《计算物理》第 5 次作业

1900017812 高乐耘*

2022 年 12 月 10 日

I. KZ 孤立子问题改进

考虑如下一般形式的 KDV 方程：

$$u_t + \varepsilon u u_x + \mu u_{xxx} = 0,\ u := u(x,t) \tag{1}$$

其中 ε 和 μ 为与 u，x，t 均无关的参数。作差分近似

$$u_t \to \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta t},\ u_x \to \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{2\Delta x},\ u \to \frac{u_{i,j-1} + u_{i,j}, u_{i,j+1}}{3} \tag{2}$$

后得到两步递推方程：

$$\begin{aligned} u_{i+1,j} =& u_{i-1,j} + \frac{\varepsilon}{3}\frac{\Delta t}{\Delta x}(u_{i,j-1} + u_{i,j} + u_{i,j+1})(u_{i,j-1} - u_{i,j+1}) \\ &+ \mu\frac{\Delta t}{(\Delta x)^3}(u_{i,j-2} - 2u_{i,j-1} + 2u_{i,j+1} - u_{i,j+2}) \end{aligned} \tag{3}$$

其中 x 的等间隔分划 $0 = x_0 < x_1 < \cdots < x_{n_x} = 2$ 在周期性边界条件的约定下可以作变换：

$$x_{-1} \to x_{n_x-1},\ x_{-2} \to x_{n_x-2},\ x_{n_x} \to x_0,\ x_{n_x+1} \to x_1 \tag{4}$$

这样对于每个 i 指定的时刻只需要计算 $u_{i,0}$ 至 u_{i,n_x-1} 即可。

式 (3) 给出的两步递推关系不足以得到 $t = t_1$ 时刻的解，故改用差分近似

$$u_t \to \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta t} \tag{5}$$

得到类似形式

$$\begin{aligned} u_{i+1,j} =& u_{i,j} + \frac{\varepsilon}{6}\frac{\Delta t}{\Delta x}(u_{i,j-1} + u_{i,j} + u_{i,j+1})(u_{i,j-1} - u_{i,j+1}) \\ &+ \frac{\mu}{2}\frac{\Delta t}{(\Delta x)^3}(u_{i,j-2} - 2u_{i,j-1} + 2u_{i,j+1} - u_{i,j+2}) \end{aligned} \tag{6}$$

这样得到 $u_1(x)$ 后的后续迭代步骤可以按照式 (3) 顺利进行。

源文件 kdv/kdv.c 实现了上述求解步骤，其函数签名为：

```
int kdv(int nt, int nx, number u0[nx], number u1[nx],
    number dt, number dx, number eps, number mu, int first);
```

*电子邮件地址: seeson@pku.edu.cn 手机号: 13759115414

其中 `nt` 和 `nx` 分别为 t 和 x 在求解区间上的分段数，`u0` （`u1`）为 $t=0$（$t=1$）时刻的 x_0 至 x_{n_x-1} 的取值，`dt` 和 `dx` 分别为 Δt 和 Δx，`eps` 和 `mu` 给定了 ε 和 μ 两个参数。当 `first` 为非零值时，表示为首次调用，需要使用式 (6) 得到 $u_1(x)$，此时传入 `u1` 中的值被忽略。函数退回时，`u0` 和 `u1` 分别被写为 $u(x,t_{n_t})$ 和 $u(x,t_{n_t+1})$，以供调用者查看结果和进行下一轮迭代。继续迭代可直接传入函数退回时写入的 `u0` 和 `u1` 值，并置 `first` 为 0。

令 $t_0=0.0,\ t_{n_t}=8.0,\ n_x=256,\ n_t=20000000,\ \varepsilon=1.0,\ \mu=0.022^2$，取余弦初值条件，编写程序 kdv/kz.c 求解得到组图 1 至 2 所示结果。所有嵌入图片均为矢量图，读者可以不失真地放大仔细查看。

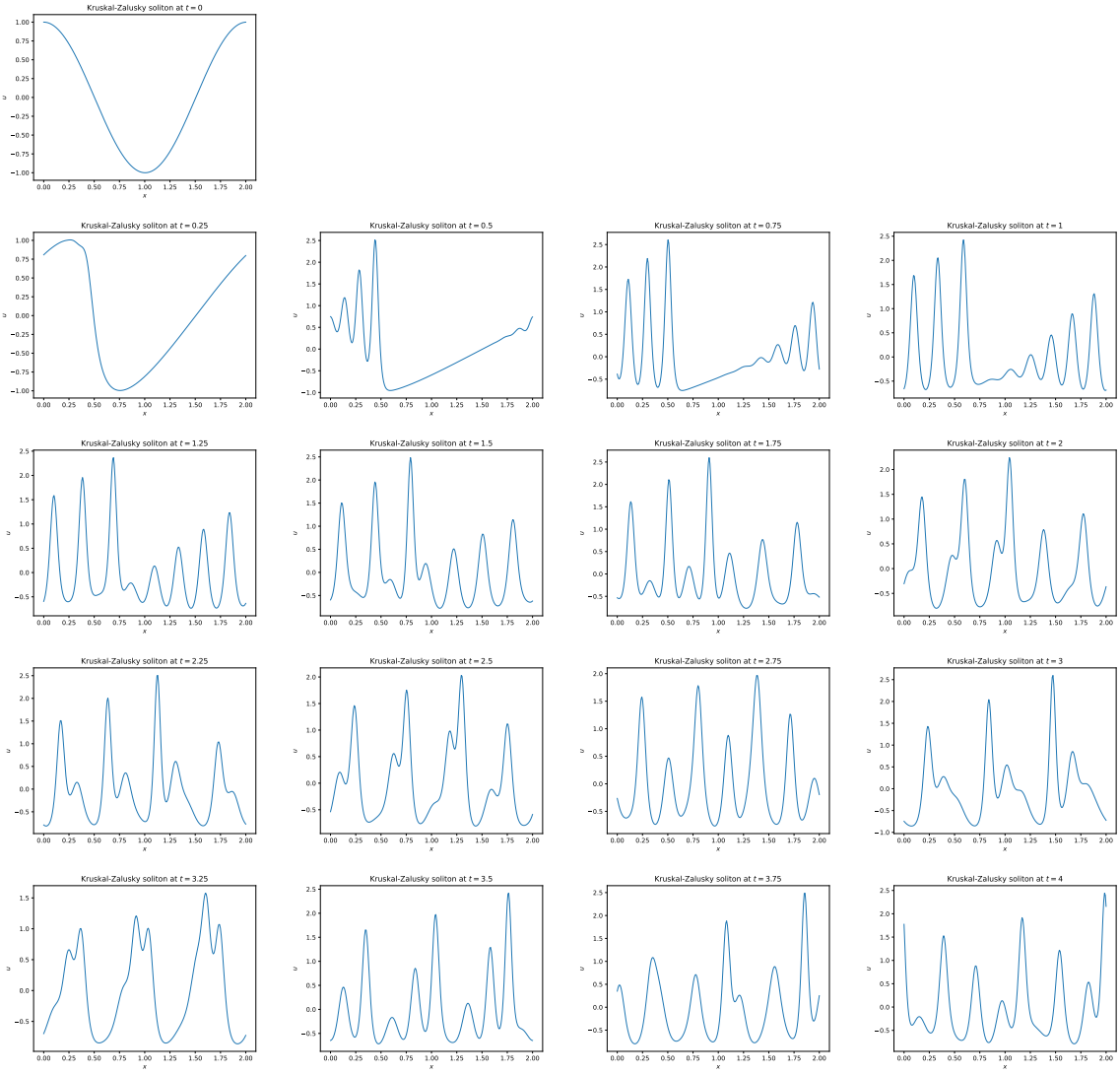

图 1: $t=0$ 和 t 以 0.25 为步长增加时 $u(x,t)$ 的变化情况（$0\le t\le 4$）

图 1 至 2 中的结果很好地展现出了孤子的演化特性。各个孤子在 $t=0.75$ 至 $t=1$ 时成型，按照正比于高度的速度独立向各自的方向运动传播。当其中一个孤子与另一个孤子因速度的不同相遇时，它们短暂地叠加到一起（如 $t=2$ 和 $t=3.5$）之后又各自分离出来（如 $t=2.25$ 和 $t=3.5$），继续保持相同的速度和方向运行。由于本题边界条件的周期性，孤子移出边界之后并不会消失，而是从另一边界以相同的速度和方向又移动进来，$t=4$ 的这幅图捕捉到了运动速度最快的孤子左半部分位于右边界，右半部分位于左边界的图像，这一结

