# Ετήσια Τεχνική Έκθεση

# Έτος 2013

# 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 4.2

## Επικύρωση Αποτελεσμάτων σε Προβλήματα Ιατρικής

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο

ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

# Περιεχόμενα




Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο

ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

# 1 Σκοπός

Κεντρική επιδίωξη της παρούσας δράσης αποτελεί αφενός μεν η επικύρωση των αποτελεσμάτων μας (αποδοτικότητα μεθόδων) με ένα τόσο σημαντικό πρόβλημα, αφετέρου δε η μελέτη της εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου, με χρήση νέων μεθόδων, λογισμικού και σύγχρονων υπολογιστικών αρχιτεκτονικών.

Την τρέχουσα περίοδο σκοπός μας ήταν η εφαρμογή της μεθόδου που αναπτύξαμε στις δράσεις 2.1 και 2.4 (βλ. Τεχνικές Εκθέσεις 2.1 και 2.4 Έτους 2013) σε γενικευμένα (με ακαθόριστου πλήθους περιοχών ασυνέχειας και αρχικών πηγών) γραμμικά προβλήματα διάχυσης καρκινικών όγκων στον εγκέφαλο στις $1 + 1$ αλλά και στις $1 + 2$ διαστάσεις όπου παράλληλα επαληθεύσαμε την τέταρτη τάξη σύγκλισης της μεθόδου dDHC. Προς τούτο η dDHC μέθοδος συνδυάστηκε με ένα Diagonally Implicit Runge-Kutta σχήμα διακριτοποίησης χρόνου τρίτης τάξεως. Παράλληλα, εφαρμόσαμε τη Hermite-Collocation, με φορμαλισμό Hadamard που αναπτύξαμε στη Δράση 2.1 για μη-γραμμικά παραβολικά προβλήματα σε ομοιογενή περιβάλλοντα, σε γενικευμένα προβλήματα βιολογικής εισβολής τύπου Fisher και KPP. Τα Runge-Kutta σχήματα διακριτοποίησης χρόνου που χρησιμοποιήσαμε για αυτήν την κατηγορία προβλημάτων ανήκουν στην κλάση Strong Stability Preserving (SSP) τριών και τεσσάρων βημάτων τρίτης τάξεως.

Επιπλέον, την περίοδο αυτή συνεχίστηκε η πειραματική επεξεργασία δεδομένων και η πραγματοποίηση ενδεικτικών προσομοιώσεων με την πλατφόρμα πεπερασμένων στοιχείων FEniCS στα υπολογιστικά συστήματα του Εργαστηρίου Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Η/Υ (ΕΕΜΗΥ). Ταυτόχρονα επεκτείνεται η μελέτη απεικόνισης μεθόδων Hermite-Collocation σε πολυπυρήνες παράλληλες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές τύπου CPU/GPU (η περιγραφή των σχετικών αποτελεσμάτων έχει συμπεριληφθεί στη ΤΕ Δράσης 4.3 έτους 2013).

Στις επόμενες παραγράφους συνοψίζονται τα αποτελέσματα εφαρμογών της τρέχουσας περιόδου.

## 1.1 DIRK και SSP Runge-Kutta Σχήματα Δακριτοποίησης Χρόνου

Για την αποτελεσματικότερη συμπεριφορά της της μεθόδου dDHC είναι απαραίτητη η ζεύξη της με κατάλληλο αριθμητικό σχήμα χρονικής διακριτοποίησης ικανό να διατηρεί την συνολική τάξη σύγκλισης της μεθόδου σε γραμμικά και μη-γραμμικά μοντέλα διάχυσης καρκινικού όγκου αλλά και σε προβλήματα με άκαμπτη λύση. Σκοπός της ενότητας αυτής είναι να περιγράψουμε με συντομία σχήματα Runge-Kutta διακριτοποίησης χρόνου τύπου Diagonally Implicit και Strong Stability Preserving (SSP) και να εξηγήσουμε την καταλληλότητα χρήσης

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

τους σε διαφορετικές κλάσεις προβλημάτων ώστε να εξυπηρετείται αφενός μεν ο πρωταρχικός μας στόχος της αποτελεσματικής ζεύξης με μεθόδους Collocation αφετέρου δε τα παραγόμενα συστήματα αλγεβρικών εξισώσεων να διατηρούν περιορισμένη πολυπλοκότητα ώστε να μπορούν να επιλυθούν γρήγορα και αποδοτικά.

## 1.2 Επικύρωση αποτελεσμάτων σε γενικευμένα γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις $1+1$ διαστάσεις

Σκοπός της ενότητας αυτής είναι η μελέτη συμπεριφοράς της σύζευξης σχημάτων Runge-Kutta, τύπου Diagonally Implicit, και μεθόδων dDHC, καθώς και μετασχηματισμού Φωκά, σε γενικευμένα μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου στις $1+1$ διαστάσεις που περιγράφονται από αντίστοιχα γενικευμένα γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων.

## 1.3 Επικύρωση αποτελεσμάτων σε ομογενή παραβολικά μη-γραμμικά προβλήματα στις $1+1$ διαστάσεις διαστάσεις

Σκοπός της ενότητας αυτής είναι η μελέτη συμπεριφοράς των μεθόδων Hermite-Collocation και SSPRK για μη-γραμμικά ομοιογενή παραβολικά προβλήματα, που αναπτύχθηκαν και περιγράφονται στη ΤΕ της Δράσης 2.1 έτους 2013, σε προβλήματα Βιολογικής εισβολής πληθυσμών στις $1+1$ διαστάσεις.

## 1.4 Επικύρωση αποτελεσμάτων σε γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις $1+2$ διαστάσεις.

Σκοπός της ενότητας αυτής είναι η μελέτη συμπεριφοράς των μεθόδων dDHC και σχημάτων DIRK σε μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου στις $1+2$ διαστάσεις που περιγράφονται από αντίστοιχα γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων.

Το υπόλοιπο της παρούσης Τεχνικής Έκθεσης είναι οργανωμένο ως εξής. Στην παράγραφο 2 περιγράφονται σχήματα Runge-Kutta καθώς και τα το γενικό μοντέλο εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου, στην παράγραφο 3 ενδεικτικά αριθμητικά αποτελέσματα, ενώ στις επόμενες παραγράγους περιγράφονται συνεργασίες που αναπτύχθηκαν καθώς και τους μελλοντικούς στόχους.

