

# Моделирование процессов сорбции в тканях

Лукшин Петр Андреевич

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

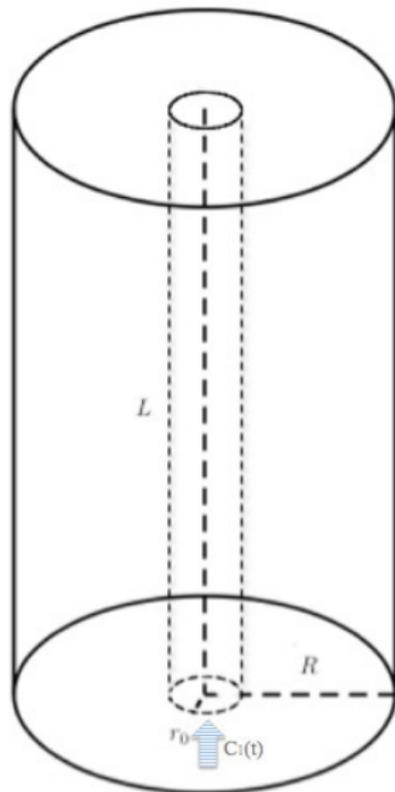
Научный руководитель: д.ф.-м.н., профессор С.И. Мухин

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
- $\beta$  – кинетический коэффициент
- $\frac{1}{\gamma}$  – коэффициент Генри

## Постановка разностной задачи

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

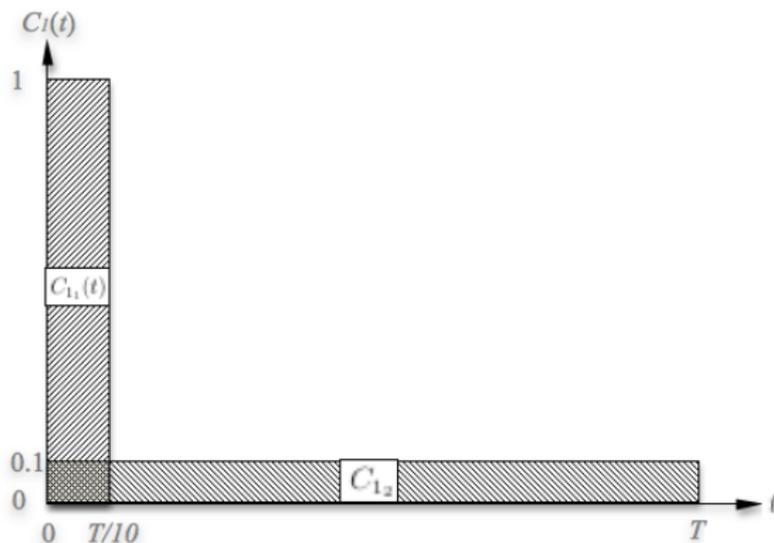
$$\begin{cases} \frac{a_{ij}^{n+1} - a_{ij}^n}{\tau} = \beta(u_{ij}^n - \gamma a_{ij}^n), \\ a_{ij}^0 = 0, \\ u_{ij}^n = f_{ij}^n, \\ i = 0, 1, \dots, N_x, j = 0, 1, \dots, N_r, n = 0, 1, \dots, N_t \end{cases} \quad (2)$$

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

## Описание численного эксперимента

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

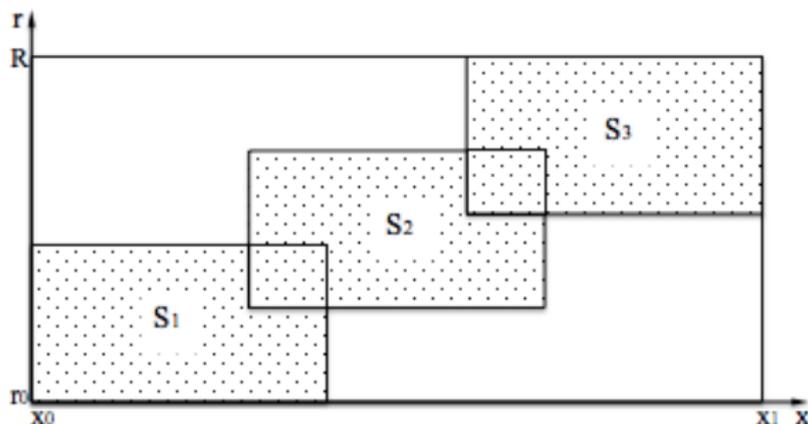
- $C_{1_1}(t) = \begin{cases} 1, & t \in [0, \frac{T}{10}], \\ 0, & t \notin [0, \frac{T}{10}] \end{cases}$
- $C_{1_2} = 0.1$



