Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

❑ posudek vedoucího ☑ posudek oponenta
❑ bakalářské práce ☑ diplomové práce

Autorka: Marie Michalová
Název práce: Mixture theory applications in blood flow simulation
Studijní program a obor: Matematika, Matematické a počítačové modelování ve fyzice a technice
Rok odevzdání: 2013

Jméno a tituly ~~vedoucího~~/oponenta: Ondřej Souček, RNDr., Ph.D.
Pracoviště: Matematický ústav UK
Kontaktní e-mail: soucek@karel.troja.mff.cuni.cz

Odborná úroveň práce:
❑ vynikající ☑ velmi dobrá ❑ průměrná ❑ podprůměrná ❑ nevyhovující

Věcné chyby:
❑ téměř žádné ☑ vzhledem k rozsahu přiměřený počet ❑ méně podstatné četné ❑ závažné

Výsledky:
❑ originální ☑původní i převzaté ❑ netriviální kompilace ❑ citované z literatury ❑ opsané

Rozsah práce:
❑ veliký ☑ standardní ❑ dostatečný ❑ nedostatečný

Grafická, jazyková a formální úroveň:
❑ vynikající ☑ velmi dobrá ❑ průměrná ❑ podprůměrná ❑ nevyhovující

Tiskové chyby:
❑ téměř žádné ☑ vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet ❑ četné

Celková úroveň práce:
❑ vynikající ☑ velmi dobrá ❑ průměrná ❑ podprůměrná ❑ nevyhovující

Slovní vyjádření, komentáře a připomínky vedoucího/oponenta:

Předložená diplomová práce se zabývá formulací úlohy proudění krve v cévách. Krev je popsána zjednodušeným konstitutivním modelem nestlačitelné newtonovské případně nenewtonovské kapaliny jejíž viskozita závisí na objemové koncentraci červených krvinek (hematokrit). Problém proudění je tedy přes reologii svázán s advekčně-difuzní rovnici pro tuto koncentraci. Další složkou krve, která je modelována, jsou krevní destičky, jejichž transport je popsán opět popsán advekčně-difuzní rovnicí. Difuze krevních destiček však vykazuje jednak anizotropii (transverzální izotropii) určenou lokálním směrem rychlostního pole, jednak zahrnuje křížový efekt s hematokritem.

Práce je rozčleněna do sedmi kapitol. V první jsou představeny základní biologické poznatky o složení krve a jejích vlastnostech, ve druhé kapitole uvažuje autorka elementy teorie směsí k navození jedné z formulací dané úlohy. Oba modely jsou (silně) zformulovány v kapitole 3 včetně uvažované třídy hraničních a počátečních podmínek. V kapitole 4 jsou uvedeny použité numerické metody, je představen konečně elementní software FEniCS, v němž je úloha implementována, a je zdokumentováno několik základních uvažovaných geometrií ve 2D a jedna 3D. V páté kapitole jsou shrnuty elementy funkcionální analýzy a důležitá tvrzení jež jsou používána v šesté kapitole. Ta tvoří jádro práce a obsahuje definici slabého řešení úlohy s newtonovskou reologií, a důkaz existence tohoto řešení limitním přechodem v Galerkinovské aproximaci. Důkaz využívá částečného rozseparování systému, které umožňuje studovat zvlášť podsystém rovnic proudění plus hematokrit, a v druhém kroku využít získané výsledky v rovnici pro koncentraci krevních destiček. Pro obě koncentrace je nejprve ukázána existence řešení pro regularizovanou úlohu jež nevyžaduje omezenost koncentrací, a následně je dokázán princip maxima, jež tuto regularizaci zpětně ospravedlňuje.

Práce je napsána přehledně, je dobře a logicky členěna a zahrnuje všechny důležité stupně formulace fyzikálního a matematického modelu, od diskuse fyzikální reality a pozorovaných vlastností, přes matematickou formulaci modelu a studium dobré podmíněnosti této formulace, až po volbu numerických metod a jejich implementaci. Právě v šíři záběru a vytyčeného cíle tkví ale současně hlavní slabina práce. S výjimkou podrobně psané části věnované analýze, je jak formulace modelu a jeho diskuse, tak část věnovaná numerickým metodám a numerickým výsledkům místy až příliš stručná, což vede k drobnějším a místy i závažnějším nejasnostem a nepřesnostem, výčet těch hlavních přikládám níže. Práci by celkově prospělo pečlivější zamyšlení nad interpretací daného modelu i pozorovaných výsledků. Na druhou stranu je potřeba vyzdvihnout autorčino úsilí uchopit a popsat daný problém v celé jeho šíři včetně podrobné existenční analýzy daného modelu. **Práce splňuje všechny nároky kladené na diplomovou práci.**

Poznámky: přikládám na samostatném listu

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

- Ve formulace úlohy je zahrnut křížový člen mezi koncentrací krevních destiček a červených krvinek. Tento člen se však objevuje pouze v rovnici pro koncentraci krevních destiček, přitom například v kontextu lineární nerovnovážné termodynamiky lze usuzovat, že by se duální křížový člen (tedy s ∇c měl objevit i v rovnici pro koncentraci červených krvinek. Jaké jsou důvody pro jeho vynechání a lze odhadnout, jak by přítomnost takového členu zkomplikovala analýzu daného systému?
- V závěru se objevuje úvaha o přílišném zjednodušení rovnice pro hematokrit, která je v tuto chvíli vlastně pouze regularizovaná transportní rovnice. Jak konkrétně by se vylepšení modelu pro hematikrit provedlo?

