

ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ ΚΡΗΤΗΣ
ΓΕΝΙΚΟ ΤΜΗΜΑ



ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ
ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΕΣ ΕΠΙΣΤΗΜΕΣ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΟΥ ΔΙΠΛΩΜΑΤΟΣ ΕΙΔΙΚΕΥΣΗΣ
ΚΑΤΕΥΘΥΝΣΗ : «ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΑ ΚΑΙ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΑ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΑ»

ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΤΗΣ ΜΕΘΟΔΟΥ ΦΩΚΑ ΣΤΟ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΟ
ΜΟΝΤΕΛΟ ΔΙΑΧΥΣΗΣ ΤΩΝ ΚΑΡΚΙΝΙΚΩΝ ΚΥΤΤΑΡΩΝ ΣΕ $n+1$
ΕΓΚΕΦΑΛΙΚΕΣ ΠΕΡΙΟΧΕΣ

ΙΩΑΝΝΗΣ ΜΑΡΙΟΣ ΑΣΒΕΣΤΑΣ

Επιβλέπων : Καθηγητής **Ιωάννης Σαριδάκης**

ΧΑΝΙΑ , 2013



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

ΑΝΑΓΝΩΡΙΣΗ

Η παρούσα έρευνα έχει συγχρηματοδοτηθεί από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο - ΕΚΤ) και από εθνικούς πόρους μέσω του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» του Εθνικού Στρατηγικού Πλαισίου Αναφοράς (ΕΣΠΑ) – Ερευνητικό Χρηματοδοτούμενο Έργο: ΘΑΛΗΣ (ΟΠΣ 379416). Επένδυση στην κοινωνία της γνώσης μέσω του Ευρωπαϊκού Κοινωνικού Ταμείου.

Ευχαριστίες

Πρώτα, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα της εργασίας μου, Καθηγητή και πρόεδρο του Εργαστηρίου Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Η/Υ του Πολυτεχνείου Κρήτης Ιωάννη Σαριδάκη, ο οποίος πίστεψε σε μένα και μου παρείχε την επιστημονική καθοδήγηση για την ολοκλήρωση της.

Ευχαριστώ από καρδιάς τον Επίκουρο Καθηγητή Εμμανουήλ Μαθιουδάκη για την συμπαράσταση και για την πολύτιμη βοήθεια του από το ξεκίνημα μέχρι και την ολοκλήρωση του μεταπτυχιακού προγράμματος.

Ευχαριστώ, ακόμα, τον Επίκουρο Καθηγητή Ανάργυρο Δελή για τις σημαντικές παρατηρήσεις του, οι οποίες με βοήθησαν να τελειοποιήσω την παρούσα εργασία.

Τέλος, ένα μεγάλο ευχαριστώ στους γονείς μου, οι οποίοι με στήριζαν και με στηρίζουν σε κάθε μου βήμα.

Περίληψη

Από τον εγκέφαλο και μόνο από τον εγκέφαλο πηγάζουν η ευχαρίστηση, οι ηδονές, οι χαρές, το γέλιο και οι λύπες μας. Μέσω του εγκεφάλου βλέπουμε ακούμε, γευόμαστε, διακρίνουμε το άσχημο από το ωραίο και το ευχάριστο από το δυσάρεστο.

Ιπποκράτης 460-377 π.Χ

Τα γλοιώματα είναι από τους σοβαρότερους και συχνότερους κακοήθεις όγκους του εγκεφάλου. Οι ασθενείς έχουν συνήθως χαμηλό προσδόκιμο ζωής. Το σημαντικότερο πρόβλημα στην διάγνωση τους είναι η ταχύτατη διήθηση των καρκινικών κυττάρων στους γειτονικούς φυσιολογικούς ιστούς. Έχουν δημιουργηθεί διάφορα μαθηματικά μοντέλα μερικών διαφορικών εξισώσεων, στηριζόμενα σε πειραματικά δεδομένα αξονικών και μαγνητικών τομογραφιών, για να προσομοιάσουν την εξέλιξη των καρκινικών όγκων στον εγκέφαλο. Στην παρούσα εργασία το μοντέλο για την προσομοίωση της διάχυσης των καρκινικών που μελετάται έχει ως βασικό του χαρακτηριστικό κυττάρων την ασυνέχεια που εμφανίζεται στον συντελεστή διάχυσης λόγω της ετερογένειας του εγκεφάλου (λευκή και φαιά ουσία). Στη συνέχεια, σ' αυτό το μαθηματικό μοντέλο γίνεται εφαρμογή της μεθόδου του Φωκά, μιας νέας ημι-αναλυτικής μεθόδου από την οποία δίνεται με ολοκληρώματα η λύση των διαφορικών εξισώσεων. Τέλος, γίνεται αριθμητική προσέγγιση της λύσης και παρουσιάζονται αριθμητικά αποτελέσματα.

Περιεχόμενα

Ευχαριστίες	iii
Περίληψη	v
1 Εγκέφαλος - Γλοιώματα	1
1.1 Εγκέφαλος	1
1.2 Νεοπλάσματα του Κ.Ν.Σ. - Γλοιώματα	4
2 Μαθηματικό μοντέλο της Swanson	7
2.1 Γενική μορφή	7
2.2 Μονοδιάστατη μορφή - 1 περιοχή	10
2.3 Μονοδιάστατη μορφή - $n + 1$ περιοχές	11
3 Μέθοδος του Φωκά	13
3.1 Παρουσίαση της μεθόδου	13
3.2 Εφαρμογή στο μονοδιάστατο μαθηματικό μοντέλο 1 περιοχής	16
3.3 Εφαρμογή στο μονοδιάστατο μαθηματικό μοντέλο $n + 1$ περιοχών	24
4 Αριθμητική Προσέγγιση	37
4.1 Μεταφορά καμπυλών ολοκλήρωσης	37
4.2 Πολυπλοκότητα αριθμητικής ολοκλήρωσης	40
4.3 Συμμετρικότητα ολοκληρωμάτων	42

5	Αριθμητικά Αποτελέσματα	45
5.1	Συμπεριφορά λύσης διαφόρων προβλημάτων	45
5.2	Ακρίβεια λύσης	49

Κεφάλαιο 1

Εγκέφαλος - Γλοιώματα

Στο κεφάλαιο αυτό ορίζονται όλες οι βιολογικές έννοιες, οι οποίες χρειάζονται για την καλύτερη κατανόηση του μαθηματικού μοντέλου και του προβλήματος που προκύπτει [18].

1.1 Εγκέφαλος

Το νευρικό σύστημα (Ν.Σ.) διαιρείται στο κεντρικό νευρικό σύστημα (Κ.Ν.Σ.) το οποίο αποτελείται από τον εγκέφαλο και τον νωτιαίο μυελό και το περιφερικό νευρικό σύστημα (Π.Ν.Σ.), το οποίο αποτελείται από τα εγκεφαλικά, τα περιφερικά νεύρα και τους κλάδους τους. Ο εγκέφαλος είναι το τμήμα του ΚΝΣ που βρίσκεται στο κρανίο κι ο νωτιαίος μυελός είναι το τμήμα που βρίσκεται στη σπονδυλική στήλη.

Ο εγκέφαλος με τη σειρά του αποτελείται από νευρώνες και τα κύτταρα της γλοίας, τα οποία ξεπερνούν αριθμητικώς τους νευρώνες κατά 10 φορές.

- Οι νευρώνες είναι εξειδικευμένα κύτταρα που είναι υπεύθυνα για την λήψη, επεξεργασία και μεταφορά πληροφοριών. Αποτελούνται από: α) κεραίες-δεκτικές περιοχές μέσω των οποίων λαμβάνουν πληροφορίες (δενδρίτες), β) το κυτταρικό σώμα όπου ολοκληρώνονται οι πληροφορίες και γ) ένα μακρύ άξονα, που μοιάζει με ηλεκτρικό καλώδιο, μέσω του οποίου μεταφέρονται οι πληροφορίες. (άξονας ή νευράξονας) Ο άξονας αυτός καταλήγει σε απολήξεις μέσω των οποίων ο νευρώνας έρχεται σε επαφή με τις δεκτικές περιοχές άλλων νευρώνων, δηλαδή δημιουργεί

συνάψεις με άλλους νευρώνες. Με τις συνάψεις τους οι νευρώνες σχηματίζουν εκτενή νευρωνικά δίκτυα (άξονες ή νευράξονες ή νευρικές ίνες). Ουσιαστικά το παραπάνω λειτουργεί ως εξής: οι δενδρίτες προσλαμβάνουν τις πληροφορίες, το κυτταρικό σώμα ολοκληρώνει και οι άξονες μεταβιβάζουν. Η διαδικασία αυτή ονομάζεται πόλωση. Τα σώματα των νευρικών κυττάρων τα οποία διατάσσονται σε ομάδες, στήλες ή στοιβάδες αποτελούν την φαιά ουσία του Κ.Ν.Σ. Το γκριζωπό της χρώμα το οφείλει στο ότι μέσα σε αυτή βρίσκονται σε μεγάλη συγκέντρωση τα σώματα των κυττάρων αυτών. Αντίθετα, η λευκή ουσία σχηματίζεται κυρίως από τους νευράξονες των νευρικών κυττάρων. Οι νευρώνες κάτω από την επίδραση διαφόρων τοξικών παραγόντων μπορεί να χάσουν την σφριγηλότητά τους, να αποσύρουν τις απολήξεις τους, να συρρικνωθούν και τελικά να πεθάνουν. Ο νευρωνικός θάνατος έχει σαν αποτέλεσμα την απώλεια λειτουργιών του εγκεφάλου.

- Υπάρχουν τέσσερα είδη κυττάρων γλοίας (Fields, Stevens-Graham, 2002). Τα ολιγοδενδροκύτταρα, τα κύτταρα Schwann, μικρογλοιακά κύτταρα και τα αστροκύτταρα. Για δεκαετίες, θεωρούταν ότι η λειτουργία των κυττάρων της γλοίας ήταν μόνο να παρέχουν στήριξη σε νευρώνες παρέχοντας σε αυτούς τροφή, απομακρύνοντας τα υπολείμματα και διαμορφώνοντας μια φυσική μήτρα για τη συγκράτηση νευρωνικών κυκλωμάτων. Τα τελευταία χρόνια, τα κύτταρα της γλοίας έχει αποδειχθεί ότι στέλλουν και λαμβάνουν σήματα από νευρώνες και άλλα κύτταρα της γλοίας και ότι ελέγχουν την καθιέρωση και τη διατήρηση συνάψεων μεταξύ νευρώνων και ότι συμμετέχουν σε κυκλώματα της γλοίας (Volterra, Meldolesi, 2005).

Ο ανθρώπινος εγκέφαλος βρίσκεται μέσα στο κύτος του κρανίου προβαλλόμενος για μεγαλύτερη προστασία από τρία περιβλήματα, τις μήνιγγες. Η σκληρή μήνιγγα είναι το εξωτερικό περίβλημα. Το μεσαίο μηνιγγικό περίβλημα αποτελεί η αραχνοειδής μήνιγγα. Τόσο η σκληρή όσο κι η αραχνοειδής μήνιγγα περιβάλλουν χαλαρά τον εγκέφαλο. Το εσωτερικό περίβλημα είναι η χοριοειδής μήνιγγα, η οποία προσκολλάται ΑΕ την επιφάνεια του εγκεφάλου. Επίσης ο εγκέφαλος διαιρείται σε πέντε τμήματα, στον τελικό,

διάμεσο, μέσο, οπίσθιο, και έσχατο εγκέφαλο. Εκτός όλως από αυτήν την εμβρυολογική διαίρεση συνηθίζεται για περιγραφικούς λόγους η διαίρεσή του σε τρία κύρια θέρη που είναι:

- Τα ημισφαίρια του εγκεφάλου,
- Το στέλεχος του εγκεφάλου και
- Την παρεγκεφαλίδα.

Τα εγκεφαλικά ημισφαίρια είναι τα δυο τμήματα στα οποία χωρίζεται μορφολογικά αλλά και από άποψη λειτουργιών ο εγκέφαλος του ανθρώπου και άλλων θηλαστικών. Κάθε ημισφαίριο ελέγχει την «χιαστί» αντίθετη πλευρά του σώματος. Δηλαδή, το δεξί ημισφαίριο δέχεται τα ερεθίσματα από το αριστερό τμήμα του σώματος, και ελέγχει τις κινήσεις αυτού του τμήματος. Το αντίστροφο ισχύει για το αριστερό.

Στην επιφάνειά τους παρουσιάζουν πολυάριθμες προεξοχές και αυλακώσεις. οι οποίες ονομάζονται έλικες και αύλακες αντίστοιχα. Οι βαθύτερες αύλακες ονομάζονται σχισμές. Η επιμήκης σχισμή χωρίζει τα ημισφαίρια μεταξύ τους ενώ άλλες σχισμές χωρίζουν το κάθε ημισφαίριο σε 4 λοβούς: το μετωπιαίο λοβό, το βρεγματικό λοβό, τον κροταφικό λοβό και τον ινιακό λοβό. Τα εγκεφαλικά ημισφαίρια αποτελούνται από ένα εξωτερικό στρώμα φαιάς ουσίας, το φλοιό των ημισφαιρίων, ενώ κάτω από τον φλοιό βρίσκεται η λευκή ουσία η οποία αποτελείται από προσαγωγές και απαγωγές φλοιώδεις ίνες, οι οποίες συγκλίνουν και σχηματίζουν την έσω κάψα. Επίσης φαιά ουσία βρίσκεται και εσωτερικά, ανάμεσα στη λευκή ουσία, και αποτελεί τους πυρήνες των ημισφαιρίων.

Και τα δύο ημισφαίρια δέχονται, επεξεργάζονται και αφομοιώνουν τις ίδιες πληροφορίες. Μόνο το κυρίαρχο ημισφαίριο (συνήθως το αριστερό) περιέχει τις περιοχές για ομιλία και γλώσσα και αυτή η πλευρά ενδιαφέρεται κυρίως για τις αναλυτικές λειτουργίες. Το μη κυρίαρχο ημισφαίριο παίζει μεγαλύτερο ρόλο στην μη προφορική, δημιουργική δραστηριότητα που απαιτεί εκτίμηση του χώρου (Tyldesley, Grieve, 1996)

1.2 Νεοπλάσματα του Κ.Ν.Σ. - Γλοιώματα

Τα νεοπλάσματα του ΚΝΣ διαχωρίζονται σε 2 κατηγορίες. Στα πρωτοπαθή και στα δευτεροπαθή. Τα πρωτοπαθή νεοπλάσματα είναι μια ιδιαίτερα μεγάλη ομάδα με ποικιλία ως προς την ιστολογική εικόνα τους, διαφορετική διάγνωσης τους, την βιολογική συμπεριφορά τους, την ιδιαίτερα υψηλή θνησιμότητα που έχουν και τη θεραπεία τους.

Τα νεοπλάσματα του νευροπαθητικού ιστού αποτελούν τη μεγαλύτερη ομάδα πρωτοπαθών νεοπλασμάτων του ΚΝΣ (περίπου το 50-60%), με συχνότερα τα γλοιώματα, που προέρχονται από τα νευρογλοιακά κύτταρα. Ανάλογα με την προέλευση και μορφολογία τους τα νεοπλάσματα αυτά χαρακτηρίζονται ως αστροκυττώματα, ολιγοδενδρογλοιακά και επενδυματικά, ενώ υπάρχουν και μεικτές μορφές (π.χ. ολιγοαστροκυττώματα). Ανάλογα, επίσης, με τα μορφολογικά κριτήρια και την αναμενόμενη βιολογική τους συμπεριφορά κατηγοριοποιούνται σε 4 βαθμίδες (grades)

- Βαθμός I: Πιλοκυτταρικό (τριχοειδή ή νεανικά) αστροκυττώματα
- Βαθμός II: Αστροκυττώματα, επενδυμώματα, ολιγοδενδρογλοιώματα
- Βαθμός III: Αναπλαστικά αστροκυττώματα (γλοιώματα ή ολιγοδενδρογλοιώματα)
- Βαθμός IV: Πολύμορφα γλοιοβλαστώματα

Οι βαθμοί I-IV είναι ενδεικτικοί της επιθετικότητας των όγκων αυτών.

Τα αστροκυττώματα, τα συχνότερα πρωτοπαθή νεοπλάσματα του ΚΝΣ, αποτελούν μια ετερογενή ομάδα από περιγεγραμμένες βλάβες με βραδεία εξέλιξη, έως διηθητικά νεοπλάσματα υψηλής κακοήθειας. Στους ενήλικες αναπτύσσονται κυρίως στα εγκεφαλικά ημισφαίρια ενώ στην παιδική ηλικία συχνότερα στο εγκεφαλικό στέλεχος ή το θάλαμο. Λιγότερο συχνά αναπτύσσονται στο ΝΜ και την παρεγκεφαλίδα. Τα αστροκυττώματα χωρίζονται για πρακτικούς λόγους σε α) διάχυτα διηθητικά και β) καλά περιγεγραμμένα, ενώ ανάλογα με την βιολογική τους συμπεριφορά διακρίνονται σε α) χαμηλής κακοήθειας και β) υψηλής κακοήθειας (αναπλαστικό [III], γλοιοβλάστωμα [IV]). Τα ολιγοδεν-

δρογλοιακά διακρίνονται στα ολιγοδενδρογλοιώματα (II) και στα αναπλαστικά ολιγοδενδρογλοιώματα (III). Αναπτύσσονται σε όλο το νευράξονα, κυρίως όμως στα εγκεφαλικά ημισφαίρια και συνήθως σε ενήλικες.

Τα επενδυματικά αναπτύσσονται σε όλο το νευράξονα σε στενή σχέση με το επένδυμα ή υπολειμματικά στοιχεία. Διακρίνονται σε υποεπενδυμάματα (I), μυξοθηλώδη επενδυμάματα (I), επενδυμάματα (II) και αναπλαστικά επενδυμάματα (III).

Το κυριότερο χαρακτηριστικό των γλοιωμάτων είναι η εξέλιξη τους από νεοπλάσματα καλής διαφοροποίησης σε περισσότερο κακοήθεις μορφές, όπως αναπλαστικά αστροκυτώματα και πολύμορφα γλοιοβλαστώματα σε διάστημα ενός με δέκα χρόνων, και οφείλεται στην συσσώρευση όλο και περισσότερων γενετικών βλαβών. Βέβαια, είναι δυνατή εξ' αρχής η ανάπτυξη πολύμορφου γλοιοβλαστώματος, χωρίς να αποτελεί εξέλιξη των βαθμίδων I,II ή III. Χαρακτηριστικό των αστροκυτωμάτων είναι η διήθηση του γειτονικού φυσιολογικού εγκεφαλικού ιστού διαμέσου συγκεκριμένων ανατομικών δομών και είναι εμφανής τόσο στα υψηλής βαθμίδας νεοπλάσματα όσο και στα χαμηλής.

