

Západočeská univerzita v Plzni

Fakulta aplikovaných věd

Katedra mechaniky

Diplomová práce

**Využití lattice Boltzmannovy metody pro  
numerické řešení proudění krve ve  
vybraných problémech kardiovaskulární  
biomechaniky**

Plzeň, 2022

**Bc. David Hron**

## **Prohlášení**

Prohlašuji, že jsem diplomovou práci zpracoval samostatně a že jsem uvedl použitou literaturu a všechny prameny, ze kterých jsem čerpal.

V Plzni dne 31. května 2022

.....

Podpis

## Poděkování

Rád bych na tomto místě poděkoval Ing. Aleně Jonášové, Ph. D. za konzultace biologického názvosloví a významnou pomoc s programem *HyperMesh*, Ing. Stanislavu Pláničkovi, Ph. D. za představení programu *Ansys Fluent* a Bc. Kateřině Škorvánkové za pomoc se stylistickou formou práce a za psychickou podporu.

Dík patří také Ing. Veronice Duškové za rady. Veronice budu muset poděkovat rovnou dvakrát, neboť jsem ji zapomněl uvést v poděkování bakalářské práce, kde by si poděkování také zasloužila.

Především však děkuji doc. Ing. Janu Vimroví, Ph. D. za čas, který mi věnoval, a za trpělivost, kterou se mnou měl.

Nemalý dík za nezbytnou duševní podporu patří rodičům, sourozencům, přítelkyni, Ing. Veronice Duškové a všem dobrým lidem, které jsem měl tu čest na akademické půdě potkat.

## Anotace

Tato diplomová práce se věnuje implementaci lattice Boltzmannovy metody pro numerické řešení vybraných problémů kardiovaskulární biomechaniky. Je provedena rešerše literatury zaměřená na využití lattice Boltzmannovy metody v oblasti kardiovaskulární biomechaniky a jsou popsány základní principy kinetické teorie, na nichž metoda staví. Následně je představen algoritmus lattice Boltzmannovy metody včetně implementace okrajových podmínek typu „Zou-He“ v rovinných oblastech různých geometrií. Jsou prezentovány numerické simulace ustáleného proudění krve jak v idealizovaném, tak v reálném 2D modelu cévní bifurkace. V závěru práce je studován vliv úhlu mezi dceřinými větvemi idealizované symetrické 2D cévní bifurkace na proudové pole, konkrétně na hodnoty smykového napětí na stěně.

**Klíčová slova:** lattice Boltzmannova metoda, kardiovaskulární biomechanika, idealizovaná cévní bifurkace, karotida, numerické simulace, okrajové podmínky typu „Zou-He“

## Abstract

This diploma thesis deals with the implementation of the lattice Boltzmann method for the numerical solution of selected problems of cardiovascular biomechanics. A literature search is performed, which focuses on the use of the lattice Boltzmann method in the field of cardiovascular biomechanics. The basic principles of kinetic theory on which the method is based are described. Subsequently, the algorithm of lattice Boltzmann method is presented, including the implementation of *Zou-He* boundary conditions in planar regions of various geometries. Numerical simulations of steady blood flow in both idealized and real 2D model of vascular bifurcation are presented. At the end of the work, the influence of the angle between the daughter branches of the idealized symmetric 2D vascular bifurcation on the velocity field, specifically on the values of shear stress on its wall, is studied.

**Keywords:** lattice Boltzmann method, cardiovascular biomechanics, idealized vascular bifurcation, carotid artery, numerical simulations, Zou-He boundary conditions

# Obsah

Úvod	1
<b>1 Rešerše využití lattice Boltzmannovy metody pro řešení problémů kardiovaskulární biomechaniky</b>	<b>3</b>
1.1 Modelování proudění krve v cévě postižené aneurysmatem . . .	3
1.2 Simulace proudění krve přes umělou srdeční chlopuň . . . . .	5
1.3 Simulace transportu krevních buněk . . . . .	8
1.4 Simulace proudění krve v cévní bifurkaci . . . . .	9
1.5 Simulace proudění krve v cévách s poddajnými stěnami . . . .	11
1.6 Simulace krevního toku srdcem pacienta postiženého vrozenou srdeční vadou . . . . .	12
1.7 Shrnutí . . . . .	13
<b>2 Teoretické pozadí lattice Boltzmannovy metody</b>	<b>14</b>
2.1 Boltzmannova rovnice a distribuční funkce . . . . .	14
2.1.1 Diskretizace Boltzmannovy rovnice v čase . . . . .	16
2.2 Lokální rovnovážná distribuční funkce . . . . .	17
2.2.1 Zjednodušené vyjádření lokální rovnovážné distribuční funkce pro problémy pomalého proudění . . . . .	18
2.3 Lattice Boltzmannova rovnice . . . . .	19
2.3.1 Numerický výpočet momentů distribuční funkce . . . .	19
2.3.2 Diskretizace Boltzmannovy rovnice ve fázovém prostoru	19
<b>3 Implementace lattice Boltzmannovy rovnice</b>	<b>24</b>
3.1 Převod fyzikálních veličin . . . . .	25
3.1.1 Reynoldsovo podobnostní číslo . . . . .	26
3.2 Kolize . . . . .	27
3.3 Propagace . . . . .	28
3.4 Okrajové podmínky . . . . .	29
3.4.1 Okrajové podmínky typu „ <i>bounce-back</i> “ . . . . .	29
3.4.2 <i>Periodické</i> okrajové podmínky . . . . .	31
3.4.3 <i>Modifikované periodické</i> okrajové podmínky . . . . .	31
3.4.4 Okrajové podmínky typu „ <i>Zou-He</i> “ . . . . .	32
3.4.5 Extrapoláční schéma . . . . .	40
3.5 Vyhodnocení makroskopických veličin . . . . .	41
3.6 Numerické simulace . . . . .	42

3.6.1	Testování okrajových podmínek při řešení problému proudění kapaliny v obdélníkovém kanálu . . . . .	42
3.6.2	Proudění krve v idealizované cévní bifurkaci . . . . .	49
3.6.3	Proudění krve v cévní bifurkaci reálné geometrie . . . . .	55
<b>4</b>	<b>Analýza vlivu úhlu větvení symetrické bifurkace na proudové pole</b>	<b>58</b>
4.1	Numerické simulace . . . . .	59
4.1.1	Aplikace Murrayho teorie . . . . .	62
	<b>Závěr</b>	<b>64</b>
	<b>Literatura</b>	<b>66</b>

# Úvod

Výpočtové metody dynamiky tekutin (CFD - Computational Fluid Dynamics) tvoří v současné době nedílnou součást aplikované mechaniky. Metody konečných prvků (FEM) a konečných diferencí (FDM) byly poprvé aplikovány na řešení problémů dynamiky tekutin na konci šedesátých let minulého století a metoda konečných objemů (FVM) byla vyvinuta v roce 1980. Lattice Boltzmannova metoda, stavějící na principu buněčných automatů, je ze zde uvedených výpočtových metod v kontextu řešení problémů dynamiky tekutin nejmladší. Poprvé byla představena jako nástroj numerického řešení proudění až v roce 1988 pány McNamarou a Zanettim [34]. Konvenční konečno-prvkové výpočtové metody dynamiky tekutin řeší rovnice popisující zachování hmotnosti, hybnosti a celkové energie na diskrétních prvcích, objemech nebo uzlech. Jinými slovy, nelineární parciální diferenciální rovnice jsou pomocí těchto konvenčních metod převedeny na soustavu nelineárních algebraických rovnic, které jsou řešeny iteračně. Lattice Boltzmannova metoda užívá přístup zcela odlišný. Tekutinu nahrazuje tzv. shluky částic. Standardní algoritmus lattice Boltzmannovy metody pak na výpočtové oblasti sleduje srážky (kolize) a přemísťování (propagaci) těchto shluků v uvažovaných směrech. Přestože lattice Boltzmannova metoda v současné době ještě není součástí běžně užívaných profesionálních výpočetních softwarů pro řešení proudění tekutin, je inženýry speciálně vyhledávána pro numerické řešení konkrétních problémů. V úlohách kardiovaskulární biomechaniky je lattice Boltzmannova metoda s výhodou užívána především díky snadné implementaci okrajových podmínek simulující různé fyziologické a patologické stavy a díky možnosti numericky simulovat transport a depozici různých částic v krvi.

Význam numerických simulací v oblasti kardiovaskulární biomechaniky s rozvojem počítačové techniky neustále roste. V současné době se numerické simulace v biomechanice neomezují pouze na nástroj pro zodpovězení vědeckých otázek, ale stále častěji se užívají k predikci rozvoje a léčby nemocí konkrétních pacientů.

## Struktura práce

V první kapitole je provedena rešerše literatury s cílem stručně popsat základní problémy kardiovaskulární biomechaniky, které autoři s výhodou řeší právě užitím lattice Boltzmannovy metody. Ve druhé kapitole je stručně nastíněno teoretické pozadí lattice Boltzmannovy metody. Zřetel je brán především

na představení rychlostního modelu D2Q9, jehož způsob implementace je předmětem kapitoly třetí. Nemalý prostor je zde rovněž věnován způsobu modelování stěny obecného tvaru na uvažované mřížkové čtvercové oblasti. Vlastním přínosem prezentovaným v této kapitole je pak (na základě citované teorie [52]) odvození implementovatelných okrajových podmínek pro zadaný tlak nebo rychlost tekutiny na obecné stěně a provedení numerických simulací proudění krve na 2D výpočtových oblastech různých geometrií s užitím těchto okrajových podmínek. V závěrečné čtvrté kapitole je s využitím numerických simulací popsán vliv změny úhlu rovinné symetrické idealizované bifurkace na velikost extrémních hodnot smykového napětí (WSS - Wall Shear Stress) na jejích stěnách a je diskutován vliv hodnot smykového napětí na pravděpodobnost vzniku patologických jevů v arteriální bifurkaci.

## Cíle práce

Uvedme dále cíle této diplomové práce:

- Provedení rešerše zaměřené na aplikaci lattice Boltzmannovy metody v úlohách kardiovaskulární biomechaniky.
- Vytvoření geometricky variabilního výpočtového modelu arteriální bifurkace ve 2D.
- Vývoj výpočetních algoritmů pro implementaci lattice Boltzmannovy metody pro numerické řešení proudění krve.
- Posouzení vlivu vybraných geometrických parametrů 2D modelu arteriální bifurkace na proudové pole.
- Vyhodnocení a diskuse dosažených numerických výsledků, formulace závěrů.



# Kapitola 1

## Rešerše využití lattice Boltzmannovy metody pro řešení problémů kardiovaskulární biomechaniky

V této kapitole představujeme vybrané studie užívající lattice Boltzmannovu metodu pro řešení problémů kardiovaskulární biomechaniky.

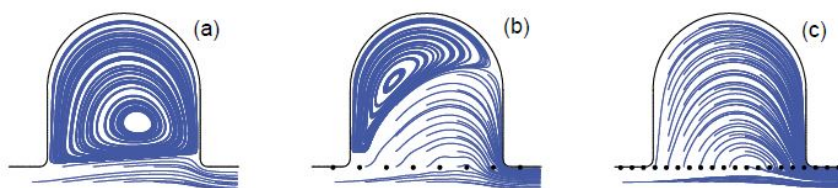
Po více než dvou desítkách let vývoje je lattice Boltzmannova metoda vhodnou alternativní numerickou metodou pro studium modelování proudění tekutin [31]. Možných aplikací lattice Boltzmannovy metody je v současné době mnoho. Jako příklady uveďme řešení proudění stlačitelných i nestlačitelných tekutin přes porézní médium [6] nebo proudění suspenze [25] či proudění krve v cévním oběhu. V této kapitole se věnujeme výhradně úlohám kardiovaskulární biomechaniky. Právě numerický model kardiovaskulární hemodynamiky může s dostatečnou přesností predikovat možnost výskytu kardiovaskulárních chorob, které jsou v současnosti nejčastější příčinou úmrtí v západních zemích [8, 41]. Představením těchto aplikací bude demonstrován široký záběr lattice Boltzmannovy metody a vhodnost použití metody ve zmíněném oboru.

### 1.1 Modelování proudění krve v cévě postižené aneurysmatem

Aneurysma je ohraničené rozšíření tepny (výduť) způsobené strukturálními změnami v její stěně. Může postihnout kteroukoli tepnu, nejčastěji však postihuje aortu. Ruptura aneurysmatu může zapříčinit smrt nebo trvalé postižení pacientů [39]. Léčba aneurysmat porézním stentem byla navržena jako minimálně invazivní způsob její prevence. Stentem rozumíme ohebnou válcovou trubici vyrobenou z pletiva z nerezové oceli nebo slitiny [21]. Pro-

pustnost stentů je navržena k takovému snížení rychlosti toku v aneurysmatu, které je dostatečné k úspěšnému vyvolání trombózy ve výduti a tak obnovení normálního toku v cévě [20].

Cílem článku [21] publikovaného v roce 2004 bylo pomocí lattice Boltzmannovy metody identifikovat, jak struktura stentu a jeho umístění ovlivňuje hemodynamické vlastnosti proudění krve uvnitř aneurysmatu. Autoři modelovali dvourozměrný problém proudění krve v obdélníkovém kanálu s připojenou dutinou, viz obr. 1.1. Krev byla simulována jako newtonská homogenní nestlačitelná kapalina. Dále byla pro jednoduchost uvažována dokonale tuhá stěna cévy a byl předepsán konstantní tlakový gradient nad zkoumaným kanálem.



Obr. 1.1: Vybrané výsledky článku [39] a) aneurysma bez stentu, b) a c) se stentem.

Autoři popisovali vliv velikosti, materiálu, propustnosti a umístění stentu na vznik recirkulačních zón uvnitř aneurysmatu, na hodnoty smykového napětí na stěnách cévy a na redukcí rychlosti uvnitř cévy. Závislosti mezi těmito veličinami jsou ve shodě s experimentálními výsledky zveřejněnými v literatuře, viz [4]. Navíc byly formulovány nové závislosti, které literatura [4] neobsahuje. Studie publikovaná v článku [20] navázala na tento výzkum. Na základě výsledků stejné numerické simulace zde byly formulovány nové parametry, jejichž změna má přímý vliv na redukcí rychlosti a průtoku krve v cévách obsahujících aneurysma se stentem. Dle autorů článku lattice Boltzmannova metoda na rozdíl od běžných CFD řešičů nabízí možnost snadno implementovat různě definované okrajové podmínky. Toho s výhodou využili i při řešení tohoto problému.

Další studií na podobné téma je studie [39]. Její autoři rozšířili standardní algoritmus lattice Boltzmannovy metody pro proudění krve jako neneutonské kapaliny o krok, který realizoval proces srážení krve. S tímto algoritmem pak sestavili 2D numerický model, s jehož pomocí simulovali vznik krevních sraženin v okolí různě velkých aneurysmat. V závěru studie byla na základě numerických simulací vyčíslena tzv. prahová hodnota smykové rychlosti pro konkrétní model. Pro smykové rychlosti nižší než tato hodnota vzniká trombóza a pro smykové rychlosti vyšší dochází k zastavení vzniku trombu.

Další prací na obdobné téma je práce výzkumného týmu vedeného R. Qua-

redem [38]. Zde je detailně popsáno sestavení numerického modelu pomocí lattice Boltzmannovy metody řešícího úlohu proudění krve v aneurysmatu se stentem ve dvourozměrném prostoru podobně jako v článku [21], resp. [20]. Autoři dále uvažují krev jako neneutonskou kapalinu a jejich algoritmus připouští možnost vzniku krevních sraženin stejně, jako je tomu v článku [39]. Ačkoli Quared zde řeší 'pouze' benchmarkové příklady, jeho práce názorně demonstruje snadnou implementovatelnost lattice Boltzmannovy metody pro řešení problémů proudění neneutonské kapaliny.

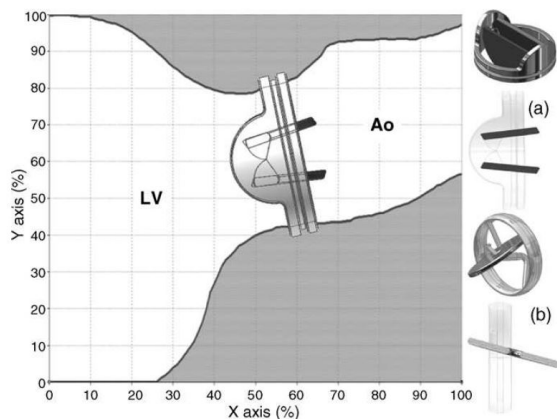
## 1.2 Simulace proudění krve přes umělou srdeční chlopuň

První srdeční chlopuň byla úspěšně implantována do lidského těla v roce 1952 [23]. Od té doby probíhá experimentální i teoretický výzkum, jehož cílem je návrh vhodného designu a materiálu umělé srdeční chlopuň tak, aby co nejlépe imitovala chování té biologické. U pacientů s umělou náhradou srdeční chlopuň je totiž zvýšená pravděpodobnost vzniku trombů a hemolýzy [48]. To, že lze dobře numericky simulovat proudění krve přes srdeční chlopuň pomocí lattice Boltzmannovy metody, dokazuje několik nedávno zveřejněných výzkumů.

Jako první představme článek publikovaný pod záštitou bioinženýrského institutu Venezuelské univerzity, viz [40]. Cílem autorů bylo pomocí tzv. multiple relaxation time lattice Boltzmannovy metody ve variantě řešící izotermické laminární proudění simulovat interakci tekutiny s pohybujeící se mechanickou aortální chlopuň ve dvourozměrném prostoru. Byly uvažovány modely (tvar a materiálové charakteristiky) chlopuň HK valve (Hall Kaster, Medtronic Hall) a SJM valve (St. Jude Medical). Krev byla aproximována jako newtonská nestlačitelná kapalina s odpovídající hustotou a viskozitou. Výpočtová oblast byla modelována podle biologických příruček na uniformní ortogonální síti a stěny tkáně byly pro potřeby simulace uvažovány jako dokonale tuhé a nepropustné. Vstupní a výstupní okrajové podmínky byly voleny tak, aby co možná nejlépe aproximovaly reálné biologické děje. V tomto případě byla zadána časově závislá rychlost na vstupu do sledované oblasti (levá komora) a rychlostní parabolický profil na výstupu ze sledované oblasti (aorta). Geometrie zadaného problému je pro ilustraci zobrazena na obr. 1.2. 'Standardní' sekvence lattice Boltzmannovy metody propagace-kolize je rozšířena o přesíťovací krok (*re-meshing step*), který odráží pohyb umělé chlopuň. V tomto kroku je změněna definice vybraných buněk určujících kapalinu na buňky určující pevnou umělou chlopuň (a opačně).

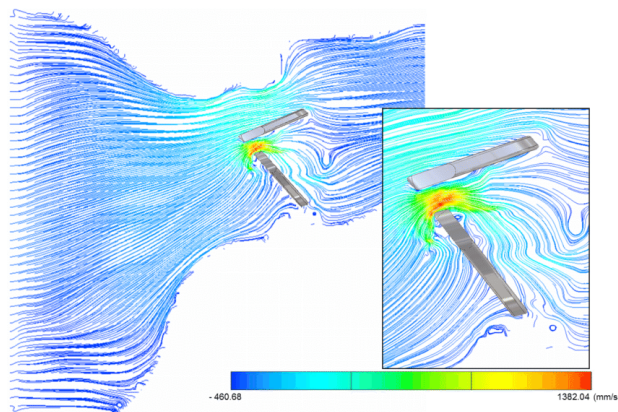
Autoři nejprve popisují zavedení okrajových podmínek pro interakci kapaliny s pohybujeící se pevnou překážkou (*moving boundary condition*). Správnost jejich zavedení ověřují validačními příklady. Až následně představují výsledné

průběhy rychlostí a smykového napětí sledovaného okolí umělé srdeční chlopně v daných časech. Pro lepší představu přikládáme obr. 1.3 z citované práce, který zachycuje proudnice v autory zvoleném čase.



Obr. 1.2: Schématicky zobrazené zadání problému řešeného v [40], (a) SJM valve, (b) HK valve.

Numerickou simulací byly kvalitativně dosaženy experimentální hodnoty studovaného problému. Připouští se zde však limitace ortogonální sítě (D2Q9) na detailní zachycení pohybu chlopní s odkazem na literaturu řešící právě proudění na neortogonální síti, viz [14]. Autoři se samozřejmě netají skutečností, že se jedná o prvotní práci idealizující geometrii a stavy realizované okrajovými podmínkami. Přesto věří, že studie dokazuje možnost dostatečně přesné simulace proudění krve přes umělou srdeční chlopně právě pomocí lattice Boltzmannovy metody.

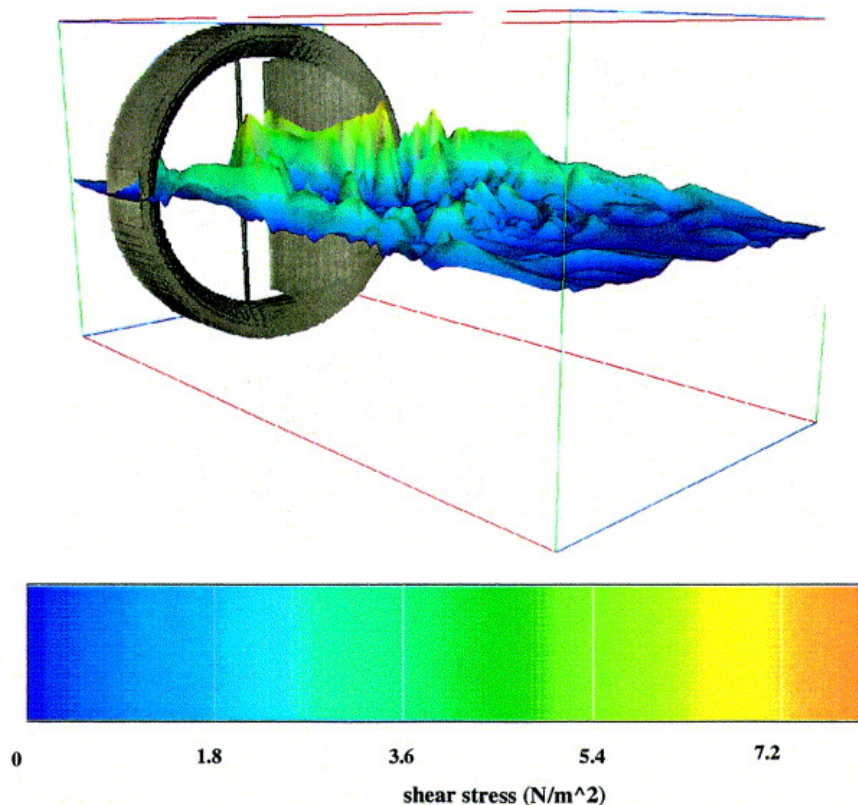


Obr. 1.3: Proudnice v daném čase ( $T = 0,16$  s) podle [40].

Další hojně citovanou studií na stejné téma, kterou představíme, je práce autorů Krafczyk a spol, viz [26]. Ti zkoumali změny průtoku krve po zavedení umělé aortální chlopně do válcového krevního řečiště v závislosti na různých fixních úhlech otevření cípů umělé chlopně při různých vstupních a výstupních (i časově proměnných) okrajových podmínkách. Předmětem

práce bylo demonstrovat možné užití lattice Boltzmannovy metody při řešení problémů proudění krve přes umělou chlopeň ve trojrozměrném prostoru. Vyšetřované smykové napětí se řádově shodovalo se smykovým napětím identifikovaným experimentálními studiemi od jiných autorů [29]. Příkladáme obr. 1.4 autory představeného numerického výsledku smykového napětí v daném čase. Stejně jako v případě výše zmíněného výzkumu je i zde poukázána limitace zvolené ortogonální uniformní výpočtové sítě (D3Q15). Podle autorů použití jednotné mřížky snižuje možnost představeného algoritmu modelovat detailně vliv tloušťky cípů chlopní a dalších geometrických parametrů na proudové pole s odkazem na potřebu dalšího bádání.

Práce badatelské skupiny pod vedením profesora Krafczyka navázala na tuto studii prací [27], ve které položila základ řešení interakce kapaliny a pevného pohyblivého tělesa užitím lattice Boltzmannovy metody. V práci zkoumá proudění krve přes pohyblivou chlopeň ve dvourozměrném obdélníkovém kanálu. Tuto práci pak doplnil a rozšířil profesor Monrroy ve studii [40].



Obr. 1.4: Smykové napětí  $|\sigma_{xy}|$  v daném čase ( $T = 0,165$  s) podle [26].

## 1.3 Simulace transportu krevních buněk

Lidská krev je tkání skládající se o něco více než z poloviny (55-60 %) z tekuté složky - krevní plazmy - a zbývajících složek pevných: červených krvinek (erytrocytů), bílých krvinek (leukocytů) a krevních destiček. Ve specifických případech, jako je např. proudění krve v mikrovaskulárních sítích, nelze existenci pevných složek plně zanedbat.

Cílem článku [45] bylo představit algoritmus, který dokáže simulovat průtok krve v komplexních mikrovaskulárních sítích explicitním zohledněním agregace červených krvinek, interakcí leukocyt-endotel a vzájemné interakce krevních buněk. Lattice Boltzmannova metoda se ukazuje jako vhodná, snadno implementovatelná metoda pro řešení takového problému, neboť zmíněné jevy zohledňuje prostým rozšířením standardního kolizního kroku a dále pak rozšířením algoritmu o přesíťovací krok definující buňky výpočtové sítě (plazma x krvinka). Pomocí tohoto algoritmu řeší autoři nestacionární proudění krve v mikrocévě a na základě numerických výsledků pak formulují závislost mezi vzdáleností buňky od cévy a smykovým napětím na stěnách cévy. Získané závislosti jsou ve shodě s odbornou literaturou.

V článku [44] stejná výzkumná skupina pak pomocí dalších vyvinutých rheologických modelů sestavila algoritmus zohledňující chování pevných tělísek v krvi, který je schopen simulovat únik plazmy v případě nedokonalé těsnosti (propustnosti) cév při proudění krve ve dvourozměrném prostoru. Na základě těchto simulací je možné predikovat pravděpodobnost vzniku nádorů.

