

POLITECNICO DI TORINO

Corso di Laurea Magistrale
in Ingegneria Matematica

Tesi di Laurea Magistrale

**Metodi numerici semi-Lagrangiani per problemi di
trasporto-diffusione non lineari**



Relatori

Prof.ssa Chiara Giverso
Prof. Adriano Festa

Candidato

Stefano Peirone

Anno Accademico 2021-2022

A mia madre e Anna

Sommario

Nella presente tesi viene applicato un metodo numerico semi-Lagrangiano per risolvere modelli matematici di natura biologica. I modelli in esame descrivono fenomeni di migrazione cellulare attraverso membrane sottili, le quali vengono trattate come un dominio di spessore ridotto rispetto all'ambiente circostante oppure come interfacce sulle quali sono imposte appropriate condizioni di attraversamento. Lo scopo di questo lavoro di tesi è ottenere validazioni numeriche di tali modelli e sviluppare un codice adatto alla simulazione di questi processi.

Il metodo semi-Lagrangiano utilizzato si basa su due passaggi fondamentali per lo studio di fenomeni evolutivi: la costruzione di curve caratteristiche che descrivono lo spostamento di informazioni nel piano delle fasi e l'uso di un interpolatore per ricostruire nel punto di partenza di ogni caratteristica l'informazione trasportata. Un vantaggio di questo metodo numerico è l'indipendenza dei due passi che lo costituiscono, i quali possono essere sviluppati attingendo ai numerosi schemi presenti in letteratura riguardo la teoria del metodo delle caratteristiche e le tecniche di interpolazione. Nato per lo studio di fenomeni a convezione dominante, il metodo è stato espanso da diversi autori in lavori successivi per trattare fenomeni diffusivi e per gestire la presenza di condizioni al contorno di varia natura. La teoria necessaria per lo studio di problemi convettivi e di condizioni al contorno di Dirichlet è tratta dai libri di [Fletcher \[2020\]](#) e [Durrant \[1999\]](#), lo schema numerico per sviluppare processi diffusivi proviene dal lavoro di [Bonaventura and Ferretti \[2014\]](#) e lo schema usato per gestire condizioni al contorno di Neumann è ripreso dall'articolo di [Calzola et al. \[2021\]](#). Gli schemi trattati sono stati implementati utilizzando il software di calcolo numerico Matlab e l'algoritmo è stato testato su opportuni problemi benchmark con soluzione nota, in modo da verificarne la correttezza e le proprietà teoriche trattate nel materiale di riferimento.

Nella seconda parte di questo lavoro di tesi, i codici sviluppati sono stati applicati ad un problema di interesse biologico. In particolare, il problema studiato riguarda il moto di cellule attraverso una membrana sottile che separa tra loro due regioni di spazio. Questo processo biologico costituisce una dinamica alla base di molti processi fisiologici e patologici, come accade ad esempio durante la crescita, l'immunosorveglianza, l'invasione di cellule tumorali e la fibrosi. Poiché in molti studi la membrana può presentare uno spessore molto più piccolo rispetto alla scala spaziale del dominio in esame, la sua descrizione come regione sottile nel dominio tramite metodi numerici può risultare computazionalmente onerosa. Per ovviare a questo, in [Chaplain et al. \[2019\]](#) partendo da un modello continuo con membrana sottile viene proposta una riformulazione del problema

in cui la membrana viene rappresentata tramite un'interfaccia effettiva, su cui vengono imposte delle condizioni di attraversamento tali da riprodurre la dinamica generata dalla membrana stessa. Il modello proposto da [Chaplain et al. \[2019\]](#) si concentra sullo studio di cellule appartenenti ad un'unica popolazione omogenea. Questo modello è stato quindi espanso da [Givero et al. \[2021\]](#) per trattare la migrazione di cellule appartenenti a popolazioni diverse attraverso membrane sottili rappresentabili da un'interfaccia effettiva. Il metodo semi-Lagrangiano è stato quindi utilizzato per riprodurre le simulazioni ottenute con un codice commerciale (COMSOL Multiphysics®) nel lavoro originale di [Chaplain et al. \[2019\]](#). Queste ultime sono state utilizzate come riferimento per testare l'applicabilità del metodo semi-Lagrangiano allo studio della migrazione cellulare attraverso una membrana, sia che questa venga descritta come una regione sottile di spazio sia che venga trattata tramite un'interfaccia efficace. Successivamente, è stato applicato il metodo semi-Lagrangiano per studiare alcune situazioni di interesse biologico riguardanti due popolazioni cellulari (caratterizzate da motilità e proliferazione differenti). Le simulazioni numeriche proposte forniscono una validazione al modello teorico ideato da [Givero et al. \[2021\]](#) e possono essere utilizzate per simulare processi di compartimentalizzazione e invasione di opportune popolazioni cellulari nell'ambiente circostante.

Ringraziamenti

Un ringraziamento alla mia relatrice prof.ssa Chiara Giverso per avermi seguito con estrema disponibilità e tempestività ad ogni mia richiesta, per avermi fornito materiale utile alla stesura dell'elaborato e per le conoscenze che mi ha trasmesso durante questi mesi di lavoro.

Grazie anche al mio correlatore prof. Adriano Festa per il prezioso supporto, per i consigli pratici e per avermi suggerito le giuste modifiche da apportare alla mia tesi.

Indice

Elenco delle figure	8
1 I metodi semi-Lagrangiani	13
1.1 Introduzione	13
1.2 Caso lineare uniforme	14
1.2.1 Trasporto	14
1.2.2 Diffusione	34
1.3 Caso non uniforme	38
1.3.1 Trasporto	38
1.3.2 Diffusione	39
1.4 Condizioni al contorno	40
1.4.1 Dirichlet	40
1.4.2 Neumann	42
1.4.3 Simulazioni numeriche	44
2 Applicazione ad un problema biologico	49
2.1 Introduzione	49
2.2 Modello biologico ad una popolazione cellulare	50
2.3 Risultati numerici del modello ad una popolazione cellulare	55
2.4 Modello biologico con molteplici popolazioni cellulari	62
2.5 Risultati numerici del modello con molteplici popolazioni cellulari	68
Conclusioni e sviluppi futuri	81
Appendice: codice Matlab utilizzato	83

Elenco delle figure

1.1	Trasporto di una curva a campana (1.8) con $\Delta x=0.1$, $\Delta t=0.15$, $c=1$, CFL=1.5 e interpolazione lineare	16
1.2	Trasporto di una curva a campana (1.8) con $\Delta x=0.1$, $\Delta t=0.15$, $c=1$, CFL=1.5 e interpolazione quadratica	16
1.3	Trasporto di una curva a campana (1.8) con $\Delta x=0.1$, $\Delta t=0.15$, $c=1$, CFL=1.5 e interpolazione cubica	17
1.4	Trasporto di un'onda quadra (1.9) con $\Delta x=0.1$, $\Delta t=0.15$, $c=1$, CFL=1.5 e interpolazione lineare	17
1.5	Trasporto di un'onda quadra (1.9) con $\Delta x=0.1$, $\Delta t=0.15$, $c=1$, CFL=1.5 e interpolazione quadratica	18
1.6	Trasporto di un'onda quadra (1.9) con $\Delta x=0.1$, $\Delta t=0.15$, $c=1$, CFL=1.5 e interpolazione cubica	18
1.7	Confronto tra la soluzione esatta di un problema di trasporto di una curva a campana (1.8) con $c = 1$ al tempo $t = 40$ e quelle ottenute usando interpolazione lineare con diversi valori di CFL	19
1.8	Confronto tra la soluzione esatta di un problema di trasporto di una curva a campana (1.8) con $c = 1$ al tempo $t = 40$ e quelle ottenute usando interpolazione quadratica con diversi valori di CFL	19
1.9	Confronto tra la soluzione esatta di un problema di trasporto di una curva a campana (1.8) con $c = 1$ al tempo $t = 40$ e quelle ottenute usando interpolazione cubica con diversi valori di CFL	20
1.10	Fattore di amplificazione in funzione di α al variare della frequenza $k\Delta x$ nel caso di interpolazione lineare	27
1.11	Frequenza relativa in funzione della frequenza $k\Delta x$ al variare di p nel caso di interpolazione lineare	27
1.12	Fattore di amplificazione in funzione di α al variare della frequenza $k\Delta x$ nel caso di interpolazione quadratica	28
1.13	Frequenza relativa in funzione della frequenza $k\Delta x$ al variare di p nel caso di interpolazione quadratica	28
1.14	Fattore di amplificazione in funzione di α al variare della frequenza $k\Delta x$ nel caso di interpolazione cubica	29
1.15	Frequenza relativa in funzione della frequenza $k\Delta x$ al variare di p nel caso di interpolazione cubica	29

1.16	Rappresentazione del moto casuale di particelle che partono dal nodo x_j al tempo t^n . Al tempo t^{n+1} si ottiene uno spostamento medio verso sinistra e verso destra pari a δ secondo la relazione $\delta = \sqrt{2\Delta t\mu}$	35
1.17	Diffusione di una curva a campana (1.8) con $\mu=1$, $\Delta x=0.5$, $\Delta t=0.1$ e interpolazione lineare	35
1.18	Diffusione di una curva a campana (1.8) con $\mu=1$, $\Delta x=0.5$, $\Delta t=0.1$ e interpolazione quadratica	36
1.19	Diffusione di una curva a campana (1.8) con $\mu=1$, $\Delta x=0.5$, $\Delta t=0.1$ e interpolazione cubica	36
1.20	Estensione del dominio tramite i ghost nodes x_{-1} e x_{-2} per includere la base \tilde{x}_1 della caratteristica che oltrepassa il bordo sinistro x_{sx}	41
1.21	Troncatura della caratteristica con base \tilde{x}_1 oltre il bordo del dominio, identificando un'intersezione (x_{sx}, \tilde{t}) col bordo stesso	42
1.22	Riflessione speculare della caratteristica che interseca il bordo con condizione di Neumann omogenea, identificando una base \tilde{x}_1 interna al dominio	43
1.23	Alterazione della caratteristica che oltrepassa il limite del dominio con condizione di Neumann non omogenea, riposizionando la base \hat{x}_1 a una distanza \tilde{d}_1 dal bordo data dall'espressione (1.86)	44
1.24	Diffusione lineare con forzante lineare e condizioni al contorno di Dirichlet	46
1.25	Diffusione lineare con forzante lineare e condizioni al contorno di Dirichlet a destra e Neumann a sinistra	46
1.26	Diffusione non-omogenea con forzante non-omogenea e condizioni al contorno di Dirichlet a destra e Neumann a sinistra	47
2.1	Rappresentazione del dominio Ω diviso in tre sottodomini Ω_i (nell'immagine indicati come \mathcal{D}_i). Di essi, Ω_2 rappresenta la membrana porosa ed è separata dalle regioni adiacenti da superfici Σ_{ij} di normale unitaria \mathbf{n}_{ij} rivolta da Ω_i verso Ω_j . Immagine tratta da Chaplain et al. [2019]	50
2.2	Analisi dei risultati per il problema di una popolazione cellulare. Immagini tratte da Chaplain et al. [2019]. a) Confronto tra le soluzioni di \mathcal{P}_ε (2.41) e \mathcal{P}_0 (2.42) per $\varepsilon \rightarrow 0$ al tempo $t=20$. b) Errore relativo tra le soluzioni dei problemi \mathcal{P}_ε e \mathcal{P}_0 agli estremi della membrana al tempo $t=20$. Viene indicato con err^- l'errore relativo tra $u_{1\varepsilon}(0,20)$ e $\tilde{u}_1(0^-,20)$ e con err^+ quello tra $u_{1\varepsilon}(\varepsilon,20)$ e $\tilde{u}_1(0^+,20)$	57
2.3	Confronto tra la soluzione numerica del problema con membrana sottile \mathcal{P}_ε (2.41) ottenuta col software COMSOL Multiphysics® e quella ricavata tramite il metodo semi-Lagrangiano sviluppato nella Proposizione 4 al tempo $t=20$	61
2.4	Confronto tra la soluzione numerica del problema con interfaccia effettiva \mathcal{P}_0 (2.42) ottenuta col software COMSOL Multiphysics® e quella ricavata tramite il metodo semi-Lagrangiano sviluppato nella Proposizione 4 al tempo $t=20$	61

2.5	Errore relativo tra le soluzioni del problema con membrana sottile \mathcal{P}_ε e del problema con interfaccia effettiva \mathcal{P}_0 ottenute col metodo semi-Lagrangiano valutato agli estremi della membrana al tempo $t=20$. Viene indicato con err^- l'errore relativo tra $u_{1\varepsilon}(0,20)$ e $\tilde{u}_1(0^-,20)$ e con err^+ quello tra $u_{1\varepsilon}(\varepsilon,20)$ e $\tilde{u}_1(0^+,20)$	62
2.6	Analisi dei risultati al tempo $t = 20$ per il problema di due popolazioni cellulari ottenuti con gli algoritmi espressi nella Proposizione 6 a) Confronto delle concentrazioni delle due popolazioni per il problema $\mathcal{P}_\varepsilon^2$ con $\varepsilon = 0.1$ b) Confronto tra le soluzioni della prima popolazione dei problemi $\mathcal{P}_\varepsilon^2$ e \mathcal{P}_0^2 per $\varepsilon \rightarrow 0$ c) Confronto tra le soluzioni della seconda popolazione dei problemi $\mathcal{P}_\varepsilon^2$ e \mathcal{P}_0^2 per $\varepsilon \rightarrow 0$ d) Errore relativo tra le soluzioni dei problemi \mathcal{P}_ε e \mathcal{P}_0 agli estremi della membrana.	78
2.7	Analisi dei risultati al tempo $t = 15$ per il problema di due popolazioni cellulari ottenuti con gli algoritmi espressi nella Proposizione 7 a) Confronto delle concentrazioni delle due popolazioni per il problema $\mathcal{P}_\varepsilon^2$ con $\varepsilon = 0.1$ b) Confronto tra le soluzioni della prima popolazione dei problemi $\mathcal{P}_\varepsilon^2$ e \mathcal{P}_0^2 per $\varepsilon \rightarrow 0$ c) Confronto tra le soluzioni della seconda popolazione dei problemi $\mathcal{P}_\varepsilon^2$ e \mathcal{P}_0^2 per $\varepsilon \rightarrow 0$ d) Errore relativo tra le soluzioni dei problemi \mathcal{P}_ε e \mathcal{P}_0 agli estremi della membrana.	79
2.8	Analisi dei risultati al tempo $t = 30$ per il problema di due popolazioni cellulari ottenuti con gli algoritmi espressi nella Proposizione 7 a) Confronto delle concentrazioni delle due popolazioni per il problema $\mathcal{P}_\varepsilon^2$ con $\varepsilon = 0.1$ b) Confronto tra le soluzioni della prima popolazione dei problemi $\mathcal{P}_\varepsilon^2$ e \mathcal{P}_0^2 per $\varepsilon \rightarrow 0$ c) Confronto tra le soluzioni della seconda popolazione dei problemi $\mathcal{P}_\varepsilon^2$ e \mathcal{P}_0^2 per $\varepsilon \rightarrow 0$ d) Errore relativo tra le soluzioni dei problemi \mathcal{P}_ε e \mathcal{P}_0 agli estremi della membrana.	80

*In mathematics, you don't understand
things.*

You just get used to them.

[JOHN VON NEUMANN]

Capitolo 1

I metodi semi-Lagrangiani

1.1 Introduzione

Nato negli anni 50 del '900, il metodo semi-Lagrangiano è stato sviluppato allo scopo di trattare problemi di meteorologia, in alternativa ai classici approcci Euleriano e Lagrangiano utilizzati in fluidodinamica. Generalmente, lo schema Lagrangiano si presta in maniera naturale alla descrizione di un moto di particelle fluide all'interno di un campo di moto. In molte applicazioni si può però verificare che le particelle studiate, di distribuzione iniziale uniforme, tendano nel tempo ad una distribuzione altamente non uniforme, il che porta ad una ricostruzione di scarsa qualità della variabile d'interesse nelle regioni con bassa densità di particelle. Il metodo semi-Lagrangiano subentra a questa mancanza tramite un approccio ibrido: introducendo una griglia in spazio analoga a quella di un metodo Euleriano, ad ogni passo temporale il metodo utilizza nuove particelle posizionate sui nodi della griglia, in modo da mantenere una densità di alta qualità.

Nascendo in un contesto meteorologico, in cui dominano i fenomeni convettivi, le tecniche semi-Lagrangiane per la descrizione di puro trasporto sono ben consolidate in letteratura. Studi successivi hanno poi cercato di estendere questo approccio ai fenomeni diffusivi. In questo lavoro discuteremo anche una variante del metodo proveniente dall'articolo di [Bonaventura and Ferretti \[2014\]](#) per trattare problemi combinati di trasporto-diffusione. In aggiunta verrà fatta una breve esposizione sulle condizioni al contorno e di come esse possano essere trattate in un contesto semi-Lagrangiano, facendo riferimento in particolare allo studio di [Calzola et al. \[2021\]](#) per la descrizione di condizioni al contorno di Neumann non omogenee.

1.2 Caso lineare uniforme

1.2.1 Trasporto

Introduzione allo schema

Cominciamo trattando un problema di trasporto lineare 1D. Esso è descritto da un'equazione

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad u : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}. \quad (1.1)$$

di variabile $u(x, t)$. Il termine $c \in \mathbb{R}$ costante rappresenta la velocità con cui le particelle si spostano all'interno del dominio. In questo contesto, il metodo semi-Lagrangiano si sovrappone esattamente al metodo delle caratteristiche, secondo cui la soluzione esatta del problema in esame risulta essere

$$u(x, t) = u_0(x - ct) \quad (1.2)$$

in cui $u_0(x)$ è una distribuzione iniziale nota. Come descritto dalla soluzione esatta, si possono quindi identificare delle rette parallele di pendenza $\frac{1}{c}$ nel piano delle fasi lungo le quali il valore della variabile rimane immutato. Ciò permette di conoscere u in qualsiasi punto del piano delle fasi recuperando un suo valore noto sulla retta caratteristica associata.

Questa idea è anche alla base del metodo semi-Lagrangiano. Effettuata una discretizzazione in spazio e tempo, si identificano i nodi di una griglia spaziale uniforme $x_j = j\Delta x$ e degli istanti temporali $t^n = n\Delta t$. In maniera analoga al metodo esatto, si ha che l'incognita u_j^{n+1} nel nodo x_j al tempo t^{n+1} , detto punto di arrivo della caratteristica, può essere ottenuta recuperando il valore di u all'istante temporale precedente nel punto di partenza $\tilde{x}_j = x_j - c\Delta t$. Se esso coincide con un nodo della griglia, allora $u(\tilde{x}_j, t^n)$ risulta noto ed il valore attribuito a u_j^{n+1} è esatto. Se così non fosse, è necessario recuperare il valore di u in \tilde{x}_j tramite un'interpolazione che coinvolge i nodi adiacenti al punto di partenza. Questo porta ad uno schema generale della forma

$$u_j^{n+1} = \mathbb{I}[u(t^n)](x_j - c\Delta t) \quad j \in \mathcal{Z}, n \geq 0 \quad (1.3)$$

in cui si introduce l'interpolatore \mathbb{I} . In questo lavoro verranno considerati i polinomi interpolanti di Lagrange, ma interpolatori di tipo diverso possono essere applicati.

Per trattare le espressioni dei polinomi interpolanti, si introduce $p = \lceil c \frac{\Delta t}{\Delta x} \rceil$, in modo tale che x_{j-p} indichi il primo nodo a destra del punto di partenza \tilde{x}_j , da cui la loro distanza normalizzata risulta essere

$$\alpha \equiv \frac{x_{j-p} - \tilde{x}_j}{\Delta x} \in (0, 1]. \quad (1.4)$$

A questo punto, una ricostruzione di $u(\tilde{x}_j, t^n)$ con un polinomio di primo grado porta allo schema

$$u_j^{n+1} = (1 - \alpha)u_{j-p}^n + \alpha u_{j-p-1}^n, \quad (1.5)$$

mentre una interpolazione fatta con un polinomio quadratico conduce a

$$u_j^{n+1} = \frac{\alpha(\alpha + 1)}{2} u_{j-p-1}^n + (1 - \alpha^2) u_{j-p}^n + \frac{\alpha(\alpha - 1)}{2} u_{j-p+1}^n \quad (1.6)$$

ed infine uno schema ricavato da un'interpolazione cubica risulta essere

$$u_j^{n+1} = -\frac{\alpha(1-\alpha^2)}{6}u_{j-p-2}^n + \frac{\alpha(1+\alpha)(2-\alpha)}{2}u_{j-p-1}^n + \frac{(1-\alpha^2)(2-\alpha)}{2}u_{j-p}^n + \frac{\alpha(\alpha-1)(2-\alpha)}{6}u_{j-p+1}^n. \quad (1.7)$$

Il diverso grado polinomiale di interpolazione non influenza solo il costo computazionale di risoluzione dello schema, che dipende dal numero di nodi coinvolti ad ogni ricostruzione, ma anche il tipo di errore numerico commesso.

La trattazione dell'errore richiede innanzitutto l'introduzione del numero di Courant $CFL = c \frac{\Delta t}{\Delta x}$. Esso descrive il rapporto tra la pendenza $\frac{\Delta t}{\Delta x}$ delle rette che collegano nodi adiacenti di istanti temporali successivi nel piano delle fasi e la pendenza $\frac{1}{c}$ delle rette caratteristiche. Dalla teoria degli schemi Euleriani, si sa che in questo caso lineare un valore unitario del numero di Courant porta ad una descrizione esatta del fenomeno fisico, in quanto le informazioni si spostano da nodo a nodo senza la necessità di approssimazioni, mentre un valore diverso di CFL implica la necessità di un'approssimazione, come anticipato, con conseguente introduzione di un errore. Lo stesso si verifica nel contesto semi-Lagrangiano, come si può osservare dalla riproduzione del trasporto di una curva a campana

$$u_0(x) = e^{-\frac{x^2}{2}}. \quad (1.8)$$

Nel caso lineare, si ha che l'uso di $CFL \neq 1$ porta all'introduzione di un errore diffusivo, la cui entità dipende dal valore di CFL stesso (Figura 1.1). Diverso è il caso dell'interpolazione effettuata con polinomi di secondo e terzo grado, i quali causano una minore diffusione numerica, ma in compenso inducono un errore di tipo dispersivo (Figure 1.2, 1.3). Si noti comunque come il grado polinomiale maggiore riduca questi effetti (Figura 1.3). Indipendentemente dal grado polinomiale di interpolazione, una simulazione effettuata con $CFL = 1$ riproduce perfettamente la soluzione esatta. Invece per valori diversi del numero di Courant si ha un errore numerico, di natura determinata dal grado polinomiale utilizzato, che risulta essere tanto più significativo quanto più CFL si allontana dal valore unitario (Figure 1.7, 1.8, 1.9).

Passando ora alla riproduzione del trasporto di una curva discontinua, come ad esempio una funzione gradino

$$u_0(x) = \begin{cases} 1 & x \in [-2.5, 2.5] \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}, \quad (1.9)$$

nuovi effetti possono essere osservati. Mentre l'uso di un'interpolazione lineare anche in questo caso genera diffusione di natura numerica (Figura 1.4), all'interno delle simulazioni effettuate con secondo e terzo grado polinomiale nascono oscillazioni spurie attorno ai salti. Nel caso quadratico le oscillazioni nascono solo a monte, ma tendono a propagarsi nel tempo (Figura 1.5), mentre invece nel caso cubico tali oscillazioni si formano a entrambi i lati del salto, ma rimangono controllate durante il fenomeno (Figura 1.6). Il principale vantaggio rispetto uno schema Euleriano è il mantenimento della stabilità anche con $CFL > 1$. Infatti, come verrà esposto a breve, l'approccio semi-Lagrangiano per il trasporto lineare è incondizionatamente stabile.

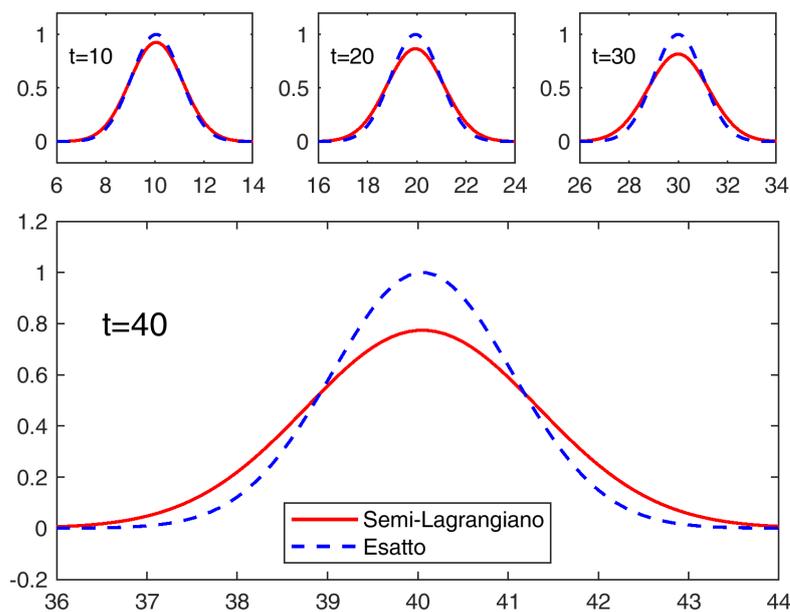


Figura 1.1: Trasporto di una curva a campana (1.8) con $\Delta x=0.1$, $\Delta t=0.15$, $c=1$, $CFL=1.5$ e interpolazione lineare

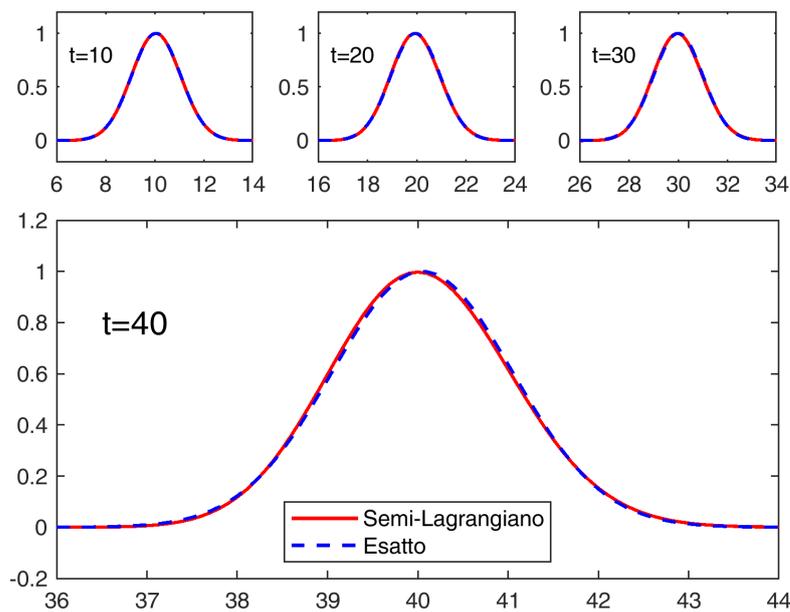


Figura 1.2: Trasporto di una curva a campana (1.8) con $\Delta x=0.1$, $\Delta t=0.15$, $c=1$, $CFL=1.5$ e interpolazione quadratica

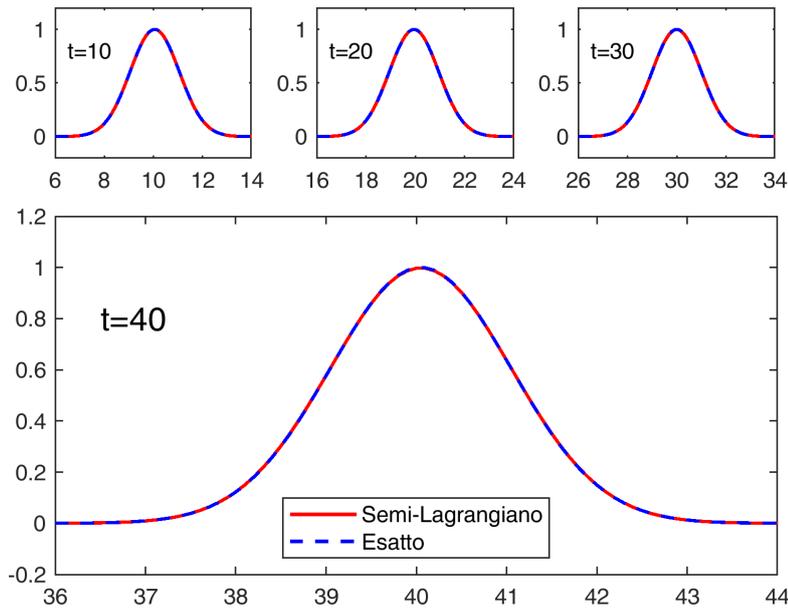


Figura 1.3: Trasporto di una curva a campana (1.8) con $\Delta x=0.1$, $\Delta t=0.15$, $c=1$, $CFL=1.5$ e interpolazione cubica

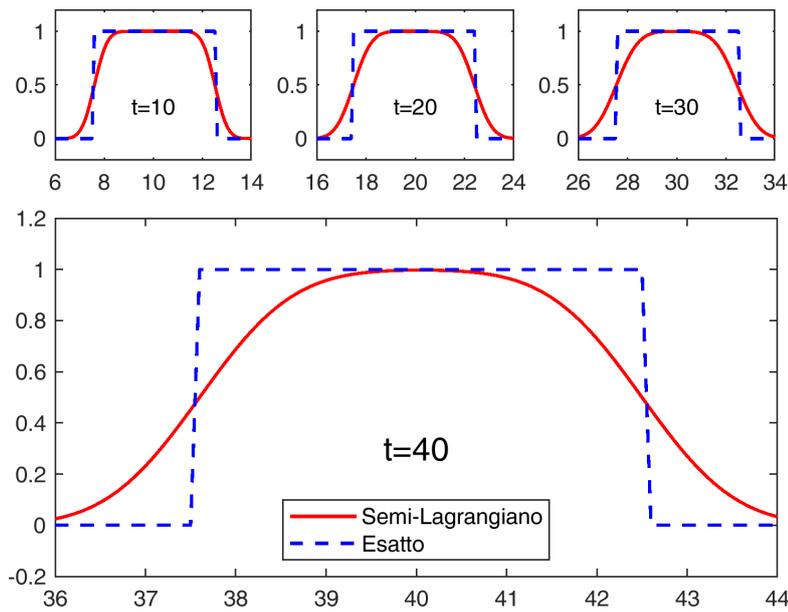


Figura 1.4: Trasporto di un'onda quadra (1.9) con $\Delta x=0.1$, $\Delta t=0.15$, $c=1$, $CFL=1.5$ e interpolazione lineare

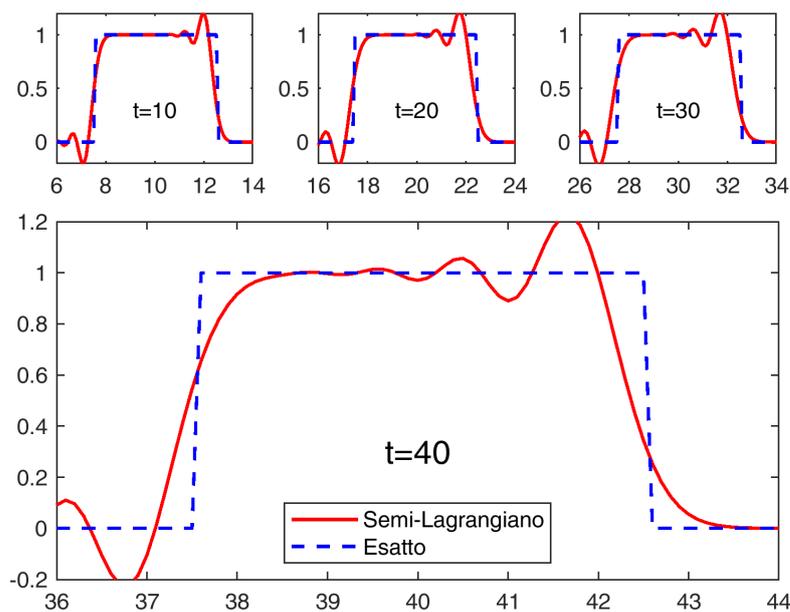


Figura 1.5: Trasporto di un'onda quadra (1.9) con $\Delta x=0.1$, $\Delta t=0.15$, $c=1$, CFL=1.5 e interpolazione quadratica

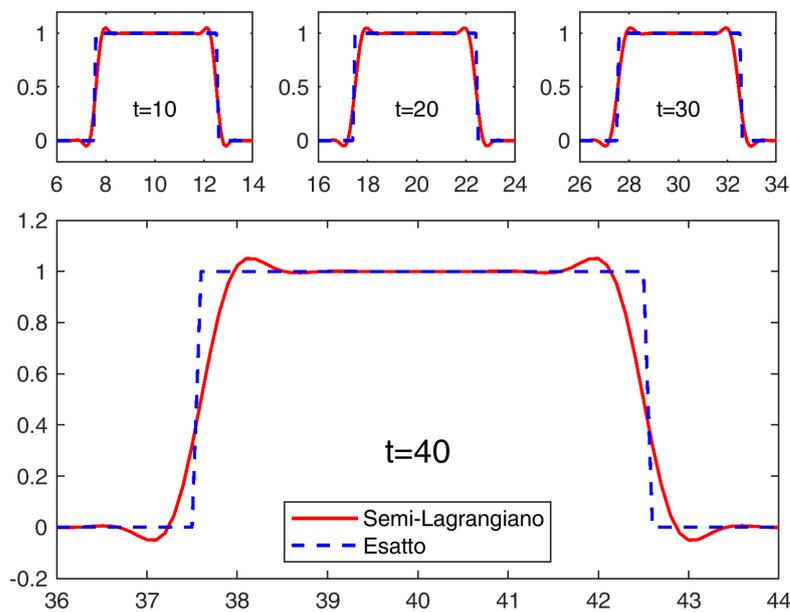


Figura 1.6: Trasporto di un'onda quadra (1.9) con $\Delta x=0.1$, $\Delta t=0.15$, $c=1$, CFL=1.5 e interpolazione cubica

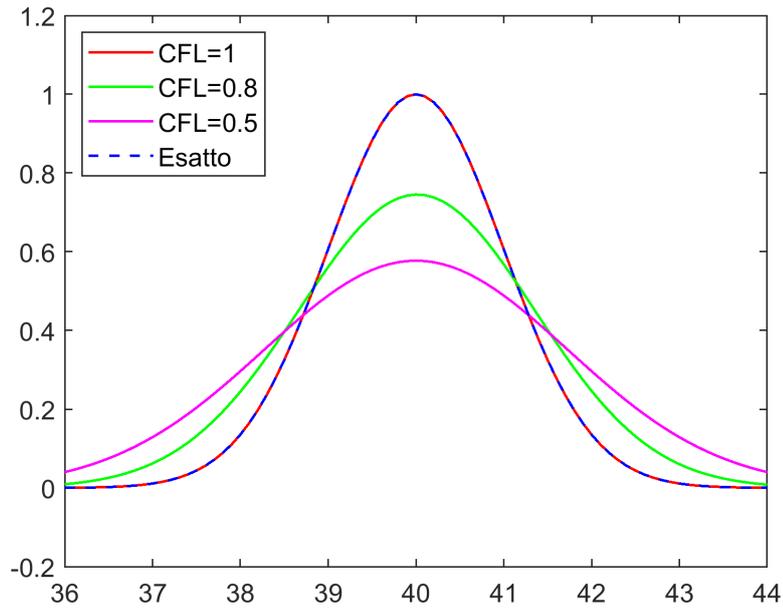


Figura 1.7: Confronto tra la soluzione esatta di un problema di trasporto di una curva a campana (1.8) con $c = 1$ al tempo $t = 40$ e quelle ottenute usando interpolazione lineare con diversi valori di CFL

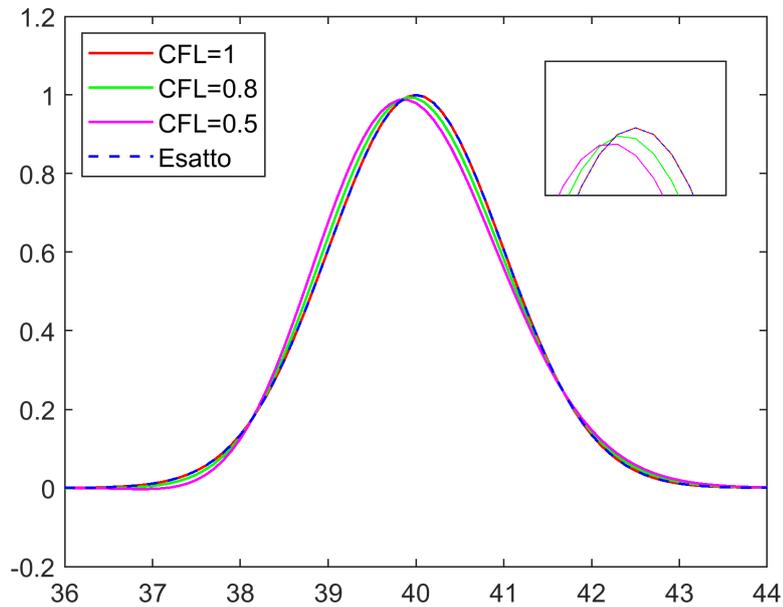


Figura 1.8: Confronto tra la soluzione esatta di un problema di trasporto di una curva a campana (1.8) con $c = 1$ al tempo $t = 40$ e quelle ottenute usando interpolazione quadratica con diversi valori di CFL

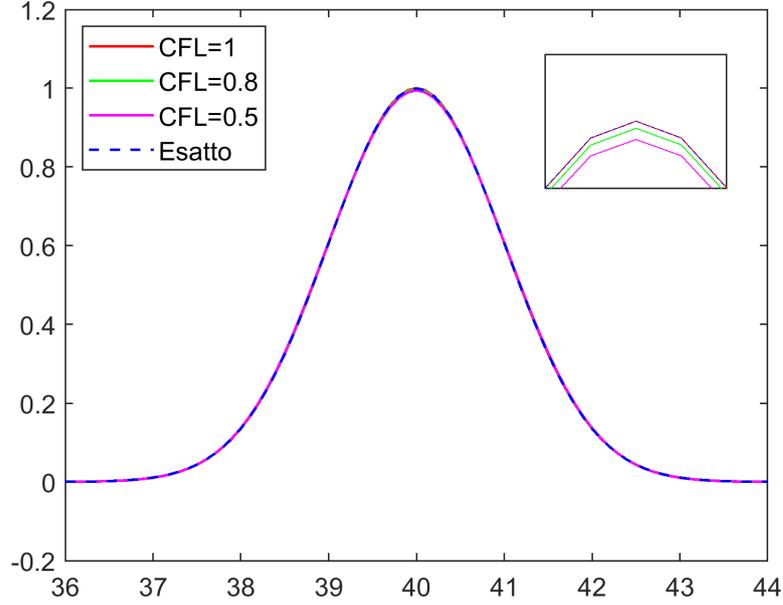


Figura 1.9: Confronto tra la soluzione esatta di un problema di trasporto di una curva a campana (1.8) con $c = 1$ al tempo $t = 40$ e quelle ottenute usando interpolazione cubica con diversi valori di CFL

Analisi della stabilità

Uno studio della stabilità spaziale del metodo può essere effettuato utilizzando l'analisi alla Von Neumann (come presentato in Quarteroni and Valli [2008]). Essa consiste nell'osservare il modo in cui lo schema numerico altera modulo e fase di una armonica elementare durante il processo di trasporto, poiché tali modifiche possono essere ricondotte ad errori di tipo diffusivo e dispersivo. Noto l'effetto che lo schema ha su un'armonica elementare, qualsiasi altra funzione soluzione del problema può essere scomposta nella sua serie di Fourier e riportata all'analisi di Von Neumann fatta.

