DOI: 10.51790/2712-9942-2020-1-2-2

**О МАТЕМАТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ДИНАМИКИ КОАГУЛИРУЮЩИХ СМЕСЕЙ В
НЕСЖИМАЕМОЙ ЖИДКОСТИ С УЧЕТОМ ЯВЛЕНИЯ ФОРМИРОВАНИЯ
КЛАСТЕРОВ-ТРОМБОВ****В. А. Галкин^{1,a}, Т. В. Гавриленко^{1,b}, А. В. Галкин²**¹ Сургутский филиал Федерального государственного учреждения «Федеральный научный центр
Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук»,
г. Сургут, Российская Федерация^a val-gal@yandex.ru, ^b taras.gavrilenko@gmail.com, ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-3243-2751>² Общество с ограниченной ответственностью «ФИНСТАБИЛИТИ», г. Мытищи, Московская обл.,
Российская Федерация, ag@webberry.ru

Аннотация: одной из ключевых проблем, на решение которой направлены ресурсы общества по преодолению заболевания, вызванного новым коронавирусом COVID-19, является проблема нарушения кровотока, связанная, в частности, с процессом тромбообразования. Это явление существенно ограничивает кровоток, снижая доставку кислорода в целом по всему организму. В статье рассмотрены результаты создания математической модели динамики коагулирующих смесей в несжимаемой жидкости с учетом явления формирования кластеров-тромбов. Создание математических моделей процессов коагуляции и тромбообразования в сердечно-сосудистой системе человека обеспечит разработку эффективного управления этими явлениями. В статье описана математическая модель для процессов коагуляции в дисперсных системах — тромбообразования. Представлены результаты численного решения задачи и визуализация аналитического решения задачи, включая такие важнейшие параметры для тромбообразования, как распределение концентрации примеси в жидкости и распределение поля давления. Указанная модель может служить основой для построения иерархической системы образования тромбов в сердечно-сосудистой системе от микроскопического уровня до макроскопических структур. В том числе модель позволит сделать выводы об эффективности использования антикоагулянтов при поступлении пациентов в отделения неотложной помощи и при положительном результате теста на COVID-19.

Ключевые слова: математическое моделирование, тромбообразование, гидродинамика, дисперсные системы, кристаллические структуры.

Благодарности: работа выполнена при поддержке РФФИ, гранты 20-04-60123, 20-07-00236.

Для цитирования: Галкин В. А., Гавриленко Т. В., Галкин А. В. О математическом моделировании динамики коагулирующих смесей в несжимаемой жидкости с учетом явления формирования кластеров-тромбов. *Успехи кибернетики*. 2020;1(2):14–25. DOI: 10.51790/2712-9942-2020-1-2-2.

**SIMULATION OF COAGULABLE MIXTURES DYNAMICS IN INCOMPRESSIBLE LIQUID
CONSIDERING CLOT CLUSTER FORMATION****Valerii A. Galkin^{1,a}, Taras V. Gavrilenko^{1,b}, Alexei V. Galkin²**¹ Surgut Branch of Federal State Institute “Scientific Research Institute for System Analysis of the Russian
Academy of Sciences”, Surgut, Russian Federation^a val-gal@yandex.ru, ^b taras.gavrilenko@gmail.com, ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-3243-2751>² FINSTABILITY Limited Liability Company, Mytishchi, Moscow Region, Russian Federation,
ag@webberry.ru

Abstract: one of the key problems associated with COVID-19 is blood circulation impairment, particularly caused by thrombosis. The impairment significantly reduces the blood flow and restricts oxygen delivery to the entire body. The paper covers the simulation model for the coagulable mixture dynamics in an incompressible liquid considering clot cluster formation. Simulation models for the thrombosis and coagulation processes in the human cardiovascular system will help efficiently manage these phenomena. The study proposes a simulation model of the coagulation processes in disperse systems, i.e., the thrombosis process. The paper presents the numerical solution results and the visualization of the analytical solution.

The key thrombosis properties such as impurity concentration distribution in the liquid, and the pressure field distribution, were estimated. The simulation model can become a foundation for developing a multi-tier clot formation system in the cardiovascular system: from the microscopic level to the macroscopic structures. Besides, the model can estimate the efficiency of anticoagulants administered to COVID-19 positive patients at emergency care departments.

Keywords: simulation, thrombosis, hydrodynamics, disperse systems, crystal systems.

Acknowledgements: this study is supported by RFBR grants 20-04-60123, 20-07-00236.

Cite this article: Galkin V. A., Gavrilenko T. V., Galkin A. V. Simulation of Coagulable Mixtures Dynamics in Incompressible Liquid Considering Clot Cluster Formation. *Russian Journal of Cybernetics*. 2020;1(2):14–25. DOI: 10.51790/2712-9942-2020-1-2-2.

