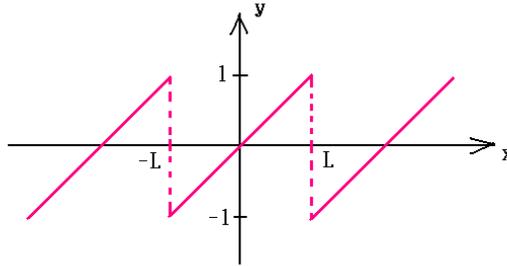


Fast Fourier Transform

1 Fourier 変換の簡単な復習



周期が 2π の関数、つまり $f(x) = f(x + 2\pi)$ となる関数を探してみよう。直ぐに思い付きそうなものとしては、

$$\begin{aligned} f(x) &= \sin x \\ f(x) &= \sin 2x \\ f(x) &= 2 \sin x \end{aligned}$$

などが挙げられる。さらに、これらの線形結合

$$f(x) = \sin x + 3 \sin 2x - 2 \sin 3x + \dots$$

なども解になるので、 $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \sin nx$ がより一般的な解である。ここで n が負の場合を考えないのは $\sin(-x) = -\sin(x)$ という性質があるためである。さらに、 $\cos(x)$ についても同様の議論を行えるので $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n \cos nx$ も解となり、これらを統合した

$$\begin{aligned} f(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} (a_n \sin nx + b_n \cos nx) \\ &= C + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \sin nx + b_n \cos nx) \end{aligned}$$

これが周期 2π の関数の一般系である。逆から言えば、周期 2π の関数は上記の様な \sin と \cos の線形結合に分解できるということになる。これを Fourier 級数展開と呼ぶ。さらに周期 $2L$ (一周期 $-L \leq x \leq L$) の関数へ拡張するには

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (a_n \sin \frac{n\pi}{L} x + b_n \cos \frac{n\pi}{L} x)$$

とすれば良い。ここで $L \rightarrow \infty$ とすると、周期が ∞ の関数、つまり無周期な一般関数を展開できるようになる。

$$f(x) = \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^{\infty} \left(a_n \sin \frac{n\pi}{L} x + b_n \cos \frac{n\pi}{L} x \right)$$

$\lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n\pi}{L}$ は、微小長さ $dk = \frac{\pi}{L}$ の加え上げとなるので、これは積分に変換できる。

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} (a_n \sin kx + b_n \cos kx) dk$$

さらに Euler の公式 $e^{ix} = \cos x + i \sin x$ を用いて整理すると

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(k) e^{ikx} dk$$

この複素関数 $F(k)$ が $f(x)$ のフーリエ変換である。Fourier 変換の係数と逆変換の係数の積が $\frac{1}{2\pi}$ となれば良いので、幾つか表示方法があつて

