

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

PEDRO HAERTER PINTO

SINCRONIZAÇÃO ENTRE OSCILADORES NÃO LINEARES
ACOPLADOS NÃO LOCALMENTE

Curitiba, 2022

PEDRO HAERTER PINTO

SINCRONIZAÇÃO ENTRE OSCILADORES NÃO LINEARES ACOPLADOS NÃO LOCALMENTE

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física do Setor de Ciências Exatas da Universidade Federal do Paraná, como requisito para a obtenção do grau de Mestre em Física

Orientador: Prof. Dr. Ricardo Luiz Viana

Curitiba, 2022

I

Catálogo na Fonte: Sistema de Bibliotecas, UFPR
Biblioteca de Ciência e Tecnologia

P659s Pinto, Pedro Haerter
 Sincronização entre osciladores não lineares acoplados não
 localmente [recurso eletrônico] / Pedro Haerter Pinto – Curitiba,
 2022.

 Dissertação - Universidade Federal do Paraná, Setor de
 Ciência Exatas, Programa de Pós-graduação em Física.

 Orientador: Prof. Dr. Ricardo Luiz Viana

 1. Sincronização. 2. Oscilações não-lineares. I. Universidade
 Federal do Paraná. II. Viana, Ricardo Luiz . III. Título.

CDD: 531.322

Bibliotecária: Roseny Rivelini Morciani CRB-9/1585

TERMO DE APROVAÇÃO

Os membros da Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação FÍSICA da Universidade Federal do Paraná foram convocados para realizar a arguição da Dissertação de Mestrado de **PEDRO HAERTER PINTO** intitulada: **"Sincronização entre osciladores não-lineares acoplados não localmente"**, sob orientação do Prof. Dr. RICARDO LUIZ VIANA, que após terem inquirido o aluno e realizada a avaliação do trabalho, são de parecer pela sua APROVAÇÃO no rito de defesa. A outorga do título de mestre está sujeita à homologação pelo colegiado, ao atendimento de todas as indicações e correções solicitadas pela banca e ao pleno atendimento das demandas regimentais do Programa de Pós-Graduação.

CURITIBA, 25 de Fevereiro de 2022.

Assinatura Eletrônica

25/02/2022 16:59:16.0

RICARDO LUIZ VIANA

Presidente da Banca Examinadora

Assinatura Eletrônica

25/02/2022 17:14:27.0

JOSÉ DANILO SZEZECH JÚNIOR

Avaliador Interno (UNIVERSIDADE ESTADUAL DE PONTA GROSSA)

Assinatura Eletrônica

25/02/2022 20:16:02.0

ANTONIO MARCOS BATISTA

Avaliador Externo (UNIVERSIDADE ESTADUAL DE PONTA GROSSA)

Agradecimentos

Aos meus pais Carlos e Denise que sempre me apoiaram, incentivaram e estiveram presentes em todas as fases da minha formação, estimulando e permitindo um desenvolvimento criativo e plural.

A Eduarda, minha namorada, que mesmo, à distância, sempre me deu apoio e incentivo, ajudando quando possível e dando conforto quando necessário.

Aos meus dois amigos que tenho muito prazer em dividir a profissão de Físico, João e Lucas, que a alguns anos me auxiliam e incentivam como físico, sempre dividindo experiências, ideias e bons momentos.

Aos “*Virts*” que, mesmo a distância, sempre se fizeram presentes, todos me escutaram falar sobre os assuntos mais “empolgantes” de física e mesmo assim ainda incentivaram e deram forças para concluir este trabalho.

A Alexandra Elbakyan e o *Sci-Hub* que lutam pela divulgação da ciência e o livre acesso ao conhecimento e permitiram a realização deste trabalho, por meio da liberação de diversos trabalhos que seriam impossíveis de se adquirir.

Meu sinceros agradecimentos ao prof. Dr. Ricardo Luiz Viana, que aceitou orientar este trabalho e compartilhou muito de seu conhecimento, que mesmo com as condições impostas pela natureza sempre esteve presente e auxiliando, ajudando em todos os momentos de necessidade e incentivou todas as ideias que apresentei, permitindo a realização deste trabalho de maneira mais tranquila.

A CAPES e ao CNPq pelo apoio financeiro.

E a todos aqueles que ajudaram direta ou indiretamente na realização deste trabalho, muito obrigado.

“Um sistema mantém uma certa estabilidade fluida que pode ser destruída por um deslize em apenas um nicho. Um sistema tem ordem, uma correnteza que flui de um ponto a outro. Se algo represar a correnteza, a ordem desmoronará.”
(Herbert, Frank. Duna)

RESUMO

Entender como um grupo de elementos funciona de maneira conjunta é de interesse para uma gama de áreas na Física, principalmente quando associado a outros campos do saber, tais como a Química, Meteorologia e Biologia. Trabalhando com esse último campo, pode-se descrever e entender como alguns fenômenos de sincronização, como controle de hormônios ou regularização de ciclos ocorrem e compreender as chaves para tais efeitos.

Para estudar esses efeitos, fazemos algumas simplificações, como considerar os sistemas biológicos como sendo osciladores pontuais que vão emitir e absorver uma substância que se difunde pelo meio e causa o acoplamento entre os osciladores como células interagindo em alguma parte do corpo por meio de hormônios.

Utilizando o modelo de acoplamento de Kuramoto em uma rede de todos com todos, nós descrevemos matematicamente como é a interação de um conjunto de osciladores de fase, os quais serão acoplados por meio de uma função que depende da concentração da substância em cada ponto do espaço e do tempo, e da fase dos osciladores, resultando em equação integro-diferencial. A solução da equação integro-diferencial foi obtida por meio de um método de integração numérica que nós revisamos e adaptamos.

Tal problema já foi tratado anteriormente, porém todas as abordagens prévias consideravam a difusão da substância no meio como sendo instantânea, simplificando as equações e facilitando as contas. Porém, nós resolvemos esse problema de maneira completa e utilizando um tempo de difusão compatível com os osciladores.

Por meio dos métodos desenvolvidos por Kuramoto para o estudo da sincronização, como o parâmetro de Ordem e a análise de frequências perturbadas, entre osciladores, foi possível analisar e perceber como os parâmetros da substância (coeficiente de difusão e degradação) influenciam na sincronização dos osciladores para três geometrias espaciais diferentes.

Palavras chave: Sincronização, Osciladores biológicos, Método Integral, Acoplamento não-local.

ABSTRACT

Understanding how a group of elements work together is of interest to a range of areas in physics, especially when associated with other fields of knowledge, such as chemistry, meteorology and biology. Working with the latter field, one can describe and understand how some synchronization phenomena, such as hormone control or cycle regularization occur, and understand the keys to such effects.

To study these effects we make some simplifications, such as considering biological systems as being point oscillators that will emit and absorb a substance that diffuses into the medium and causes coupling between the oscillators like cells interacting somewhere in the body by means of hormones.

Using Kuramoto's coupling model in an all-with-all network, we describe mathematically what the interaction of a set of phase oscillators looks like, which will be coupled by means of a function that depends on the concentration of the substance at each point in space and time, and on the phase of the oscillators, resulting in an integro-differential equation. The solution of the integro-differential equation was obtained by means of a numerical integration method that we have reviewed and adapted.

Such a problem has been addressed after, but all previous approaches considered the diffusion of the substance in the medium to be instantaneous, simplifying the equations and making the math easier. But we solve this problem completely and using a diffusion time compatible with oscillators.

By means of the methods developed by Kuramoto for the study of synchronization, such as the Order parameter and the analysis of perturbed frequencies, between oscillators, it was possible to analyze and realize how the substance parameters (diffusion coefficient and degradation) influence the synchronization of the oscillators for three different spatial geometries.

Keywords: Synchronization, Biological Oscillators, Integral Method, Nonlocal Coupling.

LISTA DE FIGURAS

2.1	Exemplo de Espaço de fase e da dinâmica de um oscilador harmônico simples	18
2.2	Evolução temporal de 10 osciladores aleatórios descritos pela equação (2.8) para diferentes valores de acoplamento K , sendo (a) $K = 0$, (b) $K = 0.4$ e (c) $K = 1.2$.	22
2.3	100 osciladores no plano complexo para diferentes valores de acoplamento, juntamente com o vetor z cujo módulo é o parâmetro de ordem médio $\bar{R}$ e o ângulo a fase média do sistema. Tem-se que em (a) $K = 0$, (b) $K = 0.3$, (c) $K = 0.4$ e (d) $K = 1.2$.	23
2.4	Parâmetro de ordem médio $\bar{R}$ em função do fator de acoplamento K , onde a reta vertical representa o valor de acoplamento crítico $K_C = 0.03$ que será apresentada na seção 2.3.1	24
3.1	Diagrama representando o modelo estudado, sendo os pontos vermelhos os sistemas dinâmicos, com posição r_j , imersos em um espaço d -dimensional e a região hachurada o local onde ocorre a difusão da substância química.	31
3.2	Representação do erro médio e erro máximo cometido pelo método desenvolvido quando comparado a solução analítica para diferentes valores de espaçamento h .	46
4.1	Representação dos osciladores no espaço unidimensional, sendo os círculos vermelhos os osciladores distribuídos no espaço de tamanho L	48
4.2	Frequências perturbadas Ω_j organizadas em ordem crescente para diferentes valores de difusão D no espaço unidimensional. Utilizando $N = 100$, $K = 10$ e $\eta = 1$. O caso não perturbado representa a situação sem acoplamento com $K = 0$ para ser utilizado como referencial para total dessincronização.	49
4.3	Frequências perturbadas Ω_j organizadas em ordem crescente para diferentes valores do parâmetro de degradação η , considerando o espaço unidimensional. Utilizando $N = 100$, $K = 10$ e $D = 1$. Tendo como padrão não perturbado o caso $K = 0$.	50
4.4	O quadro mostra a evolução temporal do parâmetro de ordem para o caso unidimensional para diferentes propriedades do sistema, onde é variada a propriedade mostrada no gráfico e mantido o resto constante da forma $K = 10$, $D = 1$ e $\eta = 1$	51

4.5	Análise dos valores da função de Green $G(x, t \xi, 0)$ para diferentes limites da variável de soma n	51
4.6	Representação dos osciladores no espaço bidimensional, onde os círculos vermelhos simbolizam os osciladores distribuídos no espaço, sendo localizados dois osciladores de exemplo.	52
4.7	Comparação das frequências perturbadas organizadas em valores crescentes para diferentes coeficientes de difusão D considerando o caso bidimensional, sendo utilizado $K = 10$ e $\eta = 1.0$	53
4.8	Frequências perturbadas Ω_j organizadas em ordem crescente para o caso do espaço bidimensional, mantendo $K = 10$, $D = 1$ e variando η	54
4.9	Representação dos osciladores no espaço circular, sendo os círculos vermelhos os osciladores que estão distribuídos no espaço, e mostrando como é localizado dois osciladores de exemplo.	54
4.10	Representação das frequências perturbadas organizadas de maneira crescente para diferentes valores de D , sendo analisado o caso circular e mantendo $K = 10$ e $\eta = 1.0$	55
4.11	Frequências perturbadas Ω_j organizadas em ordem crescente para diferentes valores de η considerando o espaço circular. Fazendo uso de $K = 10$ e $D = 1$. Tendo como padrão não perturbado o caso $K = 0$	56
4.12	Parâmetro de ordem em função da constante de acoplamento para as três diferentes geometrias estudadas, sendo o eixo inferior a escala referente aos casos unidimensional e circular, e o eixo superior referente a geometria bidimensional. Foi mantido $D = \eta = 1$	57
4.13	Parâmetro de ordem em função do coeficiente de difusão para as três diferentes geometrias estudadas, sendo o eixo inferior a escala referente aos casos unidimensional e bidimensional, e o eixo superior referente a geometria circular. Sendo mantido $K = 10$ e $\eta = 1$	58
4.14	Parâmetro de ordem em função do coeficiente de degradação para as três diferentes geometrias estudadas. Utilizando $K = 10$ e $D = 1$	59
4.15	Comparação dos métodos de resolução para diferentes valores da constante de acoplamento K , e mantendo $D = \eta = 1$, com a marcação do valor de K_C	61
4.16	Comparação dos métodos de resolução da equação integro diferencial variando o coeficiente de difusão e mantendo $K = 10$ e $\eta = 1$. Sendo o eixo superior referente ao caso do tipo Born e o eixo inferior referente ao caso numérico, devida a grande diferença de escala.	62

4.17	Contraste entre os resultados obtidos por diferentes métodos de resolução da equação integro diferencial variando o coeficiente de degradação e mantendo $K = 10$ e $D = 1$. Sendo o eixo superior referente ao caso tipo Born e o eixo inferior referente ao caso numérico, devida a grande diferença de escala.	63
------	--	----

SUMÁRIO

1	Introdução	12
2	Osciladores e Sincronização	17
2.1	Oscilações	17
2.1.1	Oscilador de Fase	18
2.2	Sincronização	19
2.2.1	Travamento de fase e frequência	19
2.2.2	Modelo de Kuramoto	20
2.3	Análise estacionária	25
2.3.1	Acoplamento Crítico K_C	26
3	Osciladores acoplados por uma substância difusível com velocidade finita	29
3.1	Equação da difusão	29
3.1.1	Modelo de acoplamento	31
3.2	Funções de Green	32
3.2.1	Solução por Green	33
3.3	Limite de rápida difusão	39
3.3.1	Análise estacionária	41
3.3.2	Acoplamento Crítico K_c	43
3.4	Método numérico	44
3.4.1	Exemplo	46
4	Sincronização de Osciladores acoplados por uma substância difusiva com velocidade finita	47
4.1	Sincronização de frequência	48
4.1.1	Caso Unidimensional	48
4.1.2	Caso Bidimensional	52
4.1.3	Caso Circular	53
4.2	Parâmetro de ordem	56
4.3	Método de Born	59
4.3.1	Comparação entre métodos	60

5	Considerações Finais	64
	Referências Bibliográficas	67
A	Cálculo das Funções de Green para diferentes geometrias	71
A.1	Função $G(x, t \xi, \tau)$ para o caso unidimensional em todo o espaço livre $-\infty < x, \xi < \infty$	71
A.2	Função $G(x, t \xi, \tau)$ para o caso unidimensional limitado entre $0 \leq x, \xi \leq L$	72
A.3	Função $G(x, y, t \xi, \mu, \tau)$ para o caso bidimensional limitado entre $0 \leq x, \xi \leq a$ e $0 \leq x, \xi \leq b$	73
A.4	Função $G(r, \theta, t \rho, \theta', \tau)$ para o caso bidimensional em coordenadas polares entre $0 < r < a$ e $0 \leq \theta \leq 2\pi$	75
A.5	Função $G(r, \theta, t \rho, \theta', \tau)$ para o caso bidimensional em coordenadas polares entre $a < r < \infty$ e $0 \leq \theta \leq 2\pi$	78
A.6	Função $G(r, \theta, t \rho, \theta', \tau)$ para o caso bidimensional em coordenadas polares entre $a < r < b$ e $0 \leq \theta \leq 2\pi$	79

1 Introdução

Uma das interpretações que pode-se dar à segunda lei da termodinâmica é de que tudo no universo tende para a desordem [1]. Porém contrariando a expectativa de total desordem, encontramos na natureza alguns exemplos de sistemas e efeitos que tem seu comportamento bem regulado e um funcionamento coletivo organizado, sejam influenciados por algum agente externo, ou por uma adaptação de sobrevivência. Como a sincronização de metrônimos [2], o piscar simultâneo de diversos vaga-lumes e até o funcionamento conjunto das células de um coração, tais efeitos que vão contra a tendência natural de desordem são exemplos de sistemas sincronizados [3].

Tais sincronizações ocorrem quando todo o sistema estudado trabalha de forma única e coesa, assim todos os integrantes do sistema em estudo realizam suas ações juntamente. Um dos relatos historicamente mais relevantes que se tem de tal efeito é o do físico Christiaan Huygens (1629-1695), citado como criador dos relógios de pêndulo e grande estudioso dos fenômenos do tempo e oscilações. Durante uma enfermidade em que Huygens teve que ficar de cama, notou que dois relógios que havia construído e estavam presos próximos em uma parede começaram a oscilar de maneira igual [4].

Intrigado pelo efeito, o cientista holandês testou diversas configurações do experimento para determinar a origem do efeito, primeiro crendo que a simpatia, como ele chamou a princípio, era causada devido a correntes de ar que influenciavam o experimento, após colocar um aparato entre os relógios e ainda permanecer o efeito, Huygens realizou mais alguns experimentos para determinar a origem do efeito e conseguiu determinar que a causa da sincronização entre os relógios se dava pela viga de madeira que conectava ambos os relógios e que a sincronização entre eles seria fruto das ondas mecânicas [4].

Apesar das descrições de Huygens no século XVII, foi somente no século XX que a sincronização foi entendida de forma mais completa. Durante os estudos de Edward Appleton (1892-1965) e Balthasar van der Pol (1889-1959) com um elemento não linear em circuitos eletrônicos, o triodo, percebeu-se que ocorriam efeitos de sincronização entre circuitos conectados e com oscilações causadas por tais triodos [5].

Após tais pesquisas surgiram mais artigos e trabalhos na área de estudo dos comportamentos conjuntos, um dos mais influentes pesquisadores foi Arthur Winfree (1942-2002) que teve sucesso simplificando os sistemas para osciladores de ciclo-limite, que, mesmo que tivessem equações complicadas, podiam ser resolvidas dado alguns casos especiais de

relaxamento do sistema e variando a escala temporal [6]. Seu modelo é comandado pela equação

$$\frac{d\theta_i}{dt} = \omega_i + \left(\sum_{j=1}^N X(\theta_j) \right) Z(\theta_i), \quad i = 1, \dots, N. \quad (1.1)$$

sendo θ as fases dos osciladores, ω as suas respectivas frequências naturais e X e Z os parâmetros de influência de j em i e a sensibilidade a essas influências respectivamente, assim cada oscilador j influencia todos os outros e a dinâmica do oscilador i vai depender da influência conjunta de todos os outros, ao analisar os resultados do sistema Winfree notou uma característica de transição de fase temporal na dinâmica dos osciladores. Tais fenômenos chamaram a atenção de Yoshiki Kuramoto(1940-), que começou a trabalhar em seu próprio modelo baseado no de Winfree [7].

Partindo das ideias de Winfree e motivado pelo fenômeno de sincronização coletiva, Kuramoto solidificou toda a base da dinâmica e aplicou métodos perturbativos para mostrar que, para qualquer sistema de osciladores de ciclo limite quase iguais, com um fraco acoplamento, a dinâmica dos osciladores é dada pela equação

$$\frac{d\theta_i}{dt} = \omega_i + \sum_{j=1}^N \Gamma_{ij}(\theta_j - \theta_i), \quad i = 1, \dots, N. \quad (1.2)$$

com o parâmetro Γ_{ij} determinado de acordo com o modelo de ciclo limite. Mesmo nesta primeira simplificação, o modelo ainda era difícil de ser tratado, devido a complexidade para se determinar as funções de acoplamento e devido a falta de uma especificação topológica.

Desta forma, Kuramoto utilizou, tal qual Winfree, o campo médio para poder tratar o seu modelo, de modo que o *Modelo de Kuramoto* corresponde ao caso mais simples, onde todos os osciladores estão acoplados entre si, com pesos iguais e por meio de uma função senoidal

$$\frac{d\theta_i}{dt} = \omega_i + \frac{K}{N} \sum_{j=1}^N \sin(\theta_j - \theta_i), \quad i = 1, \dots, N. \quad (1.3)$$

sendo $K \geq 0$ a força que acopla os osciladores. Mais tarde também encontra-se uma solução analítica para descrever a forma com que os osciladores iriam se sincronizar para diferentes valores de acoplamento [8, 9], permitindo assim estudar uma grande classe de efeitos.

Um dos exemplos de sincronização na natureza é a sincronização entre os vagalumes do gênero *Pteroptyx* que são encontrados no sudeste asiático, principalmente na Tailândia, Nova Guiné e Malásia. Os vagalumes de tal gênero, em oposição ao comportamento popularmente conhecido de emitir o brilho de maneira contínuo, piscam de maneira mais rápida, com uma determinada frequência própria para atrair as fêmeas de sua espécie. O

fato observado por diversos exploradores e curiosos é que passado um tempo, os piscares que eram aleatórios e individuais se alteram formando um efeito coletivo em que os vagalumes piscam de maneira conjunta, mostrando um efeito de sincronização entre todos os indivíduos [10, 11].

Outros fenômenos de sincronização ocorrem dentro do corpo humano: como o funcionamento das células do núcleo supraquiasmático que se sincronizam dependendo da quantidade de luz que é recebida pela retina e regulam os ciclos diários da vida humana [12–14]; A sincronização das células- β na liberação de hormônios da insulina dada a concentração de Ca^{2+} no pâncreas [15]; Pode-se citar de maneira mais macroscópica, o efeito que ocorre com mulheres que convivem de maneira próxima, dividindo ambientes cotidianamente e, a partir de tal convivência, começam a sincronizar os seus ciclos menstruais [16].

Cada um dos exemplos dados possui um agente físico que vai mediar o acoplamento entre os indivíduos do sistema, os vagalumes sincronizam por meio da luz [17], as células do núcleo supraquiasmático por meio de estímulos elétricos dos neurônios e as células do pâncreas por meio de hormônios e a menstruação de mulheres acredita-se que ocorre por meio da difusão de um feromônio [18, 19].

Outra relação que se pode estabelecer entre os sistemas biológicos e físicos é a repetição de efeitos e comportamentos dado um intervalo de tempo. Na física há vários exemplos de osciladores de diferentes naturezas, podendo ser mecânicos, elétricos ou químicos. Já na biologia os comportamentos que se repetem podem ir da concentração de mRNA [20] e proteínas no nosso organismo até populações de animais, estando presente em todas as escalas.

Entretanto, os que mais podemos destacar são as oscilações que ocorrem dentro do nosso próprio corpo, tendo diversos períodos diferentes, com algumas sendo extremamente rápidos, da ordem de milissegundos como as oscilações cerebrais, passando pelos ciclos cardíacos que levam alguns poucos segundos, as regulações de nutrientes e minerais do corpo, que podem variar em alguns minutos, até os ciclos de reprodução que podem ocorrer a cada mês para as mulheres ou considerar vários anos observando populações ecológicas. [21]

Usando as oscilações que ocorrem em nossos organismos juntamente com os modelos matemáticos para sincronização e acoplamento, podemos descrever alguns fenômenos biológicos de maneira matemática, dada certas simplificações, e assim ajudar a descrever e entender melhor o funcionamento do corpo humano, compreender melhor o surgimento de enfermidades e como podemos tratá-las [22, 23]. Dado isto, o objetivo deste trabalho é realizar tal junção, estudando como osciladores vão funcionar quando acoplados por uma substância que se difunde no ambiente em que estão inseridos, levando em conta a geometria do espaço e algumas características da substância que se difunde, como velocidade de difusão e degradação e assim compreender como pode ocorrer o ganho ou perda de

sincronização entre os osciladores do sistema.

Tal ideia foi inicialmente introduzida por Kuramoto e Nakao em dois principais artigos [24,25], onde era discutido o acoplamento não local de um conjunto de osciladores mediados por uma substância química que se difundiu pelo espaço de acordo com a equação da difusão, entretanto, acoplar os osciladores por meio de tal equação é demasiadamente complicado, gerando uma equação integro diferencial não linear.

Para se obter resultados possíveis foram feitas algumas considerações, sendo a principal delas, tomar o limite difusão instantânea, fazendo com que o sistema se encontre em um estado estacionário de difusão e as equações resultantes sejam possíveis de tratar. Mesmo com tais considerações, o modelo apresentou resultados interessantes e motivaram outros trabalhos.

Inspirados por tal modelo e seus possíveis resultados Viana e Aristides [26], desconsideraram o limite de rápida difusão e por meio do método de Born obtiveram novos resultados de grande interesse. Entretanto para o estudo feito foram utilizadas apenas duas aproximações no método, limitando os resultados obtidos à aproximações de ordens baixas, mas já apresentando novos e melhores resultados, condizentes com o esperado do sistema e permitindo um avanço nos estudos dos osciladores acoplados por uma substância que se difunde.

Tendo isto em mente, nós adaptamos e apresentamos um método geral para resolver equação integro-diferencial, e aplicamos tal método na equação que descreve os osciladores acoplados por uma substância difusível, assim obtendo resultados mais refinados e que podem ser utilizados futuramente para um melhor entendimento do efeito. Também foi proposto uma solução e comparação com as soluções estacionárias propostas por Kuramoto para o seu modelo de osciladores acoplados, assim permitindo um estudo mais analítico dos resultados obtidos.

Para tal solução este trabalho é dividido em três capítulos. O primeiro, é focado em revisar e compreender sobre sincronização e osciladores de fase, mostrando sua origem matemática e como podem ser utilizados para o estudo da sincronização, além de mostrar as medidas e métodos que se faz uso para determinar a intensidade do trabalho conjunto entre os osciladores. Mostrando as equações e resultados obtidos para o caso descrito pelo modelo de Kuramoto.

O segundo capítulo constrói a equação integro-diferencial por meio da solução da equação da difusão por meio do método das funções de Green para um grande conjunto de geometrias espaciais. Tais resultados são utilizados para determinar a concentração da substância química no espaço e no tempo e assim acoplar os osciladores. Também será apresentado o método numérico desenvolvido para resolver a equação integro-diferencial e alguma das suas propriedades numéricas que influenciaram as escolhas feitas nas simulações.

No capítulo 3 são apresentados os resultados obtidos por meio das equações desenvol-

vidas no segundo capítulo, comparando como a frequência perturbada e o parâmetro de ordem médio varia conforme se alterna as variáveis do sistema e quais os impactos se tem em cada uma das geometrias estudadas. Também é feita uma comparação de resultados com aqueles obtidos pelo método de Born, em que é feita uma aproximação recursiva. Mostrando então como cada um dos métodos obtém resultados quantitativamente diferentes, mas com comportamentos parecidos.

Por fim, a conclusão deste trabalho apresenta as principais ideias levantadas e os conceitos abordados, além de uma reflexão sobre os resultados apresentados e como eles podem representar as situações de casos reais, além de inspirações para projetos futuros que possam se inspirar neste trabalho.

2 Osciladores e Sincronização

Dos fenômenos da natureza, um dos primeiros que o ser humano dominou foi a contar o tempo e entender os ciclos da natureza, percebendo nos astros do céu um padrão que se repetia com o tempo e exibia seus reflexos na Terra [27]. Com os avanços filosóficos e científicos continuamos sempre interessados nos movimentos circulares e repetitivos, sendo até esta uma das explicações epistemológicas para o funcionamento do universo e dos astros por um grande período histórico [28].

Por ação do tempo e dos avanços tecnológicos e científicos tais pensamentos foram ultrapassados [29], que junto do grande interesse pelo estudo sobre os movimentos repetitivos culminaram na publicação do livro *Horologium Oscillatorium* por Christiaan Huygens em 1673, onde é feita uma descrição completa sobre todos os fenômenos envolvendo o movimento pendular e como tal repetição poderia ser utilizada para construção de relógios e na medição do tempo, sendo reconhecido como um dos primeiros e mais importantes livros a tratar de sistemas oscilatórios [30].