Το σύνηθες σύμπτωμα των γλοιωμάτων είναι η εμφάνιση εστιακής ή γενικευμένης επιληπτικής κρίσης κι αργότερα εκδηλώσεις αυξημένης ενδοκρανιακής πίεσης (κεφαλαλγία, έμετοι, οίδημα των οπτικών θηλών, διαταραχές συνείδησης κ.τ.λ.). Στους νέους οι όγκοι εμφανίζονται κυρίως στην παρεγκεφαλίδα και συνδυάζονται με αστάθεια, οπτικές διαταραχές, κ.τ.λ.

Η μαγνητική και η αξονική τομογραφία είναι οι μέθοδοι εντοπισμού του όγκου και καθορισμού του σταδίου, στο οποίο βρίσκεται. Πολλές φορές καθίστανται απαραίτητες και πρόσθετες μέθοδοι απεικόνισης, όπως η μαγνητική φασματοσκοπία, η λειτουργική μαγνητική τομογραφία, η τρισδιάστατη μαγνητική τομογραφία και η τομογραφία εκπομπής ποζιτρονίων.

Παρ' όλο που η αφαίρεση του όγκου μέσω κρανιοτομίας, που χρησιμοποιούταν παλαιότερα, επέτρεπε τη λειτουργική επιβίωση για μεγάλο χρονικό διάστημα, τα τελευταία χρόνια εφαρμόζονται μέθοδοι ριζικότερης αφαίρεσης των γλοιωμάτων, ακόμα και σε ι-

διαίτερα δυσπρόσιτες περιοχές, οι οποίες προστατεύουν τις σημαντικές λειτουργίες κι έχουν αυξησει και ποσοτικά και ποιοτικά το προσδόκιμο ζωής. Τέτοιες τεχνικές είναι η νευροπλοήγηση, η λειτουργική μαγνητική τομογραφία, ο διεγχειρητικός νευροφυσιολογικός έλεγχος και η διεγχειρητική απεικόνιση μέσω υπερήχου ή ειδικών συστημάτων διεγχειρητικής τομογραφίας. Σε ιδιαίτερα δυσμενείς περιπτώσεις, λόγω χάρη διήθησης περισσότερων του ενός λοβού του εγκεφάλου, επέκτασης σε περιοχή λειτουργικών κέντρων, κ.τ.λ., η κρανιοτομία δεν προσφέρει ουσιαστικά οφέλη, αφού δεν γίνεται ριζική αφαίρεση του γλοιώματος, και συνίσταται επιβεβαίωση της διάγνωσης μέσω ιστολογικής εξέτασης. Σε όλες τις περιπτώσεις γλοιωμάτων χορηγείται μετεγχειρητικά συμβατική ακτινοθεραπεία και συμπληρωματική χημειοθεραπεία κατά τη διάρκεια αυτής.

Κεφάλαιο 2

Μαθηματικό μοντέλο της Swanson

Το σημαντικότερο πρόβλημα στη έγκαιρη διάγνωση των γλοιωμάτων είναι η ταχεία διάδοση του γειτονικού φυσιολογικού ιστού από τα καρκινικά κύτταρα με αποτέλεσμα την αδυναμία διάγνωσης του όγκου σε αρχικό στάδιο με τις συνηθισμένες μεθόδους απεικόνισης, αξονική και μαγνητική τομογραφία. Αυτός είναι ο κυριότερος λόγος, που οι επιστήμονες τις τελευταίες δεκαετίες μελετούν την ανάπτυξη των γλοιωμάτων μέσω διαφόρων μαθηματικών μοντέλων. Τα πρώτα μοντέλα, που βασίζοντας σε νόμους εκθετικούς, Verhulst ή Gompertz, αντικαταστάθηκαν από deterministic μοντέλα, τα οποία θεωρούν την ανάπτυξη των καρκινικών κυττάρων ως ένα φαινόμενο διάδοσης κύματος. Τα μοντέλα, που χρησιμοποιούνται τώρα πιο συχνά, είναι μοντέλα διάχυσης, στα οποία μέσω διαφορικών εξισώσεων με μερικές παραγώγους προσομοιώνεται η αλλαγή της πυκνότητας των κυττάρων του γλοιώματος [3,8,11,13,14,16].

2.1 Γενική μορφή

Το μαθηματικό μοντέλο της Swanson [8,9,10,11], το οποίο έχει αναπτυχθεί τα τελευταία χρόνια, έχει διαπιστωθεί μετά από έρευνες στο Πανεπιστήμιο της Washington ότι προσομοιάζει τη συμπεριφορά ενός πραγματικού καρκινικού όγκου με μεγάλη αποτελεσματικότητα, αφού η πιο σημαντική διαφορά του σε σχέση με τα προγενέστερα μοντέλα είναι ότι λαμβάνει υπόψη την ανατομία του εγκεφάλου. Με άλλα λόγια τη διαφορετική κινητική πυκνότητα στη φαιά και στη λευκή ουσία. Μπορεί να περιγραφεί από τη σχέση :

ρυθμός μεταβολής της πυκνότητας του πληθυσμού = διάχυση καρκινικών κυττάρων στη λευκή ή στη φαιά ουσία + πολλαπλασιασμός των καρκινικών κυττάρων

Αυτό οδηγεί στην εξής διαφορική εξίσωση

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = \bar{\nabla} \cdot \mathbf{J} + \rho \bar{c}, \quad (2.1)$$

όπου $\bar{c}(\bar{x}, \bar{t})$ είναι ο αριθμός των κυττάρων στη θέση \bar{x} και στο χρόνο \bar{t} , ρ (time^{-1}) το ποσοστό ανάπτυξης των κυττάρων αυτών συμπεριλαμβανομένου του πολλαπλασιασμού και του θανάτου τους και \mathbf{J} η διάχυση ροής των κυττάρων, η οποία λαμβάνεται να είναι ανάλογη της κλίσης της κυτταρικής πυκνότητας, δηλαδή

$$\mathbf{J} = \bar{D} \bar{\nabla} \bar{c}, \quad (2.2)$$

όπου \bar{D} ($\text{distance}^2/\text{time}$) είναι η σταθερά διάχυσης των κυττάρων στον ιστό του εγκεφάλου.

Άρα η εξίσωση (2.1) χρησιμοποιώντας την εξίσωση (2.2) γίνεται

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = \bar{D} \bar{\nabla}^2 \bar{c} + \rho \bar{c} \quad (2.3)$$

ή αλλιώς

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = \bar{\nabla} \cdot (\bar{D}(\bar{x}) \bar{\nabla} \bar{c}) + \rho \bar{c}. \quad (2.4)$$

Λαμβάνοντας υπόψιν την ετερογένεια του ιστού του εγκεφάλου, η σταθερά διάχυσης, η οποία αντιπροσωπεύει την κινητικότητα των καρκινικών κυττάρων, είναι διαφορετική στην φαιά και διαφορετική στη λευκή ουσία, δηλαδή

$$\bar{D}(\bar{x}) = \begin{cases} D_w, & \bar{x} \text{ ανήκει σε περιοχή με λευκή ουσία} \\ D_g, & \bar{x} \text{ ανήκει σε περιοχή με φαιά ουσία} \end{cases}, \quad (2.5)$$

όπου D_w και D_g είναι σταθερές και ισχύει $D_w > D_g$.

Χρησιμοποιώντας την Fisher προσέγγιση [3] η σταθερά διάχυσης στη λευκή και στη

φαιά ουσία μπορεί να αντιστοιχιστεί με τη γραμμική ταχύτητα των καρκινικών κυττάρων, δηλαδή

$$D_w = \frac{u_w^2}{4\rho} \quad (2.6)$$

και

$$D_g = \frac{u_g^2}{4\rho}, \quad (2.7)$$

όπου u_w και u_g οι γραμμικές ταχύτητες της λευκής και φαιάς περιοχής, αντίστοιχα, που έχει διαγνωστεί ότι είναι προσβεβλημένη από καρκίνο. Αυτή η προσέγγιση είναι επακόλουθο της παρατήρησης ότι ο πληθυσμός που διέπεται από την διάχυση και τον πολλαπλασιασμό εξαπλώνεται για μεγάλο χρονικό διάστημα με ρυθμό $2\sqrt{\rho D}$.

Πειραματικά δεδομένα γλοιωμάτων υψηλού βαθμού κακοήθειας δίνονται από τον παρακάτω πίνακα [8]

Παράμετροι	Σύμβολο	Πειραματικές Τιμές	Μονάδες Μέτρησης
Γραμμική ταχύτητα στη λευκή ουσία	u_w	> 0.016	$\frac{\text{cm}}{\text{day}}$
Γραμμική ταχύτητα στη φαιά ουσία	u_g	0.008	$\frac{\text{cm}}{\text{day}}$
Σταθερά διάχυσης στη λευκή ουσία	D_w	> 0.0042	$\frac{\text{cm}^2}{\text{day}}$
Σταθερά διάχυσης στη φαιά ουσία	D_g	0.0013	$\frac{\text{cm}^2}{\text{day}}$
Ποσοστό ανάπτυξης καρκινικών κυττάρων	ρ	0.0012	day^{-1}

Όπως προκύπτει η σταθερά διάχυσης στη λευκή ουσία είναι περίπου πενταπλάσια της σταθεράς διάχυσης στη φαιά ουσία $D_w \simeq 5D_g$.

Επίσης, στον παρακάτω πίνακα παραθέτονται πειραματικά δεδομένα για τη σταθερά διάχυσης στη φαιά ουσία γλοιωμάτων διαφόρων βαθμών κακοήθειας, τα οποία εντοπίστηκαν στον κροταφικό λοβό

Βαθμός κακοήθειας γλοιώματος	Σταθερά διάχυσης στη φαιά ουσία D_g
Βαθμός I	0.00013
Βαθμός II	0.0013
Βαθμός III	0.00013
Βαθμός IV	0.0013

Τέλος, στο σύνορο η ροή θεωρείται μηδενική, δηλαδή

$$\bar{D}(\bar{x}) \nabla \bar{c} \cdot n = 0, \quad (2.8)$$

και η αρχική πηγή των καρκινικών κυττάρων δίνεται από την σχέση

$$\bar{c}(\bar{x}, 0) = \bar{f}(\bar{x}). \quad (2.9)$$

2.2 Μονοδιάστατη μορφή - 1 περιοχή

Για να γίνει μετάβαση του προβλήματος από την γενική μορφή των τριών διαστάσεων (x, y, z) στη μονοδιάστατη, δηλαδή στον x -άξονα, σε 1 ενιαία περιοχή $[a, b]$ λευκής ή φαιάς ουσίας χρησιμοποιήθηκαν οι αδιάστατες μεταβλητές

$$x = \sqrt{\frac{\rho}{D_w}} \bar{x}, \quad (2.10)$$

$$t = \rho \bar{t}, \quad (2.11)$$

$$c(x, t) = \frac{D_w}{\rho N_0} \bar{c}\left(\sqrt{\frac{\rho}{D_w}} \bar{x}, \rho \bar{t}\right), \quad (2.12)$$

και

$$f(x) = \bar{f}\left(\sqrt{\frac{\rho}{D_w}} \bar{x}\right), \quad (2.13)$$

όπου $N_0 = \int \bar{f}(\bar{x}) d\bar{x}$ δηλώνει τον αρχικό αριθμό καρκινικών κυττάρων στον εγκέφαλο, δηλαδή για χρόνο $\bar{t} = 0$.

Παραδείγματος χάρη για το χρόνο η σχέση μεταξύ της αδιάστατης ποσότητας t και του πραγματικού χρόνου για $\rho = 0.012 \text{day}^{-1}$ δίνεται από τον πίνακα

Αδιάστατη ποσότητα χρόνου t	Πραγματικός χρόνος
$t = 0.01$	≈ 20 ώρες
$t = 0.10$	≈ 8 μέρες
$t = 1.00$	≈ 3 μήνες
$t = 4.00$	≈ 1 χρόνος
$t = 10.00$	≈ 2 χρόνια

Η εξίσωση του μαθηματικού μοντέλου (2.4) μετατρέπεται σε

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (D(x) \nabla c) + \rho c. \quad (2.14)$$

Το μοντέλο, λοιπόν, σε μία διάσταση μπορεί να γραφεί συνοπτικά ως εξής

$$\begin{cases} c_t = (Dc_x)_x + c, & x \in [a, b], \quad t \geq 0 \\ c_x(a, t) = 0 \quad \text{και} \quad c_x(b, t) = 0 \\ c(x, 0) = f(x) \end{cases}. \quad (2.15)$$

Αντικαθιστώντας

$$q(x, t) = e^{-t}c(x, t) \quad (2.16)$$

μετατρέπεται σε

$$\begin{cases} q_t = (Dq_x)_x, & x \in [a, b], \quad t \geq 0 \\ q_x(a, t) = 0 \quad \text{και} \quad q_x(b, t) = 0 \\ q(x, 0) = f(x) \end{cases}, \quad (2.17)$$

όπου $[a, b]$ να συμβολίζει μια περιοχή λευκής ή φαιάς ουσίας, η αδιάστατη παράμετρος

D θεωρείται

$$D(x) = \begin{cases} 1, & x \text{ σε περιοχή λευκής ουσίας} \\ \gamma, & x \text{ σε περιοχή φαιάς ουσίας} \end{cases}, \quad \text{με} \quad \gamma := \frac{D_g}{D_w} < 1, \quad (2.18)$$

και

$$c(x, 0) = f(x), \quad (2.19)$$

με την αρχική πηγή των καρκινικών κυττάρων $f(x)$ να ορίζεται ως εξής

$$f(x) := \delta(x - \xi), \quad \xi \in (a, b), \quad (2.20)$$

όπου $\delta(x)$ δηλώνει τη συνάρτηση του Dirac. Για πολλαπλές πηγές η αρχική συνθήκη έχει τον εξής ορισμό

$$f(x) := \sum_{\tau=1}^m \delta(x - \xi_\tau), \quad \xi_\tau \in (a, b). \quad (2.21)$$

2.3 Μονοδιάστατη μορφή - $n + 1$ περιοχές

Έστω $a = r_0 < r_1 < r_2 < \dots < r_n < r_{n+1} = b$ και $R_j := \{x : r_{j-1} < x < r_j\}$.

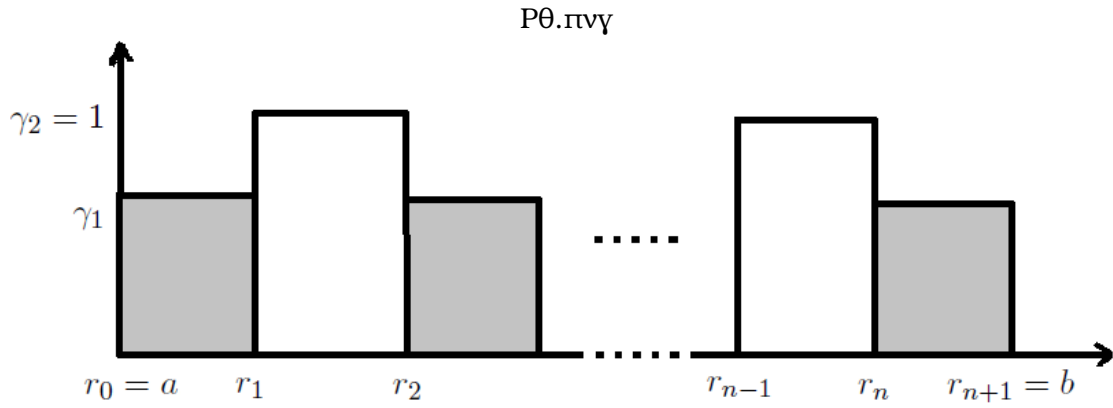
Λόγω της ετερογένειας του εγκεφαλικού ιστού θεωρείται το ίδιο μονοδιάστατο πρόβλημα ορισμένο στο πεπερασμένο σύνολο $[a, b]$, το οποίο χωρίζουν τα σημεία r_1, r_2, \dots, r_n σε

$n + 1$ περιοχές R_j . Εξαιτίας αυτής της εναλλαγής στις περιοχές από φαιά σε λευκή κι από λευκή σε φαιά ουσία, αν $x \in R_j$ σημαίνει ότι x ανήκει σε περιοχή με λευκή ουσία, τότε $x \in R_{j-1}$ και $x \in R_{j+1}$ σημαίνουν ότι x ανήκει σε περιοχή με φαιά ουσία για κάθε j . Δηλαδή αλλάζει και η σταθερά διάχυσης από τη μια περιοχή στην άλλη.

Ορίζεται, λοιπόν, η D ως εξής:

$$D(x) = \begin{cases} \gamma_1, & x \in R_j \text{ με } j = \text{περιττός} \\ \gamma_2, & x \in R_j \text{ με } j = \text{άρτιος} \end{cases}, \quad (2.22)$$

όπου $0 < \gamma_1 \leq \gamma_2 = 1$ ή $0 < \gamma_2 \leq \gamma_1 = 1$ ανάλογα με το αν υπάρχει λευκή ή φαιά ουσία στην πρώτη περιοχή, αντίστοιχα.



Σχήμα 2.1: Γραφική παράσταση της $D(x)$ για $0 < \gamma_1 \leq \gamma_2 = 1$.

