

Fourierovské metody v numer. výpočtech

- používali jsme v analýze stability PDE a konvergence
- Fourierovská báze (e^{ikx} , \sin / \cos) ve spektrálních metodách - slabá formulace ... rychlá konverg. pro hluboké úlohy
- spektrální kolokační metody - reprezentace funkcí interpolací dat na gridu

Dnes:

- Připomenutí vlastností Fourier. transf. řad s ohledem na numerickou reprez. funkcí a výpočet jejich vlastností atd. ...
 - "Rychlá Fourierova transformace" a její použití
- ↖ $N \log N$ algoritmus

pár úvah na začátek:

F.T : $\hat{u}(k) \equiv [\hat{F}u](k) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} u(x) dx$

neomezený interval
→ numerický končí

Spojitá
prom.

→ numericky: diskretizace

prostor (čas) prom.	freq. prom.
x	k
t	ω

přehled transformací:

Jméno metody	Prostorová proměnná	Frekvenční proměnná
Fourierova transformace (F.T)	neomezená, spojitá $L^2(\mathbb{R})$	neomezená spojitá $L^2(\mathbb{R})$
Fourierova řada (F.Ř)	omezená, spojitá $L^2(-\pi, \pi)$	neomezená, diskrétní ℓ^2
semi-diskrétní F.T	neomezená, diskrétní ℓ^2 (číslová řada)	omezená, spojitá $L^2(-\pi, \pi)$
diskrétní Four. Transf. DFT	omezená, diskrétní \mathbb{C}^N	omezená, diskrétní \mathbb{C}^N

vlastnosti, vztahy mezi nimi, aprox. jedno druhou
použití

① Fourierova transformace - shrnutí pro numeriku

$$\hat{u}(k) \equiv (\hat{F}u)(k) = \int_{-\infty}^{\infty} u(x) e^{-ikx} dx \quad \forall k \in \mathbb{R}$$

věta o inverzi:

(prostor $\mathcal{D}'(\mathbb{R}^2)$
distribuce)

$$u \in L^2(\mathbb{R}) \Rightarrow \hat{u}(k) \in L^2(\mathbb{R}) \text{ a}$$

$$u(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{u}(k) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi} \equiv \hat{F}^{-1} \hat{u} \quad \text{Inverze F.T.}$$

Vlastnosti:

• Parsevalova rovnost

$$\|\hat{u}\| = \sqrt{2\pi} \|u\|$$

(produktivní vlastnost F.T.)

• konvoluce: $u \in L^2, v \in L^1$

$$\hat{F}(u * v) = \hat{u}(k) \hat{v}(k)$$

zpracování obrazů (dekonvoluce)

výpočet integrálů či transformací

$$L = \int u(x-y) v(y) dy$$

• derivace: $\hat{F} \partial_x u = ik \hat{u}(k)$

výpočet derivace řešení ODE a PDE

• další užitečné vlast:

Linearita: $\hat{F}(u+v) = \hat{u} + \hat{v}$; $\hat{F}(cu) = c\hat{u}$

škálování: $\hat{F} u(cx) = \hat{u}\left(\frac{k}{c}\right) \frac{1}{|c|}$

sdružení: $\hat{F} \bar{u} = \overline{\hat{u}(-k)}$

Inverze: $\hat{F}^{-1}[\hat{u}](k) = \frac{1}{2\pi} \hat{u}(-k)$

Translace: $\hat{F}[u(x+x_0)] = e^{ikx_0} \hat{u}(k)$

Modulace: $\hat{F}[e^{ik_0x} u(x)] = \hat{u}(k-k_0)$

Symetrie

parita: $u(x) = u(-x)$ sudá ; $u(x) = -u(-x)$ lichá

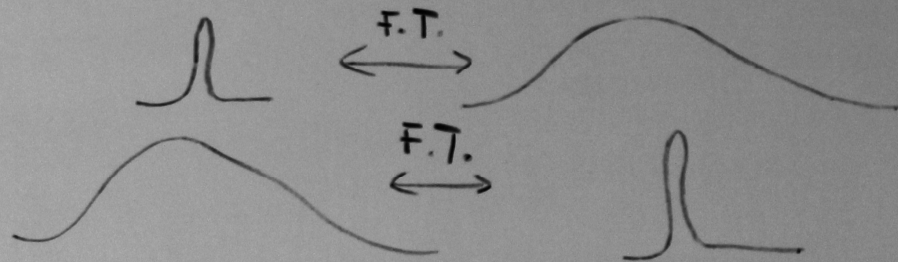
Sdvození: $\overline{u(x)} = -u(x)$ imaginární; $\overline{u(x)} = u(x)$ reálná; $u(x) = \overline{u(-x)}$ Hermitsuská
 $u(x) = -\overline{u(-x)}$ anti Hermitsuská

prostor $u(x)$	freq. $\hat{u}(k)$
(+) sudá	(+) sudá
(-) lichá	(-) lichá
(R) Reálná	Hermite (H)
(I) Imaginární	anti-Hermite (alt)
R+	R+
R-	I-
I+	I+
I-	R-

} F zachováá paritu

Hladkost \leftrightarrow dlouhodobost

souvisí s reálnou neuvěřitelností



$u(x)$	$\hat{u}(k)$
hladká	rychle klesá $ k \rightarrow \infty$
rychle klesá $ x \rightarrow \infty$	hladká

Podrobněji: ... pro $u \in L^2(\mathbb{R})$

	$u(x)$	$\hat{u}(k)$
(a)	$(p-1)$ spoj. deriv. $u^{(p)}$... omezená variace	$\hat{u}(k) = O(k ^{-(p+1)}) \quad k \rightarrow \infty$
(b)	$u \in C^\infty(\mathbb{R})$ a $\forall u^{(p)} \in L^2(\mathbb{R})$	$\hat{u}(k) = o(k ^{-M}) \quad k \rightarrow \infty$ $a \neq M$
(c)	$u(x)$ lze rozšířit na analyt. na $\{z \in \mathbb{C} \mid \text{Im } z < a\} \subset \mathbb{C} \quad a > 0$ a $ u(z) \leq C \dots$ stejnoměrně $\forall y \in (-a, a)$ $z = x + iy$	$e^{-a k } \hat{u}(\xi) \in L^2(\mathbb{R})$
(d)	u lze rozšířit na analyt na \mathbb{C} a $ u(z) = O(e^{-a z }) \quad z \rightarrow \infty$ nějaké $a > 0$	u má kompaktní supp ... $u(x) = 0$ mě $x \in (a, \infty)$ BAND-LIMITED FUNCTION

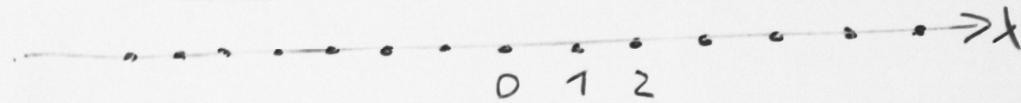
② Semidiskrétní Fourierova transformace (Fourierovy řady ... interval)

DATA NA GRIDU - síti ... krok $h > 0$

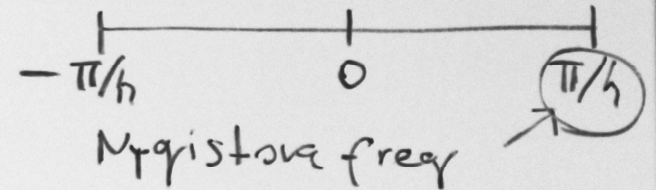
Grid: $x_j = jh$... $u(x_j) \equiv r_j$

... Aliasing: e^{ikx} pro k a $k + \frac{2\pi}{h} \cdot m$; $m \in \mathbb{Z}$
nerozlišitelné na gridu x_j

x-prostor:



k-prostor



... ℓ^2 prostor $\|r\| \equiv \sqrt{h \sum_j |r_j|^2}$

semiDFT:

$$\hat{r}(k) \equiv (F_h r)(k) \equiv h \sum_j r_j e^{-ikx_j} \quad k \in \left\langle -\frac{\pi}{h}, \frac{\pi}{h} \right\rangle$$

přech.: konvoluce na ℓ^2 :

$$(r * w)_j \equiv h \sum_m r_{j-m} w_m = h \sum_m r_m w_{j-m}$$

substituce $m' = j - m$

... pozn: $\hat{f} \in L_h^2 \equiv L^2 \left(-\frac{\pi}{h}, \frac{\pi}{h} \right)$

