

PROGRAMUL CERCETARE DE EXCELENTA 2005 - 2008

CEEX-05-D11-25/5.10.2005

MODELARE MATEMATICA IN PROCESE DE DIFUZIE

Prezentarea proiectului

Obiectivul general al acestui proiect a fost modelarea matematica a unor procese de difuzie, studiul functional si metode numerice de rezolvare. Realizarea proiectului a comportat atat cercetarea fundamentala privind modele generale de difuzie cat si analiza unor modele particulare de importanta majora in stiinte si inginerie.

Proiectul a cuprins studiul calitativ al fiecarui tip de model (existenta, unicitate, proprietati ale solutiilor, etc.) si dezvoltarea unor metode numerice pentru rezolvarea ecuatiilor si validarea rezultatelor. In mod special s-a insistat pe diferitele tipuri de neliniaritati din modelele de difuzie care datorita complexitatii lor matematice au ridicat probleme interesante si au condus la noi rezultate semnificative. Consideram ca rezultatele investigatiilor noastre teoretice si numerice constituie suportul unor aplicatii in biologie, medicina si in proiectarea si managementul resurselor naturale.

Cercetarea a fost desfasurata de patru parteneri (Institutul de Statistica Matematica si Matematica Aplicata, Universitatea Politehnica Bucuresti, Universitatea Ovidius Constanta si Universitatea din Pitesti) si a avut in vedere atingerea urmatoarelor obiective principale:

- 1 Modelare si studiul calitativ al modelelor de difuzie
- 2 Tehnici numerice, algoritmi, simulare numerica si validare.
- 3 Analiza comparativa a proceselor de difuzie discrete si continue.

Coordonatorul (ISMMA) s-a preocupat in special de aspectele pur matematice ale proiectului. Astfel, a dezvoltat un studiu functional al unor modele de difuzie in medii poroase neomogene. Au fost introduse modele matematice de difuzie in medii poroase cu porozitate variabila, pe baza unor ipoteze privind comportamentul functiilor lege constitutiva si conductivitate a mediului poros in vecinatatea punctului de saturatie. Pornind de la ecuatia lui Richards', s-au construit modele de difuzie care se incadreaza in cele trei clase specifice si anume: difuzie lenta, difuzie rapida si superdifuzie. S-a analizat modelul de difuzie rapida, care reprezinta un caz singular, acela al exploziei coeficientului de difuzie. Au fost analizate diverse tipuri de conditii la limita dar s-a insistat pe un caz reprezentativ, cu flux neomogen pe o parte a frontierei si Robin pe restul frontierei. S-a extins studiul functional si la probleme degenerate, acestea constand in analiza unei inecuatii variationale degenerate care a fost redusa la o incluziune multivoca intr-un spatiu Hilbert. De asemenea au fost studiate modele de difuzie cu

PROGRAMUL CERCETARE DE EXCELENȚA 2005 - 2008

histerezis, fiind analizat complet modelul reprezentativ al infiltrației apei în soluri. Pentru toate aceste modele s-a stabilit existența, unicitatea și alte proprietăți ale soluției prin tehnici din teoria ecuațiilor de evoluție cu operatori neliniari în spații Hilbert.

Tehnica de integrare numerică dezvoltată în cadrul parteneriatului a fost validată, de către Coordonator și Partenerul 1, prin analiză comparativă cu rezultatele de simulare numerică obținute prin implementarea modelului matematic în mediul de dezvoltare multifizică COMSOL – bazat pe metoda elementului finit, în formularea Galerkin. Testele efectuate se referă la infiltrarea apei sau evaporarea, într-un mediu poros nesaturat, considerându-se ambele tipuri de condiții la limită: Dirichlet sau Robin. Rezultatele obținute au demonstrat că cele două metode propuse sunt performante și robuste.

