

Fourier series to Fourier transform

Masahiro Yamamoto

September 9, 2016

化学系の学生さんは、フーリエ級数はなんとなく知っている（習ったことを覚えている）けれどもフーリエ変換となるとお手上げだということを研究室の輪読会で良く聞きます。”フーリエの冒険”ヒップファミリークラブの本がわかりやすいとのことでした（研究室OB岩見氏・曾田氏談）のでそれを読んで頂くのが良いかもしれませんが、ここでは最短のルートで簡単に説明します。

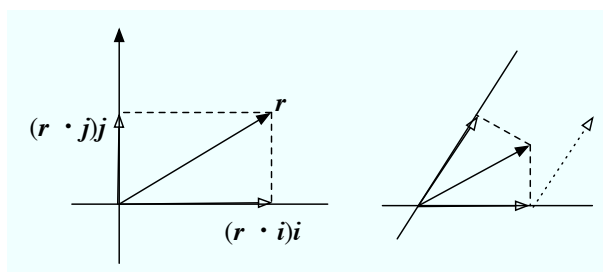


Figure 1: normal coordinate, projection, inner product

話はすこし変わりますが、3次元のベクトル \mathbf{r} は、直交した単位ベクトル $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ とそれらへの射影（内積） $x = \mathbf{r} \cdot \mathbf{i}, y = \mathbf{r} \cdot \mathbf{j}, z = \mathbf{r} \cdot \mathbf{k}$ の単純な和で $\mathbf{r} = x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k}$ と表されます。（3次元のベクトルですが、これを4次元、5次元、..., N 次元へと拡張することもできます。我々は3次元の空間しか認識できませんが。量子力学の波動関数（状態ベクトル）は、（複素）無限次元空間（ヒルベルト空間）での単位ベクトルとその射影であらわされます。） Fig.1の右図にあるように、直交座標系でない場合は、射影（内積）の単純な和にはなりません。 $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ は、 $\mathbf{i} \cdot \mathbf{j} = \mathbf{j} \cdot \mathbf{k} = \mathbf{k} \cdot \mathbf{i} = 0$ ですので直交系です。また、 $\mathbf{i} \cdot \mathbf{i} = \mathbf{j} \cdot \mathbf{j} = \mathbf{k} \cdot \mathbf{k} = 1$ なので、正規直交系です。

1 フーリエ級数

同じ発想で、ある関数 $f(x)$ を直交する関数 $g_n(x)$ の和で表そうとするのがフーリエ級数、フーリエ変換です。（関数の直交の意味は直ぐに述べます。）この場合関数 $f(x)$ と $g_n(x)$ の内積は

$$(f, g_n) = \int_a^b dx f(x) g_n^*(x) \quad (1)$$

で定義します。ここで*は複素共役を示す。関数 $f(x)$ が $[-l, l]$ の繰り返し周期 $2l$ をもつとき、関数は以下のように展開できます。

$$f(x) = \sum_n (f, g_n) g_n = \frac{1}{\sqrt{2l}} \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} c'_n e^{in\pi x/l} \quad (2)$$

ただし、

$$g_n = \frac{e^{in\pi x/l}}{\sqrt{2l}} \quad (3)$$

$$c'_n = (f, g_n) = \frac{1}{\sqrt{2l}} \int_{-l}^l dx f(x) e^{-in\pi x/l} \quad (4)$$

である。 g_n の直交関係は

$$(g_n, g_m) = \frac{1}{2l} \int_{-l}^l dx e^{in\pi x/l} e^{-im\pi x/l} = \begin{cases} 1, & (n = m) \\ \frac{\sin(n-m)\pi}{2(n-m)\pi} = 0, & (n \neq m) \end{cases}$$

となり、従って以下のように書けます。(正規直交系)

$$(g_n, g_m) = \delta_{nm}$$

今、 $c_n = c'_n/\sqrt{2l}$ とすれば

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} c_n e^{in\pi x/l} \quad (5)$$

$$c_n = \frac{1}{2l} \int_{-l}^l dx f(x) e^{-in\pi x/l} \quad (6)$$

また、

$$f(x+2l) = \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} c_n e^{in\pi(x+2l)/l} e^{i2n\pi} = f(x)$$

を満たします。

フーリエ級数で表したノコギリ波、および矩形波の例を Fig.2 に示します。 n が大きくなるにしたがってそれぞれの波がよく再現されています。

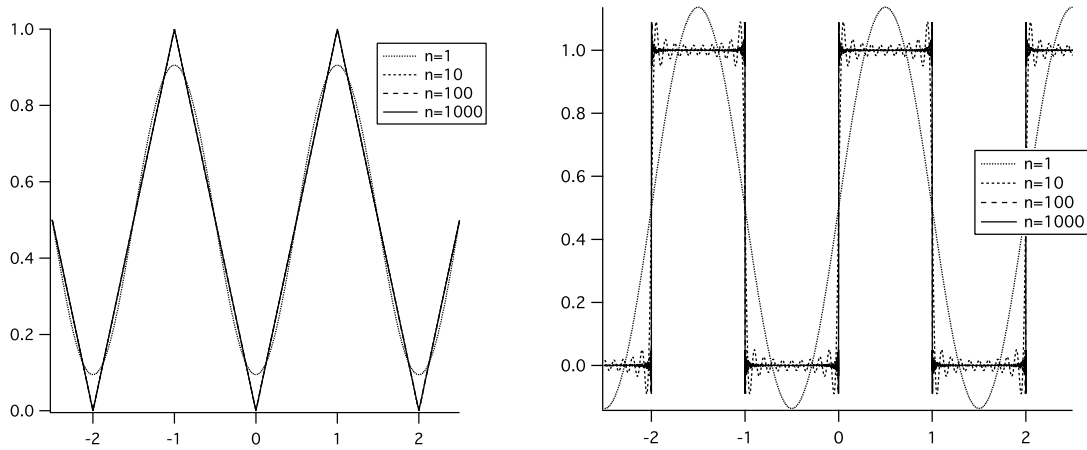


Figure 2: Examples of Fourier series

今、試しに、Eq.(6) の右辺の $f(x)$ に Eq.(5) を代入すると

$$\begin{aligned} c_n &= \frac{1}{2l} \int_{-l}^l dx \sum_{m=-\infty}^{m=\infty} c_m e^{im\pi x/l} e^{-in\pi x/l} \\ &= \sum_{m=-\infty}^{m=\infty} c_m \delta_{mn} = c_n \end{aligned}$$

また、Eq.(5) の右辺の c_n に Eq.(6) を代入すると

$$\begin{aligned} f(x) &= \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} \frac{1}{2l} \int_{-l}^l dx' f(x') e^{-in\pi x'/l} e^{in\pi x/l} \\ &= \int_{-l}^l dx' f(x') \frac{1}{2l} \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} e^{-in\pi(x'-x)/l} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{-l}^l dx' f(x') \frac{1}{2l} \frac{1}{\Delta k} \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} e^{-ik_n(x'-x)} \Delta k, \quad \left(k_n = \frac{n\pi}{l}, \Delta k = \frac{\pi}{l} \right) \\
&= \int_{-l}^l dx' f(x') \frac{1}{2l} \frac{l}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-ik(x'-x)} \\
&= \int_{-l}^l dx' f(x') \frac{1}{2\pi} 2\pi \delta(x' - x) = f(x)
\end{aligned}$$

となります。ここで、デルタ関数が出てくる最後の式の証明は後ほど行います。

Eq.(5)Eq.(6)では、 $L \equiv 2l$ で表されることがよくある。

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n e^{i2\pi n x/L} \quad (7)$$

$$c_n = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} dx f(x) e^{-i2\pi n x/L} \quad (8)$$

また、

$$f(x+L) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n e^{i2\pi n x/L} e^{i2\pi n} = f(x)$$

2 フーリエ変換

周期 $2l$ が無限大の時、 $k_n \equiv n\pi/l$ は連続数 k になり、 $\Delta_k = \pi/l$ とすると

$$f(x) = \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta_k} \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} c_n e^{in\pi x/l} \Delta_k = \lim_{l \rightarrow \infty} \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} \frac{c_n}{\Delta_k} e^{ik_n x} \Delta_k \quad (9)$$

$f(k) \equiv c_n/\Delta_k$ で定義すると、

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk f(k) e^{ikx} \quad (10)$$

$$f(k) = \frac{c_n}{\Delta_k} = \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{1}{2l} \frac{l}{\pi} \int_{-l}^l dx f(x) e^{-ik_n x} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-ikx} \quad (11)$$

試しに、 $f(x)$ に $f(k)$ を代入すると

$$\begin{aligned}
f(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} dk f(k) e^{ikx} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx' f(x') e^{-ikx'} e^{ikx} \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx' f(x') \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-ik(x'-x)} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx' f(x') 2\pi \delta(x' - x) = f(x)
\end{aligned}$$

となる。

2.1 Gauss 関数のフーリエ変換

$$f(x) = A \exp(-\alpha x^2), \quad \alpha > 0 \quad (12)$$

のフーリエ変換を行う。

$$\begin{aligned}
f(k) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx A e^{-\alpha x^2} e^{-ikx} = \frac{A}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\alpha(x+i\frac{kx}{2\alpha})^2} e^{-\frac{k^2}{4\alpha}} \\
&= \frac{A}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{-\frac{k^2}{4\alpha}} = \frac{A}{2\sqrt{\pi\alpha}} e^{-\frac{k^2}{4\alpha}}
\end{aligned} \quad (13)$$

その逆変換は、

$$f(x) = \frac{A}{2\sqrt{\pi\alpha}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{-\frac{k^2}{4\alpha}} e^{ikx} = \frac{A}{2\sqrt{\pi\alpha}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{-\frac{1}{4\alpha}(k-2i\alpha x)^2} e^{-\alpha x^2} = \frac{A}{2\sqrt{\pi\alpha}} 2\sqrt{\alpha\pi} e^{-\alpha x^2} = A e^{-\alpha x^2}$$

2.2 Gaussian wavepacket のフーリエ変換

$$f(x) = Ae^{ikx}e^{-x^2/2\Delta^2} \quad (14)$$

のフーリエ変換を行う。

$$\begin{aligned} f(k') &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx Ae^{ikx} e^{-x^2/2\Delta^2} e^{-ik'x} = \frac{A}{2\pi} e^{[-(\Delta^2/2)(k-k')^2]} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{1}{2\Delta^2}[x-i\Delta^2(k-k')]^2} \\ &= \frac{A}{2\pi} \exp\left[-\frac{\Delta^2}{2}(k-k')^2\right] \sqrt{2\pi\Delta^2} = \frac{A\Delta}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{\Delta^2}{2}(k-k')^2\right] \end{aligned} \quad (15)$$

その逆変換は、

$$\begin{aligned} f(x) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dk' f(k') e^{ik'x} = \frac{A\Delta}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \exp\left[-\frac{\Delta^2}{2}(k-k')^2\right] e^{ik'x} \\ &= \frac{A\Delta}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{\Delta^2}{2}k^2\right] \exp\left[\frac{\Delta^2}{2}\left(k + \frac{i}{\Delta^2}x\right)^2\right] \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \exp\left[-\frac{\Delta^2}{2}\left\{k' - \left(k + \frac{i}{\Delta^2}x\right)\right\}^2\right] \\ &= \frac{A\Delta}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{\Delta^2}{2}k^2\right] \exp\left[\frac{\Delta^2}{2}\left(k + \frac{i}{\Delta^2}x\right)^2\right] \sqrt{\frac{2\pi}{\Delta^2}} \\ &= Ae^{ikx} e^{-x^2/(2\Delta^2)} \end{aligned} \quad (16)$$

実数部だけを考えると、

$$\begin{aligned} \text{Re}f(x) &= \frac{A\Delta}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \exp\left[-\frac{\Delta^2}{2}(k-k')^2\right] \cos(k'x) \\ &= \frac{A\Delta}{\sqrt{2\pi}} \sum (\delta k') \exp\left[-\frac{\Delta^2}{2}(k-k')^2\right] \cos(k'x) \\ k'' &= k - k' \\ \text{Re}f(x) &= \frac{A\Delta}{\sqrt{2\pi}} \sum_{k''} (\delta k'') \exp\left[-\frac{\Delta^2}{2}k''^2\right] \cos[(k-k'')x] \\ k'' &= k - k' = ndk'', \quad (n = -N, -N+1, \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots, N-1, N) \end{aligned}$$

2.3 delta function のフーリエ変換

ここで、

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-ik(x'-x)} &= \lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-L}^L dk e^{-ik(x'-x)} = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{-i(x'-x)} [e^{-iL(x'-x)} - e^{iL(x'-x)}] \\ &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{2 \sin[L(x'-x)]}{(x'-x)} = C \delta(x'-x) \end{aligned}$$

最後の式の C を決めよう。その前に、 $X = x' - x$ として $2 \sin(LX)/X$ の関数の形をみると

$$\lim_{X \rightarrow 0} \frac{2 \sin(LX)}{X} = 2L, \quad \frac{2 \sin(LX)}{X} = 0 \quad \text{at } X = \pm \frac{\pi}{L}$$

となる。従って、 $L \rightarrow \infty$ で、ピーク値は無限大に発散し、ピーク幅は無限小に小さくなる。(Fig.3) C は、Fig.4 に示した複素平面での経路積分より求めることができる。 $C = 2\pi$ となる。

$$\begin{aligned} C \int_{-\infty}^{\infty} dX \delta(X) &= C = \int_{-\infty}^{\infty} dX \frac{2 \sin(LX)}{X} \\ &= 2 \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{e^{iLz}}{z} = 2 \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} dZ \frac{e^{iZ}}{Z}, \quad (Z = zL) \\ &= 2 \text{Im} i\pi = 2\pi \end{aligned}$$

デルタ関数の積分形は従って以下のように与えられる。

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-ik(x'-x)} = 2\pi \delta(x'-x)$$