Věta o inverzi: $f \in L_h^2 \Rightarrow F_h f(k) \equiv \hat{f}(k) \in L_h^2$

a platí $f_j = \int_{-\frac{\pi}{h}}^{\frac{\pi}{h}} e^{ikx_j} \hat{f}(k) \frac{dk}{2\pi} \quad j \in \mathbb{Z}$
 $\equiv F_h^{-1}[\hat{f}]$

Vlastnosti jako FT: Parseval $\|\hat{f}\| = \sqrt{2\pi} \|f\|$ konvoluce

• $f \in L_h^2, g \in L_h^1 \rightarrow f * g \in L_h^2$ a $F[f * g] = \hat{f} \hat{g}$

• linearita, translace, modulace, škálování, střížení, symetrie

Vztah F.T a semiDFT ... totožné až na ALIASING!

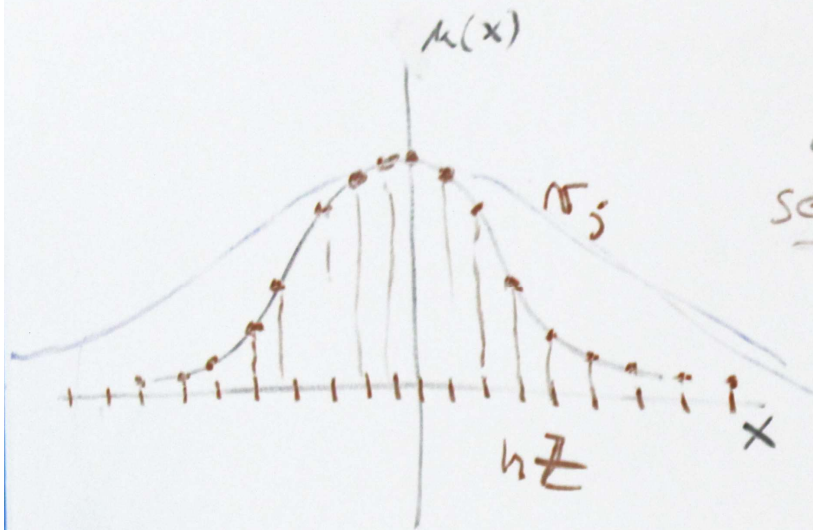
Poissonova sumáční formule (Aliasing formula)

$\mu \in L^2$ dost hladká (Schwartz \mathcal{S}); $F\mu \equiv \hat{\mu}$ a $f \in L_h^2$ restrikce $\mu(x)$ na $h\mathbb{Z}$

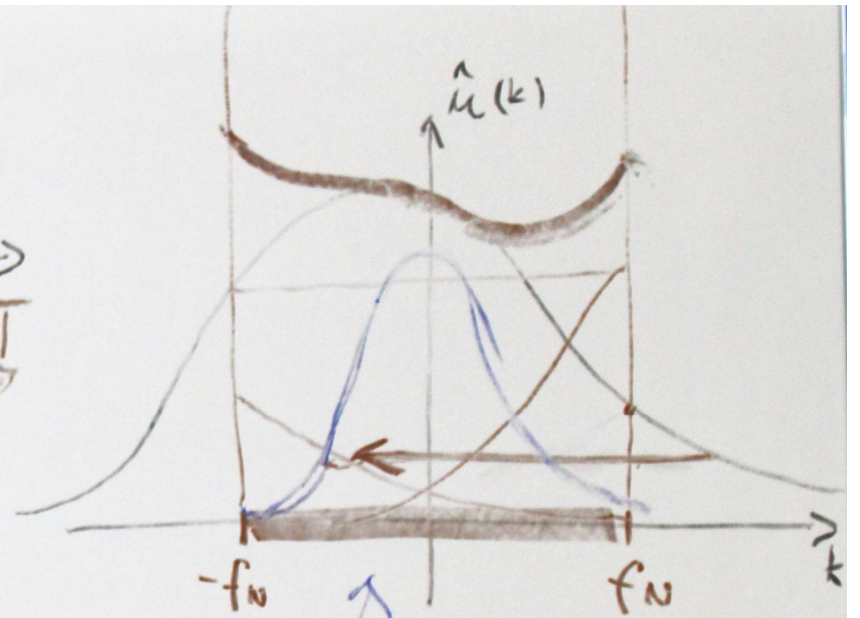
Pak $\hat{f}(k) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \mu(k + \frac{2\pi}{h} j) \quad \forall k \in \left(-\frac{\pi}{h}, \frac{\pi}{h} \right)$

