



ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská



Matematické modelování proudění tekutin a transportu kontrastní látky v cévách

Mathematical modeling of fluid flow and transport of contrast agent in vessels

Bakalářská práce

Autor: **Jan Kovář**
Vedoucí práce: **Ing. Radek Fučík, Ph.D.**
Konzultant: **Ing. Pavel Eichler**
Akademický rok: 2019/2020

ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

Student:	Jan Kovář
Studijní program:	Aplikace přírodních věd
Obor:	Matematické inženýrství
Zaměření:	Matematické modelování
Název práce (česky):	Matematické modelování proudění tekutin a transportu kontrastní látky v cévách
Název práce (anglicky):	Mathematical modeling of fluid flow and transport of contrast agent in vessels

Pokyny pro vypracování:

1. Seznamte se s advektivně difuzními rovnicemi pro popis transportu kontrastní látky v medicínských aplikacích.
2. Formulujte zjednodušenou 1D úlohu perfuze myokardu podle dostupné literatury, navrhněte a implementujte vhodné numerické schéma pro její řešení a toto schéma otestujte na vybraných úlohách.
3. Seznamte se s rovnicemi izotermálního proudění nestlačitelné tekutiny ve volném a porézním prostředí.
4. Formulujte úlohu proudění tekutiny a transportu kontrastní látky v 2D oblasti reprezentující svými rozměry cévu krevního řečiště, navrhněte a implementujte vhodné numerické schéma pro její řešení a toto schéma otestujte na vybraných úlohách.

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. T. Krüger, et al., The lattice Boltzmann method. Springer International Publishing 10, 2017, 978-993.
3. Z. Guo, S. Chang, Lattice Boltzmann method and its applications in engineering. World Scientific, 2013.
4. J. Bear, Modeling phenomena of flow and transport in porous media. Springer, 2018.
5. Z. Chen, G. Huan, Y. Ma, Computational methods for multiphase flows in porous media. Computational Science and Engineering – Svazek 2, SIAM, 2006.

Jméno a pracoviště vedoucího bakalářské práce:

Ing. Radek Fučík, Ph.D.

Katedra matematiky , Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská , České vysoké učení technické v Praze, Trojanova 339/13 , 120 00 Praha 2

Jméno a pracoviště konzultanta:

Ing. Pavel Eichler

Katedra matematiky , Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská , České vysoké učení technické v Praze, Trojanova 339/13 , 120 00 Praha 2

Datum zadání bakalářské práce: 31.10.2019

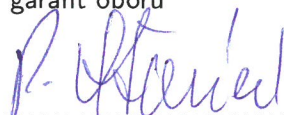
Datum odevzdání bakalářské práce: 7.7.2020

Doba platnosti zadání je dva roky od data zadání.

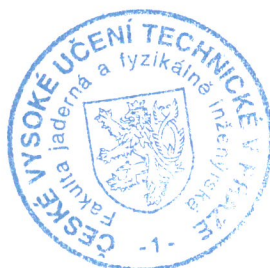
V Praze dne 23. října 2019

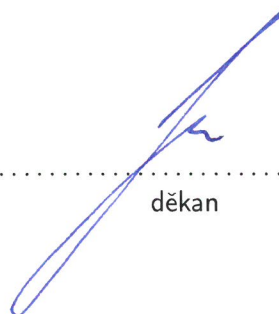


garant oboru



vedoucí katedry





děkan

Poděkování:

Chtěl bych zde poděkovat především svému školiteli Ing. Radku Fučíkovi, Ph.D. za pečlivost, ochotu, vstřícnost a odborné i lidské zázemí při vedení mé bakalářské práce. Dále děkuji svému konzultantovi Ing. Pavlu Eichlerovi za zájem a odborné připomínky k dané problematice. Mé poděkování patří také mé rodině a přítelkyni za jejich trpělivost a dosavadní podporu při studiu.

Čestné prohlášení:

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

V Praze dne 20. července 2020

Jan Kovář

Název práce:

Matematické modelování proudění tekutin a transportu kontrastní látky v cévách

Autor: Jan Kovář

Obor: Matematické inženýrství

Zaměření: Matematické modelování

Druh práce: Bakalářská práce

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

Konzultant: Ing. Pavel Eichler, 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 úloh spojených s vyšetřením perfuze myokardu za použití kontrastní látky. Úloha proudění a transportu kontrastní látky je v úvodu rozdělena do třech základních typových úloh, z nichž dvě jsou řešeny v rámci této práce.

Čtenáři je představen matematický model proudění newtonovské nestlačitelné kapaliny v izotermálním rigidním porézním prostředí a v izotermálním volném prostředí. Hlavním cílem této práce je řešení úlohy jednofázového proudění a transportu kontrastní látky v porézním prostředí představující srdeční svalovinu a v dvourozměrné oblasti reprezentující svými rozměry cévu krevního řečiště za použití mřížkové Boltzmannovy metody.

Mřížková Boltzmannova metoda byla úspěšně aplikována pro řešení zmíněných úloh a získané výsledky jsou v souladu s výsledky obdrženy pomocí metody konečných diferencí, či smíšené hybridní metody konečných prvků.

Klíčová slova: advektivně-difuzní rovnice, matematický model perfuze myokardu, mřížková Boltzmannova metoda, transport kontrastní látky, 2D simulace proudění kapaliny

Title:

Mathematical modeling of fluid flow and transport of contrast agent in vessels

Author: Jan Kovář

Abstract: This bachelor thesis deals with mathematical modeling of problems associated with myocardial perfusion examination using a contrast agent. Initially, the problem of fluid flow and transport of contrast agent is divided into three benchmark problems, two of which are solved within this thesis.

The reader is introduced to a mathematical model of Newtonian incompressible fluid flow in an isothermal rigid porous medium and in an isothermal free flow system. The main goal of this thesis is to solve the benchmark problem of single-phase flow in a porous medium representing the myocardium and in a two-dimensional domain representing a blood vessel from the vascular bed using the lattice Boltzmann method.

The lattice Boltzmann method has been successfully applied to solve the mentioned mathematical problems and the obtained results are in accordance with the results acquired from the finite difference method or the mixed-hybrid finite element method.

Key words: advection-diffusion equation, mathematical model of myocardial perfusion, lattice Boltzmann method, transport of contrast agent, 2D fluid flow simulation

Obsah

Úvod	11
1 Matematický model	13
1.1 Proudění tekutin ve volném prostředí	13
1.2 Proudění tekutin v porézním prostředí	14
1.2.1 Porézní prostředí	14
1.2.2 Rovnice proudění tekutiny v porézním prostředí	16
1.3 Transport kontrastní látky	18
1.3.1 Transport kontrastní látky ve volném prostředí	18
1.3.2 Transport kontrastní látky v porézním prostředí	19
1.4 Přestup hmoty v porézním prostředí	19
1.5 Formulace zjednodušené Úlohy M bez advekce	20
1.6 Formulace Úlohy M	21
1.6.1 Přechod k bezrozměrným veličinám	21
1.6.2 Úloha M-1D	22
1.6.3 Úloha M-2D	23
1.7 Formulace Úlohy C	24
2 Numerické metody	25
2.1 Metoda konečných diferencí	25
2.2 Mřížková Boltzmannova metoda	27
2.2.1 Přechod k bezrozměrným jednotkám	28
2.2.2 Schéma diskretizace Boltzmannovy transportní rovnice	31
2.2.3 SRT-LBM	33
2.2.4 CLBM	34
2.2.5 Algoritmus mřížkové Boltzmannovy metody	35
2.2.6 Počáteční podmínky	36
2.2.7 Bounce-back okrajová podmínka	37
2.2.8 Anti-bounce-back okrajová podmínka	38
2.2.9 Rovnovážná okrajová podmínka na vstupu/výstupu	38
2.2.10 Periodická okrajová podmínka	39
2.3 LBM schéma Úlohy M	39
2.3.1 LBM schéma Úlohy M-1D	40
2.3.2 LBM schéma Úlohy M-2D	41
2.4 LBM schéma Úlohy C	42
2.5 Poznámky k implementaci	42
2.5.1 Implementace MKD a SRT-LBM pro řešení Úlohy M-1D	42

2.5.2	Metodika srovnání metod MKD a SRT-LBM pro jednorozměrné úlohy	43
2.5.3	Implementace LBM pro dvourozměrné Úlohy M a C	44
3	Numerické simulace	45
3.1	Srovnání MKD a LBM na vybraných advekčně-difuzních úlohách	45
3.1.1	Ryze difuzní úloha	47
3.1.2	Advekčně-difuzní rovnice s dominantní advekcí	51
3.2	Úloha M-1D	60
3.2.1	1D perfuze myokardu	61
3.2.2	1D perfuze myokardu pro vysoký koeficient přestupu	64
3.3	Úloha M-2D	67
3.3.1	2D perfuze myokardu	68
3.4	Úloha C	75
3.4.1	Proudění a transport KL v nezúžené cévě	76
3.4.2	Proudění a transport KL v zúžené cévě	79
	Závěr	83

Úvod

Tato bakalářská práce se věnuje matematickému modelování situací vznikajících při vyšetření perfuze pomocí kontrastní látky (dále jen KL). Perfuzí tkáně, resp. cévy, se rozumí celkový průtok krve danou tkání, resp. cévou. Jedním z vyšetření, kde se tato metoda přímého měření perfuze s využitím KL používá, je perfuzní vyšetření myokardu pomocí magnetické rezonance (dále jen MR). Při tomto vyšetření je současně s nitrožilním podáním KL prováděno opakované měření s časovým rozlišením kolem 1 až 2 sekundy za účelem zobrazení změny signálu způsobené nárůstem koncentrace KL při prvním průchodu kapilárami myokardu (anglicky tzv. „first pass“), viz [21]. Vyšetření umožňuje odhalit disfunkční části srdeční svaloviny, ve kterých nedochází k dostatečnému prokrvení. Srdeční vady lze rozdělit do dvou skupin: získané a vrozené vady srdce. Metoda MR vyšetření perfuze myokardu se během posledního desetiletí vyvinula ve velmi přesnou techniku diagnostiky získaných vad srdce, zejména ischemické choroby srdeční¹, či kardiomyopatie². Díky vyššímu rozlišení moderních přístrojů MR, absenci ionizujícího záření v průběhu celého vyšetření a výrazné bezpečnosti KL má MR velký potenciál ve vyšetření kardiologických pacientů. V posledních letech se tato metoda začíná využívat i pro diagnostiku vrozených srdečních vad, kde je absence ionizujícího záření prioritou, viz [8]. Velkou výhodou perfuzního vyšetření pomocí MR je schopnost zachytit nejen trvalejší změny myokardu (např. poinfarktové jizvy), ale také aktuální vývoj prokrvení myokardu pacienta. Tato metoda umožňuje nejen diagnostikovat zmíněná kardiovaskulární onemocnění, ale dokonce by do budoucna mohla pomoci těmto onemocněním předejít včasným odhalením jejich příčin, nikoli až jejich následků, viz [6, 8].

Existují veskrze dva typy KL: intravaskulární a nespecifické. Intravaskulární typ KL se váže na krevní bílkoviny, typicky albumin, a proto nemůže opustit cévní řečiště, tj. nepřestupuje přes cévní stěnu do extracelulárního prostoru. Naopak nespecifické KL mohou volně difundovat i do mimobuněčného prostoru, viz [9].

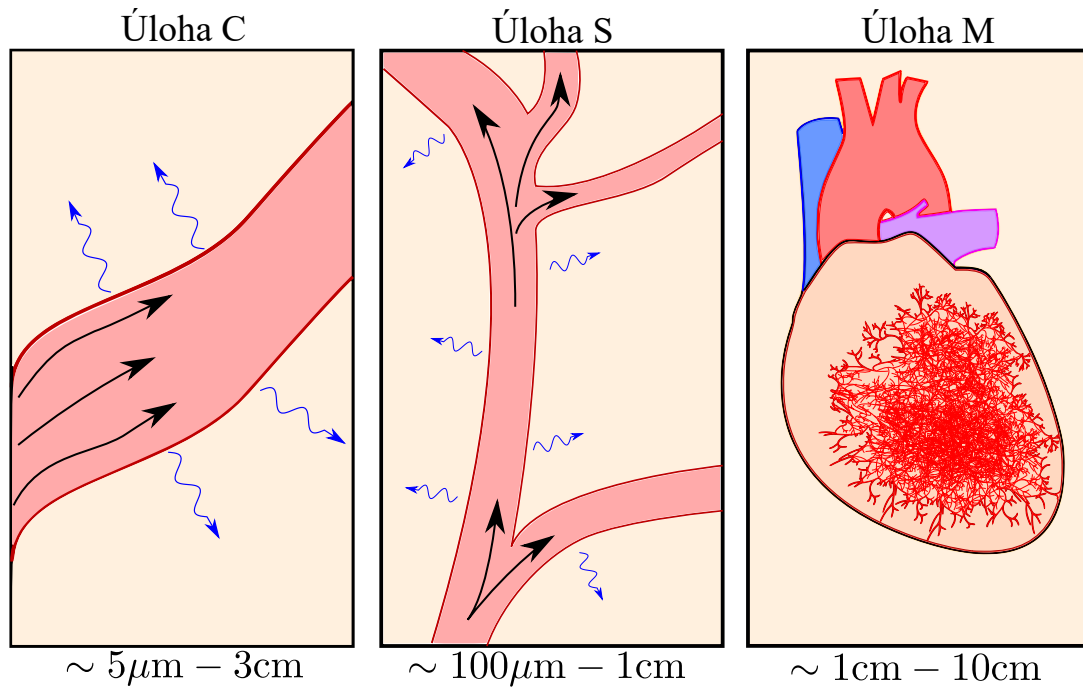
Na základě povahy a složitosti lze rozdělit úlohy proudění a transportu KL v cévách na tři typové úlohy, viz obr. 1. V Úloze C zkoumáme proudění v jednotlivých cévách zvlášť. Průměry cév v lidském těle se mohou pohybovat pro nejmenší vlásečnice od 5 μm do 2 až 3 cm pro největší cévu v těle, aortu. Úloha C bude v této práci rozpracována pouze pro KL intravaskulárního typu, tj. přestup KL přes stěnu cévy nebude uvažován. V návaznosti na Úlohu C je naznačena obecnější Úloha S, kde se jedná o modelování systému cév. Tato úloha bude předmětem budoucího výzkumu a v této práci nebude dále rozebírána. Matematické modelování Úlohy M (schéma komplexního cévního řečiště myokardu) bude hlavní náplní této práce. Inspirací pro přístup k Úloze M byl článek [9], kde je úloha řešena ve dvourozměrném prostoru pomocí aproximace cévního řečiště myokardu porézním prostředím.

První kapitola zahrnuje matematické modely Úlohy C a M. Věnuje se proudění transportu KL ve volném a porézním prostředí a formulacím jednotlivých úloh, které budou v práci řešeny. V druhé kapitole jsou čtenářovi představeny numerické metody použité k řešení úloh z první kapitoly, tj. metoda konečných diferencí (MKD) a mřížková Boltzmannova metoda (LBM, z anglického lattice Boltzmann method).

¹Onemocnění srdeční svaloviny způsobené nedostatečným zásobováním svalových buněk kyslíkem.

²Skupina chorob, jejichž společným rysem je poškození vlastního srdečního svalu (myokardu), viz [30].

V poslední kapitole jsou uvedeny výsledky numerických simulací. Nejprve jsou zde porovnány zmíněné numerické metody na vybraných jednorozměrných úlohách, následují výsledky jednorozměrné a dvou-
rozměrné Úlohy M a jejich srovnání a konec této kapitoly je věnován výsledkům řešení dvourozměrné Úlohy C. Dvourozměrné úlohy jsou již řešeny pouze pomocí LBM. V rámci této práce byla implementována MKD a LBM v jazyce C++ pro jednorozměrné úlohy a k řešení dvourozměrných úloh metodou LBM byl využit kód vyvíjený na katedře matematiky FJFI ČVUT v Praze, který byl upraven dle potřeb této práce.



Obrázek 1: Konceptuální dělení úloh proudění a transportu kontrastní látky v cévách.

Kapitola 1

Matematický model

1.1 Proudění tekutin ve volném prostředí

Proudění tekutiny ve volném prostředí je popsáno Navierovými-Stokesovými rovnicemi, které mají v konzervativním tvaru podobu, viz [1],

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

$$\frac{\partial(\rho v_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v_i \vec{v}) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{i1}}{\partial x_1} + \frac{\partial \tau_{i2}}{\partial x_2} + \frac{\partial \tau_{i3}}{\partial x_3} + \rho g_i \quad \text{pro } i \in \{1, 2, 3\}, \quad (1.1b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(E + \frac{\vec{v}^2}{2} \right) \right] + \nabla \cdot \left[\rho \left(E + \frac{\vec{v}^2}{2} \right) \vec{v} \right] = \nabla \cdot (\kappa \nabla \theta) + \rho \vec{g} \cdot \vec{v} + \rho Q + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\sum_{i=1}^3 v_i \tau_{ik} \right) - \nabla \cdot (\rho \vec{v}), \quad (1.1c)$$

kde $\vec{v}^2 = \vec{v} \cdot \vec{v}$. Uvedené veličiny jsou funkcemi od času t [s] a polohy \vec{x} [m] a mají následující význam:

\vec{v}	[m s ⁻¹]	Makroskopická rychlost se složkami v_i , $i \in \{1, 2, 3\}$.
\mathbb{T}_D	[kg m ⁻¹ s ⁻²]	Dynamický tenzor napětí se složkami $\mathbb{T}_{ij} = \tau_{ij}$ pro $i, j \in \{1, 2, 3\}$.
p	[kg m ⁻¹ s ⁻²]	Tlak tekutiny.
ρ	[kg m ⁻³]	Objemová hustota tekutiny.
\vec{g}	[m s ⁻²]	Vektor zrychlení vnějších sil.
E	[m ² s ⁻²]	Specifická vnitřní energie.
κ	[kg m s ⁻³ K ⁻¹]	Koeficient tepelné vodivosti.
θ	[K]	Teplota tekutiny.
Q	[m ² s ⁻³]	Hustota tepelných zdrojů vztažená na jednotku hmotnosti.

Rovnice (1.1a), (1.1b) a (1.1c) mají po řadě význam zákona zachování hmoty, zákona zachování hybnosti a zákona zachování vnitřní energie. Pro newtonovskou tekutinu lze složky dynamického tenzoru napětí zapsat ve tvaru

$$\tau_{ii} = \lambda \nabla \cdot \vec{v} + 2\mu \frac{\partial v_i}{\partial x_i}, \quad (1.2a)$$

$$\tau_{ij} = \tau_{ji} = \mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right), \quad (1.2b)$$

kde μ [kg m⁻¹ s⁻¹] je dynamická viskozita a koeficient λ [kg m⁻¹ s⁻¹] se nazývá druhý viskózní koeficient, pro který za předpokladu platnosti Stokesovy hypotézy, viz [1], platí

$$\lambda = -\frac{2}{3}\mu. \quad (1.3)$$

Uved' me nyní stručně dodatečné předpoklady, které klademe na uvažovaný systém:

1. Uvažujeme izotermální systém bez vnějších sil, tj.

- $\theta = konst.$,
- $\vec{g} = \vec{0}$.

2. Zkoumáme proudění nestlačitelné newtonovské kapaliny s konstantní dynamickou viskozitou, tj.

- $\rho = konst.$,
- složky dynamického tenzoru napětí jsou ve tvaru uvedeném v rovnicích (1.2),
- $\mu = konst.$

Dle uvedených předpokladů lze rovnici (1.1a) upravit do tvaru

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0, \quad (1.4)$$

Dosazením rovnic (1.2) a (1.4) do rovnice (1.1b) dostáváme s využitím uvedených předpokladů vztah, viz [1],

$$\rho \left(\frac{\partial v_i}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla v_i \right) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho \nu \Delta v_i \quad \text{pro } i \in \{1, 2, 3\}, \quad (1.5)$$

kde Δ je Laplaceův operátor $\Delta = \left(\sum_{k=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} \right)$ a ν [$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$] je kinematická viskozita, která je svázána s dynamickou viskozitou vztahem $\mu = \rho \nu$. Rovnici (1.5) lze zapsat ve vektorové podobě, viz [1, 22],

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = -\nabla p + \rho \nu \Delta \vec{v}, \quad (1.6)$$

kde $\frac{D}{Dt} = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \right)$ je materiálová derivace a Laplaceův operátor Δ působí na vektor \vec{v} po složkách¹.

Soustava rovnic (1.4) a (1.6) je za uvedených předpokladů řešitelná bez použití zákona zachování vnitřní energie (1.1c), jelikož se jedná o 4 rovnice pro 4 neznámé funkce polohy a času p, v_1, v_2, v_3 , viz [1, 22]. Shrňme soustavu rovnic, která bude v této práci numericky řešena v sekci 3.4

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0, \quad (1.7a)$$

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = -\nabla p + \rho \nu \Delta \vec{v}. \quad (1.7b)$$

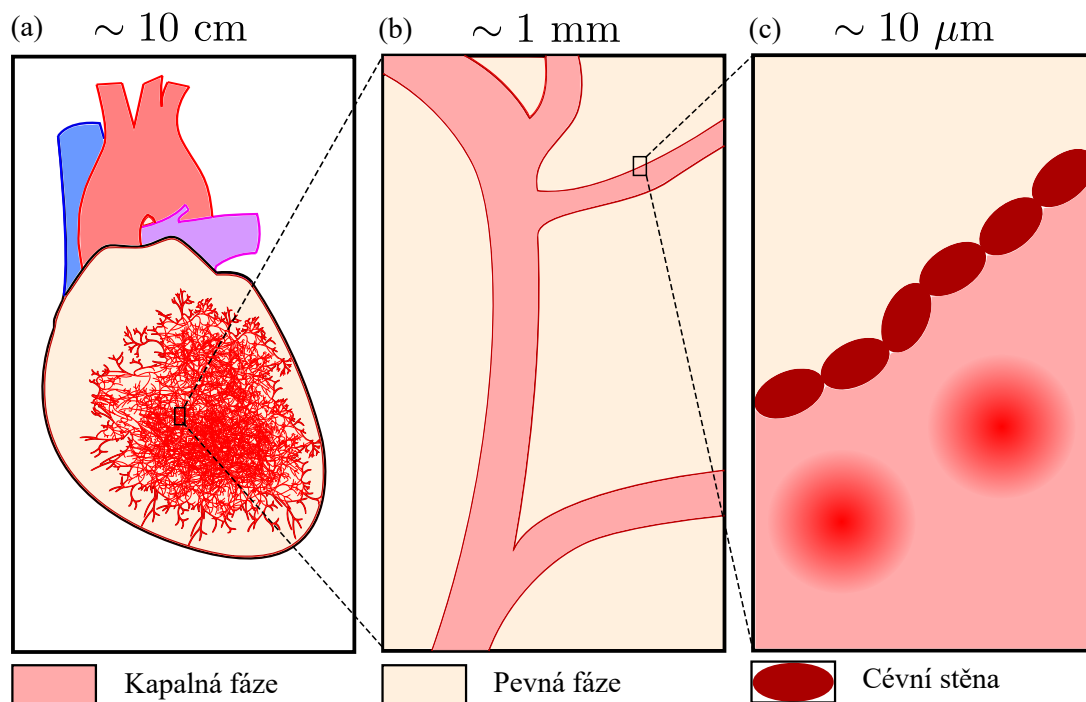
1.2 Proudění tekutin v porézním prostředí

1.2.1 Porézní prostředí

Porézní prostředí je prostředí skládající se z pevných látek (tzv. skelet, neboli pevná fáze), které obsahují prázdny prostor (tzv. póry). Póry mohou být vyplněny tekutinami, tj. kapalinami nebo plyny. Pokud jsou póry zcela vyplněny kapalinou, nazveme tuto část porézního prostředí kapalnou fází. Fází označujeme chemicky homogenní část zkoumaného systému, která je od ostatních částí systému oddělena jednoznačnou hranicí, viz [2]. Na obr. 1.1 je schéma myokardu, jenž lze považovat za porézní prostředí.

K proudění v porézním prostředí lze přistupovat v různých měřítkách, které budeme demonstrovat na příkladu srdeční svaloviny dle obr. 1.1, tj. zleva (a) makroskopicky, (b) mezoskopicky, (c) mikroskopicky.

¹ $\Delta \vec{v} = \left(\sum_{k=1}^3 \frac{\partial^2 v_1}{\partial x_k^2}, \sum_{k=1}^3 \frac{\partial^2 v_2}{\partial x_k^2}, \sum_{k=1}^3 \frac{\partial^2 v_3}{\partial x_k^2} \right)^T$.



Obrázek 1.1: Schéma myokardu jako porézního prostředí, kde kapalnou fází tvoří cévní řečiště a pevnou fází představuje extracelulární prostor mezi jednotlivými cévami.

Z makroskopického pohledu rozlišujeme pouze část fyzikálních vlastností zkoumané oblasti myokardu, např. průměrnou tloušťku cév v dané oblasti, nejsme však schopni blíže rozlišit vnitřní strukturu daného prostředí, např. vnitřní geometrii srdeční svaloviny. V mezoskopickém měřítku již identifikujeme systémy cév a jejich morfologii. V mikroskopickém náhledu se dostáváme na úroveň nejmenších vlásečnic a krevních buněk, které mají rozměry v řádech jednotek až desítek mikrometrů. Nabízí se možnost popsat proudění v porézním prostředí na mikroskopické úrovni, stejně jako proudění ve volném prostředí, viz sekce 1.1, pomocí Navierových-Stokesových rovnic. Okrajové podmínky na mikroskopické úrovni mohou však být kvůli veskrze náhodné geometrii krevního řečiště tak složité, že je tento přístup použitelný pouze pro oblasti „malých“ rozměrů. Cévní řečiště zásobující myokard je tvořeno složitým systémem cév a vlásečnic, a proto v této práci přistoupíme k úloze perfuze myokardu (Úloha M, viz obr. 1) makroskopicky. Za tímto účelem je třeba definovat tzv. reprezentativní objem (REV, z ang. representative elementary volume), který je definován následujícími dvěma požadavky, viz [3]:

- 1) Je dostatečně velký na to, aby byly všechny veličiny v REV homogenní a statisticky neměnné.
- 2) Zároveň je tak malý vzhledem k celkovému objemu zkoumané oblasti, aby mohl být z makroskopického hlediska považován za bod, tj. jeho objem je v rámci zkoumané oblasti zanedbatelně malý.

Pokud takto definovaný objem nelze pro dané prostředí nalézt, nelze pro studium proudění v daném porézním prostředí použít makroskopický přístup. Průměrováním mikroskopických veličin přes reprezentativní objemy získáváme kýženou aproximaci porézního prostředí kontinuem, v němž jsou jednotlivé body právě reprezentativní objemy. Tato technika aproximace porézního prostředí se anglicky nazývá *upscaling*, viz [4].

Pomocí reprezentativního objemu zavedeme veličinu zvanou porozita, což je makroskopická veličina, která charakterizuje rozložení pórů na mikroskopické úrovni. Porozita vyjadřuje poměr objemu pórů k celkovému objemu určité oblasti. Bud' $\Gamma \subset \mathbb{R}^d$ oblast porézního prostředí v prostoru o dimenzi $d \in \{1, 2, 3\}$. Definujme na Γ charakteristickou funkci

$$\gamma(\vec{x}) = \begin{cases} 1 & \text{pro } \vec{x} \text{ ležící v póru,} \\ 0 & \text{pro } \vec{x} \text{ ležící v pevné fázi,} \end{cases} \quad \forall \vec{x} \in \Gamma. \quad (1.8)$$

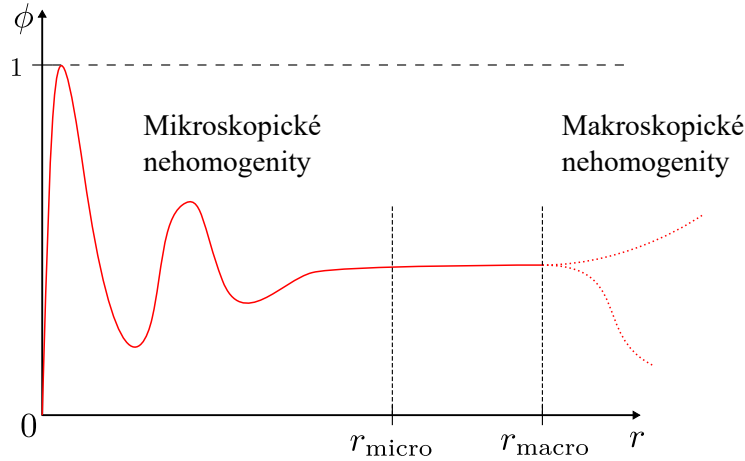
O poloze bodu $\vec{x} \in \Gamma$ rozhodujeme na mikroskopické úrovni. Mějme kouli $B(\vec{x}_0, r) \subset \Gamma$ se středem v bodě $\vec{x}_0 \in \Gamma$ a poloměrem $r \in \mathbb{R}^+$. Zaved' me funkci

$$\phi(\vec{x}_0, r) = \frac{1}{\int_{B(\vec{x}_0, r)} 1 \, d\vec{x}} \int_{B(\vec{x}_0, r)} \gamma(\vec{x}) \, dx, \quad (1.9)$$

tj. $\phi(\vec{x}_0, r)$ je průměr hodnoty charakteristické funkce $\gamma(\vec{x})$ přes kouli $B(\vec{x}_0, r)$. Objem koule $B(\vec{x}_0, r)$ lze považovat za reprezentativní objem (REV), viz [14], pokud existují $r_{\text{micro}}, r_{\text{macro}} \in \mathbb{R}^+$ takové, že hodnota $\phi(\vec{x}_0, r)$ nezávisí na poloměru r v rozmezí

$$r_{\text{micro}} \ll r \ll r_{\text{macro}}. \quad (1.10)$$

Závislost velikosti porozity na volbě poloměru kulového reprezentativního objemu r je znázorněna na obr. 1.2.



Obrázek 1.2: Příklad závislosti porozity ϕ na volbě poloměru REV r .

Od mikroskopických veličin k makroskopickým se lze dostat i matematickou technikou nazývanou homogenizace, viz [4], která je postavena na teorii asymptotického rozvoje.

1.2.2 Rovnice proudění tekutiny v porézním prostředí

Uvažujme porézní prostředí sestávající se kromě pevné fáze, tj. skeletu, z právě jedné další fáze. Takový systém nazveme jednofázový. Pokud systém obsahuje více fází vyplňující póry, nazveme jej vícefázovým systémem.

Jednofázové proudění newtonovské kapaliny v izotermálním porézním prostředí je popsáno rovnicí kontinuity (taktéž zákonem zachování hmoty) a Darcyho zákonem, viz [7].

Zákon zachování hmoty

Pro porézní prostředí lze zákon zachování hmoty zapsat v diferenciálním tvaru, viz [7],

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho\vec{u}) + q, \quad \text{v } \Omega \subset \mathbb{R}^3, \quad (1.11)$$

kde jsou uvedené veličiny funkcemi od t a \vec{x} a mají následující význam:

ϕ [-]	Porozita definovaná v rovnici (1.9). Předpokládáme, že Ω je rigidní (nedeformovatelné) prostředí, proto je porozita uvažována pouze jako funkce polohy nezávislá na čase.
\vec{u} [$m \cdot s^{-1}$]	Měrný průtok, neboli Darcyho rychlost udává množství kapaliny, která proteče jednotkou plochy za 1 sekundu. Závislost Darcyho rychlosti \vec{u} a skutečné rychlosti kapaliny v pórech \vec{v} je vyjádřena vztahem $\vec{v} = \frac{1}{\phi}\vec{u}$.
ρ [$kg \cdot m^{-3}$]	Objemová hustota kapaliny.
q [$kg \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}$]	Zdrojový člen.

Darcyho zákon

Darcyho zákon je zákonem zachování hybnosti pro makroskopický popis proudění v porézním prostředí. Obecný tvar Darcyho zákona lze získat např. průměrováním Navierových-Stokesových rovnic přes reprezentativní objemy, viz [26], nebo metodou homogenizace, viz [19]. Darcyho zákon zapisujeme v obecném tvaru, viz [7],

$$\vec{u} = -\frac{1}{\mu}\mathbb{K}(\nabla p - \rho\vec{g}) \quad \text{v } \Omega \subset \mathbb{R}^3, \quad (1.12)$$

kde jsou uvedené veličiny funkcemi od t a \vec{x} a mají následující význam:

\vec{u} [$m \cdot s^{-1}$]	Darcyho rychlost uvedená v (1.11).
\mathbb{K} [m^2]	Symetrický pozitivně definitní tenzor 2.řádu \mathbb{K} nazýváme tenzor propustnosti, neboli tenzor permeability. V případě heterogenního prostředí je funkcí polohy. V izotropním prostředí má tenzor tvar $\mathbb{K} = K(\vec{x})\mathbb{I}$, kde $K(\vec{x})$ je skalární funkce polohy nazývaná propustnost (permeabilita) a \mathbb{I} je jednotkový tenzor.
μ [$kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$]	Dynamická viskozita kapaliny. Obecně se jedná o funkci polohy a času, ovšem v této práci budeme uvažovat dynamickou viskozitu pro jednoduchost konstantní.
p [Pa]	Tlak kapaliny.
ρ [$kg \cdot m^{-3}$]	Objemová hustota kapaliny, stejně jako v (1.11).
\vec{g} [$m \cdot s^{-2}$]	Vektor zrychlení vnějších sil.

Shrňme nyní stručně dodatečné předpoklady, které klademe na pevnou a kapalnou fázi porézního prostředí, tj.

1. modelujeme proudění newtonovské nestlačitelné kapaliny, tj. $\rho = konst.$, $\mu = konst.$,
2. porézní prostředí je izotermální, rigidní, izotropní a bez zdrojů, tj. $\theta = konst.$, $\phi = konst.$, $\mathbb{K} = KI$, $q = 0$,
3. neuvažujeme vnější síly, tj. vektor \vec{g} v rovnici (1.12) je nulový.

Rovnice (1.11) a (1.12) lze dle uvedených předpokladů upravit do podoby

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0, \quad (1.13a)$$

$$\mu \vec{u} + K \nabla p = 0, \quad (1.13b)$$

kde permeabilita $K = K(\vec{x})$ je funkcí pouze polohy.

1.3 Transport kontrastní látky

1.3.1 Transport kontrastní látky ve volném prostředí

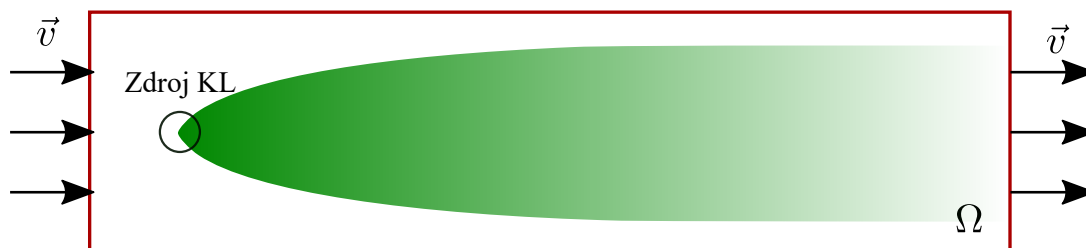
V této části práce se budeme věnovat popisu transportu KL v samostatné cévě, což odpovídá Úloze C z obr. 1. Mějme oblast $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ reprezentující cévu krevního řečiště. Transport KL v oblasti Ω je definován advektivně-difuzní rovnicí

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \underbrace{\nabla \cdot (\vec{v}c)}_{\text{advekce}} = \underbrace{\nabla \cdot (D \nabla c)}_{\text{difuze}} - \underbrace{f}_{\text{zdroj}} \quad \text{v } \Omega, \quad (1.14)$$

kde mají veličiny následující význam:

\vec{v}	[m s ⁻¹]	Rychlost kapaliny získaná ze soustavy rovnic (1.7).
c	[kg m ⁻³]	Hmotnostní koncentrace KL.
D	[m ² s ⁻¹]	Difuzní koeficient KL.
f	[kg m ⁻³ s ⁻¹]	Zdrojový člen (nitrožilní aplikace KL).

Schéma transportu KL v cévě je možno nahlédnout na obr. 1.3. Jak již bylo řečeno v úvodu této práce, v Úloze C bude uvažována pouze intravaskulární KL, tj. k přestupu KL do extracelulárního prostoru nedochází.



Obrázek 1.3: Ilustrace transportu KL ve dvourozměrném průřezu cévy, kde je koncentrace KL vyznačena zeleně.

1.3.2 Transport kontrastní látky v porézním prostředí

Mějme oblast $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ v porézním prostředí, která se skládá z pevné fáze Ω_s (reprezentující mimobuňčný prostor) a kapalně fáze Ω_f (reprezentující krevní řečiště), viz obr. 1.4. Transport KL je, viz [9], řízen advekčně-difuzní rovnicí ve fázi kapalně

$$\frac{\partial(\phi_f c_f)}{\partial t} + \underbrace{\nabla \cdot (\phi_f \vec{u}_f c_f)}_{\text{advekce}} = \underbrace{\nabla \cdot (\phi_f D_f \nabla c_f)}_{\text{difuze}} + \underbrace{f_f - J}_{\text{zdroj}} \quad \text{v } \Omega_f \quad (1.15)$$

a difuzní rovnicí ve fázi pevně

$$\frac{\partial(\phi_s c_s)}{\partial t} = \underbrace{\nabla \cdot (\phi_s D_s \nabla c_s)}_{\text{difuze}} + \underbrace{J}_{\text{zdroj}} \quad \text{v } \Omega_s. \quad (1.16)$$

Index f , resp. s u uvedených veličin značí, zda se jedná o veličinu v kapalně, resp. pevně fázi. Jelikož uvažujeme jednofázový systém, viz sekce 1.2.2, porozity ϕ_f a ϕ_s jsou svázány vztahem

$$\phi_f + \phi_s = 1. \quad (1.17)$$

Veličiny v rovnicích (1.15) a (1.16) mají následující význam:

\vec{u}_f	[m s ⁻¹]	Darcyho rychlost kapaliny získaná z (1.13).
c	[kg m ⁻³]	Hmotnostní koncentrace KL.
ϕ	[-]	Porozita. Uvažujeme konstantní porozitu, tj. není funkcí ani polohy, ani času.
D	[m ² s ⁻¹]	Difuzní koeficient KL, který v této práci uvažujeme konstantní.
J	[kg m ⁻³ s ⁻¹]	Funkce charakterizující přestup hmoty mezi fázemi, která propojuje rovnice (1.15) a (1.16).
f_f	[kg m ⁻³ s ⁻¹]	Zdrojový člen (injekce KL do kapalně fáze).

