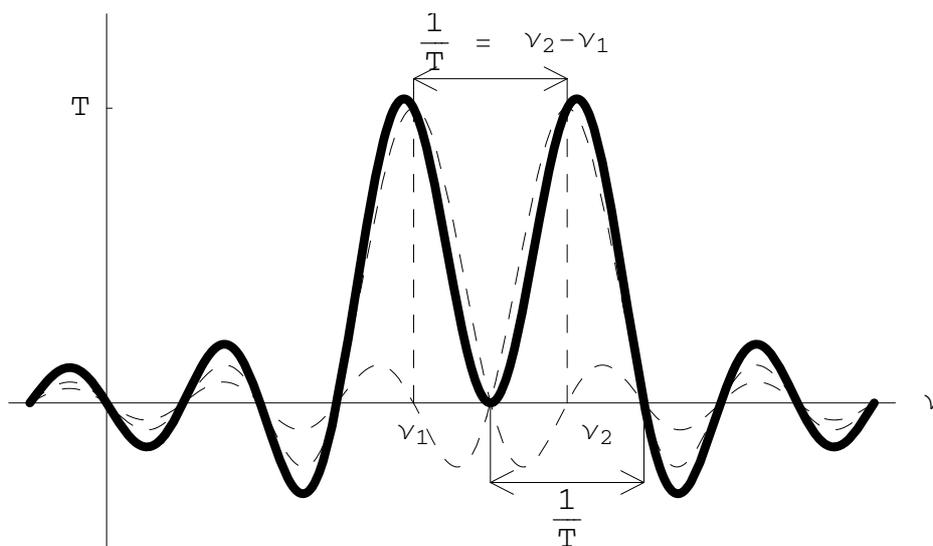


Fourierova transformace

(s příklady z infračervené spektroskopie)

Doc.RNDr.Alois Klíč, CSc. Prof.Ing.Karel Volka, CSc.
RNDr.Miroslava Dubcová



Předmluva ke 3. vydání

Do rukou se Vám dostává třetí, opět rozšířené, vydání skript o Fourierově transformaci a infračervené spektroskopii. Během těchto tří vydání narostl rozsah skript na dvojnásobek. Postupně jsme přidávali dvojrozměrnou Fourierovu transformaci, pak Fourierovy řady s aplikacemi. Nakonec se v tomto vydání objevuje Gramova-Schmidtova metoda ortonormalizace jako vhodný nástroj k získávání chromatogramů, doplněná singulárním rozkladem matice interferogramů.

Únor 2002

Autoři

Obsah

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Úvod | 9 |
| 2 | Základní pojmy a vzorce | 11 |
| 2.1 | Periodické funkce | 11 |
| 2.2 | Funkce $\sin t$ a $\cos t$ | 11 |
| 2.3 | Frekvence | 13 |
| 2.4 | Vlnočet | 13 |
| 2.5 | Funkce e^{it} | 14 |
| 2.6 | Funkce $\operatorname{sinc} t$ | 15 |
| 2.7 | Integrální sinus | 16 |
| 2.8 | Jednotková funkce | 17 |
| 2.9 | Konvoluce funkcí | 19 |
| 3 | Diracova delta-funkce | 24 |
| 3.1 | Zavedení δ -funkce | 24 |
| 3.2 | Fyzikální motivace | 24 |
| 3.3 | Některé vlastnosti δ -funkce | 26 |
| 3.4 | Konvoluce funkce s δ -funkcí | 28 |
| 3.5 | Násobení δ -funkce funkcí | 28 |
| 3.6 | Diskretizace spojitého signálu | 29 |
| 4 | Fourierova transformace. | 31 |
| 4.1 | Definice Fourierovy transformace | 31 |
| 4.2 | Vzorec pro inverzní FT | 32 |
| 4.3 | Vlastnosti Fourierovy transformace | 33 |
| 4.4 | Fourierova transformace sudé a liché funkce. | 37 |
| 4.5 | Fourierova transformace δ -funkce. | 38 |
| 4.6 | \mathcal{F} -obraz obdélníkového impulsu. | 39 |
| 4.7 | \mathcal{F} -obraz trojúhelníkového impulsu. | 41 |
| 4.8 | Grafické znázornění \mathcal{F} -obrazu a terminologické poznámky. | 43 |
| 4.9 | Fourierova transformace periodických funkcí. | 43 |
| 4.10 | Signály konečné délky. | 45 |
| 4.11 | Apodizace. | 47 |
| 4.12 | Dekonvoluce. | 52 |
| 4.13 | Aliasing a překrývání frekvencí. | 54 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 5 | Diskrétní Fourierova transformace | 60 |
| 5.1 | Zavedení diskrétní FT (DFT) | 60 |
| 5.2 | Aliasing v DFT | 62 |
| 5.3 | Zero-filling | 63 |
| 6 | Infračervený spektrometr | 65 |
| 6.1 | Spektrometr s Fourierovou transformací | 66 |
| 6.2 | Instrumentace | 73 |
| 6.2.1 | Zdroj záření | 73 |
| 6.2.2 | Dělič svazku paprsků | 75 |
| 6.2.3 | Pohyblivé zrcadlo | 76 |
| 6.2.4 | Detektor záření | 77 |
| 6.2.5 | Umístění vzorku | 78 |
| 6.2.6 | Měření optického dráhového rozdílu, digitalizace interferogramu | 78 |
| 6.3 | Zpracování interferogramu | 81 |
| 6.3.1 | Fázová korekce | 82 |
| 6.4 | Výhody FTIR spektroskopie | 87 |
| 6.5 | Spojení FTIR spektrometru s chromatografem | 91 |
| 7 | Dvojměrná Fourierova transformace | 94 |
| 7.1 | Definice dvojměrné FT | 94 |
| 7.2 | Vzorec pro inverzní dvojměrnou FT | 96 |
| 7.3 | Příklad | 96 |
| 7.4 | Vlastnosti dvojměrné FT | 99 |
| 7.4.1 | Linearita \mathcal{F}_2 -FT | 99 |
| 7.4.2 | Věta o obrazu derivace | 99 |
| 7.4.3 | Věta o derivaci obrazu | 100 |
| 7.4.4 | Věty o translaci | 100 |
| 7.4.5 | Věta o změně měřítka | 101 |
| 7.4.6 | Zobecnění věty o změně měřítka | 101 |
| 7.5 | Věty o obrazu konvoluce a součinu | 102 |
| 7.5.1 | Konvoluce funkcí dvou proměnných | 102 |
| 7.5.2 | Věta o obrazu konvoluce | 103 |
| 7.5.3 | Věta o obrazu součinu | 104 |
| 7.6 | Diracova δ_2 -funkce dvou proměnných | 104 |
| 7.6.1 | Posloupnost funkcí konvergující k δ_2 -funkci | 104 |
| 7.6.2 | Některé vlastnosti δ_2 -funkce | 105 |
| 7.6.3 | Násobení δ_2 -funkce obyčejnou funkcí | 106 |
| 7.6.4 | Diskretizace spojitého signálu | 106 |
| 7.6.5 | Několik užitečných impulsních funkcí dvou proměnných | 107 |
| 7.6.6 | Konvoluce funkce s δ_2 -funkcí | 110 |
| 7.7 | Fourierova \mathcal{F}_2 -transformace δ -funkcí | 110 |
| 7.7.1 | \mathcal{F}_2 -obraz impulsní funkce δ_2 | 110 |
| 7.7.2 | \mathcal{F}_2 -obraz konstantní funkce $J_2(t_1, t_2)$ | 111 |
| 7.7.3 | \mathcal{F}_2 -obrazy impulsních funkcí I_1 až I_6 | 111 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 7.8 | Fourierova \mathcal{F}_2 -transformace periodických funkcí | 112 |
| 7.8.1 | Periodické funkce dvou proměnných | 113 |
| 7.9 | Sinová a kosinová \mathcal{F}_2 -transformace | 114 |
| 7.10 | Poznámka k aplikaci dvojrozměrné FT | 114 |
| 8 | Fourierovy řady | 116 |
| 8.1 | Úvod | 116 |
| 8.2 | Pojem Fourierovy řady funkce f | 117 |
| 8.3 | Pomocné vztahy | 117 |
| 8.4 | Výpočet Fourierových koeficientů funkce f | 118 |
| 8.5 | Příklady | 120 |
| 8.6 | Fourierova řada sudé a liché funkce | 121 |
| 8.7 | Fázový tvar Fourierovy řady | 123 |
| 8.8 | Komplexní tvar Fourierovy řady | 126 |
| 8.9 | Parsevalova rovnost | 127 |
| 8.10 | Fourierova metoda pro rovnici difúze | 128 |
| 8.10.1 | Úvod | 128 |
| 8.10.2 | Věta o maximu pro rovnici difúze | 129 |
| 8.10.3 | Fourierova metoda | 130 |
| 8.10.4 | Příklady | 134 |
| 8.10.5 | Modifikovaná Fourierova metoda | 140 |
| 8.10.6 | Případ obecných okrajových podmínek | 143 |
| A | Nástin teorie distribucí | 144 |
| A.1 | Pojem funkcionálu | 144 |
| A.2 | Prostor funkcí D | 145 |
| A.3 | Regulární distribuce | 145 |
| A.4 | Singulární distribuce | 145 |
| A.5 | Vícerozměrné distribuce | 147 |
| A.5.1 | Regulární distribuce dvou proměnných | 147 |
| A.5.2 | Singulární distribuce dvou proměnných | 148 |
| B | Rychlá FT (FFT) | 149 |
| B.1 | Úvod | 149 |
| B.2 | Princip FFT | 149 |
| B.3 | Počet operací při provedení FFT | 151 |
| C | Gramova-Schmidtova ortonormalizace a chromatogramy | 153 |
| C.1 | Základní pojmy | 153 |
| C.1.1 | Podprostory \mathbb{R}^d a jejich ortonormální báze | 153 |
| C.1.2 | Změna báze | 154 |
| C.1.3 | Ortogonalní rozklad vektoru | 154 |
| C.2 | Gramova-Schmidtova ortonormalizace (GSO) | 155 |
| C.3 | Generování chromatogramů s použitím GSO | 157 |
| C.3.1 | Popis metody | 157 |
| C.3.2 | Ortogonalní matice | 158 |

| | | |
|----------|--|------------|
| C.3.3 | Singulární hodnoty matice | 158 |
| C.3.4 | Singulární rozklad matice | 159 |
| C.3.5 | Matice interferogramů pozadí | 159 |
| D | Program Mathematica | 163 |
| D.1 | Numerické výpočty | 164 |
| D.1.1 | Aritmetické operace | 164 |
| D.1.2 | Matematické funkce | 164 |
| D.1.3 | Komplexní čísla | 166 |
| D.2 | Symbolická matematika | 166 |
| D.2.1 | Algebraické operace | 166 |
| D.2.2 | Derivace | 167 |
| D.2.3 | Totální diferenciál | 168 |
| D.2.4 | Integrace | 168 |
| D.2.5 | Suma a součin | 169 |
| D.2.6 | Relační a logické operace | 170 |
| D.2.7 | Řešení rovnic | 171 |
| D.2.8 | Řešení diferenciálních rovnic | 171 |
| D.2.9 | Limity | 172 |
| D.3 | Numerická matematika | 172 |
| D.3.1 | Integrál, součet | 172 |
| D.3.2 | Řešení rovnic | 173 |
| D.3.3 | Řešení diferenciálních rovnic | 173 |
| D.4 | Lineární algebra | 173 |
| D.5 | Grafika | 176 |
| D.5.1 | Graf funkce $f(\mathbf{x})$ | 176 |
| D.5.2 | Graf funkce $f(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ | 178 |
| D.5.3 | Graf křivky zadané parametricky | 180 |
| D.6 | Čtení dat ze souboru, vypis dat do souboru | 181 |
| D.7 | Fourierova transformace | 183 |
| D.7.1 | Analytické výpočty FT | 183 |
| D.7.2 | Dekonvoluce | 186 |
| D.7.3 | Diskrétní Fourierova transformace | 189 |
| D.7.4 | Singulární rozklad matice | 191 |

Kapitola 1

Úvod

Fourierova transformace je pro matematika velmi rozsáhlou disciplínou a ještě rozsáhlejší jsou oblasti, ve kterých metoda Fourierovy transformace nalézá svoje použití. Znalý čtenář bude proto asi poněkud dotčen již nadpisem těchto skript, ve kterém se objevuje spojení Fourierovy transformace výlučně s infračervenou spektroskopií, a položí otázku, proč právě infračervená spektroskopie. Odpověď je jednoduchá: infračervená spektroskopie dává matematikovi řadu příležitostí demonstrovat na praktických příkladech to, co by v čistě matematickém díle bylo pro většinu chemiků málo stravitelné. Pokud jsme informace o infračervené spektroskopii rozšířili i o ty části, které s matematickým aparátem nemají nic společného, tak jenom proto, abychom čtenáři poskytli ucelený obraz. Rádi bychom však v budoucnu rozšířili toto dílo o další oblasti, v kterých Fourierova transformace nalézá své použití.

Spektroskopie je věda, která se zabývá interakcí elektromagnetického záření s hmotou. Tyto interakce mohou zahrnovat přechody mezi určitými energetickými stavy, které sledujeme jako absorpci nebo emisi elektromagnetického záření. Jiné interakce, jako jsou reflexe, refrakce, difrakce a některé typy rozptylu, nezahrnují přechody mezi energetickými stavy, ale způsobují změny v optických vlastnostech záření (např. změnu směru či polarizace).

Infračervená spektroskopie¹ se zabývá interakcemi té části elektromagnetického záření, kterou konvenčně vymezujeme vlnovými délkami 700 nm až 1000 μm , což odpovídá vlnovým 12 900 až 10 cm^{-1} nebo frekvencím 1,2 $\cdot 10^{14}$ až 6,0 $\cdot 10^{12}$ Hz. Pro chemiky je však nejzajímavější tzv. **oblast střední** (angl. M(id)IR) 2,5 až 50 μm (tj. 6,0 $\cdot 10^{12}$ až 1,2 $\cdot 10^{14}$ Hz nebo 4000 až 200 cm^{-1}). V této oblasti se odehrávají vibrační, resp. vibračně-rotační přechody v molekulách, a proto je také tato oblast nejužívanější, označení střední je často vynecháváno a blíže nespecifikovaným infračerveným spektrem rozumíme obvykle spektrum v oblasti střední. Oblast kratších vlnových délek je označována jako **oblast blízká** (angl. N(ear)IR), oblast vlnových délek delších jako **oblast vzdálená** (F(ar)IR).

Závislost intenzity záření emitovaného, absorbovaného nebo rozptýleného vzorkem na vlnové délce, frekvenci nebo vlnočtu (obecně veličině, která má vztah k energii interagujících fotonů) označujeme jako **spektrum**, a zařízení, které takové spektrum umožňuje měřit, **spektrometr**. Způsobům získání infračerveného spektra pomocí techniky, která získala označení FTIR spektroskopie (česky poněkud kostrbatě infračervená spektroskopie s Fourie-

¹Často používané označení spektrometrie má omezenější význam než spektroskopie a označuje kvantitativní měření intenzity elektromagnetického záření při jedné či více vlnových délkách s použitím fotoelektrické detekce.

rovou transformací) je věnován tento text.

Fourierova transformace jako matematický aparát a infračervená spektroskopie jako metoda získání infračerveného spektra jsou zcela nezávislé disciplíny a s trochou nadsázky lze říci, že jejich vývoj probíhal prakticky nezávisle až do roku 1963, kdy se objevil první komerční FTIR spektrometr pro střední oblast, vyrobený firmou Block Engineering Inc. (později Digilab Inc.). To je více než 160 let po objevení infračerveného záření Sirem W. Herschelem v roce 1800. Celá tato doba byla vyplněna intenzivním vývojem zařízení, která označujeme jako spektrometry disperzní (viz oddíl 6.4). Za pouhých 30 let, které uplynuly od vyrobení prvního FTIR spektrometru, se z velmi nákladného zařízení stal přístroj, který je dnes cenově srovnatelný se spektrometry disperzními a pro své kvality je z trhu prakticky vytlačuje. Pro pochopení funkce, výhod, ale i nevýhod FTIR spektrometru proti přístrojům disperzním je nezbytné seznámit se s matematickým aparátem, který označujeme jako Fourierova transformace. Většina textů, věnovaných FTIR spektroskopii, se detailnímu popisu matematického aparátu zdaleka vyhýbá, naopak studiu matematicky orientovaných učebnic se vyhýbá většina spektroskopiků. Tento text je jakýmsi kompromisem, který si neklade zvláštní nároky na rigoróznost matematických odvození, ale také nechce být učebnicí infračervené spektroskopie. Je na čtenáři, zda studium textu zahájí částí matematickou (kapitola 2) nebo částí spektroskopickou (kapitola 6). V obou částech nalezne odkazy, které by mu prolnutí obou disciplín měly usnadnit.

Kapitola 2

Základní pojmy a vzorce

2.1 Periodické funkce

Funkci f nazýváme **periodickou**, jestliže existuje **kladné** číslo T takové, že pro všechna $t \in D(f)$ platí

$$f(t \pm T) = f(t) \quad (2.1)$$

Číslo $T > 0$ nazýváme **periodou** funkce f . Je zřejmé, že je-li T perioda funkce f , pak každé číslo tvaru kT , $k \in \mathbf{N}$, je rovněž periodou funkce f , takže platí

$$f(t \pm kT) = f(t) \quad (2.2)$$

pro všechna $t \in D(f)$.

Nejmenší kladná perioda funkce f se nazývá **primitivní perioda**.

Příklad 2.1 Funkce $f(t) \equiv konst.$, tj. konstantní funkce, je periodickou funkcí. Její periodou je každé kladné reálné číslo, neboť pro každé $T > 0$ platí

$$f(t \pm T) = konst. = f(t).$$

Tato funkce nemá primitivní periodu, neboť nejmenší kladné číslo neexistuje!

2.2 Funkce $\sin t$ a $\cos t$.

S těmito funkcemi se budeme nejčastěji setkávat. Proto podrobněji zopakujeme některé jejich vlastnosti.

1. Funkce $\sin t$ a $\cos t$ mají primitivní periodu 2π .
2. Funkce $\cos at$, resp. $\sin at$, $a \in \mathbf{R}$, $a \neq 0$, mají periodu $\frac{2\pi}{a}$,
neboť

$$\cos a\left(t + \frac{2\pi}{a}\right) = \cos(at + 2\pi) = \cos at.$$

Příklad 2.2 Volíme-li:

(i) $a = 2\pi$, má funkce $\cos 2\pi t$ periodu $T = 1$.

(ii) $a = 2n\pi$, má funkce $\cos 2n\pi t$ periodu $T = \frac{1}{n}$, kde $n \in \mathbb{N}$.

(iii) $a = n$, má funkce $\cos nt$ periodu $T = \frac{2\pi}{n}$.

(iv) $a = \frac{\pi}{l}$, má funkce $\cos \frac{\pi}{l}t$ periodu $T = 2l$, kde $l \in \mathbb{R}^+$.

(v) $a = \frac{n\pi}{l}$, má funkce $\cos \frac{n\pi}{l}t$ periodu $T = \frac{2l}{n}$.

Tytéž vztahy platí pro funkci \sin .

Součtové vzorce pro \cos a \sin

$$\cos(\alpha \pm \beta) = \cos \alpha \cos \beta \mp \sin \alpha \sin \beta. \quad (2.3)$$

$$\sin(\alpha \pm \beta) = \sin \alpha \cos \beta \pm \cos \alpha \sin \beta. \quad (2.4)$$

$$\sin \alpha + \sin \beta = 2 \sin \frac{\alpha + \beta}{2} \cos \frac{\alpha - \beta}{2}. \quad (2.5)$$

$$\sin \alpha - \sin \beta = 2 \cos \frac{\alpha + \beta}{2} \sin \frac{\alpha - \beta}{2}. \quad (2.6)$$

$$\cos \alpha + \cos \beta = 2 \cos \frac{\alpha + \beta}{2} \cos \frac{\alpha - \beta}{2}. \quad (2.7)$$

$$\cos \alpha - \cos \beta = -2 \sin \frac{\alpha + \beta}{2} \sin \frac{\alpha - \beta}{2}. \quad (2.8)$$

Z těchto vzorců lze odvodit následující vzorce důležité při integrování součinů goniometrických funkcí.

$$\sin mx \sin nx = \frac{1}{2}[\cos(m-n)x - \cos(m+n)x] \quad (2.9)$$

$$\cos mx \cos nx = \frac{1}{2}[\cos(m-n)x + \cos(m+n)x] \quad (2.10)$$

$$\sin mx \cos nx = \frac{1}{2}[\sin(m+n)x + \sin(m-n)x] \quad (2.11)$$

Například vzorec (2.10) dostaneme ze vzorce (2.7) položíme-li v něm $\alpha = mx + nx$, $\beta = mx - nx$.

Příklad 2.3 Například pomocí vzorce (2.11) dostáváme

$$\int_0^{2\pi} \sin 2x \cos 3x dx = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} [\sin 5x + \sin(-x)] dx = 0.$$

2.3 Frekvence

Jestliže periodickou funkci $f(t)$ interpretujeme jako nějaký fyzikální periodický **signál** s periodou T , pak **frekvenci** ν tohoto signálu definujeme vztahem

$$\nu = \frac{1}{T}. \quad (2.12)$$

Fyzikální rozměr frekvence je sec^{-1} a jednotkou je 1 Hz.

Poznámka 2.1 Protože signál $f(t)$, mající periodu T , má i periodu kT , $k \in \mathbb{N}$, má kromě frekvence $\nu = \frac{1}{T}$ i frekvenci $\nu_k = \frac{1}{kT} = \frac{\nu}{k}$. **Primitivní periodě** odpovídá tzv. **základní frekvence**.

Vraťme se ještě ke vztahu (2.12). Je-li signál $f(t)$ neperiodický, pak jeho primitivní perioda je $T = \infty$ a odpovídající frekvence $\nu = 0$.

Příklad 2.4 Z příkladu 2.2 plyne:

- (i) Funkce $\cos 2\pi t$ má základní frekvenci $\nu = 1$.
- (ii) Funkce $\cos 2n\pi t$ má základní frekvenci $\nu = n$.
- (iii) Funkce $\cos nt$ má základní frekvenci $\nu = \frac{n}{2\pi}$.
- (iv) Funkce $\cos \frac{\pi t}{l}$ má základní frekvenci $\nu = \frac{1}{2l}$.
- (v) Funkce $\cos \frac{n\pi t}{l}$ má základní frekvenci $\nu = \frac{n}{2l}$.

2.4 Vlnočet

Uvažujme vlnění s vlnovou délkou λ . Pak číslo

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} \quad (2.13)$$

se nazývá **vlnočet (vlnové číslo)**. Protože $\lambda = c \cdot T$, kde c je rychlost šíření vlnění a T je perioda (doba kmitu), pak

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{cT} = \frac{1}{c} \cdot \frac{1}{T} = \frac{1}{c} \nu,$$

tedy

$$\nu = c\tilde{\nu}. \quad (2.14)$$

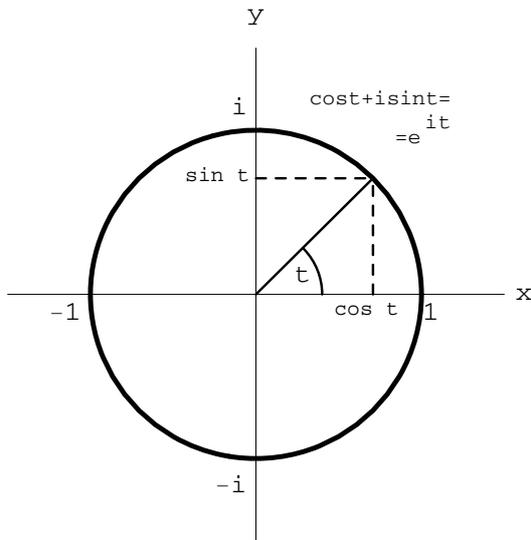
Toto je vztah mezi frekvencí (kmitočtem) a vlnovým číslem (vlnočtem).

2.5 Funkce e^{it}

Funkce e^{it} , kde i je imaginární jednotka, ($i^2 = -1$) a $t \in R$, je definována vztahem

$$e^{it} = \cos t + i \sin t. \quad (2.15)$$

Je to komplexní funkce reálné proměnné. Tato funkce je periodická a má primitivní periodu 2π .



Obrázek 2.1: Definice e^{it}

Protože

$$|e^{it}| = \sqrt{\cos^2 t + \sin^2 t} = 1,$$

zobrazuje funkce e^{it} reálnou osu na jednotkovou kružnici v Gaussově rovině, viz obr.2.1.

Cvičení 2.1 Určete

$$e^{\frac{i\pi}{4}}, e^{\frac{i\pi}{2}}, e^{i\pi}, e^{2i\pi}.$$

Příklad 2.5 Probíhá-li proměnná t interval $(-\infty, +\infty)$, pak bod $z = e^{2\pi i \nu t}$ obíhá jednotkovou kružnici. Doba jednoho oběhu je $\frac{1}{\nu}$, což je perioda funkce $e^{2\pi i \nu t}$. Jinými slovy, bod $e^{2\pi i \nu t}$ obíhá jednotkovou kružnici s frekvencí ν . Průmět tohoto bodu na osu x (nebo na osu y) koná kmitavý pohyb mezi body -1 a 1 s frekvencí ν .

Ze vztahu (2.15) plynou tyto vztahy:

$$\cos t = \frac{e^{it} + e^{-it}}{2}, \quad \sin t = \frac{e^{it} - e^{-it}}{2i} \quad (2.16)$$

tzv. **Eulerovy vzorce**. Připomeňme ještě, že:

$$1. \quad \frac{d}{dt} e^{i\nu t} = (e^{i\nu t})' = i\nu e^{i\nu t},$$

neboť

$$(e^{i\nu t})' = (\cos \nu t + i \sin \nu t)' = -\nu \sin \nu t + i\nu \cos \nu t = i\nu(\cos \nu t + i \sin \nu t) = i\nu e^{i\nu t}.$$

$$2. \quad \int e^{i\nu t} dt = \frac{e^{i\nu t}}{i\nu} = \frac{-i}{\nu} e^{i\nu t}.$$

Příklad 2.6 Vypočítejme

$$\int_0^{2\pi} t e^{it} dt.$$

Použijeme-li vztah (2.15), pak dostaneme:

$$\int_0^{2\pi} te^{it} dt = \int_0^{2\pi} t \cos t dt + i \int_0^{2\pi} t \sin t dt$$

a po použití metody per partes na oba integrály obdržíme

$$\int_0^{2\pi} t \cos t dt = 0, \quad \int_0^{2\pi} t \sin t dt = -2\pi$$

takže

$$\int_0^{2\pi} te^{it} dt = -2\pi i.$$

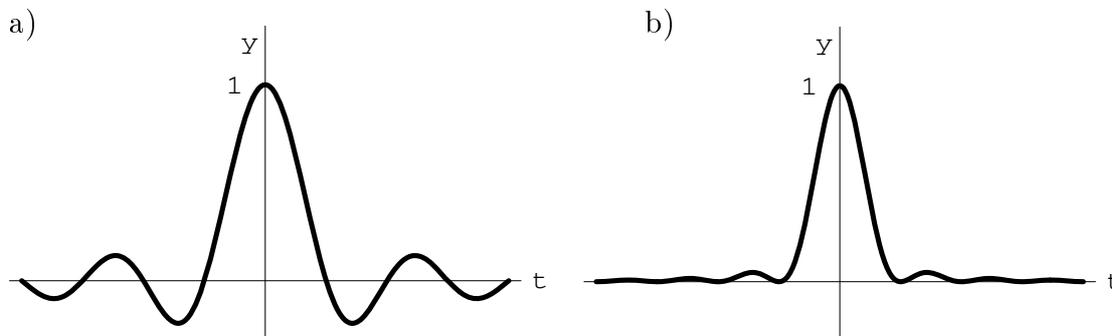
Kratší je výpočet bez použití (2.15) a to přímým použitím per partes na daný integrál:

$$\int_0^{2\pi} te^{it} dt = \left[-ite^{it} \right]_0^{2\pi} + i \int_0^{2\pi} e^{it} dt = -2\pi i + i \frac{e^{i2\pi} - e^0}{i} = -2\pi i.$$

2.6 Funkce sinc t

Funkce sinc t je definována takto:

$$\operatorname{sinc} t = \begin{cases} \frac{\sin t}{t} & \text{pro } t \neq 0, \\ 1 & \text{pro } t = 0. \end{cases} \quad (2.17)$$



Obrázek 2.2: Graf $\operatorname{sinc} t$ a $\operatorname{sinc}^2 t$

Definiční obor funkce sinc t je \mathbb{R} . Funkce je spojitá na celém definičním oboru, neboť pro $t \neq 0$ je to zřejmé a pro $t = 0$ víme, že

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{\sin t}{t} = 1.$$

Dále je funkce $\text{sinc } t$ **sudá**, tudíž její graf je souměrný podle osy y , viz obr.2.2a.

S funkcí $\text{sinc } t$ se budeme často setkávat v dalším textu. Rovněž tak s funkcí $\text{sinc}^2 t$, jejíž graf je nakreslen na obr.2.2b.

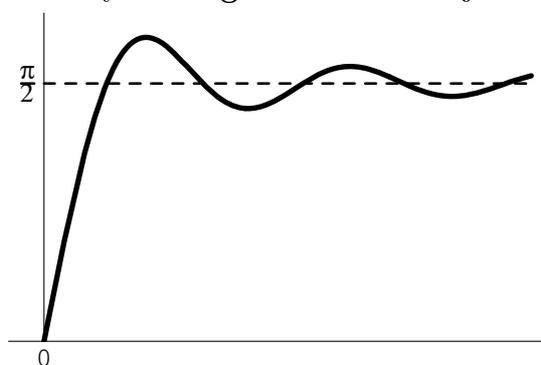
Cvičení 2.2 Určete vzdálenost **nulových** bodů funkce $\text{sinc } 2\pi\nu t$.

2.7 Integrální sinus

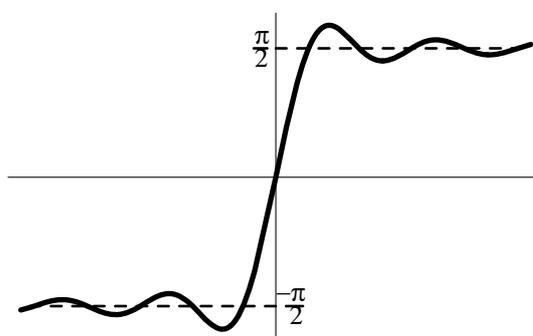
Funkce definovaná pro $x \in [0, \infty)$ vztahem

$$\text{Si } x = \int_0^x \frac{\sin t}{t} dt = \int_0^x \text{sinc } t dt \quad (2.18)$$

se nazývá **integrální sinus**. Zřejmě $\text{Si } 0 = 0$.



Obrázek 2.3: Graf $\text{Si } x$



Obrázek 2.4: Rozšíření $\text{Si } x$ na $(-\infty, +\infty)$

Dále se dá dokázat, že existuje

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} \int_0^x \text{sinc } t dt = \frac{\pi}{2} \quad (2.19)$$

a z (2.19) dále plyne, vzhledem k sudosti $\text{sinc } t$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \text{sinc } t dt = \pi. \quad (2.20)$$

Vztah (2.20) je třeba brát v tom smyslu, že

$$\lim_{a \rightarrow \infty} \int_{-a}^a \text{sinc } t dt = \pi.$$

Graf integrálního sinu je zakreslen na obr.2.3.

Poznámka 2.2 Definiční obor integrálního sinu lze přirozeným způsobem rozšířit z $[0, \infty)$ na $(-\infty, +\infty)$ tak, že v definičním vztahu (2.7) připustíme i $x < 0$. Pak máme pro $x < 0$:

$$\int_0^x \operatorname{sinc} t \, dt = - \int_x^0 \operatorname{sinc} t \, dt = - \int_0^{|x|} \operatorname{sinc} t \, dt = - \int_0^{-x} \operatorname{sinc} t \, dt.$$

Použili jsme toho, že funkce $\operatorname{sinc} t$ je sudá funkce a dále substituci $t = -s$. Tudíž pro $x < 0$ jsme odvodili, že

$$\operatorname{Si} x = -\operatorname{Si}(-x),$$

takže takto rozšířená definice integrálního sinu na $(-\infty, +\infty)$ dává **lichou** funkci. Její graf je nakreslen na obr.2.4 a je tudíž souměrný podle počátku.

Rozvinutím funkce $\operatorname{Si} x$, $x \in (-\infty, +\infty)$ v Taylorovu řadu se středem v $x_0 = 0$ dostáváme

$$\operatorname{Si} x = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)(2n+1)!}.$$

Cvičení 2.3 Nakreslete graf funkce

$$\operatorname{Si}^* x = \int_{-\infty}^x \frac{\sin t}{t} \, dt.$$

Cvičení 2.4 Rozvedte v Taylorovu řadu se středem v bodě $x_0 = 0$ funkci $\operatorname{sinc} x$.

2.8 Jednotková funkce

Funkci definovanou vztahem

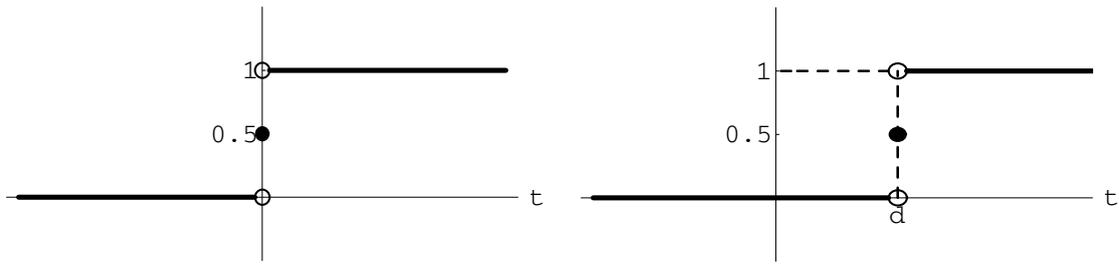
$$1(t) = \begin{cases} 0 & \text{pro } t < 0, \\ \frac{1}{2} & \text{pro } t = 0, \\ 1 & \text{pro } t > 0 \end{cases}$$

nazýváme **jednotkovou funkcí (jednotkovým skokem)** , v literatuře též často nazývanou **Heavisideovou funkcí**.

Příklad 2.7 Nakresleme grafy funkcí ($d > 0$):

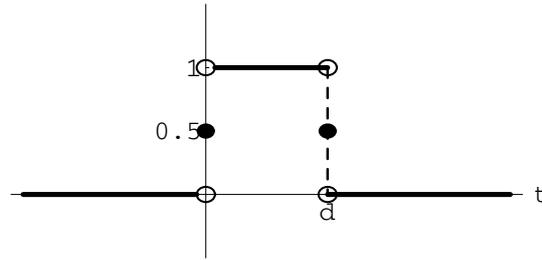
$$a) r_1(t) = 1(t) - 1(t-d), b) r_2(t) = t[1(t) - 1(t-d)] + d1(t-d).$$

Graf $r_1(t)$ dostaneme postupem znázorněným na obr.2.5 a graf $r_2(t)$ získáme obdobným způsobem, viz obr.2.6.



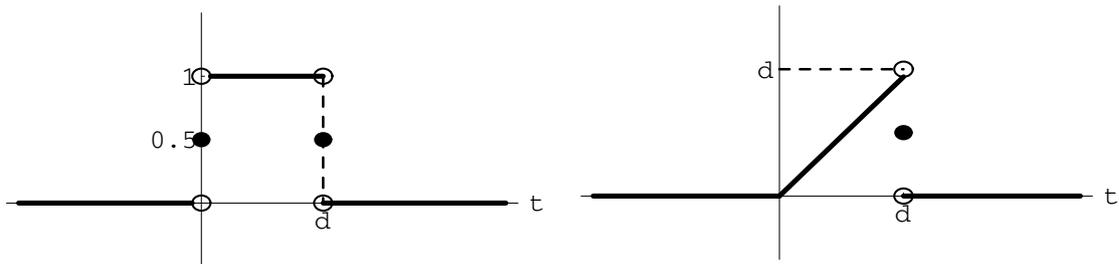
a) graf $1(t)$

b) graf $1(t-d)$



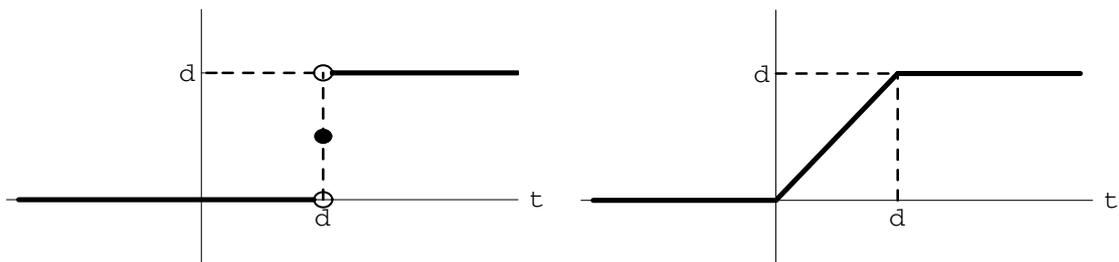
c) graf $r_1(t)$

Obrázek 2.5: Konstrukce grafu $r_1(t)$



a) graf $1(t) - 1(t-d)$

b) graf $t \cdot [1(t) - 1(t-d)]$



c) graf $d \cdot 1(t-d)$

d) graf $r_2(t)$

Obrázek 2.6: Konstrukce grafu $r_2(t)$

2.9 Konvoluce funkcí

Konvoluce funkcí je jedna z nejdůležitějších operací s funkcemi, které se vyskytují ve Fourierově transformaci a jejich aplikacích.

Nechť f a g jsou po částech spojitě funkce na $(-\infty, +\infty)$. Potom funkci

$$(f * g)(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x-s)g(s) ds \quad (2.21)$$

nazýváme **konvolucí** funkcí f a g . Říkáme, že konvoluce $f * g$ existuje, jestliže pro skoro všechna $x \in R$ je

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x-s)g(s) ds < +\infty.$$

Poznámka 2.3 V definičním integrálu (2.21) je integrační proměnnou s a x je pevné číslo!

Provedeme-li na pravé straně v (2.21) substituci

$$x-s = \tau \Rightarrow s = x-\tau, \quad ds = -d\tau,$$

pak

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x-s)g(s) ds = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\tau)g(x-\tau) d\tau, \quad (2.22)$$

což značí, že konvoluce je **komutativní** operace, tj.

$$f * g = g * f. \quad (2.23)$$

Takže můžeme psát

$$(f * g)(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x-s)g(s) ds = \int_{-\infty}^{+\infty} f(s)g(x-s) ds \quad (2.24)$$

a při výpočtu konvoluce použijeme ten integrál, který je početně jednodušší.

Příklad 2.8 Spočítejme konvoluci funkcí $f(x) = 1(x)e^{ax}$ a $g(x) = 1(x)e^{bx}$, kde $a \neq b$.

Použitím prvního integrálu v (2.24) dostáváme:

$$\begin{aligned} (f * g)(x) &= \int_{-\infty}^{+\infty} 1(x-s)e^{a(x-s)}1(s)e^{bs} ds = \int_0^x e^{ax}e^{-as}e^{bs} ds = \\ &= e^{ax} \int_0^x e^{(b-a)s} ds = \frac{e^{ax} - e^{bx}}{a-b}. \end{aligned}$$

Při výpočtu jsme použili toho, že $1(s) = 0$ pro $s < 0$ a $1(x-s) = 0$ pro $s > x$. Výpočet je proveden pro $x \geq 0$ a pro $x < 0$ dostaneme přímo $(f * g)(x) \equiv 0$. Tudíž celkový výsledek je

$$(f * g)(x) = 1(x)e^{ax} * 1(x)e^{bx} = 1(x) \frac{e^{ax} - e^{bx}}{a-b}.$$

Konvoluci konkrétních funkcí budeme značit tak, jako v posledním řádku, tj. místo $(f * g)(x)$ budeme používat značení $f(x) * g(x)$.

Cvičení 2.5 Spočítejte konvoluci

$$1(x)e^{ax} * 1(x)e^{ax}.$$

[Výsledek: $1(x)xe^{ax}$.]

Příklad 2.9 (Důležitý!) Nechť

$$r(t) = 1(t) - 1(t - d), \quad d > 0.$$

Funkci $r(t)$ lze interpretovat jako **obdélníkový impuls**, viz obr.2.5c. Spočítejte konvoluci

$$r * r.$$

Z (2.24) plyne

$$\begin{aligned} (r * r)(t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} r(s)r(t-s) ds = \int_{-\infty}^{+\infty} [1(s) - 1(s-d)][1(t-s) - 1(t-s-d)] ds = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} 1(s)1(t-s) ds - \int_{-\infty}^{+\infty} 1(s)1(t-s-d) ds - \int_{-\infty}^{+\infty} 1(s-d)1(t-s) ds + \int_{-\infty}^{+\infty} 1(s-d)1(t-s-d) ds. \end{aligned}$$

Nyní vypočítáme postupně všechny čtyři integrály.

$$I_1(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} 1(s)1(t-s) ds = \int_0^t ds = \begin{cases} t & \text{pro } t \geq 0, \\ 0 & \text{pro } t < 0 \end{cases}$$

$$I_2(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} 1(s)1(t-s-d) ds = \int_0^{t-d} ds = \begin{cases} t-d & \text{pro } t > d, \\ 0 & \text{pro } t < d \end{cases}$$

$$I_3(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} 1(s-d)1(t-s) ds = \int_d^t ds = \begin{cases} t-d & \text{pro } t > d, \\ 0 & \text{pro } t < d \end{cases}$$

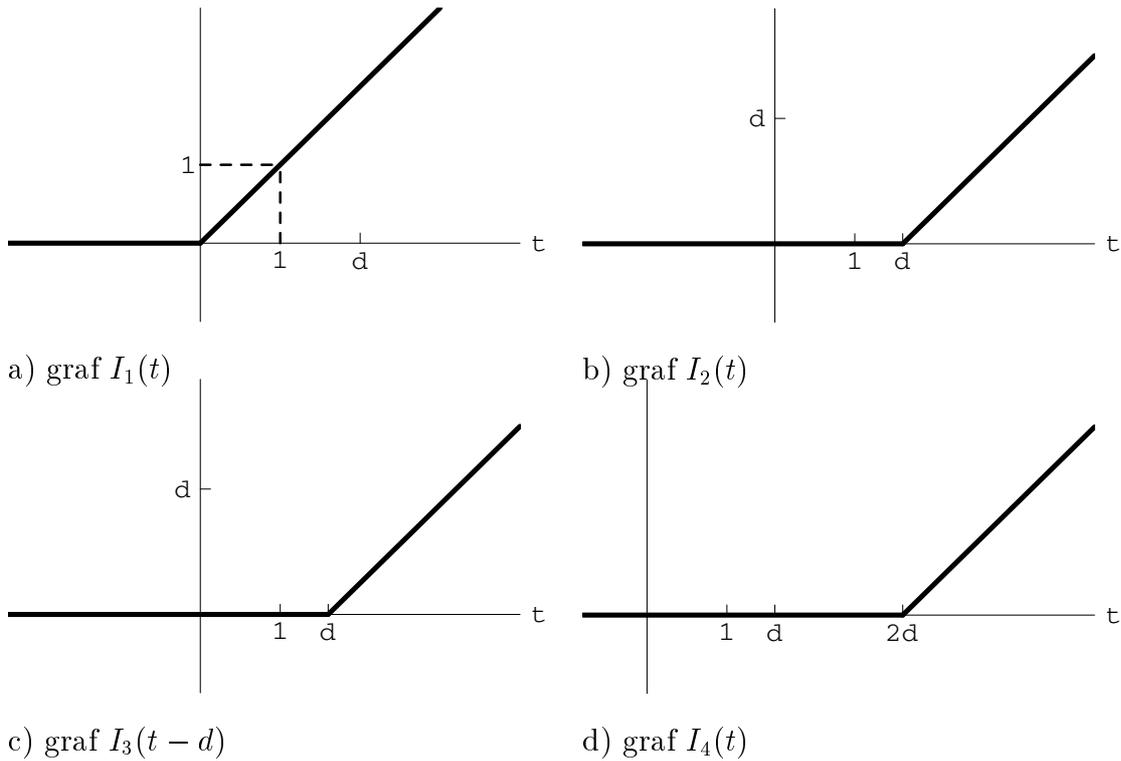
$$I_4(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} 1(s-d)1(t-s-d) ds = \int_d^{t-d} ds = \begin{cases} t-2d & \text{pro } t > 2d, \\ 0 & \text{pro } t < 2d \end{cases}$$

Například pro $I_4(t)$ máme: $1(s-d) = 1$ pro $s > d$ a současně aby $1(t-s-d) = 1$ musí být $t-s-d > 0$, tj. $s < t-d$, dohromady tedy pro s platí $d < s < t-d \Rightarrow 2d < t$. Pro taková t je integrand v $I_4(t)$ nenulový, pro ostatní t je nulový.

Celkově dostáváme:

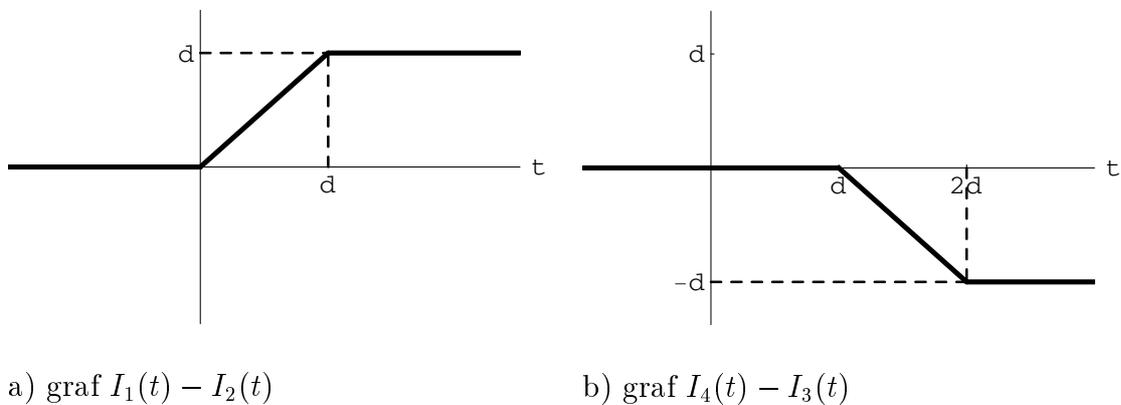
$$(r * r)(t) = I_1(t) - I_2(t) - I_3(t) + I_4(t).$$

Grafy funkcí $I_1(t), I_2(t), I_3(t), I_4(t)$ jsou na obr. 2.7a,b,c,d.



Obrázek 2.7: Pomocné grafy

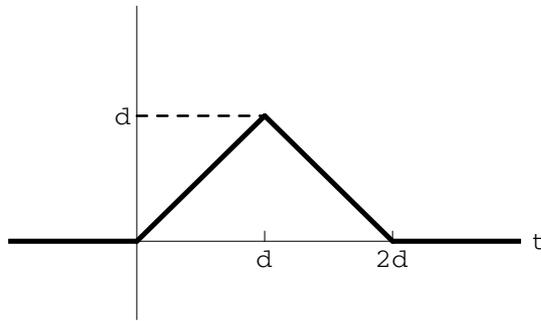
Nakreslíme grafy funkcí $I_1(t) - I_2(t)$ a $I_4(t) - I_3(t)$, viz obr.2.8.



Obrázek 2.8: Pomocné grafy

Nakonec je na obr.2.9 nakreslen graf funkce $(r * r)(t)$, tj.funkce definované takto:

$$(r * r)(t) = \begin{cases} 0 & \text{pro } t < 0, \\ t & \text{pro } t \in \langle 0, d \rangle, \\ -t + 2d & \text{pro } t \in \langle d, 2d \rangle, \\ 0 & \text{pro } t > 2d \end{cases}$$



Obrázek 2.9: graf $(r * r)(t)$

Poznámka 2.4 Výsledkem konvoluce dvou stejných obdélníkových impulsů je **trojúhelníkový** impuls.

