

**Сравнительный анализ
методов Эйлера, Верле,
Рунге-Кутты.
Применения в
естествознании**

Лицей имени Н.И. Лобачевского КФУ

**Валеев Тимур Альбертович
Коннова Елизавета Андреевна
Николаев Владимир Викторович**

2020

1 Введение

На сегодняшний день существует множество проблем в области нейрологии, географии, биологии, физики, химии, социологии, и многих других наук, решение которых требует чёткой и подробной иллюстрации, сложных многоступенчатых вычислений и анализа.

Последние несколько десятков лет справиться с этой задачей человечеству помогает компьютерное моделирование. Оно представляет собой форму отражения действительности и заключается в выяснении или воспроизведении тех или иных свойств реальных процессов и явлений с помощью других объектов, либо с помощью абстрактного описания в виде изображения, совокупности уравнений, алгоритмов и программ. Преимущество компьютерного моделирования состоит в том, что оно даёт возможность изучать неповторяющиеся явления, явления прошлого и будущего, объекты, которые не воспроизвести в реальных условиях, визуализировать абстрактные объекты, управлять временем в процессе, исследовать явления в динамике, совершать неограниченное количество испытаний модели. Поэтому было решено проанализировать методы Эйлера, Верле и Рунге-Кутты и разобрать конкретные примеры их применения для решения вопросов в области естествознания.

Методы Эйлера, Верле и Рунге-Кутты являются численными методами решения дифференциальных уравнений. Они применяются в теоретических исследованиях дифференциальных уравнений, для нахождения траектории материальной точки и для решения ряда других математических проблем. Однако важно разбираться, какой именно метод подходит для конкретной системы. Для одной системы подходит один метод, а для другой - другой. Этим и обусловлена необходимость разработки метода сравнения этих методов, которая является одной из задач статьи.

Итак, конкретные цели исследования:

1. Разработать модель тестирования для сравнительного анализа численных методов решения дифференциальных уравнений.
2. Протестировать некоторые методы с помощью данной модели.
3. Дать характеристику методам, основанную на тестировании.
4. Проверить правильность подбора алгоритмов на реальных моделях, применяющихся в естествознании.

Данное представляется необходимым, то есть, обосновывает новизну исследования по двум причинам:

1. Ранее не была дана подобная характеристика методам.
2. Ранее не была применена подобная математическая модель для изучения методов.

2 Разработка метода сравнительного анализа численных методов решений дифференциальных уравнений

Изучение различных методов решения дифференциальных уравнений приводит к вопросу оценки их эффективности. Был разработан метод, основанный на физическом законе, а конкретно на законе сохранения энергии.

Как известно, полная механическая энергия системы сохраняется в отсутствие неконсервативных сил, что и допущено в идеализации. Поэтому, создадим симуляцию: маятник массой $m = 1$, подвешенный на невесомом стержне длиной $L = 3$, отклоненный на угол $\theta_0 = 30^\circ$. Тогда полная механическая энергия системы:

$$E_0 = mgL(1 - \cos \theta_0)$$

Ввиду погрешностей, обусловленных аппроксимирующей природой метода,

полная механическая энергия будет отклоняться от изначального значения. В каждый дискретный момент времени, зная скорость и положение маятника, будем считать полную механическую энергию. Введём функцию относительной ошибки:

$$\delta(t) = \frac{|E - E_0|}{E_0},$$

где

$$E = mgL(1 - \cos \theta) + \frac{mv^2}{2}$$

Необходимо также определиться с переменными параметрами маятника. В нашей модели их три: угол θ между прямой $x = 0$ и прямой, соединяющей маятник и точку $(0;0)$; угловая скорость маятника $\frac{d\theta}{dt}$ и время t . При такой симуляции $\delta(t)$ будет возрастать, причем так, что $\delta(t)$ можно будет представить линейной функцией (за исключением метода Верле), в чем мы убедимся в дальнейших экспериментах. По угловому коэффициенту прямой будем судить об эффективности метода. Аппроксимировать $\delta(t)$ будем с помощью линейной регрессии.

3 Сравнительный анализ

3.1 Метод Эйлера [1]

Метод Эйлера является основополагающим. Говоря абстрактно, он представляет собой построение ломаной, аппроксимирующей функцию.

