



# Методы мультифизического моделирования и приложения в геофизике и медицине

Ю.В.Василевский  
ИВМ РАН

*Научная сессия ОМН РАН  
«Современная математика для передовых технологий»*

*9 декабря 2024 г.*



# Благодарности

Работа поддержана проектами РНФ

- 21-71-30023 Новые математические методы и технологии в актуальных геофизики и биомеханики (лаб. мирового уровня, рук. Ю.В.Василевский)
- 21-71-20024 Массивно-параллельные конечно-объемные методы для решения мультифизических задач (рук. К.М.Терехов)
- 22-71-10007 Программный продукт для пациент-ориентированного моделирования электромеханики сердца и медицинских приложений (рук. Ф.А.Семин)

а также

- МЦМУ «Московский центр фундаментальной и прикладной математики»
- НЦМУ «Цифровой биодизайн и персонализированное здравоохранение»
- Росатом
- НТЦ Газпром нефть

Соавторы:

- к.ф.-м.н. К.М.Терехов (ИМ РАН)
- к.ф.-м.н. И.В.Капырин (ИБРАЭ РАН)
- к.ф.-м.н. К.А.Новиков (ИМ РАН)
- к.ф.-м.н. А.А.Данилов (ИМ РАН)
- А.А.Легкий (ИМ РАН)
- к.ф.-м.н. Ф.А.Семин (МГУ)
- к.ф.-м.н. В.Ю.Саламатова (ПМГМУ)
- к.м.н. П.А.Каравайкин (РНЦХ)

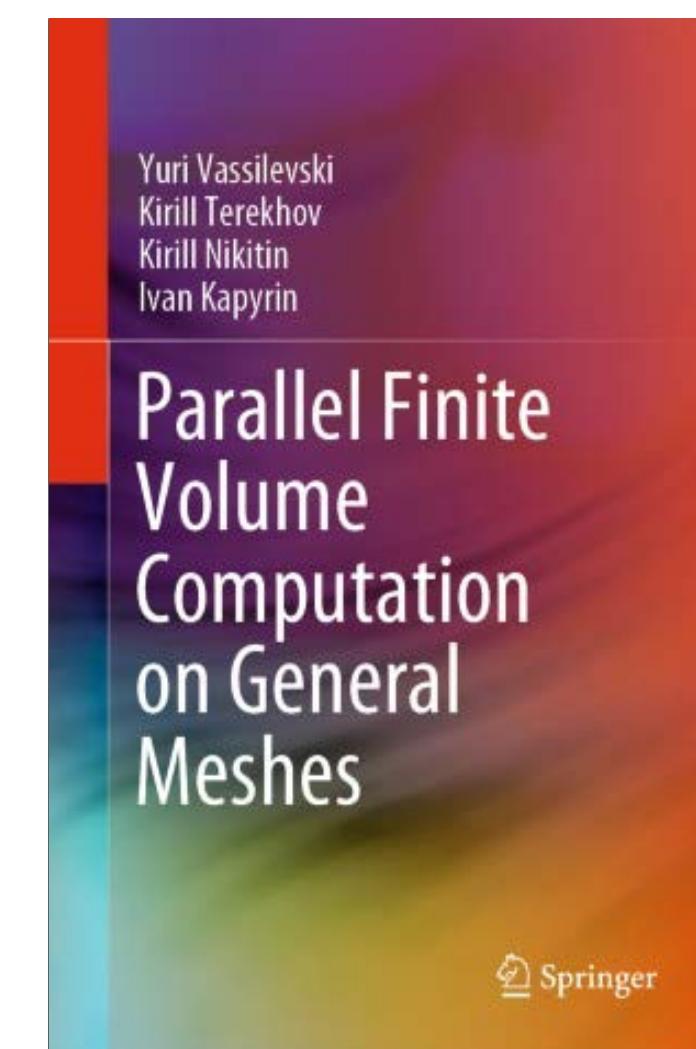
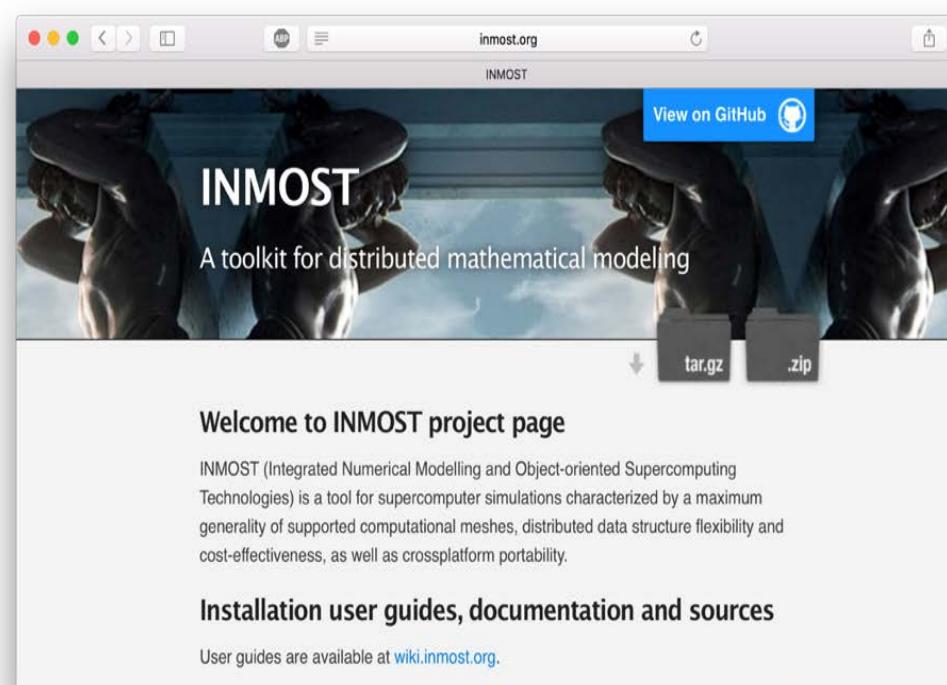


# Программная платформа INMOST (2012-2024)

**INMOST** ([www.inmost.org](http://www.inmost.org), [www.inmost.ru](http://www.inmost.ru)):

Integrated  
Numerical  
Modeling and  
Object-oriented  
Supercomputing  
Technologies

Интегрированные  
Объектно-ориентированные  
Суперкомпьютерные  
Технологии  
Численного  
Моделирования



Курс лекций с примерами:  
<https://boogie.inm.ras.ru/INMOST-DEV/INMOST-lectures>

- Распределенные сетки с многогранными ячейками общего вида
  - подвижные
  - адаптивные
- Сборка распределенных СЛАУ
- Параллельное решение СЛАУ
- Автоматическое дифференцирование
- Сборка нелинейных систем
- Совмещение неизвестных и моделей
- Дискретизации: **МКЭ**, **МКО**

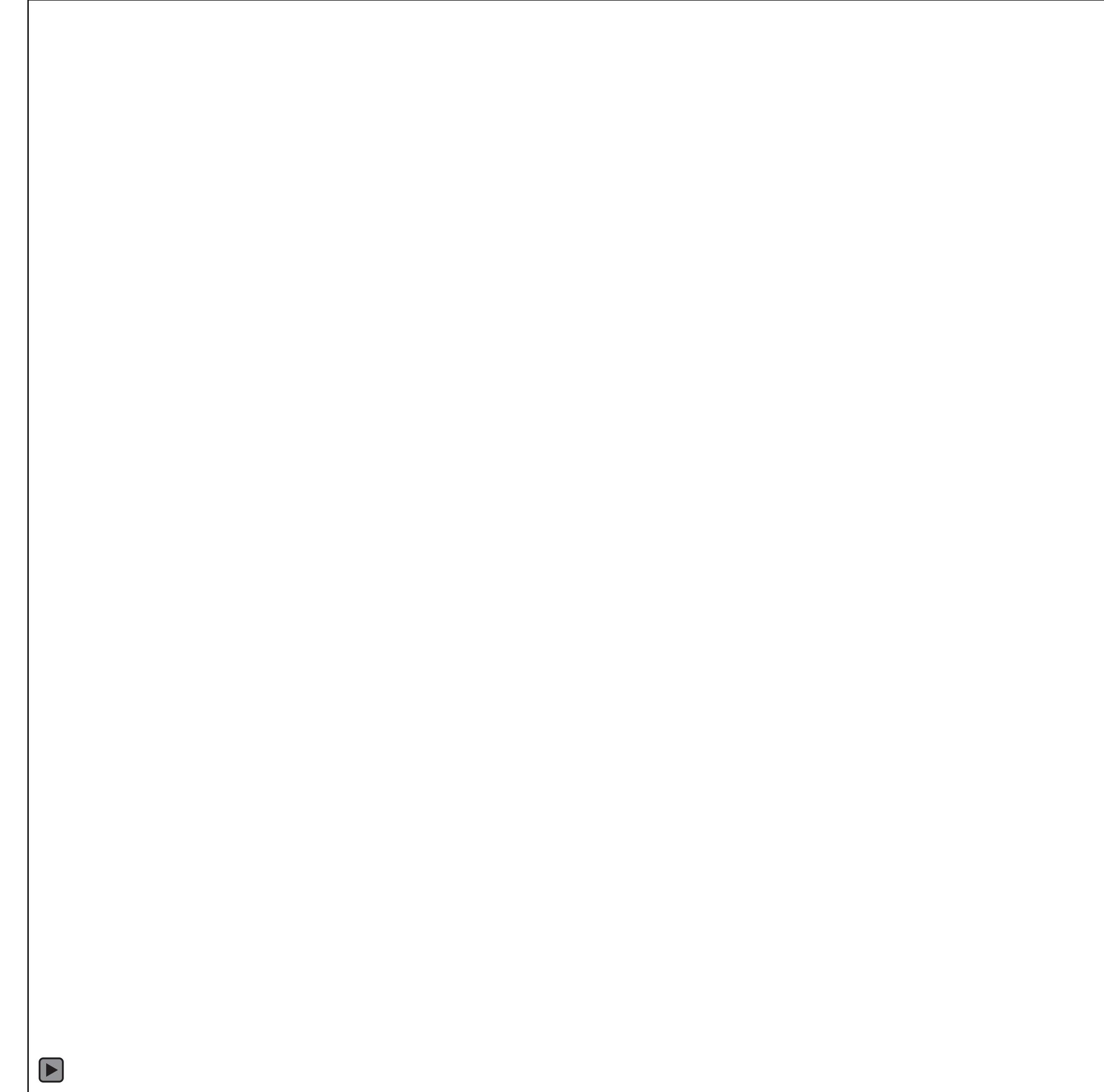
Главный разработчик проекта – К.М. Терехов

Участники: К.Нikitin, А.Данилов, И.Капырин, А.Чернышенко (ИВМ РАН, ИБРАЭ РАН), И.Коньшин, И.Капорин (ВЦ РАН) Д.Ануприенко, Д.Багаев, А.Бурачковский (МГУ), В.Крамаренко, Р.Янбарисов, А.Лёгкий, С.Петров, И.Бутаков (МФТИ), Р.Абдуллин (НОЦ НГУ) Т.Гарипов, П.Томин, К.Майер (Стэнфорд), А.Абушаика (НВКУ) и др.



# Пример адаптивного параллельного расчета

К.М.Терехов





# Программный комплекс GeRa

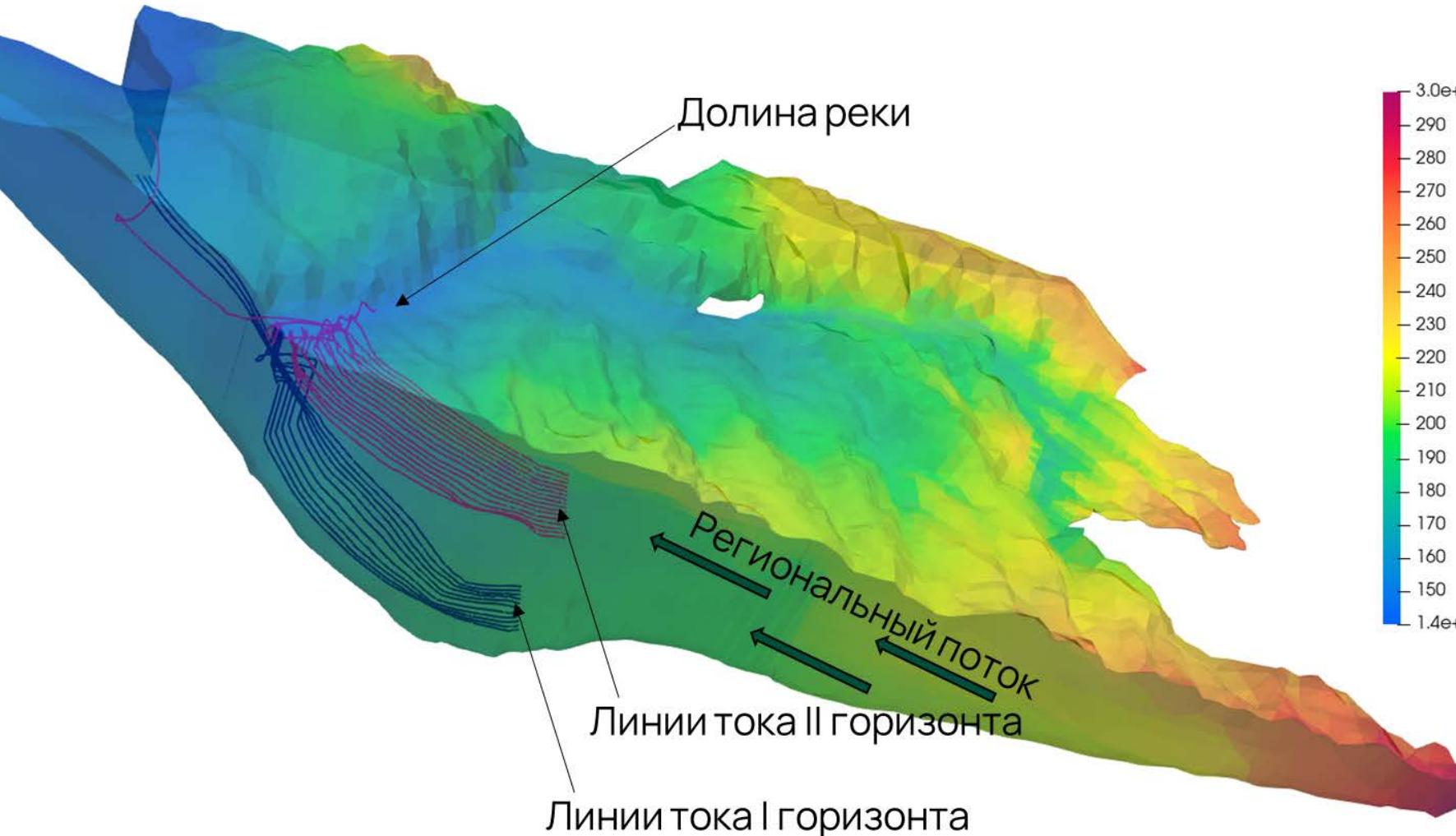
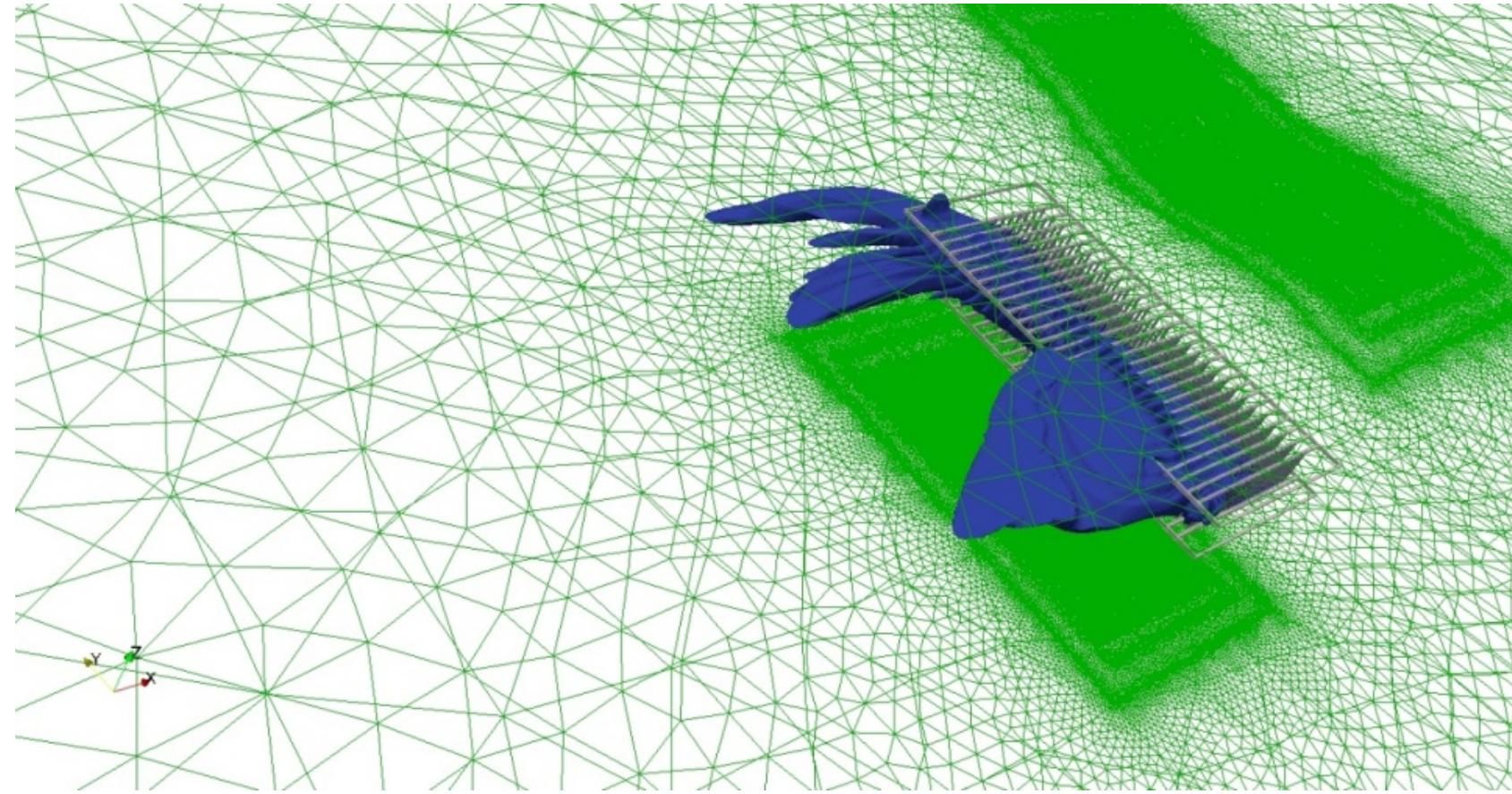