Από την ασυνέχεια αυτή στη σταθερά διάχυσης D και τη συνέχεια στην ροή Dq_x συνεπάγεται, όχι μόνο ασυνέχεια στην q_x , αλλά και πρόβλημα στο ορισμό της στα σημεία διασύνδεσης των περιοχών R_j . Με άλλα λόγια η λύση q είναι συνεχής, αλλά δεν είναι παραγωγίσιμη, στα σημεία αυτά, δηλαδή ορίζονται:

$$q(r_j, t) := \lim_{x \rightarrow r_j^+} q(x, t) = \lim_{x \rightarrow r_j^-} q(x, t), \quad \forall j = 1, 2, \dots, n. \quad (2.23)$$

Ανάλογα, λόγω της διατήρησης της ροής στα σημεία διασύνδεσης, ορίζονται:

$$Dq_x(r_j, t) := \lim_{x \rightarrow r_j^+} D(x)q_x(x, t) = \lim_{x \rightarrow r_j^-} D(x)q_x(x, t), \quad \forall j = 1, 2, \dots, n. \quad (2.24)$$

Κεφάλαιο 3

Μέθοδος του Φωκά

Είναι μια νέα ημι-αναλυτική μέθοδος, με την οποία χρησιμοποιώντας θεωρήματα και τεχνικές μιγαδικής ανάλυσης μπορεί να παρασταθεί με ολοκληρώματα η λύση μιας μερικής διαφορικής εξίσωσης. Το σημαντικότερο πλεονέκτημα της μεθόδου αυτής σε σχέση με τις προγενέστερες της είναι ότι μπορεί να υπολογιστεί η λύση του προβλήματος σε οποιοδήποτε σημείο (x, t) χωρίς να χρειάζονται επιπλέον υπολογισμοί σε ενδιάμεσα χρονικά στάδια [5]. Η επέκταση της μεθόδου του Φωκά στο μονοδιάστατο 3 περιοχών μαθηματικό μοντέλο της Swanson έγινε από τον Διονύσιο Μαντζαβίνο στο Πανεπιστήμιο του Cambridge και υλοποιήθηκε αριθμητικά από την ομάδα του Εργαστηρίου Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Η/Υ του Πολυτεχνείου Κρήτης [7]. Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζεται η μέθοδος και στη συνέχεια επεκτείνεται η εφαρμογή της στο μαθηματικό μοντέλο των $n + 1$ περιοχών αναγάγωντας το σε προβλήματα 1 περιοχής, τα οποία συνδέονται μεταξύ τους.

3.1 Παρουσίαση της μεθόδου

Έστω

$$\Omega = \{(x, t) : 0 < x < L, 0 < t < T\} \quad (3.1)$$

και $q(x, t)$ ικανοποιεί την γραμμική εξελικτική (evolution) διαφορική εξίσωση

$$q_t + \omega(-i\partial_x)q = 0, (x, t) \in \Omega \quad (3.2)$$

όπου $\omega(k)$ είναι πολυώνυμο βαθμού n τέτοιο ώστε $\Re(\omega(k)) \geq 0$ για k πραγματικό κι ονομάζεται dispersion relation της (3.2). Αυτός ο περιορισμός για το $\omega(k)$ διασφαλίζει το πρόβλημα είναι καλά ορισμένο, δηλαδή ότι η λύση δεν απειρίζεται. Έστω ότι

$$\omega(k) = \alpha_n k^n + \alpha_{n-1} k^{n-1} + \dots + \alpha_0, \quad \alpha_n \neq 0. \quad (3.3)$$

Από τον περιορισμό $\Re(\omega(k)) > 0$ συνεπάγεται ότι αν n άρτιος, τότε απαραίτητα ο όρος α_n ισούται με i ή $-i$, ενώ αν n περιττός, τότε $\Re(\alpha_n) \geq 0$.

Ορίζεται, επίσης, η τιμή της αρχικής συνθήκης (initial condition) $q(x, 0)$. Αν από τις συνοριακές συνθήκες (boundary conditions) εμφανίζονται N για $x = 0$ και $n - N$ για $x = L > 0$, με

$$N := \begin{cases} \frac{n}{2}, & n = \text{άρτιος} \\ \frac{n+1}{2}, & n = \text{περιττός}, \alpha_n = i \\ \frac{n-1}{2}, & n = \text{περιττός}, \alpha_n = -i \end{cases}. \quad (3.4)$$

τότε το πρόβλημα αρχικών και συνοριακών συνθηκών είναι καλά ορισμένο. Ορίζονται, λοιπόν, οι τιμές των $\partial_x^j q(0, t)$ και $\partial_x^j q(L, t)$ για $j = 0, 1, 2, \dots, n - 1$. Η εξίσωση (3.2) επαληθεύεται από την μονοπαραμετρική οικογένεια λύσεων

$$e^{-ikx + \omega(k)t}, \quad (3.5)$$

επομένως, εύκολα μπορεί να μετατραπεί στην local relation [19]

$$(e^{-ikx + \omega(k)t} q(x, t))_t - (e^{-ikx + \omega(k)t} \sum_{j=0}^{n-1} c_j(k) \partial_x^j q(x, t))_x = 0, \quad (3.6)$$

όπου $c_j(k)_0^{n-1}$ πολυώνυμα, τα οποία μπορούν να υπολογιστούν ως προς $\omega(k)$ με την ταυτότητα

$$\sum_{j=0}^{n-1} c_j(k) \partial_x^j = i \frac{\omega(k) - \omega(-i\partial_x)}{k - i\partial_x}. \quad (3.7)$$

Εφαρμόζοντας το Θεώρημα του Green στην (3.6) στην περιοχή (3.1) προκύπτει η σχέση

$$\hat{q}(k, 0) - \tilde{g}(k) + e^{-ikL} \tilde{h}(k) = e^{\omega(k)T} \int_0^L e^{-ikx} q(x, T) dx \quad (3.8)$$

κι αντικαθιστώντας το T με t προκύπτει η σχέση

$$\hat{q}(k, 0) - \tilde{g}(k) + e^{-ikL} \tilde{h}(k) = e^{\omega(k)t} \int_0^L e^{-ikx} q(x, t) dx, \quad (3.9)$$

όπου

$$\tilde{g}(k) = \sum_{j=0}^{n-1} c_j(k) \int_0^t e^{\omega(k)s} \partial_x^j q(0, s) ds \quad \text{και} \quad \tilde{h}(k) = \sum_{j=0}^{n-1} c_j(k) \int_0^t e^{\omega(k)s} \partial_x^j q(L, s) ds \quad (3.10)$$

και $\hat{q}(k, 0)$ ο μετασχηματισμός Fourier της αρχικής συνθήκης

$$\hat{q}(k, 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} q(k, t) dk. \quad (3.11)$$

Η εξίσωση (3.9) ισχύει για κάθε $k \in \mathbb{C}$ και ονομάζεται global relation της (3.2).

Υπάρχουν συναρτήσεις $\{\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_{n-1}\}$, τέτοιες ώστε να αφήνουν το $\omega(k)$ αναλλοίωτο, δηλαδή

$$\omega(k) = \omega(\nu_j(k)), \quad j = 1, 2, \dots, n-1. \quad (3.12)$$

Εφαρμόζοντας αυτούς τους μετασχηματισμούς στην (3.9) και αντικαθιστώντας τις συνοριακές συνθήκες προκύπτει ένα σύστημα n εξισώσεων με n αγνώστους. Στη συνέχεια, λύνοντας αυτό το σύστημα κι εφαρμόζοντας τον αντίστροφο μετασχηματισμό Fourier στην (3.9) προκύπτει μια σχέση για την $q(x, t)$, η οποία ύστερα από χρήση του Θεωρήματος του Gauss, του Λήμματος του Jordan και απαλοιφής κάποιων όρων δίνει τη λύση της εξίσωσης (3.2) [5]

$$\begin{aligned} q(x, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx - \omega(k)t} \hat{q}(k, t) dk \\ &\quad - \frac{1}{2\pi} \int_{\partial \mathcal{D}^+} e^{ikx - \omega(k)t} \tilde{g}(k) dk \\ &\quad - \frac{1}{2\pi} \int_{\partial \mathcal{D}^-} e^{ik(x-L) - \omega(k)t} \tilde{h}(k) dk, \end{aligned} \quad (3.13)$$

όπου

$$\mathcal{D} = \{k \in \mathbb{C} : \Re(\omega(k)) < 0\} \quad (3.14)$$

και

$$\mathcal{D}^+ = \mathcal{D} \cap \mathbb{C}^+, \quad \mathcal{D}^- = \mathcal{D} \cap \mathbb{C}^-. \quad (3.15)$$

3.2 Εφαρμογή στο μονοδιάστατο μαθηματικό μοντέλο 1 περιοχής

Έστω το μονοδιάστατο πρόβλημα (2.17), όπου $[a, b]$ είναι μια ενιαία περιοχή λευκής ή φαιάς ουσίας, δηλαδή ο συντελεστής διάχυσης D είναι 1 ή γ σε όλο το $[a, b]$. Έστω $D_c := D(x) = \text{const}$, τότε η λύση q ικανοποιεί τη συνάρτηση

$$q_t = (D_c q_x)_x = D_c q_{xx} \quad (3.16)$$

Έστω L διαφορικός τελεστής, τότε ο L^* είναι ο formal adjoint του L αν και μόνον αν

$$\langle L(u), v \rangle = \langle u, L^*(v) \rangle \quad \forall u, v. \quad (3.17)$$

Δηλαδή αν ο διαφορικός τελεστής είναι

$$L(u) = A \frac{\partial^2(u)}{\partial x^2} + 2B \frac{\partial^2(u)}{\partial x \partial t} + \Gamma \frac{\partial^2(u)}{\partial t^2} + \alpha \frac{\partial(u)}{\partial x} + \beta \frac{\partial(u)}{\partial t} + \gamma u \quad (3.18)$$

τότε από την (3.17) προκύπτει ότι

$$L^*(u) = \frac{\partial^2(Au)}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial^2(Bu)}{\partial x \partial t} + \frac{\partial^2(\Gamma u)}{\partial t^2} - \frac{\partial(\alpha u)}{\partial x} - \frac{\partial(\beta u)}{\partial t} + \gamma u \quad (3.19)$$

Η $\tilde{q}(x, t)$ ικανοποιεί την εξίσωση που αντιστοιχεί στον formal adjoint της (3.16), δηλαδή την εξίσωση

$$-\tilde{q}_t = D_c \tilde{q}_{xx}. \quad (3.20)$$

Πολλαπλασιάζοντας κατά μέλη τις (3.16) και (3.20) με \tilde{q} και q αντίστοιχα και στη συνέχεια προσθέτοντας κατά μέλη προκύπτει:

$$\begin{aligned} q_t \tilde{q} + q \tilde{q}_t &= D_c q_{xx} \tilde{q} - D_c q \tilde{q}_{xx} \\ \Rightarrow (q \tilde{q})_t &= (D_c q_x \tilde{q} - D_c q \tilde{q}_x)_x \\ \Rightarrow (q \tilde{q})_t - (D_c q_x \tilde{q} - D_c q \tilde{q}_x)_x &= 0. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Μια μονοπαραμετρική οικογένεια λύσεων της (3.20) δίνεται από την

$$\tilde{q}(x, t, k) = e^{-ikx + D_c k^2 t}, \quad k \in \mathbb{C}. \quad (3.22)$$

Άρα η εξίσωση (3.21) γίνεται

$$(e^{-ikx+D_c k^2 t} q)_t - (e^{-ikx+D_c k^2 t} D_c (q_x + ikq))_x, \quad k \in \mathbb{C}, \quad (3.23)$$

και λέγεται local relation της εξίσωσης (3.16). Η ποσότητα $\omega(k) = D_c k^2$, που εμφανίζεται στους εκθέτες, ονομάζεται dispersion relation της (3.16).

Έστω C μια θετικά-δεξιόστροφα προσανατολισμένη κλειστή καμπύλη και D το χωρίο το οποίο περικλύει. Αν P και Q συναρτήσεις ορισμένες σε ανοιχτή περιοχή που να περιέχει το D με συνεχείς πρώτες μερικές παραγώγους, τότε από το Θεώρημα του Green συνεπάγεται

$$\oint_C P dx + Q dy = \iint_D (\partial_x Q - \partial_y P) dx dy. \quad (3.24)$$

Ολοκληρώνοντας την local relation της (3.16) στο χωρίο A , όπου

$$A := \{(x, t) : x \in [a, b], 0 \leq t \leq T\}, \quad (3.25)$$

προκύπτει:

$$\iint_A (\partial_t P(x, t, k) + \partial_x Q(x, t, k)) dx dt = 0, \quad (3.26)$$

όπου $P(x, t, k) = e^{-ikx+D_c k^2 t} q(x, t)$ και $Q(x, t, k) = -e^{-ikx+D_c k^2 t} D_c (q_x(x, t) + ikq(x, t))$.

Από το Θεώρημα του Green συνεπάγεται

$$\oint_{\partial A^+} (P(x, t, k) dx - Q(x, t, k) dt) = 0, \quad (3.27)$$

δηλαδή το διπλό ολοκλήρωμα στο χωρίο A μετατράπηκε σε επικαμπύλιο ολοκλήρωμα πάνω στο σύνορο ∂A του χωρίου με θετικό-δεξιόστροφο προσανατολισμό. Συνεπώς, μπορεί να γραφεί κι ως άθροισμα των επικαμπύλιων ολοκληρωμάτων πάνω στις πλευρές

του χωρίου A , δηλαδή

$$\begin{aligned} \int_a^b e^{-ikx} f(x) dx - \int_a^b e^{-ikx+D_c k^2 T} q(x, T) dx \\ - \int_0^T e^{-ika+D_c k^2 t} D_c (q_x(a, t) + ikq(a, t)) dt \\ + \int_0^T e^{-ikb+D_c k^2 t} D_c (q_x(b, t) + ikq(b, t)) dt = 0 \end{aligned} \quad (3.28)$$

και λαμβάνοντας υπόψιν τις συνοριακές συνθήκες (boundary conditions)

$$\begin{aligned} \int_a^b e^{-ikx} f(x) dx - \int_a^b e^{-ikx+D_c k^2 T} q(x, T) dx \\ - \int_0^T e^{-ika+D_c k^2 t} i D_c k q(a, t) dt \\ + \int_0^T e^{-ikb+D_c k^2 t} i D_c k q(b, t) dt = 0 \end{aligned} \quad (3.29)$$

για κάθε $k \in \mathbb{C}$.

Ο μετασχηματισμός Fourier μιας συνάρτησης $f(x)$ είναι η συνάρτηση

$$\widehat{f}(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} f(x) dx. \quad (3.30)$$

Αν είναι γνωστός ο μετασχηματισμός Fourier μιας συνάρτησης, μπορεί να υπολογισθεί η ίδια η συνάρτηση $f(x)$ μέσω του αντίστροφου μετασχηματισμού Fourier, δηλαδή μέσω της σχέσης

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} \widehat{f}(k) dk \quad (3.31)$$

Στην περίπτωση συναρτήσεων δύο μεταβλητών ο μετασχηματισμός Fourier ως προς x και ο αντίστροφός του ορίζονται ως εξής

$$\widehat{f}(k, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} f(x, t) dx. \quad (3.32)$$

και

$$f(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} \widehat{f}(k, t) dk \quad (3.33)$$

Έστω $\widehat{f}(x)$ και $\widehat{q}(k, t)$ οι μετασχηματισμοί Fourier των συναρτήσεων $f(x)$ και $q(x, t)$ αντίστοιχα, δηλαδή

$$\widehat{f}(k) = \int_a^b e^{-ikx} f(x) dx \quad (3.34)$$

και

$$\widehat{q}(k, t) = \int_a^b e^{-ikx} q(x, t) dx. \quad (3.35)$$

Ορίζεται, επίσης, η συνάρτηση \widetilde{q} ως εξής

$$\widetilde{q}(x, D_c k^2) := \int_0^T e^{D_c k^2 t} q(x, t) dt. \quad (3.36)$$

Χρησιμοποιώντας τους παραπάνω ορισμούς η (3.29) γίνεται

$$e^{D_c k^2 T} \widehat{q}(k, T) = \widehat{f}(k) - e^{-ika} ik D_c \widetilde{q}(a, D_c k^2) + e^{-ikb} ik D_c \widetilde{q}(b, D_c k^2), \quad (3.37)$$

για κάθε $k \in \mathbb{C}$. Στη σχέση (3.37) μπορεί να γίνει αντικατάσταση του T με t , αφού ισχύει για κάθε $t \in [0, T]$, ακόμα και καθώς $T \rightarrow \infty$. Επομένως, μετατρέπεται σε

$$e^{D_c k^2 t} \widehat{q}(k, t) = \widehat{f}(k) - e^{-ika} ik D_c \widetilde{q}(a, D_c k^2) + e^{-ikb} ik D_c \widetilde{q}(b, D_c k^2), \quad (3.38)$$

για κάθε $k \in \mathbb{C}$, η οποία ονομάζεται global relation της εξίσωσης (3.16) στην περιοχή $[a, b]$. Οι όροι της global relation είναι αναλυτικοί και φραγμένοι για κάθε $k \in \mathbb{C}$, διότι οι μετασχηματισμοί Fourier και οι \widetilde{q} είναι αναλυτικές και φραγμένες συναρτήσεις.

Έστω $\lambda^2(k) := D_c k^2$ και $c := D_c^{-\frac{1}{2}}$. Αντικαθιστώντας τα λ και τα c στην (3.38) και στη συνέχεια μετονομάζοντας το λ σε k προκύπτει

$$e^{k^2 t} \widehat{q}(ck, t) = \widehat{f}(ck) - D_c e^{-icka} ick \widetilde{q}(a, k^2) + D_c e^{-ickb} ick \widetilde{q}(b, k^2), \quad (3.39)$$

για κάθε $k \in \mathbb{C}$.

Πολλαπλασιάζοντας την (3.39) με $\frac{1}{2\pi} e^{ickx - k^2 t}$ και εφαρμόζοντας αντίστροφο μετασχηματι-

σμό Fourier συνεπάγεται

$$\begin{aligned}
q(x, t) &= \frac{c}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ickx - k^2 t} \widehat{f}(ck) dk \\
&\quad - \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ick(x-a) - k^2 t} ik \widetilde{q}(a, k^2) dk \\
&\quad + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ick(x-b) - k^2 t} ik \widetilde{q}(b, k^2) dk,
\end{aligned} \tag{3.40}$$

Όμως η $q(x, t)$ δεν αποτελεί λύση της (3.16), διότι είναι άγνωστες οι ποσότητες $\widetilde{q}(a, k^2)$ και $\widetilde{q}(b, k^2)$.

Εφαρμόζοντας στην global relation τον μετασχηματισμό $k \rightarrow -k$, ο οποίος αφήνει αναλλοίωτη την dispersion relation, αυτή μετατρέπεται σε

$$e^{k^2 t} \widehat{q}(-ck, t) = \widehat{f}(-ck) + D_c e^{icka} ik \widetilde{q}(a, k^2) - D_c e^{ickb} ik \widetilde{q}(b, k^2) \tag{3.41}$$

για κάθε $k \in \mathbb{C}$.