Пусть дано дифференциальное уравнение:

$$\frac{dy}{dx} = f(x)$$

С начальным условием:

$$f(0) = x_0$$

Далее аппроксимируем производную малой конечной разницей Δx :

$$\frac{y(x + \Delta x) - y(x)}{\Delta x} = f(x)$$

Отсюда метод Эйлера:

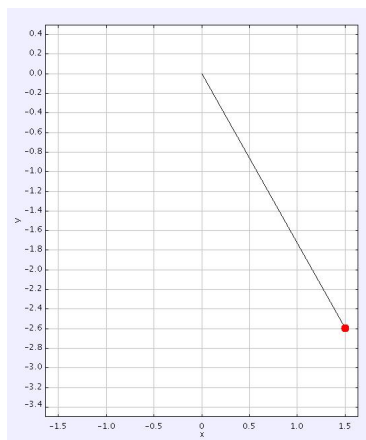
$$y(x + \Delta x) = y(x) + f(x)\Delta x$$

Итак, применим метод сравнительного анализа. Для маятника метод Эйлера примет вид:

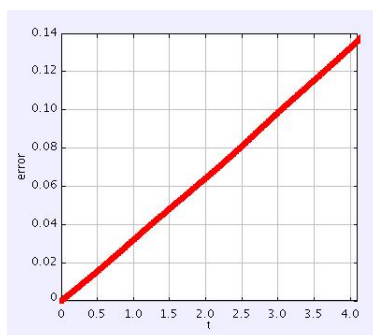
$$\begin{aligned}\theta(t + \Delta t) &= \theta(t) + \frac{d\theta(t)}{dt} \Delta t \\ \frac{d\theta(t + \Delta t)}{dt} &= \frac{d\theta(t)}{dt} - \frac{g}{L} \sin \theta(t) \Delta t\end{aligned}$$

Примем $\Delta t = 0.01$

Инициализируем и запустим симуляцию:



Спустя 4 секунды симуляции график $\delta(t)$:



На графике - линейная функция. Рассмотрим таблицу. (Первая колонка - время, вторая - ошибка):

3.8799999999999613	0.12834726543846783
3.889999999999961	0.12869079199953265
3.899999999999961	0.1290347141540609
3.9099999999999606	0.1293798517852555
3.9199999999999604	0.12972382501392238
3.92999999999996	0.13006905412301645
3.93999999999996	0.13041475947876757
3.9499999999999598	0.13076096144871846
3.9599999999999596	0.13110768031700046
3.9699999999999593	0.13145493619722404
3.979999999999959	0.1318027489433776
3.989999999999959	0.13215113805911793
3.9999999999999587	0.13250012260589347
4.009999999999959	0.13284972111032226
4.019999999999959	0.13319995147128147
4.0299999999999585	0.1335508308671656
4.039999999999958	0.1339023756637721
4.049999999999958	0.13425468132330647
4.059999999999958	0.13460752231497

Тогда для метода Эйлера $\delta(t) = kt$, где $k = 3.3125 * 10^{-2}$. Случай, когда $k = 0$, показывает абсолютную эффективность метода, и проводить дальнейшие сравнения мы будем, основываясь именно на угловом коэффициенте прямой.

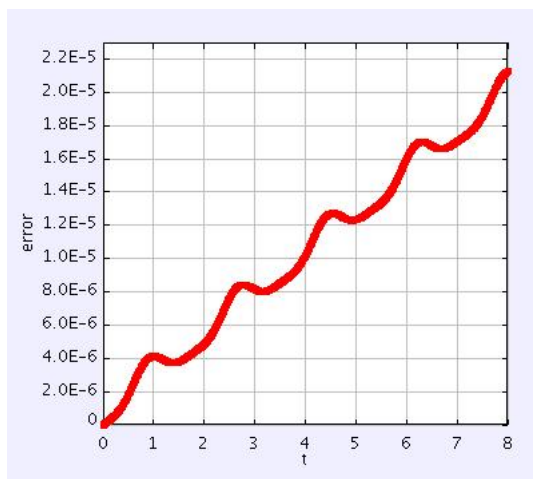
3.2 Метод Эйлера-Ричардсона [1]