Введение

Одной из ключевых проблем, на решение которой направлены ресурсы общества по преодолению заболевания, вызванного новым коронавирусом COVID-19, является проблема нарушения кровотока, связанная, в частности, с процессом тромбообразования. Это явление существенно ограничивает кровоток, снижая доставку кислорода в целом по всему организму. Математическое исследование процессов коагуляции и фрагментации тромбов в сердечно-сосудистой системе человека обеспечит разработку эффективного управления этими явлениями. Важной является разработка модели течения многофазных дисперсных сред в сердечно-сосудистой системе человека, а также в капиллярах и пористых средах (в более общей постановке задачи) с учетом переменной во времени области течения. Данный класс задач характеризуется сложной геометрией многообразия течения, переменной во времени структурой рассматриваемой области, сочетанием задач гидродинамики и кинетики коагуляции образующихся кластеров-тромбов. Описание динамики такого рода процессов основывается на сочетании задач для уравнения Смолуховского–Больцмана кинетической теории коагуляции в пространственно неоднородной разветвленной пространственной структуре типа пористой среды и гидродинамики, описываемой уравнениями Навье–Стокса. При этом следует учитывать, что изменяющаяся во времени и пространстве плотность распределения компонентов смеси за счет их взаимных реакций изменяет поле течения среды, т.е. изменяются диффузионные коэффициенты, определяющие флуктуации гидродинамического поля скоростей переноса. В простейшем приближении описания тромбообразования модель должна включать в себя уравнения Навье–Стокса для вязкой несжимаемой жидкости с коэффициентами вязкости, зависящими от плотности распределения переносимых в ней коагулирующих компонентов, рассматриваемых как примесь. При этом предполагается, что примесь оказывает влияние на гидродинамическое поле как совокупность микроскопических рассеивающих центров, аналогичных броуновским частицам в известных классических моделях Смолуховского–Фоккера–Планка–Ланжевена–Колмогорова [1].

Однако сразу следует подчеркнуть, что упомянутые модели описания броуновского движения должны рассматриваться для множества различных стохастических воздействий с усреднением результатов (канонический ансамбль в молекулярной динамике), что является весьма ресурсоемкой задачей. Поэтому в данной работе мы ограничимся эвристической моделью, нацеленной на выделение существенных связей, которые, естественно, потребуют дальнейшей детализации и микрофизического обоснования.

Эмпирическое исследование в физических и биологических средах является ограниченным ввиду высоких требований к ресурсам времени, к безопасности пациентов, а также малых пространственных масштабов. Не менее важной составляющей для медицинского персонала является необходимость качественной визуализации развития образования тромбов. Существует разрыв между специализированным программным обеспечением, направленным на решение научных исследований, и программным обеспечением для конечного потребителя. Зачастую это не позволяет массово внедрять разработки в практическую медицину. Создание программного обеспечения для моделирования и визуализации сложных структур, в том числе течения крови в сосудах и коагуляции (включая формирование тромбов) у человека на высокопроизводительных вычислительных системах, позволит сформировать базу для моделирования процессов, протекающих в физических и биологических средах, имеющую практическое применение в промышленности и в медицине.

Модели дисперсных систем и коагуляция

Многокомпонентные среды-смеси широко распространены в природе и используются во многих областях человеческой деятельности. Для газодинамических смесей в работе [2] рассмотрены модели многокомпонентных сред. Сформулированы условия, при которых из модели многоскоростных взаимодействующих континуумов следует модель турбулентного перемешивания. Предложены уравнения, описывающие для каждой компоненты генерацию, диссипацию и диффузию турбулентности. Для смесей изотермических и политропных газов приведены аналитические решения о структуре волн разрежения и ударных волн.

В задачах описания тромбообразования важен учет процессов коагуляции (слияния или, другими словами, неупругого столкновения) компонентов смеси в гидродинамическом потоке, что может служить источником образования пространственно-временных структур в поле течения среды аналогично реакциям Белоусова–Жаботинского [3–7]. Первая модель реакции Белоусова–Жаботинского была получена в 1967 году Жаботинским и Корзухиным на основе подбора эмпирических соотношений, правильно описывающих колебания в системе, см. [8], в дальнейшем рассмотренных в моделях типа «брюсселятор» в работах Пригожина И. Р. [9].

От неупругого столкновения элементов сложных систем очень многое зависит в нашей повседневной жизни, примером тому служит явление свертываемости (коагуляции) крови при порезах (отсутствие коагуляции крови грозит смертельной опасностью так же, как и ее чрезмерная интенсивность, ведущая к образованию тромбов с последующей закупоркой кровеносных сосудов!), створаживание молока и образование киселя — это тоже коагуляция; процессы полимеризации, т. е. очень интенсивной коагуляции частичек, лежат в основе производства полимерных нитей, использующихся при изготовлении современных материалов. Аналогичные явления можно наблюдать при установлении коммуникаций в телефонной сети, при передаче сообщений по всемирной паутине Интернета.

Во многих физических процессах смеси могут возникать в системах, в которых их вначале не было, в частности, из-за неустойчивости и разрушения контактных границ в условиях динамических нагрузок. В других случаях динамические нагрузки могут приводить к противоположному эффекту: к сепарации компонентов предварительно созданной смеси.

Одним из основных механизмов эволюции дисперсных систем является механизм коагуляции (слияния) частиц системы. Следует подчеркнуть, что обычно исследовательские работы посвящены исследованию поведения уже готовых смесей и не затрагивают вопросов их образования.

Коагуляция (слияние) частиц является одной из основных причин эволюции пространственно неоднородных дисперсных систем, под которыми понимают механическую смесь среды (газообразной или жидкой) с частицами диспергированной фазы (твердой или жидкой), причем свойства фаз существенно зависят от переноса вещества между различными точками координатного пространства. При этом важно подчеркнуть наличие дисперсии скоростей переноса для частиц, находящихся в различных состояниях, иначе заменой системы пространственно-временных координат описание сводится к модели, подобной пространственно однородному случаю. Следует подчеркнуть, что наличие пространственной неоднородности значительно усложняет исследование математических моделей коагуляции. В частности, это обусловлено новым эффектом (по сравнению с пространственно однородными задачами), а именно возникновением не дифференцируемых особенностей решения по пространственно-временным переменным. Эти особенности, в свою очередь, порождают пространственно-временные зоны, в которых соотношение сохранения для оператора столкновений Смолуховского переходит в соотношение диссипации (эти области можно интерпретировать как зоны интенсивного образования осадков, не взаимодействующих с дисперсной фазой).

