

Relazione finale Progetto di ricerca - GNCS 2014

Metodi numerici per modelli di propagazione di onde elettromagnetiche in tessuti biologici

Responsabile: Roberto Garrappa
(Università degli studi di Bari "Aldo Moro")

Descrizione del progetto

L'obiettivo del progetto di ricerca verteva sullo sviluppo e l'analisi di metodi numerici per la discretizzazione di operatori differenziali di tipo frazionario e pseudo-frazionario, con particolare riguardo a quelli impiegati nella simulazione della propagazione di onde elettromagnetiche all'interno di tessuti biologici.

Si tratta di un argomento che ha potenziali ricadute finali soprattutto in campo biomedico (diagnostica per immagini ed applicazioni terapeutiche) e che sta riscuotendo un crescente interesse da parte di fisici ed ingegneri impegnati nello studio delle modalità con le quali i campi elettromagnetici si propagano all'interno di materiali non omogenei e caratterizzati da fenomeni di memoria quali appunto (ma non solo) i tessuti biologici.

Dal punto di vista numerico è senza dubbio un argomento innovativo in quanto negli anni recenti sono stati proposti diversi modelli (ad esempio, quelli di tipo Havriliak-Negami) la cui descrizione nel dominio del tempo avviene mediante particolari operatori di ordine non intero (spesso detti operatori pseudo-frazionari) per i quali lo sviluppo e lo studio di schemi numerici è ancora in una fase embrionale.

Più in generale, il trattamento numerico di operatori integrali o differenziali di ordine frazionario è un argomento di ricerca particolarmente attivo in questi ultimi anni e vi è una forte domanda, da parte del mondo ingegneristico, di metodi numerici efficienti.

Composizione del gruppo di ricerca

Il gruppo di ricerca impegnato nell'ambito del progetto di ricerca è stato così composto:

- Aceto Lidia, Ricercatore Universitario, Università degli Studi di Pisa
- Garrappa Roberto, Ricercatore Universitario, Università degli studi di Bari
- Magherini Cecilia, Ricercatore Universitario, Università degli Studi di Pisa
- Novati Paolo, Professore Associato, Università degli Studi di Trieste
- Popolizio Marina, Ricercatore Universitario, Università del Salento

Principali risultati ottenuti

Nello svolgimento del progetto ci si è occupati sia di alcuni aspetti teorici legati allo studio delle proprietà degli operatori in esame che, in modo preminente, di aspetti numerici al fine di discretizzare gli operatori ed impiegare gli schemi numerici nell'ambito di simulazioni.

In particolare lo studio ha coinvolto operatori frazionari, integrali e differenziali, di tipo Riemann-Liouville, Caputo e Havriliak-Negami, sebbene alcuni dei risultati raggiunti possano essere estesi anche ad altri tipi di operatori.

Per quanto riguarda lo studio degli aspetti più teorici, in [11] si sono investigate le proprietà di completa monotonia della funzione di Mittag-Leffler a tre parametri (detta anche funzione di Prabhakar) la quale interviene nella descrizione nel dominio del tempo delle proprietà dei dielettrici con funzione di rilassamento di tipo Havriliak-Negami. Questo studio ha permesso pertanto di identificare il range dei parametri per l'accettabilità fisica del modello di Havriliak-Negami che è stato esteso rispetto ai risultati già presenti in letteratura.

I risultati così ottenuti hanno permesso una migliore focalizzazione in fase di derivazione di appositi schemi numerici per operatori di tipo Havriliak-Negami, i cui primi risultati sono stati pubblicati in [7].

In [8] si è avviato lo studio sulle tecniche basate sulla approssimazione di funzioni di matrici quando applicate a matrici con spettro immaginario. In particolare si è studiata la rappresentazione analitica della soluzione di una equazione di Schrödinger frazionaria e la convergenza dei metodi sul sottospazio di Krylov per il suo calcolo numerico. Al fine di implementare tali tecniche è stato necessario approfondire il problema dell'approssimazione della funzione di Mittag-Leffler sull'asse immaginario, per il quale si è fatto ricorso a metodi basati sulla inversione numerica della trasformata di Laplace [13].

Questo lavoro è stato quindi esteso ed approfondito in [6] al fine di costruire metodi robusti per il calcolo della funzione di Mittag-Leffler su tutto il piano complesso, con la possibilità di estendere il calcolo anche alla generalizzazione a 3 parametri di questa funzione, precedentemente studiata in [11].

Il lavoro [2] ha consentito la derivazione di innovativi schemi numerici con memoria ridotta (principio dello short-memory), per operatori classici di Riemann-Liouville e Caputo, basati su approssimazioni razionali delle funzioni generatrici delle "Fractional Backward Differentiation Formulas". Rispetto agli approcci short-memory di tipo

tradizionale sino ad ora discussi in letteratura, generalmente basati su approssimazioni polinomiali delle funzioni generatrici, la metodologia proposta in questo lavoro (che riprende in parte alcuni dei risultati di base presentati in [12]) consente di derivare schemi numerici che approssimano in modo accurato le FBDF originarie ma che al tempo stesso presentano importanti vantaggi computazionali in quanto consentono una riduzione sostanziale del costo di calcolo. Tali tecniche, che potranno essere estese anche ad altri schemi di discretizzazione e ad altri operatori, sembrano essere promettenti soprattutto in vista di applicazioni di tipo real-time dove la velocità di esecuzione risulta essere un fattore determinante.

Si è proseguito inoltre lo studio, già avviato negli anni passati, sulla generalizzazione ai problemi di ordine frazionario delle tecniche di integrazione esponenziale. Nel lavoro [10] si sono messe a punto formule di quadratura basate su integrali pesati con peso fornito da una generalizzazione della funzione di Mittag-Leffler e se ne sono derivate le condizioni d'ordine. Un review dei principali aspetti legati agli integratori per equazioni differenziali frazionarie è stato invece pubblicato in [9]. Infine si è approfondito lo studio di queste tecniche quando applicate a metodi di tipo spettrale per la soluzione di equazioni alle derivate parziali con derivata temporale di ordine non intero [5].

Complessivamente si ritiene che il progetto finanziato dal GNCS abbia consentito di ottenere risultati nuovi ed interessanti, molti dei quali richiedono ulteriori approfondimenti; si tratta infatti di un argomento scientifico di forte attualità. Le competenze acquisite dai componenti del gruppo di ricerca potranno pertanto essere utilizzate in progetti di ricerca futuri su tematiche affini o comunque relative al calcolo frazionario.

Principali attività finanziate

Il presente progetto ha ricevuto un finanziamento complessivo da parte del GNCS-INdAM pari a Euro 3.500.

Le principali attività finanziate (per intero o parzialmente) con i fondi assegnati a questo progetto sono state:

1. Partecipazione dott. Roberto Garrappa al Congresso GNCS 2014, Montecatini Terme (PT), 19-20 febbraio 2014 (importo speso Euro 100,00);
2. Partecipazione prof. Paolo Novati alla International Conference on Fractional Differentiation and Applications (ICFDA 2014), Catania 23-25 Giugno 2014 (importo speso Euro 539,26);
3. Partecipazione dott. Roberto Garrappa al Workshop on Numerical Analysis and Evolution equations, Innsbruck (Austria), 14-17 Ottobre 2014 (importo speso Euro 693,96);
4. Partecipazione dott. Roberto Garrappa alla International Conference on Applied Mathematics, Simulation, Modelling (ASM 2014), Firenze, 22-24 Novembre 2014 (importo speso Euro 243,14);

and Engineering (CMMSE 2014), Costa Ballena, Rota (Spagna), July 03-07, 2014 (invited talk).

6. Aceto L.: *Finite-recursion schemes for Fractional Differential Equations*. MPDE14 - Models in Population Dynamics and Ecology, Torino, August 25-29, 2014.
7. Aceto L.: *Short-term recursions for Fractional Differential Equations*. ICNAAM 2014, Rodi (Grecia), September 22-28, 2014 (plenary lecture).
8. Garrappa R.: *Exponential integrators for fractional differential equations*. 8th NAI - Workshop on Numerical Analysis of Evolution Equations, Innsbruck (Austria), October 14-17, 2014.
9. Garrappa R.: *A Grünwald-Letnikov Scheme for fractional operators of Havriliak-Negami type*. International Conference on Applied Mathematics, Simulation, Modelling (ASM 2014), Firenze (Italy), November 22-24, 2014 (su invito del Prof. F. Mainardi).
10. Aceto L.: *Short-term recursions for Fractional Differential Equations*. Seminario tenuto presso il Dipartimento di Matematica, Università di La Laguna (Spagna), January 22, 2015 (su invito dei Proff. Severiano Gonzalez Pinto e Juan J. Trujillo).
11. Aceto L.: *A rational short-memory approach for Fractional Differential Equations*. Seminario tenuto presso il Dipartimento di Matematica, Università di Aveiro (Portogallo), February 3, 2015 (su invito del Prof. Helmuth R. Malonek).
12. Aceto L.: *A rational short-memory approach for fractional Fokker-Planck equations*. 6th Workshop on Dynamical Systems Applied to Biology and Natural Sciences (DSABNS 2015), Lisbon (Portugal), 4-6 Febbraio 2015
13. Garrappa R.: *Numerical methods for fractional operators involved in anomalous polarization processes*. Workshop on Fractional Calculus and its Applications, Roma (Italy), 11 Marzo 2015 (su invito del Prof. R. Spigler).
14. Popolizio M. : *On Krylov subspace methods for the time-fractional Schrödinger equation*. GAMM 86th Annual Scientific Conference - Lecce (Italy) 23-27 Marzo, 2015.

Riferimenti bibliografici

- [1] L. Aceto, C. Magherini, and P. Novati. Fractional convolution quadrature based on Generalized Adams Methods. *Calcolo*, 51(3):441–463, 2014.
- [2] L. Aceto, C. Magherini, and P. Novati. On the construction and properties of m -step methods for FDEs. *SIAM J. Sci. Comput.*, 37(2):653–675, 2015.

- [3] L. Aceto, C. Magherini, and P. Novati. Short-term recursions for fractional differential equations. *AIP Conference Proceedings*, 1648:020001–1–020001–4, 2015.
- [4] M.-F. Danca and R. Garrappa. Suppressing chaos in discontinuous systems of fractional order by active control. *Applied Mathematics and Computation*, 257:89–102, 2015.
- [5] S. Esmaeili and R. Garrappa. A pseudo-spectral scheme for the approximate solution of a time-fractional diffusion equation. *International Journal of Computer Mathematics*, 92(5):980–994, 2015.
- [6] R. Garrappa. Numerical evaluation of two and three parameters Mittag-Leffler functions. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, In press.
- [7] R. Garrappa, G. Maione, and M. Popolizio. Time-domain simulation for fractional relaxation of Havriliak-Negami type. In *ICFDA 2014, International Conference on Fractional Differentiation and Its Applications*. 2014.
- [8] R. Garrappa, I. Moret, and M. Popolizio. Solving the time-fractional Schrödinger equation by krylov projection methods. *Journal of Computational Physics*, In press.
- [9] R. Garrappa and M. Popolizio. Exponential integrators for fractional differential equations. In R.A.Z. Daou and X. Moreau, editors, *Fractional Calculus: Theory*. Nova Science Publishing, US, 2014.
- [10] R. Garrappa and M. Popolizio. Exponential quadrature rules for linear fractional differential equations. *Mediterranean Journal of Mathematics*, 12(1):219–244, 2015.
- [11] F. Mainardi and R. Garrappa. On complete monotonicity of the Prabhakar function and non-debye relaxation in dielectrics. *Journal of Computational Physics*, In press.
- [12] P. Novati. Numerical approximation to the fractional derivative operator. *Numerische Mathematik*, 127(3):539–566, 2014.
- [13] M. Popolizio and R. Garrappa. Fast evaluation of the Mittag-Leffler function on the imaginary axis. In *ICFDA 2014, International Conference on Fractional Differentiation and Its Applications*. 2014.

Bari, 28 Aprile 2015