Můžeme take zavést chybu diskretizace $\varepsilon_{h,\tau}(x,t)$, která je definována v každém bodě (x,t) výpočetní oblasti, pro nějž $(x \pm h, t)$ a $(x, t+\tau)$ též leží ve výpočetní oblasti, vztahem

$$\varepsilon_{h,\tau} = \frac{\Delta_{+t}\, u}{\tau} - b\,\frac{\delta_x^2\, u}{h^2} + a\,\frac{\Delta_{0x}\, u}{h}\,.$$

Zřejmě $\varepsilon_j^n = \varepsilon_{h,\tau}(x_j, t_n)$. Je-li u dvakrát spojitě derivovatelné podle t a čtyřikrát spojitě derivovatelné podle x, pak použitím Taylorova vzorce získáme

$$\varepsilon_{h,\tau}(x,t) = \frac{1}{2}\, u_{tt}(x,\eta)\,\tau - \frac{b}{12}\, u_{xxxx}(\xi,t)\, h^2 + \frac{a}{6}\, u_{xxx}(\zeta,t)\, h^2\,,$$

kde $\eta \in (t, t+\tau)$ a $\xi, \zeta \in (x-h, x+h)$. Říkáme, že schéma je prvního řádu přesnosti v čase a druhého řádu přesnosti v prostoru.

U každého schématu je základním požadavkem, aby chyba diskretizace konvergovala k nule pro $h, \tau \to 0$. Pak říkáme, že schéma je konsistentní s řešenou diferenciální rovnicí.

1.4 Chyba aproximace

Chyba aproximace je definována vztahem $e_j^n = U_j^n - u_j^n$, kde U_j^n je přibližné řešení a u_j^n je aproximované přesné řešení v uzlu (x_j, t_n).

Všimněme si, že chyba aproximace je řešením příslušného schématu, v němž se na pravé straně objeví dodatečný člen $-\varepsilon_j^n$ nebo násobek této hodnoty (v závislosti na použitém tvaru schématu). Např. v případě schématu (6) máme

$$\frac{e_j^{n+1} - e_j^n}{\tau} = b\,\frac{e_{j+1}^n - 2\,e_j^n + e_{j-1}^n}{h^2} - a\,\frac{e_{j+1}^n - e_{j-1}^n}{2\,h} - \varepsilon_j^n\,,$$

resp.

$$e_j^{n+1} = e_j^n + \mu\,(e_{j+1}^n - 2\,e_j^n + e_{j-1}^n) - \frac{\nu}{2}\,(e_{j+1}^n - e_{j-1}^n) - \tau\,\varepsilon_j^n\,.$$

Později uvidíme, že na základě vztahů tohoto typu lze za určitých podmínek chybu aproximace odhadnout pomocí odhadu chyby diskretizace.

2 Von Neumannova analýza stability numerických schémat pro Cauchyovy úlohy

V teorii parciálních diferenciálních rovnic hraje důležitou roli Fourierova transformace. Pro funkci $u \in L^1(\mathbb{R})$ definujeme Fourierovu transformaci $\widehat{u}$ vztahem

$$\widehat{u}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\,\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} u(x)\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,x\,\xi}\, \mathrm{d}x\,, \qquad \xi \in \mathbb{R}\,. \tag{11}$$

Za určitých předpokladů pak platí

$$u(x) = \frac{1}{\sqrt{2\,\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \widehat{u}(\xi)\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,x\,\xi}\, \mathrm{d}\xi \tag{12}$$

a je splněna Parsevalova rovnost

$$\|u\|_{L^2(\mathbb{R})} = \|\widehat{u}\|_{L^2(\mathbb{R})} \,. \tag{13}$$

Pravá strana vztahu (12) je inverzní Fourierova transformace. Vztah (12) vyjadřuje funkci u jako superpozici vln daných funkcemi $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,x\,\xi}$ s různými amplitudami $\widehat{u}(\xi)$. Funkce $\widehat{u}$ představuje alternativní reprezentaci funkce u a může být komplexní, i když je funkce u reálná.