Narozdíl od advekčně-difuzní rovnice pro volně prostředí, viz (1.14), musejí být koncentrace c_f , resp. c_s v rovnicích (1.15), resp. (1.16) vynásobeny příslušnou porozitou, jelikož se jedná o koncentraci vzhledem ke kapalně, resp. pevně fázi. Porozitu uvažujeme konstantní v prostoru a čase, tudíž lze rovnici (1.15) a (1.16) upravit do tvaru

$$\frac{\partial c_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u}_f c_f) = D_f \Delta c_f - \frac{J}{\phi_f} + \frac{f_f}{\phi_f} \quad \text{v } \Omega_f, \quad (1.18a)$$

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} = D_s \Delta c_s + \frac{J}{1 - \phi_f} \quad \text{v } \Omega_s. \quad (1.18b)$$

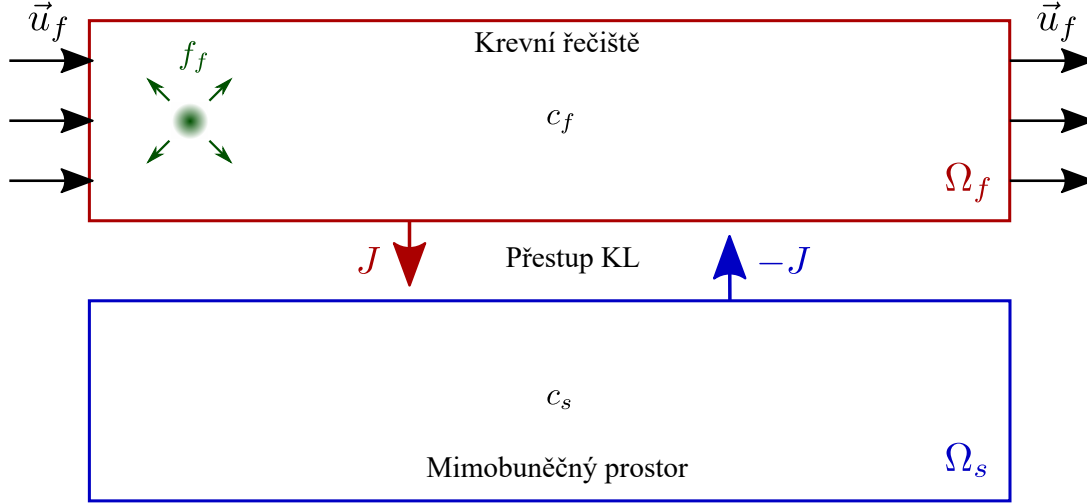
Na obr. 1.4 je naznačeno schéma transportu KL na dvourozměrně oblasti homogenního porézního prostředí (\vec{u}_f je pro jednoduchost schématu konstantní v celé oblasti Ω_f). V rovnicích (1.18) jsou dle šipek na obr. 1.4 barevně vyznačeny členy přestupu KL a v kapalně fázi Ω_f je zeleně naznačen zdroj KL, tj. nenulová hodnota f_f .

1.4 Přestup hmoty v porézním prostředí

Přestup hmoty (KL) je realizován v každém bodě oblasti, tj. v rovnicích (1.18) zastává roli zdrojového členu J , který obě rovnice propojuje. Tok J mezi pevnou a kapalnou fází v mikroskopickém měřítku, tj. v kontextu této práce tok KL mezi extracelulárním prostorem a cévou, uvažujeme úměrný rozdílu koncentrací $c_f - c_s$, viz [9],

$$J = k(c_f - c_s), \quad (1.19)$$

kde k [s^{-1}] je koeficientem přestupu.



Obrázek 1.4: Schéma 2D aproximace myokardu porézním prostředím.

V makroskopickém měřítku je v každém bodě tok průměrován přes reprezentativní objem, což nezmění koeficient přestupu k a dle [17] lze přestup hmoty definovat tokem

$$J = \alpha \phi_f (1 - \phi_f) (c_f - c_s), \quad (1.20)$$

kde $\alpha \geq 0$ je koeficient přestupu charakterizující propustnost cévní stěny vzhledem ke kontrastní látce (lze považovat za vlastnost KL, viz [9]). Pro $\alpha = 0$, resp. $\alpha > 0$ se jedná o KL intravaskulárního, resp. nespecifického typu. Dosadíme do rovnic (1.18) tok J definovaný v (1.20) a upravíme rovnice do tvaru

$$\frac{\partial c_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u}_f c_f) = D_f \nabla^2 c_f - \alpha (1 - \phi_f) (c_f - c_s) + \frac{f_f}{\phi_f} \quad \text{v } \Omega_f, \quad (1.21a)$$

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} = D_s \nabla^2 c_s + \alpha \phi_f (c_f - c_s) \quad \text{v } \Omega_s. \quad (1.21b)$$

1.5 Formulace zjednodušené Úlohy M bez advekce

Mějme jednorozměrnou oblast $\Omega_f = (0, L)$, kde $L \in \mathbb{R}^+$ a časový interval $t \in (0, T)$, kde $T \in \mathbb{R}^+$. Řešme transportní rovnici (1.21a), pro kterou uvažujeme nastavení

$$\phi_f = 1, \quad (1.22a)$$

$$f_f(x, t) = 0 \quad \forall x \in \Omega_f, \quad \forall t \in (0, T), \quad (1.22b)$$

$$u_f(x, t) = 0 \quad \forall x \in \Omega_f, \quad \forall t \in (0, T), \quad (1.22c)$$

dle kterého převedeme rovnici (1.21a) do tvaru

$$\frac{\partial c_f}{\partial t} = D_f \frac{\partial^2 c_f}{\partial x^2} \quad \text{v } \Omega_f \times (0, T). \quad (1.23)$$

Uvažujeme počáteční podmínku

$$c_f(x, 0) = c_f^{\text{ini}}(x) \quad \forall x \in \langle 0, L \rangle, \quad (1.24)$$

a Dirichletovy okrajové podmínky

$$c_f(0, t) = c_{f,0} \quad \forall t \in (0, T), \quad (1.25a)$$

$$c_f(L, t) = c_{f,L} \quad \forall t \in (0, T). \quad (1.25b)$$

1.6 Formulace Úlohy M

Formulujme nyní úlohu perfuze myokardu (Úloha M, viz obr. 1). Definujme oblasti Ω_f, Ω_s stejně jako v sekci 1.3.2, tj. Ω_f a Ω_s značí po řadě kapalnou a pevnou fázi porézního prostředí splňujícího předpoklady uvedené v sekci 1.2.2. Úloha M se skládá ze dvou oddělených částí:

1. Výpočet či předepsání rychlostního pole $\vec{u}_f(\vec{x}, t)$, které splňuje rovnice porézního prostředí (1.13).
2. Řešení transportních rovnic (1.27) v rychlostním poli \vec{u}_f z prvního kroku za účelem získání časového vývoje koncentrace KL v oblastech Ω_f a Ω_s .

Úloha M bude v této práci řešena v jednorozměrné a dvourozměrné podobě, označme je po řadě Úloha M-1D a Úloha M-2D. V Úloze M uvažujeme navíc homogenní porézní prostředí. Tato konfigurace představuje „zdravý“ myokard, viz [9]. Před samotnými formulacemi Úloh M-1D a M-2D přejdeme k bezrozměrnému popisu Úlohy M.

1.6.1 Přechod k bezrozměrným veličinám

Za účelem zefektivnění analýzy řešení rovnic (1.21) přejdeme k jejich bezrozměrnému tvaru, který je definován následujícími vztahy, viz [9],

$$\vec{u}_f = u_0 \vec{u}_f^*, \quad (1.26a)$$

$$t = \frac{l_0}{u_0} t^*, \quad (1.26b)$$

$$c_f = C_0 c_f^*, \quad (1.26c)$$

$$c_s = C_0 c_s^*, \quad (1.26d)$$

$$x = l_0 x^*, \quad (1.26e)$$

kde

u_0	$[\text{m s}^{-1}]$	je charakteristická rychlost,
C_0	$[\text{kg m}^{-3}]$	charakteristická koncentrace KL v pevné a kapalně fázi,
$t_0 = \frac{l_0}{u_0}$	$[\text{s}]$	charakteristický čas a
l_0	$[\text{m}]$	značí charakteristickou délku.

Nadále budou v této práci vystupovat pouze bezrozměrné veličiny definované v rovnicích (1.26), proto budeme vynechávat horní index *. Převodními vztahy (1.26) a drobnými algebraickými úpravami převedeme rovnice (1.21) do bezrozměrného tvaru

$$\frac{\partial c_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u}_f c_f) = \frac{1}{\text{Pe}} \nabla^2 c_f - \text{Da}(1 - \phi_f)(c_f - c_s) + \frac{f_f}{\phi_f} \quad \text{v } \Omega_f, \quad (1.27a)$$

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} = \frac{D_r}{\text{Pe}} \nabla^2 c_s + \text{Da} \phi_f (c_f - c_s) \quad \text{v } \Omega_s, \quad (1.27b)$$

ve kterém jsme použili bezrozměrná čísla, viz [9]:

$$\text{Pécletovo číslo: } \text{Pe} = \frac{u_0 l_0}{D_f}, \quad (1.28a)$$

$$\text{Damköhlerovo číslo: } \text{Da} = \frac{\alpha l_0}{u_0}, \quad (1.28b)$$

$$\text{Difuzní poměr: } \text{D}_r = \frac{D_s}{D_f}. \quad (1.28c)$$

1.6.2 Úloha M-1D

Mějme jednorozměrné oblasti $\Omega_f = (0, L)$ a $\Omega_s = (0, L)$, kde $L \in \mathbb{R}^+$. Rovnice (1.13) upravíme do jednorozměrné podoby

$$\frac{\partial u_f}{\partial x} = 0, \quad (1.29a)$$

$$\mu u_f + K \frac{\partial p}{\partial x} = 0. \quad (1.29b)$$

Z rovnice (1.13a) plyne pro jednorozměrný případ $u_f = \text{konst.}$ Jedná se tedy o úlohu definovanou rovnicí (1.13b) s neznámou funkcí tlaku $p = p(x, t)$ při počátečních a okrajových podmínkách definovaných na množině $\langle 0, L \rangle \times \langle 0, T \rangle$

$$p(x, 0) = p_0(x) \quad \forall x \in \langle 0, L \rangle, \quad (1.30a)$$

$$p(0, t) = p_1 \quad \forall t \in (0, T), \quad (1.30b)$$

$$p(L, t) = p_2 \quad \forall t \in (0, T), \quad (1.30c)$$

kde $p_1, p_2, T \in \mathbb{R}^+$. Řešením je stacionární lineární rozložení tlaku, ze kterého dostáváme Darcyho rychlost ve tvaru

$$u_f = -\frac{K}{\mu} \frac{p_2 - p_1}{L}. \quad (1.31)$$

Transportní rovnice (1.27) převedeme do jednorozměrné podoby

$$\frac{\partial c_f}{\partial t} + u_f \frac{\partial c_f}{\partial x} = \frac{1}{\text{Pe}} \frac{\partial^2 c_f}{\partial x^2} - \text{Da}(1 - \phi_f)(c_f - c_s) + \frac{f_f}{\phi_f} \quad \text{v } \Omega_f \times (0, T), \quad (1.32a)$$

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} = \frac{\text{D}_r}{\text{Pe}} \frac{\partial^2 c_s}{\partial x^2} + \text{Da} \phi_f (c_f - c_s) \quad \text{v } \Omega_s \times (0, T) \quad (1.32b)$$

s následujícími počátečními a okrajovými podmínkami definovanými pro transport KL v kapalně fázi na množině $\langle 0, L \rangle \times \langle 0, T \rangle$:

$$\text{Počáteční podmínka: } c_f(x, 0) = c_f^{\text{ini}}(x) \quad \forall x \in \langle 0, L \rangle, \quad (1.33a)$$

$$\text{Dirichletovy o.p.: } c_f(0, t) = c_{f,0} \quad \forall t \in (0, T), \quad (1.33b)$$

$$c_f(L, t) = c_{f,L} \quad \forall t \in (0, T), \quad (1.33c)$$

$$\text{Neumannovy o.p.: } \frac{\partial c_f}{\partial x}(0, t) = 0 \quad \forall t \in (0, T), \quad (1.33d)$$

$$\frac{\partial c_f}{\partial x}(L, t) = 0 \quad \forall t \in (0, T), \quad (1.33e)$$

kde $c_{f,0}, c_{f,L} \geq 0$. Analogicky definujeme počáteční a okrajové podmínky pro transport KL v pevné fázi na množině $\langle 0, L \rangle \times \langle 0, T \rangle$:

$$\text{Počáteční podmínka: } c_s(x, 0) = c_s^{\text{ini}}(x) \quad \forall x \in \langle 0, L \rangle, \quad (1.34a)$$

$$\text{Dirichletovy o.p.: } c_s(0, t) = c_{s,0} \quad \forall t \in (0, T), \quad (1.34b)$$

$$c_s(L, t) = c_{s,L} \quad \forall t \in (0, T), \quad (1.34c)$$

$$\text{Neumannovy o.p.: } \frac{\partial c_s}{\partial x}(0, t) = 0 \quad \forall t \in (0, T), \quad (1.34d)$$

$$\frac{\partial c_s}{\partial x}(L, t) = 0 \quad \forall t \in (0, T), \quad (1.34e)$$

kde $c_{s,0}, c_{s,L} \geq 0$. Konkrétní nastavení okrajových podmínek bude diskutováno pro jednotlivé úlohy později v kapitole 3.

1.6.3 Úloha M-2D

Mějme dvourozměrné oblasti Ω_f a Ω_s s hranicemi $\partial\Omega_f$ a $\partial\Omega_s$ a časový interval $\langle 0, T \rangle$. Dále uvažujme stacionární rychlostní pole $\vec{u}_f = (u_{f,x}, u_{f,y})^T$, které splňuje rovnice porézního prostředí (1.13), ve tvaru

$$u_{f,x}(\vec{x}, t) = u_f \quad \forall (\vec{x}, t) \in \Omega_f \times (0, T), \quad (1.35a)$$

$$u_{f,y}(\vec{x}, t) = 0 \quad \forall (\vec{x}, t) \in \Omega_f \times (0, T). \quad (1.35b)$$

Řešme soustavu advekčně-difuzních rovnic (1.27) s rychlostním vektorovým polem definovaném v (1.35) pro neznámé funkce koncentrací

$$c_f(\vec{x}, t) : \overline{\Omega}_f \times \langle 0, T \rangle \rightarrow \mathbb{R}_0^+, \quad (1.36a)$$

$$c_s(\vec{x}, t) : \overline{\Omega}_s \times \langle 0, T \rangle \rightarrow \mathbb{R}_0^+ \quad (1.36b)$$

s počátečními a okrajovými podmínkami definovanými následovně:

- Pro kapalnou fázi

$$c_f(\vec{x}, 0) = c_f^{\text{ini}}(\vec{x}) \quad \forall \vec{x} \in \overline{\Omega}_f, \quad (1.37a)$$

$$c_f(\vec{x}, t) = c_{f,\text{Dir}}(\vec{x}, t) \quad \forall (\vec{x}, t) \in \Gamma_{f,\text{Dir}} \times (0, T), \quad (1.37b)$$

$$\nabla c_f(\vec{x}, t) \cdot \vec{n} = 0 \quad \forall (\vec{x}, t) \in \Gamma_{f,\text{Neu}} \times (0, T), \quad (1.37c)$$

kde \vec{n} značí jednotkový vektor vnější normály k $\partial\Omega_f$ v bodě $\vec{x} \in \partial\Omega_f$ a části hranice $\Gamma_{f,\text{Dir}}$ a $\Gamma_{f,\text{Neu}}$ splňují

$$\Gamma_{f,\text{Dir}} \cap \Gamma_{f,\text{Neu}} = \emptyset, \quad (1.38a)$$

$$\overline{\Gamma_{f,\text{Dir}}} \cup \overline{\Gamma_{f,\text{Neu}}} = \partial\Omega_f. \quad (1.38b)$$

- Pro pevnou fázi:

$$c_s(\vec{x}, 0) = c_s^{\text{ini}}(\vec{x}) \quad \forall \vec{x} \in \overline{\Omega}_s, \quad (1.39a)$$

$$c_s(\vec{x}, t) = c_{s,\text{Dir}}(\vec{x}, t) \quad \forall (\vec{x}, t) \in \Gamma_{s,\text{Dir}} \times (0, T), \quad (1.39b)$$

$$\nabla c_s(\vec{x}, t) \cdot \vec{n} = 0 \quad \forall (\vec{x}, t) \in \Gamma_{s,\text{Neu}} \times (0, T), \quad (1.39c)$$

kde \vec{n} značí jednotkový vektor vnější normály k $\partial\Omega_s$ v bodě $\vec{x} \in \partial\Omega_s$ a části hranice $\Gamma_{s,\text{Dir}}$ a $\Gamma_{s,\text{Neu}}$ splňují

$$\Gamma_{s,\text{Dir}} \cap \Gamma_{s,\text{Neu}} = \emptyset, \quad (1.40a)$$

$$\overline{\Gamma_{s,\text{Dir}}} \cup \overline{\Gamma_{s,\text{Neu}}} = \partial\Omega_s. \quad (1.40b)$$

1.7 Formulace Úlohy C

V této sekci bude formulována úloha transportu KL v cévě ve 2D, která byla v první kapitole označena jako Úloha C. Mějme dvourozměrnou obdélníkovou oblast $\Omega = (0, L_x) \times (0, L_y)$ reprezentující cévu krevního řečiště s hranicí $\partial\Omega$ a časový interval $\langle 0, T \rangle$, kde $L_x, L_y, T \in \mathbb{R}^+$. Úloha C se skládá podobně jako Úloha M, viz sekce 1.6, ze dvou částí:

1. V prvním kroku řešíme soustavu rovnic (1.7) pro neznámou funkci rychlosti

$$\vec{v}(\vec{x}, t) : \overline{\Omega} \times \langle 0, T \rangle \rightarrow \mathbb{R}^2 \quad (1.41)$$

s následujícími počátečními a okrajovými podmínkami

$$\vec{v}(\vec{x}, 0) = \vec{v}^{\text{ini}}(\vec{x}) \quad \forall \vec{x} \in \overline{\Omega}, \quad (1.42a)$$

$$\vec{v}(\vec{x}, t) = \vec{v}_0(\vec{x}) \quad \forall (\vec{x}, t) \in \Gamma_{\text{Dir}} \times (0, T), \quad (1.42b)$$

$$\nabla v_k(\vec{x}, t) \cdot \vec{n} = 0 \quad \forall (\vec{x}, t) \in \Gamma_{\text{Neu}} \times (0, T), \quad \forall k \in \{1, 2\}, \quad (1.42c)$$

kde \vec{n} značí jednotkový vektor vnější normály k $\partial\Omega$ v bodě $\vec{x} \in \partial\Omega$ a části hranice Γ_{Dir} a Γ_{Neu} splňují

$$\Gamma_{\text{Dir}} \cap \Gamma_{\text{Neu}} = \emptyset, \quad (1.43a)$$

$$\overline{\Gamma_{\text{Dir}}} \cup \overline{\Gamma_{\text{Neu}}} = \partial\Omega. \quad (1.43b)$$

2. V druhém kroku řešíme transportní rovnici (1.14) s rychlostním vektorovým polem $\vec{v}(\vec{x}, t)$ vypočteném v kroku 1 pro neznámou funkci koncentrace

$$c(\vec{x}, t) : \overline{\Omega} \times \langle 0, T \rangle \rightarrow \mathbb{R}_0^+, \quad (1.44)$$

s počátečními a okrajovými podmínkami definovanými následovně:

$$c(\vec{x}, 0) = c^{\text{ini}}(\vec{x}) \quad \forall \vec{x} \in \overline{\Omega}, \quad (1.45a)$$

$$c(\vec{x}, t) = c_{\text{Dir}}^{(c)}(\vec{x}) \quad \forall (\vec{x}, t) \in \Gamma_{\text{Dir}}^{(c)} \times (0, T), \quad (1.45b)$$

$$\nabla c(\vec{x}, t) \cdot \vec{n} = 0 \quad \forall (\vec{x}, t) \in \Gamma_{\text{Neu}}^{(c)} \times (0, T), \quad (1.45c)$$

kde \vec{n} značí jednotkový vektor vnější normály k $\partial\Omega$ v bodě $\vec{x} \in \partial\Omega$ a části hranice $\Gamma_{\text{Dir}}^{(c)}$ a $\Gamma_{\text{Neu}}^{(c)}$ splňují

$$\Gamma_{\text{Dir}}^{(c)} \cap \Gamma_{\text{Neu}}^{(c)} = \emptyset, \quad (1.46a)$$

$$\overline{\Gamma_{\text{Dir}}^{(c)}} \cup \overline{\Gamma_{\text{Neu}}^{(c)}} = \partial\Omega. \quad (1.46b)$$

Kapitola 2

Numerické metody

V této kapitole se budeme věnovat:

1. metodě konečných diferencí (dále jen MKD),
2. mřížkové Boltzmannově metodě (z anglického lattice Boltzmann method, dále je LBM),

kteří byly v této práci použity k řešení úloh formulovaných v kapitole 1. MKD uvedenou v sekci 2.1 použijeme pouze pro řešení jednorozměrných úloh, tj. zjednodušené Úlohy M, viz sekce 1.5, a Úlohy M-1D, viz sekce 1.6.2. Poslouží nám zejména jako referenční metoda pro srovnání výsledků s LBM, kterou představíme v sekci 2.2. LBM je vcelku moderní numerická metoda pro simulaci tekutin, která byla poprvé představena v roce 1988 pány Guyem R. McNamarou a Gianluigim Zanettim v článku [25]. Jedná se o sěžejní numerickou metodu této práce a budou pomoci ní řešeny všechny úlohy formulované v sekcích 1.5 až 1.7.

2.1 Metoda konečných diferencí

Vzhledem k tomu, že diferenční schéma zjednodušené úlohy M je pouze speciálním případem numerického schématu pro Úlohu M-1D, budeme zde zkoumat pouze diferenční schéma pro Úlohu M-1D. Zvolme konečnou množinu bodů (tzv. síť) pro každou proměnnou, podle které derivujeme a nahradíme derivace diferenčními náhradami, tj. lineárními kombinacemi funkčních hodnot hledané funkce v okolních bodech, které je aproximují [31].

Pro numerické řešení rovnic (1.32) s počátečními a okrajovými podmínkami definovanými v (1.33) a (1.34) uvažujeme diferenční schéma semiimplicitní v čase. Pro transportní rovnici v kapalně fázi (1.32a) definujeme pravoúhlou obdélníkovou síť složenou z přímk $x = x_k$ a $t = t_i$, kde

$$x_k = k \Delta x \quad \text{pro } k \in \{0, 1, \dots, N_x\}, \quad (2.1a)$$

$$t_i = i \Delta t \quad \text{pro } i \in \{0, 1, \dots, N_t\}, \quad (2.1b)$$

kde $N_x, N_t \in \mathbb{N}$ a Δx , resp. Δt značí prostorový, resp. časový krok, pro které platí

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

Označme koncentraci c_f v uzlu sítě (x_k, t_i) výrazem

$$c_{f,k}^i = c_f(x_k, t_i). \quad (2.3)$$

Diferenciální výrazy v rovnici (1.32a) byly nahrazeny následujícími diferencemi

- časová derivace nahrazena zpětnou časovou diferencí, viz [31],

$$\frac{\partial c_f}{\partial t}(x_k, t_i) \approx \frac{c_{f,k}^{i+1} - c_{f,k}^i}{\Delta t}, \quad (2.4)$$

- první prostorová derivace je nahrazena upwindovou stabilizací 1. řádu, viz [24],

$$u_f \frac{\partial c_f}{\partial x}(x_k, t_i) \approx \begin{cases} u_f \frac{c_{f,k}^{i+1} - c_{f,k-1}^{i+1}}{\Delta x} & \text{pro } u_f \geq 0, \\ u_f \frac{c_{f,k+1}^{i+1} - c_{f,k}^{i+1}}{\Delta x} & \text{pro } u_f < 0, \end{cases} \quad (2.5)$$

- druhá prostorová derivace je nahrazena prostorovou centrální diferencí 2. řádu, viz [31],

$$\frac{\partial^2 c_f}{\partial x^2} \approx \frac{c_{f,k+1}^{i+1} - 2c_{f,k}^{i+1} + c_{f,k-1}^{i+1}}{\Delta x^2}. \quad (2.6)$$

Diferenční schéma pro rovnici (1.32a) lze po aplikaci diferencí (2.4), (2.5) a (2.6) zapsat ve tvaru

$$\frac{c_{f,k}^{i+1} - c_{f,k}^i}{\Delta t} + u_f \frac{c_{f,k}^{i+1} - c_{f,k-1}^{i+1}}{\Delta x} = \frac{1}{\text{Pe}} \frac{c_{f,k+1}^{i+1} - 2c_{f,k}^{i+1} + c_{f,k-1}^{i+1}}{\Delta x^2} - \text{Da}(1 - \phi_f)(c_{f,k}^{i+1} - c_{s,k}^i) + \frac{f_f(x_k, t_i)}{\phi_f}. \quad (2.7)$$

Všimněme si, že se v diferenčním schématu (2.7) vyskytuje koncentrace c_s v i -té časové vrstvě, tj. pro výpočet koncentrace c_f se využívá koncentrace c_s z minulé časové vrstvy, proto je schéma označeno jako „semiimplicitní“ v čase. Pro transportní rovnici v pevné fázi (1.32b) volíme stejnou pravoúhlou obdélníkovou síť a diferenciální výrazy jsou nahrazeny analogickými diferencemi jako v rovnici (1.32a), tj. diferenční schéma rovnice (1.32b) zapíšeme ve tvaru

$$\frac{c_{s,k}^{i+1} - c_{s,k}^i}{\Delta t} = \frac{\text{Dr}}{\text{Pe}} \frac{c_{s,k+1}^{i+1} - 2c_{s,k}^{i+1} + c_{s,k-1}^{i+1}}{\Delta x^2} + \text{Da} \phi_f (c_{f,k}^i - c_{s,k}^{i+1}). \quad (2.8)$$

Počáteční podmínky (1.33a) a (1.34a) jsou diskretizovány dle zvolené sítě uzlů, viz (2.1), následovně

$$c_f(x_k, 0) = c_{f,k}^{\text{ini}} \quad \forall k \in \{0, 1, \dots, N_x\}, \quad (2.9a)$$

$$c_s(x_k, 0) = c_{s,k}^{\text{ini}} \quad \forall k \in \{0, 1, \dots, N_x\}. \quad (2.9b)$$

Zbývá diskretizace okrajových podmínek definovaných pro kapalnou fázi v rovnicích (1.33b) až (1.33e). Uvažujeme okrajové podmínky dvojího typu, a sice Dirichletovu nebo Neumannovu okrajovou podmínku. Diskretizaci Dirichletovy okrajové podmínky (1.33b), resp. (1.33c) napíšeme ve tvaru

$$c_f(x_0, t_i) = c_{f,0} \quad \forall i \in \{0, 1, \dots, N_t\}, \text{ resp.} \quad (2.10a)$$

$$c_f(x_n, t_i) = c_{f,L} \quad \forall i \in \{0, 1, \dots, N_t\}. \quad (2.10b)$$

Neumannovu okrajovou podmínku (1.33d), resp. (1.33e) definujeme na síti (2.1) pomocí hodnoty koncentrace v sousedních bodech, tj.

$$c_f(x_0, t_i) = c_f(x_1, t_i) \quad \forall i \in \{0, 1, \dots, N_x\}, \text{ resp.} \quad (2.11a)$$

$$c_f(x_n, t_i) = c_f(x_{n-1}, t_i) \quad \forall i \in \{0, 1, \dots, N_x\}. \quad (2.11b)$$

Okrajové podmínky pro pevnou fázi jsou definovány analogicky, tj. Dirichletova okrajová podmínka (1.34b), resp. (1.34c) je tvaru

$$c_s(x_0, t_i) = c_{s,0} \quad \forall i \in \{0, 1, \dots, N_x\}, \text{ resp.} \quad (2.12a)$$

$$c_s(x_n, t_i) = c_{s,L} \quad \forall i \in \{0, 1, \dots, N_x\} \quad (2.12b)$$

a Neumannova okrajová podmínka (1.34d), resp. (1.34e) je převedena na

$$c_s(x_0, t_i) = c_s(x_1, t_i) \quad \forall i \in \{0, 1, \dots, N_x\}, \text{ resp.} \quad (2.13a)$$

$$c_s(x_n, t_i) = c_s(x_{n-1}, t_i) \quad \forall i \in \{0, 1, \dots, N_x\}. \quad (2.13b)$$

Úloha soustavy dvou diferenciálních rovnic (1.32) byla tedy převedena na dvě soustavy algebraických rovnic (2.7) a (2.8). Diferenční schéma semiimplicitní v čase bylo zvoleno pro svou jednodušší implementaci, jelikož soustavy algebraických rovnic (2.7) a (2.8) jsou na sobě v dané časové vrstvě nezávislé a lze je zapsat ve tvaru tridiagonálních matic, které efektivně řeší Thomasův algoritmus. Vzhledem k účelu MKD v této práci, kterým je zejména co nejjednodušeji získat referenční výsledky, které bude možno srovnat s výsledky obdrženyými pomocí mřížkové Boltzmannovy metody, je zvolené semiimplicitní diferenční schéma postačující.

2.2 Mřížková Boltzmannova metoda

Základní myšlenkou LBM je nahrazení spojitě rozložené tekutiny fiktivními částicemi diskrétně rozloženými na zvolené mřížce (anglicky lattice), které popisujeme jednočásticovými distribučními funkcemi $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ [kg s³ m⁻⁶]. Distribuční funkce $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ představuje hustotu pravděpodobnosti výskytu částic s rychlostí $\vec{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ [m s⁻¹] v bodě \vec{x} a v čase t , viz [23]. V LBM je tradičně používán pojem distribuční funkce¹, viz [22, 18, 29], proto budeme tento ustálený výraz používat i v této práci. Je však důležité neplést si s kumulativní distribuční funkcí z teorie pravděpodobnosti, viz [20]. Předpokládáme, že zmíněné fiktivní částice mají všechny stejnou hmotnost m [kg]. Jedná se o tzv. mezoskopický popis tekutiny, který leží mezi mikroskopickým a makroskopickým popisem, tj. každý bod zvolené mřížky lokálně charakterizuje danou tekutinu a její vývoj v čase je popsán přerozdělením distribučních funkcí fiktivních částic na dané mřížce. Distribuční funkce $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ splňuje Boltzmannovu transportní rovnici

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \xi_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + \frac{1}{m} \sum_{i=1}^3 F_i \frac{\partial f}{\partial \xi_i} = C(f), \quad (2.14)$$

kde

$\vec{\xi}$	[m s ⁻¹]	značí mikroskopickou rychlost částic,
$f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$	[kg s ³ m ⁻⁶]	reprezentuje hustotu pravděpodobnosti výskytu částic s rychlostí $\vec{\xi}$ v bodě \vec{x} a v čase t ,
$\frac{1}{m} \vec{F}$	[N kg ⁻¹]	značí vektor působení vnějších sil,
$C(f)$	[kg s ⁴ m ⁻⁶]	charakterizuje lokální redistribuci distribučních funkcí f vlivem srážek částic, proto se nazývá kolizním operátorem.

Všimněme si, že na rovnici (2.14) lze nahlížet jako na advekční rovnici vzhledem k funkci f . První dva členy této rovnice definují advekci distribuční funkce f rychlostí $\vec{\xi}$. Třetí člen charakterizuje síly ovlivňující rychlost $\vec{\xi}$ a kolizní operátor $C(f)$ na pravé straně rovnice hraje roli zdrojového členu.

¹anglicky distribution function

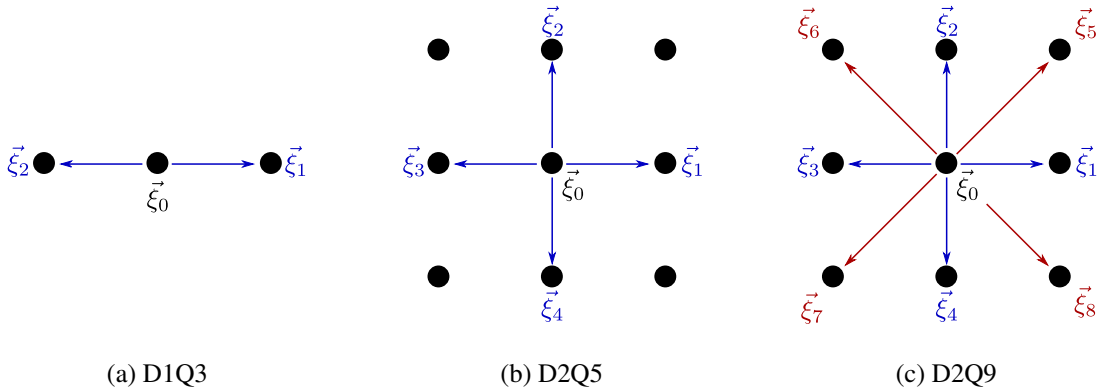
Makroskopické veličiny zkoumané tekutiny dostaneme integrací momentů distribuční funkce f přes prostor rychlostí $\vec{\xi}$, který označíme Ξ . V této práci si vystačíme s nultým a prvním momentem, tj.

$$\Pi^{(0)} = \int_{\Xi} f d\vec{\xi} = \rho, \quad (2.15a)$$

$$\Pi_{\alpha}^{(1)} = \int_{\Xi} \xi_{\alpha} f d\vec{\xi} = \rho v_{\alpha}, \quad \alpha \in \{1, 2, 3\}. \quad (2.15b)$$

Nultý moment $\Pi^{(0)}$ reprezentuje pozorovanou makroskopickou skalární veličinu, kterou může být například hustota (úloha proudění kapaliny), teplota (úloha vedení tepla), koncentrace (advektivně-difuzní rovnice, viz (1.32)), apod. První moment $\Pi_{\alpha}^{(1)}$ reprezentuje vektorovou veličinu, např. hybnost (úloha proudění kapaliny), tepelný tok (úloha vedení tepla), tok koncentrace (advektivně-difuzní rovnice), a jiné. Momenty vyššího řádu mají složitější fyzikální interpretace (např. tenzor toku hybnosti), viz [22, 18, 12].

Numerické schéma LBM lze odvodit několika způsoby, přičemž jedním z nich je diskretizace Boltzmannovy transportní rovnice, což lze nahlédnout v [12]. LBM používá pro diskretizaci prostoru v rovnici (2.14) pravidelnou mřížku. Tato mřížka má dvě hlavní charakteristiky, které se odvíjejí od použité diskretizace prostoru rychlostí. Modely diskretizace rychlostí, tzv. rychlostní modely, se v LBM označují zkratkou $DdQq$, kde d označuje dimenzi uvažovaného prostoru a q značí počet navzájem různých směrů, po kterých se v rámci zvolené mřížky můžeme pohybovat. Příklady mřížek užívaných v jednorozměrném a dvourozměrném prostoru jsou uvedeny na obr. 2.1.



Obrázek 2.1: Příklady jednorozměrných a dvourozměrných mřížkových rychlostních modelů.

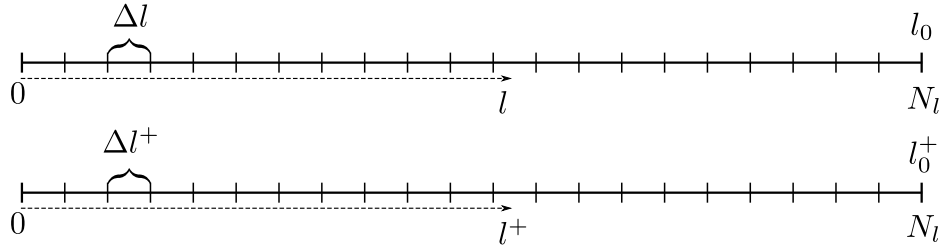
2.2.1 Přechod k bezrozměrným jednotkám

Nedílnou součástí diskretizace Boltzmannovy transportní rovnice je přechod k bezrozměrným jednotkám. LBM simulace totiž probíhají v jednotkách, které jsou vztaheny ke zvolené mřížce, proto se nazývají mřížkovými jednotkami (anglicky lattice units). Je tedy zapotřebí definovat konverzi fyzikálních jednotek do mřížkových a naopak. V rámci této práce uvažujeme izotropní ekvidistantní mřížku. Pro prostorový krok mřížky platí

$$\Delta l = \frac{l_0}{N_l}, \quad (2.16a)$$

$$\Delta t^+ = \frac{t_0^+}{N_l}, \quad (2.16b)$$

kde Δl [m] značí prostorový krok, l_0 [m] je charakteristickou délkou a N_l je počet uzlů, který dělí l_0 na délky o velikosti Δl , viz obr. 2.2.



Obrázek 2.2: Schéma přechodu mezi prostorovým krokem Δl ve fyzikálních a mřížkových jednotkách.