Схема миграции радионуклидов на пункте глубинного захоронения жидких РАО

GeRa – аттестованный программный комплекс трехмерного гидрогеологического моделирования, разработанный ИБРАЭ РАН и ИВМ РАН для эффективного решения задач геофильтрации и геомиграции загрязнений в подземных водах

## Сфера применения

- Оценка безопасности пунктов захоронения РАО и других объектов атомной отрасли
- Задачи защиты подземных вод от загрязнений различной природы
- Оценка запасов подземных вод
- Обоснование и сопровождение систем мониторинга и реабилитации
- Прогнозы подтопления и расчет дренажей

Передача в сторонние организации (10 коммерческих лицензий, 9 некоммерческих)

Ежегодные учебные курсы

Моделирование реальных объектов: **ОАО «СХК», ФГУП «ГХК», ФГУП «ПО «Маяк», Белоярская АЭС, полигон «Северный», ПГЗ ЖРО «Димитровградский», ППГХО, ПГЗРО в Нижнеканском массиве и др.**

И.В.Капырин  
ИБРАЭ РАН-ИВМ РАН





# Перенос с химическими взаимодействиями

## Математическая модель

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - \nabla \cdot \vec{u} = R(C, C_s),$$

$$\vec{u} = -K \nabla h$$

$$\frac{\partial(\phi C + C_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u} C) - \nabla \cdot D \nabla C = 0,$$

$$\phi = \phi_0 - \frac{C_s}{\rho_s} + s_{stor} (h - h_0)$$

$$K = K_0 \frac{\phi^3}{(1-\phi)^2} \frac{(1-\phi_0)^2}{\phi_0^3}$$

$$d_m = \left( \frac{\phi}{\phi_0} \right)^3 d_{m0}$$

+ химическое равновесие

- закон сохранения массы раствора
- закон Дарси

- перенос суммарных концентраций компонентов
- зависимость пористости от концентрации твердых фаз и напора
- зависимость Козени-Кармана

- закон Арчи

Дискретизация по пространству - МКО

## Схема дискретизации по времени

1. Решение задачи фильтрации:

$$s_{stor} \frac{h^{n+1} - h^n}{\Delta t} = \nabla \cdot \vec{u}^{n+1};$$

2. Решение задачи переноса:

$$\tilde{\phi}^n \frac{C^{n+1,1} - C^n}{\Delta t} = -\nabla \cdot (\vec{u}^{n+1} C^n) + \nabla \cdot D^n \nabla C^{n+1};$$

3. Расчет химического равновесия (PHREEQC):

$$(C^{n+1,2}, C_s^{n+1,2}) = \mathbf{C}(C^{n+1,1}, C_s^n).$$

4. Пересчет пористости:

$$\tilde{\phi}^{n+1} = \phi_0 - \frac{C_s^{n+1,2}}{\rho_s}.$$

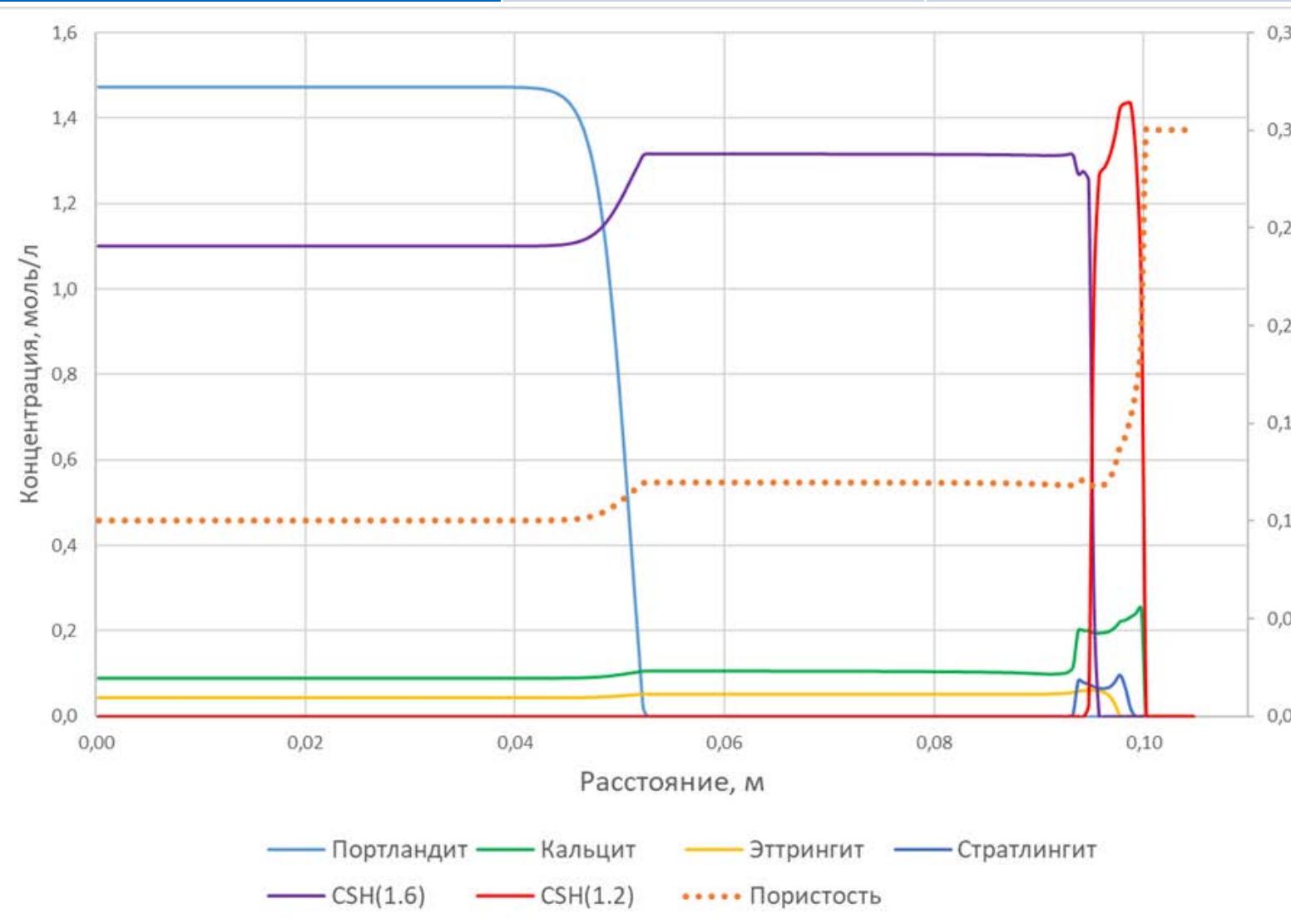
5. Корректировка концентрации (ЗСМ):

$$\tilde{\phi}^{n+1} C^{n+1} = \tilde{\phi}^n C^{n+1,2}.$$

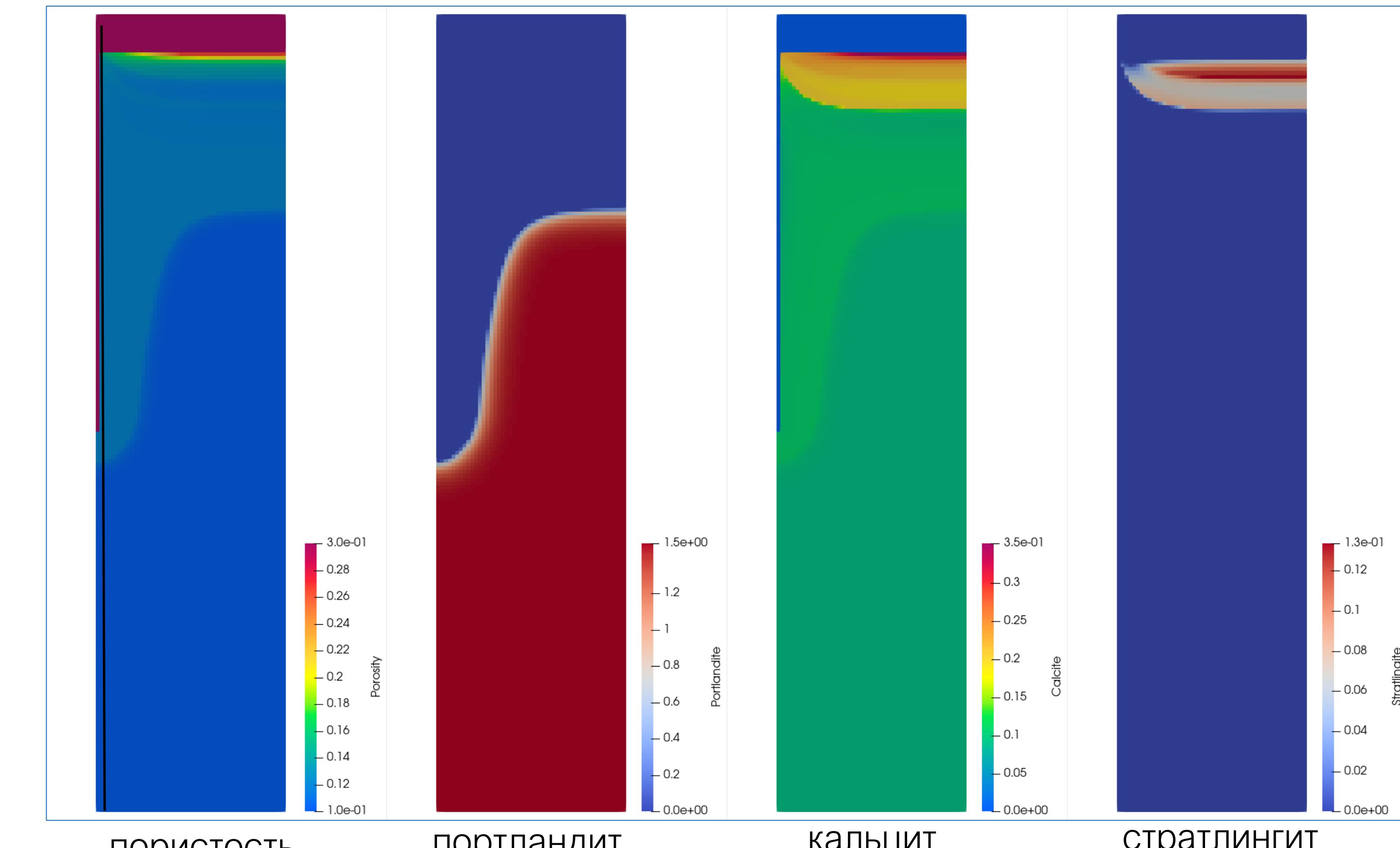
# Растворение бетона сложного минерального состава

## Минеральный состав бетона

Минерал	Концентрация в породе, моль/л	Объемная доля в породе, %
Портландит	1,472	4,86
Этtringит	$4,38 \times 10^{-2}$	3,09
Трикарбоалюминат	0	0
CSH(1,6)	1,101	8,59
CSH(1,2)	0	0
CSH(0,8)	0	0
Гидротальцит-ОН	$3,04 \times 10^{-2}$	0,68
Гидротальцит-СО <sub>3</sub>	0	0
Монокарбоалюминат	$7,71 \times 10^{-2}$	2,02
Стратлингит	0	0
Кальцит	$8,99 \times 10^{-2}$	3,30



Результаты, Т=100 лет



Ф.В.Григорьев  
ИБРАЭ РАН-ИВМ РАН

# Перенос загрязнений в подземных и поверхностных водах

## Уравнения подмоделей

### Поверхностный сток

$$\frac{\partial h_{surf}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{h_{surf}^{5/3}}{\nu \sqrt{|\nabla H_{surf}|}} \frac{\partial H_{surf}}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{h_{surf}^{5/3}}{\nu \sqrt{|\nabla H_{surf}|}} \frac{\partial H_{surf}}{\partial y} \right) = q_{prec} - q_{ss}$$

### Подземная фильтрация

$$\frac{\partial \theta(h_{sub})}{\partial t} + S_{stor} \frac{\partial h_{sub}}{\partial t} - \nabla \cdot K(h_{sub}) \nabla (h_{sub} + z) = q_{sub}$$

### Перенос в поверхностных водах

$$\frac{\partial (h_{surf} C_{surf})}{\partial t} + \nabla (\vec{u}_{surf} h_{surf} C_{surf}) - \nabla \cdot (h_{surf} D_{surf} \nabla C_{surf}) + \zeta (C_{surf} - C_{sub}) = q_{prec} C_{prec} - q_{ss} C_{up}$$

### Перенос в подземных водах

$$R \varphi \frac{\partial C_{sub}}{\partial t} - \nabla \cdot D_{sub} \nabla C_{sub} + \nabla (\vec{u}_{sub} C_{sub}) = f$$

