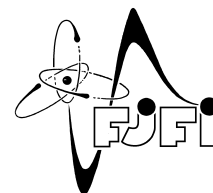




ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská



Optimalizace proudění pomocí mřížkové Boltzmannovy metody

Optimization of flow using the lattice Boltzmann method

Diplomová práce

Autor: **Bc. Bořivoj Kronowetter**

Vedoucí práce: **doc. Ing. Tomáš Oberhuber, Ph.D.**

Akademický rok: 2024/2025

I. OSOBNÍ A STUDIJNÍ ÚDAJE

Příjmení: **Kronowetter** Jméno: **Bořivoj** Osobní číslo: **492099**
Fakulta/ústav: **Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská**
Zadávající katedra/ústav: **Katedra matematiky**
Studijní program: **Matematické inženýrství**

II. ÚDAJE K DIPLOMOVÉ PRÁCI

Název diplomové práce:

Optimalizace proudění pomocí mřížkové Boltzmannovy metody

Název diplomové práce anglicky:

Optimization of flow using the lattice Boltzmann method

Pokyny pro vypracování:

1. Převedte implementaci existujícího kódu pro optimalizaci proudění z CPU na GPU.
2. Zobecněte optimalizační řešič ze 2D do 3D.
3. Navrhněte vhodný model pro optimalizaci turbulentního proudění a vhodně modifikujte kód numerického řešiče.
4. Proveďte výpočetní studii.

Seznam doporučené literatury:

- [1] T. Krüger, H. Kusumaatmaja, A. Kuzmin, O. Shardt, G. Silva, E. M. Viggien, The lattice Boltzmann method: Principles and practice, Springer, 2016.
- [2] M. H. Hekmat, M. Mirzaei, Development of discrete adjoint approach based on the lattice Boltzmann method, Advances in Mechanical Engineering, 6:230854, 2014.
- [3] M. H. Hekmat and M. Mirzaei. A comparison of the continuous and discrete adjoint approach extended based on the standard lattice Boltzmann method in flow field inverse optimization problems, Acta Mechanica, 227(4), 2015, 1025–1050.
- [4] M. Hinze, R. Pinnau, M. Ulbrich, and S. Ulbrich. Optimization with PDE Constraints, Springer, 2008.

Jméno a pracoviště vedoucí(ho) diplomové práce:


doc. Ing. Tomáš Oberhuber, Ph.D. katedra softwarového inženýrství FIT

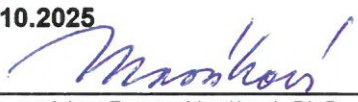
Jméno a pracoviště druhé(ho) vedoucí(ho) nebo konzultanta(ky) diplomové práce:


Datum zadání diplomové práce: **31.10.2023**

Termín odevzdání diplomové práce: **10.05.2024**

Platnost zadání diplomové práce: **31.10.2025**

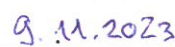

doc. Ing. Tomáš Oberhuber, Ph.D.
podpis vedoucí(ho) práce


prof. Ing. Zuzana Masáková, Ph.D.
podpis vedoucí(ho) ústavu/katedry


doc. Ing. Václav Čuba, Ph.D.
podpis děkana(ky)

III. PŘEVZETÍ ZADÁNÍ

Diplomant bere na vědomí, že je povinen vypracovat diplomovou práci samostatně, bez cizí pomoci, s výjimkou poskytnutých konzultací. Seznam použité literatury, jiných pramenů a jmen konzultantů je třeba uvést v diplomové práci.


Datum převzetí zadání


Podpis studenta

Poděkování:

Chtěl bych zde poděkovat především svému školiteli doc. Ing. Tomáši Oberhuberovi, Ph.D. za pečlivost, ochotu, vstřícnost a odborné i lidské zázemí při vedení mé diplomové práce. Dále bych chtěl poděkovat Ing. Aleši Wodeckému, Ph.D., doc. Ing. Radku Fučíkovi, Ph.D. a Ing. Pavlu Eichlerovi, Ph.D. za pravidelné konzultace a pomoc se zadáním úloh a jejich návrhy na rozšíření kódu. Také děkuji Ing. Jakobovi Klinkovskému, Ph.D. za poskytnutí TNL-LBM kódu.

Čestné prohlášení:

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

V Praze dne 6. ledna 2025

Bořivoj Kronowetter

Název práce:

Optimalizace proudění pomocí mřížkové Boltzmannovy metody

Autor: Bc. Bořivoj Kronowetter

Obor: Matematické inženýrství

Druh práce: Výzkumný úkol

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

Abstrakt: Cílem této práce je odvodit a implementovat vhodnou optimalizační metodu pro rekonstrukci proudění z naměřených makroskopických veličin, jmenovitě hustoty a rychlosti tekutiny. V této práci je řídicím parametrem zvolen rychlostní profil z Dirichletovy okrajové podmínky na vstupu do domény s tekutinou. K simulaci proudění tekutiny je využita mřížková Boltzmannova metoda (LBM) a k optimalizaci je vzhledem k velkému počtu optimalizačních parametrů použita adjungovaná metoda. Po odvození adjungované metody k LBM (ALBM) je představena interpretace výsledné úlohy pro paralelní programování. Implementace je poté úspěšně otestována na úlohách proudění tekutiny v kavitě poháněné víkem. Práce dále poukazuje na výhody a nevýhody použití ALBM a poskytuje rámec pro budoucí využití ALBM pro jiné řídicí parametry.

Klíčová slova: adjungovaná metoda, mřížková Boltzmannova metoda, optimalizační metoda, 3D simulace proudění tekutiny

Title:

Optimization of flow using the lattice Boltzmann method

Author: Bc. Bořivoj Kronowetter

Abstract: The aim of this work is to derive and implement a suitable optimization method for flow reconstruction from measured macroscopic quantities, namely fluid density and velocity. In this work, the decision parameter is chosen as the velocity profile from the Dirichlet boundary condition at the fluid domain inlet. The lattice Boltzmann method (LBM) is used for fluid flow simulation, and due to the large number of decision parameters, the adjoint method is employed for optimization. After deriving the adjoint method for LBM (ALBM), an interpretation of the resulting problem is presented for parallel programming. The implementation is then successfully tested on lid-driven cavity flow problems. The work further highlights the advantages and disadvantages of using ALBM and provides a framework for future work on applying ALBM to other decision parameters.

Key words: adjoint method, lattice Boltzmann method, optimization method, 3D fluid flow simulation

Obsah

Úvod	7
1 Mřížková Boltzmannova metoda	8
1.1 Matematický popis proudění tekutin	8
1.2 Kinetická teorie	9
1.3 Mřížková Boltzmannova metoda	10
1.3.1 Algoritmus LBM	13
1.3.2 Diskrétní aproximace kolizního operátoru	14
1.3.3 Počáteční a okrajové podmínky	16
1.3.4 Přejít k bezrozměrným jednotkám a nastavení parametrů	18
2 Optimalizace proudění – adjungovaná metoda	20
2.1 Teoretický základ adjungované metody	20
2.1.1 Algoritmus adjungované metody	23
2.2 Zadání minimalizační úlohy	23
3 Adjungovaná metoda k LBM	25
3.1 Současný stav problematiky	25
3.2 Odvození ALBM	26
3.2.1 Výpočet sdružené proměnné	29
3.2.2 Počáteční a okrajové podmínky LBM v ALBM	30
3.2.3 Výpočet gradientu	32
3.2.4 Algoritmus výpočtu sdružené proměnné	32
4 Numerická implementace	33
4.1 Výhody a nevýhody ALBM	33
4.2 Optimalizace proudění ve 2D	34
4.3 Optimalizace proudění ve 3D	35
4.3.1 Poznámka k ustálenému proudění	35

5 Numerické výsledky	37
5.1 Formulace úlohy optimalizace proudění v kavitě	38
5.2 Výsledky optimalizace ve 2D	40
5.3 Výsledky optimalizace ve 3D	44
Závěr	52
Literatura	54

Úvod

Tato diplomová práce se zabývá optimalizací proudění tekutin pomocí adjungované metody (z angl. „adjoint method“) pro rekonstrukci proudění krve v cévách z naměřených dat. Předpokládáme, že krev se ve větších cévách chová jako Newtonovská kapalina. Tento fakt umožní simulování proudění krve pomocí mřížkové Boltzmannovy metody. Proudění krve v krevním řečišti lze měřit pomocí magnetické rezonance, která má ale v dnešní době příliš hrubé rozlišení na podrobnou analýzu proudění krve. Existuje proto zájem rekonstruovat proudění pomocí výpočetních metod. V některých případech, kdy neznáme všechny parametry potřebné k rekonstrukci proudění, lze použít optimalizačních metod k přiblížení se k naměřeným datům výpočetními metodami.

Mřížková Boltzmannova metoda je poměrně nová výpočetní metoda pro aproximaci řešení proudění tekutin. Metoda je časově explicitní a umožňuje paralelizaci výpočtů v každém uzlu výpočetní mřížky. V kapitole 1 bude představen matematický popis tekutin a role mřížkové Boltzmannovy metody ve výpočetní dynamice tekutin (*CFD* z angl. „computational fluid dynamics“).

Adjungovaná metoda je optimalizační metoda používaná v minimalizačních úlohách s vazbou. Minimalizační úlohu formulujeme v kapitole 2 a vazbu definujeme jako mřížkovou Boltzmannovu rovnici. Hlavním záměrem adjungované metody je využít znalosti vazby minimalizační úlohy k vynulování výpočetně náročných členů gradientu, kterým upravujeme pomocí metody gradientního sestupu řídicí parametry. V této práci byl za řídicí parametr zvolen rychlostní profil zadaný Dirichletovou okrajovou podmínkou na vstupu do domény s tekutinou. Jelikož se řídicí parametr nachází na hranici domény, muselo být využito tzv. „first discretize, then optimize“ přístupu, viz [14, 19, 20]. V tomto přístupu adjungovanou metodou získáváme soustavu lineárních rovnic, které jsou odvozeny v kapitole 3. Soustavu se vyplatí řešit podobným algoritmem jako samotnou mřížkovou Boltzmannovu metodu, který je představen ve stejné kapitole.

V kapitole 4 budou diskutovány výhody a nevýhody adjungované metody k mřížkové Boltzmannově metodě a implementace adjungované metody, o kterou byl v této práci rozšířen kód TNL-LBM vyvíjený na katedře matematiky na FJFI ČVUT v Praze, viz [16]. Tato implementace využívá paralelizace výpočtů jak v mřížkové Boltzmannově metodě, tak v adjungované metodě, a tím výrazně zmenšuje výpočetní časy oproti předchozí implementaci v práci [20].

Adjungovaná metoda k mřížkové Boltzmannově metodě bude otestována na několika jednoduchých úlohách v kapitole 5. V této kapitole budou také nalezeny limity metody, co se vlastností simulovaného systému týče.

Kapitola 1

Mřížková Boltzmannova metoda

1.1 Matematický popis proudění tekutin

Proudění tekutin popisují na makroskopické úrovni Navierovy-Stokesovy rovnice, viz [22]. V makroskopickém popisu považujeme tekutinu za spojité prostředí, které nevykazuje některé částicové vlastnosti tekutiny. Popis tekutiny pomocí interakcí jednotlivých částic tekutiny se nazývá mikroskopický popis, viz [22].

Uvažujme izolovaný, izotermální systém bez zdrojů. Označme výpočetní prostor jako Ω s hranicí Γ . Navierovy-Stokesovy rovnice pro tento systém v konzervativním tvaru jsou potom

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \text{ na } \Omega, \quad (1.1)$$

$$\partial_t (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}^T) + \nabla p = \nabla \cdot \mathbf{T} + \rho \mathbf{a} \text{ na } \Omega, \quad (1.2)$$

kde ρ [kg m^{-3}] je objemová hustota tekutiny, p [$\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-2}$] tlak tekutiny, \mathbf{u} [m s^{-1}] makroskopická rychlost tekutiny, \mathbf{T} [$\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-2}$] dynamický tenzor napětí a \mathbf{a} [m s^{-2}] je zrychlení způsobené vnějšími silami působícími na tekutinu, viz [11].

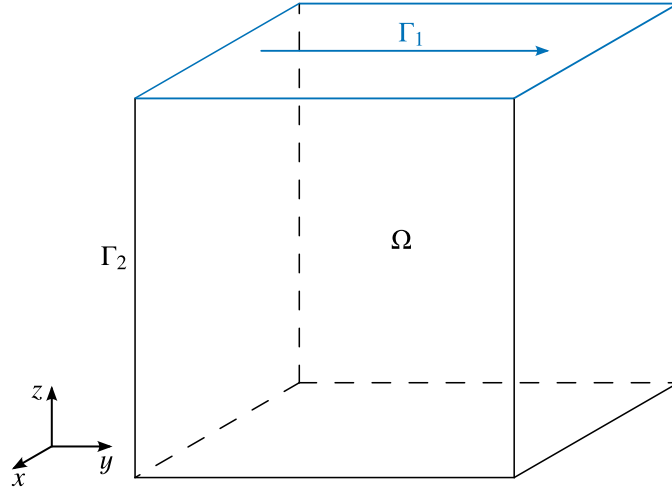
Počáteční podmínkou pro tento systém parciálních diferenciálních rovnic nastavujeme jako $\rho|_{t=0} = \rho_0$ a $\mathbf{u}|_{t=0} = \mathbf{u}_0$.

Dále bychom měli uvést okrajovou podmínku. Tou může být například Dirichletova okrajová podmínka pro rychlost ve tvaru $\mathbf{u}|_{\Gamma} = 0$, která rekonstruuje hranici s rigidní pevnou látkou, na které nedochází ke skluzu částic tekutiny. Pokud se navíc pevná látka pohybuje rychlostí \mathbf{u}_{in} , potom používáme Dirichletovu okrajovou podmínku $\mathbf{u}|_{\Gamma} = \mathbf{u}_{in}$. Později v této práci budeme řešit tzv. úlohu kavity poháněné víkem. Schéma domény s hranicí Γ , rozdělenou pro tuto úlohu na několik částí, můžeme vidět na obrázku 1.1. Detailněji se této úloze věnuje kapitola 5.1.

Jednou z charakteristických veličin popisující proudění tekutin je tzv. *Reynoldsovo číslo* Re popsané v [28]. To vypočítáme ze vztahu

$$Re = \frac{uL}{\nu}, \quad (1.3)$$

kde u [m s^{-1}] je rychlost tekutiny, L [m] je charakteristická délka (např. šířka kanálu) a ν [$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$] je kinematická viskozita tekutiny. Kinematickou viskozitu ν lze získat výpočtem z dynamické viskozity, která se mimo jiné vyskytuje v dynamickém tenzoru napětí z rovnice (1.2), pomocí



Obrázek 1.1: Schéma domény Ω v úloze kavity poháněné víkem. Jako Γ_1 je označená modrá část hranice, která tvoří víko pohybující se předepsanou rychlostí, Γ_2 je rigidní pevná látka, na které nedochází ke skluzu.

vztahu $\nu = \frac{\mu}{\rho}$, viz [11]. Reynoldsovo číslo se často používá ve výpočetní dynamice tekutin jako charakteristická veličina popisující přechod od laminárního proudění k turbulentnímu, ke kterému obecně dochází jen pro dostatečně velká Reynoldsova čísla. V případě proudění v kavité poháněné víkem se můžeme podívat na numerickou aproximaci řešení pro různá Reynoldsova čísla pomocí metody konečných prvků např. v [31].

1.2 Kinetická teorie

V mezoskopickém popisu se tekutina nepopisuje makroskopickými veličinami z kapitoly 1.1, ani mikroskopickým popisem fyzikálních interakcí částic tekutiny, ale tzv. částicovou distribuční funkcí $f = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$. Distribuční funkce $f : \Omega \times \Xi \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ [$\text{kg s}^3 \text{m}^{-6}$] reprezentuje hustotu rozdělení částic tekutiny v bodě $\mathbf{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^3$ [m] s mikroskopickou rychlostí $\boldsymbol{\xi} \in \Xi \equiv \mathbb{R}^3$ [m s^{-1}] a v čase $t \in \mathbb{R}$ [s].

Z momentů distribuční funkce f lze rekonstruovat makroskopické veličiny jako hmotnostní hustotu ρ a makroskopickou rychlost \mathbf{u} následujícím způsobem:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int_{\Xi} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}, \quad (1.4)$$

$$\rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \int_{\Xi} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \boldsymbol{\xi} d\boldsymbol{\xi}, \quad (1.5)$$

viz [22].

Rovnici popisující vývoj distribuční funkce f v čase lze získat snadno jako

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \frac{d\mathbf{x}}{dt} + \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\xi}} \frac{d\boldsymbol{\xi}}{dt}, \quad (1.6)$$

k	1	2	3	4	5	6	7	8	9
ξ_k^x	0	1	0	-1	0	1	-1	-1	1
ξ_k^y	0	0	1	0	-1	1	1	-1	-1
w_k	$\frac{4}{9}$	$\frac{1}{9}$	$\frac{1}{9}$	$\frac{1}{9}$	$\frac{1}{9}$	$\frac{1}{36}$	$\frac{1}{36}$	$\frac{1}{36}$	$\frac{1}{36}$

Tabulka 1.1: Složky rychlostí ξ_k pro všechny $k \in \{1, \dots, 9\}$ a odpovídající váhy w_k v rychlostním modelu D2Q9.

kde $\frac{dt}{dt} = 1$, $\frac{dx}{dt} = \xi$ a $\frac{d\xi}{dt} = \frac{1}{\rho} \mathbf{F}$, viz [22]. Celkově tedy při typickém označení členu $\frac{df}{dt}$ jako $C(f)$ máme

$$C(f) = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \xi + \frac{1}{\rho} \frac{\partial f}{\partial \xi} \mathbf{F}. \quad (1.7)$$

Rovnice (1.7) se nazývá *Boltzmannova transportní rovnice* a člen $C(f)$ se nazývá *kolizní operátor*. Kolizní operátor reprezentuje lokální změnu distribuční funkce f po kolizích částic tekutiny, více například v [11, 22]. Zde nacházíme výhodu mezoskopického popisu tekutiny – distribuční funkce má vztah k makroskopickým veličinám daný rovnicemi (1.4) a (1.5) a kolizní operátor (1.7) popisuje interakce na úrovni částic tekutiny. Mezoskopický popis tekutiny tedy kombinuje oba přístupy.

Pokud navíc požadujeme po Boltzmannově transportní rovnici (1.7) splnění zákona zachování hmotnosti, zákona zachování hybnosti a zákona zachování celkové energie, můžeme pro kolizní operátor $C(f)$ odvodit následující podmínky:

$$\int_{\Xi} C(f) d\xi = 0, \quad (1.8)$$

$$\int_{\Xi} C(f) \xi d\xi = \mathbf{0}, \quad (1.9)$$

$$\int_{\Xi} C(f) |\xi|^2 d\xi = 0, \quad (1.10)$$

viz [22].

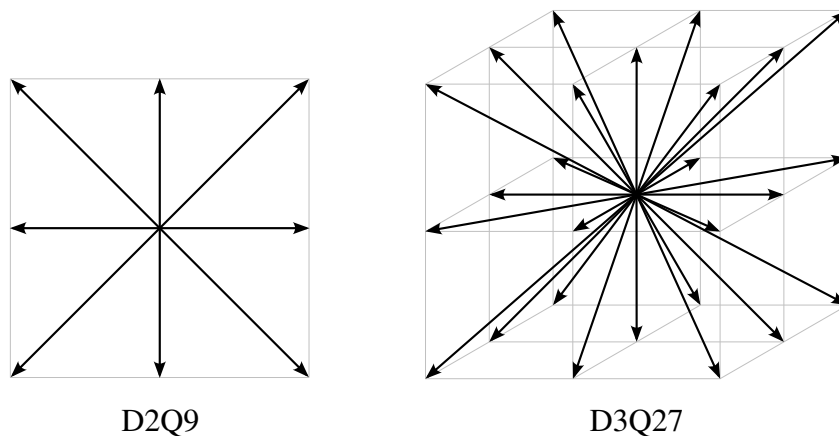
V numerické implementaci se používají různé aproximace kolizního operátoru. Některé tyto aproximace jsou detailněji popsány v kapitole 1.3.2.

