

# Trabajo práctico 1

## Sistemas complejos en máquinas paralelas

2do Cuatrimestre 2015

En el siguiente trabajo práctico se presentan dos propuestas, de las cuales cada grupo elegirá una, o bien podrá presentar su propia propuesta, la cual deberá ser aprobada por la cátedra. Los grupos estarán compuestos de hasta dos personas, y tendrán que registrarse en el siguiente link junto al tema elegido. Se recomienda fuertemente que los grupos estén compuestos por miembros de diferentes disciplinas. La entrega será el día 24 de Noviembre, en horario de práctica, cada grupo realizará además una pequeña exposición (15-20 min.) acerca de lo resuelto en todos los trabajos prácticos. Particularmente, para el actual trabajo se deberá entregar un sucinto informe, preferentemente en latex, con la estructura a continuación:

1. Portada
2. Introducción acerca de la problemática a resolver
3. Modelo matemático del problema:
  - (a) Ecuaciones: se deberá clasificarlas (ej: ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, no lineales, inhomogéneas, hiperbólicas de orden 2)
  - (b) Explicar interpretación (física/química/biológica) de cada términos (ej: transitorio, difusivo, convectivo, fuente, etc.)
  - (c) Condiciones de contorno e iniciales
  - (d) Valor de las constantes
4. Discretización e implementación:
  - (a) Explicación del método elegido
  - (b) Mostrar qué tipo de discretización se aplicó a cada término
  - (c) Esquema numérico obtenido
  - (d) Condición de estabilidad (si la posee)
  - (e) Variables numéricas usadas (ej:  $\Delta t$ ,  $\Delta x$ ,  $r$ , tolerancia)
  - (f) Cálculo de la convergencia del sistema de ecuaciones
  - (g) Herramientas de software usadas (ej: C++, g++, Octave, Matlab, Matplotlib, Paraview, etc)
  - (h) Problemas surgidos durante la discretización e implementación (ej: dificultades para convergencia, estabilidad, presentación de oscilaciones, cambio de discretización, NaNs, segmentation faults, off-by-one errors, typos, etc.)
5. Resultados obtenidos
  - (a) Descripción de resultados
  - (b) Gráficos (con etiquetas en los ejes, barra de colores, referencias, etc.)
  - (c) Adjuntar video
6. Bibliografía

## Propuestas

1. El glioma es el tumor cerebral primario más común y sin embargo prácticamente incurable debido principalmente a su gran capacidad invasiva, lo cual representa un desafío a la neurooncología. El tratamiento actual en la mayoría de los casos se conforma de una combinación de cirugía, quimioterapia y radioterapia. Se están desarrollando modelos matemáticos tendientes a determinar mejor el área de infiltración tumoral en forma paciente-específica, así como el efecto de posibles terapias. Se pide resolver numéricamente el siguiente modelo matemático en pos de tratar de predecir la evolución de un glioma en el cerebro humano y los efectos inducidos por la aplicación de la radioterapia (no se modela cirugía ni quimioterapia).

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla C) + \rho C \ln\left(\frac{C_m}{C}\right) - R(s, C) \quad (1)$$

$$R(s, C) = (1 - s) C \ln\left(\frac{C_m}{C}\right) \quad (2)$$

$$s = e^{-\alpha \text{ dose} - \beta \text{ dose}^2} \quad (3)$$

La ecuación (1) puede escribirse de la siguiente forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( D \frac{\partial C}{\partial z} \right) + \rho C \ln\left(\frac{C_m}{C}\right) - R(s, C) \quad (4)$$

Donde  $x, y, z$  y  $t \geq 0$  son las variables espacial y temporal respectivamente.  $C = C(x, y, z, t)$  la concentración de células de glioma. En la primer ecuación, el término del lado izquierdo es la tasa de cambio, del lado derecho, el primer término representa la infiltración tumoral (a través de un término difusivo), el segundo la proliferación neta, y el tercero la pérdida de células tumorales debido a la radioterapia.  $C_m = 1.10^8$  células/mm<sup>3</sup> es la concentración máxima de células.  $\rho = 0.107$  células/día es la tasa neta de proliferación celular para sustancia gris y blanca. En otro caso  $\rho = 0$ .  $\alpha = 0.036$  1/Gy y  $\beta = 0.0036$  1/Gy<sup>2</sup> corresponden a lesiones letales causadas por roturas en cadenas de ADN simples y dobles, respectivamente.  $\text{dose} = 1.8$  Gy es la dosis suministrada.  $D = D(x, y, z)$  la difusión de la concentración tumoral en la sustancia gris y blanca del cerebro. La cátedra proveerá un archivo csv cuyo contenido es una matriz de tres dimensiones (181x217x181 mm) donde el valor de cada celda debe ser transformado de la siguiente forma para obtener el valor del coeficiente de difusión en ese punto:

Entre 110 y 225: sustancia blanca.  $D = 0.255$  mm<sup>2</sup>/día

Entre 75 y 110: sustancia gris.  $D = 0.051$  mm<sup>2</sup>/día

Otro caso:  $D = 0$

El dominio del problema es un cubo donde está alojada la representación digital de un cerebro humano. Condiciones iniciales:  $C(x, y, z, 0) = 0$  en todo el dominio, excepto en una esfera de radio 3cm centrada en un punto elegido por usted, que representa al esferoide seminal, el mismo debe estar en materia gris o blanca,  $C(x_0, y_0, z_0, 0) = C_m/2$ . Condiciones de contorno: en los bordes del cubo se aplicarán condiciones de neumann  $\nabla C \cdot \hat{n} = 0$ .

Nota: El gray (símbolo Gy) es una unidad derivada del Sistema Internacional de Unidades que mide la dosis absorbida de radiaciones ionizantes por un determinado material.  $Gy = \frac{J}{kg}$ .