### Поток воды поверхность-подземный слой

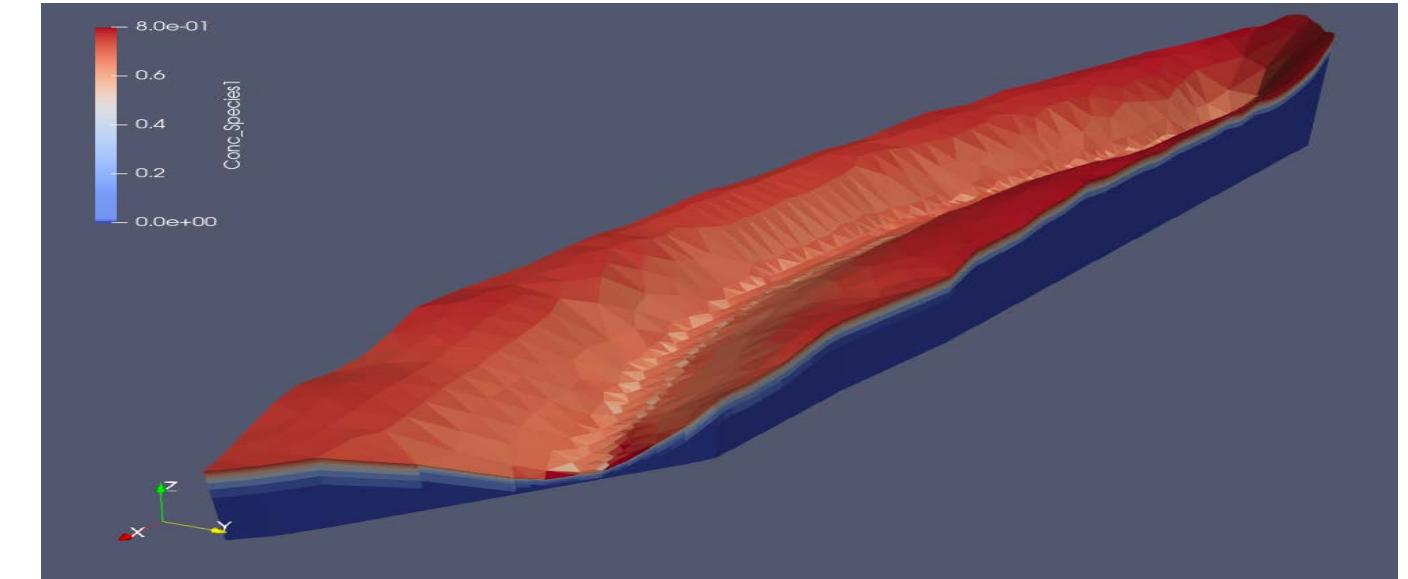
$$q_{ss} = \begin{cases} \frac{K_r}{m_r} (h_{surf} - h_{sub}), & h_{surf} > 0 \text{ или } h_{surf} < h_{sub}, \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases}$$

Поток примеси поверхность-подземный слой определяется потоком воды

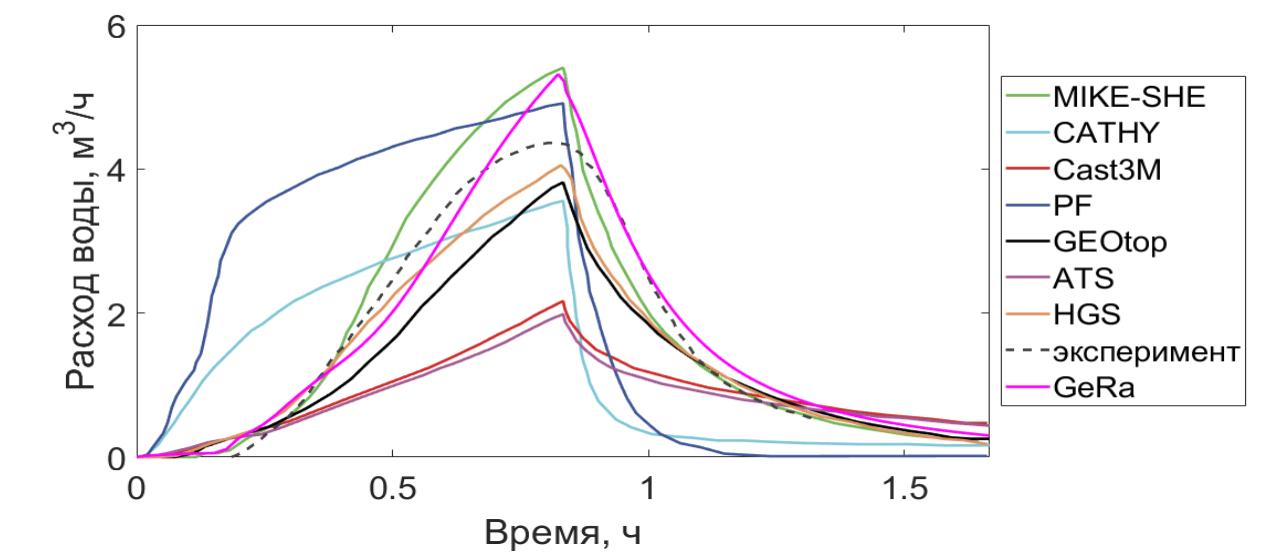
- $h_{surf}$  – глубина поверхностных вод,
- $H_{surf} = h_{surf} + z$ ,
- $\nu$  – коэффициент шероховатости Мэннинга,
- $q_{prec}$  – интенсивность осадков,
- $q_{ss}$  – поток от поверхности к подземному слою,
- $\theta$  – объемное влагосодержание,
- $h_{sub}$  – высота (давление) всасывания в подземных водах,
- $S$  – насыщенность воды,
- $s_{stor}$  – коэффициент упругоемкости пласта,
- $K(h_{sub})$  – коэффициент фильтрации,
- $q_{sub}$  – объемный расход источников/стоков,
- $C_{surf}$  – усредненная по глубине концентрация примеси в поверхностных водах
- $C_{sub}$  – концентрация растворенного вещества в подземном слое
- $\vec{u}_{surf}$  – скорость переноса в поверхностных водах
- $D_{surf}$  – коэффициент диффузии-дисперсии в поверхностных водах
- $C_{prec}$  – концентрация примеси в осадках
- $C_{up}$  – концентрация примеси в области, расположенной выше по потоку, т.е.  $C_{up} = C_{surf}$  если  $q_{ss} > 0$
- $\zeta$  – коэффициент диффузионного массообмена между поверхностными и подземными водами
- $R$  – фактор замедления
- $D_{sub}$  – тензор диффузии-дисперсии в подземном слое
- $\vec{u}_{sub}$  – скорость переноса в подземном слое,
- $K_r$  – коэффициент фильтрации донных отложений,
- $m_r$  – мощность донных отложений

К.А.Новиков

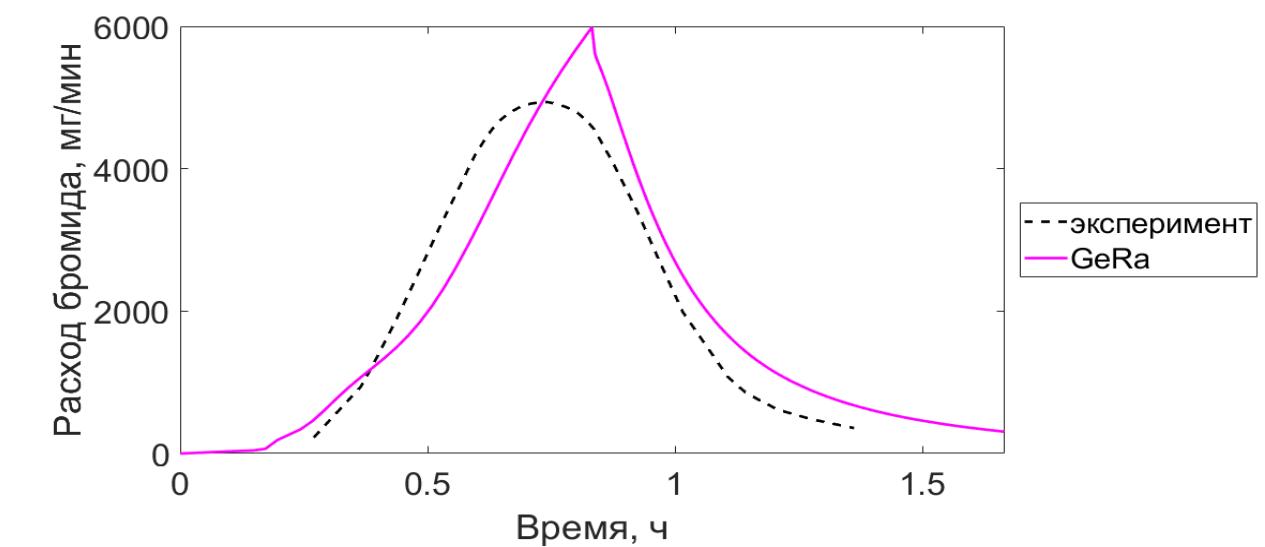
Модель верифицирована на реальных данных



Расход воды через границу области



Расход примеси через границу области

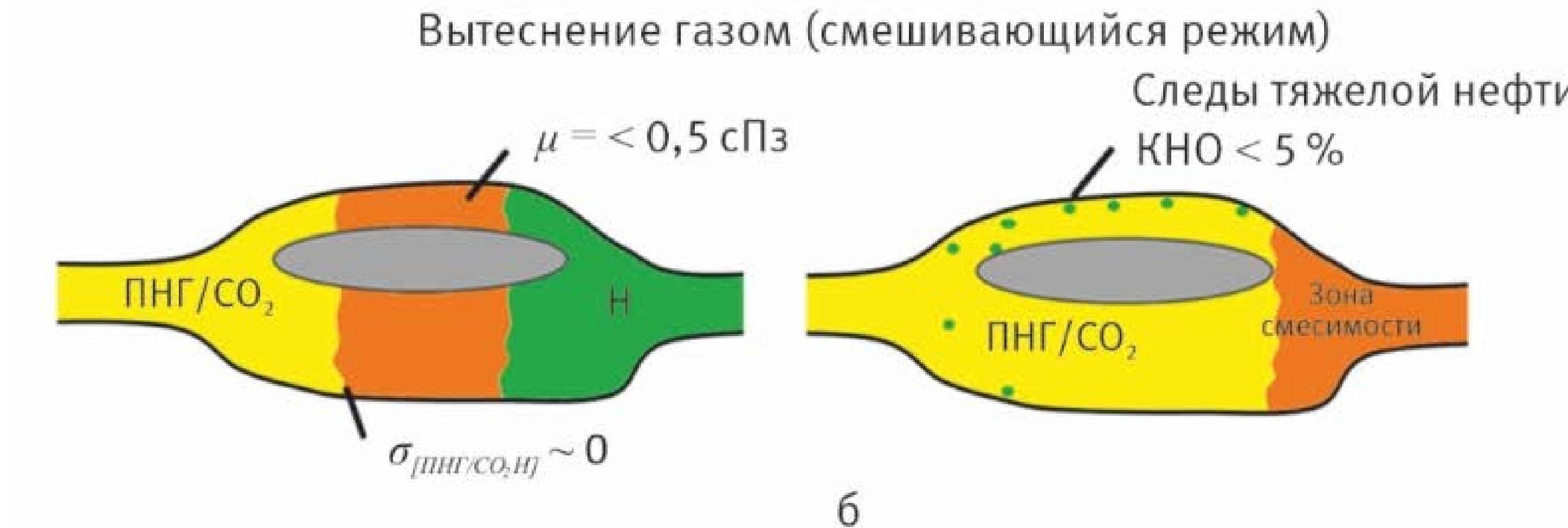
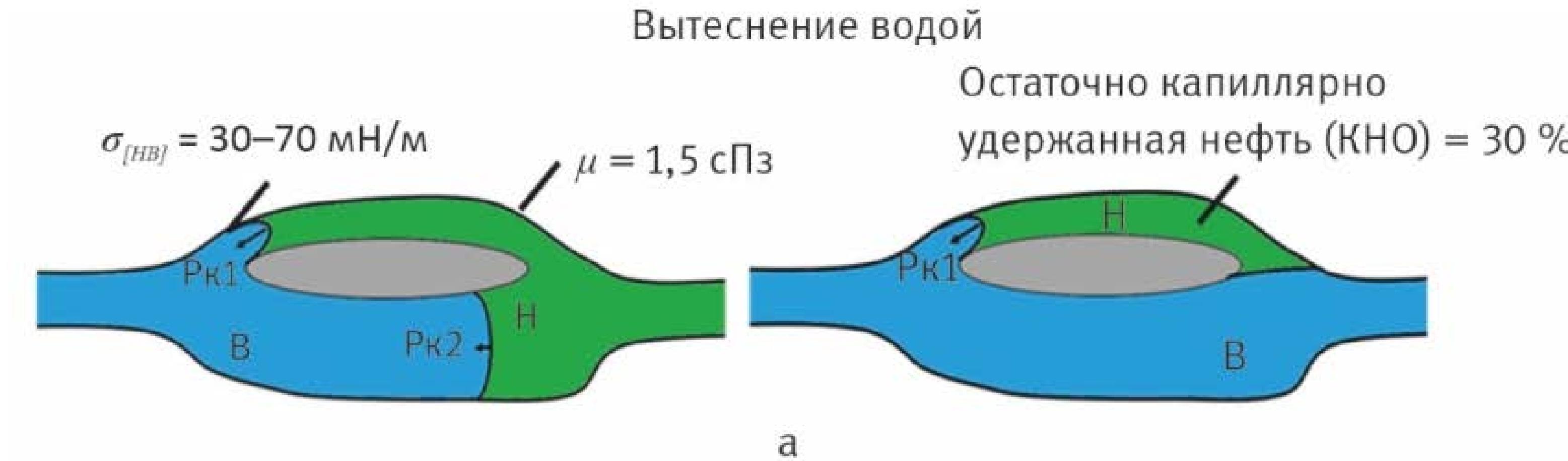




## Цифровой керн

- Трудноизвлекаемые запасы нефти – будущее нефтедобычи
- Для планирования и эксплуатации месторождения нужна математическая модель
- Модель опирается на экспериментальные данные об относительных фазовых проницаемостях пород коллектора
- Для слабопроницаемых пород эксперименты делятся месяцами и могут не получиться
- Актуальным становится виртуальный эксперимент с использованием структуры порового пространства (из микроКТ) и химического состава породы и нефти
- Типичные микроКТ содержат от 4 миллиардов voxелей
- Требуется смоделировать вытеснение одним флюидом другого флюида

# Вытеснение нефти из порового пространства





# Двухфазное течение в пористой среде

- Закон сохранения импульса:

$$\frac{\partial \rho \theta \mathbf{u}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \theta \mathbf{u} \mathbf{u}^T - \eta \theta (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)) + \theta \nabla p + \eta \theta^2 \boldsymbol{\kappa}^{-1} \mathbf{u} = \rho \theta g \nabla z - \epsilon \sigma \operatorname{div}(\theta \nabla \phi \nabla \phi^T),$$