2.1 Oscilações

Após o entendimento fenomenológico dos movimentos periódicos com Huygens e Newton, e com novas descrições matemática dos mesmos, se torna mais simples de se representar e estudar os diferentes tipos de osciladores e suas propriedades. De maneira geral pode-se definir um oscilador como um sistema que vai repetir alguma característica, ou voltar a um estado padrão em um certo intervalo de tempo [31].

Tem-se como exemplo os pêndulos já citados, as correntes em sistemas alternados, circuitos LC, os ciclos biológicos, as anomalias de temperatura causadas pelos fenômenos El Niño e La Niña. Todos esses, vão de alguma maneira repetir seus efeitos em um dado intervalo de tempo, que pode ou não ser constante [4].

Para cada instante do tempo, ter-se-á um conjunto de valores assumidos pelo sistema, como posição e velocidade, que quando postos todos em um gráfico, formam o espaço de fase, dando assim todas as possíveis configurações do sistema.

Como exemplo pode-se considerar um espaço de fase de um oscilador harmônico simples, formado pelas variáveis $x(t)$ e $y(t)$, sendo a variável x a representação da posição e y a velocidade do oscilador. Seu espaço de fase pode ser representado pela figura 2.1.

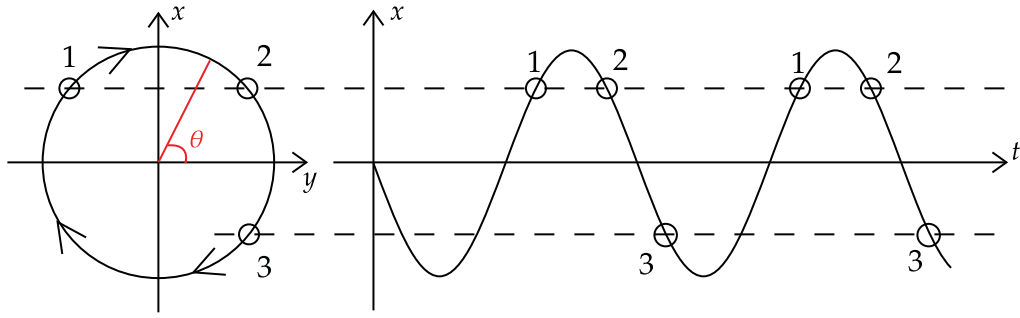


Figura 2.1: Exemplo de Espaço de fase e da dinâmica de um oscilador harmônico simples

Observando o espaço de fase e a dinâmica do oscilador, é possível notar que, como a trajetória no espaço de fase é fechada, dado um intervalo de tempo T , o sistema retorna a um mesmo estado, da forma que $(x(t), y(t)) = (x(t + T), y(t + T))$, sendo T o período do sistema.

2.1.1 Oscilador de Fase

Após um longo tempo de interação, o sistema atinge assintoticamente o estado estacionário, repousando em seu ciclo limite. Sendo tal curva fechada como o exemplo dado, pode-se usar de coordenadas polares para descrever as posições dos pontos(em relação ao centro de rotação).

Fazendo $x = r \cos(\theta)$ e $y = r \sin(\theta)$, o ângulo $\theta = \arctg(y/x)$ se torna a chamada fase geométrica do sistema, que irá ser acrescida em 2π radianos após uma oscilação completa [32].

A fase do sistema vai variar de acordo com a forma do ciclo limite, para o exemplo utilizado, onde o ciclo limite é um circunferência de raio constante, o sistema é chamado de oscilador de fase uniforme, pois a fase do sistema varia de maneira constante de acordo com a frequência natural(ω_0) do sistema, que pode ser entendida como a quantidade de vezes que o pêndulo volta para sua posição inicial em um segundo

$$\frac{d\theta}{dt} = \omega_0, \quad (2.1)$$

que representa a equação do oscilador de fase, sendo θ a fase e $\omega_0 = 2\pi/T$ a frequência do sistema, integrado a equação tem-se que

$$\theta(t) = \theta(0) + \omega_0 t, \quad (2.2)$$

onde $\theta(0)$ é a fase inicial.

2.2 Sincronização

Utilizando um oscilador de fase, pode-se fazer estudos sobre uma grande classe de efeitos, e o que é de interesse deste trabalho, são os fenômenos de sincronização, onde dois ou mais osciladores funcionam de maneira coordenada.

Fazendo uso dos pêndulos simples, colocando dois destes para oscilar de maneira que ocorra uma interação entre eles, como os relógios observados por Huygens, pode-se matematizar tais interações da forma

$$\frac{d\theta_1}{dt} = \omega_1 + KA(\theta_1, \theta_2), \quad (2.3)$$

$$\frac{d\theta_2}{dt} = \omega_2 + KB(\theta_1, \theta_2), \quad (2.4)$$

sendo K a intensidade de interação entre os pêndulos, o chamado fator de acoplamento, e as funções $A(\theta_1, \theta_2)$ e $B(\theta_1, \theta_2)$ descrevem a maneira com que tal influência ocorre [33].

2.2.1 Travamento de fase e frequência

Após um longo período de tempo as interações entre os osciladores já devem ter estabilizado e os osciladores podem ou não apresentar sincronização, e caso estejam sincronizados, é válido esperar que a diferença entre as fases seja um valor constante

$$\theta_1(t) - \theta_2(t) = C. \quad (2.5)$$

Desta forma as frequências estão travadas entre si. Caso a interação entre os sistemas seja forte o suficiente para que a sincronização ocorra, pode ocorrer dois casos com as fases, elas podem se aproximar causando a sincronização em fase, com $C \approx 0$, fazendo com que as fases sejam quase iguais, o outro resultado seria quando ocorre o afastamento, ou anti-fase, e a diferença será $C \approx \pi$.

Outra maneira de notar a sincronização entre os osciladores é por meio da frequência perturbada do sistema, que vai calcular a variação entre dois pontos da série temporal e dar assim a frequência com que cada oscilador está após as interações, tal parâmetro é calculado como

$$\Omega_i = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\theta_i(t) - \theta_i(T)}{t}, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (2.6)$$

sendo T o tempo após o transiente do sistema ter passado. Caso ocorra a sincronização, as frequências dos osciladores serão parecidas, pois todos vão estar funcionando de forma conjunta, ou seja, $\Omega_1 \approx \Omega_2 \approx \Omega_N$.

2.2.2 Modelo de Kuramoto

Para que ocorra a sincronização, é necessário que os sistemas envolvidos interajam de alguma forma, na equação (2.4) tais interações ocorrem por meio das funções A e B , existindo um conjunto de formas que essas funções podem tomar. Historicamente tem-se que o primeiro modelo para descrever interações deste tipo foi o de Winfree, que considerava o acoplamento como sendo o produto de duas funções periódicas, que dariam a influência e a sensibilidade das fases entre si. Inspirado pelos trabalhos de Winfree, surge o modelo de Kuramoto, que é o mais amplamente estudado e utilizado em sistemas acoplados [34].

O modelo de Kuramoto foi pensado para poder tratar de maneira mais simplificada diversos mecanismos da natureza, onde todos os indivíduos interagem entre si e se sincronizam em uma frequência comum, sem depender da frequência natural de cada um [6], desta forma diferentes sistemas podem ser adaptados para tal modelo.

Generalizando a ideia da equação (2.4) para um conjunto de N osciladores de fase

$$\frac{d\theta_j}{dt} = \omega_j + \sum_{k=1}^N Y(\theta_j, \theta_k) \quad j = 1, 2, \dots, N \quad (2.7)$$

sendo a função $Y(\theta_j, \theta_k)$ a função de acoplamento entre os osciladores. Para o acoplamento de Kuramoto, tem-se uma interação que favorece a igualdade de fase por meio de uma função seno, assim as fases que estão próximas vão influenciar menos que aquelas mais distantes, matematicamente, isso pode ser representado por

$$\frac{d\theta_j}{dt} = \omega_j + \frac{K}{N} \sum_{k=1}^N \sin(\theta_k - \theta_j) \quad j = 1, 2, \dots, N \quad (2.8)$$

onde K é chamado de força de acoplamento, o qual será o parâmetro que medirá a intensidade das conexões entre os osciladores e o termo $\frac{1}{N}$ surge para evitar divergências quando $N \rightarrow \infty$.

Uma das características importantes do modelo de Kuramoto, introduzidas por ele a fim de facilitar alguns resultados analíticos, é de que as frequências naturais do sistema ω_j são distribuídas de acordo com uma densidade de probabilidade $g(\omega)$, que é: simétrica em relação a uma frequência média Ω e $g(\omega)$ decresce monotonicamente da origem Ω .

Para simplificar os resultados, faz-se mais comumente a frequência média como $\Omega = 0$, que seria o equivalente a utilizar um referencial que rotaciona com a frequência média, tornando assim $g(\omega) = g(-\omega)$. Para satisfazer tais imposições comumente é feito uso das distribuições Gaussianas e Lorentzianas.

Como considera-se os osciladores de fase como posições dentro de um plano polar, pode-se tomar as coordenadas deles neste referencial e ver a proximidade entre eles utilizando vetores que os localizam, então considerando um círculo unitário no plano complexo, tem-se que as posições são dadas por

$$\vec{p}_j = x_j \hat{x} + iy_j \hat{y}, \quad (2.9)$$

$$\vec{p}_j = \cos(\theta_j) \hat{x} + i \sin(\theta_j) \hat{y}, \quad (2.10)$$

onde θ_j é a fase de cada oscilador determinado pela equação(2.8). Para determinar a sincronização entre todos os osciladores pode-se definir um novo vetor $\vec{z}$, que vai ser composto pela soma dos vetores $\vec{p}_j$ com tamanho $\frac{1}{N}$. O módulo de $\vec{z}$ vai representar o grau de sincronização(r), o chamado parâmetro de ordem, ou proximidade entre as fases, e o ângulo de $\vec{z}$ no plano vai determinar a fase global(φ), ou fase média dos osciladores, assim

$$\cos(\varphi) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \cos(\theta_j), \quad (2.11)$$

$$\sin(\varphi) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \sin(\theta_j), \quad (2.12)$$

$$(2.13)$$

e portanto

$$\vec{z} = \frac{1}{N} \left[\sum_{j=1}^N \cos(\theta_j) \hat{x} + \sum_{j=1}^N i \sin(\theta_j) \hat{y} \right], \quad (2.14)$$

$$\vec{z} = r \cos(\varphi) \hat{x} + i r \sin(\varphi) \hat{y}, \quad (2.15)$$

utilizando da fórmula de Euler, pode-se representar como

$$z = r e^{i\varphi} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N e^{i\theta_k}, \quad (2.16)$$

com o parâmetro r variando entre 0 e 1, sendo o primeiro caso total dessincronização, quando a soma dos vetores se anulam, e o segundo caso total sincronização, quando nenhum vetor se cancela. Para se obter um valor que considera toda a evolução temporal dos osciladores pode-se utilizar da média temporal do parâmetro de ordem de Kuramoto,

$$\bar{R} = \lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^T r(t) dt \quad (2.17)$$

que calcula os valores de r ponto a ponto ao longo do tempo e tira a média entre todos os valores calculados.

Para um melhor entendimento destes procedimentos pode-se tomar um exemplo, fazendo $N = 100$ e evoluindo a equação (2.8) por meio do método de Runge-Kutta de

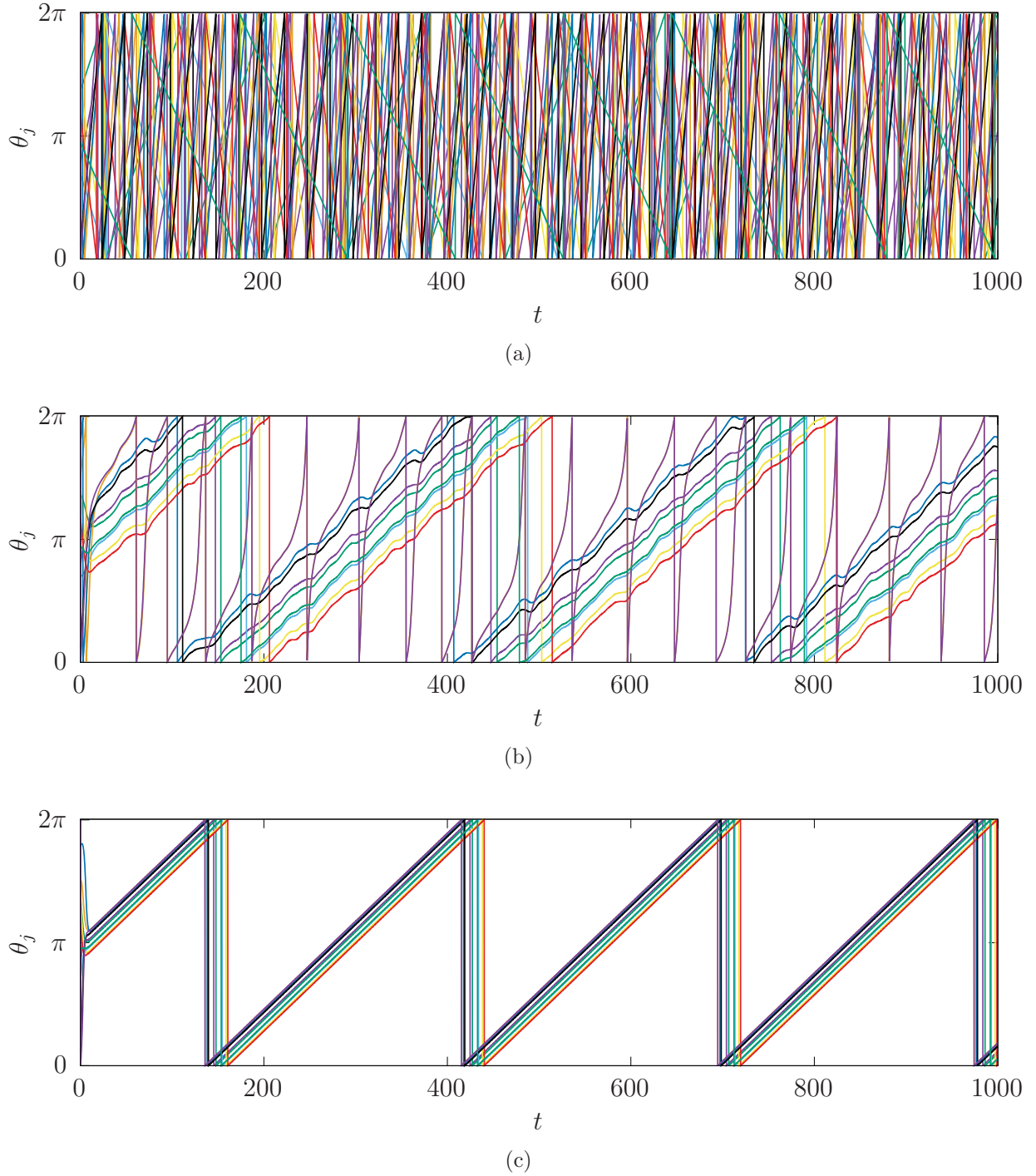


Figura 2.2: Evolução temporal de 10 osciladores aleatórios descritos pela equação (2.8) para diferentes valores de acoplamento K , sendo (a) $K = 0$, (b) $K = 0.4$ e (c) $K = 1.2$.

quarta ordem, fazendo uso de fases iniciais $\theta_i(0)$ distribuídas de acordo com a distribuição uniforme entre $[0, 2\pi)$, com frequências ω_i que provém de uma distribuição gaussiana com $\sigma = 0.02$. Realizando a solução da equação para um tempo $T = 1000$ e variando o parâmetro de acoplamento entre $K = 0$ e $K = 1.2$, onde pode ser observado já os diversos efeitos do modelo de Kuramoto.

Na figura 2.2 tem-se como ocorre a evolução das fases individuais de 10 osciladores

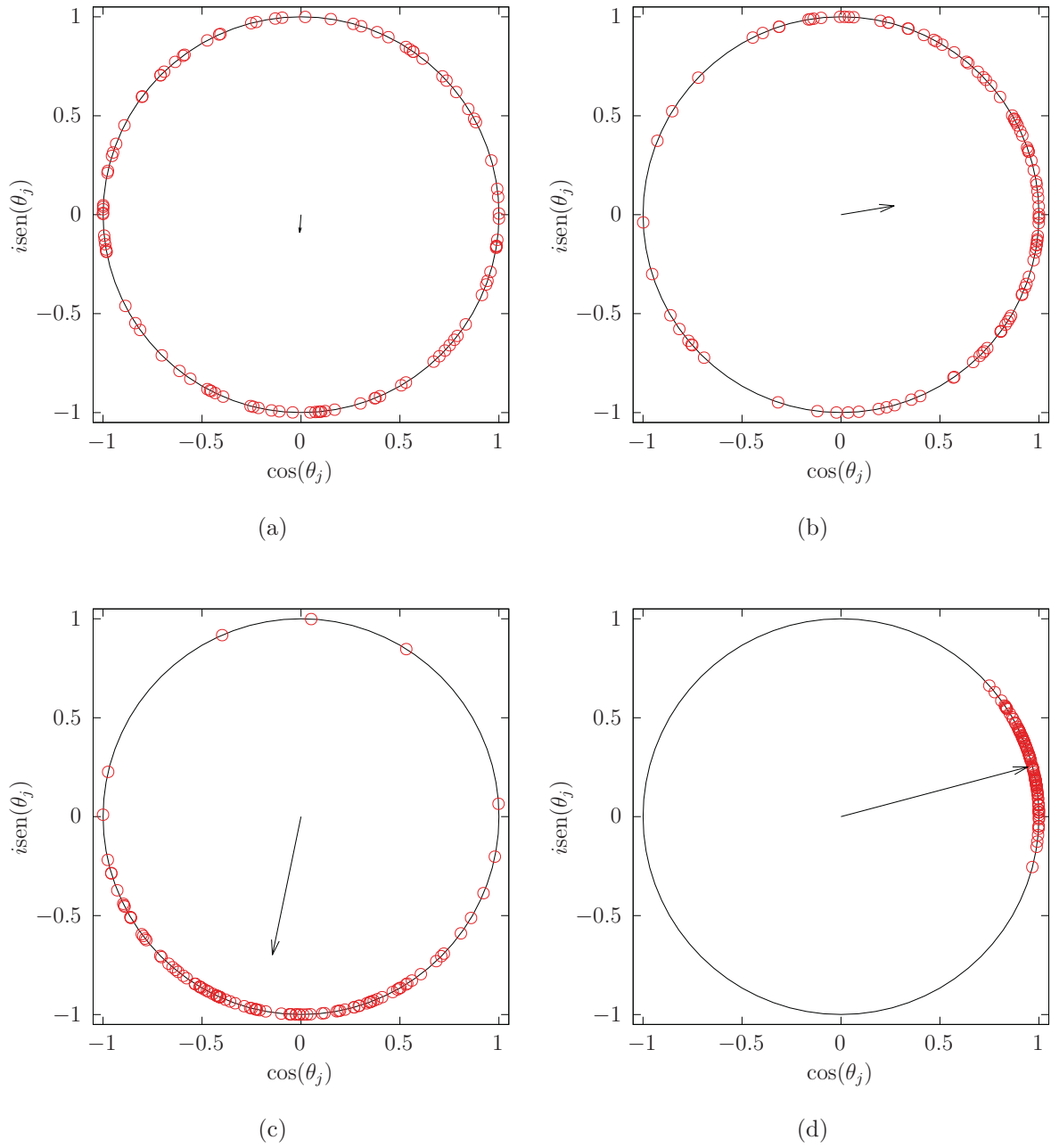


Figura 2.3: 100 osciladores no plano complexo para diferentes valores de acoplamento, juntamente com o vetor z cujo módulo é o parâmetro de ordem médio $\bar{R}$ e o ângulo a fase média do sistema. Tem-se que em (a) $K = 0$, (b) $K = 0.3$, (c) $K = 0.4$ e (d) $K = 1.2$.

aleatórios para diferentes valores de acoplamento e como esta característica age no sistema, sendo possível notar que, mesmo de maneira qualitativa, os osciladores apresentam uma evolução na sincronização, apresentando um comportamento “aleatório” na figura 2.2a, que evolui para um comportamento mais ordenado no caso 2.2b, até culminar em um padrão já quase totalmente sincronizado na figura 2.2c onde as fases apresentam um comportamento próximo.

Outra maneira de observar tal sincronização é por meio da análise da posição dos

osciladores no plano complexo, que pode ser observado na figura 2.3 que representa a posição de cada oscilador dado a equação (2.10), sendo o vetor z a soma dos vetores de fase normalizados.

Para a figura 2.3a tem-se que $K = 0$ e o valor do parâmetro de ordem médio é $\bar{R} \approx 0.09$ estando assim os osciladores quase totalmente dessincronizados, conforme o valor do acoplamento entre os osciladores é acrescido, pode-se observar uma mudança na proximidade dos osciladores no espaço de fase, da forma que quando $K = 0.3$, figura 2.3b, a sincronização entre os osciladores é $\bar{R} \approx 0.2$, passando para valores ainda maiores de K , a sincronização passa a ser mais evidente, e a proximidade dos osciladores no espaço de fase complexo maior ainda, até culminar em um valor quase máximo, quando $K = 1$ na figura 2.3d, tem-se $\bar{R} \approx 0.97$.

A evolução do parâmetro de ordem médio para diferentes valores de acoplamento é utilizado para produzir a figura 2.4, que permite uma melhor compreensão de como a sincronização vai ocorrer, e para quais valores tem-se uma maior sincronização ou uma maior desordem.

Por meio destas análises quantitativas e qualitativas, é possível determinar qual a intensidade da sincronização entre um conjunto de osciladores, e por meio do modelo de Kuramoto, tem-se uma maneira simples de simular tais interações.

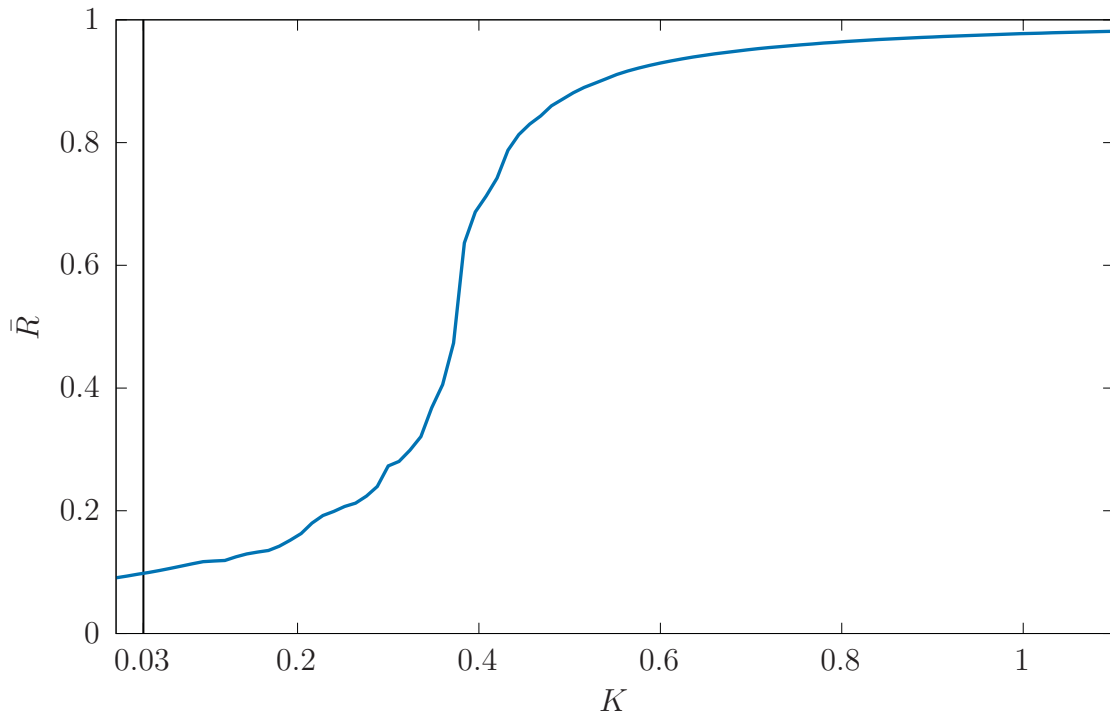


Figura 2.4: Parâmetro de ordem médio $\bar{R}$ em função do fator de acoplamento K , onde a reta vertical representa o valor de acoplamento crítico $K_C = 0.03$ que será apresentada na seção 2.3.1 .

2.3 Análise estacionária

Além das análises qualitativas realizadas por meio dos gráficos e esquemas apresentados, Kuramoto demonstrou, por meio da teoria de campo médio, que dada certas considerações, como considerar $N \rightarrow \infty$ e um regime estacionário onde não ocorre mais variação do parâmetro de ordem com o tempo, é possível resolver de maneira analítica o seu modelo [35].

Para encontrar tal solução, multiplica-se a equação (2.16) por $e^{i\theta_j}$, ficando com

$$re^{i(\varphi - \theta_j)} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N e^{i(\theta_k - \theta_j)}, \quad j = 1, \dots, N \quad (2.18)$$

fazendo uso somente da parte imaginária, fica-se com

$$r \sin(\varphi - \theta_j) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \sin(\theta_k - \theta_j), \quad j = 1, \dots, N \quad (2.19)$$

aplicado na equação (2.8), retorna

$$\frac{d\theta_j}{dt} = \omega_j + Kr \sin(\varphi - \theta_j), \quad j = 1, \dots, N \quad (2.20)$$

que descreve os osciladores por meio dos valores médios do sistema, deste modo o acoplamento entre os osciladores vai forçar eles para um funcionamento mais próximo da fase média φ , com uma intensidade proporcional ao parâmetro de ordem, portanto, simplificando de maneira significativa as análises possíveis para o sistema.

O próximo passo para a solução é a consideração de um referencial onde r não depende mais do tempo, então passado o transiente, os valores já estão constantes, como é possível observar na tendência da figura 2.4, e o parâmetro φ rotaciona de maneira constante no espaço de fase, com frequência angular Ω , desta forma pode-se definir a frequência média para um valor arbitrário como $\varphi \equiv 0$ neste referencial rodante, desta forma, por exemplo, os osciladores da figura 2.3d não vão mais alterar suas fases e consequentemente o vetor z . Para tal caso tem-se que

$$\frac{d\theta_j}{dt} = \omega_j - Kr \sin \theta_j, \quad j = 1, \dots, N \quad (2.21)$$

partindo desta equação, pode-se encontrar os pontos fixos do sistema, θ_j^* , que ocorrem quando $\dot{\theta}_j = 0$, e serão dados por

$$\begin{aligned} \omega_j &= Kr \sin(\theta_j^*), \\ \theta_j^* &= \arcsin\left(\frac{\omega_j}{Kr}\right), \end{aligned} \quad (2.22)$$

sendo tais pontos fixos atrativos quando

$$\left. \frac{d}{dt}[\omega_j - Kr \sin \theta_j] \right|_{\theta_j^*} < 0 \quad (2.23)$$

resolvendo chega-se em

$$-Kr \cos(\theta_j^*) < 0 \quad (2.24)$$

$$-Kr \sqrt{1 - \frac{\omega_j^2}{K^2 r^2}} < 0 \quad (2.25)$$

$$K^2 r^2 \left[1 - \frac{\omega_j^2}{K^2 r^2} \right] > 0 \quad (2.26)$$

$$K^2 r^2 - \omega_j^2 > 0 \quad (2.27)$$

$$Kr \geq |\omega_j|. \quad (2.28)$$

Os osciladores que seguirem tal inequação, vão cair dentro do atrator e passado um determinado tempo, irão se sincronizar em uma fase coletiva. Aqueles que não estão dentro do atrator são chamados osciladores à deriva e nunca irão se sincronizar.