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

# 2 Μεθοδολογία

Για την εφαρμογή των αριθμητικών μεθόδων dDHC και τον συνδυασμό τους με διάφορα σχήματα χρονικής διακριτοποίησης χρησιμοποιήθηκαν εξισώσεις-μοντέλα που κυρίως προσομοιώνουν, την ανάπτυξη καρκινικού όγκου στον εγκέφαλο και την βιολογική εισβολή πληθυσμού σε ομοιογενές και ανομοιογενές περιβάλλον.

## 2.1 DIRK και SSP Runge-Kutta Σχήματα Δακριτοποίησης Χρόνου

Ας θεωρήσουμε ότι έχουμε ένα σύστημα Συνήθων Διαφορικών Εξισώσεων (ΣΔΕ) της μορφής:

$$C^{(0)}\dot{\boldsymbol{a}} = L(\boldsymbol{a}). \tag{1}$$

Θεωρώντας ότι ο πίνακας $C^{(0)}$ είναι αντιστρέψιμος τότε το σύστημα θα μπορούσε επίσης να γραφεί ως:

$$\dot{\boldsymbol{a}} = \tilde{L}(\mathbf{a}) \doteq \left(C^{(0)}\right)^{-1} L(\mathbf{a}) \tag{2}$$

Όπως είναι γνωστό, η βασική ιδέα των μεθόδων Runge-Kutta είναι η προσέγγιση της λύσης απο το βήμα $\boldsymbol{a}^{(n)}$ στο χρονικό βήμα $\boldsymbol{a}^{(n+1)}$ χρησιμοποιώντας τον τύπο $q$ ενδιάμεσων βημάτων:

$$\boldsymbol{a}^{(n+1)} = \boldsymbol{a}^{(n)} + \Delta t \sum_{i=1}^{q} b_i \tilde{L}(\boldsymbol{a}^{(n,i)}) \tag{3}$$

με $\boldsymbol{a}^{(0)}$ να είναι η αρχική συνθήκη του συστήματος και $b_i$ συντελεστές βαρύτητας των μεθόδων RK. Η χρήση αριθμητικών σχημάτων υψηλής τάξης που να διατηρούν την ευστάθεια του συστήματος απεδείχθη απαραίτητη, ιδιαιτέρως σε μη-γραμμικά προβλήματα και σε προβλήματα με άκαμπτη λύση.

Στη κατεύθυνση αυτή, μελετήσαμε καταρχήν την χρήση της Διαγώνιας Πεπλεγμένης Runge-Kutta (Diagonally Implicit RK - DIRK) τρίτης τάξης, η οποία αποδείχθηκε κατάλληλη για γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1+1 και στις 1+2 διαστάσεις καθώς και σε προβλήματα που έχουν άκαμπτη λύση. Για το σύστημα (2) η μέθοδος DIRK μπορεί να γραφεί ως:

**DIRK(2,3)**

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

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

Η εφαρμογή της μεθόδου DIRK σε μη γραμμικά συστήματα ΣΔΕ κρίθηκε μη αποδοτική λόγω του υψηλού υπολογιστικού κόστους ανά χρονικό βήμα. Συγκεκριμένα, η πεπλεγμένη δομή της μεθόδου δημιουργεί μη γραμμικούς αγνώστους, με συνέπεια, η προσέγγιση της λύσης σε κάθε χρονικό βήμα να προϋποθέτει τη λύση δύο μη γραμμικών συστημάτων. Ως εναλλακτικά επιλογή θεωρήσαμε τα σχήματα Strong Stability Preserving RK (SSPRK) τριών και τεσσάρων βημάτων, που έχουν αναπτυχθεί για την επίλυση μη γραμμικών συστημάτων ΣΔΕ. Οι κανόνες SSPRK τριών και τεσσάρων βημάτων έχουν αντίστοιχα τη μορφή:

**SSP(3,3)**

$$
\begin{aligned}
\mathbf{a}^{(1)} &= \mathbf{a}^{n} + \Delta t \tilde{L}(\mathbf{a}^{n}) \\
\mathbf{a}^{(2)} &= \frac{3}{4}\mathbf{a}^{n} + \frac{1}{4}\mathbf{a}^{(1)} + \frac{1}{4}\Delta t \tilde{L}(\mathbf{a}^{(1)}) \\
\mathbf{a}^{n+1} &= \frac{1}{3}\mathbf{a}^{n} + \frac{2}{3}\mathbf{a}^{(2)} + \frac{2}{3}\Delta t \tilde{L}(\mathbf{a}^{(2)})
\end{aligned}
$$

**SSP(4,3)**

$$
\begin{aligned}
\mathbf{a}^{(1)} &= \mathbf{a}^{n} + \frac{1}{2}\Delta t \tilde{L}(\mathbf{a}^{n}) \\
\mathbf{a}^{(2)} &= \mathbf{a}^{(1)} + \frac{1}{2}\Delta t \tilde{L}(\mathbf{a}^{(1)}) \\
\mathbf{a}^{(3)} &= \frac{2}{3}\mathbf{a}^{n} + \frac{1}{3}\mathbf{a}^{(2)} + \frac{1}{6}\Delta t \tilde{L}(\mathbf{a}^{(2)}) \\
\mathbf{a}^{n+1} &= \mathbf{a}^{(3)} + \frac{1}{2}\Delta t \tilde{L}(\mathbf{a}^{(3)})
\end{aligned}
$$

## 2.2 Μαθηματικό Μοντέλο σε N περιοχές

Η βασική ΜΔΕ που περιγράφει το γραμμικό μοντέλο διάχυσης καρκινικών όγκων στον εγκέφαλο έχει τη μορφή:

$$
\frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{t}} = \nabla \cdot \left(\bar{D}(\bar{\mathbf{x}}) \nabla \bar{c}\right) + \rho \bar{c} \ , \tag{4}
$$

όπου $\bar{c}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t})$ συμβολίζει τη συγκέντρωση κυττάρων στη θέση $\bar{x}$ την χρονική στιγμή $\bar{t}$, το $\rho$ συμβολίζει το ποσοστό της αύξησης της συγκέντρωσης των κυττάρων,

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

και συμπεριλαμβάνει τόσο το ρυθμό αναπαραγωγής όσο και εκείνον της καταστροφής τους, και $\bar{D}(\bar{\mathbf{x}})$ είναι ο συντελεστής διάχυσης των κυττάρων στον ιστό του εγκεφάλου και δίδεται από την σχέση

$$\bar{D}(\bar{\mathbf{x}}) = \begin{cases} D_g & , \quad \bar{\mathbf{x}} \text{ ανήκει στην φαιά ουσία} \\ D_w & , \quad \bar{\mathbf{x}} \text{ ανήκει στην λευκή ουσία} \end{cases} , \tag{5}$$

με $D_g$ και $D_w$ να είναι σταθερές με $D_w > D_g$. Το μοντέλο ολοκληρώνεται με μηδενικές συνοριακές συνθήκες ροής που υποδηλώνουν τη μη επέκταση των καρκινικών κυττάρων εκτός της περιοχής του εγκεφάλου, καθώς και μία αρχική συνθήκη $\bar{c}(\bar{\mathbf{x}}, 0) = \bar{f}(\bar{\mathbf{x}})$, όπου $\bar{f}(\bar{x})$ δείχνει την αρχική χωρική κατανομή των κακοήθων κυττάρων.

