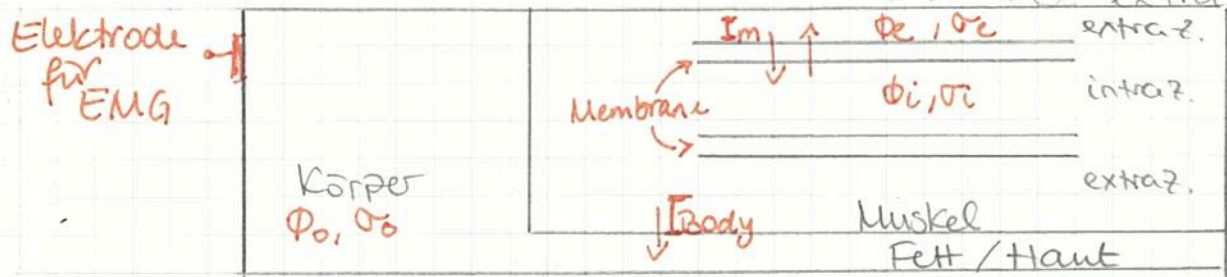


IV. Ausbreitung des Aktionspotential über die Faser

4.1 Das Modell : Die Bidomain-Gleichung

4.1.1. Modelannahmen



Es gibt insgesamt 3 Gebiete:

- 1) Muskelfaserzelle (intrazellulärer Raum)
- 2) Umgebung der Muskelfaser (extrazellulärer Raum)
- 3) Externes Gebiet, z.B. das einen Muskel angrenzendes Gewebe (Haut/Fett)

Annahmen:

- Der intra- und extrazellulärer Raum nehmen denselben physikalischen Raum ein (daher auch Bidomain)
- Das 3. Gebiet wird als benachbarter separater Raum angesehen.

Jedes Gebiet besitzt einen eigenen Konduktivitätskoeffizienten σ und ein elektr. Potential ϕ . Also ϕ_i, ϕ_e, ϕ_0 und $\sigma_i, \sigma_e, \sigma_0$.

Folgende 2 Stromflüsse sind erlaubt:

- 1) Transmembranströmung I_m über die Membran zwischen intra- und extrazellulären Raum (in beide Richtungen durch Ionenkanäle)
- 2) Das außen liegende Gebiet nimmt unter normalen Bedingungen Strom (I_{body}) aus dem extrazellulären Raum
- 3) Es fließt kein Strom zwischen dem intrazellulären Raum und dem Körper!

4.1.2. Herleitung der Bidomain-Gleichungen

Stromdichte aus dem Ohmschen Gesetz:

$$J = \frac{1}{R} \cdot E \quad \text{wobei} \quad \begin{array}{l} J: \text{Stromdichte} \\ R: \text{elektr. Widerstand } (\frac{1}{\sigma}) \\ E: \text{elektr. Feldstärke} \end{array}$$

Annahme: Quasistatische Bedingungen, dann kann E durch den negativen Gradienten des Potentialfeldes $E = -\nabla \phi$ ausgedrückt werden

$$E = -\nabla \cdot \phi$$

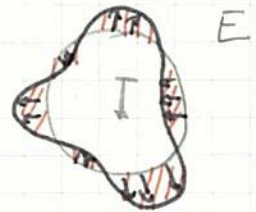
Einsetzen liefert: 1) $J_i = -\sigma_i \nabla \phi_i$

$$2) J_e = -\sigma_e \nabla \phi_e$$

Die Änderung der Stromdichte in jedem der Gebiete muss den gleichen Betrag aber mit entgegengesetzten

Vorzeichen haben:

$$\sum \uparrow \downarrow = \text{div } J$$



$$\rightarrow -\nabla \cdot J_i = \nabla J_e$$

$$\nabla [\sigma_i \nabla \phi_i] = -\nabla [\sigma_e \nabla \phi_e] *$$

Um das Prinzip der Erhaltung der Stromdichte zu beachten, muss der Stromfluss durch die Membran $A_m \cdot I_m$ gleich der Änderung der Stromdichte in beiden Gebieten sein:

$$\underline{\nabla \cdot [\sigma_i \nabla \phi_i]} = -\underline{\nabla \cdot [\sigma_e \nabla \phi_e]} = \underline{A_m \cdot I_m}$$