Příklad 2.10 Položme

$$h(t) = 1(t) - 1(-t).$$

Pak

$$h(t) = \begin{cases} -1 & \text{pro } t < 0, \\ 0 & \text{pro } t = 0, \\ 1 & \text{pro } t > 0 \end{cases}$$

Spočítejme konvoluci $\text{sinc } t * h(t)$.

$$\begin{aligned} \text{sinc } t * h(t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \text{sinc } s [1(t-s) - 1(s-t)] ds = - \int_{-\infty}^{+\infty} \text{sinc } s 1(t-s) ds - \\ &- \int_{-\infty}^{+\infty} \text{sinc } s 1(s-t) ds = \int_{-\infty}^t \text{sinc } s ds - \int_t^{+\infty} \text{sinc } s ds. \end{aligned}$$

Tento rozdíl integrálů vyjádříme pomocí integrálního sinu. Připomínáme, že

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \text{sinc } t dt = \pi$$

a funkce $\text{sinc } t$ je sudá, takže

$$\int_{-\infty}^0 \text{sinc } t dt = \int_0^{+\infty} \text{sinc } t dt = \frac{\pi}{2}.$$

Pro $t < 0$ máme:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^t \text{sinc } s ds &= \frac{\pi}{2} - \int_t^0 \text{sinc } s ds = \frac{\pi}{2} + \int_0^t \text{sinc } s ds = \frac{\pi}{2} + \text{Si } t, \\ \int_t^{+\infty} \text{sinc } s ds &= \int_t^0 \text{sinc } s ds + \int_0^{+\infty} \text{sinc } s ds = \frac{\pi}{2} - \int_0^t \text{sinc } s ds = \frac{\pi}{2} - \text{Si } t. \end{aligned}$$

Pro $t \geq 0$ máme:

$$\int_{-\infty}^t \operatorname{sinc} s \, ds = \frac{\pi}{2} + \int_0^t \operatorname{sinc} s \, ds = \frac{\pi}{2} + \operatorname{Si} t,$$
$$\int_t^{+\infty} \operatorname{sinc} s \, ds = \frac{\pi}{2} - \int_0^t \operatorname{sinc} s \, ds = \frac{\pi}{2} - \operatorname{Si} t.$$

Tudíž

$$\operatorname{sinc}(t) * h(t) = 2\operatorname{Si} t. \quad (2.25)$$

Poznámka 2.5 Základní vlastnosti konvoluce. Necht f, g, h jsou funkce. Pak platí:

- (i) $(af) * g = f * (ag) = a(f * g)$, $a \in R$.
- (ii) $(f_1 + f_2) * g = f_1 * g + f_2 * g$ (*distributivnost*).
- (iii) $f * g = g * f$, (*komutativnost*).
- (iv) $(f * g) * h = f * (g * h) = f * g * h$, (*asociativnost*).

Důkaz těchto vztahů lze ponechat čtenáři jako cvičení. (Vztah (iii) jsme již dokázali v úvodu tohoto paragrafu.)

Kapitola 3

Diracova delta-funkce

3.1 Zavedení δ -funkce

Diracova delta funkce (krátce δ -funkce) se obvykle zavádí následujícím způsobem:

$$\delta(t) = \begin{cases} 0 & \text{pro } t \neq 0 \\ \infty & \text{pro } t = 0 \end{cases} \quad (3.1)$$

a

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(t) dt = 1. \quad (3.2)$$

Poznámka 3.1 Z matematického hlediska si vztahy (3.1) a (3.2) odporují, neboť funkce, která je rovna nule všude, až na jeden bod, musí mít integrál nulový.

Přesto se v mnoha aplikacích ukazuje užitečné s takto definovanou „funkcí“ pracovat. Tedy $\delta(t)$ není funkcí v obvyklém smyslu. Budeme jí krátce nazívat **δ -funkce**.

δ -funkce je speciální případ tzv. **zobecněných funkcí**, neboli **distribucí**. Podrobněji o tom pojednáme v Dodatku A. Samotný text této kapitoly je věnován základním vlastnostem δ -funkcí používaných ve Fourierově transformaci a následně v infračervené spektroskopii. Odvození těchto vlastností bude více méně intuitivní a matematicky ne zcela rigorózní. Zájemce o nástin rigorózního přístupu odkazujeme na výše zmíněný dodatek.

3.2 Fyzikální motivace

Zavedení δ -funkce do fyziky bylo motivováno snahou popsat **impulsní děje**. Impulsem obvykle rozumíme krátké působení nějaké veličiny s vysokou intenzitou. Příkladem impulsu může sloužit velká síla působící po velmi krátkou dobu, nebo proud velké intenzity, který trvá krátkou dobu. Přitom množství náboje, který za tu dobu projde vodičem je konečné nenulové.

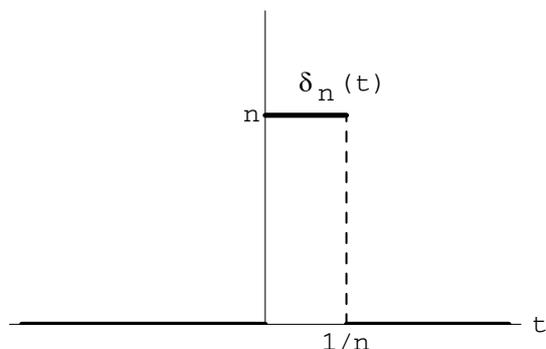
Je zřejmé, že takové veličiny můžeme alespoň přibližně popsat funkcí

$$\delta_n(t) = \begin{cases} 0 & \text{pro } t < 0 \\ n & \text{pro } 0 \leq t \leq \frac{1}{n} \\ 0 & \text{pro } t > \frac{1}{n}, \end{cases} \quad (3.3)$$

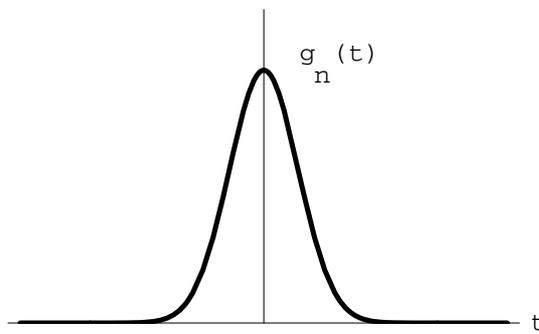
pro kterou je

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta_n(t) dt = 1 \quad (3.4)$$

Graf funkce $\delta_n(t)$ je nakreslen na obr.(3.1)



Obrázek 3.1: Graf funkce $\delta_n(t)$



Obrázek 3.2: Graf funkce $g_n(t)$

Funkce $\delta_n(t)$ bude popisovat výše uvedené děje tím lépe, čím větší bude n . Provedme limitní přechod pro $n \rightarrow \infty$ a dostaneme

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \delta_n(t) = \begin{cases} 0 & \text{pro } t \neq 0 \\ \infty & \text{pro } t = 0 \end{cases}$$

tedy

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \delta_n(t) = \delta(t),$$

příčemž

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta_n(t) dt = 1. \quad (3.5)$$

Při formální záměně pořadí limitního přechodu a integrování dostaneme

$$1 = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta_n(t) dt = \int_{-\infty}^{\infty} \lim_{n \rightarrow \infty} \delta_n(t) dt = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(t) dt. \quad (3.6)$$

Tato záměna není matematicky správná, přesto ji při intuitivním odvozování některých vlastností δ -funkce použijeme (ovšem s tím, že v dodatku, jak již bylo řečeno výše, vše uvedeme do pořádku).

Poznámka 3.2 Posloupnost funkcí $\delta_n(t)$, $n = 1, 2, \dots$ definovaná vztahem (3.3) má tedy limitu rovnou δ – funkci $\delta(t)$, kterou popisujeme „nekonečně velký impuls“ v čase $t = 0$. Proto se někdy δ – funkci říká též **impulsní funkce**

Posloupnost funkcí (3.3) ovšem není jediná posloupnost, jejíž limita je rovna δ – funkci $\delta(t)$. Např. posloupnost

$$g_n(t) = \frac{n}{\sqrt{\pi}} e^{-n^2 t^2}, \quad (3.7)$$

viz obr. 3.2 má limitu rovnou δ – funkci $\delta(t)$ a platí

$$\int_{-\infty}^{\infty} g_n(t) dt = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{n}{\sqrt{\pi}} e^{-n^2 t^2} dt = 1. \quad (3.8)$$

Cvičení 3.1 S použitím Laplaceova integrálu

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$$

ověřte vztah 3.8.

Příklad 3.1 (Důležitý). Dalším příkladem posloupnosti funkcí, jejíž limitou je δ -funkce $\delta(t)$ je posloupnost

$$h_n(t) = \frac{n \sin nt}{\pi nt} = \frac{n}{\pi} \text{sinc}(nt). \quad (3.9)$$

Pro $t = 0$ máme $h_n(0) = \frac{n}{\pi}$ a tudíž

$$\lim_{n \rightarrow \infty} h_n(0) = \infty.$$

Dále snadno zjistíme, že

$$\int_{-\infty}^{\infty} h_n(t) dt = \frac{n}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(nt)}{nt} dt = 1,$$

neboť jak víme, viz (2.20)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin t}{t} dt = \pi.$$

3.3 Některé vlastnosti δ -funkce

1.vlastnost: Položme

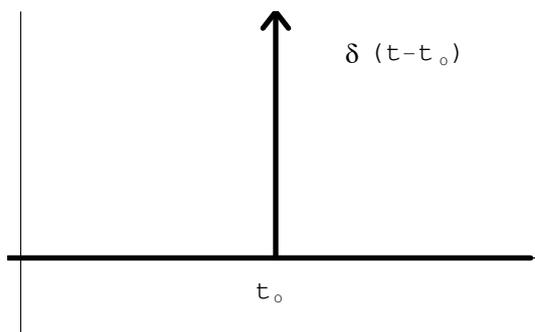
$$\delta(t - t_0) = \begin{cases} 0 & \text{pro } t \neq t_0 \\ \infty & \text{pro } t = t_0, \end{cases} \quad (3.10)$$

a

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(t - t_0) dt = 1.$$

Takto posunutá δ -funkce $\delta(t - t_0)$ modeluje impuls v čase $t = t_0$ a je limitou posloupnosti funkcí $\delta_n(t - t_0)$, nebo $g_n(t - t_0)$, nebo $h_n(t - t_0)$. Graf δ -**funkce** $\delta(\mathbf{t} - \mathbf{t}_0)$ je zvykem kreslit

tak, jak je znázorněno na obr. 3.3.



Obrázek 3.3: Graf posunuté δ -funkce

Opět se nejedná o graf funkce v obvyklém smyslu. „Graf“ na obr. 3.3 je „limitou grafů“ z obr. 3.1 nebo obr. 3.2 pro $n \rightarrow \infty$. Čára na obr. 3.3 representuje nekonečně úzký obdélník o nekonečné výšce.

2.vlastnost: (Důležitá.) Spočítejme integrál

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(t)\delta(t)dt.$$

K určení tohoto integrálu uijeme posloupnosti $\delta_n(t)$, viz (3.3) a toho, že $\lim_{n \rightarrow \infty} \delta_n(t) = \delta(t)$.

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(t)\delta(t)dt = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(t)\delta_n(t)dt = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_0^{\frac{1}{n}} f(t)n dt =$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n \int_0^{\frac{1}{n}} f(t)dt = \lim_{n \rightarrow \infty} n \frac{1}{n} f(0) = f(0).$$

Tedy máme

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(t)\delta(t)dt = f(0) \quad (3.11)$$

a podobně lze obdržet

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(t)\delta(t - t_0)dt = f(t_0). \quad (3.12)$$

Poznámka 3.3 (Důležitá.) Vztah (3.12) lze interpretovat tak, že integrování součinu funkce $f(t)$ spolu s δ -funkcí $\delta(t - t_0)$ funguje jako **výběr funkční hodnoty funkce $f(t)$ v čase $t = t_0$** .

3.vlastnost: Zřejmě platí

$$\delta(-t) = \delta(t).$$

Vzniká otázka v jakém smyslu máme chápat vztah

$$\delta(t - t_0) = \delta(t_0 - t). \quad (3.13)$$

Spočítejme pro libovolnou funkci $f(t)$ integrál

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(t)\delta(t_0 - t)dt = \left| \begin{array}{l} t = t_0 - s \\ t_0 - t = s \\ dt = ds \end{array} \right| =$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(t_0 - s)\delta(s)ds = |\text{podle(3.11)}| = f(t_0).$$

Z tohoto vidíme, že v jistém smyslu, tj. vzhledem k integrování, je funkce $\delta(t)$ sudá.

3.4 Konvoluce funkce s δ -funkcí

Konvoluce „obyčejné“ funkce $f(t)$ s δ -funkcí $\delta(t)$ je definována stejným integrálem, viz (2.24). Máme tedy (s použitím vztahů (3.12) a (3.13))

$$(f * \delta)(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t - s)\delta(s)ds = \int_{-\infty}^{\infty} f(s)\delta(t - s)ds = f(t),$$

tj.

$$(f * \delta)(t) = f(t), \quad (3.14)$$

pro každé $t \in \mathcal{R}$.

Poznámka 3.4 Chápeme-li konvoluci dvou funkcí jako jistý druh násobení, pak vztah (3.14) říká, že δ -funkce $\delta(t)$ je jednotkou při tomto „konvolučním násobení“.

3.5 Násobení δ -funkce funkcí

Nechť $f(t)$ je „obyčejná“ funkce. Pak násobek $f(t) \cdot \delta(t - t_0)$ definujeme následujícím vztahem:

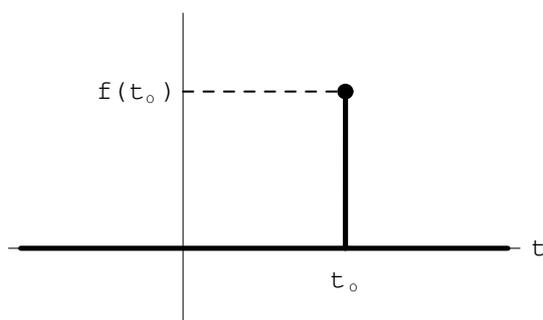
$$f(t) \cdot \delta(t - t_0) = f(t_0) \cdot \delta(t - t_0). \quad (3.15)$$

(Zdůvodnění viz Poznámka 4 v dodatku.)

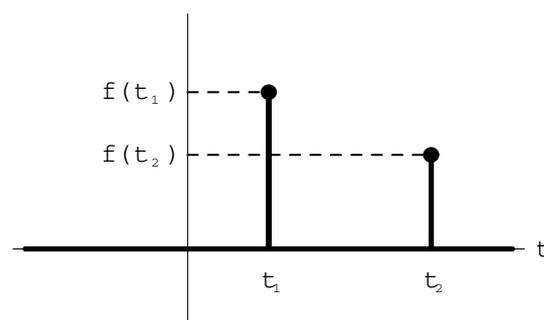
Poznámka 3.5 Vztah (3.15) souvisí úzce se vztahem (3.12) takto:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(t)\delta(t - t_0) dt = \int_{-\infty}^{\infty} f(t_0)\delta(t - t_0) dt = f(t_0) \int_{-\infty}^{\infty} \delta(t - t_0) dt = f(t_0).$$

Poznámka 3.6 V mnoha aplikacích se ukazuje užitečná následující úmluva: „Graf“ součiny $f(t) \cdot \delta(t - t_0) = f(t_0) \cdot \delta(t - t_0)$ kreslíme tak, jak je znázorněno na obr. 3.4. Dále např. graf součiny $f(t) \cdot [\delta(t - t_1) + \delta(t - t_2)] = f(t_1) \cdot \delta(t - t_1) + f(t_2) \cdot \delta(t - t_2)$ je nakreslen na obr. 3.5.



Obrázek 3.4: Graf součiny



Obrázek 3.5: Graf součiny

3.6 Diskretizace spojitého signálu

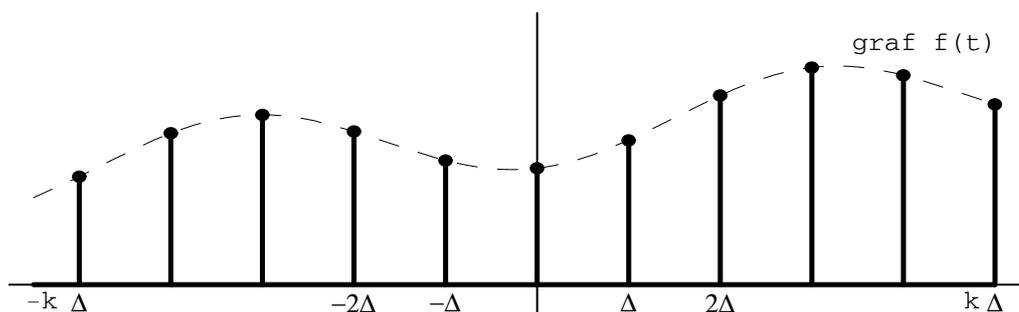
Mějme spojitou funkci $f(t)$, kterou chápeme jako **spojitý signál**. Zvolme číslo $\Delta > 0$ a položíme

$$i(t) = \sum_{n=-k}^k \delta(t - n\Delta). \quad (3.16)$$

$i(t)$ je řada impulsů v časových okamžicích $-k\Delta, \dots, -\Delta, 0, \Delta, 2\Delta, \dots, k\Delta$, vzdálených od sebe o Δ sekund. $i(t)$ nazýváme **vzorkovací funkcí**.

Utvořme součin

$$f(t) \cdot i(t) = \sum_{n=-k}^k f(t) \cdot \delta(t - n\Delta) = \sum_{n=-k}^k f(n\Delta) \cdot \delta(t - n\Delta).$$



Obrázek 3.6: Diskretizace

Jestliže použijeme úmluvy z poznámky 3.6 a nakreslíme graf součiny $f(t) \cdot i(t)$, dostáváme obr. 3.6. Jinými slovy, na obr. 3.6 je graf posloupnosti $\{f(n\Delta)\}_{n=-k}^k$ neboli **graf diskretizace spojitého časového signálu $f(t)$** .

Závěr: Násobíme-li spojitý signál součtem δ -funkcí (3.16), pak výsledkem je časová diskretizace signálu s krokem Δ . Tento postup má značný význam při počítačovém zpracování signálů (např. interferogramů získaných Michelsonovým spektrometrem). K tomuto problému se podrobně vrátíme v kapitole 5.

Kapitola 4

Fourierova transformace.

V praxi je častý případ, kdy pomocí přístroje získáme jistou funkční závislost jedné veličiny na druhé. Například v Michelsonově interferometru získáme závislost intenzity světelného paprsku na velikosti posuvu pohyblivého zrcadla. Takovouto funkční závislost budeme nazývat obecně **signálem**. Speciálně signál zaznamenaný Michelsonovým interferometrem se nazývá **interferogram**.

Při zpracování signálu je důležité poznat, zda je signál **periodický** a jakou má periodu. Prakticky je výhodnější pracovat s **frekvencí** místo s periodou.

Základním matematickým nástrojem pro zpracování a analýzu signálů je **Fourierova transformace** (dále jen FT).

FT je **zobrazení**, které každému signálu (tj. funkci) přiřazuje jinou funkci, z jejichž vlastností lze vyčíst informace o původním signálu.

4.1 Definice Fourierovy transformace

Definice 1. Budiž $s(t)$ komplexní funkce **reálné** proměnné t . **Fourierovým obrazem** (F-obrazem) funkce $s(t)$ nazýváme **komplexní** funkci $S(\nu)$ reálné proměnné ν , definovanou integrálem

$$S(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} s(t)e^{-2\pi i\nu t} dt. \quad (4.1)$$

Tedy

$$S(\nu) = \mathcal{F}[s(t)], \quad (4.2)$$

kde \mathcal{F} značí Fourierovu transformaci, tj. zobrazení z množiny funkcí do množiny funkcí.

\mathcal{F} -obraz $S(\nu)$ se též nazývá **\mathcal{F} -spektrém signálu** $s(t)$. Podrobněji se k tomuto termínu vrátíme v dalším textu.

Poznámka 4.1 Aby integrál v (4.1) měl dobrý smysl, klademe na funkci $s(t)$ následující požadavky:

1. $s(t)$ je po částech spojitá na $(-\infty, +\infty)$.
2. $s'(t)$ je po částech spojitá na $(-\infty, +\infty)$.

$$3. \int_{-\infty}^{\infty} |s(t)| dt < +\infty.$$

Definice 2. Funkce $s(t)$, která splňuje tři výše uvedené požadavky se nazývá **Fourierův předmět**, krátce \mathcal{F} -předmět.

Poznámka 4.2 V různé literatuře existují lehce modifikované definice FT, například tvaru

$$\mathcal{F}[s(t)] = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} s(t)e^{-i\nu t} dt$$

apod. My jsme volili ten tvar FT, který se nejčastěji používá v literatuře o infračervené spektroskopii.

Příklad 4.1 Určeme \mathcal{F} -obraz funkce

$$s(t) = e^{-|t|}.$$

(Ověřte sami, že tato funkce splňuje požadavky z poznámky 4.1!)

Máme

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[e^{-|t|}] = S(\nu) &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-|t|} e^{-2\pi i\nu t} dt = \int_{-\infty}^0 e^{t-2\pi i\nu t} dt + \int_0^{+\infty} e^{-t-2\pi i\nu t} dt = \\ &= \left[\frac{e^{t(1-2\pi i\nu)}}{1-2\pi i\nu} \right]_{-\infty}^0 + \left[-\frac{e^{-t(1+2\pi i\nu)}}{1+2\pi i\nu} \right]_0^{+\infty} = \frac{1}{1-2\pi i\nu} + \frac{1}{1+2\pi i\nu} = \frac{2}{1+4\pi^2\nu^2}. \end{aligned}$$

4.2 Vzorec pro inverzní FT

Inverzní FT, kterou značíme \mathcal{F}^{-1} , přiřazuje funkci $S(\nu)$ funkci $s(t)$. Dá se dokázat, že platí:

$$\mathcal{F}^{-1}[S(\nu)] = s(t) = \int_{-\infty}^{\infty} S(\nu)e^{2\pi i\nu t} d\nu. \quad (4.3)$$

Poznámka 4.3 Má-li funkce $s(t)$ body nespojitosti, pak místo (4.3) musíme psát

$$\int_{-\infty}^{\infty} S(\nu)e^{2\pi i\nu t_0} d\nu = \frac{s(t_0+) + s(t_0-)}{2},$$

kde t_0 je bod nespojitosti funkce $s(t)$ a

$$s(t_0+) = \lim_{t \rightarrow t_0+} s(t), \quad s(t_0-) = \lim_{t \rightarrow t_0-} s(t).$$

Napišeme-li vzorce pro přímou FT a inverzní FT vidíme, že jsou velmi podobné. Liší se jen znaménkem v exponentu. Tento fakt má důležitý důsledek.

Věta 4.1 .Je-li $S(\nu)$ \mathcal{F} -obraz funkce $s(t)$, pak $s(\nu)$ je \mathcal{F} -obraz funkce $S(-t)$.

Důkaz: Máme

$$\begin{aligned}\mathcal{F}[S(-t)] &= \int_{-\infty}^{\infty} S(-t)e^{-2\pi i\nu t} dt = (\text{substituce : } t = -\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} S(\tau)e^{2\pi i\nu\tau} d\tau = \\ &= \mathcal{F}^{-1}[S(\tau)] = s(\nu),\end{aligned}$$

neboť $\mathcal{F}[s] = S$.

Větu 4.1 lze vyjádřit následovně:

$$S(\nu) = \mathcal{F}[s(t)] \implies s(\nu) = \mathcal{F}[S(-t)]. \quad (4.4)$$

Vztah (4.4) je důležitý mimo jiné při používání **slovníku FT**. Vzhledem k (4.4) můžeme ve slovníku hledat \mathcal{F} -obrazy jak funkcí z levého, tak i z pravého sloupce.

Příklad 4.2 Použitím definice FT zjistíme snadno, že \mathcal{F} -obraz funkce

$$s(t) = 1(t)e^{-t}$$

je roven

$$S(\nu) = \frac{1}{1 + 2\pi i\nu}.$$

Pak podle (4.4) je \mathcal{F} -obraz funkce

$$S(-t) = \frac{1}{1 - 2\pi it}$$

roven

$$s(\nu) = 1(\nu)e^{-\nu}.$$

Při obvyklém značení máme

$$\mathcal{F}\left[\frac{1}{1 - 2\pi it}\right] = 1(\nu)e^{-\nu}. \quad (4.5)$$

4.3 Vlastnosti Fourierovy transformace

I. Linearita FT. Necht c_1, c_2 jsou konstanty. Pak

$$\mathcal{F}[c_1s_1(t) + c_2s_2(t)] = c_1\mathcal{F}[s_1(t)] + c_2\mathcal{F}[s_2(t)]. \quad (4.6)$$

Důkaz lze ponechat čtenáři jako cvičení.

II. Věta o obrazu derivace. Necht $\mathcal{F}[s(t)] = S(\nu)$. Pak

$$\mathcal{F}[s'(t)] = 2\pi i\nu S(\nu). \quad (4.7)$$

Důkaz:

$$\mathcal{F}[s'(t)] = \int_{-\infty}^{\infty} s'(t)e^{-2\pi i\nu t} dt = [s(t)e^{-2\pi i\nu t}]_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} s(t)2\pi i\nu e^{-2\pi i\nu t} dt = 2\pi i\nu S(\nu).$$

Hranatá závorka je rovna nule, neboť $\lim_{t \rightarrow \pm\infty} s(t) = 0$ (toto plyne z třetího požadavku v poznámce 4.1) a $e^{-2\pi i\nu t}$ je ohraničená funkce.

III. Věta o derivaci obrazu. Necht' $\mathcal{F}[s(t)] = S(\nu)$. Pak

$$\mathcal{F}[ts(t)] = \frac{i}{2\pi} S'(\nu). \quad (4.8)$$

Důkaz:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[ts(t)] &= \int_{-\infty}^{\infty} ts(t)e^{-2\pi i\nu t} dt = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{-2\pi i} \frac{d}{d\nu} [s(t)e^{-2\pi i\nu t}] dt = \\ &= \frac{i}{2\pi} \frac{d}{d\nu} \int_{-\infty}^{\infty} s(t)e^{-2\pi i\nu t} dt = \frac{i}{2\pi} S'(\nu). \end{aligned}$$

Příklad 4.3 Mějme funkci $s(t) = e^{-\pi t^2}$ a hledejme její \mathcal{F} -obraz. Když použijeme přímo definice, dostáváme:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[e^{-\pi t^2}] &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\pi t^2} e^{-2\pi i\nu t} dt = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\pi t(t+2i\nu)} dt = | \text{substituce : } t + i\nu = z \Rightarrow t = z - i\nu | = \\ &= \int_{-\infty+i\nu}^{+\infty+i\nu} e^{-\pi(z^2+\nu^2)} dz = e^{-\pi\nu^2}, \end{aligned}$$

neboť z teorie funkcí komplexní proměnné plyne, že

$$\int_{-\infty+i\nu}^{+\infty+i\nu} e^{-\pi z^2} dz = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\pi z^2} dz = 1.$$

(Laplaceův integrál).

Dostali jsme

$$\mathcal{F}[e^{-\pi t^2}] = e^{-\pi\nu^2}. \quad (4.9)$$

Ukážeme ještě jeden důležitý způsob, jak získat výsledek (4.9). Funkce $s(t)$ vyhovuje diferenciální rovnici

$$s'(t) = -2\pi ts(t).$$

Na obě strany této diferenciální rovnice aplikujeme FT a dostaneme s použitím vlastností II. a III.:

$$\mathcal{F}[s'(t)] = 2\pi i\nu S(\nu),$$

$$\mathcal{F}[-2\pi ts(t)] = -2\pi \mathcal{F}[ts(t)] = -2\pi \frac{i}{2\pi} S'(\nu),$$

takže dostáváme

$$2\pi i\nu S(\nu) = -i S'(\nu)$$

$$S'(\nu) = -2\pi\nu S(\nu).$$

Tuto diferenciální rovnici pro $S(\nu)$ lze řešit separací proměnných a dostaneme

$$S(\nu) = Ke^{-\pi\nu^2}, \quad K \in \mathbb{R}.$$

Konstantu K určíme následovně: Víme, že $S(0) = K$ a současně $S(0) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\pi t^2} dt = 1$.

Cvičení 4.1 Výše popsaným způsobem stanovte

$$\mathcal{F}[e^{-at^2}], \quad a > 0.$$

[Výsledek: $S(\nu) = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-\frac{\pi^2}{a}\nu^2}$.]

Příklad 4.4 Pomocí vlastnosti III stanovme $\mathcal{F}[te^{-at^2}]$. S použitím výsledku předchozího cvičení máme:

$$\mathcal{F}[te^{-at^2}] = -\frac{i}{a} \sqrt{\frac{\pi^3}{a}} \nu e^{-\frac{\pi^2}{a}\nu^2}.$$

IV. Věty o translaci. Necht $\mathcal{F}[s(t)] = S(\nu)$. Pak

$$\begin{aligned} a) \quad \mathcal{F}[s(t-a)] &= e^{-2\pi i\nu a} S(\nu), \\ b) \quad \mathcal{F}[e^{2\pi iat} s(t)] &= S(\nu-a). \end{aligned} \tag{4.10}$$

V. Věta o změně měřítka. Necht $\mathcal{F}[s(t)] = S(\nu)$. Pak

$$\mathcal{F}[s(kt)] = \frac{1}{|k|} S\left(\frac{\nu}{k}\right). \tag{4.11}$$

Příklad 4.5 Z příkladu 4.1 máme

$$\mathcal{F}[e^{-|t|}] = \frac{2}{1+4\pi^2\nu^2} = S(\nu).$$

Pomocí věty o změně měřítka dostáváme

$$\mathcal{F}[e^{-a|t|}] = \frac{1}{a} S\left(\frac{\nu}{a}\right) = \frac{2a}{a^2+4\pi^2\nu^2}.$$

VI. Věty o obrazu konvoluce a součinu. Necht $\mathcal{F}[s_1(t)] = S_1(\nu)$, $\mathcal{F}[s_2(t)] = S_2(\nu)$. Pak

$$a) \quad \mathcal{F}[(s_1 * s_2)(t)] = S_1(\nu) \cdot S_2(\nu). \tag{4.12}$$

$$b) \quad \mathcal{F}[s_1(t) \cdot s_2(t)] = S_1(\nu) * S_2(\nu). \tag{4.13}$$

Slovy řečeno: FT převádí konvoluci vzorů na součin obrazů a součin vzorů na konvoluci obrazů.

Důkaz: Dokážeme první vztah a druhý ponecháme čtenáři jako cvičení.

$$\begin{aligned}\mathcal{F}[s_1 * s_2] &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} s_1(\tau) s_2(t - \tau) d\tau \right] e^{-2\pi i \nu t} dt = \int_{-\infty}^{\infty} \left[s_1(\tau) \int_{-\infty}^{\infty} s_2(t - \tau) e^{-2\pi i \nu t} dt \right] d\tau = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} s_1(\tau) e^{-2\pi i \nu \tau} S_2(\nu) d\tau = S_1(\nu) \cdot S_2(\nu),\end{aligned}$$

což jsme měli dokázat. Zbývá ještě vypočítat vnitřní integrál v posledním dvojném integrálu:

$$\int_{-\infty}^{\infty} s_2(t - \tau) e^{-2\pi i \nu t} dt = | \text{substituce : } t - \tau = x | = \int_{-\infty}^{\infty} s_2(x) e^{-2\pi i \nu x} e^{-2\pi i \nu \tau} dx = e^{-2\pi i \nu \tau} S_2(\nu).$$

Cvičení 4.2 Dokažte vztah (4.13). Použijte vzorec pro inverzní FT.

Příklad 4.6 Snadno lze spočítat, že

$$\mathcal{F}[1(t)e^{at}] = \frac{-1}{a - 2\pi i \nu}, \quad a < 0.$$

Z cvičení 2.5 v kapitole 2 víme, že

$$1(t)e^{at} * 1(t)e^{at} = 1(t)te^{at}. \quad (4.14)$$

Z vlastnosti III - větě o derivaci obrazu - plyne

$$\mathcal{F}[1(t)te^{at}] = \frac{i}{2\pi} \frac{d}{d\nu} \left(\frac{-1}{a - 2\pi i \nu} \right) = \frac{1}{(a - 2\pi i \nu)^2}.$$

Použijeme-li přímo větu o konvoluci, vztah (4.14) dostaneme ihned:

$$\mathcal{F}[1(t)e^{at} * 1(t)e^{at}] = \mathcal{F}[1(t)e^{at}] \cdot \mathcal{F}[1(t)e^{at}] = \frac{1}{(a - 2\pi i \nu)^2}.$$

Cvičení 4.3 (Důležité!)

a) Použitím věty o změně měřítka a příkladu 4.5 odvoďte vztah (pro $a > 0$):

$$\mathcal{F}[e^{-2\pi a|t|}] = \frac{1}{\pi} \frac{a}{\nu^2 + a^2} = S_a(\nu). \quad (4.15)$$

b) Podle (4.13) dostáváme ($b > 0$):

$$\mathcal{F}[e^{-2\pi a|t|} \cdot e^{-2\pi b|t|}] = S_a(\nu) * S_b(\nu).$$

Protože levá strana této rovnosti je podle ad a) rovna

$$\frac{1}{\pi} \frac{(a+b)}{\nu^2 + (a+b)^2},$$

dostáváme pomocí (4.13) vztah:

$$S_a * S_b = S_{a+b}.$$

c) Ověřte přímo z definice konvoluce, že

$$\frac{1}{\pi} \frac{a}{\nu^2 + a^2} * \frac{1}{\pi} \frac{b}{\nu^2 + b^2} = \frac{1}{\pi} \frac{a+b}{\nu^2 + (a+b)^2}.$$

Následuje TABULKA I, v níž jsou přehledně uvedeny právě probrané vlastnosti FT. V dalším textu se budeme odkazovat na čísla vlastností z této TABULKY I.

TABULKA I.

1. $\mathcal{F}[s(t)] = S(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} s(t)e^{-2\pi i\nu t} dt.$
2. $\mathcal{F}^{-1}[S(\nu)] = s(t) = \int_{-\infty}^{\infty} S(\nu)e^{2\pi i\nu t} d\nu.$
3. $S(\nu) = \mathcal{F}[s(t)] \implies s(\nu) = \mathcal{F}[S(-t)].$
4. $\mathcal{F}[c_1 s_1(t) + c_2 s_2(t)] = c_1 \mathcal{F}[s_1(t)] + c_2 \mathcal{F}[s_2(t)].$
5. $\mathcal{F}[s'(t)] = 2\pi i\nu S(\nu).$
6. $\mathcal{F}[ts(t)] = \frac{i}{2\pi} S'(\nu).$
7. $\mathcal{F}[s(t-a)] = e^{-2\pi i\nu a} S(\nu).$
8. $\mathcal{F}[e^{2\pi iat} s(t)] = S(\nu-a).$
9. $\mathcal{F}[s(kt)] = \frac{1}{|k|} S\left(\frac{\nu}{k}\right).$
10. $\mathcal{F}[s_1(t) * s_2(t)] = S_1(\nu) \cdot S_2(\nu).$
11. $\mathcal{F}[s_1(t) \cdot s_2(t)] = S_1(\nu) * S_2(\nu).$

4.4 Fourierova transformace sudé a liché funkce.

Vraťme se k definici FT, tj. ke vztahu (4.1). Použijeme-li vztahu (2.15) dostáváme:

$$e^{-2\pi i\nu t} = \cos 2\pi\nu t - i \sin 2\pi\nu t$$

a

$$S(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} s(t)(\cos 2\pi\nu t - i \sin 2\pi\nu t) dt = \int_{-\infty}^{\infty} s(t) \cos 2\pi\nu t dt - i \int_{-\infty}^{\infty} s(t) \sin 2\pi\nu t dt. \quad (4.16)$$

Připomeňme, že $\cos 2\pi\nu t$ je **sudou** funkcí a $\sin 2\pi\nu t$ je **lichou** funkcí proměnné t .

1. Je-li $s(t)$ **lichá** funkce, pak $s(t) \cos 2\pi\nu t$ je rovněž lichá funkce a $s(t) \sin 2\pi\nu t$ je sudá funkce. Pak

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} s(t) \cos 2\pi\nu t dt &= 0, \\ \int_{-\infty}^{\infty} s(t) \sin 2\pi\nu t dt &= 2 \int_0^{+\infty} s(t) \sin 2\pi\nu t dt. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Tudíž FT liché funkce má tvar:

$$\mathcal{F}[s(t)] = 2i \int_0^{+\infty} s(t) \sin 2\pi\nu t dt.$$

2. Je-li $s(t)$ **sudá** funkce, pak obdobným způsobem zjistíme, že

$$\mathcal{F}[s(t)] = 2 \int_0^{+\infty} s(t) \cos 2\pi\nu t \, dt.$$

Máme-li funkci $s(t)$ definovanou pouze na intervalu $(-\infty, +\infty)$, pak ji můžeme vždy rozšířit na interval $(-\infty, +\infty)$ buď tak, aby byla sudá, nebo aby byla lichá. Její Fourierův obraz je pak dán výše uvedenými vztahy.

To nás vede k následující definici tzv. **sinové a kosinové Fourierovy transformace**: Budiž $s(t)$ komplexní funkce reálné proměnné, definovaná a po částech spojitá na $(0, +\infty)$, mající po částech spojitou derivaci. **Fourierovým sinovým obrazem** (krátce \mathcal{F}_s -obrazem) funkce $s(t)$ rozumíme

$$\mathcal{F}_s[s(t)] = S_s(\nu) = 2 \int_0^{+\infty} s(t) \sin 2\pi\nu t \, dt. \quad (4.18)$$

Fourierovým kosinovým obrazem (\mathcal{F}_c -obrazem) funkce $s(t)$ rozumíme

$$\mathcal{F}_c[s(t)] = S_c(\nu) = 2 \int_0^{+\infty} s(t) \cos 2\pi\nu t \, dt. \quad (4.19)$$

Poznámka 4.4 Inverzní sinová a kosinová FT je dána vztahy:

$$s(t) = \mathcal{F}_s^{-1}[S_s(\nu)] = 2 \int_0^{+\infty} S_s(\nu) \sin 2\pi\nu t \, d\nu, \quad (4.20)$$

$$s(t) = \mathcal{F}_c^{-1}[S_c(\nu)] = 2 \int_0^{+\infty} S_c(\nu) \cos 2\pi\nu t \, d\nu. \quad (4.21)$$

4.5 Fourierova transformace δ -funkce.

Nyní rozšíříme definici FT i na δ -funkce. Definice je formálně shodná s definicí 1. Tedy

$$\mathcal{F}[\delta(t)] = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(t) e^{-2\pi i\nu t} \, dt.$$

Podle vztahu (3.11) z kapitoly 3 je integrál roven funkční hodnotě funkce $e^{-2\pi i\nu t}$ v bodě $t = 0$, tj. $e^0 = 1$. Máme tedy výsledek

$$\mathcal{F}[\delta(t)] = 1. \quad (4.22)$$

Poznámka 4.5 Protože FT δ -funkcí je formálně stejná s definicí 1, platí vztahy z TABULKY I přiměřeně i v případě, kdy připouštíme δ -funkce. (Zde slovo „přiměřeně“ znamená ve smyslu teorie distribucí.)

Příklad 4.7 \mathcal{F} -obraz posunuté δ -funkce $\delta(t - t_0)$ je podle definice roven

$$\mathcal{F}[\delta(t - t_0)] = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(t - t_0) e^{-2\pi i \nu t} dt = e^{-2\pi i \nu t_0}.$$

Stejný výsledek dostaneme (přesvědčte se!), použijeme-li vztah (4.22) a vlastnost 7 z TABULKY I.

Příklad 4.8 Z paragrafu 3.4 kapitoly 3 víme, že

$$f(t) * \delta(t) = f(t),$$

viz vztah (3.16). Podle vlastnosti 10 z TABULKY I máme:

$$\mathcal{F}[f(t) * \delta(t)] = \mathcal{F}[f(t)] \cdot \mathcal{F}[\delta(t)] = \mathcal{F}[f(t)].$$

Poznámka 4.6 (Důležitá!) Rozšíření množiny \mathcal{F} -předmětů o δ -funkce má tento důsledek. Protože

$$\mathcal{F}[\delta(t)] = 1,$$

pak podle vlastnosti 3 z TABULKY I je \mathcal{F} -obrazem konstantní funkce 1 (která je sudá) δ -funkce $\delta(t)$, tj.

$$\mathcal{F}[1] = \delta(t). \quad (4.23)$$

Konstantní funkce $s(t) \equiv 1$ nespĺňuje třetí požadavek z Poznámky 4.1, neboť

$$\int_{-\infty}^{\infty} 1 dt = +\infty.$$

Tedy vynechání tohoto požadavku na \mathcal{F} -předměty má za následek, že se mezi \mathcal{F} -obrazy objeví i δ -funkce a naopak.

Protože jsme vztah (4.23) dostali dosti formálním způsobem, odvodíme v následujícím odstavci tento vztah ještě jednou a to metodou, která je sama o sobě velmi důležitá, zvláště pak v aplikacích při zpracování interferogramů.

4.6 \mathcal{F} -obraz obdélníkového impulsu.

Konstantní funkce $s(t) \equiv 1$ pro $t \in R$ je limitou **obdélníkového impulsu**

$$r_T(t) = \begin{cases} 1 & \text{pro } |t| \leq T, \\ 0 & \text{pro } |t| > T. \end{cases} \quad (4.24)$$

pro $T \rightarrow +\infty$, tj.

$$\lim_{T \rightarrow +\infty} r_T(t) = 1 \text{ pro všechna } t \in R.$$

Určeme \mathcal{F} -obraz funkce $r_T(t)$:

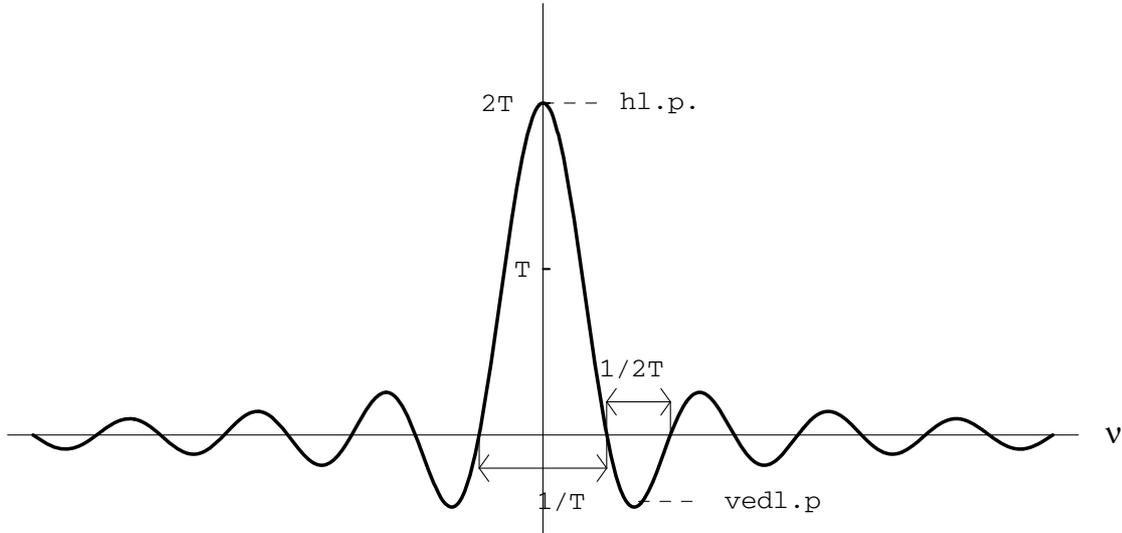
$$\mathcal{F}[r_T(t)] = \int_{-T}^T 1 \cdot e^{-2\pi i \nu t} dt = \left[\frac{e^{-2\pi i \nu t}}{-2\pi i \nu} \right]_{-T}^T =$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{1}{\pi\nu} \frac{e^{-2\pi i\nu T} - e^{2\pi i\nu T}}{2i} = \frac{1}{\pi\nu} \sin(2\pi T\nu) = \\
&= 2T \frac{\sin(2\pi T\nu)}{2\pi T\nu} = 2T \cdot \text{sinc}(2\pi T\nu).
\end{aligned}$$

Tedy

$$\mathcal{F}[r_T(t)] = 2T \text{sinc}(2\pi T\nu). \quad (4.25)$$

Funkce $2T \text{sinc}(2\pi T\nu)$ má veliký význam při zpracování interferogramů pomocí FT a proto se u ní zastavíme podrobněji. Její graf je na obr. 4.1.



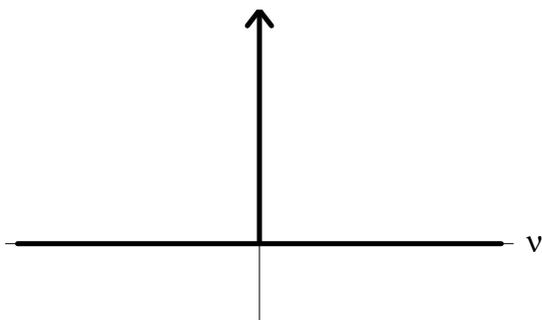
Obrázek 4.1: Obraz obdélníkového impulsu

Graf funkce $2T \text{sinc}(2\pi T\nu)$ má jeden **hlavní pík** o výšce $2T$. **Nulové body** této funkce jsou určeny nulovými body funkce $\sin(2\pi T\nu)$, kromě bodu $\nu = 0!!!$ Jsou to body

$$\nu_k = \frac{k}{2T}, \quad k = \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4.26)$$

Tedy šířka hlavního píku na ose ν je $\frac{1}{T}$ a šířka **vedlejších píků** je $\frac{1}{2T}$. Graf na obr. 4.1 je **F-spektrum obdélníkového impulsu**. Vraťme se ke vztahu (4.25), kde provedeme na obou stranách **limitní přechod** pro $T \rightarrow +\infty$. Jestliže $T \rightarrow +\infty$, pak $r_T(t) \rightarrow 1$, pro všechna $t \in \mathbb{R}$. Na pravé straně (4.25) dostáváme pro $T \rightarrow +\infty$ na základě výsledku z Příkladu 3.1 v kapitole 3

$$\lim_{T \rightarrow +\infty} 2T \text{sinc}(2\pi T\nu) = \delta(\nu).$$



Obrázek 4.2: Obraz konstanty

I z obr. 4.1 je vidět, že pro $T \rightarrow +\infty$ se hlavní pík stává nekonečně úzkým a vysokým a vedlejší píky jsou zcela potlačeny, takže „limita grafu“ na obr. 4.1 pro $T \rightarrow +\infty$ je graf δ -funkce nakreslený na obr. 4.2.

Poznámka 4.7 V limitě pro $T \rightarrow +\infty$ má pak vztah (4.25) tvar

$$\mathcal{F}[1] = \delta(\nu).$$

Tím jsme znovu odvodili vztah (4.23).

Příklad 4.9 V tomto příkladu odvodíme znovu vztah (4.23) a to postupem, který je sám o sobě velmi důležitý.

Uvažujme posloupnost funkcí

$$f_n(t) = e^{-\frac{|t|}{n}}, \quad n = 1, 2, \dots$$

Platí

$$\lim_{n \rightarrow \infty} f_n(t) = \lim_{n \rightarrow \infty} e^{-\frac{|t|}{n}} = 1 \text{ pro všechna } t \in \mathbb{R}.$$

Dále máme

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[f_n(t)] &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{|t|}{n}} e^{-2\pi i \nu t} dt = \int_{-\infty}^0 e^{(\frac{1}{n} - 2\pi i \nu)t} dt + \int_0^{\infty} e^{-(\frac{1}{n} + 2\pi i \nu)t} dt = \frac{1}{\frac{1}{n} - 2\pi i \nu} + \frac{1}{\frac{1}{n} + 2\pi i \nu} = \\ &= \frac{2n}{1 + (2\pi \nu n)^2}. \end{aligned}$$

Pak

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathcal{F}[f_n(t)] = \mathcal{F}[1] = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{2n}{1 + (2\pi \nu n)^2} = \delta(\nu),$$

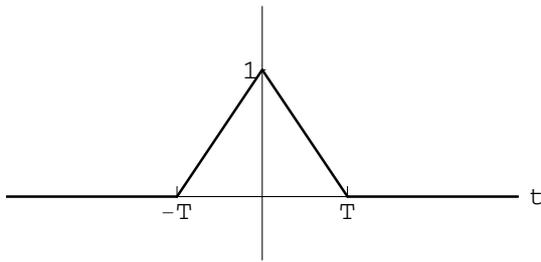
neboť pro $\nu = 0$ je limita rovna $+\infty$ a pro $\nu \neq 0$ je limita rovna 0, takže jsme znovu obdrželi vztah (4.23).

4.7 \mathcal{F} -obraz trojúhelníkového impulsu.

Mějme dán tzv. **trojúhelníkový impuls**

$$a_T(t) = \begin{cases} 1 - \frac{|t|}{T} & \text{pro } |t| \leq T, \\ 0 & \text{pro } |t| > T, \end{cases} \quad (4.27)$$

jehož graf je nakreslen na obr.4.3.