Sia dunque

$$u_0(x) = e^{ikx} \quad (1.10)$$

un'onda semplice di numero d'onda k , il suo spostamento con velocità c porta all'espressione analitica esatta

$$u(x, t) = e^{ik(x-ct)}. \quad (1.11)$$

Introducendo una semi-discretizzazione in tempo si ha che l'evoluzione è data dalla relazione

$$u(x, t^{n+1}) = e^{ik(x-c(t^n+\Delta t))} = e^{-ikc\Delta t} e^{ik(x-ct)} = Fu(x, t^n). \quad (1.12)$$

L'avanzamento di un passo temporale è dunque governato da un operatore di evoluzione E , di cui $F = e^{-ikc\Delta t}$ costituisce il simbolo di Fourier. Si noti che il modulo di F è unitario, infatti il problema di puro trasporto non comporta un'alterazione dell'ampiezza dell'onda ma solo uno spostamento di quest'ultima. Aggiungendo ora una semi-discretizzazione in

spazio, si può legare il valore di u in un dato nodo con quello nel nodo precedente tramite l'introduzione di un operatore di shift S , secondo cui

$$u_{j+1}^n = Su_j^n. \quad (1.13)$$

Un generico schema che fa uso di un interpolatore si può scrivere nella forma

$$u_j^{n+1} = \sum_{k \in \mathcal{Z}} a_k u_k^n, \quad (1.14)$$

coi coefficienti a_k determinati dallo stencil utilizzato, dunque grazie all'operatore di shift diventa possibile ricondurre l'espressione precedente ad una valutata nel solo nodo j -esimo

$$u_j^{n+1} = \sum_{k \in \mathcal{Z}} a_k S^{k-j} u_j^n =: F_i u_j^n. \quad (1.15)$$

Da essa si ottiene così l'espressione del simbolo di Fourier discreto F_i , in cui il pedice i evidenzia la dipendenza dal grado polinomiale di interpolazione scelto, il quale determina i coefficienti a_k dello schema. Stando ora al parallelismo presente tra le espressioni (1.12) e (1.15), la stabilità spaziale dello schema può essere studiata confrontando il simbolo di Fourier analitico $F = e^{-ikc\Delta t} = e^{-i\omega\Delta t}$ e quello discreto $F_i = |F_i|e^{-i\omega^*\Delta t}$, nei quali sono introdotte la frequenza analitica $\omega = kc = \frac{k(p+\alpha)\Delta x}{\Delta t}$ e quella discreta ω^* . Le discrepanze tra modulo e fase dei due simboli di Fourier daranno infatti origine rispettivamente a errori di natura diffusiva e dispersiva.

Passando al caso specifico di interpolazione lineare, sappiamo dall'equazione (1.5) che

$$u_j^{n+1} = (1 - \alpha)u_{j-p}^n + \alpha u_{j-p-1}^n = S^{-p} [(1 - \alpha) + \alpha S^{-1}] u_j^n. \quad (1.16)$$

In essa identifichiamo l'operatore di evoluzione discreto $E_1 = S^{-p} [(1 - \alpha) + \alpha S^{-1}]$ ed applicando il seguente schema ad un'onda semplice discreta $e^{ikx_j} = e^{ikj\Delta x}$ possiamo ricavare il simbolo di Fourier discreto associato

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} &= E_1 e^{ikj\Delta x} = e^{ik(j-p)\Delta x} [(1 - \alpha) + \alpha e^{ik(j-1)\Delta x}] = \\ &= e^{ik(-p)\Delta x} [(1 - \alpha) + \alpha e^{ik(-1)\Delta x}] e^{ikj\Delta x} =: F_1 e^{ikj\Delta x}. \end{aligned} \quad (1.17)$$

Per procedere con l'analisi del modulo di F_1 , conviene prima effettuare la seguente fattorizzazione

$$|F_1| = \left| e^{-ikp\Delta x} \left| [(1 - \alpha) + \alpha e^{-ik\Delta x}] \right| \right| = |F_1|_I |F_1|_R \quad (1.18)$$

identificando una parte immaginaria ed una razionale. Ciò permette di sfruttare il fatto che $|F_1|_I = 1$ per ridursi allo studio della sola parte razionale. Quest'ultima può essere scomposta come

$$(F_1)_R = (1 - \alpha) + \alpha \cos(k\Delta x) - i\alpha \sin(k\Delta x) \quad (1.19)$$

da cui

$$\begin{aligned} |F_1|_R^2 &= (1 - \alpha + \alpha \cos(k\Delta x))^2 + \alpha^2 \sin^2(k\Delta x) = \\ &= 1 + \alpha^2 + \alpha^2 \cos^2(k\Delta x) - 2\alpha - 2\alpha^2 \cos(k\Delta x) + 2\alpha \cos(k\Delta x) + \alpha^2 \sin^2(k\Delta x) \\ &= 1 - 2\alpha(1 - \alpha)(1 - \cos(k\Delta x)). \end{aligned} \quad (1.20)$$

Per la stabilità dello schema numerico è necessario che $|F_1|_R^2 < 1$, in quanto il modulo del simbolo di Fourier determina il tasso di variazione in tempo dell'ampiezza dell'onda elementare. Essendo che α è stata definita come distanza normalizzata tra due punti e dunque cade nell'intervallo $(0,1]$, segue dall'espressione precedente che lo schema (1.5) è incondizionatamente stabile, come anticipato, sebbene esso possa causare un progressivo smorzamento dell'ampiezza. Inoltre, il caso particolare di $|F_1|_R^2 = 1$, che comporta una conservazione dell'ampiezza dell'onda, si presenta se e solo se $\alpha = 1$, dunque quando il punto di partenza coincide con un nodo della griglia e CFL = 1. Dalla (1.20) si può notare che il modulo del simbolo di Fourier non dipende soltanto da α , ma anche dal numero d'onda k dell'onda trattata. Questo significa che l'entità dello smorzamento varia con la lunghezza d'onda e data una generica funzione essa presenterà una decrescita non omogenea dei suoi coefficienti di Fourier in tempo. Dall'immagine 1.10 si può osservare che, a parità di α , le onde maggiormente smorzate sono quelle con minore lunghezza d'onda. Durante la riproduzione del trasporto di una curva generica uno può quindi aspettarsi che, col procedere del fenomeno, dettagli e piccole oscillazioni vadano perdendosi in tempo. Passiamo ora allo studio dell'errore di fase dello schema lineare, il quale è dovuto alle differenze presenti tra la frequenza analitica ω e quella discreta ω^* . Quest'ultima può essere ottenuta esprimendo l'argomento di $F_1 = |F_1|e^{-i\omega^*\Delta t}$, cioè $\arg(F_1) = \arg(e^{-i\omega^*\Delta t}) = -\omega^*\Delta t$. Scrivendo gli esponenziali in forma trigonometrica si ottiene

$$\begin{aligned} -\omega^*\Delta t &= \arg(F_1) = \arg\left(e^{-ikp\Delta x} \left[(1-\alpha) + \alpha e^{-ik\Delta x}\right]\right) = \\ &= \arg\left(e^{-ikp\Delta x}\right) + \arg\left((1-\alpha) + \alpha e^{-ik\Delta x}\right) = \\ &= \arg(\cos(pk\Delta x) - i\sin(pk\Delta x)) + \arg(1-\alpha + \alpha\cos(k\Delta x) - i\alpha\sin(k\Delta x)). \end{aligned} \quad (1.21)$$

Ricordando che $\arg(x+iy) = \tan^{-1} \frac{y}{x}$ si può concludere che

$$\begin{aligned} -\omega^*\Delta t &= -\tan^{-1}\left(\frac{\sin(pk\Delta x)}{\cos(pk\Delta x)}\right) - \tan^{-1}\left(\frac{\alpha\sin(k\Delta x)}{1-\alpha+\alpha\cos(k\Delta x)}\right) \Rightarrow \\ \Rightarrow \omega^*\Delta t &= pk\Delta x + \tan^{-1}\left(\frac{\alpha\sin(k\Delta x)}{1-\alpha+\alpha\cos(k\Delta x)}\right). \end{aligned} \quad (1.22)$$

A questo punto, il confronto tra le due frequenze può essere fatto introducendo la frequenza relativa $R_i = \frac{\omega^*}{\omega}$, che nel caso attuale corrisponde a

$$\begin{aligned} R_1 = \frac{\omega^*}{\omega} &= \frac{1}{(p+\alpha)k\Delta x} \left(pk\Delta x + \tan^{-1}\left(\frac{\alpha\sin(k\Delta x)}{1-\alpha+\alpha\cos(k\Delta x)}\right) \right) = \\ &= \frac{p}{p+\alpha} + \frac{1}{(p+\alpha)k\Delta x} \tan^{-1}\left(\frac{\alpha\sin(k\Delta x)}{1-\alpha+\alpha\cos(k\Delta x)}\right). \end{aligned} \quad (1.23)$$

Come visto per $|F_1|$, la frequenza relativa dipende da α e k , con però l'aggiunta di p , il quale costituisce il numero di intervalli spaziali Δx completi compresi tra punto di partenza e arrivo della retta caratteristica. Oltre a quanto già commentato sulla dipendenza dell'errore da CFL, si può aggiungere che, come rappresentato nell'immagine 1.11, l'errore

di fase diminuisce al crescere della distanza tra punto di partenza e arrivo della caratteristica nonché all'aumentare della lunghezza dell'onda trattata. Infatti dall'immagine segue che $R_1 \rightarrow 1$ per p crescente e per $k\Delta x \rightarrow 0$. In generale, comunque, si ha che $R_1 < 1$, dunque il metodo numerico descrive un'onda in ritardo rispetto quella esatta.

Nel caso di interpolazione quadratica, ricordiamo da (1.6) l'espressione dello schema

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} &= \frac{\alpha(\alpha+1)}{2} u_{j-p-1}^n + (1-\alpha^2) u_{j-p}^n + \frac{\alpha(\alpha-1)}{2} u_{j-p+1}^n \\ &= S^{-p} \left[\frac{\alpha(\alpha+1)}{2} S^{-1} + (1-\alpha^2) + \frac{\alpha(\alpha-1)}{2} S^1 \right] u_j^n, \end{aligned} \quad (1.24)$$

da cui si può identificare l'operatore di evoluzione. Trattando il trasporto di un'onda elementare, l'equazione precedente diventa

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} &= E_2 e^{ikj\Delta x} = S^{-p} \left[\frac{\alpha(\alpha+1)}{2} S^{-1} + (1-\alpha^2) + \frac{\alpha(\alpha-1)}{2} S^1 \right] e^{ikj\Delta x} = \\ &= e^{-ikp\Delta x} \left[\frac{\alpha(\alpha+1)}{2} e^{-ik\Delta x} + (1-\alpha^2) + \frac{\alpha(\alpha-1)}{2} e^{ik\Delta x} \right] e^{ikj\Delta x} =: F_2 e^{ikj\Delta x}, \end{aligned} \quad (1.25)$$

in cui compare il simbolo di Fourier associato a E_2 . Quest'ultimo può essere riscritto fattorizzando i termini in potenze di α

$$\begin{aligned} F_2 &= e^{-ikp\Delta x} \left(1 - \alpha^2 \left(1 - \frac{1}{2} (e^{-ik\Delta x} + e^{ik\Delta x}) \right) + \frac{\alpha}{2} (e^{-ik\Delta x} - e^{ik\Delta x}) \right) \\ &= e^{-ikp\Delta x} \left(1 - \alpha^2 (1 - \cos(k\Delta x)) - i\alpha \sin(k\Delta x) \right). \end{aligned} \quad (1.26)$$

Come visto nel caso di interpolazione lineare, il simbolo di Fourier può essere diviso in una parte immaginaria ed una razionale. Dal modulo unitario della parte immaginaria segue quindi

$$\begin{aligned} |F_2|^2 &= \left(1 - \alpha^2 (1 - \cos(k\Delta x)) \right)^2 + \alpha^2 \sin^2(k\Delta x) = \\ &= 1 - 2\alpha^2 (1 - \cos(k\Delta x)) + \alpha^4 (1 - \cos(k\Delta x))^2 + \alpha^2 (1 - \cos^2(k\Delta x)) = \\ &= 1 - \alpha^2 + 2\alpha^2 \cos(k\Delta x) - \alpha^2 \cos^2(k\Delta x) + \alpha^4 (1 - \cos(k\Delta x))^2 = \\ &= 1 - \alpha^2 \left((1 - \cos(k\Delta x))^2 - \alpha^2 (1 - \cos(k\Delta x))^2 \right) = \\ &= 1 - \alpha^2 (1 - \alpha^2) (1 - \cos(k\Delta x))^2. \end{aligned} \quad (1.27)$$

Anche per l'interpolazione quadratica si è dimostrata l'incondizionale stabilità del metodo semi-Lagrangiano, in quanto nell'espressione precedente $\alpha \in (0,1]$ implica $|F_2|^2 \leq 1$. Plottando $|F_2|$ contro α nel grafico 1.12 si osserva nuovamente un maggiore effetto diffusivo sulle onde di lunghezza minore. Dal confronto con l'immagine 1.10 si può notare che mentre nel caso lineare la maggiore perdita di qualità si presentava per $\alpha = 0.5$, dunque quando il punto in cui viene effettuata la ricostruzione è alla massima distanza dai nodi, per il caso quadratico ciò si verifica quando $\alpha = \pm \frac{1}{\sqrt{2}}$. Inoltre l'effetto dissipativo diminuisce

più rapidamente al crescere della lunghezza d'onda ed è generalmente meno importante, come già osservato nelle simulazioni.

Invece per quanto riguarda l'errore di fase, si può nuovamente estrarre ω^* dall'argomento di F_2 tramite

$$\begin{aligned}
 -\omega^* \Delta t &= \arg(F_2) = \arg\left(e^{-ikp\Delta x} \left(1 - \alpha^2(1 - \cos(k\Delta x)) - i\alpha \sin(k\Delta x)\right)\right) = \\
 &= \arg\left(e^{-ikp\Delta x}\right) + \arg\left(\left(1 - \alpha^2(1 - \cos(k\Delta x)) - i\alpha \sin(k\Delta x)\right)\right) = \\
 &= -pk\Delta x - \tan^{-1}\left(\frac{\alpha \sin(k\Delta x)}{1 - \alpha^2(1 - \cos(k\Delta x))}\right)
 \end{aligned} \tag{1.28}$$

da cui

$$R_2 = \frac{\omega^*}{\omega} = \frac{p}{p + \alpha} + \frac{1}{(p + \alpha)k\Delta x} \tan^{-1}\left(\frac{\alpha \sin(k\Delta x)}{1 - \alpha^2(1 - \cos(k\Delta x))}\right). \tag{1.29}$$

Mentre l'aumento del grado polinomiale ha comportato una differenza significativa per l'errore numerico diffusivo, lo stesso non si può dire per quello di fase. Infatti dal confronto tra (1.23) e (1.29) si ha come unica differenza il grado di α a denominatore dell'argomento dell'arcotangente, il che porta ad una dinamica simile tra i due casi. Comparando le immagini 1.11 e 1.13 si può notare che l'uso dell'interpolatore quadratico non solo non migliora la convergenza della frequenza relativa ad 1, ma tende addirittura a rallentarla in maniera tanto più evidente quanto più è piccolo p .

Infine trattiamo la stabilità dello schema nel caso si utilizzi un'interpolazione cubica, riprendendo l'espressione (1.7). Quest'ultima, in seguito ad una fattorizzazione delle potenze di α , assume la forma

$$\begin{aligned}
 u_j^{n+1} &= u_{j-p}^n - \frac{1}{2}\alpha \left(u_{j-p+1}^n - u_{j-p-1}^n\right) + \frac{\alpha^2}{2} \left(u_{j-p+1}^n - 2u_{j-p}^n + u_{j-p-1}^n\right) + \\
 &\quad - \frac{\alpha(1 - \alpha^2)}{6} \left(u_{j-p+1}^n - 3u_{j-p}^n + 3u_{j-p-1}^n - u_{j-p-2}^n\right) = \\
 &= S^{-p} \left[1 - \frac{1}{2}\alpha \left(S^{+1} - S^{-1}\right) + \frac{\alpha^2}{2} \left(S^{+1} - 2 + S^{-1}\right) \right. \\
 &\quad \left. - \frac{\alpha(1 - \alpha^2)}{6} \left(S^{+1} - 3 + 3S^{-1} - S^{-2}\right)\right] u_j^n.
 \end{aligned} \tag{1.30}$$

Applicando questo schema allo studio di una funzione d'onda discreta si ottiene il simbolo di Fourier

$$\begin{aligned}
 F_3 &= e^{-ipk\Delta x} \left[1 - \frac{\alpha}{2} (e^{ik\Delta x} - e^{-ik\Delta x}) + \frac{\alpha^2}{2} (e^{ik\Delta x} - 2 + e^{-ik\Delta x}) + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{\alpha(1-\alpha^2)}{6} (e^{ik\Delta x} - 3 + 3e^{-ik\Delta x} - e^{-2ik\Delta x}) \right] = \\
 &= e^{-ipk\Delta x} \left[1 - i\alpha \sin(k\Delta x) - \alpha^2(1 - \cos(k\Delta x)) + \right. \\
 &\quad \left. - \frac{\alpha(1-\alpha^2)}{6} (4 \cos(k\Delta x) - 2i \sin(k\Delta x) + 2 - 2 \cos^2(k\Delta x) - 2i \cos(k\Delta x) \sin(k\Delta x)) \right] \\
 &= e^{-ipk\Delta x} \left[1 - i\alpha \sin(k\Delta x) - \alpha^2(1 - \cos(k\Delta x)) + \right. \\
 &\quad \left. - \frac{\alpha(1-\alpha^2)}{3} \left((1 - \cos(k\Delta x))^2 + i \sin(k\Delta x)(1 - \cos(k\Delta x)) \right) \right].
 \end{aligned} \tag{1.31}$$

Lo studio del modulo di F_3 può essere effettuato sfruttando il modulo unitario dell'esponenziale ed effettuando la combinazione dei quadrati delle rimanenti parti reale ed immaginaria, da cui

$$\begin{aligned}
 |F_3|^2 &= 1 + \alpha^4(1 - \cos(k\Delta x))^2 + \frac{\alpha^2(1-\alpha^2)^2}{9}(1 - \cos(k\Delta x))^4 + \\
 &\quad - 2\alpha^2(1 - \cos(k\Delta x)) - \frac{2\alpha(1-\alpha^2)}{3}(1 - \cos(k\Delta x))^2 + \\
 &\quad + \frac{2\alpha^3(1-\alpha^2)}{3}(1 - \cos(k\Delta x))^3 + \alpha^2 \sin^2(k\Delta x) + \\
 &\quad + \frac{\alpha^2(1-\alpha^2)^2}{9} \sin^2(k\Delta x)(1 - \cos(k\Delta x))^2 + \\
 &\quad + \frac{2\alpha^2(1-\alpha^2)}{3} \sin^2(k\Delta x)(1 - \cos(k\Delta x)) = \\
 &= 1 - \alpha(2 - \alpha) (1 - \alpha^2) \cos^2(k\Delta x) \left(\frac{3 + 2 \cos(k\Delta x)\alpha(1 - \alpha)}{9} \right).
 \end{aligned} \tag{1.32}$$

L'ultimo passaggio in (1.32) richiede una fattorizzazione per la quale ci si limita a rimandare al libro di Fletcher [2020] da cui questa teoria è tratta. In maniera analoga ai gradi polinomiali precedenti, lo schema risulta essere incondizionatamente stabile. Dal grafico 1.14 di $|F_3|$ contro α si può ritrovare un'analogia con la dinamica mostrata in 1.10, con la differenza di una riduzione molto più rapida dell'errore diffusivo al crescere della lunghezza d'onda grazie al maggiore grado polinomiale utilizzato.

Con un procedimento analogo a quanto visto per l'interpolazione lineare e quadratica, si

può studiare l'errore di fase da

$$R_3(\alpha, k) = \frac{p}{p + \alpha} + \frac{1}{(p + \alpha)k\Delta x} \tan^{-1} \left(\frac{\alpha \sin k\Delta x \left(1 + \frac{(1 - \cos(k\Delta x))(1 - \alpha^2)}{3} \right)}{1 - (1 - \cos(k\Delta x))\alpha^2 - \frac{(1 - \cos(k\Delta x))^2 \alpha (1 - \alpha^2)}{3}} \right). \quad (1.33)$$

Paragonando 1.15 con le figure 1.11 e 1.13 si può riconoscere la stessa struttura della frequenza relativa, ma a differenza del caso quadratico, il terzo grado polinomiale offre una convergenza di R_3 ad 1 significativamente più rapida, in accordo con il minore errore di fase osservato nelle simulazioni fatte.

In conclusione si può affermare la seguente Proposizione.

Proposizione 1 *Dato un interpolatore $\mathbb{I}[u]$ basato sull'uso di polinomi interpolanti di Lagrange di grado $i = 1, 2, 3$, definita α la distanza normalizzata tra il punto di interpolazione e il primo nodo di griglia alla sua destra e definito p il numero di intervalli Δx compresi tra punto di partenza e arrivo della retta caratteristica d'interesse, valgono i seguenti risultati:*

- *Indipendentemente dal grado polinomiale adottato, l'interpolatore risulta essere incondizionatamente stabile e non si ha la presenza di errori numerici se e solo se il punto in cui si effettua l'interpolazione coincide con un nodo ($\alpha = 1$). Se invece $\alpha \neq 1$, l'interpolatore causa un errore numerico di cui si distinguono un contributo diffusivo ed uno dispersivo,*
- *Per ogni $i=1, 2, 3$ la velocità della diffusione numerica cresce al diminuire della lunghezza d'onda, mentre l'entità dell'errore dispersivo cresce al diminuire della lunghezza d'onda e all'aumentare di p ,*
- *Se $i=1$ e $\alpha \neq 1$, l'intensità della diffusione numerica cresce anche al tendere della distanza normalizzata α a 0.5,*
- *Se $i=2$ e $\alpha \neq 1$, l'intensità della diffusione numerica cresce anche al tendere della distanza normalizzata α a $\pm \frac{1}{\sqrt{2}}$. Inoltre l'errore diffusivo diminuisce più rapidamente al crescere della lunghezza d'onda rispetto a quanto si verifica nel caso con $i = 1$,*
- *Se $i=3$ e $\alpha \neq 1$, l'intensità della diffusione numerica cresce anche al tendere della distanza normalizzata α a 0.5. Inoltre l'errore diffusivo diminuisce più rapidamente al crescere della lunghezza d'onda e l'errore dispersivo si riduce più velocemente per p crescente rispetto a quanto si verifica nei casi con $i = 1, 2$.*

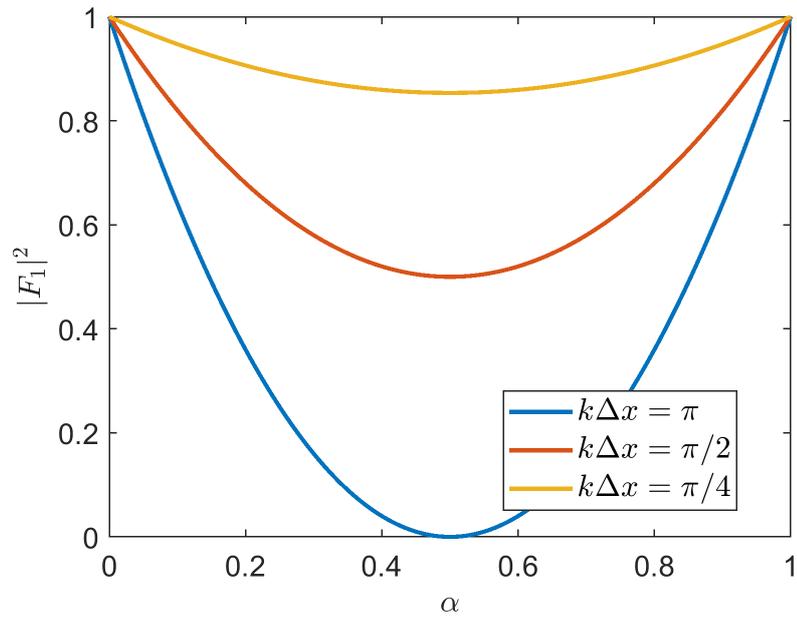


Figura 1.10: Fattore di amplificazione in funzione di α al variare della frequenza $k\Delta x$ nel caso di interpolazione lineare

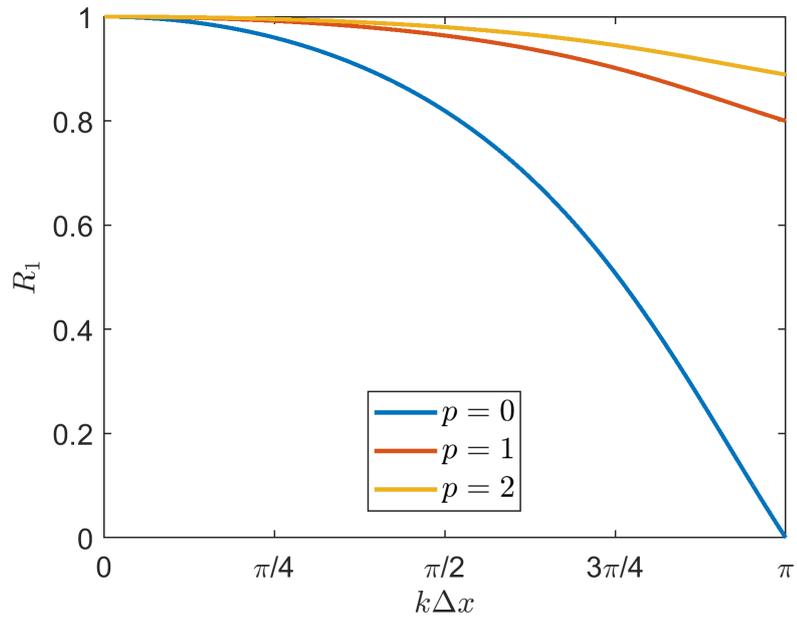


Figura 1.11: Frequenza relativa in funzione della frequenza $k\Delta x$ al variare di p nel caso di interpolazione lineare

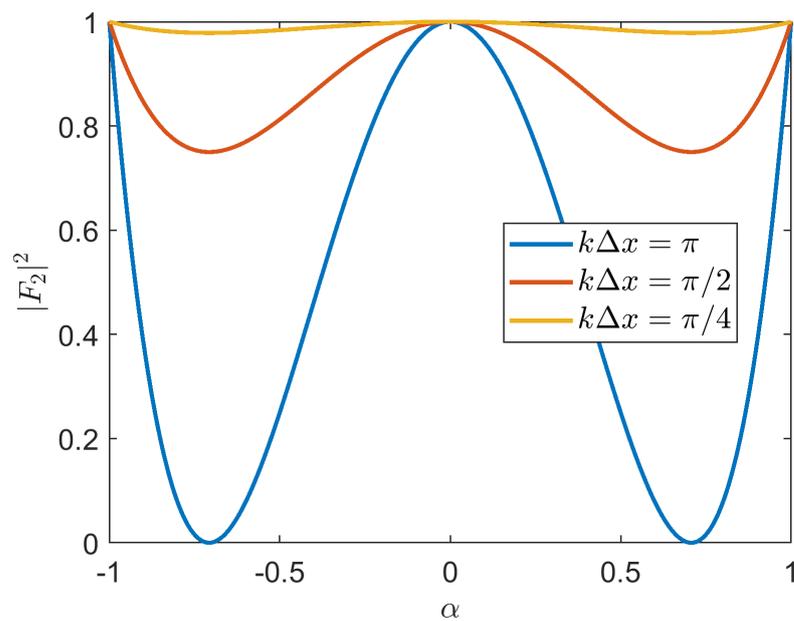


Figura 1.12: Fattore di amplificazione in funzione di α al variare della frequenza $k\Delta x$ nel caso di interpolazione quadratica

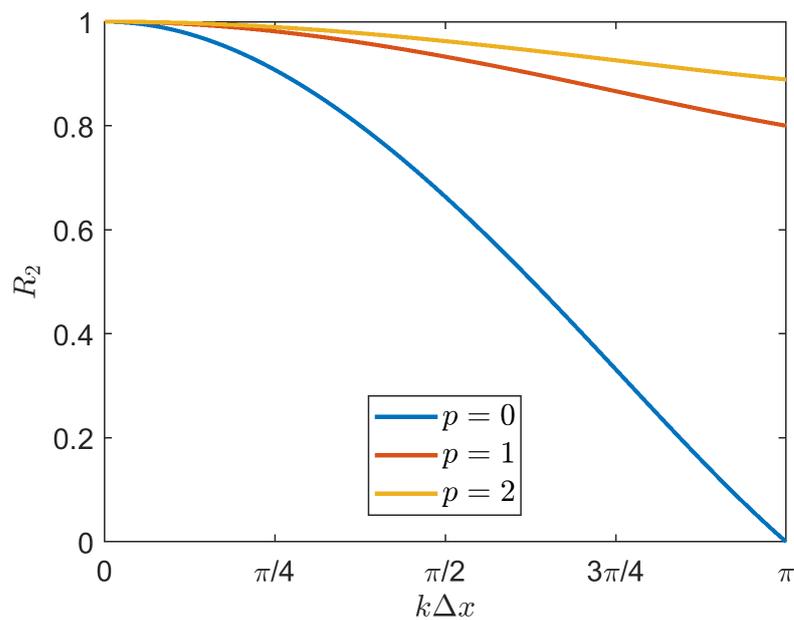


Figura 1.13: Frequenza relativa in funzione della frequenza $k\Delta x$ al variare di p nel caso di interpolazione quadratica

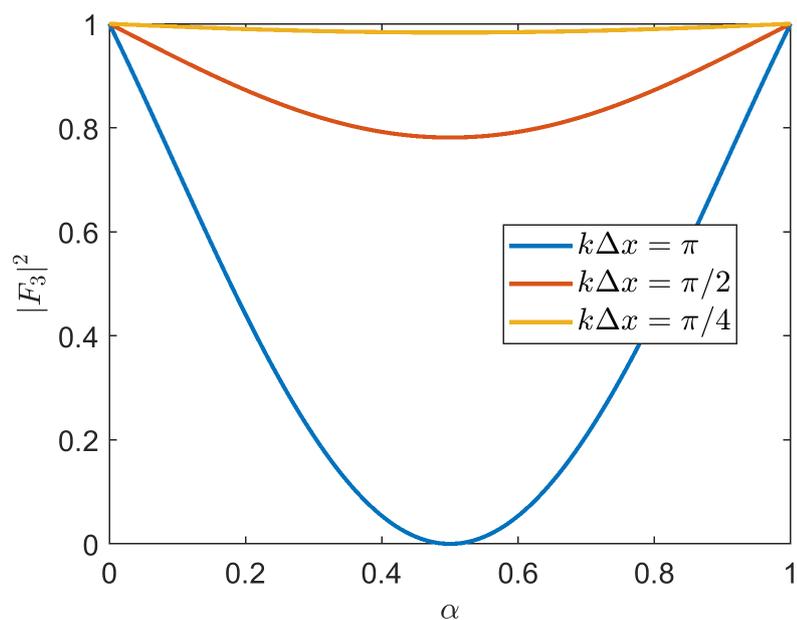


Figura 1.14: Fattore di amplificazione in funzione di α al variare della frequenza $k\Delta x$ nel caso di interpolazione cubica

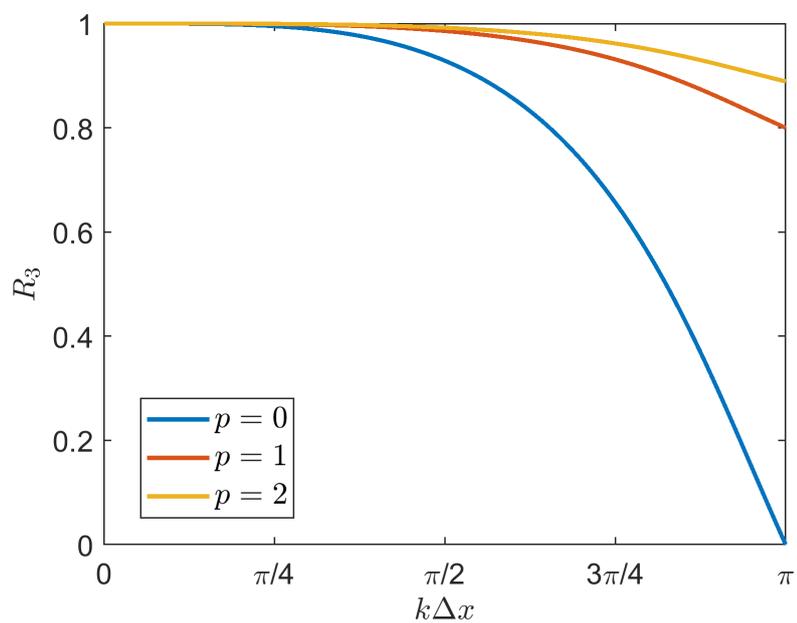


Figura 1.15: Frequenza relativa in funzione della frequenza $k\Delta x$ al variare di p nel caso di interpolazione cubica

Analisi della consistenza

La dimostrazione della consistenza degli schemi trattati qui presentata espande quanto riportato in Fletcher [2020]. Per ottenerla, bisogna innanzitutto sviluppare $u(x, t)$ in serie di Taylor attorno ai punti $(0, t)$ e $(x, 0)$. Passando temporaneamente ad una notazione più compatta per le derivate $\frac{\partial \cdot}{\partial x} = [\cdot]_x$ e $\frac{\partial \cdot}{\partial t} = [\cdot]_t$, i due sviluppi diventano

$$u(x, t) = u(0, t) + u_x(0, t)x + u_{xx}(0, t)\frac{x^2}{2} + u_{xxx}(0, t)\frac{x^3}{6} + O(x^4) \quad (1.34)$$

e

$$u(x, t) = u(x, 0) + u_t(x, 0)t + u_{tt}(x, 0)\frac{t^2}{2} + u_{ttt}(x, 0)\frac{t^3}{6} + O(t^4). \quad (1.35)$$

Sostituendo le relazioni (1.34)-(1.35) nello schema (1.5) e sfruttando l'equivalenza tra le due espressioni della distanza percorsa lungo una caratteristica

$$(p + \alpha)\Delta x = c\Delta t, \quad (1.36)$$

si ottiene dunque nel caso lineare

$$\begin{aligned} u_j^n + (u_t)_j^n \Delta t + O(\Delta t^2) &= (1 - \alpha) \left[u_j^n + (u_x)_j^n (-p\Delta x) + \frac{1}{2} (u_{xx})_j^n (-p\Delta x)^2 + \right. \\ &\quad \left. + O(\Delta x^3) \right] + \alpha \left[u_j^n + (u_x)_j^n ((-p - 1)\Delta x) + \frac{1}{2} (u_{xx})_j^n ((-p - 1)\Delta x)^2 + O(\Delta x^3) \right], \end{aligned} \quad (1.37)$$

$$\begin{aligned} (u_t)_j^n &= (u_x)_j^n \left[(1 - \alpha)(-p) + \alpha(-p - 1) \right] \frac{\Delta x}{\Delta t} + \\ &\quad + \frac{1}{2} (u_{xx})_j^n \left[(1 - \alpha)(-p)^2 + \alpha(-p - 1)^2 \right] \frac{\Delta x^2}{\Delta t} + O(\Delta t) + O\left(\frac{\Delta x^3}{\Delta t}\right) = \\ &= -(u_x)_j^n (p + \alpha) \frac{\Delta x}{\Delta t} + (u_{xx})_j^n K_1 \frac{\Delta x^2}{\Delta t} + O(\Delta t) + O\left(\frac{\Delta x^3}{\Delta t}\right), \end{aligned} \quad (1.38)$$

$$(u_t)_j^n + c(u_x)_j^n = (u_{xx})_j^n K_1 \frac{\Delta x^2}{\Delta t} + O(\Delta t) + O\left(\frac{\Delta x^3}{\Delta t}\right). \quad (1.39)$$

Nell'espressione precedente possiamo identificare a primo membro l'equazione di trasporto esatta (1.1) valutata nel punto (x_j, t^n) , il che conferma la consistenza dello schema con un errore di ordine $O(\Delta t)$ e $O\left(\frac{\Delta x^2}{\Delta t}\right)$. Nello specifico, il termine più significativo di $O\left(\frac{\Delta x^2}{\Delta t}\right)$ risulta essere $(u_{xx})_j^n K_1 \frac{\Delta x^2}{\Delta t}$, in cui il coefficiente in α e p è stato riassunto tramite K_1 . In seguito verrà fatta un'analisi di questo termine in modo identificare un ordine di consistenza nel solo passo spaziale Δx . Dato però che quest'analisi è comune per i tre schemi visti, verrà trattata al termine di questa sezione.

