Matemáticas: una visión al pasado para determinar el futuro

TFG: Métodos de Galerkin discontinuos para la resolución numérica de EDP

Daniel Acosta Soba

Tutor: J. Rafael Rodríguez Galván Cádiz, 17 de noviembre de 2020



Índice

Modelización matemática mediante EDP

Resolución matemática

Sección 1

Modelización matemática mediante EDP

-[Modelización matemática mediante EDP]

¿Cómo se comportan los fluidos que forman «atmósfera» y «océanos»?

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} - \nu \Delta \mathbf{u} + \nabla p = \mathbf{f}, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \end{cases}$$



¿Cómo se comportan los fluidos que forman «atmósfera» y «océanos»?

Modelo matemático (simplificado)

(ecuaciones de Navier-Stokes)

$$\label{eq:continuity} \begin{cases} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} - \nu \Delta \mathbf{u} + \nabla p = \mathbf{f}, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \end{cases}$$



¿Cómo se comportan los fluidos que forman «atmósfera» y «océanos»?

Modelo matemático (simplificado)

(ecuaciones de Navier-Stokes)

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} - \nu \Delta \mathbf{u} + \nabla \mathbf{p} = \mathbf{f}, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \end{cases}$$

- Presión atmosférica



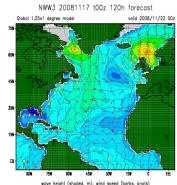
¿Cómo se comportan los fluidos que forman «atmósfera» y «océanos»?

Modelo matemático (simplificado)

(ecuaciones de Navier-Stokes)

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} - \nu \Delta \mathbf{u} + \nabla p = \mathbf{f}, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \end{cases}$$

- Velocidad del fluido



wave height (shaded, m), wind speed (barbs, knots) and peak direction (vector, not scaled) NOAA/NWS/NCEP Marine Modeling and Analysis Branch, 2008/11/17

¿Cómo se comportan los fluidos que forman «atmósfera» y «océanos»?

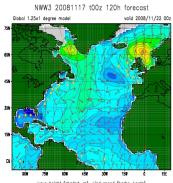
Modelo matemático (simplificado)

(ecuaciones de Navier-Stokes)

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} - \nu \Delta \mathbf{u} + \nabla p = \mathbf{f}, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \end{cases}$$

- Análisis del modelo:

¿Existe solución? ¿Con qué características? — Problema del milenio



wave height (shaded, m), wind speed (barbs, knots) and peak direction (vector, not scaled)

NOAA/NWS/NCEP Marine Modeling and Analysis Branch, 2008/11/17

Modelos biológicos

Ecuación de Cahn-Hilliard (tumor) + Ecuación de difusión (nutrientes)

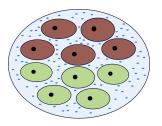


Figura: Interacción entre las cuatro especies.

Variables u y n con valores en [0,1]:

- *u* de tipo campo de fase (1 células tumorales y 0 células sanas).
- n porcentaje de nutrientes en el agua extracelular.

$$\begin{cases} \partial_t u = \nabla \cdot \left(M_u \nabla \left(F'(u) - \varepsilon^2 \Delta u \right) \right) - \chi_0 \nabla \cdot \left(M_u \nabla n \right) \\ + \delta P_0 u_+ (\mu_n - \mu_u) & \text{en } \Omega \times (0, T), \\ \partial_t n = \frac{1}{\delta} \nabla \cdot \left(M_n \nabla n \right) - \chi_0 \nabla \cdot \left(M_n \nabla u \right) \\ - \delta P_0 u_+ (\mu_n - \mu_u) & \text{en } \Omega \times (0, T), \\ \nabla u \cdot \mathbf{n} = \nabla n \cdot \mathbf{n} = \nabla \mu_u \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{sobre } \partial \Omega \times (0, T), \\ u(0) = u_0, \quad n(0) = n_0 & \text{en } \Omega, \end{cases}$$

donde $u_0, n_0 \in L^2(\Omega)$ son las condiciones iniciales.