2. Gleichung
1. Gleichung

A_m : Oberflächen-Volumen-Verhältnis der Zellmembran

I_m : Transmembranstromdichte

vgl. Hodgkin 3.3. S. 18

Laplace - Operator *

$$\nabla[\sigma_i \nabla \phi_i] \text{ mit } \phi_i = I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\rightarrow \nabla[\nabla \phi_i] = ?$$

$$\nabla \phi_i = \begin{bmatrix} \frac{\partial \phi_i}{\partial x} \\ \frac{\partial \phi_i}{\partial y} \\ \frac{\partial \phi_i}{\partial z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} \phi_i$$

$$(\nabla \cdot) = \nabla^T = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} \nabla[\nabla \phi_i] &= \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \frac{\partial \phi_i}{\partial x} \\ \frac{\partial \phi_i}{\partial y} \\ \frac{\partial \phi_i}{\partial z} \end{bmatrix} \\ &= \frac{\partial^2 \phi_i(x, y, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi_i(x, y, z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi_i(x, y, z)}{\partial z^2} \end{aligned}$$

$$= (\phi_i)_{xx} + (\phi_i)_{yy} + (\phi_i)_{zz}$$

$$= \underline{\Delta \phi_i}$$

Laplace Operator

1. Bidomain Gleichung

Stromfluss durch die Membran:

$$I_m = \frac{I_{ext}}{A} \quad \text{S. 18}$$

$$I_m = C_m \cdot \frac{\partial V_m}{\partial t} + I_{ion}(V_m(t))$$

C_m : Kapazität der Membran pro Flächeneinheit

I_m : Summe aller individuellen Ströme

$$\nabla \cdot [\sigma_i \cdot \nabla \Phi_i] = A_m \left(C_m \frac{\partial V_m}{\partial t} + I_{ion} \right)$$

bzw. bezüglich des Transmembranpotentials

$$\Phi_i = V_m + \Phi_e$$

erhält man dort die erste Bidomaingleichung

$$\nabla \cdot [\sigma_i \cdot \nabla (V_m + \Phi_e)] = A_m \left(C_m \frac{\partial V_m}{\partial t} + I_{ion} \right)$$

$$\nabla \cdot [\sigma_i \cdot \nabla V_m] + \nabla \cdot [\sigma_i \cdot \nabla \Phi_e] = A_m \left(C_m \frac{\partial V_m}{\partial t} + I_{ion} \right)$$

örtliche Ableitungen

zeitliche Abl.

DGL System
Hodgkin-Huxley

2. Bidomain Gleichung

$$\nabla \cdot [\sigma_i \cdot \nabla (V_m + \Phi_e)] = -\nabla \cdot [\sigma_e \cdot \nabla \Phi_e]$$

$$\nabla \cdot [\sigma_i \cdot \nabla \Phi_e] + \nabla \cdot [\sigma_e \cdot \nabla \Phi_e] + \nabla \cdot [\sigma_i \cdot \nabla V_m] = 0$$

$$\nabla \cdot [(\sigma_i + \sigma_e) \cdot \nabla \Phi_e] + \nabla \cdot [\sigma_i \cdot \nabla V_m] = 0$$

$$\Leftrightarrow \nabla \cdot (\sigma_i V_m) = -\nabla \cdot [(\sigma_i + \sigma_e) \cdot \nabla \Phi_e]$$

Zusammenfassung der Bidomaingleichungen:

$$1) \nabla \cdot [\sigma_i \cdot \nabla V_m] + \nabla \cdot [\sigma_i \cdot \nabla \Phi_e] = A_m \left(C_m \frac{\partial V_m}{\partial t} + I_{ion} \right)$$

$$2) \nabla \cdot [\sigma_i \cdot \nabla V_m] + \nabla \cdot [(\sigma_i + \sigma_e) \cdot \nabla \Phi_e] = 0$$

→ gekoppeltes partielles differential Gleichungssystem mit den Unbekannten V_m und Φ_e

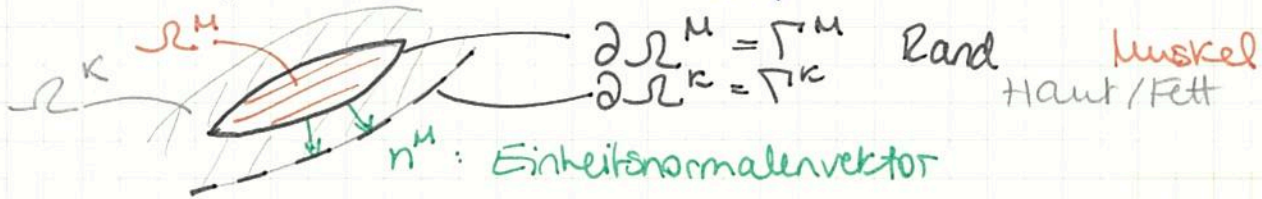
Achtung: in I_{ion} steckt noch unser GDS

gewöhnliches
DGL System

4.1.3. Randbedingungen:

- 1) Kein Stromfluss zwischen intrazellulären Raum und dem Körper (Neumann Randbedingung) vgl. S. 29

$$(\sigma_i \nabla \phi_i) \cdot n^M = 0 \text{ auf } \partial \Omega^M = \Gamma^M$$



- 2) Stromfluss: extrazellulären Bereich & Körper:

$$(\sigma_e \nabla \phi_e) \cdot n^M = -(\sigma_o \nabla \phi_o) \cdot n^M$$

- 3) Um eine stetige Lösung zu erhalten gilt:

$$\phi_o = \phi_e \text{ auf } \Gamma^M$$

4.1.4. Monodomain Gleichung

Unter der Annahme, dass die Anisotropie des extra- & intra-zellulären Bereichs gleich ist, d.h.