\mathcal{F} -obraz neboli \mathcal{F} -spektrum trojúhelníkového impulsu má opět značnou důležitost při analýze interferogramů.

Obrázek 4.3: Trojúhelníkový impuls

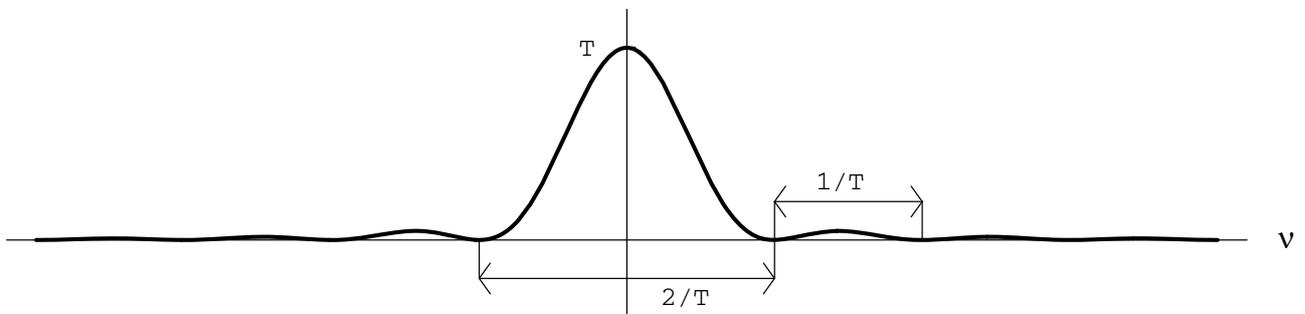
Při výpočtu $\mathcal{F}[a_T(t)]$ využijeme toho, že $a_T(t)$ je sudá funkce. Máme tedy:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[a_T(t)] &= \int_{-T}^T \left(1 - \frac{|t|}{T}\right) \cos 2\pi\nu t \, dt = \int_{-T}^T \cos 2\pi\nu t \, dt + \frac{1}{T} \left[\int_{-T}^0 t \cos 2\pi\nu t \, dt - \int_0^T t \cos 2\pi\nu t \, dt \right] = \\ &= \left[\frac{\sin 2\pi\nu t}{2\pi\nu} \right]_{-T}^T + \frac{1}{T} \left[t \frac{\sin 2\pi\nu t}{2\pi\nu} + \frac{\cos 2\pi\nu t}{(2\pi\nu)^2} \right]_{-T}^0 - \frac{1}{T} \left[t \frac{\sin 2\pi\nu t}{2\pi\nu} + \frac{\cos 2\pi\nu t}{(2\pi\nu)^2} \right]_0^T = \frac{2}{T} \frac{1 - \cos 2\pi\nu T}{(2\pi\nu)^2} = \\ &= T \frac{\sin^2(\pi\nu T)}{(\pi\nu T)^2} = T \operatorname{sinc}^2(\pi\nu T). \end{aligned}$$

Dostali jsme tedy

$$\mathcal{F}[a_T(t)] = T \operatorname{sinc}^2(\pi T \nu). \quad (4.28)$$

Spektrum trojúhelníkového impulsu, tj. graf funkce $T \operatorname{sinc}^2(\pi T \nu)$ je nakreslen na obr.4.4.



Obrázek 4.4: Obraz trojúhelníkového impulsu

Opět jde-li $T \rightarrow +\infty$, graf funkce $T \operatorname{sinc}^2(\pi T \nu)$ „konverguje“ ke grafu δ -funkce $\delta(\nu)$.

Poznámka 4.8 Srovnáním grafů na obr. 4.1 a obr. 4.4 vidíme, že hlavní pík na obr. 4.4 je sice dvakrát širší než na obr. 4.1, na druhou stranu jsou však **vedlejší píky značně menší**.

4.8 Grafické znázornění \mathcal{F} –obrazu a terminologické poznámky.

\mathcal{F} -obraz funkce (signálu) $s(t)$ se také nazývá, jak víme z předchozího textu, \mathcal{F} -spektrém signálu.

V případě, že je $S(\nu)$ **reálnou** funkcí, můžeme přímo nakreslit její graf, viz obr. 4.1, 4.2, 4.4. **Tento graf budeme nazývat spektrem signálu $s(t)$.**

V případě, že $S(\nu)$ je **komplexní** funkcí, $S(\nu) = \text{Re}S(\nu) + i\text{Im}S(\nu)$, zavádíme následující veličiny:

$$A(\nu) = |S(\nu)| = \sqrt{[\text{Re}S(\nu)]^2 + [\text{Im}S(\nu)]^2}, \quad (4.29)$$

$$\Phi(\nu) = \arg S(\nu), \quad (4.30)$$

$$P(\nu) = |S(\nu)|^2 = A^2(\nu). \quad (4.31)$$

Veličina $A(\nu)$ je **amplitudové spektrum**, $\Phi(\nu)$ je **fázové spektrum** a $P(\nu)$ je **výkonové spektrum**.

Všechny tyto funkce jsou reálné a jejich grafy se nazývají stejně. Mezi výkonovým a amplitudovým spektrem není z hlediska IČ spektroskopie žádný podstatný rozdíl. Pojem výkonového spektra se zavádí z jistých "technicko-teoretických" důvodů, s nimiž se v těchto skriptech nesetkáme.

Vraťme se ještě ke vztahům (4.29) a (4.30). Veličina $\Phi(\nu)$ je argument komplexního čísla $S(\nu)$, takže můžeme psát

$$S(\nu) = A(\nu)e^{i\Phi(\nu)}. \quad (4.32)$$

Tento vztah vyjadřuje souvislost mezi \mathcal{F} -spektrém, amplitudovým a fázovým spektrem signálu $s(t)$.

Připomeňme ještě, že fázové spektrum $\Phi(\nu)$ lze vypočítat ze vztahu

$$\text{tg}(\Phi(\nu)) = \frac{\text{Im}S(\nu)}{\text{Re}S(\nu)}. \quad (4.33)$$

Dále je užitečné uvědomit si toto: Známe-li spektrum $S(\nu)$ a fázové spektrum $\Phi(\nu)$, pak lze amplitudové spektrum $A(\nu)$ získat přímo ze vztahu (4.32) ve tvaru

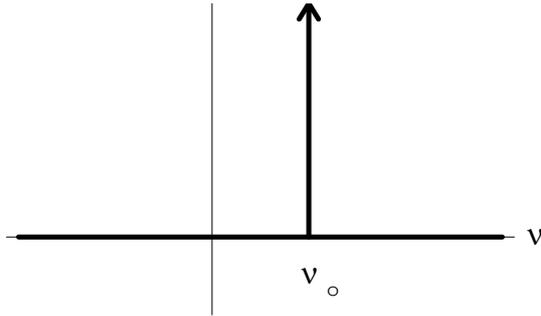
$$A(\nu) = S(\nu)e^{-i\Phi(\nu)}, \quad (4.34)$$

aniž bychom použili (4.29).

Vztah (4.34) je základem pro tzv. multiplikatívni fázovou korekci, kterou je nutno provést během transformace interferogramu na spektrum. Podrobněji o tom pojednáme v kapitole 6.

4.9 Fourierova transformace periodických funkcí.

Nyní přistoupíme k nejdůležitější vlastnosti FT. Odvodíme \mathcal{F} -obrazy periodických funkcí a to speciálně funkcí $\cos 2\pi\nu_0 t$ a $\sin 2\pi\nu_0 t$, jejichž frekvence je ν_0 (perioda $T = \frac{1}{\nu_0}$). Protože tyto funkce nesplňují požadavek (3) z poznámky 4.1, budou \mathcal{F} -obrazy těchto funkcí obsahovat δ -funkce.



Obrázek 4.5: Obraz $e^{2\pi i\nu_0 t}$

Vyjděme ze známého vztahu

$$\mathcal{F}[1] = \delta(\nu).$$

Pak podle vlastnosti 8 z TABULKY I dostáváme

$$\mathcal{F}[e^{2\pi i\nu_0 t} \cdot 1] = \delta(\nu - \nu_0). \quad (4.35)$$

Spektrum komplexního periodického signálu $s(t) = e^{2\pi i\nu_0 t}$ je nakresleno na obr. 4.5 a sestává z jedné ostré spektrální čáry nekonečně úzkého píku.

Z Eulerových vzorců plyne, že

$$\cos 2\pi\nu_0 t = \frac{1}{2}(e^{2\pi i\nu_0 t} + e^{-2\pi i\nu_0 t})$$

a

$$\sin 2\pi\nu_0 t = \frac{1}{2i}(e^{2\pi i\nu_0 t} - e^{-2\pi i\nu_0 t}).$$

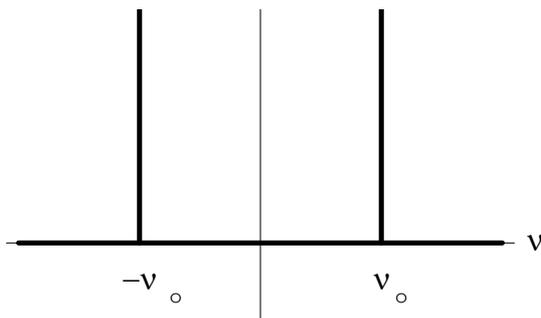
Použitím výsledku (4.35) a linearitu FT dostáváme

$$\mathcal{F}[\cos 2\pi\nu_0 t] = \frac{1}{2}[\delta(\nu - \nu_0) + \delta(\nu + \nu_0)] \quad (4.36)$$

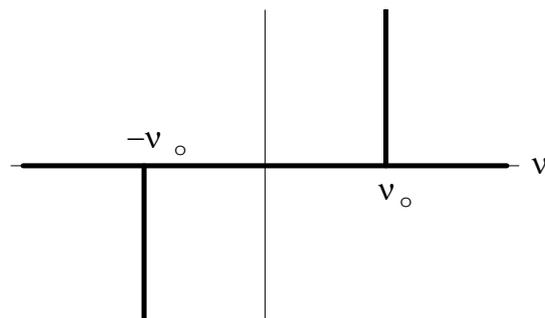
a

$$\mathcal{F}[\sin 2\pi\nu_0 t] = \frac{1}{2i}[\delta(\nu - \nu_0) - \delta(\nu + \nu_0)]. \quad (4.37)$$

Odovídající spektra jsou nakreslena na obr.4.6 a 4.7.



Obrázek 4.6: Obraz $\cos 2\pi\nu_0 t$



Obrázek 4.7: Obraz $\sin 2\pi\nu_0 t$

Přítomnost záporných frekvencí se obvykle neuvažuje, pracuje se pouze s pravou částí spekter, tj. v oblasti kladných frekvencí.

Ze známého spektra signálu lze tedy vyčíst, zda se jedná o periodický signál a jakou má frekvenci. Obsahuje-li spektrum signálu $s(t)$ několik diskretních čar, znamená to, že signál $s(t)$ obsahuje několik periodických složek.

Cvičení 4.4 Nakreslete výkonové spektrum signálu

$$s(t) = 1(t)e^{-t}.$$

Cvičení 4.5 Nakreslete spektrum signálu

$$s(t) = \cos(2\pi\nu_1 t) \cdot \cos(2\pi\nu_2 t).$$

Cvičení 4.6 Odvodte alespoň dvěma různými způsoby vztah ($a > 0$):

$$\mathcal{F}[e^{-2\pi a|t|} \cos 2\pi\nu_0 t] = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{a}{a^2 + (\nu - \nu_0)^2} + \frac{a}{a^2 + (\nu + \nu_0)^2} \right). \quad (4.38)$$

Návod:

- Použijte vztah (4.15) a vlastnost 11 z TABULKY I.
- Použijte definici FT. Při výpočtu integrálu použijte vztah

$$\int e^{at} \cos bt dt = \operatorname{Re} \int e^{at} e^{ibt} dt.$$

4.10 Signály konečné délky.

Jestliže $s(t)$ představuje signál získaný nějakou měřicí aparaturou, např. Michelsonovým interferometrem, pak je z praktického hlediska zřejmé, že tato funkce není známa na celém intervalu $(-\infty, +\infty)$. Signál je znám pouze na konečném intervalu $(-T, T)$. Je-li takto daný signál zpracován počítačovým programem, jehož výsledkem má být \mathcal{F} -obraz signálu, pak se konečná délka signálu projeví následujícím způsobem.

Předpokládejme, že měřicí aparatura generuje periodický signál

$$s_T(t) = \cos 2\pi\nu_0 t$$

pro $t \in \langle -T, T \rangle$. Tento signál je vhodné zapsat pomocí **obdélníkového impulsu** $r_T(t)$ (viz paragraf 3.6) a periodické funkce $\cos 2\pi\nu_0 t$ jako jejich **součin**, tj.

$$s_T(t) = r_T(t) \cos 2\pi\nu_0 t. \quad (4.39)$$

Pak \mathcal{F} -obraz signálu $s_T(t)$ je (vlastnost 11 z TABULKY I):

$$\mathcal{F}[s_T(t)] = \mathcal{F}[r_T(t) \cos 2\pi\nu_0 t] = \mathcal{F}[r_T(t)] * \mathcal{F}[\cos 2\pi\nu_0 t].$$

Podle vztahu (4.25) z paragrafu 4.6 je

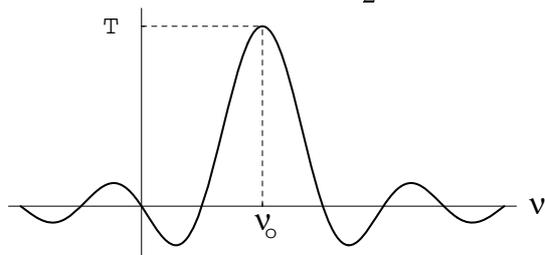
$$\mathcal{F}[r_T(t)] = 2T \operatorname{sinc}(2\pi T\nu)$$

a dále máme (viz vztah (4.36)):

$$\mathcal{F}[\cos 2\pi\nu_0 t] = \frac{1}{2}[\delta(\nu - \nu_0) + \delta(\nu + \nu_0)].$$

Vynecháme-li v posledním výrazu člen $\delta(\nu + \nu_0)$ odpovídající záporné frekvenci (tudíž nemající praktický význam) dostaneme \mathcal{F} -obraz **periodického signálu konečné délky** ve tvaru

$$\mathcal{F}[s_T(t)] = \frac{1}{2}\delta(\nu - \nu_0) * (2T \operatorname{sinc}(2\pi T\nu)) = T \operatorname{sinc}(2\pi T(\nu - \nu_0)). \quad (4.40)$$

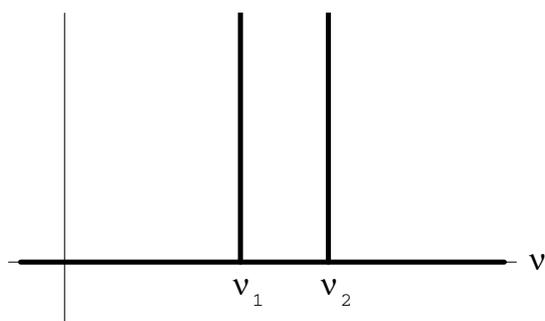


Obrázek 4.8: Přístrojová křivka

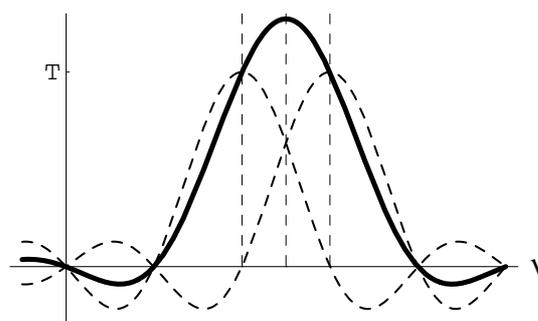
Spektrum signálu $s_T(t)$ je nakresleno na obr.4.8 a dostaneme je posunutím grafu funkce $T \operatorname{sinc}(2\pi T\nu)$ o ν_0 doprava. **Takže pro periodický signál konečné délky dostaneme místo ostré spektrální čáry hlavní pík o šířce $\frac{1}{T}$ a malé postranní píky.**

Poznámka 4.9 Tvar spektra (neboli spektrální křivky) je vlastně určen \mathcal{F} -obrazem „**ořezávacího**“ obdélníkového impulsu $r_T(t)$. V různých přístrojích jsou voleny různé ořezávací impulsy (viz dále paragraf 3.11), které určují tvar spektrální křivky. Proto se tato křivka nazývá **přístrojovou křivkou**. (Anglicky: instrument line shape (ILS) function.)

Při praktickém použití FT realizované počítačem je žádoucí, aby hlavní pík byl co možná nejužší a postranní píky co možná nejmenší. Důvod je následující: Nechť signál $s(t)$, $t \in \mathbb{R}$ obsahuje dvě frekvence ν_1 a ν_2 , které jsou blízké, tj. spektrum signálu je na obr.4.9.



Obrázek 4.9: Spektrum signálu



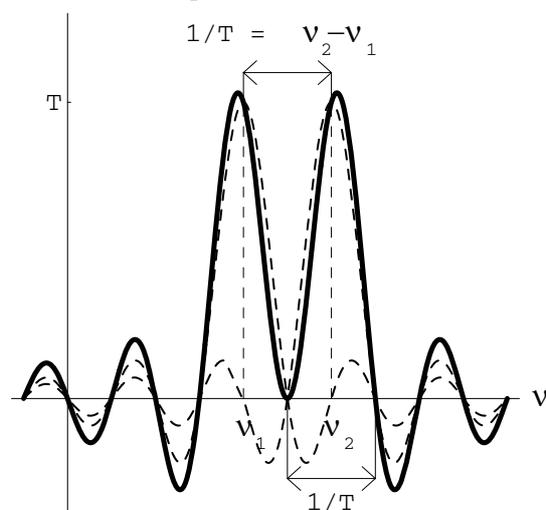
Obrázek 4.10: Špatná rozlišitelnost

Jestliže budeme signál měřit v intervalu $\langle -T, T \rangle$, délky $2T$, za použití obdélníkového impulsu $r_T(t)$, přičemž T bude takové, že

$$\frac{1}{2T} \geq \nu_2 - \nu_1,$$

pak každé frekvenci ν_1 a ν_2 odpovídá hlavní pík o šířce $\frac{1}{T}$, viz obr. 4.10. Ve spektru se vlivem

linearity FT objeví „součet píků“, na obr. 4.10 plná čára. Pak v tomto případě nemůžeme ve spektru signálu rozlišit od sebe frekvence ν_1 a ν_2 .



Obrázek 4.11: Dobrá rozlišitelnost

Zvětšíme-li délku signálu T tak, aby

$$\nu_2 - \nu_1 \geq \frac{1}{T}, \text{ tj. } T \geq \frac{1}{\nu_2 - \nu_1} \quad (4.41)$$

pak oba píky budou dostatečně úzké, viz obr. 4.11, a to nám dovolí rozlišit obě frekvence signálu. Poznamenejme ještě, že použijeme-li místo obdélníkového impulsu trojúhelníkový, pak délka signálu $2T$ musí být $T > \frac{2}{\nu_2 - \nu_1}$. Tudíž **rozlišitelnost** frekvencí ve spektru signálu závisí na **délce signálu**. Zdálo by se, že můžeme dosáhnout libovolně velké rozlišitelnosti tím, že daný signál budeme uvažovat na tak dlouhém intervalu, jak potřebujeme.

Avšak délka signálu je omezena technickými možnostmi přístroje, který daný signál generuje. Například délka signálu, který dostáváme pomocí Michelsonova interferometru (tj. délka interferogramu) je omezena velikostí maximálního možného posuvu pohyblivého zrcadla v interferometru. Zvyšování rozlišitelnosti ve spektru zvětšováním délky signálu je tedy technicky omezeno.

Další negativní vliv na rozlišitelnost frekvencí ve spektru mají již výše zmíněné postranní píky. K potlačení postranních píků používáme postup zvaný **apodizace**, viz následující paragraf.

4.11 Apodizace.

Z předcházejícího paragrafu víme, že tvar spektrální křivky je určen \mathcal{F} -obrazem obdélníkového „ořezávacího“ impulsu. „Ořezávací funkci“ můžeme volit i jinou a volbu provést tak, aby postranní píky **přístrojové křivky** byly co nejmenší.

V paragrafu 3.7 jsme odvodili spektrum trojúhelníkového impulsu, viz obr. 4.3. Přístrojová křivka, tj. spektrum trojúhelníkového „ořezávacího“ impulsu $a_T(t)$ má postranní píky mnohem menší ve srovnání s obdélníkovým impulsem, jak můžeme vidět na obr. 4.4.

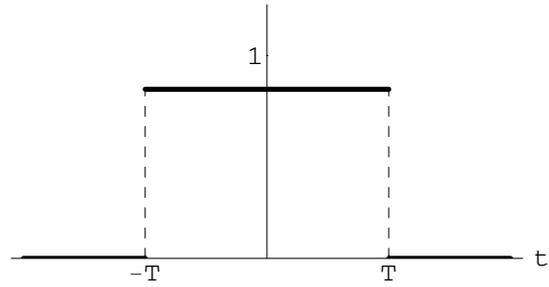
Potlačení postranních píků ve spektru se nazývá a p o d i z a c e a ořezávací funkce, které mají tuto vlastnost se nazývají apodizační funkce. Nejužívanější apodizační funkcí v IČ-spektroskopii je trojúhelníková apodizační funkce $a_T(t)$. Kromě ní se používá řada dalších apodizačních funkcí.

Následuje přehled osmi nejpoužívanějších apodizačních funkcí a jim odpovídajících přístrojových křivek. Připomínáme, že s prvními čtyřmi jsme se již v tomto textu setkali.

I. Obdélníková apodizační funkce

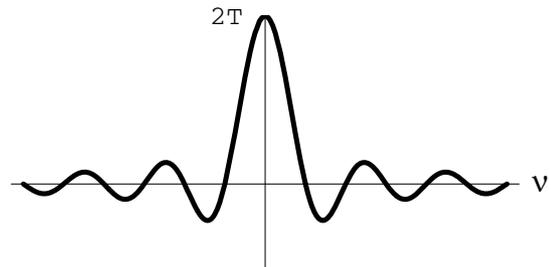
a)

$$r_T(t) = \begin{cases} 1 & \text{pro } |t| \leq T \\ 0 & \text{pro } |t| > T \end{cases}$$



b) Přístrojová křivka:

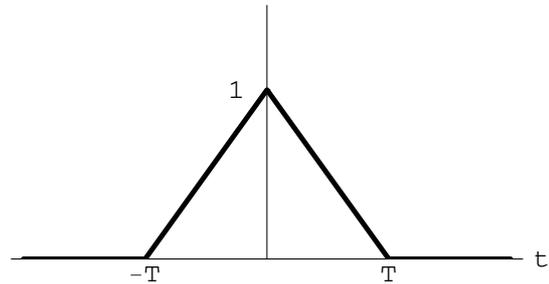
$$\mathcal{F}[r_T(t)] = 2T \operatorname{sinc}(2\pi T\nu)$$



II. Trojúhelníková apodizační funkce

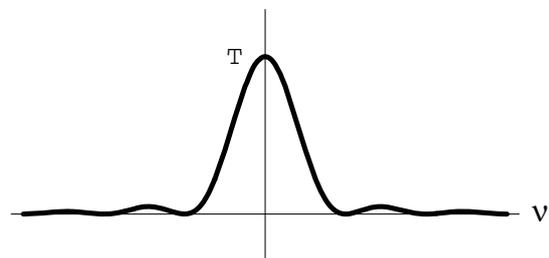
a)

$$a_T(t) = \begin{cases} 1 - \frac{|t|}{T} & \text{pro } |t| \leq T \\ 0 & \text{pro } |t| > T \end{cases}$$



b) Přístrojová křivka:

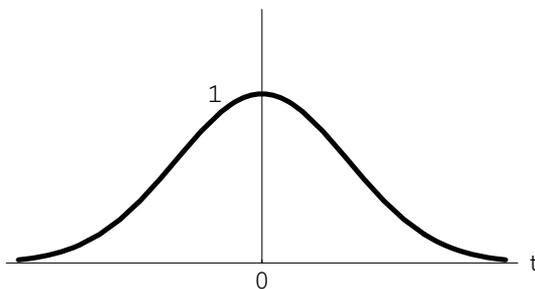
$$\mathcal{F}[a_T(t)] = T \operatorname{sinc}^2(\pi T\nu)$$



III. Gaussova apodizační funkce

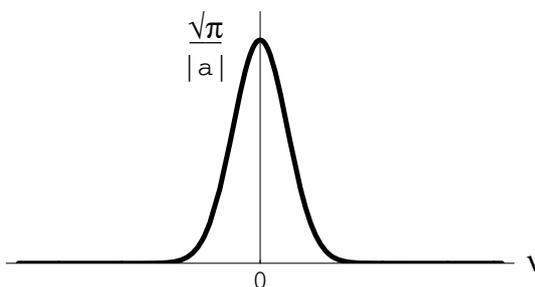
a)

$$g_T(t) = e^{-a^2 t^2}$$



b) Přístrojová křivka:

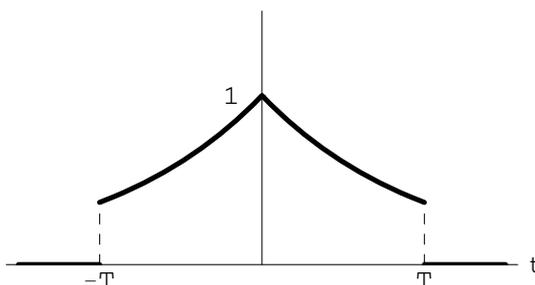
$$\mathcal{F}[g_T(t)] = \frac{\sqrt{\pi}}{|a|} e^{-\frac{\pi^2}{a^2} \nu^2}$$



IV. Exponenciální apodizační funkce

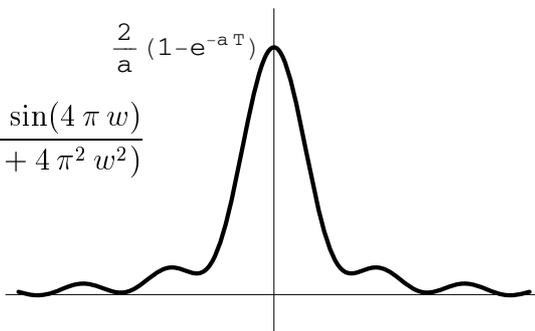
a)

$$e_T(t) = \begin{cases} e^{-a|t|} & \text{pro } |t| \leq T \\ 0 & \text{pro } |t| > T \end{cases}$$



b) Přístrojová křivka:

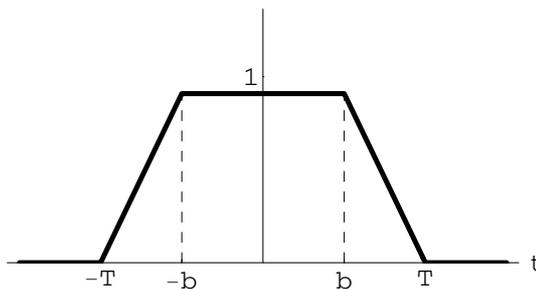
$$\mathcal{F}[e_T(t)] = \frac{2}{1 + 4\pi^2 w^2} - \frac{2 \cos(4\pi w)}{e^2 (1 + 4\pi^2 w^2)} + \frac{4\pi w \sin(4\pi w)}{e^2 (1 + 4\pi^2 w^2)}$$



V. Lichoběžníková apodizační funkce

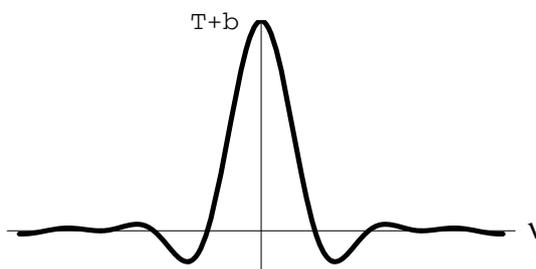
a)

$$l_T(t) = \begin{cases} 0 & \text{pro } |t| \geq T \\ \frac{t+T}{T-b} & \text{pro } t \in \langle -T, -b \rangle \\ 1 & \text{pro } t \in \langle -b, b \rangle \\ \frac{-t+T}{T-b} & \text{pro } t \in \langle b, T \rangle \end{cases}$$



b) Přístrojová křivka:

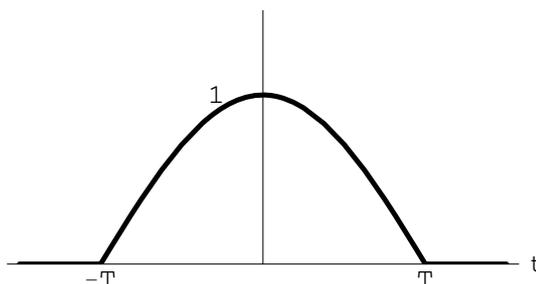
$$\mathcal{F}[l_T(t)] = (T + b) \operatorname{sinc} \pi\nu(b + T) \operatorname{sinc} \pi\nu(b - T)$$



VI. Čtvrtvlnová kosínová apodizační funkce

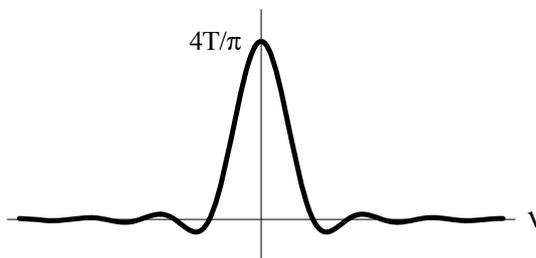
a)

$$c_T(t) = \begin{cases} \cos \frac{\pi|t|}{2T} & \text{pro } |t| \leq T \\ 0 & \text{pro } |t| > T \end{cases}$$



b) Přístrojová křivka:

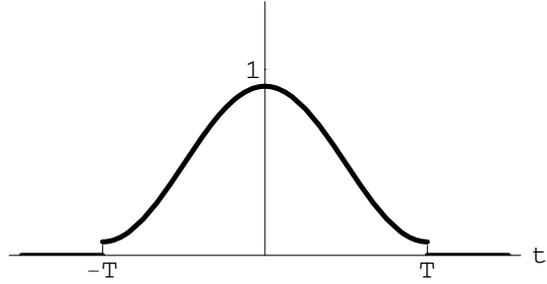
$$\mathcal{F}[c_T(t)] = -4 \frac{T \cos 2\pi T\nu}{\pi(16T^2\nu^2 - 1)}$$



VII. Happ-Geuzelova kosínová apodizační funkce

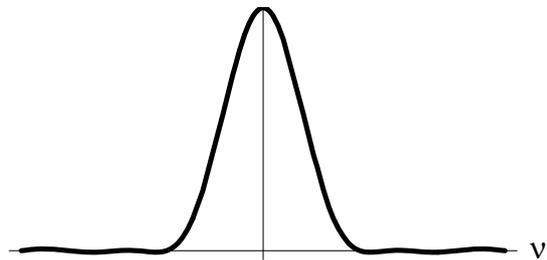
a)

$$h_T(t) = \begin{cases} 0.54 + 0.46 \cos \frac{\pi t}{T} & \text{pro } |t| \leq T \\ 0 & \text{pro } |t| > T \end{cases}$$



b) Přístrojová křivka:

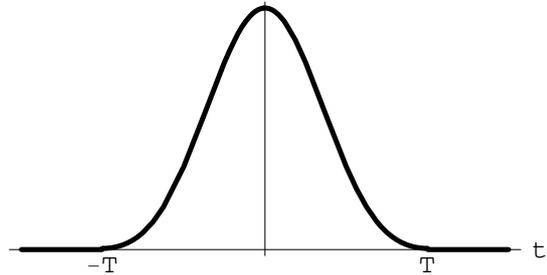
$$\mathcal{F}[h_T(t)] = \frac{2(-0.27 + 0.16t^2\nu^2) \sin 2\pi T\nu}{\pi\nu(4T^2\nu^2 - 1)}$$



VIII. Blackman-Harrisova kosínová apodizační funkce

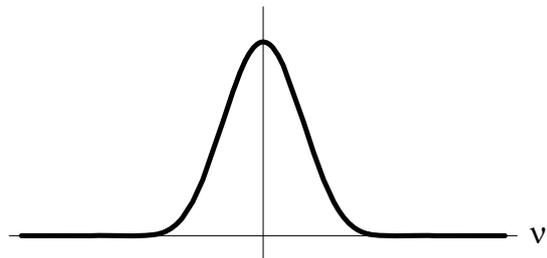
a)

$$b_T(t) = \begin{cases} 0.42323 + \\ + 0.49755 \cos \frac{\pi t}{T} + \\ + 0.07922 \cos \frac{2\pi t}{T} & \text{pro } |t| \leq T \\ 0 & \text{pro } |t| > T \end{cases}$$



b) Přístrojová křivka:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[b_T(t)] = & \frac{0.42323 \sin 2\pi T\nu}{\pi\nu(T^2\nu^2 - 1)(4T^2\nu^2 - 1)} - \\ & - \frac{0.20517T^2\nu \sin 2\pi T\nu}{\pi(T^2\nu^2 - 1)(4T^2\nu^2 - 1)} + \\ & + \frac{0.0196T^4\nu^3 \sin 2\pi T\nu}{\pi(T^2\nu^2 - 1)(4T^2\nu^2 - 1)} \end{aligned}$$



4.12 Dekonvoluce.

Dekonvoluce je další metoda, kterou lze zvýšit rozlišitelnost spektrálních čar ve spektru daného signálu **ve vymezené oblasti frekvencí**.

Uvažujme spektrum $S(\nu)$ signálu $s(t)$. Podstata metody dekonvoluce je následující: Snažíme se vyjádřit spektrum $S(\nu)$ jako konvoluci

$$S(\nu) = \hat{S}(\nu) * L(\nu), \quad (4.42)$$

dvou spekter, tzv. **dekonvolučního spektra** $\hat{S}(\nu)$ a spektra $L(\nu)$, přičemž chceme aby dekonvoluční spektrum $\hat{S}(\nu)$ mělo co nejužší píky, teoreticky tedy δ -funkce. Spektrum $L(\nu)$ je pak „odpovědné“ za rozšiřování spektrálních čar. Podle vlastnosti 11 z TABULKY I víme, že konvoluce obrazů odpovídá součinu vzorů, takže původní signál $s(t)$ lze vzhledem k (4.42) napsat jako součin

$$s(t) = \hat{s}(t) \cdot l(t), \quad (4.43)$$

kde

$$\mathcal{F}[\hat{s}(t)] = \hat{S}(\nu) \text{ a } \mathcal{F}[l(t)] = L(\nu).$$

Pak je $l(t)$ složka signálu, která je odpovědná za rozšiřování spektrálních čar ve spektru. **Vynásobením signálu $s(t)$ funkcí $\frac{1}{l(t)}$** dostaneme signál $\hat{s}(t)$, jehož spektrum $\hat{S}(\nu)$ -dekonvoluční spektrum signálu $s(t)$ má úzké píky a tedy vysokou rozlišitelnost.

Celou situaci budeme demonstrovat na následujícím velmi jednoduchém příkladu.

Příklad 4.10 Podle vztahu (4.38) ze cvičení 4.6 platí:

$$\mathcal{F}[e^{-2\pi a|t|} \cos 2\pi\nu_0 t] = S(\nu) = \frac{1}{2\pi} \left[\frac{a}{a^2 + (\nu - \nu_0)^2} + \frac{a}{a^2 + (\nu + \nu_0)^2} \right].$$

V tomto jednoduchém příkladu vidíme snadno, jak rozložit $S(\nu)$ na dekonvoluční spektrum $\hat{S}(\nu)$ a „zbytek“, tedy

$$\frac{1}{2\pi} \left[\frac{a}{a^2 + (\nu - \nu_0)^2} + \frac{a}{a^2 + (\nu + \nu_0)^2} \right] = [\delta(\nu - \nu_0) + \delta(\nu + \nu_0)] * \frac{a}{2\pi(a^2 + \nu^2)},$$

takže

$$\hat{S}(\nu) = \delta(\nu - \nu_0) + \delta(\nu + \nu_0) \text{ a } L(\nu) = \frac{a}{2\pi(a^2 + \nu^2)}.$$

Dekonvoluční spektrum $\hat{S}(\nu)$ je spektrem signálu $\hat{s}(t) = \cos 2\pi\nu_0 t$. Spektrum „odpovědné“ za rozšíření spektrálních čar je $L(\nu)$, viz obr.4.12, a je to spektrum signálu $l(t) = e^{-2\pi a|t|}$.

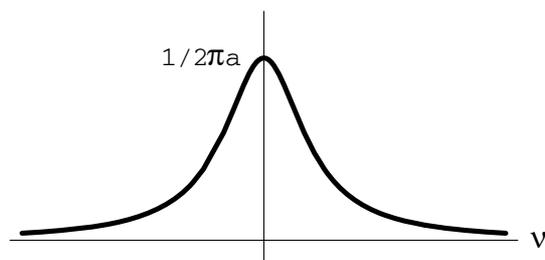
Pak

$$\frac{1}{l(t)} = e^{2\pi a|t|}$$

a

$$\frac{1}{l(t)} s(t) = \cos 2\pi\nu_0 t = \hat{s}(t).$$

Dekonvoluční spektrum signálu $s(t)$ je $\delta(\nu - \nu_0) + \delta(\nu + \nu_0)$ a má požadované vlastnosti (nekonečně úzké píky).



Obrázek 4.12: Spektrum $l(t)$

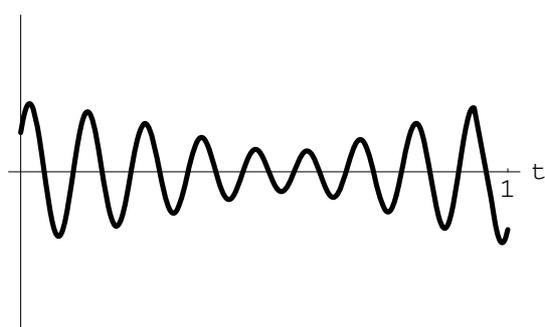
Příklad byl proto tak jednoduchý, protože tvar signálu jsme záměrně zvolili jako součin a z toho důvodu jsme snadno provedli dekonvoluci.

Při praktickém použití metody dekonvoluce neznáme a priori funkci $l(t)$ resp. $L(\nu)$. N označme, jak se postupuje při praktickém použití dekonvoluce.

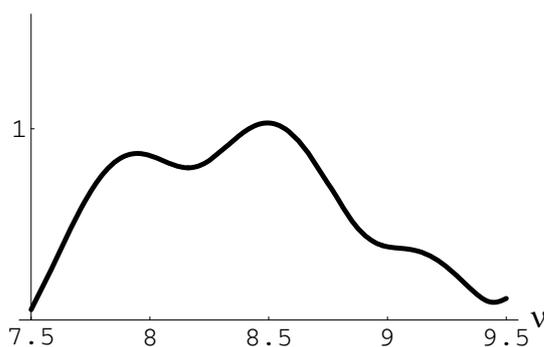
Mějme naměřený signál (např. interferogram) $s(t)$, který je nakreslený na obr. 4.13a. Jeho spektrum je na obr. 4.13b. Existence „málo ostrého“ lokálního minima pro $\nu = m$ nás upozorňuje na možnost, že jsou ve spektru „skryty“ dva blízké píky, které zatím nejsou rozlišeny. Nyní je třeba vhodnou volbou funkce $l(t)$ dosáhnout toho, aby signál

$$\hat{s}(t) = \frac{1}{l(t)} s(t)$$

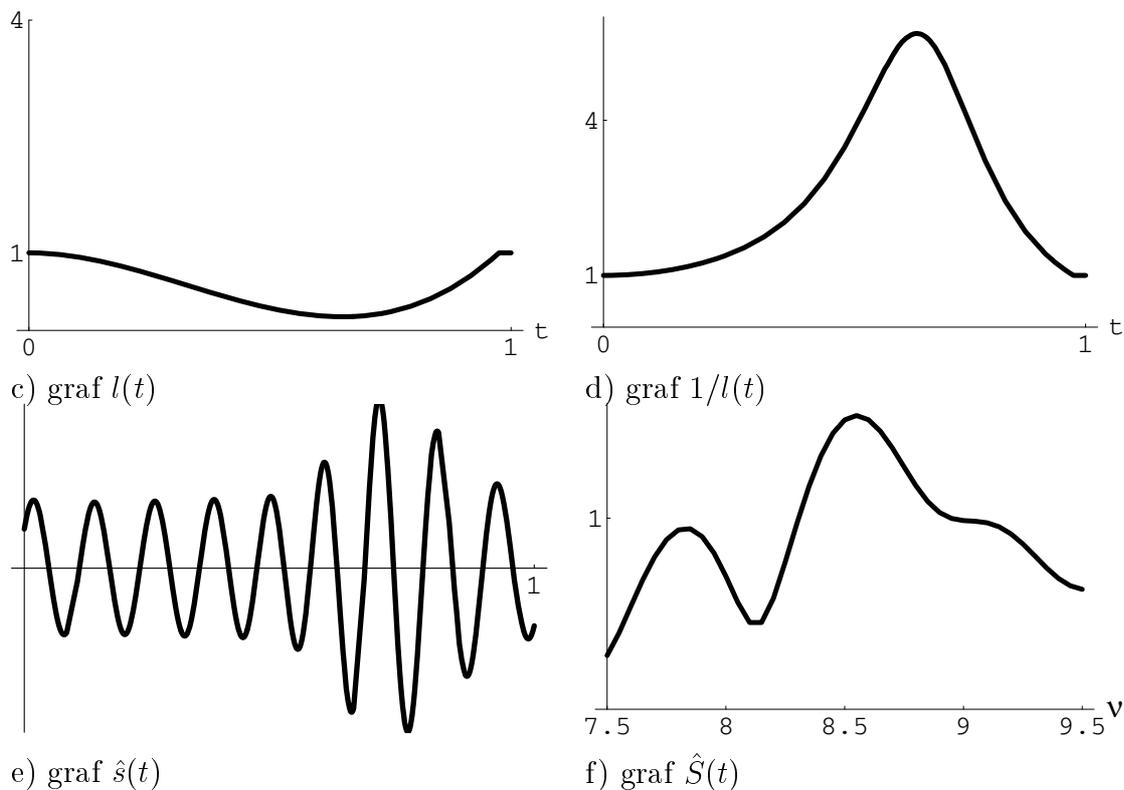
měl spektrum s vyšší rozlišitelností. Volba funkce $l(t)$ se v takovémto případě řídí více méně citem, resp. zkušeností, resp. je **předmětem experimentování**. Zvolíme-li funkci $l(t)$ tak jak je znázorněno na obr. 4.13c, kde je nakreslen graf funkce $l(t)$ a graf funkce $\frac{1}{l(t)}$ je nakreslen na obr. 4.13d, pak signál $\hat{s}(t)$ je nakreslen na obr. 4.13e. Spektrum tohoto signálu, tj. dekonvoluční spektrum signálu $s(t)$ je pak na obr. 4.13f. Naše volba funkce $l(t)$ byla úspěšná a dekonvoluční spektrum ukazuje existenci dvou frekvencí $\nu_1 \doteq 7.8$, $\nu_2 \doteq 8.5$ v signálu $s(t)$.



a) graf $s(t)$



b) graf $S(t)$



Obrázek 4.13: Dekonvoluce-příklad

Dále se ukazuje, že v oblasti kolem frekvence $\nu_3 \doteq 9.0$ mohou existovat další píky. Tuto možnost je ovšem nutné testovat další vhodnou volbou funkce $l(t)$.

V dodatku D se seznámíme s počítačovým programem MATHEMATICA, který umožňuje počítačové experimenty s výše popsanými vlastnostmi FT.

4.13 Aliasing a překrývání frekvencí.

Nyní se budeme zabývat velmi důležitým problémem, a to, **jaký vliv má na spektrum signálu jeho d i s k r e t i z a c e**.

Uvažujme tedy nekonečný spojitý signál $s(t)$ a vyberme časový krok Δ , tzv. **vzorkovací interval**. Pak **diskretizaci signálu** $s(t)$ můžeme zapsat ve tvaru součinu (viz paragraf 3.6 v Kapitole 3):

$$s_{\Delta}(t) = s(t) \cdot i(t), \quad (4.44)$$

kde

$$i(t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(t - n\Delta) \quad (4.45)$$

je nekonečná řada δ -funkcí, tj. impulsů v časech

$$\dots, -n\Delta, \dots, -2\Delta, -\Delta, 0, \Delta, 2\Delta, \dots, n\Delta, \dots$$

FT diskretizovaného signálu $s_{\Delta}(t)$ získáme pomocí vlastnosti 11 z TABULKY I jako \mathcal{F} -obraz součinu, tj.

$$\mathcal{F}[s_{\Delta}(t)] = \mathcal{F}[s(t)] * \mathcal{F}[i(t)].$$

Označme:

$$\begin{aligned}\mathcal{F}[s(t)] &= S(\nu), \\ \mathcal{F}[s_{\Delta}(t)] &= S_{\Delta}(\nu), \\ \mathcal{F}[i(t)] &= I(\nu),\end{aligned}$$

takže

$$S_{\Delta}(\nu) = S(\nu) * I(\nu). \quad (4.46)$$

Dá se dokázat, že platí:

$$I(\nu) = \mathcal{F}\left[\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(t - n\Delta)\right] = \frac{1}{\Delta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta\left(\nu - \frac{n}{\Delta}\right), \quad (4.47)$$

tj. FT převádí řadu δ -funkcí opět v řadu δ -funkcí. Dosazením z (4.47) do (4.46) dostáváme:

$$\begin{aligned}S_{\Delta}(\nu) &= S(\nu) * I(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} S(\nu - s)I(s)ds = \int_{-\infty}^{\infty} S(\nu - s)\left[\frac{1}{\Delta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta\left(s - \frac{n}{\Delta}\right)\right]ds = \\ &= \frac{1}{\Delta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{\infty} S(\nu - s)\delta\left(s - \frac{n}{\Delta}\right)ds = \frac{1}{\Delta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} S\left(\nu - \frac{n}{\Delta}\right).\end{aligned}$$

Tudíž \mathcal{F} -obraz (spektrum) diskretizovaného signálu je

$$S_{\Delta}(\nu) = \frac{1}{\Delta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} S\left(\nu - \frac{n}{\Delta}\right), \quad (4.48)$$

kde na pravé straně je řada sestavená z funkčních hodnot spektra spojitého signálu.

Poznámka 4.10 (Důležitá!!) Funkce $S_{\Delta}(\nu)$ je periodickou funkcí, jejíž perioda je rovna $\frac{1}{\Delta}$.

Důkaz:

Počítejme:

$$S_{\Delta}\left(\nu \pm \frac{1}{\Delta}\right) = \frac{1}{\Delta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} S\left(\nu \pm \frac{1}{\Delta} - \frac{n}{\Delta}\right) = \frac{1}{\Delta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} S\left(\nu - \frac{n \pm 1}{\Delta}\right) = S_{\Delta}(\nu),$$

což jsme měli dokázat.

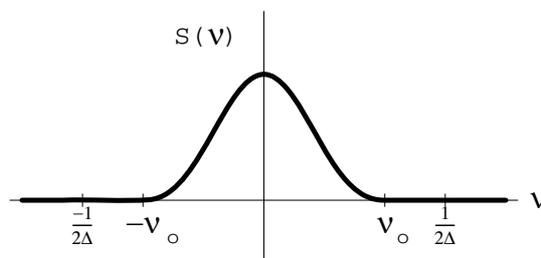
Připomeňme, že graf funkce $S\left(\nu - \frac{n}{\Delta}\right)$ získáme z grafu funkce $S(\nu)$ posunutím o $\frac{n}{\Delta}$ jednotek doprava resp. doleva, v závislosti na znaménku čísla n .

Tudíž spektrum $S_{\Delta}(\nu)$ diskretizovaného signálu je s o u č t e m příslušně posunutých spekter spojitého signálu. Tento jev se nazývá v anglicky psané literatuře **a l i a s i n g**.

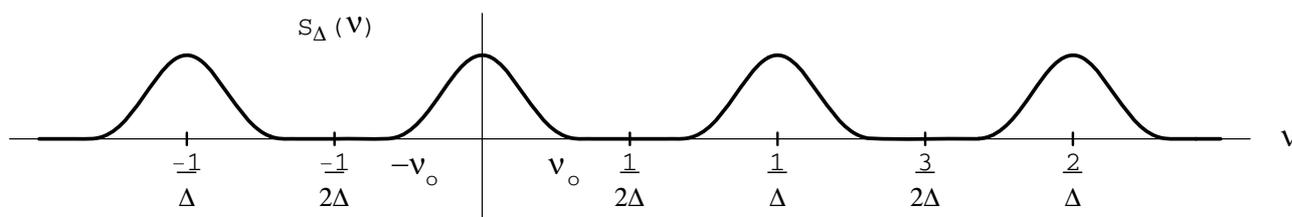
Mohou nastat tyto dva případy:

Případ I.

