

Υβριδικες/Ασυνεχείς μέθοδοι Collocation



Ιωάννης Αθανασάκης
Πολυτεχνείο Κρήτης
Σχολη Μηχανικών Παραγωγής &
Διοίκησης



Περιεχόμενα

- Σχήματα Χρονικής Διακριτοποίησης
- Ανάπτυξη Εξισώσεων Collocation
- Εξισώσεις Διάχυσης Όγκου / Βιολογικής Εισβολής
- Επικύρωση σε Προβλήματα Ιατρικής
- Συμπεράσματα

Αριθμητικά Σχήματα – Runge Kutta

- ✓ Strong Stability Preserving Runge-Kutta
 - Κατάλληλες για μη γραμμικά προβλήματα
 - Καταλήγουν σε γραμμικό Σύστημα ΣΔΕ
 - Αρκετά ευσταθείς (με κάποιους περιορισμούς)
- ✓ Diagonally Implicit Runge-Kutta
 - Κατάλληλες για γραμμικά προβλήματα
 - Unconditionally Stable
 - Περισσότερο αποδοτικές από τα full Implicit σχήματα
- ✓ Implicit Explicit Runge-Kutta
 - Unconditionally Stable
 - Κατάλληλες για μη γραμμικά προβλήματα
 - Καταλήγουν σε γραμμικό Σύστημα ΣΔΕ
 - Περισσότερο αποδοτικές από τα σχήματα SPARK και DIRK

Αριθμητικά Σχήματα Χρονικής Διακριτοποίησης

Γενική Μη γραμμική Εξίσωση

Γενική Εξίσωση
Παραβολικού Τύπου

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \mathcal{L}(u) + \mathcal{G}(u)$$

↓

Χωρική
Διακριτοποίηση

$$C^{(0)} \dot{\mathbf{a}} = L(\mathbf{a}) + G(\mathbf{a})$$

↓

Σύστημα Συνήθη
Διαφορικών Εξισώσεων

$$\dot{\mathbf{a}} = \tilde{L}(\mathbf{a}) + \tilde{G}(\mathbf{a})$$

Αριθμητικά Σχήματα Χρονικής Διακριτοποίησης

Strong Stability Preserving Runge-Kutta

SSP(3,3)

$$\mathbf{a}^{(1)} = \mathbf{a}^n + \Delta t \left(\tilde{L}(\mathbf{a}^n) + \tilde{G}(\mathbf{a}^n) \right)$$

$$\mathbf{a}^{(2)} = \frac{3}{4}\mathbf{a}^n + \frac{1}{4}\mathbf{a}^{(1)} + \frac{1}{4}\Delta t \left(\tilde{L}(\mathbf{a}^{(1)}) + \tilde{G}(\mathbf{a}^{(1)}) \right)$$

$$\mathbf{a}^{n+1} = \frac{1}{3}\mathbf{a}^n + \frac{2}{3}\mathbf{a}^{(2)} + \frac{2}{3}\Delta t \left(\tilde{L}(\mathbf{a}^{(2)}) + \tilde{G}(\mathbf{a}^{(2)}) \right)$$

SSP(4,3)

$$\mathbf{a}^{(1)} = \mathbf{a}^n + \frac{1}{2}\Delta t \left(\tilde{L}(\mathbf{a}^n) + \tilde{G}(\mathbf{a}^n) \right)$$

$$\mathbf{a}^{(2)} = \mathbf{a}^{(1)} + \frac{1}{2}\Delta t \left(\tilde{L}(\mathbf{a}^{(1)}) + \tilde{G}(\mathbf{a}^{(1)}) \right)$$

$$\mathbf{a}^{(3)} = \frac{2}{3}\mathbf{a}^n + \frac{1}{3}\mathbf{a}^{(2)} + \frac{1}{6}\Delta t \left(\tilde{L}(\mathbf{a}^{(2)}) + \tilde{G}(\mathbf{a}^{(2)}) \right)$$

$$\mathbf{a}^{n+1} = \mathbf{a}^{(3)} + \frac{1}{2}\Delta t \left(\tilde{L}(\mathbf{a}^{(3)}) + \tilde{G}(\mathbf{a}^{(3)}) \right)$$

Αριθμητικά Σχήματα Χρονικής Διακριτοποίησης

Diagonally Implicit Runge-Kutta

DIRK(2,3)

$$\mathbf{a}^{(1)} = \mathbf{a}^n + \lambda \Delta t \left(\tilde{L}(\mathbf{a}^{(1)}) + \tilde{G}(\mathbf{a}^{(1)}) \right)$$

$$\mathbf{a}^{(2)} = \mathbf{a}^n + \Delta t \left[(1 - 2\lambda) \left(\tilde{L}(\mathbf{a}^{(1)}) + \tilde{G}(\mathbf{a}^{(1)}) \right) + \lambda \left(\tilde{L}(\mathbf{a}^{(2)}) + \tilde{G}(\mathbf{a}^{(2)}) \right) \right]$$

$$\mathbf{a}^{n+1} = \mathbf{a}^n + \frac{\Delta t}{2} \left[\left(\tilde{L}(\mathbf{a}^{(1)}) + \tilde{G}(\mathbf{a}^{(1)}) \right) + \left(\tilde{L}(\mathbf{a}^{(2)}) + \tilde{G}(\mathbf{a}^{(2)}) \right) \right]$$

Αριθμητικά Σχήματα Χρονικής Διακριτοποίησης

Implicit Explicit Runge-Kutta

IMEX RK(3,3,2)

$$\begin{aligned}
 \mathbf{a}^{(1)} &= \mathbf{a}^n + \lambda \Delta t \tilde{L}(\mathbf{a}^{(1)}) \\
 \mathbf{a}^{(2)} &= \mathbf{a}^n + \Delta t \tilde{G}(\mathbf{a}^{(1)}) + \Delta t(1 - 2\lambda) \tilde{L}(\mathbf{a}^{(1)}) + \lambda \Delta t \tilde{L}(\mathbf{a}^{(2)}) \\
 \mathbf{a}^{(3)} &= \mathbf{a}^n + \frac{\Delta t}{4} [\tilde{G}(\mathbf{a}^{(1)}) + \tilde{G}(\mathbf{a}^{(2)})] + \Delta t \left(\frac{1}{2} - \lambda\right) \tilde{L}(\mathbf{a}^{(1)}) + \lambda \Delta t \tilde{L}(\mathbf{a}^{(3)}) \\
 \mathbf{a}^{n+1} &= \mathbf{a}^n + \frac{\Delta t}{6} [\tilde{G}(\mathbf{a}^{(1)}) + \tilde{G}(\mathbf{a}^{(2)}) + 4\tilde{G}(\mathbf{a}^{(3)})] \\
 &\quad + \frac{\Delta t}{6} [\tilde{L}(\mathbf{a}^{(1)}) + \tilde{L}(\mathbf{a}^{(2)}) + 4\tilde{L}(\mathbf{a}^{(3)})]
 \end{aligned}$$

Εξισώσεις Collocation

- ✓ Ανάπτυξη της dDHC για προβλήματα 3 περιοχών
- ✓ Γενίκευση της dDHC σε N περιοχές & M αρχικές πηγές
- ✓ Μη γραμμικές εξισώσεις Hermite Collocation για τις γενικευμένες εξισώσεις Fisher και Kolmogorov-Petrovskii-Piskunov σε ομοιογενές περιβάλλον
- ✓ Ανάπτυξη της μεθόδου Hermite Collocation – Interface Relaxation
- ✓ Εφαρμογή των μη Γραμμικών εξισώσεων Collocation σε προβλήματα πολλαπλών περιοχών
- ✓ Ανάπτυξη των εξισώσεων Collocation για Stripes Γραμμικά και μη Γραμμικά προβλήματα πολλαπλών περιοχών στις 2 χωρικές διαστάσεις
- ✓ Προσέγγιση του συντελεστή διάχυσης με συνεχείς συναρτήσεις
- ✓ Εφαρμογή της μεθόδου σε εξισώσεις καρκινικού όγκου με όρους θεραπείας

Derivative Discontinuous Hermite Collocation σε N περιοχές

Μαθηματικό μοντέλο

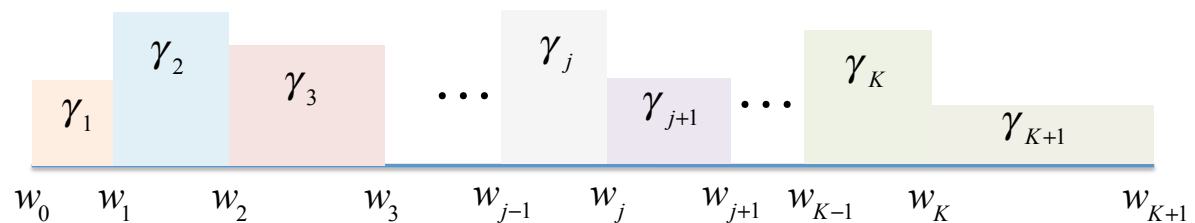
Βασική Διαφορική
Εξίσωση

$$\begin{cases} u_t = (Du_x)_x, & x \in [a, b], t \geq 0 \\ u_x(a, t) = 0 \text{ και } u_x(b, t) = 0. \\ u(x, 0) = f(x) \end{cases}$$

όπου,

$$a = w_0 < w_1 < \dots < w_k < \dots < w_K < w_{K+1} = b,$$

$$D(x) = \gamma_k \in \mathbb{R}$$



Derivative Discontinuous Hermite Collocation σε N περιοχές

Συνθήκες στα Σημεία Διεπαφής

Απο την παραβολική φύση της διαφορικής συνεπάγεται η συνέχεια της c και της (Dc_x)

$$\left\{ \begin{array}{l} \lim_{x \rightarrow w_k^-} u(x, t) = \lim_{x \rightarrow w_k^+} u(x, t) \\ \lim_{x \rightarrow w_k^-} D(x)u_x(x, t) = \lim_{x \rightarrow w_k^+} D(x)u_x(x, t) \end{array} \right.$$

Derivative Discontinuous Hermite Collocation σε N περιοχές

Τα ασυνεχή Πολυώνυμα Hermite

Ομοιόμορφη Διαμέριση
σε κάθε υποπεριοχή του
χωρίου

$$h_k := \frac{w_k - w_{k-1}}{N_k} .$$

$$[a, b] = \bigcup_{j=1}^{N+1} I_j , \quad I_j = [x_{j-1}, x_j]$$

$$x_j = a + j h_j(k) , \quad j = 0, \dots, N + 1 ,$$

$$N = \sum_{k=1}^{K+1} N_k \text{ και } h_j(k) = h_k \text{ όταν } I_j \subseteq \overline{\mathcal{W}}_k = [w_{k-1}, w_k]$$

$$u(x, t) = \sum_{j=0}^{N+1} [\alpha_{2j}(t)\phi_{2j}(x) + \alpha_{2j+1}(t)\phi_{2j+1}(x)]$$

Derivative Discontinuous Hermite Collocation σε N περιοχές

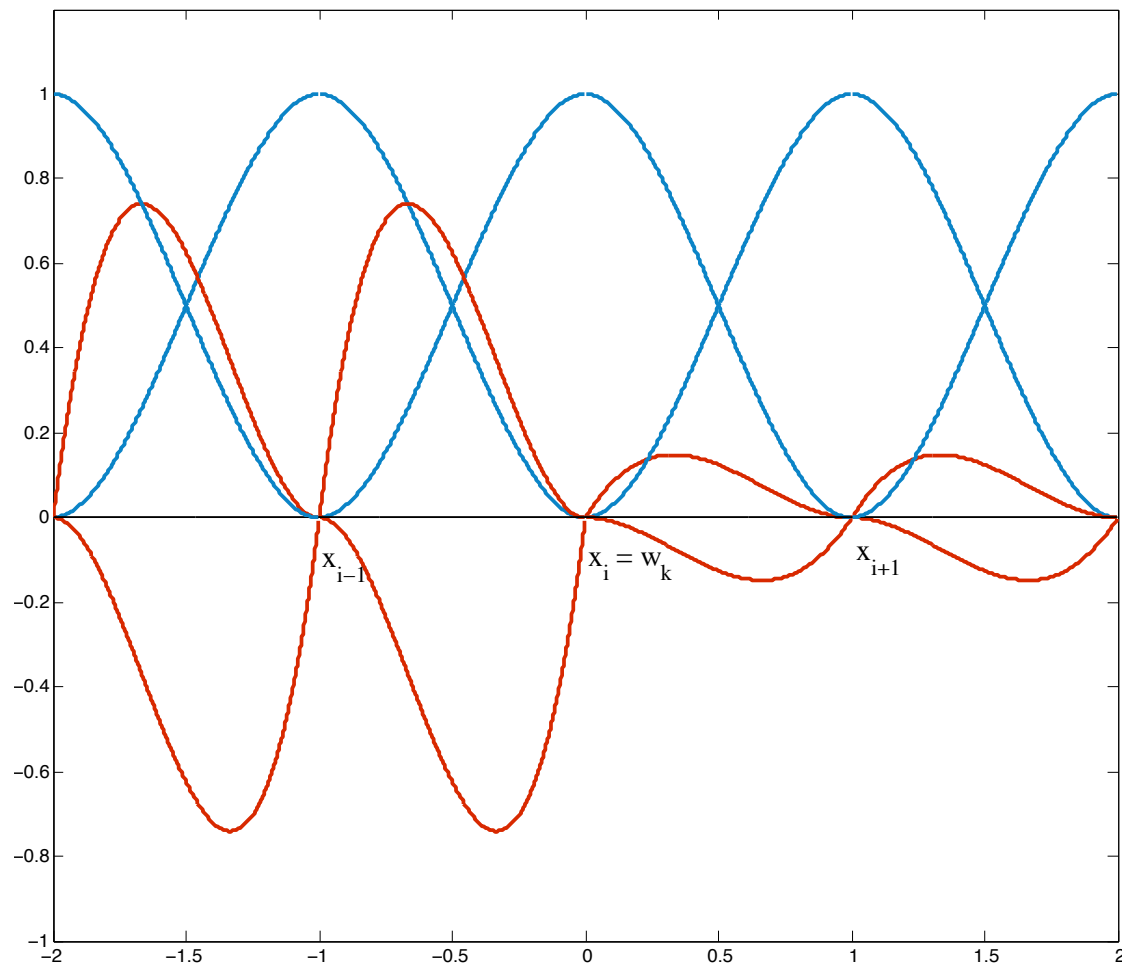
Τα ασυνεχή Πολυώνυμα Hermite

$$\phi_{2j}(x) = \begin{cases} \phi\left(\frac{x_j - x}{h_j(k)}\right) & , x \in I_j \\ \phi\left(\frac{x - x_j}{h_{j+1}(k)}\right) & , x \in I_{j+1} \\ 0 & , \text{διαφορετικά} \end{cases}, \quad \phi_{2j+1}(x) = \begin{cases} -\frac{h_j(k)}{\gamma_j} \psi\left(\frac{x_j - x}{h_j(k)}\right) & , x \in I_j \\ \frac{h_{j+1}(k)}{\gamma_{j+1}} \psi\left(\frac{x - x_j}{h_{j+1}(k)}\right) & , x \in I_{j+1} \\ 0 & , \text{διαφορετικά} \end{cases}$$