Χρησιμοποιώντας τον κλασικό εκθετικό μετασχηματισμό $c(x,t) = e^t u(x,t)$ και τις αδιάστατες μεταβλητές (βλ. [27] ):

$$x = \sqrt{\frac{\rho}{D_w}}\bar{x} \quad , \quad t = \rho\bar{t} \, , \tag{6}$$

$$c(x,t) = \bar{c}\left(\sqrt{\frac{\rho}{D_w}}\bar{x}\rho\bar{t}\right)\frac{D_w}{\rho N_0} \quad , \tag{7}$$

$$f(x) = \bar{f}\left(\sqrt{\frac{\rho}{D_w}}\bar{x}\right) \quad , \quad N_0 = \int \bar{f}(\bar{x})d\bar{x} \tag{8}$$

καταλήγουμε στην παρακάτω μορφή του μοντέλου:

$$\begin{cases} u_t = \nabla \cdot (D\nabla u)\, , \quad x \in [a,b], \quad t \geq 0 \\ u_x(a,t) = 0 \quad , \quad u_x(b,t) = 0 \\ u(x,0) = f(x) := \sum_{i=1}^{M} \delta(x - \xi_i), \quad \xi_i \in (a,b) \end{cases} , \tag{9}$$

όπου $\delta(x)$ δηλώνει την Dirac delta συνάρτηση.

Λαμβάνοντας υπ΄όψιν την ετερογένεια του εγκεφαλικού ιστού (λευκή - φαιά ουσία), θεωρούμε ότι το διάστημα $[a,b]$ είναι χωρισμένο σε $n+1$ περιοχές $R_j := (w_{j-1}, w_j)$, με $a \equiv w_0 < w_1 < w_2 < \ldots < w_n < w_{n+1} \equiv b$, και εάν, για κάποιο $j$, η $R_j$ είναι η λευκή περιοχή, τότε η $R_{j-1}$ και $R_{j+1}$ θα είναι η φαιά περιοχή. Συνεπώς η αδιάστατη μορφή του συντελεστή διάχυσης $D(x)$ γίνεται:

$$D(x) = \gamma_j \, , \; x \in R_j \, , \; j = 1, \ldots, n+1 \tag{10}$$

με

$$\gamma_j := \begin{cases} D_g/D_w, & \text{όταν η } R_j \text{ είναι η φαιά ουσία} \\ 1, & \text{when } R_j \text{ είναι λευκή ουσία} \end{cases} . \tag{11}$$

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

# 3 Αποτελέσματα

## 3.1 Επικύρωση αποτελεσμάτων σε γενικευμένα γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις $1+1$ διαστάσεις

### 3.1.1 Μεθοδος dDHC και σχήματα DIRK

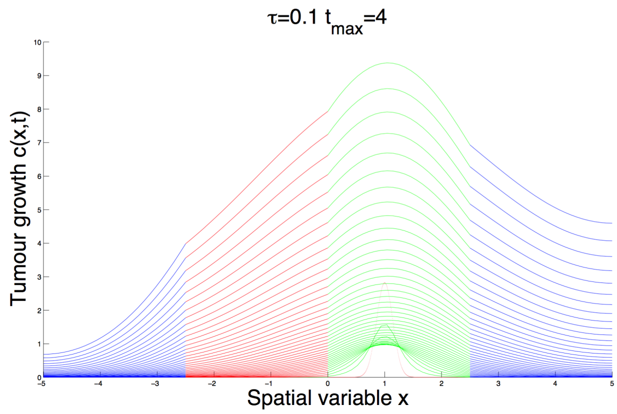
Σε αυτή την ενότητα μελετάμε αριθμητικά την απόδοση της collocation μεθόδου (DHC) με ασυνεχή πολυώνυμα Hemite στα σημεία διεπαφής σε συνδυασμό με τα χρονικά σχήματα (BE), (CN) και (2,3)-DIRK στα ακόλουθα προβλήματα:

**Πρόβλημα 1 (4 περιοχές - 1 πηγή κυττάρων)**

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

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

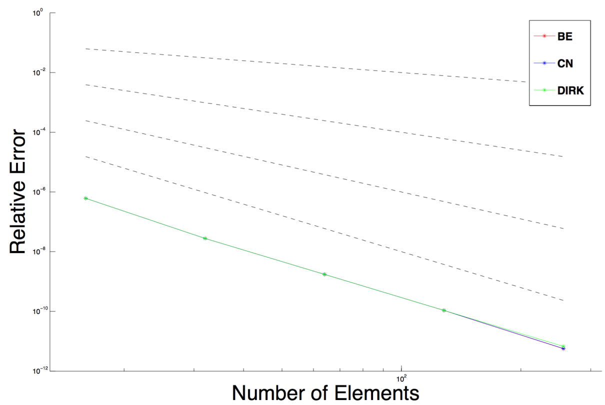
Η εξέλιξη του καρκινικού όγκου στο χρόνο για μέγιστο χρόνο $t_{max} = 4$, που αντιστοιχεί σε πραγματικό χρόνο περίπου ενός έτους, απεικονίζεται σχηματικά από το σχήμα (1) που ακολουθεί. Η τάξη σύγκλισης της collocation μεθόδου (DHC)




Σχήμα 1: Εξέλιξη της συγκέντρωσης καρκινικών κυττάρων στο χρόνο

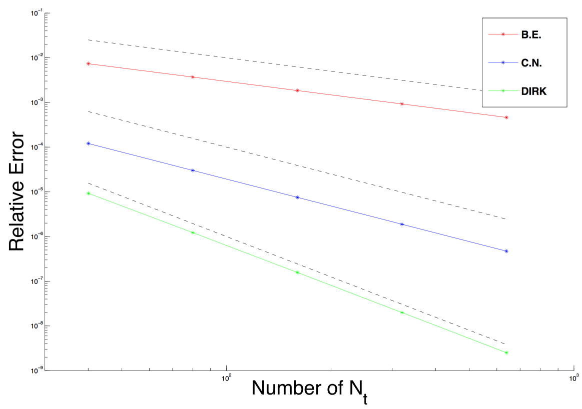
με ασυνεχή πολυώνυμα Hemite στα σημεία διεπαφής σε συνδυασμό με όλες τις μεθόδους χρονικής διακριτοποίησης, όπως φαίνεται στο σχήμα (2) διατηρείται τετάρτης τάξεως. Αντίστοιχα η τάξη σύγκλισης των χρονικών μεθόδων διακριτοποίησης, όπως φαίνεται στο σχήματα (3) παρέμεινε ένα για την BE, δύο CN και

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




Σχήμα 2: Τάξη σύγκλισης της χωρικής διακριτοποίησης όλων των μεθόδων για το Πρόβλημα 1.

