2012年4月8日(日)

フーリエ変換の公式

Formulae about Fourier transform

名古屋工業大学 先進セラミックス研究センター
ICDD Regional Co-Chair of Eastern Pacific Rim
井田　隆

内容

１．フーリエ変換の定義

フーリエ変換 Fourier transform がわかりにくい理由の一つに，定義のしかたに異なる流儀があって，公式を使うのも単純ではないという面があります。ここでは以下の定義に統一します。

フーリエ変換：$F(k)=\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\mathrm{e}^{2\pi \mathrm{i}kx}\,\mathrm{d}x$

逆フーリエ変換：$f(x)=\int_{-\infty}^{\infty} F(k)\mathrm{e}^{-2\pi \mathrm{i}kx}\,\mathrm{d}k$

この定義のしかたは結晶学の分野では伝統的に使われてきました。W. H. Press らの "*Numerical Recipes in C*"（技術評論社 1995 年）でも推奨されている定義のしかたです。この定義のしかたには，主に以下のような利点があります。

(i) 畳み込みや相関に関する公式が簡単になる。

(ii) デルタ関数のフーリエ変換が 1 になる。

(iii) ピーク形状関数の面積が，フーリエ変換の原点での値に等しくなる。

他の定義のしかたについては最後に触れることにします。

2．超関数のフーリエ変換

Dirac のデルタ関数 $\delta(x)$ には，

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\, f(x)\,\mathrm{d}x = f(0)$$

という性質があります。したがって，デルタ関数のフーリエ変換と逆フーリエ変換は

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) \mathrm{e}^{2\pi \mathrm{i} kx}\,\mathrm{d}k = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) \mathrm{e}^{-2\pi \mathrm{i} kx}\,\mathrm{d}k = 1$$

となり，逆に

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{2\pi \mathrm{i} kx}\,\mathrm{d}k = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-2\pi \mathrm{i} kx}\,\mathrm{d}k = \delta(x)$$

という関係が成立します。

デルタ関数の微分 $\delta'(x)$ のフーリエ変換は，

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta'(x) \mathrm{e}^{2\pi \mathrm{i} kx}\,\mathrm{d}x = \left[\delta(x) \mathrm{e}^{2\pi \mathrm{i} kx}\right]_{-\infty}^{\infty} - 2\pi \mathrm{i} k \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) \mathrm{e}^{2\pi \mathrm{i} kx}\,\mathrm{d}x = -2\pi \mathrm{i} k$$

となります。同じように，デルタ関数の n 階微分 $\delta^{(n)}(x)$ のフーリエ変換について，

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta^{(n)}(x) \mathrm{e}^{2\pi \mathrm{i} kx}\,\mathrm{d}x = \left[\delta^{(n-1)}(x) \mathrm{e}^{2\pi \mathrm{i} kx}\right]_{-\infty}^{\infty} - 2\pi \mathrm{i} k \int_{-\infty}^{\infty} \delta^{(n-1)}(x) \mathrm{e}^{2\pi \mathrm{i} kx}\,\mathrm{d}x$$

$$= -2\pi \mathrm{i} k \int_{-\infty}^{\infty} \delta^{(n-1)}(x) \mathrm{e}^{2\pi \mathrm{i} kx}\,\mathrm{d}x$$

という関係が成立することから，一般的に

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta^{(n)}(x) \mathrm{e}^{2\pi \mathrm{i} kx}\,\mathrm{d}x = (-2\pi \mathrm{i} k)^n$$

と書けます。

３．畳み込みと相関

２つの関数 $f(x)$ と $g(x)$ の畳み込み convolution は，

$$f(x)*g(x)=\int_{-\infty}^{\infty} f(x-y)g(y)\mathrm{d}y$$

あるいは

$$f(x)*g(x)=\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-x_1-x_2)\,f(x_1)g(x_2)\mathrm{d}x_1\,\mathrm{d}x_2$$

で表されます。「畳み込み」の代わりに接合積とか合成積と呼ばれることもあります。デルタ関数の性質から，任意の関数とデルタ関数の畳み込みは元の関数と等しくなります。つまり，

$$f(x)*\delta(x)=f(x)$$

の関係は常に成立します。また，任意の関数の n 階微分は，

$$\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}f(x)=f(x)*\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\delta(x)$$