$$\phi(s) = (1 - s)^2(1 + 2s), \quad \psi(s) = s(1 - s)^2.$$

Derivative Discontinuous Hermite Collocation σε N περιοχές

Τα ασυνεχή Πολυώνυμα Hermite



Derivative Discontinuous Hermite Collocation σε N περιοχές

Elemental εξισώσεις Collocation

Σημεία Gauss

$$\sigma_{2j-1} = \frac{x_{j-1} + x_j}{2} - \frac{h_j}{2\sqrt{3}} \text{ και } \sigma_{2i} = \frac{x_{j-1} + x_j}{2} + \frac{h_j}{2\sqrt{3}}.$$

Αντικατάσταση στην
διαφορική εξίσωση

$$\sum_{L=2j-2}^{2j+1} \dot{\alpha}_L(t) \phi_L(\sigma_i) = \gamma_j \sum_{L=2j-2}^{2j+1} \alpha_L(t) \phi_L''(\sigma_i)$$

για $i = 2j - 1, 2j$ και φυσικά, $\dot{\alpha}_L(t) = \frac{d}{dt} \alpha_L(t)$ και $\phi_L''(x) = \frac{d}{dx} \phi_L(x)$.

Derivative Discontinuous Hermite Collocation σε N περιοχές

Elemental εξισώσεις Collocation

$$\sum_{L=2j-2}^{2j+1} \alpha_L(t) \phi_L^{(m)}(\sigma_i) = C_j^{(m)} \boldsymbol{\alpha}_j, \quad i = 2j-1, 2j,$$

$$C_j^{(m)} = \begin{bmatrix} A_j^{(m)} & B_j^{(m)} \end{bmatrix}, \quad m = 0, 2$$

$$\boldsymbol{\alpha}_j = \begin{bmatrix} \alpha_{2j-2}(t) & \alpha_{2j-1}(t) & \alpha_{2j}(t) & \alpha_{2j+1}(t) \end{bmatrix}^T$$

$$A_j^{(m)} = \begin{bmatrix} \phi_{2j-2}^{(m)}(\sigma_{2j-1}) & \phi_{2j-1}^{(m)}(\sigma_{2j-1}) \\ \phi_{2j-2}^{(m)}(\sigma_{2j}) & \phi_{2j-1}^{(m)}(\sigma_{2j}) \end{bmatrix}$$

$$B_j^{(m)} = \begin{bmatrix} \phi_{2j}^{(m)}(\sigma_{2j-1}) & \phi_{2j+1}^{(m)}(\sigma_{2j-1}) \\ \phi_{2j}^{(m)}(\sigma_{2j}) & \phi_{2j+1}^{(m)}(\sigma_{2j}) \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{h_j^m} \begin{bmatrix} s_1^{(m)} & \frac{h_j(k)}{\gamma_j} s_2^{(m)} \\ s_3^{(m)} & -\frac{h_j(k)}{\gamma_j} s_4^{(m)} \end{bmatrix}, \quad m = 0, 1, 2$$

$$= \frac{1}{h_j^m} \begin{bmatrix} s_3^{(m)} & \frac{h_j(k)}{\gamma_j} s_4^{(m)} \\ s_1^{(m)} & -\frac{h_j(k)}{\gamma_j} s_2^{(m)} \end{bmatrix}, \quad m = 0, 1, 2$$

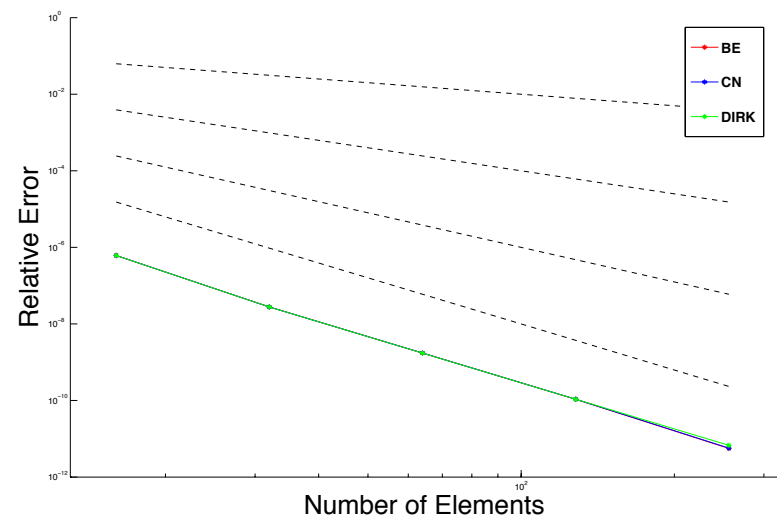
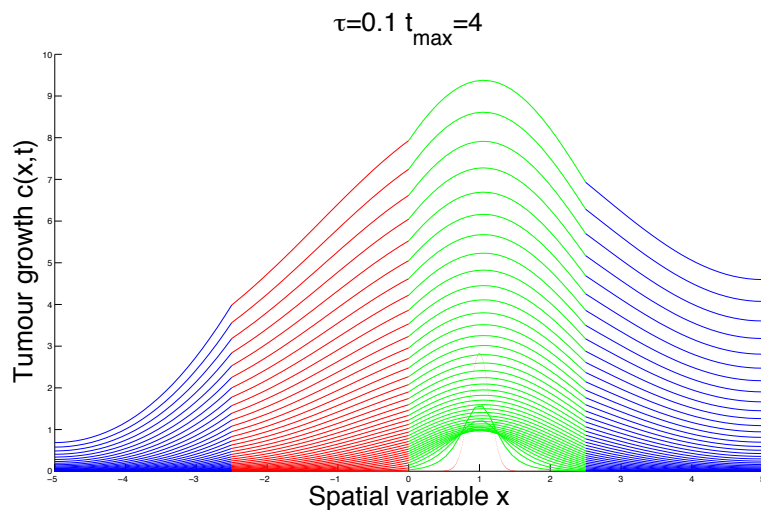
Derivative Discontinuous Hermite Collocation σε N περιοχές

Αριθμητικά Αποτελέσματα

Πρόβλημα 1 (4 περιοχές -1 πηγή)

$$a = -5, w_1 = -2.5, w_2 = 0, w_3 = 2.5, b = 5, \gamma = 0.5$$

$$\text{και } f(x) = \frac{1}{\eta\sqrt{\pi}} e^{-(x-1)^2/\eta^2}, \text{ με } \eta = 0.2.$$



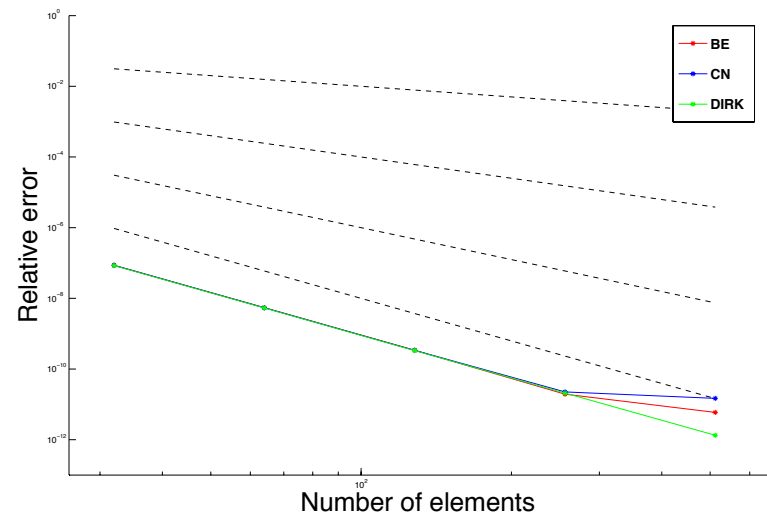
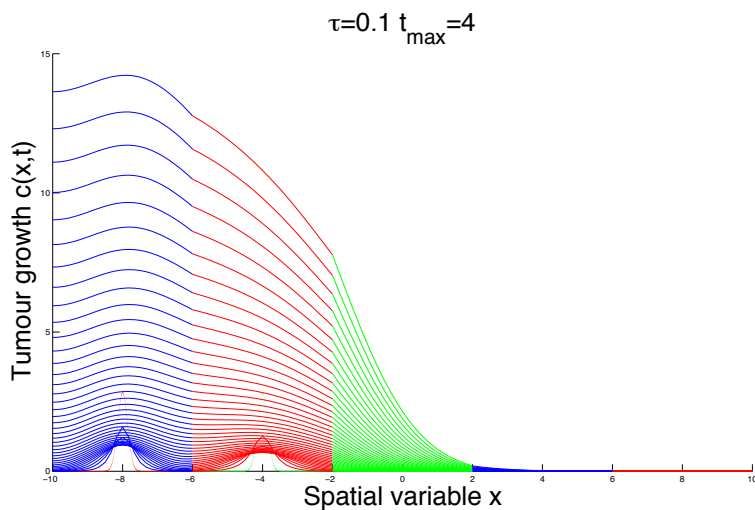
Derivative Discontinuous Hermite Collocation σε N περιοχές

Αριθμητικά Αποτελέσματα

Πρόβλημα 2 (5 περιοχές -2 πηγές)

$$a = -10, w_1 = -6, w_2 = -2, w_3 = 2, w_4 = 6, b = 10, \gamma = 0.5$$

$$\text{και } f(x) = \frac{1}{\eta\sqrt{\pi}} (e^{-(x+8)^2/\eta^2} + e^{-(x+4)^2/\eta^2}) \text{ , με } \eta = 0.2.$$



Μη γραμμικές Εξισώσεις Collocation

Γενικός μη γραμμικός πολυωνυμικός όρος

Λήμμα. Οι elemental εξισώσεις Collocation για κάθε μη γραμμικό όρο της μορφής

$$(u^{(m)}(x, t))^{m_\ell} (u^{(n)}(x, t))^{n_\ell} \quad m, n = 0, 1, 2$$

$$m_\ell, n_\ell \in \mathbb{N}$$

μπορούν να γραφούν με γινόμενο Hadamard των πινάκων,

$$\left(C_j^{(m)} \alpha_j \right)^{\circ m_\ell} \circ \left(C_j^{(n)} \alpha_j \right)^{\circ n_\ell}$$

Μη γραμμικές Εξισώσεις Collocation

Γενικευμένη μη γραμμική εξίσωση Fisher

Η γενικευμένη εξίσωση Fisher είναι μια μη γραμμική διαφορική, παραβολικού τύπου, η οποία χαρακτηρίζεται από έναν πυκνοεξαρτώμενο γραμμικό Συντελεστή Διάχυσης και περιγράφει κυρίως φαινόμενα Βιολογικής Εισβολής Πληθυσμών.

