

# Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2015



## ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

Πλατφόρμα προηγμένων μαθηματικών μεθόδων και λογισμικού για την επίλυση προβλημάτων πολλαπλών πεδίων (multi physics, multidomain) σε σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές: Εφαρμογή σε προβλήματα Περιβαλλοντικής Μηχανικής και Ιατρικής (MATENVMED- MIS 379416)

### Δράση 2.4

Μέθοδοι Μετασχηματισμού Φωκά



## Περιεχόμενα

<b>1 Σκοπός</b>	<b>3</b>
1.1 Μέθοδος Φωκά για παραβολικά γραμμικά προβλήματα, με χωρικές και χρονικές ασυνέχειες, στις 1 + 1 διαστάσεις . . . . .	3
1.2 Εισαγωγή στις δύο χωρικές διαστάσεις και σε μη-γραμμικά προβλήματα . . . . .	4
<b>2 Μεθοδολογία</b>	<b>5</b>
2.1 Μέθοδος Φωκά για παραβολικά γραμμικά προβλήματα, με χωρικές και χρονικές ασυνέχειες, στις 1 + 1 διαστάσεις . . . . .	5
2.1.1 Το Πρόβλημα Μοντέλο . . . . .	5
2.1.2 Χρονικοί Μετασχηματισμοί . . . . .	7
2.2 Μέθοδος Φωκά . . . . .	10
2.2.1 Ολική Συνθήκη . . . . .	10
2.2.2 Ολοκληρωτική Αναπαράσταση της Λύσης . . . . .	12
2.2.3 Αριθμητική Ολοκλήρωση . . . . .	16
<b>3 Αποτελέσματα</b>	<b>19</b>
3.0.1 Μοντέλα Ραδιοθεραπείας / Ακτινοθεραπείας . . . . .	19
3.0.2 Αριθμητικά αποτελέσματα . . . . .	21
<b>4 Παραδοτέα</b>	<b>27</b>
<b>5 Συνεργασίες</b>	<b>28</b>
<b>6 Μελλοντικές Δράσεις</b>	<b>28</b>

# 1 Σκοπός

Κεντρική επιδίωξη της παρούσας δράσης αποτελεί η μελέτη και προσαρμογή της μαθηματικής μεθόδου μετασχηματισμού-Φωκά για την αναλυτική επίλυση σύνθετων εξελικτικών προβλημάτων αιχμής (π.χ. πρόβλημα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου), τα οποία χαρακτηρίζονται από ασυνεχείς συντελεστές και περιγράφονται από προβλήματα πολλαπλών πεδίων, με στόχο την περιγραφή της λύσης σε κλειστή μορφή σε οποιαδήποτε χρονική στιγμή χωρίς να απαιτείται η γνώση της λύσης σε οιαδήποτε άλλες ενδιάμεσες χρονικές στιγμές.

Στην κατεύθυνση αυτή, τα κύρια ερευνητικά αποτελέσματα που παρήχθησαν κατά τη διάρκεια του έργου αναφέρονται στην ανάπτυξη, σε κλειστή μορφή, της λύσης γραμμικών εξελικτικών προβλημάτων με χρονικές και χωρικές ασυνέχειες στις 1+1 διαστάσεις. Παράλληλα, έγιναν βήματα από συνεργαζόμενες ερευνητικές ομάδες για την επέκταση του νέου φορμαλισμού στις δύο χωρικές διαστάσεις, μέσω της μελέτης της γραμμικής εξίσωσης της θερμότητας στις δύο χωρικές διαστάσεις με πλάγιες Neumann συνοριακές συνθήκες. Πρόσφατα ξεκίνησε και η μελέτη μη-γραμμικών προβλημάτων με την παραγωγή αποτελεσμάτων αναφορικά με την γραμμική και μη γραμμική ΜΔΕ του Schrödinger στις 1+1 διαστάσεις με αρχικές και συνοριακές συνθήκες σε χώρους Sobolev.

## 1.1 Μέθοδος Φωκά για παραβολικά γραμμικά προβλήματα, με χωρικές και χρονικές ασυνέχειες, στις 1 + 1 διαστάσεις

Μοντέλα εξελικτικών προβλημάτων αιχμής, που περιγράφουν τη συγκέντρωση καρκινικών κυττάρων στο εγκέφαλο, απετέλεσαν το ουσιαστικό κίνητρο και τη βάση για την επέκταση και μελέτη της καινοτόμου μεθόδου μετασχηματισμού Φωκά. Τα μοντέλα αυτά περιγράφονται με γραμμικά και μη-γραμμικά παραβολικά προβλήματα αρχικών-συνοριακών συνθηκών πολλαπλών πεδίων (ΠΑΣΣ-ΠΠ), τύπου διάχυσης-αντίδρασης, τα οποία χαρακτηρίζονται από:

- Χωρικές ασυνέχειες του συντελεστή διάχυσης για να περιγράψουν την ανομοιογένεια του εγκεφαλικού ιστού
- Χρονικές ασυνέχειες του συντελεστή επαύξησης (proliferation) για να περιγράψουν την εφαρμογή πρωτοκόλλων θεραπείας.

Για την επέκταση και προσαρμογή του γνωστού φορμαλισμού της μεθόδου Φωκά από ομοιογενή ανοικτά χωρία σε ανομοιογενή κλειστά χωρία χώρου-χρόνου ακολουθήσαμε τα παρακάτω γενικά αλγοριθμικά βήματα:



- Διακριτοποίηση του ολικού χωρίου σε υποχωρία χρόνου-χώρου στα οποία η λύση του προβλήματος είναι αναλυτική συνάρτηση.
- Παραγωγή κατάλληλων συνοριακών συνθηκών και συνθηκών διεπαφής για κάθε υποχωρίο και εφαρμογή κατάλληλων μετασχηματισμών με αλλαγή μεταβλητών για την απλοποίηση του προβλήματος.
- Παραγωγή της λύσης του προβλήματος σε κλειστή μορφή σε κάθε υποχωρίο η οποία εξαρτάται από άγνωστες συνοριακές ποσότητες διεπαφής.
- Χρήση των ολικών συνθηκών για την παραγωγή γραμμικού αλγεβρικού συστήματος και καθορισμό των άγνωστων συνοριακών ποσοτήτων στις διεπαφές.
- Εφαρμογή τεχνικών επανέναρξης με νέες αρχικές συνθήκες, για προβλήματα με ασυνέχειες στο χρόνο.
- Προσέγγιση της αναλυτικής λύσης με αριθμητικές μεθόδους σε υπερβολικές καμπύλες.

## 1.2 Εισαγωγή στις δύο χωρικές διαστάσεις και σε μη-γραμμικά προβλήματα

Στη παράγραφο αυτή παραθέτουμε μία περίληψη σχετικών ερευνητικών αποτελεσμάτων συνεργαζόμενων ομάδων στη κατεύθυνση της επέκτασης του formalισμού στις δύο διαστάσεις καθώς και της χρήσης του μετασχηματισμού Φωκά σε μη γραμμικά προβλήματα. Συγκεκριμένα:

- Η μέθοδος μετασχηματισμού Φωκά χρησιμοποιείται για την επίλυση, σε κλειστή μορφή, της εξίσωσης θερμότητας στις δύο χωρικές διαστάσεις (στο ανοικτό θετικό τέταρτο του επιπέδου) με μη-διαχωρίσιμες πλάγιες-Neumann συνοριακές συνθήκες. Σημειώνεται ότι μη-διαχωρίσιμα ΠΑΣΣ δεν είναι δυνατόν να αντιμετωπισθούν με τους συνήθεις μετασχηματισμούς, ενώ ο μετασχηματισμός Φωκά είναι ικανός να παράξει και σε αυτές τις περιπτώσεις αναλυτικές λύσεις οι οποίες συγκλίνουν ομοιόμορφα στο σύνορο και επομένως μπορούν να προσεγγιστούν αποδοτικά από αριθμητικές μεθόδους.
- Η μέθοδος Φωκά χρησιμοποιείται για την ανάλυση του κυβικού μη-γραμμικού Schrödinger (NLS) ΠΑΣΣ στην ημιευθεία και με δεδομένα στους χώρους Sobolev. Αρχικά επιλύεται το γραμμικό ομογενές Schrödinger ΠΑΣΣ, με αρχικές και συνοριακές συνθήκες σε χώρους Sobolev, και παράγονται οι βασικές χωρικές και χρονικές εκτιμήσεις της λύσης. Στη συνέχεια επιλύεται το αντίστοιχο μη ομογενές γραμμικό Schrödinger ΠΑΣΣ διασπώντας το



κατάλληλα σε ένα ομογενές ΠΑΣΣ με δεδομένα σε χώρους Sobolev και σε ένα μη ομογενές ΠΑΣΣ με μηδενικά δεδομένα. Οι εκτιμήσεις αυτές χρησιμοποιούνται για να εξασφαλισθεί ότι το NLS ΠΑΣΣ είναι καλώς ορισμένο με δεδομένα  $(u(x, 0), u(0, t))$  στον  $H_x^s(0, \infty) \times H_t^{(2s+1/4)}(0, T)$ ,  $s > 1/2$ . Με αυτή την εργασία η μέθοδος Φωκά τίθεται στο ευρύτερο πλαίσιο των μεθόδων για εξελικτικές εξισώσεις στους χώρους Sobolev.

Για τεχνική ανάλυση και μεθοδολογία παραπέμπουμε στις σχετικές δημοσιεύσεις που παρατίθενται στην παράγραφο των παραδοτέων.