- Несжимаемость:

$$\operatorname{div}(\theta \mathbf{u}) = 0,$$

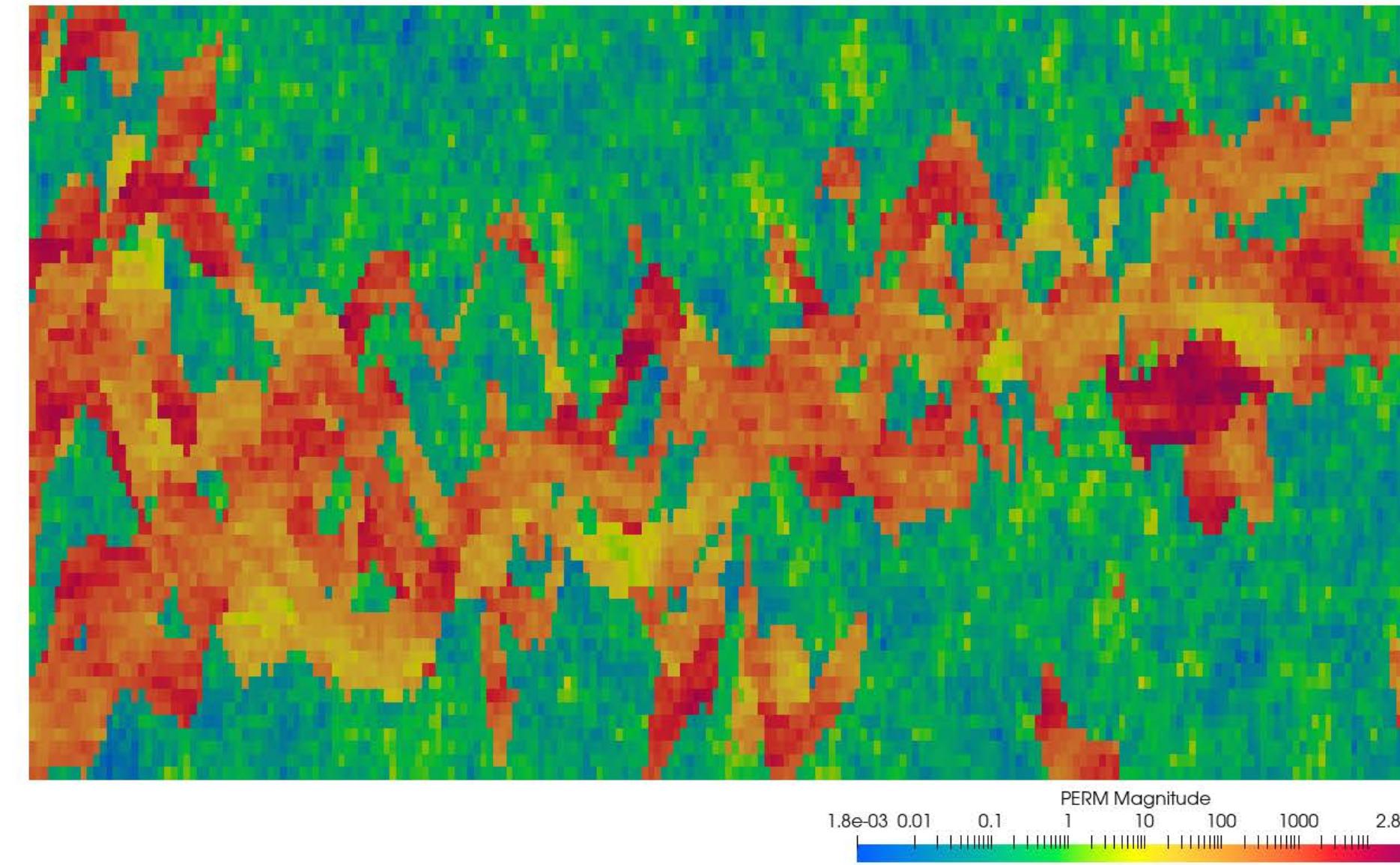
- Уравнения Кана-Хилиарда для индикаторной функции  $\phi \in [-1,1]$ :

$$\frac{\partial \theta \phi}{\partial t} + \operatorname{div}(\theta \mathbf{u} \phi - \epsilon \theta M(\phi) \nabla \mu) = 0,$$

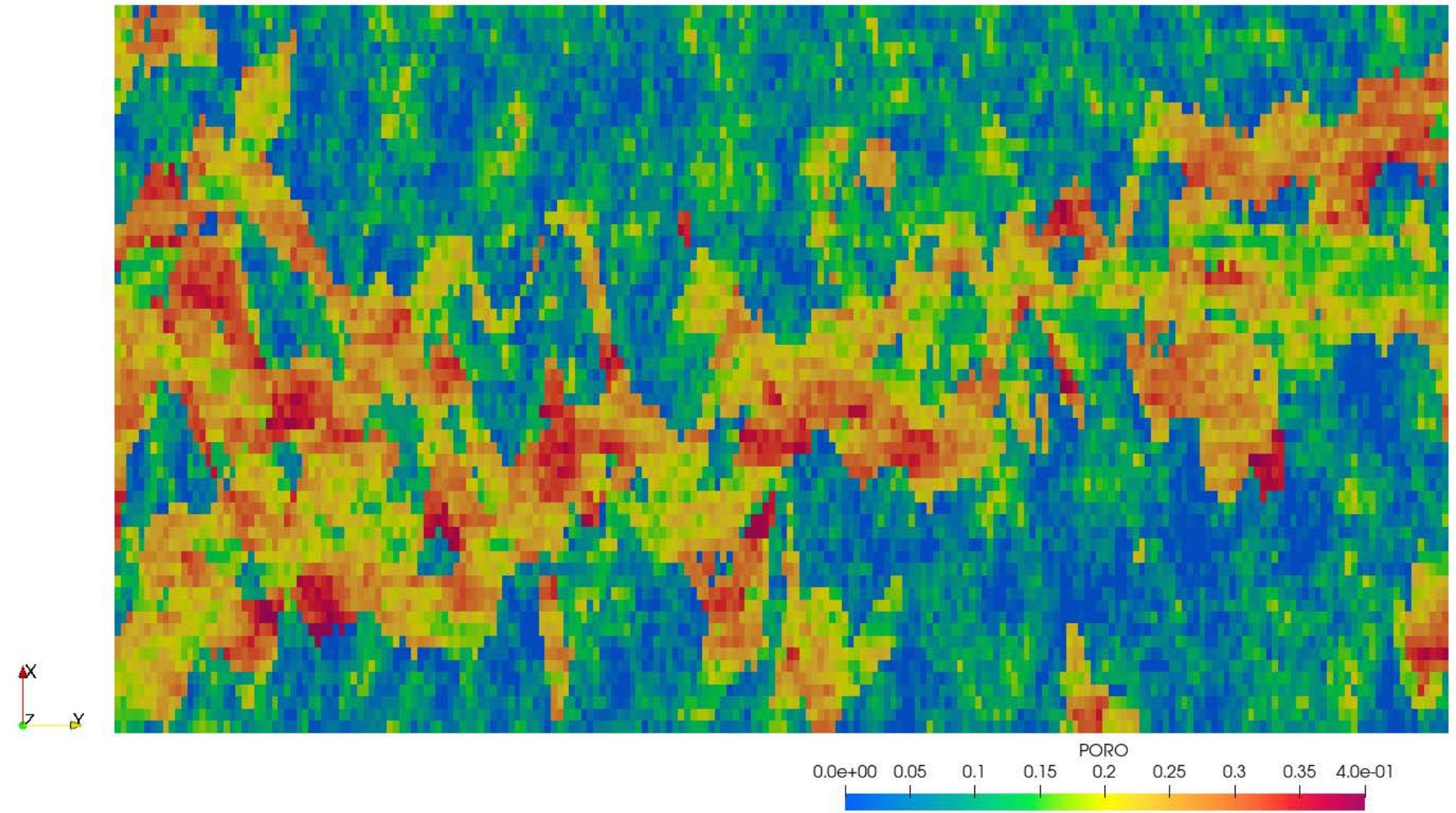
$$\theta \mu = -\epsilon \operatorname{div}(\theta \nabla \phi) + \theta \frac{\phi^3 - \phi}{\epsilon}.$$

- <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2020.103839>
- <https://arxiv.org/pdf/2305.05623>

# Пример пористой породы



Проницаемость, логарифмическая шкала



Пористость

Параметры:

$$\rho_1 = 1000 \text{ кг/м}^3 = 10^{-6} \mu\text{г}/\mu\text{м}^3, \eta_1 = 1 \text{ cP} = 10^{-3} \text{ кг/м/с} = 10^{-3} \mu\text{г}/\mu\text{м}/\text{мс} \text{ (вода)}$$

$$\rho_2 = 881 \text{ кг/м}^3 = 8.81 \cdot 10^{-7} \mu\text{г}/\mu\text{м}^3, \eta_2 = 15 \text{ cP} = 1.5 \cdot 10^{-2} \text{ кг/м/с} = 1.5 \cdot 10^{-2} \mu\text{г}/\mu\text{м}/\text{мс} \text{ (нефть)}$$

$$\text{Поверхностное натяжение } \sigma = 40 \text{ дин/см} = 40 \text{ г/с}^2 = 40 \mu\text{г}/\text{мс}^2, \text{ кадр } \frac{1}{10} \text{ мс}$$

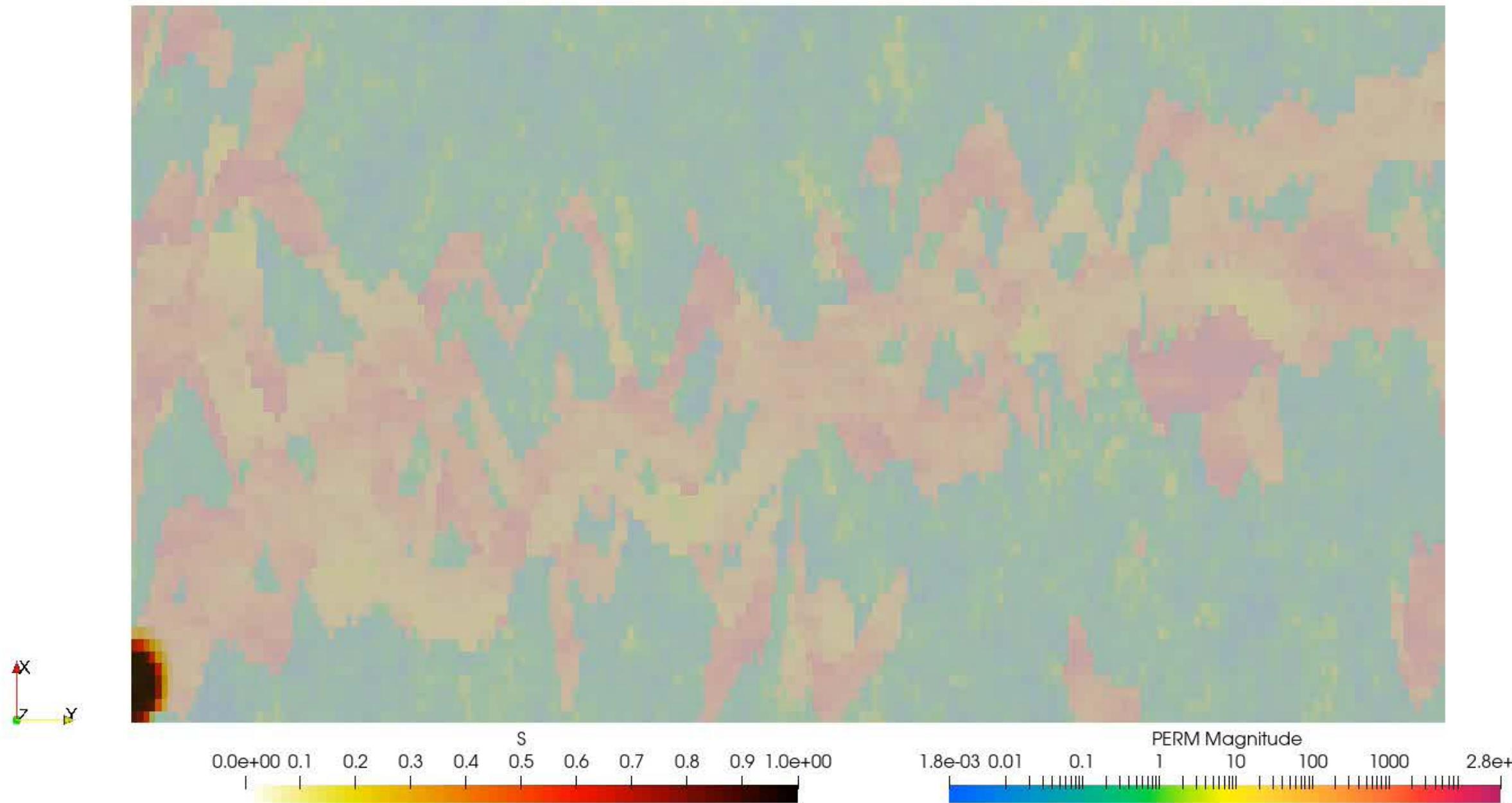
$$\text{Размер области: } 440 \mu\text{м} \times 240 \mu\text{м}, \text{ скорость втока: } 25 \frac{\mu\text{м}}{\text{мс}}$$

