

在有限区间中用FFT求微分 方程数值解的几个问题*

陈 德 明

(应用物理系)

摘 要 本文讨论了在有限区间中运用FFT求解微分方程数值解时遇到的几个问题, 并提出了解决方法。

关键词 微分方程, 数值解, 快速付里叶变换

分类号 O241.8, O174.22

引 言

有些微分方程的形式较为复杂, 解起来比较困难。比如下面形式的微分方程

$$\frac{df}{dx} = \int_{-\infty}^{\infty} S(x-x')g(x')dx' \quad (1)$$

就是这种情况。而经过付里叶变换后, 则形式

$$ikF(k) = S(k)G(k) \quad (2)$$

较为简单, 其中 $F(k)$ 、 $S(k)$ 、 $G(k)$ 分别是函数 $f(x)$ 、 $s(x)$ 、 $g(x)$ 的付里叶变换。通过对微分方程作付里叶变换, 求得未知函数在频域中的表达式, 再经付里叶逆变换, 即求得未知函数。因此, 付里叶变换方法是一种求解某类微分方程的有效途径。

为在计算机上实现这一方法, 必须采用离散付里叶变换(DFT)^[1]。为说明起见, 考虑下面常微分方程

$$\frac{df}{dx} = g(x) \quad x_0 \leq x \leq x_N \quad (3)$$

如果将 f 连续周期地延拓到 $(-\infty, +\infty)$, 则其付里叶变换为

$$ikF(k) = G(k) \quad (4)$$

在计算机上实现时, 先将区间分成 N 等分, 间距为 $\delta = (x_N - x_0) / N$, 求得在抽样点 $x_n = x_0 + n\delta$ ($n=0, 1, 2, \dots, N-1$)处的高散值 $g(x_n)$, 用快速付里叶变换(FFT)求得在频域中抽样点 k_m ($m=0, 1, 2, \dots, N-1$; $m < \frac{N}{2}$ 时 $k_m = \frac{2\pi m}{N\delta}$; $m > \frac{N}{2}$ 时 $k_m = -k_{N-m}$)上的一系

系列离散值 $G(k_m)$; 然后由(4)式求得 $F(k_m)$, 再作付里叶逆变换, 求得在 x_n 点上的一系列函数值 $f(x_n)$ 。然而, 在实际应用中, 会遇到下面几个问题。现逐个列出, 并提出解决方法。

1 问题和解决方法

1.1 求解问题一

首先, 离散付里叶变换要逼近连续付里叶变换, 除了要求采样点足够密外, 还要求函数连续。公式(4)是对连续函数的结果。我们求解方程时, 都是在有限区间内求解, 而在区间两个端点的值往往是不同的。因此, 当以区间长度对函数作周期性延拓时, 在整数倍周期处出现间断。此时, 对公式(4)要作修改。我们知道, 离散付里叶变换对是

$$F(k_m) = \sum_{n=0}^{N-1} f(x_n) e^{-i \frac{2\pi n m}{N}} \quad (5)$$

$$f(x_n) = \frac{1}{N} \sum_{m=0}^{N-1} F(k_m) e^{i \frac{2\pi n m}{N}} \quad (6)$$

它们对任何离散序列 $f(x_n)$ 都具有可逆性, 不管 $f(x)$ 在两端的值是否相等。根据(5)式, 可知导函数的离散付里叶变换为

$$\begin{aligned} \text{DFT} \left(\frac{df}{dx} \right)_{k_m} &= \sum_{n=0}^{N-1} \left. \frac{df}{dx} \right|_{x_n} e^{-i \frac{2\pi n m}{N}} \\ &= \sum_{n=0}^{N-1} \left. \frac{df}{dx} \right|_{x_n} e^{-i k_m (x_n - x_0)} \\ &= \sum_{n=0}^{N-1} \frac{d}{dx} [f(x) e^{-i k_m (x - x_0)}] \Big|_{x_n} + i k_m \sum_{n=0}^{N-1} f(x_n) e^{-i k_m (x_n - x_0)} \end{aligned} \quad (7)$$