## 2 Μεθοδολογία

### 2.1 Μέθοδος Φωκά για παραβολικά γραμμικά προβλήματα, με χωρικές και χρονικές ασυνέχειες, στις $1+1$ διαστάσεις

#### 2.1.1 Το Πρόβλημα Μοντέλο

Για την μελέτη ΠΑΣΣ-ΠΠ που παρουσιάζουν ασυνέχειες τόσο στο χρόνο όσο και στο χώρο, και έχοντας υπόψιν το πρόβλημα διάχυσης καρκινικών όγκων εγκεφάλου στο οποίο έχουν ενσωματωθεί και πρωτόκολλα θεραπείας (βλ. Τεχνική Έκθεση Δράσης 4.2), θεωρούμε ένα πρόβλημα-μοντέλο (βλ. σχήμα 1) το οποίο περιγράφεται από τις σχέσεις:

$$\begin{cases} \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D(x, t) \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \rho(t) c, & x \in [a, b], 0 < t \leq T_F \\ c(x, 0) = f(x) \\ c_x(a, t) = c_x(b, t) = 0 \end{cases} \quad (1)$$

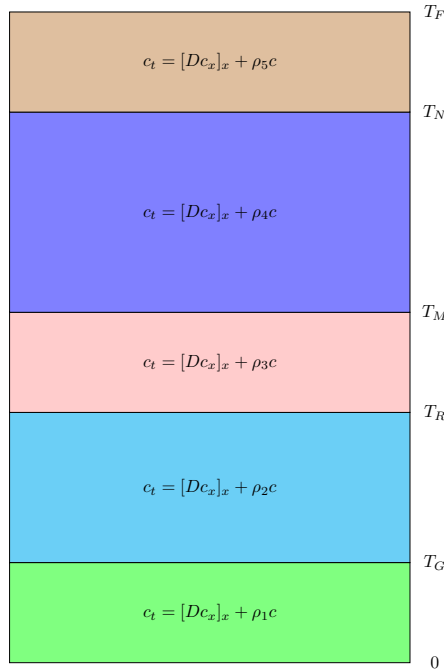
Οι συντελεστές αναπαραγωγής (proliferation)  $\rho \equiv \rho(t)$  και διάχυσης (diffusion)  $D = D(x, t)$  χαρακτηρίζουν το πρόβλημα με χρονικές και χωρικές ασυνέχειες, αντίστοιχα. Για τον συντελεστή αναπαραγωγής  $\rho \equiv \rho(t)$  θεωρούμε ότι ορίζεται από την σχέση

$$\rho \equiv \rho(t) = \begin{cases} \rho_1, & 0 < t \leq T_G \\ \rho_2, & T_G < t \leq T_R \\ \rho_3, & T_R < t \leq T_M \\ \rho_4, & T_M < t \leq T_N \\ \rho_5, & T_N < t \leq T_F \end{cases}, \quad \rho_i \in \mathbb{R}, \quad (2)$$

όπου οι διαφορετικές χρονικές περιοχές σηματοδοτούν διαφορετικούς ρυθμούς αναπαραγωγής (π.χ. λόγω εφαρμογής διαφορετικών πρωτοκόλλων θεραπείας) που απεικονίζονται και στο Σχήμα 1. Σημειώνουμε ότι ο αριθμός των χρονικών



περιόδων μπορεί τετριμμένα να γενικευτεί και επομένως ο περιορισμός σε πέντε γίνεται χωρίς καμία βλάβη της γενικότητας.

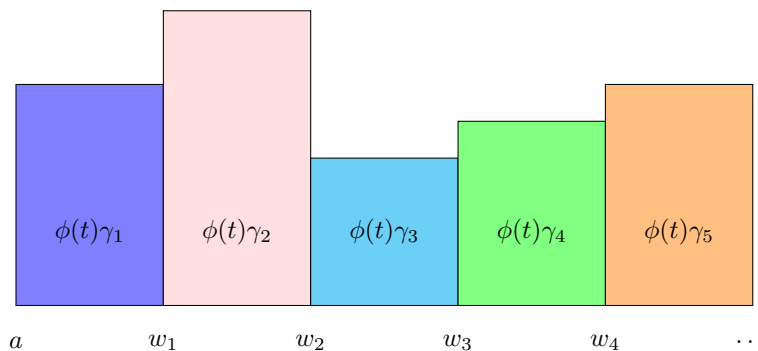


Σχήμα 1: Χρονικές περίοδοι με διαφορετικό συντελεστή αναπαραγωγής  $\rho \equiv \rho(t)$ .

Ο συντελεστής διάχυσης  $D = D(x, t)$  χαρακτηρίζει το ΠΑΣΣ ως πρόβλημα Πολλαπλών (χωρικών) Πεδίων (ΠΠ) και ορίζεται από τη σχέση

$$D(x, t) = \phi(t)\gamma_j, \quad x \in R_j, \quad j = 1, \dots, n + 1 \tag{3}$$

όπου  $\gamma_j \in \mathbb{R}$ ,  $\phi(t)$  είναι συνεχής συνάρτηση του  $t$  και  $R_j := (w_{j-1}, w_j)$  με  $w_j$  να συμβολίζουν τα σημεία χωρικής διεπαφής που ικανοποιούν την  $a \equiv w_0 < w_1 < w_2 < \dots < w_n < w_{n+1} \equiv b$  όπως επιδεικνύεται και στο Σχήμα (2).



Σχήμα 2: Ο χωρικά ασυνεχής συντελεστής διάχυσης  $D \equiv D(x, t)$ .



**Ευρωπαϊκή Ένωση**  
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ  
**ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ**  
*επένδυση στην κοινωνία της γνώσης*

ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ  
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



**ΕΣΠΑ**  
**2007-2013**  
πρόγραμμα για την ανάπτυξη  
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Θέτοντας τώρα,

$$\begin{cases} c(x, t_1) = c(x, t) & , t \in (0, T_G] \\ c(x, t_2) = c(x, t - T_G) & , t \in (T_G, T_R] \\ c(x, t_3) = c(x, t - T_R) & , t \in (T_R, T_M] \\ c(x, t_4) = c(x, t - T_M) & , t \in (T_M, T_N] \\ c(x, t_5) = c(x, t - T_N) & , t \in (T_N, T_F] \end{cases} . \quad (4)$$

το πρόβλημα (1) μπορεί να γραφεί στην παρακάτω μορφή

$$\begin{cases} \frac{\partial c}{\partial t_\ell} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \rho_\ell c, & x \in [a, b], 0 < t_\ell \leq T_\ell \\ c(x, 0) = c_\ell(x) \\ c_x(a, t_\ell) = c_x(b, t_\ell) = 0 \end{cases} \quad (5)$$

με

$$\begin{cases} T_1 = T_G \\ T_2 = T_R - T_G \\ T_3 = T_M - T_R \\ T_4 = T_N - T_M \\ T_5 = T_F - T_N \end{cases} \quad (6)$$

και

$$\begin{cases} c_1(x) = f(x) \\ c_2(x) = c(x, T_1) \\ c_3(x) = c(x, T_2) \\ c_4(x) = c(x, T_3) \\ c_5(x) = c(x, T_4) \end{cases} \quad (7)$$

### 2.1.2 Χρονικοί Μετασχηματισμοί

Για να απαλείψουμε τον όρο  $\rho_\ell c$  στο (5) θα χρησιμοποιήσουμε το παρακάτω λήμμα:

**Λήμμα 1.** *Εαν η  $c(x, t)$  ικανοποιεί την εξίσωση*

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D(x, t) \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \rho c$$

και η  $u(x, t)$  ορίζεται από

$$u(x, t) = e^{-R(t)} c(x, t), \quad (8)$$

με

$$R(t) = \int_0^t \rho(s) ds, \quad (9)$$



τότε η  $u(x, t)$  ικανοποιεί την εξίσωση

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D(x, t) \frac{\partial u}{\partial x} \right) \quad (10)$$

Απόδειξη : Παρατηρώντας ότι  $\dot{R}(t) = \rho(t)$  και παραγωγίζοντας την (8) ως προς  $t$ , εύκολα βλέπουμε ότι :

$$e^{-R(t)} \frac{\partial}{\partial t} c(x, t) = \frac{\partial}{\partial t} u(x, t) + \rho(t) u(x, t) . \quad (11)$$

Πολλαπλασιάζοντας τώρα την (1) με  $e^{-R(t)}$  καταλήγουμε στην

$$e^{-R(t)} \frac{\partial}{\partial t} c(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left( D(x, t) \frac{\partial}{\partial x} u(x, t) \right) + \rho(t) u(x, t) , \quad (12)$$

η οποία συνδυαζόμενη με την σχέση (11) ολοκληρώνει την απόδειξη. ■

Το πρόβλημα (5) μετά από την εφαρμογή του λήμματος (1) γράφεται ως εξής:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t_\ell} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial u}{\partial x} \right) , & x \in [a, b] , 0 < t_\ell \leq T_\ell \\ u(x, 0) = u_\ell(x) \equiv c_\ell(x) \\ u_x(a, t_\ell) = u_x(b, t_\ell) = 0 \end{cases} \quad (13)$$

Για να απλοποιήσουμε περαιτέρω την εξίσωση στο πρόβλημα (13), δεδομένου ότι το  $D$  εξαρτάται και από τον χρόνο (βλ. 3), θα κάνουμε αλλαγή της χρονικής μεταβλητής όπως περιγράφεται στο παρακάτω λήμμα

**Λήμμα 2.** Εάν η  $u(x, t)$  ικανοποιεί την εξίσωση

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D(x, t) \frac{\partial u}{\partial x} \right)$$

με  $D(x, t) = D(x)\phi(t)$ , τότε κάνοντας την αλλαγή μεταβλητών

$$\tau \equiv \tau(t) = \int_0^t \phi(s) ds , \quad (14)$$

η  $u(x, \tau)$  ικανοποιεί την εξίσωση:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} u(x, \tau) = \frac{\partial}{\partial x} \left( D(x) \frac{\partial}{\partial x} u(x, \tau) \right) . \quad (15)$$



Απόδειξη : Γράφοντας  $D(x, t) = \phi(t)D(x)$  η εξίσωση (10) του Λήμματος 1 γίνεται:

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x, t) = \phi(t) \frac{\partial}{\partial x} \left( D(x) \frac{\partial}{\partial x} u(x, \tau) \right) . \quad (16)$$

Το γεγονός ότι :

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x, t) = \frac{d\tau}{dt} \frac{\partial}{\partial \tau} u(x, \tau) = \phi(t) \frac{\partial}{\partial \tau} u(x, \tau) , \quad (17)$$

ολοκληρώνει την απόδειξη. ■

Το πρόβλημα (13) μετά από την εφαρμογή του λήμματος (2) γράφεται ως εξής:

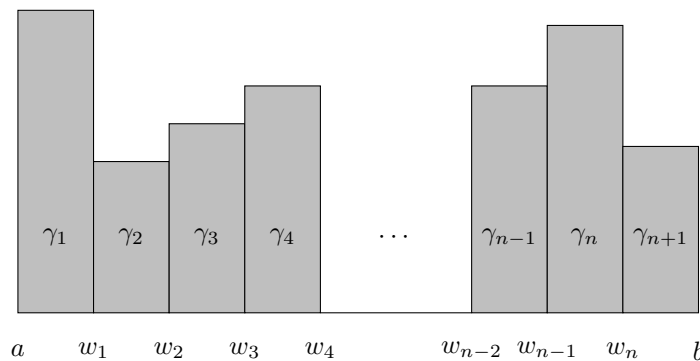
$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial \tau_\ell} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial u}{\partial x} \right) , & x \in [a, b] , & 0 < \tau_\ell \leq S_\ell \\ u(x, 0) = u_\ell(x) \\ u_x(a, \tau_\ell) = u_x(b, \tau_\ell) = 0 \end{cases} \quad (18)$$

όπου

$$S_\ell = \int_0^{\tau_\ell} \phi(s) ds , \quad (19)$$

και η συνάρτηση  $D(x)$  ορίζεται ως (βλ. σχήμα 3):

$$D = D(x) = \gamma_j , \quad x \in R_j , \quad j = 1, \dots, n + 1 \quad (20)$$



Σχήμα 3: Η συνάρτηση  $D(x)$  σε  $n + 1$  περιοχές.