Spektrum $S(\nu)$ spojitého signálu je rovno **nule** vně nějakého intervalu $\langle -\nu_0, \nu_0 \rangle$, jehož délka je menší než $\frac{1}{\Delta}$ -perioda spektra $S_{\Delta}(\nu)$, viz obr.4.14. Pak spektrum $S_{\Delta}(\nu)$ diskretizovaného signálu dostaneme periodickým opakováním grafu $S(\nu)$, tj. spektra spojitého signálu $s(t)$, viz obr.4.15.



Obrázek 4.14: Původní spektrum



Obrázek 4.15: Spektrum diskretizovaného signálu

V tomto případě je spektrem $S_{\Delta}(\nu)$ diskretizovaného signálu určeno přesně spektrum $S(\nu)$ původního spojitého signálu. Stačí se omezit na nějaký interval délky $\frac{1}{\Delta}$.

Příklad 4.11 Funkce $\sin(60\pi t)$ má periodu $T = \frac{2\pi}{60\pi} = \frac{1}{30}$, tudíž má frekvenci $\nu = 30\text{Hz}$. Diskretizujeme-li tuto funkci se vzorkovacím intervalem $\Delta = \frac{1}{256}$ (tj. za jednu sekundu jsme signál snímali 256krát), pak se nám ve spektru objeví jeden ostrý pík na frekvenci $\nu_0 = 30$ a druhý na frekvenci $\nu_1 = -30$. Tento se obvykle počítačem nezobrazuje, neboť zpravidla pracujeme jen s kladnými frekvencemi, takže další pík se objeví na frekvenci

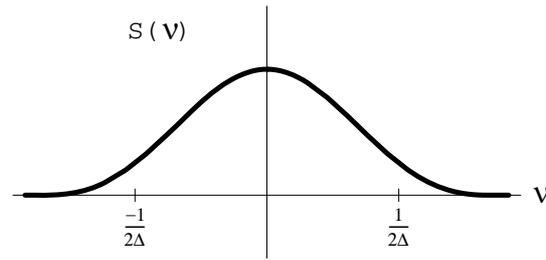
$$\nu_1 + \frac{1}{\Delta} = -30 + 256 = 226.$$

(Viz příklady v Kapitole 6.)

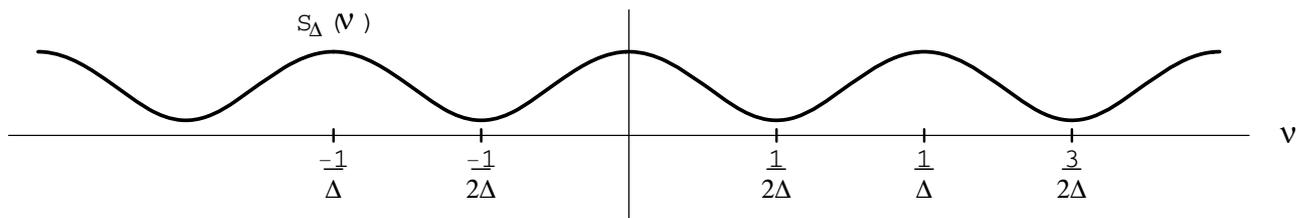
Případ II.

V případě, že je spektrum $S(\nu)$ **nenulové** na intervalu, který je delší než $\frac{1}{\Delta}$, pak dochází k „překrývání“ grafů $S(\nu)$ a $S(\nu - \frac{n}{\Delta})$, jak je nakresleno na obr.4.16,4.17.

Tento jev se nazývá **překrývání frekvencí** (někdy také aliasing) a zhoršuje kvalitu (rozlišitelnost) spektra. V tomto případě nemůžeme ze spektra $S_{\Delta}(\nu)$ přesně určit spektrum $S(\nu)$.



Obrázek 4.16: Původní spektrum



Obrázek 4.17: Překrývání frekvencí

Poznámka 4.11 Pro daný vzorkovací interval Δ nazýváme frekvenci

$$\nu_c = \frac{1}{2\Delta} \quad (4.49)$$

Nyquistovou frekvencí. Je to nejvyšší frekvence signálu, kterou můžeme při daném vzorkovacím intervalu Δ spolehlivě určit ze získaného spektra.

Příklad 4.12 Nechť je vzorkovací interval $\Delta = 0,1s$. Pak je Nyquistova frekvence rovna

$$\nu_c = \frac{1}{2\Delta} = 5\text{Hz}.$$

Hodnota spektra $S_\Delta(\nu)$ diskretizovaného signálu je např. pro $\nu = 4\text{Hz}$ podle vztahu (4.48) rovna

$$S_\Delta(4) = \frac{1}{0,1} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} S\left(4 - \frac{n}{0,1}\right) = 10 \cdot [\dots + S(4+20) + S(4+10) + S(4) + S(4-10) + S(4-20) + \dots].$$

Frekvence $\dots, -16, -6, 14, 24, \dots$ se nazývají **dvojníky** (aliases) základní frekvence $\nu = 4$.

Příklad 4.13 Určeme délku $2T$ spojitého signálu a vzorkovací interval Δ tak, abychom ve spektru mohli rozlišit píky odpovídající frekvencím $\nu_1 = 99\text{Hz}$ a $\nu_2 = 100\text{Hz}$.

Délku signálu určíme pomocí vztahu (4.41):

$$T = \frac{1}{\nu_2 - \nu_1} = \frac{1}{100 - 99} = 1s.$$

Signál musí mít délku alespoň 2 sekundy. Vzorkovací interval Δ je určen podmínkou, aby Nyquistova frekvence byla alespoň 100Hz, tj.

$$\frac{1}{2\Delta} \geq 100 \Rightarrow \Delta \leq 0,005s.$$

Tudíž v intervalu 1 s musíme vzít alespoň 200 hodnot signálu.

Poznámka 4.12 Jaký vliv na pozorovaný jev může mít nevhodná volba vzorkovacího intervalu Δ si ukážeme na jednom jevu, který dobře známe z filmů. Víme, že filmová kamera snímá 25 snímků za sekundu, tedy $\Delta = \frac{1}{25}$. Nechť kamera snímá jedoucí kočár, jehož kola mají pro jednoduchost jen čtyři loukotě. Jestliže je rychlost kočáru taková, že se kola otočí o 90 stupňů za $\frac{1}{25}$ sekundy, pak se na filmu kola jeví, jako by stála. Pro správné zaznamenání otáčení kol při větších rychlostech kočáru je vzorkovací interval $\Delta = \frac{1}{25}$ příliš dlouhý. Dochází při něm ke zcela zkresleným záznamům, např. že se kola otáčejí pozpátku.

Poznámka 4.13 (Důležitá!) Na závěr této kapitoly uvedme ještě několik poznámek k označení používaných v této kapitole. Signály jsme značili $s(t)$, kde proměnná t byla interpretována jako čas a \mathcal{F} -obraz signálu jsme značili $S(\nu)$, kde proměnná ν byla interpretována jako frekvence.

Tento způsob jsme volili proto, že základní pojmy a vlastnosti Fourierovy transformace se v tomto kontextu vysvětlují nejsnadněji. Protože tato skripta jsou věnována FT pro infračervenou spektroskopii (IČ), zastavme se krátce u označení používaných v IČ.

V IČ je signálem interferogram (viz kap.6), značený obvykle $P(x)$, kde x je velikost optického dráhového rozdílu v Michelsonově interferometru a $P(x)$ je světelný tok zaznamenávaný detektorem. Takto získaný interferogram $P(x)$ je zpracován pomocí FT. tj.

$$\mathcal{F}[P(x)] = S(\tilde{\nu}) = \int_{-\infty}^{\infty} P(x)e^{-2\pi i\tilde{\nu}x} dx, \quad (4.50)$$

kde proměnná $\tilde{\nu}$ v \mathcal{F} -obrazu $S(\tilde{\nu})$ znamená **vlnočet**. Pracovat s vlnočtem je výhodnější, neboť IČ spektroskopie pracuje se světlem, jehož frekvence je řádově $10^{12} - 10^{13}$ Hz, takže vlnočet

$$\tilde{\nu} = \frac{\nu}{c}$$

($c = 3 \cdot 10^{10} \text{ cm/s}$) se obvykle pohybuje v rozmezí 1000 - 5000 cm^{-1} , což je praktičtější.

V tomto duchu nyní přeformulujeme příklady 4.11 až 4.13.

Příklad 4.14 Nechť c značí rychlost světla. Funkce

$$P(x) = \cos(6\pi 10^3 cx)$$

má periodu

$$T = \frac{2\pi}{6\pi c 10^3} = \frac{1}{3c} 10^{-3}$$

a frekvenci

$$\nu_0 = \frac{1}{T} = 3 \cdot 10^3 \cdot c,$$

kteřé odpovídá vlnočet $\tilde{\nu}_0$

$$\tilde{\nu}_0 = \frac{\nu}{c} = 3000 \text{ cm}^{-1}.$$

Diskretizujeme-li tuto funkci se vzorkovacím intervalem $\Delta x = 10^{-4} \text{ cm}$, pak se nám ve spektru objeví jeden ostrý pík na vlnočtu $\tilde{\nu}_0 = 3000 \text{ cm}^{-1}$ a druhý na vlnočtu $\tilde{\nu}_1 = -3000 \text{ cm}^{-1}$. Tento se obvykle počítačem nezobrazuje. Další ostrý pík se objeví na vlnočtu

$$\tilde{\nu}_0 + \frac{1}{\Delta x} = -3000 + 10000 = 7000.$$

Nyquistův vlnočet. Pro daný vzorkovací interval Δx nazýváme vlnočet

$$\tilde{\nu}_f = \frac{1}{2\Delta x} \tag{4.51}$$

Nyquistovým vlnočtem. Je to největší vlnočet, který můžeme při daném vzorkovacím intervalu Δx spolehlivě určit ze získaného spektra.

Příklad 4.15 Nechtě je vzorkovací interval $\Delta x = 0,0001 \text{ cm}$. Pak je Nyquistův vlnočet roven

$$\tilde{\nu}_f = \frac{1}{2\Delta x} = 5000 \text{ cm}^{-1}.$$

Hodnota spektra $S_\Delta(\tilde{\nu})$ diskretizovaného signálu je např. pro $\tilde{\nu} = 3000 \text{ cm}^{-1}$ podle vztahu (4.48) rovna

$$\begin{aligned} S_\Delta(3000) &= 10^3 \sum_{-\infty}^{+\infty} S\left(3000 - \frac{n}{10^{-4}}\right) = \\ &= 10^3 [\dots + S(3000 + 10000) + S(3000) + S(3000 - 10000) + \dots]. \end{aligned}$$

Vlnočty $\dots, -7000, 13000, \dots$ se nazývají **dvojníky** (aliases) základního vlnočtu $\tilde{\nu} = 3000$.

Příklad 4.16 Určeme posun pohyblivého zrcadla v Michelsonově interferometru a délku vzorkovacího intervalu Δx tak, abychom ve spektru mohli rozlišit píky odpovídající vlnočtům $\tilde{\nu}_1 = 2499$ a $\tilde{\nu}_2 = 2500$.

Řešení: Minimální posun označme d a použijme vztah (4.41):

$$d = \frac{1}{2500 - 2499} = 1 \text{ cm}.$$

Vzorkovací interval Δx je určen podmínkou, aby

$$\frac{1}{2\Delta x} \geq 2500 \implies \Delta x \leq \frac{1}{5000} = 2 \cdot 10^{-4} \text{ cm}.$$

Tedy v intervalu délky 1 cm musíme zaregistrovat alespoň 5000 hodnot signálu.

Kapitola 5

Diskrétní Fourierova transformace

5.1 Zavedení diskrétní FT (DFT)

Připomeňme definiční vztah pro FT signálu $s(t)$:

$$S(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} s(t)e^{-2\pi i\nu t} dt \quad (5.1)$$

a vzorce pro inverzní FT:

$$s(t) = \int_{-\infty}^{\infty} S(\nu)e^{2\pi i\nu t} d\nu. \quad (5.2)$$

Je zřejmé, že při praktickém použití FT musíme integrál na pravé straně (5.1) počítat numericky.

Před vlastním numerickým výpočtem musíme signál vhodně „upravit“, tj. vynásobit vhodnou **apodizační funkcí** (viz. paragraf 4.11 v kapitole 4), popřípadě použít dekonvoluční metodu a potom signál diskretizovat, resp. diskretizovaný signál upravujeme výše zmíněným způsobem. To záleží na přístrojovém vybavení, které používáme. Nyní přistupme k odvození vztahů pro DFT. Samotný fakt, že pracujeme s diskretizovaným signálem nás vede k tomu, že integrál v (5.1) nahrazujeme **Riemanovým integrálním součtem**. Uvažujme tedy signál $s(t)$ konečné délky, tj. $t \in \langle 0, T \rangle$ se vzorkovacím intervalem $\Delta = \Delta t$, který volíme tak, že

$$\Delta t = \frac{T}{N}, \quad (5.3)$$

kde N je počet dílků, na který je interval $\langle 0, T \rangle$ rozdělen.

Položme

$$t_k = k\Delta t, k = 0, 1, \dots, N - 1.$$

Pak $s(t_k)$ jsou hodnoty diskretizovaného signálu. Pro dané ν dostáváme

$$S(\nu) = \Delta t \sum_{k=0}^{N-1} s(t_k)e^{-2\pi i\nu t_k}. \quad (5.4)$$

Protože potřebujeme znát graf funkce $S(\nu)$, musíme počítat funkční hodnoty $S(\nu)$ v co nejvíce bodech. Tyto body volíme následujícím způsobem:

$$\nu_n = n\Delta\nu, \quad n = 0, 1, \dots, N - 1,$$

kde

$$\Delta\nu = \frac{1}{T}. \quad (5.5)$$

Pak

$$\Delta t \cdot \Delta\nu = \frac{T}{N} \cdot \frac{1}{T} = \frac{1}{N}. \quad (5.6)$$

Ještě určíme

$$\nu_n \cdot t_k = n \cdot \frac{1}{T} \cdot k \cdot \frac{T}{N} = \frac{nk}{N}. \quad (5.7)$$

Dosazením do (5.4) za $\nu = \nu_n$ dostáváme

$$S(\nu_n) = \Delta t \sum_{k=0}^{N-1} s(t_k) e^{-\frac{2\pi i n k}{N}}, \quad n = 0, 1, \dots, N - 1. \quad (5.8)$$

Zcela analogicky odvodíme, že vztah (5.2) přejde na vztah

$$s(t_k) = \Delta\nu \sum_{n=0}^{N-1} S(\nu_n) e^{\frac{2\pi i k n}{N}}, \quad k = 0, 1, \dots, N - 1. \quad (5.9)$$

Vztahy (5.8) a (5.9) definují DFT a inverzní DFT (IDFT). Zastavme se u nich podrobněji. Označme pro stručnost

$$\left. \begin{aligned} s(t_k) &= a_k, & k &= 0, 1, \dots, N - 1 \\ S(\nu_n) &= A_n, & n &= 0, 1, \dots, N - 1. \end{aligned} \right\} \quad (5.10)$$

Pak (5.8) a (5.9) mají tvar:

$$A_n = \Delta t \sum_{k=0}^{N-1} a_k e^{-\frac{2\pi i n k}{N}}, \quad n = 0, 1, \dots, N - 1, \quad (5.11)$$

$$a_k = \Delta\nu \sum_{n=0}^{N-1} A_n e^{\frac{2\pi i k n}{N}}, \quad k = 0, 1, \dots, N - 1. \quad (5.12)$$

Poznámka 5.1 Ve vztazích (5.11) a (5.12) nemají násobné faktory Δt resp. $\Delta\nu$ žádný podstatný význam. Mají pouze vliv na volbu měřítka pro kreslení spekter. Proto je budeme v dalším ze vztahů (5.11) a (5.12) **vynechávat**.

DFT přiřazuje vztahem (5.11) vektoru

$$\vec{a} = (a_0, a_1, \dots, a_{N-1}) \in R^N$$

vektor

$$\vec{A} = (A_0, A_1, \dots, A_{N-1}) \in C^N$$

DFT je tedy zobrazení z R^N do C^N . Bude-li to vhodné budeme stručně psát

$$\mathcal{DF}[\vec{a}] = \vec{A}.$$

Připomeňme, že souřadnice vektoru \vec{a} jsou hodnoty signálu $s(t)$ v bodech $t_k, k = 0, 1, \dots, (N - 1)$ a souřadnice vektoru \vec{A} jsou hodnoty spektra $S(\nu)$ v bodech $\nu_n, n = 0, 1, \dots, N - 1$. Tudíž souřadnice vektoru \vec{A} mohou být komplexní.

Pak

$$A_n = \operatorname{Re}A_n + i\operatorname{Im}A_n,$$

resp.

$$A_n = |A_n| e^{i\Phi_n},$$

pro $n = 0, 1, \dots, N - 1$.

Analogicky jako v případě spojité FT zavádíme i v případě DFT **diskretní amplitudové spektrum** \vec{A}_a :

$$\vec{A}_a = (|A_0|, |A_1|, \dots, |A_{N-1}|); \quad (5.13)$$

diskretní fázové spektrum \vec{A}_Φ :

$$\vec{A}_\Phi = (\Phi_0, \Phi_1, \dots, \Phi_{N-1}); \quad (5.14)$$

diskretní výkonové spektrum \vec{A}_P :

$$\vec{A}_P = (|A_0|^2, |A_1|^2, \dots, |A_{N-1}|^2). \quad (5.15)$$

Pro kreslení diskretních spekter se používá obvyklý způsob kreslení grafů posloupností. V bodech $\nu_n = n \cdot \Delta\nu, n = 0, 1, \dots, N - 1$ na vodorovné frekvenční ose vynášíme na svislou osu příslušné hodnoty spekter. Kvalita takto získaného grafu, tj. spektra, závisí na "hustotě" bodů ν_n , tj. na velikosti $\Delta\nu$. Teoreticky je $\Delta\nu = \frac{1}{T}$. Jestliže by délka T signálu byla malá, pak by jednotlivé body grafu byly daleko od sebe a po jejich spojení úsečkami bychom dostali málo hladkou (neboli kostrbatou) křivku. Jak tuto nesnáz obejít, ukážeme v paragrafu 5.3.

5.2 Aliasing v DFT

V tomto odstavci ukážeme, že vlastnosti FT popsané v paragrafu 4.13 kapitoly 4 má i DFT. Jedná se o vlastnosti popsané v poznámce 4.10.

Jestliže v (5.11) připustíme, aby index n probíhal všechna celá čísla, ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$), pak platí

$$A_{n \pm N} = A_n, \quad (5.16)$$

neboť

$$A_{n+N} = \sum_{k=0}^{N-1} a_k e^{-\frac{2\pi i(N+n)k}{N}} = \sum_{k=0}^{N-1} a_k e^{-\frac{2\pi i n k}{N}} e^{-2\pi i k} = A_n,$$

protože $e^{-2\pi i k} = 1$. Tudíž posloupnost $\{A_n\}_{n=-\infty}^{+\infty}$ je periodická s periodou N . Srovnej s poznámkou 4.10. Tento jev jsme v kapitole 4 nazvali „aliasing“ a vyskytuje se v popsané formě i v DFT.

5.3 Zero-filling

Jak již bylo řečeno na konci paragrafu 5.1, kvalita spektra získaného DFT závisí na velikosti "vzorkovacího" intervalu $\Delta\nu = \frac{1}{T}$. Tudíž hustota bodů ν_n bude tím větší, čím delší je signál (interferogram). Abychom zmenšili $\Delta\nu$ musíme zvětšit T . Avšak délka signálu je z technických důvodů omezena, proto pro zmenšení $\Delta\nu$ používáme jistého "triku", tzv. **zero-filling**, což lze volně přeložit jako **doplnění nulami**. Nyní popíšeme tento trik.

Položme

$$w = e^{\frac{-2\pi i}{N}}. \quad (5.17)$$

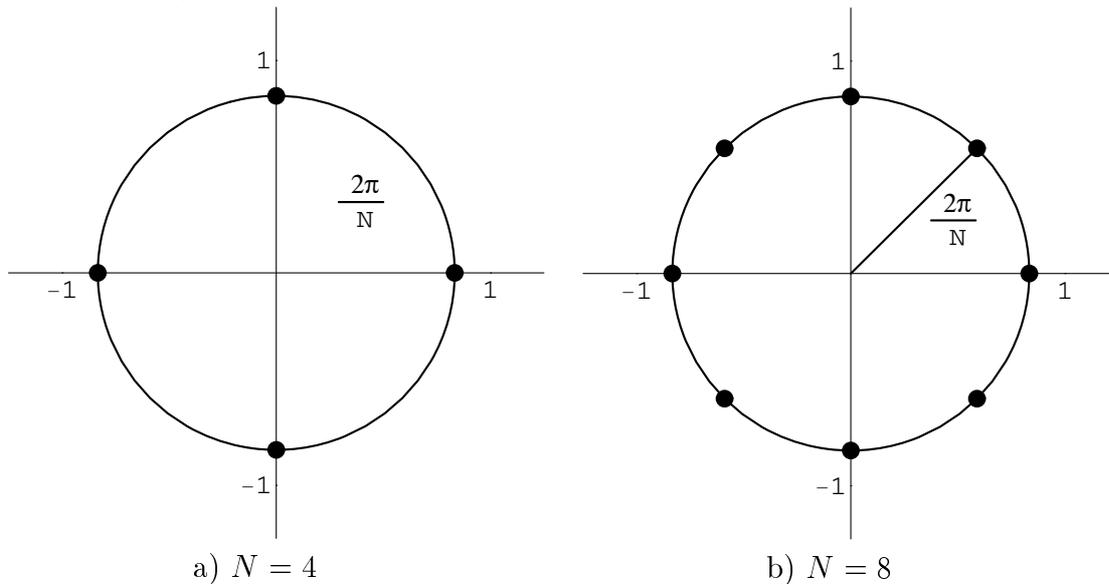
Pak

$$w^N = 1,$$

tj. w je N -tá odmocnina z 1. Jak je známo, v oboru komplexních čísel existuje právě N N -tých odmocnin z 1 a jsou to čísla tvaru

$$w^n, \quad n = 0, 1, \dots, N - 1, \quad (5.18)$$

která leží na jednotkové kružnici v komplexní rovině a argumenty sousedních N -tých odmocnin se liší o $\frac{2\pi}{N}$, viz obr.5.1a, kde $N = 4$ a obr.5.1b, kde $N = 8$.



Obrázek 5.1: N -té odmocniny z 1

S použitím označení (5.17) lze přepsat vztah (5.11) takto:

$$A_n = \sum_{k=0}^{N-1} a_k w^{nk}. \quad (5.19)$$

Definujme polynom

$$P(x) = a_0 + a_1 x + \dots + a_{N-1} x^{N-1} = \sum_{k=0}^{N-1} a_k x^k, \quad (5.20)$$

jehož koeficienty jsou souřadnice vektoru \vec{a} , tj. hodnoty signálu v bodech $k \cdot \Delta t = t_k$, $k = 0, 1, \dots, N - 1$. Pak z (5.19) a (5.20) plyne

$$A_n = P(w^n). \quad (5.21)$$

Tudíž hodnoty spektra v bodech $\nu_n = n\Delta\nu$, $n = 0, 1, \dots, N - 1$, jsou rovny funkčním hodnotám polynomu $P(x)$ v těch bodech jednotkové kružnice, které odpovídají N -tým odmocninám z 1.

Nyní prodlužme délku signálu tak, že k hodnotám a_0, a_1, \dots, a_{N-1} **přidáme dalších N nulových hodnot**, tj. nový signál má tvar

$$\hat{a} = (a_0, a_1, \dots, a_{N-1}, 0, 0, \dots, 0) \in R^{2N}, \quad (5.22)$$

tudíž délka signálu je $2T$, $\Delta\nu = \frac{1}{2T}$ a body ν_n jsou dvakrát "hustěji" rozloženy na frekvenční ose.

Pro zpracování signálu (5.22) musíme položit

$$\hat{w} = e^{\frac{-2\pi i}{2N}},$$

tj. \hat{w} je $2N$ -tá odmocnina z 1. Platí

$$\hat{w}^2 = w. \quad (5.23)$$

Dále sestavíme příslušný polynom $\hat{P}(x)$ pro signál tvaru (5.22):

$$\hat{P}(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_{N-1}x^{N-1} + 0x^N + \dots + 0x^{2N-1}$$

a zde je ten vtíp celé metody!!! Polynom $\hat{P}(x)$ je roven polynomu $P(x)$.

Tudíž hodnoty spektra pro signál doplněný nulami jsou dány vztahy:

$$\hat{A}_n = \hat{P}(\hat{w}^n) = P(\hat{w}^n), \quad (5.24)$$

a vzhledem k (5.23) dostáváme

$$\hat{A}_0 = \hat{P}(\hat{w}^0) = P(w^0) = A_0$$

$$\hat{A}_1 = \hat{P}(\hat{w}) = P(w)$$

$$\hat{A}_2 = \hat{P}(\hat{w}^2) = P(w^1) = A_1$$

$$\hat{A}_3 = \hat{P}(\hat{w}^3) = P(w^2)$$

$$\hat{A}_4 = \hat{P}(\hat{w}^4) = P(w^2) = A_2$$

atd.

Z výše uvedeného vidíme, že se hodnoty spektra signálu doplněného N nulami pro sudé n rovnají hodnotám spektra původního signálu. Pro lichá n lze nové hodnoty spektra chápat jako hodnoty polynomiální interpolace provedené pomocí polynomu $P(x)$ s původními hodnotami.

Jest zřejmé, že je-li to pro kvalitu spektra nutné, můžeme místo N nul přidat $2N$ nul, $3N$ nul, \dots , $8N$ nul, což se v praxi děje.

Kapitola 6

Infračervený spektrometr

Jak již bylo uvedeno v úvodu, zařízení, které používáme k získání infračerveného spektra nazýváme infračervený spektrometr. V chemické laboratoři se dnes setkáme nejčastěji se dvěma typy infračervených spektrometrů:

1. disperzním spektrometrem,
2. spektrometrem s Fourierovou transformací.

Obrázek 6.1: Zjednodušené optické schéma Michelsonova interferometru. FZ, PZ - rovinná zrcadla, B - dělič svazku, Z - zdroj, D - detektor, l - vzdálenost zrcadla od nulové polohy, x - optický dráhový rozdíl

V disperzním spektrometru je jako disperzní prvek nejčastěji použita odrazná mřížka nebo hranol. Na disperzním prvku dochází k prostorové disperzi spektra. Základem spektrometru s Fourierovou transformací je nejčastěji Michelsonův interferometr, který je příkladem

nedisperzního neboli multiplexního zařízení. Výsledkem měření není spektrum, ale interferogram, což je závislost odezvy detektoru na čase. Z interferogramu získáme spektrum teprve provedením Fourierovy transformace. Z hlediska měření se tudíž vlastně nejedná o spektrometrii, ale interferometrii.

6.1 Spektrometr s Fourierovou transformací

Srdcem většiny komerčních spektrometrů s Fourierovou transformací je skanující Michelsonův interferometr, který je v idealizované podobě znázorněn na (obr.6.1)

Interferometr sestává ze dvou vzájemně kolmých rovinných zrcadel (FZ a PZ) a tzv. děliče svazku B (angl. beamsplitter), který svírá s oběma zrcadly úhel 45° . Zatímco jedno zrcadlo je fixováno, druhé se pohybuje konstantní rychlostí v_m (cm/s). Svazek paprsků dopadá na dělič podél optické osy kolmé k zrcadlu FZ a na jeho polopropustné zrcadlové vrstvě se dělí na dvě rovnocenné části, které postupují odděleně k oběma zrcadlům. Na nich se odrážejí a na dělič svazku opět rekombinují. Je-li vzdálenost mezi děličem svazku a nepohyblivým zrcadlem stejná jako vzdálenost mezi děličem svazku a zrcadlem pohyblivým, tj. je-li optický dráhový rozdíl x mezi oběma rameny interferometru nulový, dochází mezi oběma svazky paprsků ke konstruktivní interferenci, tj. svazek paprsků dopadajícího na detektor má maximální intenzitu. Ke konstruktivní interferenci dojde také tehdy, bude-li dráhový rozdíl celistvým násobkem vlnové délky procházejícího záření:

$$x = n \lambda, \quad (6.1)$$

$$\text{kde } n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Je-li optický dráhový rozdíl nenulový, svazky paprsků z obou ramen interferometru nejsou ve fázi a interferují destruktivně, což vede k redukci intenzity, redukce bude maximální pro dráhový rozdíl rovný polovině vlnové délky nebo jejím celým lichým násobkům:

$$x = (n + 1/2) \lambda = (2n + 1) \frac{\lambda}{2}. \quad (6.2)$$

Setkají-li se dva svazky paprsků lišící se obecně o fázový úhel δ , je výsledný elektrický vektor R vektorovým součtem jednotlivých složek (obr. 6.2)

Platí tedy:

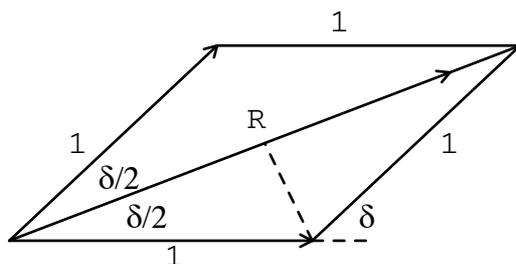
$$R = 2 \cos\left(\frac{\delta}{2}\right). \quad (6.3)$$

Tok záření P spojený s tímto výsledným vektorem, pozorovaný na detektoru D , je úměrný čtverci amplitudy jeho elektrického vektoru, tj.

$$P \propto 4 \cos^2\left(\frac{\delta}{2}\right) \propto 1 + \cos \delta. \quad (6.4)$$

Fázový úhel δ lze pomocí optického dráhového rozdílu x a vlnové délky λ , resp. vlnočtu $\tilde{\nu}$ (odd.2.4) vyjádřit vztahem (viz dále poznámka 6.3)

$$\delta = \frac{2\pi x}{\lambda} = 2\pi \tilde{\nu} x. \quad (6.5)$$



Obrázek 6.2: Výsledný elektrický vektor R pro dva stejné paprsky s fázovým rozdílem δ (elektrické vektory jsou pro jednoduchost jednotkové)

a rovnici (6.4) zapsat

$$P \propto 1 + \cos 2\pi \tilde{\nu} x. \quad (6.6)$$

Ze vztahu (6.6) plyne, že tok záření o vlnočtu $\tilde{\nu}$ opouštějící interferometr je funkcí optického dráhového rozdílu x mezi oběma rameny interferometru. Tuto skutečnost vyjádříme zápisem $P(t)$, a hovoříme o toku záření v časové oblasti na rozdíl od symbolu $P(\tilde{\nu})$ pro tok záření před interferometrem, tj. ve frekvenční oblasti. Jsou-li čas t a vzdálenost x veličiny přímo úměrné, patří do časové oblasti také závislost toku záření na vzdálenosti, kterou zapíšeme $P(x)$.

Poznámka 6.1 ke vztahu (6.3).

Není obtížné odvodit obecný vztah pro skládání dvou vln elektromagnetického záření. Vyjďeme-li ze zjednodušeného popisu vlnové funkce ve tvaru

$$y = A_m \sin(kl - \omega t),$$

kde A_m je amplituda vlny, k je 2π -násobek vlnočtu ($k = 2\pi\tilde{\nu} = 2\pi/\lambda$; tato veličina je někdy nazývána fázová konstanta), l vzdálenost od zdroje a ω úhlová rychlost, lze složení (superpozici) dvou vln, vycházejících ze stejného zdroje a lišících se o fázový úhel δ , totiž

$$y_1 = A_m \sin(kl - \omega t),$$

$$y_2 = A_m \sin(kl - \omega t + \delta)$$

popsat vztahem

$$y_3 = y_1 + y_2 = A_m \sin(kl - \omega t) + A_m \sin(kl - \omega t + \delta).$$

Použijeme vzorec

$$\sin \alpha + \sin \beta = 2 \sin \frac{(\alpha + \beta)}{2} \cos \frac{(\alpha - \beta)}{2},$$

kde

$$\frac{\alpha + \beta}{2} = kl - \omega t + \frac{\delta}{2},$$

$$\frac{\alpha - \beta}{2} = -\frac{\delta}{2},$$

a protože

$$\cos\left(\frac{\delta}{2}\right) = \cos\left(-\frac{\delta}{2}\right),$$

pro výslednou vlnu platí

$$y_3 = 2A_m \cos\left(\frac{\delta}{2}\right) \sin\left(kl - \omega t + \frac{\delta}{2}\right)$$

Výsledná harmonická vlna má stejnou frekvenci a vlnovou délku a liší se od obou původních vln ve fázi a v amplitudě, která je dána součinem $2A_m \cos(\delta/2)$. Ještě upozornění. Někdy je vlnová funkce zapsána jako funkce kosinová. To není chyba, neboť sinová a kosinová funkce se vlastně liší jenom ve fázi, neboť $\sin \alpha = \cos(\alpha - \pi/2)$. Také je možno přehodit kl a $-\omega t$, neboť $\sin(\omega t - kl) = \sin(kl - \omega t + \pi)$. Konstantní fáze se pro jednoduchost vynechává.

Poznámka 6.2 ke vztahu (6.4).

Zářivý tok P udává zářivou energii svazku Q , která danou plochou projde za 1 s. Jiným běžně používaným pojmem je intenzita I , která vyjadřuje zářivou energii prošlou jednotkovým prostorovým úhlem. Obě veličiny jsou určeny čtvercem amplitudy vlny elektromagnetického záření. I když to není zcela správné, oba pojmy se používají jako synonyma.

Poznámka 6.3 ke vztahu (6.5).

Jestliže se záření z jednoho zdroje dostane do určitého místa po různých drahách l_1, l_2 , pak pro dráhový rozdíl rovný právě jedné vlnové délce dojde ke konstruktivní interferenci a bude platit $y_1 = y_2$ a tedy také (viz poznámku 6.1)

$$(kl_1 - \omega t) = (kl_2 - \omega t + \delta)$$

Odtud plyne

$$\delta = k(l_1 - l_2) = 2\pi \tilde{\nu} x = 2\pi x/\lambda,$$

kde $x = l_1 - l_2$ je dráhový rozdíl mezi oběma body.

Pro ideální Michelsonův interferometr lze závislost toku monochromatického záření na dráhovém rozdílu $P(x)$, dopadající na detektor, vyjádřit vztahem:

$$P(x) = 2 R(\tilde{\nu})T(\tilde{\nu})P_0(\tilde{\nu}) (1 + \cos 2\pi \tilde{\nu} x), \quad (6.7)$$

kde $P_0(\tilde{\nu})$ je tok záření o vlnočtu $\tilde{\nu}$ dopadající na dělič svazku a $R(\tilde{\nu})$ a $T(\tilde{\nu})$ jsou reflektance a transmitance děliče svazku pro vlnočet $\tilde{\nu}$. Nedochozí-li na dělič svazku k absorpci, platí vztah $R(\tilde{\nu}) + T(\tilde{\nu}) = 1$. Dělič svazku je označován za 100% účinný, jestliže $R(\tilde{\nu}) = T(\tilde{\nu}) = 0,5$ a platí tedy

$$P(x) = 0,5P_0(\tilde{\nu}) (1 + \cos 2\pi \tilde{\nu} x) \quad (6.8)$$

Je zřejmé, že tok záření, dopadající na detektor, je v interferometru využitelný pouze z 50%.

Obrázek 6.3: Zjednodušené optické schéma průchodu, resp. odrazu záření na děliči svazku. Paprsky v opačných směrech jsou pro názornost posunuty a nejsou uvažovány efekty na nosiči reflexní vrstvy. Funkční závislost veličin P, R, T není pro jednoduchost vyznačena

Poznámka 6.4 ke vztahu (6.7).

Reflektance R a transmitance T jsou definovány jako poměry

$$R = \frac{P_R}{P_0}$$

a

$$T = \frac{P_T}{P_0},$$

kde P_R a P_T jsou prostředím děliče svazku odražené, resp. propuštěné toky záření. Snadno odvodíme, že tok záření, který dopadá na detektor je roven $2R(\tilde{\nu})T(\tilde{\nu})P_0(\tilde{\nu})$, zatímco ke zdroji se vrací $[R^2(\tilde{\nu}) + T^2(\tilde{\nu})]P_0(\tilde{\nu})$ (obr. 6.3).

Suma těchto dvou částí je rovna toku záření, který na interferometr dopadá:

$$\begin{aligned} & [2R(\tilde{\nu})T(\tilde{\nu})]P_0(\tilde{\nu}) + [R^2(\tilde{\nu}) + T^2(\tilde{\nu})]P_0(\tilde{\nu}) = \\ & = [R^2(\tilde{\nu}) + 2R(\tilde{\nu})T(\tilde{\nu}) + T^2(\tilde{\nu})]P_0(\tilde{\nu}) = \\ & = [R(\tilde{\nu}) + T(\tilde{\nu})]^2 P_0(\tilde{\nu}) = P_0(\tilde{\nu}). \end{aligned}$$

V praxi dělič svazku nepracuje ideálně a toky záření v obou ramenech interferometru nejsou ekvivalentní a také odezva detektoru a jeho zesilovač jsou frekvenčně závislé. Zářivý tok je potom dán vztahem

$$P(x) = A(\tilde{\nu})(1 + \cos 2\pi \tilde{\nu}x), \quad (6.9)$$

kde $A(\tilde{\nu})$ je složitou funkcí vlnočtu.

Ve skanujícím Michelsonově interferometru se optický dráhový rozdíl mění spojitě tím, že zrcadlo PZ se pohybuje konstantní rychlostí v_m . Výsledkem je kosinová modulace vystupujícího toku záření s frekvencí f , která závisí na λ a $\tilde{\nu}$ vztahem

$$f = \frac{2v_m}{\lambda} = 2v_m\tilde{\nu} \quad (6.10)$$

Poznámka 6.5 ke vztahu (6.10)

Vztah mezi frekvencí (vlnovou délkou, vlnočtem) monochromatického záření dopadajícího na interferometr a frekvencí f , kterou je modulováno záření z interferometru vycházející, snadno odvodíme z následující úvahy: jeden cyklus signálu na detektoru dostaneme, když se zrcadlo posune o vzdálenost odpovídající $\frac{\lambda}{2}$ (dráhový rozdíl x je potom λ). Na to, aby zrcadlo urazilo při konstantní rychlosti pohybu zrcadla v_m tuto dráhu, je potřebný čas τ

$$v_m\tau = \frac{\lambda}{2}$$

Frekvence f je převrácenou hodnotou τ (viz odd.2.3), tedy

$$f = \frac{1}{\tau} = \frac{2v_m}{\lambda} = 2v_m\tilde{\nu} = \frac{2v_m}{c}\nu$$

$$f = \text{konst.}\nu$$

Je-li zdroj polychromatický, je záření různých vlnových délek modulováno různě a nezávisle na všech ostatních kosinových funkcích. Díky této nezávislosti může být vystupující svazek záření fokusován přímo na detektor bez potřeby oddělovat záření jednotlivých vlnových délek. Vlastní „roztrídění“ záření jednotlivých vlnových délek je provedeno teprve Fourierovou transformací.

Příklad 6.1 Rychlost zrcadla je obvykle v mezích 0,1 až 50 cm/s. Při rychlosti 0,4 cm/s je frekvence modulovaného záření podle vlnové délky, resp. frekvence

| $\lambda, \mu\text{m}$ | ν, Hz | f, Hz |
|------------------------|----------------------|----------------|
| 0,6329 | $4,74 \cdot 10^{14}$ | 12 638,4 |
| 1,0000 | $3 \cdot 10^{14}$ | 8 000,0 |
| 2,0000 | $1,5 \cdot 10^{14}$ | 4 000,0 |
| 4,0000 | $7,5 \cdot 10^{13}$ | 2 000,0 |
| 10,0000 | $3 \cdot 10^{13}$ | 800,0 |
| 100,0000 | $3 \cdot 10^{12}$ | 80,0 |

Z hodnot frekvencí uvedených v příkladu jasně vidíme, že Michelsonův interferometr jednoznačně převádí (kóduje) každý optický signál o velmi vysoké frekvenci na nízkofrekvenční oscilace, přičemž snížení činí více než 10 řádů. Pro střední infračervenou oblast jsou tyto oscilace v oblasti zvukových frekvencí spektra, tedy v oblastech, které dovedeme detegovat, resp. zesilovat. V daleké infračervené oblasti je modulační frekvence natolik nízká, že naopak pro účely zpracování signálu se tato frekvence zvyšuje zařazením mechanického přerušovače.

Poznámka 6.6 ke vztahu frekvence modulace a frekvence (vlnočtu) záření. Kosinovou vlnu, tj. proměnný člen v rovnici (6.9) lze zapsat také vztahem

$$P(t) = A(\tilde{\nu}) \cos 2\pi f t,$$

kde t je čas. Tento vztah nám popisuje časovou závislost signálu detektoru na frekvenci modulace záření v interferometru. Po substituci ze vztahu (6.10) dostaneme

$$P(t) = A(\tilde{\nu}) \cos 2\pi 2 v_m \tilde{\nu} t$$

Rychlost zrcadla můžeme vyjádřit pomocí dráhového rozdílu

$$v_m = \frac{x}{t}$$

Po dosazení do výše uvedeného vztahu dostaneme rovnici

$$P(x) = A(\tilde{\nu}) \cos 2\pi \tilde{\nu} x,$$

kteřá vyjadřuje závislost velikosti signálu interferogramu na optickém dráhovém rozdílu a na vlnočtu vstupního optického signálu. Připomeňme, že frekvence a vlnočty záření jsou veličiny přímo úměrné (2.4).

Zatím se všechny úvahy týkaly monochromatického záření. Pro polychromatické záření je nutno vztah (6.9) nahradit vztahem

$$P(x) = \int_0^{\infty} A(\tilde{\nu}) (1 + \cos 2\pi \tilde{\nu} x) d\tilde{\nu} \quad (6.11)$$

Funkci $P(x)$ lze rozložit na složku $P(\infty)$, která je na x nezávislá, a na oscilující složku $F(x)$, která může nabývat kladných i záporných hodnot, a rovnici (6.11) zapsat:

$$P(x) = P(\infty) + F(x), \quad (6.12)$$

kde

$$P(\infty) = \int_0^{\infty} A(\tilde{\nu}) d\tilde{\nu} \quad (6.13)$$

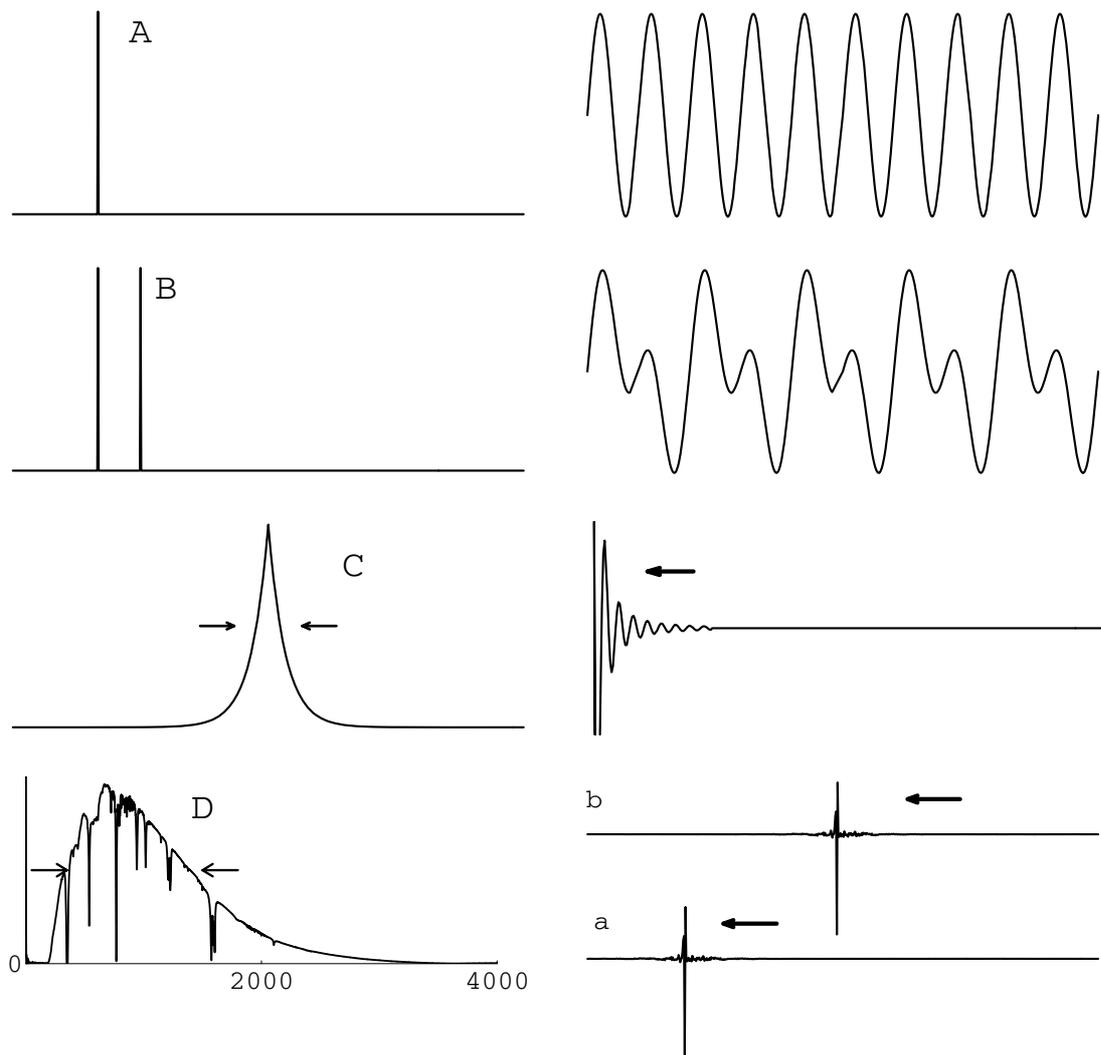
a

$$F(x) = \int_0^{\infty} A(\tilde{\nu}) \cos 2\pi \tilde{\nu} x d\tilde{\nu} \quad (6.14)$$

V bodě nulového dráhového rozdílu v obou ramenech je interferogram symetrický kolem $x = 0$ s hlavním centrálním píkem právě pro tuto hodnotu, při které konstruktivně interferují všechny vlnové délky (tzv. pozice bílého světla):

$$P(0) = 2P(\infty), \quad (6.15)$$

kde ∞ reprezentuje x podstatně větší než kterákoliv vlnová délka (platí, že hodnota $\cos 2\pi \tilde{\nu} x$ je v průměru nulová). Tuto pozici označujeme jako bod nulového dráhového rozdílu (angl. zero path difference, zkr. ZPD).



Obrázek 6.4: Srovnání interferogramů a optických spekter (vlevo) a korespondujících interferogramů. A) jedna monochromatická linie; B) dvě monochromatické linie; C) Linie s Lorentzovským tvarem; D) Širokopásmové spektrum polychromatického zdroje - a. jednostranný interferogram, b. oboustranný interferogram.

Závislost intenzity záření na optickém dráhovém rozdílu nazýváme interferogram. Interferogram je představován sumou kosinových funkcí všech vlnových délek, které interferometrem prošly. Průběh interferogramů pro některé příklady je uveden na obr. 6.4. Interferogram není snímán vždy symetricky vůči ZPD, tj. ne vždy je měřen jako **oboustranný interferogram** (angl. double-sided). Často je zaznamenána kompletně pouze jedna strana od ZPD a pouze několik desítek experimentálních bodů na straně opačné (důvodem je úspora času i paměti počítače). Takovému interferogramu říkáme **jednostranný interferogram**.

6.2 Instrumentace

Zjednodušené optické schéma komerčního FTIR spektrometru je uvedeno na obr. 6.5 a v dalším textu budou podrobněji probrány jeho jednotlivé části.

Obrázek 6.5: A) Optické uspořádání spektrometru s Fourierovou transformací. *Z* - zdroj záření, *K* - kolimační zrcadlo, *A* - apertura, *FZ* - pevné zrcadlo, *PZ* - pohyblivé zrcadlo, *B* - dělič svazku, *D* - detektor, *L* - laser, *BL* - dělič svazku pro laser, *PV* - poloha vzorku. B) Dělič svazku, *S* - substrát, *K* - kompenzátor, *M* - reflexní materiál, *V* - vzduchová mezera

6.2.1 Zdroj záření

Zdrojem záření ve střední infračervené oblasti je odporový drát (např. nikl-chromový), navinutý na keramické tyčince, nebo globar, tyčinka z karbidu křemíku, které jsou zahřívány průchodem elektrického proudu na teplotu nad 1000°C .