(7)式右边第二个求和就是 $F(k_m)$, 第一个求和用矩形积分公式, 它近似等于 $[f(x_N) \cdot e^{-i k_m (x_N - x_0)} - f(x_0)] / \delta = [f(x_N) - f(x_0)] / \delta$, 所以

$$\text{DFT} \left(\frac{df}{dx} \right)_{k_m} = i k_m F(k_m) + [f(x_N) - f(x_0)] / \delta \quad (8)$$

即导函数的离散付里叶变换要加上一修正项。当函数两端的值相等时, 这一修正项为零。又根据矩形积分公式及方程式(3)可知

$$G(k_0) = \sum_{n=0}^{N-1} g(x_n) = \frac{1}{\delta} \int_{x_0}^{x_N} g(x) dx = [f(x_N) - f(x_0)] / \delta \quad (9)$$

所以方程式(3)的离散付里叶变换应修正为

$$i k_m F(k_m) = G(k_m) - G(k_0) \quad (10)$$

1.2 求解问题二

第二个问题是, 对实方程(3), 其解为实函数, 这意味着 $f(x_n)$ 的付里叶变换序列 $F(k_m)$ 应满足

$$F(k_m) = F^*(k_{N-m}) \quad (11)$$

星号*代表复共轭, 上式即表示实函数的离散付里叶变换序列的实部是关于 $N/2$ 的偶函数, 虚部是关于 $N/2$ 的奇函数。如果频域中的 N 个样本点都由(10)式来计算, 且对所有

m 取 $k_m = 2\pi m / N\delta$ 的话, 则显然不会满足(11)式。为使求得的结果正确, 我们必须只在 $m < \frac{N}{2}$ 时使用(10)式, 对 $m > \frac{N}{2}$ 时的样本点 $F(k_m)$ 应由(11)式来求。

在(7)式的推导中有: $e^{-ik_m(x_n - x_0)} = e^{-i(k_m - \frac{2\pi}{\delta})(x_n - x_0)} = e^{ik_{N-m}(x_n - x_0)}$, 因而导致有

$$\text{DFT}\left(\frac{df}{dx}\right)_{k_m} = [f(x_N) - f(x_0)]/\delta - ik_{N-m}F(k_m), \text{ 因此, } m > \frac{N}{2} \text{ 时有}$$

$$-ik_{N-m}F(k_m) = G(k_m) - G(k_0) \quad (12)$$

因对实函数 $g(x)$, 有 $G(k_m) = G^*(k_{N-m})$, 故由(10)、(12)式确定的 $F(k_m)$ 满足(11)式。

实际上, $m > \frac{N}{2}$ 时, $F(k_m)$ 应理解为负频率的结果, (12)式正是将(10)式中的 k_m 换成对应的负频率 $-k_{N-m}$ 的结果。

1.3 求解问题三

由(10)、(11)式不能求得序列 $F(k_m)$ 的全部, 其中 $F(k_0)$ 和 $F(k_{\frac{N}{2}})$ 不能求得, 因 $k_0 = 0$, 及 $F(k_{\frac{N}{2}})$ 应为实数。所以, 为完成付里叶逆变换, 应当另找方法求得。对于 $F(k_0)$, 可利用边界条件求得。因 $k_0 = 0$, 故

$$F(k_0) = \sum_{n=0}^{N-1} f(x_n) = \frac{1}{\delta} \int_{x_0}^{x_N} f(x) dx \quad (13)$$

如果给定上式中的积分(比如求电场时, 给定两端电位差), 则由上式可求得 $F(k_0)$ 。若给定在某点上的值 $f(x_i)$, 则可利用求得的 $F(k_m)$, ($m=1, 2, \dots, N-1$), 再由逆变换公式求得, 即

$$F(k_0) = Nf(x_i) - \sum_{m=0}^{N-1} F(k_m) e^{ik_m(x_i - x_0)} \quad (14)$$

关于 $F(k_{\frac{N}{2}})$ 的求法, 可根据 $F(k_m)$ 序列的对称性求得, 可取

$$F(k_{\frac{N}{2}}) = \frac{1}{2} [F(k_{\frac{N}{2}-1}) + F(k_{\frac{N}{2}+1})] = R_e[F(k_{\frac{N}{2}-1})] \quad (15)$$

