

Válasz Bobok Elemér bírálatára

Köszönöm bírálónak a dolgozat alapos áttanulmányozását, a bátorító megjegyzéseket és kérdéseket.

A továbbiakban a bírálat végén feltett három kérdésre válaszolok.

1. *A vér nemnewtoni tulajdonságait leíró reológiai modellekről.*

Előre kell bocsátanom, hogy a vér reológiájáról nagyon nehéz hiteles kísérleti adatokat szerezni, hiszen élő szövet lévén a vér egészen másképp viselkedhet az élő szervezetben, mint in vitro körülmények között.

A vér szuszpenzió: a folytonos fázisú vérplazmában vörösvértestek, fehérvérsejtek és vérlemezkék vannak. Ezek közül a vörösvértestek a legjelentősebbek mind számukat, mind összterfogatukat tekintve (kb. 45 térfogat%), míg a plazma kb. 55 térfogat%-ot foglal el. A vér nemnewtoni tulajdonságai több formában jelentkeznek. Egyrészt növekvő alakváltozási sebességgel (sebességgradienssel) csökkenő viszkozitást mutat (shear-thinning), ami egy határértéktől kezdve már konstans viszkozitásnak tekinthető. Ennek a határ-alakváltozási sebességnek a numerikus értéke az irodalomban széles értékek között változik: 45 1/s és 300 1/s között minden érték előfordul. Vannak olyan modellek is, amelyek nagyon alacsony alakváltozási sebességnél is konstans viszkozitást jósolnak. A shear-thinning viselkedés a vörösvértestek egymásba akadásának és nagyobb nyírófeszültségeknél az összeakadás megszűnésének következménye. Másrészt több irodalmi forrás egy határfeszültséget definiál, ami alatt a vér szilárd testként, felette folyadékként viselkedik (yield stress). Harmadrészt, különösen kis méretű erekben, de kisebb mértékben nagyobb erekben is a vér viszkoelasztikus tulajdonságokat mutat. Az elaszticitás elsősorban a vörösvértestek egymásba akadásának és rugalmasságának következménye, kisebb mértékben a plazma maga is elasztikus. Negyedrészt a vér tixotróp tulajdonságokat is mutat, amik következtében egy ciklikus terhelés esetén hiszterézist is tapasztalhatunk a viszkozításban.

Az irodalomban rendkívül sok modell fordul elő. Ezeket alább az 1. és a 2. táblázatban két csoportra osztva közlöm: az első csoportban a viszkoelaszticitást nem, csak a többi (vagy közülük csak az egyik) hatást figyelembe vevő modelleket, a másodikban a viszkoelasztikus hatásokat is figyelembe vevő modelleket közlöm. A táblázatokból látszik, hogy a nem-newtoni reológiai modellek tárháza igen gazdag, a területet intenzíven kutatják. Ahogyan az irodalom sem, én sem tudok állást foglalni egyik modell mellett sem.

(Forrás: Laura Campo-Deaño et al.: A Review of Computational Hemodynamics in Middle Cerebral Aneurysms and Rheological Models for Blood Flow. Applied Mechanics Reviews. May 2015, Vol. 67. pp. 030801-1 - 030801-16)

2. *Miért csak nagyon kis átmérőjű véredényekben jelentkeznek nem-newtoni hatások?*

Ezt részben az előző kérdés kapcsán megválaszoltam. Az alakváltozási sebességtől való függés azért lesz jelentősebb a kis véredényekben, mert a konstans viszkozitás határértéke alá, a változó viszkozitású, azaz a nem-newtoni tartományba kerülünk. Ez növeli a látszólagos viszkozitást. Egy másik hatás az ún. Fåhræus-Lindquist hatás, amely azt mondja, hogy a vörösvértestek, különösen a kisméretű erekben, az ér közepe felé csoportosulnak és a fal mellett vékony, vörösvértest-mentes plazmaréteg alakul ki. Ez csökkenti a látszólagos viszkozitást. Ezek szerint két ellentmondó hatás van, mindkettő nem-newtoni, és mindkettő másképp nem-newtoni. Az eredő viselkedés meglehetősen komplikált, és valószínűleg függ a konkrét ér geometriájától is. Mivel azonban a nagyon kis erekben (< 0,2 – 0,3 mm) csökken a sejtes elemek koncentrációja, itt az eredő hatás az lesz, hogy a viszkozitás csökken, azaz a második hatás erősebb. A viszkoelasztikus

hatások azért erősödnek fel, mert a kis átmérőjű erekben nagyobb valószínűséggel akadnak össze a vörösvértestek és tudják tárolni a rugalmas energiát.

