.563 \cdot 10^{-4}$	2.016
500	$1.010 \cdot 10^{-5}$	2.000
1000	$2.514 \cdot 10^{-6}$	2.000
5000	$1.004 \cdot 10^{-7}$	2.000

Tabulka 3.1: Velikost chyby a EOC pro čistě difuzní úlohu 1.

N_x	E_2	EOC ₂
1000	$6.032 \cdot 10^{-2}$	
2000	$4.705 \cdot 10^{-2}$	0.358
4000	$3.493 \cdot 10^{-2}$	0.430
8000	$2.378 \cdot 10^{-2}$	0.555
16000	$1.468 \cdot 10^{-2}$	0.696
32000	$8.347 \cdot 10^{-3}$	0.814
64000	$4.449 \cdot 10^{-3}$	0.896

Tabulka 3.2: Velikost chyby a EOC pro advektivně-difuzní úlohu 2.

3.1.2 Advektivně-difuzní úloha

Nyní budeme uvažovat advektivně-difuzní úlohu s výrazně převládající advekcí. Cílem této úlohy bude ověřit, zda numerické řešení konverguje k analytickému řešení a určit experimentální řád konvergence. Stejně jako v podsekcí (3.1.1) budeme uvažovat téměř totožné nastavení s tím rozdílem, že v tomto případě přidáme advektivní člen. Z tohoto důvodu bude nutné ilustrovat konvergenci této metody na mnohem jemnějších sítích.

Úloha 2: Advektivně-difuzní úloha

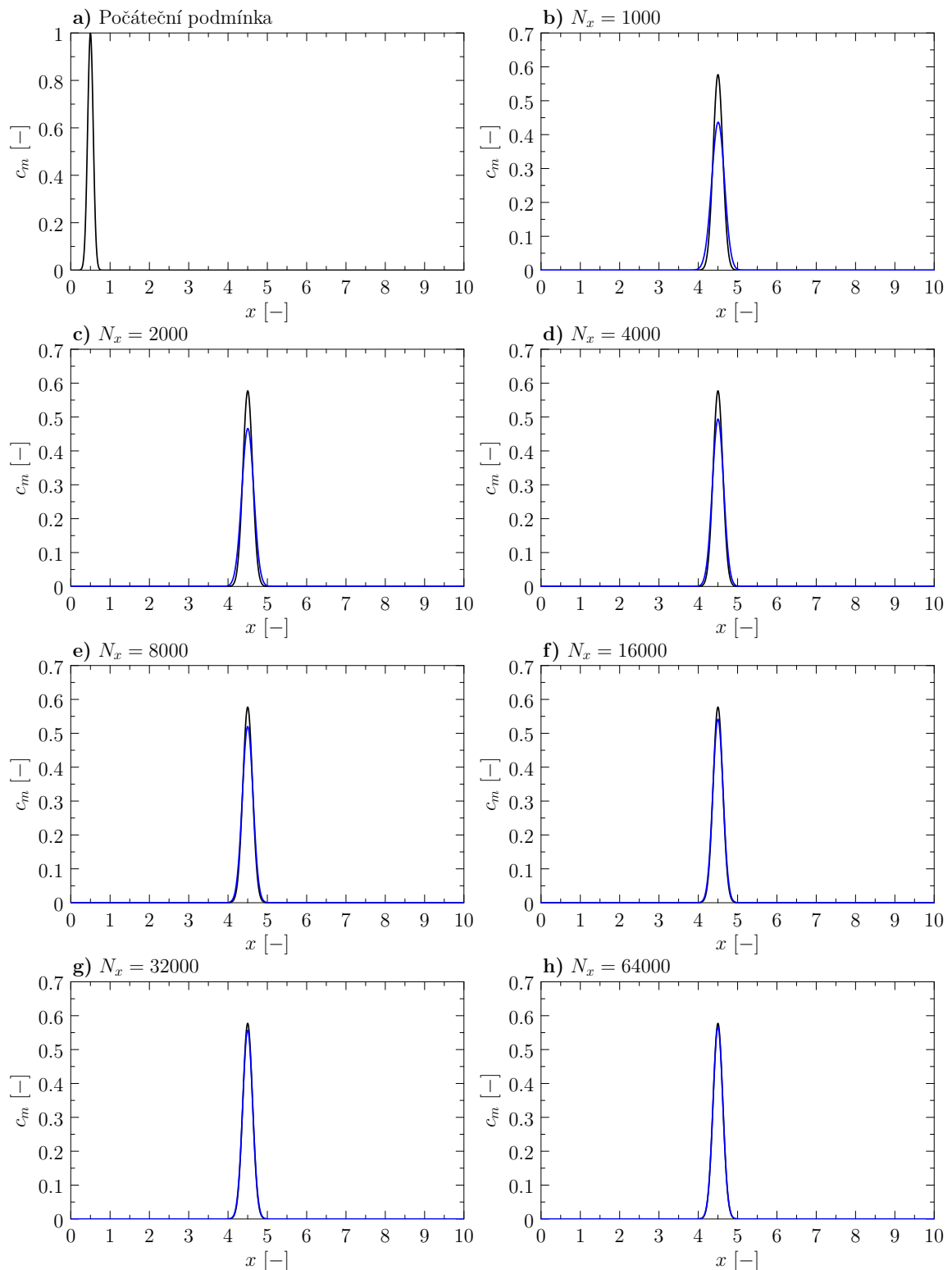
Uvažujme advektivně-difuzní úlohu (2.4) s následujícím nastavením:

- $T = 2,$
- $L = 10,$
- $N_x = 2^j \cdot 1000$ pro $j \in \{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6\},$
- $D_m = 0.0025,$
- $u_m = 2,$
- $x_0 = 0.5,$
- $t_0 = -1,$
- $g_m(x, t) = 0 \quad \forall (x, t) \in \hat{\Omega}_m \times \hat{I},$

s počáteční a okrajovými podmínkami:

$$\begin{aligned}
 c_m^{ini}(x, 0) &= c^{(an)}(x, 0) & \forall x \in \hat{\Omega}_m, \\
 c_m(0, t) &= c^{(an)}(0, t) & \forall t \in \hat{I}, \\
 c_m(L, t) &= c^{(an)}(L, t) & \forall t \in \hat{I}.
 \end{aligned}$$

Z tabulky 3.2 lze vyčíst, že kvůli přidanému advektivnímu členu se experimentální řád konvergence výrazně zmenšil, například pro síť o 64000 uzlech se dostáváme k hodnotě cca 0.9. Na následujícím obrázku 3.2 je znázorněno 8 grafů, kde první graf ilustruje nastavení počáteční podmínky v podobě analytického řešení (3.2) a zbylé grafy demonstrují vývoj koncentrace c_m ve finálním čase $t = 2$ pro různý počet uzlů v oblasti Ω_m . Je možné pozorovat, že při zvyšujícím se počtu uzlů se numerické řešení přibližuje k analytickému. Vizuálně se zdá, že pro volbu $N_x = 64000$ se tato dvě řešení výrazně neliší, ale jak již bylo zmíněno, tak hodnota EOC je více jak dvakrát menší než pro ryze difuzní úlohu.



Obrázek 3.2: Numerické řešení úlohy 2 v čase $t = 2$. Na grafu 3.4a) je zobrazena počáteční podmínka v čase $t = 0$ a ostatní grafy zobrazují řešení ve finálním čase $t = 2$ od nejhrubší sítě po nejjemnější. Hodnoty EOC pro toto nastavení jsou vyobrazeny v tabulce 3.2.

3.2 Časový průběh koncentrace v mimocévním prostředí v 1D

V této sekci budeme zkoumat časový průběh koncentrace c_m v oblasti Ω_m pro různé aproximace Diracovy delta funkce ψ na různých sítích. Následně vyhodnotíme nejlépe vyhovující aproximaci Diracovy delta funkce ψ a zvolíme si pevnou síť.

Dále definujeme celkové množství látky M_m v oblasti Ω_m v čase $t \in \hat{I}$ vztahem

$$M_m(t) = \int_{\Omega_m} c_m(x, t) dx \approx \sum_{i=0}^{N_x-2} \frac{c_m(x_i, t) + c_m(x_{i+1}, t)}{2} \Delta x. \quad (3.3)$$

3.2.1 Porovnání spojitých aproximací Diracovy delta funkce

Nyní budeme uvažovat čtyři různé aproximace Diracovy delta funkce pro c_c^E v (2.27a) definované vztahy (1.12). Tyto aproximace budeme vyhodnocovat na různých prostorových krocích Δx pro koncentraci c_m a celkové množství KL M_m v oblasti Ω_m v čase.