$$u_t = [(\lambda_0 u + \lambda_1)u_x]_x + \lambda_2 u - \lambda_3 u^2$$

$$D(u) = \lambda_0 u + \lambda_1$$

Μη γραμμικές Εξισώσεις Collocation

Γενικευμένη μη γραμμική εξίσωση Fisher: Σύστημα ΣΔΕ

$$\begin{aligned}
 C_j^{(0)} \begin{bmatrix} \dot{\alpha}_{2j-1} \\ \dot{\alpha}_{2j} \\ \dot{\alpha}_{2j+1} \\ \dot{\alpha}_{2j+2} \end{bmatrix} &= \lambda_0 \left[\left(C_j^{(1)} \begin{bmatrix} \alpha_{2j-1} \\ \alpha_{2j} \\ \alpha_{2j+1} \\ \alpha_{2j+2} \end{bmatrix} \right) \circ \left(C_j^{(1)} \begin{bmatrix} \alpha_{2j-1} \\ \alpha_{2j} \\ \alpha_{2j+1} \\ \alpha_{2j+2} \end{bmatrix} \right) + \left(C_j^{(0)} \begin{bmatrix} \alpha_{2j-1} \\ \alpha_{2j} \\ \alpha_{2j+1} \\ \alpha_{2j+2} \end{bmatrix} \right) \circ \left(C_j^{(2)} \begin{bmatrix} \alpha_{2j-1} \\ \alpha_{2j} \\ \alpha_{2j+1} \\ \alpha_{2j+2} \end{bmatrix} \right) \right] \\
 &\quad + \lambda_1 C_j^{(2)} \begin{bmatrix} \alpha_{2j-1} \\ \alpha_{2j} \\ \alpha_{2j+1} \\ \alpha_{2j+2} \end{bmatrix} + \lambda_2 C_j^{(0)} \begin{bmatrix} \alpha_{2j-1} \\ \alpha_{2j} \\ \alpha_{2j+1} \\ \alpha_{2j+2} \end{bmatrix} - \lambda_3 \left(C_j^{(0)} \begin{bmatrix} \alpha_{2j-1} \\ \alpha_{2j} \\ \alpha_{2j+1} \\ \alpha_{2j+2} \end{bmatrix} \right) \circ \left(C_j^{(0)} \begin{bmatrix} \alpha_{2j-1} \\ \alpha_{2j} \\ \alpha_{2j+1} \\ \alpha_{2j+2} \end{bmatrix} \right)
 \end{aligned}$$

$$\dot{\mathbf{a}} = C(\mathbf{a})$$

$$C(\mathbf{a}) := C^{(0)-1} \left[\lambda_0 (C^{(1)} \mathbf{a} \circ C^{(1)} \mathbf{a} + C^{(0)} \mathbf{a} \circ C^{(2)} \mathbf{a}) + \lambda_1 C^{(2)} \mathbf{a} + \lambda_2 C^{(0)} \mathbf{a} - \lambda_3 C^{(0)} \mathbf{a} \circ C^{(0)} \mathbf{a} \right]$$

Μη γραμμικές Εξισώσεις Collocation

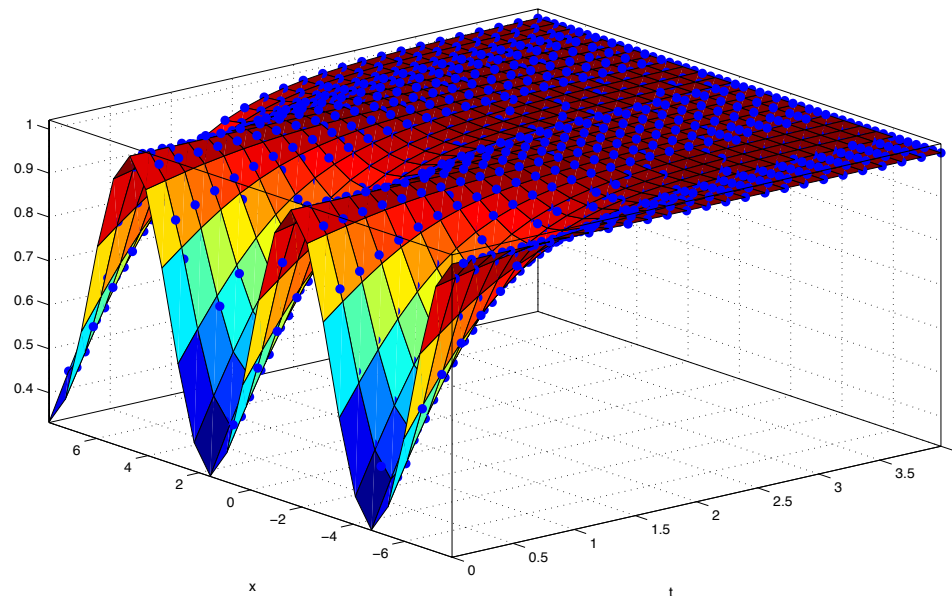
Γενικευμένη μη γραμμική εξίσωση Fisher: Αριθμητικά Αποτελέσματα

Πρόβλημα 1.

$$u_t = [(1 - u)u_x]_x + 2u - 2u^2, \quad -5\pi/2 \leq x \leq 5\pi/2, \quad 0 \leq t \leq T$$

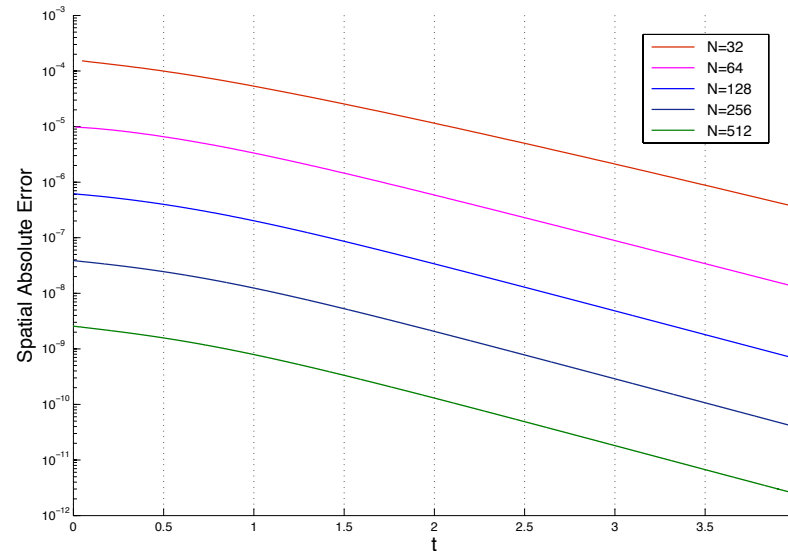
$$u_x\left(\frac{-5\pi}{2}, t\right) = 0, \quad u_x\left(\frac{5\pi}{2}, t\right) = 0, \quad u(x, 0) = \frac{1}{3} [2 + \sin(-x)]$$

Αναλυτική Λύση $u(x, t) = \frac{1}{3} \left[\frac{e^{-t}(3e^{2t} + 1 + 2\sin(-x))}{e^t + e^{-t}} \right]$



Μη γραμμικές Εξισώσεις Collocation

Γενικευμένη μη γραμμική εξίσωση Fisher: Αριθμητικά Αποτελέσματα



N	Spatial Absolute Error at $t = \Delta t$			Spatial Order of Convergence			Time (sec)		
	SSP(4,3)	SSP(3,3)	RK4	SSP(4,3)	SSP(3,3)	RK4	SSP(4,3)	SSP(3,3)	RK4
32	1.53e-04	1.56e-04	1.54e-04	-	-	-	0.01	0.03	0.02
64	9.85e-06	9.89e-06	9.87e-06	3.95	3.98	3.97	0.05	0.05	0.06
128	6.20e-07	6.20e-07	6.20e-07	3.99	3.99	3.99	0.14	0.20	0.29
256	3.88e-08	3.89e-08	3.88e-08	4.00	4.00	3.99	0.72	1.07	1.42
512	2.56e-09	2.56e-09	2.55e-09	3.93	3.93	3.92	4.28	6.48	7.87

Μη γραμμικές Εξισώσεις Collocation

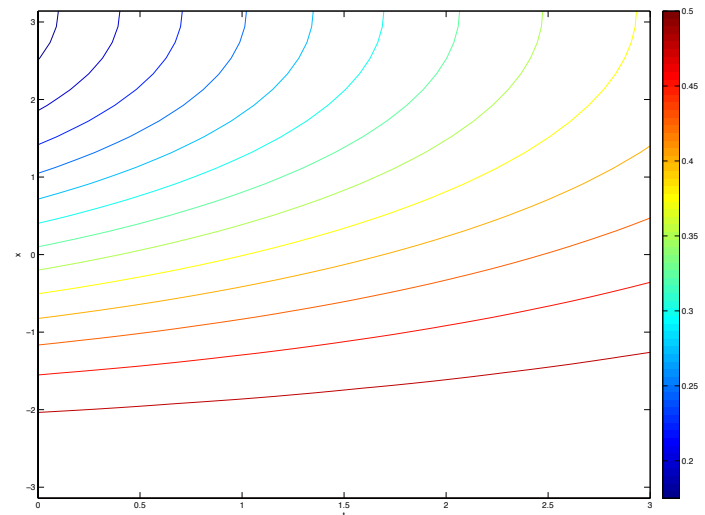
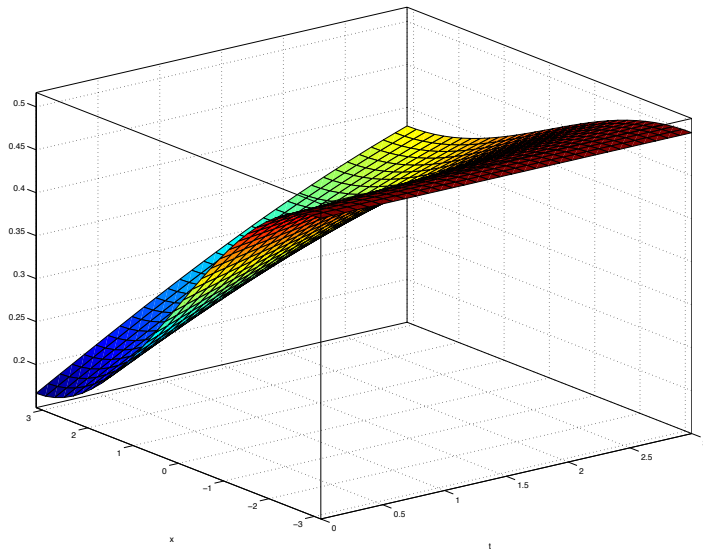
Γενικευμένη μη γραμμική εξίσωση Fisher: Αριθμητικά Αποτελέσματα

Πρόβλημα 2.

$$u_t = [(1 - 2u)u_x]_x + \frac{1}{2}u - u^2, \quad -\pi \leq x \leq \pi, \quad 0 \leq t \leq T$$

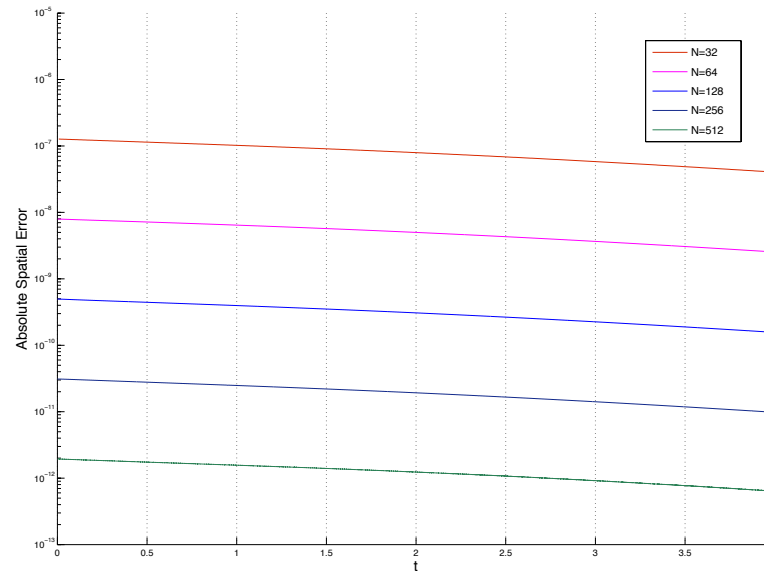
$$u_x(-\pi, t) = 0, \quad u_x(\pi, t) = 0, \quad u(x, 0) = \frac{1}{2} - \frac{1}{6} \left(1 + \sin \frac{x}{2}\right)$$

Αναλυτική Λύση $u(x, t) = \frac{1}{2} - \frac{1}{3} \left(1 + \sin \frac{x}{2}\right) \left(1 + e^{\frac{t}{2}}\right)^{-1}$



Μη γραμμικές Εξισώσεις Collocation

Γενικευμένη μη γραμμική εξίσωση Fisher: Αριθμητικά Αποτελέσματα



N	<i>Spatial Absolute Error at $t = \Delta t$</i>			<i>Spatial Order of Convergence</i>			<i>Time (sec)</i>		
	SSP(4,3)	SSP(3,3)	RK4	SSP(4,3)	SSP(3,3)	RK4	SSP(4,3)	SSP(3,3)	RK4
32	1.27e-07	1.27e-07	1.27e-07	-	-	-	0.18	0.27	0.31
64	7.94e-09	7.94e-09	7.94e-09	3.99	3.99	3.99	0.72	1.10	1.31
128	4.96e-10	4.96e-10	4.96e-10	3.99	3.99	3.99	3.33	5.06	5.95
256	3.10e-11	3.10e-11	3.10e-11	3.99	3.99	3.99	26.23	19.52	30.81
512	1.94e-12	1.94e-12	1.94e-12	3.99	4.00	4.00	99.69	151.78	175.80

Μη γραμμικές Εξισώσεις Collocation

Γενικευμένη μη γραμμική εξίσωση KPP

$$u_t = \mathcal{L}[u] := [(\lambda_1 u + \lambda_0) u_x]_x + \sum_{k=1}^M \lambda_{k+1} u^k$$

$$u_x(a, t) = 0 \quad , \quad u_x(b, t) = 0$$

$$\begin{aligned} \sum_{\ell=2j-1}^{2j+2} \dot{\alpha}_\ell(t) \phi_\ell(\bar{\sigma}_i) &= \left(\lambda_0 + \lambda_1 \sum_{\ell=2j-1}^{2j+2} \alpha_\ell(t) \phi_\ell(\bar{\sigma}_i) \right) \cdot \sum_{\ell=2j-1}^{2j+2} \alpha_\ell(t) \phi_\ell''(\bar{\sigma}_i) + \\ &+ \lambda_1 \left(\sum_{\ell=2j-1}^{2j+2} \alpha_\ell(t) \phi_\ell'(\bar{\sigma}_i) \right)^2 + \sum_{k=1}^M \lambda_{k+1} \left(\sum_{\ell=2j-1}^{2j+2} \alpha_\ell(t) \phi_\ell(\bar{\sigma}_i) \right)^k \end{aligned}$$

$$C_0 \dot{\alpha} = \lambda_0 C_2 \alpha + \lambda_1 (C_0 \alpha) \circ (C_2 \alpha) + \lambda_1 (C_1 \alpha)^{\circ 2} + \sum_{k=1}^M \lambda_{k+1} (C_0 \alpha)^{\circ k}$$