1. táblázat: Emberi vér viszkozitásmodelljei, általánosított newtoni közeggel

Modell	Leíró egyenletek
Casson	$\eta = (1/\dot{\gamma})[K_0(c) + K_1(c)\sqrt{\dot{\gamma}}]^2$ $K_0(c) = 0,1937 (Pa)^{1/2}, K_1(c) = 0,1937 (Pa \cdot s)^{1/2}$
Walburn-Schneck	$\eta = C_1 e^{(C_2 + C_3/H^2) \dot{\gamma} ^{(1-C_4H)}}$ $C_1 = 0,00797 Pa \cdot s, C_2 = 0,0608, C_3 = 377,7515, C_4 = 0,00499$
Hatványfüggvény	$\eta = k\dot{\gamma}^{n-1}$ $k = 14,67 \cdot 10^{-3} N s^n/m^2, n = 0,7755$
Herschel-Bulkley	$\eta = k\dot{\gamma}^{n-1} + (\tau_0/\dot{\gamma})$ $k = 8,9721 \cdot 10^{-3} N s^n/m^2, n = 0,8601, \tau_0 = 0,0175 N/m^2$
Carreau	$\eta(\dot{\gamma}) = \eta_\infty + (\eta_0 - \eta_\infty)[1 - (\lambda\dot{\gamma})^2]^{(n-1)/2}$ $\eta_0 = 0,056 Pa \cdot s, \eta_\infty = 0,00345 Pa \cdot s, n = 0,3568, \lambda = 3,313 s$
Carreau-Yasuda	$\eta(\dot{\gamma}) = \eta_\infty + (\eta_0 - \eta_\infty)[1 - (\lambda\dot{\gamma})^a]^{(n-1)/a}$ $\eta_0 = 0,022 Pa \cdot s, \eta_\infty = 0,0022 Pa \cdot s, a = 0,644, n = 0,392, \lambda = 0,110 s$
Módosított-általánosított Oldroyd-B	$\eta = \eta_\infty + (\eta_0 - \eta_\infty)[(1 + \ln(1 + \Lambda\dot{\gamma})) / (1 + \Lambda\dot{\gamma})]$ $\eta_\infty = 0,0055 Pa \cdot s, \eta_0 = 0,0736 Pa \cdot s, \Lambda = 14,81 s$
Quemada	$\eta = \eta_\infty \left[1 - (1/2) \left(K_0 + K_\infty \sqrt{\dot{\gamma}/\dot{\gamma}_c} / (1 + \sqrt{\dot{\gamma}/\dot{\gamma}_c}) \right) \varphi \right]^{-2}$ $\eta_\infty = 0,0012 Pa \cdot s, \dot{\gamma}_c = 1,88 s^{-1}, K_\infty = 2,07, K_0 = 4,33, \varphi = 0,45$
Cross	$\eta = \eta_\infty + (\eta_0 - \eta_\infty)/(1 + (\lambda\dot{\gamma})^n)$ $\eta_0 = 0,126 Pa \cdot s, \eta_\infty = 0,0036 Pa \cdot s, n = 0,64, \lambda = 8,2 s$

$\dot{\gamma}$ a deformációsebesség, mértékegysége s^{-1} , és az alakváltozási sebesség tenzor skalár invariánsa.
 $\dot{\gamma}_{ij} = (\partial/\partial x_i)v_j + (\partial/\partial x_j)v_i$, ekkor $\dot{\gamma} = \sqrt{(1/2)\sum_i \sum_j \dot{\gamma}_{ij}\dot{\gamma}_{ji}}$, az η_0 és az η_∞ rendre a kis és a nagy deformációsebességhez tartozó konstans viszkozitás, λ a karakterisztikus időállandó.