2.3.1 Acoplamento Crítico K_C

Utilizando da equação para determinar quando as condições de acoplamento entre os osciladores, no regime estudado em que o parâmetro de ordem não depende do tempo, pode-se fazer o valor do parâmetro de ordem como sendo a soma das médias entre os osciladores que se sincronizam e obtiveram um valor de r mais a média do parâmetro de ordem dos osciladores que nunca se sincronizam, da forma

$$r = \langle e^{i\theta} \rangle_{travados} + \langle e^{i\theta} \rangle_{deriva} \quad (2.29)$$

fazendo primeiro a média dos osciladores que não caem dentro do atrator e assim nunca se sincronizam, integra-se a densidade de probabilidade dos osciladores em todo o círculo $\rho(\theta, \omega)$ para todos os osciladores cuja frequência não é travada ($\omega > Kr$) juntamente com a distribuição de probabilidade das frequências,

$$\langle e^{i\theta} \rangle_{deriva} = \int_{-\pi}^{\pi} \int_{|\omega| > Kr} e^{i\theta} \rho(\theta, \omega) g(\omega) d\omega d\theta, \quad (2.30)$$

sendo $\rho(\theta + \pi, -\omega) = \rho(\theta, \omega)$ e lembrando que $g(\omega) = g(-\omega)$. Tais simetrias fazem com que a integral seja simétrica e os valores de ω positivo cancelem os valores de ω negativos, anulando então a integral e a média dos osciladores a deriva. A explicação plausível para tal efeito é que não há valor preferível de θ ou direção de rotação [35].

Já para o caso dos osciladores sincronizados sabe-se de início que suas frequências serão dadas pela equação (2.22) e que as frequências seguem a distribuição $g(\omega)$ cujo centro é o

zero e definidamente par, deste modo, as fases também seguirão as mesmas propriedades, o que acarreta em $\langle \sin \theta \rangle_{\text{travados}} = 0$ devido a paridade das funções. Restando somente a contribuição dos cossenos:

$$r = \langle \cos \theta \rangle_{\text{travados}} = \int_{-Kr}^{Kr} g(\omega) \cos \theta(\omega) d\omega \quad (2.31)$$

sendo θ dado pela equação (2.22), utilizando de tal equação para mudar as variáveis de ω para θ , tem-se que

$$\omega_j = Kr \sin(\theta_j) \quad \text{e} \quad d\omega = Kr \cos(\theta_j) d\theta, \quad (2.32)$$

aplicando na integral (2.31) tal substituição

$$\begin{aligned} r &= \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos \theta g(Kr \sin \theta) Kr \cos \theta d\theta, \\ r &= Kr \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos^2 \theta g(Kr \sin \theta) d\theta, \end{aligned} \quad (2.33)$$

que vai dar o comportamento do parâmetro de ordem dada a distribuição de frequências iniciais, e demonstra que o parâmetro de ordem não vai depender do tempo, tal como definido.

Tem-se de primeiro que a solução trivial é $r = 0$, que é um estado incoerente, pois significa que nunca ocorreria sincronização, sendo o oposto do observado. As soluções que correspondem ao caso de r não nulo ocorrerá quando os osciladores estiverem totalmente travados em frequência, porém com a fase somente parcialmente travadas.

Um outro dado que pode-se encontrar é o valor de acoplamento para o qual o parâmetro de ordem r deixa de ser nulo e passa a crescer, para isto toma-se o quociente entre a integral (2.33) e r , ficando com

$$1 = K \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos^2 \theta g(Kr \sin \theta) d\theta, \quad (2.34)$$

tomando o limite em que r deixa de ser nula e passa a crescer, ou $r \rightarrow 0^+$, tem-se que

$$1 = K_C \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos^2 \theta g(0) d\theta, \quad (2.35)$$

$$1 = K_C g(0) \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos^2 \theta d\theta, \quad (2.36)$$

$$1 = K_C g(0) \frac{\pi}{2}, \quad (2.37)$$

portanto o valor de K_C em que o sistema vai apresentar é dado por

$$K_C = \frac{2}{\pi g(0)} \quad (2.38)$$

onde o parâmetro $g(0)$ vai depender da forma da distribuição utilizada, para o caso exemplo, tem-se que a distribuição utilizada foi uma gaussiana com $\sigma = 0.02$, portanto é esperado que $K_C \approx 0.03$.

Tal fator pode ser observado como uma reta na figura 2.4, que não demarca o ponto exato em que a mudança entre os efeitos ocorrem devido a baixa quantidade de osciladores utilizadas para se fazer a simulação. Porém conforme $N \rightarrow \infty$, mais compatíveis serão os resultados obtidos.

Pelo mesmo motivo que a curva em tal figura não começa em zero, que seria o caso de total assincronia, visto a baixa quantidade de osciladores, pode-se ocorrer várias coincidências que acabam por aumentar o valor do parâmetro de ordem.

3 Osciladores acoplados por uma substância difusível com velocidade finita

Diversos sistemas na natureza realizam a sua comunicação e baseiam seu comportamento na concentração de certas substâncias emitidas por entidades próximas, como um conjunto de células- β no pâncreas, ou as células do Núcleo Supraquiasmático. Para descrever como tais substâncias químicas se dissipam pelo meio é possível fazer uso da equação da difusão, que vai dar a concentração da substância para todo o espaço e tempo possíveis [36].

Considerando as estruturas biológicas como simples osciladores de fase, em que um dado comportamento vai ser repetido regularmente dependendo das condições impostas, e que tais osciladores vão se acoplar por uma substância que se difunde no meio, é possível matematizar e compreender uma grande classe de eventos biológicos em que ocorre sincronização de tais entidades, como nos exemplos dados.

Tal estudo foi inicialmente proposto por Kuramoto e Nakao [24, 25, 37] originalmente, porém, eles trataram apenas do caso onde a difusão dentro do sistema é instantânea, assim simplificando as equações e tornando mais facilmente tratável o problema. Este trabalho busca estudar o mesmo problema mas considerando uma substância com velocidade de difusão finita.

A construção do modelo matemático e o método com o qual o mesmo será resolvido é apresentado neste capítulo.

3.1 Equação da difusão

Inspirados pela maneira com a qual Isaac Newton (1643-1727) descreveu a física por meio das suas equações e modelos mecânicos, Jean Baptiste Fourier (1768-1830) buscou desenvolver uma teoria para o calor em sólidos que seria tão completa quanto os estudos de mecânica.

Inicialmente utilizando os conceitos de ação a distância desenvolvidos por Newton, mas que logo foram abandonados dando lugar a uma teoria em que o considerava os sólidos como meios contínuos em que o calor fluía, inspirado também pela lei do resfriamento

de Newton, Fourier propôs que a taxa com que o calor se move dentro dos sólidos é proporcional a temperatura e inversamente proporcional ao tamanho de tal sólido.

Deste modo, introduzindo em 1807 a equação diferencial parcial ¹que descreve a condução de calor em um sólido como [38]

$$\frac{dT}{dt} = \frac{K}{CD} \left[\frac{d^2T}{dx^2} + \frac{d^2T}{dy^2} + \frac{d^2T}{dz^2} \right], \quad (3.1)$$

sendo T a temperatura, t o tempo, K a condutividade térmica, C o calor específico, D a densidade do sólido e x, y, z coordenadas espaciais. Por meio de um conjunto de séries geométricas, hoje conhecidas como séries de Fourier, foi possível encontrar soluções para diversas simetrias de sólidos em que o calor seria difundido.

Mais tardiamente durante o século XIX e com os estudos em caminhadas aleatórias e do movimento de partículas, notou-se que a evolução de uma equação, $f(n, x)$, que dava a probabilidade da soma de n variáveis aleatórias ser x era igual a

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{1}{2} \frac{\partial f}{\partial n}, \quad (3.2)$$

que tem uma forma parecida com a dada por Fourier para descrever a temperatura em um sólido.

Posteriormente a isto, Einstein durante seus estudo com o movimento browniano, onde estudava a difusão de partículas suspensas em um meio, estabeleceu um método para o estudo da teoria do movimento cinético relacionado ao calor, analisando o movimento das partículas de maneira microscópica e macroscópica, e utilizando a lei de Fick para a pressão osmótica que tais partículas sentiriam [38].

Einstein relacionou o movimento das partículas suspensas com a influência da diferença de pressão que elas sentiam, e todos os parâmetros que influenciam em tal pressão, dando assim uma descrição macroscópica do movimento browniano [38].

Para o movimento microscópico, Einstein utilizou a ideia de uma caminhada aleatória partindo de uma posição inicial $x = 0$, como visto anteriormente, era dada por uma equação da forma

$$D_s \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{1}{2} \frac{\partial f}{\partial t}, \quad (3.3)$$

onde $f(x, t)$ é a probabilidade da partícula estar a uma distância x da origem no tempo t e D_s é metade da variância da distribuição que descreve o movimento aleatório. Desta forma propondo uma ligação entre o movimento das partículas e a maneira com que elas se difundiam no meio em que estavam imersas, da mesma forma que a equação de Fourier descreve o movimento do calor dentro do sólido.

Considerando um modelo mais completo para o mundo real, pode-se introduzir alguns

¹Na equação (3.1) foi-se utilizado a notação da época, onde $d \equiv \partial$

termos a mais, como a taxa com que a substância é desintegrada (η) e deixa de ser difundir, também é possível considerar o caso de espalhamento em mais dimensões, trocando assim o operador $\frac{d^2}{dx^2}$ por ∇^2 , e por fim adicionar um termo de fonte $\mathcal{F}$, onde a substância é gerada ou absorvida, ficando assim com

$$\frac{\partial A(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \eta A(\mathbf{r}, t) - D \nabla^2 A(\mathbf{r}, t) = \mathcal{F}, \quad (3.4)$$

sendo $A(\mathbf{r}, t)$ a densidade de material difundido estudado na posição $\mathbf{r}$ e no tempo t , D descreve a intensidade da difusão da densidade de material.

3.1.1 Modelo de acoplamento

Utilizando a equação (3.4) é possível descrever uma série de substâncias cujo comportamento é difusivo, como partículas flutuando, feromônios espalhados, uma substância química espalhada dentro do corpo humano, dentro muitos outros possíveis exemplos.

O modelo de interesse vai ser dado por um conjunto de N sistemas dinâmicos acoplados, estando estes imersos em um espaço d – *dimensional* com paredes absorvedoras, com posição dada por $\mathbf{r}_j$. O estado dinâmico de cada um dos sistemas é dado por $\mathbf{X}_j(t)$ em um espaço de fase com M dimensões, como representado na figura 3.1.

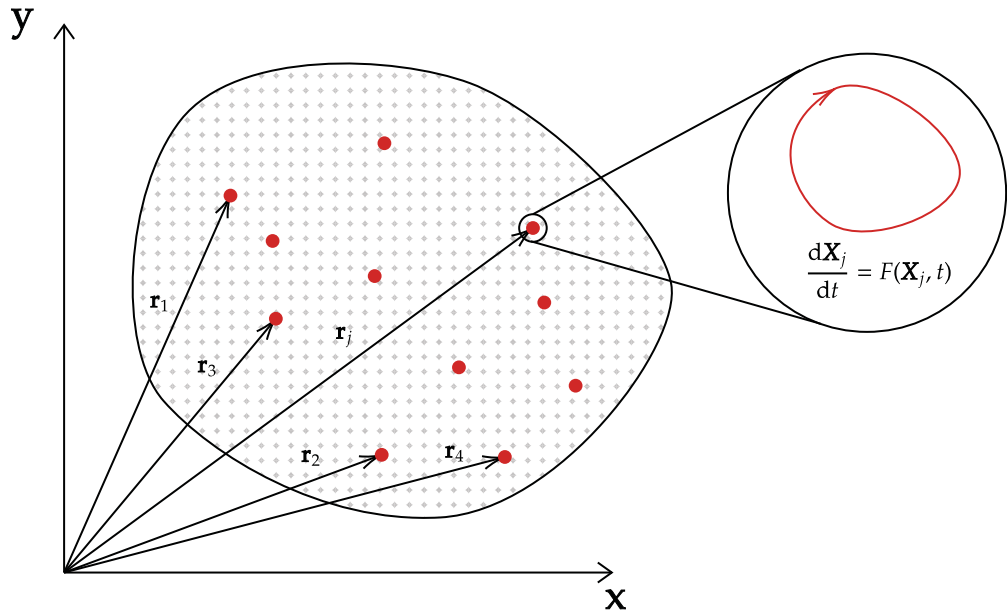


Figura 3.1: Diagrama representando o modelo estudado, sendo os pontos vermelhos os sistemas dinâmicos, com posição r_j , imersos em um espaço d – *dimensional* e a região hachurada o local onde ocorre a difusão da substância química.

A evolução temporal dos sistemas desacoplados é dado por

$$\frac{d\mathbf{X}_j}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{X}_j, t), \quad (j = 1, 2, \dots, N) \quad (3.5)$$

utilizando de uma função acoplamento que depende da concentração da substância

$$\frac{d\mathbf{X}_j}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{X}_j, t) + \mathbf{g}(A(\mathbf{r}_j, t)). \quad (3.6)$$

Considerando que cada oscilador é um ponto infinitesimal de fonte e sumidouro localizado em uma certa posição $\mathbf{r}_j$, pode-se escrever o termo de fonte da equação (3.4) como sendo um somatório da posição de cada oscilador multiplicada por um fator de interação H que dá o peso das interações dos osciladores, assim tendo que cada oscilador vai contribuir de maneira proporcional a H com origem de fonte na sua localização, ficando com

$$\frac{\partial A(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \eta A(\mathbf{r}, t) - D\nabla^2 A(\mathbf{r}, t) = \sum_{k=1}^N H(\mathbf{X}_k) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_k), \quad (3.7)$$

que resolvendo resulta na concentração da substância (A) e que é aplicada na equação (3.6) para devolver o comportamento dos osciladores.

3.2 Funções de Green

Para resolver funções diferenciais mais complexas como a equação (3.7), pode-se recorrer ao método das funções de Green. Desenvolvido por George Green (1793-1841) este método é utilizado para resolver equações diferenciais que descrevem um comportamento originado por uma fonte pontual e com condições de contorno estabelecidas, o mesmo consiste em calcular os efeitos que serão produzidos por cada fonte individualmente e então somar-los assim tendo o efeito completo.

De maneira geral, pode-se dizer que as funções de Green tem como objetivo resolver equações com a forma

$$Ly(x) = f(x), \quad (3.8)$$

sendo L um operador linear diferencial, $y(x)$ a equação a ser resolvida e $f(x)$ é uma função conhecida. Por meio da linearidade do operador L , pode-se afirmar que conhecendo a solução da equação para um fonte pontual, então é possível encontrar a solução geral por meio da soma das soluções pontuais, da forma que

$$y(x) = \int f(\xi) G(x|\xi) d\xi, \quad (3.9)$$

sendo $G(x|\xi)$ a função de Green que resolve a equação

$$LG(x|\xi) = \delta(x - \xi), \quad (3.10)$$

onde x representa a posição em que se há interesse de estudo e ξ a posição em que está localizada a fonte pontual.

Outro resultados importante obtido por Green em seus trabalhos é o de que a soma do campo das fontes que passam por um volume V é igual a soma do fluxo de correntes que passa pela superfície S que delimita V , que é conhecido como segunda identidade de Green,

$$\iiint_V (\varphi \nabla^2 \chi - \chi \nabla^2 \varphi) = \iint_S (\varphi \nabla \chi - \chi \nabla \varphi), \quad (3.11)$$

sendo este resultado de muita importância para problemas envolvendo equações diferenciais e campos vetoriais e de utilidade para as equações desenvolvidas a seguir.

3.2.1 Solução por Green

Por meio do método das funções de Green é possível resolver a equação (3.7) e obter as concentrações da substância difusível no espaço e no tempo e então aplicar no acoplamento da função (3.6) para obter a equação que descreve o sistema de maneira completa.

Para encontrar a solução da equação (3.7), faz-se uma mudança de variável de $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{z}$ e $t \rightarrow \tau$, assim procurando a solução da concentração em pontos onde elas são geradas e no tempo gerado, fazendo também

$$\mathcal{H}(\mathbf{z}, \tau) := \sum_{k=1}^N H(\mathbf{X}_k) \delta(\mathbf{z} - \mathbf{z}_k), \quad (3.12)$$

fica-se com

$$\frac{\partial A(\mathbf{z}, \tau)}{\partial \tau} + \eta A(\mathbf{z}, \tau) - D \nabla'^2 A(\mathbf{z}, \tau) = \mathcal{H}(\mathbf{z}, \tau). \quad (3.13)$$

A função de Green para tal equação é dada por

$$\frac{\partial G(\mathbf{z}, \tau | \mathbf{r}, t)}{\partial \tau} + \eta G(\mathbf{z}, \tau | \mathbf{r}, t) - D \nabla'^2 G(\mathbf{z}, \tau | \mathbf{r}, t) = \delta(\tau - t) \delta(\mathbf{z} - \mathbf{r}) \quad (3.14)$$

sendo $G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau)$ a função de Green, e tendo que $\mathbf{r}$ representa o local onde ocorre a difusão no tempo t , e $\mathbf{z}$ a posição em que é medida a difusão no tempo τ . Considerando que as paredes do sistema vão absorver toda a substância que entre em contato e que a concentração inicial será nula, se define as condições de contorno de Dirichlet da forma que na superfície de contorno S tem-se que $A(\mathbf{r} \in S, t) = 0$ e a condição inicial $A(\mathbf{r}, 0) = A(\mathbf{r}) = 0$. Desta forma, as condições de contorno e iniciais da função de Green serão

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r} \in S, t | \mathbf{z}, \tau) &= 0. \\ G(\mathbf{r}, t = 0 | \mathbf{z}, \tau) &= 0. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Mudando o sinal das equações (3.13) e (3.14) tem-se

$$D \nabla'^2 A(\mathbf{z}, \tau) - \frac{\partial A(\mathbf{z}, \tau)}{\partial \tau} - \eta A(\mathbf{z}, \tau) = -\mathcal{H}(\mathbf{z}, \tau), \quad (3.16)$$

e

$$D\nabla'^2 G(\mathbf{z}, \tau | \mathbf{r}, t) - \frac{\partial G(\mathbf{z}, \tau | \mathbf{r}, t)}{\partial \tau} - \eta G(\mathbf{z}, \tau | \mathbf{r}, t) = -\delta(\tau - t)\delta(\mathbf{z} - \mathbf{r}), \quad (3.17)$$

utilizando da simetria que a função de Green para o caso da difusão permite, $G(\mathbf{z}, \tau | \mathbf{r}, t) = G(\mathbf{r}, -t | \mathbf{z}, -\tau)$ [39], faz-se

$$D\nabla'^2 G(\mathbf{r}, -t | \mathbf{z}, -\tau) - \frac{\partial G(\mathbf{r}, -t | \mathbf{z}, -\tau)}{\partial \tau} - \eta G(\mathbf{r}, -t | \mathbf{z}, -\tau) = -\delta(\tau - t)\delta(\mathbf{z} - \mathbf{r}), \quad (3.18)$$

e alterando a direção temporal do sistema novamente para a direção de interesse, fazendo $-t \rightarrow t$ e $-\tau \rightarrow \tau$, tem-se

$$D\nabla'^2 G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) + \frac{\partial G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau)}{\partial \tau} - \eta G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) = -\delta(\tau - t)\delta(\mathbf{z} - \mathbf{r}). \quad (3.19)$$

Para continuidade, multiplica-se a equação (3.16) por $G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau)$ e a equação (3.19) por $A(\mathbf{z}, \tau)$ e se subtrai a segunda equação da primeira, resultado em

$$\begin{aligned} & DG(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) \nabla'^2 A(\mathbf{z}, \tau) - G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) \frac{\partial A(\mathbf{z}, \tau)}{\partial \tau} - \eta G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) A(\mathbf{z}, \tau) \\ & - DA(\mathbf{z}, \tau) \nabla'^2 G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) - A(\mathbf{z}, \tau) \frac{\partial G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau)}{\partial \tau} + \eta A(\mathbf{z}, \tau) G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) \\ & = -G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) \mathcal{H}(\mathbf{z}, \tau) + A(\mathbf{z}, \tau) \delta(\tau - t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{z}) \end{aligned} \quad (3.20)$$

organizando as equações para melhor visualização, tem-se

$$\begin{aligned} & D \left[G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) \nabla'^2 A(\mathbf{z}, \tau) - A(\mathbf{z}, \tau) \nabla'^2 G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) \right] \\ & \left[-G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) \frac{\partial A(\mathbf{z}, \tau)}{\partial \tau} - A(\mathbf{z}, \tau) \frac{\partial G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau)}{\partial \tau} \right] \\ & [-\eta G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) A(\mathbf{z}, \tau) + \eta A(\mathbf{z}, \tau) G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau)] \\ & = -G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) \mathcal{H}(\mathbf{z}, \tau) + A(\mathbf{z}, \tau) \delta(t - \tau) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_k) \end{aligned} \quad (3.21)$$

integrando a equação para todo o espaço e tempo e utilizando $t+ = t+0$ um instante logo após o momento t , evitando assim a descontinuidade das funções delta. Pode-se separar em quatro equações a serem resolvidas, definindo

$$\begin{aligned}
 \textcircled{\text{A}} &:= \int_0^{t+} \int_{V'} D \left[G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) \nabla'^2 A(\mathbf{z}, \tau) - A(\mathbf{z}, \tau) \nabla'^2 G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) \right] d\tau d\mathbf{V}' \\
 \textcircled{\text{B}} &:= - \int_0^{t+} \int_{V'} \left[G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) \frac{\partial A(\mathbf{z}, \tau)}{\partial \tau} + A(\mathbf{z}, \tau) \frac{\partial G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau)}{\partial \tau} \right] d\tau d\mathbf{V}' \\
 \textcircled{\text{C}} &:= \int_0^{t+} \int_{V'} [-\eta G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) A(\mathbf{z}, \tau) + \eta A(\mathbf{z}, \tau) G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau)] d\tau d\mathbf{V}' \\
 \textcircled{\text{D}} &:= \int_0^{t+} \int_{V'} [A(\mathbf{z}, \tau) \delta(t - \tau) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_k) - G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) \mathcal{H}(\mathbf{z}, \tau)] d\tau d\mathbf{V}'
 \end{aligned} \tag{3.22}$$

desta forma a equação a ser simplificada se torna

$$\textcircled{\text{A}} + \textcircled{\text{B}} + \textcircled{\text{C}} = \textcircled{\text{D}} \tag{3.23}$$

Para $\textcircled{\text{A}}$ tem-se que

$$\int_0^{t+} \int_{V'} D \left[G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) \nabla'^2 A(\mathbf{z}, \tau) - A(\mathbf{z}, \tau) \nabla'^2 G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) \right] d\tau d\mathbf{V}' \tag{3.24}$$

usando a equação (3.11), onde S é a superfície que limita o volume $\mathbf{V}$ e $\mathbf{n}$ a direção normal da superfície, resultando em

$$\int_0^{t+} \oint_{S'} D [G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) \nabla' A(\mathbf{z}, \tau) - A(\mathbf{z}, \tau) \nabla' G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau)] \cdot \mathbf{n} dS' d\tau. \tag{3.25}$$

Para $\textcircled{\text{B}}$ tem-se

$$- \int_0^{t+} \int_{V'} \left[G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) \frac{\partial A(\mathbf{z}, \tau)}{\partial \tau} + A(\mathbf{z}, \tau) \frac{\partial G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau)}{\partial \tau} \right] d\tau d\mathbf{V}' \tag{3.26}$$

fazendo uso da propriedade da derivada do produto

$$\frac{\partial}{\partial \tau} (A(\mathbf{z}, \tau) G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau)) = G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) \frac{\partial A(\mathbf{z}, \tau)}{\partial \tau} + A(\mathbf{z}, \tau) \frac{\partial G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau)}{\partial \tau} \tag{3.27}$$

logo

$$- \int_0^{t+} \int_{V'} \left[\frac{\partial}{\partial \tau} (A(\mathbf{z}, \tau) G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau)) \right] d\tau d\mathbf{V}' \tag{3.28}$$

utilizando do teorema fundamental do cálculo para a variável $d\tau$,

$$A(\mathbf{z}, \tau) G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) \Big|_0^{t+} = A(\mathbf{z}, t+) G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, t+) - A(\mathbf{z}, 0) G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, 0) \tag{3.29}$$

o primeiro termo após a igualdade é nulo, pois $t+ > t$, é um evento em $t+$ não pode ocorrer antes de t , e fazendo $A(\mathbf{z}, 0) G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, 0) = A_0(\mathbf{z})$ tem-se que $\textcircled{\text{B}}$ é

$$\int_{V'} A_0(\mathbf{z}) d\mathbf{V}'. \quad (3.30)$$

A equação (C) vai se anular, pois ambos os termos são iguais. Por fim em (D)

$$\int_0^{t+} \int_{V'} [A(\mathbf{z}, \tau) \delta(t - \tau) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_k) - G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) \mathcal{H}(\mathbf{z}, \tau)] d\tau d\mathbf{V}' \quad (3.31)$$

usando a propriedade de filtragem da função delta, resulta em

$$A(\mathbf{r}, t) - \int_0^{t+} \int_{V'} G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) \mathcal{H}(\mathbf{z}, \tau) d\tau d\mathbf{V}' \quad (3.32)$$

juntando (A), (B), (C) e (D)

$$\begin{aligned} & \int_0^{t+} \oint_{S'} D[G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) \nabla A'(\mathbf{z}, \tau) - A(\mathbf{z}, \tau) \nabla' G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau)] \cdot \mathbf{n} dS' d\tau + \int_{V'} A_0(\mathbf{z}) d\mathbf{V}' \\ &= A(\mathbf{r}, t) - \int_0^{t+} \int_{V'} G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) \mathcal{H}(\mathbf{z}, \tau) d\tau d\mathbf{V}' \end{aligned} \quad (3.33)$$

ou

$$\begin{aligned} A(\mathbf{r}, t) &= \int_0^{t+} \oint_{S'} D[G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) \nabla' A(\mathbf{z}, \tau) - A(\mathbf{z}, \tau) \nabla' G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau)] \cdot \mathbf{n} dS' d\tau + \\ & \int_{V'} A_0(\mathbf{z}) d\mathbf{V}' + \int_0^{t+} \int_{V'} G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) \mathcal{H}(\mathbf{z}, \tau) d\tau d\mathbf{V}' \end{aligned} \quad (3.34)$$

Por meio das condições de contorno estabelecidas em (3.15), tem-se que o termo da integral de superfície se anula, pois todas as considerações na borda são nulas e também se elimina o termo de $A_0(\mathbf{z})$, já que a concentração inicial é nula, ficando somente com

$$A(\mathbf{r}, t) = \int_0^{t+} \int_{V'} G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) \mathcal{H}(\mathbf{z}, \tau) d\tau d\mathbf{V}' \quad (3.35)$$

ou

$$A(\mathbf{r}, t) = \int_0^{t+} \int_{V'} \sum_{k=1}^N H(\mathbf{X}(\tau)) \delta(\mathbf{z} - \mathbf{z}_k) G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) d\tau d\mathbf{V}' \quad (3.36)$$

usando da propriedade de filtragem da delta

$$A(\mathbf{r}, t) = \int_0^{t+} \sum_{k=1}^N H(\mathbf{X}(\tau)) G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}_k, \tau) d\tau \quad (3.37)$$

tendo assim a equação que descreve a concentração da substância química para todo o tempo e espaço dentro da região limitada S . Tal resultado é utilizado na equação (3.6)

chegando em

$$\frac{d\mathbf{X}_j}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{X}_j, t) + \mathbf{g} \left(\int_0^{t+} \sum_{k=1}^N H(\mathbf{X}(\tau)) G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}_k, \tau) d\tau \right) \quad (3.38)$$

escolhendo uma função de acoplamento que não depende do tempo, e considerando que é linear com H , tem-se então $L = g \circ H$

$$\frac{d\mathbf{X}_j}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{X}_j, t) + \int_0^{t+} \sum_{k=1}^N L(\mathbf{X}(\tau)) G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}_k, \tau) d\tau \quad (3.39)$$

sendo tal equação a que descreve de maneira mais completa o conjunto de sistemas acoplados por uma substância difusível limitada por uma superfície.