Další komplexní studie zveřejněná v článku [11] se zabývala prouděním krve s uvažováním vlivu pevných těles v ní obsažených a sestavením numerického řešiče lattice Boltzmannovy metody tentokrát ve trojdimenzionálním prostoru (s užitím modelu D3Q19). Autoři v úvodu článku poukazují na skutečnost, že mnoho nemocí má spojitost nebo je přímým důsledkem abnormálního toku krve, který je často způsoben deformací červených krvinek a jehož důsledkem je znemožnění toku krve přes mikrovaskulární síť. Byl představen tzv. neo-Hookeův model krvinky s odkazem na příslušnou literaturu, viz [17] a další. Následně byl na základě této teorie autory vyvinut algoritmus proudění krve pomocí lattice Boltzmannovy metody, a to i pro nemocí postižené červené krevní buňky - krevní srpkovitou anémií, malárií. Vrcholem práce pak byla simulace transportu červených krvinek skrz cévu, jejíž průsvit je na sledované oblasti zúžen přibližně na obsah povrchu zdravé červené krvinky. Výsledky této numerické simulace zobrazuje obr. 1.5, kde pozice zdravých červených krvinek je ve vybraných časech zobrazena v levém sloupci a pozice srpkovitých krvinek je zobrazena v těch samých časech ve sloupci pravém. Obr. 1.5 demonstruje, že zdravé erytrocyty se významně deformují a snadno procházejí zúžením, zatímco abnormálně tvarované a méně deformovatelné srpkovité erytrocyty před ním uvíznou. Takové zablokování kapiláry vede ke snížení dodávky kyslíku a může tak mít až fatální následky.



Obr. 1.5: Transport zdravých červených krvinek (levý sloupec) a srpkovitých červených krvinek (pravý sloupec) přes zúžení cévy podle [11].

Uvedme, že stejný problém je možné řešit pomocí přístupu navrženého v práci [13] kombinujícího lattice Boltzmannovu metodu a metodu zvanou Immersed Boundary Method (IBM). Problém transportu červených krvinek postižených malárií ve 2D obdélníkovém kanále je řešen pomocí tohoto přístupu v práci [37].

## 1.4 Simulace proudění krve v cévní bifurkaci

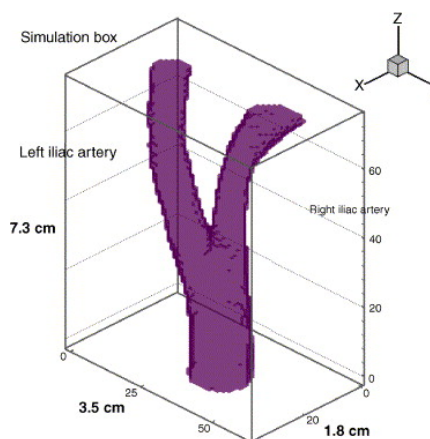
Problém proudění kapaliny v bifurkacích bývá typickou benchmarkovou úlohou nových numerických řešičů dynamiky tekutin. Později i v této diplomové práci bude problému proudění krve v bifurkacích různých tvarů věnována nemalá pozornost. Za účelem potvrzení široké univerzálnosti lattice Boltzmannovy metody bude v tomto odstavci brán zřetel především na ty problémy proudění krve v bifurkacích, jejichž podmínky a předpoklady dosud nebyly v této kapitole uvažovány, a na problémy řešené dosud nezmíněnými přístupy.

Jako první uvedeme práci [3], jejímž předmětem bylo řešení ustáleného proudění newtonské kapaliny v idealizované symetrické bifurkaci. Autoři článku konstatují, že při plánování cévní chirurgie je na anatomickém obrazu pacienta, který je poskytnut vhodnou zobrazovací technikou, třeba testovat různá geometrická řešení. S touto motivací je v práci nejprve řešen problém



proudění v symetrické dvourozměrné bifurkaci při zadaném úhlu mezi dceřinými větvemi  $\theta$ . V momentě, kdy se proudění v důsledku zvolených okrajových podmínek ustálí, je výpočet zastaven a úhel mezi dceřinými větvemi změněn o malou hodnotu  $\delta\theta$ . S cílem ušetření výpočtového času pak řešič 'nezahazuje' předešlý výsledek, ale využije tento výsledek jako počáteční podmínku pro novou simulaci. Příslušné buňky jsou 'posunuty' o úhel  $\delta\theta$ , výpočet je inicializován ze získané počáteční podmínky a zastavuje se v okamžiku, kdy se proudění na nové výpočtové síti, dané úhlem  $\theta + \delta\theta$ , ustálí. Na jednoduchém příkladu je tak autory demonstrována námi dosud nezmíněná možnost adaptace výpočtové sítě algoritmu lattice Boltzmannovy metody.

Pro úplnost uvedme ještě další práci stejného výzkumného týmu [2]. Řešenou úlohou je problém proudění krve, která je uvažována jako newtonská kapalina, ve sledované části aortální bifurkace s dokonale tuhými stěnami ve trojdimenzionálním prostoru (model D3Q19). Výpočtová síť byla zrekonstruována na základě snímků magnetické rezonance pacienta, viz obr. 1.6. Bylo realizováno několik vstupních a výstupních okrajových podmínek vyvolávající ustálené i nestacionární proudění.

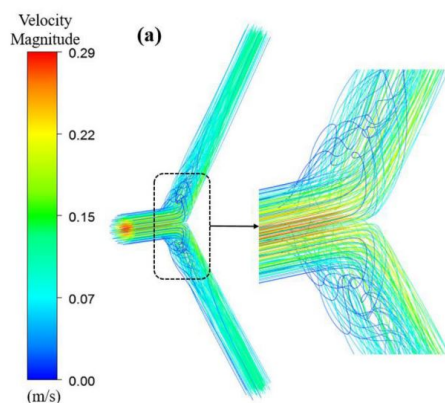


Obr. 1.6: Výpočtová síť [2].

Další studií, kterou zmíníme, je studie [36], jejímž hlavním cílem bylo pomocí lattice Boltzmannovy metody studovat hodnoty hemodynamických veličin při proudění krve (jako newtonské kapaliny) v prostorově idealizované bifurkaci, která je dána různými úhly větvení dceřiných větví od osy větve mateřské. Pro lepší představu přikládáme obr. 1.7 zobrazující jeden z výsledků práce. V diskuzi se autoři opírají o fakt, že ateroskleróza (kornatění tepen) vzniká především v místech cévy, ve kterých je hodnota smykového napětí na stěnách nízká. Pomocí lattice Boltzmannovy metody identifikují autoři článku tato nejrizikovější místa pro vznik aterosklerózy dané bifurkace řešením problémů ustáleného i nestacionárního proudění.

Hodnotných studií řešící problémy proudění krve v cévních bifurkacích pomocí lattice Boltzmannovy metody je celá řada. Jejich představení překračuje rámec diplomové práce. Proto odkážme alespoň na vybrané komplexní studie. Práce [1] řeší proudění krve jako newtonské kapaliny v prostorové bifurkaci se vzniklým aneurysmatem. Článek [49] představuje řešení transportu červených krvinek v mikrovaskulární bifurkaci.





Obr. 1.7: Jedno z výsledných rychlostních polí práce, viz [36].

## 1.5 Simulace proudění krve v cévách s poddajnými stěnami

Nabízí se otázka, zda-li jsou vyvinuty algoritmy lattice Boltzmannovy metody pro řešení proudění krve v cévách s poddajnými stěnami, neboť všechny dosud citované práce z různých důvodů (úspora výpočtového času, zanedbatelný vliv poddajnosti stěn při řešení konkrétní úlohy) uvažovaly cévní stěny jako dokonale tuhé. V následujících několika odstavcích se pokusíme otázku zodpovědět představením numerických simulací vybraných prací, které uvažovaly biologicky správný předpoklad poddajnosti stěn.

Článek [8] představuje novou okrajovou podmínku opírající se o teorii [47], kterou lze implementovat v rámci lattice Boltzmannovy metody. Následně byl algoritmus uplatňující tuto okrajovou podmínku testován na řešení problému proudění kapaliny v obdélníkovém kanálu (model D2Q9). V případě ustáleného proudění byly výsledky porovnány s literaturou [17]. Další numerické experimenty potvrzující správnost tohoto přístupu zveřejnil jiný výzkumný tým v článku [9].

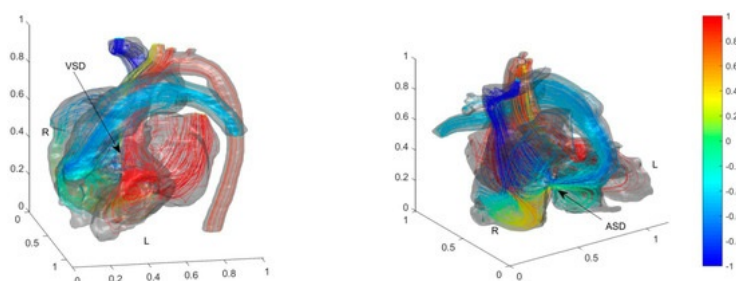
Další přístup řešící problém proudění krve v cévách s poddajnými stěnami je podrobně popsán v článku [12]. Ačkoli numerické výsledky, které staví na tomto algoritmu, viz [22], jsou v dobré shodě s experimenty, někteří autoři varují nad nedostatečnou časovou efektivností představeného algoritmu (včetně [8, 9]).

Nový náhled řešící problematiku proudění krve v cévách s poddajnými stěnami představuje práce [33] publikovaná v roce 2021. Autoři článku představují nové okrajové podmínky implementovatelné lattice Boltzmannovou metodou, které jsou následně testovány. Autoři práce připouští, že výsledky získané algoritmem užívající tyto okrajové podmínky nejsou v úplné shodě s analytickým řešením proudění krve ve válci s elastickou stěnou. Nicméně jejich

užití dává zásadně přesnější výsledky než v případě výpočtu s předpokladem dokonale tuhé stěny. Hlavní předností algoritmu je jeho časová úspornost.

## 1.6 Simulace krevního toku srdcem pacienta postiženého vrozenou srdeční vadou

Do této chvíle jsme v této diplomové práci vesměs zabývali studii, které měly za cíl buď představovat nové algoritmy rozšiřující klasickou dvoukrokovou lattice Boltzmannovu metodu, nebo demonstrovat funkčnost těchto algoritmů řešením různých problémů. Věnujme následujících několik řádků představení komplexní studie [46] simulující námi diskutovanou metodou průtok krve a krevního kyslíku srdcem dětského pacienta postiženého vrozenou srdeční vadou.



Obr. 1.8: Průtok krve a distribuce obsahu kyslíku v srdci pacienta před operací podle [46]. Barevná škála znázorňuje relativní obsah kyslíku v krvi.

Vrozené srdeční vady (VSV) patří mezi nejčastější vývojové vady. Udává se, že tato nemoc postihuje asi 1 % novorozenců. Vrozenou srdeční vadu rozlišujeme podle lokalizace defektu na defekt septa síně a komor, aortální či pulmonální stenózu nebo komplexní srdeční vadu. Obecně tato nemoc může způsobovat abnormální změny hemodynamiky, prekordiální bolesti a únavu pacienta. V případě těžkých případů může vést ke zpomalení růstu, dušnosti, cyanóze kůže a v krajním případě k předčasné smrti pacienta. Hemodynamická data o stavu nemoci lze získat ze zobrazovacích vyšetření, jako je srdeční katetrizace, echokardiografie, počítačová tomografie (CT) nebo magnetická rezonance (MRI). Všechna tato vyšetření však mají určitá omezení. Díky srdeční katetrizaci mohou lékaři přesně měřit tlak v plicnici a další hemodynamická data. Jedná se však o invazivní operační vyšetření. Během a po operaci mohou nastat komplikace.

Autoři si vybrali jako nástroj pro simulaci toku krve a krevního kyslíku v srdci pacienta před a po operaci právě lattice Boltzmannovu metodu vzhledem k možnosti přímočaré implementaci i komplexních okrajových podmínek. Tradiční CFD metody se dle autorů obtížně vypořádávají s modelováním vnitřní stěny srdce, a to zejména v případech, ve kterých dochází k velké

deformaci srdeční stěny. Za účelem věrného modelování srdce byla věnována nemalá pozornost simulaci distribuce krevního kyslíku, která je dle autorů jen zřídka k vidění v existujících studiích užívajících konvenční CFD metody. V práci byl implementován algoritmus dvojité distribuční funkce (*DDF - Double Distribution Function*) s odkazem na příslušnou literaturu [18].

Model vnitřní stěny srdce byl zrekonstruován na základě 210 skenů počítačové tomografie. Simulací a porovnáním průtoku krve srdcem, tlakového pole, obsahu kyslíku v krvi a distribuce tvorby entropie před a po operaci byly podrobně analyzovány účinky defektu septa na plicní hypertenzi (PH), cyanózu a srdeční zátěž. Bylo tak formulováno mnoho závěrů, jejichž cílem bylo rozšířit poznatky o zkoumané problematice. Pro lepší ilustraci výsledků diskutované studie přikládáme obr. 1.8. Ten zobrazuje průtok krve a distribuci obsahu kyslíku v krvi v srdci pacienta před operací. Barva proudnic představuje bezrozměrný obsah kyslíku v krvi - červená pro relativně vysoký obsah kyslíku a modrá pro relativně nízký obsah kyslíku.

## 1.7 Shrnutí

Představené studie v této kapitole dokazují vhodnost užití lattice Boltzmannovy metody pro řešení problémů kardiovaskulární biomechaniky. Konkrétně zde byly představeny práce, jejichž předmětem bylo simulování proudění krve v cévách různých tvarů a modelování transportu krevních buněk právě pomocí lattice Boltzmannovy metody.

Prezentací vybraných studií řešící problémy proudění krve v cévních bifurkacích různých tvarů užitím lattice Boltzmannovy metody jsme potvrdili vhodnost implementace této metody pro řešení těchto problémů. Proto pro numerické modelování proudění krve v cévních bifurkacích v následujících kapitolách uijeme právě lattice Boltzmannovu metodu.

# Kapitola 2

## Teoretické pozadí lattice Boltzmannovy metody

V této kapitole bude představeno teoretické pozadí, na kterém stojí základní principy lattice Boltzmannovy metody. Bude představen význam distribuční funkce, lokální rovnovážné distribuční funkce a Boltzmannovy rovnice. Následně bude demonstrován způsob diskretizace Boltzmannovy rovnice a odvození rychlostního modelu, který bude užit v následující kapitole.

Před tím, než Boltzmannovu rovnici a distribuční funkce uvedeme, definujme nejprve takzvané mezoskopické měřítko, na kterém Boltzmannova rovnice, potažmo lattice Boltzmannova metoda, tekutinu popisuje. Mezoskopické měřítko stojí mezi makroskopickým a mikroskopickým měřítkem. Na makroskopickém měřítku je sledován plný kontinuální obraz tekutiny makroskopicky sledovatelnými veličinami, jakými jsou např. rychlost, hustota a teplota tekutiny. Na tomto měřítku pracuje většina konvenčních CFD řešičů včetně těch stavějících na principech metody konečných prvků a konečných objemů. Naopak na mikroskopickém měřítku je sledována tekutina na molekulární úrovni (molecular dynamics). Zjednodušeně můžeme tvrdit, že při užití tohoto popisu je sledován pohyb každé jedné částice. Na mezoskopickém měřítku jsou sledovány informace o reprezentativní množině částic, kterou budeme v naší práci nazývat 'shlukem částic'.

### 2.1 Boltzmannova rovnice a distribuční funkce

K popisu výše popsaného shluku částic definujeme distribuční funkci  $f$  a její momenty. Distribuční funkce  $f$  reprezentuje hustotu částic majících mikroskopickou rychlost  $\boldsymbol{\xi}$  v místě daném polohovým vektorem  $\mathbf{r}$  a v čase  $t$ . Jinými slovy ji lze považovat za zobecnění hustoty, které navíc bere v úvahu mikroskopickou rychlost částic [28]. Zatímco  $\rho(\mathbf{r}; t)$  představuje hustotu hmoty v trojrozměrném fyzickém prostoru,  $f(\mathbf{r}; \boldsymbol{\xi}; t)$  současně představuje hustotu hmoty jak v trojrozměrném fyzickém prostoru, tak v trojrozměrném rych-

lostním prostoru. Proto má distribuční funkce  $f$  jednotku

$$[f] = \text{kg} \cdot \frac{1}{\text{m}^3} \cdot \frac{1}{(\text{m/s})^3} = \frac{\text{kg} \cdot \text{s}^3}{\text{m}^6}. \quad (2.1)$$

Definujme vztah mezi distribuční funkcí  $f$  a hustotou  $\rho$  jako moment hustoty, tedy

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \int f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t) d^3 \xi, \quad (2.2)$$

kde symbolem  $\int d^3 \xi$  rozumíme trojný (objemový) integrál nad oblastí zkoumaného kontinua. Jinými slovy tvrdíme, že hustota  $\rho(\mathbf{r}, t)$  je rovna integrálnímu součtu distribučních funkcí všech rychlostí v dané poloze  $\mathbf{r}$  a daném čase  $t$ . (Povšimněme si analogií mezi tímto a vztahem mezi hmotností a hustotou uvažovaného kontinua  $m = \int \rho d^3 x$ .) Přenásobíme-li moment hustoty rychlostí, dostaneme vyjádření pro moment hustoty hybnosti

$$\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \int \boldsymbol{\xi} f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t) d^3 \xi, \quad (2.3)$$

kde  $\mathbf{u}$  je makroskopická rychlost tekutiny. Obdobně definujeme moment hustoty celkové energie

$$\rho(\mathbf{r}, t) E(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \int |\boldsymbol{\xi}|^2 f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t) d^3 \xi \quad (2.4)$$

a dále moment hustoty vnitřní energie

$$\rho(\mathbf{r}, t) e(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \int |\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)|^2 f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t) d^3 \xi, \quad (2.5)$$

kde  $\mathbf{v}$  je takzvaná relativní rychlost, která je dána rozdílem makroskopické a mikroskopické rychlosti  $\mathbf{v} = \mathbf{u} - \boldsymbol{\xi}$ .

Za účelem odvození Boltzmannovy rovnice provedeme totální derivaci funkce  $f$  podle času

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} \frac{dt}{dt} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \frac{d\mathbf{r}}{dt} + \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\xi}} \frac{d\boldsymbol{\xi}}{dt}, \quad (2.6)$$

kterou přepíšeme jako

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \boldsymbol{\xi} + \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\xi}} \mathbf{a} + \frac{\partial f}{\partial t}, \quad (2.7)$$

kde  $\mathbf{a}$  je zrychlení shluku částic. Stejnou rovnici uvedeme ještě v podobě

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \boldsymbol{\xi} + \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\xi}} \frac{\mathbf{F}}{m} + \frac{\partial f}{\partial t}, \quad (2.8)$$

kde  $m$  je hmotnost jednoho shluku částic a  $\mathbf{F}$  je vnější objemová síla působící na jeden shluk částic. Zavedením tzv. kolizního operátoru  $\Omega = \frac{df}{dt}$  rovnici přepíšeme

$$\Omega = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \boldsymbol{\xi} + \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\xi}} \frac{\mathbf{F}}{m} + \frac{\partial f}{\partial t}. \quad (2.9)$$

Pokud budeme sílu  $\mathbf{F}$  dále uvažovat nulovou, získáváme Boltzmannovu rovnici ve známém tvaru ( $\nabla = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$ )

$$\boxed{\Omega = \frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \nabla f}. \quad (2.10)$$

Boltzmannova rovnice je parciální diferenciální rovnice se zdrojovým členem. Její řešení komplikuje fakt, že kolizní operátor  $\Omega$  je funkce závislá na distribuční funkci  $f$ . Pro její řešení je třeba kolizní operátor diskretizovat. Nejznámější a nejrozšířenější formulace kolizního operátoru je vyjádřena pomocí BGKW (Bhatnagar, Gross, Krook, Welander) aproximace z roku 1954 [34]

$$\Omega = \omega(f^{eq} - f) = \frac{1}{\tau}(f^{eq} - f), \quad (2.11)$$

kde  $\omega$  je relaxační frekvence, respektive  $\tau$  je relaxační čas, a  $f^{eq}$  je lokální rovnovážná distribuční funkce, jejíž význam bude ještě v této kapitole objasněn.

Dosazením rovnice (2.11) do rovnice (2.10) dostáváme

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \nabla f = \omega(f^{eq} - f) = \frac{1}{\tau}(f^{eq} - f). \quad (2.12)$$

Rovnici (2.12) nazveme Boltzmannovou rovnicí s diskretizovaným kolizním operátorem.

### 2.1.1 Diskretizace Boltzmannovy rovnice v čase

Pro naše další potřeby je nutné Boltzmannovu rovnici diskretizovat v čase. Uvažujme konstantní časový krok  $\Delta t$  diskretizovaného času. Provedme nyní Taylorův rozvoj distribuční funkce  $f(\mathbf{r} + \boldsymbol{\xi}\Delta t, \boldsymbol{\xi}, t + \Delta t)$  následovně

$$f(\mathbf{r} + \boldsymbol{\xi}\Delta t, \boldsymbol{\xi}, t + \Delta t) = f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t) + \frac{\partial f}{\partial t} \Delta t + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \boldsymbol{\xi} \Delta t + \vartheta(\Delta t^2), \quad (2.13)$$

kde člen  $\vartheta(\Delta t^2)$  značí členy druhého a vyššího řádu Taylorova rozvoje. Ty v tomto momentě zanedbáme. Rovnici vydělíme časovým krokem  $\Delta t$  a upravíme do podoby

$$\frac{f(\mathbf{r} + \boldsymbol{\xi}\Delta t, \boldsymbol{\xi}, t + \Delta t) - f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t)}{\Delta t} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \boldsymbol{\xi}. \quad (2.14)$$

Povšimněme si, že pravá strana rovnice (2.14) je rovna levé straně rovnice (2.12), tedy diskretizovanému koliznímu operátoru  $\Omega$ . Položme proto do rovnosti levou stranu rovnice (2.14) a diskretizovaný kolizní operátor daný rovnicí (2.11) a dále algebraickými úpravami vyjádříme  $f(\mathbf{r} + \boldsymbol{\xi}\Delta t, t + \Delta t)$ . Dostáváme

$$f(\mathbf{r} + \boldsymbol{\xi}\Delta t, t + \Delta t) = f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t) + \frac{\Delta t}{\tau}(f^{eq}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t) - f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t)). \quad (2.15)$$

Rovnice (2.15) je diskretizovanou verzí Boltzmannovy rovnice v čase s diskretizovaným kolizním operátorem.

## 2.2 Lokální rovnovážná distribuční funkce

Předpokládáme, že pokud bude tekutina ponechána v klidu dostatečně dlouho, distribuční funkce  $f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t)$  dosáhne rovnovážného stavu a nabude hodnoty rovnovážné distribuční funkce  $f^{eq}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t)$ . Ta je v rychlostním prostoru izotropní kolem bodu, který je dán vektorem  $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{u}$  (odsud přívlástek lokální). V referenční soustavě, která se pohybuje rychlostí  $\mathbf{u}$ , lokální rovnovážná distribuční funkce může být vyjádřena jako  $f^{eq}(\mathbf{r}, |\mathbf{v}|, t) = f^{eq}(|\mathbf{v}|)$ . V tomto odstavci následujeme postup pro nalezení vyjádření lokální rovnovážné distribuční funkce uvedený v [28].

Omezme se na hledání vyjádření lokální rovnovážné distribuční funkce v separovatelné podobě

$$f^{eq}(|\mathbf{v}|^2) = f^{eq}(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) = f_{1D}^{eq}(v_x^2) f_{1D}^{eq}(v_y^2) f_{1D}^{eq}(v_z^2). \quad (2.16)$$

Jinými slovy předpokládejme, že prostorová lokální rovnovážná distribuční funkce může být vyjádřena jako kombinace tří 1D lokálních rovnovážných distribučních funkcí. Pokud budeme uvažovat velikost rychlosti konstantní, tedy  $|\mathbf{v}|^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2 = \text{konst.}$ , potom platí

$$f^{eq}(|\mathbf{v}|^2) = \text{konst.} \Rightarrow \ln f^{eq}(v_x^2) + \ln f^{eq}(v_y^2) + \ln f^{eq}(v_z^2) = \text{konst.} \quad (2.17)$$

Takový požadavek splňuje 1D lokální rovnovážná distribuční funkce, pro kterou platí  $\ln f^{eq}(v_x^2) = a + bv_x^2$ , kde  $a$  a  $b$  jsou obecné reálné konstanty. Dosazením takto vyjádřené lokální rovnovážné distribuční funkce do rovnice (2.17) dostaneme

$$\ln f^{eq}(v_x^2) + \ln f^{eq}(v_x^2) + \ln f^{eq}(v_x^2) = 3a + b(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) = \text{konst.} \quad (2.18)$$

Prostorová lokální rovnovážná distribuční funkce má potom tvar

$$f^{eq}(|\mathbf{v}|) = e^{3a} e^{b|\mathbf{v}|^2}. \quad (2.19)$$

Lokální rovnovážná distribuční funkce  $f^{eq}$  je zvláštním případem distribuční funkce  $f$ , tudíž předpokládáme, že konstanty  $a$ ,  $b$  lze nalézt pomocí požadavku, aby funkce  $f^{eq}$  měla stejné momenty hustoty, viz (2.2), a energie, viz (2.4), resp. (2.5), jako  $f$ .

Lokální rovnovážnou distribuční funkci potom uvedeme v podobě

$$f^{eq}(\mathbf{r}, |\mathbf{v}|, t) = \rho \left( \frac{3}{4\pi e} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{-3|\mathbf{v}|^2}{4e}} \quad (2.20)$$

a po uplatnění rovnice popisující ideální monoatomický plyn,  $e = \frac{3}{2}RT$ , také v podobě

$$f^{eq}(\mathbf{r}, |\mathbf{v}|, t) = \rho \left( \frac{1}{2\pi RT} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{-|\mathbf{v}|^2}{2RT}}, \quad (2.21)$$

kde  $T$  je termodynamická teplota a  $R$  je plynová konstanta. Naznačení odvození lokální rovnovážné distribuční funkce ve dvoudimenzionálním prostoru bychom pak provedli zcela analogicky s výsledkem

$$f^{eq}(\mathbf{r}, |\mathbf{v}|, t) = \rho \left( \frac{1}{2\pi RT} \right)^{\frac{2}{2}} e^{\frac{-|\mathbf{v}|^2}{2RT}} = \rho \left( \frac{1}{2\pi RT} \right) e^{\frac{-|\mathbf{v}|^2}{2RT}}. \quad (2.22)$$

Některé zdroje za účelem větší obecnosti uvádějí vyjádření diskutované funkce jako

$$f^{eq}(\mathbf{r}, |\mathbf{v}|, t) = \rho \left( \frac{1}{2\pi RT} \right)^{\frac{D}{2}} e^{\frac{-|\mathbf{v}|^2}{2RT}}, \quad (2.23)$$

kde  $D$  značí dimenzi prostoru zkoumaného problému proudění.