Математические вопросы корректности задач кинетической теории коагуляции весьма сложные, и большинство результатов относится, как правило, к теории пространственно однородных систем либо близких к ним. Пространственно неоднородные задачи, в особенности, связанные со свободным переносом частиц, осуществляемым посредством однопараметрической группы сдвигов по пространственной переменной, являются наиболее трудными с математической точки зрения.

Математическая модель

Пусть в пространстве $\mathbb{R}_3 = \{x = (x_1, x_2, x_3)\}$ в вязкой среде, заполненной частицами различной массы $\mu \in \mathbb{R}^+$ с распределением концентрации $f(\mu, x, t)$, движущимися под действием гидроди-

намического поля внешней среды, происходит процесс коагуляции при парных соударениях частиц с интенсивностью $\Phi(\mu, \mu_1, x, t) \geq 0$, либо дробление частиц с интенсивностью $\Psi(\mu, \mu_1, x, t) \geq 0$, где μ и μ_1 — массы взаимодействующих частиц. (Ниже возможную зависимость интенсивности соударений и дробления от пространственно-временных координат x, t будем опускать для простоты записи формул. При этом существенной является зависимость от масс.) Для скорости переноса частиц, например, для однородных сфер с массой μ , падающих в вязкой среде под действием гравитации по закону Стокса, справедлива степенная зависимость:

$$V(\mu) \sim \mu^{2/3}.$$

Если при этом частицы движутся в локально-одномерном гидродинамическом потоке внешней среды со скоростью $V(\mu, x, t) = (v_1, v_2, v_3) \in \mathbb{R}_3$ и испытывают при этом броуновское блуждание с коэффициентом диффузии $D(\mu, x, t)$, то принятой математической моделью указанного процесса является кинетическое уравнение Смолуховского для непрерывных масс [10–12]:

$$\frac{\partial f(\mu, x, t)}{\partial t} + \operatorname{div}_x [V(\mu, x, t)f(\mu, x, t)] - \operatorname{div}_x [D(\mu, x, t)\nabla_x f(\mu, x, t)] = S(f) + q(\mu, x, t), \quad x, \mu \geq 0, \quad t > 0, \quad (1)$$

где $S(f)$ — оператор столкновений частиц, который действует на неизвестную функцию (концентрацию) f по переменной μ , обычно не затрагивая ее пространственно-временные аргументы x, t , величина $q(\mu, x, t) \geq 0$ — заданная интенсивность источников частиц:

$$S(f) = S_c(f) + S_b(f).$$

Для модели Смолуховского коагулирующих систем, состоящих из частиц с непрерывным спектром масс, оператор неупругих локальных по x, t столкновений $S_c(f)$ имеет следующий вид [1]:

$$S_c(f) = \frac{1}{2} \int_0^\mu \Phi(\mu - \mu_1, \mu_1) f(\mu - \mu_1, x, t) f(\mu_1, x, t) d\mu_1 - f(\mu, x, t) \int_0^\infty \Phi(\mu, \mu_1) f(\mu_1, x, t) d\mu_1. \quad (2)$$

Оператор спонтанного дробления частиц $S_b(f)$ со спектром $\Psi(\mu, \mu_1)$ распределения продуктов распада по значениям масс $\mu \geq 0$, образующихся из делящейся частицы с массой $\mu_1 \geq \mu$ (при условии марковости этого процесса), задается выражением [13]:

$$S_b(f)(\mu, x, t) = \int_0^\infty \Psi(\mu, \mu_1) f(\mu + \mu_1, x, t) d\mu_1 - \frac{1}{2} f(\mu, x, t) \int_0^\mu \Psi(\mu - \mu_1, \mu_1) d\mu_1. \quad (3)$$

Аналогично выглядят операторы $S_c(f)$ и $S_b(f)$ для спектров $f^{(\omega)}$ частиц с дискретными массами $\omega \in \mathbb{N}$ [14]:

$$S_c^{(\omega)}(f^{(\cdot)}) = \frac{1}{2} \sum_{\omega'=1}^{\omega-1} \Phi(\omega - \omega', \omega') f^{(\omega-\omega')} f^{(\omega')} - f^{(\omega)} \sum_{\omega'=1}^{\infty} \Phi(\omega, \omega') f^{(\omega')}, \quad \omega \in \mathbb{N}; \quad (4)$$

$$S_b^{(\omega)}(f) = \sum_{\omega'=1}^{\infty} \Psi(\omega, \omega') f^{(\omega+\omega')} - \frac{1}{2} f^{(\omega)} \sum_{\omega'=1}^{\omega-1} \Psi(\omega - \omega', \omega'). \quad \omega \in \mathbb{N}. \quad (5)$$

Выражения в указанных операторах, записанные со знаком минус, задают «гибель» частиц в спектре, а остальные неотрицательные слагаемые — их «рождение». Эвристический метод их записи основан на локальном законе сохранения массы. (Для оператора столкновений Смолуховского — это соотношения баланса рождения и гибели частиц в процессе их парного мгновенного взаимодействия.) Математическое обоснование модели коагуляции является весьма трудоемким, см. [14].