2. táblázat: Matematikai modellek az emberi vér viszkoelasztikus tulajdonságokat mutató nemnewtoni folyadékként való leírására

Modell	Leíró egyenletek
Thurston	$\boldsymbol{\tau} = \sum_{j=1}^6 \tau_j + 2\eta_\infty \mathbf{D}$ $\tau_j + \lambda_j (\partial \tau_j / \partial t) = 2 \left(\eta_{0,j} / \left(1 + (\lambda_j \dot{\gamma})^2 \right) \right) \mathbf{D}$ $\eta = \eta_\infty + \sum_{j=1}^6 \eta_{0,j} \left[1 + (\lambda_j \dot{\gamma})^2 \right]^{-1}$
Owens ^a	$\boldsymbol{\tau} + \mu \left(\frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} - \nabla \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \mathbf{v}^T \right) = N_0 k_b T \mu \dot{\gamma}$ $\mu = (n \lambda_H / (1 + g_n n \lambda_H))$ $(dn/dt) = -(1/2)[b(\dot{\gamma})(n - n_{st})(n + n_{st} - 1)]$ $b(\dot{\gamma}) = a(\dot{\gamma})N_0/[n_{st}(n_{st} - 1)]$ $n_{st} = (\eta_0/\eta_\infty)(1 + \Phi \dot{\gamma}^m)/(1 + \beta \dot{\gamma})(1 + (3/2)aN_0 \lambda_H)$
Moyers-Gonzalez ^b	$(DN_0/Dt) = D_{tr} \nabla^2 N_0 - (D_{tr}/(k_b T + \kappa)) - \nabla \nabla : \boldsymbol{\tau}$ $\boldsymbol{\tau} + \bar{\mu} \nabla \boldsymbol{\tau} - D_{tr} \bar{\mu} (\nabla^2 \boldsymbol{\tau} + (\nabla \nabla : \boldsymbol{\tau}) \boldsymbol{\delta}) = N_0 (k_b T + \kappa) \bar{\mu} \dot{\gamma}$ $(DM/Dt) = D_{tr} \nabla^2 M - (D_{tr}/(k_b T + \kappa)) \nabla \nabla : \boldsymbol{\sigma} - (a(\dot{\gamma})/2) M^2$ $+ (b(\dot{\gamma})/2)(N_0 - M)$ $\boldsymbol{\sigma} + \bar{\mu} \nabla \boldsymbol{\sigma} - D_{tr} \bar{\mu} (\nabla^2 \boldsymbol{\sigma} + (\nabla \nabla : \boldsymbol{\sigma}) \boldsymbol{\delta}) = M (k_b T + \kappa) \bar{\mu} \dot{\gamma}$

Anand és Rajagopal ^c	$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \mathbf{S}$ $\mathbf{S} = \mu \mathbf{B}_{k_p(t)} + \eta_1 \mathbf{D}$ $\mathbf{B}_{k_p(t)} = -2(\mu/\alpha)^{1+2n} \left(\text{tr}(\mathbf{B}_{k_p(t)}) - 3\lambda \right)^n [\mathbf{B}_{k_p(t)} - \lambda \mathbf{I}]$ $\lambda = \left[3 / \text{tr}(\mathbf{B}_{k_p(t)}^{-1}) \right]$ $n = (\gamma - 1) / (1 - 2\gamma); n > 0$
Giesekus	$\boldsymbol{\tau}_p + \lambda \frac{\nabla}{\tau_p} + \alpha(\lambda/\eta_0) \boldsymbol{\tau}_p \boldsymbol{\tau}_p = -\eta_0 \dot{\gamma}$ $\gamma(\text{tr} \boldsymbol{\tau}_p) + \lambda \frac{\nabla}{\tau_p} + (\xi/2) \lambda (\dot{\gamma} \boldsymbol{\tau}_p + \boldsymbol{\tau}_p \dot{\gamma}) = \eta_0 \dot{\gamma}$

^a N_0 az egységnyi térfogatban található vörösvértestek száma; n az aggregátumban lévő vörösvértestek átlagos száma; n_{st} n állandósult állapotbeli értéke egy adott deformációs sebességre ($\dot{\gamma}$); $a(\dot{\gamma})$ és $b(\dot{\gamma})$, rendre az aggregátum felépülésének és lebomlásának sebessége; Φ és β a Cross modell paraméterei, λ_H Maxwell relaxációs idő; $g_n n = (1/2) b n(n-1) + a N_0$; T az abszolút hőmérséklet.