Данный метод является модификацией классического метода Эйлера. Он заключается в построении касательной к аппроксимируемой нами функции в точке $t = t_n + \frac{1}{2}\Delta t$, что делается с помощью метода Эйлера. Затем из точки t_n на кривой проводится луч, параллельный ранее найденной касательной, тогда следующая точка ломаной - пересечение луча и прямой $x = t_{n+1}$. Для нашего маятника метод выглядит следующим образом:

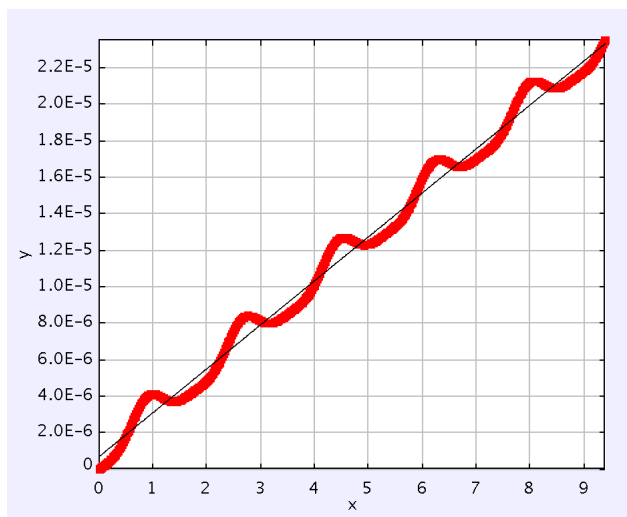
$$\begin{aligned}\theta_{mid} &= \theta(t) + \frac{1}{2} \frac{d\theta(t)}{dt} \Delta t \\ \frac{d\theta_{mid}}{dt} &= \frac{d\theta(t)}{dt} - \frac{1}{2} \frac{g}{L} \sin \theta(t) \Delta t \\ \frac{d^2\theta_{mid}}{dt^2} &= -\frac{g}{L} \sin \theta_{mid} \\ \theta(t + \Delta t) &= \theta(t) + \frac{d\theta_{mid}}{dt} \Delta t \\ \frac{d\theta(t + \Delta t)}{dt} &= \frac{d\theta(t)}{dt} + \frac{d^2\theta_{mid}}{dt^2} \Delta t\end{aligned}$$

Запустим симуляцию, примем $\Delta t = 0.01$.

Спустя 8 секунд симуляции, график $\delta(t)$:



Как видно по графику, с помощью модели линейной регрессии резонно построить соответствующую прямую для $\delta(t)$:



Тогда для метода Эйлера-Ричардсона, $\delta(t) = kt$, где $k = 2.43 \cdot 10^{-6}$.

Несмотря на незначительные изменения метода, эффективность увеличилась в 13632 раза. Данные изменения, надо предполагать, происходят в силу того факта, что при методе Эйлера, если участок кривой между t_n и t_{n+1}

монотонно убывает или возрастает, строящаяся ломаная стремительно "отходит" от аппроксимируемой функции, в то время как построение касательной в $t_n + \frac{1}{2}\Delta t$ дает более точное приближение к функции.

3.3 Метод Рунге-Кутты четвертого порядка [1]

Данный метод является наиболее используемым в вычислительных науках. Несмотря на большие, относительно метода Эйлера, вычислительные затраты, метод Рунге-Кутты четвертого порядка дает крайне точные результаты в большинстве моделей.

Метод состоит в следующем: примем за k_1 значение функции в начале интервала $x = x_n$. Далее, с помощью метода Эйлера, рассчитаем значение в $x_n + \frac{1}{2}\Delta x$, пусть это значение равно k_2 . Используя уже k_2 , вместо k_1 в методе Эйлера, вновь рассчитаем значение в $x_n + \frac{1}{2}\Delta x$. И теперь, используя k_3 в методе Эйлера, найдем k_4 в $x_n + \Delta x$. Вычислим искомое значение, придавая больший вес точкам в середине интервала:

$$y(x + \Delta x) = y(x) + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)\Delta t.$$

Применим метод для нашего маятника.

