

# Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2012



## 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</b>	<b>Σκοπός</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Μεθοδολογία</b>	<b>3</b>
2.1	Πρόβλημα Τριών Πεδίων σε $1 + 1$ Διαστάσεις . . . . .	3
2.2	Ολική Συνθήκη . . . . .	5
2.3	Ολοκληρωτική Αναπαράσταση της Λύσης . . . . .	7
2.4	Αριθμητικοί Υπολογισμοί . . . . .	12
2.4.1	Αναλυτικές εκφράσεις για τα ολοκληρώματα των Gaussian συναρτήσεων . . . . .	12
2.4.2	Μονοπάτια ολοκλήρωσης . . . . .	13
2.4.3	Αλγεβρικές Ιδιότητες Ολοκληρωμάτων . . . . .	14
2.5	Σύγκλιση . . . . .	16
<b>3</b>	<b>Παραδοτέα</b>	<b>20</b>
<b>4</b>	<b>Συνεργασίες</b>	<b>20</b>
<b>5</b>	<b>Μελλοντικές Δράσεις</b>	<b>20</b>

## 1 Σκοπός

Την περίοδο αυτή ολοκληρώθηκε η ανάπτυξη νέου φορμαλισμού ώστε να επεκταθεί η μέθοδος Φωκά και να συμπεριλάβει γραμμικές ΜΔΕ με ασυνεχή συντελεστή διάχυσης. Αντιμετωπίστηκαν με επιτυχία τα προβλήματα που παρουσιάζονται στις διεπαφές και κατέστη δυνατό να βρεθεί σε κλειστή μορφή η λύση ενός προβλήματος τριών χωρικών πεδίων σε  $1 + 1$  διαστάσεις. Η τεχνική περιγραφή περιλαμβάνεται στις παραγράφους που ακολουθούν.

## 2 Μεθοδολογία

### 2.1 Πρόβλημα Τριών Πεδίων σε $1 + 1$ Διαστάσεις

Έστω το παρακάτω αδιάστατο πρόβλημα αρχικών και συνοριακών τιμών (ΠΑΣΤ) :

$$\begin{cases} c_t = (Dc_x)_x + c, & x \in [a, b], t \geq 0 \\ c_x(a, t) = 0 \text{ και } c_x(b, t) = 0 \\ c(x, 0) = f(x) \end{cases} \quad (1)$$

όπου αντικαθιστώντας

$$c(x, t) = e^t u(x, t) \quad (2)$$

καταλήγουμε στο

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

Ο συντελεστής διάχυσης  $D = D(x)$  είναι μια ασυνεχής συνάρτηση του  $x$  :

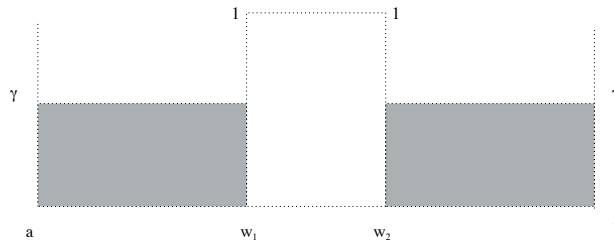
$$D = D(x) = \begin{cases} \gamma, & a \leq x < w_1 \\ 1, & w_1 \leq x < w_2 \\ \gamma, & w_2 \leq x \leq b \end{cases}, \quad (4)$$

όπου  $a \equiv w_0 < w_1 < w_2 < w_3 \equiv b$  μια διαμέριση, τριών περιοχών, του διαστήματος  $[a, b]$  και  $\gamma < 1$  (βλ. σχήμα 4).

Επίσης ως αρχική συνθήκη  $f(x)$  θα θεωρήσουμε την

$$f(x) := \delta(x - \xi), \quad \xi \in (a, b) \quad (5)$$





Σχήμα 1: Συντελεστής Διάχυσης

όπου  $\delta(x)$  η συνάρτηση δέλτα του Dirac.

Παρατηρήστε ότι ο ασυνεχής συντελεστής διάχυσης  $D(x)$  δηλώνει απευθείας ασυνέχεια της παραγώγου  $u_x$ , και επομένως συνέχεια του  $Du_x$ , πάνω σε κάθε σημείο διεπαφής ( $w_1$  και  $w_2$ ). Η γραμμική παραβολική φύση του προβλήματος αρχικών-συνοριακών συνθηκών (3) συνεπάγεται συνέχεια της  $u$  σε κάθε σημείο διεπαφής δηλαδή

$$[u] := u^+ - u^- = 0, \quad \text{στα } x = w_k, \quad k = 1, 2, \quad (6)$$

όπου

$$u^+ := \lim_{x \rightarrow w_k^+} u(x) \quad \text{και} \quad u^- := \lim_{x \rightarrow w_k^-} u(x).$$

Η ολοκλήρωση της εξίσωσης στο (3) γύρω από τα σημεία διασύνδεσης συνεπάγεται ότι:

$$[Du_x] := D^+ u_x^+ - D^- u_x^- = 0, \quad \text{στα } x = w_k, \quad k = 1, 2. \quad (7)$$

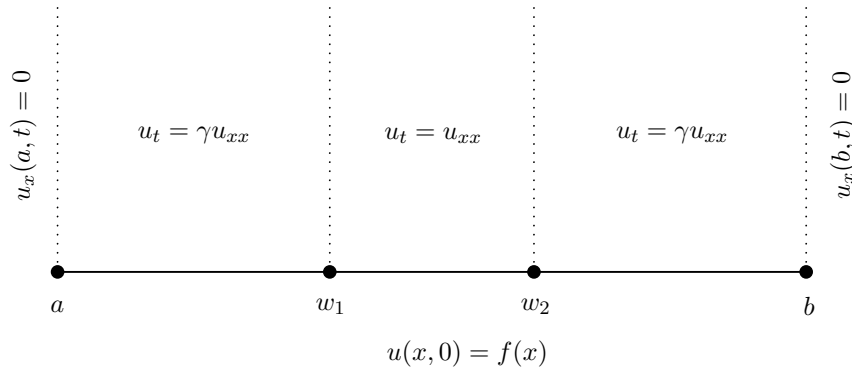
Λαμβάνοντας υπόψιν τους παραπάνω περιορισμούς συνέχειας (6)-(7) μπορούμε να περιγράψουμε εναλλακτικά το πρόβλημα μοντέλο (3) ως

$$\left\{ \begin{array}{l} u_t = Du_{xx}, \quad x \in \mathcal{R}_\ell, \quad \ell = 1, 2, 3, \quad t \geq 0 \\ u_x(a, t) = 0 \quad \text{και} \quad u_x(b, t) = 0 \\ [u] = 0 \quad \text{και} \quad [Du_x] = 0 \quad \text{στα } x = w_k, \quad k = 1, 2 \\ u(x, 0) = f(x) \end{array} \right. \quad (8)$$

όπου με  $\mathcal{R}_\ell$  δηλώνουμε τις περιοχές

$$\mathcal{R}_1 := [a, w_1], \quad \mathcal{R}_2 := [w_1, w_2], \quad \mathcal{R}_3 := [w_2, b]. \quad (9)$$

Στο σχήμα 2 δίδεται μια γραφική αναπαράσταση του προβλήματος. Το πρόβλημα θεωρείται πολλαπλών πεδίων αφού σε κάθε περιοχή η προς επίλυση μερική διαφορική εξίσωση είναι διαφορετική.