Veličiny v mřížkových jednotkách jsou odlišeny od svých protějšků ve fyzikálních jednotkách pravým horním indexem $^+$. Vzhledem k tomu, že počet uzlů N_l se při převodu jednotek nemění, dostáváme pomocí něho z rovnic (2.16) převodní vztah

$$\Delta l = \frac{l_0}{l_0^+} \Delta l^+. \quad (2.17)$$

Analogickým postupem pro převod časového kroku Δt [s] dostáváme převodní vztah

$$\Delta t = \frac{t_0}{t_0^+} \Delta t^+, \quad (2.18)$$

kde t_0 [s] je charakteristický čas. Pro implementaci a obecně snazší práci s jednotkami v LBM je výhodné volit, viz [22],

$$\Delta l^+ = 1, \quad (2.19a)$$

$$\Delta t^+ = 1. \quad (2.19b)$$

Tuto volbu použijeme i v této práci. Rovnice (2.17) a (2.18) přejdou na rovnice

$$l_0^+ = \frac{l_0}{\Delta l}, \quad (2.20a)$$

$$t_0^+ = \frac{t_0}{\Delta t}, \quad (2.20b)$$

kde jsme si vyjádřili charakteristickou délkou, resp. čas v mřížkových jednotkách, jelikož je budeme v dalším postupu potřebovat. Uvědomme si, že vztahy (2.17) a (2.18) platí pro jakoukoli délku l [m] a čas t [m], nejen pro Δl a Δt , viz obr. 2.2,

$$l = \frac{l_0}{l_0^+} l^+, \quad (2.21a)$$

$$t = \frac{t_0}{t_0^+} t^+. \quad (2.21b)$$

Pomocí převodu (2.21) pro časovou a prostorovou proměnnou jsme schopni definovat převodní vztahy pro složky rychlosti v_i [m s^{-1}], a sice

$$v_i = \frac{l}{t} \stackrel{(2.21)}{=} \frac{l_0 t_0^+ l^+}{l_0^+ t t^+} \stackrel{(2.20)}{=} \frac{\Delta l}{\Delta t} v_i^+, \quad (2.22)$$

kde $v_i^+ = \frac{l^+}{t^+}$ jsou složky rychlosti \vec{v} v mřížkových jednotkách. Převodní vztah pro kinematickou viskozitu ν [$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$] modelované tekutiny získáme pomocí bezrozměrného Reynoldsova čísla, které musí nabývat v obou systémech jednotek stejné hodnoty. Reynoldsovo číslo je definováno ve tvaru

$$\text{Re} = \frac{l_0 v_0}{\nu} = \frac{l_0^2}{t_0 \nu}, \quad (2.23)$$

kde $v_0 = \frac{l_0}{t_0}$ [m s^{-1}] je charakteristická rychlost. Pro kinematickou viskozitu ν tedy platí

$$\nu = \frac{l_0 v_0}{l_0^+ v_0^+} \nu^+ \stackrel{(2.20)}{=} \frac{\Delta l^2}{\Delta t} \nu^+. \quad (2.24)$$

V případě advekčně-difuzní rovnice se kinematická viskozita ν interpretuje jako difuzní koeficient D [$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$], jehož přechod do mřížkových jednotek je definován pomocí bezrozměrného Pécletova čísla

$$\text{Pe} = \frac{l_0 v_0}{D} = \frac{l_0^2}{t_0 D}. \quad (2.25)$$

Difuzní koeficient D tedy splňuje vztah

$$D = \frac{l_0 v_0}{l_0^+ v_0^+} D^+ \stackrel{(2.20)}{=} \frac{\Delta l^2}{\Delta t} D^+ \quad (2.26)$$

analogický k vztahu pro kinematickou viskozitu, viz (2.24).

V případě soustavy advekčně-difuzních rovnic figurující v Úloze M, viz sekce 1.6, je třeba definovat ještě převod pro koeficient přestupu α [s^{-1}], viz (1.27). Pro konverzi koeficientu přestupu slouží tzv. Damköhlerovo číslo [9]

$$\text{Da} = \frac{\alpha l_0}{v_0}, \quad (2.27)$$

kteří musí, stejně jako Pécletovo a Reynoldsovo číslo, nabývat v obou systémech stejných hodnot, z čehož pro koeficient α plyne vztah

$$\alpha = \frac{v_0 l_0^+}{l_0 v_0^+} \alpha^+ \stackrel{(2.20)}{=} \frac{\alpha^+}{\Delta t}. \quad (2.28)$$

Poznámka: Pro zjednodušenou Úlohu M bez advekce definovanou v sekci 1.5 nelze převést difuzní koeficient D do mřížkových jednotek pomocí Pécletova čísla, viz (2.25), jelikož Pécletovo číslo lze definovat pouze pro advekčně-difuzní úlohu. Úlohu definovanou v sekci 1.5 převedeme do mřížkových jednotek pomocí charakteristického času t_0 , charakteristické délky l_0 , viz (2.21), a charakteristické koncentrace C_0 , která splňuje

$$c_f = C_0 c_f^*. \quad (2.29)$$

V mřížkových jednotkách lze rovnici (1.23) zapsat s využitím vztahů (2.21) a (2.20) následovně

$$\frac{\partial c_f^+}{\partial t^+} = D^+ \frac{\partial^2 c_f^+}{\partial x^{+2}}, \quad (2.30)$$

kde pro difuzní koeficient D^+ v mřížkových jednotkách platí analogický vztah jako pro advekčně-difuzní úlohu

$$D^+ = \frac{\Delta t}{\Delta l^2} D. \quad (2.31)$$

V dalším textu nebudeme pro přehlednost zápisu označovat mřížkové jednotky horním indexem $+$ nebude-li to pro porozumění nutné.

2.2.2 Schéma diskretizace Boltzmannovy transportní rovnice

Uvažujme d -rozměrnou oblast $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d \in \mathbb{N}$ s hranicí Γ a definujme jejich diskretizované ekvivalenty

$$\hat{\Omega} = \{\vec{x}_k \mid k \in \{0, \dots, N\}\}, \quad (2.32a)$$

$$\hat{\Gamma} = \{\vec{y}_r \mid r \in \{0, \dots, M\}\}, \quad (2.32b)$$

v systému bezrozměrných jednotek, viz sekce 2.2.1. Uveďme zde příklady diskretizací, které budeme v této práci používat, tj. ekvidistantní izotropní obdélníkovou mřížku:

(a) jednorozměrnou

$$\hat{\Omega}^{1D} = \{\vec{x}_i = i\Delta x \mid i \in \{1, \dots, N_x - 1\}\}, \quad (2.33a)$$

$$\hat{\Omega}^{\wedge 1D} = \{\vec{x}_i = i\Delta x \mid i \in \{0, 1, \dots, N_x\}\}, \quad (2.33b)$$

(b) dvourozměrnou

$$\hat{\Omega}^{2D} = \{\vec{x}_{i,j} = (i\Delta l, j\Delta l)^T \mid i \in \{1, \dots, N_x - 1\}, j \in \{1, \dots, N_y - 1\}\}, \quad (2.34a)$$

$$\hat{\Omega}^{\wedge 2D} = \{\vec{x}_{i,j} = (i\Delta l, j\Delta l)^T \mid i \in \{0, 1, \dots, N_x\}, j \in \{0, 1, \dots, N_y\}\}, \quad (2.34b)$$

kde Δx , resp. Δl je vzdálenost mezi sousedními uzly jednorozměrné, resp. dvourozměrné mřížky v bezrozměrných mřížkových jednotkách. Zvolenou prostorovou diskretizací přejde Boltzmannova transportní rovnice (2.14) do tvaru, viz [22, 18],

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{\xi}_k \cdot \nabla \right) f_k(\vec{x}, t) = C_k(\vec{x}, t) + F_k(\vec{x}, t) \quad \text{pro } \forall k \in \{0, 1, \dots, q-1\}, \quad (2.35)$$

kde $\vec{x} \in \hat{\Omega}$ libovolné, q je určeno zvoleným rychlostním modelem DdQq a dále

$\vec{\xi}_k$ [-] značí mikroskopickou rychlost v k -tém směru v bezrozměrných jednotkách,

$f_k(\vec{x}, t) = f(\vec{x}, \vec{\xi}_k, t)$ [-] je diskrétní distribuční funkce,

$F_k(\vec{x}, t)$ [-] je diskrétní zdrojový člen, jenž závisí na konkrétním typu LBM modelu a

$C_k(\vec{x}, t)$ [-] označuje diskrétní kolizní operátor, jehož podoba rovněž závisí na konkrétní volbě typu LBM modelu.

Nyní definujme diskretizaci časového intervalu $\langle 0, T \rangle$, $T \in \mathbb{R}^+$ pomocí sítě uzlů

$$t_n = n\Delta t \quad \text{pro } \forall n \in \{0, 1, \dots, N_t\}, \quad (2.36)$$

kde $N_t \in \mathbb{N}$ a $\Delta t = \frac{T}{N_t}$ označuje časový krok. Na levou stranu rovnice (2.35) aplikujeme metodu charakteristik, viz [22], a integraci v čase od t_n do t_{n+1} , kde $n \in \{0, 1, \dots, N_t - 1\}$, přejde rovnice (2.35) na rovnici

$$f_k(\vec{x} + \Delta t \vec{\xi}_k, t_n + \Delta t) - f_k(\vec{x}, t_n) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} C_k(\vec{x}, t) dt + \int_{t_n}^{t_{n+1}} F_k(\vec{x}, t) dt \quad (2.37)$$

pro $\forall k \in \{0, 1, \dots, q-1\}$ a $\forall \vec{x} \in \hat{\Omega}$. Ukažme nyní dvě možnosti diskretizace integrálů na pravé straně rovnice (2.37). První možností označující se jako diskretizace prvního řádu je diskretizovat integrály na pravé straně hodnotou v jednom bodě, tj.

$$f_k(\vec{x} + \Delta t \vec{\xi}_k, t_n + \Delta t) - f_k(\vec{x}, t_n) = \Delta t C_k(\vec{x}, t_n) + \Delta t F_k(\vec{x}, t_n). \quad (2.38)$$

Tato aproximace se také nazývá obdélníková diskretizace [22]. Výsledkem je plně explicitní schéma definované rovnicí

$$f_k(\vec{x} + \Delta t \vec{\xi}_k, t_n + \Delta t) = f_k(\vec{x}, t_n) + \Delta t C_k(\vec{x}, t_n) + \Delta t F_k(\vec{x}, t_n), \quad (2.39)$$

kteřá se nazývá mřížková Boltzmannova rovnice (z ang. Lattice Boltzmann equation). Diskretizace prvního řádu ovšem není dostatečná za přítomnosti členu silového působení $F_k(\vec{x}, t)$ a vede k nesprávnému řešení, viz [18]. Použitím lichoběžníkového pravidla

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} C_k(\vec{x}, t) \approx \frac{\Delta t}{2} (C_k(\vec{x}, t_n) + C_k(\vec{x} + \Delta t \vec{\xi}_k, t_n + \Delta t)), \quad (2.40a)$$

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} F_k(\vec{x}, t) \approx \frac{\Delta t}{2} (F_k(\vec{x}, t_n) + F_k(\vec{x} + \Delta t \vec{\xi}_k, t_n + \Delta t)), \quad (2.40b)$$

pro $\forall k \in \{0, 1, \dots, q-1\}$, $\forall n \in \{0, 1, \dots, N_t-1\}$ a $\forall \vec{x} \in \hat{\Omega}$ na integrály v rovnici (2.37) obdržíme vztah

$$\begin{aligned} f_k(\vec{x} + \Delta t \vec{\xi}_k, t_n + \Delta t) - f_k(\vec{x}, t_n) &= \frac{\Delta t}{2} (C_k(\vec{x}, t_n) + C_k(\vec{x} + \Delta t \vec{\xi}_k, t_n + \Delta t)) + \\ &+ \frac{\Delta t}{2} (F_k(\vec{x}, t_n) + F_k(\vec{x} + \Delta t \vec{\xi}_k, t_n + \Delta t)) \end{aligned} \quad (2.41)$$

pro $\forall k \in \{0, 1, \dots, q-1\}$. Zavedením vhodné distribuční funkce ve tvaru

$$\bar{f}_k(\vec{x}, t_n) = f_k(\vec{x}, t_n) - \frac{\Delta t}{2} (C_k(\vec{x}, t_n) + F_k(\vec{x}, t_n)) \quad (2.42)$$

a následným dosazením nově definované distribuční funkce $\bar{f}_k(\vec{x}, t_n)$ do rovnice (2.41) dostáváme schéma

$$\bar{f}_k(\vec{x} + \Delta t \vec{\xi}_k, t_n + \Delta t) = \bar{f}_k(\vec{x}, t_n) + \Delta t C_k(\vec{x}, t_n) + \Delta t F_k(\vec{x}, t_n), \quad (2.43)$$

kteřé je druhého řádu v čase, viz [18, 22]. Všimněme si, že rovnice (2.43) je mřížková Boltzmannova rovnice (zkráceně MBR), ovšem na rozdíl od (2.39) v ní vystupuje modifikovaná distribuční funkce $\bar{f}_k(\vec{x}, t_n)$. Mimo jiné jsme se modifikací distribuční funkce (2.42) zbavili rovnice (2.41) v čase, jelikož MBR (2.43) je opět v čase zcela explicitní. Pro jednoduchost zápisu opět přeznačme distribuční funkci definovanou v (2.42) na původní f_k , protože nadále bude v této práci uvažován pouze tento tvar. Poznamenejme, že použití \bar{f} místo f ovlivní vztahy pro výpočet makroskopických momentů $\Pi^{(0)}$ a $\vec{\Pi}^{(1)}$, viz [22],

$$\Pi^{(0)} = \sum_{k=0}^{q-1} f_k + \frac{\Delta t}{2} \sum_{k=0}^{q-1} F_k, \quad (2.44a)$$

$$\vec{\Pi}^{(1)} = \sum_{k=0}^{q-1} f_k \vec{\xi}_k + \frac{\Delta t}{2} \sum_{k=0}^{q-1} F_k \vec{\xi}_k. \quad (2.44b)$$

V této práci budeme uvažovat dva typy mřížkové Boltzmannovy metody, a to SRT-LBM² a CLBM³.

²z ang. single relaxation time LBM, tj. LBM s jedním relaxačním časem

³z ang. cascaded LBM - kaskádová LBM

2.2.3 SRT-LBM

Typ SRT-LBM aproximuje kolizní operátor tzv. BGK⁴ kolizním operátorem, který je definován, viz [18, 22],

$$C_k = \frac{1}{\tau}(f_k^{\text{eq}} - f_k), \quad (2.45)$$

kde τ [–] představuje tzv. relaxační čas (bezrozměrný), který určuje rychlost, jakou spěje pozorovaný systém k termodynamické rovnováze [22]. Tuto rovnováhu definuje Maxwellova rovnovážná distribuční funkce, kterou uvažujeme v aproximované podobě tvaru

$$f_k^{\text{eq}}(\rho, \vec{v}) = \rho \omega_k \left(1 + \frac{\vec{\xi}_k \cdot \vec{v}}{c_{zv}^2} + \frac{(\vec{\xi}_k \cdot \vec{v})^2}{2c_{zv}^4} - \frac{\vec{v} \cdot \vec{v}}{2c_{zv}^2} \right) \quad \text{pro } \forall k \in \{0, 1, \dots, q-1\}, \quad (2.46)$$

kde c_{zv} [–] je tzv. mřížková rychlost zvuku a ω_k je váhová funkce, která nabývá různých hodnot pro různé rychlostní modely. Poznamenejme, že modifikace distribuční funkce f_k definovaná vztahem (2.42) změní hodnotu relaxačního času τ , který je poté tvaru, viz [22],

$$\bar{\tau} = \tau + \frac{\Delta t}{2}. \quad (2.47)$$

Jak již bylo řečeno v sekci 2.2.2, budeme zde pracovat pouze s modifikovanou distribuční funkcí, proto modifikovaný relaxační čas bude v dalším textu značen symbolem τ (tj. bez pruhu). V této práci budou užity modely D1Q3 a D2Q9, pro které jsou váhové funkce ve tvaru:

- D1Q3:

$$\omega_k = \begin{cases} \frac{4}{6} & \text{pro } k = 0, \\ \frac{1}{6} & \text{pro } k = 1, 2. \end{cases} \quad (2.48)$$

- D2Q9

$$\omega_k = \begin{cases} \frac{4}{9} & \text{pro } k = 0, \\ \frac{1}{9} & \text{pro } k = 1, 2, 3, 4, \\ \frac{1}{36} & \text{pro } k = 5, 6, 7, 8. \end{cases} \quad (2.49)$$

Mřížková rychlost zvuku je pro oba rychlostní modely totožná a platí pro ni, viz [18, 22],

$$c_{zv} = \frac{1}{\sqrt{3}}. \quad (2.50)$$

Kinematická viskozita ν , resp. difuzní koeficient D a relaxační čas τ jsou svázány vztahem, viz [18, 22],

$$\nu = c_{zv}^2 \left(\tau - \frac{\Delta t}{2} \right), \quad \text{resp. } D = c_{zv}^2 \left(\tau - \frac{\Delta t}{2} \right). \quad (2.51)$$

Připomeňme, že se jedná o veličiny v mřížkových jednotkách, viz sekce 2.2.1. Zdůrazněme, že vztah (2.51) znemožňuje nezávisle volit relaxační parametr τ , přímo ovlivňující stabilitu metody, a kinematickou viskozitu ν , resp. difuzní koeficient, viz [22]. Pro relaxační čas platí v případě kolizního operátoru SRT podmínka stability, viz [18, 22],

$$\tau > \frac{\Delta t}{2}. \quad (2.52)$$

Podmínka kladená na relaxační čas (2.52) je ekvivalentní platnosti nerovnosti

$$\nu > 0, \quad \text{resp. } D > 0 \quad (2.53)$$

v rovnicích (2.51).

⁴Pojmenováno po vědcích Prabhu L. Bhatnagarovi, Eugene P. Grossovi a Maxu Krookovi, kteří BGK aproximaci kolizního operátoru představili v roce 1954 v článku [5].

2.2.4 CLBM

CLBM, neboli Kaskádová mřížková Boltzmannova metoda, je typ LBM, který v roce 2006 představili M. Geier, A. Greiner a J. G. Korvink v článku [15]. Kolizní krok je v CLBM prováděn v prostoru centrálních momentů distribuční funkce f_k . Kolize je v každém uzlu mřížky realizována v lokální vztažné soustavě, která se pohybuje dle makroskopické rychlosti tekutiny v daném uzlu. Důvodem volby zvoleného systému vztažných soustav, označme ho A , je zlepšení Galileovské invariantnosti výsledných rovnic, což vede ke zlepšení numerické stability této metody, viz [28]. CLBM je typ LBM, který podobně jako např. MRT-LBM⁵ používá q relaxačních časů dle zvoleného DdQq modelu. Pro jednoduchost zápisu a vzhledem k využití CLBM v této práci se omezme na rychlostní model D2Q9, viz obr. 2.1, uvažujeme tedy devět relaxačních časů $\tau_0, \tau_1, \dots, \tau_8$.

Centrální momenty pravděpodobnostní distribuční funkce f_k v diskrétním tvaru definujeme dle [28] následovně

$$\kappa_{\beta_1, \beta_2} = \sum_{k=0}^8 f_k(\xi_{k,1} - v_1)^{\beta_1} (\xi_{k,2} - v_2)^{\beta_2}, \quad (2.54)$$

kde $\beta_1, \beta_2 \in \mathbb{N}_0$, $\vec{\xi}_k = (\xi_{k,1}, \xi_{k,2})^T$ a $\vec{v} = (v_1, v_2)^T$. Centrální momenty definované v rovnici (2.54) odpovídají momentům v systému vztažných soustav A . Obecné momenty odpovídající momentům v nepohybující se vztažné soustavě jsou tvaru, viz [28],

$$m_{\beta_1, \beta_2} = \sum_{k=0}^8 f_k(\xi_{k,1})^{\beta_1} (\xi_{k,2})^{\beta_2}, \quad (2.55)$$

kde $\beta_1, \beta_2 \in \mathbb{N}_0$. Výpočet postkolizní distribuční funkce f_k^* lze zapsat následovně

$$\vec{f}^*(\vec{x}, t_n) = \vec{f}(\vec{x}, t_n) + C(\vec{x}, t_n), \quad (2.56)$$

kde $C = \mathbb{K}^{-1} \mathbb{S} \mathbb{K} (\vec{f}^{\text{eq}} - \vec{f})$, $\vec{f} = (f_0, f_1, \dots, f_8)^T$ a $\vec{f}^{\text{eq}} = (f_0^{\text{eq}}, f_1^{\text{eq}}, \dots, f_8^{\text{eq}})^T$, \mathbb{K} je matice přechodu z prostoru distribučních funkcí do prostoru centrálních momentů $\kappa_{\beta_1, \beta_2}$ a matice \mathbb{S} je diagonální matice ve tvaru

$$\mathbb{S} = \text{diag} \left(\frac{1}{\tau_0}, \frac{1}{\tau_1}, \frac{1}{\tau_2}, \frac{1}{\tau_3}, \frac{1}{\tau_4}, \frac{1}{\tau_5}, \frac{1}{\tau_6}, \frac{1}{\tau_7}, \frac{1}{\tau_8} \right), \quad (2.57)$$

viz [15, 29]. Do kolizního kroku tedy vstupují kombinace centrálních momentů $\vec{k} = \mathbb{K} \vec{f}$, kde \vec{k} je dle zvolené báze prostoru centrálních momentů například tvaru

$$k_0 = \kappa_{0,0}, \quad (2.58a)$$

$$k_1 = \kappa_{1,0}, \quad (2.58b)$$

$$k_2 = \kappa_{0,1}, \quad (2.58c)$$

$$k_3 = \kappa_{1,1}, \quad (2.58d)$$

$$k_4 = \kappa_{2,0} + \kappa_{0,2}, \quad (2.58e)$$

$$k_5 = \kappa_{2,0} - \kappa_{0,2}, \quad (2.58f)$$

$$k_6 = \kappa_{2,1}, \quad (2.58g)$$

$$k_7 = \kappa_{1,2}, \quad (2.58h)$$

$$k_8 = \kappa_{2,2}, \quad (2.58i)$$

⁵z ang. multi-relaxation time LBM, tj. LBM s více relaxačními časy

viz [15]. První tři složky vektoru \vec{k}

$$k_0 = \kappa_{0,0} = \rho, \quad (2.59a)$$

$$k_1 = \kappa_{1,0} = \sum_{i=0}^8 f_i(\xi_{i,1} - v_1) = 0, \quad (2.59b)$$

$$k_2 = \kappa_{0,1} = \sum_{i=0}^8 f_i(\xi_{i,2} - v_2) = 0 \quad (2.59c)$$

odpovídají po řadě hustotě ρ a složkám hybnosti $\rho\vec{v}$, a tedy jsou kolizními invarianty, viz [12, 15, 28]. To znamená, že na jejich hodnotách při kolizi nezáleží a můžeme je zvolit rovné nule

$$k_0 = k_1 = k_2 = 0. \quad (2.60)$$

Pro izotropní kinematickou viskozitu lze položit relaxační časy

$$\tau_4 = \tau_5 = \tau, \quad (2.61)$$

kde pro τ platí vztah (2.51) stejně jako v SRT-LBM, viz [29]. Za účelem zlepšení numerické stability CLBM jsou v této práci zbylé relaxační časy $\tau_3, \tau_6, \tau_7, \tau_8$ voleny následovně

$$\tau_3, \tau_6, \tau_7, \tau_8 = 1, \quad (2.62)$$

viz [16].

2.2.5 Algoritmus mřížkové Boltzmannovy metody

Algoritmus LBM lze obecně rozdělit do několika základních kroků, jak je naznačeno na obr. 2.3.

1. **Inicializace** počátečních podmínek (komentováno v sekci 2.2.6) ve všech uzlech zvolené mřížky.
2. **Šíření** postkolizních distribučních funkcí f_k^* , viz (2.56), z okolních bodů dle zvoleného rychlostního modelu, což lze interpretovat jako přesun fiktivních částic tekutiny mezi sousedními uzly mřížky po zvolených směrech (q počet směrů, viz obr. 2.1). Poznamenejme, že v tomto kroku jsou vynechány uzly na hranici mřížky Ω , protože se pro ně krok šíření může kvůli okrajovým podmínkám lišit, viz např. sekce 2.2.7.
3. **Aktualizace makroskopických veličin**, tj. momentů distribučních funkcí. Integrály v rovnicích (2.15a) a (2.15b) pro výpočet prvních dvou momentů přejdou pro diskrétní distribuční funkce do tvaru uvedeném v rovnicích (2.44)

(a) pro řešení Úlohy C:

$$\rho = \Pi^{(0)}, \quad (2.63a)$$

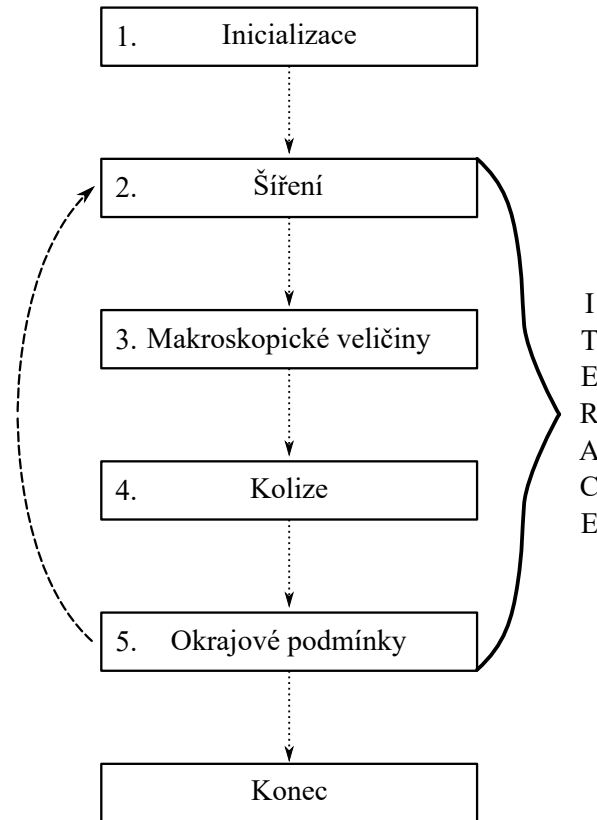
$$\rho\vec{v} = \vec{\Pi}^{(1)}. \quad (2.63b)$$

(b) pro řešení Úlohy M:

$$c = \Pi^{(0)}, \quad (2.64)$$

kde c je koncentrace KL a Darcyho rychlost \vec{u}_f je v advekčně-difuzní úloze definována apriori rovnicemi (1.13), tudíž není v algoritmu LBM počítána.

4. **Kolizní krok**, ve kterém dojde k výpočtu postkolizního stavu distribuční funkce, definované vztahem (2.56). Samotný výpočet postkolizní distribuční funkce závisí na konkrétním typu zvoleného kolizního operátoru, např. SRT-LBM, CLBM, a dalších.
5. **Řešení okrajových podmínek** [12, 18, 22], což bude podrobněji diskutováno v sekcích 2.2.7 až 2.2.9.



Obrázek 2.3: Základní kroky algoritmu LBM.

2.2.6 Počáteční podmínky

Nejjednodušší přístup k nastavení počátečních podmínek je přes rovnovážnou distribuční funkci. Mějme oblast $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, viz sekce 2.2.2. Potom počáteční rozložení makroskopické veličiny ρ , resp. \vec{v} definované funkcí $\rho_{\text{ini}}(\vec{x})$, resp. $\vec{v}_{\text{ini}}(\vec{x})$ definujeme přes distribuční funkce následovně

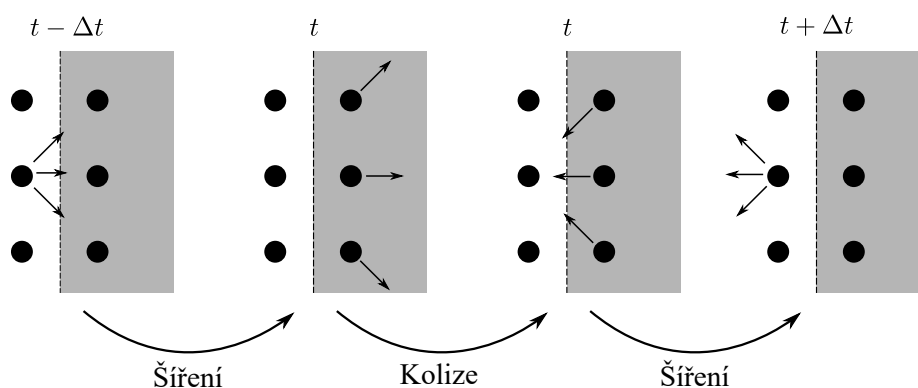
$$f_k(\vec{x}, 0) = f_k^{\text{eq}}(\rho_{\text{ini}}(\vec{x}), \vec{v}_{\text{ini}}(\vec{x})) \quad \text{pro } \forall k \in 0, 1, \dots, q-1 \quad (2.65)$$

pro $\forall \vec{x} \in \hat{\Omega}^{2D}$, viz [18, 22] (analogicky pro jednorozměrný případ). Tato počáteční podmínka je implementačně a výpočetně nenáročná, ovšem ne vždy je konzistentní s Boltzmannovou transportní rovnicí (2.14), viz [22]. Popis volby přesnější počáteční podmínky je k nahlédnutí v [11], kde je zároveň otestován vliv volby počáteční podmínky na řešení. V této práci bude využita pouze jednodušší forma volby počáteční podmínky přes rovnovážné distribuční funkce, viz (2.65).

2.2.7 Bounce-back okrajová podmínka

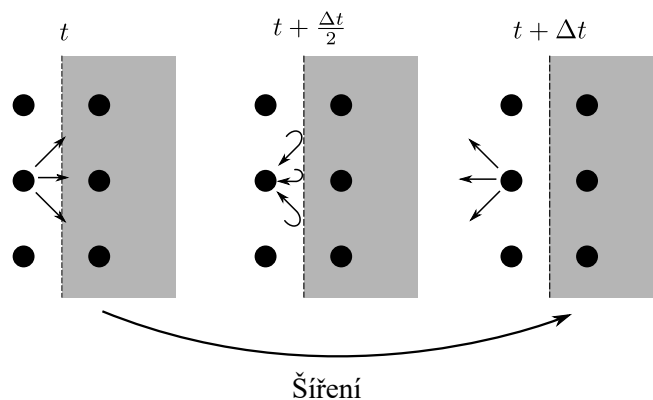
Bounce-back okrajová podmínka (česky odrazová okrajová podmínka) simuluje chování tekutiny na rozhraní s rigidní pevnou látkou, přičemž na hranici se uvažuje rychlost tekutiny nulová, tj. jedná se o tzv. neklouzavou okrajovou podmínku. Název okrajové podmínky je příhodný, jelikož tato podmínka spočívá v odrazu hypotetických částic zpět do směrů, ze kterých se do daného bodu hranice dostaly. Podmínka lze implementovat dvěma způsoby, a sice

- **Fullway bounce-back**, viz obr. 2.4, ve kterém odraz probíhá až v kolizním kroku (tj. na hranici se mění kolizní krok).



Obrázek 2.4: Schéma fullway typu odrazové okrajové podmínky.

- **Halfway bounce-back**, viz obr. 2.5, kde je odraz realizován již v kroku šíření (tj. na hranici se mění krok šíření).



Obrázek 2.5: Schéma halfway typu odrazové okrajové podmínky.

Zatímco v přístupu fullway bounce-back podmínky dochází k odrazu hypotetické částice až v uzlu mřížky příslušejícím pevné rigidní látce, v přístupu halfway bounce-back se částice odráží již v polovině vzdálenosti mezi hraničními uzly mřížky, viz obr. 2.4 a obr. 2.5. Podrobněji je bounce-back okrajová podmínka popsána například v [11, 18, 22].

2.2.8 Anti-bounce-back okrajová podmínka

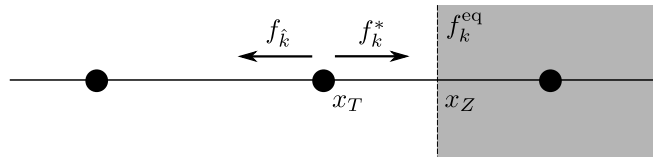
Pro použití LBM na řešení advekčně-difuzních rovnic (1.27) budeme v úlohách potřebovat simulovat Dirichletovu okrajovou podmínku pro funkci koncentrace $c(\vec{x}, t)$. Implementaci okrajové podmínky ilustrujeme v jednorozměrném případě. Mějme hraniční uzly x_T příslušející tekutině a x_Z příslušející pevné rigidní látce (nazvěme ji pro tuto ilustraci zdí). Stejně jako v halfway bounce-back okrajové podmínce pro hraniční body x_T a x_Z platí

$$x_Z = x_T + \frac{1}{2}\xi_k\Delta t, \quad (2.66)$$

kde ξ_k je příslušný rychlostní směr, ve kterém se z bodu x_T šíří hypotetické částice do bodu x_Z , viz obr. 2.6. Uvažujeme rigidní nehybnou zeď, na jejímž rozhraní je předepsána koncentrace c_Z , potom lze anti-bounce-back okrajová podmínka zapsat ve tvaru, viz [22],

$$f_{\bar{k}}(x_T, t + \Delta t) = -f_k^*(x_T, t) + 2\omega_k c_Z, \quad (2.67)$$

kde ω_k je příslušná hodnota váhové funkce ω a \bar{k} značí index opačného směru k diskrétní rychlosti $\vec{\xi}_k$.



Obrázek 2.6: Schématické znázornění anti-bounce-back okrajové podmínky v 1D.

2.2.9 Rovnovážná okrajová podmínka na vstupu/výstupu

Rovnovážná okrajová podmínka spočívá v nastavení hodnot diskrétní rovnovážné distribuční funkce v hraničních uzlech s předem definovanou hodnotou makroskopické veličiny ρ a rychlosti \vec{v} . Tato okrajová podmínka se využívá zejména pro nastavení tekutiny na vstupu, tj. na části hranice, odkud tekutina do zkoumané oblasti přichází, a na výstupu, tj. na části hranice, kudy tekutina zkoumanou oblast opouští. Máme-li na hranici oblasti $\partial\Omega$ předepsány hustotu $\rho_{\partial\Omega}$ a rychlost $\vec{v}_{\partial\Omega}$, pak lze rovnovážnou okrajovou podmínku pro hraniční bod $\vec{x} \in \partial\Omega$ definovat rovnicí

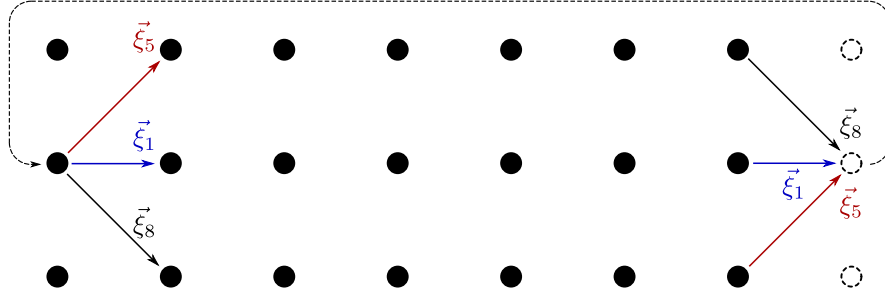
$$f_k(\vec{x}) = f_k^{\text{eq}}(\rho_{\partial\Omega}, \vec{v}_{\partial\Omega}) \quad \forall k \in \{0, 1, \dots, q-1\}. \quad (2.68)$$

Rovnovážná okrajová podmínka byla v této práci využita pro reprezentaci Dirichletovy i Neumannovy podmínky v Úloze M. Dirichletovu okrajovou podmínku pro koncentraci v Úloze M implementujeme vztahem (2.68), kam dosadíme předepsanou koncentraci na dirichletovské části hranice. Neumannovu okrajovou podmínku pro Úlohu M implementujeme analogicky, ovšem do vztahu (2.68) dosadíme koncentraci ze sousedního uzlu, který leží nejbližší ve směru vnitřní normály k neumannovské části hranice.

Stejně jako v případě počáteční podmínky v sekci 2.2.6 je nastavení pomocí rovnovážné distribuční funkce na hranici nekonzistentní s původní makroskopickou podmínkou. V praktické části této práce bude zkoumán vliv volby rovnovážné a anti-bounce-back okrajové podmínky na numerické řešení pro reprezentaci Dirichletovy okrajové podmínky.

2.2.10 Periodická okrajová podmínka

Periodická okrajová podmínka simuluje periodické proudění tekutiny v rámci uvažované oblasti, popřípadě proudění v uzavřené oblasti v geometrickém smyslu. Tato okrajová podmínka lze výstižně graficky ilustrovat, viz obr. 2.7, a je podrobněji rozebrána v [22].



Obrázek 2.7: Schématické znázornění periodické okrajové podmínky.

2.3 LBM schéma Úlohy M

Řešme Úlohu M formulovanou v sekci 1.6 pro jednorozměrný a dvourozměrný případ. Vzhledem k podobnosti LBM schémat pro tyto případy definujeme nejdříve numerické schéma obecně pro Úlohu M, a až poté se budeme věnovat jednotlivým případům, tj. Úloze M-1D a Úloze M-2D.