Από τις global relations πριν και μετά τον μετασχηματισμό προκύπτει το 2×2 σύστημα

$$G \widetilde{\mathbf{q}} = \widehat{\mathbf{f}}, \tag{3.42}$$

όπου

$$\begin{aligned}
G &= \begin{bmatrix} D_c e^{-icka} ik & -D_c e^{-ickb} ik \\ -D_c e^{icka} ik & D_c e^{ickb} ik \end{bmatrix}, \\
\widetilde{\mathbf{q}} &= \begin{bmatrix} \widetilde{q}(a, k^2) \\ \widetilde{q}(b, k^2) \end{bmatrix} \quad \text{και} \quad \widehat{\mathbf{f}} = \begin{bmatrix} \widehat{f}(ck) \\ \widehat{f}(-ck) \end{bmatrix}.
\end{aligned}$$

Παραλείπονται από το σύστημα (3.42) οι όροι $\widehat{q}(\pm ck, t)$, διότι τα ολοκληρώματα, που περιέχουν τους όρους $\frac{\widehat{q}(\pm ck, t)}{\det(G)}$, μηδενίζονται [5, 19].

Έστω η συνάρτηση $f(k)$ αναλυτική πάνω σε ένα κλειστό μονοπάτι \mathcal{C} και στο εσωτερικό του, εκτός από πεπερασμένο αριθμό σημείων k_1, k_2, \dots, k_N στο εσωτερικό του. Τότε από

το Θεώρημα του Cauchy [3]

$$\oint_C f(k)dk = 2\pi i \sum_{j=1}^N \alpha_j, \quad (3.43)$$

όπου $\alpha_j = \text{Res}(f(k), k_j)$, δηλαδή το ολοκληρωτικό υπόλοιπο της συνάρτησης $f(k)$ στο σημείο k_j . Έστω, επίσης, ότι $f(k) \rightarrow 0$ ομοιόμορφα καθώς $\|k\| \rightarrow \infty$ και $k \in C_R$, το οποίο είναι ημικύκλιο ακτίνας R . Τότε καθώς $R \rightarrow \infty$ από το Λήμμα του Jordan [3] συνεπάγεται

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_{C_R} e^{ick} f(k)dk = 0, \quad (3.44)$$

όπου $c > 0$. Οι αναλυτικές συναρτήσεις, που περιέχονται στα ολοκληρώματα της (3.40), επιτρέπουν με χρήση του Θεωρήματος του Cauchy και του Λήμματος του Jordan την αντικατάσταση των ολοκληρωμάτων αυτών με επικαμπύλια ολοκληρώματα στα οποία η προς ολοκλήρωση συνάρτηση φθίνει εκθετικά καθώς $k \rightarrow \infty$.

Αρχικά, θα γίνει αλλαγή του δεύτερου ολοκληρώματος της (3.40). Έστω

$$\mathcal{D} = \{k \in \mathbb{C} : \Re(\omega(k)) < 0\},$$

δηλαδή περιέχει τα k , για τα οποία

$$\begin{aligned} \Re(\omega(k)) < 0 &\Rightarrow \Re(D_c k^2) < 0 \\ &\Rightarrow D_c \cos(2\arg(k)) < 0 \\ &\Rightarrow 2\arg(k) \in \left(\frac{\pi}{2} + m\pi, \frac{3\pi}{2} + m\pi\right), \quad m = 0, 1, \\ &\Rightarrow \arg(k) \in \left(\frac{\pi}{4}, \frac{3\pi}{4}\right) \cup \left(\frac{5\pi}{4}, \frac{7\pi}{4}\right), \end{aligned}$$

τα σύνολα

$$\mathbb{C}^+ = \{k \in \mathbb{C} : \Im(k) > 0\}, \quad \mathcal{D}^+ = \mathcal{D} \cap \mathbb{C}^+,$$

$$\mathbb{C}^- = \{k \in \mathbb{C} : \Im(k) < 0\}, \quad \mathcal{D}^- = \mathcal{D} \cap \mathbb{C}^-,$$

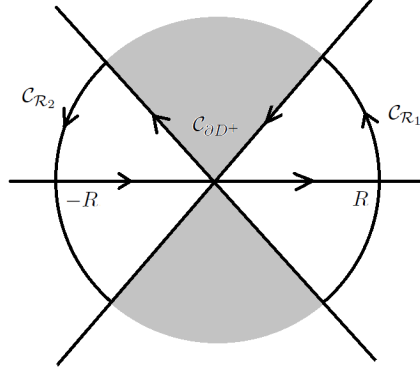
και η θετικά (αριστερόστροφα) προσανατολισμένη καμπύλη

$$\mathcal{C} = [-R, R] \cup \mathcal{C}_{\mathcal{R}_1} \cup \mathcal{C}_{\partial\mathcal{D}^+} \cup \mathcal{C}_{\mathcal{R}_2},$$

όπου :

- $\mathcal{C}_{\partial\mathcal{D}^+} = \{k \in \partial\mathcal{D}^+ : |k| \leq R \text{ και } \arg(k) \in \left\{\frac{\pi}{4}, \frac{3\pi}{4}\right\}\}$

- $\mathcal{C}_{\mathcal{R}_1} = \{k \in \mathbb{C} \setminus \mathcal{D}^+ : |k| = R \text{ και } \arg(k) \in [0, \frac{\pi}{4}]\}$
- $\mathcal{C}_{\mathcal{R}_2} = \{k \in \mathbb{C} \setminus \mathcal{D}^+ : |k| = R \text{ και } \arg(k) \in [\frac{3\pi}{4}, \pi]\}$.



Σχήμα 3.1: Η καμπύλη \mathcal{C} .

Η συνάρτηση $e^{ick(x-a)-k^2t} i c k \tilde{q}(a, k^2)$ είναι αναλυτική και φραγμένη πάνω στην καμπύλη \mathcal{C} , διότι

- $e^{ick(x-a)}$ ($x - a > 0$) αναλυτική και φραγμένη για $\Im(k) > 0$
- e^{-k^2t} ($t \geq 0$) αναλυτική και φραγμένη για $\Re(\omega(k)) \geq 0$
- \tilde{q} αναλυτική και φραγμένη για κάθε $k \in \mathbb{C}$

κι, επομένως, από την εφαρμογή του Θεωρήματος του Cauchy συνεπάγεται

$$\oint_{\mathcal{C}} e^{ick(x-a)-k^2t} \tilde{q}(a, k^2) dk = 0 \quad (3.45)$$

δηλαδή

$$\left(\int_{-R}^R + \int_{\mathcal{C}_{\mathcal{R}_1}} + \int_{\mathcal{C}_{\partial \mathcal{D}^+}} + \int_{\mathcal{C}_{\mathcal{R}_2}} \right) e^{ick(x-a)-k^2t} i c k \tilde{q}(a, k^2) dk = 0. \quad (3.46)$$

Καθώς $R \rightarrow \infty$ η συνάρτηση $e^{ick(x-a)-k^2t} i c k \tilde{q}(a, k^2)$ συγκλίνει ομοιόμορφα στο 0, συνεπώς, για τα ολοκληρώματα πάνω στα τόξα $\mathcal{C}_{\mathcal{R}_i}$, $i = 1, 2$, από το Λήμμα του Jordan ισχύει

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_{\mathcal{C}_{\mathcal{R}_i}} e^{ic_{i(j)}k(x-r_{j-1})-k^2t} \tilde{g}^{(j)}(r_{j-1}, k^2) dk = 0. \quad (3.47)$$

Άρα η (3.86) καθώς $R \rightarrow \infty$ γίνεται

$$\left(\int_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\partial\mathcal{D}^+} \right) e^{ick(x-a)-k^2t} ick\tilde{q}(a, k^2) dk = 0. \quad (3.48)$$

Χρησιμοποιείται ο ίδιος συλλογισμός και για το τρίτο ολοκλήρωμα της (3.40) εφαρμόζοντας το Θεώρημα του Cauchy στην θετικά προσανατολισμένη καμπύλη

$$\mathcal{C} = [-R, R] \cup \mathcal{C}_{\mathcal{R}_3} \cup \mathcal{C}_{\partial\mathcal{D}^-} \cup \mathcal{C}_{\mathcal{R}_4},$$

όπου

- $\mathcal{C}_{\partial\mathcal{D}^-} = \{k \in \partial\mathcal{D}^- : |k| \leq R \text{ και } \arg(k) \in \{\frac{5\pi}{4}, \frac{7\pi}{4}\}\}$
- $\mathcal{C}_{\mathcal{R}_3} = \{k \in \mathbb{C} \setminus \mathcal{D}^+ : |k| = R \text{ και } \arg(k) \in [\pi, \frac{5\pi}{4}]\}$
- $\mathcal{C}_{\mathcal{R}_4} = \{k \in \mathbb{C} \setminus \mathcal{D}^+ : |k| = R \text{ και } \arg(k) \in [\frac{7\pi}{4}, 2\pi]\}$.

Επίσης, τα ολοκληρώματα πάνω στα τόξα $\mathcal{C}_{\mathcal{R}_i}$, $i = 3, 4$, μηδενίζονται καθώς $R \rightarrow \infty$ από το Λήμμα του Jordan. Άρα προκύπτει η σχέση

$$\left(\int_{-\infty}^{\infty} + \int_{\partial\mathcal{D}^-} \right) e^{ick(x-b)-k^2t} ick\tilde{q}(b, k^2) dk = 0 \quad (3.49)$$

Από τις (3.48)-(3.49) η σχέση (3.40) γίνεται

$$\begin{aligned} q(x, t) &= \frac{c}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ickx-k^2t} \hat{f}(ck) dk \\ &\quad - \frac{1}{2\pi} \int_{\partial\mathcal{D}^+} e^{ick(x-a)-k^2t} ick\tilde{q}(a, k^2) dk \\ &\quad - \frac{1}{2\pi} \int_{\partial\mathcal{D}^-} e^{ick(x-b)-k^2t} ick\tilde{q}(b, k^2) dk. \end{aligned} \quad (3.50)$$

Αν δεν παραλειφθούν από το σύστημα (3.42) οι όροι $\hat{q}(\pm ck, t)$, θα εμφανιστούν στη σχέση (3.50) τα ολοκληρώματα

$$\int_{\partial\mathcal{D}^+} k^2 e^{ick(x-a)} \frac{\hat{q}(\pm ck, t)}{\det(G)} dk \quad (3.51)$$

και

$$\int_{\partial\mathcal{D}^-} k^2 e^{ick(x-b)} \frac{\widehat{q}(\pm ck, t)}{\det(G)} dk. \quad (3.52)$$

Έστω η θετικά προσανατολισμένη καμπύλη

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{\partial\mathcal{D}^+} \cup \mathcal{L}_{\mathcal{R}^+}, \quad (3.53)$$

όπου

- $\mathcal{L}_{\partial\mathcal{D}^+} = \{k \in \partial\mathcal{D}^+ : |k| \leq R \text{ και } \arg(k) \in \{\frac{5\pi}{4}, \frac{7\pi}{4}\}\}$
- $\mathcal{L}_{\mathcal{R}^+} = \{k \in \mathcal{D}^+ : |k| = R \text{ και } \arg(k) \in [\frac{5\pi}{4}, \frac{7\pi}{4}]\}$.

Η προς ολοκλήρωση ποσότητα $k^2 e^{ick(x-a)} \frac{\widehat{q}(\pm ck, t)}{\det(G)}$ είναι αναλυτική και φραγμένη πάνω στην καμπύλη \mathcal{L} , επομένως, από την εφαρμογή του Θεωρήματος του Cauchy προκύπτει

$$\left(\int_{\mathcal{L}_{\partial\mathcal{D}^+}} + \int_{\mathcal{L}_{\mathcal{R}^+}} \right) k^2 e^{ick(x-a)} \frac{\widehat{q}(\pm ck, t)}{\det(G)} dk = 0 \quad (3.54)$$

και κάνοντας χρήση του Λήμματος του Jordan συνεπάγεται

$$\int_{\partial\mathcal{D}^+} k^2 e^{ick(x-a)} \frac{\widehat{q}(\pm ck, t)}{\det(G)} dk = 0 \quad (3.55)$$

Ανάλογη είναι η διαδικασία που ακολουθείται και στα ολοκληρώματα πάνω στην καμπύλη $\partial\mathcal{D}^-$. Επομένως, λόγω της μηδενικής συνεισφοράς των ολοκληρωμάτων αυτών, μπορούν οι όροι $\widehat{q}(\pm ck, t)$ να παραλειφθούν από την αρχή.

3.3 Εφαρμογή στο μονοδιάστατο μαθηματικό μοντέλο $n + 1$ περιοχών

Έστω το μονοδιάστατο πρόβλημα $n + 1$ περιοχών, που έχει ορισθεί στην παράγραφο 2.3. Για να μελετηθεί θα γίνει αναγωγή του σε προβλήματα 1 περιοχής, τα οποία συνδέονται μεταξύ τους με ένα γραμμικό σύστημα.

Ορίζονται, λοιπόν, οι συναρτήσεις $q^{(j)}(x, t)$, $j = 1, 2, \dots, n + 1$, τέτοιες ώστε

$$q^{(j)}(x, t) := \begin{cases} q(x, t), & x \in R_j \\ \lim_{x \rightarrow r_{j-1}^+} q(x, t), & x = r_{j-1} \\ \lim_{x \rightarrow r_j^-} q(x, t), & x = r_j \end{cases} . \quad (3.56)$$

Δηλαδή $q^{(j)}(x, t)$ είναι ο περιορισμός της λύσης του μαθηματικού μοντέλου στην κλειστότητα της περιοχής R_j , δηλαδή στο σύνολο $\overline{R_j} := \{r_{j-1}\} \cup R_j \cup \{r_j\}$, αντίστοιχα.

Ορίζεται, επίσης, η παράγωγος της συνάρτησης $q^{(j)}(x, t)$ στα σημεία r_{j-1} και r_j ως εξής

$$q_x^{(j)}(r_{j-1}, t) := \lim_{x \rightarrow r_{j-1}^+} q_x(x, t) \quad \text{και} \quad q_x^{(j)}(r_j, t) := \lim_{x \rightarrow r_j^-} q_x(x, t). \quad (3.57)$$

Αυτές οι ιδιότητες θα χρειαστούν αργότερα στην επίλυση και την κατασκευή του γραμμικού συστήματος.

Εστω, ακόμα, η βοηθητική συνάρτηση

$$l(j) := \begin{cases} 1, & j = \text{περιττός} \\ 2, & j = \text{άρτιος} \end{cases} . \quad (3.58)$$

Τότε οι παραπάνω συνθήκες (2.23)-(2.24) μέσω των ορισμών (3.56)-(3.57) γίνονται

$$q^{(j)}(r_j, t) = q^{(j+1)}(r_j, t) \quad \text{και} \quad \gamma_{l(j)} q_x^{(j)}(r_j, t) = \gamma_{l(j+1)} q_x^{(j+1)}(r_j, t), \quad \forall j = 1, 2, \dots, n + 1. \quad (3.59)$$

Στο σύνολο $\overline{R_j}$ η συνάρτηση $q^{(j)}(x, t)$ ικανοποιεί την διαφορική εξίσωση

$$q_t^{(j)} = (\gamma_{l(j)} q_x^{(j)})_x = \gamma_{l(j)} q_{xx}^{(j)} \quad (3.60)$$

Η $\tilde{q}^{(j)}(x, t)$ ικανοποιεί την εξίσωση που αντιστοιχεί στον formal adjoint της (3.60), δηλαδή την εξίσωση

$$-\tilde{q}_t^{(j)} = \gamma_{l(j)} \tilde{q}_{xx}^{(j)} . \quad (3.61)$$

Πολλαπλασιάζοντας κατά μέλη τις (3.60) και (3.61) με \tilde{q} και q αντίστοιχα και στη συνέχεια προσθέτοντας κατά μέλη προκύπτει:

$$\begin{aligned} q_t^{(j)} \tilde{q}^{(j)} + q^{(j)} \tilde{q}_t^{(j)} &= \gamma_{l(j)} q_{xx}^{(j)} \tilde{q}^{(j)} - \gamma_{l(j)} q^{(j)} \tilde{q}_{xx}^{(j)} \\ \Rightarrow (q^{(j)} \tilde{q}^{(j)})_t &= (\gamma_{l(j)} q_x^{(j)} \tilde{q}^{(j)} - \gamma_{l(j)} q^{(j)} \tilde{q}_x^{(j)})_x \end{aligned}$$

$$\Rightarrow (q^{(j)}\tilde{q}^{(j)})_t - (\gamma_{l(j)}q_x^{(j)}\tilde{q}^{(j)} - \gamma_{l(j)}q^{(j)}\tilde{q}_x^{(j)})_x = 0. \quad (3.62)$$

Μια μονοπαραμετρική οικογένεια λύσεων της (3.61) δίνεται από την

$$\tilde{q}^{(j)}(x, t, k) = e^{-ikx + \gamma_{l(j)}k^2t}, \quad k \in \mathbb{C}. \quad (3.63)$$

Άρα η εξίσωση (3.62) γίνεται

$$(e^{-ikx + \gamma_{l(j)}k^2t}q)_t - (e^{-ikx + \gamma_{l(j)}k^2t}\gamma_{l(j)}(q_x + ikq))_x, \quad k \in \mathbb{C}, \quad (3.64)$$

και λέγεται local relation της εξίσωσης (3.60). Η ποσότητα $\omega_{l(j)}(k) = \gamma_{l(j)}k^2$ που εμφανίζεται στους εκθέτες ονομάζεται dispersion relation [5] της (3.60).

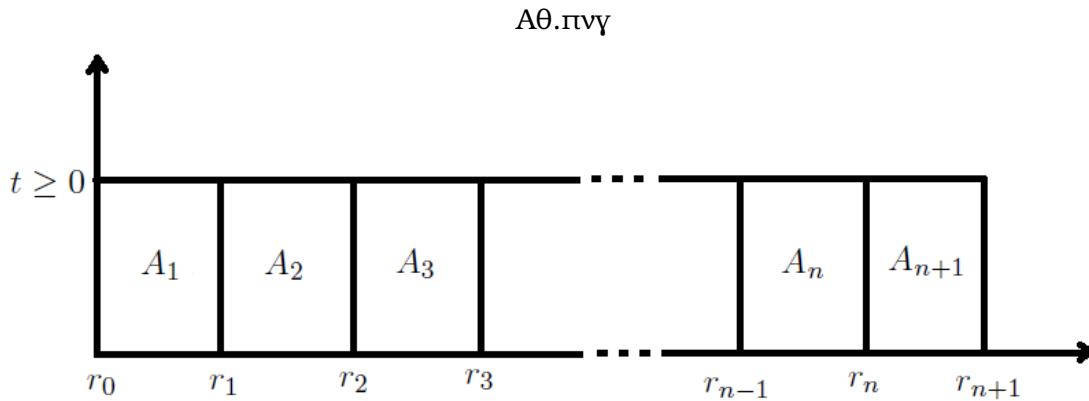
Ολοκληρώνοντας την local relation της (3.60) στο αντίστοιχο χωρίο A_j , όπου

$$A_j := \{(x, t) : x \in \overline{R_j}, 0 \leq t \leq T\}, \quad (3.65)$$

προκύπτει:

$$\iint_{A_j} (\partial_t P_j(x, t, k) + \partial_x Q_j(x, t, k)) dx dt = 0, \quad (3.66)$$

όπου $P_j(x, t, k) = e^{-ikx + \gamma_{l(j)}k^2t}q^{(j)}(x, t)$ και $Q_j(x, t, k) = -e^{-ikx + \gamma_{l(j)}k^2t}\gamma_{l(j)}(q_x^{(j)}(x, t) + ikq^{(j)}(x, t))$



Σχήμα 3.2: Οι περιοχές A_j στις οποίες γίνεται η ολοκλήρωση.