Podobně jako výše lze postupovat též v diskrétním případě. Buď $l \in \mathbb{R}$ a označme

$$\varphi_j(\xi) = \frac{1}{\sqrt{l}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,(2\,\pi\,j/l)\,\xi}\,, \qquad \xi \in \mathbb{R}\,, \quad j \in \mathbb{Z}\,.$$

Pak pro libovolné reálné číslo a tvoří množina $\{\varphi_j\}_{j\in\mathbb{Z}}$ úplný ortonormální systém v prostoru $L^2(a, a+l)$. Je-li dána posloupnost $U = \{U_j\}_{j\in\mathbb{Z}}$ splňující $\sum_{j\in\mathbb{Z}} |U_j|^2 < \infty$, pak řada $\sum_{j\in\mathbb{Z}} U_j\,\varphi_j$ konverguje v prostoru $L^2(a, a+l)$ k funkci $\widetilde{U}$ a platí $U_j = \int_a^{a+l} \widetilde{U}\,\overline{\varphi_j}\,\mathrm{d}\xi$. Navíc je splněna Parsevalova rovnost $\sum_{j\in\mathbb{Z}} |U_j|^2 = \|\widetilde{U}\|^2_{L^2(a,a+l)}$. Předpokládejme nyní, že hodnoty U_j představují hodnoty síťové funkce v uzlech $x_j = j\,h$. Zvolme $a = -l/2$, $l = 2\,\pi/h$ a definujme funkci $\widehat{U} \in L^2(-\pi/h, \pi/h)$ vztahem

$$\widehat{U}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\,\pi}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} h\,U_j\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,x_j\,\xi} \tag{14}$$

(tj. $\widehat{U} = \sqrt{h}\,\widetilde{U}$). Pak

$$U_j = \frac{1}{\sqrt{2\,\pi}} \int_{-\pi/h}^{\pi/h} \widehat{U}(\xi)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,x_j\,\xi}\,\mathrm{d}\xi \qquad \forall\ j \in \mathbb{Z}\,. \tag{15}$$

Vztahy (14) a (15) jsou diskrétními analogiemi vztahů (11) a (12). Vztah (15) opět vyjadřuje U jako superpozici vln. Označíme-li

$$\|U\|_2 = \sqrt{\sum_{j=-\infty}^{\infty} h\,|U_j|^2}$$

diskrétní analogii normy v prostoru $L^2(\mathbb{R})$, platí podobně jako v (13) Parsevalova rovnost

$$\|U\|_2 = \|\widehat{U}\|_{L^2(-\pi/h,\pi/h)}\,. \tag{16}$$

Uvažujme Cauchyovu úlohu najít funkci $u = u(x,t)$ definovanou pro $x \in \mathbb{R}$ a $t \geq 0$ a splňující

$$u_t + L\,u = 0 \quad \text{v } \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+\,, \qquad u(x,0) = u^0(x) \quad \text{pro } x \in \mathbb{R}\,, \tag{17}$$

kde u^0 je zadaná počáteční podmínka a L je lineární diferenciální operátor s konstantními koeficienty obsahující pouze derivace podle x. Obecné jednokrokové schéma pro úlohu (17) na stejnoměrné síti s uzly $x_j = j\,h$, $j \in \mathbb{Z}$, má tvar

$$\sum_{s=-M}^{M} \alpha_s\, U_{j+s}^{n+1} = \sum_{s=-M}^{M} \beta_s\, U_{j+s}^{n} \qquad \forall\, j \in \mathbb{Z}\,,\ n \in \mathbb{N}_0\,, \tag{18}$$

