



KATEDRA INFORMATIKY
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY
UNIVERZITA KOMENSKÉHO, BRATISLAVA

FOURIEROVA TRANSFORMÁCIA, JEJ PRÍBUZNÍ

A ICH POUŽITIE

(bakalárska práca)

PETER PEREŠÍN

Vedúci: Mgr. Michal Forišek

Bratislava, 2009

Čestne prehlasujem, že som túto bakalársku prácu
vypracoval samostatne s použitím citovaných zdro-
jov.

.....

Obsah

1	Úvod	1
2	Fourierova transformácia	3
2.1	Definícia	3
2.2	Vlastnosti	3
2.3	Viacrozmerná fourierova transformácia	3
3	Algoritmy	5
3.1	DFT	5
3.2	Radix FFT	5
3.3	Split-radix	7
3.4	Bluesteinov FFT algoritmus	7
3.5	Ďalšie algoritmy	7
3.6	Čo s DCT	7
4	Použitie	9
4.1	Matematika	9
4.1.1	Rozklad funkcií na ortonormálny systém	9
4.1.2	Riešenie diferenciálnych rovníc 2. rádu	9
4.2	Fyzika	9
4.2.1	Optika	9
4.2.2	Spektrálna analýza	9
4.3	Informatika	11
4.3.1	Signal processing	11
4.3.2	Audio	11
4.3.3	Image processing	11
4.3.4	Image compression	11
4.3.5	Volumetric/video compression	11

4.3.6	Rýchle násobenie polynómov	11
-------	--------------------------------------	----

Kapitola 1

Úvod

Táto bakalárska práca.

Kapitola 2

Fourierova transformácia

2.1 Definícia

2.2 Vlastnosti

2.3 Viacrozmerná fourierova transformácia

Kapitola 3

Algoritmy

3.1 DFT

Začneme najzákladnejším algoritmom na výpočet diskkrétnej Fourierovej transformácie. Algoritmus vychádza priamo zo vzorca na výpočet diskkrétnej Fourierovej transformácie

$$X_k = \sum_{n=0}^{N-1} x_n e^{-\frac{2\pi i}{N} kn} \quad k = 0, \dots, N-1$$

ako aj inverznej transformácie

$$x_k = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} X_n e^{\frac{2\pi i}{N} kn} \quad k = 0, \dots, N-1$$

3.2 Radix FFT

Pretým, než si ukážeme tento algoritmus, objavíme najskôr krásu motýľích krídel¹. To, čo robí štandardný DFT algoritmus pomalým, je jeho ignorancia. Ignoruje totiž 2 veľmi dôležité fakty o komplexných koreňoch ω , ktorými sú

- Symetria: $\omega_N^{k+N/2} = -\omega_N^k$, ak je N párne
- Periodicita: $\omega_N^{k+N} = \omega_N^k$

¹Z anglického názvu “Butterfly”

```
#include <stdio.h>

template< typename T >
struct is_field {
    static const bool value = false;
};

template<>
struct is_field<Complex> {
    static const bool value = true;
}

int main(){
    return 0;
}
```

Program 3.1: DFT

Ich všímavým pozorovaním môžeme dospieť napríklad k nasledujúcemu faktú:

$$\begin{aligned}
 X_k &= \sum_{n=0}^{N-1} x_n \omega_N^{kn}, \quad k = 0, 1, \dots, N-1 \\
 &= \sum_{n \text{ je párne}} x_n \omega_N^{kn} + \sum_{n \text{ je nepárne}} x_n \omega_N^{kn} \\
 &= \sum_{n=0}^{\lceil N/2 \rceil - 1} x_{2n} \omega_N^{2kn} + \sum_{n=0}^{\lfloor N/2 \rfloor - 1} x_{2n+1} \omega_N^{k(2n+1)}
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

V ďalšom texte budeme automaticky uvažovať prípad, že N je párne. Využijeme rovnosť $\omega_N^2 = \omega_{N/2}$ a výsledok upravíme na tvar

$$X_k = \sum_{n=0}^{(N/2)-1} x_{2n} \omega_{N/2}^{kn} + \omega_N^k \sum_{n=0}^{(N/2)-1} x_{2n+1} \omega_{N/2}^{kn} \tag{3.2}$$

Nech $y_n = x_{2n}$, $z_n = x_{2n+1}$. Potom $X_k = Y_k + \omega_N^k Z_k$, kde X_k, Y_k sú $N/2$ bodové diskkrétne Furierove transformácie postupností x , resp. y .