τρία για την DIRK. Το $N_t$ συμβολίζει το πλήθος των χρονικών βημάτων μεταξύ του $t = 0$ και του $t = 4$.




Σχήμα 3: Τάξη σύγκλισης της χρονικής διακριτοποίησης όλων των μεθόδων για το Πρόβλημα 1.

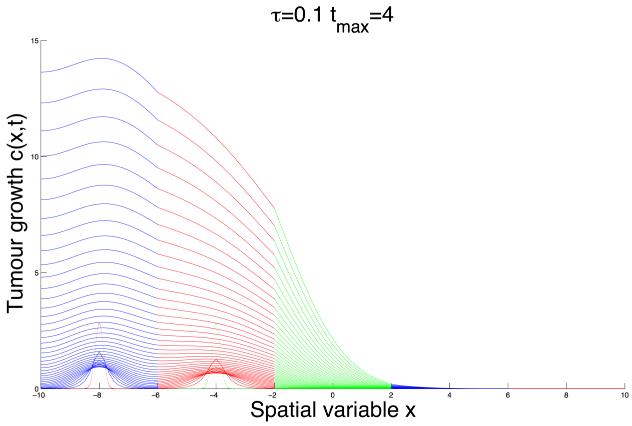
**Πρόβλημα 2 (5 περιοχές -2 πηγές)**

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

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

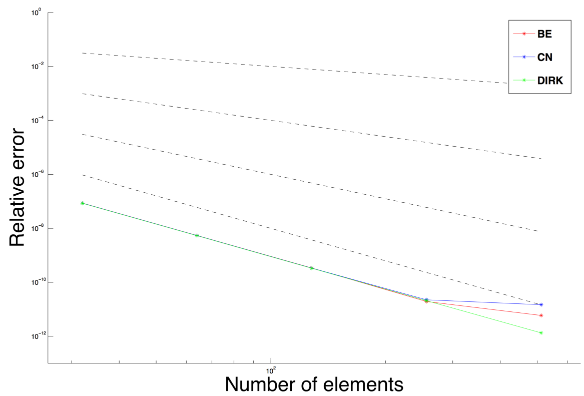
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και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

Όπως και στο πρόβλημα 1, η εξέλιξη του καρκινικού όγκου στο χρόνο για μέγιστο χρόνο $t_{max} = 4$, που αντιστοιχεί σε πραγματικό χρόνο περίπου ενός έτους, απεικονίζεται σχηματικά από το σχήμα (4) που ακολουθεί.




Σχήμα 4: Εξέλιξη της συγκέντρωσης καρκινικών κυττάρων στο χρόνο

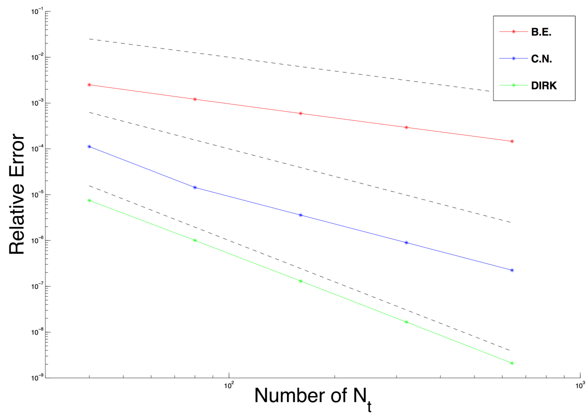
Η τάξη σύγκλισης της collocation μεθόδου (DHC) με ασυνεχή πολυώνυμα Hemite στα σημεία διεπαφής σε συνδυασμό με όλες τις μεθόδους χρονικής διακριτοποίησης, όπως φαίνεται στο σχήμα (5) διατηρείται και πάλι τετάρτης τάξεως .




Σχήμα 5: Τάξη σύγκλισης της χωρικής διακριτοποίησης όλων των μεθόδων για το Πρόβλημα 2.

Αντίστοιχα η τάξη σύγκλισης των χρονικών μεθόδων διακριτοποίησης, όπως φαίνεται στο σχήμα (6), παρέμεινε ένα για την BE, δύο CN και τρία για την DIRK. Το $N_t$ συμβολίζει το πλήθος των χρονικών βημάτων μεταξύ του $t = 0$ και του $t = 4$.

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

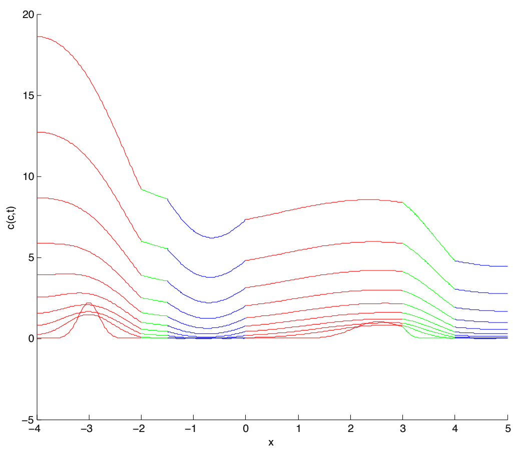



Σχήμα 6: Τάξη σύγκλισης της χρονικής διακριτοποίησης όλων των μεθόδων για το Πρόβλημα 2.

### 3.1.2 Μέθοδος Φωκά

Για τα αριθμητικά μας πειράματα χρησιμοποιήσαμε $[a, b] = [-4, 5]$ για τα άκρα, $[w_1, w_2, w_3, w_4, w_5] = [-2, -1.5, 0, 3, 4]$ για τα σημεία διεπαφής των περιοχών, $\gamma_j = D_g/D_w$ is $0.2$ για όλα τα $j = 1, 3, \ldots, n+1$ και δύο πηγές καρκινικών κυττάρων με $\xi_1 = -3$ και $\xi_2 = 2.5$.