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

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

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

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(k) e^{ikx} dk$$

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

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(k) e^{ikx} dk$$

さらには係数の無い表式も導くことが出来る。

$$F(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-i2\pi kx} dx$$

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} F(k) e^{i2\pi kx} dk$$

以上が Fourier 変換の簡単な復習である。

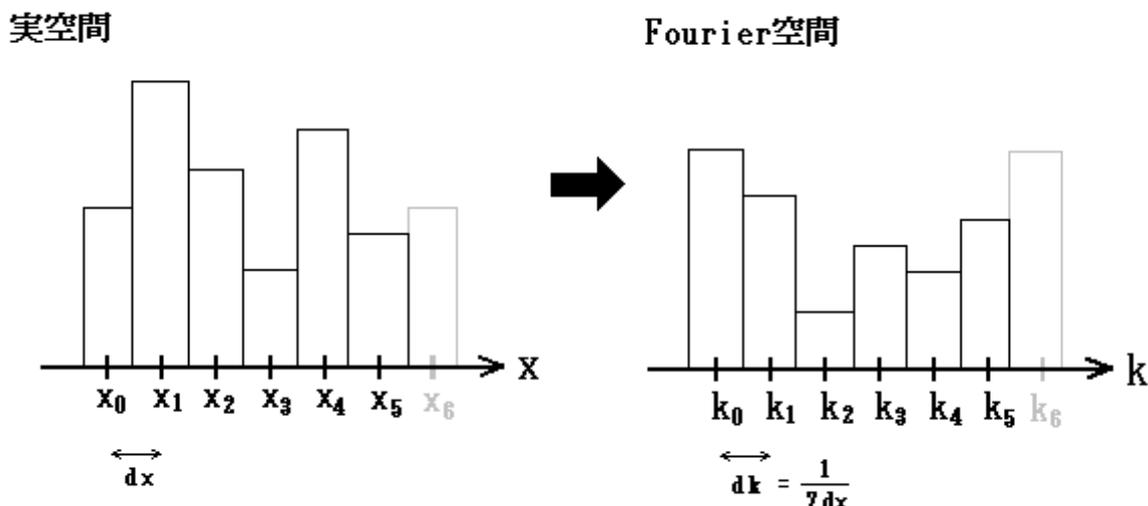
2 Discrete Fourier Transform

Fourier 変換

$$F(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-i2\pi kx} dx$$

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} F(k)e^{i2\pi kx} dk$$

は $f(x)$ の関数形が分かっていたら容易に計算出来る。しかし数値計算においては、 $f(x_1), f(x_2), f(x_3)$ といった様な断片的な情報だけで、関数形が分からない事が多い。このような状況で Fourier 変換を行うにはどうすれば良いのか？ 離散データから連続関数 $f(x)$ を推測するのは難しいので、逆に Fourier 変換を離散的にする事を考えてみよう。



Δx の距離で等間隔に並んだ、 N 個の離散データが有る場合を考えよう。 x 座標を $x_\alpha = \alpha\Delta x$ ($\alpha = 0 \sim N-1$) と表す時、 Fourier 変換は以下のように離散化できるはずである。

$$F(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-i2\pi kx} dx$$

$$= \sum_{\alpha=0}^{N-1} f(x_\alpha)e^{-i2\pi k(\alpha\cdot\Delta x)} \Delta x$$

これで離散化が完了したかに思えるが、もうひとつ考えなければならないことがある。実空間上の N 個のデータ点は、 $-\infty$ から ∞ の積分範囲から見れば、 $x = 0$ 付近に局在したデルタ関数の様なものである。すると Fourier 変換 $F(k)$ は Fourier 空間上にほぼ一様に分布することとなり、逆フーリエ変換する際には無限空間 (無限のデータ点) を足し合わせ (積分し) なければならなくなってしまう。(注: 関数の実空間上の広がり と Fourier 空間上の広がりには反比例し、実空間での一様分布は Fourier 空間のデルタ関数、実空間でのデルタ関数は Fourier 空間の一様分布になる。どちらの空間でも同じ形になるいわば釣り合いの形はガウス分布である) これを解消するために、1つのトリックを導入する。

- 実空間のデータは周期 N の周期関数であるとする。 $f(x_i) = f(x_{i+N})$

すると Fourier 空間上の関数も周期関数になるはずなので、実空間の一周期だけを積分することで $F(k)$ を求め、 Fourier 空間の一周期分だけを積分して $f(x)$ に戻ってこれるようになるはずである。(もちろん実空間データは本

当は周期関数ではないので、このトリックによる計算誤差は必ず現れる。)

では逆フーリエ変換を考えてみよう。Fourier 空間上の離散点を $k_l = l\Delta k$ とすると (この時点ではまだ Fourier 空間での関数の周期は分からないので、 l の範囲も分からない)

$$\begin{aligned} f(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} F(k) e^{i2\pi kx} dk \\ &= \sum_{\alpha=0}^? F(k_l) e^{i2\pi(l\cdot\Delta k)(\alpha\cdot\Delta x)} \Delta k \\ &= \sum_{l=0}^? F(k_l) e^{i2\pi\cdot l\cdot\alpha\cdot\Delta x\cdot\Delta k} \Delta k \end{aligned}$$