3.3 Split-radix

3.4 Bluesteinov FFT algoritmus

3.5 Ďalšie algoritmy

3.6 Čo s DCT

Kapitola 4

Použitie

4.1 Matematika

4.1.1 Rozklad funkcií na ortonormálny systém

4.1.2 Riešenie diferenciálnych rovníc 2. rádu

4.2 Fyzika

4.2.1 Optika

4.2.2 Spektrálna analýza

Snáď najdôležitejšou aplikáciou fourierovej transformácie vo fyzike a chémii je spektrálna interferometria. V tejto kapitole v skratke rozvedieme najdôležitejšie pojmy a mechanizmy o tejto pre chemikov životne dôležitej metóde skúmania látok.

Ako už názov naznačuje, spektrálna analýza má za úlohu analyzovať látky. Deje sa tak prostredníctvom infračervených vln. Čitateľ by sa mohol opýtať, prečo sa používajú tieto vlny a jeho zvedavosti bude za chvíľu zadostučinené.

Ako funguje spektrálna analýza

Základom každej chemickej zlúčeniny sú atómy, medzi ktorými vznikajú väzby. Väzba je akási neviditeľná pružina, ktorá vzniká ako dôsledok pô-

sobení elektromagnetické a slabé jadrovej sily. Existuje istá vzialenosť molekúl, keď sú tieto sily v rovnováhe a celková energia väzby je minimálna. Vychýlením atómu zo svojej polohy prevládne jedna z týchto dvoch síl a atóm má snahu dostať sa do svojej pôvodnej polohy. Samozrejme, atómy za predpokladu bežnej teploty nestoja na mieste ale kmitajú okolo rovnovážnej polohy a väzby ich držia pokope.

To čo je ale pri spektrálnej analýze dôležité je, že rôzne väzby sa správajú rôzne. Kratšie väzby kmitajú rýchlejšie, väzba od ťažkých atómov kmitá pomalšie, a takisto vlastnosti väzby závisia aj od elektrických vlastností atómov. Preto sa každá väzba dá identifikovať podľa svojej frekvencie kmitania. Prehľad niektorých vybraných typov väzieb sa dá nájsť v tabuľke 4.1 (čiasťočne prevzatá z [Wik08b]).

väzba	špecifický typ väzby	frekvencia (cm^{-1}).
C-O	alkoholy	1040-1060, 1100
C-H	C=CH	3020
C-H	metyl	1260
C=O	aldehyd	1725
C-C	aromatické C=C	1450, 1500, 1580, 1600
O-H	alkoholy	3200-3400
N-H	amíny	3400-3500, 1560-1640

Tabuľka 4.1: Ukážka absorbných frekvencií väzieb

Otázkou ale ostáva, ako odhaliť frekvenciu kmitania väzieb. Odpoveď nám núka fyzika sama. Atómy sa bežne nachádzajú v základnom stave. Avšak pôsobením žiarenia s frekvenciou rovnou frekvencii kmitania väzby môžeme atóm rozkmitať ešte viac. Je to jav podobný rezonancii - vonkajším pôsobením vynútime kmity rezonátora - väzby. Takto rozkmitaný atóm sa môže dostať do excitovaného stavu. Pri tomto prechode medzi stavmi atóm pohltí energiu. Zo zákona zachovania energie musí tým pádom dopadajúce žiarenie stratiť nejakú časť energie. No a táto strata energie (na príslušnej frekvencii) je základom pre spektrometriu.