Μη γραμμικές Εξισώσεις Collocation

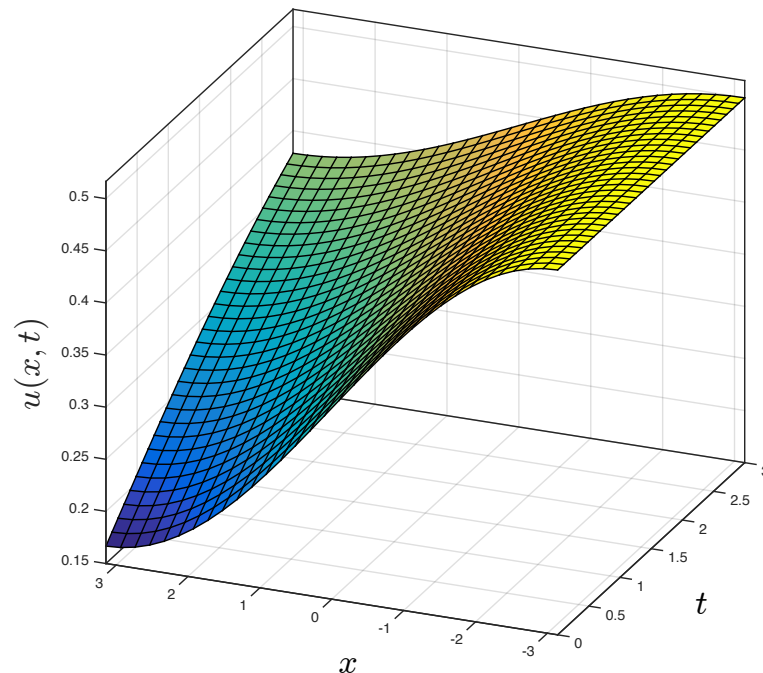
Γενικευμένη μη γραμμική εξίσωση KPP: Αριθμητικά Αποτελέσματα

Πρόβλημα 1.

$$\begin{cases} u_t = [(1 - 2u)u_x]_x + \frac{1}{2}u - u^2 \\ u_x(-\pi, t) = 0, \quad u_x(\pi, t) = 0 \\ u(x, 0) = \frac{1}{2} - \frac{1}{6}(1 + \sin \frac{x}{2}) \end{cases}$$

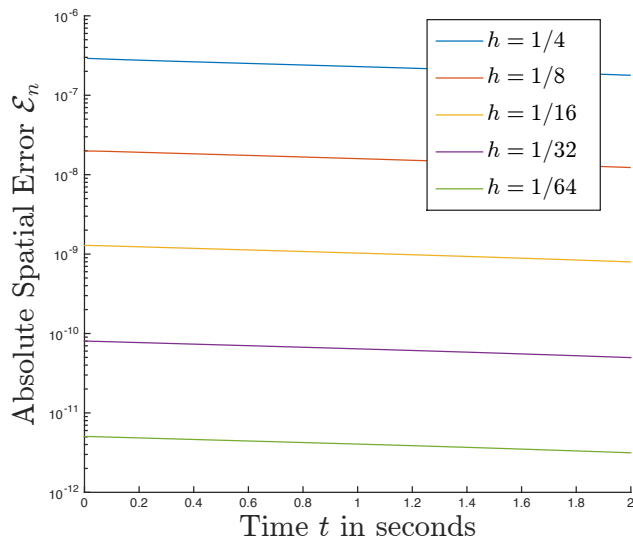
Αναλυτική Λύση:

$$u(x, t) = \frac{1}{2} - \frac{1}{3}(1 + \sin \frac{x}{2})(1 + e^{\frac{t}{2}})^{-1}$$



Μη γραμμικές Εξισώσεις Collocation

Γενικευμένη μη γραμμική εξίσωση KPP: Αριθμητικά Αποτελέσματα



Αποτελέσματα για την SSP(4,3)

h	Error Norm	HC O.o.c	Time for $t = 2$
1/4	2.91e-07	-	0.07
1/8	1.97e-08	3.88	0.26
1/16	1.28e-09	3.94	1.19
1/32	8.01e-11	3.99	5.22
1/64	5.05e-12	3.98	28.38

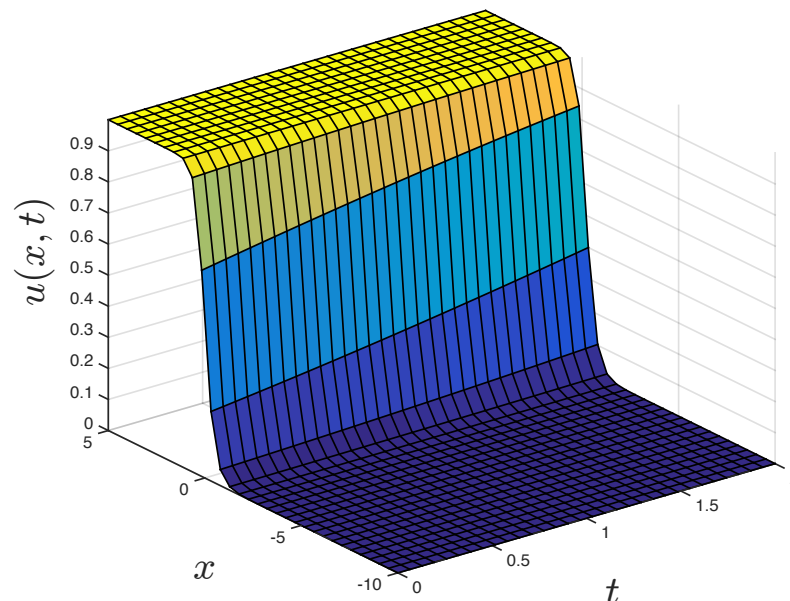
Μη γραμμικές Εξισώσεις Collocation

Γενικευμένη μη γραμμική εξίσωση KPP: Αριθμητικά Αποτελέσματα

Πρόβλημα 1.

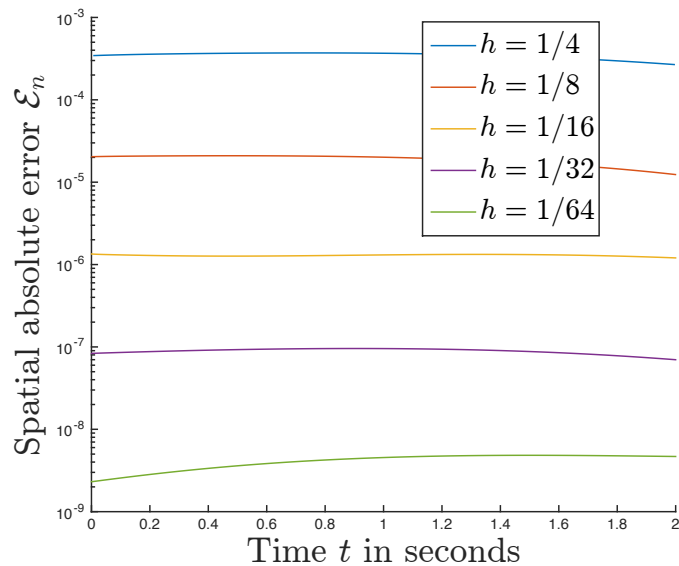
$$\left\{ \begin{array}{l} u_t = \frac{1}{100} u_{xx} + \frac{1}{4} u(1 - u^3) \\ u_x(-10, t) = 0, \quad u_x(5, t) = 0 \\ u(x, 0) = 1 + (2^{3/2} - 1)e^{(-15\sigma_1 x)^{-2/3}} \end{array} \right.$$

Αναλυτική Λύση: $u(x, t) = 1 + (2^{3/2} - 1)e^{-\frac{3}{2}\sigma_1(10x+2\lambda t)^{-2/3}}$ $\sigma_1 = \lambda - \sqrt{\lambda^2 - \frac{1}{4}}$ και $\lambda = \frac{7\sqrt{2}}{16\sqrt{5}}$.



Μη γραμμικές Εξισώσεις Collocation

Γενικευμένη μη γραμμική εξίσωση KPP: Αριθμητικά Αποτελέσματα



Αποτελέσματα για την SSP(4,3)

h	Error Norm	HC O.o.c	Time for $t = 2$
1/4	2.17e-04	-	0.10
1/8	1.42e-05	3.93	0.51
1/16	8.84e-07	4.00	2.85
1/32	5.52e-08	4.00	18.60
1/64	3.45e-09	4.00	134.71

Hermite Collocation – Interface Relaxation

Περιγραφή της μεθόδου

$$u_t = [(D(x)u_x)_x + \mathcal{L}(u)] + \mathcal{G}(u)$$

$$x \in [a, b] = \Omega, \quad t \in [0, T], \quad u(x, 0) = f(x), \quad u_x(a, t) = u_x(b, t) = 0$$

$$D = \begin{cases} \gamma & , \quad x \in [a, w] = \Omega_1 \\ 1 & , \quad x \in (w, b] = \Omega_2 \end{cases}, \quad \text{for } w \in (a, b)$$



Συνθήκες Διεπαφής

$$\lim_{x \rightarrow w^-} Du_x(x, t) = \lim_{x \rightarrow w^+} Du_x(x, t)$$

$$\lim_{x \rightarrow w^-} u(x, t) = \lim_{x \rightarrow w^+} u(x, t)$$

Hermite Collocation – Interface Relaxation

Η αλγοριθμική διαδικασία

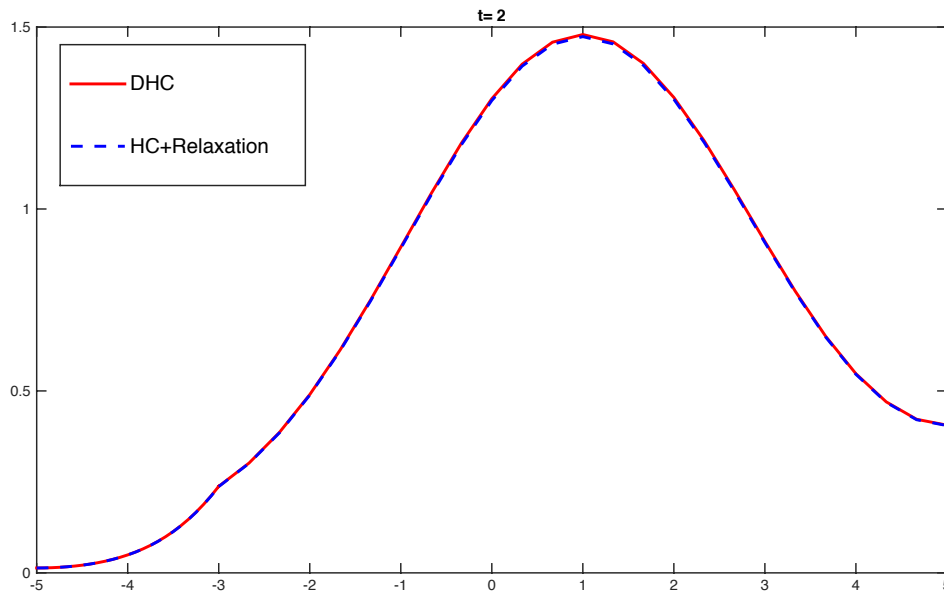
Two Step AVE-Method

- ① Χωρίζουμε το χωρίο Ω σε δύο υποχωρία Ω_1 , Ω_2 και διαλέγουμε τυχαίες λύσεις $u_1^{(0)}$, $u_2^{(0)}$ σε κάθε υποχωρίο αντίστοιχα.
- ②
$$g_1 = \beta_1 \frac{du_1^{2k}}{dx} \Big|_{x=w} + \frac{1-\beta_1}{\gamma} \frac{du_1^{2k}}{dx} \Big|_{x=w}, \quad g_2 = \gamma g_1$$
- ③ Λύση της εξίσωσης στο Ω_1 με $u_x(a,t) = 0, u_x(w,t) = g_1$
Λύση της εξίσωσης στο Ω_2 με $u_x(w,t) = g_2, u_x(b,t) = 0$
- ④
$$h_1 = \alpha_1 u_1^{2k+1} \Big|_{x=w} + (1-\alpha_1) u_2^{2k+1} \Big|_{x=w}, \quad h_2 = h_1$$
- ⑤ Λύση της εξίσωσης στο Ω_1 με $u_x(a,t) = 0, u(w,t) = h_1$
Λύση της εξίσωσης στο Ω_2 με $u(w,t) = h_2, u_x(b,t) = 0$

Hermite Collocation – Interface Relaxation

Αριθμητικά Αποτελέσματα

$$u_t = Du_{xx} + u, \quad x \in [-5, 5], \quad t \in [0, 4], \quad w = -3$$



$$\mathcal{E}_i = \frac{U_{dhc}^i - U_{rel}^i}{U_{dhc}^i}$$

h	$Error$	$O.o.c$
1/4	3.70e-03	-
1/8	1.68e-06	11.10
1/16	1.05e-07	3.99
1/32	6.57e-09	4.00
1/64	4.11e-10	3.99