- $F(u) = \Gamma u^2 (1-u)^2$, $\Gamma > 0$ funcional de doble pozo Ginzburg-Landau.
- $\mu_u = F'(u) \varepsilon^2 \Delta u + \partial_u \chi(u, n)$ potencial químico de u.
- $\mu_n = \frac{1}{8}n + \partial_n \chi(u, n)$ potencial químico de n.

$$\begin{cases} \partial_t u = \nabla \cdot \left(M_u \nabla \left(F'(u) - \varepsilon^2 \Delta u \right) \right) \boxed{-\chi_0 \nabla \cdot \left(M_u \nabla n \right)} \\ + \delta P_0 u_+ (\mu_n - \mu_u) & \text{en } \Omega \times (0, T), \\ \partial_t n = \frac{1}{\delta} \nabla \cdot \left(M_n \nabla n \right) \boxed{-\chi_0 \nabla \cdot \left(M_n \nabla u \right)} \\ - \delta P_0 u_+ (\mu_n - \mu_u) & \text{en } \Omega \times (0, T), \\ \nabla u \cdot \mathbf{n} = \nabla n \cdot \mathbf{n} = \nabla \mu_u \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{sobre } \partial \Omega \times (0, T), \\ u(0) = u_0, \quad n(0) = n_0 & \text{en } \Omega, \end{cases}$$

donde $u_0, n_0 \in L^2(\Omega)$ son las condiciones iniciales.

- $F(u) = \Gamma u^2 (1-u)^2, \Gamma > 0$ funcional de doble pozo Ginzburg-Landau.
- $\blacksquare \mu_{u} = F'(u) \varepsilon^{2} \Delta u + \partial_{u} \chi(u, n) \text{ potencial químico de } u.$
- $\mu_n = \frac{1}{\delta} n + \partial_n \chi(u, n)$ potencial químico de n.
- Desplazamiento de células tumorales ← **Términos de difusión cruzada**.
- Reacciones químicas células-nutrientes.

$$\begin{cases} \partial_t u = \nabla \cdot \left(M_u \nabla \left(F'(u) - \varepsilon^2 \Delta u \right) \right) - \chi_0 \nabla \cdot \left(M_u \nabla n \right) \\ + \delta P_0 u_+(\mu_n - \mu_u) & \text{en } \Omega \times (0, T), \end{cases} \\ \partial_t n = \frac{1}{\delta} \nabla \cdot \left(M_n \nabla n \right) - \chi_0 \nabla \cdot \left(M_n \nabla u \right) \\ - \delta P_0 u_+(\mu_n - \mu_u) & \text{en } \Omega \times (0, T), \end{cases} \\ \nabla u \cdot \mathbf{n} = \nabla n \cdot \mathbf{n} = \nabla \mu_u \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{sobre } \partial \Omega \times (0, T), \\ u(0) = u_0, \quad n(0) = n_0 & \text{en } \Omega, \end{cases}$$

donde $u_0, n_0 \in L^2(\Omega)$ son las condiciones iniciales.

- $F(u) = \Gamma u^2 (1-u)^2$, $\Gamma > 0$ funcional de doble pozo Ginzburg-Landau.
- $\mu_{\mu} = F'(u) \varepsilon^2 \Delta u + \partial_{\mu} \chi(u, n)$ potencial químico de u.
- $\mu_n = \frac{1}{\delta} n + \partial_n \chi(u, n)$ potencial químico de n.
- Reacciones químicas células-nutrientes.

Crecimiento de un tumor con fuente de nutrientes

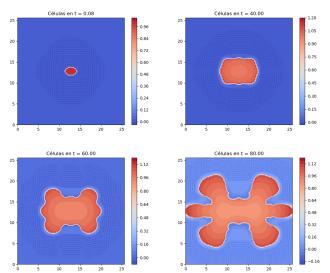


Figura: Representación de las células para la solución obtenida.

