

В океанических водах в присутствии сульфат-иона идет реакция с горячими породами, например

$$4\text{Fe}_2\text{SiO}_4 + 3\text{Mg}_2\text{SiO}_4 + \text{H}_2\text{O} + \text{CaSO}_4 \rightarrow 5\text{MgSiO}_3 + 4\text{Fe}_2\text{O}_3 + \text{H}_2\text{S} + \text{CaMgSi}_2\text{O}_6 + 33,0 \text{ ккал/моль.}$$

Фаялит Форстерит Энстатит Гематит Диопсид

Описание процесса фильтрации в пористых средах переменной массы

Среди компонентов многокомпонентного вещества твердой фазы, как правило, есть такие, которые способны вступать в реакции обмена с аналогичными компонентами фильтрующихся флюидов. Пусть химически инертные компоненты твердой фазы обладают плотностью ρ_s и занимают объем V_s в представительном объеме V пористой среды. Запишем уравнение баланса массы (переноса массы) флюида в пористой среде переменной:

$$\partial(mS\rho)/\partial t + \text{div}(m\rho S\mathbf{V}) = -j. \quad (1)$$

Здесь m – доля объема транспортных пор пористой среды; S – насыщенность транспортных пор пористой среды флюидом, который участвует в обмене массой с пористым скелетом; ρ – плотность этого флюида; \mathbf{V} – скорость движения флюида в пористой среде; j – источник/сток вещества между флюидом и твердой фазой.

Запишем теперь уравнение баланса массы (переноса массы) твердого вещества пористого скелета грунта

$$\partial[(1-m)\rho_s^f]/\partial t + \text{div}[(1-m)\rho_s^f\mathbf{W}] = j. \quad (2)$$

Здесь ρ_s^f есть общая плотность вещества твердой фазы, \mathbf{W} – скорость движения вещества твердой фазы. При этом для массы твердой фазы грунта имеем

$$M_s = \rho_s V_s + \rho_a [(1-m)V - V_s], \quad \rho_s V_s = M = \text{const}. \quad (3)$$

Здесь V , M_s есть объем представительного элемента пористой среды и масса твердой фазы в представительном объеме соответственно, ρ_s – плотность не участвующего в реакциях массообмена вещества твердой фазы, ρ_a – плотность абсорбированных твердой фазой в ходе массообмена компонентов флюида.

Определим дилатацию

$$\theta = (V - V_0)/V_0. \quad (4)$$

Здесь V_0 – значение V в начальный момент времени. Заметим, что в случае уменьшения объема при деформации определение (4) совпадает с определением относительной усадки. Используя предположение о малости коэффициента объемного расширения, будем с достаточной точностью полагать

$$V = V_0 \exp \theta, \quad V_0 = V(\theta = 0). \quad (5)$$

Тогда, используя (5), запишем (3) в виде

$$M_s = M(1 - \varepsilon) + \rho_a(1 - m)V, \quad \varepsilon = \rho_a/\rho_s \leq 1.$$

Дифференцируя последнее уравнение по времени, получаем

$$\frac{\partial M_s}{\partial t} = -M \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + (1 - m)V \frac{\partial \rho_a}{\partial t} + (1 - m)\rho_a V \frac{\partial \theta}{\partial t} - \rho_a V \frac{\partial m}{\partial t}. \quad (6)$$

Выразим общую плотность твердой фазы ρ_s^f , а также источник/сток j :

$$\rho_s^f = \frac{M_s}{(1-m)V} = \rho_a + \frac{M(1-\varepsilon)}{(1-m)V}, \quad j = \frac{\partial M_s / \partial t}{V}.$$

Проводя дифференцирование в (2), получаем

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[(1-m)\rho_a + \frac{M(1-\varepsilon)}{V} \right] + \operatorname{div} \left\{ \left[(1-m)\rho_a + \frac{M(1-\varepsilon)}{V} \right] \mathbf{W} \right\} = \frac{\partial M_s / \partial t}{V}. \quad (7)$$