Επισημαίνουμε επίσης ότι η παραβολική φύση του προβλήματος συνεπάγεται συνέχεια των  $u$  και  $Du_x$  στα σημεία διεπαφής  $w_j$ , για κάθε  $j = 1, 2, \dots, n$  και  $\ell = 1, \dots, 5$ , και επομένως

$$\begin{cases} \lim_{x \rightarrow w_j^+} u(x, \tau_\ell) = \lim_{x \rightarrow w_j^-} u(x, \tau_\ell) \\ \lim_{x \rightarrow w_j^+} D(x)u_x(x, \tau_\ell) = \lim_{x \rightarrow w_j^-} D(x)u_x(x, \tau_\ell) \end{cases} . \quad (21)$$

## 2.2 Μέθοδος Φωκά

### 2.2.1 Ολική Συνθήκη

Επανονομάζοντας, για λόγους απλότητας συμβολισμού, το  $\tau_\ell$  με  $t$  (δηλ.  $\tau_\ell \rightarrow t$ ) και το  $S_\ell$  με  $T$  (δηλ.  $S_\ell \rightarrow T$ ), ως συμβολίσουμε με  $u^{(j)}(x, t)$  τη λύση του 18 στη περιοχή  $[w_{j-1}, w_j] \times [0, T]$ , η οποία ορίζεται από τη σχέση:

$$u^{(j)}(x, t) := \begin{cases} u(x, t), & x \in R_j = (w_{j-1}, w_j) \\ \lim_{x \rightarrow w_{j-1}^+} u(x, t), & x = w_{j-1} \\ \lim_{x \rightarrow w_j^-} u(x, t), & x = w_j \end{cases}, \quad j = 1, \dots, n+1, \quad (22)$$

και, επιπροσθέτως,

$$u_x^{(j)}(w_{j-1}, t) := \lim_{x \rightarrow w_{j-1}^+} u_x(x, t) \quad \text{και} \quad u_x^{(j)}(w_j, t) := \lim_{x \rightarrow w_j^-} u_x(x, t). \quad (23)$$

Τότε θα ισχύει

$$u_t^{(j)} = (\gamma_j u_x^{(j)})_x = \gamma_j u_{xx}^{(j)}, \quad (24)$$

και χρησιμοποιώντας τους περιορισμούς (21), έχουμε επίσης ότι:

$$u^{(j)}(w_j, t) = u^{(j+1)}(w_j, t) \quad \text{και} \quad \gamma_j u_x^{(j)}(w_j, t) = \gamma_{j+1} u_x^{(j+1)}(w_j, t). \quad (25)$$

Στην περιοχή  $\overline{R_j} = [w_{j-1}, w_j]$  παρατηρούμε ότι η  $u^{(j)}(x, t)$  ικανοποιεί την εξίσωση:

$$u_t^{(j)} = (\gamma_j u_x^{(j)})_x = \gamma_j u_{xx}^{(j)} \quad (26)$$

και η formal adjoint  $\tilde{u}_t^{(j)}$  ικανοποιεί την εξίσωση:

$$-\tilde{u}_t^{(j)} = \gamma_j \tilde{u}_{xx}^{(j)}. \quad (27)$$

Πολλαπλασιάζοντας τις εξισώσεις (24) και (27) με  $\tilde{u}$  και  $u$ , αντίστοιχα, και αφαιρώντας τις εξισώσεις που παράγονται καταλήγουμε στην :

$$(u^{(j)} \tilde{u}^{(j)})_t - (\gamma_j u_x^{(j)} \tilde{u}^{(j)} - \gamma_j u^{(j)} \tilde{u}_x^{(j)})_x = 0. \quad (28)$$

Δεδομένου ότι μια μονοπαραμετρική οικογένεια λύσεων της (27) δίνεται από τη σχέση:

$$\tilde{u}^{(j)}(x, t, k) = e^{-ikx + \gamma_j k^2 t}, \quad k \in \mathbb{C}. \quad (29)$$

η εξίσωση (28) γίνεται:

$$(e^{-ikx + \gamma_j k^2 t} u)_t - (e^{-ikx + \gamma_j k^2 t} \gamma_j (u_x + iku))_x, \quad k \in \mathbb{C}, \quad (30)$$

η οποία είναι η divergence form της εξίσωσης (24). Ολοκληρώνοντας στην περιοχή  $A_j := \{(x, t) : x \in \overline{R_j}, 0 \leq t \leq T\}$  και χρησιμοποιώντας το θεώρημα του Green καταλήγουμε στην εξίσωση:

$$\begin{aligned} & \int_{w_{j-1}}^{w_j} e^{-ikx} f^{(j)}(x) dx - \int_{w_{j-1}}^{w_j} e^{-ikx + \gamma_j k^2 T} u^{(j)}(x, T) dx \\ & - \int_0^T e^{-ikw_{j-1} + \gamma_j k^2 t} \gamma_j (u_x^{(j)}(w_{j-1}, t) + ik u^{(j)}(w_{j-1}, t)) dt \\ & + \int_0^T e^{-ikw_j + \gamma_j k^2 t} \gamma_j (u_x^{(j)}(w_j, t) + ik u^{(j)}(w_j, t)) dt = 0. \end{aligned} \quad (31)$$

Αν η  $f^{(j)}(x)$  είναι η αρχική συνθήκη στην  $\overline{R_j}$ ,

$$f^{(j)}(x) = f|_{\overline{R_j}}(x)$$

$\widehat{f}^{(j)}(x)$  και  $\widehat{q}^{(j)}(k, t)$  είναι η μετασχηματισμοί Fourier των συναρτήσεων  $f^{(j)}(x)$  και  $u^{(j)}(x, t)$ , αντίστοιχα

$$\widehat{f}^{(j)}(k) = \int_{w_{j-1}}^{w_j} e^{-ikx} f^{(j)}(x) dx \quad (32)$$

$$\widehat{u}^{(j)}(k, t) = \int_{w_{j-1}}^{w_j} e^{-ikx} u^{(j)}(x, t) dx, \quad (33)$$

και  $\widetilde{u}^{(j)}$  και  $\widetilde{u}_x^{(j)}$  δίνονται από τις σχέσεις :

$$\widetilde{u}^{(j)}(x, \gamma_j k^2) := \int_0^T e^{\gamma_j k^2 t} u^{(j)}(x, t) dt \quad (34)$$

$$\widetilde{q}_x^{(j)}(x, \gamma_j k^2) := \int_0^T e^{\gamma_j k^2 t} u_x^{(j)}(x, t) dt. \quad (35)$$

τότε η εξίσωση (31) παίρνει τη μορφή:

$$\begin{aligned} e^{\gamma_j k^2 T} \widehat{u}^{(j)}(k, T) &= \widehat{f}^{(j)}(k) - \gamma_j e^{-ikr_{j-1}} (\widetilde{u}_x^{(j)}(w_{j-1}, \gamma_j k^2) + ik \widetilde{u}^{(j)}(w_{j-1}, \gamma_j k^2)) \\ &+ \gamma_j e^{-ikr_j} (\widetilde{u}_x^{(j)}(w_j, \gamma_j k^2) + ik \widetilde{u}^{(j)}(w_j, \gamma_j k^2)), \end{aligned} \quad (36)$$

για όλα τα  $k \in \mathbb{C}$ . Η (36) ισχύει για όλα τα  $t \in [0, T]$ . Αντικαθιστώντας το  $T$  με  $t$  έχουμε :

$$e^{\gamma_j k^2 t} \widehat{u}^{(j)}(k, t) = \widehat{f}^{(j)}(k) - \gamma_j e^{-ikw_{j-1}} [\widetilde{u}_x^{(j)}(w_{j-1}, \gamma_j k^2) + ik \widetilde{u}^{(j)}(w_{j-1}, \gamma_j k^2)] \\ + \gamma_j e^{-ikw_j} [\widetilde{u}_x^{(j)}(w_j, \gamma_j k^2) + ik \widetilde{u}^{(j)}(w_j, \gamma_j k^2)], \quad (37)$$

για όλα τα  $k \in \mathbb{C}$ . Η τελευταία εξίσωση καλείται "Ολική Συνθήκη".

## 2.2.2 Ολοκληρωτική Αναπαράσταση της Λύσης

Θέτοντας  $\lambda_j^2 = \gamma_j k^2$  και  $c_j = \gamma_j^{-\frac{1}{2}}$  αν στην εξίσωση (37) και στη συνέχεια μετονομάζοντας το  $\lambda$  το  $k$  η σχέση γίνεται:

$$e^{k^2 t} \widehat{u}^{(j)}(c_j k, t) = \widehat{f}^{(j)}(c_j k) - \gamma_j e^{-ic_j k w_{j-1}} (\widetilde{u}_x^{(j)}(w_{j-1}, k^2) + ic_j k \widetilde{u}^{(j)}(w_{j-1}, k^2)) \\ + \gamma_j e^{-ic_j k w_j} (\widetilde{u}_x^{(j)}(w_j, k^2) + ic_j k \widetilde{u}^{(j)}(w_j, k^2)), \quad (38)$$

για όλα τα  $k \in \mathbb{C}$ . Αντιστρέφοντας τους μετασχηματισμούς Fourier  $\widehat{u}^{(j)}(c_j k, t)$  στην εξίσωση (38) έχουμε:

$$u^{(j)}(x, t) = \frac{c_j}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_j k x - k^2 t} \widehat{f}^{(j)}(c_j k) dk \\ - \frac{1}{2\pi c_j} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_j k (x - w_{j-1}) - k^2 t} [\widetilde{u}_x^{(j)}(w_{j-1}, k^2) + ic_j k \widetilde{u}^{(j)}(w_{j-1}, k^2)] dk \\ - \frac{1}{2\pi c_j} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_j k (x - w_j) - k^2 t} [\widetilde{u}_x^{(j)}(w_j, k^2) + ic_j k \widetilde{u}^{(j)}(w_j, k^2)] dk. \quad (39)$$

Στην παραπάνω έκφραση για την λύση  $u^{(j)}(x, t)$  εμφανίζονται κάποιες άγνωστες ποσότητες :

- $\widetilde{u}^{(j)}(w_{j-1}, k^2)$  για κάθε  $j = 1, 2, \dots, n + 1$
- $\widetilde{u}_x^{(j)}(w_j, k^2)$  για κάθε  $j = 1, 2, \dots, n + 1$
- $\widetilde{u}_x^{(j)}(w_{j-1}, k^2)$  για κάθε  $j = 2, 3, \dots, n + 1$



- $\tilde{u}_x^{(j)}(w_j, k^2)$  για κάθε  $j = 1, 2, \dots, n$ .

Χρησιμοποιώντας την απεικόνιση  $k \rightarrow -k$  η εξίσωση (37) γίνεται :

$$e^{k^2 t} \tilde{u}^{(j)}(-c_j k, t) = \hat{f}^{(j)}(-c_j k) - \gamma_j e^{ic_j k w_{j-1}} (\tilde{u}_x^{(j)}(w_{j-1}, k^2) - ic_j k \tilde{u}^{(j)}(w_{j-1}, k^2)) \\ + \gamma_j e^{ic_j k w_j} (\tilde{u}_x^{(j)}(w_j, k^2) - ic_j k \tilde{u}^{(j)}(w_j, k^2)), \quad (40)$$

για όλα τα  $k \in \mathbb{C}$ .