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

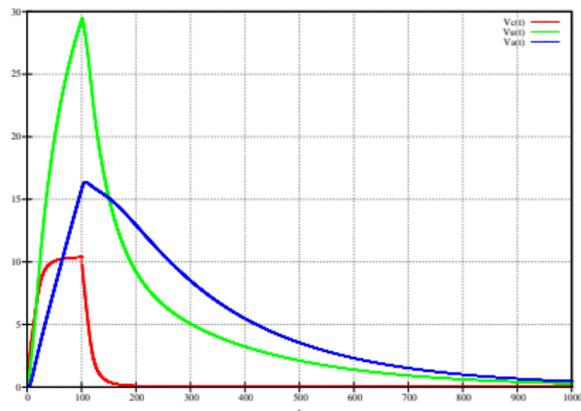
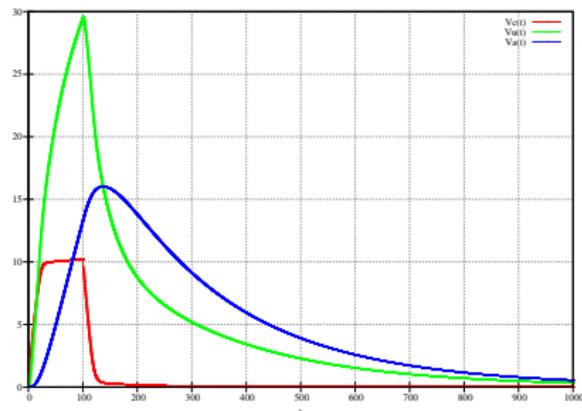
$S_1$ ,  $S_2$  и  $S_3$  прямоугольной формы и в них коэффициент  $\beta$  на порядок выше, чем во всей остальной ткани.



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.

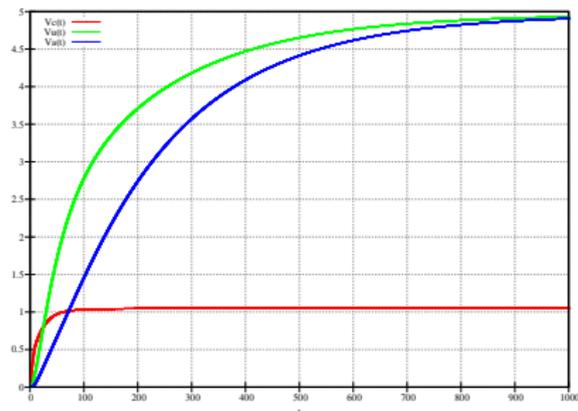
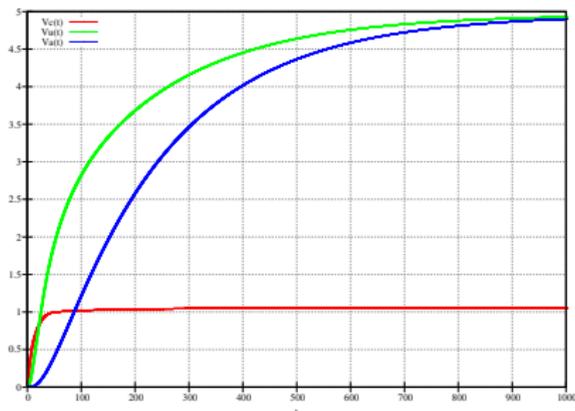
## Примеры графических иллюстраций (1/4)

