Einführung in die Fouriertransformation und Signalanalyse

Blockkurs Strukturbiologie/Biophysik HS2010
September 2010 S. Grzesiek
e-mail: stephan.grzesiek@unibas.ch

1 Einleitung

Die Fourieranalyse von periodischen Funktionen spielt in der modernen Signalverarbeitung eine herausragende Rolle. Viele der Anwendungen beruhen auf der direkten Analyse von Frequenzen und dem digitalen Filtern. In diesem Blockkurs wird die Fourieranalyse in der Roentgenkristallographie, der Elektronenmikroskopie und in der Kernspinresonanz gebraucht.

Die folgenden Abschnitte sind teilweise aus den folgenden Büchern adaptiert:

- Forster, “Analysis 1”, Vieweg Verlag, Wiesbaden, 1976.
- Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, “Numerical Recipes in C”, Cambridge University Press, 1988.
- Henry Rattle, “An NMR Primer for Life Scientists”, Partnership Press, Fareham Hants, 1995.

2 Periodische Funktionen

Eine auf ganz $\mathbb{R}$ definierte reell oder komplexwertige Funktion f heisst *periodisch* mit der Periode $L > 0$, falls

$$f(x + L) = f(x) \text{ für alle } x \in \mathbb{R}. \tag{2.1}$$

Natürlich gilt dann auch $f(x + nL) = f(x)$, falls n irgendeine ganze Zahl ($n \in \mathbb{Z}$) ist.

2.1 Räumlich-periodische Funktionen

2.1.1 Kristallgitter

In einem dreidimensionalen, rhombischen (rechtwinkligen) Kristallgitter mit den Gitterkonstanten L_x, L_y, L_z gilt für die Elektronendichte $\rho(x,y,z)$

$$\rho(x,y,z) = \rho(x + n_xL_x, y + n_yL_y, z + n_zL_z), \text{ mit } n_x,n_y,n_z \in \mathbb{Z}. \tag{2.2}$$

zeige Beispiel eines Gitters.

2.1.2 Wasser- und Lichtwellen

Wasser- und Lichtwellen sind, wenn man sie zu einem bestimmten festen Zeitpunkt betrachtet, oft periodische Funktionen im Raum. Die Periodenlänge ist die Wellenlänge λ. Zum Beispiel könnte für die Höhe des Wasser h in einer ebenen Wasserwelle gelten:

$$h(x) = h(x + n\,\lambda) \qquad (2.3)$$

Für das elektrische (E) und magnetische (B) Feld in einer ebenen, elektromagnetischen Welle (Lichtwelle) gilt zu einem festen Zeitpunkt:

$$E(x) = E(x + n\,\lambda) \text{ und } B(x) = B(x + n\,\lambda) \qquad (2.4)$$

2.2 Zeitlich-periodische Funktionen

2.2.1 Wasser-, Licht- und Schallwellen

Auch die zeitliche Entwicklung von ebenen (ungedämpften) Wellen (Wasser, elektromagnetisches Feld, Schallwellen) ist periodisch. Betrachtet man z.B. die zeitliche Entwicklung der Wasserhöhe an einem festen Ort, so gilt:

$$h(t) = h(t + n\,T) \qquad (2.5)$$

Man bezeichnet T als die Periodendauer der Welle. Entsprechende Beziehungen gelten für die elektrischen und magnetischen Felder in einer elektromagnetischen Welle oder für den Luftdruck in einer Schallwelle.

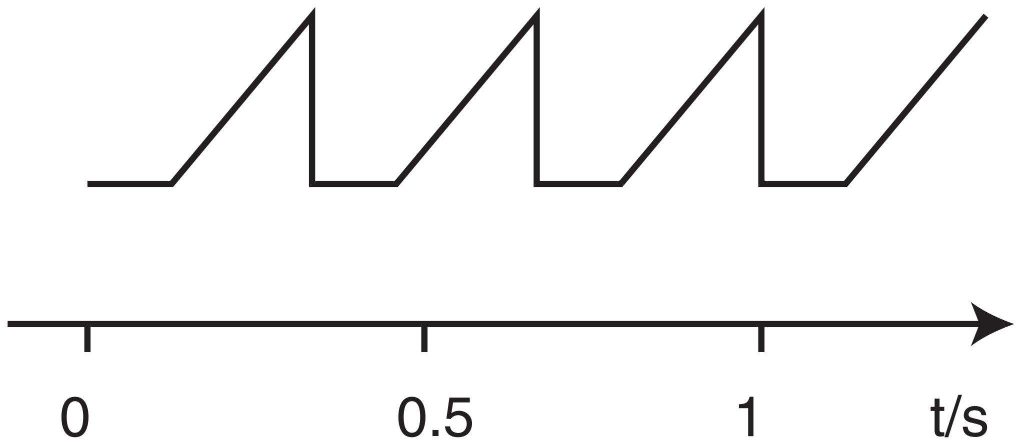
2.3 Zeitliche und räumliche Frequenzen

In vielen Formeln trifft man auf die reziproken Werte der Periodenlänge. Diese werden als Frequenzen bezeichnet:

Zeitfrequenz: Bezeichnung ν oder f: $\nu = 1/T$ (2.6)

Raumfrequenz: $1/L$ oder $1/\lambda$ (heisst auch Wellenzahl)

Beispiel: man bestimme die Periode und Frequenz der folgenden zeitlich-periodischen Funktion:



2.4 Periodische Funktionen auf einem Kreis

Um die Schreibweise zu vereinfachen, kann man die Funktionen mit der Periode L auf eine solche mit der Periode 2π zurückführen. Hat die Funktion f die Perioden L, so hat die Funktion F, definiert durch

$$F(x) := f(Lx/\, 2\pi) \tag{2.7}$$

die Periode 2π. Aus F kann man f durch die Formel

$$f(x) = F(2\pi\, x/L) \tag{2.8}$$

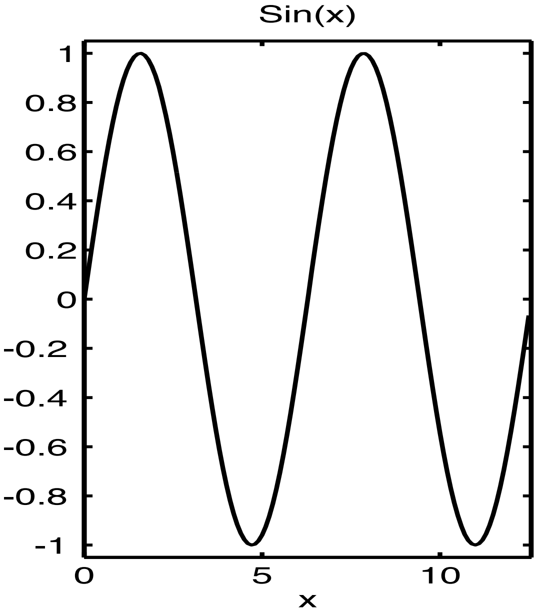
wiedergewinnen.

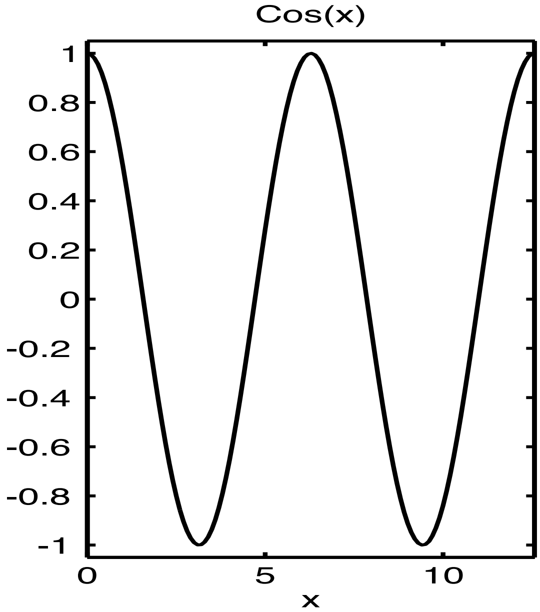
Den Wert $2\pi/L$ bezeichnet man als *Kreisfrequenz*. (2.9)

Beispiel: Bestimme die Kreisfrequenz der obigen Funktion.