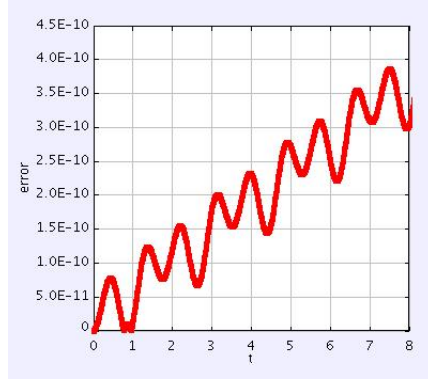
Для угла:

$$\begin{aligned} n_1 &= \frac{d\theta(t)}{dt} \\ n_2 &= \frac{d\theta(t)}{dt} + \frac{1}{2} \frac{dn_1}{dt} \Delta t \\ n_3 &= \frac{d\theta(t)}{dt} + \frac{1}{2} \frac{dn_2}{dt} \Delta t \\ n_4 &= \frac{d\theta(t)}{dt} + \frac{dn_3}{dt} \Delta t \\ \theta(t + \Delta t) &= \theta(t) + \frac{1}{6}(n_1 + 2n_2 + 2n_3 + n_4)\Delta t \end{aligned}$$

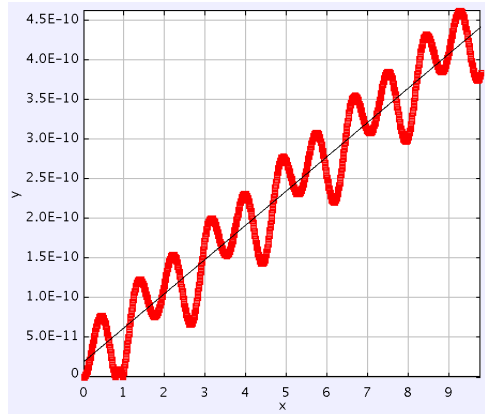
Для угловой скорости:

$$\begin{aligned}
m_1 &= \frac{d^2\theta(t)}{dt^2} = -\frac{g}{L} \sin \theta(t) \\
m_2 &= -\frac{g}{L} \sin \theta(t) + \frac{1}{2} \frac{dm_1}{dt} \Delta t \\
m_3 &= -\frac{g}{L} \sin \theta(t) + \frac{1}{2} \frac{dm_2}{dt} \Delta t \\
m_4 &= -\frac{g}{L} \sin \theta(t) + \frac{dm_3}{dt} \Delta t \\
\frac{d\theta(t + \Delta t)}{dt} &= \frac{d\theta(t)}{dt} + \frac{1}{6}(m_1 + 2m_2 + 2m_3 + m_4)\Delta t
\end{aligned}$$

Начнем симуляцию, $\Delta t = 0.01$. График $\delta(t)$ через 8 секунд симуляции:



Применение модели линейной регрессии резонно и для метода Рунге-Кутты:



Тогда для метода Рунге-Кутты четвертого порядка $\delta(t) = kt$, где

$$k = 4.38 * 10^{-11}.$$

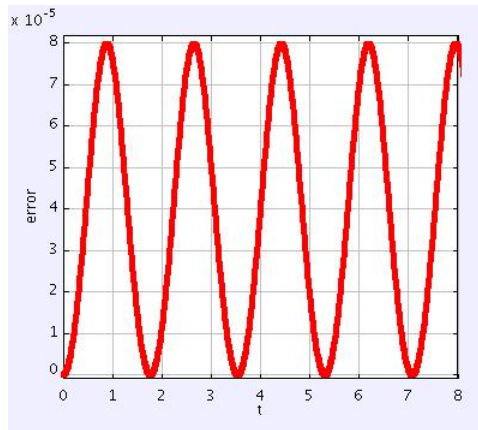
Эффективность метода Рунге-Кутты четвертого порядка в 55480 раз больше, чем эффективность метода Эйлера-Рундсона.

3.4 Метод Верле [1]

Метод Верле наиболее часто используется в разнообразных компьютерных играх, но, взглянув лишь на математическое описание метода, изложенного далее, этот факт не представляется очевидным. С помощью разработанного способа сравнительного анализа прекрасно будет видна причина этого использования. Применим метод для маятника:

$$\begin{aligned}\theta(t + \Delta t) &= \theta(t) + \frac{d\theta(t)}{dt} \Delta t - \frac{1}{2} \frac{g}{L} \sin \theta(t) (\Delta t)^2 \\ \frac{d^2\theta(t + \Delta t)}{dt^2} &= -\frac{g}{L} \sin \theta(t + \Delta t) \\ \frac{d\theta(t + \Delta t)}{dt} &= \frac{d\theta(t)}{dt} + \frac{\frac{d^2\theta(t)}{dt^2} + \frac{d^2\theta(t+\Delta t)}{dt^2}}{2} \\ \frac{d\theta(t + \Delta t)}{dt} &= \frac{d\theta(t)}{dt} - \frac{g}{L} \frac{\sin \theta(t) + \sin \theta(t + \Delta t)}{2}\end{aligned}$$

