

# Inleiding

In de huid wordt via diffusie zuurstof opgenomen uit de buitenlucht. In het weefsel vindt omzetting plaats via een eerste orde chemische reactie. Het bijbehorende model luidt na schaling:

$$\begin{cases} \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \alpha^2 c & 0 < x < 1 \\ c|_{x=0} = 1 \\ \frac{\partial c}{\partial x}|_{x=1} = 0 \\ c|_{t=0} = f(x) \end{cases}$$

met  $\alpha = \frac{kl^2}{D}$

Voor ons model is gegeven dat  $\alpha = 1$ .

In het model is het interval genomen op  $[0, 1]$  als representatie van de huid, waarbij op  $x = 0$  de scheiding is met de buitenlucht en op  $x = 1$  de scheiding met het bindweefsel. Op  $x = 0$  wordt een constante concentratie aangenomen en op  $x = 1$  is aangenomen dat er geen zuurstoftransport meer is.

# Opgaven

Normaal gesproken zal zich een stationaire toestand instellen. In de stationaire toestand is  $\frac{\partial c}{\partial t} = 0$ .

1. Bepaal analytisch de stationaire oplossing  $c_{stat}$  van het model. Teken deze stationaire oplossing.

Het model wordt dan:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = c & 0 < x < 1 \\ c|_{x=0} = 1 \\ \frac{\partial c}{\partial x}|_{x=1} = 0 \\ c|_{t=0} = f(x) \end{cases}$$

De algemene oplossing hiervan is

$$c = c_1 e^{-x} + c_2 e^x$$

Met de beginvoorwaarden komen we uit op:

$$c = \frac{e^2}{e^2 + 1} e^{-x} + \frac{1}{e^2 + 1} e^x$$

In figuur 1 is deze oplossing getekend.

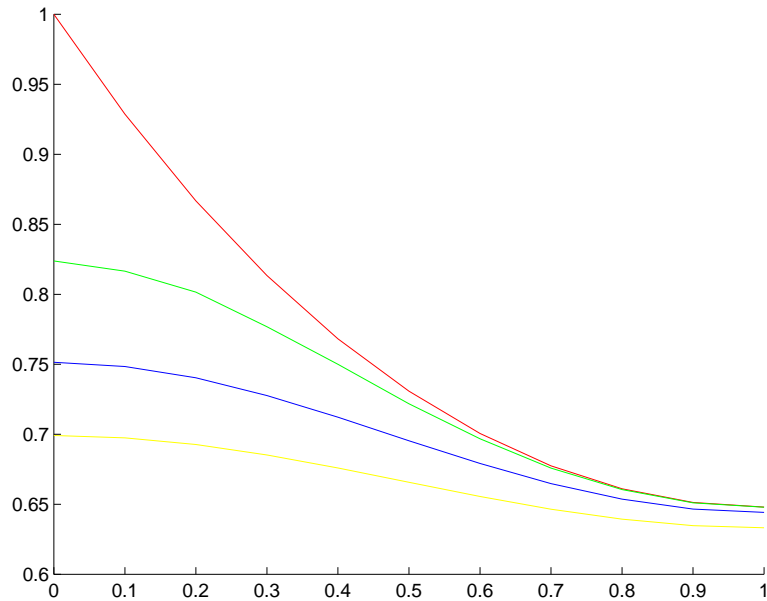
2. Bij ziekte van de huid vindt bestraling plaats. Het effect van deze bestraling is groter bij een lage zuurstofconcentratie. Het doel is nu om de huid zolang als mogelijk af te sluiten zonder dat er schade optreedt.

Stel dat de huid op tijdstip  $t = 0$  wordt afgesloten, dan is het te bestuderen model:

$$\begin{cases} \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \alpha^2 c & 0 < x < 1 \\ c|_{x=0} = 0 \\ \frac{\partial c}{\partial x}|_{x=1} = 0 \\ c|_{t=0} = c_{stat}(x) \end{cases}$$

De discretisatie van dit model in de  $x$ -richting vindt plaats met gebruik van tweede orde eindige differenties. De roosterafstand noemen we  $h$ . Het resulterende semi-discrete stelsel noteren we met

$$\frac{dy}{dt} = Ay + r \tag{1}$$



Figuur 1: Stationaire oplossing

Gevraagd wordt ons  $A$  en  $r$  te bepalen. Geef details over de verwerking van de Neumann randvoorwaarden.