2.5 Standardbeispiele von periodischen Funktionen

2.5.1 Sinus- und Cosinuswelle



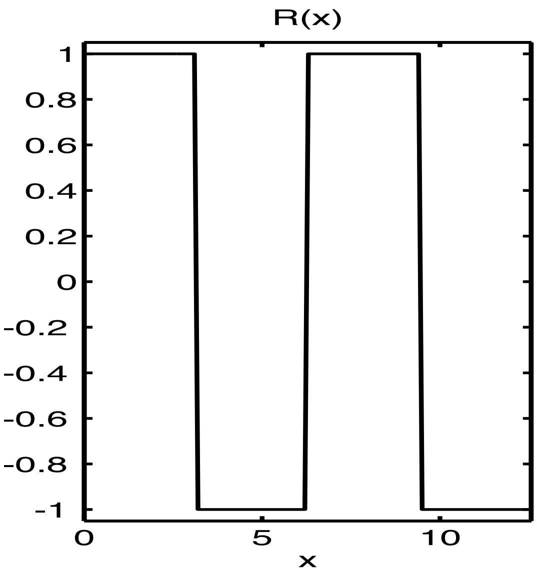


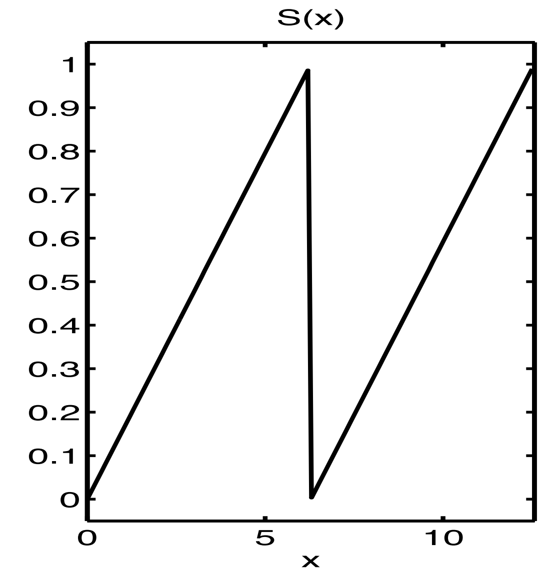
2.5.2 Rechteckwelle

$$R(x) = R(x + 2\pi), R(x) = \begin{cases} 1 \text{ für } 0 \le x < \pi \\ -1 \text{ für } \pi \le x < 2\pi \end{cases} \tag{2.10}$$

2.5.3 Sägezahn

$$S(x) = S(x + 2\pi), S(x) = x / 2\pi, \text{ für } 0 \le x < 2\pi \tag{2.11}$$





3 Fourier Theorem

Das Theorem von Fourier besagt, dass periodische Funktionen (falls sie nicht pathologisch sind) durch Summen von Sinus- und Cosinusfunktionen approximiert werden können.

Mathematisch ausgedrückt gilt das Folgende:

Sei f(x) eine reell- (oder komplexwertige) periodische Funktion, die über das Periodenintervall [0, 2π[integrierbar ist. Dann konvergiert die *Fourierreihe* von f (im quadratischen Mittel) gegen f.

Die *Fourierreihe* ist wie folgt definiert:

$$\frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} (a_k \cos kx + b_k \sin kx) \tag{3.1}$$

wobei a_k und b_k Fourierkoeffizienten heissen. Sie werden wie folgt berechnet

$$\begin{aligned} a_k &= \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x) \cos kx \, dx \\ b_k &= \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x) \sin kx \, dx \end{aligned} \tag{3.2}$$

Salopp ausgedrückt gilt also

$$f(x) \cong \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} (a_k \cos kx + b_k \sin kx) \tag{3.3}$$

wobei das $\cong$ Zeichen für eine bestimmte Art von Konvergenz (im quadratischen Mittel) steht. In den weiteren Beispielen kümmern wir uns nicht um solche Feinheiten, sondern nehmen an, dass beide Ausdrücke ziemlich genau gleich sind.

3.1 Beispiel Sinuswelle

Wir berechnen die Fourierreihe von sin(x). Die Koeffizienten lauten

$a_k = 0,$ für alle k
$b_1 = 1; \quad b_k = 0,$ für $k \neq 1$

Dies ist sehr einfach, da sin(x) bereits eine Fourierreihe ist!

3.2 Beispiel Rechteckwelle

Wir betrachten die oben definierte Rechteckwelle R(x) und berechnen die Fourierkoeffizienten:

$$
\begin{aligned}
a_k &= \frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi} R(x)\cos kx\,dx = \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi} 1\cdot\cos kx\,dx + \frac{1}{\pi}\int_{\pi}^{2\pi} -1\cdot\cos kx\,dx = \\
&= \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi}\cos kx\,dx - \frac{1}{\pi}\int_{\pi}^{2\pi}\cos kx\,dx = \frac{1}{k\pi}\sin kx\Big|_{x=0}^{\pi} - \frac{1}{k\pi}\sin kx\Big|_{x=\pi}^{2\pi} = 0
\end{aligned}
\tag{3.4}
$$

Man kann sich das leicht ohne Integralrechung klar machen, weil sich positive und negative Flächen unter cos kx im Bereich von 0 bis π und im Bereich von π bis 2π für alle Zahlen k=1,2,3, ... immer gegenseitig kompensieren.

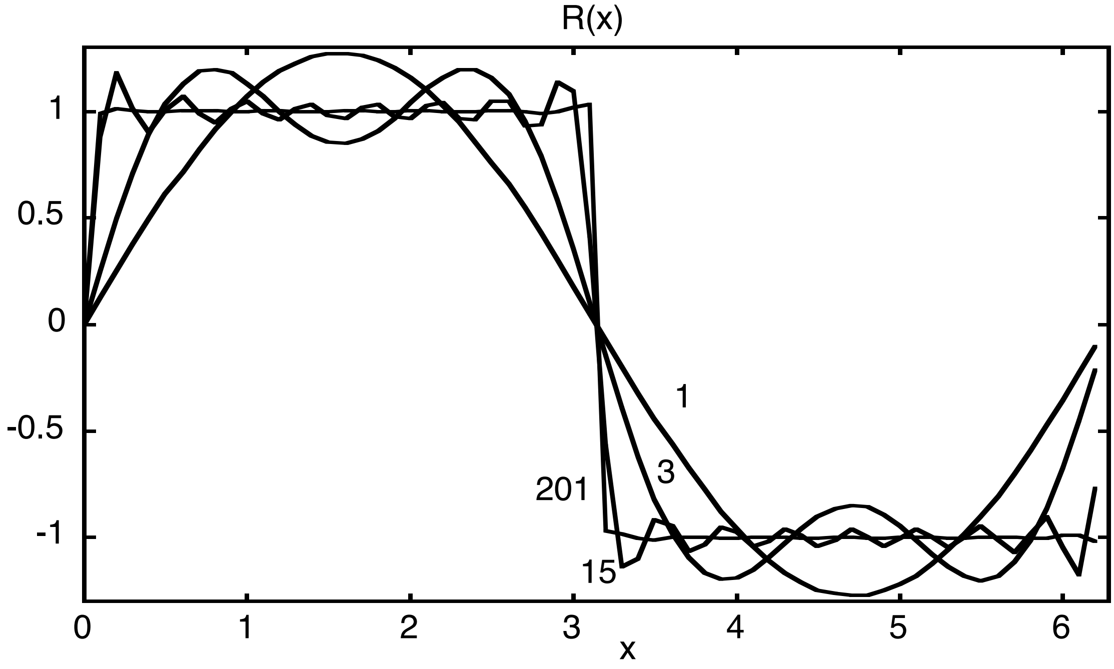
$$
\begin{aligned}
b_k &= \frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi} R(x)\sin kx\,dx = \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi} 1\cdot\sin kx\,dx + \frac{1}{\pi}\int_{\pi}^{2\pi} -1\cdot\sin kx\,dx = \\
&= \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi}\sin kx\,dx - \frac{1}{\pi}\int_{\pi}^{2\pi}\sin kx\,dx = -\frac{1}{k\pi}\cos kx\Big|_{x=0}^{\pi} + \frac{1}{k\pi}\cos kx\Big|_{x=\pi}^{2\pi} \\
&= \begin{cases} -\dfrac{1}{k\pi}(-1-1-1-1) = \dfrac{4}{k\pi}, & \text{für } k \text{ ungerade} \\ -\dfrac{1}{k\pi}(1-1+1-1) = 0, & \text{für } k \text{ gerade} \end{cases}
\end{aligned}
\tag{3.5}
$$

Die Fourierreihe von R(x) lautet also

$$
R(x) \approx \sum_{k=1,3,5,7,..}^{\infty} \frac{4}{k\pi}\sin kx = \frac{4}{\pi}\left(\sin x + \frac{1}{3}\sin 3x + \frac{1}{5}\sin 5x + \frac{1}{7}\sin 7x + ...\right)
\tag{3.6}
$$

Man sieht an dieser Reihe, dass die Funktion R(x) die Kreisfrequenzen 1, 3, 5, 7, usw enthält.

