離散 Fourier 変換

(中村祐介, 2015/6)

概要

皆がよく知っている（はず）の Fourier 級数展開・Fourier 変換と、数値計算で使う離散 Fourier 変換の違いや注意事項を説明する。

1　連続変数に対する Fourier 級数展開

$0 \le x \le L$ で定義された周期関数 $f(x)$ に対する Fourier 級数展開は

$$f(x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \tilde{f}_m \, e^{ik_m x} \tag{1}$$

$$\tilde{f}_m = \frac{1}{L} \int_0^L \mathrm{d}x \, f(x) \, e^{-ik_m x} \tag{2}$$

ただし

$$k_m = \frac{2\pi m}{L} \tag{3}$$

以下では式 (1) と (2) を

$$f = \mathcal{F}^{-1}\big[\, \tilde{f} \,\big], \qquad \tilde{f} = \mathcal{F}\big[\, f \,\big] \tag{4}$$

と略記する。

これらの表記を用いると

$$\frac{\mathrm{d}^n f}{\mathrm{d}x^n} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} (ik_m)^n \, \tilde{f}_m \, e^{ik_m x} = \mathcal{F}^{-1}\Big[(ik)^n \; \mathcal{F}[f] \Big] \tag{5}$$

と書ける。つまり f を Fourire 級数展開し、$(ik)^n$ を掛け、逆変換をすれば、n 階微分が計算できる。

2　離散 Fourier 変換

以上の話を離散化する。つまり区間 $[0, L]$ を N 分割する。格子点の座標 x_n は

$$x_n = \frac{nL}{N} \qquad n = 0, 1, \cdots, N-1 \tag{6}$$

とする。以後 $f_n \equiv f(x_n)$ とする。$f(x)$ は周期関数なので、$f(x_0) = f(x_N)$ である。式 (2) の積分を区分求積にすると

$$\tilde{f}_m = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} f_n \, e^{-2i\pi \frac{mn}{N}} \tag{7}$$

となる。離散化によって絶対値の大きい k_m の情報が失われることを考えると、式 (1) は

$$\begin{aligned}
f_n &= \sum_{m=-N/2}^{N/2-1} \tilde{f}_m \, e^{2i\pi \frac{mn}{N}} && (8)\\
&= \sum_{m=0}^{N/2-1} \tilde{f}_m \, e^{2i\pi \frac{mn}{N}} + \sum_{m=-N/2}^{-1} \tilde{f}_m \, e^{2i\pi \frac{mn}{N}} && (9)\\
&= \sum_{m=0}^{N/2-1} \tilde{f}_m \, e^{2i\pi \frac{mn}{N}} + \sum_{m=N/2}^{N-1} \tilde{f}_{m-N} \, e^{2i\pi \frac{mn}{N}} && (10)\\
&= \sum_{m=0}^{N-1} \tilde{f}_m \, e^{2i\pi \frac{mn}{N}} && (11)
\end{aligned}$$

と書ける。途中で $f_{m-N} = f_m$ であることを用いた。式 (11) と (7) は矛盾していない。確かに変換と逆変換の関係になっている。伝統的に正規化因子 $1/N$ は逆変換の方につける。そこで $\tilde{f} \to \tilde{f}/N$, $f \to fN$ と定義し直すと

$$\begin{cases} \tilde{f}_m & = \displaystyle\sum_{n=0}^{N-1} f_n\, e^{-2i\pi\frac{mn}{N}} \\ \\ f_n & = \displaystyle\sum_{m=0}^{N-1} \tilde{f}_m\, e^{2i\pi\frac{mn}{N}} \end{cases} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{cases} \tilde{f} & = \mathcal{F}[\,f\,] \\ \\ f & = \mathcal{F}^{-1}[\,\tilde{f}\,] \end{cases} \tag{12}$$

を得る。

ここで $\mathcal{F}$ を順方向 **(forward)** の離散 **Fourier** 変換、$N\mathcal{F}^{-1}$ を逆方向 **(backward)** の離散 **Fourier** 変換という。$\mathcal{F}^{-1}$ の事を離散逆 (inverse) Fourier 変換というが、余り使わない。とりあえず、順方向にも逆方向にも正規化因子がついていないことに気をつけること。

n 階微分は

$$\frac{\mathrm{d}^n f}{\mathrm{d}x^n} = \sum_{m=-N/2}^{N/2-1} (ik_m)^n\, \tilde{f}_m\, e^{2i\pi\frac{mn}{N}} = N\mathcal{F}^{-1}\left[\frac{(ik')^n}{N}\,\mathcal{F}[f]\right] \tag{13}$$

となる。ここで

$$k'_m = \begin{cases} k_m & (0 \le m < N/2) \\ \\ k_{m-N} & (N/2 \le m < N) \end{cases} = \begin{cases} 2\pi\frac{m}{L} \\ \\ 2\pi\frac{m-N}{L} \end{cases} \tag{14}$$

である。微分する為に掛けるものが ik_m ではなく、ik'_m であることに注意。これは元々の定義が $\sum_{m=-N/2}^{N/2-1}$ なのにも関わらず、逆方向の変換が $\sum_{m=0}^{N}$ であるためである。