

VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

Fakulta strojního inženýrství

Ústav automatizace a informatiky

Ing. Jan Chládek

**EVOLUČNÍ ALGORITMY V APLIKACÍCH NMR
EVOLUTIONARY ALGORITHMS IN NMR APPLICATIONS**

ZKRÁCENÁ VERZE PHD THESIS

Obor: Technická kybernetika

Školitel: Doc. Ing. Pavel Ošmera, CSc.

Oponenti: Prof. Ing. Jiří Bíla, DrSc.
Doc. RNDr. Jiří Pospíchal, CSc.
Ing. Josef Schwarz, CSc.

Datum obhajoby: 27. 4. 2001

KLÍČOVÁ SLOVA

optimalizace, evoluční algoritmus, genetický algoritmus, Evoluční strategie, NMR, korekční cívka, gradientní cívka

KEY WORDS

Optimization, Evolutionary Algorithm, Genetic Algorithm, Evolution Strategy, NMR, Shim Coil, Gradient Coil

MÍSTO ULOŽENÍ CELÉ PRÁCE

Oddělení pro vědu a výzkum FSI VUT v Brně

© 2001 Jan Chládek

ISBN 80-214-2030-8

ISSN 1213-4198

Obsah

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Současný stav řešené problematiky | 2 |
| 1.1 | Úvod | 2 |
| 1.2 | Nukleární magnetická rezonance (NMR) | 2 |
| 1.3 | Optimalizační úlohy v NMR | 4 |
| 1.4 | Optimalizace systémů korekčních cívek pro magnety NMR | 4 |
| 1.5 | Optimalizační metody | 5 |
| 2 | Cíl práce | 7 |
| 3 | Zvolené metody zpracování | 8 |
| 3.1 | Model magnetického pole | 8 |
| 3.2 | Optimalizace parametrů korekčních cívek | 9 |
| 3.3 | Výběr optimalizačních metod | 10 |
| 4 | Hlavní výsledky práce | 11 |
| 4.1 | Oblast optimalizačních metod | 11 |
| 4.1.1 | Řešené optimalizační problémy | 11 |
| 4.1.2 | Meta-algoritmus pro optimalizaci řídicích parametrů | 12 |
| 4.1.3 | Respektování platnosti vazebních podmínek | 12 |
| 4.1.4 | Bivalentně-reálná transformace | 12 |
| 4.2 | Návrh korekční a gradientní cívky typu X | 13 |
| 4.2.1 | Technická specifikace | 13 |
| 4.2.2 | Výsledky | 13 |
| 4.3 | Návrh korekční cívky typu XZ2 | 14 |
| 4.3.1 | Technická specifikace | 14 |
| 4.3.2 | Výsledky | 15 |
| 4.4 | Návrh korekční cívky typu XZ4 | 15 |
| 4.4.1 | Technická specifikace | 15 |
| 4.4.2 | Výsledky | 16 |
| 4.5 | Vytvořené programy | 18 |
| 5 | Závěr | 19 |
| | Summary | 21 |
| | Literatura | 22 |
| | Publikace | 25 |

Kapitola 1

Současný stav řešené problematiky

1.1 Úvod

Předkládaná práce se zabývá evolučními optimalizačními metodami a možnostmi jejich uplatnění v oblasti přístrojového vybavení nukleární magnetické rezonance (NMR). Metody jsou aplikovány na optimalizaci parametrů konkrétních korekčních a gradientních cívek pro solenoidální magnety NMR.

Teoretická část práce se zabývá problematikou inverzních úloh v oblasti NMR a možnostmi využití evolučních optimalizací k jejich řešení. Obsahuje rozbor a porovnání různých typů evolučních algoritmů, snaží se zachytit sjednocující prvky i rozdíly mezi jednotlivými metodami, zmiňuje funkce jednotlivých evolučních operátorů. Popis algoritmů je doplněn poznatky a zkušenostmi získanými při aplikaci jednotlivých metod. Dále jsou v práci uvedeny metody řešení problémů, se kterými se lze setkat při aplikaci evolučních optimalizačních metod (např. zajištění platnosti vazebních rovnic a nerovnic, efektivní práce s prostory přípustných a nepřípustných řešení, kódování stupňů volnosti, nastavení řídicích parametrů, atd.). Protože bylo potřeba optimalizovat také diskrétní veličiny (např. směry proudů, počet proudovodičů) byla zmíněna i samostatná problematika smíšeného celočíselně-diskrétně-spojitého nelineárního programování.

Aplikační část práce je zaměřena na hledání takových optimalizačních metod, které by byly vhodné k optimalizaci parametrů korekčních a gradientních cívek typu X, XZ2, XZ4, atd. Optimalizace konstrukčních parametrů těchto cívek je velmi problematická a metody, které byly doposud užívány nepostačují k optimalizaci korekcí především vyšších řádů. Proto byly hledány především takové metody a postupy, aby umožnily nalézt optimální konstrukční parametry cívek vyšších řádů a také zjednodušily optimalizační proceduru návrhu.

Práce byla realizována v Oddělení magnetické rezonance Ústavu přístrojové techniky AV ČR v Brně, kde metodám systematické numerické optimalizace byla věnována pozornost již od roku 1982.

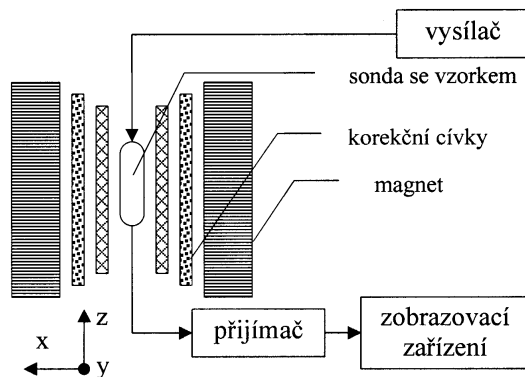
1.2 Nukleární magnetická rezonance (NMR)

NMR je obor kvantové radiofyziky a v současnosti je jednou z velmi významných metod chemické analýzy a medicínské diagnostiky [24]. Metoda je založena na principu kvantových přechodů v látce umístěné v homogenním magnetickém poli, jejíž magnetický spinový systém je buzen vysokofrekvenčním signálem. Prakticky se rozděluje na dvě významné aplikační oblasti: NMR spektroskopii [1] a NMR tomografii [32]. NMR spektro-

skopie se používá při fyzikálně-chemické analýze kapalin [9] a pevných látek organického i neorganického původu. Touto metodou lze provádět kvantitativní, kvalitativní, strukturální i kinetickou analýzu látek. NMR tomografie patří v současné době mezi významné zobrazovací techniky [30].

Přístroje NMR

Přístroje NMR jsou technicky velmi náročné a složité. Každý z nich sestává z několika základních celků, které jsou tvořeny zdrojem magnetického pole, vysokofrekvenčním generátorem, přijímačem, řídicí elektronickou jednotkou a výpočetním a zobrazovacím systémem.



Obrázek 1.1: Zjednodušené schématické znázornění NMR spektrometru.

Spektrometr NMR se používá pro chemickou analýzu. Vzorek bývá umístěn ve středu magnetu, který je zdrojem základního magnetického pole o magnetické indukci \vec{B}_0 . Vlivem interakce jader se stacionárním a vysokofrekvenčním magnetickým polem, prochází plochou závitů snímací cívky magnetický tok a indukuje napětí ve snímací cívce, které je snímáno jako signál FID. Transformací signálu FID z časové do frekvenční oblasti pomocí FFT (*Fast Fourier Transform*) lze získat spektrum, na jehož základě lze usuzovat nejen na složení a strukturu měřené látky, ale také na dynamiku chemických pochodů. Vlivem poruch měřeného signálu jsou naměřená spektra většinou deformovaná, což způsobuje problémy s jejich identifikací.

Tomograf pro MRI (*Magnetic Resonance Imaging*) je přístroj, který pracuje na stejných principech jako NMR spektrometr. Je doplněn cívkami generujícími proměnlivé magnetické gradientní pole. Díky němu je možné získat dvourozměrný tomografický obraz rezonujících jader.

Zdrojem magnetického pole pro NMR experimenty bývají různé typy magnetů [4] (*permanentní, odporové, supravodivé*). Prováděná měření vyžadují silná a stabilní statická magnetická pole (požadovaná homogenita může dosahovat řádově až 10^{-10} velikosti základního pole) [16, 18, 20]. Homogenita základního magnetického pole nebývá pro požadovaná měření dostatečná. Proto je magnet doplněn soustavou korekčních systémů (pasivní, aktivní).

Aktivní korekční systémy jsou tvořeny cívkami, kterými protéká stejnosměrný proud. Průchodem vhodných korekčních proudů se zvyšuje homogenita magnetického pole. Počet korekčních cívek závisí na požadovaném tvaru pole [4, 32].

