V diskrétním případě je

$$U_j^n = \frac{1}{\sqrt{2\,\pi}} \int_{-\pi/h}^{\pi/h} \widehat{U}^n(\xi)\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,\xi\, j\, h}\, \mathrm{d}\xi\,, \qquad \text{kde} \qquad \widehat{U}^n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\,\pi}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} h\, U_j^n\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\xi\, j\, h}\,.$$

Všimněme si, že interval $[-\pi/h, \pi/h]$ obsahuje všechny frekvence, které lze na síti s krokem h reprezentovat, neboť pro libovolné $k \in \mathbb{Z}$ je

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,\left(\xi + \frac{2\,\pi}{h}\,k\right)\, j\, h} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,\xi\, j\, h}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,2\,\pi\, k\, j} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,\xi\, j\, h}\,.$$

Pro libovolné jednokrokové diferenční schéma platí $\widehat{U}^{n+1}(\xi) = \lambda(\xi)\, \widehat{U}^n(\xi)$. Vzhledem ke vztahu (37) je tedy žádoucí, aby $\lambda(\xi)$ byla dobrá aproximace $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\xi\, a\, \tau}$. Abychom tato dvě čísla mohli lépe porovnat, zapíšeme amplifikační faktor ve tvaru $\lambda(\xi) = |\lambda(\xi)|\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\xi\, \alpha(\xi)\, \tau}$. Hodnota $|\lambda(\xi)|$ vyjadřuje pokles amplitudy složky přibližného řešení o frekvenci ξ během jednoho časového kroku. Jelikož, jak jsme viděli, pro přesné řešení libovolný Fourierův člen není tlumený, požadujeme, aby $|\lambda(\xi)|$ bylo blízké hodnotě 1. Veličina $\alpha(\xi)$ se nazývá *fázová rychlost*. Je to rychlost, kterou diferenční schéma šíří vlny o frekvenci ξ. Pokud by bylo $\alpha(\xi) = a$ pro všechna ξ, pak by se vlny šířily správnou rychlostí, avšak s tím se obecně nesetkáme u žádného z diferenčních schémat. Rychlost $\alpha(\xi)$ je pouze aproximací a a je obecně různá pro různé hodnoty ξ, což se projevuje deformací tvaru řešení diferenčního schématu. Jev, kdy se vlny o různých frekvencích pohybují různými rychlostmi, se nazývá *disperze*. Rozdíl $a - \alpha(\xi)$ se nazývá *fázová chyba*.

Fázovou rychlost můžeme určit ze vztahu

$$\tan(\xi\, \alpha(\xi)\, \tau) = -\frac{\operatorname{Im} \lambda(\xi)}{\operatorname{Re} \lambda(\xi)}\,.$$

Je-li $|\lambda(\xi)| = 1$, platí $\sin(\xi\, \alpha(\xi)\, \tau) = -\operatorname{Im} \lambda(\xi)$. Fázovou chybu je vhodné vyšetřovat zejména pro malé hodnoty $|\xi\, h|$, neboť vlny s takovýmito frekvencemi lze na síti s krokem h dobře aproximovat. Přitom můžeme využít následující vztahy pro počítání s malými čísly:

$$\frac{1}{1+x} = 1 - x + O(x^2)\,, \quad \sin x = x \left(1 - \frac{x^2}{6} + O(x^4)\right), \quad \cos x = 1 - \frac{x^2}{2} + O(x^4)\,,$$
$$\tan x = x \left(1 + \frac{x^2}{3} + O(x^4)\right), \qquad \tan^{-1} y = y \left(1 - \frac{y^2}{3} + O(y^4)\right).$$

