## Ετήσια Τεχνική Έκθεση

## Έτος 2014



## 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 2.1

## Υβριδικές/Ασυνεχείς Μέθοδοι Collocation



1	Σκοπός				
	1.1	Ανάπτυξη dDHC για μη-γραμμικά ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+2 διαστάσεις με ασυνέχειες μόνο σε μία διάσταση	3		
	1.2	Ανάπτυξη dDHC για γραμμικά ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+2 διαστάσεις με			
		ασυνέχειες ταυτόχρονα και στις δύο χωρικές διαστάσεις	3		
	1.3	Ι Ιροσέγγιση του ασυνεχούς συντελεστή διάχυσης με γενικευμένα	٨		
	14	Οι-κυρικά πολυωνυμα Ανάπτιξη Υβοιδικής Collocation - ΜΧΛ (HC-IR) μεθόδου στις 1+1	4		
		διαστάσεις	4		
2	Μεθ	οδολογία	4		
	2.1	Ανάπτυξη dDHC για μη-γραμμικά ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+2 διαστάσεις			
	<b>~</b> ~	με ασυνέχειες μόνο σε μια διάσταση	4		
	۷.۷	ασυνέχειες ταυτόχρονα και στις δύο χωρικές διαστάσεις	5		
	2.3	Προσέγγιση του ασυνεχούς συντελεστή διάχυσης με γενικευμένα			
		δι-κυβικά πολυώνυμα	7		
	2.4	Ανάπτυξη Υβριδικής Collocation - ΜΧΔ (HC-IR) μεθόδου στις 1+1	4.0		
	25		10		
	2.5		11		
3	Αποτελέσματα				
	3.1	Ανάπτυξη dDHC για μη-γραμμικά ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+2 διαστάσεις			
	<u> </u>	με ασυνέχειες μόνο σε μία διάσταση	12		
	3.2	Προσεγγιση του ασυνεχούς συντελεστη σιαχυσης με γενικευμενά	14		
	3.3	Ανάπτυξη Υβριδικής Collocation - ΜΧΔ (HC-IR) μεθόδου στις 1+1			
		διαστάσεις	15		
	3.4	Γενικευμένοι Συντελεστές Διάχυσης	16		
4	Παραδοτέα		17		
5	Συν	εργασίες	17		
6	Μελλοντικές Δράσεις				



## 1 Σκοπός

Η βασική ερευνητική δραστηριότητα που αναπτύξαμε τη τρέχουσα περίοδο ήταν η ανάπτυξη φορμαλισμού σχετικά με την επέκταση της μεθόδου dDHC για την επίλυση:

- Μη-γραμμικών παραβολικών και ελλειπτικών προβλήματα αρχικών και συνοριακών συνθηκών πολλαπλών πεδίων (ΠΑΣΣ-ΠΠ) στις 1+2 (μία χρόνου + δύο χωρικές) διαστάσεις, με ασυνεχή συντελεστή διάχυσης όπου οι ασυνέχειες παρουσιάζονται μόνο στην μία από τις δύο διαστάσεις.
- Γραμμικών παραβολικών και ελλειπτικών ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+2 διαστάσεις, με ασυνεχή συντελεστή διάχυσης όπου οι ασυνέχειες παρουσιάζονται ταυτόχρονα και στις δύο διαστάσεις (εσωτερικές "γωνίες").

Παράλληλα, ξεκινήσαμε τη μελέτη υβριδικών μεθόδων collocation (στις 1+1 διαστάσεις) μέσω του συνδυασμού τους με Μεθόδους Χαλάρωσης στις Διεπαφές (ΜΧΔ).

#### 1.1 Ανάπτυξη dDHC για μη-γραμμικά ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+2 διαστάσεις με ασυνέχειες μόνο σε μία διάσταση

Συνδυάζοντας το φορμαλισμό που αναπτύξαμε αφενός μεν για την απόδοση των collocation πινάκων μέσω τανυστινικών γινομένων και αφετέρου μεν την απόδοση των μη-γραμμικών όρων μέσω Hadamard γινομένων, προχωρήσαμε στην ανάπτυξη των μη γραμμικών εξισώσεων Collocation για προβλήματα στις 1+2 διαστάσεις με ασυνεχή συντελεστή διάχυσης όπου οι ασυνέχειες παρουσιάζονται μόνο στην μία από τις δύο διαστάσεις. Με τον τρόπο αυτό μας δόθηκε η δυνατότητα σύγκρισης και μελέτης δύο διαφορετικών μοντέλων εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου (βλ. Τεχνικές Εκθέσεις Δράση 4.2), αυτό της εκθετικής αύξησης (γραμμικό μοντέλο) και της λογιστικής αύξησης (μη-γραμμικό μοντέλο).