Na následující úloze 3 demonstrujeme rozdíl mezi aproximacemi $\psi_2, \psi_3, \psi_{4a}$ a ψ_{4b} . Cílem této úlohy je ukázat, jak se tyto aproximace projeví na koncentraci c_m a celkové množství látky M_m .

Úloha 3: Porovnání Diracových delta funkcí

Uvažujme advekčně-difuzní úlohu (2.4) s následujícím nastavením:

- $T = 10$,
- $L = 1$,
- $N_x \in \{10, 50, 100\}$,
- $D_m = 0.0025$,
- $g_m(x, t) = c_c^E(x, t)$
- $c_c(t) = \exp[-K_c(t - t_c)^2]$
- $u_m = 0.25$,
- $K_c = 0.5$,
- $t_c = 5$,
- $X = 0.5$,
- $\forall (x, t) \in \hat{\Omega}_m \times \hat{I}$,
- $\forall t \in \hat{I}$, viz (1.14),

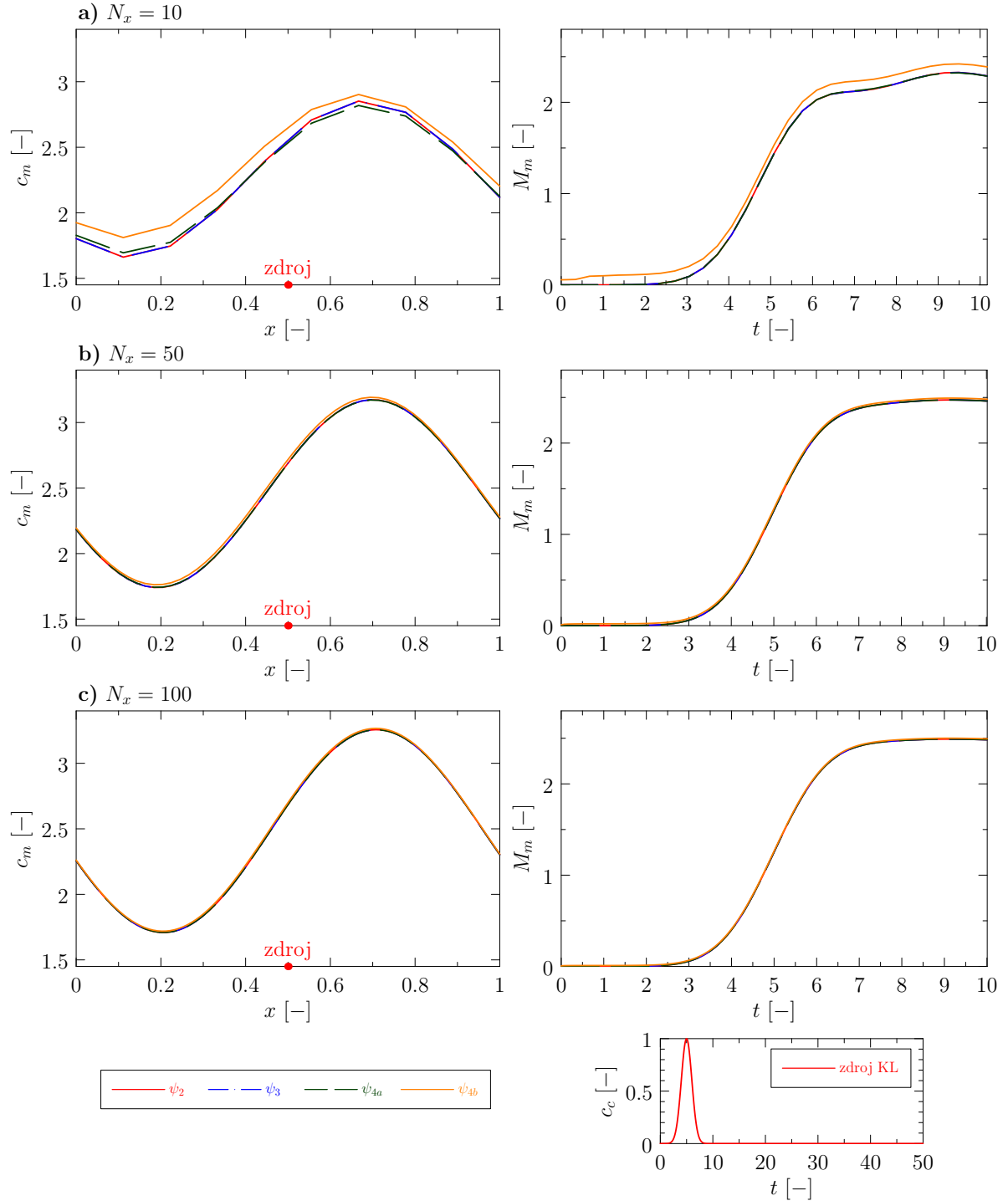
s počátečními a okrajovými podmínkami:

$$\begin{aligned} c_m^{ini}(x, 0) &= 0 & \forall x \in \hat{\Omega}_m, \\ c_m(0, t) &= c_m(L, t) & \text{(periodická podmínka)} & \forall t \in \hat{I}. \end{aligned}$$

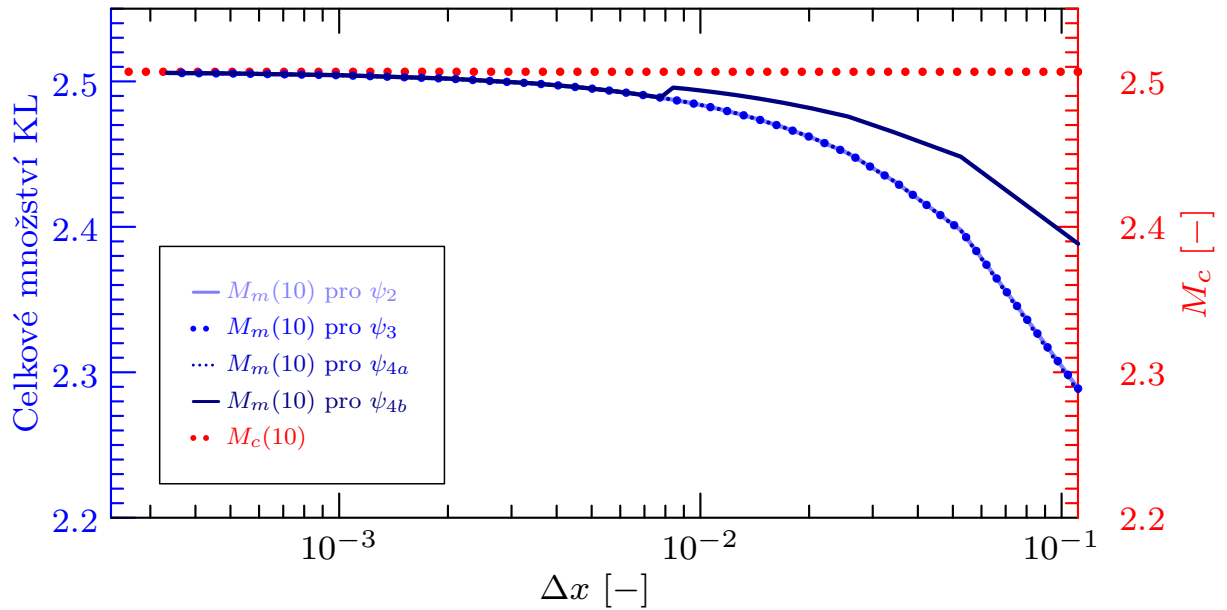
V této úloze předpokládáme, že v čase $t = 0$ se v oblasti Ω_m nenachází žádná KL. V čase $t = 5$ do oblasti Ω_m přichází KL ve své maximální hodnotě. Na okrajích předpokládáme periodické podmínky. Toto nastavení lze vidět na obrázku 3.3, kde zkoumáme tři nastavení sítě s počtem uzlů 10, 50 a 100 a čtyři různé volby aproximace pravé strany g . Na levé straně je vyobrazen průběh koncentrace c_m v oblasti Ω_m a na pravé straně průběh množství látky M_m v čase. Dole na tomto obrázku je přiložen graf průběhu koncentrace c_c v čase, která je vstříknutá do oblasti Ω_m v bodě Ω_c umístěném v $x = 0.5$.