と表され，デルタ関数の n 階微分 $\delta^{(n)}(x)$ との畳み込みと同じことです。

関数 $f(x)$ と $g(x)$ のそれぞれのフーリエ変換を

$$F(k)=\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}kx}\,\mathrm{d}x$$

$$G(k)=\int_{-\infty}^{\infty} g(x)\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}kx}\,\mathrm{d}x$$

とします。畳み込みのフーリエ変換は

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left[f(x)*g(x)\right]\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}kx}\,\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{\infty}\left[\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-x_1-x_2)f(x_1)g(x_2)\mathrm{d}x_1\,\mathrm{d}x_2\right]\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}kx}\,\mathrm{d}x$$

と表され，積分の順序を交換すれば，

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-x_1-x_2)\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}kx}\,\mathrm{d}x\right]f(x_1)g(x_2)\mathrm{d}x_1\,\mathrm{d}x_2$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} f(x_1)g(x_2)\exp\left[2\pi\mathrm{i}k(x_1+x_2)\right]\mathrm{d}x_1\,\mathrm{d}x_2$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty} f(x_1)\exp(2\pi\mathrm{i}kx_1)\mathrm{d}x_1\int_{-\infty}^{\infty} g(x_2)\exp(2\pi\mathrm{i}kx_2)\mathrm{d}x_2$$

$$=F(k)G(k)$$

となります。つまり，「畳み込みのフーリエ変換はフーリエ変換の積に等しい」という関係があります。これを畳み込み定理 convolution theorem と呼びます。

２つの関数 $f(x)$ と $g(x)$ の相関 correlation は

$$\mathrm{Corr}\left[f(x),g(x)\right]=\int_{-\infty}^{\infty}f(x+y)g(y)\,\mathrm{d}\,y$$

あるいは

$$\mathrm{Corr}\left[f(x),g(x)\right]=\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\delta\left(x-x_1+x_2\right)\,f\left(x_1\right)g\left(x_2\right)\mathrm{d}\,x_1\,\mathrm{d}\,x_2$$

で定義され， $f(x)$ と $g(-x)$ の畳み込みと同じことです。相関のフーリエ変換は，

$$\int_{-\infty}^{\infty}\,\mathrm{Corr}\left[f(x),g(x)\right]\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}kx}\,\mathrm{d}\,x=\int_{-\infty}^{\infty}\,\left[\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\delta\left(x-x_1+x_2\right)\,f\left(x_1\right)g\left(x_2\right)\mathrm{d}\,x_1\,\mathrm{d}\,x_2\right]\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}kx}\,\mathrm{d}\,x$$

と表され，積分の順序を交換すれば，

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\,\left[\int_{-\infty}^{\infty}\,\delta\left(x-x_1+x_2\right)\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}kx}\,\mathrm{d}\,x\right]f\left(x_1\right)g\left(x_2\right)\mathrm{d}\,x_1\,\mathrm{d}\,x_2$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\,f\left(x_1\right)g\left(x_2\right)\exp\left[2\pi\mathrm{i}k\left(x_1-x_2\right)\right]\mathrm{d}\,x_1\,\mathrm{d}\,x_2$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\,f\left(x_1\right)\exp\left(2\pi\mathrm{i}kx_1\right)\mathrm{d}\,x_1\int_{-\infty}^{\infty}\,g\left(x_2\right)\exp\left(-2\pi\mathrm{i}kx_2\right)\mathrm{d}\,x_2$$

$$=F(k)G(-k)$$

となります。さらに関数 $g(x)$ が実関数（実数値をとる関数）の場合には，
$G(-k)=G^*(k)$ （ただし $G^*(k)$ は $G(k)$ の複素共役）という関係から，

$$\int_{-\infty}^{\infty}\,\mathrm{Corr}\left[f(x),g(x)\right]\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}kx}\,\mathrm{d}\,x=F(k)G^*(k)$$

という関係が成立します。つまり，相関のフーリエ変換は，フーリエ変換とフーリエ変換の複素共役との積に等しくなります。この関係は相関定理 correlation theorem と呼ばれます。