Korekční cívky jsou napájeny stejnosměrným proudem a tvar magnetického pole,

jehož jsou zdrojem, může být i velmi složitý. Používají se ve spektrometrech i tomografech.

Gradientní cívky lze zjednodušeně považovat za speciální případ korekčních cívek. Pracují však v pulsním režimu, tvar jejich pole má lineární průběh vzhledem k osám x , y nebo z a používají se v tomografech.

1.3 Optimalizační úlohy v NMR

S problematikou optimalizací se lze setkat v mnoha různých aplikacích NMR spektroskopie a tomografie. Možnosti jejich uplatnění jsou široké a lze je rozčlenit do několika oblastí.

- Konstrukce přístrojů
 - Oblast statického magnetického pole (optimalizace parametrů základních magnetů, optimalizace systémů korekčních cívek [4])
 - Oblast dynamického magnetického pole (gradientní magnetická pole) [17, 19, 20, 21, 4, 13]
 - Oblast vysokofrekvenčních magnetických polí [4, 23]
- Provoz přístroje (ladění, optimalizace excitačních pulsů)
- Zpracování dat

V úlohách jde většinou o hledání parametrů či řešení, které by co nejlépe splňovaly jedno či současně více kritérií optimality.

Většinu optimalizačních problémů NMR lze řadit do skupiny úloh se známým matematickým modelem. Cílové funkce těchto úloh lze většinou charakterizovat jako vysoce nelineární, s velkým počtem lokálních minim, nekonvexní, nediferencovatelné a některé jako nespojitě.

K optimalizaci je možné využít všech výhod, které poskytují stochastické a především evoluční optimalizační metody. Proto byla pozornost věnována především těmto metodám.

1.4 Optimalizace systémů korekčních a gradientních cívek pro magnety NMR

Mnoho experimentů v NMR spektroskopii vyžaduje vysoce homogenní magnetická pole. Tento požadavek magnety obecně nesplňují. Proto jsou magnety doplňovány korekčními systémy, jejichž úkolem je eliminace nežádoucích nehomogenit magnetického pole v pracovních oblastech. Aktivní proudové korekce jsou obecně tvořeny vodiči navinutými do cívek definovaného tvaru. V případě solenoidálních magnetů s válcovým pracovním prostorem jsou jednotlivé aktivní korekce tvořeny kruhovými a sedlovými cívkami, které jsou symetricky umístěny na koaxiální válcové ploše. Korekční systém je pak tvořen souborem takovýchto korekcí o předepsaných prostorových konfiguracích. Superpozicí jednotlivých magnetických polí o vhodné velikosti a směru spolu s magnetickým polem základního magnetu dochází ke snížení nehomogenit základního pole magnetu [19].

Požadavky na aktivní korekční systémy:

- **Dostatečná citlivost** - jednotlivé korekční cívky musí generovat magnetická pole s tak velkou magnetickou indukci B_z , aby umožňovala dostatečné zkorrigování odpovídající nehomogenity základního magnetického pole.

- **Maximální čistota** - korekční magnetická pole by měla obsahovat minimum parazitních složek. Jejich tvar by měl maximálně odpovídat tvaru ideálnímu.
- **Minimální ztrátový výkon** - celý systém nesmí tepelně ovlivňovat měřený vzorek, ani by neměl ovlivňovat své okolí.
- **Maximální ortogonalita** - jednotlivé korekční systémy by měly být na sobě navzájem nezávislé.
- **Minimální tloušťka stěny korekčního systému** - umožňuje maximální možné využití prostoru dutiny magnetu pro sondu a měřený vzorek.
- **Minimální indukčnost** - zajišťuje minimální časovou prodlevu a bývá vyžadována u gradientových systémů v MRI (*Magnetic Resonance Imaging*).
- **Omezení možnosti vzniku vířivých proudů** by mělo být zajištěno u gradientových systémů celkovou konstrukcí korekčního systému.
- **Realizovatelnost** - v návrzích musí být brán ohled na technologii výroby a navržené řešení musí být přijatelné v mezích tolerance výroby.

Některé z uvedených požadavků se navzájem podmiňují, jiné jsou navzájem protikladné, což značně komplikuje celý optimalizační problém.

Návrhy a optimalizace korekčních a gradientních cívek

Na Ústavu přístrojové techniky AV ČR byly doposud korekční a gradientní cívky navrhovány pomocí metod založených na analytickém rozboru, prakticky však pouze pro počet maximálně tří závitů, respektive závitových sekcí s konstantní roztečí proudovodičů. Požadujeme-li optimalizaci většího počtu závitů, je třeba použít některou ze stochastických optimalizačních metod.

Dosud byla k optimalizaci poloh jednotlivých proudovodičů použita pouze stochastická metoda Monte-Carlo. Použití této metody bylo pracné a vyžadovalo značnou představu o tvaru cílové funkce. Metoda umožňovala optimalizovat nevelký počet proměnných. Pomocí této metody se také nepodařilo optimalizovat směry proudů a počty závitů, což je potřeba zvláště u korekcí vyššího řádu. Metoda vykazovala problémy s konvergencí.

Z literatury je znám pouze jediný případ, ve kterém autoři využívají stochastické optimalizační metody Simulovaného žihání (*Simulate Annealing*) pro návrhy poloh závitů korekčních a gradientních cívek [6]. Články jsou pouze informativní a pro návrhy konkrétních korekčních cívek je nelze použít.

Přesná dokumentace komerčně dostupných přístrojů není z pochopitelných důvodů k přístrojům dodávána.

1.5 Optimalizační metody

Hlavní cíl globální optimalizace je nalezení globálního minima cílové funkce. Ve většině technických aplikací však postačí alespoň „lepší“ řešení, než které bylo doposud známo. Z tohoto úhlu pohledu byla hledána globální nebo i různá lokální minima cílových funkcí.

Evoluční optimalizační metody

se řadí mezi stochastické nelineární optimalizační metody. Metody se vykazují značnou robustností a globalitou prohledávání optimalizačního prostoru. Mezi dvě základní se řadí metody evolučních strategií a genetické algoritmy.

Evoluční strategie (ES)

jsou optimalizační metody inspirované zjednodušenou darwinovou evoluční teorií [5]. Evoluční strategie odpovídají biologickému evolučnímu procesu z hlediska fenotypů. Optimalizační proces je závislý na nastavení pravděpodobnostních hodnot především „proměnlivosti“ a „úmrtnosti“ [12]. ES byly vyvinuty pro řešení složitých diskrétních i spojitých, ale především parametrizačních úloh vyskytujících se u různých typů experimentálních problémů [3].

Genetické algoritmy (GA)

jsou optimalizační metody inspirované teorií dědičnosti G.Mendela. U těchto optimalizačních metod je veškerá informace kódována do řetězce zvaného *chromozóm*. Ten může být reprezentován binárním řetězcem (0 a 1), reálnými čísly nebo jinou abecedou. Genetické optimalizace jsou založeny na principu změn a reorganizace základních genetických jednotek. Charakter a úspěšnost prohledávání optimalizačního prostoru závisí na velkém množství řídicích parametrů.

Kapitola 2

Cíl práce

V oblasti NMR spektroskopie je potřeba řešit řada optimalizačních úloh, k jejichž řešení může značně přispět vhodné použití evolučních stochastických metod. Práce je proto zaměřena na tyto optimalizační metody a na možnosti jejich uplatnění v různých oblastech NMR. Metody jsou aplikovány na jeden z optimalizačních problémů.

Naplnění cílů v sobě zahrnuje:

1. Analýzu současného stavu v oblasti evolučních optimalizačních metod.
2. Vyhodnocení možností použití evolučních optimalizačních metod v NMR spektroskopii a tomografii.
3. Zjednodušenou analýzu několika vybraných optimalizačních úloh.
4. Aplikaci evolučních optimalizací při hledání optimálních parametrů korekčních a gradientních cívek pro magnety NMR metodou MSZ (Metoda samostatných závitů) [19]. Cílem je zkvalitnění a zjednodušení dosud používaných optimalizačních postupů při optimalizaci korekčních cívek typu X a dalších korekcí typu XZ2, XZ4, XZ6, atd.
5. Zhodnocení dosažených výsledků u jednotlivých aplikací, vyvození závěrů s výhledem na další možnosti využití evolučních algoritmů v dané oblasti NMR a nastínění směru dalšího rozvoje.

Výběr řešených úloh je v souladu se zaměřením pracoviště autora.