Fourier 空間上の微小刻み Δk の次元が $\frac{1}{\Delta x}$ である (これは Fourier 級数展開を思い返してみても良いが、 e^{ikx} の引数が無次元でないといけないという事からも理解できる) ことに注目すると、 Δk は実空間上のデータ間隔 αdx の逆数の中で、一番小さな値のものになると考えられる。つまり $\Delta k = \frac{1}{N\Delta x}$ 、 $k_l = l\Delta k = l\frac{1}{N\Delta x}$ である。これを先ほどの式に代入すると

$$\begin{aligned} f(x) &= \sum_{l=0}^? F(k_l) e^{i2\pi\cdot l\cdot\alpha\cdot\Delta x\cdot\Delta k} \Delta k \\ &= \sum_{l=0}^? F(k_l) e^{i2\pi\cdot l\cdot\alpha\cdot\Delta x\cdot\frac{1}{N\Delta x}} \frac{1}{N\Delta x} \\ &= \frac{1}{N\Delta x} \sum_{l=0}^? F(k_l) e^{i\frac{2\pi}{N}\cdot l\alpha} \end{aligned}$$

この変形により l の周期が α と同様 N である事が明らかになった。実空間データに周期を仮定すると、Fourier 空間データにも”同じ”周期がかかるというわけである。以上より

$$\begin{aligned} F(k_l) &= \Delta x \sum_{\alpha=0}^{N-1} f(x_\alpha) e^{-i\frac{2\pi}{N}\cdot l\alpha} \\ f(x_\alpha) &= \frac{1}{N\Delta x} \sum_{l=0}^{N-1} F(k_l) e^{i\frac{2\pi}{N}\cdot l\alpha} \end{aligned}$$

ここで、通常の Fourier 変換における係数 2π と同様、お互いの係数の積が $dx \cdot \frac{1}{Ndx} = \frac{1}{N}$ であれば大勢は変化しないという性質を用いて

$$\begin{aligned} F(k_l) &= \sum_{\alpha=0}^{N-1} f(x_\alpha) e^{-i\frac{2\pi}{N}\cdot l\alpha} \\ f(x_\alpha) &= \frac{1}{N} \sum_{l=0}^{N-1} F(k_l) e^{i\frac{2\pi}{N}\cdot l\alpha} \end{aligned}$$

これが離散フーリエ変換、Discrete Fourier Transform(DFT) である。

$N = 6$ の時の DFT を行列で表現すると

$$F(k_l) = \sum_{\alpha=0}^{N-1} f(x_\alpha) e^{-i\frac{2\pi}{N} \cdot l\alpha}$$

$$\begin{pmatrix} F(k_0) \\ F(k_1) \\ F(k_2) \\ F(k_3) \\ F(k_4) \\ F(k_5) \end{pmatrix} = \begin{matrix} l=0 \\ l=1 \\ l=2 \\ l=3 \\ l=4 \\ l=5 \end{matrix} \begin{matrix} \alpha=0 & \alpha=1 & \alpha=2 & \alpha=3 & \alpha=4 & \alpha=5 \\ \begin{pmatrix} e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 0 \cdot 0} & e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 0 \cdot 1} & e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 0 \cdot 2} & e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 0 \cdot 3} & e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 0 \cdot 4} & e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 0 \cdot 5} \\ e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 1 \cdot 0} & e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 1 \cdot 1} & e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 1 \cdot 2} & e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 1 \cdot 3} & e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 1 \cdot 4} & e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 1 \cdot 5} \\ e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 2 \cdot 0} & e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 2 \cdot 1} & e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 2 \cdot 2} & e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 2 \cdot 3} & e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 2 \cdot 4} & e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 2 \cdot 5} \\ e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 3 \cdot 0} & e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 3 \cdot 1} & e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 3 \cdot 2} & e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 3 \cdot 3} & e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 3 \cdot 4} & e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 3 \cdot 5} \\ e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 4 \cdot 0} & e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 4 \cdot 1} & e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 4 \cdot 2} & e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 4 \cdot 3} & e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 4 \cdot 4} & e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 4 \cdot 5} \\ e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 5 \cdot 0} & e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 5 \cdot 1} & e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 5 \cdot 2} & e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 5 \cdot 3} & e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 5 \cdot 4} & e^{i\frac{2\pi}{N} \cdot 5 \cdot 5} \end{pmatrix} \end{matrix} \begin{pmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ f(x_2) \\ f(x_3) \\ f(x_4) \\ f(x_5) \end{pmatrix}$$