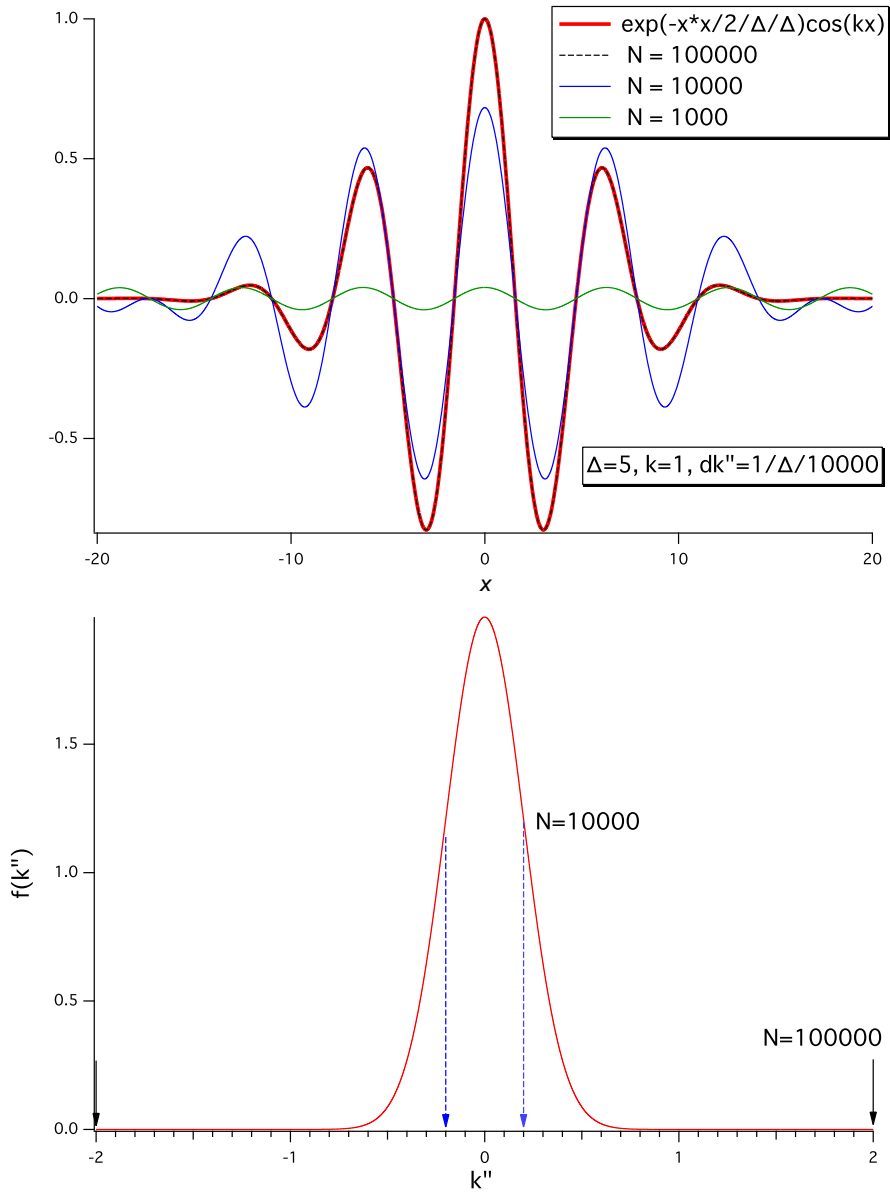


Figure 3: FT of Gaussian wave-packet

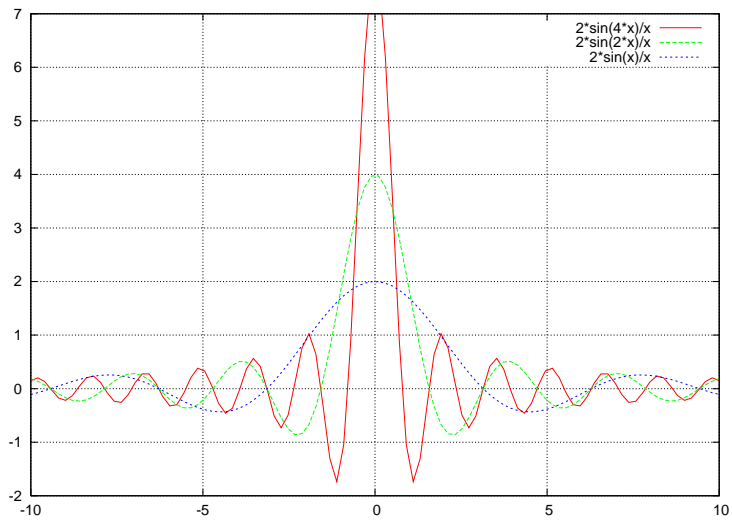


Figure 4: functional form of $2 \sin(LX)/X$

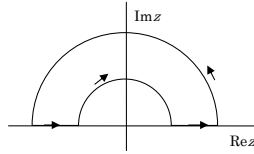


Figure 5: Contour to calculate $\int e^{iz}/z$

2.4 step function のフーリエ変換

ここでは、ついでに階段関数（シータ関数, step function）のフーリエ変換も求めておこう。求め方は、小出昭一郎「物理現象のフーリエ解析」（東京大学出版会）に従った。step function は以下の様に定義される。

$$\theta(x - x_0) = \begin{cases} 1, & x > x_0 \\ 0, & x < x_0 \end{cases} \quad (17)$$

フーリエ変換された $\theta(k)$ は、

$$\theta(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \theta(x - x_0) e^{-ikx} = \frac{1}{2\pi} \int_{x_0}^{+\infty} dx e^{-ikx} \quad (18)$$

上の式のままでは積分が求められないので、 $x = +\infty$ でゼロになる減衰項 $e^{-\epsilon x}$ を乗じ、後で ϵ をゼロの極限にもっていく方法をとる。

$$\theta(k) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi} \int_{x_0}^{+\infty} dx e^{-i(k-i\epsilon)x} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi} \left[\frac{e^{-i(k-i\epsilon)x}}{-i(k-i\epsilon)} \right]_{x_0}^{+\infty} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi} \frac{e^{-i(k-i\epsilon)x_0}}{i(k-i\epsilon)} \quad (19)$$

$$= \frac{-i}{2\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{e^{-i(k-i\epsilon)x_0}}{k-i\epsilon} \quad (20)$$

複素関数論のところで示したように、

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x \pm i\epsilon} = \text{P} \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x) \quad (21)$$

となる。ここで、P は積分に際してコーシーの主値をとること（0- と 0+ の極限を取って、0 での発散を回避せよ。）を意味する。step function のフーリエ変換は以下のようなになる。

$$\theta(k) = \theta(k; x_0) = \frac{-i}{2\pi} \left[\text{P} \frac{1}{k} + i\pi\delta(k) \right] e^{-ikx_0} \quad (22)$$

ここで、 $\theta(k)$ は x_0 に依存するので $\theta(k; x_0)$ と記した。

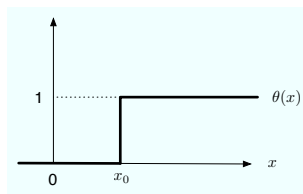


Figure 6: step function $\theta(x - x_0)$

$\theta(k; x_0)$ を逆フーリエ変換して $\theta(x - x_0)$ を求めよう。

$$\theta(x - x_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} dk \theta(k; x_0) e^{ikx} = \frac{-i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \left[\text{P} \frac{1}{k} + i\pi\delta(k) \right] e^{ik(x-x_0)} \quad (23)$$

$$= \frac{-i}{2\pi} \text{P} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{e^{ik(x-x_0)}}{k} + \frac{-i}{2\pi} i\pi \int_{-\infty}^{+\infty} dk \delta(k) e^{ik(x-x_0)} \quad (24)$$

$$= \frac{1}{2} - \frac{i}{2\pi} \text{P} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{e^{ik(x-x_0)}}{k} \quad (25)$$

主値積分を求めるために、 k の積分を複素平面に拡張する。複素数 k を $k = k' + ik''$ とすると、 $x - x_0 > 0$ の時、 $e^{ik(x-x_0)} = e^{ik'(x-x_0)}e^{-k''(x-x_0)}$ はFig.7での上半面の円弧 C' での経路積分がゼロになり、 $x - x_0 < 0$ の時は下半面の円弧 C'' の経路積分がゼロになる。

$x - x_0 > 0$ の時、Fig.7の左上の経路では、経路は特異点 $k = 0$ を含まないので

$$0 = \int_{-\infty}^{0-} dk \frac{e^{ik(x-x_0)}}{k} + \int_{C_1} dk \frac{e^{ik(x-x_0)}}{k} + \int_{0+}^{+\infty} dk \frac{e^{ik(x-x_0)}}{k} + \int_{C'} dk \frac{e^{ik(x-x_0)}}{k} \quad (26)$$

$$= \text{P} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{e^{ik(x-x_0)}}{k} - \pi i e^{i0(x-x_0)} + 0 \quad (27)$$

$$\pi i = \text{P} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{e^{ik(x-x_0)}}{k} \quad (28)$$

となる。Fig.7の左下の経路では、経路は特異点 $k = 0$ を含むので

$$2\pi i e^{i0(x-x_0)} = \text{P} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{e^{ik(x-x_0)}}{k} + \pi i e^{i0(x-x_0)} + 0 \quad (29)$$

となり、上式と同じ結果を与える。従って、

$$\theta(x - x_0) = \frac{1}{2} - \frac{i}{2\pi} \text{P} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{e^{ik(x-x_0)}}{k} = \frac{1}{2} - \frac{i}{2\pi} \pi i = 1, \quad x - x_0 > 0 \quad (30)$$

$x - x_0 < 0$ の時、Fig.7の右図の経路になり、右上図では経路は特異点 $k = 0$ を含むので

$$-2\pi i e^{i0(x-x_0)} = \text{P} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{e^{ik(x-x_0)}}{k} - \pi i e^{i0(x-x_0)} + 0 \quad (31)$$

$$-\pi i = \text{P} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{e^{ik(x-x_0)}}{k} \quad (32)$$

となる。右上図では経路は特異点 $k = 0$ を含まないので、

$$0 = \text{P} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{e^{ik(x-x_0)}}{k} + \pi i e^{i0(x-x_0)} \quad (33)$$

となり上と同じ結果を与える。したがって、

$$\theta(x - x_0) = \frac{1}{2} - \frac{i}{2\pi} \text{P} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{e^{ik(x-x_0)}}{k} = \frac{1}{2} - \frac{i}{2\pi} (-\pi i) = 0, \quad x - x_0 < 0 \quad (34)$$

以上より、 $\theta(k; x_0)$ のフーリエ変換により

$$\theta(x - x_0) = \begin{cases} 1, & x > x_0 \\ 0, & x < x_0 \end{cases} \quad (35)$$

が得られた。

2.5 Convolution:たたみこみ

たとえば、ある時間で外力 $f(t)$ が系に働いた場合、瞬間的な応答と遅れてくる応答が得られる場合が多い。 $r(t)$ を外力がない場合からの応答のずれとすると

$$r(t) = \chi^\infty f(t) + \int_{-\infty}^t \phi(t-t') f(t') dt' \quad (36)$$

ここで、 χ^∞ は瞬間的な応答への比例定数で、 $\phi(t-t')$ は、 t' の時間に働いた外力が t 応答にどの程度寄与する応答関数である。 $t > t'$ の時のみ意味を持つので、 $\phi(t-t') = 0, t-t' < 0$ としてよい。このようにおけば積分範囲を拡張して

$$r(t) = \chi^\infty f(t) + \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(t-t') f(t') dt' \quad (37)$$

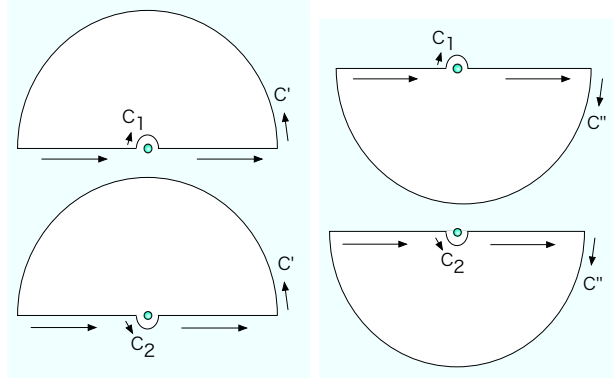


Figure 7: contour to calculate $\theta(x - x_0), x > x_0$ (left) and $\theta(x - x_0), x < x_0$ (right) from $\theta(k)$

とかける。この式全体をフーリエ変換して、角振動数 ω 空間にもっていくと、

$$\int_{-\infty}^{+\infty} r(t)e^{i\omega t} dt = \chi^\infty \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)e^{i\omega t} dt + \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(t-t')f(t')dt'e^{i\omega t} dt \quad (38)$$

$$r(\omega) = \chi^\infty f(\omega) + \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(t-t')f(t')e^{i\omega(t-t')}e^{i\omega t'} dt' dt \quad (39)$$

第2項の二重積分では、積分範囲がどちらも $-\infty$ から $+\infty$ なので、 $T = t - t'$ の積分と t' の積分を独立におこなってよい。すなわち、

$$r(\omega) = \chi^\infty f(\omega) + \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(T)e^{i\omega T} dT \int_{-\infty}^{+\infty} f(t')e^{i\omega t'} dt' \quad (40)$$

$$= \chi^\infty f(\omega) + \phi(\omega)f(\omega) \quad (41)$$

$\chi(\omega) = \chi^\infty + \phi(\omega)$ と定義すれば

$$r(\omega) = \chi(\omega)f(\omega) \quad (42)$$

となる。特に、以下の積分をたたみ込み (convolution) といい

$$\phi(t) * f(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(t-t')f(t')dt' \quad (43)$$

のように定義する。上の関係から $\phi(t) * f(t)$ のフーリエ変換はそれぞれのフーリエ変換の積 $\phi(\omega)f(\omega)$ になる。

2.6 時空 (space-time) でのフーリエ変換

実空間から波数空間 k への Fourier 変換は e^{-ikx} (1D), $e^{-ik_x x} e^{-ik_y y} e^{-ik_z z} = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ (3D) をかけて実空間で積分を、波数空間から実空間への Fourier 変換は e^{ikx} (1D), $e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ (3D) をかけて波数空間で積分する。時間から周波数 (各振動数) の場合は、空間とは逆符号をつけるとう便利である。時間から周波数 (各振動数) へは、 $e^{i\omega t}$ をかけて時間で積分し、周波数から時間へは、 $e^{-i\omega t}$ をかけて ω で積分する。

$$F(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d\mathbf{r} \int dt f(\mathbf{r}, t) \exp[-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)] \quad (44)$$

$$f(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{k} \int d\omega F(\mathbf{k}, \omega) \exp[i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)] \quad (45)$$

3 微分方程式と Fourier 変換

電荷密度 $\rho(\mathbf{r})$ より Poisson 方程式をつかって電位 $\phi(\mathbf{r})$ を求める。

$$-\nabla \cdot [\epsilon(\mathbf{r})\nabla\phi(\mathbf{r})] = \frac{\rho(\mathbf{r})}{\epsilon_0} \quad (46)$$

if $\epsilon(\mathbf{r})$ is position-independent

$$-\nabla^2\phi(\mathbf{r}) = \frac{\rho(\mathbf{r})}{\epsilon_0\epsilon} \quad (47)$$

両辺を Fourier 変換すると、関数の微分の Fourier 変換の関係式 $\int e^{-ikx} d^n[f(x)/dx^n]dx = (ik)^n \int e^{-ikx} f(x)dx$ を使って

$$\mathbf{k}^2\phi(\mathbf{k}) - \frac{\rho(\mathbf{k})}{\epsilon_0\epsilon} = 0 \quad (48)$$

$$\phi(\mathbf{k}) = \frac{\rho(\mathbf{k})}{\epsilon_0\epsilon\mathbf{k}^2} \quad (49)$$

この式を逆変換すれば、電位 $\phi(\mathbf{r})$ を求めることができる。

すなわち、「実空間の微分方程式」を Fourier 変換し、波数空間で代数方程式を解く、その解を Fourier 逆変換で実空間に戻すことにより、微分方程式が解ける。ということである。

4 Fourier transform of the periodic system

The structure of all crystal can be described in terms of lattice with a group of atoms attached to every lattice point. The group of atoms is called the basis.

$$\text{crystal structure} = \text{lattice}\{\mathbf{R}\} + \text{basis}\{\tau\} \quad (50)$$

A lattice translation vector can be described by the primitive cell vectors

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3 \quad (51)$$

Any function f invariant under a lattice translation \mathbf{R} may be expanded in a Fourier series of the form

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} f(\mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \quad (52)$$

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = f(\mathbf{r}) \quad (53)$$

$$\exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}) = 1 \quad (54)$$

$$f(\mathbf{G}) = \frac{1}{\Omega_{\text{cell}}} \int_{\text{cell}} d\mathbf{r} f(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} = \frac{1}{\Omega} \int d\mathbf{r} f(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} \quad (55)$$

$$f(\mathbf{G}) = \sum_{\mathbf{G}'} f(\mathbf{G}') \underbrace{\frac{1}{\Omega_{\text{cell}}} \int_{\text{cell}} d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}}}_{\delta_{\mathbf{G}', \mathbf{G}} \Omega_{\text{cell}}} = f(\mathbf{G}) \quad (56)$$

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \frac{1}{\Omega_{\text{cell}}} \int_{\text{cell}} d\mathbf{r}' f(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}'} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} \quad (57)$$

$$= \frac{1}{N_{\text{cell}}} \int d\mathbf{r}' f(\mathbf{r}') \underbrace{\frac{1}{\Omega_{\text{cell}}} \sum_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}}_{\Omega \delta_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}} \quad (N_{\text{cell}} \Omega_{\text{cell}} = \Omega) \quad (58)$$

$$= f(\mathbf{r}) \quad (59)$$

$$\sum_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} = \frac{1}{\Delta G_x \Delta G_y \Delta G_z} \sum_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \Delta G_x \Delta G_y \Delta G_z = \frac{\Omega}{8\pi^3} \int d\mathbf{G} e^{i\mathbf{G} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} = \frac{8\pi^3 \Omega}{8\pi^3} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

If we define the reciprocal lattice(逆格子)

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij} \quad (60)$$

The primitive translation vectors of the reciprocal lattice are

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} \quad \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} \quad (61)$$

Here $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ are the primitive translation vectors of the crystal lattice.

