

# Методы Адамса

Методы Адамса являются, в отличие от одношаговых методов Рунге-Кутты, многошаговыми.

## Задача (многошаговый метод общего вида)

Пусть в некоторый момент  $t$  известно состояние системы  $\mathbf{x}(t)$ . Требуется найти состояние системы на следующем шаге, то есть  $\mathbf{x}(t + h)$ . При этом, в многошаговых методах также известны состояния системы на предыдущих  $k - 1$  шагах.

$$\left. \begin{array}{l} \mathbf{x}(t), \quad \mathbf{f}(\mathbf{x}(t)) \\ \mathbf{x}(t - h), \quad \mathbf{f}(\mathbf{x}(t - h)) \\ \mathbf{x}(t - 2h), \quad \mathbf{f}(\mathbf{x}(t - 2h)) \\ \dots \\ \mathbf{x}(t - (k - 1)h), \quad \mathbf{f}(\mathbf{x}(t - (k - 1)h)) \end{array} \right\} \xrightarrow{\mathbf{f}} \mathbf{x}(t + h)$$

Здесь  $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x})$ .

Введем упрощающую нотацию. Пусть  $x_n$  — состояние системы на текущем шаге,  $\mathbf{f}_n$  — вектор правой части для этого состояния. Получаем запись:

$$\left. \begin{array}{l} \mathbf{x}_n, \quad \mathbf{f}_n \\ \mathbf{x}_{n-1}, \quad \mathbf{f}_{n-1} \\ \mathbf{x}_{n-2}, \quad \mathbf{f}_{n-2} \\ \dots \\ \mathbf{x}_{n-k+1}, \quad \mathbf{f}_{n-k+1} \end{array} \right\} \xrightarrow{\mathbf{f}} \mathbf{x}_{n+1}$$

Так же как и в методах Рунге-Кутты, функция  $\mathbf{f}$  может вызываться неограниченное число раз.

## Задача (метод Адамса)

Ранее был рассмотрен общий вид многошаговых методов. В методе Адамса же используются предыдущие значения  $\mathbf{x}_{n-1}, \dots, \mathbf{x}_{n-k+1}$ . Записать это можно так:

$$\left. \begin{array}{l} \mathbf{x}_n, \quad \mathbf{f}_n \\ \mathbf{f}_{n-1} \\ \mathbf{f}_{n-2} \\ \dots \\ \mathbf{f}_{n-k+1} \end{array} \right\} \xrightarrow{\mathbf{f}} \mathbf{x}_{n+1}$$

В основе методов Адамса лежит экстраполяция (или интерполяция) функции  $\mathbf{f}$ , то есть правой части.

Допустим, есть истинная функция  $\mathbf{f}$ , проходящая через точки  $(t_{n-k+1}, \mathbf{f}_{n-k+1}), \dots, (t_n, \mathbf{f}_n)$ . Функцию можно аппроксимировать полиномом, который также проходит через эти точки, ожидая, что на интервале  $t_n, t_{n+1}$  поведение полинома не будет сильно отличаться от поведения функции.

Значение следующего  $\mathbf{x}_{n+1}$  получается путем интегрирования функции  $\mathbf{f}$  на всем промежутке от  $t_n, t_{n+1}$

## Экстраполяция $\mathbf{f}$ на основе $k$ предыдущих значений

Обратные разделенные разности:

$$\begin{aligned} [\mathbf{f}_n] &= \mathbf{f}_n \\ [\mathbf{f}_n \dots \mathbf{f}_{n-i}] &= \frac{[\mathbf{f}_n \dots \mathbf{f}_{n-i+1}] - [\mathbf{f}_{n-1} \dots \mathbf{f}_{n-i}]}{t_n - t_{n-i}} \end{aligned}$$

Так, обратная разделенная разность 0-го порядка в точке  $\mathbf{f}_n$  равна значению  $\mathbf{f}_n$ , а разности высших порядков вычисляются рекурсивно.