Passando ora alla consistenza per lo schema con interpolazione quadratica, analogamente

a quanto già visto, da (1.6) si ottiene l'espressione

$$\begin{aligned}
 u_j^n + (u_t)_j^n \Delta t + \frac{1}{2}(u_{tt})_j^n \Delta t^2 + O(\Delta t^3) &= \frac{\alpha(\alpha+1)}{2} \left[u_j^n + (u_x)_j^n ((-p-1)\Delta x) + \right. \\
 &+ \frac{1}{2}(u_{xx})_j^n ((-p-1)\Delta x)^2 + \frac{1}{6}(u_{xxx})_j^n ((-p-1)\Delta x)^3 + O(\Delta x^4) \left. \right] + \\
 &+ (1-\alpha^2) \left[u_j^n + (u_x)_j^n (-p\Delta x) + \frac{1}{2}(u_{xx})_j^n (-p\Delta x)^2 + \frac{1}{6}(u_{xxx})_j^n (-p\Delta x)^3 + \right. \\
 &+ O(\Delta x^4) \left. \right] + \frac{\alpha(\alpha-1)}{2} \left[u_j^n + (u_x)_j^n ((-p+1)\Delta x) + \frac{1}{2}(u_{xx})_j^n ((-p+1)\Delta x)^2 + \right. \\
 &+ \left. \frac{1}{6}(u_{xxx})_j^n ((-p+1)\Delta x)^3 + O(\Delta x^4) \right], \tag{1.40}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (u_t)_j^n + \frac{1}{2}(u_{tt})_j^n \Delta t &= (u_x)_j^n \left[\frac{\alpha(\alpha+1)}{2}(-p-1) + (1-\alpha^2)(-p) + \right. \\
 &+ \left. \frac{\alpha(\alpha-1)}{2}(-p+1) \right] \frac{\Delta x}{\Delta t} + \frac{1}{2}(u_{xx})_j^n \left[\frac{\alpha(\alpha+1)}{2}(-p-1)^2 + (1-\alpha^2)(-p)^2 + \right. \\
 &+ \left. \frac{\alpha(\alpha-1)}{2}(-p+1)^2 \right] \frac{\Delta x^2}{\Delta t} + \frac{1}{6}(u_{xxx})_j^n \left[\frac{\alpha(\alpha+1)}{2}(-p-1)^3 + (1-\alpha^2)(-p)^3 + \right. \\
 &+ \left. \frac{\alpha(\alpha-1)}{2}(-p+1)^3 \right] \frac{\Delta x^3}{\Delta t} + O(\Delta t^2) + O\left(\frac{\Delta x^4}{\Delta t}\right) = \\
 &= -(u_x)_j^n (p+\alpha) \frac{\Delta x}{\Delta t} + \frac{1}{2}(u_{xx})_j^n (p+\alpha)^2 \frac{\Delta x^2}{\Delta t^2} \Delta t + (u_{xxx})_j^n K_2 \frac{\Delta x^3}{\Delta t} + \\
 &+ O(\Delta t^2) + O\left(\frac{\Delta x^4}{\Delta t}\right), \tag{1.41}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \left((u_t)_j^n + c(u_x)_j^n \right) + \frac{\Delta t}{2} \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} - c \frac{\partial}{\partial x} \right) \left((u_t)_j^n + c(u_x)_j^n \right) \right] &= \\
 = (u_{xxx})_j^n K_2 \frac{\Delta x^3}{\Delta t} + O(\Delta t^2) + O\left(\frac{\Delta x^4}{\Delta t}\right). \tag{1.42}
 \end{aligned}$$

Nella relazione precedente è possibile identificare due volte l'equazione esatta, dunque l'espressione, e con essa la consistenza dello schema, è soddisfatta con un errore di ordine $O(\Delta t^2)$ e $O\left(\frac{\Delta x^3}{\Delta t}\right)$.

Infine la consistenza dello schema cubico si ricava dalla sostituzione degli sviluppi di Taylor

nella relazione (1.7), da cui

$$\begin{aligned}
 u_j^n + (u_t)_j^n \Delta t + \frac{1}{2}(u_{tt})_j^n \Delta t^2 + \frac{1}{6}(u_{ttt})_j^n \Delta t^3 + O(\Delta t^4) = & -\frac{\alpha(1-\alpha^2)}{6} \left[u_j^n + \right. \\
 & + (u_x)_j^n ((-p-2)\Delta x) + \frac{1}{2}(u_{xx})_j^n ((-p-2)\Delta x)^2 + \frac{1}{6}(u_{xxx})_j^n ((-p-2)\Delta x)^3 + \\
 & + \frac{1}{24}(u_{xxxx})_j^n ((-p-2)\Delta x)^4 + O(\Delta x^5) \left. \right] + \frac{\alpha(1+\alpha)(2-\alpha)}{2} \left[u_j^n + \right. \\
 & + (u_x)_j^n ((-p-1)\Delta x) + \frac{1}{2}(u_{xx})_j^n ((-p-1)\Delta x)^2 + \frac{1}{6}(u_{xxx})_j^n ((-p-1)\Delta x)^3 + \\
 & + \frac{1}{24}(u_{xxxx})_j^n ((-p-1)\Delta x)^4 + O(\Delta x^5) \left. \right] + \frac{(1-\alpha^2)(2-\alpha)}{2} \left[u_j^n + \right. \\
 & + (u_x)_j^n (-p\Delta x) + \frac{1}{2}(u_{xx})_j^n (-p\Delta x)^2 + \frac{1}{6}(u_{xxx})_j^n (-p\Delta x)^3 + \\
 & + \frac{1}{24}(u_{xxxx})_j^n (-p\Delta x)^4 + O(\Delta x^5) \left. \right] + \frac{\alpha(\alpha-1)(2-\alpha)}{2} \left[u_j^n + \right. \\
 & + (u_x)_j^n ((-p+1)\Delta x) + \frac{1}{2}(u_{xx})_j^n ((-p+1)\Delta x)^2 + \frac{1}{6}(u_{xxx})_j^n ((-p+1)\Delta x)^3 + \\
 & + \left. \frac{1}{24}(u_{xxxx})_j^n ((-p+1)\Delta x)^4 + O(\Delta x^5) \right], \tag{1.43}
 \end{aligned}$$

$$(u_t)_j^n + \frac{1}{2}(u_{tt})_j^n \Delta t + \frac{1}{6}(u_{ttt})_j^n \Delta t^2 = (u_x)_j^n \left[-\frac{\alpha(1-\alpha^2)}{6}(-p-2) + \right. \tag{1.44}$$

$$\left. + \frac{\alpha(1+\alpha)(2-\alpha)}{2}(-p-1) + \frac{(1-\alpha^2)(2-\alpha)}{2}(-p) + \right. \tag{1.45}$$

$$\left. + \frac{\alpha(\alpha-1)(2-\alpha)}{2}(-p+1) \right] \frac{\Delta x}{\Delta t} + (u_{xx})_j^n \left[-\frac{\alpha(1-\alpha^2)}{6}(-p-2)^2 + \right. \tag{1.46}$$

$$\left. + \frac{\alpha(1+\alpha)(2-\alpha)}{2}(-p-1)^2 + \frac{(1-\alpha^2)(2-\alpha)}{2}(-p)^2 + \right. \tag{1.47}$$

$$\left. + \frac{\alpha(\alpha-1)(2-\alpha)}{2}(-p+1)^2 \right] \frac{\Delta x^2}{\Delta t} + (u_{xxx})_j^n \left[-\frac{\alpha(1-\alpha^2)}{6}(-p-2)^3 + \right. \tag{1.48}$$

$$\left. + \frac{\alpha(1+\alpha)(2-\alpha)}{2}(-p-1)^3 + \frac{(1-\alpha^2)(2-\alpha)}{2}(-p)^3 + \right. \tag{1.49}$$

$$\left. + \frac{\alpha(\alpha-1)(2-\alpha)}{2}(-p+1)^3 \right] \frac{\Delta x^3}{\Delta t} + (u_{xxxx})_j^n \left[-\frac{\alpha(1-\alpha^2)}{6}(-p-2)^4 + \right. \tag{1.50}$$

$$\left. + \frac{\alpha(1+\alpha)(2-\alpha)}{2}(-p-1)^4 + \frac{(1-\alpha^2)(2-\alpha)}{2}(-p)^4 + \right. \tag{1.51}$$

$$\left. + \frac{\alpha(\alpha-1)(2-\alpha)}{2}(-p+1)^4 \right] \frac{\Delta x^4}{\Delta t} + O(\Delta t^3) + O\left(\frac{\Delta x^5}{\Delta t}\right) = \tag{1.52}$$

$$= -(u_x)_j^n (p + \alpha) \frac{\Delta x}{\Delta t} + \frac{1}{2} (u_{xx})_j^n (p + \alpha)^2 \frac{\Delta x^2}{\Delta t^2} \Delta t + \quad (1.53)$$

$$- \frac{1}{6} (u_{xxx})_j^n (p + \alpha)^3 \frac{\Delta x^3}{\Delta t^3} \Delta t^2 + (u_{xxxx})_j^n K_3 \frac{\Delta x^4}{\Delta t} + O(\Delta t^3) + O\left(\frac{\Delta x^5}{\Delta t}\right), \quad (1.54)$$

$$\begin{aligned} & \left((u_t)_j^n + c(u_x)_j^n \right) + \frac{\Delta t}{2} \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} - c \frac{\partial}{\partial x} \right) \left((u_t)_j^n + c(u_x)_j^n \right) \right] + \\ & + \frac{\Delta t^2}{6} \left[\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - c \frac{\partial^2}{\partial t \partial x} + c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \left((u_t)_j^n + c(u_x)_j^n \right) \right] = \quad (1.55) \\ & = (u_{xxxx})_j^n K_3 \frac{\Delta x^4}{\Delta t} + O(\Delta t^3) + O\left(\frac{\Delta x^5}{\Delta t}\right). \end{aligned}$$

Nuovamente, la presenza dell'equazione esatta conferma la consistenza dello schema con un errore di ordine $O(\Delta t^3)$ e $O\left(\frac{\Delta x^4}{\Delta t}\right)$.

Concludiamo la trattazione della consistenza analizzando i termini della forma

$$\left(\frac{\partial^{i+1} u}{\partial x^{i+1}} \right)_j^n K_i \frac{\Delta x^{i+1}}{\Delta t}, \quad (1.56)$$

con i pari al grado del polinomio interpolante dello schema.

I risultati finora ottenuti possono essere riassunti nella seguente proposizione.

Proposizione 2 *Dato un interpolatore $\mathbb{I}[u]$ basato sull'uso di polinomi interpolanti di Lagrange di grado $i = 1, 2, 3$, lo schema (1.3) che esso determina è consistente con ordini $O(\Delta t^i)$ e $O\left(\frac{\Delta x^{i+1}}{\Delta t}\right)$.*

Osservazione 1 *Dati Δt e Δx , esistono tre possibili modi in cui essi possono tendere a zero relativamente tra loro:*

- Se $\Delta t, \Delta x \rightarrow 0$ e $\frac{\Delta t}{\Delta x} \rightarrow 0$, allora si verifica che il passo temporale diventa troppo breve affinché le rette caratteristiche possano attraversare interi intervalli Δx durante un Δt , dunque $p \rightarrow 0$. Ricordando (1.36), si ha allora $\alpha \rightarrow c \frac{\Delta t}{\Delta x}$. In questo caso limite, i coefficienti K_i tendono così a $\pm c \frac{\Delta t}{\Delta x}$, da cui segue che $O\left(\frac{\Delta x^{i+1}}{\Delta t}\right)$ si riduce a $O(\Delta x^i)$
- Se $\Delta t, \Delta x \rightarrow 0$ e $\frac{\Delta t}{\Delta x} \rightarrow \text{cost.}$, allora semplicemente $O\left(\frac{\Delta x^{i+1}}{\Delta t}\right)$ equivale a $O(\Delta x^i)$
- Se $\Delta t, \Delta x \rightarrow 0$ e $\frac{\Delta x}{\Delta t} \rightarrow 0$, allora gli intervalli spaziali diventano molto più piccoli della distanza percorsa lungo la caratteristica. Ciò significa che $|c| \frac{\Delta t}{\Delta x} \gg |\alpha|$ e $p \rightarrow c \frac{\Delta t}{\Delta x}$. I coefficienti K_i tendono allora a $\left(-c \frac{\Delta t}{\Delta x}\right)^{i+1}$, il che porta $O\left(\frac{\Delta x^{i+1}}{\Delta t}\right)$ a coincidere con $O(\Delta t^i)$. Essendo che in questo caso la dimensione del passo temporale è molto maggiore di quella del passo spaziale, si può concludere che l'ordine di consistenza spaziale è $O(\Delta x^i)$.

In tutti i casi trattati si verifica dunque che l'ordine spaziale degli schemi è pari al grado del polinomio interpolante adottato.

Una volta verificate stabilità e consistenza degli schemi introdotti, la loro convergenza è garantita dal Teorema di equivalenza di Lax.

Teorema 1 (Teorema di equivalenza di Lax) *Dato un problema alle derivate parziali ben posto, uno schema numerico alle differenze finite associato a tale problema è convergente se e solo se è stabile e consistente.*

1.2.2 Diffusione

Introduzione allo schema

Passiamo ora ad un fenomeno di pura diffusione 1D. Il problema in questione è descritto dall'equazione

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \mu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \quad (1.57)$$

in cui viene introdotto il coefficiente di diffusione $\mu \in \mathbb{R}$. Analogamente al problema di trasporto, in seguito ad una semi-discretizzazione temporale di passo Δt l'approccio semi-Lagrangiano consiste nell'identificare delle rette caratteristiche lungo cui le particelle si spostano durante ogni passo temporale. Mentre nel caso di trasporto lineare lo spostamento $c\Delta t$ derivava direttamente dalla presenza di una velocità c , nel fenomeno attuale bisogna ricorrere alla teoria del moto Browniano, secondo cui è possibile definire uno spostamento medio per diffusione delle particelle $\delta = \sqrt{2\Delta t\mu}$ (Figura 1.16). Poiché la diffusione causa moto in ogni direzione, da ogni punto dello spazio partono due caratteristiche che si allontanano tra loro e ciò significa che il valore della variabile in un dato (x, t^{n+1}) è dovuto alla combinazione di due informazioni che convergono in esso provenienti da due punti spaziali distinti in t^n . Questo ragionamento permette di costruire il seguente schema approssimato

$$u(x, t^{n+1}) \approx \frac{1}{2}u(x + \delta, t^n) + \frac{1}{2}u(x - \delta, t^n). \quad (1.58)$$

Come espresso nell'equazione precedente, il valore della variabile non si sposta invariato lungo entrambe le caratteristiche che partono da un dato punto, ma per ragioni di conservazione viene diviso equamente tra esse. Poiché in seguito all'aggiunta di una semi-discretizzazione in spazio le informazioni alla base delle caratteristiche non sono note, analogamente a (1.3) si introduce un interpolatore, il che porta allo schema

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{2}\mathbb{I}[u(t^n)](x_j + \delta) + \frac{1}{2}\mathbb{I}[u(t^n)](x_j - \delta). \quad (1.59)$$

Dallo studio della diffusione di una funzione a campana si può osservare come la scelta del grado polinomiale all'interno dell'interpolatore determini errori numerici analoghi a quelli visti nello studio del problema di trasporto (Figure 1.17, 1.18, 1.19). Mentre nel caso del trasporto tali errori erano riconoscibili in quanto generavano dinamiche non fisiche, la

presenza di diffusione numerica nel caso attuale può accelerare il fenomeno in maniera non evidente. Dunque per le simulazioni successive all'interno di questo lavoro che faranno uso dello schema (1.59) verrà sempre utilizzato un grado polinomiale almeno superiore al primo.

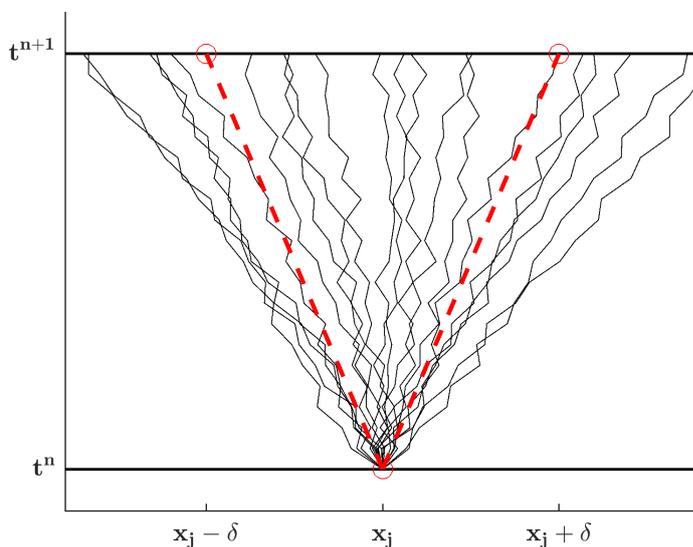


Figura 1.16: Rappresentazione del moto casuale di particelle che partono dal nodo x_j al tempo t^n . Al tempo t^{n+1} si ottiene uno spostamento medio verso sinistra e verso destra pari a δ secondo la relazione $\delta = \sqrt{2\Delta t\mu}$

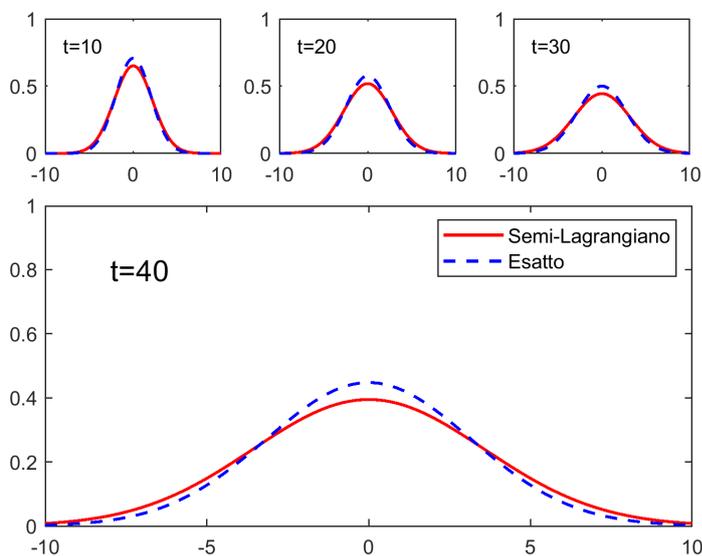


Figura 1.17: Diffusione di una curva a campana (1.8) con $\mu=1$, $\Delta x=0.5$, $\Delta t=0.1$ e interpolazione lineare

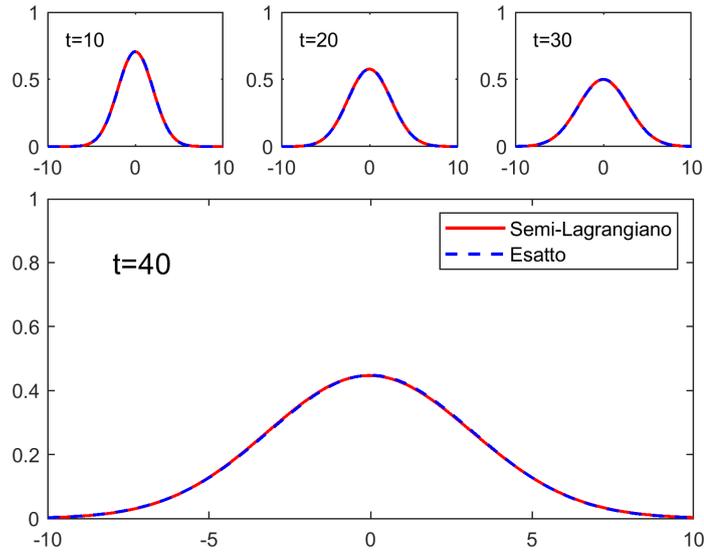


Figura 1.18: Diffusione di una curva a campana (1.8) con $\mu=1$, $\Delta x=0.5$, $\Delta t=0.1$ e interpolazione quadratica

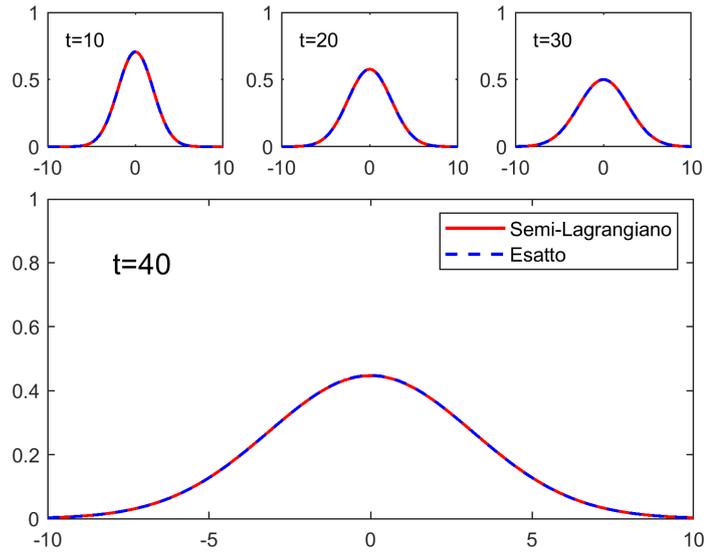


Figura 1.19: Diffusione di una curva a campana (1.8) con $\mu=1$, $\Delta x=0.5$, $\Delta t=0.1$ e interpolazione cubica

Analisi di stabilità e consistenza

Confrontando (1.3) e (1.59), si può notare che lo schema per la diffusione può essere interpretato come una combinazione convessa di schemi per il trasporto lineare. La stabilità trattata per (1.3) può essere dunque ereditata dallo schema (1.59) in maniera diretta.

Lo studio della consistenza in spazio ricalca quello visto per il trasporto lineare con l'aggiunta di una combinazione convessa, per cui rimane che l'ordine di consistenza spaziale è pari al grado polinomiale di interpolazione. Per quanto riguarda invece lo studio della consistenza temporale, si può partire dall'espressione (1.58) successiva alla semi-discretizzazione in tempo e generalizzarla per una combinazione lineare qualsiasi dei termini presenti, da cui segue l'espressione approssimata

$$u(x, t^{n+1}) \approx A^+ u(x + \delta, t^n) + A^- u(x - \delta, t^n), \quad (1.60)$$

in cui $A^\pm = A^\pm(x)$ e $\delta = \delta(x)$. Gli sviluppi di Taylor da utilizzare sono

$$u(x \pm \delta, t^n) = u \pm u_x \delta + \frac{1}{2} u_{xx} \delta^2 \pm \frac{1}{6} u_{xxx} \delta^3 + O(\delta^4) \quad (1.61)$$

e

$$u(x, t^{n+1}) = u + u_t \Delta t + O(\Delta t^2) = u + \mu u_{xx} \Delta t + O(\Delta t^2), \quad (1.62)$$

nei quali è stata omessa la dipendenza di u, \dots, u_{xxx} da (x, t^n) . Dalla loro sostituzione in (1.60) si ottiene

$$u + \nu \Delta t u_{xx} + O(\Delta t^2) = (A^+ + A^-) u + (A^+ - A^-) \delta u_x + \frac{1}{2} (A^+ + A^-) \delta^2 u_{xx} + \quad (1.63)$$

$$+ \frac{1}{6} (A^+ - A^-) \delta^3 u_{xxx} + O(\delta^4). \quad (1.64)$$

La consistenza è verificata se si ha la coincidenza tra i coefficienti delle derivate di u tra i due membri dell'equazione. Questo permette di identificare le relazioni

$$\begin{cases} A^+ + A^- = 1 + O(\Delta t^2) & (1.65a) \\ (A^+ + A^-) \delta^2 = 2\mu \Delta t + O(\Delta t^2) & (1.65b) \\ (A^+ - A^-) (\delta + \delta^3) = O(\Delta t^2). & (1.65c) \end{cases}$$

Date le tre condizioni per la consistenza di una generica espressione (1.60), torniamo al problema in esame per $A^+ = A^- = \frac{1}{2}$ e $\delta = \sqrt{2\mu \Delta t}$. A questo punto, la verifica del sistema (1.65) risulta immediato. Si noti inoltre che si ha anche $O(\delta^4)$ pari a $O(\Delta t^2)$, in quanto sappiamo che $\delta \propto \sqrt{\Delta t}$. In conclusione, si ha che lo schema trattato è consistente in tempo. A differenza però da quanto visto per la convezione lineare in cui l'ordine era dato dal grado polinomiale di interpolazione, in questo caso si può solamente ottenere un primo ordine di consistenza in tempo.

Osservazione 2 (Combinazione con un problema di trasporto)

In caso di un problema misto trasporto-diffusione descritto da un'equazione

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} - \mu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \quad (1.66)$$

la linearità permette una naturale combinazione degli schemi visti. Ciò significa che

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{2} \mathbb{I}[u(t^n)](x_j - c\Delta t + \delta) + \frac{1}{2} \mathbb{I}[u(t^n)](x_j - c\Delta t - \delta). \quad (1.67)$$

1.3 Caso non uniforme

1.3.1 Trasporto

Molti problemi fisici di trasporto presentano un campo di velocità $c(x, t)$ variabile in spazio e tempo, dunque è di maggiore interesse trattare una generalizzazione di quanto visto in precedenza. Diversamente dal caso uniforme, in un problema della forma

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c(x, t) \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (1.68)$$

le caratteristiche non sono più rette, ma sono curve generiche determinate dall'equazione differenziale

$$\frac{dx}{dt} = c(x, t). \quad (1.69)$$

Integrando l'equazione precedente in un intervallo temporale $[t, t + \Delta t]$ si ottiene

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \int_t^{t+\Delta t} c(x(\tau), \tau) d\tau. \quad (1.70)$$

Chiaramente, se c fosse costante si otterrebbe il risultato noto $x(t + \Delta t) = x(t) + c\Delta t$, ma quando ciò non si verifica diventa necessario approssimare l'integrale. L'approccio più utilizzato consiste nel sostituire $c(x, t)$ con una costante pari ad uno dei valori che esso ha assunto lungo il tratto $[x(t), x(t + \Delta t)] = [\tilde{x}_j, x_j]$. Si noti che ciò introduce una nuova fonte di errore nello schema, in quanto il punto di partenza della caratteristica in cui viene interpolata la variabile non sarà più esatto.

L'approccio più semplice è quello di Eulero esplicito, il quale consiste nel porre la velocità pari al suo valore nel punto di arrivo noto all'istante attuale. Lo schema esplicito che ne consegue è

$$\tilde{x}_j = x_j - c(x_j, t^n) \Delta t. \quad (1.71)$$

Si può dimostrare che questa scelta molto semplice garantisce solamente un primo ordine di accuratezza in tempo, per cui sono stati ideati schemi di ordine maggiore. Uno di essi è descritto da

$$\tilde{x}_j = x_j - c\left(\frac{\tilde{x}_j + x_j}{2}, t^{n+\frac{1}{2}}\right) \Delta t, \quad (1.72)$$

nel quale l'obiettivo è ottenere un'approssimazione della velocità nel punto medio della caratteristica. Si dimostra che questo schema offre un secondo ordine in tempo, ma richiede di essere risolto con un approccio iterativo, trattandosi di un'espressione implicita. Un approccio che mantiene il secondo ordine pur essendo esplicito è il metodo a due passi di Runge-Kutta. Dallo schema che segue

$$\begin{aligned} x_* &= x_j + c(x_j, t^n) \frac{\Delta t}{2} \\ \tilde{x}_j &= x_j + c(x_*, t^{n+\frac{1}{2}}) \Delta t \end{aligned} \quad (1.73)$$

si può notare che esso costituisce un'approssimazione di (1.72), in quanto la velocità utilizzata per ricavare il punto di partenza è stata valutata in una stima del punto medio della caratteristica. Quest'ultima è stata ottenuta utilizzando la stessa definizione di velocità dello schema (1.71) per un tempo $\frac{\Delta t}{2}$.

Osservazione 3 *Finora si è supposto che si disponesse di una legge analitica per la velocità c , ma se fossero noti solamente i valori nei punti (x_j, t^n) allora le valutazioni espresse negli schemi precedenti possono essere sostituite da interpolazioni. In particolare, non conoscendo lo stato del sistema nel tempo t^{n+1} , le valutazioni fatte in $t^{n+\frac{1}{2}}$ possono essere stimate tramite estrapolazione. Per rimanere consistenti con l'ordine degli schemi visti, si è soliti utilizzare un'extrapolazione lineare del secondo ordine, secondo cui*

$$c(x, t^{n+\frac{1}{2}}) = \frac{3}{2}c(x, t^n) - \frac{1}{2}c(x, t^{n-1}). \quad (1.74)$$

1.3.2 Diffusione

Analogamente alla convezione, è possibile che il coefficiente di diffusione μ sia funzione di spazio e tempo, dando luogo ad un problema di diffusione non-uniforme della forma

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu(x, t) \frac{\partial u}{\partial x} \right). \quad (1.75)$$

In tal caso, secondo [Bonaventura and Ferretti \[2014\]](#) lo spostamento causato dalla diffusione segue dalla relazione implicita

$$\delta_j^\pm = \sqrt{2\Delta t \mu(x_j \pm \delta_j^\pm, t^n)}. \quad (1.76)$$

Tale espressione afferma che δ viene calcolato utilizzando per l'intera lunghezza della caratteristica un valore di μ costante scelto pari a quello nel punto di partenza. Poiché in ogni nodo x_j convergono due caratteristiche provenienti da due punti di partenza distinti e quindi associati a valori diversi di μ , le lunghezze di tali rette saranno generalmente diverse. Per questa ragione vengono distinti δ^- per indicare la distanza percorsa dalla caratteristica che giunge in x_j partendo da un punto alla sua sinistra e δ^+ associato alla caratteristica proveniente da destra. L'espressione precedente è una relazione implicita, in quanto i punti di partenza delle due caratteristiche sono incogniti, dunque va risolta tramite un metodo iterativo, come quello di bisezione. Dopo aver ottenuto le due lunghezze δ_j^\pm per ogni nodo x_j , lo schema semi-Lagrangiano equivalente a (1.59) nel caso di diffusore non-uniforme risulta essere

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{2}\mathbb{I}[u(t^n)](x_j + \delta_j^+) + \frac{1}{2}\mathbb{I}[u(t^n)](x_j - \delta_j^-). \quad (1.77)$$

Osservazione 4 *Dato un problema di trasporto e diffusione con c e μ non-uniformi, gli spostamenti causati dai due contributi possono essere ottenuti separatamente usando le relazioni trattate, analogamente al caso uniforme. Ciò comporta un errore di splitting del primo ordine, ma questo è compatibile con l'ordine del metodo visto per la diffusione.*

Osservazione 5 *Un caso di diffusione non lineare, espresso da un'equazione della forma*

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu(x, t, u) \frac{\partial u}{\partial x} \right), \quad (1.78)$$

può essere trattato allo stesso modo di un caso lineare non-uniforme, tramite la valutazione del coefficiente di diffusione μ nel punto di partenza della caratteristica. Benché di μ si abbia a disposizione la legge analitica, non è noto il valore di u in ogni punto spaziale, dunque è necessario ricorrere all'uso di un interpolatore $\mathcal{I}[u]$. Dunque, nel caso di diffusione non lineare, lo spostamento diffusivo δ^\pm può essere ottenuto dall'espressione

$$\delta_j^\pm = \sqrt{2\Delta t \mu(x_j \pm \delta_j^\pm, t^n, \mathbb{I}[u(t^n)](x_j \pm \delta_j^\pm))}. \quad (1.79)$$

1.4 Condizioni al contorno

Finora non sono state fatte ipotesi sul dominio spaziale, considerandolo di fatto illimitato o periodico. Questo permette alla base di ogni caratteristica di trovarsi all'interno del dominio, dove è noto il valore della variabile, e quindi risulta sempre possibile effettuare un'interpolazione di u in \tilde{x}_j . Quando il dominio è invece limitato diventa necessario poter ricostruire il valore della variabile alla base delle caratteristiche che escono da esso utilizzando le condizioni al contorno presenti. Introduciamo dunque per questa trattazione un dominio 1D limitato Ω di bordo $\partial\Omega = \{x_{sx}, x_{dx}\}$.

1.4.1 Dirichlet

Sia data una condizione al contorno di Dirichlet

$$u(\bar{x}, t) = k(t) \quad \bar{x} \in \partial\Omega, \quad \Omega \subset \mathcal{R} \quad (1.80)$$

esistono due approcci principali per la sua trattazione tramite il metodo semi-Lagrangiano:

1. Buffer zone

Un primo modo per gestire le caratteristiche che escono da Ω consiste nell'estendere il dominio tramite ghost nodes generando una cosiddetta buffer zone, la quale ricopre le basi di tutte le caratteristiche che si sviluppano oltre i bordi (Figura 1.20). Questo approccio si accoppia in modo naturale col metodo semi-Lagrangiano, in quanto non altera il processo di costruzione delle caratteristiche e interpolazione della variabile alla base di esse.

La condizione $k(t)$ imposta al bordo determina il valore di u che deve essere posto sui ghost nodes. Per trattare una condizione k costante in tempo è sufficiente assegnare $u = k$ su ogni nodo aggiunto. Nel caso di una condizione più generale funzione del tempo, tale attribuzione di valori diventa più complicata. L'uso di un'estrapolazione delle informazioni interne al dominio può far nascere instabilità nella simulazione, quindi è generalmente sconsigliata. Un approccio più stabile si basa sul fatto che per la buona positura del problema deve essere nota la legge analitica di $k(t)$, dunque da essa seguono le sue derivate in tempo che rappresentano le derivate di u sul bordo. Nel caso di un problema di trasporto a velocità costante, si possono dunque scrivere le relazioni

$$\frac{\partial u(\bar{x}, t)}{\partial x} = -\frac{1}{c} \frac{\partial u(\bar{x}, t)}{\partial t}, \quad \frac{\partial^2 u(\bar{x}, t)}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u(\bar{x}, t)}{\partial t^2}, \quad \dots \quad (1.81)$$

Espandendo in serie di Taylor il valore di u in un ghost node distante $l\Delta x$ da un punto del bordo \bar{x} e sostituendo le espressioni precedenti è dunque possibile ottenere la relazione

$$\begin{aligned} u(\bar{x} \pm l\Delta x, t) &= u(\bar{x}, t) \mp \frac{l\Delta x}{c} \frac{\partial u(\bar{x}, t)}{\partial t} + \frac{(l\Delta x)^2}{c^2} \frac{\partial^2 u(\bar{x}, t)}{\partial t^2} + O(\Delta x^3) = \\ &= k(t) \mp \frac{l\Delta x}{c} k'(t) + \frac{(l\Delta x)^2}{c^2} k''(t) + O(\Delta x^3) \end{aligned} \quad (1.82)$$

la quale permette così di assegnare i valori richiesti all'interno della buffer zone.

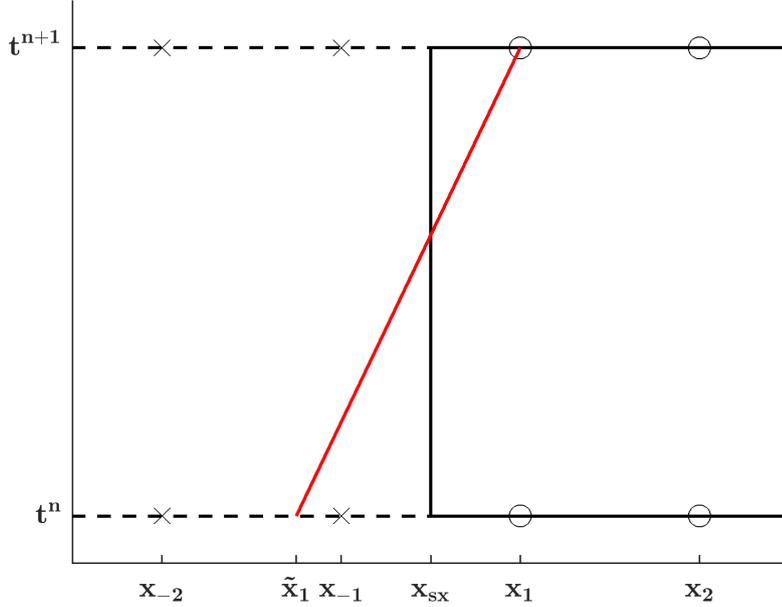


Figura 1.20: Estensione del dominio tramite i ghost nodes x_{-1} e x_{-2} per includere la base \tilde{x}_1 della caratteristica che oltrepassa il bordo sinistro x_{sx}

2. Troncamento delle caratteristiche

L'approccio alternativo all'estensione del dominio consiste nell'interrompere sul bordo le caratteristiche che lo attraversano (Figura 1.21). Poiché questo approccio non permette più di recuperare il valore della variabile alla base della caratteristica in (\tilde{x}, t^n) , è necessario sostituirlo col valore noto in un altro punto di essa. Sapendo che la caratteristica interseca il bordo \bar{x} ad un tempo \tilde{t} , allora grazie alla condizione di Dirichlet si può esprimere

$$u_j^{n+1} = k(\tilde{t}). \quad (1.83)$$

Il tempo \tilde{t} in cui la caratteristica interseca il bordo nel piano delle fasi dipende dal fenomeno trattato. Nel caso di una convezione lineare di velocità c , ad esempio, si ha che $\tilde{t} = t^{n+1} - \frac{1}{c}(x_j - \bar{x})$. Invece per un processo diffusivo lineare di coefficiente μ si può identificare $\tilde{t} = t^{n+1} - \frac{\Delta t}{\sqrt{2\mu\Delta t}}(x_j - \tilde{x})$.

