计算物理 Ⅲ

快速傅里叶变换

Author^{a,1}

a 武汉大学, 物理科学与技术学院

Keywords—快速傅里叶变换,贝塞尔函数, Python

Contents

1	Introduction		1
	1.1	傅里叶级数	1
	1.2	傅里叶变换	1
2	快速	速傅里叶变换	
	2.1	Sampling Theorem and Aliasing	1
	2.2	离散傅里叶变换(Discrete Fourier Transform)	2
	2.3	快速傅里叶变换(Fast Fourier Transform)	2
3	使月	月 FFT 算法计算 Bessel 函数	
4	Cod	Codes	
	Ref	References	

1. Introduction

- 数学物理中最常出现的主题是傅里叶分析。例如,它出现在经典
- 力学和非简正模的分析中, 出现在电磁理论和波的频率分析中,
- 出现在噪声考虑和热物理中, 出现在量子理论和动量与坐标表示
- 之间的转换中,出现在相对论量子场论中,出现在非正则态的产
- 生和湮灭运算中.[1] 在介绍快速傅里叶变换的算法之前,我们首
- 先简单回顾一下傅里叶变换的定义。

1.1. 傅里叶级数

- 在关于贝塞尔函数的迭代计算作业中, 我们提到了魏尔斯特拉斯
- 定理,它告诉我们任意关于x的连续函数都可以展开成x的代数
- 多项式。这个结论可以推广到 n 个自变量的情形:

Generalized Stone-Weierstrass Theorem

如果函数 $f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$ 是区间 $[a_i,b_i]^n$ 上的连续函数,那么 $f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$ 可以展开成多项式 $x_1^{k_1}x_2^{k_2}\cdots x_n^{k_n}$, k_i 是非负整数.

由 $x = r \cos \theta$, $y = r \sin \theta$, 我们得到了极坐标下展开一个二元函数 的方法:

$$f(r,\theta) = \sum_{m,k=0}^{\infty} a_{mk} x^k y^m = \sum_{m,k=0}^{\infty} a_{m,k} r^{m+k} \cos^k \theta \sin^m \theta \qquad (1)$$

如果我们令r=1(或者其他常数)就得到了一个只关于 θ 的函数:

$$f(\theta) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} b_n e^{in\theta} = b_0 + \sum_{n=1}^{\infty} (A_n \cos \theta + B_n \sin \theta)$$
 (2)

- 这是一个周期为 2π 的周期性函数,它可以表示 $[-\pi,\pi]$ 上的连续
- 函数 (或者分段连续函数,准确地讲是满足狄利克雷条件的函数)。
- 利用正交性和归一性,不难求出[1]

$$b_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-in\theta} f(\theta) \, d\theta \tag{3}$$

- 但是,我们感兴趣的函数并不总是定义在 $-\pi$, π 上。更一般的,
- 对于定义在 (a,b) 上,周期为 L=(b-a) 的函数 F(x), 通过换元

$$\theta = \frac{2\pi}{L}(x - a - \frac{L}{2})$$

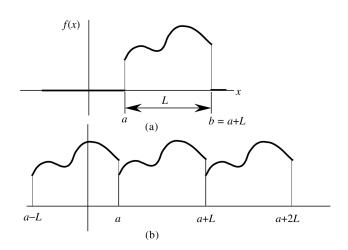


Figure 1. (a) The function we want to represent. (b) The Fourier series representation of the function

可以得到

$$F(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{-\infty}^{\infty} F_n e^{2\pi i n x/L}$$
 (4)

$$F_n = \frac{1}{\sqrt{L}} \int_a^b e^{-2\pi i n x/L} F(x) \, \mathrm{d}x \tag{5}$$

1.2. 傅里叶变换

傅里叶级数可以展开任意周期性函数 F(x), 但是物理学中遇到的大 多数函数并不是周期性的。一种简单的想法是使周期 $L\to\infty$,此时 $\Delta\omega=\frac{2\pi}{L}\to0$ 。[2] 我们直接给出傅里叶积分的定义,为了避免 和频率 f 混淆, 我们改用 h(t) 表示函数。

$$H(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} h(t)e^{i\omega t} dt$$
 (6)