A função de Green $G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}_k, \tau)$ pode ser determinada de acordo com a geometria do sistema, que, para os principais casos foram resolvidas no apêndice A, e tem seus resultados:

1. Espaço Livre

(a) Unidimensional

$$G(x, t | \xi, \tau) = \frac{H(t - \tau)}{\sqrt{4\pi D(t - \tau)}} \exp \left\{ -\eta(t - \tau) - \frac{(x - \xi)^2}{4D(t - \tau)} \right\} \quad (3.40)$$

(b) $d \geq 2$

$$G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) = \frac{H(t - \tau)}{[4\pi D(t - \tau)]^{d/2}} \exp \left\{ -\eta(t - \tau) - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{z}|^2}{4D(t - \tau)} \right\} \quad (3.41)$$

2. Espaço finito retangular

(a) Unidimensional com comprimento $0 \leq x \leq L$

$$G(x, t | \xi, \tau) = \frac{2}{L} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \text{sen}\left(\frac{n\pi\xi}{L}\right) \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right) e^{-(D(\frac{n\pi}{L})^2 + \eta)(t - \tau)} \right] H(t - \tau) \quad (3.42)$$

(b) Bidimensional com tamanho $0 \leq x \leq a$ e $0 \leq y \leq b$

$$G(x, y, t | \xi, \mu, \tau) = \frac{4}{ab} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \text{sen}\left(\frac{n\pi\xi}{a}\right) \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \text{sen}\left(\frac{m\pi\mu}{b}\right) \text{sen}\left(\frac{m\pi y}{b}\right) \right] \exp \left\{ - \left[D\pi^2 \left(\frac{n^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2} \right) + \eta \right] (t - \tau) \right\} H(t - \tau) \quad (3.43)$$

(c) Tridimensional com tamanho $0 \leq x \leq a$, $0 \leq y \leq b$ e $0 \leq z \leq c$

$$G(x, y, t | \xi, \mu, \zeta, \tau) = \frac{8}{abc} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{o=1}^{\infty} \text{sen}\left(\frac{n\pi\xi}{a}\right) \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \text{sen}\left(\frac{n\pi\mu}{b}\right) \text{sen}\left(\frac{n\pi y}{b}\right) \\ \text{sen}\left(\frac{n\pi\zeta}{c}\right) \text{sen}\left(\frac{n\pi z}{c}\right) \exp\left\{-\left[D\pi^2\left(\frac{n^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2} + \frac{o^2}{c^2}\right) + \eta\right](t - \tau)\right\} H(t - \tau) \quad (3.44)$$

3. Espaço finito polar

(a) Domínio circular com $0 \leq r < a$ e $0 \leq \theta \leq 2\pi$

$$G(r, \theta, t | \rho, \theta', \tau) = \frac{1}{\pi D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_m(\alpha_n r) J_m(\alpha_n \rho)}{[J'_m(\alpha_n a)]^2} \cos[m(\theta - \theta')] e^{-(\eta + D\alpha_n^2)(t - \tau)} \quad (3.45)$$

de modo que α_n é a n -ésima raiz positiva de $J_m(\alpha a) = 0$

(b) Domínio circular complementar com $a < r < \infty$ e $0 \leq \theta \leq 2\pi$

$$G(r, \theta, t | \rho, \theta', \tau) = \frac{1}{2\pi} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \cos[m(\theta - \theta')] \int_0^{\infty} e^{-(\eta + D\alpha^2)(t - \tau)} \frac{U_m(\alpha r) U_m(\alpha \rho)}{J_m^2(\alpha a) + Y_m^2(\alpha a)} d\alpha \quad (3.46)$$

sendo $U_m(\alpha r) = J_m(\alpha r) Y_m(\alpha a) - J_m(\alpha a) Y_m(\alpha r)$.

(c) Domínio anelar com $a < r < b$ e $0 \leq \theta \leq 2\pi$

$$G(r, \theta, t | \rho, \theta', \tau) = \frac{\pi}{4} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_m^2(k_n b) U_m(k_n \rho) U_m(k_n r)}{J_m^2(k_n a) - J_m^2(k_n b)} k_n^2 \cos[m(\theta - \theta')] e^{-(\eta + Dk_n^2)(t - \tau)} \quad (3.47)$$

da forma que $U_m(k_n r) = J_m(k_n r) Y_m(k_n a) - J_m(k_n a) Y_m(k_n r)$ e k_n é a n -ésima raiz positiva de $U_m(k_n b) = 0$.

Para este trabalho a equação (3.39) foi simplificada da forma a considerar os sistemas como osciladores de fase, de modo que os estados são descritos pela fase $\mathbf{X}_j(t) := \theta_j(t)$, com $0 \leq \theta \leq 2\pi$, em um espaço de fase com $M = 2$ e sendo osciladores de fase, cada um terá associada uma frequência natural $\mathbf{F}(\mathbf{X}_j) := \omega_j$. Tornado assim em

$$\frac{d\theta_j}{dt} = \omega_j + \int_0^{t+} \sum_{k=1}^N L(\theta_j(\tau)) G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}_k, \tau) d\tau, \quad (3.48)$$

utilizando do acoplamento de Kuramoto para realizar a interação entre os osciladores tem-se que $L(\theta_j(t)) = \frac{K}{N} \text{sen}(\theta_k - \theta_j)$, ficando por fim com

$$\frac{d\theta_j}{dt} = \omega_j + \int_0^{t+} \sum_{k=1}^N \frac{K}{N} \text{sen}(\theta_k(\tau) - \theta_j(\tau)) G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}_k, \tau) d\tau \quad (3.49)$$

sendo tal equação integro-diferencial que, ao ser resolvida, dá a dinâmica dos osciladores de fase acoplados com uma substância difusível.

3.3 Limite de rápida difusão

Como visto previamente, o primeiro empenho para resolver o problema dos osciladores acoplados por uma substância difusível foi resolvido por Kuramoto e Nakao, onde estes consideraram um limite de rápida difusão para a substância química, atingindo assim um regime estacionário [37] além de não considerar as paredes do sistema como sendo absorvedoras.

Considerando que a difusão será instantânea, é possível mostrar que os resultados obtidos na seção anterior para as diferentes funções de Green retornam aos resultados obtidos por Kuramoto e Nakao.

Resolvendo tal problema para o caso unidimensional no espaço livre, tem-se que a função de Green é

$$G(x, t|\xi, \tau) = \frac{H(t - \tau)}{\sqrt{4\pi D(t - \tau)}} \exp\left\{-\eta(t - \tau) - \frac{(x - \xi)^2}{4D(t - \tau)}\right\} \quad (3.50)$$

fazendo que

$$a_1 = \frac{\eta(x - \xi)^2}{4D} = \left\{\frac{\gamma(x - \xi)}{2}\right\}^2 \quad (3.51)$$

$$u_1 = \frac{(x - \xi)^2}{4Dt} \quad (3.52)$$

e definindo o comprimento de acoplamento

$$\gamma = \sqrt{\frac{\eta}{D}} \quad (3.53)$$

resulta em

$$G(x, t|\xi, 0) = \frac{x - \xi}{4D\sqrt{u_1^3\pi}} e^{-u_1 - \frac{a_1}{u_1}} \quad (3.54)$$

para considerar o limite de rápida difusão faz-se $t \rightarrow \infty$, onde o sistema já se encontra em um estado quase estacionário. Utilizando a função de Green em todo o tempo, teria-se que a concentração da substância é dada por

$$A(x) = \int_{u_1}^{\infty} G(x, t|\xi, 0) du_1 \quad (3.55)$$

que resulta em

$$A(x) = \frac{\gamma}{2\eta} e^{\gamma(x-\xi)} \quad (3.56)$$

O mesmo pode ser feito para o caso bidimensional, onde a função de Green será

$$G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) = \frac{H(t - \tau)}{[4\pi D(t - \tau)]} \exp \left\{ -\eta(t - \tau) - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{z}|^2}{4D(t - \tau)} \right\} \quad (3.57)$$

fazendo as simplificações

$$a_2 = \frac{\eta[(x - \xi)^2 + (y - \mu)^2]}{4D} = \left| \frac{\gamma(\mathbf{r} - \mathbf{z})}{2} \right|^2 \quad (3.58)$$

$$u_1 = \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{z}|^2}{4Dt} \quad (3.59)$$

a função de Green se torna

$$G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, 0) = \frac{x - \xi}{4\pi D u_1} e^{-u_1 - \frac{a_2}{u_1}} \quad (3.60)$$

utilizando novamente a aproximação de rápida difusão, tem-se

$$A(x) = \frac{1}{2\pi D} K_0(\gamma |\mathbf{r} - \mathbf{z}|) \quad (3.61)$$

onde K_0 é a função de Bessel modificada de segunda espécie e ordem zero.

Por fim, para o caso tridimensional a função de Green será

$$G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) = \frac{H(t - \tau)}{[4\pi D(t - \tau)]^{3/2}} \exp \left\{ -\eta(t - \tau) - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{z}|^2}{4D(t - \tau)} \right\} \quad (3.62)$$

novamente simplificando com

$$a_3 = \frac{\eta}{4D} |\mathbf{r} - \mathbf{z}|^2 \quad (3.63)$$

$$u_1 = \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{z}|^2}{4Dt} \quad (3.64)$$

a função de Green será

$$G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, 0) = -\frac{1}{4\pi^{3/2} D \sqrt{u_1}} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{z}|} e^{-u_1 - \frac{a_3}{u_1}} \quad (3.65)$$

que aplicado ao limite de rápida difusão retorna

$$A(x) = \frac{1}{4\pi D} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{z}|} e^{-\gamma |\mathbf{r} - \mathbf{z}|} \quad (3.66)$$

Tais resultados são análogos aos obtidos por Kuramoto e seus colegas nos primeiros estudos que relacionam osciladores acoplados por uma substância difusiva [40]. Mostrando assim uma relação entre os resultados obtidos recentemente e aqueles já estabelecidos na literatura.

3.3.1 Análise estacionária

Da mesma forma que foi possível encontrar um valor crítico para que ocorresse o acoplamento entre os osciladores descritos pelo modelo de Kuramoto, é possível repetir o cálculo para o caso em que o acoplamento envolve uma substância difusível para o caso unidimensional. Utilizando novamente a equação (2.19) tem-se que

$$\frac{d\theta_j}{dt} = \omega_j - \int_0^{t^+} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2Kr}{L} \sin(\varphi - \theta_j) \sin\left(\frac{n\pi\xi}{L}\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) e^{-(D(\frac{n\pi}{L})^2 + \eta)(t-t')} H(t-t') dt' \quad (3.67)$$

fazendo uso de $\varphi = 0$, como feito para o caso tradicional, e procurando os pontos fixos da forma que $\dot{\theta}_j = 0$, logo

$$0 = \omega_j - \int_0^{t^+} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2Kr}{L} \sin(\theta_j^*) \sin\left(\frac{n\pi\xi}{L}\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) e^{-(D(\frac{n\pi}{L})^2 + \eta)(t-t')} H(t-t') dt' \quad (3.68)$$

Considerando que a série em n possui uma rápida conversão², pode-se tomar somente o primeiro termo da série e fazer

$$P(x, \xi) = \sin\left(\frac{\pi\xi}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \quad (3.69)$$

levando em conta que para um ponto fixo o valor de θ_j não deve variar no tempo, pode-se tratar $\sin(\theta_j)$ como quase constante e o remover da integral. Resultando assim em

$$0 = (\omega_j) - P(x, \xi) \sin(\theta_j^*) \int_0^{t^+} \frac{2Kr}{L} e^{-\lambda(t-t')} H(t-t') dt' \quad (3.70)$$

sendo

$$\lambda = D \frac{\pi^2}{L^2} + \eta \quad (3.71)$$

integrando a equação, fica-se com

$$0 = \omega_j - P(x, \xi) \sin(\theta_j^*) \frac{2Kr (1 - e^{\lambda(-t)})}{\lambda L} \quad (3.72)$$

²Tal suposição será demonstrada válida no próximo capítulo

Considerando um regime de $t \rightarrow \infty$ tem-se que

$$\omega_j = P(x, \xi) \sin(\theta_j^*) \frac{2Kr}{\lambda L} \quad (3.73)$$

ou o ponto fixo

$$\theta_j^* = \arcsin\left(\frac{\omega_j \lambda L}{P(x, \xi) 2Kr}\right) \quad (3.74)$$

Para encontrar o atrator, pode-se seguir os mesmos passos realizados para o caso não difusivo, tomando primeiro

$$-\frac{d}{dt} \int_0^{t^+} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2Kr}{L} \sin(\theta_j^*) \sin\left(\frac{n\pi\xi}{L}\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) e^{-(D(\frac{n\pi}{L})^2 + \eta)(t-t')} H(t-t') dt' < 0 \quad (3.75)$$

considerado as mesmas simplificações já feitas,

$$P(x, \xi) \frac{d}{dt} \int_0^{t^+} \frac{2Kr}{L} \sin(\theta_j^*) e^{-\lambda(t-t')} H(t-t') dt' > 0 \quad (3.76)$$

realizando a derivada em t

$$P(x, \xi) \frac{2Kr}{L} \int_0^{t^+} \left[\sin(\theta_j^*) \delta(t-\tau) e^{-\lambda(t-\tau)} - \lambda \sin(\theta_j^*) H(t-\tau) e^{-\lambda(t-\tau)} + \cos(\theta_j^*) H(t-\tau) e^{-\lambda(t-\tau)} \right] dt' > 0 \quad (3.77)$$

aplicando θ_j^*

$$P(x, \xi) \frac{2Kr}{L} \int_0^{t^+} \left[\frac{\omega_j \lambda L}{P(x, \xi) 2Kr} \delta(t-\tau) e^{-\lambda(t-\tau)} - \lambda \frac{\omega_j \lambda L}{P(x, \xi) 2Kr} H(t-\tau) e^{-\lambda(t-\tau)} + \sqrt{1 - \left(\frac{\omega_j \lambda L}{P(x, \xi) 2Kr}\right)^2} H(t-\tau) e^{-\lambda(t-\tau)} \right] dt' > 0 \quad (3.78)$$

resolvendo a integral tem-se que

$$P(x, \xi) \frac{2Kr}{L} \left[\frac{\omega_j \lambda L}{P(x, \xi) 2Kr} - \lambda \frac{\omega_j \lambda L}{P(x, \xi) 2Kr} \frac{(1 - e^{-\lambda t})}{\lambda} + \sqrt{1 - \left(\frac{\omega_j \lambda L}{P(x, \xi) 2Kr}\right)^2} \frac{(1 - e^{-\lambda t})}{\lambda} \right] > 0 \quad (3.79)$$

ou

$$\omega_j \lambda - \omega_j \lambda (1 - e^{-\lambda t}) + P(x, \xi) \frac{2Kr}{L} \sqrt{1 - \left(\frac{\omega_j \lambda L}{P(x, \xi) 2Kr} \right)^2} \frac{(1 - e^{-\lambda t})}{\lambda} > 0 \quad (3.80)$$

fazendo novamente uso da condição $t \rightarrow \infty$

$$P(x, \xi) \frac{2Kr}{L\lambda} \sqrt{1 - \left(\frac{\omega_j \lambda L}{P(x, \xi) 2Kr} \right)^2} > 0 \quad (3.81)$$

que leva a condição de ponto fixo

$$P^2(x, \xi) \frac{4K^2 r^2}{L^2 \lambda^2} \left(1 - \left(\frac{\omega_j \lambda L}{P(x, \xi) 2Kr} \right)^2 \right) > 0 \quad (3.82)$$

$$P^2(x, \xi) \frac{4K^2 r^2}{L^2 \lambda^2} - \omega_j^2 > 0 \quad (3.83)$$

$$P(x, \xi) \frac{2Kr}{L\lambda} > \omega_j \quad (3.84)$$

$$(3.85)$$

Que da mesma forma que para o caso tradicional, vai limitar aqueles osciladores que vão ou não poder sincronizar, causando assim os osciladores à deriva.

3.3.2 Acoplamento Crítico K_c

Pode-se também, assim como para o caso mais simples, encontrar o valor crítico para o qual os osciladores sincronizam, para isso utiliza-se o fato de que a sincronização será dada pela média entre os osciladores travados e não travados, levando em conta assim o espaço em que eles serão atraídos tem-se que

$$r = \int_{-P(x, \xi) \frac{2Kr}{\lambda L}}^{P(x, \xi) \frac{2Kr}{\lambda L}} \cos[\theta(\omega)] g(\omega) d\omega \quad (3.86)$$

utilizando a equação (3.74) para obter $\theta(\omega)$ e para os novos intervalos de integração, fica-se com

$$r = \frac{2KrP(x, \xi)}{\lambda L} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos^2(\theta) g\left(P(x, \xi) \sin(\theta) \frac{2Kr}{\lambda L}\right) d\theta \quad (3.87)$$

tomando novamente que $r \rightarrow 0^+$, tem-se que

$$1 = \frac{2KP(x, \xi)}{\lambda L} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos^2(\theta) g(0) d\theta \quad (3.88)$$

que resulta em

$$1 = \frac{\pi K_c P(x, \xi)}{\lambda L} g(0) \quad (3.89)$$

portanto o valor de K_c para o caso dos osciladores acoplados por uma substância difusível será dado por

$$K_c = \frac{\lambda L}{\pi P(x, \xi) g(0)} \quad (3.90)$$

3.4 Método numérico

Devido a complexidade que a equação (3.49) apresenta por ser uma equação integro-diferencial não linear, um dos melhores caminhos para abordar a solução é por meio de soluções numéricas, podendo utilizar métodos de aproximação recursiva [26], ou por meio de uma método numérico para resolver a equação de maneira completa [41]. O foco deste trabalho é a segunda maneira, que posteriormente será comparada ao primeiro método.

Para o desenvolvimento do método, se considera uma equação integro-diferencial da forma

$$\frac{d\theta_j}{dt} = f(t, \theta_j(t)) + \int_0^t F(t, s, \theta_j(s)) ds \quad (3.91)$$

considerando cada ponto temporal em uma posição infinitesimal com tamanho h , da forma que $\theta_j(t_n)$ é o valor da função θ_j no tempo $t_n = nh$, do mesmo modo que $\theta'_j(t_n)$ é a derivada de θ no tempo t_n e θ_j^n representa a aproximação de θ_j no tempo t_n . Integrando a equação entre dois tempos infinitesimais t_n e $t_n + h$

$$\int_{t_n}^{t_n+h} \frac{d\theta_j}{dt} dt = \int_{t_n}^{t_n+h} f(t, \theta_j(t)) dt + \int_{t_n}^{t_n+h} \int_0^t F(t, s, \theta_j(s)) ds dt \quad (3.92)$$

usando o teorema fundamental do cálculo no lado esquerdo da equação fica

$$\begin{aligned} \theta_j(t_n + h) &= \theta_j(t_n) + \int_{t_n}^{t_n+h} f(t, \theta_j(t)) dt + \int_{t_n}^{t_n+h} \int_0^t F(t, s, \theta_j(s)) ds dt \\ \theta_j(t_n + h) &= \theta_j(t_n) + I_j^1 + I_j^2 \end{aligned} \quad (3.93)$$

Para as integrais em t pode-se utilizar a integração por meio do método o trapézio,

$$I_j^1 = \frac{h}{2} [f(t_n, \theta_j(t_n)) + f(t_{n+1}, \theta_j(t_{n+1}))] \quad (3.94)$$

e

$$I_j^2 = \frac{h}{2} \left[\int_0^{t_n} F(t_n, s, \theta_j(s)) ds + \int_0^{t_{n+1}} F(t_{n+1}, s, \theta_j(s)) ds \right] \quad (3.95)$$

entretanto, o valor $\theta_j(t_{n+1})$ é desconhecido, para isto pode-se usar a definição formal de derivada e assim obter a aproximação $\theta_j^{n+1} = \theta_j^n + \theta_j'^n$, e utilizando de uma primeira aproximação da equação (3.91)

$$\theta_j'^{n+1} = f(t_{n+1}, \theta_j^{n+1}) + \int_0^{t_{n+1}} F(t_{n+1}, s, \theta_j(s)) ds \quad (3.96)$$

com $\theta_j'^0 = f(t_0, \theta_j^0)$.

As integrais em ds que restaram podem ser resolvidas numericamente por meio do método do trapézio novamente, de modo que $\theta_j'^{n+1}$ se torna

$$\begin{aligned} \theta_j'^{n+1} = f(t_{n+1}, \theta_j^{n+1}) + \frac{h}{2} [& F(t_{n+1}, 0, \theta_j^0) + 2F(t_{n+1}, t_1, \theta_j^1) + F(t_{n+1}, t_n, \theta_j^2) \\ & + \dots + 2F(t_{n+1}, t_n, \theta_j^n) + F(t_{n+1}, t_{n+1}, \theta_j^{n+1})] \end{aligned} \quad (3.97)$$

e para I_j^2 tem-se que

$$\begin{aligned} I_j^2 = & \frac{h^2}{4} [F(t_n, 0, \theta_j^0) + 2F(t_n, t_1, \theta_j^1) + \dots + F(t_n, t_n, \theta_j^n)] \\ & + \frac{h^2}{4} [F(t_{n+1}, 0, \theta_j^0) + 2F(t_{n+1}, t_1, \theta_j^1) + \dots + F(t_{n+1}, t_{n+1}, \theta_j^{n+1})] \end{aligned} \quad (3.98)$$

onde novamente θ_j^{n+1} pode ser aproximado por $\theta_j^{n+1} = \theta_j^n + h\theta_j'^n$.

Desta forma a equação final para $\theta_j(t_n + h)$ será

$$\begin{aligned} \theta_j(t_n + h) = & \theta_j(t_n) + \frac{h}{2} [f(t_n, \theta_j^n) + f(t_{n+1}, \theta_j^n + h\theta_j'^n)] \\ & + \frac{h^2}{4} [F(t_n, 0, \theta_j^0) + 2F(t_n, t_1, \theta_j^1) + \dots + F(t_n, t_n, \theta_j^n)] \\ & + \frac{h^2}{4} [F(t_{n+1}, 0, \theta_j^0) + 2F(t_{n+1}, t_1, \theta_j^1) + \dots + F(t_{n+1}, t_{n+1}, \theta_j^n + h\theta_j'^n)] \end{aligned} \quad (3.99)$$

Para a equação em estudo no trabalho tem-se então que

$$f(t, \theta_j(t)) = \omega_j \quad (3.100)$$

e

$$F(t, s, \theta(s)) = \sum_{k=1}^N \frac{K}{N} \text{sen}(\theta_k(s) - \theta_j(s)) G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}_k, s) \quad (3.101)$$

3.4.1 Exemplo

Para demonstrar a eficiência e funcionalidade do método apresentado é possível utilizar de uma equação integro-diferencial cuja solução é conhecida. A equação

$$\frac{dy}{dx} = 1 - \int_0^x y(s)ds \quad (3.102)$$

tem como solução $y(x) = \sin(x)$ e pode ser utilizada para comparar os resultados apresentados pelo método numérico com os resultados analíticos.

O gráfico 3.2 apresenta a diferença entre o resultado numérico e o resultado analítico para diferentes valores de espaçamento h para um dado intervalo de $0 \leq x \leq 1000$. É possível notar que os valores de erro crescem conforme o espaçamento h é acrescido.

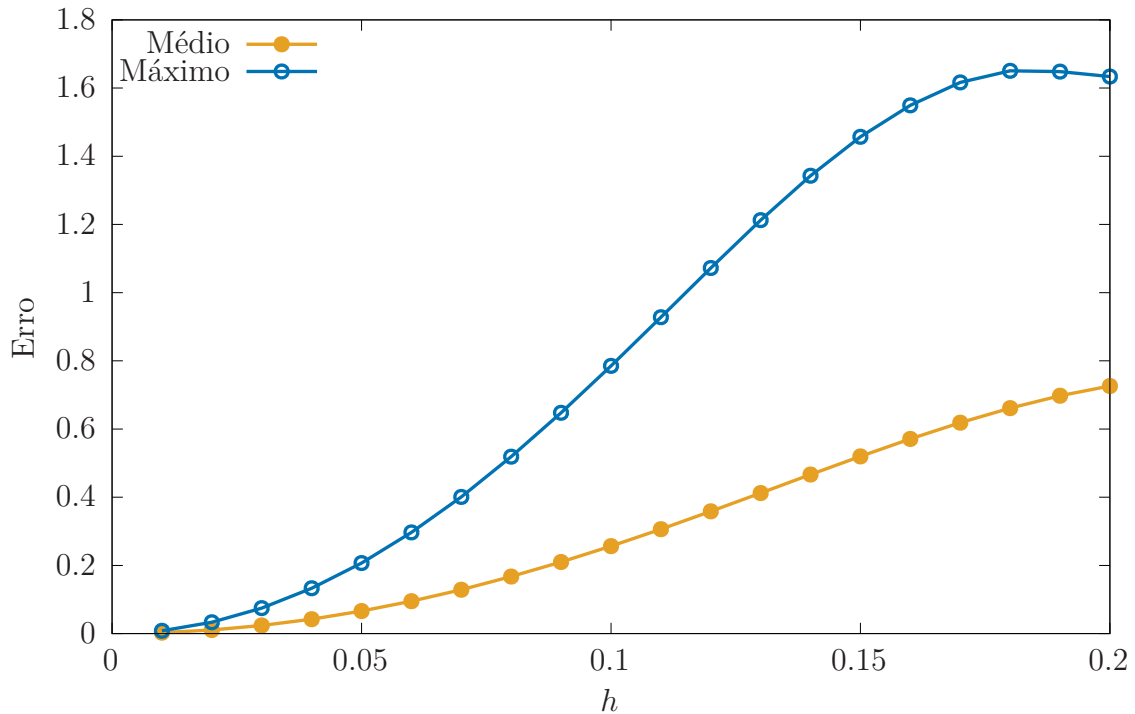


Figura 3.2: Representação do erro médio e erro máximo cometido pelo método desenvolvido quando comparado a solução analítica para diferentes valores de espaçamento h .