Příklad 1 *Vyšetřeme fázovou chybu pro schéma* (34)*.*

Řešení: Podle (35) a výše uvedených vztahů je

$$\tan(\xi\, \alpha(\xi)\, \tau) = \frac{\nu\, \sin(\xi\, h)}{1 - |\nu| + |\nu| \cos(\xi\, h)} = \frac{\nu\, \xi\, h \left(1 - \frac{(\xi\, h)^2}{6} + O((\xi\, h)^4)\right)}{1 - |\nu|\, \frac{(\xi\, h)^2}{2} + O((\xi\, h)^4)}$$
$$= \nu\, \xi\, h \left[1 - \left(\frac{1}{6} - \frac{|\nu|}{2}\right) (\xi\, h)^2 + O((\xi\, h)^4)\right],$$

z čehož plyne (je $\nu\,\xi\,h = \xi\,a\,\tau$)

$$\begin{aligned}\alpha(\xi) &= a\left[1-\left(\frac{1}{6}-\frac{|\nu|}{2}\right)(\xi\,h)^2+O((\xi\,h)^4)\right]\left(1-\frac{\nu^2}{3}(\xi\,h)^2+O((\xi\,h)^4)\right)\\ &= a\left[1-\frac{1}{6}(1-|\nu|)(1-2\,|\nu|)(\xi\,h)^2+O((\xi\,h)^4)\right].\end{aligned}$$

Vidíme, že fázová chyba je řádu $(\xi\,h)^2$ a znaménko závisí na ν. Pro $|\nu|\in(\frac{1}{2},1)$ dochází k předbíhání a pro $|\nu|\in(0,\frac{1}{2})$ ke zpožďování fáze. Pro $|\nu|=\frac{1}{2}$ dostaneme z (35)

$$\begin{aligned}\lambda(\xi) &= \frac{1}{2}\left[1+\cos(\xi\,h)-\mathrm{i}\,2\,\nu\,\sin(\xi\,h)\right]=\frac{1}{2}\left[1+\cos(2\,\nu\,\xi\,h)-\mathrm{i}\,\sin(2\,\nu\,\xi\,h)\right]\\ &= \frac{1}{2}\left[1+\cos^2(\nu\,\xi\,h)-\sin^2(\nu\,\xi\,h)-\mathrm{i}\,2\,\sin(\nu\,\xi\,h)\cos(\nu\,\xi\,h)\right]\\ &= \cos(\nu\,\xi\,h)\left[\cos(\nu\,\xi\,h)-\mathrm{i}\,\sin(\nu\,\xi\,h)\right]=\cos\left(\frac{\xi\,h}{2}\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\xi\,a\,\tau},\end{aligned}$$

a tudíž chyba fáze je nulová. Pro $|\nu|=1$ víme, že schéma dává přesné řešení, což plyne i z toho, že podle (35) je

$$\lambda(\xi)=\cos(\xi\,h)-\mathrm{i}\,\nu\,\sin(\xi\,h)=\cos(\nu\,\xi\,h)-\mathrm{i}\,\sin(\nu\,\xi\,h)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\xi\,a\,\tau}.$$

Ukažme si to např. pro $\nu=1$. Pak $\widehat{U}^n(\xi)=\lambda(\xi)^n\,\widehat{U}^0(\xi)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\xi\,n\,h}\,\widehat{U}^0(\xi)$, a tudíž

$$\begin{aligned}U_j^n &= \frac{1}{\sqrt{2\,\pi}}\int_{-\pi/h}^{\pi/h}\widehat{U}^0(\xi)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,\xi\,(j-n)\,h}\,\mathrm{d}\xi=U_{j-n}^0=u^0(x_{j-n})=u^0(x_j-n\,h)\\ &= u^0(x_j-a\,t_n)=u(x_j,t_n).\end{aligned}$$

Ze vztahu (36) vidíme, že kromě případu $|\nu|=1$ dochází u upwind schématu (34) vždy k chybě v amplitudě řádu $(\xi\,h)^2$ v jednom časovém kroku, což vede ke globální chybě řádu $\xi\,h$ (na daném časovém intervalu $[0,T]$). Pro většinu problémů je takovéto tlumení nepřijatelné.

