

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

Лицей имени Н.И. Лобачевского КФУ

Валеев Тимур Альбертович

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:

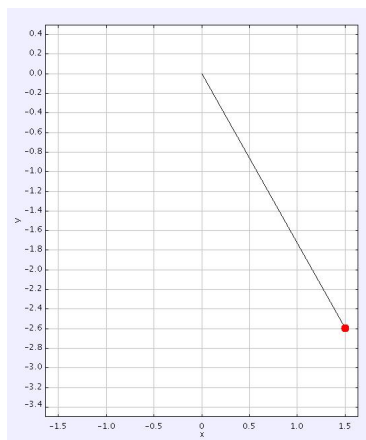
$$y(x + \Delta x) = y(x) + f(x)\Delta x$$

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

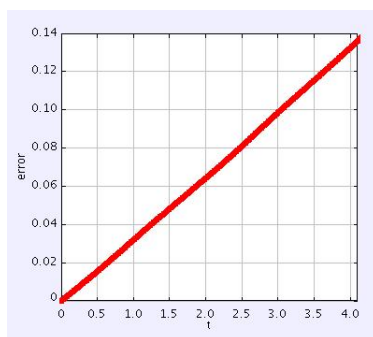
$$\begin{aligned}\theta(t + \Delta t) &= \theta(t) + \frac{d\theta(t)}{dt} \Delta t \\ \frac{d\theta(t + \Delta t)}{dt} &= \frac{d\theta(t)}{dt} - \frac{g}{L} \sin \theta(t) \Delta t\end{aligned}$$

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.

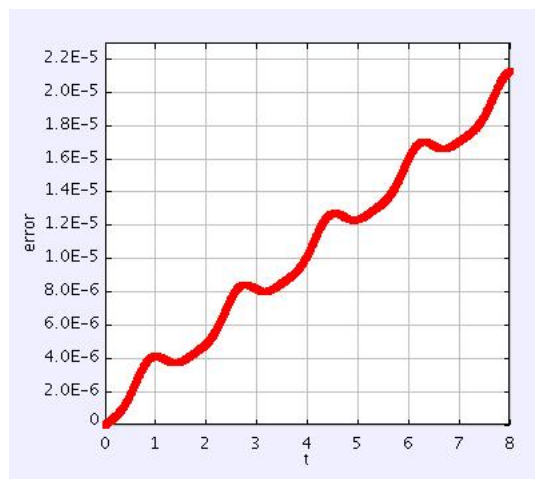
3.2 Метод Эйлера-Ричардсона [1]

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:

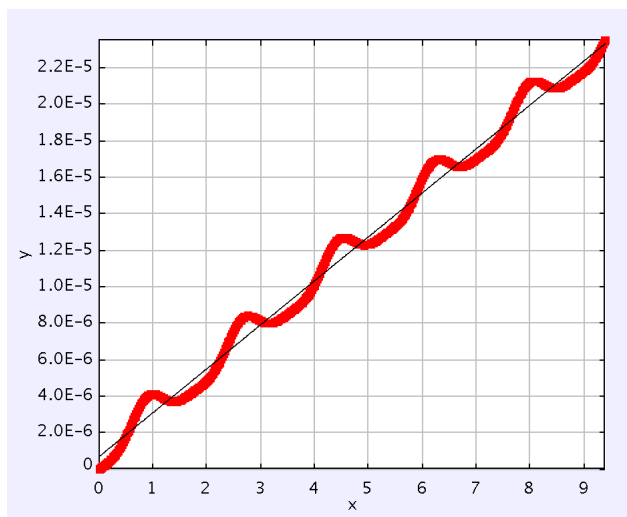
$$\begin{aligned}\theta_{mid} &= \theta(t) + \frac{1}{2} \frac{d\theta(t)}{dt} \Delta t \\ \frac{d\theta_{mid}}{dt} &= \frac{d\theta(t)}{dt} - \frac{1}{2} \frac{g}{L} \sin \theta(t) \Delta t \\ \frac{d^2\theta_{mid}}{dt^2} &= -\frac{g}{L} \sin \theta_{mid} \\ \theta(t + \Delta t) &= \theta(t) + \frac{d\theta_{mid}}{dt}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

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.