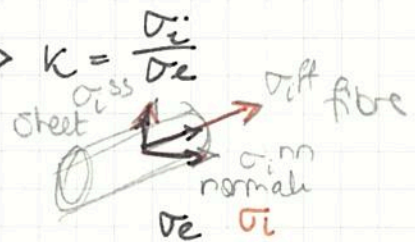
$$\sigma_i = \kappa \cdot \sigma_e \Leftrightarrow \sigma_e = \frac{1}{\kappa} \sigma_i \Leftrightarrow \kappa = \frac{\sigma_i}{\sigma_e}$$

3D:

$$\sigma_i = \begin{bmatrix} 10 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{i,ff} & \sigma_{i,fs} & \sigma_{i,fn} \\ \sigma_{i,fs} & \sigma_{i,ss} & \sigma_{i,sn} \\ \sigma_{i,fn} & \sigma_{i,sn} & \sigma_{i,nn} \end{bmatrix}$$

$$\sigma_e = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\sigma_i \neq \kappa \cdot \sigma_e$$



Konduktivität?

1D:



es gibt immer ein κ , so dass gilt:

$$\sigma_i = \kappa \cdot \sigma_e$$

→ Damit können die einzelnen Gleichungen der Bidomain-Gleichungen reduziert werden

$$\nabla[(\sigma_i + \sigma_e) \nabla \phi_e] = -\nabla[\sigma_i \nabla V_m] \quad (2.)$$

$$\nabla[(1 + \frac{1}{\kappa}) \sigma_i \nabla \phi_e] = -\nabla[\sigma_i \nabla V_m]$$

$$\frac{\kappa+1}{\kappa} \nabla \cdot [\sigma_i \nabla \phi_e] = -\nabla[\sigma_i \nabla V_m]$$

$$\nabla \cdot [\sigma_i \nabla \phi_e] = -\frac{\kappa}{\kappa+1} \nabla[\sigma_i \nabla V_m]$$

Dieser Ausdruck kann nun in die erste Bidomaingleichung eingesetzt werden:

$$\nabla[\sigma_i \nabla V_m] + \nabla[\sigma_i \nabla \phi_e] = A_m (C_m \frac{\partial V_m}{\partial t} + I_{ion}) \quad (1)$$

$$\frac{\kappa+1}{\kappa+1} \nabla \cdot [\sigma_i \nabla V_m] - \frac{\kappa}{\kappa+1} \nabla[\sigma_i \nabla V_m] = A_m (C_m \frac{\partial V_m}{\partial t} + I_{ion})$$

$$\frac{1}{\kappa+1} \nabla[\sigma_i \nabla V_m] = A_m (C_m \frac{\partial V_m}{\partial t} + I_{ion})$$

$$\nabla[\frac{\sigma_i \sigma_e}{\sigma_i + \sigma_e} \nabla V_m] = A_m (C_m \frac{\partial V_m}{\partial t} + I_{ion})$$

Diffusionsterm

Reaktionsterm

führt man $\sigma_{eff} = \frac{\sigma_i \sigma_e}{\sigma_i + \sigma_e}$ ein, dann erhält man die

Monodomaingleichung:

$$\nabla[\sigma_{eff} \nabla V_m] = A_m [C_m \frac{\partial V_m}{\partial t} + I_{ion}]$$

