

На правах рукописи

Новиков Константин Александрович

**МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ПРОЦЕССОВ
ПЕРЕНОСА В СЛОЖНЫХ СРЕДАХ И
ПРИНЦИПЫ МАКСИМУМА ДЛЯ НИХ**

Специальность 05.13.18 —
«Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Москва — 2017

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор
Романюха Алексей Алексеевич

Официальные оппоненты: **Полежаев Андрей Александрович**,
доктор физико-математических наук,
Федеральное государственное бюджетное
учреждение науки Физический институт
имени П.Н. Лебедева Российской академии
наук,
главный научный сотрудник

Савенков Евгений Борисович,
кандидат физико-математических наук,
Федеральное государственное бюджетное
учреждение науки Институт прикладной ма-
тематики имени М.В. Келдыша Российской
академии наук,
заведующий сектором

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное
учреждение науки Институт проблем управ-
ления имени В.А. Трапезникова Российской
академии наук

Защита состоится 5 июля 2017 года в 14 часов на заседании диссертационно-
го совета Д 002.045.01 при федеральном государственном бюджетном учре-
ждении науки Институте вычислительной математики Российской акаде-
мии наук по адресу: Москва, ул. Губкина, 8.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ИВМ РАН
<http://www.inm.ras.ru>.

Автореферат разослан _____ 2017 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета
Д 002.045.01,
доктор физико-математических наук

Бочаров Геннадий Алексеевич

Общая характеристика работы

Актуальность работы. При моделировании процессов переноса в сложных средах (в т.ч. многофазной фильтрации в нефтяных пластах и переноса веществ в живых клетках) необходимы адекватные математические модели, учитывающие неоднородность среды, и численные методы их реализации.

При моделировании процессов переноса и фильтрации в пористой среде часто приходится численно решать уравнения на произвольных многогранных сетках для неоднородной анизотропной среды. Важным требованием к численному методу является выполнение дискретного принципа максимума для решения. Его выполнения естественно потребовать, если принципу максимума удовлетворяет исходная постановка задачи. Таким образом, проверка его выполнения является необходимой процедурой при построении численной схемы решения уравнений математической модели.

В процессах внутриклеточного переноса ведущая роль, согласно современным представлениям, отводится линейным белковым структурам – микротрубочкам. Совокупность микротрубочек образует эволюционирующую сеть, по которой осуществляется перенос веществ. Значительная часть моделей внутриклеточного переноса или вовсе не учитывают эту особенность, или описывают сеть микротрубочек как неподвижную структуру, хотя свойства переноса в значительной мере определяется ее изменчивостью. Поэтому важно создать математическое описание процессов внутриклеточного переноса веществ с учетом указанных особенностей.

Целью работы является построение, исследование и реализация в виде программных комплексов численных моделей процессов переноса в нефтяном пласте и клетке.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи**:

1. Разработка математической модели переноса веществ в клетке с учетом неоднородности сети микротрубочек, по которым осуществляется перенос.
2. Разработка численной модели двухфазной фильтрации на основе нелинейной многоточечной схемы конечных объемов.
3. Исследование выполнения принципов максимума для решений уравнений моделей многофазной фильтрации и внутриклеточного переноса веществ с учетом неоднородности среды.
4. Исследование решения, получаемого с помощью разработанной численной модели двухфазной фильтрации, на выполнение дискретного принципа максимума.
5. Разработка комплексов программ для реализации численных моделей фильтрации и внутриклеточного переноса веществ.

6. Численный анализ влияния неоднородности сети микротрубочек и анизотропных свойств нефтяного пласта на количественные и качественные характеристики переноса веществ.

Научная новизна. Впервые получены следующие результаты:

1. Сформулированы и доказаны принципы максимума для решения уравнений многофазной фильтрации в ограниченной области.
2. Сформулирован и доказан дискретный принцип максимума для переменной давления в модели двухфазной фильтрации, реализованной с использованием нелинейной многоточечной схемы аппроксимации потока.
3. Предложена математическая модель внутриклеточного переноса веществ, учитывающая нерегулярную геометрию и динамику сети микротрубочек.
4. Предложен метод оценки энергетической эффективности переноса веществ в клетке, исследована зависимость эффективности системы переноса веществ от энергетической цены ее создания.