С помощью обратных разделенных разностей можно записать интерполяционный многочлен в форме Ньютона:

$$\begin{aligned} \mathbf{f}(t) \approx & [\mathbf{f}_n] + \\ & [\mathbf{f}_n \mathbf{f}_{n-1}](t - t_n) + \\ & [\mathbf{f}_n \mathbf{f}_{n-1} \mathbf{f}_{n-2}](t - t_n)(t - t_{n-1}) + \\ & \dots \\ & [\mathbf{f}_n \dots \mathbf{f}_{n-k+1}](t - t_n) \dots (t - t_{n-k+2}) \end{aligned}$$

Равенство нестрогое, потому что многочлен является аппроксимацией истинной функции  $\mathbf{f}(t)$ .

Введем также нотацию обратных конечных разностей:

$$\begin{aligned} \nabla^0 \mathbf{f}_n &= \mathbf{f}_n \\ \nabla^i \mathbf{f}_n &= \nabla^{i-1} \mathbf{f}_n - \nabla^{i-1} \mathbf{f}_{n-1} \end{aligned}$$

Как видно, нотация похожа на обратные разделенные разности, так же рекурсивно задается. На самом деле, обратную конечную разность можно вывести из обратной разделенной и наоборот:

$$t_m - t_{m-i} = ih \Rightarrow [\mathbf{f}_n \dots \mathbf{f}_{n-i}] = \frac{\Delta^i \mathbf{f}}{i! h^i}$$

Перепишем интерполяционный полином с использованием обратных конечных разностей.

Дополнительно введем переменную  $s = \frac{t - t_n}{h}$

$$\begin{aligned} \mathbf{f}(t) \approx & \nabla^0 \mathbf{f}_n \cdot 1 + \\ & \frac{\nabla^1 \mathbf{f}_n}{h} \cdot h s + \\ & \frac{\nabla^2 \mathbf{f}_n}{2h^2} \cdot h^2 s(s+1) + \\ & \dots \\ & \frac{\nabla^{k-1} \mathbf{f}_n}{(k-1)! h^{k-1}} \cdot h^{k-1} s \dots (s+k-2) \end{aligned}$$

## Интеграл правой части

Прежде чем взять интеграл, перепишем функцию в виде суммы:

$$\mathbf{f}(t) \approx \sum_{i=0}^{k-1} \frac{1}{i!} \nabla^i \mathbf{f}_n \cdot 1 \cdot s(s+1) \dots (s+i-1)$$

Проинтегрируем функцию от  $t_n$  до  $t_{n+1}$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{n+1} &= \mathbf{x}_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{f}(\mathbf{x}(t)) dt \\ &\approx \mathbf{x}_n + h \int_0^1 \sum_{i=0}^{k-1} \frac{1}{i!} \nabla^i \mathbf{f}_n \cdot 1 \cdot s(s+1) \dots (s+i-1) ds \\ &= \mathbf{x}_n + h \sum_{i=0}^{k-1} \gamma_i \nabla^i \mathbf{f}_n \end{aligned}$$

Здесь вводятся коэффициенты  $\gamma_i$ :

$$\gamma_i = \frac{1}{i!} \int_0^1 1 \cdot s(s+1) \dots (s+i-1) ds$$

Подчеркнем, что при  $i = 0$  под интегралом только 1. Соответственно, при  $i = 1$  под интегралом  $s$  и так далее.

Чтобы вывести эти коэффициенты (которые для каждого  $i$  являются константой), введем понятие *биномиального коэффициента (обобщенного)*:

$$\frac{(-s)(-s-1)(-s-2) \dots (-s-i+1)}{i!} \equiv \binom{-s}{i}$$

Тогда коэффициенты  $\gamma_i$  можно записать следующим образом:

$$\gamma_i = \frac{1}{i!} \int_0^1 1 \cdot s(s+1) \dots (s+i-1) ds = (-1)^i \int_0^1 \binom{-s}{i} ds$$

$(-1)^i$  появилась потому, что каждая скобка была умножена на  $-1$  для соответствия биномиальному коэффициенту.

Чтобы посчитать  $\gamma_i$ , обратимся к методу производящей функции.

