

Моделирование процессов сорбции в тканях

Лукшин Петр Андреевич

МГУ им. М. В. Ломоносова
Факультет вычислительной математики и кибернетики
Кафедра вычислительных методов

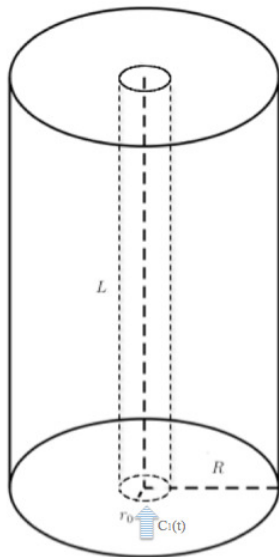
Научный руководитель: д.ф.-м.н., профессор С.И. Мухин

Москва, 2015

Цель работы

Математическое моделирование процессов сорбции/десорбции некоторого рассматриваемого вещества (лекарства) в тканях, цилиндрически окружающих одиночный кровеносный сосуд с учетом гемодинамического и диффузионного вкладов.

Постановка задачи



- L — длина сосуда
- r_0 — внутренний радиус сосуда
- R — внешний радиус сосуда
- $C_1(t)$ — импульс вещества на нижней границе сосуда

Постановка дифференциальной задачи

Задача Коши для уравнения кинетики сорбции с изотермой Генри:

$$\begin{cases} \frac{\partial a}{\partial t} = \beta(u - \gamma a), & t > 0, \\ a(x, r, 0) = a_0(x, r), \\ u(x, r, t) = \varphi(x, r, t) \end{cases} \quad (1)$$

- $u(x, r, t)$ — концентрация вещества в ткани
- $a(x, r, t)$ — количество сорбированного вещества
- β — кинетический коэффициент
- $\frac{1}{\gamma}$ — коэффициент Генри

Постановка разностной задачи

Явная разностная схема для уравнения кинетики сорбции (метод Эйлера):

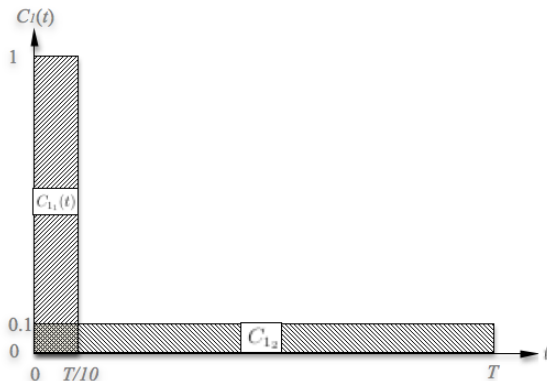
$$\begin{cases} \frac{a_{ij}^{n+1} - a_{ij}^n}{\tau} = \beta(u_{ij}^n - \gamma a_{ij}^n), \\ a_{ij}^0 = 0, \\ u_{ij}^n = f_{ij}^n, \\ i = 0, 1, \dots, N_x, j = 0, 1, \dots, N_r, n = 0, 1, \dots, N_t \end{cases} \quad (2)$$

$$\begin{cases} a_{ij}^{n+1} = a_{ij}^n + \tau \beta(u_{ij}^n - \gamma a_{ij}^n), \\ a_{ij}^0 = 0, \\ u_{ij}^n = f_{ij}^n, \\ i = 0, 1, \dots, N_x, j = 0, 1, \dots, N_r, n = 0, 1, \dots, N_t \end{cases} \quad (3)$$

Описание численного эксперимента

Рассмотрим два различных вида импульса $C_1(t)$:

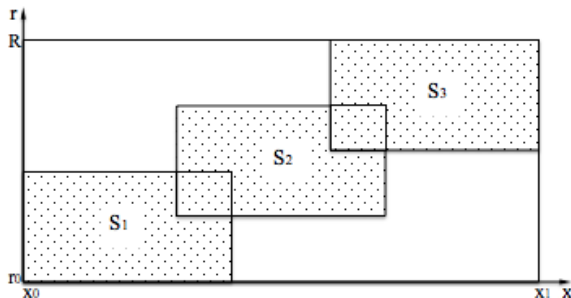
- $C_{1_1}(t) = \begin{cases} 1, & t \in [0, \frac{T}{10}], \\ 0, & t \notin [0, \frac{T}{10}] \end{cases}$
- $C_{1_2} = 0.1$



Варианты задания области повышенной сорбции:

- Без области повышенной сорбции
- Область S_1 ближе к месту возникновения импульса
- Область S_2 по центру ткани
- Область S_3 в наиболее удаленной от места возникновения импульса части ткани