Zde naznačené odvození funkce  $f^{eq}$  je sice pro naše potřeby dostatečné, nicméně nevysvětluje motivace za uvedenými předpoklady a nedokazuje jednoznačnost tohoto vyjádření. Pro plné doplnění těchto mezer odkazujeme čtenáře na studium statistické mechaniky [32].

Lokální rovnovážnou distribuční funkci poprvé formuloval fyzik James Clerk Maxwell. Jednoznačnost funkce v této podobě byla později dokázána Ludwigem Boltzmannem. Proto lokální rovnovážnou distribuční funkci nazýváme také Maxwell-Boltzmannovou distribuční funkcí.

## 2.2.1 Zjednodušené vyjádření lokální rovnovážné distribuční funkce pro problémy pomalého proudění

Vyjádření lokální rovnovážné distribuční funkce (2.23) lze elegantně zjednodušit pro problémy proudění nižšího Machova čísla. Lokální rovnovážnou distribuční funkci (2.23) uvedeme podle [15] nejprve v podobě

$$f^{eq} = f^{eq}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}, t) = \rho \left( \frac{1}{2\pi RT} \right)^{\frac{D}{2}} e^{\frac{-(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2}{2RT}}. \quad (2.24)$$

Následně roznásobíme závorku v exponentu Eulerova čísla a upravíme,

$$f^{eq} = \rho \left( \frac{1}{2\pi RT} \right)^{\frac{D}{2}} e^{\frac{-(\boldsymbol{\xi}^2 - 2\boldsymbol{\xi}\mathbf{u} + \mathbf{u}^2)}{2RT}} = \rho \left( \frac{1}{2\pi RT} \right)^{\frac{D}{2}} e^{\frac{-\boldsymbol{\xi}^2}{2RT}} e^{\frac{-(-2\boldsymbol{\xi}\mathbf{u} + \mathbf{u}^2)}{2RT}}. \quad (2.25)$$

S využitím známého vyjádření exponenciální funkce pomocí nekonečné Taylorovy řady ( $e^x = 1 + x + x^2/2 + \dots$ , resp.  $e^{-x} = 1 - x + x^2/2 + \dots$ ) vyjádříme

$$e^{\frac{-(-2\boldsymbol{\xi}\mathbf{u} + \mathbf{u}^2)}{2RT}} = 1 + \frac{\boldsymbol{\xi}\mathbf{u}}{RT} - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT} + \frac{(\boldsymbol{\xi}\mathbf{u})^2}{2(RT)^2} + \vartheta, \quad (2.26)$$

kde symbol  $\vartheta$  zastupuje členy vyššího řádu Taylorova rozvoje, které zanedbáme. Dosazením takto vyjádřené exponenciální funkce do rovnice (2.25)



jsme získali vyjádření lokální rovnovážné distribuční funkce pro problémy pomalého proudění

$$f^{eq} = \rho \left( \frac{1}{2\pi RT} \right)^{\frac{D}{2}} e^{\frac{-\xi^2}{2RT}} \left[ 1 + \frac{\xi \mathbf{u}}{RT} - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT} + \frac{(\xi \mathbf{u})^2}{2(RT)^2} \right]. \quad (2.27)$$

## 2.3 Lattice Boltzmannova rovnice

V těchto odstavcích bude naznačeno odvození lattice Boltzmannovy rovnice a bude představen rychlostní model D2Q9. Lattice Boltzmannovou rovnicí ve variantě pro zmíněný rychlostní model budou totiž v následující kapitole řešeny konkrétní numerické úlohy této diplomové práce.

### 2.3.1 Numerický výpočet momentů distribuční funkce

Výpočet momentů distribuční funkce (2.2) až (2.5) provedeme s dostatečnou přesností užitím Gaussovy integrace, tedy

$$\int \psi(\boldsymbol{\xi}) f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi} = \sum_i W_i \psi(\boldsymbol{\xi}_i) f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}_i, t) \quad (2.28)$$

nebo

$$\int \psi(\boldsymbol{\xi}) f^{eq}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi} = \sum_i W_i \psi(\boldsymbol{\xi}_i) f^{eq}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}_i, t), \quad (2.29)$$

kde  $\psi(\boldsymbol{\xi})$  je polynom mikroskopické rychlosti  $\boldsymbol{\xi}$ ,  $W_i$  je  $i$ -tý váhový koeficient kvadratury a  $\boldsymbol{\xi}_i$  je " $i$ -tá" mikroskopická rychlost a zároveň  $i$ -tý integrační bod Gaussovy kvadratury. Rovnice (2.2), (2.3) a (2.5) přejdou v

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_i f_i = \sum_i f_i^{eq}, \quad (2.30)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \sum_i \boldsymbol{\xi}_i f_i = \sum_i \boldsymbol{\xi}_i f_i^{eq}, \quad (2.31)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) e(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \sum_i (\boldsymbol{\xi}_i - \mathbf{u})^2 f_i = \frac{1}{2} \sum_i (\boldsymbol{\xi}_i - \mathbf{u})^2 f_i^{eq}, \quad (2.32)$$

kde  $f_i = f_i(\mathbf{r}, t) = W_i f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}_i, t)$  a  $f_i^{eq} = f_i^{eq}(\mathbf{r}, t) = W_i f^{eq}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}_i, t)$ .

### 2.3.2 Diskretizace Boltzmannovy rovnice ve fázovém prostoru

Ačkoli lattice Boltzmannova rovnice byla historicky odvozena z metody Lattice-gas automata (LGA) [16], v roce 1997 byl představen způsob odvození lattice Boltzmannovy rovnice přímou diskretizací spojitě Boltzmannovy rovnice ve fázovém prostoru, viz [19]. Ten bude nyní prezentován.

Diskretizovaná Boltzmannova rovnice v čase (2.15) připouští pohyb shluku částic s mikroskopickou rychlostí  $\boldsymbol{\xi}$  v nekonečně mnoha směrech. Lattice Boltzmannova rovnice je diskretizovanou verzí této rovnice ve fázovém prostoru, tzn. uvažuje pohyb shluku částic pouze ve 'vybraných' směrech, které jsou dány mikroskopickými rychlostmi  $\boldsymbol{\xi}_i$ , a ty je třeba správně určit. Počet těchto směrů musí vzhledem k dimenzi zkoumaného prostoru zajišťovat tzv. mřížkovou strukturu [19], odsud často užívané české označení lattice Boltzmannovy metody jako mřížkové metody. Dalším požadavkem je, aby výpočet integrálů hydrodynamických momentů, viz rovnice (2.30) až (2.32), byl nejen dostatečně přesný, ale aby navíc zachovával nezbytné symetrie požadované Navier-Stokesovými rovnicemi. Doplňme pro úplnost, že lattice Boltzmannovu rovnici a Navier-Stokesovy rovnice dává do souvislosti Chapman-Enskogova teorie, viz [43].

Pokusme se nyní s dostatečnou přesností vyčíslit integrál na levé straně rovnice (2.29). Uvažujme zjednodušenou lokální rovnovážnou distribuční funkci pro problémy proudění nízkého Machova čísla, viz (2.27). Řešený integrál přejde do podoby

$$I = \int \psi(\boldsymbol{\xi}) \rho \left( \frac{1}{2\pi RT} \right)^{\frac{D}{2}} e^{-\frac{\boldsymbol{\xi}^2}{2RT}} \left[ 1 + \frac{\boldsymbol{\xi}\mathbf{u}}{RT} - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT} + \frac{(\boldsymbol{\xi}\mathbf{u})^2}{2(RT)^2} \right] d\boldsymbol{\xi}. \quad (2.33)$$

Tento integrál má tvar  $\int e^{-\mathbf{x}^2} \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$  a je možné ho tak vyčíslit užitím Gaussových kvadraturních vzorců.

Pokračujme nyní konkrétně. Uvažujme řešený problém rovinného proudění a čtvercový mřížkový prostor. Předpokládáme pak podobu polynomiální funkce  $\psi(\boldsymbol{\xi})$  jako

$$\psi(\boldsymbol{\xi}) = \xi_x^m \xi_y^n, \quad (2.34)$$

kde  $\xi_x$  a  $\xi_y$  jsou složky mikroskopické rychlosti v kartézském souřadném systému. Dosadíme (2.34) pro  $D = 2$  do integrálu (2.33) a dostaneme

$$\begin{aligned} I &= \int \xi_x^m \xi_y^n f^{eq} d\boldsymbol{\xi} \\ &= \frac{\rho}{\pi} (\sqrt{2RT})^{m+n} \left\{ \left( 1 - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT} \right) I_m I_n \right. \\ &\quad \left. + \frac{2(u_x I_{m+1} I_n + u_y I_m I_{n+1})}{\sqrt{2RT}} \right. \\ &\quad \left. + \frac{u_x^2 I_{m+2} I_n + 2u_x u_y I_{m+1} I_{n+1} + u_y^2 I_m I_{n+2}}{\sqrt{RT}} \right\}, \end{aligned} \quad (2.35)$$

kde

$$I_m = \int e^{-\zeta_x^2} \zeta_x^m d\zeta_x, \quad I_n = \int e^{-\zeta_y^2} \zeta_y^n d\zeta_y \quad (2.36)$$

a

$$\zeta_x = \frac{\xi_x}{\sqrt{2RT}}, \quad \zeta_y = \frac{\xi_y}{\sqrt{2RT}}. \quad (2.37)$$

Pro výpočet integrálů (2.36) zvolíme jejich aproximaci tzv. Hermitovskou formulí třetího řádu, tedy

$$I_m = \sum_{j=1}^3 \omega_j \zeta_j^m, I_n = \sum_{i=1}^3 \omega_i \zeta_i^n, \quad (2.38)$$

kde integrační konstanty jsou

$$\zeta_1 = -\sqrt{\frac{3}{2}}, \quad \zeta_2 = 0, \quad \zeta_3 = \sqrt{\frac{3}{2}} \quad (2.39)$$

a váhové koeficienty jsou

$$\omega_1 = \frac{\sqrt{\pi}}{6}, \quad \omega_2 = 2\frac{\sqrt{\pi}}{3}, \quad \omega_3 = \frac{\sqrt{\pi}}{6}. \quad (2.40)$$

Dosažením takto vyjádřených integrálů  $I_m$ , resp.  $I_n$ , do rovnice (2.35) dostaneme

$$I = \frac{\rho}{\pi} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \omega_i \omega_j \psi(\boldsymbol{\xi}_{i,j}) \left[ 1 + \frac{\boldsymbol{\xi}_{i,j} \mathbf{u}}{RT} - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT} + \frac{(\boldsymbol{\xi}_{i,j} \mathbf{u})^2}{2(RT)^2} \right], \quad (2.41)$$

kde  $\boldsymbol{\xi}_{i,j}$  je řádkový vektor  $\boldsymbol{\xi}_{i,j} = (\xi_i, \xi_j) = \sqrt{2RT}(\zeta_i, \zeta_j)$ . Porovnáním vztahu (2.41) a (2.28) identifikujeme

$$f_{i,j}^{eq} = \frac{\omega_i \omega_j \rho}{\pi} \left[ 1 + \frac{\boldsymbol{\xi}_{i,j} \mathbf{u}}{RT} - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT} + \frac{(\boldsymbol{\xi}_{i,j} \mathbf{u})^2}{2(RT)^2} \right]. \quad (2.42)$$

Se zavedeným značením

$$c = \sqrt{2RT} \zeta_3 = \sqrt{2RT} \frac{\sqrt{3}}{2} = \sqrt{3RT}, \quad (2.43)$$

$$W_k = \frac{\omega_i \omega_j}{\pi} = \begin{cases} 4/9 & i = j = 2; & k = 1 \\ 1/9 & i = 1, j = 2, \dots; & k = 2, 3, 4, 5 \\ 1/36 & i = j = 1, \dots; & k = 6, 7, 8, 9, \end{cases} \quad (2.44)$$

$$\begin{aligned}
i = 1 : \mathbf{c}_1 &= (\zeta_2, \zeta_2) \cdot \frac{c}{\zeta_3} = (0, 0)c, \\
i = 2 : \mathbf{c}_2 &= (\zeta_3, \zeta_2) \cdot \frac{c}{\zeta_3} = (1, 0)c, \\
i = 3 : \mathbf{c}_3 &= (\zeta_2, \zeta_3) \cdot \frac{c}{\zeta_3} = (0, 1)c, \\
i = 4 : \mathbf{c}_4 &= (\zeta_1, \zeta_2) \cdot \frac{c}{\zeta_3} = (-1, 0)c, \\
i = 5 : \mathbf{c}_5 &= (\zeta_2, \zeta_1) \cdot \frac{c}{\zeta_3} = (0, -1)c, \\
i = 6 : \mathbf{c}_6 &= (\zeta_3, \zeta_3) \cdot \frac{c}{\zeta_3} = (1, 1)c, \\
i = 7 : \mathbf{c}_7 &= (\zeta_1, \zeta_3) \cdot \frac{c}{\zeta_3} = (-1, 1)c, \\
i = 8 : \mathbf{c}_8 &= (\zeta_1, \zeta_1) \cdot \frac{c}{\zeta_3} = (-1, -1)c, \\
i = 9 : \mathbf{c}_9 &= (\zeta_3, \zeta_1) \cdot \frac{c}{\zeta_3} = (1, -1)c
\end{aligned} \tag{2.45}$$

uvedeme (2.42) jako

$$f_i^{eq} = W_i \rho \left[ 1 + \frac{3(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})}{c^2} + \frac{9(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2}{2c^4} - \frac{3\mathbf{u}^2}{2c^2} \right]. \tag{2.46}$$

Představme na tomto místě vztah (2.46) v podobě, ve které figuruje rychlost zvuku prostředí  $c_s$ . S uvažováním stavové rovnice ideálního plynu

$$p = \rho RT \tag{2.47}$$

a stavové rovnice pro izotermický děj

$$p = \rho c_s^2 \tag{2.48}$$

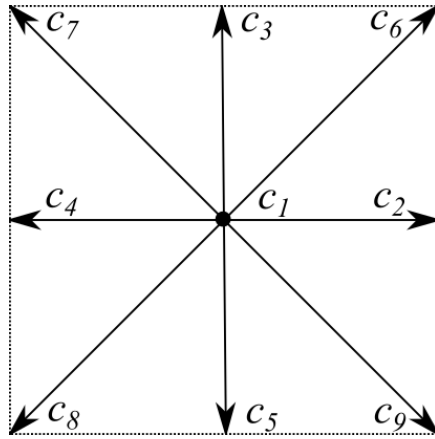
lze uvést vyjádření tzv. mřížkové rychlosti  $c$ ,

$$c = \sqrt{3} \cdot c_s. \tag{2.49}$$

Tu pak dosadíme do rovnice (2.46) a dostaneme

$$f_i^{eq} = W_i \rho \left[ 1 + \frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2} \right]. \tag{2.50}$$

Volbou třetího řádu integrace rovnic (3.36) jsme odvodili právě devět rychlostních směrů zajišťujících čtvercovou mřížkovou strukturu, viz (2.45) a obr. 2.1, devět váhových koeficientů, viz (2.44), a představili jsme odpovídající vyjádření lokální rovnovážné distribuční funkce v těchto rychlostních směrech, viz (2.46) nebo (2.50). Takový rychlostní model je v literatuře označován jako



Obr. 2.1: Mikroskopické rychlosti  $\mathbf{c}_i$  pro model D2Q9.

D2Q9, kde D2 značí řešenou rovinnou úlohu a Q9 právě devět uvažovaných rychlostních směrů. Rychlostní model D2Q9 je pravděpodobně nejpoužívanějším rychlostním modelem pro řešení problémů rovinného proudění lattice Boltzmannovou metodou a bude užít při řešení problémů v následujících kapitolách. Pro problémy proudění v trojdimenzionálním prostoru jsou nejrozšířenější rychlostní modely D3Q15 a D3Q19.

Levou stranu lattice Boltzmannovy rovnice

$$f_i(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{r}, t) + \frac{\Delta t}{\tau} (f_i^{eq}(\mathbf{r}, t) - f_i(\mathbf{r}, t)) \quad (2.51)$$

nazveme propagací a pravou stranu nazveme kolizí. Implementaci uvedené rovnice v těchto dvou krocích bude věnována následující kapitola.

# Kapitola 3

## Implementace lattice Boltzmannovy rovnice

V této kapitole bude představen způsob implementace lattice Boltzmannovy rovnice, kterým budou následně řešeny vybrané problémy ustáleného proudění vazké nestlačitelné newtonské kapaliny. Konkrétně bude představen dvoukrokový algoritmus řešení lattice Boltzmannovy rovnice a budou představeny vybrané okrajové podmínky lattice Boltzmannovy metody. Ty budou testovány na řešení problému proudění kapaliny v obdélníkovém kanálu a na problémech proudění kapaliny v bifurkacích různých tvarů. V této kapitole bude implementován rychlostní model D2Q9 při standardní volbě časového a rychlostního kroku  $\Delta t$ , resp.  $\Delta x$ .

V odstavci 2.3.2 jsme nastínili odvození rychlostního modelu D2Q9. V odvozených rovnicích figuruje časový krok  $\Delta t$  a mřížková rychlost  $c$ . Jak označení mřížkové rychlosti  $c$  napovídá, můžeme ji také vyjádřit jako podíl rozměrového kroku výpočtové mřížky a časového (iteračního) kroku, tj.

$$c = \frac{\Delta x}{\Delta t}. \quad (3.1)$$

Pokud budeme uvažovat

$$\Delta x = \Delta t = 1, \quad (3.2)$$

pak i mřížková rychlost bude rovna jedné a vyjádření mikroskopických rychlostí  $\mathbf{c}_i$ , viz (2.45), se zjednoduší. Při uvažování tohoto nastavení pak vyjádříme rychlost zvuku  $c_s$  z rovnice (2.49),

$$c_s = \frac{1}{\sqrt{3}}, \quad (3.3)$$

a uvedeme lattice Boltzmannovu rovnici

$$f_i(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{\tau} (f_i^{eq}(\mathbf{r}, t) - f_i(\mathbf{r}, t)). \quad (3.4)$$

Implementace lattice Boltzmannovy rovnice s takovým nastavením kroků  $\Delta$  je výhodná nejen proto, že takové nastavení je široce rozšířeno a okomentováno mnoha autory, ale i proto, že takové nastavení se jeví jako výhodné

z důvodu úspory výpočtového času.

Abychom mohli uplatnit takové nastavení, je nejprve nutné převést fyzikální rozměrové veličiny řešeného problému na tzv. lattice boltzmannovské veličiny (lattice units). Lattice boltzmannovské veličiny literatura často uvádí zcela bez fyzikálních jednotek, a tak činíme i my, viz rovnice (3.2).

### 3.1 Převod fyzikálních veličin

Jak jsme uvedli výše, je výhodné uvažovat nastavení kroků  $\Delta x = \Delta t = 1$ . S uplatněním tohoto nastavení se pokusíme na následujících řádcích nalézt tzv. konverzní faktory  $C_q$ , jejichž prostřednictvím budeme schopni přepočítat fyzikální veličiny  $q_r$  na veličiny lattice boltzmannovské  $q$  předpisem

$$q_r = C_q \cdot q. \quad (3.5)$$

Nejprve uvedeme vztah (3.5) pro fyzikální veličinu délky  $l$  a vyjádříme konverzní faktor pro rozměr  $C_l$ , tedy

$$l_r = C_l \cdot l \Rightarrow C_l = \frac{l_r}{l}. \quad (3.6)$$

V této rovnici rozumíme znakem  $l_r$  referenční (charakteristický) rozměr problému ve fyzikálních jednotkách a znakem  $l$  stejný referenční rozměr problému v jednotkách lattice boltzmannovských. Reálný referenční rozměr problému z podstaty známe a referenční rozměr modelu vhodně volíme.

V tuto chvíli jsme již schopni určit rozměrový krok problému  $\Delta x_r$  jako

$$\Delta x_r = C_l \cdot \Delta x \Rightarrow \Delta x_r = C_l. \quad (3.7)$$

Analogický vztah uvedeme i pro časový iterační krok, tedy

$$\Delta t_r = C_t \cdot \Delta t \Rightarrow \Delta t_r = C_t. \quad (3.8)$$

Dále se pokusíme určit konverzní faktor pro veličinu hmotnosti  $C_m$ . Za tímto účelem napíšeme vztah (3.5) pro hustotu a vyjádříme její konverzní faktor, tedy

$$\rho_r = C_\rho \cdot \rho \Rightarrow C_\rho = \frac{\rho_r}{\rho}. \quad (3.9)$$

Ve vztahu (3.9) je  $\rho_r$  je referenční hustota řešeného problému ve fyzikálních jednotkách známá a  $\rho$  je lattice boltzmannovská hustota, kterou volíme. Protože fyzikální veličina hustoty má rozměr  $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ , můžeme i pro konverzní faktory psát  $C_\rho = C_m C_l^{-3}$ , potom

$$C_m = C_\rho C_l^3. \quad (3.10)$$

Veličinu tlaku  $p_r$  mající fyzikální jednotku  $\text{Pa} = \text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-2}$  potom určíme jako

$$p_r = C_m C_l^{-1} C_t^{-2} \cdot p. \quad (3.11)$$

Za účelem vyjádření relaxačního času  $\tau$ , který v rovnici lattice Boltzmannovy metody přímo figuruje, uvedeme vztah vyjádřený v lattice boltzmannovských jednotkách odvoditelný již zmíněnou Chapman-Enskogovou analýzou dávající do souvislosti časový iterační krok  $\Delta t$ , rychlost zvuku ve zkoumaném prostředí  $c_s$ , relaxační čas  $\tau$  a kinematickou viskozitu tekutiny  $\nu$ , tedy

$$\nu = c_s^2 \Delta t \left( \tau - \frac{1}{2} \right). \quad (3.12)$$

Dosazením (3.3) za  $c_s$  a (3.2) za  $\Delta t$  dostaneme vyjádření pro relaxační čas  $\tau$ ,

$$\nu = \frac{1}{3} \left( \tau - \frac{1}{2} \right) \Rightarrow \tau = 3\nu + \frac{1}{2}. \quad (3.13)$$

Pro zajištění numerické stability musí být relaxační čas  $\tau$  větší než  $\frac{1}{2}$ . Reálnou kinematickou  $\nu_r$  viskozitu uvedeme jako

$$\nu_r = C_l^2 C_t^{-1} \nu, \quad (3.14)$$

protože  $[\nu_r] = \text{m}^2 \text{s}^{-1}$ . Z rovnice (3.14) vyjádříme konverzní faktor pro čas  $C_t$ , tedy

$$C_t = \frac{C_l^2 \nu}{\nu_r}. \quad (3.15)$$

Hodnotu referenční rychlosti v lattice boltzmannovských jednotkách  $u$  jako odvozené fyzikální veličiny s jednotkou  $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$  bychom se znalostí konverzních faktorů a referenční rychlosti zkoumaného problému ve fyzikálních jednotkách mohli vyjádřit jako

$$u_r = C_l C_t^{-1} u. \quad (3.16)$$

Hodnoty referenčních veličin v lattice boltzmannovských jednotkách volíme. Volba však musí nejen zaručovat numerickou stabilitu Boltzmannovy metody ( $\tau \gg \frac{1}{2}$ ), ale navíc musí platit rovnost podobnostních čísel modelu vyjádřeného v lattice boltzmannovských jednotkách a řešeného problému popsáno fyzikálními jednotkami.

### 3.1.1 Reynoldsovo podobnostní číslo

Jako příklad bezrozměrového podobnostního čísla často užívaného v dynamice tekutin uvedeme Reynoldsovo podobnostní číslo. To je definováno vztahem

$$Re = \frac{u_r \cdot l_r}{\nu_r} = \frac{u \cdot l}{\nu}, \quad (3.17)$$

kde  $u_r$ , resp.  $u$ , je charakteristická rychlost ve fyzikálních, resp. lattice boltzmannovských jednotkách. Jednoduchou rozměrovou analýzou se snadno přesvědčíme, že jde skutečně o bezrozměrové číslo:  $[Re] = \frac{\text{m} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}} = 1$ .



Uplatnění výše uvedených vztahů bude demonstrováno při řešení vybraných úloh v závěru kapitoly.

## 3.2 Kolize

Jak již bylo uvedeno, pravou stranu lattice Boltzmannovy rovnice nazýváme *kolizním krokem* lattice Boltzmannovy metody nebo prostě *kolizí*. V tomto kroku dochází ve všech uzlech, ve kterých probíhá výpočet, k pomyslným srážkám shluků.

Prvním v této práci představeným přístupem řešení kolizního kroku je řešení takzvaným single relaxation time modelem, zkráceně SRT modelem. Lattice Boltzmannovu metodu užívající principu SRT někdy také souhrnně označujeme jako SRT-LBM. Jak název metody napovídá, SRT se opírá pouze o jeden parametr, a to již dříve skloňovaný relaxační čas  $\tau$ .

V kolizním kroku algoritmu jsou určeny postkolizní distribuční funkce  $f_i^{post}$  pomocí pravé strany lattice Boltzmannovy rovnice,

$$f_i^{post}(\mathbf{r}, t) = f_i(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{\tau}(f_i^{eq}(\mathbf{r}, t) - f_i(\mathbf{r}, t)). \quad (3.18)$$

Postkolizní distribuční funkce  $f_i^{post}$  jsou následně propagovány dalším krokem algoritmu.

SRT model je bohužel často nedostatečným nástrojem při numerických simulacích a zejména pro relaxační časy  $\tau$  blížíící se jedné polovině jeví znaky numerické nestability. Proto zavádíme alternativní způsob řešení kolizního kroku lattice Boltzmannovy rovnice, a to pomocí tzv. MRT modelu, nebo-li přístupu s mnohonásobným relaxačním parametrem.

