Laxovo–Wendroffovo schéma

Z jednokrokových schémat, která jsme dosud analyzovali, jsou pro řešení rovnice (1) použitelná (při libovolném znaménku a) pouze schémata (8) a (9). Obě tato schémata jsou pouze prvního řádu přesnosti (v případě schématu (8) za podmínky $h = O(\tau)$). Naším cílem je nyní odvodit schéma druhého řádu přesnosti v prostoru i v čase. Pro jednoduchost budeme opět uvažovat konstantní rychlost a. Bude však poučné schéma odvodit pro nenulovou pravou stranu $f = f(x,t)$. Řešíme tedy rovnici

$$u_t + a\,u_x = f \qquad \text{v } \mathbb{R}\times\mathbb{R}^+ \tag{28}$$

s počáteční podmínkou (2).

Předpokládejme, že $u \in C^4(\mathbb{R}\times\mathbb{R}_0^+)$. Pak pro $(x,t) \in \mathbb{R}\times\mathbb{R}_0^+$ je

$$u(x,t+\tau) = u(x,t) + u_t(x,t)\,\tau + \frac{1}{2}\,u_{tt}(x,t)\,\tau^2 + O(\tau^3)\,. \tag{29}$$

Derivace u_t a u_{tt} získáme z rovnice (28). V případě u_t je to triviální. Abychom získali u_{tt}, zderivujeme rovnici (28) podle t. Tím vznikne člen u_{xt}, který získáme z rovnice (28) zderivováním podle x. Máme tedy

$$u_{tt} = f_t - a\,u_{xt} = f_t - a\,(f_x - a\,u_{xx}) = a^2\,u_{xx} - a\,f_x + f_t\,.$$

Dosazením do (29) obdržíme

$$u(x,t+\tau) = u - a\,\tau\,u_x + \tau\,f + \frac{a^2\,\tau^2}{2}\,u_{xx} - \frac{a\,\tau^2}{2}\,f_x + \frac{\tau^2}{2}\,f_t + O(\tau^3)\,,$$

kde členy na pravé straně jsou uvažovány v bodě (x,t). Jelikož

$$u_x = \frac{\Delta_{0x}\,u}{h} + O(h^2)\,, \qquad u_{xx} = \frac{\delta_x^2\,u}{h^2} + O(h^2)\,,$$

dostáváme

$$\Delta_{+t}\,u = -\nu\,\Delta_{0x}\,u + O(\tau\,h^2) + \frac{\nu^2}{2}\,\delta_x^2\,u + \frac{\tau}{2}\,[f + f(x,t+\tau)] - \frac{a\,\tau^2}{2\,h}\,\Delta_{0x}\,f + O(\tau^3)\,.$$

To nás vede ke schématu

$$\begin{aligned}\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\tau} + a\,\frac{U_{j+1}^n - U_{j-1}^n}{2\,h} - \frac{a^2\,\tau}{2}\,\frac{U_{j+1}^n - 2\,U_j^n + U_{j-1}^n}{h^2}&\\ = \frac{1}{2}\left(f_j^{n+1} + f_j^n\right) - \frac{a\,\tau}{4\,h}\left(f_{j+1}^n - f_{j-1}^n\right)&\,,\end{aligned} \tag{30}$$

které můžeme též zapsat ve tvaru

$$\begin{aligned}U_j^{n+1} = U_j^n - \frac{\nu}{2}\,(U_{j+1}^n - U_{j-1}^n) + \frac{\nu^2}{2}\,(U_{j+1}^n - 2\,U_j^n + U_{j-1}^n)&\\ + \frac{\tau}{2}\left(f_j^{n+1} + f_j^n\right) - \frac{\nu\,\tau}{4}\left(f_{j+1}^n - f_{j-1}^n\right)&\,.\end{aligned}$$