Porém é necessário ponderar entre o tamanho do espaçamento h e o tempo gasto para se obter a solução, já que o tempo cresce de forma quadrática com o decrescimento do espaçamento.

Tendo isto em mente, foi-se considerado como uma boa opção o valor de $h = 0.1$ para os estudos realizados neste trabalho. Já que tal valor permite a execução dos códigos em tempo viável³, e também um erro médio aceitável considerando o problema proposto e as condições impostas.

³Para o caso exemplo foi obtido um tempo de $t = 0.12s$ e para $h = 0.01$ levou $t = 11s$ para se obter a solução

4 Sincronização de Osciladores acoplados por uma substância difusiva com velocidade finita

Utilizando dos métodos de análise apresentados no Capítulo 2 para o estudo da sincronização de osciladores de fase, é possível entender como será o comportamento dos sistemas dinâmicos acoplados descritos no Capítulo 3.

Por meio da análise de frequências e do parâmetro de ordem médio é possível estudar como a difusão, degradação e acoplamento vão afetar os sistemas para diferentes geometrias, além de ser possível comparar com os resultados obtidos por meio de outras aproximações para o modelo.

Para todos os casos estudados, usou-se a equação (4.1), sendo as geometrias utilizadas para a função de Green: unidimensional e bidimensional, e o domínio circular finito, sendo sempre considerado a distância entre origem e borda como sendo 1 e a distribuição de posições dos osciladores foi dada por uma distribuição uniforme randômica e todos os parâmetros foram considerados adimensionais,

$$\frac{d\theta_j}{dt} = \omega_j + \int_0^{t+} \sum_{k=1}^N \frac{K}{N} \text{sen}(\theta_k(\tau) - \theta_j(\tau)) G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}_k, \tau) d\tau, \quad (4.1)$$

Foram utilizados 100 osciladores com fase distribuídas de acordo com a distribuição uniforme randômica entre $[0, 2\pi)$, também se utilizou de frequências ω_j dadas pela distribuição de probabilidade $g(\omega)$, da mesma forma que os exemplos dados no capítulo 2, a distribuição $g(\omega)$ utilizada é simétrica e tem seu máximo em $g(0)$, desta forma sendo utilizada a distribuição normal com $\sigma = 0.02$.

A equação (4.1) foi resolvida por meio da técnica apresentada no capítulo 3, considerando espaçamentos de $h = 0.1$ e utilizando 500 iterações devido a rápida convergência e tempo necessário para a execução das soluções. Para as análises do parâmetro de ordem médio foi considerados a média de 5 sistemas diferentes, enquanto para o caso da sincronização de frequências, foram escolhidos sistemas aleatórios para cada gráfico.

4.1 Sincronização de frequência

A sincronização de frequência é o primeiro recurso na detecção de sincronia, avaliando o grau de proximidade das frequências perturbadas é possível verificar se há ou não sincronização entre os osciladores, caso haja pouca diferença entre as frequências, de modo que $\Omega_1 \approx \Omega_2 \approx \dots \Omega_j$, o sistema está em sincronia e os osciladores funcionando em conjunto. Utilizando que

$$\Omega_j = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\theta_j(t - T) - \theta_j(T)}{t} \quad (4.2)$$

e considerando um transiente T grande o suficiente, que para os casos analisados foi de $T = 200$, pode-se calcular a frequência perturbada do sistema. Para efeito de comparação, pode-se tomar o caso em que $K = 0$, que resulta em $\Omega_j \approx \omega_j$, já que não há perturbação no sistema, e comparar com as outras variações.

4.1.1 Caso Unidimensional

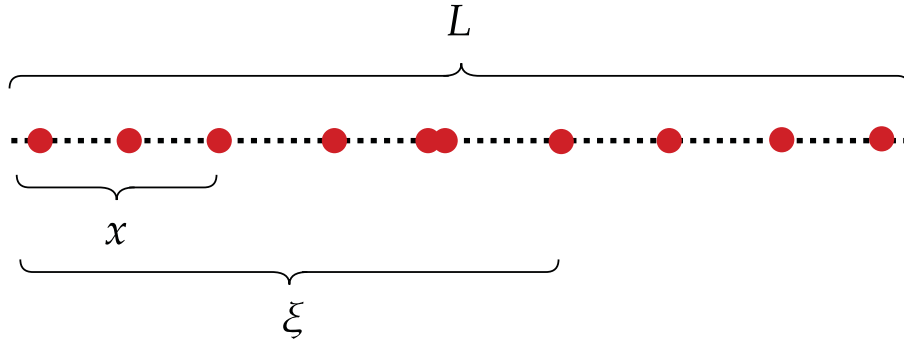


Figura 4.1: Representação dos osciladores no espaço unidimensional, sendo os círculos vermelhos os osciladores distribuídos no espaço de tamanho L

A situação mais simples a ser estudada é aquela em que o sistema está inserido em um espaço unidimensional de tamanho $L = 1$, como representado na figura 4.1, onde a função de Green calculada para a geometria de sistema é dada por

$$G(x, t|\xi, \tau) = \frac{2}{L} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \text{sen}\left(\frac{n\pi\xi}{L}\right) \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right) e^{-(D(\frac{n\pi}{L})^2 + \eta)(t-\tau)} \right] H(t - \tau), \quad (4.3)$$

Utilizando de tal função de Green é possível, então, simular o comportamento de osciladores e variando os valores de K, D e η obter resultados que mostram como cada parâmetro afeta o comportamento do sistema.

Para estudar como a taxa de difusão da substância afeta o sistema, pode-se fazer

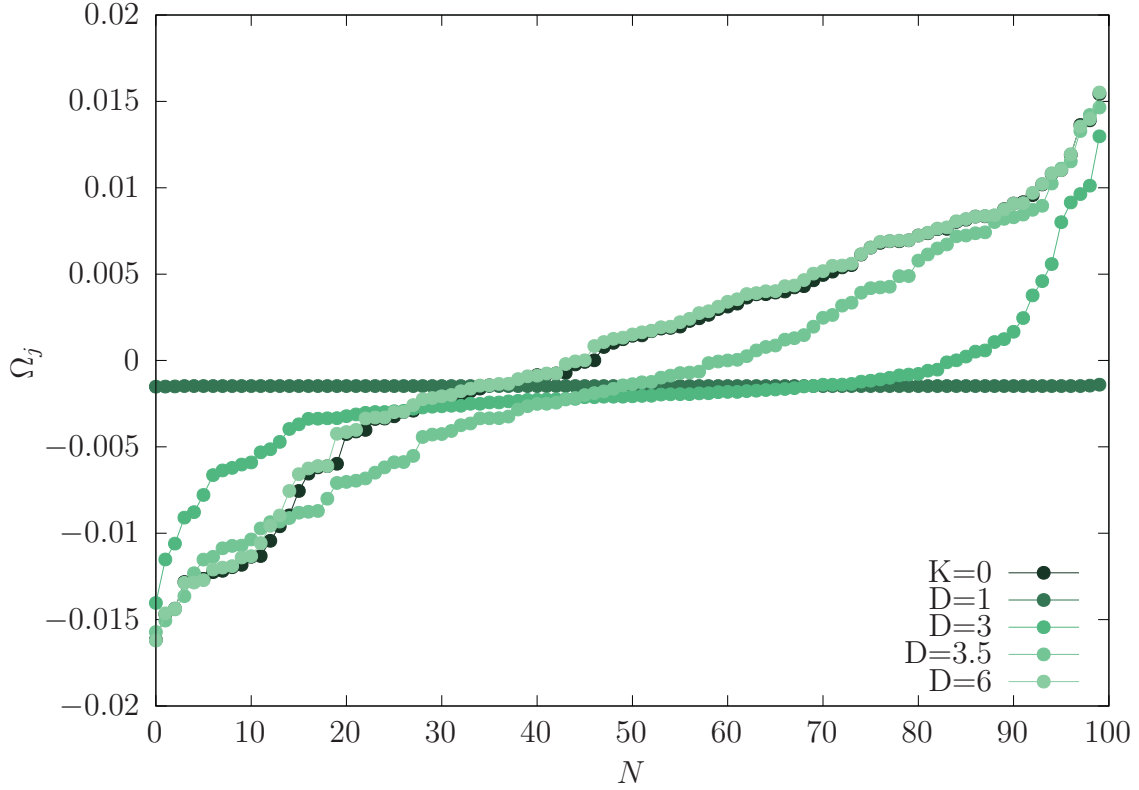


Figura 4.2: Frequências perturbadas Ω_j organizadas em ordem crescente para diferentes valores de difusão D no espaço unidimensional. Utilizando $N = 100$, $K = 10$ e $\eta = 1$. O caso não perturbado representa a situação sem acoplamento com $K = 0$ para ser utilizado como referencial para total dessincronização.

a análise das frequências perturbadas para diferentes valores de D . Tomando $\eta = 1$ e $K = 10$, o sistema foi iterado 500 vezes e então calculada às frequências perturbadas. A figura 4.2 apresenta as frequências perturbadas Ω_j organizadas em ordem crescente de valor, para diferentes valores do coeficiente de degradação D e tendo o caso não perturbado $K = 0$ como referência.

Pode-se notar que, conforme há um aumento no valor do coeficiente D , menor a correlação entre as frequências perturbadas e a maior a proximidade com o caso não perturbado. Para $D = 1$ (pontos verde escuro) há uma grande sincronização entre as frequências perturbadas, e conforme o valor de difusão cresce, o platô formado pelos osciladores sincronizados diminui e a forma das curvas se aproxima do caso totalmente dessincronizado $K = 0$ (pontos em preto).

Sendo importante notar que há uma diferença de comportamento abrupta entre os valores $D = 3$ e $D = 3.5$, e após isto, a tendência dos pontos segue parecida, indicando assim um possível efeito de transição de fase. A partir destes resultado, pode-se concluir que a sincronização entre os osciladores é favorecida para menores taxas de difusão.

A mesma análise é feita para o impacto da degradação na sincronização dos osciladores, a figura 4.3 mostra como o fator de degradação η da substância, afeta as frequências

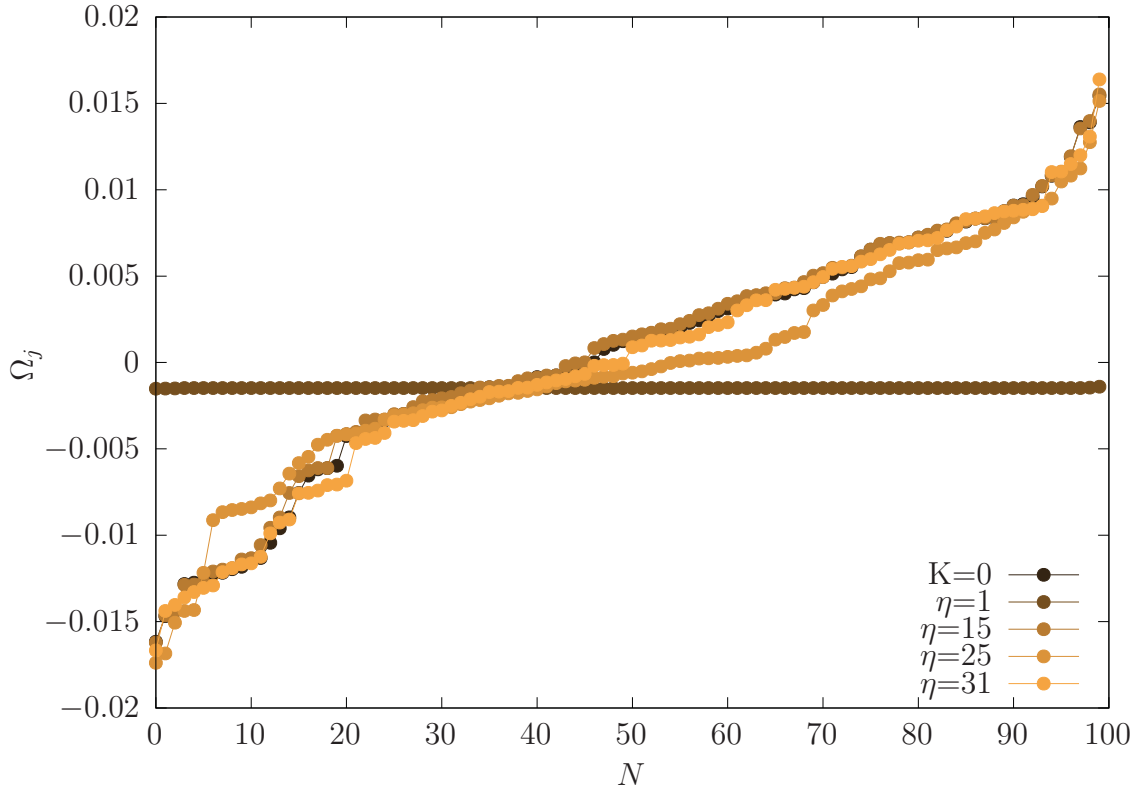


Figura 4.3: Frequências perturbadas Ω_j organizadas em ordem crescente para diferentes valores do parâmetro de degradação η , considerando o espaço unidimensional. Utilizando $N = 100$, $K = 10$ e $D = 1$. Tendo como padrão não perturbado o caso $K = 0$.

perturbadas.

Tal qual o caso do coeficiente de difusão, conforme o valor de η cresce, há uma perda de sincronização entre os osciladores, apresentando um platô de frequências perturbadas para valores intermediários. Mas, após uma pequena mudança nos valores de η , há uma grande diferença no comportamento das frequências perturbadas, já quase não havendo um platô de sincronização quando $\eta = 26$, da mesma forma que ocorreu para o coeficiente de difusão.

Analisando a equação (4.3) nota-se que tanto o parâmetro D quanto o parâmetro η , se fazem presentes somente no termo exponencial, com apenas uma diferença de escala com que são multiplicados.

O rompimento do platô para o parâmetro de difusão ocorre para $D = 3.5$ e para o caso da degradação só ocorre quando $\eta = 26$, o que demonstra uma maior influência da difusão nos efeitos de sincronização dos osciladores, tal diferença numérica se dá pelo fator multiplicativo da variável D .

Para as simulações realizadas neste trabalho, os somatórios das expansões em série para n e m foram considerados somente o primeiro valor, devida a rápida convergência da função de Green, como é possível ver na figura 4.5. Utilizando de tal propriedade, foi possível utilizar o valor de $T = 500$. A figura 4.4 mostra como o valor de $\bar{R}$ varia com

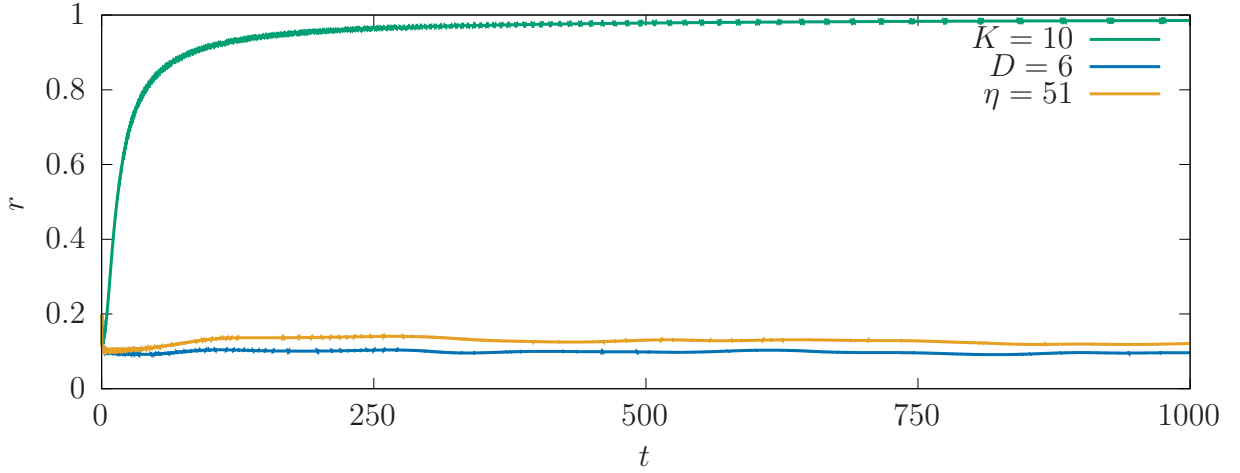


Figura 4.4: O quadro mostra a evolução temporal do parâmetro de ordem para o caso unidimensional para diferentes propriedades do sistema, onde é variada a propriedade mostrada no gráfico e mantido o resto constante da forma $K = 10$, $D = 1$ e $\eta = 1$

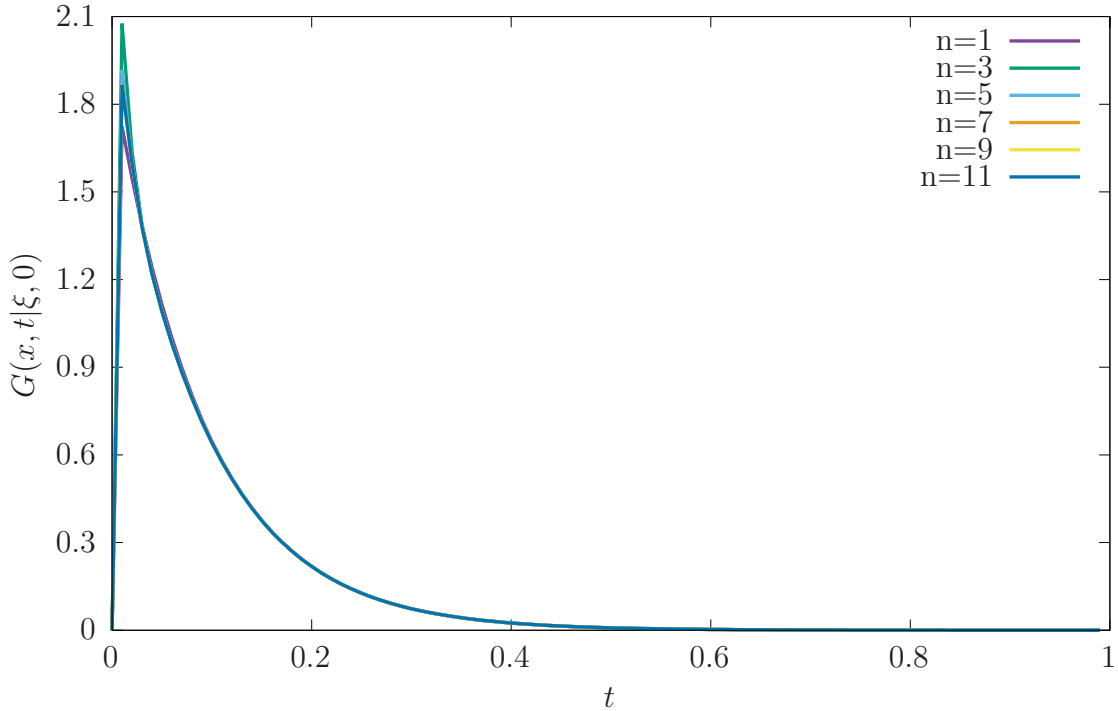


Figura 4.5: Análise dos valores da função de Green $G(x, t|\xi, 0)$ para diferentes limites da variável de soma n .

o tempo para as três variáveis no caso unidimensional, mas o mesmo é válido para os casos bidimensional e circular. A complexidade do sistema a ser resolvido resulta em um grande tempo de execução, o qual reduzido por meio de tais considerações.

Com isto pode-se concluir que ambos os parâmetros D e η tem igual importância para os efeitos de dessincronização, entretanto o coeficiente de difusão vai apresentar uma maior facilidade para influenciar o sistema. Como exemplo, tomando $n = 1$, $\eta = 1$ e

$D = 3, 5$, a exponencial fica elevada a aproximadamente 35.54 e já para $n = 1$, $\eta = 26$ e $D = 1$ tem-se que o valor exponenciado é aproximadamente 35.86, mostrando assim uma forte correlação entre os valores, mas dando predominância para a difusão devido as constantes que o multiplicam.

4.1.2 Caso Bidimensional

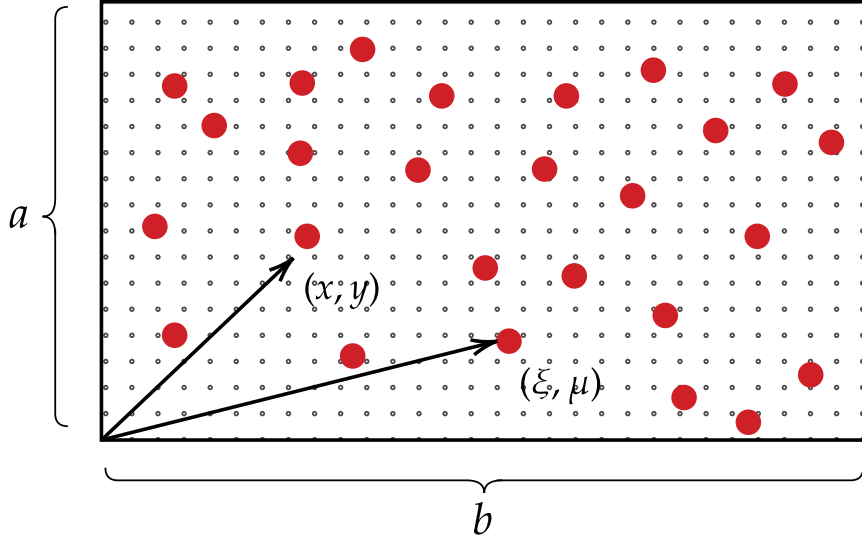


Figura 4.6: Representação dos osciladores no espaço bidimensional, onde os círculos vermelhos simbolizam os osciladores distribuídos no espaço, sendo localizados dois osciladores de exemplo.

Após o estudo do caso unidimensional simples, o próximo modelo a ser estudado foi o caso bidimensional, cuja função de Green que o descreve é

$$G(x, y, t | \xi, \mu, \tau) = \frac{4}{ab} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \text{sen}\left(\frac{n\pi\xi}{a}\right) \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \text{sen}\left(\frac{n\pi\mu}{b}\right) \text{sen}\left(\frac{n\pi y}{b}\right) \right] \exp\left\{ - \left[D\pi^2 \left(\frac{n^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2} \right) + \eta \right] (t - \tau) \right\} H(t - \tau) \quad (4.4)$$

onde o espaço está limitado entre $0 \leq a \leq 1$ e $0 \leq b \leq 1$, representado na figura 4.6. Utilizando configurações parecidas com a do caso unidimensional, a principal diferença a se reparar é que para o caso bidimensional, coeficiente de acoplamento K fixo utilizado para análise das frequências perturbadas passou de $K = 10$ para $K = 100$, apresentando assim uma maior dificuldade na sincronização dos osciladores para um espaço maior. Os valores de T e N foram mantidos os mesmos para todos os casos estudados neste trabalho.

Analisando como a difusão vai influenciar a sincronização do sistema, a figura 4.7 mostra as frequências perturbadas para diferentes valores de D e novamente é possível notar um platô de sincronização que é desfeito conforme a difusão da substância química aumenta, repetindo assim o efeito já visto para o caso unidimensional, porém agora com

uma maior sensibilidade ao fator difusivo, pois o valor de que mais se aproxima do caso não perturbado passa de $D = 5$ para o sistema unidimensional para $D = 4.5$ para o sistema bidimensional.

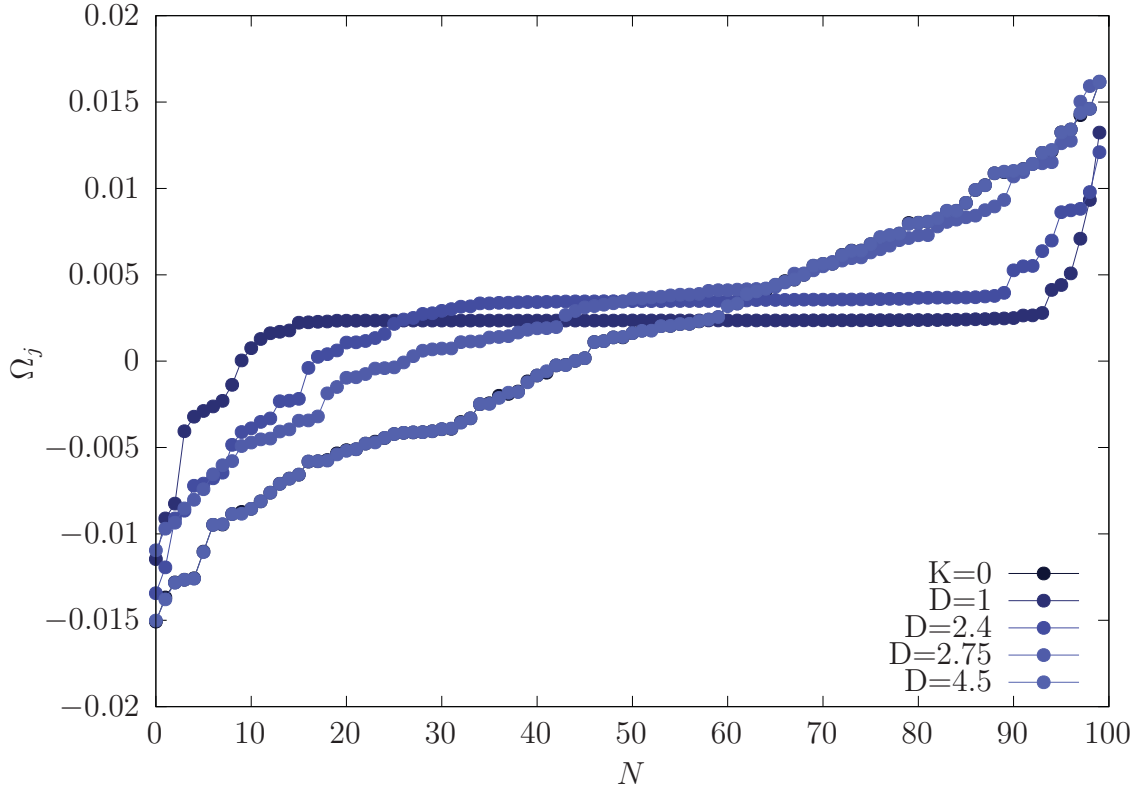


Figura 4.7: Comparação das frequências perturbadas organizadas em valores crescentes para diferentes coeficientes de difusão D considerando o caso bidimensional, sendo utilizado $K = 10$ e $\eta = 1.0$.

Para o caso do coeficiente de degradação, novamente o comportamento é parecido com o apresentado no caso unidimensional, porém agora a transição entre o estado mais e menos sincronizado é dada de maneira mais suave, não apresentando a quebra quase que direta que para o caso em uma única dimensão. Também é possível notar novamente que os valores de difusão são maiores que os de degradação, mas novamente, isto se dá pela forma com que a equação (4.4) é formulada.

Mesmo aumentando a dimensão trabalhada, os resultados ainda são muito condizentes entre si, mostrando que um aumento na degradação e na difusão da substância química vai influenciar de maneira negativa a sincronização dos osciladores.

