a opět předpokládáme, že řada konverguje absolutně a že $B_m = -B_{-m}\ \forall\, m \in \mathbb{Z}$. Podobně jako při Fourierově analýze jednokrokových metod výše hledejme nejprve řešení diferenčního schématu ve tvaru se "separovanými proměnnými", tj. položme

$$U_j^n = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,k\,j\,h}\,\widehat{U}^n(k)\,,$$

kde $k = m\,\pi$, $m \in \mathbb{Z}$. Dosazením do (80) získáme

$$\widehat{U}^{n+1}(k) + 2\,q(k)\,\widehat{U}^n(k) - \widehat{U}^{n-1}(k) = 0\,, \quad n \ge 1\,, \quad \text{kde } q(k) = \frac{4\,\tau}{h^2}\,\sin^2\frac{k\,h}{2}\,. \tag{82}$$

Charakteristický polynom $\lambda^2 + 2\,q(k)\,\lambda - 1$ této soustavy diferenčních rovnic má dva různé reálné kořeny $\lambda_\pm = -q(k) \pm \sqrt{q(k)^2+1}$, a tudíž obecné řešení soustavy (82) je

$$\widehat{U}^n(k) = \alpha_+(k)\,\lambda_+(k)^n + \alpha_-(k)\,\lambda_-(k)^n\,, \tag{83}$$

kde koeficienty $\alpha_\pm$ jsou libovolná komplexní čísla. Tato čísla určíme tak, aby platilo $\widehat{U}^0(m\,\pi) = A_m$ a $\widehat{U}^1(m\,\pi) = B_m$. Z toho plyne

$$\alpha_+(m\,\pi) = \frac{B_m - A_m\,\lambda_-(m\,\pi)}{\lambda_+(m\,\pi) - \lambda_-(m\,\pi)}\,, \qquad \alpha_-(m\,\pi) = \frac{A_m\,\lambda_+(m\,\pi) - B_m}{\lambda_+(m\,\pi) - \lambda_-(m\,\pi)}\,. \tag{84}$$

Řešení diskrétního problému (80), (66), (65), (81) je pak dáno řadou

$$U_j^n = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,m\,\pi\,j\,h}\,\widehat{U}^n(m\,\pi)\,, \qquad j = 0, 1, \ldots, J\,, \quad n \ge 0\,. \tag{85}$$

Bohužel složky řešení odpovídající kořenu $\lambda_-$ jsou nestabilní, neboť $\lambda_-(k) < -1$, kdykoli $\sin(\frac{1}{2}\,k\,h) \neq 0$. Schéma (80) je tedy bezcenné, neboť je pro libovolnou volbu $h$ a $\tau$ nestabilní.

Poznamenejme, že pokud charakteristický polynom soustavy diferenčních rovnic odpovídajících dvoukrokovému schématu má pro dané $k$ jeden dvojnásobný kořen, tj. $\lambda_+(k) = \lambda_-(k) \equiv \lambda(k)$, má obecné řešení soustavy diferenčních rovnic tvar

$$\widehat{U}^n(k) = \alpha(k)\,\lambda(k)^n + \beta(k)\,n\,\lambda(k)^{n-1}\,,$$

kde $\alpha(k), \beta(k) \in \mathbb{C}$. V tomto případě tedy je

$$\widehat{U}^n(m\,\pi) = A_m\,\lambda(m\,\pi)^n + [B_m - A_m\,\lambda(m\,\pi)]\,n\,\lambda(m\,\pi)^{n-1}\,. \tag{86}$$

Pokud je koeficient u druhého členu nenulový, je ke stabilitě nutné, aby $|\lambda(m\,\pi)| < 1$, neboť jinak $\widehat{U}^n$ poroste lineárně v $n$.