A reciprocal lattice vector has the form

$$\mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3, \quad (62)$$

where h, k, l are integers or zero. This equation satisfies $\exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}) = 1$.

If we consider $\mathbf{a}_1/h, \mathbf{a}_2/k, \mathbf{a}_3/l$ plane (hkl Miller index: ミラ指数), the reciprocal lattice vector $\mathbf{G}_{hkl} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$ is perpendicular to this plane. The distance between the two adjacent parallel planes of the lattice is $d(hkl) = 2\pi/|\mathbf{G}_{hkl}|$.¹

¹proof: An arbitrary vector \mathbf{t} in the (hkl) plane can be described

$$\mathbf{t} = \alpha(\mathbf{a}_1/h - \mathbf{a}_2/k) + \beta(\mathbf{a}_2/k - \mathbf{a}_3/l) \quad (63)$$

The inner product

$$\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{t} = 2\pi\alpha(h/h - k/k) + 2\pi\beta(k/k - l/l)$$

5 Electrostatic Potential

The Poisson equation is given in the SI unit

$$-\nabla \cdot [\epsilon(\mathbf{r})\nabla\phi(\mathbf{r})] = \frac{\rho(\mathbf{r})}{\epsilon_0} \quad (66)$$

if $\epsilon(\mathbf{r})$ is position-independent

$$-\nabla^2\phi(\mathbf{r}) = \frac{\rho(\mathbf{r})}{\epsilon_0\epsilon} \quad (67)$$

The Fourier transform of the above equation becomes ϕ and ρ is

$$-\nabla^2 \sum_{\mathbf{G}} \phi(\mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) = \frac{1}{\epsilon_0\epsilon} \sum_{\mathbf{G}'} \rho(\mathbf{G}') \exp(i\mathbf{G}' \cdot \mathbf{r}) \quad (68)$$

$$\sum_{\mathbf{G}} \left[\mathbf{G}^2 \phi(\mathbf{G}) - \frac{\rho(\mathbf{G})}{\epsilon_0\epsilon} \right] \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) = 0 \quad (69)$$

$$\phi(\mathbf{G}) = \frac{\rho(\mathbf{G})}{\epsilon_0\epsilon\mathbf{G}^2} \quad (70)$$

Then we will back-Fourier transform of the rhs of the above equation, we can get $\phi(\mathbf{r})$

In the 3-d FFT program $f(\mathbf{G}) = \frac{1}{\Omega_{\text{cell}}} \int_{\text{cell}} d\mathbf{r} f(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}$ is forward transformation and $f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} f(\mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})$ is backward transformation.

6 Electrostatic Free Energy

$$E_{\text{elst}} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r})v_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \quad (71)$$

$$= \frac{\Omega}{2} \sum_{\mathbf{G}} \rho^*(\mathbf{G})\phi(\mathbf{G}) + \Omega \sum_{\mathbf{G}} \rho^*(\mathbf{G})V_{\text{ext}}(\mathbf{G}) \quad (72)$$

$$\text{div}\mathbf{D} = \rho, \quad \mathbf{D} = \epsilon_0\epsilon(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{E} = -\text{grad}\phi(\mathbf{r}) \quad (73)$$

$$-\nabla \cdot \epsilon(\mathbf{r})\nabla\phi(\mathbf{r}) = \frac{\rho(\mathbf{r})}{\epsilon_0} \quad (74)$$

$$\sum_{\mathbf{G}''} \rho(\mathbf{G}'') \exp(i\mathbf{G}'' \cdot \mathbf{r}) = -\epsilon_0\nabla \cdot \sum_{\mathbf{G}} \epsilon(\mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \nabla \sum_{\mathbf{G}'} \phi(\mathbf{G}') \exp(i\mathbf{G}' \cdot \mathbf{r}) \quad (75)$$

$$= 0 \quad (64)$$

Thereby \mathbf{G}_{hkl} is perpendicular to the (hkl) plane. If we define the vector \mathbf{d} is the one from the origin to the intersection of (hkl) plane and the vector \mathbf{G}

$$\begin{aligned} \mathbf{d} &= \frac{\mathbf{G}_{hkl}}{|\mathbf{G}_{hkl}|} d(hkl) \\ \frac{\mathbf{G}_{hkl}}{|\mathbf{G}_{hkl}|} \cdot \mathbf{d} &= d(hkl) \\ \mathbf{d} &= \frac{\mathbf{a}_1}{h} + \mathbf{t}_{\text{intersect}} \\ \mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{d} &= \frac{\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{a}_1}{h} + \mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{t}_{\text{intersect}} \\ &= \frac{2\pi h}{h} + 0 = 2\pi \quad \text{then} \\ d(hkl) &= \frac{2\pi}{|\mathbf{G}_{hkl}|} \end{aligned} \quad (65)$$

$$f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}_{\parallel}, z) \quad (76)$$

$$f(\mathbf{r}_{\parallel} + \mathbf{R}_{\parallel}, z) = f(\mathbf{r}_{\parallel}, z) \quad (77)$$

$$f(\mathbf{r}_{\parallel}, z) = \sum_{\mathbf{G}_{\parallel}} f(\mathbf{G}_{\parallel}, z) e^{i\mathbf{G}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}} \quad (78)$$

$$f(\mathbf{G}_{\parallel}, z) = \frac{1}{\Omega_{\parallel}} \int d\mathbf{r}_{\parallel} f(\mathbf{r}_{\parallel}, z) e^{-i\mathbf{G}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}} \quad (79)$$

$$= \frac{1}{\Omega_{\parallel}} \int d\mathbf{r}_{\parallel} \sum_{\mathbf{G}'_{\parallel}} f(\mathbf{G}'_{\parallel}, z) e^{i(\mathbf{G}'_{\parallel} - \mathbf{G}_{\parallel}) \cdot \mathbf{r}_{\parallel}} \quad (80)$$

$$= \sum_{\mathbf{G}'_{\parallel}} f(\mathbf{G}'_{\parallel}, z) \underbrace{\frac{1}{\Omega_{\parallel}} \int d\mathbf{r}_{\parallel} e^{i(\mathbf{G}'_{\parallel} - \mathbf{G}_{\parallel}) \cdot \mathbf{r}_{\parallel}}}_{\Omega_{\parallel} \delta_{\mathbf{G}'_{\parallel}, \mathbf{G}_{\parallel}}} = f(\mathbf{G}_{\parallel}, z) \quad (81)$$

$$\nabla \phi(\mathbf{r}_{\parallel}, z) = \left(\mathbf{i} \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j} \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{k} \frac{\partial}{\partial z} \right) \sum_{\mathbf{G}_{\parallel}} \phi(\mathbf{G}_{\parallel}, z) e^{i(G_x x + G_y y)} \quad (82)$$

$$= (i\mathbf{G}_{\parallel}) \phi(\mathbf{r}_{\parallel}, z) + \mathbf{k} \sum_{\mathbf{G}_{\parallel}} \frac{\partial \phi(\mathbf{G}_{\parallel}, z)}{\partial z} e^{i(G_x x + G_y y)} \quad (83)$$

Then the PB equation becomes

$$-\nabla \cdot \epsilon(z) \nabla \phi(\mathbf{r}_{\parallel}, z) = \frac{\rho(\mathbf{r}_{\parallel}, z)}{\epsilon_0} \quad (84)$$

$$\sum_{\mathbf{G}_{\parallel}} \frac{\rho(\mathbf{G}_{\parallel}, z)}{\epsilon_0} e^{i\mathbf{G}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}} = - \sum_{\mathbf{G}_{\parallel}} \left(\mathbf{i} \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j} \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{k} \frac{\partial}{\partial z} \right) \cdot \epsilon(z) \left[(\mathbf{i}(iG_x) + \mathbf{j}(iG_y)) \phi(\mathbf{G}_{\parallel}, z) e^{i(G_x x + G_y y)} + \mathbf{k} \frac{\partial \phi(\mathbf{G}_{\parallel}, z)}{\partial z} e^{i(G_x x + G_y y)} \right] \quad (85)$$

$$= \sum_{\mathbf{G}_{\parallel}} \left[\epsilon(z) \mathbf{G}_{\parallel}^2 \phi(\mathbf{G}_{\parallel}, z) - \frac{d\epsilon(z)}{dz} \frac{\partial \phi(\mathbf{G}_{\parallel}, z)}{\partial z} - \epsilon(z) \frac{\partial^2 \phi(\mathbf{G}_{\parallel}, z)}{\partial z^2} \right] e^{i\mathbf{G}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}} \quad (86)$$

$$\frac{\rho(\mathbf{G}_{\parallel}, z)}{\epsilon_0} = \epsilon(z) \mathbf{G}_{\parallel}^2 \phi(\mathbf{G}_{\parallel}, z) - \frac{d\epsilon(z)}{dz} \frac{\partial \phi(\mathbf{G}_{\parallel}, z)}{\partial z} - \epsilon(z) \frac{\partial^2 \phi(\mathbf{G}_{\parallel}, z)}{\partial z^2} \quad (87)$$

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i z_i e n_i(\mathbf{r}) + \sum_{\mathbf{R}_{\parallel}, I} e z_I \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\parallel} - \mathbf{r}_I) + \sigma_M \delta(z) \quad (88)$$

$$D_z^+ - D_z^- = \sigma_{12} \quad (89)$$

$$\epsilon_0 \epsilon_2 E_z^+ - \epsilon_0 \epsilon_1 E_z^- = \sigma_{12} \quad (90)$$

$$-\epsilon_0 \epsilon_2 \frac{\partial \phi(z^+)}{\partial z} + \epsilon_0 \epsilon_1 \frac{\partial \phi(z^-)}{\partial z} = \sigma_{12} \quad (91)$$

7 FFT (高速フーリエ・コサイン・サイン変換) の概略と設計法: 大浦 拓哉 (現: 京大数理解析研) modified with Numerical Redcipe by MY

FFT とは離散フーリエ変換に関連する変換を高速に実行する一連の 計算方法のことです. ここでは, FFT の考え方とその設計方法について 具体的なプログラムを用いて示します. これは, FFT のライブラリを作成したときのメモがもとになっています. 専門的な説明は極力避けたので, エレガントでない説明になっているかもしれませんが, 基礎知識として, 複素数の演算規則とフーリエ変換が何かということさえ知っていれば理解できると思います.

7.1 離散 Fourier 変換

通常 FFT は, 離散 Fourier 変換を高速に行う技法です. この 離散 Fourier 変換は通常の Fourier 変換とは異なり, 少し癖のある 変換です. FFT を安全に利用するためにはまず, 離散 Fourier 変換の 性質を知っていなければなりません.

7.1.1 DFT と通常の Fourier 変換

DFT を実際に応用するときには注意しなければいけないことがあります. それは, DFT と普通の Fourier 変換とは似た性質はあるが, 異なるものであるということです. 違いの一つは, DFT は離散的だということです. 連続な関数の Fourier 変換を離散的な DFT で近似するとき, 離散化誤差が発生します. 一般に, m 階微分が有限な関数を離散化すると, 単位区間の データ数 N に対して, DFT の離散化誤差は, ほぼ N^{-m-1} に比例した 大きさになります. また, 離散化する関数が無限階微分可能で, ある条件を満たすならば, 離散化誤差はデータ数 N に対して e^{-CN} となり, N を少し大きくすると指数関数的に急激に減少します. さらに, 離散化する 関数が整関数で, その Fourier 変換の周波数成分が f_{\max} 以上を含まないならば, 単位区間のデータ数 N を $2f_{\max}$ 以上にすれば, 離散化誤差は 完全にゼロになります (いわゆる 標本化定理). 要するに, 関数が十分滑らかであれば, 標本数を多くすれば離散化誤差は十分小さくなるということです. もし, 関数が滑らかでなく不連続な場合は, いくら N を大きくしてもほとんど近似はよくなりず, 普通の Fourier 変換と DFT とはまったく 別物になってしまいます.

DFT と Fourier 変換とのもう一つの違いは, 通常の Fourier 変換は 無限区間の積分なのに対して DFT は有限区間だということです. 通常の Fourier 変換を DFT で置き換える場合, 積分を有限で打ち切らなければならず, 当然誤差 (打ち切り誤差) が発生します. さらに, DFT は離散的な関数の Fourier 級数展開に相当するので, DFT される関数は 単なる長さ N の関数ではなく, 周期的に拡張された関数とみなされます. DFT を使って周波数解析を行う場合, 長さ N のデータは, この N 周期で無限に続くデータに改ざんされてしまいます. この周期的に拡張された関数は一般に, つなぎ目で不連続となるため, DFT には 大きな離散化誤差が発生します. この問題は, 窓関数を掛けたりするなどの データを滑らかな周期関数にする操作で大幅に改善できます. また, 打ち切り誤差は, 変換する関数が減少関数ならば, 区間の長さを十分に 大きくとることで小さくできます. もし, 関数の性質がわかっているならば, DFT を保存するような線形の加速法が使える場合もあります.