Kapitola 3

Zvolené metody zpracování

3.1 Model magnetického pole

Při návrhu zvoleného typu korekční nebo gradientní cívky jde o nalezení takových geometrických (např. polohy proudovodičů, ...) a fyzikálních parametrů (např. velikosti a směry proudů, ...), aby se tvar magnetického pole B_z v oblasti vzorku co nejvíce blížil tvaru požadovanému. Ten nejčastěji odpovídá zvolenému typu sférické funkce, pomocí kterých je vyjádřena Laplaceova rovnice pro magnetickou indukci. Koeficienty jsou definovány pomocí rekurzních vztahů publikovaných v [18]. Při optimalizaci se snažíme vynulovat koeficienty, které vyjadřují nežádoucí derivace pole v počátku.

Magnetické pole lze rozložit ve složky, které jsou ortogonální. Složku B_z magnetické indukce lze vyjádřit pomocí sférického rozvoje

$$B_z(r, \theta, \varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n r^n P_n^m(\cos \theta) \times [a_{m,n} \cos(m\varphi) + b_{m,n} \sin(m\varphi)], \quad (3.1)$$

kde r, θ, φ jsou souřadnice ve sférické soustavě,
 $a_{m,n}, b_{m,n}$ jsou koeficienty,
 $P_n^m \cos(\theta)$ jsou přidružené Legendreovy ortogonální polynomy prvního druhu, stupně n a řádu m .

První člen $a_{0,0}$ rozvoje Legendreova polynomu představuje magnetickou indukci ideálně homogenního magnetického pole. Magnetické pole v okolí počátku lze také vyjádřit ve tvaru tří-rozměrné Taylorovy řady v kartézských souřadnicích. Oba rozvoje popisují totéž pole. Porovnáním koeficientů u polynomů stejného stupně lze získat jejich vzájemné relační vztahy [19]. Koeficienty $a_{m,n}$ a $b_{m,n}$ lze pak určit jako lineární kombinace „derivací“ $\tau_{i,j,k}$. Vzhledem k tomu, že jednotlivé koeficienty v obou rozvoji mají různé fyzikální rozměry a vzhledem k různým stupňům homogenních polynomů v rozvoji, zavádí se relativní souřadnice vztažené např. k poloměru maximální vepsané koule. Všechny koeficienty tak získají jednotný fyzikální rozměr $[T]$ a představují příspěvek k celkové axiální složce magnetické indukce B_z v daném bodě. Tyto vztahy umožňují navrhovat velmi čistá magnetická pole v oblasti uvnitř koule vepsané do systému korekčních cívek [18, 19, 7].

Pro tenký kruhový proudovodič byly na základě Biotova-Savartova zákona odvozeny výrazy pro jednotlivé koeficienty $a_{m,n}$ a $b_{m,n}$ [18] ve tvaru

$$a_{m,n} = C_n \left[\prod_{i=1}^m \frac{|2i-3|}{|n+1|} \right] \times [(4m^2-1)Z_n^m - Z_n^{m-2}] \frac{\sin(m\varphi)}{m} \quad (3.2)$$

kde je $\beta = z/R$, funkce $Z_{(q=p)}^p = (1 + \beta^2)^{-p-(3/2)}$, $Z_{(q<p)}^p = 0$, konstanta $C_n = \mu_0 I / (2\pi R n!)$ a kde je $b_{m,n} = 0$ vzhledem k uvažované symetrii cívek.

Optimální návrh parametrů korekčních nebo gradientních cívek znamená minimalizaci cílové funkce vyjádřené jako

$$f(\vec{x}) = f(\vec{z}_1, \vec{z}_2, \varphi) = \sum_{m,n} abs \sum_i [a_{m,n}(\varphi_i, z_{1i}) - a_{m,n}(\varphi_i, z_{2i})] = min, \quad (3.3)$$

kde i představuje i -tý závit,

$a_{m,n}$ představují minimalizované nežádoucí koeficienty.

Koeficienty $a_{m,n}$ jsou lineární kombinace parciálních derivací magnetického pole v počátku a jsou vyjádřeny vztahy

$$a_{1,1} = C_3(z^2 - 2)/(1 + z^2)^{2.5} \sin \varphi \quad (3.4)$$

$$a_{1,3} = C_4(4z^4 - 27z^2 + 4)/(1 + z^2)^{4.5} \sin \varphi \quad (3.5)$$

$$a_{1,5} = C_5(8z^6 - 116z^4 + 101z^2 - 6)/(1 + z^2)^{6.5} \sin \varphi \quad (3.6)$$

$$a_{1,7} = C_6(64z^8 - 1116z^6 + 3480z^4 - 1235z^2 + 40)/(1 + z^2)^{8.5} \sin \varphi \quad (3.7)$$

$$a_{3,3} = C_7(3z^2 - 4)/(1 + z^2)^{4.5} \sin(3\varphi) \quad (3.8)$$

$$a_{3,5} = C_8(8z^4 - 23z^2 + 2)/(1 + z^2)^{6.5} \sin(3\varphi) \quad (3.9)$$

$$a_{3,7} = C_9(720z^6 - 3780z^4 + 1863z^2 - 72)/(1 + z^2)^{8.5} \sin(3\varphi) \quad (3.10)$$

$$a_{5,5} = C_{10}(5z^2 - 6)/(1 + z^2)^{6.5} \sin(5\varphi) \quad (3.11)$$

$$a_{5,7} = C_{11}(60z^4 - 127z^2 + 8)/(1 + z^2)^{8.5} \sin(5\varphi) \quad (3.12)$$

$$a_{7,7} = C_{12}(7z^2 - 8)/(1 + z^2)^{8.5} \sin(7\varphi) \quad (3.13)$$

kde C je konstanta.

Nežádoucí koeficienty se eliminují nastavením vhodných parametrů cívky (směry proudů v závitěch, relativní polohy proudovodičů z_i , úhly rozevření φ_i).

Uvedený model magnetického pole byl zvolen z důvodu jasně patrné souvislosti mezi polohou proudovodiče a hodnotou derivací, popř. koeficientů $a_{m,n}$.

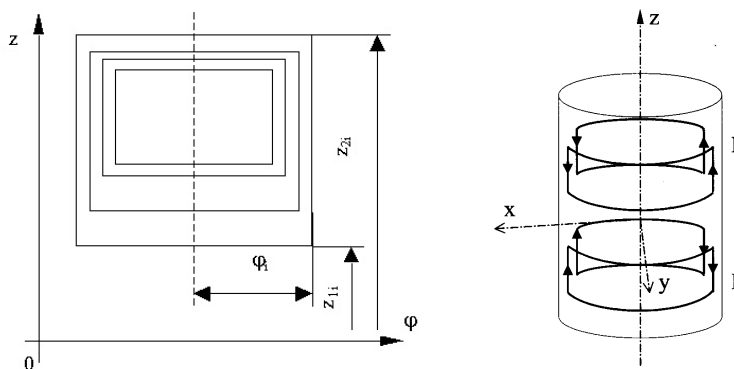
3.2 Optimalizace parametrů korekčních cívek

Systém korekčních cívek většinou sestává ze čtyř sedlových cívek, které jsou symetricky umístěny na povrchu válce o poloměru r . Každá z nich je tvořena J-závity. Jeden kvadrant takového systému je zobrazen v rozvinutém stavu na obr. 3.1.

Relativní souřadnice z_{1i} a z_{2i} vztažené na poloměr r jsou polohy jednotlivých proudovodičů a jsou uvažovány v cylindrické vztažné soustavě, φ_i je poloúhel rozevření. V práci jsou uvedeny optimalizace korekcí neaxiálního typu XZ^k , kde k je sudé. Tomu odpovídá konfigurace cívky a nulové koeficienty rozvoje pole $a_{0,n} = 0$ a $b_{m,n} = 0$. Velikost amplitud jednotlivých koeficientů s jejich rostoucím stupněm a řádem výrazně klesá. Obecně se při návrhu korekčního systému minimalizují jen vybrané nežádoucí koeficienty $a_{m,n}$ a vždy je upřednostňováno ze získaných řešení takové, které lépe vyhovuje podmínce zohledňující citlivost magnetického pole (3.14).

$$abs \sum_i [a_{max}(\varphi_i, z_{1i}) - a_{max}(\varphi_i, z_{2i})] = max \quad (3.14)$$

Omezující podmínky $\vec{h}(\vec{x})$ jsou dány fyzikální realizovatelností a technologií výroby:



Obrázek 3.1: Schéma korekční a gradientní cívky v jednom kvadrantu a směry protékajících proudů v jednotlivých kvadrantech.

- vodiče mají nenulový průměr,
- vodiče se nesmějí navzájem překrývat,
- vodiče jsou za sebou řazeny postupně, nemohou se navzájem křížit,
- mezi vodiči musí zůstat technologická mezera.

Při řešení úlohy se hledá globální minimum cílové funkce, které musí být z hlediska fyzikální realizovatelnosti dostatečně stabilní.

