

Методы Адамса

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

Задача (многошаговый метод общего вида)

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

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

Здесь $\dot{x} = \mathbf{f}(x)$.

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

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

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 не используются предыдущие значения $x_{n-1}, \dots, x_{n-k+1}$. Записать это можно так:

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

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 x_{n+1} получается путем интегрирования функции f на всем промежутке от t_n, t_{n+1}

Экстраполяция f на основе k предыдущих значений

Обратные разделенные разности:

$$\begin{aligned} [f_n] &= f_n \\ [f_n \dots f_{n-i}] &= \frac{[f_n \dots f_{n-i+1}] - [f_{n-1} \dots f_{n-i}]}{t_n - t_{n-i}} \end{aligned}$$

Так, обратная разделенная разность 0-го порядка в точке f_n равна значению f_n , а разности высших порядков вычисляются рекурсивно.

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

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

Неравенство нестрогое, потому что многочлен является аппроксимацией истинной функции $f(t)$.

Введем также нотацию обратных конечных разностей:

$$\begin{aligned} \nabla^0 f_n &= f_n \\ \nabla^i f_n &= \nabla^{i-1} f_n - \nabla^{i-1} f_{n-1} \end{aligned}$$

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

$$t_n - t_{n-i} = ih \Rightarrow [f_n \dots f_{n-i}] = \frac{\Delta^i f}{i! h^i}$$

Перепишем интерполяционный полином с использованием обратных конечных разностей.

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

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

Интеграл правой части

Прежде, чем взять интеграл, перепишем функцию в виде суммы:

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

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 γ_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 γ_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 γ_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 не целой 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:

γ_0	γ_1	γ_2	γ_3	γ_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 не способны 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 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 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

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

Заметим, что сумма уже от 0 до k включительно, в отличие от явного метода. Также вводятся коэффициенты γ_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!)

$$\begin{aligned}
\gamma_i - \gamma_{i-1} &= \int_0^1 \binom{-s}{i} + \binom{-s}{i-1} ds \\
&= \int_0^1 \binom{-s + 1}{i} ds = \gamma_i^*, \quad i > 0
\end{aligned}$$

Итак, коэффициенты γ_i^* можно вывести из γ_i по формуле выше, а значит можно также составить таблицу:

γ_0^*	γ_1^*	γ_2^*	γ_3^*	γ_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 присвоение 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, поэтому итерация сходится за 3-4 шага.

Изложенная схема является самодостаточной реализацией неявного метода Адамса, не считая того, что первые $k - 1$ шагов все также должно быть получено явным методом.

Оптимизация вычислений

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

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

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

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 f .

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

Посчитаем разность между функцией и ее аппроксимацией:

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

$$\begin{aligned}\xi &\geq \min(t_{n-k+1}, \dots, t_n, t) \\ \xi &\leq \max(t_{n-k+1}, \dots, t_n, t)\end{aligned}$$

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

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

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, так как необходимо

- Использовать эффективные методы пересчета конечных разностей
- Эффективные алгоритмы применения 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.