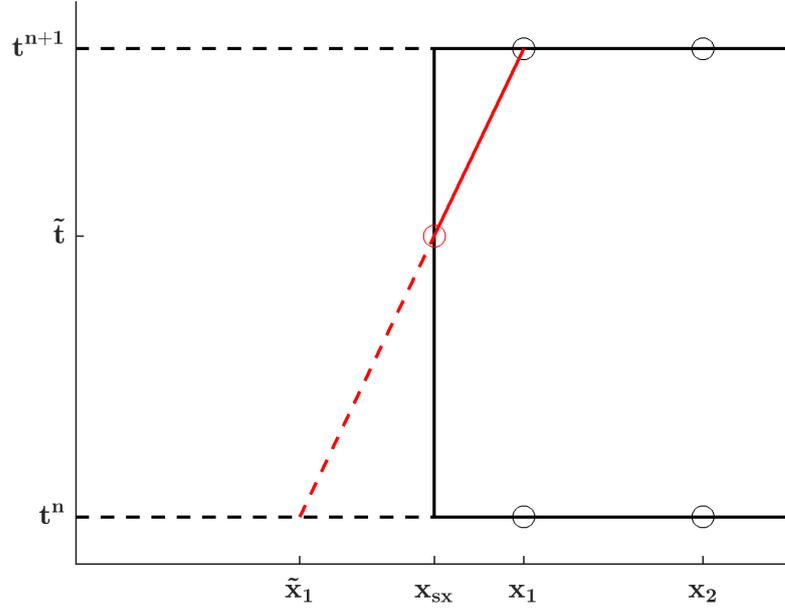


Figura 1.21: Troncatura della caratteristica con base \tilde{x}_1 oltre il bordo del dominio, identificando un'intersezione (x_{sx}, \tilde{t}) col bordo stesso

1.4.2 Neumann

Dato un generico problema di trasporto-diffusione

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(cu - \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) = 0 \quad (1.84)$$

una condizione di Neumann è espressa nella relazione

$$\left(cu(\bar{x}, t) - \mu \frac{\partial u(\bar{x}, t)}{\partial x} \right) \cdot n = k, \quad (1.85)$$

in cui n è la normale uscente al bordo $\partial\Omega$.

Un approccio classico per trattare condizioni di Neumann omogenee è quello di riflettere il problema studiato oltre il bordo, introducendo dei ghost points in cui il valore della variabile d'interesse è posto pari a quello nei nodi interni. Questo metodo, analogamente alla buffer zone introdotta per la condizione di Dirichlet, non richiede l'alterazione degli schemi semi-Lagrangiani introdotti e garantisce una derivata nulla al bordo.

Un metodo alternativo per trattare una condizione omogenea può essere definito analizzando ciò che accade utilizzando i ghost points. Dato un nodo x_j associato ad una caratteristica originata in \tilde{x}_j tale che, per esempio, si abbia $\tilde{x}_j < x_{sx} < x_j$, allora per riflessione del dominio oltre il bordo si avrà che il valore della variabile in \tilde{x}_j sarà pari a quello presente in $\bar{x} + (x_{sx} - \tilde{x}_j)$ interno al dominio. Dunque un'interpretazione alternativa al metodo dei ghost points si basa sulla riflessione non più del dominio oltre il bordo ma delle caratteristiche che lo intersecano, modificando la posizione del punto di partenza

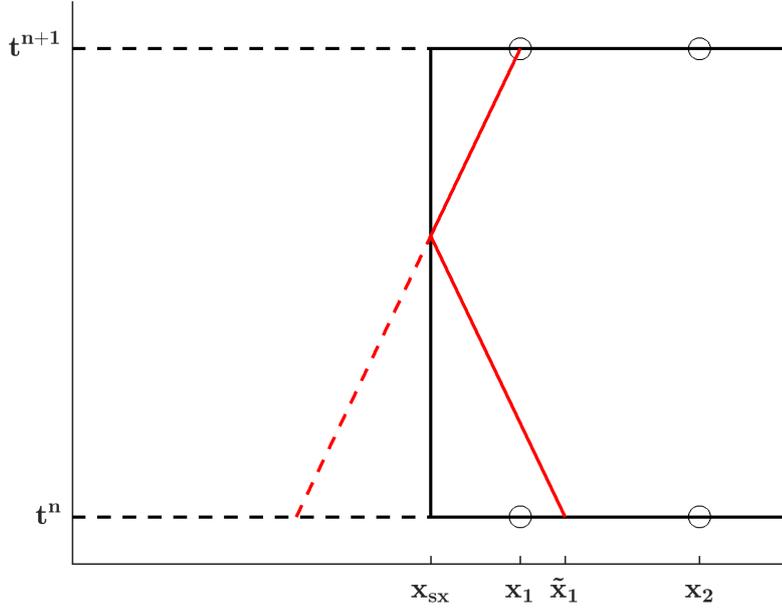


Figura 1.22: Riflessione speculare della caratteristica che interseca il bordo con condizione di Neumann omogenea, identificando una base \tilde{x}_1 interna al dominio

ottenuta in modo appropriato (Figura 1.22).

Il passaggio all'implementazione di una condizione di Neumann generale con $k = k(t)$ è tratto da un articolo di Calzola et al. [2021]. Il metodo proposto si basa sulla riflessione delle caratteristiche prima trattata e modifica l'attribuzione del valore di u_j^{n+1} introducendo un termine correttivo. Sia innanzitutto d_j la distanza di \tilde{x}_j da \bar{x} , definiamo

$$\tilde{d}_j = \begin{cases} 0 & \text{se } \tilde{x}_j \in \Omega \\ d_j + a\sqrt{\Delta t} & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (1.86)$$

con $a > 0$ una costante fissata. Il processo di riflessione utilizzato in questo articolo non tiene conto del valore di d_j per modificare la posizione del punto di partenza di una caratteristica che interseca il bordo, bensì lo riposiziona all'interno del dominio ad una distanza costante pari ad $a\sqrt{\Delta t}$ da \bar{x} (Figura 1.23). La posizione della base di una caratteristica può essere dunque riassunta come

$$\hat{x}_j = \begin{cases} \tilde{x}_j & \text{se } \tilde{x}_j \in \Omega \\ \bar{x}_{sx} + a\sqrt{\Delta t} & \text{se } \tilde{x}_j < \bar{x}_{sx} \\ \bar{x}_{dx} - a\sqrt{\Delta t} & \text{se } \tilde{x}_j > \bar{x}_{dx}. \end{cases} \quad (1.87)$$

In conclusione, secondo il metodo proposto il contributo che da \hat{x}_j viene mandato in x_j lungo la caratteristica corrispondente è pari a

$$\mathbb{I}[u(t^n)](\hat{x}_j) + \tilde{d}_j k(t^n) \quad (1.88)$$

composto dal valore della variabile ricostruito nel punto \hat{x}_j , analogamente agli schemi visti, con l'aggiunta di un termine $\tilde{d}_j k(t^n)$ che tiene conto della condizione al contorno. Si ricorda che nel caso di un problema di diffusione, il contributo espresso in (1.88) deve essere combinato con un secondo associato ad una caratteristica proveniente dalla direzione opposta.

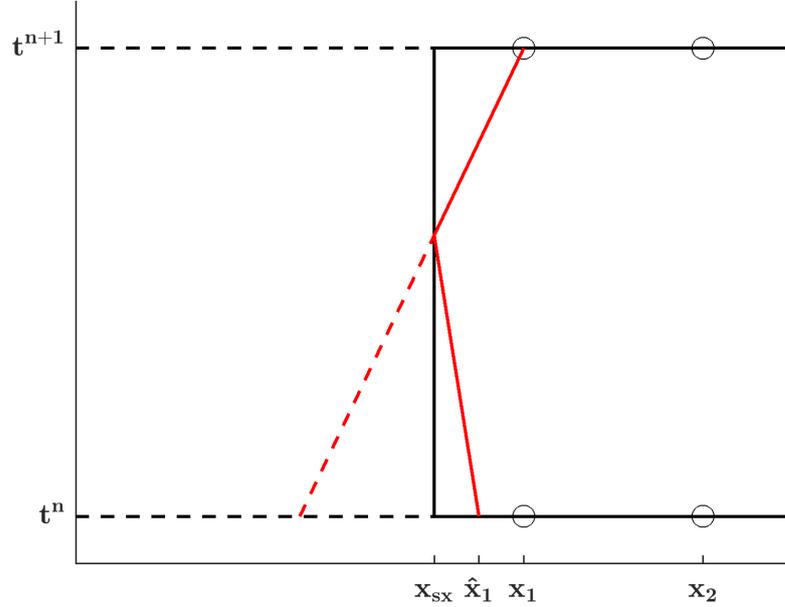


Figura 1.23: Alterazione della caratteristica che oltrepassa il limite del dominio con condizione di Neumann non omogenea, riposizionando la base \hat{x}_1 a una distanza \tilde{d}_1 dal bordo data dall'espressione (1.86)

1.4.3 Simulazioni numeriche

L'applicabilità dei metodi visti può essere verificata attraverso alcune simulazioni di controllo.

Iniziando con l'uso di sole condizioni di Dirichlet, il problema

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 1 & x \in [-1,1], t > 0 \\ u(x,t) = 0 & x = -1,1, t > 0 \\ u(x,0) = 0 & x \in [-1,1] \end{cases} \quad (1.89)$$

presenta come stato stazionario l'espressione analitica $u(x) = -x^2 + 1$. La presenza di una forzante $f(x,t)$, non precedentemente trattata, può essere descritta con diverse tecniche che variano in complessità e ordine di consistenza. In questo lavoro ci si limiterà all'approccio esplicito che consiste nell'aggiungere allo schema (1.67) un termine $f(x_j, t^n)dt$. Dalla figura 1.24 si può osservare la perfetta riproduzione della soluzione esatta tramite

l'uso del metodo semi-Lagrangiano.

Sostituendo una condizione di Dirichlet nel problema precedente con $\frac{\partial u}{\partial x}(-1, t) = 2$ viene conservato lo stato stazionario, ma ciò permette di analizzare la tecnica usata per descrivere condizioni di Neumann non omogenee. Il risultato riprodotto in figura 1.25 mostra una discrepanza tra la soluzione numerica e quella esatta nella descrizione del valore al bordo, però tale discrepanza scompare per $\Delta x \rightarrow 0$.

Infine si può studiare un problema generalizzato

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - \left(1 + \frac{x}{2}\right) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 1 + x^2 & x \in [-1, 1], t > 0 \\ \frac{\partial u}{\partial x}(-1, t) = 1 & t > 0 \\ u(1, t) = 0 & t > 0 \\ u(x, 0) = 0 & x \in [-1, 1] \end{cases} \quad (1.90)$$

il cui stato stazionario non presenta una forma analitica nota. Come riferimento è stato utilizzato il risultato ottenuto tramite un algoritmo alle differenze finite con Eulero implicito. Dalla figura 1.26 si può osservare come il metodo semi-Lagrangiano riesca a riprodurre fedelmente anche la soluzione di un problema complesso e l'unica discrepanza presente può essere riportata a quella già identificata nella figura 1.25.

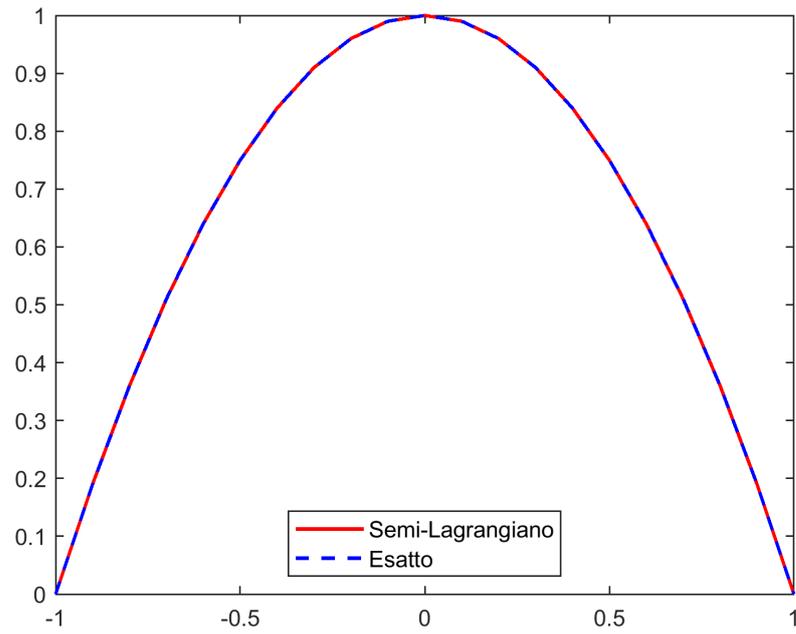


Figura 1.24: Diffusione lineare con forzante lineare e condizioni al contorno di Dirichlet

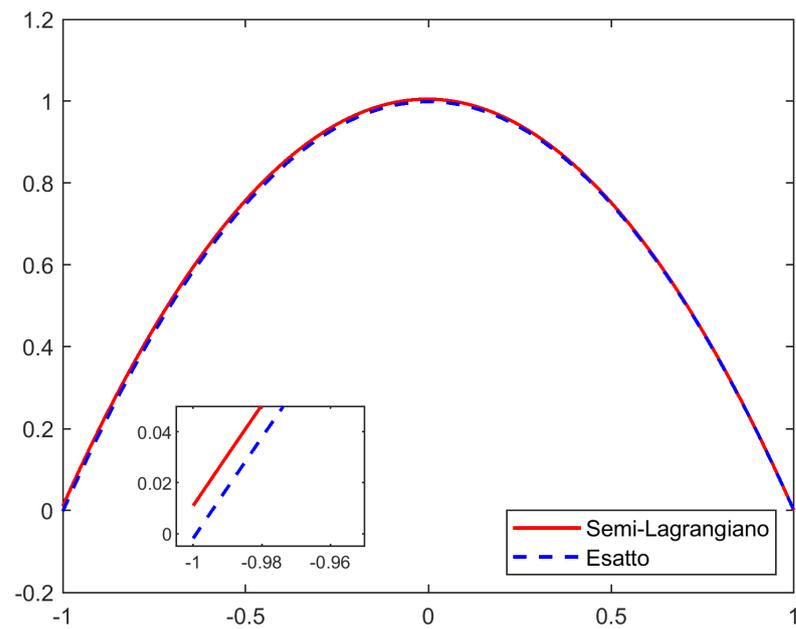


Figura 1.25: Diffusione lineare con forzante lineare e condizioni al contorno di Dirichlet a destra e Neumann a sinistra

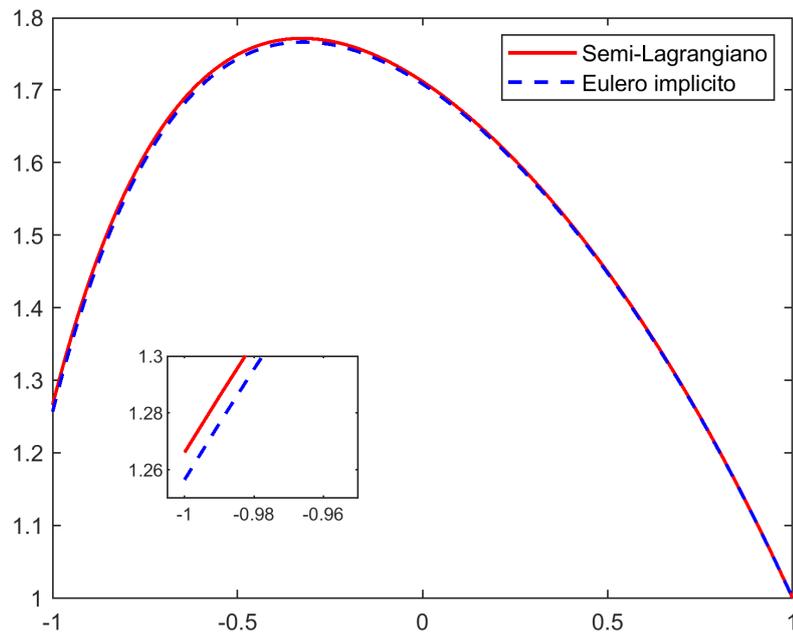


Figura 1.26: Diffusione non-omogenea con forzante non-omogenea e condizioni al contorno di Dirichlet a destra e Neumann a sinistra

Capitolo 2

Applicazione ad un problema biologico

2.1 Introduzione

Numerosi fenomeni biologici negli organismi viventi comportano la risoluzione di equazioni di trasporto-diffusione non lineare per descrivere il processo di migrazione cellulare. Legandosi alla matrice extracellulare, le cellule possono muoversi per percorrere brevi distanze. Gli spostamenti maggiori però si presentano quando le cellule vengono trasportate attraverso l'organismo dal flusso sanguigno e linfatico. Perché ciò avvenga, le cellule devono superare l'endotelio cellulare e la membrana basale che compongono la parete dei vasi. Quest'ultima agisce da filtro che permette il passaggio solo a molecole di dimensioni tali da attraversare i pori della matrice che la compone. Sebbene le cellule abbiano dimensioni maggiori rispetto alla scala di tali pori, processi di rimozione o rimodellamento della membrana hanno luogo sia in condizioni fisiologiche che patologiche e questi permettono la formazione di varchi con conseguente passaggio delle cellule.

In letteratura sono presenti diversi modelli multifase continui per lo studio del moto cellulare su una matrice extracellulare. Molti di questi tengono anche conto della presenza di una membrana, legando i coefficienti di motilità cellulare con la densità della matrice e le proprietà meccaniche delle cellule. Dato però che le membrane sono solitamente molto sottili relativamente alla dimensione del dominio, la loro descrizione come regioni finite di dominio può risultare computazionalmente onerosa. La soluzione proposta da [Chaplain et al. \[2019\]](#) consiste nel trattare le membrane come interfacce e porre su di esse delle appropriate condizioni per l'attraversamento. Questo modello inizialmente ideato per la presenza di una singola popolazione cellulare è stato successivamente espanso da [Giverso et al. \[2021\]](#) per trattare la compresenza di molteplici popolazioni differenti tra loro.

Nel presente lavoro verranno esposti i modelli definiti da [Chaplain et al. \[2019\]](#) e [Giverso et al. \[2021\]](#). Successivamente verrà mostrato come l'approccio semi-Lagrangiano permetta la riproduzione di risultati già descritti negli articoli citati, ma ottenuti tramite altri metodi numerici, nonché di fornire nuovi risultati non presenti negli articoli di riferimento che offrono un'ulteriore validazione numerica dei modelli trattati.

2.2 Modello biologico ad una popolazione cellulare

Iniziamo presentando il modello continuo che tratta la membrana basale come una regione finita di spazio. Si consideri un dominio semplicemente connesso $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ con $d = 1, 2, 3$. Esso può essere suddiviso in tre sottodomini Ω_i per $i = 1, 2, 3$. Di questi Ω_2 rappresenta la membrana porosa, la quale divide tra loro le due regioni Ω_1 e Ω_3 di matrice extracellulare ed è separata da esse tramite le interfacce Σ_{12} e Σ_{23} (Figura 2.1). Poiché i tre sottodomini

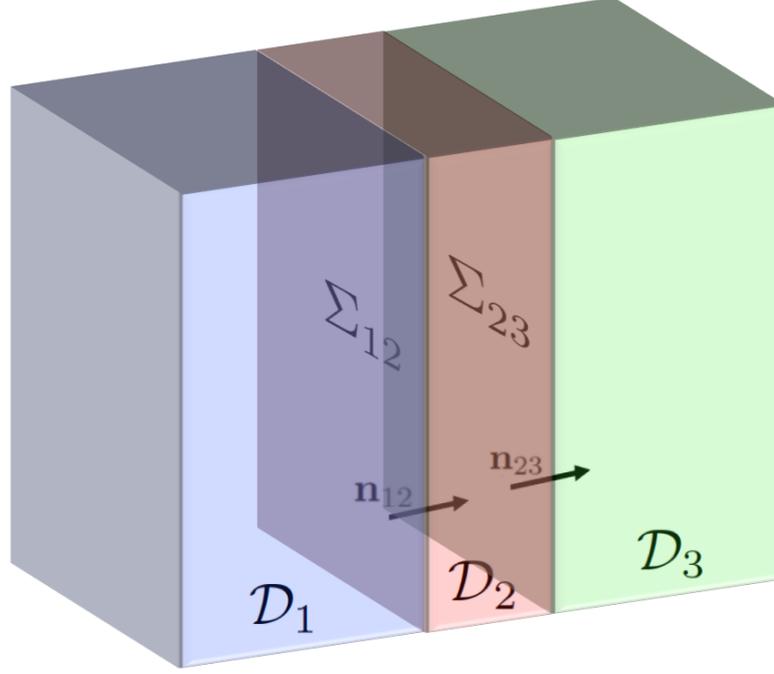


Figura 2.1: Rappresentazione del dominio Ω diviso in tre sottodomini Ω_i (nell'immagine indicati come \mathcal{D}_i). Di essi, Ω_2 rappresenta la membrana porosa ed è separata dalle regioni adiacenti da superfici Σ_{ij} di normale unitaria \mathbf{n}_{ij} rivolta da Ω_i verso Ω_j .

Immagine tratta da [Chaplain et al. \[2019\]](#)

generalmente presentano proprietà biofisiche differenti, le quantità che verranno introdotte potranno risultare discontinue attraverso le due interfacce. Conviene dunque introdurre la notazione $(\cdot)_i$ per indicare la restrizione di (\cdot) all'interno di ogni Ω_i .

La concentrazione di cellule, espressa in frazione di volume all'interno di Ω_i , può essere descritta dalla funzione $u_i(\mathbf{x}, t)$. La sua evoluzione è determinata dalla legge di bilancio di massa in forma locale

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \nabla \cdot (u_i \mathbf{v}_i) = \Gamma_i(u_i) \quad \mathbf{x} \in \Omega_i \subset \Omega, \quad t > 0 \quad (2.1)$$

in cui vengono introdotti il tasso di crescita cellulare Γ_i e la velocità di convezione \mathbf{v}_i . A questa equazione va accoppiato il bilancio della quantità di moto di una fase fluida elastica con inerzia trascurabile

$$\mathbf{v}_i = -\nu_i \nabla p_i \quad (2.2)$$

dove ν_i è un coefficiente di motilità legato alle proprietà fisiche del sottodominio Ω_i secondo una relazione $\nu_i(x, t)$ e p_i rappresenta la pressione cellulare determinata da una legge barotropica $p_i(u_i)$. Stando all'equazione (2.2), il campo di velocità descrive un moto verso regioni con pressione minore, in quanto ciò corrisponde ad una minore concentrazione di cellule, seguendo una dinamica analoga a quella data dalla legge di Darcy per i fluidi.

Mentre il comportamento nel dominio è completamente governato dalle equazioni (2.1) e (2.2), l'attraversamento delle due interfacce richiede delle condizioni appropriate. Secondo la teoria della meccanica dei continui, flusso di massa e sforzi devono rimanere continui attraverso ogni interfaccia Σ_{ij} di normale \mathbf{n}_{ij} che divide le regioni Ω_i e Ω_j . Ciò può essere espresso tramite le equazioni

$$u_i \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{n}_{ij} = u_j \mathbf{v}_j \cdot \mathbf{n}_{ij} \quad \text{su } \Sigma_{ij} \text{ con } i = 1, 2, \quad j = i + 1 \quad (2.3)$$

e

$$p_i = p_j \quad \text{su } \Sigma_{ij} \text{ con } i = 1, 2, \quad j = i + 1. \quad (2.4)$$

A questo punto, il fenomeno del moto cellulare attraverso la membrana porosa può essere descritto dall'equazione (2.1) applicata ad ogni Ω_i e dalle relazioni (2.3), (2.4) applicate sulle due Σ_{ij} , nelle quali è possibile sostituire l'espressione (2.2) al posto della velocità \mathbf{v}_i , ottenendo così il sistema

$$\begin{cases} \frac{\partial u_i}{\partial t} - \nabla \cdot (u_i \nu_i \nabla p(u_i)) = \Gamma_i(u_i) & \text{in } \Omega_i, \quad i = 1, 2, 3 \\ \llbracket \nu u \nabla p(u) \rrbracket \cdot \mathbf{n}_{ij} = 0 & \text{su } \Sigma_{ij}, \quad i = 1, 2 \\ \llbracket p(u) \rrbracket = 0 & \text{su } \Sigma_{ij}, \quad i = 1, 2 \end{cases} \quad (2.5)$$

per $j=i+1$, in cui $\llbracket (\cdot) \rrbracket$ rappresenta il salto attraverso l'interfaccia Σ_{ij} definito da $\llbracket (\cdot) \rrbracket = (\cdot)_j - (\cdot)_i$. Tale sistema, per essere chiuso, richiede infine la definizione della relazione barotropica $p(u)$.

Dato il problema generale (2.5), [Chaplain et al. \[2019\]](#) hanno definito il loro modello partendo da una sua versione derivante dall'introduzione di tre assunzioni:

- Il coefficiente di motilità cellulare ν_i è continuo in x e t all'interno di ogni Ω_i .
- Il tasso di crescita cellulare Γ_i è differenziabile in u con derivata continua all'interno di ogni Ω_i .
- La legge barotropica $p(u)$ che determina la pressione è differenziabile con derivata continua e strettamente crescente in u .

Una conseguenza diretta dell'assunzione di continuità di $p(u)$ è il fatto che la continuità degli sforzi attraverso le interfacce data da (2.4) implichi anche la continuità della variabile stessa, esprimibile come

$$\llbracket u \rrbracket = 0 \quad \text{su } \Sigma_{ij} \text{ con } i = 1, 2, \quad j = i + 1. \quad (2.6)$$

Per effettuare la transizione al modello con membrana descritta tramite un'interfaccia, definiamo innanzitutto lo spessore della membrana stessa come

$$\varepsilon := \max_{\hat{\mathbf{x}}_{12} \in \Sigma_{12}} \{ \min \{ a > 0 : \hat{\mathbf{x}}_{12} + a \mathbf{n}_{12} \in \Sigma_{23} \} \}. \quad (2.7)$$

Data L la più piccola lunghezza caratteristica del dominio Ω , in molti problemi di natura biologica si ha che $\varepsilon \ll L$, cioè la membrana presenta uno spessore molto sottile che richiederebbe una discretizzazione spaziale eccessivamente fine per essere descritta numericamente. Dunque l'idea alla base del modello proposto consiste nel sostituire il sottodominio Ω_2 con un'interfaccia ottenuta mandando $\varepsilon \rightarrow 0$ e nel definire delle nuove condizioni per il suo attraversamento. Esplicitando la dipendenza da ε nel sistema (2.5) si ottiene

$$\mathcal{P}_\varepsilon = \begin{cases} \frac{\partial u_{i\varepsilon}}{\partial t} - \nabla \cdot (u_{i\varepsilon} \nu_{i\varepsilon} p'(u_{i\varepsilon}) \nabla u_{i\varepsilon}) = \Gamma_{i\varepsilon}(u_{i\varepsilon}) & \text{in } \Omega_{i\varepsilon}, i = 1, 2, 3 \\ \nu_{i\varepsilon} u_{i\varepsilon} p'(u_{i\varepsilon}) \nabla u_{i\varepsilon} \cdot \mathbf{n}_{ij} = \nu_{j\varepsilon} u_{j\varepsilon} p'(u_{j\varepsilon}) \nabla u_{j\varepsilon} \cdot \mathbf{n}_{ij} & \text{su } \Sigma_{ij\varepsilon}, i = 1, 2 \\ u_{i\varepsilon} = u_{j\varepsilon} & \text{su } \Sigma_{ij\varepsilon}, i = 1, 2 \end{cases} \quad (2.8)$$

con $j = i + 1$, il quale descrive il cosiddetto "problema con strato sottile". L'atto di portare $\varepsilon \rightarrow 0$ definisce così un nuovo problema

$$\mathcal{P}_0 = \begin{cases} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} - \nabla \cdot (\tilde{u}_i \tilde{\nu}_i p'(\tilde{u}_i) \nabla \tilde{u}_i) = \tilde{\Gamma}_i(\tilde{u}_i) & \text{in } \tilde{\Omega}_i, i = 1, 3 \\ \text{condizioni di attraversamento} & \text{su } \tilde{\Sigma}_{13} \end{cases} \quad (2.9)$$

detto "problema con interfaccia effettiva", in cui vengono introdotti

$$\tilde{\Omega}_1 = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \Omega_{1\varepsilon}, \quad \tilde{\Omega}_3 = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \Omega_{3\varepsilon}, \quad \tilde{\Sigma}_{13} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \Sigma_{12\varepsilon} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \Sigma_{23\varepsilon}, \quad (2.10)$$

$$\tilde{u}_i = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} u_{i\varepsilon}, \quad \tilde{\nu}_i = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \nu_{i\varepsilon}, \quad \tilde{\Gamma}_i = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \Gamma_{i\varepsilon}, \quad i = 1, 3. \quad (2.11)$$

Le condizioni mancanti nel sistema (2.9) devono essere costruite in maniera tale che l'interfaccia $\tilde{\Sigma}_{13}$ influenzi il moto cellulare analogamente a quanto fatto dalla regione $\Omega_{2\varepsilon}$ mentre essa viene ridotta per $\varepsilon \rightarrow 0$. Tale compattazione della membrana equivale a ridurre la dimensione dei pori nella matrice che la compone, con una conseguente diminuzione della conducibilità $\nu_{2\varepsilon}$ proporzionale a tale restringimento. Affinché ciò si verifichi, assumiamo

$$\nu_{2\varepsilon} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0 \quad \text{in modo tale che} \quad \frac{\nu_{2\varepsilon}}{\varepsilon} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \tilde{\nu}_{13} \quad \text{con} \quad \tilde{\nu}_{13} = \tilde{\nu}_{13}(x, t) \quad (2.12)$$

e

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\nabla \nu_{2\varepsilon}}{\varepsilon} \cdot \mathbf{n}_{12} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\nabla \nu_{2\varepsilon}}{\varepsilon} \cdot \mathbf{n}_{23} = \nabla \tilde{\nu}_{13} \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{13} = 0 \quad (2.13)$$

in cui $\tilde{\mathbf{n}}_{13}$ rappresenta la normale unitaria a $\tilde{\Sigma}_{13}$. La funzione positiva $\tilde{\nu}_{13}$ appena definita può essere interpretata come un coefficiente di mobilità effettiva per le cellule che attraversano l'interfaccia $\tilde{\Sigma}_{13}$.

Osservazione 6 *Il ragionamento appena fatto per definire $\tilde{\nu}_{13}$ può essere giustificato paragonando il problema del flusso cellulare attraverso la membrana con uno di flusso fluido attraverso uno strato poroso di sezione unitaria. Il flusso fluido Q può essere definito tramite la legge di Darcy come*

$$Q = -\frac{k}{\nu} \frac{\Delta P}{\Delta x} \quad (2.14)$$

secondo cui il flusso del fluido di viscosità dinamica ν attraverso la membrana di permeabilità idraulica k e spessore Δx è causato dal salto di pressione ΔP tra i suoi estremi. In analogia con il problema biologico, l'interesse è mantenere costante il flusso Q per $\Delta x \rightarrow 0$ a parità di salto di pressione ΔP . Ciò può essere ottenuto se

$$k \xrightarrow{\Delta x \rightarrow 0} 0 \quad \text{in modo tale che} \quad \frac{k}{\Delta x} \xrightarrow{\Delta x \rightarrow 0} \tilde{k} \quad (2.15)$$

dove \tilde{k} rappresenta la permeabilità effettiva dello strato poroso trattato come un'interfaccia, ottenendo un'assunzione analoga a (2.12).

A questo punto possiamo definire le condizioni all'interfaccia che completano il sistema (2.9). Si verificherà che una di esse descrive una continuità del flusso, simile a quella presente in (2.8). In compenso, la continuità di sforzo e concentrazione cellulare non sarà più valida, in quanto la compattazione della membrana porta a perdere di vista la dinamica al suo interno che permette tale continuità. Essa verrà dunque sostituita da una nuova condizione che legherà il salto della concentrazione cellulare e conseguentemente della pressione al flusso che attraversa l'interfaccia, proporzionalmente al nuovo parametro di motilità effettiva introdotto. La derivazione di tali condizioni verrà fatta nel caso in cui $\Sigma_{12\varepsilon}$ e $\Sigma_{23\varepsilon}$ siano piani tra loro paralleli, ma la validità del risultato rimane per casi più generali.

Partendo dal problema con strato sottile, introduciamo innanzitutto la notazione $\Omega_{2\varepsilon} \ni \mathbf{x} := (x_\perp, \mathbf{x}_\Sigma)$, dove $x_\perp := \mathbf{x} \cdot \mathbf{n}_{12} = \mathbf{x} \cdot \mathbf{n}_{23}$, ed effettuiamo il cambio di variabili $x_\perp \mapsto x_\perp - \hat{x}_{12\perp}$, con $\hat{x}_{12\perp}$ ottenuto da $\hat{\mathbf{x}}_{12} = (\hat{x}_{12\perp}, \hat{\mathbf{x}}_{12\Sigma}) \in \Sigma_{12\varepsilon}$. Ciò permette di identificare ogni punto della membrana tramite una sua proiezione \mathbf{x}_Σ su un generico piano Σ parallelo a $\Sigma_{12\varepsilon}$, $\Sigma_{23\varepsilon}$ e tramite la distanza x_\perp di \mathbf{x} da $\Sigma_{12\varepsilon}$. Passando poi all'uso della distanza normalizzata $\eta := \frac{x_\perp}{\varepsilon} \in (0,1)$, l'equazione di conservazione della massa per $u_{2\varepsilon}$ in (2.8) può essere espressa rispetto alla nuova notazione come

$$\frac{\partial u_{2\varepsilon}}{\partial t} - \nabla_{\mathbf{x}_\Sigma} \cdot (\nu_{2\varepsilon} u_{2\varepsilon} p'(u_{2\varepsilon}) \nabla_{\mathbf{x}_\Sigma} u_{2\varepsilon}) - \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\nu_{2\varepsilon}}{\varepsilon} u_{2\varepsilon} p'(u_{2\varepsilon}) \frac{\partial u_{2\varepsilon}}{\partial \eta} \right) = \Gamma_{2\varepsilon}(u_{2\varepsilon}), \quad (2.16)$$

in cui $\nabla_{\mathbf{x}_\Sigma}$ rappresenta l'operatore differenziale vettoriale contenente le derivate fatte lungo le direzioni di due vettori tra loro ortogonali appartenenti al piano su cui si trova \mathbf{x}_Σ . Inoltre, tenendo conto che la derivata normale alle due superfici corrisponde alla derivata fatta rispetto a η , si possono riformulare i membri delle condizioni di continuità del flusso (2.3) che sono valutati in $\Omega_{2\varepsilon}$ ed ottenere così

$$\nu_{1\varepsilon} u_{1\varepsilon} p'(u_{1\varepsilon}) \nabla u_{1\varepsilon} \cdot \mathbf{n}_{12}|_{\Sigma_{12\varepsilon}} = \frac{\nu_{2\varepsilon}}{\varepsilon} u_{2\varepsilon} p'(u_{2\varepsilon}) \frac{\partial u_{2\varepsilon}}{\partial \eta} \Big|_{\eta=0}, \quad (2.17)$$

$$\nu_{3\varepsilon} u_{3\varepsilon} p'(u_{3\varepsilon}) \nabla u_{3\varepsilon} \cdot \mathbf{n}_{23}|_{\Sigma_{23\varepsilon}} = \frac{\nu_{2\varepsilon}}{\varepsilon} u_{2\varepsilon} p'(u_{2\varepsilon}) \frac{\partial u_{2\varepsilon}}{\partial \eta} \Big|_{\eta=1}. \quad (2.18)$$

Moltiplicando l'equazione (2.16) per ε ed effettuando le opportune fattorizzazioni, questa può essere riscritta come

$$\frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\nu_{2\varepsilon}}{\varepsilon} u_{2\varepsilon} p'(u_{2\varepsilon}) \frac{\partial u_{2\varepsilon}}{\partial \eta} \right) = \varepsilon \left(\frac{\partial u_{2\varepsilon}}{\partial t} - \nabla_{\mathbf{x}_\Sigma} \cdot (\nu_{2\varepsilon} u_{2\varepsilon} p'(u_{2\varepsilon}) \nabla_{\mathbf{x}_\Sigma} u_{2\varepsilon}) - \Gamma_{2\varepsilon}(u_{2\varepsilon}) \right). \quad (2.19)$$

Lo studio di un problema in cui è presente un parametro caratteristico che tende ad essere infinitesimo si presta alla trattazione tramite espansione asintotica, perciò effettuiamo l'ansatz per la soluzione del problema con strato sottile all'interno della regione $\Omega_{2\varepsilon}$

$$u_{2\varepsilon}(\eta, \mathbf{x}_\Sigma) = u_2^0(\eta, \mathbf{x}_\Sigma) + \varepsilon u_2^1(\eta, \mathbf{x}_\Sigma) + O(\varepsilon) \quad (2.20)$$

e le conseguenti espansioni

$$p'(u_{2\varepsilon}) = p'(u_2^0) + \varepsilon p''(u_2^0)u_2^1 + O(\varepsilon) \quad \Gamma(u_{2\varepsilon}) = \Gamma(u_2^0) + \varepsilon \Gamma'(u_2^0)u_2^1 + O(\varepsilon). \quad (2.21)$$

Sostituendo (2.20), (2.21) in (2.19) e mandando $\varepsilon \rightarrow 0$ si ottiene

$$\frac{\partial}{\partial \eta} \left(\tilde{\nu}_{13} u_2^0 p'(u_2^0) \frac{\partial u_2^0}{\partial \eta} \right) = 0 \quad \Rightarrow \quad \tilde{\nu}_{13} u_2^0 p'(u_2^0) \frac{\partial u_2^0}{\partial \eta} = C^* \quad \forall \eta \in (0,1), \quad (2.22)$$

in cui è stata usata l'ipotesi (2.12) per introdurre $\tilde{\nu}_{13}$ e C^* è una costante. Lo stesso può essere fatto per i due secondi membri delle condizioni di continuità del flusso (2.17) e (2.18), da cui

$$\tilde{\nu}_1 \tilde{u}_1 p'(\tilde{u}_1) \nabla \tilde{u}_1 \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{13}|_{\tilde{\Sigma}_{13}} = \tilde{\nu}_2 u_2^0 p'(u_2^0) \frac{\partial u_2^0}{\partial \eta} \Big|_{\eta=0}, \quad (2.23)$$

$$\tilde{\nu}_3 \tilde{u}_3 p'(\tilde{u}_3) \nabla \tilde{u}_3 \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{13}|_{\tilde{\Sigma}_{13}} = \tilde{\nu}_2 u_2^0 p'(u_2^0) \frac{\partial u_2^0}{\partial \eta} \Big|_{\eta=1}. \quad (2.24)$$

Stando all'invarianza in η espressa in (2.22), segue che i secondi membri di (2.23) e (2.24) coincidono tra loro e con qualsiasi loro valutazione in $\eta \in (0,1)$, da cui

$$\tilde{\nu}_{13} u_2^0 p'(u_2^0) \frac{\partial u_2^0}{\partial \eta} = \tilde{\nu}_1 \tilde{u}_1 p'(\tilde{u}_1) \nabla \tilde{u}_1 \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{13}|_{\tilde{\Sigma}_{13}} = \tilde{\nu}_3 \tilde{u}_3 p'(\tilde{u}_3) \nabla \tilde{u}_3 \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{13}|_{\tilde{\Sigma}_{13}}. \quad (2.25)$$

Nella seconda uguaglianza appena scritta riconosciamo una continuità del flusso attraverso $\tilde{\Sigma}_{13}$, in forma simile a quella presente nel problema con strato sottile (2.8), che quindi costituisce la prima condizione all'interfaccia per il problema (2.9).