つまり N 個のデータの変換には N^2 回の計算が必要ということである。さらに、三次元では

$$F(k_l, k_m, k_n) = \sum_{\alpha=0}^{N-1} \sum_{\beta=0}^{N-1} \sum_{\gamma=0}^{N-1} f(x_\alpha, x_\beta, x_\gamma) e^{-i\frac{2\pi}{N} (l\alpha + m\beta + n\gamma)}$$

$$f(x_\alpha, x_\beta, x_\gamma) = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{l=0}^{N-1} \sum_{n=0}^{N-1} F(k_l, k_m, k_n) e^{i\frac{2\pi}{N} (l\alpha + m\beta + n\gamma)}$$

となるので N^6 回の計算が必要になる。

3 Fast Fourier Transform

前節で扱った Discrete Fourier Transform は、一次元辺り N^2 回の計算が必要になるため、 N が大きな場合は実質的に解けない。そこで、なんとか計算量を減らすことを考えよう。まずは準備として以下の計算を見てみよう。(データ点 $N = 8$ の場合)

$$\begin{aligned} f(k_l) &= \sum_{\alpha=0}^7 f(x_\alpha) e^{-i\frac{2\pi}{8}l\alpha} \\ &= f(x_0)e^{-i\frac{0\pi}{8}l} + f(x_1)e^{-i\frac{2\pi}{8}l} + f(x_2)e^{-i\frac{4\pi}{8}l} + f(x_3)e^{-i\frac{6\pi}{8}l} \\ &\quad + f(x_4)e^{-i\frac{8\pi}{8}l} + f(x_5)e^{-i\frac{10\pi}{8}l} + f(x_6)e^{-i\frac{12\pi}{8}l} + f(x_7)e^{-i\frac{14\pi}{8}l} \end{aligned}$$

ここで、前半と後半の類似性 (π 回転) に注目して折りたたむ

$$\begin{aligned} &= f(x_0)e^{-i\frac{0\pi}{8}l} + f(x_1)e^{-i\frac{2\pi}{8}l} + f(x_2)e^{-i\frac{4\pi}{8}l} + f(x_3)e^{-i\frac{6\pi}{8}l} \\ &\quad + f(x_4)e^{-i(\frac{0\pi}{8}+\pi)l} + f(x_5)e^{-i(\frac{2\pi}{8}+\pi)l} + f(x_6)e^{-i(\frac{4\pi}{8}+\pi)l} + f(x_7)e^{-i(\frac{6\pi}{8}+\pi)l} \\ &= \{f(x_0) + e^{-i\pi l}f(x_4)\}e^{-i\frac{0\pi}{8}l} + \{f(x_1) + e^{-i\pi l}f(x_5)\}e^{-i\frac{2\pi}{8}l} \\ &\quad + \{f(x_2) + e^{-i\pi l}f(x_6)\}e^{-i\frac{4\pi}{8}l} + \{f(x_3) + e^{-i\pi l}f(x_7)\}e^{-i\frac{6\pi}{8}l} \end{aligned}$$

2度目の折りたたみ ($\frac{\pi}{2}$ 回転)