1.3 Mřížková Boltzmannova metoda

Mřížková Boltzmannova metoda (také *LBM* z anglického lattice Boltzmann method) vychází ze starší metody lattice gas automata, viz [11]. LBM je založena na diskretizaci Boltzmannovy transportní rovnice (1.7) z kapitoly 1.2.

Nejdříve diskretizujeme prostor mikroskopických rychlostí Ξ , poté prostor Ω a časový interval $[0, T]$, kde $T \in \mathbb{R}^+$.

Diskretizace prostoru rychlostí Ξ se provádí dle zvoleného rychlostního modelu $DdQq$, kde d značí dimenzi prostoru Ω a q počet směrů, ve kterých se Ξ diskretizuje. V této práci bude použit rychlostní model D2Q9 pro úlohy proudění ve 2D a model D3Q27 pro úlohy proudění ve 3D.



Obrázek 1.2: Schematické znázornění rychlostních modelů D2Q9 a D3Q27.

k	1	2-3	4-5	6-7	8-11	12-15	16-19	20-27
ξ_k^x	0	± 1	0	0	± 1	± 1	0	± 1
ξ_k^y	0	0	± 1	0	± 1	0	± 1	± 1
ξ_k^z	0	0	0	± 1	0	± 1	± 1	± 1
w_k	$\frac{8}{27}$	$\frac{2}{27}$	$\frac{2}{27}$	$\frac{2}{27}$	$\frac{1}{54}$	$\frac{1}{54}$	$\frac{1}{54}$	$\frac{1}{216}$

Tabulka 1.2: Složky rychlostí ξ_k pro všechny $k \in \{1, \dots, 27\}$ a odpovídající váhy w_k v rychlostním modelu D3Q27. (Zápis vektorů je zkrácen pomocí \pm , všechny kombinace takových vektorů se vyskytují.)

Na oba modely může čtenář nahlédnout na obrázku 1.2 a na jednotlivé směry mikroskopické rychlosti ξ_k pro $k \in \{1, \dots, q\}$ v tabulce 1.1 a 1.2.

V použitých rychlostních modelech s váhami w_k z tabulek 1.1 a 1.2 splňuje *diskrétní distribuční funkce* $f_k(\mathbf{x}, t) = w_k f(\mathbf{x}, \xi_k, t)$ pro všechna $k \in \{1, \dots, q\}$ následující Boltzmannovu transportní rovnici diskretizovanou v rychlostním prostoru

$$\frac{\partial f_k(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \xi_k \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_k(\mathbf{x}, t) = C_k(\mathbf{x}, t) \quad \text{pro } \mathbf{x} \in \Omega, \quad (1.11)$$

kde $C_k(\mathbf{x}, t) = C(f_k(\mathbf{x}, t))$, pro D2Q9 označíme $\mathbf{x} = (x \ y)^T$ a $\nabla_{\mathbf{x}} = \left(\frac{\partial}{\partial x} \ \frac{\partial}{\partial y} \right)^T$ a pro D3Q27 $\mathbf{x} = (x \ y \ z)^T$ a $\nabla_{\mathbf{x}} = \left(\frac{\partial}{\partial x} \ \frac{\partial}{\partial y} \ \frac{\partial}{\partial z} \right)^T$.

Makroskopické momenty ρ a \mathbf{u} můžeme rekonstruovat z diskrétní distribuční funkce f_k jako

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{k=1}^q f_k(\mathbf{x}, t), \quad (1.12)$$

$$\rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \sum_{k=1}^q f_k(\mathbf{x}, t) \xi_k, \quad (1.13)$$

viz [11, 22].

Prostor Ω diskretizujeme jako pravidelnou mřížku s konstantní vzdáleností sousedních uzlů Δx . Dále uvedeme diskretizaci pouze pro proudění ve 3D, protože ve 2D se diskretizace provádí triviálně analogicky. Pro prostor

$$\Omega = [0, L_x] \times [0, L_y] \times [0, L_z] \subset \mathbb{R}^3, \quad (1.14)$$

kde L_x, L_y, L_z [m] jsou rozměry prostoru, sestrojíme diskretizovaný prostor

$$\hat{\Omega} = \left\{ \mathbf{x}_{lmn} = \begin{pmatrix} l\Delta x \\ m\Delta x \\ n\Delta x \end{pmatrix} \middle| l \in \{0, \dots, N_x - 1\}, m \in \{0, \dots, N_y - 1\}, n \in \{0, \dots, N_z - 1\} \right\}, \quad (1.15)$$

kde $N_\alpha = \frac{L_\alpha}{\Delta x} + 1$ je počet uzlů na ose $\alpha \in \{x, y, z\}$.

Časový interval $[0, T]$ je diskretizován konstantním časovým krokem $\Delta t = \frac{T}{N_t - 1}$, kde N_t je počet časových kroků v intervalu $[0, T]$. Získáme tedy množinu $\{t_n\}_{n=0}^{N_t-1} \subset [0, T]$, kde $t_n = n\Delta t$.

Metodou charakteristik přes trajektorii z bodu (\mathbf{x}_{lmn}, t_n) do bodu $(\mathbf{x}_{lmn} + \Delta t \xi_k, t_{n+1})$ získáme z rovnice (1.11) pro všechna $k \in \{1, \dots, q\}$ následující rovnici:

$$f_k(\mathbf{x}_{lmn} + \Delta t \xi_k, t_{n+1}) - f_k(\mathbf{x}_{lmn}, t_n) = \int_0^{\Delta t} C_k(\mathbf{x}_{lmn} + t \xi_k, t_n + t) dt, \quad (1.16)$$

viz [11, 22]. Zde je také důležité zmínit, že nenulové komponenty rychlosti ξ_k v rychlostním modelu budou voleny tak, aby splňovaly rovnici $\xi_k^\alpha = \frac{\Delta x}{\Delta t}$, kde ξ_k^α je každá nenulová komponenta vektoru ξ_k . To zajistí, že $\mathbf{x}_{lmn} + \Delta t \xi_k$ bude poloha jednoho ze sousedních uzlů na mřížce.

Pro bezsilové schéma lze na integrál na levé straně rovnice (1.16) použít diskretizaci prvního řádu, viz [22], tedy

$$\int_0^{\Delta t} C_k(\mathbf{x}_{lmn} + t\boldsymbol{\xi}_k, t_n + t) dt = C_k(\mathbf{x}_{lmn}, t_n) + \mathcal{O}(\Delta t^2). \quad (1.17)$$

Toto schéma má dokonce přesnost druhého řádu, jak je ukázáno např. v [22]. Při vhodném předefinování distribuční funkce a diskretizaci integrálu na levé straně rovnice (1.16) do druhého řádu získáváme totiž znovu rovnici 1.17 pro všechny běžně používané aproximace kolizních operátorů, viz [22]. Aproximace kolizního operátoru použité v této práci jsou popsány v kapitole 1.3.2 a splňují tuto vlastnost.

Spojením rovnic (1.16) a (1.17) a zanedbáním členu $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ získáváme Boltzmannovu mřížkovou rovnici

$$f_k(\mathbf{x}_{lmn} + \Delta t\boldsymbol{\xi}_k, t_n + \Delta t) - f_k(\mathbf{x}_{lmn}, t_n) = C_k(\mathbf{x}_{lmn}, t_n). \quad (1.18)$$

Rovnice (1.18) nám dává explicitní schéma pro diskrétní distribuční funkce f_k v každém uzlu domény $\hat{\Omega}$. Kolizní operátor C_k je možné pro numerické výpočty aproximovat několika způsoby. Některé z těchto způsobů budou popsány v kapitole 1.3.2.

1.3.1 Algoritmus LBM

Implementace mřížkové Boltzmannovy metody má následující algoritmus, jehož schematické znázornění může čtenář vidět na obrázku 1.3. V následujících krocích jsou uzly mřížky označeny jako $\mathbf{x} \in \hat{\Omega}$.

0. *Inicializace*: Pomocí počátečních podmínek zkonstruujeme diskrétní distribuční pole f_k v každém bodě, viz kapitola 1.3.3. Nastavíme $t = 0$.
1. *Šíření*: Propagace distribuční funkce do okolních uzlů mřížky.

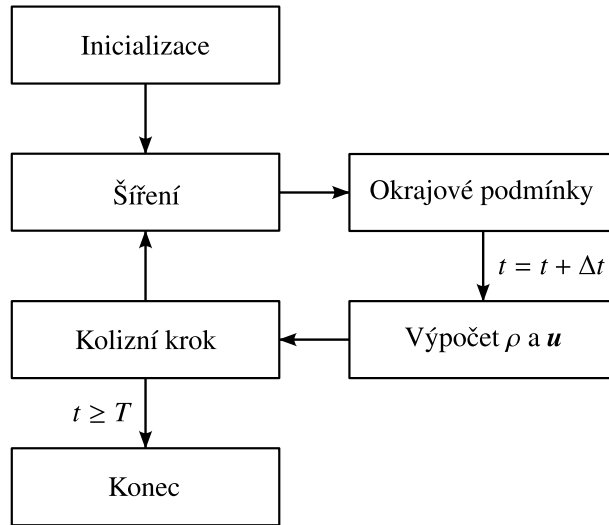
$$f_k(\mathbf{x} + \Delta t\boldsymbol{\xi}_k, t + \Delta t) = f_k^{kol}(\mathbf{x}, t), \quad (1.19)$$

kde horní index kol označuje distribuční funkce po kolizi (krok 5). V první časové iteraci jsou to jednoduše distribuční funkce z počáteční podmínky, protože kolize by jejich hodnoty nezměnila, viz kapitola 1.3.3.

2. *Řešení okrajových podmínek*: Viz kapitola 1.3.3.
3. *Inkrementace časového kroku*: $t \rightarrow t + \Delta t$.
4. *Výpočet makroskopických veličin*:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{k=1}^9 f_k(\mathbf{x}, t), \quad (1.20)$$

$$\rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \sum_{k=1}^9 f_k(\mathbf{x}, t) \boldsymbol{\xi}_k. \quad (1.21)$$



Obrázek 1.3: Schéma algoritmu mřížkové Boltzmannovy metody implementované v TNL-LBM.

5. *Kolizní krok*: Výpočet kolizního operátoru, více v kapitole 1.3.2.

$$f_k^{kol}(\mathbf{x}, t) = f_k(\mathbf{x}, t) + C_k(\mathbf{x}, t). \quad (1.22)$$

6. *Kontrola konce*: Ukončení výpočtu, pokud $t > T$. V opačném případě zopakování algoritmu od kroku 1.

Toto schéma umožňuje výhodnou paralelizaci, jelikož všechny kroky (až na krok šíření) se provádí lokálně na každém uzlu. Pokud navíc v implementaci definujeme druhé pole distribučních funkcí pro ukládání jejich hodnot po kroku kolize, pak lze paralelizovat i krok šíření pro každý uzel. Stejnou vlastnost převeze i algoritmus odvozené adjungované úlohy, jak uvidíme v kapitole 3.2.4.

1.3.2 Diskrétní aproximace kolizního operátoru

V této kapitole budou představeny aproximace kolizního operátoru $C_k = C(f_k)$ z rovnice (1.11). Různé způsoby aproximace tohoto operátoru byly odvozeny a otestovány, viz např. [9, 11, 22, 30]. Tato práce bude pracovat s aproximacemi nazývanými SRT (z angl. „single relaxation time“) a MRT (z angl. „multiple relaxation time“).

První aproximace, které se budeme věnovat, je právě SRT. Schéma mřížkové Boltzmannovy metody s touto aproximací se nazývá SRT-LBM, viz [22], a bylo představeno v [3]. Kolizní operátor nabývá tvaru

$$C^{\text{SRT}}(f) = -\frac{1}{\tau}(f - f^{eq}), \quad (1.23)$$

kde τ se nazývá *relaxační čas* a f^{eq} je *Maxwellova-Boltzmannova distribuční funkce*, viz [11]. V diskrétním tvaru potom

$$C_k^{\text{SRT}}(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau}(f_k(\mathbf{x}, t) - f_k^{eq}(\mathbf{x}, t)). \quad (1.24)$$

V implementaci SRT-LBM navíc využíváme aproximaci Maxwelllovy-Boltzmannovy distribuční funkce (dále také *rovnovážná distribuční funkce*), která má tvar

$$f_k^{eq}(\mathbf{x}, t) = w_k \rho(\mathbf{x}, t) \left(1 + \frac{\boldsymbol{\xi}_k \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)}{c_{zv}^2} + \frac{(\boldsymbol{\xi}_k \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t))^2}{2c_{zv}^4} - \frac{\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)}{2c_{zv}^2} \right), \quad (1.25)$$

kde c_{zv} reprezentuje rychlost zvuku v tekutině a makroskopické momenty ρ , \mathbf{u} rekonstruujeme z diskrétní distribuční funkce f_k pomocí rovnic (1.12) a (1.13), viz [11, 22]. Dále budeme značit rovnovážnou distribuční funkci f_k^{eq} i jako $f_k^{eq}(\mathbf{x}, t) \equiv f_k^{eq}(\rho(\mathbf{x}, t), \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)) \equiv f_k^{eq}(\rho, \mathbf{u})$.

Alternativním schématem k SRT-LBM je MRT-LBM. V něm nedochází ke kolizi v prostoru distribučních funkcí f , ale v prostoru *momentů* této distribuční funkce. Momenty distribuční funkce se dají spočítat z distribuční funkce pomocí Hermitových polynomů, viz [22]. Některé momenty potom odpovídají hydrodynamickým momentům. To nám umožňuje každému momentu přiřadit jiný relaxační čas, což více odpovídá fyzikálním kolizím v tekutině, viz [11, 22]. V tomto textu budou představeny pouze aspekty MRT-LBM důležité pro odvození adjungované úlohy k této metodě v kapitole 3.2. Širší diskuzi a odvození se věnují např. [11, 22, 30].

Označme si v této části pro jednodušší zápis $\mathbf{f} := (f_1 \dots f_q)^T$ a $\mathbf{f}^{eq} := (f_1^{eq} \dots f_q^{eq})^T$. Do prostoru momentů distribuční funkce můžeme potom přejít lineární transformací pomocí matice $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{q \times q}$ jako $\mathbf{m} := \mathbf{M}\mathbf{f}$.

Kolizní operátor nabývá tvaru

$$C_k^{\text{MRT}}(\mathbf{x}, t) = -\mathbf{M}^{-1} \mathbf{S}(\mathbf{m}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{m}^{eq}(\mathbf{x}, t)), \quad (1.26)$$

kde $\mathbf{S} = \text{diag}(s_1, \dots, s_q)$ je matice relaxačních časů s_i a \mathbf{m}^{eq} jsou rovnovážné momenty. Rovnovážné momenty můžeme získat z aproximace kolizního operátoru z rovnice (1.25) jako

$$\mathbf{m}^{eq} = \mathbf{M}\mathbf{f}^{eq} \quad (1.27)$$

Přesnější schéma je ale rekonstruovat rovnovážné momenty pomocí rovnice

$$m_k^{eq} = \rho \sum_{l,m,n} a_{k,lmn} u_x^l u_y^m u_z^n, \quad (1.28)$$

kde konstanty $a_{k,lmn}$ jsou specifické k použitému rychlostnímu modelu, viz [22]. Odvození těchto konstant i matice \mathbf{M} a možné nastavení relaxačních časů s_i k modelu D2Q9 lze nalézt v [22] a k modelu D3Q27 v [30].

Přesný tvar momentů m_k^{eq} uvedeme pouze pro rychlostní model D2Q9 v rovnicích (1.29)). Tyto momenty jsou odvozené v [22].

$$\begin{aligned} m_1^{eq} &= \rho, & m_2^{eq} &= \rho u_x, & m_3^{eq} &= \rho u_y, \\ m_4^{eq} &= \rho u_x^2, & m_5^{eq} &= \rho u_y^2, & m_6^{eq} &= \rho u_x u_y, \\ m_7^{eq} &= \rho u_x u_y^2, & m_8^{eq} &= \rho u_x^2 u_y, & m_9^{eq} &= \rho u_x^2 u_y^2. \end{aligned} \quad (1.29)$$

Na rovnicích (1.29) lze vidět, že je snadnější počítat momenty přímo z tohoto předpisu, než z diskrétní rovnovážné distribuční funkce z rovnice (1.27).

1.3.3 Počáteční a okrajové podmínky

Počáteční podmínku pro makroskopické veličiny $\rho(\mathbf{x}, 0) = \rho_0$ a $\mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{u}_0$ budeme rekonstruovat v mřížkové Boltzmannově metodě nastavením distribučních funkcí na rovnovážnou distribuční funkci z rovnice (1.25) jako

$$f_k(\mathbf{x}, 0) = f_k^{eq}(\rho_0, \mathbf{u}_0). \quad (1.30)$$

Při řešení okrajových podmínek musíme předepsat tvar distribučních funkcí po kroku šíření z kapitoly 1.3.1. Některé distribuční funkce v uzlech na okraji domény jsou totiž zatím neznámé, jak lze vidět pro model D2Q9 na obrázku 1.4.

Pro rekonstrukci hranice tekutiny s rigidní pevnou látkou, na které nedochází ke skluzu částic, použijeme tzv. „fullway bounce back schéma“. V tomto schématu dochází k odrazu distribučních funkcí od stěny v kroku kolize v algoritmu z kapitoly 1.3.1. Formální předpis pro neznámé distribuční funkce ve směrech k je v fullway bounce back okrajové podmínce následovný:

$$f_k(\mathbf{x}, t_n) = f_{\bar{k}}(\mathbf{x}, t_n), \quad (1.31)$$

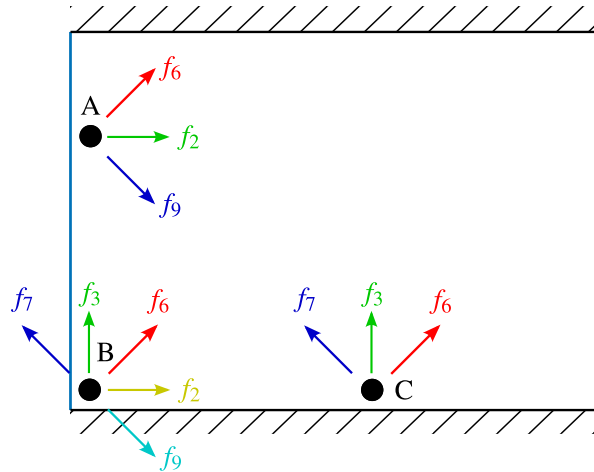
kde \mathbf{x} je uzel nacházející se v pevné látce a \bar{k} je index opačného směru ke směru ξ_k . Znázornění fullway bounce back okrajové podmínky si může čtenář prohlédnout na obrázku 1.5. Toto schéma rekonstruuje Dirichletovu okrajovou podmínku pro makroskopickou rychlost $\mathbf{u}|_{\Gamma} = 0$ na hranici nacházející se mezi uzly tekutiny a pevné látky. Její ověření najdeme například v [22].