#### 1.2 Ανάπτυξη dDHC για γραμμικά ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+2 διαστάσεις με ασυνέχειες ταυτόχρονα και στις δύο χωρικές διαστάσεις

Έχοντας αναπτύξει τον απαραίτητο φορμαλισμό για γραμμικά και μη-γραμμικά ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+1 και στις 1+2 διαστάσεις, ξεκινήσαμε την τρέχουσα περίοδο την αντιμετώπιση του γενικού προβλήματος στις 1+2 διαστάσεις το οποίο επιτρέπει οι ασυνέχειες του συντελεστή διάχυσης να παρουσιάζονται και στις δύο χωρικές διαστάσεις ταυτόχρονα. Με τον τρόπο αυτό παρουσιάζονται γωνιακές



ασυνέχειες, δηλαδή εσωτερικές γωνίες όπου και οι μερικές παράγωγοι ως προς *x* και ως προς *y* είναι ταυτόχρονα ασυνεχείς. Βασικός στόχος της ερευνητικής δραστηριότητας ήταν η ανάπτυξη των Collocation εξισώσεων και η μελέτη της τάξης σύγκλισης της μεθόδου. Παρατηρήθηκε και μελετήθηκε η μείωση της τάξης σύγκλισης στη *γειτονιά* της γωνιακής ασυνέχειας.

#### 1.3 Προσέγγιση του ασυνεχούς συντελεστή διάχυσης με γενικευμένα δι-κυβικά πολυώνυμα

Για την αποκατάσταση της τάξης σύγκλισης της Collocation μεθόδου, όταν χρησιμοποιείται για την χωρική διακριτοποίηση του γενικού προβλήματος στις 1+2 διαστάσεις το οποίο επιτρέπει οι ασυνέχειες του συντελεστή διάχυσης να παρουσιάζονται και στις δύο χωρικές διαστάσεις ταυτόχρονα, θεωρήσαμε τη συνεχή βάση των δι-κυβικών πολυωνύμων Hermite ως συναρτήσεις βάσεις και κατασκευάσαμε νέα γενικευμένα δι-κυβικά πολυώνυμα για να προσεγγίσουμε τον ασυνεχή συντελεστή διάχυσης του ΠΑΣΣ-ΠΠ.

#### 1.4 Ανάπτυξη Υβριδικής Collocation - ΜΧΔ (HC-IR) μεθόδου στις 1+1 διαστάσεις

Σε συνεργασία με την ερευνητική ομάδα του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας, την τρέχουσα περίοδο, αναπτύξαμε τον απαραίτητο φορμαλισμό για την ανάπτυξη και εφαρμογή της Collocation - ΜΧΔ για την επίλυση του γραμμικού ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+1 διαστάσεις. Παρατηρήσαμε ότι η νέα επαναληπτική μέθοδος συγκλίνει στην λύση που παράγει η dDHC με τετάρτης τάξης ταχύτητα.

Το υπόλοιπο της παρούσης Τεχνικής Έκθεσης είναι οργανωμένο ως εξής. Στην παράγραφο 2 παρουσιάζουμε τα βασικά στοιχεία της μεθοδολογίας που ακολουθήσαμε και στην παράγραφο 3 τα σημαντικότερα αποτελέσματα ενώ στις επόμενες δύο αναφέρουμε τις συνεργασίες που προέκυψαν κατα τη διάρκεια του έτους καθώς και τους μελλοντικούς στόχους.

## 2 Μεθοδολογία

#### 2.1 Ανάπτυξη dDHC για μη-γραμμικά ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+2 διαστάσεις με ασυνέχειες μόνο σε μία διάσταση

Τα βασικά αποτελέσματα-εργαλεία που αναπτύξαμε στην κατεύθυνση αυτή συνοψίζονται στα παρακάτω.



Γνωρίζουμε ήδη ότι κάθε όρος της μορφής

$$\left(\frac{\partial^{m+n}}{\partial x^m\partial y^n}u(x,y,t)\right)$$

με  $m,n \in \mathcal{N}$  ,  $m+n \leq 2$ , μπορεί να γραφεί με χρήση του Tensor Product Collocation ως,

$$A_{mn}\boldsymbol{a} = (C_m \otimes C_n)\,\boldsymbol{a},$$

όπου με  $C_m$  και  $C_n$  συμβολίζουμε τους Collocation πίνακες που αντιστοιχούν στη 1-διάσταση. Συνεπώς, σε αναλογία με την περίπτωση των 1+1 διαστάσεων (βλ. Τεχνική Έκθεση Δράση 2.1 Έτος 2013), αποδείξαμε ότι αν θεωρήσουμε ένα μη γραμμικό πολυωνυμικό όρο της μορφής

$$\left(\frac{\partial^m}{\partial x^m}u(x,y,t)\right)\left(\frac{\partial^n}{\partial y^n}u(x,y,t)\right)$$