Napíšeme-li lattice Boltzmannovu rovnici ve vektorovém zápisu, kde  $\mathbf{f} = (f_1, f_2, \dots, f_9)^T$ , a následně rovnici přenásobíme jednotkovou maticí  $\mathbf{I} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{M}$  řádu 9, dostaneme

$$\begin{aligned} \mathbf{f}(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i\Delta t, t + \Delta t) - \mathbf{f}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{\tau}(\mathbf{f}^{eq}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{f}(\mathbf{r}, t)) \\ &= \mathbf{M}^{-1}\mathbf{M}\frac{1}{\tau}(\mathbf{f}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{f}^{eq}(\mathbf{r}, t)) \\ &= \mathbf{M}^{-1}\frac{1}{\tau}(\mathbf{M}\mathbf{f}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{M}\mathbf{f}^{eq}(\mathbf{r}, t)) \\ &= \mathbf{M}^{-1}\mathbf{S}(\mathbf{m}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{m}^{eq}(\mathbf{r}, t)). \end{aligned} \quad (3.19)$$

Z (3.19) plyne  $\mathbf{m} = \mathbf{M}\mathbf{f}$ ,  $\mathbf{m}^{eq} = \mathbf{M}\mathbf{f}^{eq}$  a  $\mathbf{S} = \frac{1}{\tau}\mathbf{I}$ . V takovém případě jde stále o již představený SRT model, neboť operujeme s jedním parametrem  $\tau$ .

Avšak v případě, kdy matice  $\mathbf{S}$  má podobu obecně diagonální matice,

$$\mathbf{S} = \text{diag}(s_1, s_2, s_3, \dots, s_9), \quad (3.20)$$

mluvíme o MRT modelu. Hodnoty parametrů  $s_i$  je třeba pro konkrétní problém vždy vhodně zvolit. Základní myšlenkou přístupu modelu MRT je provedení kolizního kroku v momentového prostoru. Transformační matici  $\mathbf{M}$  a předpis pro prvky vektoru  $\mathbf{m}^{eq}$  lze nalézt pomocí Gram-Schmidtova ortogonalizačního procesu nebo použitím Hermitových polynomů, viz [28]. Pro model D2Q9 platí

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -4 & -1 & -1 & -1 & -1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 4 & -2 & -2 & -2 & -2 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 2 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.21)$$

$$\begin{aligned} m_1^{eq} &= \rho, \\ m_2^{eq} &= \rho(-2 + 3(\rho(u_x^2 + u_y^2))), \\ m_3^{eq} &= \rho(1 - 3(\rho(u_x^2 + u_y^2))), \\ m_4^{eq} &= \rho u_x, \\ m_5^{eq} &= -\rho u_x, \\ m_6^{eq} &= \rho u_y, \\ m_7^{eq} &= -\rho u_y, \\ m_8^{eq} &= \rho(u_x^2 - u_y^2) \\ m_9^{eq} &= \rho u_x u_y. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Z důvodu ušetření výpočtového času je výhodnější vyčíslení vektoru  $\mathbf{m}^{eq}$  pomocí výše uvedených předpisů (3.22) než pomocí rovnice  $\mathbf{m}^{eq} = \mathbf{M}\mathbf{f}^{eq}$ .

Hledané postkolizní distribuční funkce  $\mathbf{f}^{post} = (f_1^{post}, f_2^{post}, \dots, f_9^{post})^T$  tak určíme rovnicí

$$\mathbf{f}^{post}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{f}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{M}^{-1}\mathbf{S}(\mathbf{m}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{m}^{eq}(\mathbf{r}, t)) \quad (3.23)$$

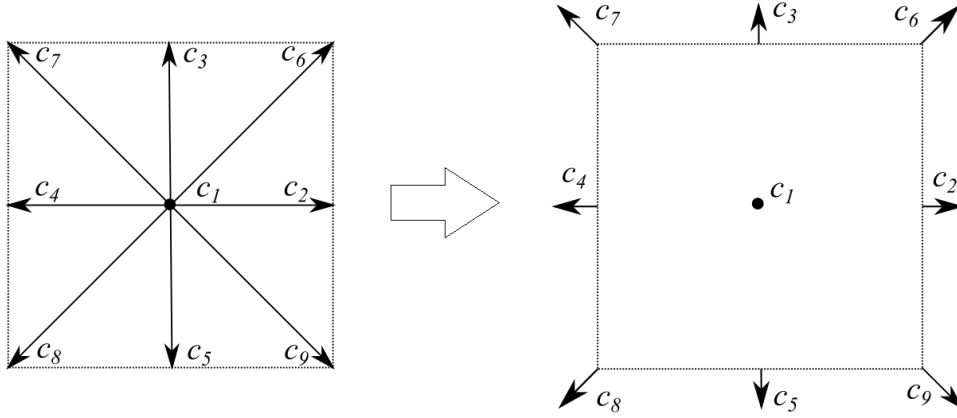
a algoritmus pokračuje propagačním krokem.

### 3.3 Propagace

Při *propagačním kroku* lattice Boltzmannovy metody dochází k přesunu distribučních funkcí do sousedních uzlů ve smyslu směrových vektorů, viz obr. 3.1, podle rovnice

$$f_i(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i\Delta t, t + \Delta t) = f_i^{post}(\mathbf{r}, t); i = 1, \dots, 9. \quad (3.24)$$

Následně probíhá vyhodnocení rychlosti a hustoty kapaliny v daném uzlu výpočtové mříže. Problém chybějících distribučních funkcí na okraji výpočtové mříže, o nichž nám propagační krok informaci neposkytuje, řešíme implementací okrajových podmínek.



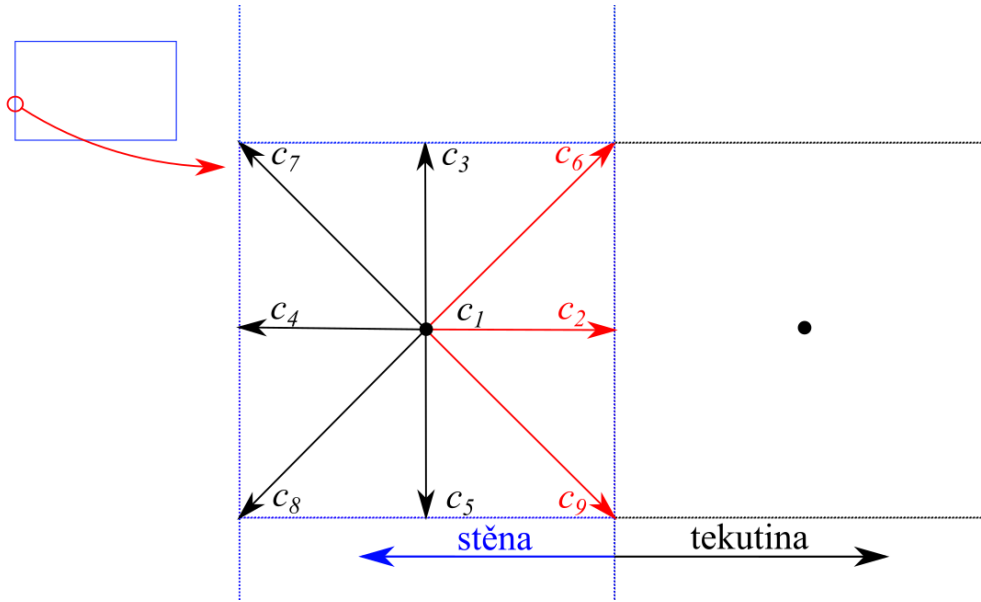
Obr. 3.1: Schéma přesunu distribučních funkcí po uplatnění kroku propagace.

### 3.4 Okrajové podmínky

Jak již bylo zmíněno v odstavci 3.3, *propagační krok* lattice Boltzmannovy metody nám neposkytuje informaci o všech distribučních funkcích nacházejících se na okraji výpočtové mříže, což nám znemožňuje vyhodnotit hustotu  $\rho$  a makroskopickou rychlost tekutiny  $\mathbf{u}$  v těchto místech. Problém řeší okrajové podmínky zadávané na hranicích výpočtové oblasti, které budeme od této chvíle nazývat *stěnami*. Okrajové podmínky lze definovat různými způsoby použitím mnoha teorií a mohou reflektovat různé fyzikální stavy (např. předepsaný tlak, termodynamickou teplotu, rychlost tekutiny, ...). V těchto odstavcích představíme vybrané okrajové podmínky: okrajové podmínky typu „*bounce-back*“, okrajové podmínky typu „*Zou-He*“, *periodické* a *modifikované periodické* okrajové podmínky. Krátce bude také diskutováno extrapoláční schéma představené v článku [7].

#### 3.4.1 Okrajové podmínky typu „*bounce-back*“

Okrajová podmínka typu „*bounce-back*“ je užita při interakci tekutiny s pevnou nepropustnou stěnou. „*Bounce-back*“, neboli okrajová podmínka pro prostý odraz, popisuje situaci, kdy shluky částic narážejí na pevnou nepropustnou stěnu s neklouzavým povrchem po stejných trasách, po kterých se odrážejí zpět do výpočtové oblasti. Uvažujme shluk částic nacházející se na západní stěně výpočtové oblasti, viz obr. 3.2. Po uplatnění propagačního kroku identifikujeme neznámé distribuční funkce. Ty jsou na obr. 3.2 označeny



Obr. 3.2: Shluk částic nacházející se na západní stěně.

červeně. Pro odvození okrajové podmínky vyjdeme z *nerovnovážné* okrajové podmínky typu „*bounce-back*“ (NEBB) podle [52], tedy

$$f_i - f_i^{eq} = \bar{f}_i - \bar{f}_i^{eq}, \quad (3.25)$$

kde  $f_i$  je hledaná distribuční funkce a  $\bar{f}_i$  je 'protější' distribuční funkce. Je-li neznámou distribuční funkcí  $f_2$ , potom 'protější' distribuční funkcí je podle *nerovnovážné* okrajové podmínky typu „*bounce-back*“  $f_4$ . Je-li neznámou distribuční funkcí  $f_6$ , potom 'protější' distribuční funkcí je  $f_8$  apod.

Pro situaci zobrazenou na obr. 3.2 určíme nyní distribuční funkci  $f_2$  při znalosti 'protější' distribuční funkce  $f_4$ . Pro tento případ tedy rovnici (3.25) uveďme jako

$$f_2 - f_2^{eq} = f_4 - f_4^{eq} \quad (3.26)$$

a dosadíme odpovídající vyjádření lokálních rovnovážných distribučních funkcí (2.50), tedy

$$\begin{aligned} f_2 - W_2\rho \left[ 1 + \frac{\mathbf{c}_2 \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_2 \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2} \right] = \\ f_4 - W_4\rho \left[ 1 + \frac{\mathbf{c}_4 \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_4 \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2} \right]. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Protože odvozujeme okrajovou podmínku typu „*bounce-back*“ na pevné nepohyblivé stěně, musí pro rychlost tekutiny na stěně platit  $\mathbf{u} = (0, 0)^T$ . Po dosazení získáme

$$f_2 - W_2\rho = f_4 - W_4\rho. \quad (3.28)$$

S ohledem na skutečnost, že váhové funkce  $W_2$  a  $W_4$  se podle (2.44) rovnají, získáme konečný tvar okrajové podmínky typu „*bounce-back*“ pro distribuční

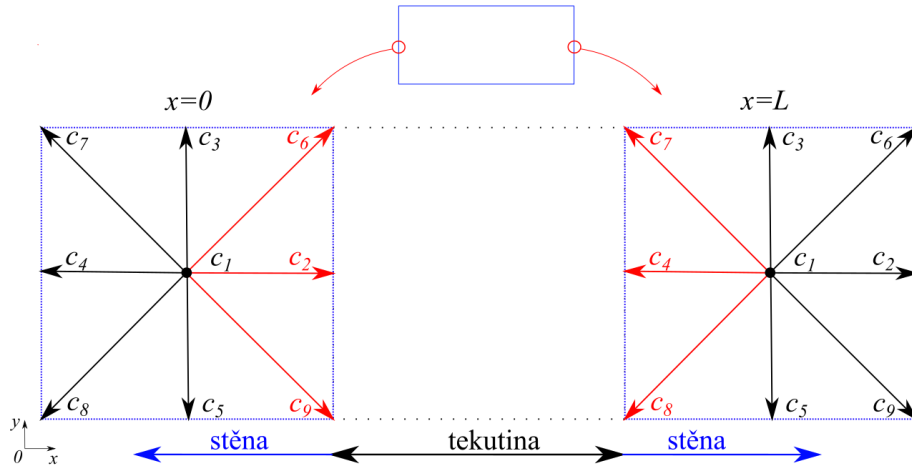
funkci  $f_2$ , tedy

$$f_2 = f_4. \quad (3.29)$$

Pro problém zobrazený na obr. 3.2 bychom určili další neznámé distribuční funkce zcela analogicky s výsledkem  $f_6 = f_8$  a  $f_9 = f_7$ .

### 3.4.2 Periodické okrajové podmínky

*Periodické* okrajové podmínky uplatňujeme pro situace, kdy je řešení proudění periodické, tzn. tekutina opouští výpočtovou oblast na jedné straně a znovu do ní okamžitě vstupuje z opačné strany.



Obr. 3.3: Shluky částic nacházející se na východní a západní stěně výpočtové oblasti.

Pokud tedy pro problém proudění v kanále délky  $L$ , viz obr. 3.3, uplatníme *periodické* okrajové podmínky na jeho západní, resp. východní stěnu, potom platí

$$\begin{aligned} i = 2; 6; 9 : f_i([x = 0, y]^T, t) &= f_i([x = L, y]^T, t) \\ i = 4; 7; 8 : f_i([x = L, y]^T, t) &= f_i([x = 0, y]^T, t). \end{aligned} \quad (3.30)$$

### 3.4.3 Modifikované periodické okrajové podmínky

Podle postupu představeném v [51] lze modifikovat výše představené *periodické* podmínky tak, aby reflektovaly problém proudění v obdélníkovém kanálu délky  $L$  se zadaným tlakovým spádem  $\Delta p$ . Pro takový problém, viz obr. 3.3, tedy v případě ustáleného stavu platí

$$\begin{aligned} \mathbf{u}([x = 0, y]^T, t) &= \mathbf{u}([x = L, y]^T, t); \\ p([x = 0, y]^T, t) &= p([x = L, y]^T, t) + \Delta p, \end{aligned} \quad (3.31)$$

kde  $\Delta p$  je uvažovaný rozdíl konstantního tlaku na vstupní (v našem případě východní) a konstantního tlaku na výstupní (západní) stěně

$$\Delta p = p^{vstup} - p^{vystup}. \quad (3.32)$$

Pro naši potřebu jej uvedeme zavedením konstanty  $\beta[\text{Pa/m}]$  jako  $\Delta p = \beta L$ .

Uplatněním 'klasických' *periodických* okrajových podmínek, viz (3.30), distribuční funkce vstupující do výpočtové oblasti jsou rovny distribučním funkcím z výpočtové oblasti vystupujícím. V tomto případě však by navíc měly produkovat změnu rychlosti a hustoty úměrnou rozdílu hustoty  $\Delta\rho = \frac{\Delta p}{c_s^2} = \frac{\beta L}{c_s^2}$ , viz rovnice (2.48). Hledané distribuční funkce, viz obr. 3.3, tedy vyjádříme podle [51] jako

$$\begin{aligned} i = 2; 6; 9 : f_i([X = 0, Y], t) &= f_i([X = L, Y], t) \frac{\rho_0 + \frac{\beta}{c_s^2}}{\rho_{out}}, \\ i = 4; 7; 8 : f_i([X = L, Y], t) &= f_i([X = 0, Y], t) \frac{\rho_0 - \frac{\beta L}{c_s^2}}{\rho_{in}}, \end{aligned} \quad (3.33)$$

kde  $\rho_0$  je inicializační hodnota hustoty a  $\rho_{in}$ , resp.  $\rho_{out}$ , je průměrná hodnota hustoty na vstupní, resp. výstupní, stěně v daném čase  $t$ .

### 3.4.4 Okrajové podmínky typu „Zou-He“

V článku [52] byl představen způsob, jak s užitím již zmíněné *nerovnovážné* okrajové podmínky typu „*bounce-back*“ odvodit okrajové podmínky na stěně se zadanou rychlostí. V citovaném článku byl naznačen způsob odvození pro rovnou stěnu (tj. horizontální a vertikální v kartézském souřadném systému), který krátce shrneme, a následně odvodíme s užitím stejné teorie konečnou podobu okrajových podmínek pro stěnu šikmou. Na počest autorů citovaného článku tyto okrajové podmínky označujeme jako okrajové podmínky typu „*Zou-He*“.

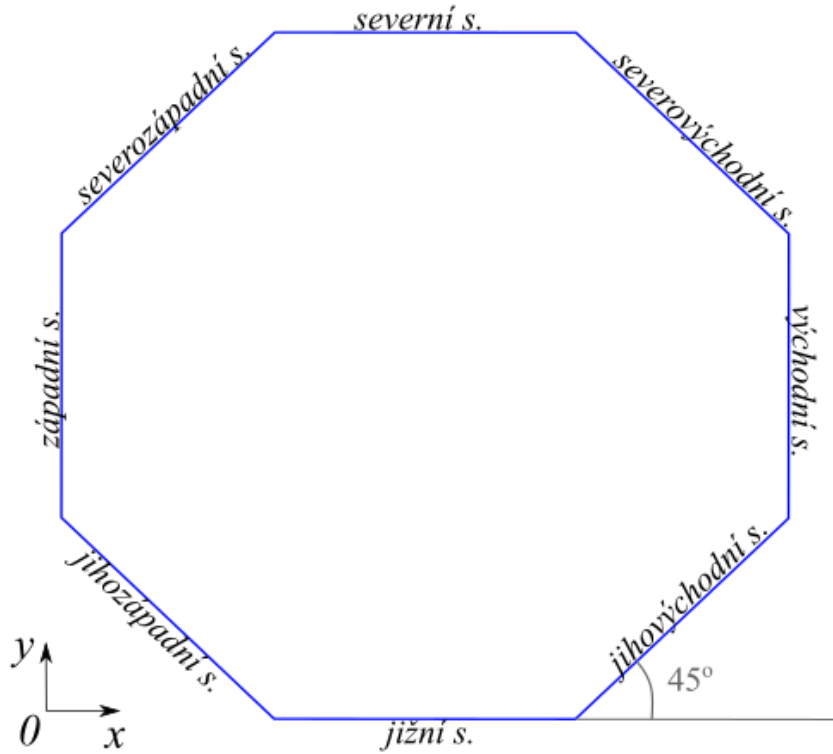
Pro snazší orientaci v následujících odstavcích zavedeme značení *jižní*, *severní*, *východní*, *západní*, *jihovýchodní*, *jihozápadní*, *severovýchodní* a *severozápadní stěna*, viz obr. 3.4.

Uvažujme nejprve shluk nacházející se na západní stěně výpočtové oblasti, viz obr. 3.2. Neznámými distribučními funkcemi, tedy distribučními funkcemi, o kterých nám informaci propagační krok lattice Boltzmannovy metody informaci neposkytuje, jsou distribuční funkce  $f_2, f_6$  a  $f_9$ . Pro určení těchto neznámých distribučních funkcí vyjdeme ze vztahů, které dávají do souvislosti makroskopickou rychlost  $\mathbf{u} = (u_x, u_y)^T$ , hustotu tekutiny  $\rho$  a distribuční funkce  $f_i$ , tedy rovnice (2.30) a (2.31). Rovnici (2.31) uveďme s uvažováním výše určených mikroskopických rychlostí  $\mathbf{c}_i$ , tedy

$$\rho = f_1 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8 + f_9, \quad (3.34)$$

$$\rho \mathbf{u} = \mathbf{c}_1 f_1 + \mathbf{c}_2 f_2 + \mathbf{c}_3 f_3 + \mathbf{c}_4 f_4 + \mathbf{c}_5 f_5 + \mathbf{c}_6 f_6 + \mathbf{c}_7 f_7 + \mathbf{c}_8 f_8 + \mathbf{c}_9 f_9, \quad (3.35)$$

kde symboly  $\rho$ , resp.  $\mathbf{u}$ , rozumíme hustotu, resp. rychlost, tekutiny na uvažované stěně v místě zkoumaného shluku. Rovnici (3.35) dále rozepíšeme do složek



Obr. 3.4: Označení diskutovaných stěn.

kartézského souřadného systému a dosadíme za složky mikroskopických rychlostí  $\mathbf{c}_i$ , viz (2.45),

$$\rho u_x = f_2 - f_4 - f_8 + f_9 + f_6 - f_7, \quad (3.36)$$

$$\rho u_y = f_3 + f_6 + f_7 - f_5 - f_8 - f_9. \quad (3.37)$$

Odečtením rovnice (3.36) od rovnice (3.34) dostaneme

$$\rho - \rho u_x = f_1 + 2f_4 + 2f_8 + 2f_7 + f_3 + f_5. \quad (3.38)$$

Z této rovnice pak algebraickými úpravami vyjádříme hustotu  $\rho$ ,

$$\boxed{\rho = \frac{1}{1 - u_x} (f_1 + f_3 + f_5 + 2(f_4 + f_7 + f_8))}. \quad (3.39)$$

Protože je v tomto momentě hustota kapaliny  $\rho$  už známa, můžeme přistoupit k již předeslané aplikaci *nerovnovážné* okrajové podmínky typu „*bounce-back*“ (NEBB), viz (3.25). Za účelem určení distribuční funkce  $f_2$  tuto podmínku uvedeme v podobě

$$f_2 - f_2^{eq} = f_4 - f_4^{eq}, \quad (3.40)$$

a následně dosadíme odpovídající vyjádření lokálních rovnovážných distribučních funkcí, viz (2.50),

$$\begin{aligned} f_2 - W_2\rho \left[ 1 + \frac{\mathbf{c}_2 \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_2 \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2} \right] = \\ f_4 - W_4\rho \left[ 1 + \frac{\mathbf{c}_4 \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_4 \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2} \right]. \end{aligned} \quad (3.41)$$

Povšimněme si, že váhové koeficienty v rovnici (3.41) se rovnají, viz (2.44). Rovnici s tímto vědomím upravme do podoby

$$f_2 - W_2\rho \left[ \frac{\mathbf{c}_2 \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_2 \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} \right] = f_4 - W_2\rho \left[ \frac{\mathbf{c}_4 \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_4 \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} \right]. \quad (3.42)$$

Do rovnice (3.42) dosadíme vyjádření mikroskopické rychlosti  $\mathbf{c}_2$ , resp.  $\mathbf{c}_4$ , viz (2.45), a upravíme. Dostaneme

$$\begin{aligned} f_2 - W_2\rho \left[ \frac{u_x}{c_s^2} + \frac{(u_x)^2}{2c_s^4} \right] = f_4 - W_2\rho \left[ -\frac{u_x}{c_s^2} + \frac{(u_x)^2}{2c_s^4} \right] \Rightarrow \\ \Rightarrow f_2 = f_4 + W_2\rho \frac{2u_x}{c_s^2}. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Dosadíme-li pak do této rovnice již dříve uvedené vyjádření rychlosti zvuku pro rychlostní model D2Q9, viz (3.3), a váhový koeficient  $W_2$ , viz (2.44), dostaneme

$$\boxed{f_2 = f_4 + \frac{2}{3}\rho u_x}, \quad (3.44)$$

což je finální verze okrajové podmínky pro distribuční funkci  $f_2$ . Další neznámé distribuční funkce  $f_6$  a  $f_9$  získáme řešením soustavy rovnic, kterou tvoří rovnice (3.36), (3.37) a (3.44). Jejich konečná podoba je

$$\boxed{f_6 = \frac{1}{2}(f_5 - f_3) + f_8 + \frac{\rho u_x}{6} + \frac{\rho u_y}{2}}, \quad (3.45)$$

$$\boxed{f_9 = \frac{1}{2}(f_3 - f_5) + f_7 + \frac{\rho u_x}{6} - \frac{\rho u_y}{2}}. \quad (3.46)$$

Okrajové podmínky typu „Zou-He“ pro východní, jižní a severní stěnu uvedeme bez komentářů na obr. 3.5, 3.6 a 3.7.



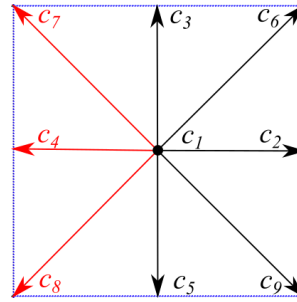
$$\rho = \frac{1}{1 + u_x} (f_1 + f_3 + f_5 + 2(f_2 + f_6 + f_9))$$

$$f_4 = f_2 - \frac{2}{3}\rho u_x$$

$$f_8 = \frac{1}{2}(f_3 - f_5) + f_6 - \frac{\rho u_x}{6} - \frac{\rho u_y}{2}$$

$$f_7 = \frac{1}{2}(f_5 - f_3) + f_9 - \frac{\rho u_x}{6} + \frac{\rho u_y}{2}$$

(a) Okrajové podmínky pro shluk na východní stěně.



(b) Shluk na východ. s.

Obr. 3.5: Okrajové podmínky typu „Zou-He“ pro shluk částic na východní stěně.

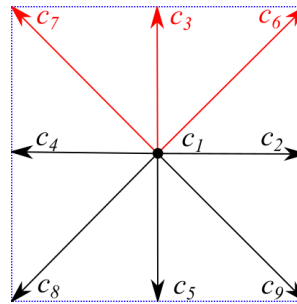
$$\rho = \frac{1}{1 - u_y} (f_1 + f_2 + f_4 + 2(f_5 + f_8 + f_9))$$

$$f_3 = f_5 + \frac{2}{3}\rho u_y$$

$$f_6 = \frac{1}{2}(f_4 - f_2) + f_8 + \frac{\rho u_y}{6} + \frac{\rho u_x}{2}$$

$$f_7 = \frac{1}{2}(f_2 - f_4) + f_9 + \frac{\rho u_y}{6} - \frac{\rho u_x}{2}$$

(a) Okrajové podmínky pro shluk na jižní stěně.



(b) Shluk na jižní s.

Obr. 3.6: Okrajové podmínky typu „Zou-He“ pro shluk částic na jižní stěně.

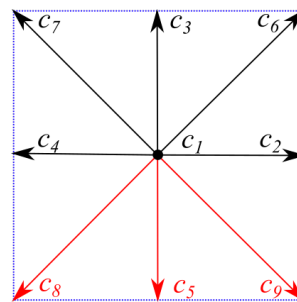
$$\rho = \frac{1}{1 + u_y} (f_1 + f_2 + f_4 + 2(f_3 + f_7 + f_6))$$

$$f_5 = f_3 - \frac{2}{3}\rho u_y$$

$$f_7 = \frac{1}{2}(f_2 - f_4) + f_6 - \frac{\rho u_y}{6} - \frac{\rho u_x}{2}$$

$$f_9 = \frac{1}{2}(f_4 - f_2) + f_7 - \frac{\rho u_y}{6} + \frac{\rho u_x}{2}$$

(a) Okrajové podmínky pro shluk na severní stěně.