$$\text{Параметры Кана-Хилиарда: } \epsilon = 1 \mu\text{м}, M_0 = 100$$



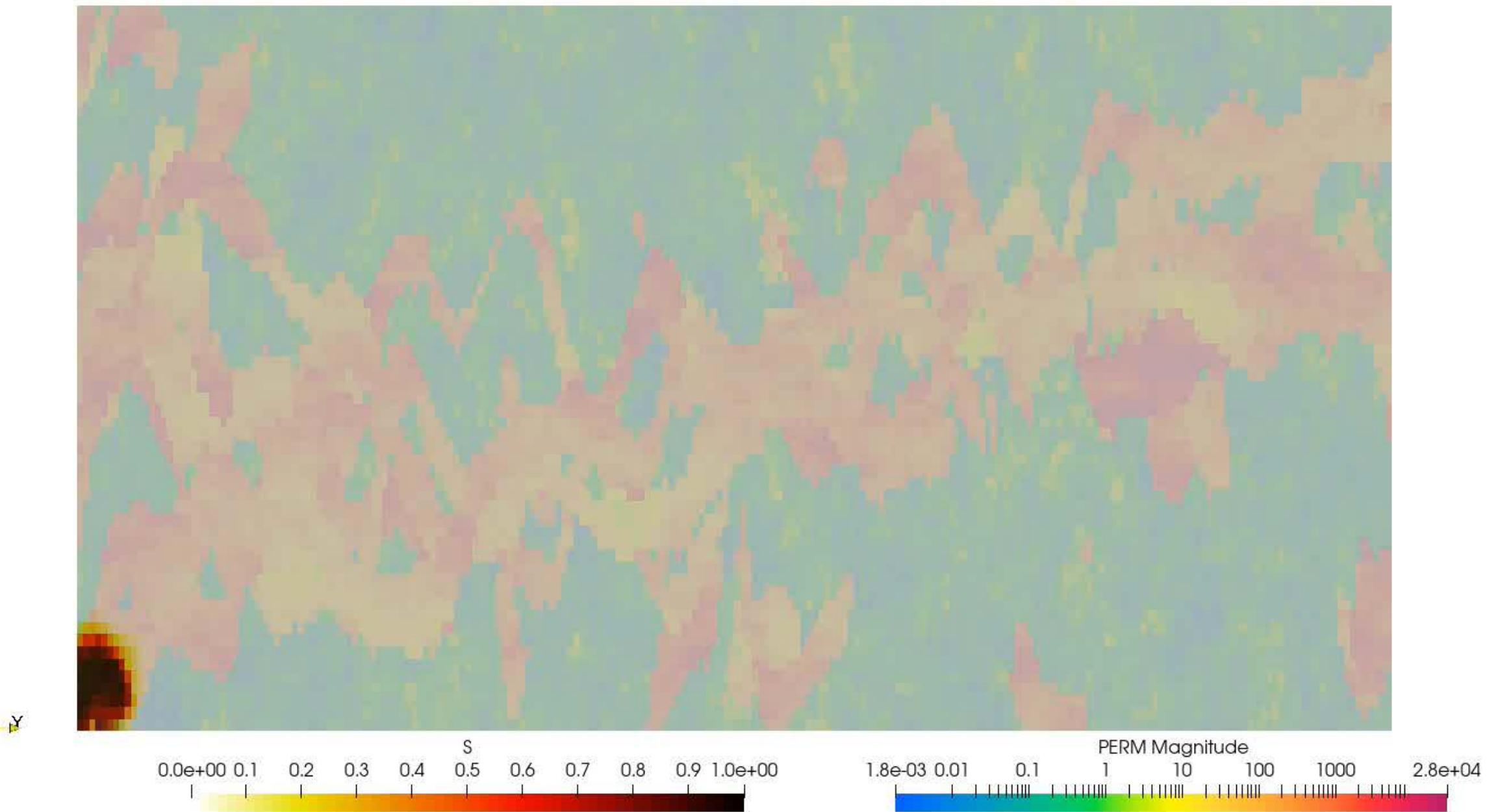
# Вытеснение нефти водой

К.М.Терехов



$$\sigma = 40 \mu\text{g}/\text{ms}^2$$

Шаг по времени  $\frac{1}{80}$  мс, МКО



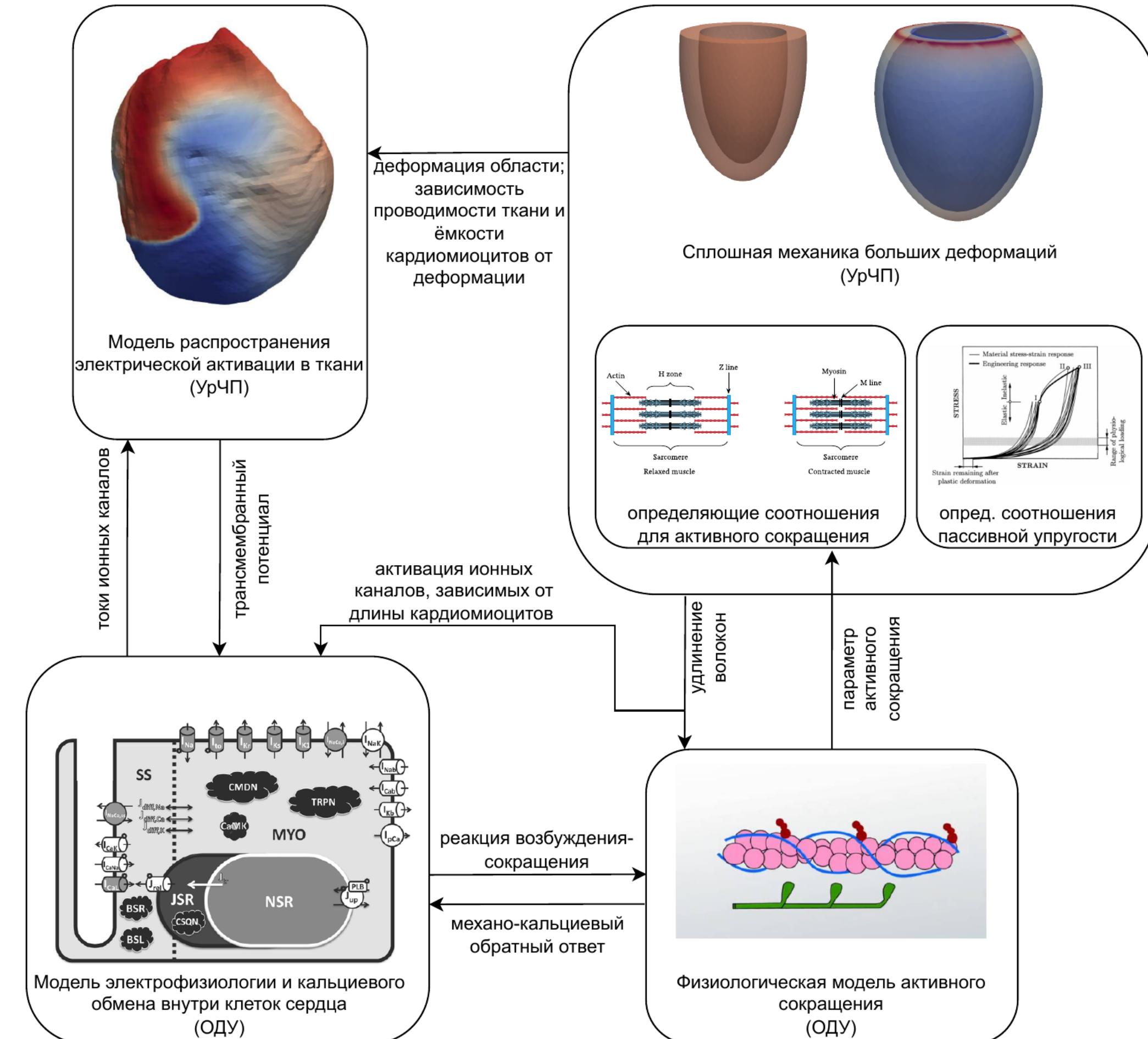
$$\sigma = 4000 \mu\text{g}/\text{ms}^2$$



# Электромеханическая модель сердца

## Клинические приложения:

- Характеризация постинфарктного рубца
- Неинвазивная локализация и характеристика источника аритмии
- Персонализированное лечение аритмий (лекарства/планирование аблаций)



Технология персонализированного моделирования:

DICOM → сетка → накрутка волокон → расчет

- Мультифизичность
- Многомасштабность
- Персонализированная геометрия
- Взаимосвязь моделей
- нелинейность

## Математическая модель

- Механика конечных деформаций,  $\mathbf{u}$  - поле перемещений:

$$\rho_0 \partial_{tt} \mathbf{u}^i - \nabla_j \mathbb{P}^{ij}(\mathbb{F}, \mathbf{a}) = 0, \quad \mathbb{F} = \mathbb{I} + \nabla \mathbf{u}$$

- Однодоменная модель распространения электрической активации,  $v$  - трансмембранный потенциал:

$$\chi_m C_m(\mathbf{a}) \partial_t v - \nabla \cdot (\sigma \nabla v) + \chi_m i_{ion}(v, \mathbf{w}, \mathbf{a}) = I_{stim}(t)$$

- Модель электрофизиологии и кальциевого обмена клетки,  $\mathbf{w}$  - переменные состояния модели:

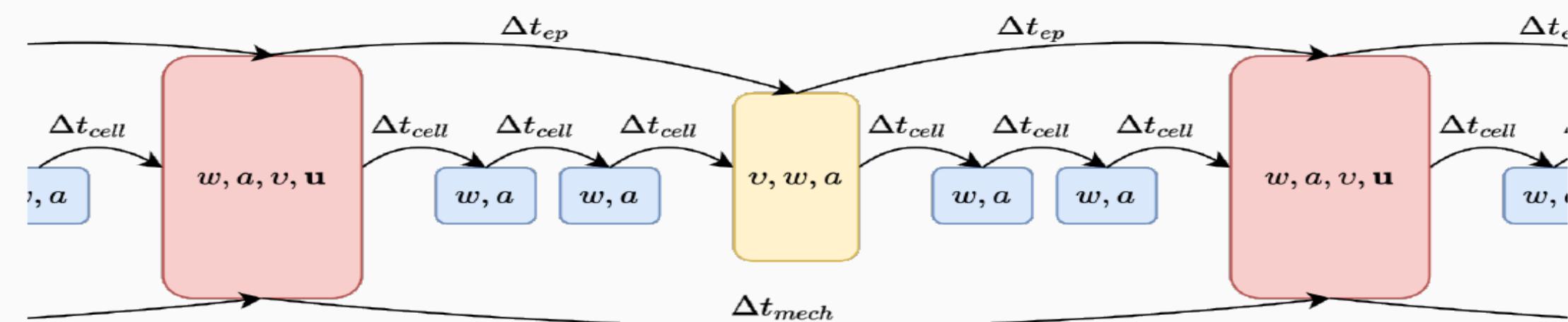
$$\partial_t \mathbf{w} = \mathbf{q}(\mathbf{w}, v, \mathbb{F})$$

- Физиологическая модель активного сокращения,  $\mathbf{a}$  - переменные состояния модели:

$$\partial_t \mathbf{a} = \mathbf{r}(\mathbf{a}, \mathbf{w}, \mathbb{F})$$

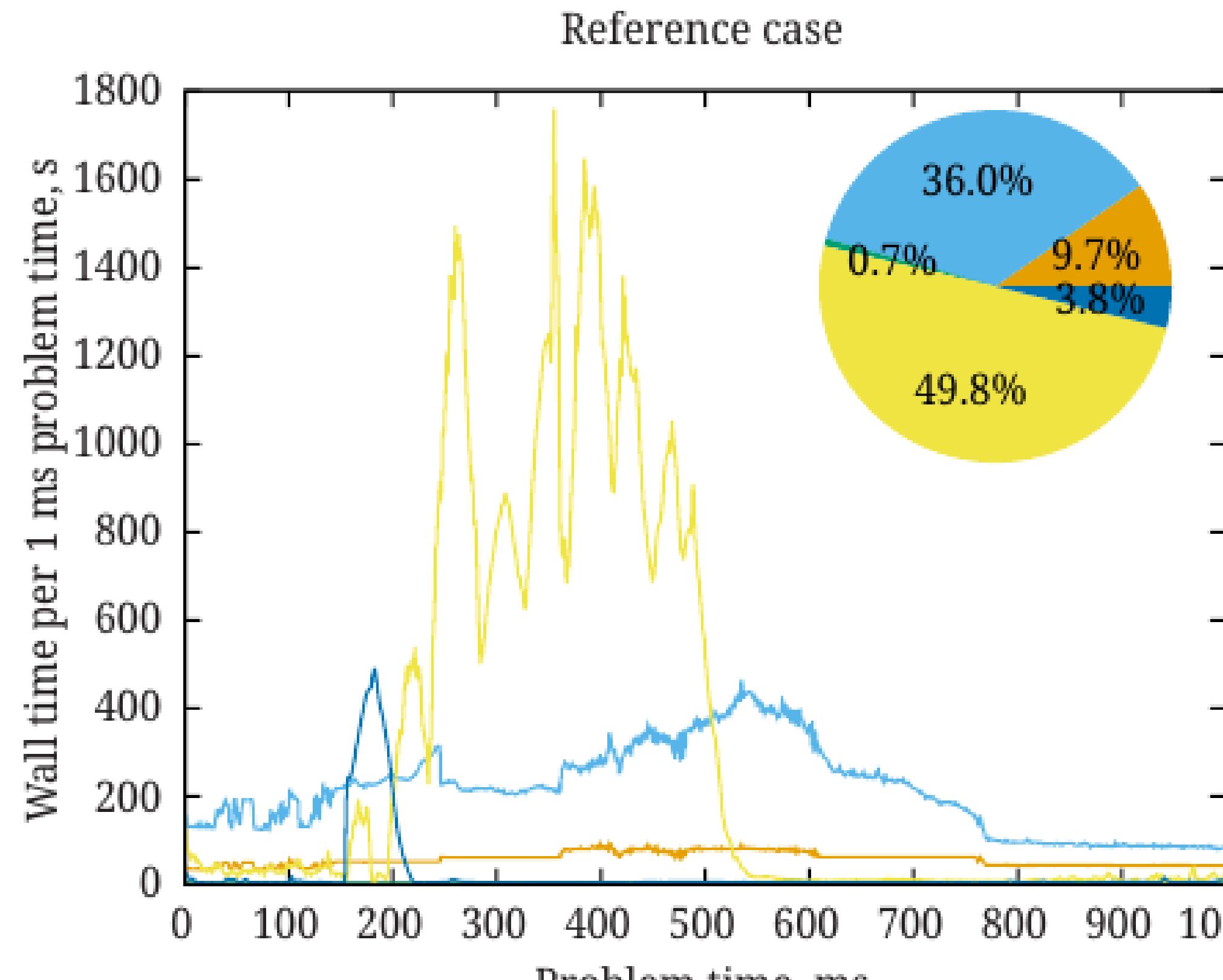
## Дискретизации

- механика среды  $\mathcal{M}$ :  
МКЭ, перемещение  $\mathbf{u}$  -  $(P_2)^3$  на  $\Omega_{coarse}^h$
  - распространение электрической активации  $\mathcal{E}$ :  
МКЭ, трансмембранный потенциал  $v$  -  $P_1$  на  $\Omega_{fine}^h$
  - клеточная электрофизиология  $\mathcal{C}$ :  
неизвестные  $\mathbf{w}$  в точках квадратур обоих сеток  $\Omega_{coarse}^h$  и  $\Omega_{fine}^h$ ;  
системы ОДУ решаются независимо
  - клеточная модель активного сокращения  $\mathcal{A}$ :  
неизвестные  $\mathbf{a}$  в точках квадратур сетки  $\Omega_{coarse}^h$ ; системы ОДУ независимы
- Метод разделения по процессам:  
процессы имеют собственные шаги по времени:  $\Delta t_{mech}$ ,  $\Delta t_{ep}$ ,  $\Delta t_{cell}$
- механика сплошной среды:
    - неявная схема постоянного среднего ускорения
    - Нелинейная алгебраическая система
  - распространение электрической активации:
    - явно-неявная схема
    - СЛАУ
  - клеточные процессы:
    - методы численного интегрирования жёстких нелинейных ОДУ