Λαμβάνοντας υπόψιν τόσο τους περιορισμούς (25) όσο και τις συνοριακές συνθήκες, οι ολικές συνθήκες (38) (40) γίνονται :

- για  $j = 1$ :

$$ic_1 \gamma_1 k e^{-ic_1 k r_0} \tilde{u}^{(1)}(w_0, k^2) - ic_1 \gamma_1 k e^{-ic_1 k w_1} \tilde{u}^{(1)}(w_1, k^2) + \gamma_1 e^{-ic_1 k w_1} \tilde{u}_x^{(1)}(w_1, k^2) = \hat{f}(c_1 k) \quad (41)$$

$$-ic_1 \gamma_1 k e^{ic_1 k w_0} \tilde{u}^{(1)}(w_0, k^2) + ic_1 \gamma_1 k e^{ic_1 k w_1} \tilde{u}^{(1)}(w_1, k^2) - \gamma_1 e^{-ic_1 k w_1} \tilde{u}_x^{(1)}(w_1, k^2) = \hat{f}(-c_1 k), \quad (42)$$

- για  $j = 2, 3, \dots, n$ :

$$ic_j \gamma_j k e^{-ic_j k w_{j-1}} \tilde{u}^{(j-1)}(w_{j-1}, k^2) + \gamma_{l(j-1)} e^{-ic_j k w_{j-1}} \tilde{u}_x^{(j-1)}(w_{j-1}, k^2) \\ - ic_j \gamma_j k e^{-ic_j k w_j} \tilde{u}^{(j)}(w_j, k^2) - \gamma_j e^{-ic_j k r_j} \tilde{u}_x^{(j)}(r_j, k^2) = \hat{f}(c_j k) \quad (43)$$

$$-ic_j \gamma_j k e^{ic_j k w_{j-1}} \tilde{u}^{(j-1)}(w_{j-1}, k^2) + \gamma_{j-1} e^{ic_j k w_{j-1}} \tilde{u}_x^{(j-1)}(w_{j-1}, k^2) \\ + ic_j \gamma_j k e^{ic_j k w_j} \tilde{u}^{(j)}(w_j, k^2) - \gamma_j e^{-ic_j k w_j} \tilde{u}_x^{(j)}(w_j, k^2) = \hat{f}(-c_j k), \quad (44)$$

- για  $j = n + 1$ :

$$\begin{aligned}
 & i c_{l(n+1)} \gamma_{n+1} k e^{-i c_{n+1} k r_n} \tilde{u}^{(n)}(w_n, k^2) + \gamma_n e^{-i c_{n+1} k w_n} \tilde{u}_x^{(n)}(w_n, k^2) \\
 & - i c_{n+1} \gamma_{n+1} k e^{-i c_{n+1} k w_{n+1}} \tilde{u}^{(n+1)}(w_{n+1}, k^2) = \hat{f}(c_{n+1} k)
 \end{aligned} \tag{45}$$

$$\begin{aligned}
 & - i c_{n+1} \gamma_{n+1} k e^{i c_{n+1} k r_n} \tilde{u}^{(n)}(w_n, k^2) + \gamma_n e^{i c_{n+1} k r_n} \tilde{u}_x^{(n)}(w_n, k^2) \\
 & + i c_{n+1} \gamma_{n+1} k e^{i c_{n+1} k w_{n+1}} \tilde{u}^{(n+1)}(w_{n+1}, k^2) = \hat{f}(-c_{n+1} k).
 \end{aligned} \tag{46}$$

Οι παραπάνω εξισώσεις μας οδηγούν στο  $2(n + 1) \times 2(n + 1)$  γραμμικό σύστημα, η λύση του οποίου μας προσδιορίζει τις άγνωστες ποσότητες  $\tilde{u}_x^{(j)}(w_j, k^2)$  και  $\tilde{u}^{(j)}(w_j, k^2)$ .

$$G \tilde{\mathbf{u}} = \hat{\mathbf{f}}, \tag{47}$$

με

$$G = \begin{bmatrix}
 A_1^{(1)} & A_3^{(1)} & A_4^{(1)} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 A_5^{(1)} & A_7^{(1)} & A_8^{(1)} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & A_1^{(2)} & A_2^{(2)} & A_3^{(2)} & A_4^{(2)} & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & A_5^{(2)} & A_6^{(2)} & A_7^{(2)} & A_8^{(2)} & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & A_1^{(n)} & A_2^{(n)} & A_3^{(n)} & A_4^{(n)} & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & A_5^{(n)} & A_6^{(n)} & A_7^{(n)} & A_8^{(n)} & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & A_1^{(n+1)} & A_2^{(n+1)} & A_3^{(n+1)} \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & A_5^{(n+1)} & A_6^{(n+1)} & A_7^{(n+1)}
 \end{bmatrix},$$

$$\tilde{\mathbf{u}} = \begin{bmatrix}
 \tilde{u}^{(1)}(w_0, k^2) \\
 \tilde{u}^{(1)}(w_1, k^2) \\
 \tilde{u}_x^{(1)}(w_1, k^2) \\
 \vdots \\
 \tilde{u}^{(n)}(w_n, k^2) \\
 \tilde{u}_x^{(n)}(w_n, k^2) \\
 \tilde{u}^{(n+1)}(w_{n+1}, k^2)
 \end{bmatrix} \quad \text{και} \quad \hat{\mathbf{f}} = \begin{bmatrix}
 \hat{f}^{(1)}(c_1 k) \\
 \hat{f}^{(1)}(-c_1 k) \\
 \hat{f}^{(2)}(c_2 k) \\
 \hat{f}^{(2)}(-c_2 k) \\
 \vdots \\
 \hat{f}^{(n)}(c_n k) \\
 \hat{f}^{(n)}(-c_n k) \\
 \hat{f}^{(n+1)}(c_{n+1} k) \\
 \hat{f}^{(n+1)}(-c_{n+1} k)
 \end{bmatrix}.$$

με τις τιμές των  $A_i^{(j)}$  να δίνονται από

$i$	$A_i^{(j)}$
1	$ic_j\gamma_jke^{-ic_jkw_{j-1}}$
2	$\gamma_{j-1}e^{-ic_jkw_{j-1}}$
3	$-ic_j\gamma_jke^{-ic_jkw_j}$
4	$-\gamma_je^{-ic_jkw_j}$
5	$-ic_j\gamma_jke^{ic_jkw_{j-1}}$
6	$\gamma_{j-1}e^{ic_jkw_{j-1}}$
7	$ic_j\gamma_jke^{ic_jkw_j}$
8	$-\gamma_je^{ic_jkw_j}$

Επαναφέροντας τώρα τον πρωτότυπο συμβολισμό των μεταβλητών του χρόνου, η λύση του προβλήματος 18  $u^{(j)}(x, \tau_\ell)$  στην περιοχή  $[w_{j-1}, w_j] \times [0, S_\ell]$  προφανώς δίνεται από την σχέση

$$\begin{aligned}
 u^{(j)}(x, \tau_\ell) = & \frac{c_j}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_jkx - k^2\tau_\ell} \widehat{u}_\ell^{(j)}(c_jk) dk \\
 & - \frac{1}{2\pi c_j} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_jk(x-w_{j-1}) - k^2\tau_\ell} \\
 & \cdot [\widehat{u}_x^{(j)}(w_{j-1}, k^2) + ic_jk\widetilde{u}^{(j)}(w_{j-1}, k^2)] dk \\
 & - \frac{1}{2\pi c_j} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_jk(x-w_j) - k^2\tau_\ell} \\
 & \cdot [\widehat{u}_x^{(j)}(w_j, k^2) + ic_jk\widetilde{u}^{(j)}(w_j, k^2)] dk,
 \end{aligned} \tag{48}$$

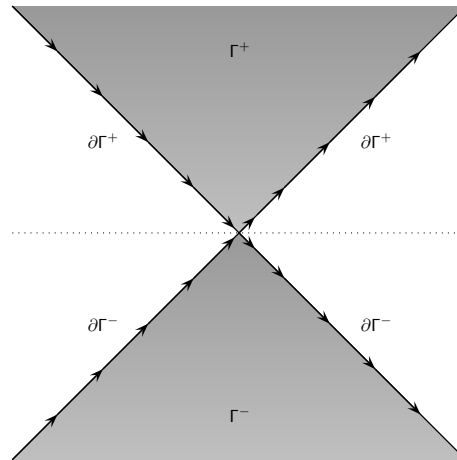
Η αναλυτικότητα των συναρτήσεων που εμπλέκονται στην ολοκληρωτική αναπαράσταση των λύσεων  $u^{(j)}(x, \tau_\ell)$ , μας επιτρέπει την αντικατάσταση του πραγματικού άξονα  $(-\infty, \infty)$  με άλλα μονοπάτια ολοκλήρωσης στο μιγαδικό επίπεδο για να επιτύχουμε εκθετική, κατά απόλυτη τιμή, μείωση των προς ολοκλήρωση ποσοτήτων όσο απομακρυνόμαστε από το μηδέν. Για παράδειγμα, στην ολοκληρωτική αναπαράσταση της  $u^{(1)}(x, \tau_\ell)$  στην (48), παρατηρούμε ότι:

- η ποσότητα  $e^{ick(x-w_1)}$  είναι αναλυτική και φραγμένη για  $Im(k) < 0$
- η ποσότητα  $e^{ick(x-a)}$  είναι αναλυτική και φραγμένη για  $Im(k) > 0$
- η ποσότητα  $e^{-k^2t}$  είναι αναλυτική και φραγμένη για  $Re(k^2) \geq 0$ .