Coordonatorul a dezvoltat tehnici numerice, studiind aproximarea numerică a unei clase de procese de difuzie rapidă, cu aplicații la mișcarea apei prin medii poroase nesaturate. Schema de aproximare utilizează metoda volumelor de control pentru discretizarea operatorilor de derivare spațială în timp ce operatorul de derivare în raport cu timpul își păstrează caracterul continuu. În acest mod soluția ecuațiilor cu derivate este aproximată de soluția unor sisteme de ecuații diferențiale ordinare. Se definește o schema de aproximare a termenilor difuzivi și convectivi și pentru aceste scheme se demonstrează că sistemul diferențial este quasimonoton. Pentru această clasă de modele discrete se demonstrează existența unui principiu de comparație și se arată că soluția este marginită cu margini independente de pasul rețelei spațiale. Integrarea numerică în raport cu timpul utilizează o schemă implicată de ordin superior cu pasul de timp adaptabil. Sunt prezentate câteva rezultate numerice privind infiltrația apei prin medii poroase stratificate.

Partenerul 1 a studiat următoarele modele:

1. Modelarea difuziei curenților transmembranari și a tensiunii membranare în sinapsa nicotinică.

Modelele fizice și matematice elaborate și integrate numeric se referă la potențialul de acțiune: depolarizarea, respectiv polarizarea inversă a celor două fețe ale membranei celulare (în comparație cu membrana depolarizată) ale axonului terminal, cu deschiderea consecutivă a canalelor de calciu dependent de tensiunea transmembranară, precum și de apariția unui influx de calciu în neuron. Acest model a fost implementat și rezolvat numeric folosind mediul de dezvoltare-cercetare Mathematica. Au fost utilizate tehnici și algoritmi de integrare pentru ecuații diferențiale ordinare, precum și unele clase de ecuații cu derivate parțiale – care sunt un set de ecuații diferențialo-algebrice (DAE), cu condiții la limită liniare. În acest formalism algoritmic, soluțiile sunt reprezentate prin funcții de interpolare, care produc aproximații ale soluției pentru un suport de dimensiune finită. Algoritmii de ordinul I și II implementați (de tip Euler: explicit, cu punct median, implicit, implicit liniar; trapezoidal (Lobatto); punct median implicit; implicit și explicit RungeKutta; metode de extrapolare și proiecție) permit definirea unei strategii de

PROGRAMUL CERCETARE DE EXCELENȚA 2005 - 2008

rezolvare care asigură controlul optim al ratei de convergență, în limitele de acuratețe numerică acceptată.

2. Modelarea proceselor de difuzie specifice activității electrice cardiace – simularea numerică a ritmului cardiac normal și a unor aritmii.

Modelul matematic dezvoltat simulează comportamentul normal și aritmic al unui șir de celule miocardice. În particular, am urmărit simularea transmiterii potențialului de acțiune – prin difuzie nestaționară – după o direcție spațială, respectiv în lungul unui șir de celule ale miocardului ventricular. Modelul elaborat a fost integrat numeric în mediul de cercetare-dezvoltare MATLAB. Partea spațială a ecuației diferențiale cu derivate parțiale neliniară a fost discretizată în metoda diferențelor finite, iar partea temporală a fost tratată cu o schema Crank-Nicolson pentru urmărirea procesului dinamic. Sistemul de ecuații algebrice rezultat, cu matricea coeficienților tridiagonală, se rezolvă cu algoritmul Thomas, iar ecuațiile diferențiale care descriu dinamica parametrilor fizici de control au fost integrate numeric folosind metoda Euler directă. Pașii de timp, k , și pașii de rețea, h , au fost stabiliți în condițiile satisfacerii criteriului de stabilitate $h^2/k > 2D$, unde D este coeficientul de difuzie. Stimulul utilizat în toate simulările este de tipul densității de curent injectat prin membrana, având forma de undă a unui puls dreptunghiular, cu amplitudine și durată specificate. Modelul elaborat a permis simularea funcționării normale a celulelor miocardului ventricular, precum și aritmia cardiacă de alternanță concordantă și alternanță discordantă.