特に関数 $g(x)$ が関数 $f(x)$ に等しいとき，

$$\mathrm{Corr}\left[f(x),f(x)\right]=\int_{-\infty}^{\infty}f(x+y)\,f(y)\,\mathrm{d}\,y=\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\,\delta\left(x-x_1+x_2\right)\,f\left(x_1\right)f\left(x_2\right)\mathrm{d}\,x_1\,\mathrm{d}\,x_2$$

のことを自己相関 autocorrelation と呼びます。自己相関のフーリエ変換について，

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{Corr}\left[f(x), f(x)\right] \mathrm{e}^{2\pi \mathrm{i} k x}\,\mathrm{d}x = F(k)F^*(k) = \left|F(k)\right|^2$$

という関係はただちに導かれますが，この関係はウィーナー・ヒンチン Wiener-Khinchin の定理と呼ばれます。

信号の全パワー total power は

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left|f(t)\right|^2 \mathrm{d}t = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(t) f(t) \mathrm{d}t$$

で表されますが，信号のフーリエ変換：

$$F(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \mathrm{e}^{2\pi \mathrm{i} \nu t}\,\mathrm{d}t$$

について同様の計算をすると，

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left|F(\nu)\right|^2 \mathrm{d}\nu = \int_{-\infty}^{\infty} F^*(\nu) F(\nu) \mathrm{d}\nu$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} f^*(t_1) \exp(-2\pi \mathrm{i} \nu t_1) \mathrm{d}t_1\right]\left[\int_{-\infty}^{\infty} f(t_2) \exp(2\pi \mathrm{i} \nu t_2) \mathrm{d}t_2\right] \mathrm{d}\nu$$

積分の順序を入れ替えて

$$= \int_{-\infty}^{\infty} f^*(t_1) \int_{-\infty}^{\infty} f(t_2) \left\{\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[2\pi \mathrm{i} \nu (t_2 - t_1)\right] \mathrm{d}\nu\right\} \mathrm{d}t_2\,\mathrm{d}t_1$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} f^*(t_1) \int_{-\infty}^{\infty} f(t_2) \delta(t_2 - t_1) \mathrm{d}t_2\,\mathrm{d}t_1$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} f^*(t_1) f(t_1) \mathrm{d}t_1$$

となり，

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left|f(t)\right|^2 \mathrm{d}t = \int_{-\infty}^{\infty} \left|F(\nu)\right|^2 \mathrm{d}\nu$$

の関係が成立します。このことをパーセバル Parseval の定理と呼びます。

４．関数の面積とフーリエ変換

任意の関数 $f(x)$ について，フーリエ変換の原点での値は，

$$F(0) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \mathrm{d}x$$

という関係が成立します。このことは $F(0)$ が関数 $f(x)$ の面積を表すことを意味しています。関数 $f(x)$ が面積が 1 となるように規格化されている場合には，フーリエ変換の原点での値は 1 になります。

規格化された関数との畳み込みでは面積は変わりません。

５．初等ピーク形状関数のフーリエ変換

面積 1 の関数 $f(x)$ とそのフーリエ変換 $F(k)$ の形式を以下に示します。積分幅を B，半値全幅を W，標準偏差を σ と表します。

$f(x)$	$F(k)$
$\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\exp\left(-\dfrac{x^2}{2\sigma^2}\right)$ （正規分布関数；Gauss 型関数）	$\exp\left(-2\pi^2 k^2 \sigma^2\right)$（Gauss 型関数）
$\dfrac{1}{B}\exp\left(-\dfrac{\pi x^2}{B^2}\right)$（Gauss 型関数）	$\exp\left(-\pi k^2 B^2\right)$（Gauss 型関数）
$\dfrac{2\sqrt{\ln 2}}{\sqrt{\pi}W}\exp\left(-\dfrac{4(\ln 2)x^2}{W^2}\right)$（Gauss 型関数）	$\exp\left(-\dfrac{\pi^2 k^2 W^2}{4\ln 2}\right)$（Gauss 型関数）
$\dfrac{1}{B}\left(1+\dfrac{\pi^2 x^2}{B^2}\right)^{-1}$ （Cauchy 分布関数；Lorentz 型関数）	$\exp\left(-2\|k\|B\right)$（対称化指数関数）
$\dfrac{2}{\pi W}\left(1+\dfrac{4x^2}{W^2}\right)^{-1}$（Lorentz 型関数）	$\exp\left(-\pi\|k\|W\right)$（対称化指数関数）
$\dfrac{1}{B}\left(1+\dfrac{4x^2}{B^2}\right)^{-3/2}$（中間 Lorentz 型関数） $\dfrac{B}{W}=\dfrac{1}{\sqrt{2^{2/3}-1}}\sim 1.30477$	$\pi\|k\|B\mathrm{K}_1\left(\pi\|k\|B\right)$