$$\text{mit } (\sigma_{eff} \nabla V_m) \cdot n^M = 0 \text{ auf } \Gamma^M$$



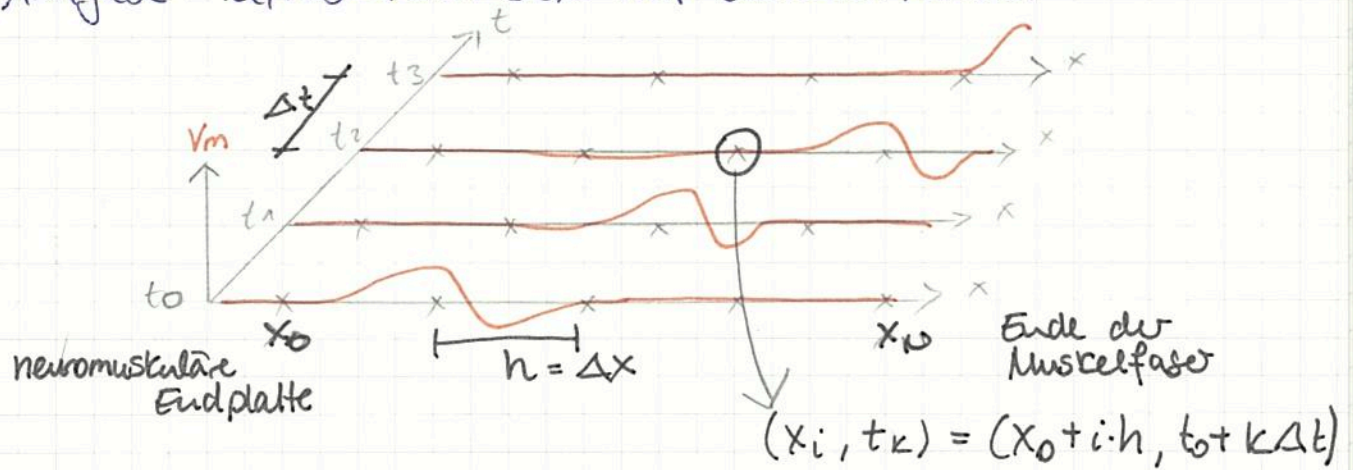
Achtung: im 3D: $\frac{1}{\sigma_i}$ gibt es nicht σ_i^{-1} wird genutzt

$$\sigma_i \frac{1}{\kappa+1} = \frac{\sigma_i \sigma_e}{\sigma_i + \sigma_e}$$

$$\text{mit } \sigma_i = \kappa \sigma_e$$

4.2. Numerische Implementierung der Monodomaingleichung

Aufgabe: Repräsentation DGL auf diskreten Punkten



Annahme: • äquidistante Stützstellen $(x_0, t_0) = (0, 0)$

$$\Rightarrow (x_i, t_k) = (i \cdot h, k \cdot \Delta t)$$

• das AP an der motorischen Endplatte ist bekannt $V_m(x_0, t)$

$$-\frac{\partial V_m}{\partial t} + \sigma \Delta V_m(x, t) = \frac{1}{C_m} I_{ion}(V_m, t)$$

$\sigma = \frac{\sigma_{eff}}{A_m C_m}$ unabh. von x ,
konstant entlang
der Faser

$$\Delta V_m(x, t) = \frac{\partial^2 V_m(x, t)}{\partial x^2} = V_m''(x, t) = V_{m,xx}(x, t)$$

$$V_m(x_0, t) = g(t) \quad (\text{bekannt})$$

$$V_m'(x_N, t) = 0 \quad (\text{Neumann Randbedingung})$$

Nomenklatur: exakter Wert: $V_m(jh, k\Delta t) = V_m(x_j, t_k)$

$$\text{approximierter W.: } V_j^k \approx V_m(x_j, t_k)$$

Hier: Diskretisierung der Monodomaingleichung und der Randbedingung erfolgt mit Hilfe der Finite-Differenzen-Methode.

$$\underbrace{\nabla}_{\text{D.H. Abl.}} [\underbrace{\epsilon}_{\text{H.}} \underbrace{\nabla V_m}_{\text{H.}}] = \underbrace{A_m}_{\text{zeit. Abl.}} [\underbrace{C_m}_{\text{H.}} \underbrace{\frac{\partial V_m}{\partial t}}_{\text{zeit. Abl.}} + \underbrace{I_{\text{ion}}}_{\text{gewöhnl. DGL}}]$$

4.2. 1. Herleitung der Differenzenquotienten

Durch die Taylor-Reihenentwicklung um x erhält man

$$(1) u(x+h) = u(x) + h u'(x) + \frac{h^2}{2} u''(x) + \frac{h^3}{6} u'''(x) + \dots$$

$$(2) u(x-h) = u(x) - h u'(x) + \frac{h^2}{2} u''(x) - \frac{h^3}{6} u'''(x) + \dots$$

Wir suchen 1. Ableitungen und 2. Ableitungen

man erhält für die 1. Ableitungen:

$$\begin{aligned} \text{aus (1)} \quad u'(x) &= \frac{1}{h} [u(x+h) - u(x)] - \frac{h^2}{2} u''(x) - \frac{h^3}{6} u'''(x) - \dots \\ &= \frac{u(x+h) - u(x)}{h} + \mathcal{O}(h) \end{aligned}$$

x (x) (x)

$$u'(x) \approx \frac{u(x+h) - u(x)}{h}$$

vorwärts Differenz

$$\begin{aligned} \text{aus (2)} \quad u'(x) &= \frac{1}{h} [u(x) - u(x-h)] + \frac{h^2}{2} u''(x) - \frac{h^3}{6} u'''(x) - \dots \\ u'(x) &= \frac{u(x) - u(x-h)}{h} + \mathcal{O}(h) \end{aligned}$$

rückwärts Differenz

$$u'(x) = \frac{u(x) - u(x-h)}{h}$$

Durch Subtraktion von (1) - (2):

$$u(x+h) - u(x-h) = 2h u'(x) + \frac{h^3}{3} u'''(x) + \dots$$

$$u'(x) = \frac{u(x+h) - u(x-h)}{2h}$$

$$\mathcal{O}(h^2) = \frac{h^2}{6} u'''(x) + \dots$$

bessere Konvergenz

zentraler Differenzenquotient

Ähnlich können wir die 2. Ableitung herleiten:

Durch (1) + (2) erhält man:

$$u(x+h) + u(x-h) = 2u(x) + h^2 u''(x) + \frac{h^4}{12} u^{(4)}(x) + \dots$$

$$u''(x) = \frac{u(x+h) - 2u(x) + u(x-h)}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)$$

→ Fehler

$$\frac{\partial^2 V_m}{\partial x^2} \cdot \sigma = \frac{\partial V_m}{\partial t} + I_{ion} \frac{1}{C_m}$$

$$\text{mit } \sigma = \frac{\sigma_{eff}}{A_m C_m}$$

$$\overset{\sigma(V''(x,t))}{\nabla [\cancel{\sigma_{eff}} \nabla V_m]} = \cancel{A_m} [\cancel{C_m} \frac{\partial V_m}{\partial t} + \overset{\uparrow \frac{1}{C_m}}{I_{ion}}]$$

$\downarrow$ über 2. Ableitung

4.2.2. Die Diskretisierung des örtlichen Teils der

Monodomaingleichung

Mit $\begin{array}{ccccccc} & x_{i-1} & & x_i & & x_{i+1} & \\ & \times & & \times & & \times & \\ x_{i-1} & & x_i & & x_{i+1} & & \end{array}$ gilt am Punkt x_i für die Monodomaingleichung:

$$-\frac{\partial v(x_i, t)}{\partial t} + \sigma \frac{v(x_{i-1}, t) - 2v(x_i, t) + v(x_{i+1}, t))}{h^2} = \frac{1}{c_m} I_{ion}(v(x_i, t))$$

Allgemein gilt:

1) linker Randpunkt / Dirichlet Randbedingung: wir haben den Startpunkt x_0

$$i=1: -\frac{\partial v(x_1, t)}{\partial t} + \sigma \frac{v(x_0, t) - 2v(x_1, t) + v(x_2, t))}{h^2} = \frac{1}{c_m} I_{ion}$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial v(x_1, t)}{\partial t} = \sigma \frac{v(x_0, t) - 2v(x_1, t) + v(x_2, t))}{h^2} - \frac{1}{c_m} I_{ion}(v(x_1, t))$$

2) für einen Punkt in der Mitte der Domäne: $1 < i < N$

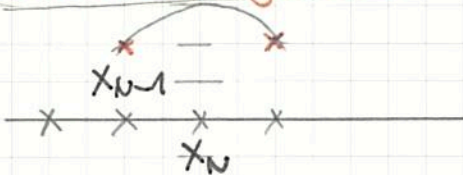
$$-\frac{\partial v(x_i, t)}{\partial t} + \sigma \frac{v(x_{i-1}, t) - 2v(x_i, t) + v(x_{i+1}, t))}{h^2} = \frac{1}{c_m} I_{ion}$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial v(x_i, t)}{\partial t} = \sigma \frac{v(x_{i-1}, t) - 2v(x_i, t) + v(x_{i+1}, t))}{h^2} - \frac{1}{c_m} I_{ion}(v(x_i, t))$$

3) Neumann-Randbedingung / rechter Randpunkt

$$i=N: \frac{\partial v(x_N, t)}{\partial t} = \sigma \frac{2 \cdot v(x_{N-1}, t) - 2v(x_N, t))}{h^2} - \frac{1}{c_m} I_{ion}(v(x_N, t))$$

Annahme von Symmetrie



$v(x_N, t)$ unbekannt

$$\dot{v}(x_N, t) = 0$$

mit $v(x_i, t) = v_i(t)$

$$\text{und } \underline{v}(t) = \begin{bmatrix} v_1(t) \\ \vdots \\ v_N(t) \end{bmatrix} \text{ gilt}$$

(siehe nächste Seite)

$$\boxed{1} \quad \frac{\partial V_1(t)}{\partial t} = \sigma \cdot \frac{V_0(t) - 2V_1(t) + V_2(t)}{h^2} - \frac{1}{C_m} I_{ion}(V_1(t), t)$$

$$\boxed{2} \quad \frac{\partial V_i(t)}{\partial t} = \sigma \cdot \frac{V_{i-1}(t) - 2V_i(t) + V_{i+1}(t)}{h^2} - \frac{1}{C_m} I_{ion}(V_i(t), t)$$

$$\boxed{3} \quad \frac{\partial V_N(t)}{\partial t} = \sigma \cdot \frac{2V_{N-1}(t) - 2V_N(t)}{h^2} - \frac{1}{C_m} I_{ion}(V_N(t), t)$$

$$\Rightarrow \boxed{\dot{\underline{v}}(t) = \underline{f}(t, \underline{v}(t))}$$

also ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen

→ je mehr x Punkte, desto größer das System
(meist aber auch genaueres Modell)

