複素フーリエ変換

by T.Koyama

１．フーリエ変換の定義

まず、フーリエ級数は、

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left\{ A_n \cos\left(2\pi n \frac{x}{a}\right) + B_n \sin\left(2\pi n \frac{x}{a}\right) \right\} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left\{ A(k)\cos(kx) + B(k)\sin(kx) \right\} \tag{1}$$

$$k \equiv \frac{2\pi}{a} n \tag{2}$$

にように表現され、係数 $A(k)$, $B(k)$ は、

$$\begin{aligned} A(k) &= \frac{1}{a}\int_{-a/2}^{a/2} f(x)\cos(kx)dx \\ B(k) &= \frac{1}{a}\int_{-a/2}^{a/2} f(x)\sin(kx)dx \end{aligned} \tag{3}$$

と計算される。

２．複素フーリエ変換の定義

以上のフーリエ表現は、オイラーの関係式を用いて、

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} C(k)\exp(-ikx) \tag{4}$$

とも表記することができる。一般的には、振幅 $C(k)$ も複素数であり、

$$C(k) = C_r(k) + iC_i(k) \tag{5}$$

と表される。これより、

$$\begin{aligned} f(x) &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} C(k)\exp(-ikx) \\ &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} \{C_r(k) + iC_i(k)\}\{\cos(-kx) + i\sin(-kx)\} \\ &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} \{C_r(k) + iC_i(k)\}\{\cos(kx) - i\sin(kx)\} \\ &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left[C_r(k)\cos(kx) + C_i(k)\sin(kx) + i\{-C_r(k)\sin(kx) + C_i(k)\cos(kx)\}\right] \end{aligned} \tag{6}$$

と展開することができる。

さて、関数 $f(x)$ が実関数である場合、式(6)の虚数項は存在しないのであるから、

$$\begin{aligned} C_r(-k) &= C_r(k) \\ C_i(-k) &= -C_i(k) \end{aligned} \tag{7}$$

が成立する。この条件はまとめて、

$$
\begin{aligned}
&C_r(-k)+iC_i(-k)=C_r(k)-iC_i(k) \\
&\therefore\ C(-k)=C^*(k)
\end{aligned}
\tag{8}
$$

とも表記できる。式(4)の逆フーリエ変換によって、$C(k)$ は、

$$
C(k)=\frac{1}{a}\int_{-a/2}^{a/2} f(x)\exp(ikx)dx=\frac{1}{a}\int_{-a/2}^{a/2} f(x)\cos(kx)dx+i\frac{1}{a}\int_{-a/2}^{a/2} f(x)\sin(kx)dx \tag{9}
$$

と計算され、これと式(1)を比較することによって、

$$
\begin{aligned}
A(k)=C_r(k)=\frac{1}{a}\int_{-a/2}^{a/2} f(x)\cos(kx)dx \\
B(k)=C_i(k)=\frac{1}{a}\int_{-a/2}^{a/2} f(x)\sin(kx)dx
\end{aligned}
\tag{10}
$$

であることがわかる。

以上より関数 $f(x)$ が実関数である場合、虚数項を除いて改めて式(6)を書くと、

$$
f(x)=\sum_{k=-\infty}^{\infty}\left\{C_r(k)\cos(kx)+C_i(k)\sin(kx)\right\} \tag{11}
$$

と表現できるが、高速フーリエ変換を用いた実際の数値計算では、この $C_r(k)$ と $C_i(k)$ が得られる。

3．振幅項に演算を施した場合の逆フーリエ変換

しばしば、高速フーリエ変換して得られた $C_r(k)$ と $C_i(k)$ に何らかの演算を施した後、それらを逆フーリエ変換して、実空間の物理量を求める場合がある。この際、演算後の振幅成分の奇関数および偶関数が変化する場合が出現するので注意を要する。具体的に、$C_r(k)$ と $C_i(k)$ に k をかけて逆フーリエ変換する場合を考えてみよう。