V oblasti vlnových délek větších než $100\ \mu\text{m}$ se používá vysokotlaká rtuťová výbojka (ultrafialové a viditelné záření je nutno odfiltrvat vhodnými filtry, např. uhlíkem impregnovaným polyethylenem), v blízké infračervené oblasti wolframová žárovka. Přibližné spektrální oblasti zdrojů záření jsou uvedeny na obr. 6.6.

Důležitou součástí zdroje je zobrazovací optika, jejímž úkolem je ze záření vysílaného zdrojem vytvořit svazek rovnoběžných paprsků. Reálný zdroj není bodový, ale zaujímá určitý prostorový úhel. V takovém případě není kolimátor schopen vytvořit svazek rovnoběžných paprsků, neboť paprsky šikmé vůči optické ose budou absolvovat dráhový rozdíl podstatně

Obrázek 6.6: Přibližné spektrální oblasti zdrojů záření. *W* - wolframová žárovka, *NiCr* - nikl-chromový drát, *Hg* - rtuťová výbojka

větší, než paprsky v ose. Důsledkem je ztráta rozlišení $\Delta\tilde{\nu}$, které na prostorovém úhlu Ω a vlnočtu $\tilde{\nu}$ závisí podle vztahu:

$$\Delta\tilde{\nu} = \frac{\tilde{\nu}_{\max}\Omega}{2\pi} \quad (6.16)$$

Obrázek 6.7: Schématické znázornění divergujících paprsků procházejících Michelsonovým interferometrem. *FZ*, *PZ* - zrcadla, *B* - dělič svazku, *C* - centrální paprsek, *E* - extrémní paprsek, *l* dráha posunu zrcadla

Poznámka 6.7 ke vztahu 6.16.

Centrální a extrémní paprsek, který svírá s optickou osou úhel α , jsou znázorněny na obr. 6.7. Mezi oběma paprsky vzniká optická dráhová diference

$$u = \frac{2l}{\cos \alpha} - 2l = 2l \frac{(1 - \cos \alpha)}{\cos \alpha} = 2l \frac{2\sin^2 \frac{\alpha}{2}}{\cos \alpha},$$

takže lze ukázat, že pro malé α platí

$$u = 2l \frac{\alpha^2}{2} = l\alpha^2,$$

neboť

$$\sin \frac{\alpha}{2} \doteq \frac{\alpha}{2}.$$

Extrémní paprsek bude s centrálním mimo fázi „poprvé“ pro $u = \frac{\lambda}{2} = \frac{1}{2\tilde{\nu}}$ a v tomto případě také zmizí interferenční obraz na detektoru. Protože rozlišení $\tilde{\nu}$ bude dáno maximálním dráhovým rozdílem dosažitelným na interferometru (viz odd. 4.10)

$$\Delta\tilde{\nu} = (2l)^{-1}$$

a dráhová diference musí být splněna pro maximální vlnočet, který chceme měřit, $\tilde{\nu}_{\max}$

$$l \alpha_{\max}^2 = \frac{\alpha^2}{2(\Delta\tilde{\nu})} = \frac{1}{2\tilde{\nu}_{\max}}$$

Odtud

$$\alpha_{\max} = \left(\frac{\Delta\tilde{\nu}}{\tilde{\nu}_{\max}} \right)^{\frac{1}{2}}$$

a maximální tolerovatelný prostorový úhel (ve steradiánech):

$$\Omega_{\max} = 2\pi \alpha_{\max} = 2\pi \frac{\Delta\tilde{\nu}}{\tilde{\nu}_{\max}}.$$

Protože velikost zdroje je fixní, je pro zvětšení rozlišení nezbytné zmenšit prostorový úhel zařazením vhodné clony, **apertury**, která je umístěna do ohniska zrcadla umístěného před kolimátor. Apertura je někdy v anglosaské literatuře označována jako Jacquinotova clona (angl. Jacquinot stop, viz obr. 6.5).

6.2.2 Dělič svazku paprsků

Obrázek 6.8: Přibližné spektrální oblasti děličů svazku. Solid Substrate je označení výrobku firmy Nicolet Instruments

Dělič svazku paprsků musí mít vysokou propustnost i reflektanci, a tuto funkci plní tenké filmy materiálu s vysokým indexem lomu: ve střední oblasti germanium ($n \sim 4.0$) nebo křemík ($n \sim 3,5$), v blízké infračervené oblasti oxid železitý. Tento tenký film musí být nanosen

na vhodném nosiči, kterým je přesně zbroušené okénko nejčastěji KBr pro oblast MIR, CaF₂ nebo křemen pro oblast NIR. Pro oblast FIR jsou používány nejčastěji samonosné filmy z polyethylentereftalátu o tloušťce obvykle mezi 50 a 5 μm (komerční označení Mylar). Přibližné spektrální oblasti některých děličů svazku jsou uvedeny na obr. 6.8. Protože reflexní materiál je jen na jedné straně substrátu a tedy i ramene interferometru, je z důvodu zmenšení fázové chyby do druhého ramene umístěna kompenzační destička z téhož materiálu (viz obr. 6.5).

6.2.3 Pohyblivé zrcadlo

Správná funkce interferometru je kriticky závislá na velmi přesně řízeném pohybu zrcadla a to při rychlostech od několika mm do desítek cm/s. Již nepatrný výkyv zrcadla způsobí, že svazky paprsků odražené od obou zrcadel nebudou moci vzájemně interferovat. Proto je zrcadlo ve špičkových přístrojích umístěno na vzduchovém loži (obr. 6.9A) a jeho pohyb je zajišťován solenoidem. V přístrojích pro rutinní účely je používáno jednodušších zařízení, jakým je např. zavěšení zrcadla na kyvném zařízení. (obr. 6.9B).

A

B

Obrázek 6.9: Znárodnění vzduchového lože (A) a závěsného uložení (B) pohyblivého zrcadla. *M* - permanentní magnet, *C* - cívka, *VL* - vzduchové lože, *PZ* - pohyblivé zrcadlo, *in* - vstup stlačeného vzduchu, *out* - výstup stlačeného vzduchu, *W* - protizávaží

Poznámka 6.8 Je logické, že rozlišení bude degradováno, jestliže dráha, kterou urazí paprsky záření budou různé v různých místech svazku. Jestliže tato dráhová diference dosáhne hodnoty poloviny vlnové délky, interferometr nebude pro danou vlnovou délku schopen poskytnout použitelný interferogram. Toto kritérium platí nejen pro rovinnost všech optických komponent interferometru, ale určuje také nároky na vlastnosti skanujícího systému, tj. přípustný výkyv zrcadla. O co jde je patrné z obr. 6.10, detailní odvození však ponecháváme na čtenáři.

Obrázek 6.10: Schématické znázornění efektu vychýlení roviny pohyblivého zrcadla. *FZ*, *PZ* - zrcadla, *B* - dělič svazku

6.2.4 Detektor záření

Obrázek 6.11: Závislost hodnoty D^* na frekvenci.

Nejběžněji používaný detektor záření je označován zkratkou DTGS. Jedná se o pyroelektrický detektor na bázi deuterovaného triglycinsulfátu, který poskytuje dobrou odezvu

v rozsahu 7500 až 200 cm^{-1} . Jeho odezva však vykazuje frekvenční závislost a pro vysoké frekvence modulační záření, tj. vysoké rychlosti pohybu zrcadla, je detektor nevhodný: mezi 0 a 1 kHz klesá hodnota D^* téměř o dva řády (obr. 6.11).

D^* charakterizuje citlivost detektoru, tj. změnu jeho odezvy odpovídající jednotkovému přírůstku vstupního signálu. Jde o převrácenou hodnotu nejmenšího stanovitelného signálu (prahové odezvy, též NEP noise-equivalent power) detektoru, tj. signálu, který vyvolá výstupní signál, rovnající se střední hodnotě šumu detektoru zvětšené o konvenční násobek (dvoj- nebo trojnásobek) standardní odchylky šumu. Je obvyklé hodnotu NEP specifikovat pro plochu 1 cm^2 a šířku elektrického filtru šumu 1 Hz, frekvenci modulační, teplotu detektoru, vlnovou délku, atd. Spektrální oblasti použitelnosti některých detektorů jsou znázorněny na obr. 6.12.

Obrázek 6.12: Přibližné oblasti použitelnosti detektorů záření. Pod lomítkem je uveden materiál použitý jako nosič

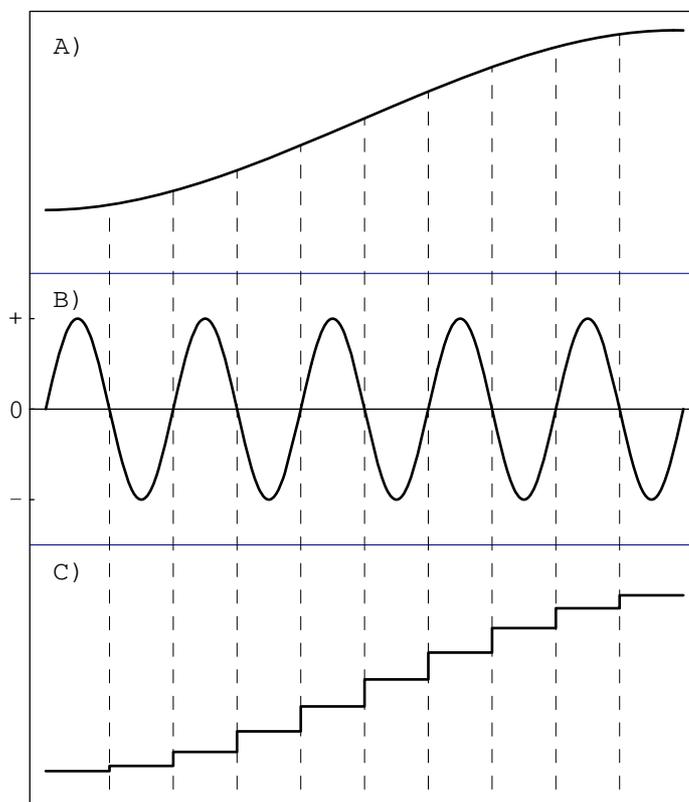
6.2.5 Umístění vzorku

Vzorek je ve spektrometru umístěn mezi interferometr a detektor záření. V této poloze je veškeré záření dopadající na vzorek modulováno (tj. transformováno na kosinové vlny), zatímco záření, které vzorek sám emituje (připomeňme, že emise vzorku bude tím vyšší, čím vyšší bude jeho teplota), modulováno není a nepřispěje tudíž k modulované složce interferogramu.

6.2.6 Měření optického dráhového rozdílu, digitalizace interferogramu

Z diskuse v odst. 4.13 vyplývá, že kosinové funkce, které tvoří interferogram, mohou být jednoznačně charakterizovány ekvidistantně rozloženými vzorkovacími body pouze tehdy, připadají-li na vzdálenost jedné vlnové délky minimálně dva body, pro které je odečtena hodnota intenzity. Má-li tedy přístroj měřit záření vlnové délky $1 \mu\text{m}$, je třeba s velkou přesností sledovat změny polohy pohyblivého zrcadla menší než $0,5 \mu\text{m}$. Pro tyto účely se využívá měření interference záření helium-neonového laseru na stejném nebo pomocném

interferometru. Elektrický signál ze samostatného detektoru tohoto záření má v závislosti na optickém dráhovém rozdílu kosinový průběh (viz obr. 6.13) a je po zesílení nastaven tak, že napětí je nulové vždy, když dráhový rozdíl odpovídá polovině vlnové délky.



Obrázek 6.13: Vzorkování interferogramu pomocí He-Ne laseru. A) Analogový signál; B) Interferogram He-Ne laseru s body nulového napětí; C) Digitální forma zaznamenaného signálu

Pro tuto nulovou hodnotu je digitalizován výstup z detektoru infračerveného záření. Vlnová délka záření He-Ne laseru emitovaného ve vakuu je $0,6329914 \mu\text{m}$ (ve vzduchu $0,6328165 \mu\text{m}$), tzn. že digitalizovaný signál mění svoji hodnotu vždy po změně optického dráhového rozdílu o $\Delta x = 0,3164082 \mu\text{m}$.

Poznámka 6.9 Záření emitované He-Ne laserem je ve skutečnosti dubletem, jehož linie jsou separovány o $0,02 \text{ cm}^{-1}$. Interferogram tohoto zdroje je tedy součinem kosinové funkce odpovídající vlnové délce ca $0,63 \mu\text{m}$ a kosinové funkce odpovídající $100 \mu\text{m}$. Amplituda interferogramu bude proto klesat od maxima pro nulový dráhový rozdíl k nule pro dráhový rozdíl 25 cm . Pro sledování dráhového rozdílu většího než 25 cm u přístrojů s vysokým rozlišením je nezbytné izolovat pouze jedinou laserovou linii. Pro velkou vlnočtovou přesnost je navíc nezbytné termostatování laseru.

Pro daný vzorkovací interval Δx je nejvyšší vlnočť signálu, který můžeme ze spektra

spolehlivě určit, tzv. Nyquistův vlnčet, dán vztahem (4.13), tj. $\tilde{\nu}_f = \tilde{\nu}_{\max} = 1/(2\Delta x)$. Pro interval digitalizace $0,3164957n \mu\text{m}$ je tedy $\tilde{\nu}_{\max} = 15798,002/n$, kde n je použitý násobek minimálního vzorkovacího kroku, $\Delta x = n \cdot 0,3164082 \mu\text{m}$.

Jestliže tedy měřené záření obsahuje vlnočty nad hodnotu $\tilde{\nu}_{\max}$, jsou při digitalizaci charakterizovány stejně jako vlnočty z rozsahu 0 až $\tilde{\nu}_{\max}$. Dojde tedy k jevu, který označujeme jako aliasing (viz odd. 4.13). Nevýhodou tohoto jevu je, že spektrum v požadovaném intervalu 0 až $\tilde{\nu}_{\max}$ může být zkresleno přítomností záření nad $\tilde{\nu}_{\max}$, což je efekt analogický rozptýlenému záření u disperzních přístrojů. Výhodou je možnost získat spektrum v rozsahu $\tilde{\nu}_{\min}$ do $\tilde{\nu}_{\max}$ z interferogramu, který byl digitalizován v podstatně větším vzorkovacím intervalu, než pro rozsah 0 až $\tilde{\nu}_{\max}$ připouští Nyquistův vlnčet. Interferogram tudíž obsahuje podstatně méně dat, což je výhodné pro ukládání do paměti a spotřebu výpočetního času.

Poznámka 6.10 Jestliže spektrum obsahuje například kromě korektně vzorkovaného rozsahu vlnočtů 0 až 7899 cm^{-1} také vlnočty do hodnoty 15798 cm^{-1} ($2\tilde{\nu}_{\max}$), můžeme na vypočtené spektrum pohlížet jako na „složené“ (angl. folded) na délku $\tilde{\nu}_{\max}$ (představa skládacího metru je ta pravá!). Škála od 0 do 7899 cm^{-1} je pak překryta škálou od 15798 do 7899 cm^{-1} . Vlnčet $\tilde{\nu} = 0 \text{ cm}^{-1}$ tedy odpovídá 0 a 15798 cm^{-1} současně, stejně jako např. $1974,75 \text{ cm}^{-1}$ ($\tilde{\nu}_{\max}/4$) odpovídá $13823,25 \text{ cm}^{-1}$ ($7\tilde{\nu}_{\max}/4$), atp.

| $n^1)$ | $\tilde{\nu}_{\text{korekt}}^1), \text{ cm}^{-1}$ | | $\tilde{\nu}_{\text{alias}}^1), \text{ cm}^{-1}$ |
|--------|---|----|--|
| 1 | 0 → 15798 | 1) | 31596 → 15798 |
| | | 2) | 31596 → 47394 |
| | | 3) | 63192 → 47394 |
| | | 4) | 63192 → 78990 |
| 2 | 0 → 7899 | 1) | 15798 → 7899 |
| | | 2) | 15798 → 23697 |
| | | 3) | 31596 → 23697 |
| | | 4) | 31596 → 39495 |
| 4 | 0 → 3949,5 | 1) | 7899 → 3949,5 |
| | | 2) | 7899 → 11848,5 |
| | | 3) | 15798 → 11848,5 |
| 8 | 0 → 1974,75 | 1) | 3949,5 → 1974,75 |
| | | 2) | 3949,5 → 5924,25 |
| | | 3) | 7899 → 5924,25 |
| 16 | 0 → 987,375 | 1) | 1974,75 → 987,375 |
| | | 2) | 1974,75 → 2962,125 |
| | | 3) | 3949,5 → 2962,125 |

¹⁾ Interval digitalizace je $0.3164957 \cdot n$, index korekt značí korektně reprezentovaný rozsah vlnočtů, index alias značí aliasing.

Tabulka 6.1: Rozsah vlnočtů, interval digitalizace a aliasing

Jestliže je tedy zkoumané spektrum omezeno jen na určitý rozsah vlnočtů, lze „aliasing“ využít k redukci počtu dat, aniž by došlo k nežádoucímu překrytí s jiným rozsahem. Tak

např., není-li ve spektru záření o vlnočtu nad 3900 nebo pod 3000 cm^{-1} , plyne z tabulky 6.1, že digitalizaci lze provést vzorkovacím intervalem $0,3164957/16$ místo $0,3164957/4$, který plyne ze vztahu (4.13). Počet uložených dat se sníží čtyřikrát. Spektrum je zdánlivě měřeno v rozsahu 0 až $987,375 \text{ cm}^{-1}$, fakticky měřen však bude rozsah 3949,5 až $2962,125 \text{ cm}^{-1}$. Digitalizace elektrického signálu se provádí analogově-digitálním převodníkem, který je spínán změnou napětí generovanou laserovým interferometrem. Rozlišení analogově-digitálního převodníku musí být nejméně 16 bitů, frekvence digitalizace minimálně 50 až 90 kHz. V současné době jsou používány až 18 bitové převodníky, které pracují s frekvencí 100, nyní běžně s 200 kHz.

Poznámka 6.11 Poměr signálu a šumu lze zvětšit zvýšením zisku (gainu). To je opačná zkušenost než u analogových přístrojů.

6.3 Zpracování interferogramu

Vlastní měření na Michelsonově spektrometru představuje sběr digitalizovaných dat interferogramu $s(t_k)$, který musí být na spektrum $S(\tilde{\nu})$ konvertován Fourierovou transformací, přesněji řečeno diskrétní Fourierovou transformací (DFT, kapitola 5). Je třeba zdůraznit, že DFT pouze aproximuje spojitou FT. Tato aproximace je většinou dobrá, i když již víme, že kvalita spektra bude záviset na velikosti vzorkovacího intervalu, nebo v termínech spektroskopických, na použitém spektrálním rozlišení. V části 5.3 bylo ukázáno, jak lze využít **doplnění interferogramu nulami**, abychom získali interpolované hodnoty spektra. Doplnění nulami patří k běžným technickým postupům, používaným při zpracování interferogramu.

Poznámka 6.12 Platí pravidlo, že velikost původního interferogramu je třeba nejméně zdvojnásobit doplněním nulami, tzv. zero-filling factor (ZFF) se volí 2. V případech, kde očekávaná šířka spektrální linie je podobná vzorkovacímu intervalu, se ZFF volí až 8.

S diskretizovanou formou spektra je dále spojen efekt, který byl nazván **aliasing**. Ten byl podrobně popsán v oddíle 4.13 a dále v části „Měření optického dráhového rozdílu, digitalizace interferogramu“. Zásadní matematická operace, kterou musíme při zpracování interferogramu provést, je tzv. **apodizace** (viz část 4.11). Z předcházejícího textu víme (viz odd. 4.10), že z praktických důvodů nelze interferogram změřit v celém intervalu $(-\infty, +\infty)$, a jeho omezení na konečnou dráhu vede k rozšíření teoreticky ostré spektrální čáry na pík rozšířený s malými postranními píky. Tento efekt je také označován v anglické literatuře jako „leakage“, tzn. netěsnost, prosakování.

Matematicky je tento efekt popsán jako konvoluce interferogramu a Fourierovým obrazem kosinové funkce není monochromatická linie (tedy nekonečně úzká), ale složitá funkce $\text{sinc } t$ (viz oddíly 4.6 a 4.10), pro kterou jsou charakteristické postranní píky, které dosahují 22% výšky hlavního píku. Její šířka v polovině výšky je závislá na dráhové diferencii L a činí $0,61L$. Postranní píky neodpovídají skutečnosti a je tedy žádoucí jejich velikost minimalizovat. Postup, kterým se toho dosahuje, je nazýván apodizace a spočívá v tom, že interferogram je „ořezáván“ méně náhle než je tomu v případě obdélníkové apodizační funkce. Vliv různých apodizačních funkcí na tvar přístrojové funkce je podrobně popsán v oddíle 4.11.

Všechny běžné apodizační funkce více či méně potlačují postranní píky přístrojové křivky, na druhou stranu lze však ukázat, že šířka přístrojové křivky v polovině výšky je nejmenší v případě obdélníkové apodizační funkce ($0,61/L$), ve všech ostatních případech je tato šířka větší (pro trojúhelníkovou, Happ-Genzelovu i Blackman-Harrisovu funkci je to ca $0,9/L$).

Volba určité apodizační funkce je tedy závislá na tom, co je cílem měření. Je-li potřebné dosáhnout maximálního rozlišení dvou píků, je výhodná volba obdélníkové apodizační funkce. Lze-li naproti tomu tolerovat až 50% ztrátu rozlišení vzhledem k této obdélníkové funkci, je vhodné použít apodizační funkce Happ-Genzelovy a nebo ještě lépe funkce Blackmann-Harrisovy.

Poznámka 6.13 Přístrojová funkce způsobená šterbinou mřížkového spektrometru koreponduje přístrojové funkci, kterou reprezentuje trojúhelníková apodizační funkce. Diference mezi FT a disperzními spektrometry pokud jde o apodizační funkci je v tom, že zatímco v FT spektrometrii lze apodizační funkci volit s ohledem na konkrétní aplikaci, v disperzní spektrometrii takovou možnost nemáme.

6.3.1 Fázová korekce

Poslední matematická operace, kterou je nezbytné během konverze interferogramu na spektrum realizovat, je fázová korekce. Tato fázová korekce je nutná vzhledem k tomu, že FT měřeného interferogramu poskytuje obecně nikoliv reálnou, ale komplexní funkci $S(\tilde{\nu})$, které lze zapsat jako sumu (viz odd. 4.8)

$$S(\tilde{\nu}) = \text{Re}S(\tilde{\nu}) + i \text{Im}S(\tilde{\nu}) \quad (6.17)$$

kde Re a Im značí reálnou a imaginární část spektra, nebo jako součin

$$S(\tilde{\nu}) = A(\tilde{\nu})e[i\Phi(\tilde{\nu})] \quad (6.18)$$

ve kterém $A(\tilde{\nu})$ reprezentuje „amplitudové“ spektrum a $\Phi(\tilde{\nu})$ vlnčtově závislou „fázi“. Cílem tzv. fázové korekce je získání amplitudového spektra $A(\tilde{\nu})$ z komplexního výstupu FT. To lze učinit ze vztahu

$$\begin{aligned} A(\tilde{\nu}) &= |S(\tilde{\nu})| = [S(\tilde{\nu}) \cdot \overline{S(\tilde{\nu})}]^{\frac{1}{2}} \\ &= [\text{Re}^2 S(\tilde{\nu}) + \text{Im}^2 S(\tilde{\nu})]^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (6.19)$$

nebo

$$A(\tilde{\nu}) = \text{Re}[S(\tilde{\nu})e(-i\Phi(\tilde{\nu}))] \quad (6.20)$$

a fázi $\Phi(\tilde{\nu})$ lze vypočítat ze vztahu

$$\Phi(\tilde{\nu}) = \arctan\left[\frac{\text{Im}S(\tilde{\nu})}{\text{Re}S(\tilde{\nu})}\right] \quad (6.21)$$

Důvodem pro vznik komplexního spektra je fakt, že interferogram, který je podroben FT, není symetrický kolem bodu $x = 0$. Asymetrie způsobují tři zdroje:

1. žádný ze vzorkovacích bodů nekoinciduje přesně s vlastní polohou nulové dráhové difference;

2. měřen je obvykle pouze jednostranný interferogram, tj. v plném rozsahu je měřena jen jedna strana interferogramu, druhou stranu tvoří jen několik stovek bodů (výchylka zrcadla, potřebná k dosažení požadovaného rozlišení, se uskutečňuje pouze na jednu stranu od ZPD, zatímco na druhou stranu je výchylka minimální, něco kolem 0,5 mm);
3. "vnitřní" asymetrii interferogramu mohou způsobovat vlnočtově závislá fázová zpoždění buď na optice, na zesilovači či elektronických filtrech. Z toho, co bylo řečeno o pozici bílého světla, resp. nulové dráhové diferencí (ZPD) vyplývá, že poloha maxima v interferogramu koinciduje s ZPD. Ve skutečnosti tomu tak není, protože index lomu děliče svazku paprsků není pro všechny vlnové délky shodný. Problém je tedy v tom znát ZPD pro každou měřenou vlnovou délku.

Asymetrie interferometru vede k tomu, že vztah (6.14) musíme nahradit vztahem

$$F(x) = \int_0^{\infty} A(\tilde{\nu}) \cos[2\pi \tilde{\nu}(x + \Phi(\tilde{\nu}))] d\tilde{\nu} \quad (6.22)$$

a po úpravě dostaneme

$$F(x) = \int_0^{\infty} [A(\tilde{\nu}) \cos 2\pi \tilde{\nu} \Phi(\tilde{\nu}) \cdot \cos 2\pi \tilde{\nu} x - A(\tilde{\nu}) \sin 2\pi \tilde{\nu} \Phi(\tilde{\nu}) \cdot \sin 2\pi \tilde{\nu} x] d\tilde{\nu} \quad (6.23)$$

Označme

$$C(\tilde{\nu}') = \int_{-\infty}^{\infty} F(x) \cos 2\pi \tilde{\nu}' x dx \quad (6.24)$$

a

$$S(\tilde{\nu}') = \int_{-\infty}^{\infty} F(x) \sin 2\pi \tilde{\nu}' x dx \quad (6.25)$$

$C(\tilde{\nu}')$ je tzv. kosinová Fourierova transformace a $S(\tilde{\nu}')$ je sinová Fourierova transformace funkce $F(x)$ a z definice \mathcal{F} -transformace plyne:

$$\mathcal{F}[F(x)] = C(\tilde{\nu}') - iS(\tilde{\nu}').$$

Dále se dá dokázat, že

$$\mathcal{F}[F(x)] = A(\tilde{\nu}') \cos 2\pi \tilde{\nu}' \Phi(\tilde{\nu}') + iA(\tilde{\nu}') \sin 2\pi \tilde{\nu}' \Phi(\tilde{\nu}'), \quad (6.26)$$

takže

$$C(\tilde{\nu}') = A(\tilde{\nu}') \cos 2\pi \tilde{\nu}' \Phi(\tilde{\nu}') \quad (6.27)$$

$$S(\tilde{\nu}') = -A(\tilde{\nu}') \sin 2\pi \tilde{\nu}' \Phi(\tilde{\nu}'). \quad (6.28)$$

Pro určitý vlnočť $\tilde{\nu}'$ je tudíž poměr sinové a kosinové Fourierovy transformace roven

$$\frac{S(\tilde{\nu}')}{C(\tilde{\nu}')} = -\tan[2\pi \tilde{\nu}' \Phi(\tilde{\nu}')], \quad (6.29)$$

ze kterého lze vypočítat $\Phi(\tilde{\nu}')$.

Fázově korigované spektrum $A(\tilde{\nu}')$ lze potom vypočítat z kosinové transformace

$$A(\tilde{\nu}') = \frac{C(\tilde{\nu}')}{\cos 2\pi \tilde{\nu}'\Phi(\tilde{\nu}')} \quad (6.30)$$

nebo ze sinové transformace

$$A(\tilde{\nu}') = \frac{-S(\tilde{\nu}')}{\sin 2\pi \tilde{\nu}'\Phi(\tilde{\nu}')} \quad (6.31)$$

nebo, jak je nejobvyklejší z obou transformací

$$A(\tilde{\nu}') = C(\tilde{\nu}') \cos 2\pi \tilde{\nu}'\Phi(\tilde{\nu}') + S(\tilde{\nu}') \sin 2\pi \tilde{\nu}'\Phi(\tilde{\nu}') \quad (6.32)$$

Jinou možností je ještě využití vztahu

$$A(\tilde{\nu}') = [C^2(\tilde{\nu}') + S^2(\tilde{\nu}')]^{\frac{1}{2}} \quad (6.33)$$

Rovnice pro (6.30,6.31,6.32) a (6.33) pro výpočet $A(\tilde{\nu}')$ jsou ekvivalentní jen tehdy, jestliže pracujeme s daty, která neobsahují šum. V reálných spektrech je ale šum vždy přítomen a pak příspěvky k šumu, vypočtené ze vztahu (6.33) jsou vždy pozitivní, na rozdíl od znaménkově správných hodnot amplitud šumu, vypočtených z rovnic (6.30,6.31,6.32).

Pro výpočet fázové korekce se využívá krátkých souborů dat, které jsou k dispozici i u jednostranného interferogramu po obou stranách kolem ZPD. Na základě těchto dat je po apodizaci (všechny shora uvedené vztahy se týkaly ideálního interferometru s nekonečným optickým dráhovým rozdílem, pro reálný interferometr musíme provést vynásobení apodizační funkcí), doplnění nulami a FT získáno fázové spektrum s nízkým rozlišením (obr. 6.14). Protože fáze se v závislosti na vlnočtu mění jen málo (až na oblast, kde dochází ke změně děliče svazku nebo u hrany filtru), je takové málo rozlišené fázové spektrum zcela vyhovující a fázové úhly pro všechny požadované vlnočty se získají interpolací.

Vypočtené málo rozlišené fázové spektrum lze při výpočtu spektra z jednostranného interferogramu použít dvěma způsoby.

První způsob, tzv. multiplikativní metoda (Mertzova), je v podstatě popsána rovnicemi (6.27) až (6.32) až na jeden důležitý rozdíl: integrační meze nejsou v reálném měření od minus do plus nekonečna, ale pouze od $-X_1$ do X_2 . V principu by bylo možno integraci provádět od 0 do X_2 po vynásobení apodizační funkcí a doplnění nulami, ale v praxi není možno s integrací začít přesně pro nulový dráhový rozdíl. Zopakujme, že důvodem je skutečnost, že přesně v nule nebudeme mít jednak experimentální bod a dále pozice nulové dráhové difference se bude pro různé vlnočty lišit. Aby se tato obtíž obešla, obecný postup je takový, že se jednostranný interferogram násobí funkcí, jejíž průběh je znázorněn na obr. 6.15.

Jedná se o funkci, která vznikne vynásobením symetrické trojúhelníkové apodizační funkce od $-X_1$ do X_2 rampovou funkcí, narůstající od $-X_1$ do $+X_1$. Takto získaná funkce je pak použita v příslušných vztazích a výsledné transformace jsou potom užity v rovnici (6.32) spolu s fázovými úhly, které byly vypočteny z „krátkého“ oboustranného interferogramu

Druhý způsob, konvoluční metoda (Formanova, Steeleova, Vanasseova).

Obrázek 6.14: Výpočet fázové korekce. A) Kompletní jednostranný interferogram. B) Krátký oboustranný interferogram použitý k výpočtu fázového spektra. C) Krátký oboustranný interferogram je apodizován, doplněn nulami a podroben FT. D) Fázové spektrum je vypočteno z komplexního výstupu FT pomocí vztahu (5.21) pro plné rozlišení

Rovnici (6.32) můžeme v komplexní podobě zapsat takto

$$A(\tilde{\nu}') = \operatorname{Re} [M(\tilde{\nu}')e(-2\pi i \tilde{\nu}'\Phi(\tilde{\nu}'))], \quad (6.34)$$

$$\text{kde } M(\tilde{\nu}') = C(\tilde{\nu}') - i S(\tilde{\nu}') \text{ a } i = \sqrt{-1}.$$

Konvoluční teorém říká, že Fourierova transformace součinu dvou funkcí je rovna konvoluci Fourierových transformací těchto funkcí (viz odd. 2.9). Fourierovou transformací $M(\tilde{\nu}')$ je pozorovaný interferogram. Výsledkem konvoluce tohoto pozorovaného interferogramu s Fourierovou transformací komplexní exponenciální fázové funkce je potom Fourierova transformace fázově korigovaného spektra $A(\tilde{\nu})$, tudíž symetrický interferogram.

Celý postup je prováděn tak, že málo rozlišená fázová funkce je podrobena Fourierově transformaci s apodizací. Poté je provedena konvoluce této funkce s původním jednostranným interferogramem. Jestliže výsledný interferogram není symetrický, je konvoluce opakována s Fourierovou transformací fázové funkce. Je-li interferogram symetrický, je vypočtena jeho kosinová Fourierova transformace s apodizací, aby se získalo fázově korigované spektrum.

Obrázek 6.15: A) Symetrická trojúhelníková apodizační funkce; B) Levá rampová funkce; C) Produkt symetrické trojúhelníkové apodizační funkce a levé rampové funkce

Použita je rampová funkce, aby se překonala obvyklá absence experimentálního bodu přesně v bodě nulové optické dráhové difference.

Konvoluční metoda se zdá ve srovnání s multiplikativní metodou méně náchylná k chybám, pocházejícím z asymetrie interferogramu, způsobené změnou ZPD s vlnočtem. Je však zřejmé, že konvoluční metoda je početně náročnější než metoda multiplikativní, a proto není tak rozšířena. Z toho, co bylo řečeno, je zřejmé, **že získání spektra látky v transmittanční nebo absorbanční škále** je velmi komplikovaný proces, který sestává např. z těchto kroků (obr. 6.16):

1. výpočet jednopaprskového spektra I_o z interferogramu měřeného bez vzorku (tzv. background, pozadí):
 - (a) výpočet fázového spektra,
 - (b) apodizace,
 - (c) Rychlá Fourierova transformace (FFT),
 - (d) fázová korekce;
2. výpočet jednopaprskového spektra I_s z interferogramu se vzorkem:
 - (a) výpočet fázového spektra,
 - (b) apodizace,
 - (c) Rychlá Fourierova transformace (FFT),
 - (d) fázová korekce;
3. výpočet transmittance $T = (I_s/I_o)$ pro každý vlnočet;
4. výpočet absorbance $A = -\log T$ pro každý vlnočet.

Obrázek 6.16: Jednotlivé fáze sběru dat pro infračervené spektrum polystyrenu [podle Siesler H.W.: Proc. 5th European Symp. on Polymer Spectroscopy (D.O. Hummel, Ed.), Verlag Chemie, Weinheim 1979]

Ve skutečnosti není vyhodnocení spektra většinou prováděno pouze z jednoho záznamu, ale měřené signály jsou průměrovány. To dovoluje zlepšit poměr signálu a šumu.

6.4 Výhody FTIR spektroskopie

Interferometrický spektrometr má proti disperznímu spektrometru řadu výhod. Abychom správně porozuměli výhodám FTIR spektrometru, zopakujme si funkci disperzního spektrometru. Na obr. 6.17 je zjednodušené schéma disperzního infračerveného spektrometru, stále ještě hojně používaného v ČR.

Záření ze zdroje Z je rozděleno pomocí zrcadel na dva rovnocenné svazky paprsků: paprsek měrný (M) a paprsek srovnávací (R). Tyto paprsky jsou po průchodu kyvetovým prostorem pomocí rotujícího pólkruhového zrcadla (RZ) střídavě přivedeny na vstupní štěrbinu monochromátoru. V monochromátoru je záření spektrálně rozloženo na vhodném disperz-

Obrázek 6.17: Optické schéma disperzního infračerveného spektrometru. 1 - infračervený zářič; 2,3,4,5 - duté zrcadlo; 6 - korekční clona 100%; 7 - zeslabovací hřebenová clona; 8 - měřený vzorek; 9 - srovnávací vzorek; 10 - rovinné zrcadlo; 11,12 - duté zrcadlo; 13 - přerušovač; 14 - torické zrcadlo; 15 - clona; 16 - čočka KBr; 17 - vstupní štěrbinu dvojitého hranolového-mřížkového monochromátoru; 18 - duté zrcadlo; 19 - odrazné mřížky 1 a 2; 20,22 - zrcadlo; 21 - mezištěrbinu; 23 - duté zrcadlo; 24 - hranol z KBr; 25 - Littrowovo zrcadlo; 26 - vstupní štěrbinu; 27 - sběrná čočka z KBr; 28 - vypuklé zrcadlo; 29 - duté zrcadlo; 30 - detektor

ním prvku, kterým je odrazná mřížka (zde v kombinaci s hranolem) a vybraná vlnová délka vystupujícího záření je vymezena výstupní štěrbinou. Takto vymezený svazek záření je přiveden na detektor záření, kterým je nejčastěji termočlánek. Vlnová délka záření, dopadající na detektor, se mění natočením disperzního prvku, monochromaticnost tohoto záření je dána nastavením šířky štěrbin (vstupní i výstupní štěrbinu jsou obvykle nastavovány na stejnou šířku). Na detektoru vzniká během jedné půlotáčky rotujícího půlkruhového zrcadla elektrický signál, odpovídající toku záření ve svazku měrném, v druhé půlotáčce signál odpovídající toku záření ve svazku srovnávacím. Při rychlém otáčení půlkruhového zrcadla vzniká na detektoru střídavá složka napětí, která se po zesílení u přístrojů pracujících na tzv. principu optické nuly používá k tomu, aby se pomocí servomotoru do svazku srovnávacího zasunula hřebenová clona tak, aby se tato střídavá složka napětí eliminovala. Moderní přístroje pracují s tzv. poměrovým záznamem (ratio-recording), kdy je signál každého svazku vyhodnocován samostatně, většinou již v digitalizované formě. Již z uvedeného zjednodušeného schématu jsou patrné nevýhody disperzních spektrometrů, které shrneme do těchto bodů:

a. Velký počet pohyblivých částí

- rotující půlkruhové zrcadlo, sloužící ke střídání měrného a srovnávacího svazku paprsků na vstupní štěrbině monochromátoru,

- složitý mechanismus natáčení, resp. výměny mřížek, který slouží tomu, aby se na výstupní šterbinu dostala jen požadovaná vlnová délka,
- nastavení šířky šterbiny, kterou je v závislosti na vlnové délce třeba upravovat tak, aby se dosáhlo konstantního toku záření dopadajícího na detektor,
- výměna filtrů používaných k odstranění nežádoucího záření (nežádoucího řádu mřížky, rozptýleného záření)
- nastavení hřebenové clony, používané k zeslabení světelného toku v měrném paprsku (u přístrojů s tzv. optickou nulou).

Všechny tyto části jsou předmětem mechanického opotřebení a prokluzování.

b. Malá rychlost záznamu spektra

Detektor poskytuje v daném čase odezvu pouze pro jeden spektrální element, jehož šířka je dána pouze požadovaným rozlišením a tedy nastavenou šířkou šterbiny. Celková doba záznamu tedy záleží na tom, na kolik spektrálních elementů je celé spektrum rozděleno a jako dobu bude potřebovat spektrometr k tomu, aby byly jednotlivé elementy s co nejmenší chybou změřeny.

c. Malá optická propustnost spektrometru

Větší část záření emitovaného zdrojem je odcloněna šterbinami, jejichž šířka určuje rozlišení přístroje. Čím větší rozlišení má přístroj dosáhnout, tím užší musí být nastavení šterbin a tím menší bude tok záření, který dopadá na detektor. S tím je spojeno zhoršení poměru signálu a šumu. Malé toky záření dopadají na detektor také v případě silně absorbujících vzorků či technik, které pracují se značnými optickými ztrátami.

d. Rušivý vliv rozptýleného světla

Má-li být odezva detektoru správná, musí se na detektor dostat vždy jen to záření, které odpovídá danému nastavení vlnové délky na monochromátoru. Jestliže se na detektor dostane rotujícím sektorem modulované záření jiné vlnové délky (např. díky nedokonalosti použité mřížky), detektor toto záření není schopen odlišit a dojde tedy ke zkreslení odečtené hodnoty intenzity. Způsobená chyba bude tím větší, čím vyšší bude absorpce měřeného vzorku, a proto se kvantitativní analýza na disperzních spektrometrech s tzv. optickou nulou nedoporučuje pro vzorky s absorpční větší než 1 (tj. propustností pod 10%).

e. Absence vnitřní kalibrace přístroje

Důležitým úkonem při práci na disperzních přístrojích je kontrola vlnočtové stupnice přístroje. Disperzní přístroje nemají žádný vnitřní standard, který by zaručil přesnost nastaveného vlnočtu, a vlnočtovou stupnici přístroje je proto nutno kalibrovat proměřením spektra externích standardů, kterými jsou látky nebo směsi látek se známou polohou absorpčních pásů (např. polystyrenová folie, kapalná směs kafr-inden-cyklohexanon, plynný HCl, HCN, NH₃ atp. Chyba vlnočtové osy souvisí mj. s mechanickým nastavením přístroje a není proto v celém spektrálním rozsahu konstantní a souvisí tudíž velmi úzce také s teplotou jednotlivých částí přístroje.

f. **Zahřátí vzorku**

Vzorek je v infračervených spektrometrech umístěn bezprostředně za zdroj záření, což sice snižuje rozptyl záření, ke kterému by docházelo, kdyby byl umístěn bezprostředně před detektorem, na druhou stranu dochází k zahřátí vzorku, které může v řadě případů vést k rozkladu, resp. dalším změnám.

g. **Emise záření vzorkem**

Zahřátý vzorek může emitovat záření, a proto u přístrojů, ve kterých záření prochází vzorkem před jeho modulací rotujícím sektorem, bude emitované záření detegováno a může tudíž zkreslit data, týkající se absorpce záření.

Výhody infračervené spektroskopie s Fourierovou transformací jsou v několika případech spojovány se jménem autorů, kteří na ně jako první upozornili:

a. **Fellgettova (multiplexní) výhoda** (čte se felžetova)

Disperzní přístroj dovoluje, aby na detektor v každém okamžiku dopadalo pouze záření jedné vlnové délky (přesněji jednoho úzkého intervalu vlnových délek). V interferometru dopadá na detektor záření všech vlnových délek současně. Jestliže jsou oba experimenty prováděny se stejnou integrační časovou konstantou, disperzní přístroj bude potřebovat pro každý spektrální element stejný čas, jako interferometr pro naměření jednoho interferogramu. To znamená, že za stejnou dobu, která bude potřebná pro získání celého spektra skládajícího se z N elementů bude na interferometru možno změřit N interferogramů a díky tomu zlepšit poměr signálu a šumu \sqrt{N} -krát.

b. **Jacquinotova výhoda** (čte se žakinotova)

V disperzním spektrometru musí záření projít vstupní a výstupní štěrbinou monochromátoru, která propustí pouze část záření, které do monochromátoru vstoupilo. V interferometru je srovnatelným omezujícím prvkem pouze kruhová apertura, která pro srovnatelné rozlišení dovolí průchod podstatně většímu toku záření než obdélníková štěrbinu disperzního spektrometru.

c. **Connesova výhoda** Interferometr používá He-Ne laseru pro kontrolu pohybu pohyblivého zrcadla. To dovoluje vysoký stupeň přesnosti na vlnočtové škále získaného spektra a odstraňuje potřebu kalibrace vlnočtové škály přístroje, která je nezbytná u přístrojů disperzních. Laser zde slouží jako vlnočtový standard o přesnosti ca $0,01 \text{ cm}^{-1}$.

d. **Výhoda rozptýleného světla** V disperzním přístroji je veškeré záření rotujícím polokruhovým zrcadlem modulováno na stejnou frekvenci a tak je současně se zářením o vlnočtu, na které je nastaven monochromátor, detegováno i záření jiného vlnočtu, které se na detektor dostane. V interferometru je záření každé frekvence modulováno odlišně a tudíž v interferometru analogický jev nemůže nastat.

e. **Eliminace vlivu emise vzorku** (viz část 6.2.5).

f. **Rozlišení** V části 4.10 bylo ukázáno, že rozlišení, dosažitelné na spektrometru s Fourierovou transformací, je určeno reciprokou hodnotou dráhového rozdílu

$$\Delta\tilde{\nu} = \frac{1}{x} \tag{6.35}$$

což je jen jiný zápis vztahu (4.41), kde klademe $x = 2T$.

Příklad 6.2 Špičkové přístroje dosahují ve střední oblasti rozlišení lepší než $0,0063 \text{ cm}^{-1}$. Znamená to tedy, že na interferometru musí být dosažitelný maximální dráhový rozdíl $x = 1/0,0063 \text{ cm} = 158 \text{ cm}$. Posun zrcadla musí činit minimálně 79 cm. Rutinní přístroje naproti tomu mají rozlišení např. 2 cm^{-1} , tzn. $x = 1/2 \text{ cm} = 0,5 \text{ cm}$. Posun zrcadla musí činit min. 0,25 cm. Tady bychom si měli znovu připomenout, že rozlišení můžeme ovlivnit použitou apodizační funkcí. Největší rozlišení dosáhneme pro obdélníkovou apodizační funkci.

g. Rychlost

Pro časovou škálu, ve které jsme schopni zachytit dostatečný počet interferogramů pro další zpracování, je určující rychlost pohybu zrcadla (samozřejmě vedle ostatních prvků, podílejících se na přenosu dat). Je zřejmé, že infračervené spektrum měřeného vzorku musí být konstantní alespoň po dobu, která je nezbytná pro to, aby pohyblivé zrcadlo jednou urazilo celou dráhu odpovídající požadovanému rozlišení. Nejrychlejší interferometry na to potřebují 20 ms, neboli jsou schopny za sekundu zachytit 50 interferogramů. Další zvětšení rychlosti naráží na řadu obtíží, a proto se pro sledování opakovatelných rychlých procesů používá techniky v anglické literatuře označované "step-scan", krokové skanování interferogramů. Pohyblivé zrcadlo je posunuto o zvolený krok, a měření je provedeno v jeho klidové, přesně definované poloze. Modulace záření musí být zajištěna jinou cestou, a to buď mechanickým přerušovačem záření (modulace amplitudová), který je umístěn za interferometr, nebo sinusovými vibracemi pohyblivého zrcadla (fázová modulace). Touto cestou lze pro velmi rychlé, opakovatelné procesy (jakými jsou např. fotochemické nebo elektrochemické reakce) postupným opakováním měření v každé poloze zrcadla získat informaci o změně infračerveného spektra s rozlišením $5 \mu\text{s}$.

h. Modularita

Velkou předností spektrometrů s Fourierovou transformací je možnost snadno změnit spektrální rozsah přístroje záměnou zdroje záření, děliče svazku a detektoru.

6.5 Spojení FTIR spektrometru s chromatografem

FTIR spektrometr představuje ideální detektor, který lze připojit na výstup separační kolony, nejběžněji plynového chromatografu. Toto spojení se realizuje pomocí průtočné kyvety, na jejíž konstrukci však máme poměrně vysoké nároky:

- musí být vyhřívaná, aby v ní nedocházelo ke kondenzaci eluovaných složek,
- musí být dostatečně dlouhá, aby bylo dosaženo dostatečné absorpce záření a tedy dostatečné hodnoty poměru signálu a šumu,
- musí mít minimální objem, aby nedocházelo k degradaci rozlišení, dosaženého na separační koloně.