Теоретическая значимость работы состоит в формулировке и доказательстве принципов максимума для моделей двух- и трехфазной фильтрации, разработке численной модели двухфазной фильтрации и доказательстве дискретного принципа максимума для нее, построении и обосновании адекватности модели внутриклеточного переноса веществ, численном анализе энергетических закономерностей процессов переноса веществ в клетке. Разработанный численный метод решения уравнений многофазной фильтрации может быть использован для решения более широкого класса нелинейных эллиптических и параболических уравнений и их систем. Предложенный метод оценки энергетической эффективности переноса в клетке может служить основой для постановки оптимизационной задачи, в которой целевая функция определяется разницей цены и выигрыша.

Практическая значимость работы заключается в реализации моделей двухфазной фильтрации и внутриклеточного переноса веществ в виде комплексов программ, численном анализе выполнения дискретного принципа максимума для различных значений параметров моделей многофазной фильтрации, оценке параметров модели переноса веществ в клетке. Предложенная численная модель двухфазной фильтрации может быть использована для решения инженерных задач, связанных с моделированием нефтедобычи, а модель внутриклеточного переноса веществ может быть использована для анализа процессов направленной доставки лекарственных препаратов и движения вирусов в клетке.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Для классического решения уравнений моделей двух- и трехфазной фильтрации получены принципы максимума и минимума.

2. На основе многоточечной нелинейной схемы конечных объемов построена численная модель двухфазной фильтрации. Для значения переменной давления в численной модели двухфазной фильтрации показана справедливость дискретного принципа максимума.
3. Построена и исследована математическая модель, описывающая процессы формирования сети микротрубочек и переноса веществ по ней. Подтверждена адекватность модели.
4. Для сети микротрубочек со структурой, близкой к реальной, показаны зависимость энергетической цены переноса веществ от ее количественных характеристик и влияние динамики и геометрии сети на внутриклеточный перенос веществ.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на научных семинарах ИВМ РАН и на следующих конференциях: Тихоновские чтения (Москва, 2013), 9th European Conference on Mathematical and Theoretical Biology (Гётеборг, Швеция, 2014), Moscow Conference on Computational Molecular Biology (Москва, 2015), XXXV Dynamics Days Europe (Эксетер, Великобритания, 2015), Управление развитием крупномасштабных систем (Москва, 2015), 58-я научная конференция МФТИ (Москва, 2015), Актуальные проблемы прикладной математики и механики (Дюрсо, 2016), German-Russian Workshop on Mathematical Modelling in Medicine and Geophysics (Аугсбург, Германия, 2016).

Публикации По теме диссертации опубликованы 8 работ, среди которых 4 статьи [1–4] в журналах, рекомендованных ВАК, и 4 печатных работы [5–8] в сборниках тезисов и трудов конференций.

Личный вклад. Автором сформулированы и доказаны принципы максимума для моделей двух- и трехфазной фильтрации и дискретный принцип максимума для модели двухфазной фильтрации, построена и реализована численная модель двухфазной фильтрации на основе нелинейной многоточечной схемы конечных объемов, разработаны и исследованы модели внутриклеточного переноса, проведены численные эксперименты.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения. Объем диссертации составляет 115 страниц, включая 20 рисунков и 12 таблиц. Список литературы содержит 81 наименование.

Содержание работы

Во **введении** обоснована актуальность исследований, проводимых в рамках диссертационной работы, сформулированы ее цели и задачи, описана структура диссертации.

В **первой главе** дан обзор научной литературы, посвященной моделированию процессов переноса в пористом нефтяном пласте и клетках,

рассмотрены численные методы решения и принцип максимума для задач данного типа.

Вторая глава посвящена исследованию выполнения принципов максимума для моделей двух- и трехфазной фильтрации и построению численной модели двухфазной фильтрации, для которой решение удовлетворяет дискретному принципу максимума.

