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

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

Za určitých předpokladů pak platí

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

a je splněna Parsevalova rovnost

$$\|u\|_{L^2(\mathbb{R})} = \|\widehat{u}\|_{L^2(\mathbb{R})}\,. \tag{3}$$

Pravá strana vztahu (2) je inverzní Fourierova transformace. Vztah (2) vyjadřuje funkci u jako superpozici vln daných funkcemi $e^{\mathrm{i}\,x\,\xi}$ 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

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

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 sít'ové 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

$$\widehat{U}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\,\pi}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} h\,U_j\, e^{-\mathrm{i}\,x_j\,\xi} \tag{4}$$

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

$$U_j = \frac{1}{\sqrt{2\,\pi}} \int_{-\pi/h}^{\pi/h} \widehat{U}(\xi)\, e^{\mathrm{i}\,x_j\,\xi}\, \mathrm{d}\xi \qquad \forall\ j \in \mathbb{Z}\,. \tag{5}$$

Vztahy (4) a (5) jsou diskrétními analogiemi vztahů (1) a (2). Vztah (5) 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 (3) Parsevalova rovnost

$$\|U\|_2 = \|\widehat{U}\|_{L^2(-\pi/h,\pi/h)} \,. \tag{6}$$

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

$$u_t + L\,u = 0 \quad \text{v } \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+ \,, \qquad u(x,0) = u^0(x) \quad \text{pro } x \in \mathbb{R} \,, \tag{7}$$

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 (7) na stejnoměrné síti s uzly $x_j = j\,h$, $j \in \mathbb{Z}$, má tvar

$$\sum_{s=-M}^{M} \alpha_s\, U_{j+s}^{n+1} = \sum_{s=-M}^{M} \beta_s\, U_{j+s}^{n} \qquad \forall\, j \in \mathbb{Z}\,,\ n \in \mathbb{N}_0\,, \tag{8}$$

$$U_j^0 = u^0(x_j) \qquad \forall\, j \in \mathbb{Z}\,. \tag{9}$$

Přirozené číslo M závisí na způsobu aproximace derivací podle x v operátoru L. Zapíšeme-li $U^n = \{U_j^n\}_{j\in\mathbb{Z}}$ ve tvaru (5) pomocí Fourierovy transformace $\widehat{U}^n = \widehat{U}^n(\xi)$ definované vztahem (4), získáme dosazením do (8)

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

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

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

Všimněme si, že tento vztah lze formálně získat tak, že diskrétní řešení U_j^n nahradíme v (8) výrazem $\widehat{U}^n(\xi)\, e^{\mathrm{i}\,x_j\,\xi}$. Označíme-li

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

obdržíme

$$\widehat{U}^{n+1}(\xi) = \lambda(\xi)\, \widehat{U}^n(\xi) \qquad \forall\, n \in \mathbb{N}_0\,. \tag{10}$$

Tento vztah ukazuje, že provedení jednoho časového kroku schématu (8) 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 (10) získáme

$$\widehat{U}^n(\xi) = \lambda(\xi)^n\, \widehat{U}^0(\xi) \qquad \forall\, n \in \mathbb{N}_0\,. \tag{11}$$

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 (8) lze definovat následujícím způsobem.

Definice 1 Diferenční schéma (8) 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 (8) je stabilní v oblasti stability Λ právě tehdy, když existuje konstanta K nezávislá na ξ, h a τ taková, že*

$$|\lambda(\xi)| \le 1 + K\,\tau \qquad \forall\, \xi \in \mathbb{R}\,,\ (h,\tau) \in \Lambda\,. \tag{12}$$

Je-li funkce $\lambda(\xi/h)$ na Λ nezávislá na h a τ, pak lze podmínku (12) nahradit podmínkou

$$|\lambda(\xi)| \le 1 \qquad \forall\, \xi \in \mathbb{R}\,,\ (h,\tau) \in \Lambda\,. \tag{13}$$

Důkaz. Z Parsevalovy rovnosti (6) a vztahu (11) plyne

$$\|U^n\|_2 = \|\lambda^n\, \widehat{U}^0\|_{L^2(-\pi/h,\pi/h)}\,. \tag{14}$$

Poznamenejme, že λ^n zde značí n–tou mocninu λ. Platí-li (12), je pro $n \le T/\tau$

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

tj. schéma (8) je stabilní v Λ. Předpokládejme nyní, že (12) 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 (6) a (14) 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 (8) 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 (12) a (13) 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 (12) se většinou nazývá von Neumannova podmínka.

Uvažujme rovnici

$$u_t = b\, u_{xx} - a\, u_x \qquad \forall\, t > 0, \quad x \in \mathbb{R}\,, \tag{15}$$

kde $b > 0$ a a jsou konstanty. Explicitní schéma je přirozené uvažovat ve tvaru

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

Označíme-li

$$\mu = \frac{\tau}{h^2}\, b\,, \qquad \nu = \frac{\tau}{h}\, a\,,$$

získáme

$$U_j^{n+1} = U_j^n + \mu\, (U_{j+1}^n - 2\, U_j^n + U_{j-1}^n) - \frac{\nu}{2}\, (U_{j+1}^n - U_{j-1}^n)\,.$$

Amplifikační faktor explicitního schématu proto je

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

kde $\mu = b\, \tau/h^2$ a $\nu = a\, \tau/h$, a pro nalezení nutné a postačující podmínky pro stabilitu v diskrétní L^2 normě je třeba uvažovat podmínku (12). Snadno zjistíme, 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

$$|\widehat{u}(\xi, t + \tau)| \le e^{\alpha\, \tau}\, |\widehat{u}(\xi, t)| \qquad \forall\, \xi \in \mathbb{R} \tag{16}$$

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

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

Pro rovnici (15) platí (16) 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

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

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, nebot' v praxi je často $b \ll |a|$.