離散化の簡単な具体例を次に示します. 通常の Fourier 変換²

$$H(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dh(t)e^{-i\omega t} \quad (92)$$

$$= H(f) = \int_{-\infty}^{\infty} dh(t)e^{-i2\pi ft}, \quad \omega = 2\pi f \quad (93)$$

$$h(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega H(\omega)e^{i\omega t} \quad (94)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} df H(f)e^{i2\pi ft} \quad (95)$$

²よく使われる通常の変換は,

$$f(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int \int d\mathbf{r} dt f(\mathbf{r}, t) e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}$$

$$f(\mathbf{r}, t) = \int \int d\mathbf{k} d\omega f(\mathbf{k}, \omega) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}$$

である. $(1/2\pi)$ の因子が変換か逆変換のどちらにつくかということや $e^{i\cdot}$ または $e^{-i\cdot}$ の符号は任意である.

$$H(f) \simeq \int_{-T/2}^{T/2} dt h(t) e^{-i2\pi ft} = \sum \Delta_t h(t) e^{-i2\pi ft} \quad (96)$$

$$= \Delta_t \sum_{j=0}^{N-1} h(-T/2 + j\Delta_t) e^{-i2\pi f(-T/2 + j\Delta_t)} \quad (97)$$

$$= \Delta_t \sum_{j=0}^{N-1} h(j\Delta_t) e^{-i2\pi f j\Delta_t} \quad [t \rightarrow t + T/2] \quad (98)$$

$$\Delta_t = \frac{T}{N}, \quad t(j) = j\Delta_t, \quad (j = 0, 1, 2, 3, \dots, N-2, N-1) \quad (99)$$

$$f_{\min} = \frac{1}{T} = \Delta_f, \quad (f = 0, \Delta_f, 2\Delta_f, 3\Delta_f, \dots, f_{\max}) \quad (100)$$

$$f_{\max} = \frac{1}{2\Delta_t} = \frac{N}{2T}, \quad \text{Nyquist critical frequency. See Fig.2 below.} \quad (101)$$

$$f_{\max}/f_{\min} = \frac{N}{2T} T = \frac{N}{2} \quad (102)$$

$$f(k) = k\Delta_f = k\frac{1}{T}, \quad (k = -\frac{N}{2}, -\frac{N}{2} + 1, \dots, \frac{N}{2} - 2, \frac{N}{2} - 1) \quad (103)$$

$$(N = \text{even is assumed.}) \quad (104)$$

$$H(f(k)) = \Delta_t \sum_{j=0}^{N-1} h(j\Delta_t) e^{-i2\pi j k \Delta_t \Delta_f} = \Delta_t \sum_{j=0}^{N-1} h(j\Delta_t) e^{(-i2\pi/N)jk} \quad (105)$$

$$= \Delta_t H_k \quad (106)$$

$$H_k \equiv \sum_{j=0}^{N-1} h_j e^{(-i2\pi/N)jk} = \sum_{j=0}^{N-1} h_j (W_N)^{jk}, \quad W_N \equiv e^{-i2\pi/N} \quad (107)$$

$$H_{-k} = H_{-k+N}, \quad (W_N)^{-k+N} = (W_N)^{-k} \underbrace{(W_N)^N}_{=1} = (W_N)^{-k} \quad (108)$$

$$H_{k+N} = H_k, \quad (W_N)^{k+N} = (W_N)^k \underbrace{(W_N)^N}_{=1} = (W_N)^k \quad (109)$$

$$h(t(j)) = \Delta_f \sum_{k=0}^{N-1} H(f(k)) e^{2\pi i f(k)t(j)} \quad (110)$$

$$= \Delta_f \sum_{k=0}^{N-1} \Delta_t H_k e^{2\pi i k j \Delta_f \Delta_t} \quad (111)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} H_k e^{(2\pi i/N)kj} = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} H_k (W_N)^{-kj} \quad (112)$$

$$h_{j+N} = h_j, \quad h_{-j} = h_{-j+N} \quad (113)$$

DFT では短時間のデータで細かい周波数の分解能を出すのは不可能で、時間幅か周波数の分解能のどちらかを犠牲にしなければいけないということです。

7.1.2 DFT の定義

離散 Fourier 変換 - Discrete Fourier Transform は、通常の Fourier 変換の無限区間積分を有限の和で書き換えたもので、時間領域、周波数領域ともに離散化された Fourier 変換のことです。因みに、Fourier 級数展開は、周波数領域でのみ離散化された変換に相当します。

ここでは以後、時間領域の離散データ $(a_0, a_1, \dots, a_{N-1})$ から周波数領域への離散データ $(A_0, A_1, A_2, \dots, A_{N-1})$ への長さ N の DFT を

$$A_k = \sum_{j=0}^{N-1} a_j (W_N)^{jk}, \quad W_N = e^{-2\pi i/N} \quad (114)$$

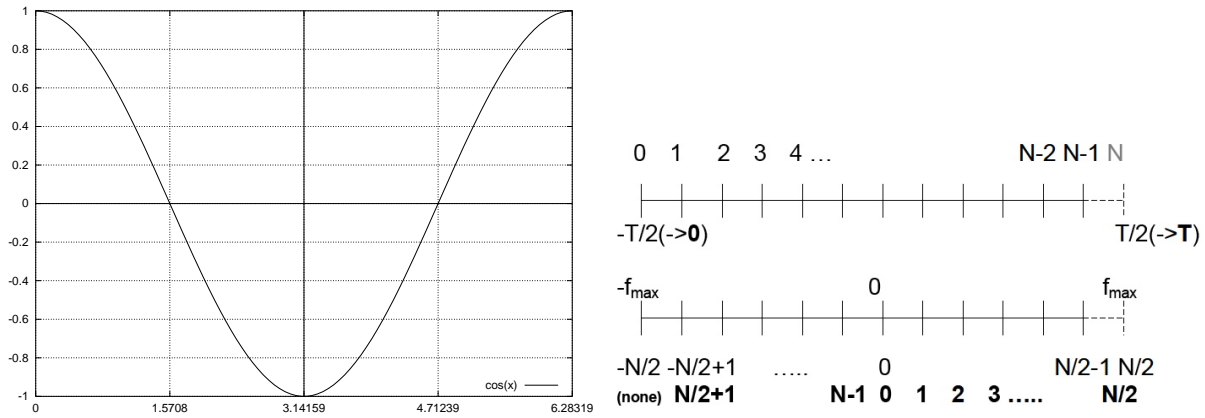


Figure 8: (left) Critical sampling of a cosine wave is two sample points per cycle. (peak to peak). Nyquist critical wavelength is $2\Delta t$. (right) DFT mesh

で定義します. この変換の逆変換は

$$a_k = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} A_j (W_N)^{-jk} \quad (115)$$

となります.

DFT の定義は, 書物によって異なるので注意してください. 少し調べた限りでは, 規格化定数 ($1/N, \sqrt{1/N}$) の付け方と, 指数関数の符号のとり方は, 考えられるすべての組合せがありました. FFT の使用での多くのトラブルはこのことに起因しているようです.

一般に, DFT では, 負の周波数データ A_{-k} や, 添字が N より大きい データは除外されます. なぜならば, $W_N^N = 1$ という周期性から, 負の周波数データ A_{-k} は A_{N-k} に一致し, A_{N+k} は A_k に一致するので, 連続な N 個のデータさえあれば, あとは周期的に拡張できるからです. そのことから, 負の引数のデータを扱う場合に, DFT の定義として, データの添字を 0 から $N-1$ ではなく, $-N/2$ から $N/2-1$ までとすることがよくあります. この場合, データを適当に並べ替える (あるいは符号を付け変える) ことが必要になります.

また, 対称性をよくするために, DFT を次のように拡張することがあります.

$$A_k = \sum_{j=1}^{N-1} a_j W_N^{(j+\delta_1)(k+\delta_2)}, \quad W_N = e^{-2\pi i/N} \quad (116)$$

定数 δ_1, δ_2 は, 片方を $1/2$ にすることが多く, これは, Odd DFT と いわれるものです. この拡張 DFT は, 通常の DFT の変換前と変換後の データに適切な係数を掛けたものにすぎないのですが, 実対称なデータなどの変換 (離散コサイン変換など) では, データの対称性がよくなり, FFT アルゴリズムが直接適用できるようになります.

7.1.3 DFT の性質

ここでの離散 Fourier 変換は, 複素数データから複素数データへの変換です. しかし, 実際の応用では, 実数のデータがほとんどです. そこで, 実離散 Fourier 変換/逆変換の性質を少しだけ考えてみます. もし, a_j が実数ならば, A_k は複素共役対称は,

$$A_k^* = \sum_{j=1}^{N-1} a_j^* (e^{2\pi i/N})^{jk} \quad (117)$$

$$= \sum_{j=1}^{N-1} a_j (e^{-2\pi i/N})^{j(-k)} \quad (118)$$

$$= A_{-k} = A_{N-k} \quad (119)$$

となることが簡単にわかると思います。とくに、 $A_0, A_{N/2}$ は実数になります。この変換後のデータは半分が冗長になります。逆に、 a_j が複素共役対称ならば、 A_k は実数となります。さらに、 a_j が実対称 ($a_j = a_{N-j}$) ならば、 A_k も実対称となり、 a_j が実反対称 ($a_j = -a_{N-j}$) ならば、 A_k は純虚数で反対称となります。これらは、タイプ1の離散コサイン変換、離散サイン変換といわれるものです。

これらの DFT の対称性は、通常の Fourier 変換での対称性と全く同じです。

DFT に関連する重要な演算に、畳み込み (Digital Convolution) があります。ここでは、離散データ a_j と h_j の長さ N の巡回畳み込みを

$$y_k = \sum_{j=0}^{N-1} a_j h_{k-j} \quad (120)$$

により定義します。直観的には、 a_j は信号で h_j はフィルタの係数に相当し、 y_j はフィルタされた信号に相当します。ここでの畳み込みは巡回で、 a_j と h_j は長さ NN で周期的に拡張されています。通常の Fourier 変換の性質と同様に、巡回畳み込みは DFT を行うと単なる積に変換されます。すなわち、 y_j の DFT されたデータ Y_k は a_j, h_j の DFT されたデータ A_k, H_k を用いて

$$Y_k = A_k H_k \quad (121)$$

と表されます。したがって、巡回畳み込みは、 Y_k を逆 DFT すれば計算できることになり、FFT による高速算法が利用できます。この方法は、巡回畳み込みを計算する最も強力な方法として知られています。しかし、比較的短い長さの巡回畳み込みの計算には、一次元畳み込みをより短い長さの多次元畳み込みに変換する直接算法が適している場合があります。この方法は、後に示す Prime Factor 型 FFT の添字の変換で実現できます。

8 Cooley-Tukey 型 FFT

FFT が一般に知られるようになったのは、1965 年の J.W.Cooley と J.W.Tukey による 3 ページほどの短い論文からです。それ以前にも、一部の人は FFT の算法について気づいていたようですが、広く知られることはありませんでした。FFT があまり知られていなかったころは、長さ N の離散 Fourier 変換を計算するためには N^2 回の計算が必要であると信じられていました。しかし、FFT を用いると $N \log(N)$ に比例する計算で済みます。この違いは具体的には、一秒間に 10^9 回の演算ができるコンピュータで $N = 2^{30}$ の離散 Fourier 変換を実行した場合に、30 年と 3 分の違いになります。この FFT の基本原理はコロンブスの卵的な発想で、一言でいえば大きな問題を計算が楽な小さな問題に分解するというものです。この分解の方法はいくつかあり、ここでは Cooley と Tukey の示した分解による FFT を紹介します。

8.1 基本的な考え方

まず、長さ N の DFT

$$A_k = \sum_{j=0}^{N-1} a_j (W_N)^{jk}, \quad W_N = e^{-2\pi i/N} \quad (122)$$

を素直に計算する場合を考えます。この場合 A_0 から A_{N-1} までの各項の計算に N 回の乗算が必要なため、全体で N^2 回の乗算が必要になります。しかし、少し考えてみてください。もし、 N が 2 で割り切れるならば、添字 k を偶数と奇数とに分けることで、長さ N の DFT は、次の二つの、長さ $N/2$ の DFT

$$A_{2k} = \sum_{j=0}^{N/2-1} (a_j + a_{N/2+j}) (W_{N/2})^{jk} \quad (123)$$

$$A_{2k+1} = \sum_{j=0}^{N/2-1} [(a_j - a_{N/2+j}) (W_N)^j] (W_{N/2})^{jk} \quad (124)$$

$$(125)$$

に分解できることがわかると思います。長さ $N/2$ の DFT は、素直に計算すると $N^2/4$ 回の乗算で実行できるので、この分解により、計算量は約半分に減ります。さらに、この分解を 2 回、3 回、... と繰

り返せば、計算量は約 $1/4, 1/8, \dots$ と激減します。これが Cooley-Tukey 型の FFT (正確には、基数 2, 周波数間引き Cooley-Tukey 型 FFT) の基本的な考え方です。

$N = 8$ の場合を行列 (N 行 1 列 =) で考えてみよう。 $W_8 = e^{-i\pi/4} = U$ とおこう。

$$A_k = \sum_{j=0}^{N-1} (W_N)^{kj} a_j, \quad W_N = e^{-2\pi i/N}$$

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \\ A_5 \\ A_6 \\ A_7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} W_8^{0,0} & W_8^{0,1} & W_8^{0,2} & W_8^{0,3} & W_8^{0,4} & W_8^{0,5} & W_8^{0,6} & W_8^{0,7} \\ W_8^{1,0} & W_8^{1,1} & W_8^{1,2} & W_8^{1,3} & W_8^{1,4} & W_8^{1,5} & W_8^{1,6} & W_8^{1,7} \\ W_8^{2,0} & W_8^{2,1} & W_8^{2,2} & W_8^{2,3} & W_8^{2,4} & W_8^{2,5} & W_8^{2,6} & W_8^{2,7} \\ W_8^{3,0} & W_8^{3,1} & W_8^{3,2} & W_8^{3,3} & W_8^{3,4} & W_8^{3,5} & W_8^{3,6} & W_8^{3,7} \\ W_8^{4,0} & W_8^{4,1} & W_8^{4,2} & W_8^{4,3} & W_8^{4,4} & W_8^{4,5} & W_8^{4,6} & W_8^{4,7} \\ W_8^{5,0} & W_8^{5,1} & W_8^{5,2} & W_8^{5,3} & W_8^{5,4} & W_8^{5,5} & W_8^{5,6} & W_8^{5,7} \\ W_8^{6,0} & W_8^{6,1} & W_8^{6,2} & W_8^{6,3} & W_8^{6,4} & W_8^{6,5} & W_8^{6,6} & W_8^{6,7} \\ W_8^{7,0} & W_8^{7,1} & W_8^{7,2} & W_8^{7,3} & W_8^{7,4} & W_8^{7,5} & W_8^{7,6} & W_8^{7,7} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \\ a_5 \\ a_6 \\ a_7 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} U^0 & U^0 & U^0 & U^0 & U^0 & U^0 & U^0 & U^0 \\ U^0 & U^1 & U^2 & U^3 & U^4 & U^5 & U^6 & U^7 \\ U^0 & U^2 & U^4 & U^6 & U^8 & U^{10} & U^{12} & U^{14} \\ U^0 & U^3 & U^6 & U^9 & U^{12} & U^{15} & U^{18} & U^{21} \\ U^0 & U^4 & U^8 & U^{12} & U^{16} & U^{20} & U^{24} & U^{28} \\ U^0 & U^5 & U^{10} & U^{15} & U^{20} & U^{25} & U^{30} & U^{35} \\ U^0 & U^6 & U^{12} & U^{18} & U^{24} & U^{30} & U^{36} & U^{42} \\ U^0 & U^7 & U^{14} & U^{21} & U^{28} & U^{35} & U^{42} & U^{49} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \\ a_5 \\ a_6 \\ a_7 \end{pmatrix}$$

$$(W_N)^j = (W_N)^{j-N} = (W_N)^{j-2N} \dots$$

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \\ A_5 \\ A_6 \\ A_7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^0 & U^0 & U^0 & U^0 & U^0 & U^0 & U^0 & U^0 \\ U^0 & U^1 & U^2 & U^3 & U^4 & U^5 & U^6 & U^7 \\ U^0 & U^2 & U^4 & U^6 & U^0 & U^2 & U^4 & U^6 \\ U^0 & U^3 & U^6 & U^1 & U^4 & U^7 & U^2 & U^5 \\ U^0 & U^4 & U^0 & U^4 & U^0 & U^4 & U^0 & U^4 \\ U^0 & U^5 & U^2 & U^7 & U^4 & U^1 & U^6 & U^3 \\ U^0 & U^6 & U^4 & U^2 & U^0 & U^6 & U^4 & U^2 \\ U^0 & U^7 & U^6 & U^5 & U^4 & U^3 & U^2 & U^1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \\ a_5 \\ a_6 \\ a_7 \end{pmatrix}$$