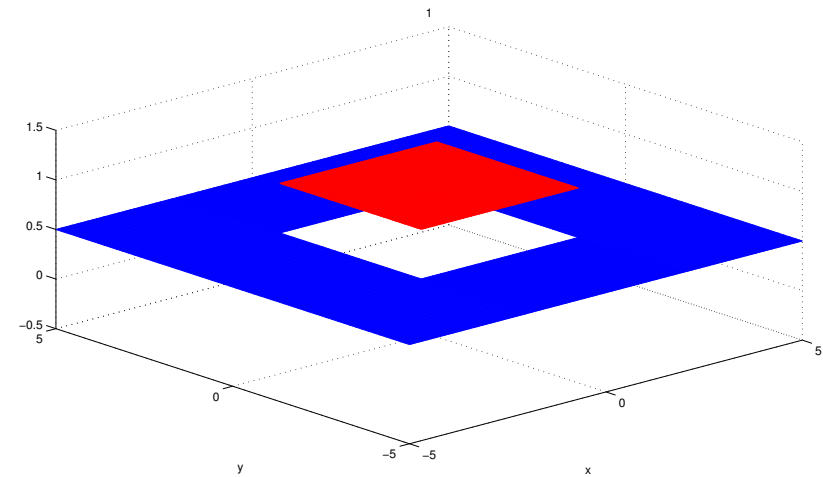
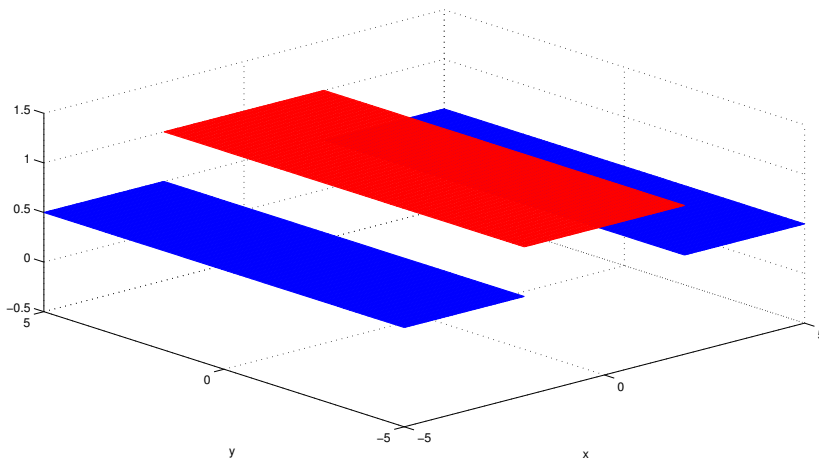
Derivative Discontinuous Hermite Collocation

Δύο χωρικές διαστάσεις

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla [D \nabla(u)] \quad , \quad u := u(x, y, t)$$

$$(x, y) \in [a, b]^2 \quad , \quad 0 \leq t \leq T$$

$$u(x, y, 0) = f(x, y) \quad , \quad \frac{\partial u}{\partial \eta} = 0$$



Derivative Discontinuous Hermite Collocation

Δύο χωρικές διαστάσεις: Stripes

Συντελεστής Διάχυσης
για Stripes πρόβλημα

$$D = \begin{cases} \gamma & , (x, y) \in [-4, -2] \times [-4, 4] \\ 1 & , (x, y) \in (-2, 2) \times [-4, 4] \\ \gamma & , (x, y) \in [2, 4] \times [-4, 4] \end{cases}$$

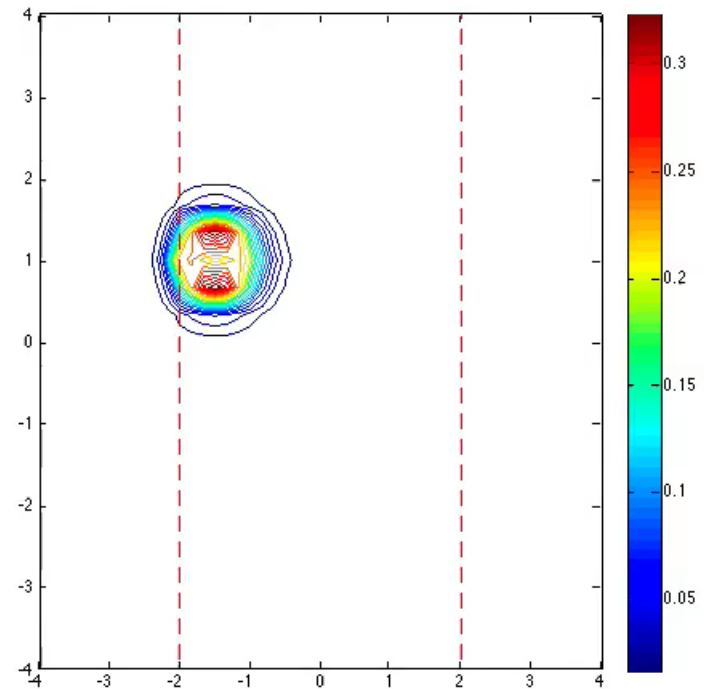
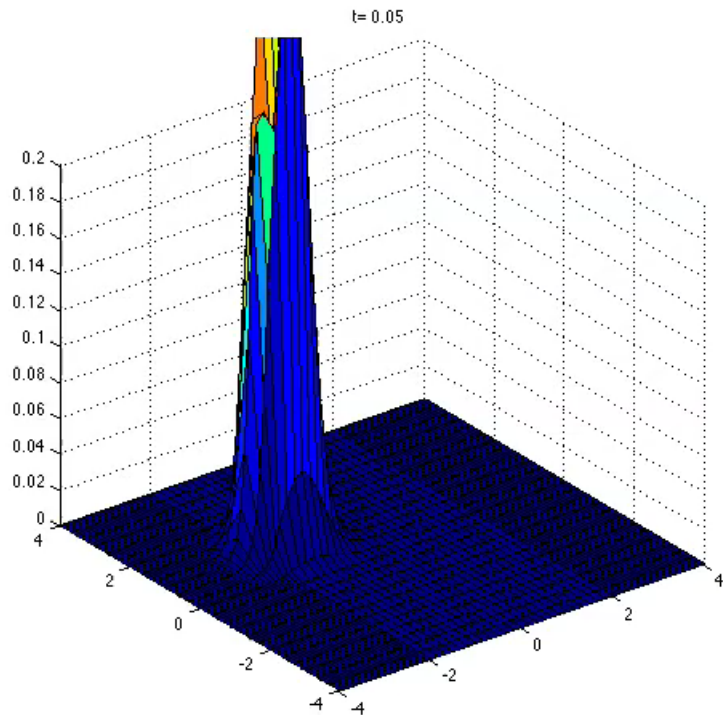
Σύστημα ΣΔΕ

$$\begin{aligned} \left(\tilde{C}_x^{(0)} \otimes C_y^{(0)} \right) \dot{\mathbf{a}} &= \left(D_x \tilde{C}_x^{(2)} \otimes C_y^{(0)} \right) \mathbf{a} + \left(D_x \tilde{C}_x^{(0)} \otimes C_y^{(2)} \right) \mathbf{a} \\ A_{00} \dot{\mathbf{a}} &= (A_{20} + A_{02}) \mathbf{a} \\ A_{00} \dot{\mathbf{a}} &= B \mathbf{a} \end{aligned}$$

$$D_x = \text{diag}(\gamma, \dots, \gamma, 1, \dots, 1, \gamma, \dots, \gamma) \in \mathbb{R}^{N_x}$$

Derivative Discontinuous Hermite Collocation

Δύο χωρικές διαστάσεις: *Stripes Linear* – Αριθμητικά Αποτελέσματα

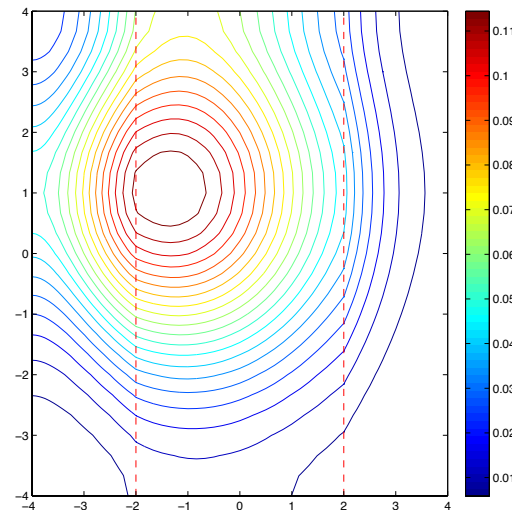
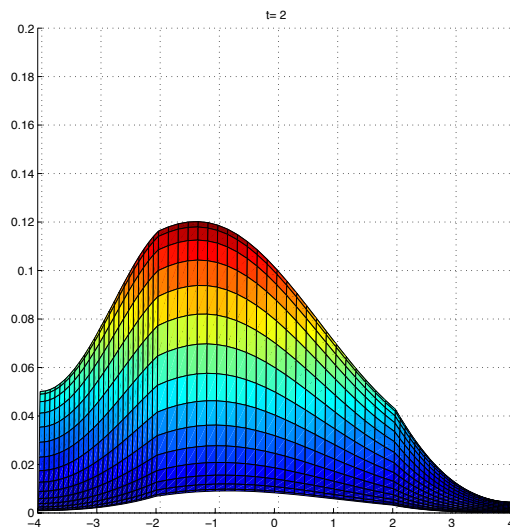


Derivative Discontinuous Hermite Collocation

Δύο χωρικές διαστάσεις: *Stripes Linear* – Αριθμητικά Αποτελέσματα

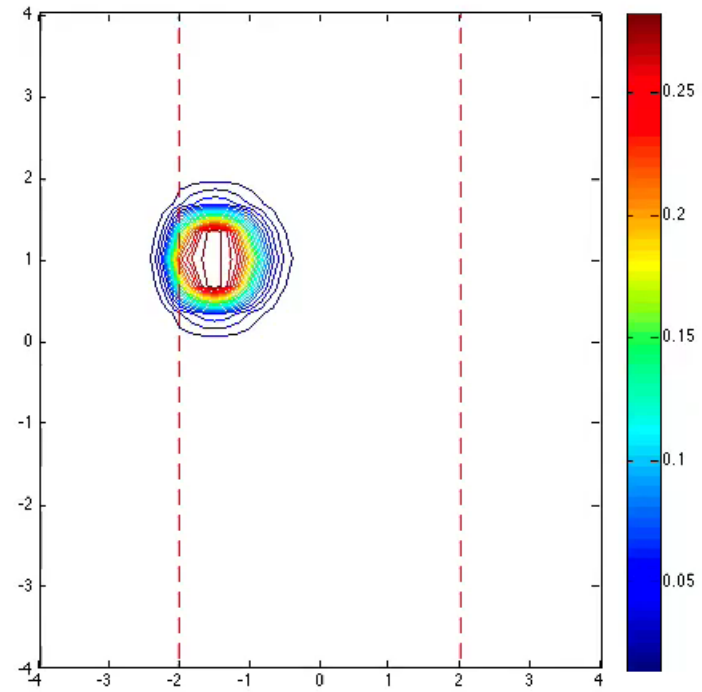
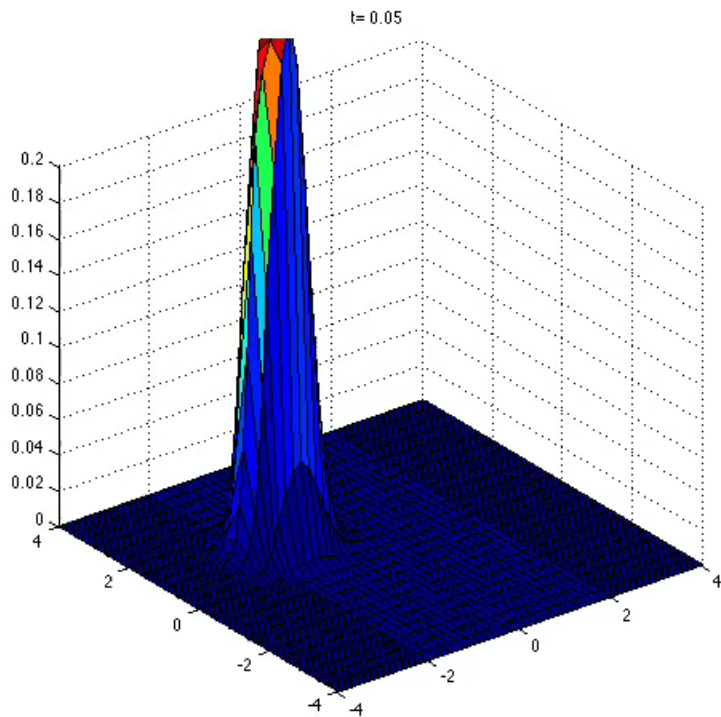
$$\tilde{u}_t = Du_{xx} + D\tilde{u}_{yy} \quad , \quad (x, y) \in [-4, 4]^2 \quad , \quad t \in [0, 2] \quad , \quad \tilde{u} = e^t u$$

(N_x, N_y)	Error	O.o.c.	Time (sec)
(32, 32)	3.59e-03	-	2.71
(64, 64)	1.02e-05	8.46	12.68
(128, 128)	6.88e-07	3.88	84.09
(256, 256)	4.38e-08	3.97	584.07
(512, 512)	2.75e-09	3.99	4342.55