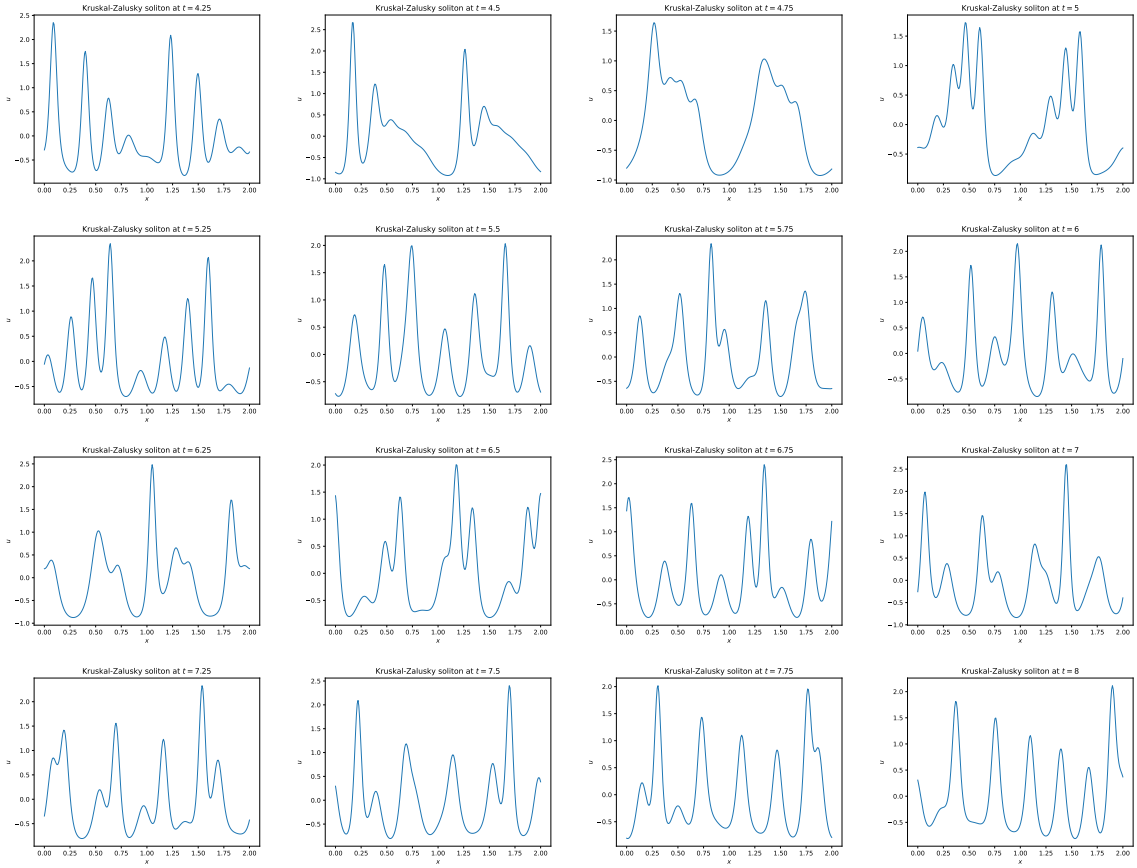

图 2: t 以 0.25 为步长增加时 $u(x,t)$ 的变化情况（$4 < t \leq 8$）

论为 $t = 4.25$ 时的图像所印证。$t = 4.75$ 和 $t = 6.5$ 时出现了更多个孤子叠加在一起的情况，但直到 $t = 8$ 时，各个孤子的孤立性质仍然保存得很好。这很好地验证了 KDV 方程有孤子解的猜想，验证了 KDV 方程中的色散项和二次非线性项叠加相互抵消而消除色散的理论。

II. 二维扩散问题

本题的方程和定解条件为：

$$
\begin{aligned}
&T_t = T_{xx} + T_{yy},\ 0 < x < 1,\ 0 < y < 1 \\
&T\big|_{t=0} = \begin{cases} 1, & |x-0.5| < 0.1 \text{ and } |y-0.5| < 0.1, \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases} \\
&T\big|_{x=0} = T\big|_{x=1} = 0,\ T_y\big|_{y=0} = T_y\big|_{y=1} = 0
\end{aligned}
\tag{7}
$$

本题的解析结果可以根据齐次边界条件直接分离变量得到。具体地，设

$$
T(x,y,t) = \psi(x,y)\varphi(t) \not\equiv 0 \tag{8}
$$

由边界条件得：

$$
\psi_{mn}(x,y) = \sin(m\pi x)\cos(n\pi y);\ m = 1,2,\ldots;\ n = 0,1,2,\ldots \tag{9}
$$

代入式 (7) 得：

$$\varphi_t = -(m^2+n^2)\pi^2\varphi_t \ \Rightarrow\ \varphi_{mn}(t) = \mathrm{e}^{-(m^2+n^2)\pi^2 t} \tag{10}$$

综上

$$T(x,y,t) = \sum_{m=1}^{+\infty}\sum_{n=0}^{+\infty} C_{mn}\psi_{mn}(x,y)\varphi_{mn}(t) = \sum_{m=1}^{+\infty}\sum_{n=0}^{+\infty} C_{mn}\sin(m\pi x)\cos(n\pi y)\mathrm{e}^{-(m^2+n^2)\pi^2 t} \tag{11}$$

代入初值条件得

$$T(x,y,0) = \sum_{m=1}^{+\infty}\sum_{n=0}^{+\infty} C_{mn}\sin(m\pi x)\cos(n\pi y) = \begin{cases} 1, & |x-0.5|<0.1 \text{ and } |y-0.5|<0.1, \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{12}$$

对于 $m, m' = 1, 2, \ldots$ 和 $n, n' = 0, 1, 2, \ldots$，

$$\int_0^1 \mathrm{d}x \int_0^1 \mathrm{d}y \sin(m'\pi x)\cos(n'\pi y)\sin(m\pi x)\cos(n\pi y) = \frac{\delta_{mm'}\delta_{nn'}}{2(2-\delta_{n0})} \tag{13}$$

由此得到

$$C_{mn}\frac{1}{2(2-\delta_{n0})} = \int_{0.4}^{0.6}\mathrm{d}x\int_{0.4}^{0.6}\mathrm{d}y\sin(m\pi x)\cos(n\pi y) \tag{14}$$

由于 $m \neq 0$，

$$\int_{0.4}^{0.6}\sin(m\pi x)\mathrm{d}x = -\frac{1}{m\pi}\cos(m\pi x)\Big|_{0.4}^{0.6} = \frac{\cos(0.4m\pi)-\cos(0.6m\pi)}{m\pi} \tag{15}$$

当 $n \neq 0$ 时，

$$\int_{0.4}^{0.6}\cos(n\pi x)\mathrm{d}x = \frac{1}{n\pi}\sin(n\pi x)\Big|_{0.4}^{0.6} = \frac{\sin(0.6n\pi)-\sin(0.4n\pi)}{n\pi} \tag{16}$$

当 $n = 0$ 时，

$$\int_{0.4}^{0.6}\cos(n\pi x)\mathrm{d}x = 0.2 \tag{17}$$

综上

$$C_{mn} = \begin{cases} 4\dfrac{\cos(0.4m\pi)-\cos(0.6m\pi)}{m\pi}\dfrac{1}{10}, & n=0, \\ 4\dfrac{\cos(0.4m\pi)-\cos(0.6m\pi)}{m\pi}\dfrac{\sin(0.6n\pi)-\sin(0.4n\pi)}{n\pi}, & n\neq 0. \end{cases} \tag{18}$$

对于 $m \to +\infty$, $n \to +\infty$，$C_{mn} \sim 4/(mn\pi^2)$，按照解析结果计算在 $m = M$, $n = N$ 处截断可以获得 $\sim 1/(MN)$ 的精度，这一结果将作为衡量下面数值结果好坏的参考：

$$\begin{aligned} T(x,y,t) &\approx \sum_{m=1}^{M}\sum_{n=0}^{N} C_{mn}\sin(m\pi x)\cos(n\pi y)\mathrm{e}^{-(m^2+n^2)\pi^2 t} \\ &= 4\left(\sum_{m=1}^{M}\frac{\cos(0.4m\pi)-\cos(0.6m\pi)}{m\pi}\sin(m\pi x)\mathrm{e}^{-m^2\pi^2 t}\right) \\ &\quad \left(\frac{1}{10}+\sum_{n=1}^{N}\frac{\sin(0.6n\pi)-\sin(0.4n\pi)}{n\pi}\cos(n\pi y)\mathrm{e}^{-n^2\pi^2 t}\right) \end{aligned} \tag{19}$$

下面看数值方法。取 x 方向本征函数 $\sin(m\pi x)$ 对方程进行傅里叶展开得：

$$\tilde{T}_t = -m^2\pi^2\tilde{T} + \tilde{T}_{yy},\ \tilde{T}_m(y,t) := \int_0^1 T(x,y,t)\sin(m\pi x)\mathrm{d}x \tag{20}$$

显然由傅里叶逆变换我们有：

$$T(x,y,t) = 2\sum_{m=1}^{+\infty}\tilde{T}_m(y,t)\sin(m\pi x) \tag{21}$$

取 $m = 1, 2, \ldots, M$，省略 $\tilde{T}_m$ 的下标 m，将上述关系离散化就得到：

$$\frac{\tilde{T}_{l+1,n} - \tilde{T}_{l,n}}{\Delta t} = -m^2\pi^2\tilde{T}_{l,n} + \frac{\tilde{T}_{l,n-1} - 2\tilde{T}_{l,n} + \tilde{T}_{l,n+1}}{(\Delta y)^2} \tag{22}$$

进行 CN 修正后得：

$$\begin{aligned} &2\frac{\tilde{T}_{l+1,n} - \tilde{T}_{l,n}}{\Delta t} \\ =&-m^2\pi^2(\tilde{T}_{l,n} + \tilde{T}_{l+1,n}) + \frac{\tilde{T}_{l,n-1} - 2\tilde{T}_{l,n} + \tilde{T}_{l,n+1}}{(\Delta y)^2} + \frac{\tilde{T}_{l+1,n-1} - 2\tilde{T}_{l+1,n} + \tilde{T}_{l+1,n+1}}{(\Delta y)^2} \end{aligned} \tag{23}$$

整理得：

$$\begin{aligned} &-\frac{\tilde{T}_{l+1,n-1}}{(\Delta y)^2} + \left(\frac{2}{\Delta t} + \frac{2}{(\Delta y)^2} + m^2\pi^2\right)\tilde{T}_{l+1,n} - \frac{\tilde{T}_{l+1,n+1}}{(\Delta y)^2} \\ =&\frac{\tilde{T}_{l,n-1}}{(\Delta y)^2} + \left(\frac{2}{\Delta t} - \frac{2}{(\Delta y)^2} - m^2\pi^2\right)\tilde{T}_{l,n} + \frac{\tilde{T}_{l,n+1}}{(\Delta y)^2} \end{aligned} \tag{24}$$

为避免大数相减增大误差，将上式化为：

$$\begin{aligned} &-\frac{\Delta t}{2(\Delta y)^2}\tilde{T}_{l+1,n-1} + \left(1 + \frac{\Delta t}{(\Delta y)^2}\left(1 + \frac{(m\pi\Delta y)^2}{2}\right)\right)\tilde{T}_{l+1,n} - \frac{\Delta t}{2(\Delta y)^2}\tilde{T}_{l+1,n+1} \\ =&\frac{\Delta t}{2(\Delta y)^2}\tilde{T}_{l,n-1} + \left(1 - \frac{\Delta t}{(\Delta y)^2}\left(1 + \frac{(m\pi\Delta y)^2}{2}\right)\right)\tilde{T}_{l,n} + \frac{\Delta t}{2(\Delta y)^2}\tilde{T}_{l,n+1} \end{aligned} \tag{25}$$