Z odvození je zřejmé, že chyba diskretizace splňuje $\varepsilon_{h,\tau} = O(h^2 + \tau^2)$, tj. skutečně jsme získali schéma druhého řádu přesnosti v prostoru i v čase. Pro $f \equiv 0$ je Laxovo–Wendroffovo schéma ekvivalentní přidání umělé difúze o velikosti $\frac{1}{2} a^2 \tau$ k nestabilnímu schématu (6). V tomto případě můžeme Laxovo–Wendroffovo schéma odvodit též pomocí charakteristik, podobně jako schéma (9), viz obr. 3. Přidáme-li v obr. 3 na přímce $t = t_n$ uzel C tak, že B je střed úsečky AC, a definujeme-li v bodě Q aproximaci u pomocí kvadratické interpolace hodnot přibližného řešení v uzlech A, B a C, získáme Laxovo–Wendroffovo schéma.

Von Neumannovu analýzu provádíme pro $f \equiv 0$. Získáme

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

a schéma je tedy stabilní pro $|\nu| \le 1$, přičemž celý tento interval je povolen CFL podmínkou. Fázová rychlost splňuje

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

a při $|\nu| < 1$ tedy dochází vždy ke zpožďování fáze (pro malé $|\xi h|$). Pro $|\nu| = 1$ je $\lambda(\xi) = e^{-\mathrm{i}\,\xi\, a\,\tau}$, a schéma tudíž dává přesné řešení. Fázová chyba je stejného řádu jako u schémat (8) a (9), avšak tlumení je podstatně menší (v jednom časovém kroku je chyba v amplitudě řádu $(\xi\, h)^4$ místo $(\xi\, h)^2$). Pro nejvyšší frekvenci na síti ($\xi = \pi/h$) je $\lambda(\pi/h) = 1 - 2\,\nu^2$, a tedy $\alpha(\pi/h) = 0$, což znamená, že tato rychle oscilující složka řešení se nepohybuje pryč. Při $|\nu| < 1$ je však tato složka řešení tlumena: např. počáteční podmínce $U_j^0 = (-1)^j$ odpovídá řešení $U_j^n = (1 - 2\,\nu^2)^n (-1)^j$. Nedostatkem Laxova–Wendroffova schématu je, že na rozdíl od schémat (8) a (9) nesplňuje diskrétní princip maxima.

Cvičení 2 *Proveďte výpočet ze cvičení 1 pro Laxovo–Wendroffovo schéma a srovnejte výsledek s přibližným řešením získaným pomocí Laxova–Friedrichsova schématu* (8)*.*

Cvičení 3 *Uvažujme rovnici $u_t + u_x = 0$ v oblasti $(-1,1) \times \mathbb{R}^+$ s počáteční podmínkou $u^0(x) = \sin(2\,\pi\, x)$. Definujme ekvidistantní prostorové uzly $-1 = x_0 < x_1 < \cdots < x_J = 1$ s prostorovým krokem $h = 2/J$. Dále definujme uzel $x_{J+1} = 1 + h$ ležící mimo interval $[-1,1]$. Zvolme $J = 20$ a uvažujme konstatní časový krok $\tau = 0.09$. V čase $t = 0$ je přibližné řešení určeno počáteční podmínkou. Na následujících časových hladinách $t_n = n\,\tau$, $n \in \mathbb{N}$ počítejte v uzlech $x_1, \ldots, x_J$ přibližná řešení pomocí schémat* (8)*,* (9) *a* (30)*. Pak položte $U_0^n = U_J^n$ a $U_{J+1}^n = U_1^n$. Uvažujeme tedy periodické okrajové podmínky. U zmíněných schémat porovnejte fázovou chybu a tlumení a srovnejte výsledky provedených numerických experimentů s teoretickými výsledky uvedenými výše.*

Schéma Crankovo–Nicolsonové

Schéma Crankovo–Nicolsonové jsme v úvodní části o metodě konečných dirferencí definovali jako aritmetický průměr explicitního a implicitního schématu. Nyní si ukážeme jiný způsob, jak toto schéma odvodit. Naše motivace bude opět získat jednokrokové schéma pro rovnici (28), které je druhého řádu v prostoru i v čase.

