

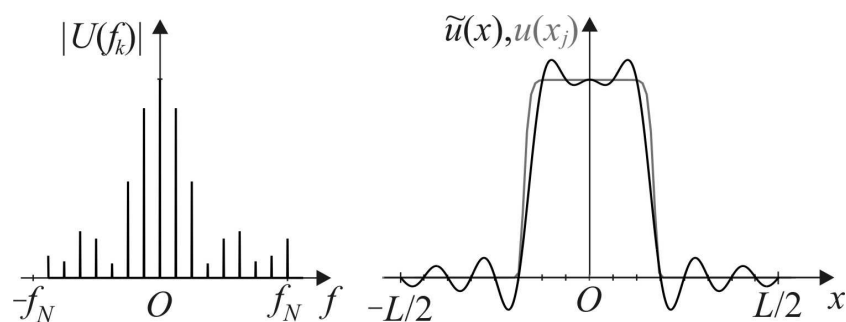
МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. Ломоносова

Физический факультет



В.П. Кандидов, С.С. Чесноков, С.А. Шленов

ДИСКРЕТНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФУРЬЕ



Москва 2019

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. Ломоносова

Физический факультет

В.П. Кандидов, С.С. Чесноков, С.А. Шленов

ДИСКРЕТНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФУРЬЕ

Учебно-методическое пособие

Москва 2019

УДК 519.6
ББК 22.19
К19

Кандидов В.П., Чесноков С.С., Шленов С.А.

К19 **Дискретное преобразование Фурье.** Учебное пособие
/В.П. Кандидов и др. – Москва: физический факультет МГУ,
2019. – 88 с. : ил.
ISBN 978-5-8279-0179-2

Рецензенты:

дф-мн профессор В.А.Трофимов, дф-мн доцент В.А.Хохлова

Печатается по рекомендации Ученого Совета физического
факультета МГУ имени М.В.Ломоносова

В пособии систематически изложены теоретические основы и сформулированы рекомендации по практическому применению преобразования Фурье в численных исследованиях. Рассмотрены особенности преобразования Фурье для функции дискретного аргумента, задаваемой числовым массивом конечной размерности. Приведена теорема Котельникова–Шеннона и ее связь с дискретным преобразованием Фурье. Значительное внимание уделено вопросам ширины спектральной полосы и спектрального разрешения образа Фурье сеточной функции. Кратко представлены алгоритм быстрого преобразования Фурье и библиотеки стандартных программ преобразования Фурье, используемые в численных исследованиях. Рассмотрены возможные артефакты при дискретном преобразовании Фурье и даны практические рекомендации по его использованию. Изложенный материал проиллюстрирован конкретными примерами.

Пособие может быть полезным при изучении курсов по численным методам, радиофизике, оптике и спецкурсам на физическом факультете и других естественных факультетах МГУ, а также в классических и технических университетах страны.

Ключевые слова: вычислительный эксперимент, дискретное преобразование Фурье, теорема Котельникова-Шеннона, частота Найквиста, быстрое преобразование Фурье.

УДК 519.6
ББК 22.19

ISBN 978-5-8279-0179-2

© Физический факультет МГУ
© В.П. Кандидов, С.С. Чесноков, С.А. Шленов

Оглавление

Предисловие	4
Введение	5
Глава 1. Преобразование Фурье и его свойства	8
§1.1. Ряд Фурье	8
§1.2. Интеграл Фурье	12
§1.3. Свойства преобразования Фурье	13
Глава 2. Функция дискретного аргумента	20
§2.1. Дискретность и конечность области определения сеточной функции	20
§2.2. Спектр функции дискретного аргумента	21
§2.3. Теорема Котельникова – Шеннона	27
§2.4. Осцилляции Гиббса	31
§2.5. Взаимосвязь функции и спектра при дискретизации аргумента	35
§2.6. Вычисление производных с использованием спектров	38
Глава 3. Дискретное преобразование Фурье (ДПФ)	44
§3.1. Анализ Фурье. Ортогональность гармоник в дискретном пространстве. Синтез Фурье	44
§3.2. Свойства ДПФ. Формулы запаздывания, смещения и свертки	47
§3.3. Двумерное преобразование Фурье	48
Глава 4. Практика дискретного преобразования Фурье	50
§4.1. Выбор шага дискретизации на сетке Δx	50
§4.2. Выбор области периодизации функции L	53
§4.3. Частотное разрешение Δf	58
§4.4. Заключительная иллюстрация влияния шага дискретизации и периода функции на спектр при ДПФ	61
Глава 5. Быстрое преобразование Фурье (БПФ)	63
§5.1. Алгоритм БПФ	63
§5.2. Оценка эффективности	66
§5.3. Двоичная инверсия	67
§5.4. Простой пример. Графическая схема БПФ	68
Глава 6. Компьютерные библиотеки ДПФ	71
§6.1. Свободно распространяемая библиотека FFTW	71
§6.2. ДПФ в пакете Wolfram Mathematica	81
§6.3. ДПФ на языке Python	82
Литература	87

Предисловие

Учебное пособие “Дискретное преобразование Фурье” знакомит студентов и аспирантов с аппаратом и физическими представлениями преобразования Фурье в численном исследовании. В нем кратко изложены теоретические основы и даны рекомендации по практическому применению прямого и обратного преобразования Фурье для функции дискретного аргумента, задаваемой числовым массивом конечной размерности. На основе формализма построения функции дискретного аргумента на однородной сетке рассмотрены особенности образа и оригинала Фурье, связанные с их периодизацией, ограничением спектральной полосы частотой Найквиста, эффектом наложения частот, вычислением производных. С позиций вычислительного эксперимента изложена теорема Котельникова - Шеннона и ее связь с дискретным преобразованием Фурье в задаче восстановления непрерывных функций по дискретным отсчетам. Значительное внимание уделено вопросам ширины спектральной полосы и спектрального разрешения образа Фурье для сеточной функции. Кратко рассмотрены алгоритм Быстрого преобразования Фурье и его эффективность. В конце пособия представлены библиотеки стандартных программ преобразования Фурье и некоторые рекомендации по их использованию.

В пособии наглядно представлена структура числовых массивов и возможные артефакты при дискретном преобразовании Фурье, даны практические рекомендации по его использованию для анализа реальных функциональных зависимостей. Изложенный материал наглядно иллюстрирован конкретными примерами.

Пособие подготовлено на основе многолетнего опыта преподавания общего курса «Численные методы в физике» на радиофизическом отделении физического факультета Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова.

Учебное пособие “Дискретное преобразование Фурье” может быть полезным при изучении общих курсов по численным методам, радиофизике, оптике и спецкурсам на физическом факультете и других естественных факультетах МГУ, а также в классических и технических университетах страны.

В.П. Кандидов, С.С. Чесноков, С.А. Шленов
Москва, 2019 г.

Введение

В численных исследованиях дискретное преобразование Фурье является эффективным методом, с помощью которого осуществляется взаимно однозначное соответствие сеточной функции и ее образа в спектральном пространстве. Спектральная обработка результатов вычислительного и физического эксперимента с помощью преобразования Фурье существенно расширяет возможности анализа в научных исследованиях. В методах расщепления решения многомерных задач математической физики дискретное преобразование Фурье стало мощным средством построения экономичных вычислительных схем. Возможность прямого и обратного перехода от сеточной функции к ее спектру позволяет решать в спектральном пространстве отдельные компоненты расщепленной задачи, что значительно повышает эффективность числительной схемы. Дискретное преобразование Фурье является ключевой составляющей программного обеспечения в спектроскопии, томографии, в обработке сигналов и изображений.

Дискретное преобразование Фурье представляет собой численный алгоритм представления функций разложением в ряд по тригонометрическим функциям. Метод разложения функций в тригонометрический ряд принадлежит Жан-Батисту Жозефу Фурье. В 1807 году его доклад в Парижской академии наук «О распространении тепла в твёрдом теле» с решением задачи теплопроводности разложением в тригонометрический ряд не получил одобрения, а уже в 1812 году Фурье был удостоен Большой премии академии за труд «Аналитическая теория тепла», в котором его метод получил дальнейшее развитие. Переход в спектральное пространство гармоник Фурье особенно эффективно при фундаментальных и прикладных исследованиях аналитическими и численными методами волновых процессов в оптике, акустике, электронике, радиофизике и других научных областях. Метод гармоник Фурье, получивший начало как математический аппарат для решения задачи теплопроводности, в настоящее время стал мощным средством спектрального анализа в физических исследованиях.

С дискретным преобразованием Фурье тесно связана теорема отсчетов, впервые сформулированная в 1933 году В.А.Котельниковым в статье «О пропускной способности “эфира” и проволоки в электросвязи». Независимо от него в 1949 году К. Шенноном также получена ее формулировка. Эта теорема, связанная с цифровой

обработкой сигнала, определяет оптимальный интервал дискретизации непрерывной функции, при котором по дискретным отсчетам полностью восстанавливается исходная функция. Теорема отсчетов имеет фундаментальное значение в области коммуникационных технологий и вместе с этим является средством обработки и представления результатов вычислительного эксперимента. В настоящем пособии теорема отсчетов Котельникова–Шеннона включена как составная часть дискретного преобразования Фурье в численном исследовании.

Дискретное преобразование Фурье получило широкое распространение после разработки алгоритмов быстрого преобразования, позволивших значительно сократить вычислительные затраты особенно для массивов большой размерности. В настоящее время алгоритмы быстрого преобразования Фурье хорошо известны и широко используются в спектральном анализе. Хотя в современной литературе излагается ряд различных подходов к разработке алгоритмов БПФ, в пособии представлен один из них, а именно, так называемый алгоритм Кули–Тьюки, впервые описанный в статье J. W. Cooley and J. W. Tukey, "An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series", Math. Comput. **19**, 297–301 (1965). Алгоритм БПФ и его аппаратная реализация позволило в реальном времени осуществлять спектральную обработку больших массивов, что существенно повысило быстродействие в численном исследовании, криптографии, анализе сигналов и изображений.

В пособии основное внимание уделено анализу погрешностей, связанных с дискретизацией функций, полей при выполнении операций с массивами конечных размерностей. Несмотря на то, что вычислительные мощности современных кластеров стремительно увеличиваются, исследователь сталкивается с проблемой аппроксимации полей и процессов на вычислительных сетках. исследования динамических полей с широким диапазоном масштабов проблема сеточной аппроксимации является особенно острой в многомерных нестационарных задачах нелинейной волновой оптики, нелинейной акустики, физики плазмы, нано оптики, распространения волн в случайно-неоднородных средах и других областях физики.

Пособие состоит из шести глав. В первой главе кратко изложены основные свойства и формализм преобразования Фурье, которые используются в последующем изложении. Во второй главе рассмотрены функция дискретного аргумента, особенности ее спектра и

эффект наложения частот. Введено понятие частоты Найквиста, получена формула для восстановления непрерывной функции в соответствии с теоремой Котельникова – Шеннона, дан анализ возникновения осцилляций Гиббса и приведена процедура вычисления спектров производных. В третьей главе построены формулы анализа и синтеза дискретного преобразования Фурье и приведены его свойства. Значительное внимание уделено возникновению ошибок при наложении частот, подавлению осцилляций Гиббса, улучшению спектрального разрешения в дискретном образе Фурье. Кратко приведен аппарат дискретного преобразования Фурье двумерных функций в декартовой системе координат. Четвертая глава посвящена рекомендациям по практическому использованию дискретного преобразования Фурье, в частности, вопросам выбора шага сетки, периода регистрации и частотного разрешения. В пятой главе представлен алгоритм быстрого преобразования Фурье (БПФ) и дана оценка его эффективности. Рассмотрен порядок последовательного представления элементов массива исходной сеточной функции и ее дискретного образа, а также приведен в качестве примера граф алгоритма БПФ. Шестая глава посвящена использованию свободно распространяемой библиотеки FFTW, эффективно осуществляющей БПФ. Подробно описана ее установка на компьютер в среде GNU/Linux и проиллюстрирована ее работа на конкретных примерах для действительных и комплексных массивов. Далее изложено применение БПФ в пакете Wolfram Mathematica. В конце главы рассмотрено использование для БПФ программ, написанных на языке Python, проведено сравнение их быстродействия.

Глава 1. Преобразование Фурье и его свойства

§1.1. Ряд Фурье

Периодическую функцию $u(x) = u(x \pm nL)$ ($n = 1, 2, \dots$), которая имеет конечное число разрывов на периоде и абсолютно интегрируема,

т.е. удовлетворяет условию $\int_{-L/2}^{L/2} |u(x)| dx < \infty$, можно представить в виде

суммы гармонических составляющих (ряда Фурье):

$$u(x) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{k=1}^{\infty} [a_k \cos(2\pi f_k x) + b_k \sin(2\pi f_k x)], \quad (1.1)$$

где $f_k = \frac{1}{L}k$ – частота k -ой гармонической компоненты. Если функция $u(x)$ зависит от времени, то частота f_k имеет размерность $\Gamma_{\text{ц}} = \text{с}^{-1}$, если она зависит от пространственной координаты, то f_k измеряется в м^{-1} . Гармонические функции $\cos(2\pi f_k x)$ и $\sin(2\pi f_k x)$, образующие базис разложения, ортогональны на периоде:

$$\left. \begin{aligned} \int_{-L/2}^{L/2} \cos(2\pi f_k x) \cdot \cos(2\pi f_m x) dx &= \begin{cases} 0 & \text{при } k \neq m, \\ L/2 & \text{при } k = m, \end{cases} \\ \int_{-L/2}^{L/2} \sin(2\pi f_k x) \cdot \sin(2\pi f_m x) dx &= \begin{cases} 0 & \text{при } k \neq m, \\ L/2 & \text{при } k = m, \end{cases} \\ \int_{-L/2}^{L/2} \cos(2\pi f_k x) \cdot \sin(2\pi f_m x) dx &= 0 \text{ при всех } k \text{ и } m. \end{aligned} \right\} \quad (1.2)$$

Используя свойство ортогональности базисных функций, нетрудно показать, что амплитуды косинус и синус компонент гармоник Фурье вычисляются по формулам:

$$\begin{aligned} a_k &= \frac{2}{L} \int_{-L/2}^{L/2} u(x) \cos(2\pi f_k x) dx, \\ b_k &= \frac{2}{L} \int_{-L/2}^{L/2} u(x) \sin(2\pi f_k x) dx, \quad k = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (1.3)$$

Наряду с (1.1) разложение периодической функции можно представить в виде:

$$u(x) = \frac{1}{2} a_0 + \sum_{k=1}^{\infty} C_k \cos(2\pi f_k x - \varphi_k), \quad (1.4)$$

где $C_k = \sqrt{a_k^2 + b_k^2}$ – амплитуда и $\varphi_k = \arctg \frac{b_k}{a_k}$ – фаза гармоники на частоте f_k .

Поскольку гармонические функции $\cos(2\pi f_k x)$ и $\sin(2\pi f_k x)$ выражаются через экспоненты с мнимым аргументом следующим образом: $\cos(2\pi f_k x) = \frac{(e^{i2\pi f_k x} + e^{-i2\pi f_k x})}{2}$ и $\sin(2\pi f_k x) = \frac{(e^{i2\pi f_k x} - e^{-i2\pi f_k x})}{2i}$, из (1.1) следует комплексное представление ряда Фурье, которое более удобно в вычислениях:

$$u(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} d_k e^{i2\pi f_k x}, \quad \text{где } d_k = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} u(x) e^{-i2\pi f_k x} dx. \quad (1.5)$$

Отрицательные частоты при $k < 0$ в выражении (1.5) введены математически формально. Физически реально существуют гармоники $\cos(2\pi f_k x - \varphi_k)$ и их компоненты $\cos(2\pi f_k x)$ и $\sin(2\pi f_k x)$ с положительными частотами f_k , которые можно зарегистрировать экспериментально. Амплитуда C_k и фаза φ_k гармоник, амплитуды косинус и синус их компонент a_k и b_k связаны с комплексными коэффициентами разложения d_k простыми соотношениями:

$$C_k = 2|d_k|, \quad \varphi_k = \arctg\left(\frac{\operatorname{Im}[d_k]}{\operatorname{Re}[d_k]}\right), \quad (1.6)$$

$$a_k = d_k + d_{-k}, \quad b_k = i(d_k - d_{-k}).$$

Множества $\{C_k, \varphi_k, k=1, 2, 3, \dots\}$ являются соответственно амплитудным и фазовым спектром функции $u(x)$.

Если функция $u(x)$ вещественная, то амплитуды синус и косинус компонент a_k и b_k действительны и коэффициенты разложения разных знаков являются комплексно сопряженными числами: $d_k = d_{-k}^*$. В этом случае амплитуды компонент a_k и b_k равны:

$$a_k = 2\operatorname{Re}[d_k], \quad b_k = -2\operatorname{Im}[d_k] \quad (1.7)$$

Качественный вид косинус a_k и синус b_k компонент в спектре вещественной функции представлен на рис. 1.1:

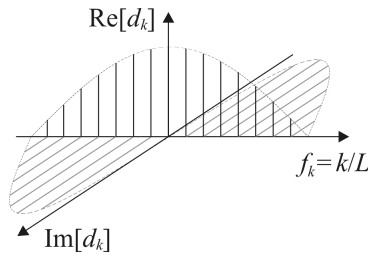


Рис.1.1. Схематическое изображение комплексно сопряженных коэффициентов разложения $d_k = d_{-k}^*$ вещественной функции.

В случае симметричной функции $u(x) = u(-x)$ коэффициенты разложения d_k являются действительными ($b_k = -2\operatorname{Im}[d_k] = 0$) и, следовательно, фаза $\varphi_k = 0$, что соответствует разложению по косинусоидальным гармоникам $\cos(2\pi f_k x)$.

Бесконечное множество амплитуд и фаз $\{C_k, \varphi_k, k=1, 2, 3, \dots\}$ или коэффициентов разложения $\{d_k, k=-\infty, \dots, 0, \dots, +\infty\}$ является

образом Фурье $U(f)$ периодической функции $u(x)$. Соответствие между $u(x)$ и $U(f)$ будем обозначать следующим образом:

$$u(x) \leftrightarrow U(f) \quad (1.8)$$

Образ Фурье периодической функции в виде коэффициентов разложения d_k можно символически представить бесконечной суммой:

$$U(f) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \delta\left(f - \frac{k}{L}\right) d_k, \quad (1.9)$$

где $\delta(x)$ – дельта функция Дирака, определяемая условием

$$\int_{x_1}^{x_2} \delta(x - x_0) g(x) dx = g(x_0), \quad \text{если } x_0 \text{ принадлежит области}$$

$$\text{интегрирования } [x_1, x_2], \text{ и } \int_{x_1}^{x_2} \delta(x - x_0) g(x) dx = 0, \quad \text{если } x_0 \text{ не}$$

принадлежит $[x_1, x_2]$.

Таким образом, спектр периодической функции является дискретным, в котором интервал частот $\Delta f = f_{k+1} - f_k$ между соседними гармониками равен величине, обратной ее периоду L :

$$\Delta f = \frac{1}{L}. \quad (1.10)$$

В качестве примера на рис.1.2 приведен спектр периодической последовательности прямоугольных импульсов длительностью h_0 с амплитудой A . В этом случае функция $u(x) = u(x \pm nL)$ на одном периоде $-L/2 \leq x \leq L/2$ имеет вид

$$u(x) = \begin{cases} A & \text{при } -h_0/2 < x < h_0/2, \\ 0 & \text{при } x < -h_0/2 \text{ и при } x > h_0/2. \end{cases} \quad (1.11)$$

Коэффициенты разложения d_k функции $u(x)$ равны:

$$d_k = \frac{Ah_0}{L} \cdot \frac{\sin(\pi f_k h_0)}{\pi f_k h_0}, \text{ или } d_k = \frac{Ah_0}{L} \cdot \text{sinc}(\pi f_k h_0). \quad (1.12)$$

Коэффициенты d_k действительны, так как функция (1.11) симметрична. В спектре периодической последовательности импульсов (рис.1.2) гармоники «идут» по оси частот с шагом $\Delta f = 1/L$, где L – период следования импульсов. Длительность импульсов h_0 не влияет на интервал Δf между частотами гармоник, но определяет области частот $f \approx \frac{1}{h_0}, \frac{2}{h_0}, \dots$, в окрестности которых амплитуды гармоник d_k малы.

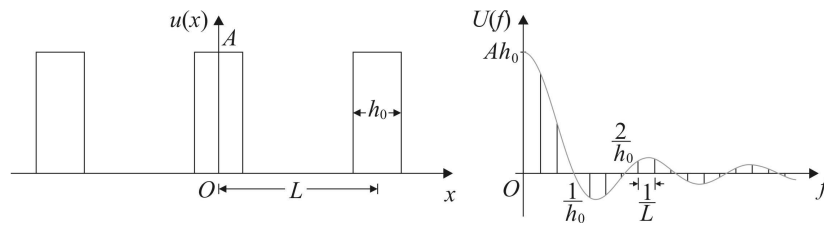


Рис.1.2. Периодическая последовательность прямоугольных импульсов и ее спектр.

§1.2. Интеграл Фурье

Непериодическую функцию $u(x)$ можно представить в виде интеграла Фурье, если она однозначна, кусочно-непрерывна, абсолютно интегрируема и имеет конечное число экстремумов:

$$\begin{aligned} u(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} U(f) e^{i2\pi fx} df, \\ U(f) &= \int_{-\infty}^{\infty} u(x) e^{-i2\pi fx} dx. \end{aligned} \quad (1.13)$$

Спектр, или образ Фурье $U(f)$ непериодической функции является сплошным. Частота f меняется непрерывно от $-\infty$ до $+\infty$. Соотношения (1.13) устанавливают связь между функцией $u(x)$ и ее образом Фурье $U(f)$:

$$u(x) \leftrightarrow U(f). \quad (1.14)$$

Если функция $u(x)$ вещественная, то $U(f) = U^*(-f)$. Для симметричных $u(x)$ спектр $U(f)$ – действительная функция. Например, спектр симметричного относительно начала отсчета $x=0$ прямоугольного импульса длительностью h_0 с амплитудой A имеет вид (рис.1.3):

$$U(f) = Ah_0 \cdot \text{sinc}(\pi fh_0). \quad (1.15)$$

На частотах $f_s = \frac{s}{h_0}$, $s = \pm 1, 2, 3, \dots$ спектр $U(f) = 0$.