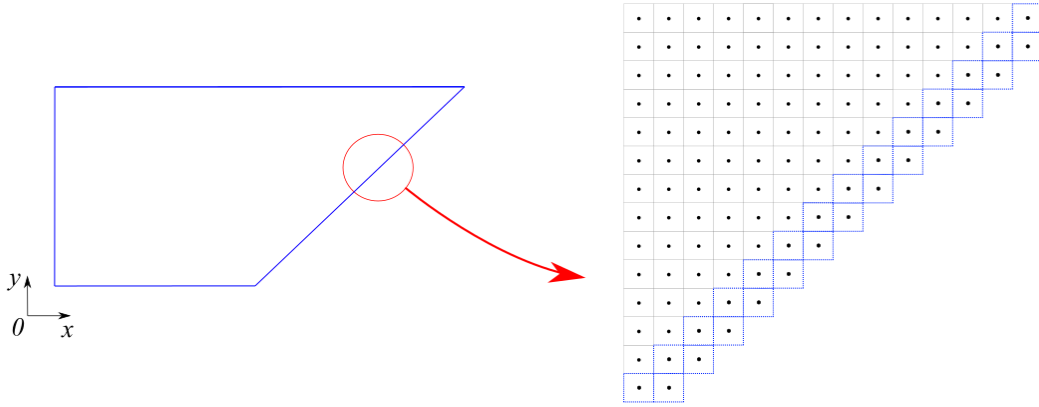


(b) Shluk na severní s.

Obr. 3.7: Okrajové podmínky typu „Zou-He“ pro shluk částic na severní stěně.

## Okrajové podmínky typu „Zou-He“ na šikmé stěně

Pro odvození okrajové podmínky typu „Zou-He“ (tj. okrajové podmínky pro stěnu se zadanou rychlostí) pro svislou stěnu v kartézském souřadném systému jsme sestavili soustavu lineárních rovnic tvořenou třemi rovnicemi (3.34), (3.36) a (3.37). V této soustavě jsme identifikovali čtyři neznámé  $f_2$ ,  $f_6$ ,  $f_9$  a  $\rho$ . Aby byla soustava jednoznačně řešitelná, museli jsme k této soustavě připojit nejméně jednu *nerovnovážnou* okrajovou podmínku typu „bounce-back“. Zcela analogicky budeme postupovat v případě odvození okrajové podmínky na šikmé stěně.



Obr. 3.8: Aproximace šikmé stěny na výpočtové (mřížkové) oblasti.

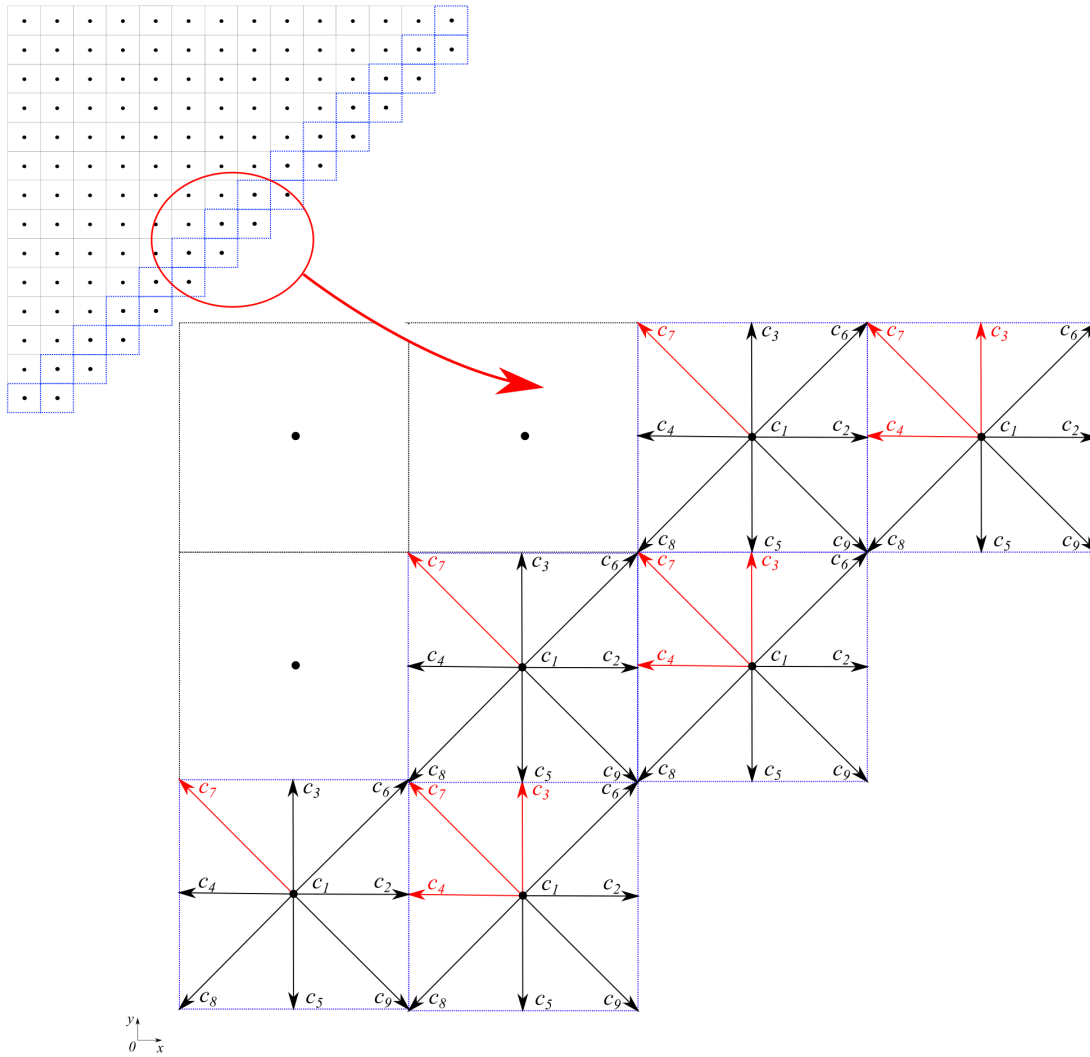
Šikmou stěnu se sklonem  $45^\circ$  od vodorovné osy  $x$  na ortogonální výpočtové oblasti s uvažovanou mřížkovou strukturou nejlépe aproximujeme vybranými prvky podle schématu, který je zobrazen na obr. 3.8. Provedeme propagační krok lattice Boltzmannovy metody na výpočtové oblasti s takto definovanou stěnou a identifikujeme neznámé distribuční funkce. Zjistíme, že na stěně se nacházejí dva typy shluků, viz obr. 3.9, tj. shluk s neznámými distribučními funkcemi  $f_3$ ,  $f_4$  a  $f_7$  a shluk s neznámou distribuční funkcí  $f_7$ .

Zabývejme se nejprve shlukem se třemi neznámými distribučními funkcemi. Sečtením rovnic (3.34) a (3.36) a algebraickými úpravami dostaneme předpis pro distribuční funkci  $f_3$ ,

$$f_3 = \rho + \rho u_x - f_1 - f_5 - 2(f_2 + f_6 + f_9), \quad (3.47)$$

kde však hustotu  $\rho$  v místě zkoumaného shluku v tomto momentě neznáme. Takto vyjádřenou distribuční funkci  $f_3$  dosadíme do rovnice (3.37) a dostaneme vyjádření hustoty  $\rho$ , tedy

$$\rho = \frac{-f_1 - 2f_5 - 2f_2 - f_6 - 3f_9 + f_7 - f_8}{u_y - 1 - u_x}. \quad (3.48)$$



Obr. 3.9: Identifikace 'neznámých' distribučních funkcí.

Stále dosud neurčenou distribuční funkci  $f_7$  figurující v rovnici (3.48) určíme právě aplikací *nerovnovážné* okrajové podmínky typu „*bounce-back*“

$$f_7 - f_7^{eq} = f_9 - f_9^{eq}. \quad (3.49)$$

Dosažením lokálních rovnovážných distribučních funkcí podle rovnice (2.50) a jim odpovídajícím mikroskopickým rychlostem, viz (2.45), dostaneme

$$\begin{aligned} f_7 - W_7 \rho \left[ \frac{u_y - u_x}{c_s^2} \right] &= f_9 + W_7 \rho \left[ \frac{u_y - u_x}{c_s^2} \right] \Rightarrow \\ \Rightarrow f_7 &= f_9 + W_7 \rho \frac{2(u_y - u_x)}{c_s^2}. \end{aligned} \quad (3.50)$$

Vyčísleme-li pak váhový koeficient  $W_7$  ( $W_7 = W_9$ ), viz (2.44), a rychlost zvuku  $c_s$ , viz (3.3), dostaneme finální podobu okrajové podmínky typu „*Zou-*

He“ pro distribuční funkci  $f_7$ ,

$$f_7 = f_9 + \frac{1}{6}\rho(u_y - u_x). \quad (3.51)$$

Dosažením takové podoby distribuční funkce  $f_7$  do rovnice (3.48) dostaneme vyjádření hustoty  $\rho$  v místě zkoumaného shluku

$$\rho = \frac{-f_1 - f_6 - f_8 - 2(f_2 + f_5 + f_9)}{\frac{5}{6}u_y - \frac{5}{6}u_x - 1}. \quad (3.52)$$

Řešením soustavy rovnic tvořené rovnicemi (3.36), (3.37) a (3.51) pro neznámé  $f_4$  a  $f_3$  získáme jejich konečnou podobu

$$f_4 = \rho - \rho u_y - f_2 - f_1 - 2(f_9 + f_8 + f_5), \quad (3.53)$$

$$f_3 = \frac{5}{6}\rho u_y + \frac{1}{6}\rho u_x - f_6 + f_5 + f_8. \quad (3.54)$$

Tak jsme odvodili okrajové podmínky „Zou-He“ pro shluk částic nacházející se na jihovýchodní stěně, který má po uplatnění propagačního kroku lattice Boltzmannovy metody tři neurčené distribuční funkce  $f_3$ ,  $f_4$  a  $f_7$ .

V případě shluku, který má pouze jednu neurčenou distribuční funkci  $f_7$ , viz obr 3.9, je pak zcela postačující určit hustotu v místě shluku podle rovnice (3.52) a následně neznámou distribuční funkci uplatněním rovnice (3.51).

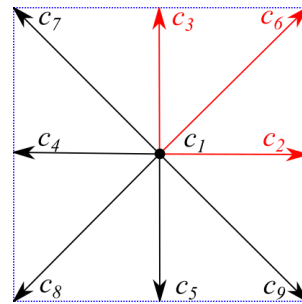
Finální podobu okrajových podmínek pro shluky se třemi neznámými distribučními funkcemi na jihozápadní, severozápadní a severovýchodní stěně zobrazují obr. 3.10, 3.11 a 3.12.

$$\rho = \frac{-f_1 - f_7 - f_9 - 2(f_4 + f_5 + f_8)}{\frac{5}{6}u_y + \frac{5}{6}u_x - 1}$$

$$f_6 = f_8 + \frac{1}{6}\rho(u_y + u_x)$$

$$f_2 = \rho - \rho u_y - f_4 - f_1 - 2(f_9 + f_8 + f_5)$$

$$f_3 = \frac{5}{6}\rho u_y - \frac{1}{6}\rho u_x + f_9 + f_5 - f_7$$



(a) Okrajové podmínky pro shluk na jihozápadní stěně.

(b) Shluk na jihozápadní stěně.

Obr. 3.10: Okrajové podmínky typu „Zou-He“ pro shluk částic na jihozápadní stěně.

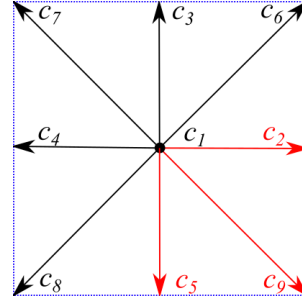
$$\rho = \frac{-f_1 - f_6 - f_8 - 2(f_3 + f_4 + f_7)}{\frac{5}{6}u_x - \frac{5}{6}u_y - 1}$$

$$f_2 = \rho + \rho u_y - f_4 - f_1 - 2(f_7 + f_6 + f_3)$$

$$f_9 = f_7 - \frac{1}{6}\rho(u_y - u_x)$$

$$f_5 = -\frac{5}{6}\rho u_y - \frac{1}{6}\rho u_x + f_3 + f_6 - f_8$$

(a) Okrajové podmínky pro shluk na severozápadní stěně.



(b) Shluk na severozápadní stěně.

Obr. 3.11: Okrajové podmínky typu „Zou-He“ pro shluk částic na severozápadní stěně.

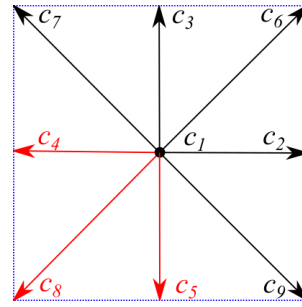
$$\rho = \frac{f_1 + f_7 + f_9 + 2(f_2 + f_6 + f_3)}{\frac{5}{6}u_y + \frac{5}{6}u_x + 1}$$

$$f_4 = \rho + \rho u_y - f_2 - f_1 - 2(f_7 + f_6 + f_3)$$

$$f_8 = f_6 - \frac{1}{6}\rho(u_y + u_x)$$

$$f_5 = -\frac{5}{6}\rho u_y + \frac{1}{6}\rho u_x - f_9 + f_3 + f_7$$

(a) Okrajové podmínky pro shluk na severovýchodní stěně.

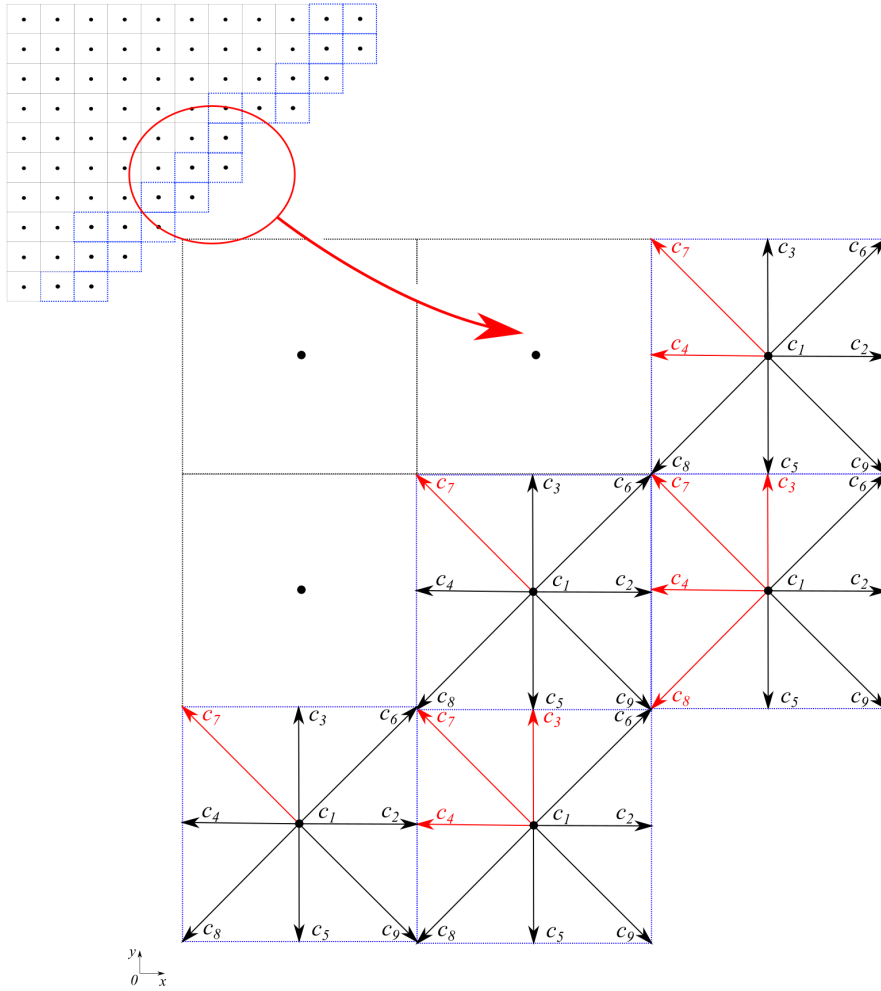


(b) Shluk na severovýchodní stěně.

Obr. 3.12: Okrajové podmínky typu „Zou-He“ pro shluk částic na severovýchodní stěně.

Při aproximaci stěny s obecným sklonem od osy  $x$  se můžeme setkat se shluky se čtyřmi neznámými distribučními funkcemi, viz obr. 3.13. K řešeným rovnicím (3.34), (3.36) a (3.37) pak musíme v tomto případě připojit nejméně dvě *nerovnovážné* okrajové podmínky typu „*bounce-back*“. Řešíme-li problém uvedený na obr. 3.13, identifikujeme po propagačním kroku lattice Boltzmannovy metody čtyři neznámé distribuční funkce  $f_3$ ,  $f_4$ ,  $f_7$  a  $f_8$ . Pro ně platí již dříve odvozené okrajové podmínky pro shluk nacházející se na jihovýchodní stěně, viz rovnice (3.51), (3.52), (3.53) a (3.54). Distribuční funkci  $f_8$  figurující v těchto rovnicích však musíme vyjádřit pomocí *nerovnovážné* okrajové podmínky typu „*bounce-back*“ jako

$$f_8 = f_6 - \frac{1}{6}\rho(u_y + u_x). \quad (3.55)$$



Obr. 3.13: Identifikace shluku se čtyřmi neznámými distribučními funkcemi.

### 3.4.5 Extrapolační schéma

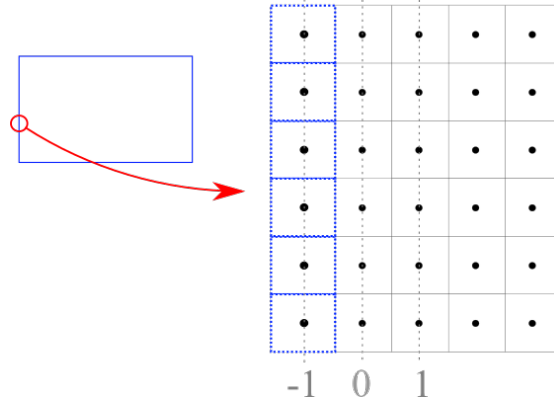
Autoři článku [7] upozorňují, že lattice Boltzmannovu metodu lze považovat za speciální konečno-diferenciální metodu pro distribuční funkci  $f_i$ , viz rovnice (2.51). Takový vhlad nám umožňuje představit novou sadu okrajových podmínek zvanou jako *extrapolační schéma*, která je podobná té užívané konečno-diferenciálními schématy.

Princip schématu je poměrně prostý. Na stěně obdél níkového kanálu uvažujme tři 'za sebou' ležící shluky, viz obr. 3.14. Shluk na úrovni 0 leží na stěně, shluk na úrovni 1 leží uvnitř tekutiny a shluk na úrovni  $-1$  leží uvnitř stěny. Distribuční funkce, které po uplatnění standardního propagačního kroku nejsou známy, určíme rovnicí

$$f_i^{-1} = 2f_i^0 - f_i^1, \quad (3.56)$$

kde  $f_i^{-1}$  je distribuční funkce shluku uvnitř stěny,  $f_i^0$  na stěně a  $f_i^1$  uvnitř tekutiny. Algoritmus lattice Boltzmannovy metody probíhá zcela standardně s tou výjimkou, že předepsaná makroskopická veličina hustoty  $\rho$  nebo rychlost shluků ležících uvnitř stěny  $\mathbf{u}$  není standardně vyhodnocena, ale je prostě zadána. Se zadanou makroskopickou veličinou jsou pak určeny lokální rovnovážné distribuční funkce  $f_i^{eq}$  těchto shluků, viz rovnice (2.46). Algoritmus dále pokračuje výpočtem postkolizních distribučních funkcí  $f_i^{post}$  a propagačním krokem.

Princip rovnice (3.56) je sice poměrně rozšířen ve schématech metody konečných diferencí, nicméně v případě lattice Boltzmannovy metody ho lze použít pouze pro problémy, jejichž relaxační čas se blíží jedné, tedy  $\tau \approx 1$ . Všimněme si, že pokud relaxační čas problému se přímo rovná jedné, potom postkolizní funkce  $f_i^{post}$  určené v kolizním kroku lattice Boltzmannovy metody, viz rovnice (3.18), se přímo rovnají lokálním rovnovážným distribučním funkcím  $f_i^{eq}$ . Zvolené nastavení iteračního a rozměrového kroku, viz (3.2), je v tomto ohledu velice restriktivní a extrapoláčním schématem tak lze postihnout pouze problémy pomalého proudění.



Obr. 3.14: Označení úrovní -1/0/1 pro extrapoláční schéma.

### 3.5 Vyhodnocení makroskopických veličin

Vyhodnocení rychlosti a hustoty kapaliny v daném uzlu výpočtové mříže uskutečníme po provedení kolizního kroku, propagačního kroku a po uplatnění příslušných okrajových podmínek užitím rovnic

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_i f_i, \quad (3.57)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \sum_i \mathbf{c}_i f_i, \quad (3.58)$$

kteří jsou analogické rovnicím (2.30), (2.31). Tím je ukončen výpočet v daném iteračním kroku. Simulace v tomto momentě buď pokračuje novou iterací,

tj. kolizním krokem, nebo je zastavena.

V této práci řešíme výhradně problémy ustáleného proudění. Výpočet zastavujeme v momentě, kdy se rychlostní pole řešeného problému výrazně nemění. Tento moment při řešení problémů této práce s dostatečnou přesností nastane tehdy, když je naplněna zastavovací podmínka

$$\frac{\sum_{ij} ||\mathbf{u}_{ij}^{n+1}| - |\mathbf{u}_{ij}^n||}{\sum_{ij} |\mathbf{u}_{ij}^{n+1}|} < 5 \cdot 10^{-9}, \quad (3.59)$$

kde  $|\mathbf{u}_{ij}^n|$  je velikost rychlosti v  $n$ -tém časovém kroku a v místě  $(x_i, y_j)$  výpočtové oblasti.

Uvedme na tomto místě ještě vztah pro vyjádření smykového napětí na stěnách výpočtové oblasti  $\boldsymbol{\tau}_w$  (tzv. wall shear stress). Za tímto účelem napíšeme vztah vyjadřující napětí newtonské kapaliny

$$\tau_{ij} = -p\delta_{ij} + 2\nu\rho L_{ij}, \quad (3.60)$$

kde  $L_{ij}$  je tenzor rychlosti deformace. Z Chapman-Enskogovy analýzy plyne, že

$$\mathbf{L} = -\frac{1}{2c_s^2\rho\tau} \sum_i (f_i - f_i^{eq}) \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i. \quad (3.61)$$

Smykové napětí na stěnách výpočtové oblasti pak určíme pomocí normály stěny výpočtové oblasti  $\mathbf{n}$  jako

$$\tau_{wi} = \sigma_{ij}n_j - (\sigma_{kj}n_jn_k)n_i. \quad (3.62)$$

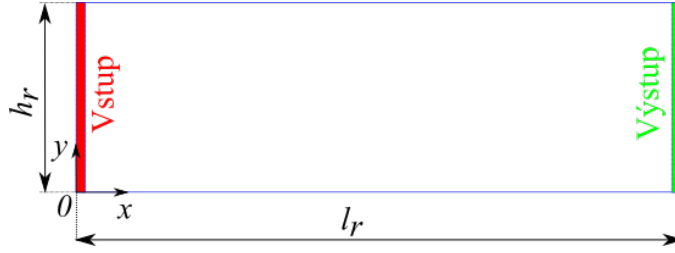
## 3.6 Numerické simulace

S užitím algoritmu užívajícího principu MRT, který jsme představili dříve v této kapitole, budou řešeny problémy proudění kapaliny na obdélníkové výpočtové oblasti, v idealizované a reálné cévní bifurkaci. Simulace budou realizovány v programu *MATLAB* a jejich výsledky zde budou diskutovány.

### 3.6.1 Testování okrajových podmínek při řešení problému proudění kapaliny v obdélníkovém kanálu

V tomto odstavci bude řešen problém proudění newtonské kapaliny v obdélníkovém kanálu se zadaným tlakovým koeficientem. Sledováním ustáleného stavu proudění budou testovány okrajové podmínky dříve představené v této kapitole.





Obr. 3.15: Geometrie problému proudění v obdélníkovém kanálu.

Uvažujme tedy výpočtovou oblast zobrazenou na obr. 3.15, kde  $l_r$ , resp.  $h_r$ , je délka, resp. šířka, kanálu a  $\delta$  je zadaný tlakový koeficient. Ten definujeme jako

$$\delta = \frac{p_r^{vstup} - p_r^{vystup}}{p_r}, \quad (3.63)$$

kde  $p_r$  je počáteční tlak kapaliny uvnitř kanálu a  $p_r^{vstup}$ , resp.  $p_r^{vystup}$ , je zadaný tlak na vstupní, resp. výstupní, stěně kanálu ( $p_r^{vstup} > p_r^{vystup}$ ). Zadané parametry zobrazuje tab. 3.1.

Tab. 3.1: Zadání problému proudění kapaliny v obdélníkovém kanálu.

Veličina	Rozměr	Hodnota
$l_r$	$10^{-4}[\text{m}]$	2,0
$h_r$	$10^{-4}[\text{m}]$	0,2
$(c_s)_r$	$10^3[\text{ms}^{-1}]$	1,58
$\nu_r$	$10^{-6}[\text{m}^2\text{s}^{-1}]$	4,5
$\delta$	$10^{-6}[-]$	7,0

Horní a spodní stěnu kanálu uvažujeme dokonale tuhou, hladkou a nepropustnou.

Parametry s fyzikálním rozměrem zobrazené v tab. 3.1 přepočítáme na tzv. veličiny lattice boltzmannovské, se kterými bude dále algoritmus operovat.