Mějme oblasti Ω_f a Ω_s , viz sekce 1.6. Diskretizujme je stejnou ekvidistantní izotropní mřížkou, viz (2.32a), $\hat{\Omega} = \{\vec{x}_k \mid k \in \{0, 1, \dots, n\}\}$ s rychlostním modelem DdQq se sadou diskretních rychlostí, viz sekce 2.2,

$$\{\vec{\xi}_i \mid i \in \{0, 1, \dots, q-1\}\}, \quad (2.69)$$

Neznámé funkce koncentrace c_f , resp. c_s přísluší sada diskretních distribučních funkcí, definovaných v (2.42),

$$\{f_i(\vec{x}_k, t) \mid i \in \{0, 1, \dots, q-1\}\}, \text{ resp.} \quad (2.70)$$

$$\{s_i(\vec{x}_k, t) \mid i \in \{0, 1, \dots, q-1\}\}, \quad (2.71)$$

kde $\vec{x}_k \in \hat{\Omega}$, $t \in (0, T)$. Čas t diskretizujeme ekvidistantní sítí

$$t_j = j \Delta t \quad \text{pro } j \in \{0, 1, \dots, N_t\}, \quad (2.72)$$

kde $N_t \in \mathbb{N}$. Uvažujeme kolizní operátor typu SRT uvedený v sekci 2.2.3 pro obě sady distribučních funkcí $\{f_i\}$ a $\{g_i\}$. Označme koncentraci c_f v uzlu mřížky x_k v čase t_j výrazem

$$c_{f,k}^j = c_f(\vec{x}_k, t_j). \quad (2.73)$$

LBM schéma pro řešení advektivně-difuzní rovnice (1.27a) je v případě kolizního operátoru SRT tvaru

$$f_i(\vec{x}_k + \vec{\xi}_i \Delta t, t_j + \Delta t) - f_i(\vec{x}_k, t_j) = \frac{\Delta t}{\tau_f} \left[f_i(\vec{x}_k, t_j) - f_i^{\text{eq}}(c_{f,k}^j, u_f) \right] + \left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau_f} \right) F_{f,i} \Delta t \quad (2.74)$$

pro $i \in \{0, 1, \dots, q-1\}$, $k \in \{1, 2, \dots, N_x-1\}$ a $j \in \{1, 2, \dots, N_t\}$, kde τ_f je relaxační čas pro kapalnou fázi, f_i^{eq} je diskrétní rovnovážná distribuční funkce, viz (2.46), s váhovou funkcí ω a mřížkovou rychlostí zvuku c_{zv} , které jsou konkrétně určeny zvoleným rychlostním modelem. Zdrojový člen KL v kapalně fázi $F_{f,i}$ je roven, viz [22],

$$F_{f,i} = \omega_i F_f \quad \text{pro } i \in \{0, 1, \dots, q-1\}, \quad (2.75)$$

tj. v Úloze M, viz sekce 1.6, platí

$$F_{f,i} = \omega_i \left[-\text{Da}(1 - \phi_f)(c_{f,k}^j - c_{s,k}^j) + \frac{f_f(\vec{x}_k, t_j)}{\phi_f} \right] \quad \text{pro } i \in \{0, 1, \dots, q-1\}. \quad (2.76)$$

Relaxační parametr τ_f je svázán s difuzním koeficientem D_f vztahem (2.51). LBM schéma pro řešení rovnice (1.27b) s kolizním operátorem SRT zapíšeme analogicky, tj.

$$s_i(\vec{x}_k + \xi_i \Delta t, t_j + \Delta t) - s_i(\vec{x}_k, t_j) = \frac{\Delta t}{\tau_s} \left[s_i(\vec{x}_k, t_j) - s_i^{\text{eq}}(c_{s,k}^j) \right] + \left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau_s} \right) F_{s,i} \Delta t \quad (2.77)$$

pro $i \in \{0, 1, \dots, q-1\}$, $k \in \{1, 2, \dots, N_x-1\}$ a $j \in \{1, 2, \dots, N_t\}$, kde τ_s je relaxační čas pro pevnou fázi, $s_i^{\text{eq}}(c_s) = f^{\text{eq}}(c_s, 0)$ je diskrétní rovnovážná distribuční funkce příslušející distribučním funkcím s_i . Pro zdrojový člen v pevné fázi $F_{s,i}$ platí analogické vztahy jako pro fázi kapalnou, tj.

$$F_{s,i} = \omega_i F_s \quad \text{pro } i \in \{0, 1, \dots, q-1\}, \quad (2.78)$$

tj. v Úloze M, viz 1.6, platí

$$F_{s,i} = \omega_i \left(\text{Da} \phi_f (c_{f,k}^j - c_{s,k}^j) \right) \quad \text{pro } i \in \{0, 1, \dots, q-1\}. \quad (2.79)$$

Také pro relaxační parametr τ_s a difuzní koeficient D_s platí vztah (2.51).

Z rovnic (2.74), resp. (2.77) získáme hodnoty koncentrací c_f , resp. c_s v daném uzlu mřížky napočítáním nultého momentu distribučních funkcí f_i , resp. g_i v příslušném uzlu, který je pro advekčně-difuzní rovnici se zdrojovým členem tvaru, viz [22],

$$c_f = \sum_{i=0}^{q-1} f_i + \frac{\Delta t}{2} \sum_{i=0}^{q-1} F_{f,i}, \quad \text{resp.} \quad (2.80a)$$

$$c_s = \sum_{i=0}^{q-1} s_i + \frac{\Delta t}{2} \sum_{i=0}^{q-1} F_{s,i}. \quad (2.80b)$$

Inicializace počátečních podmínek pro koncentrace c_f a c_s jsou implementovány pomocí rovnovážných distribučních funkcí f^{eq} a s^{eq} dle sekce 2.2.6. Okrajové podmínky budou specifikovány pro jednotlivé úlohy M-1D a M-2D.

2.3.1 LBM schéma Úlohy M-1D

Úlohu M-1D, viz sekce 1.6.2, řešíme rychlostním modelem D1Q3, tj. mřížka je tvaru (2.33b). Množina diskretních rychlostí je pro model D1Q3 dle obr. 2.1 množina jednorozměrných vektorů

$$\vec{\xi}_0 = (0), \quad \vec{\xi}_1 = (1), \quad \vec{\xi}_2 = (-1). \quad (2.81)$$

Distribuční funkce f_i a s_i jsou počítány pomocí rovnic (2.74) a (2.77) s rovnovážnými funkcemi f^{eq} a s^{eq} , v nichž vystupuje váhová funkce pro rychlostní model D1Q3, viz (2.48), a mřížková rychlost zvuku, viz (2.50).

V Úloze M-1D uvažujeme dva typy okrajových podmínek, a to Dirichletovu a Neumannovu, viz rovnice (1.33) v kapalně fázi, resp. (1.34) v pevně fázi. Dirichletova okrajová podmínka je implementována pomocí rovnovážné, resp. anti-bounce-back okrajové podmínky, viz sekce 2.2.9, resp. 2.2.8. Neumannova okrajová podmínka je implementována přes rovnovážnou okrajovou podmínku, tj. pro hraniční uzly jednorozměrné mřížky x_0 a x_{N_x} platí

$$f_i(x_0, t_j) = f_i^{\text{eq}}(c_{f,1}^j, u_f) \quad \forall j \in \{0, 1, \dots, N_t\}, \quad (2.82a)$$

$$f_i(x_{N_x}, t_j) = f_i^{\text{eq}}(c_{f,N_x-1}^j, u_f) \quad \forall j \in \{0, 1, \dots, N_t\} \quad (2.82b)$$

pro $\forall i \in \{0, 1, 2\}$. Pro distribuční funkce s_i vypadají Neumannovy okrajové podmínky analogicky

$$s_i(x_0, t_j) = s_i^{\text{eq}}(c_{s,1}^j) \quad \forall j \in \{0, 1, \dots, N_t\}, \quad (2.83a)$$

$$s_i(x_{N_x}, t_j) = s_i^{\text{eq}}(c_{s,N_x-1}^j) \quad \forall j \in \{0, 1, \dots, N_t\} \quad (2.83b)$$

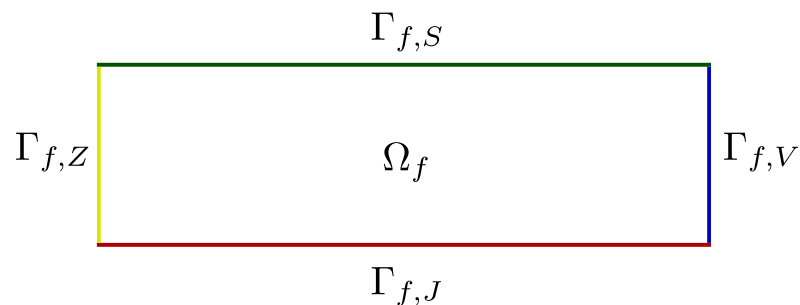
pro $\forall i \in \{0, 1, 2\}$.

2.3.2 LBM schéma Úlohy M-2D

Úlohu M-2D, viz sekce 1.6.3, řešíme rychlostním modelem D2Q9, tj. mřížka je tvaru (2.34b) Množina diskretních rychlostí je pro model D2Q9 dle obr. 2.1 množina dvourozměrných vektorů

$$\begin{aligned} \vec{\xi}_0 &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, & \vec{\xi}_1 &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, & \vec{\xi}_2 &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, & \vec{\xi}_3 &= \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}, & \vec{\xi}_4 &= \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \\ \vec{\xi}_5 &= \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, & \vec{\xi}_6 &= \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}, & \vec{\xi}_7 &= \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix}, & \vec{\xi}_8 &= \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.84)$$

Koncentrace c_f a c_s jsou počítány pomocí rovnic (2.74) a (2.77) s rovnovážnými funkcemi f^{eq} a s^{eq} , v nichž vystupuje váhová funkce pro rychlostní model D2Q9, viz (2.49), a mřížková rychlost zvuku, viz (2.50). V Úloze M-2D uvažujeme pro koncentraci c_f , resp. c_s opět dva typy okrajových podmínek Dirichletovy a Neumannovy okrajové podmínky, viz rovnice (1.37), resp. (1.39). Dirichletovy okrajové podmínky simulujeme pomocí anti-bounce-back podmínky, která je uvedena v sekci 2.2.8. Neumannovy okrajové podmínky implementujeme skrze rovnovážnou okrajovou podmínku, viz 2.2.9, analogicky jako v bezrozměrném případě, viz 2.3.1. Pro jednoduchost zápisu okrajových podmínek označme hranice uvažovaných výpočetních oblastí Ω_f a Ω_s dle obr. 2.8.



Obrázek 2.8: Schématické znázornění dvourozměrné výpočetní oblasti Ω_f s označením částí její hranice. Pro výpočetní oblast Ω_s označíme části hranice analogicky a místo dolního indexu f budeme psát dolní index s .

2.4 LBM schéma Úlohy C

Řešme Úlohu C formulovanou v sekci 1.7 na dvourozměrné oblasti Ω . Poznamenejme, že pomocí LBM získáme pouze určitou aproximaci numerického řešení soustavy rovnic pro proudění nestlačitelné kapaliny (1.7), jelikož v průběhu LBM simulace není hustota konstantní. Nicméně tyto fluktuace hustoty jsou úměrně třetí mocnině prostorového kroku, proto je lze zanedbat, viz [22]. V LBM schématu pro Úlohu C se musí navíc definovat okrajové a počáteční podmínky pro hustotu kapaliny ρ .

K řešení soustavy (1.7) s okrajovými a počátečními podmínkami definovanými v (1.42) použijeme CLBM typ LBM, viz sekce 2.2.4. Typ CLBM volíme pro jeho větší stabilitu (vzhledem k SRT-LBM) pro simulaci proudění odpovídajícím vyšším Reynoldsovým číslem, viz [15]. Oblast Ω diskretizujeme dvourozměrnou ekvidistantní izotropní mřížkou definovanou rovnicí (2.34a) a podobně jako pro Úlohu M-2D, viz sekce 2.3.2, uvažujeme rychlostní model D2Q9, viz obr. 2.1. Sadu diskretních distribučních funkcí příslušející neznámé funkci \vec{v} označme

$$\{g_k(\vec{x}_{i,j}, t) \mid k \in \{0, 1, \dots, 8\}\}. \quad (2.85)$$

Výpočet postkolizní distribuční funkce g_k^* je uveden v sekci 2.2.4. Relaxační čas pro CLBM označme τ_g . V Úloze C uvažujeme Dirichletovu a nulovou Neumannovu okrajovou podmínku, viz (1.42). Nulová Dirichletova podmínka pro rychlost \vec{v} na hranici odpovídá tzv. neklouzavé okrajové podmínce, viz [22], a k její simulaci uijeme bounce-back okrajovou podmínku definovanou v sekci 2.2.7. Pro simulaci nenulové Dirichletovy a nulové Neumannovy okrajové podmínky využijeme podobně jako v LBM schématu Úlohy M, viz sekce 2.3, rovnovážnou okrajovou podmínku zavedenou v sekci 2.2.9.

V druhé části Úlohy C řešíme advekčně-difuzní rovnici (1.14) pro neznámou funkci koncentrace c s počátečními a okrajovými podmínkami zapsanými v (1.45) na diskretizované oblasti Ω . Jedná se o zjednodušenou verzi soustavy advekčně-difuzních rovnic (1.21), proto využijeme LBM schématu Úlohy M-2D, viz sekce 2.3.2, tj. uvažujeme rychlostní model D2Q9 a typ SRT-LBM. Sadu diskretních distribučních funkcí pro neznámou funkci koncentrace c označme

$$\{f_k(\vec{x}_{i,j}, t) \mid k \in \{0, 1, \dots, 8\}\}. \quad (2.86)$$

Postkolizní distribuční funkci f_k^* vypočteme dle vztahu (2.74), kde zdrojový člen $F_f = 0$, protože přestup KL v Úloze C neuvažujeme a funkci zdroje KL f_f pokládáme rovnu nule. Relaxační čas pro SRT-LBM označme τ_f . Pro koncentraci c uvažujeme Dirichletovy a Neumannovy okrajové podmínky, které v LBM simulujeme okrajovými podmínkami, viz sekce 2.3.2.

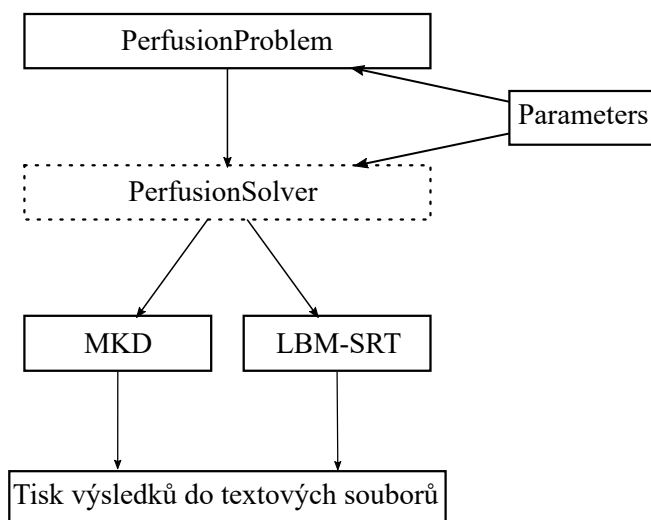
Připomeňme, že relaxační čas τ_g , resp. τ_f je svázán s viskozitou, resp. difuzním koeficientem, viz vztah (2.51). Pro jednoduchost budeme v sekci 3.4 volit tyto relaxační časy tak, aby byl časový krok stejný jak pro výpočet rychlosti pomocí CLBM, tak pro výpočet koncentrace pomocí SRT-LBM. To znamená, že provedeme jednu iteraci CLBM, čímž získáme rozložení \vec{v} v Ω , následně pro toto \vec{v} provedeme jednu iteraci SRT-LBM, z čehož dostáváme rozložení koncentrace c v Ω . LBM schéma pro Úlohu C označme LBM-C.

2.5 Poznámky k implementaci

2.5.1 Implementace MKD a SRT-LBM pro řešení Úlohy M-1D

Metody MKD a SRT-LBM byly pro řešení Úlohy M-1D, viz sekce 1.6.2, implementovány objektivě v jazyce C++ bez využití speciálních knihoven pro numerické výpočty (práce s maticemi, vektory, atd...). Schéma kódu je k nahlédnutí na obr. 2.9. Vzhledem k povaze kódu, ve kterém jednotlivé objekty

neobsahují data, která by nemohla být sdílena s ostatními objekty, byl použit objektový typ struktura, ve které je oprávnění k přístupu implicitně definováno jako public (tedy veřejné). Základními strukturami jsou `PerfusionProblem` (struktura obsahující všechna data o nastavení fyzikální úlohy perfuze myokardu) a `PerfusionSolver` (obecná struktura, která reprezentuje numerickou metodu řešící úlohu typu `PerfusionProblem`). Samotné numerické metody obsažené v plně oddělených strukturách MKD a SRT-LBM dědí obecné virtuální metody struktury `PerfusionProblem`.



Obrázek 2.9: Schéma struktury C++ kódu řešícího Úlohu M-1D. Šipky mají ve schématu představovat směr toku informací mezi strukturami.

Nyní uvedeme pár stručných poznámek k implementacím samotných numerických metod.

- MKD:
 - Tridiagonální matice soustavy algebraických rovnic (2.7), resp. (2.8) je v paměti uložena ve třech polích reprezentujících diagonály matice a je řešena pomocí Thomasova algoritmu.
- LBM-SRT:
 - Každá sada distribučních funkcí D1Q3 rychlostního modelu je reprezentována jedním polem, ve kterém jsou uloženy distribuční funkce po šíření, distribuční funkce postkolizní a hodnoty koncentrace.
 - Distribuční funkce jsou v poli uloženy po šesti, kde každá šestice odpovídá jednomu uzlu mřížky (3 distribuční funkce po šíření a 3 postkolizní).
 - Hodnoty koncentrace, která je součtem distribučních funkcí v daném uzlu, jsou uloženy jako sedmá hodnota za šesticí distribučních funkcí.

2.5.2 Metodika srovnání metod MKD a SRT-LBM pro jednorozměrné úlohy

Přechod k mřížkovým pro soustavu advekčně-difuzních rovnic, resp. ryze difuzní rovnice je definovaný v sekci 2.2.1. Základními vstupními parametry Úlohy M-1D v bezrozměrných jednotkách jsou u_f , Pe , Da a D_r . Vzhledem k tomu, že stabilita SRT-LBM je přímo závislá na difuzním koeficientu v mřížkových jednotkách D^+ skrze vztah (2.51), chtěli bychom tento parametr volit. LBM difuze D^+ však zároveň

v SRT-LBM ovlivňuje společně s relaxačním časem také časový krok Δt a prostorový krok Δx , viz převodní vztah (2.26). Zbývá nám pouze jeden stupeň volnosti pro volbu nastavení parametrů, a sice buď prostorový, nebo časový krok. Prostorový krok si necháváme pro volbu jemnosti mřížky, a tedy časový krok je na základě zvolených parametrů D , D^+ a Δx definovaný vztahem

$$\Delta t = \frac{D^+}{D} \Delta x^2, \quad (2.87)$$

viz (2.26). Jelikož implicitní schéma MKD je nepodmíněně stabilní numerické schéma, viz [31], pracuje MKD pro jednoduchost přímo ve fyzikálních jednotkách.

Typ mřížkové Boltzmannovy metody SRT-LBM, viz sekce 2.2.3, který v této práci využijeme k řešení Úlohy M, je numericky nestabilní pro vyšší rychlosti, viz [22]. Přesná hodnota této kritické maximální rychlosti se v mřížkových jednotkách liší v závislosti na volbě relaxačního času, viz [22]. V této práci bylo pro Úlohu M otestováno, že pro relaxační čas $\tau \geq 0,515$ a maximální rychlost $|\vec{u}_f^+| \leq 0,4$ v mřížkových jednotkách je SRT-LBM stabilní. Velikost rychlosti v mřížkových jednotkách je možno dle vztahu (2.22) snížit, snížením velikosti časového kroku, který je definován volbou relaxačního času a prostorového kroku, viz (2.87).

2.5.3 Implementace LBM pro dvourozměrné Úlohy M a C

Jak již bylo zmíněno v úvodu této práce, pro numerická řešení dvourozměrných Úloh M a C byl využit kód vyvíjený na katedře matematiky FJFI v Praze. V tomto kódu byla implementovaná LBM typu CLBM a SRT-LBM pro řešení Navierových-Stokesových rovnic pro newtonovskou nestlačitelnou kapalinu s konstantní viskozitou. Program obsahuje paralelní implementaci LBM v jazyce C++ s využitím platformy CUDA pro výpočet na grafických kartách, což značně urychluje výpočetní čas. V programu bylo provedeno několik úprav umožňujících jeho aplikaci na Úlohy M a C. Stěžejními úpravami jsou:

- modifikace kolizního operátoru SRT-LBM pro řešení advekčně-difuzní rovnice s přestupem KL mezi fázemi,
- přidání druhé sady distribučních funkcí (kapalná/pevná fáze v Úloze M, rychlost/koncentrace v Úloze C),
- propojení CLBM a SRT-LBM za účelem řešení Úlohy C.

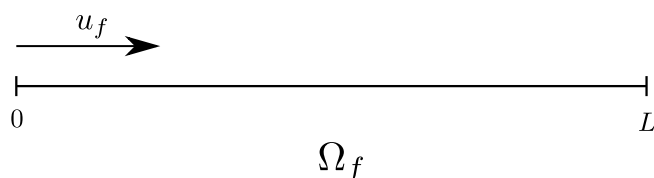
Kapitola 3

Numerické simulace

V této kapitole jsou uvedeny výsledky numerických simulací zjednodušené Úlohy M bez advekce, Úlohy M a Úlohy C za použití matematických modelů a numerických metod uvedených v předchozích kapitolách. V první části výsledků se věnujeme srovnání numerických metod MKD a SRT-LBM na vybraných advekčně-difuzních úlohách, které odpovídají zjednodušené verzi Úlohy M-1D. V další sekci jsou uvedeny výsledky simulace perfuze myokardu v jedné dimenzi, tj. výsledky Úlohy M-1D. Následují simulace Úlohy M-2D při co nejpodobnějším nastavení jako v Úloze M-1D, za účelem porovnání jednorozměrného a dvourozměrného matematického modelu perfuze myokardu. Zároveň výsledky Úlohy M-2D porovnáme s výsledky v člancích [9] a [27]. V poslední sekci jsou uvedeny výsledky Úlohy C pro dvě výpočetní oblasti reprezentující nezúženou a zúženou cévu.

3.1 Srovnání MKD a LBM na vybraných advekčně-difuzních úlohách

Srovnáme numerické metody MKD a SRT-LBM uvedené v sekcích 2.1 a 2.2 na dvou advekčně-difuzních úlohách. V prvním případě, viz úloha 3.1.1, řešíme zjednodušenou Úlohu M bez advekce definovanou v sekci 1.5. V druhém případě, viz úloha 3.1.2, řešíme Úlohu M-1D, viz 1.6.2, ve které uvažujeme pouze kapalnou část ($\phi_f = 1$), tj. řešíme pouze jednu transportní rovnici (1.32a) s okrajovými a počátečními podmínkami definovanými v (1.33). Ryze advekční úlohu není možné pomocí SRT-LBM řešit, jelikož je difuzní koeficient D_f^+ svázán s relaxačním časem vztahem (2.51). Pro volbu $D_f^+ = 0$ by relaxační čas nabyl hodnoty $\tau = \frac{1}{2}$, což je v přímém rozporu s podmínkou numerické stability (2.52). Schéma výpočetní oblasti pro obě úlohy v sekci 3.1 je znázorněno na obr. 3.1.



Obrázek 3.1: Schéma výpočetní oblasti pro sérii úloh v sekci 3.1.

V následujících dvou úlohách budeme mimo jiné odhadovat řády konvergence MKD a SRT-LBM. K odhadu teoretické hodnoty řádu konvergence slouží tzv. experimentální řád konvergence (EOC¹),

¹anglicky experimental order of convergence

viz [10]. Označme $u_{\Delta x}^{\text{num}}$ numerické řešení na síti/mřížce o prostorovém kroku velikosti Δx a dále označme u^{an} řešení analytické. Definujme diskrétní L_p normu chyby numerického řešení na mřížce $\hat{\Omega}^{\text{1D}}$, viz (2.33a), v časové hladině t_i následovně

$$E_{\Delta x}^{(p)}(t_i) := \|u_{\Delta x}^{\text{num}} - u^{\text{an}}\|_{L_p(\hat{\Omega}^{\text{1D}})}(t_i) := \left(\Delta x \sum_{k=1}^{N_x-1} |u_{\Delta x}^{\text{num}}(x_k, t_i) - u^{\text{an}}(x_k, t_i)|^p \right)^{\frac{1}{p}}, \quad (3.1)$$

kde $p \in \{1, 2\}$. Dále definujme L_q normu chyb $E_{\Delta x}^{(p)}(t_i)$ na časovém intervalu $(0, T)$, který je diskretizován, viz (2.36), s časovým krokem Δt následovně

$$E_{\Delta x, \Delta t}^{(p,q)} := \|E_{\Delta x}^{(p)}(t_i)\|_{L_q((0,T))} := \left(\Delta t \sum_{i=0}^{N_t} (E_{\Delta x}^{(p)}(t_i))^q \right)^{\frac{1}{q}}, \quad (3.2)$$

kde $q \in \{1, 2\}$. Zvlášť definujme maximovou normu L_∞ chyby $E_{\Delta x}^{(p)}(t_i)$ na časovém intervalu $(0, T)$

$$E_{\Delta x, \Delta t}^{(p,\infty)} = \max_{i \in \{0, 1, \dots, N_t\}} E_{\Delta x}^{(p)}(t_i). \quad (3.3)$$

Předpokládejme chybu řešení ve tvaru

$$E_{\Delta x, \Delta t}^{(p,q)} = A (\Delta x)^{\beta_x} + B (\Delta t)^{\beta_t}, \quad (3.4)$$

kde $\beta_x \in \mathbb{R}$, resp. $\beta_t \in \mathbb{R}$ je řád konvergence vůči prostoru, resp. času a $A, B = \text{konst.}$ jsou neznámé konstanty. Použijeme-li difuzní škálování, tj. $\frac{\Delta t}{\Delta x^2} = \text{konst.}$, viz [22], které je v souladu se vztahem mezi prostorovým a časovým krokem v případě SRT-LBM, viz (2.87), předpokládáme chybu řešení ve tvaru

$$E_{\Delta x, \Delta t}^{(p,q)} = C (\Delta x)^\beta, \quad (3.5)$$

kde β je řád konvergence při difuzním škálování a $C = \text{konst.}$ je neznámá konstanta. Pro jednoduchost zápisu, budeme tedy spodní index Δt vynechávat a místo prostorového kroku Δx budeme psát index j , který značí prostorový krok při j -tém zjemnění sítě, které je následujících úlohách určeno číslem $N_x^{(j)}$, kde

$$\Delta x_j = \frac{1}{N_x^{(j)}}. \quad (3.6)$$

Máme-li k dispozici numerické řešení na mřížkách s dvěma různými prostorovými kroky Δx_j a Δx_{j+1} lze teoretickou hodnotu řádu konvergence odhadnout pomocí EOC ve tvaru

$$\beta \approx \text{EOC}_{j+1}^{(p,q)} = \frac{\ln E_{j+1}^{(p,q)} - \ln E_j^{(p,q)}}{\ln \Delta x_{j+1} - \ln \Delta x_j}, \quad (3.7)$$

kde index j představuje j -té zjemnění sítě, viz (3.6).

3.1.1 Ryze difuzní úloha

Úloha 3.1.1

Nastavení úlohy:

- $\Omega_f = (0, 1)$ m
- $u_f = 0$ m s⁻¹
- $D_f = 4 \cdot 10^{-3}$ m²s⁻¹
- $C_0 = 1$ kg m⁻³
- $l_0 = L = 1$ m
- $t_0 = T = 50$ s
- $f_f(x, t) = 0 \quad \forall x \in \Omega, \forall t \in (0, T)$
- $D^+ = 1 \cdot 10^{-1}$

Počáteční a okrajové podmínky:

- Nulové Dirichletovy okrajové podmínky v obou hraničních uzlech x_0 a x_{N_x} , viz (1.25), tj. $c_{f,0} = 0$ a $c_{f,L} = 0$.
 - MKD: Dirichletova okrajová podmínka ve tvaru (2.10).
 - LBM: Dirichletova okrajová podmínka pomocí:
 1. rovnovážné okrajové podmínky, viz 2.2.9, (označme LBM-EQ).
 2. anti-bounce-back okrajové podmínky, viz 2.2.8, (označme LBM-ABB).

- Počáteční podmínka:

$$c_f^{\text{ini}}(x) = \sin(\pi x) \quad \forall x \in \langle 0, 1 \rangle \quad (3.8)$$

- Analytické řešení:

$$c_f^{(\text{An})}(x, t) = e^{(-\pi^2 D_f t)} \sin(\pi x) \quad \forall x \in \langle 0, 1 \rangle, \forall t \in \langle 0, T \rangle \quad (3.9)$$

Diskretizace:

- $N_x^{(j)} = 2^j \cdot 25 \quad \forall j \in \{0, 1, \dots, 6\}$

Numerická metoda	Typ chyby numerického řešení $E_j^{(p,q)}$	Číslo tabulky s EOC
MKD	$E_j^{(1,\infty)}$ a $E_j^{(2,\infty)}$	3.2
LBM-EQ	$E_j^{(1,\infty)}$ a $E_j^{(2,\infty)}$	3.3
LBM-ABB	$E_j^{(1,\infty)}$ a $E_j^{(2,\infty)}$	3.4
LBM-ABB	$E_j^{(1,1)}$ a $E_j^{(2,2)}$	3.5

Tabulka 3.1: Přehled tabulek s vypočtenými chybami numerického řešení a experimentálním řádem konvergence pro nastavení úlohy 3.1.1.

Úloha 3.1.1 si klade za cíl prozkoumat vliv anti-bounce-back, resp. rovnovážné okrajové podmínky na numerické řešení a srovnat obdržené výsledky s MKD. Na obr. 3.2 jsou uvedena řešení úlohy 3.1.1 ve finálním čase $t = 50$ s pomocí MKD, LBM-EQ a LBM-ABB, kde LBM-EQ značí LBM s použitím

rovnovážné okrajové podmínky a LBM-ABB označuje LBM s použitím anti-bounce-back okrajové podmínky. V tabulce 3.1 je uveden přehled tabulek s chybami numerického řešení v různých normách, viz (3.2) a (3.3), pro metody MKD, LBM-EQ a LBM-ABB, z nichž jsou vypočteny příslušné EOC.

Z tabulky 3.2 lze vyvodit, že MKD je pro ryze difuzní úlohu metodou druhého řádu, což souhlasí s teoretickým řádem konvergence centrální difference, která byla v této práci v MKD implementována, viz [31].

Všimněme si rozdílu hodnot EOC v tabulkách 3.3 a 3.4 pro LBM. Zatímco při rovnovážné okrajové podmínce se EOC drží v těsné blízkosti hodnoty 1, viz 3.3, tak při použití anti-bounce-back okrajové podmínky je hodnota EOC při chybě typu $E_j^{(1,\infty)}$ rovna přibližně 2, viz 3.4. Hodnoty chyb jsou navíc pro anti-bounce-back schéma řádově nižší, než v případě rovnovážné okrajové podmínky.

Poukažme nyní na rozpor mezi hodnotami EOC pro chyby tvaru $E_j^{(1,\infty)}$ a $E_j^{(2,\infty)}$ v tabulce 3.4. Oproti $EOC_{j+1}^{(1,\infty)}$, který se drží kolem hodnoty 2 pro všechny jemnosti mřížky, se hodnota $EOC_{j+1}^{(2,\infty)}$ pro zjemněné mřížky snižuje. Ukázalo se, že příčina tohoto poklesu tkví v nastavení počáteční podmínky pomocí rovnovážné distribuční funkce, viz 2.2.6, která je v tomto případě nekonzistentní s makroskopickou počáteční podmínkou. Pro výpočet $EOC_j^{(2,\infty)}$ byla použita maximová norma přes časové hladiny $E_j^{(2,\infty)}$. Při bližším zkoumání bylo zjištěno, že chyba numerického řešení byla pro všechny jemnosti mřížek maximální hned v druhé časové hladině, tj. v druhé iteraci. Na základě této skutečnosti byly pro porovnání vypočteny hodnoty EOC pro metodu LBM-ABB za použití chyby typu $E_j^{(1,1)}$, resp. $E_j^{(2,2)}$, tj. diskrétní L_1 norma v prostoru i čase, resp. diskrétní L_2 norma v prostoru i čase, které jsou uvedeny v tabulce 3.5. V těchto normách, které na rozdíl od maximové normy již započítají chyby ve všech časových hladinách, se nepřesnost způsobená nastavením počáteční podmínky již víceméně neprojevuje a oba $EOC_{j+1}^{(1,1)}$ a $EOC_{j+1}^{(2,2)}$ neklesnou pod hodnotu 2, tj. LBM-ABB je pro úlohu 3.1.1 při difuzním škálování metodou s přesností druhého řádu.

V úloze 3.1.1 bylo ukázáno, že použití rovnovážné okrajové podmínky pro simulaci Dirichletovy okrajové podmínky vede na metodu prvního řádu, zatímco použitím anti-bounce-back okrajové podmínky dostáváme metodu druhého řádu. Dále bylo v úloze 3.1.1 zjištěno, že časová hladina, ve které byla chyba numerického řešení pomocí LBM největší, se nacházela pro všechny jemnosti mřížky hned v druhé iteraci. Počáteční podmínka, která se nastavuje stejně jako rovnovážná okrajová podmínka pomocí rovnovážné distribuční funkce, vnesla do řešení chybu, která se projevila poklesem hodnoty $EOC_{j+1}^{(2,\infty)}$.

j	$N_x^{(j)}$	$E_j^{(1,\infty)}$	$EOC_{j+1}^{(1,\infty)}$	$E_j^{(2,\infty)}$	$EOC_{j+1}^{(2,\infty)}$
0	25	$4,921 \cdot 10^{-4}$		$5,473 \cdot 10^{-4}$	
1	50	$1,232 \cdot 10^{-4}$	1,998	$1,369 \cdot 10^{-4}$	2,000
2	100	$3,082 \cdot 10^{-5}$	2,000	$3,423 \cdot 10^{-5}$	2,000
3	200	$7,705 \cdot 10^{-6}$	2,000	$8,558 \cdot 10^{-6}$	2,000
4	400	$1,926 \cdot 10^{-6}$	2,000	$2,139 \cdot 10^{-6}$	2,000
5	800	$4,816 \cdot 10^{-7}$	2,000	$5,349 \cdot 10^{-7}$	2,000
6	1600	$1,204 \cdot 10^{-7}$		$1,337 \cdot 10^{-7}$	

Tabulka 3.2: Tabulka chyb typu $E_j^{(1,\infty)}$ a $E_j^{(2,\infty)}$ mezi analytickým řešením a MKD řešením pro různé jemnosti prostorové diskretizace, viz 3.1.1, s příslušnými hodnotami experimentálních řádů konvergence.

j	$N_x^{(j)}$	$E_j^{(1,\infty)}$	$EOC_{j+1}^{(1,\infty)}$	$E_j^{(2,\infty)}$	$EOC_{j+1}^{(2,\infty)}$
0	25	$9,756 \cdot 10^{-2}$	1,010	$1,006 \cdot 10^{-1}$	1,018
1	50	$4,845 \cdot 10^{-2}$	1,005	$4,965 \cdot 10^{-2}$	1,008
2	100	$2,414 \cdot 10^{-2}$	1,003	$2,469 \cdot 10^{-2}$	1,003
3	200	$1,205 \cdot 10^{-2}$	1,001	$1,232 \cdot 10^{-2}$	1,002
4	400	$6,018 \cdot 10^{-3}$	1,001	$6,152 \cdot 10^{-3}$	1,001
5	800	$3,008 \cdot 10^{-3}$	1,000	$3,074 \cdot 10^{-3}$	1,000
6	1600	$1,503 \cdot 10^{-3}$		$1,537 \cdot 10^{-3}$	

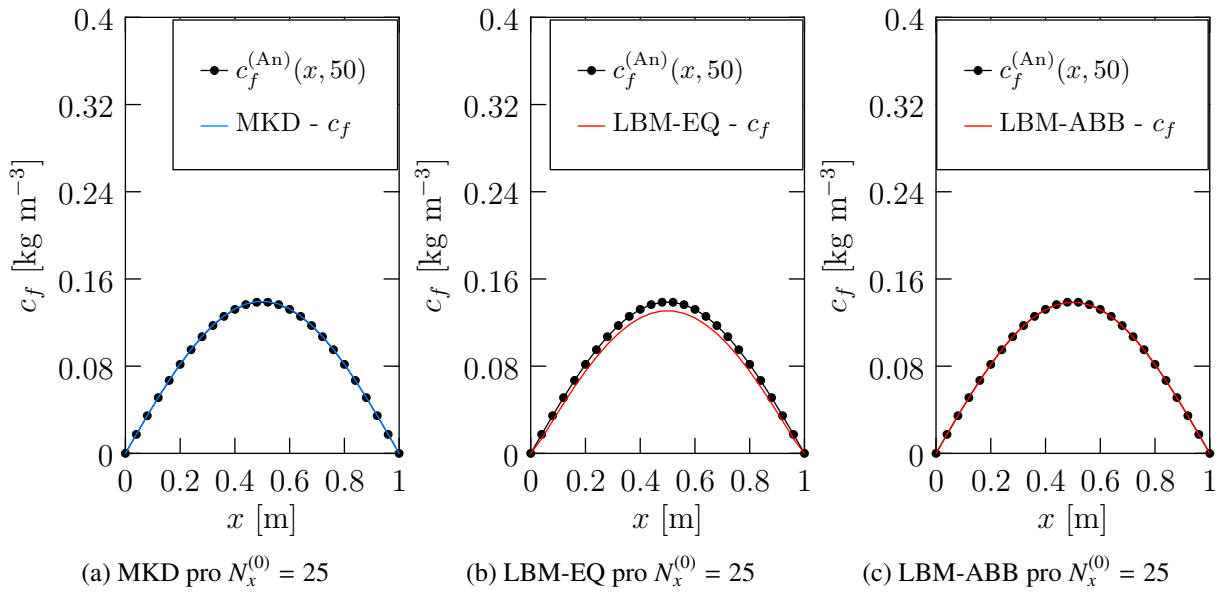
Tabulka 3.3: Tabulka chyb typu $E_j^{(1,\infty)}$ a $E_j^{(2,\infty)}$ mezi analytickým řešením a LBM-EQ řešením pro různé jemnosti prostorové diskretizace, viz 3.1.1, s příslušnými hodnotami experimentálních řádů konvergence.

j	$N_x^{(j)}$	$E_j^{(1,\infty)}$	$EOC_{j+1}^{(1,\infty)}$	$E_j^{(2,\infty)}$	$EOC_{j+1}^{(2,\infty)}$
0	25	$6,680 \cdot 10^{-4}$	1,996	$7,428 \cdot 10^{-4}$	1,945
1	50	$1,674 \cdot 10^{-4}$	1,999	$1,930 \cdot 10^{-4}$	1,731
2	100	$4,188 \cdot 10^{-5}$	2,000	$5,813 \cdot 10^{-5}$	1,647
3	200	$1,047 \cdot 10^{-5}$	2,000	$1,856 \cdot 10^{-5}$	1,586
4	400	$2,618 \cdot 10^{-6}$	2,000	$6,184 \cdot 10^{-6}$	1,547
5	800	$6,545 \cdot 10^{-7}$	2,000	$2,117 \cdot 10^{-6}$	1,524
6	1600	$1,636 \cdot 10^{-7}$		$7,359 \cdot 10^{-7}$	

Tabulka 3.4: Tabulka chyb typu $E_j^{(1,\infty)}$ a $E_j^{(2,\infty)}$ mezi analytickým řešením a LBM-ABB řešením pro různé jemnosti prostorové diskretizace, viz 3.1.1, s příslušnými hodnotami experimentálních řádů konvergence.

j	$N_x^{(j)}$	$E_j^{(1,1)}$	$EOC_{j+1}^{(1,1)}$	$E_j^{(2,2)}$	$EOC_{j+1}^{(2,2)}$
0	25	$2,074 \cdot 10^{-2}$	2,036	$3,325 \cdot 10^{-3}$	2,030
1	50	$5,055 \cdot 10^{-3}$	2,020	$8,140 \cdot 10^{-4}$	2,015
2	100	$1,247 \cdot 10^{-3}$	2,010	$2,014 \cdot 10^{-4}$	2,008
3	200	$3,095 \cdot 10^{-4}$	2,005	$5,008 \cdot 10^{-5}$	2,004
4	400	$7,710 \cdot 10^{-5}$	2,003	$1,249 \cdot 10^{-5}$	2,002
5	800	$1,924 \cdot 10^{-5}$	2,001	$3,117 \cdot 10^{-6}$	2,001
6	1600	$4,807 \cdot 10^{-6}$		$7,790 \cdot 10^{-7}$	

Tabulka 3.5: Tabulka chyb typu $E_j^{(1,1)}$ a $E_j^{(2,2)}$ mezi analytickým řešením a LBM-ABB řešením pro různé jemnosti prostorové diskretizace, viz 3.1.1, s příslušnými hodnotami experimentálních řádů konvergence.