令 $C = \Delta t/(\Delta y)^2$，$K_m = m\pi\Delta y$，得到：

$$\begin{aligned} &-\frac{C}{2}\tilde{T}_{l+1,n-1} + \left(1 + C\left(1 + \frac{K_m^2}{2}\right)\right)\tilde{T}_{l+1,n} - \frac{C}{2}\tilde{T}_{l+1,n+1} \\ =&\frac{C}{2}\tilde{T}_{l,n-1} + \left(1 - C\left(1 + \frac{K_m^2}{2}\right)\right)\tilde{T}_{l,n} + \frac{C}{2}\tilde{T}_{l,n+1} \end{aligned} \tag{26}$$

考虑边界条件 $\tilde{T}_y\big|_{y=0} = \tilde{T}_y\big|_{y=1} = 0$，这表明：

$$\tilde{T}_{l,0} = \tilde{T}_{l,1},\ \tilde{T}_{l,N-1} = \tilde{T}_{l,N} \tag{27}$$

故 $n = 1$ 时，方程化为：

$$\left(1 + \frac{C}{2}(1 + K_m^2)\right)\tilde{T}_{l+1,n} - \frac{C}{2}\tilde{T}_{l+1,n+1} = \left(1 - \frac{C}{2}(1 + K_m^2)\right)\tilde{T}_{l,n} + \frac{C}{2}\tilde{T}_{l,n+1} \tag{28}$$

故 $n = N - 1$ 时，方程化为：

$$-\frac{C}{2}\tilde{T}_{l+1,n-1} + \left(1 + \frac{C}{2}(1 + K_m^2)\right)\tilde{T}_{l+1,n} = \frac{C}{2}\tilde{T}_{l,n-1} + \left(1 - \frac{C}{2}(1 + K_m^2)\right)\tilde{T}_{l,n} \tag{29}$$

假定 $N \geq 3$，由此得到了三对角方程组的三组系数：

$$
\begin{aligned}
d_n &= \begin{cases} 1 + \dfrac{C}{2}(1+K_m^2), & n = 1 \text{ or } n = N-1, \\ 1 + C\left(1 + \dfrac{K_m^2}{2}\right), & n = 2, 3, \dots, N-2. \end{cases} \\
a_n &= -\frac{C}{2},\ n = 2, 3, \dots, N-1 \\
b_n &= -\frac{C}{2},\ n = 1, 3, \dots, N-2
\end{aligned}
\tag{30}
$$

以及右端系数：

$$
r_n = \frac{C}{2}\tilde{T}_{l,n-1} + \left(1 - C\left(1 + \frac{K_m^2}{2}\right)\right)\tilde{T}_{l,n} + \frac{C}{2}\tilde{T}_{l,n+1},\ n = 1, 2, \dots, N-1 \tag{31}
$$

对于 $m = 1, 2, \dots, M$，它们的迭代是完全独立的，因而可以在多个逻辑运算核心上同时进行。每次迭代求解一 $(N-1)$ 元三对角方程组便可实现由 $\tilde{T}_m(y, t_l)$ 算出 $\tilde{T}_m(y, t_{l+1})$，连续迭代 L 次便实现了从 $\tilde{T}_m(y, 0)$ 算出直至 $\tilde{T}_m(y, t_L)$ 的各个时刻的谱。由 $\tilde{T}$ 的定义知：

$$
\tilde{T}(y, 0) = \int_0^1 T(x, y, 0)\sin(m\pi x)\mathrm{d}x = \begin{cases} 0, & |y - 0.5| \geq 0.1, \\ \dfrac{\cos(0.4m\pi) - \cos(0.6m\pi)}{m\pi}, & |y - 0.5| < 0.1. \end{cases} \tag{32}
$$

由此确定了 $\tilde{T}_{0,n} = \tilde{T}(y_n, 0),\ \forall n \in \{0, 1, \dots, N\}$。至此 $T(x, y_n, t_l)$ 已全部解出：

$$
T(x, y_n, t_l) \approx 2\sum_{m=1}^{M} \tilde{T}_m(y_n, t_l)\sin(m\pi x) \tag{33}
$$

按照解析结果，我们有：

$$
\begin{aligned}
\tilde{T}_m(y_n, t_l) \approx\ & 2\left(\frac{\cos(0.4m\pi) - \cos(0.6m\pi)}{m\pi}\right)\mathrm{e}^{-m^2\pi^2 t_l} \\
& \left(\frac{1}{10} + \sum_{n'=1}^{N} \frac{\sin(0.6n'\pi) - \sin(0.4n'\pi)}{n'\pi}\cos(n'\pi y_n)\mathrm{e}^{-n'^2\pi^2 t_l}\right)
\end{aligned}
\tag{34}
$$

这一理论结果也将作为衡量谱数值结果准确性的参照。

程序 diff/diff.c 实现了以 $\tilde{T}_m(y_n, t_l)$（对应变量 `TT[m][l][n]`，便于按照 C 语言的数组存储方式进行局部性优化）迭代求出各个时刻格点函数值 $T(x_m, y_n, t_l)$（对应变量 `T[m][l][n]`）的傅里叶谱方法。文本文件 diff/param.txt 给出了我实验中得到的不同 t 区间以较小的计算量得到光滑函数曲面的推荐参数取值。组图 3 至 6 给出了程序运算结果的可视化图像，为方便比对，图 4 至 6 的第一幅图均为上一组图的最后一幅图的重复。组图 7 给出了根据公式 (19) 按照 x 和 y 方向各傅里叶展开至 $M = N = 65536$ 阶得到的参考图像，组图 8 给出了谱方法相对其的偏差。

图 3 描绘了从底面为正方形的长方体初值到底面近似为圆形的锥筒形函数曲面形状的演化过程。$t = 0$ 时的图像与标准的长方体有一定差别，这是由于傅里叶展开在 $M = 128$ 处截断所致。特别是在长方体四个侧面附近，由于高频信息的丢失，图像上出现了一些尖刺或孔洞。增大 M 将改善这一幅图的质量，但也将几乎是线性地延长计算时间。从公式 (19) 我们看到，高频部分随时间衰减得比低频分量快得多，后面也将看到，即使是在 $M = 128$ 处截断，已经可以得到非常准确的数值结果。