3.3 Výběr optimalizačních metod

Pro optimalizace gradientních a korekčních cívek byly na základě charakteru a tvaru cílové funkce zvoleny tyto optimalizační metody:

- $(1 + 1)$ -ES, [11, 2]
- $(\mu + \lambda)$ -ES [2],
- (μ, λ) -ES, [2]
- $(1 + 1)$ -metaES [10],
- GA [15] a
- meta ES-GA.

Všechny jsou založeny na základních algoritmech ES a GA a lze je zařadit do skupiny stochastických evolučních optimalizací. Byly diskutovány jejich vlastnosti a základní rozdíly. Z evolučních strategií byly pro optimalizaci testovány varianty: $(1 + 1)$ -ES, $(1 + 1)$ -metaES, $(\mu + \lambda)$ -ES a (μ, λ) -ES. Prakticky se nejlépe osvědčily $(\mu + \lambda)$ -ES a $(1 + 1)$ -ES optimalizace. U genetických optimalizací nebyl použit standardní GA, ale jeho upravená varianta podle [15]. Tato varianta je rozšířena o další typy genetických operátorů (*aritmetické křížení, heuristické křížení, jednoduché křížení, hraniční mutace, několikanásobná ne-uniformní mutace, ne-uniformní mutace, uniformní mutace*) pracujících v oblasti reálných čísel. Důvodem pro volbu této varianty byly výhodnější vlastnosti algoritmu a zajištění přirozené reprezentace optimalizovaných proměnných.

Kapitola 4

Hlavní výsledky práce

4.1 Oblast optimalizačních metod

4.1.1 Řešené optimalizační problémy

Ze známého modelu základního magnetického pole byly sestaveny cílové funkce popisující tvar konkrétních korekčních magnetických polí. Z důvodu velkého množství lokálních minim, omezujících podmínek a nespojitosti optimalizovaného prostoru, byly pro optimalizaci zvoleny evoluční stochastické metody. Byly vytvořeny jejich nové varianty tak, aby odpovídaly řešené úloze. Řešené problémy (metody) se týkaly problematiky:

- sestavení vhodné cílové funkce (použití metody „minimax“, atd.),
- respektování omezujících hraničních podmínek,
- respektování omezujících vazebních podmínek,
- použití meta-optimalizačního algoritmu pro:
 - využití jako restartovací metody,
 - optimalizaci řídicích parametrů ES a GA,
 - optimalizaci diskrétních veličin,
 - realizaci rozhodovacího kritéria u multi-kriteriální cílové funkce,
 - optimalizaci váhových koeficientů jednotlivých optimalizačních kritérií multi-kriteriální cílové funkce,
 - optimalizaci koeficientů bariérové funkce,
 - získání různých variant výsledného řešení,
 - využití odlišných mechanismů prohledávání optimalizačního prostoru u GA a ES v jednom algoritmu,
- transformace diskrétních proměnných do intervalu reálných čísel,
- využití apriorních informací o povaze hledaného řešení.

Byl vytvořen programový celek zahrnující všechny dosud uvedené stochastické evoluční optimalizační metody. Všechny algoritmy byly sestaveny tak, aby mohly navzájem využívat stejné proměnné i jednotlivé programové bloky. Díky tomuto uzpůsobení bylo možné vše integrovat do jednoho meta-evolučního algoritmu. Ten, ve dvou vzájemně provázaných vrstvách, v sobě zahrnuje různé varianty genetických algoritmů (reálná, binární) a různé

typy evolučních strategií. Sestavený meta-optimalizační algoritmus nestaví jednotlivé optimalizační metody proti sobě jako konkurenční, ale umožňuje využít různých charakteristických vlastností jednotlivých metod tak, aby bylo dosaženo požadovaného a efektivního výsledku.

4.1.2 Meta-algoritmus pro optimalizaci řídicích parametrů

Princip meta-algoritmu spočívá v hierarchickém rozšíření základního evolučního algoritmu o další (vyšší) optimalizační vrstvy. Pomocí nich lze nastavovat řídicí parametry optimalizačních metod na nižší úrovni a to podle předem definovaného tzv. „meta-kritéria“. Nalezení vhodných hodnot řídicích parametrů je problém špatně strukturovaný, špatně podmíněný a komplexní [8]:

- řídicí parametry nejsou na sobě nezávislé,
- systematický výzkum nastavení řídicích parametrů vyžaduje nezměrné množství statisticky podložených experimentů a proto je ve většině technických aplikací prakticky nepoužitelný,
- proces nastavování parametrů je časově náročný i v tom případě, kdy se postupně nastavují jednotlivé parametry bez ohledu na jejich vzájemné vazby,
- výsledné nastavení řídicích parametrů pro daný problém nemusí být vždy optimální.

Obecně existují dva přístupy pro nastavování parametrů evolučních optimalizací. První z nich představuje *ladění parametrů*, druhý *řízení parametrů*. V práci jsou diskutovány a testovány obě metody.

4.1.3 Respektování platnosti vazebních podmínek

Respektování vazebních podmínek [28] bylo zajištěno pomocí metod založených na:

- adaptivní změně hranic (M0),
- zamítnutí všech nevyhovujících řešení (M1),
- znevýhodnění „pokutou“ všech nevyhovujících řešení (M2).

V případě optimalizací korekčních cívek byly k zajištění platnosti vazebních podmínek použity především metody M0 a M1, každá však v jiné části algoritmu. Metoda M2 se ukázala jako problematická.

Princip metody M0 spočívá na průběžných změnách hraničních mezí jednotlivých proměnných. Tuto metodu lze formálně považovat jako speciální případ meta-optimalizací. Mezi její výhody patří vyšší pravděpodobnost nalezení přípustného řešení, nevýhodou je větší pravděpodobnost předčasné konvergence optimalizačního procesu do lokálního řešení.

4.1.4 Bivalentně-reálná transformace

Byla zavedena bivalentně-reálná transformace, která umožňuje optimalizovat směry proudů proudovodičů i na základní úrovni meta-optimalizačního algoritmu. Tato operace převádí diskrétní bivalentní hodnoty -1 , $+1$ do oboru reálných čísel a před ohodnocením jedince tyto hodnoty převádí nazpět do původní reprezentace. Pomocí této metody byl řešen problém velkých skokových změn cílové funkce pro diskrétní hodnoty.

4.2 Návrh korekční a gradientní cívky typu X

4.2.1 Technická specifikace

Korekční a gradientní cívky typu X (korekce typu X) generují magnetická pole s lineárním průběhem kolem osy x . Směry protékajících proudů jsou naznačeny na obr. 3.1. Cílová funkce je definována vztahem

$$f_{min}(\vec{x}) = f_{min}(\vec{z}_1, \vec{z}_2, \varphi) = \sum_{m,n} abs \sum_i [a_{m,n}(\varphi_i, z_{1i}) - a_{m,n}(\varphi_i, z_{2i})] = min, \quad (4.1)$$

kde i představuje i -tý závit a $a_{m,n}$ představují minimalizované koeficienty. Při návrhu cívky typu X se minimalizují nežádoucí koeficienty $a_{1,3}$, $a_{1,5}$, $a_{1,7}$, $a_{3,3}$. Počet stupňů volnosti je dán počtem optimalizovaných parametrů z_{1i} , z_{2i} a φ_i , kde i představuje počet zavítů cívky. Vždy je upřednostňováno takové řešení, které lépe vyhovuje podmínce zohledňující citlivost magnetického pole (3.14), kde $a_{max} = a_{1,1}$. Z analýzy cílové funkce bylo zjištěno, že parametry z_{2i} je možné pevně stanovit a během celého optimalizačního procesu fixovat na určitých hodnotách. Hodnoty jsou určeny maximálními možnými rozměry korekční a gradientní cívky. Analytický závěr byl potvrzen optimalizačním výpočtem. Sestavená cílová funkce obsahuje velké množství lokálních minim. Je nekonvexní a nespojitá, s průběžně se měnícími omezujícími podmínkami během optimalizačního procesu v závislosti na hodnotách jednotlivých vázaných proměnných.

4.2.2 Výsledky

Pro optimalizaci korekci typu X byl použit meta-ES (MES) algoritmus. K jeho sestavení byla použita dvoustupňová (1 + 1)-ES evoluční strategie. Parametry P a Q spolu s poměrem μ/λ byly optimalizovány na meta-hladině, parametry z_{1i} byly optimalizovány na základní hladině. Za meta-evoluční kritérium optimality bylo použito kritérium výběru nejlepšího dosaženého řešení z množiny všech lokálních minim. Meta-evoluční algoritmus se při provedených testech projevil jako dostatečně robustní.