Pro rekonstrukci Dirichletovy okrajové podmínky pro makroskopickou rychlost $\mathbf{u}|_{\Gamma} = \mathbf{u}_{in}$ z kapitoly 1.1 použijeme schéma navržené v [23]. V kódu TNL-LBM je již implementováno schéma založené na momentech distribuční funkce (dále *momentové schéma*). Důvodem použití schématu z [23] místo momentového schématu, je stabilita momentového schématu pro SRT-LBM, viz [17], ve kterém autoři nebyli schopni získat stabilní výsledky pro $Re=1000$. Schéma z [23] funguje podobně jako bounce back schéma pro neznámé distribuční funkce ve směrech k

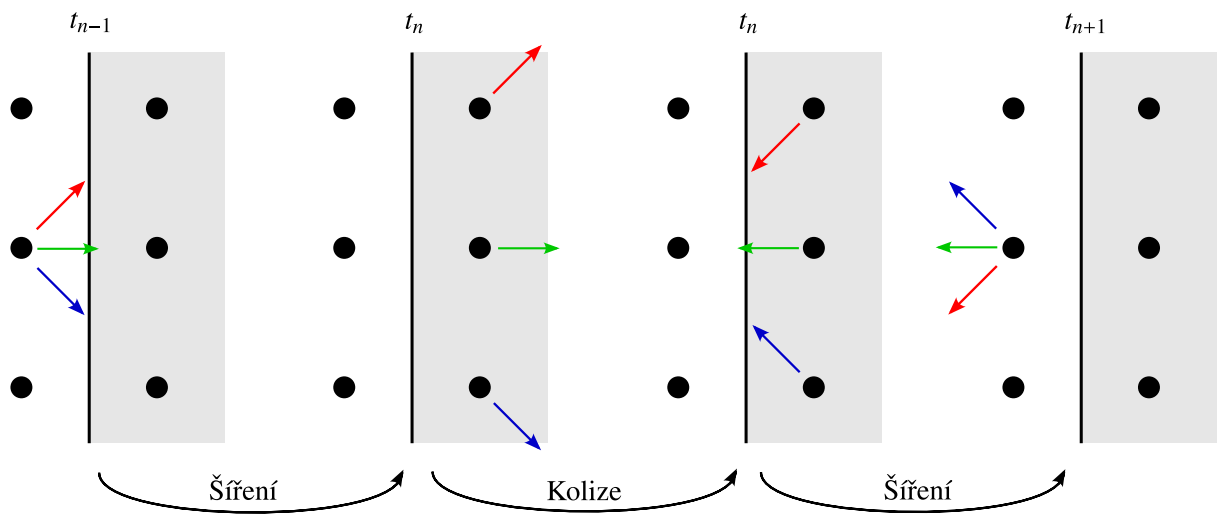
$$f_k(\mathbf{x}, t_{n+1}) = f_{\bar{k}}^{kol}(\mathbf{x}, t_n) - 2w_{\bar{k}}\rho_w \frac{\mathbf{u}_{in}(\mathbf{x}, t_n) \cdot \xi_{\bar{k}}}{c_{zv}^2}, \quad (1.32)$$

kde \mathbf{u}_{in} je rychlost pohybující se stěny a ρ_w je makroskopická hustota na stěně. Hustotu na stěně nahradíme lokální hustotou v tekutině $\rho_w = \rho(\mathbf{x}, t_n)$ stejně jako v [22]. Toto schéma nezachovává celkovou hmotu v systému, pokud je kolmá složka rychlosti na stěně nenulová, viz [22]. Zjednodušené schéma této metody je k nahlédnutí na obrázku 1.6. V této práci je použito tzv. „halfway velocity bounce back“ schéma, ve kterém dochází k odrazu distribučních funkcí v kroku 1 (šíření) v algoritmu z kapitoly 1.3.1. Důvodem k tomu je, že pro snadnější odvození a paralelizaci adjungované metody v kapitole 3.2 se vyplatí pracovat s lokální makroskopickou hustotou $\rho(\mathbf{x}, t_n)$, ale při fullway implementaci tohoto schématu bychom museli aproximovat lokální hustotu například z nejbližšího uzlu nacházejícího se v tekutině, viz [22].

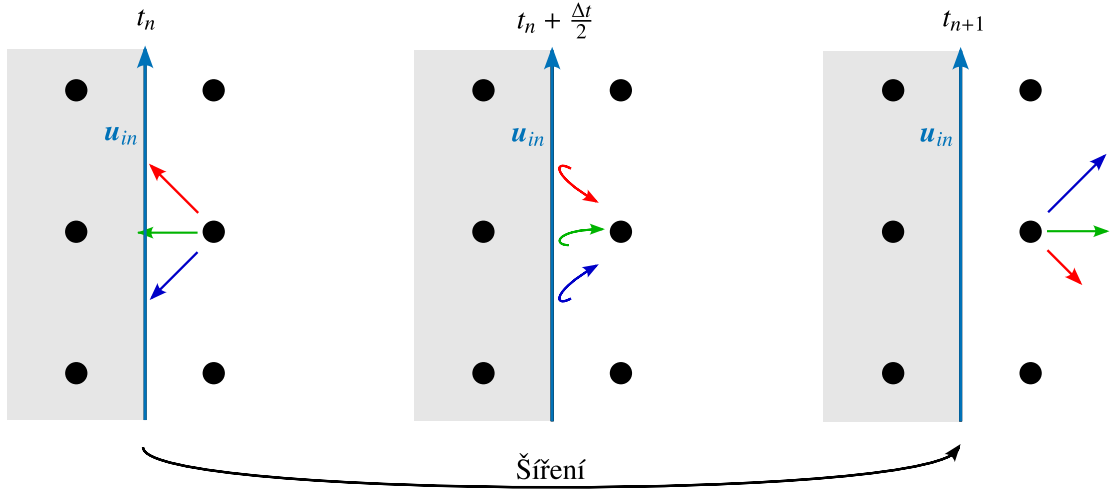
V MRT-LBM se vyplatí používat momentové schéma okrajových podmínek, viz [17]. Pro rychlostní model D2Q9 je momentové schéma popsáno v [2] a pro model D3Q27 v [4]. Toto schéma je založeno na práci [32], která byla rozšířena na momentové schéma v práci [2].



Obrázek 1.4: Znázornění neznámých distribučních funkcí v modelu D2Q9 na okraji domény, které musíme vhodně dodefinovat pro rekonstrukci okrajových podmínek pro makroskopické veličiny.



Obrázek 1.5: Schéma fullway bounce back okrajové podmínky rekonstruuující hranici s rigidní pevnou látkou, kde nedochází ke skluzu částic.



Obrázek 1.6: Schéma half-way bounce back okrajové podmínky rekonstruující pohybuující se stěnu rychlostí u_{in} .

1.3.4 Přechod k bezrozměrným jednotkám a nastavení parametrů

V implementaci LBM se používají tzv. *bezrozměrné jednotky*. Bezrozměrné jednotky budeme dále označovat horním indexem * a reálné jednotky ponecháme beze změny v zápisu. Pro snadnější implementaci volíme bezrozměrný prostorový krok $\Delta x^* = 1$ a bezrozměrný časový krok $\Delta t^* = 1$. Při převodu mezi mřížkovými a reálnými veličinami musíme používat konstanty detailněji popsané v [19]. V bezrozměrném popisu odpovídají komponenty vektorů ξ_k tabulkám 1.1 a 1.2.

V mřížkových jednotkách je pro oba rychlostní modely z kapitoly 1.3 mřížková rychlost zvuku

$$c_{zv}^* = \frac{1}{\sqrt{3}}, \quad (1.33)$$

viz [22].

Nyní vysvětlíme postup nastavování mřížkových parametrů tak, aby rekonstruovaly vlastnosti tekutiny, které budeme zadávat v reálných jednotkách.

V implementaci nejdříve zvolíme počet uzlů N_α na jedné ose $\alpha \in \{x, y, z\}$ a vypočítáme prostorový krok Δx . Mřížkový prostorový krok nastavíme $\Delta x^* = 1$ a zároveň nastavíme mřížkový časový krok $\Delta t^* = 1$. V SRT-LBM dále musíme nastavit mřížkový relaxační čas τ^* . Ten nastavíme podle předem zvolené kinematické viskozity ν , Reynoldsova čísla Re z rovnice (1.3) a maximální mřížkové rychlosti, kterou ve většině úloh v kapitole 5 nastavujeme pro úlohu kavity poháněné víkem z kapitoly 1.1 na $u_{max}^* = 0.1$, tak aby

$$Re = Re^* = \frac{L^* u_{max}^*}{\nu^*}, \quad (1.34)$$

kde L^* je bezrozměrná charakteristická délka (v případě kavity s fullway bounce back okrajovou podmínkou je $L^* = N_x - 1$) a

$$\nu^* = c_{zv}^{*2} \left(\tau^* - \frac{1}{2} \right) \quad (1.35)$$

je tzv. mřížková viskozita. Ve skutečnosti v implementaci v kapitole 4.3 nastavujeme právě mřížkovou viskozitu ν^* , ne přímo relaxační čas τ^* . Je důležité provést i výpočet relaxačního času τ^* , protože analýza stability SRT-LBM ukazuje, že hodnota τ^* by měla být větší než $\frac{1}{2}$ a ne příliš blízko $\frac{1}{2}$, viz [22]. Reálný časový krok Δt můžeme vypočítat následovně:

$$\Delta t = \frac{\nu^*}{\nu} \Delta x^2, \quad (1.36)$$

viz [22]. V rovnici (1.36) je důležité si všimnout, že velikost časového kroku klesá s druhou mocninou při zmenšování prostorového kroku, což zvyšuje výpočetní náročnost LBM. Toto schéma umožňuje dynamicky škálovat rozlišení mřížky (prostorový krok Δx) a zároveň zachovat hydrodynamické vlastnosti simulované tekutiny, viz [22].

Diskuze stability a přesnosti řešení proudění tekutiny pomocí SRT-LBM je provedena v [22]. Zde se spokojíme se zmínkou, že SRT-LBM není stabilní při použití hrubých mřížek pro vysoká Reynoldsova čísla, nicméně použití jemnějších mřížek zvyšuje výpočetní náročnost. Dále bychom měli zohlednit, že mřížkové Reynoldsovo číslo

$$\text{Re}_g = \frac{u_{max}^* \Delta x^*}{\nu^*} \quad (1.37)$$

by nemělo být příliš větší než 10 pro vyřešení malých lokálních vírů, viz [22].

Kapitola 2

Optimalizace proudění – adjungovaná metoda

V této části bude představena použitá optimalizační metoda – *adjungovaná metoda*, která umožňuje využít předpisu parciálních diferenciálních rovnic původní úlohy k zjednodušení výpočtu gradientu vynulováním členů rozvoje gradientu, které jsou numericky náročné na výpočet. Toho je dosaženo zavedením tzv. *sdrúžené proměnné*. Adjungovaná metoda byla v této práci zvolena díky její vlastnosti zjednodušit výpočet gradientu pro řídicí parametry z prostoru vysoké dimenze, které jsou ve výpočetní dynamice tekutin běžné. V následujících kapitolách bude metoda podrobně popsána a poté odvozena pro formulaci LBM z kapitoly 1. Tato kapitola vychází především z [10, 14].

2.1 Teoretický základ adjungované metody

Tato podkapitola je z velké části převzata z bakalářské práce autora, viz [19]. Značení v této kapitole je převzato z [14], ale je upraveno pro lepší návaznost na další podkapitoly, především kapitolu 3.2, která se věnuje odvození adjungované metody k LBM.

Definice 1 (Směrová derivace). Necht' X, F jsou normované lineární prostory, U je otevřená podmnožina prostoru X , $f : U \rightarrow F$, $x \in U$, $v \in X$. Pak

$$\delta f(x; v) := \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(x + tv) - f(x)}{t} \in F \quad (2.1)$$

nezveme *směrovou derivací* f v bodě x a ve směru v .

Definice 2 (Gateauxova derivace). Necht' X, F jsou normované lineární prostory, U je otevřená podmnožina prostoru X , $f : U \rightarrow F$, $x \in U$. Když existuje omezený lineární operátor $Df(x)$ takový, že

$$(\forall v \in X) \left(Df(x)[v] = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(x + tv) - f(x)}{t} \right), \quad (2.2)$$

pak řekneme, že f je *Gateauxovsky diferencovatelná* v bodě x .

Definice 3 (Fréchetova derivace). Necht' $(X, \|\cdot\|_X)$, $(F, \|\cdot\|_F)$ jsou normované lineární prostory, U je otevřená podmnožina prostoru X , $f : U \rightarrow F$, $x \in U$. Pokud existuje omezený lineární operátor $f'(x)$ takový, že

$$\lim_{\|h\|_X \rightarrow 0} \frac{\|f(x+h) - f(x) - f'(x)[h]\|_F}{\|h\|_X} = 0, \quad (2.3)$$

pak řekneme, že f je *Fréchetovsky diferencovatelná v bodě x* .

Definice 4 (Fréchetova parciální derivace). Necht' X, F, Z jsou Banachovy prostory, $v \in X$. Dále necht' $f : X \times F \rightarrow Z$ je Fréchetovsky diferencovatelná a $(a, b) \in X \times F$, kde $a \in X$ a $b \in F$. Označíme $f_1(x) = f(x, b)$.

$$f_x(a, b)[v] := f'_1(a)[v] \quad (2.4)$$

nazveme *Fréchetova parciální derivace v bodě (a, b)* .

Podle [14] poté zavedeme také následující definice.

Definice 5 (Minimalizační úloha). Necht' X je Banachův prostor, U je otevřená podmnožina prostoru X , $C \subset U$ je neprázdná konvexní uzavřená množina. Dále necht' máme funkcionál $J : U \rightarrow \mathbb{R}$, který se snažíme minimalizovat. Pak

$$\min_{x \in C} J(x) \quad (2.5)$$

nazveme *minimalizační úloha*.

Definice 6 (Lokální a globální řešení minimalizační úlohy). O $x_0 \in C$ řekneme, že je *lokálním řešením* minimalizační úlohy $\min_{x \in C} J(x)$ právě tehdy, když $\exists V$ otevřená podmnožina prostoru X tak, že $(\forall x \in V \cap C)(J(x) \geq J(x_0))$.

Pokud navíc $V = U$, pak $x_0 \in C$ nazveme *globálním (také optimálním) řešením* minimalizační úlohy $\min_{x \in C} J(x)$.

Nyní můžeme vyslovit důležité věty pro minimalizační úlohu.

Věta 7 (Nutná podmínka). Necht' X je Banachův prostor, U je otevřená podmnožina prostoru X , $C \subset U$ je neprázdná konvexní uzavřená množina a necht' $\min_{x \in C} J(x)$ je minimalizační úloha. Necht' $x_0 \in C$ je lokálním řešením a J je Gateauxovsky diferencovatelná. Potom $\forall x \in C$ platí

$$DJ(x_0)[x - x_0] \geq 0. \quad (2.6)$$

Poznámka 8. Místo Gateauxovské diferencovatelnosti stačí i jen směrová derivace ve směru $[x - x_0]$.

Věta 9 (Postačující podmínka). Necht' X je Banachův prostor, U je otevřená podmnožina prostoru X , $C \subset U$ je neprázdná konvexní uzavřená množina a necht' $\min_{x \in C} J(x)$ je minimalizační úloha. Dále necht' nějaké $x_0 \in C$ splňuje $(\forall x \in C)(DJ(x_0)[x - x_0] \geq 0)$. Potom x_0 je globální minimum.

Definice 10 (Minimalizační úloha s vazbou). Necht' U, F jsou Banachovy prostory. Prostoru U říkáme *prostor řízení*, $u \in U$ nazveme *řídícím parametrem* a prostor F říkáme *prostor řešení*. Necht' Z je Hilbertův prostor, dále mějme zobrazení $e : F \times U \rightarrow Z$, $J : F \times U \rightarrow \mathbb{R}$. Rovnici $e(f, u) = 0$ nazýváme *stavovou rovnicí*, viz [14]. Dále mějme $W_{ad} \subset F \times U$ neprázdnou konvexní uzavřenou množinu. Potom

$$\begin{aligned} \min \quad & J(f, u) \\ (f, u) \in & W_{ad} \\ e(f, u) = & 0 \end{aligned} \quad (2.7)$$

nazveme *minimalizační úloha s vazbou*.

Nyní se budeme snažit minimalizovat účelovou funkci s vazbami, které budou představovat parciální diferenciální rovnice popisující nějaký fyzikální systém, který v adjungované metodě označujeme jako *primární úloha*, viz [10].

Ve spojitém přístupu v adjungované metodě, který se nazývá *nejdříve minimalizovat, poté diskretizovat* (z angl. „first optimize, then discretize“), se zavádí pomocná Lagrangeova funkce $L : F \times U \times Z \rightarrow \mathbb{R}$ jako

$$L(f, u, \lambda) = J(f, u) + \langle \lambda, e(f, u) \rangle_Z, \quad (2.8)$$

kde $\langle \cdot, \cdot \rangle_Z$ je skalární součin v prostoru Z , viz [14]. Spojitý přístup k adjungované metodě je dále popsán v [19]. V následující části se práce věnuje diskrétnímu přístupu v adjungované metodě, který je v principu stejný jako spojitý přístup, ovšem probíhá na konečněrozměrných prostorech.

V diskrétním přístupu k adjungované úloze nahradíme obecně nekonečněrozměrné prostory F, U a Z konečněrozměrnými prostory F_h, U_h a Z_h . Dále místo účelové funkce $J : F \times U \rightarrow \mathbb{R}$ uvažujeme funkci stejného značení $J : F_h \times U_h \rightarrow \mathbb{R}$ s konečněrozměrnou vazbou, kterou označíme podobně jako v [10] $N : F_h \times U_h \rightarrow Z_h$. Tento přístup se v literatuře nazývá *nejdříve diskretizovat, poté minimalizovat* (z angl. „first discretize, then optimize“), viz [14].

V následující části označme vektor řešení primární úlohy $f \in F_h$, vektor řídicích parametrů $u \in U_h$ a Lagrangeovu funkci $L : F_h \times U_h \times Z_h \rightarrow \mathbb{R}$ s Lagrangeovými multiplikátory $\lambda \in Z_h$. Minimalizační úloha s vazbou má potom tvar

$$\min_{N(f,u)=0} J(f, u) \quad (2.9)$$

a Lagrangeova funkce

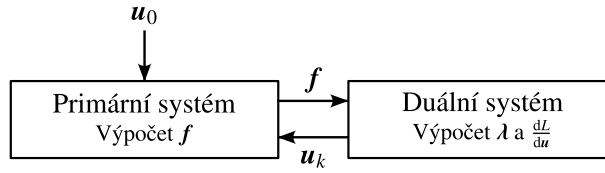
$$L(f, u, \lambda) = J(f, u) - \lambda^T N(f, u). \quad (2.10)$$

Jelikož řešení primární úlohy f závisí na optimalizačních parametrech u , zřejmě platí

$$\frac{dL}{du} = \left(\frac{\partial J}{\partial f} - \lambda^T \frac{\partial N}{\partial f} \right) \left(\frac{df}{du} \right)^T + \left(\frac{\partial J}{\partial u} - \lambda^T \frac{\partial N}{\partial u} \right). \quad (2.11)$$

Podobně jako ve spojitém případě se chceme zbavit závislosti derivace $\frac{dL}{du}$ z rovnice (2.11) na derivaci $\frac{df}{du}$, která bývá v úlohách proudění tekutin výpočetně náročná, viz [14]. Vektor Lagrangeových multiplikátorů λ tedy nastavíme tak, aby

$$\frac{\partial J}{\partial f} - \lambda^T \frac{\partial N}{\partial f} = 0. \quad (2.12)$$



Obrázek 2.1: Schéma algoritmu diskretní adjungované metody.

Definice 11 (Diskretní adjungovaná úloha). *Diskretní adjungovanou úlohou* (také *duální úlohou*) nazveme úlohu definovanou rovnicí (2.12) pro neznámou λ . Řešením duální úlohy je nějaké $\lambda_0 \in Z_h$, toto λ_0 nazveme *sdrúžená proměnná*.

Vyřešení duální úlohy zjednoduší výpočet $\frac{dL}{du}$ z rovnice (2.11) na

$$\frac{dL}{du} = \left(\frac{\partial J}{\partial u} - \lambda_0^T \frac{\partial N}{\partial u} \right). \quad (2.13)$$

2.1.1 Algoritmus adjungované metody

Zvolíme počáteční odhad $\mathbf{u}_0 \in U_h$ a parametr ϵ . Iterace v k -tém kroku bude mít následující tvar.

1. Vyřešíme primární úlohu pro \mathbf{f} s optimalizačním parametrem \mathbf{u}_k .
2. Vyřešíme duální úlohu: Použijeme vyřešené \mathbf{f} k výpočtu sdrúžené proměnné λ_0 podle rovnice (2.12).
3. Pomocí λ_0 spočítáme $\frac{dL}{du}$ z rovnice (2.13).
4. Spočítáme nový odhad řídicích parametrů pomocí gradientního sestupu: $\mathbf{u}_{k+1} = \mathbf{u}_k - \epsilon \frac{dL}{du}$.
5. Postup opakujeme s novým odhadem \mathbf{u}_{k+1} .