Eine der Anwendungen ist, dass man beliebige periodische Funktionen, durch eine endliche Reihe von Sinusen und Cosinusen approximieren kann:



Das Bild zeigt die Fourierapproximation von R(x) für Fourierreihen, die bei k=1, 3, 15, und 201 abgebrochen wurden.

4 Komplexe Zahlen

Viele der Rechnungen über periodische Funktionen und Schwingungsvorgänge werden einfacher, wenn man mit komplexen Zahlen rechnen kann.

Man definiert die imaginäre Einheit *i* als neue Zahl mit der Eigenschaft:

$$i = \sqrt{-1} \tag{4.1}$$

Diese Zahl ist nicht in der Menge der reellen Zahle $\mathbb{R}$ enthalten, sondern gehört zu den komplexen Zahlen $\mathbb{C}$.

Man kann eine beliebige komplexe Zahl $z \in \mathbb{C}$ wie folgt schreiben:

$$z = x + i\, y, \text{ wobei } x,y \in \mathbb{R} \tag{4.2}$$

Der Realteil von z ist dann definiert als Re(z) = x.
Der Imaginärteil von z ist dann definiert als Im(z) = y

Zwei komplexe Zahlen sind genau dann gleich, wenn ihre Real- und Imaginärteile gleich sind.

4.1 Rechenregeln

$$\begin{aligned} i &= \sqrt{-1} \\ i^2 &= -1 \\ i^3 &= i^2 i = -i \\ i^4 &= i^2 i^2 = (-1)(-1) = 1 \\ &\text{usw.} \end{aligned} \tag{4.3}$$

4.1.1 Addition und Multiplikation

Sei $z_1 = x_1 + i\,y_1$ und $z_2 = x_2 + i\,y_2$. Dann gilt für Addition und Multiplikation

$$\begin{aligned} z_1 + z_2 &= (x_1 + iy_1) + (x_2 + iy_2) = \\ &= (x_1 + x_2) + i(y_1 + y_2) \end{aligned} \tag{4.4}$$

$$\begin{aligned} z_1 \cdot z_2 &= (x_1 + iy_1) \cdot (x_2 + iy_2) = \\ &= x_1x_2 + ix_1y_2 + iy_1x_2 - y_1y_2 = \\ &= (x_1x_2 - y_1y_2) + i(x_1y_2 + y_1x_2) \end{aligned} \tag{4.5}$$

4.1.2 Komplexe Konjugation

Das komplex konjugierte von $z = x + iy$ wird definiert als

$$z^* = x - iy \tag{4.6}$$

4.1.3 Betrag einer komplexen Zahl

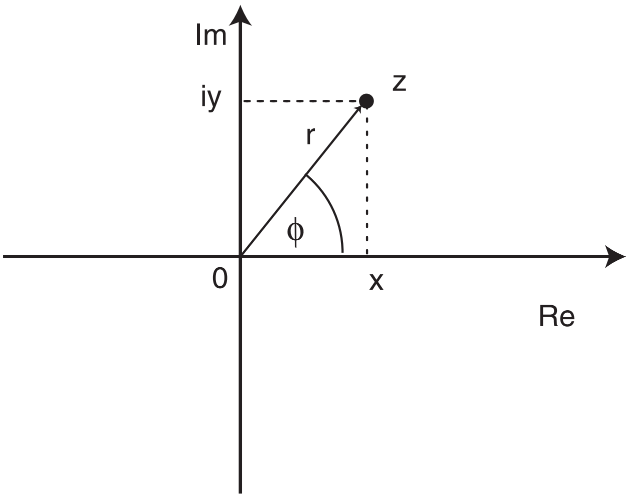
Für den Betrag von z definiert man

$$\begin{aligned} |z| &= \sqrt{z \cdot z^*} = \sqrt{(x + iy)(x - iy)} = \\ &= \sqrt{x^2 + ixy - ixy - i^2y^2} = \sqrt{x^2 + y^2} \end{aligned} \tag{4.7}$$

Das bedeutet, dass der Betrag eine positive reelle Zahl ist.

4.2 Gauss'sche Zahlenebene

Komplexe Zahlen werden oft in der Gauss'schen Zahlenebene dargestellt. Dabei malt man den Realteil in Richtung der x-Achse und den Imaginärteil in Richtung der y-Achse.



Man kann dann leicht die Polardarstellung verstehen. Der Punkt z = x + iy hat vom Nullpunkt 0 den Abstand r und der Vektor 0->z schliesst mit der x-Achse den Winkel ϕ ein. ϕ wird auch häufig die Phase genannt. Es gilt:

$$\begin{aligned} r &= |z| = \sqrt{x^2 + y^2} \\ \cos\phi &= x/r \\ \sin\phi &= y/r \\ \tan\phi &= y/x \\ \phi &= \arctan y/x = \arccos x/r = \arcsin y/r \\ z &= r(\cos\phi + i\sin\phi) = x + iy \end{aligned} \tag{4.8}$$

4.3 Komplexe e-Funktion

Für die e-Funktion eines rein imaginären Arguments ($i\phi$) gilt die Eulersche Beziehung

$$e^{i\phi} = \cos\phi + i\sin\phi = "cis"(\phi), \quad \phi \text{ reell} \tag{4.9}$$

Damit wird die Polardarstellung besonders einfach

$$z = |z|(\cos\phi + i\sin\phi) = |z|e^{i\phi} \tag{4.10}$$

Es gilt dann für Sinus und Cosinus

$$\cos\phi = \frac{e^{i\phi} + e^{-i\phi}}{2}$$
$$\sin\phi = \frac{e^{i\phi} - e^{-i\phi}}{2i} \tag{4.11}$$

Die Berechnung von komplexen Multiplikationen wird mit der Euler-Beziehung sehr einfach:

$$z_1 \cdot z_2 = |z_1| e^{i\phi_1} \cdot |z_2| e^{i\phi_2} = |z_1| |z_2| e^{i\phi_1} e^{i\phi_2} = |z_1| |z_2| e^{i(\phi_1 + \phi_2)} \tag{4.12}$$

Die Multiplikation mit der komplexen Zahl z_2 kann daher als eine Streckung um den Faktor $|z_2|$ und eine Drehung um den Winkel ϕ_2 aufgefasst werden

5 Komplexe Fourierreihe

Mit der komplexen e-Funktion wird die Schreibweise für die Fourierreihe ebenfalls besonders einfach. Man schreibt für die Fourierreihe der über das Intervall $[0, 2\pi]$ periodischen Funktion f(x)

$$f(x) \cong \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k e^{ikx} \tag{5.1}$$

wobei für die Koeffizienten c_k gilt:

$$c_k = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} f(x) e^{-ikx}\, dx = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} f(x)\left[\cos(-kx) + i\sin(-kx)\right] dx \tag{5.2}$$

Man überzeugt sich mit der Eulerschen Beziehung, dass dies äquivalent ist zu:

$$c_0 = \frac{a_0}{2}$$
$$c_k = \frac{1}{2}(a_k - ib_k), c_{-k} = \frac{1}{2}(a_k + ib_k) \quad \text{für } k \geq 1 \tag{5.3}$$

Beispiel: für die oben angegebene Rechteckwelle R(x) gilt in der komplexen Schreibweise:

$$
\begin{aligned}
a_k &= 0 \\
b_k &= \begin{cases} \dfrac{4}{k\pi}, & \text{für } k \text{ ungerade} \\ 0, & \text{für } k \text{ gerade} \end{cases} \\
c_k &= \frac{-2i}{k\pi}, c_{-k} = \frac{2i}{k\pi}, \text{ für } k \text{ ungerade und } k \geq 1 \\
c_k &= 0, \text{ sonst}
\end{aligned}
\tag{5.4}
$$

6 Diskrete Fourieranalyse im Computer

Signale im Computer sind meist nicht als kontinuierliche Funktionen, sondern als diskrete Punkte dargestellt. Zum Beispiel tastet ein Analog-Digitalkonverter ein Audiosignal ca. alle 20 μs ab. Dadurch entsteht eine Serie von Intervallpunkten, z.B. X_m = m * dw = 0, 20, 40, 60, ... μs (m = 0, 1, 2, ..., N-1), für die zeitliche Signale $y_m = f(X_m)$ vorliegen. Das Sample Intervall dw wird häufig als dwell time bezeichnet. Falls man N gesamte Punkte aufgenommen hat, ergibt sich eine Gesamtlänge des überstrichenen Zeitbereichs von L = N*dw. Wir verwenden wie oben die Normierung auf den Kreis, so dass $x_m = 2\pi * X_m/L = 2\pi * m * dw/(N * dw) = 2\pi * m/N$ und $y_m = f(X_m) = F(x_m) = F(2\pi * m/N)$.