$$
\begin{aligned}
g(x)&=\sum_{k=-\infty}^{\infty} kC(k)\exp(-ikx) \\
&=\sum_{k=-\infty}^{\infty}\{kC_r(k)+ikC_i(k)\}\{\cos(kx)-i\sin(kx)\} \\
&=\sum_{k=-\infty}^{\infty}\left[kC_r(k)\cos(kx)+kC_i(k)\sin(kx)+i\{-kC_r(k)\sin(kx)+kC_i(k)\cos(kx)\}\right] \\
&=\sum_{k=-\infty}^{\infty} i\{kC_i(k)\cos(kx)-kC_r(k)\sin(kx)\}
\end{aligned}
\tag{12}
$$

のようになり、$g(x)$ は実関数ではなくなってしまっている。同様に今度は、$C_r(k)$ と $C_i(k)$ に $-k^2$ をかけて逆フーリエ変換してみよう（これは x による２階微分に相当する）。

$$
\begin{aligned}
h(x) &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} -k^2 C(k)\exp(-ikx) \\
&= -\sum_{k=-\infty}^{\infty} \{k^2 C_r(k) + ik^2 C_i(k)\}\{\cos(kx) - i\sin(kx)\} \\
&= -\sum_{k=-\infty}^{\infty} \left[k^2 C_r(k)\cos(kx) + k^2 C_i(k)\sin(kx) + i\{-k^2 C_r(k)\sin(kx) + k^2 C_i(k)\cos(kx)\}\right] \\
&= \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left[\{-k^2 C_r(k)\}\cos(kx) + \{-k^2 C_i(k)\}\sin(kx)\right]
\end{aligned} \tag{13}
$$

となり、$h(x)$ は実関数のままである。つまり、$C_r(k)$ と $C_i(k)$ に偶関数を作用させた場合は、まともに逆フーリエ変換を行って差し支えないが、奇関数を作用させ逆フーリエ変換した際に得られる関数は、もはや実関数ではなくなっている。

奇関数を作用させ、かつ逆フーリエ変換後の関数が実関数である場合の例としては、奇数回微分操作がある。微分によって、展開基底である sin と cos が入れ替わるので、結局展開基底の偶奇が入れ替わる事になり、奇関数を作用させた後、逆フーリエ変換した関数は実関数となる。ただし、この場合、常に-i も同時に作用させる必要がある。すなわち、例えば k ではなく $-ik$ を作用させる（これは x による１階微分に相当する)。具体的に計算してみよう。

$$
\begin{aligned}
g(x) &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} -ikC(k)\exp(-ikx) \\
&= -\sum_{k=-\infty}^{\infty} \{ikC_r(k) - kC_i(k)\}\{\cos(kx) - i\sin(kx)\} \\
&= -\sum_{k=-\infty}^{\infty} \left[ikC_r(k)\cos(kx) + ikC_i(k)\sin(kx) + \{kC_r(k)\sin(kx) - kC_i(k)\cos(kx)\}\right] \\
&= -\sum_{k=-\infty}^{\infty} \{kC_r(k)\sin(kx) - kC_i(k)\cos(kx)\} \\
&= \sum_{k=-\infty}^{\infty} \{kC_i(k)\cos(kx) - kC_r(k)\sin(kx)\} \\
&= \sum_{k=-\infty}^{\infty} \{(-ik)iC_i(k)\cos(kx) - (-ik)iC_r(k)\sin(kx)\}
\end{aligned} \tag{14}
$$

となる。なお先の２階微分は、$-ik$ を２回作用させ、$(-ik)(-ik) = -k^2$ とした場合に対応している。

ここで、式(13)と(14)の和は、

$$
\begin{aligned}
u(x) &= g(x) + h(x) \\
&= \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left[\{(-k^2)C_r(k) + (-ik)iC_i(k)\}\cos(kx) + \{(-k^2)C_i(k) - (-ik)iC_r(k)\}\sin(kx)\right]
\end{aligned} \tag{15}
$$