Derivative Discontinuous Hermite Collocation

Δύο χωρικές διαστάσεις: *Stripes Non Linear* – Αριθμητικά Αποτελέσματα

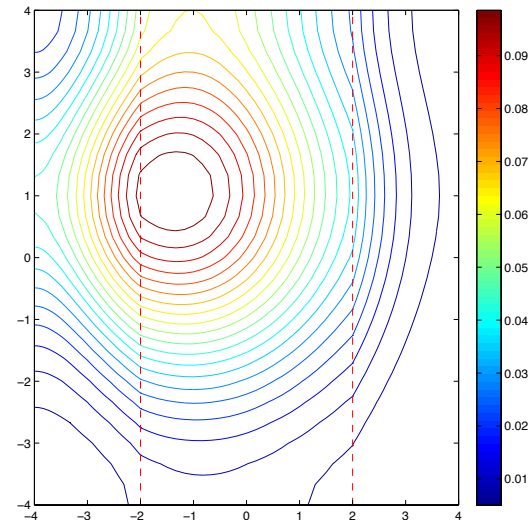
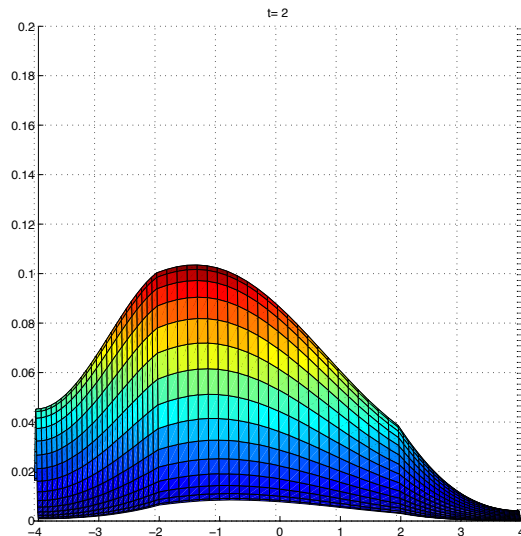


Derivative Discontinuous Hermite Collocation

Δύο χωρικές διαστάσεις: *Stripes Non Linear* – Αριθμητικά Αποτελέσματα

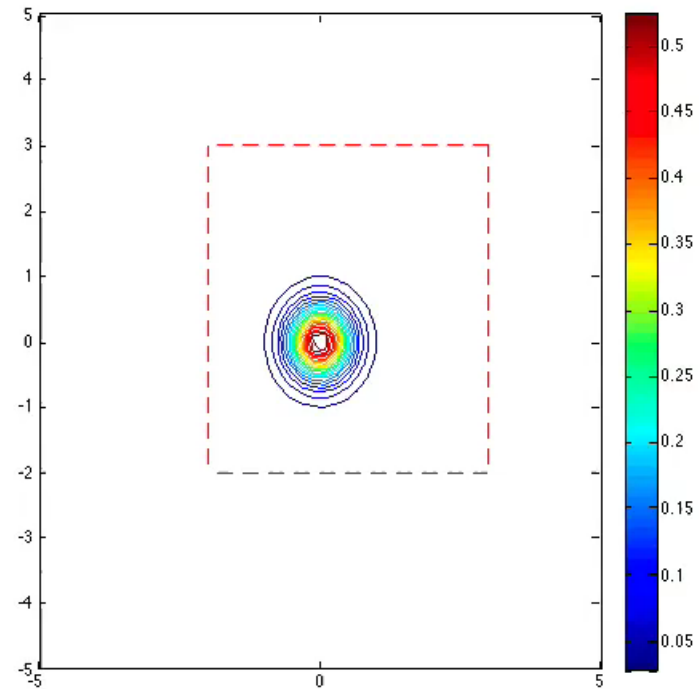
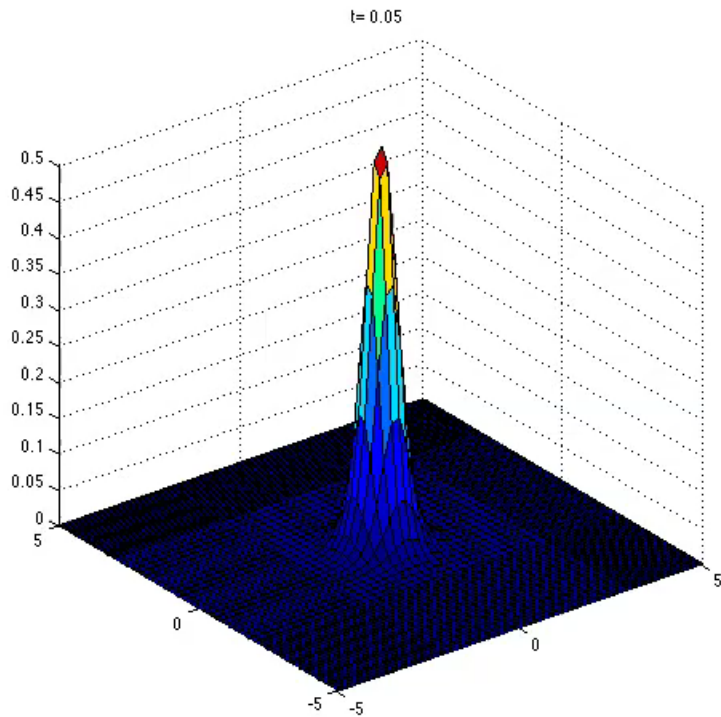
$$u_t = Du_{xx} + Du_{yy} + u - u^2, \quad (x, y) \in [-4, 4]^2, \quad t \in [0, 2]$$

(N_x, N_y)	Error	O.o.c.	Time (sec)
(32, 32)	2.98e-03	-	2.54
(64, 64)	7.33e-06	8.66	11.20
(128, 128)	4.89e-07	3.90	75.52
(256, 256)	3.10e-08	3.97	562.41
(512, 512)	1.94e-09	3.99	3959.62



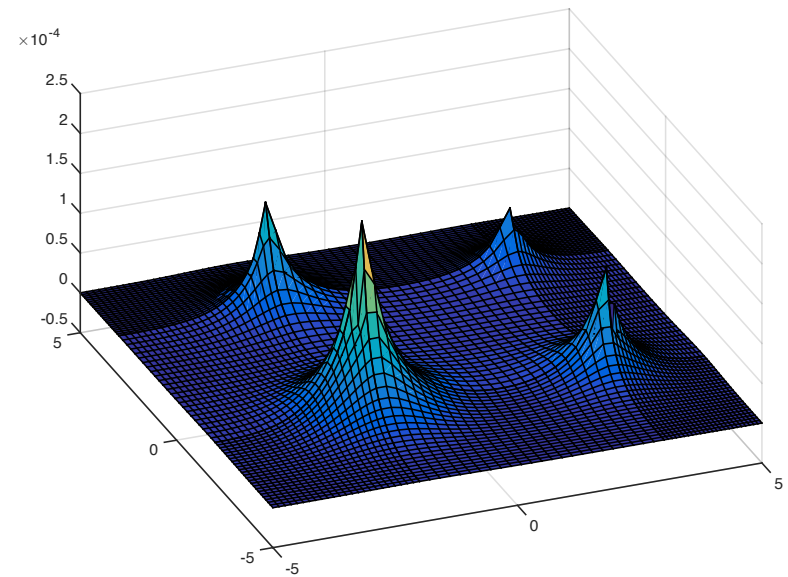
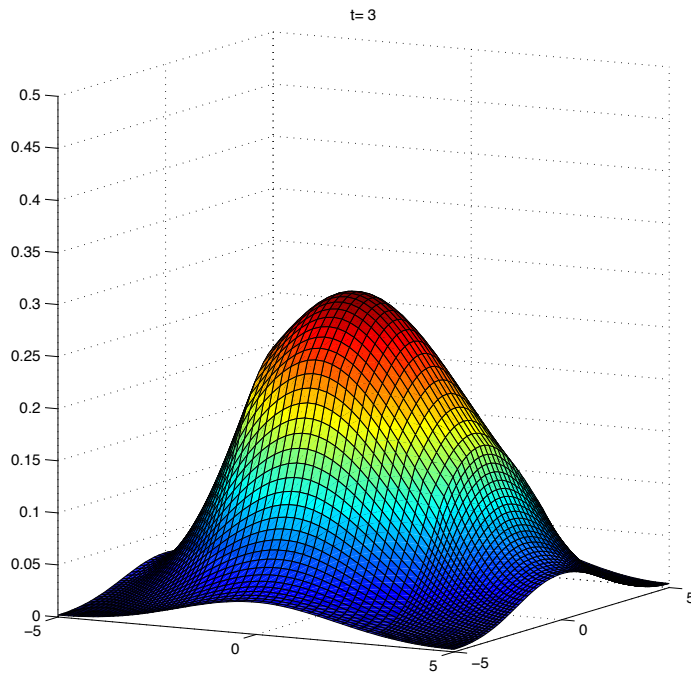
Derivative Discontinuous Hermite Collocation

Δύο χωρικές διαστάσεις: *Rectangular Linear* – Αριθμητικά Αποτελέσματα



Derivative Discontinuous Hermite Collocation

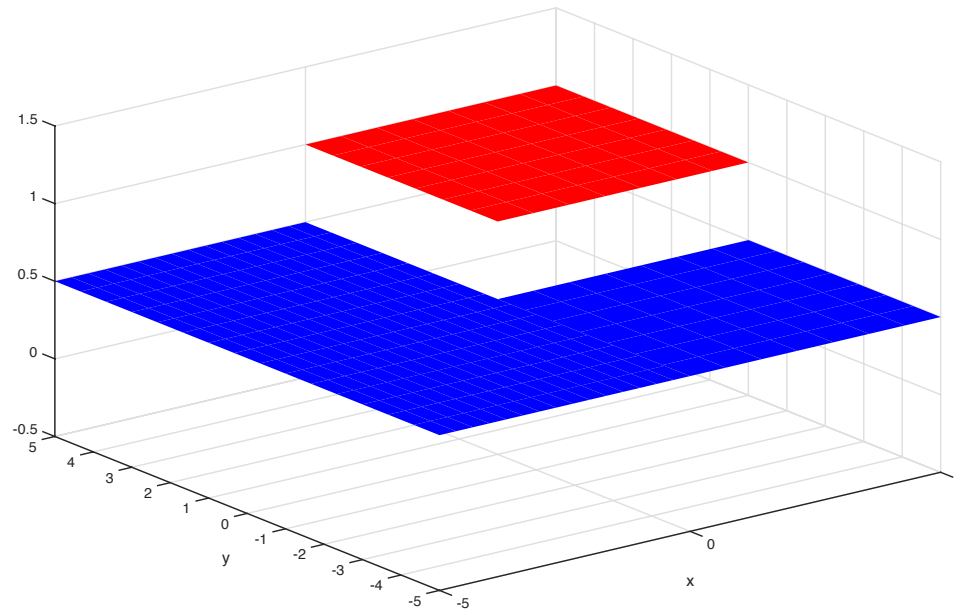
Δύο χωρικές διαστάσεις: *Rectangular Linear* – Αριθμητικά Αποτελέσματα



Derivative Discontinuous Hermite Collocation

Δύο χωρικές διαστάσεις: Simple Corner Problem

$$D = \begin{cases} 1 & , (x, y) \in (w, b] \times (w, b] \\ \gamma & , (x, y) \notin (w, b] \times (w, b] \end{cases}$$



Derivative Discontinuous Hermite Collocation

Δύο χωρικές διαστάσεις: Simple Corner Problem

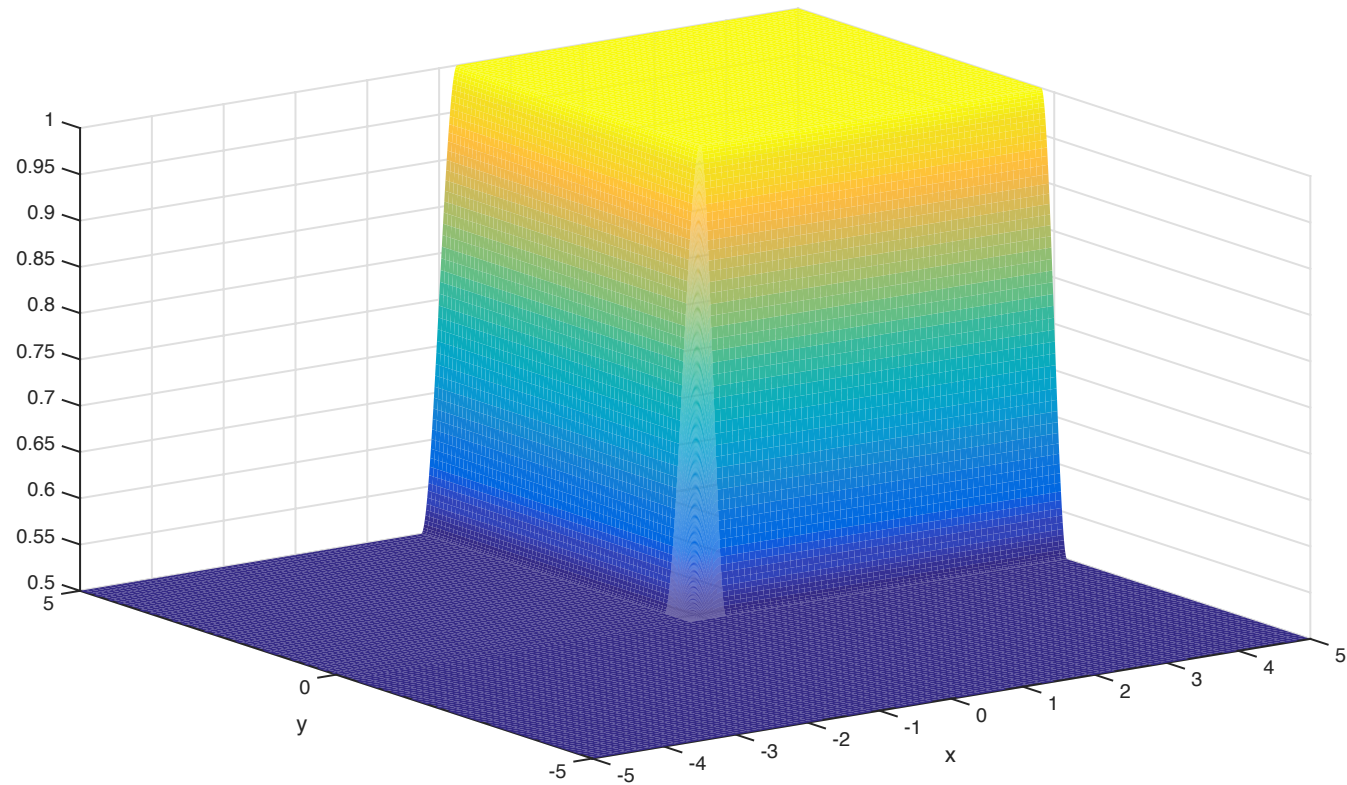
$$\tilde{D} = \begin{cases} 1 & , (x, y) \in (w + h, b] \times (w + h, b] \\ p(x) & , (x, y) \in (w - h, w + h] \times (w + h, b] \\ p(y) & , (x, y) \in (w + h, b] \times (w - h, w + h] \\ c(x, y) & , (x, y) \in (w - h, w + h] \times (w - h, w + h] \\ \gamma & , \text{οπουδήποτε αλλού} \end{cases}$$