$\frac{1}{B}\left(1+\frac{\pi^2 x^2}{4B^2}\right)^{-2}$ （修正 Lorentz 型関数） $\frac{B}{W}=\frac{\pi}{4\sqrt{2^{1/2}-1}}\sim 1.22033$	$(1+4\|k\|B)\exp(-4\|k\|B)$
$\frac{1}{B}\operatorname{sech}\frac{\pi x}{B}$ （双曲正割関数） $\frac{B}{W}=\frac{\pi}{2\ln\left(2+\sqrt{3}\right)}\sim 1.19275$	$\operatorname{sech}(\pi kB)$ （双曲正割関数）
$\frac{1}{B}\operatorname{sech}^2\frac{2k}{B}$ （logistic 分布関数） $\frac{B}{W}=\frac{1}{\ln\left(1+\sqrt{2}\right)}\sim 1.13459$	$\frac{\pi^2 kB}{2}\operatorname{cosech}\frac{\pi^2 kB}{2}$ （双曲余割関数）
$\frac{\sin^2(\pi x/B)}{\pi^2 x^2/B}$ （Laue 関数）	$\begin{cases} 1-\|k\|B & \left[\|k\|<1/B\right] \\ 0 & \left[1/B\le\|k\|\right] \end{cases}$ （Bartlett 型関数）
$\begin{cases} \frac{1}{B} & \left[\|x\|<\frac{B}{2}\right] \\ 0 & \left[\frac{B}{2}\le\|x\|\right] \end{cases}$ （矩形関数）	$\frac{\sin(\pi kB)}{\pi kB}$
$\begin{cases} \frac{1}{B}\left(1-\frac{\|x\|}{B}\right) & \left[\|x\|<B\right] \\ 0 & \left[B\le\|x\|\right] \end{cases}$ （Bartlett 型関数）	$\frac{\sin^2(\pi kB)}{\pi^2 k^2 B^2}$ （ Laue 関数）
$\frac{\Gamma(\mu)}{\sqrt{\pi}\Gamma(\mu-1/2)\gamma}\left(1+\frac{x^2}{\gamma^2}\right)^{-\mu}\quad\left[\frac{1}{2}<\mu\right]$ （Pearson VII 関数）	$\frac{2\left(\pi\|k\|\gamma\right)^{\mu-1/2}}{\Gamma(\mu-1/2)}\mathrm{K}_{\mu-1/2}\left(2\pi\|k\|\gamma\right)$