3. Modelarea matematică a Difuziei, Convecției și Reacției Moleculilor de ADN într-un canal microfluidic

Combinarea tehnologiilor de tip microarray cu sisteme lab-on-a-chip oferă posibilitatea integrării într-un singur dispozitiv medical cât și a automatizării tuturor pașilor necesari în procesul de diagnostic molecular (fragmentarea celulelor, extragere ADN, amplificarea ADN prin reacția de polimerizare în lanț – PCR, hibridizare, rezultat clinic). Astfel de dispozitive implică o rețea de microcanale și un sistem de pompare și reglare a fluxului de fluid necesar fiecărei etape. În ceea ce privește reacția de hibridizare ADN, fenomenele fizico-chimice sunt complexe iar interacțiunea dintre ele afectează performanțele sistemului cum ar fi rata de creștere a concentrației hibridului și eficiența hibridizării (procentul de molecule hibridizate din totalul de molecule proba când reacția ajunge la echilibru). Din acest motiv este de dorit o cunoaștere fundamentală a impactului transportului convectiv și difuziv asupra reacției de hibridizare. În acest sens, studiul de față prezintă un model matematic multifizic al convecției, difuziei și reacției moleculelor de ADN într-un canal microfluidic.

4. Analiza numerică a unei celule de combustie cu membrană polimer cu curgere interdigitată

Modelul (multi)fizic adoptat este alcătuit din: *modelul Darcy* pentru curgerea transversală în electrozi și electrolit; *modelul electrocinetic* pentru câmpul electric în electrozi și membrană; *modelul convecție-difuzie Maxwell – Stephen* pentru transportul de masă în electrozi. În analiza pe care o propunem variabilele primitive sunt potențialul electric,

PROGRAMUL CERCETARE DE EXCELENTA 2005 - 2008

câmpurile de viteză și presiune și concentrație pentru hidrogen, oxigen, azot și apă. Modelul este presupus izoterm, prin urmare proprietățile fizice sunt independente de temperatură.

În conformitate cu cele prevăzute în Planul de Realizare a proiectului, Partenerul 2 – UOC a avut ca activitate principală de cercetare elaborarea, analiza conceptuală și implementarea software ale unor categorii de algoritmi numerici pentru rezolvarea eficientă a unor clase de probleme de difuzie. S-au construit în acest sens un algoritm de tip Gauss-Seidel neliniar cu direcții alternante (ALGS) și un algoritm multigrid neliniar de tip Full Approximation Storage (MG-FAS). Ideea algoritmului ALGS este de a considera coloane succesive ale discretizării, determinând valorile necunoscute în punctele de pe coloana fixată în funcție de valorile, deja modificate de pe coloanele considerate anterior și cele încă nemodificate de pe celelalte coloane. Pentru fiecare coloană se rezolvă un sistem tridiagonal. Algoritmul MG-FAS, folosește maxim 4 nivele succesive de discretizare și are următoarea structură: (i) ciclu de tip V; (ii) relaxare prin metoda Gauss-Seidel alternată pe linii (înainte de corecție se fac 2 pași de relaxare și după, unul); (iii) interpolarea este de tip biliniar (pentru corecții); (iv) operatorul de restricție a reziduuului este de tip "full weighting". Implementarea algoritmilor de rezolvare s-a realizat în limbajul FORTRAN, iar pentru prezentarea și analiza grafică a rezultatelor s-au folosit componente ale produsului software MATLAB. S-a realizat astfel un mediu de dezvoltare software interactiv, ce da posibilitatea analizei comparative a diferitelor probleme și condiții la limită considerate.