Σχήμα 2: Το πρόβλημα μοντέλο

## 2.2 Ολική Συνθήκη

Έστω  $u_\ell(x, t)$ ,  $\ell = 1, 2, 3$  η λύση του προβλήματος μοντέλου (8) στην περιοχή  $\mathcal{R}_\ell$ ,  $\ell = 1, 2, 3$ . Προφανώς οι περιορισμοί (6)-(7) γράφονται ισοδύναμα ως:

$$u_1(w_1, t) = u_2(w_1, t) \tag{10}$$

$$\gamma u_{1x}(w_1, t) = u_{2x}(w_1, t) \tag{11}$$

$$u_2(w_2, t) = u_3(w_2, t) \tag{12}$$

$$u_{2x}(w_2, t) = \gamma u_{3x}(w_2, t) \tag{13}$$

Η μέθοδος μετασχηματισμού Φωκά χρησιμοποιεί την *divergent μορφή* μιας διαφορικής εξίσωσης για να παράξει την επανομαζόμενη *Ολική Συνθήκη (Global Relation)* η οποία χρησιμοποιείται στην συνέχεια για να οδηγηθούμε στην ολοκληρωτική μορφή της λύσης. Σε αυτή την κατεύθυνση παρατηρούμε ότι η  $u_1(x, t)$  ικανοποιεί την εξίσωση

$$u_{1t} = \gamma u_{1xx} \quad , \quad x \in \mathcal{R}_1 \tag{14}$$

ενώ η formal adjoint της  $u_1^*(x, t)$  ικανοποιεί την

$$-u_{1t}^* = \gamma u_{1xx}^* \quad , \quad x \in \mathcal{R}_1 \tag{15}$$

Πολλαπλασιάζοντας τις (14) και (15) με τις  $u_1^*$  και  $u_1$ , αντίστοιχα, και αφαιρώντας τις παραγόμενες εξισώσεις καταλήγουμε στην

$$(u_1 u_1^*)_t - \gamma (u_1^* u_{1x} - u_1 u_{1x}^*)_x = 0 \tag{16}$$

Λαμβάνοντας υπόψιν ότι μια μονοπαραμετρική οικογένεια λύσεων της (15) δίνεται από την

$$u_1^*(x, t; k) = e^{-ikx + \gamma k^2 t}, \quad k \in \mathbb{C}, \quad (17)$$

η εξίσωση (16) γίνεται

$$\left[ e^{-ikx + \gamma k^2 t} u_1 \right]_t - \left[ e^{-ikx + \gamma k^2 t} \gamma (u_{1x} + ik u_1) \right]_x = 0 \quad (18)$$

η οποία είναι και η *divergence μορφή* της διαφορικής εξίσωσης (14). Ολοκληρώνοντας στο χώρο και στο χρόνο έχουμε

$$\int_a^{w_1} \int_0^t \left[ e^{-ikx + \gamma k^2 \tau} u_1(x, \tau) \right]_\tau d\tau dx - \int_0^t \int_a^{w_1} \left[ e^{-ikx + \gamma k^2 \tau} \gamma (u_{1x}(x, \tau) + ik u_1(x, \tau)) \right]_x dx d\tau = 0 \Leftrightarrow \quad (19)$$

$$\Leftrightarrow \int_a^{w_1} e^{-ikx + \gamma k^2 t} u_1(x, t) dx - \int_a^{w_1} e^{-ikx} u_1(x, 0) dx - \int_0^t \gamma e^{-ikw_1 + \gamma k^2 \tau} u_{1x}(w_1, \tau) d\tau - \int_0^t ik \gamma e^{-ikw_1 + \gamma k^2 \tau} u_1(w_1, \tau) d\tau + \int_0^t \gamma e^{-ika + \gamma k^2 \tau} u_{1x}(a, \tau) d\tau + \int_0^t ik \gamma e^{-ika + \gamma k^2 \tau} u_1(a, \tau) d\tau = 0 \quad (20)$$

Μπορούμε να ορίσουμε τον ευθύ μετασχηματισμό Fourier της  $u_\ell(x, t)$  με

$$\widehat{u}_\ell(k, t) = \int_{l_\ell}^{r_\ell} e^{-ikx} u_\ell(x, t) dx \quad k \in \mathbb{C}, \quad \ell = 1, 2, 3 \quad (21)$$

και τον αντίστροφο μετασχηματισμό Fourier με

$$u_\ell(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \widehat{u}_\ell(k, t) dk, \quad \ell = 1, 2, 3 \quad (22)$$

όπου  $l_\ell$  και  $r_\ell$  δηλώνουν το αριστερό και το δεξί άκρο των περιοχών  $\mathcal{R}_\ell$ . Επίσης αν ορίσουμε

$$\tilde{u}_\ell(x, \gamma k^2) := \int_0^t e^{\gamma k^2 \tau} u_\ell(x, \tau) d\tau \quad \ell = 1, 3 \quad (23)$$

$$\tilde{u}_2(x, k^2) := \int_0^t e^{k^2 \tau} u_2(x, \tau) d\tau \quad (24)$$

και

$$\tilde{u}_{\ell x}(x, \gamma k^2) := \int_0^t e^{\gamma k^2 \tau} u_{\ell x}(x, \tau) d\tau \quad \ell = 1, 3 \quad (25)$$

$$\tilde{u}_{2x}(x, k^2) := \int_0^t e^{k^2 \tau} u_{2x}(x, \tau) d\tau \quad (26)$$

η εξίσωση (20) γίνεται η **Ολική Συνθήκη** για την περιοχή  $\mathcal{R}_1$ :

$$e^{\gamma k^2 t} \hat{u}_1(k, t) = \hat{f}_1(k) + \gamma e^{-ikw_1} [\tilde{u}_{1x}(w_1, \gamma k^2) + ik\tilde{u}_1(w_1, \gamma k^2)] - \gamma e^{-ika} [\tilde{u}_{1x}(a, \gamma k^2) + ik\tilde{u}_1(a, \gamma k^2)], \quad k \in \mathbb{C} \quad (27)$$

με

$$\hat{f}_\ell(r) = \int_{l_\ell}^{r_\ell} e^{-irx} f_\ell(x) dx \quad (28)$$

όπου η  $f_\ell$  δηλώνει την αρχική συνθήκη  $u(x, 0)$  στην περιοχή  $\mathcal{R}_\ell$ ,  $\ell = 1, 2, 3$ .

## 2.3 Ολοκληρωτική Αναπαράσταση της Λύσης

Δουλεύοντας με παρόμοιο τρόπο, οι ολικές συνθήκες για τις περιοχές  $\mathcal{R}_2$  και  $\mathcal{R}_3$  είναι οι

$$e^{k^2 t} \hat{u}_2(k, t) = \hat{f}_2(k) + e^{-ikw_2} [\tilde{u}_{2x}(w_2, k^2) + ik\tilde{u}_2(w_2, k^2)] - e^{-ikw_1} [\tilde{u}_{2x}(w_1, k^2) + ik\tilde{u}_2(w_1, k^2)], \quad k \in \mathbb{C} \quad (29)$$

και

$$e^{\gamma k^2 t} \hat{u}_3(k, t) = \hat{f}_3(k) + \gamma e^{-ikb} [\tilde{u}_{3x}(b, \gamma k^2) + ik\tilde{u}_3(b, \gamma k^2)] - \gamma e^{-ikw_2} [\tilde{u}_{3x}(w_2, \gamma k^2) + ik\tilde{u}_3(w_2, \gamma k^2)], \quad k \in \mathbb{C}. \quad (30)$$



Επιπρόσθετα, λαμβάνοντας υπόψιν τους περιορισμούς (10)-(13) και τις συνοριακές συνθήκες  $u_x(a, t) = 0$  και  $u_x(b, t) = 0$ , οι παραπάνω ολικές συνθήκες γίνονται:

$$e^{\gamma k^2 t} \hat{u}_1(k, t) = \hat{f}_1(k) + \gamma e^{-ikw_1} [\tilde{u}_{1x}(w_1, \gamma k^2) + ik\tilde{u}_1(w_1, \gamma k^2)] - \gamma e^{-ika} ik\tilde{u}_1(a, \gamma k^2), \quad k \in \mathbb{C} \quad (31)$$

$$e^{k^2 t} \hat{u}_2(k, t) = \hat{f}_2(k) + e^{-ikw_2} [\tilde{u}_{2x}(w_2, k^2) + ik\tilde{u}_2(w_2, k^2)] - e^{-ikw_1} [\gamma \tilde{u}_{1x}(w_1, k^2) + ik\tilde{u}_1(w_1, k^2)], \quad k \in \mathbb{C} \quad (32)$$

$$e^{\gamma k^2 t} \hat{u}_3(k, t) = \hat{f}_3(k) + \gamma e^{-ikb} ik\tilde{u}_3(b, \gamma k^2) - \gamma e^{-ikw_2} \left[ \frac{1}{\gamma} \tilde{u}_{2x}(w_2, \gamma k^2) + ik\tilde{u}_2(w_2, \gamma k^2) \right], \quad k \in \mathbb{C}. \quad (33)$$