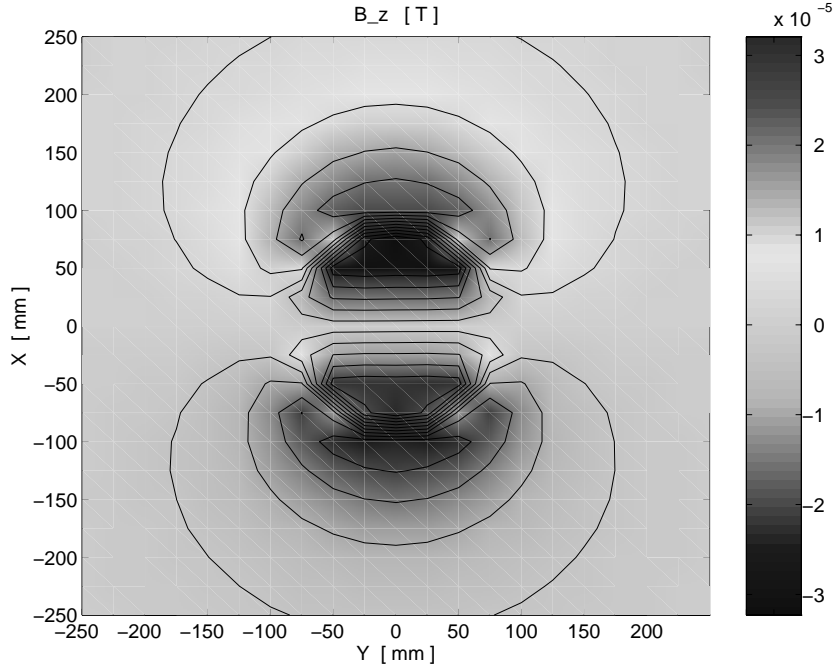
Byly porovnány jednotlivé optimalizační metody z hlediska počtu volání cílové funkce, podílu koeficientu a_{11} a hodnoty součtu nežádoucích koeficientů $f(\vec{x})$ (charakteristika citlivosti), průměrného dosaženého lokálního řešení a dosaženého globálního řešení. Největší rychlosti konvergence dosáhly $(\mu + \lambda)$ -ES (pro $\mu = 40$, $\lambda = 30$) zvláště v počáteční fázi prohledávání. Ve druhé fázi prohledávání optimalizačního prostoru bylo výhodnější použít (1 + 1)-ES. Co se týče kvality (globality) řešení, nejlepších průměrných výsledků bylo dosaženo pomocí genetických algoritmů. Výpočet se podařilo urychlit pomocí kombinace obou algoritmů: $MES + GA$.

V práci jsou uvedena nejlepší nalezená řešení vyhovující zadaným omezujícím podmínkám. Řešení odpovídají konkrétním technickým parametrům, které jsou taktéž uvedeny. Velikosti minimalizovaných koeficientů pro korekci typu X s poloměrem $r = 0.085m$ a proudem $I = 1A$ jsou uvedeny v tab. 4.1 spolu s hodnotou koeficientu a_{11} představujícího základní citlivost magnetického pole. Magnetické pole generované korekční cívkou

| Minimalizované koeficienty | | | | | Citl.koef. |
|----------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|----------------------|-----------------|
| $a_{13}[\mu T]$ | $a_{15}[\mu T]$ | $a_{17}[\mu T]$ | $a_{33}[\mu T]$ | $\sum a_{ij}[\mu T]$ | $a_{11}[\mu T]$ |
| 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.007306 | 0.007306 | 53.456643 |

Tabulka 4.1: Hodnoty koeficientů $a_{m,n}$ pro korekci typu X s poloměrem $r = 0.1m$ a proudem $I = 1A$.

s navrženou konfigurací je patrné z obr. 4.1. Pole bylo vypočítáno numerickou integrací pomocí Biotova-Savartova zákona. Nalezené řešení splňuje všechny hraniční podmínky a



Obrázek 4.1: Výsledné magnetické pole B_z korekční cívky X v rovině XY. Souřadnice Z je rovna konstantě.

technologické požadavky a je z hlediska fyzikální realizovatelnosti dostatečně stabilní. Intenzita magnetického pole odpovídající maximalizovanému koeficientu $a_{1,1}$ je dostatečná. Cívka bude sestávat z jedné nezávislé vrstvy vodičů.

Popsaná problematika návrhu korekcí typu X byla publikována v [35] a [33].

4.3 Návrh korekční cívky typu XZ2

4.3.1 Technická specifikace

XZ2-korekční cívka je korekce vyššího řádu. Vzájemné proudové orientace v jednotlivých cívkách jsou stejné jako v případě korekce typu X. Cílová funkce je vyjádřena vztahem

$$f_{min}(\vec{x}) = f_{min}(\vec{z}_1, \vec{z}_2, \varphi) = \sum_{m,n} (abs \sum_i W_{m,n} d_i [a_{m,n}(\varphi_i, z_{1i}) - a_{m,n}(\varphi_i, z_{2i})]), \quad (4.2)$$

kde i představuje i -tý závit, $a_{m,n}$ představuje minimalizované koeficienty, $W_{m,n}$ jsou jejich váhové koeficienty a

$d_i \in \{-1, 1\}$ je směr proudu v i -tém závitě. Při návrhu korekční cívky typu XZ2 se minimalizují nežádoucí koeficienty $\{m, n\} = \{1, 1\}, \{1, 5\}, \{1, 7\}$ a $\{3, 3\}$. Z analýzy cílové funkce vyplývá, že vyrušení minimalizovaných koeficientů lze dosáhnout nastavením vhodných geometrických parametrů cívky (relativní polohy proudovodičů, velikosti odpovídajících úhlů) a volbou vhodných směrů proudů v jednotlivých závitech. Při výpočtech je upřednostňováno takové řešení, které lépe vyhovuje podmínce zohledňující citlivost magnetického pole

$$f_{max}(\vec{x}) = f_{max}(\vec{z}_1, \vec{z}_2, \varphi) = \sum_i d_i [a_{1,3}(\varphi_i, z_{1,i}) - a_{1,3}(\varphi_i, z_{2,i})] = max \quad (4.3)$$

Jestliže je minimalizován výraz f_{min} vyjádřený vztahem (4.2) a zároveň maximalizován výraz f_{max} popsany rovnici (4.3), lze sestavit výslednou multi- kriteriální cílovou funkci

$$f(\vec{x}) = f_{max}(\vec{z}_1, \vec{z}_2, \vec{\varphi}) = W_{min} f_{min} - W_{max} f_{max}, \quad (4.4)$$

kde W_{min} and W_{max} jsou váhové koeficienty. Sestavená cílová funkce obsahuje velké množství lokálních minim. Je nekonvexní a nespojitá, s proměnnými omezujícími podmínkami.

4.3.2 Výsledky

Pro optimalizaci parametrů korekční cívky typu XZ2 byl použit meta-evoluční algoritmus aplikovaný v hierarchické struktuře, zahrnující genetický algoritmus a řídicí algoritmus (1 + 1)-ES.

Přestože bylo vyzkoušeno velké množství variant a metod pracujících s prostorem přípustných a nepřípustných řešení (bariérové funkce, atd.), řešení se podařilo nalézt pouze za přispění uživatele. Aby byla zajištěna správná konvergence algoritmu, bylo třeba zajistit možnost zásahu uživatele do optimalizačního procesu. Postupným nastavováním jednotlivých váhových koeficientů cílové funkce $W_{m,n}$, W_{min} , W_{max} během průběhu optimalizačního procesu se podařilo řídit prohledávání optimalizovaného prostoru a dosáhnout tak žádaného řešení. Problematika je v práci podrobně diskutována.

V práci je uvedeno nejlepší z dosažených lokálních řešení pro cívku YZ2 s 19 závitů, vyhovující zadaným omezujícím podmínkám a odpovídající konkrétním technickým parametrům. Velikosti minimalizovaných koeficientů pro korekci typu XZ2 s poloměrem $r = 0.19m$ a proudem $I = 0.2A$ jsou uvedeny v tab. 4.2. Také je zde uvedena hodnota koeficientu a_{13} představujícího citlivost magnetického pole.

| Minimalizované koeficienty | | | | | Citl.koef. |
|----------------------------|------------------|------------------|------------------|-----------------------|------------------|
| $a_{11} [\mu T]$ | $a_{15} [\mu T]$ | $a_{17} [\mu T]$ | $a_{33} [\mu T]$ | $\sum a_{ij} [\mu T]$ | $a_{13} [\mu T]$ |
| -0.000039 | -0.000001 | 0.570180 | 0.000062 | -0.570282 | -2.7941 |

Tabulka 4.2: Hodnoty koeficientů $a_{m,n}$ pro korekci YZ2 s poloměrem $r = 0.19m$ a proudem $I = 0.2A$.