По своему физическому содержанию вышеуказанные модели взаимодействия частиц в потоке внешней среды соответствуют подходу Больцмана Л. в кинетической теории газов [15].

При рассмотрении математической модели будем налагать следующие предположения физического характера:

- частиц достаточно большое число, чтобы можно было применить функцию распределения числа частиц по массам;
- частицы системы образуют локально-хаотическое множество.

К вышеуказанному классу моделей больцмановского типа для локально взаимодействующих частиц (при парных соударениях) примыкают модели с нелокальными взаимодействиями, к которым, прежде всего, относятся уравнения теории плазмы (Власова А.А.) [16]. В частности, в работе [17] для моделирования роста кристаллических структур в объеме переохлажденного расплава предложено кинетическое уравнение власовского типа.

Состояние такой системы в каждый момент времени t описывается плотностью вероятности распределения частиц $f(m, t)$ по массам m . В начальный момент времени состояние системы задается плотностью вероятности распределения f_0 . Новые частицы могут поступать в нашу систему за счет источника, который действует с интенсивностью $q(m, t)$. На практике источником может быть, например, неоднородность среды. То есть, если мы помещаем в нашу систему ионы какого-либо вещества, на них немедленно конденсируется расплав и образуются новые частицы. Функция Φ — это интенсивность столкновений частиц.

Уравнение коагуляции власовского типа [18–19] в пространстве масс $m \geq 0$ имеет вид:

$$\frac{\partial f(m, t)}{\partial t} + \frac{\partial \dot{m}(m, t)}{\partial m} = -\frac{1}{2} f(m, t) \int_0^{\infty} \Phi(m, y) f(y, t) dy + q(m, t), \quad t > 0, \quad (6)$$

где

$$\dot{m} = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} \Phi(m, y) f(y, t) y dy.$$

Гипотезы, на основе которых записано уравнение (6), предполагают, что в процессе взаимодействия имеет место парное взаимодействие частиц, т.е. поле частиц достаточно разреженное, что соответствует начальной стадии кристаллизации (тромбообразования).

Это уравнение для динамики спектра в пространстве значений непрерывных масс взаимодействующих между собой частиц напрямую связано с задачами создания и эксплуатации ядерных реакторных установок с тяжелым жидкометаллическим теплоносителем (ТЖМТ) свинец-висмут или свинец, одной из ключевых проблем эксплуатации которых является проблема замораживания-размораживания ТЖМТ в первом контуре. При замораживании, нагреве и охлаждении ТЖМТ в твердом состоянии могут возникать значительные механические воздействия на конструкции, обусловленные несогласованностью перемещений объемов теплоносителя с перемещениями конструкций и соизмеримостью механических свойств теплоносителя в твердом состоянии со свойствами конструкционных материалов.

Моделирование множественных слияний представляет собой существенно более сложную модель коагуляции и основывается на кинетическом подходе. Но даже такие упрощенные модели демонстрируют крайнюю сложность проблемы, связанную с диссипативными явлениями, исследованными в простейших моделях типа «брюсселятор» Пригожиным И.Р. [9].

Спецификой моделей, рассматриваемых в настоящей работе, является их существенно большая (неограниченная) размерность по спектру масс взаимодействующих частиц, что может служить источником нового класса явлений — спонтанного структурообразования в коагулирующей системе, аналогичного процессу образования ударных фронтов в газовой динамике [20–22].

По существу, вышеперечисленные математические модели — это аналог процессов тромбообразования в кровеносной системе за счет коагуляции сгустков, образующихся в крови. В частности, такие же процессы исследовались для явления роста кристаллов математической модели кристаллизации в объеме переохлажденного расплава, основанной на кинетическом подходе [23]. Очевидно, что уравнение (1) относится к семейству типа «reaction-diffusion» [24–25] с континуумом компонент. Как известно, для трехкомпонентных семейств возможно образование периодических пространственно-временных структур [9].

В многокомпонентных системах коагулирующих смесей со стационарным источником были предсказаны аналогичные явления, см. [26].

Уравнение (1) дополняется при $t = 0$ пространственной области $G \subseteq \mathbb{R}_3$ начальными данными:

$$\hat{f}(\mu, x, 0) = f^{(0)}(\mu, x), \quad \mu, x \in \Pi_0 = \mathbb{R}_1^+ \times G. \quad (7)$$

Дополнительные условия на границе ∂G области G обсудим ниже.

В рамках рассматриваемой упрощенной модели в качестве первого приближения положим, что перенос частиц подчиняется системе уравнений Навье–Стокса для вязкой несжимаемой жидкости с полем скоростей течения $V(x, t) = \{V^{(i)}\} \in \mathbb{R}_N$, $x \in \mathbb{R}_N$, $t > 0$ и давлением $p(x, t)$:

$$\frac{\partial}{\partial t} V^{(i)} + \sum_{j=1}^N V^{(j)} \frac{\partial}{\partial x_j} V^{(i)} + \rho^{-1} \frac{\partial}{\partial x_i} \rho^{-1} p = \rho^{-1} R^{(i)} + \operatorname{div}_x [v(n, T) \nabla_x V^{(i)}],$$

$$x \in G, \quad t > 0, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (8)$$

$$\operatorname{div}_x V = 0, \quad (9)$$

$$n(\mu, x, t) = \int_0^\infty \hat{f}(\mu, x, t) d\mu, \quad v(n) \geq 0. \quad (10)$$

Предполагается, что в области G жидкость имеет постоянную плотность $\rho > 0$, $\nu = \eta \rho^{-1}$ — кинематическая вязкость жидкости, η — динамическая вязкость. В общем случае, учитывая закон сохранения энергии, уравнения движения (1) следует рассматривать в совокупности с динамикой температуры жидкости $T(x, t)$, от которой зависит кинематическая вязкость [27–28].