Используя (6) и проводя последовательные дифференцирования в (7), имеем в итоге

$$\partial\theta/\partial t = \operatorname{div}\mathbf{W}. \quad (8)$$

Далее, вводя относительную скорость движения флюида в грунте (скорость фильтрации) $\mathbf{q} = mS(\mathbf{V} - \mathbf{W})$, записываем на основании уравнений (1) и (8)

$$mS\partial\rho/\partial t + \rho S\partial m/\partial t + m\rho\partial S/\partial t + \operatorname{div}(\rho\mathbf{q}) + \operatorname{div}(\rho mS\mathbf{W}) + j = 0. \quad (9)$$

Преобразуя последнее уравнение и пренебрегая по тем же причинам, что и выше, членами второго порядка малости $\mathbf{q}\operatorname{grad}\rho$, $\mathbf{W}\operatorname{grad}(m\rho)$, получаем

$$mS\rho^{-1} \frac{\partial\rho}{\partial t} + S \frac{\partial m}{\partial t} + m \frac{\partial S}{\partial t} + \operatorname{div}\mathbf{q} + mS \frac{\partial\theta}{\partial t} = - \frac{\partial M_s / \partial t}{\rho V}. \quad (10)$$

Факт малости последнего члена $\mathbf{q}\operatorname{grad}\rho$, $\mathbf{W}\operatorname{grad}(m\rho)$ объясняется следующим образом. Из известного соотношения Терцаги $P = \sigma^f + p$, где P – внешняя нагрузка на почво-грунт, σ^f – эффективное напряжение, p – давление в жидкости, следует, что для $\operatorname{grad}P = 0$ справедливо $\operatorname{grad}\sigma^f = -\operatorname{grad}p$. Поскольку пористость m и плотность ρ_s являются функциями аргументов σ^f и p , то с учетом последнего соотношения член $\mathbf{W}\operatorname{grad}[(1-m)\rho]$ в уравнении (10) пропорционален произведению $\mathbf{W}\operatorname{grad}p$, следовательно, с учетом закона Дарси произведению скорости \mathbf{W} и скорости фильтрации \mathbf{q} . Механика пористых сред изучает процессы, протекающие с малыми скоростями, поэтому член, содержащий вторую степень скорости, может быть отброшен.

С учетом (6) сомножитель правой части уравнения (10) переходит в уравнение

$$-\frac{\partial M_s / \partial t}{\rho V} = \frac{M}{\rho V} \frac{\partial\varepsilon}{\partial t} - \frac{1-m}{\rho} \partial\rho_a / \partial t - \frac{1-m}{\rho} \rho_a \partial\theta / \partial t + \frac{\rho_a}{\rho} \frac{\partial m}{\partial t}. \quad (11)$$

После обозначения $\rho_a/\rho = \delta$ имеем для (10) с учетом (11)

$$mS\rho^{-1} \partial\rho / \partial t + S \partial m / \partial t + m \partial S / \partial t + \operatorname{div}\mathbf{q} + mS \partial\theta / \partial t = \frac{M}{\rho V} \frac{\partial\varepsilon}{\partial t} - (1-m)\rho^{-1} \partial\rho_a / \partial t - (1-m)\delta \partial\theta / \partial t + \delta \frac{\partial m}{\partial t}. \quad (12)$$

Приводя общие члены в уравнении (12), получаем

$$mS\rho^{-1} \partial\rho / \partial t + (1-m)\delta\rho_a^{-1} \partial\rho_a / \partial t + m \partial S / \partial t + \operatorname{div}\mathbf{q} + [mS + \delta(1-m)] \partial\theta / \partial t = \frac{M}{\rho V} \frac{\partial\varepsilon}{\partial t} + (\delta - S) \frac{\partial m}{\partial t}. \quad (13)$$

Рассмотрим случай однофазной фильтрации $S = 1$; $\delta, \varepsilon = \text{const}$.

