Fourieora transformace – FFT a její využití

- pro lib. $u \in L^2(\mathbb{R})$ bude Fourierův obraz

$$\hat{u}(\xi) = (\mathcal{F}u)(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\xi x} u(x)\, dx \quad , \quad \xi \in \mathbb{R}$$

také z $L^2(\mathbb{R})$ a $u(x)$ je dáno pomocí $\hat{u}(\xi)$ inverzní FT

$$u(x) = (\mathcal{F}^{-1}\hat{u})(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\xi x} \hat{u}(\xi)\, d\xi \,, \quad x \in \mathbb{R}$$

Pozn: občas se liší faktor $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$, případně též je použito $e^{-i2\pi\xi x}$

obecně je-li

$$\hat{u}(\xi) = \frac{a}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ic\xi x} u(x)\, dx \quad \text{a} \quad u(x) = \frac{b}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ic\xi x} \hat{u}(\xi)\, d\xi$$

pak musí být $\quad \frac{ab}{|c|} = 1 \quad \leftarrow$ plyne z $\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ic\xi(x-x')} d\xi = \frac{1}{|c|}\delta(x-x')$

- Parsevalova rovnost:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) g^*(x)\, dx = \frac{|c|}{|a|^2} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(\xi) \hat{g}^*(\xi)\, d\xi \quad \text{neboli} \quad \|f\|_2 = \sqrt{\frac{|c|}{|a|^2}}\, \|\hat{f}\|_2$$

neboli pro $a = 1$, $c = 1$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) g^*(x)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(\xi) \hat{g}^*(\xi)\, d\xi \quad \text{neboli} \quad \|f\|_2 = \|\hat{f}\|$$

- pro konvoluci $\quad (u * v)(x) = \int_{-\infty}^{\infty} u(x-y) v(y)\, dy = \int_{-\infty}^{\infty} u(y) v(x-y)\, dy$

platí (je-li $u \in L^2$, $v \in L^1$ nebo obráceně)

$$\widehat{u * v}(\xi) = \hat{u}(\xi)\hat{v}(\xi)$$

- vlastnosti
  1) linearita $\widehat{u+v}(\xi) = \hat{u}(\xi) + \hat{v}(\xi)$, $\widehat{cu}(\xi) = c\,\hat{u}(\xi)$
  2) translace, pokud $x_0 \in \mathbb{R}$, pak $\widehat{u(x+x_0)}(\xi) = e^{i\xi x_0}\hat{u}(\xi)$
  3) modulace, pokud $\xi_0 \in \mathbb{R}$, pak $\widehat{e^{i\xi_0 x} u(x)}(\xi) = \hat{u}(\xi - \xi_0)$
  4) dilatace, pokud $c \in \mathbb{R}$, $c \neq 0$, pak $\widehat{u(cx)}(\xi) = \hat{u}(\xi/c)/|c|$
  5) sdružení $\widehat{u^*}(\xi) = \hat{u}(-\xi)^*$
  6) derivace $\widehat{u_x}(\xi) = i\xi\,\hat{u}(\xi)$

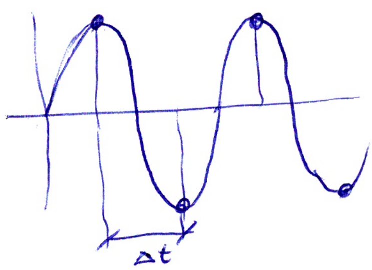
~~7)~~

Diskrétní Fourierova transformace

- uvažujme funkci $h(t)$ zadanou pouze s jistou vzorkovací frekvencí v bodech $t_n = n\Delta t$, kde $n = \ldots -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3 \ldots$

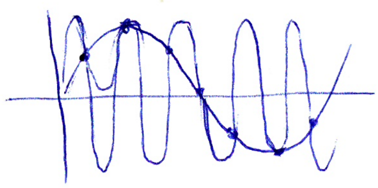
  ($\frac{1}{\Delta t}$ odpovídá počtu bodů (sampling rate) ~~za~~ 1s)

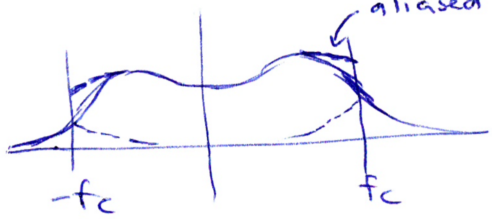
- nyní nejvyšší frekvence, kterou můžeme takto popsat, je dána **Nyquistovou kritickou frekvencí** $\boxed{f_c = \frac{1}{2\Delta t}}$



  tj. máme 2 body na jednu periodu
  což je minimum na zachycení této frekvence
  tj. vlny $\sin 2\pi f_c t$