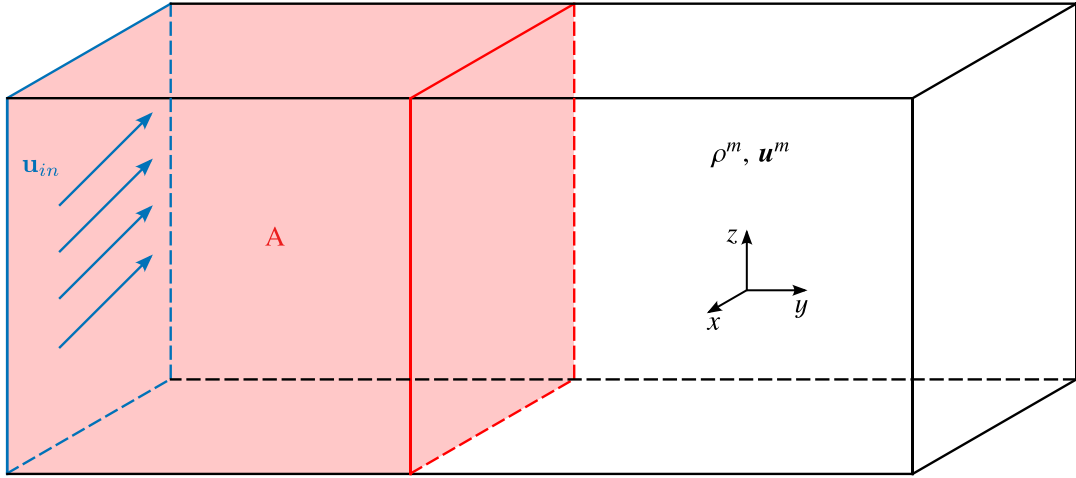
Zjednodušené schéma algoritmu adjungované metody je k nahlédnutí na obrázku 2.1.

2.2 Zadání minimalizační úlohy

V této podkapitole bude zadána minimalizační úloha, se kterou tato práce pracuje. Numerický model, který použijeme na aproximaci řešení proudění tekutiny, je popsán v kapitole 1. Optimalizační přístup k úloze využitý v této práci je potom popsán v kapitole 2.1.

Proudění tekutin můžeme popsat pomocí makroskopických veličin z kapitoly 1.1, jimiž jsou lokální hustota tekutiny ρ a lokální rychlost tekutiny \mathbf{u} . Při snaze zrekonstruovat proudění z naměřených dat budeme tedy uvažovat naměření právě těchto makroskopických veličin (dále také „data“) a pro zjednodušení zápisu je odlišíme horním indexem m .

Cílem práce je zrekonstruovat proudění pomocí nastavení rychlostního profilu \mathbf{u}_{in} v Dirichletově okrajové podmínce na vstupu do domény s tekutinou. Takto zadaná úloha by nedávala příliš smysl, pokud bychom měli makroskopické veličiny naměřeny přímo u vstupu. Proto



Obrázek 2.2: Příklad domény pro zadanou minimalizační úlohu. V části domény označené jako A nejsou naměřeny makroskopické veličiny ρ^m, \mathbf{u}^m .

budeme uvažovat naměřená data ρ^m, \mathbf{u}^m pouze v části domény. Na obrázku 2.2 se můžeme podívat na příklad domény s tekutinou a na příklad oblasti A, ve které nejsou data naměřena.

Minimalizační úlohu potom zadáváme pomocí účelové funkce $J(\mathbf{u}_{in})$ následovně:

$$\min_{\mathbf{u}_{in}} J(\mathbf{u}_{in}) = \min_{\mathbf{u}_{in}} \sum_{t_k} \int_{\Omega \setminus A} \frac{1}{2} |\mathbf{w}(\mathbf{u}_{in}; \mathbf{x}, t_k) - \mathbf{w}^m(\mathbf{x}, t_k)|^2 dx, \quad (2.14)$$

kde t_k jsou časové okamžiky, ve kterých proběhlo měření dat, a kde

$$\mathbf{w}(\mathbf{u}_{in}; \mathbf{x}, t) = \begin{pmatrix} \rho(\mathbf{u}_{in}; \mathbf{x}, t) \\ \mathbf{u}(\mathbf{u}_{in}; \mathbf{x}, t) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{w}^m(\mathbf{x}, t) = \begin{pmatrix} \rho^m(\mathbf{x}, t) \\ \mathbf{u}^m(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

V definici (2.14) navíc předpokládáme, že data jsou naměřená spojitě v každém bodě domény vyjma části A. To samozřejmě není v reálném měření možné a naměřená data se nachází například na hrubé mřížce. V numerických výpočtech na jemnější mřížce tedy můžeme provádět optimalizaci například s lineární interpolací naměřených dat. V této práci ovšem nejsou využita žádná experimentálně naměřená data. Abychom mohli otestovat použitou adjungovanou metodu, zvolili jsme přístup, ve kterém si makroskopické veličiny předpočítáme a uložíme pro nějaký profil $\mathbf{u}_{p,in}$, a poté se tento profil snažíme zrekonstruovat pouze z uložených dat. Tento přístup zároveň řeší problém interpolace dat pro jemnější výpočetní mřížky – jednoduše data také předpočítáme na jemnější mřížce.

Kapitola 3

Adjungovaná metoda k LBM

V této kapitole bude představeno podrobné odvození adjungované úlohy k LBM. Minimalizační úloha zadaná v kapitole 2.2 bude přeformulována na diskretizovanou minimalizační úlohu s vazbou. Poté bude představen algoritmus duální úlohy, jehož implementace bude detailněji popsána v kapitole 4. Nejdříve se ale tato kapitola věnuje řešerši do současného stavu problematiky použití adjungované metody k optimalizaci proudění pomocí LBM.

3.1 Současný stav problematiky

První použití adjungované metody ve výpočetní dynamice tekutin lze najít v [27]. Adjungovaná metoda ve výpočetní dynamice tekutin se často používá k optimalizaci parametrizovaného tvaru domény, či nějaké překážky v doméně, viz [10], topologie (např. porézního prostředí), viz [18, 24, 26], a jiných řídicích parametrů vysoké dimenze, jako například silového pole působícího na tekutinu, viz [12, 13, 19].

K LBM byla již adjungovaná metoda odvozena v několika pracích, např. [12, 18, 19, 20, 24, 26]. V pracích [12, 18, 19] je za řídicí parametry voleno zrychlení tekutiny způsobené vnější silou, kdežto v [24, 26] je volena topologie prostoru. Toho je dosaženo pomocí porézního prostředí popsaného v [29].

V bakalářské práci autora [19] byla odvozena adjungovaná metoda k LBM přístupem „first optimize, then discretize“. Řídicím parametrem bylo zrychlení způsobené vnějším silovým polem. Tento přístup byl ověřen na několika úlohách. Byl ovšem objeven nedostatek tohoto přístupu - v LBM se často okrajové podmínky zavádějí až po diskretizaci a jejich správnost v rekonstrukci makroskopických okrajových podmínek je poté zpětně ověřena, viz např. [22]. Při odvozování adjungované úlohy přístupem „first optimize, then discretize“ okrajové podmínky tedy vůbec neuvažujeme, díky čemuž je odvozená okrajová podmínka pro adjungovaný operátor Dirichletova a identicky rovna nule, viz [19].

Problém okrajových podmínek v adjungované metodě k LBM vhodně řeší přístup „first discretize, then optimize“, prozkoumaný a srovnaný s předchozím přístupem na 2D úlohách ve výzkumném úkolu autora, viz [20]. Tento přístup nejen že umožňuje zakomponovat do odvození a výpočtu adjungované úlohy okrajové podmínky, ale dokonce můžeme volit okrajové podmínky jako řídicí parametry. Další výhodou tohoto přístupu v optimalizaci pomocí LBM je

obecnost odvození pro různé kolizní operátory, více v podkapitole 3.2. Optimalizace proudění pomocí okrajových podmínek se v literatuře příliš nevyskytuje.

Na současný stav problematiky tedy navazujeme touto prací, ve které rozšíříme odvození na 3D proudění a podrobněji jej rozepíšeme tak, aby dávalo smysl pro iterativní řešení a paralelní programování. Zároveň poslouží jako rámec pro budoucí práce na vyvíjeném kódu adjungované metody, např. s jinými kolizními operátory v LBM, či s jinými řídicími parametry. Paralelní implementace pro výpočet na grafických kartách je podrobněji popsána v kapitole 4 a získané numerické výsledky jsou uvedeny v kapitole 5.

Adjungovaná metoda k LBM se v některých pracích nazývá zkráceně *ALBM*, viz [18]. Toto názvosloví tedy převezmeme i v této práci.

3.2 Odvození ALBM

Nejdříve upravíme minimalizační úlohu z kapitoly 2.2 na diskrétní minimalizační úlohu s vazbou zadanou pomocí LBM. K tomu využijeme diskretizace Boltzmannovy transportní rovnice z kapitoly 1.3. Odvození bude v této kapitole provedeno obecně pro 3D proudění, protože zjednodušení na 2D proudění je triviální. Navíc budeme pracovat s popisem LBM pomocí bezrozměrných jednotek, který čtenář najde v kapitole 1.3.4. Jednotlivé mřížkové parametry, na rozdíl od kapitoly 1.3.4, nebudou pro zjednodušení značeny horním indexem *. U všech veličin tedy předpokládáme, že jsou v mřížkových jednotkách.

Označme pro lepší přehlednost $T = N_t - 1$, $X = N_x$, $Y = N_y$, $Z = N_z$ a

$$\mathbf{f} = \begin{pmatrix} f_1(\mathbf{x}_1, 0) \\ f_2(\mathbf{x}_1, 0) \\ \vdots \\ f_q(\mathbf{x}_1, 0) \\ f_1(\mathbf{x}_2, 0) \\ \vdots \\ f_q(\mathbf{x}_{XYZ}, 0) \\ f_1(\mathbf{x}_1, 1) \\ \vdots \\ f_q(\mathbf{x}_{XYZ}, T) \end{pmatrix}, \mathbf{u}_{in} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_{in}(\mathbf{x}_1, 0) \\ \mathbf{u}_{in}(\mathbf{x}_2, 0) \\ \vdots \\ \mathbf{u}_{in}(\mathbf{x}_{XY}, 0) \\ \mathbf{u}_{in}(\mathbf{x}_1, 1) \\ \vdots \\ \mathbf{u}_{in}(\mathbf{x}_{XY}, T) \end{pmatrix}, \mathbf{N}(\mathbf{f}, \mathbf{u}_{in}) = \begin{pmatrix} N_1(\mathbf{x}_1, 0) \\ N_2(\mathbf{x}_1, 0) \\ \vdots \\ N_q(\mathbf{x}_1, 0) \\ N_1(\mathbf{x}_2, 0) \\ \vdots \\ N_q(\mathbf{x}_{XYZ}, 0) \\ N_1(\mathbf{x}_1, 1) \\ \vdots \\ N_q(\mathbf{x}_{XYZ}, T) \end{pmatrix}, \quad (3.1)$$

kde jsme změnil indexování uzlů $\mathbf{x} \in \hat{\Omega}$ tak, že každý uzel má index $i \in \{1, \dots, XYZ\}$. Upozorňujeme, že vektor distribučních funkcí \mathbf{f} nemá nyní stejný význam jako vektor \mathbf{f} z kapitoly 1.3.2 v popisu MRT-LBM. Nyní představuje vektor všech distribučních funkcí ve všech uzlech a časových krocích. Vektor rychlostního profilu \mathbf{u}_{in} na vstupu do domény, který je řídicím parametrem minimalizační úlohy, zadáváme pouze na jedné stěně, která v tomto značení odpovídá víku Γ_1 z obrázku 1.1 z úlohy kavity poháněné víkem z kapitoly 1.1. Vektor vazeb $\mathbf{N}(\mathbf{f}, \mathbf{u}_{in})$ tvoří mřížková Boltzmannova rovnice (1.18) a okrajové podmínky. Pro uzel \mathbf{x} nacházející se v

tekutině má tedy tvar

$$N_k(\mathbf{x}, t + 1) = f_k(\mathbf{x}, t + 1) - (f_k(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}_k, t) + C_k(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}_k, t)) = 0. \quad (3.2)$$

V odvození adjungované metody se vyplatí zápis

$$N_k(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_k, t + 1) = f_k(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_k, t + 1) - (f_k(\mathbf{x}, t) + C_k(\mathbf{x}, t)) = 0. \quad (3.3)$$

Diskretizovaná minimalizační úloha s vazbou potom nabývá tvaru

$$\min_{N(\mathbf{f}, \mathbf{u}_{in})=0} J(\mathbf{f}, \mathbf{u}_{in}), \quad (3.4)$$

kde jsme označili novou minimalizační funkci

$$J(\mathbf{f}, \mathbf{u}_{in}) = \sum_{\mathbf{x}} \sum_{t_k} \frac{1}{2} |\mathbf{w}(\mathbf{u}_{in}; \mathbf{x}, t_k) - \mathbf{w}^m(\mathbf{x}, t_k)|^2, \quad (3.5)$$

kde uzly \mathbf{x} jsou uzly tekutiny, ve kterých máme naměřena data \mathbf{w}^m a t_k jsou časy, ve kterých došlo k měření, viz kapitola 2.2.

S nově zadanou minimalizační úlohou s vazbou podle rovnice (3.4) a (3.5) můžeme přejít k odvození adjungované úlohy tak, jak byla popsána v kapitole 2.1. K tomu potřebujeme vyřešit úlohu zadanou rovnicí (2.12), aby pro Lagrangeovu funkci (2.10) platila rovnice (2.13).

Složky vektoru adjungovaných operátorů $\boldsymbol{\lambda}$, který má stejnou dimenzi jako vektor distribučních funkcí \mathbf{f} , si označíme jako

$$\boldsymbol{\lambda} = \begin{pmatrix} \lambda_1(\mathbf{x}_1, 0) \\ \lambda_2(\mathbf{x}_1, 0) \\ \vdots \\ \lambda_q(\mathbf{x}_1, 0) \\ \lambda_1(\mathbf{x}_2, 0) \\ \vdots \\ \lambda_q(\mathbf{x}_{XYZ}, 0) \\ \lambda_1(\mathbf{x}_1, 1) \\ \vdots \\ \lambda_q(\mathbf{x}_{XYZ}, T) \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

První poznatek z rovnice (2.12) a rovnice (3.5) je, že člen

$$\frac{\partial J}{\partial \mathbf{f}} = \left(\frac{\partial J}{\partial f_1(\mathbf{x}_1, 0)} \quad \cdots \quad \frac{\partial J}{\partial f_q(\mathbf{x}_1, 0)} \quad \frac{\partial J}{\partial f_1(\mathbf{x}_2, 0)} \quad \cdots \quad \frac{\partial J}{\partial f_q(\mathbf{x}_{XYZ}, 0)} \quad \frac{\partial J}{\partial f_1(\mathbf{x}_0, 1)} \quad \cdots \quad \frac{\partial J}{\partial f_q(\mathbf{x}_{XYZ}, T)} \right) \quad (3.7)$$

má nenulové složky pouze v uzlech \mathbf{x} a časech t , ve kterých jsou data naměřena. V takových bodech (\mathbf{x}, t) bude mít tvar

$$\frac{\partial J}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} = (\rho(\mathbf{x}, t) - \rho^m(\mathbf{x}, t)) \frac{\partial \rho(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} + (\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{u}^m(\mathbf{x}, t))^T \frac{\partial \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)}, \quad (3.8)$$

kde vycházíme z tvaru \mathbf{w} a \mathbf{w}^m z rovnice (2.15). Pokud navíc využijeme rovnice (1.12) a (1.13) pro výpočet makroskopických veličin ρ a \mathbf{u} z distribučních funkcí, získáme

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} = 1, \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} = \frac{\boldsymbol{\xi}_k - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)}{\rho(\mathbf{x}, t)}. \quad (3.10)$$

Matici $\frac{\partial N}{\partial f}$ z rovnice (2.12) můžeme rozepsat po prvcích

$$\frac{\partial N_j(\mathbf{x}_l, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}_m, t)}, \quad (3.11)$$

kde $\mathbf{x}_l, \mathbf{x}_m \in \hat{\Omega}$ jsou uzly a $t \in \{0, \dots, T\}$ jsou všechny časy. Jediné nenulové prvky jsou

$$\frac{\partial N_k(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} = 1, \quad (3.12)$$

a po přepsání podle rovnice (3.3) také

$$\frac{\partial N_j(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_j, t + 1)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} = - \left(\frac{\partial f_j(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} + \frac{\partial C_j(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} \right), \quad (3.13)$$

kde triviálně

$$\frac{\partial f_j(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} = \delta_{jk}, \quad (3.14)$$

kde $\delta_{jk} = 1$ pro $j = k$ a $\delta_{jk} = 0$ pro $j \neq k$. Poslední člen $\frac{\partial C_j(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)}$ z rovnice (3.13) závisí na zvolené diskrétní aproximaci kolizního operátoru, viz kapitola 1.3.2.

Pro aproximaci kolizního operátoru v SRT-LBM získáváme

$$\frac{\partial C_j^{\text{SRT}}(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} = -\frac{1}{\tau} \left(\delta_{jk} - \frac{\partial f_j^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} \right), \quad (3.15)$$

kde rozepíšeme

$$\frac{\partial f_j^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} = \frac{\partial f_j^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)}{\partial \rho(\mathbf{x}, t)} + \frac{\partial f_j^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)} \frac{\partial \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)}, \quad (3.16)$$

kde

$$\frac{\partial f_j^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)}{\partial \rho(\mathbf{x}, t)} = w_j \left(1 + \frac{\boldsymbol{\xi}_j \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)}{c_{zv}^2} + \frac{(\boldsymbol{\xi}_j \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t))^2}{2c_{zv}^4} - \frac{\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)}{2c_{zv}^2} \right), \quad (3.17)$$

$$\left(\frac{\partial f_j^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)} \right)^T = w_j \rho(\mathbf{x}, t) \left(\frac{\boldsymbol{\xi}_j}{c_{zv}^2} + \frac{(\boldsymbol{\xi}_j \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t))}{c_{zv}^4} \boldsymbol{\xi}_j - \frac{\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)}{c_{zv}^2} \right). \quad (3.18)$$

V MRT-LBM situace není příliš komplikovanější. Získáváme rovnici

$$\frac{\partial C_j^{\text{MRT}}(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} = -\mathbf{M}^{-1} \mathbf{S} \left(\frac{\partial \mathbf{m}(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} - \frac{\partial \mathbf{m}^{eq}(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} \right), \quad (3.19)$$

kde $\frac{\partial \mathbf{m}(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)}$ odpovídá k -tému sloupci matice \mathbf{M} a člen $\frac{\partial \mathbf{m}^{eq}(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)}$ můžeme vypočítat po složkách z rovnice (1.28) jako

$$\frac{\partial m_j^{eq}(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} = \sum_{l,m,n} a_{j,lmn} u_x^l(\mathbf{x}, t) u_y^m(\mathbf{x}, t) u_z^n(\mathbf{x}, t) + \frac{\partial m_j^{eq}(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)} \frac{\partial \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)}, \quad (3.20)$$

kde

$$\left(\frac{\partial m_j^{eq}(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)} \right)^T = \rho \sum_{l,m,n} a_{j,lmn} \begin{pmatrix} l u_x^{l-1}(\mathbf{x}, t) u_y^m(\mathbf{x}, t) u_z^n(\mathbf{x}, t) \\ m u_x^l(\mathbf{x}, t) u_y^{m-1}(\mathbf{x}, t) u_z^n(\mathbf{x}, t) \\ n u_x^l(\mathbf{x}, t) u_y^m(\mathbf{x}, t) u_z^{n-1}(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix}. \quad (3.21)$$

Pro D2Q9 model lze z rovnic (1.29) odvodit

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial m_1^{eq}}{\partial \mathbf{u}} \right)^T &= \mathbf{0}, & \left(\frac{\partial m_2^{eq}}{\partial \mathbf{u}} \right)^T &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, & \left(\frac{\partial m_3^{eq}}{\partial \mathbf{u}} \right)^T &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \\ \left(\frac{\partial m_4^{eq}}{\partial \mathbf{u}} \right)^T &= \begin{pmatrix} 2\rho u_x \\ 0 \end{pmatrix}, & \left(\frac{\partial m_5^{eq}}{\partial \mathbf{u}} \right)^T &= \begin{pmatrix} 0 \\ 2\rho u_y \end{pmatrix}, & \left(\frac{\partial m_6^{eq}}{\partial \mathbf{u}} \right)^T &= \begin{pmatrix} \rho u_y \\ \rho u_x \end{pmatrix}, \\ \left(\frac{\partial m_7^{eq}}{\partial \mathbf{u}} \right)^T &= \begin{pmatrix} \rho u_y^2 \\ 2\rho u_x u_y \end{pmatrix}, & \left(\frac{\partial m_8^{eq}}{\partial \mathbf{u}} \right)^T &= \begin{pmatrix} 2\rho u_x u_y \\ \rho u_x^2 \end{pmatrix}, & \left(\frac{\partial m_9^{eq}}{\partial \mathbf{u}} \right)^T &= \begin{pmatrix} 2\rho u_x u_y^2 \\ 2\rho u_x^2 u_y \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Všechny potřebné členy z rovnice (2.12) jsou tedy určeny předcházejícími rovnicemi. Úlohu (2.12) nyní lze řešit jako soustavu lineárních rovnic. Jak ovšem bude ukázáno v kapitole 3.2.1, úlohu pro sdruženou proměnnou λ lze upravit na podobný tvar jako má rovnice (1.18) a poté paralelizovat podobně jako LBM, viz kapitola 3.2.4 a 4.1.