Εάν στις σχέσεις (31) και (33), θέσουμε  $\lambda^2 = \gamma k^2$  και  $c = \gamma^{-\frac{1}{2}}$  και μετονομάσουμε το  $\lambda$  σε  $k$  οι παραπάνω σχέσεις παίρνουν την μορφή:

$$e^{k^2 t} \hat{u}_1(ck, t) = \hat{f}_1(ck) + \gamma e^{-ickw_1} [\tilde{u}_{1x}(w_1, k^2) + ick\tilde{u}_1(w_1, k^2)] - \gamma e^{-icka} ick\tilde{u}_1(a, k^2), \quad k \in \mathbb{C} \quad (34)$$

$$e^{k^2 t} \hat{u}_2(k, t) = \hat{f}_2(k) + e^{-ikw_2} [\tilde{u}_{2x}(w_2, k^2) + ik\tilde{u}_2(w_2, k^2)] - e^{-ikw_1} [\gamma \tilde{u}_{1x}(w_1, k^2) + ik\tilde{u}_1(w_1, k^2)], \quad k \in \mathbb{C} \quad (35)$$

$$e^{k^2 t} \hat{u}_3(ck, t) = \hat{f}_3(ck) + \gamma e^{-ickb} ick\tilde{u}_3(b, k^2) - \gamma e^{-ickw_2} \left[ \frac{1}{\gamma} \tilde{u}_{2x}(w_2, k^2) + ick\tilde{u}_2(w_2, k^2) \right], \quad k \in \mathbb{C}. \quad (36)$$

Αντιστρέφοντας τον μετασχηματισμό Fourier στις εξισώσεις (34)-(36) παίρνουμε τις ολοκληρωτικές αναπαραστάσεις των λύσεων  $u_\ell(x, t)$ ,  $\ell = 1, 2, 3$  αντίστοιχα:

$$u_1(x, t) = \frac{c}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ickx} e^{-k^2 t} \hat{f}_1(ck) dk \quad (37\alpha')$$

$$- \frac{1}{2c\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ick(x-w_1)} e^{-k^2 t} [\tilde{u}_{1x}(w_1, k^2) + ick\tilde{u}_1(w_1, k^2)] dk \quad (37\beta')$$

$$- \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} ik e^{ick(x-a)} e^{-k^2 t} \tilde{u}_1(a, k^2) dk \quad (37\gamma')$$



$$u_2(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx-k^2t} \hat{f}_2(k) dk \quad (38\alpha')$$

$$- \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-w_2)} e^{-k^2t} [\tilde{u}_{2x}(w_2, k^2) + ik\tilde{u}_2(w_2, k^2)] dk \quad (38\beta')$$

$$- \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-w_1)} e^{-k^2t} [\gamma\tilde{u}_{1x}(w_1, k^2) + ik\tilde{u}_1(w_1, k^2)] dk \quad (38\gamma')$$

$$u_3(x, t) = \frac{c}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ickx-k^2t} \hat{f}_3(ck) dk \quad (39\alpha')$$

$$- \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ick(x-b)} e^{-k^2t} ik\tilde{u}_3(b, k^2) dk \quad (39\beta')$$

$$- \frac{1}{2c\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ick(x-w_2)} e^{-k^2t} \left[ \frac{1}{\gamma} \tilde{u}_{2x}(w_2, k^2) + ick\tilde{u}_2(w_2, k^2) \right] dk \quad (39\gamma')$$

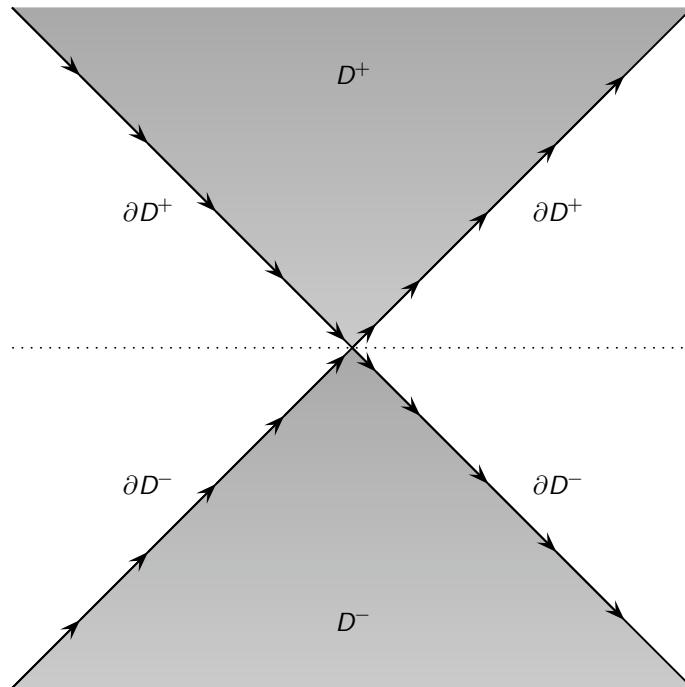
Η αναλυτικότητα των συναρτήσεων που εμπλέκονται στην ολοκληρωτική αναπαράσταση των λύσεων  $u_\ell(x, t)$ , μας επιτρέπει την αντικατάσταση του πραγματικού άξονα  $(-\infty, \infty)$  με άλλα μονοπάτια ολοκλήρωσης στο μιγαδικό επίπεδο για να επιτύχουμε εκθετική, κατά απόλυτη τιμή, μείωση των προς ολοκλήρωση ποσοτήτων όσο απομακρυνόμαστε από το μηδέν. Για παράδειγμα, στην ολοκληρωτική αναπαράσταση της  $u_1(x, t)$  στην (37), 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 ορισμό των χωρίων  $D$ ,  $D^+$  και  $D^-$  (δες επίσης το γράφημα 3)

$$D = \{k \in \mathbb{C} : Re k^2 < 0\} = \{k \in \mathbb{C} : \arg k \in \{(\frac{\pi}{4}, \frac{3\pi}{4}) \cup (\frac{5\pi}{4}, \frac{7\pi}{4})\}\} \quad (40)$$





Σχήμα 3: Τα μονοπάτια ολοκλήρωσης  $\partial D^+$  και  $\partial D^-$

$$D^+ = \{k : \arg k \in (\frac{\pi}{4}, \frac{3\pi}{4})\} = D \cap \mathbb{C}^+ \tag{41}$$

$$D^- = \{k : \arg k \in (\frac{5\pi}{4}, \frac{7\pi}{4})\} = D \cap \mathbb{C}^- \tag{42}$$