Per definire la seconda condizione, è necessario integrare i tre membri dell'espressione (2.25) in η lungo lo spessore della membrana, ottenendo

$$\int_0^1 \tilde{\nu}_{13} u_2^0 p'(u_2^0) \frac{\partial u_2^0}{\partial \eta} d\eta = \tilde{\nu}_1 \tilde{u}_1 p'(\tilde{u}_1) \nabla \tilde{u}_1 \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{13}|_{\tilde{\Sigma}_{13}} \int_0^1 d\eta = \tilde{\nu}_3 \tilde{u}_3 p'(\tilde{u}_3) \nabla \tilde{u}_3 \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{13}|_{\tilde{\Sigma}_{13}} \int_0^1 d\eta. \quad (2.26)$$

Dall'ipotesi (2.13) precedentemente introdotta si ha l'invarianza di $\tilde{\nu}_{13}$ lungo la direzione ortogonale alle superfici $\Sigma_{ij\varepsilon}$, che equivale ad un'invarianza in η . Successivamente si può riformulare

$$\int_0^1 u_2^0 p'(u_2^0) \frac{\partial u_2^0}{\partial \eta} d\eta = \int_0^1 \Pi'(u_2^0) \frac{\partial u_2^0}{\partial \eta} d\eta = \int_0^1 \frac{\partial \Pi}{\partial \eta} d\eta = \llbracket \Pi \rrbracket \quad (2.27)$$

grazie all'introduzione di un termine $\Pi(u)$ tale che

$$\Pi'(u) := up'(u). \quad (2.28)$$

Queste ultime due considerazioni permettono di riscrivere il primo membro di (2.26) e ottenere così l'espressione

$$\tilde{\nu}_{13}[\Pi] = \tilde{\nu}_1 \tilde{u}_1 p'(\tilde{u}_1) \nabla \tilde{u}_1 \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{13} = \tilde{\nu}_3 \tilde{u}_3 p'(\tilde{u}_3) \nabla \tilde{u}_3 \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{13} \quad \text{su } \tilde{\Sigma}_{13}. \quad (2.29)$$

La condizione all'interfaccia appena ottenuta determina un legame tra il flusso attraverso $\tilde{\Sigma}_{13}$ e il salto di concentrazione e pressione, rappresentato tramite Π .

E' pertanto possibile definire la seguente proposizione:

Proposizione 3 *Il sistema che descrive il problema con interfaccia effettiva è dato da*

$$\mathcal{P}_0 = \begin{cases} \frac{\partial \tilde{u}_1}{\partial t} - \nabla \cdot (\tilde{u}_1 \tilde{\nu}_1 p'(\tilde{u}_1) \nabla \tilde{u}_1) = \tilde{\Gamma}_1(\tilde{u}_1) & \text{in } \tilde{\Omega}_1 \\ \frac{\partial \tilde{u}_3}{\partial t} - \nabla \cdot (\tilde{u}_3 \tilde{\nu}_3 p'(\tilde{u}_3) \nabla \tilde{u}_3) = \tilde{\Gamma}_3(\tilde{u}_3) & \text{in } \tilde{\Omega}_3 \\ \tilde{\nu}_{13}[\Pi] = \tilde{\nu}_1 \tilde{u}_1 p'(\tilde{u}_1) \nabla \tilde{u}_1 \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{13} = \tilde{\nu}_3 \tilde{u}_3 p'(\tilde{u}_3) \nabla \tilde{u}_3 \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{13} & \text{su } \tilde{\Sigma}_{13} \end{cases} \quad (2.30)$$

2.3 Risultati numerici del modello ad una popolazione cellulare

Per validare il modello da loro definito, [Chaplain et al. \[2019\]](#) hanno confrontato i risultati numerici ottenuti per un problema con membrana sottile e quelli di un problema con interfaccia effettiva con l'obiettivo di mostrare la convergenza della soluzione del problema \mathcal{P}_ε a quella del problema \mathcal{P}_0 per $\varepsilon \rightarrow 0$.

Lo studio è stato effettuato in un dominio unidimensionale con una regione $\Omega_{1\varepsilon}$ di lunghezza $L > 0$. Per poter ottenere una stato stazionario non costante dal problema \mathcal{P}_ε , è stata adottata una legge di crescita cellulare Γ di tipo logistico con opportune condizioni al bordo in modo tale che nella regione $\Omega_{1\varepsilon}$ si abbia un tasso di crescita intrinseco $r > 0$, mentre nelle due regioni rimanenti ci sia un bilancio tra nascita e morte cellulare con conseguente annullamento della crescita Γ . Passando all'uso di variabili adimensionalizzate $rt \rightarrow t$ e $x/L \rightarrow x$, possiamo quindi definire

$$\Omega_{1\varepsilon} = (-1, 0), \quad \Omega_{2\varepsilon} = (0, \varepsilon), \quad \Omega_{3\varepsilon} = (\varepsilon, 1) \quad (2.31)$$

e

$$\Gamma_{1\varepsilon}(u_{1\varepsilon}) = (1 - u_{1\varepsilon})u_{1\varepsilon}, \quad \Gamma_{2\varepsilon}(u_{2\varepsilon}) = \Gamma_{3\varepsilon}(u_{3\varepsilon}) = 0. \quad (2.32)$$

Come coefficienti di motilità cellulare sono stati utilizzati

$$\nu_{1\varepsilon} = \nu_{3\varepsilon} = 0.5, \quad \nu_{2\varepsilon} = 0.1\varepsilon, \quad (2.33)$$

con una definizione di $\nu_{2\varepsilon}$ che soddisfa le ipotesi (2.12), (2.13) richieste. Come legge barotropica è stata adottata

$$p(u) = (u - u_0)_+ \quad (2.34)$$

in cui u_0 rappresenta la distribuzione iniziale e $(\cdot)_+$ è l'operatore parte positiva. Nello specifico, è stata scelta la distribuzione iniziale

$$u_{i\varepsilon}(x, t = 0) = u_0 = 0.5 \quad \forall x \in \Omega_{i\varepsilon} \quad i = 1, 2, 3. \quad (2.35)$$

Si noti che, trattando un fenomeno di crescita in $\Omega_{1\varepsilon}$ e diffusione nelle altre due regioni, ad ogni istante temporale si avrà $u(x, t) \geq u_0(x)$, per cui è possibile avere la semplificazione

$$p(u) = (u - u_0)_+ = u - u_0 \quad \Rightarrow \quad p'(u) = 1. \quad (2.36)$$

Infine sono state adottate le condizioni al contorno

$$\frac{\partial u_{1\varepsilon}}{\partial x}(-1, t) = 0, \quad u_{3\varepsilon}(1, t) = 0.5 \quad \forall t > 0. \quad (2.37)$$

Definito il problema con membrana sottile \mathcal{P}_ε d'interesse, il problema con interfaccia effettiva \mathcal{P}_0 associato si ottiene mandando $\varepsilon \rightarrow 0$. Dunque, vengono coinvolte le regioni

$$\tilde{\Omega}_1 = (-1, 0), \quad \tilde{\Omega}_3 = (0, 1) \quad (2.38)$$

ed il problema è identificato da

$$\tilde{\Gamma}_1(\tilde{u}_1) = (1 - \tilde{u}_1)\tilde{u}_1, \quad \tilde{\Gamma}_3(u_3) = 0, \quad \tilde{\nu}_1 = \tilde{\nu}_3 = 0.5, \quad \tilde{\nu}_{13} = 0.1, \quad (2.39)$$

con legge barotropica, condizioni iniziali e condizioni al contorno analoghe a (2.34), (2.35), (2.37).

Grazie alla scelta fatta per la legge barotropica, la condizione all'interfaccia (2.29) gode di un'espressione semplice per il salto di Π , in quanto, secondo la definizione (2.28), si ha che

$$\Pi'(u) = u \quad \Rightarrow \quad \Pi(u) = \frac{u^{\uparrow 2}}{2} \quad \Rightarrow \quad [[\Pi]] = \frac{\tilde{u}_3^{\uparrow 2} - \tilde{u}_1^{\uparrow 2}}{2}, \quad (2.40)$$

in cui viene introdotta la notazione $(\cdot)^{\uparrow 2}$ per indicare l'elevamento al quadrato.

In seguito alle assunzioni fatte, i problemi \mathcal{P}_ε e \mathcal{P}_0 trattati risultano essere

$$\mathcal{P}_\varepsilon = \begin{cases} \frac{\partial u_{1\varepsilon}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(0.5u_{1\varepsilon} \frac{\partial u_{1\varepsilon}}{\partial x} \right) = (1 - u_{1\varepsilon})u_{1\varepsilon} & \text{in } \Omega_{1\varepsilon} \\ \frac{\partial u_{2\varepsilon}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(0.1\varepsilon u_{2\varepsilon} \frac{\partial u_{2\varepsilon}}{\partial x} \right) = 0 & \text{in } \Omega_{2\varepsilon} \\ \frac{\partial u_{3\varepsilon}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(0.5u_{3\varepsilon} \frac{\partial u_{3\varepsilon}}{\partial x} \right) = 0 & \text{in } \Omega_{3\varepsilon} \\ 0.5u_{1\varepsilon} \frac{\partial u_{1\varepsilon}}{\partial x} = 0.1\varepsilon u_{2\varepsilon} \frac{\partial u_{2\varepsilon}}{\partial x} & \text{su } \Sigma_{12\varepsilon} \\ 0.1\varepsilon u_{2\varepsilon} \frac{\partial u_{2\varepsilon}}{\partial x} = 0.5u_{3\varepsilon} \frac{\partial u_{3\varepsilon}}{\partial x} & \text{su } \Sigma_{23\varepsilon} \\ u_{i\varepsilon} = u_{j\varepsilon} & \text{su } \Sigma_{ij\varepsilon}, \quad i = 1, 2, \quad j = i + 1 \end{cases} \quad (2.41)$$

$$\mathcal{P}_0 = \begin{cases} \frac{\partial \tilde{u}_1}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(0.5\tilde{u}_1 \frac{\partial \tilde{u}_1}{\partial x} \right) = (1 - \tilde{u}_1)\tilde{u}_1 & \text{in } \tilde{\Omega}_1 \\ \frac{\partial \tilde{u}_3}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(0.5\tilde{u}_3 \frac{\partial \tilde{u}_3}{\partial x} \right) = 0 & \text{in } \tilde{\Omega}_3 \\ 0.1 \frac{\tilde{u}_3^{\uparrow 2} - \tilde{u}_1^{\uparrow 2}}{2} = 0.5\tilde{u}_1 \frac{\partial \tilde{u}_1}{\partial x} = 0.5\tilde{u}_3 \frac{\partial \tilde{u}_3}{\partial x} & \text{su } \tilde{\Sigma}_{13} \end{cases} \quad (2.42)$$

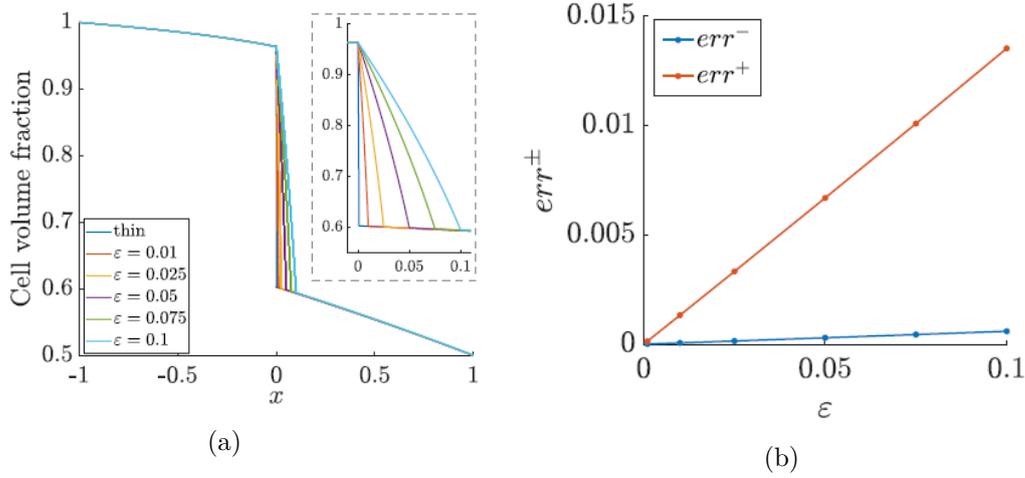


Figura 2.2: Analisi dei risultati per il problema di una popolazione cellulare. Immagini tratte da [Chaplain et al. \[2019\]](#).

a) Confronto tra le soluzioni di \mathcal{P}_ε (2.41) e \mathcal{P}_0 (2.42) per $\varepsilon \rightarrow 0$ al tempo $t=20$.

b) Errore relativo tra le soluzioni dei problemi \mathcal{P}_ε e \mathcal{P}_0 agli estremi della membrana al tempo $t=20$. Viene indicato con err^- l'errore relativo tra $u_{1\varepsilon}(0,20)$ e $\tilde{u}_1(0^-,20)$ e con err^+ quello tra $u_{1\varepsilon}(\varepsilon,20)$ e $\tilde{u}_1(0^+,20)$.

Entrambi sono stati studiati fino ad un tempo $t = 20$, in cui si ha in raggiungimento dello stato stazionario. Le simulazioni fatte dagli autori sono state effettuate tramite il software agli elementi finiti COMSOL Multiphysics®. I risultati in figura 2.2a mostrano la convergenza dello stato stazionario del problema \mathcal{P}_ε verso quello del problema \mathcal{P}_0 al ridursi dello spessore della membrana. Da un'analisi dell'errore relativo agli estremi della membrana, rappresentato in figura 2.2b, è dunque evidente come l'uso dell'interfaccia effettiva permetta di approssimare con un buon grado di accuratezza il problema \mathcal{P}_ε quando ε è sufficientemente piccolo.

Passiamo ora allo studio dei problemi \mathcal{P}_ε e \mathcal{P}_0 col metodo semi-Lagrangiano. Lo scopo delle simulazioni numeriche successive è mostrare come questo metodo sia capace di riprodurre i risultati presenti nel lavoro di [Chaplain et al. \[2019\]](#).

Entrambi i problemi trattati descrivono un fenomeno di diffusione non-lineare, come si osserva dal confronto delle equazioni dei due problemi (2.41), (2.42) con la forma generale (1.78), dunque il passo principale per la risoluzione col metodo semi-Lagrangiano consiste nel calcolo degli spostamenti diffusivi δ^\pm definiti da (1.79). Sia per il calcolo degli spostamenti δ^\pm che per la successiva ricostruzione del valore della variabile alla base della caratteristica, è stato scelto di utilizzare un interpolatore $\mathbb{I}[u]$ con polinomi di Lagrange di terzo grado, in quanto secondo le analisi fatte nella sezione 1.2.2 esso garantisce una ricostruzione di alta qualità con errori numerici diffusivi contenuti.

Il fenomeno descritto da \mathcal{P}_ε e \mathcal{P}_0 ha luogo in regioni spaziali distinte comunicanti tramite interfacce, dunque le relazioni applicate su tali interfacce vanno riprodotte usando i

metodi per la descrizione delle condizioni al contorno trattati nella sezione 1.4. Le condizioni richieste sulle $\Sigma_{ij\varepsilon}$ del problema \mathcal{P}_ε possono essere gestite ponendo una condizione di Dirichlet sul lato sinistro dell'interfaccia per verificare la continuità della concentrazione cellulare e una condizione di Neumann sul lato destro per descrivere la continuità del flusso di massa. Analogamente, per il problema \mathcal{P}_0 sono state imposte due condizioni di Neumann ai lati dell'interfaccia effettiva $\tilde{\Sigma}_{13}$ in modo da poter trattare la condizione richiesta sul flusso. Il valore da imporre alle condizioni di Dirichlet e Neumann è stato cercato in maniera implicita, in modo da garantire il soddisfacimento delle condizioni alle interfacce successivamente all'evoluzione temporale e ottenere in generale una maggiore accuratezza dei risultati. Poiché le condizioni al contorno influenzano solo le caratteristiche che intersecano le interfacce, per semplicità esecutiva è stato scelto di effettuare una discretizzazione in spazio con griglia omogenea di nodi $x_j = -1 + j\Delta x$ e una discretizzazione in tempo con istanti $t^n = n\Delta t$ in modo tale che

$$\exists \bar{j}_1, \bar{j}_2 : 1 < \bar{j}_1 < \bar{j}_2 < \frac{2}{\Delta x}, \quad x_{\bar{j}_1} = 0, \quad x_{\bar{j}_2} = \varepsilon \quad (2.43)$$

se viene trattato \mathcal{P}_ε o

$$\exists \bar{j} : 1 < \bar{j} < \frac{2}{\Delta x}, \quad x_{\bar{j}} = 0 \quad (2.44)$$

nel caso di \mathcal{P}_0 . Inoltre viene anche richiesto che

$$\Delta x > \delta^\pm(\Delta t) = \sqrt{2\Delta t \mu(x, u)}. \quad (2.45)$$

Queste due ipotesi sulla discretizzazione garantiscono che soltanto le caratteristiche associate ai nodi $x_{\bar{j}_1}$, $x_{\bar{j}_2}$ in \mathcal{P}_ε e $x_{\bar{j}}$ in \mathcal{P}_0 saranno influenzate dalle condizioni all'interfaccia. Si noti che, benché il valore di δ^\pm in (2.45) non sia noto a priori, esso può essere stimato per questi problemi in esame. Dato che per la legge logistica della forzante Γ e per la natura diffusiva del fenomeno si ha che $u < 1$, allora vale $\delta^\pm(\Delta t) = \sqrt{2\Delta t \nu u} < \sqrt{2\Delta t \max(\nu)}$. Sarà dunque sufficiente richiedere $\Delta x \geq \sqrt{2\Delta t \max(\nu)} = \sqrt{\Delta t}$.

Proposizione 4 *In seguito all'uso di una discretizzazione spaziale con griglia $x_j = -1 + j\Delta x \in [-1, 1]$ e una discretizzazione temporale di istanti $t^n = n\Delta t \in [0, 20]$ tali da soddisfare (2.43), (2.44), (2.45), l'algoritmo basato sul metodo semi-Lagrangiano per trattare il problema \mathcal{P}_ε (2.41) risulta essere*

1. *Ricavare gli spostamenti diffusivi in ogni nodo nelle tre regioni $\Omega_{i\varepsilon}$ tramite le espressioni implicite*

$$(\delta_1^\pm)_j^n = \sqrt{\Delta t \mathbb{I}[u_{1\varepsilon}(t^n)](x_j \pm (\delta_1^\pm)_j^n)} \quad \text{per } x_j \in \Omega_{1\varepsilon} \quad (2.46)$$

$$(\delta_2^\pm)_j^n = \sqrt{0.2 \varepsilon \Delta t \mathbb{I}[u_{2\varepsilon}(t^n)](x_j \pm (\delta_2^\pm)_j^n)} \quad \text{per } x_j \in \Omega_{2\varepsilon} \quad (2.47)$$

$$(\delta_3^\pm)_j^n = \sqrt{\Delta t \mathbb{I}[u_{3\varepsilon}(t^n)](x_j \pm (\delta_3^\pm)_j^n)} \quad \text{per } x_j \in \Omega_{3\varepsilon}. \quad (2.48)$$

2. Evolvere il valore delle variabili nei nodi situati nelle parti interne delle regioni $\Omega_{i\varepsilon}$ (indicando con (\cdot) la parte interna dell'insieme (\cdot)) secondo lo schema semi-Lagrangiano

$$(u_{i\varepsilon})_j^{n+1} = \frac{1}{2} \left(\mathbb{I}[u_{i\varepsilon}(t^n)](x_j - (\delta_i^-)_j^n) + \mathbb{I}[u_{i\varepsilon}(t^n)](x_j + (\delta_i^+)_j^n) \right) \quad \text{per } x_j \in \overset{\circ}{\Omega}_{i\varepsilon}, \quad i = 1, 2, 3. \quad (2.49)$$

3. Evolvere le variabili sui bordi del dominio Ω $x = -1$, $x = 1$ tramite gli schemi

$$(u_{1\varepsilon})_j^{n+1} = \frac{1}{2} \left(\mathbb{I}[u_{1\varepsilon}(t^n)](x_j + 0.1\sqrt{\Delta t}) + \mathbb{I}[u_{1\varepsilon}(t^n)](x_j + (\delta_1^+)_j^n) \right) \quad \text{per } x_j = -1 \quad (2.50)$$

$$(u_{3\varepsilon})_j^{n+1} = 0.5 \quad \text{per } x_j = 1. \quad (2.51)$$

4. Evolvere le variabili sulle interfacce $x_j = 0$ e $x_j = \varepsilon$ risolvendo i sistemi

$$\begin{cases} (u_{1\varepsilon})_j^{n+1} = \frac{1}{2} \left(\mathbb{I}[u_{1\varepsilon}(t^n)](x_j - (\delta_1^-)_j^n) + \mathbb{I}[u_{1\varepsilon}(t^n)](x_j - 0.1\sqrt{\Delta t}) + \right. \\ \quad \left. + ((\delta_1^+)_j^n + 0.1\sqrt{\Delta t})(k_1)^{n+1} \right) \\ (u_{2\varepsilon})_j^{n+1} = \frac{1}{2} \left(\mathbb{I}[u_{2\varepsilon}(t^n)](x_j + 0.1\sqrt{\Delta t}) + \mathbb{I}[u_{2\varepsilon}(t^n)](x_j + (\delta_2^+)_j^n) + \right. \\ \quad \left. + ((\delta_2^-)_j^n + 0.1\sqrt{\Delta t})(k_2)^{n+1} \right) \\ 0.5(u_{1\varepsilon})_j^{n+1}(k_1)^{n+1} = 0.1\varepsilon(u_{2\varepsilon})_j^{n+1}(k_2)^{n+1} \\ (u_{1\varepsilon})_j^{n+1} = (u_{2\varepsilon})_j^{n+1} \end{cases} \quad (2.52)$$

in $x_j = 0$ nelle incognite $(u_{1\varepsilon})_j^{n+1}$, $(u_{2\varepsilon})_j^{n+1}$, $(k_1)^{n+1}$, $(k_2)^{n+1}$ e

$$\begin{cases} (u_{2\varepsilon})_j^{n+1} = \frac{1}{2} \left(\mathbb{I}[u_{2\varepsilon}(t^n)](x_j - (\delta_2^-)_j^n) + \mathbb{I}[u_{2\varepsilon}(t^n)](x_j - 0.1\sqrt{\Delta t}) + \right. \\ \quad \left. + ((\delta_2^+)_j^n + 0.1\sqrt{\Delta t})(k_2)^{n+1} \right) \\ (u_{3\varepsilon})_j^{n+1} = \frac{1}{2} \left(\mathbb{I}[u_{3\varepsilon}(t^n)](x_j + 0.1\sqrt{\Delta t}) + \mathbb{I}[u_{3\varepsilon}(t^n)](x_j + (\delta_3^+)_j^n) + \right. \\ \quad \left. + ((\delta_3^-)_j^n + 0.1\sqrt{\Delta t})(k_3)^{n+1} \right) \\ 0.1\varepsilon(u_{2\varepsilon})_j^{n+1}(k_2)^{n+1} = 0.5\varepsilon(u_{3\varepsilon})_j^{n+1}(k_3)^{n+1} \\ (u_{2\varepsilon})_j^{n+1} = (u_{3\varepsilon})_j^{n+1} \end{cases} \quad (2.53)$$

in $x_j = \varepsilon$ nelle incognite $(u_{2\varepsilon})_j^{n+1}$, $(u_{3\varepsilon})_j^{n+1}$, $(k_2)^{n+1}$, $(k_3)^{n+1}$.

5. Applicare la forzante ad $u_{1\varepsilon}$, ottenendo

$$(u_{1\varepsilon})_j^{n+1} + \left(1 - (u_{1\varepsilon})_j^n \right) (u_{1\varepsilon})_j^n. \quad (2.54)$$

Invece la trattazione del problema \mathcal{P}_0 (2.42) si basa sull'algoritmo

1. Ricavare gli spostamenti diffusivi in ogni nodo nelle tre regioni $\tilde{\Omega}_i$ tramite le espressioni implicite

$$(\delta_1^\pm)_j^n = \sqrt{\Delta t \mathbb{I}[\tilde{u}_1(t^n)](x_j \pm (\delta_1^\pm)_j^n)} \quad \text{per } x_j \in \tilde{\Omega}_1 \quad (2.55)$$

$$(\delta_3^\pm)_j^n = \sqrt{\Delta t \mathbb{I}[\tilde{u}_3(t^n)](x_j \pm (\delta_3^\pm)_j^n)} \quad \text{per } x_j \in \tilde{\Omega}_3. \quad (2.56)$$

2. Evolvere il valore delle variabili nei nodi situati nelle parti interne delle regioni $\tilde{\Omega}_i$ (indicando con $\dot{(\cdot)}$ la parte interna dell'insieme (\cdot)) secondo lo schema semi-Lagrangiano

$$(\tilde{u}_i)_j^{n+1} = \frac{1}{2} \left(\mathbb{I}[\tilde{u}_i(t^n)](x_j - (\delta_i^-)_j^n) + \mathbb{I}[\tilde{u}_i(t^n)](x_j + (\delta_i^+)_j^n) \right) \quad \text{per } x_j \in \dot{\tilde{\Omega}}_i, \quad i = 1, 3. \quad (2.57)$$

3. Evolvere le variabili sui bordi $x = -1$, $x = 1$ tramite gli schemi

$$(\tilde{u}_1)_j^{n+1} = \frac{1}{2} \left(\mathbb{I}[\tilde{u}_1(t^n)](x_j + 0.1\sqrt{\Delta t}) + \mathbb{I}[\tilde{u}_1(t^n)](x_j + (\delta_1^+)_j^n) \right) \quad \text{per } x_j = -1 \quad (2.58)$$

$$(\tilde{u}_3)_j^{n+1} = 0.5 \quad \text{per } x_j = 1. \quad (2.59)$$

4. Evolvere le variabili sull'interfaccia $x_j = 0$ risolvendo il sistema

$$\begin{cases} (\tilde{u}_2)_j^{n+1} = \frac{1}{2} \left(\mathbb{I}[\tilde{u}_2(t^n)](x_j - (\delta_2^-)_j^n) + \mathbb{I}[\tilde{u}_2(t^n)](x_j - 0.1\sqrt{\Delta t}) + \right. \\ \quad \left. + ((\delta_2^+)_j^n + 0.1\sqrt{\Delta t})(k_2)^{n+1} \right) \\ (\tilde{u}_3)_j^{n+1} = \frac{1}{2} \left(\mathbb{I}[\tilde{u}_3(t^n)](x_j + 0.1\sqrt{\Delta t}) + \mathbb{I}[u_3(t^n)](x_j + (\delta_3^+)_j^n) + \right. \\ \quad \left. + ((\delta_3^-)_j^n + 0.1\sqrt{\Delta t})(k_3)^{n+1} \right) \\ \frac{((\tilde{u}_3)_j^{n+1})^{\uparrow 2} - ((\tilde{u}_1)_j^{n+1})^{\uparrow 2}}{2} = 5(\tilde{u}_1)_j^{n+1}(k_1)^{n+1} = 5(\tilde{u}_3)_j^{n+1}(k_3)^{n+1} \end{cases} \quad (2.60)$$

nelle incognite $(\tilde{u}_1)_j^{n+1}$, $(\tilde{u}_3)_j^{n+1}$, $(k_1)_k^{n+1}$, $(k_3)_k^{n+1}$.

5. Applicare la forzante ad $u_{1\varepsilon}$, ottenendo

$$(\tilde{u}_1)_j^{n+1} + \left(1 - (\tilde{u}_1)_j^n\right) (\tilde{u}_1)_j^n \quad \text{per } x_j \in \tilde{\Omega}_1. \quad (2.61)$$

Gli interpolatori $\mathbb{I}[u]$ introdotti si basano sull'uso di polinomi di Lagrange di terzo grado, secondo lo schema espresso da (1.7).

Confrontando le soluzioni ottenute usando gli schemi presentati con quelle generate tramite il software commerciale COMSOL Multiphysics[®], secondo quanto fatto da [Chaplain et al. \[2019\]](#), si può osservare una sovrapposizione dei risultati per entrambi i problemi trattati (Figure 2.3, 2.4). Questo risultato conferma l'applicabilità del metodo semi-Lagrangiano nel trattare il problema in esame, in quanto capace di riprodurre la convergenza alla base del modello per membrane successivamente più sottili. Analizzando la velocità di tale convergenza tramite gli errori relativi ai lati della membrana, si può ritrovare l'andamento lineare dell'errore in ε già visto in 2.2b. Dal confronto dell'errore relativo rappresentato in figura 2.5 con quello ottenuto dallo studio tramite COMSOL si può osservare un andamento equivalente degli errori.

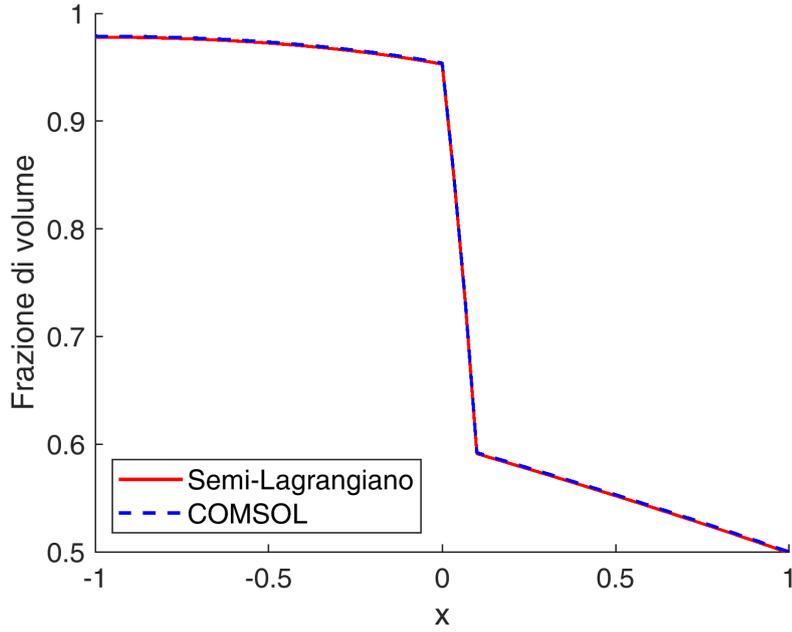


Figura 2.3: Confronto tra la soluzione numerica del problema con membrana sottile \mathcal{P}_ε (2.41) ottenuta col software COMSOL Multiphysics® e quella ricavata tramite il metodo semi-Lagrangiano sviluppato nella Proposizione 4 al tempo $t=20$.

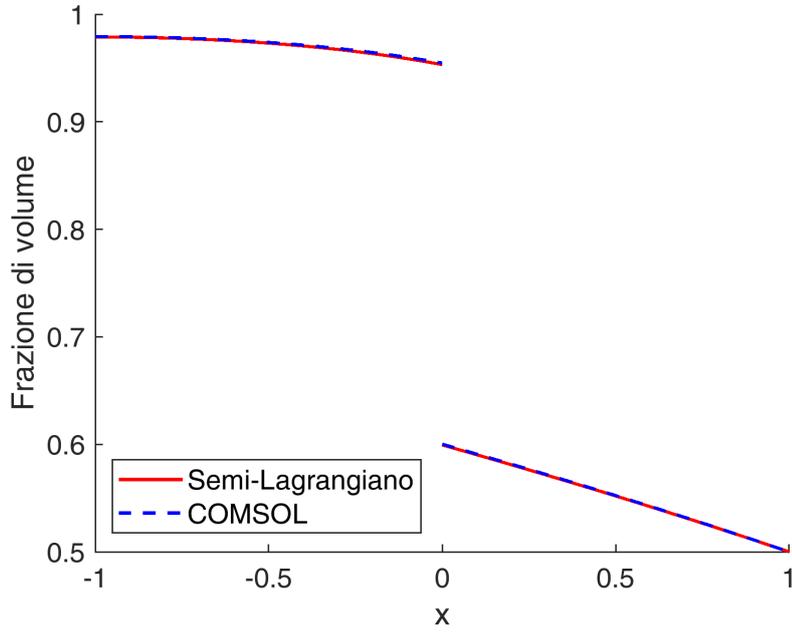


Figura 2.4: Confronto tra la soluzione numerica del problema con interfaccia effettiva \mathcal{P}_0 (2.42) ottenuta col software COMSOL Multiphysics® e quella ricavata tramite il metodo semi-Lagrangiano sviluppato nella Proposizione 4 al tempo $t=20$.

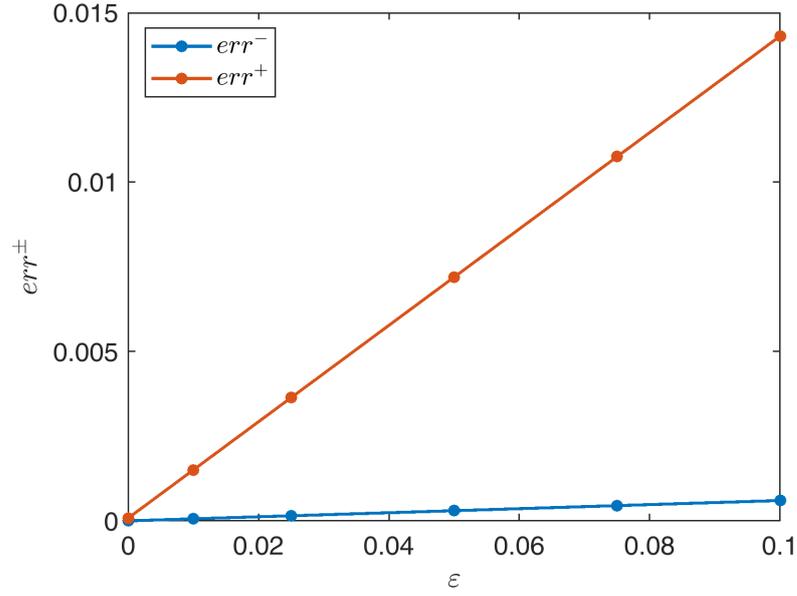


Figura 2.5: Errore relativo tra le soluzioni del problema con membrana sottile \mathcal{P}_ε e del problema con interfaccia effettiva \mathcal{P}_0 ottenute col metodo semi-Lagrangiano valutato agli estremi della membrana al tempo $t=20$. Viene indicato con err^- l'errore relativo tra $u_{1\varepsilon}(0,20)$ e $\tilde{u}_1(0^-,20)$ e con err^+ quello tra $u_{1\varepsilon}(\varepsilon,20)$ e $\tilde{u}_1(0^+,20)$.

2.4 Modello biologico con molteplici popolazioni cellulari

Passiamo ora alla descrizione del problema di attraversamento della membrana con presenza di K popolazioni cellulari interagenti proposto da [Givero et al. \[2021\]](#). Introducendo l'apice $k = 1, \dots, K$ per rappresentare la popolazione d'interesse, il sistema equivalente a (2.5) per ognuna delle popolazioni cellulari risulta essere

$$\begin{cases} \frac{\partial u_i^k}{\partial t} - \nabla \cdot (u_i^k \nu_i^k \nabla p^k) = \Gamma_i^k(u_i^k, U_i) & \text{in } \Omega_i, \quad i = 1, 2, 3 \\ \llbracket \nu^k u^k \nabla p^k \rrbracket \cdot \mathbf{n}_{ij} = 0 & \text{su } \Sigma_{ij}, \quad i = 1, 2 \\ \llbracket p^k \rrbracket = 0 & \text{su } \Sigma_{ij}, \quad i = 1, 2 \\ U_i := \sum_{k=1}^K u_i^k & \end{cases} \quad k = 1, \dots, K. \quad (2.62)$$

A differenza del caso con singola popolazione, il tasso di crescita $\Gamma_i^k(u_i^k, U_i)$ e la legge barotropica $p^k = p^k(u_i^k, U_i)$ possono dipendere non solo dalla concentrazione cellulare della k -esima popolazione nell' i -esima regione di spazio ma anche dalla concentrazione totale U_i nella stessa regione. Ciò ha senso da un punto di vista biologico, in quanto le cellule

sentono la pressione delle altre nel loro intorno, indipendentemente dalla popolazione di cui esse fanno parte, e ciò influenza sia il loro moto che la loro riproduzione. Inoltre, la dipendenza del coefficiente di mobilità ν da k rappresenta la diversa tendenza al moto da parte di cellule che si distinguono tra loro in dimensioni e proprietà meccaniche all'interno della stessa matrice extracellulare. Si noti che nel caso in cui la legge barotropica dipendesse soltanto da u_i^k , si verificherebbe la stessa dinamica descritta dal modello ad una singola popolazione, con K problemi di moto cellulare tra loro indipendenti e accoppiati solamente tramite la forzante. Nel lavoro di [Givero et al. \[2021\]](#) il problema generale è stato semplificato trattando una legge barotropica del tipo $p^k = p^k(U_i)$. Questa scelta si basa su osservazioni fenomenologiche, le quali mostrano che tutte le cellule appartenenti ad un sistema multi-popolazione sentono la stessa pressione esercitata dalle cellule circostanti, indipendentemente dalle loro popolazioni di appartenenza. Successivamente, gli autori hanno introdotto le assunzioni equivalenti a quelle viste nel problema ad una popolazione, secondo cui

- Il coefficiente di motilità cellulare ν_i^k è continuo in x e t all'interno di ogni Ω_i .
- Il tasso di crescita cellulare Γ_i^k è differenziabile in u e U con derivata continua all'interno di ogni Ω_i .
- La legge barotropica $p^k(U)$ è differenziabile con derivata continua e strettamente crescente in U .