→ ohne $I_{ion} \frac{1}{C_m}$ lineares IGLS → einfacher

→ mit explizit / implizit EULER lösbar

4.2.3 Diskretisierung des zeitlichen Anteils mit einer expliziten Methode

Approximation der Zeit: $v_i(t_k) = v_i(k \cdot \Delta t) = v_i^k$

Für die Berechnung des Membranstroms wird folgende

Annahme getroffen: $I_{ion,i}^k = I_{ion}(v_i(t_k))$

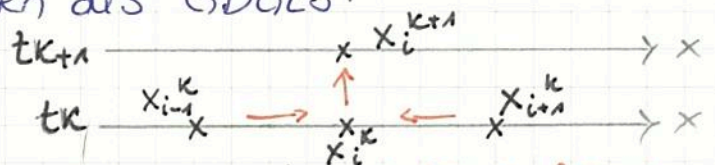
d.h. $I_{ion,i}^{k+1}$ erhält man durch die Zeitintegration über $[t_k, t_{k+1}]$ mit dem Startwert $v_i(t_k)$. Ein iteratives

Ändern des Transmembranpotential wird nicht beabsichtigt

($\rightarrow$ Schwache Kopplung / Entkopplung des zellulären Modells.)

Explizites-Verfahren zum Lösen des GDGLs:

Vorwärts-EULER



(1) $i=1$:

$$\frac{v_i^{k+1} - v_i^k}{\Delta t} = \frac{\sigma}{h^2} [v_0^k - 2v_1^k + v_2^k] - \frac{I_{ion,1}^k}{C_m} \quad \text{* bekannt für jeden Zeitschritt (Dirichlet R.B.)}$$

$$v_i^{k+1} = v_i^k + \underbrace{\frac{\sigma \cdot \Delta t}{h^2}}_{r} [v_0^k - 2v_1^k + v_2^k] - \underbrace{\frac{\Delta t}{C_m} I_{ion,i}^k}_{f_i^k}$$

$$r = \frac{\sigma \cdot \Delta t}{h^2}$$

$$f_i^k = \frac{\Delta t}{C_m} I_{ion,i}^k - r v_0^k$$

$$v_i^{k+1} = v_i^k - 2r v_1^k + r v_2^k - f_1^k$$

$$\Leftrightarrow v_i^{k+1} = (1-2r) v_1^k + r v_2^k - f_1^k$$

$$f_i^k = \frac{\Delta t}{C_m} I_{ion,i}^k \quad \text{für } i > 1$$

(2) $1 < i < N$

$$v_i^{k+1} = r v_{i-1}^k + (1-2r) v_i^k + r v_{i+1}^k - f_i^k$$

(3) $i=N$

$$v_N^{k+1} = (1-2r) v_N^k + 2r v_{N-1}^k - f_N^k$$

Wunsch: $\underline{v}^{k+1} = \underline{A} \underline{v}^k - \underline{f}^k$

mit $\underline{v}_i^k = \begin{bmatrix} v_1^k \\ \vdots \\ v_N^k \end{bmatrix}$ und $\underline{f}_i^k = \begin{bmatrix} f_1^k \\ \vdots \\ f_N^k \end{bmatrix}$ $f_1^k = \frac{\Delta t}{cm} I_{ion,1}^k - r v_0^k$
 $f_i^k = \frac{\Delta t}{cm} I_{ion,i}^k$ ($1 < i < N$)

$$A = \underline{I} + r \underline{J} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & 1 & \\ 0 & & & 1 \end{bmatrix} + r \cdot \begin{bmatrix} -2 & 1 & & \\ 1 & -2 & 1 & \\ & \ddots & \ddots & \\ 0 & & 2 & -2 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} (1-2r) & +r & & 0 \\ +r & (1-2r) & +r & \\ 0 & +r & (1-2r) & +r \\ 0 & & \ddots & \ddots & 2r & (1-2r) \end{bmatrix}$$

Bemerkungen:

- 1) A hängt von Δt und $h = \Delta x$ ab $r = \sigma \cdot \frac{\Delta t}{h^2}$
- 2) Dirichlet - Randbedingungen: $\rightarrow$ Vektor $\underline{f}^k$
- 3) Neumann - Randbedingung: $\rightarrow$ führt zu einem Zeileneintrag
- 4) Notwendig und hinreichend für die absolute Stabilität ist die Bedingung, dass die Eigenwerte von $\lambda(A) < 1$

$$1 - 4r < \lambda(A) < 1 ; r > 0$$

$\rightarrow$ Absolute Stabilität ist erfüllt durch:

$$r > \frac{1}{2} \Leftrightarrow \frac{\sigma \cdot \Delta t}{h^2} < \frac{1}{2} \quad \text{oder} \quad \Delta t < \frac{h^2}{2 \cdot \sigma}$$