Tyto požadavky nejlépe splňuje skleněná kapilára o průměru do 1 mm a délce min. 10 cm, jejíž vnitřní stěna je pozlacená (v anglosaské literatuře se označuje jako "light pipe", pipe je trubice, roura, také dýmka). Záření neprochází kyvetou rovnoběžně s osou kyvety, ale kyveta slouží jako světlovod, záření prochází díky odrazům na pozlacených stěnách. Rozměry kyvety nejsou samozřejmě ideální, a tak rozlišení dosažené na plynovém chromatografu je vesměs degradováno (detailní diskusi najde čtenář v monografii [10]). Spojení obou technik je však i za těchto okolností výhodné z toho důvodu, že na rozdíl od běžně používaných detektorů, jakými jsou např. detektor plamenově-ionizační, detektor tepelně-vodivostní nebo detektor elektronového záchytu, které nám pro určitý retenční čas dovolí získat pouze jediný, nespecifický signál (z hodnoty proudu nelze zjistit, která složka byla právě eluována), v případě spojení GC-FTIR máme možnost pro každý retenční čas získat celé infračervené absorpční spektrum, charakteristické pro eluovanou látku. Pro efektivní spojení je nezbytné, aby byl FTIR spektrometr schopen snímat jednotlivé interferogramy dostatečně rychle. Současné přístroje dovolují uložit do paměti počítače více než 60 interferogramů za sekundu. Při 10 minutovém chromatografickém experimentu získáme tedy minimálně $60 \cdot 60 \cdot 10 = 36000$ interferogramů. Mezi sejmutím interferogramu a výsledným spektrem je samozřejmě nezbytné provést ohromné množství výpočetních operací a tak je důležitou otázkou, jak jednoduchou cestou rozhodnout, které ze získaných interferogramů odpovídají eluovaným složkám a má je tudíž cenu transformovat na spektra, a které interferogramy náleží pouze pozadí (nosnému plynu) a jsou pro nás bezcenné. Tuto informaci lze získat tak, že spolu s měřením pomocí FTIR spektrometru provedeme měření pomocí vhodného chromatografického detektoru. Tato cesta není zcela bez úskalí a je zřejmě experimentálně mnohem jednodušší získat takový **chromatogram** - závislost jediné závisle proměnné veličiny I na elučním čase t - přímo z naměřených interferogramů.

Chromatogram lze konstruovat v zásadě dvěma cestami: jedna vede přes FT analýzu malého počtu dat z naměřeného interferogramu, druhá vychází přímo z interferogramů a FT analýzu nepoužívá. Čas nezbytný pro provedení FFT (rychlou FT) je úměrný $d \ln d$, kde d je celkový počet transformovaných dat, a podstatné snížení výpočetního času lze tedy získat tím, že nebudeme zpracovávat celý interferogram, ale vybereme pouze některé body, např. s krokem 32 cm^{-1} místo všech naměřených bodů. K získání těchto "přibližných" spekter vede stejná cesta jako při zpracování celého interferogramu. Pro získání hodnot transmitance T_i , resp. absorbance A_i potřebujeme naměřit interferogramy samotného nosného plynu před vlastním chromatografickým dělením. Závisle proměnnou veličinou I v chromatogramu pak může být suma příspěvků jednotlivých vybraných bodů interferogramu

$$I = \sum_{i=1}^n (1 - T_i)$$

můžeme ale také spočítat sumy hodnot absorbance ve vybraných úsecích spektra, a získat tak informaci o přítomnosti vybraných funkčních skupin. Tyto chromatogramy se někdy nazývají chemigramy. Konstrukce chromatogramu přímo z interferogramů výrazně snižuje nároky na výpočetní čas. Existuje opět řada cest, jak konstrukci chromatogramu provést, nejcitlivější a na výpočetní čas nejméně náročná se ukázala Gramova-Schmidtova ortogonalizace. Na každý interferogram pohlížíme jako na d -rozměrný vektor, tj. prvek z \mathbb{R}^d . Jestliže naměříme n interferogramů, lze očekávat, že jednotlivé interferogramy nebudou vždy vzájemně nezávislé. Bude-li procházet např. jenom nosný plyn, v ideálním případě budou všechny in-

terferogramy stejné. Důvod, proč ve skutečnosti stejné nikdy nejsou, známe. Během měření se uplatní řada fluktuací, která způsobí, že naše měření bude zatíženo šumem. Díky tomu nebude nosný plyn reprezentovat jeden interferogram, ale určitý podprostor $P \subset \mathbb{R}^d$, který bude charakterizován bází, definovanou několika vektory (všechny ostatní vektory budou lineární kombinací vektorů této báze!). Při konstrukci chromatogramu porovnáváme všechny interferogramy, které generujeme po nástřiku vzorku, s touto bází (resp. s tímto podprostorem). Pokud se v interferogramu objeví příspěvek eluované složky, bude mezi tímto vektorem eluované složky (tj. interferogramem vzorku) a podprostorem P určitá vzdálenost. Hledáme nejmenší možnou vzdálenost. Tato vzdálenost je funkcí absorbance v celé měřené oblasti spektra. Postup, jak tuto vzdálenost nalézt, popisuje Gramova-Schmidtova ortogonalizace (ortonormalizace), která je podrobně popsána v dodatku C. Spojení FTIR spektrometru a plynového chromatografu není jediná možnost. Připojit lze též kapalinový chromatograf (LC-FTIR) nebo chromatograf, pracující s tekutinou v nadkritickém stavu (SFC-FTIR). Možné je spojení i s tenkovrstvou chromatografií (TLC-FTIR). Tyto techniky se označují jako "hyphenated techniques" (v překladu techniky s rozdělovací čárkou, spojovníkem). Problematika spojená se získáním chromatogramů je stejná jako pro spojení FTIR-GC až na jeden podstatný rozdíl: zatímco mobilní fázi (nosný plyn) v plynové chromatografii lze volit tak, aby neabsorbovala infračervené záření, kapalinová chromatografie a také chromatografie tekutinou v nadkritickém stavu je až na řídké výjimky omezena vlastní absorpcí mobilní fáze. Ve spojení FTIR-TLC vyhodnocujeme rozdělení složek po odstranění mobilní fáze, zde jsme však omezovali vlastní absorpci fáze stacionární (silikagel, alumina).

Kapitola 7

Dvojmrozměrná Fourierova transformace

V předchozích kapitolách jsme ukázali, jak se používá **jednorozměrná** Fourierova transformace ve spektroskopii. Tato kapitola bude věnována **dvojmrozměrné** Fourierově transformaci. Až se seznámíme s jejími základními vlastnostmi, pak se v závěru kapitoly zmíníme o některých aplikačních možnostech dvojmrozměrné FT ve spektroskopii.

Protože dvojmrozměrná FT má většinu vlastností analogických s jednorozměrnou FT, bude výklad veden stručnější formou.

7.1 Definice dvojmrozměrné FT

Zavedme nejprve následující označení. Abychom zachovali analogii a formální podobnost se značeními v Kapitole 4, budeme uspořádané dvojice reálných čísel značit tučnými písmeny.

Tedy položíme

$$\mathbf{t} = (t_1, t_2) \in R^2, \quad \boldsymbol{\nu} = (\nu_1, \nu_2) \in R^2$$

a jejich skalární součin

$$\boldsymbol{\nu} \cdot \mathbf{t} = \nu_1 t_1 + \nu_2 t_2. \quad (7.1)$$

Poznámka 7.1 Platí poznámka obdobná Poznámce 4.13: Proměnnou $\mathbf{t} = (t_1, t_2)$ můžeme interpretovat jako dvojici časových proměnných a proměnnou $\boldsymbol{\nu} = (\nu_1, \nu_2)$ jako dvojici frekvencí. Nebo můžeme tyto dvojice interpretovat jako dvojice velikostí optických dráhových rozdílů a jim odpovídající dvojice vlnočtů, viz Poznámku 4.13. Další možné interpretace jsou například v NMR spektroskopii, viz konec této kapitoly.

Definice 7.1 Budiž $s(t_1, t_2)$ komplexní funkce definovaná na R^2 . Fourierovým obrazem funkce $s(t_1, t_2)$ nazýváme komplexní funkci $S(\nu_1, \nu_2)$ reálných proměnných ν_1, ν_2 definovanou integrálem

$$S(\nu_1, \nu_2) = \iint_{R^2} s(t_1, t_2) e^{-2\pi i (\nu_1 t_1 + \nu_2 t_2)} dt_1 dt_2, \quad (7.2)$$

který zpravidla zapisujeme stručně takto:

$$S(\boldsymbol{\nu}) = \iint_{R^2} s(\mathbf{t}) e^{-2\pi i \boldsymbol{\nu} \cdot \mathbf{t}} d\mathbf{t}. \quad (7.3)$$

O funkci $s(t_1, t_2)$ budeme vždy předpokládat, že má takové vlastnosti, aby nevlastní dvojný integrál na pravé straně v (7.2) konvergoval. Dále budeme psát

$$S(\nu_1, \nu_2) = \mathcal{F}_2[s(t_1, t_2)],$$

resp. stručněji

$$S(\boldsymbol{\nu}) = \mathcal{F}_2[s(\mathbf{t})], \quad (7.4)$$

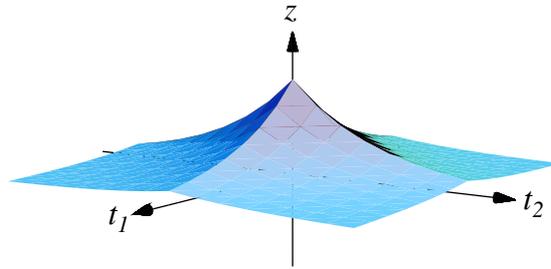
kde index 2 značí, že se jedná o dvojrozměrnou FT.

Poznámka 7.2 Definující integrál pro dvojrozměrnou FT je nevlastní dvojný integrál a pro jeho výpočet se nejčastěji používá Fubiniova věta, viz [8], Věta 12.10 a věta o substituci ve dvojném integrálu, viz Větu 12.9 tamtéž.

Příklad 7.1 Nalezněme \mathcal{F}_2 -obraz funkce

$$s(t_1, t_2) = e^{-(|t_1|+|t_2|)}.$$

Graf této funkce je na obr. 7.1



Obrázek 7.1:

Řešení: Podle definice máme

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_2[e^{-(|t_1|+|t_2|)}] &= S(\nu_1, \nu_2) = \iint_{\mathbb{R}^2} e^{-(|t_1|+|t_2|)} e^{-2\pi i(\nu_1 t_1 + \nu_2 t_2)} dt_1 dt_2 = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-|t_1|} e^{-2\pi i \nu_1 t_1} e^{-|t_2|} e^{-2\pi i \nu_2 t_2} dt_1 \right) dt_2 = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-|t_1|} e^{-2\pi i \nu_1 t_1} dt_1 \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-|t_2|} e^{-2\pi i \nu_2 t_2} dt_2 = \\ &= \frac{2}{1 + 4\pi^2 \nu_1^2} \cdot \frac{2}{1 + 4\pi^2 \nu_2^2} = \frac{4}{(1 + 4\pi^2 \nu_1^2)(1 + 4\pi^2 \nu_2^2)}, \end{aligned}$$

kde jsme použili výsledku z příkladu 4.1.

Výsledek příkladu 7.1 je speciálním případem následující věty:

Věta 7.1 Je-li $s(t_1, t_2) = s_1(t_1) \cdot s_2(t_2)$, pak platí

$$\mathcal{F}_2[s_1(t_1) \cdot s_2(t_2)] = \mathcal{F}[s_1(t_1)] \cdot \mathcal{F}[s_2(t_2)] = S_1(\nu_1) \cdot S_2(\nu_2). \quad (7.5)$$

Důkaz lze ponechat čtenáři jako cvičení na použití Fubiniovy věty.

7.2 Vzorec pro inverzní dvojrozměrnou FT

Situace je zcela obdobná jednorozměrnému případu. Je-li

$$S(\boldsymbol{\nu}) = \mathcal{F}_2[s(\mathbf{t})],$$

pak

$$\mathcal{F}_2^{-1}[S(\boldsymbol{\nu})] = s(\mathbf{t}) = \iint_{R^2} S(\boldsymbol{\nu}) e^{2\pi i \cdot} \, d\boldsymbol{\nu}. \quad (7.6)$$

Poznámka 7.3 Vzorec (7.6) má dobrý smysl pro funkce $s(t_1, t_2)$, které mají spojitě parciální derivace na R^2 a nevlastní integrál

$$\iint_{R^2} |s(t_1, t_2)| \, dt_1 \, dt_2$$

konverguje.

Dále platí věta obdobná Větě 4.1.

Věta 7.2 Je-li $S(\nu_1, \nu_2)$ \mathcal{F}_2 -obraz funkce $s(t_1, t_2)$, pak $s(\nu_1, \nu_2)$ je \mathcal{F}_2 -obraz funkce $S(-t_1, -t_2)$.

Důkaz: Máme

$$\mathcal{F}_2[S(-t_1, -t_2)] = \iint_{R^2} S(-t_1, -t_2) e^{-2\pi i(\nu_1 t_1 + \nu_2 t_2)} \, dt_1 \, dt_2.$$

Provedeme substituci ve dvojném integrálu

$$t_1 = -\tau_1, \quad t_2 = -\tau_2.$$

Jakobián této substituce je roven 1, takže podle věty o substituci ve dvojném integrálu (viz [8], věta ve:12.9) dostáváme

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_2[S(-t_1, -t_2)] &= \iint_{R^2} S(\tau_1, \tau_2) e^{2\pi i(\nu_1 \tau_1 + \nu_2 \tau_2)} \, d\tau_1 \, d\tau_2 = \\ &= \mathcal{F}_2^{-1}[S(\tau_1, \tau_2)] = s(\nu_1, \nu_2). \end{aligned}$$

Tedy stručněji zapsáno

$$\mathcal{F}_2[S(-\mathbf{t})] = \mathcal{F}_2^{-1}[S(\boldsymbol{\tau})] = s(\boldsymbol{\nu}), \quad (7.7)$$

což jsme měli dokázat.

7.3 Příklad

Tento příklad má pomoci čtenáři k hlubšímu porozumění "dvojrozměrným" signálům.

Příklad 7.2 Nalezněme \mathcal{F}_2 -obraz funkce

$$s(t_1, t_2) = e^{-t_1} 1(t_1 - t_2) 1(t_2), \quad (7.8)$$

kde $1(t)$ je jednotková (Heavisideova) funkce, definovaná v paragrafu 2.8

Řešení: Nejdříve se seznámíme s grafy příslušných funkcí na pravé straně v 7.8.

(i) Funkce $f(t_1, t_2) = 1(t_1 - t_2)$ je nulová tam, kde $t_1 - t_2 < 0$, tedy v polorovině

$$\Pi_0 = \{(t_1, t_2) \in \mathbb{R}^2, \quad t_1 < t_2\},$$

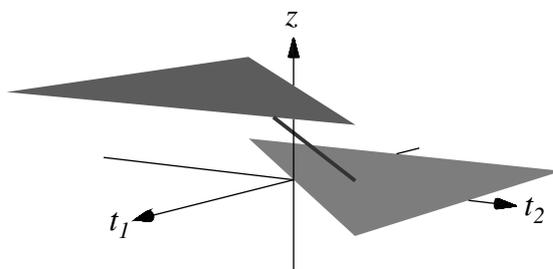
jejíž hraniční přímkou p je přímka o rovnici $t_2 = t_1$. Dále je funkce f rovna 1 v polorovině

$$\Pi_1 = \{(t_1, t_2) \in \mathbb{R}^2, \quad t_1 > t_2\}$$

a je rovna $\frac{1}{2}$ v bodech přímky p . Tedy

$$1(t_1 - t_2) = \begin{cases} 0 & \text{pro } (t_1, t_2) \in \Pi_0, \\ \frac{1}{2} & \text{pro } (t_1, t_2) \in p, \\ 1 & \text{pro } (t_1, t_2) \in \Pi_1. \end{cases} \quad (7.9)$$

Graf této funkce je na obr. 7.2

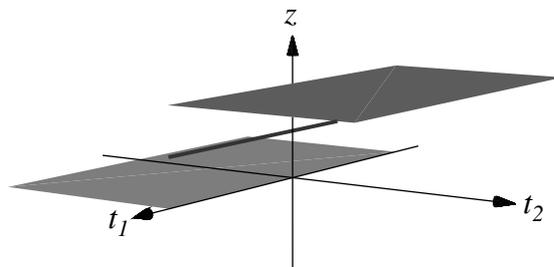


Obrázek 7.2:

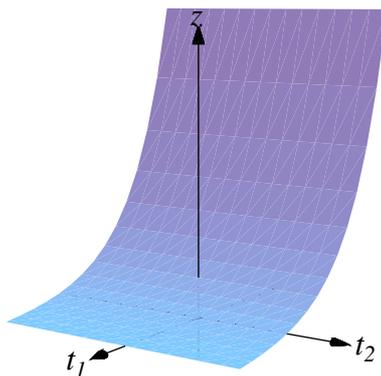
(ii) Funkce $g(t_1, t_2) = 1(t_2)$ jakožto funkce **dvou proměnných** je dána vztahem

$$1(t_2) = \begin{cases} 0 & \text{pro } (t_1, t_2) \in \Sigma_0, \\ \frac{1}{2} & \text{pro } (t_1, t_2) \in q, \\ 1 & \text{pro } (t_1, t_2) \in \Sigma_1, \end{cases} \quad (7.10)$$

kde přímka q je osa t_1 a Σ_0, Σ_1 jsou příslušné poloroviny v rovině t_1, t_2 , viz obr. 7.3, na kterém je nakreslen graf funkce $g(t_1, t_2)$.



Obrázek 7.3:



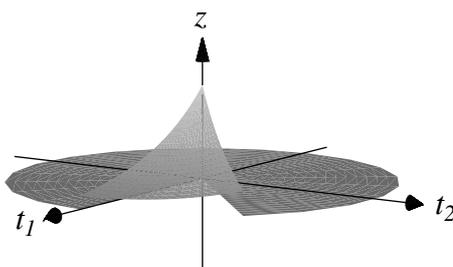
Obrázek 7.4:

Podobně na obr. 7.4 je nakreslen graf funkce $h(t_1, t_2) = e^{-t_1}$.

Nakonec je na obr. 7.5 nakreslen graf funkce

$$s(t_1, t_2) = e^{-t_1} 1(t_1 - t_2) 1(t_2),$$

jehož \mathcal{F}_2 -obraz nyní spočítáme.



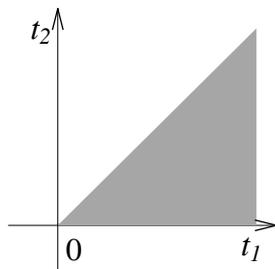
Obrázek 7.5:

$$\mathcal{F}_2[e^{-t_1} 1(t_1 - t_2) 1(t_2)] = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-t_1} 1(t_1 - t_2) 1(t_2) e^{-2\pi i(\nu_1 t_1 + \nu_2 t_2)} dt_1 dt_2.$$

Integrovaná funkce je nenulová pouze ve výšce 1. kvadrantu

$$V = \{(t_1, t_2) \in \mathbb{R}^2, \quad t_1 > t_2 > 0\},$$

viz obr. 7.6.



Obrázek 7.6:

Takže máme

$$\mathcal{F}_2[e^{-t_1} 1(t_1 - t_2) 1(t_2)] = \iint_V e^{-t_1} 1(t_1 - t_2) 1(t_2) e^{-2\pi i(\nu_1 t_1 + \nu_2 t_2)} dt_1 dt_2 =$$

$$\begin{aligned}
&= \int_0^{+\infty} \left(e^{-t_1} e^{-2\pi i \nu_1 t_1} \int_0^{t_1} 1(t_1 - t_2) e^{-2\pi i \nu_2 t_2} dt_2 \right) dt_1 = \\
&= \int_0^{+\infty} \left(e^{-(1+2\pi i \nu_1)t_1} \int_0^{t_1} e^{-2\pi i \nu_2 t_2} dt_2 \right) dt_1 = \\
&= \frac{1}{2\pi i \nu_2} \int_0^{+\infty} (e^{-(1+2\pi i \nu_1)t_1} (1 - e^{-2\pi i \nu_2 t_1})) dt_1 = \\
&= \frac{1}{2\pi i \nu_2} \left(\frac{1}{1+2\pi i \nu_1} - \frac{1}{1+2\pi i \nu_1 + 2\pi i \nu_2} \right) = \\
&= \frac{1}{(1+2\pi i \nu_1)(1+2\pi i \nu_1 + 2\pi i \nu_2)}.
\end{aligned}$$

Dostáváme tedy

$$\mathcal{F}_2[e^{-t_1} 1(t_1 - t_2) 1(t_2)] = \frac{1}{(1+2\pi i \nu_1)(1+2\pi i \nu_1 + 2\pi i \nu_2)}. \quad (7.11)$$

7.4 Vlastnosti dvojrozměrné FT

Nyní probereme základní vlastnosti dvojrozměrné FT, které jsou analogické vlastnostem jednorozměrné FT (srovnejte s paragrafem 4.3).

7.4.1 Linearita \mathcal{F}_2 -FT

Nechť c_1, c_2 jsou konstanty. Pak

$$\mathcal{F}_2[c_1 s_1(t_1, t_2) + c_2 s_2(t_1, t_2)] = c_1 \mathcal{F}_2[s_1(t_1, t_2)] + c_2 \mathcal{F}_2[s_2(t_1, t_2)]. \quad (7.12)$$

Důkaz ponecháme čtenáři jako cvičení.

7.4.2 Věta o obrazu derivace

Nechť $\mathcal{F}_2[s(t_1, t_2)] = S(\nu_1, \nu_2)$. Pak

$$\mathcal{F}_2 \left[\frac{\partial s(t_1, t_2)}{\partial t_k} \right] = 2\pi i \nu_k S(\nu_1, \nu_2), \quad (7.13)$$

kde $k = 1, 2$. **Důkaz:** Důkaz provedeme pro $k = 1$. Podle definice máme

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}_2 \left[\frac{\partial s(t_1, t_2)}{\partial t_1} \right] &= \iint_{\mathbb{R}^2} \frac{\partial s(t_1, t_2)}{\partial t_1} e^{2\pi i \cdot} dt_1 dt_2 = \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial s(t_1, t_2)}{\partial t_1} e^{-2\pi i \nu_1 t_1} dt_1 \right) e^{-2\pi i \nu_2 t_2} dt_2 =
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\left[s(t_1, t_2) e^{-2\pi i \nu_1 t_1} \right]_{t_1=-\infty}^{t_1=+\infty} + 2\pi i \nu_1 \int_{-\infty}^{\infty} s(t_1, t_2) e^{-2\pi i \nu_1 t_1} dt_1 \right) e^{-2\pi i \nu_2 t_2} dt_2 = \\
&= 2\pi i \nu_1 S(\nu_1, \nu_2).
\end{aligned}$$

Hranatá závorka uvnitř integrálu je rovna nule, neboť

$$\lim_{t_1 \rightarrow \pm\infty} s(t_1, t_2) = 0.$$

Cvičení 7.1 Pomocí vztahu 7.13 ukažte, že

$$(i) \quad \mathcal{F}_2 \left[\frac{\partial^2 s(t_1, t_2)}{\partial t_1 \partial t_2} \right] = (2\pi i)^2 \nu_1 \nu_2 S(\nu_1, \nu_2)$$

$$(ii) \quad \mathcal{F}_2 [\Delta s] = \mathcal{F}_2 \left[\frac{\partial^2 s}{\partial t_1^2} + \frac{\partial^2 s}{\partial t_2^2} \right] = -4\pi^2 (\nu_1^2 + \nu_2^2) S(\nu_1, \nu_2).$$

7.4.3 Věta o derivaci obrazu

Nechť $\mathcal{F}_2[s(t_1, t_2)] = S(\nu_1, \nu_2)$. Pak

$$\mathcal{F}_2[t_k s(t_1, t_2)] = \frac{i}{2\pi} \frac{\partial S(\nu_1, \nu_2)}{\partial \nu_k}, \quad (7.14)$$

kde $k = 1, 2$. Důkaz ponecháváme čtenáři jako cvičení, neboť je snadnou modifikací důkazu pro jednorozměrný případ, viz str. 34.

7.4.4 Věty o translaci

Věty o translaci zapíšeme pomocí stručnějšího zápisu použitého ve vztahu 7.3. Nechť tedy $\mathcal{F}_2[s(\mathbf{t})] = S(\boldsymbol{\nu})$ a $\mathbf{a} = (a_1, a_2)$ je konstantní vektor. Pak platí:

$$a) \quad \mathcal{F}_2[s(\mathbf{t} - \mathbf{a})] = e^{-2\pi i \cdot \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\nu}} S(\boldsymbol{\nu}), \quad (7.15)$$

$$b) \quad \mathcal{F}_2[e^{2\pi i \cdot \mathbf{a} \cdot \mathbf{t}} s(\mathbf{t})] = S(\boldsymbol{\nu} - \mathbf{a}). \quad (7.16)$$

Důkaz: Provedeme důkaz prvního vztahu a druhý ponecháme čtenáři jako cvičení.

$$\mathcal{F}_2[s(\mathbf{t} - \mathbf{a})] = \iint_{\mathbb{R}^2} s(t_1 - a_1, t_2 - a_2) e^{-2\pi i (\nu_1 t_1 + \nu_2 t_2)} dt_1 dt_2.$$

Po substituci

$$t_1 = u_1 + a_1, \quad t_2 = u_2 + a_2,$$

jejíž Jakobián je roven 1 a ze vztahu

$$\boldsymbol{\nu} \cdot \mathbf{t} = \nu_1 t_1 + \nu_2 t_2 = \nu_1 (u_1 + a_1) + \nu_2 (u_2 + a_2) = \boldsymbol{\nu} \cdot \mathbf{u} + \boldsymbol{\nu} \cdot \mathbf{a},$$

dostáváme po dosazení do integrálu žádaný výsledek. ■

7.4.5 Věta o změně měřítka

Nechť $\mathcal{F}_2[s(\mathbf{t})] = S(\boldsymbol{\nu})$ a $k \neq 0$ je konstanta. Pak

$$\mathcal{F}_2[s(k\mathbf{t})] = \frac{1}{k^2} S\left(\frac{1}{k}\boldsymbol{\nu}\right). \quad (7.17)$$

Důkaz: Máme

$$\mathcal{F}_2[s(k\mathbf{t})] = \iint_{\mathbb{R}^2} s(kt_1, kt_2) e^{-2\pi i(\nu_1 t_1 + \nu_2 t_2)} dt_1 dt_2.$$

V dvojném integrálu provedeme substituci

$$t_1 = \frac{u_1}{k}, \quad t_2 = \frac{u_2}{k},$$

jejíž Jakobián je roven $\frac{1}{k^2}$ a ze vztahu

$$\nu_1 t_1 + \nu_2 t_2 = \frac{\nu_1}{k} u_1 + \frac{\nu_2}{k} u_2$$

dostáváme po dosazení do integrálu žádaný výsledek. ■

7.4.6 Zobecnění věty o změně měřítka

Nechť \mathbf{A} je reálná regulární matice řádu 2 a $|\mathbf{A}|$ je její determinant. Pak platí

$$\mathcal{F}_2[s(\mathbf{A}\mathbf{t})] = \frac{1}{|\mathbf{A}|} S(\mathbf{A}^*\boldsymbol{\nu}), \quad (7.18)$$

kde

$$\mathbf{A}^* = (\mathbf{A}^t)^{-1},$$

tj. \mathbf{A}^* je inverzní matice k transponované matici matice \mathbf{A} a dvojice \mathbf{t} a $\boldsymbol{\nu}$ nyní chápeme jako sloupcové vektory, tj.

$$\mathbf{t} = \begin{bmatrix} t_1 \\ t_2 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\nu} = \begin{bmatrix} \nu_1 \\ \nu_2 \end{bmatrix}.$$

Důkaz této věty je příliš pracný a proto jej zde nebudeme provádět. Poznamenejme pouze, že vztah (7.17) obdržíme ze vztahu (7.18), volíme-li matici \mathbf{A} ve tvaru

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} k & 0 \\ 0 & k \end{bmatrix}.$$

Přesvědčte se sami snadným výpočtem.

Příklad 7.3 Pomocí vztahu (7.18) a výsledku Příkladu 7.2 určíme

$$\mathcal{F}_2[e^{-2t_1} 1(t_1 - t_2) 1(t_1 + t_2)].$$

Řešení: Z Příkladu 7.2 víme, že \mathcal{F}_2 -obraz funkce

$$s_1(t_1, t_2) = e^{-t_1} 1(t_1 - t_2) 1(t_2)$$

je

$$S_1(\nu_1, \nu_2) = \frac{1}{(1 + 2\pi i \nu_1)[1 + 2\pi i (\nu_1 + \nu_2)]}.$$

Funkce

$$s_2(t_1, t_2) = e^{-2t_1} 1(t_1 - t_2) 1(t_1 + t_2)$$

vznikne z funkce $s_1(t_1, t_2)$ pomocí matice

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix},$$

neboť

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{t} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} t_1 \\ t_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2t_1 \\ t_1 + t_2 \end{bmatrix},$$

takže

$$s_2(t_1, t_2) = s_1(\mathbf{A} \cdot \mathbf{t}) = s_1(2t_1, t_1 + t_2).$$

Dále snadno zjistíme, že $|\mathbf{A}| = 2$ a

$$\mathbf{A}^* = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A}^* \cdot \boldsymbol{\nu} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}\nu_1 - \frac{1}{2}\nu_2 \\ \nu_2 \end{bmatrix}.$$

Pak podle vztahu (7.18) dostáváme

$$\begin{aligned} & \mathcal{F}_2[e^{-2t_1} 1(t_1 - t_2) 1(t_1 + t_2)] = \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{[1 + 2\pi i (\frac{1}{2}\nu_1 - \frac{1}{2}\nu_2)] [1 + 2\pi i (\frac{1}{2}\nu_1 + \frac{1}{2}\nu_2)]} = \frac{2}{[2 + 2\pi i (\nu_1 - \nu_2)] [2 + 2\pi i (\nu_1 + \nu_2)]}. \end{aligned}$$

■

7.5 Věty o obrazu konvoluce a součinu

Nyní zobecníme vztahy (5.12) a (5.13) platné pro jednorozměrnou FT na případ dvojrozměrný.

7.5.1 Konvoluce funkcí dvou proměnných

Nechť $f(x_1, x_2)$ a $g(x_1, x_2)$ jsou funkce definované na R^2 . Pak **konvoluce** těchto funkcí je definována analogicky jako v jednorozměrném případě, viz paragraf 2.9.

Definujeme tedy

$$(f * g)(x_1, x_2) = \iint_{R^2} f(x_1 - s_1, x_2 - s_2) g(s_1, s_2) ds_1 ds_2. \quad (7.19)$$

Použijeme-li stručnější označení $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$, $\mathbf{s} = (s_1, s_2)$, pak lze (7.19) psát

$$(f * g)(\mathbf{x}) = \iint_{\mathbb{R}^2} f(\mathbf{x} - \mathbf{s})g(\mathbf{s}) \, d\mathbf{s} = \iint_{\mathbb{R}^2} f(\mathbf{s})g(\mathbf{x} - \mathbf{s}) \, d\mathbf{s}. \quad (7.20)$$

Poznámka 7.4 Z tohoto vztahu je ihned vidět, že i dvojrozměrná konvoluce je komutativní. Dále platí, že **dvojrozměrná konvoluce má všechny vlastnosti uvedené v Poznámce 2.5**.

Příklad 7.4 Spočítejme konvoluci funkcí

$$f(x_1, x_2) = e^{-(x_1^2+x_2^2)} \quad a \quad g(x_1, x_2) = x_1x_2.$$

Řešení: Podle definice máme

$$\begin{aligned} (f * g)(x_1, x_2) &= \iint_{\mathbb{R}^2} e^{-(s_1^2+s_2^2)}(x_1 - s_1)(x_2 - s_2) \, ds_1 \, ds_2 = \\ &= \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-s_1^2}(x_1 - s_1) \, ds_1 \right) \cdot \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-s_2^2}(x_2 - s_2) \, ds_2 \right) = \\ &= \sqrt{\pi}x_1\sqrt{\pi}x_2 = \pi x_1x_2. \end{aligned}$$

Při výpočtu integrálů v závorkách jsme použili **Laplaceův integrál**

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-s^2} \, ds = \sqrt{\pi}$$

a dále integrál

$$\int_{-\infty}^{\infty} se^{-s^2} \, ds = 0,$$

neboť se jedná o integrál z liché funkce.

Dostali jsme tedy výsledek

$$\left(e^{-(x_1^2+x_2^2)} \right) * (x_1x_2) = \pi x_1x_2. \quad (7.21)$$

■

7.5.2 Věta o obrazu konvoluce

Nechť $\mathcal{F}_2[s_1(t_1, t_2)] = S_1(\nu_1, \nu_2)$ a $\mathcal{F}_2[s_2(t_1, t_2)] = S_2(\nu_1, \nu_2)$. Pak

$$\mathcal{F}_2[(s_1 * s_2)(t_1, t_2)] = S_1(\nu_1, \nu_2) \cdot S_2(\nu_1, \nu_2). \quad (7.22)$$

\mathcal{F}_2 -obraz konvoluce funkcí je součin obrazů. Důkaz je zcela analogický důkazu pro jednorozměrný případ a ponecháme jej proto čtenáři jako snadné cvičení.

7.5.3 Věta o obrazu součinu

Nechť $\mathcal{F}_2[s_1(t_1, t_2)] = S_1(\nu_1, \nu_2)$ a $\mathcal{F}_2[s_2(t_1, t_2)] = S_2(\nu_1, \nu_2)$. Pak

$$\mathcal{F}_2[s_1(t_1, t_2) \cdot s_2(t_1, t_2)] = S_1(\nu_1, \nu_2) * S_2(\nu_1, \nu_2). \quad (7.23)$$

\mathcal{F}_2 -obraz součinu funkcí je roven konvoluci obrazů. K důkazu vztahu (7.23) lze použít vzorec (7.6) pro inverzní \mathcal{F}_2 -FT, a pak postupovat podobně jako v jednorozměrném případě.

7.6 Diracova δ_2 -funkce dvou proměnných

Diracovu δ_2 -funkci dvou proměnných zavedeme obdobně jako jsme v Kapitole 3 zavedli δ -funkci jedné proměnné:

$$\delta_2(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{pro } (x, y) \neq (0, 0) \\ +\infty & \text{pro } (x, y) = (0, 0) \end{cases} \quad (7.24)$$

a

$$\iint_{\mathbb{R}^2} \delta_2(x, y) \, dx \, dy = 1. \quad (7.25)$$

Poznámka 3.1 platí zcela beze změny a rovněž tak text za touto poznámkou. Funkci δ_2 budeme také nazývat **impulsní funkcí dvou proměnných**.

7.6.1 Posloupnost funkcí konvergující k δ_2 -funkci

Vyšetřeme posloupnost funkcí

$$g_n(x, y) = \frac{n^2}{\pi} e^{-n^2(x^2+y^2)}, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (7.26)$$

Zřejmě platí

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n^2}{\pi} e^{-n^2(x^2+y^2)} = \begin{cases} 0 & \text{pro } (x, y) \neq (0, 0) \\ +\infty & \text{pro } (x, y) = (0, 0). \end{cases}$$

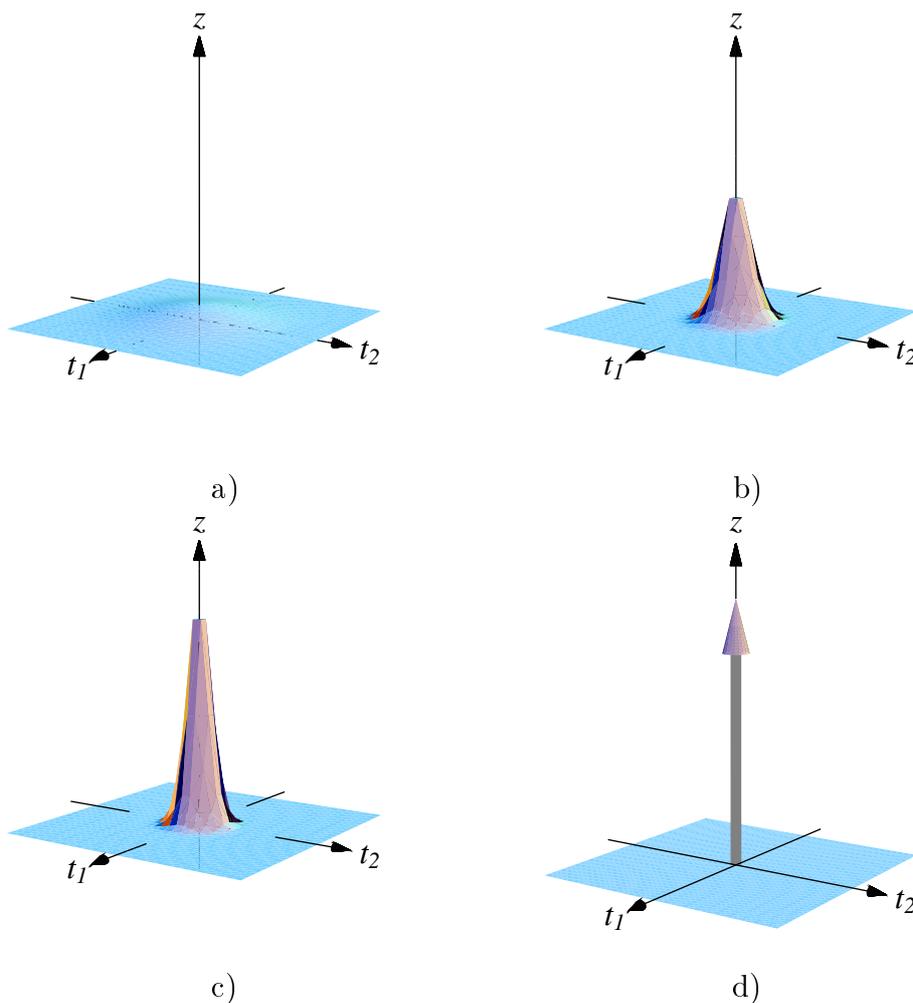
Dále s využitím vztahu (3.8) a Fubiniovy věty máme

$$\iint_{\mathbb{R}^2} g_n(x, y) \, dx \, dy = \iint_{\mathbb{R}^2} \frac{n^2}{\pi} e^{-n^2(x^2+y^2)} \, dx \, dy = 1,$$

takže můžeme psát

$$\lim_{n \rightarrow \infty} g_n(x, y) = \delta_2(x, y). \quad (7.27)$$

Říkáme, že posloupnost $g_n(x, y)$ konverguje k δ_2 -funkci ve smyslu teorie distribucí, viz Dodatek A. Konvergence funkcí $g_n(x, y) \rightarrow \delta_2(x, y)$ pro $n \rightarrow +\infty$ je znázorněna na obr. 7.7, kde na obr. 7.7a je graf funkce $g_1(x, y)$, na obr. 7.7b je graf funkce $g_3(x, y)$, na obr. 7.7c je graf funkce $g_4(x, y)$ a na obr. 7.7c je symbolicky znázorněn graf funkce $\delta_2(x, y)$ jako šipka kolmá k rovině xy , spojující symbolicky bod $(0, 0)$ s "bodem $+\infty$ ".



Obrázek 7.7:

7.6.2 Některé vlastnosti δ_2 -funkce

1. vlastnost: Je výhodné v některých situacích psát, resp. vyjádřit δ_2 -funkci jako součin

$$\delta_2(x, y) = \delta(x) \cdot \delta(y). \quad (7.28)$$

Motivací k tomuto vyjádření je například vztah (7.27), přepsaný následovně:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n^2}{\pi} e^{-n^2(x^2+y^2)} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left[\left(\frac{n}{\sqrt{\pi}} e^{-n^2 x^2} \right) \left(\frac{n}{\sqrt{\pi}} e^{-n^2 y^2} \right) \right] = \delta(x) \cdot \delta(y).$$

2. vlastnost: Posunutá δ_2 -funkce se definuje následovně

$$\delta_2(x - x_0, y - y_0) = \begin{cases} 0 & \text{pro } (x, y) \neq (x_0, y_0) \\ +\infty & \text{pro } (x, y) = (x_0, y_0) \end{cases} \quad (7.29)$$

a modeluje impuls v bodě (x_0, y_0) . Je limitou posloupnosti funkcí $g_n(x - x_0, y - y_0)$. "Grafem" posunuté δ_2 -funkce je šipka kolmá na rovinu xy , spojující symbolicky bod (x_0, y_0) s bodem $+\infty$.

3. vlastnost: Stejně jako v jednorozměrném případě lze ukázat (viz paragraf 3.3), že platí

$$\iint_{\mathbb{R}^2} f(x, y) \delta_2(x - x_0, y - y_0) dx dy = f(x_0, y_0). \quad (7.30)$$

Tento vztah koresponduje s definičním vztahem, kterým je definována δ_2 -funkce jako **singularní distribuce** v Dodatku A, tj. se vztahem (A.14)

$$\langle \delta_2, f \rangle = f(x_0, y_0).$$

7.6.3 Násobení δ_2 -funkce obyčejnou funkcí

Nechť $f(x, y)$ je "obyčejná" funkce. Pak násobek $f(x, y)\delta(x - x_0, y - y_0)$ definujeme následovně:

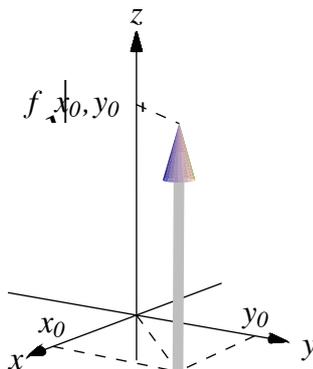
$$f(x, y)\delta(x - x_0, y - y_0) = f(x_0, y_0)\delta(x - x_0, y - y_0). \quad (7.31)$$

Zdůvodnění této definice nalezne čtenář v Dodatku A.

Poznámka 7.5 Domluvme se, že "graf" součinu

$$f(x, y)\delta(x - x_0, y - y_0)$$

budeme kreslit tak, jak je znázorněno na obr. 7.8.



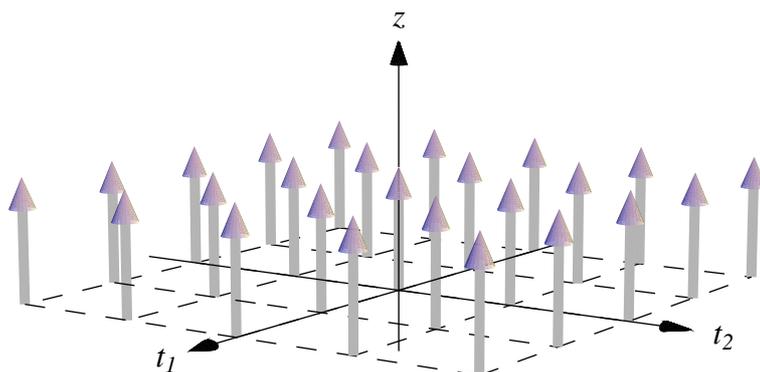
Obrázek 7.8:

Této úmluvy se používá při grafickém znázornění diskretizace spojitého dvojrozměrného signálu, viz následující odstavec.

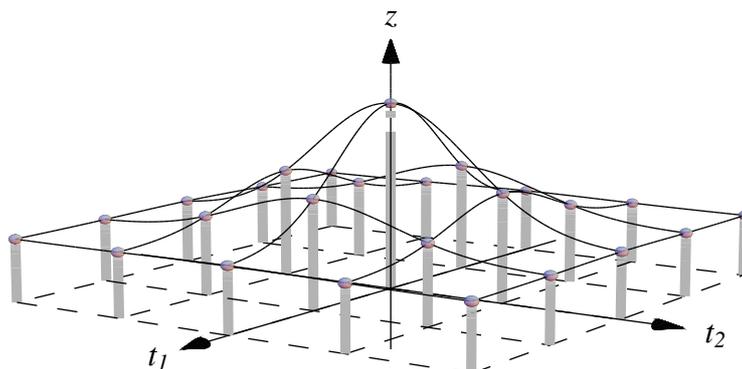
7.6.4 Diskretizace spojitého signálu

Mějme spojitou funkci $f(t_1, t_2)$, kterou chápeme jako spojitý signál dvou proměnných. K diskretizaci tohoto signálu použijeme dvojrozměrnou vzorkovací funkci

$$i_2(t_1, t_2) = \sum_{m, n=-\infty}^{+\infty} \delta_2(t_1 - m\Delta_1, t_2 - n\Delta_2), \quad (7.32)$$



Obrázek 7.9:



Obrázek 7.10:

kde Δ_1 a Δ_2 jsou délky vzorkovacích intervalů na časových osách t_1 a t_2 . Grafické znázornění vzorkovací funkce je uvedeno na obr. 7.9 a diskretizace spojitého dvojrozměrného signálu je znázorněna na obr. 7.10.

Tuto diskretizaci dostaneme jako součin

$$\begin{aligned} f(t_1, t_2) i_2(t_1, t_2) &= \sum_{m, n=-\infty}^{+\infty} f(t_1, t_2) \delta_2(t_1 - m\Delta_1, t_2 - n\Delta_2) = \\ &= \sum_{m, n=-\infty}^{+\infty} f(m\Delta_1, n\Delta_2) \delta_2(t_1 - m\Delta_1, t_2 - n\Delta_2). \end{aligned}$$

7.6.5 Několik užitečných impulsních funkcí dvou proměnných

(i)

Položme

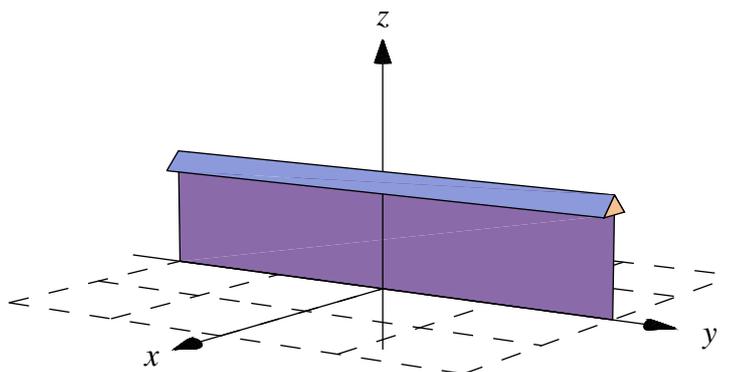
$$I_1(x, y) = \delta(x). \quad (7.33)$$

Tato impulsní funkce dvou proměnných je impulsní pouze v proměnné x a na druhé proměnné y nezávisí. Podrobněji lze impulsní funkci I_1 napsat následovně:

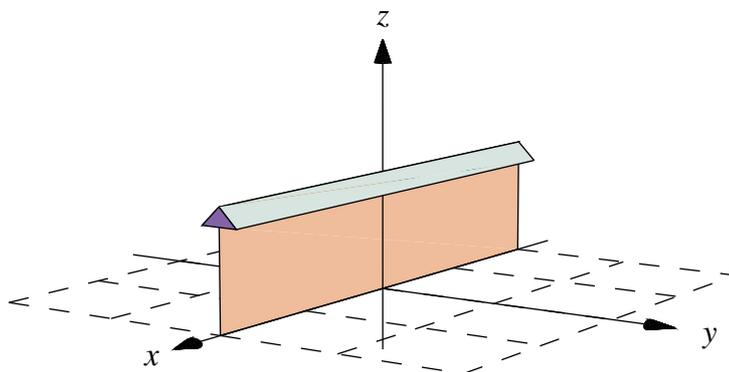
$$I_1(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{pro } x \neq 0 \quad a \quad y \in R \\ \infty & \text{pro } x = 0 \quad a \quad y \in R. \end{cases}$$

Při grafickém znázornění postupujeme stejně jako v případě obyčejných funkcí dvou proměnných, jejichž funkční předpis obsahuje pouze jednu proměnnou, např. $z = f(x, y) = x^2$, (viz [8], str. 165). Graf této funkce vznikne rovnoběžným posouváním paraboly $z = x^2$ podél osy y .

Tedy graf impulsní funkce $I_1(x, y)$ vznikne tak, že graf impulsní funkce $\delta(x)$ posouváme rovnoběžně podél osy y . Dostaneme graf znázorněný na obr. 7.11. Je to vlastně "polorovina" kolmá na rovinu x, y "nad" osou y .



Obrázek 7.11:



Obrázek 7.12:

(ii)

Podobně

$$I_2(x, y) = \delta(y) \quad (7.34)$$

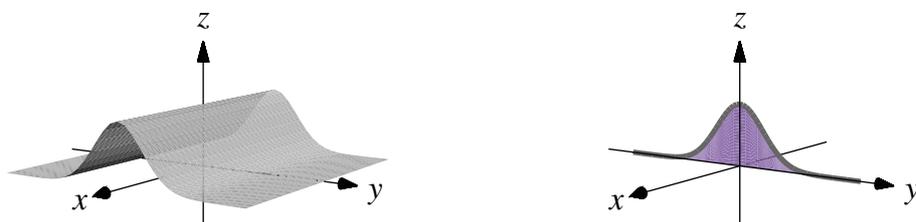
je impulsní funkcí v proměnné y a její graf je znázorněn na obr. 7.12.

(iii)

Položme

$$I_3(x, y) = e^{-\pi y^2} \delta(x) = e^{-\pi y^2} I_1(x, y). \quad (7.35)$$

Na impulsní funkci $I_3(x, y)$ je třeba pohlížet jako na součin "obyčejné" funkce dvou proměnných $g(x, y) = e^{-\pi y^2}$ a impulsní funkce $I_1(x, y)$, viz odstavce 7.6.3 a 7.6.4. V duchu textu těchto odstavců dovedeme, že graf impulsní funkce $I_3(x, y)$ dostaneme jako průnik grafu funkce $g(x, y) = e^{-\pi y^2}$, znázorněného na obr. 7.13a, s grafem impulsní funkce $I_1(x, y)$, znázorněného na obr. 7.11. Výsledný graf impulsní funkce $I_3(x, y)$ je na obr. 7.13b.