Тогда уравнение (13) примет вид

$$\operatorname{div}\mathbf{q} + [m + \delta(1-m)] \partial\theta / \partial t = \frac{M}{\rho V} \frac{\partial\varepsilon}{\partial t} + (\delta - 1) \frac{\partial m}{\partial t}. \quad (14)$$

Считая $\rho_a = \text{const}$ и учитывая, что при этом $\frac{1}{\rho_a V} \frac{\partial M_s}{\partial t} = \frac{\partial \theta}{\partial t} - m \frac{\partial \theta}{\partial t} - \frac{\partial m}{\partial t}$, получаем

$$\text{div} \mathbf{q} + \partial \theta / \partial t = - \frac{(\delta - 1)}{\rho_a V} \frac{\partial M_s}{\partial t}. \quad (15)$$

В одномерном случае для вертикального сжимающего напряжения σ_{zz} в пористой среде имеем в соответствии с теорией упругости

$$\sigma_{zz} = - \left(K + \frac{4}{3} G \right) \theta + p. \quad (16)$$

Полагая вертикальную нагрузку постоянной и используя для скорости фильтрации закон Дарси, получаем из (15) и (16) с учетом обозначения $L = K + \frac{4}{3} G$

$$\partial \theta / \partial t = \text{div} (D \nabla \theta) + \xi, \quad \xi = - \frac{(\delta - 1)}{\rho_a V} \frac{\partial M_s}{\partial t}. \quad (17)$$

Здесь η – вязкость флюида, k – проницаемость, и введено обозначение $kL/\eta = D$. Поскольку, как правило, проницаемость зависит от изменения объема среды, то можно считать $D = D(\theta)$. Рассмотрим далее ряд следствий из уравнения (17).

Поромеханика горных пород с пористым скелетом постоянной массы

В этом случае массообменный поток j равен нулю, зависимостью проницаемости от пористости, а, следовательно, и усадки можно пренебречь, и уравнение (6) с учетом того, что $\rho_a = \rho_s$, $\rho_s (1 - m) \exp \theta = M_s / V_0 = \text{const}$, в этом случае примет вид

$$\partial \theta / \partial t = D \partial^2 \theta / \partial z^2, \quad D = \text{const}. \quad (18)$$

Это классический вид уравнения одномерной фильтрационной консолидации, имеющего многочисленные приложения в механике грунтов.

Поромеханика набухающих горных пород

В этом случае $\rho_a = \rho$, $\delta = 1$, однако, пренебрегать зависимостью проницаемости от пористости, а, следовательно, и усадки нельзя, и на основании (17) мы в этом случае имеем

$$\partial \theta / \partial t = \text{div} (D \nabla \theta), \quad D = D(\theta). \quad (19)$$

В таком виде уравнение для набухающих глинистых грунтов было получено и исследовано в [3].

Общий случай уравнения поромеханики

В случае, когда источник в уравнении (17) не равен нулю, мы имеем общий случай фильтрации в пористой среде с пористым скелетом переменной массы. Этот случай отвечает многим геоло-

гическим процессам, в частности, процессам дегидратации или гидратации горных пород [1]. Для большинства приложений можно принять

$$\xi = \lambda(\theta_{\infty} - \theta)^n; \quad \lambda, n = \text{const}. \quad (20)$$

где θ_{∞} – значение усадки на стационарной стадии процесса. В этом случае мы приходим к нелинейному уравнению теплопроводности с источником. Решение уравнения (17) с источником вида (20) при $n = 1$ в соответствии с [2] дает соотношение для скорости движения границы зоны трансформации следующего вида

$$V = 2\sqrt{\lambda D}. \quad (21)$$

На рис. 1 представлено распределение давления в объеме в условиях инфильтрационного движения подземных вод. На боковых гранях задано условие второго рода (непроницаемость), на верхней и нижней гранях задано давление. Как можно видеть, в центральной части объема возникает флюидная зона повышенного давления, по терминологии автора – флюидная система, возникновение которой может быть причиной землетрясений.