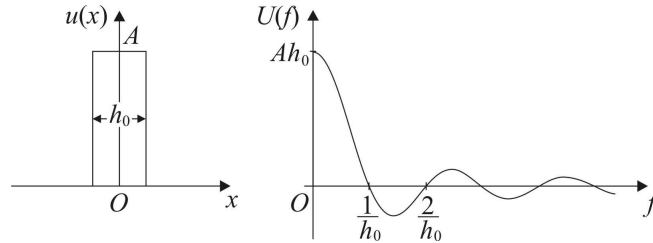


Рис.1.3 Прямоугольный импульс длительностью h_0 и его спектр $U(f)$

В общем случае спектр $U(f)$ является комплексным:

$$U(f) = |U(f)| \cdot e^{i\varphi(f)}, \quad \text{где } \varphi(f) = \arg[U(f)]. \quad (1.16)$$

Здесь $|U(f)|$ – амплитудный, $\varphi(f)$ – фазовый спектр функции, не имеющей периода.

§1.3. Свойства преобразования Фурье

1. Линейность:

$$\begin{aligned} &\text{Если } u_1(x) \leftrightarrow U_1(f) \text{ и } u_2(x) \leftrightarrow U_2(f), \text{ то} \\ &\alpha_1 u_1(x) + \alpha_2 u_2(x) \leftrightarrow \alpha_1 U_1(f) + \alpha_2 U_2(f). \end{aligned} \quad (1.17)$$

2. Теорема запаздывания:

$$\text{Если } u(x) \leftrightarrow U(f), \text{ то } u(x - x_0) \leftrightarrow U(f) e^{-i2\pi f x_0}. \quad (1.18)$$

Теорема запаздывания позволяет определять образ Фурье функций $u(x-x_0)$ с запаздывающим аргументом по образу Фурье $U(f)$ симметричных функций $u(x)$, который проще вычислить.

Пусть $u(x)$ – симметричная функция и ее спектр действительный, т.е. $\text{Im}[U(f)] = 0$ или $\text{Im}[d_k] = 0$ и в разложении присутствуют только косинус-компоненты, фаза $\phi_k = 0$, или $a_k \neq 0$ и $b_k = 0$. Тогда у функции $u(x-x_0)$ спектр является комплексным:

$$\text{Im}[U(f)] \neq 0 \text{ или } \text{Im}[d_k] \neq 0$$

и фаза $\phi_k = 2\pi f x_0 \neq 0$, что соответствует существованию синус-компонент наряду с косинус-компонентами.

В качестве примера на рис.1.4 приведены действительная $\text{Re}[U(f)]$ и мнимая $\text{Im}[U(f)]$ части спектра гауссовой функции

$u(x) = A \exp\left(-\frac{x^2}{a_0^2}\right)$, симметричной относительно начала координат, и

гауссовой функции с запаздывающим аргументом

$u(x-x_0) = A \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{a_0^2}\right)$ при различном запаздывании x_0 .

На рис. 1.5 представлены амплитудный $|U(f)|$ и фазовый $\arg[U(f)] = -2\pi f x_0$ спектры запаздывающей гауссовой функции. С увеличением запаздывания x_0 фаза $\phi = -2\pi f x_0$ меняется с частотой сильнее (рис.1.5) и период осцилляций действительной $\text{Re}[U(f)]$ и мнимой $\text{Im}[U(f)]$ частей спектра сокращается (см. рис. 1.4).

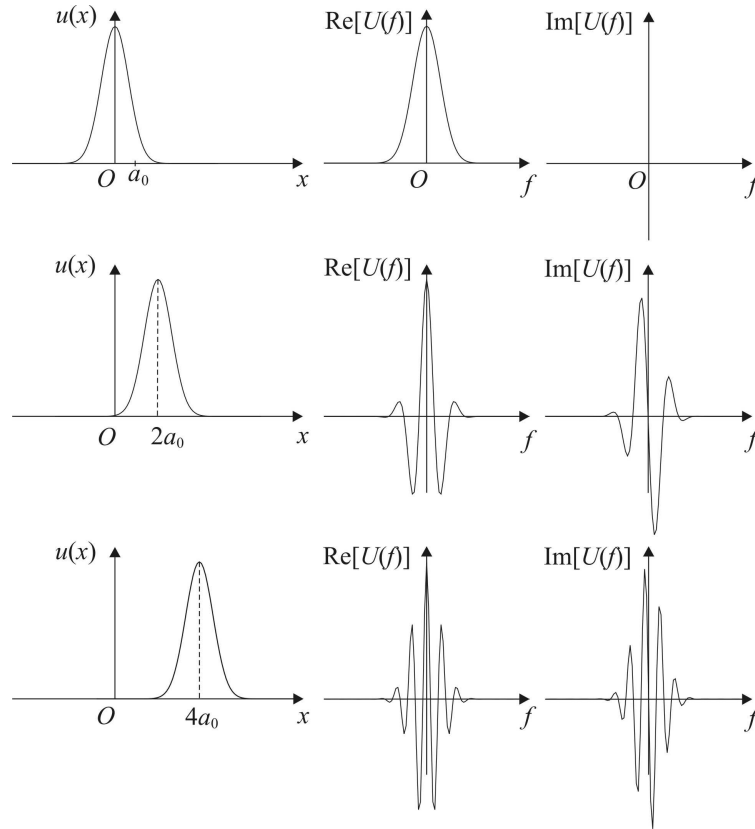


Рис.1.4. Гауссова функция, действительная $\text{Re}[U(f)]$ и мнимая $\text{Im}[U(f)]$ части ее

спектра: симметричная относительно начала координат $u(x) = A \exp\left(-\frac{x^2}{a_0^2}\right)$

(верхняя строка) и функции с запаздывающим аргументом

$$u(x - x_0) = A \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{a_0^2}\right) \text{ при } x_0 = 2a_0 \text{ (средняя строка) и } x_0 = 4a_0 \text{ (нижняя строка).}$$

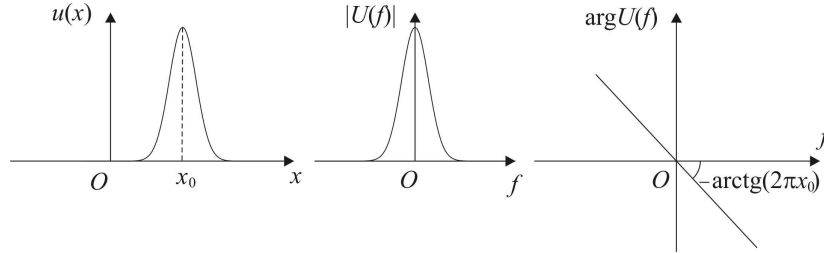


Рис. 1.5. Модуль $|U(f)|$ и фаза $\varphi = -2\pi f x_0$ спектра гауссовой функции

$$u(x - x_0) = A \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{a_0^2}\right)$$

3. Теорема смещения:

$$\text{Если } u(x) \leftrightarrow U(f), \text{ то } u(x)e^{i2\pi f_0 x} \leftrightarrow U(f - f_0). \quad (1.19)$$

Из этой теоремы следует, что спектр радиоимпульса $u(x)e^{i2\pi f_0 x}$ на несущей частоте f_0 и огибающей $u(x)$ совпадает со спектром функции $u(x)$, сдвинутым по оси частот на f_0 .

В качестве примера на рис.1.6 приведен спектр гауссовой функции $u(x) = A \exp\left(-\frac{x^2}{a_0^2}\right)$ и радиоимпульса $u(x) = A \exp\left(-\frac{x^2}{a_0^2}\right) \cdot \exp(i2\pi f_0 x)$, несущая частота которого f_0 , а огибающая $u(x)$.

4. Формулы свертки:

$$\begin{aligned} \text{Если } u_1(x) \leftrightarrow U_1(f) \text{ и } u_2(x) \leftrightarrow U_2(f), \text{ то} \\ u_1(x) \cdot u_2(x) \leftrightarrow U_1(f) \otimes U_2(f), \end{aligned} \quad (1.20)$$

где $U_1(f) \otimes U_2(f) = \int_{-\infty}^{+\infty} U_1(f - \xi) U_2(\xi) d\xi$ – свертка спектров.

Эта формулы свертки означает, что образом Фурье произведения двух функций $u_1(x) \cdot u_2(x)$ является свертка образов Фурье сомножителей $U_1(f)$ и $U_2(f)$.

$$\begin{aligned} \text{Если } u_1(x) \leftrightarrow U_1(f) \text{ и } u_2(x) \leftrightarrow U_2(f), \text{ то} \\ u_1(x) \otimes u_2(x) \leftrightarrow U_1(f) \cdot U_2(f), \end{aligned} \quad (1.21)$$

Следовательно, образом Фурье для свертки двух функций $u_1(x) \otimes u_2(x)$ является произведение образов Фурье этих функций $U_1(f)$ и $U_2(f)$.

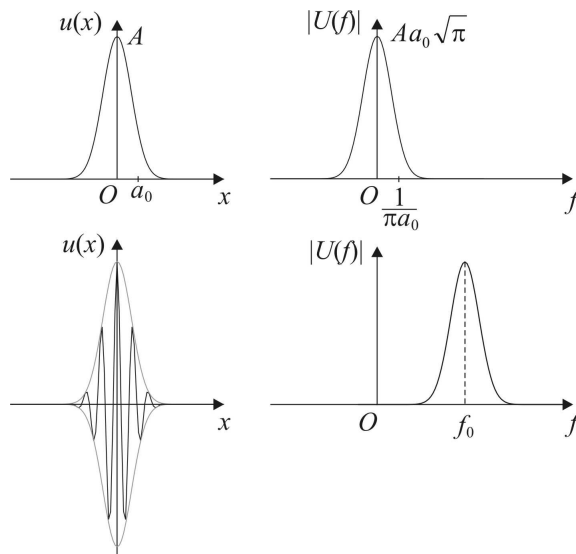


Рис.1.6. Спектр функции $u(x) = A \exp\left(-\frac{x^2}{a_0^2}\right)$ и радиоимпульса

$$u(x) = A \exp\left(-\frac{x^2}{a_0^2}\right) \cdot \exp(i 2 \pi f_0 x)$$

5. Образ Фурье $\delta(x)$ -функции Дирака:

$$\delta(x) \leftrightarrow 1. \quad (1.22)$$

Спектр $\delta(x)$ -функции является действительным и равномерным на всей оси частот $U(f)=1$. Схематически $\delta(x)$ -функцию Дирака можно представить в виде единственного отличного от нуля значения в точке

$x = 0$, взятого с весом 1 (рис.1.7). На этом же рисунке приведен спектр $U_{\delta}(f)$ для $\delta(x)$ -функции.

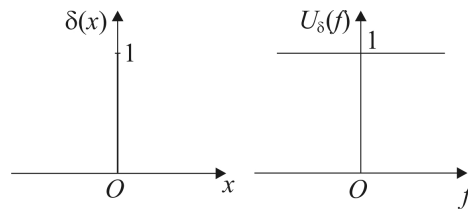


Рис.1.7. Схематическое изображение $\delta(x)$ -функции Дирака и ее спектра $U_{\delta}(f) = 1$.

6. Образ Фурье функции $\delta(x - x_0)$.

В соответствии с теоремой запаздывания спектр функции $\delta(x - x_0)$ является комплексным:

$$\delta(x - x_0) \leftrightarrow \exp\{-i2\pi f x_0\}. \quad (1.23)$$

Запаздывающая функция Дирака $\delta(x - x_0)$, модуль $|U_{\delta}(f)|$ и аргумент $\varphi_{\delta} = -2\pi f x_0$ ее спектра приведены на рис. 1.8.

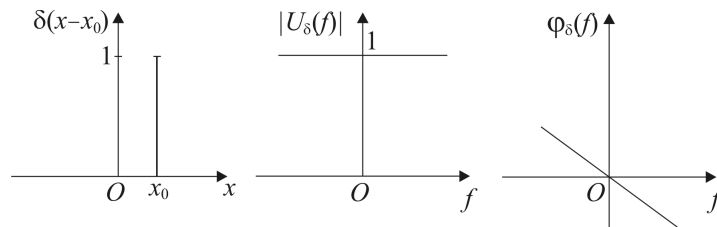


Рис.1.8. Схематическое изображение запаздывающей функции Дирака $\delta(x - x_0)$, модуля $|U_{\delta}(f)|$ и фазы $\varphi_{\delta}(f) = -2\pi f x_0$ ее спектра.

7. Образ Фурье гребневой функции Дирака $\text{Ш}(x)$.

Гребневая функция определяется как бесконечная сумма эквидистантно смещенных $\delta(x - j\Delta x)$ -функций:

$$\text{Ш}(x) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \delta(x - j\Delta x). \quad (1.24)$$

Функция $\text{Ш}(x)$ периодическая и ее Фурье-образом $U_{\text{Ш}}(f)$ является ряд Фурье, в котором гармоники $f_k = k / \Delta x$ «идут» по оси частот с шагом $\Delta f = 1 / \Delta x$, где Δx – период δ -функций в $\text{Ш}(x)$. Используя выражение для коэффициентов Фурье d_k (1.5) и свойства функции $\delta(x - x_0)$, нетрудно получить, что все коэффициенты разложения функции $\text{Ш}(x)$ в ряд являются действительными и равны $d_k = 1 / \Delta x$, фаза $\phi_k = 0$. В символической записи (1.9) образ Фурье гребневой функции Дирака $\text{Ш}(x)$ имеет вид:

$$\begin{aligned} \text{Ш}(x) &\leftrightarrow \frac{1}{\Delta x} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \delta(f - k / \Delta x) \text{ или} \\ \sum_{j=-\infty}^{\infty} \delta(x - j\Delta x) &\leftrightarrow \frac{1}{\Delta x} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \delta(f - k / \Delta x), \text{ или} \end{aligned} \quad (1.25)$$

$$\text{Ш}(x) \leftrightarrow \frac{1}{\Delta x} U_{\text{Ш}}(f), \text{ где } U_{\text{Ш}}(f) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \delta(f - k / \Delta x)$$

Схематическое изображение гребневой функции Дирака $\text{Ш}(x)$ и ее спектра $U_{\text{Ш}}(f)$ приведено на рис.1.9.

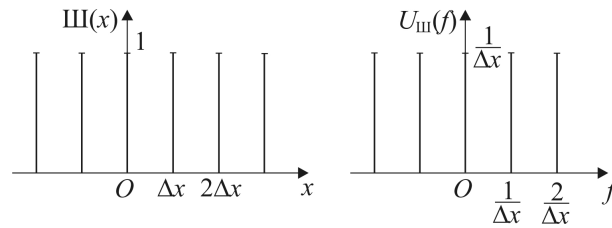


Рис.1.9. Схематическое изображение гребневой функции Дирака $\text{Ш}(x)$ и ее спектра $U_{\text{Ш}}(f)$.

Глава 2. Функция дискретного аргумента

§2.1. Дискретность и конечность области определения сеточной функции

В компьютерном эксперименте осуществляются операции с конечными массивами чисел, которые представляют рассматриваемые функции. Для перехода к массиву чисел от функции $u(x)$ с непрерывно меняющимся аргументом x накладывается на область ее определения сетка, которая представляет собой дискретное множество точек x_j , где $j = -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2} - 1$. Точки x_j называются узлами сетки, интервал между узлами – шагом. Сетка – равномерная, если шаг $\Delta x = x_{j+1} - x_j$ постоянный во всей области. В этом случае $\Delta x \cdot N = L$, где L – область определения аргумента x . Значения функции в узлах сетки $u(x_j)$, где $j = -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2} - 1$, представляет собой массив конечной размерности N , с которым выполняются вычисления на компьютере. Последовательность чисел $u_j = u(x_j)$ является функцией дискретного аргумента, к которой осуществлен переход от исходной функции $u(x)$ с непрерывно меняющейся переменной x :

$$u(x) \rightarrow u_j, j = -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2} - 1. \quad (2.1)$$

Таким образом, область определения сеточной функции u_j является дискретной и имеет конечную размерность.

Формально переход от $u(x)$ к сеточной функции дискретного аргумента u_j удобно представить следующим образом:

$$u_j = u(x) \cdot \Pi(x) \cdot \Delta x, \text{ или } u_j = u(x) \cdot \sum_{j=-\infty}^{\infty} \delta(x - j\Delta x) \cdot \Delta x \quad (2.2)$$

Выражение (2.2) удовлетворяет следующему тождеству, которое соответствует интегральному определению функции дискретного аргумента u_j на ячейке сетки $x \in \left[x_j - \frac{\Delta x}{2}, x_j + \frac{\Delta x}{2} \right]$:

$$\int_{x_j - \frac{\Delta x}{2}}^{x_j + \frac{\Delta x}{2}} u_j dx \equiv \int_{x_j - \frac{\Delta x}{2}}^{x_j + \frac{\Delta x}{2}} u(x) \Pi(x) dx \cdot \Delta x. \quad (2.3)$$

Схематически функции $u(x)$, $\Pi(x)$, u_j и выполнение тождества (2.3) иллюстрирует рис.2.1.

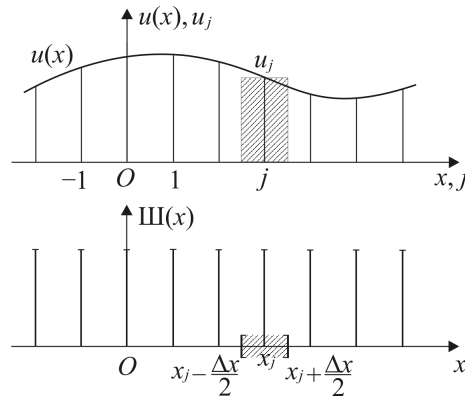


Рис.2.1. Иллюстрация перехода от функции непрерывного аргумента $u(x)$ к сеточной функции u_j и интегральной эквивалентности этих функций на ячейке сетки.

§2.2. Спектр функции дискретного аргумента

Пусть от функции непрерывного аргумента $u(x)$ с известным спектром $U(f)$ осуществлен с помощью преобразования (2.2) переход к функции дискретного аргумента $u_j \equiv u(x_j)$, определенной на сетке с

шагом Δx . Требуется найти спектр $U_{\Delta x}(f)$ функции u_j и установить его связь со спектром $U(f)$ исходной функции $u(x)$.

Так как, согласно (2.2), функция u_j равна произведению исходной функции $u(x)$ и гребневой функции Дирака $\text{Ш}(x)$, то по теореме о свертке (1.20) искомый образ Фурье $U_{\Delta x}(f)$ является сверткой Фурье-образов $U(f)$ функции непрерывного аргумента и спектра $U_{\text{Ш}}(f)$ гребневой функции:

$$U_{\Delta x}(f) = U(f) \otimes U_{\text{Ш}}(f) \cdot \Delta x. \quad (2.4)$$

После подстановки в (1.20) выражения (1.25) для $U_{\text{Ш}}(f)$ формула (2.4) принимает вид:

$$U_{\Delta x}(f) = \int_{-\infty}^{+\infty} U(\xi) \cdot \frac{1}{\Delta x} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \delta\left(f - \frac{k}{\Delta x} - \xi\right) d\xi \cdot \Delta x \quad (2.5)$$

Области интегрирования принадлежит бесконечное множество слагаемых подынтегрального выражения, и, в соответствии с определением δ -функции, интеграл в правой части (2.5) является

бесконечной суммой $\sum U(\xi)$ при замене аргумента ξ на $\xi = f - k/\Delta x$.

Таким образом, образ Фурье $U_{\Delta x}(f)$ функции дискретного аргумента u_j равен:

$$U_{\Delta x}(f) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} U\left(f - \frac{k}{\Delta x}\right). \quad (2.6)$$

Полученное выражение означает, что спектр $U_{\Delta x}(f)$ функции дискретного аргумента представляет собой бесконечную сумму спектров $U(f - k/\Delta x)$ непрерывной функции, сдвинутых по оси частот на $\pm \frac{k}{\Delta x}$, где $k = -\infty, \dots, 1, 0, 1, \dots, +\infty$, Δx – шаг сетки, с помощью

которой осуществлен переход от функции $u(x)$ к функции дискретного аргумента u_j (рис.2.2).

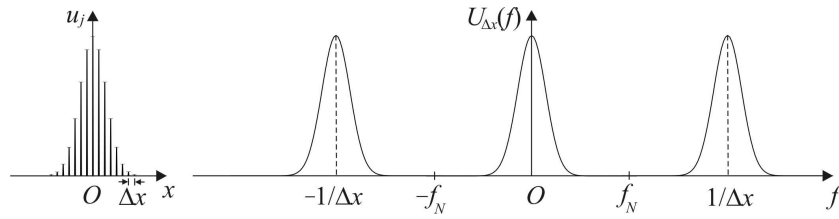


Рис.2.2. Функция дискретного аргумента u_j на сетке с шагом Δx , ее спектр $U_{\Delta x}(f)$ и частота Найквиста f_N .

Из (2.6) видно, что спектр $U_{\Delta x}(f)$ функции дискретного аргумента u_j имеет следующие свойства:

1. Спектр функции дискретного аргумента является периодическим

$$U_{\Delta x}(f) = U_{\Delta x}\left(f - \frac{k}{\Delta x}\right), \quad (2.7)$$

где период спектра $1/\Delta x$ равен величине, обратной шагу дискретизации Δx функции $u(x)$;

2. Существует частота f_N , называемая частотой Найквиста:

$$f_N = \frac{1}{2\Delta x}, \quad (2.8)$$

которая является верхней границей полосы частот, которую воспроизводит сетка с шагом Δx (рис.2.2).