と表現される。これより、実空間における微分演算を逆空間で行う場合、$C_r(k)$ と $C_i(k)$ に作用させる実関数を

$$
\begin{aligned}
q_r(k) &= (-ik)^{2m} = (-i)^{2m}(k)^{2m} = (-1)^m (k)^{2m}, \quad (m \geq 1) \\
q_i(k) &= (-ik)^{2n+1} = (-ik)(-ik)^{2n} = (-ik)(-1)^n (k)^{2n} = (-i)(-1)^n (k)^{2n+1}, \quad (n \geq 0)
\end{aligned} \tag{16}
$$

とし、

$$
\begin{aligned}
p(x) &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left[\{q_r(k)C_r(k) + iq_i(k)C_i(k)\}\cos(kx) + \{q_r(k)C_i(k) - iq_i(k)C_r(k)\}\sin(kx) \right] \\
&= \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left[\begin{aligned} &\{(-1)^m (k)^{2m} C_r(k) + i(-i)(-1)^n (k)^{2n+1} C_i(k)\}\cos(kx) \\ &+\{(-1)^m (k)^{2m} C_i(k) - i(-i)(-1)^n (k)^{2n+1} C_r(k)\}\sin(kx) \end{aligned} \right] \\
&= \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left[\begin{aligned} &\{(-1)^m (k)^{2m} C_r(k) + (-1)^n (k)^{2n+1} C_i(k)\}\cos(kx) \\ &+\{(-1)^m (k)^{2m} C_i(k) - (-1)^n (k)^{2n+1} C_r(k)\}\sin(kx) \end{aligned} \right]
\end{aligned} \tag{17}
$$

として良いことがわかる。さらにこれは

$$
p(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left[\{Q(k)C_r(k) + Q(k)C_i(k)\}\cos(kx) + \{Q(k)C_i(k) - Q(k)C_r(k)\}\sin(kx) \right] \tag{18}
$$

$$
Q(k) \equiv (-1)^m (k)^{2m} + (-1)^n (k)^{2n+1}, \quad (m \geq 1,\ n \geq 0) \tag{19}
$$

と書き直すことができる。一見、余分な項が含まれているようにように見えるが、余分な部分は和を取る際にキャンセルアウトされている。

４．２次元の場合

まず２次元における複素フーリエ変換は、

$$
f(x, y) = \sum_{k_x=-\infty}^{\infty} \sum_{k_y=-\infty}^{\infty} C(k_x, k_y) \exp\{-i(k_x x + k_y y)\} \tag{20}
$$

にて定義される。振幅$C(k_x, k_y)$は、

$$
C(k_x, k_y) = C_r(k_x, k_y) + iC_i(k_x, k_y) \tag{21}
$$

と表される。これより、

$$
\begin{aligned}
f(x,y) &= \sum_{k_x=-\infty}^{\infty}\sum_{k_y=-\infty}^{\infty} C(k_x,k_y)\exp\{-i(k_x x + k_y y)\} \\
&= \sum_{k_x=-\infty}^{\infty}\sum_{k_y=-\infty}^{\infty} \{C_r(k_x,k_y)+iC_i(k_x,k_y)\}\exp\{-i(k_x x + k_y y)\} \\
&= \sum_{k_x=-\infty}^{\infty}\sum_{k_y=-\infty}^{\infty} \{C_r(k_x,k_y)+iC_i(k_x,k_y)\}[\cos(k_x x + k_y y) - i\sin(k_x x + k_y y)] \\
&= \sum_{k_x=-\infty}^{\infty}\sum_{k_y=-\infty}^{\infty} \begin{bmatrix} C_r(k_x,k_y)\cos(k_x x + k_y y) + C_i(k_x,k_y)\sin(k_x x + k_y y) \\ +i\left\{C_i(k_x,k_y)\cos(k_x x + k_y y) - C_r(k_x,k_y)\sin(k_x x + k_y y)\right\} \end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{22}
$$

