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, 18 de enero de 2021

Índice

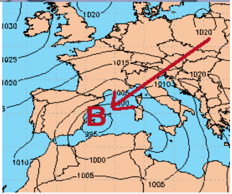
Sección 1

Modelización matemática mediante EDP

Modelos del clima

Modelos del clima

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



Modelo matemático (simplificado)

(ecuaciones de Navier-Stokes)

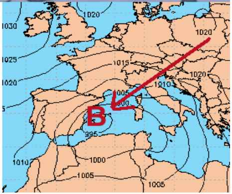
$$\begin{cases} \dfrac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u}\cdot\nabla)\mathbf{u} - \nu\Delta\mathbf{u} + \nabla p = \mathbf{f}, \\ \nabla\cdot\mathbf{u} = 0. \end{cases}$$

- Presión atmosférica
- Velocidad del fluido
- Análisis del modelo:

¿Existe solución? ¿Con qué características? $\longrightarrow$ Problema del milenio

Modelos del clima

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



Modelo matemático (simplificado)

(ecuaciones de Navier-Stokes)

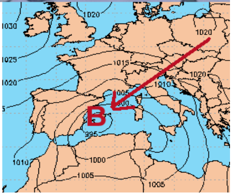
$$\left\{\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u}\cdot\nabla)\mathbf{u} - \nu\Delta\mathbf{u} + \nabla p = \mathbf{f}, \\ \nabla\cdot\mathbf{u} = 0. \end{aligned}\right.$$

- Presión atmosférica
- Velocidad del fluido
- Análisis del modelo:

¿Existe solución? ¿Con qué características? $\longrightarrow$ Problema del milenio

Modelos del clima

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



Modelo matemático (simplificado)

(ecuaciones de Navier-Stokes)

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

- Presión atmosférica
- Velocidad del fluido
- Análisis del modelo:

¿Existe solución? ¿Con qué características? $\longrightarrow$ Problema del milenio

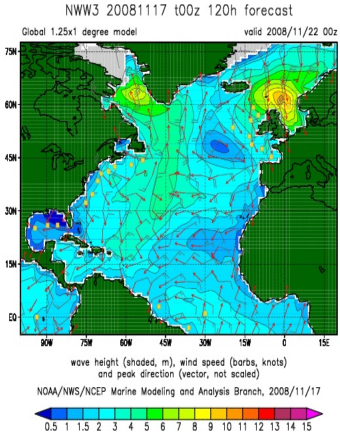
Modelos del clima

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

Modelo matemático (simplificado)

(ecuaciones de Navier-Stokes)

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



- Presión atmosférica
- Velocidad del fluido
- Análisis del modelo:

¿Existe solución? ¿Con qué características? $\longrightarrow$ Problema del milenio

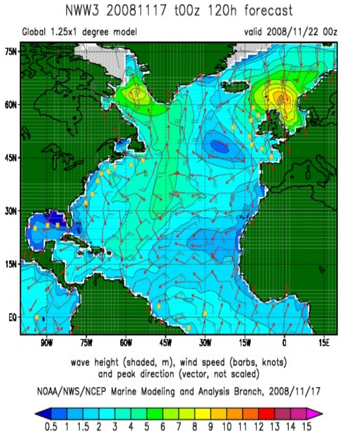
Modelos del clima

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

Modelo matemático (simplificado)

(ecuaciones de Navier-Stokes)

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



- Presión atmosférica
- Velocidad del fluido
- Análisis del modelo:

¿Existe solución? ¿Con qué características? $\longrightarrow$ Problema del milenio

Modelo de tsunami en la costa de Cádiz

Modelos biológicos

Modelos de tumores

Modelo de tumores

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

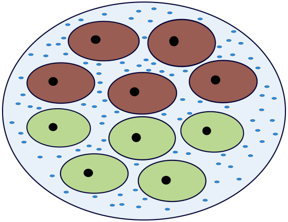


Figura: Interacción entre las cuatro especies.

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.

Modelo de tumores

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

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.
- $\mu_n = \frac{1}{\delta} n + \partial_n \chi(u, n)$ potencial químico de n.
- Desplazamiento de células tumorales $\longleftarrow$ **Términos de difusión cruzada.**
- Reacciones químicas células-nutrientes.

Modelo de tumores

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

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.
- $\mu_n = \frac{1}{\delta} n + \partial_n \chi(u,n)$ potencial químico de n.
- Desplazamiento de células tumorales $\longleftarrow$ **Términos de difusión cruzada**.
- Reacciones químicas células-nutrientes.

Modelo de tumores

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

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.
- $\mu_n = \frac{1}{\delta} n + \partial_n \chi(u,n)$ potencial químico de n.
- Desplazamiento de células tumorales $\longleftarrow$ **Términos de difusión cruzada.**
- Reacciones químicas células-nutrientes.