ODPOVÍDÁ NA OTÁZKU V JAKÉM SMYSLU FT \approx semiDFT

pozn: jak funguje aliasing



F.T.
↔
semi DFT
↔

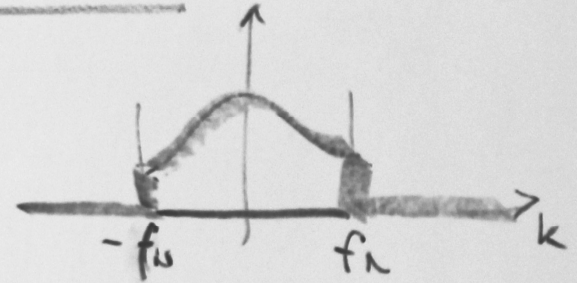


vyšší fre se vejde do okna - nekresbna'

Fouvierovská interpolace na síti



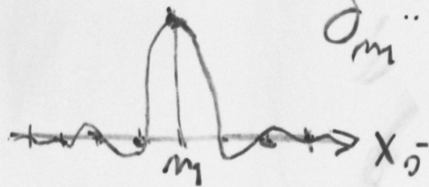
semi DFT
→



← (F.T)⁻¹

interpretace jako
BAND-LIMITED F.T

PODROBNĚJI:



δ_m ... funkce $N_j = \delta_{j,m}$
 $m=0$ →

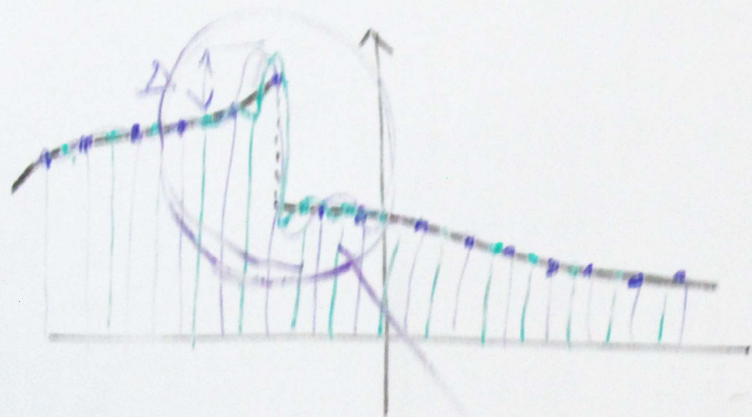
$$F_h \rightarrow \delta_0(k) = h \xrightarrow{F_h^{-1}} \delta_j = \frac{\sin \frac{\pi x_j}{h}}{\frac{\pi x_j}{h}}$$

... Sinc-funkce na gridu: $S_h(x) = \frac{\sin \frac{\pi x}{h}}{\frac{\pi x}{h}} = \frac{h}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{h}}^{\frac{\pi}{h}} e^{ikx} dk$
... analogie Lagrange interpolace $l_j(x)$