μπορούμε ισοδύναμα να εκφράσουμε (δες επίσης [8]) την ολοκληρωτική αναπαράσταση των  $u_\ell(x, t)$  ως:

$$u_1(x, t) = \frac{c}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ickx} e^{-k^2t} \widehat{f}_1(ck) dk \tag{43\alpha'}$$

$$- \frac{1}{2c\pi} \int_{\partial D^-} e^{ick(x-w_1)} e^{-k^2t} [\tilde{u}_{1x}(w_1, k^2) + ick\tilde{u}_1(w_1, k^2)] dk \tag{43\beta'}$$

$$- \frac{1}{2\pi} \int_{\partial D^+} ike^{ick(x-a)} e^{-k^2t} \tilde{u}_1(a, k^2) dk \tag{43\gamma'}$$

$$u_2(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx-k^2t} \hat{f}_2(k) dk \quad (44\alpha')$$

$$- \frac{1}{2\pi} \int_{\partial D^-} e^{ik(x-w_2)} e^{-k^2t} [\tilde{u}_{2x}(w_2, k^2) + ik\tilde{u}_2(w_2, k^2)] dk \quad (44\beta')$$

$$- \frac{1}{2\pi} \int_{\partial D^+} e^{ik(x-w_1)} e^{-k^2t} [\gamma\tilde{u}_{1x}(w_1, k^2) + ik\tilde{u}_1(w_1, k^2)] dk \quad (44\gamma')$$

$$u_3(x, t) = \frac{c}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ickx-k^2t} \hat{f}_3(ck) dk \quad (45\alpha')$$

$$- \frac{1}{2\pi} \int_{\partial D^-} e^{ick(x-b)} e^{-k^2t} ik\tilde{u}_3(b, k^2) dk \quad (45\beta')$$

$$- \frac{1}{2c\pi} \int_{\partial D^+} e^{ick(x-w_2)} e^{-k^2t} \left[ \frac{1}{\gamma} \tilde{u}_{2x}(w_2, k^2) + ick\tilde{u}_2(w_2, k^2) \right] dk \quad (45\gamma')$$

Για να προσδιορίσουμε τις ποσότητες  $\tilde{u}_1(a, k^2)$ ,  $\tilde{u}_1(w_1, k^2)$ ,  $\tilde{u}_{1x}(w_1, k^2)$ ,  $\tilde{u}_2(w_2, k^2)$ ,  $\tilde{u}_{2x}(w_2, k^2)$ ,  $\tilde{u}_3(b, k^2)$  αντικαθιστούμε το  $k$  με  $-k$  στις εξισώσεις (34)-(36) και παίρνουμε:

$$e^{k^2t} \hat{u}_1(-ck, t) = \hat{f}_1(-ck) + \gamma e^{ickw_1} [\tilde{u}_{1x}(w_1, k^2) - ick\tilde{u}_1(w_1, k^2)] + \gamma e^{icka} ick\tilde{u}_1(a, k^2), \quad k \in \mathbb{C} \quad (46)$$

$$e^{k^2t} \hat{u}_2(-k, t) = \hat{f}_2(-k) + e^{ikw_2} [\tilde{u}_{2x}(w_2, k^2) - ik\tilde{u}_2(w_2, k^2)] - e^{ikw_1} [\gamma\tilde{u}_{1x}(w_1, k^2) - ik\tilde{u}_1(w_1, k^2)], \quad k \in \mathbb{C} \quad (47)$$

$$e^{k^2t} \hat{u}_3(-ck, t) = \hat{f}_3(-ck) - \gamma e^{ickb} ick\tilde{u}_3(b, k^2) - \gamma e^{ickw_2} \left[ \frac{1}{\gamma} \tilde{u}_{2x}(w_2, k^2) - ick\tilde{u}_2(w_2, k^2) \right], \quad k \in \mathbb{C} \quad (48)$$

Οι εξισώσεις (34), (46), (35), (47), (36), (48) ορίζουν το γραμμικό σύστημα

$$G\tilde{u} = f \quad (49)$$



όπου

$$G = \begin{bmatrix} ick\gamma e^{-icka} & -\gamma ick e^{-ickw_1} & -\gamma e^{-ickw_1} & & & & \\ -ick\gamma e^{icka} & \gamma ick e^{ickw_1} & -\gamma e^{ickw_1} & & & & \\ & ike^{-ikw_1} & \gamma e^{-ikw_1} & -ike^{-ikw_2} & -e^{-ikw_2} & & \\ & -ike^{ikw_1} & e^{ikw_1}\gamma & ike^{ikw_2} & -e^{ikw_2} & & \\ & & & e^{-ickw_2} ick\gamma & e^{-ickw_2} & -ick\gamma e^{-ickb} & \\ & & & -e^{ickw_2} ick\gamma & e^{ickw_2} & ick\gamma e^{ickb} & \end{bmatrix}, \quad (50)$$

$$\tilde{\mathbf{u}} = \begin{bmatrix} \tilde{u}_1(a, k^2) \\ \tilde{u}_1(w_1, k^2) \\ \tilde{u}_{1x}(w_1, k^2) \\ \tilde{u}_2(w_2, k^2) \\ \tilde{u}_{2x}(w_2, k^2) \\ \tilde{u}_3(b, k^2) \end{bmatrix}, \quad \text{και} \quad \mathbf{f} = \begin{bmatrix} \hat{f}_1(ck) \\ \hat{f}_1(-ck) \\ \hat{f}_2(k) \\ \hat{f}_2(-k) \\ \hat{f}_3(ck) \\ \hat{f}_3(-ck) \end{bmatrix} - e^{k^2 t} \begin{bmatrix} \hat{u}_1(ck, t) \\ \hat{u}_1(-ck, t) \\ \hat{u}_2(k, t) \\ \hat{u}_2(-k, t) \\ \hat{u}_3(ck, t) \\ \hat{u}_3(-ck, t) \end{bmatrix} \quad (51)$$

Η λύση του παραπάνω γραμμικού συστήματος μας δίνει τις άγνωστες ποσότητες.

### Παρατήρηση 1

Οι όροι  $\hat{u}_\ell(\pm ck, t)$  θα παραληφθούν από το σύστημα (49), κατά την επίλυσή του, καθώς η συνεισφορά των  $\frac{\hat{u}_\ell(\pm ck, t)}{\det(G)}$  είναι μηδενική ([10]).

## 2.4 Αριθμητικοί Υπολογισμοί

Έχοντας ως στόχο την ανάπτυξη αποδοτικών μεθόδων ολοκλήρωσης, σε αυτή την παράγραφο υπογραμμίζουμε τις ιδιότητες των ολοκληρωμάτων στις σχέσεις (43)-(45) και αναζητούμε κατάλληλα μονοπάτια ολοκλήρωσης στο μιγαδικό επίπεδο για τον αριθμητικό υπολογισμό των ολοκληρωμάτων.

### 2.4.1 Αναλυτικές εκφράσεις για τα ολοκληρώματα των Gaussian συναρτήσεων

Σύμφωνα με τους ορισμούς (5) και (28) έχουμε ότι

$$f_\ell(x) = \begin{cases} \delta(x - \xi) & , \xi \in \mathcal{R}_\ell \\ 0 & , \text{αλλιώς} \end{cases}, \quad \ell = 1, 2, 3 \quad (52)$$

και

$$\hat{f}_\ell(\lambda k) = \begin{cases} e^{-i\lambda k \xi} & , \xi \in \mathcal{R}_\ell \\ 0 & , \text{αλλιώς} \end{cases} \quad (53)$$



οπότε τα πρώτα ολοκληρώματα στις (43)-(45) υπολογίζονται αναλυτικά ως

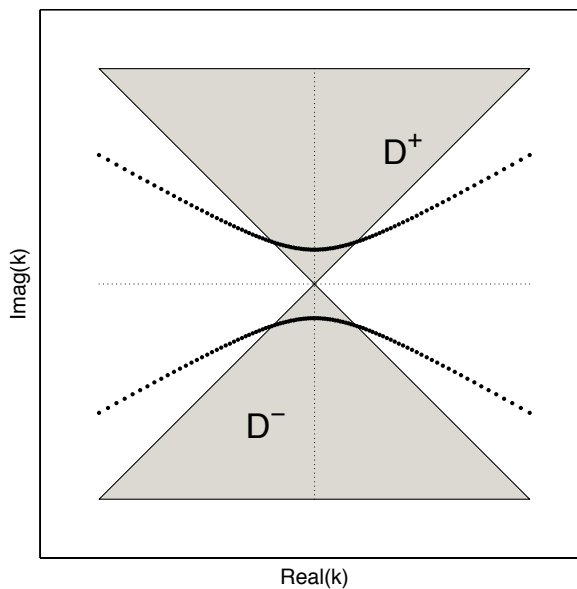
$$\begin{aligned}
 u_{\ell a}(x, t) &:= \frac{\lambda}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\lambda k x} e^{-k^2 t} \widehat{f}_{\ell}(\lambda k) dk = \\
 &= \begin{cases} \frac{\lambda}{2\sqrt{t\pi}} e^{-\frac{\lambda^2(\xi-x)^2}{4t}} & , \xi \in \mathcal{R}_{\ell} \\ 0 & , \text{αλλού} \end{cases} \quad (54)
 \end{aligned}$$

με  $\lambda = c$  όταν  $\ell = 1, 3$  και  $\lambda = 1$  όταν  $\ell = 2$ .