4.1.3 Caso Circular

O último caso estudado neste trabalho foi para um espaço circular limitado entre $0 \leq r \leq 1$ representado na figura 4.9, que tem a função de Green como

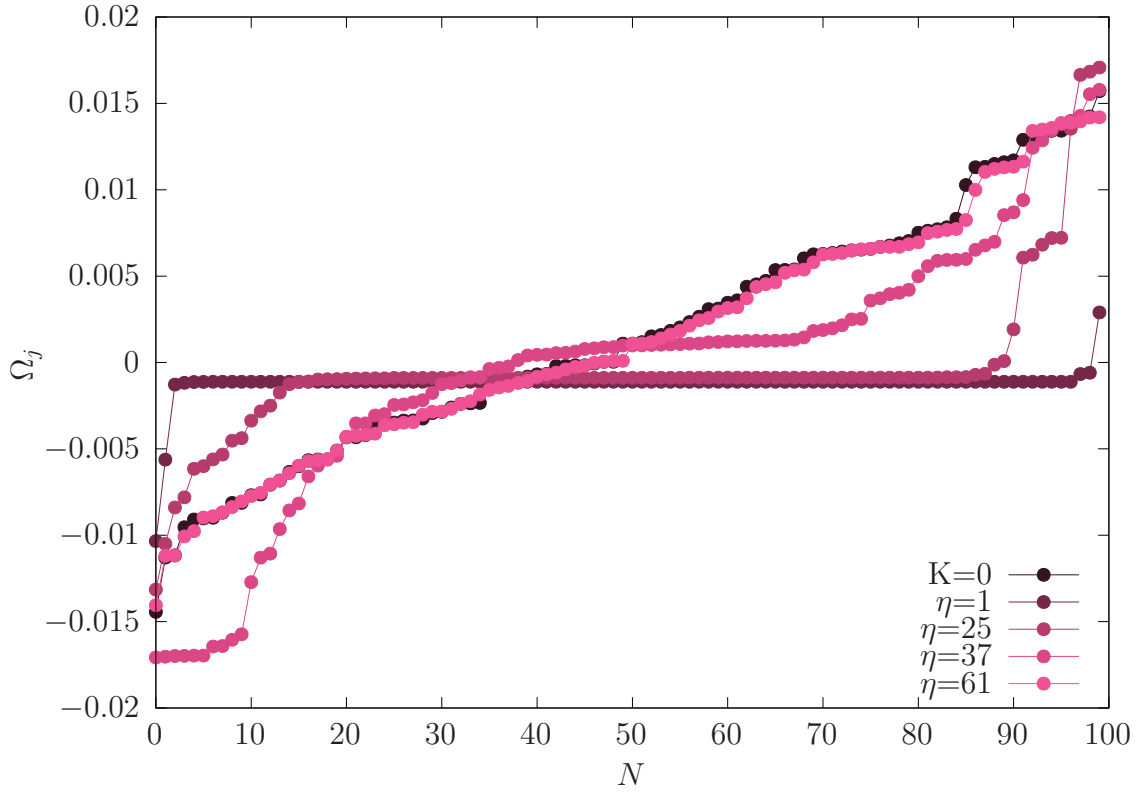


Figura 4.8: Frequências perturbadas Ω_j organizadas em ordem crescente para o caso do espaço bidimensional, mantendo $K = 10$, $D = 1$ e variando η .

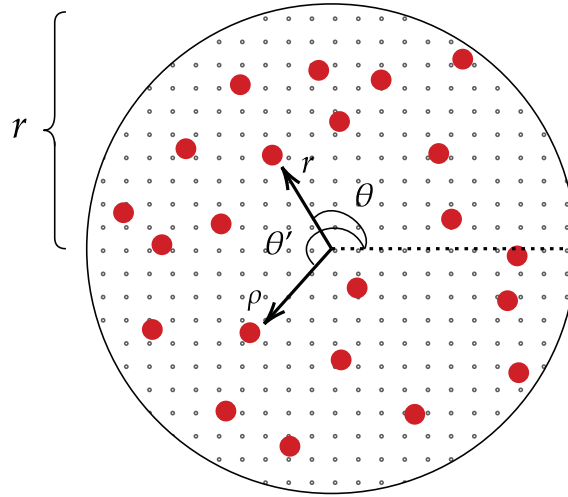


Figura 4.9: Representação dos osciladores no espaço circular, sendo os círculos vermelhos os osciladores que estão distribuídos no espaço, e mostrando como é localizado dois osciladores de exemplo.

$$G(r, \theta, t | \rho, \theta', \tau) = \frac{1}{\pi D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_m(\alpha_n r) J_m(\alpha_n \rho)}{[J'_m(\alpha_n a)]^2} \cos[m(\theta - \theta')] e^{-(\eta + D\alpha_n^2)(t - \tau)} \quad (4.5)$$

sendo α_n a n -ésima raiz positiva de $J_m(\alpha a) = 0$. Seguindo o mesmo padrão de resolução, mas novamente alterando $K = 10$ como caso de máxima sincronia, pois este já apresenta uma forte sincronização para o sistema.

A figura 4.10 mostra como as frequências perturbadas vão variar no domínio circular para diferentes valores de difusão, e como visto principalmente no caso unidimensional, há a formação de uma região plana para valores menores de D e quando variado de maneira simples, passando de $D = 4$ para $D = 6$ ocorre o rompimento total da sincronização, já quase não apresentando regiões sincronizadas. Trazendo assim novamente a ideia de transição de fase.

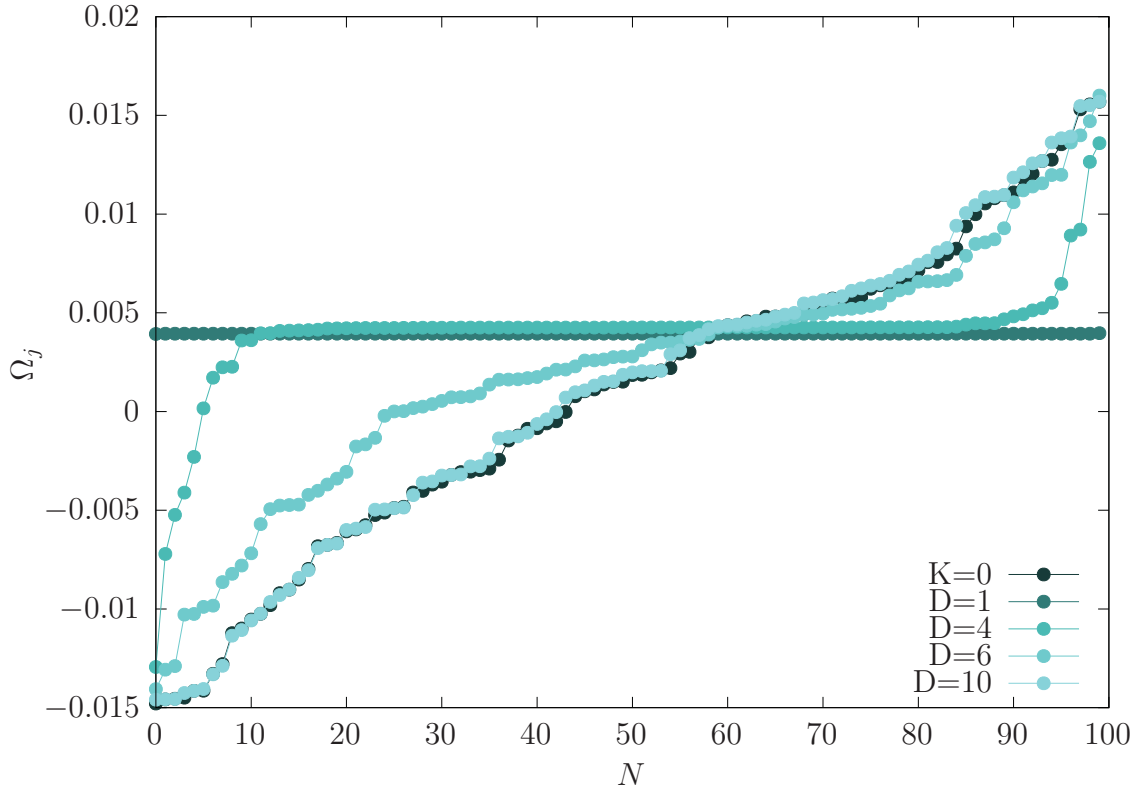


Figura 4.10: Representação das frequências perturbadas organizadas de maneira crescente para diferentes valores de D , sendo analisado o caso circular e mantendo $K = 10$ e $\eta = 1.0$.

Para o parâmetro de degradação η , a figura 4.11 mostra como o comportamento das frequências perturbadas foi influenciada a medida que o coeficiente η é acrescido, da mesma maneira que para as geometrias espaciais anteriormente apresentadas. Apresentando uma região planificada para menores valores de degradação, mas que é rompida após passar por um valor crítico.

Um fator importante de se notar, é que para o caso circular, o sistema é menos sensível às influências da difusão da substância química, apresentando os maiores valores de D até atingir a total dessincronização. Enquanto para o caso de η , os valores utilizados estão entre os valores utilizados para os casos unidimensional e bidimensional.

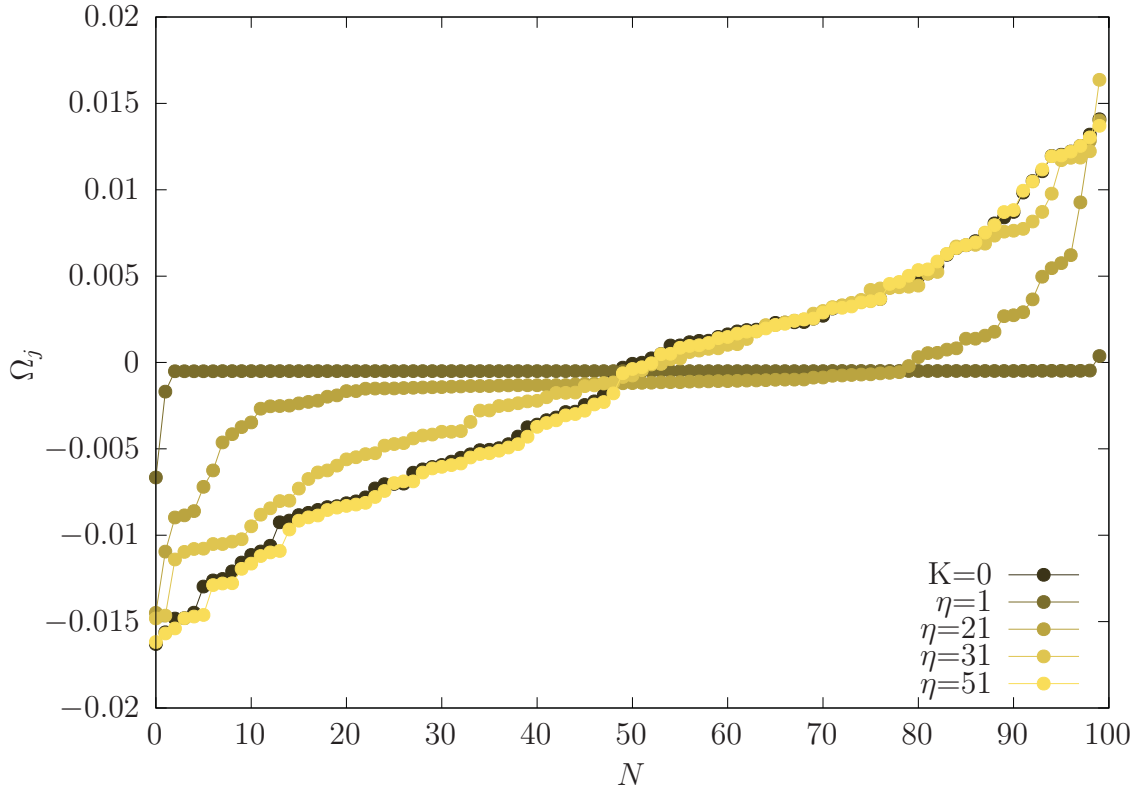


Figura 4.11: Frequências perturbadas Ω_j organizadas em ordem crescente para diferentes valores de η considerando o espaço circular. Fazendo uso de $K = 10$ e $D = 1$. Tendo como padrão não perturbado o caso $K = 0$.

4.2 Parâmetro de ordem

Outro modo de perceber a variação na sincronização das fases é por meio do parâmetro de ordem do sistema, calculado com base na posição das fases dos osciladores no plano complexo. O parâmetro de ordem tem seu valor confinado no intervalo $[0 : 1]$, o primeiro representando total assincronia do sistema e o segundo osciladores completamente sincronizados. Para evitar efeitos de ruído e grandes variações, é possível tomar a média do parâmetro de ordem por meio da equação

$$\bar{R} = \frac{1}{TN} \lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^T \sum_{j=1}^N |\cos(\theta_j)\hat{x} + i\sin(\theta_j)\hat{y}| dt \quad (4.6)$$

Calculando o parâmetro de ordem para diferentes valores de K , D e η permite traçar as curvas que vão descrever o comportamento do sistema conforme se varia as suas propriedades. As curvas apresentadas nesta seção foram obtidas por meio de médias para 5 sistemas diferentes em cada uma das geometrias. Somente para o caso circular foram utilizados menos pontos para curva devido o tempo necessário para a realização do experimento.

A figura 4.12 apresenta as curvas do parâmetro de ordem em função do valor do

acoplamento, mantendo $D = \eta = 1$. Considerando que o caso bidimensional está em uma escala maior indo até $K = 100$, é possível notar que o comportamento das curvas é quase idêntico independente da geometria, mostrando um rápido crescimento perto da origem e que se estabiliza lentamente rumo a $R \approx 1$. Demonstrando assim o resultado esperado de que conforme o acoplamento entre os osciladores cresce, maior é a sincronização entre os mesmo, sendo o efeito independente da geometria utilizada, essa só afetando a intensidade com que o efeito vai ocorrer, já que para o caso com geometria bidimensional é necessário um valor até 10 vezes maior de acoplamento.

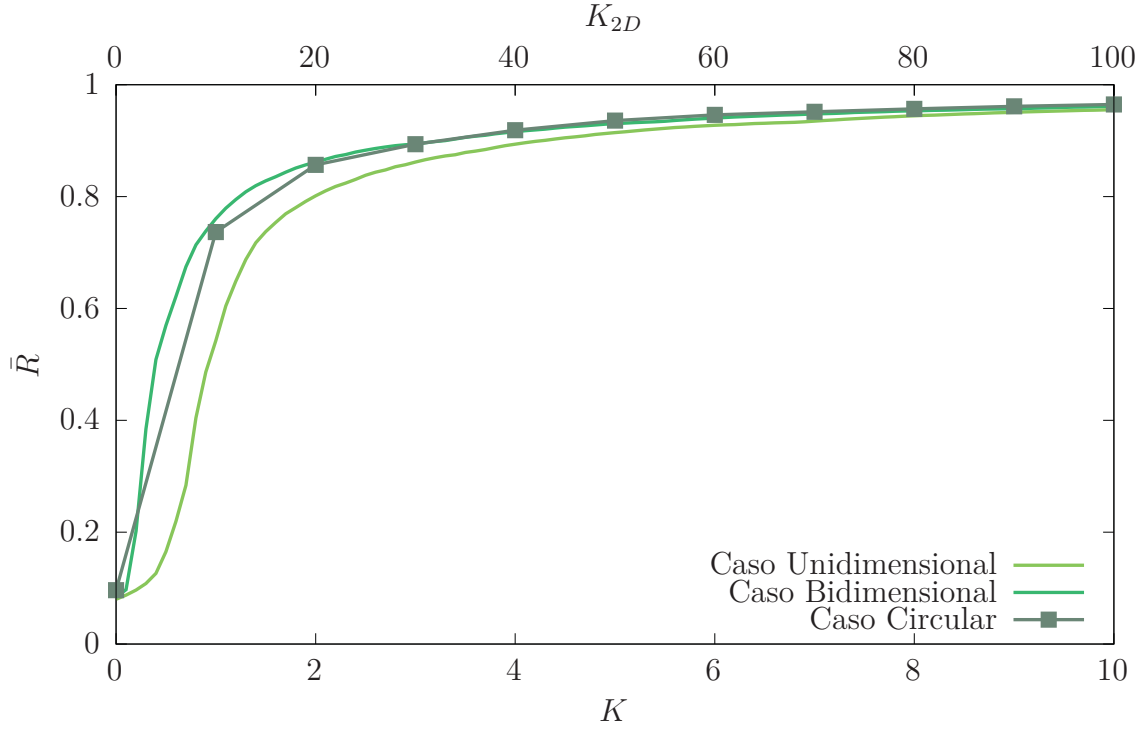


Figura 4.12: Parâmetro de ordem em função da constante de acoplamento para as três diferentes geometrias estudadas, sendo o eixo inferior a escala referente aos casos unidimensional e circular, e o eixo superior referente a geometria bidimensional. Foi mantido $D = \eta = 1$

Para as variáveis do sistemas associadas a substância química que realiza o acoplamento entre os osciladores a figura 4.13 mostra o valor do parâmetro de ordem para diferentes valores do coeficiente de difusão, e, novamente como para o caso do acoplamento, os feitos ocorrem de maneira muito parecida qualitativamente, porém para o caso circular que apresenta uma melhor resistência a perda de sincronia chegando a valores de $\bar{R} \approx 0$ quando $D = 11$, enquanto para $D = 5$ ambos os casos estão dessincronizados.

Apresentando uma queda lenta até um ponto em que ocorre um efeito similar a uma transição de fase e passa para quase dessincronização completa, tal efeito foi notado também na análise das frequências perturbadas e pode estar relacionado a uma difusão tão veloz que, dado um valor limite, os osciladores não conseguem se comunicar de maneira própria para que haja o acoplamento.

Sendo novamente alterada a escala de um dos gráficos para que seja melhor visualizado a semelhança qualitativa entre as curvas.

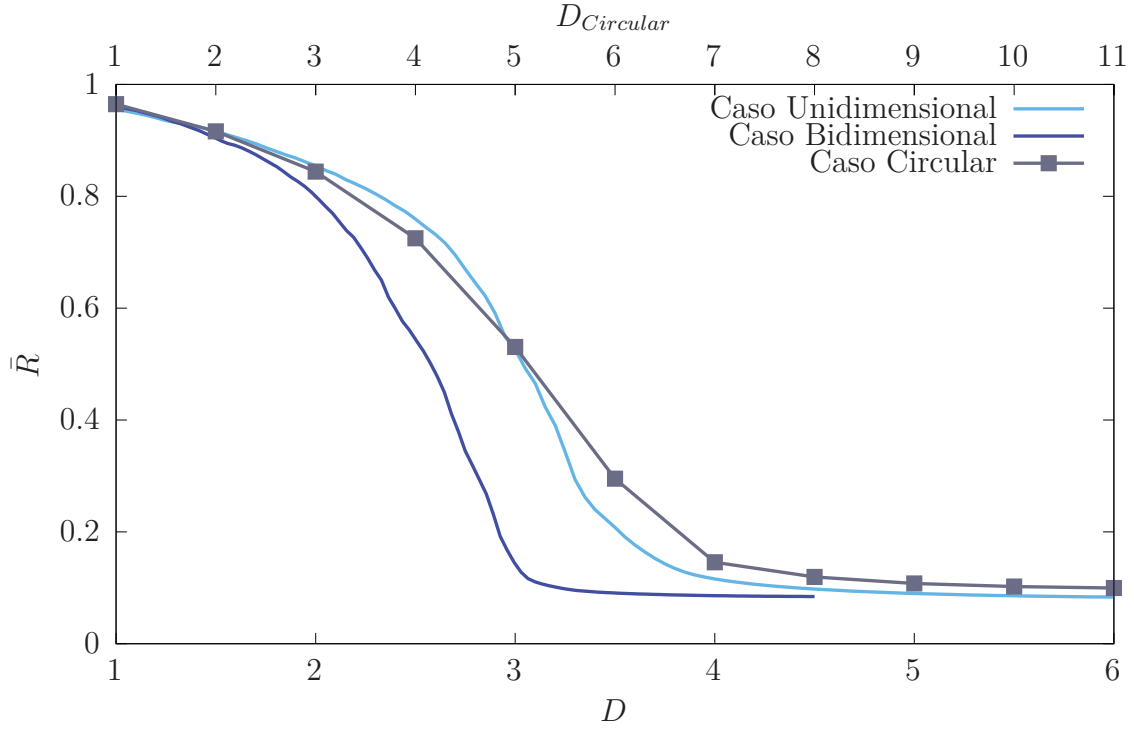


Figura 4.13: Parâmetro de ordem em função do coeficiente de difusão para as três diferentes geometrias estudadas, sendo o eixo inferior a escala referente aos casos unidimensional e bidimensional, e o eixo superior referente a geometria circular. Sendo mantido $K = 10$ e $\eta = 1$

O coeficiente de degradação é a outra característica associada a substância química que vai ter impacto na sincronização dos osciladores, a figura 4.14 demonstra como tal efeito ocorre, apresentando o parâmetro de ordem para diferentes valores de η e da mesma forma que para todos os outros casos, o comportamento entre as curvas é muito próximo e, para este caso, os valores numéricos também. Novamente há a presença de um comportamento parecido com uma transição de fase, principalmente para a geometria unidimensional e circular, onde após um dado valor há um decréscimo que leva a um valor quase constante de $\bar{R}$.

Da mesma forma que para o coeficiente de difusão, onde a substância se espalhou tão rápido que não era possível haver um acoplamento, para este caso a substância se desintegra de maneira demasiadamente acelerada, impedindo que haja contato e portanto sincronização entre os osciladores.

Tais gráficos mostram como as variáveis do sistema vão afetar de maneira direta a sincronização entre os osciladores, e que, dependendo da geometria que os osciladores estão inseridos, haverá uma maior facilidade ou dificuldade em sincronizar os osciladores.

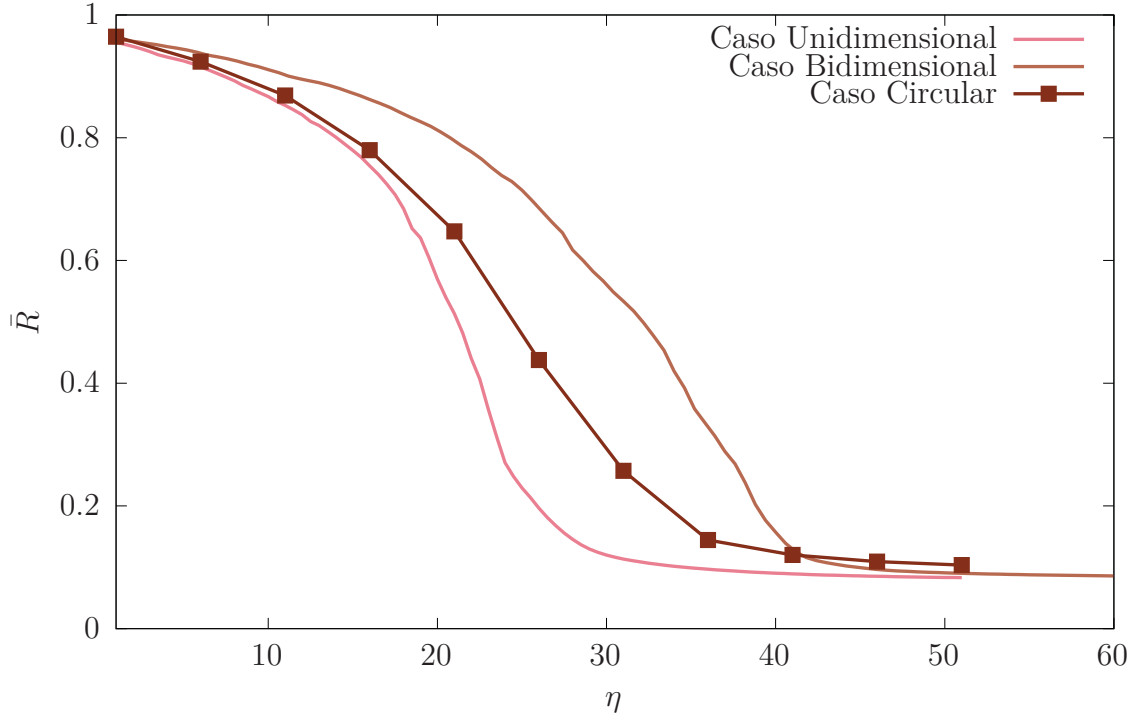


Figura 4.14: Parâmetro de ordem em função do coeficiente de degradação para as três diferentes geometrias estudadas. Utilizando $K = 10$ e $D = 1$.

4.3 Método de Born

Além do método apresentado para este trabalho, é possível resolver a mesma equação integro-diferencial (4.1) por meio da aproximação de Born [26], onde é feito uma aproximação de ordem zero da forma

$$\frac{d\mathbf{X}_j^{(0)}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{X}_j^0, t), \quad (4.7)$$

que vai ser aplicada a primeira aproximação

$$\frac{d\mathbf{X}_j^{(1)}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{X}_j^{(1)}, t) + \int_0^{t+} \sum_{k=1}^N H(\mathbf{X}^{(0)}(t')) G(\mathbf{r}, t | \mathbf{r}'_k, t') dt' \quad (4.8)$$

e assim em diante, na segunda aproximação tem-se

$$\frac{d\mathbf{X}_j^{(2)}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{X}_j^{(2)}, t) + \int_0^{t+} \sum_{k=1}^N H(\mathbf{X}^{(1)}(t')) G(\mathbf{r}, t | \mathbf{r}'_k, t') dt' \quad (4.9)$$

Por meio desse recurso, é possível obter uma fórmula mais simples de ser tratada e que permite encontrar uma solução analítica para a parte integral. Utilizando apenas uma aproximação do caso unidimensional, o resultado é

$$\begin{aligned} \frac{d\theta_j^{(1)}}{dt} = & \omega_j + \frac{2K}{LN} \sum_{k=1}^N \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{t+} \text{sen}[(\omega_k - \omega_j)t' + \theta_k(0) - \theta_j(0)] \text{sen}\left(\frac{n\pi x_j}{L}\right) \text{sen}\left(\frac{n\pi x_k}{L}\right) \\ & \times \exp\left(-\left[D\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 + \eta\right](t - t')\right) H(t - t') dt' \end{aligned} \quad (4.10)$$

cuja integração pode ser realizada para dt' , e utilizando duas integrações por partes chega-se em

$$\frac{d\theta_j^{(1)}}{dt} = \omega_j + \frac{K}{N} \sum_{k=1}^N \mathcal{I}_{jk}(t) \quad (4.11)$$

sendo

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{jk}(t) = & \frac{2}{L} \sum_{n=1}^{\infty} \text{sen}\left(\frac{n\pi x_j}{L}\right) \text{sen}\left(\frac{n\pi x_k}{L}\right) (\alpha_{jk}^2 + \gamma_n^2)^{-1} \times \\ & \{[\text{sen}(\theta_k(t) - \theta_j(k)) - \alpha_{jk} \cos(\theta_k(t) - \theta_j(k))] - e^{-\gamma_n t} [\text{sen}\beta_{jk} - \alpha_{jk} \cos\beta_{jk}]\} \end{aligned} \quad (4.12)$$

e

$$\alpha_{jk} = \omega_k - \omega_j \quad (4.13)$$

$$\beta_{jk} = \theta_k(0) - \theta_j(0) \quad (4.14)$$

$$\gamma_n = D\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 + \eta \quad (4.15)$$

4.3.1 Comparação entre métodos

Utilizando de tal metodologia para resolver o problema, pode-se comparar os resultados obtidos por meio do método do tipo Born com os resultados obtidos via o método numérico apresentado neste trabalho.