Графики  $V_c(t)$ ,  $V_u(t)$ ,  $V_a(t)$  при импульсе  $C_{1_1}(t)$  без зоны повышенной сорбции и с зоной повышенной сорбции  $S_1$ :



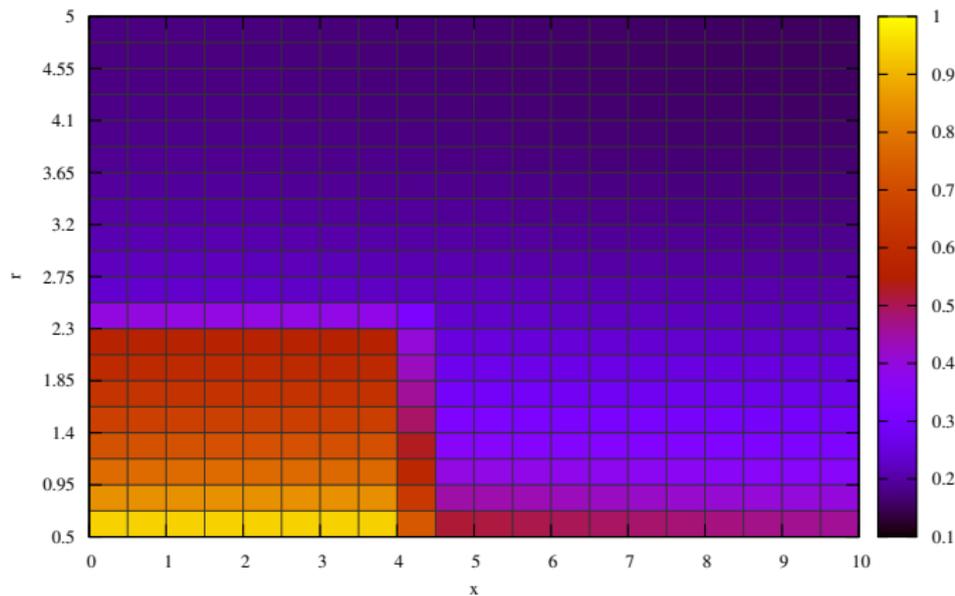
## Примеры графических иллюстраций (2/4)

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



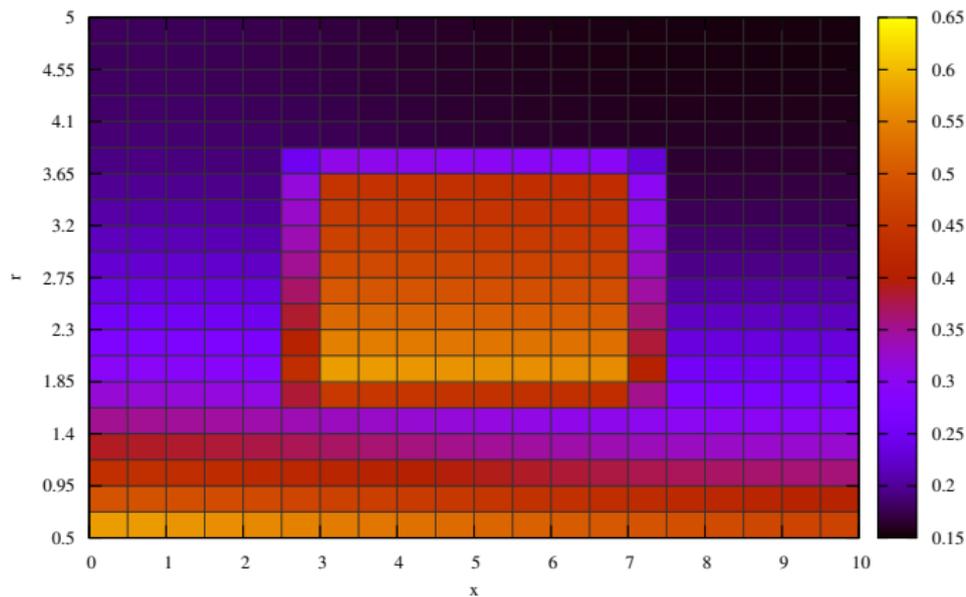
## Примеры графических иллюстраций (3/4)

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!**