τότε αντίστοιχα μπορεί να γραφεί στην μορφή πινάκων ως εξής:

$$[(C_m \otimes C_0) \boldsymbol{a}] \circ [(C_0 \otimes C_n) \boldsymbol{a}]$$

Επιπλέον την παραπάνω πρόταση μπορούμε να την γενικέυσουμε για τον μη γραμμικό όρο

$$\left(\frac{\partial^m}{\partial x^m}u(x,y,t)\right)^k \left(\frac{\partial^n}{\partial y^n}u(x,y,t)\right)^l$$

όπου οι αντίστοιχοι πίνακες Collocation θα είναι:

$$[(C_m \otimes C_0) \boldsymbol{a}]^{\circ k} \circ [(C_0 \otimes C_n) \boldsymbol{a}]^{\circ l}$$

Ο φορμαλισμός αυτός που προέκυψε, είναι απαραίτητος για την ευκολότερη επίλυση και μελέτη των μη γραμμικών διαφορικών εξισώσεων στις 1+2 διαστάσεις για ομοιογενή καθώς και ανομοιογενή περιβάλλοντα.

#### 2.2 Ανάπτυξη dDHC για γραμμικά ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+2 διαστάσεις με ασυνέχειες ταυτόχρονα και στις δύο χωρικές διαστάσεις

Σε συνέχεια των αποτελεσμάτων που έχουμε παράξει με την μέθοδο dDHC για γραμμικά και μη γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1+1 και 1+2 διαστάσεις το προηγούμενο διάστημα, προχωρήσαμε στη εφαρμογή της dDHC σε ΠΑΣΣ-ΠΠ που παρουσιάζουν και γωνιακές ασυνέχειες.



Ειδικότερα, ας θεωρήσουμε το γραμμικό μοντέλο ΠΑΣΣ-ΠΠ

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \nabla \left[ D \nabla (u) \right] \quad , \quad u := u(x, y, t) \\ (x, y) &\in [a, b]^2 \quad , \quad 0 \le t \le T \\ u(x, y, 0) &= f(x, y) \quad , \quad \frac{\partial u}{\partial n} = 0 \end{aligned}$$

όπου ο συντελεστής διάχυσης D όπως φαίνεται στο Σχ. (1) δημιουργεί δύο περιοχές με ορθογώνιο interface (διεπαφή) μεταξύ τους



Σχήμα 1: Συντελεστής διάχυσης για το Rectangular πρόβλημα.



Σχήμα 2: Η αριθμητική λύση για ένα Rectangular πρόβλημα.



Με ιδιαίτερη προσοχή και ακολουθώντας διαφορετικές προσεγγίσεις αναπτύξαμε το αντίστοιχο collocation σύστημα συνήθων διαφορικών εξισώσεων κάνοντας χρήση και τανυστικών γινομένων σε επιλεγμένες περιοχές.

Όπως φαίνεται στο Σχ. 2 η αριθμητική λύση που παρήχθη προσεγγίζει το επιθυμητό προφίλ της ασυνέχειας της παραγώγου στο ορθογώνιο διεπαφής. Όμως, μετά από σειρά προσομοιώσεων και ανάλυσης, διαπιστώσαμε ότι η μέθοδος δημιουργεί σφάλματα χαμηλότερης τάξης σε γειτονιές των γωνιακών ασυνεχειών (Σχ. 3) με συνέπεια την απώλεια της τέταρτης τάξης σύγκλισης της μεθόδου.



Σχήμα 3: Το απόλυτο χωρικό σφάλμα της λύσης για ένα Rectangular πρόβλημα.

Η μελέτη για την αντιμετώπιση του προβλήματος της απώλειας της τέταρτης τάξης σύγκλισης μας οδήγησε στην εισαγωγή γενικευμένων συνθηκών στις περιοχές των γωνιακών ασυνεχειών οι οποίες δεν ικανοποιούνται από τα ασυνεχή δι-κυβικά Hermite πολυώνυμα. Η εισαγωγή ενός νέου γενικευμένου δι-κυβικού πολυωνύμου είναι απαραίτητη γεγονός που μας οδήγησε στην ανάπτυξη της μεθόδου που παρουσιάζουμε στην επόμενη παράγραφο.

#### 2.3 Προσέγγιση του ασυνεχούς συντελεστή διάχυσης με γενικευμένα δι-κυβικά πολυώνυμα

Για την πληρέστερη παρουσίαση των αποτελεσμάτων της παραγράφου αυτής παραθέτουμε καταρχήν τα σχετικά αποτελέσματα για ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+1 διαστάσεις και προχωρούμε με την εισαγωγή των γενικευμένων δι-κυβικών πολυωνύμων.