We hebben  $A$  bepaald met de eindige differentie methode en de randvoorwaarden zijn als volgt verwerkt:

Omdat  $\frac{\partial c}{\partial x}|_{x=0} = 0$  maken we een virtueel punt  $u_{-1}$  aan en verwerken we deze met behulp van de centrale differentie  $\frac{u_1 - u_{-1}}{2h} = 0$  zodat volgt dat  $u_1 = u_{-1}$ . Hieruit volgt voor de eerste rij uit  $A$ :

$$\frac{u_1 - 2u_0 + u_{-1}}{h^2} = \frac{2u_1 - 2u_0}{h^2}$$

Omdat  $\frac{\partial c}{\partial x}|_{x=1} = 0$  maken we wederom een virtueel punt, nu  $u_{n+1}$ , aan en verwerken we deze weer met behulp van centrale differentie  $\frac{u_{n+1} - u_{n-1}}{2h} = 0$  zodat volgt  $u_{n-1} = u_{n+1}$ . Dit zorgt voor de verandering in de laatste rij van  $A$ .

Voor de andere elementen in  $A$  hoeven we alleen de centrale differentie tweemaal toe te passen:

$$\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2}$$

Omdat er in de differentiaalvergelijking nog een term  $c$  (de functie zelf) voorkomt, moet er nog de identiteitsmatrix worden afgetrokken. De matrix  $A$  heeft dan de volgende vorm:

$$\frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} -2 & 2 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \circlearrowleft \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \circlearrowleft & & 1 & -2 & 1 \\ & & & 1 & -2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & \circlearrowleft & \\ & & \ddots & & \\ & \circlearrowleft & & 1 & \\ & & & & 1 \end{pmatrix}$$

Doordat we te maken hadden met Neumann randvoorwaarden is  $r$  gelijk aan de nulvector.

3. Toon aan dat voor de eigenwaarden  $\lambda_i$  van  $A$  geldt:  $\lambda_i \leq 0$ . Geef een bovengrens voor de in absolute zin maximale eigenwaarde  $\lambda_{max}$ .

Hiervoor gebruiken we de stelling van Greshgorin:

$$|z - a_{ii}| \leq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}|$$

Alle elementen op de diagonaal van  $A$  zijn gelijk aan  $\frac{-2}{h^2} - 1$ . Als we de rest van de termen voor elke rij optellen komt het er op neer dat alle eigenwaarden liggen in een cirkel met middelpunt  $\frac{-2}{h^2} - 1$  en straal  $\frac{2}{h^2}$ . Hieruit volgt dat alle eigenwaarden liggen in het interval  $[\frac{-4}{h^2} - 1, -1]$  en dus allen kleiner zijn dan nul. Ook volgt hieruit dat  $\lambda_{max}$  in absolute zin kleiner is dan  $1 + \frac{4}{h^2}$ .

4. Voor de tijdsintegratie vals de keuze op de methode van Heun.

De vraag aan ons is hoe de methode van Heun luidt, toegepast op (1)?