Модель двухфазной фильтрации в пористой среде состоит из следующих уравнений:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\phi s_\alpha}{b_\alpha} \right) + \operatorname{div} \left(\frac{1}{b_\alpha} u_\alpha \right) = q_\alpha, \quad (x, t) \in \Omega \times (0, T), \quad (1)$$

$$u_\alpha = - \frac{k_{r\alpha}}{\mu_\alpha} \mathbb{K} (\nabla p_\alpha - \rho_\alpha g e_3), \quad (2)$$

где $x = (x_1, x_2, x_3)$ – пространственные переменные, $\alpha = w, o$ обозначает водную и нефтяную фазы соответственно, e_3 – третий орт координатной системы, $s_\alpha, p_\alpha, u_\alpha$ – неизвестные фазовая насыщенность, давление и скорость Дарси, $b_\alpha, q_\alpha, k_{r\alpha}, \mu_\alpha, \rho_\alpha$ обозначают фактор сжатия, внешние источники, относительную проницаемость, вязкость и плотность при нормальных условиях соответственно. Пористость среды, тензор абсолютной проницаемости и ускорение свободного падения обозначены символами ϕ , \mathbb{K} и g .

Дополнительные уравнения связывают насыщенности и давления разных фаз:

$$s_w + s_o = 1, p_w - p_o = p_c, \quad (3)$$

где p_c – капиллярное давление.

Предполагается, что значения s_α лежат в отрезке $[0, 1]$, b_α и μ_α – неотрицательные функции от давления соответствующей фазы, $k_{r\alpha}$ – неотрицательные функции насыщенности соответствующей фазы, p_c – функция от насыщенности воды s_w , а q_α – функция от x, t . \mathbb{K} – матрица 3 на 3, коэффициенты которой зависят от x . Положительная функция пористости ϕ , вообще говоря, не является постоянной и зависит от свойств среды и фазовых давлений.

Модель трехфазной фильтрации состоит из тех же уравнений для воды и нефти, что и модель двухфазной фильтрации (1), а также дополнительного уравнения для фазы газа:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\phi s_\alpha}{b_\alpha} \right) + \operatorname{div} \left(\frac{1}{b_\alpha} u_\alpha \right) = q_\alpha, \quad (x, t) \in \Omega \times (0, T), \alpha = w, o, \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\phi s_g}{b_g} + \frac{r_s s_o}{b_o} \right) + \operatorname{div} \left(\frac{1}{b_g} u_g + \frac{r_s}{b_o} u_o \right) = q_g, \quad (x, t) \in \Omega \times (0, T)$$

где фаза газа обозначена индексом g , а r_s обозначает растворимость газа. Скорости Дарси для каждой из фаз описываются теми же уравнениями (2), что и в модели двухфазной фильтрации.

Модель также содержит уравнения, связывающие насыщенности и давления различных фаз:

$$s_w + s_o + s_g = 1, p_\alpha - p_o = p_{c\alpha}, \alpha = w, o, g, \quad (5)$$

где $p_{co} \equiv 0$, p_{cg} обозначает капиллярное давление газа в системе нефть-газ, p_{cw} обозначает капиллярное давление воды в системе нефть-вода, взятое с отрицательным знаком.

В **разделе 2.1** сформулированы принципы максимума для классического решения уравнений моделей многофазной фильтрации. При определенных предположениях доказаны принципы максимума для различных переменных: фазовых насыщенностей в модели двухфазной фильтрации, фазовых давлений в моделях двух- и трехфазной фильтрации и глобального давления в моделях двух- и трехфазной фильтрации.

Для доказательства принципа максимума для фазовых насыщенностей используются следующие предположения:

- (a1) область Ω ограничена,
- (a2) элементы \mathbb{K} постоянны: $\mathbb{K}_{ij} \equiv const$,
- (a3) матрица \mathbb{K} симметрична и положительно определена:
$$\sum_{i,j=1}^3 (\mathbb{K})_{ij} \xi_i \xi_j > 0, \quad \forall \xi \neq 0 \in \mathbb{R}^3,$$
- (a4) фазовые вязкости постоянны: $\mu_\alpha \equiv const, \alpha = w, o$,
- (a5) пренебрегаем гравитацией: $g = 0$,
- (a6) постоянная пористость: $\phi \equiv const$,
- (a7) постоянные факторы сжатия $b_\alpha \equiv 1, \alpha = w, o$,
- (a8) k_{rw} – дифференцируемая монотонно возрастающая функция от s_w ,
 k_{ro} – дифференцируемая монотонно убывающая функция от s_w ,
- (a9) p_c – дважды дифференцируемая монотонно убывающая функция от s_w ,
- (a10) функции $dp_c(s_w)/ds_w$ и $d^2p_c(s_w)/ds_w^2$ ограничены в Ω_T константой $M > 0$ и удовлетворяют условию Липшица с той же константой,
- (a11) функции $k_{r\alpha}(s_w)$ и $dk_{r\alpha}(s_w)/ds_w$ ограничены в Ω_T константой $M > 0$ и удовлетворяют условию Липшица с той же константой.