A figura 4.15 mostra a comparação entre os métodos para a variação do acoplamento, sendo possível notar uma grande diferença no formato das curvas, com a curva apresentada pelo método numérico mais próxima daquela que descreve o modelo de Kuramoto e foi mostrada no capítulo 2, assim mostrando que o método numérico apresentado devolve uma maior proximidade com o caso ideal.

Todavia, quando analisado cada um dos casos com os resultados analíticos obtidos na subseção 3.3.2, pode-se notar uma concordância de crescimento somente após o valor de acoplamento crítico, calculado para este caso como $K_C \approx 0.17$.

Para a comparação do coeficiente de difusão os resultados estão presentes na figura

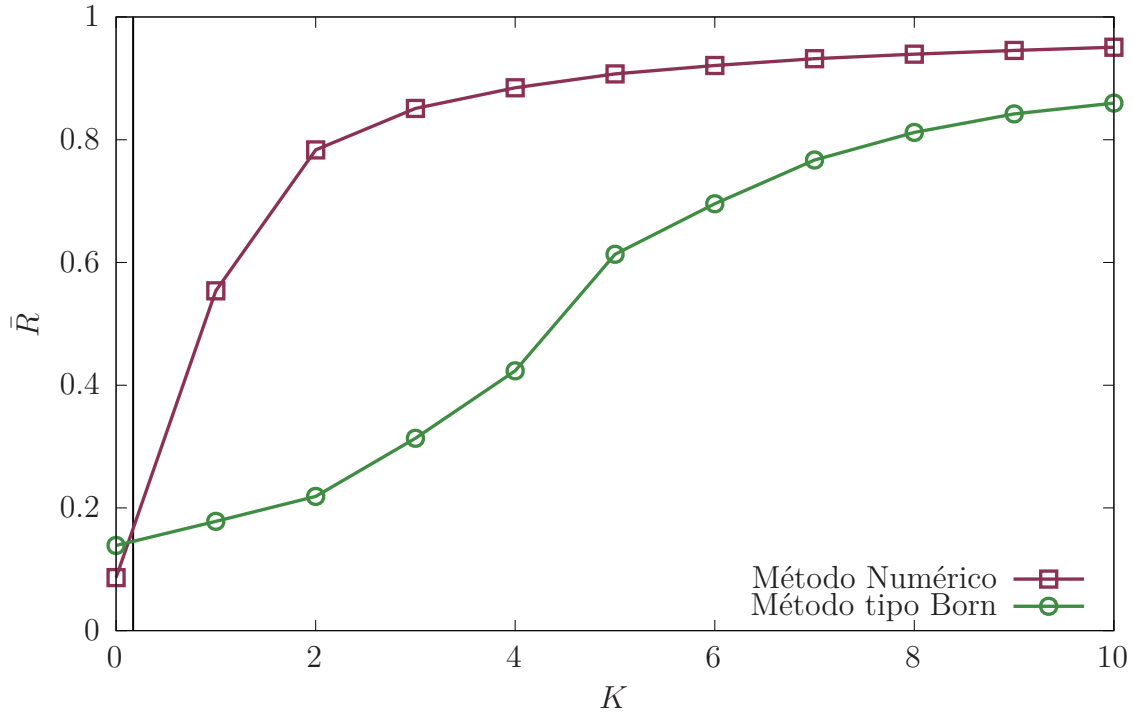


Figura 4.15: Comparação dos métodos de resolução para diferentes valores da constante de acoplamento K , e mantendo $D = \eta = 1$, com a marcação do valor de K_C .

4.16, onde é possível notar que há uma diferença de resultados quantitativos, porém ocorre uma concordância qualitativa de perda de sincronização com o aumento da difusão. Importante ressaltar também a diferença de escala apresentada, onde na parte superior do gráfico está a escala para o caso do tipo Born e essa é mais de duas vezes menor que para o caso numérico, mostrando assim uma diferença de valores significativa para qual os efeitos ocorrem.

A figura 4.17 apresenta por fim a comparação para a última característica do sistema, a degradação da substância química, e assim como para o caso do coeficiente de difusão, os resultados apresentam pontos iniciais e finais quase próximos, entretanto a forma como ocorre a passagem de um para o outro é muito díspar.

Ambas as curvas repetem os padrões apresentados pelas curvas de difusão, porém para o caso da degradação o caso tipo Born segue mais linearmente que todos os outros, o que não é visto quando utilizado o método numérico.

Utilizando tais gráficos de comparação, pode-se notar que os resultados obtidos utilizando cada um dos métodos é muito díspar, mesmo que qualitativamente ocorram processos parecidos, como a perda de sincronização para o aumento da difusão ou degradação, a forma com que ocorre tais processos é diferente.

Tais diferenças ocorrem principalmente devido a forma com que os métodos de solução são construídos, onde o método de Born se utiliza apenas de considerações do tempo presente, e foi proposto inicialmente para solução de problemas de espalhamento, onde as

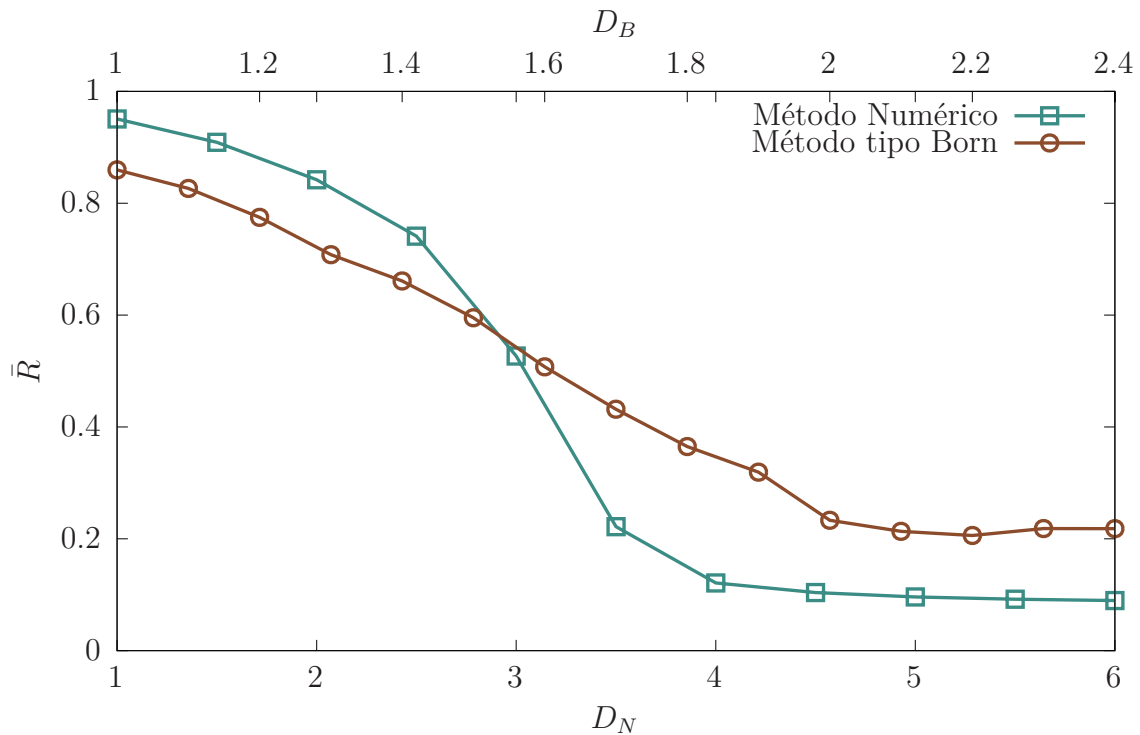


Figura 4.16: Comparação dos métodos de resolução da equação integro diferencial variando o coeficiente de difusão e mantendo $K = 10$ e $\eta = 1$. Sendo o eixo superior referente ao caso do tipo Born e o eixo inferior referente ao caso numérico, devida a grande diferença de escala.

interações são locais.

O método numérico apresentado neste trabalho por outro lado, leva em conta todas as interações que ocorrem, carregando a história do sistema com si, e não apresenta problemas devido a não localidade do problema estudado, assim permitindo resultados mais precisos.

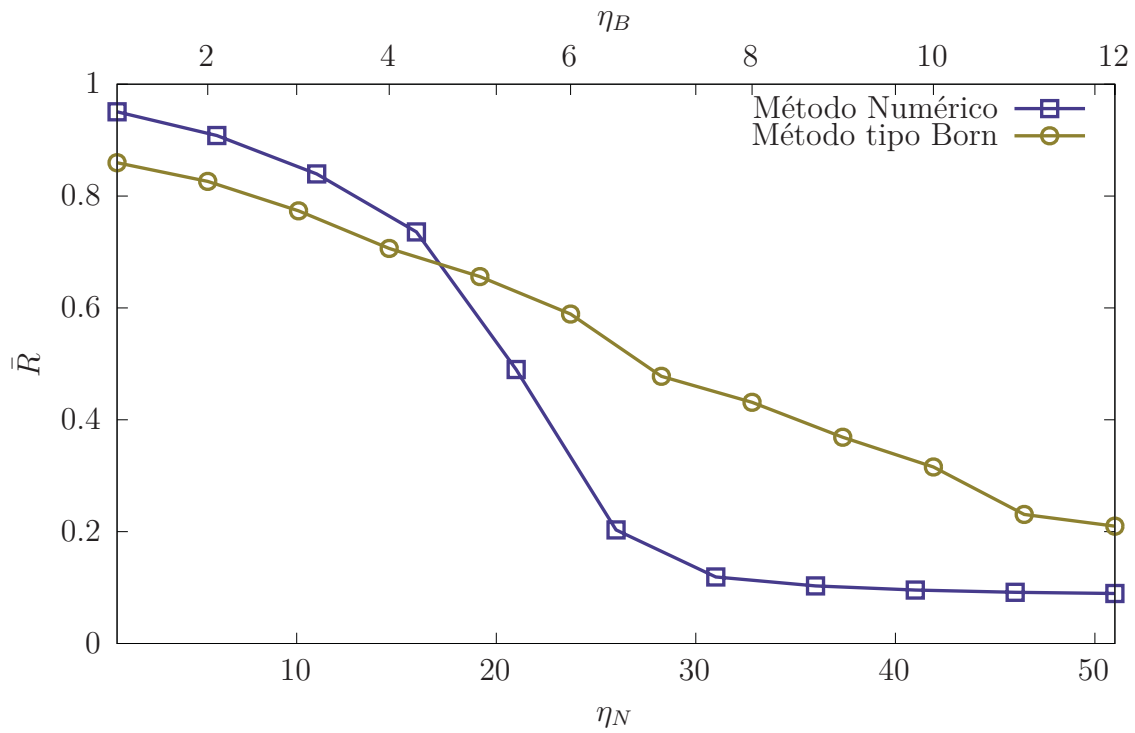


Figura 4.17: Contraste entre os resultados obtidos por diferentes métodos de resolução da equação integro diferencial variando o coeficiente de degradação e mantendo $K = 10$ e $D = 1$. Sendo o eixo superior referente ao caso tipo Born e o eixo inferior referente ao caso numérico, devida a grande diferença de escala.

5 Considerações Finais

O estudo e compreensão da Natureza é uma das paixões do ser humano, buscando construir e racionalizar todos os fenômenos e efeitos que lhe são apresentados à sua contemplação. Para este fim são utilizados teorias, conceitos e postulados, que são criados para representar e prever o mundo ao seu redor.

Um destes fenômenos descritos e que apresenta grande interesse e do ser humano é entender como se dá e os efeitos relacionados ao funcionamento síncrono de um conjunto de objetos ou seres, encontrando inspiração em sistemas mecânicos, aparelhos eletrônicos e até mesmo no funcionamento do corpo humano.

Analisando que muitas características da vida humana se repetem em ciclos, como o ciclo menstrual, a liberação de hormônios ou as batidas rítmicas do coração, é possível intuir que outros componentes do corpo vão apresentar um comportamento parecido.

Considerando que outras partes do funcionamento humano podem ser aproximadas por osciladores que estão conectados por uma substância, como células se comunicando por meio de hormônios, Yoshiki Kuramoto propôs um modelo que considerava que as células iriam emitir e absorver tais hormônios para realizar um funcionamento conjunto, e que a dinâmica seria dada pela concentração da substância difusiva.

Entretanto as equações obtidas foram de difícil tratamento e Kuramoto considerou tempos de difusão muito rápidos, podendo assim simplificar os resultados e encontrar uma primeira solução, mas que somente descrevia alguns poucos casos.

Apoiado em tal ideia foi desenvolvido um meio de resolução que por meio do método de aproximação de Born, o qual permite realizar as simulações para qualquer tempo de difusão, mas ainda se tratava de um conjunto difícil de obter grande precisão devido a complexidade crescente para cada nova ordem de aproximação e acabava por não ser tão preciso devido a forma com que o método foi inicialmente idealizado.

Tomando todos estes pontos como base, este trabalho foi proposto para resolver o problema de osciladores acoplados por uma substância difusiva de maneira mais precisa por meio do desenvolvimento de um método numérico. Para isto, foi resolvida a equação da difusão por meio das funções de Green para um conjunto de geometrias espaciais diferentes, como os espaços em uma, duas e três dimensões retangulares abertos e fechados, e os domínios circulares e seus complementos.

Utilizando a concentração determinada como parâmetro para o acoplamento junta-

mente com o modelo de Kuramoto para acoplamento de osciladores de fase, chegou-se a equação integro-diferencial

$$\frac{d\theta_j}{dt} = \omega_j + \int_0^{t+} \sum_{k=1}^N \frac{K}{N} \sin(\theta_k(\tau) - \theta_j(\tau)) G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}_k, \tau) d\tau \quad (5.1)$$

cuja solução é intratável de maneira analítica, porém adaptando e desenvolvendo um método numérico que resolve as equações integro-diferenciais de maneira completa foi possível simular um conjunto de osciladores descritos pela mesma e assim obter melhores resultados.

Para os estudos feitos neste trabalho seguiu-se o padrão de considerar um conjunto de $N = 100$ osciladores de fase com suas frequências e fases iniciais determinadas de maneira randômica por meio de diferentes funções de distribuição de probabilidade.

Foram feitas quintuplicatas para cada simulação, então tirado a médias dos valores e assim obtido os resultados finais, permitindo que influências de valores fossem descartadas e um comportamento mais geral obtido.

A primeira análise feita foi a comparação de como a variação de um dos parâmetros que caracterizam a substância que realiza o acoplamento afeta o valor da frequência perturbada do sistema, primeiro mantendo $K = 10$ e $\eta = 1$ para todas as três geometrias estudadas e variar o valor do coeficiente de difusão.

Notando que quanto mais rápido a substância química se difunde, maior será a quantidade de substância absorvida pelas paredes do sistema, assim diminuindo a concentração no meio e dificultando a sincronização.

O mesmo foi feito para o estudo do impacto do fator de degradação, mantendo $K = 10$ e $D = 1$ e variando o parâmetro η , sendo novamente observando que quanto mais rápido ocorre a degradação da substância, menor a quantidade de osciladores em frequências próximas, mostrando a perda de sincronização.

Em ambos os casos, para todas as geometrias, é possível notar que, ao atingir um valor específico de parâmetro, o sistema perde a sincronização muito mais rapidamente, indicando um efeito de mudança de fase, que é esperado e conhecido de modelos envolvendo o acoplamento de Kuramoto.

Para melhor análise dos resultados, utilizou-se da média temporal do parâmetro de ordem de Kuramoto. Novamente seguindo a mesma metodologia de fixar dois parâmetros e variar o terceiro para se obter uma curva.

Primeiro foi feito $D = 1 = \eta = 1$ e variado a constante de acoplamento K , que apresentou um formato de curva muito próximo com o modelo de Kuramoto de acoplamento entre osciladores. Mostrando assim uma forte correlação entre o modelo modificado e o mais simples.

Outro ponto importante que tal medida apresentou foi a diferença de valores para que ocorresse o acoplamento para diferentes geometrias, com o espaço bidimensional retangu-

lar necessitando de um valor 10 vezes maior para repetir o mesmo comportamento que os outros dois casos, tal efeito pode ser causado devido o tamanho do espaço e a distância entre os osciladores, fazendo com que seja necessária uma força maior para que ocorra a sincronização.

Também foi possível observar, que para o caso unidimensional retangular, pode-se determinar o valor de K_C em que ocorreria a sincronização e que tanto os resultados obtidos pelo método numérico quanto os obtidos pelo método de Born concordam com o valor analítico.

Quando realizada a análise do parâmetro de ordem médio para os casos do coeficiente de difusão e degradação, os resultados foram muito parecidos, dada as escaladas de valores utilizadas, apresentando para os dois casos uma curva com formato quase sigmóide, onde a partir de um dado valor crítico a perda de sincronização ocorre de maneira veloz até se estabilizar, formando um padrão parecido com uma transição de fase.

Desta forma, foi possível compreender o papel de cada um dos parâmetros na sincronização dos osciladores e como as diferentes geometrias espaciais em que o sistema está inserido também afetam a facilidade ou dificuldade de se variar a intensidade do trabalho conjunto dos osciladores. Compreendendo de maneira mais precisa os resultados já obtidos em trabalhos anteriores e fornecendo conteúdo para um melhor entendimento de fenômenos que possam ocorrer na natureza.

Para próximos trabalhos, creio que tópicos relacionados que poderiam ser estudados são:

- Trocar a mediação dos osciladores para outra equação diferencial, como a equação da onda;
- Buscar uma solução analítica para valores de D_C e η_C em que ocorre a inversão de sincronização;
- Verificar o comportamento para as geometrias restantes apresentadas neste trabalho.

Referências Bibliográficas

- [1] S. Strogatz, *Sync: The emerging science of spontaneous order*. Penguin UK, 2004.
- [2] J. Pantaleone, “Synchronization of metronomes,” *American Journal of Physics*, vol. 70, no. 10, pp. 992–1000, 2002.
- [3] R. Brown and L. Kocarev, “A unifying definition of synchronization for dynamical systems,” *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, vol. 10, no. 2, pp. 344–349, 2000.
- [4] A. Pikovsky, J. Kurths, and M. Rosenblum, *Synchronization: a universal concept in nonlinear sciences*. No. 12, Cambridge university press, 2003.
- [5] M. Rosenblum and A. Pikovsky, “Synchronization: from pendulum clocks to chaotic lasers and chemical oscillators,” *Contemporary Physics*, vol. 44, no. 5, pp. 401–416, 2003.
- [6] S. H. Strogatz, “From kuramoto to crawford: exploring the onset of synchronization in populations of coupled oscillators,” *Physica D: Nonlinear Phenomena*, vol. 143, no. 14, pp. 1–20, 2000.
- [7] Y. Kuramoto, *Chemical oscillations, waves, and turbulence*. Courier Corporation, 2003.
- [8] H. Sakaguchi and Y. Kuramoto, “A soluble active rotater model showing phase transitions via mutual entertainment,” *Progress of Theoretical Physics*, vol. 76, no. 3, pp. 576–581, 1986.
- [9] Y. Kuramoto, “Cooperative dynamics of oscillator communitya study based on lattice of rings,” *Progress of Theoretical Physics Supplement*, vol. 79, pp. 223–240, 1984.
- [10] J. Buck and E. Buck, “Synchronous fireflies,” *Scientific American*, vol. 234, no. 5, pp. 74–85, 1976.
- [11] J. Buck, “Synchronous rhythmic flashing of fireflies. ii.,” *The Quarterly review of biology*, vol. 63, no. 3, pp. 265–289, 1988.

- [12] D. K. Welsh, J. S. Takahashi, and S. A. Kay, “Suprachiasmatic nucleus: cell autonomy and network properties,” *Annual review of physiology*, vol. 72, pp. 551–577, 2010.
- [13] S. Yamaguchi, H. Isejima, T. Matsuo, R. Okura, K. Yagita, M. Kobayashi, and H. Okamura, “Synchronization of cellular clocks in the suprachiasmatic nucleus,” *Science*, vol. 302, no. 5649, pp. 1408–1412, 2003.
- [14] D. Gonze, S. Bernard, C. Waltermann, A. Kramer, and H. Herzel, “Spontaneous synchronization of coupled circadian oscillators,” *Biophysical journal*, vol. 89, no. 1, pp. 120–129, 2005.
- [15] M. Saadati and Y. Jamali, “The effects of beta-cell mass and function, intercellular coupling, and islet synchrony on Ca^{2+} dynamics,” *Scientific reports*, vol. 11, no. 1, pp. 1–14, 2021.
- [16] M. K. McClintock *et al.*, “Menstrual synchrony and suppression,” *Nature*, vol. 229, no. 5282, pp. 244–245, 1971.
- [17] E. Ott and T. M. Antonsen Jr, “Frequency and phase synchronization in large groups: Low dimensional description of synchronized clapping, firefly flashing, and cricket chirping,” *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, vol. 27, no. 5, p. 051101, 2017.
- [18] R. E. Mirollo and S. H. Strogatz, “Synchronization of pulse-coupled biological oscillators,” *SIAM Journal on Applied Mathematics*, vol. 50, no. 6, pp. 1645–1662, 1990.
- [19] B. Podobnik, D. Korošak, M. S. Klemen, A. Stožer, J. Dolenšek, M. S. Rupnik, P. C. Ivanov, P. Holme, and M. Jusup, “ β cells operate collectively to help maintain glucose homeostasis,” *Biophysical journal*, vol. 118, no. 10, pp. 2588–2595, 2020.
- [20] P. E. Hardin, J. C. Hall, and M. Rosbash, “Circadian oscillations in period gene mrna levels are transcriptionally regulated,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 89, no. 24, pp. 11711–11715, 1992.
- [21] A. Goldbeter, *Biochemical oscillations and cellular rhythms: the molecular bases of periodic and chaotic behaviour*. Cambridge university press, 1997.
- [22] P. J. Uhlhaas and W. Singer, “Neural synchrony in brain disorders: Relevance for cognitive dysfunctions and pathophysiology,” *Neuron*, vol. 52, no. 1, pp. 155–168, 2006.
- [23] Z. Ghanbari and S. Gharibzadeh, “Synchrony analysis: application in early diagnosis,

- staging and prognosis of multiple sclerosis,” *Frontiers in computational neuroscience*, vol. 8, p. 73, 2014.
- [24] Y. Kuramoto and H. Nakao, “Origin of power-law spatial correlations in distributed oscillators and maps with nonlocal coupling,” *Physical review letters*, vol. 76, no. 23, p. 4352, 1996.
- [25] Y. Kuramoto and H. Nakao, “Power-law spatial correlations and the onset of individual motions in self-oscillatory media with non-local coupling,” *Physica D: Nonlinear Phenomena*, vol. 103, no. 1-4, pp. 294–313, 1997.
- [26] R. P. Aristides and R. L. Viana, “An integro-differential equation for dynamical systems with diffusion-mediated coupling,” *Nonlinear Dynamics*, vol. 100, pp. 3759–3770, 2020.
- [27] A. Pannekoek, *A history of astronomy*. Courier Corporation, 1989.
- [28] A. Aaboe, “Scientific astronomy in antiquity,” *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, vol. 276, no. 1257, pp. 21–42, 1974.
- [29] J. B. Brackenridge, “Kepler, elliptical orbits, and celestial circularity: A study in the persistence of metaphysical commitment: Part i,” *Annals of Science*, vol. 39, no. 2, pp. 117–143, 1982.
- [30] A. Bell, “The horologium oscillatorium of christian huygens,” *Nature*, vol. 148, no. 3748, pp. 245–248, 1941.
- [31] J. B. Marion, *Classical dynamics of particles and systems*. Academic Press, 2013.
- [32] R. L. Viana and F. F. d. Carvalho, “Sincronização entre um oscilador de fase e um forçamento externo,” *Revista Brasileira de Ensino de Física*, vol. 39, 2017.
- [33] R. L. Viana, “Sincronização de relógios de pêndulo e metrônomos: um tratamento qualitativo,” *Revista Brasileira de Ensino de Física*, vol. 42, 2020.
- [34] T. Stankovski, T. Pereira, P. V. McClintock, and A. Stefanovska, “Coupling functions: universal insights into dynamical interaction mechanisms,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 89, no. 4, p. 045001, 2017.
- [35] B. C. Daniels, “Synchronization of globally coupled nonlinear oscillators: the rich behavior of the kuramoto model,” *Ohio Wesleyan Physics Dept., Essay*, vol. 7, no. 2, p. 20, 2005.
- [36] D. G. Hardie, *Biochemical messengers: hormones, neurotransmitters and growth*

- factors*. Springer Science & Business Media, 1991.
- [37] H. Nakao, “Anomalous spatio-temporal chaos in a two-dimensional system of nonlocally coupled oscillators,” *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, vol. 9, no. 4, pp. 902–909, 1999.
- [38] T. Narasimhan *et al.*, “The dichotomous history of diffusion,” *Physics Today*, vol. 62, no. 7, pp. 48–53, 2009.
- [39] D. G. Duffy, *Green’s functions with applications*. Chapman and Hall/CRC, 2015.
- [40] Y. Kuramoto, “Scaling behavior of turbulent oscillators with non-local interaction,” *Progress of Theoretical Physics*, vol. 94, no. 3, pp. 321–330, 1995.
- [41] J. T. Day, “Note on the numerical solution of integro-differential equations,” *The Computer Journal*, vol. 9, no. 4, pp. 394–395, 1967.

A Cálculo das Funções de Green para diferentes geometrias

A função de Green $G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau)$ para a equação da difusão trabalhada neste trabalho pode ser determinada resolvendo a equação

$$D\nabla^2 G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) - \frac{\partial G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau)}{\partial t} - \eta G(\mathbf{r}, t | \mathbf{z}, \tau) = -\delta(t - \tau)\delta(\mathbf{r} - \mathbf{z}) \quad (\text{A.1})$$

para diferentes sistemas de coordenadas e simetrias, sendo considerado em todos os casos que $t, \tau > 0$.