3.2.1 Výpočet sdružené proměnné

Rovnici (2.12) přepíšeme pro každou složku vektoru (pro každý směr k , uzel \mathbf{z} a čas s) jako

$$\frac{\partial J}{\partial f_k(\mathbf{z}, s)} - \sum_{j=1}^q \sum_{n=1}^{XYZ} \sum_{t=0}^T \lambda_j(\mathbf{x}, t) \frac{\partial N_j(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{z}, s)} = 0. \quad (3.23)$$

V sumě z rovnice (3.23) se vyskytuje hodně nulových členů, jak bylo ukázáno v kapitole 3.2. Sumu můžeme tedy s využitím rovnic z kapitoly 3.2 upravit na

$$\frac{\partial J}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} - \sum_{j=1}^q \left(\lambda_j(\mathbf{x}, t) \frac{\partial N_j(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} + \lambda_j(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_j, t + 1) \frac{\partial N_j(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_j, t + 1)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} \right) = 0. \quad (3.24)$$

Dále lze sumu zjednodušit pomocí rovnice (3.12) na

$$\frac{\partial J}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} - \lambda_k(\mathbf{x}, t) - \sum_{j=1}^q \lambda_j(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_j, t + 1) \frac{\partial N_j(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_j, t + 1)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} = 0 \quad (3.25)$$

a spolu s rovnicí (3.13) při přerovnání členů sumy získáváme

$$\lambda_k(\mathbf{x}, t) = \lambda_k(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_k, t + 1) + \sum_{j=1}^q \lambda_j(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_j, t + 1) \frac{\partial C_j(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} + \frac{\partial J}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)}. \quad (3.26)$$

Získáváme tedy předpis pro sdruženou proměnnou λ explicitní v čase. Srovnáním rovnice (3.26) s mřížkovou Boltzmannovou rovnicí (1.18) lze pozorovat několik podobností. Sdruženou proměnnou λ_k lze považovat za „distribuční funkci“ v adjungované úloze. Suma z rovnice (3.26) potom působí jako kolizní člen a poslední člen rovnice $\frac{\partial J}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)}$ lze srovnat s působením vnější síly v původní mřížkové Boltzmannově rovnici, viz [22]. Stejně jako původní mřížková Boltzmannova rovnice (1.18) lze tedy rovnici pro sdruženou proměnnou (3.26) dobře paralelizovat.

Hlavním rozdílem je, že časová iterace pro sdruženou proměnnou bude probíhat v opačném směru (tzv. *zpětný chod*). Místo počáteční podmínky zadáváme pro $\lambda_k(\mathbf{x}, T)$ koncovou podmínku ve tvaru

$$\lambda_k(\mathbf{x}, T) = \frac{\partial J}{\partial f_k(\mathbf{x}, T)}. \quad (3.27)$$

Další rozdíly mezi mřížkovou Boltzmannovou rovnicí (1.18) a rovnicí (3.26) budou diskutovány v kapitole 3.2.4.

Z rovnice (3.27) a (3.8) lze vidět, že měření dat by mělo proběhnout i v čase T . V opačném případě by byly $\lambda_k(\mathbf{x}, T)$ nastaveny na nulu a zjevně by zůstaly nulové až do času t_k , ve kterém byly data naposledy měřeny. Iterace do času t_k by tedy bylo zbytečné provádět.

3.2.2 Počáteční a okrajové podmínky LBM v ALBM

Počáteční podmínku pro LBM z kapitoly 1.3.3 zapíšeme jako

$$N_k(\mathbf{x}, 0) = f_k(\mathbf{x}, 0) - f_k^{eq}(\rho_0, \mathbf{u}_0) = 0. \quad (3.28)$$

Z této rovnice jednoduše získáváme další nenulové prvky matice $\frac{\partial N}{\partial f}$ z rovnice (2.12)

$$\frac{\partial N_k(\mathbf{x}, 0)}{\partial f_k(\mathbf{x}, 0)} = 1. \quad (3.29)$$

Použité okrajové podmínky pro LBM jsou také popsány v kapitole 1.3.3. Podobně jako počáteční podmínku přepíšeme i okrajové podmínky jako vazby N z kapitoly 3.2.

Fullway bounce back okrajovou podmínku definovanou rovnicí (1.31) přepíšeme jako

$$N_k(\mathbf{x}, t) = f_k(\mathbf{x}, t) - \hat{f}_k(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (3.30)$$

a získáváme pro uzly rigidní pevné látky \mathbf{x} další nenulové prvky matice $\frac{\partial N}{\partial f}$

$$\frac{\partial N_k(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} = 1, \quad (3.31)$$

$$\frac{\partial N_{\bar{k}}(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} = 1. \quad (3.32)$$

Z rovnice (3.23) potom získáváme okrajové podmínky pro sdruženou proměnnou na uzlech pevné látky

$$\lambda_k(\mathbf{x}, t) = \lambda_{\bar{k}}(\mathbf{x}, t). \quad (3.33)$$

Podmínku na vstupu do domény definuje vztah (1.32). V zápisu vazeb N má následující tvar

$$N_k(\mathbf{x}, t + 1) = f_k(\mathbf{x}, t + 1) - \left(f_{\bar{k}}(\mathbf{x}, t) + C_{\bar{k}}(\mathbf{x}, t) - 2w_{\bar{k}}\rho(\mathbf{x}, t) \frac{\mathbf{u}_{in}(\mathbf{x}, t) \cdot \boldsymbol{\xi}_{\bar{k}}}{c_s^2} \right) = 0. \quad (3.34)$$

Pro uzly \mathbf{x} , kde definujeme tuto podmínku, tedy navíc získáváme další nenulové prvky matice

$$\frac{\partial N_k(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} = 1 \quad (3.35)$$

a navíc

$$\frac{\partial N_j(\mathbf{x}, t + 1)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} = - \left(\delta_{jk} + \frac{\partial C_{\bar{j}}(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} + \frac{\partial D_{\bar{j}}(\rho(\mathbf{x}, t))}{\partial \rho(\mathbf{x}, t)} \frac{\partial \rho(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} \right), \quad (3.36)$$

kde jsme označili $D_j(\rho) = -2w_j\rho \frac{\mathbf{u}_{in}(\mathbf{x}, t) \cdot \boldsymbol{\xi}_j}{c_s^2}$ a pro poslední člen tedy získáváme

$$\frac{\partial D_{\bar{j}}(\rho(\mathbf{x}, t))}{\partial \rho(\mathbf{x}, t)} = -2w_{\bar{j}} \frac{\mathbf{u}_{in}(\mathbf{x}, t) \cdot \boldsymbol{\xi}_{\bar{j}}}{c_s^2}, \quad (3.37)$$

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} = 1. \quad (3.38)$$

Pro sdruženou proměnnou pomocí rovnice (3.23) získáváme v těchto uzlech okrajovou podmínku pro neznámé sdružené proměnné ve směrech \bar{k}

$$\lambda_{\bar{k}}(\mathbf{x}, t) = \lambda_k(\mathbf{x}, t + 1) + \sum_{j=1}^q \lambda_j(\mathbf{x}, t + 1) \frac{\partial C_{\bar{j}}(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} + \sum_{i \in \mathcal{I}} \lambda_i(\mathbf{x}, t + 1) \frac{\partial D_{\bar{i}}(\rho(\mathbf{x}, t))}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)}, \quad (3.39)$$

kde \mathcal{I} je množina indexů i , pro které probíhá úprava f_i podle rovnice (1.32), a kde se člen $\frac{\partial J}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)}$ nevyskytuje, protože okrajová podmínka pro vstup se nachází v oblasti A , kde nejsou data měřena, viz kapitola 2.2. Pro ostatní sdružené proměnné λ_k v bodě \mathbf{x} a ve směrech k , kde probíhá klasická kolize pro distribuční funkce f_k , navíc získáváme nový člen v rovnici (3.26)

$$\lambda_k(\mathbf{x}, t) = \lambda_k(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_k, t + 1) + \sum_{j=1}^q \lambda_j(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_j, t + 1) \frac{\partial C_j(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} + \sum_{i \in \mathcal{I}} \lambda_i(\mathbf{x}, t + 1) \frac{\partial D_{\bar{i}}(\rho(\mathbf{x}, t))}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)}. \quad (3.40)$$

3.2.3 Výpočet gradientu

Pro výpočet gradientu v gradientním sestupu v ALBM potřebujeme ještě určit členy z rovnice (2.13). Jelikož účelová funkce J z definice (3.5) nezávisí přímo na vstupním rychlostním profilu \mathbf{u}_{in} , tak $\left(\frac{\partial J}{\partial \mathbf{u}_{in}}\right)^T = \mathbf{0}$. Zbývá tedy pouze člen $\frac{\partial N}{\partial \mathbf{u}_{in}}$. Z rovnice (3.34) získáme

$$\left(\frac{\partial N_i(\mathbf{x}, t+1)}{\partial \mathbf{u}_{in}(\mathbf{x}, t)}\right)^T = 2w_i \rho(\mathbf{x}, t) \frac{\xi_i}{c_{zw}^2}. \quad (3.41)$$

Pro výpočet finálního gradientu z rovnice (2.13) v bodě (\mathbf{x}, t) tedy získáváme předpis

$$\frac{dL}{d\mathbf{u}_{in}(\mathbf{x}, t)} = - \sum_{i \in \mathcal{I}} \lambda_i(\mathbf{x}, t+1) \frac{\partial N_i(\mathbf{x}, t+1)}{\partial \mathbf{u}_{in}(\mathbf{x}, t)}. \quad (3.42)$$

Rovnicí (3.42) získáváme poslední neznámý člen v adjungované metodě z kapitoly 2. Gradient využijeme v metodě gradientního sestupu k iterativnímu nalezení nového odhadu rychlostního profilu \mathbf{u}_{in} , viz kapitola 2.1.1.

3.2.4 Algoritmus výpočtu sdružené proměnné

Pomocí rovnic odvozených v předchozích kapitolách je nyní představen algoritmus duální úlohy pro sdruženou proměnnou.

0. *Inicializace*: Nastavení $t = T$ a koncové podmínky

$$\lambda_k(\mathbf{x}, T) = \frac{\partial J}{\partial f_k(\mathbf{x}, T)}. \quad (3.43)$$

1. *Úprava časového kroku*: $t \rightarrow t - 1$.

2. *Výpočet gradientu*: Výpočet a uložení členů $\frac{dL}{d\mathbf{u}_{in}(\mathbf{x}, t)}$ podle kapitoly 3.2.3.

3. *Řešení okrajových podmínek*: Viz kapitola 3.2.2.

4. *Šíření*: Propagace sdružené proměnné do okolních uzlů mřížky:

$$\lambda_k^{sir}(\mathbf{x}, t) = \lambda_k(\mathbf{x} + \xi_k, t+1). \quad (3.44)$$

5. *„Kolizní“ krok*: Pomocí rovnice (3.26) získáváme

$$\lambda_k(\mathbf{x}, t) = \lambda_k^{sir}(\mathbf{x}, t) + \sum_{j=1}^q \lambda_j^{sir}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial C_j(\mathbf{x}, t)}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)} + \frac{\partial J}{\partial f_k(\mathbf{x}, t)}. \quad (3.45)$$

6. *Kontrola konce*: Ukončení výpočtu, pokud $t = 0$. Jinak zopakování algoritmu od kroku 1.

Kapitola 4

Numerická implementace

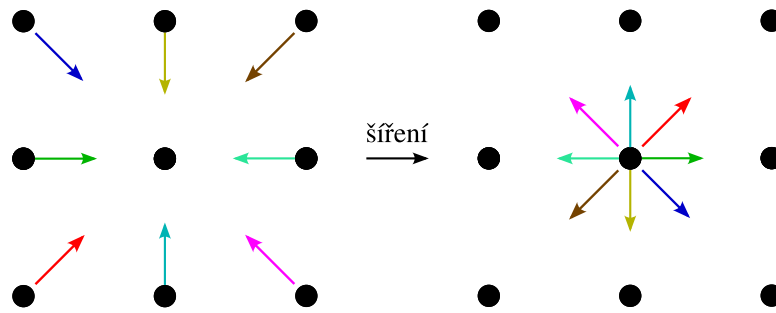
V této kapitole je popsána konkrétní numerická implementace ALBM. V podkapitole 4.1 jsou popsány výhody a nevýhody ALBM, které byly při implementaci zohledněny. Pro úlohy proudění tekutin ve 2D byla autorem práce implementována jak primární úloha (LBM), tak duální úloha, viz kapitola 4.2. Úlohy proudění tekutin ve 3D byly řešeny kódem TNL-LBM vyvíjeným na katedře matematiky na FJFI ČVUT v Praze, viz [16]. Tento kód autor rozšířil o duální úlohu adjungované metody, viz kapitola 4.3. Ověření obou implementací a výpočetní studie pro různé typy proudění v úloze proudění v kavitě poháněné víkem jsou provedeny v kapitole 5.

4.1 Výhody a nevýhody ALBM

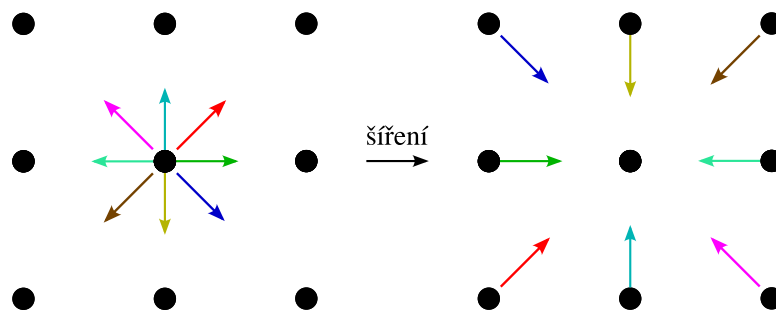
Srovnáním algoritmu LBM z kapitoly 1.3.1 a algoritmu ALBM z kapitoly 3.2.4 lze pozorovat velkou podobnost. Tento fakt umožňuje z velké části využít implementaci primární úlohy LBM. Rozdíl je především v implementaci kroku šíření a kolize v duální úloze.

Na obrázcích 4.1 a 4.2 lze nahlédnout na rozdíl v kroku šíření primární a duální úlohy v ALBM. Sdružené proměnné v duální úloze se šíří v opačných směrech. Krok kolize probíhá v obou algoritmech lokálně na každém uzlu. Tento krok lze tedy paralelizovat pro každý uzel. Ze stejného důvodu lze i krok výpočtu makroskopických veličin v algoritmu LBM paralelizovat. Pokud navíc zavedeme v implementaci druhé pole sdružených proměnných pro ukládání jejich hodnot po kroku kolize, pak lze podobně jako v LBM paralelizovat i krok šíření pro každý uzel. Celý jeden časový krok algoritmů lze tedy v každém uzlu provést paralelně.

Hlavní nevýhodou adjungované metody je potřeba ukládání distribučních funkcí f_k z primární úlohy v každém uzlu mřížky a v každém časovém kroku. K uložení těchto výsledků je při použití dvojité přesnosti potřeba $qN_xN_yN_t \cdot \text{sizeof}(\text{double})$ [B] paměti pro 2D proudění a $qN_xN_yN_zN_t \cdot \text{sizeof}(\text{double})$ [B] paměti pro 3D proudění. Jak lze ale vidět v kapitole 3.2, hodnota distribučních funkcí se ve výpočtu duální úlohy přímo nevyskytuje. K výpočtu sdružené proměnné potřebujeme pouze makroskopické veličiny ρ , \mathbf{u} , což snižuje nároky na paměť pro úlohu 2D proudění na $3N_xN_yN_t \cdot \text{sizeof}(\text{double})$ [B] a 3D proudění na $4N_xN_yN_zN_t \cdot \text{sizeof}(\text{double})$ [B]. Tyto nároky jsou ovšem zvláště pro 3D úlohy velké, proto bude v kapitole 4.3.1 upraven výpočet sdružené proměnné pro ustálené proudění, čímž se nároky na paměť ještě významně sníží.



Obrázek 4.1: Schéma šíření distribučních funkcí f_k v algoritmu LBM.



Obrázek 4.2: Schéma šíření sdružených proměnných λ_k v algoritmu ALBM.

4.2 Optimalizace proudění ve 2D

Pro úlohy proudění tekutin ve 2D bylo využito kódu, jehož implementace je popsána ve výzkumném úkolu [20]. Implementaci přístupu „first optimize, then discretize“ nalezneme v práci [19]. Obě implementace byly provedeny v jazyce C++ za použití pouze standardních knihoven. Proudění tekutin ve 2D je řešeno rychlostním modelem D2Q9 a za použití SRT-LBM aproximace kolizního operátoru z kapitoly 1.3.2.

V implementaci přístupu „first discretize, then optimize“ v práci [20] nebylo využito možnosti paralelizace v primární a duální úloze, popsané v kapitole 4.1. Výpočty v obou úlohách tedy probíhají na CPU, což významně zvyšuje výpočetní čas obou úloh. Návrhem na další směřování v práci [20] je právě paralelizace výpočtů a přechod na úlohy proudění ve 3D. Toto rozšíření je popsáno v kapitole 4.3.

Pro proudění ve 2D používáme mřížkové jednotky popsané v kapitole 1.3.4. Důvodem k tomu je snadnější implementace, jelikož duální úloha pracuje stejně jako primární úloha s bezrozměrnými jednotkami a převod na reálné jednotky tedy v tomto ohledu není důležitý. V kapitole výsledků pro 2D proudění 5.2 tedy budou nastavované parametry uváděny v bezrozměrných jednotkách.

Pro proudění tekutin ve 2D provedeme v kapitole 5.2 výpočetní studii s různým nastavením parametrů tekutiny a minimalizační úlohy, jako je viskozita, zašumění naměřených dat, atd.

4.3 Optimalizace proudění ve 3D

Jak již bylo zmíněno v úvodu kapitoly 4, tato práce rozšiřuje kód TNL-LBM, viz [1, 5, 6, 7, 8, 16], o adjungovanou úlohu k LBM. Kód je napsán v jazyce C++ s použitím architektury CUDA a knihovny TNL, viz [15, 25]. Díky podobnosti algoritmů LBM a ALBM, viz kapitola 4.1, využijeme stávající LBM kernel a jeho funkce definované v TNL-LBM i pro duální úlohu adjungované metody.

Do kódu byl implementován nový kolizní operátor pro sdruženou proměnnou v ALBM z kapitoly 3.2.1 pro SRT-LBM, nacházející se v hlavičkovém souboru `col_srt_adjoint.h` a v doprovodných hlavičkových souborech `common_adjoint.h` a `eq_adjoint.h`. Okrajové podmínky nacházející se v hlavičkovém souboru `bc.h` byly rozšířeny o okrajovou podmínku popsanou v kapitole 1.3.3 pro primární úlohu a okrajové podmínky z kapitoly 3.2.2 pro duální úlohu. V tomto souboru je také přidána klasifikace uzlů kategorií `GEO_ADJOINT_FLUID`, ve které dochází k opačnému šíření sdružené proměnné, viz kapitola 4.1, a `GEO_ADJOINT_FLUID_m`, ve které navíc dochází k měření dat a členy $\frac{\partial J}{\partial f_k(x,t)}$ z rovnice (3.26) tedy nejsou nulové. Dále byla pozměněna inicializace pole sdružených proměnných v duální úloze podle koncové podmínky (3.27). Do hlavičkového souboru `streaming_AB.h` byl přidán krok šíření sdružené proměnné. Do hlavičkového souboru `macro.h` byla přidána struktura `D3Q27_MACRO_Adjoint` a do souboru `defs.h` struktura `D3Q27_KernelStruct_Adjoint`. Tyto struktury obsahují pro každý uzel načtené hodnoty ρ , \mathbf{u} z primární úlohy a také naměřené ρ^m , \mathbf{u}^m .