Napišme vztah (3.63) s vyjádřením tlaku podle rovnice (2.48),

$$\frac{c_s^2 \rho_r^{vstup} - c_s^2 \rho_r^{vystup}}{c_s^2 \rho_r} = \frac{\rho_r^{vstup} - \rho_r^{vystup}}{\rho_r} = \delta. \quad (3.64)$$

Počáteční hodnotu hustoty v lattice boltzmannovských jednotkách volme  $\rho_0 = 1$ . V případě řešení pomocí okrajových podmínek typu „Zou-He“ okrajových podmínek musíme vstupní  $\rho^{vstup}$ , resp. výstupní  $\rho^{vystup}$ , hodnotu hustoty přímo zvolit tak, aby byl zachován poměr  $\delta$  i v lattice boltzmannovských jednotkách, tedy  $\rho^{vstup} = \rho + \frac{\delta}{2}$ ;  $\rho^{vystup} = \rho - \frac{\delta}{2}$ .

Dalším bezrozměrovým parametrem, který je potřeba zohlednit, je podíl šířky

a délky kanálu, tedy

$$\lambda = \frac{h_r}{l_r} = \frac{h}{l}. \quad (3.65)$$

Volbou šířky  $h$  pak dopočítáme z této rovnice délku kanálu  $l$  jako

$$l = \frac{h}{\lambda}. \quad (3.66)$$

Užitím vztahu (3.6) dostaneme pak vyjádření konverzního faktoru pro rozměr.

Se znalostí dříve představeného vztahu pro přepočet charakteristické rychlosti, viz (3.16), jsme schopni určit konverzní faktor pro čas  $C_t$ . Roli charakteristické rychlosti v tomto případě bude hrát rychlost zvuku ve zkoumaném prostředí v lattice boltzmannovských jednotkách  $c_s$ , resp. ve fyzikálních jednotkách  $(c_s)_r$ . Vyjádření časového konverzního faktoru tedy je

$$(c_s)_r = C_l C_t^{-1} c_s \Rightarrow C_t = \frac{C_l c_s}{(c_s)_r}. \quad (3.67)$$

Kinematickou viskozitu v lattice boltzmannovských jednotkách vyjádříme ze vztahu (3.14) jako

$$\nu_r = C_l^2 C_t^{-1} \nu \Rightarrow \nu = C_l^{-2} C_t \nu_r \quad (3.68)$$

a následně vyčíslíme relaxační čas  $\tau$  dosazením do rovnice (3.13).

Pro tento problém bylo zvoleno MRT schéma. Matice  $\mathbf{S}$  a její relaxační časy  $s_i$ , viz (3.20), byly voleny podle [34] jako

$$\mathbf{S} = \text{diag}(1, 7/5, 7/5, 1, 6/5, 1, 6/5, 1/\tau, 1/\tau), \quad (3.69)$$

což je podle literatury vhodné nastavení pro řešení ustáleného proudění v obdélníkovém kanálu.

Řešení rychlostního pole problému lattice Boltzmannovou metodou bude porovnáno s jeho analytickým řešením. To je odvoditelné ze soustavy rovnic tvořené Navier-Stokesovými rovnicemi a rovnicí kontinuity. My ho uvedeme v podobě

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= (u_x, u_y)^T; \\ u_x(x, y) &= \frac{[(c_s)_r]^2 (\rho_r^{vstup} - \rho_r^{vystup})}{2\nu_r \rho_r l_r} y(y - h_r); \\ u_y(x, y) &= 0. \end{aligned} \quad (3.70)$$

### Testování okrajových podmínek typu „Zou-He“

Řešme problém nejprve užitím okrajových podmínek typu „Zou-He“ na vstupní a výstupní stěně a okrajových podmínek typu „bounce-back“ na horní a spodní stěně. Zkoumejme vliv jemnosti sítě na přesnost řešení.

Šířku kanálu v lattice boltzmannovských jednotkách jsme postupně volili  $h = 10, 20, 30$  a  $60$ . S takto uvažovanými hodnotami šířky kanálu jsme přepočítali veličiny s fyzikálním rozměrem na veličiny lattice boltzmannovské. Uvažujeme aplikaci okrajových podmínek typu „*Zou-He*“ na vstupní (západní) stěně kanálu, tj. rovnice (3.44), (3.45), (3.46). V případě, že by byla předepsána na stěně rychlost kapaliny, dopočítali bychom hustotu kapaliny užitím rovnice (3.39). V našem případě je však neznámou právě  $x$ -ová složka rychlosti kapaliny  $u_x$ . Z rovnice (3.39) ji vyjádříme ( $\rho = \rho_{vstup}$ ) jako

$$u_x = 1 - \frac{1}{\rho_{vstup}} (f_1 + f_3 + f_5 + 2(f_4 + f_7 + f_8)). \quad (3.71)$$

S přirozeným předpokladem  $u_y = 0$  pak určíme neznámé distribuční funkce na hranici výpočtové oblasti. Zcela analogicky bychom postupovali při určování okrajových podmínek na východní stěně, viz obr. 3.5. Okrajovou podmínku prostého odrazu na spodní a horní stěně užijeme podle principu, který jsme nastínili v odstavci 3.4.1.

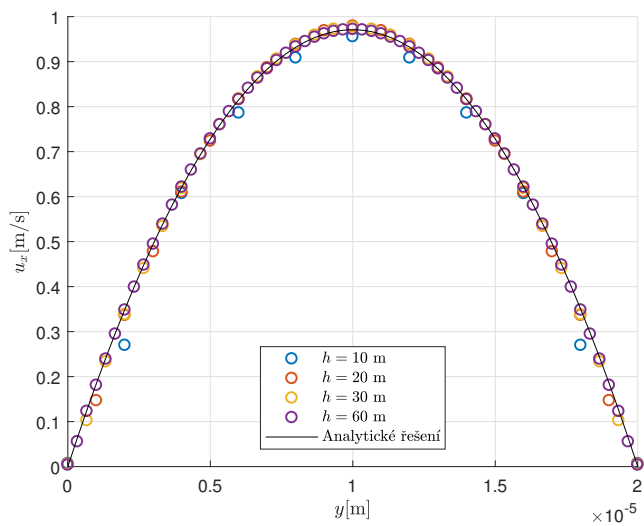
Výpočet zastavujeme v momentě, kdy je naplněna podmínka (3.59). Tu je možné zjednodušit, přijmeme-li předpoklad, že  $y$ -pílonová složka rychlosti je nulová, viz (3.70).

Sledujeme nenulovou složku rychlosti  $u_x$  v příčném řezu kanálu na obr. 3.16 a 3.17. Docházíme k závěru, že numerické řešení problému se blíží analytickému řešení se zvyšující se hustotou výpočtové sítě. Důvodem je fakt, že na jemnější síti se výsledný rychlostní parabolický profil může přesněji vykreslit. Se zvyšující se jemností výpočtové sítě navíc roste relaxační čas  $\tau$ , který se tak vzdaluje od problematické hodnoty  $\tau = \frac{1}{2}$ . O tom se přesvědčíme, vyjádříme-li z rovnice (3.14) kinematickou viskozitu v lattice boltzmannovských jednotkách  $\nu$  a dosadíme ji do rovnice (3.13), tedy

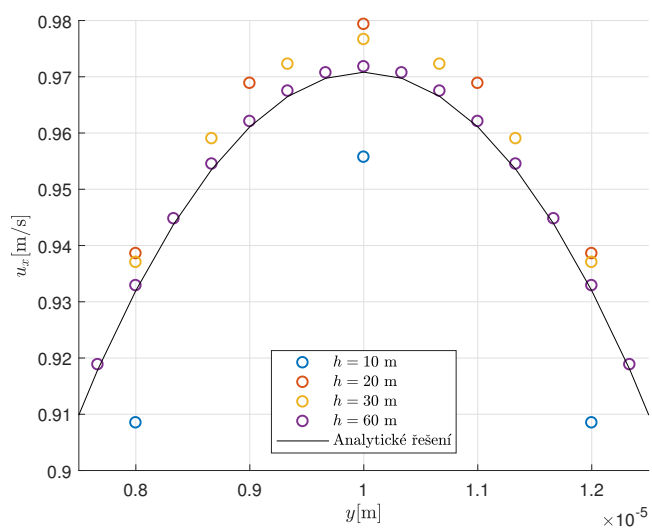
$$\tau = 3 \frac{C_t}{C_l^2} \nu_r + \frac{1}{2} \Rightarrow \tau = 3 \frac{C_t}{l_r^2} l^2 \nu_r + \frac{1}{2}. \quad (3.72)$$

Odtud je patrné, že s rostoucím rozměrem  $l$  roste i relaxační čas  $\tau$ .

Užitím okrajových podmínek typu „*bounce-back*“ na spodní a horní stěně jsme uvažovali polohu stěny přímo procházející čtvercovým shlukem o délce hrany  $\Delta x$ . Pro zvýšení přesnosti zejména pro případ slabě zahuštěné sítě ( $h = 10$ ) je podle [28, 5] vhodné přidání další podélné řady 'suchých' shluků a užití okrajové podmínky typu „*half-way bounce-back*“. Tato okrajová podmínka pak uvažuje polohu stěny mezi 'suchými' a jejichmi sousedními shluky.



Obr. 3.16: Rychlostní profil řešeného problému (okrajová podmínka typu „Zou-He“).

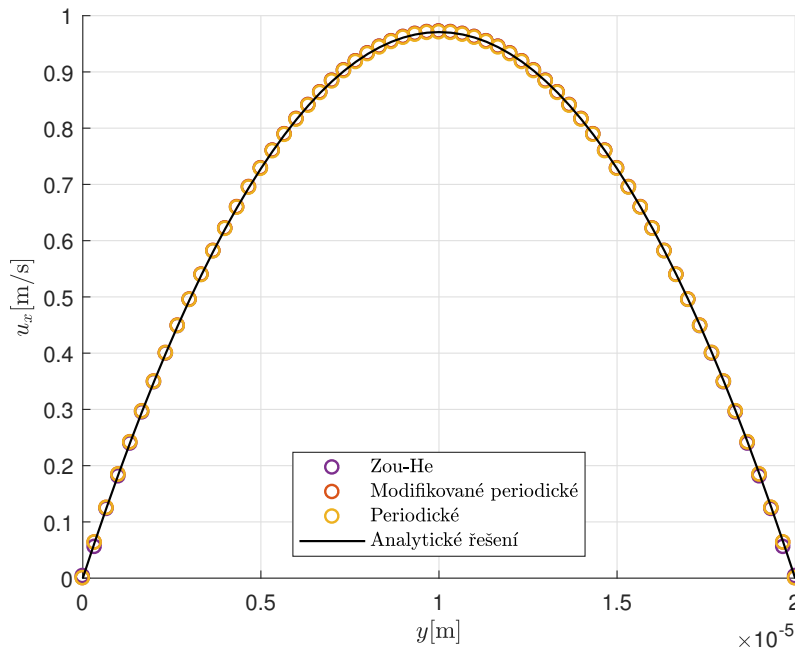


Obr. 3.17: Rychlostní profil řešeného problému v okolí maximální rychlosti (okrajová podmínka typu „Zou-He“).

## Řešení problému pomocí *periodických* okrajových podmínek

V předcházejícím odstavci jsme se přesvědčili, že pro variantu  $h = 60$  se numerické řešení problému pomocí okrajových podmínek typu „*Zou-He*“ dostatečně shoduje s analytickým. Při stejném nastavení šířky kanálu  $h$  a okrajové podmínky na horní a spodní stěně řešíme nyní problém užitím *periodických* okrajových podmínek, viz rovnice (3.30), a *modifikovaných periodických* okrajových podmínek, viz rovnice (3.33), na vstupu a výstupu.

V případě užití *periodických* okrajových podmínek je navíc nutné působit na shluky částic silou, která je úměrná předepsanému tlakovému koeficientu. Důsledkem působení této síly jest rozpořívání těchto shluků a potažmo kapaliny na makroskopickém měřítku. Toho docílíme zavedením tlakové síly působící na jednotku objemu  $F = \frac{\Delta p}{2l}$ . Tu po uplatnění okrajových podmínek přičteme k distribuční funkci ležící ve směru rychlosti předpokládaného proudění kapaliny ( $f_2$ ) a odečteme od distribuční funkce ležící proti tomuto směru ( $f_4$ ). Následně probíhá algoritmus zcela standardně.



Obr. 3.18: Rychlostní profil řešeného problému okrajovými podmínkami typu „*Zou-He*“ a *periodickými* okrajovými podmínkami.

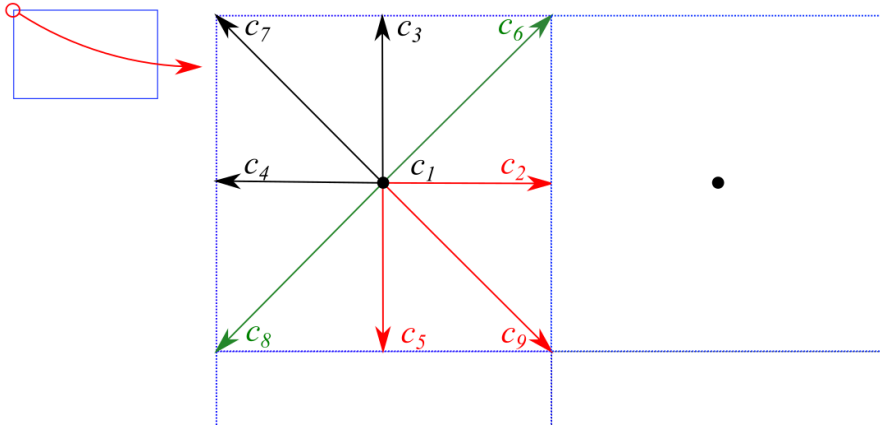
Na obr. 3.18 sledujeme vyvinuté rychlostní profily získané zmíněnými přístupy. Nejmarkantnější rozdíly mezi těmito řešeními sledujeme v blízkosti horních a spodních stěn. Řešení *periodických* a *modifikovaných periodických* okrajových podmínek se zde sice jeví jako téměř totožné, ale rozchází se v těchto místech s řešením, které jsme v předcházejícím odstavci získali pomocí okrajových podmínek typu „*Zou-He*“. Důvodem je pravděpodobně

fakt, že řešíme-li problém proudění pomocí okrajových podmínek typu „Zou-He“, musíme věnovat zvláštní pozornost shlukům nacházejícím se v rozích výpočtové oblasti. Rohové shluky obsahují navíc ve srovnání se shluky situovanými uvnitř stěny neznámé distribuční funkce, které jsou na obr. 3.19 označeny zeleně. Autoři publikací [28, 52] popisují různé způsoby, jak tyto neznámé distribuční funkce určit. My přijímáme předpoklad, že tyto distribuční funkce mají shodnou velikost, viz [28]. Pro případ zobrazený na obr. 3.19 s uvažováním rovnice (3.55) potom docházíme k závěru, že platí

$$\begin{aligned} f_6 &= \frac{1}{12} \rho^{vstup}(u_y + u_x), \\ f_8 &= -\frac{1}{12} \rho^{vstup}(u_y + u_x). \end{aligned} \quad (3.73)$$

Protože je tento rohový shluk součástí horní stěny, kde uvažujeme obě složky rychlosti nulové, platí  $f_6 = f_8 = 0$ . Distribuční funkci  $f_5$  potom určíme užitím teorie pro okrajové podmínky typu „bounce-back“ jako  $f_5 = f_3$ . Distribuční funkce  $f_2$  a  $f_9$  určíme užitím rovnic (3.45) a (3.46), které se při uvažované nulové rychlosti kapaliny na stěně zjednoduší v  $f_9 = f_7$  a  $f_5 = f_4$ .

V případě užití *periodických* okrajových podmínek jsou neznámé funkce prostě určeny podle principu periodicity ze znalosti distribučních funkcí na protější stěně kanálu. Užijeme-li tedy *periodické* okrajové podmínky, potom kanál z podstaty žádné rohy nemá a není třeba formulovat další předpoklad jako v případě řešení okrajovými podmínkami typu „Zou-He“.

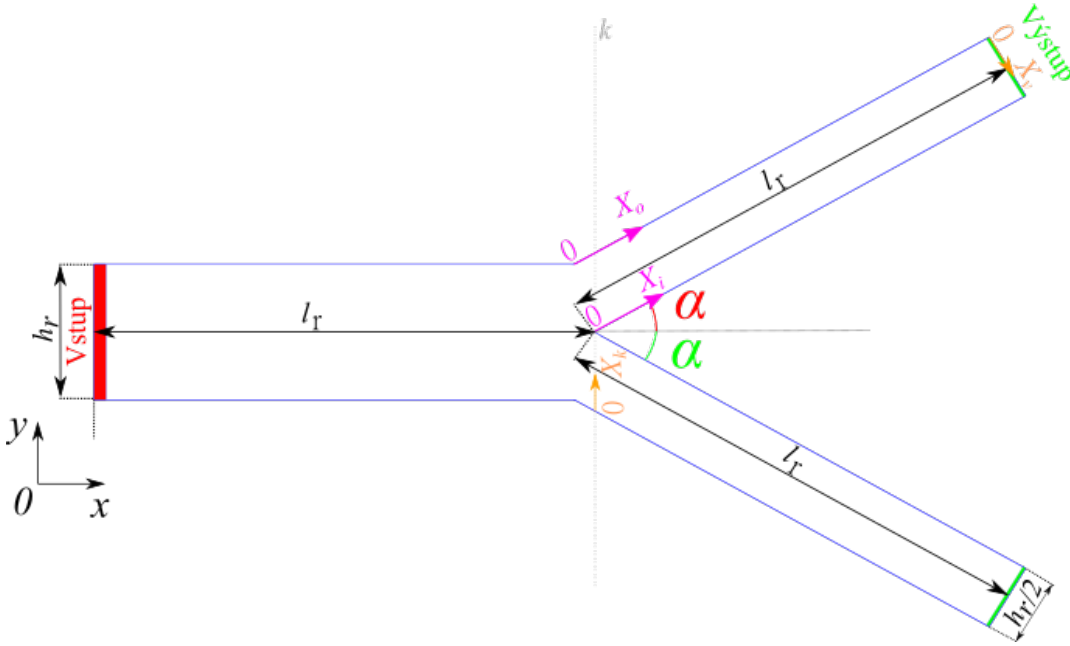


Obr. 3.19: Shluk nacházející se v rohu výpočtové oblasti. Neznámé distribuční funkce jsou označeny barevně.

Ukázali jsme, že okrajové podmínky typu „Zou-He“ jsou při dostatečném zahuštění sítě vhodné pro řešení problému. Dále jsme ukázali, že je lze modifikovat pro případ zadaného tlaku, resp. hustoty, na stěně. Proto budou užity pro řešení problému proudění v cévní bifurkaci.

### 3.6.2 Proudění krve v idealizované cévní bifurkaci

V tomto odstavci řešíme problém proudění krve v idealizované cévní bifurkaci. Krev uvažujeme jako nestlačitelnou vazkou homogenní newtonskou kapalinu. Geometrie oblasti je zobrazena na obr. 3.20. Vyčíslené rozměry a charakteristiky krve zobrazuje tab. 3.2. Na vstupní stěně bifurkace předepisujeme konstantní rychlost  $(u_0)_r$  po celé její délce. Na výstupní stěnách uvažujeme předepsaný konstantní tlak  $(p_0)_r$ , který je shodný s počátečním tlakem uvnitř výpočtové oblasti.



Obr. 3.20: Geometrie problému proudění v idealizované bifurkaci.

Zadané hodnoty veličin s fyzikálním rozměrem zobrazené v tab. 3.2 musíme převést na veličiny lattice boltzmannovské. Přepočet geometrických parametrů  $h_r$  a  $l_r$  provedeme zcela analogicky, jako jsme to udělali v odstavci 3.6.1. Hodnotu šířky kanálu v lattice boltzmannovských jednotkách volíme v našem případě  $h = 82$  a lattice boltzmannovskou délku kanálu dopočítáme zavedením bezrozměrového parametru  $\lambda$ , viz (3.65). Konverzní faktor pro rozměr určíme dosazením do rovnice (3.6).

Kinematickou viskozitu v lattice boltzmannovských jednotkách volíme  $\nu = 0,01$ . Konverzní faktor pro čas pak dopočítáme dosazením do rovnice (3.15). Rychlost  $u_0$  zadanou na vstupní stěně výpočtové oblasti pak určíme z požadavku rovnosti Reynoldsových podobnostních čísel vyjádřených v lattice boltzmannovských a fyzikálních jednotkách, tedy

$$\text{Re} = \frac{(u_0)_r h_r}{\nu_r} = \frac{u_0 h}{\nu} \Rightarrow u_0 = \frac{(u_0)_r h_r \nu}{\nu_r h}. \quad (3.74)$$

Hustotu v lattice boltzmannovských jednotkách nastavíme rovnu jedné, tedy  $\rho = 1$ . Počáteční hodnotu tlaku pak dopočítáváme užitím rovnice (2.48) jako

$p = \frac{1}{3}$ . Uplatněním rovnic (3.11) a (3.10) zjišťujeme, že tomuto nastavení odpovídá hodnota tlaku s fyzikálním rozměrem  $p_r = 4556,18$  Pa. Numerickou simulací budeme schopni určit tlakový spád  $\Delta p_r$ . Řešíme-li problém ustáleného proudění nestlačitelné kapaliny, tento spád se reálně nemění i pro jiné nastavení tlaku  $p_r$ . Můžeme psát

$$p_r^{vstup} = p_r^{vystup} + \Delta p_r. \quad (3.75)$$

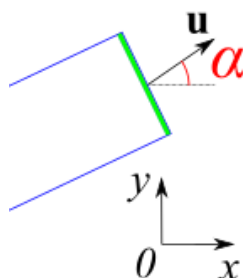
Tab. 3.2: Zadání problému proudění krve v idealizované bifurkaci.

Veličina	Rozměr	Hodnota
$l_r$	[m]	0,25
$h_r$	[m]	0,0075
$\nu_r$	$10^{-6}[\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}]$	3,3
$\rho_r$	$10^3[\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}]$	1,056
$(u_0)_r$	$[\text{m} \cdot \text{s}^{-1}]$	0,2

Před zahájením prvního časového kroku algoritmu identifikujeme neznámé distribuční funkce  $f_i$  shluků nacházejících se na okraji výpočtové oblasti, pro které je třeba zavést vyjádření pomocí okrajových podmínek.

Na výstupní stěně uvažujeme konstantní tlak  $p^{vystup}$ , který je shodný s počátečním tlakem na celé výpočtové oblasti  $p$ . Pro určení distribučních funkcí na těchto stěnách uijeme okrajové podmínky typu „Zou-He“ podrobně představené v odstavci 3.4.4. V tomto případě známe hustotu kapaliny na stěně  $\rho = \rho^{vystup}$  a neznáme složky rychlostí  $u_x$  a  $u_y$  figuruující v rovnicích okrajových podmínek. Uvědomme si, že složky rychlosti jsou průmětem velikosti rychlosti  $|\mathbf{u}|$  do souřadnicových os  $x$  a  $y$ , viz obr. 3.21,

$$\begin{aligned} u_x &= |\mathbf{u}|\cos(\alpha); \\ u_y &= |\mathbf{u}|\sin(\alpha). \end{aligned} \quad (3.76)$$



Obr. 3.21: Vektor rychlosti na horním výstupu symetrické bifurkace.



S tímto vědomím, podobně jako v případě řešeného problému proudění v obdélníkovém kanálu, vyjádříme z rovnice popisující hustotu shluku na stěně neznámou velikost rychlosti  $|\mathbf{u}|$ . Následně určíme složky rychlostí dosazením do (3.76) a po uplatnění propagačního kroku lattice Boltzmannovy metody neznámé distribuční funkce  $f_i$ .

Na vstupní stěně uvažujeme konstantní zadanou rychlost  $u_x = u_0$  a  $u_y = 0$  po celé její délce. Užijeme okrajové podmínky typu „Zou-He“ pro shluk nacházející se na západní stěně, tedy rovnice (3.39), (3.44), (3.45) a (3.46).

Stěny cévy, které jsou na obr. 3.20 označeny modře, uvažujeme dokonale tuhé, hladké a nepropustné. Neznámé distribuční funkce určíme aplikací okrajových podmínek typu „bounce-back“, které jsme podrobně představili v odstavci 3.4.1.

Tab. 3.3: Zadání problému proudění krve v idealizované bifurkaci vyjádřené v LB jednotkách.

Veličina	Hodnota
$l$	2733
$h$	82
$\nu$	0,01
$\rho$	1
$u_0$	0,0554

Kolizní krok lattice Boltzmannovy metody řešíme implementací MRT modelu s doporučeným nastavením prvků matice  $\mathbf{S}$  podle [10] jako

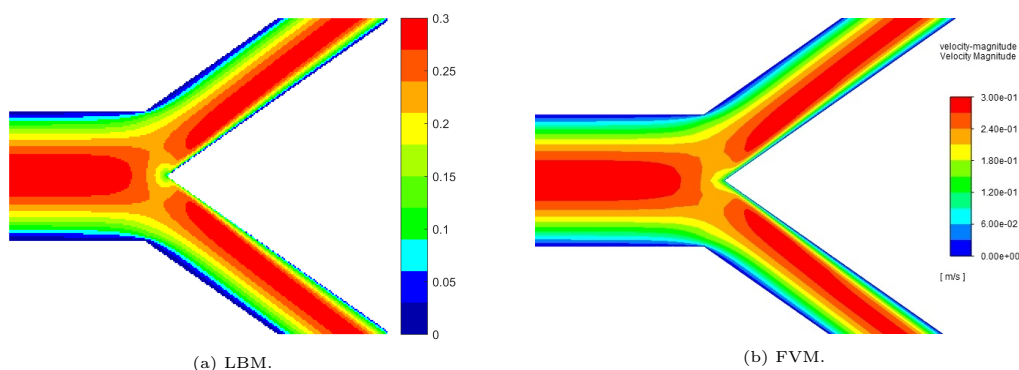
$$\mathbf{S} = \text{diag}(1, 6/5, 6/5, 1, 11/10, 1, 11/10, 1/\tau, 1/\tau). \quad (3.77)$$

Simulaci zastavujeme v momentě, kdy se rychlost kapaliny již významně nemění zastavovací podmínkou (3.59).

Uvažujme nejprve idealizovanou cévní bifurkaci mající úhel, který svírá dceřiná větev bifurkace s osou  $x$ ,  $\alpha = 35^\circ$ . Tento úhel nazýváme od této chvíle úhlem větvení bifurkace. Sestavme dle výše zmíněného postupu výpočtovou oblast se 460840 shluky, provedme numerickou simulaci a porovnejme naše výsledky s těmi poskytnutými softwarem pracujícím na principu metody konečných objemů (FVM). Za tímto účelem sestavme numerický model spustitelný v programu *Ansys Fluent* mající 32258 buněk.