Der Computer führt die Berechnung der Koeffizienten c_k der Fourierreihe von $F(x_m)$ dadurch aus, dass er die Integration durch eine Summation ersetzt.

$$
\begin{aligned}
c_k &= \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} F(x)e^{-ikx}\,dx \approx \frac{1}{2\pi}\sum_{m=0}^{N-1} F(x_m)e^{-ikx_m}\Delta x = \frac{1}{2\pi}\sum_{m=0}^{N-1} y_m e^{-i\frac{2\pi km}{N}}\frac{2\pi}{N} \\
c_k &= \frac{1}{N}\sum_{m=0}^{N-1} y_m e^{-i\frac{2\pi km}{N}}
\end{aligned}
\tag{6.1}
$$

Dabei wurde $\Delta x = \dfrac{2\pi}{N}$ als Schrittweite für die numerische Integration verwendet. Diese Art von Fourieranalyse wird als *diskrete Fouriertransformation* (DFT) bezeichnet. Falls der berechnete Koeffizient c_k von Null verschieden ist, so bedeutet das, dass im ursprünglichen Signal eine Frequenz der Grösse k/L vorhanden war. Dies kann man zur Klanganalyse verwenden.

Die Berechnung der Koeffizienten c_k erfolgt meist mit dem *Fast Fourier Transform* (FFT) Algorithmus, der von Cooley und Tuckey Mitte der 60er Jahre des 20. Jahrhunderts entwickelt wurde. Dieser Algorithmus setzt voraus, dass die Zahl der Punkte eine Potenz von 2 ist. Falls das ursprüngliche Signal nicht aus einer solchen Zahl von Punkten besteht, kann man dies erreichen, indem man einfach noch Punkte anhängt, deren Wert Null ist. Dies nennt man auch *zero filling*.

Aus den Koeffizienten c_k kann man mit Hilfe der inversen Fouriertransformation das ursprüngliche Signal wiedergewinnen. Es gilt:

$$y_m = \sum_{k=0}^{N-1} c_k e^{+i\frac{2\pi km}{N}} \tag{6.2}$$

Man kann also zwischen den Koeffizienten c_k und den gemessenen Funktionswerten y_m durch diese beiden Summenformeln beliebig hin- und herspringen. Die beiden Darstellungen sind vollkommen äquivalent und bilden ein so genanntes Fouriertransformationspaar: $y_m \Leftrightarrow c_k$. Die Darstellung y_m ist im Orts- oder Zeitraum, die Darstellung c_k im Frequenzraum.

Dies kann man zum Beispiel dazu benutzen, digitale Filter zu konstruieren: man berechnet zuerst die Koeffizienten c_k, unterdrückt dann die Frequenzen, die unerwünscht sind, indem man die Koeffizienten für diese Frequenzen gleich Null setzt, und transformiert wieder zurück zum Signal y_m. Das neue Signal enthält die unterdrückten Frequenzen nicht mehr.

7 Beispiel Klanganalyse mit Matlab

7.1 Matlab-Routine zum Lesen, Spielen, Fourieranalyse von Sound

```
function demofft(filename)

% read sound file
wd = cd;
soundpath = 'AIFFSOUNDS';
fn = [ wd ':' soundpath ':' filename ];
yt = readAIFF(fn); % this is the time domain data


freq = 22050.0;
td = length(yt);

sound(yt)

timestart = 0;
timedelta = 1/freq;

plotdata( real(yt), td, timestart, timedelta, ...
      'real part of time domain data', 'time [s]' );

% calculate next power of 2 of total data points
p2 = pow2(ceil(log(length(yt))/log(2)));

% zero pad total number of points once
tnp = p2*2;

% this is the Fourier transform:

yf = fftshift(fft(yt,tnp));

freqdelta = freq/tnp;
freqstart = -freq/2;

plotdata( real(yf), tnp, freqstart, freqdelta, ...
      'real part of frequency domain data', 'frequency [Hz]' );
plotdata( imag(yf), tnp, freqstart, freqdelta, ...
      'imaginary part of frequency domain data', 'frequency [Hz]' );
plotdata( pspectraldensity(yf), tnp/2, 0, freqdelta, ...
      'power spectral density of frequency domain data', 'frequency
[Hz]' );
```

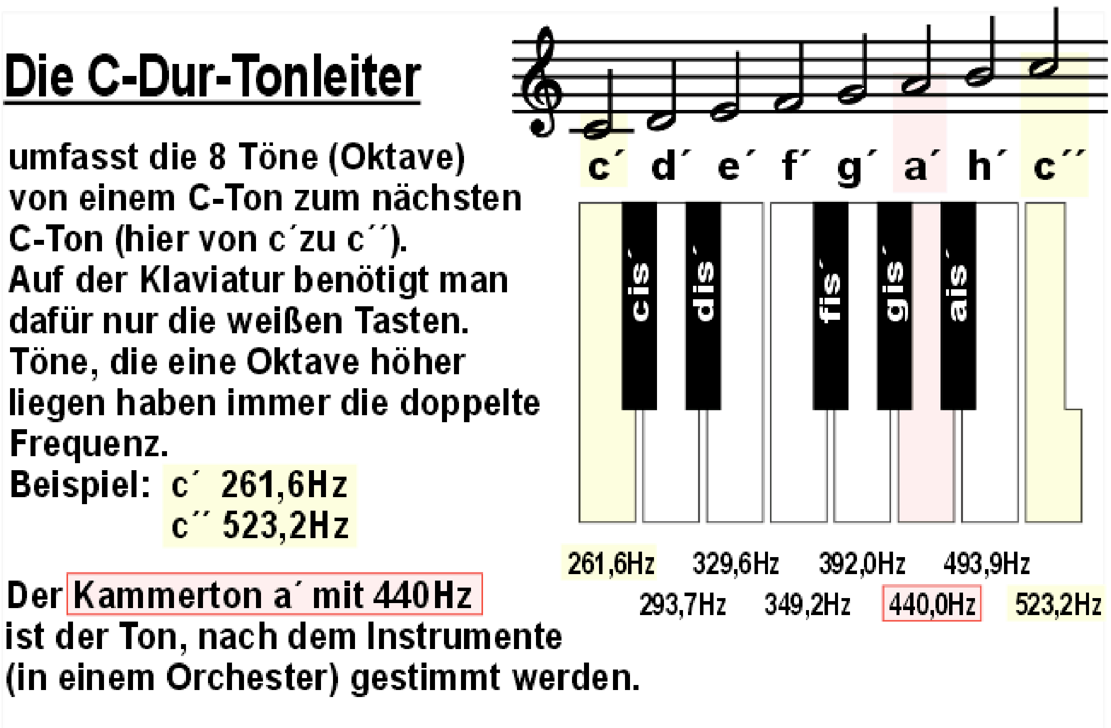
7.2 Powerspektrum

Oft ist man nur daran interessiert zu wissen, welche Frequenzen vorhanden sind und nicht, ob sie zu Sinus oder Cosinustermen gehören. In diesem Fall berechnet man das Absolutquadrat der Fourierkoeffizienten $|c_k|^2 = c_k c_k^*$. Falls das ursprüngliche Signal reell war, gilt $c_k c_k^* = c_{-k} c_{-k}^*$. Das heisst, dass man nur den Fall $k > 0$ (positive Frequenzen) anschauen muss. Die Grösse $|c_k|^2$ bezeichnet man als die spektrale Leistungsdichte im Frequenzintervall [k/L, (k+1)/L].