Здесь $R^{(i)} = R^{(i)}(x, t)$ — компоненты плотности поля внешних сил, приложенных к смеси (отметим, что для потенциальных сил их влияние приводит только к аддитивной добавке потенциала сил к величине давления в задаче без их действия, при этом поле скоростей $V(x, t)$ остается неизменным). Предполагается, что составные части смеси захватываются потоком среды, мгновенно приобретая ее локальную скорость $V(x, t)$, оказывая влияние на динамику жидкости, составляющую смесь, через ее интегральную локальную концентрацию $n(\mu, x, t)$. Такая гипотеза о влиянии концентрации смеси на поле течения предполагает, что компоненты смеси являются рассеивающими центрами, которые через свое локальное броуновское блуждание меняют среднее значение изотропного коэффициента вязкости среды $v(n, T)$. При построении более детальных моделей динамики смеси, очевидно, следует учитывать возможность изменения во времени области течения $G(t)$ [29].

В том числе следует учитывать воздействие эффектов инерции для частиц с положительной массой μ , которые меняют конфигурацию поля течения с явной зависимостью $V(\mu, x, t)$ (то же относится к коэффициентам вязкости). Более того, наличие протяженных размеров у коагулирующих частиц в потоке может приводить к сложному явлению — эффекту зацепления, см. [13], когда «... безынерционная неброуновская частичка, вообще говоря, должна крупную частицу обойти ... Однако обтекающие частички обладают конечными размерами. И поскольку на расстоянии порядка радиуса частички от поверхности крупной частицы нормальная составляющая скорости ... конечна, при конвективном переносе возможно «зацепление» мелкой частицы за крупную» [13]. Имеет место также эффект инерционного осаждения. «Поскольку гидродинамическое поле крупной частицы неоднородно, на движение мелких частичек в этом поле всегда оказывает влияние их инерция. Влияние инерции проявляется в уменьшении в некоторых областях течения кривизны траекторий частичек по сравнению с кривизной линий тока среды. Возможны два различных режима движения частичек под влиянием инерции в неоднородном поле среды: докритический, когда траектории частичек и линий тока среды не совпадают, но их поведение аналогично, и сверхкритический, когда влияние инерции столь велико, что траектории частиц пересекают поверхность крупных частиц. В первом случае инерция частиц либо усиливает, либо уменьшает действие других механизмов коагуляции, например, эффекта зацепления. При сверхкритическом режиме имеет место новый механизм коагуляции, действующий самостоятельно, — инерционное осаждение» [13]. Ввиду крайней сложности учета таких эффектов, мы ограничимся рассмотрением вышеупомянутой упрощенной модели, в которой можно провести анализ влияния совместных факторов: процессов коагуляции, фрагментации точечных частиц и их

взаимодействия во внешнем слабо возмущенном гидродинамическом поле несжимаемой жидкости с коэффициентом вязкости, зависящим от интегральной концентрации смеси.

В частности, в настоящей работе предполагается, что область течения G неизменна во времени, а на ее границе заданы условия прилипания, или условия непротекания для поля скоростей $V(x, t)$, задаются также значения концентраций и температуры, или их входящие потоки вдоль нормали к границе области.

Остановимся на явлении внутреннего трения в вязкой несжимаемой жидкости [27, 28, 30, 31], которое для крупномасштабных течений может оказывать влияние на тепловые и электрические явления при больших значениях вязкости ν , меняя характеристики течения, а в некоторых случаях — приводить к фазовым переходам, электрическим пробоям и т.п. Это может повлечь переоценку эксплуатационных режимов при управлении пластами. Аналогичные проблемы связаны с управлением гемодинамикой, в частности, с теплоэлектрическими процессами при течении в пористых средах, характерных для теплокровных организмов, а также с оптимизационными задачами управляемого плавления в вязкой несжимаемой жидкости.

Из закона сохранения энергии следует, что диссипативные процессы, обусловленные внутренним трением, определяют уравнение для температурного поля вязкой несжимаемой жидкости [28, 30]:

$$\frac{\partial}{\partial t} T(x, t) + \sum_i V^{(i)} \frac{\partial}{\partial x_i} T(x, t) = \chi \Delta T(x, t) + \frac{\varepsilon}{c_p}, \quad t > 0, x \in G, \quad (11)$$

где $\chi = \kappa \rho^{-1} c_p^{-1}$ — коэффициент температуропроводности среды, c_p — теплоемкость. Последнее слагаемое в правой части уравнения (11) описывает общее прогревание среды, вызванное внутренним трением жидкости. Вид диссипативного внутреннего источника тепла определяется следующим выражением:

$$\varepsilon = \frac{1}{2} \nu \sum_{i,j} \left(\frac{\partial}{\partial x_i} V^{(j)} + \frac{\partial}{\partial x_j} V^{(i)} \right)^2.$$

Прямые расчеты показывают существенное влияние этого источника тепла для жидкостей с большими коэффициентами вязкости ν , что является прямым аналогом закона Джоуля–Ленца в электрических цепях. Имеются экспериментальные подтверждения [32] о влиянии такого вязкого тепловыделения в масляных подшипниках. Отметим, что эту же природу имеет эффект дросселирования течения вязкой жидкости в пористой среде. В частности, в [33] приведена таблица значений тепловыделения нефтепродуктов, воды и метилового спирта при дроссельном движении при заданном перепаде давления. По-видимому, эти же эффекты тепловыделения имеют место при инициализации объемных взрывов при внесении пористого катализатора в вязкие жидкости [34], описываемых функциональными решениями систем законов сохранения [14].