Στο γράφημα 7 παρουσιάζεται η διάχυση του καρκινικού όγκου σε διάφορα χρονικά βήματα.



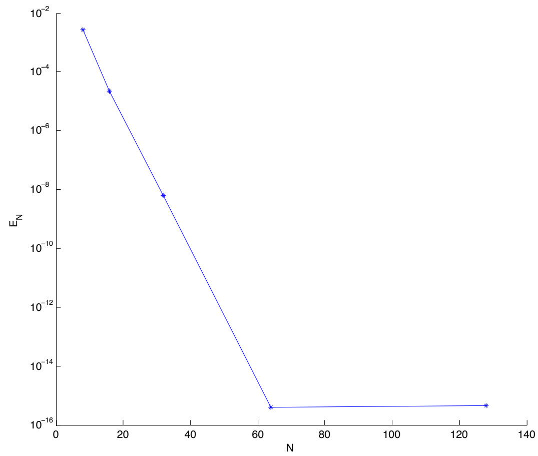

Σχήμα 7: Χρονική εξέλιξη του πυκνότητας του όγκου $c(x, t)$.

Το σχετικό σφάλμα, που απεικονίζεται στο γράφημα 8, δίνεται από τη σχέση:

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

$$E_N := \|u_{N_{i+1}} - u_{N_i\|_\infty} / \|u_{N_{i+1}}\|_\infty$$

με $N$ να δηλώνει τον αριθμό των σημείων ολοκλήρωσης και $u_N$ είναι η αντίστοιχη αριθμητική λυση. Παρατηρήστε την ταχεία πτώση του σφάλματος καθώς αυξάνονται τα σημεία ολοκλήρωσης.




Σχήμα 8: Το σχετικό σφάλμα $E_N$

## 3.2 Επικύρωση αποτελεσμάτων σε ομογενή παραβολικά μη-γραμμικά προβλήματα στις $1+1$ διαστάσεις διαστάσει

**Πρόβλημα I**

Το πρώτο πρόβλημα μοντέλο, που χρησιμοποιήθηκε για την μελέτη της συμπεριφοράς της μεθόδου HC-SSPRK, περιγράφεται από την γενικευμένη εξίσωση του Fisher ως ακολούθως:

$$\begin{aligned} u_t &= [(1-u)u_x]_x + 2u - 2u^2 \quad , \qquad -5\pi/2 \le x \le 5\pi/2, \quad 0 \le t \le T \\ u_x(\frac{-5\pi}{2}, t) &= 0, \quad u_x(\frac{5\pi}{2}, t) = 0 \quad , \qquad u(x,0) = \frac{1}{3}\,[2 + \sin(-x)] \end{aligned} \tag{12}$$

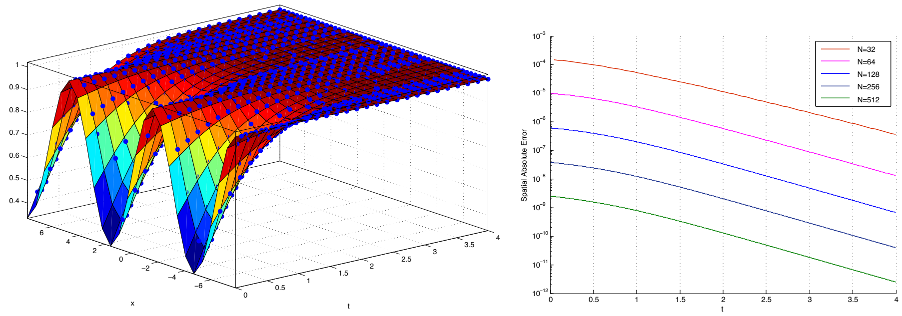
και επιδέχεται την αναλυτική λύση

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

Το χωρικό απόλυτο σφάλμα που χρησιμοποιήθηκε σε όλα τα πειράματα ορίζεται απο τη σχέση $\mathcal{E}^n := ||U(x,t^n) - u(x,t^n)||_2$ και οι απαραίτητοι περιορισμοί που τέθηκαν στην χρονική διαμέριση είναι $\Delta t \le \frac{1}{5}h^2$ για την SSP(4,3), $\Delta t \le \frac{1}{10}h^2$

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

για την SSP(3,3) και $\Delta t \le \frac{1}{9}h^2$ για την RK4. Υπο αυτούς τους περιορισμούς όλα τα χρονικά σχήματα έχουν υψηλή ευστάθεια, όπως φαίνεται στην εικόνα b του σχήματος Σχ. 9 για την SSP(4,3) ενώ, την ίδια στιγμή, η $O(h^4)$ τάξη σύγκλισης της HC διατηρείται (βλέπε πίνακα I). Το μέγιστο σφάλμα $\mathcal{E}^1 = \max_n\{\mathcal{E}^n\}$ και ο υπολογιστικός χρόνος που χρειάζεται να φτάσει το πρόβλημα στο χρόνο $t = 1$ συμπεριλαμβάνονται επίσης στον πίνακα I ώστε να δειχθεί η αποτελεσματικότητα της μεθόδου. Για να είναι πιο κατανοητή η σύγκριση των σχημάτων υλοποιήσαμε επίσης και την απλή μέθοδο RK τέταρτης τάξης.




(a) (b)

Σχήμα 9: a) Αναλυτική (συμπαγής) και HC-SSPRK(4,3) προσεγγιστική (σημεία) λύση για $N = 64$ b) Χωρικό απόλυτο σφάλμα σαν συνάρτηση του χρόνου για την HC-SSPRK(4,3)

Πίνακας I Υπολογιστική Επίδοση των σχημάτων HC-RK

| | *Απόλυτο Χωρικό Σφάλμα στο $t = \Delta t$* | | | *Χωρική Τάξη Σύγκλισης* | | | *Χρόνος (sec)* | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| N | SSP(4,3) | SSP(3,3) | RK4 | SSP(4,3) | SSP(3,3) | RK4 | SSP(4,3) | SSP(3,3) | RK4 |
| 32 | 1.53e-04 | 1.56e-04 | 1.54e-04 | - | - | - | 0.01 | 0.03 | 0.02 |
| 64 | 9.85e-06 | 9.89e-06 | 9.87e-06 | 3.95 | 3.98 | 3.97 | 0.05 | 0.05 | 0.06 |
| 128 | 6.20e-07 | 6.20e-07 | 6.20e-07 | 3.99 | 3.99 | 3.99 | 0.14 | 0.20 | 0.29 |
| 256 | 3.88e-08 | 3.89e-08 | 3.88e-08 | 4.00 | 4.00 | 3.99 | 0.72 | 1.07 | 1.42 |
| 512 | 2.56e-09 | 2.56e-09 | 2.55e-09 | 3.93 | 3.93 | 3.92 | 4.28 | 6.48 | 7.87 |