Рассмотрим такую функцию  $G(u)$ :

$$G(u) \equiv \sum_{i=0}^{\infty} \gamma_i u^i = \int_0^1 \sum_{i=0}^{\infty} 1^{-s-i} \binom{-s}{i} (-u)^i ds$$

Здесь сумма под интегралом – бином Ньютона, обобщенный на случай нецелой степени, поэтому

$$= \int_0^1 (1-u)^{-s} ds = -\frac{u}{(1-u) \ln(1-u)}$$

Перепишем равенство в другом виде:

$$-\frac{\ln(1-u)}{u} G(u) = \frac{1}{1-u}$$

Все сомножители равенства имеют выражение в рядах, и выражение принимает вид:

$$\left(1 + \frac{1}{2}u + \frac{1}{3}u^2 + \dots\right) (\gamma_0 + \gamma_1 u + \gamma_2 u^2 + \dots) = (1 + u + u^2 + u^3 + \dots)$$

Отсюда можно найти  $\gamma_0, \gamma_1, \dots$

$$\begin{aligned} \gamma_0 &= 1 \\ \frac{1}{2}\gamma_0 + \gamma_1 &= 1 \\ \frac{1}{3}\gamma_0 + \frac{1}{2}\gamma_1 + \gamma_2 &= 1 \\ \dots & \\ \frac{1}{i+1}\gamma_0 + \dots + \frac{1}{2}\gamma_{i-1} + \gamma_i &= 1 \end{aligned}$$

Решение этой системы уравнений можно представить в виде таблицы, которая как правило заложена в реализации методов:

$\gamma_0^*$	$\gamma_1^*$	$\gamma_2^*$	$\gamma_3^*$	$\gamma_4^*$	$\dots$
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{5}{12}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{251}{720}$	$\dots$

## Метод Адамса-Башфорта: итоговые формулы

Общая формула метода:

$$\mathbf{x}_{n+1} \approx \mathbf{x}_n + h \sum_{i=0}^{k-1} \gamma_i \nabla^i \mathbf{f}_n$$

Формулы для  $\mathbf{x}_{n+1}$  при разном значении  $k$  (метод в каждом случае называется  $k$ -шаговым):

$$k = 1 : \mathbf{x}_{n+1} \approx \mathbf{x}_n + h \mathbf{f}_n$$

$$k = 2 : \mathbf{x}_{n+1} \approx \mathbf{x}_n + h \left( \frac{3}{2} \mathbf{f}_n - \frac{1}{2} \mathbf{f}_{n-1} \right)$$

$$k = 3 : \mathbf{x}_{n+1} \approx \mathbf{x}_n + h \left( \frac{23}{12} \mathbf{f}_n - \frac{4}{3} \mathbf{f}_{n-1} + \frac{5}{12} \mathbf{f}_{n-2} \right)$$

$$k = 4 : \mathbf{x}_{n+1} \approx \mathbf{x}_n + h \left( \frac{55}{24} \mathbf{f}_n - \frac{59}{24} \mathbf{f}_{n-1} + \frac{37}{24} \mathbf{f}_{n-2} - \frac{3}{8} \mathbf{f}_{n-3} \right)$$

Стоит отметить, что методы Адамса неспособны работать без использования другого одношагового метода для «разгона». Разгон необходим потому, что метод Адамса подразумевает наличие  $k - 1$  предыдущих уже сделанных шагов. Соответственно, на первом шаге метода делается  $k - 1$  шагов одношаговым методом.

Методы Адамса-Башфорта основаны на экстраполяции функции  $\mathbf{f}$  на один шаг дальше некоторого промежутка, где есть сохраненные ранее значения. Но экстраполяция работает хуже, чем интерполяция за пределами интервала, в котором имеются известные значения.

## Неявный метод Адамса: интерполяция функции правой части

Неявные методы отличаются тем, что используют в определении полинома, который интерполирует функцию  $\mathbf{f}$ , точку  $t_{n+1}$ .