行列の積の演算回数は、 $8 \times 8 (= N \times N)$ である。偶数と奇数にわけて書くと、偶数の場合

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ A_2 \\ A_4 \\ A_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^0 & U^0 & U^0 & U^0 & U^0 & U^0 & U^0 & U^0 \\ U^0 & U^2 & U^4 & U^6 & U^0 & U^2 & U^4 & U^6 \\ U^0 & U^4 & U^0 & U^4 & U^0 & U^4 & U^0 & U^4 \\ U^0 & U^6 & U^4 & U^2 & U^0 & U^6 & U^4 & U^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \\ a_5 \\ a_6 \\ a_7 \end{pmatrix}$$

行列 U の 1 列と 5 列, 2 列と 6 列, 3 列と 7 列, 4 列と 8 列は同じなのでまとめて

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ A_2 \\ A_4 \\ A_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^0 & U^0 & U^0 & U^0 \\ U^0 & U^2 & U^4 & U^6 \\ U^0 & U^4 & U^0 & U^4 \\ U^0 & U^6 & U^4 & U^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 + a_4 \\ a_1 + a_5 \\ a_2 + a_6 \\ a_3 + a_7 \end{pmatrix}$$

$U^2 = V (= W_4)$ とすれば

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ A_2 \\ A_4 \\ A_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V^0 & V^0 & V^0 & V^0 \\ V^0 & V^1 & V^2 & V^3 \\ V^0 & V^2 & V^0 & V^2 \\ V^0 & V^3 & V^2 & V^1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 + a_4 \\ a_1 + a_5 \\ a_2 + a_6 \\ a_3 + a_7 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ A_2 \\ A_4 \\ A_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} W_4^{0,0} & W_4^{0,1} & W_4^{0,2} & W_4^{0,3} \\ W_4^{1,0} & W_4^{1,1} & W_4^{1,2} & W_4^{1,3} \\ W_4^{2,0} & W_4^{2,1} & W_4^{2,2} & W_4^{2,3} \\ W_4^{3,0} & W_4^{3,1} & W_4^{3,2} & W_4^{3,3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 + a_4 \\ a_1 + a_5 \\ a_2 + a_6 \\ a_3 + a_7 \end{pmatrix}$$

$$A_{2k} = \sum_{j=0}^{N/2-1} (W_{N/2})^{kj} (a_j + a_{N/2+j}) \quad (126)$$

となる。奇数の場合,

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ A_3 \\ A_5 \\ A_7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^0 & U^1 & U^2 & U^3 & U^4 & U^5 & U^6 & U^7 \\ U^0 & U^3 & U^6 & U^1 & U^4 & U^7 & U^2 & U^5 \\ U^0 & U^5 & U^2 & U^7 & U^4 & U^1 & U^6 & U^3 \\ U^0 & U^7 & U^6 & U^5 & U^4 & U^3 & U^2 & U^1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \\ a_5 \\ a_6 \\ a_7 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} U^0 & U^0 & U^0 & U^0 & U^4 & U^4 & U^4 & U^4 \\ U^0 & U^2 & U^4 & U^6 & U^4 & U^6 & U^0 & U^2 \\ U^0 & U^4 & U^0 & U^4 & U^4 & U^0 & U^4 & U^0 \\ U^0 & U^6 & U^4 & U^2 & U^4 & U^2 & U^0 & U^6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U^0 a_0 \\ U^1 a_1 \\ U^2 a_2 \\ U^3 a_3 \\ U^0 a_4 \\ U^1 a_5 \\ U^2 a_6 \\ U^3 a_7 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} U^0 & U^0 & U^0 & U^0 & -U^0 & -U^0 & -U^0 & -U^0 \\ U^0 & U^2 & U^4 & U^6 & -U^0 & -U^2 & -U^4 & -U^6 \\ U^0 & U^4 & U^0 & U^4 & -U^0 & -U^4 & -U^0 & -U^4 \\ U^0 & U^6 & U^4 & U^2 & -U^0 & -U^6 & -U^4 & -U^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U^0 a_0 \\ U^1 a_1 \\ U^2 a_2 \\ U^3 a_3 \\ U^0 a_4 \\ U^1 a_5 \\ U^2 a_6 \\ U^3 a_7 \end{pmatrix}$$

最後の式で $U_0 = -U_4, U_6 = -U_2$ を使った。行列の 1 列と 5 列, 2 列と 6 列, 3 列と 7 列, 4 列と 8 列は符号は違うが同じなのでまとめて

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ A_3 \\ A_5 \\ A_7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^0 & U^0 & U^0 & U^0 \\ U^0 & U^2 & U^4 & U^6 \\ U^0 & U^4 & U^0 & U^4 \\ U^0 & U^6 & U^4 & U^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U^0(a_0 - a_4) \\ U^1(a_1 - a_5) \\ U^2(a_2 - a_6) \\ U^3(a_3 - a_7) \end{pmatrix}$$

行列 U は偶数の場合と同じであるので,

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ A_3 \\ A_5 \\ A_7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} W_4^{0,0} & W_4^{0,1} & W_4^{0,2} & W_4^{0,3} \\ W_4^{1,0} & W_4^{1,1} & W_4^{1,2} & W_4^{1,3} \\ W_4^{2,0} & W_4^{2,1} & W_4^{2,2} & W_4^{2,3} \\ W_4^{3,0} & W_4^{3,1} & W_4^{3,2} & W_4^{3,3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} W_8^0(a_0 - a_4) \\ W_8^1(a_1 - a_5) \\ W_8^2(a_2 - a_6) \\ W_8^3(a_3 - a_7) \end{pmatrix}$$

$$A_{2k+1} = \sum_{j=0}^{N/2-1} (W_{N/2})^{kj} [(W_N)^j (a_j - a_{N/2+j})]$$

8.2 2D FFT: example

周期的に並んだガウス関数を2次元FFTする例を示す。

$$f(x, y) = \sum_I A_I \exp[-\{(x - x_I)^2 + (y - y_I)^2\}/\sigma] \quad (127)$$

$$A_I = 255, \quad \sigma = 5, \quad L_x = L_y = 512 \quad (128)$$

ガウス関数のフーリエ変換はガウス関数になるが (Eq.134-Eq.135), 実空間での広がり σ が小さければ波数空間でのガウス関数は広がる。波数空間では, 周期的な構造のフーリエ変換にガウス関数の減衰が重なったフーリエ変換構造になる。

$$f(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} f(\mathbf{r}) \quad (129)$$

$$f(\mathbf{r}) = \sum_I A_I \exp\left[-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{R}_I)^2}{\sigma}\right] \quad (130)$$

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \sum_I A_I \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \exp\left[-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{R}_I)^2}{\sigma}\right] = \frac{1}{(2\pi)^2} \sum_I A_I e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_I} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r} - \mathbf{R}_I)} \exp\left[-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{R}_I)^2}{\sigma}\right] \\ &= \frac{\pi\sigma}{(2\pi)^2} e^{-\sigma\mathbf{k}^2/4} \sum_I A_I e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_I} \\ &= \frac{\sigma}{4\pi} e^{-\sigma\mathbf{k}^2/4} S(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (131)$$

$$S(\mathbf{k}) = \sum_I A_I e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_I} \quad (\text{structure factor}) \quad (132)$$

$$|f(\mathbf{k})| = \frac{\sigma}{4\pi} e^{-\sigma\mathbf{k}^2/4} |S(\mathbf{k})| \quad (133)$$

8.2.1 Gauss 関数のフーリエ変換

$$f(x) = A \exp(-\alpha x^2), \quad \alpha > 0 \quad (134)$$

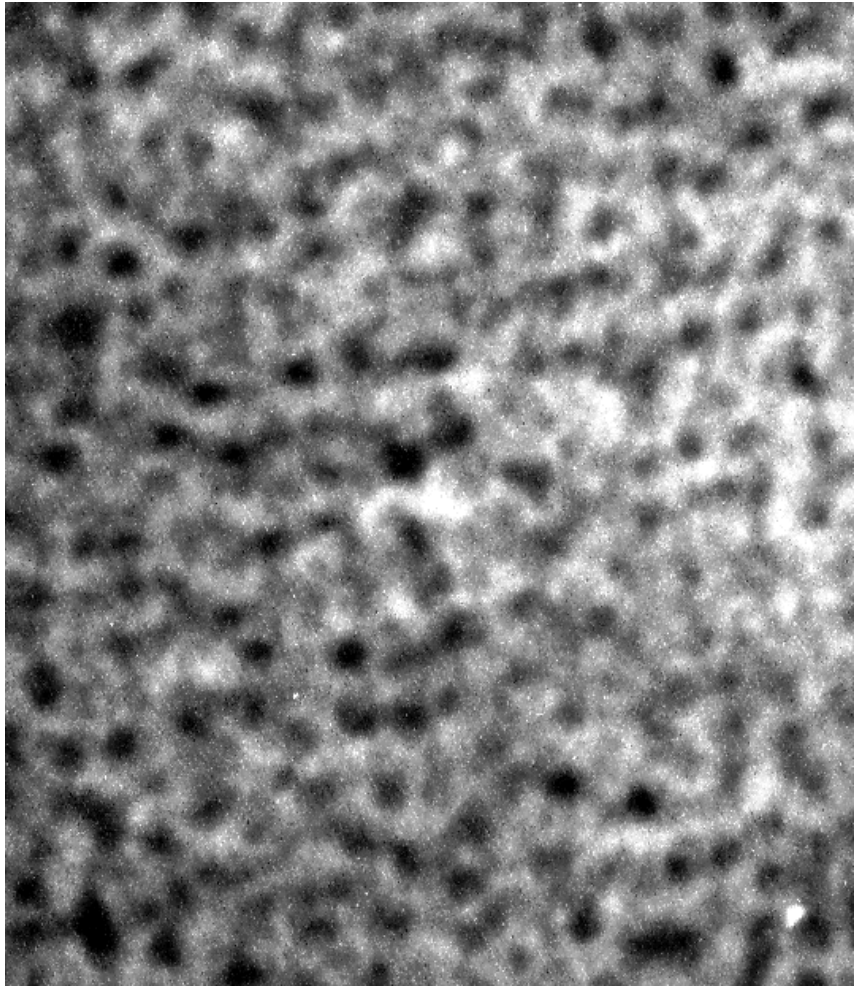
のフーリエ変換を行う。

$$\begin{aligned} f(k) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx A e^{-\alpha x^2} e^{-ikx} = \frac{A}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\alpha(x + i\frac{kx}{2\alpha})^2} e^{-\frac{k^2}{4\alpha}} \\ &= \frac{A}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{-\frac{k^2}{4\alpha}} = \frac{A}{2\sqrt{\pi\alpha}} e^{-\frac{k^2}{4\alpha}} \end{aligned} \quad (135)$$

その逆変換は,

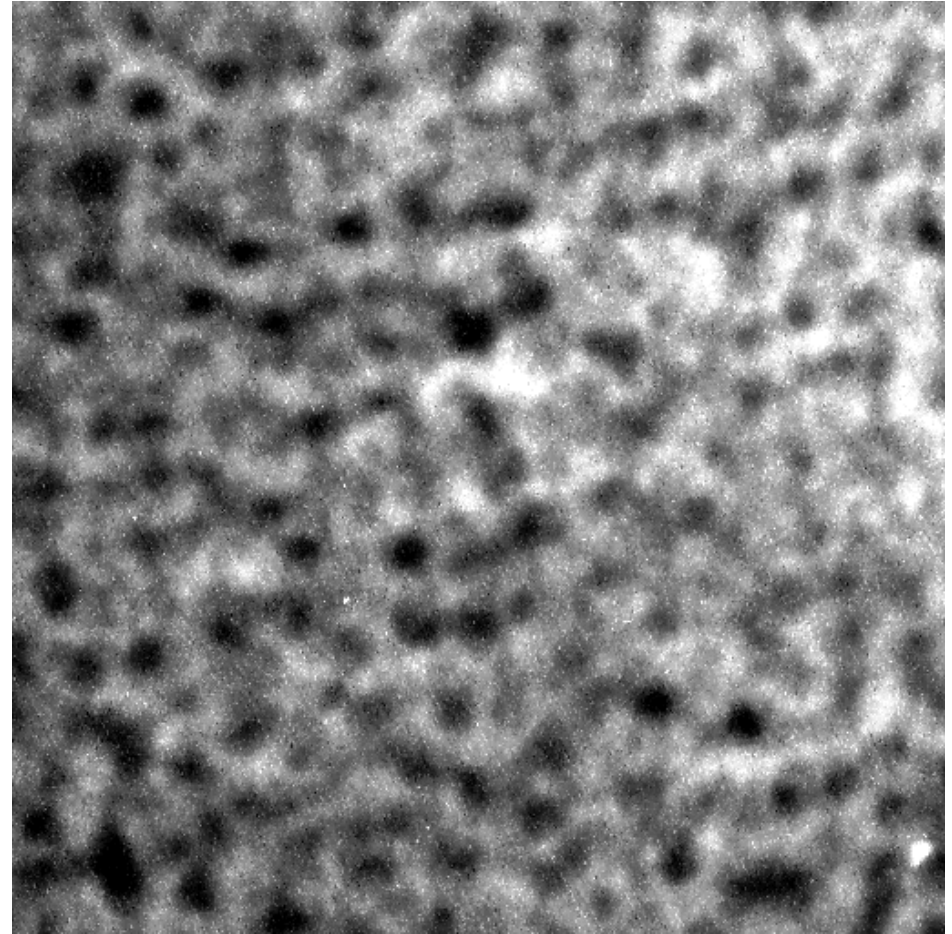
$$f(x) = \frac{A}{2\sqrt{\pi\alpha}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{-\frac{k^2}{4\alpha}} e^{ikx} = \frac{A}{2\sqrt{\pi\alpha}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{-\frac{1}{4\alpha}(k - 2i\alpha x)^2} e^{-\alpha x^2} = \frac{A}{2\sqrt{\pi\alpha}} 2\sqrt{\alpha\pi} e^{-\alpha x^2} = A e^{-\alpha x^2}$$

original写真(B-600-135min-11.bmp)
は、143nm × 164nmです。



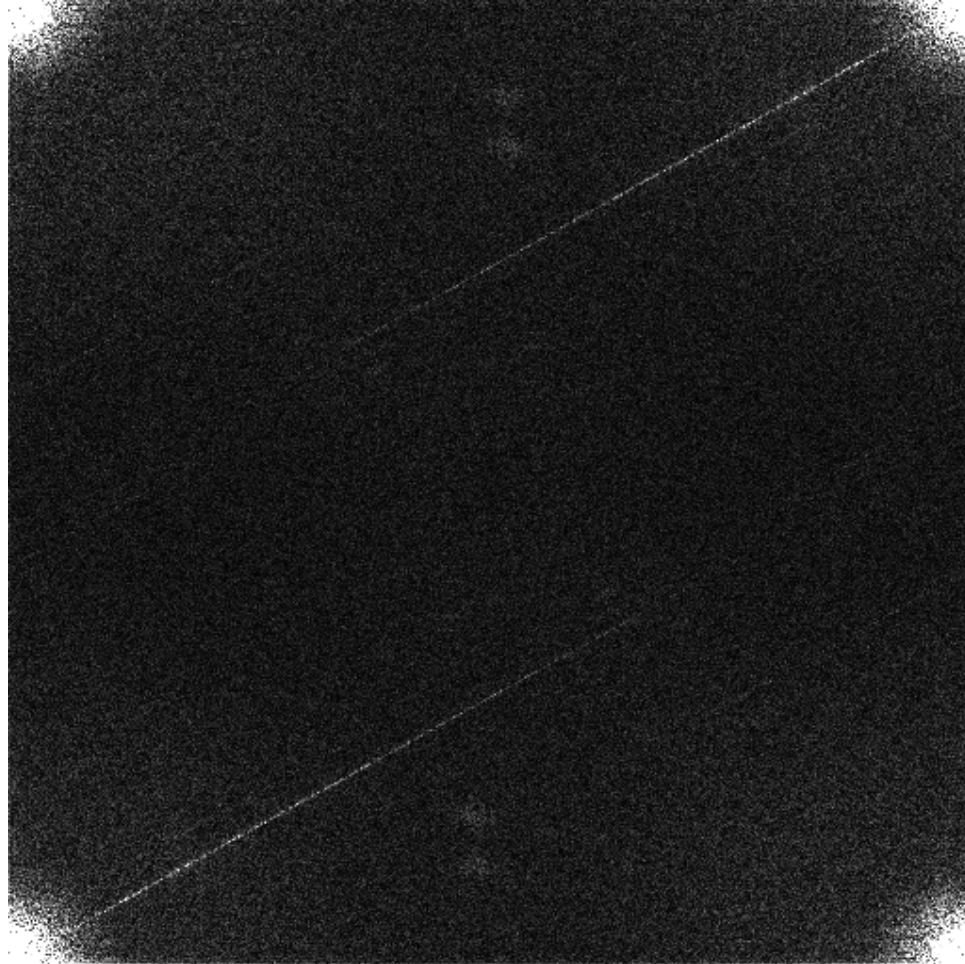
Original
B-600-135min-11.bmp
(541x621 image)

For FFT cal. $2^n \times 2^m$ size bmp
file is required.