Начнем симуляцию, $\Delta t = 0.01$. График $\delta(t)$ через 8 секунд:



Из графика $\delta(t)$ - синусоида, и использовать модель линейной регрессии в данном случае нецелесообразно. Поэтому, обратив внимание на точечные

данные, полученные в процессе симуляции, определяется период синусоиды, равный $T = 1.83$, и амплитуда $A = 4 * 10^{-5}$. Тогда

$$\delta(t) = A \sin\left(\frac{2\pi}{T}t - \frac{\pi}{2}\right) + A$$

Отсюда становится понятным применение алгоритма. Метод Рунге-Кутты слишком ресурсозатратен для выполнения на большинстве компьютеров и стабильной игры, а метод Эйлера крайне неточен. Однако проблема метода Эйлера-Ричардсона заключается в том, что ошибка со временем возрастает и уже через $\frac{k_{richardson}}{A} = 16.46$ секунд симуляции $\delta_{richardson}(t)$ сравняется со средним значением $\delta_{verlet}(t)$ и будет возрастать далее.

У всех данных методов можно обнаружить соответствие: количество участков монотонности $\delta(t)$ равно количеству шагов в методе. Так, метод Эйлера одношаговый и $\delta_{Euler}(t)$ монотонна на всех участках; метод Эйлера-Ричардсона двушаговый и $\delta_{Richardson}(t)$ имеет два участка монотонности(рис.1); метод Рунге-Кутты четырёхшаговый и $\delta_{Runge-Kutta}(t)$ имеет четыре участка монотонности(рис.2); метод Верле двушаговый и имеет два участка монотонности(рис.3).

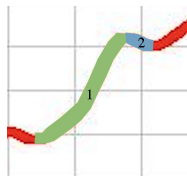


Рис.1

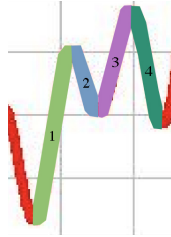


Рис.2

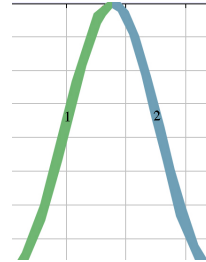


Рис.3

4 Итоговая сравнительная характеристика методов и выбор для применения в моделях

Метод Эйлера крайне неточен и параметры системы быстро рассеиваются, однако он необходим для функционирования более эффективных методов. Метод Эйлера-Рундсона даёт заметные улучшения и ненамного увеличивает вычислительную сложность, однако при долгих симуляциях погрешность становится заметна. Он служит наилучшей альтернативой методу Верле в случае невозможности его применения (дифференциальное уравнение вида, отличного от $\frac{d^2x(t)}{dt^2} = A(x(t))$).

Метод Рунге-Кутты четвертого порядка является наиболее эффективным, однако не всегда может применяться ввиду вычислительной сложности.

Метод Верле - лучший вариант для длительных симуляций движения материальных точек при требовании низких вычислительных затрат.

Одна из целей работы - привлечь внимание к практическому применению данных методов. Для ознакомления читателя с концепцией компьютерного моделирования в следующей секции разобрана простая модель землетрясения, не включающая в себя вышеописанных методов. Применять методы мы будем в двух моделях: проблеме трёх тел и биофизической модели Ходжкина-Хаксли. Из написанного ранее, для обеих моделей наилучшим вариантом будет метод Рунге-Кутты четвертого порядка, однако ввиду высоких вычислительных затрат, для проблемы трёх тел мы будем использовать метод Верле (движение материальных точек), а для модели Ходжкина-Хаксли - метод Эйлера-Рундсона (система дифференциальных уравнений типа, отличного от $\frac{d^2x(t)}{dt^2} = A(x(t))$).

