Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics, v. 11, n. 1, 2025.

Trabalho apresentado no XLIII CNMAC, Centro de Convenções do Armação Resort - Porto de Galinhas - PE, 2024

Método Numérico para Resolução de Problema Pressão-Densidade-Deslocamento com Condições de Fronteira Mistas

Edmilson Paulo de Oliveira[1]
IFMT, Cáceres, MT
Giuseppe Romanazzi[2]
IMECC/Unicamp, Campinas, SP

No processo de desenvolvimento do câncer no cólon do reto, mutações podem surgir na estrutura chamada cripta, que contém células-tronco e transientes [3]. Neste trabalho, nós consideramos um domínio retangular $S = [0, a] \times [0, b]$ que aproxima uma porção de uma cripta do epitélio do cólon. Utilizamos um modelo difusivo-convectivo para a dinâmica das células nessa estrutura. Supomos que uma cripta contém duas famílias de células [2]: transientes proliferativas, com densidade $c_1 = c_1(\mathbf{x}, t)$, e células vivas totalmente diferenciadas, com densidade $c_2 = c_2(\mathbf{x}, t)$, em que $\mathbf{x} = (x, y) \in S$ e $t \in [0, T]$. Supomos também que $c_1 + c_2 = 1$ e que as famílias de células têm o mesmo coeficiente de difusão D. Considerando $c_1 = c$ e que uma cripta pode ser considerada uma estrutura viscoelástica [2] e, portanto, o domínio S pode ter um deslocamento $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = (u_1(\mathbf{x}, t), u_2(\mathbf{x}, t))$ em relação à sua posição original, o seguinte sistema de EDP modela o problema [2]:

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \frac{\partial c}{\partial t} - \nabla \cdot (\nabla p c) & = & \nabla \cdot (D \nabla c) + \alpha c - \beta c\,, \quad \text{em } S \times]0, T] \\ -\nabla \cdot (\nabla p) & = & \alpha c\,, \quad \text{em } S \times]0, T] \\ -\nabla \cdot \sigma(\mathbf{u}) & = & \mathbf{f}\,, \quad \text{em } S \times]0, T] \end{array} \right. , \tag{1}$$

em que α e β são taxas de proliferação das células e p é a pressão de adesão célula-célula responsável pela transição celular ascendente ao longo do eixo da cripta, $\mathbf{f} = (f_1, f_2)$, $\mathbf{f} = -\gamma \nabla (p - p_*)$, γ é um parâmetro, $\sigma(\mathbf{u})$ é um tensor de tensões, p_* é a pressão em uma situação normal e p, em caso de anormalidade. O problema (1) será resolvido considerando condições de fronteiras mistas. Salientamos que o mesmo problema foi anteriormente resolvido apenas com condições de Dirichlet.