### 2.4.2 Μονοπάτια ολοκλήρωσης

Είναι γνωστό ([16]) ότι ένας τρόπος για τον αποδοτικό υπολογισμό ολοκληρωμάτων που περιέχουν όρους της μορφής  $e^z$  είναι να εφαρμόσουμε τον κανόνα του τραπεζίου σε ένα κατάλληλα επιλεγμένο μονοπάτι Hankel. Οι υπερβολές, μια κλάση τέτοιων μονοπατιών, είναι απλές καμπύλες που έχουν ασύμπτωτες και είναι μια φυσική επιλογή μονοπατιών ολοκλήρωσης. Για να ορίσουμε τις υπερβολές (δες επίσης [4], [9]) αντιστοιχούμε τα σημεία  $\theta$  του πραγματικού άξονα στα σημεία  $\pm k(\theta)$  του μιγαδικού επιπέδου χρησιμοποιώντας την αναλυτική συνάρτηση:

$$k_{\theta} \equiv k(\theta) := i \sin(\beta - i\theta). \quad (55)$$



Σχήμα 4: Οι υπερβολές για  $\beta = \pi/6$

Προφανώς οι καμπύλες  $k(\theta)$  και  $-k(\theta)$  αντικαθιστούν τα μονοπάτια ολοκλήρωσης  $\partial D^+$  και  $\partial D^-$  αντίστοιχα. Χρησιμοποιώντας αυτές τις υπερβολές στις (43)-(45), οι ολοκληρωτικές αναπαραστάσεις των λύσεων  $u_\ell(x, t)$  παίρνουν τη μορφή:

$$u_\ell(x, t) = u_{\ell a}(x, t) + u_{\ell b}(x, t) + u_{\ell c}(x, t) \quad , \quad \ell = 1, 2, 3 \quad (56)$$

όπου  $u_{\ell a}$  όπως έχει οριστεί στην (54), και

$$\begin{aligned} u_{1b}(x, t) &= + \frac{1}{2c\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ick_\theta(w_1-x)} e^{-k_\theta^2 t} [\tilde{u}_{1x}(w_1, k_\theta^2) - ick_\theta \tilde{u}_1(w_1, k_\theta^2)] k'_\theta d\theta \\ u_{2b}(x, t) &= + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik_\theta(w_2-x)} e^{-k_\theta^2 t} [\tilde{u}_{2x}(w, k_\theta^2) - ik_\theta \tilde{u}_2(w_2, k_\theta^2)] k'_\theta d\theta \\ u_{3b}(x, t) &= - \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ick_\theta(b-x)} e^{-k_\theta^2 t} ik_\theta \tilde{u}_3(b, k_\theta^2) k'_\theta d\theta \\ u_{1c}(x, t) &= - \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} ik_\theta e^{ick_\theta(x-a)} e^{-k_\theta^2 t} \tilde{u}_1(a, k_\theta^2) k'_\theta d\theta \\ u_{2c}(x, t) &= - \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik_\theta(x-w_1)} e^{-k_\theta^2 t} [\gamma \tilde{u}_{1x}(w_1, k_\theta^2) + ik_\theta \tilde{u}_1(w_1, k_\theta^2)] k'_\theta d\theta \end{aligned} \quad (57)$$

$$u_{3c}(x, t) = - \frac{1}{2c\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ick_\theta(x-w_2)} e^{-k_\theta^2 t} \left[ \frac{1}{\gamma} \tilde{u}_{2x}(w_2, k_\theta^2) + ick_\theta \tilde{u}_2(w_2, k_\theta^2) \right] k'_\theta d\theta \quad (58)$$

με το  $k'_\theta$  να δηλώνει την παράγωγο του  $k(\theta)$  ως προς  $\theta$

$$k'_\theta = \cos(\beta - i\theta). \quad (59)$$

Με αυτή την επιλογή μονοπατιών ολοκλήρωσης επιτυγχάνουμε γρήγορη μείωση, κατά μέτρο, των προς ολοκλήρωση ποσοτήτων όπως φαίνεται στα σχήματα (5) και (7) για τα  $u_{1b}$  και  $u_{1c}$ .

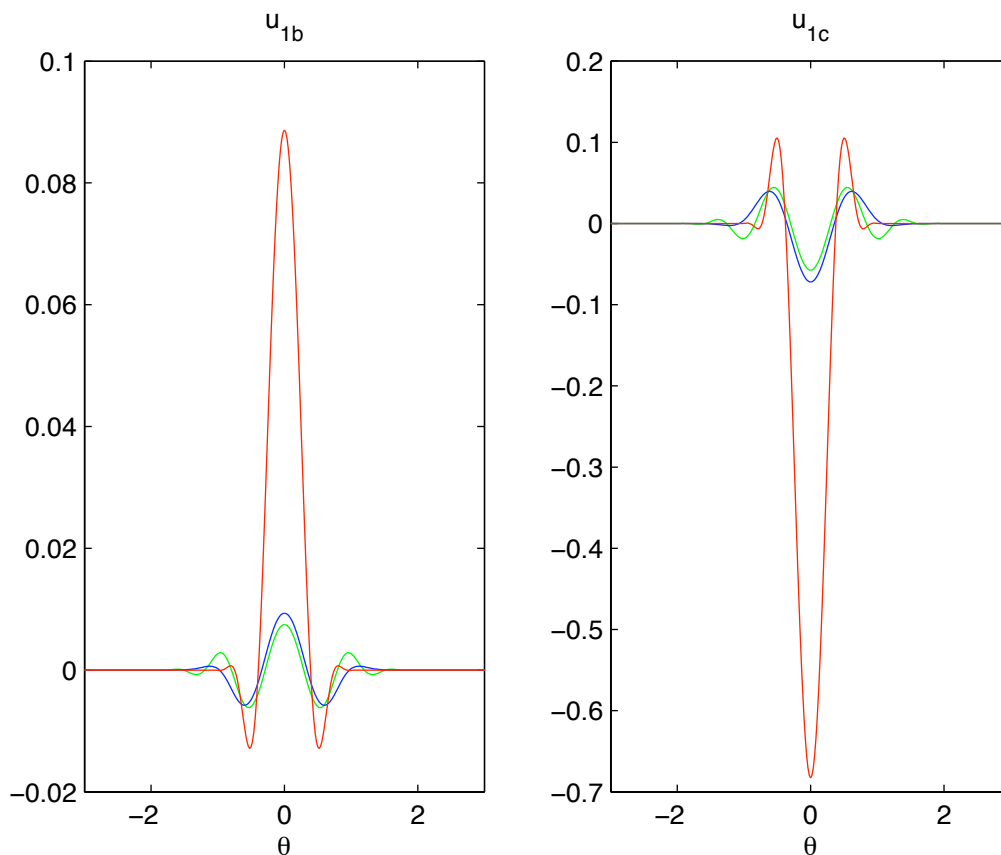
### 2.4.3 Αλγεβρικές Ιδιότητες Ολοκληρωμάτων