$$U_j^0 = u^0(x_j) \qquad \forall\, j \in \mathbb{Z}\,, \tag{19}$$

kde přirozené číslo M závisí na způsobu aproximace derivací podle x v operátoru L. Předpokládáme, že přibližné řešení je uvedeným schématem určeno jednoznačně. Zapíšeme-li $U^n = \{U_j^n\}_{j\in\mathbb{Z}}$ ve tvaru (15) pomocí Fourierovy transformace $\widehat{U}^n = \widehat{U}^n(\xi)$ definované vztahem (14), získáme dosazením do (18)

$$\int_{-\pi/h}^{\pi/h} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,x_j\,\xi} \left(\widehat{U}^{n+1}(\xi) \sum_{s=-M}^{M} \alpha_s\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,s\,h\,\xi} - \widehat{U}^{n}(\xi) \sum_{s=-M}^{M} \beta_s\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,s\,h\,\xi} \right) \mathrm{d}\xi = 0 \quad \forall\, j \in \mathbb{Z}\,,\ n \in \mathbb{N}_0\,.$$

Jelikož funkce $\{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,x_j\,\xi}\}_{j\in\mathbb{Z}}$ tvoří úplný ortogonální systém v prostoru $L^2(-\pi/h, \pi/h)$, platí

$$\widehat{U}^{n+1}(\xi) \sum_{s=-M}^{M} \alpha_s\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,s\,h\,\xi} = \widehat{U}^{n}(\xi) \sum_{s=-M}^{M} \beta_s\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,s\,h\,\xi} \qquad \forall\, n \in \mathbb{N}_0\,.$$

Všimněme si, že tento vztah lze formálně získat tak, že diskrétní řešení U_j^n nahradíme v (18) výrazem $\widehat{U}^n(\xi)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,x_j\,\xi}$. Díky předpokladu o jednoznačné řešitelnosti schématu je součet na levé straně pro libovolné ξ nenulový, a můžeme proto definovat funkci

$$\lambda(\xi) = \frac{\displaystyle\sum_{s=-M}^{M} \beta_s\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,s\,h\,\xi}}{\displaystyle\sum_{s=-M}^{M} \alpha_s\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,s\,h\,\xi}}\,.$$

Pak obdržíme

$$\widehat{U}^{n+1}(\xi) = \lambda(\xi)\,\widehat{U}^{n}(\xi) \qquad \forall\, n \in \mathbb{N}_0\,. \tag{20}$$

Tento vztah ukazuje, že provedení jednoho časového kroku schématu (18) je ekvivalentní přenásobení Fourierovy transformace diskrétního řešení amplifikačním faktorem $\lambda(\xi)$. Velikost amplifikačního faktoru $|\lambda(\xi)|$ představuje zesílení amplitudy $\widehat{U}^n(\xi)$ libovolné frekvence ξ při provedení jednoho časového kroku. Ze vztahu (20) získáme

$$\widehat{U}^{n}(\xi) = \lambda(\xi)^n\,\widehat{U}^{0}(\xi) \qquad \forall\, n \in \mathbb{N}_0\,. \tag{21}$$

Vidíme, že všechny informace o schématu jsou obsaženy v amplifikačním faktoru. Mimo jiné lze z amplifikačního faktoru snadno získat informace o stabilitě a přesnosti příslušného schématu. Fourierova transformace proto představuje standardní metodu pro studium vlastností diferenčních schémat.

Diferenční schémata jsou často pouze podmíněně stabilní, což znamená, že jsou stabilní, jen pokud prostorový krok h a časový krok τ splňují jistou podmínku. Množinu $\Lambda \subset \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+$ takovou, že pro libovolnou dvojici $(h, \tau) \in \Lambda$ je příslušná podmínka stability splněna, nazveme oblastí stability diferenčního schématu. Vždy budeme předpokládat, že množina Λ je omezená a že dvojice $(0, 0)$ je jejím hromadným bodem. Stabilitu schématu (18) lze definovat následujícím způsobem.