Při porovnávání těchto grafů lze vidět, že při diskrétní volbě sítě ($N_x = 10$) se aproximace $\psi_2, \psi_3, \psi_{4a}$ výrazně neliší, zatímco aproximace ψ_{4b} dává mírně vyšší hodnoty koncentrace. Při zvětšení počtu uzlů sítě se ψ_{4b} začíná přibližovat k ostatním a při volbě $N_x = 100$ už všechny aproximace splývají, a proto

pro další zkoumání bude pro nás dostačující síť o 100 uzlech. Jelikož při této volbě sítě dávají všechny aproximace podobné výsledky, budeme v další části kapitoly používat výhradně aproximaci ψ_{4a} .



Obrázek 3.3: Numerická řešení úlohy 3 pro různé spojité aproximace Diracovy delta funkce. Grafy na levé straně zobrazují vývoj koncentrace c_m v oblasti Ω_m v čase $t = 10$ a grafy napravo ukazují časový průběh celkového množství KL v Ω_m v čase.



Obrázek 3.4: Porovnání celkového množství látky M_m v čase $t = 10$ v oblasti Ω_m pro různé aproximace Diracovy delta funkce v závislosti na prostorovém kroku Δx s celkovým množstvím látky M_c vstříknutém do této oblasti skrz bod Ω_c .

Z obrázku 3.4 vidíme, že se zmenšující se volbou prostorového kroku hodnoty M_m pro všechny aproximace Diracovy delta funkce konvergují k celkovému množství vstříknuté KL v daném čase $t \in I$, které ozn. M_c a definujeme vztahem

$$M_c(t) = \int_0^t c_c(\tau) d\tau. \quad (3.4)$$

Dále na obrázku 3.4 můžeme vidět, že při vyšší volbě prostorového kroku se ψ_{4b} lehce liší od ostatních, ale pro nižší hodnoty Δx se aproximace Diracovy delta funkce od sebe příliš neliší.

3.2.2 Čistě difuzní úloha

V této části rozebereme čistě difuzní úlohu, ve které se do oblasti Ω_m vsříkne KL v bodě Ω_c s maximální hodnotou v čase $t = 5$. Budeme předpokládat, že KL do této oblasti přiteče, a pak v ní zůstane. Opět nejdříve zavedeme nastavení úlohy, kde budeme uvažovat periodické okrajové podmínky a nulovou počáteční koncentraci v oblasti Ω_m .

Úloha 4: Čistě difuzní úloha

Uvažujme difuzní úlohu (2.4) s následujícím nastavením:

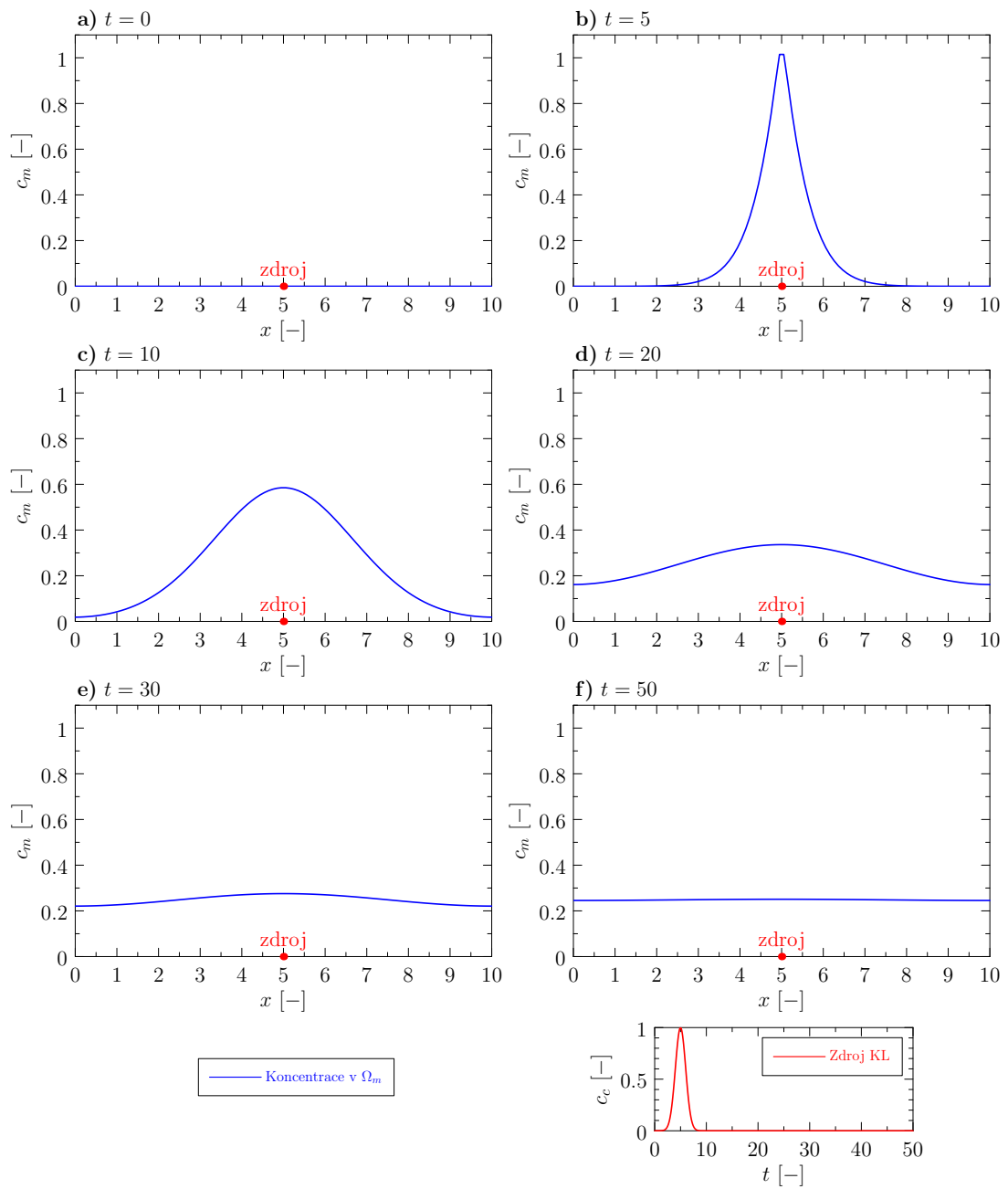
- $T = 50$,
- $L = 10$,
- $N_x = 100$,
- $D_m = 0.3$,
- $u_m = 0$,
- $g_m(x, t) = c_c^E(x, t)$
- $c_c(t) = \exp[-K_c(t - t_c)^2]$
- $K_c = 0.5$,
- $t_c = 5$,
- $X = 5$,
- Aproximace Diracovy delta funkce: ψ_2 ,
- $\forall (x, t) \in \hat{\Omega}_m \times \hat{I}$,
- $\forall t \in \hat{I}$, viz (1.14),

s počáteční a okrajovými podmínkami:

$$\begin{aligned}
 c_m^{ini}(x, 0) &= 0 & \forall x \in \hat{\Omega}_m, \\
 c_m(0, t) &= c_m(L, t) & \text{(periodická podmínka)} & \forall t \in \hat{I}.
 \end{aligned}$$

Toto nastavení je znázorněno na obrázku 3.5, kde modře je vyobrazen průběh koncentrace c_m v oblasti Ω_m v různých časech, červená tečka znázorňuje Ω_c , tj. v jakém bodě je vpouštěna KL, a na spodním grafu je znázorněn průběh koncentrace c_c v čase.

V čase vpouštění KL se v oblasti Ω_m výrazně zvětší hodnota koncentrace c_m a následně vlivem difuze se koncentrace c_m v oblasti Ω_m rozprostírá do všech stran, až v čase $t = 50$ se ustálí na hodnotě okolo 0.25.



Obrázek 3.5: Numerické řešení úlohy 4 v různých časech. První graf vlevo zobrazuje počáteční podmínku v čase $t = 0$ a zbylé grafy zobrazují vývoj koncentrace c_m v oblasti Ω_m .