Κατόπιν, βασιζόμενοι στον παρακάτω ορισμό των χωρίων  $\Gamma$ ,  $\Gamma^+$  και  $\Gamma^-$  (δες επίσης το γράφημα 4)

$$\Gamma = \{k \in \mathbb{C} : Re k^2 < 0\} = \{k \in \mathbb{C} : \arg k \in \{(\frac{\pi}{4}, \frac{3\pi}{4}) \cup (\frac{5\pi}{4}, \frac{7\pi}{4})\}\} \tag{49}$$





Σχήμα 4: Τα μονοπάτια ολοκλήρωσης  $\partial\Gamma^+$  και  $\partial\Gamma^-$

$$\Gamma^+ = \{k : \arg k \in (\frac{\pi}{4}, \frac{3\pi}{4})\} = \Gamma \cap \mathbb{C}^+ \tag{50}$$

$$\Gamma^- = \{k : \arg k \in (\frac{5\pi}{4}, \frac{7\pi}{4})\} = \Gamma \cap \mathbb{C}^- \tag{51}$$

μπορούμε ισοδύναμα να εκφράσουμε (δες επίσης [7]) τα  $u^{(j)}(x, \tau_\ell)$  και ως

$$\begin{aligned} u^{(j)}(x, \tau_\ell) = & \frac{c_j}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_j k x - k^2 \tau_\ell} \widehat{u}_\ell^{(j)}(c_j k) dk \\ & - \frac{1}{2\pi c_j} \int_{\partial\Gamma^+} e^{ic_j k(x-w_{j-1}) - k^2 \tau_\ell} \\ & \cdot [\widetilde{u}_x^{(j)}(w_{j-1}, k^2) + ic_j k \widetilde{u}^{(j)}(w_{j-1}, k^2)] dk \\ & - \frac{1}{2\pi c_j} \int_{\partial\Gamma^-} e^{ic_j k(x-w_j) - k^2 \tau_\ell} \\ & \cdot [\widetilde{u}_x^{(j)}(w_j, k^2) + ic_j k \widetilde{u}^{(j)}(w_j, k^2)] dk . \end{aligned} \tag{52}$$

### 2.2.3 Αριθμητική Ολοκλήρωση

Η λύση  $u^{(j)}(x, \tau_\ell)$  (52) μπορεί να εκφραστεί και στη μορφή:

$$u^{(j)}(x, \tau_\ell) = \frac{c_j}{2\pi} I_{(-\infty, \infty)}^\ell - \frac{1}{2\pi c_j} I_{\partial\Gamma^+}^\ell - \frac{1}{2\pi c_j} I_{\partial\Gamma^-}^\ell \tag{53}$$

όπου  $I_{(-\infty, \infty)}^\ell$ ,  $I_{\partial\Gamma^+}$  και  $I_{\partial\Gamma^-}$  είναι το πρώτο, το δεύτερο και τρίτο αντίστοιχα ολοκλήρωμα της (52).

ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ  
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ  
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης

ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ  
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

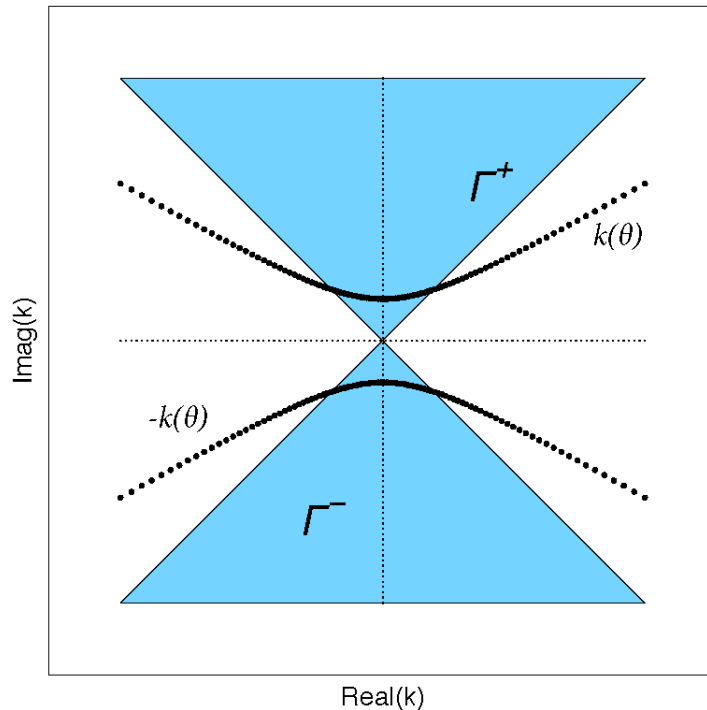
ΕΣΠΑ  
2007-2013  
πρόγραμμα για την ανάπτυξη  
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ



Για τον αποδοτικό αριθμητικό υπολογισμό των  $I_{\partial\Gamma^+}$  και  $I_{\partial\Gamma^-}$ , χρησιμοποιούμε τον κανόνα του τραπεζίου πάνω σε κατάλληλα μονοπάτια ολοκλήρωσης ώστε να πετύχουμε εκθετικούς ρυθμούς σύγκλισης (βλ. [15], [8], [4], [9], [1]). Γι'αυτό το λόγο αντικαθιστούμε (βλ.[1]) τα μονοπάτια ολοκλήρωσης  $\partial\Gamma^\pm$  με υπερβολές του μιγαδικού επιπέδου μέσω του μετασχηματισμού:

$$k_\theta \equiv k(\theta) := i \sin(\beta - i\theta), \tag{54}$$

όπου η γωνία  $\beta$  έχει επιλεγθεί να είναι  $\beta = \pi/6$  και οι καμπύλες  $\pm k(\theta)$  απεικονίζονται στο Σχ. 5.



Σχήμα 5: The contours  $\pm k(\theta)$  for numerical integration

Συνεπώς

$$I_{\partial\Gamma^+} = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_j k_\theta(x-w_{j-1})-k_\theta^2 \tau_\ell} \cdot [\tilde{u}_x^{(j)}(w_{j-1}, k_\theta^2) + ic_j k_\theta \tilde{u}^{(j)}(w_{j-1}, k_\theta^2)] k'_\theta dk_\theta, \tag{55}$$

και

$$I_{\partial\Gamma^-} = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ic_j k_\theta(x-w_j)-k_\theta^2 \tau_\ell} \cdot [\tilde{u}_x^{(j)}(w_j, k_\theta^2) - ic_j k_\theta \tilde{u}^{(j)}(w_j, k_\theta^2)] k'_\theta dk_\theta, \tag{56}$$

όπου  $k'_\theta$  είναι η παράγωγος του  $k(\theta)$ .

Για την αποδοτική εφαρμογή του κανόνα ολοκλήρωσης στα ολοκληρώματα (55) και (56) (βλ. [1]) πρέπει να λαβουμε υπ' όψιν τις παρακάτω ιδιότητες:

- Τα πραγματικά μέρη των προς ολοκλήρωση ποσοτήτων είναι άρτιες συναρτήσεις του *even functions of*  $\theta$ .
- Τα φανταστικά μέρη των προς ολοκλήρωση ποσοτήτων είναι περιπτές συναρτήσεις του  $\theta$ .
- Οι προς ολοκλήρωση ποσότητες είναι φθίνουσες συναρτήσεις του  $|\theta|$ .

Η εφαρμογή των παραπάνω ιδιοτήτων έχει ως άμεση συνέπεια:

$$\int_{-\infty}^{\infty} U(\theta) d\theta = 2 \int_0^{\infty} \operatorname{Re}(U(\theta)) d\theta \approx 2 \int_0^{\Theta} \operatorname{Re}(U(\theta)) d\theta ,$$

όπου  $U(\theta)$  δηλώνει οποιαδήποτε από τις δύο προς ολοκλήρωση ποσότητες που εμπλέκονται στις (55)-(56) και  $\Theta$  είναι ένας σχετικά μικρός πραγματικός αριθμός. Για μια καλή εκτίμηση του  $\Theta$  κάποιος πρέπει να απαιτήσει ο κυρίαρχος εκθετικός όρος  $e^{-k_\theta^2 \tau_\ell}$ , που είναι κοινός σε όλα τα ολοκληρώματα να ικανοποιεί την σχέση:

$$\left| e^{-k_\theta^2 \tau_\ell} \right| \leq 10^{-M} \text{ for all } \theta \geq \Theta \equiv \Theta(\tau_\ell; M)$$

για ικανοποιητικά μεγάλο  $M$ , (βλ. [6])

$$\Theta = \frac{1}{2} \ln \frac{4\tau + 8M \ln 10}{\tau_\ell} . \quad (57)$$

Για τον αριθμητικό υπολογισμό του  $I_{(-\infty, \infty)}^\ell$  στο (53), λαμβανουμε υπ' όψιν την (33) και έχουμε:

$$\begin{aligned} I_{(-\infty, \infty)}^\ell &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{ic_j k x} e^{-k^2 \tau_\ell} \widehat{u}_\ell^{(j)}(c_j k) dk \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{ic_j k x} e^{-k^2 \tau_\ell} \int_{w_{j-1}}^{w_j} e^{-ic_j k x} u_\ell^{(j)}(x) dx dk . \end{aligned} \quad (58)$$

Στην περίπτωση που ως αρχική συνθήκη επιλέξουμε ένα γραμμικό συνδυασμό συναρτήσεων δέλτα του Dirac

$$u_1^{(j)}(x) = \sum_{r=1}^{M_\delta} \zeta_r \delta(x - \xi_r) \quad (59)$$



και  $\xi_r \in (w_{j-1}, w_j)$ , είναι προφανές ότι

$$\widehat{u}_1^{(j)}(c_j k) = \sum_r \zeta_r e^{-ic_j k \xi_r}, \quad r \text{ τέτοιο ώστε } \xi_r \in (w_{j-1}, w_j) \quad (60)$$

και επομένως

$$I_{(-\infty, \infty)}^1 = \frac{c_j}{2\sqrt{\tau_\ell \pi}} \sum_r \zeta_r e^{-\frac{c_j^2 (\xi_r - x)^2}{4\tau_\ell}}. \quad (61)$$

Για  $\ell \geq 2$ , η  $u_\ell^{(j)}(x) = u^{(j)}(x, \tau_\ell)$  δίνεται από την (52) και επομένως η  $\widehat{u}_\ell^{(j)}(c_j k)$  πρέπει να υπολογιστεί από ένα ικανοποιητικά ακριβή κανόνα ολοκλήρωσης αφού οι αντίθετοι εκθέτες στους εκθετικούς όρους της (58) οδηγούν το  $k$  να είναι πραγματικός αριθμός. Σε αυτή την περίπτωση θεωρώντας την εφαρμογή ενός  $N_q$  σημείων Gaussian or Clenshaw-Curtis κανόνα ολοκλήρωσης μπορούμε να γράψουμε

$$\widehat{u}_\ell^{(j)}(x) \approx \sum_{\kappa=1}^{N_q} \alpha_\kappa e^{-ic_j k x_\kappa} u_\ell^{(j)}(x_\kappa) \quad (62)$$

και επομένως

$$I_{(-\infty, \infty)}^\ell \approx \frac{c_j}{2\sqrt{\tau_\ell \pi}} \sum_{\kappa=1}^{N_q} \alpha_\kappa u_\ell^{(j)}(x_\kappa) e^{-\frac{c_j^2 (x_\kappa - x)^2}{4\tau_\ell}}. \quad (63)$$