Используя предположения (а4–а7), можно упростить уравнения модели двухфазной фильтрации следующим образом:

$$\begin{cases} \phi \frac{\partial s_w}{\partial t} - \frac{1}{\mu_w} \operatorname{div} (k_{rw} \mathbb{K} \nabla p_w) = q_w \\ \phi \frac{\partial s_o}{\partial t} - \frac{1}{\mu_o} \operatorname{div} (k_{ro} \mathbb{K} \nabla p_o) = q_o \\ s_o(s_w) = 1 - s_w \\ p_o - p_w = p_c(s_w). \end{cases} \quad (6)$$

Для записанной в таком виде модели выполняется принцип максимума.

Теорема 1. Пусть для функций $s_w(x,t)$, $s_o(x,t)$, $p_w(x,t)$, $p_o(x,t) \in C^{2,1}(\overline{\Omega_T})$, где $\Omega_T = \Omega \times (0, T]$, в Ω_T выполняется система

$$\begin{cases} \phi \frac{\partial s_w}{\partial t} - \frac{1}{\mu_w} \operatorname{div} (k_{rw} \mathbb{K} \nabla p_w) \leq 0, \\ \phi \frac{\partial s_o}{\partial t} - \frac{1}{\mu_o} \operatorname{div} (k_{ro} \mathbb{K} \nabla p_o) \geq 0, \\ s_o(s_w) = 1 - s_w, \\ p_o - p_w = p_c(s_w). \end{cases} \quad (7)$$

Тогда, если верны предположения (а1–а11), то

$$\sup_{\Omega \times (0, T]} s_w \leq \sup_{\Gamma} s_w,$$

где $\Gamma = (\partial\Omega \times [0, T]) \cup (\Omega \times 0)$.

Для доказательства принципа максимума для фазовых давлений используется формулировка моделей многофазной фильтрации в виде параболического уравнения, которое, пренебрегая гравитационными членами, можно записать в следующем виде (для модели двухфазной фильтрации):

$$\begin{aligned} c \frac{\partial p}{\partial t} &= -\nabla \cdot u - (d_1 u + d_w \nabla s_w) \cdot \nabla p + q(p), \\ u &= -\mathbb{K} \lambda(\nabla p), \end{aligned}$$

где $\lambda = \lambda(s_w)$, $c = c(s_w, p)$, $d_1 = d_1(s_w, p)$, $d_\alpha = d_\alpha(s_w, p)$, $q = q(p)$, а за $p = p_o$ обозначено давление нефтяной фазы.

Используя оператор

$$L[p] = c \frac{\partial p}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbb{K} \lambda \nabla p) - d_1 \mathbb{K} \lambda \nabla p \cdot \nabla p + (d_w \nabla s_w) \cdot \nabla p,$$

можно переписать эти уравнения в виде $L[p] = q(p)$.

Используем следующие предположения:

(b1) область Ω ограничена,

- (b2) элементы \mathbb{K} постоянны: $\mathbb{K}_{ij} \equiv const$,
- (b3) матрица \mathbb{K} симметрична и положительно определена:

$$\sum_{i,j=1}^3 (\mathbb{K})_{ij} \xi_i \xi_j > 0, \quad \forall \xi \neq 0 \in \mathbb{R}^3,$$
- (b4) пренебрегаем капиллярным давлением: $p_c \equiv 0$,
- (b5) пренебрегаем гравитацией,
- (b6) λ и производная λ по s_w ограничены константой $M > 0$ в Ω_T ,
- (b7) функции d_1, d_w ограничены константой $M > 0$ в Ω_T ,
- (b8) d_1, d_w липшицевы как функции от p с константой Липшица $M > 0$,
- (b9) c липшицево как функция от p с константой Липшица $M > 0$,
- (b10) c строго положительно.