Για τον αποδοτικό υπολογισμό όλων των παραπάνω ολοκληρωμάτων πρέπει να λάβουμε υπόψιν τις παρακάτω βασικές ιδιότητες:

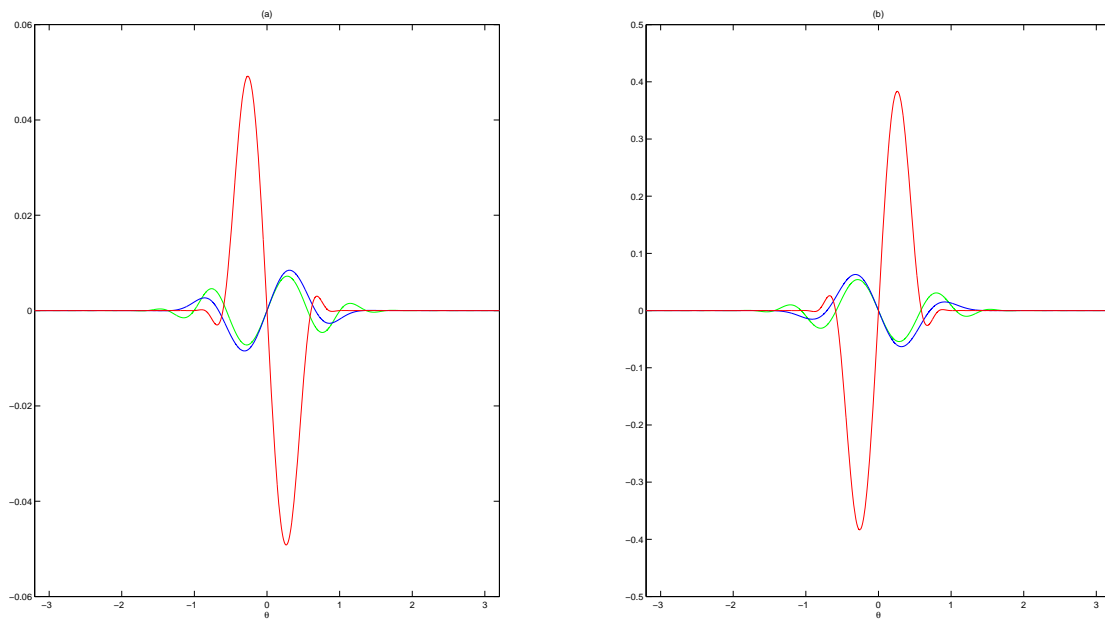


- Τα πραγματικά μέρη όλων των προς ολοκλήρωση ποσοτήτων είναι *άρτιες* συναρτήσεις του  $\theta$ .
- Τα φανταστικά μέρη όλων των προς ολοκλήρωση ποσοτήτων είναι *περιττές* συναρτήσεις του  $\theta$ .
- Οι προς ολοκλήρωση ποσότητες είναι φθίνουσες συναρτήσεις του  $\theta$ .

Η απόδειξη των δυο πρώτων ιδιοτήτων υπάρχει στο [8] ενώ η τρίτη ιδιότητα είναι άμεση συνέπεια των επιλεγμένων μονοπατιών ολοκλήρωσης. Αυτές οι ιδιότητες παρουσιάζονται εποπτικά στα σχήματα (5), (6) και (7) για τα ολοκληρώματα  $u_{1b}$  και  $u_{1c}$ .



Σχήμα 5: Τα πραγματικά μέρη των προς ολοκλήρωση ποσοτήτων στα  $u_{1b}$  και  $u_{1c}$  για  $x = -\pi$  και για διάφορες τιμές του  $t$ . Πράσινο για  $t = 0.1$ , μπλέ για  $t = 1$  και κόκκινο για  $t = 10$ .



Σχήμα 6: Τα φανταστικά μέρη των προς ολοκλήρωση ποσοτήτων στα  $u_{1b}$  και  $u_{1c}$  ολοκληρώματα για  $x = -\pi$  και  $t = 0.1$  (πράσινο),  $t = 1$  (μπλε),  $t = 10$  (κόκκινο).

Η εφαρμογή αυτών των ιδιοτήτων συνεπάγεται ότι

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

όπου η  $U(\theta)$  συμβολίζει οποιαδήποτε από τις προς ολοκλήρωση ποσότητες και  $R$  είναι ένας σχετικά μικρός πραγματικός αριθμός. Για μια εκτίμηση του  $R$  μπορούμε να απαιτήσουμε ο κυρίαρχος εκθετικός όρος  $e^{-k_{\theta}^2 t}$ , που εμφανίζεται σε όλα τα ολοκληρώματα, να ικανοποιεί την

$$\left| e^{-k_{\theta}^2 t} \right| \leq 10^{-M} \quad \text{για όλα } \theta \geq R \equiv R(t; M)$$

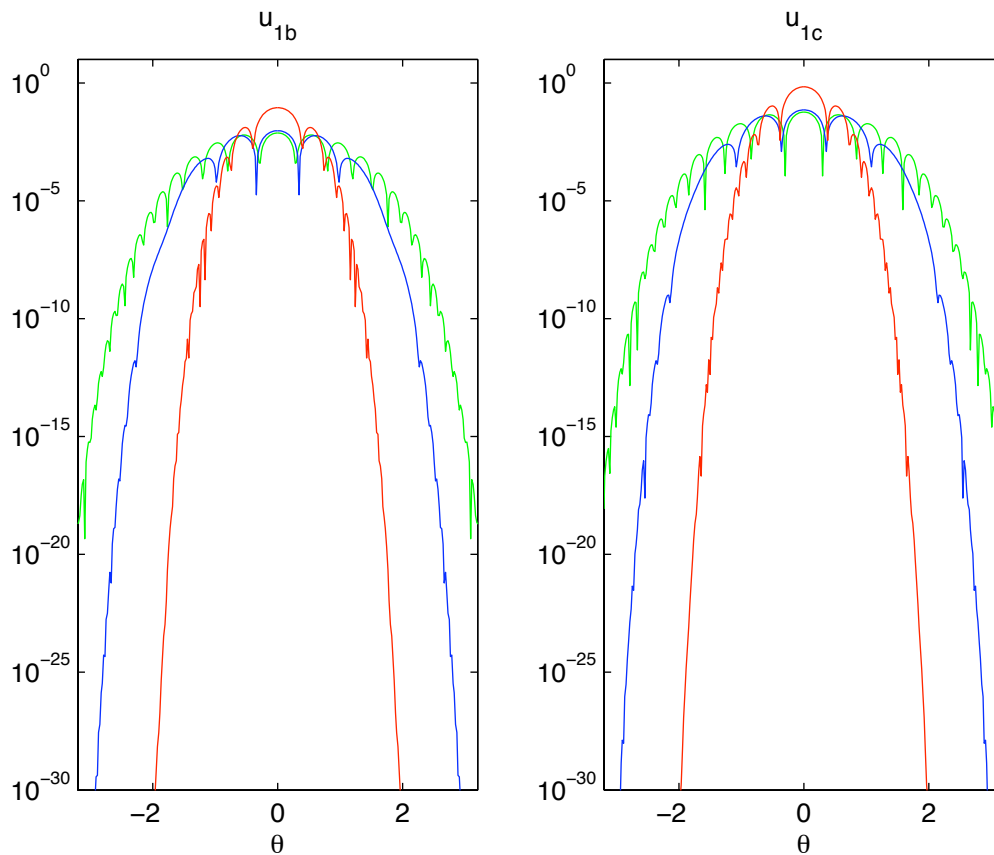
για ικανά μεγάλο  $M$ , επομένως

$$R = \frac{1}{2} \ln \frac{4t + 8M \ln 10}{t}. \quad (60)$$

## 2.5 Σύγκλιση

Η σύγκλιση της διαδικασίας της αριθμητικής ολοκλήρωσης επηρεάζεται κυρίως από την επιλογή της παραμέτρου  $R$ , η οποία καθορίζει τα όρια ολοκλήρωσης, και από το πλήθος των σημείων ολοκλήρωσης  $N$ . Για να ερευνήσουμε την