Práci
☑ doporučuji
❑ nedoporučuji
uznat jako diplomovou~~/bakalářskou~~.

Navrhuji hodnocení stupněm:
❑ výborně ☑ velmi dobře ❑ dobře ❑ neprospěl/a

Místo, datum a podpis ~~vedoucího~~/oponenta:

V Praze, dne 16.1.2014

RNDr. Ondřej Souček, Ph.D.

Příloha k oponentskému posudku diplomové práce

Marie Michalová, Mixture theory applications in blood flow simulations, Matematika, Matematické a počítačové modelování ve fyzice a technice, 2013.

Poznámky a připomínky

1. Odvození směsového modelu z parciálních bilancí pro jednotlivé složky ve druhé kapitole je dosti schematické, přechod od kinematických veličin pro jednotlivé složky směsi ke kinematickým veličinám pro směs jako celek není diskutován vůbec, není jasné, jak se dospěje k modelu (2.6). V tomto smyslu je také název práce lehce zavádějící, teorie směsí není de facto k formulaci modelů použita nebo alespoň ne přímo v práci. Oba modely se dají chápat jako fenomenologické modely kombinující proudění s advekčně difuzním problémem pro dvě skalární veličiny (koncentrace).

2. Interpretace jednotlivých členů v konstitutivním vztahu pro difuzní tok na str 13 je chybná. Autorka píše: "The term $-\mathrm{div}(\boldsymbol{D}\nabla c(\epsilon_2 + \phi))$ represents the diffusion of platelets away from the regions with high hematocrit values, whereas the term $-\mathrm{div}(c(1-c)k_3\nabla\phi)$ enhances the transport in the direction of $\nabla\phi$."První člen představuje klasickou difuzi pro c, pouze difuzní koeficient závisí na orientaci proudění a na hematokritu, afinitou tohoto transportního procesu je nicméně stále ∇c - gradient koncentrace destiček (platelet). Oproti tomu druhý člen odpovídá křížovému efektu - difuze destiček hnaná gradientem hematokritu, proti směru (nikoli ve směru) tohoto gradientu.

3. Chybné znaménko u $\mathrm{div}\mathbb{T}$ ve (3.9_1)

4. Setup test 3.2.2. příliš neumožňuje posoudit řešení a jeho vztah k citovanému analytickému výsledku.

5. Jaká je motivace k použití Taylor-Hood elementů (str 18) - je v citované práci dokázána např. stabilita pro takovouto diskretizaci?

6. Jaké jsou parametry výsledných používaných sítí? Proč je síť zahuštěna pouze v oblasti aneurysmatu? Výsledky naznačují, že jemnější diskretizace by byla vhodná také u hranic, kde se koncentrují destičky v důsledku křížového efektu s hematokritem.

7. Sekce 4.5.1.- Co je v_T^h? Jak je přesně definován parametr δ_v^h z vektorového rychlostního pole? Citovaný Tezduyar (1992) (vz.4.12) uvažuje trochu jiný vzorec, než je uveden v práci. Jedná se o překlep? Na str. 22 ve vzorci pro d_c^h a τ_c má být zřejmě D nahrazeno k_3 - viz. (3.2). Není mi jasné, jak zapadá člen s $c(1-c)$ (nelinearita) do schematu úplně dole na str. 21.

8. První nerovnost v (6.26) neplatí, máme odhad pro $1 + \|\boldsymbol{v}^n - \boldsymbol{v}_D\|_2^2$.

9. str. 39, limitní přechod ve členu $\int_Q \bar{\mu}(\phi^n)\mathbb{D}\boldsymbol{v}^n \cdot \mathbb{D}\boldsymbol{w}_k\xi$ je nesprávně zdůvodněn ((a) i (b)). V a) se nesprávně použije slabá konvergence, v b) pro nelinearitu $\bar{\mu}(\phi^n)$ zase nemáme slabou konvergenci $\bar{\mu}(\phi^n)$ k $\bar{\mu}(\phi)$ v $L^2(0,T;W^{1,2}(\Omega))$, jak je uvedeno. Pokud ale rozdělíme původní integrál jako $\int_Q(\bar{\mu}(\phi^n)\mathbb{D}\boldsymbol{v}^n - \bar{\mu}(\phi)\mathbb{D}\boldsymbol{v}) \cdot \mathbb{D}\boldsymbol{w}_k\xi = \int_Q(\bar{\mu}(\phi)(\mathbb{D}\boldsymbol{v}^n - \mathbb{D}\boldsymbol{v}) \cdot \mathbb{D}\boldsymbol{w}_k\xi +$

$\int_Q (\bar{\mu}(\phi^n) - \bar{\mu}(\phi))\mathbb{D}\boldsymbol{v}^n \cdot \mathbb{D}\boldsymbol{w}_k\xi$ projdeme v prvním integrálu slabou konvergencí a ve druhém můžeme využít konvergenci bodovou (a.e.), jež plyne ze silné konvergence ϕ^n v $L^2(0,T;L^2(\Omega))$ a použít Vitaliho větu (využívajíc omezenosti $\mathbb{D}\boldsymbol{v}^n$ v $L^2(0,T;L^2(\Omega))$ díky slabé konvergenci).