## 3 Αποτελέσματα

### 3.0.1 Μοντέλα Ραδιοθεραπείας / Ακτινοθεραπείας

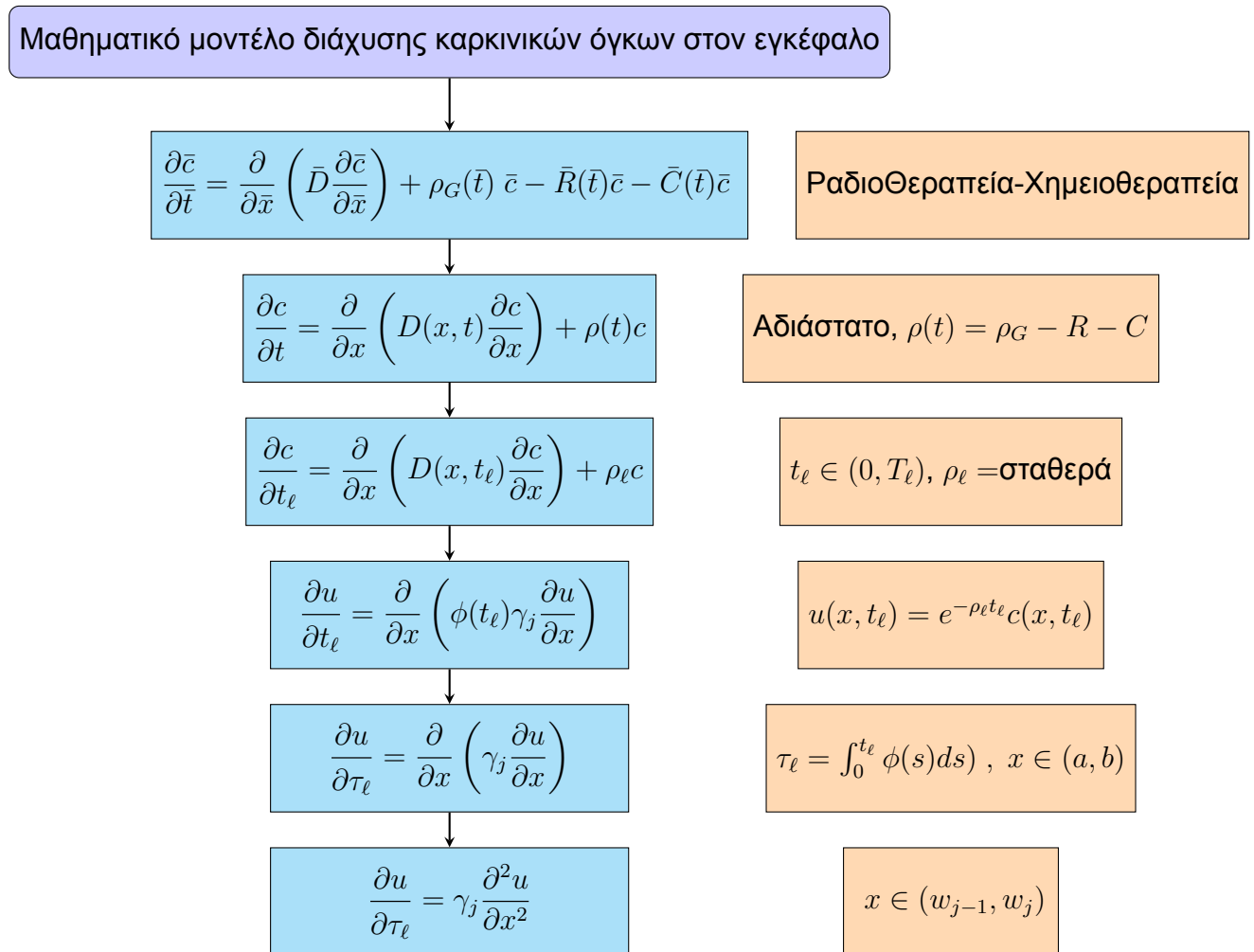
Όπως έχουμε ήδη αναφέρει, το ΠΑΣΣ (5) χρησιμοποιείται για να περιγράψει [12] μαθηματικά μοντέλα διάχυσης καρκινικών όγκων εγκεφάλου, τα οποία, πέρα από την ανομοιογένεια του εγκεφαλικού ιστού, ενσωματώνουν και πρωτόκολλα ραδιοθεραπείας ή/και ακτινοθεραπείας [11, 14, 16, 5, 3]. Σε αυτή την περίπτωση θεωρούμε ότι ο συντελεστής διάχυσης  $D(x, t)$ , ο οποίος περιγράφει τον ρυθμό διεύθυνσης των καρκινικών κυττάρων σε ανομοιογενή (λευκή και φαιά ουσία) εγκεφαλικό ιστό, ορίζεται όπως στην (3), ενώ ο συντελεστής αναπαραγωγής  $\rho(t)$ , ο οποίος περιγράφει τον ρυθμό μεταβολής του αριθμού των καρκινικών κυττάρων, ορίζεται από την σχέση

$$\rho(t) = \rho_G(t) - R(t) - C(t)$$

όπου όροι  $R(t)$  και  $C(t)$  αναφέρονται σε πρωτόκολλα ραδιοθεραπείας και χημιοθεραπείας, αντίστοιχα, και περιγράφονται με λεπτομέρεια στη Τελική Τεχνική



Έκθεση της Δράσης 4.2. Οι βασικές εξισώσεις του προβλήματος και οι απαραίτητοι μετασχηματισμοί για την εφαρμογή της μεθόδου Φωκά συνοψίζονται στο διάγραμμα που ακολουθεί.



Το πρωτόκολλο θεραπείας, που θα χρησιμοποιήσουμε στα αριθμητικά παραδείγματα της επόμενης παραγράφου, χαρακτηρίζεται από τις ακόλουθες χρονικές περιόδους:

- περίοδος χωρίς θεραπεία:  $t \in (0, T_G]$ ,
- περίοδος με ραδιοθεραπεία:  $t \in (T_G, T_R]$ ,
- περίοδος συνδυασμού ράδιο-χημειοθεραπείας:  $t \in (T_R, T_M]$ ,
- περίοδος με χημειοθεραπεία:  $t \in (T_M, T_M]$  και

- περίοδος χωρίς θεραπεία:  $t \in (T_N, T_F]$

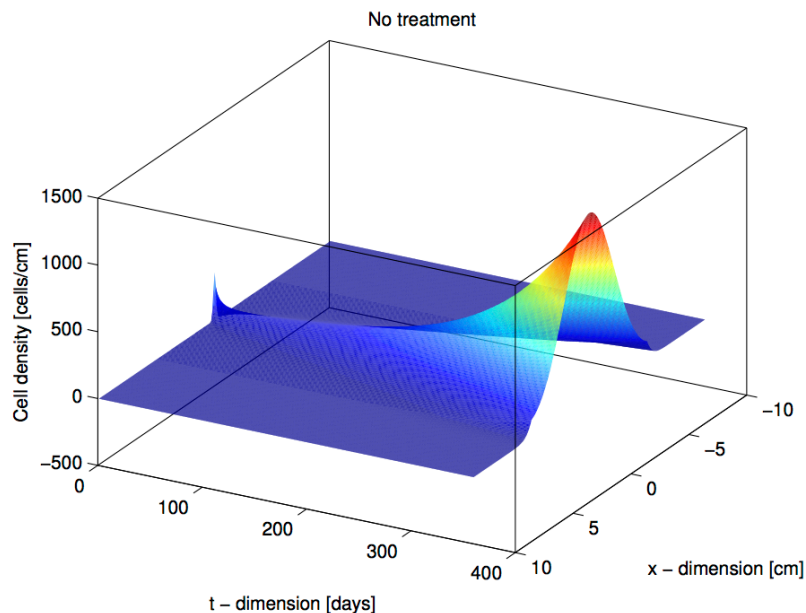
όπου

$$0 < T_G < T_R < T_M < T_N < T_F. \quad (64)$$

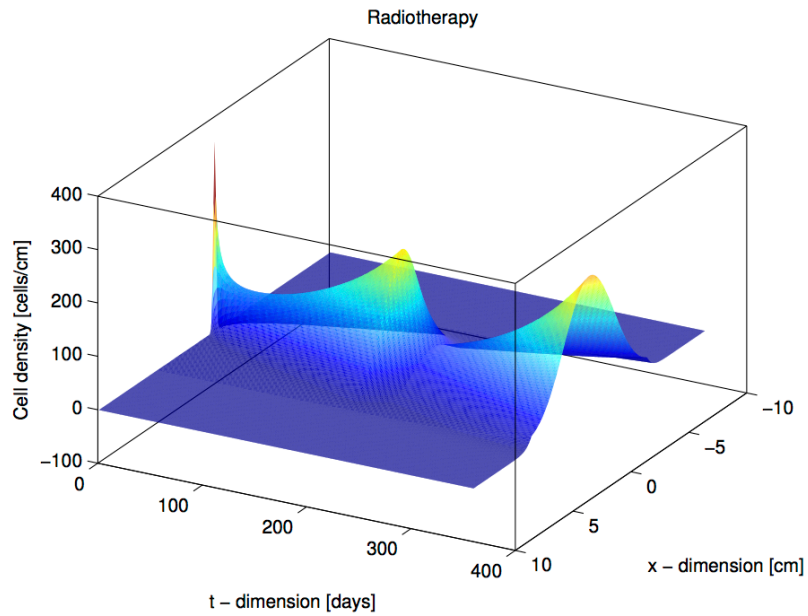
Για την αριθμητική μελέτη της συμπεριφοράς της μεθόδου Φωκά για προβλήματα εξέλιξης καρκινικών όγκων, η οποία επηρεάζεται από διάφορα πρωτόκολλα θεραπείας, παρουσιάζουμε, στις παραγράφους που ακολουθούν, αριθμητικά αποτελέσματα από ιατρικά προβλήματα μοντέλα που έχουν συμπεριληφθεί και περιγράφονται αναλυτικά στην Τελική Τεχνική Έκθεση της Δράσης 4.2 [12] (και ως εκ τούτου η περιγραφή τους παραλείπεται).

### 3.0.2 Αριθμητικά αποτελέσματα

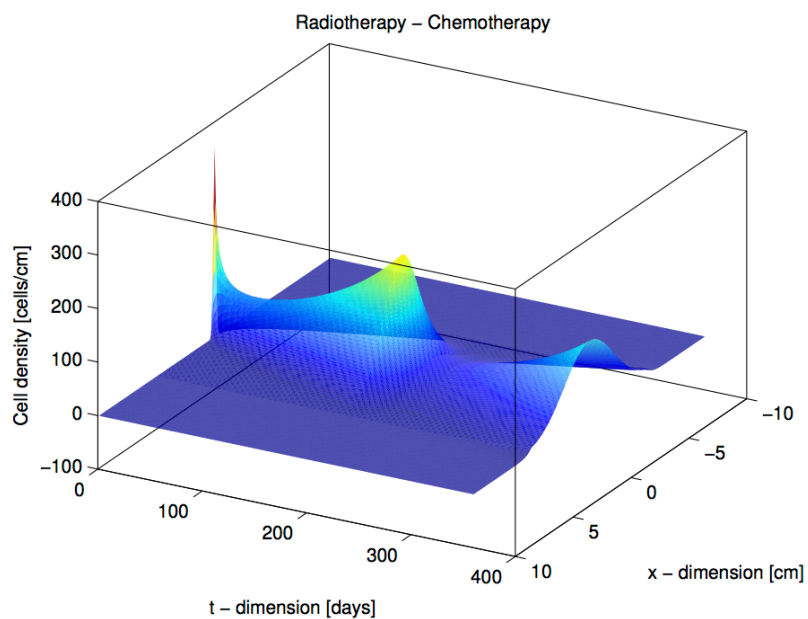
Με στόχο τη μελέτη συμπεριφοράς των αριθμητικών μεθόδων ολοκλήρωσης που χρησιμοποιούμε για την προσέγγιση της αναλυτικής λύσης (52), παραθέτουμε κατωτέρω τα Σχήματα 6-8 στα οποία επιδεικνύουμε την χρονική εξέλιξη μίας αρχικής πηγής καρκινικών κυττάρων με εφαρμογή τριών διαφορετικών πρωτοκόλλων θεραπείας (1. εκθετική αύξηση χωρίς θεραπεία σχ. 6, 2. εφαρμογή πρωτοκόλλου ραδιοθεραπείας σχ. 7, 3. συνδυασμός πρωτοκόλλων ραδιοθεραπείας και χημειοθεραπείας 8). Τα σχήματα αναφέρονται στο πρόβλημα I της Τελικής Τεχνικής Έκθεσης της Δράσης 4.2 [12].