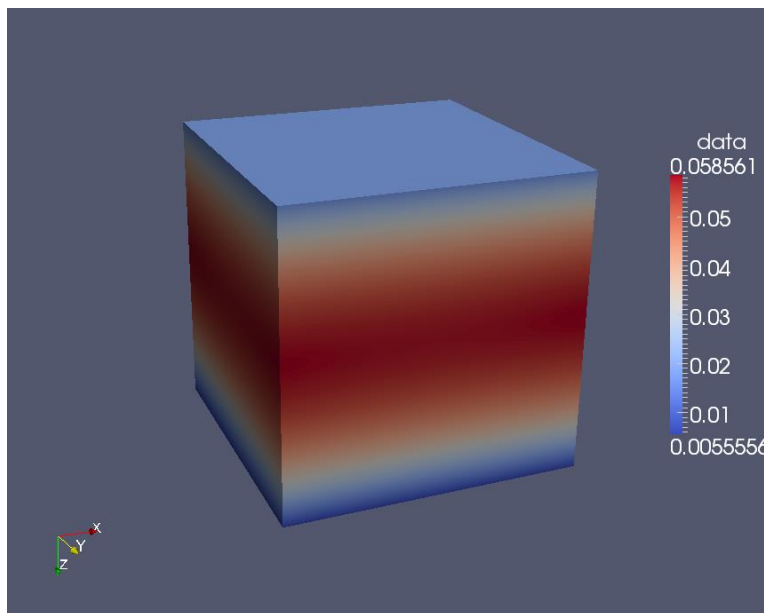


Рис. 1. Распределение давления в флюидной системе

Другая картина возникает в случае, когда по трещине сверху вниз движется флюид, проникая при этом в боковые области за счет их деформирования. Подобная постановка возникает при моделировании формирования гидротермальных месторождений, а также при формировании магматического очага. Распределение давления в этом случае приведено на рис. 2. Распределение возникающих при этом деформаций приведено на рис. 3.