V případě Laxova–Friedrichsova schématu (33) je

$$\lambda(\xi)=\cos(\xi\,h)-\mathrm{i}\,\nu\,\sin(\xi\,h),\qquad |\lambda(\xi)|^2=1-(1-\nu^2)\,\sin^2(\xi\,h).$$

Schéma je tedy stabilní pro $|\nu|\le 1$, tj. opět pro ty hodnoty ν, pro něž je splněna CFL podmínka. Tlumení je stejného řádu jako u schématu (34), avšak pokles amplitudy je více než dvojnásobný (v jednom časovém kroku zhruba $(1+|\nu|)(1-|\nu|)(\xi\,h)^2$ namísto $|\nu|(1-|\nu|)(\xi\,h)^2$ u schématu (34)). Analogicky jako výše dostaneme

$$\alpha(\xi)=a\left[1+\frac{1}{3}(1-\nu^2)(\xi\,h)^2+O((\xi\,h)^4)\right].$$

Kromě případu $|\nu|=1$, kdy Laxovo–Friedrichsovo schéma je totožné se schématem (34) a dává tedy přesné řešení, dochází podle uvedeného vztahu vždy k předbíhání fáze.

3.3 Diskrétní princip maxima pro Cauchyovy úlohy

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

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

kde u^0 je zadaná počáteční podmínka a L je lineární diferenciální operátor s konstantními koeficienty tvaru

$$L = \sum_{k=1}^{m} a_k \, \frac{\partial^k}{\partial x^k} .$$

Obecné jednokrokové schéma pro tuto úlohu na stejnoměrné síti s uzly (x_j, t_n), kde $x_j = j\,h$, $t_n = n\,\tau$, $j \in \mathbb{Z}$ a $n \in \mathbb{N}_0$, má tvar

$$\sum_{s=-M}^{M} \alpha_s \, U_{j+s}^{n+1} = \sum_{s=-M}^{M} \beta_s \, U_{j+s}^{n} \qquad \forall\, j \in \mathbb{Z} ,\ n \in \mathbb{N}_0 , \tag{38}$$

$$U_j^0 = u^0(x_j) \qquad \forall\, j \in \mathbb{Z} . \tag{39}$$

Budeme předpokádat, že $\alpha_0 > 0$, $\alpha_s \leq 0 \ \ \forall\ s \neq 0$, $\beta_s \geq 0 \ \ \forall\ s$ a

$$\sum_{s=-M}^{M} \alpha_s = \sum_{s=-M}^{M} \beta_s > 0 . \tag{40}$$

Poznámka 2 *Je-li schéma* (38) *ve tvaru s diferenčními kvocienty, pak*

$$\sum_{s=-M}^{M} \alpha_s \, u_{j+s}^{n+1} - \sum_{s=-M}^{M} \beta_s \, u_{j+s}^{n} \approx (u_t + L\,u)(x_j, t_{n+\theta}) ,$$

kde $\theta \in [0,1]$. Je rozumné požadovat, aby tato aproximace byla přesná, pokud u je lineární funkce (polynom prvního stupně v x a t). Volbou $u(x,t) = 1$ a $u(x,t) = t$ pak dostáváme podmínku (40).

Pro libovolnou síťovou funkci $\{U_j^n\}_{j \in \mathbb{Z}, n \in \mathbb{N}_0}$ zavedeme označení

$$U_{\min}^n = \inf_{j \in \mathbb{Z}} U_j^n , \qquad U_{\max}^n = \sup_{j \in \mathbb{Z}} U_j^n , \qquad\qquad n \in \mathbb{N}_0 .$$

Věta 4 (Diskrétní princip maxima) *Nechť $\{U_j^n\}_{j \in \mathbb{Z}}$ je pro každé $n \in \mathbb{N}_0$ omezené a splňuje vztah* (38)*. Pak*

$$U_{\min}^n \leq U_j^{n+1} \leq U_{\max}^n \qquad \forall\, j \in \mathbb{Z} ,\ n \in \mathbb{N}_0 . \tag{41}$$