Σχήμα 6: Η χρονική εξέλιξη της λύσης χωρίς την εφαρμογή πρωτοκόλλων θεραπείας.



Σχήμα 7: Η χρονική εξέλιξη της λύσης με εφαρμογή πρωτοκόλλου ραδιοθεραπείας.



Σχήμα 8: Η χρονική εξέλιξη της λύσης με εφαρμογή συνδυασμού πρωτοκόλλων ραδιοθεραπείας και χημειοθεραπείας.

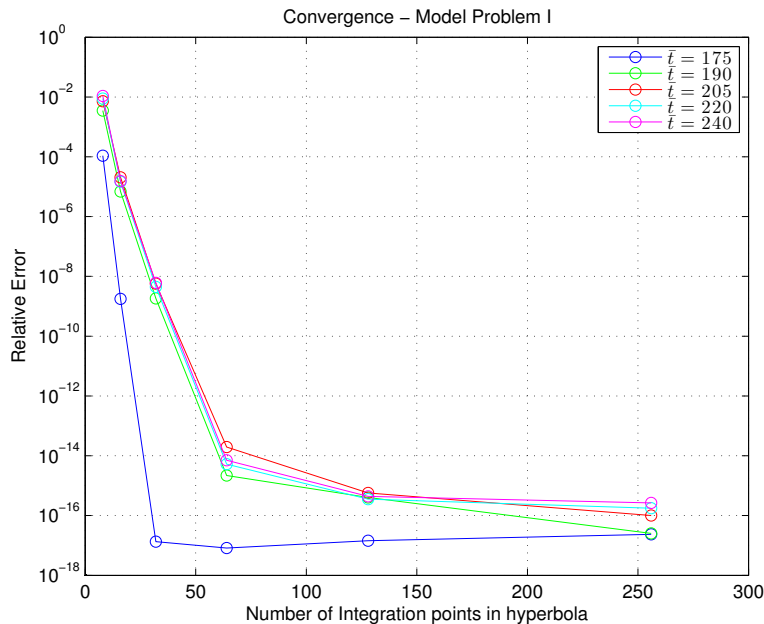
Ας συμβολίσουμε τώρα με  $C_N$  το διάνυσμα που περιέχει τις αριθμητικές προ-

	<p>ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ <i>επένδυση στην κοινωνία της γνώσης</i></p>	<p><b>ΕΣΠΑ</b> <b>2007-2013</b> πρόγραμμα για την ανάπτυξη ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ</p>
<p>Ευρωπαϊκή Ένωση Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο</p>	<p>ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ</p>	
<p>Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης</p>		

σεγγίσεις της λύση  $\bar{c}(\bar{x}_i, \bar{t})$  σε ένα ικανό πλήθος χωρικών σημείων  $\bar{x}_i$  in  $[\bar{a}, \bar{b}]$ . Το  $N$  δηλώνει το πλήθος των σημείων ολοκλήρωσης που χρησιμοποιούνται στον κανόνα του τραπεζίου, για τον υπολογισμό των ολοκληρωμάτων  $I_{\partial\Gamma^+}$  and  $I_{\partial\Gamma^-}$  στις (55) και (56), και στον Gaussian ή στον Clenshaw-Curtis κανόνα για τον υπολογισμό του ολοκληρώματος  $I_{(-\infty, \infty)}^\ell$  στο (53). Ορίζουμε ακόμα το σχετικό σφάλμα  $E_N$ , σε σχέση με το πλήθος των σημείων ολοκλήρωσης, ως:

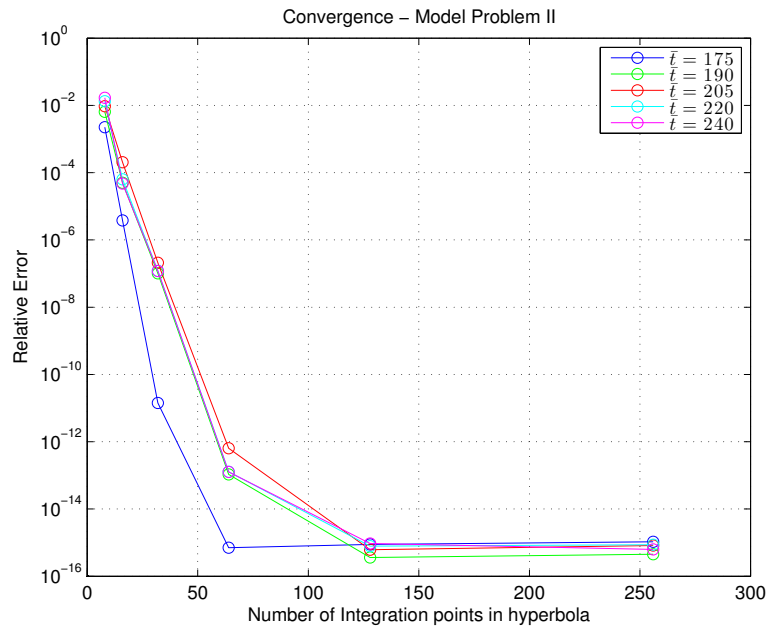
$$E_N := \frac{\|C_N - C_{2N}\|_\infty}{\|C_{2N}\|_\infty}. \quad (65)$$

Υπενθυμίζουμε ότι για  $\ell = 1$  το ολοκλήρωμα  $I_{(-\infty, \infty)}^\ell$  υπολογίζεται αναλυτικά χρησιμοποιώντας την σχέση (61). Σε αυτή την περίπτωση, η εκθετική σύγκλιση του κανόνα του τραπεζίου στα υπερβολικά μονοπάτια φαίνεται, για τα προβλήματα I και II της Τελικής Τεχνικής Έκθεσης της Δράσης 4.2 [12], στα σχήματα 9 και 10.

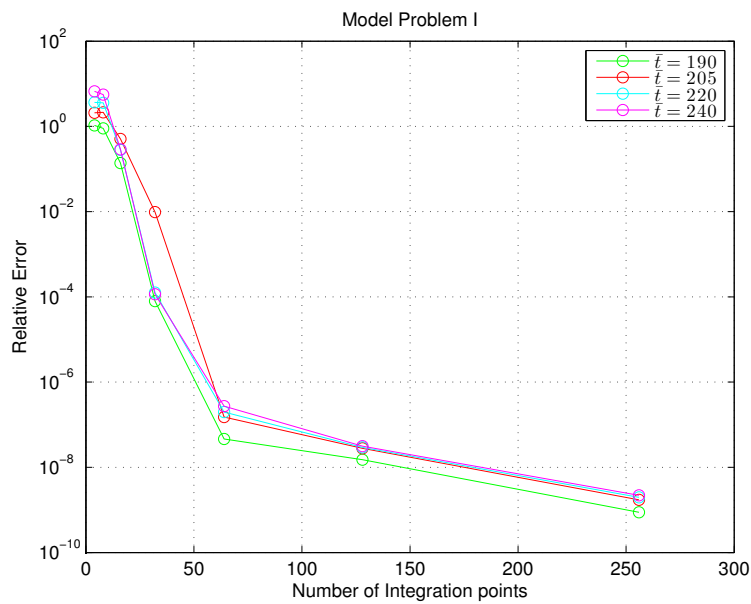


Σχήμα 9: Καμπύλες σύγκλισης για τον κανόνα του τραπεζίου για το πρόβλημα I.

Για  $\ell \neq 1$  το ολοκλήρωμα  $I_{(-\infty, \infty)}^\ell$  υπολογίζεται αριθμητικά κάνοντας χρήση της σχέσης (63). Το αριθμητικό σφάλμα για τον υπολογισμό του  $I_{(-\infty, \infty)}^\ell$  κυριαρχεί στο συνολικό σφάλμα και φαίνεται στα σχήματα 11 και 12 στην περίπτωση της Gaussian ολοκλήρωσης και στα σχήματα 13 και 14 στην περίπτωση που χρησιμοποιείται ο κανόνας Clenshaw-Curtis. Οι αποδόσεις των δυο σχημάτων είναι παρόμοιες αλλά μικρότερες από την περίπτωση του κανόνα του τραπεζίου στα υπερβολικά μονοπάτια για  $\ell = 1$ .

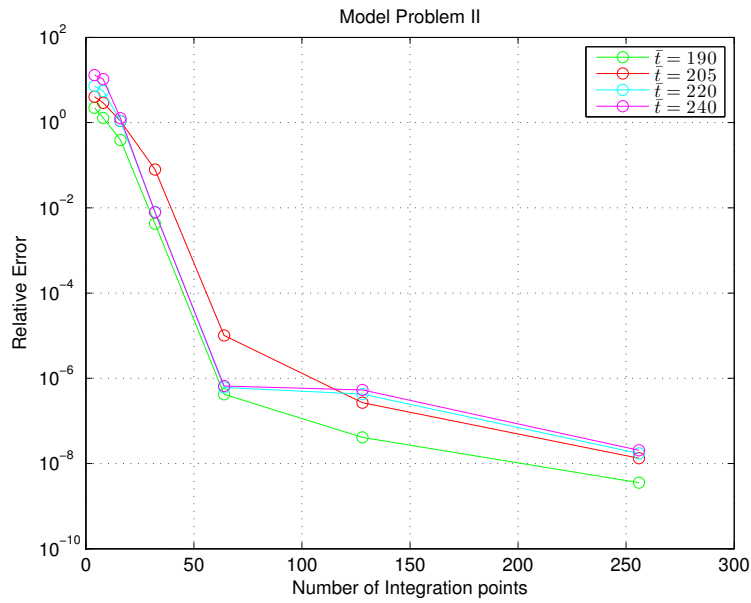


Σχήμα 10: Καμπύλες σύγκλισης για τον κανόνα του τραπεζίου για το πρόβλημα II.