Obrázek 3.2: Ukázka numerického řešení úlohy 3.1.1 pro nejhrubší síť/mřížku $N_x^{(0)} = 25$ v čase $t = 50$ s. Černými čarami je pro srovnání vyznačeno analytické řešení $c_f^{(An)}(x, 50)$ definované v rovnici (3.9).

3.1.2 Advečně-difuzní rovnice s dominantní advekcí

Úloha 3.1.2

Nastavení úlohy:

- $\Omega_f = (0, 10)$
- $Pe = 1000$
- $f_f(x, t) = 0 \quad \forall x \in \Omega, \forall t \in (0, T)$
- nastavení u_f, D^+ a T , viz tabulka 3.6

Počáteční a okrajové podmínky:

- Dirichletova okrajová podmínka $c_{f,0} = 0$ v uzlu x_0 , viz (1.33b), a Neumannova okrajová podmínka v uzlu x_{N_x} , viz (1.33e).
 - MKD: Dirichletova, resp. Neumannova okrajová podmínka ve tvaru (2.10), resp. (2.11).
 - LBM: Dirichletova okrajová podmínka, viz 2.2.8, a Neumannova okrajová podmínka, viz (2.82) a (2.3.1).
- Počáteční podmínka:

$$c_f^{\text{ini}}(x) = 4 \left(x - \frac{1}{2} \right) \left(\frac{3}{2} - x \right) \quad x \in \left\langle \frac{1}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle \quad (3.10)$$

Diskretizace:

- $N_x^{(j)} = 2^j \cdot 250 \quad \forall j \in \{0, 1, \dots, 6\}$

Nastavení	Číslo obrázku	Číslo tabulky s EOC	u_f	D^+	T
A	3.4	3.7	$\frac{1}{8}$	$\frac{2}{25}$	64
B	3.5	3.8	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{25}$	32
C	3.6	3.9	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{50}$	16
D	3.7	3.10	1	$\frac{1}{100}$	8
E	3.8	3.11	2	$\frac{1}{200}$	4

Tabulka 3.6: Přehled obrázků znázorňujících řešení úlohy 3.1.2 s nastavením trojice parametrů u_f, D^+ a T . Čísla tabulek s vypočteným experimentálním řádem konvergence pro příslušná nastavení jsou uvedeny v druhém sloupci.

Přehled obrázků znázorňujících řešení úlohy 3.1.2 pro danou volbu trojice parametrů u_f, D^+ a T je uveden v tabulce 3.6. Každá volba těchto parametrů byla simulována na všech 7 sítích/mřížkách definovaných ve formulaci úlohy 3.1.2 parametrem $N_x^{(j)}$, viz (3.6). Každá série grafů obsahuje graf s počáteční podmínkou a poté zbylých 7 grafů po 7 jemnostích sítě/mřížky.

Cílem úlohy 3.1.2 je poukázat na míru numerické difuze, kterou je oproti SRT-LBM zatížena MKD, definovaná v 2.1. V grafech na obr. 3.4 až 3.8 je možno porovnat profily koncentrací c_f vypočtené pomocí MKD a SRT-LBM ve výsledném čase T . Zároveň jsou profily pro srovnání proloženy hodnotami koncentrace při počáteční podmínce v čase $t = 0$ (v grafech znázorněno černou čárkovanou čarou), pokud

by se příslušnou rychlostí (dle nastavení A-E) posunula bez působení difuze. Nastavení A-E, viz 3.6, jsou seřazena vzestupně podle velikosti rychlosti, tj. míry advekce. Všimněme si, že čím je advekce větší (dominantnější), tím se zvětšuje efekt numerické difuze a výsledné rozložení koncentrace se pro metody MKD a SRT-LBM výrazněji liší, viz obr. 3.4 až 3.8.

Pro jednotlivá nastavení A-E byly vypočteny experimentální řady konvergence MKD pro chyby $E_j^{(1,\infty)}$ a $E_j^{(2,\infty)}$ pro 7 zjemnění sítě $j \in \{0, 1, \dots, 6\}$, které jsou uvedené pro nastavení A-E po řadě v tabulkách 3.7 až 3.11, viz přehled nastavení v tabulce 3.6. Vzhledem k tomu, že analytické řešení této úlohy není k dispozici, bylo aproximováno řešením obdrženým pomocí metody SRT-LBM na jemné mřížce s diskretizací $N_x^{(7)} = 32000$, na kterou byla řešení na hrubších sítích projektována pomocí lineární extrapolace, viz [31]. Advekcí část je v MKD nahrazena diferencí s upwindovou stabilizací prvního řádu, tj. EOC by se mělo blížit hodnotě 1. Z tabulek 3.7 až 3.11 je patrné, že numerická difuze zvětšující se pro vyšší rychlosti, zvětšuje chybu MKD vůči referenčnímu řešení LBM a zároveň snižuje EOC pro obě uvažované chyby na všech sedmi sítích/mřížkách, viz obr. 3.3a a obr. 3.3b. Je důležité dále zdůraznit, že řešení pomocí SRT-LBM se oproti MKD zjemněním mřížky nijak markantně nemění, tj. metodou LBM získáváme relativně přesné řešení už při nejhrubší uvažované mřížce ($N_x^{(0)} = 250$). SRT-LBM se tedy ukazuje jako výrazně efektivnější metoda pro řešení advekcí-difuzní rovnice s dominantní advekcí než MKD (ve tvaru, viz 2.1), a přitom se jedná o implementačně srovnatelně náročné numerické metody.

j	$N_x^{(j)}$	$E_j^{(1,\infty)}$	$EOC_{j+1}^{(1,\infty)}$	$E_j^{(2,\infty)}$	$EOC_{j+1}^{(2,\infty)}$
0	250	$3,800 \cdot 10^{-1}$	0,759	$2,439 \cdot 10^{-1}$	0,674
1	500	$2,246 \cdot 10^{-1}$	0,867	$1,528 \cdot 10^{-1}$	0,811
2	1000	$1,232 \cdot 10^{-1}$	0,929	$8,710 \cdot 10^{-2}$	0,897
3	2000	$6,472 \cdot 10^{-2}$	0,963	$4,676 \cdot 10^{-2}$	0,946
4	4000	$3,320 \cdot 10^{-2}$	0,981	$2,426 \cdot 10^{-2}$	0,972
5	8000	$1,682 \cdot 10^{-2}$	0,990	$1,236 \cdot 10^{-2}$	0,986
6	16000	$8,464 \cdot 10^{-3}$		$6,239 \cdot 10^{-3}$	

Tabulka 3.7: Tabulka chyb mezi řešením pomocí LBM a řešením pomocí MKD, viz obr. 3.4, pro různé jemnosti prostorové diskretizace.

j	$N_x^{(j)}$	$E_j^{(1,\infty)}$	$EOC_{j+1}^{(1,\infty)}$	$E_j^{(2,\infty)}$	$EOC_{j+1}^{(2,\infty)}$
0	250	$4,710 \cdot 10^{-1}$	0,672	$3,193 \cdot 10^{-1}$	0,573
1	500	$2,956 \cdot 10^{-1}$	0,796	$2,146 \cdot 10^{-1}$	0,729
2	1000	$1,702 \cdot 10^{-1}$	0,882	$1,295 \cdot 10^{-1}$	0,843
3	2000	$9,236 \cdot 10^{-2}$	0,935	$7,218 \cdot 10^{-2}$	0,915
4	4000	$4,830 \cdot 10^{-2}$	0,966	$3,828 \cdot 10^{-2}$	0,956
5	8000	$2,476 \cdot 10^{-2}$	0,982	$1,974 \cdot 10^{-2}$	0,977
6	16000	$1,252 \cdot 10^{-2}$		$1,003 \cdot 10^{-2}$	

Tabulka 3.8: Tabulka chyb mezi řešením pomocí LBM a řešením pomocí MKD, viz obr. 3.5, pro různé jemnosti prostorové diskretizace.

j	$N_x^{(j)}$	$E_j^{(1,\infty)}$	$EOC_{j+1}^{(1,\infty)}$	$E_j^{(2,\infty)}$	$EOC_{j+1}^{(2,\infty)}$
0	250	$5,400 \cdot 10^{-1}$	0,612	$3,777 \cdot 10^{-1}$	0,508
1	500	$3,533 \cdot 10^{-1}$	0,745	$2,656 \cdot 10^{-1}$	0,671
2	1000	$2,108 \cdot 10^{-1}$	0,843	$1,669 \cdot 10^{-1}$	0,801
3	2000	$1,175 \cdot 10^{-1}$	0,909	$9,578 \cdot 10^{-2}$	0,887
4	4000	$6,257 \cdot 10^{-2}$	0,949	$5,179 \cdot 10^{-2}$	0,938
5	8000	$3,241 \cdot 10^{-2}$	0,973	$2,702 \cdot 10^{-2}$	0,967
6	16 000	$1,651 \cdot 10^{-2}$		$1,382 \cdot 10^{-2}$	

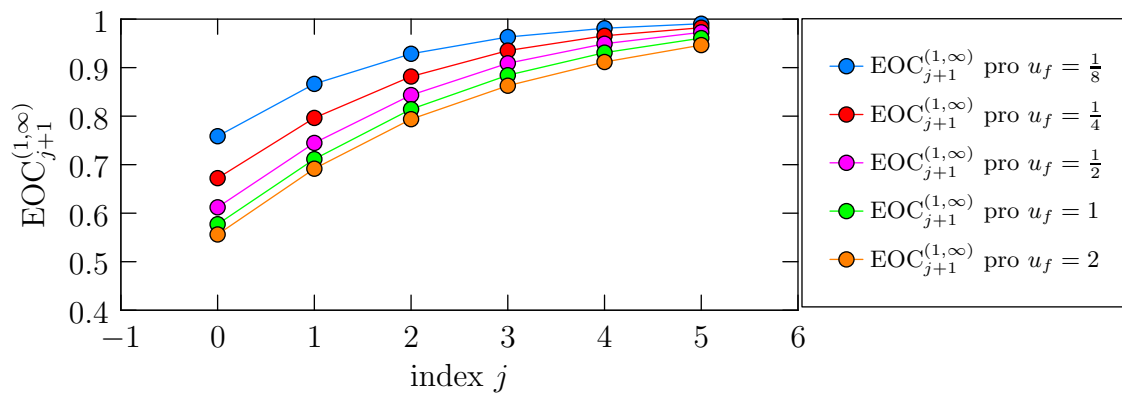
Tabulka 3.9: Tabulka chyb mezi řešením pomocí LBM a řešením pomocí MKD, viz obr. 3.6, pro různé jemnosti prostorové diskretizace.

j	$N_x^{(j)}$	$E_j^{(1,\infty)}$	$EOC_{j+1}^{(1,\infty)}$	$E_j^{(2,\infty)}$	$EOC_{j+1}^{(2,\infty)}$
0	250	$5,879 \cdot 10^{-1}$	0,577	$4,161 \cdot 10^{-1}$	0,469
1	500	$3,940 \cdot 10^{-1}$	0,711	$3,006 \cdot 10^{-1}$	0,633
2	1000	$2,406 \cdot 10^{-1}$	0,814	$1,939 \cdot 10^{-1}$	0,767
3	2000	$1,368 \cdot 10^{-1}$	0,884	$1,139 \cdot 10^{-1}$	0,856
4	4000	$7,413 \cdot 10^{-2}$	0,931	$6,294 \cdot 10^{-2}$	0,913
5	8000	$3,888 \cdot 10^{-2}$	0,961	$3,343 \cdot 10^{-2}$	0,950
6	16 000	$1,998 \cdot 10^{-2}$		$1,731 \cdot 10^{-2}$	

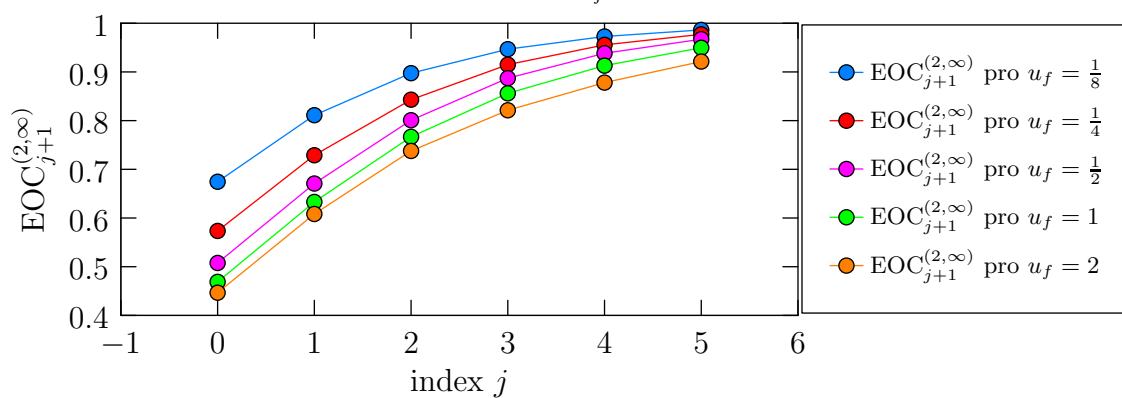
Tabulka 3.10: Tabulka chyb mezi řešením pomocí LBM a řešením pomocí MKD, viz obr. 3.7, pro různé jemnosti prostorové diskretizace.

j	$N_x^{(j)}$	$E_j^{(1,\infty)}$	$EOC_{j+1}^{(1,\infty)}$	$E_j^{(2,\infty)}$	$EOC_{j+1}^{(2,\infty)}$
0	250	$6,174 \cdot 10^{-1}$	0,556	$4,390 \cdot 10^{-1}$	0,447
1	500	$4,199 \cdot 10^{-1}$	0,692	$3,221 \cdot 10^{-1}$	0,608
2	1000	$2,600 \cdot 10^{-1}$	0,794	$2,113 \cdot 10^{-1}$	0,738
3	2000	$1,500 \cdot 10^{-1}$	0,863	$1,267 \cdot 10^{-1}$	0,821
4	4000	$8,247 \cdot 10^{-2}$	0,912	$7,172 \cdot 10^{-2}$	0,878
5	8000	$4,384 \cdot 10^{-2}$	0,946	$3,902 \cdot 10^{-2}$	0,921
6	16 000	$2,275 \cdot 10^{-2}$		$2,060 \cdot 10^{-2}$	

Tabulka 3.11: Tabulka chyb mezi řešením pomocí LBM a řešením pomocí MKD, viz obr. 3.8, pro různé jemnosti prostorové diskretizace.

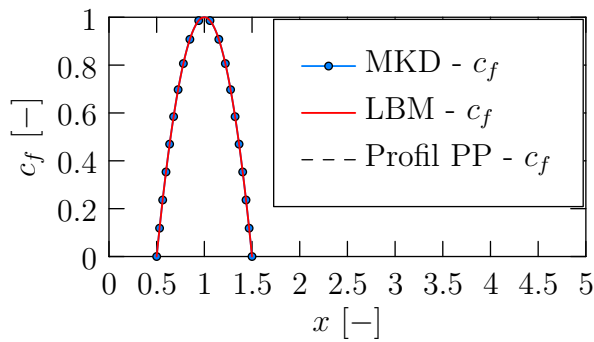


(a) $EOC_{j+1}^{(1, \infty)}$

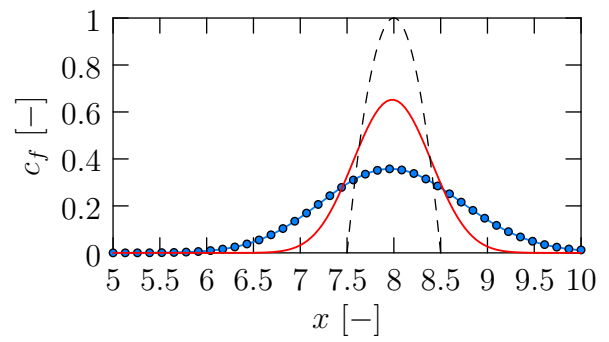


(b) $EOC_{j+1}^{(2, \infty)}$

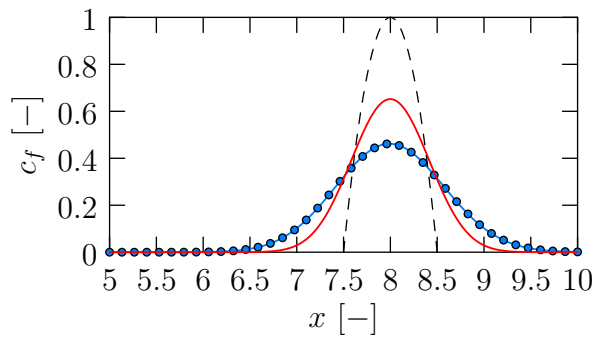
Obrázek 3.3: Srovnání hodnot EOC pro nastavení A-E úlohy 3.1.2, viz tabulka 3.6, v rámci uvažovaných zjemnění sítě/mřížky.



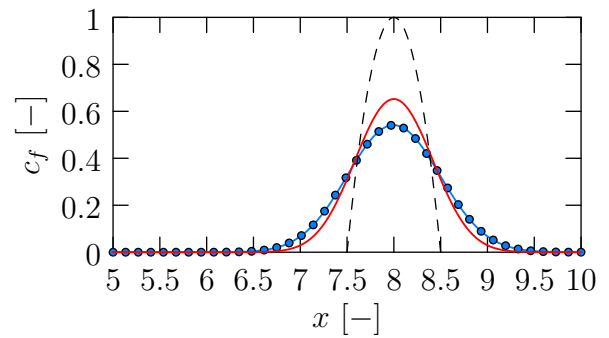
(a) Počáteční podmínka



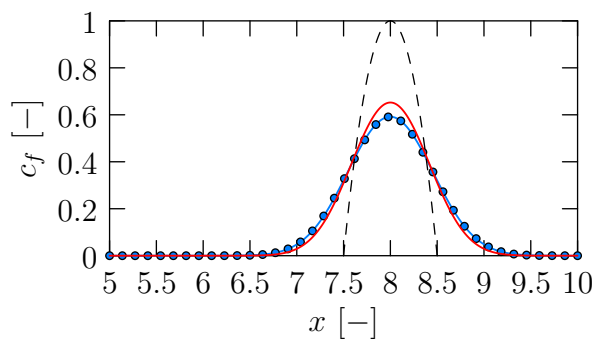
(b) $N_x^{(0)} = 250$



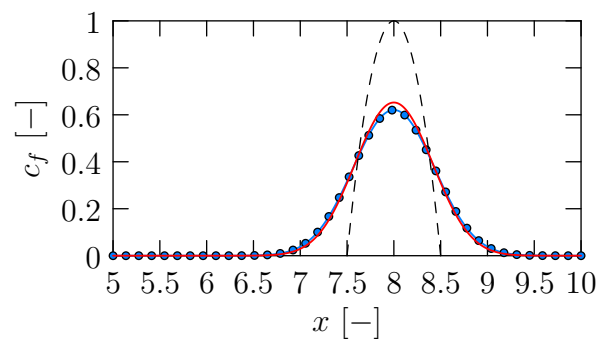
(c) $N_x^{(1)} = 500$



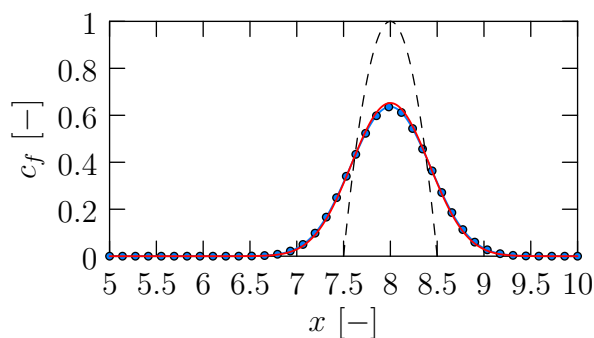
(d) $N_x^{(2)} = 1000$



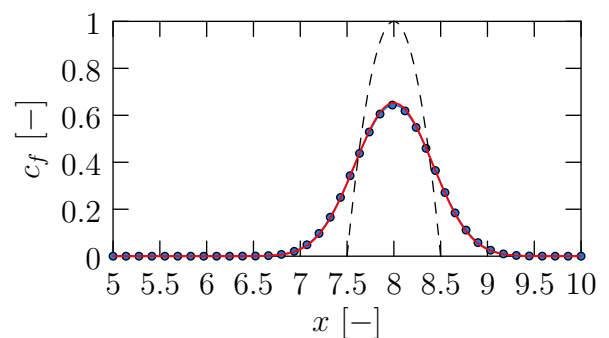
(e) $N_x^{(3)} = 2000$



(f) $N_x^{(4)} = 4000$

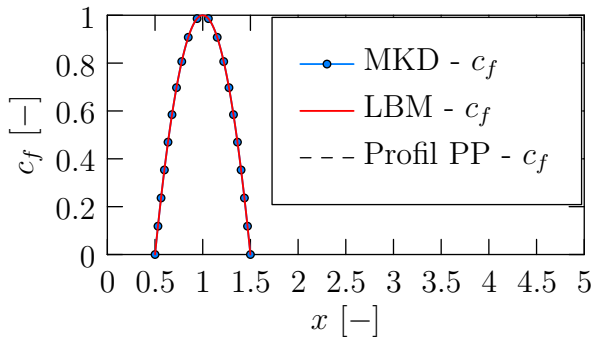


(g) $N_x^{(5)} = 8000$

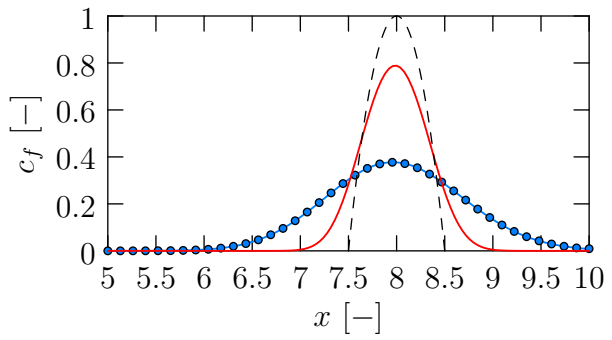


(h) $N_x^{(6)} = 16000$

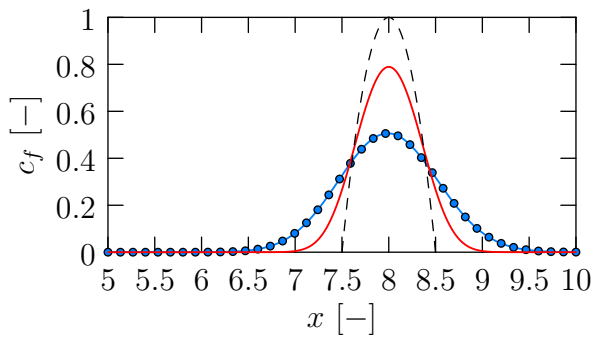
Obrázek 3.4: Numerické řešení úlohy 3.1.2 pro $u_f = 0, 125$, $D^+ = 0,08$ a $T = 64$. Graf 3.4a zobrazuje počáteční podmínku v čase $t = 0$ a zbylé grafy 3.4b až 3.4h zobrazují řešení v čase $t = 64$ pro různě jemné sítě/mřížky. Řešení je na každém grafu možné porovnat s profilem počáteční podmínky (PP), který je znázorněn černou čárkovanou křivkou.



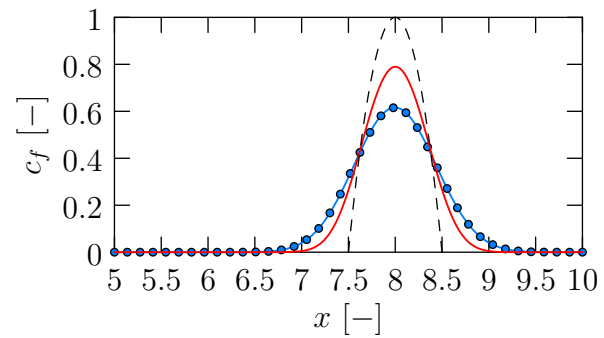
(a) Počáteční podmínka



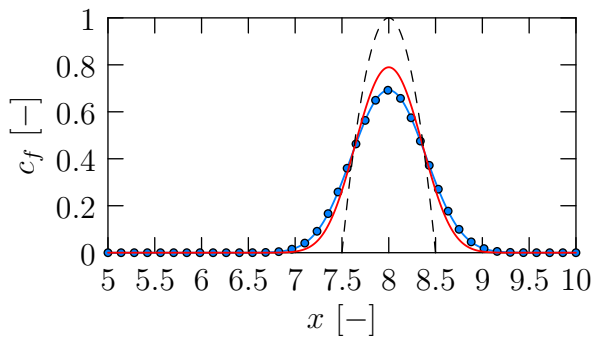
(b) $N_x^{(0)} = 250$



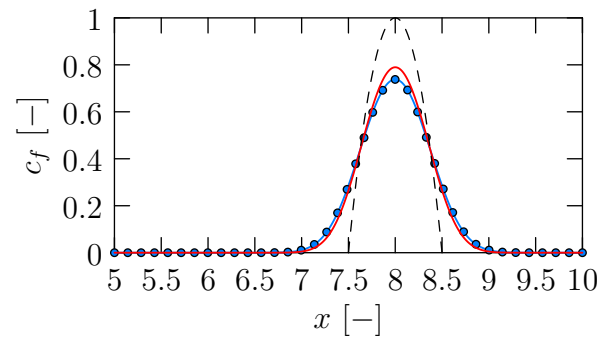
(c) $N_x^{(1)} = 500$



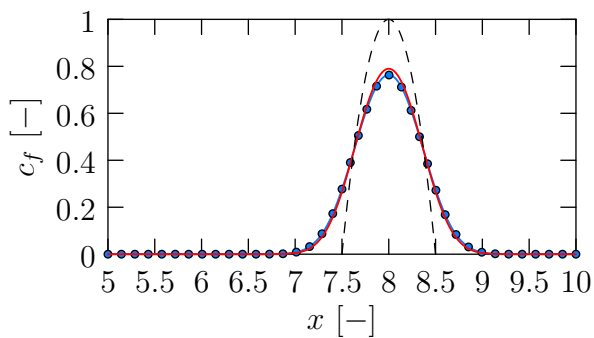
(d) $N_x^{(2)} = 1000$



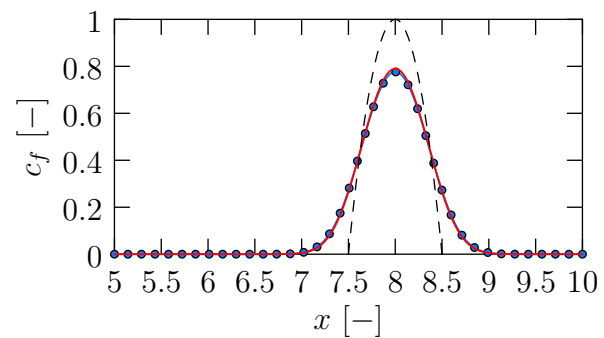
(e) $N_x^{(3)} = 2000$



(f) $N_x^{(4)} = 4000$

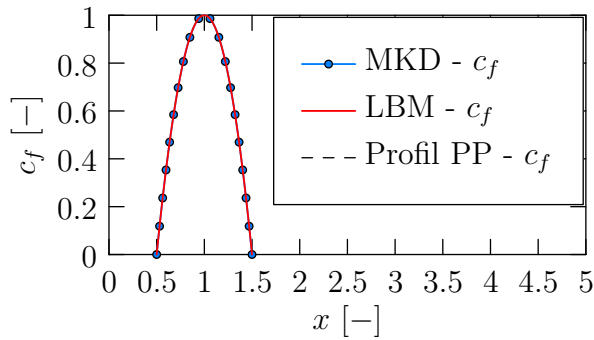


(g) $N_x^{(5)} = 8000$

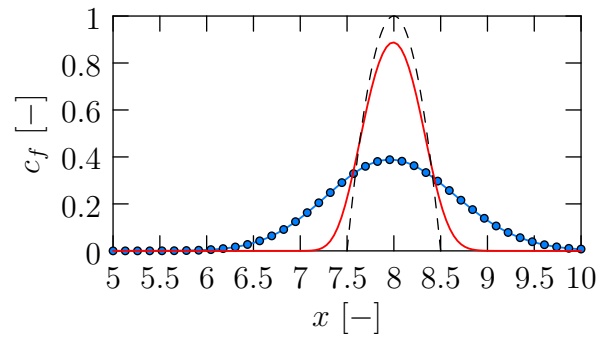


(h) $N_x^{(6)} = 16000$

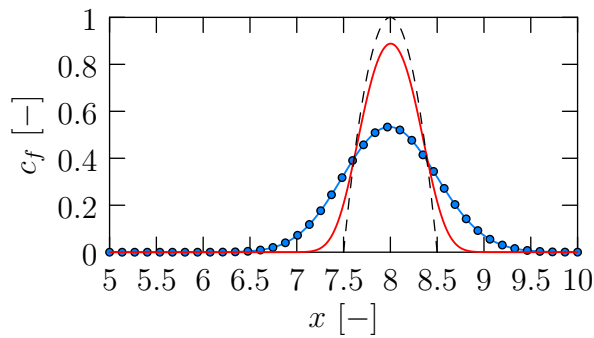
Obrázek 3.5: Numerické řešení úlohy 3.1.2 pro $u_f = 0,25$, $D^+ = 0,04$ a $T = 32$. Graf 3.5a zobrazuje počáteční podmínku v čase $t = 0$ a zbylé grafy 3.5b až 3.5h zobrazují řešení v čase $t = 32$ pro různě jemné sítě/mřížky. Řešení je na každém grafu možné porovnat s profilem počáteční podmínky (PP), který je znázorněn černou čárkovanou křivkou.



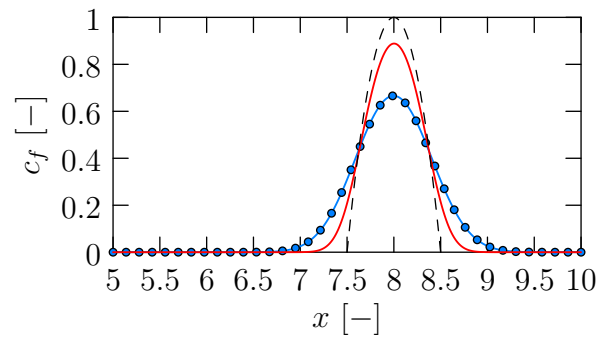
(a) Počáteční podmínka



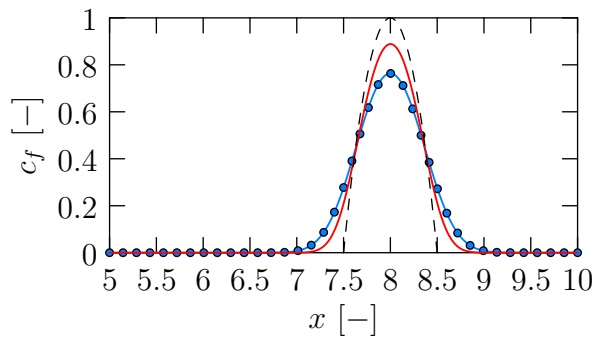
(b) $N_x^{(0)} = 250$



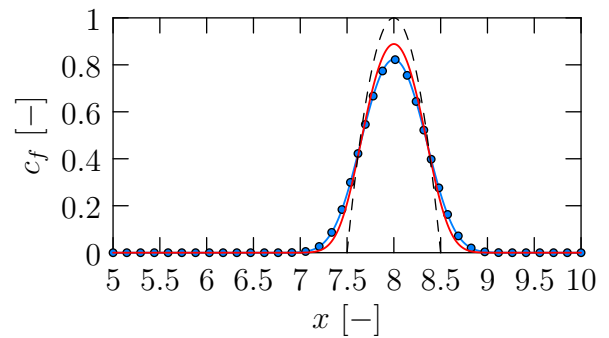
(c) $N_x^{(1)} = 500$



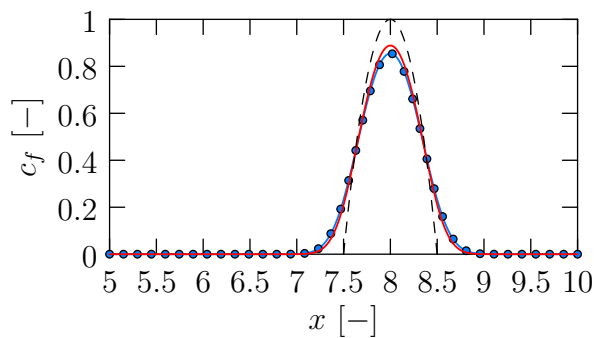
(d) $N_x^{(2)} = 1000$



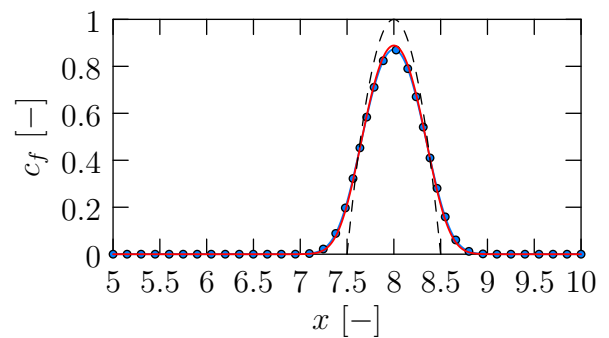
(e) $N_x^{(3)} = 2000$



(f) $N_x^{(4)} = 4000$

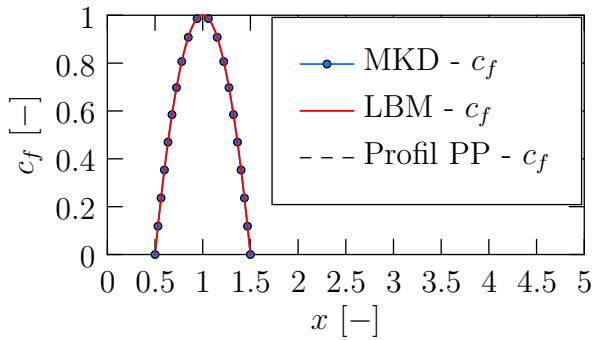


(g) $N_x^{(5)} = 8000$

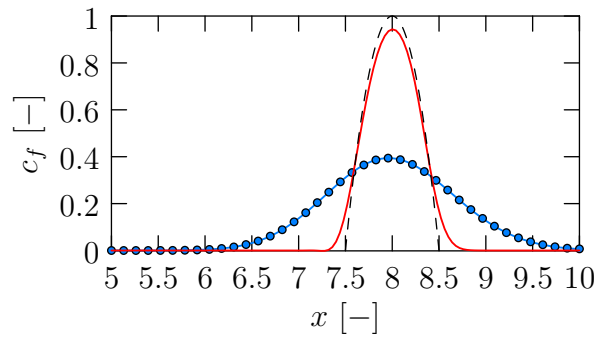


(h) $N_x^{(6)} = 16000$

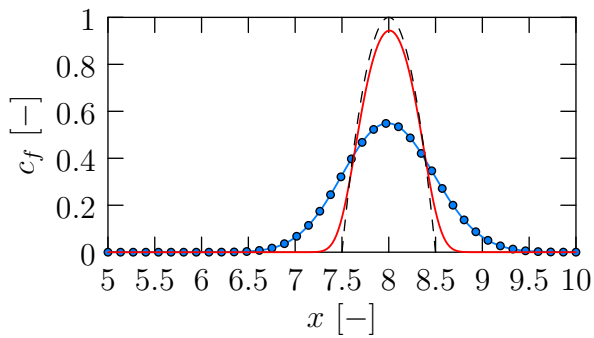
Obrázek 3.6: Numerické řešení úlohy 3.1.2 pro $u_f = 0,5$, $D^+ = 0,02$ a $T = 16$. Graf 3.6a zobrazuje počáteční podmínku v čase $t = 0$ a zbylé grafy 3.6b až 3.6h zobrazují řešení v čase $t = 16$ pro různě jemné sítě/mřížky. Řešení je na každém grafu možné porovnat s profilem počáteční podmínky (PP), který je znázorněn černou čárkovanou křivkou.