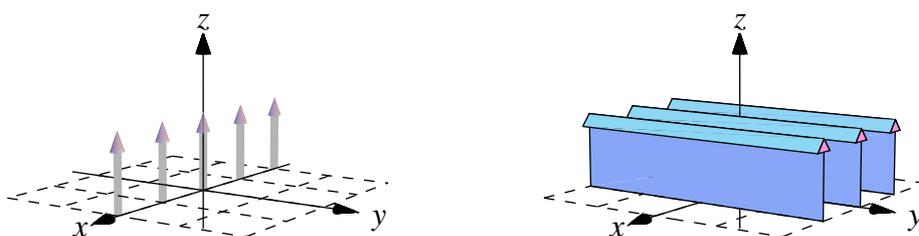


Obrázek 7.13:
(iv)

Položme

$$I_4(x, y) = i(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x - n). \quad (7.36)$$

Impulsní funkce $i(x)$ je jednorozměrná vzorkovací funkce (viz paragraf 3.6), jejíž graf je znázorněn na obr. 7.14a. Graf impulsní funkce $I_4(x, y)$ dostaneme rovnoběžným posunutím grafu $i(x)$ podél osy y , viz obr. 7.14b.



Obrázek 7.14:
(v)

Ponecháme čtenáři nakreslení grafu impulsní funkce

$$I_5(x, y) = i(y) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(y - n). \quad (7.37)$$

(vi)

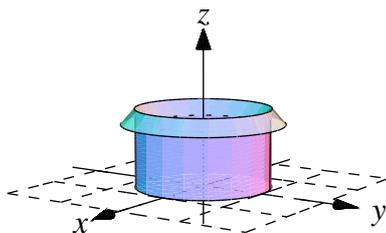
Nakonec definujme ještě impulsní funkci

$$I_6(x, y) = \delta(\sqrt{x^2 + y^2} - 1). \quad (7.38)$$

Označme $\mathcal{K} = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2; x^2 + y^2 = 1\}$ jednotkovou kružnicí v rovině x, y se středem v počátku. Pak lze impulsní funkci $I_6(x, y)$ zapsat takto :

$$I_6(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{pro } (x, y) \notin \mathcal{K} \\ \infty & \text{pro } (x, y) \in \mathcal{K}. \end{cases}$$

Její graf je znázorněn na obr. 7.15 jako nekonečný válec nad kružnicí \mathcal{K} .



Obrázek 7.15:

7.6.6 Konvoluce funkce s δ_2 -funkcí

Mějme "obyčejnou" funkci $f(x_1, x_2)$ a δ -funkci $\delta_2(x_1, x_2)$. Pak jejich konvoluce je definována vztahem (7.19) a s využitím vztahu (7.30) dostáváme

$$(f * \delta_2)(x_1, x_2) = \iint_{R^2} f(x_1 - s_1, x_2 - s_2) \delta_2(s_1, s_2) ds_1 ds_2,$$

tj.

$$(f * \delta_2)(x_1, x_2) = f(x_1, x_2),$$

neboli

$$f * \delta_2 = f. \quad (7.39)$$

Poslední vztah ukazuje, že δ_2 je jednotkou pro "konvoluční násobení".

7.7 Fourierova \mathcal{F}_2 -transformace δ -funkcí

Nejprve zavedeme pomocné funkce, které nám usnadní další zápisy.

Označme $J_1(x)$ funkci identicky rovnou 1 na R , tj.

$$J_1(x) = 1 \quad \text{pro všechna } x \in R. \quad (7.40)$$

Dále označme $J_2(x_1, x_2)$ funkci identicky rovnou 1 na R^2 , tj.

$$J_2(x_1, x_2) = 1 \quad \text{pro všechna } (x_1, x_2) \in R^2. \quad (7.41)$$

7.7.1 \mathcal{F}_2 -obraz impulsní funkce δ_2

Vzhledem k tomu, že

$$\delta_2(t_1, t_2) = \delta(t_1)\delta(t_2),$$

viz vztah (7.28), použijeme k výpočtu \mathcal{F}_2 -obrazu δ_2 -funkce Větu 7.1 a dále fakt, že

$$\mathcal{F}[\delta(t)] = 1,$$

viz vztah (4.22), který vzhledem k našemu novému značení má tvar

$$\mathcal{F}[\delta(t)] = J_1(\nu).$$

Nyní můžeme psát:

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_2[\delta_2(t_1, t_2)] &= \mathcal{F}_2[\delta(t_1)\delta(t_2)] = \mathcal{F}[\delta(t_1)] \cdot \mathcal{F}[\delta(t_2)] = \\ &= J_1(\nu_1) \cdot J_1(\nu_2) = J_2(\nu_1, \nu_2),\end{aligned}$$

tj.

$$\mathcal{F}_2[\delta_2] = J_2, \quad (7.42)$$

tedy obrazem impulsní funkce $\delta_2(t_1, t_2)$ je konstantní funkce $J_2(\nu_1, \nu_2)$.

7.7.2 \mathcal{F}_2 -obraz konstantní funkce $J_2(t_1, t_2)$

Protože podle (7.42) je

$$\mathcal{F}_2[\delta_2(t_1, t_2)] = J_2(\nu_1, \nu_2)$$

a pro funkci $J_2(x_1, x_2)$ platí

$$J_2(-x_1, -x_2) = J_2(x_1, x_2),$$

Pak podle Věty 7.2 dostáváme

$$\mathcal{F}_2[J_2(t_1, t_2)] = \delta_2(\nu_1, \nu_2). \quad (7.43)$$

7.7.3 \mathcal{F}_2 -obrazy impulsních funkcí I_1 až I_6

Nyní postupně stanovíme \mathcal{F}_2 -obrazy impulsních funkcí $I_1(t_1, t_2)$ až $I_6(t_1, t_2)$, definovaných v odstavci 7.6.5. Podstatné bude použití Věty 7.1.

(i)

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_2[I_1(t_1, t_2)] &= \mathcal{F}_2[\delta(t_1)] = \mathcal{F}_2[\delta(t_1) \cdot J_1(t_2)] = \mathcal{F}[\delta(t_1)] \cdot \mathcal{F}[J_1(t_2)] = \\ &= J_1(\nu_1) \cdot \delta(\nu_2) = 1 \cdot \delta(\nu_2) = I_2(\nu_1, \nu_2).\end{aligned}$$

Tedy dostáváme

$$\mathcal{F}_2[I_1(t_1, t_2)] = I_2(\nu_1, \nu_2). \quad (7.44)$$

(ii)

Jako cvičení dokažte, že

$$\mathcal{F}_2[I_2(t_1, t_2)] = I_1(\nu_1, \nu_2). \quad (7.45)$$

(iii)

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_2[I_3(t_1, t_2)] &= \mathcal{F}_2[e^{-\pi t_2^2} \delta(t_1)] = \mathcal{F}[e^{-\pi t_2^2}] \cdot \mathcal{F}[\delta(t_1)] = \\ &= e^{-\pi \nu_2^2} J_1(\nu_1) = 1 \cdot e^{-\pi \nu_2^2}.\end{aligned}$$

Máme tedy

$$\mathcal{F}_2[I_3(t_1, t_2)] = e^{-\pi \nu_2^2} J_2(\nu_1, \nu_2). \quad (7.46)$$

(iv)

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_2[I_4(t_1, t_2)] &= \mathcal{F}_2[i(t_1) \cdot J_1(t_2)] = \mathcal{F}[i(t_1)] \cdot \delta(\nu_2) = \\ &= \left(\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(\nu_1 - n) \right) \cdot \delta(\nu_2) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(\nu_1 - n) \delta(\nu_2) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta_2(\nu_1 - n, \nu_2),\end{aligned}$$

kde jsme použili pro $\mathcal{F}[i(t_1)]$ vztah (4.47), ve kterém jsme volili $\Delta = 1$.

Dostáváme tedy

$$\mathcal{F}_2[I_4(t_1, t_2)] = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta_2(\nu_1 - n, \nu_2). \quad (7.47)$$

(v)

Jako cvičení dokažte, že

$$\mathcal{F}_2[I_5(t_1, t_2)] = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta_2(\nu_1, \nu_2 - n). \quad (7.48)$$

(vi)

Výpočet \mathcal{F}_2 -obrazu impulsní funkce $I_6(t_1, t_2)$ je mnohem komplikovanější a my zde uvedeme pouze výsledek.

$$\mathcal{F}_2[I_6(t_1, t_2)] = \mathcal{J}_0(r), \quad (7.49)$$

kde $r = \sqrt{\nu_1^2 + \nu_2^2}$ a $\mathcal{J}_0(r)$ je **Besselova funkce** definovaná řadou

$$\mathcal{J}_0(r) = \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n \frac{r^{2n}}{2^{2n}(n!)^2}. \quad (7.50)$$

7.8 Fourierova \mathcal{F}_2 -transformace periodických funkcí

Začněme důležitým příkladem. Stanovme \mathcal{F}_2 -obraz funkce

$$s(t_1, t_2) = e^{-\pi t_1^2} \cos 2\pi \nu_0 t_2,$$

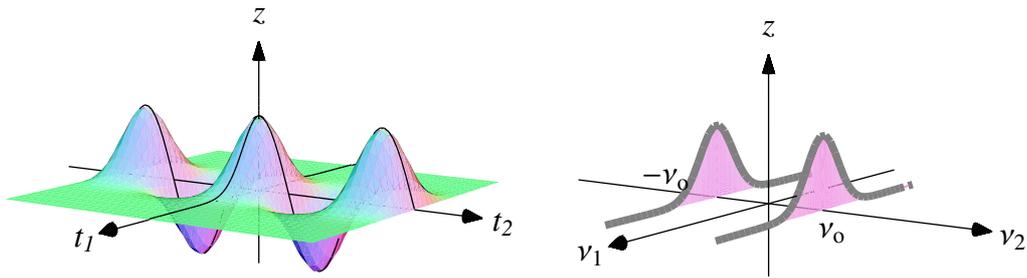
kde ν_0 je kladná konstanta. Tato funkce je periodická v proměnné t_2 , takže její Fourierův obraz bude impulsní funkcí v jedné proměnné. Podle Věty 7.1 dostáváme

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_2[e^{-\pi t_1^2} \cos 2\pi \nu_0 t_2] &= \mathcal{F}[e^{-\pi t_1^2}] \cdot \mathcal{F}[\cos 2\pi \nu_0 t_2] = \\ &= e^{-\pi \nu_1^2} \frac{1}{2} [\delta(\nu_2 - \nu_0) + \delta(\nu_2 + \nu_0)].\end{aligned}$$

Celkově tedy

$$\mathcal{F}_2[e^{-\pi t_1^2} \cos 2\pi \nu_0 t_2] = \frac{1}{2} e^{-\pi \nu_1^2} [\delta(\nu_2 - \nu_0) + \delta(\nu_2 + \nu_0)]. \quad (7.51)$$

Graficky je tento výsledek znázorněn na obr. 7.16a,b. Na obr. 7.16a je znázorněn graf signálu $s(t_1, t_2)$ a na obr. 7.16b graf jeho \mathcal{F}_2 -obrazu.



Obrázek 7.16:

7.8.1 Periodické funkce dvou proměnných

Funkce dvou proměnných $f(\mathbf{t}) = f(t_1, t_2)$ je periodická, existuje-li dvojice čísel $\mathbf{p} = (p_1, p_2)$ tj. **vektorová perioda** tak, že platí

$$f(\mathbf{t} + \mathbf{p}) = f(\mathbf{t})$$

pro všechna $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^2$, neboli ve složkách

$$f(t_1 + p_1, t_2 + p_2) = f(t_1, t_2). \quad (7.52)$$

Příklad 7.5 Ukažme, že funkce

$$f(t_1, t_2) = e^{2\pi i \cdot \cdot} = e^{2\pi i (a_1 t_1 + a_2 t_2)}$$

má vektorovou periodu

$$\mathbf{p} = \left(\frac{1}{a_1}, \frac{1}{a_2} \right)$$

a určíme její Fourierův \mathcal{F}_2 -obraz.

Řešení: Snadno spočítáme, že

$$\begin{aligned} f\left(t_1 + \frac{1}{a_1}, t_2 + \frac{1}{a_2}\right) &= e^{2\pi i \cdot (+)} = e^{2\pi i \cdot} \cdot e^{2\pi i \cdot} = \\ &= f(t_1, t_2) e^{4\pi i} = f(t_1, t_2). \end{aligned}$$

Z Věty o translaci, tj. vztahu (7.16) a pomocí vztahu (7.43) dostáváme

$$\mathcal{F}_2[e^{2\pi i \cdot \cdot} \cdot 1] = \mathcal{F}_2[e^{2\pi i \cdot \cdot} \cdot J_2(t_1, t_2)] = \delta_2(\nu_1 - a_1, \nu_2 - a_2).$$

Tedy **obraz periodické funkce s vektorovou periodou**

$$\mathbf{p} = \left(\frac{1}{a_1}, \frac{1}{a_2} \right)$$

je δ_2 -funkce posunutá do bodu (a_1, a_2) . ■

7.9 Sinová a kosinová \mathcal{F}_2 -transformace

Jestliže v Definicí 7.1 použijeme k vyjádření komplexní exponenciály Eulerovy vzorce, tj.

$$\begin{aligned} e^{-2\pi i(\nu_1 t_1 + \nu_2 t_2)} &= e^{-2\pi i \nu_1 t_1} e^{-2\pi i \nu_2 t_2} = (\cos 2\pi \nu_1 t_1 - i \sin 2\pi \nu_1 t_1) \cdot (\cos 2\pi \nu_2 t_2 - i \sin 2\pi \nu_2 t_2) = \\ &= \cos 2\pi \nu_1 t_1 \cos 2\pi \nu_2 t_2 - \sin 2\pi \nu_1 t_1 \sin 2\pi \nu_2 t_2 - i [\cos 2\pi \nu_1 t_1 \sin 2\pi \nu_2 t_2 + \cos 2\pi \nu_2 t_2 \sin 2\pi \nu_1 t_1], \end{aligned}$$

pak po dosazení do definičního vztahu (7.2) dostáváme ihned, že

$$S(\nu_1, \nu_2) = \mathcal{F}_2[s(t_1, t_2)] = \mathcal{F}_2^{cc}[s(t_1, t_2)] - \mathcal{F}_2^{ss}[s(t_1, t_2)] - i [\mathcal{F}_2^{cs}[s(t_1, t_2)] + \mathcal{F}_2^{sc}[s(t_1, t_2)]], \quad (7.53)$$

kde

$$\mathcal{F}_2^{cc}[s(t_1, t_2)] = \iint_{R^2} s(t_1, t_2) \cos 2\pi \nu_1 t_1 \cos 2\pi \nu_2 t_2 dt_1 dt_2; \quad (7.54)$$

$$\mathcal{F}_2^{ss}[s(t_1, t_2)] = \iint_{R^2} s(t_1, t_2) \sin 2\pi \nu_1 t_1 \sin 2\pi \nu_2 t_2 dt_1 dt_2; \quad (7.55)$$

$$\mathcal{F}_2^{cs}[s(t_1, t_2)] = \iint_{R^2} s(t_1, t_2) \cos 2\pi \nu_1 t_1 \sin 2\pi \nu_2 t_2 dt_1 dt_2; \quad (7.56)$$

$$\mathcal{F}_2^{sc}[s(t_1, t_2)] = \iint_{R^2} s(t_1, t_2) \sin 2\pi \nu_1 t_1 \cos 2\pi \nu_2 t_2 dt_1 dt_2. \quad (7.57)$$

Vyjádření \mathcal{F}_2 -transformace ve tvaru (7.53) je někdy výhodné při explicitním výpočtu reálné a imaginární části spektra $S(\nu_1, \nu_2)$, zejména, je-li signál $s(t_1, t_2)$ reálnou funkcí.

7.10 Poznámka k aplikaci dvojrozměrné FT

Užitečnost dvojrozměrné FT lze nejlépe demonstrovat na NMR spektroskopii. V tomto paragrafu budeme proto předpokládat, že je čtenář seznámen se základními principy metody NMR, viz například [7].

Nechť je $g(\omega)$ NMR spektrem dané látky, tj. funkce $g(\omega)$ udává pravděpodobnost, že dané jádro má **Larmorovu frekvenci** v intervalu $(\omega, \omega + \Delta\omega)$ s pravděpodobností $g(\omega)\Delta\omega$. (Tedy funkce $g(\omega)$ je hustota pravděpodobnosti spojité náhodné veličiny.)

Je známo, že funkci $g(\omega)$ lze získat inverzní FT, provedenou na **signál spinového echa** $f(t_2)$, tj.

$$g(\omega) = \mathcal{F}^{-1}[f(t_2)] = \int_{-\infty}^{\infty} f(t_2) e^{2\pi i \omega t_2} dt_2.$$

Provedeme-li řadu experimentů s různým časovým odstupem t_1 budících impulsů, získáme **dvojrozměrný** signál $s(t_1, t_2)$, například lze cvičně volit

$$s(t_1, t_2) = f(t_2) e^{-|t_1|}.$$

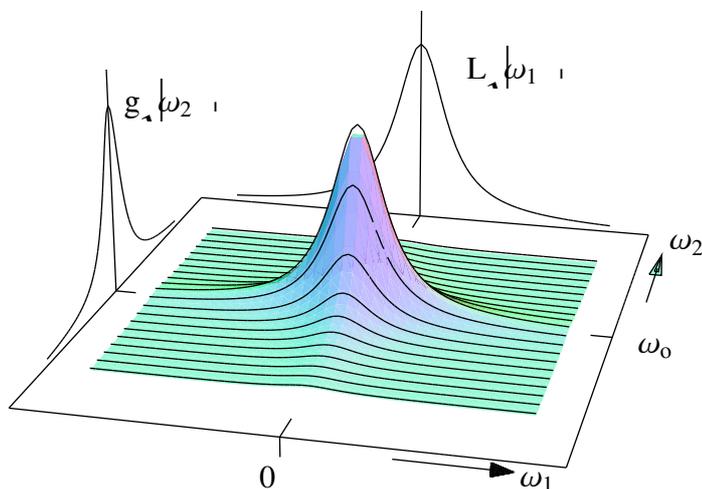
Po provedení dvojrozměrné inverzní FT dostaneme

$$G(\omega_1, \omega_2) = \iint_{R^2} s(t_1, t_2) e^{2\pi i(\omega_1 t_1 + \omega_2 t_2)} dt_1 dt_2,$$

tedy dvojrozměrné NMR spektrum. V našem případě je

$$G(\omega_1, \omega_2) = g(\omega_2) \frac{2}{1 + 4\pi^2\omega_1^2} = g(\omega_2)L(\omega_1).$$

Situace je znázorněna na obr. 7.17.



Obrázek 7.17:

Je vidět (a zkušenosti ukazují), že dvojrozměrné spektrum může obsahovat informace, které jsou v běžném jednorozměrném spektru současně nedostupné. Je vypracována řada metod využívajících dvojrozměrnou FT. Zájemce odkazujeme například na práci [7].

Kapitola 8

Fourierovy řady

8.1 Úvod

Připomeňme nejprve pojem **Taylorovy řady** funkce f se středem v bodě x_0 . Tam jsme za jistých podmínek odvodily vyjádření funkce f ve tvaru mocninné řady

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (x - x_0)^n, \quad (8.1)$$

kde $a_n = \frac{f^n(x_0)}{n!}$, $n = 0, 1, 2, \dots$. K takovému vyjádření je třeba, aby funkce f měla derivace všech řádů, což je velmi silný požadavek a v řadě technických, fyzikálních a chemických aplikací není splněn. V těchto aplikacích se často setkáváme s funkcemi, které nejenže nemají všechny derivace na daném intervalu, ale nejsou tam dokonce ani spojité. V dalším budeme pracovat s funkcemi **po částech spojitými**.

Definice 8.1 Říkáme, že funkce f , definovaná na intervalu $\langle a, b \rangle$, je na tomto intervalu **po částech spojitá**, jestliže existuje konečný počet bodů nespojitosti funkce f na intervalu $\langle a, b \rangle$, přičemž požadujeme, aby v bodech nespojitosti měla funkce f obě jednostranné limity konečné.

Poznámka 8.1 Taylorův rozvoj funkce f v řadu 8.1 lze chápat jako vyjádření funkce f pomocí **nekonečné lineární kombinace** funkcí

$$u_0(x) = (x - x_0)^0, \quad u_1(x) = x - x_0, \dots, \quad u_n(x) = (x - x_0)^n, \dots$$

s koeficienty a_0, a_1, a_2, \dots . Funkce $\{u_i(x)\}_{i=0}^{\infty}$ lze snadno chápat jako „bázi“, v níž vyjadřujeme danou funkci f .

Zvolíme-li jinou „bázi“, dostaneme jiné rozvoje funkce f .

Ukazuje se, že pro mnohé aplikace je vhodné volit jako „bázi“ goniometrické funkce, viz následující odstavec.

8.2 Pojem Fourierovy řady funkce f

Zvolme funkce

$$u_n(x) = \cos \frac{n\pi x}{l}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (8.2)$$

$$v_n(x) = \sin \frac{n\pi x}{l}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (8.3)$$

kde $l > 0$ je zvolené pevné číslo.

Poznámka 8.2 a) Funkce $u_0(x) = \cos 0 = 1$ je konstantní funkce.

b) Všechny funkce v (8.2) a (8.3) kromě $u_0(x)$ jsou periodické funkce s **primitivní periodou $2l$**

Mějme funkci f definovanou na intervalu $\langle 0, 2l \rangle$, resp. f je periodická funkce s periodou $2l$ definovaná na $(-\infty, +\infty)$.

Vyjádříme funkci f jako nekonečnou lineární kombinaci funkcí (8.2) a (8.3).

Dostaneme

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \cos \frac{k\pi x}{l} + \sum_{k=1}^{\infty} b_k \sin \frac{k\pi x}{l}.$$

Je zvykem psát pravou stranu ve tvaru

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} \left(a_k \cos \frac{k\pi x}{l} + b_k \sin \frac{k\pi x}{l} \right). \quad (8.4)$$

Vztah (8.4) je třeba zatím chápat jako symbolický. Zatím nevíme, zda řada vpravo konverguje a v případě, že konverguje, zda se její součet rovná funkční hodnotě $f(x)$. Dříve než odpovíme na tyto otázky, uvedeme několik pomocných tvrzení.

8.3 Pomocné vztahy

I. Je-li funkce $f(x)$ periodická s periodou T , je

$$\int_a^{a+T} f(x) dx = \int_0^T f(x) dx \quad (8.5)$$

pro libovolné reálné číslo a .

Důkaz: Platí

$$\int_a^{a+T} f(x) dx = \int_a^T f(x) dx + \int_T^{a+T} f(x) dx = \int_a^T f(x) dx + \int_0^a f(x) dx = \int_0^T f(x) dx,$$

protože

$$\int_T^{a+T} f(x) dx = \int_T^{a+T} f(y) dy = \int_0^a f(y) dy.$$

■

II. Platí:

$$a) \int_0^{2l} \cos \frac{n\pi x}{l} \cos \frac{m\pi x}{l} dx = \begin{cases} 0 & \text{pro } n \neq m \\ l & \text{pro } n = m > 0 \\ 2l & \text{pro } n = m = 0 \end{cases}$$

$$b) \int_0^{2l} \sin \frac{n\pi x}{l} \sin \frac{m\pi x}{l} dx = \begin{cases} 0 & \text{pro } n \neq m \\ 0 & \text{pro } n = m = 0 \\ l & \text{pro } n = m > 0 \end{cases}$$

$$c) \int_0^{2l} \cos \frac{n\pi x}{l} \sin \frac{m\pi x}{l} dx = 0 \text{ pro libovolné } m, n .$$

Důkazy těchto vztahů lze provést pomocí vzorců

$$\begin{aligned} \sin mx \sin nx &= \frac{1}{2}[\cos(m-n)x - \cos(m+n)x] , \\ \cos mx \cos nx &= \frac{1}{2}[\cos(m-n)x + \cos(m+n)x] , \\ \sin mx \cos nx &= \frac{1}{2}[\sin(m-n)x + \sin(m+n)x] . \end{aligned}$$

8.4 Výpočet Fourierových koeficientů funkce f

Vraťme se ke vztahu (8.4). Nyní ukažme, jak musíme volit koeficienty a_k, b_k , aby součet řady byl roven funkční hodnotě $f(x)$. Předpokládejme, že pro každé $x \in \langle 0, 2l \rangle$ řada v (8.4) konverguje a její součet je roven $f(x)$. Vynásobme tuto rovnost funkcí $\cos \frac{n\pi x}{l}$. Dostaneme

$$f(x) \cos \frac{n\pi x}{l} = \frac{a_0}{2} \cos \frac{n\pi x}{l} + \sum_{k=1}^{\infty} \left(a_k \cos \frac{k\pi x}{l} \cos \frac{n\pi x}{l} + b_k \sin \frac{k\pi x}{l} \cos \frac{n\pi x}{l} \right) .$$

Za předpokladu, že lze řadu vpravo integrovat člen po členu, dostaneme

$$\begin{aligned} \int_0^{2l} f(x) \cos \frac{n\pi x}{l} dx &= \int_0^{2l} \frac{a_0}{2} \cos \frac{n\pi x}{l} dx + \sum_{k=1}^{\infty} \left(\int_0^{2l} a_k \cos \frac{k\pi x}{l} \cos \frac{n\pi x}{l} dx + \right. \\ &\quad \left. + \int_0^{2l} b_k \sin \frac{k\pi x}{l} \cos \frac{n\pi x}{l} dx \right) = \int_0^{2l} a_n \cos^2 \frac{n\pi x}{l} dx = a_n l , \end{aligned}$$

neboť ostatní integrály jsou rovny nule, viz odstavec 8.3.

Speciálně pro $n = 0$ máme

$$\int_0^{2l} f(x) dx = \int_0^{2l} \frac{a_0}{2} dx = a_0 l .$$

Z předchozího vyplývají vztahy pro a_n :

$$a_n = \frac{1}{l} \int_0^{2l} f(x) \cos \frac{n\pi x}{l} dx , \quad n = 0, 1, 2, \dots . \quad (8.6)$$

Vzorce pro b_n odvodíme podobně. Vztah (8.4) vynásobíme funkcí $\sin \frac{n\pi x}{l}$. Integrujeme člen po členu a obdržíme

$$b_n = \frac{1}{l} \int_0^{2l} f(x) \sin \frac{n\pi x}{l} dx, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (8.7)$$

Definice 8.2 Koeficienty $a_0, a_1, a_2, \dots, b_1, b_2, \dots$, určené vzorci (8.6), (8.7) nazýváme **Fourierovými koeficienty funkce f** .

Řadu

$$\frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos \frac{n\pi x}{l} + b_n \sin \frac{n\pi x}{l} \right)$$

nazýváme **Fourierovou řadou funkce $f(x)$** a zapisujeme takto:

$$f(x) \sim \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos \frac{n\pi x}{l} + b_n \sin \frac{n\pi x}{l} \right). \quad (8.8)$$

Tímto zápisem (vlnovkou) chceme zdůraznit, že jde o formální přiřazení řady vpravo k funkci $f(x)$ a že součet řady nemusí být roven $f(x)$. V tomto smyslu je třeba chápat i vztah (8.4).

Podmínky za nichž je Fourierova řada funkce f konvergentní, dává následující věta.

Věta 8.1 Nechť je funkce f po částech spojitá na intervalu $\langle 0, 2l \rangle$ a má zde po částech spojitou derivaci. Pak platí:

a) Je-li $f(x)$ spojitá v bodě $x_0 \in \langle 0, 2l \rangle$, je

$$\frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos \frac{n\pi x_0}{l} + b_n \sin \frac{n\pi x_0}{l} \right) = f(x_0), \quad (8.9)$$

b) Je-li x_0 bod nespojitosti funkce f , pak

$$\frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos \frac{n\pi x_0}{l} + b_n \sin \frac{n\pi x_0}{l} \right) = \frac{1}{2} (f(x_{0+}) + f(x_{0-})), \quad (8.10)$$

kde $f(x_{0\pm}) = \lim_{x \rightarrow x_{0\pm}} f(x)$.

Poznámka 8.3 Máme-li funkci f definovanou na $\langle 0, 2l \rangle$, pro níž $f(0) = f(2l)$, můžeme ji periodicky rozšířit na celý interval $(-\infty, +\infty)$. Označme toto rozšíření $\tilde{f}(x)$. Pak

$$\begin{aligned} \tilde{f}(x) &= f(x) \text{ pro } x \in \langle 0, 2l \rangle, \\ \tilde{f}(x + 2l) &= \tilde{f}(x) \text{ pro každé } x \in \mathcal{R}. \end{aligned}$$

Větu 8.1 lze formulovat i takto:

Věta 8.2 Nechť je funkce f , definovaná na $(-\infty, +\infty)$ periodická s periodou $2l$ a na intervalu $\langle a, a + 2l \rangle$ je po částech spojitá a má z zde po částech spojitou derivaci. Pak platí:

a) Je-li f spojitá v bodě x_0 , pak platí (8.9).

b) Je-li x_0 bod nespojitosti funkce f , pak platí (8.10).

V tomto případě můžeme pro výpočet Fourierových koeficientů ve vztazích (8.6) a (8.7), je-li to výhodné použít integrační meze od $-l$ do l , tj. využít vztahu 8.5):

$$a_n = \frac{1}{l} \int_{-l}^l f(x) \cos \frac{n\pi x}{l} dx, \quad b_n = \frac{1}{l} \int_{-l}^l f(x) \sin \frac{n\pi x}{l} dx.$$

8.5 Příklady

Příklad 8.1 Nalezněme Fourierovu řadu funkce $f(x) = x$ pro interval $\langle 0, 2\pi \rangle$, ($l = \pi$).

Řešení:

$$a_0 = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} x \, dx = 2\pi$$

$$a_n = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} x \cos nx \, dx = \frac{1}{\pi} \left[\frac{x}{n} \sin nx \right]_0^{2\pi} - \frac{1}{n\pi} \int_0^{2\pi} \sin nx \, dx = 0, \text{ pro } n = 1, 2, \dots$$

$$b_n = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} x \sin nx \, dx = \frac{1}{\pi} \left[-\frac{x}{n} \cos nx \right]_0^{2\pi} + \frac{1}{n\pi} \int_0^{2\pi} \cos nx \, dx = -\frac{2}{n}, \text{ pro } n = 1, 2, \dots$$

Fourierova řada funkce $f(x) = x$ pro $x \in \langle 0, 2\pi \rangle$ je

$$f(x) \sim \pi - \frac{2}{1} \sin x - \frac{2}{2} \sin 2x - \frac{2}{3} \sin 3x - \dots$$

tj.

$$x \sim \pi - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \sin nx, \quad x \in \langle 0, 2\pi \rangle.$$

Příklad 8.2 Nalezněme Fourierovu řadu funkce $f(x) = \operatorname{sgn} x$ pro $x \in \langle -\pi, \pi \rangle$, tj.

$$f(x) = \begin{cases} -1 & \text{pro } x \in \langle -\pi, 0 \rangle \\ 0 & \text{pro } x = 0 \\ 1 & \text{pro } x \in (0, \pi) \end{cases}.$$

Řešení:

$$a_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \operatorname{sgn} x \cos nx \, dx = \frac{1}{\pi} \left[\int_{-\pi}^0 -\cos nx \, dx + \int_0^{\pi} \cos nx \, dx \right] = 0, \text{ pro } n = 0, 1, 2, \dots$$

$$b_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \operatorname{sgn} x \sin nx \, dx = \frac{1}{\pi} \left[\int_{-\pi}^0 -\sin nx \, dx + \int_0^{\pi} \sin nx \, dx \right] = \begin{cases} \frac{4}{n\pi} & \text{pro } n \text{ liché} \\ 0 & \text{pro } n \text{ sudé} \end{cases}.$$

Na intervalu $\langle -\pi, \pi \rangle$ je tedy

$$\operatorname{sgn} x \sim \frac{4}{\pi} \left(\frac{\sin x}{1} + \frac{\sin 3x}{3} + \frac{\sin 5x}{5} + \dots \right),$$

tj.

$$\operatorname{sgn} x \sim \frac{4}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\sin(2k+1)x}{2k+1}. \quad (8.11)$$

Nyní si ukážeme, jak lze pomocí věty 8.1 stanovit součet konkrétní číselné řady. Funkce $\operatorname{sgn} x$ na intervalu $\langle -\pi, \pi \rangle$ splňuje předpoklady věty 8.1, tudíž pro $x \in (0, \pi)$ platí rovnost

$$1 = \frac{4}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\sin(2k+1)x}{2k+1}. \quad (8.12)$$

Speciálně pro $x = \frac{\pi}{2}$ je $\sin(2k+1)\frac{\pi}{2} = (-1)^k$. Dosazením do (8.12) a úpravě dostáváme, že

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{2k+1} = \frac{\pi}{4},$$

tj.

$$1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{5} - \frac{1}{7} + \cdots = \frac{\pi}{4}.$$

Cvičení 8.1 Ověřte vztah (8.10) pro funkci $\operatorname{sgn} x$, $x \in \langle -\pi, \pi \rangle$ v bodě $x = 0$.

(Návod: Platí $\lim_{x \rightarrow 0^+} \operatorname{sgn} x = 1$, $\lim_{x \rightarrow 0^-} \operatorname{sgn} x = -1$).

8.6 Fourierova řada sudé a liché funkce

Připomeňme následující fakt: Je-li $h(x)$ **lichá** funkce, pak

$$\int_{-a}^a h(x) dx = 0.$$

Je-li $h(x)$ **sudá** funkce, pak

$$\int_{-a}^a h(x) dx = 2 \int_0^a h(x) dx.$$

Snadným důsledkem těchto vztahů je následující věta.

Věta 8.3 Nechť je $f(x)$ **sudá** funkce na intervalu $\langle -l, l \rangle$. Pak pro její Fourierovy koeficienty platí:

$$\begin{aligned} b_n &= 0, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \\ a_n &= \frac{2}{l} \int_0^l f(x) \cos \frac{n\pi x}{l} dx, \quad n = 0, 1, 2, \dots. \end{aligned}$$

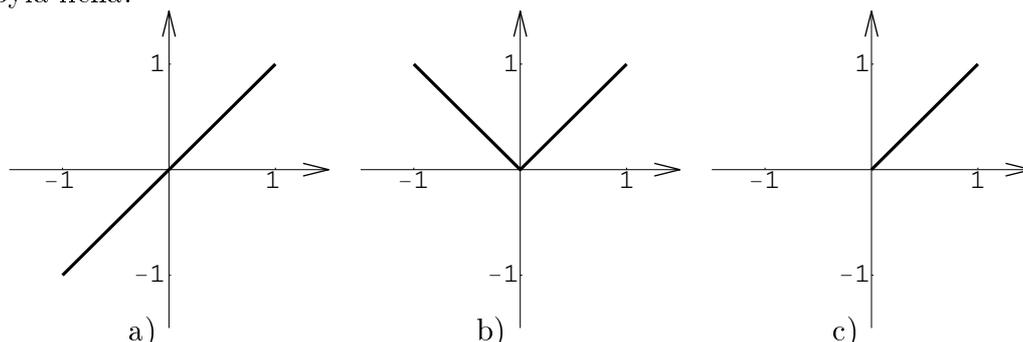
Je-li $f(x)$ **lichá** funkce na intervalu $\langle -l, l \rangle$, pak pro její Fourierovy koeficienty platí:

$$\begin{aligned} a_n &= 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \\ b_n &= \frac{2}{l} \int_0^l f(x) \sin \frac{n\pi x}{l} dx, \quad n = 1, 2, 3, \dots. \end{aligned}$$

Důkaz této věty lze ponechat čtenáři. Je třeba si uvědomit, že funkce $\cos \frac{n\pi x}{l}$ jsou sudé funkce a $\sin \frac{n\pi x}{l}$ jsou liché funkce. Součin dvou sudých (lichých) funkcí je funkce sudá a součin liché funkce se sudou je lichá funkce.

Poznámka 8.4 Tudíž podle věty 8.3 Fourierova řada **sudé** funkce obsahuje pouze kosinové členy a nazývá se **kosinová Fourierova řada**. Podobně **lichá** funkce má **sinovou Fourierovu řadu**.

Poznámka 8.5 Máme-li funkci $f(x)$ zadanou na intervalu $(0, l)$, můžeme ji rozšířit (dodefinovat) na interval $\langle -l, l \rangle$ buď tak, aby výsledná funkce byla sudá, anebo tak, aby výsledná funkce byla lichá.



Obrázek 8.1:

Příklad 8.3 Mějme funkci $f(x) = x$ pro $x \in \langle 0, 1 \rangle$. Její graf je na obr. 8.1a. Označme $f_2(x)$ její sudé rozšíření na interval $\langle -1, 1 \rangle$. Graf $f_2(x)$ je nakreslen na obr. 8.1b. Zřejmě

$$f_2(x) = |x| \text{ pro } x \in \langle -1, 1 \rangle .$$

Nechť $f_1(x)$ je liché rozšíření funkce f na interval $\langle -1, 1 \rangle$. Graf $f_1(x)$ je na obr. 8.1c. Zřejmě

$$f_1(x) = x \text{ pro } x \in \langle -1, 1 \rangle .$$

Cvičení 8.2 Určete Fourierovy řady funkcí $f_1(x)$ a $f_2(x)$ na intervalu $\langle -1, 1 \rangle$.

Poznámka 8.6 Rčením „rozvedme funkci $f(x)$ definovanou na intervalu $\langle 0, l \rangle$ v sinovou Fourierovu řadu“ rozumíme to, že funkci $f(x)$ nejprve rozšíříme „lichým způsobem“ na interval $\langle -l, l \rangle$ a pak spočítáme její Fourierovy koeficienty pomocí vztahů z věty 8.3. Obdobná poznámka platí, chceme-li funkci $f(x)$, definovanou na $\langle 0, l \rangle$, rozvést v kosinovou řadu.

Příklad 8.4 Rozvedme funkci $f(x) = x^2$ na intervalu $\langle 0, 2\pi \rangle$ v kosinovou Fourierovu řadu.

Řešení: Máme $l = 2\pi$ a použijeme postup popsany v Poznámce 8.6. Pak $b_n = 0$, $n = 1, 2, \dots$ a

$$a_0 = \frac{2}{2\pi} \int_0^{2\pi} x^2 dx = \frac{8\pi^2}{3}$$

$$a_n = \frac{2}{2\pi} \int_0^{2\pi} x^2 \cos \frac{nx}{2} dx = (-1)^n \frac{16}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots .$$

Pro $x \in \langle 0, 2\pi \rangle$ máme

$$x^2 = \frac{4\pi^2}{3} + 16 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n^2} \cos \frac{nx}{2}. \quad (8.13)$$

Vztah (8.13) použijeme k určení součtu dvou číselných řad.

1. Dosadíme do (8.13) $x = 0$ a po úpravě dostaneme:

$$\frac{\pi^2}{12} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n^2} = 1 - \frac{1}{2^2} + \frac{1}{3^2} - \frac{1}{4^2} + \dots$$

2. Dosadíme-li do (8.13) $x = 2\pi$, je $\cos \frac{n2\pi}{2} = \cos n\pi = (-1)^n$ a po úpravě dostáváme

$$\frac{\pi^2}{6} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = 1 + \frac{1}{2^2} + \frac{1}{3^2} + \frac{1}{4^2} + \dots$$

8.7 Fázový tvar Fourierovy řady

V některých aplikacích je výhodné vyjádřit n -tý člen Fourierovy řady (8.4) ve tvaru, který obsahuje pouze jednu goniometrickou funkci, tj. buď ve tvaru

$$a_n \cos \frac{n\pi x}{l} + b_n \sin \frac{n\pi x}{l} = h_n \cos \left(\frac{n\pi x}{l} + \varphi_n \right), \quad (8.14)$$

nebo ve tvaru

$$a_n \cos \frac{n\pi x}{l} + b_n \sin \frac{n\pi x}{l} = g_n \sin \left(\frac{n\pi x}{l} + \psi_n \right), \quad (8.15)$$

Veličiny φ_n , resp. ψ_n se nazývají **fázemi** a veličiny h_n , resp. g_n **amplitudami**. Ukážeme nyní, jak lze tyto veličiny vypočítat pomocí Fourierových koeficientů a_n , b_n .

Nejprve se budeme věnovat vztahu (8.15). Pravou stranu tohoto vztahu upravíme pomocí součtového vzorce (2.4) a dostaneme pro $n \geq 1$:

$$g_n \sin \left(\frac{n\pi x}{l} + \psi_n \right) = g_n \sin \frac{n\pi x}{l} \cos \psi_n + g_n \cos \frac{n\pi x}{l} \sin \psi_n.$$

Porovnáním koeficientů u funkcí

$$\cos \frac{n\pi x}{l} \quad \text{a} \quad \sin \frac{n\pi x}{l},$$

na levé a pravé straně vztahu (8.15) dostaneme rovnice

$$a_n = g_n \sin \psi_n, \quad (8.16)$$

$$b_n = g_n \cos \psi_n, \quad n = 1, 2, \dots \quad (8.17)$$

Po umocnění obou rovnic a jejich sečtení pak po snadné úpravě dostaneme

$$g_n = \sqrt{a_n^2 + b_n^2}. \quad (8.18)$$

Po dosažení takto vypočítané amplitudy g_n do rovnic (8.16) a (8.17) dostaneme rovnice pro určení fáze ψ_n :

$$\sin \psi_n = \frac{a_n}{g_n} \quad \wedge \quad \cos \psi_n = \frac{b_n}{g_n} . \quad (8.19)$$

Těmito rovnicemi je fáze ψ_n pro všechna $n \geq 1$ jednoznačně určena. Nakonec zvolíme ještě g_0 a ψ_0 tak, aby

$$g_0 \sin \psi_0 = \frac{a_0}{2} . \quad (8.20)$$

Cvičení 8.3 Odvoďte z rovnice (8.14) následující vztahy pro $n \geq 1$:

$$h_n = \sqrt{a_n^2 + b_n^2} \quad (8.21)$$

a

$$\sin \varphi_n = \frac{-b_n}{\sqrt{a_n^2 + b_n^2}} \quad \wedge \quad \cos \varphi_n = \frac{a_n}{\sqrt{a_n^2 + b_n^2}} . \quad (8.22)$$

Pro $n = 0$ volíme h_0 a φ_0 tak, aby

$$h_0 \cos \varphi_0 = \frac{a_0}{2} .$$

Fázový tvar Fourierovy řady (8.4) má pak tvar

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} g_n \sin \left(\frac{n\pi x}{l} + \psi_n \right) , \quad (8.23)$$

resp.

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} h_n \cos \left(\frac{n\pi x}{l} + \varphi_n \right) , \quad (8.24)$$

kde veličiny $g_n, \psi_n, h_n, \varphi_n$ jsou určeny pomocí vztahů (8.18) - (8.22).

Příklad 8.5 Napišme sinový i kosinový fázový tvar Fourierovy řady funkce $\operatorname{sgn} x$ z příkladu 8.2

Řešení: Víme, že

$$\operatorname{sgn} x = \frac{4}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\sin(2k+1)x}{2k+1} ,$$

tzn.,že

$$\begin{aligned} b_{2k+1} &= \frac{4}{\pi} \frac{1}{2k+1} , & b_{2k+2} &= 0 , & k &= 0, 1, \dots , \\ a_n &= 0 , & n &= 0, 1, 2, \dots . \end{aligned} \quad (8.25)$$

Pak

$$h_{2k+1} = \sqrt{b_{2k+1}^2} = \frac{4}{\pi} \frac{1}{2k+1} , \quad h_{2k+2} = 0 .$$

Z rovnic

$$\cos \varphi_{2k+1} = 0 \quad \wedge \quad \sin \varphi_{2k+1} = -1$$

dostáváme

$$\varphi_{2k+1} = \frac{3\pi}{2},$$

takže hledaný kosinový tvar Fourierovy řady je

$$\operatorname{sgn} x = \frac{4}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\cos((2k+1)x + \frac{3\pi}{2})}{2k+1}.$$

Obdobně

$$g_{2k+1} = \frac{4}{\pi} \frac{1}{2k+1}, \quad g_{2k+2} = 0,$$

a z rovnic

$$\cos \psi_{2k+1} = 1 \quad \wedge \quad \sin \psi_{2k+1} = 0$$

plyne, že

$$\psi_{2k+1} = 0.$$

Tento výsledek jsme nemuseli počítat pomocí vztahů (8.18) a (8.19), neboť Fourierova řada pro funkci $\operatorname{sgn} x$, $x \in \langle -\pi, \pi \rangle$ má již fázový tvar (8.23).

Příklad 8.6 Převedme Fourierovu řadu

$$f(x) = \frac{1}{\pi} + \frac{1}{2} \sin x - \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\cos 2kx}{4k^2 - 1}$$

na fázový tvar (8.23) a (8.24). Ukažte sami, že se jedná o Fourierovu řadu funkce

$$f(x) = \begin{cases} \sin x & \text{pro } x \in \langle 0, \pi \rangle \\ 0 & \text{pro } x \in \langle \pi, 2\pi \rangle. \end{cases}$$

Řešení: Máme

$$a_0 = \frac{2}{\pi}, \quad a_{2k} = -\frac{2}{\pi} \frac{1}{4k^2 - 1}, \quad a_{2k+1} = 0, \quad k = 1, 2, \dots$$

$$b_1 = \frac{1}{2}, \quad b_n = 0 \quad \text{pro } n = 2, 3, \dots$$

Pak

$$g_1 = \sqrt{a_1^2 + b_1^2} = \sqrt{0 + \frac{1}{4}} = \frac{1}{2}$$

a

$$\sin \psi_1 = 0 \quad \wedge \quad \cos \psi_1 = 1 \quad \Rightarrow \quad \psi_1 = 0.$$

Dále

$$g_{2k} = \sqrt{a_{2k}^2 + b_{2k}^2} = \frac{2}{\pi} \frac{1}{4k^2 - 1}, \quad g_{2k+1} = 0, \quad k = 1, 2, \dots$$

a

$$\sin \psi_{2k} = -1 \quad \wedge \quad \cos \psi_{2k} = 0 \quad \Rightarrow \quad \psi_{2k} = \frac{3\pi}{2}, \quad k = 1, 2, \dots$$

Nakonec v rovnosti

$$g_0 \cdot \sin \psi_0 = \frac{1}{\pi}$$

volíme

$$g_0 = -\frac{2}{\pi} \quad \text{a} \quad \psi_0 = \frac{7\pi}{6}.$$

Fázový tvar (sinový) naší řady má tvar

$$f(x) = -\frac{2}{\pi} \sin \frac{7\pi}{6} + \frac{1}{2} \sin x + \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin(2kx + \frac{3\pi}{2})}{4k^2 - 1}.$$

Sami spočítejte, že kosinový fázový tvar naší řady má tvar

$$f(x) = \frac{2}{\pi} \cos \frac{\pi}{6} + \frac{1}{2} \cos(x - \frac{\pi}{2}) - \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\cos 2kx}{4k^2 - 1}.$$

8.8 Komplexní tvar Fourierovy řady

Jestliže ve Fourierově řadě (8.4) vyjádříme goniometrické funkce pomocí Eulerových vzorců (2.16) dostáváme

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \frac{e^{i \frac{n\pi x}{l}} + e^{-i \frac{n\pi x}{l}}}{2} + b_n \frac{e^{i \frac{n\pi x}{l}} - e^{-i \frac{n\pi x}{l}}}{2i} \right) = \\ &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{a_n - i b_n}{2} e^{i \frac{n\pi x}{l}} + \frac{a_n + i b_n}{2} e^{-i \frac{n\pi x}{l}} \right). \end{aligned}$$

Položme

$$c_0 = \frac{a_0}{2}, \quad c_n = \frac{a_n - i b_n}{2} \quad \text{a} \quad c_{-n} = \frac{a_n + i b_n}{2}, \quad \text{pro } n = 1, 2, \dots \quad (8.26)$$

Dosadíme-li do (8.26) za Fourierovy koeficienty jejich vyjádření z (8.6) a (8.7) dostáváme

$$c_n = \frac{a_n - i b_n}{2} = \frac{1}{2l} \left[\int_0^{2l} f(x) \cos \frac{n\pi x}{l} dx - i \int_0^{2l} f(x) \sin \frac{n\pi x}{l} dx \right].$$

Po úpravě pak máme

$$c_n = \frac{1}{2l} \int_0^{2l} f(x) e^{-i \frac{n\pi x}{l}} dx \quad \text{pro } n = 0, 1, 2, \dots$$

a

$$c_{-n} = \frac{1}{2l} \int_0^{2l} f(x) e^{i \frac{n\pi x}{l}} dx \quad \text{pro } n = 1, 2, \dots$$

Dostáváme Fourierovu řadu v tzv. **komplexním tvaru**

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{i \frac{n\pi x}{l}} \quad (8.27)$$

a pro koeficienty platí

$$c_n = \frac{1}{2l} \int_0^{2l} f(x) e^{-i \frac{n\pi x}{l}} dx \quad \text{pro všechna } n \in \mathcal{Z}. \quad (8.28)$$

8.9 Parsevalova rovnost

Vyjděme opět ze vztahu (8.4), tj.