Визуализация и численные решения

Пример визуализации точного решения уравнений трехмерной гидродинамики в пористой среде, состоящей из нитевидной сетки вертикальных препятствий ∂G , которые расположены с периодом $\lambda > 0$ ортогонально к плоскости $x_3 = 0$, приведен ниже. Предполагается, что в препятствиях выполнены условия прилипания $V|_{\partial G} = 0$. Семейство точных решений этих уравнений, включая поля температуры $T(x, t)$ и примеси $n(x, t)$, определяемые постоянными параметрами $\alpha, \beta, \chi, \lambda, \mu, \nu$, имеет следующий вид:

$$V = \begin{pmatrix} \exp(\mu x_3) \sin \lambda x_2 \\ \exp(-\mu x_3) \sin \lambda x_1 \\ 0 \end{pmatrix} \exp\left((\mu^2 - \lambda^2) \nu t\right);$$

$$p = \exp\left(2\nu (\mu^2 - \lambda^2) t\right) \cos(\lambda x_1) \cos(\lambda x_2);$$

$$n = \exp\left((\mu^2 - \lambda^2) \chi t\right) (\exp(-\mu x_3) \cos(\lambda x_1) - \exp(\mu x_3) \cos(\lambda x_2)) +$$

$$+ \exp\left(\mu^2 \chi t\right) [\alpha \exp(-\mu x_3) + \beta \exp(-\mu x_3)].$$

Температурное поле $T(x, t)$ в случае отсутствия внутреннего тепловыделения выглядит аналогично полю примесей $n(x, t)$.

Ниже приведены графики различных сечений поля течения и примесей. (Визуализация полей выполнена Дубовиком А.О., ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН.)

Рис. 1. Пространственное распределение концентраций примеси $n(x, t)$, сечение $x_3 = 0$

Рис. 2. Пространственное распределение поля давления $p(x, t)$, сечение $x_3 = 0$

Нижеследующий пример стационарной гидродинамики с учетом процесса коагуляции указывает на возможность появления макроскопической структуры в одномерном потоке коагулирующего вещества:

$$V(\mu) \frac{\partial f(\mu, x)}{\partial x} = \frac{1}{2} \int_0^\mu f(\mu - \mu_1, x) f(\mu_1, x) d\mu_1 - f(\mu, x) \int_0^\infty f(\mu_1, x) d\mu_1, \quad x \geq 0, \quad (12)$$

$$f(\mu, 0) = f_0(\mu),$$

где значения скорости пространственного переноса $V(\mu) > 0$ считаются заданной функцией массы $\mu \geq 0$ коагулирующих в потоке частиц. На входе $x = 0$ в одномерный канал течения, расположенный вдоль оси $x \geq 0$, подается заданный стационарный входящий поток частиц $J_0(\mu) = V(\mu)f_0(\mu) \geq 0$. Полагая новой неизвестной величиной значения потока $J(\mu, x) = V(\mu)f(\mu, x)$, получаем для J задачу Коши для уравнения Смолуховского:

$$\frac{\partial J(\mu, x)}{\partial x} = \frac{1}{2} \int_0^\mu \Phi(\mu - \mu_1, \mu_1) J(\mu - \mu_1, x) J(\mu_1, x) d\mu_1 - J(\mu, x) \int_0^\infty \Phi(\mu, \mu_1) J(\mu_1, x) d\mu_1, \quad (13)$$

$$x \geq 0, \quad \mu \geq 0,$$

$$J(\mu, 0) = J_0(\mu), \quad \Phi(\mu, \mu_1) \equiv V^{-1}(\mu)V^{-1}(\mu_1).$$

Рис. 3. Пространственное распределение поля концентрации примеси $n(x, t)$, сечение $x_3 > 0$

Рис. 4. Пространственное распределение поля давления $p(x, t)$, сечение $x_3 > 0$

Рис. 5. Пространственное распределение поля давления $p(x, t)$, сечение $x_3 < 0$

Полагая

$$V(\mu) \equiv \mu^{-1} \quad (14)$$

при $\mu > 0$, получаем классический пример решений с диссипативной структурой [23, 24]. В этом случае из потока коагулирующего вещества выделяется макроскопический осадок для значений пространственных координат:

$$x \geq x_c = \frac{1}{\int_0^{\infty} \mu^2 J_0(\mu) d\mu > 0}.$$

Следует подчеркнуть, что величина интегрального потока массы коагулирующих частиц $\int_0^{\infty} \mu_1 J(\mu_1, x) d\mu_1$ является постоянной величиной, равной $\int_0^{\infty} \mu_1 J_0(\mu_1) d\mu_1$ при $0 \leq x \leq x_c$, а при $x \geq x_c$ эта величина монотонно убывает, стремясь к нулю при $x \rightarrow +\infty$, за счет выпадения вдоль канала течения макроскопического осадка, не взаимодействующего с микрочастицами в течении [10].

Для описания характеристик течения выделяющейся макроструктуры и ее воздействия на структуру потока требуются дополнительные гипотезы и исследования [35, 23].