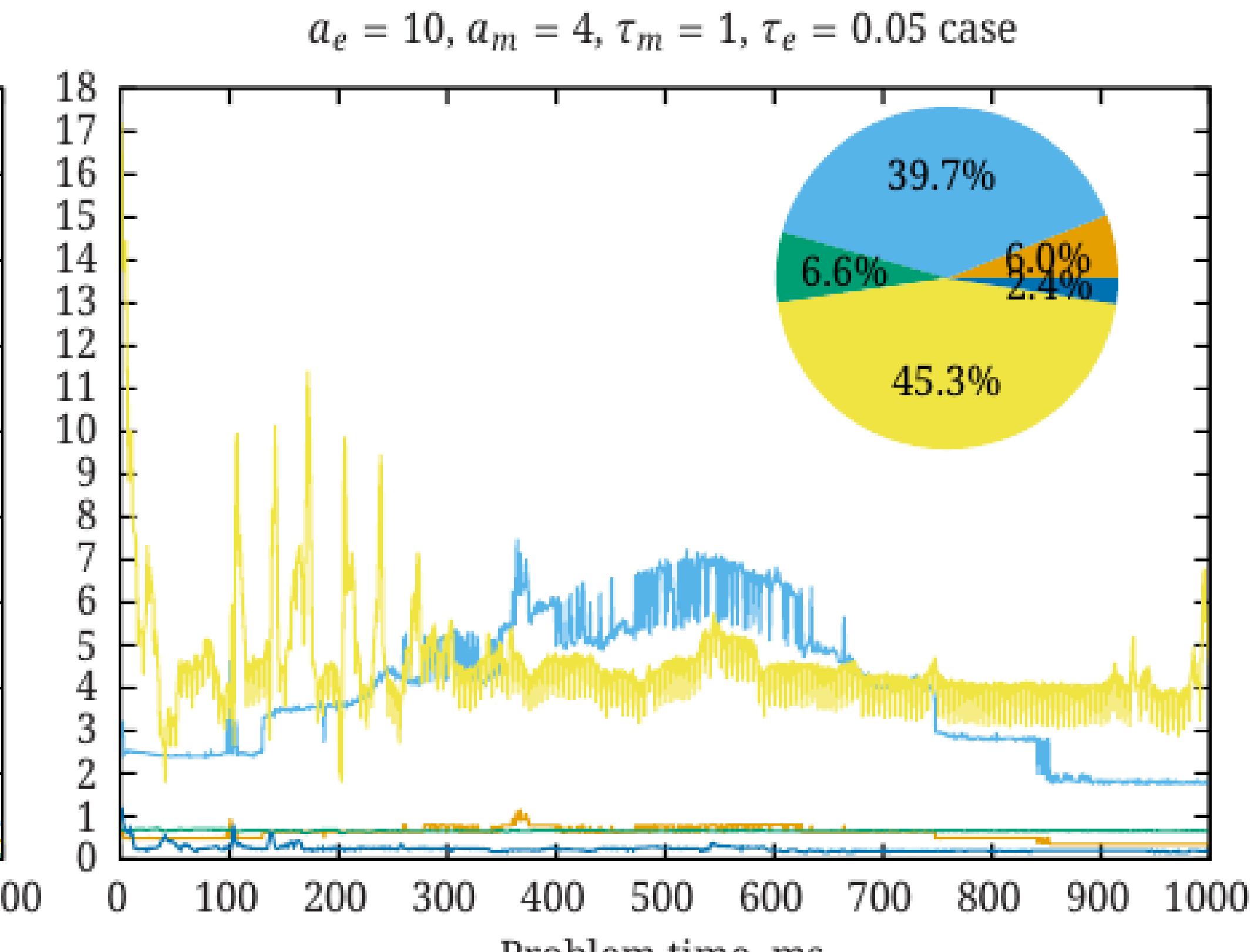


# Суперкомпьютерный расчет одного теста

512 ядер, 165 часов



156 ядер, 3 часа



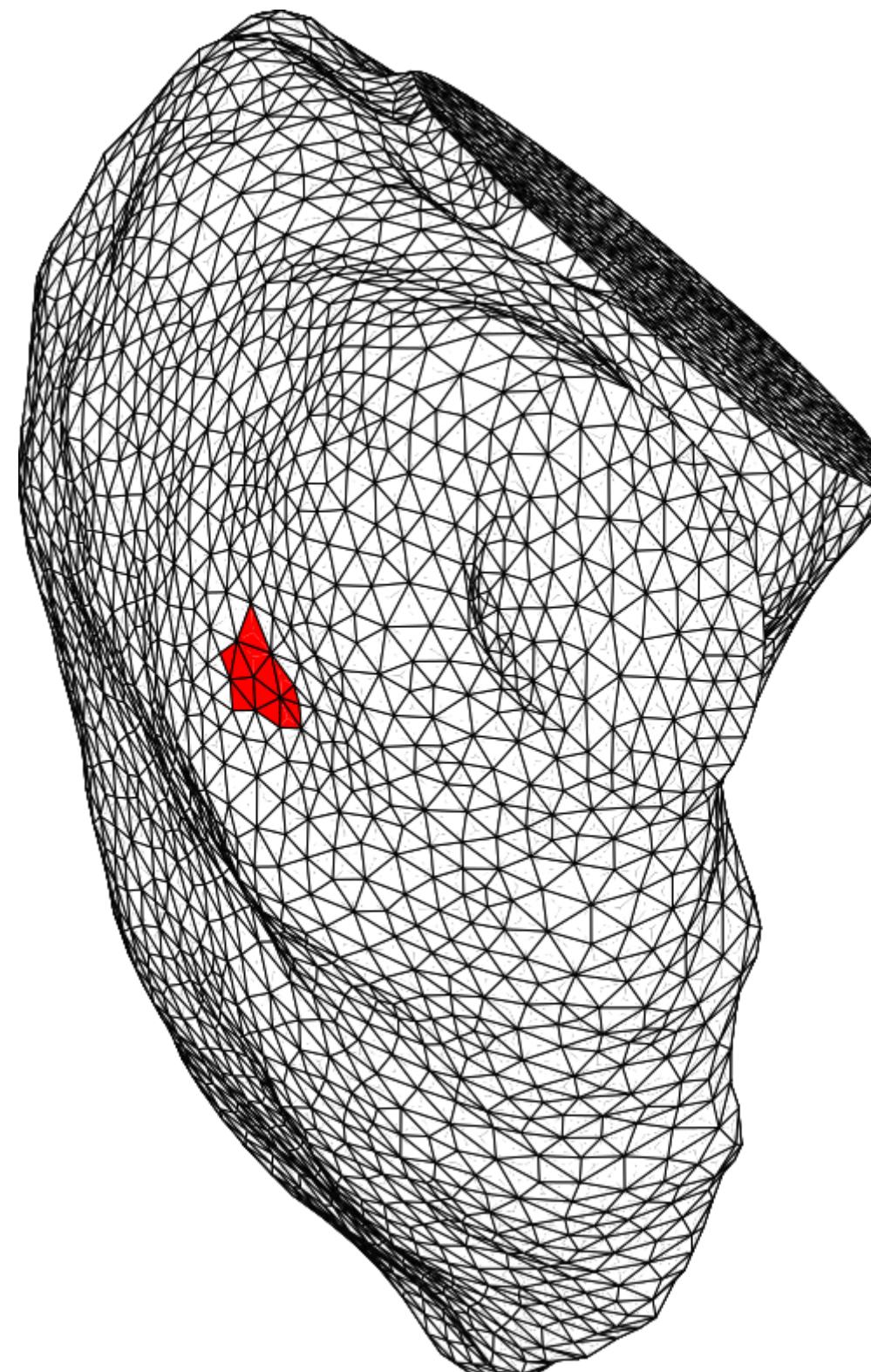
Расчет на общей сетке  $a_e=a_m=12$ ,  $t_e=t_o=0.01$ мс,  $t_m=0.1$ мс

А.Легкий, А.Данилов, Ф.Семин  
ИВМ РАН-МГУ



# Рост тромба в кровотоке бьющегося желудочка

К.М.Терехов



$$\partial_t \mathbf{u} + \operatorname{div} (\mathbf{u} \mathbf{u}^T - \nu_b (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) + p \mathbb{I}) + \frac{\nu_b}{K} \mathbf{u} = \mathbf{0},$$

ур-е Навье-Стокса-Бринкмана

$$\operatorname{div} (\mathbf{u}) = 0,$$

ур-е несжимаемости

$$\partial_t P + \operatorname{div} (\mathbf{u} P - D \nabla P) = - (k_1 \phi_a + k_2 B + k_3 T + k_4 T^2 + k_5 T^3) P,$$

протромбин

$$\partial_t T + \operatorname{div} (\mathbf{u} T - D \nabla T) = (k_1 \phi_a + k_2 B + k_3 T + k_4 T^2 + k_5 T^3) P - k_6 A T,$$

тромбин

$$\partial_t B + \operatorname{div} (\mathbf{u} B - D \nabla B) = (k_7 \phi_a + k_8 T) (B^0 - B) - k_9 A B,$$

тканевой фактор

$$\partial_t A + \operatorname{div} (\mathbf{u} A - D \nabla A) = -k_6 A T - k_9 A B,$$

антитромбин

$$\partial_t G + \operatorname{div} (\mathbf{u} G - D \nabla G) = -k_{10} T G (k_{11} + G)^{-1},$$

фибриноген

$$\partial_t F + \operatorname{div} (\mathbf{u} F - D \nabla F) = k_{10} T G (k_{11} + G)^{-1} - k_{12} F,$$

фибрин

$$\partial \phi_f + \operatorname{div} (k(\phi_f, \phi_a) (\mathbf{u} \phi_f - D_p \nabla \phi_f)) = -(k_{13} T + k_{14} \phi_a) \phi_f,$$

свободные тромбоциты

$$\partial \phi_a + \operatorname{div} (k(\phi_f, \phi_a) (\mathbf{u} \phi_a - D_p \nabla \phi_a)) = (k_{13} T + k_{14} \phi_a) \phi_f,$$

агрегированные тромбоциты

$$\partial_t M = k_{12} F,$$

полимер фибрин

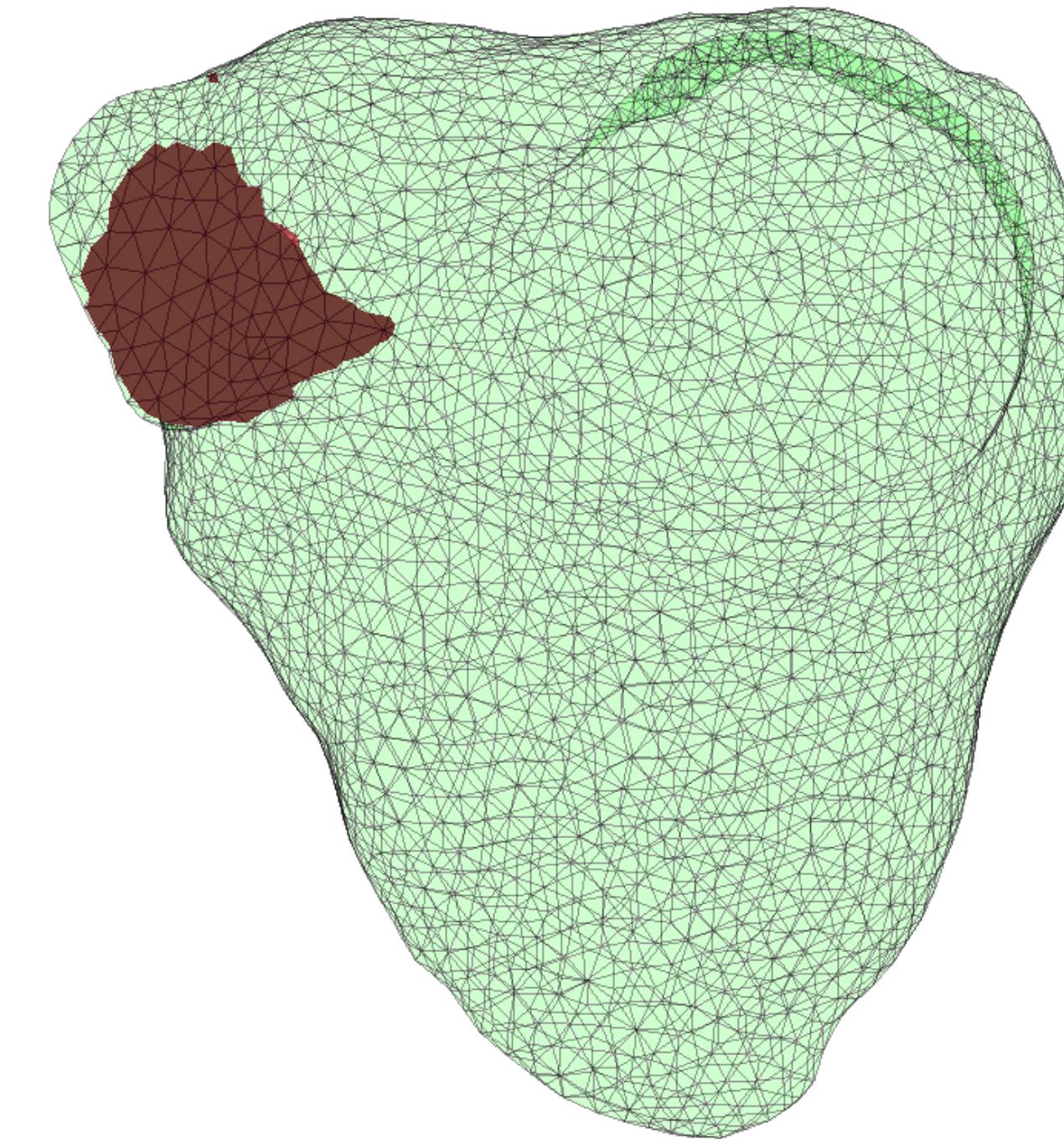
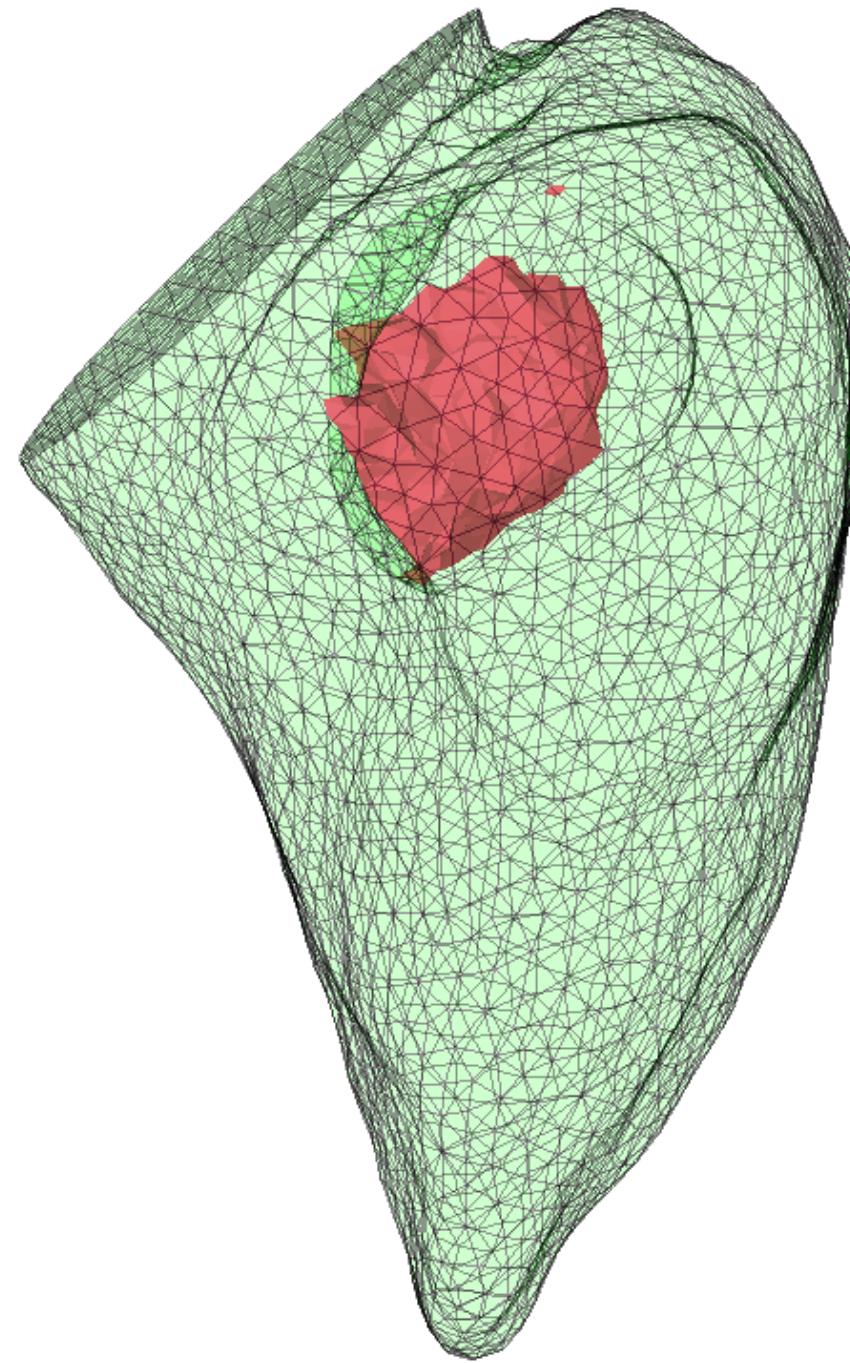
Постинфарктное воспаление