3.2.3 Advektivně-difuzní úloha

Cílem této části bude prozkoumat vývoj koncentrace c_m v oblasti Ω_m za přítomnosti difuzního i advektivního členu. Opět bude do oblasti vstříknuta KL, která bude následně odnášena advektivním členem směrem doprava a difuzní člen ji bude rozlévat do stran. V této úloze jsou formálně voleny periodické okrajové podmínky, které nebudou hrát žádnou roli. Na počátku budeme mít opět oblast Ω_m s nulovou koncentrací c_m , do které přiteče již zmíněná KL a ta následně v této oblasti zůstane. Přesné nastavení této úlohy (ozn. úloha 5) je popsáno níže.

Úloha 5: Advektivně-difuzní úloha

Uvažujme advektivně-difuzní úlohu (2.4) s následujícím nastavením:

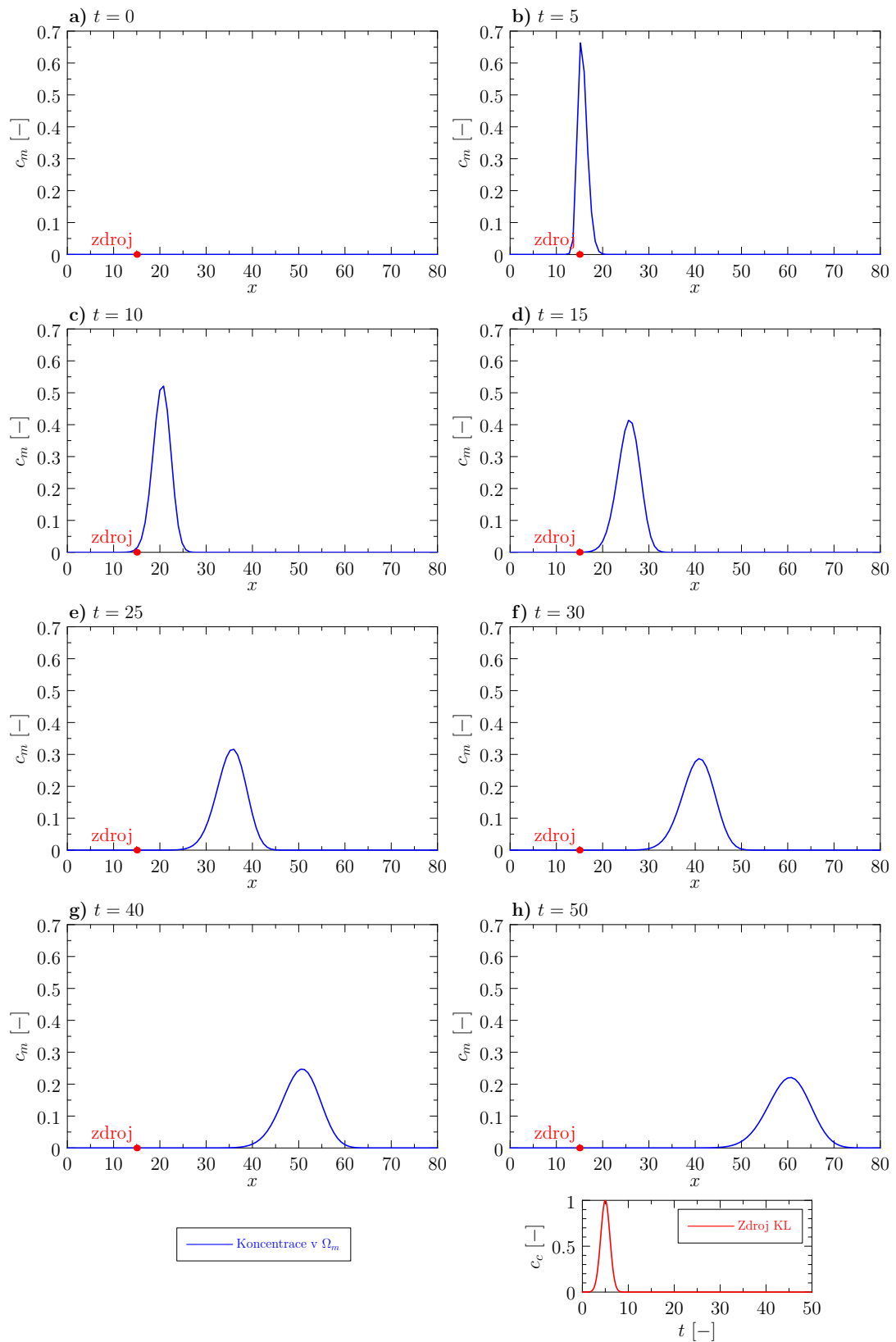
- $T = 50$,
- $L = 80$,
- $N_x = 100$,
- $D_m = 0.0015$,
- $u_m = 1$,
- $g_m(x, t) = c_c^E(x, t)$
- $c_c(t) = \exp[-K_c(t - t_c)^2]$
- $K_c = 0.5$,
- $t_c = 5$,
- $X = 15$,
- Aproximace Diracovy delta funkce: ψ_2 ,
- $\forall (x, t) \in \hat{\Omega}_m \times \hat{I}$,
- $\forall t \in \hat{I}$, viz (1.14),

s počáteční a okrajovými podmínkami:

$$c_m^{ini}(x, 0) = 0 \quad \forall x \in \hat{\Omega}_m,$$

$$c_m(0, t) = c_m(L, t) \quad (\text{periodická podmínka}) \quad \forall t \in \hat{I}.$$

Na obrázku 3.6 je vyobrazen modrou barvou průběh koncentrace c_m v oblasti Ω_m v různých časech. První graf ukazuje, že na počátku je v oblasti nulová koncentrace a následně je do této oblasti bodem Ω_c umístěným v $x = 15$ vpouštěna KL s maximální hodnotou v čase $t = 5$, jejíž průběh lze vidět na spodním grafu. Lze vypořadovat, že vstříknutá KL je unášena v kladném směru osy x a přitom difunduje do okolí.



Obrázek 3.6: Numerické řešení úlohy 5 v různých časech. První graf vlevo zobrazuje počáteční podmínku v čase $t = 0$ a zbylé grafy zobrazují vývoj koncentrace c_m v oblasti Ω_m .

3.2.4 Rezervoár

V této části budeme zkoumat situaci (ozn. úloha 6), která připomíná rezervoár (vyživovaný myokard). Budeme uvažovat oblast Ω_m , do které přiteče KL v bodě Ω_c s koncentrací c_c , následně se vlivem difuzního členu bude šířit v této oblasti a nakonec tato KL odteče opět skrz bod Ω_c pomocí vztahu (1.6). Aneb na počátku budeme předpokládat, že se v oblasti Ω_m nenachází žádná látka, poté do této oblasti přijde pomocí funkce g KL a ta se začne rozšiřovat po celé oblasti. Důležitou veličinou je koeficient přestupu k , který udává, jak rychle KL přestupuje mezi Ω_c a Ω_m . Periodické podmínky jsou tu zvoleny proto, aby KL z oblasti Ω_m neodtekla.