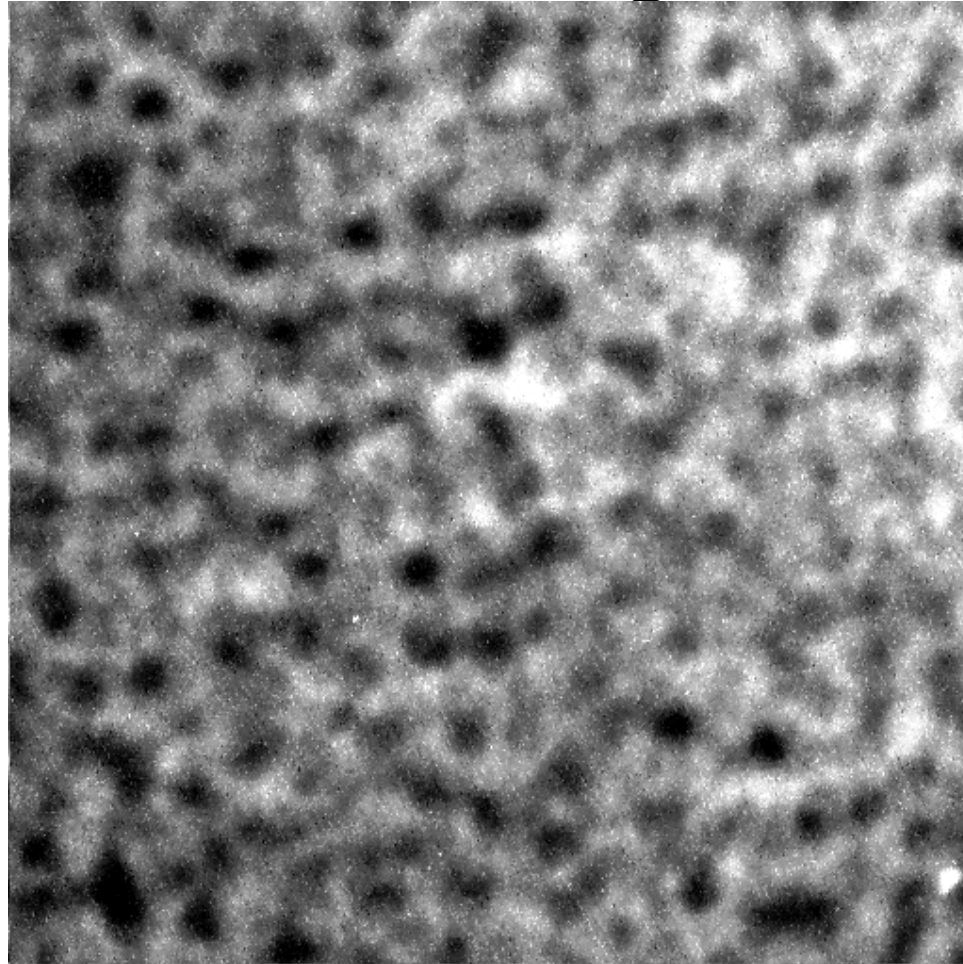


For 2D FFT calculation
B-600-135min-11_512x512.bmp
(512x512 image)

$|F(\mathbf{k})|$ FFT image
max is normalized by 1/500 of the peak value



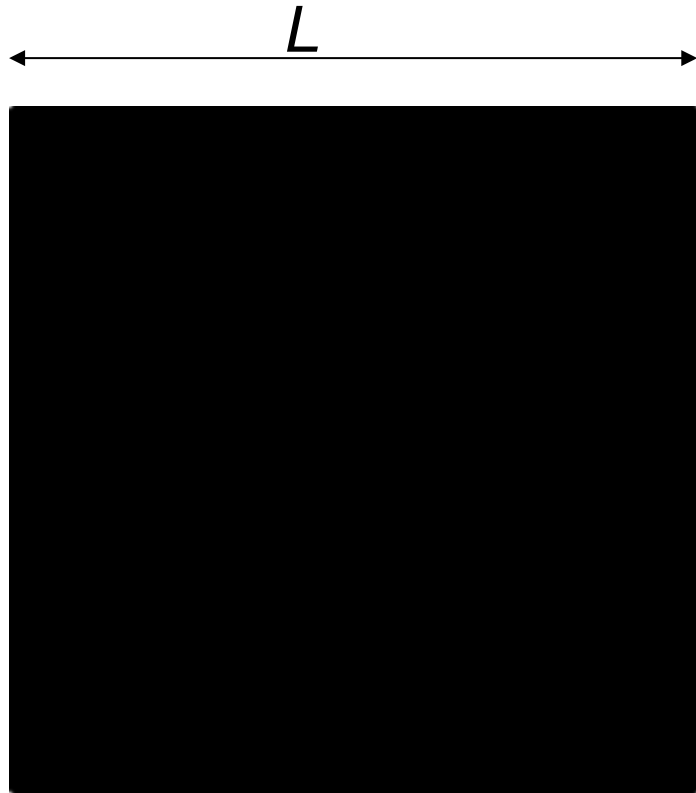
Inverse-FFT image $F(\mathbf{k}) \rightarrow f(\mathbf{r})$



Inverse FT from the FT image we can get the almost same image as original one. So our FFT calculation may be right.

Real space $f(\mathbf{r})$

Gaussian peak with $\lambda_{x,y} = L$



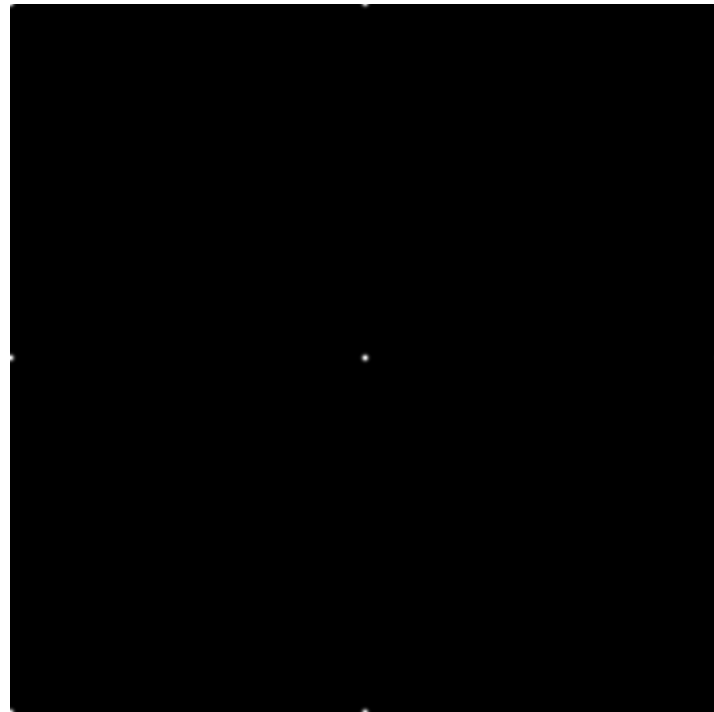
↑4隅にガウスピーク
(白)がある。 $L \times L$

$$|F(\mathbf{k})| \quad k_{x,y} = 2\pi / \lambda_{x,y} = 2\pi / L$$
$$1 \text{ pixel} = 2\pi / L$$



Real space $f(\mathbf{r})$

Gaussian peak with $\lambda_{x,y} = L/2$



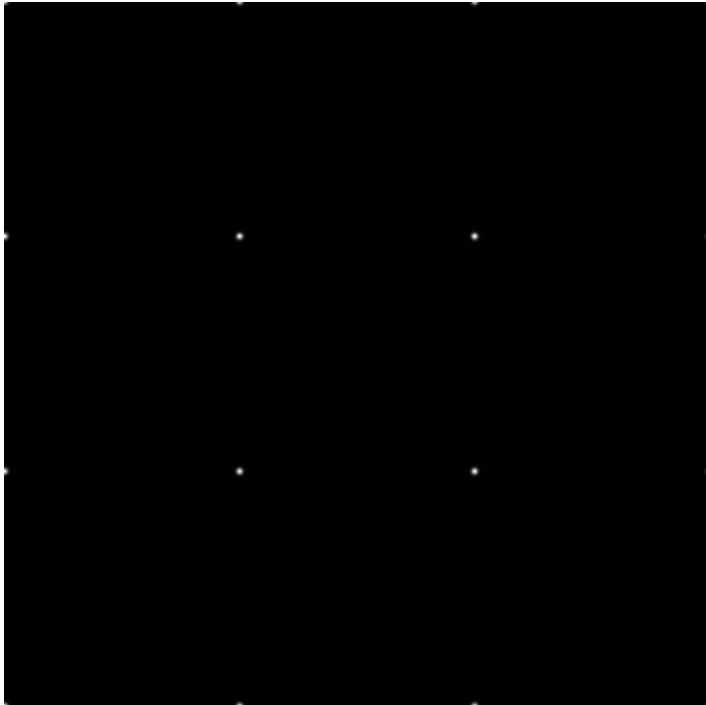
↑4隅, 辺の midpoint, 中央にガウスピーク (白)がある。 $L/2 \times L$

$$|F(\mathbf{k})| \quad k_{x,y} = 2\pi / \lambda_{x,y} = 4\pi / L$$
$$1 \text{ pixel} = 2\pi / L$$

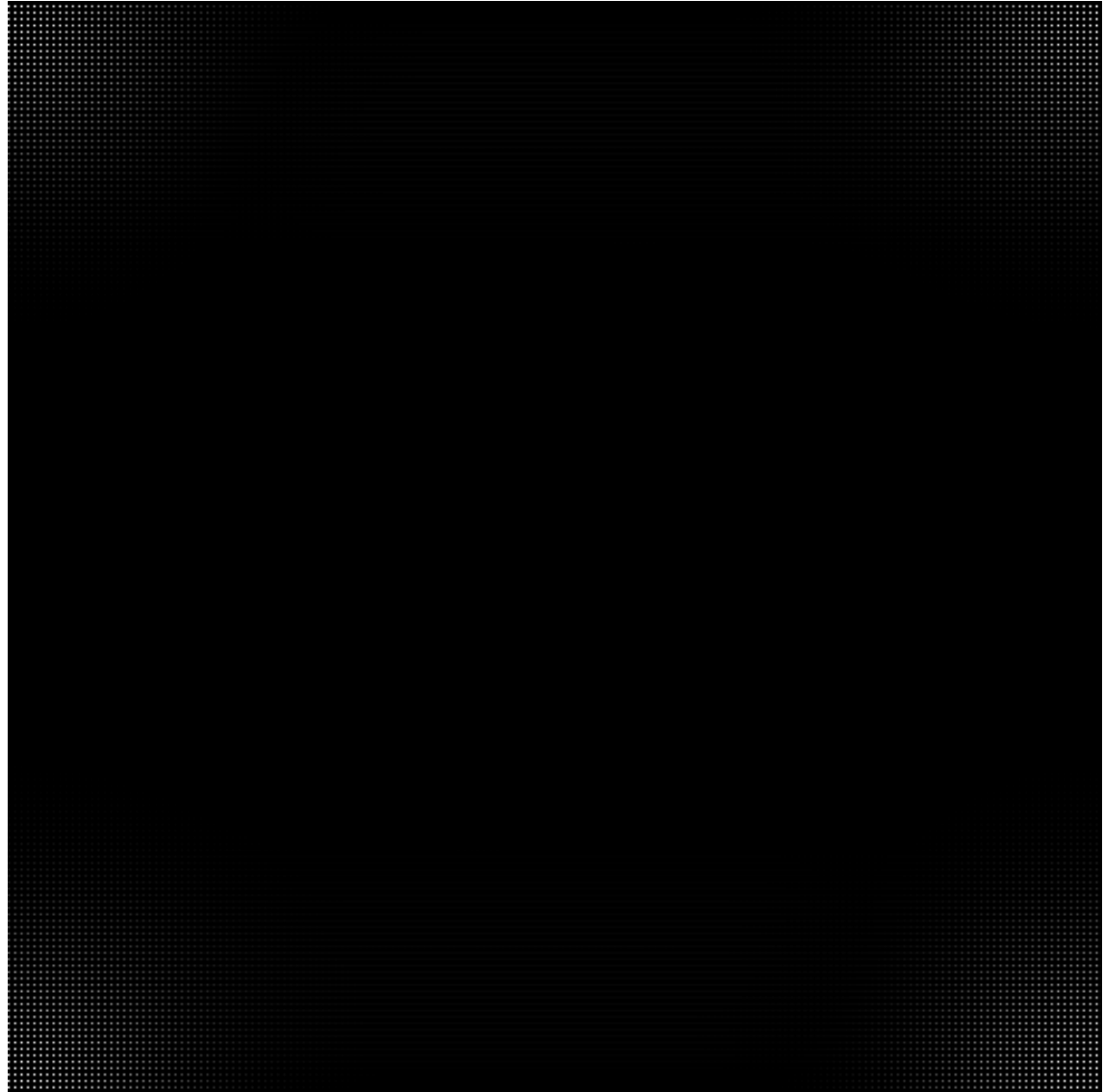


Real space $f(\mathbf{r})$

Gaussian peak with $\lambda_{x,y} = L/3$

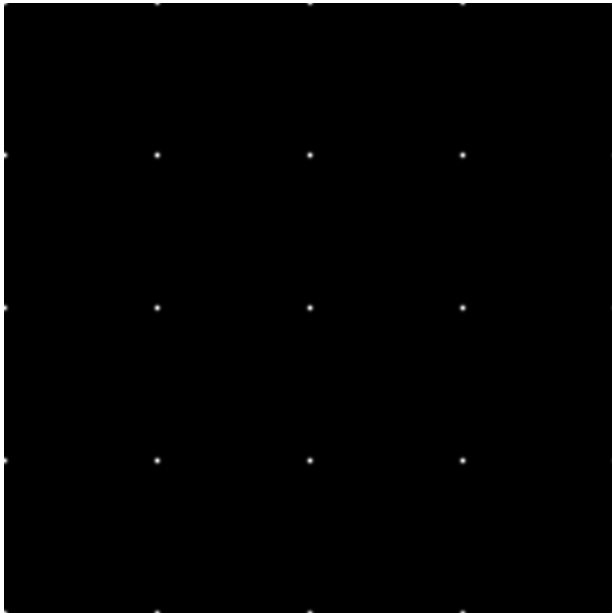


$$|F(\mathbf{k})| \quad k_{x,y} = 2\pi / \lambda_{x,y} = 6\pi / L$$
$$1 \text{ pixel} = 2\pi / L$$