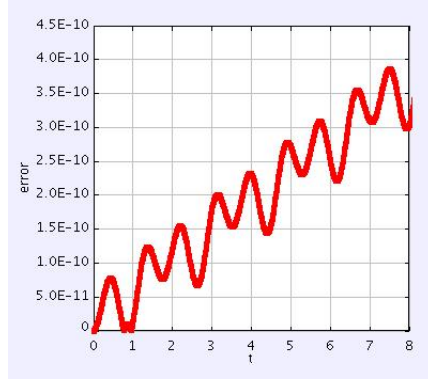
Для угла:

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

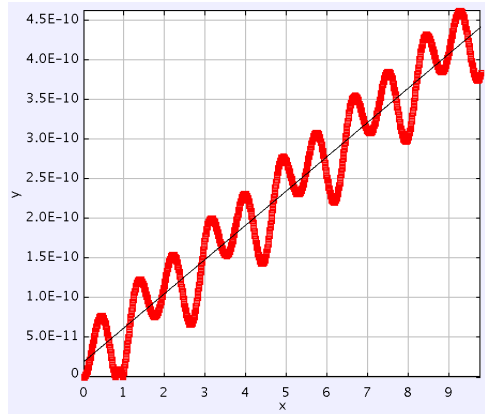
Для угловой скорости:

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

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

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

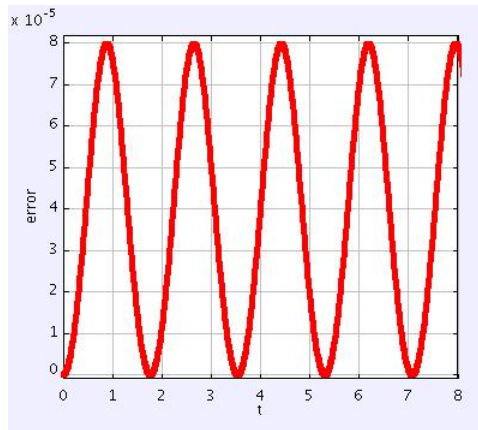
Эффективность метода Рунге-Кутты четвертого порядка в 55480 раз больше, чем эффективность метода Эйлера-Ричардсона.

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).

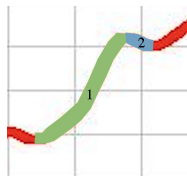


Рис.1

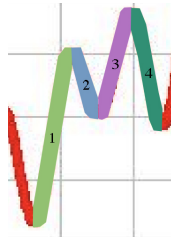


Рис.2

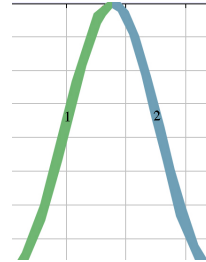


Рис.3

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:

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

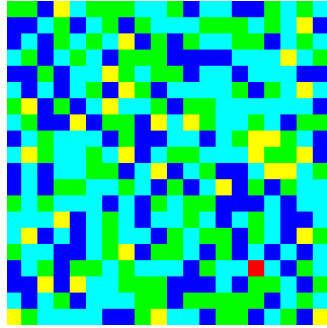


Рис. 1: Состояние модели в момент времени $t = 23$.

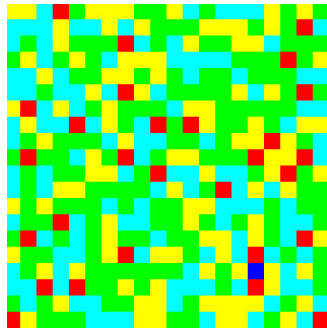


Рис. 2: Состояние модели в момент времени $t = 93$.

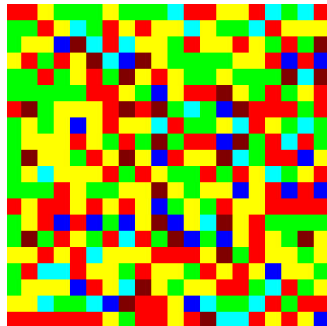


Рис. 3: Состояние модели в момент времени $t = 158$.

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

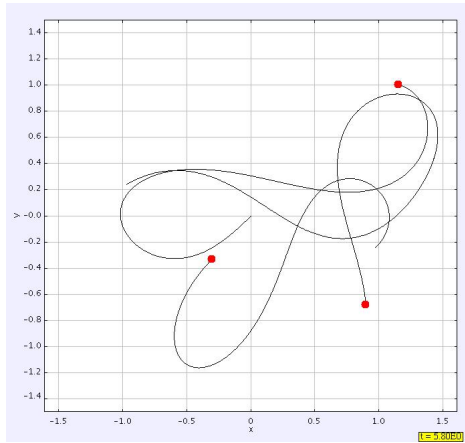
Система дифференциальных уравнений, описывающая движение трёх тел:

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

где G - гравитационная постоянная, m_i соответственно массы тел,

\vec{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.