Úloha 6: Rezervoár

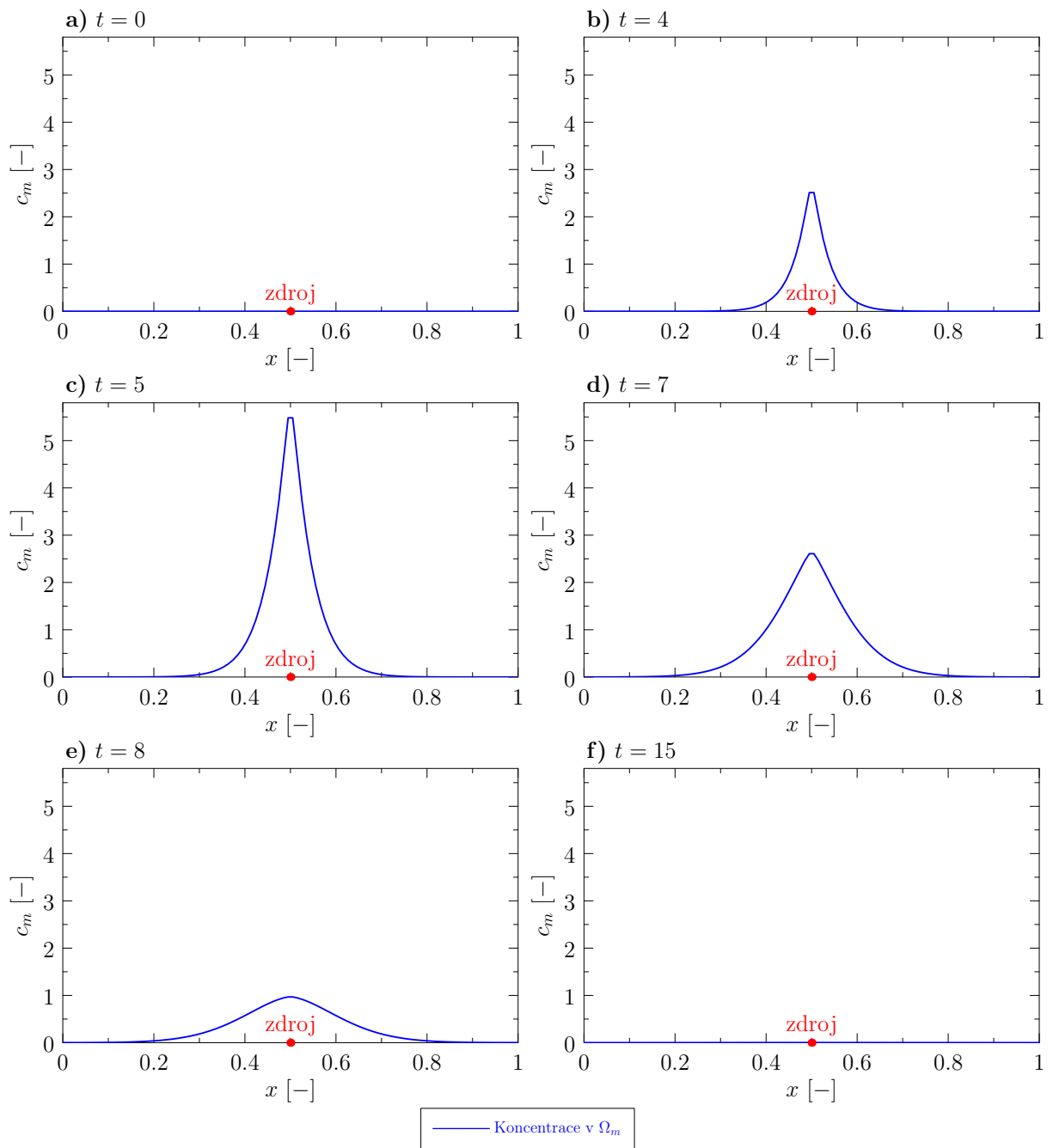
Uvažujme difuzní úlohu (2.4) s následujícím nastavením:

- $T = 10$,
- $k \in \{0.5, 0.75, 2\}$,
- $L = 1$,
- $N_x = 100$,
- $D_m = 0.003$,
- $g_m(x, t) = k(c_c^E(x, t) - c_m(x, t))$
- $c_c(t) = \exp[-K_c(t - t_c)^2]$
- $u_m = 0$,
- $K_c = 0.5$,
- $t_c = 5$,
- $X = 0.5$,
- Aproximace Diracovy delta funkce: ψ_2 ,
- $\forall (x, t) \in \hat{\Omega}_m \times \hat{I}$,
- $\forall t \in \hat{I}$, viz (1.14),

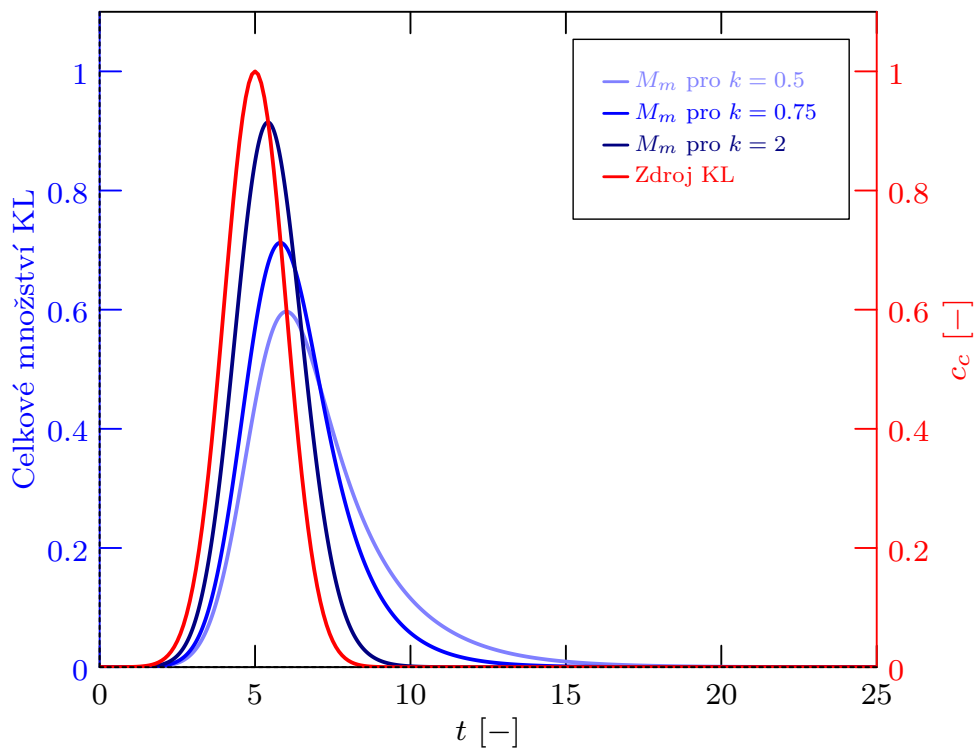
s počáteční a okrajovými podmínkami:

$$\begin{aligned}
 c_m^{ini}(x, 0) &= 0 & \forall x \in \hat{\Omega}_m, \\
 c_m(0, t) &= c_m(L, t) & \text{(periodická podmínka)} & \forall t \in \hat{I}.
 \end{aligned}$$

Na obrázku 3.7 jsou vykresleny grafy, které znázorňují časový průběh koncentrace c_m (modrou barvou) v oblasti Ω_m v různých časech a opět červenou tečkou je vyobrazeno místo vpuštění KL. V čase $t = 5$ hodnota vpuštění koncentrace KL dosahuje svého maxima.



Obrázek 3.7: Numerické řešení úlohy 6 v čase $t = 10$. První graf vlevo zobrazuje počáteční podmínku v čase $t = 0$ a zbylé grafy zobrazují vývoj koncentrace c_m v oblasti Ω_m .



Obrázek 3.8: Porovnání celkového množství látky v oblasti Ω_m s celkovým množstvím KL vstříknuté do této oblasti skrz bod Ω_c pro různé koeficienty přestupu k .

Jak již bylo zmíněno výše, důležitou roli v této úloze hraje koeficient přestupu k . Na obrázku 3.8 je vyobrazeno porovnání celkového množství KL v oblasti Ω_m v závislosti na čase pro různé koeficienty přestupu k a dále červenou barvou je pro porovnání zobrazen časový průběh koncentrace vypouštěné KL.

3.3 Časový průběh koncentrace ve 2D

V této sekci se budeme zabývat typově stejnou úlohou úloze 6 s tím rozdílem, že budeme uvažovat dvourozměrnou oblast Ω_m , která bude čtvercového typu se stejným počtem bodů na ose x_1 a x_2 . Dále Ω_c bude představovat úsečku délky L_c , kterou umístíme vodorovně s osou x_1 a ve výšce $x_2 = 58.5$. Poznamenejme, že uzly diskretizace Ω_c se nemusí nutně shodovat s uzly diskretizace oblasti Ω_m .