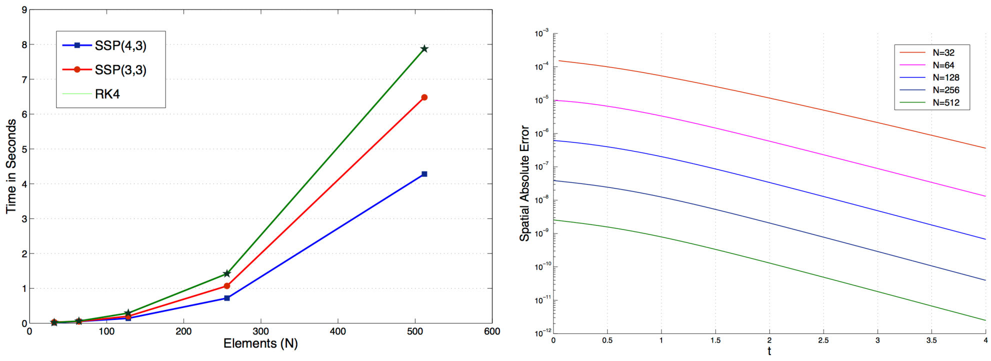
### 3.2.1 Πρόβλημα II

Το δεύτερο πρόβλημα που χρησιμοποιήσαμε για να ερευνήσουμε την συμπεριφορά της HC-RK δίνεται απο:

$$
\begin{aligned}
u_t = [(1-2u)u_x]_x + \frac{1}{2}u - u^2 \quad &, \qquad -\pi \le x \le \pi, \quad 0 \le t \le T \\
u_x(-\pi,t) = 0, \quad u_x(\pi,t) = 0 \quad &, \qquad u(x,0) = \frac{1}{2} - \frac{1}{6}\left(1 + \sin\frac{x}{2}\right)
\end{aligned}
\tag{13}
$$

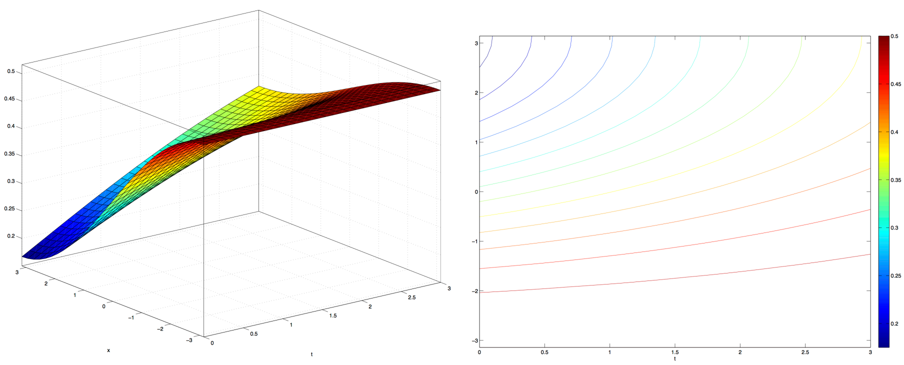
και επαληθεύει την αναλυτική λύση $u(x,t) = \frac{1}{2} - \frac{1}{3}\left(1 + \sin\frac{x}{2}\right)\left(1 + e^{\frac{t}{2}}\right)^{-1}$.

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




(a) (b)

Σχήμα 10: (a) Χρονική σύγκριση σε δευτερόλεπτα μεταξύ των SSPRK(4,3)-(3,3) & RK4. (b) Το απόλυτο σχετικό σφάλμα της μεθόδου ως συνάρτηση του χρόνου για την HC-SSPRK(4,3)



(a) (b)

Σχήμα 11: (a) Αναλυτική λύση και (b) κάτοψη λύσης για την εξ. (13)

Οι απαραίτητοι χρονικοί περιορισμοί που πρέπει να θέσουμε είναι $\Delta t = \frac{1}{5}h^2$ για την SSPRK(4,3), $\Delta t = \frac{1}{10}h^2$ για την SSPRK(3,3) και $\Delta t = \frac{1}{9}h^2$ για την RK4. Κάτω απο αυτούς τους περιορισμούς, διατηρούνται οι συνθήκες ευστάθειας και η τάξη σύγκλισης της HC για κάθε σχήμα χρονικής διακριτοποίησης. Η εξάρτηση του χρονικού βήματος απο το $h^2$ συνεπάγει στο υψηλό υπολογιστικό κόστος του προβλήματος. (Σημειώνουμε ότι για το πρόβλημα II $h = 2\pi/N$, ενώ για το πρόβλημα I $h = 5\pi/N$).

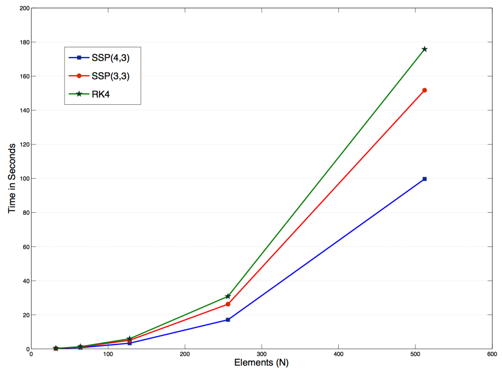
Η συνάρτηση του απόλυτου χωρικού σφάλματος της εξίσωσης, όπως φαίνεται στο Σχ. 12, επιβεβαιώνει την παρατήρηση μας στο Πρόβλημα I, ότι ο συνδυασμός της HC με ένα σχήμα χρονικής διακριτοποίησης Strong Stability παράγει μια ευσταθή μέθοδο υψηλής τάξης για μη γραμμικά παραβολικά προβλήματα

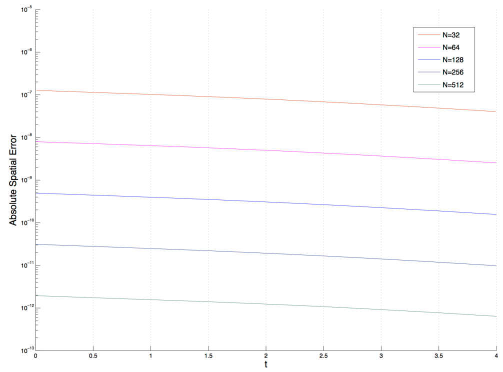
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και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