$\frac{1}{B}\left\{1+\pi\left[\frac{\Gamma(\mu-1/2)x}{\Gamma(\mu)B}\right]^2\right\}^{-\mu}$ $\left[\frac{1}{2}<\mu\right]$ （Pearson VII 関数）	$\frac{2}{\Gamma(\mu-1/2)}\left[\frac{\sqrt{\pi}\lvert k\rvert\Gamma(\mu)B}{\Gamma(\mu-1/2)}\right]^{\mu-1/2}$ $\mathrm{K}_{\mu-1/2}\left(\frac{2\sqrt{\pi}\Gamma(\mu)\lvert k\rvert B}{\Gamma(\mu-1/2)}\right)$
$\frac{1}{b}\mathrm{Re}\left[\mathrm{wofz}\left(\frac{\sqrt{\pi}x}{b}+\mathrm{i}\rho\right)\right]$ $[0<\rho<1]$ $b=B\exp\left(\rho^2\right)\mathrm{erfc}\left(\rho\right)$ （Voigt 関数）	$\exp\left(-\pi b^2x^2-2\sqrt{\pi}b\ \rho\lvert x\rvert\right)$
$\frac{1}{2\pi\beta x}\arctan\frac{2\pi B\beta x\sinh^2\beta}{B^2\sinh^2\beta+\pi^2\beta^2x^2}$ $[0<\beta]$	$\frac{1}{2\beta}\left[\mathrm{E}_1\left(\frac{2\lvert k\rvert B\sinh(\beta)}{\beta\mathrm{e}^{\beta}}\right)-\mathrm{E}_1\left(\frac{2\lvert k\rvert B\sinh(\beta)}{\beta\mathrm{e}^{-\beta}}\right)\right]$
$\frac{1}{4B\beta}\arctan\frac{\pi^2x^2\sinh^2\beta+B^2\beta^2\mathrm{e}^{2\beta}}{\pi^2x^2\sinh^2\beta+B^2\beta^2\mathrm{e}^{-2\beta}}$ $[0<\beta]$	$\frac{1}{4B\beta\lvert k\rvert}\left[\exp\left(-\frac{2B\beta\lvert k\rvert\mathrm{e}^{-\beta}}{\sinh\beta}\right)\right.$ $\left.-\exp\left(-\frac{2B\beta\lvert k\rvert\mathrm{e}^{\beta}}{\sinh\beta}\right)\right]$

ただし，$\mathrm{K}_\nu(z)$ は

$$\mathrm{K}_\nu(z)=\frac{\Gamma(\nu+1/2)(2z)^\nu}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty\frac{\cos t\,\mathrm{d}t}{\left(t^2+z^2\right)^{\nu+1/2}}$$

で定義される第２種変形ベッセル関数，あるいは MacDonald 関数と呼ばれる関数です。関数 $\Gamma(\nu)$ は

$$\Gamma(\nu)\equiv\int_0^\infty t^{\nu-1}\,\mathrm{e}^{-t}\,\mathrm{d}t$$

で定義されるガンマ関数です。関数 $\mathrm{sech}\,x$ と $\mathrm{cosech}\,x$，$\sinh x$ はそれぞれ

$$\mathrm{sech}\,x\equiv\frac{2}{\mathrm{e}^x+\mathrm{e}^{-x}}$$

$$\mathrm{cosech}\,x\equiv\frac{2}{\mathrm{e}^x-\mathrm{e}^{-x}}$$

$$\sinh x \equiv \frac{e^x - e^{-x}}{2}$$

で定義される双曲正割関数および双曲余割関数，双曲正弦関数です。また，$E_1(x)$ は

$$E_1(x) \equiv \int_x^\infty \frac{e^{-t}\,dt}{t}$$

で定義される指数積分です。関数 $\mathrm{wofz}(z) \equiv \exp(-z^2)\mathrm{erfc}(-iz)$ は Faddeeva 関数あるいは規格化された複素誤差補関数あるいは複素補誤差関数とも呼ばれる関数です。補誤差関数は，

$$\mathrm{erfc}(z) \equiv \int_z^\infty e^{-t^2}\,dt$$

で定義されます。

6．フーリエ変換の種々の定義のしかた

例えば，以下のような定義のしかたが，実際に市販されている公式集で使われています。

1．「岩波数学公式 II 級数・フーリエ解析」（岩波書店，1957 年）

Fourier 変換：$F(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{ixy}\,dx$

Fourier の積分公式：$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(y) e^{-ixy}\,dy$

2．「岩波数学辞典」（岩波書店，1960 年）

Fourier 変換：$F(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ix\xi}\,dx$

Fourier 逆変換：$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(y) e^{ix\xi}\,d\xi$

3．「共立数学公式」（共立出版，1969 年）：以下の２つの式が両方ともフーリエ変換と呼ばれています。

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(u) e^{-ixu}\,du$$

$$F(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{itu}\,dt$$

4．以下の定義のしかたもあります。

Fourier 変換：$F(k)=\dfrac{1}{2\pi}\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\,\mathrm{d}x$

Fourier 逆変換：$f(x)=\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} F(k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\,\mathrm{d}k$