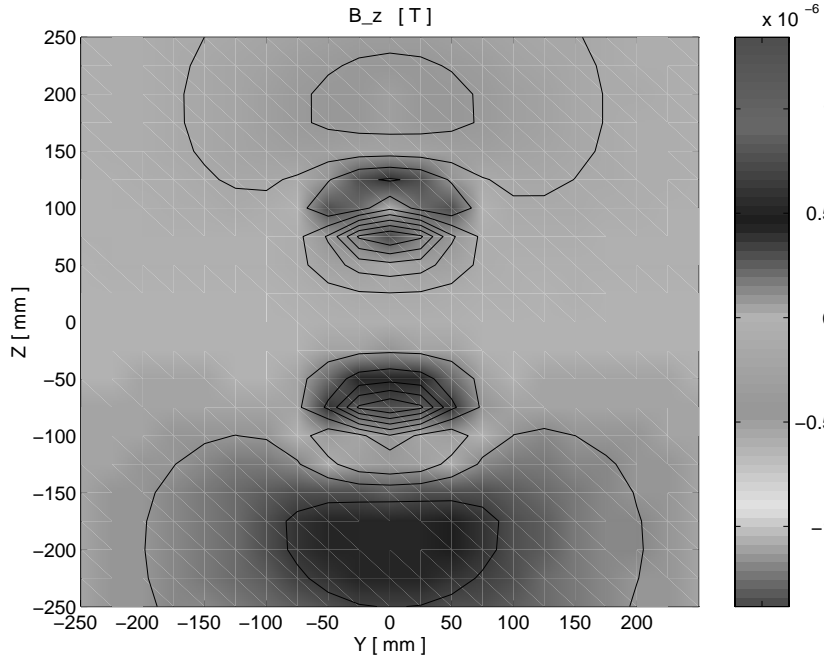
Navržená konfigurace s poměrně vysokou hodnotou koeficientu $a_{17} = -0,57 [\mu T]$ je přijatelná v takovém případě, pokud je měřený vzorek umístěn blízko středu pracovního prostoru magnetu. Magnetické pole generované korekční cívku s navrženou konfigurací je patrné z obr. 4.2.

4.4 Návrh korekční cívky typu XZ4

4.4.1 Technická specifikace

XZ4-korekční cívka se řadí do skupiny korekcí vyššího řádu. Vzájemné proudové orientace v jednotlivých cívkách jsou stejné jako u korekcí typu X a XZ2. Cílová funkce je vyjádřena vztahem

$$f_{min}(\vec{x}) = f_{min}(\vec{z}_1, \vec{z}_2, \varphi) = \sum_{m,n} abs \sum_i d_i [a_{m,n}(\varphi_i, z_{1,i}) - a_{m,n}(\varphi_i, z_{2,i})], \quad (4.5)$$



Obrázek 4.2: Výsledné magnetické pole B_z korekční cívky YZ2 v centrální rovině XY. Souřadnice Z je rovna konstantě.

kde i představuje i -tý závit, $a_{m,n}$ představují minimalizované nežádoucí koeficienty a $d_i \in \{-1, 1\}$ je směr proudu v i -tém závitě.

Při návrhu korekční cívky typu XZ4 se minimalizují koeficienty $\{m, n\} = \{1, 1\}, \{1, 3\}, \{1, 7\}$ a $\{3, 3\}$. Vyrušení nežádoucích koeficientů může být dosaženo nastavením vhodných geometrických parametrů cívky (relativní polohy proudovodičů, velikosti odpovídajících úhlů) a volbou vhodných směrů proudů v jednotlivých závitěch. Při výpočtech je vždy upřednostňováno takové řešení, které lépe vyhovuje podmínce zohledňující citlivost magnetického pole

$$f_{max}(\vec{x}) = f_{max}(z_1, z_2, \varphi) = \sum_i d_i [a_{1,5}(\varphi_i, z_{1,i}) - a_{1,5}(\varphi_i, z_{2,i})] = max. \quad (4.6)$$

Jestliže je požadována minimalizace výrazu f_{min} v (4.5) a zároveň maximalizace výrazu f_{max} v (4.6), lze sestavit výslednou multi-kriteriální cílovou funkcí (4.7).

$$f(\vec{x}) = f_{max}(z_1, z_2, \vec{\varphi}) = W_{min} f_{min} - W_{max} f_{max}, \quad (4.7)$$

kde W_{min} and W_{max} jsou váhové koeficienty.

Sestavená cílová funkce obsahuje velké množství lokálních minim. Je nekonvexní a nespojitá, s průběžně se měnícími omezujícími podmínkami a vázanými proměnnými. Optimalizace směrů proudů vnáší do optimalizačního procesu prvek velkých skokových změn.

4.4.2 Výsledky

Při optimalizaci parametrů korekčních cívek typu XZ4 byl použit meta-evoluční optimalizační algoritmus, který byl sestaven ze dvou optimalizačních vrstev. Na řídicí meta-vrstvě byly použity (1 + 1)-ES, v základní vrstvě byl použit GA. Na základní optimalizační hladině byly pomocí GA optimalizovány parametry z_{1i}, φ_i spolu se směry proudů v

jednotlivých vodičích (po zavedení bivalentně-reálné transformace). (1 + 1)-ES Evoluční strategie byla použita na meta-hladině. Pomocí této metody byly optimalizovány další diskrétní parametry (počet proudovodičů se změněným směrem procházejícího proudu), váhové koeficienty W_{min}, W_{max} definované na multi-kriteriální cílové funkci (4.7) a škálovací faktor S penalizační funkce

$$F = 1 + S * \exp(-0.001 * (a_{max} + 0.4)^{10}), \quad (4.8)$$

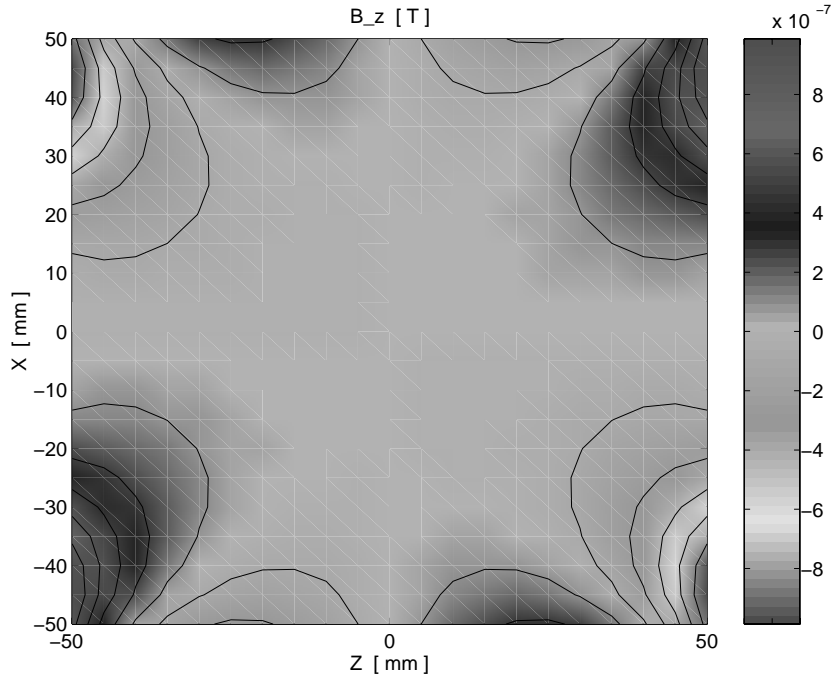
kde koeficient a_{max} byl maximalizován. Ukázalo se, že kvalita nalezeného řešení významně závisí na škálovacím faktoru S . Proto byl také tento parametr zahrnut do množiny řídicích parametrů optimalizovaných na meta-hladině. Teprve po uvedených úpravách bylo dosaženo uspokojivého řešení.

V práci je uvedeno nejlepší dosažené řešení pro cívku se 12 závitů. Velikosti minimalizovaných koeficientů pro korekci typu XZ4 s poloměrem $r = 0.1m$ a proudem $I = 1A$ jsou uvedeny v tab. 4.3. Také je zde uvedena hodnota koeficientu a_{15} představujícího citlivost magnetického pole.

| Minimalizované koeficienty | | | | | Citl.koef. |
|----------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|----------------------|-----------------|
| $a_{11}[\mu T]$ | $a_{13}[\mu T]$ | $a_{17}[\mu T]$ | $a_{33}[\mu T]$ | $\sum a_{ij}[\mu T]$ | $a_{15}[\mu T]$ |
| 0.000009 | 0.000006 | 0.000033 | 0.000000 | -0.000048 | -3.9284 |

Tabulka 4.3: Hodnoty koeficientů $a_{m,n}$ pro korekci typu XZ4 s poloměrem $r = 0.1m$ a proudem $I = 1A$.

Magnetické pole generované korekční cívku s navrženou konfigurací je patrné z obr. 4.3.