Τεχνική Έκθεση 2014

Για την ανάπτυξη της μεθόδου θεωρούμε το γραμμικό πρόβλημα μοντέλο ενός ΠΑΣΣ-ΠΠ:

$$u_t = (Du_x)_x + u$$
  
  $x \in [a,b] = \Omega$ ,  $t \in [0,T]$ ,  $u(x,0) = f(x)$ ,  $u_x(a,t) = u_x(b,t) = 0$ 

όπου χωρίς βλάβη της γενικότητας θεωρούμε επίσης ότι ο συντελεστής διάχυσης χαρακτηρίζει δύο διαφορετικές περιοχές,

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

Για την επίλυση αυτού του προβλήματος χωρίς την χρήση ασυνεχών Hermite πολυωνύμων θεωρήσαμε εναλλακτικά την προσέγγιση του συντελεστή διάχυσης Dαπό μία συνεχή συνάρτηση που κατασκευάζεται χρησιμοποιώντας κατάλληλα κυβικά πολυώνυμα κοντά στα σημεία διεπαφής. Ειδικότερα, αν θεωρήσουμε για το κάθε χωρίο ομοιόμορφη διαμέριση μήκους  $h_1 = (w - a)/N_1$  και  $h_2(b - w)/N_2$ αντίστοιχα τότε ο συνεχής συντελεστής διάχυσης θα έχει τη μορφή:

$$\tilde{D} = \begin{cases} \gamma & , x \in [a, w - h_1] \\ p(x) & , x \in (w - h_1, w + h_2] \\ 1 & , x \in (w + h_2, b] \end{cases}$$

όπου  $p(x) = a_3 x^3 + a_2 x^2 + a_1 x + a_0$  ένα κυβικό πολυώνυμο που παράγεται με τη χρήση των απαραίτητων συνθηκών:

$$p(w - h_1) = \gamma$$
,  $p_x(w - h_1) = 0$ ,  $p(w + h_2) = 1$ ,  $p_x(w + h_2) = 0$ 





Αξίζει να σημειώσουμε ότι όσο πιο πυκνή χωρική διαμέριση χρησιμοποιήσουμε τόσο η λύση αυτής της μεθόδου προσεγγίζει την ασυνεχή της dDHC.



Ας θεωρήσουμε τώρα το πρόβλημα μοντέλο που περιγράφει την ανάπτυξη καρκινικού όγκου στον εγκέφαλο στις 1+2 διαστάσεις

$$\begin{split} \frac{\partial u}{\partial t} &= \nabla \cdot (D \nabla u) + u \quad , \quad u := u(x, y, t) \\ & (x, y) \in [a, b]^2 \quad , \quad 0 \leq t \leq T \\ & u(x, y, 0) = f(x, y) \quad , \quad \frac{\partial u}{\partial \eta} = 0 \end{split}$$

όπου ο συντελεστής διάχυσης, που χαρακτηρίζεται από μία γωνιακή ασυνέχεια, ορίζεται ως:



Σχήμα 5: Ο συντελεστής διάχυσης για το πρόβλημα μιας γωνίας.

Αν υποθέσουμε, για ευκολία στη παρουσίαση, ότι έχουμε ομοιόμορφη διαμέριση και στις δύο κατευθύνσεις μήκους h, τότε η γενικευμένη συνάρτηση  $\tilde{D}(x,y)$  που προσεγγίζει τον συντελεστή διάχυσης D είναι της μορφής:

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

όπου τα πολυώνυμα p(x), p(y) έχουν οριστεί παραπάνω για το πρόβλημα στις 1+1 διαστάσεις ενώ στη γωνία χρησιμοποιούμε ένα γενικευμένο κυβικό πολυώνυμο  $c(x,y) = \sum_{i=0}^{i=3} \sum_{j=0}^{j=3} a_{ij} x^i y^j$ ώστε να δημιουργήσουμε μια προσέγγιση του





ασυνεχούς συντελεστή όπως φαίνεται στο σχήμα παρακάτω Αξίζει να σημειώ-

Σχήμα 6: Συνεχής συντελεστής διάχυσης.

σουμε ότι, με τη μέθοδο αυτή, οι πίνακες collocation που συμμετέχουν στο αντίστοιχο σύστημα συνήθων διαφορικών εξισώσεων παράγονται με χρήση τανυστικών γινομένων και η τάξη σύγκλισης της μεθόδου παραμένει τετάρτη.