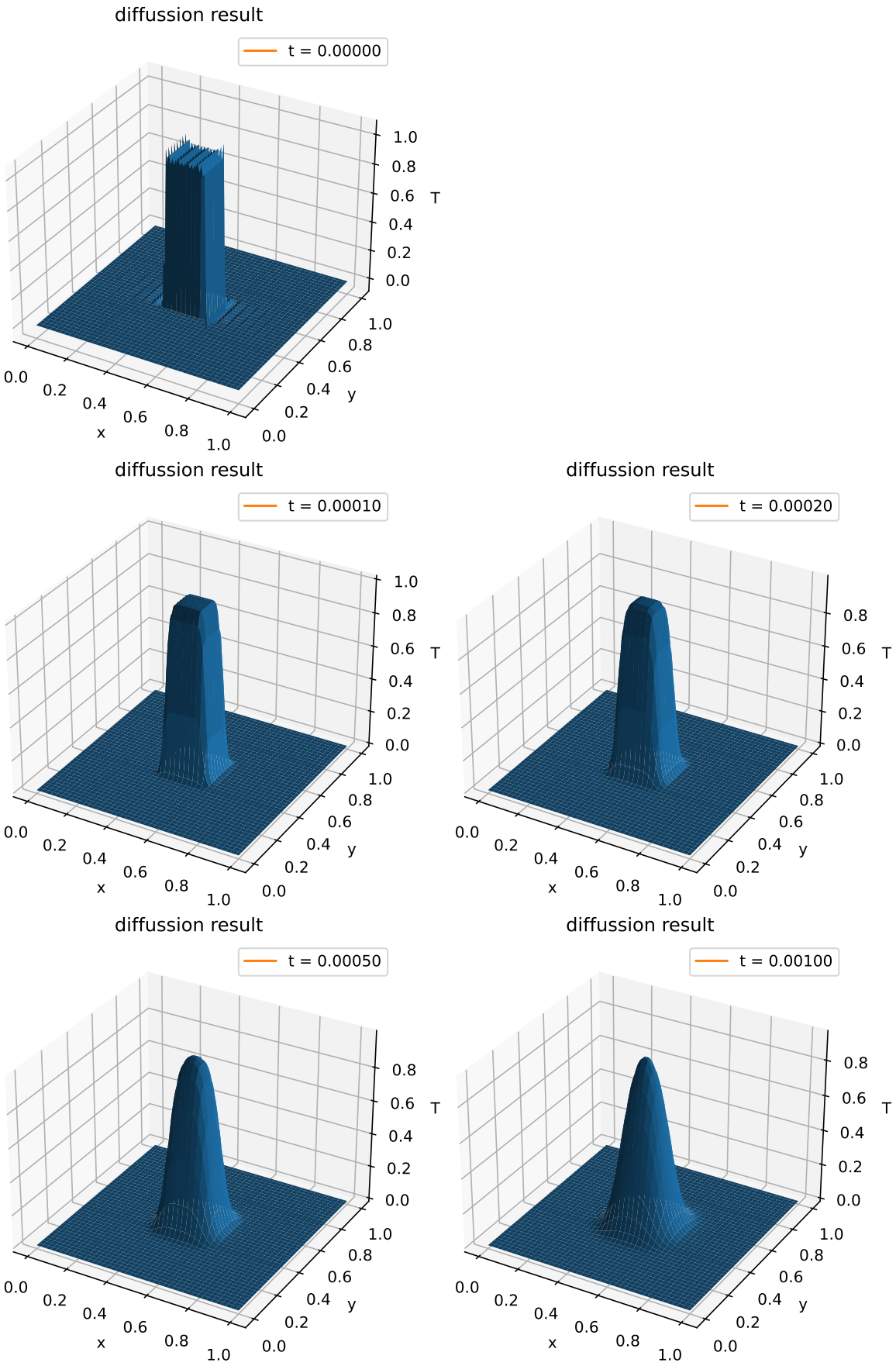

图 3: 扩散方程谱方法数值结果（$0 \le t \le 0.001$）

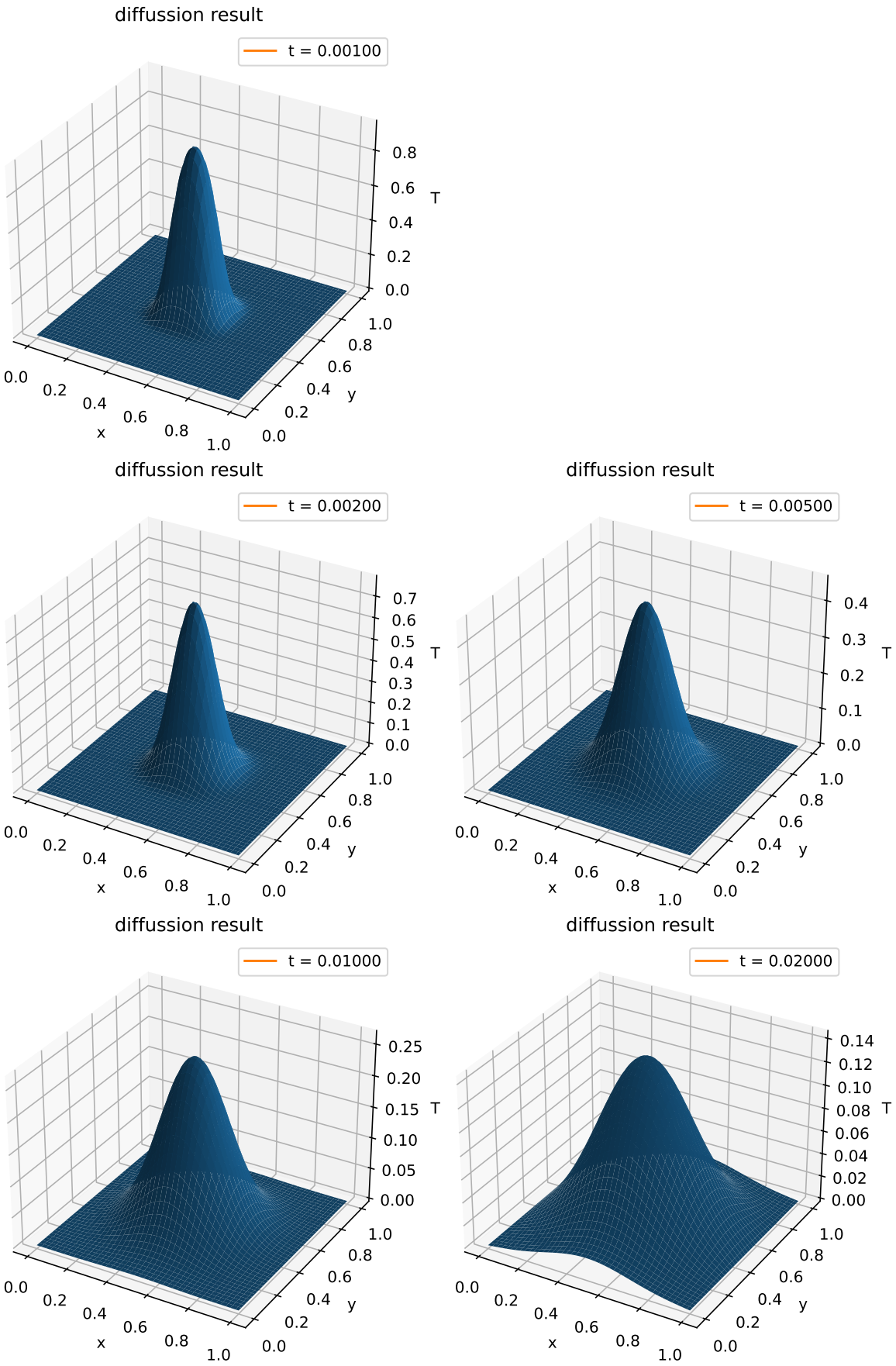

图 4: 扩散方程谱方法数值结果（$0.001 \leq t \leq 0.02$）

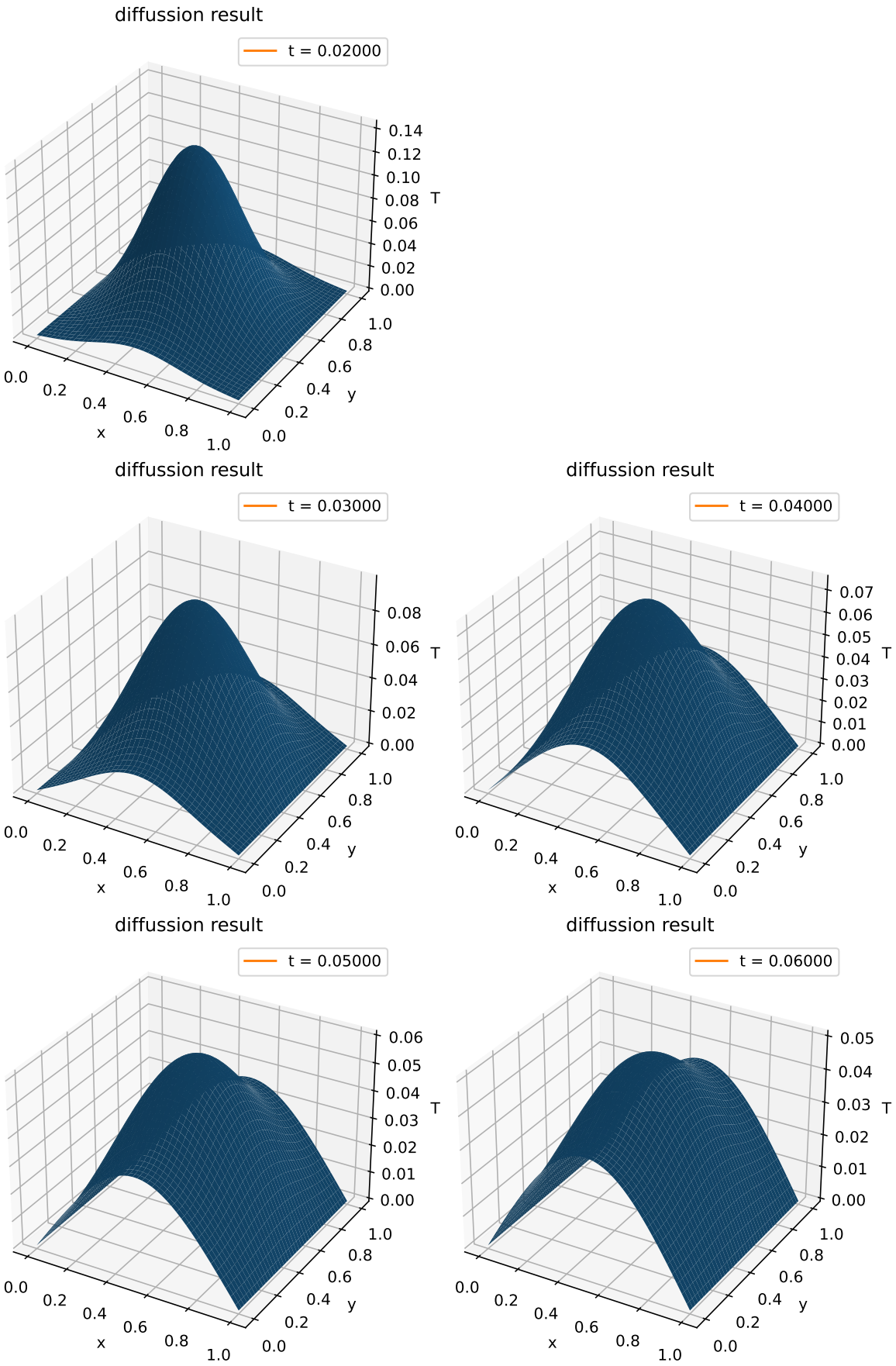

图 5: 扩散方程谱方法数值结果（$0.02 \leq t \leq 0.06$）

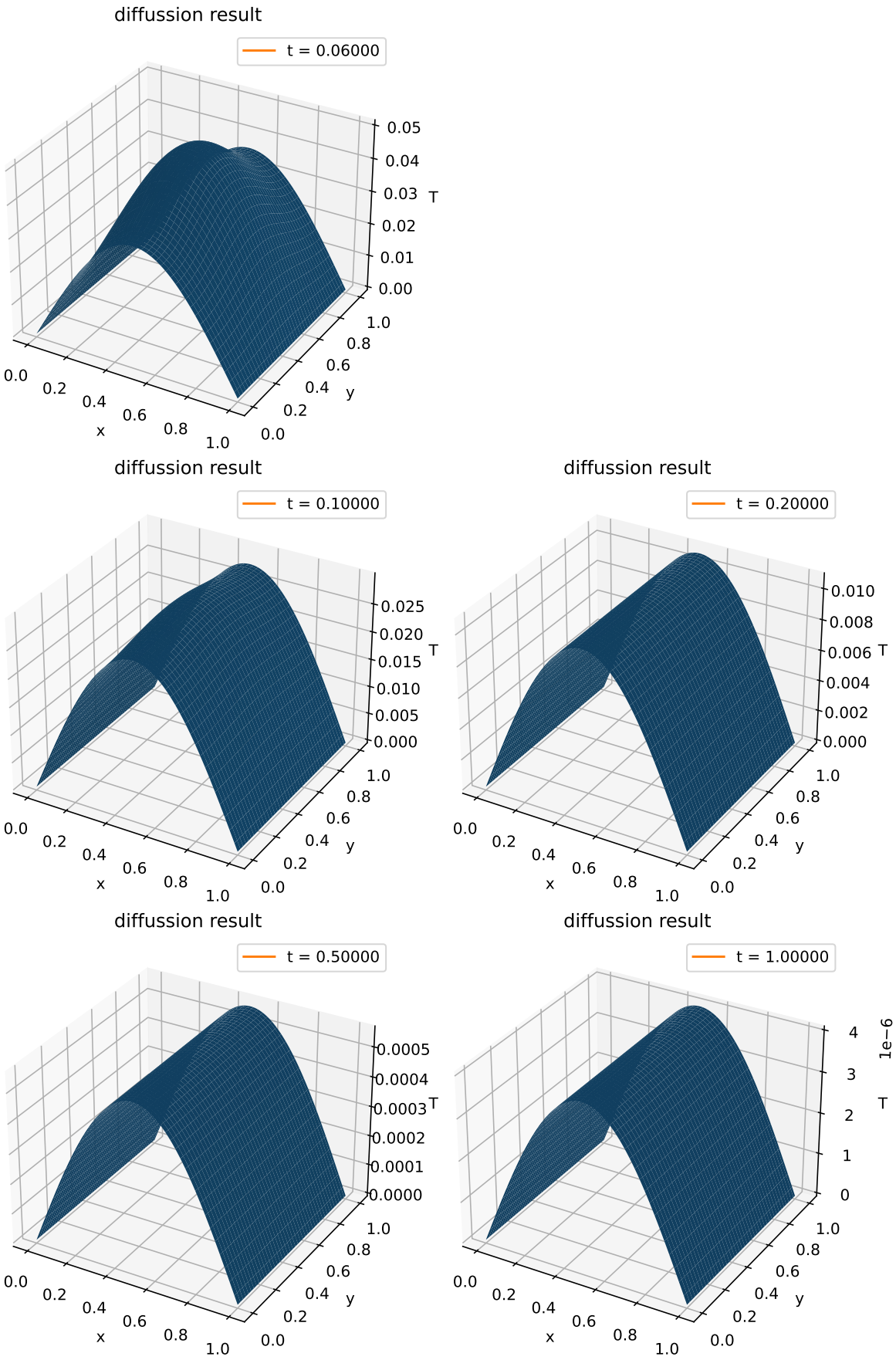

图 6: 扩散方程谱方法数值结果（$0.06 \leq t \leq 1.0$）

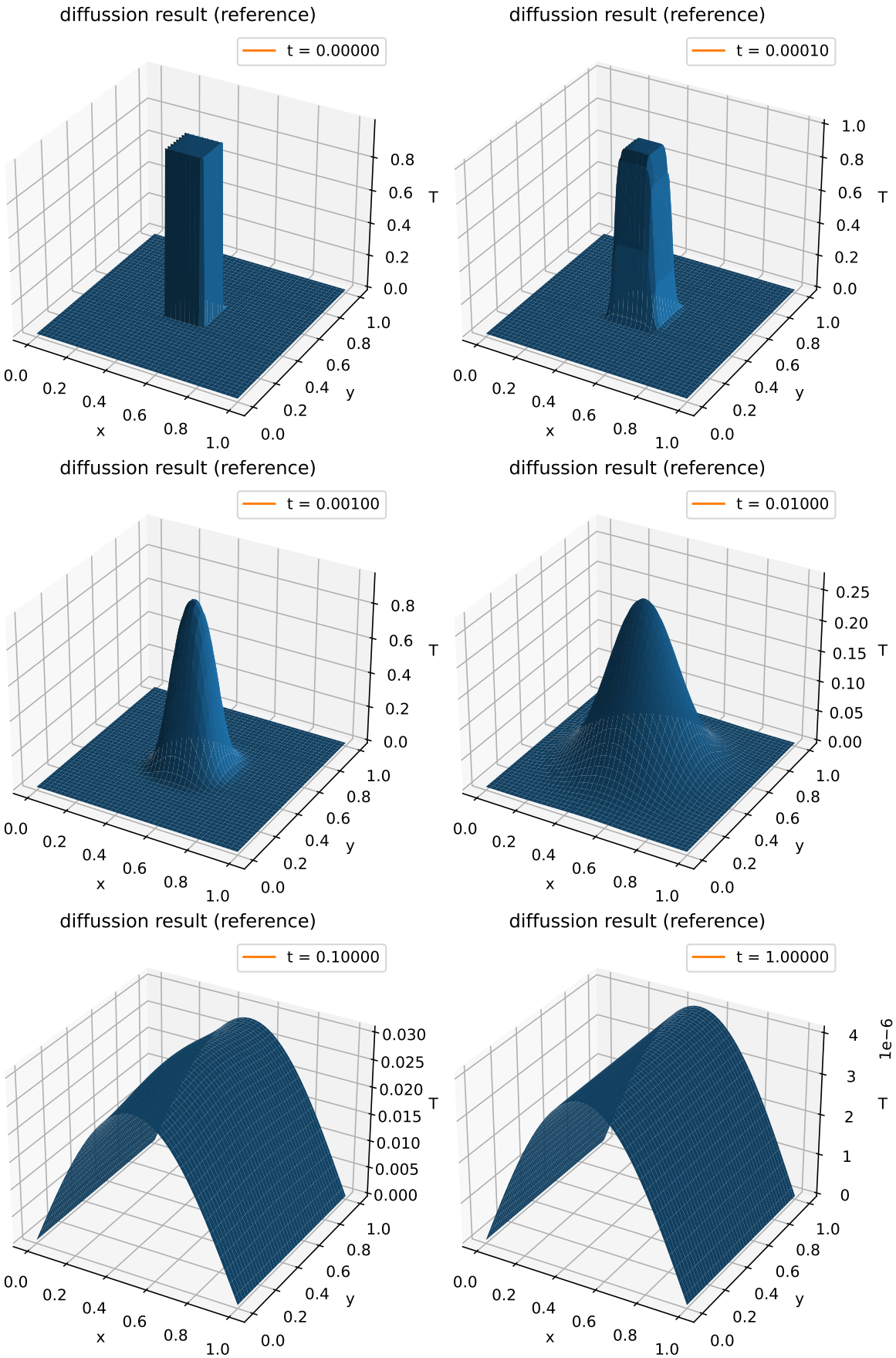