と展開される。

さて先と同様に、関数 $f(x,y)$ が実関数である場合、式(22)の虚数項は存在しないのであるから、

$$
\begin{aligned}
\cos(k_x x + k_y y) &= \cos(k_x x)\cos(k_y y) - \sin(k_x x)\sin(k_y y) \\
\sin(k_x x + k_y y) &= \sin(k_x x)\cos(k_y y) + \cos(k_x x)\sin(k_y y)
\end{aligned}
$$

を考慮して、

$$
\begin{aligned}
&C_r(-k_x,-k_y) = C_r(k_x,k_y), \quad C_r(-k_x,k_y) = C_r(k_x,-k_y) \\
&C_i(-k_x,-k_y) = -C_i(k_x,k_y), \quad C_i(-k_x,k_y) = -C_i(k_x,-k_y)
\end{aligned}
$$

が成立する。この条件はベクトルで表現した方がわかりやすい。すなわち、

$$
\begin{aligned}
C_r(-\mathbf{k}) &= C_r(\mathbf{k}) \\
C_i(-\mathbf{k}) &= -C_i(\mathbf{k})
\end{aligned}
\tag{23}
$$

である。さらにこの条件はまとめて、

$$
\begin{aligned}
&C_r(-\mathbf{k}) + iC_i(-\mathbf{k}) = C_r(\mathbf{k}) - iC_i(\mathbf{k}) \\
&\therefore\ C(-\mathbf{k}) = C^*(\mathbf{k})
\end{aligned}
\tag{24}
$$

とも表記できる。式(20)の逆フーリエ変換によって、$C(k_x,k_y)$ は、

$$
\begin{aligned}
C(k_x,k_y) &= \frac{1}{a^2}\int_{-a/2}^{a/2}\int_{-a/2}^{a/2} f(x,y)\exp\{i(k_x x + k_y y)\}dxdy \\
&= \frac{1}{a^2}\int_{-a/2}^{a/2}\int_{-a/2}^{a/2} f(x,y)\cos(k_x x + k_y y)dxdy + i\frac{1}{a^2}\int_{-a/2}^{a/2}\int_{-a/2}^{a/2} f(x,y)\sin(k_x x + k_y y)dxdy
\end{aligned}
\tag{25}
$$

と計算され、

$$
\begin{aligned}
C_r(k_x,k_y) &= \frac{1}{a^2}\int_{-a/2}^{a/2}\int_{-a/2}^{a/2} f(x,y)\cos(k_x x + k_y y)dxdy \\
C_i(k_x,k_y) &= \frac{1}{a^2}\int_{-a/2}^{a/2}\int_{-a/2}^{a/2} f(x,y)\sin(k_x x + k_y y)dxdy
\end{aligned}
\tag{26}
$$

であることがわかる。

以上より関数 $f(x)$ が実関数である場合、虚数項を除いて改めて式(22)を書くと、

$$
f(x,y) = \sum_{k_x=-\infty}^{\infty}\sum_{k_y=-\infty}^{\infty}\left\{C_r(k_x,k_y)\cos(k_x x + k_y y) + C_i(k_x,k_y)\sin(k_x x + k_y y)\right\}
\tag{27}
$$

と表現できるが、高速フーリエ変換を用いた実際の数値計算では、この $C_r(k_x,k_y)$ と $C_i(k_x,k_y)$ が得られる。

５．多次元の場合

先の議論をそのまま多次元に拡張してみよう。まず多次元における複素フーリエ変換は、

$$
f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}=-\infty}^{\infty} C(\mathbf{k})\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})
\tag{28}
$$