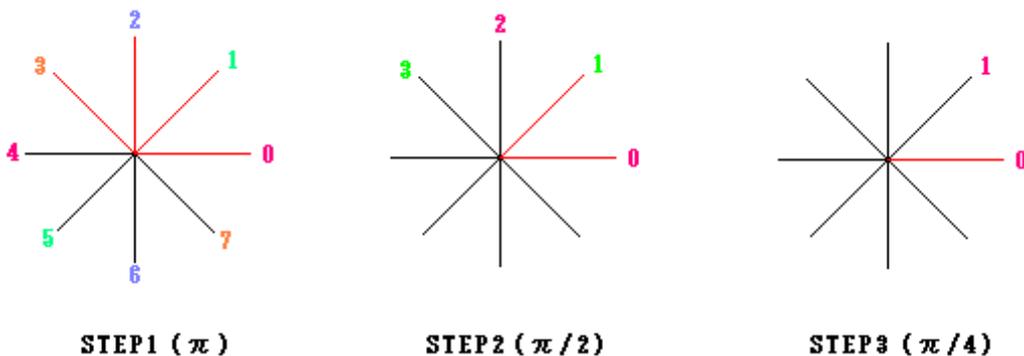
$$\begin{aligned} &= \{f(x_0) + e^{-i\pi l}f(x_4)\}e^{-i\frac{0\pi}{8}l} + \{f(x_1) + e^{-i\pi l}f(x_5)\}e^{-i\frac{2\pi}{8}l} \\ &\quad + \{f(x_2) + e^{-i\pi l}f(x_6)\}e^{-i(\frac{0\pi}{8}+\frac{\pi}{2})l} + \{f(x_3) + e^{-i\pi l}f(x_7)\}e^{-i(\frac{2\pi}{8}+\frac{\pi}{2})l} \\ &= [\{f(x_0) + e^{-i\pi l}f(x_4)\} + e^{-i\frac{\pi}{2}l}\{f(x_2) + e^{-i\pi l}f(x_6)\}]e^{-i\frac{0\pi}{8}l} \\ &\quad + [\{f(x_1) + e^{-i\pi l}f(x_5)\} + e^{-i\frac{\pi}{2}l}\{f(x_3) + e^{-i\pi l}f(x_7)\}]e^{-i\frac{0\pi}{2}l} \end{aligned}$$

3度目の折りたたみ ($\frac{\pi}{4}$ 回転)

$$\begin{aligned} &= [\{f(x_0) + e^{-i\pi l}f(x_4)\} + e^{-i\frac{\pi}{2}l}\{f(x_2) + e^{-i\pi l}f(x_6)\}]e^{-i\frac{0\pi}{8}l} \\ &\quad + [\{f(x_1) + e^{-i\pi l}f(x_5)\} + e^{-i\frac{\pi}{2}l}\{f(x_3) + e^{-i\pi l}f(x_7)\}]e^{-i\frac{2\pi}{8}l} \\ &= ([\{f(x_0) + e^{-i\pi l}f(x_4)\} + e^{-i\frac{\pi}{2}l}\{f(x_2) + e^{-i\pi l}f(x_6)\}] \\ &\quad + e^{-i\frac{\pi}{4}l}[\{f(x_1) + e^{-i\pi l}f(x_5)\} + e^{-i\frac{\pi}{2}l}\{f(x_3) + e^{-i\pi l}f(x_7)\}])e^{-i\frac{0\pi}{8}l} \end{aligned}$$

この時点ではまだ計算は早くなっていない。対称性に注目して整理しただけである。

今の計算をまとめてみると



- 一度目の折りたたみでは、 π 回転した部分との類似性を利用する。
- 二度目の折りたたみでは、 $\frac{\pi}{2}$ 回転した部分との類似性を利用する。
- 三度目の折りたたみでは、 $\frac{\pi}{4}$ 回転した部分との類似性を利用する。

$$\begin{aligned}
 F(k_l) &= \sum_{\alpha=0}^{N-1} f(x_\alpha) e^{-i \frac{2\pi}{N} l \alpha} \\
 &= \sum_{\alpha=0}^{N/2-1} (f(x_\alpha) + e^{-i\pi l} f(x_{\alpha+N/2})) e^{-i \frac{2\pi}{N} l \alpha} \\
 &= \sum_{\alpha=0}^{N/4-1} (f(x_\alpha) + e^{-i\pi l} f(x_{\alpha+N/2})) e^{-i \frac{2\pi}{N} l \alpha} + e^{-i \frac{\pi}{2} l} \sum_{\alpha=0}^{N/4-1} (f(x_{\alpha+N/4}) + e^{-i\pi l} f(x_{\alpha+N/4+N/2})) e^{-i \frac{2\pi}{N} l \alpha} \\
 &= \left\{ \sum_{\alpha=0}^{N/8-1} (f(x_\alpha) + e^{-i\pi l} f(x_{\alpha+N/2})) + e^{-i \frac{\pi}{2} l} \sum_{\alpha=0}^{N/8-1} (f(x_{\alpha+N/4}) + e^{-i\pi l} f(x_{\alpha+N/4+N/2})) \right\} e^{-i \frac{2\pi}{N} l \alpha} \\
 &\quad + e^{-i \frac{\pi}{4} l} \left\{ \sum_{\alpha=0}^{N/8-1} (f(x_{\alpha+N/8}) + e^{-i\pi l} f(x_{\alpha+N/8+N/2})) \right. \\
 &\quad \quad \left. + e^{-i \frac{\pi}{2} l} \sum_{\alpha=0}^{N/8-1} (f(x_{\alpha+N/8+N/4}) + e^{-i\pi l} f(x_{\alpha+N/8+N/4+N/2})) \right\} e^{-i \frac{2\pi}{N} l \alpha} \\
 &= \dots
 \end{aligned}$$