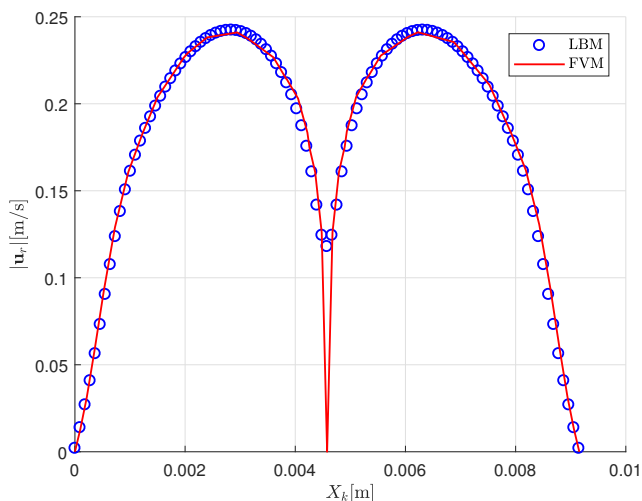
Předpokládáme, že vliv zvolené mřížkové výpočtové oblasti užití řešičem pracujícím na principu LBM se nejvíce projeví v blízkosti samotného větvení a v dceřiných větvích bifurkace. Zde předpokládáme také největší rozdíl mezi numerickým výsledkem poskytnutým naším a profesionálním FVM řešičem. Rychlostní pole v blízkosti samotného větvení porovnáváme na obr. 3.22. Pozorujeme kvalitativní shodu. Největší rozdíl sledujeme v blízkosti

počátku lokálního souřadného systému  $X_i$  zavedeným na obr. 3.20. Na tomto obr. jsme také zavedli osu  $k$ .



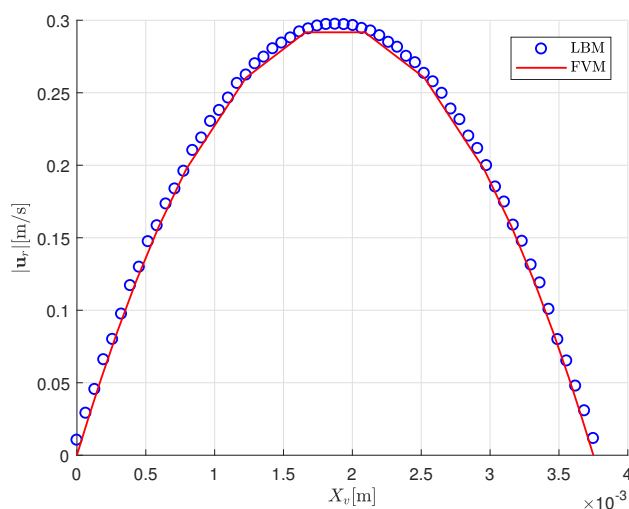
Obr. 3.22: Porovnání rychlostních polí  $|\mathbf{u}_r|$  [m/s],  $\alpha = 35^\circ$ .

Velikost rychlosti  $|\mathbf{u}_r|$  na ose  $k$  zobrazujeme na obr. 3.23. Povšimněme si, že shluk nacházející se v počátku souřadného systému  $X_i$  generuje nenulovou rychlost. Důvodem je, že okrajovou podmínkou pro prostý odraz typu „*bounce-back*“ aplikujeme pouze na jednu neznámou distribuční funkci, což pro generování nulové rychlosti není dostatečné. Přesto hodnotíme shodu jako vyhovující.



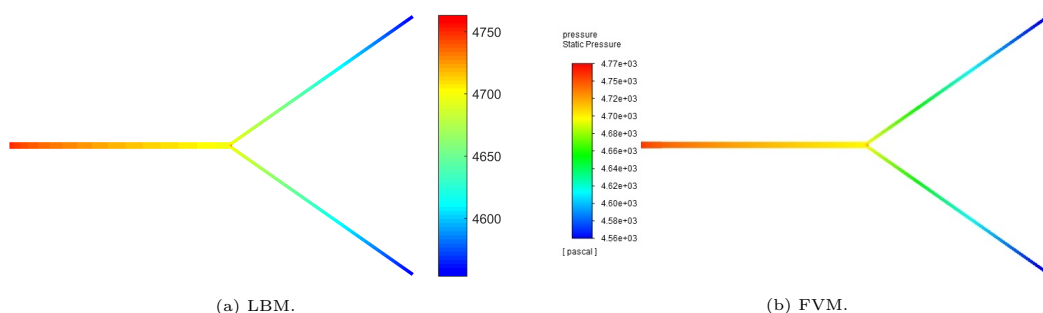
Obr. 3.23: Rychlostní profil na ose  $k$ ,  $\alpha = 35^\circ$ .

Velikost rychlosti  $|\mathbf{u}_r|$  na výstupu modelu sledujeme na obr. 3.24. Povšimněme si, že výsledná rychlost poskytnutá lattice Boltzmannovou metodou je mírně nadhodnocena ve srovnání s tou poskytnutou metodou konečných objemů.



Obr. 3.24: Rychlostní profil na výstupní stěně bifurkace,  $\alpha = 35^\circ$ .

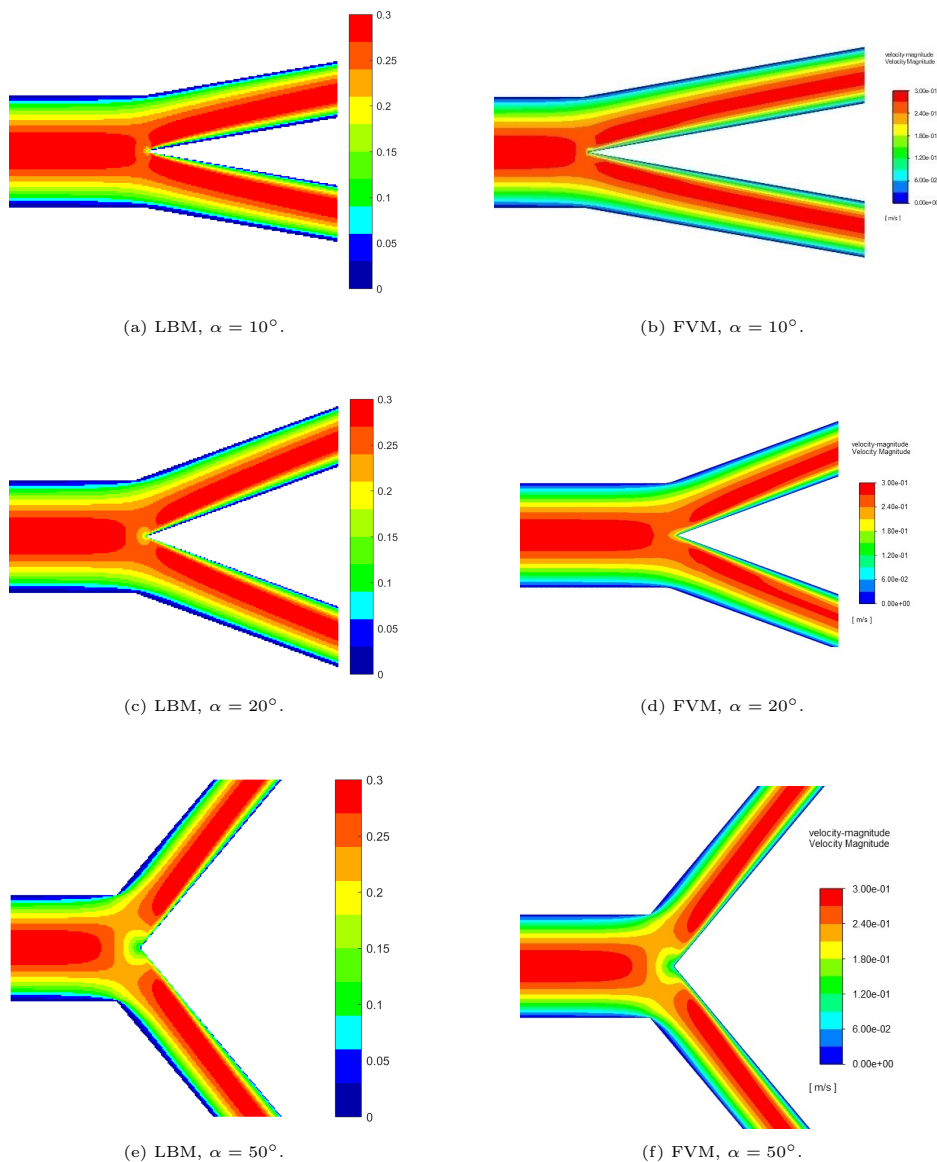
Obr. 3.25 zobrazuje výsledná tlaková pole. Pomocí obou přístupů určíme tlakový spád užitím rovnice (3.75) jako  $\Delta p^{LB} = 207,20$  Pa a  $\Delta p^{FVM} = 210,58$  Pa. Hodnoty tlakových spádů se tak neliší o více než dvě procenta.



Obr. 3.25: Porovnání tlakových polí  $p_r$  [Pa],  $\alpha = 35^\circ$ .

Uskutečnili jsme i další numerické simulace proudění krve v cévních bifurkacích s různými úhly větvení  $\alpha$ . Pozorujeme srovnatelnou shodu mezi výsledky poskytnutými naším a komerčním řešičem jako v případě již diskutované bifurkace dané úhlem  $\alpha = 35^\circ$ . Na obr. 3.26 jsou zobrazeny rychlostní pole  $|\mathbf{u}_r|$  v blízkosti větvení mateřské větve pro idealizované cévní bifurkace s úhly  $\alpha = 10^\circ$ ,  $\alpha = 20^\circ$  a  $\alpha = 50^\circ$ . Na tyto výsledky se ještě odkážeme v následující kapitole.

Přesto, že náš řešič používá přibližnou aproximaci šikmé stěny na mřížkové výpočtové oblasti, pozorujeme uspokojivou shodu rychlostních a tlakových polí, které jsme získali pomocí našeho a profesionálního softwaru *Ansys Fluent*. Ke komplikacím dochází, vyhodnocujeme-li makroskopickou veličinu smykového napětí přímo na stěně, viz rovnice (3.62). Ukazuje se, že za tímto



Obr. 3.26: Porovnání rychlostních polí  $|\mathbf{u}_r|$  [m/s],  $\alpha = 10^\circ; 20^\circ; 50^\circ$ .

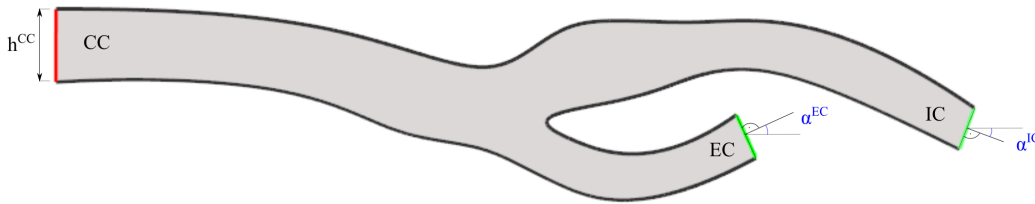
účelem není zvolená aproximace šikmé stěny dostatečná. Autoři článku [42] při použití stejné aproximace šikmé stěny poukazují, že vliv schodovitého charakteru šikmé stěny na smykové napětí se se zvyšující vzdáleností od ní snižuje. Zároveň však velikost smykového napětí klesá se zvyšující se vzdáleností od stěny. Vyhodnocení smykového napětí na stěnách v dostatečné vzdálenosti od stěny se tak jeví jako ne zcela vhodný přístup, a proto se obecně za tímto účelem doporučuje použití jiných okrajových podmínek, tzv. *curved boundary condition*. Vzhledem k těmto skutečnostem v následující kapitole provedeme analýzu vlivu úhlu větvení symetrické bifurkace a s ní spojené vyhodnocení smykového napětí na stěnách pomocí numerických simulací uskutečněných v softwaru *Ansys Fluent* s důležitou poznámkou, že vývoj vhodných algoritmů lattice Boltzmannovy metody za účelem korektního vyhodnocení smykového napětí na šikmých stěnách je předmětem naší po-

tenciální budoucí práce.

### 3.6.3 Proudění krve v cévní bifurkaci reálné geometrie

V tomto odstavci se pokusíme námi představený algoritmus aplikovat na problém proudění newtonské kapaliny v cévní bifurkaci reálné geometrie. Za tímto účelem byl pomocí příkazu *imRead* v programu MATLAB načten obrázek karotidy (krkavice) ve formátu *PNG*, viz obr. 3.27. Byly označeny barevné pixely obrázku za čtvercové shluky, v nichž bude realizován výpočet lattice Boltzmannovy rovnice, viz obr. 3.28. Tak byla vytvořena kompletní výpočtová oblast obsahující 765 shluků.

V prvním časovém kroku algoritmu byly stejně jako v případě řešení předcházejícího problému rozlišeny shluky nacházející se na okraji výpočtové oblasti podle počtu a typu neznámých distribučních funkcí. Následně byly aplikovány okrajové podmínky typu „*bounce-back*“ na stěny, které jsou na obr. 3.27 označeny černě, okrajové podmínky typu „*Zou-He*“ pro zadanou rychlost na stěně, která je na obr. 3.27 označena červeně, a okrajové podmínky typu „*Zou-He*“ pro zadanou hustotu na stěnách, které jsou na obr. 3.27 označeny zeleně.

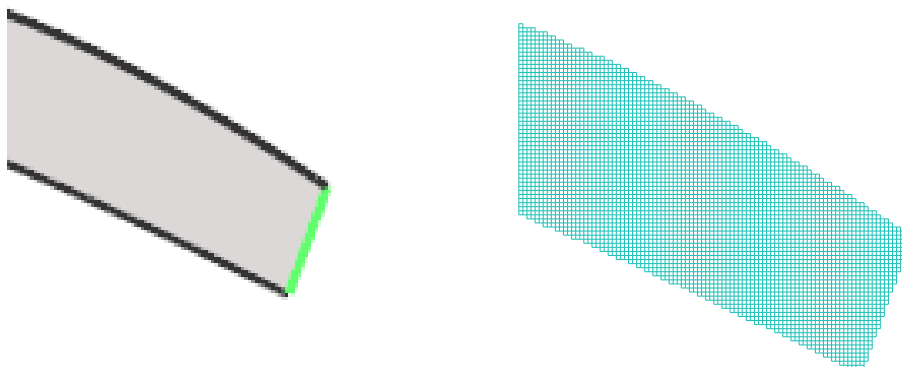


Obr. 3.27: Geometrie problému proudění krve v cévní bifurkaci.

Na červené stěně, tj. na vstupu společné krkavice (CC - common carotid), uvažujeme zadaný parabolický rychlostní profil s amplitudou  $u_r^{CC} = 0,276$  m/s. Tlak na výstupu zevní (EC - external carotid) karotidy uvažujeme  $p_r^{EC} = 0,98(p_0)_r$ , kde  $(p_0)_r$  je počáteční hodnota tlaku zkoumané kapaliny na celé výpočtové oblasti. Tlak na výstupu vnitřní karotidy (IC - internal carotid) uvažujeme roven počátečnímu tlaku  $(p_0)_r$ , tj.  $p^{IC} = (p_0)_r$ . Délku průsvitu společné krkavice uvažujeme  $h_r^{CC} = 0,0072$  m a kinematickou viskozitu kapaliny uvažujeme  $\nu_r = 4,5 \cdot 10^{-6} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$ .

Délku krkavice v lattice boltzmannovských jednotkách aproximujeme šedesáti shluky, tj.  $h^{CC} = 60$ . Kinematickou viskozitu v lattice boltzmannovských jednotkách volíme  $\nu = 0,01$  a rychlost kapaliny v lattice boltzmannovských jednotkách dopočítáváme zavedením Reynoldsova podobnostního čísla zcela analogicky jako v případě řešeného problému proudění v idealizované cévní bifurkaci, viz (3.74).

Hustotu kapaliny v lattice boltzmannovských jednotkách  $\rho$  volíme rovnu jedné. Inicializační tlak  $p$  pak se znalostí rovnice (2.48) vyčíslíme roven jedné třetině. Hodnotu inicializačního tlaku ve fyzikálních jednotkách  $(p)_r$  odpovídající tomuto nastavení určíme stejně jako v případě řešeného problému proudění v idealizované cévní bifurkaci užitím rovnic (3.10) a (3.11). Připomeňme, že v případě řešeného problému ustáleného proudění zůstane tlakový spád, který numerickým výpočtem identifikujeme, zachován i pro jiná zadání tlaku  $p_r$ . Prvky matice  $\mathbf{S}$ , viz rovnice (3.20), uijeme totožné s těmi aplikovanými v případě již řešeného problému proudění v idealizované bifurkaci, viz (3.77).



Obr. 3.28: Načtení obrázku a vytvoření mřížkové výpočtové oblasti.

Zadané parametry a jejich vyjádření v lattice boltzmannovských jednotkách zobrazuje tab. 3.4. Zároveň jsou zde uvedeny velikosti úhlů  $\alpha^{IC}$  a  $\alpha^{EC}$ , viz obr. 3.27, které je nezbytné znát pro správné užití okrajových podmínek typu „Zou-He“. Doplníme, že červená vstupní stěna na obr. 3.27 svírá s osou  $y$  úhel  $0^\circ$ , tudíž stejně jako v případě řešeného problému v idealizované cévní bifurkaci uijeme okrajové podmínky na vstupu (3.44), (3.45) a (3.46), kde  $u_y = 0$  a  $u_x$  je dána (parabolický profil s předepsanou amplitudou  $u^{CC}$ ).

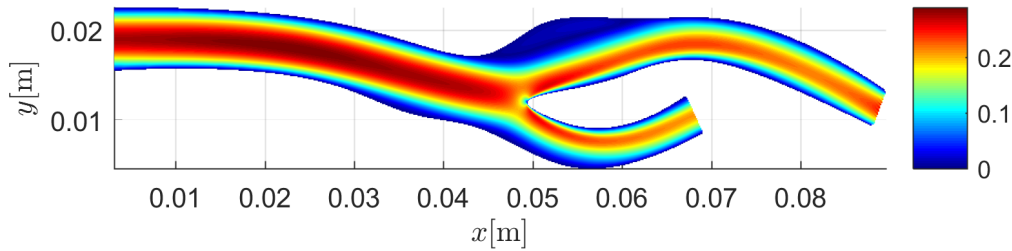
V momentě, kdy se proudění s dostatečnou přesností ustálí a je zastaveno podmínkou (3.59), sledujeme tlak a rychlost kapaliny. Na obr. 3.29 je zobrazeno rozložení velikosti rychlosti  $|\mathbf{u}_r|$  uvnitř karotidy a na obr. 3.30 je zobrazeno rozložení tlaku  $p_r$  na zkoumané oblasti.

Na obr. 3.29 sledujeme oblast nízkých rychlostí podél vnější stěny vnitřní karotidy, tzv. recirkulační zónu. Taková zóna je potenciálně nebezpečné místo

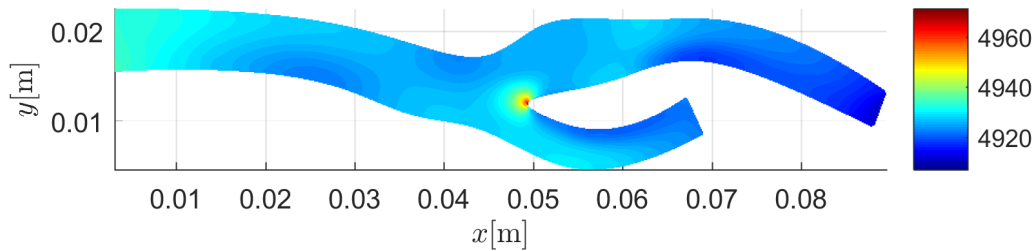
Tab. 3.4: Zadání problému proudění kapaliny v cévní bifurkaci.

Veličina	s fyzikálním rozměrem	s LB rozměrem
$\nu$	$4,5 \cdot 10^{-6} [\text{m}^2 \text{s}^{-1}]$	0,01
$h^{CC}$	$7,2 \cdot 10^{-3} [\text{m}]$	60
$\rho$	$1,05 \cdot 10^3 [\text{kgm}^{-3}]$	1
$u^{CC}$	$0,276 [\text{ms}^{-1}]$	$4,90\bar{6} \cdot 10^{-2}$
$p$	$4,92210^3 [\text{Pa}]$	$\frac{1}{3}$
$p^{IC}$	$4,92210^3 [\text{Pa}]$	$\frac{1}{3}$
$p^{EC}$	$4,82310^3 [\text{Pa}]$	$0,32\bar{6}$
$\alpha^{IC}$		$20,2 [^\circ]$
$\alpha^{EC}$		$24,3 [^\circ]$

pro vznik stenózy [30]. Na obr. 3.30 je patrný předpokládatelný tlakový spád mezi vstupem a výstupy zkoumané oblasti. Tento tlakový spád je narušen přítomností maximální hodnoty tlaku v oblasti samotného větvení společné karotidy. Zvýšené hodnoty tlaku v tomto místě jsme zaregistrovali i v případě řešení bifurkací idealizovaných tvarů, viz obr. 3.25. Dovolíme si předpokládat, že v případě užití jemnější sítě by bylo toto maximum částečně potlačeno.



Obr. 3.29: Rozložení velikosti rychlosti  $|\mathbf{u}_r|$  [m/s] v karotidě.



Obr. 3.30: Rozložení tlaku  $p_r$  [Pa] v karotidě.

Výše představené numerické simulace dokazují, že zde představený a následně implementovaný algoritmus je možné užít pro vyhodnocení rychlosti a tlaku ustáleného proudění nestlačitelné vazké kapaliny v rovinných oblastech různých tvarů.

# Kapitola 4

## Analýza vlivu úhlu větvení symetrické bifurkace na proudové pole

V této kapitole představíme výsledky numerických simulací proudění krve v idealizované bifurkaci ve dvourozměrném prostoru. Následně budeme diskutovat optimální úhel větvení symetrické bifurkace i s přispěním tzv. *Murrayho teorie*.

Hledání matematické teorie, která by jednoznačně popsala optimální geometrii cévy vzhledem k rizikovosti vzniku patologických jevů, má dlouhou historii. Cecil D. Murray v roce 1926 zveřejnil studii, ve které hledal optimální rozměr cév na základě principu minimální práce [35]. Tu definoval jako součet výkonu krevního proudu (součinu tlakového gradientu ve větvi a průtokového objemu), který je potřeba pro protlačení krve cévou, a metabolického podílu cévy potřebného k udržení daného objemu krve v cévách. Důsledkem studie je pak tzv. *Murrayho zákon* (cubic law). Pokud se mateřská větev o průměru  $a_0$  větví do dvou dceřiných větví o průměrech  $a_1$  a  $a_2$ , tak podle *Murrayho zákona* platí

$$a_0^3 = a_1^3 + a_2^3. \quad (4.1)$$

V práci [50] byl pak později zaveden index  $\gamma$  a pomocí něho byl *Murrayho zákon* přepsán do podoby

$$a_0^\gamma = a_1^\gamma + a_2^\gamma. \quad (4.2)$$

Následně byl formulován vztah mezi průměrem průsvitu cévy  $a$ , indexem  $\gamma$  a smykovým napětím na stěnách cévy (Wall Shear Stress WSS)  $\tau_w$  jako

$$\tau_w \sim a^{\gamma-3}. \quad (4.3)$$

Relace  $\gamma < 3$  indikuje, že smykové napětí je větší v cévě o menším průměru, což neodpovídá reálné fyziologii. Relace  $\gamma > 3$  naopak značí fyziologicky pravděpodobnější stav, kdy smykové napětí je menší v cévě o menším průměru.



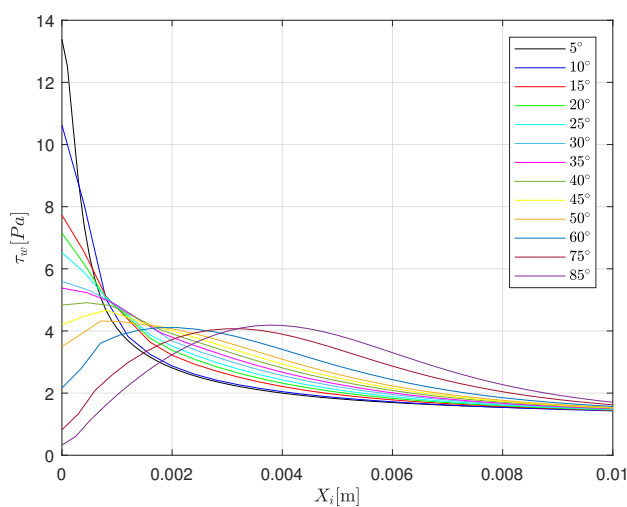
Jako optimální se podle principu minimální práce jeví varianta pro  $\gamma = 3$  - tedy pro případ *Murrayho zákona*.

Výše uvedené závěry *Murrayho zákona* jsou ve shodě s experimentálními studii [24]. Smykové napětí na stěnách cévy se jeví jako vhodný indikátor vzniku patologických jevů. Nízké smykové napětí na stěnách cévy může být problematické z důvodu zvýšeného rizika vzniku stenózy (zúžení) cév. Naopak vyšší smykové napětí na stěnách cévy může vyústit až v její poškození.

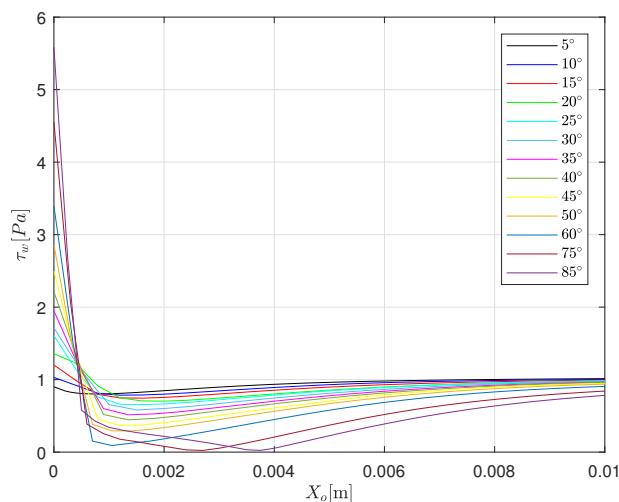
## 4.1 Numerické simulace

V softwaru *Ansys Fluent*, který staví na principu metody konečných objemů, uskutečníme několik numerických simulací proudění krve jako newtonské kapaliny v idealizované symetrické bifurkaci. Geometrie výpočtové oblasti idealizované bifurkace je na obr. 3.20. Uvažované charakteristiky krve a vyčíslené rozměry výpočtové oblasti jsou uvedeny v tab. 3.2. Po délce vstupní stěny uvažujeme předepsanou konstantní rychlost  $(u_0)_r$ . Na výstupu oblasti uvažujeme konstantní tlak shodný s tlakem inicializačním na celé oblasti. V následujících odstavcích se zaměříme především na analýzu extrémních hodnot velikosti smykových napětí na stěnách bifurkace v ustáleném stavu v závislosti na velikosti úhlu větvení symetrické bifurkace  $\alpha$ .