Dalla terza assunzione, segue in maniera diretta che la continuità degli sforzi implica una continuità della concentrazione totale U_i . Reintroducendo lo spessore ε definito da (2.7) nel sistema (2.62) si ottiene il problema con membrana sottile multipopolazione

$$\mathcal{P}_\varepsilon^K = \begin{cases} \frac{\partial u_{i\varepsilon}^k}{\partial t} - \nabla \cdot (u_{i\varepsilon}^k \nu_{i\varepsilon}^k p'(U_{i\varepsilon}) \nabla U_{i\varepsilon}) = \Gamma_{i\varepsilon}^k(u_{i\varepsilon}^k, U_{i\varepsilon}) & \text{in } \Omega_{i\varepsilon}, i = 1, 2, 3 \\ \nu_{i\varepsilon}^k u_{i\varepsilon}^k p'(U_{i\varepsilon}) \nabla U_{i\varepsilon} \cdot \mathbf{n}_{ij} = \nu_{j\varepsilon}^k u_{j\varepsilon}^k p'(U_{j\varepsilon}) \nabla U_{j\varepsilon} \cdot \mathbf{n}_{ij} & \text{su } \Sigma_{ij\varepsilon}, i = 1, 2 \\ U_{i\varepsilon} = U_{j\varepsilon} & \text{su } \Sigma_{ij\varepsilon}, i = 1, 2 \\ U_{i\varepsilon} := \sum_{k=1}^K u_{i\varepsilon}^k & \end{cases} \quad k = 1, \dots, K. \quad (2.63)$$

Si noti che, così come nel problema a singola popolazione, le condizioni al contorno tra le tre regioni tengono conto della continuità dei flussi delle variabili, ma al posto della continuità delle singole concentrazioni è solamente garantita la continuità della concentrazione totale.

Mandando $\varepsilon \rightarrow 0$ si ha la transizione al problema con interfaccia effettiva multipopolazione

$$\mathcal{P}_0^K = \begin{cases} \frac{\partial \tilde{u}_i^k}{\partial t} - \nabla \cdot (\tilde{u}_i^k \tilde{\nu}_i^k p'(\tilde{U}_i) \nabla \tilde{U}_i) = \tilde{\Gamma}_i^k(\tilde{u}_i^k, \tilde{U}_i) & \text{in } \tilde{\Omega}_i, i = 1, 3 \\ \text{condizioni di attraversamento} & \text{su } \tilde{\Sigma}_{13} \\ \tilde{U}_i := \sum_{k=1}^K \tilde{u}_i^k & \end{cases} \quad k = 1, \dots, K \quad (2.64)$$

in cui si introducono

$$\tilde{\Omega}_1 = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \Omega_{1\varepsilon}, \quad \tilde{\Omega}_3 = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \Omega_{3\varepsilon}, \quad \tilde{\Sigma}_{13} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \Sigma_{12\varepsilon} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \Sigma_{23\varepsilon}, \quad (2.65)$$

$$\tilde{u}_i^k = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} u_{i\varepsilon}^k, \quad \tilde{\nu}_i^k = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \nu_{i\varepsilon}^k, \quad \tilde{\Gamma}_i^k = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \Gamma_{i\varepsilon}^k, \quad i = 1, 3. \quad (2.66)$$

La costruzione delle condizioni di attraversamento di $\tilde{\Sigma}_{13}$ segue un procedimento analogo a quanto visto nel caso di singola popolazione, nell'ipotesi non restrittiva di superfici $\Sigma_{12\varepsilon}$, $\Sigma_{23\varepsilon}$ piane e parallele tra loro. Innanzitutto vengono fatte due assunzioni sui coefficienti di mobilità nella membrana $\nu_{2\varepsilon}^k$ secondo cui

$$\nu_{2\varepsilon}^k \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0 \quad \text{in modo tale che} \quad \frac{\nu_{2\varepsilon}^k}{\varepsilon} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \tilde{\nu}_{13}^k \quad \text{con} \quad \tilde{\nu}_{13}^k = \tilde{\nu}_{13}^k(x, t) \quad (2.67)$$

e

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\nabla \nu_{2\varepsilon}^k}{\varepsilon} \cdot \mathbf{n}_{12} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\nabla \nu_{2\varepsilon}^k}{\varepsilon} \cdot \mathbf{n}_{23} = \nabla \tilde{\nu}_{13}^k \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{13}. \quad (2.68)$$

Si introduce quindi la notazione $\Omega_{2\varepsilon} \ni \mathbf{x} := (x_\perp, \mathbf{x}_\Sigma)$, dove $x_\perp := \mathbf{x} \cdot \mathbf{n}_{12} = \mathbf{x} \cdot \mathbf{n}_{23}$, con successivo cambio di variabili $x_\perp \mapsto x_\perp - \hat{x}_{12\perp}$, con $\hat{x}_{12\perp}$ ottenuto da $\hat{\mathbf{x}}_{12} = (\hat{x}_{12\perp}, \hat{\mathbf{x}}_{12\Sigma}) \in \Sigma_{12\varepsilon}$, e $\eta := \frac{x_\perp}{\varepsilon} \in (0, 1)$. A seguito di questo cambio, l'equazione di bilancio di massa per $u_{2\varepsilon}^k$ può essere riscritta come

$$\frac{\partial u_{2\varepsilon}^k}{\partial t} - \nabla_{\mathbf{x}_\Sigma} \cdot (\nu_{2\varepsilon}^k u_{2\varepsilon}^k p'(U_{2\varepsilon}) \nabla_{\mathbf{x}_\Sigma} U_{2\varepsilon}) - \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\nu_{2\varepsilon}^k}{\varepsilon} u_{2\varepsilon}^k p'(U_{2\varepsilon}) \frac{\partial U_{2\varepsilon}}{\partial \eta} \right) = \Gamma_{2\varepsilon}^k(u_{2\varepsilon}^k, U_{2\varepsilon}), \quad (2.69)$$

e i due membri delle condizioni di continuità del flusso valutati in $\Omega_{2\varepsilon}$ possono essere riformulati come

$$\nu_{1\varepsilon}^k u_{1\varepsilon}^k p'(U_{1\varepsilon}) \nabla U_{1\varepsilon} \cdot \mathbf{n}_{12}|_{\Sigma_{12\varepsilon}} = \frac{\nu_{2\varepsilon}^k}{\varepsilon} u_{2\varepsilon}^k p'(U_{2\varepsilon}) \frac{\partial U_{2\varepsilon}}{\partial \eta} \Big|_{\eta=0}, \quad (2.70)$$

$$\nu_{3\varepsilon}^k u_{3\varepsilon}^k p'(U_{3\varepsilon}) \nabla U_{3\varepsilon} \cdot \mathbf{n}_{23}|_{\Sigma_{23\varepsilon}} = \frac{\nu_{2\varepsilon}^k}{\varepsilon} u_{2\varepsilon}^k p'(U_{2\varepsilon}) \frac{\partial U_{2\varepsilon}}{\partial \eta} \Big|_{\eta=1}. \quad (2.71)$$

Si introducono dunque gli ansatz

$$u_{2\varepsilon}^k(\eta, \mathbf{x}_\Sigma) = u_2^{k0}(\eta, \mathbf{x}_\Sigma) + \varepsilon u_2^{k1}(\eta, \mathbf{x}_\Sigma) + O(\varepsilon), \quad (2.72)$$

da cui segue

$$U_{2\varepsilon}(\eta, \mathbf{x}_\Sigma) = U_2^0(\eta, \mathbf{x}_\Sigma) + \varepsilon U_2^1(\eta, \mathbf{x}_\Sigma) + O(\varepsilon), \quad (2.73)$$

e le espansioni

$$p'(U_{2\varepsilon}) = p'(U_2^0) + \varepsilon p''(U_2^0) U_2^1 + O(\varepsilon), \quad (2.74)$$

$$\Gamma_{2\varepsilon}^k(u_{2\varepsilon}^k, U_{2\varepsilon}) = \Gamma_2^k(u_2^{k0}, U_2^0) + \varepsilon \left(\frac{\partial \Gamma_2^k}{\partial u_{2\varepsilon}^k}(u_2^{k0}, U_2^0) u_2^{k1} + \frac{\partial \Gamma_2^k}{\partial U_{2\varepsilon}}(u_2^{k0}, U_2^0) U_2^1 \right) + O(\varepsilon). \quad (2.75)$$

Sostituendo (2.72), (2.73), (2.74), (2.75) nel bilancio di massa (2.69) e mandando $\varepsilon \rightarrow 0$ si ottiene

$$\frac{\partial}{\partial \eta} \left(\tilde{\nu}_{13}^k u_2^{k0} p'(U_2^0) \frac{\partial U_2^0}{\partial \eta} \right) = 0 \quad \Rightarrow \quad \tilde{\nu}_{13}^k u_2^{k0} p'(U_2^0) \frac{\partial U_2^0}{\partial \eta} = C \quad \forall \eta \in (0,1), \quad (2.76)$$

con C costante. Applicando lo stesso procedimento a (2.70) e (2.71) segue che

$$\tilde{\nu}_1^k \tilde{u}_1^k p'(\tilde{U}_1) \nabla \tilde{U}_1 \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{13}|_{\tilde{\Sigma}_{13}} = \tilde{\nu}_2^k u_2^{k0} p'(U_2^0) \frac{\partial U_2^0}{\partial \eta} \Big|_{\eta=0}, \quad (2.77)$$

$$\tilde{\nu}_3^k \tilde{u}_3^k p'(\tilde{U}_3) \nabla \tilde{U}_3 \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{13}|_{\tilde{\Sigma}_{13}} = \tilde{\nu}_2^k u_2^{k0} p'(U_2^0) \frac{\partial U_2^0}{\partial \eta} \Big|_{\eta=1}. \quad (2.78)$$

L'invarianza in η espressa in (2.76) unita a (2.77) e (2.78) porta a concludere

$$\tilde{\nu}_{13}^k u_2^{k0} p'(U_2^0) \frac{\partial U_2^0}{\partial \eta} = \tilde{\nu}_1^k \tilde{u}_1^k p'(\tilde{U}_1) \nabla \tilde{U}_1 \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{13}|_{\tilde{\Sigma}_{13}} = \tilde{\nu}_3^k \tilde{u}_3^k p'(\tilde{U}_3) \nabla \tilde{U}_3 \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{13}|_{\tilde{\Sigma}_{13}}. \quad (2.79)$$

la quale esprime la continuità del flusso per ogni k -esima popolazione cellulare. Per definire la seconda condizione di attraversamento è sufficiente dividere per $\tilde{\nu}_{13}^k$ l'equazione precedente, poi integrare ogni membro in η sullo spessore della membrana e sommare in k , ottenendo così

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^K \int_0^1 u_2^{k0} p'(U_2^0) \frac{\partial U_2^0}{\partial \eta} d\eta &= \sum_{k=1}^K \left(\frac{\tilde{\nu}_1^k \tilde{u}_1^k}{\tilde{\nu}_{13}^k} \right) p'(\tilde{U}_1) \nabla \tilde{U}_1 \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{13}|_{\tilde{\Sigma}_{13}} \int_0^1 d\eta = \\ &= \sum_{k=1}^K \left(\frac{\tilde{\nu}_3^k \tilde{u}_3^k}{\tilde{\nu}_{13}^k} \right) p'(\tilde{U}_3) \nabla \tilde{U}_3 \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{13}|_{\tilde{\Sigma}_{13}} \int_0^1 d\eta. \end{aligned} \quad (2.80)$$

Introducendo un termine Π definito in modo tale che

$$\Pi'(U) := U P'(U) \quad (2.81)$$

è possibile riscrivere il primo membro di (2.80) nella forma

$$\sum_{k=1}^K \int_0^1 u_2^{k0} p'(U_2^0) \frac{\partial U_2^0}{\partial \eta} d\eta = \sum_{k=1}^K \int_0^1 \Pi'(U_2^0) \frac{\partial U_2^0}{\partial \eta} d\eta = \int_0^1 \frac{\partial \Pi}{\partial \eta} d\eta = \llbracket \Pi \rrbracket. \quad (2.82)$$

Questo permette così di ottenere la seconda condizione di attraversamento

$$\llbracket \Pi \rrbracket = \sum_{k=1}^K \left(\frac{\tilde{\nu}_1^k \tilde{u}_1^k}{\tilde{\nu}_{13}^k} \right) p'(\tilde{U}_1) \nabla \tilde{U}_1 \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{13}|_{\tilde{\Sigma}_{13}} = \sum_{k=1}^K \left(\frac{\tilde{\nu}_3^k \tilde{u}_3^k}{\tilde{\nu}_{13}^k} \right) p'(\tilde{U}_3) \nabla \tilde{U}_3 \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{13}|_{\tilde{\Sigma}_{13}}. \quad (2.83)$$

Come già osservato per il sistema (2.63), la condizione appena ottenuta non definisce una relazione tra i singoli salti delle concentrazioni cellulari ed i relativi flussi, bensì lega il flusso totale con il salto di Π , il quale è un descrittore della concentrazione cellulare totale

e della pressione che tale concentrazione causa.

In conclusione, il sistema che descrive il problema con interfaccia effettiva multipopolazione è dato da

$$\mathcal{P}_0^K = \begin{cases} \frac{\partial \tilde{u}_i^k}{\partial t} - \nabla \cdot (\tilde{u}_i^k \tilde{\nu}_i^k p'(\tilde{U}_i) \nabla \tilde{U}_i) = \tilde{\Gamma}_i^k(\tilde{u}_i^k, \tilde{U}_i) & \text{in } \tilde{\Omega}_i, \quad i = 1, 3 \\ \tilde{\nu}_1^k \tilde{u}_1^k p'(\tilde{U}_1) \nabla \tilde{U}_1 \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{13} = \tilde{\nu}_3^k \tilde{u}_3^k p'(\tilde{U}_3) \nabla \tilde{U}_3 \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{13} & \text{su } \tilde{\Sigma}_{13} \\ \begin{aligned} \llbracket \Pi \rrbracket &= \sum_{k=1}^K \left(\frac{\tilde{\nu}_1^k}{\tilde{\nu}_{13}^k} \tilde{u}_1^k \right) p'(\tilde{U}_1) \nabla \tilde{U}_1 \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{13} = \\ &= \sum_{k=1}^K \left(\frac{\tilde{\nu}_3^k}{\tilde{\nu}_{13}^k} \tilde{u}_3^k \right) p'(\tilde{U}_3) \nabla \tilde{U}_3 \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{13} \end{aligned} & \text{su } \tilde{\Sigma}_{13} \quad k = 1, \dots, K. \\ \tilde{U}_i := \sum_{k=1}^K \tilde{u}_i^k & \end{cases} \quad (2.84)$$

Il problema con membrana sottile multipopolazione (2.63) è descritto da un sistema di $3K$ equazioni in $3K$ incognite (K per sottodominio), dunque su ogni superficie Σ_{ij} sono necessarie sufficienti condizioni per legare tra loro le variabili definite nelle regioni adiacenti. La continuità del flusso di ogni popolazione cellulare e la continuità della concentrazione totale impongono solo $2(K+1)$ condizioni sulle interfacce, ma esse risultano essere sufficienti per la chiusura del problema. E' infatti possibile riscrivere il sistema in modo da identificare 3 equazioni paraboliche e $3(K-1)$ equazioni iperboliche. Tale riformulazione fa sì che su ogni superficie Σ_{ij} siano sufficienti 2 condizioni per le equazioni paraboliche definite nelle regioni adiacenti e $K-1$ condizioni per quelle iperboliche. La stessa osservazione può essere fatta per il problema con interfaccia effettiva multipopolazione (2.84), il quale è identificato da $2K$ equazioni in $2K$ incognite. In tal caso, le $2(K+1)$ condizioni imposte sull'interfaccia $\tilde{\Sigma}_{13}$ bastano a chiudere il problema se il sistema viene riscritto così da ottenere 2 equazioni paraboliche e $K-1$ equazioni iperboliche.

Nel caso di un problema a due popolazioni aventi coefficienti di motilità ν^k omogenei e pressioni di legge lineare $p(U)$ tali che $p'(U) = d$, allora risulta semplice effettuare la formulazione delle equazioni iperboliche descritte. Per comodità, effettuiamo la sostituzione $\nu d \rightarrow \nu$, con conseguente cambiamento del significato del coefficiente ν . Questa sostituzione risulterà essere una modifica temporanea, in quanto nelle simulazioni numeriche successive verrà adottata una legge barometrica di derivata unitaria, dunque il termine ν tornerà a rappresentare la motilità cellulare. Partendo dai due bilanci di massa

$$\begin{cases} \frac{\partial u^1}{\partial t} - \nabla \cdot (u^1 \nu^1 \nabla U) = \Gamma^1(u^1, U) \\ \frac{\partial u^2}{\partial t} - \nabla \cdot (u^2 \nu^2 \nabla U) = \Gamma^2(u^2, U), \end{cases} \quad (2.85)$$

in cui u rappresenta una qualsiasi $u_{i\varepsilon}$ $i = 1,2,3$ del problema (2.63) o \tilde{u}_i $i = 1,3$ di (2.84), espandiamo il termine relativo al moto causato dalla pressione, ottenendo

$$\begin{cases} \frac{\partial u^1}{\partial t} - \nu^1 \nabla u^1 \cdot \nabla U - \nu^1 u^1 \nabla^2 U = \Gamma^1(u^1, U) \\ \frac{\partial u^2}{\partial t} - \nu^2 \nabla u^2 \cdot \nabla U - \nu^2 u^2 \nabla^2 U = \Gamma^2(u^2, U). \end{cases} \quad (2.86)$$

A questo punto, moltiplichiamo ogni equazione per il rapporto tra la concentrazione dell'altra popolazione e il quadrato della concentrazione totale (nell'ipotesi di concentrazione totale non nulla) ed effettuiamo la differenza tra le equazioni che seguono. Ciò porta a

$$\begin{cases} \frac{u^2}{U^{\uparrow 2}} \frac{\partial u^1}{\partial t} - \nu^1 \frac{u^2}{U^{\uparrow 2}} \nabla u^1 \cdot \nabla U - \frac{u^2}{U^{\uparrow 2}} \nu^1 u^1 \nabla^2 U = \frac{u^2}{U^{\uparrow 2}} \Gamma^1(u^1, U) \\ \frac{u^1}{U^{\uparrow 2}} \frac{\partial u^2}{\partial t} - \nu^2 \frac{u^1}{U^{\uparrow 2}} \nabla u^2 \cdot \nabla U - \frac{u^1}{U^{\uparrow 2}} \nu^2 u^2 \nabla^2 U = \frac{u^1}{U^{\uparrow 2}} \Gamma^2(u^2, U) \end{cases} \quad (2.87)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{u^2}{U^{\uparrow 2}} \frac{\partial u^1}{\partial t} - \frac{u^1}{U^{\uparrow 2}} \frac{\partial u^2}{\partial t} - \left(\nu^1 \frac{u^2}{U^{\uparrow 2}} \nabla u^1 - \nu^2 \frac{u^1}{U^{\uparrow 2}} \nabla u^2 \right) \cdot \nabla U + \\ - (\nu^1 - \nu^2) \frac{u^1 u^2}{U^{\uparrow 2}} \nabla^2 U = \frac{u^2}{U^{\uparrow 2}} \Gamma^1(u^1, U) - \frac{u^1}{U^{\uparrow 2}} \Gamma^2(u^2, U), \end{aligned} \quad (2.88)$$

dove ricordiamo che la notazione $\uparrow (\cdot)$ indica l'elevamento a potenza. Ipotizzando l'uguaglianza dei coefficienti di motilità tra le popolazioni $\nu^k = \nu$ si ottiene l'equazione iperbolica nella variabile $y = \frac{u^1}{U}$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{u^1}{U} \right) - \nu \nabla \left(\frac{u^1}{U} \right) \cdot \nabla U = \frac{u^2}{U^{\uparrow 2}} \Gamma^1(u^1, U) - \frac{u^1}{U^{\uparrow 2}} \Gamma^2(u^2, U) \quad (2.89)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial y}{\partial t} - \nu \nabla y \cdot \nabla U = \frac{u^2}{U^{\uparrow 2}} \Gamma^1(u^1, U) - \frac{u^1}{U^{\uparrow 2}} \Gamma^2(u^2, U). \quad (2.90)$$

Ad essa si può accoppiare l'equazione parabolica in U ottenuta sommando le equazioni del sistema (2.85), da cui segue il sistema

$$\begin{cases} \frac{\partial y}{\partial t} - \nu \nabla y \cdot \nabla U = \frac{u^2}{U^{\uparrow 2}} \Gamma^1(u^1, U) - \frac{u^1}{U^{\uparrow 2}} \Gamma^2(u^2, U) \\ \frac{\partial U}{\partial t} - \nu \nabla \cdot (U \nabla U) = \Gamma^1(u^1, U) + \Gamma^2(u^2, U). \end{cases} \quad (2.91)$$

Tale riscrittura delle equazioni può essere effettuata in ogni sottodominio per i sistemi (2.63), (2.84). Questo permette di esprimere il seguente risultato.

Proposizione 5 *Nell'ipotesi di coefficienti di motilità uguali tra le popolazioni cellulari e omogenei in spazio e per una legge barotropica lineare nella concentrazione totale, i sistemi*

(2.63), (2.84) per due popolazioni cellulari possono essere riscritti come

$$\mathcal{P}_\varepsilon^2 = \begin{cases} \frac{\partial y_{i\varepsilon}}{\partial t} - \nu_{i\varepsilon} \nabla y_{i\varepsilon} \cdot \nabla U_{i\varepsilon} = \frac{u_{i\varepsilon}^2}{U_{i\varepsilon}^{\uparrow 2}} \Gamma_{i\varepsilon}^1(u_{i\varepsilon}^1, U_{i\varepsilon}) - \frac{u_{i\varepsilon}^1}{U_{i\varepsilon}^{\uparrow 2}} \Gamma_{i\varepsilon}^2(u_{i\varepsilon}^2, U_{i\varepsilon}) & \text{in } \Omega_{i\varepsilon}, i = 1, 2, 3 \\ \frac{\partial U_{i\varepsilon}}{\partial t} - \nu_{i\varepsilon} \nabla \cdot (U_{i\varepsilon} \nabla U_{i\varepsilon}) = \Gamma_{i\varepsilon}^1(u_{i\varepsilon}^1, U_{i\varepsilon}) + \Gamma_{i\varepsilon}^2(u_{i\varepsilon}^2, U_{i\varepsilon}) & \text{in } \Omega_{i\varepsilon}, i = 1, 2, 3 \\ \nu_{i\varepsilon} y_{i\varepsilon} U_{i\varepsilon} \nabla U_{i\varepsilon} \cdot \mathbf{n}_{ij} = \nu_{j\varepsilon} y_{j\varepsilon} U_{j\varepsilon} \nabla U_{j\varepsilon} \cdot \mathbf{n}_{ij} & \text{su } \Sigma_{ij\varepsilon}, i = 1, 2 \\ \nu_{i\varepsilon} (1 - y_{i\varepsilon}) U_{i\varepsilon} \nabla U_{i\varepsilon} \cdot \mathbf{n}_{ij} = \nu_{j\varepsilon} (1 - y_{j\varepsilon}) U_{j\varepsilon} \nabla U_{j\varepsilon} \cdot \mathbf{n}_{ij} & \text{su } \Sigma_{ij\varepsilon}, i = 1, 2 \\ U_{i\varepsilon} = U_{j\varepsilon} & \text{su } \Sigma_{ij\varepsilon}, i = 1, 2 \end{cases} \quad (2.92)$$

per $j = i + 1$, e

$$\mathcal{P}_0^2 = \begin{cases} \frac{\partial \tilde{y}_i}{\partial t} - \tilde{\nu}_i \nabla \tilde{y}_i \cdot \nabla \tilde{U}_i = \frac{\tilde{u}_i^2}{\tilde{U}_i^{\uparrow 2}} \tilde{\Gamma}_i^1(\tilde{u}_i^1, \tilde{U}_i) - \frac{\tilde{u}_i^1}{\tilde{U}_i^{\uparrow 2}} \tilde{\Gamma}_i^2(\tilde{u}_i^2, \tilde{U}_i) & \text{in } \tilde{\Omega}_i, i = 1, 3 \\ \frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial t} - \tilde{\nu}_i \nabla \cdot (\tilde{U}_i \nabla \tilde{U}_i) = \tilde{\Gamma}_i^1(\tilde{u}_i^1, \tilde{U}_i) + \tilde{\Gamma}_i^2(\tilde{u}_i^2, \tilde{U}_i) & \text{in } \tilde{\Omega}_i, i = 1, 3 \\ \tilde{\nu}_1 \tilde{y}_1 \tilde{U}_1 \nabla \tilde{U}_1 \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{13} = \tilde{\nu}_3 \tilde{y}_3 \tilde{U}_3 \nabla \tilde{U}_3 \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{13} & \text{su } \tilde{\Sigma}_{13} \\ \tilde{\nu}_1 (1 - \tilde{y}_1) \tilde{U}_1 \nabla \tilde{U}_1 \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{13} = \tilde{\nu}_3 (1 - \tilde{y}_3) \tilde{U}_3 \nabla \tilde{U}_3 \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{13} & \text{su } \tilde{\Sigma}_{13} \\ \frac{(\tilde{U}_3)^{\uparrow 2} - (\tilde{U}_2)^{\uparrow 2}}{2} = \frac{\tilde{\nu}_1}{\tilde{\nu}_{13}} \tilde{U}_1 \nabla \tilde{U}_1 \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{13} = & \text{su } \tilde{\Sigma}_{13} \\ = \frac{\tilde{\nu}_3}{\tilde{\nu}_{13}} \tilde{U}_3 \nabla \tilde{U}_3 \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{13} & \end{cases} \quad (2.93)$$

in cui vengono introdotte le variabili $y_i = \frac{u_i^1}{U_i}$, $U_i = u_i^1 + u_i^2$ e il coefficiente ν rappresenta il prodotto tra la motilità cellulare e la derivata della legge barometrica nella sua variabile.

2.5 Risultati numerici del modello con molteplici popolazioni cellulari

A differenza di quanto fatto per il modello a singola popolazione, il problema multipopolazione non può essere risolto tramite software commerciali come COMSOL Multiphysics® basati su metodi numerici agli elementi finiti, formulati per problemi parabolici o ellittici. Essi, infatti, non riescono a riprodurre fenomeni a convezione dominante in maniera stabile senza l'introduzione di diffusione numerica. Poiché le condizioni imposte nei problemi (2.63), (2.84) sono sufficienti solo se essi vengono trattati nella forma (2.92), (2.93) contenente un'equazione iperbolica, la trattazione di quest'ultima coi software citati può risultare impossibile o inesatta. I metodi semi-Lagrangiani invece, essendo nati per studiare problemi atmosferici dominati da convezione, risultano ideali per descrivere questi fenomeni. Inoltre i risultati ottenuti nella sezione 2.3 mostrano la validità delle simulazioni fatte usando questi metodi.

Come fatto nel lavoro di Chaplain et al. [2019], l'obiettivo delle simulazioni seguenti è

dimostrare la convergenza del risultato del problema con membrana sottile multipopolazione (2.92) verso quello del problema con interfaccia effettiva (2.93) per $\varepsilon \rightarrow 0$. Lo studio è stato fatto in condizioni simili a quelle imposte nella sezione 2.3, seguendo le ipotesi richieste nella Proposizione 5. Dunque il problema $\mathcal{P}_\varepsilon^2$ (2.92) unidimensionale a due popolazioni è stato studiato utilizzando un dominio $\Omega = [-1,1]$ di partizioni

$$\Omega_{1\varepsilon} = (-1,0), \quad \Omega_{2\varepsilon} = (0,\varepsilon), \quad \Omega_{3\varepsilon} = (\varepsilon,1), \quad (2.94)$$

coefficienti di motilità uguali tra le popolazioni

$$\nu_{1\varepsilon}^k = \nu_{1\varepsilon} = 0.5, \quad \nu_{3\varepsilon}^k = \nu_{3\varepsilon} = 0.5, \quad \nu_{2\varepsilon}^k = \nu_{2\varepsilon} = 0.1\varepsilon \quad \text{per } k = 1,2, \quad (2.95)$$

legge barotropica lineare

$$p^1(U_{i\varepsilon}) = p^2(U_{i\varepsilon}) = p(U_{i\varepsilon}) = (U_{i\varepsilon} - U_{0i\varepsilon})_+ \quad \text{per } i = 1,2,3 \quad (2.96)$$

in cui $(\cdot)_+$ rappresenta la funzione parte positiva. Come distribuzioni iniziali sono state scelte

$$u_{0i\varepsilon}^1 = u_{0i\varepsilon}^2 = 0.25 \quad \Rightarrow \quad U_{0i\varepsilon} = 0.5, \quad y_{0i\varepsilon} = 0.5 \quad \text{per } i = 1,2,3, \quad (2.97)$$

mentre le condizioni al contorno utilizzate sono

$$\frac{\partial u_{1\varepsilon}^1}{\partial x}(-1, t) = \frac{\partial u_{1\varepsilon}^2}{\partial x}(-1, t) = 0.5, \quad U_{3\varepsilon}(1, t) = 0.5. \quad (2.98)$$

Per la forzante viene adottata una legge tale che Γ^k determini una crescita cellulare logistica nella regione $\Omega_{1\varepsilon}$ e un bilancio tra nascita e morte nei sottodomini $\Omega_{2\varepsilon}, \Omega_{3\varepsilon}$ con conseguente annullamento del termine reattivo per entrambe le specie cellulari. Poiché in seguito verranno effettuate delle simulazioni numeriche variando la legge logistica adottata per la forzante, l'espressione scelta verrà presentata successivamente.

Considerando che la legge della concentrazione totale U unita a parametri e condizioni imposte porta ad una dinamica equivalente a quella studiata per il problema a singola popolazione cellulare nella sezione 2.3, allora ci si può aspettare una distribuzione di U qualitativamente comparabile a quella ottenuta nella figura 2.2a. Prevedendo di avere gradienti non positivi di U su tutto il dominio per l'intera durata dello studio, le caratteristiche di y di pendenza data da $-\frac{\partial U}{\partial x}$ non saranno mai rivolte verso valori decrescenti di x . Ciò giustifica la presenza di un'unica condizione al contorno sul bordo destro del dominio, in quanto la richiesta di una seconda condizione porterebbe ad un problema mal posto. Inoltre, analogamente a quanto visto nel problema a singola popolazione, la legge di diffusione-reazione adottata per $U_{i\varepsilon}$ e le condizioni al bordo imposte fan sì che la concentrazione cellulare totale non sia mai inferiore al suo valore iniziale. Ciò comporta

$$p(U_{i\varepsilon}) = (U_{i\varepsilon} - U_{0i\varepsilon})_+ = U_{i\varepsilon} - U_{0i\varepsilon} \quad \Rightarrow \quad p'(U_{i\varepsilon}) = 1 \quad (2.99)$$

e il coefficiente ν in cui era stata inclusa la derivata della legge barometrica (si veda la Proposizione 5) torna a rappresentare la motilità cellulare.

Una volta definito il problema con membrana sottile, gli elementi che costituiscono il

problema con interfaccia effettiva associato sono ottenuti mandando $\varepsilon \rightarrow 0$. Questo porta il problema \mathcal{P}_0^2 (2.93) unidimensionale a due popolazione ad essere caratterizzato da

$$\tilde{\Omega}_1 = (-1,0), \quad \tilde{\Omega}_3 = (0,1), \quad (2.100)$$

$$\tilde{\nu}_1^k = \tilde{\nu}_1 = 0.5, \quad \tilde{\nu}_3^k = \tilde{\nu}_3 = 0.5, \quad \tilde{\nu}_2^k = \tilde{\nu}_2 = 0.1 \quad \text{per } k = 1,2, \quad (2.101)$$

$$\tilde{p}^1(U_i) = \tilde{p}^2(U_i) = \tilde{p}(\tilde{U}_i) = (\tilde{U}_i - \tilde{U}_{0i})_+ \quad \text{per } i = 1,2,3, \quad (2.102)$$

$$\tilde{u}_{0i}^1 = \tilde{u}_{0i}^2 = 0.25 \quad \Rightarrow \quad \tilde{U}_{0i} = 0.5, \quad \tilde{y}_{0i} = 0.5 \quad \text{per } i = 1,2,3, \quad (2.103)$$

$$\frac{\partial \tilde{u}_1^1}{\partial x}(-1, t) = \frac{\partial \tilde{u}_1^2}{\partial x}(-1, t) = 0, \quad \tilde{U}_3(1, t) = 0.5 \quad (2.104)$$

e una forzante Γ^k che determina una crescita logistica in $\tilde{\Omega}_1$ e una reazione nulla in $\tilde{\Omega}_3$ per $k = 1,2$.

Le assunzioni qui introdotte fan sì che i problemi $\mathcal{P}_\varepsilon^2$ e $\mathcal{P}_\varepsilon^2$ studiati siano descritti dai sistemi

$$\mathcal{P}_\varepsilon^2 = \begin{cases} \frac{\partial y_{1\varepsilon}}{\partial t} - 0.5 \frac{\partial y_{1\varepsilon}}{\partial x} \frac{\partial U_{1\varepsilon}}{\partial x} = \frac{u_{i\varepsilon}^2}{U_{i\varepsilon}^{\uparrow 2}} \Gamma_{i\varepsilon}^1(u_{i\varepsilon}^1, U_{i\varepsilon}) - \frac{u_{i\varepsilon}^1}{U_{i\varepsilon}^{\uparrow 2}} \Gamma_{i\varepsilon}^2(u_{i\varepsilon}^2, U_{i\varepsilon}) & \text{in } \Omega_{1\varepsilon} \\ \frac{\partial y_{2\varepsilon}}{\partial t} - 0.1\varepsilon \frac{\partial y_{2\varepsilon}}{\partial x} \frac{\partial U_{2\varepsilon}}{\partial x} = 0 & \text{in } \Omega_{2\varepsilon} \\ \frac{\partial y_{3\varepsilon}}{\partial t} - 0.5 \frac{\partial y_{3\varepsilon}}{\partial x} \frac{\partial U_{3\varepsilon}}{\partial x} = 0 & \text{in } \Omega_{3\varepsilon} \\ \frac{\partial U_{1\varepsilon}}{\partial t} - 0.5 \frac{\partial}{\partial x} \left(U_{1\varepsilon} \frac{\partial U_{1\varepsilon}}{\partial x} \right) = \Gamma_{1\varepsilon}^1(u_{1\varepsilon}^1, U_{1\varepsilon}) + \Gamma_{1\varepsilon}^2(u_{1\varepsilon}^2, U_{1\varepsilon}) & \text{in } \Omega_{1\varepsilon} \\ \frac{\partial U_{2\varepsilon}}{\partial t} - 0.1\varepsilon \frac{\partial}{\partial x} \left(U_{2\varepsilon} \frac{\partial U_{2\varepsilon}}{\partial x} \right) = 0 & \text{in } \Omega_{2\varepsilon} \\ \frac{\partial U_{3\varepsilon}}{\partial t} - 0.5 \frac{\partial}{\partial x} \left(U_{3\varepsilon} \frac{\partial U_{3\varepsilon}}{\partial x} \right) = 0 & \text{in } \Omega_{3\varepsilon} \\ 0.5 y_{1\varepsilon} U_{1\varepsilon} \frac{\partial U_{1\varepsilon}}{\partial x} = 0.1\varepsilon y_{2\varepsilon} U_{2\varepsilon} \frac{\partial U_{2\varepsilon}}{\partial x} & \text{su } \Sigma_{12\varepsilon} \\ 0.1\varepsilon y_{2\varepsilon} U_{2\varepsilon} \frac{\partial U_{2\varepsilon}}{\partial x} = 0.5 y_{3\varepsilon} U_{3\varepsilon} \frac{\partial U_{3\varepsilon}}{\partial x} & \text{su } \Sigma_{23\varepsilon} \\ 0.5(1 - y_{1\varepsilon}) U_{1\varepsilon} \frac{\partial U_{1\varepsilon}}{\partial x} = 0.1\varepsilon(1 - y_{2\varepsilon}) U_{2\varepsilon} \frac{\partial U_{2\varepsilon}}{\partial x} & \text{su } \Sigma_{12\varepsilon} \\ 0.1\varepsilon(1 - y_{2\varepsilon}) U_{2\varepsilon} \frac{\partial U_{2\varepsilon}}{\partial x} = 0.5(1 - y_{3\varepsilon}) U_{3\varepsilon} \frac{\partial U_{3\varepsilon}}{\partial x} & \text{su } \Sigma_{23\varepsilon} \\ U_{1\varepsilon} = U_{2\varepsilon} & \text{su } \Sigma_{12\varepsilon} \\ U_{2\varepsilon} = U_{3\varepsilon} & \text{su } \Sigma_{23\varepsilon} \end{cases} \quad (2.105)$$

$$\mathcal{P}_0^2 = \begin{cases} \frac{\partial \tilde{y}_1}{\partial t} - 0.5 \frac{\partial \tilde{y}_1}{\partial x} \frac{\partial \tilde{U}_1}{\partial x} = \frac{\tilde{u}_i^2}{\tilde{U}_i^{\uparrow 2}} \tilde{\Gamma}_i^1(\tilde{u}_i^1, \tilde{U}_i) - \frac{\tilde{u}_i^1}{\tilde{U}_i^{\uparrow 2}} \tilde{\Gamma}_i^2(\tilde{u}_i^2, \tilde{U}_i) & \text{in } \tilde{\Omega}_1 \\ \frac{\partial \tilde{y}_3}{\partial t} - 0.5 \frac{\partial \tilde{y}_3}{\partial x} \frac{\partial \tilde{U}_3}{\partial x} = 0 & \text{in } \tilde{\Omega}_3 \\ \frac{\partial \tilde{U}_1}{\partial t} - 0.5 \frac{\partial}{\partial x} \left(\tilde{U}_1 \frac{\partial \tilde{U}_1}{\partial x} \right) = \tilde{\Gamma}_i^1(\tilde{u}_i^1, \tilde{U}_i) + \tilde{\Gamma}_i^2(\tilde{u}_i^2, \tilde{U}_i) & \text{in } \tilde{\Omega}_1 \\ \frac{\partial \tilde{U}_3}{\partial t} - 0.5 \frac{\partial}{\partial x} \left(\tilde{U}_3 \frac{\partial \tilde{U}_3}{\partial x} \right) = 0 & \text{in } \tilde{\Omega}_3 \\ 0.51 \tilde{y}_1 \tilde{U}_1 \frac{\partial \tilde{U}_1}{\partial x} = 0.5 \tilde{y}_3 \tilde{U}_3 \frac{\partial \tilde{U}_3}{\partial x} & \text{su } \tilde{\Sigma}_{13} \\ 0.5(1 - \tilde{y}_1) \tilde{U}_1 \frac{\partial \tilde{U}_1}{\partial x} = 0.5(1 - \tilde{y}_3) \tilde{U}_3 \frac{\partial \tilde{U}_3}{\partial x} & \text{su } \tilde{\Sigma}_{13} \\ \frac{(\tilde{U}_3)^{\uparrow 2} - (\tilde{U}_1)^{\uparrow 2}}{2} = \frac{0.5}{0.1} \tilde{U}_1 \frac{\partial \tilde{U}_1}{\partial x} = \frac{0.5}{0.1} \tilde{U}_3 \frac{\partial \tilde{U}_3}{\partial x} & \text{su } \tilde{\Sigma}_{13} \end{cases} \quad (2.106)$$

La risoluzione dei sistemi appena scritti tramite il metodo semi-Lagrangiano si basa sul calcolo delle caratteristiche ad ogni passo temporale. Per l'evoluzione di y , legato a un fenomeno solamente convettivo di velocità non-omogenea, viene applicata la relazione (1.72) per calcolare la velocità c nel punto medio della caratteristica e determinare lo spostamento convettivo $c\Delta t$. Invece, per trattare U , identificato da un'equazione parabolica con diffusione non-lineare, è necessario calcolare gli spostamenti diffusivi δ^\pm tramite l'espressione (1.79). Le interpolazioni $\mathbb{I}[u]$ adottate per ottenere gli spostamenti diffusivi e successivamente per ricostruire il valore delle variabili alla base delle caratteristiche sono state effettuate usando polinomi di Lagrange di terzo grado.