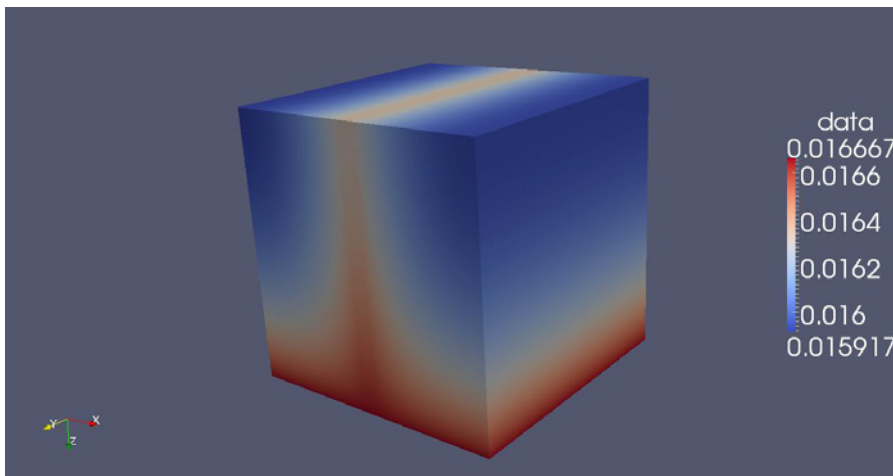


Рис. 2. Распределение давления в случае гидротермального рудообразования

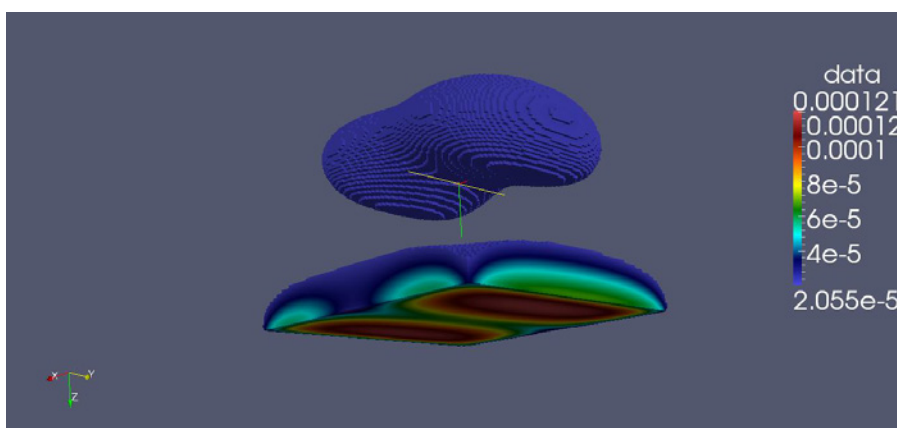


Рис. 3. Распределение деформаций в случае гидротермального рудообразования

Массообмен в биологических системах. Моделирование роста злокачественной опухоли

Из всего многообразия отличительных свойств опухолевых клеток именно неконтролируемый рост является универсальным маркером злокачественных новообразований, присущим всем без исключения опухолевым клеткам. Анализ кинетических характеристик роста опухолей показал значительное многообразие картин роста. (Типичная картина роста показана на рис. 4.)

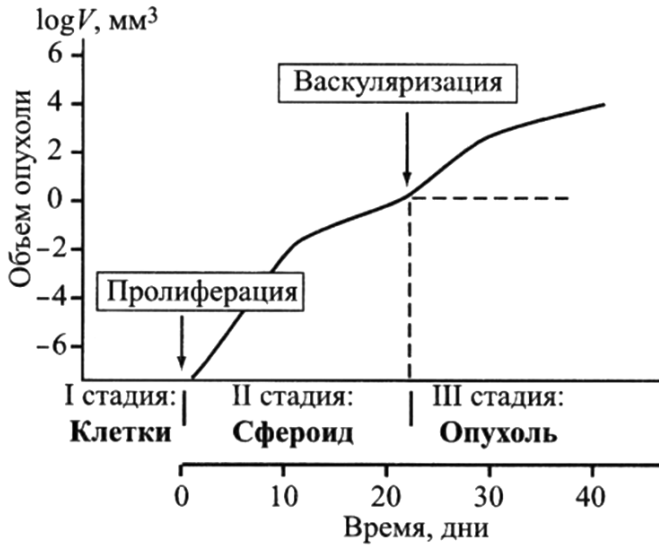


Рис. 4. Схематическая иллюстрация трех стадий роста опухоли

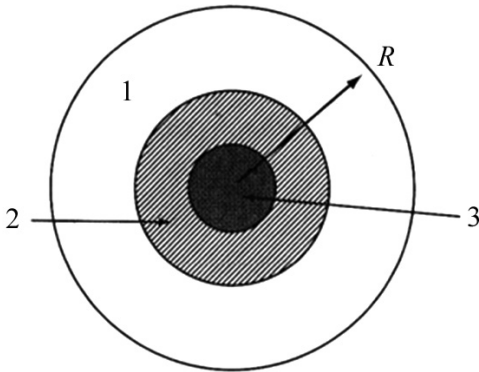


Рис. 5. Структура пролиферативной гетерогенности роста: 1 — слой живых клеток, 2 — слой покоящихся клеток, 3 — некротическая зона

Примерная структура раковой опухоли показана на рис. 5. С давних пор ученые пытались строить математические модели, описывающие кинетику роста опухоли. Одной из первых моделей была экспоненциальная модель. Но если в начальной стадии модель давала хорошее описание, то на заключительной стадии опухоль растет линейно (в 1932 г. это показал Майнорд).

