

УДК 519.95

НЕЯВНАЯ РАЗНОСТНАЯ СХЕМА ДЛЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ АУТОСТАБИЛИЗАЦИИ ТЕМПЕРАТУРЫ БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ

© А.В. Кулаева, А.А. Арзамасцев

Ключевые слова: математическая модель; неявная разностная схема; аутостабилизация температуры; компьютерное моделирование, биологический объект, распределенная клеточная ткань. Изучается явление аутостабилизации (саморегулирования) температуры биологических объектов с помощью математической модели, основанной на неявной разностной схеме. Объектом моделирования является распределенная клеточная ткань.

Аутостабилизацией (саморегулированием) называют способность биологического объекта к стабилизации значения какого-либо фактора на определенном уровне за счет работы его (объекта) внутренних механизмов.

Ранее это явление изучалось экспериментально и с помощью математических моделей. Простейшими биологическими системами занимались А.Г. Дигерменджи, Н.С. Печуркин, И.А. Терсков, А.А. Арзамасцев и др. [1–3]. В работах А.А. Арзамасцева и Е.Н. Альбицкой [3–4] была использована распределенная модель аутостабилизации в клеточной ткани на основе явной разностной схемы, которая плохо сходилась, что требовало использовать достаточно маленький шаг, и это приводило к длительному времени расчета результатов, поэтому было принято решение разработать модель, основанную на неявных разностных схемах.

Объектом моделирования является распределенная клеточная ткань (для упрощения взята форма прямоугольного параллелепипеда). Объект находится во внешней среде, отличающейся от него своими тепловыми и кинетическими свойствами. Будем считать, что параметры внешней среды постоянны и их влияние на объект моделирования задано граничными условиями.

Допущения математической модели были описаны ранее [4].

Основными уравнениями математической модели являются балансовые соотношения вида:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial t} = & \frac{\lambda}{c\rho} \left[\frac{\partial^2 T(x, y, z, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T(x, y, z, t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T(x, y, z, t)}{\partial z^2} \right] - \\ & - w_x \frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial x} - w_y \frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial y} - \\ & - w_z \frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial z} + Q_T; \end{aligned} \quad (1)$$

$$\frac{\partial S(x, y, z, t)}{\partial t} =$$

$$\begin{aligned} = D_S \left[\frac{\partial^2 S(x, y, z, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S(x, y, z, t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 S(x, y, z, t)}{\partial z^2} \right] - \\ - w_x \frac{\partial S(x, y, z, t)}{\partial x} - w_y \frac{\partial S(x, y, z, t)}{\partial y} - \\ - w_z \frac{\partial S(x, y, z, t)}{\partial z} + Q_S; \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial t} = \\ = D_C \left[\frac{\partial^2 C(x, y, z, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C(x, y, z, t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C(x, y, z, t)}{\partial z^2} \right] - \\ - w_x \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial x} - w_y \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial y} - \\ - w_z \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial z} + Q_C. \end{aligned} \quad (3)$$

Дифференциальные уравнения (1)–(3) описывают изменения температуры, с учетом изменения концентрации кислорода и субстрата. В этих уравнениях: $T(x, y, z, t)$, $S(x, y, z, t)$, $C(x, y, z, t)$ – температура, концентрации субстрата и растворенного кислорода в точке с координатами x, y, z в момент времени t ; λ – коэффициент теплопроводности; c, ρ – удельная теплоемкость и плотность клеточной ткани; w_x, w_y, w_z – скорости конвективного переноса; D_S, D_C – коэффициенты диффузии для субстрата и кислорода; Q_T, Q_S, Q_C – распределенные функции источников для температуры, субстрата и кислорода.

Для получения однозначного решения, система (1)–(3) дополнена следующими краевыми условиями.

Начальные условия:

$$T(x, y, z, 0) = T_0, S(x, y, z, 0) = S_0, C(x, y, z, 0) = C_0. \quad (4)$$

Граничные условия:

$$\left. \frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial x} \right|_{x=0} = \eta_1 [T(0, y, z, t) - g_1(t)];$$

$$\begin{aligned}
\left. \frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial x} \right|_{x=L_1} &= -\eta_1 [T(L_1, y, z, t) - g_1(t)]; \\
\left. \frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial y} \right|_{y=0} &= \eta_1 [T(x, 0, z, t) - g_1(t)]; \\
\left. \frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial z} \right|_{z=L_2} &= -\eta_1 [T(x, L_2, z, t) - g_1(t)]; \\
\left. \frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} &= \eta_1 [T(x, y, 0, t) - g_1(t)]; \\
\left. \frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial z} \right|_{z=L_3} &= -\eta_1 [T(x, y, L_3, t) - g_1(t)],
\end{aligned} \quad (5)$$