Интерполяционный полином записывается таким образом и имеет  $k + 1$  слагаемых (запись с помощью обратных разностей):

$$\begin{aligned} \mathbf{f}(t) \approx & \nabla^0 \mathbf{f}_{n+1} \cdot 1 + \\ & \frac{\nabla^1 \mathbf{f}_{n+1}}{1} \cdot (s - 1) + \\ & \frac{\nabla^2 \mathbf{f}_{n+1}}{2} \cdot (s - 1)s + \\ & \frac{\nabla^3 \mathbf{f}_{n+1}}{6} \cdot (s - 1)s(s + 1) + \\ & \dots \\ & \frac{\nabla^k \mathbf{f}_{n+1}}{k!} \cdot (s - 1) \dots (s + k - 2) \end{aligned}$$

## Метод Адамса-Мултона: вывод коэффициентов

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{f}(\mathbf{x}(t)) dt \approx \mathbf{x}_n + h \sum_{i=0}^k \gamma_i^* \nabla^i \mathbf{f}_{n+1}$$

Заметим, что сумма уже от 0 до  $k$  включительно, в отличие от явного метода. Также вводятся коэффициенты  $\gamma_i^*$ , которые определены следующим образом:

$$\gamma_i^* = \frac{1}{i!} \int_0^1 (s - 1)s(s + 1) \dots (s + i - 2) ds = (-1)^i \int_0^1 \binom{-s + 1}{i} ds$$

Теперь попробуем посчитать разность  $\gamma_i - \gamma_{i-1}$  (без звездочек!)

$$\gamma_i - \gamma_{i-1} = (-1)^i \int_0^1 \binom{-s}{i} + \binom{-s}{i-1} ds (-1)^i = (-1)^i \int_0^1 \binom{-s+1}{i} ds = \gamma_i^*, \quad i > 0$$

Итак, коэффициенты  $\gamma_i^*$  можно вывести из  $\gamma_i$  по формуле выше, а значит можно аналогично составить таблицу:

$\gamma_0^*$	$\gamma_1^*$	$\gamma_2^*$	$\gamma_3^*$	$\gamma_4^*$	$\dots$
1	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{24}$	$-\frac{19}{720}$	$\dots$

### Предиктор и корректор

Один из методов решения неявных уравнений вида, который задан формулой  $\mathbf{x}_{n+1}$  — это метод неподвижной точки, которому однако необходимо начальное приближение точки  $\mathbf{x}_{n+1}$ , для чего можно использовать метод Адамса-Башфорта.

Используем нотацию не совсем математическую: далее знак  $\leftarrow$  означает присваивание переменной значения.

$$\mathbf{x}_{n+1} \leftarrow \mathbf{x}_n + h \sum_{i=0}^{k-1} \gamma_i \nabla^i \mathbf{f}_n : \text{Predictor (P)}$$

$$\mathbf{f}_{n+1} \leftarrow \mathbf{f}(\mathbf{x}_{n+1}) : \text{Evaluator (PE)}$$

Итак, теперь можно использовать формулу метода Адамса-Мултона:

$$\mathbf{x}_{n+1} \leftarrow \mathbf{x}_n + h \sum_{i=0}^k \gamma_i^* \nabla^i \mathbf{f}_{n+1} : \text{Corrector (PEC)}$$

Можно предпринимать и дальнейшие шаги:

$$\mathbf{f}_{n+1} \leftarrow \mathbf{f}(\mathbf{x}_{n+1}) \text{ (PECE)}$$

$$\mathbf{x}_{n+1} \leftarrow \mathbf{x}_n + h \sum_{i=0}^k \gamma_i^* \nabla^i \mathbf{f}_{n+1} \text{ (PECEC)}$$

И так далее. Как правило, таких шагов не требуется слишком много, итерации сходятся за 3-4 шага.

Изложенная схема является самодостаточной реализацией неявного метода Адамса, не считая того, что первые  $k-1$  значений  $\mathbf{f}_i$  должны быть, как и в явном методе Адамса, предварительно рассчитаны одношаговым методом.