Πίνακας ΙΙ Υπολογιστική Επίδοση των σχημάτων HC-RK

| | *Απόλυτο Χωρικό Σφάλμα στο $t = \Delta t$* | | | *Χωρική Τάξη Σύγκλισης* | | | *Χρόνος (sec)* | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| N | SSP(4,3) | SSP(3,3) | RK4 | SSP(4,3) | SSP(3,3) | RK4 | SSP(4,3) | SSP(3,3) | RK4 |
| 32 | 1.27e-07 | 1.27e-07 | 1.27e-07 | - | - | - | 0.18 | 0.27 | 0.31 |
| 64 | 7.94e-09 | 7.94e-09 | 7.94e-09 | 3.99 | 3.99 | 3.99 | 0.72 | 1.10 | 1.31 |
| 128 | 4.96e-10 | 4.96e-10 | 4.96e-10 | 3.99 | 3.99 | 3.99 | 3.33 | 5.06 | 5.95 |
| 256 | 3.10e-11 | 3.10e-11 | 3.10e-11 | 3.99 | 3.99 | 3.99 | 26.23 | 19.52 | 30.81 |
| 512 | 1.94e-12 | 1.94e-12 | 1.94e-12 | 3.99 | 4.00 | 4.00 | 99.69 | 151.78 | 175.80 |

παραβολικής φύσης (αυτή η παρατήρηση φυσικά ισχύει με την υπόθεση ότι η λύση είναι επαρκώς ομαλή).




(a) (b)

Σχήμα 12: (a) Χρονική σύγκριση σε δευτερόλεπτα μεταξύ των SSPRK(4,3)-(3,3) & RK4. (b) Το απόλυτο σχετικό σφάλμα της μεθόδου ως συνάρτηση του χρόνου για την HC-SSPRK(4,3)

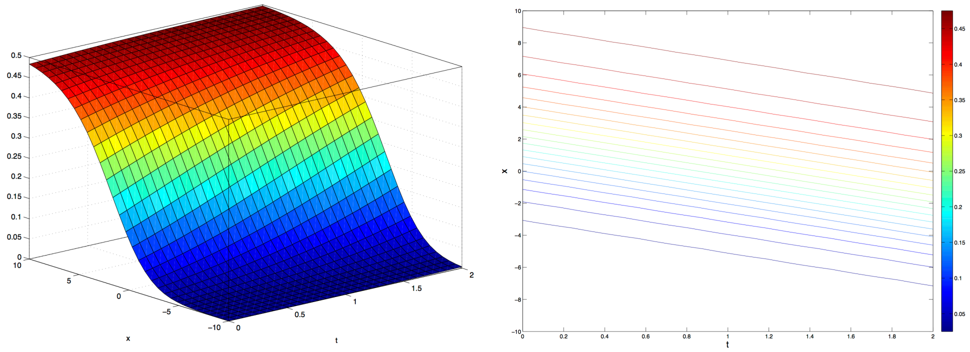
### 3.2.2 Πρόβλημα III

Το τρίτο πρόβλημα που επιλέξαμε για την μελέτη της συμπεριφοράς της μεθόδου HC-RK δίνεται απο:

$$\begin{aligned} u_t = u - 2u^2 + u_{xx} \quad &, \quad -10 \le x \le 10, \quad 0 \le t \le T \\ u_x(-10,t) = f(-10) \quad &, \quad u_x(10,t) = f(10) \\ f(x) = \frac{e^{\frac{5}{3}t + \sqrt{\frac{2}{3}}x}}{\sqrt{6}(e^{\frac{5}{6}t + \frac{1}{\sqrt{6}}x} + 1)^3} \quad &, \quad u(x,0) = -\frac{1}{8}\left[sech^2\frac{\sqrt{6}}{12}x - 2tanh\frac{\sqrt{6}}{12}x - 2\right] \end{aligned} \tag{14}$$

Η Εξ. (14) ανήκει στην οικογένεια των Κλασσικών εξισώσεων Fisher, όπου ο συντελεστής διάχυσης είναι σταθερός. Αναλυτικές λύσεις για τέτοιου τύπου εξισώσεις δίνεται στο [11].

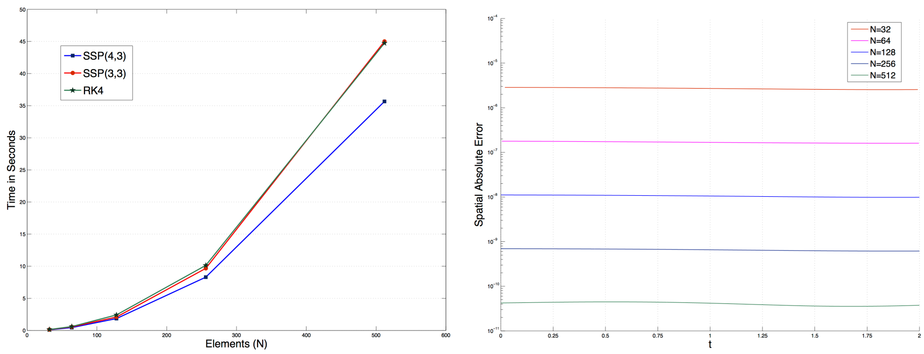
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ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




(a) (b)

Σχήμα 13: (a) Αναλυτική Λύση και (b) κάτοψη της λύσης για την εξ. (14)

Ο απαραίτητος περιορισμός για το χρονικό βήμα είναι $\Delta t \leq \frac{1}{10}h^2$ για την SSPRK(4,3), $\Delta t \leq \frac{1}{15}h^2$ για την SSPRK(3,3) και $\Delta t \leq \frac{1}{13}h^2$ για την RK4. Με αυτούς τους περιορισμούς πετυχαίνουμε την τάξη σύγκλισης της HC (Πίνακας II) ενώ, οι ιδιότητες ευστάθειας για όλα τα χρονικά σχήματα είναι χαλαρωμένες (Σχ. 14b).




(a) (b)

Σχήμα 14: (a) Χρονική σύγκριση σε δευτερόλεπτα μεταξύ των SSPRK(4,3)-(3,3) & RK4. (b) Το απόλυτο σχετικό σφάλμα της μεθόδου ως συνάρτηση του χρόνου για την HC-SSPRK(4,3)

Αυτή η εξίσωση χρειάζεται πυκνότερη χρονική διαμέριση από τα προηγούμενα προβλήματα, λόγω της κινούμενης άκαμπτης λύσης που παρουσιάζει. Αυτή η ιδιαιτερότητα της λύσης επηρεάζει την ευστάθεια και τον υπολογιστικό χρόνο των σχημάτων Runge-Kutta (Πίνακας III & Σχ. 14a).