Seja $H = (h_i, k_j)_{i,j=1}^{N,M}$ o conjunto dos passos da malha na qual o problema será resolvido numericamente. Definimos $H_{max} = \max_{(h_i,k_j) \in H}\{h_i, k_j\}$ e o conjunto $\overline{S_H}$ de todos os pontos $(x_i, y_j)_{i,j=0}^{N,M}$ da malha. Seja o conjunto de funções $W_H = \{v^H : \overline{S_H} \to \mathbb{R}\}$. Definimos $\|v^H\|_H^2 = \frac{h_1}{2}\frac{k_1}{2}(v_{0,0}^H)^2 + \frac{k_1}{2}\sum_{i=1}^{N-1} h_{i+\frac{1}{2}}(v_{i,0}^H)^2 + \frac{h_N}{2}\frac{k_1}{2}(v_{N,0}^H)^2 + \frac{h_N}{2}\sum_{j=1}^{M-1} k_{j+\frac{1}{2}}(v_{N,j}^H)^2 + \frac{h_N}{2}\frac{k_M}{2}(v_{N,M}^H)^2 + \frac{k_M}{2}\sum_{i=1}^{N-1} h_{i+\frac{1}{2}}(v_{i,M}^H)^2 + \frac{h_1}{2}\frac{k_M}{2}(v_{0,M}^H)^2 + \frac{h_1}{2}\sum_{j=1}^{M-1} k_{j+\frac{1}{2}}(v_{0,j}^H)^2 + \sum_{i,j=1}^{N-1,M-1} h_{i+\frac{1}{2}}k_{j+\frac{1}{2}}(v_{i,j}^H)^2$ como a norma em W_H. Definimos também, em $W_H \times W_H$, a norma $\|\overrightarrow{v}^H\|_{H,+} = \sqrt{\|v^{H,1}\|_{h,+}^2 + \|v^{H,2}\|_{k,+}^2}$, com: $\|v^{H,1}\|_{h,+} = \sqrt{\sum_{i,j=1}^{N,M-1} h_i k_{j+\frac{1}{2}}(v_{i,j}^{H,1})^2 + \frac{k_1}{2}\sum_{i=1}^{N} h_i(v_{i,0}^{H,1})^2 + \frac{k_M}{2}\sum_{i=1}^{N} h_i(v_{i,M}^{H,1})^2}$ e, analogamente, $\|v^{H,2}\|_{k,+} = \sqrt{\sum_{i,j=1}^{N-1,M} h_{i+\frac{1}{2}} k_j(v_{i,j}^{H,2})^2 + \frac{h_1}{2}\sum_{j=1}^{M} k_j(v_{0,j}^{H,2})^2 + \frac{h_N}{2}\sum_{j=1}^{M} k_j(v_{N,j}^{H,2})^2}$. Podemos então escrever o problema numérico: encontrar $p^H, c^H, \mathbf{u}^H \in W_H$ tais que:

[1]edmilson.oliveira@ifmt.edu.br
[2]groman@unicamp.br

$$\begin{cases} -\mathcal{L}_{\mathcal{A}}(p^H) &= \alpha c^H \\ \dfrac{\partial c^H}{\partial t} - \nabla_c \cdot (\mathcal{A} D_H p^H c^H) &= \mathcal{L}_{\mathcal{B}}(c^H) + \alpha c^H - \beta c^H \\ \mathcal{L}_{\mathcal{A}_\sigma}(\mathbf{u^H}) &= f_1^H \\ \mathcal{L}_{\mathcal{B}_\sigma}(\mathbf{u^H}) &= f_2^H \end{cases}, \tag{2}$$

em que $\mathcal{L}_{\mathcal{C}}(f^H) = \delta_x^{(\frac{1}{2})}(\mathcal{C}_{11}\delta_x^{(\frac{1}{2})} f^H) + \delta_x(\mathcal{C}_{12}\delta_y f^H) + \delta_y(\mathcal{C}_{21}\delta_x f^H) + \delta_y^{(\frac{1}{2})}(\mathcal{C}_{22}\delta_y^{(\frac{1}{2})} f^H)$, com $\mathcal{C} = \mathcal{A}$, $\mathcal{C} = \mathcal{B}$, $\mathcal{C} = \mathcal{A}_\sigma$ ou $\mathcal{C} = \mathcal{B}_\sigma$ e $\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{A}_\sigma, \mathcal{B}_\sigma : [0,1]^2 \to \mathbb{R}^{2\times 2}$, com $\mathcal{A} = \mathcal{B} = I$; $\mathcal{A}_{\sigma 11} = -\lambda - 2\mu$, $\mathcal{A}_{\sigma 12} = -\lambda$, $\mathcal{A}_{\sigma 21} = \mathcal{A}_{\sigma 22} = -\mu$;$\mathcal{B}_{\sigma 11} = \mathcal{B}_{\sigma 12} = -\mu$, $\mathcal{B}_{\sigma 21} = -\lambda$,$\mathcal{B}_{\sigma 22} = -\lambda - 2\mu$, em que λ e μ são os parâmetros de Lamé do material;