#### 2.4 Ανάπτυξη Υβριδικής Collocation - ΜΧΔ (HC-IR) μεθόδου στις 1+1 διαστάσεις

Για λόγους σύγκρισης, αναπτύσσουμε την HC-IR στο πρόβλημα μοντέλο που χρησιμοποιήσαμε και στην προηγούμενη παράγραφο στις 1+1 διαστάσεις. Ειδικότερα,

#### Ασυνεχές ΠΑΣΣ-ΠΠ

$$u_{t} = (Du_{x})_{x} + u$$

$$x \in [a, b] = \Omega, \ t \in [0, T], \ u(x, 0) = f(x), \ u_{x}(a, t) = u_{x}(b, t) = 0$$

$$D = \int \gamma, \ x \in [a, w] = \Omega_{1} \quad \text{wg av } \in (a, b)$$
(1)

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

Υπενθυμίζουμε ότι οι συνθήκες συνέχειας που προκύπτουν από την παραβολική φύση του ΠΑΣΣ-ΠΠ και πρέπει να ικανοποιεί η μέθοδός μας είναι οι:

$$\lim_{x \to w^-} Du_x(x,t) = \lim_{x \to w^+} Du_x(x,t) \Longleftrightarrow \gamma u_x(w^-,t) = u_x(w^+,t)$$

και

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



Η HC-IR σε αντίθεση με την dDHC δεν λύνει ένα ενιαίο πρόβλημα πολλαπλών πεδίων, αλλά το διαιρεί σε ανεξάρτητα προβλήματα και χρησιμοποιεί τα σημεία διεπαφής για να παράγει τις συνοριακές συνθήκες ανάμεσα σε αυτά. Συνεπώς, για την ανάπτυξη της μεθόδου, χρησιμοποιήσαμε τα συνεχή πολυώνυμα Hermite και θεωρήσαμε τις συνθήκες συνέχειας στις διεπαφές ως εσωτερικές συνοριακές συνθήκες των προβλημάτων. Ειδικότερα, η μέθοδος που αναπτύξαμε ανήκει στην κατηγορία two step AVE methods, και μπορούμε να την περιγράψουμε αλγοριθμικά για προβλήματα με δύο περιοχές ως εξής:

- 1.  $\Gamma_{I}\alpha k = 0, \dots$
- 2. Χωρίζουμε το χωρίο μας  $\Omega$  σε δύο υποχωρία  $\Omega_1, \Omega_2$  και διαλέγουμε τυχαία αρχικά  $u_1^{(0)}, u_2^{(0)}$  για την λύση κάθε υποχωρίου.

**3.** 
$$g_1 = \beta_1 \left. \frac{du_1^{(2k)}}{dx} \right|_{x=w} + \frac{1-\beta_1}{\gamma} \left. \frac{du_2^{(2k)}}{dx} \right|_{x=w}$$
,  $g_2 = \gamma g_1$ 

4. Λύνουμε το (ΑΠΣΤ) στο  $\Omega_1$  με  $u_x(a,t) = 0$ ,  $u_x(w,t) = g_1$  και Λύνουμε το (ΑΠΣΤ) στο  $\Omega_2$  με  $u_x(w,t) = g_2$ ,  $u_x(b,t) = 0$ 

5. 
$$h_1 = \alpha_1 u_1^{(2k+1)} \Big|_{x=w} + (1-a_1) u_2^{(2k+1)} \Big|_{x=w}$$
,  $h_2 = h_1$ 

- 6. Λύνουμε το (ΑΠΣΤ) στο  $\Omega_1$  με  $u_x(a,t) = 0$ ,  $u(w,t) = h_1$  και Λύνουμε το (ΑΠΣΤ) στο  $\Omega_2$  με  $u(a,t) = h_2$ ,  $u_x(b,t) = 0$ .
- 7. Κριτήριο Τερματισμού
- 8. Τέλος Για

Η μέθοδος συγκλίνει επαναληπτικά στην ασυνεχή λύση της dDHC με μικρό αριθμό βημάτων και τερματίζει όταν η νέα λύση που παράγει είναι πολύ κοντά στην προηγούμενη λύση ( $||u^{(2k+1)} - u^{(2k-1)}||_2 \le tol$ ).

#### 2.5 Γενικευμένοι Συντελεστές Διάχυσης

Η αντιμετώπιση ΠΑΣΣ-ΠΠ, με συντελεστή διάχυσης D(x) να ορίζεται μέσω γενικευμένων συνεχών συναρτήσεων με ασυνεχή παράγωγο σε ένα πεπερασμένο αριθμό σημείων του πεδίου ορισμού, είναι άμεση και αντιμετωπίζεται μέσω του φορμαλισμού που έχουμε ήδη αναπτύξει. Για παράδειγμα, ας θεωρήσουμε ΠΑΣΣ-ΠΠ μοντέλο:

$$c_{t} = (Dc_{x})_{x} + c , \quad x \in [a, b] , \quad t \ge 0$$
  

$$c_{x}(a, t) = 0 \quad \text{Kal} \quad c_{x}(b, t) = 0$$
  

$$c(x, 0) = f(x)$$
(2)



Τεχνική Έκθεση 2014

ή, ισοδύναμα, αντικαθιστώντας  $c(x,t) = e^t u(x,t)$ :

$$\begin{cases} u_t = (Du_x)_x , x \in [a, b], t \ge 0 \\ u_x(a, t) = 0 \quad \text{Kal} \quad u_x(b, t) = 0 \\ u(x, 0) = f(x) \end{cases}$$
(3)