Obrázek 4.3: Mapa magnetického pole B_z korekční cívky XZ4 v rovině XZ. Souřadnice Y je rovna konstantě.

4.5 Vytvořené programy

Při řešení dané problematiky byly sestaveny dvě různé skupiny programů. První z nich je určena pro analýzu magnetických polí generovaných proudovým vláknem konečné délky. Druhá skupina programů je určena pro řešení minimalizačních úloh pomocí různých typů optimalizačních metod a jejich variant. Všechny programy byly napsány a odladěny ve výpočetním prostředí MATLAB.

Kapitola 5

Závěr

Evoluční stochastické optimalizační metody (evoluční strategie, genetické algoritmy) byly úspěšně aplikovány na problematiku optimálních návrhů gradientních korekčních cívek typu X, korekčních cívek typu XZ2 a XZ4.

Pomocí zobecněného evolučního principu tzv. meta-optimalizace a jejich různých variant byla řešena problematika globality prohledávání optimalizačního prostoru a také s tím spojená otázka vhodného nastavení popř. adaptace řídicích parametrů těchto metod vzhledem k topologii cílové funkce. Uvedený princip byl rozšířen i na parametry cílových a bariérových funkcí. Byly řešeny otázky spojené s optimalizací navzájem závislých proměnných, problematika multi-kriteriální optimalizace, otázky týkající se problému efektivní práce s prostorem přípustných a nepřípustných řešení. Byly řešeny problémy týkající se úloh smíšeného celočíselně-diskrétně-spojitého nelineárního programování.

Práce přináší původní poznatky a zkušenosti v oblasti aplikace evolučních stochastických optimalizačních metod na návrhy korekčních cívek NMR typu X, XZ2 a XZ4. Pro jednotlivé typy cívek byla provedena analýza problému, stanoveny optimalizované proměnné, sestaveny odpovídající cílové funkce, které bylo možné charakterizovat jako nelineární, nespojité, multi-kriteriální, s navzájem závislými proměnnými a s velkým počtem lokálních minim. Byly provedeny různé varianty experimentů, z nichž pouze některé vedly k řešení daného problému. V tomto směru se osvědčilo užití meta-evolučních optimalizací. U všech uvedených korekcí se s uspokojivými výsledky podařilo minimalizovat zbytkové koeficienty v rozvoji magnetického pole. Dosažená řešení splňují vazební rovnice a nerovnice definované vzhledem k fyzikálním a technologickým požadavkům a navržené cívky mají požadované magnetické pole dostatečně silné. Dosažené výsledky jsou reprodukovatelné.

U korekcí typu X byla posouzena správnost a vhodnost použitých optimalizačních metod porovnáním jejich výsledků s parametry již dříve vypočtených, realizovaných a změřených korekcí. U korekcí vyššího řádu bylo potřeba zároveň optimalizovat diskrétní proměnné, čímž byla problematika rozšířena na mnohem komplikovanější úlohu smíšeného celočíselně-diskrétně-spojitého nelineárního programování. Použitím meta-optimalizačních metod bylo umožněno optimalizovat polohy jednotlivých proudovodičů, ale také počty závitů, směry proudů v jednotlivých proudovodičích, polohy bloků závitů a směry proudů v těchto blocích, atd. Při optimalizaci směrů proudů v jednotlivých proudovodičích značně vzrostl počet stupňů volnosti a cílová funkce získala diskrétní charakter. Proto byla aplikována transformace bivalentních hodnot do oboru reálných čísel. Tuto transformaci je možné použít pro optimalizaci dalších typů vyšších korekcí.

K optimalizaci byly použity různé varianty genetických optimalizací a evolučních strategií $((\mu, \lambda)$ -ES, $(\mu + \lambda)$ -ES, $(1 + 1)$ -ES, $(1 + 1)$ -Meta ES). Jejich vlastnosti a charakter chování byly zvažovány z hledisek globality, rychlosti konvergence k lokálnímu či globál-

nímu minimu, snadné aplikovatelnosti na řešený problém a možnosti ovlivňovat charakter prohledávání optimalizačního prostoru. Jako meta-optimalizační metoda se osvědčila varianta využívající (1+1)-ES algoritmus na řídicí rovině a GA algoritmus na základní rovině.

Příspěvkem k řešení dané problematiky je především zjednodušení optimalizační procedury, která byla plně zautomatizována pro korekce typu X a XZ4 a částečně pak pro korekce typu XZ2. Použití evolučních metod umožnilo zvýšení počtu optimalizovaných stupňů volnosti. Aplikací uvedených metod je možné dosáhnout kvalitnějšího řešení (zvláště u korekcí vyššího řádu) v mnohem kratším čase. Byly doporučeny postupy pro optimalizaci uvedených typů korekcí a nalezeny optimální konstrukční parametry pro gradientní korekční cívky typu X, XZ2 a XZ4. Použitými metodami se podařilo snížit nároky na znalosti a zkušenosti řešitele. Otevřeným problémem zůstává především otázka optimálních návrhů gradientních cívek o minimální indukčnosti.

V předkládané práci byly naplněny stanovené cíle. Práce představuje další krok ke zkvalitnění návrhů korekčních systémů pro magnety NMR a MRI. Dosažené výsledky byly průběžně prezentovány na mezinárodních konferencích doma: MENDEL (Brno) i v zahraničí Japan-Czecho-Slovak Seminar on Applied Electromagnetism (Slovensko), COMPUMAG '99 (Sapporo, Japonsko) a Joint Seminar'99 (Hokkaido University, Sapporo, Japonsko). Dosažené výsledky byly publikovány v mezinárodních časopisech Journal of Electrical Engineering a v IEEE Transactions on Magnetics.

Summary

Magnetic Resonance is one of the most useful methodologies used in different areas of chemical analysis, biochemistry, biology and medicine. Two most important branches of Magnetic Resonance are Magnetic Resonance Spectroscopy (MRS) and Magnetic Resonance Imaging (MRI). For a good performance of instruments, highly stable magnetic fields of precisely defined shape are required. In the case of spectroscopy, inhomogeneities of magnetic field should not exceed the level 10^{-8} of the basic magnetic field. To achieve this level, it is necessary to correct the basic magnetic field by additional corrective field. For this purpose, the active corrections (shims) formed by a system of coils, through which a DC electric current of a suitable magnitude and direction flows, are used.

In the thesis, the main emphasis is put on the use of Evolutionary Optimization for solving optimization tasks in NMR. Different Evolution Strategies and Genetic Algorithms are used for the design parameters optimizations of active current shim coils.

The resulting shim design is usually a compromise between the contradictory requirement of homogeneity, sensitivity, power consumption, strength acting on individual conductors, temperature, general dimensions, inductance, etc. The optimized objective function is based on recursion expressions for coefficients of particular spherical harmonics describing the magnetic field. Since it reflects some of the described demands, another optimization problems, like the optimization of mutually depending variables, the multi-criterial optimization and the mixed integer-discrete-continuous optimization, are solved.

Using the Evolutionary optimizations, the procedure of optimizing the element positions is illustrated for X, YZ2 and XZ4 shim coils designs.

Reference

[SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY]

- [1] Abraham R.J., Fisher J., Loftus P., *Introduction to NMR Spectroscopy*. John Wiley & Sons, Chichester, New York, Brisbane, Toronto, Singapore, 1988
- [2] Back T., *Evolutionary Algorithms in Theory and Practice*. Oxford University Press, 1996
- [3] Back T., Evolutionary Computation: Comments on the History and Current State. *IEEE Transactions On Evolutionary Computation*. April 1997, vol.1, no.1
- [4] Chen C-N, Hoult D.I., *Biomedical Magnetic Resonance Technology*. Adam Hilger, Bristol and New York, 1989
- [5] Conor Ryan, Shades-A polygenic Inheritance scheme. *3rd International Mendel Conference on Genetic Algorithms, Optimization Problems, Fuzzy Logic, Neural Networks, Rough Sets*. Brno, June 1997, p. 25-27
- [6] Crozier S., Doddrell D.M., Gradient-Coil Design by Simulated Annealing. *Journal of Magnetic Resonance*, Ser.A 103, Academic Press, Inc., 1993, p.354-357
- [7] Crozier S., Dodd S., Doddrell D.M., A novel design methodology for N-th order, shielded longitudinal coils for NMR. *Measurement Scientific Technology*, UK, 1996, no.7, p.36-41
- [8] Eiben A.E., Hinterding R., Michalewicz Z., Parameter Control in Evolutionary Algorithms. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 1999, vol.3, no.2, p. 12
- [9] Frank J.M. van de Ven, *Multidimensional NMR in Liquids*. VCH Publishers, Inc., 1995
- [10] Gottvald A., Meta-Evolutionary Optimization. *In: Proc. of MENDEL'95 - the International Conference on Genetic Algorithms*. Brno, p. 47-52, 1995
- [11] Gottvald A., Inverse Methodologies, Meta-Evolutionary Optimization and Bayesian Statistics: Applications to In Vivo MRS. *In: Proc. of the 4th International Workshop on Optimization and Inverse Problems in Electromagnetism*, Brno, 1996, p.34 p.48
- [12] Gottvald A., Biological Consequences of Evolutionary Optimizations: Mortality, Variability, Survival. *In: Proc. of MENDEL'97 - 3rd International Mendel Conference on Genetic Algorithms, Optimization Problems, Fuzzy Logic, Neural Networks, Rough Sets*, Brno, 1997, p. 56-58