Odvození bude založeno na tom, že na diferenci $u(x,t+\tau) - u(x,t)$ můžeme pohlížet jako na centrální diferenci vzhledem k času $t + \frac{\tau}{2}$. Je tedy

$$\frac{u(x,t+\tau) - u(x,t)}{\tau} = \frac{\delta_t\, u(x,t+\frac{\tau}{2})}{\tau} = u_t(x,t+\tfrac{\tau}{2}) + O(\tau^2)\,.$$

Dále platí

$$\begin{aligned}\frac{u(x,t+\tau) + u(x,t)}{2} &= u(x,t+\tfrac{\tau}{2}) + \frac{u(x,t+\tau) - 2\,u(x,t+\frac{\tau}{2}) + u(x,t)}{2}\\ &= u(x,t+\tfrac{\tau}{2}) + O(\tau^2)\,.\end{aligned}$$

Z toho plyne, že

$$\begin{aligned}u_x(x,t+\tfrac{\tau}{2}) &= \frac{1}{2}\left[u_x(x,t+\tau) + u_x(x,t)\right] + O(\tau^2)\\ &= \frac{1}{2}\left[\frac{u(x+h,t+\tau) - u(x-h,t+\tau)}{2\,h} + \frac{u(x+h,t) - u(x-h,t)}{2\,h}\right] + O(h^2+\tau^2)\,.\end{aligned}$$

To ukazuje, že v bodě $(x, t+\frac{\tau}{2})$ může být vhodné rovnici (28) aproximovat schématem

$$\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\tau} + a\,\frac{U_{j+1}^{n+1} - U_{j-1}^{n+1} + U_{j+1}^n - U_{j-1}^n}{4\,h} = \frac{f_j^{n+1} + f_j^n}{2}\,,$$

což lze psát též ve tvaru

$$-\frac{\nu}{4}\,U_{j-1}^{n+1} + U_j^{n+1} + \frac{\nu}{4}\,U_{j+1}^{n+1} = \frac{\nu}{4}\,U_{j-1}^n + U_j^n - \frac{\nu}{4}\,U_{j+1}^n + \frac{\tau}{2}\left(f_j^{n+1} + f_j^n\right).$$

Nyní již není možné hodnotu přibližného řešení v daném uzlu na nové časové vrstvě jednoduchým způsobem vyjádřit pomocí hodnot přibližného řešení na předcházející časové vrstvě a jedná se tedy o implicitní schéma. Hodnoty přibližného řešení na nové časové vrstvě jsou navzájem svázány a získají se vyřešením soustavy lineárních rovnic. Jelikož hodnota přibližného řešení v daném uzlu na nové časové vrstvě závisí na všech hodnotách přibližného řešení z předcházející časové vrstvy, nevede CFL podmínka k žádné podmínce na parametr ν.

Von Neumannova analýza (pro $f \equiv 0$) dává amplifikační faktor

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

Je tedy $|\lambda(\xi)| = 1$ pro všechna $\xi \in \mathbb{R}$, a tudíž schéma je nepodmíněně stabilní. Nedochází však k žádnému tlumení, takže drobné poruchy v řešení zůstávají trvale přítomny. Speciálně pro vlnu s nejvyšší frekvencí π/h opět platí, že fázová rychlost je nulová, avšak na rozdíl od Laxova–Wendroffova schématu se její amplituda v čase nemění: počáteční podmínce $U_j^0 = (-1)^j$ odpovídá řešení $U_j^n = (-1)^j$. Stejně jako u Laxova–Wendroffova schématu neplatí ani pro schéma Crankovo–Nicolsonové diskrétní princip maxima.

Analýza leapfrog scheme

Názvem *leapfrog scheme* je označováno dvoukrokové schéma (7). Je zřejmé, že se jedná o schéma druhého řadu přesnosti v prostoru i v čase, které nesplňuje diskrétní princip maxima. CFL podmínka je splněna, jestliže $|\nu| \leq 1$, což budeme nadále předpokládat.