Crecimiento de un tumor con fuente de nutrientes

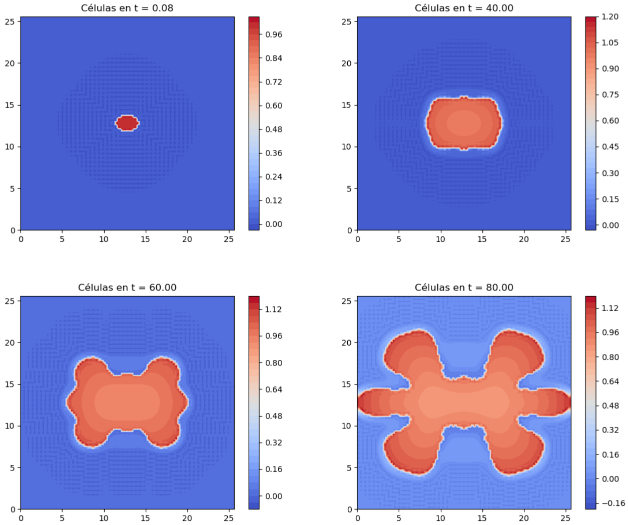


Figura: Representación de las células para la solución obtenida.

Agregación de tumores circulares

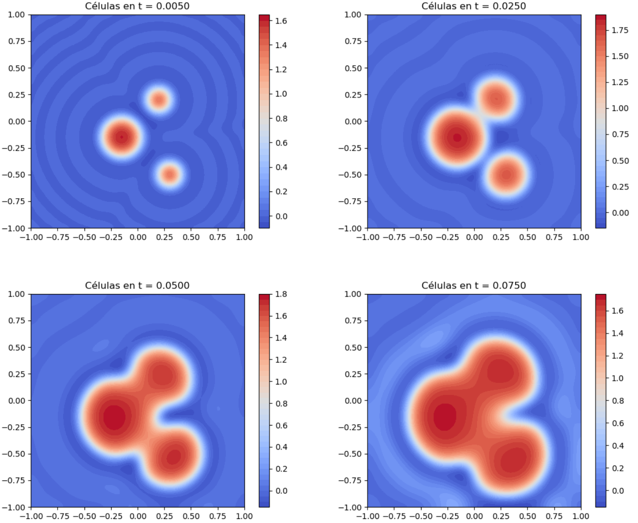


Figura: Representación de las células para la solución obtenida.

Modelos de migración celular

Modelo de migración celular

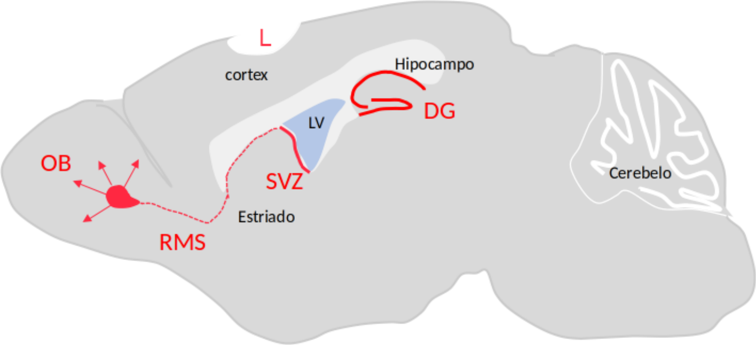


Figura: Esquema del movimiento de los neuroblastos por el cerebro de un roedor.

Sección 2

Resolución matemática

Problema elíptico

Problema modelo

Consideramos el problema de Poisson:

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

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

Formulación variacional continua

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

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

Problema variacional:

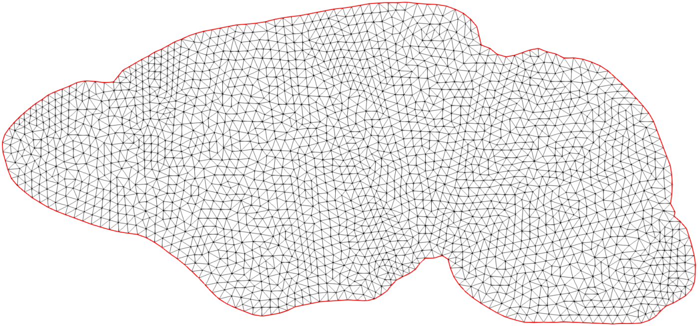
> encontrar $u \in H_0^1(\Omega)$ tal que $a(u, v) = L(v)$ para todo $v \in H_0^1(\Omega)$.

El problema modelo y su formulación variacional son equivalentes.