Действительно, пусть спектр $U(f)$ функции непрерывного аргумента $u(x)$ ограничен по полосе частот:

$$U(f) \begin{cases} \neq 0, & \text{если } f \in [-f_{\max}, f_{\max}], \\ = 0, & \text{если } f \notin [-f_{\max}, f_{\max}] \end{cases} \quad (2.9)$$

Тогда, если частота Найквиста f_N больше или равна верхней границе спектральной полосы $f_{\max}$, то спектр $U(f)$ функции непрерывного аргумента можно получить из спектра $U_{\Delta x}(f)$ дискретной функции, наложив на него единичное прямоугольное окно $\Pi(f)$ на оси частот:

$$U(f) = U_{\Delta x}(f) \cdot \Pi(f) \quad \text{при } f_N \geq f_{\max}, \quad (2.10)$$

где прямоугольное спектральное окно $\Pi(f)$ определяется выражением:

$$\Pi(f) = \begin{cases} 1, & \text{если } f \in [-f_N, f_N] \\ 0, & \text{если } f \notin [-f_N, f_N] \end{cases} \quad (2.11)$$

Восстановление спектра непрерывной функции $U(f)$ по спектру $U_{\Delta x}(f)$ дискретной функции при $f_N \geq f_{\max}$ иллюстрирует рис.2.3.

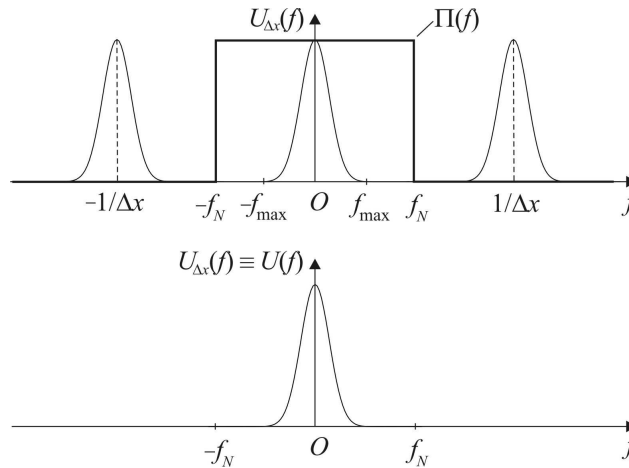


Рис.2.3. Восстановление спектра $U(f)$ с ограниченной полосой $f_{\max}$ по спектру $U_{\Delta x}(f)$ функции u_j на сетке с шагом Δx , при котором частота Найквиста f_N удовлетворяет условию $f_N \geq f_{\max}$

Если частота Найквиста f_N на выбранной сетке меньше верхней границы спектральной полосы $f_{\max}$, то по спектру $U_{\Delta x}(f)$

дискретной функции невозможно восстановить спектр $U(f)$ функции непрерывного аргумента:

$$U(f) \neq U_{\Delta x}(f) \cdot \Pi(f) \quad \text{при } f_N < f_{\max}. \quad (2.12)$$

В этом случае в сумме (2.6) перекрываются слагаемые $U\left(f - \frac{k}{\Delta x}\right)$ и наложение окна $\Pi(f)$ на спектр $U_{\Delta x}(f)$ не позволяет получить без погрешностей спектр функции непрерывного аргумента (рис.2.4).

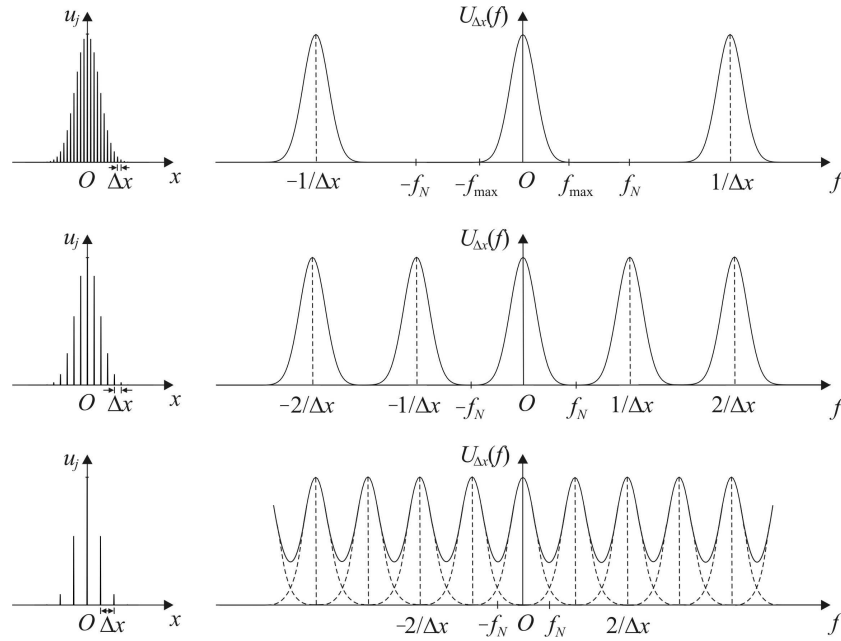


Рис.2.4. Перекрывание слагаемых $U\left(f - \frac{k}{\Delta x}\right)$ в спектре $U_{\Delta x}(f)$ при $f_N < f_{\max}$,

т.е. когда частота Найквиста f_N меньше, чем верхняя граница спектральной полосы $f_{\max}$ в спектре $U(f)$

Эта погрешность, известная как “наложение частот” (“frequency aliasing”), вызывает возникновение в спектре, вычисляемом по (2.12),

ложных частот, которые отсутствуют в спектре $U(f)$ исходной функции. Так, гармоника с длиной волны λ^* на сетке с шагом $\Delta x > \lambda^*/2$ будет иметь вид гармонической функции дискретного аргумента u_j , длина волны которой $\lambda \gg \lambda^*$ (рис.2.5).

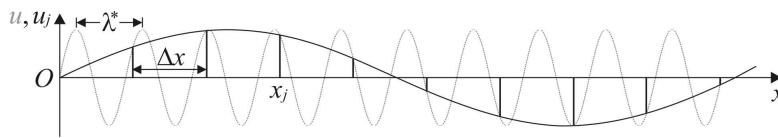


Рис.2.5. Эффект наложения частот при представлении гармоники с длиной волны λ^* на сетке с шагом $\Delta x \approx 1,1\lambda^*$ ($\Delta x > \lambda^*/2$). Частота гармоники $f^* > f_N$

Частота Найквиста f_N является фундаментальной характеристикой сетки и определяется ее шагом Δx (2.8). Она не связана с рассматриваемой функцией $u(x)$. Частоте f_N соответствует длина волны Найквиста λ_N , которая равна:

$$\lambda_N = 2\Delta x. \quad (2.13)$$

Длина волны Найквиста λ_N имеет смысл наименьшей длины волны гармоники, которую можно воспроизвести на сетке с шагом дискретизации Δx (рис.2.6). В функции u_j , являющейся гармоникой на длине волны λ_N , значения в соседних узлах сетки равны по величине и имеют противоположные знаки.

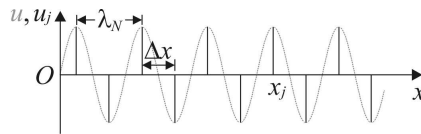


Рис.2.6. Гармоника с длиной волны λ , равной длине волны Найквиста $\lambda_N = 2\Delta x$ в виде функции дискретного аргумента u_j

Гармоник с длиной волны $\lambda < 2\Delta x$ на сетке с шагом Δx не существует.

Таким образом, сетка с шагом Δx является фильтром низких частот, спектральная полоса которого ограничена сверху частотой

Найквиста $f_N = \frac{1}{2\Delta x}$. Соответственно, наименьшая длина волны гармоники, воспроизводимой на сетке, равна длине волны Найквиста $\lambda_N = 2\Delta x$.

§2.3. Теорема Котельникова – Шеннона

Теорема сформулирована В.А. Котельниковым¹ в 1933 году и независимо Шенноном в 1949 году. Близкая теорема дана Найквистом в 1927 году. Применительно к численному моделированию теорема Котельникова-Шеннона формулируется следующим образом.

Если функция $u(x)$ имеет ограниченный спектр:

$$U(f) \begin{cases} \neq 0, & \text{если } f \in [-f_{\max}, f_{\max}], \\ = 0, & \text{если } f \notin [-f_{\max}, f_{\max}] \end{cases}$$

то по ее сеточным значениям u_j при шаге дискретизации Δx таком, что частота Найквиста f_N превышает максимальную частоту $f_{\max}$ в спектре ($f_N \geq f_{\max}$), функция $u(x)$ точно восстанавливается по формуле Котельникова – Шеннона, которая имеет вид:

$$u(x) = \sum_{j=-\infty}^{+\infty} u_j \Phi_{\text{КШ}}(x, j), \quad (2.14)$$

$$\text{где } \Phi_{\text{КШ}}(x, j) = \text{sinc}\left(\frac{\pi(x - j\Delta x)}{\Delta x}\right) \quad (2.15)$$

– функция Котельникова-Шеннона.

Действительно, при выполнении условия $f_N \geq f_{\max}$ спектр $U(f)$ функции непрерывного аргумента согласно (2.10) можно получить из спектра $U_{\Delta x}(f)$ наложением прямоугольного спектрального окна $\Pi(f)$ (Рис.2.7).

¹ Академик Владимир Александрович Котельников, основатель и первый директор Института радиотехники и электроники АН СССР.

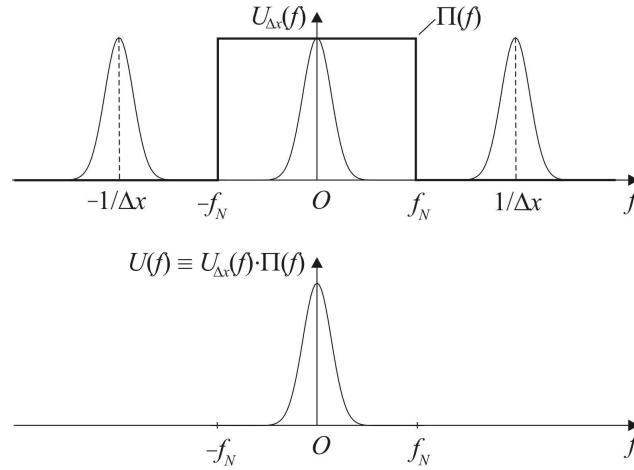


Рис.2.7. Выделение спектра $U(f)$ функции непрерывного аргумента $u(x)$ при наложении прямоугольного спектрального окна $\Pi(f)$ на спектр $U_{\Delta x}(f)$ функции дискретного аргумента

В этом случае спектр $U(f)$ является произведением спектра сеточной функции $U_{\Delta x}(f)$ и прямоугольного спектрального окна $\Pi(f)$:

$$U(f) = U_{\Delta x}(f) \cdot \Pi(f), \quad (2.16)$$

и согласно (1.21) функция $u(x)$, которая является оригиналом произведения спектров, равна свертке оригиналов сомножителей $u_j \equiv u(x_j)$ и $\Pi(x)$:

$$u(x) = u_j \otimes \Pi(x) \quad \text{или} \quad u(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} u(\xi_j) \Pi(x - \xi) d\xi. \quad (2.17)$$

Здесь $u(\xi_j)$ в соответствии с представлением (2.2) имеет вид:

$$u(\xi_j) = u(\xi) \cdot \sum_{j=-\infty}^{\infty} \delta(\xi - j\Delta x) \cdot \Delta x. \quad .$$

Оригинал $\Pi(x)$ прямоугольного окна $\Pi(f)$ (2.11) вычисляется по формуле (1.13) для обратного преобразования Фурье:

$$\Pi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \Pi(f) e^{i2\pi f x} df = \int_{-f_N}^{f_N} e^{i2\pi f x} df = \frac{1}{\pi x} \sin(2\pi f_N x).$$

Так как, частота Найквиста f_N равна $f_N = \frac{1}{2\Delta x}$, полученное выражение для оригинала $\Pi(x)$ преобразуется к виду:

$$\Pi(x) = \frac{1}{\Delta x} \operatorname{sinc}\left(\frac{\pi x}{\Delta x}\right). \quad (2.18)$$

Искомая функция $u(x)$ после подстановки в свертку (2.17) оригинала $u(\xi_j)$ в виде (2.2) и $\Pi(x-\xi)$ в виде (2.18) записывается следующим образом:

$$u(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} u(\xi) \sum_{j=-\infty}^{+\infty} \delta(\xi - j\Delta x) \cdot \Delta x \cdot \frac{1}{\Delta x} \operatorname{sinc}\left(\frac{\pi(x-\xi)}{\Delta x}\right) d\xi.$$

Поскольку области интегрирования принадлежит бесконечное множество слагаемых, то функция $u(x)$ в соответствии со свойствами δ -функции выражается следующей суммой:

$$u(x) = \sum_{j=-\infty}^{+\infty} u(j\Delta x) \cdot \operatorname{sinc}\left(\frac{\pi(x-j\Delta x)}{\Delta x}\right). \quad (2.19)$$

Полученное выражение (2.19) является формулой Котельникова-Шеннона (2.14, 2.15), точно восстанавливающей функцию непрерывного аргумента $u(x)$ по ее сеточным значениям u_j .

Свойства функции Котельникова-Шеннона $\Phi_{\text{КШ}}(x, j)$ (2.15) таковы, что для любого выбранного $j = j^*$ она равна единице в j^* -ом узле и равна нулю во всех других узлах сетки:

$$\Phi_{\text{КШ}}(x, j^*) = \begin{cases} 1 & \text{при } x = \Delta x \cdot j^*, \\ 0 & \text{при } x = \Delta x \cdot j, \text{ если } j \neq j^*. \end{cases} \quad (2.20)$$

Вид функции $\Phi_{\text{КШ}}(x, j^*)$ иллюстрирует рисунок (рис.2.8), где она приведена в качестве примера при $j^* = 0$ и $j^* = 2$.

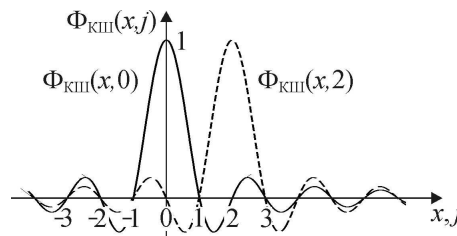


Рис.2.8. Функция Котельникова-Шеннона $\Phi_{\text{КШ}}(x, j^*)$. например при $j^* = 0$ (сплошная кривая) и $j^* = 2$ (штриховая кривая)

Из вида функции $\Phi_{\text{КШ}}(x, j)$ (см. рис.2.8) следует, что любое слагаемое $\Phi_{\text{КШ}}(x, j^*)$ не меняет значения суммы (2.14) или (2.19) во всех узлах с номерами $j \neq j^*$, но влияет на результат суммирования при переменной x в интервалах между узлами.

Несколько слагаемых $u_j \Phi_{\text{КШ}}(x, j^*)$ при $j^* = -1, 0, 2$ в формуле Котельникова-Шеннона (2.15) приведены на рис. 2.9 при восстановлении некоторой функции $u(x)$.

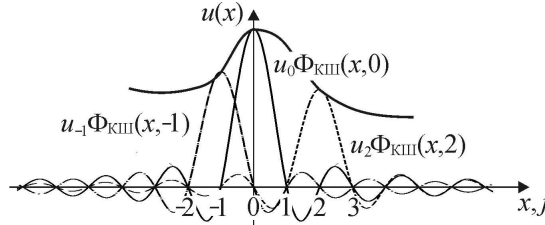


Рис.2.9. Функция непрерывного аргумента $u(x)$ (жирная кривая) и некоторые слагаемые $u_j\Phi_{\text{КШ}}(x, j)$ в формуле Котельникова-Шеннона; например, при $j = -1$ (штрихпунктирная кривая), при $j = 0$ (сплошная кривая), при $j = 2$ (штриховая кривая)

§2.4. Осцилляции Гиббса

Если формула Котельникова-Шеннона используется для получения функции $u(x)$ со спектром $U(f)$ по ее сеточным значениям u_j при шаге дискретизации Δx таким, что частота Найквиста f_N меньше максимальной частоты $f_{\max}$ в спектре $U(f)$ ($f_N < f_{\max}$), то восстановленная функция $\tilde{u}(x)$ совпадает с $u(x)$ только в узлах сетки x_j и отклоняется от $u(x)$ при переменной x в интервалах между узлами $x \neq x_j$:

$$\sum_{j=-\infty}^{+\infty} u_j \Phi_{\text{КШ}}(x, j) \begin{cases} = u(x) & \text{при } x = x_j, \\ \neq u(x) & \text{при } x \neq x_j, \end{cases} \text{ если } f_N < f_{\max}. \quad (2.21)$$

Отклонения функции $\tilde{u}(x) = \sum_{j=-\infty}^{+\infty} u_j \Phi_{\text{КШ}}(x, j)$ от исходной функции $u(x)$ при x , расположенных в интервалах между узлами сетки ($x \neq x_j$), называются осцилляциями Гиббса (рис.2.10).

Осцилляции Гиббса при использовании формулы Котельникова-Шеннона в случае $f_N < f_{\max}$ появляются вследствие

отсутствия высокочастотных гармоник в функциях $\Phi_{\text{КШ}}(x, j)$, спектр которых ограничен частотой Найквиста f_N .

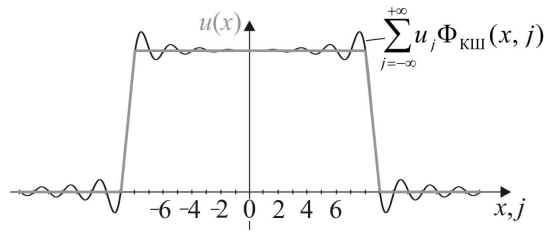


Рис.2.10. Осцилляции Гиббса при восстановлении по формуле Котельникова-Шеннона трапециевидного импульса

В преобразовании Фурье осцилляции Гиббса возникают при вычислении функции $u(x) = u(x \pm nL)$ по формулам (1.1) или (1.4), или (1.5) с усеченным рядом Фурье. Пусть периодическая функция $u(x) = u(x \pm nL)$ имеет ограниченный спектр $U(f)$ и формула (1.19) принимает соответственно следующий вид :

$$U(f) = \sum_{k=-k_{\max}}^{k=+k_{\max}} \delta\left(f - \frac{k}{L}\right) d_k, \quad (2.22)$$

где $f_{\max} = \frac{k_{\max}}{L}$ — максимальная частота, $k_{\max}$ — максимальный номер гармоник в дискретном спектре периодической функции $u(x) = u(x \pm nL)$. Для функции с ограниченным спектром ряд Фурье, например (1.15), записывается следующим образом:

$$u(x) = \sum_{k=-k_{\max}}^{k=+k_{\max}} d_k e^{i2\pi f_k x}. \quad (2.23)$$

Функция $\tilde{u}(x)$, восстановленная усеченным рядом Фурье, в котором осуществляется суммирование по k от $-k^*$ до $+k^*$, где $k^* < k_{\max}$, равна:

$$\tilde{u}(x) = \sum_{k=-k^*}^{k=+k^*} d_k e^{i2\pi f_k x}. \quad (2.24)$$

Высшая частота в ряде (2.24) является частотой Найквиста $f_N = k^* / L$. При $k^* < k_{\max}$ частота Найквиста f_N меньше максимальной частоты $f_{\max}$ в спектре $U(f)$ (2.22), что и приводит к появлению осцилляций Гиббса, как и при использовании формулы Котельникова-Шеннона в случае $f_N < f_{\max}$. Для последовательности прямоугольных импульсов, например, вычисление по формулам (1.1) или (1.4), или (1.5) всегда сводится к суммированию усеченных рядов Фурье, так как спектр последовательности таких импульсов является неограниченным.

Наиболее существенны осцилляции Гиббса, возникающие при вычислениях по формуле Котельникова-Шеннона или суммировании усеченного ряда Фурье, для разрывных функций и в меньшей степени для непрерывных функций с разрывами производных. Следует заметить, что для функций с неограниченным спектром уменьшение шага дискретизации Δx и, соответственно, увеличение частоты Найквиста f_N не приводит к уменьшению амплитуды осцилляций Гиббса в восстановленной функции $\tilde{u}(x)$, а вызывает сокращение их периода из-за уменьшения шага Δx .