Do souboru `lbm_data.h` byla navíc přidána struktura `NSE_Data_Adjoint` pro adjungovanou úlohu a struktura `NSE_Data_InflowProfile` obsahující rychlostní profil na okrajové podmínce z kapitoly 1.3.3.

Vzhledem k velkým nárokům ALBM na paměť (viz kapitola 4.1) byly do hlavičkového souboru `state.h` přidány funkce na ukládání a načítání makroskopických veličin do binárních souborů.

Úlohy z kapitoly 5.3 jsou pak implementovány v souboru `sim_adjoint.cu`. Rozšíření kódu TNL-LBM o ALBM je k nahlédnutí v [21].

4.3.1 Poznámka k ustálenému proudění

V kapitole 4.1 byly diskutovány nároky ALBM na paměť. V případě ustáleného proudění, kdy vývoj makroskopických veličin ρ a \mathbf{u} nezávisí na čase, proto bude využita následující úprava ALBM. Ustáleného proudění v kapitole 5.3 dosahujeme vhodným nastavením vstupního rychlostního profilu $\mathbf{u}_{in}(\mathbf{x})$ nezávislého na čase. Tento fakt mění výpočet gradientu z kapitoly 3.2.3, kde je finální gradient v uzlu \mathbf{x} na vstupu do domény roven součtu gradientů v tomto uzlu přes všechny časové iterace.

Zvolíme finální čas dostatečně velký tak, aby se proudění řešené pomocí LBM v primární úloze stihlo ustálit z obecně zadané počáteční podmínky. Poté uložíme pouze ustálené makroskopické veličiny v každém uzlu. Tím se nároky na paměť sníží pro úlohu 3D proudění na $4N_x N_y N_z \cdot \text{sizeof}(\text{double})$ [B]. V duální úloze potom načítáme makroskopické veličiny pouze jednou na rozdíl od každé časové iterace, což odpovídá odvození ALBM pro úlohu, ve které zadáváme počáteční podmínky v primární úloze v rovnici (1.30) pomocí vypočítaných ustálených makroskopických veličin ρ a \mathbf{u} . V takovém proudění se makroskopické veličiny nemění a tedy

nezáleží na počtu časových kroků. Duální úloha tedy navíc může mít pro ustálené proudění menší počet časových iterací oproti původní primární úloze. Počet časových kroků v duální úloze musí být dostatečně velký, aby došlo k šíření nenulových sdružených proměnných λ_k až k okrajové podmínce, viz algoritmus 3.2.4.

Tohoto zjednodušení využijeme pouze u úloh 3D proudění tekutin, kde jsou nároky na paměť obecně vyšší než u 2D proudění.

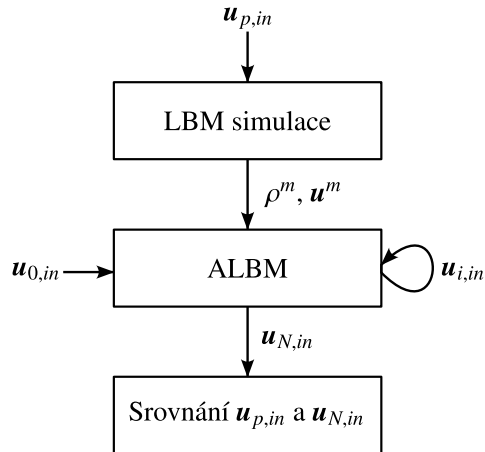
Kapitola 5

Numerické výsledky

V této kapitole budou představeny výsledky optimalizace okrajové podmínky pomocí ALBM, která je popsána a odvozena v kapitole 3.

V této práci jsme neměli k dispozici naměřená data. Tento problém obejdeme pomocí následujícího testovací schématu, ve kterém využijeme LBM k předpočítání makroskopických veličin ρ^m , \mathbf{u}^m s nějakým rychlostním profilem na vstupu $\mathbf{u}_{p,in}$. Poté zvolíme počáteční odhad $\mathbf{u}_{0,in} \neq \mathbf{u}_{p,in}$ a pomocí ALBM se budeme snažit zrekonstruovat původní $\mathbf{u}_{p,in}$ pouze z dat ρ^m , \mathbf{u}^m . Počáteční odhad $\mathbf{u}_{0,in}$ bude v následujících úlohách vždy identicky roven nule. Testovací schéma v tomto tvaru umožňuje otestovat ALBM na proudění i se složitějšími profily $\mathbf{u}_{p,in}$, ke kterým naměřená data nemusí nutně existovat. Náčrt algoritmu testovacího schématu je k nahlédnutí na obrázku 5.1 a probíhá následovně.

1. Zvolení parametrů tekutiny a tvaru rychlostního profilu $\mathbf{u}_{p,in}$ na vstupu do domény.
2. Spuštění simulace LBM se zvolenými parametry a vstupním profilem $\mathbf{u}_{p,in}$.
3. Uložení makroskopických momentů ρ a \mathbf{u} ve zvolených mřížkových bodech a časech jako ρ^m , \mathbf{u}^m .
4. Zapomenutí vstupního rychlostního profilu $\mathbf{u}_{p,in}$. Zvolení počátečního odhadu $\mathbf{u}_{0,in}$.
5. Spuštění adjungované metody k mřížkové Boltzmannově metodě, viz kapitola 2.1.1.
6. Zastavení adjungované metody po nalezení dostatečně přesného řešení.
7. Porovnání původního rychlostního profilu $\mathbf{u}_{p,in}$ s odhadem vstupního profilu $\mathbf{u}_{N,in}$ z adjungované metody po N krocích. Porovnání makroskopických momentů ρ a \mathbf{u} uvnitř domény s „naměřenými“ daty ρ^m a \mathbf{u}^m .



Obrázek 5.1: Algoritmus testovacího schématu.

5.1 Formulace úlohy optimalizace proudění v kavitě

Testovací schéma použijeme pro optimalizaci proudění v kavitě poháněné víkem z obrázku 1.1. Rychlostní profil na víku kavity bude v této úloze pro snadnější vizualizaci konstantní v čase.

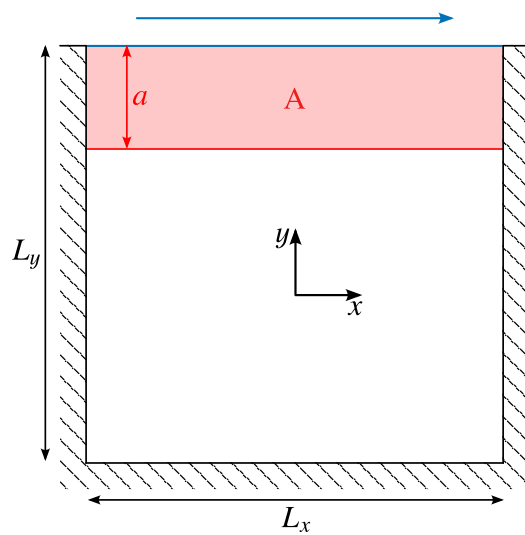
Doménu v úloze kavity nastavujeme na $\Omega = (0, L_x) \times (0, L_y)$ pro úlohu 2D proudění a pro úlohu 3D proudění $\Omega = (0, L_x) \times (0, L_y) \times (0, L_z)$ s časovým intervalem $[0, T]$. Schéma domény úlohy proudění v kavitě poháněné víkem je pro 2D proudění k nahlédnutí na obrázku 5.2 a pro 3D proudění na obrázku 5.3. Zadání minimalizační úlohy má potom stejnou formulaci jako v kapitole 2.2 a účelová funkce má tedy tvar pro makroskopické veličiny podle rovnice (2.14) a v diskretizované formě podle rovnice (3.5). Nastavení parametrů LBM, ze kterých poté vychází i nastavení parametrů v ALBM, je popsáno v kapitole 1.3.4.

Rychlostní profil na víku kavity $\mathbf{u}_{p,in}(\mathbf{x}, t)$ navíc z obecného odvození v kapitole 3.2 zůžeme na konstantní profil v čase

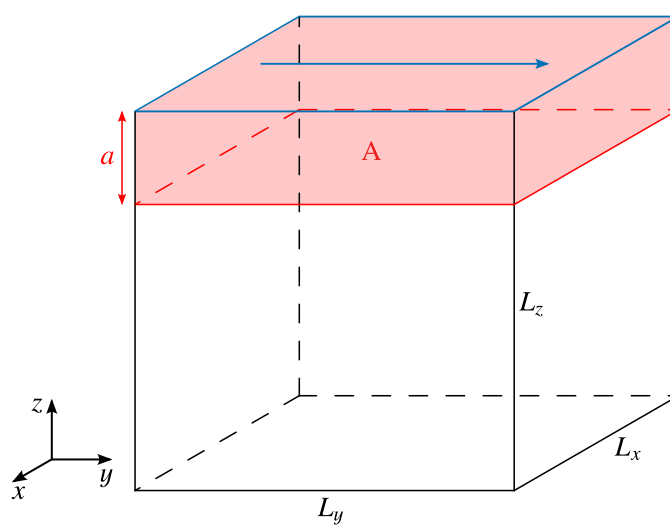
$$\mathbf{u}_{p,in}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} u_{p,in}^x(\mathbf{x}) \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{u}_{p,in}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} u_{p,in}^x(\mathbf{x}) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.1)$$

pro úlohu ve 2D a 3D. Toto zúžení umožní snadnější analýzu výsledků, a jak je diskutováno v kapitole 4.3.1, tak i sníží nároky na paměť pro ustálené proudění.

Vizualizace proudění v úloze kavity poháněné víkem jsou v této práci inspirované prací [31], kde autoři ověřují metodu konečných prvků pro různé hodnoty Reynoldsova čísla.



Obrázek 5.2: Schéma kavity poháněné víkem pro 2D úlohu.



Obrázek 5.3: Schéma kavity poháněné víkem pro 3D úlohu.

Parametr	Hodnota
N_x	100
N_y	100
N_t	2000
τ	3.5
a	20
$\mathbf{u}_{0,in}$	$\mathbf{0}$

Tabulka 5.1: Nastavení parametrů úlohy 2D proudění v kavitě poháněné víkem.

5.2 Výsledky optimalizace ve 2D

Pro úlohu 2D proudění, jejíž implementace je popsána v kapitole 4.2, byl volen rychlostní profil na víku $u_{p,in}^x$ následujícím způsobem

$$u_{p,in}^x(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0.1 \sin^2\left(\frac{\pi x}{0.3L_x}\right) & \text{pro } x \in [0, 0.15L_x], \\ 0.1 & \text{pro } x \in [0.15L_x, 0.85L_x], \\ 0.1 \sin^2\left(\frac{\pi(x-L_x)}{0.3L_x}\right) & \text{pro } x \in [0.85L_x, L_x], \end{cases} \quad (5.2)$$

kde x je x -ová souřadnice vektoru \mathbf{x} . Tento profil je inspirovaný prací [5].

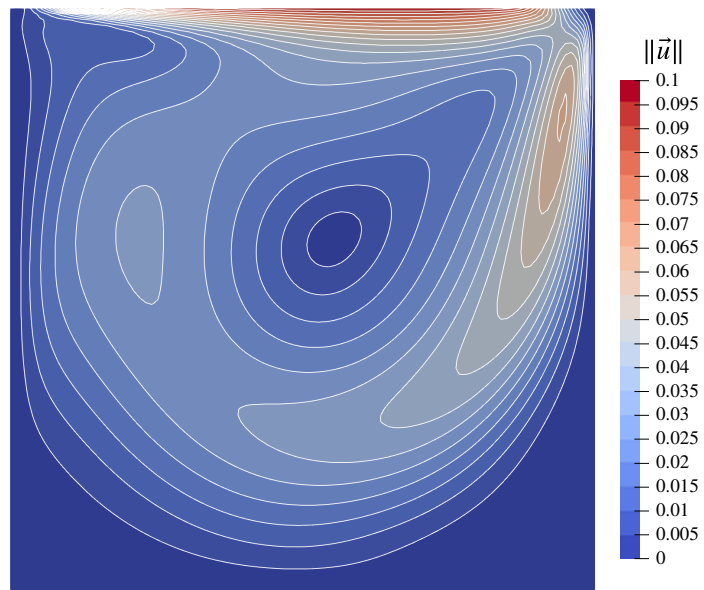
Výsledky následujících optimalizací mají stejné nastavení většiny parametrů podle tabulky 5.1. Jediné změněné parametry jsou vždy uvedené u jednotlivých obrázků. Optimalizaci pomocí ALBM ve všech následujících výpočtech zastavujeme, pokud je gradient z rovnice (2.13) menší než 0.01.

Na obrázku 5.4 lze nahlédnout na typický vír vytvořený pohybujícím se víkem v kavitě pro $Re = 1000$, který jsme rekonstruovali pomocí LBM. Na obrázku 5.5 lze nahlédnout na stejné proudění, ale se zakrytím domény podle obrázku 5.2 a přidaným šumem, který byl uměle vytvořen vynásobením každé složky vektoru w z kapitoly 2.2 náhodnou veličinou s normálním rozdělením.

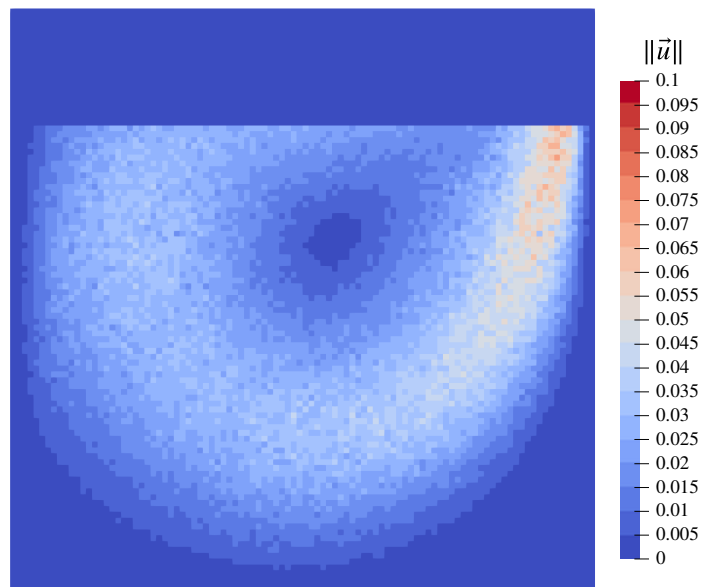
Výsledky optimalizace proudění s parametry z tabulky 5.1 pro různé hodnoty zakrytí „naměřených“ dat, které kontroluje parametr a z obrázku 5.2, jsou k nahlédnutí na obrázku 5.6. Menší hodnoty parametru a resultují v lepší odhad původního profilu pomocí ALBM.

Na obrázku 5.7 jsou výsledky optimalizace s nastavením z tabulky 5.1 pro různé hodnoty Reynoldsova čísla, které ovládáme nastavením relaxačního času τ podle rovnice (1.34) z kapitoly 1.3.4. Pro vysoké hodnoty Reynoldsova čísla se relaxační čas τ blíží hodnotě $\frac{1}{2}$. Pro tyto hodnoty nemusí být SRT-LBM stabilní, viz kapitola 1.3.4. Pro $Re = 2000$ jsme nebyli jsme schopni pomocí ALBM získat stabilní výsledky odhadu rychlostního profilu na víku. Pro stabilní řešení bychom museli zvýšit rozlišení mřížky a tím i počet časových kroků podle rovnice (1.36), což by významně zvýšilo nároky na paměť, viz kapitola 4.1. Tento fakt je důležitý i ve výsledcích 3D úloh v kapitole 5.3.

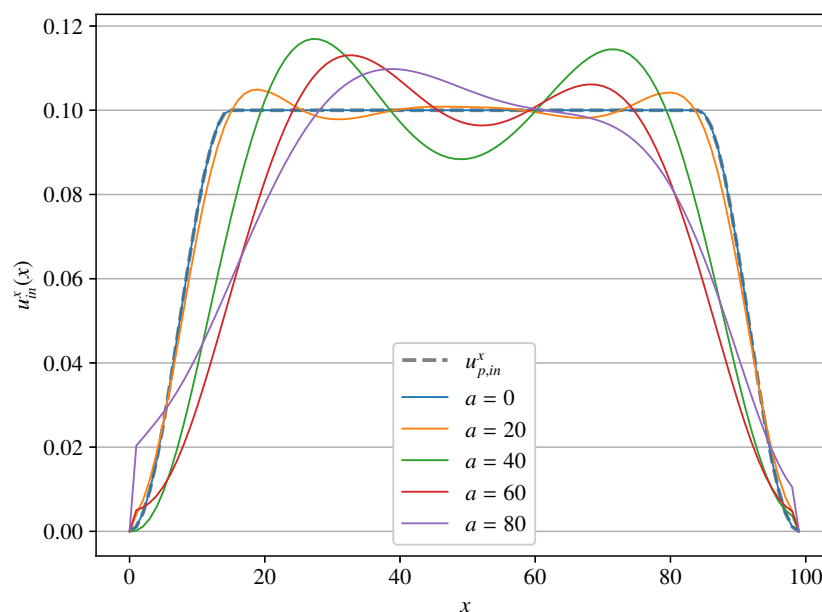
Obrázek 5.8 ukazuje srovnání výsledků optimalizace pro různá zašumění dat ρ^m , \mathbf{u}^m s nastavením parametrů proudění z tabulky 5.1.



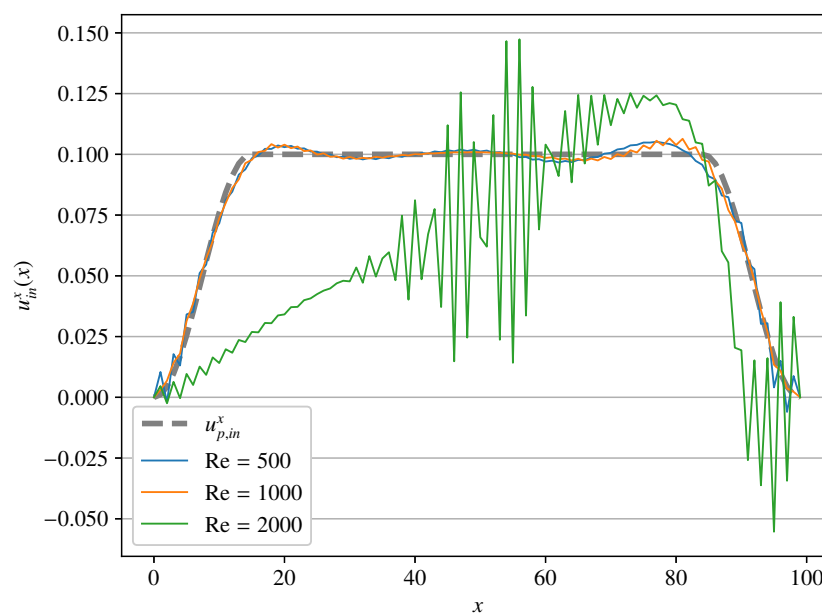
Obrázek 5.4: Izolinie velikosti makroskopické rychlosti získané pomocí LBM pro ustálené proudění v kavitě pro $Re = 1000$.



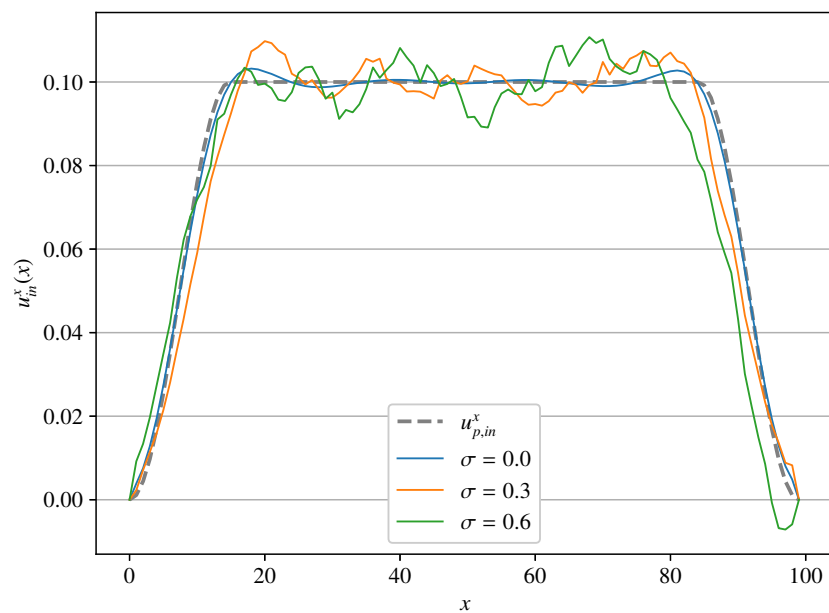
Obrázek 5.5: Velikost „naměřené“ makroskopické rychlosti s šumem v kavitě pro Reynoldsovo číslo $Re = 1000$. Šum byl získán vynásobením každé složky vektoru w^m náhodnou veličinou s normálním rozdělením se střední hodnotou $\mu = 1$ a rozptylem $\sigma = 0.1$.