Από το Θεώρημα του Green συνεπάγεται

$$\oint_{\partial A_j^+} (P_j(x, t, k)dx - Q_j(x, t, k)dt) = 0, \quad (3.67)$$

δηλαδή το διπλό ολοκλήρωμα στο χωρίο A_j μετατράπηκε σε επικαμπύλιο ολοκλήρωμα πάνω στο σύνορο ∂A_j του χωρίου με θετικό-δεξιόστροφο προσανατολισμό. Συνεπώς, μπορεί να γραφεί κι ως άθροισμα των επικαμπύλιων ολοκληρωμάτων πάνω στις πλευρές του χωρίου A_j , δηλαδή

$$\begin{aligned} & \int_{r_{j-1}}^{r_j} e^{-ikx} f^{(j)}(x)dx - \int_{r_{j-1}}^{r_j} e^{-ikx + \gamma_{l(j)}k^2 T} q^{(j)}(x, T)dx \\ & - \int_0^T e^{-ikr_{j-1} + \gamma_{l(j)}k^2 t} \gamma_{l(j)}(q_x^{(j)}(r_{j-1}, t) + ikq^{(j)}(r_{j-1}, t))dt \\ & + \int_0^T e^{-ikr_j + \gamma_{l(j)}k^2 t} \gamma_{l(j)}(q_x^{(j)}(r_j, t) + ikq^{(j)}(r_j, t))dt = 0 \end{aligned} \quad (3.68)$$

για κάθε $k \in \mathbb{C}$.

Έστω $\widehat{f}^{(j)}(x)$ και $\widehat{q}^{(j)}(k, t)$ οι μετασχηματισμοί Fourier των συναρτήσεων $f^{(j)}(x)$ και $q^{(j)}(x, t)$ αντίστοιχα, δηλαδή

$$\widehat{f}^{(j)}(k) = \int_{r_{j-1}}^{r_j} e^{-ikx} f^{(j)}(x)dx \quad (3.69)$$

και

$$\widehat{q}^{(j)}(k, t) = \int_{r_{j-1}}^{r_j} e^{-ikx} q^{(j)}(x, t)dx, \quad (3.70)$$

όπου $f^{(j)}(x) = f|_{\overline{R_j}}$, δηλαδή ο περιορισμός της αρχικής συνθήκης (initial condition) $q(x, 0) = f(x)$ στην περιοχή $\overline{R_j}$. Ορίζονται, επίσης, οι συναρτήσεις $\widetilde{q}^{(j)}$ και $\widetilde{q}_x^{(j)}$ ως εξής

$$\widetilde{q}^{(j)}(x, \gamma_{l(j)}k^2) := \int_0^T e^{\gamma_{l(j)}k^2 t} q^{(j)}(x, t)dt \quad (3.71)$$

και

$$\tilde{q}_x^{(j)}(x, \gamma_{l(j)}k^2) := \int_0^T e^{\gamma_{l(j)}k^2t} q_x^{(j)}(x, t) dt. \quad (3.72)$$

Χρησιμοποιώντας τους παραπάνω ορισμούς η (3.68) γίνεται

$$\begin{aligned} e^{\gamma_{l(j)}k^2T} \hat{q}^{(j)}(k, T) &= \hat{f}^{(j)}(k) - \gamma_{l(j)} e^{-ikr_{j-1}} (\tilde{q}_x^{(j)}(r_{j-1}, \gamma_{l(j)}k^2) + ik\tilde{q}^{(j)}(r_{j-1}, \gamma_{l(j)}k^2)) \\ &+ \gamma_{l(j)} e^{-ikr_j} (\tilde{q}_x^{(j)}(r_j, \gamma_{l(j)}k^2) + ik\tilde{q}^{(j)}(r_j, \gamma_{l(j)}k^2)), \end{aligned} \quad (3.73)$$

για κάθε $k \in \mathbb{C}$. Στη σχέση (3.73) μπορεί να γίνει αντικατάσταση του T με t , ισχύει για κάθε $t \in [0, T]$, ακόμα και καθώς $T \rightarrow \infty$. Επομένως, μετατρέπεται σε

$$\begin{aligned} e^{\gamma_{l(j)}k^2t} \hat{q}^{(j)}(k, t) &= \hat{f}^{(j)}(k) - \gamma_{l(j)} e^{-ikr_{j-1}} (\tilde{q}_x^{(j)}(r_{j-1}, \gamma_{l(j)}k^2) + ik\tilde{q}^{(j)}(r_{j-1}, \gamma_{l(j)}k^2)) \\ &+ \gamma_{l(j)} e^{-ikr_j} (\tilde{q}_x^{(j)}(r_j, \gamma_{l(j)}k^2) + ik\tilde{q}^{(j)}(r_j, \gamma_{l(j)}k^2)), \end{aligned} \quad (3.74)$$

για κάθε $k \in \mathbb{C}$, η οποία ονομάζεται global relation της εξίσωσης (3.60). Οι όροι της global relation είναι αναλυτικοί και φραγμένοι για κάθε $k \in \mathbb{C}$, διότι οι μετασχηματισμοί Fourier είναι αναλυτικές συναρτήσεις και οι $\tilde{q}^{(j)}$ και $\tilde{q}_x^{(j)}$ είναι αναλυτικές και φραγμένες. Έστω $\lambda_{l(j)}^2(k) = \gamma_{l(j)}k^2$ και $c_{l(j)} = \gamma_{l(j)}^{-\frac{1}{2}}$. Αντικαθιστώντας τα λ και τα c στην (3.74) και στη συνέχεια μετονομάζοντας το λ σε k προκύπτει

$$\begin{aligned} e^{k^2t} \hat{q}^{(j)}(c_{l(j)}k, t) &= \hat{f}^{(j)}(c_{l(j)}k) - \gamma_{l(j)} e^{-ic_{l(j)}kr_{j-1}} (\tilde{q}_x^{(j)}(r_{j-1}, k^2) + ic_{l(j)}k\tilde{q}^{(j)}(r_{j-1}, k^2)) \\ &+ \gamma_{l(j)} e^{-ic_{l(j)}kr_j} (\tilde{q}_x^{(j)}(r_j, k^2) + ic_{l(j)}k\tilde{q}^{(j)}(r_j, k^2)), \end{aligned} \quad (3.75)$$

για κάθε $k \in \mathbb{C}$.

Πολλαπλασιάζοντας την (3.75) με $\frac{1}{2\pi} e^{ic_{l(j)}kx - k^2t}$ και εφαρμόζοντας αντίστροφο μετασχη-

ματισμό Fourier συνεπάγεται

$$\begin{aligned}
q^{(j)}(x, t) &= \frac{c_{l(j)}}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_{l(j)}kx - k^2t} \widehat{f}^{(j)}(c_{l(j)}k) dk \\
&\quad - \frac{1}{2\pi c_{l(j)}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_{l(j)}k(x-r_{j-1}) - k^2t} [\widetilde{q}_x^{(j)}(r_{j-1}, k^2) + ic_{l(j)}k \widetilde{q}^{(j)}(r_{j-1}, k^2)] dk \\
&\quad + \frac{1}{2\pi c_{l(j)}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_{l(j)}k(x-r_j) - k^2t} [\widetilde{q}_x^{(j)}(r_j, k^2) + ic_{l(j)}k \widetilde{q}^{(j)}(r_j, k^2)] dk,
\end{aligned} \tag{3.76}$$

Όμως η $q^{(j)}(x, t)$ δεν αποτελεί λύση της (3.60) για κανένα j , διότι είναι άγνωστες οι ποσότητες

- $\widetilde{q}^{(j)}(r_{j-1}, k^2)$ για κάθε $j = 1, 2, \dots, n+1$
- $\widetilde{q}^{(j)}(r_j, k^2)$ για κάθε $j = 1, 2, \dots, n+1$
- $\widetilde{q}_x^{(j)}(r_{j-1}, k^2)$ για κάθε $j = 2, 3, \dots, n+1$
- $\widetilde{q}_x^{(j)}(r_j, k^2)$ για κάθε $j = 1, 2, \dots, n$.

Εμφανίζονται, δηλαδή, $4n+2$ άγνωστες ποσότητες. Μόνο η $\widetilde{q}_x^{(j)}(r_0, k^2)$ και η $\widetilde{q}_x^{(j)}(r_{n+1}, k^2)$ είναι γνωστές από τις συνοριακές συνθήκες (boundary conditions) $q_x(a, t) = 0$ και $q_x(b, t) = 0$. Εφαρμόζοντας στην global relation τον μετασχηματισμό $k \rightarrow -k$, ο οποίος αφήνει αναλλοίωτη την dispersion relation, αυτή μετατρέπεται σε

$$\begin{aligned}
e^{k^2t} \widetilde{q}^{(j)}(-c_{l(j)}k, t) &= \widehat{f}^{(j)}(-c_{l(j)}k) - \gamma_{l(j)} e^{ic_{l(j)}kr_{j-1}} (\widetilde{q}_x^{(j)}(r_{j-1}, k^2) - ic_{l(j)}k \widetilde{q}^{(j)}(r_{j-1}, k^2)) \\
&\quad + \gamma_{l(j)} e^{ic_{l(j)}kr_j} (\widetilde{q}_x^{(j)}(r_j, k^2) - ic_{l(j)}k \widetilde{q}^{(j)}(r_j, k^2)),
\end{aligned} \tag{3.77}$$

για κάθε $k \in \mathbb{C}$.

Από τις global relations πριν και μετά τον μετασχηματισμό για κάθε $j = 1, 2, \dots, n+1$ προκύπτει ένα σύστημα $2(n+1)$ εξισώσεων με $4n+2$ αγνώστους, το οποίο μπορεί να

λυθεί, αφού πρώτα γίνει αντικατάσταση από τις σχέσεις (3.59) και μετατραπεί σε ένα σύστημα $2(n+1) \times 2(n+1)$. Οι εξισώσεις γίνονται

- για $j = 1$:

$$ic_1\gamma_1ke^{-ic_1kr_0}\tilde{q}^{(1)}(r_0, k^2) - ic_1\gamma_1ke^{-ic_1kr_1}\tilde{q}^{(1)}(r_1, k^2) + \gamma_1e^{-ic_1kr_1}\tilde{q}_x^{(1)}(r_1, k^2) = \hat{f}(c_1k) \quad (3.78)$$

$$-ic_1\gamma_1ke^{ic_1kr_0}\tilde{q}^{(1)}(r_0, k^2) + ic_1\gamma_1ke^{ic_1kr_1}\tilde{q}^{(1)}(r_1, k^2) - \gamma_1e^{-ic_1kr_1}\tilde{q}_x^{(1)}(r_1, k^2) = \hat{f}(-c_1k), \quad (3.79)$$

- για $j = 2, 3, \dots, n$:

$$ic_{l(j)}\gamma_{l(j)}ke^{-ic_{l(j)}kr_{j-1}}\tilde{q}^{(j-1)}(r_{j-1}, k^2) + \gamma_{l(j-1)}e^{-ic_{l(j)}kr_{j-1}}\tilde{q}_x^{(j-1)}(r_{j-1}, k^2) - ic_{l(j)}\gamma_{l(j)}ke^{-ic_{l(j)}kr_j}\tilde{q}^{(j)}(r_j, k^2) - \gamma_{l(j)}e^{-ic_{l(j)}kr_j}\tilde{q}_x^{(j)}(r_j, k^2) = \hat{f}(c_{l(j)}k) \quad (3.80)$$

$$-ic_{l(j)}\gamma_{l(j)}ke^{ic_{l(j)}kr_{j-1}}\tilde{q}^{(j-1)}(r_{j-1}, k^2) + \gamma_{l(j-1)}e^{ic_{l(j)}kr_{j-1}}\tilde{q}_x^{(j-1)}(r_{j-1}, k^2) + ic_{l(j)}\gamma_{l(j)}ke^{ic_{l(j)}kr_j}\tilde{q}^{(j)}(r_j, k^2) - \gamma_{l(j)}e^{-ic_{l(j)}kr_j}\tilde{q}_x^{(j)}(r_j, k^2) = \hat{f}(-c_{l(j)}k), \quad (3.81)$$

- για $j = n+1$:

$$ic_{l(n+1)}\gamma_{l(n+1)}ke^{-ic_{l(n+1)}kr_n}\tilde{q}^{(n)}(r_n, k^2) + \gamma_{l(n)}e^{-ic_{l(n+1)}kr_n}\tilde{q}_x^{(n)}(r_n, k^2) - ic_{l(n+1)}\gamma_{l(n+1)}ke^{-ic_{l(n+1)}kr_{n+1}}\tilde{q}^{(n+1)}(r_{n+1}, k^2) = \hat{f}(c_{l(n+1)}k) \quad (3.82)$$

$$\begin{aligned}
& -ic_{l(n+1)}\gamma_{l(n+1)}ke^{ic_{l(n+1)}kr_n}\tilde{q}^{(n)}(r_n, k^2) + \gamma_{l(n)}e^{ic_{l(n+1)}kr_n}\tilde{q}_x^{(n)}(r_n, k^2) \\
& + ic_{l(n+1)}\gamma_{l(n+1)}ke^{ic_{l(n+1)}kr_{n+1}}\tilde{q}^{(n+1)}(r_{n+1}, k^2) = \hat{f}(-c_{l(n+1)}k).
\end{aligned} \tag{3.83}$$

Άρα προκύπτει το σύστημα

$$G\tilde{\mathbf{q}} = \hat{\mathbf{f}}, \tag{3.84}$$

όπου

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

τα στοιχεία του οποίου δίνονται απο τον πίνακα :

i	$A_i^{(j)}$
1	$ic_{l(j)}\gamma_{l(j)}ke^{-ic_{l(j)}kr_{j-1}}$
2	$\gamma_{l(j-1)}e^{-ic_{l(j)}kr_{j-1}}$
3	$-ic_{l(j)}\gamma_{l(j)}ke^{-ic_{l(j)}kr_j}$
4	$-\gamma_{l(j)}e^{-ic_{l(j)}kr_j}$
5	$-ic_{l(j)}\gamma_{l(j)}ke^{ic_{l(j)}kr_{j-1}}$
6	$\gamma_{l(j-1)}e^{ic_{l(j)}kr_{j-1}}$
7	$ic_{l(j)}\gamma_{l(j)}ke^{ic_{l(j)}kr_j}$
8	$-\gamma_{l(j)}e^{ic_{l(j)}kr_j}$

$$\tilde{\mathbf{q}} = \begin{bmatrix} \tilde{q}^{(1)}(r_0, k^2) \\ \tilde{q}^{(1)}(r_1, k^2) \\ \tilde{q}_x^{(1)}(r_1, k^2) \\ \vdots \\ \tilde{q}^{(n)}(r_n, k^2) \\ \tilde{q}_x^{(n)}(r_n, k^2) \\ \tilde{q}^{(n+1)}(r_{n+1}, k^2) \end{bmatrix} \quad \text{και} \quad \hat{\mathbf{f}} = \begin{bmatrix} \hat{f}^{(1)}(c_1k) \\ \hat{f}^{(1)}(-c_1k) \\ \hat{f}^{(2)}(c_2k) \\ \hat{f}^{(2)}(-c_2k) \\ \vdots \\ \hat{f}^{(n)}(c_nk) \\ \hat{f}^{(n)}(-c_nk) \\ \hat{f}^{(n+1)}(c_{n+1}k) \\ \hat{f}^{(n+1)}(-c_{n+1}k) \end{bmatrix}.$$

Παραλείπονται από το σύστημα οι όροι $\hat{q}^{(j)}(\pm c_{l(j)}k, t)$, διότι τα ολοκληρώματα, που περιέχουν τους όρους $\frac{\hat{q}^{(j)}(\pm c_{l(j)}k, t)}{\det(G)}$, μηδενίζονται όπως ακριβώς και στην παράγραφο 3.2.

Όπως πριν, οι αναλυτικές συναρτήσεις, που περιέχονται στα ολοκληρώματα της (3.76), επιτρέπουν με χρήση του Θεωρήματος του Cauchy και του Λήμματος του Jordan την αντικατάσταση των ολοκληρωμάτων αυτών με επικαμπύλια ολοκληρώματα στα οποία η προς ολοκλήρωση συνάρτηση φθίνει εκθετικά καθώς $k \rightarrow \infty$. Με αυτόν τον τρόπο επιτυγχάνεται γρηγορότερη σύγκλιση στα αριθμητικά αποτελέσματα.

Αρχικά, θα γίνεται αλλαγή του δεύτερου ολοκληρώματος της (3.76). Έστω

$$\mathcal{D} = \{k \in \mathbb{C} : \Re(\omega_j(k)) < 0\},$$

δηλαδή περιέχει τα k , για τα οποία

$$\begin{aligned} \Re(\omega_j(k)) < 0 &\Rightarrow \Re(\gamma_{l(j)}k^2) < 0 \\ &\Rightarrow \gamma_{l(j)}\cos(2\arg(k)) < 0 \\ &\Rightarrow 2\arg(k) \in \left(\frac{\pi}{2} + m\pi, \frac{3\pi}{2} + m\pi\right), \quad m = 0, 1, \\ &\Rightarrow \arg(k) \in \left(\frac{\pi}{4}, \frac{3\pi}{4}\right) \cup \left(\frac{5\pi}{4}, \frac{7\pi}{4}\right), \end{aligned}$$

τα σύνολα

$$\mathbb{C}^+ = \{k \in \mathbb{C} : \Im(k) > 0\}, \quad \mathcal{D}^+ = \mathcal{D} \cap \mathbb{C}^+,$$

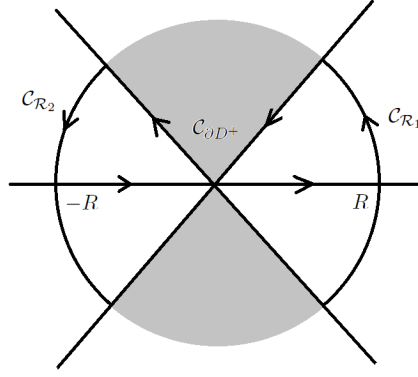
$$\mathbb{C}^- = \{k \in \mathbb{C} : \Im(k) < 0\}, \quad \mathcal{D}^- = \mathcal{D} \cap \mathbb{C}^-,$$

και η θετικά (αριστερόστροφα) προσανατολισμένη καμπύλη

$$\mathcal{C} = [-R, R] \cup \mathcal{C}_{\mathcal{R}_1} \cup \mathcal{C}_{\partial\mathcal{D}^+} \cup \mathcal{C}_{\mathcal{R}_2},$$

όπου :

- $\mathcal{C}_{\partial\mathcal{D}^+} = \{k \in \partial\mathcal{D}^+ : |k| \leq R \text{ και } \arg(k) \in \{\frac{\pi}{4}, \frac{3\pi}{4}\}\}$
- $\mathcal{C}_{\mathcal{R}_1} = \{k \in \mathbb{C} \setminus \mathcal{D}^+ : |k| = R \text{ και } \arg(k) \in [0, \frac{\pi}{4}]\}$
- $\mathcal{C}_{\mathcal{R}_2} = \{k \in \mathbb{C} \setminus \mathcal{D}^+ : |k| = R \text{ και } \arg(k) \in [\frac{3\pi}{4}, \pi]\}$.