Úloha 7: Rezervoár ve 2D

Uvažujme 2D úlohu (2.26) s následujícím nastavením:

- $T = 400$,
- $k = 0.01$,
- $L_{x_1} = L_{x_2} = 100$,
- $N_{x_1} = N_{x_2} \in \{50, 100, 200\}$,
- $D_m = 0.04$,
- $u_m = 0$,
- $\Omega_c = \{X(s) = (X_1(s), X_2(s)) : s \in (0, L_c), X_1(s) = sL_{x_1}, X_2(s) = 58.5\}$,
- $g_m(x, t) = k(c_c^E(x, t) - c_m(x, t)) \quad \forall (x, t) \in \hat{\Omega}_m \times \hat{I}$,
- $g_c(s, t) = k(c_m^L(s, t) - c_c(s, t)) \quad \forall (s, t) \in \hat{\Omega}_c \times \hat{I}$,
- $K_c = 0.5$,
- $t_c = 20$,
- $L_c = 100$,
- $N_s \in \{50, 100, 200\}$,
- $D_c = 0.0025$,
- $u_c = 1$,

s počátečními a okrajovými podmínkami:

$$\begin{aligned}
 c_c^{ini}(s, 0) &= \exp[-K_c t_c^2] && \forall s \in \hat{\Omega}_c, \text{ viz (1.14)}, \\
 c_c(0, t) &= \exp[-K_c(t - t_c)^2] && \forall t \in \hat{I}, \text{ viz (1.14)}, \\
 c_c(L_c - 1, t) &= c_c(L_c, t) && \forall t \in \hat{I}, \\
 c_m^{ini}(x, 0) &= 0 && \forall x \in \hat{\Omega}_m, \\
 c_m(x_1, 0, t) &= c_m(x_1, L_{x_2}, t) && \text{(periodická podmínka)} \quad \forall x_1 \in \hat{\Gamma} \cap (0, L_{x_1}), \\
 c_m(0, x_2, t) &= c_m(L_{x_1}, x_2, t) && \text{(periodická podmínka)} \quad \forall x_2 \in \hat{\Gamma} \cap (0, L_{x_2}), \\
 c_m(0, 0, t) &= c_m(L_{x_1}, L_{x_2}, t), && \text{(periodická podmínka)} \\
 c_m(L_{x_1}, 0, t) &= c_m(0, L_{x_2}, t). && \text{(periodická podmínka)}
 \end{aligned}$$

Dále definujeme celkové množství látky M_c v oblasti Ω_c a M_m v oblasti Ω_m (viz [14]) v čase $t \in \hat{I}$ vztahy

$$M_c(t) = \int_M c_c(s, t) ds \approx \sum_{\ell=0}^{N_s-2} \frac{c_c(s_\ell, t) + c_c(s_{\ell+1}, t)}{2} \Delta s, \quad (3.5)$$

$$M_m(t) = \int_{\Omega_m} c_m(x, t) dx \approx \sum_{j=0}^{N_{x_1}-1} \sum_{k=0}^{N_{x_2}-1} \omega(x_{j,k}) c_m(x_{j,k}, t) (\Delta x)^2, \quad (3.6)$$

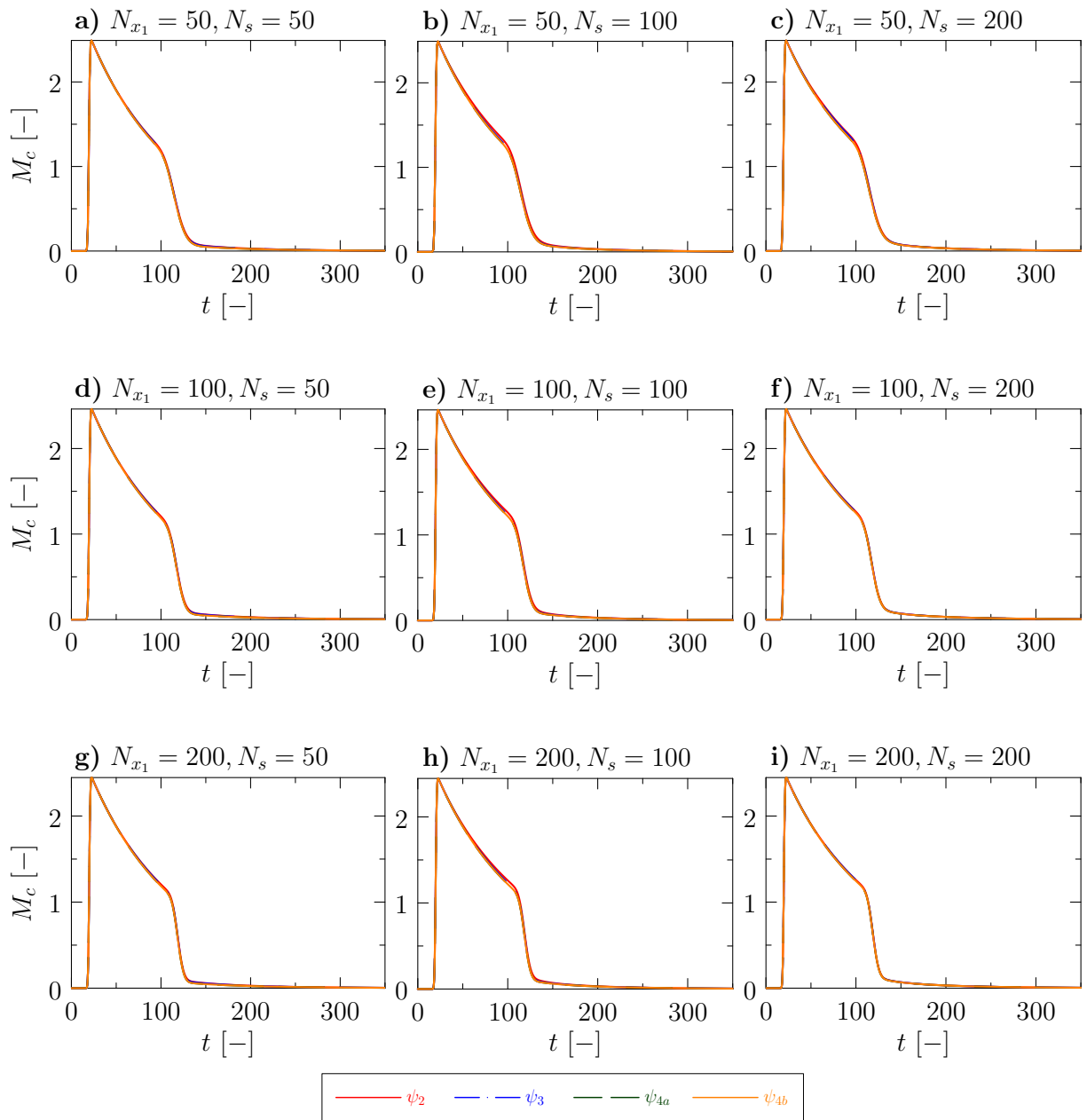
kde pro definici váhové funkce ω zavedeme pomocnou množinu vrcholů oblasti $\hat{\Omega}_m$ jako $B = \{\mathbf{x}_{0,0}, \mathbf{x}_{0,N_{x_2}-1}, \mathbf{x}_{N_{x_1}-1,0}, \mathbf{x}_{N_{x_1}-1,N_{x_2}-1}\}$

$$\omega(\mathbf{y}) = \begin{cases} 1 & \mathbf{y} \in \hat{\Omega}_m, \\ \frac{1}{2} & \mathbf{y} \in \partial\hat{\Omega}_m \setminus B, \\ \frac{1}{4} & \mathbf{y} \in B. \end{cases} \quad (3.7)$$