Agregación de tumores circulares

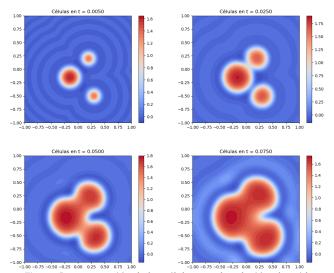


Figura: Representación de las células para la solución obtenida.

Modelo del migración celular

-[Modelización matemática mediante EDP]-

Modelo de migración celular

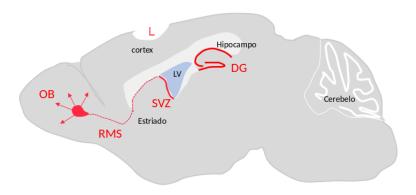


Figura: Esquema del movimiento de los neuroblastos por el cerebro de un roedor.

Sección 2

Resolución matemática

Problema elíptico

–[Resolución matemática]—

Problema modelo

Consideramos el problema de Poisson:

$$\begin{cases} -\Delta u = f & \text{en } \Omega, \\ u = 0 & \text{en } \partial \Omega, \end{cases}$$

-[Resolución matemática]----

donde $f \in L^2(\Omega)$.

Formulación variacional continua

Espacio de soluciones: $H_0^1(\Omega)$.

- \blacksquare $a: H_0^1(\Omega) \times H_0^1(\Omega) \to \mathbb{R}, a(u,v) := \int_{\Omega} \nabla u \nabla v;$
- $L: H_0^1(\Omega) \to \mathbb{R}, L(v) := \int_{\Omega} fv.$

Problema variacional:

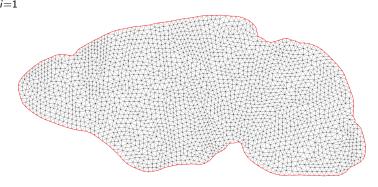
encontrar $u \in H_0^1(\Omega)$ tal que a(u, v) = L(v) para todo $v \in H_0^1(\Omega)$.

El problema modelo y su formulación variacional son equivalentes.

Malla de $\bar{\Omega}$

Conjunto \mathcal{T}_h de d-símplices $(K_i)_{i \in \{1,2,\ldots,N_{\mathcal{T}_h}\}}$ no degenerados que satisfacen:

- $K_i \subseteq \bar{\Omega}$ para todo $i \in \{1, 2, ..., N_{\mathcal{T}_h}\};$
- $\blacksquare \bigcup_{i=1}^{\infty} K_i = \bar{\Omega}.$



Aproximaciones discretas

Método de los Elementos Finitos:

$$V_h := \left\{ v_h \in \mathscr{C}^0\left(\bar{\Omega}\right) : v_{h|_{K_i}} \in \mathbb{P}_k(K_i) \text{ con } K_i \in \mathscr{T}_h, \forall i \in \{1, 2, \dots, N_{\mathscr{T}_h}\} \right\}$$

con base $\{\varphi_i\}_{i\in\{1,2,\ldots,N_h\}}$.

Métodos de Galerkin discontinuos:

$$\mathcal{S}_h := \left\{ v_h \in L^2(\Omega) \colon v_{h|_{\mathcal{K}_i}} \in \mathbb{P}_k(\mathcal{K}_i) \text{ con } \mathcal{K}_i \in \mathcal{T}_h, \forall i \in \{1, 2, \dots, N_{\mathcal{T}_h}\} \right\}$$

con base $\{\phi_i\}_{i \in \{1, 2, ..., N_b\}}$.

Método de los Elementos Finitos

Encontrar $u \in V$ tal que a(u, v) = L(v) para todo $v \in V$.