- [13] Gottvald A., Optimizing Axisymmetric Magnet Systems for NMR: A Tutorial. *Journal of Japan Society of Applied Electromagnetics*, Tokyo, Japan, 1996
- [14] Hoffmeister F., Back T., Genetic Algorithms and Evolution Strategies: Similarities and Differences. *University Dortmund, Technical Report no. SYS -1/92*, 1992
- [15] Houck C.R., Joines J.A., Kay M.G., A Genetic Algorithm for Function Optimization: A Matlab Implementation. *North Carolina State University*
- [16] Jurák, P., *Problematika nehomogenity a ladění magnetického pole v NMR spektroskopii*. Kandidátská disertační práce, ÚPT BRNO ČSAV, 1992
- [17] Konzbul P., *Stanovení konfigurace magnetických polí ve spektrometrech nukleární magnetické rezonance*. Diplomová práce, FEI VUT Brno, 1989
- [18] Konzbul P., Švéda K., Shim coils for NMR and MRI solenoid magnets. *Measurement Science & Technology*, 1995, vol. 6, no. 8, p. 1116-1123
- [19] Konzbul P., *Generace a analýza korečních magnetických polí pro NMR a MRI solenoidální magnety*. Disertační práce, FEI VUT Brno, 1997
- [20] Konzbul P., Švéda K., Design and Optimization of Low Power Consumption Shim-Gradient Coil of Z0 Type for MRI and NMR. *Journal of Electrical Engineering*, vol. 48/ 8s, p. 125-128, 1997
- [21] Konzbul P., Švéda K., Superconducting Shim System with High Purity Magnetic Field for NMR and MRI Solenoid Magnet MIDI-200. *IEEE Transactions on Magnetic Resonance*, 1996, no.32, p. 2643
- [22] Lampinen J., Zelinka I., Mixed Integer-Discrete-Continuous Optimization by Differential Evolution. *5th International Conference on Soft Computing MENDEL'99*, Brno, June 1999
- [23] Lunati E., Cofrancesco P., Villa M., Marzola P., Osculati F., Evolution Strategy Optimization for Selective Pulses in NMR. *Journal of Magnetic Resonance*, 1998, 134, p. 223-235
- [24] Macomber R.S., *A Complete Introduction to Modern NMR Spectroscopy*. John Wiley & Sons, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, 1988
- [25] Malczyk R., Gottvald A., Comparison of Evolution Strategy and Backpropagation for Estimating Parameters of Neural Networks. *In: Proc. of the 2nd International Conference on Genetic Algorithms MENDEL'96*, Brno, 1996, p. 71-74
- [26] Malczyk R., Gottvald A., On Evolutionary Phase Corrections in MRS. *In: Proc. of the 3rd International Mendel Conference on Genetic Algorithms, Optimization Problems, Fuzzy Logic, Neural Networks, Rough Sets*, Brno, 1997
- [27] Malczyk R., Gottvald A., Comparison of Evolution Strategy and Back-Propagation for Estimating Parameters of Neural Network. *4th International Workshop on Optimization and Inverse Problems in Electromagnetism*, Brno, June 1996
- [28] Michalewicz Z., A Survey of Constraint Handling Techniques in Evolutionary Computation Methods. *In.: McDonnell J.R., Reynolds R.G., Fogel D.B.: Evolutionary Programming IV.*, MIT Press, 1995

- [29] Ošmera P., Šimoník I., Roupec J., Multilevel Distributed Genetic Algorithm. *In: Proc. Of the First IEE/IEEE Int. Conference on Genetic Algorithms in Engineering Systems – GALESIA '95*, Sheffield, UK, 1995, p. 505-510
- [30] Schild H.H., *MRI made easy*. Radilogische Univrsitatsklinik Bonn, Bergkamen, 1990
- [31] Spall, James C., An Overview of the Simultaneous Perturbation Method for Efficient Optimization. *John Hopkins Apl. Technical Digest*, 1998, vol. 19, no. 4
- [32] Woodward P., Freimarc R., *MRI for Technologists*. McGraw-Hill, 1995

[SEZNAM VLASTNÍCH PUBLIKACÍ]

- [33] Chládek J., Konzbul P., Ošmera P., Gottvald A., Evolutionary and Genetic Optimization of NMR Gradient and Shim Coils. *IEEE Transactions on Magnetics*, July 2000, vol.36, no.4, p.1102-1105
- [34] Chládek J., Konzbul P., Evolution and Genetic Optimization of Higher-Order Shim Coils for NMR. *6th International Mendel Conference Mendel 2000*, Brno, 2000, p. 39-44
- [35] Chládek J., Konzbul P., Ošmera P., Gottvald A., Evolutionary and Genetic Optimization of NMR Gradient and Shim Coils. *COMPUMAG 99*, Sapporo, Japan, 1999
- [36] Konzbul P., Švéda K., Chládek J., Srnka A., Axial Super Shim Coils System for MRI. *In.: Digests of the Joint Seminar'99*, Hokkaido University, Sapporo, Japan, 1999, p. 18-19
- [37] Chládek J., Konzbul P., Ošmera P., Gottvald A., Optimization of NMR and Shim Coils Using Evolutionary Algorithms. *In.: Digests of the Joint Seminar'99*, Hokkaido University, Sapporo, Japan, 1999, p. 22-23
- [38] Konzbul P., Švéda K., Chládek J., Optimum Design of Axial Matrix Shim Coils For NMR. *5th International Mendel Conference Mendel'99*, Brno, 1999
- [39] Konzbul P., Švéda K., Chládek J., Practical Optimization of the MRI Gradient System. *4th International Mendel Conference Mendel'98*, Brno, 1998, p. 173-177
- [40] Chládek J., Ošmera P., Neural Network for Automatic Increasing of Homogeneity of magnetic Field in NMR Spectroscopy. *Journal of Electrical Engeneering*, 1997, vol.48, 8/s, ISSN 0013-578X, p.167-169
- [41] Ošmera P., Chládek J., Neural Model of Magnetic Field in MRS with Genetic Optimization. *4th International Workshop on Optimization and Inverse Problems in Electromagnetism*. Brno, 1996
- [42] Ošmera P., Chládek J., Optimization of Neural Network by Genetic Algorithms. *Proc. of the 1st Slovak Neural Network Symposium*, Herlany, Slovakia, 1996
- [43] Chládek J., *Návrh ovladače pro ladění magnetického pole spektrometru NMR*. Diplomová práce, VUT FS Brno, 1996

CURRICULUM VITAE

Jméno, příjmení: Jan Chládek
Datum narození: 8.10.1972
Bydliště: Brožíkova 435, 530 09 Pardubice
Stav: svobodný

Vzdělání:

1996 - 1999 interní doktorandské studium oboru Technická kybernetika,
VUT Brno, Fakulta strojní, Ústav automatizace a informatiky;
postgraduální student,
Ústav přístrojové techniky AV ČR, Brno
1991 - 1996 absolvent inženýrského studia oboru Přístrojová, regulační a
automatizační technika (ASŘ),
VUT Brno, Fakulta strojní, Ústav automatizace a informatiky
1994 - 1996 Doplnkové pedagogické studium,
Ústav společenských věd, VUT Brno, Fakulta stavební
1987 - 1991 Gymnázium Pardubice
1987 - 1990 Jazyková škola

Dosavadní pracovní zkušenosti:

1996-doposud Ústav přístrojové techniky AV ČR,
Královopolská 147, 612 64 Brno,
Tel: 05/415 14 232,
E-mail: chladek@isibrno.cz
1997 COMSOFT ČR, s.r.o.,
překladačská činnost pro Aris Toolset (systémy řízení);
1994 - 1996 Moravská zemská knihovna Brno, Odbor automatizace,
programátor analytik, technická podpora

Odborné znalosti:

Optimalizační metody (metody matematického programování),
neuronové sítě, zpracování signálu;
programovací jazyky MATLAB, C, Pascal, FoxPro, OOP.
Původní vědecké práce byly prezentovány konferencích v ČR i v zahraničí.

Jazykové znalosti:

anglický jazyk (ruský jazyk, německý jazyk)