5 Модели

5.1 Клеточный автомат. Простая модель землетрясения [2]

5.1.1 Введение

В конце 1940 года Дж. фон Нейманом и К. Цусе была сформулирована идея клеточных автоматов. Она рассматривалась как универсальная вычислительная среда для построения методов. Начальное состояние всех ячеек и правило их перехода из одного состояния в другое определяют развитие событий в моделях.

5.1.2 Модель землетрясения

Модель представляет собой зависимость количества толчков n_r и землетрясений заданного размера N_e от предельного значения силы F_c и изменения напряженности блоков ΔF , имеющих координаты $(i; j)$, через каждый дискретный момент времени t . Задаётся длина решётки L , F_c , ΔF и N - величина, определяющая N_e , численно равная количеству толчков в дискретный момент времени.

5.1.3 Правила обновления решётки

[1]. Увеличивается значение F в каждом блоке на небольшую величину ΔF , а значение времени t - на 1. Это приращение представляет собой эффект движущей силы, обусловленной медленным движением тектонической плиты.

[2]. Сравнивается значение $F(i, j)$ со значением F_c . Если значение $F(i, j) < F_c$, то система стабильна и шаг [1] повторяется. Если система нестабильна ($F(i, j) \geq F_c$), то $|2| \rightarrow |3|$.

[3]. Высвобождение напряженности, обусловленное проскальзыванием блока, показывается присвоением переменной $F(i, j) = F(i, j) - F_c$. Передача напряженности показывается обновлением напряженности в позициях,

являющихся четырьмя соседними к текущей – $(i, j \pm 1)$ и $(i \pm 1, j)$ – следующим образом: $F \rightarrow F + 0.25F_c$.

[4]. Периодические граничные условия не используются.

Инициализируем и запустим симуляцию:

$$L = 20; \Delta F = 0.01; F_c = 4; N = 5.$$

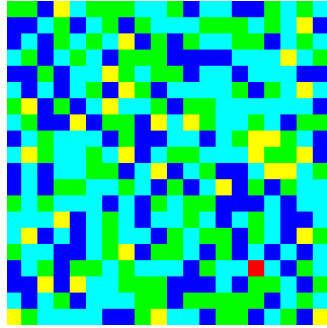


Рис. 1: Состояние модели в момент времени $t = 23$.

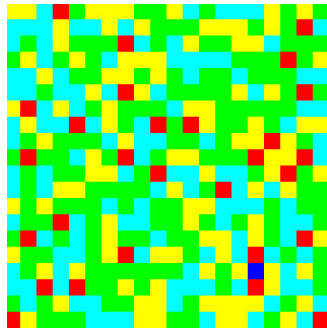


Рис. 2: Состояние модели в момент времени $t = 93$.

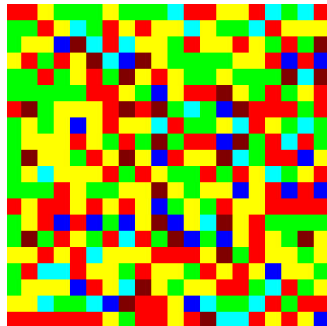


Рис. 3: Состояние модели в момент времени $t = 158$.

5.2 Проблема трех тел [1]

5.2.1 Введение

Проблема состоит в определении относительного движения трёх материальных точек, гравитационно взаимодействующих друг с другом. В 1892-1899 годах Анри Пуанкаре доказал, что систему дифференциальных уравнений проблемы невозможно свести к интегрируемой.

5.2.2 Моделирование

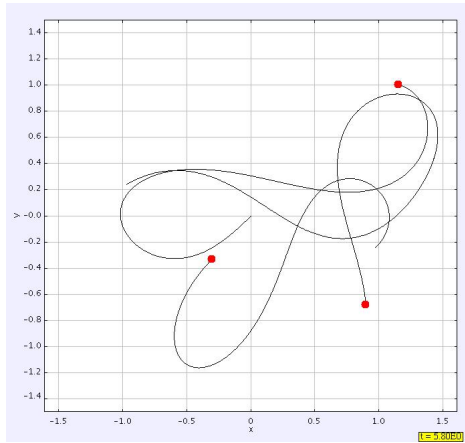
Система дифференциальных уравнений, описывающая движение трёх тел:

$$\begin{cases} \frac{d^2 \vec{r}_1}{dt^2} = Gm_2 \frac{\vec{r}_2 - \vec{r}_1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|^3} + Gm_3 \frac{\vec{r}_3 - \vec{r}_1}{|\vec{r}_3 - \vec{r}_1|^3} \\ \frac{d^2 \vec{r}_2}{dt^2} = Gm_1 \frac{\vec{r}_1 - \vec{r}_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^3} + Gm_3 \frac{\vec{r}_3 - \vec{r}_2}{|\vec{r}_3 - \vec{r}_2|^3} \\ \frac{d^2 \vec{r}_3}{dt^2} = Gm_1 \frac{\vec{r}_1 - \vec{r}_3}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_3|^3} + Gm_2 \frac{\vec{r}_2 - \vec{r}_3}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_3|^3} \end{cases}$$

где G - гравитационная постоянная, m_i соответственно массы тел,

r_i соответственно радиус-векторы тел.

Все три уравнения соответствуют типу $\frac{d^2 x(t)}{dt^2} = A(x(t))$, используем для них метод Верле. Инициализируем симуляцию, присвоим изначальным координатам и скоростям тел случайные значения от -1 до 1.



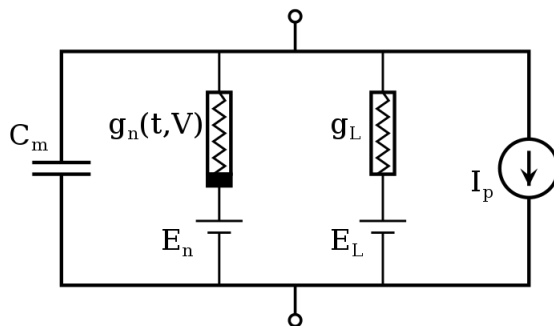
5.3 Модель Ходжкина-Хаксли [3]

5.3.1 Введение

Рассматриваемое есть биофизическая модель, описывающая потенциал действия в нейронах. Была описана А.Ходжкином и Э.Хаксли в 1952 году, за что ими была получена Нобелевская Премия по физиологии и медицине в 1963 году. Потенциал действия или нервный импульс - это стремительное увеличение, а затем уменьшение потенциала мембраны клетки. Он возникает, когда при увеличении потенциала мембраны клетки за счет внешних факторов достигается определенный порог. Тогда, например, в аксоне нейрона при достижении порога (в нашей модели мы будем рассматривать порог -55 мВ), открываются потенциалозависимые каналы ионов натрия. Ионы натрия быстро попадают внутрь клетки, тем самым вызывая деполяризацию мембраны, далее каналы натрия деактивируются, открываются каналы ионов калия, потенциал вновь уменьшается, происходит реполяризация, и постепенно, потенциал возвращается в начальное положение покоя (-70 мВ в нашей модели).

5.3.2 Моделирование

Описанная Ходжкином и Хаксли электрическая схема:



C_m - мембрана клетки, E_n - электрохимический градиент ионов,

$g_n(t, V)$ - потенциалозависимый канал,

E_L - электрохимический градиент пассивно двигающихся элементов,

g_L - каналы пассивно двигающихся элементов

Система дифференциальных уравнений, описывающих систему (V - потенциал):

$$\begin{cases} C_m \frac{dV}{dt} = -g_K n^4 (V - V_k) - g_{Na} m^3 h (V - V_{Na}) - g_L (V - V_L) + I_{ext}(t) \\ \frac{dn}{dt} = \alpha_n (1 - n) - \beta_n n \\ \frac{dm}{dt} = \alpha_m (1 - m) - \beta_m m \\ \frac{dh}{dt} = \alpha_h (1 - h) - \beta_h h \end{cases}$$