Malla de $\bar{\Omega}$

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

- $K_i \subseteq \bar{\Omega}$ para todo $i \in \{1, 2, \dots, N_{\mathscr{T}_h}\}$;
- $\operatorname{int}(K_i) \cap \operatorname{int}(K_j) = \varnothing$ para $i, j \in \{1, 2, \dots, N_{\mathscr{T}_h}\}$ con $i \neq j$;
- $\displaystyle\bigcup_{i=1}^{N_{\mathscr{T}_h}} K_i = \bar{\Omega}$.



Aproximaciones discretas

Método de los Elementos Finitos:

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

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

Métodos de Galerkin discontinuos:

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

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

Método de los Elementos Finitos

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

$$\Big\downarrow$$

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

$$\Big\Updownarrow$$

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

Método de Galerkin discontinuo

Primera idea:

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

$$\Big\downarrow \longleftarrow \text{¡ERROR!}$$

- Encontrar $u_h \in \mathcal{S}_h$ 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 $v \in V$.

$$\Big\downarrow$$

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

Método de Galerkin discontinuo

Primera idea:

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

$$\Big\downarrow \longleftarrow \text{¡ERROR!}$$

- Encontrar $u_h \in \mathcal{S}_h$ 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 $v \in V$.

$$\Big\downarrow$$

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

Forma bilineal SIP

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

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

  - Fórmula de integracion por partes
  - Simetría
  - Coercitividad

- $L_h : \mathcal{S}_h \to \mathbb{R}$, $L_h(v_h) := \int_\Omega f v_h$.

Forma bilineal SIP

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

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

  - Fórmula de integracion por partes
  - Simetría
  - Coercitividad

- $L_h : \mathcal{S}_h \to \mathbb{R}$, $L_h(v_h) := \int_\Omega f v_h$.

Forma bilineal SIP

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

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

$$\boxed{- \sum_{e\in\mathcal{E}_h} \int_e \{\!\{\nabla_h v \cdot \mathbf{n}_e\}\!\} [\![u]\!]}$$

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

  - Fórmula de integracion por partes
  - Simetría
  - Coercitividad

- $L_h : \mathcal{S}_h \to \mathbb{R}$, $L_h(v_h) := \int_\Omega f v_h$.

Forma bilineal SIP

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

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

$$- \sum_{e \in \mathcal{E}_h} \int_e \{\!\{\nabla_h v \cdot \mathbf{n}_e\}\!\} [\![u]\!]$$

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

  - Fórmula de integracion por partes
  - Simetría
  - Coercitividad

- $L_h : \mathcal{S}_h \to \mathbb{R}$, $L_h(v_h) := \int_\Omega f v_h$.

Método de Penalización Interior Simétrica

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

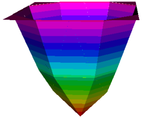
$$\Big\downarrow$$

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

$$\Big\Updownarrow$$

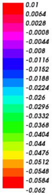
- Resolver el sistema lineal $A^{\text{sip}}\mathbf{U}^{\text{sip}} = \mathbf{F}^{\text{sip}}$ donde:
  - $A^{\text{sip}} = \left(A_{ij}^{\text{sip}}\right)_{i,j\in\left\{1,2,\ldots,N_h^{\text{sip}}\right\}}$ con $A_{ij}^{\text{sip}} = a_h^{\text{sip},\sigma}(\phi_j, \phi_i)$;
  - $\mathbf{U}^{\text{sip}} = \left(U_1^{\text{sip}}, U_2^{\text{sip}}, \ldots, U_{N_h^{\text{sip}}}^{\text{sip}}\right)^t$ con $u_h = \sum_{i=1}^{N_h^{\text{sip}}} U_i^{\text{sip}}\phi_i$;
  - $\mathbf{F}^{\text{sip}} = \left(F_1^{\text{sip}}, F_2^{\text{sip}}, \ldots, F_{N_h^{\text{sip}}}^{\text{sip}}\right)^t$ con $F_i^{\text{sip}} = L_h(\phi_i)$.

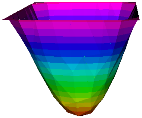
Soluciones numéricas



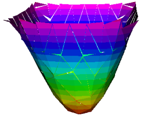
(a) Solución exacta.

(b) Solución discreta.



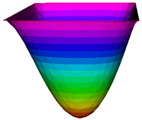


(c) Solución exacta.

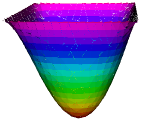


(d) Solución discreta.

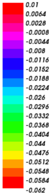
Figura: A la izquierda $h \approx \frac{1}{4}$. A la derecha $h \approx \frac{1}{8}$.

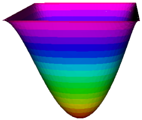


(a) Solución exacta.

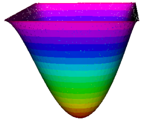


(b) Solución discreta.