Возникновение осцилляций Гиббса при восстановлении функции по усеченному ряду Фурье наглядно иллюстрирует формирование последовательности знакопеременных прямоугольных импульсов, период следования которых L вдвое больше их длительности h_0 (рис. 2.11 (a)). В этом случае коэффициенты разложения d_k (1.12) имеют вид:

$$d_k = \frac{A}{\pi k} \sin \frac{\pi k}{2}. \quad (2.25)$$

Коэффициенты разложения действительны и в спектре последовательности импульсов присутствуют только косинус компоненты с нечетными номерами $k = 2m + 1$, $m = 0, 1, 2, \dots$. При этом амплитуды гармоник a_k (1.7) знакопеременны и их величина обратно пропорциональна номеру k :

$$a_k = \begin{cases} \frac{2A}{\pi k} (-1)^m & \text{при } k = 2m + 1, \\ 0 & \text{при } k = 2m. \end{cases} \quad (2.26)$$

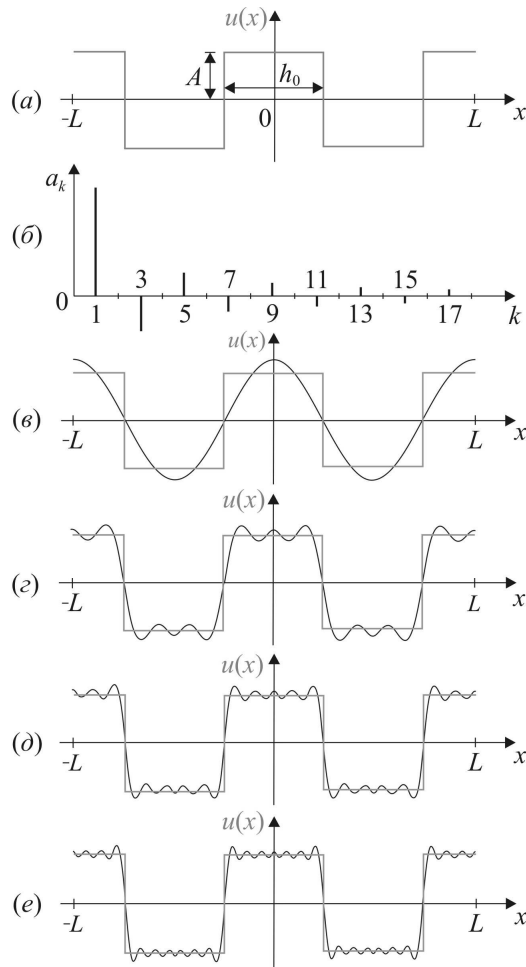


Рис.2.11. Периодическая последовательность знакопеременных прямоугольных импульсов (а), амплитуды косинус компонент a_k в ряде Фурье (б), восстановленная функция $\tilde{u}(x)$, как сумма усеченного ряда Фурье при различном числе слагаемых: $m^*=0$ (в), $m^*=1$ (г), $m^*=2$ (д) и $m^*=3$ (е)

В результате восстановленная функция $\tilde{u}(x)$, вычисленная как сумма усеченного ряда Фурье для рассматриваемой последовательности импульсов записывается следующим образом:

$$\tilde{u}(x) = \frac{2A}{\pi} \sum_{m=0}^{m^*} \frac{(-1)^m}{2m+1} \cos\left(2\pi \frac{(2m+1)x}{L}\right). \quad (2.27)$$

Амплитуды a_k косинус-компонент разложения функции $u(x)$ в ряд Фурье приведены на рис. 2.11 (б). В усеченном ряде Фурье вычисляется сумма конечного числа слагаемых в (2.27) от $m=0$ до $m=m^*$. Последовательное суммирование членов усеченного ряда Фурье при $m^*=0, 1, 2, 3$ представлено соответствующими кривыми на рис. 2.11 (в–е).

§2.5. Взаимосвязь функции и спектра при дискретизации аргумента

Общую логику перехода от функции $u(x)$ и ее спектра $U(f)$ к сеточной функции u_j и ее спектра $U_{\Delta x}(f)$ можно проследить поэтапно с помощью следующей диаграммы (рис.2.12).

1. Функция непрерывного аргумента $u(x)$ и ее образ Фурье $U(f)$, определенный на непрерывной оси частот, однозначно связаны преобразованием Фурье (1.14):

$$u(x) \leftrightarrow U(f), \quad (2.28)$$

где переменные x и f являются непрерывными и определены на бесконечной оси $x \in (-\infty, +\infty)$ и $f \in (-\infty, +\infty)$.

2. Поскольку в численном моделировании производятся операции с массивами чисел, выполняется переход от непрерывных переменных x и f к дискретным множествам с шагами дискретизации Δx и Δf , соответственно:

$$x \rightarrow x_j \equiv \Delta x \cdot j \quad \text{и} \quad f \rightarrow f_k \equiv \Delta f \cdot k. \quad (2.29)$$

3. При дискретизации переменных x и f происходит переход от функций непрерывного аргумента $u(x)$ и $U(f)$ к сеточным функциям $u(j)$ и $U(k)$:

$$u(x) \rightarrow u(j) \equiv u(\Delta x \cdot j) \text{ и } U(f) \rightarrow U(k) \equiv U(\Delta f \cdot k). \quad (2.30)$$

4. Поскольку сеточная функция $U(k)$ представляет собой дискретный спектр с интервалом частот между соседними гармониками Δf , то она является образом Фурье периодической функции с периодом $L = \frac{1}{\Delta f}$:

$$u(x) = u(x \pm nL), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.31a)$$

Для сеточной функции $u(j)$ условие периодичности принимает вид:

$$u(j) = u(j \pm nN), \quad (2.31b)$$

где число узлов N на периоде сеточной функции равно отношению периода L к шагу дискретизации Δx :

$$N = \frac{L}{\Delta x}. \quad (2.32)$$

Итак, в результате дискретизации по оси частот и перехода от непрерывного спектра $U(f)$ к дискретному спектру $U(k)$ функция $u(x)$ и сеточная функция $u(j)$ становятся периодическими.

5. Функция дискретного аргумента $u(j)$ согласно (2.7) имеет периодический спектр:

$$U_{\Delta x}(f) = U_{\Delta x}\left(f - \frac{n}{\Delta x}\right), \quad (2.33)$$

Для сеточной функции $U(k)$ условие периодичности принимает вид:

$$U(k) = U(k \pm nP) \quad (2.34)$$

где число гармоник P на периоде спектра.

Итак, в результате дискретизации переменной x и перехода от функции $u(x)$ к сеточной $u(j)$ стали периодическими спектр $U(f)$ и его дискретная форма $U(k)$.

Число гармоник P на периоде спектра равно отношению его периода $(\Delta x)^{-1}$ к шагу дискретизации по частоте Δf :

$$P = \frac{(\Delta x)^{-1}}{\Delta f}. \quad (2.35)$$

Поскольку $\Delta f = L^{-1}$, то $P = N$. Число гармоник на периоде дискретного спектра совпадает с числом узлов на периоде сеточной функции. Это означает, что при преобразовании Фурье информация сохраняется и численный массив гармоник $U(k)$, $k = 1, 2, \dots, N$, содержит тот же объем информации, что и массив значений сеточной функции $u(j)$, $j = 1, 2, \dots, N$.

6. Таким образом, сеточная функция $u(j)$ и ее образ Фурье $U(k)$ однозначно связаны преобразованием Фурье:

$$u(j) \leftrightarrow U(k). \quad (2.36)$$

При этом оригинал $u(j)$ и Фурье-образ $U(k)$ являются периодическими функциями дискретного аргумента:

$$u(j) = u(j \pm nN) \text{ и } U(k) = U(k \pm nN), \quad (2.37)$$

где N – число узлов на периоде сеточной функции $u(j)$ или число гармоник на периоде дискретного спектра $U(k)$. Схематически сеточную функцию $u(j)$, для которой осуществляется преобразование Фурье, и ее образ $U(k)$ иллюстрирует рис.2.12.

Ключевыми характеристиками спектра при дискретном преобразовании Фурье являются:

- Частота Найквиста $f_N = 1/(2\Delta x)$, равная верхней границе спектра, воспроизводимого на сетке с шагом дискретизации Δx ,

- Спектральное разрешение, или шаг дискретизации по частоте $\Delta f = 1/L$, воспроизводимый для функции с периодом L .

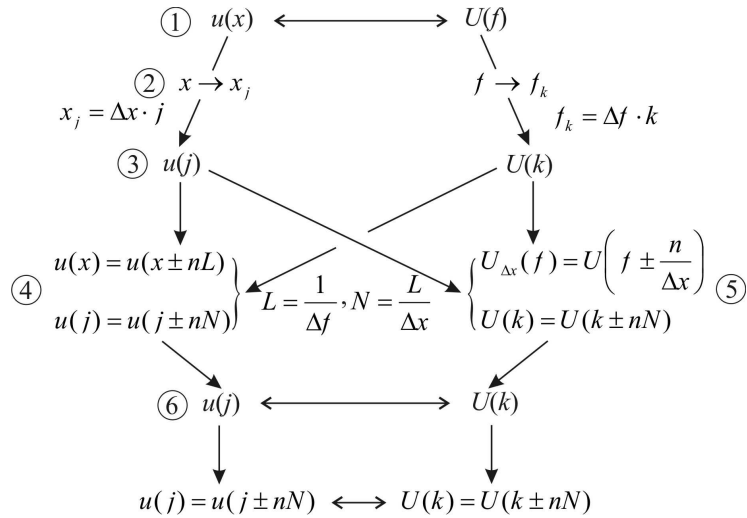


Рис.2.12. Трансформация функции непрерывного аргумента $u(x)$ и ее спектра $U(f)$ при дискретизации переменных x и f и при переходе к сеточной функции $u(j)$ и ее дискретному спектру $U(k)$.

§2.6 Вычисление производных с использованием спектров

Рассмотрим функцию $u(x_j)$ с периодом L , заданную на равномерной сетке, содержащей N узлов с шагом $\Delta x = L/N$. Используя формулу Котельникова–Шеннона, получим по сеточным значениям функции $u(x_j)$ восстановленную функцию $\tilde{u}(x)$ непрерывного

аргумента $\tilde{u}(x) = \sum_{j=-N/2}^{N/2-1} u(x_j) \text{sinc}\left(\frac{\pi}{\Delta x}(x - x_j)\right)$. Дифференцируя эту

формулу, можно найти ее производные $d\tilde{u}/dx$, $d^2\tilde{u}/dx^2$ и т.д. при любых x , в том числе в узлах сетки. Вместе с тем, можно предложить более простой и универсальный способ дифференцирования сеточных функций. Для этого введем волновое число k -ой Фурье-гармоники

$\kappa_k = 2\pi f_k = 2\pi \frac{k}{L}$, где $-N/2 \leq k \leq N/2 - 1$, и разложим $\tilde{u}(x)$ на отрезке $[-L/2, L/2]$ в ряд Фурье. Имеем

$$\tilde{u}(x) = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} U(f_k) \exp(i\kappa_k x). \quad (2.38)$$

Дифференцируя это соотношение, получаем, что производные восстановленной функции равны

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\tilde{u}}{dx} &= \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} i\kappa_k U(f_k) \exp(i\kappa_k x), \\ \frac{d^2\tilde{u}}{dx^2} &= - \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \kappa_k^2 U(f_k) \exp(i\kappa_k x). \end{aligned} \right\} \quad (2.39)$$

Сопоставляя эти формулы с исходным разложением (2.38), приходим к выводу, что первой производной $d\tilde{u}/dx$ соответствует спектр $i\kappa_k U(f_k)$, а второй производной $d^2\tilde{u}/dx^2$ соответствует спектр $-\kappa_k^2 U(f_k)$. Кратко эти утверждения можно записать так: если

$$\tilde{u}(x) \leftrightarrow U(f_k), \text{ то } \frac{d\tilde{u}}{dx} \leftrightarrow i\kappa_k U(f_k), \frac{d^2\tilde{u}}{dx^2} \leftrightarrow -\kappa_k^2 U(f_k) \text{ и т.д.} \quad (2.40)$$

Таким образом, процедура вычисления производных с использованием спектров может быть представлена следующим образом. Сначала вычисляют спектр $U(f_k)$ функции $u(x)$, заданной в узлах равномерной сетки $x_j = j\Delta x$ ($-N/2 \leq j \leq N/2 - 1$), используя алгоритм прямого дискретного преобразования Фурье (см. § 3.1). Затем преобразуют этот спектр в соответствии с формулами (2.40), и с помощью обратного дискретного преобразования Фурье (см. § 3.1) восстанавливают массив производных в узлах равномерной сетки.

Если наложения частот для спектра $U(f_k)$ нет, то, в соответствии с теоремой Котельникова–Шеннона, восстановленная между узлами сетки функция $\tilde{u}(x)$ тождественно совпадает с исходной

функцией $u(x)$. Следовательно, в этом случае $\left. \frac{d\tilde{u}}{dx} \right|_{x=x_j} \equiv \left. \frac{du}{dx} \right|_{x=x_j}$. В свою очередь, если нет наложения частот для спектра первой производной $\kappa_k U(f_k)$, то $\left. \frac{d^2 \tilde{u}}{dx^2} \right|_{x=x_j} \equiv \left. \frac{d^2 u}{dx^2} \right|_{x=x_j}$. Подобные рассуждения могут быть продолжены для производных более высокого порядка.

Успешное использование спектрального подхода на примере дифференцирования гауссовской функции $u(x) = \exp(-x^2/a_0^2)$ проиллюстрировано на рис. 2.13.

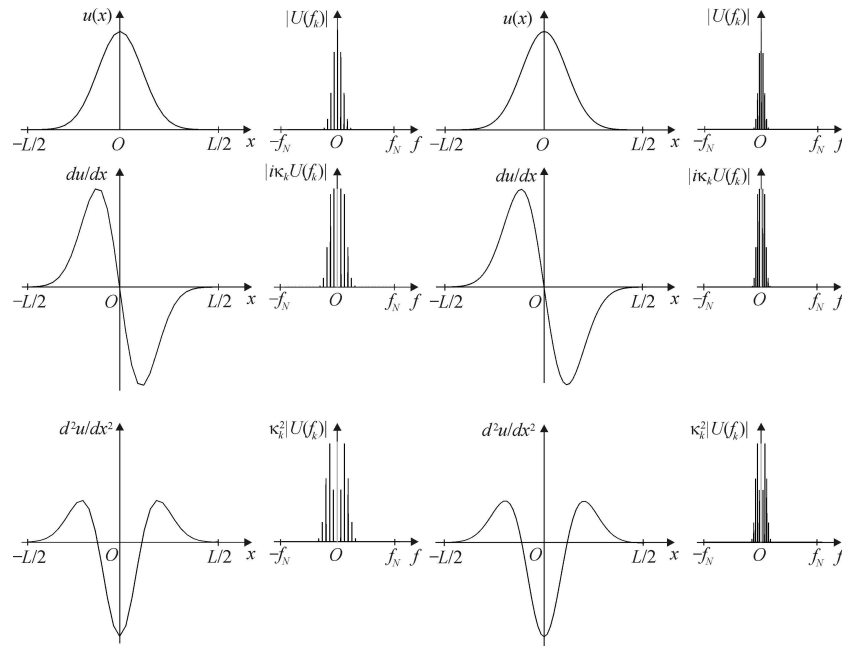


Рис. 2.13. Использование спектров для вычисления первой и второй производной гауссовской функции $u(x) = \exp(-x^2/a_0^2)$ на сетке с $N = 32$ (левые две колонки) и $N = 64$ (правые две колонки)

Спектральный подход совместно с алгоритмом быстрого преобразования Фурье (см. главу 5) является весьма эффективным и экономичным. Он широко используется при решении дифференциальных уравнений (см. например статью J. Fleck, J. Morris and M. Feit, "Time-Dependent Propagation of High Energy Laser Beams through the Atmosphere," Applied Physics A, Vol. 10, No. 2, 1976, pp. 129-160, в которой по-видимому впервые были убедительно продемонстрированы преимущества спектрального подхода при решении квазиоптического уравнения).

Однако, практическое применение спектрального подхода для вычисления производных требует определенной аккуратности. В самом деле, если для спектра функции или ее производных имеет место наложение частот, то возникновение осцилляций Гиббса между узлами сетки приводит к ошибкам при вычислении производных в узлах сетки. Возникновение подобного рода ошибок при нахождении первой производной супергауссовой функции $u(x) = \exp(-(x/a_0)^{12})$ проиллюстрировано на рис. 2.14 – 2.15.

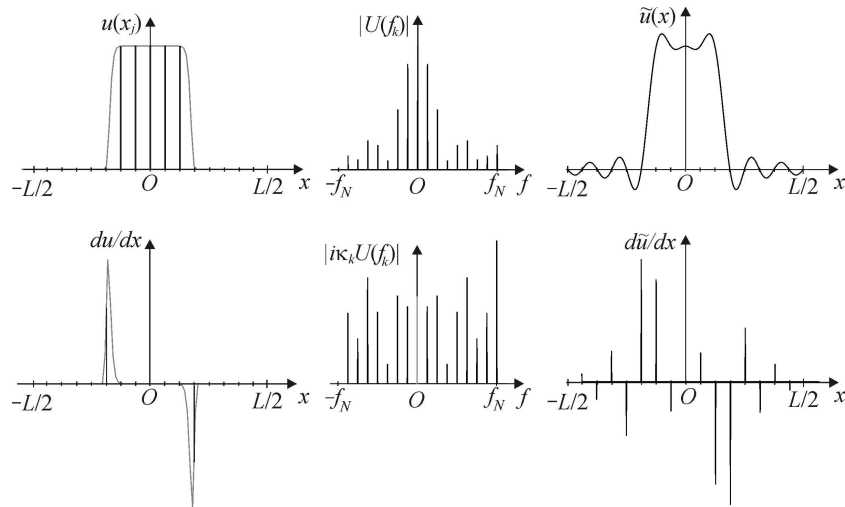


Рис. 2.14. Вычисление первой производной супергауссовской функции $u(x) = \exp(-(x/a_0)^{12})$. Верхний ряд: исходная функция $u(x)$ (серые линии) и сеточная функция $u(x_j)$ на сетке с $N = 16$; ее спектр $U(f_k)$; восстановленная по формуле Котельникова-Шеннона функция $\tilde{u}(x)$. Нижний ряд: производная du/dx , найденная аналитически (серые линии) и в узлах сетки (черные линии); спектр $|ik_k U(f_k)|$; производная $d\tilde{u}/dx$ в узлах сетки.

На рисунке 2.14 отчетливо видно, что при восстановлении функции $\tilde{u}(x)$ по искаженному наложением частот спектру возникают значительные осцилляции Гиббса. Отличные от нуля наклоны функции $\tilde{u}(x)$ в узлах сетки приводят к отличным от нуля производным в тех областях, где производные исходной функции тождественно равны нулю. Возникающие ошибки могут быть уменьшены путем увеличения числа узлов сетки на период (рис. 2.15). В самом деле, увеличение N приводит к уменьшению Δx и, как следствие, к увеличению частоты Найквиста, относительному сужению спектра функции в полосе $-f_N, +f_N$ и ослаблению эффекта наложения частот.

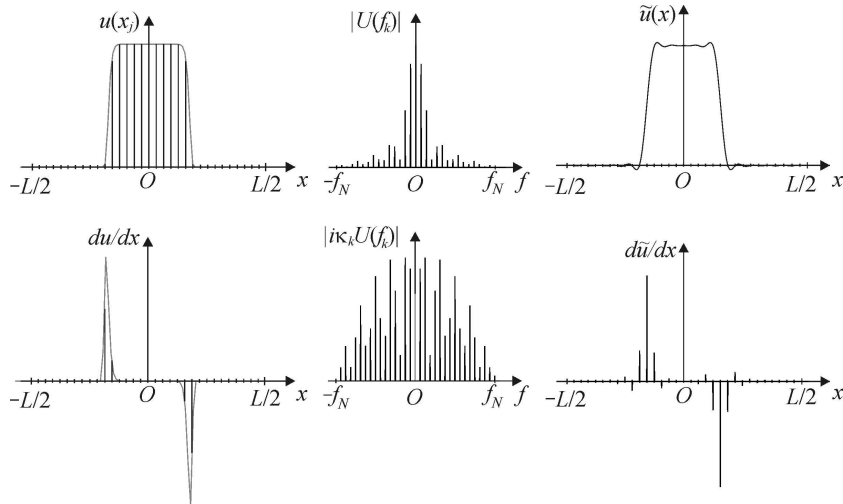


Рис. 2.15. То же самое, что на рис. 2.14, но на сетке с $N = 32$

Замечание. При практическом использовании описанного подхода важно учитывать порядок нумерации узлов сетки и Фурье-гармоник в соответствующих числовых массивах. В частности, в некоторых стандартных подпрограммах применяется следующая нумерация: $k = 0, 1, \dots, N-1$, $j = 0, 1, \dots, N-1$. В этом случае для корректного вычисления спектра первой производной вместо соответствия $\frac{d\tilde{u}}{dx} \leftrightarrow i\kappa_k U(f_k)$ ($-N/2 \leq k \leq N/2-1$) необходимо разбить

спектр на два массива и пользоваться формулами соответствия

$$\frac{d\tilde{u}}{dx} \leftrightarrow \begin{cases} i\kappa_k U(f_k) & \text{при } 0 \leq k \leq N/2 - 1, \\ i\kappa_{N-k} U(f_{N-k}) & \text{при } N/2 \leq k \leq N - 1. \end{cases} \quad \text{Для спектра второй}$$

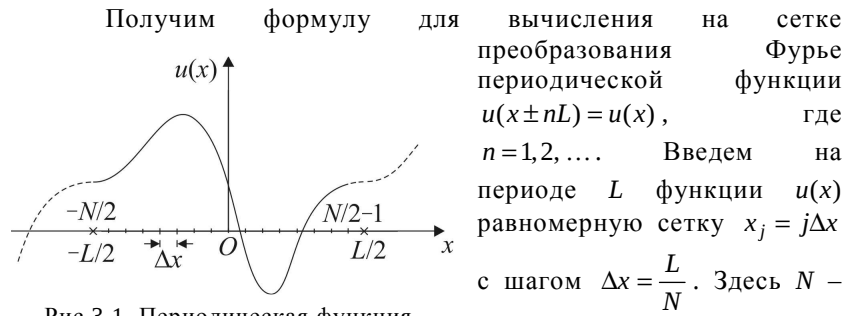
производной справедливы следующие формулы соответствия:

$$\frac{d^2\tilde{u}}{dx^2} \leftrightarrow \begin{cases} -\kappa_k^2 U(f_k) & \text{при } 0 \leq k \leq N/2 - 1, \\ -\kappa_{N-k}^2 U(f_{N-k}) & \text{при } N/2 \leq k \leq N - 1. \end{cases}$$

Спектры производных более высокого порядка вычисляются аналогично.

Глава 3. Дискретное преобразование Фурье (ДПФ)

§3.1. Анализ Фурье. Ортогональность гармоник в дискретном пространстве. Синтез Фурье



число узлов сетки, которое совпадает с числом отрезков разбиения. При этом номер узла сетки j пробегает значения $-N/2 \leq j \leq N/2 - 1$ и сеточная функция $u(j) \equiv u(x_j)$ периодична с периодом N , т.е. $u(j \pm nN) = u(j)$. Важно обратить внимание на то, что в силу периодичности функции $u(j)$ справедливо равенство $u(N/2) = u(-N/2)$.