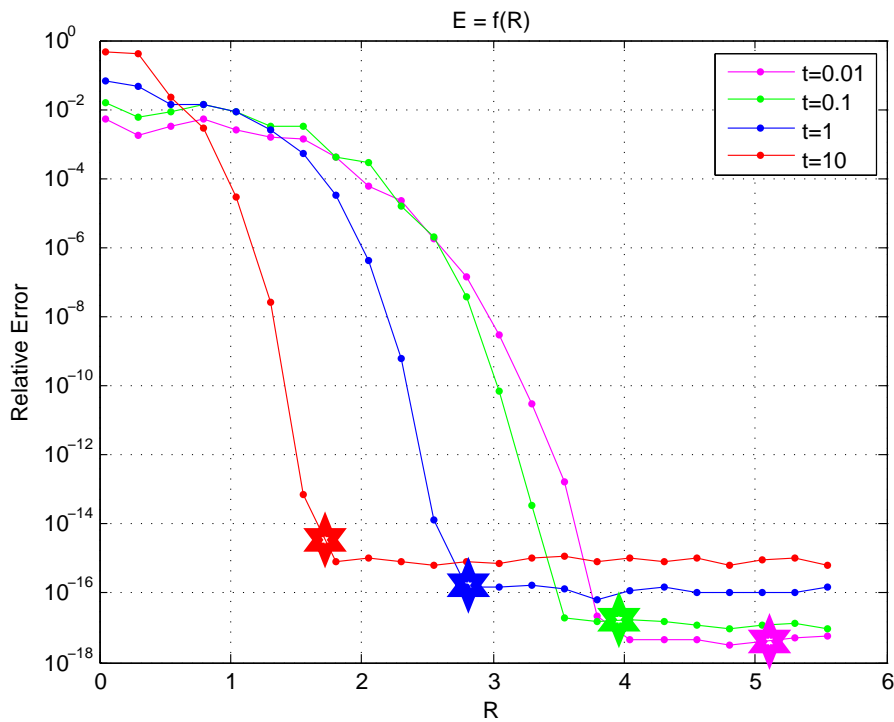


Σχήμα 7: Οι προς ολοκλήρωση ποσότητες, (η απόλυτη τιμή των πραγματικών τους μερών σε λογαριθμική κλίμακα) των  $u_{1b}$  και  $u_{1c}$  για  $x = -\pi$  και για διαφορετικές τιμές του  $t$ . Πράσινο για  $t = 0.1$ , μπλέ για  $t = 1$  και κόκκινο για  $t = 10$ .

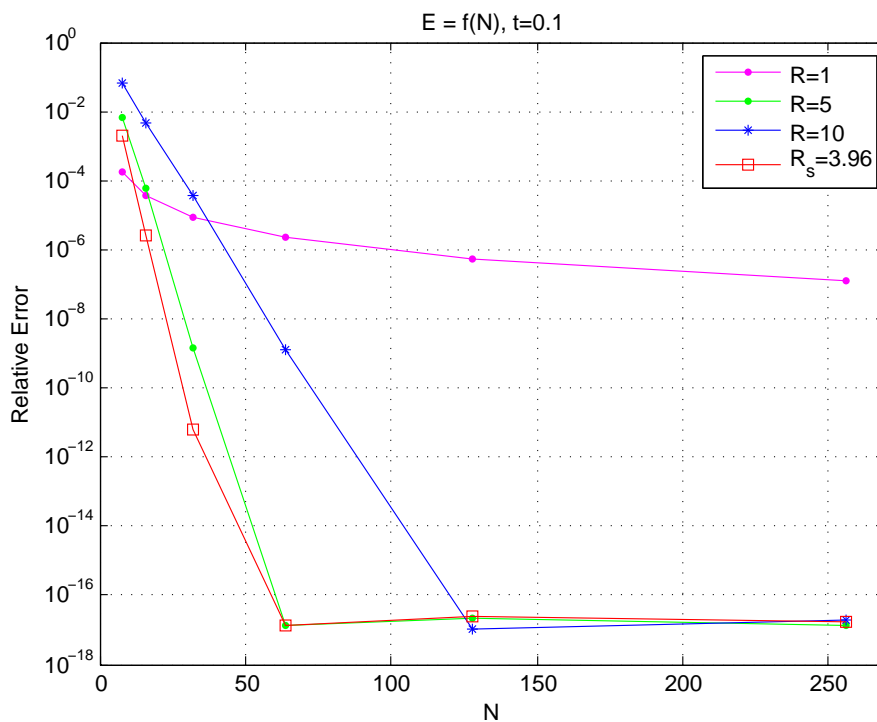
εξάρτηση από την παράμετρο  $R$  χρησιμοποιούμε το σχετικό σφάλμα  $E_R$ , που ορίζεται ως:

$$E_R := \frac{\|U_{R_i} - U_{R_{i+1}}\|_{\infty}}{\|U_{R_{i+1}}\|_{\infty}}, \quad (61)$$

όπου  $U_{R_i}$  δηλώνει το διάνυσμα των προσεγγίσεων  $\hat{u}(\bar{x}_j, \bar{t}; R_i)$ ,  $j = 1, \dots, M$  της λύσης  $u(x, t)$  που παράγονται χρησιμοποιώντας τα  $-R_i, R_i$  σαν όρια ολοκλήρωσης σε όλα τα ολοκληρώματα. Διατηρώντας το  $N$  σταθερό σε ένα αρκετά ικανό πλήθος σημείων ολοκλήρωσης ( $N \geq 64$ ), το σχετικό σφάλμα  $E_R$  φαίνεται στο σχήμα (8). Παρατηρείται ότι υπάρχει μια βέλτιστη τιμή  $R_{opt}$  τέτοια ώστε το σχετικό σφάλμα  $E_R$  παραμένει πρακτικά το ίδιο για όλα τα  $R \geq R_{opt}$ . Η τιμή  $R = R_s$ , που παίρνουμε χρησιμοποιώντας την σχέση (60) και που φαίνεται σχηματικά με ένα "αστέρι" στο σχήμα (8), είναι σαφώς μια καλή προσέγγιση του  $R_{opt}$ .



Σχήμα 8: Το σχετικό σφάλμα  $E_R$  για διαφορετικές τιμές του χρόνου ( $t$ )



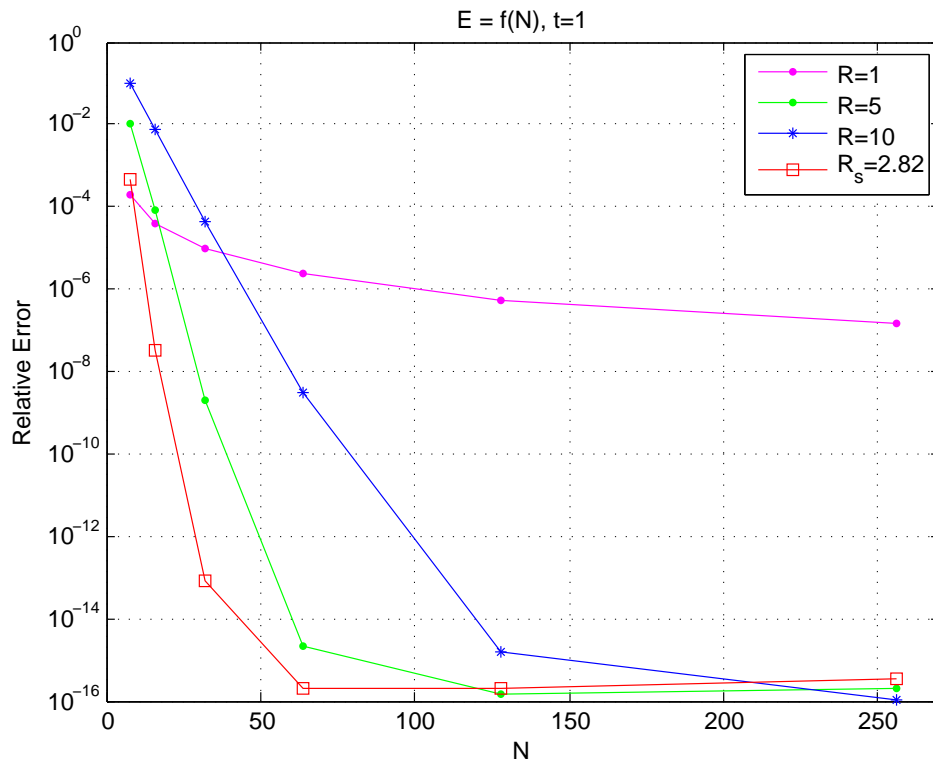
Σχήμα 9: Το σχετικό σφάλμα  $E_N$  για  $t = 0.1, 1$  και διαφορετικές τιμές του  $R$ .