In het algemene geval gaat de methode van Heun als volgt:

$$\begin{cases} u_{j+1}^* = u_j + hf(t_j, u_j) \\ u_{j+1} = u_j + \frac{h}{2}[f(t_j) + f(t_{j+1}, u_{j+1}^*)] \end{cases} \quad (2)$$

Passen we dit toe op (1) met  $f(t, y) = Ay$  dan zien we:

$$\begin{aligned} u_{j+1}^* &= u_j + hAu_j \\ u_{j+1} &= u_j + \frac{h}{2}[Au_j + A(u_j + hAu_j)] \\ &= u_j + \frac{h}{2}Au_j + \frac{h}{2}Au_j + \frac{h^2}{2}u_j \\ &= (I + hA + \frac{1}{2}h^2A^2)u_j \end{aligned}$$

5. Bepaal de orde van de lokale fout.

De lokale fout (afbreekfout)  $e_{j+1}$  is gedefinieerd als

$$e_{j+1} = \frac{y_{j+1} - y_j}{h} - \frac{1}{2}[f_j + f(t_{j+1}, y_{j+1} + hf_j)]$$

Werken we dit verder uit dan dien we:

$$\begin{aligned} y_{j+1} &= y_j + hy'_j + \frac{1}{2}h^2y''_j + O(h^3) \\ f_j &= Ay_j \\ f(t_{j+1}, y_{j+1} + hf_j) &= f_j + h(f_t)_j + hf_j(f_y)_j + O(h^2) \\ y'_j &= Ay_j \\ y''_j &= Ay'_j = A(Ay_j) = A^2y_j \end{aligned}$$

Dit levert op voor de lokale fout:

$$\begin{aligned} e_{j+1} &= y'_j + \frac{1}{2}hy''_j + O(h^2) - \frac{1}{2}[f_j + f_j + hA^2y_j + O(h^2)] \\ &= Ay_j + \frac{1}{2}hA^2y_j + O(h^2) - Ay_j - \frac{1}{2}hA^2y_j - \frac{1}{2}O(h^2) \\ &= O(h^2) \end{aligned}$$

6. Bepaal de orde van de globale fout.

Hiervoor gebruiken we stelling 5.6.1 uit het dictaat: Als het numerieke schema stabiel en consistent is, dan convergeert de numerieke oplossing naar de exacte oplossing. Bovendien is de orde van de globale fout gelijk aan die van de lokale fout.

Onze methode is consistent omdat  $\lim_{h \rightarrow 0} e_j = 0$ .

Nu moeten we nog aantonen dat ons numerieke schema stabiel is en dan weten we dat de orde van de globale fout is aan die van de lokale fout, en wel van orde 2.

Met behulp van stelling 5.8.1 zien we dat de versterkingsfactor van een numeriek schema in absolute waarde kleiner moet zijn dan 1. Voor de methode van Heun volgt dat

$$|k(\tau\lambda)| = \left| 1 + \tau\lambda + \frac{1}{2}(\tau\lambda)^2 \right| \leq 1$$

Nu volgt dat als  $\tau < \frac{2}{|\lambda|}$  dat ons schema stabiel is. Dan volgt dus dat de orde van de globale fout gelijk is aan 2.

7. De tijdsintegratie is stabiel voor  $\tau < \tau_{max}$ . Bepaal  $\tau_{max}$ .

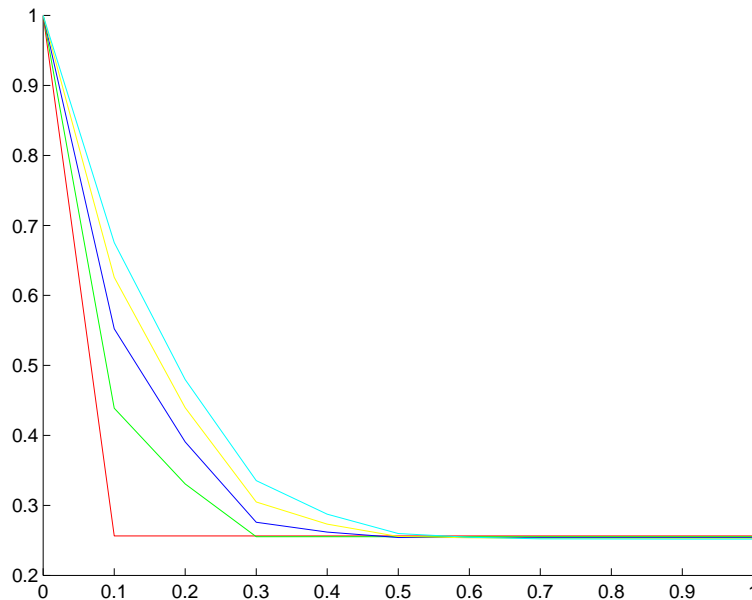
Zoals we al weten is de tijdsintegratie met de methode van Heun stabiel voor  $\tau < \frac{2}{|\lambda|}$ .