Спектр периодической функции представляет собой ряд Фурье

$$U(k) \equiv U(f_k) = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} u(x) \exp\left(-\frac{2\pi i k x}{L}\right) dx, \quad (3.1)$$

где k – номер фурье-гармоники.

Предполагая, что спектр $U(f)$ ограничен и $f_{\max} \leq f_N$, по формуле Котельникова–Шеннона (2.19) имеем для периодической функции

$$u(x) \equiv \tilde{u}(x) = \sum_{j=-N/2}^{N/2-1} u(j) \operatorname{sinc}\left(\frac{\pi}{\Delta x}(x - x_j)\right). \quad (3.2)$$

Подставляя $u(x)$ в виде (3.2) в формулу (3.1), и используя для $u(j)$ представление (2.2) через гребневую функцию Дирака, получаем

$$U(k) = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \Delta x \sum_{j=-N/2}^{N/2-1} \delta(x - x_j) u(x) \operatorname{sinc}\left(\frac{\pi}{\Delta x}(x - x_j)\right) \exp\left(-\frac{2\pi i k x}{L}\right).$$

Отсюда, в соответствии с определением функции Дирака (§1), следует, что

$$U(k) = \frac{\Delta x}{L} \sum_{j=-N/2}^{N/2-1} u(j) \exp\left(-\frac{2\pi i k j \Delta x}{L}\right) U.$$

Учитывая, что $\frac{\Delta x}{L} = \frac{1}{N}$ и вводя обозначение $W_N = \exp\left(\frac{2\pi i}{N}\right)$, запишем последнее равенство в виде

$$U(k) = \frac{1}{N} \sum_{j=-N/2}^{N/2-1} u(j) W_N^{-kj}, \quad k = -N/2, \dots, N/2-1. \quad (3.3)$$

Это выражение называется формулой прямого дискретного преобразования Фурье (дискретного анализа Фурье). Оно определяет k -ю фурье-гармонику дискретного спектра $U(k)$ по функции дискретного аргумента $u(j)$. Выражение (3.3) является дискретным аналогом формулы (1.5) для вычисления коэффициентов разложения d_k в ряд Фурье периодической функции. При замене во второй формуле (1.5) интеграла суммой и в подстановках $f_k = k/L$, $x = j\Delta x$ и $L = \Delta x N$, можно формально перейти к (3.3).

Рассмотрим свойства дискретных гармонических функций W_N^{kj} , определенных на множестве номеров гармоник $k = -N/2, \dots, N/2-1$ в пространстве частот и множестве узлов $j = -N/2, \dots, N/2-1$ в пространстве отсчетов.

1. Гармоники разных номеров k и l ортогональны на периоде отсчетов $j = -N/2, \dots, N/2-1$:

$$\sum_{j=-N/2}^{N/2-1} W_N^{kj} \cdot W_N^{-lj} = \begin{cases} N & \text{при } k = l, \\ 0 & \text{при } k \neq l. \end{cases} \quad (3.4)$$

2. Гармоники одного и того же номера k , взятые в разных точках сетки j и m , ортогональны на периоде спектра $k = -N/2, \dots, N/2-1$:

$$\sum_{k=-N/2}^{N/2-1} W_N^{kj} \cdot W_N^{-km} = \begin{cases} N & \text{при } j = m, \\ 0 & \text{при } j \neq m. \end{cases} \quad (3.5)$$

Используя свойства ортогональности гармоник, получим формулу дискретного синтеза Фурье для вычисления функции дискретного аргумента $u(j)$ по гармоникам $U(k)$ дискретного спектра. Согласно (3.3) имеем

$$U(k) = \frac{1}{N} \sum_{m=-N/2}^{N/2-1} u(m) W_N^{-km}. \quad (3.6)$$

Умножим левую и правую части этого равенства на W_N^{kj} и просуммируем по всем k слева и справа. Получим

$$\sum_{k=-N/2}^{N/2-1} U(k) W_N^{kj} = \frac{1}{N} \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \sum_{m=-N/2}^{N/2-1} u(m) W_N^{-km} W_N^{kj}.$$

Поменяем в правой части равенства порядок суммирования:

$$\sum_{k=-N/2}^{N/2-1} U(k) W_N^{kj} = \sum_{m=-N/2}^{N/2-1} u(m) \frac{1}{N} \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} W_N^{-km} W_N^{kj}.$$

В силу ортогональности гармоник (3.5) вторая сумма в правой части равна N при $m = j$ и обращается в ноль при $m \neq j$. Отсюда, поменяв местами правую и левую части равенства, получаем

$$u(j) = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} U(k) W_N^{kj}, \quad j = -N/2, \dots, N/2-1. \quad (3.7)$$

Выражение (3.7) называется формулой обратного дискретного преобразования Фурье, с помощью которой вычисляется функция дискретного аргумента $u(j)$ по ее спектру $U(k)$. Формула (3.7) является дискретным аналогом разложения (1.5) периодической функции в ряд Фурье. При замене в сумме (1.5) бесконечных пределов на суммирование от $-N/2$ до $N/2-1$ и в подстановках $d_k = U(k)$, $f_k = k/L$, $x = j\Delta x$ и $L = \Delta x N$, можно формально перейти к (3.7).

§3.2 Свойства ДПФ. Формулы запаздывания, смещения и свертки

Выпишем вновь формулы дискретного преобразования Фурье

$$\left. \begin{aligned} U(k) &= \frac{1}{N} \sum_{j=-N/2}^{N/2-1} u(j) W_N^{-kj}, \\ u(j) &= \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} U(k) W_N^{kj}, \end{aligned} \right\} \quad (3.8)$$

где $k = -N/2, \dots, N/2-1$, $j = -N/2, \dots, N/2-1$, $W_N = \exp\left(\frac{2\pi i}{N}\right)$.

Перечислим кратко основные свойства дискретных оригинала и его Фурье-образа. К ним относятся:

1. Периодичность: $u(j \pm nN) = u(j)$, $U(k \pm nN) = U(k)$.
2. Линейность: $\alpha u_1(j) + \beta u_2(j) \leftrightarrow \alpha U_1(k) + \beta U_2(k)$.
3. Изменение знака: $u(-j) \leftrightarrow U(-k)$.
4. Комплексное сопряжение: $u^*(j) \leftrightarrow U^*(-k)$.
5. Запаздывание: $u(j-m) \leftrightarrow U(k) W_N^{-km}$.
6. Смещение: $U(k-l) \leftrightarrow u(j) W_N^{jl}$.
7. Свертка: $u_1(j) \otimes u_2(j) \leftrightarrow U_1(k) \cdot U_2(k)$,

где $u_1(j) \otimes u_2(j) = \frac{1}{N} \sum_{m=-N/2}^{N/2-1} u_1(m) \cdot u_2(j-m)$.

8. Образ Фурье $\delta(j)$ –функции Дирака: $\delta(j) \leftrightarrow 1$

9. Образ Фурье запаздывающей функции Дирака $\delta(j-j_0)$:

$$\delta(j-j_0) \leftrightarrow W^{kj_0}$$

§3.3. Двумерное преобразование Фурье

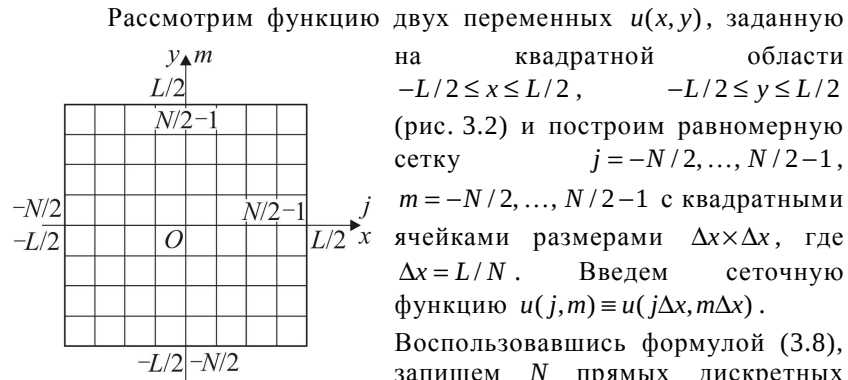


Рис. 3.2. Двумерная сетка

вспомогательную функцию $\bar{U}(j,l)$ и используя обозначение

$$W_N = \exp\left(\frac{2\pi i}{N}\right), \text{ имеем}$$

$$\bar{U}(j,l) = \frac{1}{N} \sum_{m=-N/2}^{N/2-1} u(j,m) W_N^{-lm}, \quad j = -N/2, \dots, N/2-1.$$

Выполнив теперь N дискретных преобразований для столбцов $\bar{U}(j,l)$, получаем двумерный спектр $U(k,l)$ функции $u(j,m)$

$$U(k,l) = \frac{1}{N} \sum_{j=-N/2}^{N/2-1} \bar{U}(j,l) W_N^{-kj}, \quad k = -N/2, \dots, N/2-1.$$

Записанные выше формулы удобно объединить в одну. Таким образом, прямое двумерное преобразование Фурье имеет вид

$$U(k, l) = \frac{1}{N^2} \sum_{j=-N/2}^{N/2-1} \sum_{m=-N/2}^{N/2-1} u(j, m) W_N^{-kj} W_N^{-lm}, \quad (3.9)$$

$$k = -N/2, \dots, N/2-1, \quad l = -N/2, \dots, N/2-1.$$

Обратное двумерное преобразование Фурье записывается как

$$u(j, m) = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \sum_{l=-N/2}^{N/2-1} U(k, l) W_N^{kj} W_N^{lm}. \quad (3.10)$$

При практическом использовании преобразований (3.9), (3.10) нужно принять во внимание, что двумерная дискретизация оригинала $u(j, m)$ и его Фурье-образа $U(k, l)$ приводит к их принудительной периодизации с периодом N как по j, k , так и по m, l , т.е. $u(j \pm n_1 N, m \pm n_2 N) = u(j, m)$, $U(k \pm n_1 N, l \pm n_2 N) = U(k, l)$, где $n_1, n_2 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Для корректного выполнения двумерных преобразований Фурье необходимо следить за отсутствием наложения отсчетов и частот сразу по обоим координатным и частотным осям. Указанное обстоятельство проиллюстрировано на рис. 3.3, где оригинал и Фурье-образ условно изображены линиями равного значения.

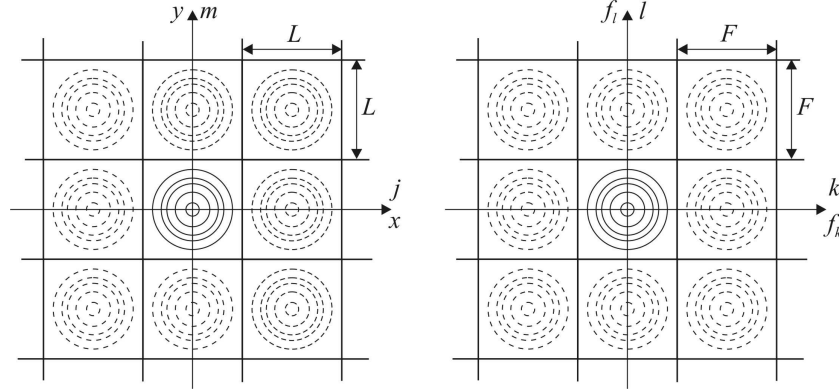


Рис. 3.3. Периодизация двумерной функции (слева) и двумерного спектра (справа). Здесь $F = 2f_N$ – ширина частотной полосы,
 $f_k = k/L$, $f_l = l/L$

Глава 4. Практика дискретного преобразования Фурье

При практическом использовании ДПФ ключевым является вопрос о выборе шага Δx дискретизации функции $u(x)$ на сетке, а также области ее регистрации L , которая играет роль периода при принудительной периодизации функции $u(x)$, неизбежно связанной с переходом к дискретному спектру. На спектральном языке речь идет о выборе ширины спектральной полосы $[-f_N, \dots, f_N]$, граница которой равна частоте Найквиста $f_N = \frac{1}{2\Delta x}$, и о частотном разрешении сетки, которое равно $\Delta f = \frac{1}{L}$.

§4.1. Выбор шага дискретизации на сетке Δx

Для выбора шага Δx сетки определяющим является ширина спектра функции-оригинала. Если спектр оригинала ограничен, т.е. существует верхняя граница спектра $f_{\max}$, то шаг Δx выбирается из условия превышения частотой Найквиста сетки $f_N = \frac{1}{2\Delta x}$ верхней границы $f_{\max}$ спектра рассматриваемой функции:

$$f_N \geq f_{\max}, \text{ или } \Delta x \leq \frac{1}{2f_{\max}}. \quad (4.1)$$

Если спектр функции-оригинала неограничен, то за величину верхней его границы $f_{\max}$ можно принять значение, при котором спектральная компонента $U(f_{\max})$ мала:

$$U(f_{\max}) \ll \max_f U(f) \quad (4.2)$$

Например, для гауссовой функции $u(x) = \exp\left(-\frac{x^2}{a_0^2}\right)$ спектр имеет вид $U(f) = a_0 \sqrt{\pi} \exp(-\pi^2 a_0^2 f^2)$. Если принять, что $f_{\max} = \frac{1}{a_0}$, то

относительная величина спектральной компоненты на границе спектральной полосы составляет $U(f_{\max})/U(0) \leq 10^{-4}$ и шаг дискретизации согласно (4.1) должен удовлетворять неравенству $\Delta x \leq \frac{a_0}{2}$, т.е. на полуширину a_0 гауссовой функции должно приходиться не менее двух шагов сетки. При таком выборе шага Δx наложение частот практически отсутствует. Непрерывная функция $\tilde{u}(x)$, восстановленная по дискретному спектру, близка к исходной $u(x)$ (рис. 4.1).

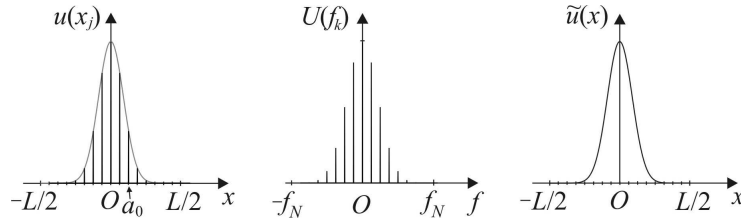


Рис. 4.1. Гауссова функция $u(x_j) = \exp(-x_j^2/a_0^2)$ на сетке с шагом $\Delta x = 0,5a_0$; ее дискретный спектр $U(f_k) = a_0\sqrt{\pi} \exp(-\pi^2 a_0^2 f_k^2)$ и непрерывная функция $\tilde{u}(x)$, восстановленная по дискретному спектру

В общем случае спектр $U(f)$ функции $u(x)$ не известен и для границы спектральной полосы используются качественные оценки, которые включают в себя и возможное уширение спектра в процессе решения конкретной задачи. В отсутствии представлений о спектре $U(f)$ функции $u(x)$ шаг дискретизации Δx выбирается таким, чтобы на интервале наибольшего градиента (максимальной производной) функции приходился хотя бы один узел сетки.

На рис. 4.2 приведена в качестве примера функция $u(x)$, которая в узком интервале от $0,35L$ до $0,45L$ быстро уменьшается. Там же изображены ее спектр $U(f)$ и функция $\tilde{u}(x)$, восстановленная по дискретному спектру, полученному при различных шагах дискретизации Δx . Видно, что в случае, когда шаг $\Delta x = \frac{L}{32} \approx 0,03L$, при котором узел сетки находится в интервале между максимальным и

минимальным значениями функции, спектральные компоненты на частоте Найквиста малы и, следовательно, наложение частот несущественно. Функция, восстановленная по дискретному спектру в этом случае близка к исходной. В то же время, при шаге $\Delta x = \frac{L}{16} \approx 0,06L$ в область сильного градиента не попадает ни один промежуточный узел сетки, частота Найквиста мала, появляется наложение частот, и восстановленная функция существенно отличается от исходной.

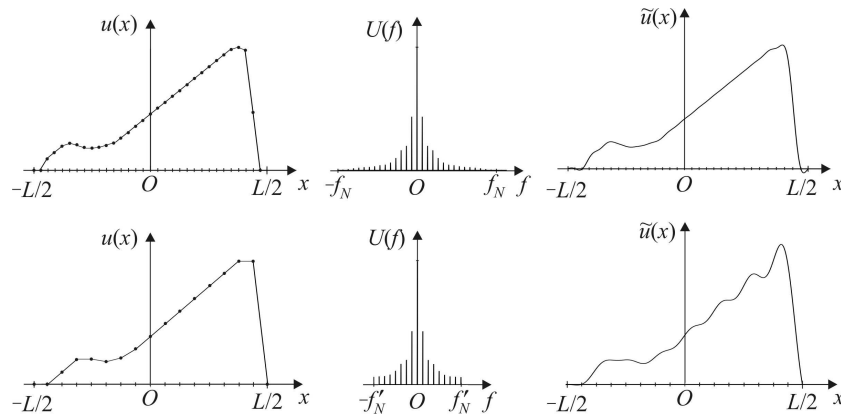


Рис.4.2. Произвольная функция $u(x)$ с большой производной в интервале $0,35L < x < 0,45L$, ее дискретные аналоги, спектры $U(f)$ и восстановленные функции $\tilde{u}(x)$ при различном шаге дискретизации Δx .

Верхняя строка: $\Delta x = L/32$; нижняя строка: $\Delta x = L/16$

Может оказаться так, что при чрезмерно малом Δx спектральная ширина сетки f_N окажется избыточно большой. Разумно выбранное соотношение между разрешением сетки и шириной спектра функции во многих случаях позволит сократить вычислительные затраты при выполнении ДПФ.

В качестве примера рассмотрим гауссову функцию $u(x) = \exp(-x^2/a_0^2)$ на периоде длиной $L = 16a_0$. На рис. 4.3 видно, что сетка с числом узлов $N = 32$ и шагом $\Delta x = 0,5a_0$ является вполне достаточной для воспроизведения как функции, так и ее спектра. При

этом на полуширину функции приходится 2 узла, а полуширина ее спектра, равная $f_0 = \frac{1}{\pi a_0}$, в π раз меньше частоты Найквиста $f_N = 1/a_0$.

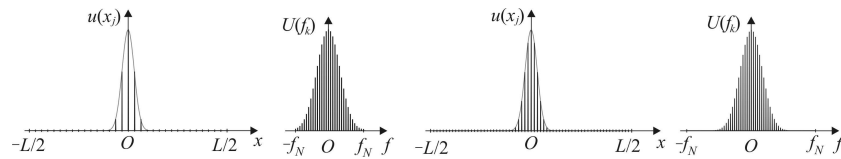


Рис. 4.3. Гауссова функция $u(x_i)$ и ее спектр $U(f_k)$ на сетке с $N = 32$ (слева) и на сетке с $N = 64$ (справа)

В то же время, сетка с числом узлов $N = 64$ и шагом $\Delta x = 0,25a_0$ является в данном случае явно избыточной, поскольку спектр функции содержит примерно половину нулевых компонент, вычисление которых требует дополнительных затрат.

Подводя итог, можно утверждать, что в случае, когда не предполагается выполнять каких-либо операций с ограниченным спектром, приводящих в последующем к его уширению, оптимальное разрешение сетки достигается при $\Delta x \approx \frac{1}{2f_{\max}}$ где $f_{\max}$ – верхняя граница спектра.

§4.2. Выбор области периодизации функции L

При выборе L необходимо в первую очередь учитывать принудительную периодизацию функции $u(x)$, неизбежно возникающую из-за дискретности ее спектра. Одним из последствий этого может явиться появление разрывов функции или ее производных на границах периода $[-L/2, L/2]$ исходной функции с ее периодическими продолжениями. Возникновение разрывов при периодизации функции $u(x)$ вызывает расширение спектра, которое имеет чисто вычислительную природу. Поэтому необходимо контролировать и подавлять появление артефактов, связанных с таким расширением спектра и, как следствие этого, возникновения эффекта наложения частот и связанных с ним погрешностей.

В соответствии с общепринятыми рекомендациями, для непериодической функции период L следует выбирать из условия малости функции $u(x)$ на границах периода. При этом взаимные перекрытия исходной функции и ее периодических продолжений, практически, отсутствуют:

$$u(-L/2), u(L/2) \ll \max_x u(x). \quad (4.3)$$

Например, для гауссовой функции $u(x) = \exp(-x^2/a_0^2)$ ее относительная величина на границах периода при $L = 6a_0$ составляет $u(\pm L/2)/u(0) \approx 10^{-4}$, и перекрытием функции и ее продолжений можно пренебречь. Заметим, что у симметричной функции при периодическом продолжении не возникают разрывы на границах периода при любом периоде L .

Однако, при неудачном выборе L возможно появление на границах периода разрывов производных функции $u(x)$. Иллюстрацией этого эффекта служит рис. 4.4, на котором продемонстрировано вычисление первой производной гауссовой функции, принудительно периодизированной с периодом $L = 3a_0$. Отчетливо видны осцилляции Гиббса на профиле производной восстановленной функции $d\tilde{u}/dx$, наиболее сильно проявляющиеся в окрестности точек разрыва производной (изломов на профиле) периодизированной функции $u(x)$. Заметим, что с увеличением числа узлов N на выбранном периоде, т.е. с уменьшением шага дискретизации Δx и, следовательно, увеличением частоты Найквиста f_N , амплитуда осцилляций не уменьшается.

Иными словами, при разрыве производной спектр периодизированной функции становится неограниченным и осцилляции, вызванные разрывом производной, не ослабляются по мере увеличения числа узлов сетки N (§2.4).

Поэтому, фактически единственный способ избежать искажений спектра из-за наложения частот у периодизированной функции $u(x)$ состоит в выборе такого периода L , при котором не возникают взаимные перекрытия исходной функции и ее периодических продолжений. Если же излом существует на профиле самой функции в пределах периода ее регистрации, то устранить возникшее при этом наложение частот путем увеличения числа узлов сетки N не

представляется возможным. В этом случае необходимо осуществлять контролируемое ограничение спектра исследуемой функции.