La trattazione delle condizioni sulle interfacce $\Sigma_{12\varepsilon}$, $\Sigma_{23\varepsilon}$ per $\mathcal{P}_\varepsilon^2$ e su $\tilde{\Sigma}_{13}$ per \mathcal{P}_0^2 si basa su un approccio simile a quello utilizzato per il problema ad una popolazione: ad ogni passo temporale vengono cercate in maniera implicita le condizioni al contorno di Neumann e Dirichlet da applicare a U e y che possano garantire il soddisfacimento delle condizioni all'interfaccia richieste in seguito all'evoluzione in tempo. Nello specifico, la trattazione delle condizioni richieste nel problema $\mathcal{P}_\varepsilon^2$ richiede la ricerca di una condizione di Dirichlet per U a sinistra dell'interfaccia per trattare la continuità della concentrazione totale e una di Neumann per U unita ad una di Dirichlet per y a destra dell'interfaccia per garantire la continuità del flusso delle due specie cellulari. Invece, per garantire le condizioni sull'interfaccia effettiva del problema \mathcal{P}_0^2 vengono ricavate condizioni di Neumann per U ad entrambi i lati dell'interfaccia e una condizione di Dirichlet per y alla sua destra.

Per garantire che le condizioni alle interfacce influenzino ad ogni passo temporale l'evoluzione dei soli nodi presenti su di essi, sono state effettuate le stesse richieste sulla discretizzazione spaziale di nodi $x_j = -1 + j\Delta x$ e sulla discretizzazione temporale di istanti $t^n = n\Delta t$ vista per il problema a singola popolazione cellulare, secondo le quali

$$\begin{cases} \exists \bar{j}_1, \bar{j}_2 : 1 < \bar{j}_1 < \bar{j}_2 < \frac{2}{\Delta x}, & x_{\bar{j}_1} = 0, x_{\bar{j}_2} = \varepsilon \\ \Delta x > \max(\delta^\pm(\Delta t), c\Delta t) \end{cases} \quad (2.107)$$

per lo studio di $\mathcal{P}_\varepsilon^2$ e

$$\begin{cases} \exists \bar{j} : 1 < \bar{j} < \frac{2}{\Delta x}, & x_{\bar{j}} = 0 \\ \Delta x > \max(\delta^\pm(\Delta t), c\Delta t) \end{cases} \quad (2.108)$$

per trattare \mathcal{P}_0^2 , con δ^\pm lo spostamento diffusivo calcolato per l'evoluzione di U e c la velocità convettiva che deve essere ricavata dall'equazione di y .

A questo punto, come anticipato, introduciamo le leggi scelte per la forzante Γ^k e i risultati numerici che ne conseguono.

Caso 1: forzante con limite alla singola concentrazione cellulare

La prima legge adottata per il termine reattivo del problema $\mathcal{P}_\varepsilon^2$ è

$$\Gamma_{1\varepsilon}^1(u_{1\varepsilon}^1) = 5(1 - u_{1\varepsilon}^1)u_{1\varepsilon}^1, \quad \Gamma_{2\varepsilon}^1(u_{2\varepsilon}^1) = \Gamma_{3\varepsilon}^1(u_{3\varepsilon}^1) = 0, \quad (2.109)$$

$$\Gamma_{1\varepsilon}^2(u_{1\varepsilon}^2) = (1 - u_{1\varepsilon}^2)u_{1\varepsilon}^2, \quad \Gamma_{2\varepsilon}^2(u_{2\varepsilon}^2) = \Gamma_{3\varepsilon}^2(u_{3\varepsilon}^2) = 0, \quad (2.110)$$

il cui equivalente per il problema \mathcal{P}_0^2 risulta essere

$$\tilde{\Gamma}_1^1(\tilde{u}_1^1) = 5(1 - \tilde{u}_1^1)\tilde{u}_1^1, \quad \tilde{\Gamma}_2^1(\tilde{u}_2^1) = \tilde{\Gamma}_3^1(\tilde{u}_3^1) = 0, \quad (2.111)$$

$$\tilde{\Gamma}_1^2(\tilde{u}_1^2) = (1 - \tilde{u}_1^2)\tilde{u}_1^2, \quad \tilde{\Gamma}_2^2(\tilde{u}_2^2) = \tilde{\Gamma}_3^2(\tilde{u}_3^2) = 0. \quad (2.112)$$

Imporre una legge di crescita logistica funzione solo della concentrazione cellulare della popolazione interessata determina una dinamica in cui le due specie cellulare possono crescere indipendentemente le une dalle altre, interagendo soltanto tramite la pressione che esse applicano reciprocamente. Questa scelta permette di descrivere solo un caso specifico e in biologia sono generalmente osservabili situazioni più complesse, però ciò ci consente di ottenere una prima semplice transizione dal problema a singola popolazione verso quello multipopolazione.

Proposizione 6 *In seguito all'uso di una discretizzazione spaziale con griglia $x_j = -1 + j\Delta x \in [-1,1]$ e una discretizzazione temporale di istanti $t^n = n\Delta t$ tali da soddisfare le ipotesi (2.107), l'algoritmo basato sul metodo semi-Lagrangiano per trattare il problema $\mathcal{P}_\varepsilon^2$ (2.105) facente uso delle forzanti (2.109), (2.110) risulta essere*

1. Ricavare gli spostamenti diffusivi di U in ogni nodo nelle tre regioni $\Omega_{i\varepsilon}$ tramite le espressioni implicite

$$(\delta_1^\pm)_j^n = \sqrt{\Delta t \mathbb{I}[U_{1\varepsilon}(t^n)](x_j \pm (\delta_1^\pm)_j^n)} \quad \text{per } x_j \in \Omega_{1\varepsilon} \quad (2.113)$$

$$(\delta_2^\pm)_j^n = \sqrt{0.2\varepsilon \Delta t \mathbb{I}[U_{2\varepsilon}(t^n)](x_j \pm (\delta_2^\pm)_j^n)} \quad \text{per } x_j \in \Omega_{2\varepsilon} \quad (2.114)$$

$$(\delta_3^\pm)_j^n = \sqrt{\Delta t \mathbb{I}[U_{3\varepsilon}(t^n)](x_j \pm (\delta_3^\pm)_j^n)} \quad \text{per } x_j \in \Omega_{3\varepsilon}. \quad (2.115)$$

2. Ricavare la velocità c relativa a y nel punto medio delle caratteristiche per ogni nodo nelle tre regioni $\Omega_{i\varepsilon}$ tramite le espressioni implicite

$$(c_1)_j^n = -0.5\mathbb{I} \left[\frac{\partial U_{1\varepsilon}(t^n)}{\partial x} \right] \left(\frac{x_j + (x_j - (c_1)_j^n \Delta t)}{2} \right) \quad \text{per } x_j \in \Omega_{1\varepsilon} \quad (2.116)$$

$$(c_2)_j^n = -0.1\varepsilon\mathbb{I} \left[\frac{\partial U_{2\varepsilon}(t^n)}{\partial x} \right] \left(\frac{x_j + (x_j - (c_2)_j^n \Delta t)}{2} \right) \quad \text{per } x_j \in \Omega_{2\varepsilon} \quad (2.117)$$

$$(c_3)_j^n = -0.5\mathbb{I} \left[\frac{\partial U_{3\varepsilon}(t^n)}{\partial x} \right] \left(\frac{x_j + (x_j - (c_3)_j^n \Delta t)}{2} \right) \quad \text{per } x_j \in \Omega_{3\varepsilon}. \quad (2.118)$$

3. Evolvere il valore della popolazione totale U nei nodi situati nelle parti interne delle regioni $\Omega_{i\varepsilon}$ (indicando con $\overset{\circ}{(\cdot)}$ la parte interna dell'insieme (\cdot)) secondo lo schema semi-Lagrangiano

$$(U_{i\varepsilon})_j^{n+1} = \frac{1}{2} \left(\mathbb{I}[U_{i\varepsilon}(t^n)](x_j - (\delta_i^-)_j^n) + \mathbb{I}[U_{i\varepsilon}(t^n)](x_j + (\delta_i^+)_j^n) \right) \quad \text{per } x_j \in \overset{\circ}{\Omega}_{i\varepsilon}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.119)$$

e della variabile y in tutti i nodi delle tre regioni $\Omega_{i\varepsilon}$ esclusi i loro bordi sinistri secondo lo schema

$$(y_{i\varepsilon})_j^{n+1} = \mathbb{I}[y_{i\varepsilon}(t^n)](x_j - (c_i)_j^n \Delta t) \quad \text{per } x_j \in \begin{cases} (-1, 0] & \text{se } i = 1 \\ (0, \varepsilon] & \text{se } i = 2 \\ (\varepsilon, 1] & \text{se } i = 3. \end{cases} \quad (2.120)$$

4. Evolvere le variabili sui bordi $x = -1$, $x = 1$ tramite le espressioni

$$(U_{1\varepsilon})_j^{n+1} = \frac{1}{2} \left(\mathbb{I}[U_{1\varepsilon}(t^n)](x_j + 0.1\sqrt{\Delta t}) + \mathbb{I}[U_{1\varepsilon}(t^n)](x_j + (\delta_1^{k,+})_j^n) \right) \quad \text{per } x_j = -1 \quad (2.121)$$

$$(y_{1\varepsilon})_j^{n+1} = (y_{1\varepsilon})_j^n \quad \text{per } x_j = -1 \quad (2.122)$$

$$(U_{3\varepsilon})_j^{n+1} = 0.5 \quad \text{per } x_j = 1. \quad (2.123)$$

5. Evolvere le variabili sulle interfacce $x_j = 0$ e $x_j = \varepsilon$ risolvendo i sistemi

$$\left\{ \begin{array}{l} (U_{1\varepsilon})_j^{n+1} = \frac{1}{2} \left(\mathbb{I}[U_{1\varepsilon}(t^n)](x_j - (\delta_1^-)_j^n) + \mathbb{I}[U_{1\varepsilon}(t^n)](x_j - 0.1\sqrt{\Delta t}) + \right. \\ \qquad \qquad \qquad \left. + ((\delta_1^+)_j^n + 0.1\sqrt{\Delta t}) (k_1)^{n+1} \right) \\ (U_{2\varepsilon})_j^{n+1} = \frac{1}{2} \left(\mathbb{I}[U_{2\varepsilon}(t^n)](x_j + 0.1\sqrt{\Delta t}) + \mathbb{I}[U_{2\varepsilon}(t^n)](x_j + (\delta_2^+)_j^n) + \right. \\ \qquad \qquad \qquad \left. + ((\delta_2^-)_j^n + 0.1\sqrt{\Delta t}) (k_2)^{n+1} \right) \\ 0.5(y_{1\varepsilon})_j^{n+1}(U_{1\varepsilon})_j^{n+1} (k_1)^{n+1} = 0.1\varepsilon(y_{2\varepsilon})_j^{n+1}(U_{2\varepsilon})_j^{n+1} (k_2)^{n+1} \\ 0.5 \left(1 - (y_{1\varepsilon})_j^{n+1} \right) (U_{1\varepsilon})_j^{n+1} (k_1)^{n+1} = 0.1\varepsilon \left(1 - (y_{2\varepsilon})_j^{n+1} \right) (U_{2\varepsilon})_j^{n+1} (k_2)^{n+1} \\ (U_{1\varepsilon})_j^{n+1} = (U_{2\varepsilon})_j^{n+1} \end{array} \right. \quad (2.124)$$

in $x_j = 0$ nelle incognite $(U_{1\varepsilon})_j^{n+1}$, $(U_{2\varepsilon})_j^{n+1}$, $(y_{1\varepsilon})_j^{n+1}$, $(k_1)^{n+1}$, $(k_2)^{n+1}$ e

$$\left\{ \begin{array}{l} (U_{2\varepsilon})_j^{n+1} = \frac{1}{2} \left(\mathbb{I}[U_{2\varepsilon}(t^n)](x_j - (\delta_2^-)_j^n) + \mathbb{I}[U_{2\varepsilon}(t^n)](x_j - 0.1\sqrt{\Delta t}) + \right. \\ \qquad \qquad \qquad \left. + ((\delta_2^+)_j^n + 0.1\sqrt{\Delta t}) (k_2)^{n+1} \right) \\ (U_{3\varepsilon})_j^{n+1} = \frac{1}{2} \left(\mathbb{I}[U_{3\varepsilon}(t^n)](x_j + 0.1\sqrt{\Delta t}) + \mathbb{I}[U_{3\varepsilon}(t^n)](x_j + (\delta_3^+)_j^n) + \right. \\ \qquad \qquad \qquad \left. + ((\delta_3^-)_j^n + 0.1\sqrt{\Delta t}) (k_3)^{n+1} \right) \\ 0.1\varepsilon(y_{2\varepsilon})_j^{n+1}(U_{2\varepsilon})_j^{n+1} (k_2)^{n+1} = 0.5(y_{3\varepsilon})_j^{n+1}(U_{3\varepsilon})_j^{n+1} (k_3)^{n+1} \\ 0.1\varepsilon \left(1 - (y_{2\varepsilon})_j^{n+1} \right) (U_{2\varepsilon})_j^{n+1} (k_2)^{n+1} = 0.5 \left(1 - (y_{3\varepsilon})_j^{n+1} \right) (U_{3\varepsilon})_j^{n+1} (k_3)^{n+1} \\ (U_{2\varepsilon})_j^{n+1} = (U_{3\varepsilon})_j^{n+1} \end{array} \right. \quad (2.125)$$

in $x_j = \varepsilon$ nelle incognite $(U_{2\varepsilon})_j^{n+1}$, $(U_{3\varepsilon})_j^{n+1}$, $(y_{3\varepsilon})_j^{n+1}$, $(k_2)^{n+1}$, $(k_3)^{n+1}$.

6. Applicare la forzante alle variabili nella regione $\Omega_{1\varepsilon}$, ottenendo

$$(y_{1\varepsilon})_j^{n+1} + \left(5(1 - (y_{1\varepsilon})_j^n (U_{1\varepsilon})_j^n) - (1 - (1 - (y_{1\varepsilon})_j^n) (U_{1\varepsilon})_j^n) \right) (y_{1\varepsilon})_j^n (1 - (y_{1\varepsilon})_j^n) \quad (2.126)$$

$$(U_{1\varepsilon})_j^{n+1} + 5 \left(1 - (y_{1\varepsilon})_j^n (U_{1\varepsilon})_j^n \right) (y_{1\varepsilon})_j^n (U_{1\varepsilon})_j^n + \left(1 - (1 - (y_{1\varepsilon})_j^n) (U_{1\varepsilon})_j^n \right) (1 - (y_{1\varepsilon})_j^n) (U_{1\varepsilon})_j^n \quad (2.127)$$

per $x_j \in \Omega_{1\varepsilon}$.

Invece, date discretizzazioni in spazio e tempo tali da soddisfare le ipotesi (2.108), l'algoritmo basato sul metodo semi-Lagrangiano per trattare il problema \mathcal{P}_0^2 (2.106) facente uso delle forzanti (2.111), (2.112) risulta essere

1. Ricavare gli spostamenti diffusivi di \tilde{U} in ogni nodo nelle due regioni $\Omega_{i\varepsilon}$ tramite le espressioni implicite

$$(\delta_1^\pm)_j^n = \sqrt{\Delta t \mathbb{I}[\tilde{U}_1(t^n)](x_j \pm (\delta_1^\pm)_j^n)} \quad \text{per } x_j \in \tilde{\Omega}_1 \quad (2.128)$$

$$(\delta_3^\pm)_j^n = \sqrt{\Delta t \mathbb{I}[\tilde{U}_3(t^n)](x_j \pm (\delta_3^\pm)_j^n)} \quad \text{per } x_j \in \tilde{\Omega}_3. \quad (2.129)$$

2. Ricavare la velocità c relativa a \tilde{y} nel punto medio delle caratteristiche per ogni nodo nelle tre regioni $\tilde{\Omega}_i$ tramite le espressioni implicite

$$(c_1)_j^n = -0.5 \mathbb{I} \left[\frac{\partial \tilde{U}_1(t^n)}{\partial x} \right] \left(\frac{x_j + (x_j - (c_1)_j^n \Delta t)}{2} \right) \quad \text{per } x_j \in \tilde{\Omega}_1 \quad (2.130)$$

$$(c_3)_j^n = -0.5 \mathbb{I} \left[\frac{\partial \tilde{U}_3(t^n)}{\partial x} \right] \left(\frac{x_j + (x_j - (c_3)_j^n \Delta t)}{2} \right) \quad \text{per } x_j \in \tilde{\Omega}_3. \quad (2.131)$$

3. Evolvere il valore della popolazione totale \tilde{U} nei nodi situati nelle parti interne delle regioni $\tilde{\Omega}_i$ (indicando con $\overset{\circ}{(\cdot)}$ la parte interna dell'insieme (\cdot)) secondo lo schema semi-Lagrangiano

$$(\tilde{U}_i)_j^{n+1} = \frac{1}{2} \left(\mathbb{I}[\tilde{U}_i(t^n)](x_j - (\delta_i^-)_j^n) + \mathbb{I}[\tilde{U}_i(t^n)](x_j + (\delta_i^+)_j^n) \right) \quad \text{per } x_j \in \overset{\circ}{\tilde{\Omega}}_i, \quad i = 1, 3 \quad (2.132)$$

e della variabile \tilde{y} in tutti i nodi delle due regioni $\tilde{\Omega}_i$ esclusi i loro bordi sinistri secondo lo schema

$$(\tilde{y}_i)_j^{n+1} = \mathbb{I}[\tilde{y}_i(t^n)](x_j - (c_i)_j^n \Delta t) \quad \text{per } x_j \in \begin{cases} (-1, 0] & \text{se } i = 1 \\ (0, 1] & \text{se } i = 3. \end{cases} \quad (2.133)$$

4. Evolvere le variabili sui bordi $x = -1$, $x = 1$ tramite le espressioni

$$(\tilde{U}_1)_j^{n+1} = \frac{1}{2} \left(\mathbb{I}[\tilde{U}_1(t^n)](x_j + 0.1\sqrt{\Delta t}) + \mathbb{I}[\tilde{U}_1(t^n)](x_j + (\delta_1^{k,+})_j^n) \right) \quad \text{per } x_j = -1 \quad (2.134)$$

$$(\tilde{y}_1)_j^{n+1} = (\tilde{y}_1)_j^n \quad \text{per } x_j = -1 \quad (2.135)$$

$$(\tilde{U}_3)_j^{n+1} = 0.5 \quad \text{per } x_j = 1. \quad (2.136)$$

5. Evolvere le variabili sull'interfaccia $x_j = 0$ risolvendo il sistema

$$\left\{ \begin{array}{l} (\tilde{U}_1)_j^{n+1} = \frac{1}{2} \left(\mathbb{I}[\tilde{U}_1(t^n)](x_j - (\delta_1^-)_j^n) + \mathbb{I}[\tilde{U}_1(t^n)](x_j - 0.1\sqrt{\Delta t}) + \right. \\ \qquad \qquad \qquad \left. + ((\delta_1^+)_j^n + 0.1\sqrt{\Delta t}) (k_1)^{n+1} \right) \\ (\tilde{U}_3)_j^{n+1} = \frac{1}{2} \left(\mathbb{I}[\tilde{U}_3(t^n)](x_j + 0.1\sqrt{\Delta t}) + \mathbb{I}[\tilde{U}_3(t^n)](x_j + (\delta_2^+)_j^n) + \right. \\ \qquad \qquad \qquad \left. + ((\delta_3^-)_j^n + 0.1\sqrt{\Delta t}) (k_3)^{n+1} \right) \\ 0.5(\tilde{y}_1)_j^{n+1}(\tilde{U}_1)_j^{n+1} (k_1)^{n+1} = 0.5(\tilde{y}_3)_j^{n+1}(\tilde{U}_3)_j^{n+1} (k_3)^{n+1} \\ \frac{((\tilde{U}_3)_j^{n+1})^{\uparrow 2} - ((\tilde{U}_1)_j^{n+1})^{\uparrow 2}}{2} = 5(\tilde{U}_1)_j^{n+1}(k_1)^{n+1} = 5(\tilde{U}_3)_j^{n+1}(k_3)^{n+1} \end{array} \right. \quad (2.137)$$

nelle incognite $(\tilde{U}_1)_j^{n+1}$, $(\tilde{U}_2)_j^{n+1}$, $(\tilde{y}_1)_j^{n+1}$, $(k_1)^{n+1}$, $(k_2)^{n+1}$.

6. Applicare la forzante alle variabili nella regione $\Omega_{1\varepsilon}$, ottenendo

$$(\tilde{y}_1)_j^{n+1} + \left(5(1 - (\tilde{y}_1)_j^n(\tilde{U}_1)_j^n) - (1 - (1 - (\tilde{y}_1)_j^n)(\tilde{U}_1)_j^n) \right) (\tilde{y}_1)_j^n (1 - (\tilde{y}_1)_j^n) \quad (2.138)$$

$$\begin{aligned} (\tilde{U}_1)_j^{n+1} + 5 \left(1 - (\tilde{y}_1)_j^n(\tilde{U}_1)_j^n \right) (\tilde{y}_1)_j^n (\tilde{U}_1)_j^n + \\ + \left(1 - (1 - (\tilde{y}_1)_j^n)(\tilde{U}_1)_j^n \right) (1 - (\tilde{y}_1)_j^n)(\tilde{U}_1)_j^n \end{aligned} \quad (2.139)$$

per $x_j \in \tilde{\Omega}_1$.

Gli interpolatori $\mathbb{I}[u]$ introdotti si basano sull'uso di polinomi di Lagrange di terzo grado, secondo lo schema espresso da (1.7).

Le simulazioni sono state effettuate fino ad un tempo $t = 20$, in cui si ha il raggiungimento dello stato asintotico descritto nella figura 2.6a. I risultati rappresentati nelle figure 2.6b, 2.6c mostrano la convergenza delle soluzioni di $\mathcal{P}_\varepsilon^2$ effettuate per una successione decrescente di spessori della membrana ε verso quella del problema con interfaccia effettiva \mathcal{P}_0^2 . Una misura della discrepanza tra tali risultati è data dall'errore relativo misurato agli estremi della membrana. Indicando con err^- l'espressione $\frac{|u_{1\varepsilon}(0,20) - \tilde{u}_1(0^-,20)|}{\tilde{u}_1(0^-,20)}$ riguardante l'errore relativo sul lato sinistro della membrana e

con err^+ dato da $\frac{|u_{3\varepsilon}(\varepsilon,20) - \tilde{u}_3(0^+,20)|}{\tilde{u}_3(0^+,20)}$ l'errore relativo sul lato destro, la loro dinamica per $\varepsilon \rightarrow 0$ rappresentata nella figura 2.6d mostra una convergenza lineare analoga a quella già osservata per il problema a singola popolazione nella sezione 2.3.

Caso 2: forzante con limite alla concentrazione cellulare totale

Una seconda serie di simulazioni è stata effettuata utilizzando come termini reattivi

$$\Gamma_{1\varepsilon}^1(u_{1\varepsilon}^1, U_{1\varepsilon}) = 1.1(1 - U_{1\varepsilon})u_{1\varepsilon}^1, \quad \Gamma_{2\varepsilon}^1(u_{2\varepsilon}^1, U_{2\varepsilon}) = \Gamma_{3\varepsilon}^1(u_{3\varepsilon}^1, U_{3\varepsilon}) = 0 \quad (2.140)$$

$$\Gamma_{1\varepsilon}^2(u_{1\varepsilon}^2, U_{1\varepsilon}) = (1 - U_{1\varepsilon})u_{1\varepsilon}^2, \quad \Gamma_{2\varepsilon}^2(u_{2\varepsilon}^2, U_{2\varepsilon}) = \Gamma_{3\varepsilon}^2(u_{3\varepsilon}^2, U_{3\varepsilon}) = 0 \quad (2.141)$$

nella trattazione di $\mathcal{P}_\varepsilon^2$ e

$$\tilde{\Gamma}_1^1(\tilde{u}_1^1, \tilde{U}_1) = 1.1(1 - \tilde{U}_1)\tilde{u}_1^1, \quad \tilde{\Gamma}_2^1(\tilde{u}_2^1, \tilde{U}_2) = \tilde{\Gamma}_3^1(\tilde{u}_3^1, \tilde{U}_3) = 0 \quad (2.142)$$

$$\tilde{\Gamma}_1^2(\tilde{u}_1^2, \tilde{U}_1) = (1 - \tilde{U}_1)\tilde{u}_1^2, \quad \tilde{\Gamma}_2^2(\tilde{u}_2^2, \tilde{U}_2) = \tilde{\Gamma}_3^2(\tilde{u}_3^2, \tilde{U}_3) = 0 \quad (2.143)$$

all'interno di \mathcal{P}_0^2 . Queste nuove espressioni introducono un'ulteriore interazione tra le popolazioni cellulari determinando una dinamica competitiva tra di esse, la quale può essere comunemente riconosciuta nelle osservazioni in vitro. L'evoluzione che avrà luogo sarà dunque formata da un'iniziale aumento di entrambe le popolazioni, seguito quindi da una lenta sostituzione della popolazione con minore crescita da parte dell'altra quando la concentrazione totale si avvicina al suo limite logistico.

Proposizione 7 *L'algoritmo basato sul metodo semi-Lagrangiano usato per trattare il problema $\mathcal{P}_\varepsilon^2$ (2.105) in seguito all'introduzione delle forzanti (2.140), (2.141) si basa sulle stesse ipotesi e gli stessi passaggi elencati nella Proposizione 6, con la seguente modifica al passo 6:*

6 alt. Applicare la forzante alle variabili nella regione $\Omega_{1\varepsilon}$, ottenendo

$$(y_{1\varepsilon})_j^{n+1} + 0.1(1 - (U_{1\varepsilon})_j^n)(y_{1\varepsilon})_j^n(1 - (y_{1\varepsilon})_j^n) \quad (2.144)$$

$$(U_{1\varepsilon})_j^{n+1} + \left(1.1(y_{1\varepsilon})_j^n + (1 - (y_{1\varepsilon})_j^n)\right) \left(1 - (U_{1\varepsilon})_j^n\right) \quad (2.145)$$

per $x_j \in \Omega_{1\varepsilon}$.

Allo stesso modo, l'algoritmo usato per trattare il problema \mathcal{P}_0^2 (2.106) con le forzanti (2.142), (2.143) richiede le stesse ipotesi e segue gli stessi passaggi della Proposizione 6, con la seguente modifica al passo 6:

6 alt. Applicare la forzante alle variabili nella regione $\Omega_{1\varepsilon}$, ottenendo

$$(\tilde{y}_1)_j^{n+1} + 0.1(1 - (\tilde{U}_1)_j^n)(\tilde{y}_1)_j^n(1 - (\tilde{y}_1)_j^n) \quad (2.146)$$

$$(\tilde{U}_1)_j^{n+1} + \left(1.1(\tilde{y}_1)_j^n + (1 - (\tilde{y}_1)_j^n)\right) \left(1 - (\tilde{U}_1)_j^n\right) \quad (2.147)$$

per $x_j \in \tilde{\Omega}_1$.

Nelle figure 2.7a, 2.8a è riportato lo stato del sistema ai tempi $t = 15$ e $t = 30$. Come osservato nello studio precedente, i risultati del problema con membrana sottile convergono verso quello del problema con interfaccia effettiva all'assottigliarsi dello spessore della membrana (figure 2.7b, 2.7c, 2.8b, 2.8c). Le curve nelle figure 2.7d, 2.8d rappresentanti l'errore relativo valutato agli estremi della membrana confermano la convergenza di primo ordine in ε già osservata.

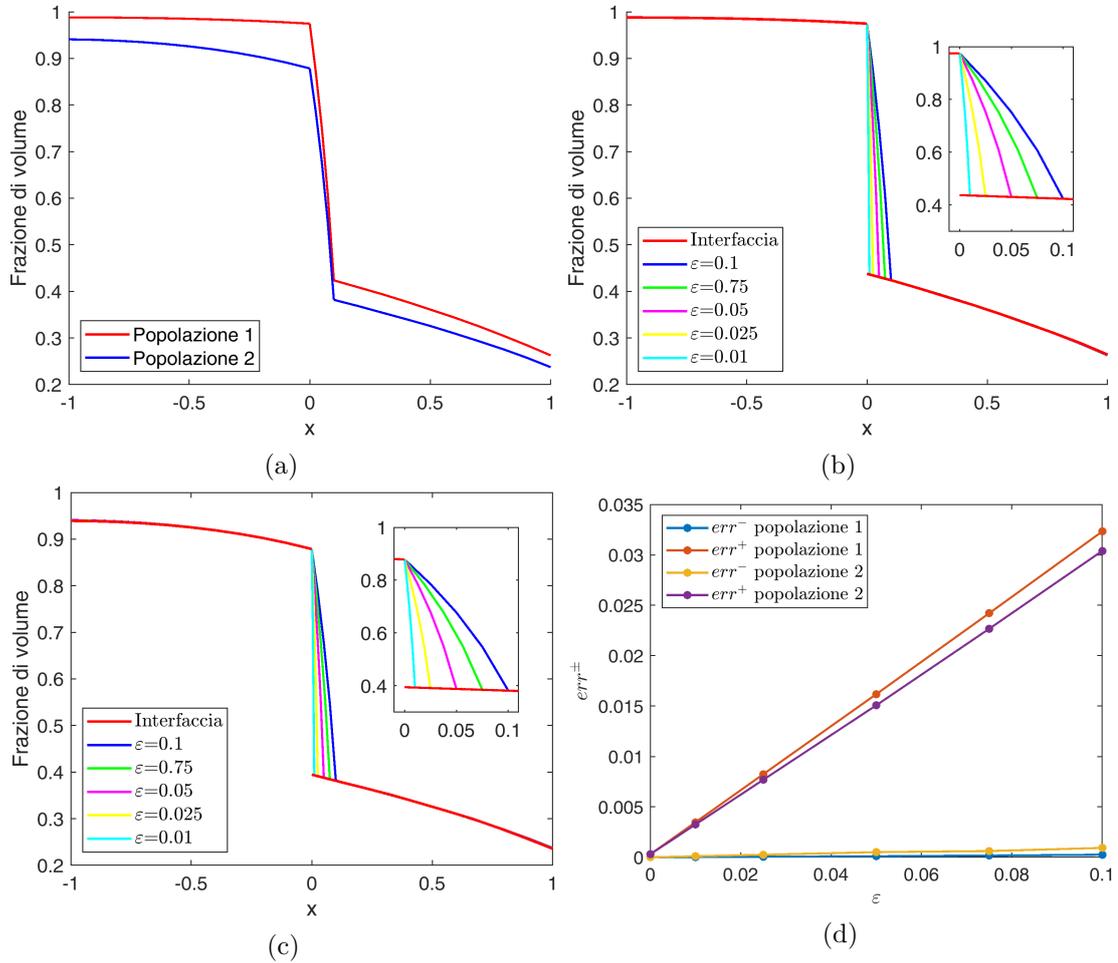


Figura 2.6: Analisi dei risultati al tempo $t = 20$ per il problema di due popolazioni cellulari ottenuti con gli algoritmi espressi nella Proposizione 6

- a) Confronto delle concentrazioni delle due popolazioni per il problema \mathcal{P}_ϵ^2 con $\epsilon = 0.1$
- b) Confronto tra le soluzioni della prima popolazione dei problemi \mathcal{P}_ϵ^2 e \mathcal{P}_0^2 per $\epsilon \rightarrow 0$
- c) Confronto tra le soluzioni della seconda popolazione dei problemi \mathcal{P}_ϵ^2 e \mathcal{P}_0^2 per $\epsilon \rightarrow 0$
- d) Errore relativo tra le soluzioni dei problemi \mathcal{P}_ϵ e \mathcal{P}_0 agli estremi della membrana.

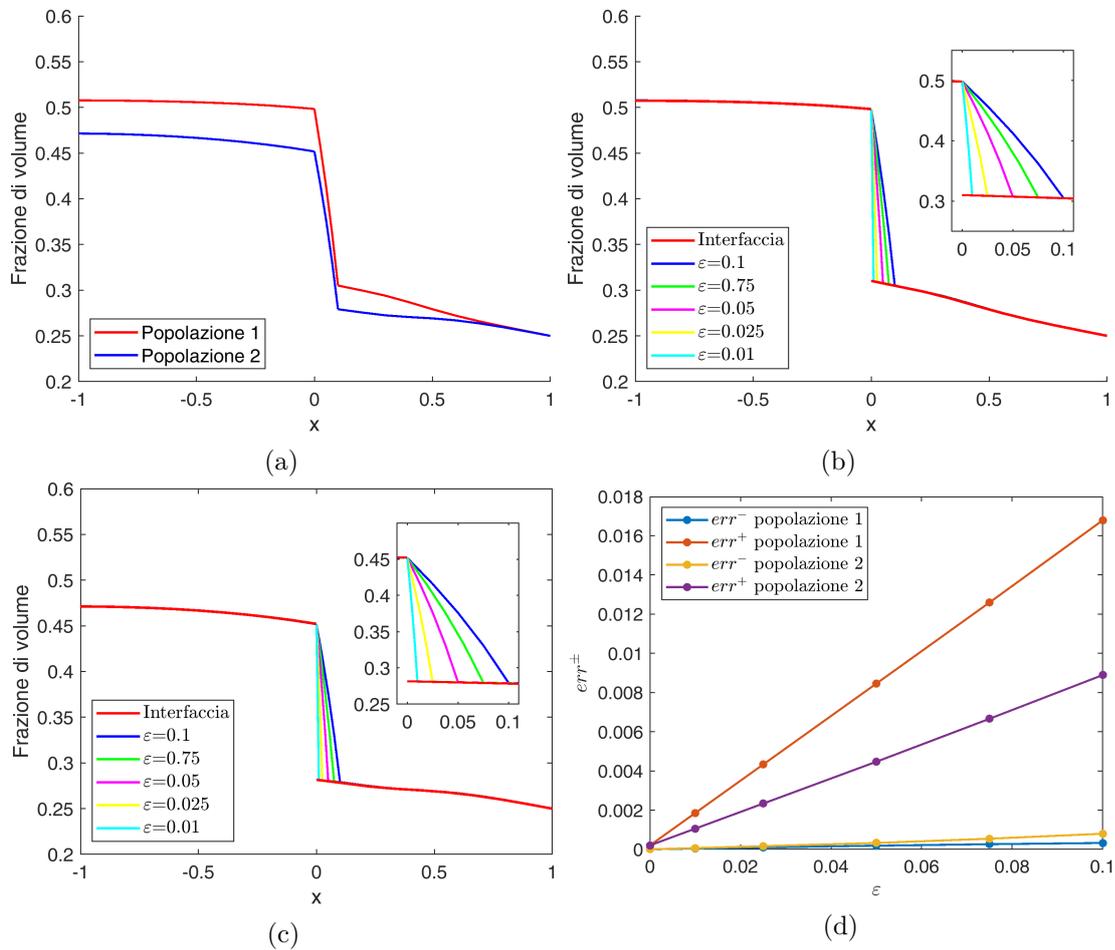


Figura 2.7: Analisi dei risultati al tempo $t = 15$ per il problema di due popolazioni cellulari ottenuti con gli algoritmi espressi nella Proposizione 7

- Confronto delle concentrazioni delle due popolazioni per il problema \mathcal{P}_ϵ^2 con $\epsilon = 0.1$
- Confronto tra le soluzioni della prima popolazione dei problemi \mathcal{P}_ϵ^2 e \mathcal{P}_0^2 per $\epsilon \rightarrow 0$
- Confronto tra le soluzioni della seconda popolazione dei problemi \mathcal{P}_ϵ^2 e \mathcal{P}_0^2 per $\epsilon \rightarrow 0$
- Errore relativo tra le soluzioni dei problemi \mathcal{P}_ϵ e \mathcal{P}_0 agli estremi della membrana.

