

Posudek na doktorskou disertační práci M. Čapka

Mathematical Modelling of Blood Coagulation Process

Práce se zabývá matematickým modelováním a numerickou simulací procesu krevní koagulace v proudící krvi. Práce je psána v anglickém jazyce.

Tato práce se věnuje velmi aktuálnímu tématu, které je v současné době předmětem intenzivního výzkumu týmů na celém světě. Je to dáno jednak prudkým vývojem dosažitelných výpočetních kapacit, tak i možností přímé aplikace získaných výsledků v medicínské praxi. Téma práce lze považovat za náročnější, především vzhledem k jeho multidisciplinarnosti, která v případě předložené práce předpokládá dostatečné zvládnutí a porozumění biochemii a biofyzice krve, fyzice proudění tekutin a deformace poddajných těles, v kombinaci s matematickým modelováním a numerickou simulací těchto procesů.

V rámci předložené disertační práce jsou diskutovány a numericky řešeny modely popisující proudění krve a její koagulaci. Popsané a později v práci použité modely zahrnují ty nejpodstatnější z procesů formujících tvorbu krevních sraženin. Jde především o model proudění vazké nestlačitelné tekutiny, jeho rozšíření pro ne-Newtonovské tekutiny, model biochemických reakcí vedoucích v tvorbě krevní sraženiny včetně uvažování důležitých biomechanických faktorů. Uvedené modely tvoří základ pro formulaci trojrozměrné, časově závislé úlohy pro růst krevní sraženiny na stěně segmentu cévy. Tato úloha je řešena užitím metody konečných prvků. Výsledky jednoduchých simulací jsou diskutovány jednak z pohledu fyzikálního s ohledem na očekávané predikce matematického modelu, tak i z pohledu efektivity paralelní implementace modelu v použitém numerickém řešiči.

Práce je členěna do logických celků, kde v kapitole 2 je stručně, ale výstižně představena krev z pohledu biochemie její srážlivosti. Kapitola třetí pak shrnuje odvození a prezentaci jednotlivých modelů proudění nestlačitelné tekutiny, ne-Newtonovských rheologických modelů použitelných v hemodynamice a dále i zvolené a dále použité modely koagulace krve. V této kapitole jsou dále popsány i modely a postupy, jež tyto jednotlivé stavební bloky (modely jednotlivých procesů) propojují do komplexního modelu koagulace v proudící krvi. Výsledné systémy rovnic jsou řešeny numericky, metodami popsanými v kapitole 4, kde jsou kromě slabých formulací úloh uvedeny i další detaily pro jejich řešení metodou konečných prvků. Kapitola pátá pak obsahuje výsledky numerických simulací pro zjednodušené trojrozměrné

testovací případy, včetně stručné diskuse získaných výsledků a kvalitativní srovnání s obdobnými simulacemi a experimentálními daty. Součástí této kapitoly je i stručné posouzení efektivity paralelní implementace numerických řešičů.

HODNOCENÍ

Předložená práce je vcelku dobře zpracovaná a to jak po stránce ryze odborné, tak i po stránce formální a grafické. Vzhledem k rozsahu práce a šíři jejího záběru není divu, že se v práci vyskytují drobné chyby, překlepy a formulační nepřesnosti. To však výrazně nesnižuje jinak velmi dobrou úroveň celé práce (a proto jejich explicitní výčet neuvádím). Dále shrnuji pro ilustraci jen několik předností a nedostatků předložené práce.

Přednosti:

- Pečlivé nastudování a prezentace problematiky hemodynamiky a biochemie krve, včetně diskuse příslušných matematických modelů.
- Vhodná volba jednotlivých (velmi pokročilých a aktuálních) modelů a jejich provázání do komplexního modelu srážlivosti proudící krve.
- Dotažení výsledných modelů až do použitelných numerických kódů, včetně jejich paralelní implementace na moderní výpočetní platformě.

Nedostatky:

- Drobnější formulační nedostatky (zčásti jistě vlivem použití angličtiny), nevhodně zvolené a místy špatně čitelné obrázky a jejich popisky.
- Převážně pouze kvalitativní srovnání výsledků numerických simulací a jejich prezentace pouze v bezrozměrné formě.
- Absence nějaké alespoň základní fyzikální kvantitativní interpretace výsledků simulací. Vhodné by mohlo být například vyhodnocení průběhu jednotlivých veličin v čase a prostoru (např. vývoj tloušťky sraženiny v čase, průběhy jednotlivých koncentrací ve vybraných bodech, maxima napětí, atd.). Kvantitativní srovnání takovýchto výstupů s dostupnými experimentálními daty by byly nezbytné pro validaci modelu a jeho budoucí praktické využití.

Rád bych se autora zeptal:

1. Jak a hlavně proč byla volena konstanta C ve vztahu (3.218)? Neměla by být rovna jedné, aby mělo t fyzikální význam času?
2. Na straně 50 (ale i jinde) je uvedena Cahn-Hillardova rovnice (3.207) a zvláště pak

explicitní vztah (3.208) pro chemický potenciál μ . Proč není μ rovnou dosazeno do (3.207) a je pak i v numerickém řešení (např. v (4.29)) uvažována soustava dvou rovnic?

3. Byla při konstrukci sítí pro numerické simulace nějak zohledněna tloušťka mezní vrstvy? Obvykle pro simulace vazkého proudění volíme tloušťku buněk u stěny v závislosti na Reynoldsově čísle, aby byly v těchto místech korektně diskretizovány velké gradienty řešení. Zde ještě přichází do úvahy velmi vysoké Pecletovo číslo v simulacích s koagulací. To by naznačovalo nutnost užití extrémně štíhlých buněk v blízkosti stěny. To ale v zobrazených sítích nevidím.

ZÁVĚR

Celkově je práce velmi kvalitní a přínosná a to jak svým zadáním, volbou modelů, metod a prostředků pro její řešení. Výsledky práce, ať už se jedná o modifikace matematických modelů, jejich vzájemné provázání, formulace úloh, nebo vytvoření a odladění numerického kódu pro jejich řešení, představuje potenciálně důležitý přínos pro budoucí praktické využití i další rozvoj výpočtových modelů proudění a koagulace krve. V tomto směru vidím neodiskutovatelný přínos práce studenta pro další rozvoj tohoto oboru.

Autor touto prací jasně prokázal svou velmi dobrou odbornou úroveň i předpoklady pro samostatnou tvořivou práci. Práce splňuje všechny formální i kvalitativní požadavky na ní kladené a proto ji doporučuji k obhajobě.

V Praze dne 16. 8. 2019

Doc. Mgr. Ing. Tomáš Bodnár, PhD.