### Оптимизация вычислений

Для оптимизации вычислений можно упростить вычисления корректора. Повторим сначала всю схему предиктора и корректора:

$$\mathbf{x}_{n+1} \leftarrow \mathbf{x}_n + h \sum_{i=0}^{k-1} \gamma_i \nabla^i \mathbf{f}_n : \text{Predictor (P)}$$

$$\mathbf{f}_{n+1} \leftarrow \mathbf{f}(\mathbf{x}_{n+1}) : \text{Evaluator (PE)}$$

$$\mathbf{x}_{n+1} \leftarrow \mathbf{x}_n + h \sum_{i=0}^k \gamma_i^* \nabla^i \mathbf{f}_{n+1} : \text{Corrector (PEC)}$$

На шаге корректора можно ввести поправку, вычислив разность между суммами в корректоре и предикторе:

$$\begin{aligned} & \sum_{i=0}^k (\gamma_i - \gamma_{i-1}) \nabla^i \mathbf{f}_{n+1} - \sum_{i=0}^{k-1} \gamma_i \nabla^i \mathbf{f}_n = \dots \\ & \dots = \gamma_k \nabla^k \mathbf{f}_{n+1} \end{aligned}$$

Таким образом, корректор может работать намного проще:

$$\mathbf{x}_{n+1} \leftarrow \mathbf{x}_{n+1} + h\gamma_k \nabla^k \mathbf{f}_{n+1}$$

Используя такой корректор, можно значительно поднять производительность реализации метода.

## Оценка ошибки методов Адамса

Оценка ошибки выводится из оценки ошибки интерполяции или экстраполяции функции  $\mathbf{f}$ .

Рассмотрим на примере метода Адамса-Башфорта, то есть на примере экстраполяции (для интерполяции схема такая же).

Посчитаем разность между функцией и ее аппроксимацией:

$$\begin{aligned} \mathbf{f}(t) - \sum_{i=0}^{k-1} \frac{\nabla^i \mathbf{f}_n}{i! h^i} (t - t_n) \dots (t - t_{n-i+1}) &= \frac{\mathbf{f}^{(k)}(\xi)}{k!} \prod_{i=0}^{k-1} (t - t_{n-i}) \\ \xi &\geq \min(t_{n-k+1}, \dots, t_n, t) \\ \xi &\leq \max(t_{n-k+1}, \dots, t_n, t) \end{aligned}$$

Если  $\mathbf{f}^{(k)}$  ограничена, то ошибка также ограничена:

$$\mathbf{f}(t) - \sum_{i=0}^{k-1} \frac{\nabla^i \mathbf{f}_n}{i! h^i} (t - t_n) \dots (t - t_{n-i+1}) = \frac{\mathbf{f}^{(k)}(\xi)}{k!} \prod_{i=0}^{k-1} (t - t_{n-i}) \stackrel{|\mathbf{f}^{(k)}| \leq M}{<} h^k \frac{M}{k!} \prod_{i=0}^{k-1} (s + i) = O(h^k)$$

### Локальная оценка ошибки явного метода

$$\mathbf{x}_{n+1} - (\mathbf{x}_n + h \sum_{i=0}^{k-1} \gamma_i \nabla^i \mathbf{f}_n) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} O(h^k) dt = o(h^k)$$

### Локальная оценка ошибки неявного метода

$$\mathbf{x}_{n+1} - (\mathbf{x}_n + h \sum_{i=0}^k \gamma_i^* \nabla^i \mathbf{f}_n) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} O(h^{k+1}) dt = o(h^{k+1})$$

Порядок интерполяции на 1 больше, так как она делается по  $k + 1$  точке.

Итак,

- $k$ -шаговый метод Адамса-Башфорта имеет порядок  $k$
- $k$ -шаговый метод Адамса-Мултона имеет порядок  $k + 1$

## Заключение

Стоит сказать, что методы Адамса-Башфорта и Адамса-Мултона придумал именно Адамс, единолично. Они так названы для различимости.

Неявные методы Адамса-Мултона могут накапливать существенно меньшую ошибку, так как используют полиномиальную интерполяцию, а не экстраполяцию.

Общеизвестные источники приводят не самую эффективную реализацию. Для ускорения нужно:

- Применять эффективный метод пересчета конечных разностей
- Применять эффективный алгоритм корректора

Все методы Адамса не могут работать без одношагового разгона, для него можно использовать методы Рунге-Кутты, например, 4-го порядка или выше.

Выше рассматривалась интерполяция и экстраполяция на равномерной сетке, что может приводить к большим ошибкам. Известна функция Рунге, которая интерполируется тем хуже, чем меньше шаг. Для борьбы с этим можно применять неравномерные сетки, которые затруднительно применять в методах Адамса.

Существуют и другие многошаговые методы, например, метод BDF.