Definice 1 Diferenční schéma (18) je stabilní v oblasti stability Λ, pokud pro každý pevný čas $T > 0$ existuje konstanta C_T taková, že pro libovolnou počáteční podmínku U^0 platí

$$\|U^n\|_2 \le C_T \, \|U^0\|_2 \qquad \forall \, n \in \mathbb{N}, \, (h, \tau) \in \Lambda, \, n\tau \le T \, .$$

Věta 1 *Diferenční schéma (18) je stabilní v oblasti stability Λ právě tehdy, když existuje konstanta K nezávislá na ξ, h a τ taková, že*

$$|\lambda(\xi)| \le 1 + K\,\tau \qquad \forall \, \xi \in \mathbb{R} \, , \; (h, \tau) \in \Lambda \, . \tag{22}$$

Je-li funkce $\lambda(\xi/h)$ na Λ nezávislá na h a τ, pak lze podmínku (22) nahradit podmínkou

$$|\lambda(\xi)| \le 1 \qquad \forall \, \xi \in \mathbb{R} \, , \; (h, \tau) \in \Lambda \, . \tag{23}$$

Důkaz. Z Parsevalovy rovnosti (16) a vztahu (21) plyne

$$\|U^n\|_2 = \|\lambda^n \, \widehat{U}^0\|_{L^2(-\pi/h, \pi/h)} \, . \tag{24}$$

Poznamenejme, že λ^n zde značí n–tou mocninu λ. Platí-li (22), je pro $n \le T/\tau$

$$\|U^n\|_2 \le (1 + K\,\tau)^n \, \|\widehat{U}^0\|_{L^2(-\pi/h, \pi/h)} \le (1 + K\,\tau)^{T/\tau} \, \|U^0\|_2 \le \mathrm{e}^{K\,T} \, \|U^0\|_2 \, ,$$

tj. schéma (18) je stabilní v Λ. Předpokládejme nyní, že (22) neplatí pro žádnou konstantu K. Zvolme libovolné číslo $C > 0$. Jelikož funkce λ závisí na ξ spojitě a periodicky s periodou $2\,\pi/h$, existuje $(h, \tau) \in \Lambda$ a interval $(\xi_1, \xi_2) \subset (-\pi/h, \pi/h)$ tak, že $|\lambda(\xi)| > 1 + C\,\tau$ $\forall \, \xi \in (\xi_1, \xi_2)$. Nechť

$$\widehat{U}^0(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\xi_2 - \xi_1}} \quad \text{pro } \xi \in (\xi_1, \xi_2) \qquad \text{a} \qquad \widehat{U}^0(\xi) = 0 \quad \text{pro } \xi \notin (\xi_1, \xi_2) \, .$$

Pak dle (16) a (24) je $\|U^0\|_2 = \|\widehat{U}^0\|_{L^2(-\pi/h, \pi/h)} = 1$ a

$$\|U^n\|_2 = \|\lambda^n \, \widehat{U}^0\|_{L^2(\xi_1, \xi_2)} > (1 + C\,\tau)^n \ge (1 + C\,\tau_{max})^{n\tau/\tau_{max}} \, \|U^0\|_2 \, ,$$

kde τ_{max} je takové, že $\Lambda \subset \mathbb{R}^+ \times (0, \tau_{max})$ (využili jsme, že funkce $(1 + C\,\tau)^{1/\tau}$ je klesající). Pro libovolné $T > \tau_{max}$ a $n \in \mathbb{N}$ splňující $T/2 \le n\tau \le T$ je

$$\|U^n\|_2 > (1 + C\,\tau_{max})^{T/(2\,\tau_{max})} \, \|U^0\|_2 \, .$$

Schéma (18) tedy není stabilní v Λ, neboť C lze volit libovolně velké. Je-li funkce $\lambda(\xi/h)$ na Λ nezávislá na h a τ, pak jsou zřejmě podmínky (22) a (23) ekvivalentní. $\square$

Poznámka 1 Uvedená věta pochází od von Neumanna, a analýza diferenčních metod založená na Fourierově metodě se proto obvykle nazývá von Neumannova analýza. Nerovnost (22) se většinou nazývá von Neumannova podmínka.