图 7: 扩散方程分离变量法数值结果（$M = N = 65536$，忽略误差，作为参考值）

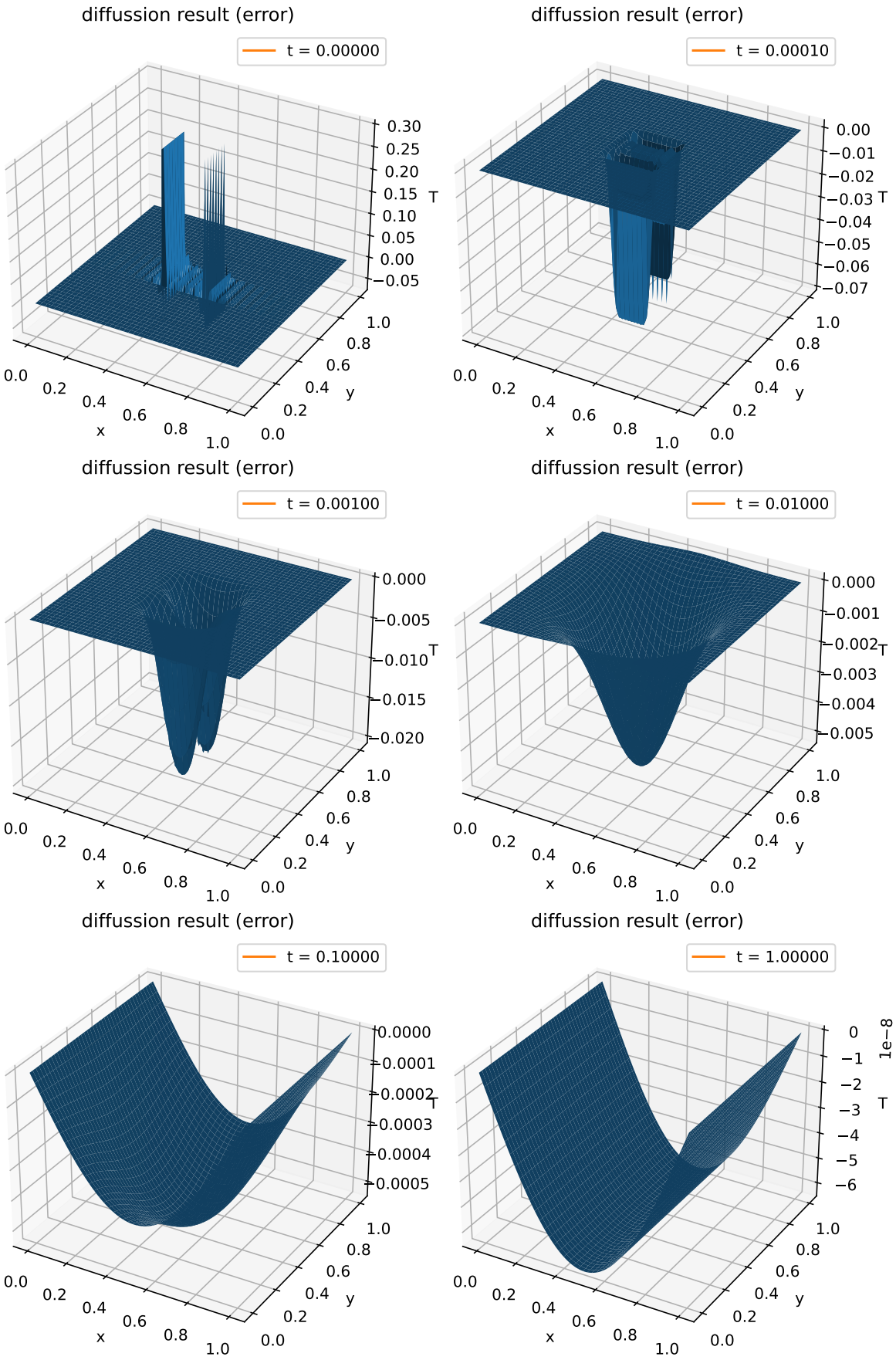

图 8: 扩散方程谱方法相对分离变量法（参考值）的偏差

本题的边界条件决定了热量将沿 $x=0$ 和 $x=1$ 两边界不断外流，而 $y=0$ 和 $y=1$ 两边界是绝热的。由此可以断定，在 $t=0.001$ 时我们从图中看到的旋转对称性必定是暂时的、近似的，是边界效应尚未显现的结果。图 4 给出了这一近似的对称性破坏的演化过程。由于热量不能从 $y=0$ 和 $y=1$ 两边界流出，此处积累的热量使得曲面于 $t=0.02$ 左右开始显著上升；$x=0$ 和 $x=1$ 处由于边界条件的限制曲面保持零值，与之形成鲜明对比。