7.2.1 Matlab-Routine zur Berechnung des Powerspektrums

```
function y=pspectraldensity( yf )
%calculate power spectral density for positive frequencies only;

tnp = length(yf)/2;
yf  = yf( tnp+1: 2*tnp );        % take only positive Frequencies, i.e.
                                  % right half of points
                                  % from tnp+1 to 2*tnp
y = real(yf.*conj(yf));          % calculate absolute value squared
```



8 Kontinuierliche Fouriertransformation

Falls eine Funktion nicht periodisch ist, d.h. sich nicht nach dem Intervall L wiederholt, kann man trotzdem noch eine Fouriertransformation definieren, indem man die Intervallgrenzen gegen unendlich gehen lässt und von der Summation zum Integral übergeht. Man definiert *F(k)* als die Fouriertransformierte von *f(x)*:

$$F(k) \equiv \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-ikx}dx \tag{8.1}$$

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} F(k)e^{ikx}dk \tag{8.2}$$

Die beiden Funktionen *f(x)* und *F(k)* werden als Fouriertransformationspaare bezeichnet. Man sieht an den obigen Gleichung, dass man beliebig zwischen den beiden Darstellungen der Funktion hin- und herwechseln kann, indem man das Integral ausführt.

Bemerkung: Im Computer verhalten sich Fourierreihe und Fourierintegral identisch, da man sowieso nur diskrete Punkte hat und nur endlich viele davon nehmen kann. D.h. die Integration über ein unendliches Intervall wird durch eine Summation über einzelne Punkte in einem genügend grossen Intervall ersetzt. Genügend gross bedeutet, dass das Signal ausserhalb dieses Bereiches genügend nahe bei Null ist.

9 Mehrdimensionale Fourierreihen und -integrale

Falls Funktionen von mehreren Variablen abhängen, z.B. Ort x,y,z, und man möchte eine Fourieranalyse durchführen, dann muss über die mehreren Variablen unabhängig voneinander summiert oder integriert werden. Im dreidimensional Fall, gilt zum Beispiel für die Fourierreihen:

$$f(x,y,z) \cong \sum_{h=-\infty}^{\infty} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} c_{hkl} e^{i(hx+ky+lz)} \tag{9.1}$$

wobei für die Koeffizienten c_{hkl} gilt:

$$c_{hkl} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} f(x,y,z) e^{-i(hx+ky+lz)}\, dxdydz \tag{9.2}$$

Ebenso findet man für die kontinuierliche Fouriertransformation:

$$f(x,y,z) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} F(h,k,l) e^{i(hx+ky+lz)} dhdkdl \tag{9.3}$$

$$F(h,k,l) \equiv \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x,y,z) e^{-i(hx+ky+lz)} dxdydz \tag{9.4}$$

Analoges gilt für den zwei-dimensionalen oder n-dimensionalen Fall. Wichtige Beispiele für zwei- und dreidimensionale Fourierreihen finden sich in der Elektronenmikroskopie zweidimensionaler Membranproteingitter und in der normalen Röntgenkristallographie dreidimensionaler Kristalle. Ein- bis vierdimensionale kontinuierliche Fouriertransformationen findet man in der NMR-Spektroskopie.

10 Elementare Eigenschaften der Fouriertransformation

Die folgenden wichtigen Eigenschaften gelten für die kontinuierliche Fouriertransformation und in analog übertragener Form auch für Fourierreihen und die diskrete Fouriertransformation im Computer.

Seien $f(x) \Leftrightarrow F(k) = FT[f(x)]$ und $g(x) \Leftrightarrow G(k) = FT[g(x)]$ Fouriertransformationspaare, a und b komplexe Zahlen, und c, x_0, k_0 reelle Zahlen. Dann gilt:

- **Linearität:**

$$FT[a \cdot f(x) + b \cdot g(x)] = a \cdot FT[f(x)] + b \cdot FT[g(x)] = a \cdot F(k) + b \cdot G(k) \quad (10.1)$$

Dies besagt, dass die Fouriertransformierte eines Signals, das aus der Summe von zwei Einzelsignalen besteht, gleich der Summe der Fouriertransformierten der Einzelsignale ist.

- **Skalierung im Orts- oder Zeitraum:**

$$f(s \cdot x) \Leftrightarrow \frac{1}{|s|} F(\frac{k}{s}) \quad (10.2)$$

Wird die Zeit [oder der Ort] (x) mit einem Faktor s skaliert, so wird die Frequenz (k) mit dem inversen Faktor skaliert.

- **Skalierung im Frequenzraum:**

$$\frac{1}{|s|} f(\frac{x}{s}) \Leftrightarrow F(s \cdot k) \quad (10.3)$$

Wird die Frequenz (k) mit einem Faktor s skaliert, so wird die Zeit [oder der Ort] (x) mit dem inversen Faktor skaliert.

- **Zeit- oder Ortsverschiebung:**

$$f(x - x_0) \Leftrightarrow F(k) e^{-ikx_0} \quad (10.4)$$

Wird die Zeit [oder der Ort] (x) um eine Konstante x_0 verschoben, so bekommt die Fouriertransformierte einen frequenzabhängigen Phasenfaktor.

- **Frequenzverschiebung:**

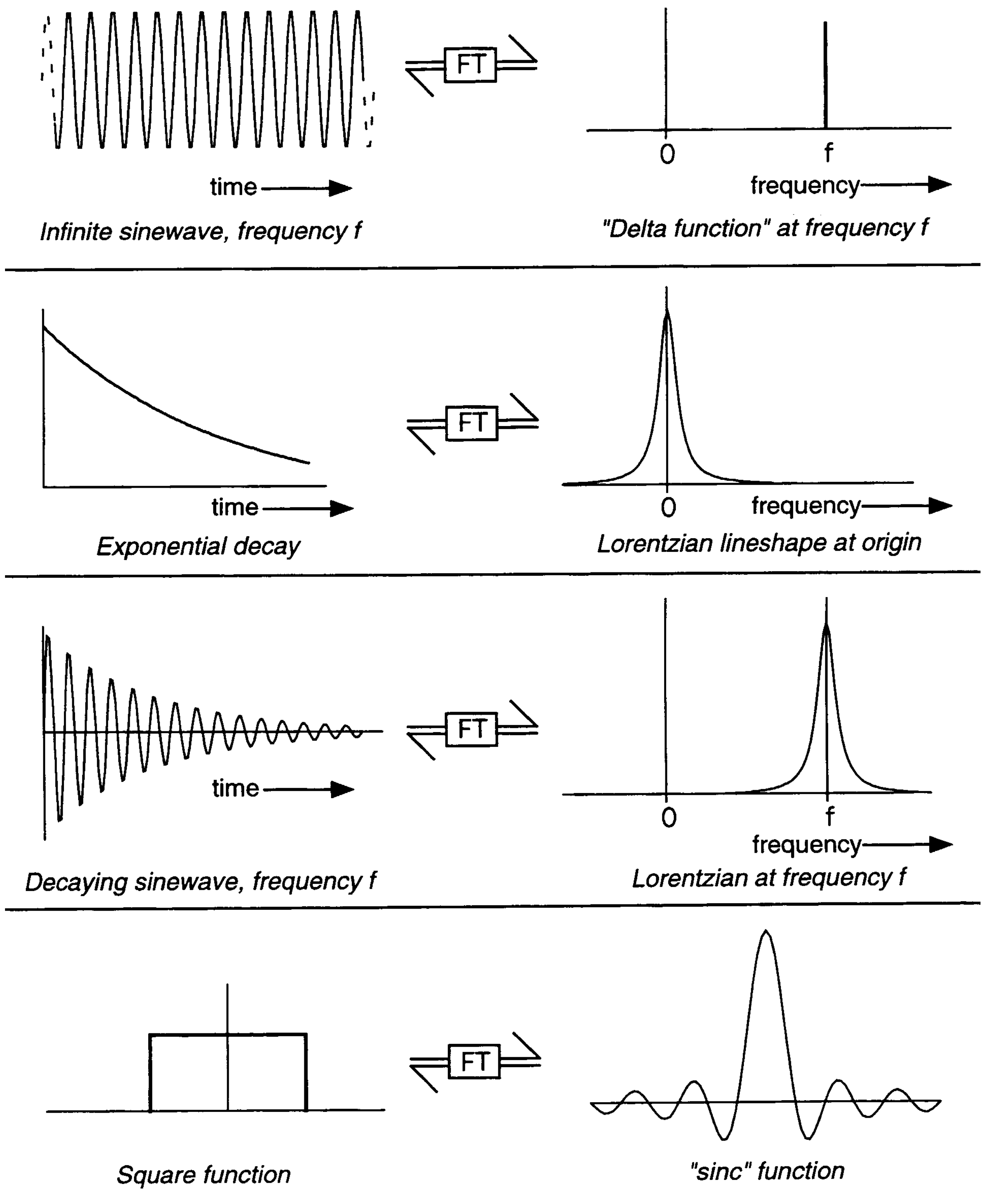
$$f(x) e^{ik_0 x} \Leftrightarrow F(k - k_0) \quad (10.5)$$

Wird die Frequenz um eine Konstante k_0 verschoben, so bekommt die inverse Fouriertransformierte einen orts- [oder zeit-] abhängigen Phasenfaktor.