Uvedená analýza schématu (80) samozřejmě neznamená, že každé dvoukrokové explicitní schéma je vždy nestabilní. Uvažujme např. schéma

$$\frac{U_j^{n+1} - U_j^{n-1}}{2\,\tau} = \frac{\delta_x^2\,U_j^n + \delta_x^2\,U_j^{n-1}}{2\,h^2}\,, \qquad j = 1, 2, \ldots, J-1\,, \quad n \ge 1\,. \tag{87}$$

V tomto případě získáme soustavu diferenčních rovnic

$$\widehat{U}^{n+1}(k) + q(k)\,\widehat{U}^n(k) + (q(k)-1)\,\widehat{U}^{n-1}(k) = 0\,, \qquad n \ge 1\,, \tag{88}$$

jejíž charakteristický polynom má kořeny $\lambda_+(k) = 1 - q(k)$ a $\lambda_-(k) = -1$. Je-li $q(k) \neq 2$, jsou oba kořeny různé a $\widehat{U}^n(k)$ je opět dáno vztahy (83) a (84). Zřejmě je $|\lambda_\pm(k)| \le 1$ právě tehdy, když $q(k) \in [0, 2)$, z čehož plyne podmínka stability $\tau \le h^2/2$. Je-li $q(k) = 2$, je $\lambda_+(k) = \lambda_-(k)$ a $\widehat{U}^n(k)$ je dáno vztahem (86) s $\lambda(k) = -1$. Případ $q(m\,\pi) = 2$ za uvedené podmínky stability může nastat pouze tehdy, je-li $m = (2\,l+1)J$, kde $l \in \mathbb{Z}$. Členy s $m = (2\,l+1)J$ se však v řešení neprojeví, neboť řadu (85) můžeme díky vlastnosti $\widehat{U}^n(m\,\pi) = -\widehat{U}^n(-m\,\pi)$ $\forall\ m \in \mathbb{Z}$ zapsat ve tvaru

$$U_j^n = 2\,\mathrm{i} \sum_{m=1}^{\infty} \sin(m\,\pi\,j\,h)\,\widehat{U}^n(m\,\pi)\,, \qquad j = 0, 1, \ldots, J\,, \quad n \ge 0\,.$$

Schéma (87) je tedy pro $\tau \le h^2/2$ stabilní.

Stabilita metody však nemusí znamenat, že diskrétní řešení bude bez oscilací. Jak jsme viděli, platí v případě $q(k) \neq 2$

$$\widehat{U}^n(k) = \alpha_+(k)\,(1 - q(k))^n + \alpha_-(k)\,(-1)^n\,.$$

Označíme-li

$$V_j^n = \sum_{\substack{m=-\infty \\ q(m\pi)<2}}^{\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,m\,\pi\,j\,h}\,\alpha_+(m\,\pi)\,(1 - q(m\,\pi))^n\,, \qquad W^j = \sum_{\substack{m=-\infty \\ q(m\pi)<2}}^{\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,m\,\pi\,j\,h}\,\alpha_-(m\,\pi)\,,$$

můžeme psát

$$U_j^n = V_j^n + (-1)^n\,W_j\,, \qquad j = 0, 1, \ldots, J\,, \quad n \ge 0\,.$$

Síťová funkce $W_j$ nezávisí na čase, a pokud je nenulová, bude pro velké $n$ představovat dominantní složku řešení, neboť $V_j^n \to 0$ pro $n \to \infty$. Obvykle se projeví ve formě oscilací, jejichž velikost může být i větší než jsou hodnoty počáteční podmínky, jelikož velikost $\alpha_+(m\,\pi)$ a $\alpha_-(m\,\pi)$ může být podstatně větší než $|A_m|$. Ze stability metody však plyne, že tyto oscilace nebudou pro $n \to \infty$ narůstat. Navíc se jejich velikost zmenší, pokud zjemníme síť.

Časově nezávislá oscilující složka nebude v řešení schématu (87) přítomna, pokud řešení v čase $t_1$ určíme pomocí schématu (64). Podle (72) a (71) je pak totiž $B_m = A_m\,(1 - q(m\,\pi)) = A_m\,\lambda_+(m\,\pi)$, a tudíž $\alpha_-(m\,\pi) = 0$ pro každé $m \in \mathbb{Z}$.