где η_1 – коэффициент теплопереноса. В нашем случае $g_1(t) = \text{Const} = T^{**}$, где T^{**} – температура внешней области. Граничные условия для S , C аналогичны условиям для T , с коэффициентами массопереноса η_2 , η_3 , соответственно:

$$g_2(t) = \text{Const} = S^{**};$$

$$g_3(t) = \text{Const} = C^{**},$$

где S^{**} , C^{**} – концентрации субстрата и растворенного кислорода во внешней области, соответственно.

С учетом специфики биохимических превращений модель (1)–(5) дополнена уравнениями макрокинетики.

Для решения системы (1)–(5) с помощью неявных разностных схем требуется разработка соответствующего шаблона.

Выбор шаблона обусловлен следующими факторами:

1) уравнение (1) имеет частные производные второго порядка по x , y , z (для составления уравнений требуется по три точки в слое) и частную производную первого порядка по t (достаточно двух точек в слое);

2) выбрана неявная схема, поэтому функция должна содержать несколько неизвестных значений на новом слое.

В связи с этим, было принято решение использовать следующий шаблон:

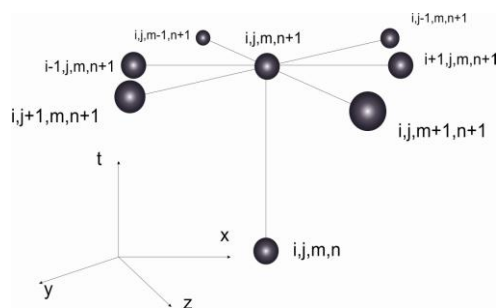


Рис. 1. Шаблон неявной схемы для 4-мерного случая с переменной, имеющей физический смысл времени

Составим следующие уравнения аппроксимации:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial T}{\partial t} &\approx \frac{1}{k} (T_{i,j,m,n+1} - T_{i,j,m,n}); \\
\frac{\partial T}{\partial x} &\approx \frac{1}{h_1} (T_{i+1,j,m,n+1} - T_{i,j,m,n+1}); \\
\frac{\partial T}{\partial y} &\approx \frac{1}{h_2} (T_{i,j+1,m,n+1} - T_{i,j,m,n+1}); \\
\frac{\partial T}{\partial z} &\approx \frac{1}{h_3} (T_{i,j,m+1,n+1} - T_{i,j,m,n+1}); \\
\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} &\approx \frac{1}{h_1^2} (T_{i+1,j,m,n+1} - 2T_{i,j,m,n+1} + T_{i-1,j,m,n+1}); \\
\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} &\approx \frac{1}{h_2^2} (T_{i,j+1,m,n+1} - 2T_{i,j,m,n+1} + T_{i,j-1,m,n+1}); \\
\frac{\partial^2 T}{\partial z^2} &\approx \frac{1}{h_3^2} (T_{i,j,m+1,n+1} - 2T_{i,j,m,n+1} + T_{i,j,m-1,n+1}).
\end{aligned} \quad (10)$$

Подставив эти уравнения в выражение (1), получим неявную разностную схему для T :

$$\begin{aligned}
&\frac{T_{i,j,m,n+1} - T_{i,j,m,n}}{k} = \\
&= \frac{\lambda}{c\rho} \left(\frac{T_{i+1,j,m,n+1} - 2T_{i,j,m,n+1} + T_{i-1,j,m,n+1}}{h_1^2} + \right. \\
&+ \frac{T_{i,j+1,m,n+1} - 2T_{i,j,m,n+1} + T_{i,j-1,m,n+1}}{h_2^2} + \\
&+ T \frac{T_{i,j,m+1,n+1} - 2T_{i,j,m,n+1} + T_{i,j,m-1,n+1}}{h_3^2} \Big) - \\
&- w_x \frac{T_{i+1,j,m,n+1} - T_{i,j,m,n+1}}{h_1} - \\
&- w_y \frac{T_{i,j+1,m,n+1} - T_{i,j,m,n+1}}{h_2} - \\
&- w_z \frac{T_{i,j,m+1,n+1} - T_{i,j,m,n+1}}{h_3} + Q_T.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T_{i,j,m,n} &= k(T_{i,j,m,n+1} \left(\frac{1}{k} + \frac{2\lambda}{c\rho} \left(\frac{1}{h_1^2} + \frac{1}{h_2^2} + \frac{1}{h_3^2} \right) - \right. \\
&- \frac{w_x}{h_1} - \frac{w_y}{h_2} - \frac{w_z}{h_3} \Big) + T_{i+1,j,m,n+1} \left(\frac{w_x}{h_1} - \frac{\lambda}{c\rho h_1^2} \right) + \\
&+ T_{i,j+1,m,n+1} \left(\frac{w_y}{h_2} - \frac{\lambda}{c\rho h_2^2} \right) + \\
&+ T_{i,j,m+1,n+1} \left(\frac{w_z}{h_3} - \frac{\lambda}{c\rho h_3^2} \right) -
\end{aligned}$$