图 5 和 6 给出了随着时间增长，由于 $x=0$ 和 $x=1$ 边界的绝热性，温度在 y 方向上趋于平均；而由于 $y=0$ 和 $y=1$ 边界的零温条件，热量不断在此外流而温度曲面在 x 方向上过渡到正弦特征的演化过程。理论结果表明：

$$\begin{aligned} T(x,y,t) &= 4\left(\sum_{m=1}^{+\infty}\frac{\cos(0.4m\pi)-\cos(0.6m\pi)}{m\pi}\sin(m\pi x)\mathrm{e}^{-m^2\pi^2 t}\right) \\ &\quad \left(\frac{1}{10}+\sum_{n=1}^{+\infty}\frac{\sin(0.6n\pi)-\sin(0.4n\pi)}{n\pi}\cos(n\pi y)\mathrm{e}^{-n^2\pi^2 t}\right) \\ &\sim \frac{2}{5}\frac{\cos(0.4\pi)-\cos(0.6\pi)}{\pi}\sin(\pi x)\mathrm{e}^{-\pi^2 t},\ t\to+\infty \end{aligned} \tag{35}$$

从图 6 中看到，$t=1$ 时，曲线已经非常接近上述渐进结果：除了给定边界条件下的最低空间频率，其余高频分量由于衰减快得多可以忽略不计。

定性比较以上曲线与图 7 中的结果，它们在肉眼可见的精度下一致，这验证了数值结果的精确性和截断条件选取的合理性。纵观图 8 中的误差结果（将图 7 中的结果视为精确值），除 $t=0$ 外，其余图像均表明，谱方法得到的结果相比理论结果偏小。其中最主要的原因可能是：CN 算法对方程 (7) 右端拉普拉斯结果的近似为 $t=t_l$ 和 $t=t_{l+1}$ 时的算数平均值，由于 T 函数不同空间频率分量相对时间而言都是指数衰减的下凸函数，其时间导数的绝对值亦是如此，故真实的 $|T_t|$ 必定小于上面的近似结果。这使得每次迭代 T 的衰减量被高估，是造成图 8 中呈现结果的主要系统误差。此外，傅里叶展开的截断和数值精度等也是误差来源的一部分。

III. 二维振动方膜

本题的方程和定解条件为：

$$\begin{aligned} &u_{tt}=u_{xx}+u_{yy},\ 0<x<1,\ 0<y<1 \\ &u\big|_{t=0}=\sin(\pi x)\sin(2\pi y),\ u_t\big|_{t=0}=0 \\ &u\big|_{x=0}=u\big|_{x=1}=0,\ u\big|_{y=0}=u\big|_{y=1}=0 \end{aligned} \tag{36}$$

与上题一样，设：

$$u(x,y,t)=\psi(x,y)\varphi(t);\ \psi_{mn}(x,y):=\sin(m\pi x)\sin(n\pi y);\ m,n=1,2,... \tag{37}$$

代入原方程得：

$$\varphi_{tt}=-(m^2+n^2)\pi^2\varphi\ \Rightarrow\ \varphi_{mn}=A_{mn}\sin(\sqrt{m^2+n^2}\pi t)+B_{mn}\cos(\sqrt{m^2+n^2}\pi t) \tag{38}$$

所以：

$$u(x,y,t)=\sum_{m=1}^{+\infty}\sum_{n=1}^{+\infty}(A_{mn}\sin(\sqrt{m^2+n^2}\pi t)+B_{mn}\cos(\sqrt{m^2+n^2}\pi t))\sin(m\pi x)\sin(n\pi y) \tag{39}$$

代入初条件得：

$$u(x,y,t)=\cos(\sqrt{5}\pi t)\sin(\pi x)\sin(2\pi y) \tag{40}$$

下面看数值算法。首先将方程格点化为：

$$\begin{aligned}&\frac{u_{l-1,m,n}-2u_{l,m,n}+u_{l+1,m,n}}{(\Delta t)^2}=\frac{u_{l,m-1,n}-2u_{l,m,n}+u_{l,m+1,n}}{(\Delta x)^2}\\&+\frac{u_{l,m,n-1}-2u_{l,m,n}+u_{l,m,n+1}}{(\Delta y)^2};\ l=1,\dots,L-1;\ m=1,\dots,M-1;\ n=1,\dots,N-1\end{aligned} \tag{41}$$

由此立即得出：

$$\begin{aligned}&u_{l+1,m,n}=2u_{l,m,n}-u_{l-1,m,n}\\&+\frac{(\Delta t)^2}{(\Delta x)^2}(u_{l,m-1,n}-2u_{l,m,n}+u_{l,m+1,n})+\frac{(\Delta t)^2}{(\Delta y)^2}(u_{l,m,n-1}-2u_{l,m,n}+u_{l,m,n+1})\end{aligned} \tag{42}$$

由初条件知：

$$u_{0,m,n}=u_{1,m,n}=u(x_m,y_n,0)=\sin(\pi x_m)\sin(2\pi y_n);\ m=1,\dots,M-1;\ n=1,\dots,N-1 \tag{43}$$

由边条件知：

$$u_{l,0,n}=u_{l,m,0}=u_{l,M,n}=u_{l,m,N}=0;\ l=0,\dots,L;\ m=0,\dots,M;\ n=0,\dots,N \tag{44}$$

显然初条件和边条件完备地包含了 $t=t_0$ 和 $t=t_1$ 时各格点处的函数值。以从 $t=t_0$ 和 $t=t_1$ 计算 $t=t_2$ 时的函数值为例，在式 (42) 中令 $l=1$，取 $m=1,\dots,M-1$; $n=1,\dots,N-1$，算出各内点处的 $u_{2,m,n}$；由边条件知，所有边界点处的函数值均为 0，至此 $t=t_2$ 时所有格点处的函数值全部求出。$t=t_3,\dots,t_L$ 的情形类似。实际上，在计算中，只需将边界点函数值初始化为零，之后便无需再次写零。

程序 vibra/vibra.c 实现了这一迭代算法。其中 vibra/vibra.c#L30-L44 实现了初条件写入和边条件的一次性写入。在后续迭代步骤中，各边界格点的零值保持不变，边条件自动维持。vibra/vibra.c#L58-L70 按照公式 (42) 实现了由前两个时刻（`u0` 和 `u1`）推出下一时刻（`u2`）函数值的迭代过程。

vibra/vibra.gif 给出了 $\lambda=1$, $\Delta x=\Delta y=2^{-7}$, $\Delta t=2^{-10}$ 时的数值结果动画演示。读者可以点击链接下载查看。如无法正常点击链接，请使用下面这个 GitHub 地址：

https://github.com/lyazj/numphy-05/raw/main/vibra/vibra.gif

定义参数

$$\mathrm{TS}=\sqrt{\lambda}\Delta t\sqrt{(\Delta x)^{-2}+(\Delta y)^{-2}} \tag{45}$$

由数值稳定性分析结果知 $\mathrm{TS}\le 1$ 为本问题数值稳定的条件。对于 $\lambda=1$, $\Delta x=\Delta y=2^{-7}$, $\Delta t=2^{-10}$，如动画中所示，$\mathrm{TS}=0.17678<1$，满足数值稳定性条件。

组图 9 至 11 给出了 $\lambda=1$, $\Delta x=\Delta y=2^{-7}$, $\Delta t=2^{-10}$ 时振动方膜曲面随时间演化的数值结果和相较公式 (40) 的理论结果的误差曲面。在所有的情形中，误差函数的绝对值均比振动函数的绝对值小一个量级以上，这说明数值结果较为精确。组图 12 给出了其它各种参数设定下 $\mathrm{TS}>1$ 的情形，它们均得到发散结果；当 $\mathrm{TS}=1$ 时，结合参考值和误差曲面知，数值结果也是稳定的。这些结果验证了 $\mathrm{TS}\le 1$ 的数值稳定条件。