Pokud místo (38) *je pouze*

$$\sum_{s=-M}^{M} \alpha_s \, U_{j+s}^{n+1} \leq \sum_{s=-M}^{M} \beta_s \, U_{j+s}^{n} \qquad \forall\, j \in \mathbb{Z} ,\ n \in \mathbb{N}_0 , \tag{42}$$

platí

$$U_j^{n+1} \le U_{\max}^n \qquad \forall\, j \in \mathbb{Z}\,,\; n \in \mathbb{N}_0\,. \tag{43}$$

Pokud

$$\sum_{s=-M}^{M} \alpha_s\, U_{j+s}^{n+1} \ge \sum_{s=-M}^{M} \beta_s\, U_{j+s}^n \qquad \forall\, j \in \mathbb{Z}\,,\; n \in \mathbb{N}_0\,, \tag{44}$$

platí

$$U_{\min}^n \le U_j^{n+1} \qquad \forall\, j \in \mathbb{Z}\,,\; n \in \mathbb{N}_0\,. \tag{45}$$

Důkaz. Nechť platí (42). Pak pro libovolné $j \in \mathbb{Z}$ a $n \in \mathbb{N}_0$ je

$$\alpha_0\, U_j^{n+1} \le \sum_{\substack{s=-M\\ s\neq 0}}^{M} (-\alpha_s)\, U_{j+s}^{n+1} + \sum_{s=-M}^{M} \beta_s\, U_{j+s}^n \le U_{\max}^{n+1} \sum_{\substack{s=-M\\ s\neq 0}}^{M} (-\alpha_s) + U_{\max}^n \sum_{s=-M}^{M} \beta_s$$

Označíme-li $A = \sum_{s=-M}^{M} \beta_s$, plyne z této nerovnosti díky (40)

$$\alpha_0\, U_{\max}^{n+1} \le (\alpha_0 - A)\, U_{\max}^{n+1} + A\, U_{\max}^n\,,$$

a tedy i (43). Je-li splněno (44), pak $-U_j^n$ splňuje (42), a tudíž pro všechna $j \in \mathbb{Z}$ a $n \in \mathbb{N}_0$ je $-U_j^{n+1} \le \sup_{k\in\mathbb{Z}} (-U_k^n) = -U_{\min}^n$, tj. platí (45). Platí-li (38), platí dle předchozího (43) a (45), a tudíž i (41). □

Diskrétní princip maxima (41) zaručuje, že se v přibližném řešení neobjeví narůstající oscilace pozorované u některých metod ve cvičení 1. Navíc lze díky diskrétnímu principu maxima odhadnout chybu aproximace pomocí odhadu chyby diskretizace. Ukažme si to na příkladu schématu (29). Pro toto schéma je chyba diskretizace dána vztahem

$$\varepsilon_j^n = \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} + a\, \frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{h}\,,$$

kde opět $u_j^n = u(x_j, t_n)$. Je-li u dvakrát spojitě derivovatelné, pak použitím Taylorova vzorce získáme

$$\varepsilon_j^n = \frac{1}{2}\, u_{tt}(x_j, \eta)\, \tau + \frac{a}{2}\, u_{xx}(\xi, t_n)\, h\,, \tag{46}$$

kde $\xi \in (x_j, x_j + h)$ a $\eta \in (t_n, t_n + \tau)$. Jedná se tedy o schéma prvního řádu přesnosti v prostoru i v čase. Chyba aproximace $e_j^n = U_j^n - u_j^n$ v případě schématu (29) splňuje

$$e_j^{n+1} = (1 + \nu)\, e_j^n - \nu\, e_{j+1}^n - \tau\, \varepsilon_j^n\,. \tag{47}$$

Schéma (29) splňuje předpoklady použité k důkazu diskrétního principu maxima právě tehdy, když $1 + \nu \ge 0$ a $-\nu \ge 0$, tj. $\nu \in [-1, 0]$. Tato podmínka zaručuje platnost CFL