$$-\frac{\lambda}{c\rho h_1^2}T_{i-1,j,m,n+1}-\frac{\lambda}{c\rho h_2^2}T_{i,j-1,m,n+1}-$$

$$\frac{\lambda}{c\rho h_3^2}T_{i,j,m-1,n+1}+Q_T).$$

Аналогично получаем схемы для S , C :

$$S_{i,j,m,n}=k(S_{i,j,m,n+1}(\frac{1}{k}+2D_S(\frac{1}{h_1^2}+\frac{1}{h_2^2}+\frac{1}{h_3^2})-$$

$$-\frac{w_x}{h_1}-\frac{w_y}{h_2}-\frac{w_z}{h_3})+S_{i+1,j,m,n+1}(\frac{w_x}{h_1}-\frac{D_S}{h_1^2})+$$

$$+S_{i,j+1,m,n+1}(\frac{w_y}{h_2}-\frac{D_S}{h_2^2})+S_{i,j,m+1,n+1}(\frac{w_z}{h_3}-\frac{D_S}{h_3^2})-$$

$$-\frac{D_S}{h_1^2}S_{i-1,j,m,n+1}-\frac{D_S}{h_2^2}S_{i,j-1,m,n+1}-$$

$$-\frac{D_S}{h_3^2}S_{i,j,m-1,n+1}+Q_S).$$

$$C_{i,j,m,n}=k(C_{i,j,m,n+1}(\frac{1}{k}+2D_C(\frac{1}{h_1^2}+\frac{1}{h_2^2}+\frac{1}{h_3^2})-$$

$$-\frac{w_x}{h_1}-\frac{w_y}{h_2}-\frac{w_z}{h_3})+S_{i+1,j,m,n+1}(\frac{w_x}{h_1}-\frac{D_C}{h_1^2})+$$

$$+C_{i,j+1,m,n+1}(\frac{w_y}{h_2}-\frac{D_C}{h_2^2})+C_{i,j,m+1,n+1}(\frac{w_z}{h_3}-\frac{D_C}{h_3^2})-$$

$$-\frac{D_C}{h_1^2}C_{i-1,j,m,n+1}-\frac{D_C}{h_2^2}C_{i,j-1,m,n+1}-$$

$$-\frac{D_C}{h_3^2}C_{i,j,m-1,n+1}+Q_C).$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Дегерменджи А.Г., Печуркин Н.С., Шкидченко А.Н. Аустостабилизация контролирующего роста факторов в биологических системах. Новосибирск: Наука, 1979.
2. Печуркин Н.С., Терсков И.А. Анализ кинетики роста и эволюции микробных популяций. Новосибирск: Наука, 1975. 215 с.
3. Арзамасцев А.А. Компьютерное моделирование саморегулирования температуры в популяциях микроорганизмов. Сообщение 1: Периодический режим // Вестник Тамбовского университета. Серия Естественные и технические науки. Тамбов, 1996. Т. 1. Вып. 1. С. 71-77.
4. Арзамасцев А.А., Альбицкая Е.Н. Математическое моделирование саморегулирования температуры в популяциях микроорганизмов: непрерывный процесс // Вестник Тамбовского университета. Серия Естественные и технические науки. Тамбов, 2007. Т. 12. Вып. 6. С. 709-714.

Поступила в редакцию 19 августа 2013 г.

Kulaeva A.V., Arzamastsev A.A. IMPLICIT DIFFERENCE SCHEME FOR MATHEMATICAL MODEL OF TEMPERATURE AUTOSTABILIZATION OF BIOLOGICAL OBJECTS

The autostabilization (self-regulation) of temperature of biological objects with help of mathematical model, based on uncertain difference scheme is considered. The object of modeling is distributed cellular tissue.

Key words: mathematical model; temperature autostabilization; computer simulation; biological object; distributed cellular tissue.