Clasele de probleme de difuzie analizate au fost următoarele:

1. O variantă simplificată a problemei adimensionalizate de transport în medii poroase (unde $g(x, y) \leq 1$ este de tip Dirac, iar Pe este numărul Peclet), cu forma generală

$$-\Delta u(x, y) + Pe \frac{\partial u}{\partial x} + \beta(x, y)u(x, y) = 0, \beta(x, y) = \begin{cases} Da, (\text{Damkholer number}) \\ Da \cdot g(x, y) \end{cases}$$

2. O problemă ce modelează un fenomen de infiltrație într-un mediu poros izotrop, omogen, nesaturat și cu porozitatea constantă, cu forma generală

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (\beta(u) \nabla u) + \frac{\partial K(u)}{\partial y} = f(x, y)$$

unde $u(x, y)$ este conținutul de fluid (adimensionalizat), cu difuzivitatea și conductivitatea hidraulică

$$\beta(u) = \frac{c(c-1)}{(c-u)^2}, c \in (1, \infty) \quad K(u) = \frac{(c-1)u^2}{c-u}, c \in (1, \infty)$$

Condițiile pe frontieră au fost de tip Dirichlet sau Robin, iar problema 2 a fost analizată și în cazul mediilor poroase eterogene.

Pentru validarea celor doi algoritmi de calcul și a mediului de dezvoltare software interactiv realizat, rezultatele obținute (valori și reprezentări grafice) au fost comparate cu cele ale Partenerului 1, care a utilizat în acest sens produsul software COMSOL. Această probă prezintă precizia și robustețea algoritmilor elaborați de Partenerul 2 - UOC.

PROGRAMUL CERCETARE DE EXCELENTA 2005 - 2008

Noutatea si eficienta algoritmilor propusi sunt certificate de lucrarile publicate (in reviste cotate ISI sau recunoscute CNCSIS) si comunicate (la manifestari stiintifice nationale si internationale de prestigiu) pe parcursul desfasurarii proiectului (precizate in fiecare Raport Intermediar de Activitate).

Studiile întreprinse de Partenerul 3 au fost îndreptate în special în direcția aplicațiilor pe care noțiunea de varietate inerțială aproximativă îl are în construcția unor aproximări ale soluțiilor ecuațiilor parabolice semiliniare, în particular ale unor ecuații de difuzie. Partenerul 3 a elaborat o varianta nouă a “metodei Galerkin neliniare”, varianta care prezintă mai multe avantaje față de cea deja existentă în literatura științifică: o mai buna structurare a calculelor, economie de memorie, un număr mai mic de calcule.

Pentru toate acestea se pastreaza ordinul de mărime al erorii din metoda nelinară Galerkin clasică. Noua metodă este expusă pentru ecuațiile Navier-Stokes bi-dimensionale. Metoda a fost aplicată la găsirea soluțiilor aproximative pentru o problemă simplă de difuzie , anume difuzia unei substanțe într-un lichid Newtonian (cazul mișcării nestaționare), în cadrul modelului Fickean de difuzie. Metoda se poate extinde la probleme de difuzie neliniară, ca și la alte probleme de tip parabolic.

Pe lângă domeniul de cercetare prezentat mai sus, Partenerul 3 a colaborat cu Coordonatorul la realizarea unui studiu privind difuzia neFickeană și la realizarea unui studiu privind metodele numerice pentru ecuații de evoluție.

Modul de atribuire si exploatare a drepturilor de proprietate

Pentru lucrările deja publicate sau in curs de publicare drepturile de autor sunt cedate editorului, iar pentru preprinturi și pentru lucrările comunicate la conferințe și nepublicate, dreptul de autor aparține autorului.

Elemente de dezvoltare economica

Impact economic si social:

- mentinerea si extinderea colaborarilor europene si atragerea cercetarii romanesti in circuitul mondial de valori
- introducerea unor domenii noi de instruire a studentilor care sa le permita sa faca fata noilor provocari de pe piata muncii
- scurtarea ciclului proiectare, testare, executie prin utilizarea mecanicii computationale
- imbunatatirea actului de predare si instruire in activitatea didactica
- reducerea emigrarii inteligentei romanesti prin includerea in proiect a unor doctoranzi si masteranzi
- managementul si protectia resurselor de apa subterana