它对结果的影响很小。

1.4 算例

解决了上述问题, 能求得比较正确的结果。为检验上述作法, 作者编了一个解下列方程的示例程序

$$\frac{df}{dx} = \left(\frac{x}{L} - \frac{1}{2}S\right)g \quad 0 \leq x \leq L \quad (16)$$

$$\int_0^L f(x) dx = -U \quad (17)$$

其中 L 、 S 、 g 为常数。容易求得在边界条件式(17)下方程式(16)的准确解是

$$f(x) = \left(\frac{x^2}{2L} - \frac{1}{2}Sx\right)g - \left[\frac{U}{L} + \frac{gL}{6}\left(1 - \frac{3}{2}S\right)\right] \quad (18)$$

将用付里叶变换求得的结果与上式比较, 就可检验其正确性。图1是 $N=128$, $L=$

12.8, $S=0, g=1.0, U=0$ 时的解。曲线1是根据(18)式描出的真实解, 曲线2是利用修正的(10)、(11)式计算的结果, 曲线3则是利用(4)、(11)式计算的结果。从图看出, 不作修正时求得的曲线3与真实解差距甚远, 而作了修正后求得的曲线2与真实解符合较好, 只是在区间端点有点振荡, 偏离真实解。这种振荡是付里叶变换所固有的吉布斯现象, 是由在两端函数的间断性引起的。当 $S=0$ 时, 由(18)式知, $f(0) \neq f(L)$ 。如果我们选择 $S=1$, 则函数 $f(x)$ 在两端的值相等。图2即是 $N=128, L=12.8, S=1.0, g=1, U=10$ 时的情况, 图中各曲线意义同图1, 可以看出, 这时数值求得的结果(曲线2和3)与真实解(曲线1)符合得很好, 并且不再存在吉布斯现象。曲线3之所以重合于曲线2是由于 $S=1$ 时, (10)式中的修正项实际上是零。上述参数及其它参数的算例表明, 我们的处理是正确的。

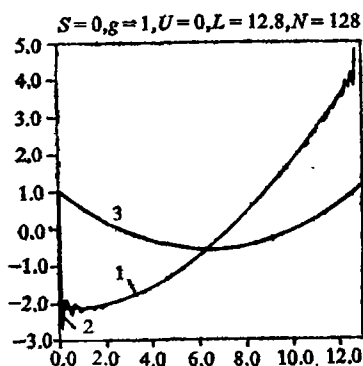


图 1

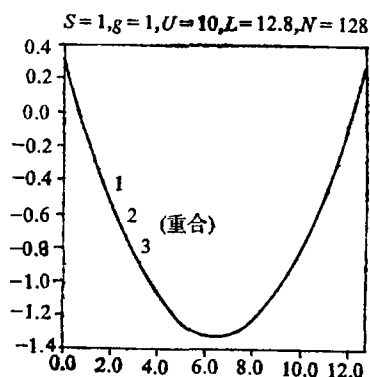


图 2

2. 结 论

综上所述, 在用快速付里叶变换求微分方程数值解时, 如果解在区间两端的值不相等, 则在对方程作离散付里叶变换时要注意修正, 并充分利用已知条件来求频域中的各分量, 这样才能得到较正确的结果。这些处理可以应用于各阶微分方程的求解。该方法作者已应用于理论计算研究工作中^[2]。

参 考 文 献

- [1] Brigham E O; 柳群译. 快速付里叶变换. 上海: 科学技术出版社, 1979
- [2] 陈德明, 王闯. 虚阴极振荡的粒子模拟. 承德: 全国第三届高功率粒子束学术交流会, 1988

Some Problems in Application of FFT to Finding Numerical Solutions of Differential Equations in Finite Interval

Chen Deming

Abstract

Some problems met in finding numerical solutions of differential equations by FFT method are discussed in this paper. The effective solutions to these problems are presented.

Key words: differential equation, numerical method, fast fourier transformation (FFT)