Viac o chemických väzbách sa dá nájsť v [Wik08a] a [Mon04]. Taktiež na stránke [Web] sa dá nájsť interaktívny program na porovnávanie spektier.

Konštrukcia interferometra

Výpočet spektrálneho útlmu

4.3 Informatika

4.3.1 Signal processing

4.3.2 Audio

4.3.3 Image processing

4.3.4 Image compression

4.3.5 Volumetric/video compression

4.3.6 Rýchle násobenie polynómov

V tejto sekcii si porozprávame niečo o použití Fourierovej transformácie na rýchle násobenie polynómov. Naša púť začne hľadaním analógie Fourierovej transformácie v konečných poliach. Ešte predtým však zhrnieme klasické metódy násobenia polynómov.

Klasický prístup k násobeniu polynómov

Asi najtriviálnejším spôsobom na násobenie polynómov je použitie “násobenia zo školy”, kedy postupne vynásobíme prvý polynóm každou cifrou druhého, medzivýsledky podpisujeme a nakoniec sčítame. Táto implementácia má časovú zložitosť $O(N^2)$ a pamäťovú zložitosť tiež $O(N^2)$. Veľmi jednoduchý algoritmus ale vieme upraviť tak, aby sčítaval medzivýsledky priebežne, čím dostávame pamäťovú zložitosť $O(N)$.

Rýchlejší prístup nám ponúka dynamické programovanie. Nech sú obe čísla x, y veľkosti n . Potom ich môžeme zapísať ako

$$x = a \cdot 10^{n/2} + b, \quad y = c \cdot 10^{n/2} + d$$

Štandardným vynásobením dostávame výraz

$$x \cdot y = a \cdot c \cdot 10^n + (a \cdot d + b \cdot c) \cdot 10^{n/2} + b \cdot d.$$

ktorý potrebuje 4 násobenia veľkosti $n/2$. Pravá strana sa ale dá šikovne prepísať na

$$x.y = ac10^n + (ac + bd + (a - b)(d - c))10^{n/2} + bd$$

Môžeme si všimnúť, že sme oproti pôvodnému zápisu ušetrili jedno násobenie. Dostávame teda 3 násobenia veľkosti $n/2$ a 6 sčítaní/odčítaní (veľkosti maximálne n). Tento postup môžeme rekurzívne aplikovať a ak by sme napísali rekurentnú reláciu, dostali by sme $T(1) = 1$, $T(n) = 3T(n/2) + c.n$. Podľa Master theorem [THCS01, p. 73-90] dostávame $T(n) < \bar{c}n^{\log_2 3}$ pre nejakú konštantu \bar{c} . Algoritmus má tým pádom časovú zložitosť $O(n^{1.59})$.

Bližšie informácie o tomto algoritme sa dajú nájsť v [KOG92, p. 118-119] pod názvom Karatsubov algoritmus.

Literatúra

- [KOG92] G. Labahn K. O. Geddes, S. R. Czapor. *Algorithms for computer algebra*, chapter 4 - Arithmetic of Polynomials, Rational Functions, and Power Series. Kluwer Academic Publishers, 1992.
- [Mon04] Paul Monk. *Physical Chemistry, Understanding our Chemical World*. John Wiley & Sons Ltd, 2004.
- [THCS01] Ronald L. Rivest Thomas H. Cormen, Charles E. Leiserson and Clifford Stein. *Introduction to Algorithms*. MIT Press and McGraw-Hill, second edition, 2001.
- [Web] WebSpectra. Webspectra. [Online; accessed 27-October-2008].
- [Wik08a] Wikipedia. Chemical bond — wikipedia, the free encyclopedia, 2008. [Online; accessed 27-October-2008].
- [Wik08b] Wikipedia. Infrared spectroscopy correlation table — wikipedia, the free encyclopedia, 2008. [Online; accessed 28-October-2008].