Используя данные предположения можно доказать следующую теорему.

Теорема 2. Пусть для $s_w, s_o, p \in C^{2,1}(\overline{\Omega_T})$, где $\Omega_T = \Omega \times (0, T]$, выполнено неравенство $L[p] \leq 0$ в Ω_T . Тогда, если верны предположения (b1–b10), то

$$\sup_{\Omega \times (0, T]} p \leq \sup_{\Gamma} p,$$

где $\Gamma = (\partial\Omega \times [0, T]) \cup (\Omega \times 0)$.

Аналогично можно получить принцип максимума для модели трехфазной фильтрации. При ненулевом капиллярном давлении доказан принцип максимума для глобального давления: переменной зависящей от фазовых и капиллярных давлений.

В [разделах 2.2](#) и [2.3](#) описаны численная модель двухфазной фильтрации и полностью неявная схема для нее.

В [разделе 2.4](#) показано, что численное значение переменной давления, полученное при помощи полностью неявной схемы дискретизации по времени и нелинейной многоточечной схемы дискретизации потока, удовлетворяет дискретному принципу максимума (нелинейная многоточечная схема дискретизации потока для уравнения конвекции-диффузии описана авторами K. Lipnikov, D. Svyatskiy, Y. Vassilevski в Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling, 2012).

Для доказательства выполнения дискретного принципа максимума для переменной давления в модели двухфазной фильтрации используются следующие предположения относительно вида коэффициентов модели:

- (c1) несжимаемость обеих фаз: $b_\alpha \equiv 1$, $\alpha = w, o$,
- (c2) постоянная пористость: $\phi \equiv const$,
- (c3) пренебрегаем капиллярным давлением: $p_c \equiv 0$,
- (c4) пренебрегаем гравитацией: $u_\alpha = -\frac{k_{r\alpha}}{\mu_\alpha} \mathbb{K}(\nabla p_\alpha)$, $\alpha = w, o$.

Интегрируя по многогранной ячейке T_i упрощенные на основе предположений (с1–с4) уравнения модели, получим (для l -ой итерации)

$$-\int_{T_i} \text{div} (\mathbb{K}\lambda\nabla p_o)^l dx = \int_{T_i} (q_w + q_o)^l dx, \quad (8)$$

где $\lambda = \frac{k_{rw}}{\mu_w} + \frac{k_{ro}}{\mu_o}$.

Используя теорему Остроградского-Гаусса, перепишем уравнение (8):

$$\sum_{f \in \partial T_i} \lambda_f^l \mathbf{q}_f^l \cdot \mathbf{n}_f = \int_{T_i} (q_w + q_o)^l dx \quad (9)$$

где \mathbf{n}_f – внешняя нормаль к грани f , $|\mathbf{n}_f| = |f|$, $|f|$ – площадь грани f , и \mathbf{q}_f – средний поток через грань f . Дискретная нормальная компонента потока $\mathbf{q}_f \cdot \mathbf{n}_f$ определяется через разности давлений в соответствии с нелинейной многоточечной схемой дискретизации потока:

$$\sum_{f \in \partial T_i} \sum_{j=1}^3 \lambda_f^l A_{j,f} (p_{T_i}^l - p_{T_i,j}^l) = \int_{T_i} (q_w + q_o)^l dx, \quad (10)$$

где значения коэффициентов $A_{i,f}$ определяются численной схемой.

Пусть \mathcal{T} обозначает множество всех ячеек сетки, а \mathcal{T}_D и \mathcal{T}_N обозначают множество ячеек с граничными гранями с условиями Дирихле и Неймана соответственно. Обозначим также все граничные ячейки символом $\mathcal{T}_B = \mathcal{T}_D \cup \mathcal{T}_N$. Для численного значения переменной p , полученного с помощью нелинейной многоточечной схемы, справедлива следующая теорема.