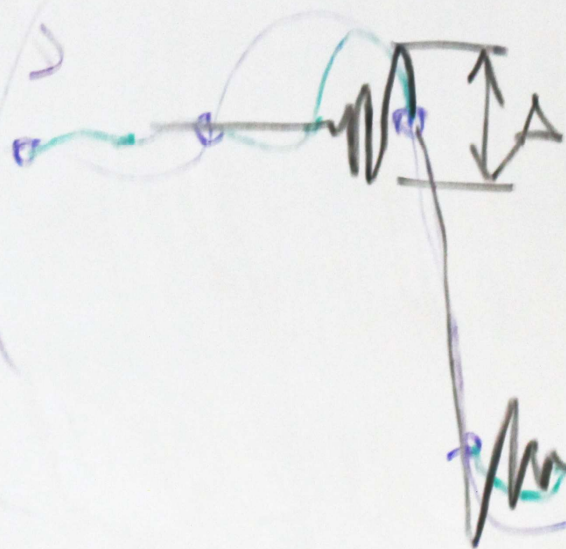
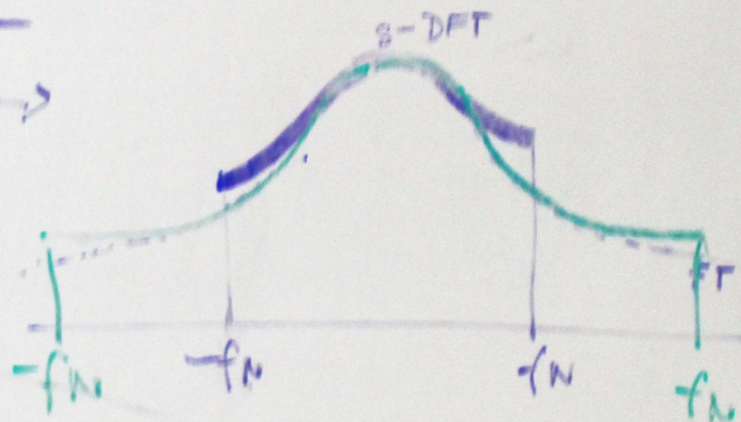
... konvoluce $N_j = \sum_m N_m \delta_{m-j} = \sum_m N_m S_h(x_j - x_m)$

$x_j \rightarrow x$
interpolace

Gibbsův jev ... interpolace nepoj. fci



semi DFT



$h \rightarrow 0$

konverguje v L^2 ,
ale ne bodově

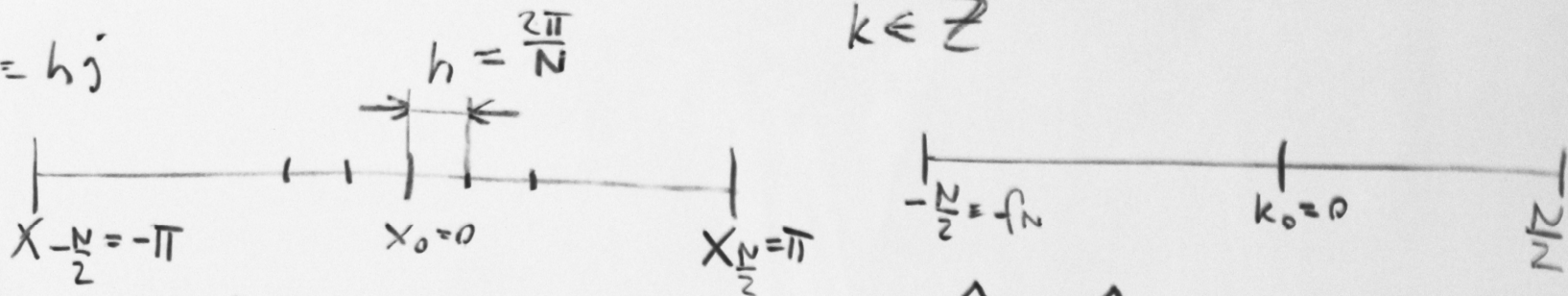
$\Delta \sim 9\%$

③ DFT ... diskretní F.T.

x ... omezené!
... bina $(-\pi, \pi)$

$$x_j = h \delta_j$$

$$k \in \mathbb{Z}$$



ν_j ... periodické ... $\nu_{j+N} = \nu_j$

$$\hat{\nu}_k = \hat{\nu}_{k+N}$$

$$\|\nu\| \equiv \sqrt{h \sum \nu_j^2}$$

Def: $\hat{\nu}(k) \equiv (\hat{F}_N \nu)(k) \equiv h \sum_j e^{-i k x_j} \nu_j$ $k \in \left\{ -\frac{N}{2}, -\frac{N}{2}+1, \dots, \frac{N}{2}-1 \right\}$