όπου ο συντελεστής διάχυσης ορίζεται ως:

$$D = \begin{cases} D_1(x) &, a \le x \le w \\ D_2(x) &, w < x \le b \end{cases}$$

με  $D_1(x)$  και  $D_2(x)$  παραγωγίσιμες συναρτήσεις στο πεδίο ορισμού τους. Και στην περίπτωση αυτή, οι συνθήκες συνέχειας, που η παραβολική μορφή του προβλήματος επιβάλλει στο σημείο διεπαφής x = w, έχουν τη μορφή:

$$[u] := u^+ - u^- = 0 , \qquad (4)$$

$$[Du_x] := D^+ u_x^+ - D^- u_x^- = 0 , \qquad (5)$$

όπου  $u^+ := \lim_{x \to w^+} u(x)$  και  $u^- := \lim_{x \to w^-} u(x)$ . Παρατηρώντας τώρα ότι η συνθήκη (5) γράφεται ως

$$\lim_{x \to w^+} D_2(x) u_x = \lim_{x \to w^-} D_1(x) u_x$$
(6)

και επομένως και ως

$$\lim_{x \to w^+} u_x = \gamma \lim_{x \to w^-} u_x \ , \gamma := \frac{D_1(w)}{D_2(w)} \ (D_2(w) \neq 0)$$
(7)

καθίσταται σαφές ότι ο φορμαλισμός της μεθόδου dDHC, που έχουμε αναπτύξει για την περίπτωση των step συναρτήσεων και συμπεριλάβει στις προηγούμενες τεχνικές εκθέσεις, ισχύει και στη γενικότερη περίπτωση.

### 3 Αποτελέσματα

#### 3.1 Ανάπτυξη dDHC για μη-γραμμικά ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+2 διαστάσεις με ασυνέχειες μόνο σε μία διάσταση

Θεωρούμε την εξίσωση

$$\begin{cases} c_t = (Dc_x)_x + (Dc_y)_y + c(1-c) , & (x,y) \in [-4,4]^2 , t \ge 0 \\ \frac{\partial c}{\partial \eta} = 0 & \text{Kal} \quad c(x,y,0) = f(x) \end{cases}$$
(8)



με

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

Η λύση της εξίσωσης στον τελικό χρόνο είναι:



Σχήμα 7: Η αριθμητική λύση της μη γραμμικής εξίσωσης στις 2+1 διαστάσεις.

και η τάξη σύγκλισης της μεθόδου διατηρείτε στο 4, όπως φαίνεται στο παρακάτω διάγραμμα



Σχήμα 8: Η τάξη σύγκλισης της μεθόδου dDHC.



Δ2.1/13

#### 3.2 Προσέγγιση του ασυνεχούς συντελεστή διάχυσης με γενικευμένα δι-κυβικά πολυώνυμα

Ας θεωρήσουμε το πρόβλημα μοντέλο:

$$\begin{split} \frac{\partial u}{\partial t} &= \nabla \left[ D \nabla (u) \right] \quad , \quad u := u(x,y,t) \\ & (x,y) \in [0,2]^2 \quad , \quad 0 \leq t \leq 2 \\ u(x,y,0) &= f(x,y) \quad , \quad \frac{\partial u}{\partial \eta} = 0 \end{split}$$

με συντελεστή διάχυσης:

$$D = \left\{ \begin{array}{rrr} 1 & , & (x,y) \in (1,2] \times (1,2] \\ \gamma & , & (x,y) \not \in (1,2] \times (1,2] \end{array} \right.$$

Η επίλυση της εξίσωσης με τον Συντελεστή Διάχυσης  $\tilde{D}$ , τον οποίο έχουμε περιγράψει στην Μεθοδολογία της μεθόδου παραπάνω μας οδηγεί στην αριθμητική λύση που φαίνεται στο Σχ. (9), η οποία φαίνεται να προσεγγίζει σωστά το αναμενόμενο προφίλ στις περιοχές διεπαφής.



Σχήμα 9: Η αριθμητική λύση με τον γενικευμένο δι-κυβικό συντελεστή διάχυσης.

Τέλος, στον Πίνακα (1) φαίνεται το απόλυτο σφάλμα, η τάξη σύγκλισης καθώς και ο υπολογιστικός χρόνος της συνολικής υλοποίησης της μεθόδου.



$(N_x, N_y)$	Error	0.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

Πίνακας 1: Πίνακας Αριθμητικών Αποτελεσμάτων για την μέθοδο κυβικής προσέγγισης του Συντελεστή Διάχυσης.

