Hinweise zur Implementation impliziter RK-Verfahren

Man betrachte das Anfangswertproblem

$$y'(t) = f(t, y(t)), \quad y(t_0) = y_0 \in \mathbb{R}^n$$

und ein s-stufiges implizites RK-Verfahren gegeben durch

$$u_{k+1} = u_k + h \sum_{i=1}^{s} b_i k_i(t_k, u_k), \tag{1}$$

$$k_i(t_k, u_k) = f(t_k + c_i h, u_k + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} k_j(t_k, u_k)), \quad i = 1, \dots, s, \tag{2}$$

mit Koeffizienten

$$\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & b^T \end{array} \qquad \text{bzw.} \qquad \begin{array}{c|ccc} c_1 & a_{11} & \cdots & a_{1s} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_s & a_{s1} & \cdots & a_{s,s} \\ \hline & b_1 & \cdots & b_s \end{array} .$$

In jedem Zeitschritt sind die Steigungen k_i durch Lösung des Gleichungssystems (2) zu ermitteln. Es gilt: $k_1, \dots, k_s$ sind Lösung von (2) $\Longleftrightarrow$ $z_i := h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} k_j, \ i = 1, \dots, s$ sind Lösungen von

$$z_i = h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} f(t_k + c_j h, u_k + z_j), \qquad i = 1, \dots, s. \tag{3}$$

Lösung des modifizierte Systems (3) mittels Newton-Verfahren: mit

$$Z := \begin{bmatrix} z_1 \\ \vdots \\ z_s \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{s \cdot n}, \quad F(h, Z) := \begin{bmatrix} f(t_k + c_1 h, u_k + z_1) \\ \vdots \\ f(t_k + c_s h, u_k + z_s) \end{bmatrix}$$

sowie

$$A \otimes I_n := \begin{pmatrix} a_{11} I_n & \vdots & a_{1s} I_n \\ \vdots & & \vdots \\ a_{s1} I_n & \cdots & a_{ss} I_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{sn \times sn}$$

können wir (3) schreiben als

$$G(Z) := Z - h(A \otimes I_n) F(h, Z) = 0.$$

Mit dem Startwert $Z^{(0)} := 0$ lautet dann ein Schritt des Newton-Verfahrens für $m \in \mathbb{N}_0$:

$$\begin{aligned} [I_{sn} - h(A \otimes I_n)(D_Z F)(h, Z^{(m)})] \Delta Z^{(m)} &= -G(Z^{(m)}), \\ Z^{(m+1)} &= Z^{(m)} + \Delta Z^{(m)}. \end{aligned}$$

Als Alternative läßt sich das vereinfachte Newton-Verfahren anwenden: mit

$$D_Z F(h, Z) \approx D_Z F(0, Z)$$

und $J := D_y f(t_k, u_k)$ hat man

$$(A \otimes I_n)(D_Z F)(0, Z^{(m)}) = (A \otimes I_n)(I_n \otimes J) = A \otimes J$$

und damit die vereinfachte Newton-Iteration

$$(I_{sn} - hA \otimes J) \Delta Z^{(m)} = -Z^{(m)} + h(A \otimes I_n) F(h, Z^{(m)}).$$