Σχήμα 3.3: Η καμπύλη \mathcal{C} .

Στη συνέχεια ορίζεται η συνάρτηση

$$\tilde{g}^{(j)}(r_{j-1}, k^2) = \tilde{q}_x^{(j)}(r_{j-1}, k^2) + ic_{l(j)}k\tilde{q}^{(j)}(r_{j-1}, k^2).$$

Οπότε η συνάρτηση $e^{ic_{l(j)}k(x-r_{j-1})-k^2t}\tilde{g}^{(j)}(r_{j-1}, k^2)$ είναι αναλυτική και φραγμένη πάνω στην καμπύλη \mathcal{C} για κάθε $j = 1, 2, \dots, n+1$, διότι

- $e^{ic_{l(j)}k(x-r_{j-1})}$ ($x - r_{j-1} > 0$) αναλυτική και φραγμένη για $\Im(k) > 0$
- e^{-k^2t} ($t \geq 0$) αναλυτική και φραγμένη για $\Re(\omega_j(k)) \geq 0$
- $\tilde{q}_x^{(j)}$ και $\tilde{q}^{(j)}$ αναλυτικές και φραγμένες για κάθε $k \in \mathbb{C}$

κι, επομένως, από την εφαρμογή του Θεωρήματος του Cauchy συνεπάγεται

$$\oint_{\mathcal{C}} e^{ic_{l(j)}k(x-r_{j-1})-k^2t}\tilde{g}^{(j)}(r_{j-1}, k^2)dk = 0 \quad (3.85)$$

δηλαδή

$$\left(\int_{-R}^R + \int_{\mathcal{C}_{R_1}} + \int_{\mathcal{C}_{\partial D^+}} + \int_{\mathcal{C}_{R_2}} \right) e^{ic_{l(j)}k(x-r_{j-1})-k^2t}\tilde{g}^{(j)}(r_{j-1}, k^2)dk = 0. \quad (3.86)$$

Καθώς $R \rightarrow \infty$ η συνάρτηση $e^{ic_{l(j)}k(x-r_{j-1})-k^2t}\tilde{g}^{(j)}(r_{j-1}, k^2)$ συγκλίνει ομοιόμορφα στο 0, συνεπώς, για τα ολοκληρώματα πάνω στα τόξα \mathcal{C}_{R_i} , $i = 1, 2$, από το Λήμμα του Jordan ισχύει

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_{\mathcal{C}_{R_i}} e^{ic_{l(j)}k(x-r_{j-1})-k^2t}\tilde{g}^{(j)}(r_{j-1}, k^2)dk = 0. \quad (3.87)$$

Άρα η (3.86) καθώς $R \rightarrow \infty$ γίνεται

$$\left(\int_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\partial\mathcal{D}^+} \right) e^{ic_{l(j)}k(x-r_{j-1})-k^2t} \tilde{g}^{(j)}(r_{j-1}, k^2) dk = 0. \quad (3.88)$$

Χρησιμοποιείται ο ίδιος συλλογισμός και για το τρίτο ολοκλήρωμα της (3.76) εφαρμόζοντας το Θεώρημα του Cauchy στην θετικά προσανατολισμένη καμπύλη

$$\mathcal{C} = [-R, R] \cup \mathcal{C}_{\mathcal{R}_3} \cup \mathcal{C}_{\partial\mathcal{D}^-} \cup \mathcal{C}_{\mathcal{R}_4},$$

όπου

- $\mathcal{C}_{\partial\mathcal{D}^-} = \{k \in \partial\mathcal{D}^- : |k| \leq R \text{ και } \arg(k) \in \{\frac{5\pi}{4}, \frac{7\pi}{4}\}\}$
- $\mathcal{C}_{\mathcal{R}_3} = \{k \in \mathbb{C} \setminus \mathcal{D}^- : |k| = R \text{ και } \arg(k) \in [\pi, \frac{5\pi}{4}]\}$
- $\mathcal{C}_{\mathcal{R}_4} = \{k \in \mathbb{C} \setminus \mathcal{D}^- : |k| = R \text{ και } \arg(k) \in [\frac{7\pi}{4}, 2\pi]\}$.

Επίσης, τα ολοκληρώματα πάνω στα τόξα $\mathcal{C}_{\mathcal{R}_i}$, $i = 3, 4$, μηδενίζονται καθώς $R \rightarrow \infty$ από το Λήμμα του Jordan. Άρα προκύπτει η σχέση

$$\left(\int_{-\infty}^{\infty} + \int_{\partial\mathcal{D}^-} \right) e^{ic_{l(j)}k(x-r_{j-1})-k^2t} \tilde{g}^{(j)}(r_{j-1}, k^2) dk = 0 \quad (3.89)$$

Από τις (3.88)-(3.89) η σχέση (3.76) γίνεται

$$\begin{aligned} q^{(j)}(x, t) &= \frac{c_{l(j)}}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_{l(j)}kx-k^2t} \hat{f}^{(j)}(c_{l(j)}k) dk \\ &\quad - \frac{1}{2\pi c_{l(j)}} \int_{\partial\mathcal{D}^+} e^{ic_{l(j)}k(x-r_{j-1})-k^2t} [\tilde{q}_x^{(j)}(r_{j-1}, k^2) + ic_{l(j)}k \tilde{q}^{(j)}(r_{j-1}, k^2)] dk \\ &\quad - \frac{1}{2\pi c_{l(j)}} \int_{\partial\mathcal{D}^-} e^{ic_{l(j)}k(x-r_j)-k^2t} [\tilde{q}_x^{(j)}(r_j, k^2) + ic_{l(j)}k \tilde{q}^{(j)}(r_j, k^2)] dk, \end{aligned} \quad (3.90)$$

για κάθε $j = 1, 2, \dots, n + 1$.

Εφαρμόζοντας στην παραπάνω εξίσωση τις (3.59) προκύπτει ότι η λύση του μονοδιάστα-

του προβλήματος στην περιοχή $\overline{R_j}$ είναι

$$\begin{aligned}
q^{(j)}(x, t) &= \frac{c_{l(j)}}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_{l(j)}kx - k^2t} \widehat{f}^{(j)}(c_{l(j)}k) dk \\
&\quad - \frac{1}{2\pi c_{l(j)}} \int_{\partial\mathcal{D}^+} e^{ic_{l(j)}k(x-r_{j-1}) - k^2t} \left[\frac{\gamma_{l(j-1)}}{\gamma_{l(j)}} \widetilde{q}_x^{(j-1)}(r_{j-1}, k^2) + ic_{l(j)}k \widetilde{q}^{(j-1)}(r_{j-1}, k^2) \right] dk \\
&\quad - \frac{1}{2\pi c_{l(j)}} \int_{\partial\mathcal{D}^-} e^{ic_{l(j)}k(x-r_j) - k^2t} \left[\widetilde{q}_x^{(j)}(r_j, k^2) + ic_{l(j)}k \widetilde{q}^{(j)}(r_j, k^2) \right] dk,
\end{aligned} \tag{3.91}$$

για κάθε $j = 1, 2, \dots, n + 1$.

Κεφάλαιο 4

Αριθμητική Προσέγγιση

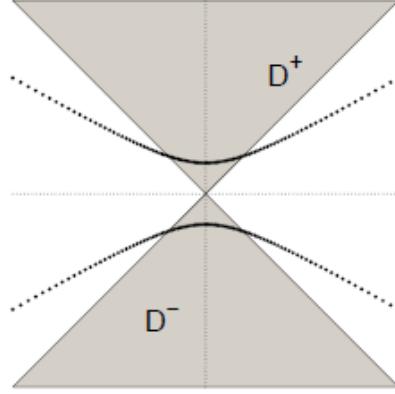
Έχει αποδειχθεί [12] ότι μια προσέγγιση ολοκληρωμάτων πάνω σε καμπύλες Hankel, τα οποία περιέχουν τον όρο e^z , δίνεται αν εφαρμοστεί ο κανόνας του τραπεζίου πάνω σε κατάλληλες καμπύλες, όπως οι υπερβολές, που είναι απλές καμπύλες με ασυμπτωτική συμπεριφορά. Επιτυγχάνεται, έτσι, ταχύτερη σύγκλιση των ολοκληρωμάτων. Θα γίνει εφαρμογή αυτού στα ολοκληρώματα της λύσης $q^{(j)}(x, t)$. Στη συνέχεια, θα μελετηθούν οι προς ολοκλήρωση συναρτήσεις ώστε να απλουστευτεί η αριθμητική ολοκλήρωση.

4.1 Μεταφορά καμπυλών ολοκλήρωσης

Για την περαιτέρω αριθμητική αντιμετώπιση της λύσης (3.91) μεταφέρεται το μονοπάτι ολοκλήρωσης ∂D^+ σε μια υπερβολή. Για να οριστεί, λοιπόν, αυτή η υπερβολή [4,6] αντιστοιχίζονται τα σημεία $k(\theta)$ του μιγαδικού επιπέδου στα σημεία θ της πραγματικής ευθείας χρησιμοποιώντας την αναλυτική συνάρτηση

$$\begin{aligned} k(\theta) &:= i \sin(\beta - i\theta) \\ &= \frac{1}{2}(e^\theta - e^{-\theta}) \cos \beta + i \frac{1}{2}(e^\theta + e^{-\theta}) \sin \beta. \end{aligned} \tag{4.1}$$

Αντίστοιχα για το μονοπάτι ∂D^- θα χρησιμοποιείται η καμπύλη $-k(\theta)$. Δηλαδή η (3.91)



Σχήμα 4.1: Η υπερβολή για $\beta = \frac{\pi}{6}$.

μετατρέπεται σε

$$\begin{aligned}
 q^{(j)}(x, t) &= \\
 &= \frac{c_{l(j)}}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_{l(j)}kx - k^2t} \widehat{f}^{(j)}(c_{l(j)}k) dk \\
 &- \frac{1}{2\pi c_{l(j)}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_{l(j)}k(\theta)(x-r_{j-1}) - k^2(\theta)t} \left[\frac{\gamma_{l(j)} \widetilde{q}_x^{(j-1)}(r_{j-1}, k^2(\theta))}{\gamma_{l(j)}} + ic_{l(j)}k(\theta) \widetilde{q}^{(j-1)}(r_{j-1}, k^2(\theta)) \right] \frac{dk(\theta)}{d\theta} d\theta \\
 &- \frac{1}{2\pi c_{l(j)}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ic_{l(j)}k(\theta)(x-r_j) - k^2(\theta)t} \left[\widetilde{q}_x^{(j)}(r_j, k^2(\theta)) - ic_{l(j)}k(\theta) \widetilde{q}^{(j)}(r_j, k^2(\theta)) \right] \frac{d(-k(\theta))}{d\theta} d\theta,
 \end{aligned} \tag{4.2}$$

για κάθε $j = 1, 2, \dots, n+1$, όπου $\frac{dk(\theta)}{d\theta} = \cos(\beta - i\theta)$. Λόγω αυτής της αλλαγής των καμπυλών ολοκλήρωσης με υπερβολές οι προς ολοκλήρωση συναρτήσεις φθίνουν εκθετικά γρήγορα. Έτσι, τα όρια ολοκλήρωσης μπορούν να περικοπούν από $[-\infty, +\infty]$ σε

$[-S, S]$, δηλαδή

$$\begin{aligned}
q^{(j)}(x, t) &\approx \\
&\approx \frac{c_{l(j)}}{2\pi} \int_{-S}^S e^{ic_{l(j)}kx - k^2t} \widehat{f}^{(j)}(c_{l(j)}k) dk \\
&- \frac{1}{2\pi c_{l(j)}} \int_{-S}^S e^{ic_{l(j)}k(\theta)(x-r_{j-1}) - k^2(\theta)t} \left[\frac{\gamma_{l(j-1)}}{\gamma_{l(j)}} \widetilde{q}_x^{(j-1)}(r_{j-1}, k^2(\theta)) + ic_{l(j)}k(\theta) \widetilde{q}^{(j-1)}(r_{j-1}, k^2(\theta)) \right] \frac{dk(\theta)}{d\theta} d\theta \\
&+ \frac{1}{2\pi c_{l(j)}} \int_{-S}^S e^{-ic_{l(j)}k(\theta)(x-r_j) - k^2(\theta)t} \left[\widetilde{q}_x^{(j)}(r_j, k^2(\theta)) - ic_{l(j)}k(\theta) \widetilde{q}^{(j)}(r_j, k^2(\theta)) \right] \frac{dk(\theta)}{d\theta} d\theta,
\end{aligned} \tag{4.3}$$

για κάθε $j = 1, 2, \dots, n+1$. Τα σημεία της υπερβολής στο μιγαδικό επίπεδο έχουν πραγματικό μέρος $\frac{1}{2}(e^\theta - e^{-\theta}) \cos \beta$ και φανταστικό $\frac{1}{2}(e^\theta + e^{-\theta}) \sin \beta$. Άρα στο σημείο τομής της υπερβολής και του συνόρου ∂D^+ θα ισχύει

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2}(e^\theta - e^{-\theta}) \cos \beta &= \frac{1}{2}(e^\theta + e^{-\theta}) \sin \beta \\
\Rightarrow \frac{e^\theta - e^{-\theta}}{e^\theta + e^{-\theta}} &= \tan \beta \\
\Rightarrow \tanh \theta &= \tan \beta \\
\Rightarrow \theta &= \tanh^{-1}(\tan \beta) \\
\Rightarrow \theta &= \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1 + \tan \beta}{1 - \tan \beta} \right)
\end{aligned} \tag{4.4}$$

για β τέτοιο ώστε

$$\begin{aligned}
|\tan \beta| &< 1 \\
\Rightarrow \theta &\in [0, \frac{\pi}{4}) \cup (\frac{3\pi}{4}, \frac{5\pi}{4}) \cup (\frac{7\pi}{4}, 2\pi].
\end{aligned} \tag{4.5}$$

Όμως, τα σημεία $k(\theta)$ της υπερβολής για θ ανήκει στο $[-\frac{1}{2} \ln(\frac{1+\tan \beta}{1-\tan \beta}), \frac{1}{2} \ln(\frac{1+\tan \beta}{1-\tan \beta})]$ βρίσκονται μέσα στην απαγορευμένη περιοχή \mathcal{D}^+ . Παρά ταύτα, είναι αποδεκτά, διότι οι εκθετικές συναρτήσεις των ολοκληρωμάτων είναι καλά ορισμένες, δηλαδή για κάθε θ μέσα στο παραπάνω σύνολο $k(\theta)$ φραγμένο $k(\theta) \not\rightarrow \infty$.

Ακόμα, για την προσέγγιση της τιμής του S ζητείται ο όρος $e^{-k^2(\theta)t}$, ο οποίος είναι κοινός στα δύο ολοκληρώματα, να είναι αρκετά μικρός, δηλαδή

$$|e^{-k^2(\theta)t}| \leq 10^{-M} \quad \text{για κάθε } \theta \text{ τέτοιο ώστε } \theta \geq S. \tag{4.6}$$

Για $\theta \geq S > 0$ και $k(\theta) = a + ib$

$$\begin{aligned}
& |e^{-(a^2-b^2)t}(\cos(2ab) + i \sin(2ab))| \leq 10^{-M} \\
& \Rightarrow e^{-(a^2-b^2)t} \leq 10^{-M} \\
& \Rightarrow -(a^2 - b^2)t \leq -M \ln 10 \\
& \Rightarrow \left(\frac{1}{2}(e^\theta - e^{-\theta}) \cos \beta\right)^2 - \left(\frac{1}{2}(e^\theta + e^{-\theta}) \sin \beta\right)^2 \geq \frac{M \ln 10}{t} \\
& \Rightarrow \frac{1}{4}(e^{2\theta} + e^{-2\theta} - 2) \cos^2 \beta - \frac{1}{4}(e^{2\theta} + e^{-2\theta} + 2) \sin^2 \beta \geq \frac{M \ln 10}{t} \\
& \Rightarrow \left(\frac{1}{4}e^{2\theta} + \frac{1}{4}e^{-2\theta}\right)(\cos^2 \beta - \sin^2 \beta) - \frac{1}{2} \geq \frac{M \ln 10}{t} \\
& \Rightarrow \frac{1}{2} \cosh \theta \cos 2\beta \geq \frac{M \ln 10}{t} + \frac{1}{2} \\
& \Rightarrow \cosh \theta \geq \frac{2M \ln 10 + t}{t \cos 2\beta} \\
& \Rightarrow \theta \geq \frac{1}{2} \ln \left(\frac{2M \ln 10 + t}{t \cos 2\beta} + \sqrt{\frac{2M \ln 10 + t}{t \cos 2\beta} - 1} \right),
\end{aligned} \tag{4.7}$$

όπου

$$\begin{aligned}
M \geq 0 & \geq \frac{(\cos 2\beta - 1)t}{2 \ln 10} \\
& \Rightarrow \frac{2M \ln 10 + t}{t \cos 2\beta} - 1 \geq 0.
\end{aligned} \tag{4.8}$$

Επομένως, μπορεί να οριστεί

$$S_{opt} = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{2M \ln 10 + t}{t \cos 2\beta} + \sqrt{\frac{2M \ln 10 + t}{t \cos 2\beta} - 1} \right). \tag{4.9}$$

Αυτό σημαίνει ότι ο όρος S εξαρτάται από την τιμή του t , του β και του M , δηλαδή $S = S(t, \beta, M)$. Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιούνται στα αριθμητικά αποτελέσματα $\beta = \frac{\pi}{6}$ και $M = 21$.

