Übungen zur Vorlesung

Simulationswerkzeuge

Dr. S. Lang, D. Popović

Besprechung am 16. Juni 2009 in der Übung

Übung 13 DUNE-pdelab: Einfache Neuronenzellen mit stationärer Diffusion-Reaktion

In der letzten Übung haben wir die Diffusions-Reaktions-Gleichung in $2D$ untersucht. Mit dieser Gleichung läßt sich die elektrische Potentialverteilung in einer einfachen zylindrischen Neuronenzelle modellieren. Sei eine idealisierte Neuronenzelle in Form eines Zylinders der Länge l mit Radius r, beide in μm, gegeben. Dann beschreibt in der Problemstellung

$$\begin{aligned} -\pi r^2 G_A\, \partial_{xx} v(x) + 2\pi r G_M\, v(x) = 0 \qquad & \text{in } \Omega = [0, l], \\ \partial_x v(x) = -\frac{2G_M}{rG_A} I_0 \qquad & \text{für } x = 0, \end{aligned}$$

zusätzliche Randbedingungen bei $x = l$

$v(x)$ die Potentialverteilung bei einem am linken Terminal appliziertem Strom. Weiter bezeichnet G_A die spezifische axiale Leitfähigkeit des Zell-Materials (Zytoplasma), während G_M die spezifische Leitfähigkeit der Zellmembran ist. Sie haben jeweils die Einheiten $\frac{1}{\Omega cm}$, während I_0 in μA angegeben wird.

Für die Randbedingungen am rechten Terminal ($x = L$) unterscheiden wir zwei Fälle:

1. *Killed end* $v = 0$, entspricht einem Durchtrennen der Zelle,
2. *Sealed end* $\partial_x v = 0$, entspricht einem Abschluss der Zelle mit einer undurchlässigen Membran.

Für die oben angegebenen Probleme existieren analytische Lösungen. Die allgemeine Lösungen einer Gleichung der Art $a\partial_{xx}V - V = 0$ lässt sich schreiben als $v = c_1\, cosh(\frac{x}{\sqrt{a}}) + c_2\, sinh(\frac{x}{\sqrt{a}})$. Mit den Randbedingungen ergeben sich mit $\frac{rG_A}{2G_M} =: a$ die Lösungen:

1. Für den Fall *killed end*: $v(x) = \frac{I_0}{\sqrt{a}} \cdot \left\{ tanh\, l\, cosh\left(\frac{x}{\sqrt{a}}\right) - sinh\left(\frac{x}{\sqrt{a}}\right) \right\}$,
2. Für den Fall *sealed end*: $v(x) = \frac{I_0}{\sqrt{a}} \cdot \left\{ coth\, l\, cosh\left(\frac{x}{\sqrt{a}}\right) - sinh\left(\frac{x}{\sqrt{a}}\right) \right\}$.

Details zu der Herleitung der Gleichung und Lösung finden sich zum Beispiel in „Introduction to theoretical neurobiology“, von Henry C. Tuckwell, erschienen bei *Cambridge University Press.*

In Ihrem Home-Verzeichnis ist wie gehabt das Verzeichnis `dune` mit dem Modul `dune-pdelab` vorhanden, in dessen Unterverzeichnis `dune/pdelab/test` wir wieder arbeiten wollen. Zunächst basteln wir uns ein neues `make`-Target:

- Dazu fügen wir im `Makefile.am` ein neues Ziel `simw_simpleneuron1D` hinzu und kopieren die vier Dateien `simw_diffusionreaction*.{cc,hh}` in entsprechende Dateien mit dem neuen Namen.
- Das Kommando `make clean && make simw_simpleneuron1D` erzeugt anschließend das Programm.

Nun müssen wir das Programm problemspezifisch verändern. Dazu gehen wir wie folgt vor:

- Hinzufügen zweier Klassen für die exakten Lösungen der beiden Randwert-Probleme in der Datei `simw_simpleneuron1Dfcts.hh`. Die Klassen sollen eine Methode `T evaluate(X x)` enthalten, die als Parameter eine Koordinate x erhält und ein `T` zurückliefert. Die Typen `T,X` sollen Template-Parameter der Funktion sein.

- Inkludieren der im Verzeichnis bereistehenden Datei `l2norm.hh`. In dieser befindet sich eine templatisierte Funktion, die die L_2-Norm des Fehlers $e(x) := v(x) - v^h(x)$ bei gegebener analytischer Lösung $v(x)$ und approximierter Lösung v^h berechnet.

- Erweiterung der Funktion `cylinder1D` um die Ausgabe des Fehlers in der L_2-Norm. Dazu wird die Funktion `l2norm` mit entsprechenden Template-Parametern aufgerufen.

Abschließend wollen wir unsere Implementierung testen und dazu folgende zwei Testprobleme lösen:

1. *Killed end*, $l = 316\mu m$, $r = 2\mu m$, $R_M = 2.0k\Omega cm^2$, $G_A = 200\frac{1}{\Omega cm}$, $I_0 = 2\mu A$.

2. *Sealed end*, gleiche Parameter wie bei vorigem Beispiel.

Rechnen Sie beide Probleme und visualisieren Sie die Lösungen. Das Gleichgewichts-Potential sollte vom linken Terminal weg abfallen. Im Falle *killed end* ergibt sich natürlich $v = 0$ am rechten Terminal, während der Potentialverlauf bei *sealed end* Randbedinungen über dem Potentialverlauf des *killed end* Falles liegt und am rechten Terminal größer 0 ist (Fluß über den Rand). Kontrollieren Sie die Konvergenzordnung $O(h^2)$ des numerischen Lösungsverfahrens durch Berechnung des Fehlers für sukzessive verfeinerte Gitter.