Dit geeft dat  $\tau < \tau_{max} \leq \frac{2}{|\lambda|_{max}} = \frac{2}{1+\frac{4}{h^2}}$ .

8. We kiezen nu  $h = 0.1$  en  $\tau = 0.9\tau_{max} = 0.0045$ . Maak in een grafiek plots van de numerieke oplossing (als functie van  $x$ ) na 0, 10, 20 en 30 tijdstappen. De bestraling dient aan te vangen als  $c < 0.75$ . Ga na op welk tijdstip dit het geval is. We noemen dit tijdstip  $t_{start}$ .

We hadden bij vraag (4) al gezien dat onze methode er als volgt uitziet:

$$u_{j+1} = (I + hA + \frac{1}{2}h^2A^2)u_j$$



Figuur 2: Afsluiting van de huid

Onze startvector is  $c_{start}(x)$ . Deze oplossing is te zien in figuur 2.

We merken op dat in de 21ste tijdstap  $c < 0.75$ . Na deze tijdstap dient de bestraling dus aan te vangen. In de bijlage is ons Matlab programma te zien.

9. De bestraling heeft tijdsduur  $T$ . We stellen  $t_{einde} = t_{start} + T$ . Op tijdstip  $t_{einde}$  stopt de bestraling en wordt de huid weer opgesteld voor zuurstof. In het bijbehorende model verandert voor  $t > t_{einde}$  de randvoorwaarde op  $x = 0$  in:

$$c|_{x=0} = 1 \tag{3}$$

Het semi-discrete stelsel is voor  $t > t_{einde}$  ook van de vorm (1).

De vraag aan ons is om  $A$  en  $r$  te bepalen voor  $t > t_{einde}$  en details te geven over de dimensie van  $A$ .

Aangezien  $u_0$  nu gegeven is, hoeven we die niet meer numeriek op te lossen. Dit betekent dat de eerste rij van  $A$  overbodig is. Om de randvoorwaarde goed te praten hebben we dit keer echter wel de vector  $r$  nodig.  $A$  en  $r$  zien er dan als volgt uit:

$$A = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \emptyset \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \emptyset & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & 2 & 2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & \emptyset & \\ & & \ddots & & \\ \emptyset & & & 1 & \\ & & & & 1 \end{pmatrix}$$

$$r = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

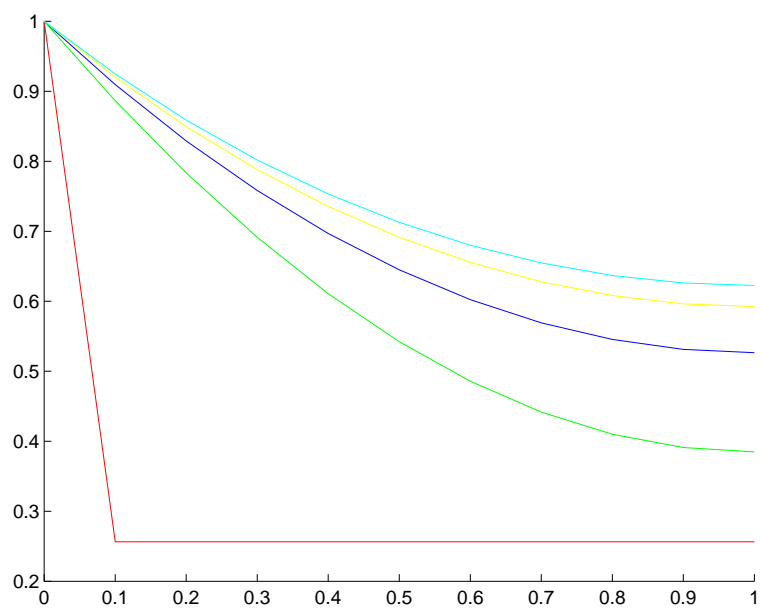
Ons stelsel is dus een dimensie lager dan het stelsel dat we eerder gebruikten en dat komt omdat de waarde aan een rand bekend is.