Замечено, что образующаяся в результате роста злокачественной опухоли ткань в некоторых случаях имеет меньшую по сравнению со здоровой тканью плотность. В качестве примера такой опухоли была взята глиобластома — опухоль головного мозга. Поскольку в мозге (напомним здесь, что нас интересует рост опухоли мозга — глиобластомы) отсутствуют крупные кровеносные сосуды с большими значениями скоростей движения крови по ним, то процесс те-

чения крови по достаточно мелким капиллярам системы кровоснабжения мозга можно рассматривать как фильтрацию. Рост злокачественной опухоли управляется чрезвычайно сложным с биохимической точки зрения механизмом, все детали которого не установлены на настоящий момент. Это еще в большей степени относится к механизму протекания химических реакций, сопровождающих процесс роста злокачественной опухоли. В силу этого претензии на окончательную формулировку математической модели развития опухоли мозга можно считать весьма сомнительными. Нами ниже будет изложен подход, позволяющий уйти от дискуссий по особенностям протекания химических реакций, перейдя к феноменологической модели развития опухоли.

В качестве модели-прототипа нами была выбрана модель [5]. Модель роста опухоли, которая была рассмотрена в модели-прототипе, представляет собой систему уравнений в частных производных, которые описывают пространственно-временную эволюцию двух взаимодействующих между собой типов клеток с кинетическим уравнением Михаэлиса-Ментен.

В основу наших представлений о развитии процесса были положены несколько фундаментальных фактов:

1. Процесс движения крови и активных для роста опухоли веществ можно рассматривать в фильтрационном (гидравлическом) приближении.

2. Рост опухоли сопровождается образованием ткани, которая имеет меньшую по сравнению со здоровой тканью плотность.

3. В процессе роста злокачественной опухоли одну из главных ролей играет рост числа злокачественных клеток, который обеспечивается доставкой к ним необходимых для их роста компонентов кровью.

В силу этого нами была взята за основу модель массообмена в ходе процесса фильтрационно-массопереноса между жидкой и твердой фазами среды, сопровождающегося изменением плотности участвующей в массообмене условно твердой фазы (в нашем случае – опухолевой ткани). В модели роста глиомы не учитываются конвективные потоки. Это происходит из-за специфики ткани, в которой растет опухоль.

Рассмотрим результаты численного исследования уравнения (17) для моделирования роста глиобластомы. Данное уравнение решается в области 400 на 400 ячеек. Область распространения опухоли на момент времени 300 дней показана на рис. 6.