4.2 Πολυπλοκότητα αριθμητικής ολοκλήρωσης

Έστω ότι ζητείται η αριθμητική λύση $q^{(j)}(x, t)$ σε κάποιο σημείο της περιοχής \overline{R}_j . Ο υπολογισμός όλων των ολοκληρωμάτων της σχέσης (4.3) θα γίνει με χρήση του κανόνα του τραπεζίου σε N σημεία

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{N} \left[\frac{f(a)}{2} + \sum_{j=1}^{N-1} f\left(a + j \frac{b-a}{N}\right) + \frac{f(b)}{2} \right]. \tag{4.10}$$

- Για το πρώτο ολοκλήρωμα της σχέσης (4.3) θα υπολογιστεί N φορές η προς ολοκλήρωση ποσότητα. Θα πρέπει, όμως, να υπολογίζεται ξεχωριστά κάθε φορά η ποσότητα $\widehat{f}^{(j)}(c_j k)$, η οποία περιέχει ένα ακόμη ολοκλήρωμα. Επομένως, θα πρέπει να γίνει ο υπολογισμός $N + 1$ ολοκληρωμάτων.
- Για τον υπολογισμό της προς ολοκλήρωση ποσότητας στο δεύτερο και στο τρίτο ολοκλήρωμα της ίδιας σχέσης, λόγω των αγνώστων που περιέχει, θα πρέπει πρώτα να λυθεί το σύστημα (3.84), του οποίου το δεξί μέλος περιέχει $2(n + 1)$ ολοκληρώματα, όπου $n + 1$ το πλήθος των περιοχών του μαθηματικού μοντέλου. Έτσι, για να υπολογιστεί το καθένα από αυτά τα δύο ολοκληρώματα θα πρέπει να γίνει ο υπολογισμός $2(n + 1)N + 1$ ολοκληρωμάτων.

Δηλαδή για να βρεθεί η αριθμητική τιμή της $q^{(j)}(x, t)$ σε ένα μόνο σημείο πρέπει να υπολογιστούν συνολικά $(4n + 5)N + 3$ ολοκληρώματα, τα οποία είναι πρακτικά πάρα πολλά.

Αρχικά, θα γίνει αναλυτικός υπολογισμός του πρώτου ολοκληρώματος κάνοντας χρήση των σχέσεων (2.21) και (3.69). Έχει, ήδη, οριστεί

$$f^{(j)}(x) := f|_{\overline{R}_j}(x) = \sum_{\tau} \delta(x - \xi_{\tau}), \quad \text{για } \tau \text{ τέτοια ώστε } \xi_{\tau} \in \overline{R}_j, \quad (4.11)$$

Από τον ορισμό της συνάρτησης του Dirac

$$\widehat{f}^{(j)}(x) = \sum_{\tau} e^{-ic_{l(j)}k\xi_{\tau}}, \quad \text{για } \tau \text{ τέτοια ώστε } \xi_{\tau} \in \overline{R}_j, \quad (4.12)$$

επομένως, το πρώτο ολοκλήρωμα της σχέσης (4.2) μετατρέπεται ως εξής

$$\frac{c_{l(j)}}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_{l(j)}kx - k^2 t} \widehat{f}^{(j)}(c_{l(j)}k) dk = \sum_{\tau} \frac{c_{l(j)}}{2\sqrt{t\pi}} e^{-\frac{[c_{l(j)}(\xi_{\tau} - x)]^2}{4t}}, \quad \text{για } \tau \text{ τέτοια ώστε } \xi_{\tau} \in \overline{R}_j. \quad (4.13)$$

Κάνοντας χρήση των παραπάνω στη σχέση (4.3) το συνολικό πλήθος των ολοκληρωμάτων, που πρέπει να υπολογιστούν, για να βρεθεί η τιμή της $q^{(j)}(x, t)$ σε ένα σημείο μειώνεται από $(4n + 5)N + 3$ σε 2. Δηλαδή πρέπει να υπολογιστεί μόνο το δεύτερο και το τρίτο ολοκλήρωμα της παραπάνω σχέσης.

4.3 Συμμετρικότητα ολοκληρωμάτων

Έστω πίνακες $A, B \in \mathbb{R}_{n \times n}$ και $u_R, u_I, \tilde{u}_R, \tilde{u}_I, b_R, b_I \in \mathbb{R}_{n \times 1}$ και τα γραμμικά συστήματα

$$\begin{cases} (A + iB)(u_R + iu_I) = b_R + ib_I \\ (A - iB)(\tilde{u}_R + i\tilde{u}_I) = b_R - ib_I \end{cases} \quad (4.14)$$

Τότε για τη λύση των παραπάνω γραμμικών συστημάτων ισχύει [18]

$$\begin{cases} \tilde{u}_R = u_R \\ \tilde{u}_I = -u_I \end{cases} \quad (4.15)$$

Με χρήση του παραπάνω Λήμματος, θα αποδειχθεί ότι το πραγματικά μέρη του δευτέρου και του τρίτου ολοκληρώματος της σχέσης (4.3) είναι άρτιες συναρτήσεις και ότι τα φανταστικά είναι περιττές, δηλαδή για τα ολοκληρώματα τους σε κάποιο συμμετρικό χωρίο ισχύει

$$\int_{-a}^a f(x) dx = 2 \int_0^a f(x) dx \quad (4.16)$$

για τις άρτιες συναρτήσεις και

$$\int_{-a}^a f(x) dx = 0 \quad (4.17)$$

για τις περιττές. Έτσι, θα μειωθούν ακόμα περισσότερο οι απαιτούμενες πράξεις λόγω αυτής της συμμετρικότητας των συναρτήσεων.

Αρχικά, θα γίνει ανάλυση των στοιχείων του συστήματος (3.84). Αν $k = R + iI$, τότε για τα στοιχεία του πίνακα G της μορφής e^{icka} ($e^{\pm icr_{j-1}}$ και $e^{\pm icr_{j-1}}$) ισχύει

$$\begin{aligned} e^{icka} &= e^{ic(R+iI)a} = \\ &= e^{-cIa} [\cos(cRa) + \sin(cRa)] = \\ &= e^{-cIa} \cos(cRa) + e^{-cIa} \sin(cRa) \end{aligned} \quad (4.18)$$

και, αντίστοιχα, για τα στοιχεία της μορφής ike^{icka} ($ike^{\pm icr_{j-1}}$ και $ike^{\pm icr_{j-1}}$) ισχύει

$$\begin{aligned} ike^{icka} &= i(R + iI)e^{-cIa} [\cos(cRa) + \sin(cRa)] = \\ &= e^{-cIa} [-I \cos(cRa) - R \sin(cRa)] + ie^{-cIa} [R \cos(cRa) - iI \sin(cRa)] \end{aligned} \quad (4.19)$$

Επίσης, τα στοιχεία $\hat{f}^{(j)}(\pm c_{l(j)}k)$ του δεξιού μέλους από την σχέση (4.12), όταν δεν είναι 0, είναι άθροισμα όρων της μορφής e^{icka} , οι οποίοι έχουν αναλυθεί παραπάνω. Οπότε

όλα τα στοιχεία του συστήματος (3.84) έχουν πραγματικό μέρος άρτια και φανταστικό μέρος περιττή συνάρτηση. Από το παραπάνω Λήμμα προκύπτει ότι εάν $\tilde{\mathbf{q}}_+ = \tilde{q}_R + i\tilde{q}_I$ η λύση του συστήματος (3.84) για $k = R + iI$, τότε $\tilde{\mathbf{q}}_- = \tilde{q}_R - i\tilde{q}_I$ είναι η λύση του ίδιου συστήματος για $k = -R + iI$.

Οι προς ολοκλήρωση συναρτήσεις του δεύτερου και του τρίτου ολοκληρώματος της σχέσης (4.3) είναι της μορφής $e^{ickx-k^2t}(\tilde{q}_1 + ik\tilde{q}_2)$, όπου \tilde{q}_1 και \tilde{q}_2 δίνονται από τη λύση του συστήματος (3.84). Αν $\tilde{q}_1 = a + ib$, $\tilde{q}_2 = d + if$ και $k = R + iI$, τότε για τις παραπάνω συναρτήσεις ισχύει

$$\begin{aligned}
& e^{ickx-k^2t}(\tilde{q}_1 + ik\tilde{q}_2) = \\
& = e^{ic(R+iI)x-(R+iI)^2t}(\tilde{q}_1 + i(R+iI)\tilde{q}_2) = \\
& = e^{-cIx-(R^2-I^2)t+i(cRx-2RI t)}(\tilde{q}_1 - cI\tilde{q}_2 + icR\tilde{q}_2) = \\
& = e^{-cIx-(R^2-I^2)t}[\cos(cRx - 2RI t) + i \sin(cRx - 2RI t)](\tilde{q}_1 - cI\tilde{q}_2 + icR\tilde{q}_2) = \\
& = e^{-cIx-(R^2-I^2)t}[\cos(cRx - 2RI t) + i \sin(cRx - 2RI t)][(a + ib) - cI(d + if) + icR(d + if)] = \\
& = e^{-cIx-(R^2-I^2)t}[(a - cId - cRf) \cos(cRx - 2RI t) - (b - cIf + cRd) \sin(cRx - 2RI t)] \\
& + ie^{-cIx-(R^2-I^2)t}[(a - cId - cRf) \sin(cRx - 2RI t) - (b - cIf + cRd) \cos(cRx - 2RI t)]
\end{aligned} \tag{4.20}$$

Άρα το πραγματικό και το φανταστικό μέρος των προς ολοκλήρωση συναρτήσεων είναι άρτιο και περιττό αντίστοιχα, οπότε το δεύτερο και το τρίτο ολοκλήρωμα της σχέσης (4.3) μπορούν, λόγω αυτής της συμμετρικότητας, να μετατραπούν ως εξής

$$\begin{aligned}
& \int_{-S}^S e^{ic_{l(j)}k(\theta)(x-r_{j-1})-k^2(\theta)t} \left[\frac{\gamma_{l(j-1)}}{\gamma_{l(j)}} \tilde{q}_x^{(j-1)}(r_{j-1}, k^2(\theta)) + ic_{l(j)}k(\theta) \tilde{q}^{(j-1)}(r_{j-1}, k^2(\theta)) \right] \frac{dk(\theta)}{d\theta} d\theta = \\
& = 2 \int_0^S \Re \left(e^{ic_{l(j)}k(\theta)(x-r_{j-1})-k^2(\theta)t} \left[\frac{\gamma_{l(j-1)}}{\gamma_{l(j)}} \tilde{q}_x^{(j-1)}(r_{j-1}, k^2(\theta)) + ic_{l(j)}k(\theta) \tilde{q}^{(j-1)}(r_{j-1}, k^2(\theta)) \right] \frac{dk(\theta)}{d\theta} \right) d\theta
\end{aligned} \tag{4.21}$$

και

$$\int_{-S}^S e^{-ic_{l(j)}k(\theta)(x-r_j)-k^2(\theta)t} [\tilde{q}_x^{(j)}(r_j, k^2(\theta)) - ic_{l(j)}k(\theta)\tilde{q}^{(j)}(r_j, k^2(\theta))] \frac{dk(\theta)}{d\theta} d\theta =$$

$$2 \int_0^S \Re(e^{-ic_{l(j)}k(\theta)(x-r_j)-k^2(\theta)t} [\tilde{q}_x^{(j)}(r_j, k^2(\theta)) - ic_{l(j)}k(\theta)\tilde{q}^{(j)}(r_j, k^2(\theta))] \frac{dk(\theta)}{d\theta}) d\theta,$$
(4.22)

για κάθε $j = 1, 2, \dots, n+1$. Δηλαδή αρκεί να γίνει ολοκλήρωση στο διάστημα $[0, S]$ μόνο του πραγματικού μέρους των συναρτήσεων. Λαμβάνοντας υπόψιν την τιμή του S_{opt} και αντικαθιστώντας στη σχέση (4.3) τα παραπάνω, καθώς και την (4.13), προκύπτει

$$q^{(j)}(x, t) \approx$$

$$\approx \sum_{\tau} \frac{c_{l(j)}}{2\sqrt{t\pi}} e^{-\frac{[c_{l(j)}(\xi_{\tau}-x)]^2}{4t}}$$

$$- \frac{1}{\pi c_{l(j)}} \int_0^S e^{ic_{l(j)}k(\theta)(x-r_{j-1})-k^2(\theta)t} \left[\frac{\gamma_{l(j-1)}}{\gamma_{l(j)}} \tilde{q}_x^{(j-1)}(r_{j-1}, k^2(\theta)) + ic_{l(j)}k(\theta)\tilde{q}^{(j-1)}(r_{j-1}, k^2(\theta)) \right] \frac{dk(\theta)}{d\theta} d\theta$$

$$+ \frac{1}{\pi c_{l(j)}} \int_0^S e^{-ic_{l(j)}k(\theta)(x-r_j)-k^2(\theta)t} [\tilde{q}_x^{(j)}(r_j, k^2(\theta)) - ic_{l(j)}k(\theta)\tilde{q}^{(j)}(r_j, k^2(\theta))] \frac{dk(\theta)}{d\theta} d\theta,$$
(4.23)

για κάθε $j = 1, 2, \dots, n+1$, για τ τέτοια ώστε $\xi_{\tau} \in \overline{R_j}$ και $S \approx S_{opt}$.

Κεφάλαιο 5

Αριθμητικά Αποτελέσματα

Στο κεφάλαιο αυτό θα μελετηθεί αριθμητικά η μέθοδος του Φωκά. Θα παρουσιαστεί η συμπεριφορά της λύσης σε διάφορα προβλήματα ως προς το χρόνο. Ακόμα, θα μελετηθεί η σύγκλιση αυτής για τις διάφορες τιμές των N και S και για διάφορα μονοπάτια ολοκλήρωσης.

5.1 Συμπεριφορά λύσης διαφόρων προβλημάτων

Στην παράγραφο αυτή παρουσιάζεται η ανάπτυξη του καρκινικού όγκου ως προς το χρόνο σε 3 διαφορετικά προβλήματα:

- **Πρόβλημα 1 (5 περιοχές - 2 πηγές):**

Έστω το μονοδιάστατο πρόβλημα των 5 περιοχών και 2 πηγών στο διάστημα $[-5, 5]$ με

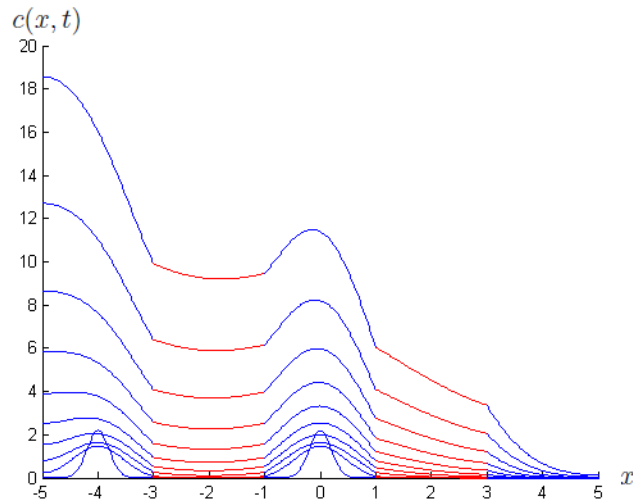
$$r_1 = -3, r_2 = -1, r_3 = 1, r_4 = 3$$

τα σημεία διασύνδεσης των περιοχών και

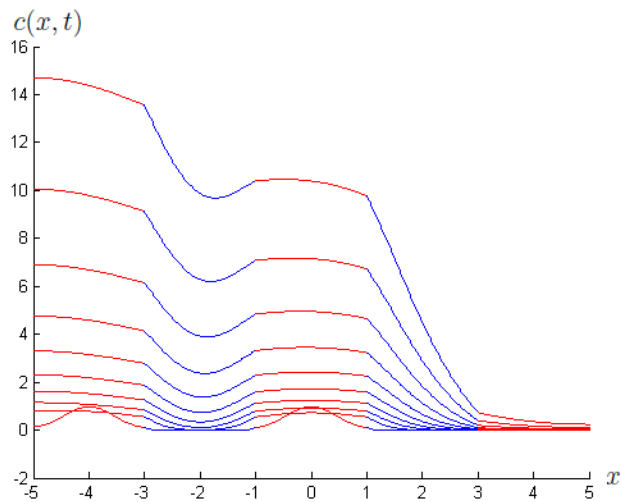
$$\xi_1 = -4, \xi_2 = 0$$

οι πηγές των καρκινικών κυττάρων. Τότε η συμπεριφορά της λύσης ως προς το χρόνο, για ελάχιστο χρόνο $t_{min} = 0.4$, μέγιστο χρόνο $t_{max} = 4$, χρονικό βήμα $t_0 = 0.4$, $\beta = \frac{\pi}{6}$ και $\gamma = 0.2$, παρουσιάζεται από το γράφημα (5.1), αν η πρώτη περιοχή

αντιστοιχεί σε περιοχή λευκής ουσίας, κι από το γράφημα (5.2), αν αντιστοιχεί σε περιοχή φαιάς ουσίας.



Σχήμα 5.1: Η λύση του Προβλήματος 1 για πρώτη περιοχή με λευκή ουσία.



Σχήμα 5.2: Η λύση του Προβλήματος 1 για πρώτη περιοχή με φαιά ουσία.