Encontrar $u_h \in V_h$ tal que $a(u_h, v_h) = L(v_h)$ para todo $v_h \in V_h$.



- Resolver el sistema lineal AU = F donde:

 - $A = (A_{ij})_{i,j \in \{1,2,...,N_h\}} \text{ con } A_{ij} = a(\varphi_j, \varphi_i);$ $\mathbf{U} = (U_1, U_2, ..., U_{N_h})^t \text{ con } u_h = \sum_{i=1}^{N_h} U_i \varphi_i;$ $\mathbf{F} = (F_1, F_2, ..., F_{N_h})^t \text{ con } F_i = L(\varphi_i).$

-[Resolución matemática]-

Método de Galerkin discontinuo

Primera idea:

■ Encontrar $u \in V$ tal que a(u, v) = L(v) para todo $v \in V$.

■ Encontrar $u_h \in V_h$ tal que $a(u_h, v_h) = L(v_h)$ para todo $v_h \in S_h$.

Idea correcta:

■ Encontrar $u \in V$ tal que a(u, v) = L(v) para todo $v \in V$.



■ Encontrar $u_h \in \mathcal{S}_h$ tal que $a_h^{\text{sip},\sigma}(u_h,v_h) = L(v_h)$ para todo $v_h \in V_h$.

Método de Galerkin discontinuo

Primera idea:

■ Encontrar $u \in V$ tal que a(u, v) = L(v) para todo $v \in V$.

■ Encontrar $u_h \in V_h$ tal que $a(u_h, v_h) = L(v_h)$ para todo $v_h \in \mathcal{S}_h$.

Idea correcta:

■ Encontrar $u \in V$ tal que a(u, v) = L(v) para todo $v \in V$.



■ Encontrar $u_h \in \mathcal{S}_h$ tal que $a_h^{\text{sip},\sigma}(u_h,v_h) = L(v_h)$ para todo $v_h \in V_h$.

 $\blacksquare a_h^{\mathsf{sip}}: \mathcal{S}_{*h} \times \mathcal{S}_h \to \mathbb{R},$

$$\begin{split} a_h^{\mathsf{sip},\sigma}(u,v_h) &:= \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \nabla_h u \nabla_h v - \sum_{e \in \mathcal{E}_h} \int_e \left\{\!\!\left\{ \nabla_h u \cdot \mathbf{n}_e \right\}\!\!\right\} \left[\!\!\left[v_h \right]\!\!\right] \\ &- \sum_{e \in \mathcal{E}_h} \int_e \left\{\!\!\left\{ \nabla_h v \cdot \mathbf{n}_e \right\}\!\!\right\} \left[\!\!\left[u \right]\!\!\right] \\ &+ \sigma \sum_{e \in \mathcal{E}_h} \int_e \frac{1}{h_e} \left[\!\!\left[u \right]\!\!\right] \left[\!\!\left[v_h \right]\!\!\right]; \end{split}$$

- Fórmula de integracion por partes
- Simetría
- Coercitividad
- $\blacksquare L_h: \mathcal{S}_h \to \mathbb{R}, \underline{L_h(v_h)} := \int_{\Omega} f v_h.$

 $\mathbf{a}_h^{\mathsf{sip}}: \mathcal{S}_{*h} \times \mathcal{S}_h \to \mathbb{R},$

$$\begin{aligned} a_{h}^{\mathsf{sip},\sigma}(u,v_{h}) &:= \left[\sum_{K \in \mathcal{T}_{h}} \int_{K} \nabla_{h} u \nabla_{h} v - \sum_{e \in \mathcal{E}_{h}} \int_{e} \left\{ \!\!\left\{ \nabla_{h} u \cdot \mathbf{n}_{e} \right\} \!\!\right\} \left[\!\!\left[v_{h} \right]\!\!\right] \\ &- \sum_{e \in \mathcal{E}_{h}} \int_{e} \left\{ \!\!\left\{ \nabla_{h} v \cdot \mathbf{n}_{e} \right\} \right\} \left[\!\!\left[u \right]\!\!\right] \\ &+ \sigma \sum_{e \in \mathcal{E}_{h}} \int_{e} \frac{1}{h_{e}} \left[\!\!\left[u \right]\!\!\right] \left[\!\!\left[v_{h} \right]\!\!\right]; \end{aligned}$$