4D метод конечных объемов с коллокацией в центрах ячеек всех 13 ст.свободы

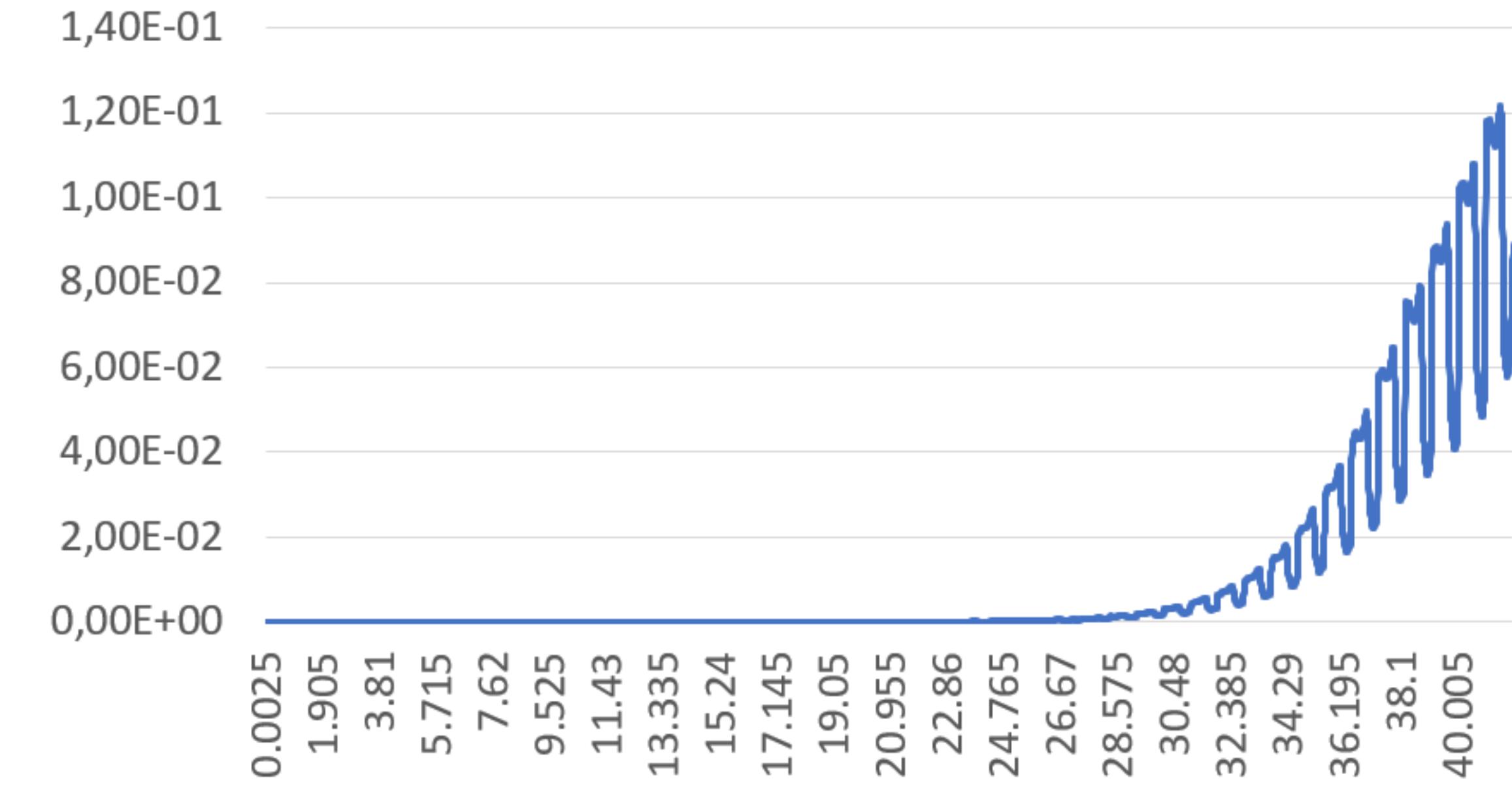


# Рост тромба в кровотоке бьющегося желудочка

К.М.Терехов

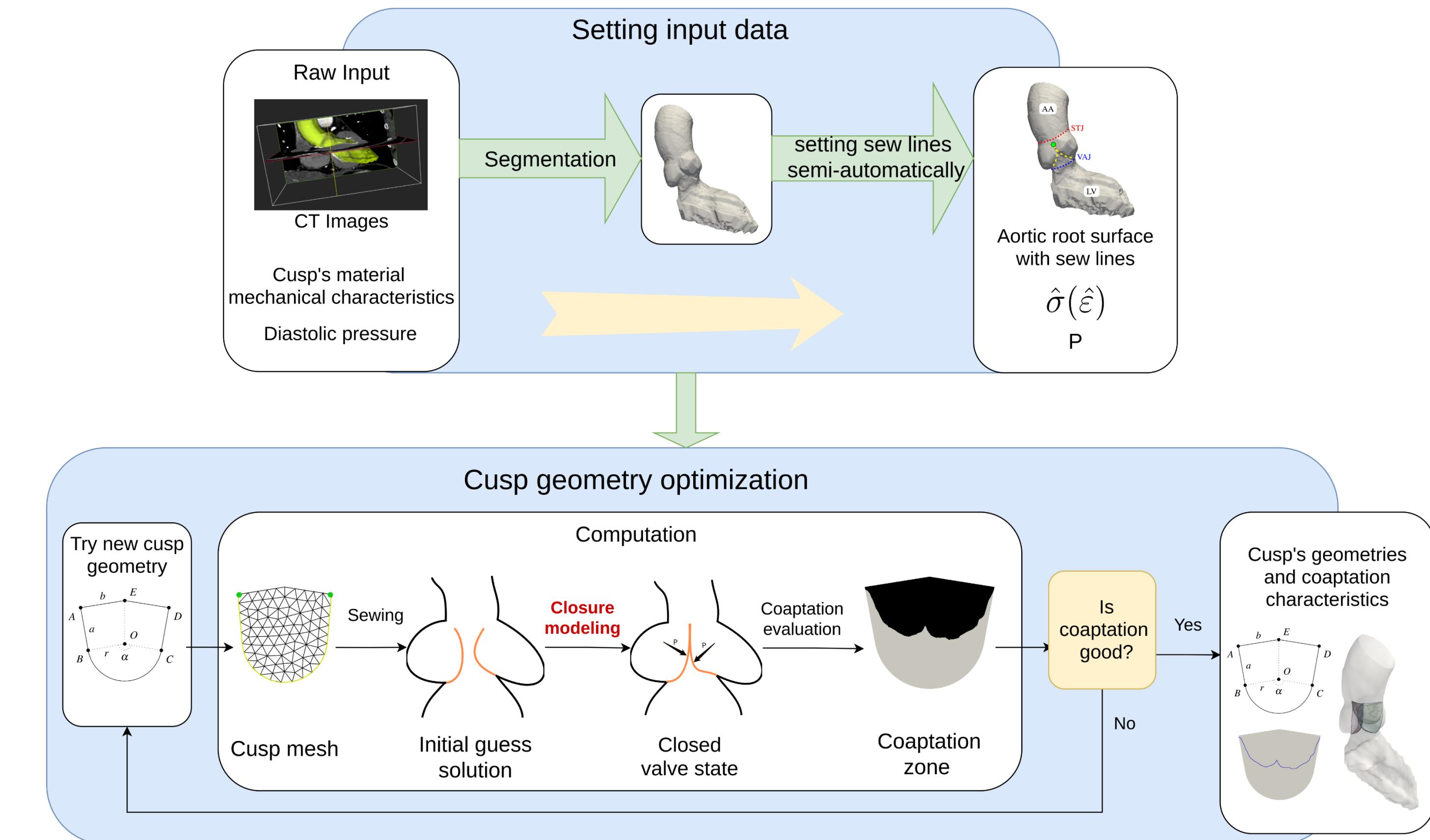
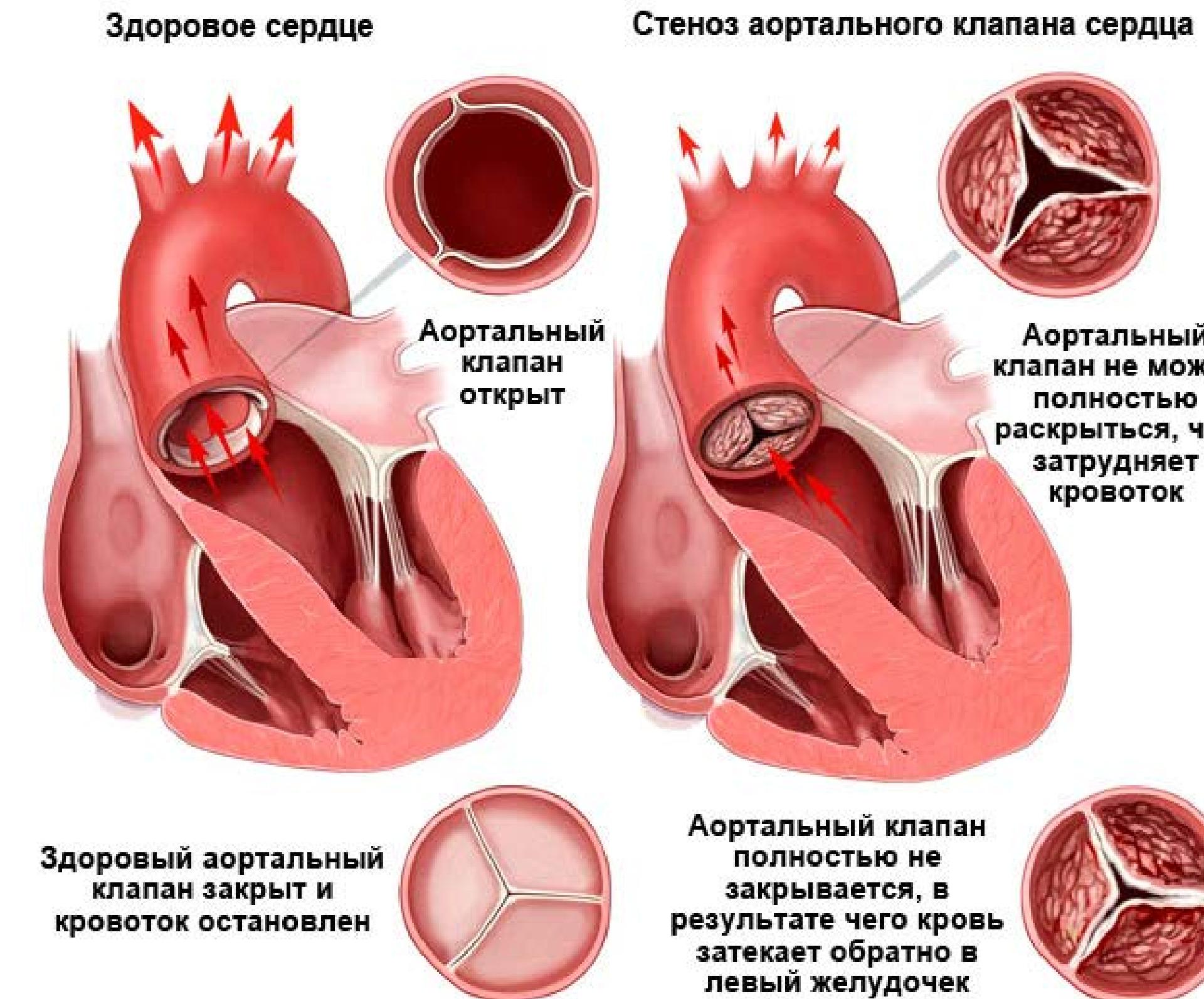