ここで回転子 $Z_N = e^{-i \frac{\pi}{N} l}$ に注目する。

- $Z_1 = e^{-i\pi l}$ は、 $l = 0, 2, 4, 6, \dots$ 、 $l = 1, 3, 5, 7, \dots$ で値が同じ。
- $Z_2 = e^{-i \frac{\pi}{2} l}$ は、 $l = 0, 4, \dots$ 、 $l = 1, 5, \dots$ 、 $l = 2, 6, \dots$ 、 $l = 3, 7, \dots$ で値が同じ。

この性質を使えば飛躍的に計算量を減らすことが出来る。例えば $F(k_0)$ と $F(k_2)$ は一度目の折りたたみまで、 $F(k_0)$ と $F(k_4)$ は二度目の折りたたみまでの計算が同じなので、二度計算する必要は無いからである。

以上より、 $2^3 = 8$ 個の一次元データを変換のする際の手順は

$$1. \text{ グループ } 1 \begin{cases} f(x_0) + e^{-i \cdot 0} f(x_4) \\ f(x_1) + e^{-i \cdot 0} f(x_5) \\ f(x_2) + e^{-i \cdot 0} f(x_6) \\ f(x_3) + e^{-i \cdot 0} f(x_7) \end{cases} \quad \text{及びグループ } 2 \begin{cases} f(x_0) + e^{-i\pi} f(x_4) \\ f(x_1) + e^{-i\pi} f(x_5) \\ f(x_2) + e^{-i\pi} f(x_6) \\ f(x_3) + e^{-i\pi} f(x_7) \end{cases} \quad \text{を計算する。}$$

前者は $l = 0, 2, 4, 6$ 、後者は $l = 1, 3, 5, 7$ の一回折り込んだ値である。

$$2. \text{ グループ } 1 \text{ からグループ } 1' \begin{cases} \{f(x_0) + e^{-i \cdot 0} f(x_4)\} + e^{-i \frac{\pi}{2} \cdot 0} \{f(x_2) + e^{-i \cdot 0} f(x_6)\} \\ \{f(x_1) + e^{-i \cdot 0} f(x_5)\} + e^{-i \frac{\pi}{2} \cdot 0} \{f(x_3) + e^{-i \cdot 0} f(x_7)\} \end{cases} \quad \text{を計算する。}$$

$$\text{グループ } 2' \begin{cases} \{f(x_0) + e^{-i \cdot 0} f(x_4)\} + e^{-i \frac{\pi}{2} \cdot 2} \{f(x_2) + e^{-i \cdot 0} f(x_6)\} \\ \{f(x_1) + e^{-i \cdot 0} f(x_5)\} + e^{-i \frac{\pi}{2} \cdot 2} \{f(x_3) + e^{-i \cdot 0} f(x_7)\} \end{cases}$$