- Fórmula de integracion por partes
- Simetría
- Coercitividad
- $\blacksquare L_h: \mathcal{S}_h \to \mathbb{R}, \underline{L_h(v_h)} := \int_{\Omega} f v_h.$

 $\mathbf{a}_h^{\mathsf{sip}}: \mathscr{S}_{*h} \times \mathscr{S}_h \to \mathbb{R},$

$$a_h^{\operatorname{sip},\sigma}(u,v_h) := \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \nabla_h u \nabla_h v - \sum_{e \in \mathscr{E}_h} \int_e \{\!\!\{ \nabla_h u \cdot \mathbf{n}_e \}\!\!\} [\![v_h]\!]$$

$$+ \sigma \sum_{o \in \mathscr{C}} \int_{e} \frac{1}{h_{e}} \llbracket u \rrbracket \llbracket v_{h} \rrbracket;$$

- Fórmula de integracion por partes
- Simetría
- Coercitividad
- $\blacksquare L_h: \mathcal{S}_h \to \mathbb{R}, \underline{L_h(v_h)} := \int_{\Omega} f v_h.$

 $\blacksquare a_h^{\mathsf{sip}}: \mathcal{S}_{*h} \times \mathcal{S}_h \to \mathbb{R},$

$$a_{h}^{\mathsf{sip},\sigma}(u,v_{h}) := \sum_{K \in \mathcal{T}_{h}} \int_{K} \nabla_{h} u \nabla_{h} v - \sum_{e \in \mathcal{E}_{h}} \int_{e} \{\!\!\{ \nabla_{h} u \cdot \mathbf{n}_{e} \}\!\!\} [\![v_{h}]\!]$$
$$- \sum_{e \in \mathcal{E}_{h}} \int_{e} \{\!\!\{ \nabla_{h} v \cdot \mathbf{n}_{e} \}\!\!\} [\![u]\!]$$

$$\left[+\sigma \sum_{e \in \mathscr{E}_h} \int_e \frac{1}{h_e} \left[\! \left[u \right] \! \right] \left[\! \left[v_h \right] \! \right] \right];$$

- Fórmula de integracion por partes
- Simetría
- Coercitividad
- $\blacksquare L_h: \mathcal{S}_h \to \mathbb{R}, L_h(v_h) := \int_{\Omega} f v_h.$

Método de Penalización Interior Simétrica

■ Encontrar $u \in V$ tal que a(u, v) = L(v) para todo $v \in V$.



■ Encontrar $u_h \in \mathcal{S}_h$ tal que $a_h^{\mathsf{sip},\sigma}(u_h,v_h) = L_h(v_h)$ para todo $v_h \in \mathcal{S}_h$.



■ Resolver el sistema lineal $A^{sip}U^{sip} = F^{sip}$ donde:

$$U^{\text{sip}} = \left(U_1^{\text{sip}}, U_2^{\text{sip}}, \dots, U_{N_h^{\text{sip}}}^{\text{sip}}\right)^t \text{con } u_h = \sum_{i=1}^{N_h^{\text{sip}}} U_i^{\text{sip}} \phi_i;$$

¡Gracias por su atención!

Imágenes sobre el clima utilizadas:

- 1 Madrid 264 weather girl. David Holt, licencia CC-by-sa.
- 2 Isobaras. MediaCommons, User:Asierog, licencia CC-by-sa.
- NOAAWavewatch III 120-hour wind and wave forecast for the North Atlantic. Public domain.

—[Resolución matemática]—