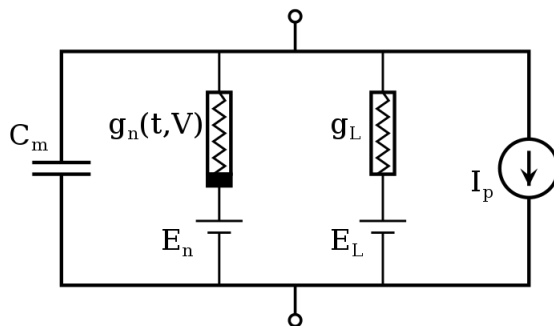
5.3 Модель Ходжкина-Хаксли [3]

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:

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

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

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

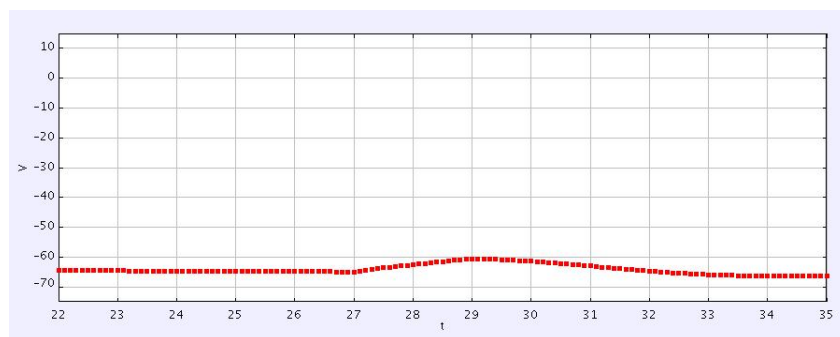
$$\beta_m = 4 e^{-\frac{V+65}{18}}$$

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

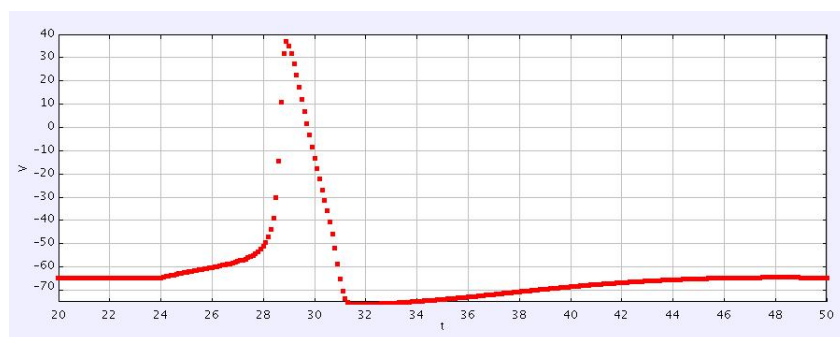
$$\beta_h = 1/[1 + e^{-\frac{V+35}{10}}]$$

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

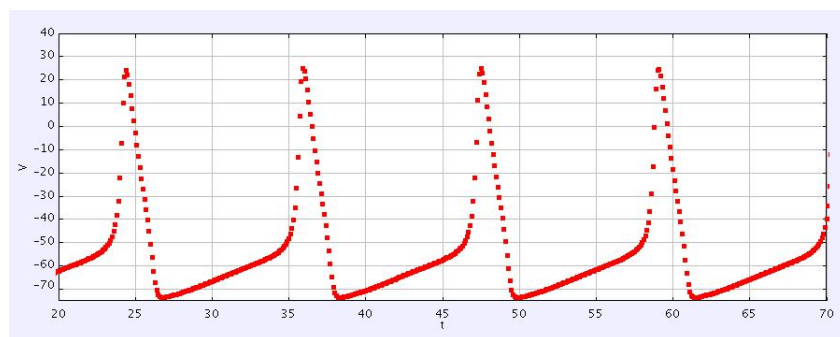
Подается ток величиной в 3 мА на короткое время, чтобы потенциал не превысил порога в -55 мВ:



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.