Δt : zeitl. h : örtlich

$\rightarrow$ je kleiner die örtliche Diskretisierung, desto kleiner die zeitliche Diskretisierung

Lokaler Diskretisierungsfehler für die explizite Methode

Für $1 < i < N$ gilt die Rechenverschrift (mit $f_i^k = 0$):

$$V_i^{k+1} = r V_{i-1}^k + (1-2r) V_i^k + r V_{i+1}^k$$

Startpunkt der Fehlerbetrachtung sind exakte Werte

an den Stellen $(x_i, t_k): V_m(x_i, t_k)$
 $(x_i, t_{k+1}): V_m(x_i, t_{k+1}) \dots$

approximierter Wert für die Stelle (x_i, t_{k+1}) :

$$\underline{V_i^{k+1}} = r \cdot V_m(x_{i-1}, t_k) + (1-2r) V_m(x_i, t_k) + r V_m(x_{i+1}, t_k)$$

lokale Diskretisierungsfehler:

$$\begin{aligned} d_i^{k+1} &:= \underline{V_m(x_i, t_{k+1})} - \underline{V_i^{k+1}} \\ &= \text{const.} + \mathcal{O}(\Delta t^p) + \mathcal{O}(h^q) + \mathcal{O}(\Delta t^r h^4) \end{aligned}$$

Taylorreihenentwicklung von

$$1) V_m(x_i, t_{k+1}) = V_m(x_i, t_k) + \Delta t \frac{\partial V_m(x_i, t)}{\partial t} \Big|_{t_k} + \frac{1}{2} \Delta t^2 \frac{\partial^2 V_m(x_i, t)}{\partial t^2} \Big|_{t_k} \dots$$

$$\begin{aligned} 2) V_m(x_{i-1}, t_k) &= V_m(x_i, t_k) - h \frac{\partial V_m(x, t_k)}{\partial x} \Big|_{x_i} + \frac{1}{2} h^2 \frac{\partial^2 V_m(x, t_k)}{\partial x^2} \Big|_{x_i} \\ &\quad - \frac{h^3}{6} \frac{\partial^3 V_m(x, t_k)}{\partial x^3} \Big|_{x_i} + \frac{h^4}{24} \frac{\partial^4 V_m(x, t_k)}{\partial x^4} \Big|_{x_i} \dots \end{aligned}$$

$(1-2r) \cdot$

$$3) V_m(x_i, t_k) = V_m(x_i, t_k)$$

$$\begin{aligned} 4) V_m(x_{i+1}, t_k) &= V_m(x_i, t_k) + h \frac{\partial V_m(x, t_k)}{\partial x} \Big|_{x_i} + \frac{1}{2} h^2 \frac{\partial^2 V_m(x, t_k)}{\partial x^2} \Big|_{x_i} \\ &\quad + \frac{h^3}{6} \frac{\partial^3 V_m(x, t_k)}{\partial x^3} \Big|_{x_i} + \frac{h^4}{24} \frac{\partial^4 V_m(x, t_k)}{\partial x^4} \Big|_{x_i} \dots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} d_i^{k+1} &= 0 + \Delta t \frac{\partial V_m(x_i, t)}{\partial t} \Big|_{t_k} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 V_m(x_i, t)}{\partial t^2} \Big|_{t_k} + 0 \\ &\quad - 2r \cdot \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 V_m(x, t_k)}{\partial x^2} \Big|_{x_i} + 0 - 2r \frac{1}{24} \cdot h^4 \frac{\partial^4 V_m(x, t_k)}{\partial x^4} \Big|_{x_i} \dots \end{aligned}$$

mit $rh^2 = \sigma \cdot \Delta t$:

$$\begin{aligned} d_i^{k+1} &= \Delta t \cdot \left. \frac{\partial V_m(x_i, t)}{\partial t} \right|_{t_k} + \frac{\Delta t^2}{2} \left. \frac{\partial^2 V_m(x_i, t)}{\partial t^2} \right|_{t_k} \\ &\quad - \sigma \cdot \Delta t \left. \frac{\partial^2 V_m(x, t_k)}{\partial x^2} \right|_{x_i} - \frac{h^2}{12} \cdot \sigma \cdot \Delta t \left. \frac{\partial^4 V_m(x, t_k)}{\partial x^4} \right|_{x_i} \dots \\ &= \Delta t \cdot \left[\left. \frac{\partial V_m(x_i, t)}{\partial t} \right|_{t_k} - \sigma \cdot \left. \frac{\partial^2 V_m(x, t_k)}{\partial x^2} \right|_{x_i} \right] \\ &\quad + \frac{\Delta t^2}{2} \left. \frac{\partial^2 V_m(x_i, t)}{\partial t^2} \right|_{t_k} - \frac{\sigma \Delta t h^2}{12} \left. \frac{\partial^4 V_m(x, t_k)}{\partial x^4} \right|_{x_i} \end{aligned}$$