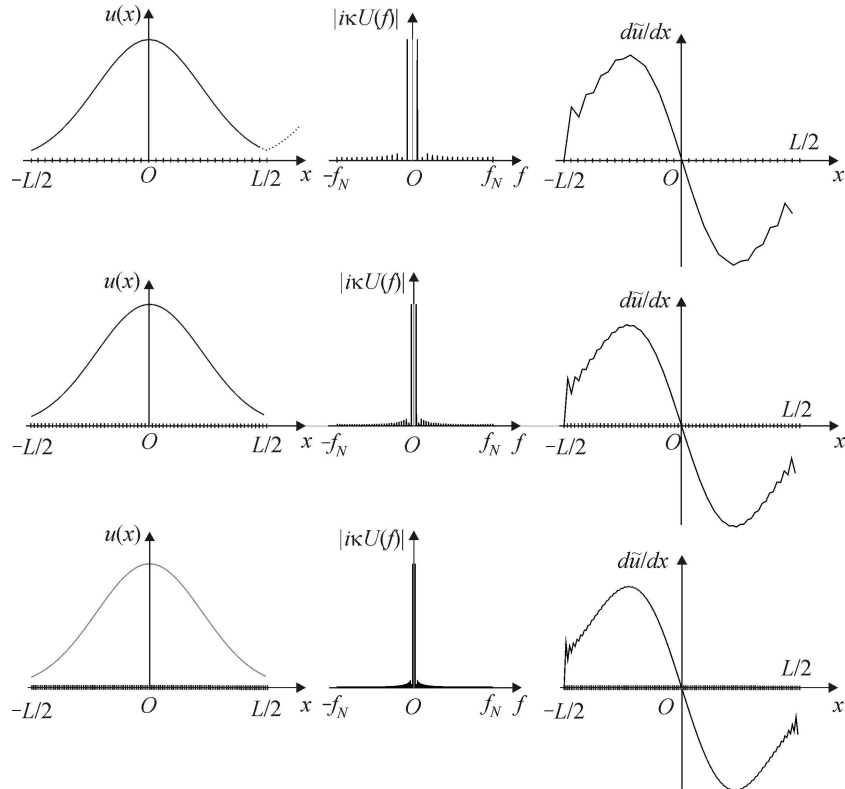


Рис. 4.4. Гауссова функция $u(x) = \exp(-x^2/a_0^2)$, периодизированная с периодом $L = 3a_0$; модуль спектра ее первой производной $|ikU(f)|$; первая производная восстановленной функции $dũ/dx$. Верхняя строка: $N = 32$; средняя строка: $N = 64$; нижняя строка: $N = 128$

В частности, для сокращения спектральной полосы периодизированной функции нередко используются так называемые окна, являющиеся некоторыми весовыми функциями, после умножения на которые оригинала $u(x)$ обрабатываемая функция на границах

периода обращается в нуль. Не вдаваясь в детали построения таких окон и анализа их спектральных свойств, отошлем читателя к великолепной книге [4], в главе 3 которой такой анализ дан с исчерпывающей полнотой.

Для уменьшения скачков функции или ее производных, возникающих при ее периодизации, можно наложить окно $\Pi(x)$ на функцию $u(x)$, т.е. сформировать некоторую «буферную» область, благодаря которой условие $u(-L/2), u(L/2) \ll \max_x u(x)$ будет выполняться в виде сильного неравенства.

Рассмотрим в качестве примера дискретное преобразование Фурье линейной функции $u(x) = \alpha \cdot (x + L/2)$, заданной на отрезке $-L/2 < x < L/2$. На рис. 4.5 изображена периодизированная функция, модуль дискретного спектра этой функции $|U(f)|$ и ее производной $|ikU(f)|$, а также производная $d\tilde{u}/dx$, восстановленная по дискретному спектру.

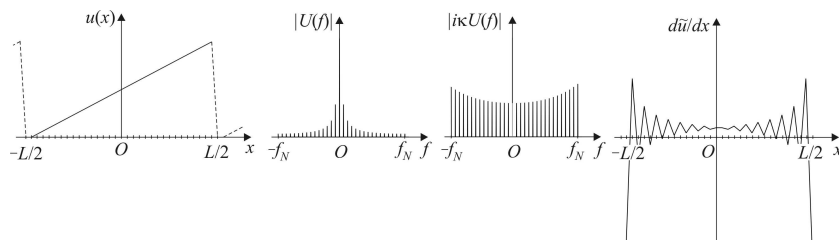


Рис. 4.5. Линейная функция $u(x) = \alpha \cdot (x + L/2)$, заданная на сетке с $N = 32$; модуль ее спектра $|U(f)|$; модуль спектра первой производной $|ikU(f)|$; первая производная восстановленной функции $d\tilde{u}/dx$

Из рисунка видно, что наличие разрывов функции при $x = -L/2$ и при $x = L/2$ при ее периодизации вызывает наложение частот в ее спектре, которое, в свою очередь, приводит к появлению осцилляций Гиббса, и, как следствие, к возникновению значительных ошибок в вычислении первой производной.

Очевидно, что указанные выше ошибки не могут быть устранены путем изменения периода L . Однако, наложение окна, при котором вводятся буферные зоны в окрестности границ периода,

позволяет существенно ослабить влияние разрывов функции при ее периодизации.

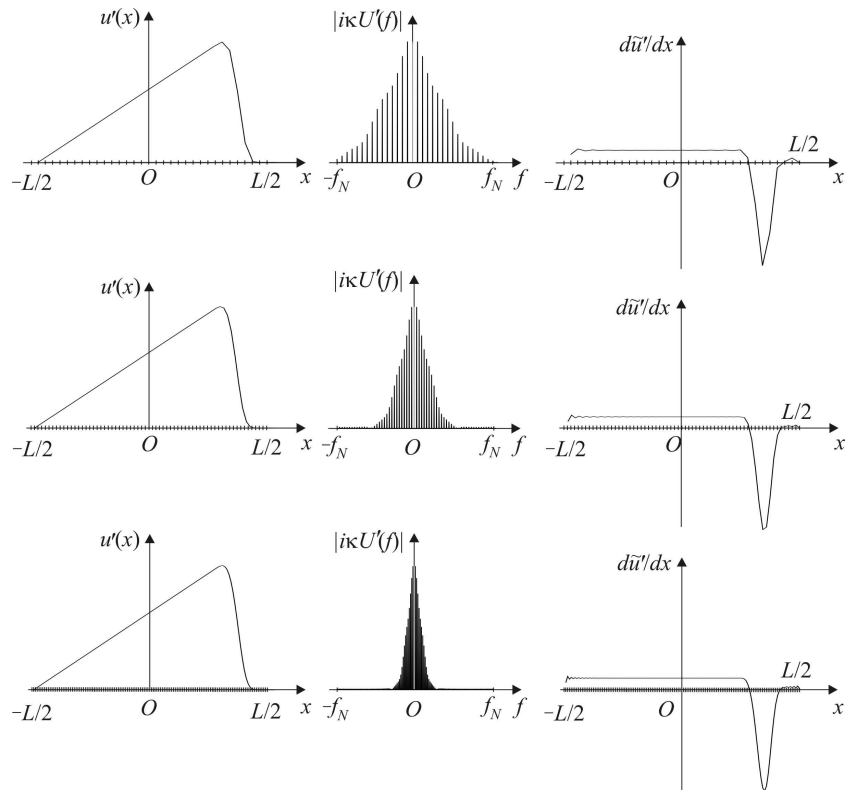


Рис. 4.6. Функция $u'(x) = u(x) \cdot \Pi(x)$, сглаженная в окрестности точки $L/2$ путем наложения окна $\Pi(x)$ (4.4) на линейную функцию $u(x) = \alpha \cdot (x + L/2)$; модуль спектра ее первой производной $|ikU'(f)|$; первая производная восстановленной функции $dũ'/dx$. Верхняя строка: $N = 32$; средняя строка: $N = 64$; нижняя строка: $N = 128$

Например, плавное убывание функции $u(x) = \alpha \cdot (x + L/2)$ от максимального значения до нуля может быть обеспечено путем ее умножения на окно

$$P(x) = \begin{cases} \exp(-((x - x_0)/a)^b) & \text{при } x \geq x_0, \\ 1 & \text{при } x < x_0, \end{cases} \quad (4.4)$$

с помощью которого сглаженная функция $u'(x) = u(x) \cdot P(x)$ становится близкой к нулю на границе $x = L/2$.

Окно $P(x)$ зависит от трех свободных параметров x_0 , a и b , подбираемых опытным путем. Эмпирически установлено, что для рассматриваемой функции близкие к оптимальным результаты с точки зрения уменьшения осцилляций Гиббса дают следующие значения параметров: $x_0 = L/4$, $a = L/12$, $b = 4$.

На рис. 4.6 продемонстрирован пример использования рассматриваемого окна. Видно, что по сравнению со случаем, представленным на рис. 4.5, у периодизированной функции с окном $u'(x) = u(x) \cdot P(x)$ отсутствует разрыв. В области $-L/2 \leq x \leq L/4$ ошибки при вычислении первой производной в целом существенно снижены. Слабо выраженные осцилляции на профиле $d\tilde{u}'/dx$ дополнительно ослабляются с уменьшением шага дискретизации при увеличении числа узлов N на периоде. Паразитный отрицательный выброс при $x > L/4$ связан с дифференцированием произведения исходной функции и окна $P(x)$.

§4.3. Частотное разрешение Δf

С выбором области периодизации L связано частотное разрешение преобразования Фурье. Действительно, шаг дискретизации в спектральном пространстве $\Delta f = \frac{1}{L}$ представляет собой интервал между соседними фурье-гармониками. Величина Δf является частотным разрешением ДПФ, которое равно наименьшему интервалу частот, различимому в дискретном спектре.

Если в спектре $U(f)$ присутствует узкая линия, т.е. малая область частот δf , в которой существует локальный экстремум $U(f)$, то шаг по частоте Δf должен удовлетворять условию

$$\Delta f < \delta f. \quad (4.5)$$

В противном случае узкая линия может оказаться между гармониками дискретного спектра и не будет воспроизводиться. Для повышения частотного разрешения при ДПФ необходимо увеличивать размер области периодизации L функции u . При экспериментальном получении выборки отсчетов $u(j)$ нужно максимально увеличивать ее длину, т.е. число отсчетов N .

На рис. 4.7 проиллюстрировано влияние длины выборки L на частотное разрешение спектра ДПФ. В левой колонке рисунка изображены отсчеты некоторой гладкой функции $u(x)$, которая при

$x_j = \pm a_0$ обращается в нуль. При шаге дискретизации $\Delta x = \frac{a_0}{6} \approx 0,17a_0$ шесть отсчетов функции $u(x_j)$ хорошо воспроизводят ее на интервале $0 < x < a_0$ и, следовательно, частота Найквиста $f_N = 1/(2\Delta x)$ значительно превышает максимальную частоту искомого спектра $U(f)$.

Пусть период принудительной периодизации выбран равным $L \approx 2,7a_0$. Его границы отмечены вертикальными штрихпунктирными отрезками (на рисунке вверху слева). Видно, что при таком выборе периода L функция на его границах мала, условие (4.3) выполняется и перекрытие периодических продолжений отсутствует. Получаемый при таком выборе периода спектр $U(f_k)$ изображен на рисунке вверху справа. Видно, что в полосе частот от $-f_N$ до $+f_N$ амплитуда гармоник монотонно убывает и обращается в нуль на ее границах (вверху справа).

Однако, при выбранном периоде L частотное разрешение $\Delta f = 1/L$ оказывается недостаточным для воспроизведения тонкой структуры искомого спектра. При увеличении периода вдвое $L' = 2L \approx 5,4a_0$ (внизу слева) видно, что в искомом спектре существует узкая спектральная линия, которая при прежнем периоде L отсутствовала (внизу справа). Это является следствием улучшения частотного разрешения, при котором интервал между гармониками дискретного спектра $\Delta f' = \frac{1}{L'}$ при увеличении периода от L до $L' = 2L$ сократился вдвое.

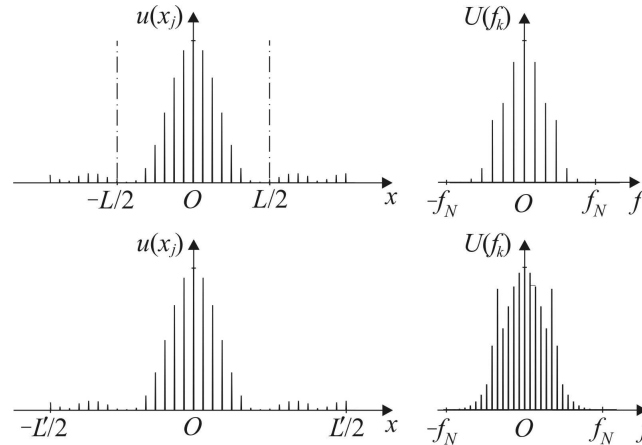


Рис. 4.7. Влияние длины выборки L на частотное разрешение спектра Δf .
Левая колонка – отсчеты некоторой функции $u(x_j)$, следующие с шагом

$$\Delta x = \frac{a_0}{6} \approx 0,17a_0. \text{ Выделенной центральной части выборки длиной}$$

$$L = 16 \cdot \Delta x = \frac{16a_0}{6} \approx 2,7a_0, \text{ ограниченной вертикальными штрихпунктирными}$$

линиями, соответствует спектр в верхней части правой колонки. Его частотное разрешение $\Delta f = \frac{6}{16a_0} \approx \frac{0,37}{a_0}$ недостаточно для отображения особенностей

полученного спектра. Увеличение длины выборки до $L' = 32 \cdot \Delta x \approx 5,3a_0$

повышает частотное разрешение спектра до $\Delta f' = \frac{6}{32a_0} \approx \frac{0,19}{a_0}$ (нижняя часть

правой колонки), что позволяет обнаружить в спектре две узкие линии, неразличимые при длине выборки $L = 16 \cdot \Delta x$.

Дальнейшее улучшение частотного разрешения при увеличении длины выборки до $L'' = 4L$ позволяет оценить ширину узкой спектральной линии в дискретном спектре $U(f_k)$ (см. рис. 4.8). Следует заметить, что улучшение частотного разрешения при неизменном шаге дискретизации Δx требует увеличения числа узлов N на расчетной сетке и, следовательно, объема вычислений.

В численном моделировании для определения необходимого частотного разрешения обычно выполняются тестовые вычисления спектра с увеличением периода принудительной периодизации

функции, чтобы убедиться в отсутствии тонкой структуры спектра или обнаружить ее существование. При спектральном анализе экспериментальных результатов следует увеличивать длину области регистрации функции, чтобы не пропустить возможные тонкие линии при их обработке средствами ДПФ.

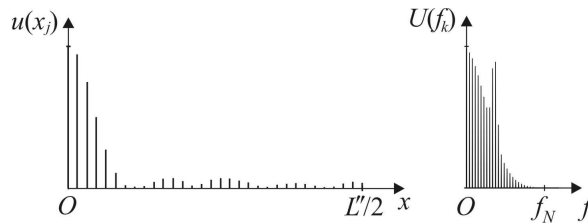


Рис. 4.8. Увеличение длины выборки от $L' = 2L$ до $L'' = 4L$ для улучшения частотного разрешения спектра (ср. с нижней строкой рис. 4.7). Для экономии места изображены только правые части выборки и спектра

§4.4. Заключительная иллюстрация влияния шага дискретизации и периода функции на спектр при ДПФ

Основные особенности трансформации оригинала и его спектра при изменении периода регистрации L и шага сетки Δx проиллюстрированы на итоговом рис. 4.9.

На верхней строке рисунка слева изображены $N = 16$ дискретных отсчетов $u(x_j)$ гауссовой функции $u(x) = \exp(-x^2/a_0^2)$ с периодом $L = 8a_0$ и шагом $\Delta x = \frac{L}{16} = \frac{a_0}{2}$. На той же строке справа изображены $N = 16$ гармоник $U(f_k)$ ее спектра $U(f) = a_0\sqrt{\pi} \exp(-\pi^2 a_0^2 f^2)$ с шагом по частоте $\Delta f = \frac{1}{8a_0}$. При этом

частота Найквиста $f_N = \frac{1}{a_0}$. На средней строке проиллюстрировано уменьшение шага сетки вдвое при том же периоде $L = 8a_0$: $N = 32$; $\Delta x' = \frac{L}{32} = \frac{a_0}{4}$; $\Delta f = \frac{1}{8a_0}$; $f'_N = \frac{2}{a_0}$. Нижняя строка иллюстрирует увеличение периода вдвое, т.е. $L' = 16a_0$ при первоначальном шаге

$\Delta x = \frac{L'}{32} = \frac{a_0}{2}$. При этом шаг по частоте $\Delta f' = \frac{1}{16a_0}$, а частота

Найквиста $f_N = \frac{1}{a_0}$.

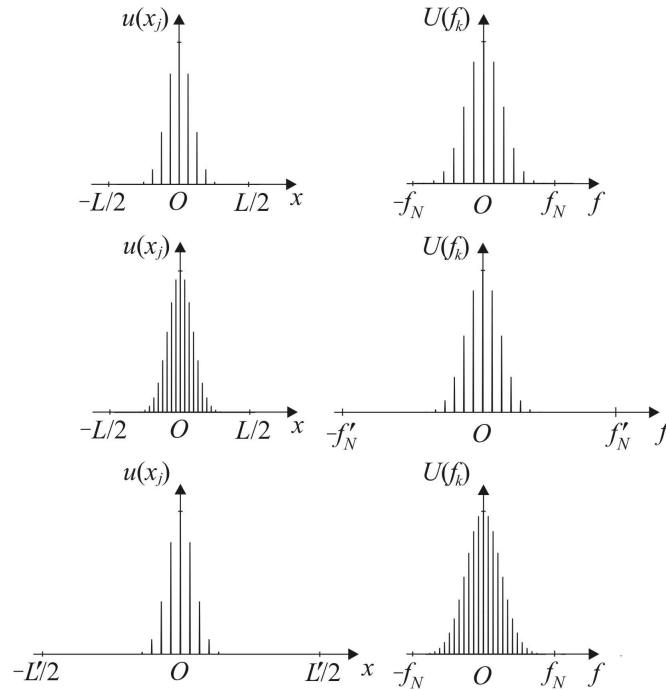


Рис. 4.9. Трансформация оригинала $u(x_j)$ и его спектра $U(f_k)$ при изменении периода регистрации L и шага сетки Δx .

Верхняя строка: период $L = 8a_0$; шаг сетки $\Delta x = L/16 = a_0/2$; шаг по частоте $\Delta f = 1/(8a_0)$; частота Найквиста $f_N = 1/a_0$.

Средняя строка: $L = 8a_0$; $\Delta x' = L/32 = a_0/4$; $\Delta f = 1/(8a_0)$; $f'_N = 2/a_0$.

Нижняя строка: $L' = 16a_0$; $\Delta x = L'/32 = a_0/2$; $\Delta f' = 1/(16a_0)$; $f_N = 1/a_0$.

Глава 5. Быстрое преобразование Фурье (БПФ)

§5.1. Алгоритм БПФ

В настоящее время алгоритмы быстрого преобразования Фурье хорошо известны и широко используются в спектральном анализе. Хотя в современной литературе излагается целый ряд различных подходов к разработке алгоритмов БПФ, мы ограничимся одним из них, а именно, так называемым алгоритмом Кули–Тьюки, впервые описанным в статье J. W. Cooley and J. W. Tukey, "An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series," *Math. Comput.* **19**, 297–301 (1965).

Необходимость введения быстрых алгоритмов суммирования рядов Фурье связана со значительными вычислительными затратами, требующимися при выполнении преобразований Фурье над массивами большой размерности. В самом деле, для вычисления одной Фурье-гармоники по N отсчетам (см. формулу (3.3)), нужно выполнить порядка N операций, каждая из которых включает вычисление W_N^{-kj} , умножение $u(j) \cdot W_N^{-kj}$ и сложение. Для нахождения всего спектра, состоящего из N гармоник, требуется порядка $S_0 = N^2$ операций. То же самое касается и обратного преобразования Фурье. Алгоритм БПФ позволяет значительно уменьшить число операций, причем одним из ключевых моментов является периодичность ядра преобразования W_N^{kj} с периодом N .

Для удобства и компактности изложения временно откажемся от принятых ранее пределов нумерации узлов сетки и фурье-гармоник от $-N/2$ до $N/2-1$, и будем использовать для оригинала и спектра пределы суммирования от 0 до $N-1$. При этом прямое и обратное преобразования выразятся формулами

$$\left. \begin{aligned} U(k) &= \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} u(j) W_N^{-kj}, \\ u(j) &= \sum_{k=0}^{N-1} U(k) W_N^{kj}, \end{aligned} \right\} \quad (5.1)$$

$$k = 0, 1, \dots, N-1, \quad j = 0, 1, \dots, N-1, \quad W_N = \exp\left(\frac{2\pi i}{N}\right).$$

На рис. 5.1 изображены дискретный оригинал и дискретный спектр при такой нумерации узлов сетки и фурье-гармоник.

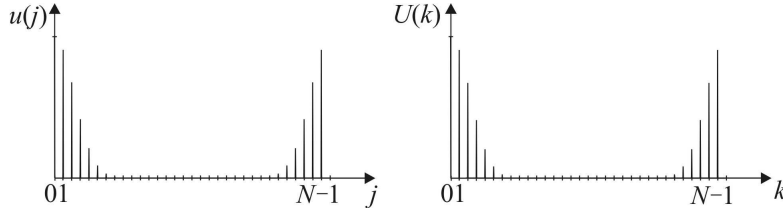


Рис. 5.1. Альтернативная нумерация узлов сетки j и фурье-гармоник k

Алгоритм быстрого суммирования рядов Фурье принципиально основывается на возможности разбиения числа N на сомножители. Отметим сразу, что если N – простое число, то построить указанный алгоритм не удастся. Рассмотрим для определенности прямое преобразование Фурье

$$U(k) = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} u(j) W_N^{-kj}. \quad (5.2)$$

Предположим, что N – составное, т.е.

$$N = N_1 \cdot N_2, \quad (5.3)$$

где N_1 и N_2 – целые числа. Тогда, разбив число N на N_2 групп по N_1 отсчетов, можно представить текущий номер узла сетки в виде $j = j_1 + j_2 N_1$, где $j_1 = 0, 1, \dots, N_1 - 1$, $j_2 = 0, 1, \dots, N_2 - 1$ (рис. 5.2).