Ходжкин и Хаксли эмпирически определили значения коэффициентов:

$$\alpha_n = 0.01 \frac{V + 55}{1 - e^{-\frac{V+55}{10}}}$$

$$\beta_n = 0.125 e^{-\frac{V+65}{80}}$$

$$\alpha_m = 0.1 \frac{V + 40}{1 - e^{-\frac{V+40}{10}}}$$

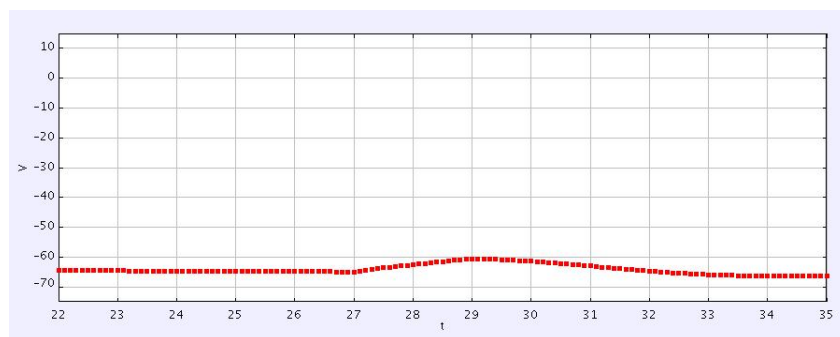
$$\beta_m = 4 e^{-\frac{V+65}{18}}$$

$$\alpha_h = 0.07 e^{-\frac{V+65}{20}}$$

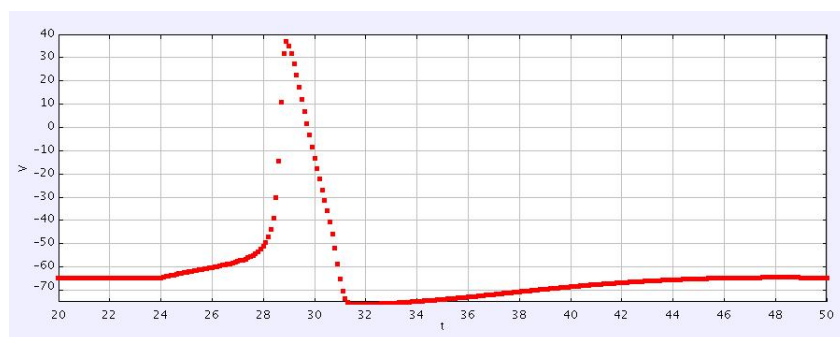
$$\beta_h = 1/[1 + e^{-\frac{V+35}{10}}]$$

Таким образом, введем в модель решение уравнений методом Эйлера-Рундсона. При нажатии на кнопку, к симуляционным дендритам подаётся электрический ток.

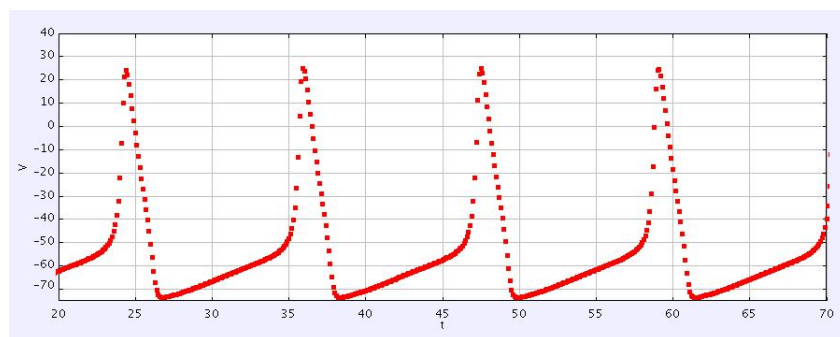
Подается ток величиной в 3 мА на короткое время, чтобы потенциал не превысил порога в -55 мВ:



Подается ток величиной в 3 мА на время, достаточное для преодоления порога в -55 мВ:



Ток величиной в 20 мА подается постоянно:



6 Заключение

1. Разработанная модель оказалась подходящей для сравнительного анализа численных методов решения дифференциальных уравнений.
2. В результате тестирования были получены конкретные численные характеристики методов.
3. В результате анализа характеристик была выявлена специфика каждого из методов, что дало возможность осознанного выбора метода для моделей.
4. На основе тестирования конкретных моделей, использующихся в естествознании, была подтверждена верность полученных характеристик.

Список литературы

- [1] Christian W. Harvey G., Tobochnik J. *An introduction to computer simulation methods: applications to physical systems*. – 2016.
- [2] I.Andreadis I.G.Georgoudas, G.Ch.Sirakoulis. *Modelling earthquake activity features using cellular automata*. – 2006.
- [3] Thomas Trappenberg. *Fundamentals of Computational Neuroscience*. – 2010.