Zabývejme se nyní stabilitou leapfrog scheme. Stejně jako v případě jednokrokových schémat vyjádříme přibližné řešení U_j^n v integrálním tvaru pomocí jeho Fourierovy transformace $\widehat{U}^n(\xi)$ a dosadíme do schématu. Tím získáme vztah

$$\int_{-\pi/h}^{\pi/h} e^{\mathrm{i}\,\xi\,j\,h} \Big(\widehat{U}^{n+1}(\xi) + \mathrm{i}\,2\,\nu\,\sin(\xi\,h)\,\widehat{U}^n(\xi) - \widehat{U}^{n-1}(\xi)\Big)\,\mathrm{d}\xi = 0 \quad \forall\, j \in \mathbb{Z}\,,\ n \in \mathbb{N}\,,$$

z něhož díky ortogonalitě funkcí $\{e^{\mathrm{i}\,\xi\,j\,h}\}_{j\in\mathbb{Z}}$ plyne

$$\widehat{U}^{n+1}(\xi) + \mathrm{i}\,2\,\nu\,\sin(\xi\,h)\,\widehat{U}^n(\xi) - \widehat{U}^{n-1}(\xi) = 0 \quad \forall\, n \in \mathbb{N}\,,\ \xi \in [-\pi/h, \pi/h]\,. \tag{31}$$

Pro každé $\xi \in [-\pi/h, \pi/h]$ tedy máme soustavu lineárních diferenčních rovnic s konstantními koeficienty. Charakteristická rovnice této soustavu diferenčních rovnic je

$$\lambda^2 + \mathrm{i}\,2\,\nu\,\sin(\xi\,h)\,\lambda - 1 = 0\,.$$

Její kořeny jsou

$$\lambda_\pm(\xi) = -\mathrm{i}\,\nu\,\sin(\xi\,h) \pm \sqrt{1 - \nu^2\,\sin^2(\xi\,h)}$$

a platí $|\lambda_\pm(\xi)| = 1$. Pokud $\lambda_+(\xi) = \lambda_-(\xi) =: \lambda(\xi)$, pak obecné řešení soustavy diferenčních rovnic (31) má tvar

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

kde $\alpha(\xi)$ a $\beta(\xi)$ jsou konstanty určené hodnotami $\widehat{U}^0(\xi)$ a $\widehat{U}^1(\xi)$. Je-li $\beta(\xi) \neq 0$, bude $\widehat{U}^n(\xi)$ růst lineárně s n. Toto nestabilní chování je třeba vyloučit. Jelikož $\lambda_+(\xi) = \lambda_-(\xi)$ může nastat pouze při $|\nu| = 1$, budeme požadovat, aby $|\nu| < 1$. Pak $\lambda_+(\xi) \neq \lambda_-(\xi)$ a obecné řešení soustavy diferenčních rovnic (31) je

$$\widehat{U}^n(\xi) = \alpha_+(\xi)\,\lambda_+(\xi)^n + \alpha_-(\xi)\,\lambda_-(\xi)^n\,. \tag{32}$$

Snadno zjistíme, že schéma je v tomto případě stabilní. Nutná a postačující podmínka pro stabilitu leapfrog scheme tedy je $|\nu| < 1$.

Leapfrog scheme (7) nelze použít k určení přibližného řešení na časové vrstvě t_1 a schéma je tedy potřeba inicializovat pomocí vhodného jednokrokového schématu. Lze ukázat, že k inicializaci vícekrokových schémat lze použít libovolné jednokrokové schéma, které je konzistentní s řešenou parciální diferenciální rovnicí. Toto schéma může být i nestabilní, neboť aplikací schématu pouze v několika prvních krocích dojde jen k malému růstu řešení (malému díky konzistenci) a tento růst nebude při použití stabilního vícekrokového schématu dále zesilován. Jeli $\tau/h = const.$, pak inicializační schéma může mít o 1 nižší řád přesnosti než vícekrokové schéma, přičemž celková přesnost bude odpovídat vícekrokovému schématu.