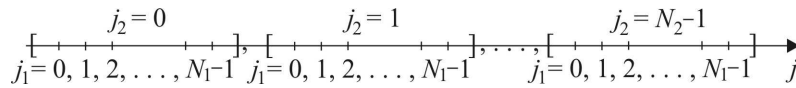


Рис. 5.2. Представление номеров узлов сетки j в виде N_2 групп по N_1 узлов в каждой группе

Аналогично представим номер фурье-гармоники как $k = k_2 + k_1 N_2$, где $k_1 = 0, 1, \dots, N_1 - 1$, $k_2 = 0, 1, \dots, N_2 - 1$ (рис. 5.3).

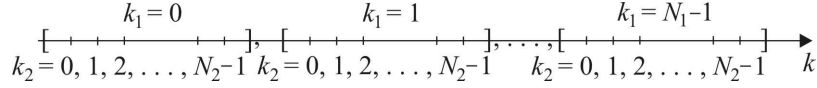


Рис. 5.3. Представление номера фурье-гармоники k в виде N_1 групп по N_2 гармоник в каждой группе

Введем обозначение $u(j) = u(j_1 + j_2 N_1) = u(j_1, j_2)$. Тем самым мы сведем одномерный массив $u(j)$ к двумерному массиву $u(j_1, j_2)$, состоящему из N_2 строк и N_1 столбцов. Тогда прямое преобразование Фурье (5.2) выразится в виде

$$U(k) = \frac{1}{N} \sum_{j_1=0}^{N_1-1} \sum_{j_2=0}^{N_2-1} u(j_1, j_2) W_N^{-k(j_1 + j_2 N_1)}. \quad (5.4)$$

Вынесем за знак внутренней суммы не зависящий от j_2 множитель $W_N^{-k j_1}$, а в оставшемся сомножителе представим $k = k_2 + k_1 N_2$. После этого имеем

$$U(k) = \frac{1}{N} \sum_{j_1=0}^{N_1-1} W_N^{-k j_1} \sum_{j_2=0}^{N_2-1} u(j_1, j_2) W_N^{-k_2 j_2 N_1} \cdot W_N^{-k_1 j_2 N_2 N_1}. \quad (5.5)$$

Учтем, что $W_N^{-k_1 j_2 N_2 N_1} = W_N^{-k_1 j_2 N}$. Используя явный вид $W_N = \exp\left(\frac{2\pi i}{N}\right)$,

получаем, что $W_N^{-k_1 j_2 N_2 N_1} = e^{-2\pi i \cdot k_1 j_2} = 1$. Введем обозначение для внутренней суммы в (5.5), а именно

$$\bar{U}(j_1, k_2) = \frac{1}{N_2} \sum_{j_2=0}^{N_2-1} u(j_1, j_2) W_N^{-k_2 j_2 N_1}. \quad (5.6)$$

Выражение (5.6) называют спектром разреженных отсчетов, где j_1 — параметр, принимающий значения $j_1 = 0, 1, \dots, N_1 - 1$. Разреженные отсчеты $u(j_1^*, j_2)$ образуются из отсчетов с номерами j_1^* , взятыми во всех группах с $j_2 = 0, 1, \dots, N_2 - 1$ (рис. 5.4).

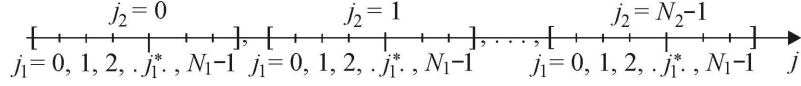


Рис. 5.4. Разреженные отсчеты

Используя (5.6), прямое преобразование Фурье можно записать следующим образом:

$$U(k) \equiv U(k_1, k_2) = \frac{1}{N_1} \sum_{j_1=0}^{N_1-1} \bar{U}(j_1, k_2) W_N^{-(k_2 + k_1 N_2) j_1}. \quad (5.7)$$

Видно, что $\bar{U}(j_1, k_2)$ многократно используются при вычислении всего спектра $U(k_1, k_2)$ ($k_1 = 0, 1, \dots, N_1 - 1$, $k_2 = 0, 1, \dots, N_2 - 1$). Если $\bar{U}(j_1, k_2)$ вычислить один раз и затем использовать при суммировании ряда (5.7) в готовом виде, то число операций сокращается. В частности, при $N = N_1 \cdot N_2$ нужно проделать: N_2^2 операций для вычисления по (5.6) спектра разреженных отсчетов для одного номера j_1^* , и $N_2^2 \cdot N_1$ операций для всех номеров j_1 . Далее N_1 операций требуется для вычисления по (5.7) одной гармоники $U(k)$ и $N_1 \cdot N$ операций для вычисления всех гармоник. Таким образом, число операций в этом случае равно $N_2^2 \cdot N_1 + N \cdot N_1 = N \cdot (N_1 + N_2)$, тогда как без разбиения отсчетов на группы число операций составляет N^2 . Нетрудно показать, что при $N = N_1 \cdot N_2 \cdot N_3$ число операций равно $N \cdot (N_1 + N_2 + N_3)$ т.д. Отсюда ясно, что экономия вычислительных затрат возрастает при увеличении числа целочисленных множителей, на которые возможно разбиение N .

§5.2. Оценка эффективности

Наибольший интерес представляет случай, когда $N = q^m$, где $m = \log_q N$. В этом случае число операций, требующихся для преобразования Фурье, $S_q = Nqm = Nq \log_q N$, и выигрыш Z по сравнению с прямым суммированием рядов Фурье составляет

$$Z = \frac{S_0}{S_q} = \frac{N^2}{Nq \log_q N} = \frac{N}{q \log_q N}.$$

Очевидно, что максимальный выигрыш по числу операций достигается при минимальном $q \log_q N$. Рассмотрим функцию $f(q) = q \log_q N$ и найдем такое q , при она достигает минимума при фиксированном N . Имеем

$$\frac{\partial f}{\partial q} = \frac{\partial}{\partial q} \left(q \frac{\ln N}{\ln q} \right) = \ln N \frac{\ln q - q(1/q)}{(\ln q)^2} = 0.$$

Отсюда получаем, что минимум функции $q \log_q N$ достигается при $\ln q = 1$, т.е. при $q = e \approx 2,72$. В алгоритме Кули–Тьюки q выбрано равным 2, что объясняется алгоритмической простотой.

§5.3. Двоичная инверсия

Важной особенностью алгоритма БПФ является необходимость такой перестановки элементов входной последовательности $u(j)$, чтобы выходная последовательность $U(k)$ имела естественный (прямой) порядок расположения, т. е. $k = 0, 1, \dots, N-1$. Характер такой перестановки элементов входной последовательности может быть описан сравнительно просто. В случае, когда N является степенью числа 2, входная последовательность должна быть расположена в памяти в двоично-инверсном порядке, который определяется следующим образом. Если записать порядковые номера элементов входной последовательности в двоичном коде, используя m двоичных разрядов, причем $N = 2^m$, а затем инвертировать порядок следования разрядов, то получаемые при этом числа и будут номерами элементов входной последовательности после их перестановки. Более подробно с практической реализацией двоичной инверсии, в частности, с весьма эффективным алгоритмом Рейдера, можно познакомиться, например, в [4], §6.4. Для случая $N = 8 = 2^3$ прямой порядок номеров приведен в таблице 1 слева, а двоично-инверсный порядок – справа.

Таблица 1. Двоичная инверсия

Исходный номер элемента последовательности	Двоичное представление исходного номера	Двоично-инверсная перестановка номера	Десятичное представление номера после инверсной перестановки
0	000	000	0
1	001	100	4
2	010	010	2
3	011	110	6
4	100	001	1
5	101	101	5
6	110	011	3
7	111	111	7

В таблице помещены исходные номера последовательности в десятичном представлении (первая колонка), в двоичном представлении (вторая колонка), двоично-инверсном представлении (третья колонка) и в десятичном представлении после двоичной инверсии (четвертая колонка).

§5.4. Простой пример. Графическая схема БПФ

Поясним на простом примере, как используются спектры разреженных отсчетов. Пусть $N = 4 = 2^2$. Запишем вначале прямое преобразование Фурье (5.2) для последовательности $u(j)$, где $j = 0, 1, 2, 3$.

$$U(0) = \frac{1}{4} [u(0) + u(1) + u(2) + u(3)],$$

$$U(1) = \frac{1}{4} [u(0) + u(1)W^{-1} + u(2)W^{-2} + u(3)W^{-3}],$$

$$U(2) = \frac{1}{4} [u(0) + u(1)W^{-2} + u(2)W^{-4} + u(3)W^{-6}],$$

$$U(3) = \frac{1}{4} [u(0) + u(1)W^{-3} + u(2)W^{-6} + u(3)W^{-9}].$$

Переставим отчеты в соответствии с двоичной инверсией, что соответствует следующей замене номеров последовательности $j=0 \rightarrow j=0$, $j=1 \rightarrow j=2$, $j=2 \rightarrow j=1$, $j=3 \rightarrow j=3$. Учтем далее, что для $N=4$ в силу периодичности гармонических функций W справедливы равенства $W^{-(kj+4n)} = W^{-kj}$, где $n=0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Тогда прямое преобразование Фурье принимает вид

$$\begin{aligned} U(0) &= \frac{1}{4} [u(0) + u(2) + u(1) + u(3)], \\ U(1) &= \frac{1}{4} [u(0) + u(2)W^{-2} + u(1)W^{-1} + u(3)W^{-3}], \\ U(2) &= \frac{1}{4} [u(0) + u(2) + u(1)W^{-2} + u(3)W^{-2}], \\ U(3) &= \frac{1}{4} [u(0) + u(2)W^{-2} + u(1)W^{-3} + u(3)W^{-5}]. \end{aligned}$$

Вычислим далее спектры разреженных отсчетов. В соответствии с (5.6), где $j_1=0, 1$ и $k_2=0, 1$, имеем

$$\begin{aligned} \bar{U}(0,0) &= \frac{1}{2} [u(0,0) + u(0,1)], \quad j_1=0, k_2=0, \\ \bar{U}(1,0) &= \frac{1}{2} [u(1,0) + u(1,1)], \quad j_1=1, k_2=0, \\ \bar{U}(0,1) &= \frac{1}{2} [u(0,0) + u(0,1)W^{-2}], \quad j_1=0, k_2=1, \\ \bar{U}(1,1) &= \frac{1}{2} [u(1,0) + u(1,1)W^{-2}], \quad j_1=1, k_2=1. \end{aligned}$$

Затем по (5.7) находим все фурье-гармоники $U(k)$ где $k=0, 1, 2, 3$:

$$\begin{aligned} U(0) &= \frac{1}{2} [\bar{U}(0,0) + \bar{U}(1,0)], \\ U(1) &= \frac{1}{2} [\bar{U}(0,1) + \bar{U}(1,1)W^{-1}], \\ U(2) &= \frac{1}{2} [\bar{U}(0,0) + \bar{U}(1,0)W^{-2}], \\ U(3) &= \frac{1}{2} [\bar{U}(0,1) + \bar{U}(1,1)W^{-3}]. \end{aligned}$$

Однократное вычисление сумм повторяющихся слагаемых и хранение их готовом виде в памяти ЭВМ позволяет достичь экономии числа операций при использовании БПФ по сравнению с ДПФ, причем эта экономия тем существеннее, чем больше N . Наглядное представление о структуре вычислений при использовании алгоритма БПФ можно получить с помощью рис. 5.5 ($N = 4$) и рис. 5.6 ($N = 8$).

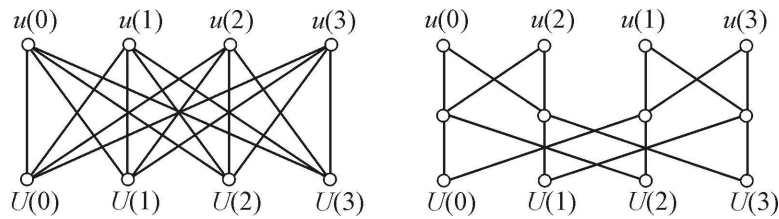


Рис. 5.5. Графическая схема прямого ДПФ (слева) и БПФ (справа) при $N = 4$

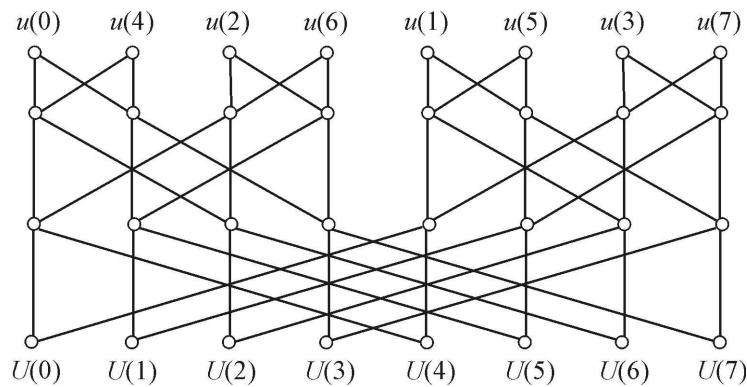


Рис. 5.6. Графическая схема БПФ при $N = 8$

Глава 6. Компьютерные библиотеки ДПФ

§6.1. Свободно распространяемая библиотека FFTW

FFTW – это библиотека подпрограмм на языке Си для вычисления дискретного преобразования Фурье. Она содержит подпрограммы как для одномерного преобразования, так и многомерного преобразования с произвольным размером обрабатываемых массивов как действительных, так и комплексных чисел. Библиотека является свободно распространяемым программным продуктом и поэтому доступна для самого широкого круга пользователей. Библиотека разработана в Массачусетском технологическом институте Матео Фриго и Стивеном Джонсоном. Аббревиатура FFTW расшифровывается как *Fastest Fourier Transform in the West*. Домашней страницей библиотеки является сайт www.fftw.org, где она доступна для скачивания, включая написанное авторами подробное пособие [<http://www.fftw.org/fftw3.pdf>], часть которого была использована для написания данной главы. Цифра 3 в названии файлов соответствует главному номеру версии библиотеки.

Будучи написанной на языке Си, библиотека является переносимым продуктом и на большинстве компьютеров её использование не потребует каких-либо модификаций, сохраняя высокую производительность – одну из лучших среди универсальных программ для быстрого преобразования Фурье. Эта производительность во многом достигается за счет того, что конкретные алгоритмы вычислений не являются раз и навсегда заданными, а подбираются исходя из имеющихся вычислительных ресурсов и структуры обрабатываемых данных. В частности, могут быть использованы такие расширения системы команд для микропроцессоров x86, как SSE или AVX и другие. Такой подход обуславливает общую двухэтапную процедуру применения программ библиотеки. На первом этапе вызывается программный модуль *планировщик*, который оптимизирует внутренние параметры алгоритмов для последующих расчётов. Его результатом является некоторая структура данных, так называемый *план*, который используется для более эффективного выполнения БПФ

на втором этапе. Для массивов фиксированной длины планировщик достаточно вызвать только один раз¹.

Несмотря на то, что библиотека поддерживает ДПФ массивов произвольной длины, включая случай, когда длина является простым числом, следует помнить, что стандартный дистрибутив FFTW обеспечивает наиболее эффективное преобразование для массивов, длина которых является целой степенью 2, 3, 5 или 7. Далее, следуя руководству [<http://www.fftw.org/fftw3.pdf>], мы рассмотрим примеры использования библиотеки для выполнения одномерного и двумерного дискретных преобразований Фурье на языке Си. Они представляют собой, вероятно, наиболее востребованные задачи применения ДПФ и дают общее представление о том, как устроена и как может быть использована данная библиотеки. Конечно, эти примеры далеко не исчерпывают все возможности библиотеки FFTW. Например, она позволяет выполнять ДПФ произвольной размерности, есть параллельные версии библиотеки как для систем с разделяемой памятью (используют OpenMP), так и с распределённой (используют MPI).

1. Установка библиотеки FFTW на компьютере

Если вы используете Unix систему, такую как, например, GNU/Linux, то процесс установки библиотеки FFTW будет для вас, наверняка, прост. Сама библиотека изначально создавалась для таких систем. Последнюю версию² исходного кода в архивированном виде можно скачать со странички сайта <http://www.fftw.org/download.html>. Архив снабжен конфигурационным файлом для утилиты make, а подробные инструкции по установке можно найти здесь <http://www.fftw.org/fftw3/doc/Installation-on-Unix.html#Installation-on-Unix>.

Несколько менее очевидным может оказаться процесс установки для пользователей Microsoft Visual Studio на Windows системах. Для упрощения ситуации авторы библиотеки разместили для скачивания предкомпилированную версию FFTW³ в виде DLL-

¹ На тот случай, если время выполнения планировщика является критичным, библиотека предлагает быстрые (но, возможно, с неоптимальным результатом) планировщики, основанные на эвристике или результатах предыдущих планирований.

² На момент написания пособия это была версия FFTW 3.3.8

³ На этот же момент Windows-версия имела номер FFTW 3.3.5

библиотеки. Далее мы рассмотрим процесс установки и пример использования библиотеки FFTW в среде Visual Studio 12.

Скачать DLL-библиотеку FFTW и заголовочные файлы к ней можно на странице <http://www.fftw.org/install/windows.html>. На этой странице размещены два архива с библиотеками, соответственно, для 32-х и 64-х-битных приложений. Скачиваем нужный вариант и разархивируем его в подходящей директории. В архиве содержатся библиотеки для вычислений с одинарной, двойной (стандартный вариант) и четверной (long double) точностью. Мы будем использовать стандартный вариант – файл libfftw3-3.dll. Наличие этой библиотеки будет важно на момент запуска исполняемого файла приложения, использующего FFTW. Во время сборки приложения («построения решения») нужна другая, статическая библиотека *.lib («импортированная библиотека»), содержащая информацию о библиотечных функциях FFTW. Эту библиотеку нужно предварительно создать.

Для создания импортированной библиотеки следует воспользоваться утилитой lib из пакета Visual Studio. Для её запуска в командном режиме можно, например, использовать утилиту «Командная строка разработчика для VS2012», которая входит в состав дистрибутива с Visual Studio 12 и по умолчанию может быть запущена из той же папки меню «Пуск», что и сама студия.

После запуска командной строки разработчика, в ее консольном окне с помощью команд выбора диска и смены директории (cd) следует выбрать текущей ту директорию, в которой находятся ранее разархивированные файлы библиотеки FFTW. В этой директории исполняется команда lib: lib /machine:x86 /def:libfftw3-3.def

Опция /machine:x86 этой команды является опцией по умолчанию и предназначена для создания 32-х битных приложений. Если вы скачали архив FFTW для 64-х битных приложений, то в этой опции «86» надо заменить на «64». При успешном выполнении команды в директории с FFTW должен появиться файл импортированной библиотеки libfftw3-3.lib, которую нужно будет включить в проект приложения.

Предположим, что мы хотим использовать библиотеку FFTW в консольном приложении, создаваемом в Visual Studio 12. Добавить в проект импортированную библиотеку можно, например, используя следующие опции меню: *Проект → Свойства → Свойства конфигурации → Компоновщик → Все параметры → Дополнительные*

зависимости, где в отдельном окне вводится имя библиотеки libfftw3-3.lib. Кроме этого, в окно ввода опции *Все параметры* → *Дополнительные каталоги библиотек* следует добавить имя директории, содержащей эту библиотеку.

На этом процесс подключения библиотеки FFTW к проекту можно считать завершённым. Саму же динамическую библиотеку libfftw3-3.dll удобно просто скопировать в ту директорию, откуда будет запускаться приложение. Если запуск будет происходить непосредственно из среды Visual Studio, то скопировать в текущую директорию проекта.

2. Одномерное ДПФ массива комплексных чисел

Дискретное преобразование Фурье в библиотеке FFTW выполняется в ненормализованном виде. Прямое преобразование имеет вид:

$$U(k) = \sum_{j=0}^{N-1} u(j) W_N^{-kj}, \quad (6.1)$$

$$\text{где } k = 0, 1, \dots, N-1, \quad j = 0, 1, \dots, N-1, \quad W_N = \exp\left(\frac{2\pi i}{N}\right).$$

В отличие от формулы (5.1) оно не содержит множителя $1/N$, при этом обратное преобразование алгоритмически отличается от прямого только знаком в показателе экспоненты:

$$u(j) = \sum_{k=0}^{N-1} U(k) W_N^{kj}. \quad (6.2)$$

Таким образом, последовательное применение прямого и обратного преобразований приведёт в итоге к умножению входных данных на N .

Ниже приведён фрагмент типовой программы вычисления ДПФ одномерного массива комплексных чисел из N элементов на языке Си и комментарии к ней.

```
#include <fftw3.h>
...
{
    fftw_complex *in, *out;
```

```
    fftw_plan plan;
    ...
    in = (fftw_complex*) fftw_malloc(sizeof(fftw_complex) * N);
    out = (fftw_complex*) fftw_malloc(sizeof(fftw_complex) * N);
    plan = fftw_plan_dft_1d(N, in, out, FFTW_FORWARD,
        FFTW_ESTIMATE);
    ...
    fftw_execute(plan); /* repeat as needed */
    ...
    fftw_destroy_plan(plan);
    fftw_free(in);
    fftw_free(out);
}
```

Эту программу нужно скомпоновать (слинковать) вместе с библиотекой FFTW и стандартной математической библиотекой. На Unix системах для этого следует использовать параметры `-lfftw3 -lm`.