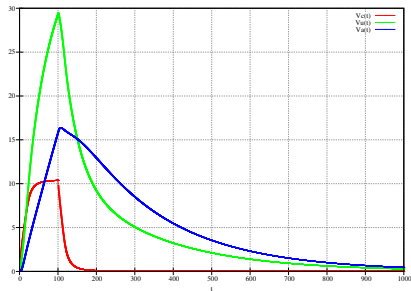
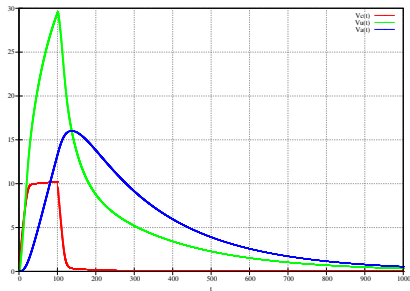
S_1 , S_2 и S_3 прямоугольной формы и в них коэффициент β на порядок выше, чем во всей остальной ткани.



Для решения поставленной задачи был разработан программный комплекс на языке программирования *Fortran 90* и проведена серия расчетов с различными вариантами задания начального импульса C_1 и области повышенной сорбции.

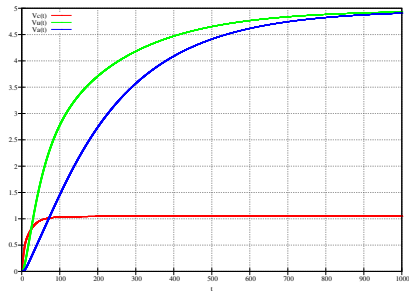
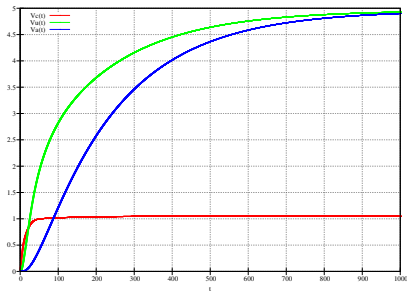
Примеры графических иллюстраций (1/4)

Графики $V_c(t)$, $V_u(t)$, $V_a(t)$ при импульсе $C_{11}(t)$ без зоны повышенной сорбции и с зоной повышенной сорбции S_1 :



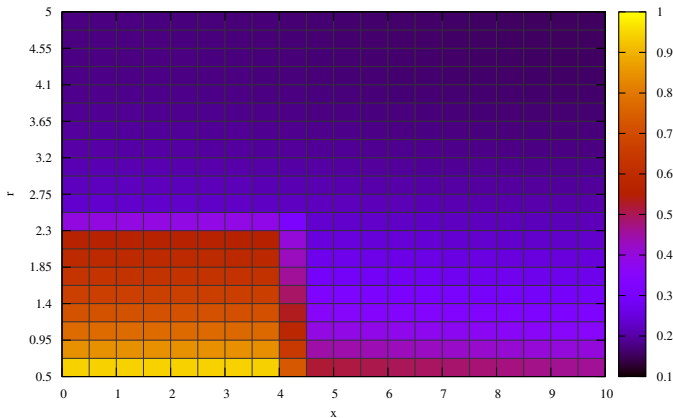
Примеры графических иллюстраций (2/4)

Графики $V_c(t)$, $V_u(t)$, $V_a(t)$ при импульсе C_{12} без зоны повышенной сорбции и с зоной повышенной сорбции S_1 :



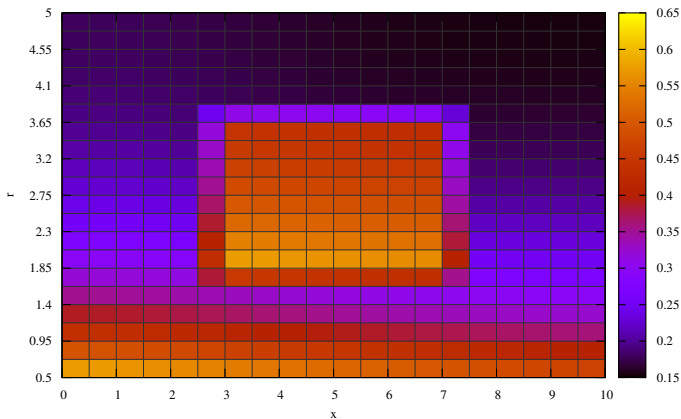
Примеры графических иллюстраций (3/4)

График $a(x, r, t_1)$ при импульсе $C_{1_1}(t)$ с областью повышенной сорбции S_1 :



Примеры графических иллюстраций (4/4)

График $a(x, r, t_1)$ при импульсе $C_{1_1}(t)$ с областью повышенной сорбции S_2 :



Результаты работы

- Поставлена и дискретизирована задача Коши для уравнения кинетики сорбции в тканях с учетом гемодинамического и диффузионного вкладов
- Написана и интегрирована в единый комплекс программа на языке *Fortran 90* для решения поставленной задачи
- Проведена серия численных экспериментов, изучены особенности полученных результатов

Спасибо за внимание!