^b D_{tr} a translációs diffúzió idő; $\bar{\mu}$ az átlagos relaxációs idő; κ konstans a vér egyéb sejtjeivel való ütközést veszi figyelembe; M pedig az aggregátumban lévő vörösvértestek egységnyi térfogatra jutó száma.

^c $\mathbf{B}_{k_p(t)}$ a bal Cauchy-Green nyúlási tenzor, amelynek referencia-konfigurációjaként $\mathbf{k}_{p(t)}(\mathbf{B})$ (azaz a test terhelésének hirtelen megszüntetésekor elért feszültségmentes állapot) szolgál. $\boldsymbol{\sigma}$ a Cauchy feszültség-tenzor, $\mathbf{D}$ az alakváltozási sebesség tenzor: $\mathbf{D} = (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)/2$.

3. „Miért korlátozza az érfalon a csúszásmentes peremfeltétel a modellezés pontosságát?”

Feltételezem, hogy bírálóm a kérdésével a következő mondatra utal, amely a disszertáció 80. oldalán található: „További hátrány, hogy a csúszásmentes fal peremfeltétel implementálása csak elsőrendű pontosságot eredményez.”

Mielőtt a kérdés lényegére válaszolok, szeretnék két tisztázó megjegyzést tenni. Az egyik, hogy az elsőrendű pontosságú séma nem feltétlenül pontatlanabb, mint a másodrendű, csak azt állíthatjuk, hogy a háló sűrítésével a másodrendű séma gyorsabban fog konvergálni. A másik, ahogy a dolgozatban is áll, nem a csúszásmentes peremfeltétel, hanem annak IMPLEMENTÁLÁSA eredményezi az elsőrendű pontosságot.

A használt lattice Boltzmann vagy rács Boltzmann módszer fiktív részecskék ütközésére alapul. A részecskék a térnek csak kijelölt, diszkrét irányba haladhatnak, pl. sík probléma esetén egy négyzet középpontjából a négy oldal felezőpontjának és a négy sarokpontnak irányában. A falat az általunk használt, legegyszerűbb implementációban rugalmas ütközéssel modellezzük. Ez azt jelenti, hogy a beesési szög egyenlő a visszaverődési szöggel. Ha csúszó fal (slip wall) peremfeltételt használunk, akkor a visszaverődés a továbbhaladás irányában történik, ha csúszásmentes fal peremfeltételt használunk, akkor a visszaverődés a részecske érkezésének irányában visszafelé történik.

A lattice Boltzmann módszerben mind a folyadékteret, mind a falat egyenlő nagyságú kockákkal, ún. voxelekkel írjuk le. Így egy görbült falat csak lépcsős közelítéssel lehet megadni.

Ha a fal sík és valamely koordinátatengellyel párhuzamos, és az áramlás stacionárius, ez a peremfeltétel másodrendű pontosságú, mert a visszaverődés akár így, akár úgy az előre megadott irányokban történik. Ha a fal görbült, vagy az áramlás instacionárius, akkor ez nagy valószínűséggel nem így van, ezért a pontosság rendje csökken.

Görbült falakra is léteznek másodrendben pontos fal-implementációk, ahol nagyobb számítási ráfordítással meghatározzák a fal lokális normálisát és a különböző irányokban visszapattanó részecskék arányát igazítják ehhez. Esetünkben a geometria igen komplikált volt, de a pontosság növelését praktikusabbnak láttuk a háló sűrítésével megoldani.

Budapest, 2016. április 14.

Dr. Paál György