Использование библиотеки FFTW требует включение в программу заголовочного файла `fftw3.h`. Собственно вычисление ДПФ предполагает следующую последовательность действий, которые подробно описаны ниже:

1. Выделение памяти для входного и выходного массивов.
2. Вызов планировщика.
3. Задание входного массива и вычисление ДПФ необходимое количество раз.
4. Освобождение выделенных ресурсов.

1. Комплексное ДПФ производится над массивом, тип элементов которых `fftw_complex` или `double[2]`⁴. Т.е., фактически, обрабатываемые данные структурируются в виде двумерного массива типа `double in[N][2]`, где `in[i][0]` это реальная часть *i*-го комплексного числа, а `in[i][1]` – мнимая часть. Память для входного массива выделяется с помощью вызова библиотечной функции `fftw_malloc()`, которая делает это аналогично стандартной Си-функции `malloc()`, но

⁴ Используется следующее определение для синонима типа: `typedef double fftw_complex[2]`.

гарантирует правильное выравнивание элементов массива, если для ускорения вычислений используются SIMD-инструкции процессора.

Аналогично выделяется память и для массива выходных данных `out`. При желании можно ограничиться одним и тем же массивом для входных и выходных данных. В этом случае результат ДПФ будет записан поверх входных данных (они не сохранятся).

2. Следующим шагом идёт вызов функции-планировщика, результатом работы которой будет объект (план), содержащий все необходимые данные для выполнения БПФ:

```
fftw_plan_dft_1d(int N, fftw_complex *in, fftw_complex *out, int sign,
unsigned flags).
```

Первый аргумент `N` – это число элементов входного (и выходного) массива.

Далее идут два указателя на входной и выходной массивы (могут быть одинаковыми).

Четвёртый аргумент, `sign`, может быть либо `FFTW_FORWARD` (–1) для прямого преобразования, либо `FFTW_BACKWARD` (+1) – для обратного преобразования.

Последний аргумент, `flags`, как правило, имеет значение либо `FFTW_MEASURE`, либо `FFTW_ESTIMATE`. В случае `FFTW_MEASURE` планировщик выполняет тестовые вычисления, используя массивы `in` и `out` с целью подбора оптимальных параметров. Поэтому вызов планировщика должен быть выполнен до инициализации массива `in`, т.к. в противном случае после вызова планировщика исходные данные во входном массиве будут утеряны. В случае `FFTW_ESTIMATE` никакие преобразования не выполняются, подходящий план строится быстрее, но он может оказаться не оптимальным.

3. После построения плана он может быть использован многократно для выполнения ДПФ с указанными массивами `in` и `out` посредством вызова функции `fftw_execute(plan)`:

```
void fftw_execute(const fftw_plan plan).
```

Результат преобразования размещается в массиве `out` в порядке возрастания номера гармоники от 0 до $N - 1$. Те, кому более привычно оперировать положительными и отрицательными частотами (см. например, формулу (3.3)), могут считать, что в первой половине массива располагаются неотрицательные гармоники от 0 до $N/2$, а затем

идут отрицательные гармоники с номерами⁵ от $-(N/2 - 1)$ до -1 . Если $in \neq out$, то входной массив остаётся неизменным.

Если есть необходимость выполнить обратное или такое же преобразование, но с другим массивом, то надо заново создать план с помощью функции `fftw_plan_dft_1d`. При возможности этот новый план будет создан на основе предыдущего.

4. Если данный план больше не будет использоваться, то выделенную для него память следует освободить с помощью вызова функции `fftw_destroy_plan(plan)`. Если память для массивов была получена с помощью `fftw_malloc()`, то для ее освобождения необходимо использовать функцию `fftw_free()`.

В качестве примера использования библиотеки FFTW рассмотрим комплексное ДПФ следующего ряда из $N = 4$ чисел: $u(0) = 1$, $u(1) = 2$, $u(2) = 3$, $u(3) = 4$. Приведенная ниже программа последовательно делает прямое преобразование Фурье, вычисляет спектральную плотность мощности (с точностью до некоторого множителя) и делает обратное преобразование:

```
#include "fftw3.h"
#include <stdio.h>
#define N 4
int main()
{
    fftw_complex *in, *out;
    fftw_plan plan, plan_inverse;
    int i;

    in = (fftw_complex*) fftw_malloc(sizeof(fftw_complex) *
N);
    out = (fftw_complex*) fftw_malloc(sizeof(fftw_complex)
* N);
    plan = fftw_plan_dft_1d(N, in, out, FFTW_FORWARD,
FFTW_MEASURE);
    plan_inverse = fftw_plan_dft_1d(N, out, in,
FFTW_BACKWARD, FFTW_ESTIMATE);

    for (i=0; i < N; i++)
```

⁵ В силу периодичности преобразования гармоника с номером $-k$ (соответствует частоте $-k/N$) совпадает с гармоникой с номером $N - k$ (частота $(N - k)/N$).

```

    {
        in[i][0]= i+1.; // {1.,2.,3.,4.}
        in[i][1]=0.;
    }

    fftw_execute(plan); // DFT

    printf("\nForward DFT:\n");
    for (i=0; i < N; i++)
    {
        printf("%f %fi\n",out[i][0],out[i][1]); // DFT
{1.,2.,3.,4.}
    }
    printf("\nPower spectral density\n");
    for (i=0; i < N; i++)
    {

    printf("%f\n",out[i][0]*out[i][0]+out[i][1]*out[i][1]);
// PSD
    }

    fftw_execute(plan_inverse); // Inverse DFT

    printf("\nBackward(Forward DFT):\n");
    for (i=0; i < N; i++)
    {
        printf("%f %fi\n",in[i][0],in[i][1]); //
Inverse(Direct DFT)
    }

    fftw_destroy_plan(plan);
    fftw_destroy_plan(plan_inverse);
    fftw_free(in);
    fftw_free(out);
    return 0;
}

```

В этой программе директива `#include "fftw3.h"` предполагает, что заголовочный файл находится в текущей директории проекта. Если это не так, и файл не размещен в системных директориях с заголовочными файлами, то к нему следует указать полный путь. В нашей программе используются два плана, один для прямого

преобразования (plan) и другой для обратного (plan_inverse). При этом для прямого преобразования входным является файл in, а выходным (с результатом преобразования) – файл out. Обратное преобразование выполняется с массивом данных, полученных в итоге прямого преобразования, поэтому эти файлы меняются местами. Так же эта программа может служить иллюстрацией использования в языке Си комплексного типа данных `fftw_complex` из библиотеки FFTW.

Результат выполнения программы в консольном окне следующий:

```
Forward DFT:
10.000000 0.000000i
-2.000000 2.000000i
-2.000000 0.000000i
-2.000000 -2.000000i

Power spectral density
100.000000
8.000000
4.000000
8.000000

Backward(Forward DFT):
4.000000 0.000000i
8.000000 0.000000i
12.000000 0.000000i
16.000000 0.000000i
```

Обратите внимание, что после обратного преобразования получается массив, числа в котором в N раз больше исходных данных. Для приведения результата обратного преобразования к виду (5.2) необходимо выполнить деление элементов на N .

3. Комплексное ДПФ двумерных массивов

Двумерное дискретное преобразование Фурье выполняется аналогично одномерному. Также требуется выделить память для `fftw_complex` массивов (предпочтительно используя `fftw_malloc`), создать план, выполнить необходимое число раз преобразование с созданным планом и освободить выделенные ресурсы. Планировщик

для двумерного комплексного массива размера $N0 \times N1$ имеет следующий прототип:

```
fftw_plan fftw_plan_dft_2d(int N0, int N1, fftw_complex *in, fftw_complex *out,
int sign, unsigned flags).
```

где $N0$ – число строк, а $N1$ – число столбцов в двумерном массиве. Предполагается, что массив комплексных чисел типа `fftw_complex` занимает в памяти непрерывную область и располагается в ней в порядке, характерном для языка Си – быстрее всего меняется последний индекс, медленнее всего – первый. Фактически обрабатываемые данные структурируются в виде трехмерного массива типа `double in[N0][N1][2]`, где `in[i][j][0]` это реальная часть комплексного числа в i -ой строке и j -ом столбце двумерной матрицы размера $N0 \times N1$, а `in[i][j][1]` – мнимая часть.

Если декларировать массивы на этапе компиляции программы на языке Си, то они автоматически получаются в нужном формате, например,

```
{
    fftw_complex data[N0][N1];
    fftw_plan plan;
    ...
    plan = fftw_plan_dft_2d(N0, N1, &data[0][0], &data[0][0], FFTW_FORWARD,
    FFTW_ESTIMATE);
    ...
}
```

В этом примере создается план двумерного комплексного преобразования массива размера $N0 \times N1$ с размещением выходных данных поверх (в том же массиве `data`) входных. Однако такое статическое выделение памяти является не очень удачным. Во-первых, могут возникнуть проблемы с переполнением стека для локальных автоматических массивов. А во-вторых, элементы массива могут быть не оптимальным образом выравнены для использования SIMD-инструкций. Вместо этого, память лучше выделять динамически с использованием `fftw_malloc`, как и в одномерном случае. Например, для комплексного массива размером 8 на 16, это можно сделать так:

```
fftw_complex *in;
in = (fftw_complex*) fftw_malloc(8*16*sizeof(fftw_complex));
```

при этом обращение к (i, j) -му элементу исходного двумерного массива происходит как к элементу одномерного массива $\text{in}[i*16+j]$.

§6.2. ДПФ в пакете Wolfram Mathematica

Дискретное преобразование Фурье можно найти во многих пакетах, предназначенных для научных и технических расчетов. Рассмотрим в качестве примера пакет Wolfram Mathematica®, который используется на физическом факультете МГУ имени М.В. Ломоносова в рамках дисциплины «Компьютерная физика». Для выполнения дискретного преобразования Фурье в пакете имеются функции `Fourier[List]` (прямое преобразование) и `InverseFourier[List]` – обратное преобразование. Аргументом обеих функций является список (List) комплексных чисел, над которыми происходит соответствующее преобразование. По умолчанию прямым преобразованием в пакете Математика называют преобразование вида:

$$U(k) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} u(j) W_N^{kj}, \quad (6.3)$$

и обратным:

$$u(j) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} U(k) W_N^{-kj}, \quad (6.4)$$

т.е. со знаком «+» в показателе экспоненты прямого преобразования, знаком «-» при обратном преобразовании и симметричным коэффициентом $1/\sqrt{N}$ перед суммой в обоих преобразованиях. С помощью опции `FourierParameters -> {a, b}` можно изменить поведение функций и привести преобразования к более удобному для конкретного применения виду. В общем случае, с использованием этой опции прямое и обратное преобразования имеют, соответственно, вид:

$$U(k) = \frac{1}{N^{(1+a)/2}} \sum_{j=0}^{N-1} u(j) e^{+\frac{2\pi i b j k}{N}}, \quad (6.5)$$

$$u(j) = \frac{1}{N^{(1-a)/2}} \sum_{k=0}^{N-1} U(k) e^{-\frac{2\pi i b j k}{N}}. \quad (6.6)$$

В частности, значение $b = -1$ меняет знак показателя экспоненты на противоположный и совместно со значением $a = 1$ приводит ДПФ к виду (5.1), принятому в настоящем пособии⁶.

В качестве примера рассмотрим ДПФ уже ранее использованного ряда из $N = 4$ чисел: $u(0) = 1$, $u(1) = 2$, $u(2) = 3$, $u(3) = 4$:

```
In[1]:= List1 = {1., 2., 3., 4.};
        S1 = Fourier[List1, FourierParameters -> {1, -1}]

Out[2]= {10. + 0. i, -2. + 2. i, -2. + 0. i, -2. - 2. i}

In[3]:= Abs[S1]^2

Out[3]= {100., 8., 4., 8.}

In[4]:= InverseFourier[S1, FourierParameters -> {1, -1}]

Out[4]= {1., 2., 3., 4.}
```

Результатом прямого ДПФ является список комплексных амплитуд дискретных гармоник, который в данном примере сохраняется в переменной $S1$. Первый элемент этого списка – это амплитуда нулевой гармоники $U(0)$, затем последовательно через запятую располагаются амплитуды первой – $U(1)$, второй – $U(2)$ и третьей (в терминах отрицательных частот – минус первой) – $U(3)$ гармоник. Далее в программе вычисляется спектральная плотность мощности анализируемого ряда чисел и, в конце, выполняется обратное дискретное преобразование Фурье, которое, будучи применённое к результату прямого преобразования, даёт исходный ряд чисел.

§6.3. ДПФ на языке Python⁷

В настоящее время одним из популярных языков программирования является Питон (Python) – интерпретируемый мультипарадигмальный язык, с помощью которого можно решать

⁶ В пакете Математика такой выбор параметров связывают с типовым применением ДПФ в задачах обработки сигналов.

⁷ Авторы выражают искреннюю признательность Е.В. Васильеву за предоставление материалов для этого параграфа.

широкий круг задач. Если у вас установлен дистрибутив Python(x,y), специально предназначенный для численных расчётов, анализа и визуализации данных, то ничего дополнительного не потребуется. Если вариант дистрибутива другой, то надо проверить наличие, и при необходимости установить пакеты NumPy (Numeric Python) и SciPy (Scientific Python). Эти пакеты предоставляют множество математических операций и алгоритмов на компилируемых языках, благодаря чему обеспечивается высокая скорость вычислений. Установка пакета NumPy в виртуальное окружение Python осуществляется командой:

```
pip install numpy.
```

1. ДПФ из модуля NumPy

Прямое и обратное дискретные преобразования Фурье из пакета NumPy соответствуют формулам (5.1). Рассмотрим опять в качестве входных данных одномерный массив из четырех чисел `arr_in = [1, 2, 3, 4]`:

```
In [1]: from numpy import array, float64, complex64
        from numpy.fft import fft as fft_numpy, ifft as ifft_numpy

        # initial array
        arr_in = array([1, 2, 3, 4], dtype=complex64)

        # forward fft
        forward_fft_numpy_res = fft_numpy(arr_in)

        # power spectral density
        spectral_density = array(forward_fft_numpy_res.real**2 +
                                forward_fft_numpy_res.imag**2,
                                dtype=float64)

        # backward fft
        backward_fft_numpy_res = ifft_numpy(forward_fft_numpy_res)

In [2]: forward_fft_numpy_res
Out[2]: array([10.+0.j, -2.+2.j, -2.+0.j, -2.-2.j], dtype=complex64)

In [3]: spectral_density
Out[3]: array([100.,  8.,  4.,  8.])

In [4]: backward_fft_numpy_res
Out[4]: array([1.+0.j, 2.+0.j, 3.+0.j, 4.+0.j], dtype=complex64)
```

Здесь исходный массив `arr_in` создается с помощью команды `array`, в которую в явном виде передается тип `complex64`. Затем функция `fft`, имя которой переопределено на `fft_numpy`, выполняет прямое одномерное комплексное ДПФ, результат которого сохраняется в `forward_fft_numpy_res`. Спектральная интенсивность гармоник вычисляется как сумма квадратов действительной и мнимой частей полученного преобразования и сохраняется в массиве `spectral_density` типа `float64`. Обратное ДПФ осуществляется функцией `ifft` (с псевдонимом `ifft_numpy`). Она возвращает массив `forward_fft_numpy_res` типа `complex64`.

Аналогично выглядит использование ДПФ из библиотеки `SciPy`. Разница заключается в том, что модуль, который реализует Фурье-преобразование, необходимо импортировать из `scipy.fftpack`.

2. Использование библиотеки FFTW

Рассмотренная выше библиотека `FFTW` доступна для использования в Питоне через интерфейс («обертку»), которая называется `PyFFTW`. Устанавливается эта библиотека командой:

```
pip install pyfftw.
```

Пользователям предлагается несколько вариантов интерфейсов. Они отличаются степенью необходимой детализации при организации выполнения ДПФ. Минимальную детализацию (более простой вариант – близкий по смыслу к `numpy.fft/scipy.fftpack.fft`) поддерживают модули `pyfftw.interfaces.numpy_fft` и `pyfftw.interfaces.scipy_fftpack.fft`. Выполнение ДПФ с функциями из этих модулей осуществляется аналогично п. 1:

Увеличить эффективность ДПФ возможно при предварительном создании планов преобразований, доступных в модуле `pyfftw.FFTW`. Некоторый компромисс между детальной настройкой и простым `numpy`-подобным интерфейсом достигается в модуле `pyfftw.builders`.

```

In [1]: from numpy import array, float64, complex64
        from pyfftw.interfaces.numpy_fft import fft as fft_pyfftw,
        ifft as ifft_pyfftw

        # initial array
        arr_in = array([1, 2, 3, 4], dtype=complex64)

        # forward dft
        forward_fft_pyfftw_res = fft_pyfftw(arr_in)

        # power spectral density
        spectral_density = array(forward_fft_pyfftw_res.real**2 +
                                forward_fft_pyfftw_res.imag**2,
                                dtype=float64)

        # backward dft
        backward_fft_pyfftw_res = ifft_pyfftw(forward_fft_pyfftw_res)

In [2]: forward_fft_pyfftw_res
Out[2]: array([10.+0.j, -2.+2.j, -2.+0.j, -2.-2.j], dtype=complex64)

In [3]: spectral_density
Out[3]: array([100.,  8.,  4.,  8.])

In [4]: backward_fft_pyfftw_res
Out[4]: array([1.+0.j, 2.+0.j, 3.+0.j, 4.+0.j], dtype=complex64)

```

3. Сравнение быстродействия ДПФ в Python

Заметим, что различные модули и библиотеки не только предлагают разный пользовательский интерфейс, но и характеризуются различной эффективностью выполнения преобразований. Общая закономерность проявляется в том, что чем более простой интерфейс и чем меньше предварительных настроек необходимо производить, тем больше время выполнения преобразования. Сравним быстродействие ДПФ из следующих библиотек:

- 1) Библиотека NumPy.
- 2) Библиотека SciPy.
- 3) Библиотека PyFFTW:
 - модуль с интерфейсом `numpy_fft`;
 - модуль с интерфейсом `scipy_fftpack`;
 - модуль `pyfftw.builders`;
 - модуль `pyfftw.FFTW` с созданием планов Фурье-преобразований.

На рис. 6.1 приведена зависимость среднего времени последовательного выполнения прямого и обратного ДПФ для каждого из рассмотренных случаев, нормированное на время выполнения ДПФ в библиотеке NumPy, для одномерного (рис. 1а) и двумерного (рис. 1б) массивов.

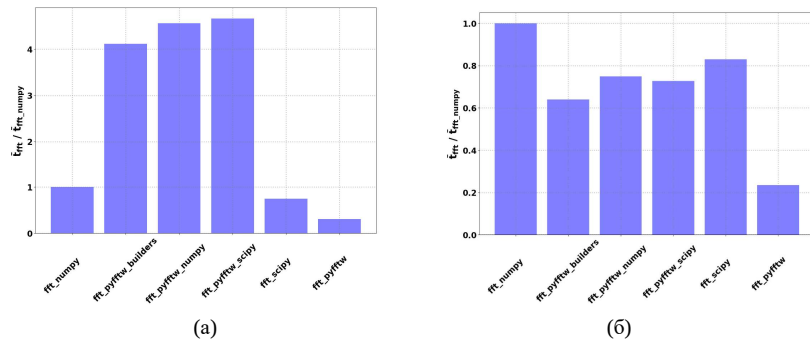


Рис. 6.1. Зависимость среднего времени последовательного выполнения прямого и обратного ДПФ для разных модулей и библиотек в Python, нормированное на время выполнения ДПФ в библиотеке NumPy, для одномерного массива типа `complex64` размером 1024 точки (усреднение по 50000 реализациям) (а) и двумерного массива типа `complex64` размером 1024 x 1024 (усреднение по 500 реализациям) (б).

Видно, что в случае одномерного массива сильно проигрывают в скорости модули библиотеки PyFFTW, имитирующие интерфейсы NumPy и SciPy, а также модуль `pyfftw.builders`. Это связано с тем, что для одномерного массива время предварительной внутренней настройки параметров, которая всегда происходит в PyFFTW, сопоставимо со временем всего преобразования. В случае двумерного массива относительный вклад времени настройки (построения плана) мал, поэтому выполнение преобразований в указанных модулях происходит быстрее, чем в тех, интерфейс которых они повторяют. Заметим, что ДПФ из SciPy немного более эффективен, чем из NumPy, а скорость выполнения преобразований в PyFFTW с предварительным созданием планов, является наибольшей⁸.

⁸ Построение планов не входит в измеряемое время.

Литература

1. А.А. Харкевич. Спектры и анализ, 4-е изд. М.: ЛКИ, 2007. 236 с.
2. Е. Скучик. Основы акустики, т.1, М.: Мир, 1976, 520 с.
3. Ж. Макс. Методы и техника обработки сигналов при физических измерениях, т.1, М.: Мир, 1983, 312 с.
4. Д. Рабинер, Б. Гоулд. Теория и применение цифровой обработки сигналов, М.: Мир, 1978, 848 с.
5. Р. Отнес, Л. Эноксон. Прикладной анализ временных рядов, М.: Мир, 1982, 428 с.
6. Р. Брейсуэлл. Преобразование Фурье //В мире науки. Scientific American. №8, с.48, 1989.

Учебно-методическое издание

КАНДИДОВ Валерий Петрович

ЧЕСНОКОВ Сергей Сергеевич

ШЛЕНОВ Святослав Александрович

ДИСКРЕТНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФУРЬЕ

Оригинал-макет и компьютерные иллюстрации: *Чесников С.С.*

Подписано в печать 2019 г. Формат 60х90 1/16

Бумага офсетная. Печать офсетная. Объем 5,5 п.л.

Тираж 100 экз. Заказ № .

Физический факультет МГУ

119991, ГСП-1, Москва, Ленинские горы, МГУ им. М.В. Ломоносова

Напечатано с готового оригинал-макета

Отдел оперативной печати физического факультета

МГУ имени М.В. Ломоносова

119991, ГСП-1, Москва

Ленинские горы, д. 1, стр. 2

Тираж 100 экз. Заказ №