VĚTA O INVERZI:
$$\nu_j = \frac{1}{2\pi} \sum_k e^{i k x_j} \hat{\nu}_k \equiv F_N^{-1} \hat{\nu}$$

Vlastnosti: Parseval $\|\hat{\nu}\| = 2\pi \|\nu\|$

o Konvoluce $(\nu * \nu)_m \equiv h \sum_j \nu_{m-j} \nu_j$... $F_N(\nu * \nu) = \hat{\nu}_k \hat{\nu}_k$
periodicitata!

o ... linearita atd ...

Algoritmus rychlé DFT = FFT (Fast four. transt)

... naivní ... $\hat{N}_k = h \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} e^{ikx_j} N_j$

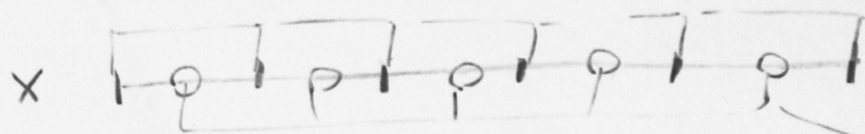
N operací pro jedno N_k \uparrow N členů

→ celkem N^2 operací ... FFT ... $N \log_2 N$ operací

princip: 1) $e^{ikx_j} = e^{ikjh} = (e^{ih})^{kj} \equiv W^{kj}$

... exponenciála se počítá jen jednou

2) rozdělení na půlky:



liché $\rightarrow \sum_e$
 sudé $\rightarrow \sum_s$

se spočítou 1x ale využijí 2x

3) ... rekurzivní užití triku pro čtvrtky, osmičky atd

pro konstrukci k a $k + \frac{N}{2}$

výpočet \sum ... N operací
 konstrukce N_k ... jen $\log_2 N$

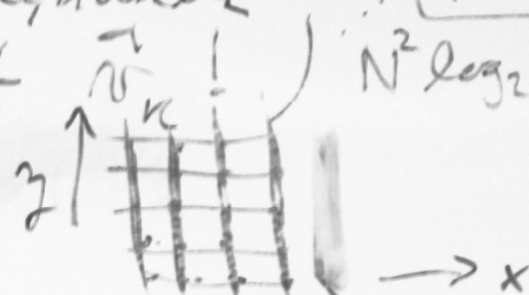
Details ... např Numerical Recipes

FFT - historické pozn:

- ... znal už Gauss 1805!
- ... znovuobjeveno Danielson, Lanczos 1942
- ... vyladění algoritmu - bitová reverze Cooley, Tukey 1965

FFT - praktické pozn:

- ... implementace algoritmu často vyžaduje $N=2^m$
- ... F.T je levná operace! vyplní se algoritmy kde se často předchází $N \rightarrow \hat{N} \rightarrow N \rightarrow \hat{N}$
- ... řešení ODE a PDE... v recipročním prostoru jsou dif operátory jen násobení polynomy
(pozor na uspořádání dat \vec{v}_k) N^2 dat $N^2 \log_2 N$
- ... více dimenzí: .. prostě se provede postupně



PR aplikace

Metoda rozděleného propagátoru:

řešení $i\partial_t \psi(x,t) = H\psi(x) = (T+V)\psi(x,t)$

→ $\psi(x,\Delta t) = e^{-iH\Delta t} \psi(x,0)$

+ aproximace $e^{-i(T+V)\Delta t} = e^{-iT\Delta t} \cdot e^{-iV\Delta t} + O(\Delta t^2)$

případě $e^{-i(T+V)\Delta t} = e^{-\frac{i}{2}T\Delta t} e^{-iV\Delta t} e^{-\frac{i}{2}T\Delta t} + O(\Delta t^3)$

$e^{-iV(x)\Delta t} \psi(x)$... diagonální v x reprezentaci

FFT
→ p -reprezentace $e^{-iT\Delta t} \psi(p) = e^{-i\frac{p^2}{2m}\Delta t} \psi(p)$... diagonální v p -rep.