- **problém aliasingu**
  - pokud Fourierův obraz obsahuje vyšší frekvence f než f_c dochází k aliasingu, neboli příspěvek vyšších frekvencí se objeví v nižších
  - vzorkování s Δt totiž nerozliší frekvence f_1 a f_2 pokud se liší o násobek $\frac{1}{\Delta t}$, což je šířka frekvenčního rozsahu $\langle -f_c, f_c \rangle$





$\Rightarrow$ nutno vzorkovat podle nejvyšší frekvence případně použít filtry apod.

- máme-li funkci $h(t)$ vzorkovánu v časech $t_k = k\Delta t$, $k = 0, 1, \dots N-1$
tj. máme posloupnost $h_k = h(t_k)$, pak její Fourierův obraz můžeme aproximovat, ovšem jen v určitých frekvencích, neboť z N bodů lze určit max. N nezávislých frekv. mezi $-f_c$ a f_c:

$$f_n = \frac{n}{N\Delta t}, \quad n = \underset{\displaystyle -f_c}{\underset{\Updownarrow}{-\frac{N}{2}}}, \dots, \underset{\displaystyle +f_c}{\underset{\Updownarrow}{\frac{N}{2}}}$$

jde o $N+1$ frekvencí, ale hodnota pro $-f_c$ a f_c bude stejná

- máme tedy

$$H(f_n) = \int_{-\infty}^{\infty} h(t)\, e^{2\pi i f_n t}\, dt \simeq$$
$$\simeq \sum_{k=0}^{N-1} h_k\, e^{2\pi i f_n t_k}\, \Delta t =$$
$$= \Delta t \underbrace{\sum_{k=0}^{N-1} h_k\, e^{2\pi i k n/N}}_{H_n} = \Delta t\, H_n$$

toto je tzv. <u>diskrétní Four. transf.</u> posloupnosti h_k (nezávisí na Δt!)

- i když jsme brali $n = -\frac{N}{2} \dots \frac{N}{2}$
"H_n se nezmění, pokud k n přičteme N
$\Rightarrow \quad H_{-n} = H_{N-n}$

proto se obvykle hledá H_n pro $n = 0, \dots, N-1$ (stejně jako k)

- ovšem je nutné dát pak pozor, které frekvence odpovídají kterému H_n, obvykle tedy H_0 je nulová frekvence

$H_1 \dots H_{N/2-1}$ odpovídají kladným $0 < f < f_c$

a $H_{\frac{N}{2}+1} \dots H_{N-1}$ odpovídají záporným $-f_c < f < 0$

a $H_{N/2}$ odpovídá oběma f_c i $-f_c$

- <u>inverzní diskrétní FT</u>, která dává přesně h_k z H_n pak je

$$h_k = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} H_n\, e^{-2\pi i k n/N}$$

liší se jen znaménkem v e… a faktorem $\frac{1}{N}$, lze počítat prakticky stejně

Rychlá Fourierova transformace (FFT)

- i když je DFT na první pohled metoda řádu $O(N^2)$, lze ji provést v řádu $O(N \log_2 N)$ operací pro $N = 2^x$, neboť (dle Danielsona-Lanczose)

$$H_n = \sum_{k=0}^{N-1} e^{2\pi i k n / N} h_k =$$

$$= \sum_{k=0}^{N/2-1} e^{2\pi i n (2k)/N} h_{2k} + \sum_{k=0}^{N/2-1} e^{2\pi i n (2k+1)/N} h_{2k+1} =$$

$$= \sum_{k=0}^{N/2-1} e^{2\pi i n k/(N/2)} h_{2k} + W^n \sum_{k=0}^{N/2-1} e^{2\pi i n k/(N/2)} h_{2k+1}$$

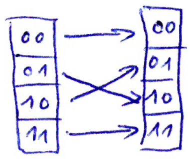
$$= \underbrace{H_n^e}_{\text{DFT sudých}} + W^n \underbrace{H_n^o}_{\text{DFT lichých vzorků } h_k}$$

a použijeme rekurzivně tento princip na H_n^e a H_n^o

až bude $H_n^{eoeeo\ldots oe} = h_k$ pro jisté k odpovídající vzoru eoee....