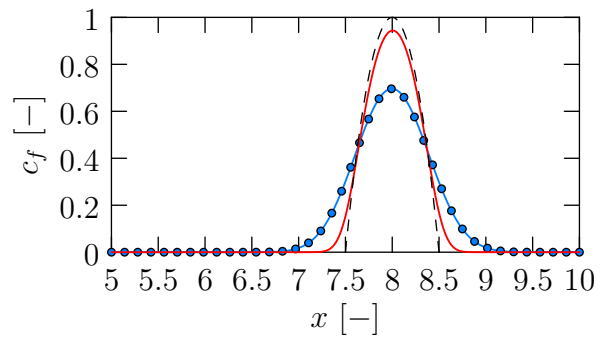
(a) Počáteční podmínka



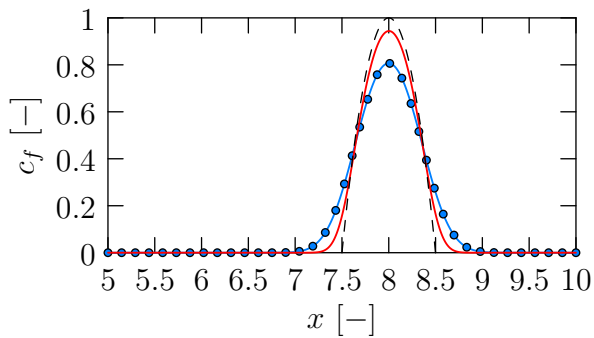
(b) $N_x^{(0)} = 250$



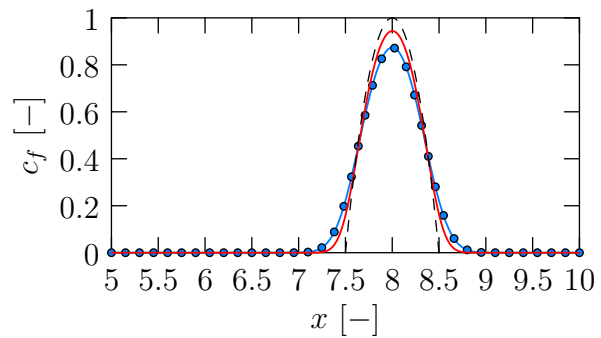
(c) $N_x^{(1)} = 500$



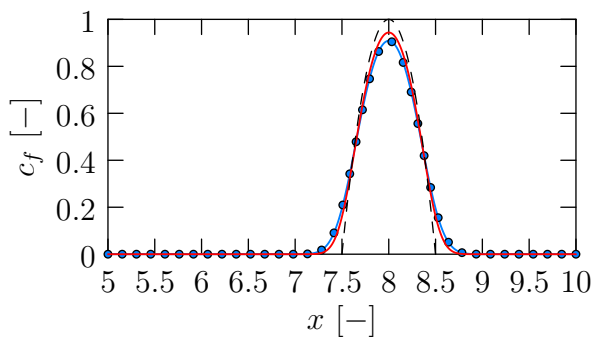
(d) $N_x^{(2)} = 1000$



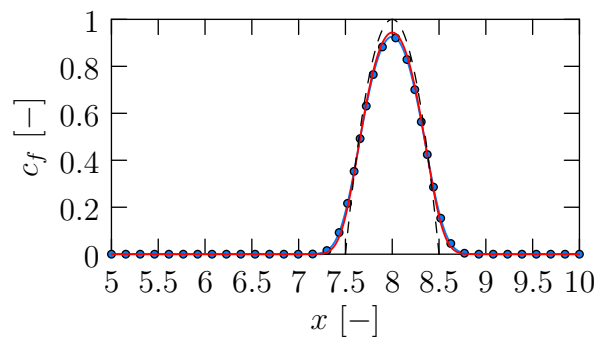
(e) $N_x^{(3)} = 2000$



(f) $N_x^{(4)} = 4000$

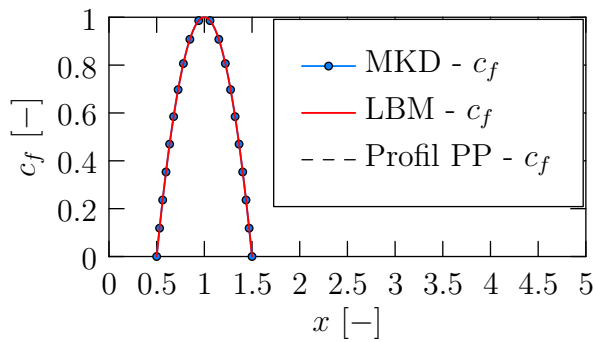


(g) $N_x^{(5)} = 8000$

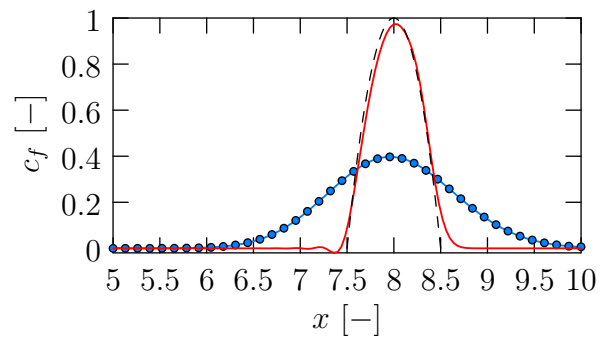


(h) $N_x^{(6)} = 16000$

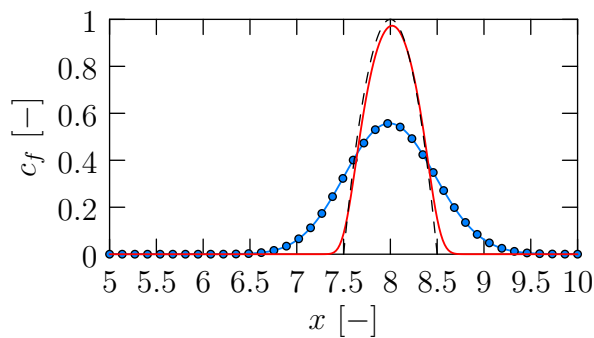
Obrázek 3.7: Numerické řešení úlohy 3.1.2 pro $u_f = 1$, $D^+ = 0,01$ a $T = 8$. Graf 3.7a zobrazuje počáteční podmínku v čase $t = 0$ a zbylé grafy 3.7b až 3.7h zobrazují řešení v čase $t = 8$ pro různé jemné sítě/mřížky. Řešení je na každém grafu možné porovnat s profilem počáteční podmínky (PP), který je znázorněn černou čárkovanou křivkou.



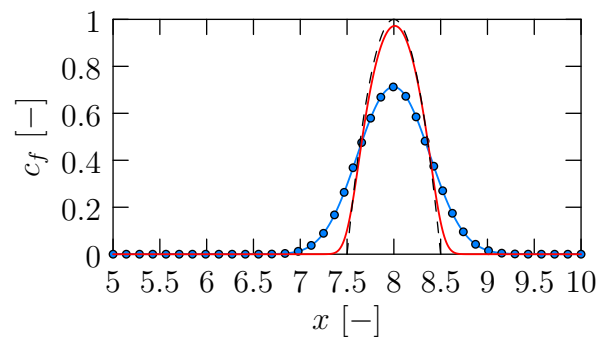
(a) Počáteční podmínka



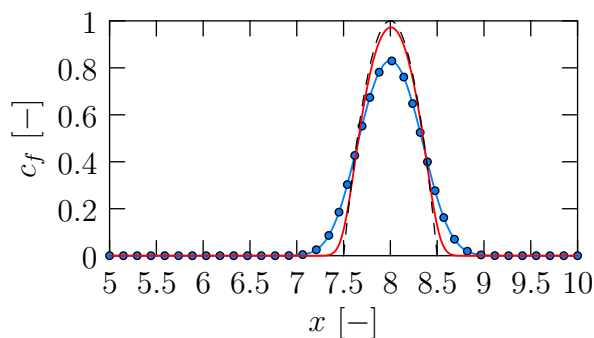
(b) $N_x^{(0)} = 250$



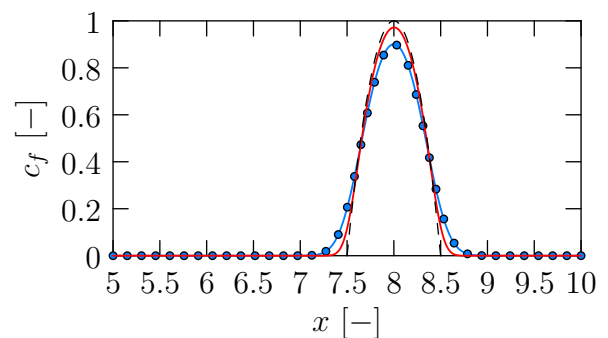
(c) $N_x^{(1)} = 500$



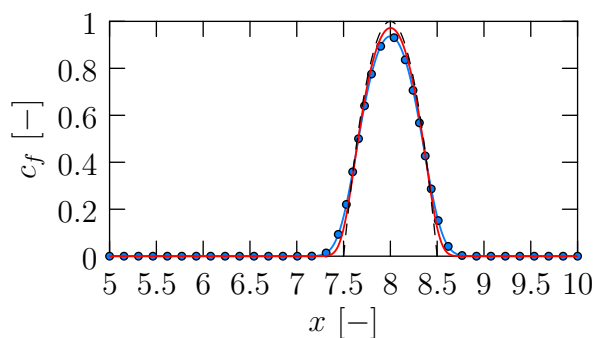
(d) $N_x^{(2)} = 1000$



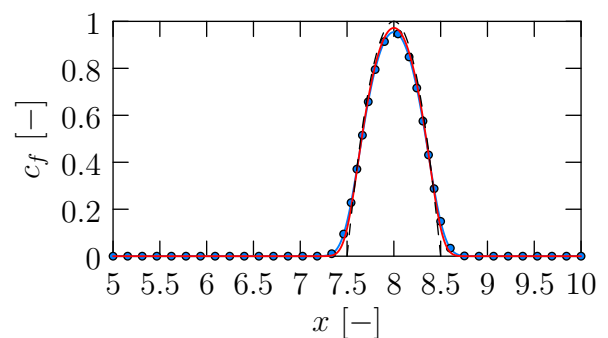
(e) $N_x^{(3)} = 2000$



(f) $N_x^{(4)} = 4000$



(g) $N_x^{(5)} = 8000$

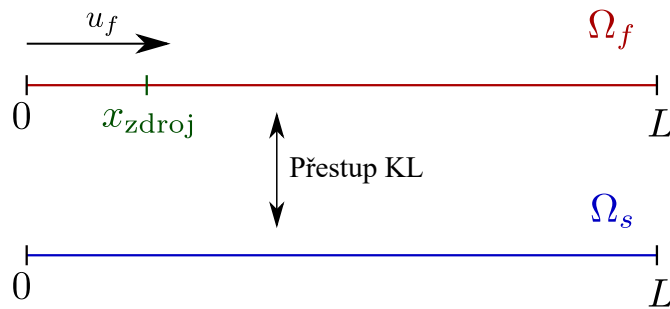


(h) $N_x^{(6)} = 16000$

Obrázek 3.8: Numerické řešení úlohy 3.1.2 pro $u_f = 2$, $D^+ = 0,005$ a $T = 4$. Graf 3.8a zobrazuje počáteční podmínku v čase $t = 0$ a zbytek grafů 3.8b až 3.8h zobrazují řešení v čase $t = 4$ pro různě jemné sítě/mřížky. Řešení je na každém grafu možné porovnat s profilem počáteční podmínky (PP), který je znázorněn černou čárkovanou křivkou.

3.2 Úloha M-1D

V této sekci jsou uvedeny výsledky simulací Úlohy M-1D, tj. jednorozměrného modelu perfuze myokardu. Řešíme Úlohu M-1D, viz sekce 1.6.2, pomocí numerických metod MKD a LBM-SRT. Schéma výpočetních oblastí Ω_f, Ω_s je k nahlédnutí na obr. 3.9.

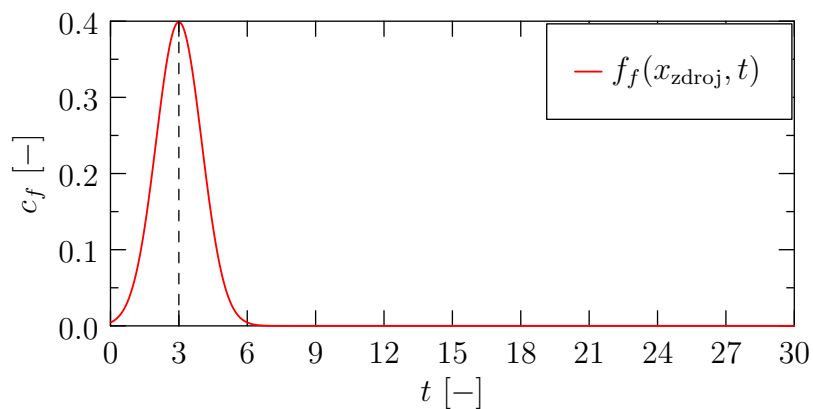


Obrázek 3.9: Schéma výpočetní oblasti pro úlohy typu M-1D.

Uvažujeme funkci bodového zdroje kontrastní látky f_f , viz obr. 3.10, ve tvaru

$$f_f(x, t) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}(t-3)^2\right) & \text{pro } x = x_{\text{zdroj}}, \\ 0 & \text{pro } x \neq x_{\text{zdroj}}, \end{cases} \quad (3.11)$$

kde $t \geq 0$.



Obrázek 3.10: Graf funkce bodového zdroje $f_f(x_{\text{zdroj}}, t)$, která je definována předpisem (3.11).

3.2.1 1D perfuze myokardu

Úloha 3.2.1

Nastavení úlohy:

- $\Omega_f, \Omega_s = (0, 5)$
- $T = 25$
- $u_f = 1$
- $Pe = 1000$
- $Da \in \langle 0; 102, 4 \rangle$
- $D_r = 1$
- $\phi_f \in \{0, 14; 0, 16; 0, 18; 0, 20\}$
- $f_f(x, t)$ ve tvaru, viz (3.11)
- $x_{zdroj} = 0, 5$
- $D^+ = 4 \cdot 10^{-2}$
- $x_p = 2, 5$

Počáteční a okrajové podmínky:

- Neumannovy okrajové podmínky na obou hraničních bodech oblasti Ω_f , viz (1.33d) a (1.33e).
 - MKD: Neumannova podmínka ve tvaru (2.11).
 - LBM: Rovnovážná okrajová podmínka, viz (2.82) a (2.3.1).
- Počáteční podmínka:

$$c_f^{\text{ini}}(x) = 0 \quad \forall x \in \overline{\Omega}_f \quad (3.12a)$$

$$c_s^{\text{ini}}(x) = 0 \quad \forall x \in \overline{\Omega}_s \quad (3.12b)$$

Diskretizace:

- $N_x = 500$

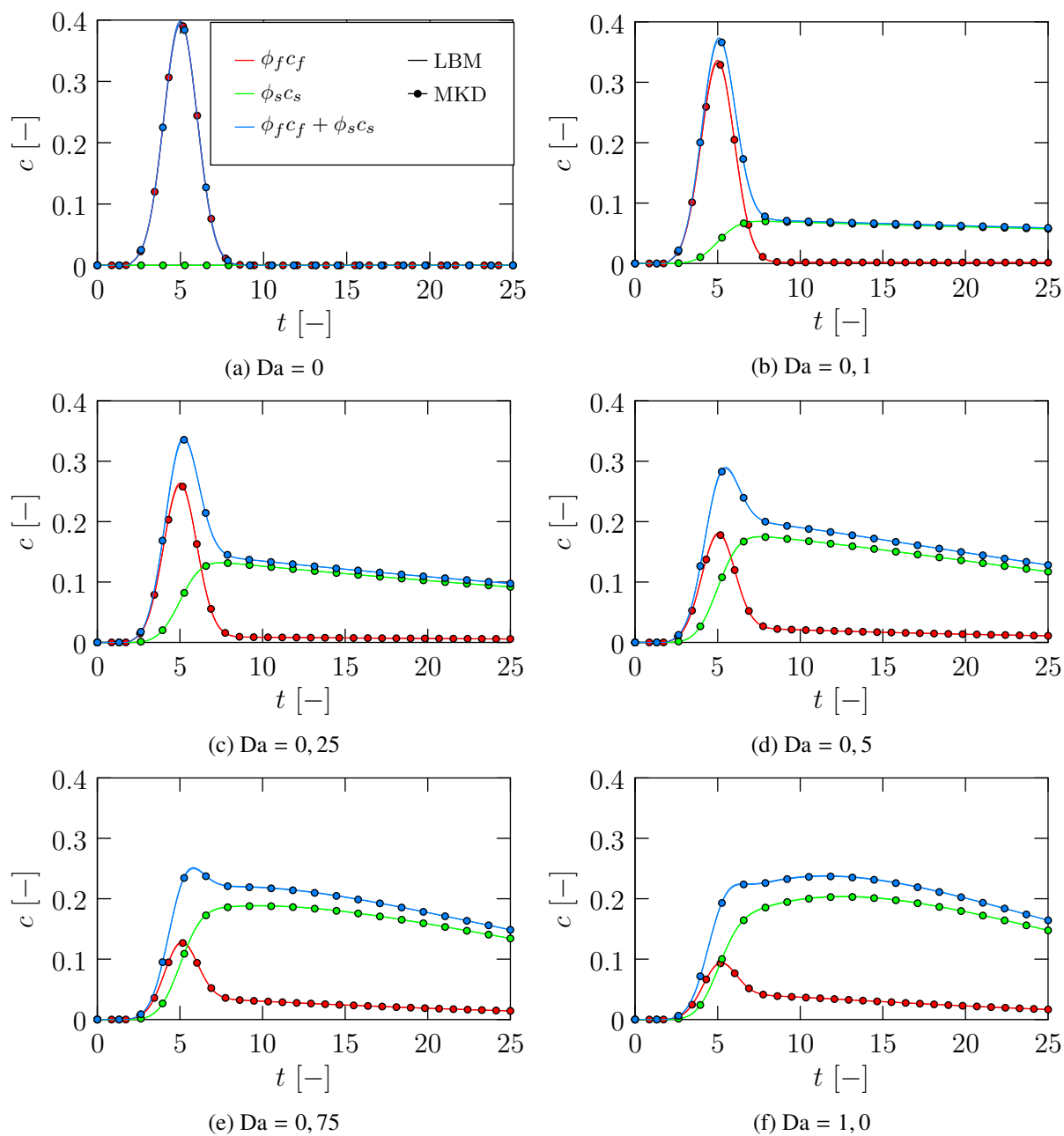
Cílem úlohy 3.2.1 je formulovat co nejpřesnější ekvivalent dvourozměrné úlohy perfuze myokardu ze článku [9] tak, aby bylo možné oba modely porovnat. Řešení úlohy 3.2.1 na "hrubé" síti odpovídající diskretizaci $N_x = 500$ pro šestici Damköhlerových čísel $Da \in \{0; 0, 1; 0, 25; 0, 5; 0, 75; 1, 0\}$ je uvedeno na obr. 3.11. Tyto hodnoty Da byly vybrány podle článku [9]. Na obr. 3.11 jsou řešení pomocí MKD a LBM velmi podobná, což jak uvidíme dále souvisí s volbou malého Da .

V článku [9] je mimo jiné kvantifikována závislost velikosti maximální koncentrace KL v pozorovaném bodě na velikosti čísla Da . Tato závislost je znázorněna na obr. 3.12 pro čtyři různé hodnoty ϕ_f uvedené v nastavení úlohy 3.2.1. Bylo provedeno několik simulací pro Damköhlerova čísla Da ve tvaru

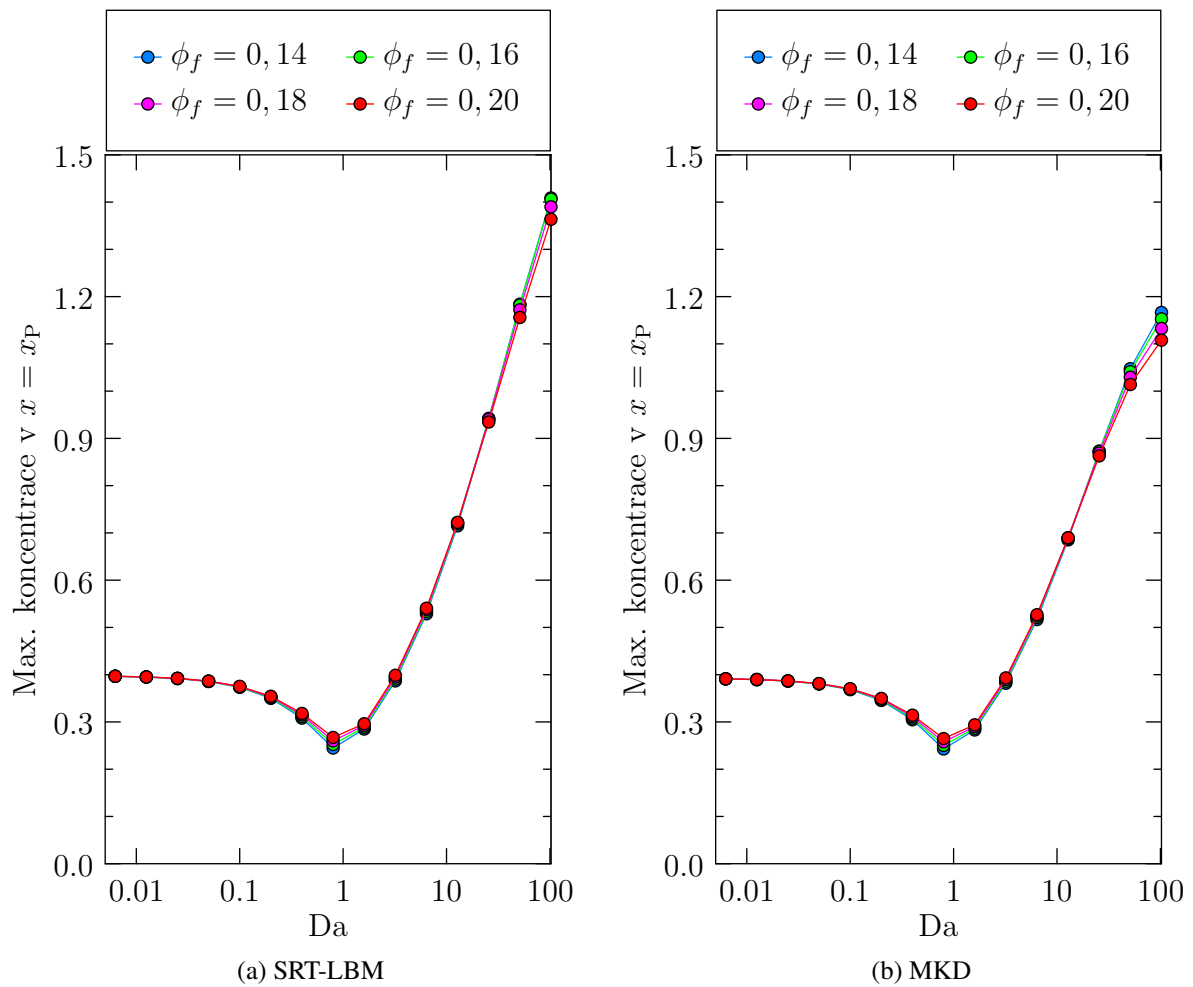
$$Da_j = 0,00625 \cdot 2^j, \quad \forall j \in \{0, 1, \dots, 14\} \quad (3.13)$$

pro každou ze čtyř uvažovaných porozit ϕ_f . Z obr. 3.12 je patrné, že pro vyšší hodnoty Da , tj. zhruba od $Da_{10} = 6, 4$, se začínají výsledky simulací MKD a LBM výrazněji lišit. Maximální celkové koncentrace vypočtené pomocí LBM v bodě $x_p = 2, 5$ se pro různé porozity liší pouze v malé míře. Všimněme si, že pro $Da = 1$ je maximální celková koncentrace nejvyšší pro největší uvažovanou porozitu kapalné fáze $\phi_f = 0, 2$, ale v bodě $Da = 102, 4$ je tomu naopak, a sice maximální koncentrace je nejvyšší pro nejmenší

uvažovanou porozitu kapalné fáze $\phi_f = 0, 14$, viz obr. 3.12a. Rozdíl mezi výsledky MKD a LBM pro vysoké koeficienty přestupu je zkoumán v následující úloze 3.2.2.



Obrázek 3.11: Vývoj koncentrace v bodě x_p , viz úloha 3.2.1, vypočtený metodou LBM-SRT a MKD na síti odpovídající $N_x = 500$ pro různé hodnoty Da .



Obrázek 3.12: Závislost maximální celkové koncentrace $\phi_f c_f + \phi_s c_s$ v bodě x_p na velikosti Da , kde $Da \in \{0,00625 \cdot 2^j \mid j \in \{0, 1, \dots, 14\}\}$. Graf vlevo obsahuje hodnoty obdržené pomocí SRT-LBM a graf vpravo zobrazuje hodnoty získané ze simulace pomocí MKD.

3.2.2 1D perfuze myokardu pro vysoký koeficient přestupu

Úloha 3.2.2

Nastavení úlohy:

- $\Omega_f, \Omega_s = (0, 5)$
- $T = 25$
- $u_f = 1$
- $Pe = 1000$
- $Da \in \{100, 800\}$
- $D_r = 1$
- $\phi_f = 0, 2$
- $f_f(x, t)$ ve tvaru, viz (3.11)
- $x_{zdroj} = 0, 5$
- $D^+ = 4 \cdot 10^{-2}$
- $x_p = 2, 5$

Počáteční a okrajové podmínky:

- Neumannovy okrajové podmínky na obou hraničních bodech oblasti Ω_f , viz (1.33d) a (1.33e).
 - MKD: Neumannova podmínka ve tvaru (2.11).
 - LBM: Rovnovážná okrajová podmínka, viz (2.82) a (2.3.1).
- Počáteční podmínka:

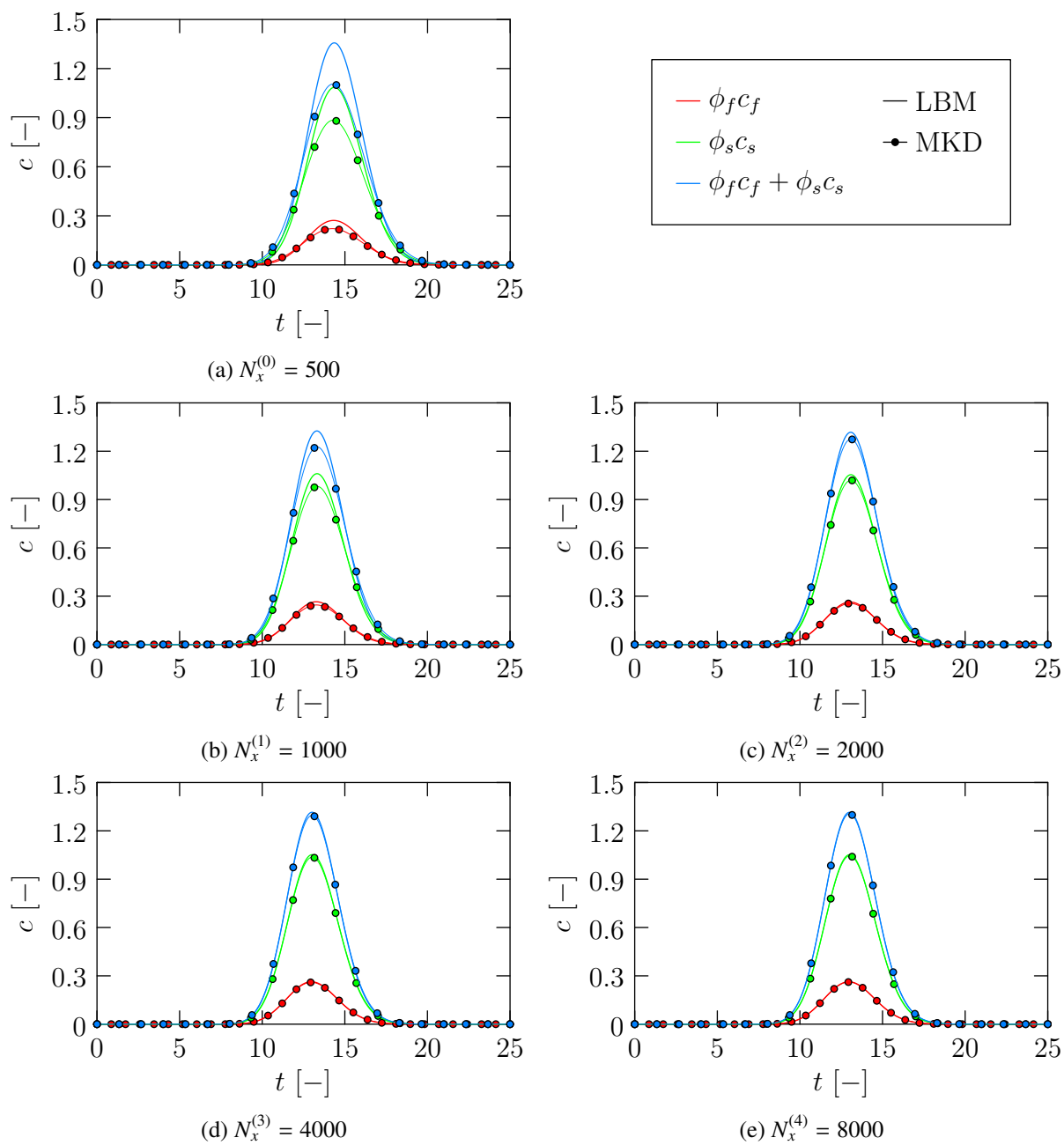
$$c_f^{ini}(x) = 0 \quad \forall x \in \overline{\Omega}_f \quad (3.14a)$$

$$c_s^{ini}(x) = 0 \quad \forall x \in \overline{\Omega}_s \quad (3.14b)$$

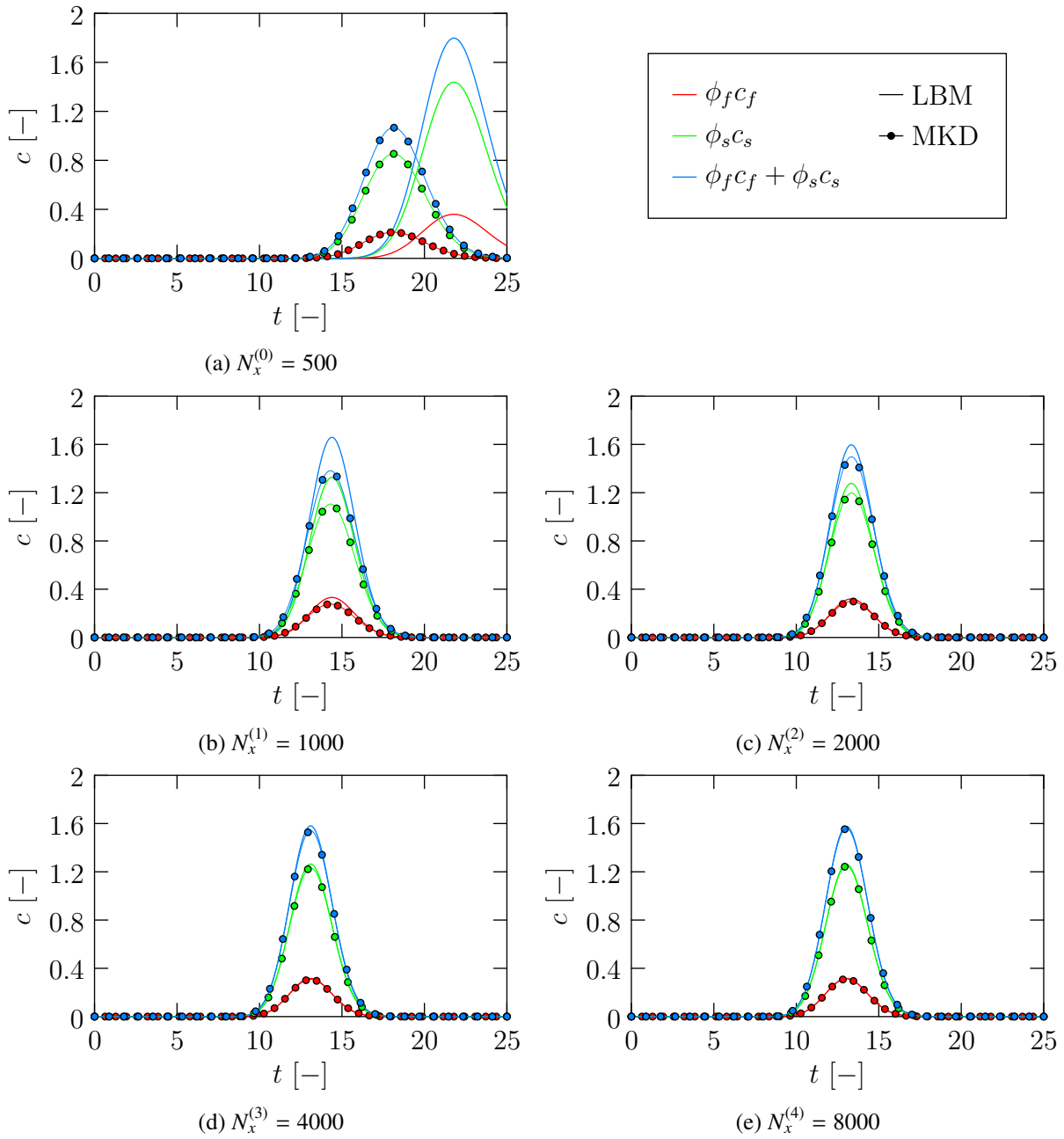
Diskretizace:

- $N_x^{(j)} = 2^j \cdot 500 \quad \forall j \in \{0, 1, \dots, 4\}$

Tato úloha si klade za cíl prozkoumat časový vývoj koncentrací c_f a c_s pro vysoká Damköhlerova čísla $Da \in \{100, 800\}$ a zjemněním sítě ověřit, zda se k sobě řešení obdržené pomocí MKD a LBM přiblíží. Na obr. 3.13 jsou k nahlédnutí řešení MKD a LBM pro uvažovanou zjemněnou síť $N_x^{(j)}$, viz nastavení úlohy 3.2.2, pro hodnotu $Da = 100$. Na obr. 3.13a, který odpovídá nejhrubší síti, je patrný rozdíl mezi výsledky MKD a LBM v hodnotách koncentrace KL v kapalně fázi c_f . Tento rozdíl lze vysvětlit dominantní advekcí, která v kapalně fázi působí, viz nastavení úlohy 3.2.2. Z výsledků úlohy 3.1.2 již víme, že MKD je zatížena numerickou difuzí, která způsobuje mimo jiné pokles vypočtené koncentrace. Postupným zjemněním sítě se řešení obdržené z MKD k řešení pomocí LBM blíží, jak je vidět na obr. 3.13b až 3.13e. Zároveň si připomeňme, že k výpočtu velikosti přestupu KL mezi fázemi se využívá hodnot koncentrace z minulé časové vrstvy (u MKD i u LBM). Jakmile je tedy přestup dominantním procesem, chyba vzniklá explicitností schématu v čase je větší, než je tomu u nižších Da . Vliv explicitnosti schématu MKD a LBM v čase (vzhledem k výpočtu přestupu KL) je ještě patrnější z grafů řešení úlohy 3.2.2 při hodnotě $Da = 800$ uvedených na obr. 3.14. Při použití nejhrubší uvažované sítě na obr. 3.14a je jasné vidět, že se LBM a MKD liší i v časech, ve kterých se nachází maximální koncentrace ve výpočetní oblasti. Postupným zjemněním sítě se k sobě řešení opět blíží, jak je vidět z obr. 3.14.



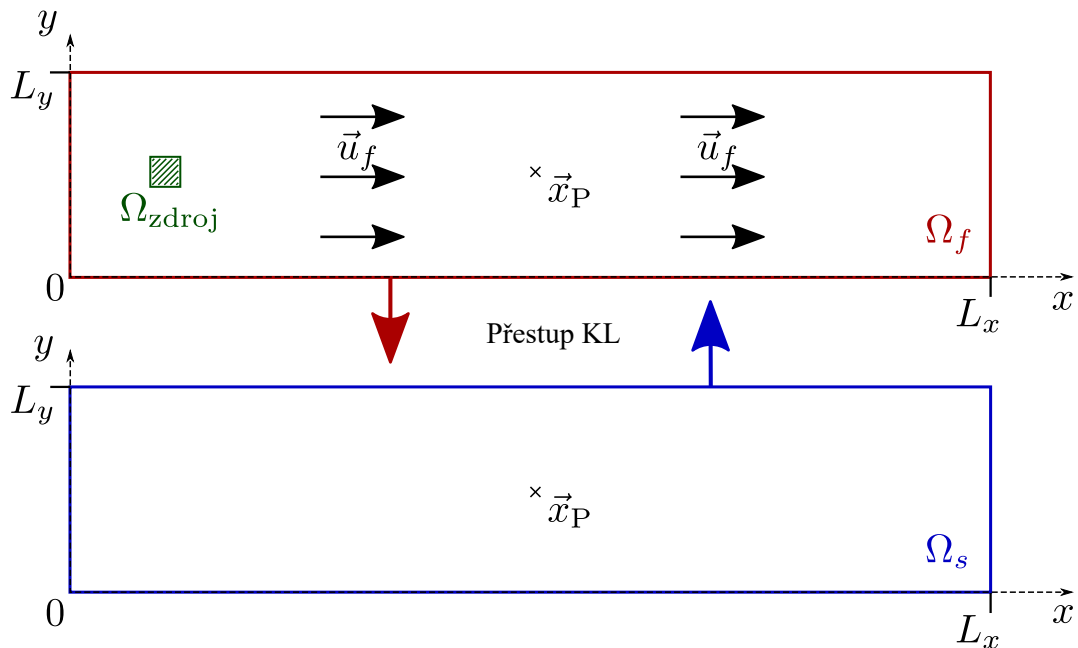
Obrázek 3.13: Znáznornění numerického řešení úlohy 3.2.2 pro $Da = 100$ pomocí LBM-SRT a MKD na pěti mřížkách/sítích definovaných v nastavení úlohy 3.2.2.