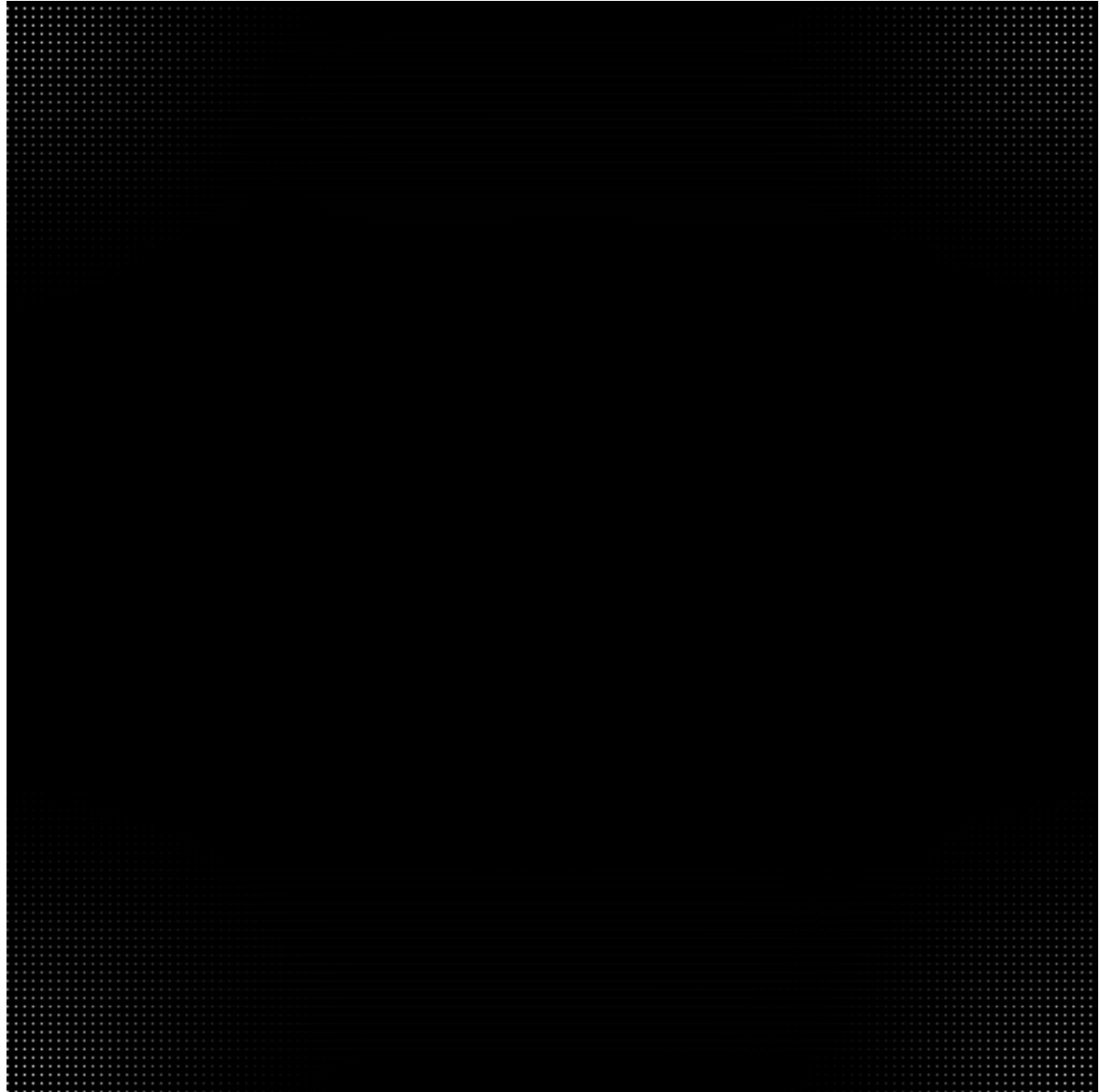


Real space $f(\mathbf{r})$

Gaussian peak with $\lambda_{x,y} = L/4$

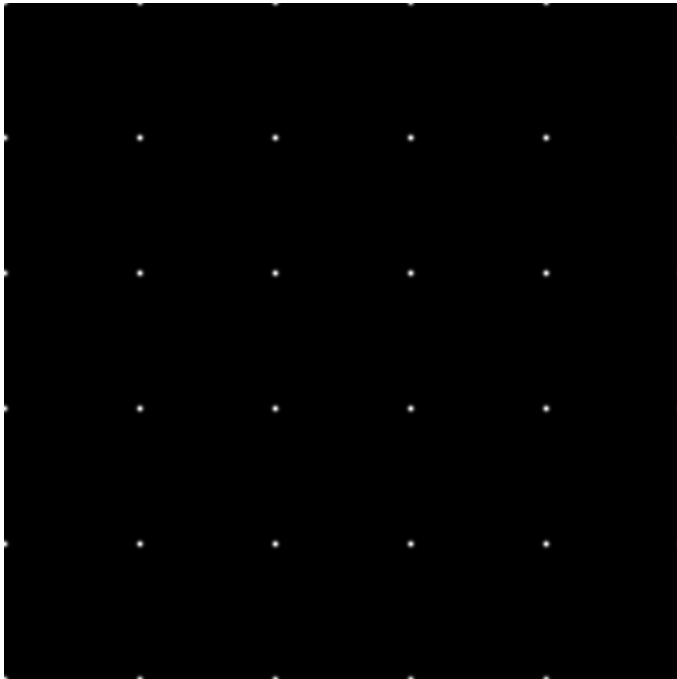


$$|F(\mathbf{k})| \quad k_{x,y} = 2\pi / \lambda_{x,y} = 8\pi / L$$
$$1 \text{ pixel} = 2\pi / L$$



Real space $f(\mathbf{r})$

Gaussian peak with $\lambda_{x,y} = L/5$

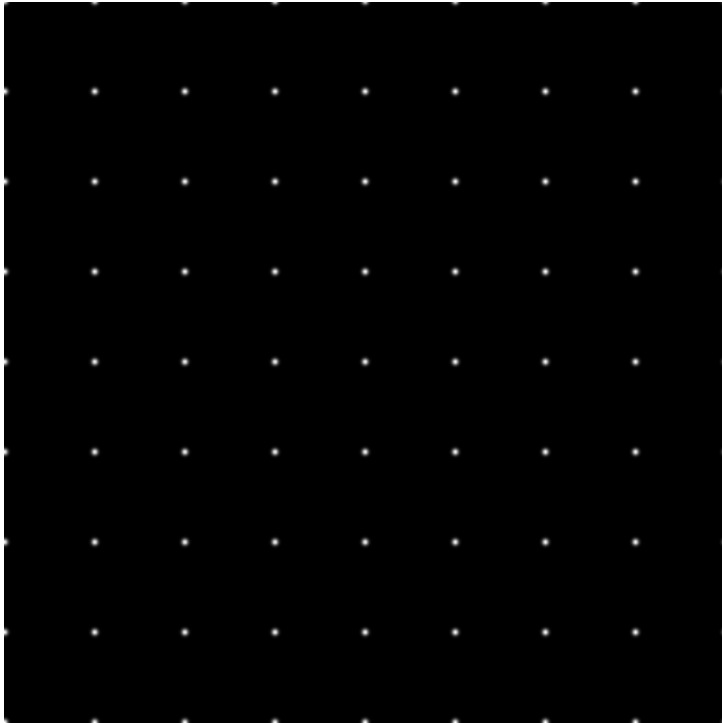


$$|F(\mathbf{k})| \quad k_{x,y} = 2\pi / \lambda_{x,y} = 10\pi / L$$
$$1 \text{ pixel} = 2\pi / L$$

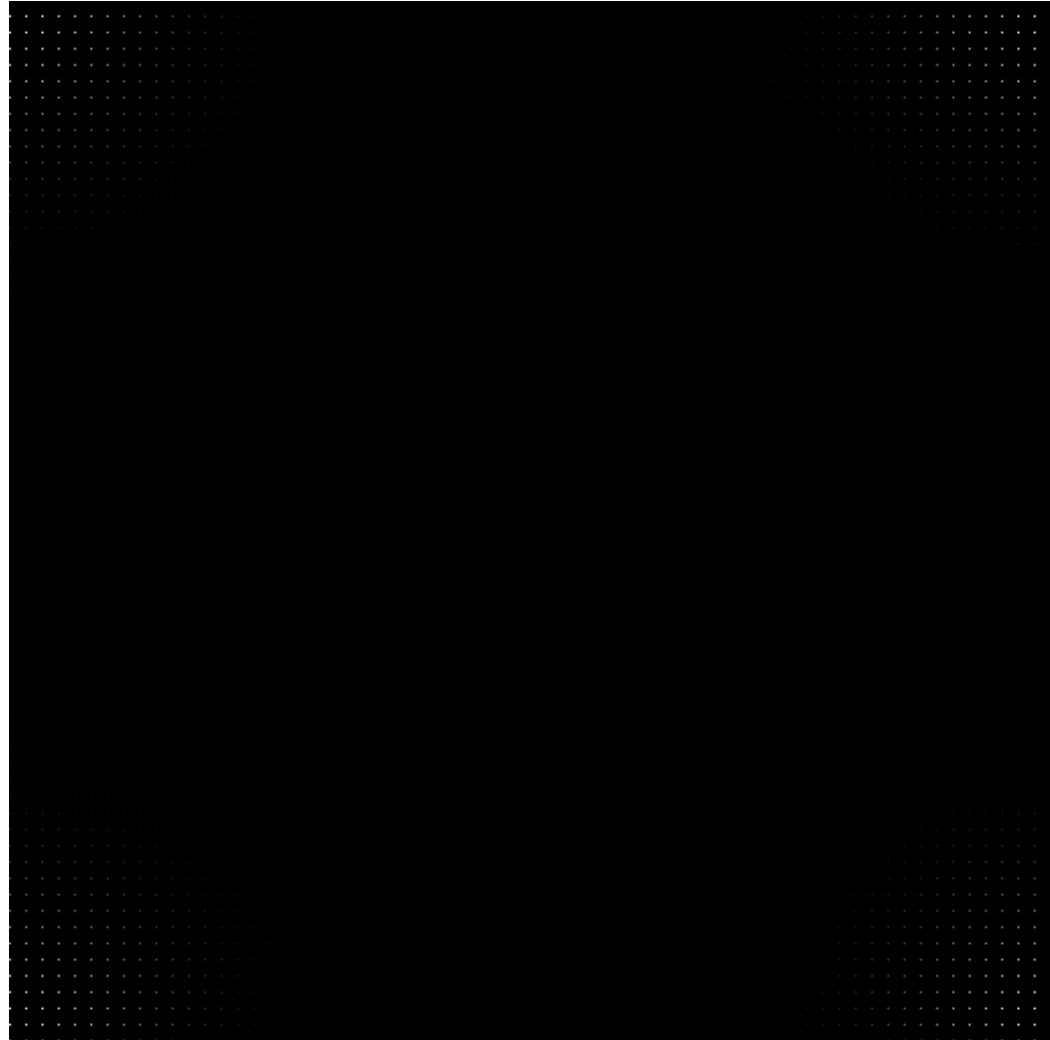


Real space $f(\mathbf{r})$

Gaussian peak with $\lambda_{x,y} = L/8$

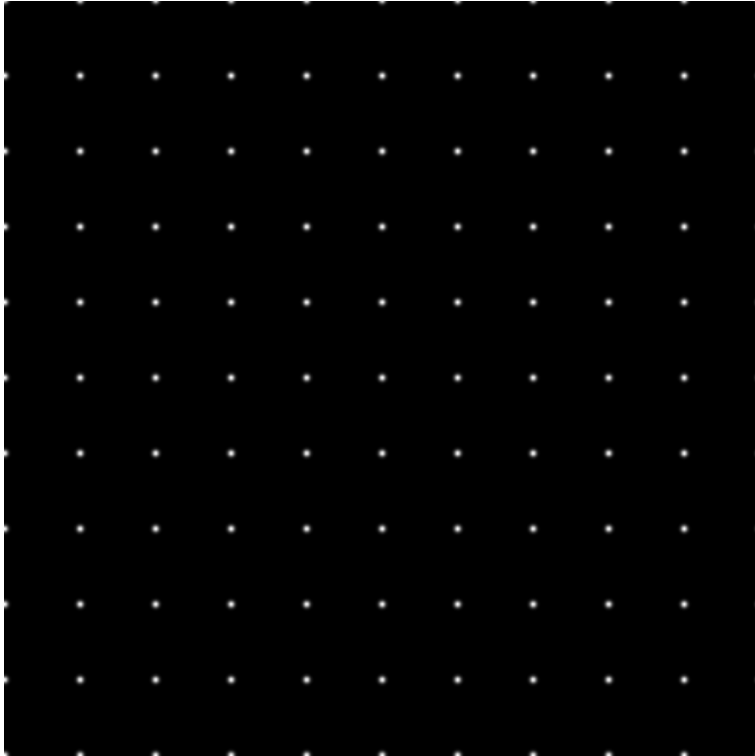


$$|F(\mathbf{k})| \quad k_{x,y} = 2\pi / \lambda_{x,y} = 16\pi / L$$
$$1 \text{ pixel} = 2\pi / L$$