$$c(x, y) = \sum_{i=0}^{i=3} \sum_{j=0}^{j=3} a_{ij} x^i y^j$$

$$p(x) = a_3 x^3 + a_2 x^2 + a_1 x + a_0$$

Derivative Discontinuous Hermite Collocation

Δύο χωρικές διαστάσεις: Simple Corner Problem

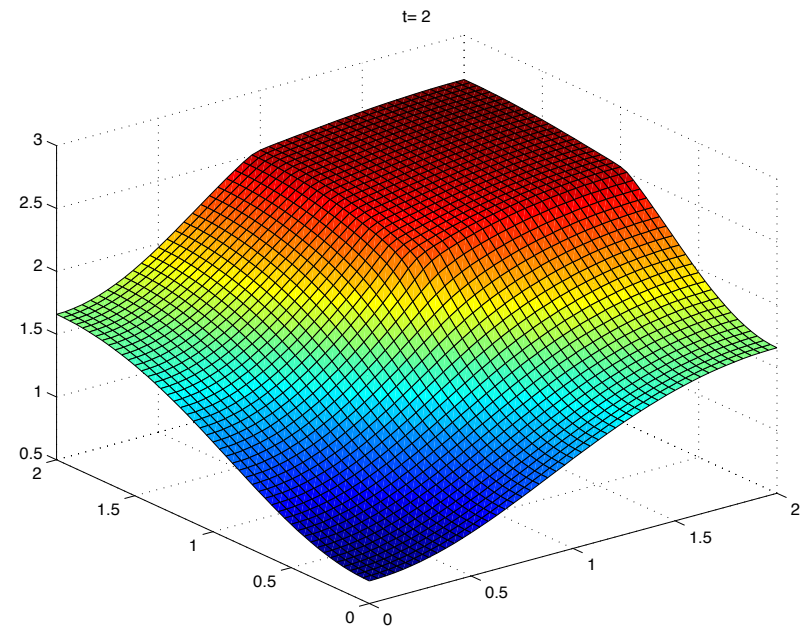


Derivative Discontinuous Hermite Collocation

Δύο χωρικές διαστάσεις: *Simple Corner Problem* – Αριθμ. Αποτελέσματα

$$u_t = (\tilde{D}u_x)_x, \quad (x, y) \in [0, 2] \times [0, 2], \quad t \in [0, 2], \quad w = 1$$

N_x, N_y	$Error$	$O.o.c.$	$Time$
(16, 16)	7.20e-03	-	1.58
(32, 32)	7.77e-06	9.85	6.03
(64, 64)	4.81e-07	4.01	46.64
(128, 128)	2.97e-08	4.01	465.33



Επικύρωση Αποτελεσμάτων

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = \nabla \cdot (\bar{D}(\bar{x}) \nabla \bar{c}) + \rho \bar{c} \left(1 - \frac{\bar{c}}{c_k}\right) - \bar{R}(\bar{c}, \bar{t}) - \bar{G}(\bar{c}, \bar{t})$$

$$\bar{D}(\bar{x}) = \begin{cases} D_g & , \quad \bar{x} \in \bar{\Omega}_g \text{ Grey Matter} \\ D_w & , \quad \bar{x} \in \bar{\Omega}_w \text{ White Matter} \end{cases}$$

Επικύρωση Αποτελεσμάτων

Εφαρμογή σε προβλήματα Ιατρικής

$$\bar{R}(\bar{c}, \bar{t}) = \begin{cases} R_{\text{eff}} k_R(\bar{t}) \bar{c} & , \bar{t} \in (\bar{T}_{R_0}, \bar{T}_{R_1}] \\ 0 & , \bar{t} \notin (\bar{T}_{R_0}, \bar{T}_{R_1}] \end{cases} \quad \bar{G}(\bar{c}, \bar{t}) = \begin{cases} k_G(\bar{t}) \bar{c} & , \bar{t} \in (\bar{T}_{G_0}, \bar{T}_{G_1}] \\ 0 & , \bar{t} \notin (\bar{T}_{G_0}, \bar{T}_{G_1}] \end{cases}$$

$$R_{\text{eff}} = nd \left\{ \alpha + 2\beta d \left[g(\mu\tau) + 2 \left(\frac{\cosh(\mu\tau) - 1}{(\mu\tau)^2} \right) h_n(\phi) \right] \right\}$$

$$g(\mu\tau) = \frac{\mu\tau - 1 + e^{-\mu\tau}}{(\mu\tau)^2} \quad \text{and} \quad h_n(\phi) = \frac{(n-1-n\phi+\phi^n)\phi}{n(1-\phi)^2}$$

$$\phi = e^{-\mu(\tau+\Delta\tau)}$$

Επικύρωση Αποτελεσμάτων

Εφαρμογή σε προβλήματα Ιατρικής

$$x = \sqrt{\frac{\rho}{D_w}} \bar{x} \quad , \quad t = \rho \bar{t} \quad , \quad c(x, t) = \frac{1}{c_k} \bar{c} \left(\sqrt{\frac{\rho}{D_w}} \bar{x}, \rho \bar{t} \right) \quad ,$$

$$D = \frac{\bar{D}}{D_w} \quad , \quad R = R(t) = \frac{R_{\text{eff}} k_R(\rho \bar{t})}{\rho} \quad , \quad G = G(t) = \frac{k_G(\rho \bar{t})}{\rho}$$

$$\text{και} \quad f(x) = \frac{1}{c_k} \bar{f} \left(\sqrt{\frac{\rho}{D_w}} \bar{x} \right)$$

αρχική πηγή κυττάρων $N_0 = \int \bar{f}(\bar{x}) d\bar{x}$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla c) + c(1 - c) - Rc - Gc$$

Επικύρωση Αποτελεσμάτων

Εφαρμογή σε προβλήματα Ιατρικής

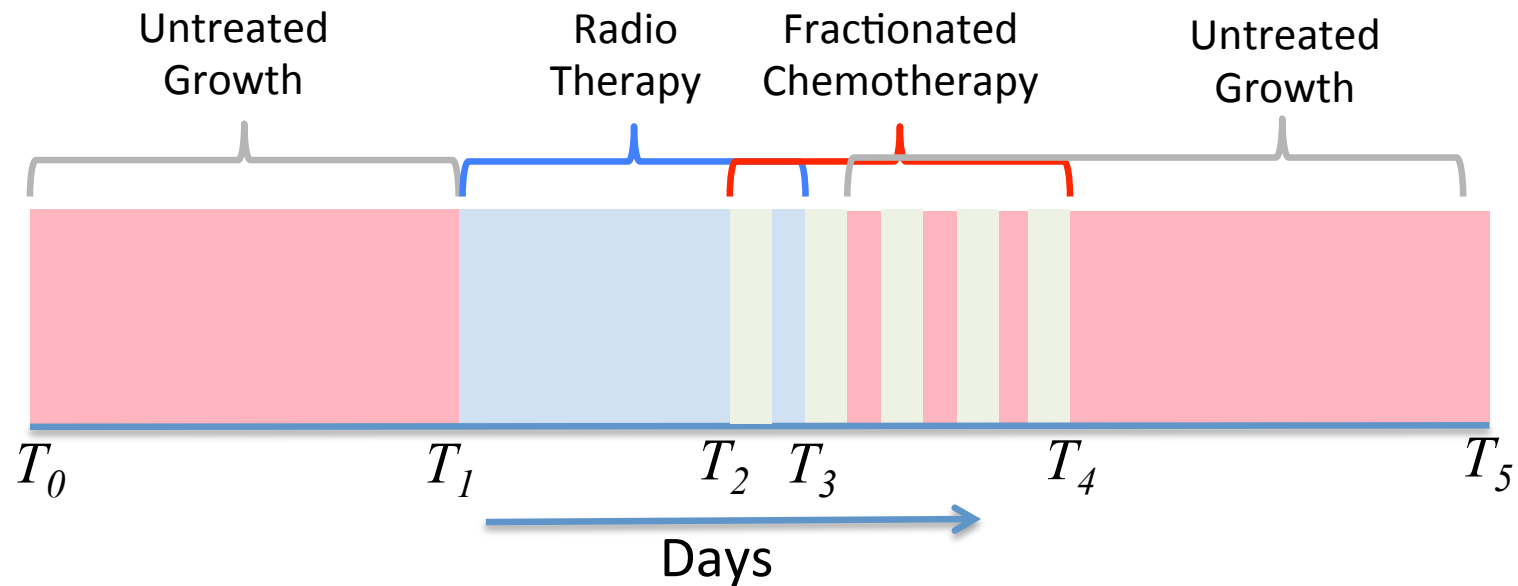
$$0 = T_0 < T_1 < T_2 \leq T_3 < T_4 < T_5 = T$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \rho_\ell c - c^2, \quad x \in [a, b], \quad T_{\ell-1} < t \leq T_\ell \\ \frac{\partial c}{\partial x}(a, t) = \frac{\partial c}{\partial x}(b, t) = 0 \\ c(x, 0) = c_\ell(x) \end{array} \right.$$

$$\rho_\ell = \rho_\ell(t) = \left\{ \begin{array}{ll} 1 & , \quad T_0 < t \leq T_1 \\ 1 - R & , \quad T_1 < t \leq T_2 \\ 1 - R - G & , \quad T_2 < t \leq T_3 \\ 1 - G & , \quad T_3 < t \leq T_4 \\ 1 & , \quad T_4 < t \leq T_5 \end{array} \right. \quad c_\ell(x) = \left\{ \begin{array}{ll} f(x) & , \quad T_0 < t \leq T_1 \\ c(x, T_1) & , \quad T_1 < t \leq T_2 \\ c(x, T_2) & , \quad T_2 < t \leq T_3 \\ c(x, T_3) & , \quad T_3 < t \leq T_4 \\ c(x, T_4) & , \quad T_4 < t \leq T_5 \end{array} \right. .$$

Επικύρωση Αποτελεσμάτων

Εφαρμογή σε προβλήματα Ιατρικής

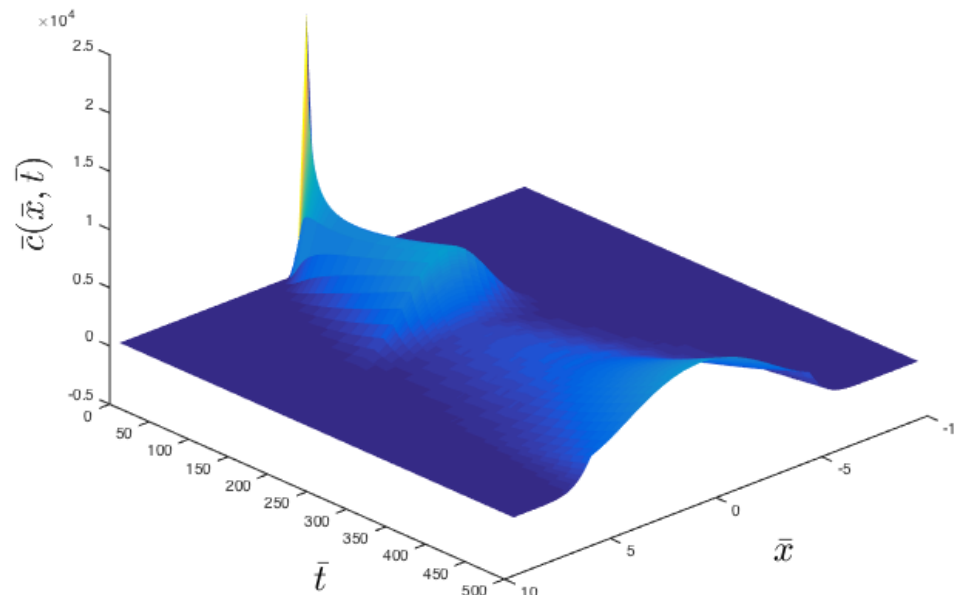


Επικύρωση Αποτελεσμάτων

Εφαρμογή σε προβλήματα Ιατρικής: Αριθμητικά Αποτελέσματα

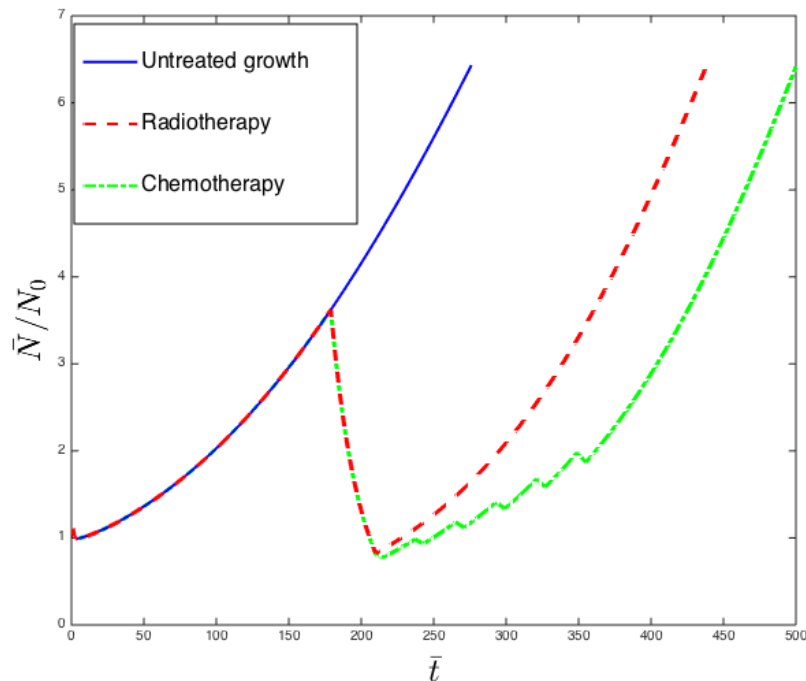
Πρόβλημα 1.

