

параллельный код с учетом химических реакций и их тепловых эффектов, основанный на методе SPH для решения уравнений газовой динамики в цилиндрической геометрии [4]. Гравитационные поля остаются трехмерными. На рисунке 4 с расчетами динамики двухфазного диска видны кольцевые, спиральные и одиночные волны плотности. Взаимное влияние газа и тел имеет место даже при соотношении массы тел к массе газа $1/50$. Из вычислительных экспериментов следует, что гравитационное взаимодействие газа и тел ведет к образованию отдельных сгущений в диске и росту в них плотности водорода. В сгустках создается восстановительная среда высокого давления газов, благоприятная для сложных органических синтезов с высокими выходами продуктов.

Таким образом, вычислительные эксперименты на суперкомпьютерах предсказывают возможность протекания в околозвездных дисках химических реакций. Часть этих реакций изучается в лабораторных реакторах с катализаторами состава первичных тел. Наши исследования в астрофизике и в астрокатализе показывают, что условия для химической эволюции с эффективным синтезом первичных органических соединений для земной биосферы в Солнечной системе действительно реализовывались на этапе околосолнечного диска.

Наши исследования поддержаны программами Президиума РАН (координаторы Заварзин Г.А., Галимов Э.М., координатор Боярчук А.А.), интеграционным проектом СО РАН (координатор Михайленко Б.Г.). Особую благодарность за поддержку и обсуждения выражаем академикам Пармону В.Н. и Розанову А.Ю.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Снытников В.Н. Абиогенный допланетный синтез пребиотического вещества // Вестник РАН. 2007. Т. 77, № 3. С. 218–226.
2. Стадниченко О.А., Снытников В.Н. Явный многошаговый алгоритм для моделирования динамики самогравитирующего газа // Вычислительные методы и программирование. 2010. Т. 11, № 1. С. 53–67.
3. Кукшева Э.А., Снытников В.Н. Параллельный алгоритм решения задач гравитационной физики, основанный на декомпозиции области // Вычислительные методы и программирование. 2010. Т. 11, № 1. С. 168–175 (<http://num-meth.srcc.msu.ru/>).
4. Стояновская О.П., Снытников В.Н. Особенности SPH-метода решения газодинамических уравнений при моделировании нелинейных волн в двухфазной гравитирующей среде // Математическое моделирование. 2010. Т. 22, № 5. С. 29–44.

Моделирование сердечной активности



5 Моделирование сердечной активности

Изучение механизмов развития различного рода аритмий, разработка методов их диагностики и способов их предотвращения и лечения являются сейчас исключительно важными вследствие того, что в экономически развитых странах сердечно-сосудистые заболевания являются основной причиной смертности. В статье описана математическая модель сердечной клетки, приводятся результаты моделирования сердечной ткани на многопроцессорном кластере с использованием технологии MPI.

*Сердце – вот истинный рычаг всего великого.
Людвиг ван Бетховен*

Интенсивные исследования сердечных аритмий ведут медики и биологи, физики и специалисты в области математического моделирования. Так как сердце является динамической системой – происходящие в нем процессы могут быть описаны как эволюция некоторых переменных состояний: электрических мембранных потенциалов, проводимостей ионных каналов, ионных токов, – то описание его работы можно получить, анализируя соответствующие математические модели. Упрощенно сердечную ткань можно рассматривать как среду, состоящую из автоколебательных и возбудимых элементов-клеток. Каждая клетка, как правило, описывается уравнениями типа Ходжкина–Хаксли. Тогда математическая модель сердца – это система очень большого числа (до нескольких десятков миллиардов) обыкновенных дифференциальных уравнений. Эти уравнения описывают электрическую активность сердца. Но для адекватного анализа требуется учесть и механическую активность. А это еще десятки миллиардов уравнений. Поэтому необходимый компьютерный анализ невозможен без привлечения методов параллельных вычислений и использования современной вычислительной техники.

Содержательная постановка задачи

В настоящее время считается общепринятым, что при одной из аритмий в сердечной мышце – тахикардии, а следовательно, в ее модели, появляется вращающаяся вокруг себя волна – спиральная волна. Частота ее вращения выше частоты нормального следования импульсов возбуждения. Результат – учащенное сердцебиение. При определенных условиях спиральная волна становится неустойчивой и разрушается на несколько спиральных волн – в модели наблюдается сложная пространственно-временная динамика – спиральный хаос (рис. 1). Поведение сердца становится беспорядочным.