Για να ερευνήσουμε την εξάρτηση από το πλήθος των σημείων ολοκλήρωσης  $N$ , ορίζουμε το σχετικό σφάλμα  $E_N$  ως:

$$E_N := \frac{\|U_{N_i} - U_{N_{i+1}}\|_\infty}{\|U_{N_{i+1}}\|_\infty} \quad (62)$$

όπου το  $U_{N_i}$  δηλώνει το διάνυσμα των προσεγγίσεων  $\hat{u}(\bar{x}_j, \bar{t}; N_i)$ ,  $j = 1, \dots, M$  της λύσης  $u(x, t)$  που παράγεται χρησιμοποιώντας  $N_i$  σημεία ολοκλήρωσης για τον αριθμητικό υπολογισμό όλων των ολοκληρωμάτων.

Στα σχήματα (9) και (10) παρατηρούμε την ταχεία σύγκλιση όταν  $R = R_s$ , (η τιμή που αποκτήσαμε χρησιμοποιώντας την σχέση (60)). Παρόμοια συμπεριφορά παρατηρείται για όλες τις τιμές του  $R$  σε μια γειτονιά του  $R_{opt}$ . Σε αυτές τις περιπτώσεις το σφάλμα πέφτει εκθετικά φθάνοντας το  $10^{-14}$  για  $N \geq 64$ . Εν αντιθέσει, για  $R < R_{opt}$  η σύγκλιση είναι αργή.



Σχήμα 10: Το σχετικό σφάλμα  $E_N$  για  $t = 0.1, 1$  και διαφορετικές τιμές του  $R$ .

Συμπερασματικά μπορούμε να πούμε ότι μια καλή εκτίμηση του  $R_{opt}$ , όπως αυτή που μας δίνει η σχέση (60), συνδυαζόμενη με ένα απλό προσαρμοστικό κανόνα ολοκλήρωσης μπορεί να μας δώσει μια προσεγγιστική μέθοδο υψηλού βαθμού σύγκλισης.

### 3 Παραδοτέα

- Παπαδομανωλάκη Μαρία, " Η μέθοδος Collocation για παραβολικές μερικές διαφορικές εξισώσεις με ασυνεχή συντελεστή διάχυσης: στην κατεύθυνση προσομοίωσης καρκινικών όγκων εγκεφάλου." Διδακτορική Διατριβή 2012.
- Δ. Μαντζαβίνος, Μ. Παπαδομανωλάκη, Ι. Σαριδάκης, Α. Σηφαλάκης "Fokas transform method for a brain tumor invasion model with heterogeneous diffusion in 1+1 dimensions", Applied Numerical Mathematics, doi:10.1016/j.apnum.2014.09.006
- Επιστημονική Διάλεξη στα πλαίσια του Διεθνούς Συνεδρίου NumAn2012 (Ιωάννινα, Σεπτέμβριος 2012)

### 4 Συνεργασίες

Για τα ερευνητικά αποτελέσματα της παρούσα περιόδου η ερευνητική ομάδα του Πολυτεχνείου Κρήτης (ΚΕΟ 1) αποτελείται από τους καθ. Ι. Σαριδάκη, καθ. Ε. Παπαδοπούλου, Δρ. Σηφαλάκη Αναστάση και Μ. Παπαδομανωλάκη συνεργάστηκε με τον καθηγητή Α. Φωκά και τον υποψήφιο διδάκτορα Δ. Μαντζαβίνο του Πανεπιστημίου Cambridge.

### 5 Μελλοντικές Δράσεις

Επέκταση της μεθόδου Φωκά σε  $N$  περιοχές στις  $1 + 1$  διαστάσεις.

### Αναφορές

- [1] M J Ablowitz και A S Fokas, Introduction and Applications of Complex Variables, Cambridge University Press, second edition 2003
- [2] P.K.Burgess, P.M.Kulesa, J.D.Murray, και E.C.Alvord Jr, The interaction of growth rates and diffusion coefficients in a three-dimensional mathematical model of gliomas, *Journal of Neuropathology and Experimental Neurology*, 56(6):704-713, 1997.
- [3] G.C.Cruywagen, D.E.Woodward, P.Tracqui, G.T.Bartoo, J.D.Murray, και E.C.Alvord Jr, The modeling of diffusive tumours, *Journal of Biological Systems*, (3):937-945, 1995.



- [4] N.Flyer και A.S.Fokas, A hybrid analytical-numerical method for solving evolution partial differential equations.I. The half-line, *Proc.R.Soc.A*,464,1823-1849,2008.
- [5] A.S.Fokas A unified transform method for solving linear and certain nonlinear PDEs, *Proc.R.Soc.A*,453,1411-1443, 1997.
- [6] A.S.Fokas A new transform method for evolution PDEs, *IMA J. Appl. Math.*,67(6),559-590, 2002.
- [7] J.D. Murray, *Mathematical Biology* , Springer-Verlag, 3rd Edition 2002.
- [8] Παπαδομανωλάκη Μαρία, " Η μέθοδος Collocation για παραβολικές μερικές διαφορικές εξισώσεις με ασυνεχή συντελεστή διάχυσης: στην κατεύθυνση προσομοίωσης καρκινικών όγκων εγκεφάλου." Διδακτορική Διατριβή 2012.
- [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] D.A. Smith, Well-posed two-point initial-boundary value problems with arbitrary boundary conditions, *Math. Proc. Camb. Phil. Soc.*, doi:10.1017/S030500411100082X, 2011
- [11] K.R.Swanson, Mathematical modeling of the growth and control of tumors, *PHD Thesis, University of Washington*,1999.
- [12] K.R.Swanson, E.C.Alvord Jr και J.D.Murray, A quantitative model for differential motility of gliomas in grey and white matter, *Cell Proliferation*,33:317-329,2000.
- [13] K.R.Swanson, E.C.Alvord Jr και J.D.Murray, Virtual brain tumours(gliomas) enhance the reality of medical imaging and highlight inadequacies of current therapy, *British Journal of Cancer*,86:14-18,2002.
- [14] K.R.Swanson, C.Bridge, J.D.Murray και E.C.Alvord Jr, Virtual and real brain tumours:using mathematical modeling to quantify glioma growth and invasion, *J.Neurol.Sci*,216:1-10,2003.
- [15] P.Tracqui, G.C.CruywagenG, D.E.Woodward, T.Bartoo, J.D.Murray και E.C.Alvord Jr, A mathematical model of glioma growth:The effect of chemotherapy on spatio-temporal growth, *Cell Proliferation*,28:17-31,1995.



- [16] L.N. Trefethen, J.A.C Weideman, T.Schmelzer, Tablot quadratures and rational approximations, *BIT Numerical Mathematics*, 46:653-670, 2006.
- [17] J.A.C Weideman και L.N. Trefethen, Parabolic and hyperbolic contours for computing the Bromwich integral, *Math. Comput., Math. Comp.*, 76:1341-1356, 2007.
- [18] 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.