Gaan we nu weer de methode van Heun uitschrijven, maar nu toegepast op dit stelsel, dan krijgen we:

$$\begin{aligned} u_{j+1}^* &= u_j + h(Au_j + r) \\ u_{j+1} &= u_j + \frac{h}{2}[Au_j + r + A(u_j + h(Au_j + r)) + r] \\ &= u_j + \frac{h}{2}Au_j + \frac{h}{2}r + \frac{h}{2}Au_j + \frac{h^2}{2}A^2u_j + \frac{h^2}{2}Ar + \frac{h}{2}r \\ &= (I + hA + \frac{1}{2}h^2A^2)u_j + hr + \frac{1}{2}h^2Ar \end{aligned}$$

Het is van belang om na te gaan hoe het herstel van de zuurstofconcentratie in de huid verloopt. In het bijzonder moet er altijd voor gezorgd worden dat  $c \geq 0.25$ . Als  $c < 0.25$  dan treedt er huidsterfte op en bovendien is ons model dan niet meer geldig, omdat de chemische reactie zich anders gaat gedragen.

In figuur (3) op pagina 8 zien we dat in de nulde tijdstap er de laagste zuurstofconcentratie is. Deze is gelijk aan 0.2565. Met  $T = 1$  gaat het dus nog (net) goed. Wat opvalt echter is dat na de bestraling de concentratie toch weer omhoog gaat.



Figuur 3: Huid na de bestraling

# Bijlage 1

In deze bijlage is het Matlab programma opgenomen dat bij vraag (8) hoorde.

```
function uitvoer = straal(h, tau, n)

M = 1/h+1;

K = diag(-2*ones(M,1),0)+diag(ones(M-1,1),1)+diag(ones(M-1,1),-1);
K(1,2) = 2;
K(M,M-1) = 2;
A = (1/h^2) * K - eye(M);

for i = 1:M
x(i) = (i-1)*h;
y(i,1) = (exp(2-((i-1)*h)) + exp((i-1)*h))/(1+exp(2));
end

for i= 1:n
y(:,i+1) = (eye(M) + tau*A + (tau^2)/2*A*A)*y(:,i);
end

clf;
hold on;

plot(x, y(:,1), 'r')
plot(x, y(:,11), 'g')
plot(x, y(:,21), 'b')
plot(x, y(:,31), 'y')

uitvoer = y(:,:);
```

## Bijlage 2

Hieronder is het Matlab programma te zien dat bij opgave (9) hoort.

```
function uitvoer = straal(h, tau, n, tgroot)

teind = (tgroot + 21 * tau)/tau

M = 1/h;

K = diag(-2*ones(M,1),0)+diag(ones(M-1,1),1)+diag(ones(M-1,1),-1);
K(M,M-1) = 2;
A = (1/h^2) * K - eye(M);
r = 1/h^2*zeros(1,M).';
r(1) = 1/h^2;

vorige = straal1(h, 0.0045, teind);

for i = 1:M
x(i) = (i-1)*h;
y(i,1) = vorige(i,teind);
end
x(M+1) = M*h;

for i = 1:n
y(:,i+1) = (eye(M) + tau*A + (tau^2)/2*A*A)*y(:,i) + tau*r + (tau^2)/2*A*r;
end

ys(:,:) = [ones(1,n+1); y(:,:)];

clf;
hold on;

plot(x, ys(:,1), 'r')
plot(x, ys(:,2), 'g')
plot(x, ys(:,3), 'b')
plot(x, ys(:,4), 'y')
plot(x, ys(:,5), 'c')

uitvoer = ys(:,:);
```