#### 3.3 Ανάπτυξη Υβριδικής Collocation - ΜΧΔ (HC-IR) μεθόδου στις 1+1 διαστάσεις

Θεωρούμε την παραβολική εξίσωση

$$u_t = (Du_x)_x + u$$

$$x \in [-5,5] = \Omega , \ t \in [0,2] , \ u(x,0) = f(x) , \ u_x(-5,t) = u_x(5,t) = 0$$
(9)

για ένα πρόβλημα δύο περιοχών που περιγράφεται απο τον συντελεστή διάχυσης,

$$D = \begin{cases} \gamma & , x \in [-5, -3] = \Omega_1 \\ 1 & , x \in (-3, 5] = \Omega_2 \end{cases}$$

Η λύση που παράξαμε με την μέθοδο Hermite Collocation - Interface Relaxation φαίνεται στο Σχ. (10) με μπλε διακεκομμένη γράμμη, σε σύγκριση με την λύση της dDHC (κόκκινη συνεχόμενη γραμμή). Επιπλέον, αφού θεωρήσαμε το σφάλμα

$$\mathcal{E}_i = \frac{U^i_{dhc} - U^i_{rel}}{U^i_{dhc}}$$

αποδείξαμε ότι η τάξη σύγκλισης της μεθόδου HC-IR ώς προς την λύση της dDHC παραμένει τετάρτη (βλ. Πίνακα (2)).

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

Πίνακας 2: Πίνακας Αριθμητικών Αποτελεσμάτων για την μέθοδο HC-IR.





Σχήμα 10: Υβριδική Hermite Collocation με χρήση Relaxation.

#### 3.4 Γενικευμένοι Συντελεστές Διάχυσης

Ας θεωρήσουμε το πρόβλήμα,

$$\begin{cases} u_t = (Du_x)_x , x \in [-5,5], = 4\\ u_x(-5,t) = 0 \quad \text{KCI} \quad u_x(5,t) = 0 \\ u(x,0) = f(x) \end{cases}$$
(10)

με γραμμικούς συντελεστές διάχυσης σε δύο υποπεριοχές του χωρίου,

$$D = \begin{cases} -0.35x - 0.85 & , & -5 \le x \le -3 \\ -0.08x + 0.53 & , & -3 < x \le 5 \end{cases}$$

Στο Σχ. 11 καθίσταται εμφανής η ασυνέχεια της λύσης στο σημείο διεπαφής καθώς και η επίδραση του γραμμικού συντελεστή διάχυσης σε κάθε περιοχή αντίστοιχα.



Σχήμα 11: Λύση προβλήματος με γραμμικό συντελεστή διάχυσης.



Τεχνική Έκθεση 2014

Επίσης, όπως μπορεί κανείς εύκολα να παρατηρήσει στο Σχ. 12, η τάξη σύγκλισης της μεθόδου παραμένει τετάρτη.



Σχήμα 12: Τάξη σύγκλισης της dDHC μεθόδου.

### 4 Παραδοτέα

- Ανάπτυξη λογισμικού σε προγραμματιστικό περιβάλλον MATLAB.
- Η παρούσα τεχνική έκθεση.

## 5 Συνεργασίες

Η παρούσα ερευνητική δραστηριότητα πραγματοποιήθηκε από η ερευνητική ομάδα του Πολυτεχνείου Κρήτης (ΚΕΟ1) αποτελούμενη από τους καθ. Ι. Σαριδάκη και καθ. Ε. Παπαδοπούλου, Δρ. Μ. Παπαδομανωλάκη και τον υποψήφιο διδάκτορα Ι. Αθανασάκη. Για την ανάπτυξη της μεθόδου HC-IR συνεργαστήκαμε και με τα μέλη της (ΚΕΟ2) καθ. Μ. Βάβαλη και Αν.καθ. Γ. Τσομπανοπούλου.

## 6 Μελλοντικές Δράσεις

Έχοντας ως σκοπό την ολοκλήρωση του συνολικού στόχου του προγράμματος, οι μελλοντικές ενέργειες που προγραμματίζουμε στα πλαίσια της παρούσας δράσης περιλαμβάνουν:

 Ολοκλήρωση της ανάπτυξης της dDHC μεθόδου για γενικευμένα ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+1 και 1+2 διαστάσεις



- Απεικόνιση της dDHC μεθόδου σε παράλληλες αρχιτεκτονικές CPU-GPU
- Συγγραφή των αποτελεσμάτων για δημοσίευση σε επιστημονικά περιοδικά και διεθνή συνέδρια.