Теорема 3 (Дискретный принцип максимума). *Пусть существует решение p уравнения (10). Если \mathcal{T}_{inj} обозначает набор ячеек, в которых $q_w + q_o > 0$, то*

$$\max_{T \in \mathcal{T} \setminus (\mathcal{T}_{inj} \cup \mathcal{T}_B)} p_T \leq p_{max} = \max_{\mathcal{T}_{inj} \cup \mathcal{T}_B} p_T. \quad (11)$$

В разделе 2.5 сравниваются предположения о виде коэффициентов модели, необходимые для доказательства дискретного принципа максимума и принципа максимума для исходной постановки модели двухфазной фильтрации.

В разделах 2.6 и разделе 2.7 вычисляется вариация коэффициентов, полученных в результате дискретизации потока методом конечных объемов с нелинейной многоточечной схемой, и якобиан, необходимый для решения нелинейной системы уравнений, к которой приводит дискретизация.

В разделе 2.8 приводятся результаты вычислительных экспериментов, в которых сравниваются линейная двухточечная, нелинейная двухточечная и нелинейная многоточечная схемы в применении к моделям двух- и трехфазной фильтрации. Подтверждается выполнение дискретного принципа максимума, доказанного в разделе 2.4. Проводится численный анализ выполнения дискретного принципа максимума для различных значений параметров модели.

В разделе 2.9 обсуждаются результаты численных экспериментов. Показано, что в приведенных экспериментах дискретный принцип максимума не нарушается, когда для данного вида коэффициентов выполняется принцип максимума для исходной постановки модели двухфазной фильтрации.

Третья глава посвящена моделированию внутриклеточного переноса веществ по микротрубочкам. Рассматривается последовательность обобщений модели, предложенной авторами E.N. Cytrynbaum, V. Rodionov и A. Mogilner в Journal of Cell Science, 2004.

В разделе 3.1 предложен первый вариант обобщения модели. Микротрубочки моделируются отрезками, у которых один конец более подвижен, а другой – менее подвижен, поэтому (по аналогии с лучом) будем называть менее подвижный конец началом, а более подвижный – просто концом. Модель, описывающая перенос эндосом (см. рис. 1А), основана на следующих предположениях:

1. Микротрубочки прямые, движение микротрубочек осуществляется только за счет роста конца и распада начала.
2. Конец микротрубочки растет с постоянной скоростью v_p .
3. Начало микротрубочки сокращается со скоростью $v_m(x, y)$. В области A скорость сокращения начала по величине меньше скорости роста конца, вне ее эти скорости совпадают, т.е.

$$v_m(x, y) = \begin{cases} \varepsilon v_p, & \text{если } (x, y) \in A, \\ v_p, & \text{иначе.} \end{cases} \quad \text{где } 0 < \varepsilon < 1.$$

4. Когда конец достигает границы клетки, он останавливается. Когда соответствующее ему начало достигает границы клетки, микротрубочка исчезает.
5. Новые микротрубочки нулевого размера появляются в области A . В начальный момент времени создается n_{max} микротрубочек. Новая микротрубочка нулевого размера появляется в области A всякий раз, когда исчезает одна из существующих микротрубочек. Угол, определяющий направление роста новой микротрубочки, выбирается случайно.

Таким образом, каждая микротрубочка описывается координатами своих начала и конца, их динамика определяется следующими уравнениями:

$$\frac{\partial p_i}{\partial t} = v_p \mathbf{u}_i, \quad \frac{\partial m_i}{\partial t} = v_m(x, y) \mathbf{u}_i, \quad (12)$$

где p_i – координата конца, m_i – координата начала, \mathbf{u}_i – единичный вектор, направленный от начала к концу i -ой микротрубочки.

Совокупность всех микротрубочек формирует поле скоростей $\mathbf{V}(x, y, t)$, которое выступает в качестве коэффициента конвекции в уравнении, описывающем изменение плотности переносимого вещества. Аналогично Е.Н. Сутрынбаум, V. Rodionov и А. Mogilner будем считать, что каждая микротрубочка имеет свою область влияния (см. рис. 1B), где α – параметр ширины области влияния, постоянный для всех микротрубочек. Поле скоростей для расположения микротрубочек в момент времени t_0 определим выражением:

$$\mathbf{V}(x, y, t_0) = - \frac{\sum_i \zeta(x, y, i) e^{-(d_i^2 / (\alpha/2)^2)} v_g \mathbf{u}_i}{\sum_i \zeta(x, y, i)}, \quad (13)$$

где суммирование производится по всем микротрубочкам, d_i – расстояние от точки (x, y) до i -ой микротрубочки, v_g – скорость переноса эндосом по микротрубочке, \mathbf{u}_i – направляющий вектор, $\zeta(x, y, i)$ – индикаторная функция области влияния i -ой микротрубочки. Если точка не принадлежит области влияния хотя бы одной микротрубочки, то будем считать, что скорость в этой точке равна нулю.