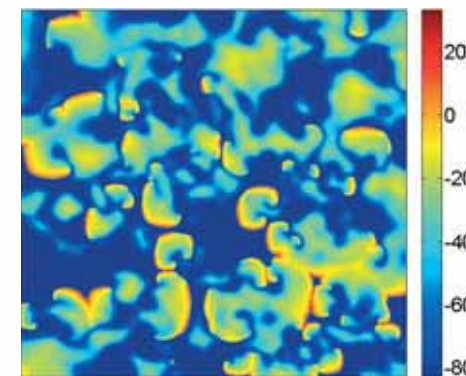


Рис. 1. Хаос спиральных волн в модели сердечной ткани. Красный цвет – возбужденные участки

АВТОРЫ:

Г.В. Осипов – докт. физ.-мат. наук, Нижегородский гос. университет им. Н.И. Лобачевского;
e-mail: osipov@rf.unn.ru

В.В. Петров – аспирант, Нижегородский гос. университет им. Н.И. Лобачевского;
e-mail: valentin.s.petrov@gmail.com

М.А. Комаров – аспирант, Нижегородский гос. университет им. Н.И. Лобачевского;
e-mail: maxim.a.komarov@gmail.com

К.А. Крюков – ассистент, Нижегородский гос. университет им. Н.И. Лобачевского;
e-mail: alkryukov@gmail.com

рядочным — возникает фибрилляция. Желудочковая фибрилляция — одна из опаснейших сердечных аритмий.

Задача состоит в отыскании параметров низкоамплитудного высокочастотного воздействия, способного подавить режим спирального хаоса в сердечной ткани. Для этого необходимо провести численное моделирование двумерной решетки 600×600 сердечных клеток и провести исследование в зависимости от параметров: A — амплитуда внешнего воздействия, ω — частота внешнего воздействия, τ — длительность внешнего импульса, а также от ряда параметров, определяющих динамику изолированной сердечной клетки, например максимальных проводимостей калиевых и кальциевых ионных каналов, G_K и G_{Si} соответственно. Кроме того, необходимо исследовать зависимость эффективности подавления режима спирального хаоса от формы подаваемого сигнала.

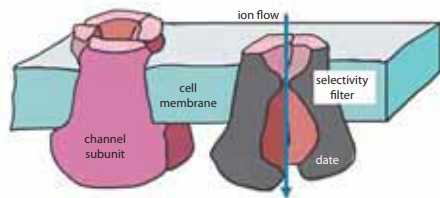


Рис. 2. Мембрана сердечной клетки. Ионные токи, протекающие через соответствующие каналы, вызывают изменение потенциала на мембране

Математическая модель

Для моделирования одной сердечной клетки нами использовалась биологически релевантная модель Луо—Руди мембранного потенциала кардиомиоцита. Данная модель является моделью типа Ходжкина—Хаксли и описывает изменение мембранного потенциала клетки в зависимости от ионных токов, протекающих через нее. Схематичное изображение мембраны клетки приведено на рис.2.

Основным уравнением данной модели является уравнение, описывающее скорость изменения потенциала на мембране клетки:

$$C_m \dot{V}_m = - (I_{Na}(V, g_i) + I_{Si}(V, g_i) + I_K(V, g_i) + I_{K1}(V, g_i) + I_{Kp}(V, g_i) + I_b(V, g_i)) + I_{stim}$$

В правой части уравнения стоит сумма шести ионных токов, являющихся сложными нелинейными функциями как потенциала V , так и воротных переменных g_i , $i \in \{m, h, j, d, f, X\}$. Изменение воротных переменных дается уравнением вида:

$$dg_i / dt = \alpha_{g_i}(V)(1-g_i) - \beta_{g_i}(V)g_i \quad i \in \{m, h, j, d, f, X\}$$

Таких уравнений шесть. Кроме того, одно дополнительное уравнение описывает изменение концентрации ионов кальция:

$$c_{Ca} = 10^{-4} I_{Si}(V, d, f, c) + 0,07 (10^{-4} - c)$$

Таким образом модель Луо—Руди для одной клетки состоит из восьми нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ). Заметим, что могут также использоваться более сложные и точные модели сердечных клеток, в которых число динамических переменных достигает нескольких десятков.