Для наглядного анализа решения уравнений (12), (13) при выполнении условия (14) для скоростей переноса частиц в одномерном потоке (14) рассмотрим пример со следующим распределением частиц на входе канала при $x = 0$:

$$f_0(\mu) = \exp(-\mu), \quad \mu \geq 0.$$

Решая эти уравнения с учетом требования примыкания решения к начальной функции, имеем:

$$J(\mu, x) = \begin{cases} \mu^{-2} x^{-1/2} I_1(2\mu x^{-1/2}) \exp[-\mu(1+x)], & \mu \geq 0, \quad 0 \leq x \leq x_c = 1, \\ \mu^{-2} x^{-1/2} I_1(2\mu x^{-1/2}) \exp[-2\mu x^{-1/2}], & \mu \geq 0, \quad x > x_c, \end{cases}$$

где I_1 — функция Бесселя мнимого аргумента. Положение критической точки x_c , правее которой начинается массовое выделение осадка вдоль течения коагулирующих частиц, определяется равенством $x_c = 1$. Соответствующие формулы для интегрального потока массы коагулирующего вещества вдоль канала $Ox = \{x \geq 0\}$ имеют вид:

$$\bar{J}_{micro}(x) \equiv \int_0^{\infty} \mu_1 J(\mu_1, x) d\mu_1 = \begin{cases} 1, & 0 \leq x \leq x_c = 1, \\ x^{-1/2}, & x > x_c. \end{cases} \quad (15)$$

Соответственно, в силу закона сохранения массы поток вещества в виде осадка $\bar{J}_{macro}(x)$ (макроструктуры-полимера), выделяющегося вдоль канала Ox и не взаимодействующего с потоком коагулирующих частиц (микрофазой вещества), определяется следующими формулами:

$$\bar{J}_{macro}(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq x_c = 1, \\ 1 - x^{-1/2}, & x > x_c. \end{cases} \quad (16)$$

Формулы (15), (16) тестировались методом прямого моделирования для указанного процесса и получено удовлетворительное согласие результатов Монте-Карло с аналитическим решением и расчетом по разностной схеме, см. рис. 6.

Заключение

Указанная модель может служить основой для построения иерархической системы образования тромбов в сердечно-сосудистой системе от микроскопического уровня до макроскопических структур. В частности, в работе [36] специалисты медицинского комплекса Маунт-Синай в Нью-Йорке подчеркивают: «Применение средств, снижающих свертываемость крови — антикоагулянтов — может повысить шансы пациентов с COVID-19 на выживание». Исследователи проанализировали записи о 2773 пациентах с COVID-19, поступавших в больницы с 14 марта по 11 апреля 2020 года. Особое внимание они обратили на выживаемость пациентов, которые получали антикоагулянты. Также ученые приняли во внимание определенные факторы риска, включая возраст, этническую принадлежность, хронические

Рис. 6. Интегральные значения количества выпадающих осадков из потока коагулирующих частиц вдоль канала течения Ox

заболевания и т.п. Антикоагулянты получали 28 % пациентов. Им вводилась доза, превышающая профилактическую: высокие концентрации препаратов используются, когда выявлено образование тромбов или есть подозрение, что они появились. Использование антикоагулянтов ассоциировалось с улучшением выживаемости пациентов с COVID-19 как в условиях отделения интенсивной терапии, так и вне его. Среди умерших пациентов те, кто получал антикоагулянты, продержались 21 день. Те, кто не получал, — 14. Прием антикоагулянтов оказался связан с ростом выживаемости среди пациентов с искусственной вентиляцией легких: в группе, не получавшей препараты, погибли 62,7 % пациентов, среди получавших — в два раза меньше, 29,1 %. Всем пациентам при поступлении в больницу делали анализ крови, который показывал также различные маркеры воспаления. Анализ этих записей показал, что у пациентов, получавших антикоагулянты, маркеры воспаления были выше, чем у остальных. Это может свидетельствовать, что пациенты в более тяжелом состоянии, возможно, получали антикоагулянты на ранней стадии. При этом, однако, у получавших антикоагулянты пациентов чаще встречались кровотечения разных видов, от внутримозгового до желудочного, кровоизлияния в глаза и кровь в моче — таковых было 3 %. В группе, не получавшей антикоагулянты, кровотечения и кровоизлияния наблюдались у 1,9 %. Это исследование демонстрирует, что антикоагулянты, принимаемые перорально, подкожно или внутривенно, могут играть важную роль в уходе за пациентами с COVID-19 и они могут предотвратить возможные смертельные исходы, связанные с коронавирусом, включая инфаркт, инсульт и эмболию легких. Возможность использования антикоагулянтов должна рассматриваться при поступлении пациентов в отделения неотложной помощи и при положительном результате теста на COVID-19.

ЛИТЕРАТУРА

1. Боголюбов Н. Н. *Собрание научных трудов в 12 томах. Том 5. Неравновесная статистическая механика, 1939–1980.* М.: Наука; 2006.
2. Куропатенко В. Ф. Неустановившиеся течения многокомпонентных сред. *Математическое моделирование.* 1989;1:2:118–136.
3. Белоусов Б. П. Периодически действующая реакция и её механизм. *Сборник рефератов по радиационной медицине за 1958 год.* М: Медгиз; 1959. С. 145–147.
4. Белоусов Б. П. Периодически действующая реакция и её механизм. *Автоволновые процессы в системах с диффузией: сб. /* Под ред. М. Т. Грековой. Горький: Институт прикладной физики АН СССР; 1981. 285 с. С. 76.
5. Жаботинский А. М. Периодический процесс окисления малоновой кислоты растворе. *Биофизика.* 1964;9:306–311.
6. Жаботинский А. М. *Концентрационные колебания.* М.: Наука; 1974. 179 с.
7. Zaikin A. N., Zhabotinsky A. M. Concentration Wave Propagation in Two-Dimensional Liquid-Phase Self-Oscillating System. *Nature.* 1970;225:535–537.
8. Корзухин М. Д., Жаботинский А. М. *Математическое моделирование химических и экологических автоколебательных систем.* М.: Наука; 1965.
9. Николис Г., Пригожин И. *Самоорганизация в неравновесных системах: От диссипативных структур к упорядоченности через флуктуации.* М.: Мир; 1979. 512 с.
10. Галкин В. А. *Уравнение Смолуховского.* М.: ФИЗМАТЛИТ; 2001. 336 с.