a sice obrátíme-li vzor eoeeo...oe binárně kde e=0 a o=1 dostaneme odpovídající k

$\Rightarrow$ nutno přeuspořádat pomocí bit reversal (přehození bitů)

např.  apod. lze provést řádu $O(N \log_2 N)$ operací

a pak kombinovat zpětným Danielsonem-Lanczosem $\log_2 N$ krát, vždy řádu N operací

podrobnosti algoritmu viz Numerical Recipes

- jsou i verze pro $N \neq 2^x$, ale efektivita je horší, záleží na faktorizaci čísla N

Výpočet Fourierovy transformace pomocí DFT (FFT)

- nechť máme program, který vrací

$$H_n = \sum_{k=0}^{N-1} h_k e^{2\pi i k n/N} \quad , n = 0, \dots, N-1$$

a chceme spočítat (přibližně) např.

$$I(\omega_n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega_n t} h(t)\, dt$$

pomocí hodnot h_k v $t_k = t_{min} + k\Delta t \quad , k = 0, \dots N-1$

pak dostaneme (za předpokladu, že h_k mimo t_k jsou nulové)

pomocí lichoběžník. pravidla

$t_r = t_{min} + r\Delta t$

$\omega_m = \frac{2\pi m}{N\Delta t} \quad , m = -\frac{N}{2}, \dots \frac{N}{2}$

$$I(\omega_m) \cong \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{r=0}^{N-1} h_r e^{i\omega_m t_r} \Delta t =$$

$$= \underbrace{\frac{\Delta t}{\sqrt{2\pi}} e^{i\omega_m t_{min}}}_{\text{tímto faktorem je nutno násobit!}} \underbrace{\sum_{r=0}^{N-1} h_r e^{2\pi i r m/N}}_{\tilde{H}_m}$$

$$\tilde{H}_m = \begin{cases} H_{m+N} & \text{pro } m < 0 \\ H_m & \text{pro } m \geq 0 \end{cases}$$

a navíc je třeba dávat pozor na umístění ~~záporných~~ frekvencí v H_n

Časový vývoj v QM pomocí split-operator metody

- vývoj je dán evolučním operátorem $U = e^{-iHt}$

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt}|\psi_0\rangle \qquad (\hbar = 1 \text{ – atomové jednotky})$$

kde $H = T + V$, T … kinetická energie (tedy operátor kin. energie)

V … potenciální energie

které spolu nekomutují, ~~tedy~~ ale tedy $e^{-iHt} \neq e^{-iTt}\, e^{-iVt}$

ovšem do řádu $O(\Delta t^2)$ pro malá Δt platí

$$e^{-iH\Delta t} = e^{-\frac{iV\Delta t}{2}} \underbrace{e^{-iT\Delta t}}_{} e^{-\frac{iV\Delta t}{2}} + O(\Delta t^3)$$

v p-reprezentaci je $e^{-i\frac{p^2}{2m}\Delta t}$

tedy násobení

$\Rightarrow$ přechody mezi $\psi^x(x)$ a $\psi^p(p) = \langle p|\psi\rangle$ lze

působení $e^{-iH\Delta t}$ převést na pouhé násobení buď $e^{-\frac{iV\Delta t}{2}}\psi^x(x)$

nebo $e^{-i\frac{p^2}{2m}\Delta t}\psi^p(p)$

- je-li $\psi^p(p)$ určeno pomocí DFT (FFT)

nutno dát pozor, jakým p násobíme!

- přechod mezi $\psi^x(x)$ a $\psi^p(p)$ je dán Fourierovými vztahy

$$\psi^p(p) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx}\, \psi^x(x)\, dx \qquad \text{(inverzní FT)}$$

$$\psi^x(x) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx}\, \psi^p(p)\, dp$$

přecházíme-li tam a zpět, konstantní faktory nehrají roli,

$\Rightarrow$ stačí násobit obraz z DFT vhodným $e^{-i\frac{p^2}{2m}\Delta t}$

a sice $\quad p_j = \dfrac{2\pi\, j}{N\Delta x} \quad$ pro $j = 0, \dots, \frac{N}{2} - 1$

a $\quad p_j = \dfrac{2\pi}{N\Delta x}(j - N)$ pro $j = \frac{N}{2}, \dots, N-1$

- zobecnění na metody vyššího řádu pomocí symetrické kompozice viz J Chem Phys 150 (2019) 204113