Obrázek 3.14: Znázornění numerického řešení úlohy 3.2.2 pro $Da = 800$ pomocí LBM-SRT a MKD na pěti mřížkách/sítích definovaných v nastavení úlohy 3.2.2.

3.3 Úloha M-2D

V této sekci jsou uvedeny výsledky numerických simulací Úlohy M-2D, viz sekce 1.6.3, pomocí SRT-LBM. Uvažujeme dvourozměrné výpočetní oblasti $\Omega_f, \Omega_s = (0, L_x) \times (0, L_y)$, jejichž grafické znázornění je k nahlédnutí na obr. 3.15.

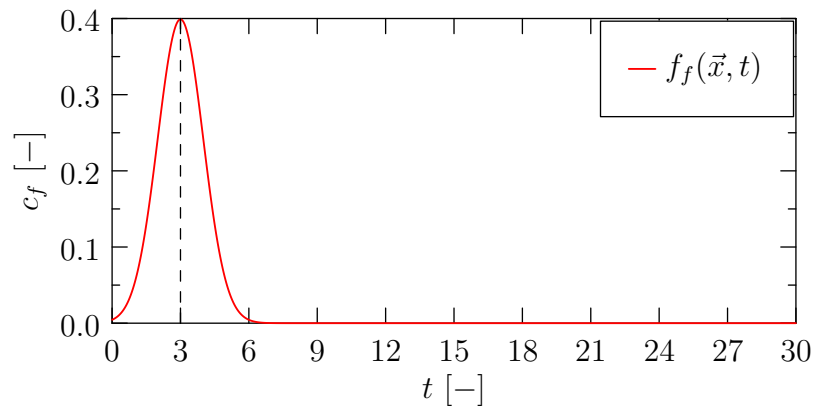


Obrázek 3.15: Grafické znázornění výpočetní oblasti pro Úlohu M-2D.

Uvažujeme funkci zdroje KL f_f , viz obr. 3.16, na čtvercové oblasti Ω_{zdroj} ve tvaru

$$f_f(\vec{x}, t) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}(t-3)^2\right) & \text{pro } \vec{x} \in \Omega_{\text{zdroj}}, \\ 0 & \text{pro } \vec{x} \notin \Omega_{\text{zdroj}}, \end{cases} \quad (3.15)$$

kde $t \geq 0$.



Obrázek 3.16: Graf funkce bodového zdroje $f_f(\vec{x}, t)$ pro $\vec{x} \in \Omega_{\text{zdroj}}$, která je definována předpisem (3.15).

3.3.1 2D perfuze myokardu

Úloha 3.3.1

Nastavení úlohy:

- $\Omega_f, \Omega_s = (0, 5) \times (0, 1)$
- $T = 30$
- $u_f = 1$
- $Pe = 1000$
- $Da \in \{0, \frac{1}{10}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}, 1\}$
- $D_r = 1$
- $\phi_f = 0, 14$
- $f_f(\vec{x}, t)$ ve tvaru, viz (3.15)
- Ω_{zdroj} , viz tabulka 3.12
- $D^+ = 4 \cdot 10^{-2}$
- $\vec{x}_p = [\frac{5}{2}, \frac{1}{2}]$

Počáteční a okrajové podmínky:

- Neumannovy okrajové podmínky, viz (1.37c), resp. (1.39c) na všech částech hranice Ω_f , resp. Ω_s .
 - LBM: Rovnovážná okrajová podmínka, viz sekce 2.2.9.
- Počáteční podmínka:

$$c_f^{ini}(\vec{x}) = 0 \quad \forall \vec{x} \in \overline{\Omega}_f \quad (3.16a)$$

$$c_s^{ini}(\vec{x}) = 0 \quad \forall \vec{x} \in \overline{\Omega}_s \quad (3.16b)$$

Diskretizace:

- $N_x \times N_y = 640 \times 128$

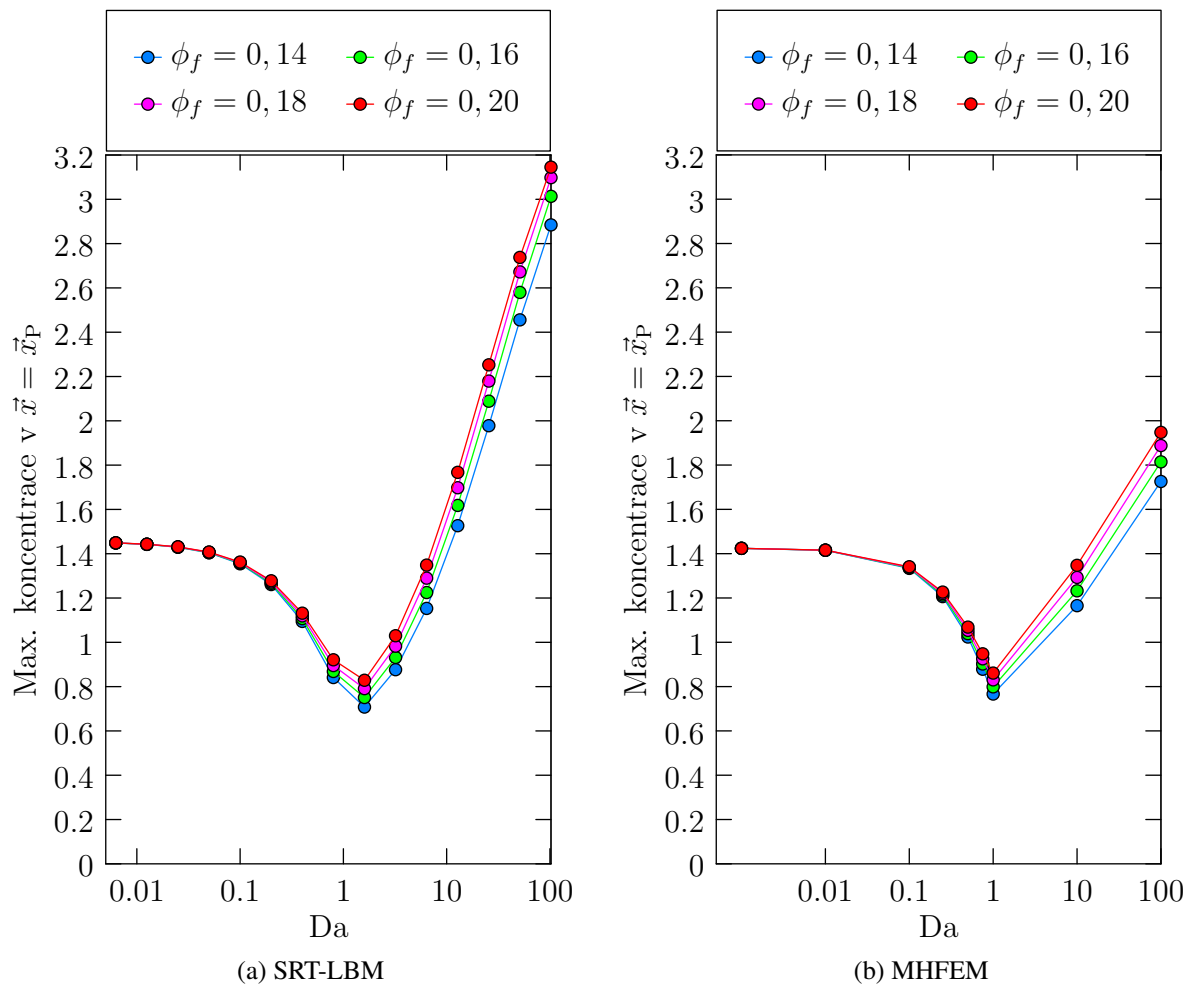
Úloha 3.3.1 odpovídá nastavení úlohy perfuze myokardu z článků [9, 27] s tím, že uvažujeme 3 různé velikosti čtvercové oblasti zdroje KL Ω_{zdroj} , které jsou uvedeny v tabulce 3.12 spolu s odkazy na příslušné obrázky s řešením. Na obr. 3.18 až 3.20 jsou k nahlédnutí řešení úlohy 3.3.1 pro nastavení po řadě A až C, viz tabulka 3.12.

Nastavení	Číslo obrázku	Střed čtverce Ω_{zdroj}	Délka strany čtverce Ω_{zdroj}
A	3.18	[0, 5; 0, 5]	0, 05
B	3.19	[0, 5; 0, 5]	0, 1
C	3.20	[0, 5; 0, 5]	0, 25

Tabulka 3.12: Přehled obrázků znázorňujících numerické řešení úlohy 3.3.1 metodou LBM pro různé velikosti čtvercové oblasti zdroje Ω_{zdroj} definované v tabulce polohou středu čtverce a velikostí jeho strany.

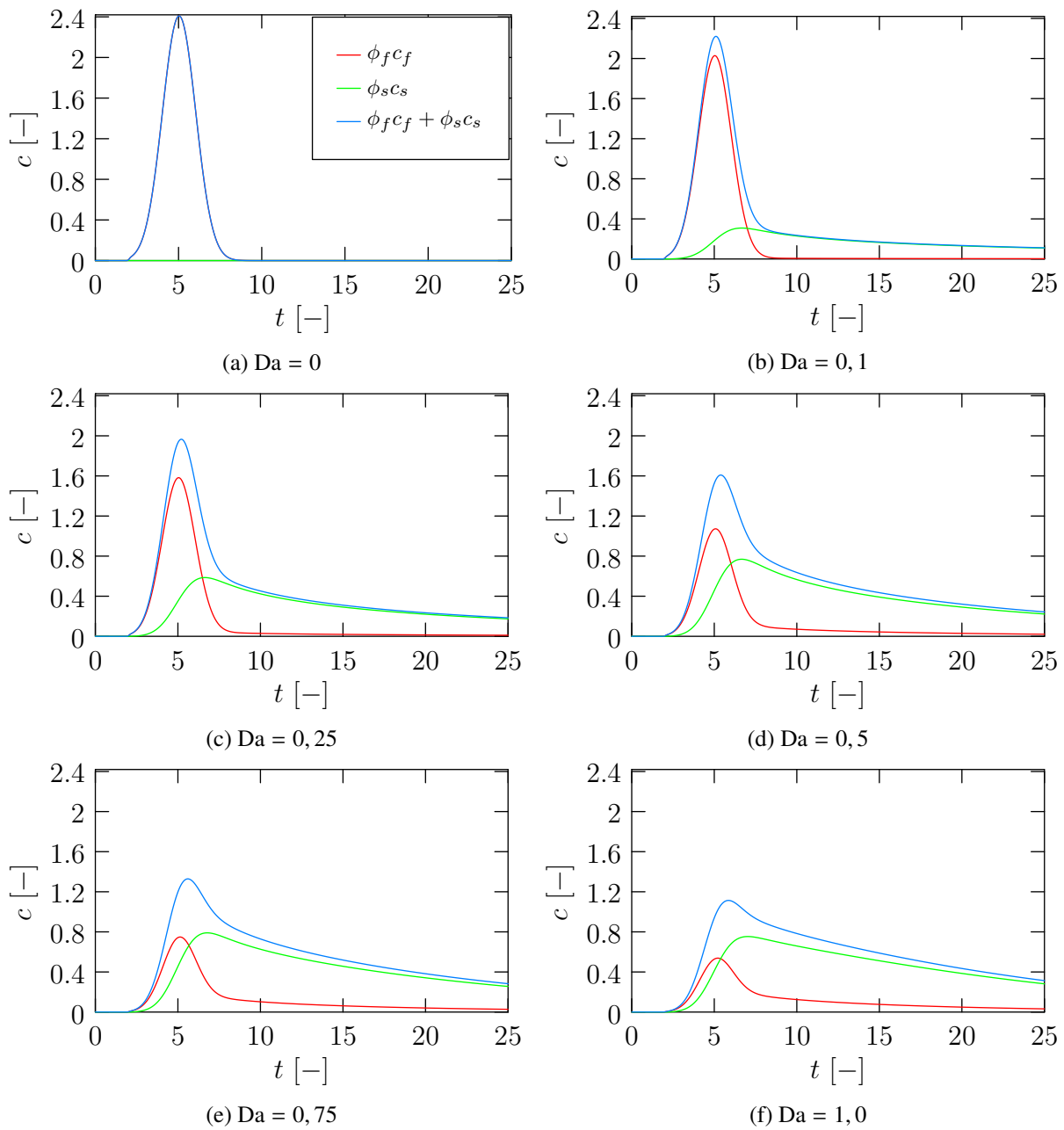
Funkce zdroje f_f byla škálována velikostí oblasti zdroje Ω_{zdroj} tak, aby bylo celkové množství KL stejné pro různé velikosti zdroje. Při zvětšení oblasti zdroje KL Ω_{zdroj} tedy dojde ke snížení maximální

koncentrace v čase, což je patrné z obr. 3.18 až 3.20. Řešení úlohy 3.3.1 jsou si tvarem velmi podobná pro všechny tři velikosti zdroje KL a liší se pouze v absolutních číslech, jak je vidět ze srovnání na obr. 3.21. V návaznosti na článek [9] byla tato úloha řešena také v technické zprávě [27], která byla sepsána na katedře matematiky FJFI ČVUT v Praze. V tomto příspěvku byla úloha 3.3.1 řešena pomocí smíšené hybridní metody konečných prvků (MHFEM²) a její výsledky byly poskytnuty k použití pro srovnání s výsledky obdrženy pomocí SRT-LBM v rámci této práce. Na obr. 3.17 je k nahlédnutí graf závislosti maximální koncentrace v bodě \vec{x}_p na velikosti Da pro výsledky získané pomocí LBM a výsledky obdržené z MHFEM, viz [27]. Hodnoty maximální koncentrace v bodě \vec{x}_p se začínají výrazně lišit pro vyšší Damköhlerova čísla Da , což odpovídá dominantnějšímu přestupu KL mezi fázemi. Proč dochází k tak výraznému rozdílu mezi LBM a MHFEM pro vyšší Da nebylo zjištěno. Na jemnějších mřížkách/sítích by mělo dojít ke snížení rozdílu mezi LBM a MHFEM, stejně jako mezi LBM a MKD v úloze 3.2.2, avšak v této práci to již nebude rozebráno.

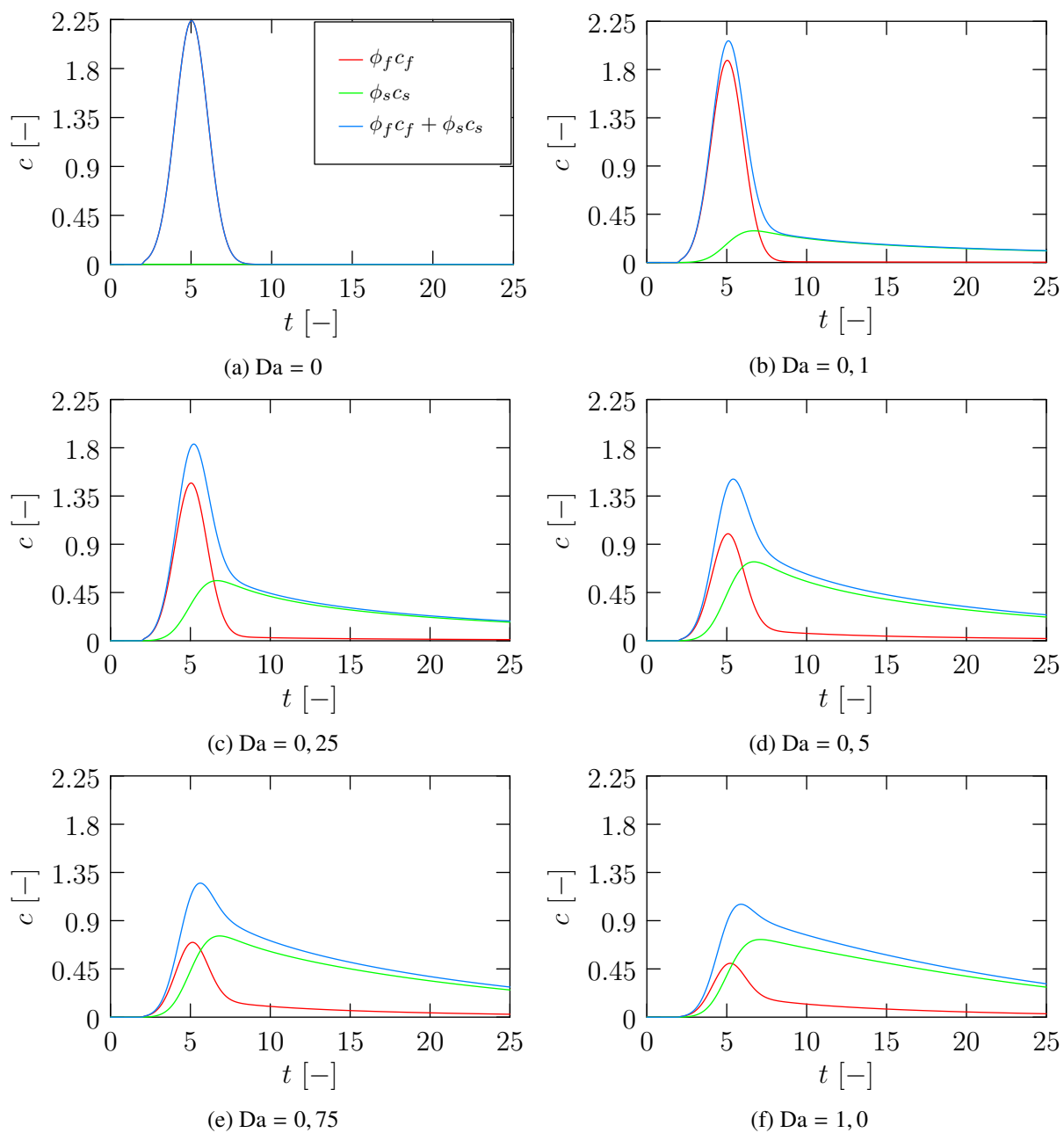


Obrázek 3.17: Závislost maximální celkové koncentrace $\phi_f c_f + \phi_s c_s$ v bodě x_p na velikosti Da . Graf vlevo obsahuje hodnoty obdržené pomocí SRT-LBM a graf vpravo zobrazuje hodnoty získané ze simulace pomocí MHFEM, viz [27].

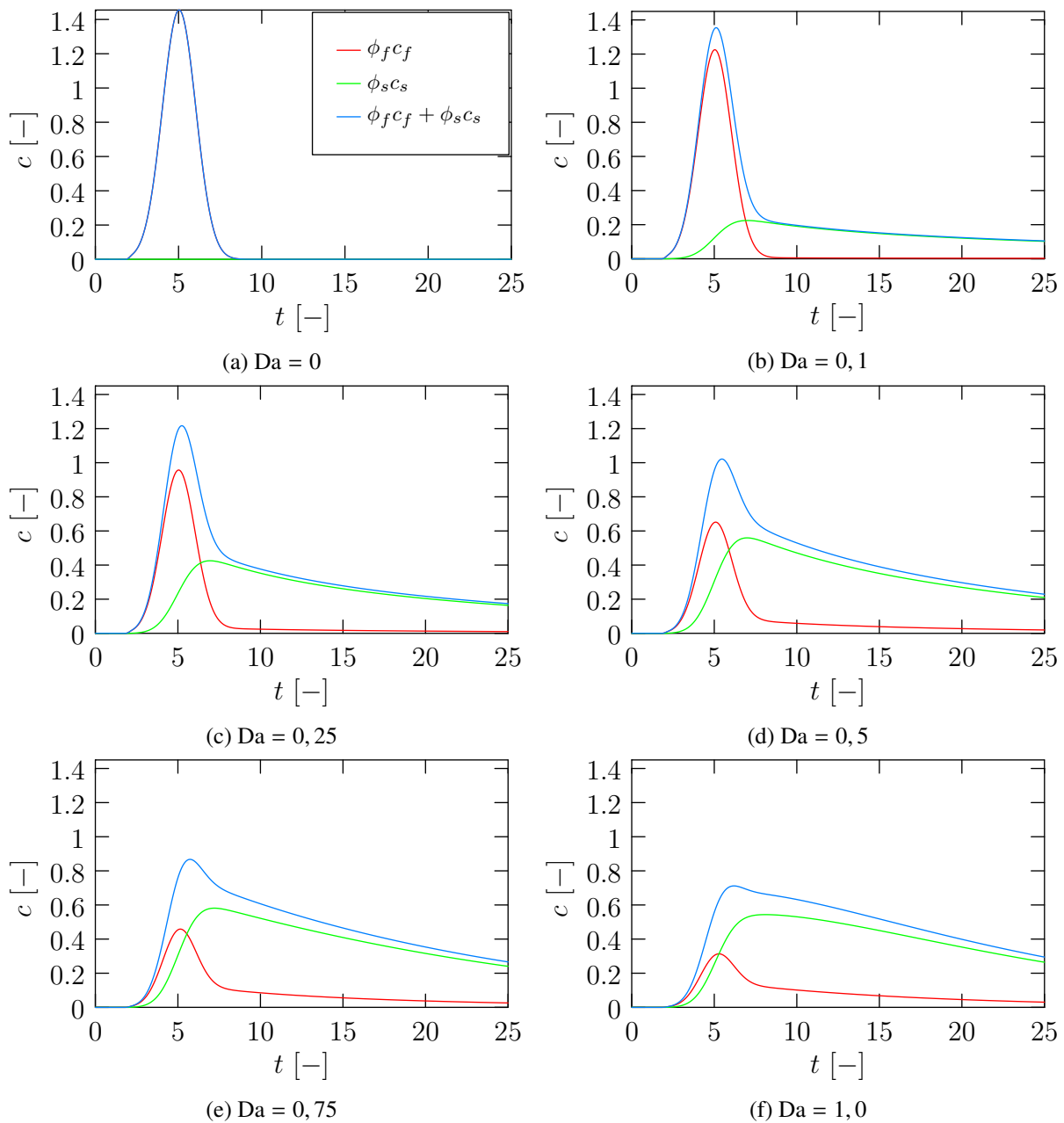
²z anglického Mixed Hybrid Finite Element Method



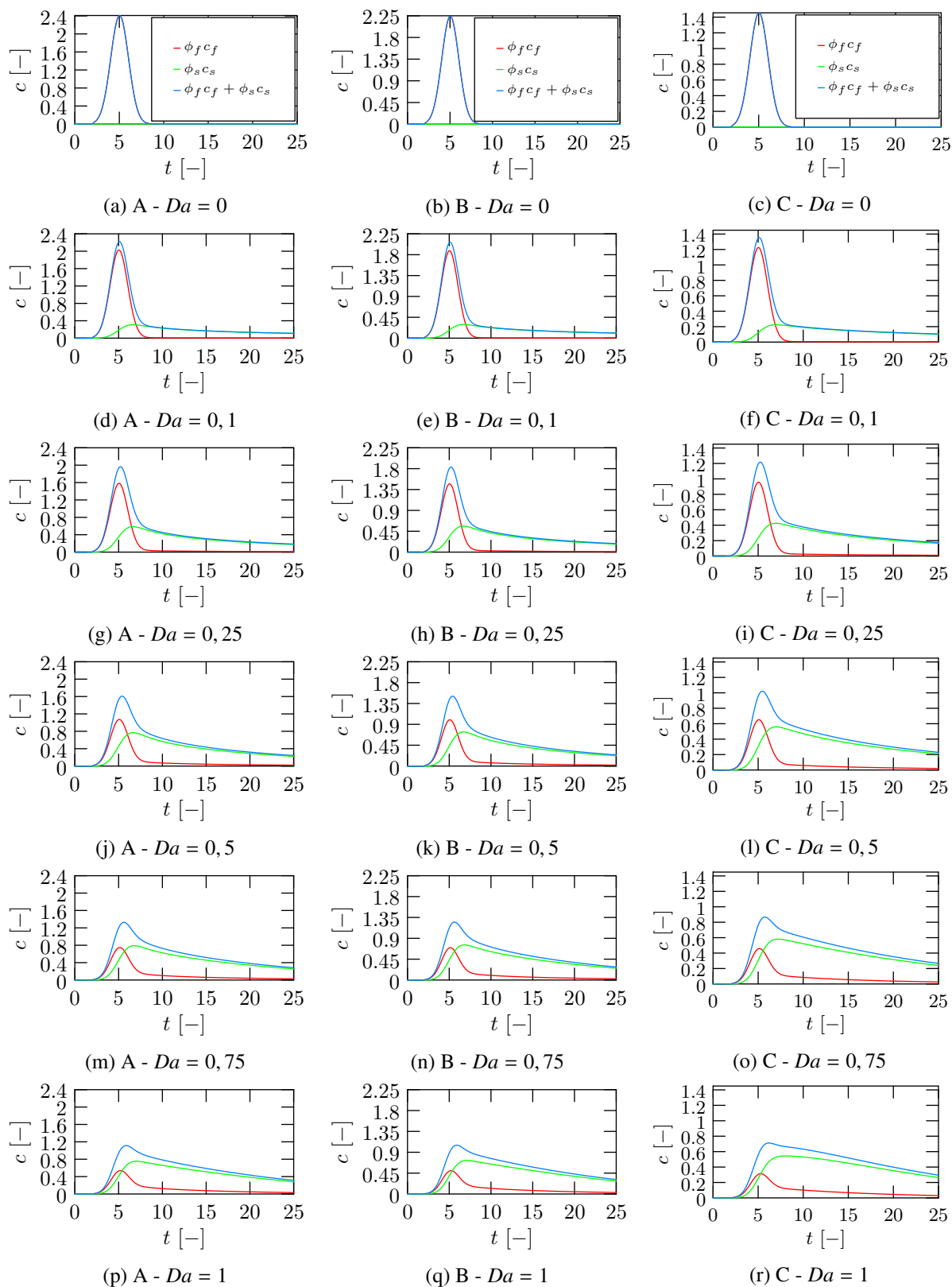
Obrázek 3.18: Grafy numerického řešení úlohy 3.3.1 pro nastavení A, viz tabulka 3.12, v bodě \vec{x}_p získané metodou SRT-LBM na mřížce 640×128 pro různé hodnoty Da .



Obrázek 3.19: Grafy numerického řešení úlohy 3.3.1 pro nastavení B, viz tabulka 3.12, v bodě \vec{x}_p získané metodou SRT-LBM na mřížce 640×128 pro různé hodnoty Da .



Obrázek 3.20: Grafy numerického řešení úlohy 3.3.1 pro nastavení C, viz tabulka 3.12, v bodě \vec{x}_p získané metodou SRT-LBM na mřížce 640×128 pro různé hodnoty Da .

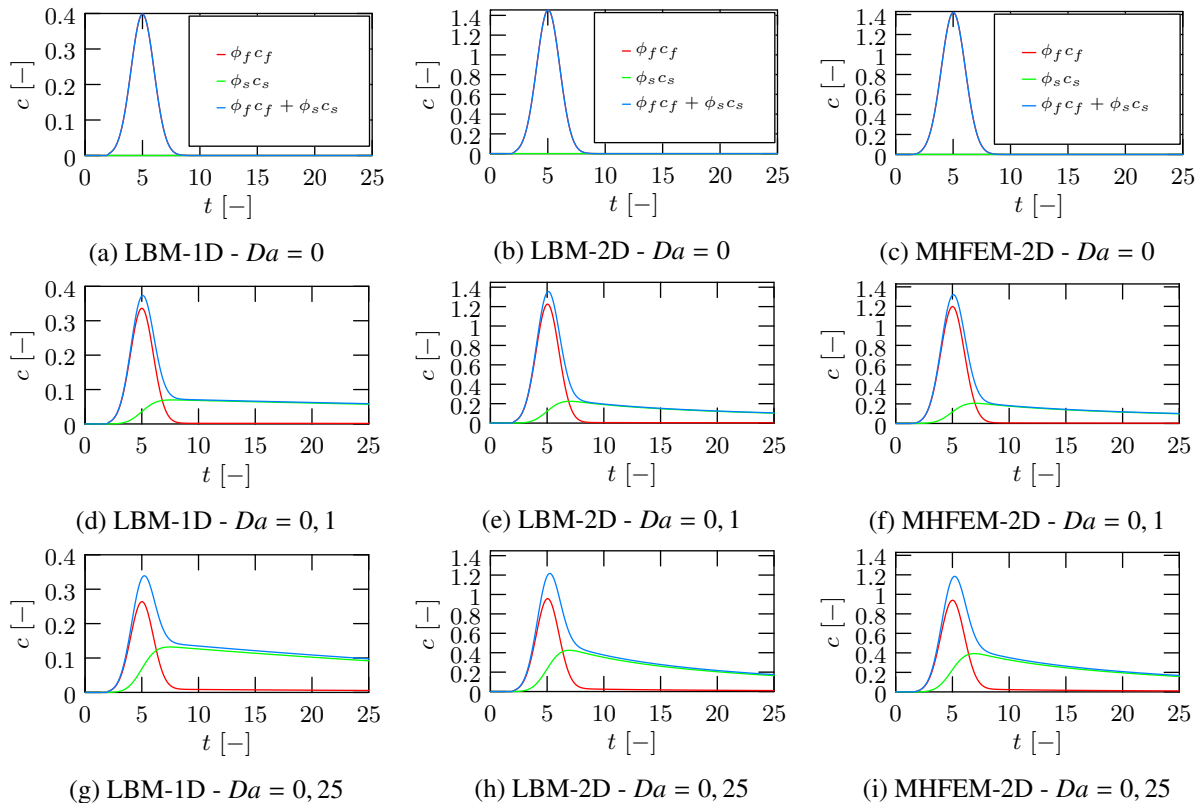


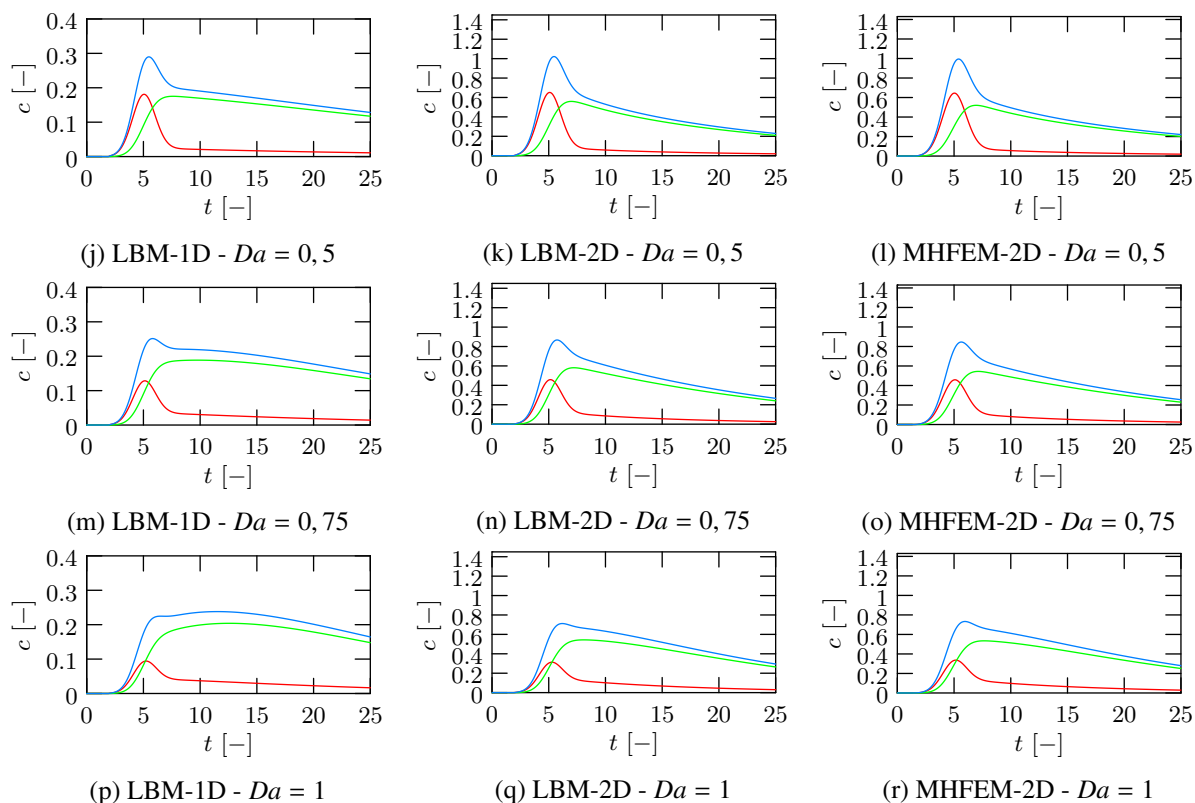
Obrázek 3.21: Srovnání numerických řešení úlohy 3.3.1 pro nastavení A až C pomocí SRT-LBM, viz tabulka 3.12. V levém sloupci jsou uvedeny grafy z obr. 3.18, v prostředním sloupci jsou grafy z obr. 3.19 a v pravém sloupci jsou grafy z obr. 3.20.

Shrnutí simulací Úlohy M

V sekcích 3.2 a 3.3 byly uvedeny simulace Úlohy M-1D a Úlohy M-2D pro různá nastavení. Shrňme výsledky úlohy 3.2.1 a úlohy 3.3.1 obdržené metodou LBM a srovnáme je s výsledky z technické zprávy, viz [27]. Toto závěrečné porovnání je k nahlédnutí na obr. 3.22, který byl navrhnut tak, aby bylo možné srovnat tvary průběhu řešení jednotlivých úloh pro pevné Da . Všimněme si, že řešení jednorozměrné Úlohy M-1D a dvourozměrné Úlohy M-2D se liší nejen v absolutních číslech, ale také tvarem. V Úloze M-1D, uvedené v levém sloupci obr. 3.22, dochází k poklesu koncentrace KL v pevné fázi pomaleji, než je tomu v Úloze M-2D, uvedené v prostředním sloupci. To je způsobeno tím, že ve dvourozměrné úloze může KL difundovat v pevné fázi ve dvou bazických směrech, zatímco v jednorozměrném případě pouze v jednom, tudíž KL se "rozpouští" výrazně pomaleji v Úloze M-1D. Dále je z obr. 3.22 možné vyčíst, že LBM podává pro tyto hodnoty Da přibližně stejné výsledky jako MHFEM. Zároveň dostáváme stejné průběhy řešení jako v referenčním článku [9], ovšem v absolutních číslech se řešení liší. Pokud vynásobíme výsledky z LBM a MHFEM porozitou $\phi_f = 0, 14$, dostáváme výsledky z článku [9], viz [27]. Proto se společně s autory technické zprávy [27] domníváme, že nebyla v článku [9] funkce zdroje f_f vydělena porozitou ϕ_f , viz (3.3.1), což je chyba, jelikož zdroj KL přispívá pouze do kapalné fáze, nikoli do celého objemu oblasti.

Na základě numerických řešení uvedených v sekcích 3.2 a 3.3 a ze srovnání na obr. 3.22 lze usoudit, že mřížková Boltzmannova metoda byla úspěšně použita a podala uspokojivé výsledky v řešení Úlohy M-1D i Úlohy M-2D.

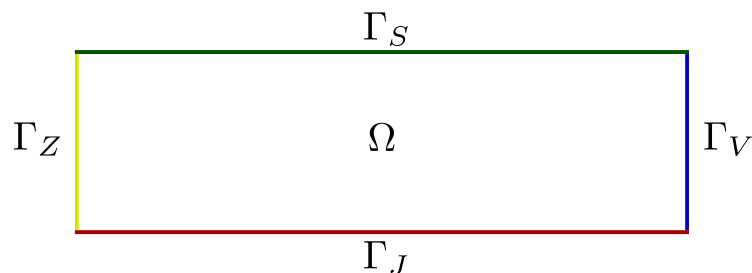




Obrázek 3.22: Srovnání numerických řešení Úlohy M. V levém sloupci jsou uvedeny řešení Úlohy M-1D, viz obr. 3.9, vypočtené metodou SRT-LBM. V prostředním sloupci jsou řešení Úlohy M-2D pro nastavení C získané pomocí SRT-LBM, viz obr. 3.20, a v pravém sloupci jsou řešení pro tutíž úlohu získané pomocí MHFEM, viz [27].

3.4 Úloha C

V této sekci jsou uvedeny výsledky numerických simulací Úlohy C, viz sekce 1.7, pomocí LBM-C, viz sekce 3.4. Uvažujeme dvourozměrnou obdélníkovou oblast Ω a pro jednoduchost zápisu okrajových podmínek označme její hranice dle obr. 3.23.



Obrázek 3.23: Schématické znázornění dvourozměrné výpočetní oblasti Ω s označením částí její hranice.