Плотность переносимого вещества описывается следующим образом. Пусть задана ограниченная двумерная область Ω (см. рис. 1A), характеризующая геометрию клетки. Переменной блока модели, описывающего перенос веществ, является плотность $g(x, y, t)$ эндосом в момент времени t в точке области с координатами (x, y) . Переменная плотность описывается следующим уравнением:

$$\frac{\partial g}{\partial t} - d \Delta g + \operatorname{div}(\mathbf{V}g) = f \quad \text{в } \Omega \times (0, T), \quad (14)$$

где d – скалярный постоянный коэффициент диффузии, $\mathbf{V}(x, y, t)$ – поле скорости переноса по микротрубочкам, f – внешние источники или стоки.

Модель реализуется следующей последовательностью шагов для каждой временной итерации:

1. Создание новых микротрубочек нулевого размера в области A . Начальные координаты и угол направления роста выбираются случайно и имеют равномерное распределение соответственно в области A и на отрезке $[0, 2\pi]$. Устраняются микротрубочки, начало и конец которых достигли границы Ω .
2. Обновление координат начала и конца микротрубочек согласно уравнениям (12).
3. Расчет поля скоростей по уравнению (13).

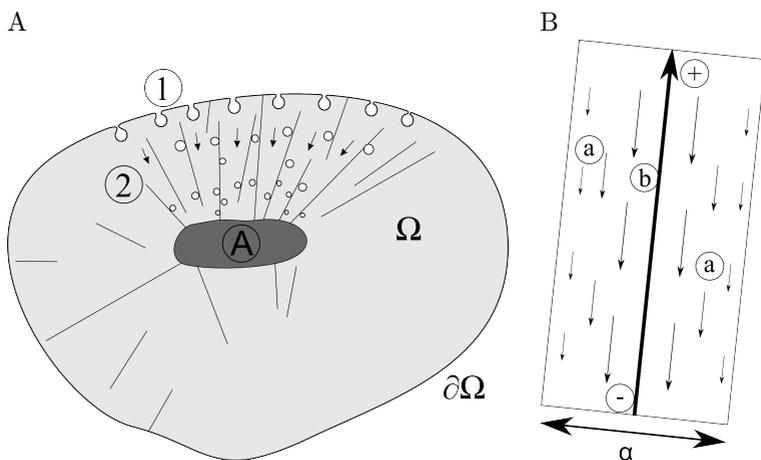


Рис. 1 — А: Схематическое представление моделируемых процессов поглощения и переноса вещества: 1 – участок поглощения внешнего материала клеткой, 2 – микротрубочки, по которым переносится вещество от участка границы 1 к области А. Клетка представлена областью Ω с границей $\partial\Omega$. В: Поле скорости (а) переноса груза, определяемое одной микротрубочкой, задается в области влияния – прямоугольнике шириной α и длиной, равной длине микротрубочки. Микротрубочка (b) растет в направлении конца. Вектор скорости переноса имеет направление от конца (+) к началу(-), величина вектора убывает по мере удаления от микротрубочки.

4. Решение уравнения (14) с неявной схемой по времени, результат берется за новую функцию плотности груза.

В **разделе 3.2** модель применяется для оценки энергетической эффективности переноса груза по сети микротрубочек. Показано, что конфигурации сетей микротрубочек, обеспечивающих больший энергетический выигрыш, требуют больших затрат энергии и большего времени для построения.

В **разделе 3.3** поле скоростей переноса веществ оценивается на основе конфигурации сети микротрубочек на их фотографии в живой клетке. Сначала оцениваются количественные характеристики геометрии сети. Затем на основе сегментированного изображения оценивается поле скоростей переноса веществ. Использование геометрически реалистичной сети микротрубочек позволяет частично объяснить феномен падения средней скорости с увеличением временного промежутка усреднения.