Obrázek 5.6: Původní a rekonstruovaný rychlostní profil na víku kavity pro různé hodnoty parametru a z obrázku 5.2.



Obrázek 5.7: Původní a rekonstruovaný rychlostní profil na víku kavity pro různé hodnoty Reynoldsova čísla (ovládané relaxačním časem τ). Pro $Re = 2000$ adjungovaná metoda nebyla stabilní a nekonvergovala – na grafu je tedy zobrazen poslední stabilní výsledek.



Obrázek 5.8: Původní a rekonstruovaný rychlostní profil na víku kavity pro různé hodnoty rozptylu σ v zašumění dat. Šum byl získán vynásobením každé složky vektoru w^m náhodnou veličinou s normálním rozdělením se střední hodnotou $\mu = 1$.

Parametr	Hodnota	Jednotka
L_x	0.1	m
L_y	0.1	m
L_z	0.1	m
T	16	s
ν	$1.5 \cdot 10^{-5}$	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
Re	500	

Tabulka 5.2: Nastavení reálných parametrů úlohy 3D proudění v kavitě poháněné víkem.

5.3 Výsledky optimalizace ve 3D

Implementace 3D úloh je popsána v kapitole 4.3. Tato kapitola pracuje se dvěma úlohami kavity poháněné víkem z kapitoly 5.1. Obě úlohy budou kvůli nárokům na paměť pracovat s úpravou pro ustálené proudění, která je diskutována v kapitole 4.3.1. Použijeme testovací schéma ze začátku kapitoly 5. Pro „naměření“ makroskopických dat s profilem $\mathbf{u}_{p,in}$ byl napsán program `sim_pseudomeasure.cu`, viz [21].

Pomocí funkce $g = g(\alpha)$ zadané pro souřadnici α jako

$$g(\alpha) = \begin{cases} \sin^2\left(\frac{\pi\alpha}{0.3L}\right) & \text{pro } \alpha \in [0, 0.15L], \\ 1 & \text{pro } \alpha \in [0.15L, 0.85L], \\ \sin^2\left(\frac{\pi(\alpha-L)}{0.3L}\right) & \text{pro } \alpha \in [0.85L, L], \\ 0 & \text{jinde,} \end{cases} \quad (5.3)$$

nastavíme rychlostní profil na víku kavity jako

$$u_{p,in}^x(\mathbf{x}) = 0.1g(x)g(y) \quad \text{pro } \mathbf{x} \in [0, L_x] \times [0, L_y] \times \{0\}, \quad (5.4)$$

kde $\mathbf{x} = (x \ y \ z)^T$ jsou souřadnice popisující víko kavity a parametr L představuje část celkové délky víka L_x .

Tabulka 5.2 udává nastavení společných reálných parametrů obou testovacích úloh v této kapitole. Úlohy se liší pouze v nastavení parametru L z rovnic (5.3) a (5.4). Pomocí požadovaného Reynoldsova čísla z tabulky 5.2 bychom dále měli spočítat maximální hodnotu velikosti rychlosti na víku. To ovšem není potřeba, jak je diskutováno v kapitole 1.3.4. Stačí pouze nastavit bezrozměrné jednotky podle kapitoly 1.3.4 pro $u_{max}^* = 0.1$ získané z rovnice (5.4). Poslední parametr z kapitoly 1.3.4, který je potřeba zadat, je prostorový krok Δx , nebo ekvivalentně počet uzlů N_x . Pro vizualizaci proudění v kavitě pro různé volby parametru L z rovnice (5.4) použijeme jemnější mřížku než při počítání samotných úloh ALBM podle testovacího schématu ze začátku kapitoly 4. Zachování hydrodynamických vlastností simulované tekutiny při zjemňování mřížky máme zajištěné nastavením ostatních mřížkových parametrů, viz kapitola 1.3.4.

Vizualizace proudění		Úloha 1		Úloha 2	
Parametr	Hodnota	Parametr	Hodnota	Parametr	Hodnota
N_x	64	N_x	32	N_x	32
ν^*	0.0126	ν^*	0.0062	ν^*	0.0062
		L	0.1 m	L	0.05 m
		$\mathbf{u}_{0,in}$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{u}_{0,in}$	$\mathbf{0}$
		a	0.02 m	a	0.02 m
		ϵ	0.001	ϵ	0.001

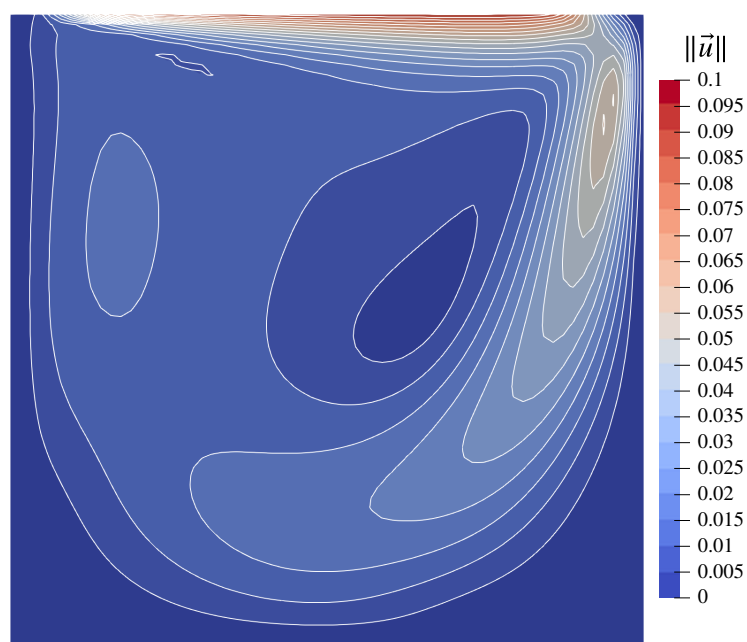
Tabulka 5.3: Nastavení parametrů pro vizualizaci proudění v kavitě poháněné víkem a dvou zkoumaných úloh.

Tabulka 5.3 zadává počet uzlů N_x , které použijeme ve vizualizaci proudění a v obou úlohách, ale také udává vypočítaný parametr mřížkové viskozity ν^* z rovnic (1.34) a (1.35) a parametr L z rovnic (5.3) a (5.4) pro jednotlivé úlohy. Navíc uvádíme parametr a z obrázku 5.3 z kapitoly 5.1, věnující se zadání úlohy optimalizace pro proudění v kavitě, a parametr ϵ z kapitoly 2.1.1. V kapitole 4.3.1 bylo zmíněno, že algoritmus duální úlohy z kapitoly 3.2.4 může mít pro ustálené proudění méně časových kroků než primární úloha. Z důvodů zkrácení výpočetního času tedy nastavujeme v obou úlohách počet časových iterací v duální úloze odpovídající času 4 s. Algoritmus ALBM byl v obou úlohách zastaven po 20000 iteracích.

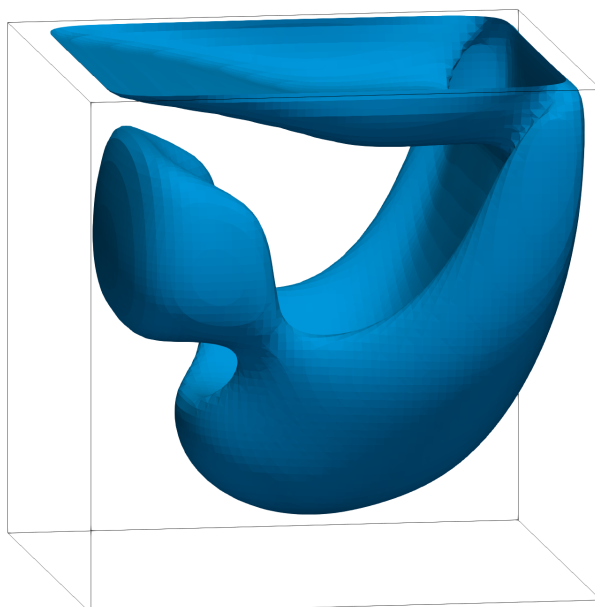
Na obrázku 5.9 a 5.10 lze vidět vizualizaci proudění v kavitě poháněné víkem pro úlohu 1 z tabulky 5.3. Pozorujeme znovu typický vír vytvořený pohybujícím se víkem. Na obrázku 5.11 je zobrazen rychlostní profil zadaný rovnicí (5.4), který se snažíme pomocí ALBM rekonstruovat, a na obrázku 5.12 je zobrazen rekonstruovaný profil po 20000 iteracích ALBM z počáteční podmínky zadané tabulkou 5.3. Rozdíl těchto profilů je potom k nahlédnutí na obrázku 5.13. Na obrázku 5.14 jsou znázorněny funkční hodnoty účelové funkce J .

Podobně pro úlohu 2 ze zadání v tabulce 5.3 je vizualizace proudění k nahlédnutí na obrázcích 5.15 a 5.16. Na obrázku 5.17 je potom původní rychlostní profil na víku kavity, na obrázku 5.18 jeho rekonstrukce pomocí ALBM a na obrázku 5.19 rozdíl těchto profilů. Průběh účelové funkce J v adjungované metodě pro úlohu 2 je na obrázku 5.20.

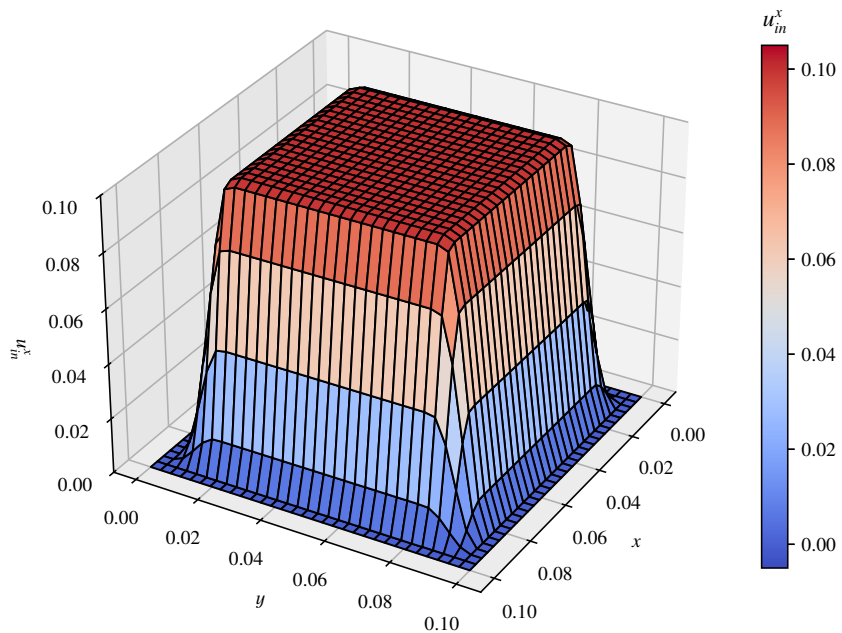
V obou úlohách jsme byli schopni pomocí adjungované metody rekonstruovat původní rychlostní profil. Tyto dvě testovací úlohy tedy slouží jako ověření implementace ALBM v TNL-LBM.



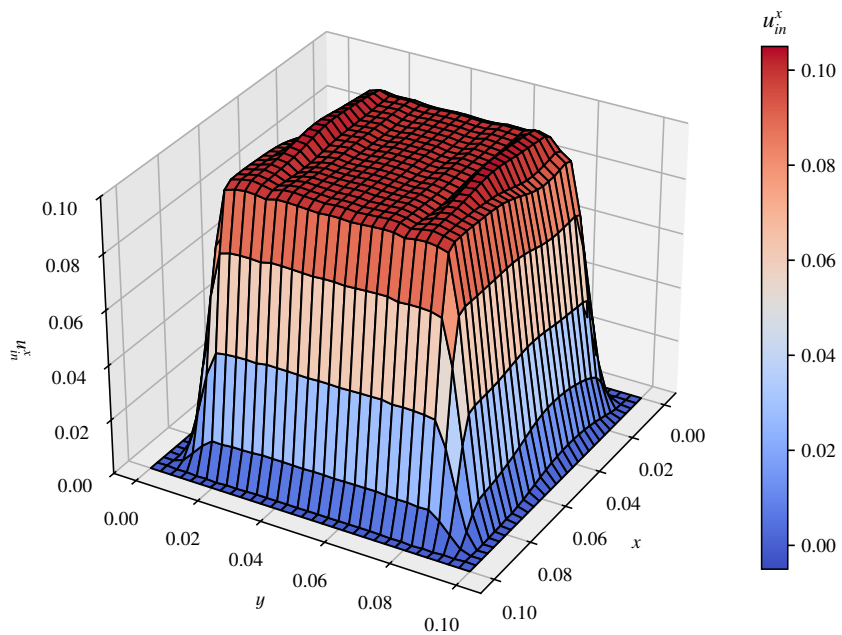
Obrázek 5.9: Velikost makroskopické rychlosti na řezu doménou kvity podél osy x v úloze 1.



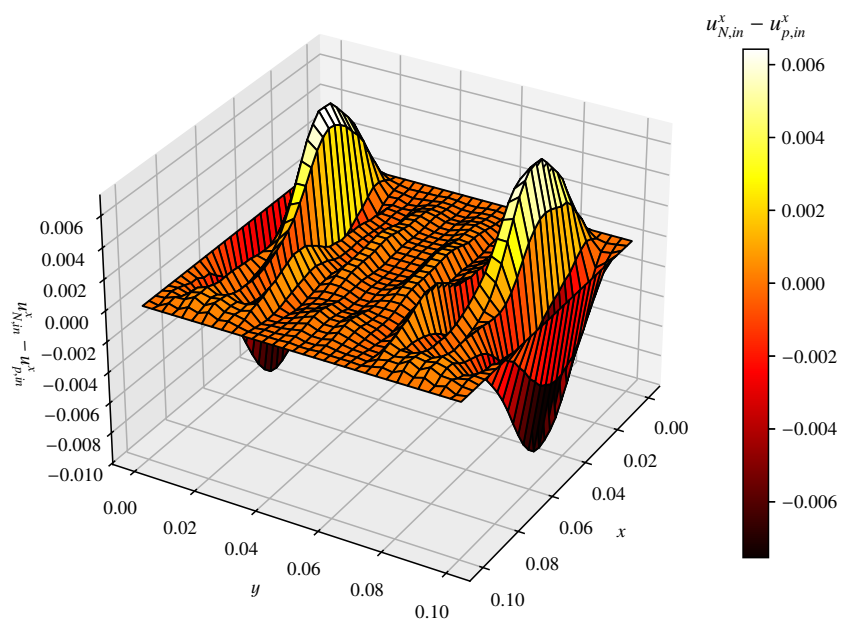
Obrázek 5.10: Vybraná izoplocha velikosti makroskopické rychlosti v kvitě v úloze 2.



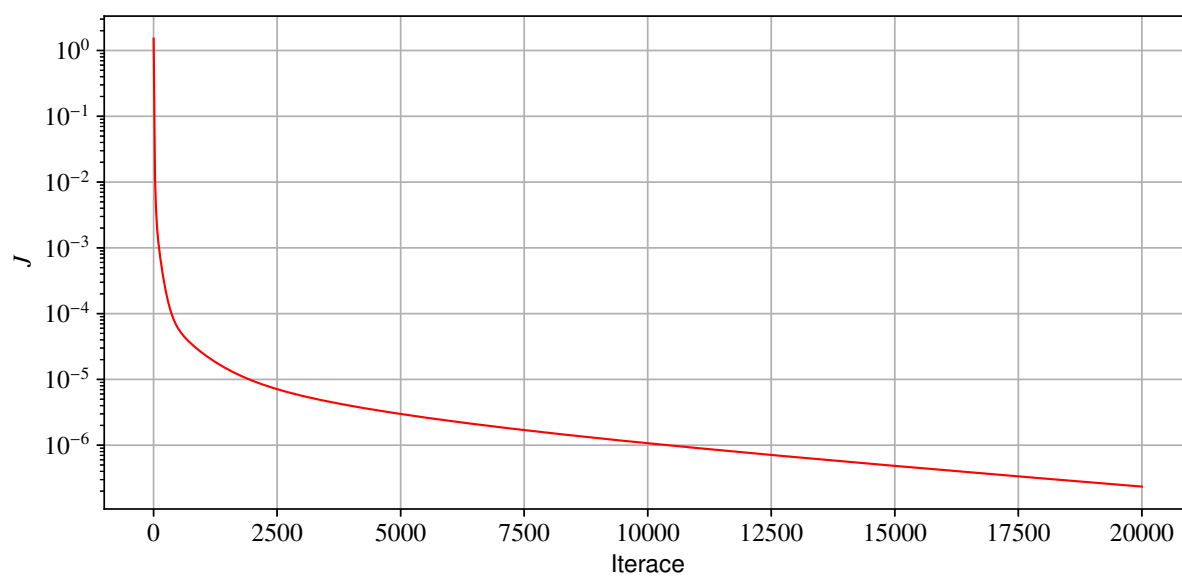
Obrázek 5.11: Původní rychlostní profil $u_{p,in}^x$ na víku kavity v úloze 1.



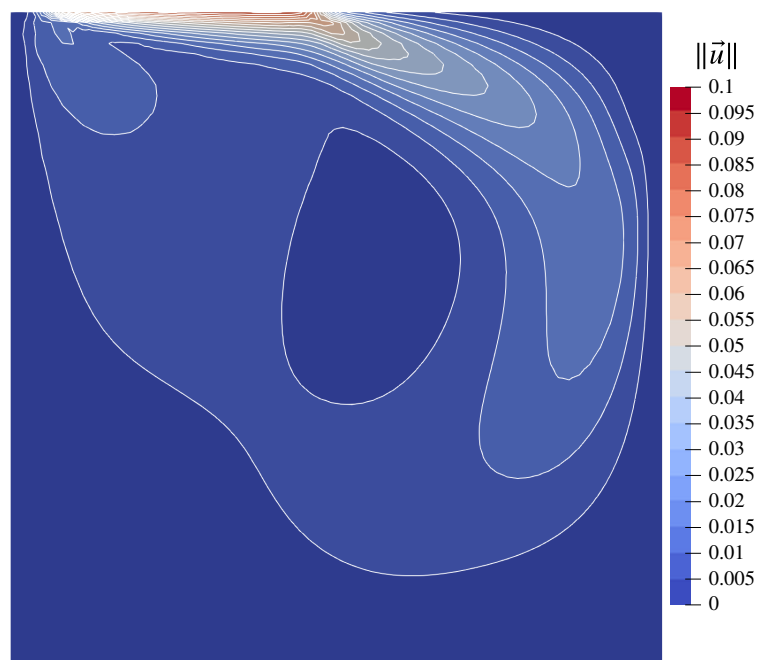
Obrázek 5.12: Rekonstruovaný rychlostní profil $u_{20000,in}^x$ na víku kavity v úloze 1.