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

Πίνακας III Υπολογιστική Επίδοση των σχημάτων HC-RK

| | *Απόλυτο Χωρικό Σφάλμα στο $t = \Delta t$* | | | *Χωρική Τάξη Σύγκλισης* | | | *Χρόνος (sec)* | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| N | SSP(4,3) | SSP(3,3) | RK4 | SSP(4,3) | SSP(3,3) | RK4 | SSP(4,3) | SSP(3,3) | RK4 |
| 32 | 2.85e-06 | 2.86e-06 | 2.84e-06 | - | - | - | 0.10 | 0.13 | 0.15 |
| 64 | 1.78e-07 | 1.78e-07 | 1.77e-07 | 4.00 | 4.00 | 3.99 | 0.45 | 0.56 | 0.61 |
| 128 | 1.11e-08 | 1.11e-08 | 1.11e-08 | 4.00 | 4.00 | 4.00 | 1.85 | 2.09 | 2.42 |
| 256 | 6.94e-10 | 6.94e-10 | 6.93e-10 | 4.00 | 4.00 | 3.99 | 8.30 | 9.67 | 10.14 |
| 512 | 4.22e-11 | 4.22e-11 | 4.22e-11 | 4.03 | 4.03 | 4.03 | 35.66 | 45.01 | 44.74 |

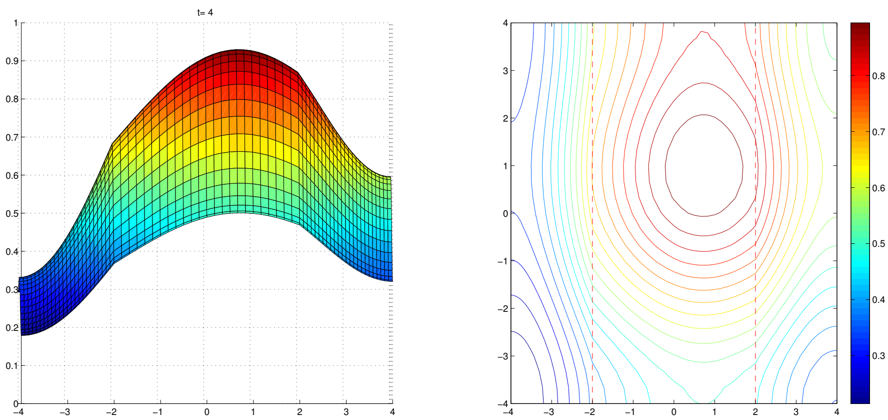
## 3.3 Επικύρωση αποτελεσμάτων σε γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις $1+2$ διαστάσεις

Θεωρούμε την εξίσωση

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

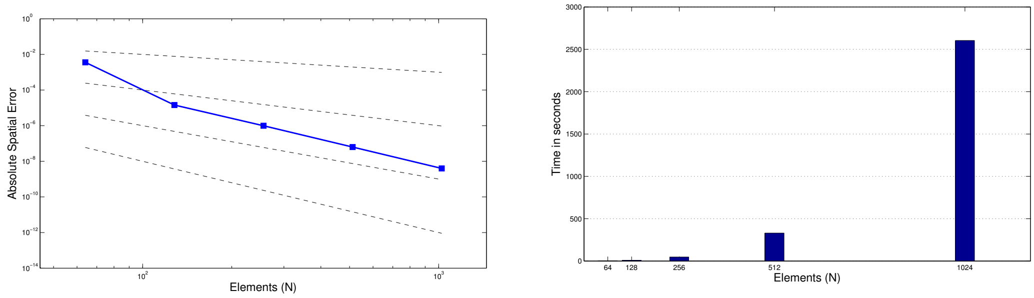
όπου

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




Σχήμα 15: Αριθμητική Λύση του προβλήματος τύπου Stripes σε 2+1 διαστάσεις

Όπως μπορεί κανείς εύκολα να παρατηρήσει στο Σχ. (15), διακρίνονται οι διαφορετικές περιοχές στο χωρίο όπου στις γραμμές διεπαφής σχηματίζεται η ασυνεχής πρώτη παράγωγος της λύσης. Η τάξη σύγκλισης της μεθόδου παραμένει στο τέσσερα (Σχ. (16)) ενώ ο υπολογιστικός χρόνος επίλυσης της εξίσωσης αυξάνει πολυωνυμικά.




Σχήμα 16: Τάξη σύγκλισης της Μεθόδου DHC-DIRK και χρόνος υπολογισμού.

# 4 Παραδοτέα

- Ι. Αθανασάκης, Ε. Παπαδοπούλου, Ι. Σαριδάκης, Runge-Kutta and Hermite Collocation for a biological invasion problem modeled by a generalized Fisher equation, 2nd International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences 2013 (Παρουσίαση)
- Ανάπτυξη λογισμικού σε προγραμματιστικό περιβάλλον MATLAB.
- Η παρούσα τεχνική έκθεση.

# 5 Συνεργασίες

Η παρούσα έρευνα πραγματοποιήθηκε από η ερευνητική ομάδα του Πολυτεχνείου Κρήτης (ΚΕΟ1) αποτελούμενη από τους καθ. Ι. Σαριδάκη, καθ. Ε. Παπαδοπούλου, Δρ. Μ. Παπαδομανωλάκη, Δρ. Α. Σηφαλάκη και τον υποψήφιο διδάκτορα Ι. Αθανασάκη.

# 6 Μελλοντικές Δράσεις

Έχοντας ως σκοπό την ολοκλήρωση του συνολικού στόχου του προγράμματος, προγραμματίζουμε ως μελλοντικές δράσεις της ομάδας μας

- Διερεύνηση νέων αριθμητικών σχημάτων για την χρονική διακριτοποίηση μη γραμμικών ΜΔΕ πολλαπλών πεδίων
- Μελέτη συμπεριφοράς της μεθόδου dDHC σε μη-γραμμικά προβλήματα στις 1+1 και 1+2 διαστάσεις.

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

- Μελέτη συμπεριφοράς της μεθόδου dDHC σε προβλήματα με ορθογώνια γεωμετρία αλλά με ασυνέχεια του συντελεστή διάχυσης ταυτόχρονα και στις δύο διαστάσεις.
- Ψηφιοποίηση ιατρικών απεικονίσεων MRI (Magnetic Resonance Imaging) και διακριτοποίηση μέσω εξειδικευμένων πακέτων λογισμικού και του FEniCS.

# 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 three-dimensional 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


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

[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



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

[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.



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο

ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

ΕΣΠΑ
2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης