



Análise Comparativa de Métodos Numéricos para a Equação do Campo Neuronal

Alexandre Luís Gonçalves Cabral

Dissertação para obtenção do Grau de Mestre em

Matemática e Aplicações

Orientador: Prof. Pedro Miguel Rita da Trindade e Lima

Júri

Presidente: Prof. José Manuel Vergueiro Monteiro Cidade Mourão

Vogal: Prof. Maria Luisa Ribeiro dos Santos Morgado

Vogal: Prof. Juha Hans Videman

Julho 2022

Dedicated to my family

Agradecimentos

Gostaria de agradecer ao meu orientador, o Professor Pedro Lima por todo o seu suporte, paciência e aconselhamento ao longo de toda a elaboração desta tese. Queria também agradecer aos meus pais por sempre me apoiarem e acreditarem em mim e à minha família por todo o amor desde sempre.

Resumo

O número de neurónios e sinapses que existem num pequeno pedaço de córtex é imenso. As equações do campo neuronal (ECN) constituem uma ferramenta essencial na análise da dinâmica comportamental destas populações de neurónios. Devido à complexidade dos modelos e à sua importância em contexto real, como em Robótica e Neurociência, têm vindo a desenvolver-se diversos métodos numéricos para a resolução correcta e eficiente das ECNs. Esta tese analisa ECNs determinísticas unidimensionais, tendo em conta velocidade de propagação dos sinais e estímulo externo, e apresenta vários métodos numéricos para as resolver, que são estudados quanto à sua convergência e complexidade. O desempenho destes métodos computacionais é ilustrado através de vários exemplos. Numa segunda fase, estes métodos são usados para estudar o efeito de memória no cérebro e as condições para que este efeito aconteça. Para concluir, apresentamos algumas simulações que ilustram as várias etapas de como se processa o efeito de memória de trabalho no cérebro.

Palavras-chave: Equação do Campo Neuronal, Euler, Velocidade de transmissão finita, Estímulo Externo, Memória de Trabalho, MatLab

Abstract

The number of neurons and synapses that exist in a small patch of cortex is immense. The Neural Field Equations (NFE) constitute an essential tool in the analysis of the behavioral dynamics of these neuron populations. Due to the complexity of the models and their importance in real life, as in Robotics and Neuroscience, several numerical methods have been developed to solve correctly and efficiently the NFEs. This thesis analyzes one-dimensional deterministic NFEs, taking into account the propagation speed of signals and the external stimulus, and presents several numerical methods to solve them, which are studied for their convergence and complexity. The performance of these computational methods is illustrated through several examples. In a second phase, these methods are used to study the effect of memory on the brain and the conditions for this effect to occur. To conclude, we present some simulations that illustrate the various steps of how the working memory effect in the brain is processed.

Keywords: Deterministic neural field equations, Euler, Finite transmission speed, External stimulus, Working memory, MatLab

Conteúdo

Agradecimentos	v
Resumo	vii
Abstract	ix
Lista de Tabelas	xiii
Lista de Figuras	xv
Lista de Símbolos	1
Glossário	1
1 Introdução	1
1.1 Motivação	1
1.2 Sistema Nervoso	1
1.3 História dos modelos matemáticos	3
1.4 Equações do Campo Neuronal	4
1.4.1 ECN com retardamento	5
1.5 Objetivos da Tese	6
2 Métodos numéricos para tratamento da equação do campo neuronal	7
2.1 Métodos numéricos e discretização	7

2.1.1	Método Semi-Implícito	8
2.1.2	Método Explícito	14
2.1.3	Método Implícito	16
3	Resultados numéricos	24
3.0.1	Resultados numéricos para exemplos sem retardamento	24
3.0.2	Resultados numéricos para exemplos com retardamento	43
4	Simulação da memória de trabalho	45
4.1	Condições necessárias para existência de solução estacionária na presença de excitação externa.	45
4.2	Criação e análise de "bumps" através de excitação local - Efeito de memória	52
4.2.1	Solução com $\sigma = 0.4$	52
4.2.2	Solução com $\sigma = 3$	56
4.2.3	Solução com $\sigma = 13$	59
4.3	Conclusão	62
5	Conclusão e Trabalho Futuro	63
	Bibliografia	65

Lista de Tabelas

3.1	Erro e Ordem de Convergência para o método explícito	26
3.2	Erro e Ordem de Convergência para o método semi-implícito	26
3.3	Erro e Ordem de Convergência para o método implícito	26
3.4	Erro e Ordem de Convergência para o método explícito	27
3.5	Erro e Ordem de Convergência para o método semi-implícito	27
3.6	Erro e Ordem de Convergência para o método implícito	27
3.7	Erro e Ordem de Convergência para o método explícito	31
3.8	Erro e Ordem de Convergência para o método semi-implícito	32
3.9	Erro e Ordem de Convergência para o método implícito	32
3.10	Erro e Ordem de Convergência para o método explícito	36
3.11	Erro e Ordem de Convergência para o método semi-implícito	37
3.12	Erro e Ordem de Convergência para o método implícito	37
3.13	Erro e Ordem de Convergência para o método implícito	41
3.14	Erro e Ordem de Convergência usando a função f_1 como taxa de disparo com $k = 180$.	42

Lista de Figuras

1.1	Componentes básicos de um neurónio, adaptado de [1]	2
3.1	Comparação dos erros para diferentes valores de τ	25
3.2	Comparação da solução exata com a solução aproximada pelo método semi-implícito usando $\tau = 0.001$ e $h = 0.1$ para o intervalo de tempo $[0, 20]$	28
3.3	Comparação da solução exata com a solução aproximada pelo método implícito usando $\tau = 0.001$ e $h = 0.1$ para o intervalo de tempo $[0, 20]$	29
3.4	Erro da solução aproximada obtida pelo método implícito para diferentes valores de h usando um passo $\tau = 0.02$ e no ponto $x = 0$	31
3.5	Interseção da reta $y = 0.5$ com a função que dá o valor do máximo de $V(x, t)$ em função de α	34
3.6	Solução exata e numérica para $\alpha = 1$, $\tau = 0.01$ e $h = 0.05$ e $V(x, 0) = 0.2$	35
3.7	Solução exata e numérica para $\alpha = 0.5$ com $\tau = 0.01$ e $h = 0.05$ e $V(x, 0) = 0.2$	36
3.8	Função $K(x)$	39
3.9	Gráficos $W(x)$ e $W(x - 2.287978)$	40
3.10	Função $V(x)$ dada pela fórmula (3.19)	40
3.11	Comparação entre a solução exata e a solução numérica usando um passo no espaço $h = 0.01$ e no tempo $\tau = 0.001$	41
3.12	Gráfico da aproximação por função contínua da função de Heaviside no intervalo $[-0.5, 0.5]$ usando $k = 180$	42

3.13 Efeito do retardamento	44
4.1 Função $W(x)$ e obtenção dos valores z_1 e z_2	48
4.2 Representação dos valores da função $S(\frac{z_1}{2})$ e $S(\frac{z_2}{2})$	49
4.3 Gráficos da função $W(x)$ e da função $\theta - S(\frac{x}{2})$ com $A = 2, k = 0.08$ e $\alpha = \pi/10$ com $S_s = 8$ e $S_i = 0.5$	49
4.4 Interpretação gráfica da equação (4.10)	50
4.5 Gráfico de uma solução estacionária no caso de $\sigma = 3$ (ver secção 3.2). Verifica-se que a largura do bump corresponde à solução da equação (4.10)	51
4.6 Solução em $x = 0$ em função do tempo no caso de $\sigma = 0.4$	53
4.7 Sinal externo e solução em $t = 10$ no caso de $\sigma = 0.4$	54
4.8 Forma da solução na ausência de sinal externo com $t = 20$	55
4.9 Solução em $x = 0$ função do tempo, no caso de $\sigma = 3$	56
4.10 Sinal externo e forma da solução em $t = 10$ no caso de $\sigma = 3$	57
4.11 Forma da solução na ausência de sinal externo em $t=20$	58
4.12 Solução em $x = 0$ função do tempo, no caso de $\sigma = 13$	59
4.13 Sinal externo e forma da solução em $t = 15$	60
4.14 Forma da solução na ausência de sinal externo	61

Capítulo 1

Introdução

1.1 Motivação

O número de neurónios e sinapses que existem num pequeno pedaço de córtex é imenso. As equações do campo neuronal (ECN) constituem uma ferramenta essencial na análise da dinâmica comportamental destas populações de neurónios. Os modelos do campo neuronal representam, em larga escala, a dinâmica espacial de redes de neurónios em termos de equações integro-diferenciais não lineares. Estas equações descrevem a evolução no espaço-tempo de variáveis como potenciais de membrana ou a atividade durante as sinapses. Desempenham um papel importante em variados campos como a Robótica, principalmente na criação de robots autónomos que interagem com outros agentes para resolver conjuntamente uma tarefa. Também desempenham um papel importante na área da neurociência como método para analisar e interpretar dados experimentais, tais como informações obtidas por ressonâncias magnéticas. Portanto, simulações tomam um papel importante no estudo da dinâmica do cérebro. Introduzimos neste trabalho métodos numéricos para aproximar estas equações. Métodos esses que, numa segunda fase, ajudar-nos-ão no estudo do efeito de memória que acontece no cérebro.

1.2 Sistema Nervoso

O sistema nervoso pode ser dividido em central(SNC) e periférico(SNP). O sistema nervoso central é formado por encéfalo e medula, enquanto o periférico é formado por nervos e gânglios. É nessa parte que as mensagens são identificadas e as respostas são geradas. Já no SNP encontramos nervos

e gânglios, que são os responsáveis por levar a informação dos órgãos para o SNC e deste para os órgãos. As unidades básicas do sistema nervoso são os neurónios. Os neurónios são células que usam sinais elétricos e químicos para receber e enviar informação para o corpo humano, desde receber estímulos do mundo externo, a enviar ordens motoras para os nossos músculos. Podem ser divididos em três partes: o corpo celular ou soma é responsável por processar informação, as dendrites são responsáveis por transportar informação de outros neurónios para o corpo celular, por último temos o axónio, que carrega informação do corpo celular para os outros neurónios, isto pode ser observado pela Figura 1.1. Para transportar a informação, os neurónios comunicam entre si e com outras células enviando sinais, usando conexões específicas chamadas sinapses. Quando vários neurónios estão conectados, eles formam o que é chamado de circuito neuronal.

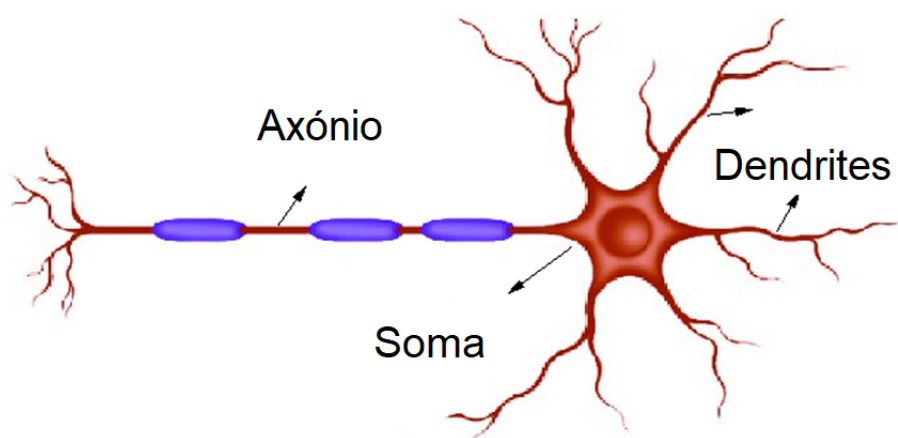


Figura 1.1: Componentes básicos de um neurónio, adaptado de [1]

Alguns números sobre o cérebro humano e o sistema nervoso podem ser encontrados no artigo [2].

431 km/h é a velocidade a que alguns sinais podem viajar na medula espinal, a maior velocidade de transmissão do corpo humano. Os recetores da pele estão entre os mais lentos, 1.6 km/h. Esta diminuição na velocidade comparativamente aos primeiros acontece por estes últimos não possuírem bainha de mielina. Em média, uma pessoa com 20 anos tem 161.000 quilómetros de fibras nervosas cobertas de mielina no cérebro. Neuro-cientistas da Universidade da Califórnia em Los Angeles, estudaram a mielinização no cérebro de adultos com idades entre 23 e 80 anos. Relataram que o revestimento atinge o pico por volta dos 39 anos – a mesma idade em que os participantes atingem velocidades máximas em testes padrão de habilidades motoras. 100 triliões é o número de conexões neuronais ou sinapses, no cérebro humano. Este número representa, no mínimo, 1000 vezes mais o número de estrelas na nossa galáxia. Investigadores britânicos reportaram que os genes envolvidos no funcionamento das sinapses representam cerca de 7% do nosso genoma. De acordo com uma simulação desenvolvida pela IBM e o Laboratório Nacional Lawrence Berkeley, realizada num super-computador, o sistema nervoso tem 1 bilião de neurónios, conectados por 10 triliões de sinapses. Na

realidade, o cérebro humano contém cerca de 100 bilhões de neurónios, pelo que a estimativa obtida pelos cientistas está a aproximar-se do valor real. O córtex cerebral de um humano tem cerca de 2-4 milímetros de espessura e contém cerca de um quinto de todos os neurónios. De acordo com estimativas recentes, o córtex pode armazenar até 100 Tb (10¹⁴ bytes) de dados.

1.3 História dos modelos matemáticos

A investigação de redes neuronais biológicas em cérebros de animais inspirou matemáticos a criar redes neuronais artificiais (RNA). Os cientistas tinham a intenção de desenvolver redes neuronais que resolveriam problemas como um cérebro humano faz. Em 1943, Warren McCulloch e Walter Pitts criaram o primeiro modelo computacional para redes neuronais baseado em matemática e algoritmos. A RNA funciona como o cérebro humano, ou seja, a RNA é baseada num conjunto de unidades básicas conectadas chamadas neurónios artificiais. A conexão também é chamada de sinapse e transmite sinais de um neurónio artificial para outro. Assim que um neurónio artificial recebe esse sinal, ele pode processá-lo e enviar um novo sinal para os vizinhos conectados. Como as redes neuronais são compostas por neurónios conectados, é importante entender matematicamente essas conexões (sinapses) e como elas são acionadas. Em 1952, A.H. Hodgkin e A.F. Huxley, ver [3], escreveram um artigo onde é descrito como os potenciais de ação em neurónios são iniciados e propagados, usando a linguagem dos circuitos elétricos e traduzindo-os para um sistema de quatro equações diferenciais ordinárias. Uma investigação mais aprofundada da propagação do estímulo nervoso levou em 1962 às equações de FitzHugh-Nagumo, [4], [5], [6], onde o sistema Hodgkin-Huxley é reduzido a duas equações que descrevem a propagação de impulsos no sistema nervoso. A alta densidade de neurónios e o grande número de sinapses que ocorrem no córtex cerebral sugerem a criação de um modelo de aproximação contínua da atividade neuronal. Deste modo, em 1956, foi feita uma primeira tentativa por Beurlle, ver [7]. Neste modelo, considera-se uma população continuamente distribuída de neurónios excitados com um limite fixo para enviar sinais uns aos outros. Além disso, concentrando-se na fração de neurónios ativados por unidade de tempo, Beurlle foi capaz de analisar o desencadeamento e propagação da atividade cerebral em larga escala. Isso também foi estudado por Griffith em 1963 [8] e 1965 [9], onde é descrito um modelo em que a atividade neuronal é representada por um campo ϕ , com os neurónios como fontes. Mostra-se que, sob certas suposições realistas do ponto de vista físico, ϕ satisfaz uma equação diferencial não linear. No artigo [9], a equação introduzida pela primeira vez em 1963 é ainda estudada a fundo, em particular, a estabilidade de soluções estacionárias é investigada e conclui-se que, em certos casos, as soluções gerais tendem para certas soluções críticas. No entanto, os modelos criados por estes dois autores consistiam em redes de neurónios excitados sem uma variável que pudesse expressar a fase refratária, fase em que os neurónios não estão aptos para emitir impulsos. Foram Wilson e Cowan, na década de 70 [10], que estenderam a teoria para incluir tanto neurónios inibitórios

quanto excitatórios, bem como o efeito refractário. Posteriormente às obras de Wilson e Cowan, Amari (1977) desenvolveu mais trabalhos em campos neuronais, particularmente na formação de padrões sob suposições naturais de conectividade e potenciais de ação, fornecendo assim as formulações para os modelos de campo neuronal tal como o conhecemos nos dias de hoje, ver [11]. Seguindo os trabalhos de Wilson e Cowan [10] e Amari [11] no desenvolvimento de modelos contínuos para campos neuronais, tem havido um interesse considerável no estudo da dinâmica espaço-temporal da atividade neuronal. Os modelos contínuos exprimem-se geralmente através de equações integro-diferenciais não lineares.

1.4 Equações do Campo Neuronal

Para modelar o que acontece no cortex cerebral, descrevendo a dinâmica espaço-temporal das interações entre neurónios e analisando as sinapses, usa-se a chamada equação do campo neuronal (ECN)[11], da forma

$$\frac{\partial}{\partial t}V(x, t) = S(x, t) - \alpha V(x, t) + \int_{\Omega} K(|x - y|)f(V(y, t))dy$$

$$t \in [0, T], x \in \Omega \subset \mathbb{R}$$
(1.1)

sujeita à condição inicial

$$V(x, 0) = V_0(x),$$

$V(x, t)$ é uma função incógnita contínua $V : \Omega \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ e representa o potencial da membrana neuronal no ponto x e no instante t .

$S(x, t)$ representa uma fonte de excitação externa (estímulo).

f representa a taxa de disparo dos neurónios, ou seja a capacidade do neurónio emitir sinal em função do potencial da membrana.

$K(|x-y|)$ é a função de conectividade e representa a força da interação entre neurónios nas posições x e y . Assume-se que K depende apenas da distância entre x e y .

α é uma constante positiva que representa a taxa de decrescimento do potencial, resultante da dissipação.

Ω representa o espaço de ação dos neurónios, onde ocorre a interação entre eles através das sinapses.

A ECN pode ser formulada no caso de Ω ser um domínio em \mathbb{R}^n , mas nesta tese restringimo-nos ao caso de $n = 1$.

1.4.1 ECN com retardamento

O retardamento surge naturalmente quando pretendemos modelar a realidade dos sistemas neurológicos. Na equação (1.1), estamos a considerar uma velocidade de propagação das interações entre os neurónios infinita porque não temos em consideração o tempo gasto pelo estímulo para viajar de um neurónio para outro. Contudo, apesar das interações acontecerem a uma velocidade bastante alta, que pode atingir 431 quilómetros por hora, existe um atraso na ordem dos milissegundos. Com o objetivo de tornar os modelos mais realistas, temos de considerar que a velocidade de propagação é finita, o que implica que o sinal necessita de um certo tempo r (retardamento) para percorrer a distância entre dois neurónios. Neste trabalho, o retardamento r é definido por $r = \frac{|x-y|}{v}$ em que x e y são as posições de dois neurónios e v a velocidade de propagação. O problema de valor inicial dependente do retardamento r tem a seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} V(x, t) = S(x, t) - \alpha V(x, t) + \int_{\Omega} K|x-y|f(V(y, t - r(x, y)))dy$$

$$t \in [0, T], x \in \Omega \subset \mathbb{R} \tag{1.2}$$

$$V(x, t) = V_0(x, t),$$

com $t \in [-r_{max}, 0]$ com $r_{max} = \frac{|\Omega|}{v}$ em que $|\Omega|$ é o comprimento de Ω .

O problema da existência, unicidade e estabilidade das soluções de (1.1) e (1.2) é resolvida em [12], por Faye e Faugeras.

1.5 Objetivos da Tese

O objetivo deste trabalho é estudar e comparar métodos numéricos para o problema do campo neuronal (1.1). Com este propósito, começamos por apresentar os problemas determinísticos sem retardamento (1.1) e com retardamento (1.2). Apresentamos depois três métodos numéricos e estudamos a sua convergência no tempo e no espaço. Posteriormente, experimentamos os métodos em exemplos de forma a poder compará-los quanto à sua performance. Por último, utilizamos os métodos numa área da Neurociência chamada memória de trabalho, permitindo concluir acerca das condições necessárias para que aconteça o efeito de memória no cérebro tal como o conhecemos no quotidiano da vida real.

Capítulo 2

Métodos numéricos para tratamento da equação do campo neuronal

Neste capítulo, introduzimos os métodos numéricos que iremos comparar e estudamos-los quanto à sua convergência. Apresentamos depois quatro exemplos, os primeiros dois com uma solução apenas dependente do tempo, o terceiro com um parâmetro que define a solução tornar-se dependente do espaço também e por último, um exemplo em que a solução depende do espaço e do tempo, introduzindo-se o conceito de "bump", importante no capítulo seguinte.

2.1 Métodos numéricos e discretização

Para tratar numericamente o problema (1.1), no intervalo de tempo $[0, T]$, definimos um passo τ e uma rede de pontos $t_j = j\tau, j = 0, 1, \dots, n_t$.

No intervalo $\Omega = [-L, L]$ no espaço, definimos um passo h e uma rede de pontos $x_i = -L + ih, i = 0, 1, \dots, N$.

Vamos usar três métodos, um explícito, um semi-implícito e por fim, um totalmente implícito. A derivada parcial em relação ao tempo do potencial $V(x, t)$ é tratada usando uma diferença progressiva, no caso do método de Euler explícito, e regressiva, no caso do semi-implícito e do implícito. Reescrevemos o problema (1.1) da seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} V(x, t) = S(x, t) - \alpha V(x, t) + \kappa(V(x, t))$$

$$t \in [0, T], x \in \Omega \subset \mathbb{R} \quad (2.1)$$

$$V(x, 0) = V_0(x),$$

em que κ denota o operador integral não linear definido por

$$\kappa(V(x, t)) = \int_{\Omega} K|x - y|f(V(y, t - r(x, y)))dy \quad (2.2)$$

Começamos por descrever os métodos numéricos no caso de $r(x, y) = 0$.

2.1.1 Método Semi-Implícito

Apresentamos aqui um método semi-implícito no tempo que calcula o estímulo externo $S(x, t)$ e a solução $V(x, t)$ no ponto $(i, j + 1)$ da rede.

O método de Euler semi-implícito no tempo apresenta-se da seguinte forma:

$$\frac{V_{i,j+1} - V_{i,j}}{\tau} = S_{i,j} - \alpha V_{i,j+1} + \kappa_{i,j}, \quad i = 0, \dots, N, \quad j = 0, \dots, n_t - 1 \quad (2.3)$$

ficando

$$V_{i,j+1} = \frac{\tau(S_{i,j} + \kappa_{i,j}) + V_{i,j}}{1 + \alpha\tau} \quad (2.4)$$

em que

- $V_{i,j}$ representa a aproximação de $V(x_i, t_j)$
- $S_{i,j}$ representa $S(x_i, t_j)$
- $\kappa_{i,j}$ representa a aproximação do integral (2.2), com $t = t_j$ e $x = x_i$

Vamos agora provar a convergência do método (2.3) para a solução do problema (1.1) no domínio $\Omega = [-L, L]$. Seguiremos uma abordagem semelhante à do artigo [13].

O esquema numérico pode ser escrito na seguinte forma simplificada e sujeito às seguintes condições iniciais:

$$\partial_t V = -\alpha V + \kappa(V) + S, \quad (x, t) \in \Omega \times [0, T] \quad (2.5)$$

$$V(x, 0) = V_0, \quad x \in \Omega$$

Colocando (2.5) na rede de pontos no espaço, obtemos:

$$\partial_t V(x_i, t) = -\alpha V(x_i, t) + \kappa(V)(x_i, t) + S(x_i, t), \quad i \in \mathbb{N}_N \quad (2.6)$$

com $\mathbb{N}_k = \{0, 1, \dots, k\}$.

Na apresentação do esquema numérico, usamos a seguinte representação em forma de vetor para o potencial da membrana ou solução:

$$V(t) = \{V_i(t) : i \in \mathbb{N}_N\} \in \mathbb{R}^{N+1}, \quad V_i(t) \approx V(x_i, t) \quad (2.7)$$

Para discretizar o operador integral não linear κ usamos a regra dos trapézios Q da seguinte forma:

$$Q(\kappa(V))(x_i, t) = h \left(\frac{g(-L) + g(L)}{2} + \sum_{k=1}^{N-1} g(x_k) \right) \quad (2.8)$$

onde

$$g(x_k) = K(|x_i - x_k|)f(V_k(t)), \quad i = 0, 1, \dots, N.$$

A discretização da equação (2.5) no espaço leva-nos ao seguinte sistema de equações diferenciais ordinárias

$$\dot{V}(t) = -\alpha V(t) + N(V(t)) + S(t) \quad (2.9)$$

em que N é o vetor com componentes $N_i(V) = Q(\kappa(V))(x_i)$ e S o vetor com componentes $S(x_i, t)$.

Quando aplicamos o método de Euler semi-implícito ao sistema (2.9) obtém-se

$$V^0 = V_0 \quad (2.10)$$

$$AV^n = V^{n-1} + \tau N(V^{n-1}) + \tau S^{n-1}$$

em que $V^n \approx V(t_n)$, $S^n = S(t_n)$ e A é a matriz:

$$A = (1 + \alpha\tau)I_{N+1} \quad (2.11)$$

Com o objetivo de estudar as propriedades do esquema, assumimos que existem constantes $C_K, C_f, C_S > 0$ tais que :

$$|K| < C_K \text{ em } \Omega \times \Omega, \quad |f| < C_f \text{ em } \mathbb{R}, \quad |S| < C_S \text{ em } \Omega \quad (2.12)$$

Vamos demonstrar que existe uma sequência limitada única $(V^n)_{n \in \mathbb{N}}$ que satisfaz o esquema (2.10)-(2.11). Adicionalmente, mostraremos que se verifica a inequação

$$\|V^n\|_\infty \leq \|V^0\|_\infty + |\Omega| \frac{C_K C_f + C_S}{\alpha} \quad (2.13)$$

Para chegar à conclusão acima, analisemos a matriz A em (2.11).

Desta forma, A tem inversa e portanto, para qualquer $n \in \mathbb{N}$ fixo, a matriz solução V^n em (2.37) é única.

A matriz A é diagonal e logo a sua inversa é

$$A^{-1} = \frac{1}{1 + \alpha\tau} I_{N+1} \quad (2.14)$$

Logo

$$\|A^{-1}\|_{\infty} = \frac{1}{1 + \alpha\tau} \quad (2.15)$$

Precisamos também limitar os vetores $N(V^{n-1}), S^n$ em (2.10).

$$\|N(V^{n-1})\|_{\infty} = \max |N_i V^{n-1}| \leq C_k C_f |\Omega| \quad (2.16)$$

e da mesma forma $\|S^{n-1}\|_{\infty} \leq C_S$ e combinando estes últimos dois com a inequação para $\|A^{-1}\|_{\infty}$ obtemos:

$$\begin{aligned} \|V^n\|_{\infty} &\leq \|A^{-1}\|_{\infty} (\|V^{n-1}\|_{\infty} + \tau \|N(V^{n-1})\|_{\infty} + \tau \|S^{n-1}\|_{\infty}) \\ &\leq \frac{1}{1 + \alpha\tau} (\|V^{n-1}\|_{\infty} + \tau C_k C_f |\Omega| + \tau C_S) \end{aligned} \quad (2.17)$$

Definindo

$$r_1 = \frac{1}{1 + \alpha\tau} < 1, \quad q_1 = \frac{\tau}{1 + \alpha\tau} (\|\Omega\| C_k C_f + C_S) \quad (2.18)$$

e usando indução e as propriedades de séries geométricas obtemos

$$\|V^n\|_{\infty} \leq r_1^n \|V^0\|_{\infty} + q \sum_{j=0}^{n-1} r_1^j \leq \|V^0\|_{\infty} + \frac{q_1}{1 - r_1} \quad (2.19)$$

chegando a (2.13).

Estudamos agora a ordem de convergência do método semi-implícito. Para tal, assumimos a existência de uma solução suficientemente regular de (2.5).

Usando (2.12), $K \in C^2(\Omega \times \Omega)$, $f \in C_b^2(\Omega)$ em que $C_b^2(\Omega)$ é o espaço de funções contínuas de Ω para \mathbb{R} com derivadas parciais contínuas e limitadas até à ordem 2. Assumindo também que (2.5) admite uma solução forte V_* cujas derivadas parciais $\partial_{tt} V_*$ e $\partial_{xx} V_*$ existem e são limitadas em $\bar{\Omega} \times [0, T]$. Definimos por V_*^n o vetor $(V_*^n)_i = V(x_i, t_n)$ para $(i, n) \in \mathbb{N}_N \times \mathbb{N}_n$. Consideremos $(V^n)_{n \in \mathbb{N}}$ a solução do esquema (2.10)-(2.11) e definimos

$$\zeta = \|K\|_{\infty} \|f'\|_{\infty} \quad (2.20)$$

Vamos mostrar que existem constantes $C_\tau, C_h > 0$ tais que

$$\|V^n - V_*^n\|_\infty \leq \frac{1}{\alpha - \zeta} (C_\tau \tau + C_h h^2) \quad \text{se } \zeta < \alpha \quad (2.21)$$

$$\|V^n - V_*^n\|_\infty \leq \frac{T}{1 + \alpha \tau} (C_\tau \tau + C_h h^2) \quad \text{se } \zeta = \alpha \quad (2.22)$$

$$\|V^n - V_*^n\|_\infty \leq \frac{C_\tau \tau + C_h h^2}{\zeta - \alpha} \exp\left(\frac{(\zeta - \alpha)T}{1 + \alpha \tau}\right) \quad \text{se } \zeta > \alpha \quad (2.23)$$

Vamos provar a afirmação acima.

As suposições sobre a regularidade de V_* e os resultados sobre as aproximações por diferenças finitas e a regra dos trapézios permitem garantir a existência de constantes $C_{tt}, C_{xx} > 0$ tais que para todo $n \in \mathbb{N}_n$

$$AV_*^n = V_*^{n-1} + \tau(N(V_*^{n-1}) + S^{n-1} + C_{tt}\tau + C_{xx}h^2) \quad (2.24)$$

em que os erros para a diferença finita progressiva no tempo do método explícito e para a regra dos trapézios aparecem por ordem na equação acima.

Subtraindo (2.24) de

$$AV^n = V^{n-1} + \tau(N(V^{n-1}) + S^{n-1}) \quad (2.25)$$

obtemos a seguinte estimativa para o erro

$$\|V - V_*^n\|_\infty \leq \|A^{-1}\|_\infty (\|V - V_*^{n-1}\|_\infty + \tau \|N(V^{n-1}) - N(V_*^{n-1})\|_\infty + \tau \omega) \quad (2.26)$$

em que $\omega = C_\tau \tau + C_h h^2$ com $C_\tau = C_{tt}$ e $C_h = C_{xx}$. Como a primeira derivada f' de f é limitada, temos a seguinte estimativa para o termo não-linear:

$$\begin{aligned} \|N(V^n) - N(V_*^n)\|_\infty &\leq \|K\|_\infty \|f'\|_\infty \max_{i \in \mathbb{N}_N} |V_i^n - (V_*^n)_i| \\ &\leq \|K\|_\infty \|f'\|_\infty \|V^n - V_*^n\|_\infty \\ &= \zeta \|V^n - V_*^n\|_\infty \end{aligned} \quad (2.27)$$

em que ζ é definido por (2.20).

Definindo

$$r_2 = \frac{1 + \zeta\tau}{1 + \alpha\tau}, \quad q_2 = \frac{\tau\omega}{1 + \alpha\tau} \quad (2.28)$$

que em conjunto com (2.15) e (2.26) dão uma estimativa recursiva para a norma- ∞ do erro $E^n = \|V^n - V_*^n\|_\infty$,

$$\begin{aligned} E^n &\leq \|A^{-1}\|_\infty (\|V - V_*^{n-1}\|_\infty + \tau \|N(V^{n-1}) - N(V_*^{n-1})\|_\infty + \tau\omega) \\ &\leq \frac{1}{1 + \alpha\tau} (E^{n-1} + \tau\zeta E^{n-1} + \tau\omega) \\ &= \frac{1 + \zeta\tau}{1 + \alpha\tau} E^{n-1} + \frac{\tau\omega}{1 + \alpha\tau} \end{aligned} \quad (2.29)$$

Ficando

$$E^0 = 0, \quad E^n \leq \frac{1 + \zeta\tau}{1 + \alpha\tau} E^{n-1} + \frac{\tau\omega}{1 + \alpha\tau} = r_2 E^{n-1} + q_2, \quad n \in \mathbb{N}_{n_t} \quad (2.30)$$

Assim, temos uma progressão geométrica de razão r_2 a começar em q_2 quando $r_2 \neq 1$ e uma progressão aritmética de razão q_2 quando $r_2 = 1$.

$$E^n \leq q_2 \frac{r_2^n - 1}{r_2 - 1}, \quad r_2 \neq 1, \quad E^n \leq nq_2 \quad r_2 = 1, \quad n \in \mathbb{N}_{n_t} \quad (2.31)$$

Se $\zeta < \alpha$, então $r_2 < 1$ e obtemos (2.21)

$$E^n \leq \frac{q_2}{1 - r_2} = \frac{\omega}{\alpha - \zeta} = \frac{1}{\alpha - \zeta} (C_\tau\tau + C_h h^2), \quad n \in \mathbb{N}_{n_t} \quad (2.32)$$

Se $\zeta = \alpha$, então $r_2 = 1$ e obtemos (2.22)

$$E^n \leq nq_2 \leq \frac{n_t\tau\omega}{1 + \alpha\tau} = \frac{T}{1 + \alpha\tau} (C_\tau\tau + C_h h^2), \quad n \in \mathbb{N}_{n_t} \quad (2.33)$$

Se $\zeta > \alpha$, então $r_2 > 1$ e podemos majorar o n -ésimo termo da sequência com uma exponencial, usando $(1 + x/n)^n \leq e^x$ para todo $x \in \mathbb{R}$ e fica

$$r_2^n = \left(1 + \frac{(\zeta - \alpha)n\tau}{n(1 + \alpha\tau)}\right)^n \leq \exp \frac{(\zeta - \alpha)n\tau}{1 + \alpha\tau} \leq \exp \frac{(\zeta - \alpha)T}{1 + \alpha\tau} \quad (2.34)$$

que combinada com (2.31) dá (2.23)

$$E^n \leq \frac{\omega}{\zeta - \alpha} \exp \frac{(\zeta - \alpha)T}{1 + \alpha\tau} = \frac{C_\tau\tau + C_h h^2}{\zeta - \alpha} \exp \frac{(\zeta - \alpha)T}{1 + \alpha\tau} \quad (2.35)$$

As equações (2.21)-(2.23) mostram que o esquema semi-implícito tem ordem de convergência um no tempo e ordem de convergência dois no espaço.

2.1.2 Método Explícito

O método de Euler explícito no tempo apresenta-se da seguinte forma:

$$\frac{V_{i,j+1} - V_{i,j}}{\tau} = S_{i,j} - \alpha V_{i,j} + \kappa_{i,j}, \quad i = 0, \dots, N, \quad j = 0, \dots, n_t - 1 \quad (2.36)$$

Para provar a convergência do método (2.36) usamos uma abordagem semelhante à do método da secção anterior.

Os passos são iguais aos usados para o método semi-implícito até ao sistema (2.10)-(2.11).

Primeiro vamos mostrar que, sob certas condições, para cada V_0 existe uma única sucessão limitada V_n que satisfaz a relação (2.36).

$$V^0 = V_0 \quad (2.37)$$

$$V^n = AV^{n-1} + \tau NV^{n-1} + \tau S^{n-1}$$

em que $V^n \approx V(t_n)$, $S^n = S(t_n)$ e A é a matriz:

$$A = (1 - \alpha\tau)I_{N+1} \quad (2.38)$$

Semelhante a (2.17), obtemos

$$\begin{aligned} \|V^n\|_\infty &\leq |A|_\infty (\|V^{n-1}\|_\infty + \tau \|N(V^{n-1})\|_\infty + \tau \|S^{n-1}\|_\infty) \\ &\leq (1 - \alpha\tau) \|V^{n-1}\|_\infty + \tau C_k C_f |\Omega| + \tau C_S \\ &= (1 - \alpha\tau) \|V^{n-1}\|_\infty + \tau (C_S + C_k C_f |\Omega|) \end{aligned} \quad (2.39)$$

A condição de estabilidade é

$$|1 - \alpha\tau| < 1 \quad (2.40)$$

De onde resulta que

$$1 - \alpha\tau > -1 \quad (2.41)$$

e assim o passo no tempo τ tem de verificar a seguinte condição

$$\tau < \frac{2}{\alpha} \quad (2.42)$$

Definindo

$$r_1 = 1 - \alpha\tau, \quad q_1 = \tau (C_S + C_k C_f |\Omega|) \quad (2.43)$$

e usando indução e as propriedades de séries geométricas obtemos

$$\|V^n\|_\infty \leq r_1^n \|V^0\|_\infty + q_1 \sum_{j=0}^{n-1} r_1^j \leq \|V^0\|_\infty + \frac{q_1}{1 - r_1} \quad (2.44)$$

Fica assim demonstrada a existência da sucessão V_n e que esta sucessão é limitada (na norma do máximo) desde que se verifique a condição (2.42). Vamos agora provar a convergência do método explícito, usando argumentos semelhantes aos do caso do método semi-implícito. Repetindo os passos que nos permitiram obter a desigualdade (2.29), neste caso obtém-se:

$$\|V - V_*^n\|_\infty \leq \|A\|_\infty \|V - V_*^{n-1}\|_\infty + \zeta \tau \|V - V_*^{n-1}\|_\infty + \tau \omega \quad (2.45)$$

com $\omega = C_\tau \tau + C_h h^2$ com $C_\tau = C_{tt}$ e $C_h = C_{xx}$.

Definindo $r_2 = 1 - \alpha \tau + \zeta \tau$ obtemos

$$\|E^n\| \leq r_2 \|E^{n-1}\| + \tau \omega \quad (2.46)$$

Para a sucessão (2.46) ser limitada, devemos ter $|r_2| < 1$. Para isso se verificar devemos ter $\alpha > \zeta$ e τ deve satisfazer

$$\tau < \frac{2}{\alpha - \zeta} \quad (2.47)$$

Temos então uma progressão geométrica de razão r_2 a começar em $\tau \omega$.

$$\|E^n\| \leq \tau \omega \frac{r_2^n - 1}{r_2 - 1} < \frac{\tau \omega}{1 - r_2} = \frac{\omega}{\alpha - \zeta}, \quad n \in \mathbb{N}_{n_t} \quad (2.48)$$

2.1.3 Método Implícito

Por último implementou-se um método implícito de forma a melhorar resultados.

O método consiste no seguinte

$$\frac{V_{i,j+1} - V_{i,j}}{\tau} = S_{i,j+1} - \alpha V_{i,j+1} + \kappa_{i,j+1} \quad (2.49)$$

em que a diferença em relação ao método anterior é o cálculo do integral no tempo $j + 1$, tal como no caso dos outros parâmetros.

Esta diferença faz com que em cada passo no tempo tenhamos que resolver um sistema de equações

não lineares.

Para resolver este sistema, usamos o método do ponto fixo. Vamos mostrar que, sob certas condições, em cada passo no tempo, o sistema de equações (2.49) tem solução e que esta solução se pode aproximar pelo método do ponto fixo. Usaremos um raciocínio semelhante ao que foi usado em [14].

Usemos, daqui em diante, esta definição,

$$V_j(x) = V(x, t_j) \quad \forall x \in \Omega, \quad i = 0, \dots, n.$$

Representemos por $U_j(x)$ a solução aproximada da equação (2.1) no instante t_j . Para aproximar a derivada de V em ordem ao tempo usemos a diferença:

$$\frac{\partial}{\partial t} U(x, t_j) \approx \frac{U_{j+1}(x) - U_j(x)}{\tau} \quad (2.50)$$

Substituindo a equação (2.50) na equação (2.1) obtém-se

$$\frac{U_{j+1}(x) - U_j(x)}{\tau} = S_{j+1} - \alpha U_{j+1}(x) + \kappa_{j+1}(U_{j+1}(x)) \quad j = 0, \dots, n-1 \quad (2.51)$$

A equação (2.51) pode ser reescrita na forma

$$U_{j+1}(x) - \frac{1}{\alpha + \frac{1}{\tau}} \kappa(U_{j+1}(x)) = f_{j+1}(x), \quad x \in \Omega \quad (2.52)$$

em que

$$f_{j+1}(x) = \left(\alpha + \frac{1}{\tau} \right)^{-1} \left(S_{j+1} + \frac{U_j(x)}{\tau} \right), \quad x \in \Omega \quad (2.53)$$

A equação (2.52)-(2.53) é uma equação integral de Fredholm não linear de segundo tipo. Para aplicar o teorema do ponto fixo de Banach, definimos o seguinte processo iterativo:

$$U_{j+1}^{(\gamma)} = \lambda \kappa(U_{j+1}^{(\gamma-1)}) + f_{j+1}(x) = G(U_{j+1}^{\gamma-1}), \quad x \in \Omega, \quad \gamma = 1, 2, \dots \quad (2.54)$$

em que

$$\lambda = \frac{1}{\alpha + \frac{1}{\tau}} = \frac{\tau}{1 + \alpha\tau} \quad (2.55)$$

Se a função G for uma contração num conjunto fechado $X \subset C([-L, L])$, tal que $G(X) \subset X$, então pelo teorema do ponto fixo de Banach, a equação (2.52) tem uma solução única em X e a sequência $U_{j+1}^{(\gamma)}$ definida em (2.54), converge para a solução no sentido da norma do máximo. A convergência verifica-se para qualquer valor inicial $U_{j+1}^{(0)} \in X$. No nosso caso, a solução é por construção, a iterada U_{j+1} , que está próxima de U_j . Desta forma, faz sentido assumir que X é um conjunto fechado que contém U_j e escolher $U_{j+1}^{(0)} = U_j$. Para provar que G é uma contração em X , precisamos mostrar que existe uma certa constante L , $L < 1$, tal que tenhamos

$$\|G(V) - G(U)\|_\infty \leq L\|V - U\|_\infty, \quad \forall U, V \in X \quad (2.56)$$

onde a norma considerada é a norma do máximo em $C([-L, L])$.

Da fórmula (2.54)

$$\|G(V) - G(U)\|_\infty \leq \lambda \int_\Omega |K(x-y)| |f(V) - f(U)| dy \quad (2.57)$$

Usando o teorema do valor intermédio para integrais, temos

$$\|G(V) - G(U)\|_\infty \leq \lambda|\Omega| \cdot \|K\|_\infty \max_{U, V \in X} |f(V) - f(U)| \quad (2.58)$$

em que $|\Omega|$ denota o comprimento de Ω . Assumindo que a função para a taxa de disparo f tem uma derivada contínua limitada em \mathbb{R} , podemos então escrever:

$$\|G(V) - G(U)\|_\infty \leq \lambda|\Omega| \cdot \|K\|_\infty f_{max} \|V - U\|_\infty \quad (2.59)$$

em que

$$f_{max} = \max_{x \in \mathbb{R}} |f'(x)|. \quad (2.60)$$

Concluindo assim que (2.56) se verifica com

$$L = \lambda|\Omega|. \|K\|_{\infty} f_{max} \quad (2.61)$$

Lembrando que

$$\lambda = \frac{\tau}{1 + \alpha\tau} < \tau \quad (2.62)$$

para satisfazer $L < 1$ é suficiente garantir que

$$\tau|\Omega|. \|K\|_{\infty} f_{max} < 1 \quad (2.63)$$

ou de forma equivalente

$$\tau < \frac{1}{|\Omega|. \|K\|_{\infty} f_{max}} \quad (2.64)$$

De (2.64) concluímos que G será uma contração num certo conjunto $X \subset [-L, L]$ se tivermos τ suficientemente pequeno e assim mostramos que o método do ponto fixo converge. Assim, o processo iterativo em (2.54) com $U_{j+1}^{(0)} = U_j$ converge para a solução de (2.52).

O sistema (2.49) resulta de discretizar a equação (2.52) no espaço, usando a regra dos trapézios. Por isso, ainda é necessário mostrar que, ao fazer essa discretização, o teorema do ponto fixo é de novo aplicável. Para esse fim utilizamos um raciocínio semelhante ao que é usado na secção 2.1.2. do artigo [14].

Recordamos aqui o que tinha sido enunciado na introdução deste capítulo. Assumimos que $\Omega = [-L, L]$ no espaço, definimos um passo h e uma rede de pontos uniforme $x_i = -L + ih$, $i = 0, 1, \dots, N$. Denotemos por Ω_h o conjunto formado pelos $N + 1$ pontos da rede. Quando introduzimos a regra dos trapézios para cálculo do integral $\kappa(U)$, introduzimos uma aproximação finita para o operador integral κ . Denotemos U^h o vector com $N + 1$ entradas tal que:

$$(U^h)_i = U(x_i), \quad i = 0, 1, N$$

Assim, a aproximação finita de κ pode ser dada por:

$$(\kappa^h(U^h))_m = h \left(\frac{g_1(x_0) + g_1(x_N)}{2} + \sum_{k=1}^{N-1} g_1(x_k) \right) \quad (2.65)$$

com

$$g_1(x_k) = K(|x_m - x_k|)f((U^h)_k) \quad m = 0, 1, \dots, N \quad (2.66)$$

Substituindo κ por κ^h na equação (2.52), ficamos com:

$$(U^h)_i - \frac{1}{\alpha + \frac{1}{\tau}}(\kappa^h(U^h))_i = (f^h)_i, \quad i = 0, 1, \dots, N \quad (2.67)$$

em que $\kappa^h(U^h)$ é definido por (2.65) e

$$(f^h)_i = f(x_i), \quad i = 0, 1, \dots, N \quad (2.68)$$

com f definido por (2.53).

Note-se que o sistema (2.67) é equivalente ao sistema (2.49), que define o método de Euler implícito para a equação considerada.

Para calcular $(f^h)_i$ no instante $j + 1$ temos de calcular U_j nesse mesmo ponto de Ω_h . Concluimos assim que em cada passo no tempo do nosso método numérico, temos de resolver (2.67), que é um sistema com $N + 1$ equações não lineares.

Introduzindo o processo iterativo

$$U^{h,(\gamma)} = \lambda\kappa(U^{h,(\gamma-1)}) + f^h(x) = G^h(U^{h,(\gamma-1)}), \quad \gamma = 1, 2, \dots \quad (2.69)$$

Como no caso da equação integral de Fredholm, a convergência do processo iterativo (2.69) depende da contratividade de G^h .

Usando os mesmos argumentos estabelecidos acima para a discretização no tempo, por analogia com (2.59), obtemos

$$\begin{aligned}
\|G^h(V) - G^h(U)\|_\infty &\leq \lambda K_{max} f_{max} \|V - U\|_\infty \left(\frac{h}{2} + (N-1)h + \frac{h}{2}\right) \\
&\leq \lambda K_{max} f_{max} \|V - U\|_\infty Nh \\
&\leq \lambda K_{max} f_{max} \|V - U\|_\infty |\Omega|
\end{aligned} \tag{2.70}$$

para $U, V \in X^h \subset \mathbb{R}^{N+1}$ em que:

$$K_{max} = \max_{x_m, y_i \in \Omega_h} |K(|x_m - y_i|)| \tag{2.71}$$

Concluimos assim que a função G^h é de Lipschitz em X^h com constante

$$L_1 = \lambda K_{max} f_{max} |\Omega| \tag{2.72}$$

em que λ é definido por (2.55).

A igualdade (2.72) é idêntica a (2.61), com a diferença que a norma $\|K\|$ é substituída por K_{max} . Por conseguinte, repetindo o raciocínio que se exprime através das fórmulas (2.62) e (2.63), chegamos à seguinte fórmula, análoga a (2.64):

$$\tau < \frac{1}{K_{max} f_{max} |\Omega|} \tag{2.73}$$

Desta forma, analogamente ao Teorema 2.3 de [2], concluimos que, se τ satisfizer a inequação (2.73) acima, então a equação não linear (2.67) tem uma única solução $U^h \in X^h$, em que $X^h \subset \mathbb{R}^{N+1}$ é um certo conjunto fechado que contém U_j^h . Além disso, o processo iterativo definido por (2.69) com $U^{h,(0)} = U_j^h$ converge para esta solução. O problema que se apresenta agora é o da convergência de U^h para U_j quando $h \rightarrow 0$. Para abordar esta questão, escrevemos a equação (2.52) em cada ponto da rede Ω_h .

$$U_{j+1}(x_i) - \frac{1}{\alpha + \frac{1}{\tau}} \kappa(U_{j+1}(x_i)) = f_{j+1}(x_i), \quad x \in \Omega_h \tag{2.74}$$

Subtraindo a esta equação a equação (2.67), obtemos:

$$U_{j+1}(x_i) - U_i^h = \lambda(\kappa(U_{j+1}(x_i)) - \kappa^h(U_i^h)), \quad i = 0, 1, \dots, N \quad (2.75)$$

Notemos que

$$\kappa(U_{j+1}(x_i)) - \kappa^h(U_i^h) = \left(\kappa(U_{j+1}(x_i)) - \kappa^h(U_{j+1}(x_i)) \right) + \left(\kappa^h(U_{j+1}(x_i)) - \kappa^h(U_i^h) \right) \quad (2.76)$$

Substituindo (2.76) em (2.75) resulta

$$U_{j+1}(x_i) - U_i^h = \lambda \left(\kappa(U_{j+1}(x_i)) - \kappa^h(U_{j+1}(x_i)) + \kappa^h(U_{j+1}(x_i)) - \kappa^h(U_i^h) \right), \quad i = 0, 1, \dots, N \quad (2.77)$$

De (2.77) obtemos

$$\|U_{j+1} - U^h\|_\infty \leq \lambda \left(\|\kappa(U_{j+1}) - \kappa^h(U_{j+1})\|_\infty + \|\kappa^h(U_{j+1}) - \kappa^h(U^h)\|_\infty \right) \quad (2.78)$$

O segundo termo na última soma pode ser escrito em função de $\|U_{j+1} - U^h\|$ se notarmos que κ^h é uma função de Lipschitz, ou seja que existe uma constante L_1 tal que

$$\|\kappa^h(U_{j+1}) - \kappa^h(U^h)\|_\infty \leq L_1 \|U_{j+1} - U^h\|_\infty, \quad \forall U_{j+1}, U^h \in X^h \quad (2.79)$$

onde L_1 é dada por (2.72).

Assim, podemos reescrever (2.78) na forma:

$$\|U_{j+1} - U^h\|_\infty (1 - \lambda L_1) \leq \lambda (\|\kappa(U_{j+1}) - \kappa^h(U_{j+1})\|_\infty) \quad (2.80)$$

Relembrando de (2.62) que $\lambda < \tau$ e assim temos $\lambda L_1 < 1$ se τ satisfizer a condição (2.73).

Finalmente, para calcular $\|\kappa(U_{j+1}) - \kappa^h(U_{j+1})\|_\infty$, devemos recordar que κ^h resulta da aproximação do integral κ pela regra dos trapézios com passo h . Assim, se $U_{j+1, K}$ e S forem funções suficientemente suaves, então existe um certo M , não dependente de h tal que:

$$\|\kappa(U_{j+1}) - \kappa^h(U_{j+1})\|_\infty \leq Mh^2 \quad (2.81)$$

Por (2.80) e (2.81) concluímos que existe uma constante M_1

$$\|U_{j+1} - U^h\|_\infty \leq M_1 h^2 \quad (2.82)$$

Por último, a seguinte estimativa para o erro verifica-se

$$\|U_{j+1} - U^h\|_\infty = O(h^2), \quad h \rightarrow 0. \quad (2.83)$$

e temos assim ordem de convergência 2 em relação ao passo no espaço h no método implícito.

Apesar do custo computacional mais elevado do método de Euler implícito em relação ao explícito, o método implícito tem a principal vantagem de ser estável, se τ satisfizer a condição (2.73), o que permite usar passos no tempo maiores sem comprometer a estabilidade. Contrariamente, no método explícito, o passo no tempo tem que satisfazer condições mais restritivas, para garantir a estabilidade do método. Ambos os métodos apresentam ordem de convergência linear, em ordem a τ , e quadrática, em ordem a h .

Capítulo 3

Resultados numéricos

3.0.1 Resultados numéricos para exemplos sem retardamento

3.0.1.1 Exemplo 1

Introduzimos aqui um primeiro exemplo já utilizado em [14] em que a solução exata é dependente apenas do tempo,

$$K(|x - y|) = e^{-(x-y)^2}$$

$$S(x, t) = -\tanh\left(\sigma \exp\left(\frac{-t}{c}\right)\right)b(x, y) \quad (3.1)$$

$$f(x) = \tanh(x)$$

onde $b(x) = \int_{-1}^1 K(x, y)dy = \frac{\sqrt{\pi}}{2}(Erf(1+x) + Erf(1-x))$.

A condição inicial é dada por $V_0(x) = 1$

Neste exemplo, a solução exata é dada por:

$$V(x, t) = \exp(-t)$$

Mostramos a seguir, os erros das diferentes aproximações obtidas usando o método implícito para diferentes valores de τ usando um passo $h = 0.1$ e no ponto $x = 0$. O intervalo considerado no espaço é $[-1, 1]$ e no tempo é $[0, 2]$.

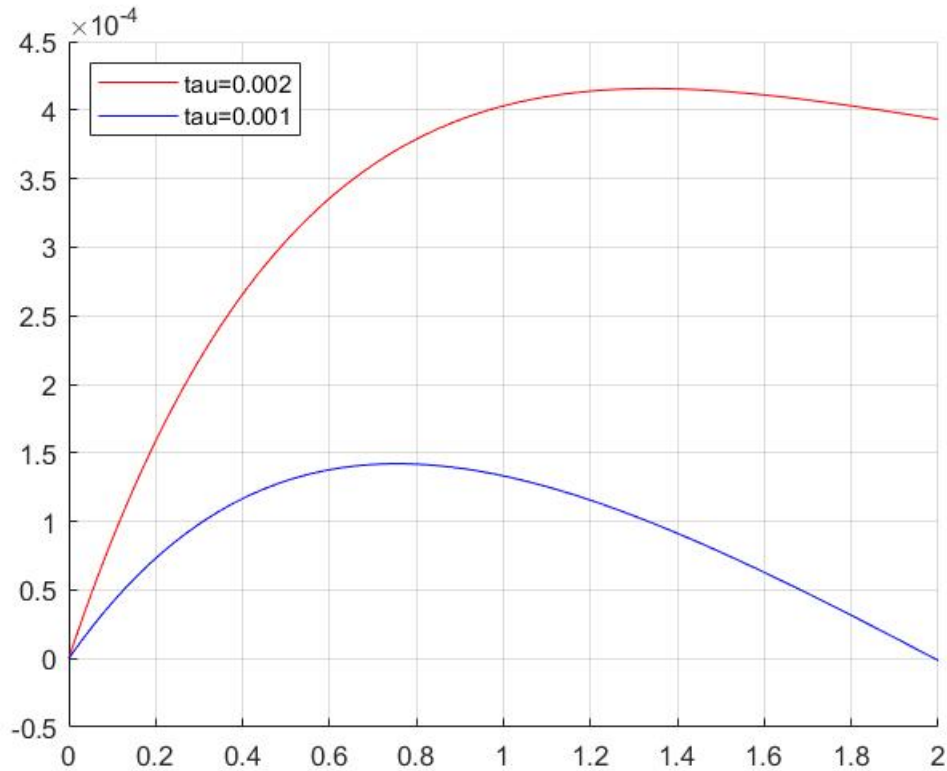


Figura 3.1: Comparação dos erros para diferentes valores de τ

No eixo das abscissas, temos a evolução do tempo e das ordenadas, o valor absoluto do erro calculado no ponto médio do intervalo $[-1, 1]$, $x_i = 0$.

Para testar a ordem de convergência z em relação ao passo no tempo τ , usamos a seguinte fórmula que calcula o erro e_τ com a norma do máximo:

$$e_{h,\tau} = \max_{i=0,1,\dots,N} |V(x_i, t_n) - V_{i,n}|$$

$$z_\tau = \frac{\log \frac{e_{h,\tau/2}}{e_{h,\tau}}}{\log \frac{1}{2}} \quad (3.2)$$

onde a norma do erro é calculada no último instante t_n .

Em relação ao passo no espaço h , usamos uma fórmula análoga

$$z_h = \frac{\log \frac{e_{h/2,\tau}}{e_{h,\tau}}}{\log \frac{1}{2}} \quad (3.3)$$

Apresentamos em baixo as tabelas com os erros e ordens de convergência em relação ao τ usando a fórmula (3.2) para os três métodos, explícito, semi-implícito e implícito para o intervalo $t = [0, 1]$ e um intervalo no espaço $[-1, 1]$ com um passo $h = 0.1$.

τ	$e_{h,\tau}$	z_τ
0.001	0.00033844	0.9868
0.002	0.00067071	0.99362
0.004	0.0013355	0.99733

Tabela 3.1: Erro e Ordem de Convergência para o método explícito

τ	$e_{h,\tau}$	z_τ
0.001	0.00062232	0.9999
0.002	0.0012446	0.99743
0.004	0.0024847	0.99371

Tabela 3.2: Erro e Ordem de Convergência para o método semi-implícito

τ	$e_{h,\tau}$	z_τ
0.001	0.00026862	1.0034
0.002	0.0005385	1.0012
0.004	0.0010779	0.99969

Tabela 3.3: Erro e Ordem de Convergência para o método implícito

Analisando os valores das tabelas, concluímos que o método implícito apresenta os melhores resultados, com o valor de erro menor. Na comparação entre explícito e semi-implícito, o explícito apresenta um erro menor. Em qualquer dos três métodos, a estimativa da ordem de convergência é próxima de 1, o que está de acordo com a teoria sobre o método e com os resultados do capítulo anterior.

Apresentamos agora os erros e ordens de convergência em relação ao passo no espaço, h , usando a fórmula (3.3) para os três métodos, explícito, semi-implícito e implícito para o intervalo $t = [0, 0.5]$ e um intervalo no espaço $[-1, 1]$ com um passo $\tau = 0.0001$.

h	$e_{h,\tau}$	z_h
0.05	2.7257e-06	1.7884
0.1	9.4155e-06	1.9433
0.2	3.621e-05	1.9912

Tabela 3.4: Erro e Ordem de Convergência para o método explícito

h	$e_{h,\tau}$	z_h
0.05	1.1172e-06	2.8048
0.1	7.8063e-06	2.148
0.2	3.4599e-05	2.0405

Tabela 3.5: Erro e Ordem de Convergência para o método semi-implícito

h	$e_{h,\tau}$	z_h
0.05	1.7323e-06	2.2813
0.1	8.4214e-06	2.064
0.2	3.5213e-05	2.0213

Tabela 3.6: Erro e Ordem de Convergência para o método implícito

As tabelas acima permitem afirmar que os três métodos apresentam erros semelhantes e que as estimativas de ordem de convergência são próximas de 2, o que está de acordo com a teoria apresentada na secção 2.2. De notar que neste exemplo, o semi-implícito apresentou valores com menor norma de erro seguido do implícito e por último o explícito. Contrastando com o exemplo que estudamos a seguir, em que o método semi-implícito revela ser o pior.

Nas próximas figuras, verificamos que a aplicação de um método implícito se revela melhor em comparação com o método semi-implícito no que diz respeito à estabilidade.

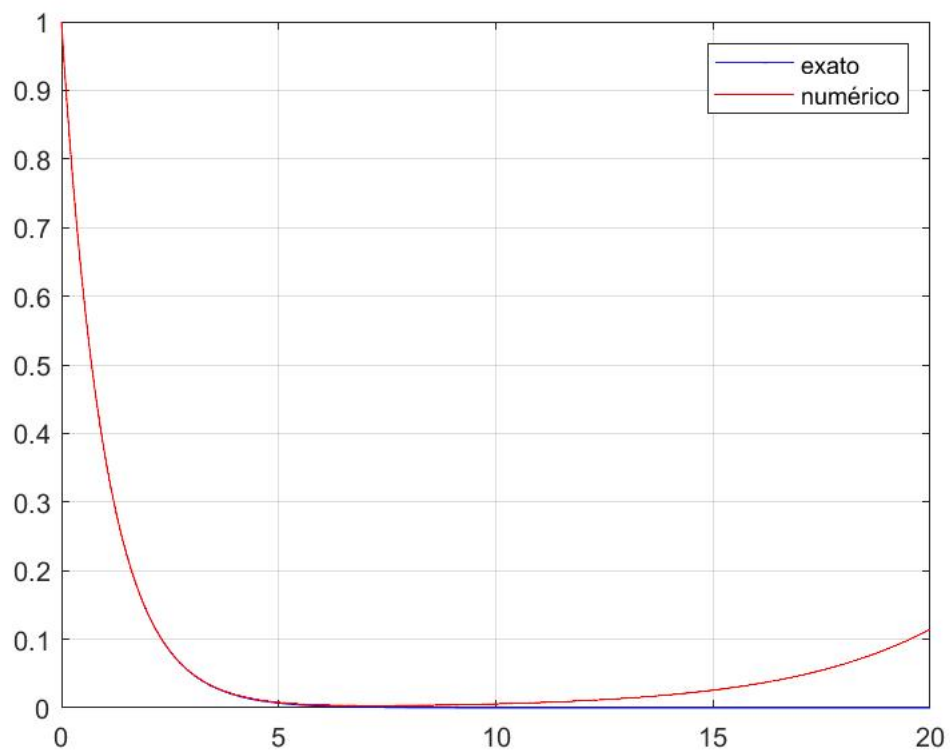


Figura 3.2: Comparação da solução exata com a solução aproximada pelo método semi-implícito usando $\tau = 0.001$ e $h = 0.1$ para o intervalo de tempo $[0, 20]$

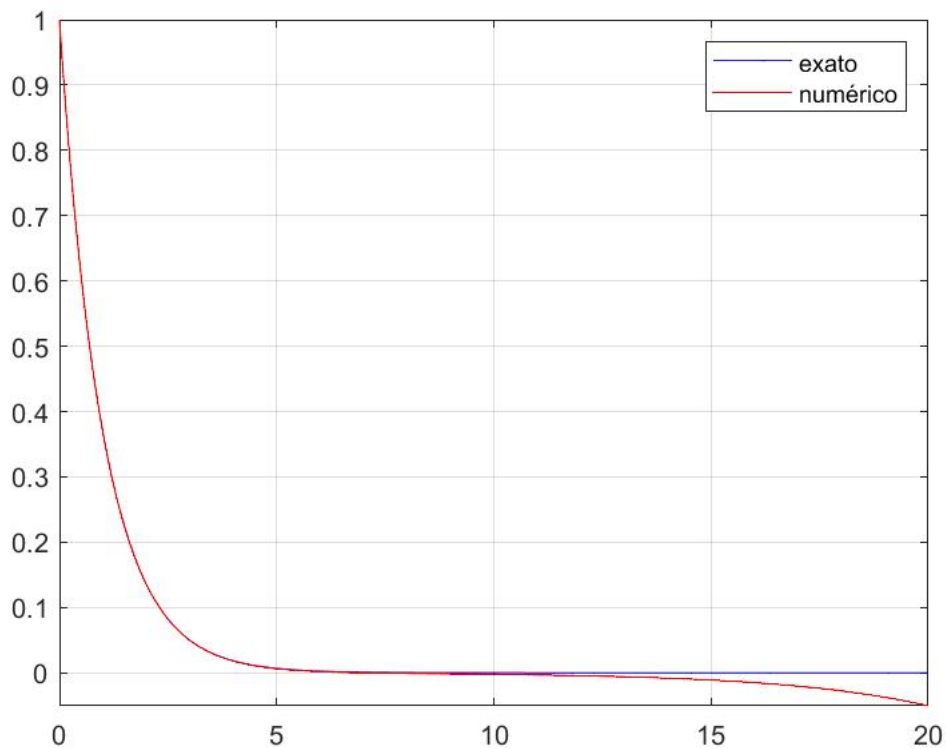


Figura 3.3: Comparação da solução exata com a solução aproximada pelo método implícito usando $\tau = 0.001$ e $h = 0.1$ para o intervalo de tempo $[0, 20]$

Comparando os dois gráficos, vemos que na Figura 3.2, a partir do instante 12, as curvas da solução exata e numérica começam a afastar-se, no método semi-implícito. Em contraste, na Figura 3.3, esta discrepância só surge a partir do instante 15, para o método implícito. Evidenciando o que as tabelas mostravam, o erro é menor no método implícito. Para o intervalo de tempo $[0,20]$, o método implícito revela-se mais próximo da solução exata por ser mais estável.

3.0.1.2 Exemplo 2

Consideramos agora um exemplo em que a solução é crescente com o tempo

$$K(|x - y|) = \exp(-(x - y)^2)$$

$$f(x) = \tanh(x)$$

$$S(x, t) = 1 + t - \tanh(t)b(x, y)$$

onde $b(x) = \int_{-1}^1 K(x, y)dy = \frac{\sqrt{\pi}}{2}(Erf(1+x) + Erf(1-x))$

A condição inicial é dada por $V_0(x) = 0$

A solução exata é dada por:

$$V(x, t) = t$$

Mostramos a seguir, a comparação entre o erro da solução exata e aproximada usando o método implícito para diferentes valores de h usando um passo $\tau = 0.02$ e num certo ponto $x = 0$. Usou-se um intervalo no espaço $[-1, 1]$ e no tempo de $[0, 1]$

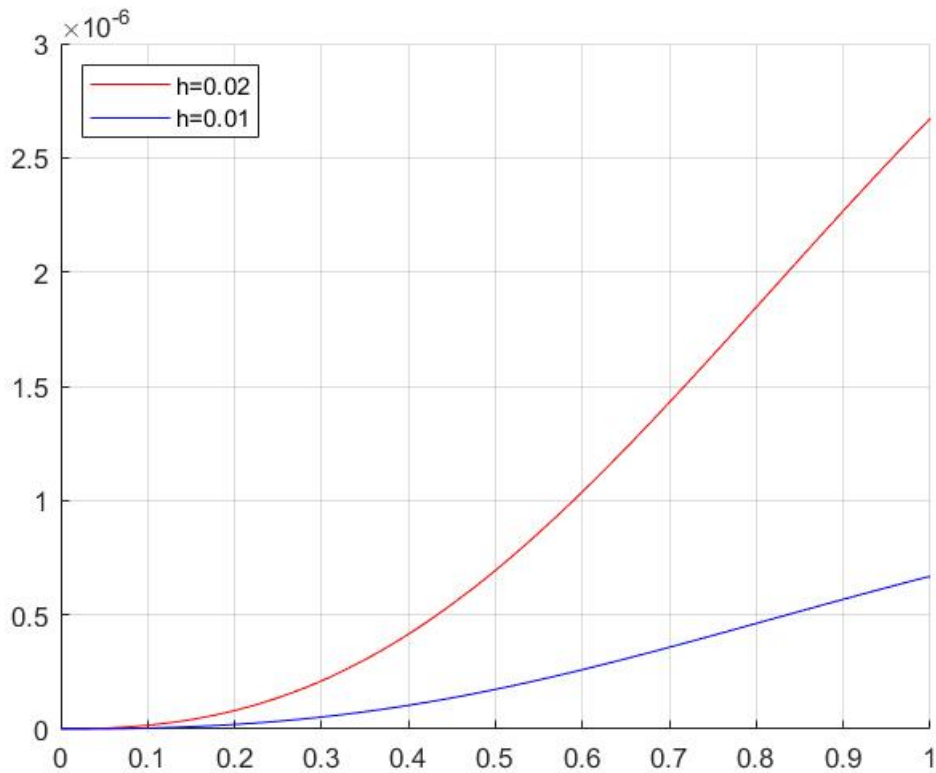


Figura 3.4: Erro da solução aproximada obtida pelo método implícito para diferentes valores de h usando um passo $\tau = 0.02$ e no ponto $x = 0$

No eixo das abscissas, temos a evolução do tempo e no das ordenadas, o valor absoluto do erro calculado no ponto $x = 0$.

Apresentamos agora os erros e ordens de convergência usando a fórmula (3.3) em relação ao passo no espaço, h , para os três métodos, explícito, semi-implícito e implícito para o intervalo $t = [0, 0.1]$ e um intervalo no espaço $[-1, 1]$ com um passo $\tau = 0.001$.

h	$e_{h,\tau}$	z_h
0.05	3.6013e-05	2.0002
0.1	0.00014407	2.0008
0.2	0.00057663	1.9474

Tabela 3.7: Erro e Ordem de Convergência para o método explícito

h	$e_{h,\tau}$	z_h
0.05	0.00015259	0.042411
0.1	0.00015715	0.15835
0.2	0.00017538	0.46333

Tabela 3.8: Erro e Ordem de Convergência para o método semi-implícito

h	$e_{h,\tau}$	z_h
0.05	1.5515e-06	2.0003
0.1	6.2075e-06	2.0013
0.2	2.4853e-05	1.9472

Tabela 3.9: Erro e Ordem de Convergência para o método implícito

Os valores das tabelas indicam um menor erro no método implícito, seguido do explícito e por último o semi-implícito. Neste exemplo, a norma do erro, no caso do método semi-implícito, é muito maior do que em qualquer dos outros métodos. Neste método, o erro diminui muito lentamente quando se diminui h . Isto resulta de que neste método (ao contrário do que acontece nos outros), o erro resultante da discretização no tempo tem um peso maior do que o resultante da discretização no espaço. Assim, quando se diminui h , o erro diminui, mas isso não se reflete na estimativa da ordem de convergência, que não reflete a real ordem de convergência do método. Neste exemplo e no anterior, notar que o método implícito apresentou sempre menores valores de erro comparativamente ao método explícito. O método semi-implícito, nem sempre, dependendo do exemplo.

Notemos que a solução deste exemplo é:

$$V(x, t) = t$$

uma função linear em ordem a t , por isso o erro do método não depende do passo no tempo. No exemplo 1, os valores de τ podem influenciar o erro no método. No caso deste exemplo, o erro não é influenciado por valores de τ exceto no caso do método semi-implícito.

3.0.1.3 Exemplo 3

Apresentamos aqui um exemplo em que a solução depende de um certo parâmetro α . Para certos valores de α , a solução nunca atinge o valor crítico da taxa de disparo. Nesse caso, a solução não

depende de x (depende apenas de t). Para outros valores de α , a solução atinge o valor crítico. Nesse caso, o integral do segundo membro deixa de ser nulo e a solução passa a depender também de x .

A equação integro-diferencial apresenta-se da seguinte forma

$$\frac{\partial}{\partial t} V(x, t) = -\alpha V(x, t) + \exp(-\alpha t) + \int_{\Omega} K(|x - y|) f(V(y, t)) dy \quad (3.4)$$

com $\alpha \in \mathbb{R}^+$,

$$K(x) = \exp(-x^2) \quad (3.5)$$

$$f(v) = \begin{cases} 0, & \text{se } v < 0.5 \\ 1, & \text{se } v \geq 0.5 \end{cases} \quad (3.6)$$

Suponhamos, numa primeira fase que $V(x, 0) = 0.2$, a solução fica:

$$V(x, t) = 0.2 \exp(-\alpha t) + t \exp(-\alpha t) \quad (3.7)$$

apenas dependente do tempo porque o termo integral é nulo e desta forma estamos a resolver apenas a equação diferencial:

$$\frac{\partial}{\partial t} V(x, t) = -\alpha V(x, t) + \exp(-\alpha t) \quad (3.8)$$

A equação geral da equação (3.8) é:

$$V(x, t) = c \exp(-\alpha t) + t \exp(-\alpha t) \quad (3.9)$$

em que c é uma constante e dada uma certa condição inicial $V(x, 0) = V_0$, teremos, neste caso, $c = V_0$.

Analisando o caso em que a condição inicial é $V(x, 0) = 0.2$, abaixo do valor 0.5 da taxa de disparo. Neste caso, numa primeira fase, o integral é nulo e a evolução da solução é dada pela equação (3.7)

até se atingir o valor crítico. Temos o máximo da função $V(x, t)$ em (3.7) quando se anula a expressão (3.8), ficando o máximo no instante:

$$t = \frac{1}{\alpha} - 0.2$$

Usando a expressão anterior em (3.7) ficamos com

$$V(x, \frac{1}{\alpha} - 0.2) = \frac{\exp(0.2\alpha - 1)}{\alpha} \quad (3.10)$$

e resolvendo a inequação

$$\frac{\exp(0.2\alpha - 1)}{\alpha} < 0.5 \quad (3.11)$$

representada na Fig. 3.5, descobrimos os valores de α para o qual a função (3.7) nunca atinge o valor crítico 0.5 e, por conseguinte, o termo integral da equação (3.4) mantém-se nulo.

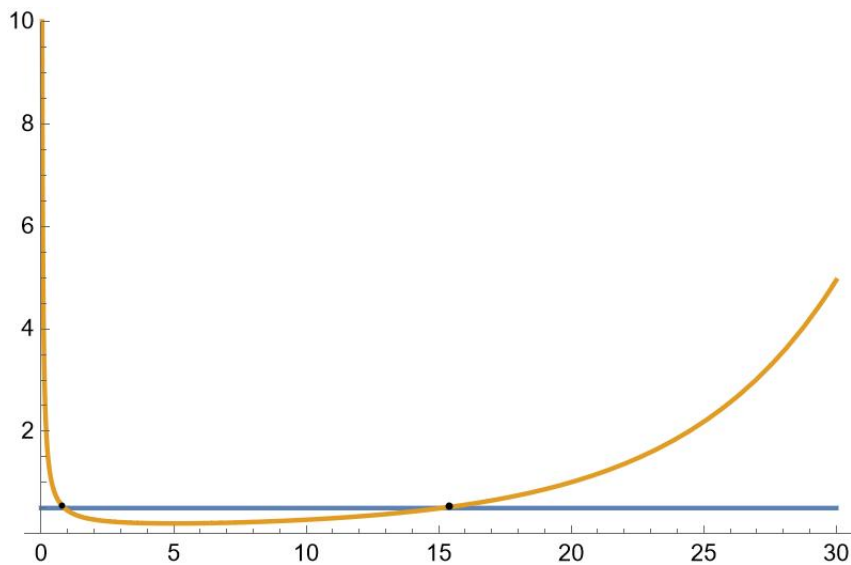


Figura 3.5: Interseção da reta $y = 0.5$ com a função que dá o valor do máximo de $V(x, t)$ em função de α

A solução da inequação (3.11) é $\alpha \in [0.876783, 15.1116]$, ou seja para estes valores a solução da equação (3.4) é dada pela expressão (3.7).

De forma a testar o nosso programa, experimentamos $\alpha = 1$ e $\alpha = 0.5$.

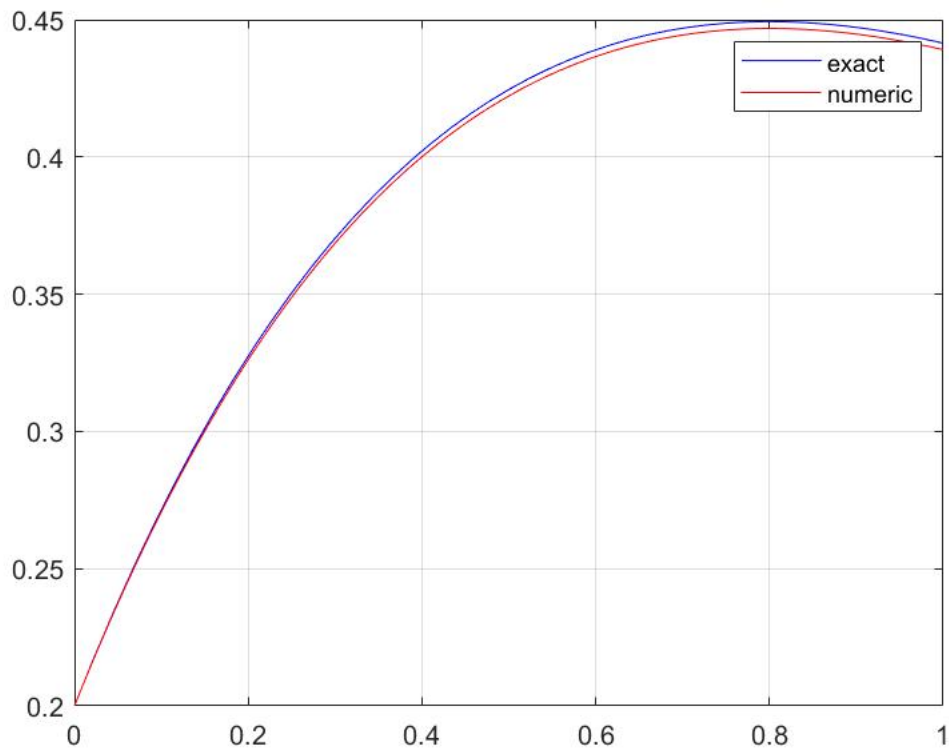


Figura 3.6: Solução exata e numérica para $\alpha = 1$, $\tau = 0.01$ e $h = 0.05$ e $V(x, 0) = 0.2$

Na Fig. 3.6 estão representadas a solução exata e a aproximada, no caso de $\alpha = 1$. Como se pode ver pelo gráfico, neste caso temos $V(x, t) < 0.5$, para $t \in [0, 1]$. Além disso, tal como a condição inicial, esta solução não depende de x , já que o termo integral no segundo membro continua a ser nulo, visto que com $\alpha = 1$, na expressão (3.10), obtemos o valor 0.449329, menor que o valor crítico 0.5.

Na Fig. 3.7 temos o caso $\alpha = 0.5$.

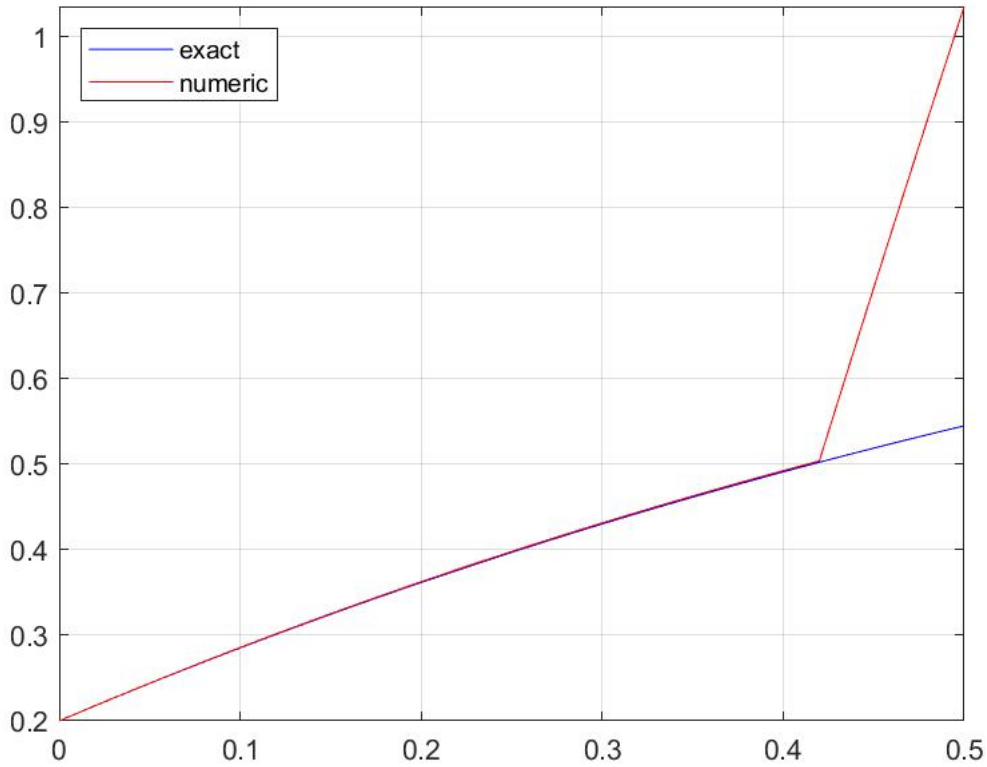


Figura 3.7: Solução exata e numérica para $\alpha = 0.5$ com $\tau = 0.01$ e $h = 0.05$ e $V(x, 0) = 0.2$

Neste caso, quando $t = 0.415$, a solução $V(x, t)$ atinge o valor 0.5 e o integral no segundo membro da equação (3.4) deixa de ser nulo, pelo que a solução desta equação deixa de coincidir com a da equação (3.8). Analiticamente, isto podia ser observado pelo uso da expressão (3.10), em que o máximo é 0.813139, acima de 0.5, e que portanto o integral deixa de ser nulo.

Quando $t < 0.415$ a solução numérica está muito próxima da solução exata, que neste caso é a solução da equação (3.8). Para $t > 0.415$, a solução numérica aproxima a equação (3.4), da qual não conhecemos a solução exacta.

Apresentamos em baixo as tabelas com os erros e ordens de convergência em relação ao τ para os três métodos, explícito, semi-implícito e implícito para o intervalo $t = [0, 0.4]$ e um intervalo no espaço $[-1, 1]$ com um passo $h = 0.1$.

Valores τ	Erro	Ordem de Convergência
0.01	0.001479	1.0051
0.02	0.0029685	1.0103
0.04	0.0059796	1.0209

Tabela 3.10: Erro e Ordem de Convergência para o método explícito

Valores τ	Erro	Ordem de Convergência
0.01	0.0014685	0.99492
0.02	0.0029267	0.9899
0.04	0.0058126	0.98002

Tabela 3.11: Erro e Ordem de Convergência para o método semi-implícito

Valores τ	Erro	Ordem de Convergência
0.01	0.0014685	0.99492
0.02	0.0029267	0.9899
0.04	0.0058126	0.98002

Tabela 3.12: Erro e Ordem de Convergência para o método implícito

Analisando as tabelas do método semi-implícito e implícito, observamos que são iguais, isto acontece porque no intervalo de tempo considerado, o integral em (3.4) é nulo, o que faz com que os métodos sejam iguais, neste caso.

3.0.1.4 Exemplo 4

Introduzimos aqui um novo exemplo em que $S(x, t)=0$, no qual se conhece uma forma fechada para a solução estacionária do problema a qual depende x .

A equação integro-diferencial apresenta-se da seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}V(x, t) = -\alpha V(x, t) + \int_{\Omega} K(x - y)f(V(y, t))dy \quad (3.12)$$

com $\alpha \in \mathbb{R}^+$,

$$f(v) = \begin{cases} 0, & \text{se } v < 0 \\ 1, & \text{se } v \geq 0 \end{cases} \quad (3.13)$$

A equação (3.12) tem uma solução estacionária não trivial $V(x)$. Quando $\frac{\partial}{\partial t}V(x, t) = 0$, a equação (3.12) reduz-se a uma equação integral independente do tempo:

$$V(x) = \frac{1}{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} K(x-y)f(V(y))dy \quad (3.14)$$

Seja

$$W(x) = \int_0^x K(y)dy \quad (3.15)$$

No artigo [11] prova-se que, se K satisfizer certas condições, então a função $V(x) = W(x) - W(x - a)$, onde a é um certo número positivo, é solução da equação (3.14).

Enumeramos a seguir essas condições:

Seja b o zero positivo da função K .

(H1) $K(x)$ é par, isto é $K(x) = K(-x)$

(H2) $K(x) > 0$ no intervalo $[-b, b]$, e $K(-b) = K(b) = 0$;

(H3) $K(x)$ é decrescente em $[0, b]$;

(H4) $K < 0$ em $[\infty, b] \cup [b, \infty[$;

(H5) K é contínua em \mathbb{R} , e o integral $\int_{-\infty}^{\infty} K(y)dy$ é finito

Pela proposição (H1) a função $W(x)$ é ímpar. Para o provar, note-se que:

$$W(-x) = \int_0^{-x} K(y)dy$$

Usando a mudança de variável $u = -y$,

$$\int_0^{-x} K(y)dy = - \int_0^x K(u)du = -W(x)$$

Concluindo que $W(-x) = -W(x)$.

Um caso particular de uma função que satisfaz as condições (H1)-(H5) é:

$$K(x) = 3.5e^{-1.8|x|} - 3e^{-1.52|x|} \quad (3.16)$$

Temos na Figura 3.8 abaixo o gráfico da função K neste caso.

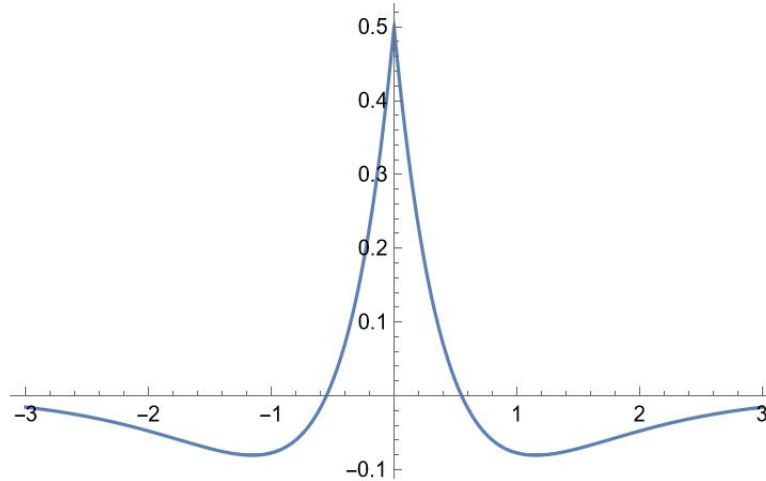


Figura 3.8: Função $K(x)$

Pela definição (3.15), temos:

$$W(x) = \int_0^x 3.5e^{-1.8|y|} - 3e^{-1.52|y|} dy \quad (3.17)$$

Calculando o integral em (3.17) obtém-se:

$$W(x) = \begin{cases} \frac{x}{|x|} [1.94(1 - e^{-1.8|x|}) + 1.97(e^{-1.52|x|} - 1)], & \text{se } x \in \mathbb{R} \setminus \{0\} \\ 0, & \text{se } x = 0 \end{cases} \quad (3.18)$$

A função W sendo ímpar e tendo um único zero positivo $a = 2.287978$, concluímos que $W(x) > 0$ no intervalo $] -\infty, -a[\cup]0, a[$.

Assim,

$$V(x) = W(x) - W(x - 2.287978) \quad (3.19)$$

só é positiva no intervalo $[0, a]$ e portanto satisfaz neste caso, a equação (3.14).

Com efeito, sendo $V(x) > 0$ se e só se $x \in [0, a]$, então o integral (3.14) reduz-se a:

$$V(x) = \frac{1}{\alpha} \int_0^a K(x-y)dy \quad (3.20)$$

pela forma como está definida a função taxa de disparo f em (3.13).

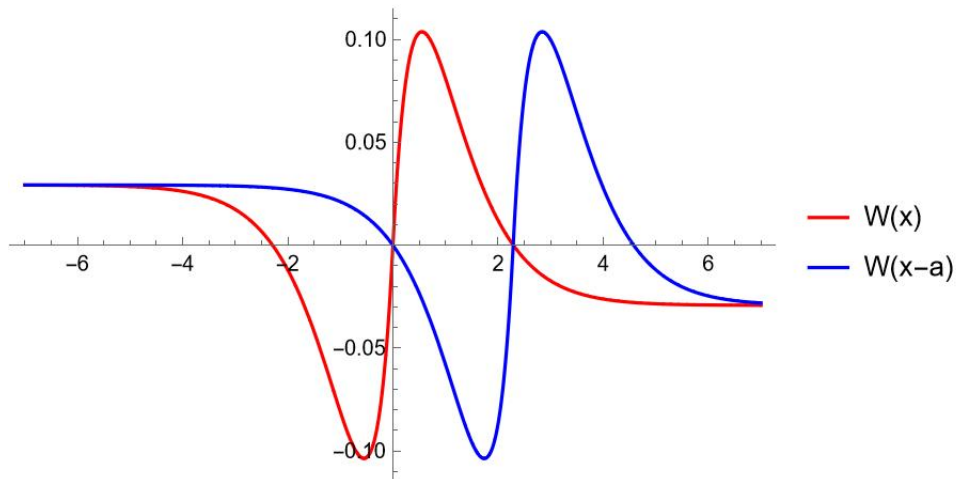


Figura 3.9: Gráficos $W(x)$ e $W(x - 2.287978)$

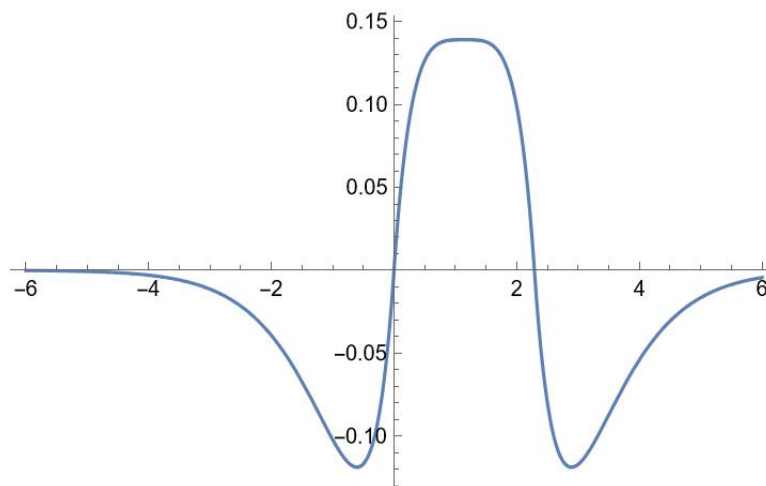


Figura 3.10: Função $V(x)$ dada pela fórmula (3.19)

Independentemente da aproximação inicial, a solução da equação (3.12) tende para a solução estacionária (3.19) quando t tende para infinito.

Consideramos aqui como condição inicial $V_0(x) = V(x)$, obtivemos a seguinte Fig. 3.11 que ilustra a comparação entre a solução exata e a solução obtida pelo método Euler implícito.

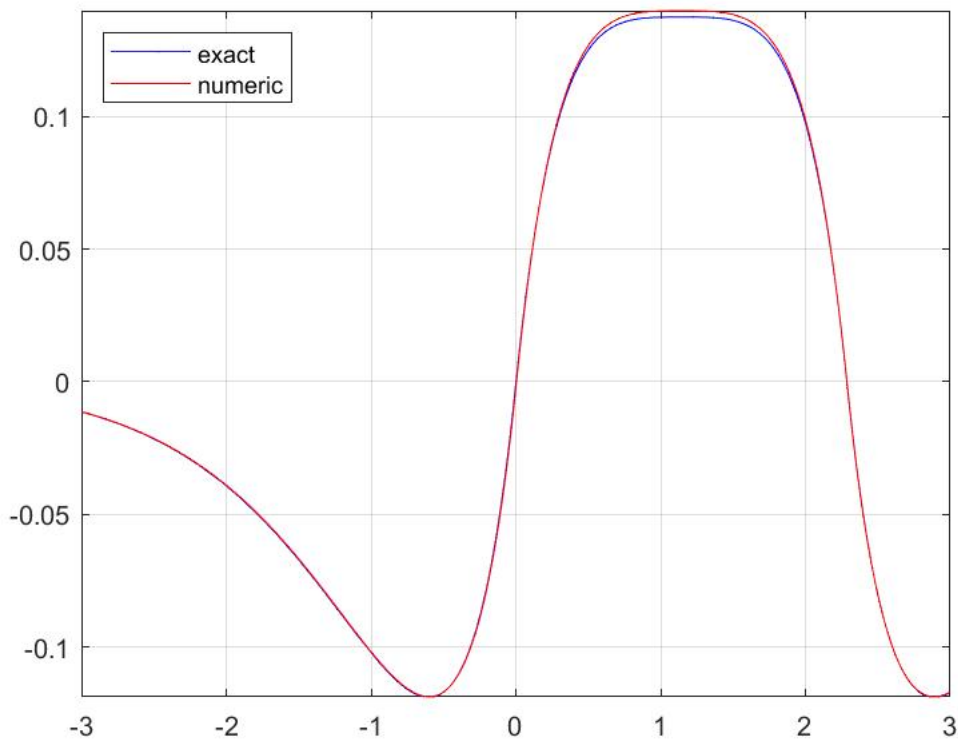


Figura 3.11: Comparação entre a solução exata e a solução numérica usando um passo no espaço $h = 0.01$ e no tempo $\tau = 0.001$

Para testar a ordem de convergência do método numérico implementado, usamos a fórmula 3.3.

Valores h	Erro	Ordem de Convergência
0.025	0.0053414	1.0255
0.05	0.010873	0.97564
0.1	0.021382	1.0381

Tabela 3.13: Erro e Ordem de Convergência para o método implícito

Analisando a tabela 3.13, vemos que o erro do método diminui linearmente com a diminuição do passo no espaço h , contrariamente à ordem 2 que seria de esperar usando o método dos trapézios para resolução do integral. Isto acontece porque a função integranda não é diferenciável, o que se deve a estarmos a usar como taxa de disparo f , a função de Heaviside, que não é contínua em $x = 0$.

Para contornar isto e obtermos uma função integranda diferenciável, usamos uma aproximação contínua conhecida da função de Heaviside:

$$f_1(x) = \frac{1}{1 + e^{-kx}} \quad (3.21)$$

para valores consideráveis de k .

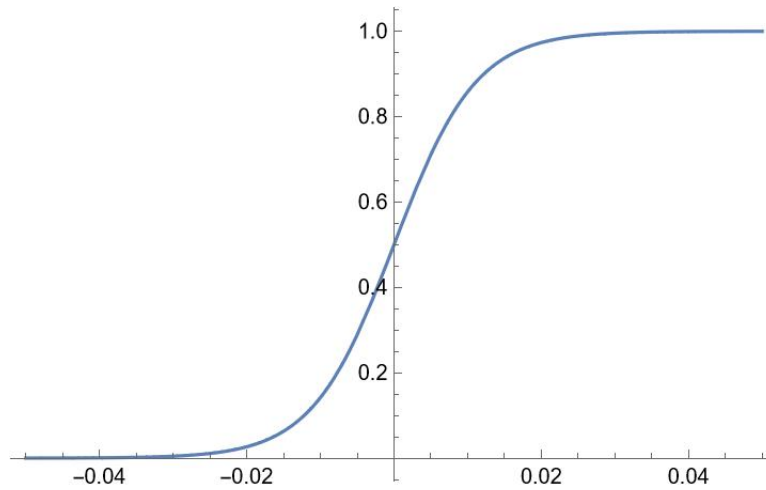


Figura 3.12: Gráfico da aproximação por função contínua da função de Heaviside no intervalo $[-0.5, 0.5]$ usando $k = 180$

Com esta alteração, deixamos de conhecer a solução exata e para calcular as ordens de convergência temos de usar a seguinte fórmula:

$$v_1 = \|v_h - v_{2h}\|_\infty$$

$$v_2 = \|v_{h/2} - v_h\|_\infty$$

$$z = \log_2 \frac{v_1}{v_2}$$

em que v_h designa o vetor solução no instante final usando um passo no espaço h .

Após esta alteração na função da taxa de disparo, obtivemos as seguintes ordens de convergência ilustradas pela Tabela 3.14 usando o intervalo $t = [0, 10]$ e um intervalo no espaço $[-3, 3]$ com um passo $\tau = 0.001$.

Valores h	Ordem de Convergência
0.025	2.4048
0.05	2.0707
0.1	2.4902

Tabela 3.14: Erro e Ordem de Convergência usando a função f_1 como taxa de disparo com $k = 180$

Comparando com a tabela 3.13, a substituição da função de Heaviside por uma função contínua provocou um aumento da ordem de convergência para valores próximos de 2, como seria esperado. Esta alteração anulou a desaceleração que estava a ser provocada ao método pela descontinuidade da função de Heaviside no ponto $x = 0$.

3.0.2 Resultados numéricos para exemplos com retardamento

Nesta secção, pela primeira vez fazemos testes usando o retardamento. Temos a seguinte equação:

$$\frac{\partial}{\partial t} V(x, t) = S(x, t) - \alpha V(x, t) + \int_{\Omega} K(|x - y|) f(V(y, t - r(x, y))) dy$$

$$V(x, t) = V_0(x, t)$$

com $t \in [-r_{max}, 0]$ como definido em (1.2).

em que como $\tau(x_i, y) \neq 0$, consideramos $\tau(x_i, y) = |x_i - y|/v$ em que v representa a velocidade e se $t_j - \tau(x_i, y)$ não for um ponto da rede, usa-se interpolação linear para aproximar $V(y, t_j - \tau(x_i, y))$.

Optou-se por usar os parâmetros e funções do exemplo 1 e comparar o efeito do retardamento.

Estes são:

$$K(|x - y|) = e^{-(x-y)^2}$$

$$S(x, y, t) = -\tanh\left(\sigma \exp\left(\frac{-t}{c}\right)\right) b(x, y)$$

$$f(x) = \tanh(x)$$

onde $b(x, y) = \int_{-1}^1 K(x, y) dy = \frac{\sqrt{\pi}}{2} (\text{Erf}(1+x) + \text{Erf}(1-x))$ com $\Omega = [-1, 1]$.

Usando como função $r(x, y) = |x - y|/20$ para todo o x .

A condição inicial é dada por $V_0(x, t) = 1$ para $t \in [-r_{max}, 0]$ com $r_{max} = \frac{|\Omega|}{v} = \frac{1}{10}$.

Como podemos ver na Fig. 3.13, usando o método implícito, vemos que com retardamento, a solução decresça mais lentamente para zero, comparativamente com o caso em que não há este efeito.

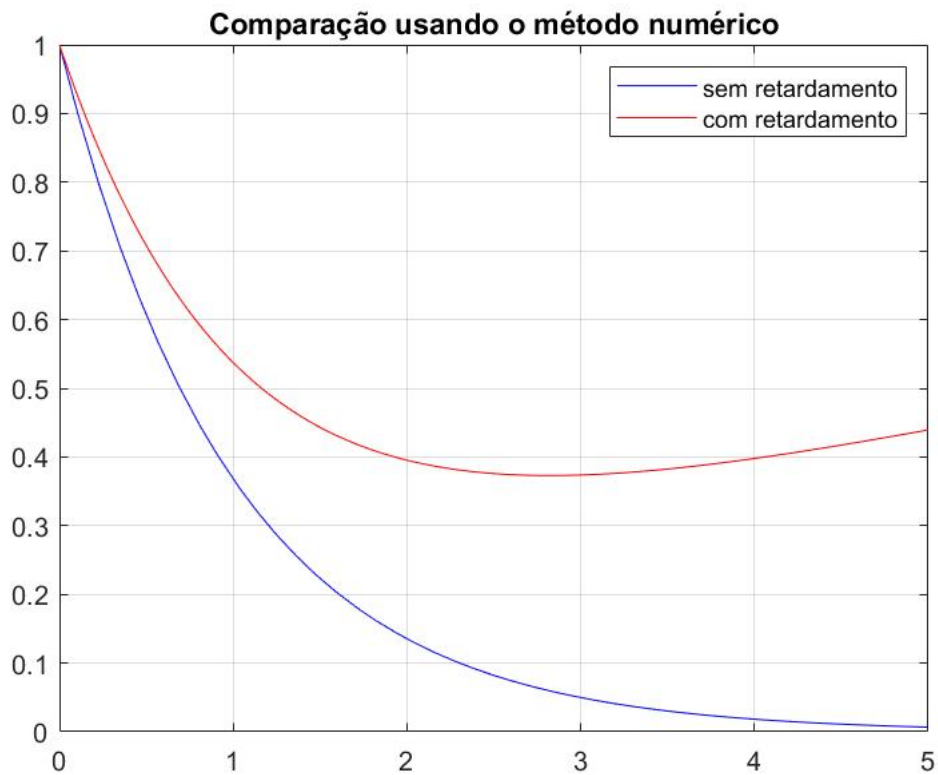


Figura 3.13: Efeito do retardamento

Capítulo 4

Simulação da memória de trabalho

4.1 Condições necessárias para existência de solução estacionária na presença de excitação externa.

Neste capítulo vamos aplicar os métodos numéricos estudados no capítulo 2 a alguns casos da ECN que foram estudados na tese [15] e que estão relacionados com a modelação da memória de trabalho. A memória de trabalho é a capacidade de os nossos neurónios registarem temporariamente a informação sensorial (por exemplo, imagens ou sons) , pela qual se orientam para as acções posteriores. Por exemplo, se estamos a trabalhar em conjunto com outra pessoa, precisamos de memorizar a posição dessa pessoa e a direcção do seu movimento mesmo quando deixamos de a ver, para podermos cooperar com ela. A utilização da ECN para a modelação da memória de trabalho também é investigada no artigo [16]. Dada uma excitação externa transiente $S(x, t)$, comparamos o seu efeito no potencial neuronal, durante e após o período em que ela está activa.

Para estudar este caso, temos a seguinte função de conectividade K ,

$$K(x, y) = Ae^{-k|x-y|}(k \sin(|bx|) + \cos(bx)) \quad (4.1)$$

onde $A > 0$ e $0 < b \leq 1$ representam o controlo da amplitude e dos zeros, respetivamente.

k controla a taxa com que as oscilações da função K decaem com a distância.

A função $f(x)$ é do tipo Heaviside

$$f(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ 1 & x \geq 0 \end{cases}$$

e a função $S(x, t)$ que representa a estimulação é do tipo Gaussiana e é definida de modo a que, a partir de um certo instante t_i , $S(x, t)$ passe a ser constante.

$$S(x) = (S_s e^{-x^2/(2\sigma^2)} - S_i) \quad (4.2)$$

$$S(x, t) = \begin{cases} S(x) & t < t_i \\ 0 & t \geq t_i \end{cases} \quad (4.3)$$

where S_s and σ describe the amplitude and the standard deviation and S_i is a constant.

Consideramos a equação do campo neuronal na forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} V(x, t) &= S(x, t) - \alpha V(x, t) + \int_{\mathbb{R}} K(|x - y|) f(V(y, t)) dy - \theta \\ V(x, 0) &= V_0(x) \end{aligned} \quad (4.4)$$

onde $\theta > 0$ é um valor para o qual a atividade do campo neuronal converge na ausência de estimulação externa.

Assumimos neste parágrafo que quando $S(x) = 0$ a equação (4.4) tem uma solução estacionária não trivial $V(x)$, tal que $V(x) > 0$, para todo o x pertencente a um certo domínio limitado Ω , e $V(x) < 0$, se x não pertence a Ω . Neste caso, para determinar o valor do parâmetro θ , é preciso ter em consideração que, quando $S(x, t) = 0$, a equação estacionária associada a (4.4) satisfaz a equação:

$$V(x) = \frac{1}{\alpha} \int_{\Omega} K(|x - y|) f(V(y, t)) dy - \frac{\theta}{\alpha} \quad (4.5)$$

como $V(y, t) > 0$, para todo o y pertencente a Ω ficamos com

$$V(x) = \frac{1}{\alpha} \int_{\Omega} K(|x - y|) dy - \frac{\theta}{\alpha} \quad (4.6)$$

Definindo

$$W(x) = \int_0^x K(y)dy$$

e assumindo que $\Omega = [0, a]$, onde a é um certo número positivo, da equação (4.6) obtém-se

$$V(x) = \frac{1}{\alpha}(W(x) + W(x - a) - \theta) \quad (4.7)$$

Finalmente, sabendo que $V(a) = 0$ e $W(0) = 0$, da equação (4.7) conclui-se que $\theta = W(a)$

Até aqui falámos do caso de $S(x) = 0$, que no caso de $\theta = 0$ se reduz ao Exemplo 4, estudado na secção 2.3.1.4. Vamos agora falar do caso de um estímulo externo não nulo ($S(x, t) \neq 0$).

Vamos obter aproximações numéricas da solução de (4.4), no caso em que os parâmetros desta equação são os seguintes:

$\theta = W(10)$, sendo a função K definida pela fórmula 4.1, com $A = 2, k = 0.08$ e $b = \pi/10$

e a função S definida pela fórmula (4.2), com $S_s = 8$ e $S_i = 0.5$

Introduzam-se as notações

$$p_1 = A/(k^2 + b^2)$$

$$p_2 = bk + k$$

$$p_3 = k^2 - b$$

Neste caso temos

$$W(x) = -p_1(e^{-kx} (p_3 \sin(bx) + p_2 \cos(bx)) - p_2)$$

Chama-se domínio de actividade da solução V o conjunto dos pontos $x \in \mathbb{R}$ tais que $V(x) > 0$. Quando esse conjunto é limitado, é frequentemente designado por bump.

As condições de existência de uma solução estacionária da equação 4.4 com um único domínio de actividade Ω podem ser deduzidas a partir do teorema 3 de [1]:

Se $S(0) \geq W(\pi/\alpha)$, $S(z_1/2) \geq 0$, $S(z_2/2) \leq 0$ então a equação

$$W(\pi/\alpha) - S(x/2) = W(x) \quad (4.8)$$

tem uma única raiz positiva que pertence a (z_1, z_2) , onde z_1 e z_2 são, respectivamente, o 1º e o 2º zero de K .

Note-se que se a equação (4.8) tiver uma raiz positiva a , então a é a largura do bump da solução estacionária, ou seja, a distância entre as suas duas raízes. Na Figura 4.1, está representado o gráfico de $W(x)$, quando K tem os parâmetros acima especificados.

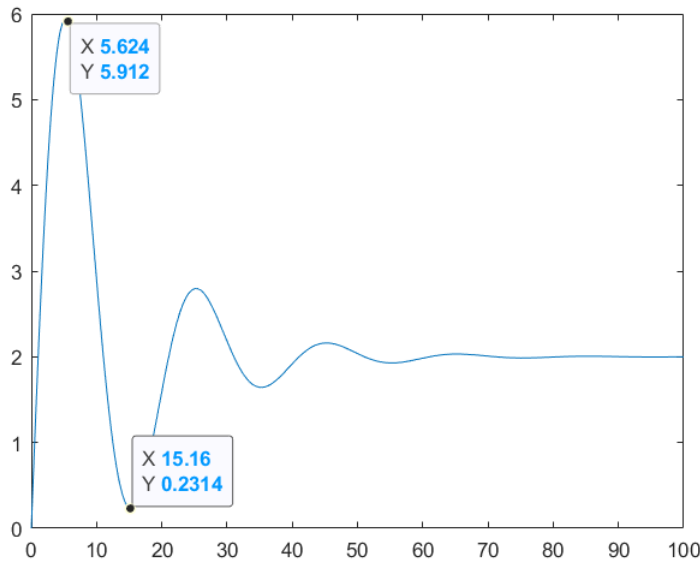


Figura 4.1: Função $W(x)$ e obtenção dos valores z_1 e z_2

Sendo z_1 e z_2 os zeros da função K , estes podem ser obtidos pela fórmula:

$$z_n = -\frac{\arctan(\frac{1}{k})}{\alpha} + \frac{n\pi}{\alpha}, \quad n \in \mathbb{N} \quad (4.9)$$

para todo o n pertence a \mathbb{N} , de onde resulta que $z_1 = 5.624$, $z_2 = 15.16$.

Por outro lado, z_1 e z_2 são, respectivamente, um máximo e um mínimo de W , como se pode ver na Fig.4.1.

Pelo teorema, sabemos que a equação (4.8) tem uma solução única a , se se verificarem as condições $S(z_1/2) > 0$ e $S(z_2/2) < 0$. Como se pode ver pela Fig.4.2, estas condições são satisfeitas quando se verifica que $1.12 < \sigma < 3.24$.

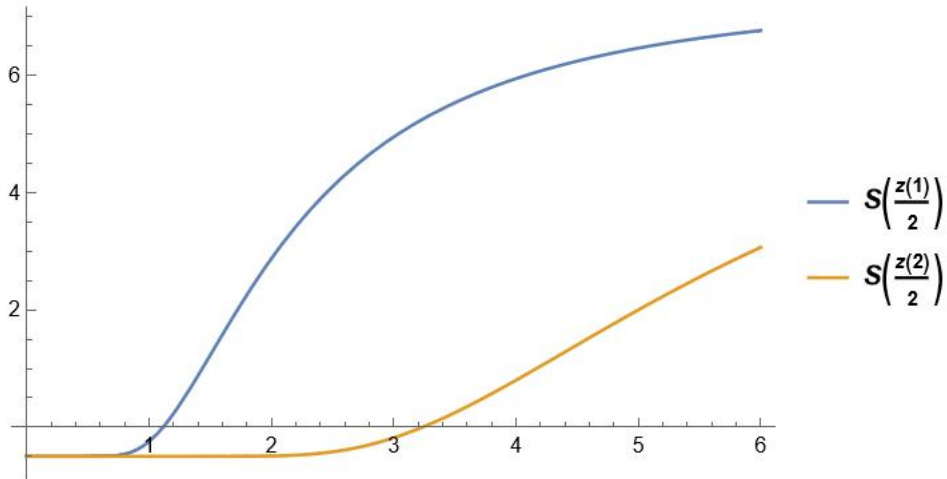


Figura 4.2: Representação dos valores da função $S(\frac{z_1}{2})$ e $S(\frac{z_2}{2})$

para $\sigma \in [0, 6]$

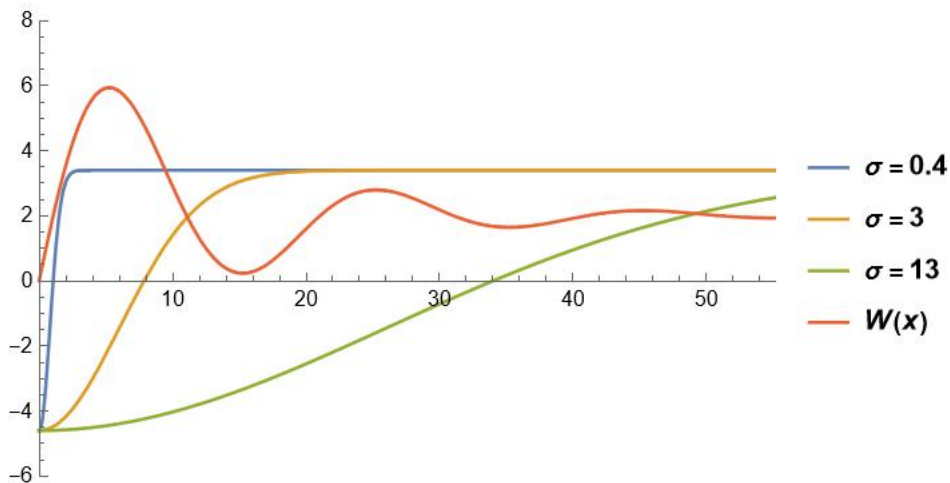


Figura 4.3: Gráficos da função $W(x)$ e da função $\theta - S(\frac{x}{2})$ com $A = 2, k = 0.08$ e $\alpha = \pi/10$ com $S_s = 8$ e $S_i = 0.5$

para os valores de $\sigma = 0.4, 3, 13$.

Pela Fig. 4.3 verifica-se que só no caso de $\sigma = 3$ é que a equação

$$W(10) - S(x/2) = W(x) \tag{4.10}$$

tem uma única raiz positiva a que pertence a (z_1, z_2) , sendo os valores de z_1 e z_2 dados pela fórmula (4.9).

Na figura seguinte, temos a representação da equação (4.10) em função de x de forma a descobrir o zero.

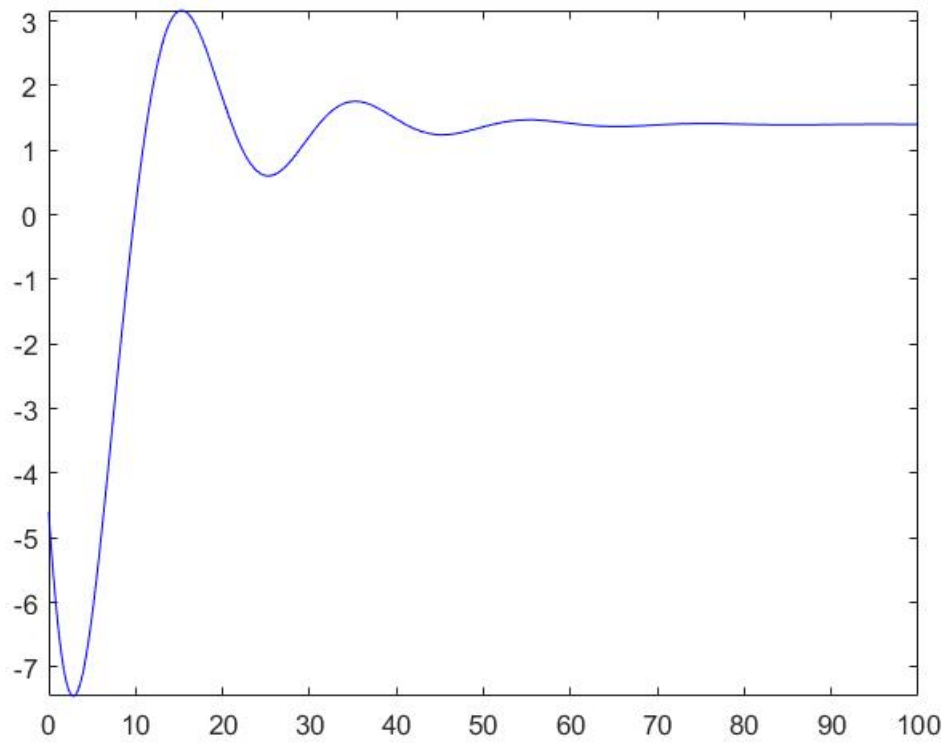


Figura 4.4: Interpretação gráfica da equação (4.10)

Pelo gráfico verifica-se que a equação (4.10) tem uma única raiz a , próxima de 9.5.

Este valor representa a largura do "bump" no gráfico da solução, como podemos ver na Fig.4.5:

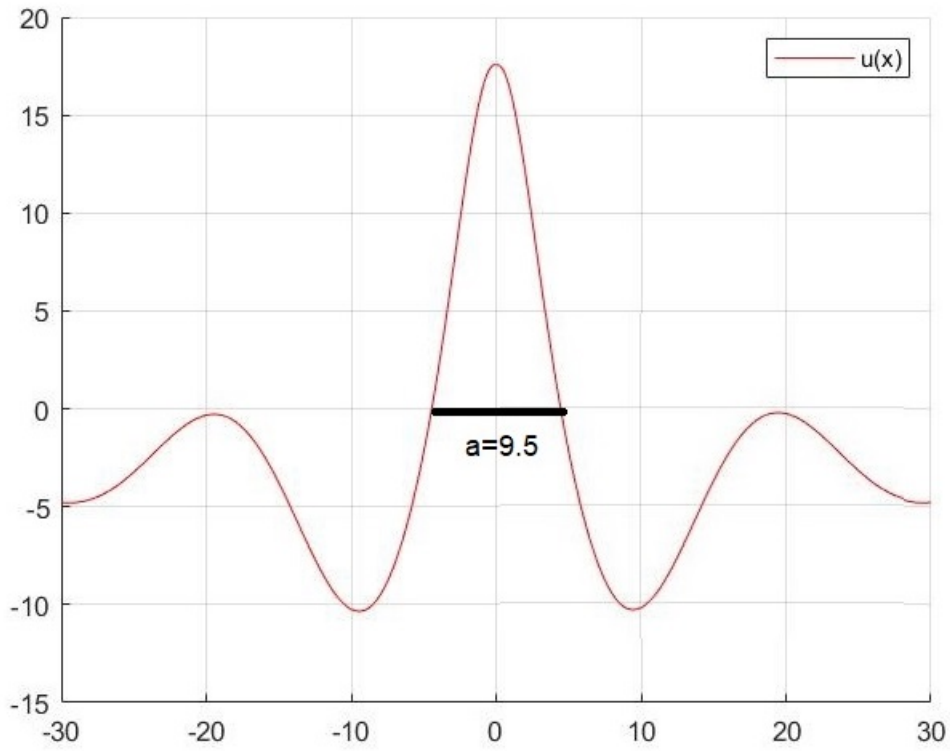


Figura 4.5: Gráfico de uma solução estacionária no caso de $\sigma = 3$ (ver secção 3.2). Verifica-se que a largura do bump corresponde à solução da equação (4.10)

4.2 Criação e análise de "bumps" através de excitação local - Efeito de memória

Analisaremos o caso de um sinal externo da forma (4.3), que é diferente de 0 apenas até ao instante t_i .

Após este instante, está a parte que nos interessa do ponto de vista das aplicações. Na ausência de estímulos externos, veremos se a solução é alterada ou se se mantém como se nenhum sinal tivesse ocorrido.

Para tal, usamos como estímulo externo uma função par e unimodal, da forma (4.3). De forma a simular a atividade neuronal, fizemos vários testes ilustrados ao longo das figuras seguintes. As variáveis do sinal externo têm os valores $S_s = 8$ e $S_i = 0.5$.

Os valores de σ considerados foram 0.4; 3; 13.

4.2.1 Solução com $\sigma = 0.4$

No caso de $\sigma = 0.4$ a solução ao longo do tempo para $x = 0$ está representada na Fig.4.6. Pela forma do gráfico nota-se claramente que no instante $t = 10$, deixa de haver estímulo externo. Com efeito, a solução aumenta até $t = 10$ a partir daí decresce. A partir de $t = 15$, o gráfico da solução praticamente coincide com o da solução estacionária, para qual converge quando $t \rightarrow \infty$ (neste caso a solução não depende de x e tem o valor $W(10)$).

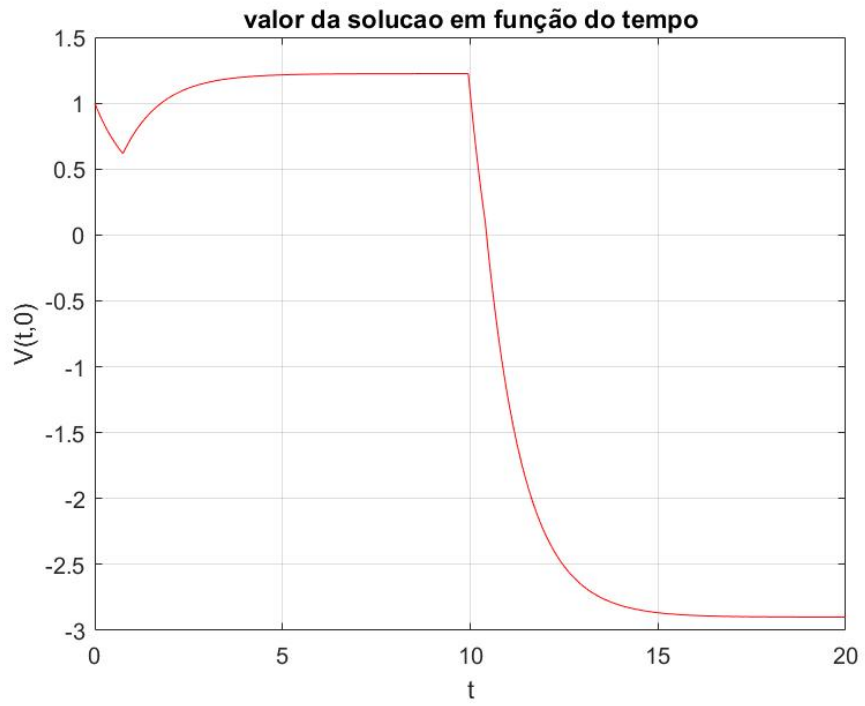


Figura 4.6: Solução em $x = 0$ em função do tempo no caso de $\sigma = 0.4$

Na Fig.4.7, temos a vermelho a função de sinal externo e a azul a solução no espaço para o instante $t = 10$, como podemos ver a solução tem comportamento semelhante ao sinal externo. Por outras formas, o estímulo molda a forma da solução nestes primeiros instantes com estímulo.

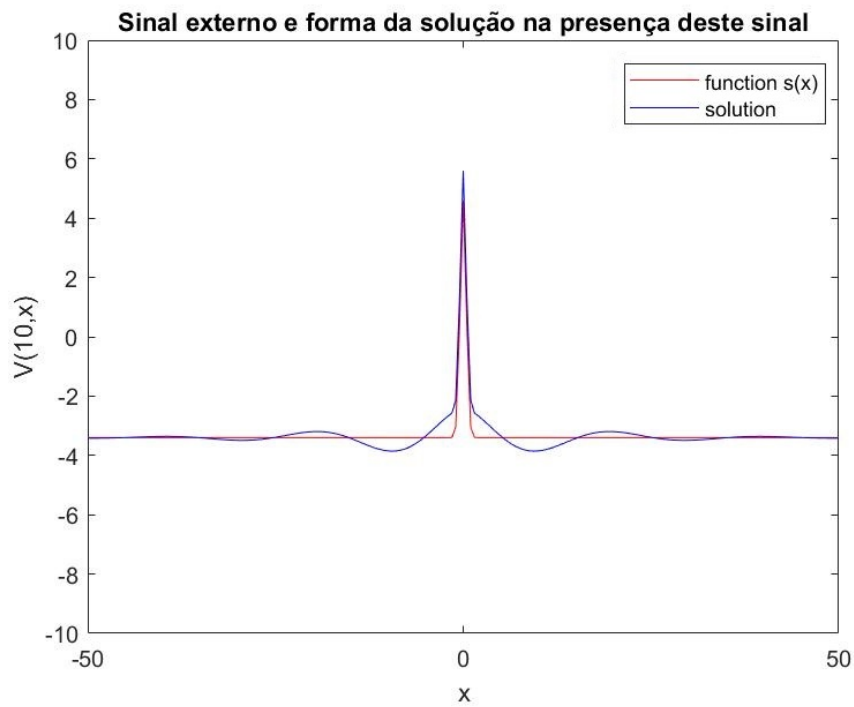


Figura 4.7: Sinal externo e solução em $t = 10$ no caso de $\sigma = 0.4$

Quando se representa solução em $t = 20$, vemos que o estímulo não foi suficientemente forte para criar um "efeito de memória" nos neurónios, porque como vemos na Figura 4.8, a solução final é constante igual ao valor de $W(10)$. Isto acontece porque o sinal externo $S(x)$ não foi "suficientemente forte", ou seja valor de σ ainda baixo, para criar uma alteração no campo neuronal e ser criado o efeito de memória.

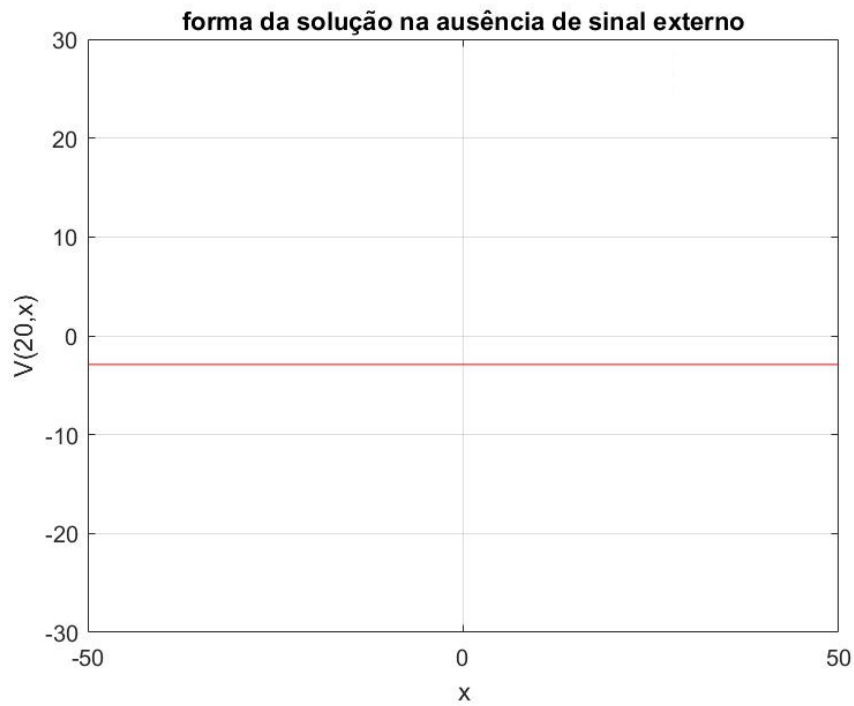


Figura 4.8: Forma da solução na ausência de sinal externo com $t = 20$

4.2.2 Solução com $\sigma = 3$

Os resultados no caso de $\sigma = 3$ são discutidos a seguir.

Na Fig.4.9 está representada a evolução da solução em $x = 0$. Nota-se claramente que no instante $t = 10$, deixa de haver estímulo externo. Desta vez, verificamos um aumento mais significativo da solução comparativamente com o resultado anterior, daí que depois de decrescer, estabilize num valor superior.

A partir, sensivelmente, do instante $t = 15$ o gráfico da solução confunde-se com o da solução estacionária, que neste caso satisfaz $V(0) = 10$ (ver fig. 4.11).

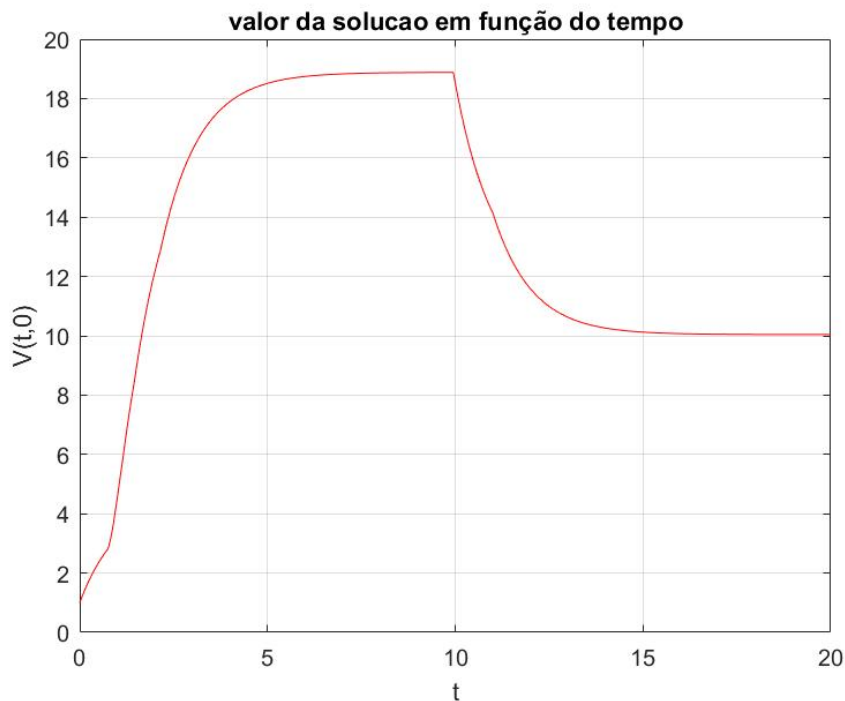


Figura 4.9: Solução em $x = 0$ função do tempo, no caso de $\sigma = 3$

Na Fig.4.10, a vermelho está representada a função de sinal externo e a azul a solução no espaço para o instante $t = 10$. Como podemos ver a solução tem comportamento semelhante ao sinal externo tal como vimos anteriormente.

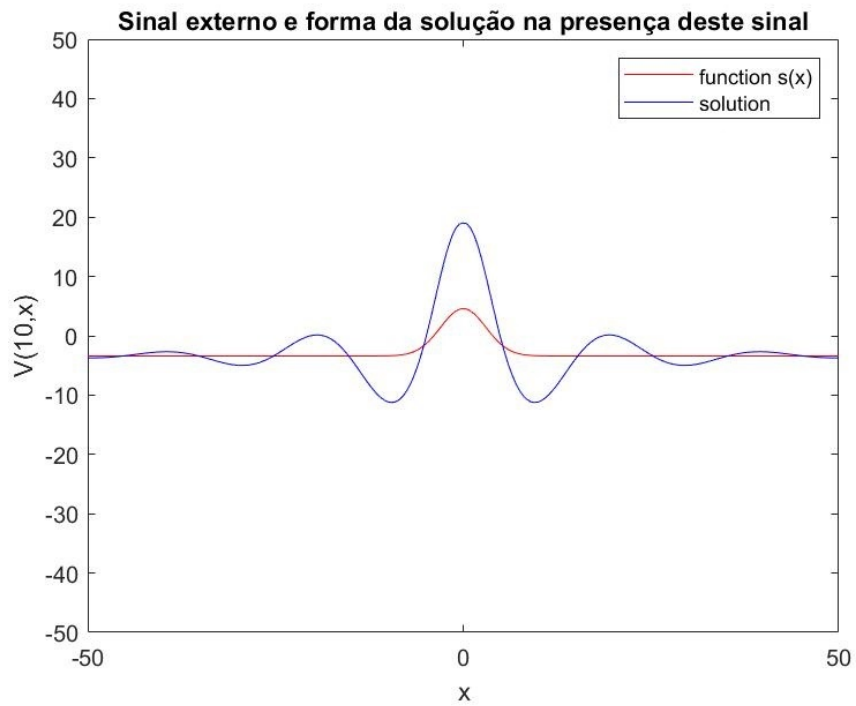


Figura 4.10: Sinal externo e forma da solução em $t = 10$ no caso de $\sigma = 3$

Nesta fase em que o estímulo externo deixa de estar ativo é que se nota a grande diferença relativamente ao valor de σ usado no estímulo anterior. Na Fig.4.11 vemos que o estímulo foi suficientemente forte para criar um "efeito de memória" nos neurónios, porque como vemos na figura seguinte, a solução em $t = 20$ não é constante e assemelha-se ao estímulo externo na forma. Mas enquanto o máximo do estímulo externo, atingido em $x = 0$, é aproximadamente 20, o da solução estacionária é aproximadamente 10.

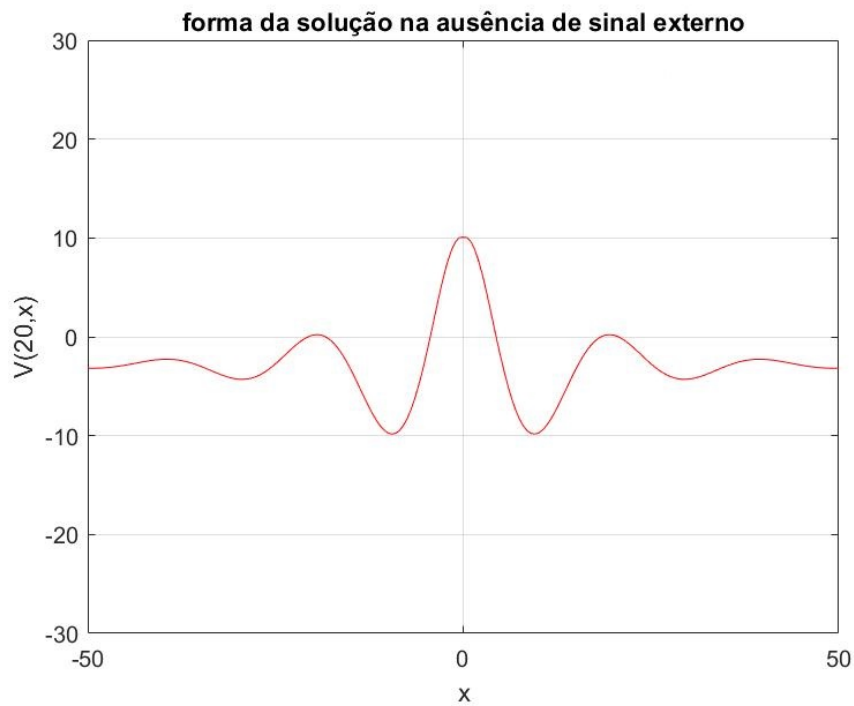


Figura 4.11: Forma da solução na ausência de sinal externo em $t=20$

4.2.3 Solução com $\sigma = 13$

Na Fig.4.12 está representada a solução ao longo do tempo novamente para $x = 0$ sendo que no instante $t = 10$, deixa de haver estímulo externo. Desta vez, verificamos um aumento ainda mais significativo da solução comparativamente ao resultado anterior, daí que quando decresce, estabilize num valor superior.

A partir, sensivelmente, do instante $t = 15$, o gráfico da solução confunde-se com o da solução estacionária, tal como nos exemplos anteriores.

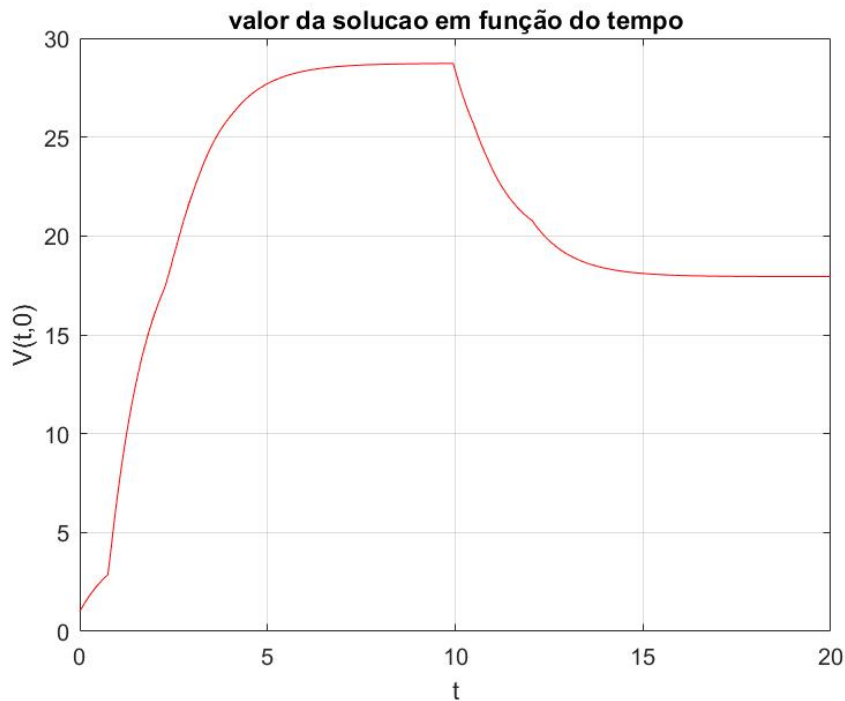


Figura 4.12: Solução em $x = 0$ função do tempo, no caso de $\sigma = 13$

Como podemos na Fig.4.13 ver, neste caso a solução em $t = 15$ não apresenta tantas semelhanças com o estímulo externo como nos exemplos anteriores.

Comparativamente ao resultados obtidos na tese [15], aqui obtiveram-se resultados diferentes, o que poderá ser justificado pelos diferentes métodos usados, a instabilidade e os incrementos de tempo e espaço para um valor de cálculo num tempo não demasiado longo. Estas limitações poderão ter justificado estas diferenças encontradas nas figuras seguintes relativamente à tese a que nos referimos.

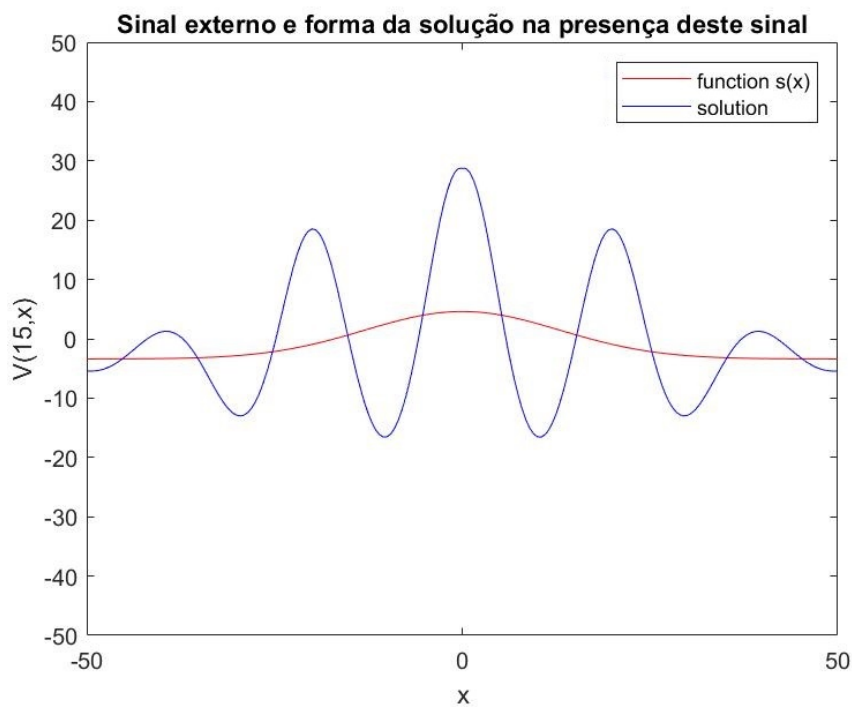


Figura 4.13: Sinal externo e forma da solução em $t = 15$

Nesta fase em que o estímulo deixa de ser usado, vemos que o estímulo foi suficientemente forte para criar um "efeito de memória" nos neurónios, porque como vemos na figura seguinte, a solução final, já estacionária, no instante $t = 20$ não é constante.

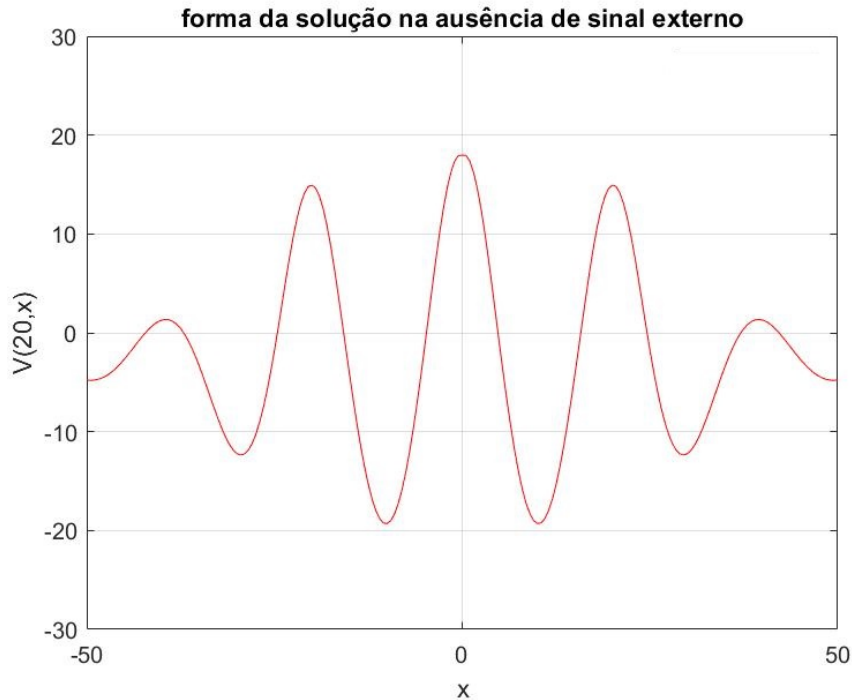


Figura 4.14: Forma da solução na ausência de sinal externo

A principal diferença deste caso para os anteriores foi que apesar do estímulo externo apresentar uma função unimodal, o que faria esperar a presença de apenas um bump (zona de atividade neuronal), neste caso este sinal unimodal originou a presença de três. Esta solução mantém-se mesmo na ausência do estímulo externo.

4.3 Conclusão

Os resultados observados permitem-nos concluir sobre a existência de soluções estacionárias, cuja forma depende da forma do estímulo externo. Primeiramente, a solução evolui para um novo estado, provocado pela estimulação externa. Após essa ser anulada, verifica-se a evolução para o estado estacionário, que representa o efeito de memória. Este feito só ocorre se o estímulo for suficientemente forte. É de realçar também que os resultados desta secção estão de acordo com os da secção 3.1. De fato, uma solução estacionária com um bump só ocorre no caso de $\sigma = 3$. Este é o único dos 3 valores de σ considerados que satisfaz a condição $1.12 < \sigma < 3.24$, mencionada no final da pág. 48.

Capítulo 5

Conclusão e Trabalho Futuro

O estudo da convergência dos três métodos, explícito, semi-implícito e implícito revelou ordem um em relação ao passo no tempo e ordem dois em relação ao passo no espaço. O maior custo computacional do método implícito é compensado por apresentar maior estabilidade que o explícito. As condições suficientes para a convergência dos métodos explícito, semi-implícito e implícito são deduzidas no Cap. 2.

A análise comparativa dos três métodos revelou as vantagens do método implícito em relação ao explícito para a resolução numérica da equação do campo neuronal. Ao longo dos exemplos apresentados observamos nas tabelas que é o método implícito o que apresenta menor erro. O método semi-implícito nem sempre apresentou menores erros comparativamente ao explícito.

O uso da linguagem MatLab mostrou algumas limitações em termos de tempo de resposta ao algoritmo quando se pretendia refinar a rede de pontos. Para trabalho futuro, uma abordagem com uma linguagem mais evoluída como o Julia, por exemplo, poderia trazer vantagens em relação ao MatLab.

As experiências numéricas realizadas no Cap. 4, quando a ECN é resolvida no caso de um sinal externo transiente, confirmam que, se este sinal satisfizer certas condições, a solução estacionária da ECN pode refletir as suas propriedades, nomeadamente, no que diz respeito à existência de um domínio limitado de atividade neuronal (bump). Tais soluções estacionárias refletem um fenómeno conhecido como memória de trabalho.

Os métodos numéricos estudados na tese podem ser adaptados de modo a ter em conta o retardamento resultante do fato de que a velocidade de propagação dos sinais é finita. No capítulo 3 é descrito um exemplo em que este retardamento é considerado. De futuro, tencionamos aplicar a equação com retardamento ao estudo de fenómenos da vida real, como por exemplo a memória de trabalho.

Bibliografia

- [1] Rafael R. Borges.: Spikes synchronization in neural networks with synaptic plasticity. Rev. Bras. Ensino Fís. [online]. 2015
- [2] Valerie Ross.: Numbers: The Nervous System, From 268-MPH Signals to Trillions of Synapses. Discover Magazine, May 15, 2011
- [3] Hodgkin, A.L. and Huxley, A.F. A quantitative description of membrane current and its application to conduction and excitation in nerve. Bulletin of Mathematical Biology, 52(1):25 – 71, 1990. ISSN 0092-8240. doi: [https://doi.org/10.1016/S0092-8240\(05\)80004-7](https://doi.org/10.1016/S0092-8240(05)80004-7). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0092824005800047>.
- [4] FitzHugh, Richard. Impulses and physiological states in theoretical models of nerve membrane. Biophysical Journal, 1(6):445 – 466, 1961. ISSN 0006-3495. doi: [https://doi.org/10.1016/S0006-3495\(61\)86902-6](https://doi.org/10.1016/S0006-3495(61)86902-6). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0006349561869026>.
- [5] Fitzhugh, Richard. Computation of impulse initiation and saltatory conduction in a myelinated nerve fiber. Biophysical Journal, 2(1):11 – 21, 1962. ISSN 0006-3495. doi: [https://doi.org/10.1016/S0006-3495\(62\)86837-4](https://doi.org/10.1016/S0006-3495(62)86837-4). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0006349562868374>.
- [6] Nagumo, J. and Arimoto, S. and Yoshizawa, S. An active pulse transmission line simulating nerve axon. Proceedings of the IRE, 50(10):2061–2070, Oct 1962. ISSN 0096-8390. doi: 10.1109/JR-PROC.1962.288235.
- [7] Beurlle, R.L. Properties of a mass of cells capable of regenerating pulses. Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series B, Biological Sciences, 240, 08 1956. doi: 10.1098/rstb.1956.0012.
- [8] Griffith, J.S. A field theory of neural nets: I: Derivation of field equations. The Bulletin of mathematical biophysics, 25, 1963. doi: <https://doi.org/10.1007/BF02477774>.
- [9] Griffith, J.S. A field theory of neural nets: li. properties of the field equations. The Bulletin of mathematical biophysics, 27:187–95, 07 1965. doi: 10.1007/BF02498774.
- [10] Wilson, Hugh and Cowan, Jack. Excitatory and inhibitory interactions in localized populations of model neurons. Biophysical journal, 12:1–24, 02 (1972). doi: 10.1016/S0006-3495(72)86068-5.

- [11] Amari, S. Dynamics of pattern formation in lateral-inhibition type neural fields. *Biol. Cybern.*, 27 (1977). <https://doi.org/10.1007/BF00337259>.
- [12] Faye, G., Faugeras, O.: Some theoretical and numerical results for delayed neural field equations. *Physica D: Nonlinear Phenomena* 239, 561-578, 2010.
- [13] Daniele Avitabile, Stephen Coombes, Pedro M. Lima.: Numerical investigation of a neural field model including dendritic processing. *Journal of Computational Dynamics*, V.7 (2020), pp. 271-290
- [14] P.M . Lima and E. Buckwar.: Numerical solution of the neural field equation in the two-dimensional case, *SIAM Journal of Scientific Computing*, 37 (2015) B962– B979.
- [15] Flora Ferreira.: Multi-bump solutions in dynamic neural fields: analysis and applications, PhD thesis, University of Minho, 2014 (<http://hdl.handle.net/1822/34416>).
- [16] Laing, C., C. Troy, W., Gutkin, B., Ermentrout, B.: Multiple bumps in a neuronal model of working memory. *SIAM Journal on Applied Mathematics* 63, 2002.