22

23 24

30

1_4

$$h(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} H(\omega) e^{-i\omega t} d\omega$$
 (7)

2. 快速傅里叶变换

2.1. Sampling Theorem and Aliasing

在通常情况下, h(t) 是通过均匀采样得到的, 令 Δ 表示两次相邻 采样的时间间隔, 称为采样率 (sample rate)。对任何采样率 Δ , 有 一个相对应的临界频率,称为 Nyquist 临界频率(Nyquist critical frequency) [3]

$$f_c = \frac{1}{2\Lambda} \tag{8}$$

关于二者有一个重要的定理:

sampling theorem

If a continuous function h(t), sampled at an interval Δ , happens to be bandwidth limited to frequencies smaller in magnitude than f_c , i.e., if H(f) = 0 for all $|f| \ge f_c$, then the function h(t) is completely determined by its samples h_n .

2.2. 离散傅里叶变换 (Discrete Fourier Transform)

对于周期为无穷的函数 h(t), 我们只需要对有限的的部分进行采样

(h(t) 等于零的部分积分仍然是 0), 我们将 h(t) 开始的初始时刻记

为t=0.

$$h_k = h(k\Delta), \qquad k = 0, 1, \dots, N - 1$$
 (9)

利用这N个输入的 h_k ,我们可以得到

$$H(f_n) = \int_{-\infty}^{\infty} h(t)e^{2\pi i f_n t} dt = \int_{0}^{(N-1)\Delta} e^{2\pi f_n k \Delta} dt$$
 (10)

根据前面的叙述, 为了将 h(t) 用 $h(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} H(\omega) e^{-i\omega t} d\omega$ 表示,

h(t) 的周期看作无穷, $\Delta \omega = \frac{2\pi}{L} \to 0$,我们应当取无数个 f_n 的值。

在推导傅里叶积分的过程中,这当然是没有问题的, $\Delta \omega = \frac{2\pi}{3} \to 0$

意味着求和被积分所取代,但当我们实际进行数值计算时却不能

取无穷个 f_n 。出于对称性的考虑,我们同样也取 $N \cap f_n$ 的值,这

样可以重复利用一部分代码

$$f_n = \frac{n}{N\Delta}, \qquad n = -\frac{N}{2}, \cdots, \frac{N}{2}$$
 (11)

这样 f_n 刚好均匀分布在 $-f_c, f_c$ 。 f_n 取更大的值没有意义,因为 如采样定理所描述,在当前的Δ下,提取不到更高频率的信号的

信息(从实际操作过程看,我们的△是根据信号中存在的频率的

上限选取的, f_c 是采样的信号中存在的最大的频率,信号中本来

不具备比 f_c 频率更高的信号)。

引入记号 $H_n = H(f_n)\Delta$ 。

$$H_n = \sum_{k=0}^{N-1} h_k e^{2\pi i k n/N} = \sum_{k=0}^{N-1} h_k W_N^{nk}$$
 (12)

其中 $W_N = e^{2\pi i/N}$ 不难验证 $H_{-n} = H_{N-n}$,所以

$$h_k = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} H_n e^{-2\pi i k n/N}$$
 (13)

2.3. 快速傅里叶变换 (Fast Fourier Transform)

由公式12可知,进行离散傅里叶变换相当于一个 N×N 矩阵和-

个N维向量相乘,所需要的时间为 $O(N^2)$,利用单位复数根的性质

可以将时间缩短为 $O(N \log N)[4]$ 。

单位复数根

单位复数根是满足 $W^N = 1$ 的复数W,这样的复数刚好有N个, $e^{2\pi i n/N}$, $n=0,1,\cdots,N-1$ 。它们均匀地分布在以原点为中 心的单位圆上。 $W_N = e^{2\pi i/N}$ 称呼为 N 次主单位根。其它根都 是 W_N 的幂。