10. Str. 40, nahoře - (a). Chybně zdůvodněný limitní přechod - pro ϕ^n_+ nemáme k dispozici silnou konvergenci v $L^2(0,T;W^{1,2}(\Omega))$. Můžeme ale využít silnou konvergenci v $L^2(0,T;L^2(\Omega))$ a omezenosti ϕ^n_+ v $L^2(0,T;L^6(\Omega))$ a interpolovat.

11. Str. 40 - Limitní přechod ve členu $\int_0^T \int_\Omega \epsilon(\nabla\phi^n - \nabla\phi) \cdot \nabla\psi_l\xi$ - silnou konvergenci $\nabla\phi^n$ nemáme k dispozici. Stačí ale využít slabé konvergence v $L^2(0,T;L^2(\Omega))$.

12. Str. 51, sekce 7.1. Co se myslí řešením? Předpokládám, že stacionární limita evolučního problému. Věta "If we leave out the third one, the solution is a constant function - even for non-constant inlet boundary condition."To se nezdá být možné. Stacionární řešení daného advekčně difuzního problému jistě obecně nebude konstanta, pouze možná s daným nastavením parametrů (dominantní difuze) se tak může opticky jevit.

13. Obrázky v sekci 7 mají poměrně nešťastně volené barevné škály. Ty vedou k mylným závěrům jako např. na str. 53: "In figure 7.2 we see that an increasing k_2 has an opposite effect than increasing k_1. Recalling equation (7.1), for higher values of k_2, we can observe a faster transport of platelets away from the regions with high velocity."Koeficient k_2 definuje (transverzálně anizotropní) difuzivitu ve směru kolmém na rychlostní pole. Tato difuzivita však nezávisí na velikosti rychlosti, jak je naznačováno. Vzhledem k tomu, že koeficient k_1 je koeficient standrardní izotropní difuzivity, není pravda, že by koeficienty k_1 a k_2 měly opačné efekty na difuzi. Efekt mají stejný - oba zvyšují difuzivitu, k_2 však pouze ve směru kolmém na rychlostní pole.

14. Str. 54 "We observe, that the terms with k_3 and k_2 seem to have the same effect."To není pravda. Zatímco člen s k_3 odpovídá křížovému efektu a zvyšuje tedy koncentraci destiček u stěn cévy, člen k_2 je klasická (self-)difuzivita jež naopak vede k "rozmazání" koncentračního profilu destiček směrem dovnitř oblasti. V tomto smyslu působí oba efekty spíše proti sobě.

Další drobné poznámky

1. Uvítal bych důsledné značení skalárních součinů mezi vektory, a psaní plošných normál v povrchových integrálech - str 32

2. Str. 36, dole. Co je $\boldsymbol{a}$?

3. Str 38, pozor na komutace:

$$\int_Q (\boldsymbol{v}^n \otimes \boldsymbol{v}^n - \boldsymbol{v} \otimes \boldsymbol{v}) \cdot \nabla\boldsymbol{w}_k\xi = \int_Q ((\boldsymbol{v}^n - \boldsymbol{v}) \otimes \boldsymbol{v}^n) \cdot \nabla\boldsymbol{w}_k\xi + \int_Q \boldsymbol{v} \otimes (\boldsymbol{v}^n - \boldsymbol{v})) \cdot \nabla\boldsymbol{w}_k\xi$$

4. Str. 41 - text nad (6.51) - uvedená formule není definicí slabé konvergence v $L^2_{0,\mathrm{div}}$

5. Str. 42 - chybějící t u členu $K_2\|\boldsymbol{v}^n - \boldsymbol{v}_D\|^2_{L^\infty(0,T;L^2(\Omega))}$
6. Str. 42 - "using weak lower semicontinuity", slabá zdola polospojitost se nijak nevyužije
7. Str. 46 - nahoře v definici α_3^j - co je C_j?
8. Str. 48 - v odhadu $C \geq \|c^n - c_D\|_{L^2(\Omega)} \geq \|c^n - c_D\|_{L^1(\Omega)} \ldots$ chybí konstanta před $\|c^n - c_D\|_{L^1(\Omega)}$ a místo γ_i^n má být zřejmě a_i^n.
9. Str. 53 - Jaká je hodnota brownovské difuzivity? Co je $\dot{\gamma}_{wall}$?

V Praze, dne 16.1. 2014 RNDr. Ondřej Souček, Ph.D.