Real space $f(\mathbf{r})$

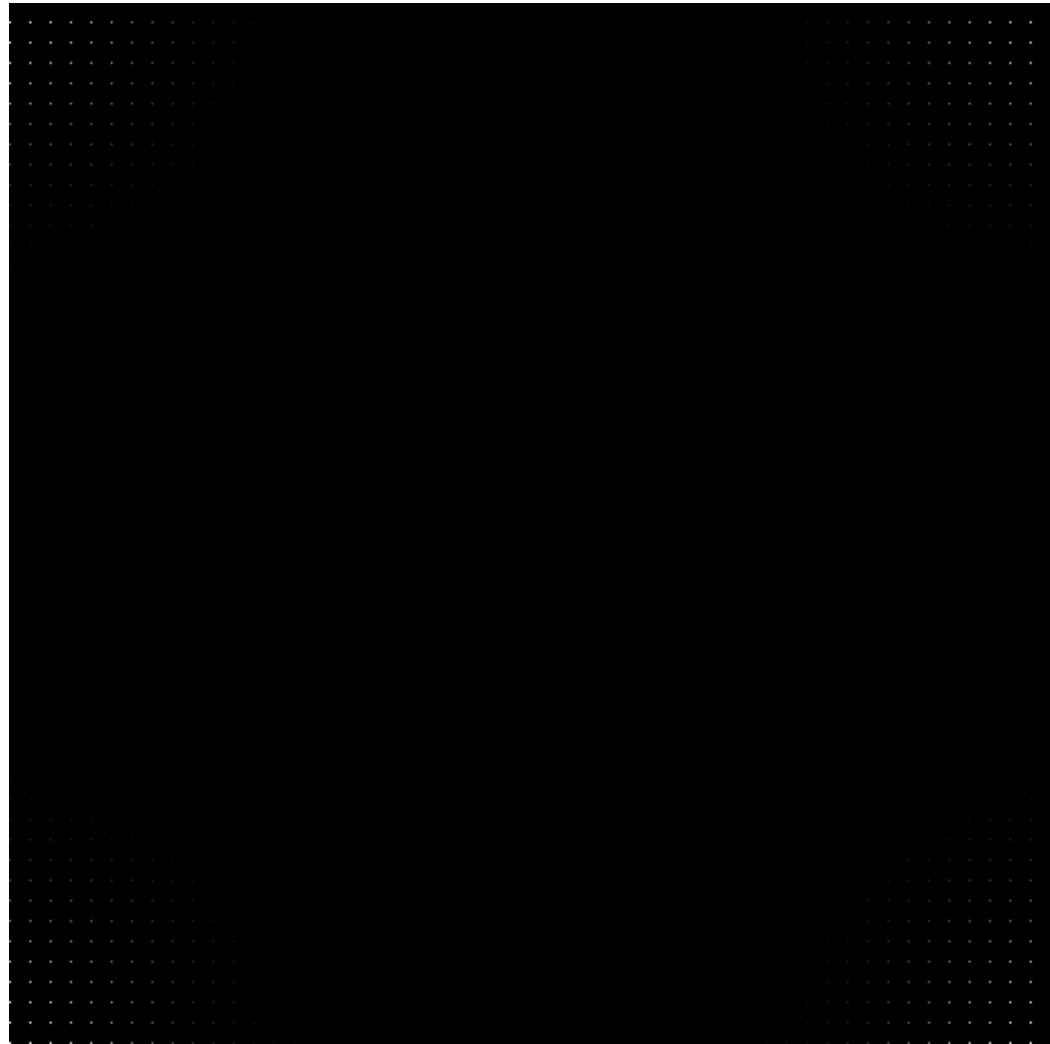
Gaussian peak with $\lambda_{x,y} = L/10$



$|F(\mathbf{k})|$

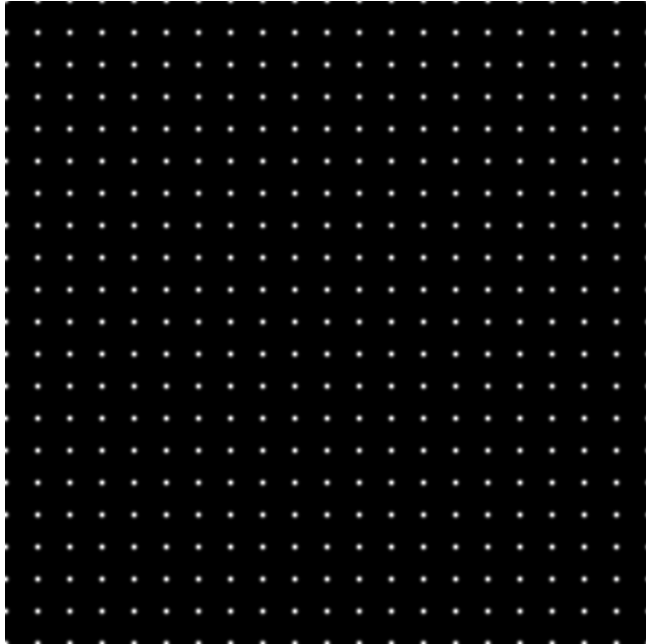
$$k_{x,y} = 2\pi / \lambda_{x,y} = 20\pi / L$$

$$1 \text{ pixel} = 2\pi / L$$



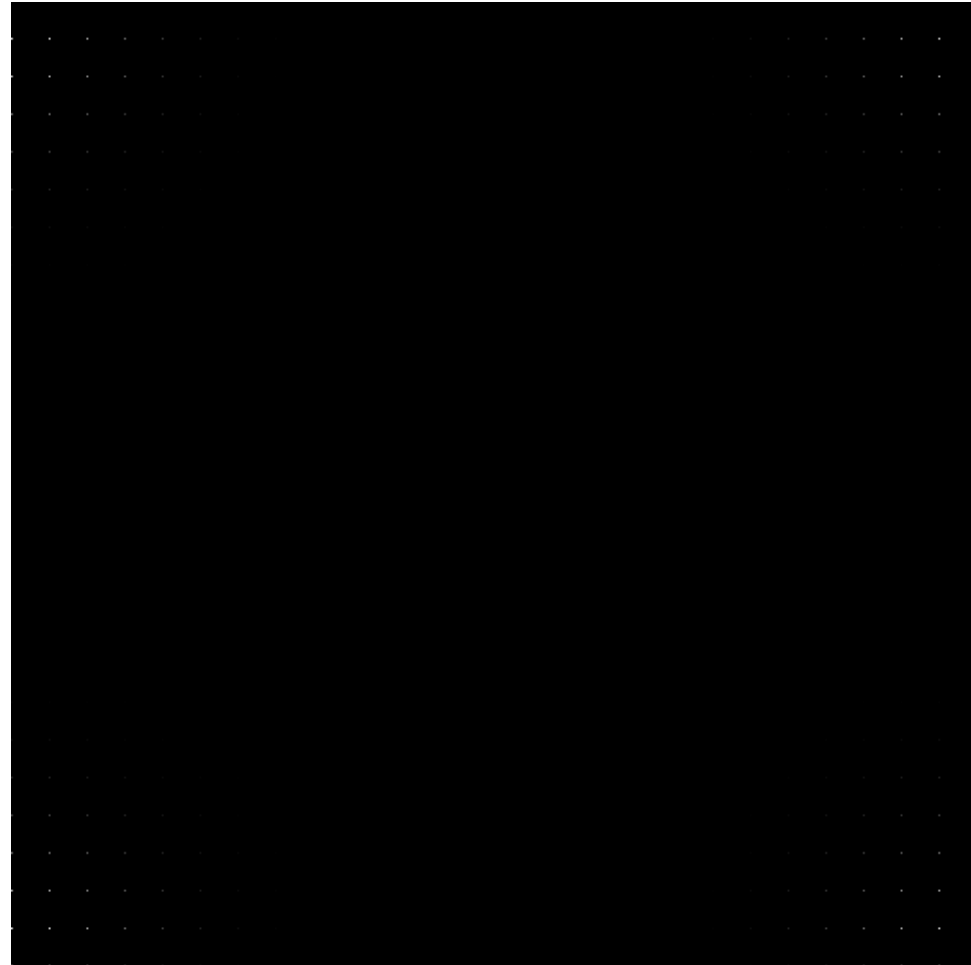
Real space $f(\mathbf{r})$

Gaussian peak with $\lambda_{x,y} = L/20$



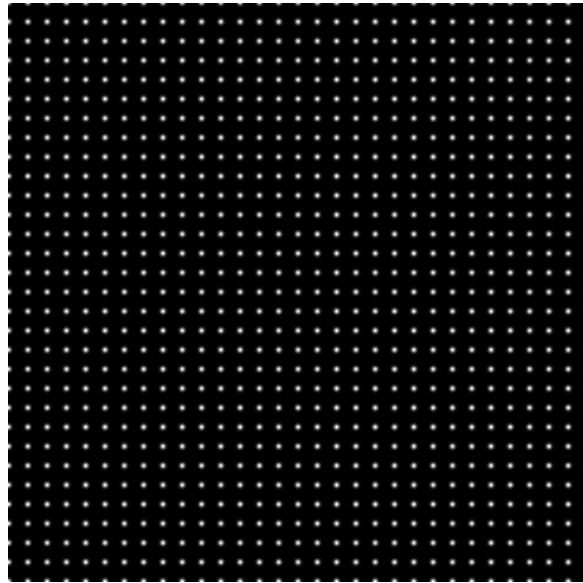
$$|F(\mathbf{k})| \quad k_{x,y} = 2\pi / \lambda_{x,y} = 40\pi / L$$

1 pixel = $2\pi / L$

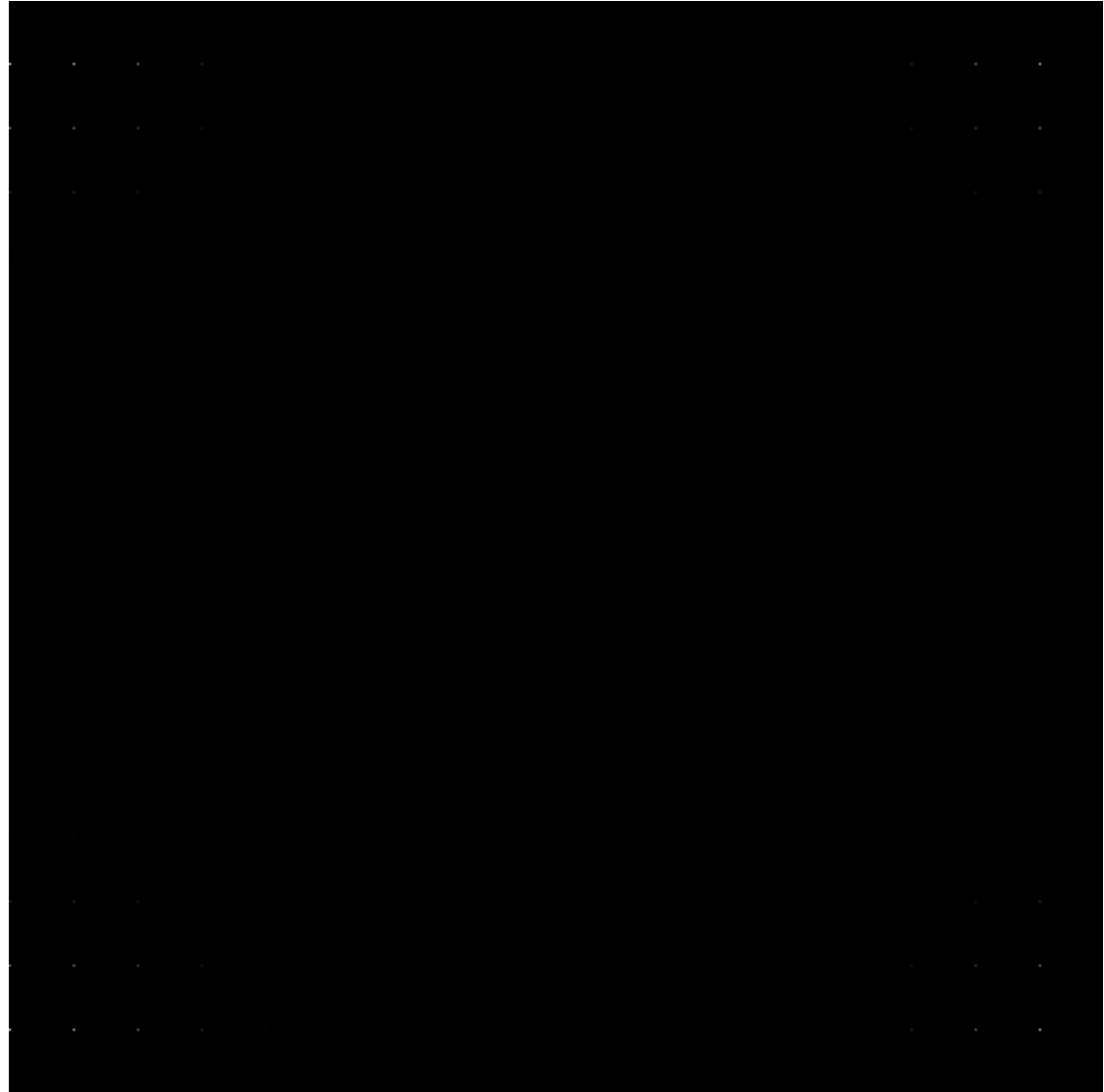


Real space $f(\mathbf{r})$

Gaussian peak with $\lambda_{x,y} = L/30$

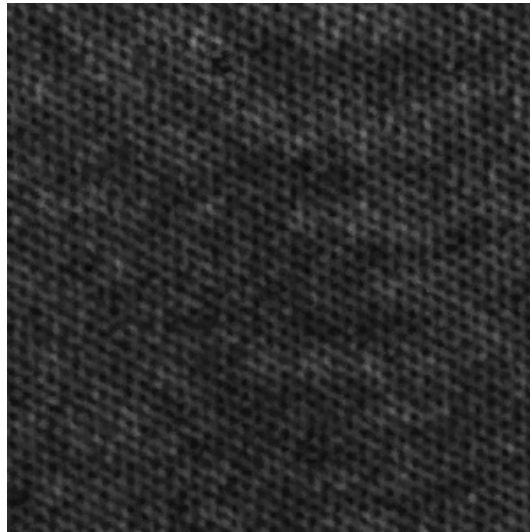


$$|F(\mathbf{k})| \quad k_{x,y} = 2\pi / \lambda_{x,y} = 60\pi / L$$
$$1 \text{ pixel} = 2\pi / L$$

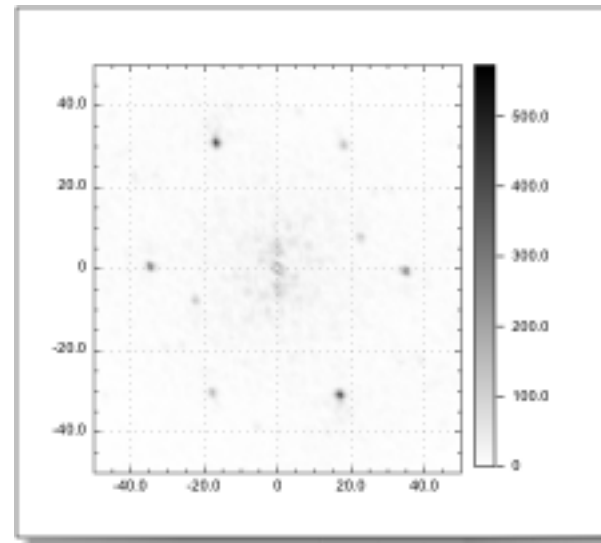


The other example

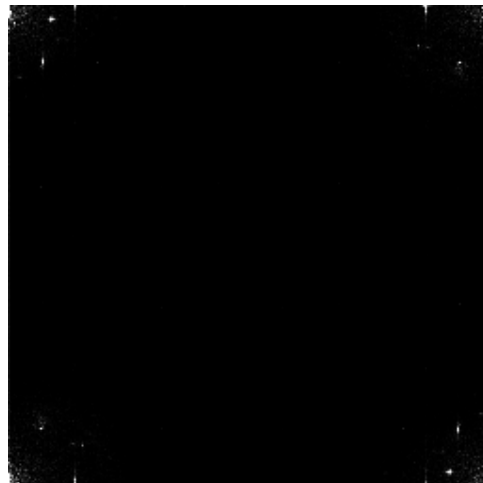
original



FFT



FFT by our code



IFFT in our code