11. Lang R., Xanh N. X. Smoluchowski's Theory of Coagulation in Colloids Holds Rigorously in Boltzmann-Grad Limit. *Z. für Wahrscheinlichkeitstheorie und Verwandte Gebiete*. 1980;54:227–280.
12. Dubovskii P. B., Galkin V. A., Stewart I. W. Exact Solution for the Coagulation-Fragmentation Equation. *J. Physics A: Math. Gen.* 1992;25:4737–4744.
13. Волощук В. М., Седунов Ю. С. *Процессы коагуляции в дисперсных системах*. Л.: Гидрометеиздат; 1975.
14. Галкин В. А. *Анализ математических моделей: системы законов сохранения, уравнения Больцмана и Смолуховского*. М., 2009. 408 с.
15. Больцман Л. *Лекции по теории газов* / Пер. с нем. Под редакцией Б. И. Давыдова. М.: Государственное издательство технико-теоретической литературы; 1953. 554 с.
16. Власов А. А. *Нелокальная статистическая механика*. М.: Наука; 1978. 264 с.
17. Галкин В. А., Забудько М. А. Точные и численные решения уравнений теплопроводности и кинетических уравнений. *Известия вузов. Ядерная энергетика*. 2000;1:19–28.
18. Galkin V. A., Zaboudko M. A., Tertychny R. G. The Simulation of Particles Growth Based on Vlasov's Approach. *Proceedings of the Fifth International Conference on Simulation of Devices and Technologies (ICSDF'95)*. Obninsk, 1995. P. 41–42.
19. Галкин В. А., Забудько М. А., Осецкий Д. Ю., Рыжиков Д. А., Галкина И. В. Математическое моделирование процессов роста агломератов в приближениях Смолуховского и Власова–Лиувилля–Смолуховского. *Вестник Нижегородского университета им. Н. И. Лобачевского. Серия «Математическое моделирование и оптимальное управление»*. 2005;1:67–74.
20. Рождественский Б. Л., Яненко Н. Н. *Системы квазилинейных уравнений и их приложения к газовой динамике*. М.: Мир; 1968.
21. Галкин В. А. Обобщенное решение уравнения Смолуховского для пространственно неоднородных систем. *ДАН СССР*. 1987;293(1):74–77.
22. Галкин А. В. Математическое моделирование газа, образующего конденсированную структуру. *Математическое моделирование*. 2009;21:103–117.
23. Галкин В. А. Кинетический метод решения систем дифференциальных уравнений. *Доклады Академии наук*. 2013;452(1):12–13.
24. Kolmogorov A., Petrovskii I., Piskunov N. Study of a Diffusion Equation That Is Related to the Growth of a Quality of Matter and Its Application to a Biological Problem. *Moscow University Mathematics Bulletin*. 1937;1:1–26.
25. Smoller J. *Shock Waves and Reaction Diffusion Equations*. Springer, 2012. 634 p.
26. Багдасарова И. Р., Галкин В. А. Моделирование периодических структур в распределении дефектов, возникающих в конструкционных материалах ЯЭУ под действием стационарного источника. *Известия вузов. Ядерная энергетика*. 1999;1:85–93.
27. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. *Теоретическая физика. Том VI. Гидродинамика*. М.: Наука; 1986. 736 с.
28. Монин А. С., Яглом А. М. *Статистическая гидромеханика. Механика турбулентности. Часть 1*. М.: Наука; 1986. 640 с.
29. Бетелин В. Б., Галкин В. А. Задачи управления параметрами несжимаемой жидкости при изменении во времени геометрии течения. *Доклады Академии наук*. 2015;463(2):149.
30. Валландер С. В. *Лекции по гидроаэромеханике*. Л.: Из-во ЛГУ; 1978, 294 с.
31. Галич Н. Е. Тепловая неустойчивость и пробой движущихся вязких жидкостей в электрическом поле и при поглощении света. *Журнал технической физики*. 1989;59(7):10–17.
32. Алтоиз Б. А., Савин Н. В., Шатагина Е. А. Влияние тепловыделения в микропрослойке жидкости при измерении ее вязкости. *Журнал технической физики*. 2014;84(5):21–27.
33. Куштанова Г. Г. *Физика геосферы*. Казань: Изд-во КазГУ; 2004. 44 с.
34. Семенов Н. Н. *Цепные реакции*. М: Гомхимтехиздат; 1934.
35. Галкин В. А. Об одном свойстве коагуляции атмосферного аэрозоля. *Метеорология и гидрология*. 1983;12:11–19.
36. Blood Thinners May Improve Survival Among Hospitalized COVID-19 Patients. *Journal of the American College of Cardiology*. Available at: https://www.eurekalert.org/pub_releases/2020-05/tmsh-btm050420.php.