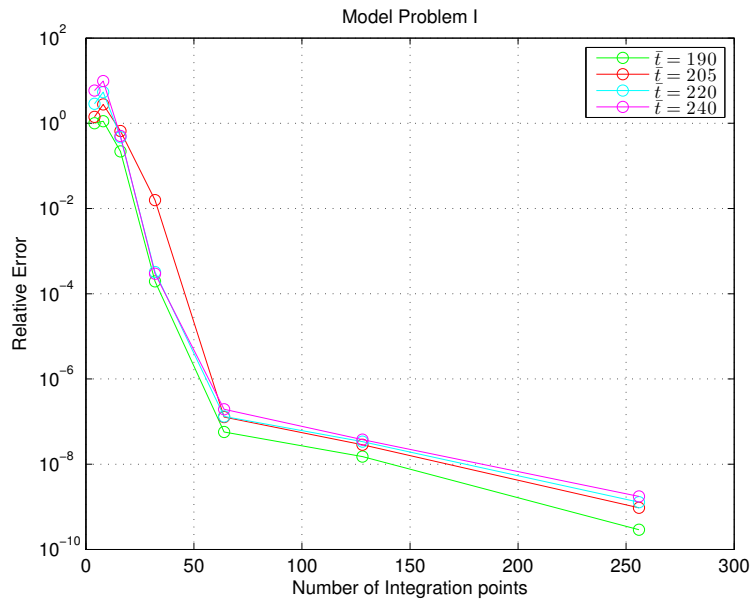


Σχήμα 11: Καμπύλες σύγκλισης για τον Gaussian κανόνα για το πρόβλημα I.

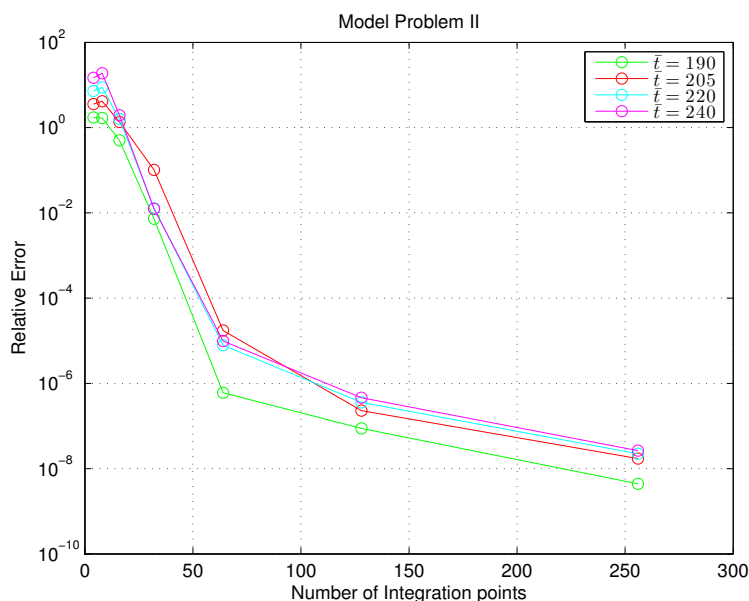




Σχήμα 12: Καμπύλες σύγκλισης για τον Gaussian κανόνα για το πρόβλημα II.



Σχήμα 13: Καμπύλες σύγκλισης για τον κανόνα Clenshaw-Curtis για το πρόβλημα I.



Σχήμα 14: Καμπύλες σύγκλισης για τον κανόνα Clenshaw-Curtis για το πρόβλημα II.

## 4 Παραδοτέα

Τα παραδοτέα της παρούσας δράσης, σύμφωνα και με το Τεχνικό Δελτίο του Έργου είναι:

- Τρεις ετήσιες τεχνικές εκθέσεις και μια τελική.
- Δημοσιεύτηκαν 4 επιστημονικά άρθρα σε διεθνή περιοδικά και σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων:
  - D. Mantzavinos, M. Papadomanolaki, Y.G. Saridakis and A.G. Sifalakis, *Fokas transform method for a brain tumor invasion model with heterogeneous diffusion in 1 + 1 dimensions*, J. Applied Numerical Mathematics (2014), in press, <http://dx.doi.org/10.1016/j.apnum.2014.09.006>
  - M. Asvestas, A.G. Sifalakis, E.P. Papadopoulou and Y.G. Saridakis, *Fokas method for a multi-domain linear reaction-diffusion equation with discontinuous diffusivity*, 2nd International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences 2013, Journal of Physics: Conference Series 490 (2014) 012143
  - M. Asvestas, E.P. Papadopoulou, A.G. Sifalakis and Y.G. Saridakis, *The Unified Transform for a Class of Reaction-Diffusion Problems*

*with Discontinuous Time Dependent Parameters*, Proceedings of the World Congress on Engineering 2015 Vol I, pp 1-6, WCE 2015, July 1 - 3, 2015, London, U.K.

- A.S. Fokas, A. Alexandrou-Himonas and D. Mantzavinos, *The Nonlinear Schrödinger equation on the half line*, Transactions of AMS, (accepted 2015)

Σημειώνουμε επίσης στα πλαίσια του έργου έχουν συγκαταλέγονται και τα επιστημονικά άρθρα:

- A.G. Sifalakis, M. Papadomanolaki, E.P. Papadopoulou and Y.G. Saridakis, *The Fokas method for heterogeneous reaction-diffusion brain tumors that incorporate Radiotherapy and Chemotherapy*, (submitted 2015)
- D. Mantzavinos and A.S. Fokas, *The Unified Transform For The Heat Equation: II. Non-Separable Boundary Conditions In Two Dimensions*, European J Applied Math, 2015 (<http://dx.doi.org/10.1017/S0956792-515000224>).
- Ολοκληρώθηκε και παραδόθηκε η μεταπτυχιακή διατριβή:
  - Μ. Ασβεστάς, "Εφαρμογή της μεθόδου Φωκά στο μαθηματικό μοντέλο διάχυσης των καρκινικών κυττάρων σε n+1 εγκεφαλικές περιοχές", Μεταπτυχιακή Διατριβή 2013

## 5 Συνεργασίες

Η ερευνητική δραστηριότητα της παρούσα δράσης πραγματοποιήθηκε από την ερευνητική ομάδα του Πολυτεχνείου Κρήτης (ΚΕΟ 1) αποτελούμενη από τους καθ. Ι. Σαριδάκη, καθ. Ε. Παπαδοπούλου, Δρ. Α. Σηφαλάκη, Δρ. Μ. Παπαδομανωλάκη σε συνεργασία με τον μετακαλούμενο Έλληνα του εξωτερικού καθηγητή Α. Φωκά (Πανεπιστήμιο Cambridge) και τον ερευνητή Δ. Μαντζαβίνο (Πανεπιστήμιο Notre Dame). Στα πλαίσια του έργου συνεργάστηκε και ολοκλήρωσε την ερευνητική διατριβή του ο μεταπτυχιακός φοιτητής Μ. Ασβεστάς.

## 6 Μελλοντικές Δράσεις

Έχοντας ολοκληρώσει πλήρως την ανάπτυξη της μεθόδου για γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1+1 διαστάσεις, οι άμεσοι μελλοντικοί μας στόχοι περιλαμβάνουν την επέκταση της μελέτης της μεθόδου Φωκά σε εξελικτικά



προβλήματα πολλαπλών χωρικών πεδίων στις δύο χωρικές διαστάσεις καθώς και σε ολοκληρώσιμα γραμμικοποιήσιμα μη-γραμμικά προβλήματα.

## Αναφορές

- [1] Μ. Ασβεστάς, Ε. Π. Παπαδοπούλου, Α. Γ. Σηφαλάκης, και Ι. Γ. Σαριδάκης, *The Unified Transform for a Class of Reaction-Diffusion Problems with Discontinuous Time Dependent Parameters*, Proceedings of the World Congress on Engineering 2015.
- [2] Cook J, Woodward DE, Tracqui P και Murray JD (1995) *Resection of gliomas and life expectancy*, J Neurooncol., 24, 131.
- [3] Corwin, David AND Holdsworth, Clay AND Rockne, Russell C. AND Trister, Andrew D. AND Mrugala, Maciej M. AND Rockhill, Jason K. AND Stewart, Robert D. AND Phillips, Mark AND Swanson, Kristin R. *Toward Patient-Specific, Biologically Optimized Radiation Therapy Plans for the Treatment of Glioblastoma*, PLoS ONE, 8, 2013.
- [4] Flyer N και Fokas AS *A hybrid analytical-numerical method for solving evolution partial differential equations I: The half-line*, Proc. R. Soc. A, 464, 1823-1849, 2008.
- [5] R. Rockne, E. C. Alvord Jr., J. K. Rockhill and K. R. Swanson, *A mathematical model for brain tumor response to radiation therapy*, J. Math. Biol., 58, 561–578, 2009.
- [6] Mantzavinos D, Papadomanolaki MG, Saridakis YG και Sifalakis AG *A novel transform approach for a brain tumor invasion model with heterogeneous diffusion in 1+1 dimensions*, (submitted) 2013
- [7] M.G. Papadomanolaki *PhD Thesis*, Technical University of Crete,
- [8] Weideman J.A.C και Trefethen L.N. *Parabolic and hyperbolic contours for computing the Bromwich integral*, Math. Comp., 76(259), 1341–1356, 2007
- [9] T.S. Papatheodorou και A.N.Kandili *Novel numerical techniques based on Fokas transforms, for the solution of initial boundary value problems*, *Journal of Computational and Applied Mathematics* 227:75-82, 2009.
- [10] K. R. Swanson, *Mathematical modeling of the growth and control of tumors*, PHD Thesis, University of Washington, 1999.



- [11] G. Powathil, M. Kohandel, S. Sivaloganathan, A. Oza and M. Milosevic, *Mathematical modeling of brain tumors: effects of radiotherapy and chemotherapy*, Phys. Med. Biol. 52 :3291-3306, 2007.
- [12] MATENVMED- MIS 379416, Δράση 4.2: Τεχνική Έκθεση 2015.
- [13] MATENVMED- MIS 379416, Δράση 2.4: Τεχνική Έκθεση 2014.
- [14] Tracqui P, Cruywagen GC, Woodward DE, Bartoo GT, Murray JD, Alvord Jr EC (1995) *A mathematical model of glioma growth: the effect of chemotherapy on spatio-temporal growth*, Cell Prolif, 28 17–31.
- [15] L.N. Trefethen, J.A.C Weideman, T.Schmelzer *Tablot quadratures and rational approximations*, BIT Numerical Mathematics, 46:653-670, 2006.
- [16] D.E.Woodward,J.Cook,P.Tracqui,G.C.Cruywagen,J.D.Murray,και E.C.Alvord Jr. *A mathematical model of glioma growth: the effect of extent of surgical resection*, Cell Proliferation,29:269-288, 1996.