## 4.8 Disipace

Z diskuse v předchozím odstavci plyne, že je žádoucí, aby diferenční schéma vedlo v každém časovém kroku k poklesu amplitud vysokofrekvenčních složek řešení, tj. aby velikost příslušných amplifikačních faktorů byla menší než 1. Jak již víme z části 3.7, tento pokles vysokofrekvenčních oscilací se nazývá disipace. Analogicky jako v definici 3 na str. 28

řekneme, že diferenční schéma je disipativní řádu $2\,r$ (má disipaci řádu $2\,r$), jestliže existuje kladná konstanta $C$ nezávislá na $h$ a $\tau$ taková, že každý amplifikační faktor $\lambda_j(k)$ splňuje

$$|\lambda_j(k)| \le 1 - C \left(\sin \frac{k\,h}{2}\right)^{2\,r} \tag{89}$$

pro všechna vlnová čísla $k$. Poznamenejme, že pro každé $k$ uvažujeme obecně více amplifikačních faktorů, abychom do našich úvah zahrnuli i vícekroková schémata. Pro ověřování platnosti podmínky (89) může být užitečné si všimnout, že nerovnost (89) je ekvivalentní podmínce

$$|\lambda_j(k)|^2 \le 1 - C' \left(\sin \frac{k\,h}{2}\right)^{2\,r}$$

s konstantou $C'$ nezávislou na $h$ a $\tau$. Disipativnost schématu je v případě parabolických rovnic velmi přirozeným požadavkem, neboť pak dochází v průběhu času ke zhlazování diskrétního řešení, stejně jako je tomu u řešení aproximované diferenciální rovnice.

Použitím vztahu (71) snadno zjistíme, že explicitní schéma (64) je disipativní řádu 2 pro $\mu \in [\mu_0, \mu_1] \subset (0, \frac{1}{2})$, kde $\mu_0$ a $\mu_1$ jsou konstanty nezávislé na $h$ a $\tau$. Proto se obvykle nepoužívá volba $\mu = \frac{1}{2}$, při níž je schéma (64) ještě stabilní. Implicitní schéma (77) je disipativní řádu 2 , je-li $\mu \ge \mu_0 > 0$, kde $\mu_0$ je konstanta nezávislá na $h$ a $\tau$. Schéma (87) samozřejmě disipativní není.

## 4.9 $\theta$–**metoda** ($\theta$–schéma, metoda váženého průměru)

Uvažujeme-li vážený průměr explicitního schématu (64) a implicitního schématu (77), získáme šestibodové schéma

$$U_j^{n+1} - U_j^n = \mu\,[\theta\,\delta_x^2\,U_j^{n+1} + (1-\theta)\,\delta_x^2\,U_j^n]\,, \qquad j = 1, 2, \ldots, J-1\,,\;\; n \ge 0\,. \tag{90}$$

Budeme předpokládat, že $\theta \in [0, 1]$. Pro $\theta = 0$ získáváme explicitní schéma (64) a pro $\theta = 1$ plně implicitní schéma (77). Pro libovolné $\theta \in (0, 1]$ je k určení hodnot přibližného řešení v čase $t_{n+1}$ nutno vyřešit tridiagonální soustavu lineárních rovnic

$$-\theta\,\mu\,U_{j-1}^{n+1} + (1 + 2\,\theta\,\mu)\,U_j^{n+1} - \theta\,\mu\,U_{j+1}^{n+1} = [1 + (1-\theta)\,\mu\,\delta_x^2]\,U_j^n\,, \qquad j = 1, 2, \ldots, J-1\,.$$

Koeficienty splňují nerovnosti (78), a můžeme tedy použít Thomasův algoritmus.

Stabilitu vyšetříme opět pomocí Fourierovy metody. Dosazením $U_j^n = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,k\,j\,h}\,\lambda^n$ do (90) získáme

$$\lambda = \frac{1 - 4\,(1-\theta)\,\mu\,\sin^2\frac{k\,h}{2}}{1 + 4\,\theta\,\mu\,\sin^2\frac{k\,h}{2}}\,.$$

Zřejmě $\lambda \le 1$. Nestabilita se může objevit pouze pokud $\lambda < -1$, což nastane právě tehdy, když

$$4\,(1 - 2\,\theta)\,\mu\,\sin^2\frac{k\,h}{2} > 2\,.$$

Z toho plyne, že

$$
(91) \qquad \begin{cases} \text{Je-li } \theta \in [0, \frac{1}{2}), \text{ pak (90) je stabilní } \iff \mu \leq \dfrac{1}{2\,(1-2\,\theta)}\,. \\ \text{Je-li } \theta \in [\frac{1}{2}, 1], \text{ pak (90) je stabilní } \forall\, \mu > 0\,. \end{cases}
$$

V prvním případě je tedy schéma podmíněně stabilní, v druhém nepodmíněně stabilní.