Границы тромба в виде изоповерхности  $\nu_b/K = 0.4 \text{ [s}^{-1}\text{]}$



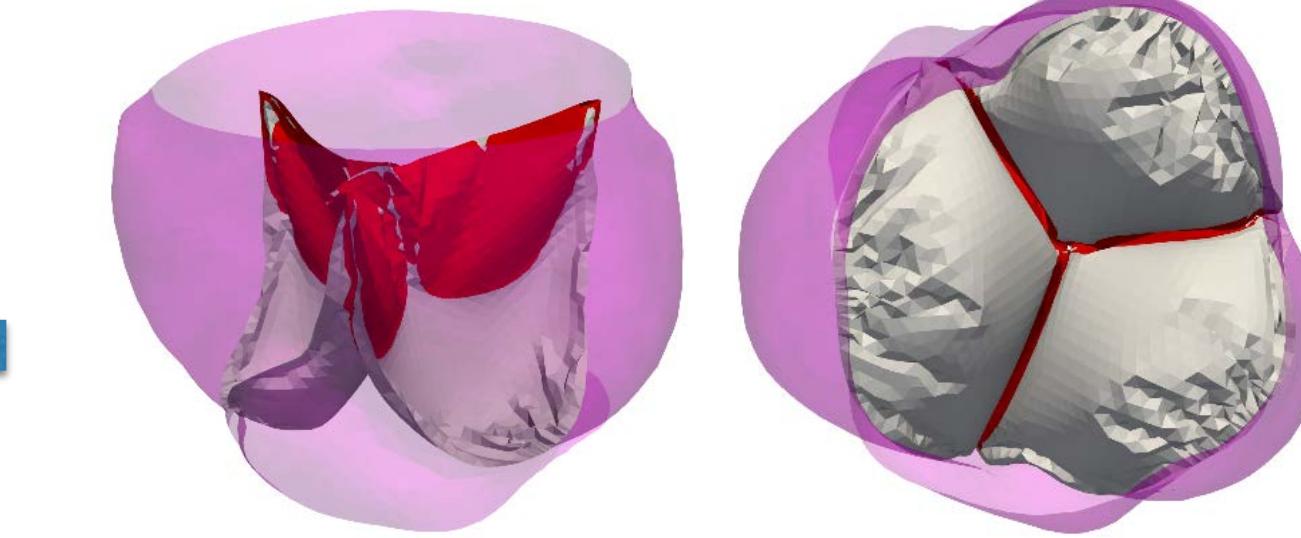
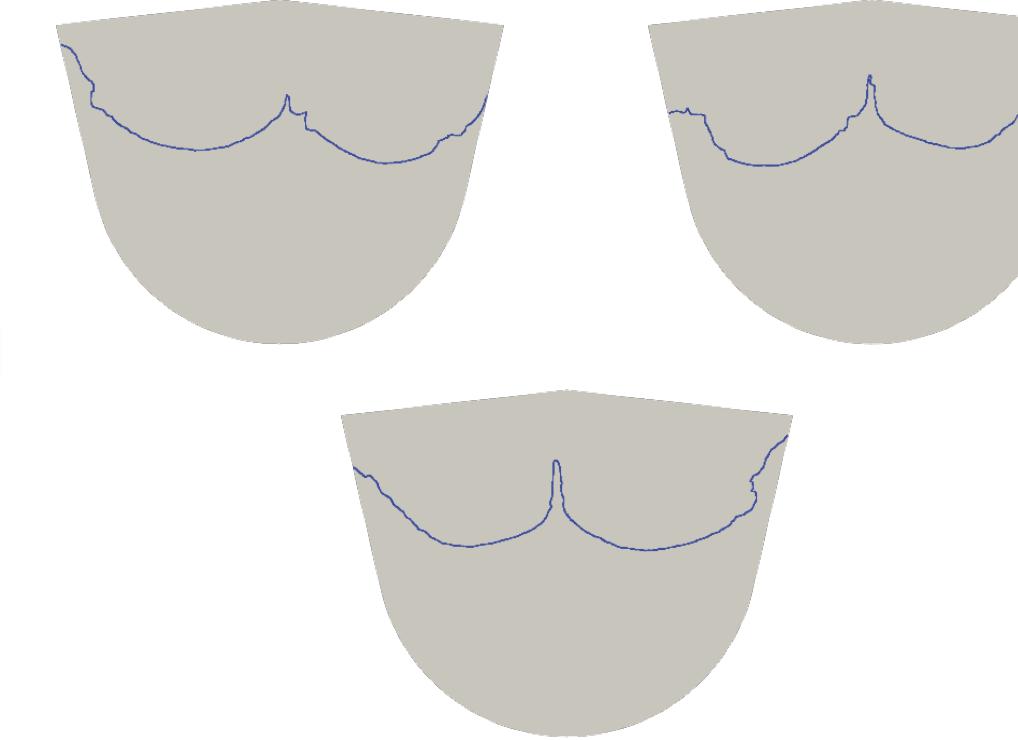
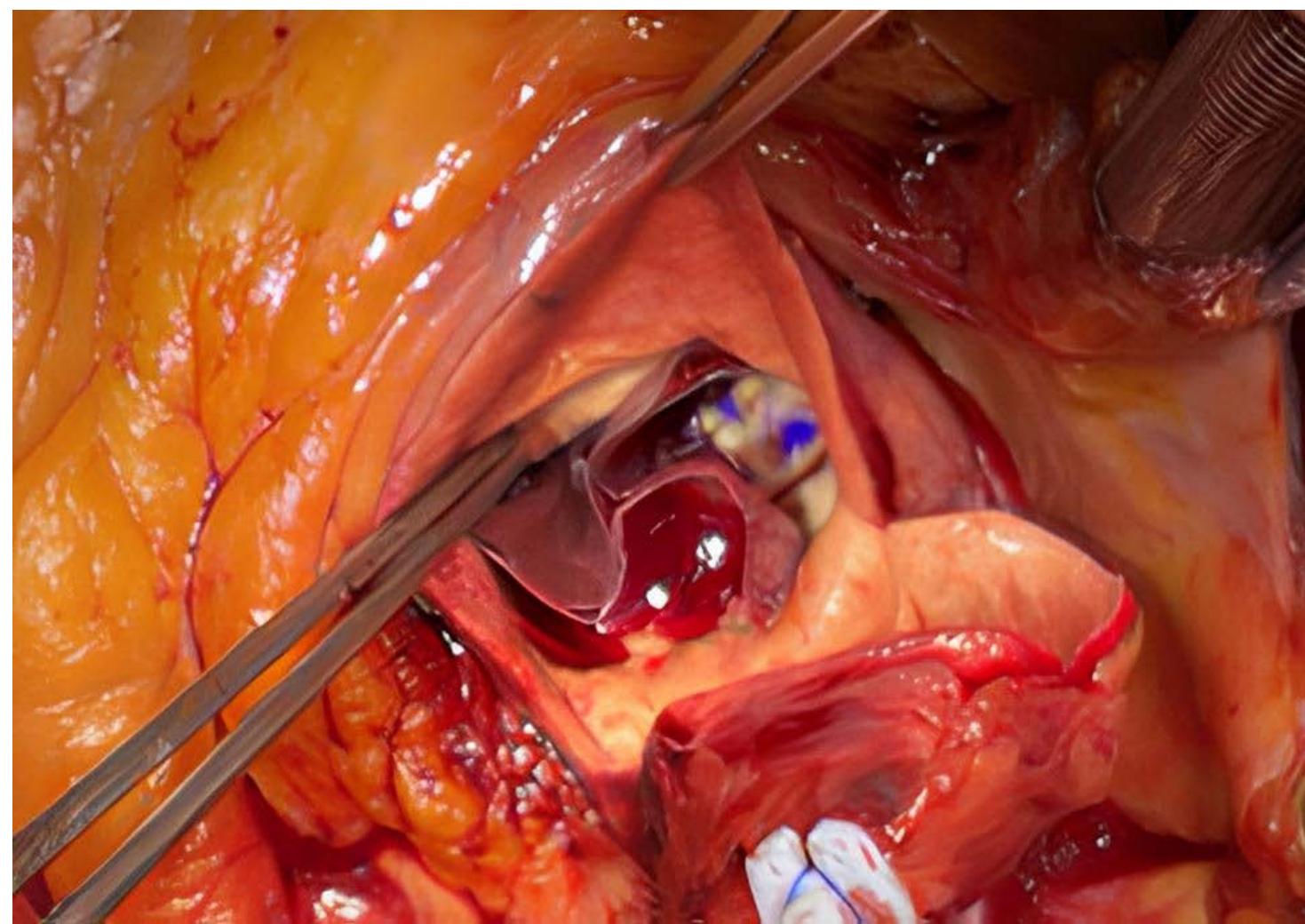
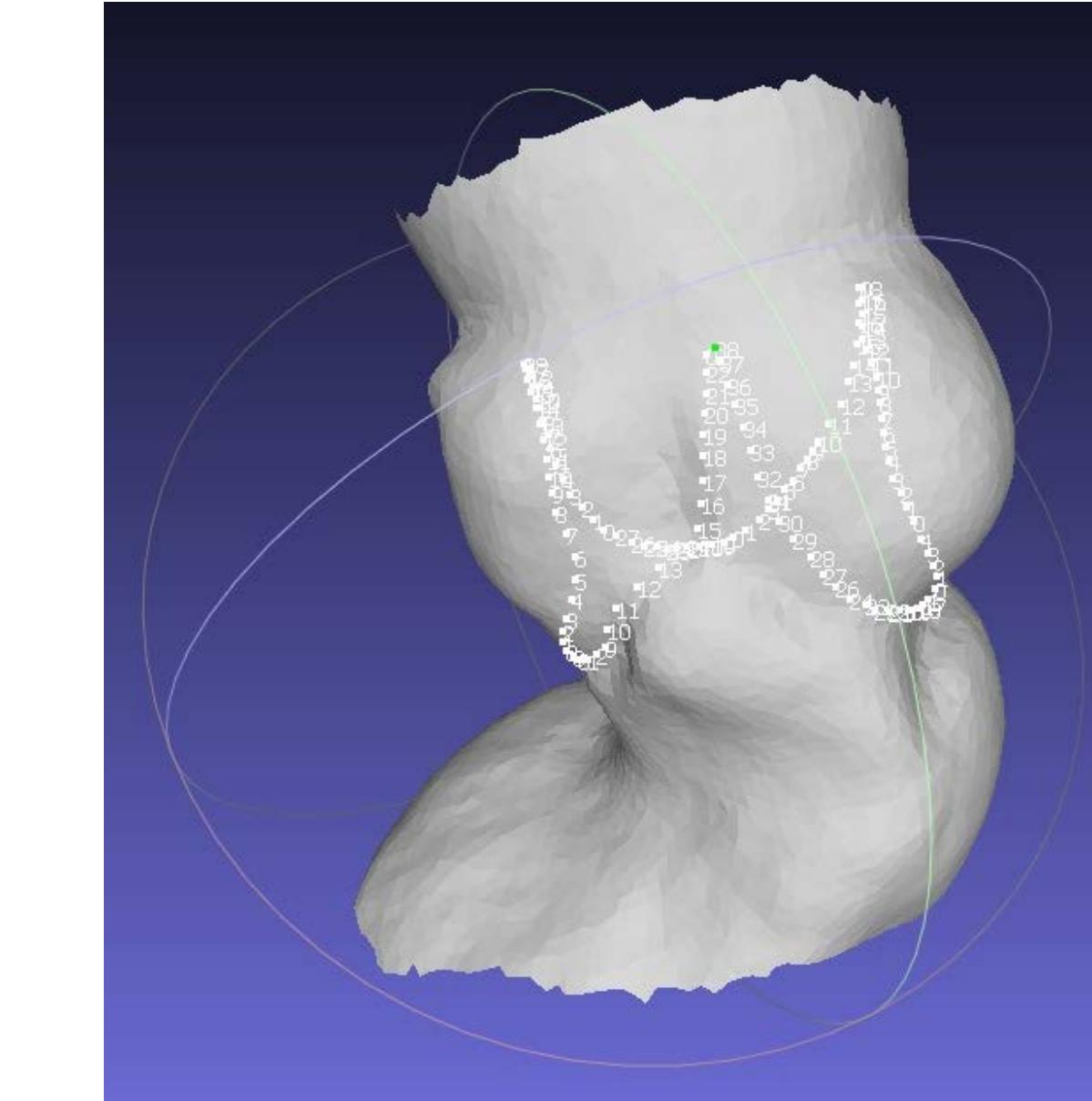
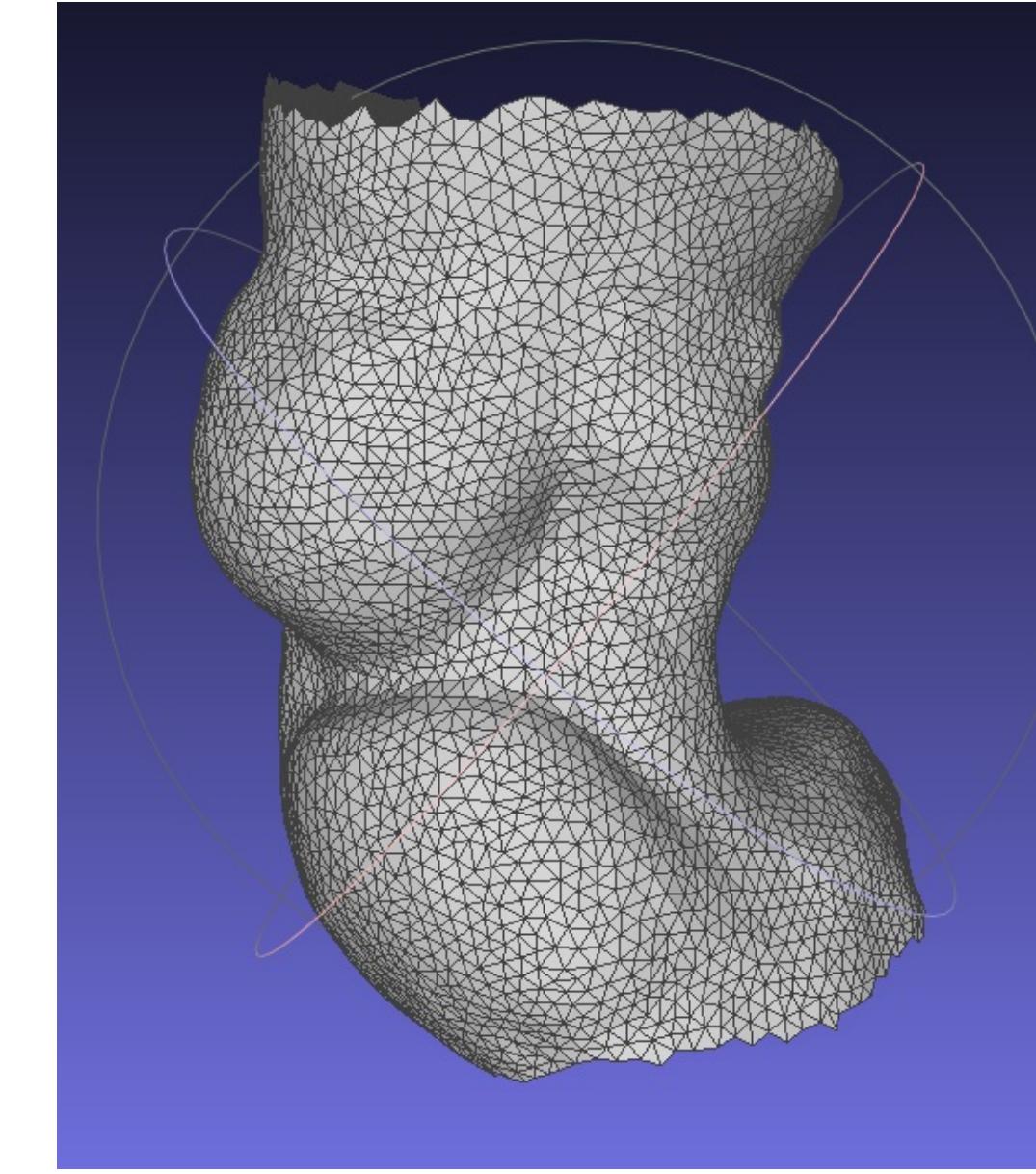
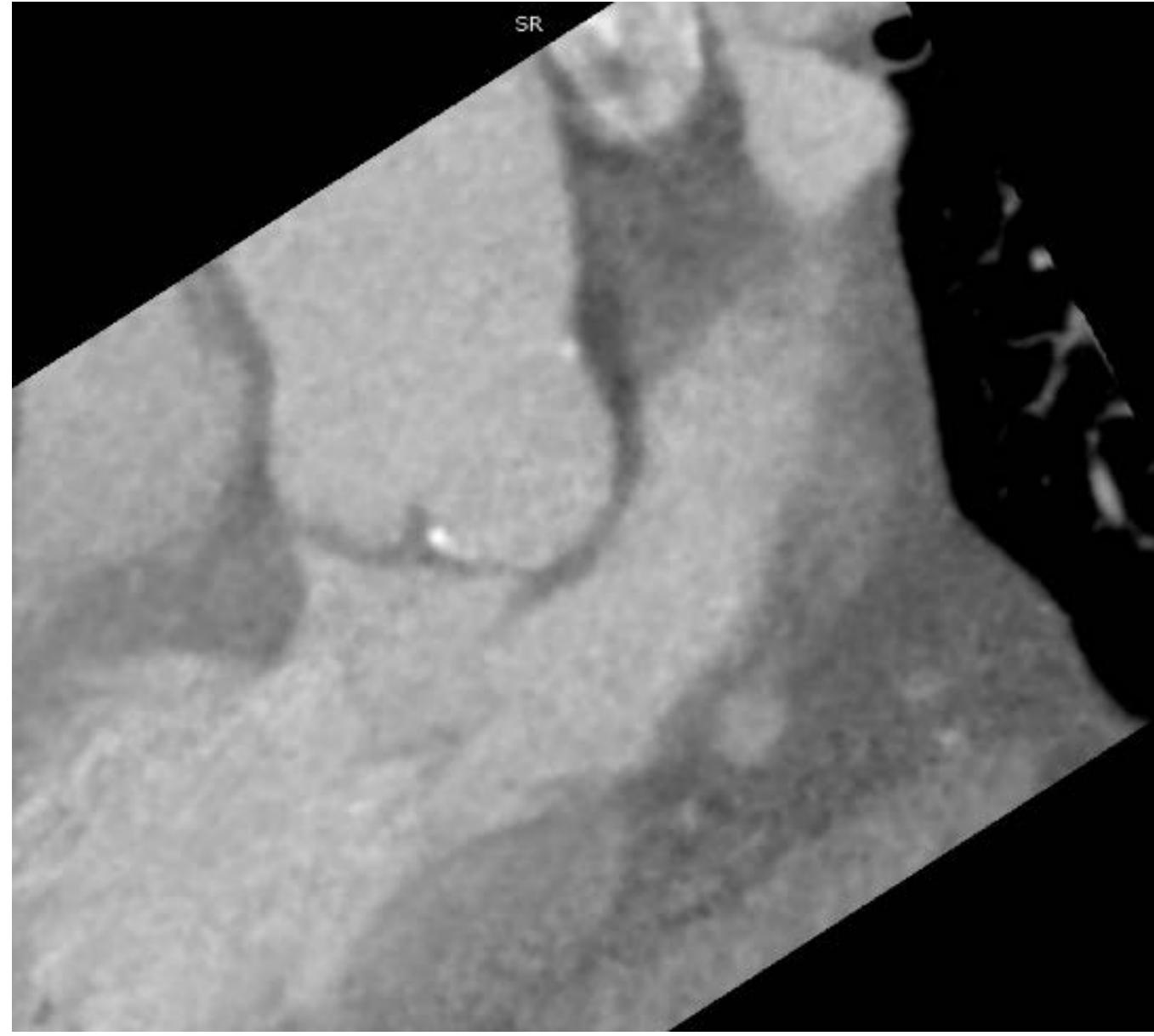
Доля объема тромба в объеме желудочка,  $\times 100\%$

# Реконструкция аортального клапана





# Апробация в клинике элементов СППВР



А.Легкий (ИВМ РАН)  
П.Каравайкин (РНЦХ)



---

**Спасибо за внимание!**