11 Typische Fouriertransformationspaare

Box 2.3: Fourier Transform Pairs

Fourier transformation is a mathematical process (here represented by FT) which interconverts two functions. Below are Fourier pairs which are important in NMR.



12 Faltungstheorem

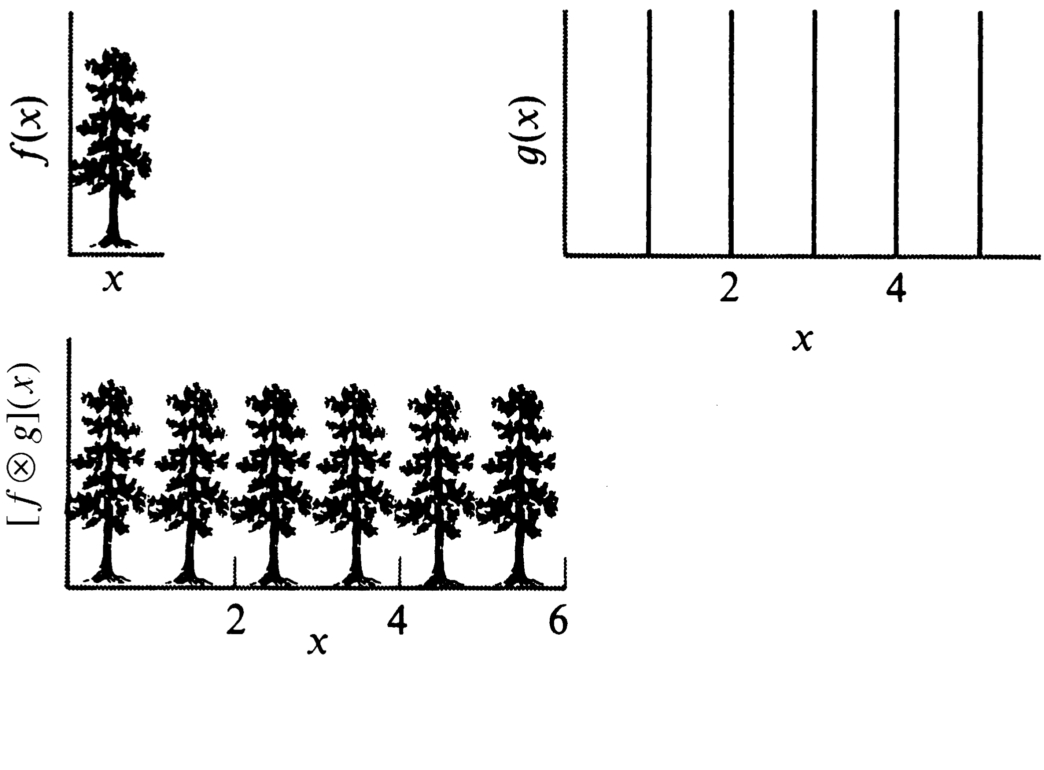
Seien $f(x) \Leftrightarrow F(k) = FT[f(x)]$ und $g(x) \Leftrightarrow G(k) = FT[g(x)]$ Fouriertransformationspaare und s eine reelle Zahl.

Die Faltung (Konvolution) der beiden Funktionen f und g, Bezeichnung $f \otimes g$, ist folgendermassen definiert:

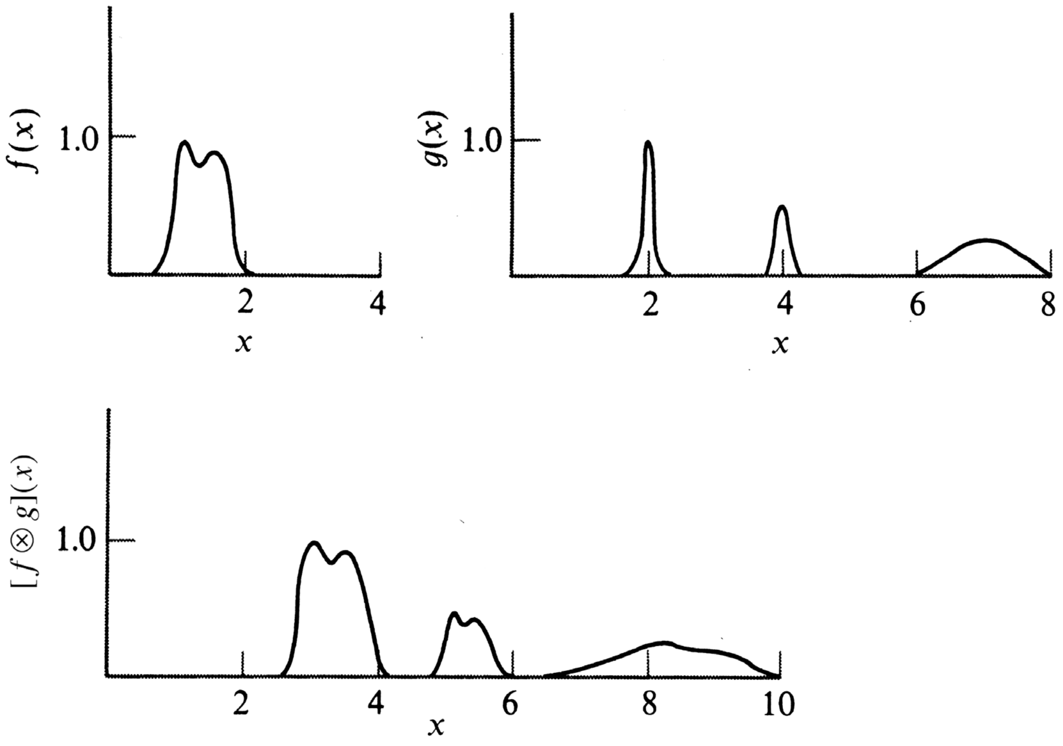
$$[f \otimes g](x) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} f(s) \cdot g(x-s)ds \tag{12.1}$$

Faltungen spielen zum Beispiel bei der Analyse von Signalverzerrungen durch einen Filter oder bei der Zusammensetzung eines komplexen Bildes aus sich wiederholenden Einzelmotiven eine Rolle.

Beispiel: eindimensionale Faltung der Funktionen eine Baumes f mit einem Gitter (eine Serie von Deltafunktionen) g (Cantor Schimmel)



Beispiel: eindimensionale Faltung der Funktionen *f* und *g* (Cantor Schimmel)