- N个N次单位复数根以乘法为群乘法构成一个群,与加法群同构, 我们给出单位复数根的几个基本性质:
 - 1. $W_N^j W_N^k = W_N^{j+k} = W_N^{(j+k) \mod N}$ 2. 消去引理: $W_{mN}^{mk} = W_N^k$
- 3. 折半引理: N 个 N 次单位复数根的平方的集合就是 N/2 个 N/2 次单位复数根的集合: $W_N^{k+N/2} = -W_N^k, (W_N^k)^2 = W_{N/2}^k$
- 现在回到计算 H_n 的问题上。我们采取分治策略,利用 H_n 的偶 数项 (even) 和奇数项 (odd) 分别定义 H^e 和 H^o .

$$\begin{split} H_{n}(h,W_{N}^{n}) = & h_{0} + W_{N}^{n} h_{1} + W_{N}^{2n} h_{2} + \dots + W_{N}^{(N-1)n} h_{N-1} \\ = & (h_{0} + W_{N}^{2n} h_{2} + \dots + W_{N}^{(N-2)n} h_{N-2}) + \\ & W_{N}^{n}(h_{1} + W_{N}^{2n} h_{3} + \dots + W_{N}^{(N-2)n} h_{N-1}) \\ = & H_{n}(h^{e}, W_{N/2}^{n}) + W_{N}^{n} H_{n}(h^{o}, W_{N/2}^{n}) \\ = & H_{e}^{e} + W_{N}^{n} H_{0}^{n} \end{split} \tag{14}$$

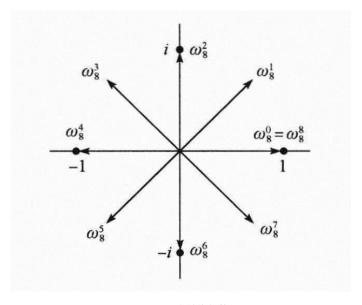


Figure 2.8次单位复数根

这样就把求 $H_n, n = 0, 1, 2, \cdots, N-1$ 的问题转化为求 H_n^e 和 $H_n^o, n =$ $0,1,2,\cdots,N/2-1$ 的问题。(折半引理)。这两个子问题的形式与 原始问题相同。重复以上步骤,我们可以得到:(一个元素的 DFT 就是它自身)

$$H_n^{eoooee\dots} = h_k \tag{15}$$

那么,n和 k 之间有什么关系呢?我们来回顾刚刚的过程, h_k 被 归入 H^e 系数的原因是 k 是偶数,将 k 写成二进制,k 的末位是 0; 而末位是1的k对应的 h_k 则被归入 h^o 。然后对分出的两组,重复 以上过程,看第二末位是0还是1。这个过程和判断二进制数的大 小是相似的, 当我们判断二进制数大小时, 首先看最高位是0还 是1,然后将所有数分为较小的半组和较大的半组,然后对第二 高位重复这个过程。因此我们只需要将 k 转为二进制, 然后左右 翻转,对 $bit_rev(k)$ 按大小进行排序。在对 h_k 在二进制倒序之后,

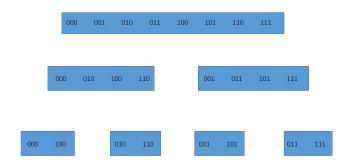


Figure 3. 对 2^M 个数按奇偶划分直至每组只有一个,相当于将下标按二进 制反转,并从小到大排列

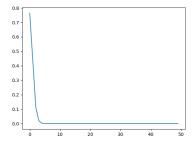
就可以按照迭代结构而不是递归结构计算。 $N=2^M$ 时要进行蝶形 运算,我们要解决的问题有:

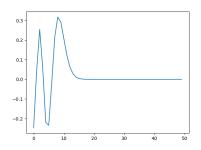
- 1. 两个输入数据之间的间隔 B
- 2. 旋转因子 W 的确定,包括:
 - (a) 第 L 级旋转指数
 - (b) 第 L 级 W 的种类确定
 - (c) 第 L 级中同一 W 之间的间隔

观察蝶形图可知第 L 级:

- 1. 两个输入数据间距为 $B = 2^{l-1}$
- 2. 有 2^{L-1} 个旋转因子
- 3. 旋转因子 W 增量为 2^{M-L}

计算物理 Ⅲ





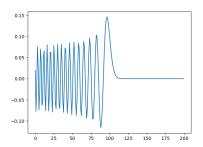


Figure 4. z = 1, 10 and 100 时的 $J_n(z)$

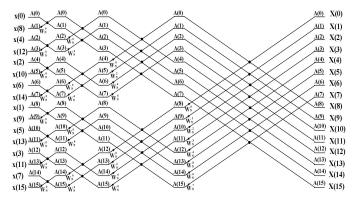


Figure 5. 在二进制倒序之后,就可以按照迭代结构而不是递归结构计算。

- 4. 同一W间隔为 $istep = 2B = 2^{L}$
- 5. 同种蝶形运算次数为 2^{M-L}

💀 3. 使用 FFT 算法计算 Bessel 函数

89 利用 FFT 程序可以按照如下的积分计算 Bessel 函数:

Bessel function

$$J_n(z) = \frac{i^{-n}}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{iz\cos\theta} e^{in\theta} d\theta$$
 (16)

90 Bessel 函数的积分可以写成如下的 FFT 形式:

$$J_{n}(z) = \frac{i^{-n}}{N} \sum_{k=0}^{N-1} e^{iz\cos(2\pi k/N)} e^{2\pi ink/N}$$
$$= \frac{i^{-n}}{N} H_{n}[e^{iz\cos(2\pi k/N)}, W_{N}^{n}]$$
(17)

4. Codes

```
import numpy
                 as np
   import matplotlib.pyplot as plt
   def DataRev(data):
       N=len(data)
       data_rev=[]
       width=int(np.log(N)/np.log(2))#计算位宽
       width,即 nmax 表示的二进制数的位数。
       for i in range(0,N):
       j= '{:0{width}b}'.format(i, width=width)
#使用格式化字符串 '{:0{width}b}' 将整数 i 转
       换为 width 位的二进制字符串, 前面用 O 补齐。
           data_rev.append(data[int(j[::-1], 2)])#
10
       将生成的二进制字符串 j 反转 (j[::-1]), 然后将其转换回整数并返回。
       return data_rev
   def Coeff(N,k,isign):
12
       return np.exp(isign*2*np.pi*1j*k/N)
13
   def FFT(data,isign):
14
15
       data=np.array(data)
16
       data=DataRev(data)
       Length=len(data)
       Width=int(np.log(Length)/np.log(2))
18
       for i in range(Width):
19
           for j in range(0,Length,2**(i+1)):
20
21
                for k in range(0,2**i):
                    x=k+j
                    y = x + 2 * * i
23
                    W = Coeff(2**(i+1),k,isign)
24
                    data[x],data[y] = data[x] + W * data[
25
       y], data[x]-W*data[y]
       if isign == -1:
           i=0
27
           while(i<Length):
28
                data[i]=data[i]/Length
29
30
                i += 1
       return data
31
   def bessl(z,M):
32
       N=2**M
33
34
       data=[]
35
       for i in range(0,N):
           data.append(np.cos(z*np.cos(2*np.pi*i/N)
       )+np.\sin(z*np.\cos(2*np.pi*i/N))*1j)
           #data.append(np.exp(z*np.cos(2*np.pi*i/N
37
       )))
       data=FFT(data,1)
       for i in range(0,N):
           data[i]=data[i]/(N*(1j)**i)
40
           data[i]=data[i].real
41
       return data
42
43
      __name__ == '__main__':
       J1=bessl(1,12)
45
       j1=[]
       xx=np.arange(0,50)
46
       for i in range(0,50):
47
48
         j1.append(J1[i])
49
       plt.plot(xx,j1)
       plt.show()
```

Code 1. code

Author 计算物理 Ⅲ 3

92 References

- 93 [1] S. Hassani, Mathematical Physics. Springer, 2013.
- 94 [2] 姚端正 and 周国全 and 贾俊基, 数学物理方法. 科学出版社,
- [3] Richard L. Burden and J. Douglas Faires, Numerical Analysis.
 Richard Stratton, 2010.
- 98 [4] T. H.Cormen and C. E.Leiserson, 算法导论, 殷建平等, Ed. 机 椒工业出版社, 2013.
- 100 [5] *PGFPlots A LaTeX package to create plots.* [Online]. Available: https://pgfplots.sourceforge.net/.

4 计算物理 III Author