A diszkrét és gyors Fourier transzformáció, illetve ezen módszerek alkalmazása fizikai problémák számítógépes megoldásában

Bevezetés

A *lineáris* transzformációkat: a Fourier- és Laplace-transzformációt széles körben alkalmazzák a fizikában és a csillagászatban. Két példa:

- Változócsillagászat: `Ae UMA` fénygörbéje
- Röntgendiffrakció: archeológiai minták kiértékelése

A Fourier-transzformált definíciója és tulajdonságai

$f(x)$ **Fourier-transzformált**ja: $F(s) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-i2\pi xs} dx$.

Inverz transzformáció: $f(x) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} F(s) e^{i2\pi xs} ds$.

$e^{i\varphi} = \cos(\varphi) + i\sin(\varphi)$ felhasználásával:

$$F(s) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} f(x)\cos(2\pi xs)dx - i\int\limits_{-\infty}^{\infty} f(x)\sin(2\pi xs)dx$$

Ha f **páros** ($f(-x) = f(x)$), akkor:

$$F(s) = F_c(s) = 2\int\limits_{0}^{\infty} f(x)\cos(2\pi xs)dx$$

(*Cosinus Fourier-transzformált*).

Ha f **páratlan** ($f(-x) = -f(x)$), akkor:

$$F(s) = -iF_s(s) = -2i\int\limits_{0}^{\infty} f(x)\sin(2\pi xs)dx$$

(*Sinus Fourier-transzformált*).

Általában f se nem páros, se nem páratlan, de felbontható egy páros és egy páratlan függvény összegére: $f(x) = E(x) + O(x)$, ahol:

$$E(x) = \frac{1}{2}\left(f(x) + f(-x)\right),$$

$$O(x) = \frac{1}{2}\left(f(x) - f(-x)\right).$$

Jelölje $F_c^E(s)$ E Cosinus Fourier-transzformáltját, $F_s^O(s)$ pedig O Sinus Fourier-transzformáltját.
A transzformáció linearitását felhasználva a f Fourier-transzformáltja:

$$F(s) = F_c^E(s) - iF_s^O(s).$$

A Fourier-transzformált szimmetria- és skálázási tulajdonságai

Lásd a 2. oldalon a táblázatot a következő cikkben:

An Introduction to Fourier Theory *by Forrest Hoffman*,

`http://utcsl.phys.utk.edu/~forrest/papers/fourier/index.html`

A Fourier-transzformált diszkretizálása

A gyakorlatban a függvényértékeket csak diszkrét helyeken ismerjük (mintavételezés), gyakran ez eleve adva van. Másrészt a számítógépek csak diszkrét adatokkal tud dolgozni és véges sok helyen tudják a függvényértékeket és a Fourier-transzformáltat is kiszámolni.

- **ha a mintavételezés adott:**
  Tegyük fel, hogy az $x_1, ..., x_n$ helyeken ismerjük a függvényértékeket: $f_1, ..., f_n$. Ekkor (ha elég sűrű a mintavételezés) a Fourier-integrált a következő trapézformulával közelíthetjük:

$$F(s) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\cos(2\pi xs)dx - i\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\sin(2\pi xs)dx =$$

$$= \sum_{i=1}^{n-1} \frac{f_i\cos(2\pi x_i s) + f_{i+1}\cos(2\pi x_{i+1} s)}{2}(x_{i+1} - x_i) -$$

$$i\sum_{i=1}^{n-1} \frac{f_i\sin(2\pi x_i s) + f_{i+1}\sin(2\pi x_{i+1} s)}{2}(x_{i+1} - x_i)$$

Ezt a formulát tetszőleges frekvenciánál használhatjuk a Fourier-transzformált kiszámítására és könnyű programozni, pl. *UNIX* alatt egy megvalósítása *AWK* scriptben:

```
BEGIN {PI=3.14159265}
{dx=$1-prevx}
NR != 1 {cosp+=(cos(2*PI*s*prevx)*prevf+cos(2*PI*s*$1)*$2)*dx/2}
NR != 1 {sinp+=(sin(2*PI*s*prevx)*prevf+sin(2*PI*s*$1)*$2)*dx/2}
{prevx=$1}
{prevf=$2}
END {print s" "cosp" "(-1)*sinp" "sqrt(cosp*cosp+sinp*sinp)}
```

- **ha megválaszthatjuk:**
  Ekkor *egyenletesen* szokták a mintavételezést választani és a Fourier-transzformált értékeit kiszámolni: f-et N_0 helyen mintavételezik Δx lépésenként, a Fourier-transzformáltat is N_0 helyen számolják ki, s_0 lépésenként. A Fourier-transzformált rs_0 helyen vett F_r értékére a következő formulát szokták megadni:

$$F_r = \sum_{k=0}^{N_0-1} f_k e^{-ir\Omega_0 k},$$

  ahol $\Omega_0 = \frac{2\pi}{N_0}$ és $f_k = \Delta x f(k\Delta x)$. Az $F(s) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-i2\pi xs}dx$ képlettel összevetve megkaphatjuk s_0-t:

$$-ir\Omega_0 k = -i2\pi(k\Delta x)(rs_0)$$

$$s_0 = \frac{\Omega_0}{2\pi\Delta x} = \frac{1}{N_0\Delta x}$$

  Az mintavételezés alsó határa 0-nak van választva, ezért az így definiált F_r nem egyezik meg $F(rs_0)$-al. Páros függvénynél az összefüggés:

$$F_r = \frac{F(\frac{r}{N_0\Delta x})}{2}.$$

A mintavételezés szabályát *Nyquist* határozta meg: a maximális frekvenciájú komponensből is legalább kétszer kell mintát venni. Ez azt jelenti, hogy ha a maximális előforduló frekvencia B, akkor Δx legfeljebb $\frac{1}{2B}$ lehet (a minimális mintavételi frekvenciát, $2B$-t *Nyquist-frekvenciának* nevezik).

A Gyors Fourier-transzformált

Ez egy diszkrét Fourier-transzformációs algoritmus, *Tukey* és *Cooley* fejlesztette ki 1965-ben. Az előnye: kevesebb (N_0^2 helyett $N_0 log N_0$ nagyságrendű) szorzás segítségével számolja ki a Fourier transzformáltat, ez jelentős gyorsulást eredményez, mivel a számítógépeknél a lebegőpontos szorzás jelentős időigényű művelet. Azok az algoritmusok terjedtek el, ahol N_0 2 hatványa. (Állítólag ez nem szükséges, de a gyakorlatban főleg ezt használják, ami előnytelen).
Egy konkrét algoritmus amit találtam (és használok):
Egy $a[0,...,i,...,N_0-1]$ tömbbe kell a bemenő adatokat ($\Delta x f(i\Delta x)$-et) rakni és az eredményt helyben készíti el (a-ba rakja):

$$a[j] = \sum_{k=0}^{N_0-1} a[k] cos(\pi \frac{(k+0.5)j}{N_0}).$$

A diszkrét Fourier-transzformáció képletével összevetve kapjuk:

$$a[j] = \frac{F(\frac{j}{2N_0\Delta x})}{2}$$