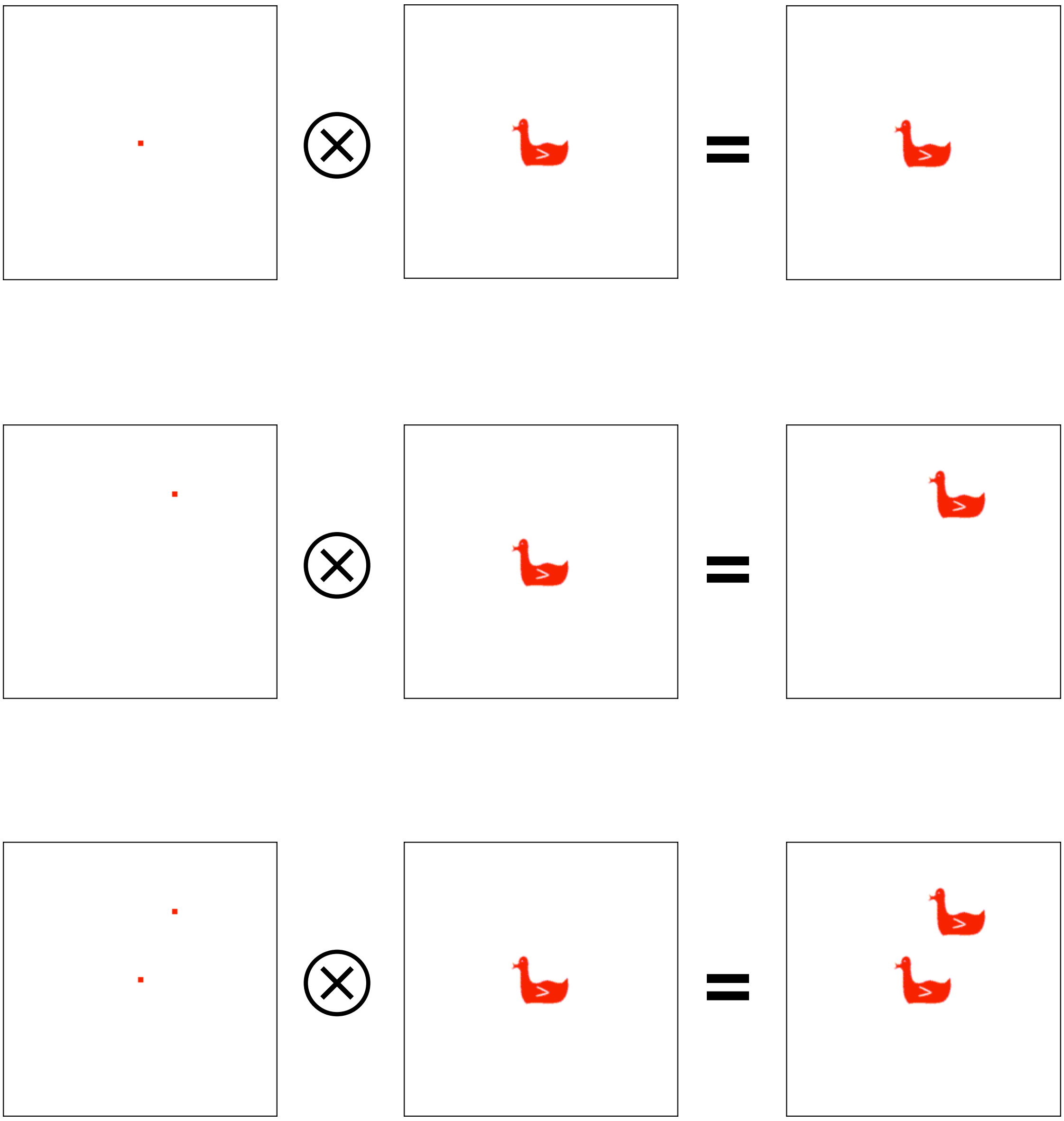


Das Faltungstheorem macht die Berechnung von Faltungen besonders einfach. Es besagt:

$$[f \otimes g](x) \Leftrightarrow F(k) \cdot G(k) \tag{12.2}$$

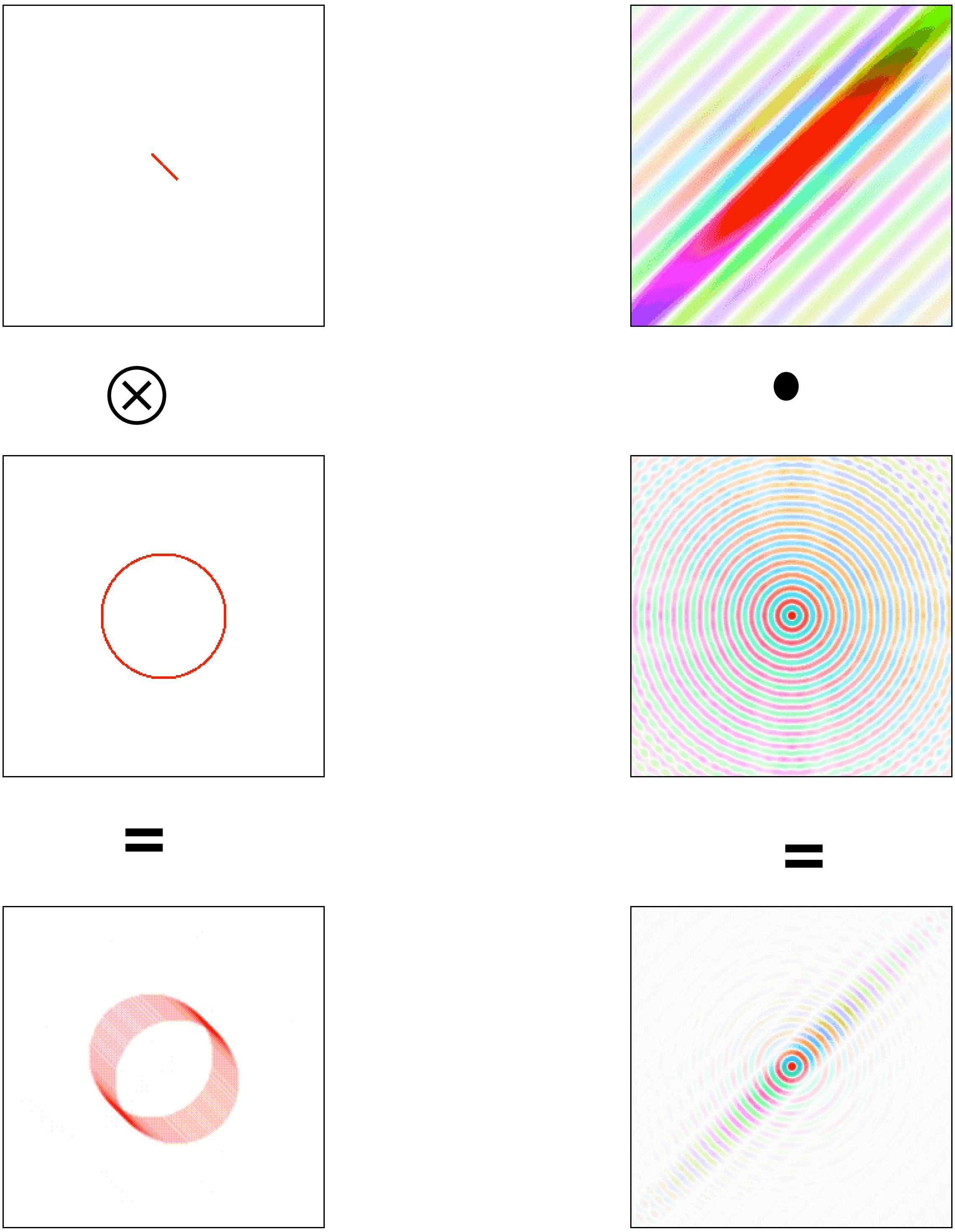
Mit anderen Worten: die Fouriertransformation einer Faltung zweier Funktionen ist einfach das Produkt der Fouriertransformierten der Einzelfunktionen.

Beispiel: zweidimensionale Faltung



Beispiel: zweidimensionale Faltung – eine Linie mit einem Kreis gefaltet

Normaler Raum **Fourier Raum**



13 Übungen

13.1 Komplexe Zahlen

13.1.1 Summe und Produkt von komplexen Zahlen

Gegeben sind die komplexen Zahlen z_1 und z_2. Berechnen Sie die angegebenen Summen und Produkte und bringen Sie sie in die Standardform $x+iy$:

$$z_1 = -1 + i2,\ z_2 = 2 - i3$$

$z_1 + z_2 =$

$2z_1 - 3z_2 =$

$z_1 \cdot z_2 =$

$z_1 \cdot z_2^* =$

$z_1 \cdot z_1^* =$

13.1.2 Division mit komplexen Zahlen

In der Vorlesung wurde nicht behandelt, wie man durch eine komplexe Zahl teilt. Wie im Reellen gilt natürlich auch für die komplexen Zahlen a,b, z:

$$z = \frac{a}{b} \Leftrightarrow a = z \cdot b \quad \text{für } b \neq 0$$

Man bring die Quotienten a/b auf Standardform $z = x + iy$, indem man den Bruch im Zähler und im Nenner mit dem konjugiert Komplexen des Nenners erweitert. Was passiert dann?

Man berechne:

$$\frac{1}{i} =$$

$$\frac{2+3i}{3-2i} =$$

13.1.3 Standardform und Polarform

Neben der Standardform x+iy kann man komplexe Zahlen auch in der Exponentialdarstellung mit Polarkoordinaten r exp(iϕ) schreiben. Wandeln Sie die gegebenen Ausdrücke in die jeweils andere Form um.