Chybu diskretizace schématu (90) je vhodné počítat v čase $t_{n+1/2} \equiv (n + \frac{1}{2})\,\tau$, tj. definujeme

$$
\varepsilon_j^{n+1/2} = \varepsilon_{h,\tau}(x_j, t_{n+1/2}) = \frac{u(x_j, t_{n+1}) - u(x_j, t_n)}{\tau} - \frac{\theta\,\delta_x^2\,u(x_j, t_{n+1}) + (1-\theta)\,\delta_x^2\,u(x_j, t_n)}{h^2}\,.
$$

Tedy

$$
\begin{aligned}
\varepsilon_{h,\tau}(x,t) &= \frac{\delta_t\,u(x,t)}{\tau} - \frac{\theta\,\delta_x^2\,u(x, t+\frac{\tau}{2}) + (1-\theta)\,\delta_x^2\,u(x, t-\frac{\tau}{2})}{h^2} \\
&= \frac{\delta_t\,u(x,t)}{\tau} - (\theta - \tfrac{1}{2})\,\frac{\delta_t\,\delta_x^2\,u(x,t)}{h^2} - \frac{\delta_x^2\,u(x, t+\frac{\tau}{2}) + \delta_x^2\,u(x, t-\frac{\tau}{2})}{2\,h^2}\,.
\end{aligned}
$$

Dosazením Taylorových rozvojů získáme

$$
\begin{aligned}
\varepsilon_{h,\tau}(x,t) &= [u_t + \tfrac{1}{24}\,u_{ttt}\,\tau^2 + \ldots] - (\theta - \tfrac{1}{2})\,[u_{xxt}\,\tau + \tfrac{1}{12}\,u_{xxxxt}\,h^2\,\tau + \ldots] \\
&\quad - [u_{xx} + \tfrac{1}{12}\,u_{xxxx}\,h^2 + \tfrac{2}{6!}\,u_{xxxxxx}\,h^4 + \tfrac{1}{8}\,u_{xxtt}\,\tau^2 + \ldots]\,.
\end{aligned}
$$

Použitím (59) zjišťujeme, že obecně $\varepsilon_{h,\tau} = O(\tau + h^2)$, avšak pro $\theta = \frac{1}{2}$ je $\varepsilon_{h,\tau} = O(\tau^2 + h^2)$. Pro $\theta = \frac{1}{2}$ je tedy schéma (90) druhého řádu přesnosti v prostoru i v čase a nazývá se schéma Crankovo–Nicolsonové. Jelikož je nepodmíněně stabilní, můžeme uvažovat $h = O(\tau)$. Pak $\varepsilon_{h,\tau} = O(\tau^2)$ a jsme tedy schopni dosáhnout dobrou přesnost při malé výpočetní náročnosti. Při volbě $h = O(\tau)$ však schéma Crankovo–Nicolsonové není disipativní, což způsobuje, že při nehladké počáteční podmínce může být méně přesné než plně implicitní schéma (77), které je disipativní řádu 2.

Metodu druhého řádu přesnosti v čase lze získat též pro

$$
\theta = \frac{1}{2} - \frac{h^2}{12\,\tau}\,, \quad \text{tj.} \qquad \mu = \frac{1}{6\,(1-2\,\theta)}\,.
$$

(Musí být $h^2 \leq 6\,\tau$, aby bylo $\theta \geq 0$.) Při této volbě je dle (91) schéma (90) stabilní a platí $\varepsilon_{h,\tau} = O(\tau^2 + h^4)$. Opět tedy můžeme používat velké časové kroky a metoda bude přitom pro hladké počáteční podmínky přesná a stabilní. Při volbě $h = O(\tau)$ však schéma opět není disipativní a pro malé $h$ je blízké schématu Crankovu–Nicolsonové.

I když lze odvodit řadu dalších schémat pro řešení úlohy (59)–(61), nejpoužívanější je v praxi schéma (90). Nejlepší volba parametru $\theta$ však závisí na řešeném problému a často není jasné, které schéma je opravdu nejlepší.