$$\nabla_c = (\delta_x, \delta_y) \quad ; \quad \delta_x v_{i,j}^H = \frac{v_{i+1,j}^H - v_{i-1,j}^H}{h_i + h_{i+1}} \quad ; \quad \delta_y v_{i,j}^H = \frac{v_{i,j+1}^H - v_{i,j-1}^H}{k_j + k_{j+1}}; \tag{3}$$

$$D_H = (\delta_h, \delta_k) \ ; \ \delta_h v_{i,j}^H = \frac{h_{i+1}\delta_x^{\frac{1}{2}} v_{i-\frac{1}{2},j}^H + h_i \delta_x^{\frac{1}{2}} v_{i-\frac{1}{2},j}^H}{h_{i+1} + h_i} \ ; \ \delta_k v_{i,j}^H = \frac{k_{j+1}\delta_y^{\frac{1}{2}} v_{j-\frac{1}{2},j}^H + k_j \delta_y^{\frac{1}{2}} v_{j-\frac{1}{2},j}^H}{k_{j+1} + k_j}, \tag{4}$$

em que $\delta_x^{\frac{1}{2}}$ e $\delta_y^{\frac{1}{2}}$ são os operadores centrados de passo metade nas direções x e y, respectivamente.

Por fim, definimos os erros relativos à pressão, à densidade e ao deslocamento por $e_p = R_H p - p^H$, $e_c = R_H c - c^H$ e $e_u = R_H \mathbf{u} - \mathbf{u^H}$, respectivamente. Temos, então, os resultados de convergência:

Teorema 1. *Seja o operador* $\nabla_{-H} = (D_{-x}, D_{-y})$, *com* $D_{-x} v_{i,j}^H = \dfrac{v_{i,j}^H - v_{i-1,j}^H}{h_i}$ *e* $D_{-y} v_{i,j}^H = \dfrac{v_{i,j}^H - v_{i,j-1}^H}{k_j}$ *e suponhamos que* $\|D_H p^H\|_\infty$ *seja uniformemente limitada com relação a* H. *Então:*

- *a solução* p^H *de* (2) *converge para a solução* p *de* (1) *e* $\|\nabla_{-H} e_p^H(t)\|_{H,+}$ *converge para zero com ordem 2 conforme* H_{max} *tende a zero;*
- *a solução* c^H *de* (2) *converge para a solução* c *de* (1) *e* $\sqrt{\|e_c^H(t)\|_H^2 + \int_0^t \|\nabla_{-H} e_c^H(s)\|_{H,+}^2 ds}$ *tende a zero com ordem 2 conforme* H_{max} *tende a zero;*
- *a solução* $\mathbf{u^H}$ *de* (2) *converge para a solução* $\mathbf{u}$ *de* (1) *e* $\sqrt{\|\nabla - H e_{u_1}^H\|_{H,+}^2 + \|\nabla_{-H} e_{u_2}^H\|_{H,+}^2}$ *converge para zero com ordem 2 conforme* H_{max} *tende a zero.*

Detalhes acerca de teoremas similares àquele acima apresentado, porém no caso em que as condições de fronteira são de Dirichlet, podem ser encontradas em [1].

Referências

[1] G. C. M. Campos, J. A. Ferreira e G. Romanazzi. "Density-pressure IBVP: Numerical analysis, simulation and cell dynamics in a colonic crypt". Em: **Applied Mathematics and Computation** 424 (2022), p. 127037. DOI: 10.1016/j.amc.2022.127037.

[2] I. N. Figueiredo, C. Leal, G. Romanazzi e B. Engquist. "Biomathematical model for simulating abnormal orifice patterns in colonic crypts". Em: **Mathematical biosciences** 315 (2019), p. 108221. DOI: 10.1016/j.mbs.2019.108221.

[3] I. M. M. Van Leeuwen, H. M. Byrne, O. E. Jensen e J. R. King. "Crypt dynamics and colorectal cancer: advances in mathematical modelling". Em: **Cell proliferation** 3 (2006), pp. 157–181. DOI: 10.1111/j.1365-2184.2006.00378.x.