$i =$

$3 =$

$3 - 4i =$

$2e^{i\frac{\pi}{4}} =$

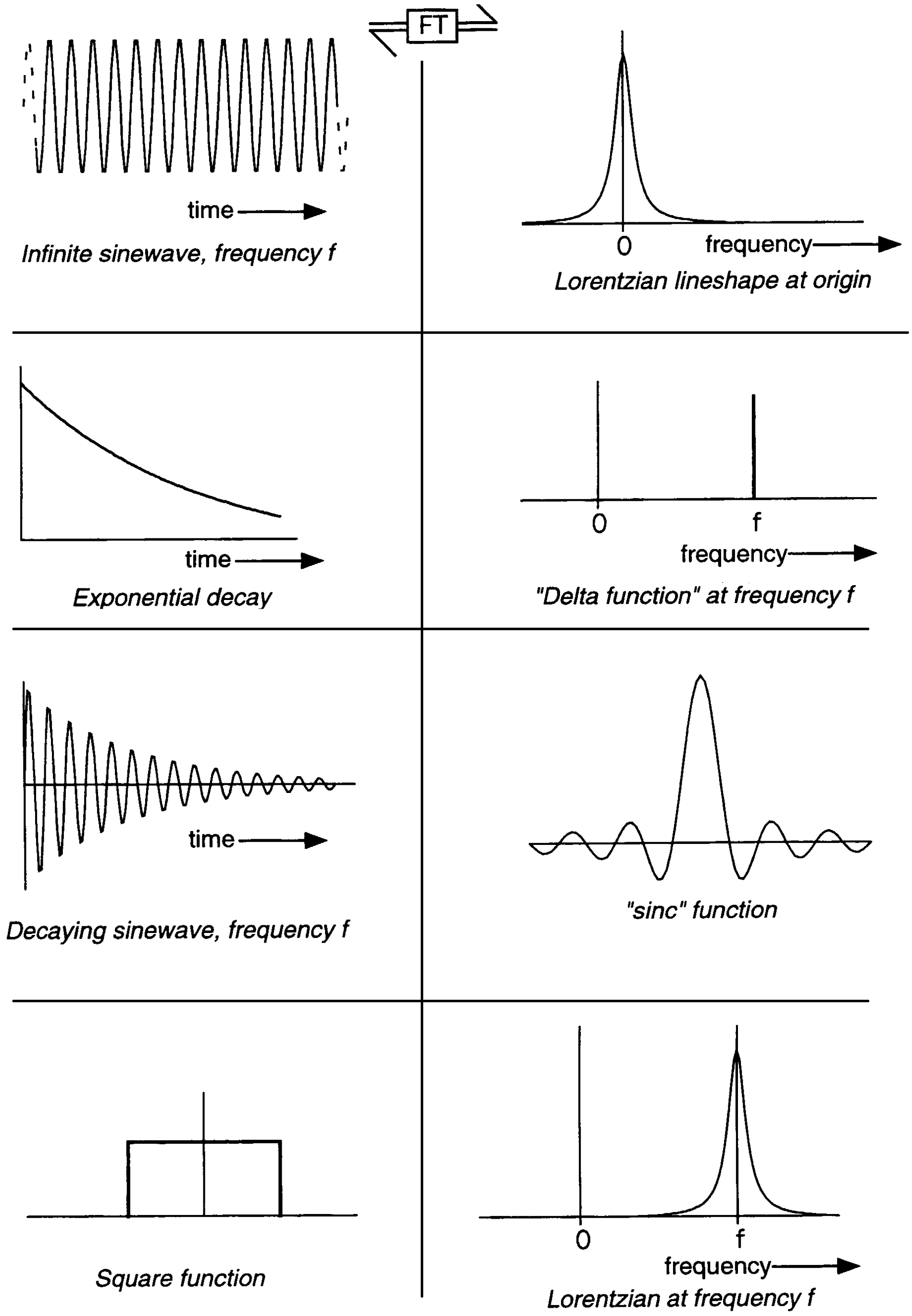
$1 + i =$

$(1 + i)^{4711} =$

13.2 Fouriertransformation

13.2.1 Fouriertransformationspaare

Welche der angegebenen Funktionen im Zeit- und Frequenzraum bilden Fouriertransformationspaare?



13.2.2 Fourierreihe 1

Man bestimme die reellen Fourierkoeffizienten a_k und b_k von

f(x) = 10

f(x) = sin(x)

f(x) = 3 cos(3x) + 7 sin(2x)

f(x) = 1001 sin(300x) + 3 cos(3x) + 7 sin(2x) + π

13.2.3 Fourierreihe 2

1. Man beweise mit Hilfe der Euler'schen Formel

$$\cos^3(x) = \frac{1}{4}\cos(3x) + \frac{3}{4}\cos(x)$$

2. Man bestimme die reellen Fourierkoeffizienten a_k und b_k dieser Funktion

13.2.4 Fourierreihe 3

Gegeben ist die folgende Rechteckfunktion:

$$T(x) = T(x+2\pi), T(x) = \begin{cases} 1 \text{ für } 0 \le x < \frac{\pi}{2} \\ 0 \text{ für } \frac{\pi}{2} \le x < \frac{3\pi}{2} \\ 1 \text{ für } \frac{3\pi}{2} \le x < 2\pi \end{cases}$$

1. Man male die Funktion im Bereich [-2π, 2π] auf.

2. Man berechne die komplexen Fourierkoeffizienten $c_k = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} T(x)e^{-ikx}\,dx$.

Hinweise:

1. Das Integral über die komplexe e-Funktion ist (wie im Reellen) gegeben als:

$$\int_a^b e^{cx}\,dx = \frac{1}{c}e^{cx}\Big|_{x=a}^{b} = \frac{1}{c}(e^{cb} - e^{ca})$$

wobei c eine beliebige komplexe Zahl ist, und a und b die reellen Integrationsgrenzen angeben.

2. Für beliebige Integrale über die Periodendauer L einer periodischen Funktion f gilt:

$$\int_0^L f(x)\,dx = \int_a^{L+a} f(x)\,dx$$

d.h. man kann das Integrationsintervall um eine Strecke a verschieben. Warum ist das so? Man kann diese Eigenschaft dazu benutzen, um das Integrationsintervall für das Fourierintegral auf den Bereich von -π bis π zu verschieben. Dies macht die Rechnung schneller (nicht unbedingt notwendig).

3. Man berechne aus den komplexen Koeffizienten die reellen Koeffizienten:

$$a_0 = 2c_0$$
$$a_k = c_k + c_{-k} \quad \text{für } k \geq 1$$
$$b_k = i(c_k - c_{-k}) \text{ für } k \geq 1$$

4. Man schreibe die ersten 3 Glieder der reellen Fourierreihe auf:

$$f(x) \cong \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} (a_k \cos kx + b_k \sin kx)$$

*13.2.5 Kontinuierliche Fouriertransformation 1**

1. Man mache sich den Verlauf der Funktion

$$f(x) = \begin{cases} \cos(k_0 x)\exp(-Rx), & \text{für x } \geq 0 \\ 0, & \text{für x } < 0 \end{cases}$$

im Bereich [0, 2π] mit R > 0 klar. Man benutze z.B. k = 3, R = 0.2.

2. Man berechne die kontinuierliche Fouriertransformierte $F(k) \equiv \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-ikx}dx$

Hinweise:

1. Man schreibe den Cosinus als Summe von e-Funktionen: $\cos\phi = \frac{e^{i\phi} + e^{-i\phi}}{2}$

2. Man benutze $e^a e^b = e^{a+b}$ um die Exponenten zu vereinfachen.

3. Das Integral über die komplexe e-Funktion ist (wie im Reellen) gegeben als:

$$\int_a^b e^{cx}\,dx = \frac{1}{c}e^{cx}\Big|_{x=a}^{b} = \frac{1}{c}(e^{cb} - e^{ca})$$

wobei c eine beliebige komplexe Zahl ist, und a und b die reellen Integrationsgrenzen angeben.
4. $e^{-\infty} = 0$

3. Man berechne den Realteil von *F(k)* und male seinen Verlauf auf. Man berechne die Halbwertsbreiten der sich ergebenden Lorentzlinien. Wie skalieren sie mit R?

*13.2.6 Kontinuierliche Fouriertransformation 2**

Die Funktion *f(x)* sei definiert als:

$$f(x) = \begin{cases} 1, \text{ für } |x| < a,\ a > 0. \\ 0, \text{ sonst} \end{cases}$$

1. Man berechne die kontinuierliche Fouriertransformierte $F(k) \equiv \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-ikx}dx$

2. Man mache sich den Verlauf von *F(k)* klar. Wie hängt die Breite der Oszillationen von *F(k)* von a ab?

Bemerkung: die Funktion $\frac{\sin x}{x}$ wird auch als sinc(x) bezeichnet. Ihre Oszillationen nennt man im Jargon „sinc wiggles". Durch Multiplikation von *f(x)* mit einer Filterfunktion, welche die Ränder sanft nach Null drückt, können die Oszillationen wesentlich reduziert werden. Siehe auch Abschnitt 11.

*Vertiefungsaufgabe