Оценка вычислительной сложности задачи

Для исследования спиральных волн в двумерной задаче необходимо проводить численное интегрирование решетки 600×600 элементов, каждый узел которой описывается восемью ОДУ. Это почти 2,9 млн переменных. Необходимо осуществлять как минимум 1 млн итераций интегрирования для каждого набора параметров. На персональном компьютере Intel Core 2 6300 1,86 GHz один подобный расчет выполняется 40 часов. Исследование же области параметров при таких временных затратах не представляется реальным.

Результаты

Специализированный алгоритм интегрирования подобных систем (Qu and Garfinkel) был успешно распараллелен для выполнения вычислений на кластере ННГУ с использованием средств MPI. На рис. 3 показана зависимость получаемого увеличения производительности в зависимости от числа процессоров, на которых выполнялись вычисления.

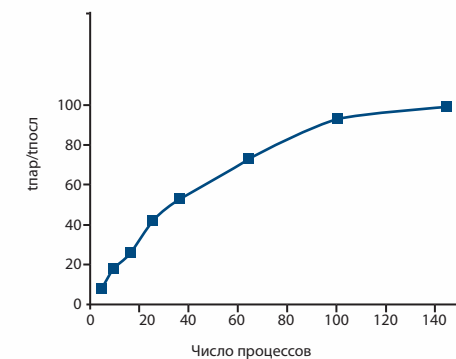


Рис. 3. Ускорение вычислений с использованием кластера ННГУ в зависимости от числа используемых процессоров

С использованием данного алгоритма задача, поставленная ранее, была успешно решена. На рис. 4 представлена демонстрация вытеснения режима хаоса спиральных волн из двумерной решетки сердечных клеток маломощным высокочастотным воздействием.

Результаты компьютерных экспериментов послужили основой для создания новых способов дефибрилляции сердца. В частности, предложенный

способ внешнего стимулирования с помощью высокочастотного локально прикладываемого электрического сигнала будет основным в создаваемом в настоящее время имплантируемом программируемом дефибрилляторе.

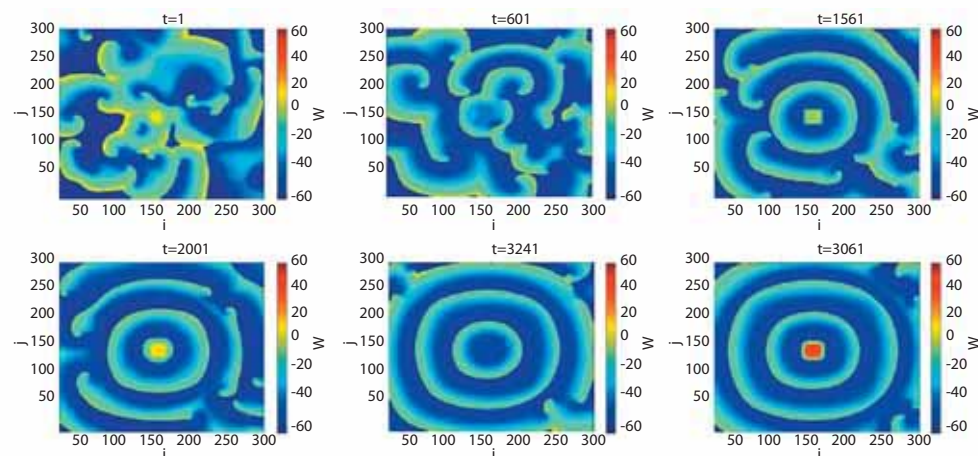


Рис. 4. Вытеснение спирального хаоса из сердечной мышцы с помощью локализованного слабого внешнего периодического воздействия

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Luo C.-H., Rudy Y. A model of the ventricular cardiac action potential: De-polarization, repolarization, and their interaction // *Circ. Res.* 1991. V. 68. P. 1501.
2. Petrov V.S., Osipov G.V., Suykens J.A.K. Passive elements influence on the dynamics of oscillatory ensembles // *Physical Review E.* 2009. V. 79. P. 046219.
3. Kryukov A.K., Petrov V.S., Averyanova L.S., Osipov G.V., Chen W., Drugova O., Chan C.K. Synchronization phenomena in mixed media of passive, excitable and oscillatory cells // *Chaos.* 2008. V. 18. P. 037129.
4. Qu Z., Weiss J.N., Garfinkel A. Cardiac electrical restitution properties and stability of reentrant spiral waves: a simulation study // *J Physiol.* 1999. V. 276. P. 69.

Вихреразрешающее моделирование турбулентных течений и переноса примеси в уличных каньонах с использованием многопроцессорной вычислительной техники