前者は $l = 0, 4$ 、後者は $l = 2, 6$ の二回折り込んだ値である。

$$3. \text{ グループ } 2 \text{ からグループ } 3' \begin{cases} \{f(x_0) + e^{-i \cdot \pi} f(x_4)\} + e^{-i \frac{\pi}{2} \cdot 1} \{f(x_2) + e^{-i \cdot \pi} f(x_6)\} \\ \{f(x_1) + e^{-i \cdot \pi} f(x_5)\} + e^{-i \frac{\pi}{2} \cdot 1} \{f(x_3) + e^{-i \cdot \pi} f(x_7)\} \end{cases} \quad \text{を計算する。}$$

$$\text{グループ } 4' \begin{cases} \{f(x_0) + e^{-i \cdot \pi} f(x_4)\} + e^{-i \frac{\pi}{2} \cdot 3} \{f(x_2) + e^{-i \cdot \pi} f(x_6)\} \\ \{f(x_1) + e^{-i \cdot \pi} f(x_5)\} + e^{-i \frac{\pi}{2} \cdot 3} \{f(x_3) + e^{-i \cdot \pi} f(x_7)\} \end{cases}$$

前者は $l = 1, 5$ 、後者は $l = 3, 7$ の二回折り込んだ値である。

4. グループ $1'$ からグループ $1''$

$$\{ \{f(x_0) + e^{-i \cdot 0} f(x_4)\} + e^{-i \frac{\pi}{2} \cdot 0} \{f(x_2) + e^{-i \cdot 0} f(x_6)\} \} + e^{-i \frac{\pi}{2} \cdot 0} \{ \{f(x_1) + e^{-i \cdot 0} f(x_5)\} + e^{-i \frac{\pi}{2} \cdot 0} \{f(x_3) + e^{-i \cdot 0} f(x_7)\} \}$$

グループ $1'$ からグループ $2''$

$$\{ \{f(x_0) + e^{-i \cdot 0} f(x_4)\} + e^{-i \frac{\pi}{2} \cdot 0} \{f(x_2) + e^{-i \cdot 0} f(x_6)\} \} + e^{-i \frac{\pi}{2} \cdot 4} \{ \{f(x_1) + e^{-i \cdot 0} f(x_5)\} + e^{-i \frac{\pi}{2} \cdot 0} \{f(x_3) + e^{-i \cdot 0} f(x_7)\} \}$$