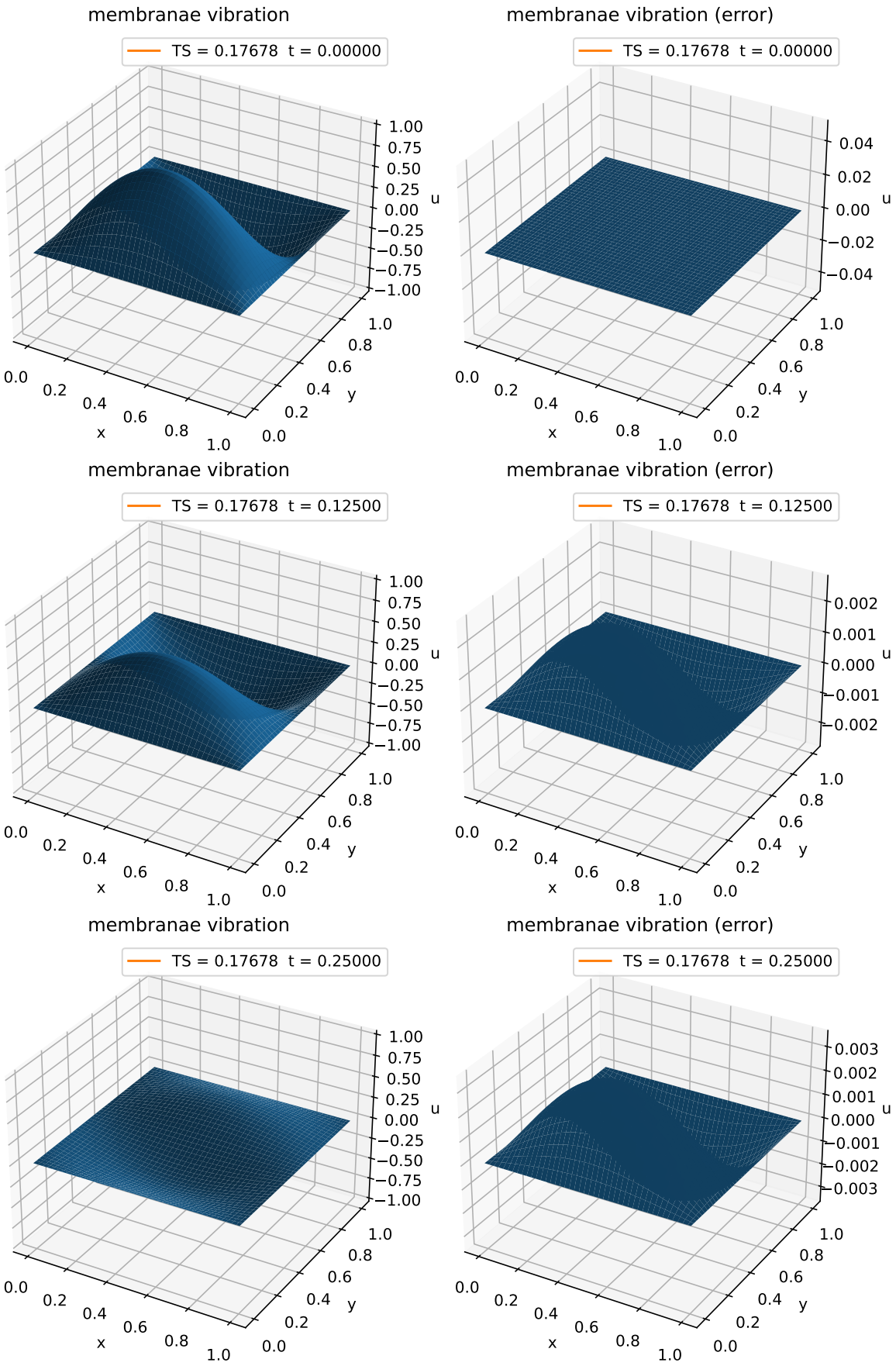

图 9: 振动方膜数值结果和误差曲面（$0 \leq t \leq 0.25$）

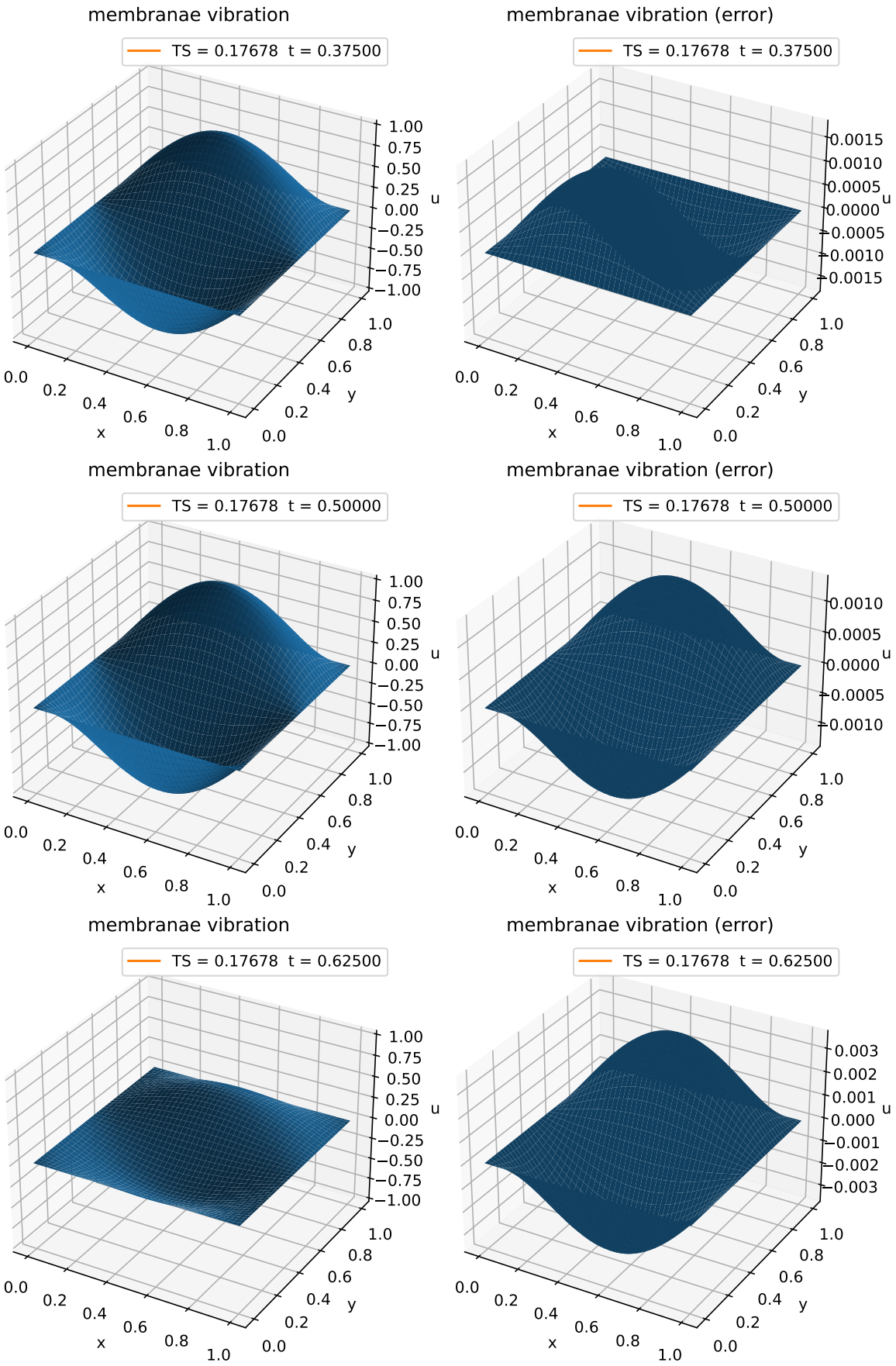

图 10: 振动方膜数值结果和误差曲面（$0.375 \leq t \leq 0.625$）

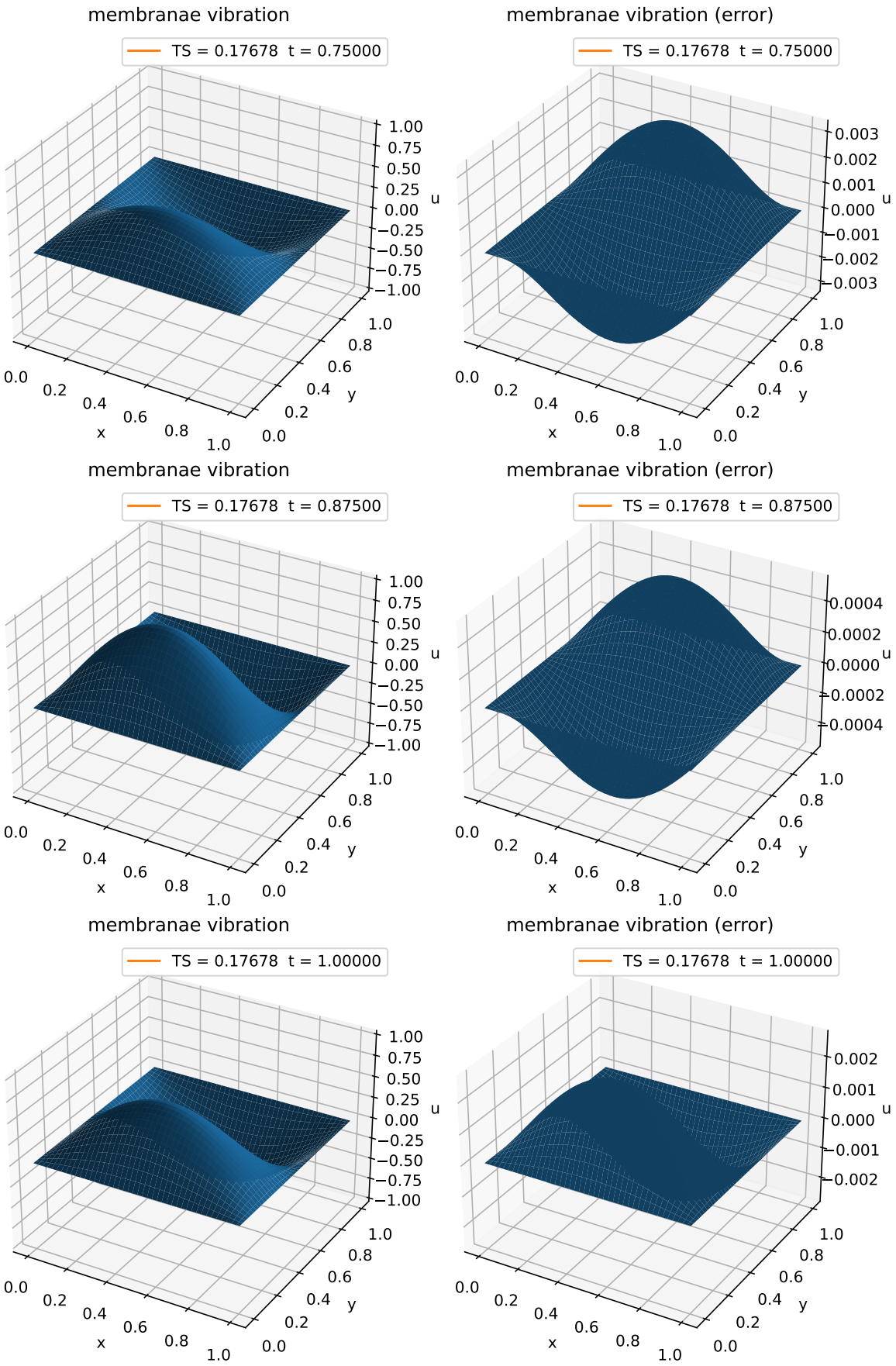

图 11: 振动方膜数值结果和误差曲面（$0.75 \leq t \leq 1$）

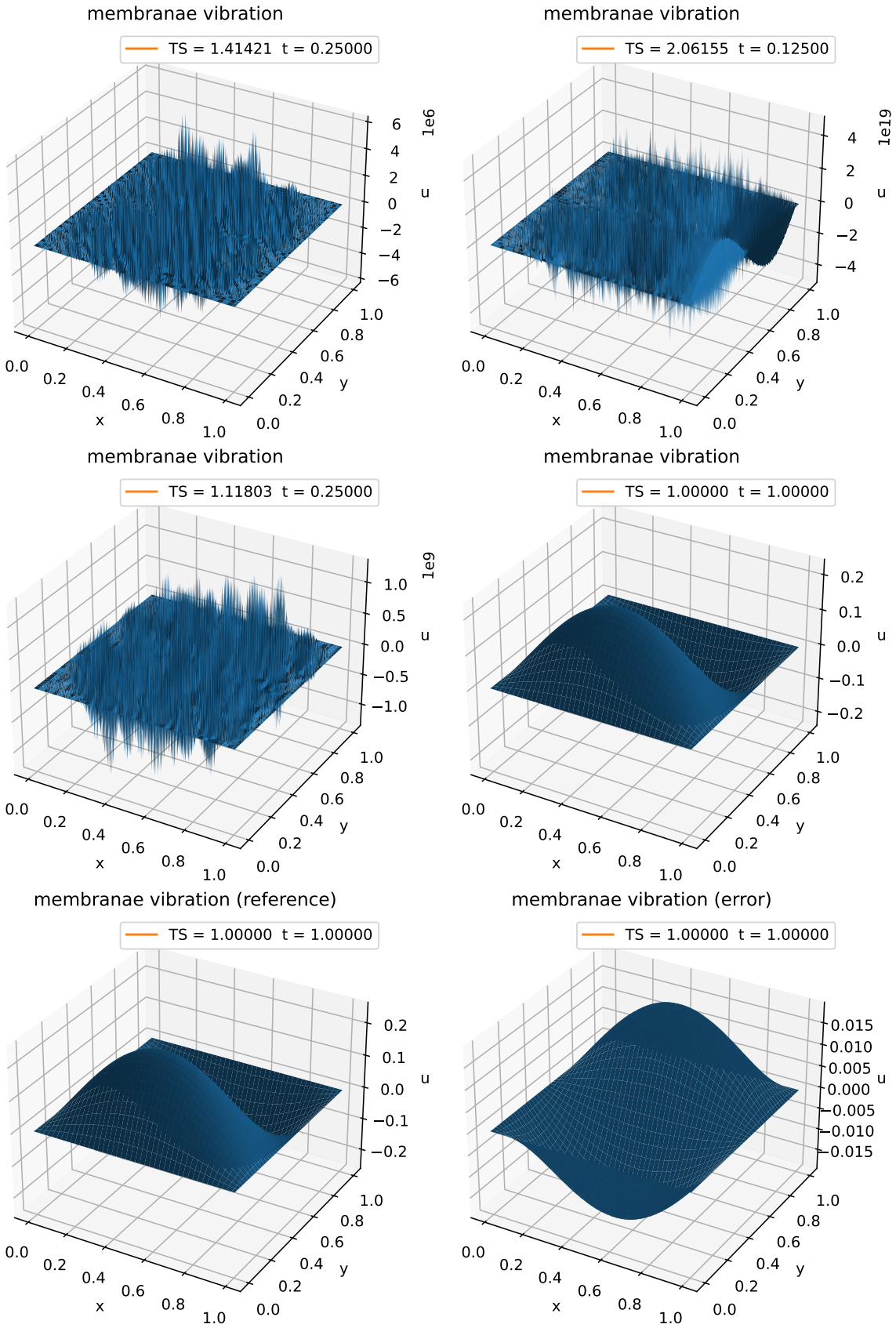

图 12: 振动方膜数值结果和误差曲面。从上到下，从左到右，各图参数设定：(1) $\lambda = 1$, $\Delta x = \Delta y = 2^{-7}$, $\Delta t = 2^{-7}$；(2) $\lambda = 1$, $\Delta x = 2^{-9}$, $\Delta y = 2^{-7}$, $\Delta t = 2^{-8}$；(3) $\lambda = 1$, $\Delta x = 2^{-7}$, $\Delta y = 2^{-8}$, $\Delta t = 2^{-8}$；(4)(5)(6) $\lambda = 0.5$, $\Delta x = 2^{-7}$, $\Delta y = 2^{-7}$, $\Delta t = 2^{-7}$。

IV. 随机数均匀性检验

程序 rand/rand.c 使用命令行参数或 `time(0)` 与 `getpid()` 的 XOR 作为随机数种子初始化随机数产生器，以 C 库函数 `drand48()` 产生在 $[0,1)$ 区间均匀分布的 `double` 类型的随机数。程序设定仅设定一次种子（因为这种算法的随机数周期足够长），共重复 $R=10000$ 次实验，每次产生 $N=10000$ 个随机数，分别统计 R 次实验中落入 $[0.3,0.4)$ 等区间的随机数个数。

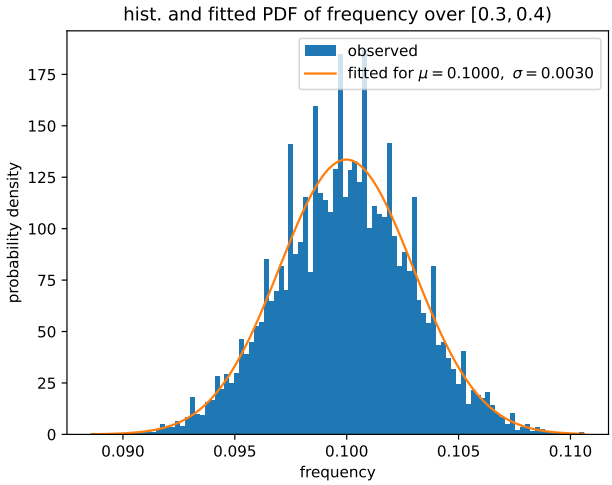

图 13: $R=10000$ 次实验中落入 $[0.3,0.4)$ 区间内的随机数频率在直方图区间内的概率密度分布观测值和正态分布概率密度函数（PDF）拟合结果。PDF 拟合所用的样本、平均值和方差值由观测数据的直方图得到。图示结果对应种子值 1670725183。

每次试验产生 N 个随机数，在随机数均匀性假设的前提下，落入 $[0.3,0.4)$ 区间的频数分布为二项分布 $B(N,0.1)$，其平均值为 $0.1N$，标准差为 $0.3\sqrt{N}$。在中心极限定理的作用下，N 充分大时，这一分布趋向于与原平均值和标准差相同的正态分布，当 $N=10000$ 时，其参数为：

$$\mu=0.1N=1000,\ \sigma=0.3\sqrt{N}=30 \tag{46}$$

将频数除以 N 就得到频率，则频率分布也遵循正态分布，其参数为：