$$d_i^{k+1} = \mathcal{O}(\Delta t^2) + \mathcal{O}(\Delta t h^2)$$

→ 1. Term fällt raus, da: $\frac{\partial V_m}{\partial t} - \sigma \frac{\partial^2 V_m}{\partial x^2} \stackrel{!}{=} 0$
vgl. Monodromiegleichung S. 35 & Bedingung $f_i^k = 0$

Der globale Diskretisierungsfehler für die explizite Methode

Zum Zeitschritt t_k wurden bereits $k = \frac{t_k}{\Delta t}$ Schritte durchgeführt und in jedem Rechenschritt entsteht ein lokaler Diskretisierungsfehler

$$g_i^{k+1} = k \cdot d_i^{k+1} = \frac{t_k}{\Delta t} \cdot [\mathcal{O}(\Delta t^2) + \mathcal{O}(\Delta t \cdot h^2)]$$

$$g_i^{k+1} = \mathcal{O}(\Delta t) + \mathcal{O}(h^2)$$

→ 1. Ordnung bzgl. der Zeit, 2. Ordnung bzgl. des Spats

Hausübung 4

$x_{k+1} \leftarrow$ zeitl. Diskretisierung
 $x_{i+1} \leftarrow$ örtl. Diskretisierung

In Matrix Notation: $\underline{A} \cdot \underline{v}^{k+1} = \underline{B} \underline{v}^k + \underline{f}^k$

$$\begin{bmatrix} (2+2r) & -r & 0 \\ -r & (2+2r) & 0 \\ 0 & \dots & -2r & (2+2r) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_N \end{bmatrix}^{k+1} = \begin{bmatrix} (2-2r) & r & & \\ r & (2-2r) & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & 2r & (2-2r) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_N \end{bmatrix}^k + \begin{bmatrix} f_1^k + r(a_1^k a_N^k) \\ -f_2^k \\ \vdots \\ -f_N^k \end{bmatrix}$$

Es gilt also zu lösen: $\underline{v}^{k+1} = \underline{A}^{-1} \underline{B} \underline{v}^k + \underline{A}^{-1} \underline{f}^k$

Rechenbeispiel für einen Zeitschritt:

• Anzahl Gitterpunkte: $n=3$ $[0,1,2,3]$

• Zeitschritt: $\Delta t = 0,05 \text{ ms}$

• Ortsauflösung: $\Delta x = h = 0,0025 \text{ cm}$

• $v_i^0 = -75 \text{ mV}$

• $I_{\text{ion},i} = 0,54$

geg: $\sigma_{\text{eff}} = 0,01 \frac{\text{mS}}{\text{cm}}$, $\lambda_m = 500 \text{ cm}^{-1}$, $C_m = 1 \frac{\text{mF}}{\text{cm}^2}$

$$\sigma = \frac{\sigma_{\text{eff}}}{\lambda_m C_m} = 2 \cdot 10^{-5} \frac{\text{cm}^2}{\text{ms}} ; r = \frac{\Delta t \cdot \sigma}{h^2} = 0,16$$

Zu lösen: $\underline{A} \underline{v}^{k+1} = \underline{B} \cdot \underline{v}^k + \underline{f}^k$ mit $f_1^k = -\frac{2\Delta t}{C_m} I_{\text{ion},1}^k + r v_0^{k+1} + r v_0^k$

$$f_i^k = -\frac{2\Delta t}{C_m} I_{\text{ion},i}^k \quad (i=2, \dots, N)$$

$$\begin{bmatrix} 2,32 & -0,16 & 0 \\ -0,16 & 2,32 & -0,16 \\ 0 & -3,2 & 2,32 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1^{k+1} \\ v_2^{k+1} \\ v_3^{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1,68 & 0,16 & 0 \\ 0,16 & 1,68 & 0,16 \\ 0 & 0,32 & 1,68 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1^k \\ v_2^k \\ v_3^k \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} f_1^k \\ f_2^k \\ f_3^k \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 2,32 & -0,16 & 0 \\ -0,16 & 2,32 & -0,16 \\ 0 & -3,2 & 2,32 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} v_1^1 \\ v_2^1 \\ v_3^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -148,09 \\ -148,87 \\ -148,97 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} -68,98 \\ -74,56 \\ -74,54 \end{bmatrix} = \underline{v}^1$$