(c) Solución exacta.



(d) Solución discreta.

Figura: A la izquierda $h \approx \frac{1}{16}$. A la derecha $h \approx \frac{1}{32}$.

Problema hiperbólico

Problema modelo

Consideramos el problema de convección-reacción:

$$\begin{cases} \beta \cdot \nabla u + \mu u = f & \text{en } \Omega, \\ u = 0 & \text{en } \partial\Omega^-, \end{cases}$$

donde

- $\partial\Omega^- = \{x \in \partial\Omega \colon \beta(x)\mathbf{n}(x) < 0\}$,
- $\mu \in L^\infty(\Omega)$,
- $\beta \in [\mathrm{Lip}(\Omega)]^d$,
- $f \in L^2(\Omega)$.

Asumimos que existe $\mu_0 > 0$ tal que $\mu - \dfrac{1}{2}\nabla \cdot \beta \geq \mu_0$ en Ω.

Formulación variacional continua

Espacio de soluciones: V (espacio de los grafos).

- $a\colon V \times V \to \mathbb{R}$,

$$a(u,v) := \int_\Omega (\beta \cdot \nabla u)v + \int_\Omega \mu uv + \int_{\partial\Omega} (\beta \mathbf{n})^- uv;$$

- $L\colon V \to \mathbb{R}$,

$$L(v) := \int_\Omega fv.$$

Problema variacional:

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

- El problema modelo y su formulación variacional son equivalentes en V.

- Existe solución y es única.

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

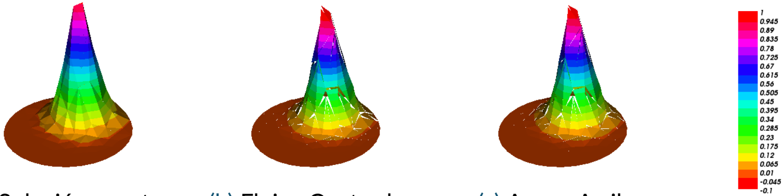
$$\downarrow$$

- Encontrar $u_h \in \mathcal{S}_h$ tal que $a_h^{\mathrm{DG}}(u_h, v_h) = L_h(v_h)$ para todo $v_h \in \mathcal{S}_h$.

$$\Updownarrow$$

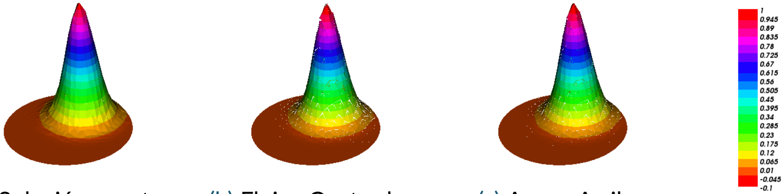
- Resolver el sistema lineal $A^{\mathrm{DG}}\mathbf{U}^{\mathrm{DG}} = \mathbf{F}^{\mathrm{DG}}$ donde:
  - $A^{\mathrm{DG}} = \left(A_{ij}^{\mathrm{DG}}\right)_{i,j\in\left\{1,2,\ldots,N_h^{\mathrm{upw}}\right\}}$ con $A_{ij}^{\mathrm{DG}} = a_h^{\mathrm{DG}}(\phi_j, \phi_i)$;
  - $\mathbf{U}^{\mathrm{DG}} = \left(U_1^{\mathrm{DG}}, U_2^{\mathrm{DG}}, \ldots, U_{N_h^{\mathrm{DG}}}^{\mathrm{DG}}\right)^t$ con $u_h = \sum_{i=1}^{N_h^{\mathrm{DG}}} U_i^{\mathrm{DG}}\phi_i$;
  - $\mathbf{F}^{\mathrm{DG}} = \left(F_1^{\mathrm{DG}}, F_2^{\mathrm{DG}}, \ldots, F_{N_h^{\mathrm{DG}}}^{\mathrm{DG}}\right)^t$ con $F_i^{\mathrm{DG}} = L_h(\phi_i)$.

Donde $a_h^{\mathrm{DG}}(u_h, v_h) = a_h^{\mathrm{cf}}(u_h, v_h)$ (flujos centrados) o $a_h^{\mathrm{upw}}(u_h, v_h)$ (flujos aguas arriba).



(a) Solución exacta. (b) Flujos Centrados. (c) Aguas Arriba.

Figura: Gráficas obtenidas con $h \approx \frac{\pi}{16}$.



(a) Solución exacta. (b) Flujos Centrados. (c) Aguas Arriba.

Figura: Gráficas obtenidas con $h \approx \frac{\pi}{32}$.

¡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.
3. NOAAWavewatch III 120-hour wind and wave forecast for the North Atlantic. Public domain.