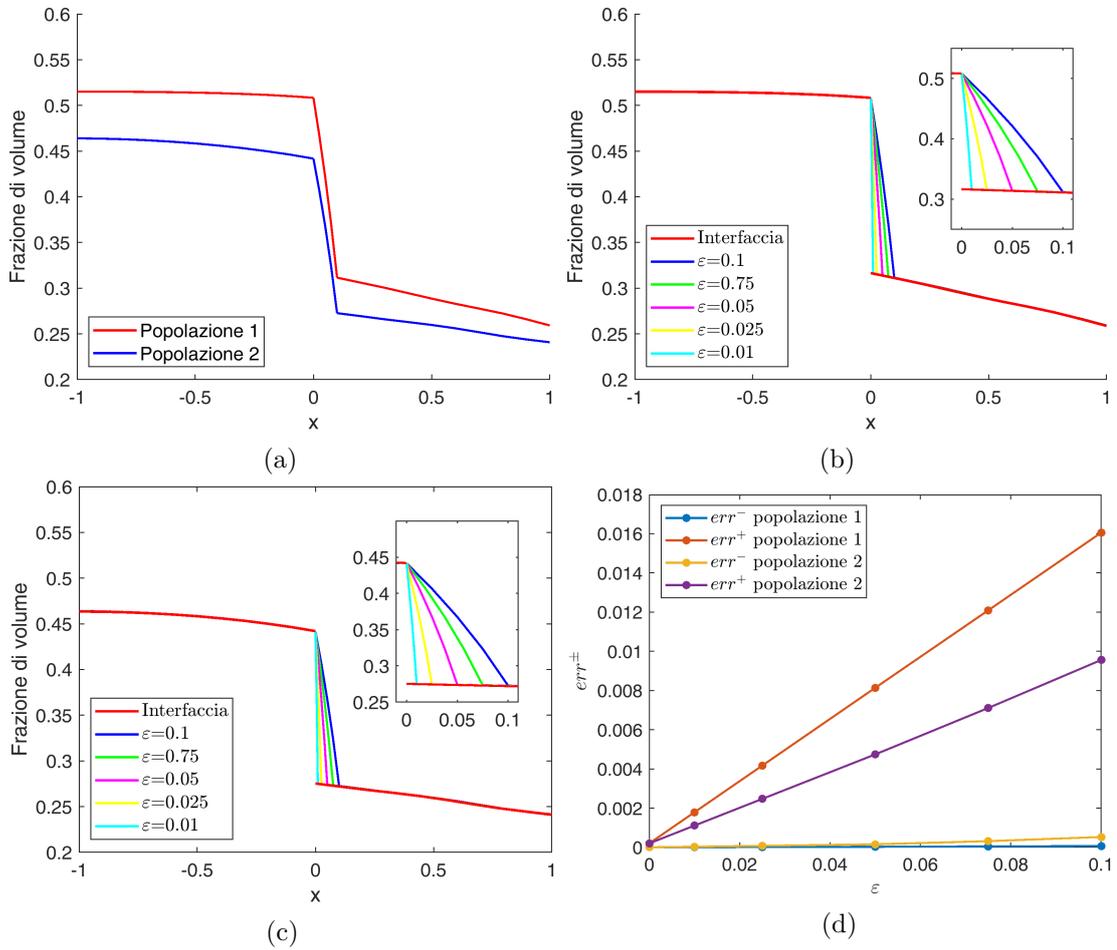


Figura 2.8: Analisi dei risultati al tempo $t = 30$ per il problema di due popolazioni cellulari ottenuti con gli algoritmi espressi nella Proposizione 7

- a) Confronto delle concentrazioni delle due popolazioni per il problema \mathcal{P}_ϵ^2 con $\epsilon = 0.1$
- b) Confronto tra le soluzioni della prima popolazione dei problemi \mathcal{P}_ϵ^2 e \mathcal{P}_0^2 per $\epsilon \rightarrow 0$
- c) Confronto tra le soluzioni della seconda popolazione dei problemi \mathcal{P}_ϵ^2 e \mathcal{P}_0^2 per $\epsilon \rightarrow 0$
- d) Errore relativo tra le soluzioni dei problemi \mathcal{P}_ϵ e \mathcal{P}_0 agli estremi della membrana.

Conclusioni e sviluppi futuri

In questa tesi sono stati inizialmente presentati, analizzati e implementati diversi schemi numerici semi-Lagrangiani presenti in letteratura. Successivamente questi schemi sono stati applicati per risolvere problemi legati alla migrazione cellulare attraverso membrane espresse come regioni sottili nel dominio ("problema con membrana sottile") o come interfacce unite a appropriate condizioni di attraversamento ("problema con interfaccia effettiva"). Entrambe le rappresentazioni della membrana sono state utilizzate per studiare prima il fenomeno di migrazione cellulare con la presenza di un'unica popolazione e in seguito con la compresenza di due popolazioni tra loro interagenti.

Nel problema a singola popolazione è stato possibile riprodurre risultati già noti, generati in precedenza tramite l'uso di software commerciali. In particolare è stata ottenuta la convergenza lineare della soluzione del problema con membrana sottile a quella del problema con interfaccia effettiva per membrane di spessore progressivamente ridotto, fornendo di fatto una ulteriore validazione del modello in esame e confermando l'applicabilità del metodo numerico utilizzato per la trattazione di tali problemi.

Passando allo studio del moto di due popolazioni cellulari, considerando una legge barometrica funzione della sola concentrazione cellulare totale, è stata effettuata una riscrittura dei sistemi trattati in modo da ottenere dei sistemi di equazioni parabolico-iperbolico con opportune condizioni al bordo tra i domini che permettessero di chiudere il problema. Successivamente sono state simulate due possibili interazioni tra le popolazioni studiate ed in entrambi i casi è stata nuovamente verificata la convergenza lineare attesa. Ciò ha permesso di ottenere una validazione del modello con interfaccia effettiva espresso in [Givero et al. \[2021\]](#) non presente nell'articolo originale.

Per scrivere le equazioni iperboliche nei sistemi (2.92), (2.93) necessarie per la buona positura del problema, sono state richieste delle ipotesi di legge barometrica lineare e coefficienti di motilità cellulare omogenei e uguali tra le due popolazioni. Ciò evidenzia due possibili fronti per espandere la presente tesi: fornire una verifica numerica del modello generale con legge barometrica legata alle singole concentrazioni cellulari oltre che alla concentrazione totale e ricercare una formulazione delle equazioni iperboliche tale che esse siano valide in contesti generali dove cadrebbero le ipotesi imposte. Mentre l'estensione al caso di legge barometrica non lineare nella sola concentrazione cellulare totale non presenta evidenti difficoltà, quella verso motilità diverse e legge barometrica funzione anche delle singole concentrazioni necessita di ulteriori studi. Un'ulteriore direzione per lavori futuri può essere l'applicazione di questo modello allo studio di domini bidimensionali o tridimensionali, con la presenza di membrane di forma generica. Ciò richiederebbe di

applicare gli equivalenti multidimensionali degli schemi numerici trattati. Simulazioni di questi ultimi casi possono infatti risultare di maggiore interesse in diversi campi di ricerca nelle scienze biologiche e mediche.

Appendice: codice Matlab utilizzato

Problema con membrana sottile e singola popolazione:

```
1 eps=0.1; %spessore membrana
2 dt=eps*1e-4;
3 dx1=0.01; dx2=eps/40; dx3=0.01;
4 x=[-1:0.01:0, 0+eps/40:eps/40:eps-eps/40, linspace(eps,1,100)
5     ]';
6 t=0:dt:20;
7 ind_sx=sum(x<=0); ind_dx=sum(x<=eps);
8 x1=x(1:ind_sx); x2=x(ind_sx:ind_dx); x3=x(ind_dx:end);
9 dx1=x1(2)-x1(1); dx2=x2(2)-x2(1); dx3=x3(2)-x3(1);
10 mu_par=[0.5 0.1*eps 0.5];
11
12 f=@(u) u.*(1-u);
13
14 u1=zeros(length(x1),length(t));
15 u2=zeros(length(x2),length(t));
16 u3=zeros(length(x3),length(t));
17 u1(:,1)=0.5; u2(:,1)=0.5; u3(:,1)=0.5;
18
19 opt=optimset('Display','off','TolFun',1e-10);
20 for n=1:length(t)-1
21     nu1=@(y) mu_par(1)*interp1(x1,u1(:,n),y,'v5cubic');
22     nu2=@(y) mu_par(2)*interp1(x2,u2(:,n),y,'v5cubic');
23     nu3=@(y) mu_par(3)*interp1(x3,u3(:,n),y,'v5cubic');
24
25     delta1=zeros(length(x1),2); delta2=zeros(length(x2),2);
26     delta3=zeros(length(x3),2);
27
28     temp_m1=@(d_m) sqrt( 2*dt*nu1(x1(2:end)-d_m) )-d_m;
29     temp_p1=@(d_p) sqrt( 2*dt*nu1(x1(1:end-1)+d_p) )-d_p;
```

```

29     temp_m2=@(d_m) sqrt( 2*dt*nu2(x2(2:end)-d_m) )-d_m;
30     temp_p2=@(d_p) sqrt( 2*dt*nu2(x2(1:end-1)+d_p) )-d_p;
31     temp_m3=@(d_m) sqrt( 2*dt*nu3(x3(2:end)-d_m) )-d_m;
32     temp_p3=@(d_p) sqrt( 2*dt*nu3(x3(1:end-1)+d_p) )-d_p;
33
34     delta1(2:end,1)=fsolve(temp_m1,(dx1/2)*ones(length(x1)
        -1,1),opt);
35     delta1(1:end-1,2)=fsolve(temp_p1,(dx1/2)*ones(length(x1)
        -1,1),opt);
36     delta2(2:end,1)=fsolve(temp_m2,(dx2/2)*ones(length(x2)
        -1,1),opt);
37     delta2(1:end-1,2)=fsolve(temp_p2,(dx2/2)*ones(length(x2)
        -1,1),opt);
38     delta3(2:end,1)=fsolve(temp_m3,(dx3/2)*ones(length(x3)
        -1,1),opt);
39     delta3(1:end-1,2)=fsolve(temp_p3,(dx3/2)*ones(length(x3)
        -1,1),opt);
40
41     delta1(1,1)=delta1(1,2);
42     delta2(1,1)=sqrt(2*dt*mu_par(2)*u2(1,n));
43     delta3(1,1)=sqrt(2*dt*mu_par(3)*u3(1,n));
44
45     XX1=zeros(length(x1),2); XX2=zeros(length(x2),2); XX3=
        zeros(length(x3),2);
46     XX1(:,1)=x1-delta1(:,1); XX1(:,2)=x1+delta1(:,2);
47     XX2(:,1)=x2-delta2(:,1); XX2(:,2)=x2+delta2(:,2);
48     XX3(:,1)=x3-delta3(:,1); XX3(:,2)=x3+delta3(:,2);
49
50     u1(1:end-1,n+1)=0.5*(int_refl(x1,u1(:,n),XX1(1:end-1,1),
        dt,0,[])+int_refl(x1,u1(:,n),XX1(1:end-1,2),dt,0,[]));
51     u2(2:end-1,n+1)=0.5*(interp1(x2,u2(:,n),XX2(2:end-1,1),'
        v5cubic')+interp1(x2,u2(:,n),XX2(2:end-1,2),'v5cubic')
        );
52     u3(2:end-1,n+1)=0.5*(interp1(x3,u3(:,n),XX3(2:end-1,1),'
        v5cubic')+interp1(x3,u3(:,n),XX3(2:end-1,2),'v5cubic')
        );
53
54     cc10=( mu_par(1)*u1(end,n)*(u1(end,n)-u1(end-1,n))/(x1(
        end)-x1(end-1)) )/(mu_par(2)*u2(1,n));
55     cc20=( mu_par(2)*u2(end,n)*(u2(end,n)-u2(end-1,n))/(x2(
        end)-x2(end-1)) )/(mu_par(3)*u3(1,n));
56     cond1=@(u) mu_par(1)*u*(u-u1(end-1,n+1))/(x1(end)-x1(end
        -1)) - mu_par(2)*u*(u2(2,n+1)-u)/(x2(2)-x2(1));
57     cond2=@(u) mu_par(2)*u*(u-u2(end-1,n+1))/(x2(end)-x2(end
        -1)) - mu_par(3)*u*(u3(2,n+1)-u)/(x3(2)-x3(1));

```

```

58     u_cond1=@(cc) 0.5*(int_refl(x2,u2(:,n),XX2(1,1),dt,cc,[])
        +int_refl(x2,u2(:,n),XX2(1,2),dt,cc,[]));
59     u_cond2=@(cc) 0.5*(int_refl(x3,u3(:,n),XX3(1,1),dt,cc,[])
        +int_refl(x3,u3(:,n),XX3(1,2),dt,cc,[]));
60     tosolve1=@(cc1) cond1(u_cond1(cc1)); tosolve2=@(cc2)
        cond2(u_cond2(cc2));
61     cc1=fsolve(tosolve1,cc10,opt);
62     cc2=fsolve(tosolve2,cc20,opt);
63
64     u2(1,n+1)=0.5*(int_refl(x2,u2(:,n),XX2(1,1),dt,cc1,[])
        +int_refl(x2,u2(:,n),XX2(1,2),dt,cc1,[]));
65     u3(1,n+1)=0.5*(int_refl(x3,u3(:,n),XX3(1,1),dt,cc2,[])
        +int_refl(x3,u3(:,n),XX3(1,2),dt,cc2,[]));
66
67     u1(:,n+1)=u1(:,n)+f(u1(:,n))*dt;
68     u1(end,n+1)=u2(1,n+1);
69     u2(end,n+1)=u3(1,n+1);
70     u3(end,n+1)=0.5;
71 end

```

Problema con interfaccia effettiva e singola popolazione:

```

1  dx=0.1; dt=0.01;
2  x=[-1:dx:1]';
3  t=0:dt:20;
4  ind_mem=sum(x<=0);
5  x1=x(1:ind_mem); x2=x(ind_mem:end);
6
7  mu_par=[0.5 0.1 0.5];
8  f=@(u) u.*(1-u);
9
10 u1=zeros(length(x(1:ind_mem)),length(t));
11 u2=zeros(length(x(ind_mem:end)),length(t));
12 u1(:,1)=0.5; u2(:,1)=0.5;
13
14 opt=optimset('Display','off','TolFun',1e-10);
15 for n=1:length(t)-1
16     nu1=@(y) mu_par(1)*interp1(x1,u1(:,n),y,'v5cubic');
17     nu2=@(y) mu_par(3)*interp1(x2,u2(:,n),y,'v5cubic');
18
19     delta1=zeros(length(x1),2); delta2=zeros(length(x2),2);
20
21     temp_m1=@(d_m) sqrt(2*dt*nu1(x1(2:end)-d_m))-d_m;
22     temp_p1=@(d_p) sqrt(2*dt*nu1(x1(1:end-1)+d_p))-d_p;
23     temp_m2=@(d_m) sqrt(2*dt*nu2(x2(2:end)-d_m))-d_m;

```

```

24     temp_p2=@(d_p) sqrt( 2*dt*nu2(x2(1:end-1)+d_p) )-d_p;
25
26     delta1(2:end,1)=fsolve(temp_m1,(dx/2)*ones(length(x1)
      -1,1),opt);
27     delta1(1:end-1,2)=fsolve(temp_p1,(dx/2)*ones(length(x1)
      -1,1),opt);
28     delta2(2:end,1)=fsolve(temp_m2,(dx/2)*ones(length(x2)
      -1,1),opt);
29     delta2(1:end-1,2)=fsolve(temp_p2,(dx/2)*ones(length(x2)
      -1,1),opt);
30
31     delta1(1,1)=delta1(1,2);
32     delta1(end,2)=sqrt(2*dt*mu_par(1)*u1(end,n));
33     delta2(1,1)=sqrt(2*dt*mu_par(2)*u2(1,n));
34
35     XX1=zeros(length(x1),2); XX2=zeros(length(x2),2);
36     XX1(:,1)=x1-delta1(:,1); XX1(:,2)=x1+delta1(:,2);
37     XX2(:,1)=x2-delta2(:,1); XX2(:,2)=x2+delta2(:,2);
38
39     u1(1:end-1,n+1)=0.5*(int_refl(x1,u1(:,n),XX1(1:end-1,1),
      dt,0,[],)+int_refl(x1,u1(:,n),XX1(1:end-1,2),dt,0,[],));
40     u2(2:end-1,n+1)=0.5*(interp1(x2,u2(:,n),XX2(2:end-1,1),'
      v5cubic')+interp1(x2,u2(:,n),XX2(2:end-1,2),'v5cubic'
      ));
41
42     cc10=mu_par(2)/mu_par(1)*((u2(1,n)^2-u1(end,n)^2)/2)/u1(
      end,n);
43     cc20=mu_par(2)/mu_par(3)*((u2(1,n)^2-u1(end,n)^2)/2)/u2
      (1,n);
44     cond1=@(usx,udx) mu_par(2)*(udx^2-usx^2)/2;
45     cond2=@(usx,udx) mu_par(1)*usx*(usx-u1(end-1,n+1))/dx;
46     cond3=@(usx,udx) mu_par(3)*udx*(u2(2,n+1)-udx)/dx;
47     u1_cond=@(cc) 0.5*(int_refl(x1,u1(:,n),XX1(end,1),dt,[],,
      cc)+int_refl(x1,u1(:,n),XX1(end,2),dt,[],,cc));
48     u2_cond=@(cc) 0.5*(int_refl(x2,u2(:,n),XX2(1,1),dt,cc,[],)
      +int_refl(x2,u2(:,n),XX2(1,2),dt,cc,[],));
49     tosolve=@(cc) [cond1(u1_cond(cc(1)),u2_cond(cc(2)))-cond2
      (u1_cond(cc(1)),u2_cond(cc(2))), ...
50         cond1(u1_cond(cc(1)),u2_cond(cc(2)))-cond3(u1_cond(cc
      (1)),u2_cond(cc(2)))]];
51     cc=fsolve(tosolve,[cc10, cc20],opt);
52
53     u1(end,n+1)=0.5*(int_refl(x1,u1(:,n),XX1(end,1),dt,[],,cc
      (1))+int_refl(x1,u1(:,n),XX1(end,2),dt,[],,cc(1)));

```

```

54     u2(1,n+1)=0.5*(int_refl(x2,u2(:,n),XX2(1,1),dt,cc(2),[])+
        int_refl(x2,u2(:,n),XX1(1,2),dt,cc(2),[]));
55
56     u1(:,n+1)=u1(:,n)+f(u1(:,n))*dt;
57     u2(end:end,n+1)=0.5;
58 end

```

Problema con membrana sottile e due popolazioni:

```

1  %caso=1: forzante data da singola popolazione cellulare
2  %caso=2: forzante data da popolazione totale
3  caso=1;
4  eps=0.1; %spessore membrana
5  T=20;
6
7  dt=eps*1e-4;
8  if caso==1
9      dt=dt/2;
10 end
11 x=[-1:0.01:0, 0+eps/40:eps/40:eps-eps/40, linspace(eps,1,100)
    ]';
12 t=0:dt:T;
13 ind_sx=sum(x<=0); ind_dx=sum(x<=eps);
14 x1=x(1:ind_sx); x2=x(ind_sx:ind_dx); x3=x(ind_dx:end);
15 dx1=x1(2)-x1(1); dx2=x2(2)-x2(1); dx3=x3(2)-x3(1);
16
17 mu_par=[0.5 0.1*eps 0.5];
18 if caso==1
19     fy=@(y,U) (5*(1-y.*U) - (1-(1-y).*U)).*y.*(1-y);
20     fU=@(y,U) 5*(1-y.*U).*y.*U + (1-(1-y).*U).(1-y).*U;
21 elseif caso==2
22     fy=@(y,U) (5*(1-U) - (1-U)).*y.*(1-y);
23     fU=@(y,U) 5*(1-U).*y.*U + (1-U).(1-y).*U;
24 end
25
26
27 u1a=zeros(length(x1),length(t));
28 u2a=zeros(length(x2),length(t));
29 u3a=zeros(length(x3),length(t));
30 u1a(:,1)=0.25; u2a(:,1)=0.25; u3a(:,1)=0.25;
31 u1b=u1a; u2b=u2a; u3b=u3a;
32
33 U1=u1a+u1b; U2=u2a+u2b; U3=u3a+u3b;
34 y1=u1a./U1; y2=u2a./U2; y3=u3a./U3;
35 conv1=@(y,U) y.*U;

```

```

36 conv2=@(y,U) (1-y).*U;
37
38 opt=optimset('Display','off','TolFun',1e-10);
39 for n=1:length(t)-1
40     g1=gradient(U1(:,n),dx1); g2=gradient(U2(:,n),dx2); g3=
        gradient(U3(:,n),dx3);
41     nu1y=@(z) -mu_par(1)*interp1(x1,g1,z,'v5cubic');
42     nu2y=@(z) -mu_par(2)*interp1(x2,g2,z,'v5cubic');
43     nu3y=@(z) -mu_par(3)*interp1(x3,g3,z,'v5cubic');
44
45     a1=@(a) a-mu_par(1)*( -interp1(x1,g1,(2*x1(2:end)-a)/2) )
        *dt;
46     a2=@(a) a-mu_par(2)*( -interp1(x2,g2,(2*x2(2:end)-a)/2) )
        *dt;
47     a3=@(a) a-mu_par(3)*( -interp1(x3,g3,(2*x3(2:end)-a)/2) )
        *dt;
48
49     alpha1=zeros(length(x1),1); alpha2=zeros(length(x2),1);
        alpha3=zeros(length(x3),1);
50
51     alpha1(2:end)=lsqnonlin(a1,(dx/2)*ones(size(x1(2:end)
        )),zeros(size(x1(2:end))),dx*ones(size(x1(2:end)))
        ,opt);
52     alpha2(2:end)=lsqnonlin(a2,(dx/2)*ones(size(x2(2:end)
        )),zeros(size(x2(2:end))),dx*ones(size(x2(2:end)))
        ,opt);
53     alpha3(2:end)=lsqnonlin(a3,(dx/2)*ones(size(x3(2:end)
        )),zeros(size(x3(2:end))),dx*ones(size(x3(2:end)))
        ,opt);
54
55     nu1=@(y) mu_par(1)*interp1(x1,U1(:,n),y);
56     nu2=@(y) mu_par(2)*interp1(x2,U2(:,n),y);
57     nu3=@(y) mu_par(3)*interp1(x3,U3(:,n),y);
58
59     delta1=zeros(length(x1),2); delta2=zeros(length(x2),2);
        delta3=zeros(length(x3),2);
60
61     temp_m1=@(d_m) sqrt( 2*dt*nu1(x1(2:end)-d_m) )-d_m;
62     temp_p1=@(d_p) sqrt( 2*dt*nu1(x1(1:end-1)+d_p) )-d_p;
63     temp_m2=@(d_m) sqrt( 2*dt*nu2(x2(2:end)-d_m) )-d_m;
64     temp_p2=@(d_p) sqrt( 2*dt*nu2(x2(1:end-1)+d_p) )-d_p;
65     temp_m3=@(d_m) sqrt( 2*dt*nu3(x3(2:end)-d_m) )-d_m;
66     temp_p3=@(d_p) sqrt( 2*dt*nu3(x3(1:end-1)+d_p) )-d_p;
67
68     delta1(2:end,1)=fsolve(temp_m1,(dx1/2)*ones(length(x1)
        -1,1),opt);

```

```

69     delta1(1:end-1,2)=fsolve(temp_p1,(dx1/2)*ones(length(x1)
70         -1,1),opt);
71     delta2(2:end,1)=fsolve(temp_m2,(dx2/4)*ones(length(x2)
72         -1,1),opt);
73     delta2(1:end-1,2)=fsolve(temp_p2,(dx2/4)*ones(length(x2)
74         -1,1),opt);
75     delta3(2:end,1)=fsolve(temp_m3,(dx3/2)*ones(length(x3)
76         -1,1),opt);
77     delta3(1:end-1,2)=fsolve(temp_p3,(dx3/2)*ones(length(x3)
78         -1,1),opt);
79
80     delta1(1,1)=delta1(1,2);
81     delta2(1,1)=sqrt( 2*dt*mu_par(2)*U2(1,n));
82     delta3(1,1)=sqrt( 2*dt*mu_par(3)*U3(1,n));
83
84     XXU1=zeros(length(x1),2); XXU2=zeros(length(x2),2); XXU3=
85         zeros(length(x3),2);
86     XXU1(:,1)=x1-delta1(:,1); XXU1(:,2)=x1+delta1(:,2);
87     XXU2(:,1)=x2-delta2(:,1); XXU2(:,2)=x2+delta2(:,2);
88     XXU3(:,1)=x3-delta3(:,1); XXU3(:,2)=x3+delta3(:,2);
89
90     XXy1=x1-alpha1; XXy2=x2-alpha2; XXy3=x3-alpha3;
91
92     y1(:,n+1)=interp1(x1,y1(:,n),XXy1,'v5cubic');
93     y2(2:end,n+1)=interp1(x2,y2(:,n),XXy2(2:end),'v5cubic');
94     y3(2:end,n+1)=interp1(x3,y3(:,n),XXy3(2:end),'v5cubic');
95
96     U1(1:end-1,n+1)=0.5*(int_refl(x1,U1(:,n),XXU1(1:end-1,1),
97         dt,0,[])+int_refl(x1,U1(:,n),XXU1(1:end-1,2),dt,0,[]))
98         ;
99     U2(2:end-1,n+1)=0.5*(interp1(x2,U2(:,n),XXU2(2:end-1,1),'
100         v5cubic')+interp1(x2,U2(:,n),XXU2(2:end-1,2),'v5cubic'
101         ));
102     U3(2:end-1,n+1)=0.5*(interp1(x3,U3(:,n),XXU3(2:end-1,1),'
103         v5cubic')+interp1(x3,U3(:,n),XXU3(2:end-1,2),'v5cubic'
104         ));
105
106     U1(:,n+1)=U1(:,n+1)+fU(y1(:,n),U1(:,n))*dt;
107     y1(:,n+1)=y1(:,n+1)+fy(y1(:,n),U1(:,n))*dt;
108
109     cc10=y2(1,n); cc30=y3(1,n);
110     cc20=( mu_par(1)*u1a(end,n)*g1(end) )/(mu_par(2)*u2a(1,n)
111         );
112     cc40=( mu_par(2)*u2a(end,n)*g2(end) )/(mu_par(3)*u3a(1,n)
113         );

```

```

100 cond1a=@(ccy,U) mu_par(1)*conv1(y1(end,n+1),U)*(U-U1(end
      -1,n+1))/(dx1) - mu_par(2)*conv1(ccy,U)*(U2(2,n+1)-U)
      /(dx2);
101 cond1b=@(ccy,U) mu_par(1)*conv2(y1(end,n+1),U)*(U-U1(end
      -1,n+1))/(dx1) - mu_par(2)*conv2(ccy,U)*(U2(2,n+1)-U)
      /(dx2);
102 cond2a=@(ccy,U) mu_par(2)*conv1(y2(end,n+1),U)*(U-U2(end
      -1,n+1))/(dx2) - mu_par(3)*conv1(ccy,U)*(U3(2,n+1)-U)
      /(dx3);
103 cond2b=@(ccy,U) mu_par(2)*conv2(y2(end,n+1),U)*(U-U2(end
      -1,n+1))/(dx2) - mu_par(3)*conv2(ccy,U)*(U3(2,n+1)-U)
      /(dx3);
104 U2_cond=@(cc) 0.5*( int_refl(x2,U2(:,n),XXU2(1,1),dt,cc
      ,[]) +int_refl(x2,U2(:,n),XXU2(1,2),dt,cc,[]) );
105 U3_cond=@(cc) 0.5*( int_refl(x3,U3(:,n),XXU3(1,1),dt,cc
      ,[]) +int_refl(x3,U3(:,n),XXU3(1,2),dt,cc,[]) );
106 tosolve1=@(cc) [cond1a(cc(1),U2_cond(cc(2))), cond1b(cc
      (1),U2_cond(cc(2)))];
107 tosolve2=@(cc) [cond2a(cc(1),U3_cond(cc(2))), cond2b(cc
      (1),U3_cond(cc(2)))];
108 cc1=fsolve(tosolve1,[cc10, cc20],opt);
109 cc2=fsolve(tosolve2,[cc30, cc40],opt);
110
111 U2(1,n+1)=0.5*( int_refl(x2,U2(:,n),XXU2(1,1),dt,cc1(2)
      ,0)+int_refl(x2,U2(:,n),XXU2(1,2),dt,cc1(2),0) );
112 U3(1,n+1)=0.5*( int_refl(x3,U3(:,n),XXU3(1,1),dt,cc2(2)
      ,0)+int_refl(x3,U3(:,n),XXU3(1,2),dt,cc2(2),0) );
113 y2(1,n+1)=cc1(1); y3(1,n+1)=cc2(1);
114
115 U1(end,n+1)=U2(1,n+1);
116 U2(end,n+1)=U3(1,n+1);
117 U3(end,n+1)=0.5;
118
119 u1a(:,n+1)=conv1(y1(:,n+1),U1(:,n+1)); u1b(:,n+1)=conv2(
      y1(:,n+1),U1(:,n+1));
120 u2a(:,n+1)=conv1(y2(:,n+1),U2(:,n+1)); u2b(:,n+1)=conv2(
      y2(:,n+1),U2(:,n+1));
121 u3a(:,n+1)=conv1(y3(:,n+1),U3(:,n+1)); u3b(:,n+1)=conv2(
      y3(:,n+1),U3(:,n+1));
122 end

```

Problema con interfaccia effettiva e due popolazioni:

```

1 %caso=1: forzante data da singola popolazione cellulare
2 %caso=2: forzante data da popolazione totale

```

```

3 caso=1;
4 T=20;
5
6 dt=0.01;
7 if caso==1
8     dt=dt/2;
9 end
10 dx=0.1;
11 x=[-1:dx:1]';
12 t=0:dt:20;
13 ind_mem=sum(x<=0);
14 x1=x(1:ind_mem); x2=x(ind_mem:end);
15
16 mu_par=[0.5 0.1 0.5];
17 if caso==1
18     fy=@(y,U) (5*(1-y.*U) - (1-(1-y).*U)).*y.*(1-y);
19     fU=@(y,U) 5*(1-y.*U).*y.*U + (1-(1-y).*U).(1-y).*U;
20 elseif caso==2
21     fy=@(y,U) (5*(1-U) - (1-U)).*y.*(1-y);
22     fU=@(y,U) 5*(1-U).*y.*U + (1-U).(1-y).*U;
23 end
24
25 u1a=zeros(length(x(1:ind_mem)),length(t));
26 u2a=zeros(length(x(ind_mem:end)),length(t));
27 u1a(:,1)=0.25; u2a(:,1)=0.25;
28 u1b=u1a; u2b=u2a;
29 U1=u1a+u1b; U2=u2a+u2b; y1=u1a./U1; y2=u2a./U2;
30 conv1=@(y,U) y.*U;
31 conv2=@(y,U) (1-y).*U;
32
33 opt=optimset('Display','off','TolFun',1e-10);
34 for n=1:length(t)-1
35     g1=gradient(U1(:,n),dx); g2=gradient(U2(:,n),dx);
36     nu1y=@(z) -mu_par(1)*interp1(x1,g1,z,'v5cubic');
37     nu2y=@(z) -mu_par(3)*interp1(x2,g2,z,'v5cubic');
38
39     a1=@(a) a-nu1y((2*x1(2:end)-a)/2)*dt;
40     a2=@(a) a-nu2y((2*x2(2:end)-a)/2)*dt;
41
42     alpha1=zeros(length(x1),1); alpha2=zeros(length(x2),1);
43
44     alpha1(2:end)=lsqnonlin(a1,(dx/2)*ones(size(x1(2:end))),
45         zeros(size(x1(2:end))),dx*ones(size(x1(2:end))),opt);
46     alpha2(2:end)=lsqnonlin(a2,(dx/2)*ones(size(x2(2:end))),
47         zeros(size(x2(2:end))),dx*ones(size(x2(2:end))),opt);

```

```

46
47 nu1U=@(z) mu_par(1)*interp1(x1,U1(:,n),z,'v5cubic');
48 nu2U=@(z) mu_par(3)*interp1(x2,U2(:,n),z,'v5cubic');
49
50 delta1=zeros(length(x1),2); delta2=zeros(length(x2),2);
51
52 d1_sx=@(d) d-sqrt( 2*dt*nu1U(x1(2:end)-d));
53 d1_dx=@(d) d-sqrt( 2*dt*nu1U(x1(1:end-1)+d));
54 d2_sx=@(d) d-sqrt( 2*dt*nu2U(x2(2:end)-d));
55 d2_dx=@(d) d-sqrt( 2*dt*nu2U(x2(1:end-1)+d));
56
57 delta1(2:end,1)=fsolve(d1_sx,(dx/2)*ones(length(x1)-1,1),
    opt);
58 delta1(1:end-1,2)=fsolve(d1_dx,(dx/2)*ones(length(x1)
    -1,1),opt);
59 delta2(2:end,1)=fsolve(d2_sx,(dx/2)*ones(length(x2)-1,1),
    opt);
60 delta2(1:end-1,2)=fsolve(d2_dx,(dx/2)*ones(length(x2)
    -1,1),opt);
61
62 delta1(1,1)=delta1(1,2);
63 delta1(end,2)=sqrt(2*dt*mu_par(1)*U1(end,n));
64 delta2(1,1)=sqrt(2*dt*mu_par(2)*U2(1,n));
65
66 XXy1=x1-alpha1;
67 XXy2=x2-alpha2;
68 XXU1(:,1)=x1-delta1(:,1); XXU1(:,2)=x1+delta1(:,2);
69 XXU2(:,1)=x2-delta2(:,1); XXU2(:,2)=x2+delta2(:,2);
70
71 U1(1:end-1,n+1)=0.5*(int_refl(x1,U1(:,n),XXU1(1:end-1,1),
    dt,0,[])+int_refl(x1,U1(:,n),XXU1(1:end-1,2),dt,0,[]))
    ;
72 U2(2:end-1,n+1)=0.5*(interp1(x2,U2(:,n),XXU2(2:end-1,1),
    'v5cubic')+interp1(x2,U2(:,n),XXU2(2:end-1,2),
    'v5cubic'
    ));
73 y1(:,n+1)=interp1(x1,y1(:,n),XXy1,'v5cubic');
74 y2(2:end,n+1)=interp1(x2,y2(:,n),XXy2(2:end),'v5cubic');
75
76 cc10=((U2(1,n).^2-U1(end,n).^2)/2)/(U1(end,n)*mu_par(1)/
    mu_par(2));
77 cc20=((U2(1,n).^2-U1(end,n).^2)/2)/(U2(1,n)*mu_par(3)/
    mu_par(2));
78 funU1=@(cc) 0.5*(int_refl(x1,U1(:,n),XXU1(end,1),dt,[],cc)
    +int_refl(x1,U1(:,n),XXU1(end,2),dt,[],cc));

```

```

79     funU2=@(cc) 0.5*(int_refl(x2,U2(:,n),XXU2(1,1),dt,cc,[])+
        int_refl(x2,U2(:,n),XXU2(1,2),dt,cc,[]));
80     u_temp=@(cc) [funU1(cc(1)),funU2(cc(2))];
81     cond1=@(U) ( U(2).^2-U(1).^2 )/2;
82     cond2=@(U) (mu_par(1)/mu_par(2)) * U(1) * (U(1)-U1(end-1,
        n+1))/dx;
83     cond3=@(U) (mu_par(3)/mu_par(2)) * U(2) * (U2(2,n+1)-U(2)
        )/dx;
84     condf1=@(ccy2,U) y1(end,n+1)*U(1)*mu_par(1)*(U(1)-U1(end
        -1,n+1))/dx - ccy2*U(2)*mu_par(3)*(U2(2,n+1)-U(2))/dx;
85     cond=@(ccy2,U) [cond1(U)-cond2(U),cond1(U)-cond3(U),
        condf1(ccy2,U)];
86     tosolve=@(cc) cond(cc(1),u_temp(cc(2:3)));
87     cc=fsolve(tosolve,[y2(1,n),cc10,cc20],opt);
88
89     ccy2=cc(1); ccU1=cc(2); ccU2=cc(3);
90     U1(end,n+1)=0.5*(int_refl(x1,U1(:,n),XXU1(end,1),dt,[],
        ccU1)+int_refl(x1,U1(:,n),XXU1(end,2),dt,[],ccU1));
91     U2(1,n+1)=0.5*(int_refl(x2,U2(:,n),XXU2(1,1),dt,ccU2,[])+
        int_refl(x2,U2(:,n),XXU2(1,2),dt,ccU2,[]));
92     y2(1,n+1)=ccy2;
93
94     U1(:,n+1)=U1(:,n+1)+fU(y1(:,n),U1(:,n))*dt;
95     y1(:,n+1)=y1(:,n+1)+fy(y1(:,n),U1(:,n))*dt;
96
97     U2(end,n+1)=0.5;
98
99     u1a(:,n+1)=conv1(y1(:,n+1),U1(:,n+1)); u2a(:,n+1)=conv1(
        y2(:,n+1),U2(:,n+1));
100    u1b(:,n+1)=conv2(y1(:,n+1),U1(:,n+1)); u2b(:,n+1)=conv2(
        y2(:,n+1),U2(:,n+1));
101    end

```

Funzione per l'evoluzione delle variabili influenzate da condizioni di Neumann non omogenee:

```

1    function vq = int_refl(x,v,xq,dt,g1,g2)
2        c=0.1;
3        d=zeros(size(xq));
4        XMax = max(x);
5        XMin = min(x);
6
7        idxMax = xq > XMax;
8        idxMin = xq < XMin;
9        d(idxMax)=xq(idxMax)-XMax;

```

```
10     xq(idxMax)=XMax-c*sqrt(dt);
11     d(idxMin)=XMin-xq(idxMin);
12     xq(idxMin)=XMin+c*sqrt(dt);
13
14     vq = interp1(x,v,xq,'v5cubic');
15     if sum(idxMax)>0
16         vq(idxMax)=vq(idxMax)+(d(idxMax)+c*sqrt(dt))*g2;
17     end
18     if sum(idxMin)>0
19         vq(idxMin)=vq(idxMin)-(d(idxMin)+c*sqrt(dt))*g1;
20     end
21 end
```

Bibliografia

- Luca Bonaventura and Roberto Ferretti. Semi-lagrangian methods for parabolic problems in divergence form, 2014. arXiv:1405.4509.
- Elisa Calzola, Elisabetta Carlini, Xavier Dupuis, and Francisco J. Silva. A semi-lagrangian scheme for hamilton-jacobi-bellman equations with oblique boundary conditions, 2021. arXiv:2109.10228.
- Mark A. J. Chaplain, Chiara Giverso, Tommaso Lorenzi, and Luigi Preziosi. Derivation e application of effective interface conditions for continuum mechanical models of cell invasion through thin membranes, 2019. arXiv:1901.10803.
- Dale R. Durran. *Numerical Methods for Wave Equations in Geophysical Fluid Dynamics*, chapter 6. Springer, 1999.
- Steven J. Fletcher. *Semi-Lagrangian Advection Methods and Their Applications in Geoscience*. Elsevier, 2020.
- Chiara Giverso, Tommaso Lorenzi, and Luigi Preziosi. Effective interface conditions for continuum mechanical models describing the invasion of multiple cell populations through thin membranes, 2021. arXiv:2104.12421.
- Hung-Chi Kuo and R. T. Williams. Semi-lagrangian solutions to the inviscid burgers equation. *Monthly Weather Review*, 118:1278–1288, 1989.
- Alfio Quarteroni and Alberto Valli. *Numerical Approximation of Partial Differential Equations*. Springer, 2008.