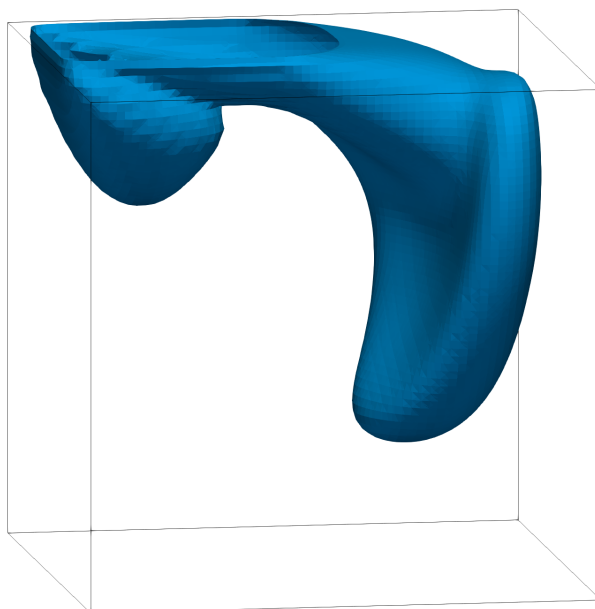
Obrázek 5.13: Rozdíl původního a rekonstruovaného profilu $u_{20000,in}^x - u_{p,in}^x$ na víku kavity v úloze 1.



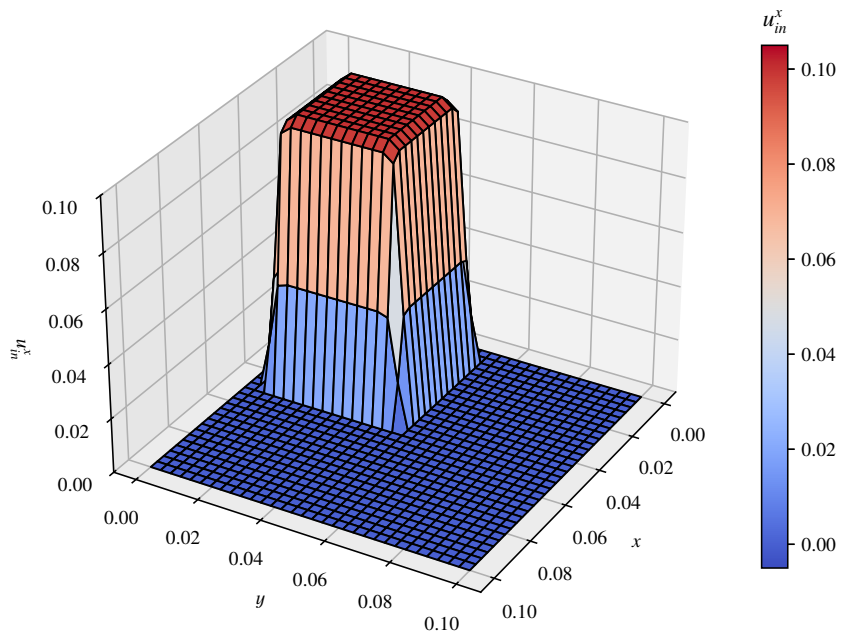
Obrázek 5.14: Konvergence účelové funkce J v úloze 1.



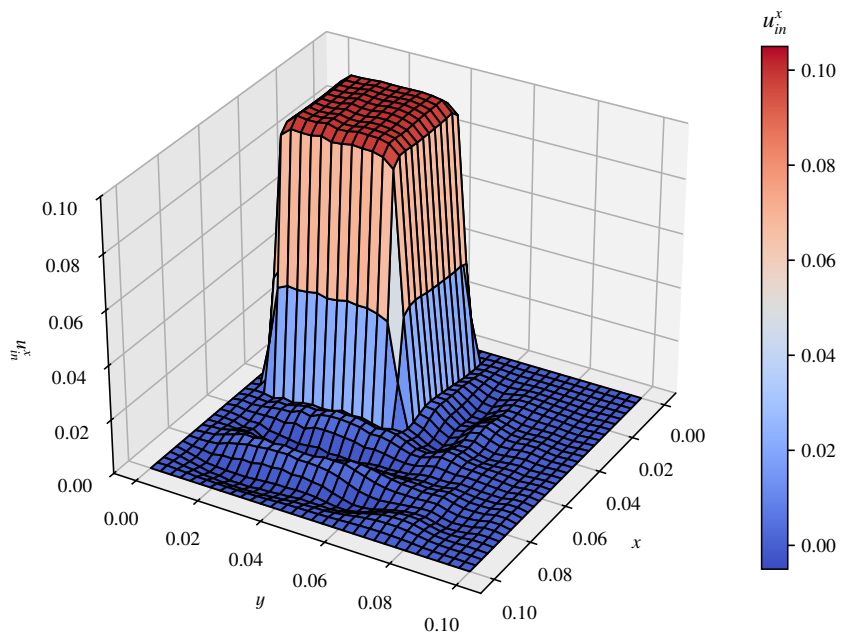
Obrázek 5.15: Velikost makroskopické rychlosti na řezu doménou kavity podél osy x v úloze 2.



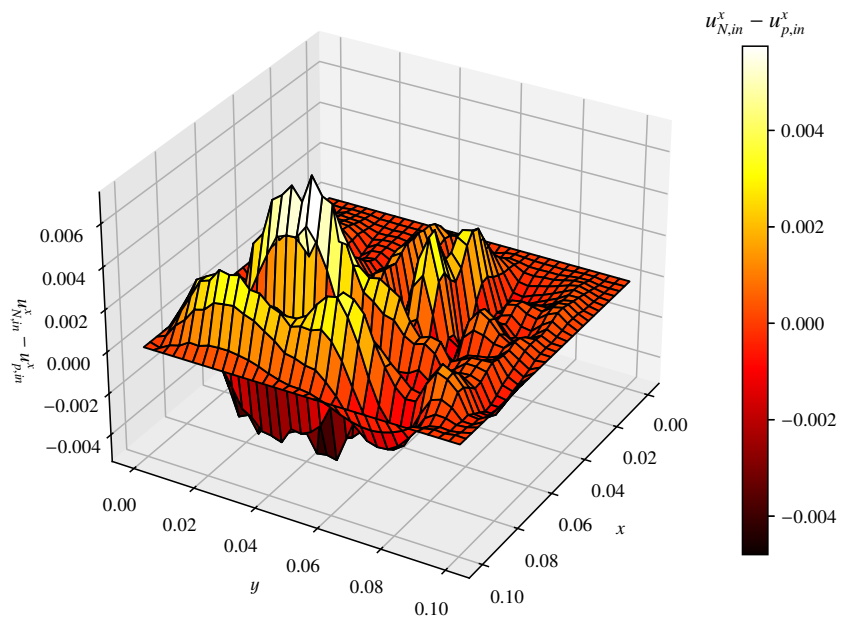
Obrázek 5.16: Vybraná izoplocha velikosti makroskopické rychlosti v 3D kavitě v úloze 2.



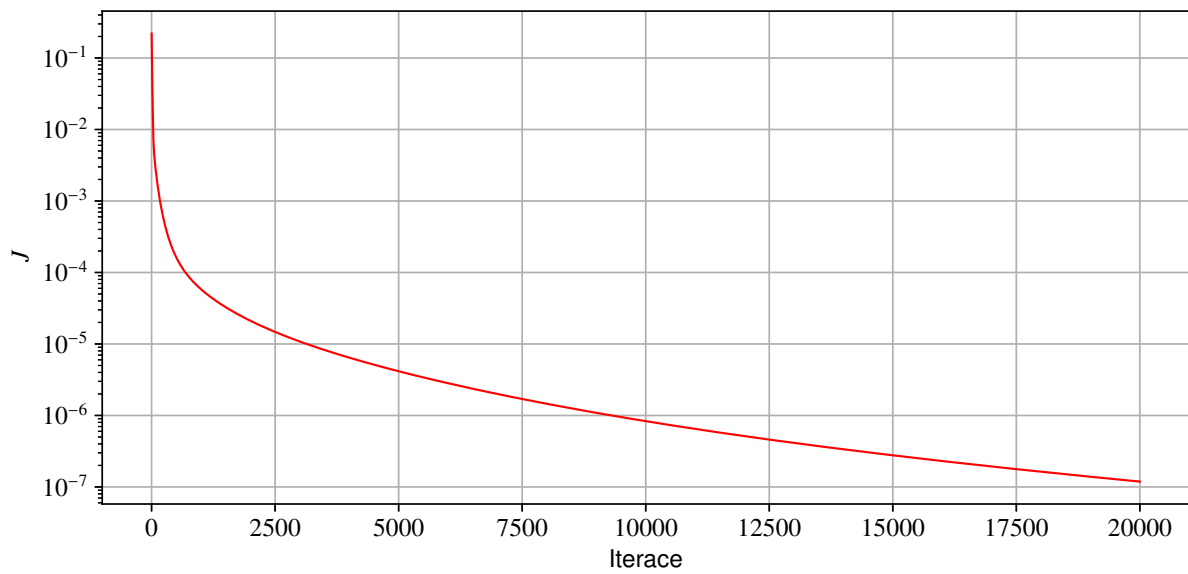
Obrázek 5.17: Původní rychlostní profil $u_{p,in}^x$ na víku kavity v úloze 2.



Obrázek 5.18: Rekonstruovaný rychlostní profil $u_{20000,in}^x$ na víku kavity v úloze 2.



Obrázek 5.19: Rozdíl původního a rekonstruovaného profilu $u_{20000,in}^x - u_{p,in}^x$ na víku kavity v úloze 2.



Obrázek 5.20: Konvergence účelové funkce J v úloze 2.

Závěr

Tato diplomová práce se zabývala optimalizací proudění tekutin pomocí adjungované metody. Práce vycházela z předchozích prací autora [19, 20], které rozšířila o odvození adjungované metody k mřížkové Boltzmannově metodě pro obecný kolizní operátor a také o implementaci adjungované metody pro proudění ve 3D.

V první kapitole byl uveden makroskopický matematický popis proudění tekutin, na který bylo navázáno mezoskopickým popisem v kinetické teorii a mřížkovou Boltzmannovou metodou. V této kapitole byly také popsány dvě aproximace kolizního operátoru, které se v mřížkové Boltzmannově metodě běžně používají.

Kapitola 2 se věnovala definicím a větám potřebným k zadání minimalizační úlohy s vazbou, kterou tato práce řešila. Rychlostní profil na vstupu do domény zadaný Dirichletovou okrajovou podmínkou byl zvolen jako řídicí parametr minimalizační úlohy. V této kapitole bylo také uvedeno obecné odvození adjungované metody a její algoritmus.

V kapitole 3 byl diskutován současný stav problematiky optimalizace proudění pomocí adjungované metody. Dále tato kapitola představila odvození adjungované metody pomocí mřížkové Boltzmannovy metody s obecně zadaným kolizním operátorem pro minimalizační úlohu z kapitoly 2. Algoritmus odvozené úlohy pro sdruženou proměnnou byl upraven pro paralelizaci na grafických kartách.

Kapitola 4 diskutuje výhody a nevýhody adjungované metody ve vztahu k numerické implementaci. Poté uvádí implementaci na CPU pro proudění ve 2D, které bylo využito již v pracích [19, 20]. Implementace pro proudění ve 3D byla provedena rozšířením kódu TNL-LBM vyvíjeného na katedře matematiky na FJFI ČVUT v Praze, viz [16, 21].

Poslední kapitola se věnovala výpočetní studii. Implementace ve 2D byla využita k provedení několika výpočtů s různým nastavením parametrů tekutiny a minimalizační úlohy. Rozšíření kódu TNL-LBM o adjungovanou metodu bylo otestováno na dvou úlohách. V obou úlohách ve 3D bylo využito navrženého snížení nároků na paměť pro ustálené proudění představeného v kapitole 4.3.1.

Rychlostní profily na vstupu do domény byly úspěšně rekonstruovány ve 2D i 3D. Práce ale narazila na hranice stability SRT-LBM při vysokých Reynoldsových číslech. Stabilní SRT-LBM simulace pro turbulentní proudění by musely mít malé prostorové i časové kroky, což by výrazně zvýšilo výpočetní čas, ale také především nároky na paměť v adjungované metodě, viz kapitola 4.1. Tyto nároky se ukázaly být nerealistické, proto v práci došlo k odklonění se od třetího bodu zadání.

Budoucí práce navazující na tuto práci by se mohly věnovat rozšíření stávajícího kódu o adjungovanou úlohu pro kolizní operátory, které vykazují větší stabilitu pro turbulentní proudění, viz [22]. Dalším možným směrováním by mohla být optimalizace topologie, jako například tvaru pevných překážek v doméně, pomocí adjungované metody k mřížkové Boltzmannově metodě využitím porézního prostředí, nebo jiné metody založené na možné změně každého uzlu mřížky na uzel tekutiny či pevné látky.

Literatura

- [1] Michal Beneš et al. „Experimental and numerical investigation of air flow through the distributor plate in a laboratory-scale model of a bubbling fluidized bed boiler“. In: *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics* 39.3 (čvc. 2022), s. 943–958. doi: 10.1007/s13160-022-00518-x.
- [2] Sam Bennett, Pietro Asinari a Paul J. Dellar. „A lattice Boltzmann model for diffusion of binary gas mixtures that includes diffusion slip“. In: *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 69.1 (2012), s. 171–189. doi: 10.1002/flid.2549.
- [3] P. L. Bhatnagar, E. P. Gross a M. Krook. „A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems“. In: *Physical Review* 94.3 (květ. 1954), s. 511–525. doi: 10.1103/physrev.94.511.
- [4] Pavel Eichler, Radek Fučík a Pavel Strachota. „Investigation of mesoscopic boundary conditions for lattice Boltzmann method in laminar flow problems“. In: *Computers & Mathematics with Applications* 173 (2024), s. 87–101.
- [5] Pavel Eichler, Radek Fučík a Robert Straka. „Computational study of immersed boundary - lattice Boltzmann method for fluid-structure interaction“. In: *Discrete and Continuous Dynamical Systems - S* 14.3 (2021), s. 819–833. doi: 10.3934/dcdss.2020349.
- [6] Pavel Eichler, Vladimír Fuka a Radek Fučík. „Cumulant lattice Boltzmann simulations of turbulent flow above rough surfaces“. In: *Computers & Mathematics with Applications* 92 (2021), s. 37–47. doi: 10.1016/j.camwa.2021.03.016.
- [7] Radek Fučík et al. „Investigation of phase-contrast magnetic resonance imaging underestimation of turbulent flow through the aortic valve phantom: experimental and computational study using lattice Boltzmann method“. In: *Magnetic Resonance Materials in Physics Biology and Medicine* 33.5 (ún. 2020), s. 649–662. doi: 10.1007/s10334-020-00837-5.
- [8] Radek Fučík et al. „On optimal node spacing for immersed boundary–lattice Boltzmann method in 2D and 3D“. In: *Computers & Mathematics with Applications* 77.4 (2019), s. 1144–1162. doi: 10.1016/j.camwa.2018.10.045.
- [9] Martin Geier et al. „The cumulant lattice Boltzmann equation in three dimensions: Theory and validation“. In: *Computers & Mathematics with Applications* 70.4 (2015), s. 507–547. doi: 10.1016/j.camwa.2015.05.001.

- [10] Michael B. Giles a Niles A. Pierce. „An Introduction to the Adjoint Approach to Design“. In: *Flow, Turbulence and Combustion* 65.3/4 (2000), s. 393–415. doi: 10.1023/a:1011430410075.
- [11] Zhaoli Guo a Chang Shu. *Lattice Boltzmann Method and Its Applications in Engineering*. World Scientific, 2013. doi: 10.1142/8806. URL: <https://worldscientific.com/doi/abs/10.1142/8806>.
- [12] Mohamad Hamed Hekmat a Masoud Mirzaei. „A comparison of the continuous and discrete adjoint approach extended based on the standard lattice Boltzmann method in flow field inverse optimization problems“. In: *Acta Mechanica* 227.4 (pros. 2015), s. 1025–1050. doi: 10.1007/s00707-015-1509-x.
- [13] Mohamad Hamed Hekmat a Masoud Mirzaei. „Development of Discrete Adjoint Approach Based on the Lattice Boltzmann Method“. In: *Advances in Mechanical Engineering* 6 (led. 2014), s. 230854. doi: 10.1155/2014/230854.
- [14] Michael Hinze et al. *Optimization with PDE Constraints*. Springer Science a Business Media, říj. 2008. doi: 10.1007/978-1-4020-8839-1.
- [15] Jakub Klinkovský et al. „Configurable Open-source Data Structure for Distributed Conforming Unstructured Homogeneous Meshes with GPU Support“. In: *ACM Trans. Math. Softw.* 48.3 (zář. 2022). doi: 10.1145/3536164.
- [16] Jakub Klinkovský et al. *LBM kód při KM FJFI ČVUT v Praze*. Navštíveno: 3. listopadu 2024. URL: <https://gitlab.com/tnl-project/tnl-lbm>.
- [17] Ivars Krastins et al. „Moment-based boundary conditions for straight on-grid boundaries in three-dimensional lattice Boltzmann simulations“. In: *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 92.12 (2020), s. 1948–1974. doi: 10.1002/flid.4856.
- [18] Mathias J. Krause, Gudrun Thäter a Vincent Heuveline. „Adjoint-based fluid flow control and optimisation with lattice Boltzmann methods“. In: *Computers & Mathematics with Applications* 65.6 (2013). Mesoscopic Methods in Engineering and Science, s. 945–960. doi: 10.1016/j.camwa.2012.08.007.
- [19] Bořivoj Kronowetter. „Numerické řešení adjungované rovnice pro mřížkovou Boltzmannovu metodu“. Bakalářská práce. České vysoké učení technické v Praze, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, 2022.
- [20] Bořivoj Kronowetter. „Optimalizační úlohy založené na mřížkové Boltzmannově metodě“. Výzkumný úkol. České vysoké učení technické v Praze, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, 2023.
- [21] Bořivoj Kronowetter et al. *ALBM implementace pro LBM kód při KM FJFI ČVUT v Praze*. Navštíveno: 5. ledna 2025. URL: <https://gitlab.com/borkro/tnl-albm>.
- [22] Timm Krüger et al. *The Lattice Boltzmann Method - Principles and Practice*. Říj. 2016. doi: 10.1007/978-3-319-44649-3.
- [23] A. J. C. Ladd a R. Verberg. „Lattice-Boltzmann Simulations of Particle-Fluid Suspensions.“ In: *Journal of Statistical Physics* 104.5/6 (2001), s. 1191–1251. doi: 10.1023/a:1010414013942.

- [24] Ł. Łaniewski-WoŃk a J. Rokicki. „Adjoint lattice Boltzmann for topology optimization on multi-GPU architecture“. In: *Computers & Mathematics with Applications* 71.3 (2016), s. 833–848. doi: 10.1016/j.camwa.2015.12.043.
- [25] Tomáš Oberhuber, Jakub Klinkovský a Radek Fučík. „TNL: NUMERICAL LIBRARY FOR MODERN PARALLEL ARCHITECTURES“. In: *Acta Polytechnica* 61.SI (ún. 2021), s. 122–134. doi: 10.14311/AP.2021.61.0122.
- [26] Georg Pingen, Anton Evgrafov a Kurt Maute. „Topology optimization of flow domains using the lattice Boltzmann method“. In: *Structural and Multidisciplinary Optimization* 34.6 (břez. 2007), s. 507–524. doi: 10.1007/s00158-007-0105-7.
- [27] O. Pironneau. „On optimum design in fluid mechanics“. In: *Journal of Fluid Mechanics* 64.1 (1974), s. 97–110. doi: 10.1017/S0022112074002023.
- [28] Osborne Reynolds. „XXIX. An experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water shall be direct or sinuous, and of the law of resistance in parallel channels“. In: *Philosophical Transactions of the Royal Society of London* 174 (1883), s. 935–982. doi: 10.1098/rstl.1883.0029.
- [29] Michael AA Spaid a Frederick R Phelan Jr. „Lattice Boltzmann methods for modeling microscale flow in fibrous porous media“. In: *Physics of fluids* 9.9 (1997), s. 2468–2474.
- [30] K. Suga et al. „A D3Q27 multiple-relaxation-time lattice Boltzmann method for turbulent flows“. In: *Computers & Mathematics with Applications* 69.6 (2015), s. 518–529. doi: 10.1016/j.camwa.2015.01.010.
- [31] J. Wang a D. Wan. „Parallel simulation of 3D lid-driven cubic cavity flows by finite element method“. In: *Proceedings of the International Offshore and Polar Engineering Conference* (led. 2011), s. 644–651.
- [32] Qisu Zou a Xiaoyi He. „On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model“. In: *Physics of Fluids* 9.6 (čvn. 1997), s. 1591–1598. doi: 10.1063/1.869307.