Na obr. 4.1 je zobrazen průběh smykového napětí na vnitřní stěně dceřiné větve bifurkace. Soustředíme se na průběh smykového napětí v místě větvení, kde identifikujeme maximální hodnoty smykového napětí na diskutované stěně. Pozorujeme, že s rostoucím úhlem  $\alpha$  roste vzdálenost tohoto extrému od místa větvení. Totožný trend zaznamenáváme, sledujeme-li průběhy smykového napětí a polohy minimálních hodnot smykového napětí na vnější stěně dceřiné bifurkace na obr. 4.2. Minimální hodnoty smykového napětí na vnější stěně dceřiné bifurkace odráží nízké hodnoty rychlosti v blízkosti těchto míst. Naopak vysoké hodnoty smykového napětí na vnitřní stěně bifurkace odráží polohu amplitudy rychlosti v blízkosti právě vnitřní stěny. To deklarují jak numerické výsledky získané pomocí programu *Ansys Fluent*, tak výsledky získané pomocí vlastního řešiče, který pracuje na principu lattice Boltzmannovy metody. Na obr. 3.26 je patrný rozšiřující se pás nižších rychlostí podél vnějších stěn cévy v okolí jejího větvení se zvyšujícím se úhlem  $\alpha$ . S tímto rozšiřujícím se pásem nižších rychlostí klesá i minimum smykového napětí na stěně cévy.

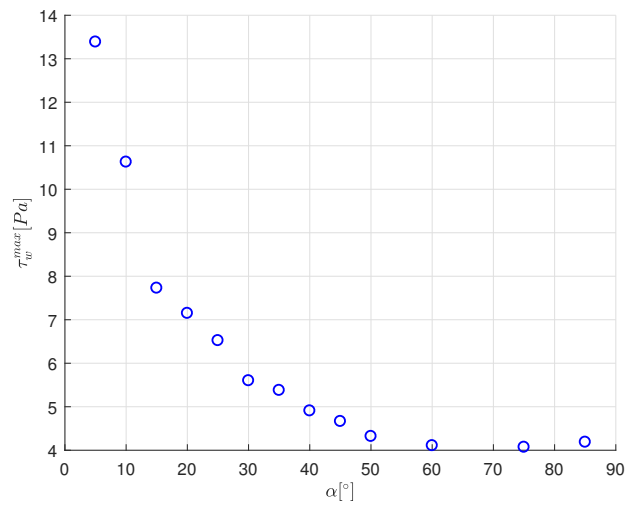


Obr. 4.1: Průběh  $\tau_w$  na vnitřní stěně dceřiné větve bifurkace.

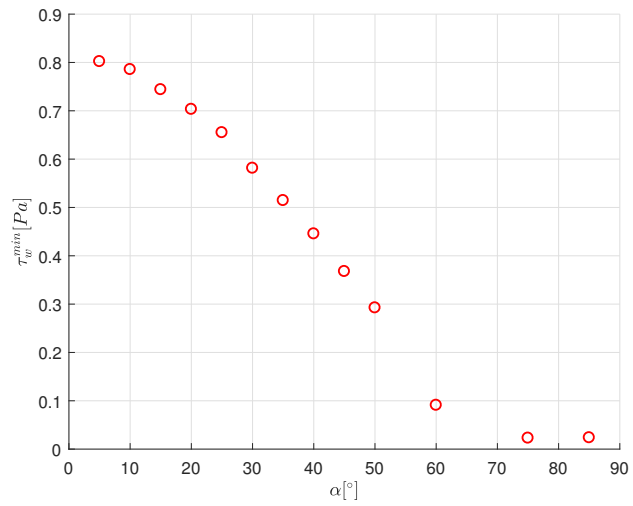


Obr. 4.2: Průběh  $\tau_w$  na vnější stěně dceřiné větve bifurkace.

Na obr. 4.3 a 4.4 pozorujeme závislost dříve identifikovaných extrémních hodnot smykových napětí v závislosti na velikosti úhlu větvení  $\alpha$ . Již jsme dříve v této práci zmínili, že nízké hodnoty smykového napětí indikují zvýšenou pravděpodobnost zúžení (stenózy) cév vlivem hromadění sraženin (trombů) a vmetků (embolů) v těchto místech. Nízké hodnoty smykových napětí  $\tau_w^{min} < 0,1$  Pa jsme identifikovali pro úhly  $\alpha$  větší než  $60^\circ$ . Naopak vysoké hodnoty smykových napětí  $\tau_w^{max} > 10$  Pa, které jsme identifikovali pro úhly  $\alpha$  menší než  $15^\circ$ , neodpovídají biologické realitě, neboť experimentální studie vyčíslují hodnoty smykových napětí na stěnách cévy v řádu několika jednotek Pascalů [17].



Obr. 4.3: Maximální hodnota  $\tau_w$  na vnitřní stěně dceřiné větve bifurkace pro varianty dané úhlem  $\alpha$ .



Obr. 4.4: Minimální hodnota  $\tau_w$  na vnější stěně dceřiné větve bifurkace pro varianty dané úhlem  $\alpha$ .

### 4.1.1 Aplikace Murrayho teorie

Množinu tzv. optimálních úhlů  $\alpha$  určíme ještě aplikací výše představené *Murrayho teorie*. Za tímto účelem uvažujme platnost rovnice (4.3), resp. její podobu v plné rovnosti

$$\tau_w = a^{\gamma-3}. \quad (4.4)$$

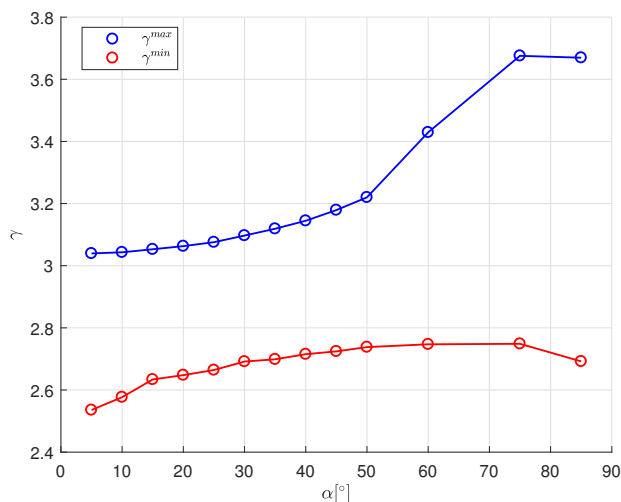
Z této rovnice pak vyjádříme koeficient  $\gamma$  jako

$$\gamma = \log_a \tau_w + 3, \quad (4.5)$$

kde  $a = \frac{h_r}{2}$ . Dosazením extrémních hodnot smykových napětí identifikovaných na stěnách dceřiné větve uvažovaného modelu do rovnice (4.5) vyčíslíme extrémní hodnoty koeficientu  $\gamma$ . Ty jsou zobrazeny v závislosti na velikosti úhlu  $\alpha$  na obr. 4.5. Za optimální označíme podle *Murrayho teorie* takové konfigurace, pro které extrémní hodnoty koeficientu  $\gamma$  jsou dostatečně blízké třem.

Povšimněme si, že koeficient  $\gamma$  nabývá nejvyšších hodnot 3,2 a zároveň nejnižších hodnot 2,6 pro úhly  $\alpha$  v intervalu  $[15^\circ; 40^\circ]$ . Konfigurace dané těmito úhly proto označíme za optimální. Uveďme dále, že smykové napětí na stěně dceřiné větve bifurkace  $\tau_{ust}$  je v dostatečné vzdálenosti od místa větvení rovno přibližně jednomu Pascalu pro všechny konfigurace dané velikostí úhlu  $\alpha$ . Koeficient  $\gamma^{ust}$ , který určíme dosazením  $\tau = \tau_{ust}$  do rovnice (4.5), je pak blízký právě třem, viz tab. 4.1.

Naše závěry jsou nejen v souladu s experimentálními studiemi, ale zároveň jsou i v souladu s 1D *Murrayho teorií*, která za optimální úhel větvení symetrické bifurkace označuje úhel  $\alpha = 37,5^\circ$ .



Obr. 4.5: Vyhodnocení extrémních hodnot koeficientu  $\gamma$  pro varianty dané úhlem  $\alpha$ .

Tab. 4.1: Výsledky pro proudění v symetrické bifurkaci

$\alpha [^\circ]$	5	10	15	20	25	30	35	40	45	50	60	75	85
	Vnitřní stěna bifurkace												
$\tau_w^{min}$ [Pa]	1,09	1,08	1,08	1,08	1,08	1,07	1,08	1,08	1,08	1,09	1,09	0,81	0,33
$\tau_w^{ust}$ [Pa]	1,09	1,08	1,08	1,08	1,09	1,08	1,08	1,08	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10
$\tau_w^{max}$ [ $\cdot 10$ Pa]	1,34	1,06	0,73	0,71	0,65	0,56	0,54	0,49	0,47	0,43	0,41	0,41	0,42
$\gamma^{min}$	2,54	2,58	2,63	2,65	2,66	2,69	2,70	2,72	2,72	2,74	2,75	2,75	2,74
$\gamma^{ust}$	2,98	2,99	2,99	2,99	2,99	2,99	2,99	2,99	2,99	2,98	2,98	2,98	2,98
$\gamma^{max}$	2,98	2,99	2,99	2,99	2,99	2,99	2,99	2,99	2,99	2,98	2,98	3,03	3,20
	Vnější stěna bifurkace												
$\tau_w^{min}$ [ $\cdot 10^{-1}$ Pa]	8,02	7,86	7,44	7,03	6,55	5,81	5,15	4,46	3,68	2,93	0,91	0,23	0,24
$\tau_w^{ust}$ [Pa]	1,10	1,08	1,08	1,08	1,09	1,08	1,08	1,08	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10
$\tau_w^{max}$ [Pa]	1,10	1,08	1,20	1,36	1,61	1,71	1,95	2,21	2,50	2,86	3,39	4,55	5,59
$\gamma^{min}$	2,98	2,99	2,97	2,95	2,92	2,90	2,88	2,86	2,84	2,81	2,78	2,73	2,69
$\gamma^{ust}$	2,98	2,99	2,99	2,99	2,99	2,99	2,99	2,99	2,99	2,98	2,98	2,98	2,98
$\gamma^{max}$	3,04	3,04	3,05	3,06	3,08	3,09	3,12	3,14	3,18	3,22	3,43	3,68	3,67

# Závěr

V této diplomové práci byly představeny vybrané studie různých autorů řešící konkrétní problémy kardiovaskulární biomechaniky pomocí lattice Boltzmannovy metody. Za vhodný nástroj pro modelování proudění byla tato metoda označena především díky možnosti snadné implementace i komplexních okrajových podmínek simulujících různé fyziologické i patologické stavy. Z provedené rešerše dále vyplývá, že pomocí lattice Boltzmannovy metody lze relativně snadno modelovat neneutonské efekty (vlastnosti) krve, interakci pevných částic s kapalinou či vznik krevních sraženin.

V práci bylo stručně shrnuto teoretické pozadí lattice Boltzmannovy metody včetně její výchozí rovnice. Byl popsán způsob implementace rovnice, který lze užít pro modelování ustáleného proudění nestlačitelné vazké newtonské kapaliny. Prostor byl věnován implementaci různých typů okrajových podmínek. Okrajové podmínky typu „Zou-He“ vycházející z *nerovnovážné* okrajové podmínky typu „bounce-back“ jsme aplikovali i na stěny s obecným sklonem.

Numerickými simulacemi ustáleného proudění newtonské kapaliny v idealizované bifurkaci jsme potom ověřili správnost implementace a navržených algoritmů. I přes mřížkový charakter výpočtové oblasti užívaný lattice Boltzmannovou metodou pozorujeme dostatečnou shodu mezi výsledným rychlostním a tlakovým polem poskytnutým naším řešičem stavějícím na principu lattice Boltzmannovy metody a profesionálním programem *Ansys Fluent* stavějícím na principu metody konečných objemů. Ukázali jsme, že náš řešič lze užít za účelem vyhodnocení rychlosti a tlaku tekutiny ve 2D oblastech různých tvarů.

V závěru práce byla realizována vlastní studie posuzující vliv velikosti úhlu  $\alpha$ , který svírá dceřiná větev symetrické idealizované cévní bifurkace s osou mateřské cévy, na proudové pole. Byla provedena řada numerických simulací vyhodnocujících smyková napětí na stěnách bifurkace v závislosti na velikosti tohoto úhlu. Za problematické z hlediska pravděpodobnosti vzniku stenózy v dceřiné větvi bifurkace pak byly označeny konfigurace s vyšším úhlem ( $\alpha > 40^\circ$ ). Výskyt konfigurací majících nižší úhel ( $\alpha < 15^\circ$ ) jsme pak na základě *Murrayho teorie* označili za nepravděpodobný.

Návazná práce může být věnována studiu a následnému zavedení speciálních okrajových podmínek do stávajícího algoritmu lattice Boltzmannovy metody

za účelem vyhodnocení makroskopických veličin na šikmých stěnách (včetně smykového napětí) nebo zefektivnění v diplomové práci představeného vlastního řešiče užitím paralelního programování.

# Literatura

- [1] Abas, A.; Mokhtar, N.; Ishak, M. H. H.; aj.: Lattice Boltzmann Model of 3D Multiphase Flow in Artery Bifurcation Aneurysm Problem. *Computational and Mathematical Methods in Medicine*, 01 2016, doi: 10.1155/2016/6143126.
- [2] Artoli, A.; Hoekstra, A.; Slood, P.: Mesoscopic Simulations of Systolic Flow in the Human Abdominal Aorta. *Journal of biomechanics*, 02 2006: s. 873–84, doi:10.1016/j.jbiomech.2005.01.033.
- [3] Artoli, A.; Kandhai, D.; Hoefsloot, H.; aj.: Lattice BGK simulations of flow in a symmetric bifurcation. *Future Generation Computer Systems*, 08 2004: s. 909–916, doi:10.1016/j.future.2003.12.002.
- [4] Baráth, K.; Cassot, F.; Ohta, M.; aj.: Influence of stent properties on the alteration of hemodynamics in elastic cerebral aneurism models, submitted for publication.
- [5] Boyd, J.; Buick, J.; Cosgrove, J.; aj.: Application of the lattice Boltzmann method to arterial flow simulation: Investigation of boundary conditions for complex arterial geometries. *Australasian physical & engineering sciences in medicine / supported by the Australasian College of Physical Scientists in Medicine and the Australasian Association of Physical Sciences in Medicine*, 01 2005: s. 207–12, doi:10.1007/BF03178650.
- [6] Chen, S.; Doolen, G.: *Lattice Boltzmann Method for Fluid Flows*. *Annual Review of Fluid Mechanics*. 1998, doi:10.1146/annurev.fluid.30.1.329.
- [7] Chen, S.; Martinez, D. C.; Mei, R.: On boundary conditions in lattice Boltzmann methods. *Physics of Fluids*, 1996: s. 2527–2536.
- [8] Daniel Leitner, M. H., Siegfried Wassertheurer; Holzinger, A.: A Lattice Boltzmann Model for pulsative blood flow in elastic vessels. *e & i Elektrotechnik und Informationstechnik*, 01 2006: s. 152–155, doi: 10.1007/s00502-006-0332.
- [9] Descovich, X.; Pontrelli, G.; Succi, S.; aj.: Modeling Elastic Walls in Lattice Boltzmann Simulations of Arterial Blood Flow. *SNE Simulation Notes Europe*, 02 2012, doi:10.3182/20120215-3-AT-3016.00165.



- [10] Du, R.; Shi, B.; Chen, X.: Multi-relaxation-time lattice Boltzmann model for incompressible flow. *Physics Letters A*, 2006, ISSN 0375-9601, doi:<https://doi.org/10.1016/j.physleta.2006.07.074>.
- [11] Dupin, M.; Halliday, I.; Care, C.; aj.: Lattice Boltzmann modeling of blood cell dynamics. *International Journal of Computational Fluid Dynamics - INT J COMPUT FLUID DYNAMICS*, 08 2008: s. 481–492, doi:10.1080/10618560802238242.
- [12] Fang, H.; Wang, Z.; Lin, Z.; aj.: Lattice Boltzmann Method for Simulating the Viscous Flow in Large Destensible Blood Vessels. *Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics*, 06 2002: str. 051925, doi:10.1103/PhysRevE.65.051925.
- [13] Feng, Z.-G.; Michaelides, E. E.: The immersed boundary-lattice Boltzmann method for solving fluid-particles interaction problems. *Journal of Computational Physics*, 2004, ISSN 0021-9991, doi:<https://doi.org/10.1016/j.jcp.2003.10.013>.
- [14] Filippova, O.; Hänel, D.: Grid Refinement for Lattice-BGK Models. *Journal of Computational Physics*, 1998: s. 219–228.
- [15] Frisch, U.; Dhumieres, D.; Hasslacher, B.; aj.: Lattice Gas Hydrodynamics in Two and Three Dimensions. *Complex Systems*, 01 1987.
- [16] Frisch, U.; Hasslacher, B.; Pomeau, Y.: Lattice-Gas Automata for the Navier-Stokes Equation. *Physical review letters*, 05 1986: s. 1505–1508, doi:10.1103/PhysRevLett.56.1505.
- [17] Fung, Y.-C.: *Biomechanics. Mechanical Properties of Living Tissues*. Springer-Verlag, 1993.
- [18] Guo, Z.; Shi, B.; Zheng, C.: A coupled lattice BGK model for the Boussinesq equations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 06 2002: s. 325 – 342, doi:10.1002/fld.337.
- [19] He, X.; Luo, L.-S.: Theory of the lattice Boltzmann method: From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation. *PHYSICAL REVIEW E*, 12 1997: s. 6811–6817, doi:10.1103/PhysRevE.56.6811.
- [20] Hirabayashi, M.; Ohta, M.; Baráth, K.; aj.: Numerical analysis of the flow pattern in stented aneurysms and its relation to velocity reduction and stent efficiency. *Mathematics and Computers in Simulation*, 09 2006: s. 128–133, doi:10.1016/j.matcom.2006.05.037.
- [21] Hirabayashi, M.; Ohta, M.; Rüfenacht, D.; aj.: A Lattice Boltzmann Study of Blood Flow in Stented Aneurism. *Future Generation Computer Systems*, 08 2004: s. 925–934, doi:10.1016/j.future.2003.12.004.

- [22] Hoekstra, A.; van 't Hoff, J.; Artoli, A.; aj.: Unsteady flow in a 2D elastic tube with the LBGK method. *Future Generation Computer Systems*, 08 2004: s. 917–924, doi:10.1016/j.future.2003.12.003.
- [23] Hufnagel, H.; co: Surgical correction of aortic insufficiency. *Surgery*, 05 1954: str. 35.
- [24] Kassab, G.; Fung, Y.-C.: The pattern of coronary arteriolar bifurcations and the uniform shear hypothesis. *Annals of biomedical engineering*, 08 1995: s. 13–20, doi:10.1007/BF02368296.
- [25] Koponen, A.: Permeability of three-dimensional random fibre webs. *Physical Review Letters*, 01 1997.
- [26] Krafczyk, M.; Cerrolaza, M.; Schulz, M.; aj.: Analysis of 3D transient blood flow passing through an artificial aortic valve by Lattice Boltzmann methods. *Journal of Biomechanics*, 1998: s. 453–462, ISSN 0021-9290, doi:https://doi.org/10.1016/S0021-9290(98)00036-0.
- [27] Krafczyk, M.; Tölke, J.; Rank, E.; aj.: Two-dimensional simulation of fluid–structure interaction using lattice-Boltzmann methods. *Computers & Structures - COMPUT STRUCT*, 09 2001: s. 2031–2037, doi: 10.1016/S0045-7949(01)00050-5.
- [28] Krueger, T.; Kusumaatmaja, H.; Kuzmin, A.; aj.: *The Lattice Boltzmann Method: Principles and Practice*. Graduate Texts in Physics, Springer, 2016, ISBN 978-3-319-44647-9.
- [29] Lee, C.; Chandran, K.: Numerical simulation of instantaneous backflow through central clearance of bileaflet mechanical heart valves at closure: shear stress and pressure fields within clearance. *Medical & biological engineering & computing*, 06 1995: s. 257–63, doi:10.1007/BF02510497.
- [30] Lee, U.; Kim, C.; Chung, G.; aj.: Hemodynamic Changes in the Carotid Artery after Infusion of Normal Saline Using Computational Fluid Dynamics. *Diagnostics*, 07 2020: str. 473, doi:10.3390/diagnostics10070473.
- [31] Li-Shi Luo, M. K.; Shyy, W.: *Lattice Boltzmann Method for Computational Fluid Dynamics*. 12 2010, ISBN 9780470686652, doi: 10.1002/9780470686652.eae064.
- [32] Liboff, R. L.: *Kinetic theory: Classical, quantum, and relativistic descriptions*. N.J: Prentice Hall, 1990.
- [33] McCullough, J.; Coveney, P.: An efficient, localised approach for the simulation of elastic blood vessels using the lattice Boltzmann method. *Scientific Reports*, 12 2021, doi:10.1038/s41598-021-03584-2.

- [34] Mohamad, A.: *Lattice Boltzmann Method Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes*. 01 2011, ISBN 978-0-85729-454-8, doi:10.1007/978-0-85729-455-5.
- [35] Murray, C. D.: The Physiological Principle of Minimum Work. I. The Vascular System and the Cost of Blood Volume. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 1926: s. 207–214, ISSN 00278424.  
URL <http://www.jstor.org/stable/85001>
- [36] Nagargoje, M.; Gupta, R.: Effect of asymmetry on the flow behavior in an idealized arterial bifurcation. *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*, 2020: s. 232–247, doi:10.1080/10255842.2019.1711068, pMID: 31931612, <https://doi.org/10.1080/10255842.2019.1711068>.  
URL <https://doi.org/10.1080/10255842.2019.1711068>
- [37] Navidbakhsh, M.; Rezazadeh, M.: An immersed boundary-lattice Boltzmann model for simulation of malaria-infected red blood cell in microchannel. *Scientia Iranica*, 2012: s. 1329–1336, ISSN 1026-3098, doi: <https://doi.org/10.1016/j.scient.2012.08.001>.
- [38] Ouared, R.; Chopard, B.: Lattice Boltzmann Simulations of Blood Flow: Non-Newtonian Rheology and Clotting Processes. *Journal of Statistical Physics*, 10 2005: s. 209–221, doi:10.1007/s10955-005-8415-x.
- [39] Ouared, R.; Chopard, B.; Stahl, B.; aj.: Thrombosis Modeling in Intracranial Aneurysms : a Lattice Boltzmann Numerical Algorithm. *Computer Physics Communications*, 07 2008: s. 128–131, doi: 10.1016/j.cpc.2008.01.021.
- [40] Pelliccioni Monrroy, O.; Cerrolaza, M.; Herrera, M.: Lattice Boltzmann dynamic simulation of a mechanical heart valve device. *Mathematics and Computers in Simulation*, 05 2007: s. 1–14, doi: 10.1016/j.matcom.2006.08.005.
- [41] Randles, A. E.: Modeling Cardiovascular Hemodynamics Using the Lattice Boltzmann Method on Massively Parallel Supercomputers. *Dižertaiční práce*, 2013.
- [42] Stahl, B.; Chopard, B.; Latt, J.: Measurements of wall shear stress with the lattice Boltzmann method and staircase approximation of boundaries. *Computers & Fluids*, 2010: s. 1625–1633, ISSN 0045-7930, doi: <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2010.05.015>.
- [43] Succi, S.; Yeomans, J.: The lattice Boltzmann equation for fluid dynamics and beyond. *Phys Today*, 01 2002.

- [44] Sun, C.; Munn, L.: NoN-Uniform Plasma Leakage Affects Local Hematocrit and Blood Flow: Implications for Inflammation and Tumor Perfusion. *Computers & mathematics with applications (Oxford, England : 1987)*, 12 2007: s. 2121–2129, doi:10.1017/s10439-007-9377-8.
- [45] Sun, C.; Munn, L.: Lattice-Boltzmann simulation of blood flow in digitized vessel networks. *Computers & mathematics with applications (Oxford, England : 1987)*, 05 2008: s. 1594–1600, doi:10.1016/j.camwa.2007.08.019.
- [46] Wang, Z.; Zhang, X.; Li, Y.; aj.: Simulation of Cardiac Flow under the Septal Defect Based on Lattice Boltzmann Method. *Entropy*, 2022, ISSN 1099-4300, doi:10.3390/e24020187.  
URL <https://www.mdpi.com/1099-4300/24/2/187>
- [47] Wolfram, S.: *Cellular Automata and Complexity*. 03 2018, ISBN 9780429494093, 1-596 s., doi:10.1201/9780429494093.
- [48] Yoganathan, A.; Corcoran, W.; Harrison, E.; aj.: In vitro fluid dynamics of the St. Jude, Ionescu-Shiley and Carpentier-Edwards aortic heart valve prostheses. *Biofluid Mechanics*, 11 2015: s. 295–316, doi:10.1007/978-1-4757-4610-5\_15.
- [49] Zai-Yi, S.; He, Y.: A Lattice Boltzmann Method for Simulating the Separation of Red Blood Cells at Microvascular Bifurcations. *Chinese Physics Letters - CHIN PHYS LETT*, 02 2012, doi:10.1088/0256-307X/29/2/024703.
- [50] Zamir, M.: *The Physics of Coronary Blood Flow*. Springer, 01 2005, ISBN 0-387-25297-5, doi:10.1007/b136492.
- [51] Zhang, J.; Kwok, D.: Pressure boundary condition of the lattice Boltzmann method for fully developed periodic flows. *Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics*, 05 2006: str. 047702, doi:10.1103/PhysRevE.73.047702.
- [52] Zou, Q.; He, X.: On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model. *Physics of Fluids*, 1995: s. 1591–1598.