にて定義される。振幅 $C(\mathbf{k})$ は、

$$
C(\mathbf{k}) = C_r(\mathbf{k}) + iC_i(\mathbf{k})
\tag{29}
$$

と表される。これより、

$$
\begin{aligned}
f(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}=-\infty}^{\infty} C(\mathbf{k})\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \\
&= \sum_{\mathbf{k}=-\infty}^{\infty} \{C_r(\mathbf{k}) + iC_i(\mathbf{k})\}\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \\
&= \sum_{\mathbf{k}=-\infty}^{\infty} \{C_r(\mathbf{k}) + iC_i(\mathbf{k})\}\{\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) - i\sin(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\} \\
&= \sum_{\mathbf{k}=-\infty}^{\infty} \left[C_r(\mathbf{k})\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) + C_i(\mathbf{k})\sin(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) + i\left\{C_i(\mathbf{k})\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) - C_r(\mathbf{k})\sin(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\right\}\right]
\end{aligned}
\tag{30}
$$

と展開される。

さて先と同様に、関数 $f(\mathbf{r})$ が実関数である場合、式(30)の虚数項は存在しないのであるから、

$$
\begin{aligned}
C_r(-\mathbf{k}) &= C_r(\mathbf{k}) \\
C_i(-\mathbf{k}) &= -C_i(\mathbf{k})
\end{aligned}
\tag{31}
$$

が成立する。さらにこの条件はまとめて、

$$
\begin{aligned}
&C_r(-\mathbf{k}) + iC_i(-\mathbf{k}) = C_r(\mathbf{k}) - iC_i(\mathbf{k}) \\
&\therefore\ C(-\mathbf{k}) = C^*(\mathbf{k})
\end{aligned}
\tag{32}
$$

とも表記できる。式(28)の逆フーリエ変換によって、$C(\mathbf{k})$は、

$$
C(\mathbf{k}) = \frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})d\mathbf{r} = \frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r})\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})d\mathbf{r} + i\frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r})\sin(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})d\mathbf{r} \tag{33}
$$

と計算され、

$$
\begin{aligned}
C_r(\mathbf{k}) &= \frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r})\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})d\mathbf{r} \\
C_i(\mathbf{k}) &= \frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r})\sin(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})d\mathbf{r}
\end{aligned}
\tag{34}
$$

であることがわかる。

以上より関数$f(\mathbf{r})$が実関数である場合、虚数項を除いて改めて式(30)を書くと、

$$
f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}=-\infty}^{\infty}\left\{C_r(\mathbf{k})\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) + C_i(\mathbf{k})\sin(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\right\} \tag{35}
$$

と表現できる。高速フーリエ変換を用いた実際の数値計算では、この$C_r(\mathbf{k})$と$C_i(\mathbf{k})$が得られる。

さて、$C_r(\mathbf{k})$や$C_i(\mathbf{k})$にある関数$B(\mathbf{k})$をかけて、逆フーリエ変換をする場合、$B(\mathbf{k})$が偶関数で$B(-\mathbf{k}) = B(\mathbf{k})$ならば、

$$
\begin{aligned}
f(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}=-\infty}^{\infty}\left[\begin{aligned}&B(\mathbf{k})C_r(\mathbf{k})\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) + B(\mathbf{k})C_i(\mathbf{k})\sin(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \\ &+i\left\{B(\mathbf{k})C_i(\mathbf{k})\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) - B(\mathbf{k})C_r(\mathbf{k})\sin(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\right\}\end{aligned}\right] \\
&= \sum_{\mathbf{k}=-\infty}^{\infty}\left\{B(\mathbf{k})C_r(\mathbf{k})\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) + B(\mathbf{k})C_i(\mathbf{k})\sin(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\right\}
\end{aligned}
$$

とすれば良い。偶関数の$B(-\mathbf{k}) = B(\mathbf{k})$である場合の例としては、

$$
B(\mathbf{k}) = k_x^2,\ k_y^2,\ k_x^2k_y^2,\ k_xk_y,\ k_x^2k_xk_y,\ k_y^2k_xk_y
$$

などが重要である。