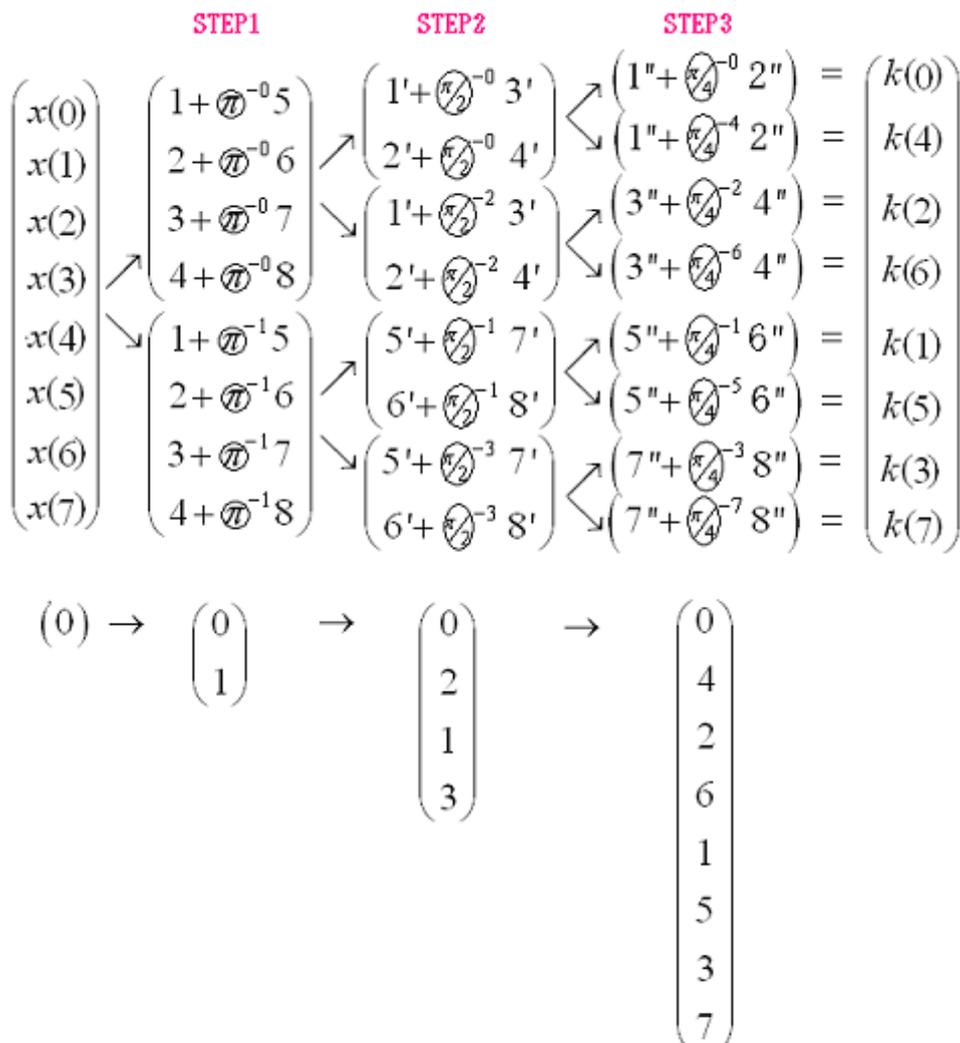
前者は $l = 0$ 、後者は $l = 4$ の三回折り込んだ値である。

5. 同様にして $1'$ から $3'' (l = 2) 4'' (l = 6)$ 、 $2'$ から $5'' (l = 1) 6'' (l = 5) 7'' (l = 3) 8'' (l = 7)$ を算出

6. 最後まで残った回転子 $\sum_{\alpha=0}^0 e^{-i \frac{2\pi}{N} l \alpha}$ をかけて Fourier 変換完了

$$\begin{cases} f(k_0) = 1'' \times e^{-i \frac{2\pi}{N} 0 \cdot 0} \\ f(k_4) = 2'' \times e^{-i \frac{2\pi}{N} 4 \cdot 0} \\ f(k_2) = 3'' \times e^{-i \frac{2\pi}{N} 2 \cdot 0} \\ f(k_6) = 4'' \times e^{-i \frac{2\pi}{N} 6 \cdot 0} \\ f(k_1) = 5'' \times e^{-i \frac{2\pi}{N} 1 \cdot 0} \\ f(k_5) = 6'' \times e^{-i \frac{2\pi}{N} 5 \cdot 0} \\ f(k_3) = 7'' \times e^{-i \frac{2\pi}{N} 3 \cdot 0} \\ f(k_7) = 8'' \times e^{-i \frac{2\pi}{N} 7 \cdot 0} \end{cases}$$

図示すると以下ようになる。



$$\left(1' + \pi/2^{-2} 3' \right) = \begin{array}{l} \text{(前のステップの上から 1 番目のデータ)} \\ + \text{Exp}(i \pi / 2 \times -2) \\ \times \text{(前のステップの上から 3 番目のデータ)} \end{array}$$

逆変換も同様のアルゴリズムで実現することが出来る。順変換と違う点は回転子の符号を反転させる事 ($e^{i \frac{2\pi}{N} l \cdot \alpha}$) と、全体を N で割る事だけである。また、今回は実空間のデータを $0 \leq k \leq (N-1)dk$ に変換したが、 $-\frac{N}{2}dk \leq k \leq \frac{(N-1)}{2}dk$ に変換するには、最後に乗じる回転子を $Z_l = e^{-i \frac{2\pi}{N} l \cdot (-N/2)}$ とすれば良い。さらに、今回は二つ折にしていくことで FFT を実現した (これを基数 2 の FFT と呼ぶ) が、この方法では 2^N のデータしか変換することが出来ない。より一般的な FFT にするには基数 2,3,5 などの FFT を用意し、これらを組み合わせる事が必要である。

参考文献

- [1] 夏目 雄平 『計算物理』 朝倉書店, 2003
- [2] <http://laputa.cs.shinshu-u.ac.jp/~yizawa/InfSys1/basic/chap7/index.htm>

Takashi Inoue
<http://www.persianblue.net/>