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{a} = -10 \text{ cm}, \bar{b} = 10 \text{ cm}, \bar{w}_1 = -6 \text{ cm}, \bar{w}_2 = 8 \text{ cm} \\ \bar{\Omega}_g = [\bar{a}, \bar{w}_1] \cup (\bar{w}_2, \bar{b}] \text{ and } \bar{\Omega}_w = [\bar{w}_1, \bar{w}_2] \\ D_g = 0.0013 \text{ cm}^2\text{day}^{-1}, D_w = 0.0065 \text{ cm}^2\text{day}^{-1} \\ \bar{\rho} = 0.012 \text{ day}^{-1}, N_0 = 2 \times 10^4 \text{ cells} \end{array} \right.$$



Επικύρωση Αποτελεσμάτων

Εφαρμογή σε προβλήματα Ιατρικής: Αριθμητικά Αποτελέσματα



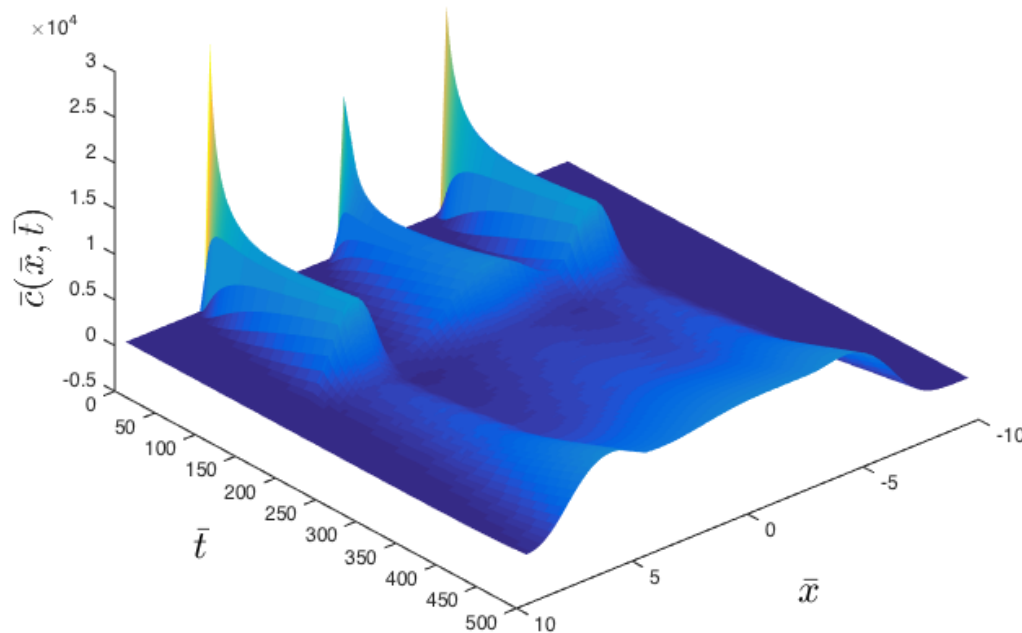
h	Error	O.o.c.	Time (sec)
1/8	3.5687e-06	-	0.24
1/16	2.3357e-07	3.93	0.30
1/32	1.4760e-08	3.98	0.42
1/64	9.2474e-10	3.99	0.88
1/128	5.6156e-11	4.04	1.55

Επικύρωση Αποτελεσμάτων

Εφαρμογή σε προβλήματα Ιατρικής: Αριθμητικά Αποτελέσματα

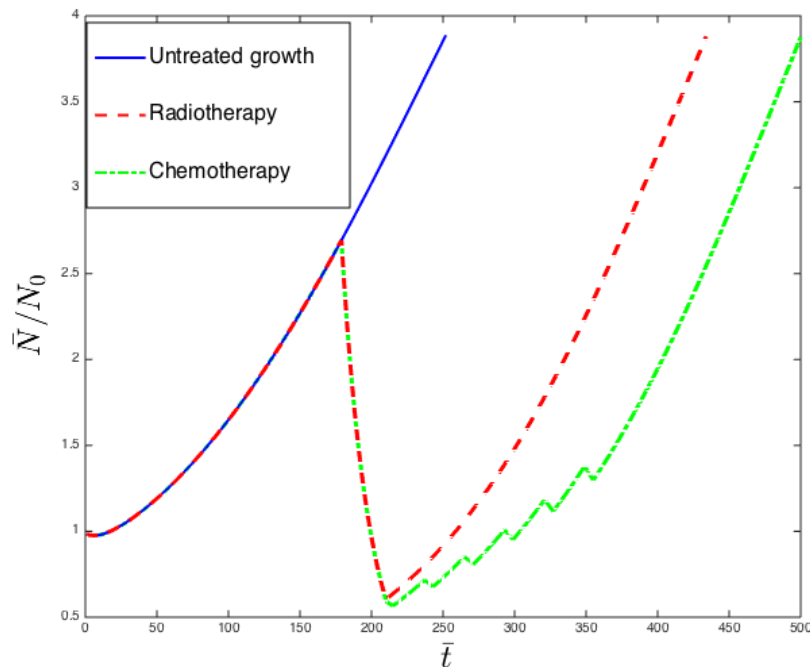
Πρόβλημα 2.

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{a} = -10 \text{ cm}, \bar{b} = 10 \text{ cm}, \bar{w}_1 = -4 \text{ cm}, \bar{w}_2 = 6 \text{ cm} \\ \bar{\Omega}_g = [\bar{a}, \bar{w}_1) \cup (\bar{w}_2, \bar{b}] \text{ and } \bar{\Omega}_w = [\bar{w}_1, \bar{w}_2] \\ D_g = 0.0013 \text{ cm}^2\text{day}^{-1}, D_w = 0.0065 \text{ cm}^2\text{day}^{-1} \\ \bar{\rho} = 0.012 \text{ day}^{-1}, N_0 = 2 \times 10^4 \text{ cells} \end{array} \right.$$



Επικύρωση Αποτελεσμάτων

Εφαρμογή σε προβλήματα Ιατρικής: Αριθμητικά Αποτελέσματα

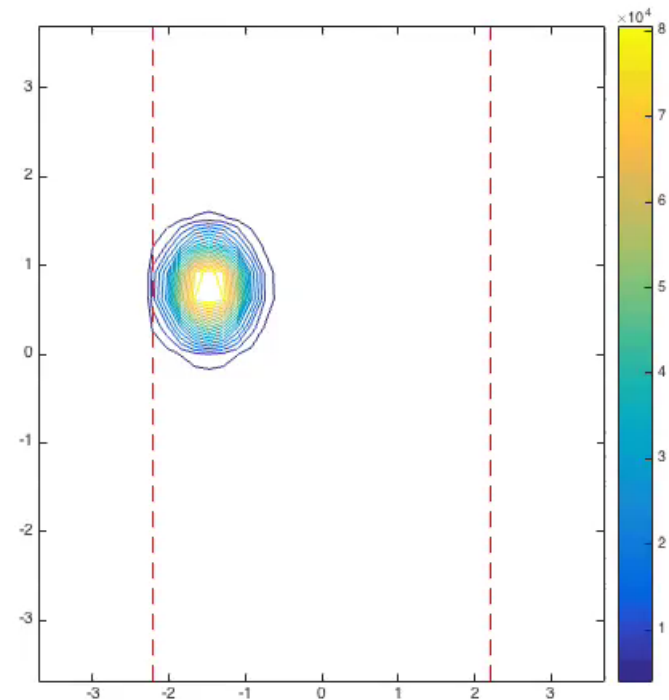
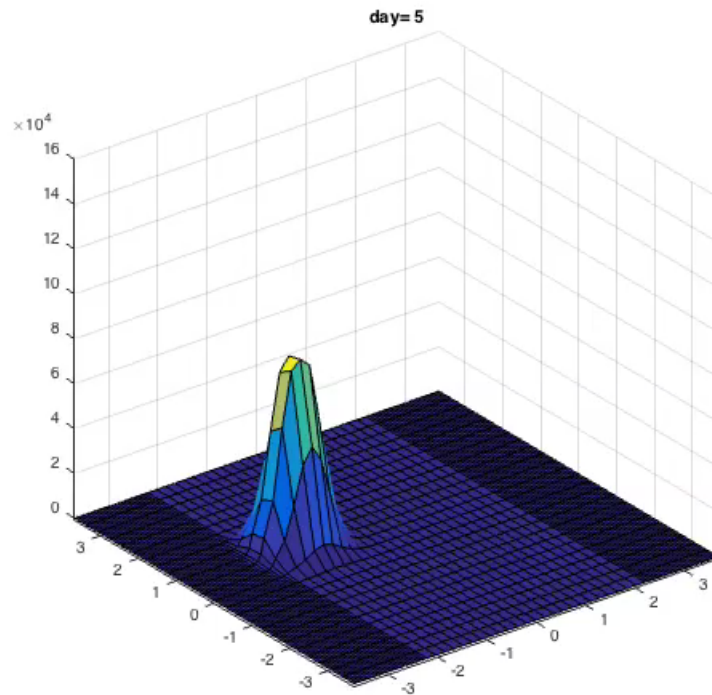


h	Error	O.o.c.	Time (sec)
1/8	5.3380e-06	-	0.22
1/16	3.4585e-07	3.94	0.28
1/32	2.1802e-08	3.98	0.40
1/64	1.3655e-09	3.99	0.90
1/128	8.5010e-11	4.00	1.52

Επικύρωση Αποτελεσμάτων

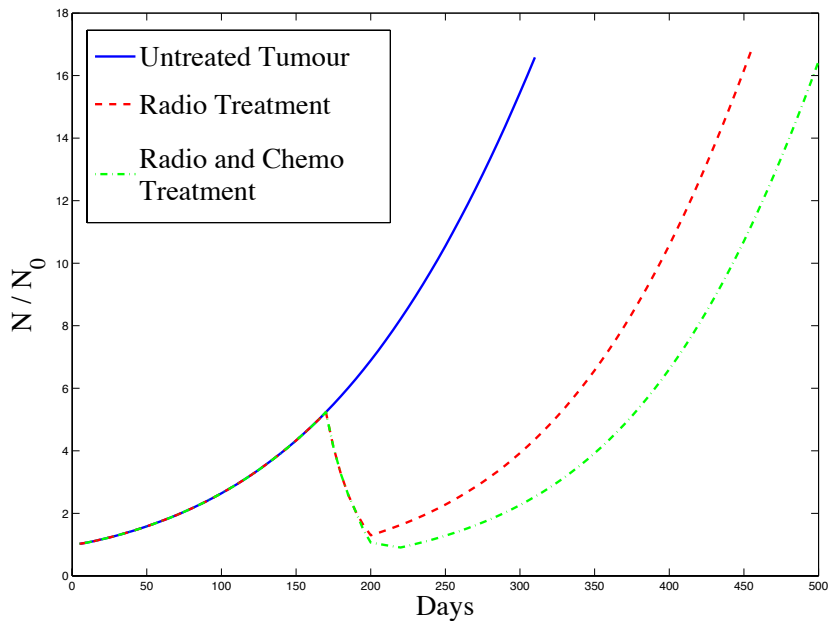
Εφαρμογή σε προβλήματα Ιατρικής: Αριθμητικά Αποτελέσματα

$$c_t = \nabla \cdot (Dc) + c(1 - c) - R(c) - G(c)$$



Επικύρωση Αποτελεσμάτων

Εφαρμογή σε προβλήματα Ιατρικής: Αριθμητικά Αποτελέσματα



$h_x = h_y$	Error	O.o.c.	Time (sec)
1/4	4.8857e-03	-	1.74
1/8	2.5397e-05	7.5877	9.05
1/16	1.9079e-06	3.7347	64.77
1/32	1.1629e-07	4.0361	480.96
1/64	7.7066e-09	3.9155	4190.50

Συμπεράσματα

- ✓ Αναπτύξαμε την ασυνεχή Μέθοδο Collocation (dDHC) τετάρτης τάξεως για γραμμικά και μη γραμμικά προβλήματα σε 1+1, 2+1 διαστάσεις
- ✓ Συνδυάσαμε την dDHC με χρονικά σχήματα υψηλής τάξης
- ✓ Αναπτύξαμε την μέθοδο Hermite Collocation – Interface Relaxation
- ✓ Αναπτύξαμε την υβριδική μέθοδο Continuous Diffusion Coeff.
- ✓ Εφαρμόσαμε τις μεθόδους σε προβλήματα Βιολογικής Εισβολής και Ιατρικής