• **Πρόβλημα 2 (3 περιοχές - 5 πηγές):**

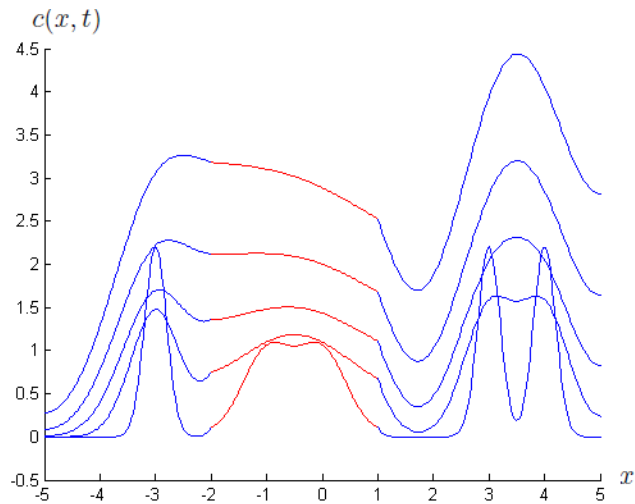
Έστω, επίσης, το μονοδιάστατο πρόβλημα 3 περιοχών και 5 πηγών στο διάστημα $[-5, 5]$ με

$$r_1 = -2, r_2 = 1$$

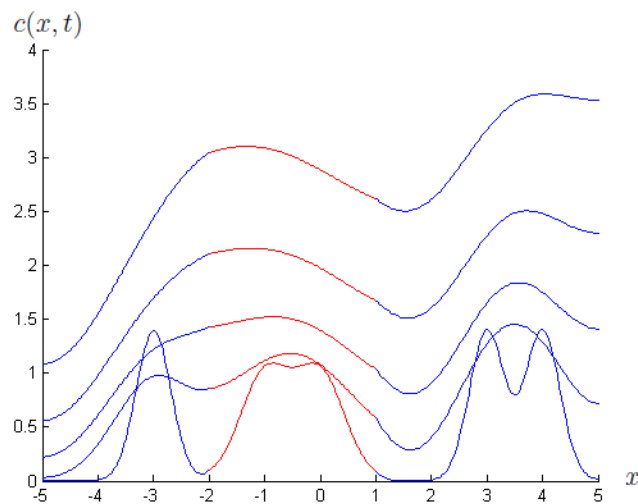
τα σημεία διασύνδεσης,

$$\xi_1 = -3, \xi_2 = -1, \xi_3 = 0, \xi_4 = 3, \xi_5 = 4$$

οι πηγές των καρκινικών κυττάρων, $t_{min} = 0.4$, $t_{max} = 2$, χρονικό βήμα $t_0 = 0.4$ και η στην πρώτη περιοχή να υπάρχει φαιά ουσία. Τότε η συμπεριφορά της λύσης φαίνεται στα γραφήματα (5.3) και (5.4) για $\gamma = 0.2$ και $\gamma = 0.5$, αντίστοιχα.



Σχήμα 5.3: Η λύση του Προβλήματος 2 για $\gamma = 0.2$.



Σχήμα 5.4: Η λύση του Προβλήματος 2 για $\gamma = 0.5$.

• **Πρόβλημα 3 (8 περιοχές - 3 πηγές):**

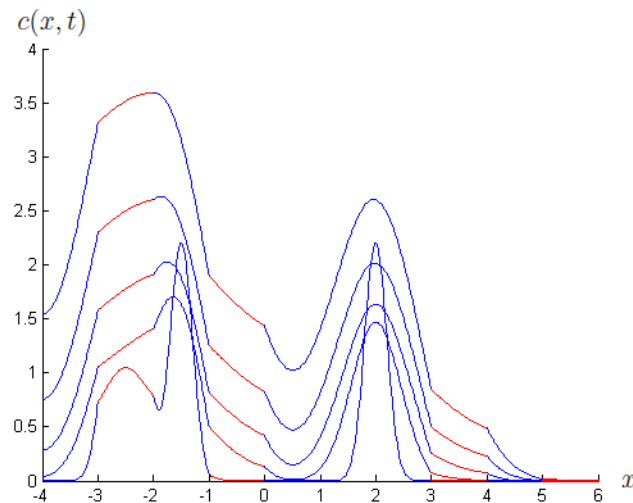
Έστω, ακόμα, το μονοδιάστατο πρόβλημα των 8 περιοχών και 3 πηγών στο διάστημα $[-4, 6]$ με

$$r_1 = -3, r_2 = -2, r_3 = -1, r_4 = 0, r_5 = 3, r_6 = 4, r_7 = 5,$$

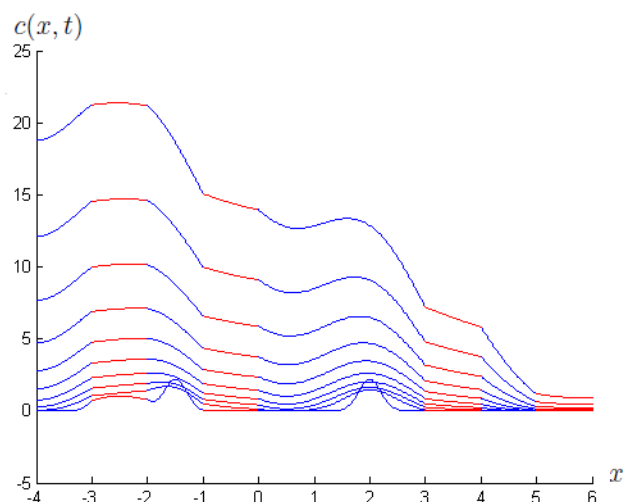
τα σημεία διασύνδεσης,

$$\xi_1 = -2.5, \xi_2 = -1.5, \xi_3 = 2$$

οι πηγές, $\gamma = 0.2$ και η πρώτη περιοχή να αντιστοιχεί σε φαιά ουσία. Η συμπεριφορά της λύσης του προβλήματος αυτού ως προς το χρόνο δίνεται από το γράφημα (5.5) για $t_{max} = 5$ κι από το (5.6) για $t_{max} = 10$ με χρονικό βήμα $t_0 = 1$ και στα δύο γραφήματα.



Σχήμα 5.5: Η λύση του Προβλήματος 3 για $t_{max} = 4$.



Σχήμα 5.6: Η λύση του Προβλήματος 3 για $t_{max} = 10$.

5.2 Ακρίβεια λύσης

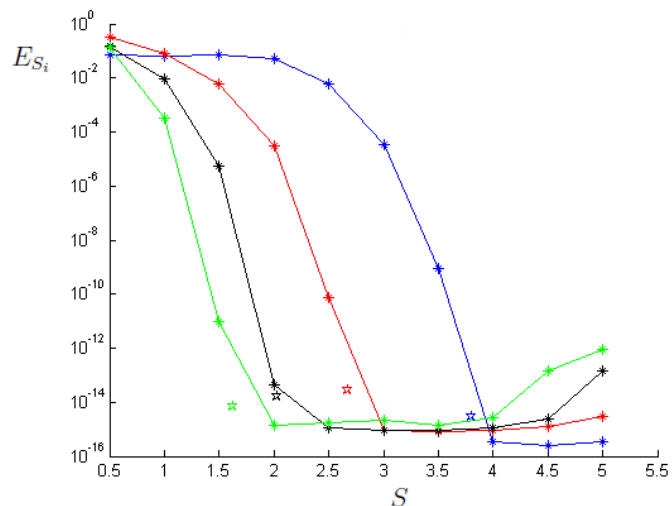
Η αριθμητική τιμή της λύσης του προβλήματος, όπως φαίνεται και στην σχέση (4.23), εξαρτάται από την αριθμητική προσέγγιση του δεύτερου και του τρίτου ολοκληρώματος, δηλαδή από τις τιμές των όρων S και N . Σε αυτήν την παράγραφο θα μελετηθεί η σύγκλιση της λύσης του Προβλήματος 3 ως προς αυτούς τους όρους για $\beta = \frac{\pi}{6}$ και $\gamma = 0.2$ σε διάφορες χρονικές στιγμές. Επίσης, θα γίνει σύγκριση διαφόρων μονοπατιών ολοκλήρωσης ως προς τη σύγκλιση.

Αρχικά, ορίζεται c_S ως η προσέγγιση της λύσης $c(x, t)$ με S το όριο ολοκλήρωσης και το σχετικό σφάλμα

$$E_{S_i} := \frac{\|c_{S_i} - c_{S_{i+1}}\|_{\infty}}{\|c_{S_{i+1}}\|_{\infty}}. \quad (5.1)$$

Στο γράφημα (5.7) φαίνεται ότι το σχετικό σφάλμα E_{S_i} ελαχιστοποιείται για σχετικά μικρές τιμές του S , ακόμα και μικρότερες του 4. Επίσης, φαίνεται ότι το S_{opt} , το οποίο, ουσιαστικά, ελαχιστοποιεί τον όρο $e^{-k^2(\theta)t}$, είναι μια αρκετά καλή προσέγγιση για το S .

Ορίζεται, επίσης, c_N ως η προσέγγιση της λύσης $c(x, t)$ με N το πλήθος των σημείων που χρησιμοποιούνται στον κανόνα του παραλληλογράμμου για τον υπολογισμό των

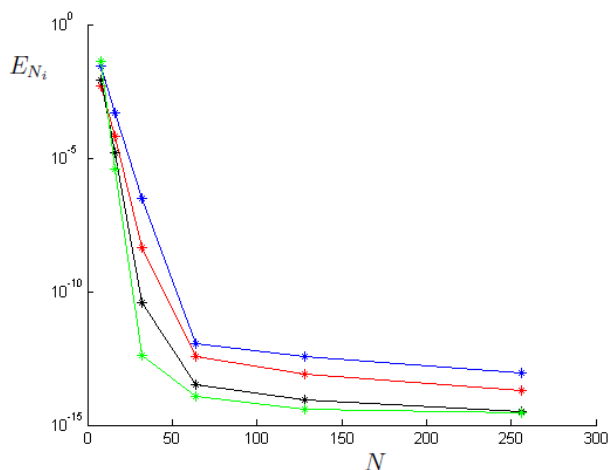


Σχήμα 5.7: Γράφημα E_{S_i} για τις χρονικές στιγμές $t = 0.1$ (μπλε), $t = 1$ (κόκκινο), $t = 4$ (μαύρο) και $t = 10$ (πράσινο).

ολοκληρωμάτων και το σχετικό σφάλμα

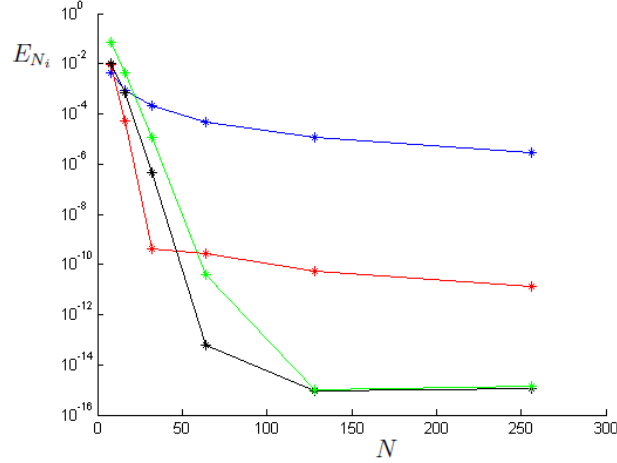
$$E_{N_i} := \frac{\|c_{N_i} - c_{N_{i+1}}\|_{\infty}}{\|c_{N_{i+1}}\|_{\infty}}. \quad (5.2)$$

Από το γράφημα (5.8) είναι φαίνεται ότι το σχετικό σφάλμα E_{N_i} συγκλίνει σε όλες τις χρονικές στιγμές για $N \geq 64$. Στις μετρήσεις χρησιμοποιήθηκε για κάθε χρονική στιγμή t η αντίστοιχη τιμή του S_{opt} με $M = 21$. Ακόμα, από το γράφημα (5.9) προκύπτει



Σχήμα 5.8: Γράφημα E_{N_i} για τις χρονικές στιγμές $t = 0.1$ (μπλε), $t = 1$ (κόκκινο), $t = 4$ (μαύρο) και $t = 10$ (πράσινο).

ότι για $t = 1$ όσο μεγαλύτερο είναι το S τόσο καλύτερη είναι η σύγκλιση του σχετικού σφάλματος E_{N_i} .

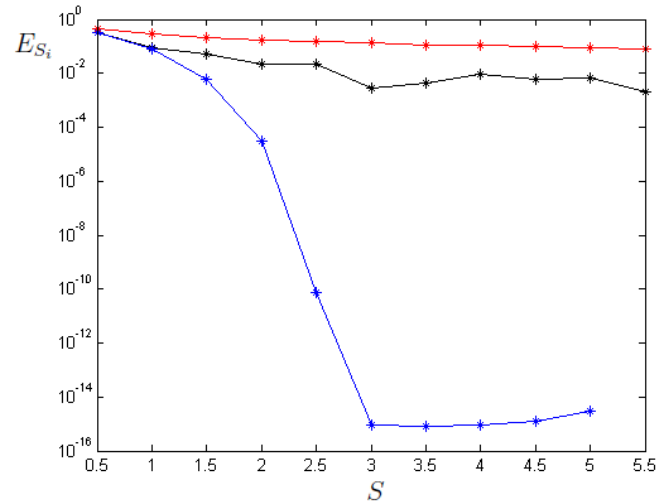


Σχήμα 5.9: Γράφημα E_{N_i} για όρια ολοκλήρωσης $S = 1.5$ (μπλε), $S = 2.5$ (κόκκινο), $S = 3.5$ (μαύρο) και $S = 4.5$ (πράσινο).

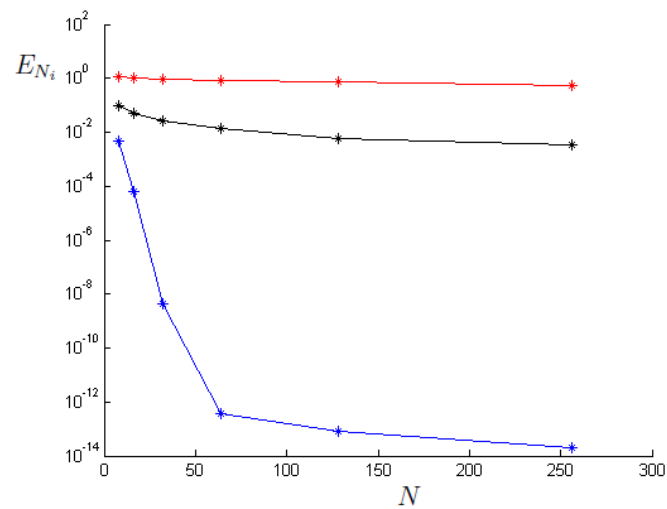
Στην παράγραφο 4.1 έγινε μεταφορά των καμπυλών ολοκλήρωσης στο δεύτερο και στο τρίτο ολοκλήρωμα της σχέσης (3.91). Συγκεκριμένα, το σύνορο $\partial\mathcal{D}^+$, που σχηματίζεται από τις δύο κάθετες ευθείες $k(\theta) = -\theta + i\theta$ για $[-\infty, 0)$ και $k(\theta) = \theta + i\theta$ για $(0, +\infty]$, αλλάχτηκε με την υπερβολή $k(\theta) = i \sin(\beta - i\theta)$. (Το σημείο $0 + i\theta$ αφαιρείται από τις ευθείες, διότι εκεί μηδενίζεται η ορίζουσα του συστήματος (3.84).) Όπως προαναφέρθηκε, τα σημεία της υπερβολής για $\theta \in [-\frac{1}{2} \ln(\frac{1+\tan\beta}{1-\tan\beta}), \frac{1}{2} \ln(\frac{1+\tan\beta}{1-\tan\beta})]$ ανήκουν στην περιοχή \mathcal{D}^+ χωρίς, όμως, να υπάρχει πρόβλημα κακού ορισμού στη λύση.

Στα γραφήματα (5.10) και (5.11) παρουσιάζονται το σχετικά σφάλματα E_{S_i} και E_{N_i} της λύσης αν γίνει ολοκλήρωση πάνω στην υπερβολή (μπλε), πάνω στις ευθείες (κόκκινο) και, τέλος, πάνω στην υπερβολή εντός του συνόλου $[-\frac{1}{2} \ln(\frac{1+\tan\beta}{1-\tan\beta}), \frac{1}{2} \ln(\frac{1+\tan\beta}{1-\tan\beta})]$ και πάνω στις ευθείες εκτός (μαύρο). Είναι εμφανές ότι η αριθμητική ολοκλήρωση πάνω στις ευθείες δεν αποφέρει τα επιθυμητά αποτελέσματα, διότι χρειάζονται πολλά σημεία ολοκλήρωσης N κι ένα αρκετά μεγάλο S για μια καλή προσέγγιση του ολοκληρώματος. Από την άλλη με την ολοκλήρωση πάνω στην υπερβολή (καμπύλη Hankel) λόγω των εκθετικών

στις προς ολοκλήρωση ποσότητες εξασφαλίζεται σύγκλιση της λύσης μόνο από τα σημεία γύρω από το 0, δηλαδή τα $k(\theta)$ μέσα στην περιοχή $[-S, S]$, ενώ για $\theta > S$ οι προς ολοκλήρωση ποσότητες τείνουν στο 0.



Σχήμα 5.10: Γράφημα E_{S_i} για τις διάφορες καμπύλες ολοκλήρωσης.



Σχήμα 5.11: Γράφημα E_{N_i} για τις διάφορες καμπύλες ολοκλήρωσης.

Βιβλιογραφία

- [1] M.J.Ablowitz and A.S.Fokas. Introduction and Applications of Complex Variables, Cambridge University Press, second edition 2003
- [2] A.S.Fokas. A unified transform method for solving linear and certain nonlinear PDEs, Proc.R.Soc.A,453,1411-1443, 1997.
- [3] 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 ,56(6):704-713, 1997.
- [4] N.Flyer and 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 new transform method for evolution PDEs, IMA J. Appl. Math.,67(6),559-590, 2002.
- [6] T.S.Papatheodorou and 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.
- [7] D.Mantzavinos, M.G.Papadomanolaki, Y.G.Saridakis and A.G.Sifalakis. A novel transform approach for a brain tumor invasion model with heterogeneous diffusion in 1+1 dimensions, 2013

- [8] K.R.Swanson. Mathematical modeling of the growth and control of tumors, PHD Thesis, University of Washington, 1999.
- [9] K.R.Swanson, E.C.Alvord Jr and J.D.Murray. A quantitative model for differential motility of gliomas in grey and white matter, *Cell Proliferation*, 33:317-329, 2000.
- [10] K.R.Swanson, E.C.Alvord Jr and 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.
- [11] 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*, 216:1-10, 2003.
- [12] L.N.Trefethen, J.A.C.Weideman and T.Schmelzer. Tablot quadratures and rational approximations, *BIT Numerical Mathematics*, 46:653- 670, 2006.
- [13] 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*, (3):937-945, 1995.
- [14] J.D.Murray. *Mathematical Biology* , Springer-Verlag, 3rd Edition 2002.
- [15] 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
- [16] 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*, 28:17-31, 1995.

- [17] 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*,29:269-288, 1996.
- [18] M.Papadomanolaki. Phd Thesis, Technical University of Crete 2011
- [19] B.Deckoninck, T.Trogdon and V.Vashan. Solving Linear Partial Differential Equations
- [20] M.Asvestas, E.Papadopoulou, Y.Saridakis, A.Sifalakis. Fokas method for a multi-domain linear reaction-diffusion equation with discontinuous diffusivity