### Αναφορές

- [1] Akrivis G *Implicit-Explicit multistep methods for nonlinear parabolic equations*, Mathematics of Computation, **82**, 45-68, 2012
- [2] R. Alexander "Diagonally Implicit Runge-Kutta Methods for stiff ODE's", *SIAM Num. Anal.*, vol. 14, no. 6, pp. 1006-1021, 1977.
- [3] C. de Boor and B. Swartz "Collocation at Gaussian points", *SIAM Num. Anal.*, vol.10, pp. 582-606, 1973.
- [4] P.K. Burgess, P.M. Kulesa, J.D. Murray and E.C. Alvord Jr. "The interaction of growth rates and diffusion coefficients in a threedimensional mathematical model of gliomas", *Journal of Neuropathology and Experimental Neurology*, vol.56, no. 6, pp.704-713, 1997.
- [5] J.C. Butcher "Implicit Runge-Kutta processes", *Math.Comp.*, vol.18, pp.50-64, 1964.
- [6] J.C.Butcher "The numerical analysis of ordinary differential equations ," *John Wiley* , 1987.
- [7] Cherniha R and Dutka V *Exact and Numerical Solutions of the Generalized Fisher Equation*, Reports on Mathematical Physics, **47**, 393-412, 2001
- [8] M. Crouzeix "Sur l'approximation des equations differentielles operationnelles lineaires par desmethodes de Runge Kutta", *PhD Thesis*, University Paris VI, Paris, 1975.
- [9] G.C. Cruywagen, D.E. Woodward, P. Tracqui, G.T. Bartoo, J.D. Murray and E.C. Alvord Jr. "The modeling of diffusive tumours," *Journal of Biological Systems*, vol.3, pp.937-945, 1995.
- [10] de Boor C and Swartz B Collocation at Gaussian points, SIAM Num. Anal., vol. 10, pp. 582-606, 1973
- [11] Duan WS, Yang HJ and Shi YR *An exact solution of Fisher equation and its stability*, Chinese Physics, **15**, 1414-17, 2006



- [12] Fisher RA *The wave of advance of advantageous genes*, Ann. Eugen., **7**, 255-369, 1937
- [13] Gottlieb S, Shu CW and Tadmor E *Strong Stability-Preserving High-Order Time Discretization Methods*, SIAM Num. Anal., **43**, 89-112, 2001
- [14] Gottlieb S and Shu CW Total variation diminishing Runge-Kutta schemes, Mat. Comp., 67, 73-85, 1998
- [15] Kolmogorov AN, Petrovsky IG and Piskunov NS Investigation of the equation of diffusion combined with increasing of the substance and its application to a biology problem, Bull. Moscow State Univ. Ser. A: Math. and Mech., 1(6), 1-25, 1937
- [16] Hairer E Unoconditionally stable explicit methods for parabolic equations, Numer. Math., 35, 57-68, 1980
- [17] Hengeveld R *Dynamics of Biological Invasions*, Chapman and Hall, London, 1989
- [18] A. R. Mitchell, D.F. Griffiths "The Finite Difference Method in Partial Differential Equations," *John Willey & Sons*, 1980.
- [19] Murray JD Mathematical Biology, Springer, Berlin, 1989
- [20] M.G. Papadomanolaki "The collocation method for parabolic differential equations with discontinuous diffusion coefficient: in the direction of brain tumour simulations", *PhD Thesis*, Technical University of Crete, 2012 (in Greek)
- [21] Petrovskii SV and Li BL *Exactly Solvable Models of Biological Invasion*, Taylor & Francis, 2010
- [22] Ruuth S and Spiteri R *Two barriers on strong-stability-preserving time discretization methods*, J. Scientific Computation, **17**, 211-220, 2002
- [23] Schmitt B Stability of implicit Runge-Kutta methods for nonlinear stiff differential equations, BIT, **28**, 884-897, 1988
- [24] Shu CW Total-variation-diminishing time discretizations, SIAM J. Sci. Stat. Comput., 9, 1073-1084, 1988
- [25] Shu CW and Osher S *Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes*, J. Comput. Phys., **77**, 439-471, 1988



- [26] G.D. Smith "Numerical solution of partial equations:finite difference methods(third edition),"*Oxford University Press*, 1985.
- [27] K.R.Swanson "Mathematical modelling of the growth and control of tumour," *PHD Thesis, University of Washington*, 1999.
- [28] K.R.Swanson, E.C.Alvord Jr and J.D.Murray "A quantitive model for differential motility of gliomas in grey and white matter," *Cell Proliferation*, vol.33, pp.317-329, 2000.
- [29] K.R.Swanson,C.Bridge,J.D.Murray and E.C.Alvord Jr "Virtual and real brain tumours:using mathematical modeling to quantify glioma growth and invasion," *J.Neurol.Sci*, vol.216, pp.1-10, 2003.
- [30] P.Tracqui,G.C.CruywagenG,D.E.Woodward,T.Bartoo, J.D.Murray and E.C.Alvord Jr. "A mathematical model of glioma growth:The effect of chemotherapy on spatio-temporal growth," *Cell Proliferation*, vol.28, pp.17-31, 1995.
- [31] D.E.Woodward,J.Cook,P.Tracqui,G.C.Cruywagen,J.D.Murray,and E.C.Alvord Jr."A mathematical model of glioma growth: the effect of extent of surgical resection," *Cell Proliferation*, vol.29, pp.269-288, 1996.