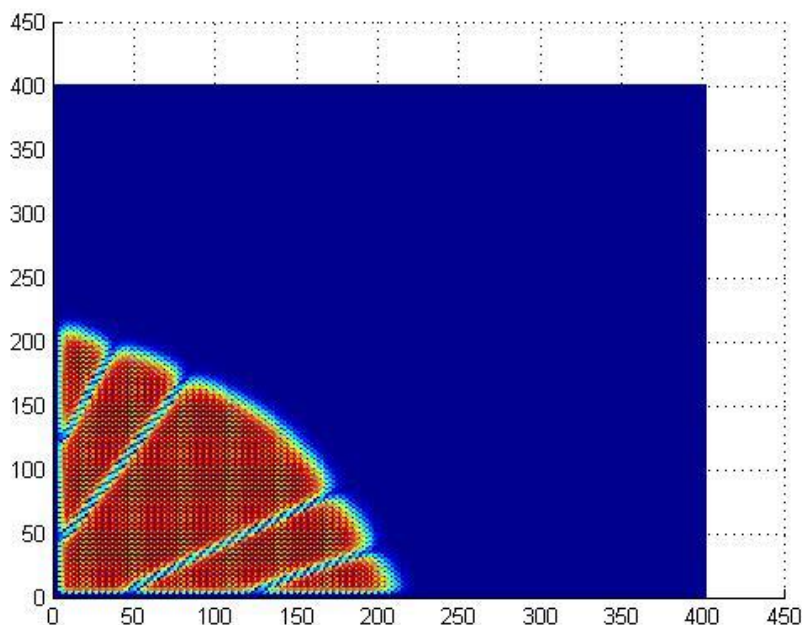


Рис. 6. Область распространения моделируемой опухоли на момент $t = 300$ дней

Выводы

В качестве основного вывода работы можно сказать, что предложено уравнение, которое при подходящем выборе параметров и замыкающих соотношений, определяемых в ходе исследования, может быть использовано для количественного описания многих геологических процессов, сопровождающихся массообменом и деформированием горных пород, а также биологических процессов, сопровождающихся перераспределением объема, занимаемого живой тканью (например, рост злокачественной опухоли).

Литература

1. Сорохтин О. Г., Чилингар Дж. В., Сорохтин Н. О. Теория развития Земли: происхождение, эволюция и трагическое будущее. М.: Институт компьютерных исследований, НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2010.

2. Трубецков Д. И., Мчеллова Е. С., Красичков Л. В. Введение в теорию самоорганизации открытых систем. М.: Физматлит, 2005.
3. Храмченков М. Г. Элементы физико-химической механики природных пористых сред. Казань: Казан. Мат. общ-во, 2003.
4. Киссин И. Г. Флюиды в земной коре: геофизический и тектонический аспекты. М.: Наука, 2009.
5. Астанин С. А., Колобов А. В., Лобанов А. И. и др. Влияние пространственной гетерогенности среды на рост и инвазию опухоли. Анализ методами математического моделирования // Медицина в зеркале информатики. 2008. С. 188–223.

ДИНАМИЧЕСКОЕ КОНФИГУРИРОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ УНИВЕРСАЛЬНОГО ПРЕПРОЦЕССОРА С ПОМОЩЬЮ ЯЗЫКА XML SCHEMA ДЛЯ ПОДГОТОВКИ ИСХОДНЫХ ДАННЫХ ЗАДАЧ МОДЕЛИРОВАНИЯ НА СУПЕРКОМПЬЮТЕРАХ

А. Д. Черевань, А. Г. Надуев, Д. А. Кожжаев

ООО «Центр компетенций и обучения», г. Саров

Введение. Постановка задачи

Современные комплексы математического моделирования включают в себя модули подготовки входных данных (препроцессор), модули, выполняющие расчет модели, в том числе в параллельном режиме с применением суперкомпьютеров, и модули визуализации и анализа полученных результатов. К модулям подготовки входных данных предъявляются разносторонние требования. Они должны обеспечивать прием данных в различных промышленных и отраслевых форматах, иметь возможность первичной проверки непротиворечивости данных, обладать возможностью эффективного задания или изменения параметров модели, начальных и граничных условий и графического представления данных. Немаловажной является также возможность быстрой адаптации как препроцессора, так и счетного модуля при модификации или создании новых расчетных методик. Более того, при наличии быстро развивающейся счетной методики, именно необходимость постоянной программной адаптации препроцессора и счетного модуля к существенным изменениям структуры данных на протяжении всего развития проекта является основным сдерживающим фактором. Подобная адаптация, как правило, приводит к существенной переработке всех частей комплекса, поскольку затрагивает базовую структуру данных, которая связывает все модули комплекса. В связи с этим возникла необходимость разработать систему динамического конфигурирования комплекса, которая позволила бы без значительных расходов на программную адаптацию иметь состояние комплекса, отвечающее последним требованиям по структуре данных.

Схема перехода к динамическому конфигурированию параметров

При традиционной схеме построения программного комплекса структура данных представлена двумя статически-динамическими подструктурами с фиксированными на этапе разработки объектами (вариант расчетной задачи и объекты проекта препроцессора). Полный цикл адаптации препроцессора под новые функциональные возможности решаемых задач занимает 2–3 месяца и включает в себя блокирующие разработку методики этапы (рис. 1, а), в то время как схема с дина-