$$\mu=0.1N/N=0.1,\ \sigma=0.3\sqrt{N}/N=0.003 \tag{47}$$

这便是图 13 中所显示的结果。从这一结果粗略看来，`drand48()` 函数产生的浮点随机数均匀性非常好，使得 $R=10000$ 次试验观测到的 $[0.3,0.4)$ 区间的频率分布与理论值完全符合。

设每次产生 $N=10000$ 个随机数的试验中 10 个区间频数分别为 $n_1,n_2,\ldots n_{10}$，按照定义可以算出 χ^2 值：

$$\chi^2=\sum_{i=1}^{10}\frac{(n_i-1000)^2}{1000} \tag{48}$$

图 14 给出了这 $R=10000$ 次实验的 χ^2 值对应的直方图及其 χ^2 拟合曲线。其中自由度 $\mathrm{df}=9$ 为区间数 10 减去各区间频数和为 N 的限制条件得到。χ^2 值的分布与 $\chi^2(\mathrm{df}=9)$ 分布曲线符合得非常好，这很好地验证了函数 `drand48()` 产生的随机数的随机性假设。

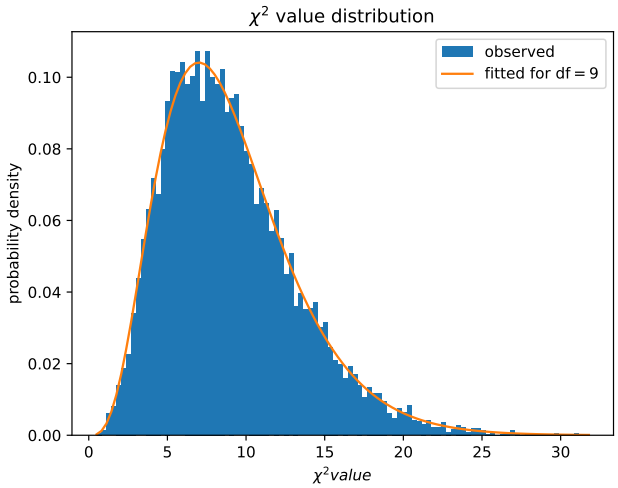

图 14: $R = 10000$ 次实验的 χ^2 值在直方图区间内的概率密度分布观测值和自由度 $\mathrm{df} = 9$ 的 χ^2 分布函数拟合结果。PDF 拟合所用的样本由观测数据的直方图得到。图示结果对应种子值 1670725183。

具体地，χ^2 值的分布与 $\chi^2(\mathrm{df} = 9)$ 符合是基于随机数在 10 个等长区间中的频数分布均为 $\mu = 1000$ 的正态分布的假设，后者又是基于中心极限定理和随机数的均匀性假设。我们前面已经说明，只有在随机数均匀性假设成立的前提下，才有上述“10 个独立的二项分布，均有 $p = 0.1$”→“10 个独立的正态分布，均有 $\mu = 1000$”→“$\mathrm{df} = 9$ 的 χ^2 分布”这样的逻辑链条。所以，χ^2 值的分布与 $\chi^2(\mathrm{df} = 9)$ 的符合能够有力地验证随机数的均匀性假设。

最后进行一次 χ^2 检验。取 $\mathrm{CL} = 95\%$，查表得到在自由度 $\mathrm{df} = 9$ 时单次试验有 95% 的把握获得 $\chi^2 < 16.92$。不传入种子值再次运行程序 rand/rand.c，程序根据时间和进程号算出种子值 1670711335，得到的第一组试验数据为：

1030	974	979	1025	1008	964	1010	998	1008	1004

按照式 (48) 算得 $\chi^2 = 4.186 < 16.92$，这一结果在 $\mathrm{CL} = 95\%$ 的置信水平上肯定了函数 `drand48()` 产生的随机数的随机性假设。

A 项目源代码

参见 `https://github.com/lyazj/numphy-05`。