Uvažujme rovnici (4), přičemž opět předpokládáme, že $b > 0$ a a jsou konstanty, a ukažme si provedení analýzy stability na příkladu explicitního schématu (6). Použitím ekvivalentního tvaru (9) zjistíme, že amplifikační faktor je dán vztahem

$$\lambda(\xi) = 1 - 4\,\mu\,\sin^2\frac{\xi\,h}{2} - \mathrm{i}\,\nu\,\sin(\xi\,h)\,.$$

Pro nalezení nutné a postačující podmínky pro stabilitu v diskrétní L^2 normě je tedy třeba uvažovat podmínku (22). Snadno vypočítáme, že

$$|\lambda(\xi)|^2 = (1 - 4\,\mu\,s^2)^2 + 4\,\nu^2\,s^2\,(1 - s^2)\,, \quad \text{kde} \quad s = \sin\frac{\xi\,h}{2}\,.$$

Při $s^2 = 1$ stačí požadovat, aby $\mu \le \frac{1}{2}$, neboť pak $|\lambda(\xi)| \le 1$. Jelikož $\nu^2 = a^2\,\mu\,\tau/b$ a $4\,s^2\,(1 - s^2) \le 1$, dostáváme při $\mu \le \frac{1}{2}$ nerovnost

$$|\lambda(\xi)| \le \left(1 + \frac{a^2}{2\,b}\,\tau\right)^{1/2} \le 1 + \frac{a^2}{4\,b}\,\tau\,.$$

Pro $\mu \le \frac{1}{2}$ je tedy von Neumannova podmínka splněna a schéma je stabilní v diskrétní L^2 normě. Nicméně při $\mu \le \frac{1}{2}$ může pro některé hodnoty ξ být $|\lambda(\xi)| > 1$, což vede k růstu příslušné amplitudy v diskrétním řešení, zatímco v řešení diferenciální rovnice jsou všechny amplitudy tlumeny. Pokud tedy exponenciální růst v čase, který von Neumannova podmínka umožňuje, neodpovídá vlastnostem aproximované parciální diferenciální rovnice, je von Neumannova podmínka v praxi příliš slabá. Zavádíme proto následující silnější definici stability.

Definice 2 Diferenční schéma se nazývá *silně stabilní*, jestliže platí: pokud Fourierova transformace řešení aproximované parciální diferenciální rovnice splňuje

$$|\widehat{u}(\xi, t + \tau)| \le \mathrm{e}^{\alpha\,\tau}\,|\widehat{u}(\xi, t)| \qquad \forall\,\xi \in \mathbb{R} \tag{25}$$

pro nějaké $\alpha \ge 0$, pak amplifikační faktory diferenčního schématu splňují

$$|\lambda(\xi)| \le \mathrm{e}^{\alpha\,\tau} \qquad \forall\,\xi \in \mathbb{R}\,.$$

Pro rovnici (4) platí (25) s $\alpha = 0$, a tedy požadujeme, aby $|\lambda(\xi)| \le 1\ \forall\,\xi \in \mathbb{R}$. Jelikož

$$|\lambda(\xi)|^2 = 1 - 4\,(2\,\mu - \nu^2)\,s^2 + 4\,(4\,\mu^2 - \nu^2)\,s^4\,,$$

dostáváme

$$|\lambda(\xi)| \le 1 \ \ \forall\,\xi \in \mathbb{R} \quad \Leftrightarrow \quad (4\,\mu^2 - \nu^2)\,s^2 \le 2\,\mu - \nu^2 \ \ \forall\,s \in [-1, 1] \quad \Leftrightarrow \quad \nu^2 \le 2\,\mu \le 1\,.$$

Kromě očekávané podmínky $\mu \le \frac{1}{2}$ jsme tedy dostali ještě další podmínku, kterou lze zapsat ve tvaru $\tau \le 2\,b/a^2$. To může být velmi vážné omezení, neboť v praxi je často $b \ll |a|$.