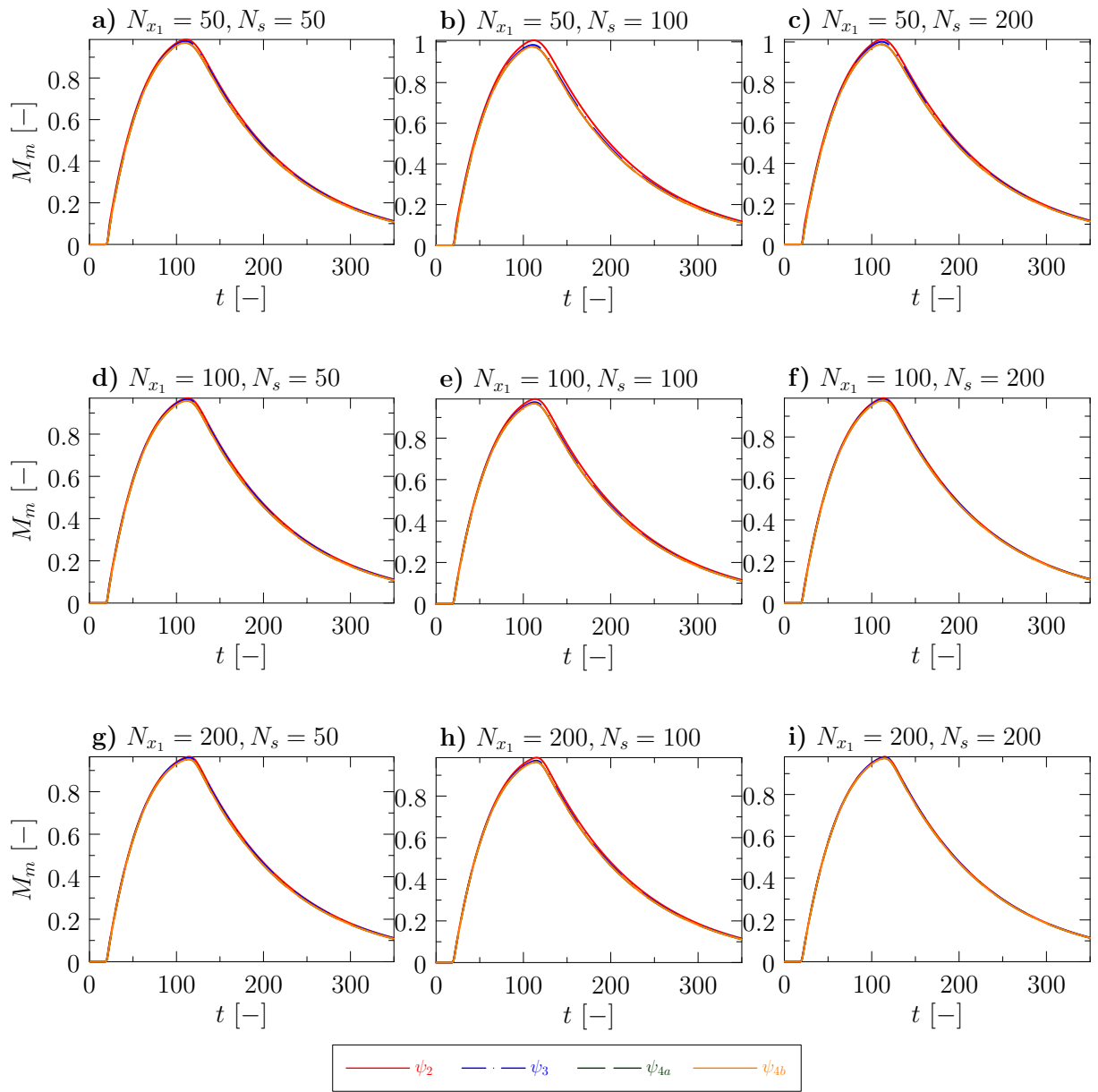
V této úloze budeme nejdříve zkoumat časový průběh celkového množství látky v cévě Ω_c a v mimocévním prostředí Ω_m pro různé diskretizace oblastí Ω_c, Ω_m a aproximace Diracovy delta funkce Ψ . Poté zobrazíme časový vývoj koncentrace c_m v oblasti Ω_m . Na závěr porovnáme celkové množství KL v Ω_c a Ω_m pro různé koeficienty přestupu.

Na obrázku 3.9 lze vidět, že v čase $t = 20$ do oblasti Ω_c přichází největší množství KL, které dále přestupuje do oblasti Ω_m . Vidíme, že ne veškeré množství KL se dostane z cévy do mimocévního prostředí. Tento jev ovlivňuje koeficient přestupu, který jsme zkoumali již v úloze 6 na obrázku 3.8 pro různé koeficienty přestupu a dále ho budeme zkoumat i pro tuto úlohu na obrázku 3.12.

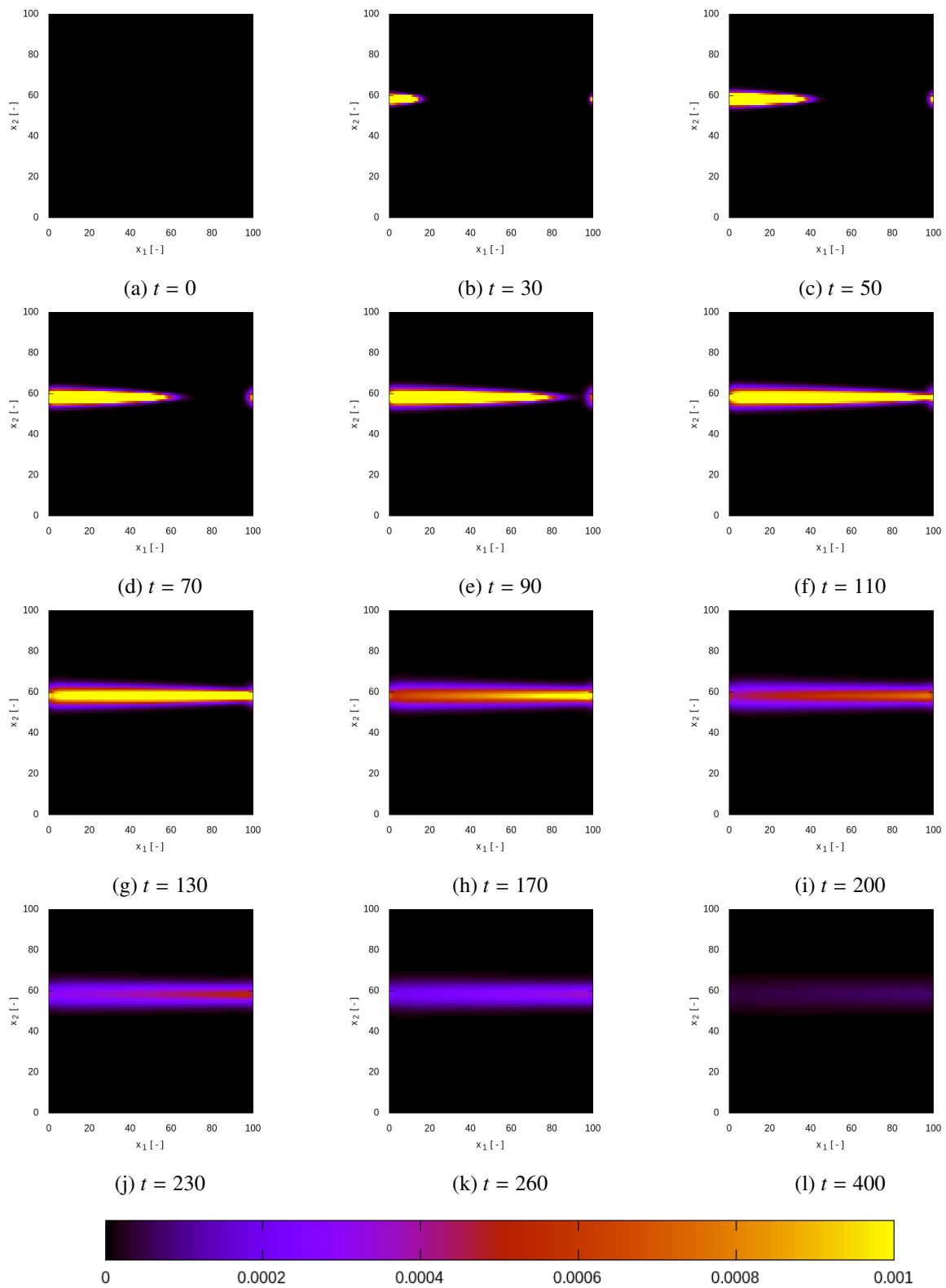
Na obrázcích 3.9 a 3.10 pozorujeme, že se na všech diskretizacích oblastí Ω_c a Ω_m aproximace Diracovy delta funkce výrazně neliší. Z tohoto důvodu stejně jako v části 3.2.1 si nyní zvolíme jednu určitou aproximaci Diracovy delta funkce a jedno nastavení diskretizace obou oblastí (ψ_{4a} a $N_{x_1} = 100, N_s = 50$). S tímto nastavením budeme dále zkoumat časový vývoj koncentrace v oblasti Ω_m , který je zobrazen na obrázku 3.11.



Obrázek 3.9: Numerické řešení úlohy 7 pro různé spojité aproximace Diracovy delta funkce a různá nastavení diskretizací oblastí Ω_c a Ω_m . Grafy zobrazují časový průběh celkového množství látky v Ω_c v čase.