В **разделе 3.4** описываются численные методы решения уравнений модели, обсуждается выполнение принципа максимума для численного решения. Кроме того, приводятся результаты численных экспериментов по

проверке адекватности модели. Проверка адекватности проводилась на основе моделирования трех экспериментальных ситуаций: переноса эндосом в двух различных типах клеток и формирования веретена деления.

Четвертая глава посвящена описанию комплексов программ, реализованных в ходе работы над диссертацией. Приводятся алгоритмы реализации численной модели двухфазной фильтрации и модели переноса веществ в клетке.

В **заключении** приведены результаты работы, которые состоят в следующем.

Основной результат работы: построены, исследованы и реализованы численные модели процессов переноса в нефтяном пласте и клетке. Получены следующие частные результаты:

1. Построена и исследована математическая модель, описывающая процессы формирования сети микротрубочек и переноса веществ по ней. Модель адекватно описывает экспериментальные данные по формированию веретена деления и динамике эндосом в различных типах клеток.
2. Построена численная модель двухфазной фильтрации на основе нелинейной многоточечной схемы конечных объемов.
3. Исследовано выполнение принципов максимума для моделей многофазной фильтрации в нефтяном пласте и внутриклеточного переноса веществ. Сформулированы и доказаны принципы максимума для моделей двух- и трехфазной фильтрации.
4. Сформулирован и доказан дискретный принцип максимума для переменной давления в построенной численной модели двухфазной фильтрации.
5. Разработаны комплексы программ для реализации моделей двух- и трехфазной фильтрации в нефтяном пласте и переноса веществ в клетке.
6. Проведен численный анализ моделируемых систем. Для модели внутриклеточного переноса исследовано влияние геометрических особенностей сети микротрубочек на движение эндосом и количественных характеристик динамики сети на энергетические эффективность и цену переноса. Для моделей многофазной фильтрации численно исследовано выполнение дискретного принципа максимума для переменной давления при различных значениях параметров.

Публикации автора по теме диссертации

1. *Новиков К. А., Романюха А. А., Грачев А. Н. [и др.]* Математическая модель самоорганизации и функционирования транспортной сети клетки // Математическое моделирование. 2015. Т. 27, № 3. С. 49—62.
2. *Новиков К. А., Романюха А. А.* Оценка эффективности механизмов и систем клетки // Автоматика и телемеханика. 2016. № 5. С. 136—147.
3. *Nikitin K., Novikov K., Vassilevski Y.* Nonlinear finite volume method with discrete maximum principle for the two-phase flow model // Lobachevski journal of mathematics. 2016. Vol. 37, no. 5. Pp. 570—581.
4. *Новиков К. А.* Принцип максимума для моделей многофазной фильтрации // Вычислительные методы и программирование. 2017. Т. 18, вып. 2. С. 138—145.
5. *Novikov K. A., Romanyukha A. A., Gratchev A. N. [et al.]* Mathematical model of self-organizing and adaptable intracellular transport network // XXXIII Dynamics Days Europe, Book of abstracts. 2013. P. 58.
6. *Новиков К. А., Романюха А. А.* Математическая модель адаптивной самоорганизующейся внутриклеточной транспортной сети // Научная конференция Тихоновские чтения: тезисы докладов. 2013. С. 73.
7. *Новиков К. А., Романюха А. А.* Математическая модель самоорганизации и функционирования внутриклеточной транспортной сети // XII Всероссийское совещание по проблемам управления. 2014. С. 6595—6601.
8. *Новиков К. А.* Пространственная модель активного внутриклеточного транспорта по реальной сети микротрубочек // Актуальные проблемы прикладной математики и механики. Тезисы докладов VIII всероссийской конференции, посвященной памяти академика А.Ф. Сидорова и Всероссийской молодежной школы-конференции. 2016. С. 75—76.

Новиков Константин Александрович

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА В СЛОЖНЫХ
СРЕДАХ И ПРИНЦИПЫ МАКСИМУМА ДЛЯ НИХ

Автореф. дис. на соискание ученой степени канд. физ.-мат. наук

Подписано в печать _____._____._____. Заказ № _____

Формат 60×90/16. Усл. печ. л. 1. Тираж 100 экз.

Типография _____