3.4.1 Proudění a transport KL v nezúžené cévě

Úloha 3.4.1

Nastavení úlohy:

- $\Omega = (0, 5) \times (0, \frac{1}{2})$ cm, viz obr. 3.24
- $T = 0, 15$ s
- $\nu = 10^{-6}$ m² s⁻¹
- $D = 1, 5 \cdot 10^{-4}$ m² s⁻¹
- $\rho_0 = 10^3$ kg m⁻³
- $l_0 = 5 \cdot 10^{-3}$ m
- $\nu^+ = 6, 35 \cdot 10^{-4}$
- $D^+ = 9, 53 \cdot 10^{-2}$

Okrajové a počáteční podmínky:

- Na Γ_Z předepisujeme Dirichletovu okrajovou podmínku s hustotou $\rho = 1$, rychlostí $\vec{v} = (\frac{4}{10}, 0)^T$ m s⁻¹ a koncentrací $c = 1$.
- Na Γ_V předepisujeme rovnovážnou okrajovou podmínku s rychlostí $\vec{v}(5, y) = \vec{v}(5 - \Delta x, y)$ a koncentrací $c(5, y) = c(5 - \Delta x, y)$ a dále $\rho = 1$.
- Na Γ_S, Γ_J uvažujeme bounce-back (halfway) okrajovou podmínku pro rychlost \vec{v} a koncentraci c a dále $\rho = 1$.
- Rovnovážná počáteční podmínka, kde

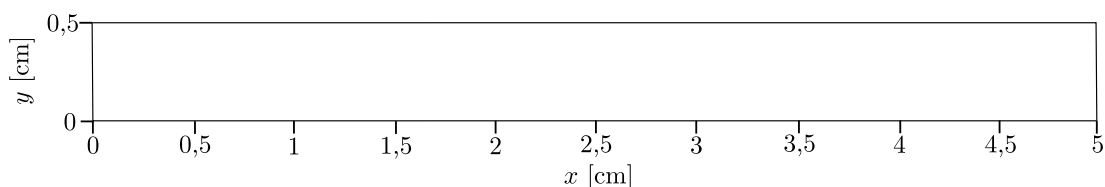
$$\rho = 1, \quad (3.17a)$$

$$c^{\text{ini}}(\vec{x}) = 0 \quad \forall \vec{x} \in \bar{\Omega}, \quad (3.17b)$$

$$\vec{v}_0(\vec{x}) = 0 \quad \vec{x} \in \bar{\Omega}. \quad (3.17c)$$

Diskretizace:

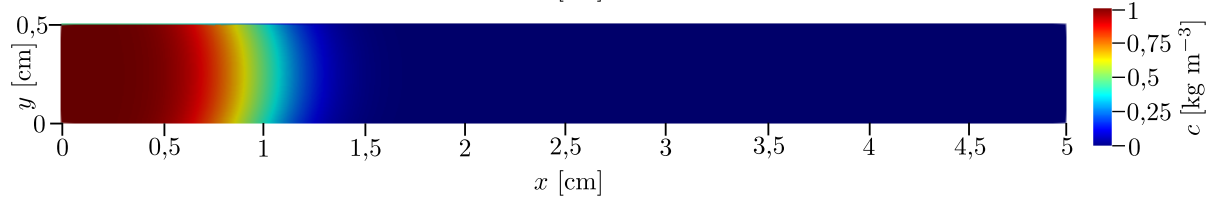
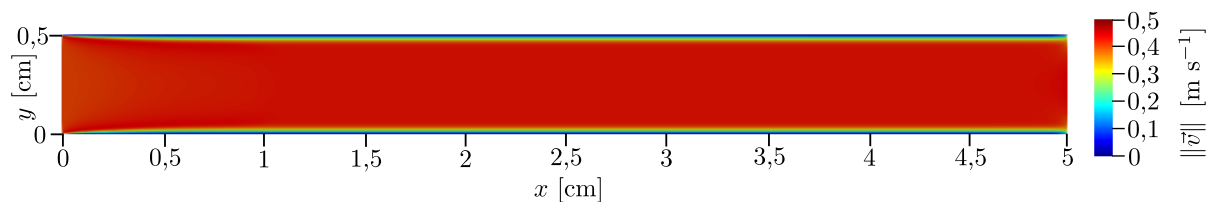
- $N_x \times N_y = 1280 \times 128$



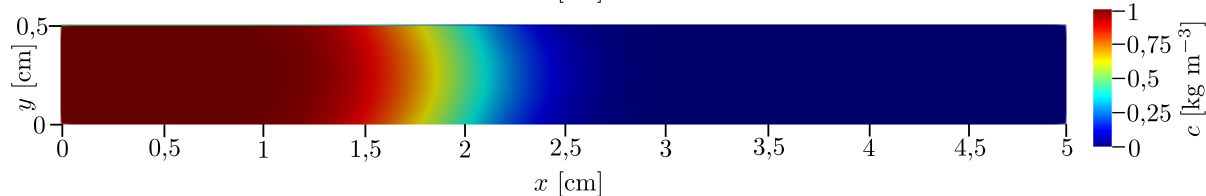
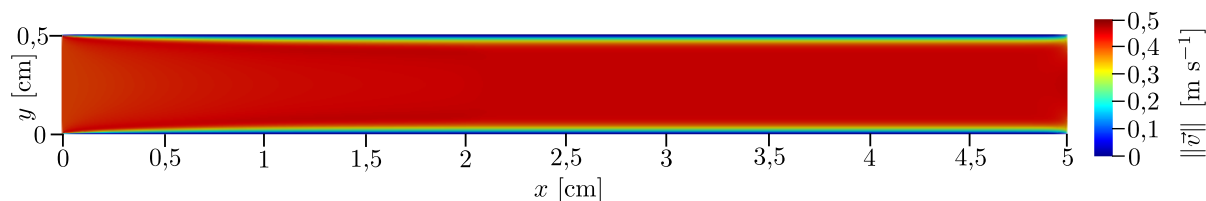
Obrázek 3.24: Schéma výpočetní oblasti v úloze 3.4.1.

Výpočetní oblast úlohy 3.4.1 znázorněna na obr. 3.24 reprezentuje cévu krevního řečiště. Parametry úlohy byly nastaveny tak, aby v rámci možností této práce alespoň přibližně odpovídaly reálné fyzikální úloze proudění a transportu KL v cévě. Fyzikální vlastnosti modelované kapaliny odpovídají fyzikálním vlastnostem vody. Rychlost kapaliny na vstupu a průměr výpočetní oblasti přibližně odpovídají rychlosti

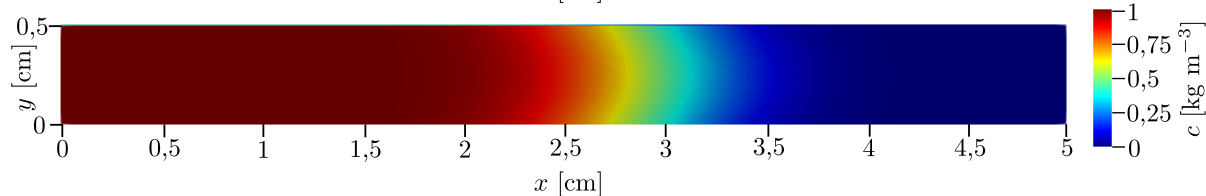
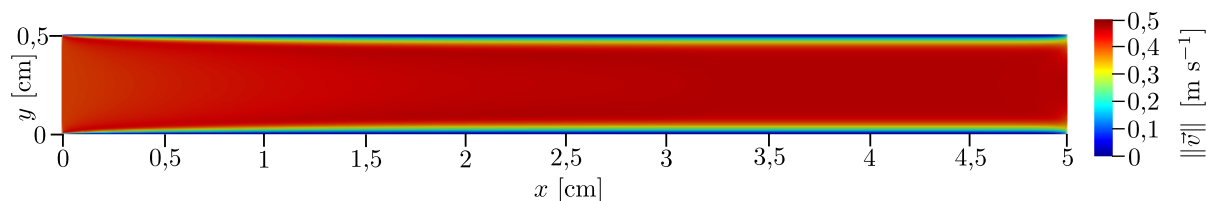
krve v krční tepně (latinsky arteria carotis) a jejímu průměru, viz [13]. Na obr. 3.25 je k nahlédnutí numerické řešení úlohy 3.4.1 pomocí metody LBM-C. Obrázek se skládá ze série dvourozměrných grafů, ve kterých je velikost rychlosti³ kapaliny, resp. koncentrace KL znázorněna barevnou škálou.



(a) $t = 0,025$ s

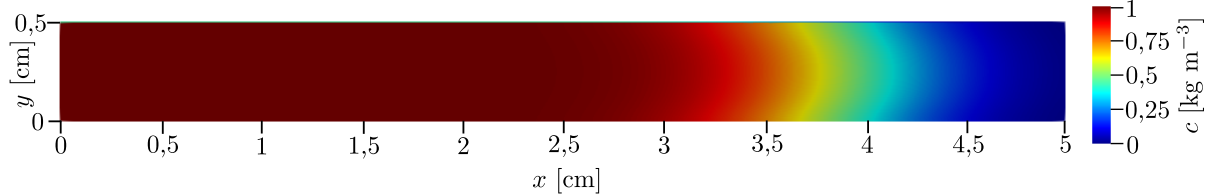
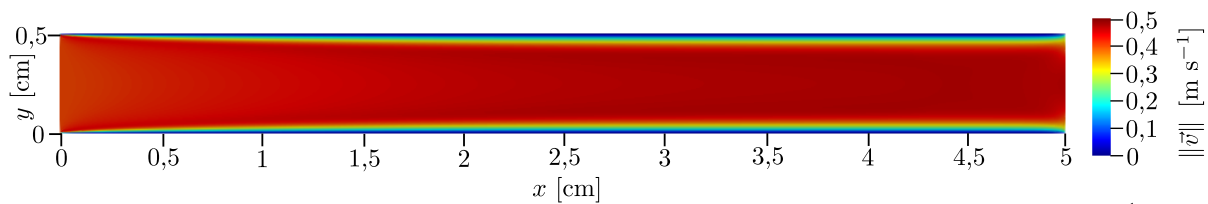


(b) $t = 0,05$ s

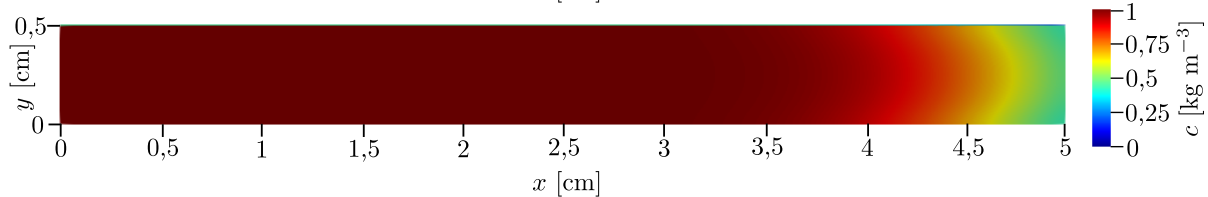
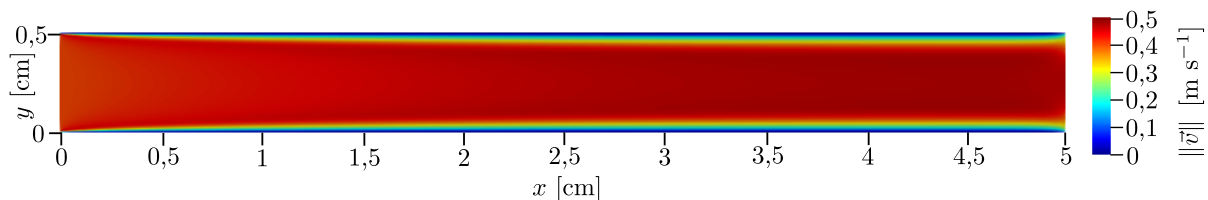


(c) $t = 0,075$ s

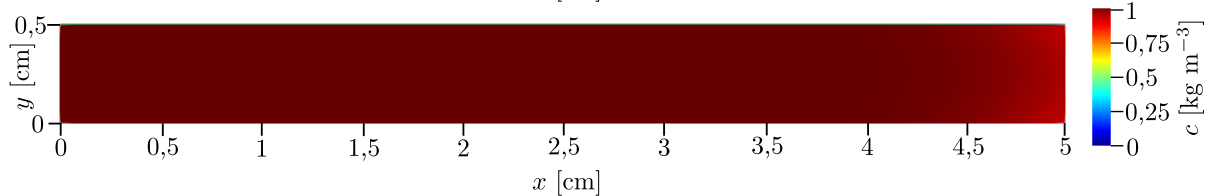
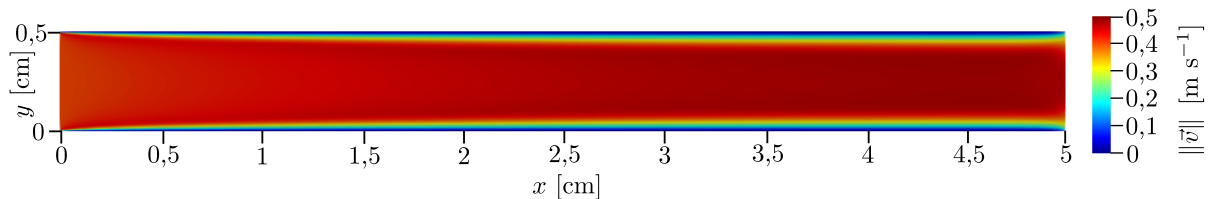
³||·|| značí euklidovskou normu vektoru



(d) $t = 0,1 \text{ s}$



(e) $t = 0,125 \text{ s}$



(f) $t = 0,15 \text{ s}$

Obrázek 3.25: Rozložení velikosti rychlosti kapaliny a koncentrace KL pro řešení úlohy 3.4.1 v různých časech, které jsou zapsány pod každým obrázkem zvlášť. Každý obr. 3.25a až 3.25f se skládá z dvojice dvourozměrných grafů. Horní graf znázorňuje rozložení velikosti rychlosti a dolní graf odpovídá rozložení koncentrace KL. Velikost rychlosti, resp. koncentrace KL je znázorněna barevnou škálou uvedenou u každého grafu vpravo.

3.4.2 Proudění a transport KL v zúžené cévě

Úloha 3.4.2

Nastavení úlohy:

- $\Omega = (0, 5) \times (0, \frac{1}{2})$ cm, viz obr. 3.26
- $T = 0,25$ s
- $\nu = 10^{-6}$ m² s⁻¹
- $D = 1,5 \cdot 10^{-4}$ m² s⁻¹
- $\rho_0 = 10^3$ kg m⁻³
- $l_0 = 5 \cdot 10^{-3}$ m
- $\nu^+ = 6,35 \cdot 10^{-4}$
- $D^+ = 9,53 \cdot 10^{-2}$

Okrajové a počáteční podmínky:

- Na Γ_Z předepisujeme Dirichletovu okrajovou podmínku s hustotou $\rho = 1$, rychlostí $\vec{v} = (\frac{4}{10}, 0)^T$ m s⁻¹ a koncentrací $c = 1$.
- Na Γ_V předepisujeme rovnovážnou okrajovou podmínku s rychlostí $\vec{v}(5, y) = \vec{v}(5 - \Delta x, y)$ a koncentrací $c(5, y) = c(5 - \Delta x, y)$ a dále $\rho = 1$.
- Na Γ_S, Γ_I uvažujeme bounce-back (halfway) okrajovou podmínku pro rychlost \vec{v} a koncentraci c a dále $\rho = 1$.
- Rovnovážná počáteční podmínka, kde

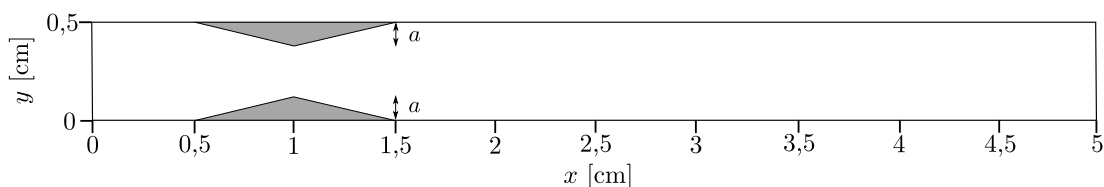
$$\rho = 1, \quad (3.18a)$$

$$c^{\text{ini}}(\vec{x}) = 0 \quad \forall \vec{x} \in \bar{\Omega}, \quad (3.18b)$$

$$\vec{v}_0(\vec{x}) = 0 \quad \vec{x} \in \bar{\Omega}. \quad (3.18c)$$

Diskretizace:

- $N_x \times N_y = 1280 \times 128$

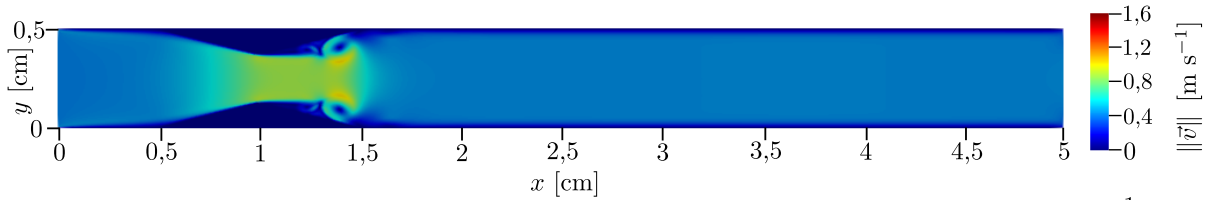


Obrázek 3.26: Schéma výpočetní oblasti v úloze 3.4.2, kde $a = 0,125$ cm.

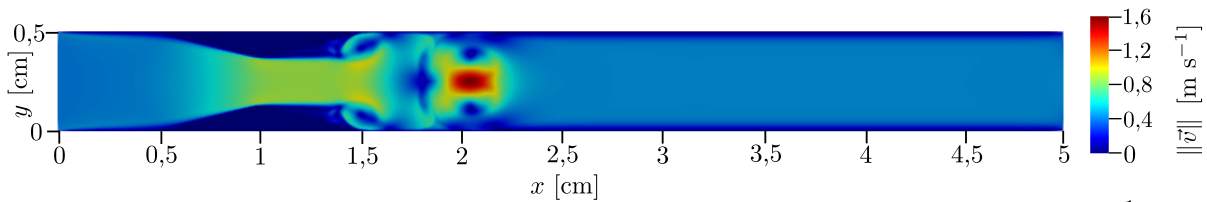
Výpočetní oblast úlohy 3.4.2 znázorněna na obr. 3.24 reprezentuje částečně zúženou cévu krevního řečiště (zúžení se odborně nazývá stenóza cévy⁴). Parametry úlohy byly voleny stejně jako v úloze 3.4.1, až na výpočetní čas T , který byl prodloužen na 0,25 s.

⁴<https://medical-dictionary.thefreedictionary.com/Stenosis>

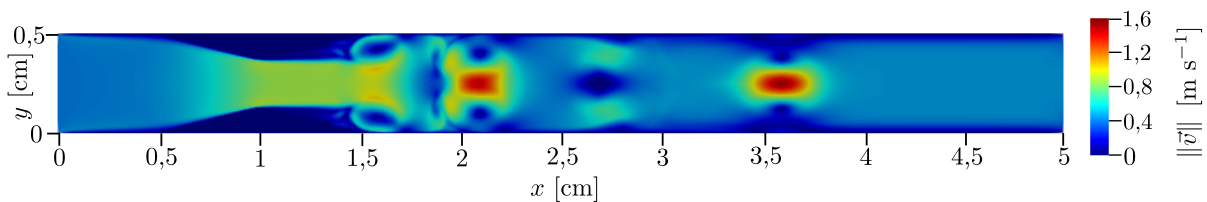
Na obr. 3.27 je k nahlédnutí numerické řešení úlohy 3.4.2 pomocí metody LBM-C. Všimněme si, že zúžení výrazně narušuje rychlostní pole \vec{v} . Z obr. 3.27g až 3.27i je patrné, že rozložení rychlostního pole v oblasti nijak výrazně neovlivňuje rozložení koncentrace KL, jelikož ta nabývá v celé oblasti hodnoty přibližně 1 kg m^{-3} .



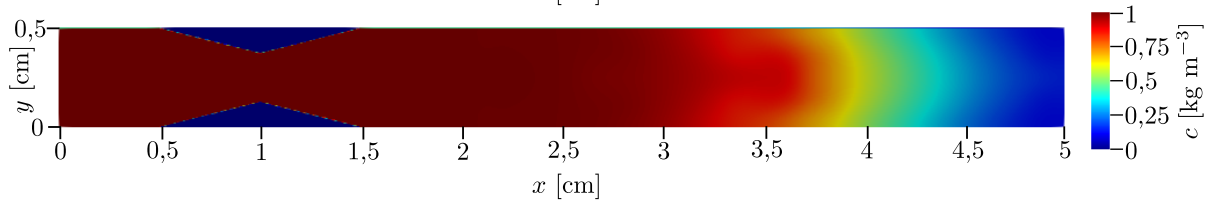
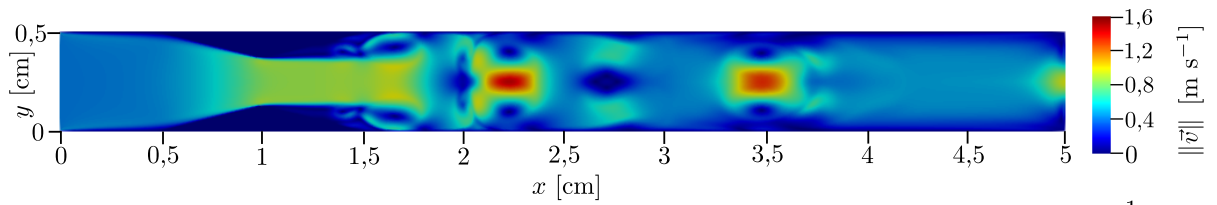
(a) $t = 0,025 \text{ s}$



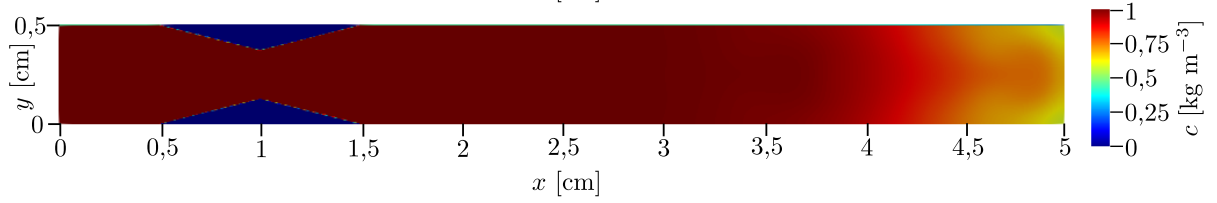
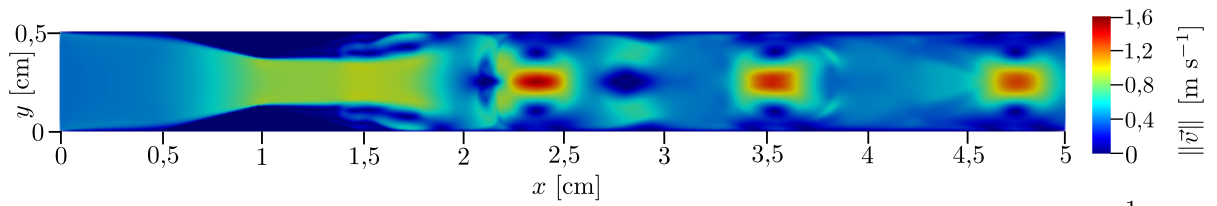
(b) $t = 0,05 \text{ s}$



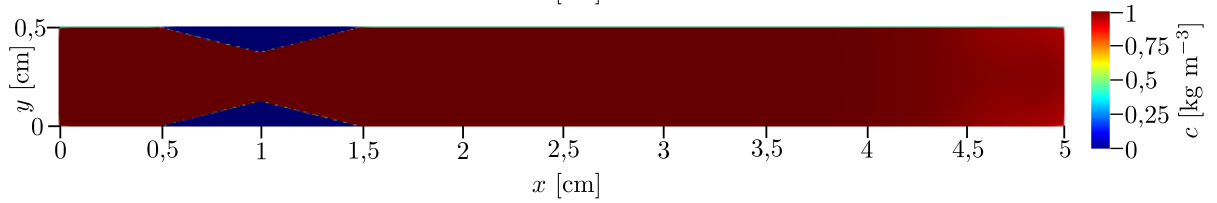
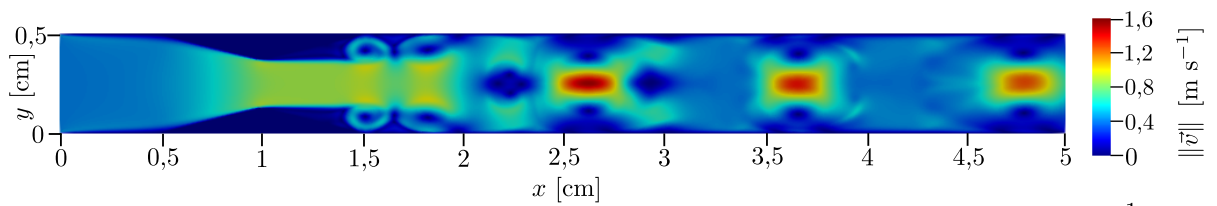
(c) $t = 0,075 \text{ s}$



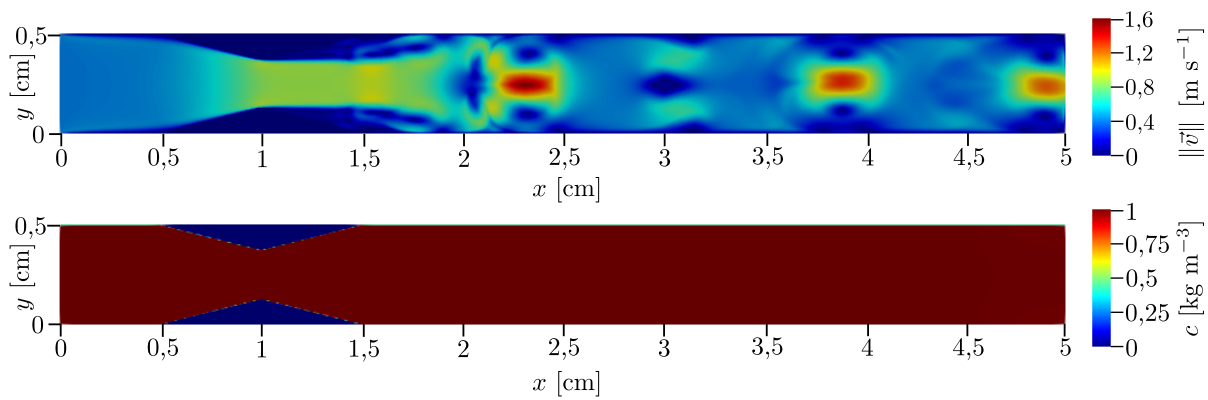
(d) $t = 0, 1$ s



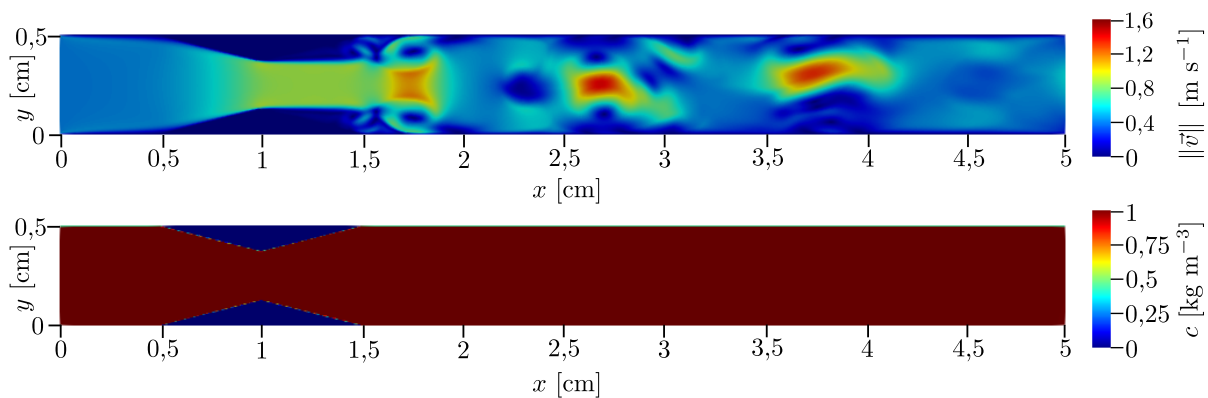
(e) $t = 0, 125$ s



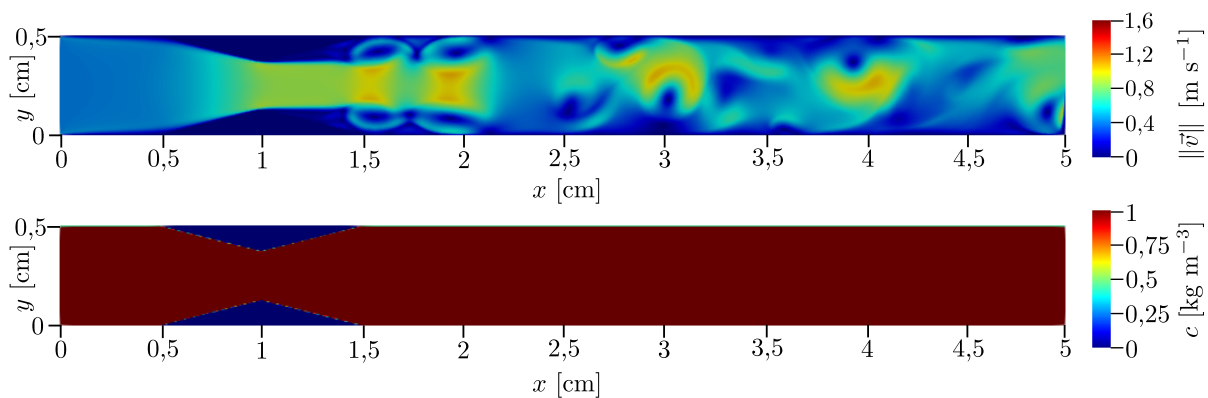
(f) $t = 0, 15$ s



(g) $t = 0,175$ s



(h) $t = 0,2$ s



(i) $t = 0,25$ s

Obrázek 3.27: Rozložení velikosti rychlosti kapaliny a koncentrace KL pro řešení úlohy 3.4.2 v různých časech, které jsou zapsány pod každým obrázkem zvlášť. Každý obr. 3.27a až 3.27i se skládá z dvojice dvourozměrných grafů. Horní graf znázorňuje rozložení velikosti rychlosti a dolní graf odpovídá rozložení koncentrace KL. Velikost rychlosti, resp. koncentrace KL je znázorněna barevnou škálou uvedenou u každého grafu vpravo.

Závěr

Cílem této práce bylo modelovat proudění a transport KL v cévách, které bylo v úvodu této práce rozděleno do třech typových úloh (Úloha M, C, S, viz obr. 1). Hlavní náplní této práce bylo řešení Úlohy M pro intravaskulární a nespecifické KL a dále byla rozpracována Úloha C pro intravaskulární typ KL.

První kapitola byla věnována rovnicím proudění izotermální nestlačitelné vazké newtonovské kapaliny a transportu KL ve volném a porézním prostředí. Dále byl čtenářovi představen matematický model Úlohy M a Úlohy C společně s formulacemi úloh řešenými v této práci. Druhá kapitola se věnovala použitým numerickým metodám, tj. metodě konečných diferencí a mřížkové Boltzmannově metodě. V rámci této kapitoly byla představena numerická schémata Úloh M a C.

Ve třetí kapitole byly nejdříve srovnány zmíněné numerické metody na ryze difuzní úloze s Dirichletovými okrajovými podmínkami a následně byly určeny experimentální řady konvergence obou metod. Bylo experimentálně zjištěno, že pro ryze difuzní úlohu je navržená MKD druhého řádu v prostoru stejně jako LBM je druhého řádu v prostoru při použití anti-bounce-back okrajové podmínky. Následně bylo podobné srovnání provedeno na advekčně-difuzní úloze s dominantní advekcí, kde bylo experimentálně zjištěno, že LBM podává srovnatelně přesná řešení jako MKD už na řádově hrubších sítích/mřížkách. Na základě tohoto pozorování lze považovat LBM za výrazně efektivnější numerickou metodu pro řešení tohoto typu rovnice. Dále jsou ve třetí kapitole uvedeny výsledky jednorozměrné Úlohy M, která byla rovněž spočítána pomocí obou numerických metod. Všechny dosud zmíněné jednorozměrné úlohy byly spočítány kódem vyvinutém v průběhu této práce, jenž obsahuje objektovou implementaci jednorozměrné MKD a LBM v jazyce C++ pro řešení advekčně-difuzní rovnice, resp. jednorozměrné Úlohy M. Zmíněný kód je přiložen k této práci.

Další částí výsledků je numerická simulace dvourozměrné Úlohy M, jejíž nastavení je inspirováno článkem [9], resp. technickou zprávou [27]. Pro nižší Damköhlerova čísla (tj. $Da \leq 1$) poskytla LBM srovnatelně přesné výsledky dvourozměrné Úlohy M jako smíšená hybridní metoda konečných prvků, viz [27]. Numerické schéma LBM představené v této práci bylo úspěšně použito k řešení Úlohy M jak v jednorozměrném, tak ve dvourozměrném případě. Na konci třetí kapitoly jsou čtenářovi k nahlédnutí výsledky dvourozměrné Úlohy C pro intravaskulární typ KL. Simulace této úlohy byla provedena pro výpočetní oblasti dvojího typu reprezentující nezúženou a zúženou cévu krevního řečiště. V rámci této práce byl pro simulaci dvourozměrných Úloh M a C upraven a použit numerický software využívající paralelní LBM implementaci v jazyce C++ s využitím architektury CUDA, který byl vyvinut na Katedře matematiky FJFI ČVUT v Praze.

Předmětem budoucího zkoumání bude mimo jiné rozšíření matematického modelu Úlohy C pro simulaci KL nespecifického typu a simulace Úlohy S (tj. systému cév). Dále je do budoucna záměrem zpracovat případ nehomogenního porézního prostředí v Úloze M a zakomponovat model nenewtonovské kapaliny do LBM schématu v Úloze C. V neposlední řadě je naším cílem rozšíření simulací Úlohy M a C do trojrozměrného prostoru.

Literatura

- [1] Anderson, J. D. a Wendt, J. *Computational fluid dynamics*. Sv. 206. Springer, 1995.
- [2] Bastian, P. „Numerical computation of multiphase flow in porous media“. Habilitationsschrift. Univeristät Kiel, 1999.
- [3] Bear, J a Verruijt, A. „Modeling groundwater flow and pollution.“ In: *D. Reidel, Dordrecht, the Netherlands*. (1990).
- [4] Bear, J. *Modeling phenomena of flow and transport in porous media*. Sv. 31. Springer, 2018.
- [5] Bhatnagar, P. L., Gross, E. P. a Krook, M. „A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems“. In: *Physical review* 94.3 (1954), s. 511.
- [6] Chabiniok, R., Súpupová, L., Kautznerová, D. a Tintěra, J. „Vyšetření srdce a velkých cév magnetickou rezonancí - přehled metod a nové perspektivy“. In: *Ces Radiol* 74.1 (2017), 279–290.
- [7] Chen, Z., Huan, G. a Ma, Y. *Computational methods for multiphase flows in porous media*. Sv. 2. Siam, 2006.
- [8] Coelho-Filho, O. R., Rickers, C., Kwong, R. Y. a Jerosch-Herold, M. „MR myocardial perfusion imaging“. In: *Radiology* 266.3 (2013), s. 701–715.
- [9] Cookson, A. N., Lee, J., Michler, C., Chabiniok, R., Hyde, E, Nordsletten, D. a Smith, N. „A spatially-distributed computational model to quantify behaviour of contrast agents in MR perfusion imaging“. In: *Medical image analysis* 18.7 (2014), s. 1200–1216.
- [10] Dziuk, G. „Convergence of a semi-discrete scheme for the curve shortening flow“. In: *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences* 4.04 (1994), s. 589–606.
- [11] Eichler, P. „Matematické modelování interakce elastického tělesa s nestlačitelnou tekutinou“. Diplomová práce. České vysoké učení technické v Praze, 2018.
- [12] Eichler, P. „Matematické modelování subsonického proudění okolo překážek pomocí metody Lattice–Boltzmann na GPU“. Bakalářská práce. České vysoké učení technické v Praze, 2016.
- [13] Fung, Y. „Blood flow in arteries“. In: *Biomechanics*. Springer, 1997, s. 108–205.
- [14] Fučík, R. „Advanced numerical methods for modelling two-phase flow in heterogeneous porous media“. Doctoral dissertation. Czech Technical University in Prague, 2010.
- [15] Geier, M., Greiner, A. a Korvink, J. G. „Cascaded digital lattice Boltzmann automata for high Reynolds number flow“. In: *Physical Review E* 73.6 (2006), s. 066705.
- [16] Geier, M., Greiner, A. a Korvink, J. G. „Properties of the cascaded lattice Boltzmann automaton“. In: *International Journal of Modern Physics C* 18.04 (2007), s. 455–462.
- [17] Gerke, H. a Van Genuchten, M. T. „Evaluation of a first-order water transfer term for variably saturated dual-porosity flow models“. In: *Water Resources Research* 29.4 (1993), s. 1225–1238.

- [18] Guo, Z. a Shu, C. *Lattice Boltzmann method and its applications in engineering*. Sv. 3. World Scientific, 2013.
- [19] Hornung, U. *Homogenization and porous media*. Sv. 6. Springer Science & Business Media, 1996.
- [20] Kingman, J. F. C. a Taylor, S. J. *Introduction to Measure and Probability*. Cambridge University Press, 2008.
- [21] Kohoutek, J., Tintěra, J. et al. „Současné možnosti a perspektivy magnetické rezonance v kardiologii“. In: *Interv Akut Kardiol* 2 (2003), s. 30–36.
- [22] Krüger, T., Kusumaatmaja, H., Kuzmin, A., Shardt, O., Silva, G. a Vigggen, E. M. „The lattice Boltzmann method“. In: *Springer International Publishing* 10 (2017), s. 978–3.
- [23] Kulhánek, P. *Statistická fyzika - studijní text pro doktorské studium*. 2002.
- [24] LeVeque, R. J. *Numerical methods for conservation laws*. Sv. 3. Springer, 1992.
- [25] McNamara, G. R. a Zanetti, G. „Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata“. In: *Physical review letters* 61.20 (1988), s. 2332.
- [26] Nordbotten, J., Celia, M. A., Dahle, H. a Hassanizadeh, S. „Interpretation of macroscale variables in Darcy’s law“. In: *Water resources research* 43.8 (2007).
- [27] Polívka, O., Fučík, R. a Solovská, K. *Mathematical Modeling of Myocardial Perfusion*. Tech. zpr. Progress report of the project NV15-27178A (Internal MMG report 4-17), Czech Technical University in Prague, 2017.
- [28] Premnath, K. N. a Banerjee, S. „Incorporating forcing terms in cascaded lattice Boltzmann approach by method of central moments“. In: *Physical Review E* 80.3 (2009), s. 036702.
- [29] Sharma, K. V., Straka, R. a Tavares, F. W. „New cascaded thermal lattice Boltzmann method for simulations of advection-diffusion and convective heat transfer“. In: *International Journal of Thermal Sciences* 118 (2017), s. 259–277.
- [30] Towbin, J. A. „Inherited cardiomyopathies“. In: *Circulation Journal* (2014), CJ–14.
- [31] Vitásek, E. *Numerické metody*. SNTL-Nakladatelství technické literatury, 1987.