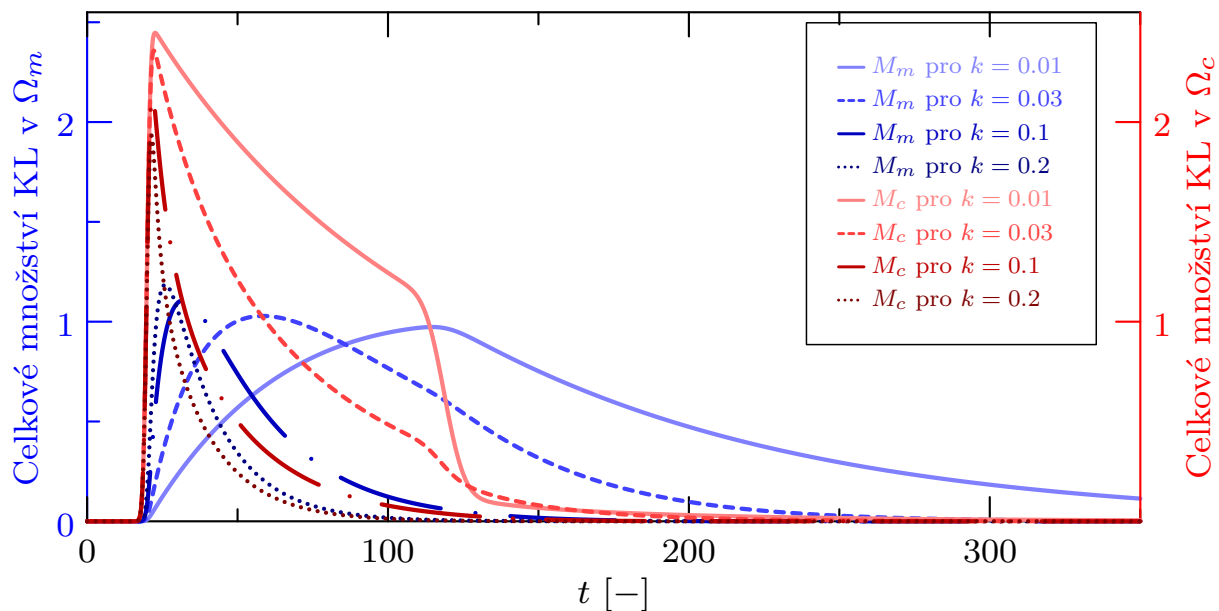


Obrázek 3.10: Numerické řešení úlohy 7 pro různé spojité aproximace ψ Diracovy delta funkce a různá nastavení diskretizací oblastí Ω_c a Ω_m . Grafy zobrazují časový průběh množství látky v čase v Ω_m .



Obrázek 3.11: Numerické řešení úlohy 7 v různých časech. První graf vlevo zobrazuje počáteční nastavení koncentrace c_m v oblasti Ω_m a zbylé grafy zobrazují časový průběh koncentrace c_m v oblasti Ω_m .

Na obrázku 3.12 je zobrazeno celkové množství KL v oblasti Ω_m s počtem uzlů $N_{x_1} = 200$ (modrou barvou) a červenou barvou je znázorněno celkové množství KL v oblasti Ω_c s počtem uzlů $N_s = 200$. Lze vidět, že při $k = 0.01$ se KL dostává z oblasti Ω_c do oblasti Ω_m s mírným zpožděním oproti větší volbě k .



Obrázek 3.12: Porovnání celkového množství KL v oblasti Ω_m s celkovým množstvím KL v oblasti Ω_c pro různé koeficienty přestupu k a pro nastavení sítě: $N_{x_1} = N_s = 200$.

Závěr

Cílem této práce bylo matematické modelování transportu a přestupu kontrastní látky (KL) skrz cévu do mimocévního prostředí a naopak. V úvodu této práce jsme rozdělili tento problém na dvě části: úlohy 1D a 2D. V úloze 1D jsme se zabývali konvergencí numerického schématu založeného na metodě konečných diferencí a dále jsme zkoumali časový vývoj hmoty v prostředí. V úloze 2D jsme se přesunuli o jednu dimenzi výš a opět jsme prozkoumali časový průběh látky v oblasti.

V první kapitole jsme se zabývali matematickými rovnicemi proudění tekutin v porézním prostředí a následně jsme zformulovali úlohy 1D a 2D. V druhé kapitole jsme zdiskretizovali výpočetní oblasti a používané diferenciální výrazy jsme nahradili konečnými diferencemi. Dále jsme aproximovali Diracovu delta funkci a odvodili numerickou stabilitu numerického schématu pro případ bez zdrojových členů. Celý tento postup jsme zpracovali pro úlohy 1D a 2D. Na konci této kapitoly jsme zavedli experimentální řád konvergence (EOC), který jsme použili v následující kapitole ke zkoumání konvergence numerického řešení.

V třetí kapitole jsme ověřili konvergenci numerického schématu nejdříve na čistě difuzní úloze, a poté na advektivně-difuzní úloze s převládající advekcí. Výsledky konvergence metody jsme popsali pomocí EOC. Zjistili jsme, že EOC pro čistě difuzní úlohu je druhého řádu a pro advektivně-difuzní úlohu je po zaokrouhlení řádu prvního. Následně byly srovnány spojité aproximace Diracovy delta funkce na různých sítích, kde jsme zjistili, že od počtu 100 uzlů se všechny aproximace chovají podobně, ale při nižší volbě uzlů dávala aproximace ψ_{4b} výrazně jiné výsledky než ostatní aproximace. Dále jsme prozkoumali úlohu rezervoáru reprezentujícího vyživovaný myokard, kde jsme zkoumali, jak látka přitéká a odtéká z oblasti pro různé hodnoty koeficientu přestupu.

V další části třetí kapitoly jsme se zabývali úlohou 2D, kde jsme zkoumali vývoj celkového množství KL v cévě a mimocévním prostředí pro různé aproximace Diracovy delta funkce a různé diskretizace těchto oblastí. Nakonec jsme zobrazili časový vývoj koncentrace v mimocévním prostředí.

V budoucnu se zaměříme na napojení více cév na sebe a budeme zkoumat transport KL z cévy do cévy a zároveň přestup KL do mimocévního prostředí.

Literatura

- [1] E. Vitásek: *Numerické metody*. SNTL-Nakladatelství technické literatury (1987).
- [2] Z. Chen, G. Huan, Y. Ma: *Computational methods for multiphase flows in porous media*. Society for Industrial and Applied Mathematics (2006).
- [3] M. Huysmans, A. Dassargues: *Review of the use of Péclet numbers to determine the relative importance of advection and diffusion in low permeability environments*. Hydrogeology Journal (2005), s. 895-904.
- [4] A. N. Cookson, J. Lee, C. Michler, R. Chabiniok, E. Hyde, D. Nordsletten, N. Smith: *A Spatially-Distributed Computational Model to Quantify Behaviour of Contrast Agent in MR Perfusion Imaging*. Medical Image Analysis 18 (2014), s. 1200-1216.
- [5] R. Fučík, J. Kovář, K. Škardová, O. Polívka, R. Chabiniok: *Lattice Boltzmann Approach to Mathematical Modeling of Myocardial Perfusion*. V recenzi v International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering.
- [6] J. Kumar, M. Peglow, G. Warnecke, S. Heinrich, L. Mörl: *Improved accuracy and convergence of discretized population balance for aggregation: The cell average technique*. Chemical Engineering Science (2006), s. 3327-3342.
- [7] C. S. Peskin: *The immersed boundary method*. Acta Numerica (2002), s. 479-517.
- [8] R. J. LeVeque: *Finite Difference Methods for Differential Equations*. AMath 585-6 (1998).
- [9] *Myokardinfarkt (rezidiviert)*. Heidelberg university. Navštíveno 31.3.2022. URL: <https://eliph.klinikum.uni-heidelberg.de/allg/57/myokardinfarkt-rezidiviert>.
- [10] H. Karahan: *Unconditional stable explicit finite difference technique for the advection-diffusion equation using spreadsheets*. Advances in Engineering Software (2007), s. 80-86.
- [11] R. Fučík, P. Eichler, R. Straka, P. Pauš, J. Klinkovský, T. Oberhuber: *On optimal node spacing for immersed boundary-lattice Boltzmann method in 2D and 3D*. Computer and Mathematics with Applications 77 (2019), s. 1144-1162.
- [12] J. Kovář: *Matematické modelování proudění tekutin a transportu kontrastní látky v cévách*. Bakalářská práce. České vysoké učení technické v Praze (2020).
- [13] P. Eichler: *Matematické modelování interakce elastického tělesa s nestlačitelnou tekutinou*. Diplomová práce. České vysoké učení technické v Praze (2018).
- [14] T. Sauer, O. Runborg: *Numerical analysis*. Pearson (2011).