A.1 Função $G(x, t | \xi, \tau)$ para o caso unidimensional em todo o espaço livre $-\infty < x, \xi < \infty$

Sendo o caso mais geral, esse também terá utilidade para as próximas soluções, parte-se da equação

$$D \frac{\partial^2 G(x, t | \xi, \tau)}{\partial x^2} - \frac{\partial G(x, t | \xi, \tau)}{\partial t} - \eta G(x, t | \xi, \tau) = -\delta(t - \tau)\delta(x - \xi) \quad (\text{A.2})$$

com as condições de contorno e iniciais

$$\begin{aligned} \lim_{|x| \rightarrow \infty} |G(x, t | \xi, \tau)| &< \infty \\ G(x, 0 | \xi, \tau) &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Tomando a transformada de Laplace da EDP tem-se que

$$\frac{d^2 G_L(x, s | \xi, \tau)}{dx^2} - \frac{(s + \eta)}{D} G_L(x, s | \xi, \tau) = -\frac{\delta(x - \xi)}{D} e^{-s\tau} \quad (\text{A.4})$$

,sendo $G_L(x, s | \xi, \tau)$ a transformada de Laplace da função $G(x, t | \xi, \tau)$, efetuando a transformada de Fourier da equação resultante,

$$(k^2 + b^2) \bar{G}_L(k, s | \xi, \tau) = \frac{e^{-ik\xi} e^{-s\tau}}{D} \quad (\text{A.5})$$

no qual $\bar{G}_L$ é a transformada de Fourier de G_L e $b^2 = (s + \eta)/D$. Tomando a inversa de tal equação pode-se achar G_L

$$G_L(x, s|\xi, \tau) = \frac{e^{-s\tau}}{2\pi D} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i(x-\xi)k}}{k^2 + b^2} dk \quad (\text{A.6})$$

Transformando esta equação em um contorno fechado usando o teorema de resíduos, encontra-se que

$$G_L(x, s|\xi, \tau) = \frac{e^{-|x-\xi|\sqrt{s+\eta}/D-s\tau}}{2\sqrt{D(s+\eta)}} \quad (\text{A.7})$$

cujas inversa de Laplace é

$$G(x, t|\xi, \tau) = \frac{H(t-\tau)}{\sqrt{4\pi D(t-\tau)}} \exp\left\{-\eta(t-\tau) - \frac{(x-\xi)^2}{4D(t-\tau)}\right\} \quad (\text{A.8})$$

A.2 Função $G(x, t|\xi, \tau)$ para o caso unidimensional limitado entre $0 \leq x, \xi \leq L$

Para tal problema, considera-se um espaço unidimensional finito entre $0 \leq x \leq L$, assim a EDP se torna

$$D \frac{\partial^2 G(x, t|\xi, \tau)}{\partial x^2} - \frac{\partial G(x, t|\xi, \tau)}{\partial t} - \eta G(x, t|\xi, \tau) = -\delta(t-\tau)\delta(x-\xi) \quad (\text{A.9})$$

com $0 < x, L < \xi$ e $0 < t, \tau$

Para resolver tal equação inicia-se aplicando a transformada de Laplace, eliminando desta forma a diferencial do tempo

$$\frac{\partial^2 G_L(x, s|\xi, \tau)}{\partial x^2} - \frac{sG_L(x, s|\xi, \tau)}{D} - \frac{\eta}{D} G_L(x, s|\xi, \tau) = -\frac{\delta(x-\xi)e^{-\tau s}}{D} \quad (\text{A.10})$$

como o intervalo de interesse é limitado, pode-se expandir a função G_L em uma série de auto-funções da forma

$$G_L(x, s|\xi, \tau) = \sum_{n=1}^{\infty} G'(\xi) \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (\text{A.11})$$

que quando derivada duas vezes em x resulta em

$$\frac{\partial^2 G_L(x, s|\xi, \tau)}{\partial x^2} = -\sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 G'(\xi) \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (\text{A.12})$$

o mesmo também é válido para a função delta de dirac, que pode ser expandida da forma

$$\delta(x - \xi) = \frac{2}{L} \sum_{n=1}^{\infty} \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \text{sen}\left(\frac{n\pi \xi}{L}\right) \quad (\text{A.13})$$

de tal forma que a equação diferencial se torna

$$-\sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 G'(\xi) \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right) - \left(\frac{s - \eta}{D}\right) \sum_{n=1}^{\infty} G'(\xi) \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = -\frac{2e^{-\tau s}}{LD} \sum_{n=1}^{\infty} \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \text{sen}\left(\frac{n\pi \xi}{L}\right) \quad (\text{A.14})$$

simplificando

$$\sum_{n=1}^{\infty} \left(\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 + \frac{s + \eta}{D}\right) G'(\xi) \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = \frac{2e^{-\tau s}}{DL} \sum_{n=1}^{\infty} \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \text{sen}\left(\frac{n\pi \xi}{L}\right) \quad (\text{A.15})$$

havendo termos iguais em ambas as séries, pode-se ver que

$$\left(\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 + \frac{s + \eta}{D}\right) G'(\xi) = \frac{2e^{-\tau s}}{LD} \text{sen}\left(\frac{n\pi \xi}{L}\right) \quad (\text{A.16})$$

logo

$$G'(\xi) = \frac{2e^{-\tau s}}{L(D\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 + s + \eta)} \text{sen}\left(\frac{n\pi \xi}{L}\right) \quad (\text{A.17})$$

assim, aplicando na expansão de $G_L(x, s|\xi, \tau)$

$$G_L(x, s|\xi, \tau) = \frac{2e^{-\tau s}}{L} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(D\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 + s + \eta)} \text{sen}\left(\frac{n\pi \xi}{L}\right) \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (\text{A.18})$$

utilizando a transformada de Laplace inversa chega-se em

$$G(x, t|\xi, \tau) = \frac{2}{L} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \text{sen}\left(\frac{n\pi \xi}{L}\right) \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right) e^{-(D\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 + \eta)(t - \tau)} \right] H(t - \tau) \quad (\text{A.19})$$

sendo $H(t - \tau)$ a função de Heaviside.

A.3 Função $G(x, y, t|\xi, \mu, \tau)$ para o caso bidimensional limitado entre $0 \leq x, \xi \leq a$ e $0 \leq y, \mu \leq b$

Seguindo a mesma ideia do problema anterior, a EDP é

$$D \left[\frac{\partial^2 G(x, y, t|\xi, \mu, \tau)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 G(x, y, t|\xi, \mu, \tau)}{\partial y^2} \right] - \frac{\partial G(x, t|\xi, \tau)}{\partial t} - \eta G(x, t|\xi, \tau) = -\delta(t - \tau) \delta(x - \xi) \delta(y - \mu) \quad (\text{A.20})$$

com $0 < x, a < \xi, 0 < y, b < \mu$ e $0 < t, \tau$. Utilizando os mesmos procedimentos, pode-se expandir a função G_L em uma série de autofunções para ξ e μ , da forma que

$$G_L(x, y, s|\xi, \mu, \tau) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} G'(\xi, \mu) \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \text{sen}\left(\frac{m\pi y}{b}\right) \quad (\text{A.21})$$

que quando derivada duas vezes para x e y resulta em

$$\frac{\partial^2 G_L(x, y, s|\xi, \mu, \tau)}{\partial x^2} = - \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 G'(\xi, \mu) \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \text{sen}\left(\frac{m\pi y}{b}\right) \quad (\text{A.22})$$

$$\frac{\partial^2 G_L(x, y, s|\xi, \mu, \tau)}{\partial y^2} = - \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{m\pi}{b}\right)^2 G'(\xi, \mu) \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \text{sen}\left(\frac{m\pi y}{b}\right) \quad (\text{A.23})$$

repetindo o mesmo processo para a função delta

$$\delta(x - \xi) = \frac{2}{a} \sum_{n=1}^{\infty} \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \text{sen}\left(\frac{n\pi \xi}{a}\right) \quad (\text{A.24})$$

$$\delta(y - \mu) = \frac{2}{b} \sum_{m=1}^{\infty} \text{sen}\left(\frac{m\pi y}{b}\right) \text{sen}\left(\frac{m\pi \mu}{b}\right) \quad (\text{A.25})$$

logo a equação diferencial se torna

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \left(\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{m\pi}{b}\right)^2 + \frac{s + \eta}{D} \right) G'(\xi, \mu) \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \text{sen}\left(\frac{m\pi y}{b}\right) \\ = \frac{4e^{-\tau s}}{Dab} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \text{sen}\left(\frac{n\pi \xi}{a}\right) \text{sen}\left(\frac{m\pi y}{b}\right) \text{sen}\left(\frac{m\pi \mu}{b}\right) \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

logo

$$G'(\xi, \mu) = \frac{4e^{-\tau s}}{ab(D\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{m\pi}{b}\right)^2 + s + \eta)} \text{sen}\left(\frac{n\pi \xi}{a}\right) \text{sen}\left(\frac{m\pi \mu}{b}\right) \quad (\text{A.27})$$

assim, aplicando na expansão de $G_L(x, y, s|\xi, \mu, \tau)$ e utilizando a transformada de Laplace inversa chega-se em

$$\begin{aligned} G(x, y, z, t|\xi, \mu, \tau) = \frac{4}{ab} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \text{sen}\left(\frac{n\pi \xi}{a}\right) \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \text{sen}\left(\frac{n\pi \mu}{b}\right) \text{sen}\left(\frac{n\pi y}{b}\right) \right] \\ \exp \left\{ - \left[D\pi^2 \left(\frac{n^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2} \right) + \eta \right] (t - \tau) \right\} H(t - \tau) \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

sendo $H(t - \tau)$ a função de Heaviside.

A.4 Função $G(r, \theta, t|\rho, \theta', \tau)$ para o caso bidimensional em coordenadas polares entre $0 < r < a$ e $0 \leq \theta \leq 2\pi$

Para este caso, a EDP será

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \eta G - D \left(\frac{\partial^2 G}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial G}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 G}{\partial \theta^2} \right) = \frac{\delta(r - \rho) \delta(\theta - \theta') \delta(t - \tau)}{2\pi r} \quad (\text{A.29})$$

e as condições de contorno são

$$G(0, \theta, t|\rho, \theta', \tau) = G(a, \theta, t|\rho, \theta', \tau) = 0 \quad \forall \theta \quad (\text{A.30})$$

e a condição inicial é

$$G(r, \theta, 0|\rho, \theta', \tau) = 0 \quad (\text{A.31})$$

com a solução sendo periódica em θ .

Como a equação diferencial é linear, pode-se escrever ela da forma

$$G(r, \theta, t|\rho, \theta', \tau) = G_{nh}(r, t|\rho, \tau) + v(r, \theta, t) \quad (\text{A.32})$$

onde G_{nh} é a solução não homogênea do problema cujo resultado foi encontrado na equação (A.8), fazendo $(x - \xi)^2 \rightarrow \mathcal{R}^2 = r^2 + \rho^2 + 2r\rho \cos(\theta - \theta')$. Deste modo v somente necessita satisfazer o problema homogêneo,

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \eta v = D \left(\frac{\partial^2 v}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v}{\partial \theta^2} \right) \quad (\text{A.33})$$

usando as condições de contorno e a equação (A.32), tem-se que as condições de contorno para v serão

$$v(a, \theta, t) = -\frac{H(t - \tau)}{4\pi D(t - \tau)} \exp \left\{ -\eta(t - \tau) - \frac{a^2 + \rho^2 - 2a\rho \cos(\theta - \theta')}{4D(t - \tau)} \right\} \quad (\text{A.34})$$

Aplicando a transformada de Laplace nas equações (A.33) e (A.34) resulta em

$$\left(\frac{\partial^2 V}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 V}{\partial \theta^2} \right) - q^2 V = 0 \quad (\text{A.35})$$

e

$$V(a, \theta, s) = -\frac{e^{-s\tau}}{2\pi D} K_0 \left(q \sqrt{a^2 + \rho^2 - 2a\rho \cos(\theta - \theta')} \right) \quad (\text{A.36})$$

de modo que $q^2 = (s + \eta)/D$ e K_0 a função de Bessel modificada de segunda ordem com $n = 0$.

Para resolver a equação (A.35), pode-se utilizar do método de separação de variáveis, por meio de $V(r, \theta, s) = R(r)\Theta(\theta)$ tem-se que

$$\left(\Theta \frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{\Theta}{r} \frac{\partial R}{\partial r} + \frac{R}{r^2} \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \theta^2} \right) - q^2 R \Theta = 0 \quad (\text{A.37})$$

dividindo a equação por $R\Theta$

$$\left(\frac{1}{R} \frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{1}{Rr} \frac{\partial R}{\partial r} + \frac{1}{\Theta r^2} \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \theta^2} \right) - q^2 = 0 \quad (\text{A.38})$$

resolvendo

$$\frac{r^2}{R} \frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{r}{R} \frac{\partial R}{\partial r} + \frac{1}{\Theta} \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \theta^2} - r^2 q^2 = 0 \quad (\text{A.39})$$

$$\frac{r^2}{R} \frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{r}{R} \frac{\partial R}{\partial r} - r^2 q^2 = -\frac{1}{\Theta} \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \theta^2} \quad (\text{A.40})$$

fazendo

$$\frac{1}{\Theta} \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \theta^2} = -m^2 \quad (\text{A.41})$$

como sabe-se que a solução deve ser periódica em θ , pode-se considerar a solução como sendo $\Theta_m = \cos[m(\theta - \theta')]$, desta forma para R será necessário resolver

$$\frac{r^2}{R} \frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{r}{R} \frac{\partial R}{\partial r} - r^2 q^2 - m^2 = 0 \quad (\text{A.42})$$

ou

$$r^2 \frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + r \frac{\partial R}{\partial r} - (r^2 q^2 + m^2) R = 0 \quad (\text{A.43})$$

cuja solução vai ser dada pelas funções de Bessel modificadas $I_m(qr)$ e $K_m(qr)$,

$$R = A_m I_m(qr) + B_m K_m(qr) \quad (\text{A.44})$$

Logo, tem-se que a solução de $V(r, \theta, s)$ será a soma do produto das funções R e Θ ,

$$V(r, \theta, s) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} [A_m I_m(qr) + B_m K_m(qr)] \cos[m(\theta - \theta')]. \quad (\text{A.45})$$

Para encontrar A_m e B_m pode-se fazer uso das condições de contorno fornecidas, primeiro para $r = 0$ a função $V(0, \theta, s)$ é finita, e como $K_m(0) = \infty$, tem-se que $B_m = 0$,

ficando apenas

$$V(r, \theta, s) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} A_m I_m(qr) \cos[m(\theta - \theta')] \quad (\text{A.46})$$

para determinar A_m pode-se usar a equação (A.36), deste modo para $r = a$

$$-\frac{e^{-s\tau}}{2\pi D} K_0(q\mathcal{R}_a) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} A_m I_m(qa) \cos[m(\theta - \theta')] \quad (\text{A.47})$$

usando a relação

$$K_0(q\mathcal{R}_a) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} I_m(q\rho) K_m(qa) \cos[m(\theta - \theta')] \quad (\text{A.48})$$

chega-se que

$$-\frac{e^{-s\tau}}{2\pi D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} I_m(q\rho) K_m(qa) \cos[m(\theta - \theta')] = \sum_{m=-\infty}^{\infty} A_m I_m(qa) \cos[m(\theta - \theta')] \quad (\text{A.49})$$

multiplicando e dividindo o lado esquerdo da equação por $I_m(qa)$,

$$-\frac{e^{-s\tau}}{2\pi D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{I_m(qa)}{I_m(qa)} I_m(q\rho) K_m(qa) \cos[m(\theta - \theta')] = \sum_{m=-\infty}^{\infty} A_m I_m(qa) \cos[m(\theta - \theta')] \quad (\text{A.50})$$

pode-se ver que

$$A_m = -\frac{e^{-s\tau}}{2\pi D} \frac{I_m(q\rho) K_m(qa)}{I_m(qa)} \quad (\text{A.51})$$

portanto

$$V(r, \theta, s) = -\frac{e^{-s\tau}}{2\pi D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{I_m(q\rho) K_m(qa)}{I_m(qa)} I_m(qr) \cos[m(\theta - \theta')] \quad (\text{A.52})$$

fazendo a mudança de variável $l = s + \eta$, tem-se que $q = \sqrt{l/D}$ e

$$V(r, \theta, s) = -\frac{e^{-l\tau+\eta\tau}}{2\pi D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{I_m(q\rho) K_m(qa)}{I_m(qa)} I_m(qr) \cos[m(\theta - \theta')] \quad (\text{A.53})$$

desta forma, pode-se obter G somando este resultado com a transformada de G_{nh}

$$g(r, \theta, t|\rho, \theta', \tau) = \frac{e^{\eta\tau-l\tau}}{2\pi D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{I_m(q\rho)}{I_m(qa)} [I_m(qa) K_m(qr) - I_m(qr) K_m(qa)] \cos[m(\theta - \theta')] \quad (\text{A.54})$$

usando o teorema da inversão

$$g(r, \theta, t | \rho, \theta', \tau) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\eta\tau}}{4\pi^2 i D} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \frac{I_m(q\rho)}{I_m(qa)} [I_m(qa)K_m(qr) - I_m(qr)K_m(qa)] \cos[m(\theta-\theta')] dl \quad (\text{A.55})$$

usando o teorema de resíduos chega-se em

$$G(r, \theta, t | \rho, \theta', \tau) = \frac{1}{\pi D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_m(\alpha_n r) J_m(\alpha_n \rho)}{[J'_m(\alpha_n a)]^2} \cos[m(\theta - \theta')] e^{-(\eta + D\alpha_n^2)(t-\tau)} \quad (\text{A.56})$$

onde α_n é a n -ésima raiz positiva de $J_m(\alpha a) = 0$

A.5 Função $G(r, \theta, t | \rho, \theta', \tau)$ para o caso bidimensional em coordenadas polares entre $a < r < \infty$ e $0 \leq \theta \leq 2\pi$

Para este caso, irá se fazer o mesmo procedimento realizado anteriormente, considerar $G = G_{nh} + v$, sendo a diferença principal as condições de contorno aplicada, que resultarão na função V

$$V(r, \theta, s) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} [A_m I_m(qr) + B_m K_m(qr)] \cos[m(\theta - \theta')] \quad (\text{A.57})$$

entretanto, como para este caso $r = \infty$, tem-se então que $A_m = 0$, pois $I_m(\infty) = \infty$, e a função V deve ser finita, logo

$$V(r, \theta, s) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} B_m K_m(qr) \cos[m(\theta - \theta')] \quad (\text{A.58})$$

usando a condição para $r = a$

$$-\frac{e^{-s\tau}}{2\pi D} K_0(q\mathcal{R}_a) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} B_m K_m(qa) \cos[m(\theta - \theta')] \quad (\text{A.59})$$

utilizando da relação de $K_0(q(R)_a)$ como sendo

$$K_0(q\mathcal{R}_a) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} I_m(qa) K_m(q\rho) \cos[m(\theta - \theta')] \quad (\text{A.60})$$

portanto

$$-\frac{e^{-s\tau}}{2\pi D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} I_m(qa) K_m(q\rho) \cos[m(\theta - \theta')] = \sum_{m=-\infty}^{\infty} B_m K_m(qa) \cos[m(\theta - \theta')] \quad (\text{A.61})$$

multiplicando e dividindo o lado esquerdo por $K_m(qa)$

$$-\frac{e^{-s\tau}}{2\pi D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{K_m(qa)}{K_m(qa)} I_m(qa) K_m(q\rho) \cos[m(\theta - \theta')] = \sum_{m=-\infty}^{\infty} B_m K_m(qa) \cos[m(\theta - \theta')] \quad (\text{A.62})$$

desta forma

$$B_m = -\frac{e^{-s\tau}}{2\pi D} \frac{I_m(qa) K_m(q\rho)}{K_m(qa)} \quad (\text{A.63})$$

assim tem-se que V é

$$V(r, \theta, s) = -\frac{e^{-s\tau}}{2\pi D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{I_m(qa) K_m(q\rho)}{K_m(qa)} K_m(qr) \cos[m(\theta - \theta')] \quad (\text{A.64})$$

aplicando em $g = g_{nh} + V$ e fazendo a mudança de variável $l = s + \eta$ da forma que $q = \sqrt{l/D}$

$$g(r, \theta, t|\rho, \theta', \tau) = \frac{e^{\eta\tau - l\tau}}{2\pi D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{K_m(q\rho)}{K_m(qa)} [I_m(qr) K_m(qa) - I_m(qa) K_m(qr)] \cos[m(\theta - \theta')] \quad (\text{A.65})$$

invertendo como feito anteriormente chega-se em

$$G(r, \theta, t|\rho, \theta', \tau) = \frac{1}{2\pi} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \cos[m(\theta - \theta')] \int_0^{\infty} e^{-(\eta + D\alpha^2)(t-\tau)} \frac{U_m(\alpha r) U_m(\alpha \rho)}{J_m^2(\alpha a) + Y_m^2(\alpha a)} d\alpha \quad (\text{A.66})$$

onde $U_m(\alpha r) = J_m(\alpha r) Y_m(\alpha a) - J_m(\alpha a) Y_m(\alpha r)$.

A.6 Função $G(r, \theta, t|\rho, \theta', \tau)$ para o caso bidimensional em coordenadas polares entre $a < r < b$ e $0 \leq \theta \leq 2\pi$

O último caso é uma junção dos dois últimos, para este irá se utilizar da equação (A.36) mas com $r = a$ e $r = b$, ou seja

$$V(a, \theta, s) = -\frac{e^{-s\tau}}{2\pi D} K_0\left(q\sqrt{a^2 + \rho^2 - 2a\rho \cos(\theta - \theta')}\right) \quad (\text{A.67})$$

e

$$V(b, \theta, s) = -\frac{e^{-s\tau}}{2\pi D} K_0\left(q\sqrt{b^2 + \rho^2 - 2a\rho \cos(\theta - \theta')}\right) \quad (\text{A.68})$$

que serão utilizadas para encontrar os valores de A_m e B_m de

$$V(r, \theta, s) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} [A_m I_m(qr) + B_m K_m(qr)] \cos[m(\theta - \theta')] \quad (\text{A.69})$$

pois as funções de Bessel são finitas em todo o intervalo de $a < r < b$.

Para encontrar as constantes fará-se uso também da relação

$$K_0(q\mathcal{R}) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} I_m(qr_{<}) K_m(qr_{>}) \cos[m(\theta - \theta')]. \quad (\text{A.70})$$

Para $r = a$ tem-se que

$$-\frac{e^{-s\tau}}{2\pi D} K_0(q\mathcal{R}_a) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} [A_m I_m(qa) + B_m K_m(qa)] \cos[m(\theta - \theta')] \quad (\text{A.71})$$

utilizando a relação para K_0 , onde $r_{<} = a$ e $r_{>} = \rho$

$$-\frac{e^{-s\tau}}{2\pi D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} I_m(qa) K_m(q\rho) \cos[m(\theta - \theta')] = \sum_{m=-\infty}^{\infty} [A_m I_m(qa) + B_m K_m(qa)] \cos[m(\theta - \theta')] \quad (\text{A.72})$$

já para $r = b$ sabe-se que $r_{<} = \rho$ e $r_{>} = b$, logo

$$-\frac{e^{-s\tau}}{2\pi D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} I_m(q\rho) K_m(qb) \cos[m(\theta - \theta')] = \sum_{m=-\infty}^{\infty} [A_m I_m(qb) + B_m K_m(qb)] \cos[m(\theta - \theta')] \quad (\text{A.73})$$

ficando com esse sistemas de equações. Para encontrar A_m multiplica-se a equação (A.72) por $K_m(qb)$ e a equação (A.73) por $K_m(qb)$, ficando com o sistema¹

$$\begin{cases} -\zeta \sum_{m=-\infty}^{\infty} I_m(qa) K_m(qb) K_m(q\rho) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} [A_m I_m(qa) K_m(qb) + B_m K_m(qa) K_m(qb)] \\ -\zeta \sum_{m=-\infty}^{\infty} I_m(q\rho) K_m(qa) K_m(qb) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} [A_m I_m(qb) K_m(qa) + B_m K_m(qb) K_m(qa)] \end{cases} \quad (\text{A.74})$$

subtraindo a segunda equação da primeira fica-se com

$$\begin{aligned} -\zeta \sum_{m=-\infty}^{\infty} [I_m(qa) K_m(qb) K_m(q\rho) - I_m(q\rho) K_m(qa) K_m(qb)] \\ = \sum_{m=-\infty}^{\infty} [A_m (I_m(qa) K_m(qb) - I_m(qb) K_m(qa))] \end{aligned} \quad (\text{A.75})$$

multiplicando e dividindo o lado direito da equação por $[I_m(qa) K_m(qb) - I_m(qb) K_m(qa)]$

¹ocultando $\cos[m(\theta - \theta')]$ por simplicidade e fazendo $\zeta = -\frac{e^{-s\tau}}{2\pi D}$

$$\begin{aligned}
 -\zeta \sum_{m=-\infty}^{\infty} K_m(qb) [I_m(qa)K_m(q\rho) - I_m(q\rho)K_m(qa)] & \left[\frac{I_m(qa)K_m(qb) - I_m(qb)K_m(qa)}{I_m(qa)K_m(qb) - I_m(qb)K_m(qa)} \right] \\
 & = \sum_{m=-\infty}^{\infty} [A_m(I_m(qa)K_m(qb) - I_m(qb)K_m(qa))]
 \end{aligned} \tag{A.76}$$

resultando em

$$A_m = -\zeta K_m(qb) \frac{I_m(qa)K_m(q\rho) - I_m(q\rho)K_m(qa)}{I_m(qa)K_m(qb) - I_m(qb)K_m(qa)}. \tag{A.77}$$

Para encontrar o valor de B_m multiplica-se a equação (A.72) por $I_m(qb)$ e a equação (A.73) por $I_m(qa)$, e realizar os mesmo procedimentos realizados para A_m , resultando em

$$B_m = -\zeta I_m(qa) \frac{I_m(qb)K_m(q\rho) - I_m(q\rho)K_m(qb)}{I_m(qa)K_m(qb) - I_m(qb)K_m(qa)} \tag{A.78}$$

utilizando tais valores chega-se em

$$\begin{aligned}
 V(r, \theta, s) &= -\frac{e^{-s\tau}}{2\pi D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{\cos[m(\theta - \theta')]}{I_m(qa)K_m(qb) - I_m(qb)K_m(ka)} \\
 &\times (K_m(qb)I_m(qr)[I_m(qa)K_m(q\rho) - I_m(q\rho)K_m(qa)] \\
 &- K_m(qr)I_m(qa)[I_m(qb)K_m(q\rho) - I_m(q\rho)K_m(qb)])
 \end{aligned} \tag{A.79}$$

desta forma, tem-se que g é

$$\begin{aligned}
 g(r, \theta, s|\rho, \theta', \tau) &= \frac{e^{s\tau}}{2\pi D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \cos[m(\theta - \theta')] \\
 &\times \frac{[I_m(qa)K_m(qr) - K_m(qa)I_m(qr)][I_m(qb)K_m(q\rho) - K_m(qb)I_m(q\rho)]}{I_m(qa)K_m(qb) - I_m(qb)K_m(ka)}
 \end{aligned} \tag{A.80}$$

fazendo a substituição $l = s + \eta$ em $q = \sqrt{l/D}$ e realizando a inversão por meio do teorema de resíduos, obtém-se o seguinte resultado

$$\begin{aligned}
 G(r, \theta, t|\rho, \theta', \tau) &= \frac{\pi}{4} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \cos[m(\theta - \theta')] k_n^2 e^{-(\eta + Dk_n^2)(t-\tau)} \\
 &\times \left[\frac{J_m^2(k_nb)U_m(k_n\rho)U_m(k_nr)}{J_m^2(k_na) - J_m^2(k_nb)} \right]
 \end{aligned} \tag{A.81}$$

de modo que $U_m(k_n r) = J_m(k_n r)Y_m(k_n a) - J_m(k_n a)Y_m(k_n r)$ e k_n é a n -ésima raiz positiva de $U_m(k_n b) = 0$.