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos \frac{n\pi x}{l} + b_n \sin \frac{n\pi x}{l} \right)$$

a obě strany této rovnosti vynásobme funkcí $\frac{1}{l}f(x)$. Dostaneme

$$\frac{1}{l}f^2(x) = \frac{a_0}{2} \frac{1}{l}f(x) + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \frac{1}{l}f(x) \cos \frac{n\pi x}{l} + b_n \frac{1}{l}f(x) \sin \frac{n\pi x}{l} \right)$$

Nyní integrujeme obě strany této rovnice na intervalu $\langle 0, 2l \rangle$, kde na pravé straně integrujeme řadu člen po členu a s využitím vztahů (8.6) a (8.7) dostaneme

$$\frac{1}{l} \int_0^{2l} f^2(x) dx = \frac{a_0^2}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n^2 + b_n^2). \quad (8.29)$$

Vztah (8.29) se nazývá **Parsevalova rovnost**. Tato rovnost nám říká, že řada na pravé straně je konvergentní a jejím součtem je číslo na levé straně.

Parsevalova rovnost nám umožňuje získat součty mnoha nekonečných řad, jak uvidíme z následujících příkladů.

Příklad 8.7 Jak víme z příkladu (8.2) je pro $x \in \langle -\pi, \pi \rangle$

$$\operatorname{sgn} x = \frac{4}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\sin(2k+1)x}{2k+1}.$$

Protože

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} (\operatorname{sgn} x)^2 dx = \frac{1}{\pi} \cdot 2\pi = 2,$$

použitím vztahu (8.29) dostáváme, že

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k+1)^2} = \frac{\pi^2}{8}.$$

Cvičení 8.4 Necht' je $f(x) = x$ pro $x \in (0, 2\pi)$, $f(0) = f(2\pi) = \pi$. Uka'zte, že pro $x \in (0, 2\pi)$ je

$$x = \pi - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin nx}{n}.$$

Pomocí tohoto výsledku a Parsevalovy rovnosti (8.29) uka'zte, že

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{6}.$$

8.10 Fourierova metoda pro rovnici difúze

V tomto paragrafu ukážeme použití Fourierových řad při řešení parciálních diferenciálních rovnic (PDR).

8.10.1 Úvod

V tomto oddíle se naučíme analyticky řešit PDR tvaru

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \quad (8.30)$$

pro $z \in \langle 0, l \rangle$ a $t \in \langle 0, T \rangle$ (kde T je libovolně velké). Řešení $u(z, t)$ rovnice (8.30) hledáme na obdélníku

$$G = \langle 0, l \rangle \times \langle 0, T \rangle \quad (8.31)$$

a požadujeme, aby splňovalo počáteční podmínku

$$u(z, 0) = g(z), \quad z \in \langle 0, l \rangle, \quad (8.32)$$

a okrajovou podmínku

$$u(0, t) = h_1(t), \quad u(l, t) = h_2(t), \quad t \in \langle 0, T \rangle. \quad (8.33)$$

Poznámka 8.7 Protože rovnice (8.30) neobsahuje zdrojový člen $f(u)$, v reaktoru neprobíhá žádná reakce. Probíhají v něm pouze difúzní děje, proto nazýváme rovnici (8.30) **rovnici difúze**, resp. **rovnici pro vedení tepla**.

Definice 8.3 Necht' funkce $g(x)$ je spojitá na intervalu $\langle 0, l \rangle$ a $h_1(t)$, $h_2(t)$ jsou spojitě na $\langle 0, T \rangle$ a splňují tzv. **podmínky kompatibility**

$$h_1(0) = g(0), \quad h_2(0) = g(l). \quad (8.34)$$

Řešením smíšené úlohy (8.30) - (8.33) rozumíme každou funkci $u(z, t)$, která je spojitá na G , a má uvnitř G spojitě parciální derivace $\frac{\partial u}{\partial t}$, $\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}$ a splňuje uvnitř G rovnici (8.30) a na hranici G podmínky (8.32) a (8.33).

Poznámka 8.8 Smíšená úloha má řešení i za obecnějších podmínek, např. pro po částech spojitou počáteční podmínkou $g(z)$. Avšak tyto problémy jsou z matematického hlediska velmi obtížné a nelze se zde s nimi zabývat.

Příklad 8.8 Funkce

$$u(z, t) = e^{-4t} \sin z$$

je řešením smíšené úlohy

$$\frac{\partial u}{\partial t} = 4 \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \quad \text{na } G = \langle 0, \pi \rangle \times \langle 0, T \rangle$$

$$u(z, 0) = \sin z, \quad z \in \langle 0, \pi \rangle$$

$$u(0, t) = u(\pi, t) = 0, \quad t \in \langle 0, T \rangle.$$

Skutečně po vyčíslení derivací

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -4e^{-4t} \sin z, \quad \frac{\partial u}{\partial z} = e^{-4t} \cos z, \quad \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = -e^{-4t} \sin z$$

a dosazení zjistíme, že PDR je splněna. Všechny derivace jsou spojité dokonce v celé rovině z, t a funkce $u(z, t) = e^{-4t} \sin z$ splňuje jak počáteční, tak okrajové podmínky jak se lze lehce přesvědčit.

8.10.2 Věta o maximu pro rovnici difúze

Věta 8.4 Budiž $u(z, t)$ řešením úlohy (8.30) - (8.33), viz Definice 8.3.

Označme

$$\max_{\substack{(z, t) \in \mathcal{H}(G) \\ t \neq T}} u(z, t) = M, \quad \min_{\substack{(z, t) \in \mathcal{H}(G) \\ t \neq T}} u(z, t) = m,$$

kde jsme symbolem $\mathcal{H}(G)$ označili **hranici** množiny G .

Pak platí

$$m \leq u(z, t) \leq M \tag{8.35}$$

pro všechny body $(z, t) \in G$.

Fyzikálně chemický význam věty o maximu je tento: Jestliže v trubkovém reaktoru nepřesáhne ani počáteční koncentrace látky zadaná funkcí $g(z)$, ani koncentrace na koncích reaktorů zadaná funkcemi $h_1(t)$, $h_2(t)$ hodnotu M , pak ani uvnitř reaktoru nepřesáhne koncentrace hodnotu M . Analogicky, díváme-li se na (8.30) jako na rovnici vedení tepla, maximální teploty je dosaženo buď v čase $t = 0$ nebo na okraji. Podobná úvaha platí i pro minimum m .

Pomocí věty 8.4 lze dokázat následující větu:

Věta 8.5 (Věta o jednoznačnosti.) Smíšená úloha (8.30) - (8.33) má nejvýše jedno řešení ve smyslu definice 8.3.

Důkaz: Předpokládejme, že úloha (8.30) - (8.33) má dvě různá řešení $u_1(z, t)$ a $u_2(z, t)$. Pak funkce

$$u(z, t) = u_1(z, t) - u_2(z, t) \tag{8.36}$$

splňuje na G rovnici (8.30). (Přesvědčíme se snadno dosazením.) Dále funkce $u(z, t)$ splňuje **nulovou** počáteční podmínku, neboť

$$u(z, 0) = u_1(z, 0) - u_2(z, 0) = g(z) - g(z) = 0$$

a podobně i **nulové** okrajové podmínky.

Podle věty 8.4 je $M = m = 0$ a tudíž platí

$$0 \leq u(z, t) \leq 0 \quad \text{na } G ,$$

tj.

$$u(z, t) \equiv 0 ,$$

což podle (8.36) znamená, že $u_1(z, t) \equiv u_2(z, t)$ na G . Tento spor s předpokladem dokazuje větu 8.5.

Zcela analogicky se pomocí věty 8.1 dokáže **věta o spojitě závislosti řešení úlohy (8.30) - (8.33) na počátečních a okrajových podmínkách.**

Věta 8.6 Nechť funkce $u_1(z, t)$ je řešením smíšené úlohy (8.30) - (8.33) a funkce $u_2(z, t)$ je řešením smíšené úlohy s počáteční podmínkou

$$u_2(z, 0) = \tilde{g}(z) , \quad z \in \langle 0, l \rangle$$

$$u(0, t) = \tilde{h}_1(t) , \quad u(l, t) = \tilde{h}_2(t) , \quad t \in \langle 0, T \rangle .$$

Nechť na intervalu $\langle 0, l \rangle$ platí

$$|g(z) - \tilde{g}(z)| \leq \varepsilon$$

a na intervalu $\langle 0, T \rangle$ platí

$$|h_1(t) - \tilde{h}_1(t)| \leq \varepsilon , \quad |h_2(t) - \tilde{h}_2(t)| \leq \varepsilon .$$

Pak všude v G platí

$$|u_1(z, t) - u_2(z, t)| \leq \varepsilon .$$

Tzn. liší-li se „málo“ počáteční a okrajové podmínky, liší se „málo“ i příslušná řešení.

8.10.3 Fourierova metoda

Hledejme řešení smíšené úlohy

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \tag{8.37}$$

$$u(z, 0) = g(z) , \quad z \in \langle 0, l \rangle \tag{8.38}$$

$$u(0, t) = u(l, t) = 0 , \quad t \in \langle 0, \infty \rangle . \tag{8.39}$$

Okrajové podmínky tohoto tvaru nazýváme **homogenní okrajové podmínky.**

Poznámka 8.9 Je-li i $g(z) = 0$ pro všechna $z \in \langle 0, l \rangle$, pak jediným řešením smíšené úlohy (8.37) - (8.39) je nulové řešení $u(z, t) \equiv 0$ pro $(z, t) \in \langle 0, l \rangle \times \langle 0, \infty \rangle$. Proto v dalším předpokládáme **nenulovou počáteční podmínku.**

Fourierovu metodu lze použít pouze pro úlohy s homogenními okrajovými podmínkami.

Hlavní myšlenka Fourierovy metody spočívá v tom, že řešení $u(z, t)$ hledáme ve tvaru

$$u(z, t) = F(z) \cdot H(t), \quad (8.40)$$

tj. funkci u rozložíme na součin dvou funkcí, z nichž každá je funkcí jen jedné proměnné. Neznámé funkce $F(z)$ a $H(t)$ se snažíme určit dosazením do (8.37). Po vyčíslení derivací

$$\frac{\partial u}{\partial t} = F(z) \cdot H'(t) \quad \text{a} \quad \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = F''(z) \cdot H(t)$$

a po dosazení do (8.37) dostáváme rovnici

$$F(z)H'(t) = DF''(z)H(t).$$

Po úpravě získáme

$$\frac{H'(t)}{D \cdot H(t)} = \frac{F''(z)}{F(z)}. \quad (8.41)$$

V této rovnici závisí funkce na levé straně pouze na proměnné t a funkce na pravé straně pouze na proměnné z . Má-li rovnost (8.41) platit pro všechny hodnoty (z, t) z příslušného oboru, musí být funkce na obou stranách konstantní, tj.

$$\frac{H'(t)}{D \cdot H(t)} = k, \quad \frac{F''(z)}{F(z)} = k, \quad k \in \mathcal{R}. \quad (8.42)$$

nebo-li

$$H'(t) - k DH(t) = 0, \quad (8.43)$$

$$F''(z) - k F(z) = 0. \quad (8.44)$$

Tím jsme řešení PDR (8.37) převedli na řešení dvou obyčejných diferenciálních rovnic (8.43) a (8.44).

Řešme nejprve rovnici (8.43). Je to lineární rovnice s konstantními koeficienty a její obecné řešení má tvar

$$H_k(t) = C_k e^{kDt}, \quad (8.45)$$

v němž jsme vyznačili závislost řešení na zvolené konstantě k v (8.42). Konstanta C_k musí být **nenulová**, neboť pro $C_k = 0$ by $H_k(t) \equiv 0$ a tudíž i $u(z, t) \equiv 0$ a protože je počáteční podmínka $g(z)$ v (8.38) nenulová, musí být $C_k \neq 0$.

Z (8.45) pak plyne, že

$$H_k(t) \neq 0 \quad \text{pro všechna } t \in \langle 0, \infty \rangle.$$

Přístupme k řešení rovnice (8.44). Z okrajových podmínek (8.39) plyne

$$u(0, t) = F(0)H(t) = 0, \quad u(l, t) = F(l)H(t) = 0,$$

a protože $H(t) \neq 0$, musí řešení rovnice (8.44) splňovat podmínky

$$F(0) = F(l) = 0. \quad (8.46)$$

Rovnice (8.44) spolu s okrajovými podmínkami (8.46) tvoří **okrajovou úlohu pro obyčejnou diferenciální rovnici**. Budeme studovat, kdy má okrajová úloha (8.44), (8.46) **reálné nenulové** řešení. To nastává právě tehdy, je-li konstanta k v (8.42), resp. (8.44) zvolena tak, že je rovna tzv. **vlastnímu číslu této okrajové úlohy**.

Určeme tato vlastní čísla.

1. **Nechť $k > 0$** . Položme $k = a^2$, $a > 0$. Pak obecné řešení rovnice (8.44) má tvar

$$F(z) = c_1 e^{az} + c_2 e^{-az}.$$

Nyní určíme konstanty c_1 , c_2 tak, aby byly splněny okrajové podmínky (8.46). To vede na soustavu dvou lineárních rovnic pro neznámé c_1 , c_2 tvaru

$$\begin{aligned} c_1 + c_2 &= 0 \\ c_1 e^{al} + c_2 e^{-al} &= 0. \end{aligned}$$

Tato soustava má pouze triviální řešení $c_1 = c_2 = 0$. To znamená, že v tomto případě nemá okrajová úloha nenulové řešení, tudíž vlastní čísla naší okrajové úlohy nemohou být kladná.

2. **Nechť $k = 0$** . Zcela analogicky se dokáže, že číslo 0 není vlastním číslem okrajové úlohy (8.44), (8.46).

3. **Budiž $k < 0$** , položme $k = -b^2$, $b > 0$.

Pak reálné obecné řešení rovnice (8.44) má tvar

$$F(z) = c_1 \cos bz + c_2 \sin bz. \quad (8.47)$$

Dosazením do okrajových podmínek (8.46) dostáváme pro c_1 a c_2 soustavu

$$\begin{aligned} c_1 &= 0 \\ c_1 \cos bl + c_2 \sin bl &= 0 \end{aligned}$$

Tato soustava má netriviální (nenulové) řešení právě tehdy, když

$$\sin bl = 0$$

což znamená, že

$$bl = n\pi, \quad n \in \mathcal{N}$$

neboli

$$b = \frac{n\pi}{l}$$

a tudíž

$$k_n = -\frac{n^2 \pi^2}{l^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (8.48)$$

jsou vlastní čísla naší okrajové úlohy.

Pro každé $n \in \mathcal{N}$ dostáváme řešení rovnice (8.37) ve tvaru

$$u_n(z, t) = e^{-\frac{n^2\pi^2 D}{l^2}t} \sin \frac{n\pi}{l}z . \quad (8.49)$$

Funkce $u_n(z, t)$ vyhovuje okrajovým podmínkám (8.39) a samozřejmě splňují rovnici (8.37). Nevyhovují však obecně počáteční podmínce (8.38).

Snadno se přesvědčíme, že každá **lineární kombinace funkcí** (8.49), tj. funkce

$$u_N(z, t) = \sum_{n=1}^N b_n u_n(z, t) = \sum_{n=1}^N b_n e^{-\frac{n^2\pi^2 D}{l^2}t} \cdot \sin \frac{n\pi}{l}z , \quad (8.50)$$

kde $b_n \in \mathcal{R}$, $n = 1, 2, \dots$ jsou koeficienty lineární kombinace, splňuje rovnici (8.37) a okrajové podmínky (8.39). Zbývá ještě zajistit splnění počáteční podmínky (8.38).

Přejdeme v (8.50) přechodem pro $N \rightarrow \infty$ od lineární kombinace k nekonečné řadě

$$u(z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n u_n(z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n e^{-\frac{n^2\pi^2 D}{l^2}t} \cdot \sin \frac{n\pi}{l}z , \quad (8.51)$$

kteřá při vhodné volbě koeficientů b_n definuje spojitou funkci proměnných z , t .

Za předpokladu, že lze řadu (8.51) derivovat člen po členu podle proměnných z , t (každý člen této řady splňuje rovnici (8.37) a okrajové podmínky (8.39)), zjistíme, že funkce $u(z, t)$ definovaná touto řadou splňuje též (8.37) a (8.39). Zbývá zajistit, aby $u(z, t)$ splňovala i počáteční podmínku (8.38), která má pro funkci $u(z, t)$ definovanou řadou (8.51) tvar

$$u(z, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin \frac{n\pi}{l}z = g(z) . \quad (8.52)$$

Z (8.52) vidíme, že počáteční podmínka (8.38) bude funkcí (8.51) splněna právě tehdy, jestliže čísla b_n , $n = 1, 2, \dots$ budou rovna Fourierovým koeficientům funkce $g(z)$ (viz oddíl 8.4):

$$b_n = \frac{2}{l} \int_0^l g(z) \sin \frac{n\pi}{l}z \, dz . \quad (8.53)$$

Tímto jsou v řadě (8.51) určeny všechny veličiny, dále se dá dokázat, že řada (8.51) je za dodatečných podmínek na funkci $g(z)$ řešením smíšené úlohy (8.37) - (8.39) ve smyslu Definice 8.1.

Poznámka 8.10 Konstrukcí řady (8.51) jsme jednak dokázali existenci řešení naší smíšené úlohy (8.37) - (8.39). Vzhledem k větě 8.3 (větě o jednoznačnosti) je toto řešení jediné. Vztah (8.51) je užitečný i v aplikacích při numerických výpočtech.

Vzorec (8.51) jsme odvodili za dosti silných předpokladů na funkci $g(z)$, $h_1(t)$, $h_2(t)$, viz Definice 8.1. Často se však např. stává, že počáteční a okrajové podmínky na sebe nenavazují (tj. nejsou splněny podmínky kompatibility), popř. počáteční podmínka $g(z)$ je pouze po částech spojitá funkce apod. viz Příklad 8.10. I takto zadané úlohy je možno řešit Fourierovou metodou, výsledkem ovšem není řešení ve smyslu Definice 8.1, nýbrž funkce, která splňuje všechny vlastnosti řešení kromě spojitosti na hranici příslušné oblasti. Takováto řešení se nazývají **zobecněná řešení**.

8.10.4 Příklady

Použití Fourierovy metody budeme ilustrovat následujícími příklady.

Příklad 8.9 Řešme smíšenou úlohu

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}, \\ u(0, t) &= u(l, t) = 0, \\ u(z, 0) &= g(z) = \begin{cases} \frac{z}{l} & \text{pro } 0 \leq z \leq \frac{l}{2} \\ \frac{l-z}{l} & \text{pro } \frac{l}{2} \leq z \leq l. \end{cases} \end{aligned}$$

Řešení: Vlastní čísla naší okrajové úlohy jsou

$$k_n = -\frac{n^2 \pi^2}{l^2}$$

a koeficienty b_n v řadě (8.51) jsou v tomto případě dány vztahem

$$b_n = \frac{2}{l} \left[\int_0^{\frac{l}{2}} \frac{z}{l} \sin \frac{n\pi}{l} z \, dz + \int_{\frac{l}{2}}^l \frac{l-z}{l} \sin \frac{n\pi}{l} z \, dz \right].$$

Výpočtem získáme

$$\begin{aligned} b_{2k} &= 0, & k &= 1, 2, \dots \\ b_{2k+1} &= \frac{4l}{\pi^2} \frac{(-1)^k}{(2k+1)^2}, & k &= 0, 1, 2, \dots \end{aligned}$$

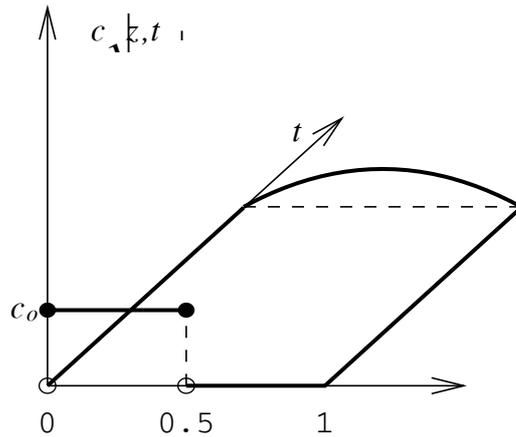
Pak řešení dané řadou (8.51) má tvar

$$u(z, t) = \frac{4l}{\pi^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)^2} e^{-\frac{(2k+1)^2 \pi^2}{l^2} t} \sin \frac{(2k+1)\pi}{l} z.$$

Příklad 8.10 Hledejme časový průběh koncentrace rozpuštěné látky ve sloupci o délce $l = 1$, jestliže na začátku děje, tj. v čase $t = 0$, je sloupec do poloviny naplněn roztokem o koncentraci $c_0 > 0$ a v druhé polovině sloupce je čisté rozpouštědlo. Na obou koncích sloupce budeme udržovat nulovou koncentraci dané látky.

Řešení: Necht z je vzdálenost od jednoho konce sloupce, D difúzní koeficient rozpuštěné látky a $c(z, t)$ koncentrace rozpuštěné látky. Pak matematickým modelem tohoto difúzního systému je následující smíšená úloha

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} &= D \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}, \\ c(0, t) &= c(1, t) = 0, \\ c(z, 0) &= g(z) = \begin{cases} c_0 & \text{pro } z \in \langle 0, \frac{1}{2} \rangle \\ 0 & \text{pro } z \in (\frac{1}{2}, 1). \end{cases} \end{aligned} \tag{8.54}$$



Obrázek 8.2:

Počáteční rozložení koncentrace podél sloupce je znázorněno na obr. 8.2

Toto je případ, kdy počáteční a okrajové podmínky nejsou kompatibilní a počáteční podmínka je nespojitá.

Řešíme-li úlohu Fourierovou metodou, dostáváme

a) Vlastní čísla jsou $k_n = n^2 \pi^2$, $n = 1, 2, \dots$

b) Fourierovy koeficienty počáteční podmínky jsou

$$b_n = 2c_0 \int_0^{\frac{1}{2}} \sin n\pi x \, dx = \frac{2c_0}{n\pi} \left(1 - \cos \frac{n\pi}{2}\right) = \begin{cases} \frac{2c_0}{n\pi} & \text{pro } n = 2k - 1 \\ \frac{4c_0}{n\pi} & \text{pro } n = 4k - 2 \\ 0 & \text{pro } n = 4k \end{cases}$$

Pak dostáváme

$$c(z, t) = \frac{2c_0}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{2k-1} e^{-(2k-1)^2 \pi^2 D t} \sin(2k-1)\pi z + \frac{4c_0}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{4k-2} e^{-(4k-2)^2 \pi^2 D t} \sin(4k-2)\pi z. \quad (8.55)$$

Pro větší hodnoty času lze toto řešení velmi dobře aproximovat funkcí

$$c(z, t) \doteq \frac{2c_0}{\pi} e^{-D\pi^2 t} \sin \pi z,$$

viz obr. 8.2.

Z tvaru řešení (8.55) je vidět, že hodnota koncentrace v bodě $z = 0$ se skokem mění z hodnoty c_0 na nulovou hodnotu, což zřejmě neodpovídá realitě. Smíšená úloha (8.54) není tedy příliš dobrým matematickým modelem našeho reálného difúzního systému.

V následujícím příkladě uvažujeme neprostupnost obou konců sloupce pro rozpuštěnou látku. V (8.54) tedy nahradíme homogenní Dirichletovy podmínky Neumanovými homogenními podmínkami.

Příklad 8.11 Řešme tedy smíšenou úlohu

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}, \quad (8.56)$$

$$\frac{\partial c(0, t)}{\partial z} = \frac{\partial c(l, t)}{\partial z} = 0, \quad (8.57)$$

$$c(z, 0) = g(z) = \begin{cases} c_0 & \text{pro } z \in \langle 0, \frac{l}{2} \rangle \\ 0 & \text{pro } z \in (\frac{l}{2}, l). \end{cases} \quad (8.58)$$

Okrajové podmínky (8.57) nyní znamenají, že oba konce sloupce jsou pro rozpuštěnou difundující látku neprostupné.

Hledejme řešení opět ve tvaru

$$c(z, t) = F(z) H(t).$$

Pro funkce $F(z)$ a $H(t)$ dostaneme rovnice (8.43) a (8.44) a funkce $H(t)$ je dána vztahem (8.45).

Okrajové podmínky pro rovnici (8.44) budou mít v tomto případě jiný tvar. Protože

$$\frac{\partial c(z, t)}{\partial z} = F'(z) H(t),$$

pak podmínky (8.57) mají tvar

$$F'(0) H(t) = F'(l) H(t) = 0$$

a protože $H(t) \neq 0$, dostáváme okrajové podmínky pro rovnici (8.44) ve tvaru

$$F'(0) = F'(l) = 0. \quad (8.59)$$

Připomeňme, že rovnice (8.44) má tvar

$$F''(z) - k F(z) = 0. \quad (8.60)$$

Nyní postupujeme analogicky jako v odstavci 8.10.3.

1. **Necht' $k > 0$.** Položme $k = a^2$, $a > 0$. Pak obecné řešení rovnice (8.44) má tvar

$$F(z) = c_1 e^{az} + c_2 e^{-az}.$$

a pak

$$F'(z) = c_1 a e^{az} - c_2 a e^{-az}.$$

a po dosazení okrajových podmínek (8.59) dostáváme pro neznámé c_1 , c_2 soustavu

$$\begin{aligned} c_1 a + c_2 a &= 0 \\ c_1 a e^{al} - c_2 a e^{-al} &= 0, \end{aligned}$$

kteřá má pouze triviální řešení $c_1 = c_2 = 0$. Tedy pro $k > 0$ nemá naše okrajová úloha nenulové řešení.

2. **Necht** $k = 0$. Pak rovnice (8.44) má tvar

$$F''(z) = 0 ,$$

a její obecné řešení je

$$F(z) = c_1 z + c_2 .$$

Pak

$$F'(z) = c_1 .$$

Dosazením do podmínek (8.59) dostáváme

$$c_1 = 0$$

a c_2 je libovolné. Tudíž v případě $k = 0$ je $F(z) = c_2$ a $H(t) = e^0 t = 1$, viz (8.45), takže

$$c(z, t) = c_2 .$$

Tato konstantní funkce vyhovuje zřejmě rovnici (8.56) a okrajovým podmínkám (8.57). Tedy číslo $k = 0$ je vlastním číslem okrajové úlohy (8.44), (8.59).

3. **Necht** $k < 0$. Položme $k = -b^2$, $b > 0$.

V tomto případě má obecné řešení rovnice (8.44) tvar (8.47), tj.

$$F(z) = c_1 \cos bz + c_2 \sin bz .$$

Pak

$$F'(z) = -c_1 b \sin bz + c_2 b \cos bz .$$

Dosazením do okrajových podmínek (8.59) dostáváme pro c_1 a c_2 soustavu

$$\begin{aligned} c_1 b &= 0 \\ -c_1 b \sin bl + c_2 b \cos bl &= 0 . \end{aligned}$$

Tato soustava má netriviální řešení, jestliže

$$\sin bl = 0 \Rightarrow b = \frac{n\pi}{l} \Rightarrow k_n = -\frac{n^2\pi^2}{l^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

viz vztah (8.48).

Vzhledem k tomu, že $k = 0$, je rovněž vlastním číslem okrajové úlohy (8.44), (8.59), jsou

$$k_n = -\frac{n^2\pi^2}{l^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (8.61)$$

vlastní čísla naší úlohy.

Pak funkce $c(z, t)$ definovaná řadou

$$c(z, t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{-\frac{n^2\pi^2 D}{l^2} t} \cos \frac{n\pi}{l} z , \quad (8.62)$$

kde čísla a_n jsou Fourierovými koeficienty počáteční podmínky $g(z)$, tj.

$$a_0 = \frac{2}{l} \int_0^l g(z) dz$$

$$a_n = \frac{2}{l} \int_0^l g(z) \cos \frac{n\pi}{l} z dz, \quad n = 1, 2, \dots$$

Speciálně pro počáteční podmínku (8.58) dostáváme

$$a_0 = \frac{2}{l} \int_0^{\frac{l}{2}} c_0 dz = \frac{c_0}{l} \cdot \frac{l}{2} = c_0,$$

$$a_n = \frac{2}{l} \int_0^{\frac{l}{2}} c_0 \cos \frac{n\pi}{l} z dz = \frac{2c_0}{n\pi} \sin \frac{n\pi}{2}, \quad n = 1, 2, \dots,$$

tj.

$$a_{2k} = 0, \quad k = 1, 2, \dots$$

$$a_{2k+1} = \frac{2c_0}{(2k+1)\pi} (-1)^k, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Pak řešení (8.62) má tvar

$$c(z, t) = \frac{c_0}{2} + \frac{2c_0}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{2k+1} e^{-\frac{(2k+1)^2 \pi^2 D}{l^2} t} \cos \frac{(2k+1)\pi}{l} z. \quad (8.63)$$

Rozeberme chování řešení (8.63) v obou krajních bodech $z = 0$ a $z = l$ v závislosti na čase. Položme

$$A_k = \frac{(2k+1)^2 \pi^2 D}{l^2}.$$

Máme tedy

$$c(0, t) = \frac{c_0}{2} + \frac{2c_0}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{2k+1} e^{-A_k t}. \quad (8.64)$$

Označíme-li

$$d(t) = \frac{2c_0}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{2k+1} e^{-A_k t}$$

můžeme psát

$$c(0, t) = \frac{c_0}{2} + d(t). \quad (8.65)$$

Je

$$d(0) = \frac{2c_0}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{2k+1} = \frac{2c_0}{\pi} \cdot \frac{\pi}{4} = \frac{c_0}{2},$$

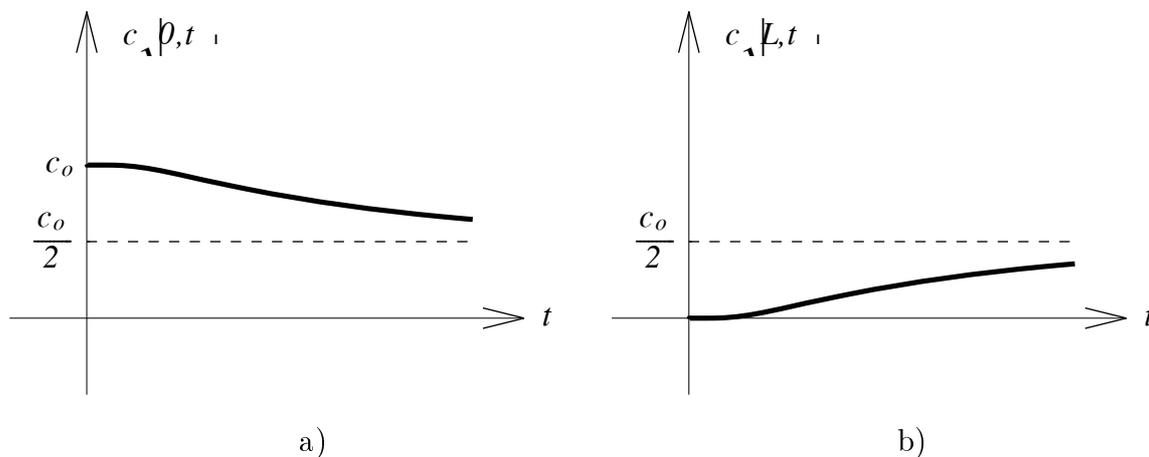
neboť $\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{2k+1} = \frac{\pi}{4}$, viz příklad 8.2, takže

$$c(0,0) = \frac{c_0}{2} + \frac{c_0}{2} = c_0.$$

Dále lze dokázat, že $\lim_{t \rightarrow \infty} d(t) = 0$ (protože $\lim_{t \rightarrow \infty} e^{(-A_k t)} = 0$), a proto

$$\lim_{t \rightarrow \infty} c(0,t) = \frac{c_0}{2}. \quad (8.66)$$

Časový průběh funkce $c(0,t)$ je znázorněn na obr. 8.3a. podobně pro $c(l,t)$ máme



Obrázek 8.3:

$$c(l,t) = \frac{c_0}{2} + \frac{2c_0}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{2k+1} e^{(-A_k t)} \cdot \cos \frac{(2k+1)\pi}{l} l,$$

tj.

$$c(l,t) = \frac{c_0}{2} - d(t) \quad (8.67)$$

a časový průběh funkce $c(l,t)$ je na obr. 8.3b.

Ještě zjistíme časový průběh koncentrace uprostřed válce, tj. průběh funkce $c(\frac{l}{2}, t)$.

Je

$$c(\frac{l}{2}, t) = \frac{c_0}{2} + \frac{2c_0}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{2k+1} e^{(-A_k t)} \cdot \cos \frac{(2k+1)\pi}{l} \frac{l}{2} = \frac{c_0}{2},$$

neboť $\cos \frac{(2k+1)\pi}{2} = 0$ pro všechna k . Tedy **uprostřed sloupce** je koncentrace stále konstantní a rovna $\frac{c_0}{2}$, což je zřejmě dobrá shoda s fyzikální realitou.

Nakonec

$$c(z,0) = \frac{c_0}{2} + \frac{2c_0}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{2k+1} \cos \frac{(2k+1)\pi}{l} z \quad (8.68)$$

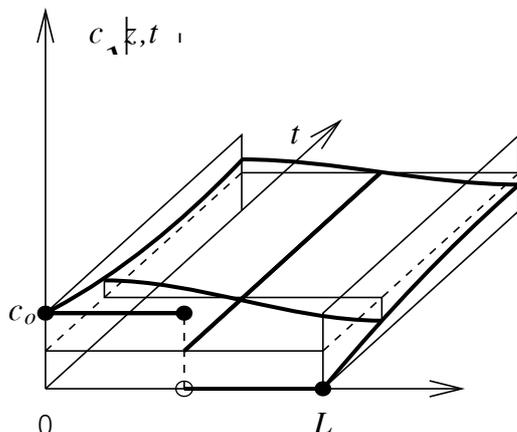
a pravá strana (8.68) je Fourierova řada funkce $g(z)$ zadané počáteční podmínkou (8.58), graf $g(z)$ je na obr. 8.2 pro $l = 1$. Podle věty 8.1 víme, že součet této Fourierovy řady se

v každém bodě z kromě bodu nespojitosti $z = \frac{l}{2}$ rovná funkční hodnotě $g(z)$. V bodě $z = \frac{l}{2}$ platí

$$c\left(\frac{l}{2}\right) = \frac{g\left(\frac{l}{2}-\right) + g\left(\frac{l}{2}+\right)}{2} = \frac{c_0 + 0}{2} = \frac{c_0}{2}.$$

Vše je znázorněno na obr. 8.4.

Funkce $u_0(z) = \frac{c_0}{2}$ je stacionárním řešením rovnice (8.56) s okrajovými podmínkami (8.57)



Obrázek 8.4:

a pro řešení $c(z, t)$ v (8.63) platí

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} c(z, t) = \frac{c_0}{2},$$

tzn., že koncentrační profily řešení (8.63) konvergují ke koncentračním profilům stacionárního řešení $u_0(z) \equiv \frac{c_0}{2}$.

To plně odpovídá fyzikální realitě našeho difúzního systému. Rozpuštěná látka postupně difunduje do celého sloupce a vyplní jej s koncentrací $\frac{c_0}{2}$.

8.10.5 Modifikovaná Fourierova metoda

V tomto odstavci ukážeme, jak lze řešit obecnější rovnici než je (8.30), a to rovnici

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + h(z, t), \quad (8.69)$$

s počáteční podmínkou

$$u(z, 0) = g(z), \quad z \in \langle 0, l \rangle \quad (8.70)$$

a homogenními okrajovými podmínkami

$$u(0, t) = u(l, t) = 0, \quad t \in \langle 0, \infty \rangle. \quad (8.71)$$

Princip modifikované Fourierovy metody spočívá v následujícím:

Řešení $u(z, t)$ rozvineme vzhledem k proměnné $z \in \langle 0, l \rangle$ v sinovou Fourierovu řadu (proměnnou t chápeme jako parametr)

$$u(z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n(t) \sin \frac{n\pi}{l} z, \quad (8.72)$$

s koeficienty $b_n(t)$ závisujícími na čase t .

Rovněž funkci $h(z, t)$ rozvineme v sinovou Fourierovu řadu vzhledem k proměnné z

$$h(z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} h_n(t) \sin \frac{n\pi}{l} z, \quad (8.73)$$

kde koeficienty $h_n(t)$ jsou určeny vztahy

$$h_n(t) = \frac{2}{l} \int_0^l h(z, t) \sin \frac{n\pi}{l} z, \quad (8.74)$$

tedy jsou známé.

Za předpokladu, že řadu (8.72) můžeme derivovat člen po členu, dostáváme

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} b'_n(t) \sin \frac{n\pi}{l} z,$$

a

$$\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = -\frac{\pi^2}{l^2} \sum_{n=1}^{\infty} n^2 b_n(t) \sin \frac{n\pi}{l} z.$$

Po dosazení těchto výrazů a řady (8.73) do rovnice (8.69) dostaneme po úpravě

$$\sum_{n=1}^{\infty} \left[b'_n(t) + \frac{n^2 \pi^2 D}{l^2} b_n(t) - h_n(t) \right] \sin \frac{n\pi}{l} z = 0. \quad (8.75)$$

Aby byla rovnost (8.75) splněna pro všechna $z \in \langle 0, l \rangle$, musí být

$$b'_n(t) + \frac{n^2 \pi^2 D}{l^2} b_n(t) = h_n(t). \quad (8.76)$$

pro všechna $n = 1, 2, \dots$.

Pro každé $n \in \mathcal{N}$ je (8.76) lineární nehomogenní diferenciální rovnicí 1. řádu, kterou umíme řešit (např. metodou variace konstanty).

Z počátečních podmínky (8.70) a ze vztahu (8.72) plyne

$$u(z, 0) = g(z) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n(0) \sin \frac{n\pi}{l} z,$$

tudíž čísla $b_n(0)$ jsou Fourierovy koeficienty funkce $g(z)$,

$$b_n(0) = \frac{2}{l} \int_0^l g(z) \sin \frac{n\pi}{l} z dz. \quad (8.77)$$

Vztah (8.77) zadává počáteční podmínky pro rovnice (8.76). Vyřešením rovnic (8.76) dostaneme koeficienty $b_n(t)$ v (8.72) a tím i řešení $u(z, t)$ úlohy (8.69) - (8.71).

Příklad 8.12 Řešme úlohu

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \sin z, \quad (8.78)$$

$$u(z, 0) = g(z) = 0, \quad z \in \langle 0, \pi \rangle, \quad (8.79)$$

$$u(0, t) = u(\pi, t) = 0, \quad t \in \langle 0, \infty \rangle. \quad (8.80)$$

Řešení: Zde funkce $h(z, t) = \sin z$ nezávisí na čase t a (8.73) má tvar

$$\sin z = \sum_{n=1}^{\infty} h_n(t) \sin nz,$$

takže

$$\begin{aligned} h_1(t) &= 1, \\ h_n(t) &= 0, \quad n = 2, 3, \dots \end{aligned}$$

Rovnice (8.76) pro $n = 1$ má tvar

$$b_1'(t) + b_1(t) = 1 \quad (8.81)$$

a pro $n \geq 2$

$$b_n'(t) + b_n(t) = 0. \quad (8.82)$$

Fourierovy koeficienty funkce $g(z) \equiv 0$ jsou všechny nulové, tj.

$$b_n(0) = 0 \quad \text{pro } n = 1, 2, \dots \quad (8.83)$$

Řešením homogenní rovnice (8.82) vzhledem k nulové počáteční podmínce (8.83) jsou pouze nulové funkce

$$b_n(t) \equiv 0 \quad \text{pro } n = 2, 3, \dots$$

Řešení nehomogenní rovnice (8.81) s počáteční podmínkou $b_1(0) = 0$ má tvar

$$b_1(t) = 1 - e^{-t}.$$

(Spočítejte sami!)

Dosadte nyní do (8.72). Tím dostáváme řešení naší úlohy ve tvaru

$$u(z, t) = (1 - e^{-t}) \sin z. \quad (8.84)$$

Cvičení 8.5 Přesvědčte se, že (8.84) splňuje (8.78) - (8.80). Nakreslete koncentrační profily pro $t = 0$, $t = 1$, $t = 2$. Ke grafu které funkce konvergují tyto koncentrační profily pro $t \rightarrow \infty$? Je tato funkce stacionárním řešením rovnice (8.78) s okrajovými podmínkami (8.80)?

8.10.6 Příklad obecných okrajových podmínek

V odstavcích (8.10.3) až (8.10.5) jsme smíšenou úlohu řešili při homogenních (tj. nulových) okrajových podmínkách. V tomto odstavci ukážeme, jak postupovat při jiných okrajových podmínkách.

Mějme tedy smíšenou úlohu

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + h(z, t), \quad (8.85)$$

$$u(z, 0) = g(z), \quad z \in \langle 0, l \rangle, \quad (8.86)$$

$$u(0, t) = h_1(t), \quad u(l, t) = h_2(t), \quad t \in \langle 0, \infty \rangle. \quad (8.87)$$

Zavedeme pomocnou funkci

$$v(z, t) = u(z, t) - h_1(t) - \frac{z}{l}(h_2(t) - h_1(t)). \quad (8.88)$$

Pak platí

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial t} - h_1'(t) - \frac{z}{l}(h_2'(t) - h_1'(t)),$$

$$\frac{\partial^2 v}{\partial z^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial z^2},$$

$$v(0, t) = h_1(t) - h_1(t) = 0,$$

$$v(l, t) = h_2(t) - h_1(t) - (h_2(t) - h_1(t)) = 0.$$

Pak je funkce $v(z, t)$ řešením smíšené úlohy

$$\frac{\partial v}{\partial t} = D \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} + h(z, t) - h_1'(t) - \frac{z}{l}(h_2'(t) - h_1'(t)), \quad (8.89)$$

$$v(z, 0) = g(z) - h_1(0) - \frac{z}{l}(h_2(0) - h_1(0)), \quad (8.90)$$

$$v(0, t) = v(l, t) = 0, \quad (8.91)$$

tedy úlohy s homogenními okrajovými podmínkami.

Úlohu (8.89) - (8.91) umíme řešit modifikovanou Fourierovou metodou z odstavce 8.10.5.

Získáme funkci $v(z, t)$ a hledané řešení $u(z, t)$ původní úlohy s obecnými okrajovými podmínkami dostaneme pomocí vztahu (8.88):

$$u(z, t) = v(z, t) + h_1(t) + \frac{z}{l}(h_2(t) - h_1(t)).$$

Tím je případ těchto okrajových podmínek rozřešen.

Dodatek A

Nástin teorie distribucí

V poznámce 3.1 v paragrafu 3.1 jsme při zavedení δ -funkce řekli, že nejde o „skutečnou funkci“, nýbrž jistý symbolický aparát, který je výhodné používat.

Na tomto místě krátce nastíníme matematickou podstatu věci.

A.1 Pojem funkcionálu

Funkcionál je zobrazení z dané množiny funkcí do množiny čísel, buď reálných nebo komplexních. Označíme-li uvažovanou množinu funkcí např. písmenem M , pak zobrazení

$$T : M \rightarrow R \quad (\text{resp. } \mathcal{C})$$

je funkcionál. Je-li množina M lineární prostor a zobrazení T je **lineární**, pak říkáme, že T je **lineární funkcionál**.

Příklad 1 S lineárními funkcionály jsme se setkali již několikrát. Například, zvolíme-li za M prostor spojitých funkcí na intervalu $\langle a, b \rangle$, tj. $M = C(\langle a, b \rangle)$, pak zobrazení $T : C(\langle a, b \rangle) \rightarrow R$ dané vztahem

$$T(\varphi) = \int_a^b \varphi(x) dx$$

(tj. každé funkci spojitě na $\langle a, b \rangle$ přiřadíme číslo $\int_a^b \varphi(x) dx$) je lineární funkcionál.

Příklad 2 Vyberme pevně $t_0 \in R$ a definujme zobrazení

$$T_{t_0}(\varphi) = \varphi(t_0), \tag{A.1}$$

tj. každé funkci $\varphi(t)$ přiřadíme číslo a to funkční hodnotu této funkce v bodě t_0 . Ukážeme, že toto zobrazení je lineární. Pro $k_1, k_2 \in R$ je

$$T_{t_0}(k_1\varphi_1 + k_2\varphi_2) = k_1\varphi_1(t_0) + k_2\varphi_2(t_0) = k_1T_{t_0}(\varphi_1) + k_2T_{t_0}(\varphi_2),$$

což ukazuje, že T_{t_0} je lineární zobrazení.

A.2 Prostor funkcí D

Označme písmenem D množinu funkcí definovaných na R , mající derivace všech řádů. Dále nechť každá funkce z D je nulová vně nějakého konečného intervalu, který závisí na dané funkci. Množina D je **lineárním prostorem**.

Definice 1 Spojitý lineární funkcionál na prostoru D nazýváme **distribucí** (nebo také **zobecněnou funkcí**).

Poznámka 1 Hodnotu distribuce T na funkci $\varphi \in D$ budeme místo $T(\varphi)$ značit symbolem

$$\langle T, \varphi \rangle.$$

A.3 Regulární distribuce

Nechť f je po částech spojitá funkce. Pomocí funkce f můžeme definovat distribuci $T_f : D \rightarrow R$ vztahem

$$\langle T_f, \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)\varphi(t)dt. \quad (\text{A.2})$$

Integrál na pravé straně vždy konverguje, neboť každá funkce $\varphi \in D$ je rovna nule vně nějakého konečného intervalu. Ověření linearitu lze ponechat čtenáři jako snadné cvičení.

Pomocí vztahu (A.2) můžeme každou funkci $f(t)$ v jistém smyslu ztotožnit s distribucí T_f .

A.4 Singulární distribuce

Přirozeně vzniká otázka, zda lze každou distribuci vyjádřit pomocí nějaké funkce vztahem (A.2). Odpověď je záporná. Existují distribuce, které nelze takto vyjádřit. Takové distribuce nazýváme **singulární distribuce**. Příkladem singulární distribuce je distribuce z příkladu 2. Vraťme se k ní podrobněji. Jedná se o Diracovu distribuci. Tedy **Diracova distribuce δ** je definována vztahem

$$\langle \delta, \varphi \rangle = \varphi(0) \quad (\text{A.3})$$

a **Diracova distribuce v bodě t_0** je definována vztahem

$$\langle \delta_{t_0}, \varphi \rangle = \varphi(t_0) \quad (\text{A.4})$$

V příkladu 2 jsme ukázali, že se jedná o lineární funkcionál na prostoru D . Diracovu distribuci nelze vyjádřit ve tvaru (A.2). Je tedy singulární distribucí.

Poznámka 2 (Důležitá.) S regulárními distribucemi se z mnoha důvodů pracuje lépe než se singulárními.

Např. pomocí grafu funkce f , která definuje distribuci T_f , můžeme graficky znázornovat vlastnosti regulární distribuce T_f . Proto je v aplikacích snaha singulární distribuce vyjádřit

vztahem (A.2) pomocí nějaké „funkce“. Takto vznikla δ -funkce definovaná vztahy (3.1) a (3.2) v kapitole 3.

δ -funkce $\delta(t)$, resp. δ -funkce $\delta(t - t_0)$ odpovídá Diracově distribuci δ , resp. Diracově distribuci δ_{t_0} , tj. pro $\varphi \in D$ je

$$\langle \delta, \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(t) \varphi(t) dt = \varphi(0),$$

resp.

$$\langle \delta_{t_0}, \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(t - t_0) \varphi(t) dt = \varphi(t_0).$$

Toto jsou vztahy (3.11), (3.12) z kapitoly 3.

Poznámka 3 Podívejme se na tento problém ještě z jiné strany. Mějme posloupnost funkcí $f_n(t)$, $n=1,2,\dots$, mající limitu $f(t)$, která je po částech spojitá, tj.

$$f(t) = \lim_{n \rightarrow \infty} f_n(t). \quad (\text{A.5})$$

Pak každá funkce $f_n(t)$ určuje distribuci T_{f_n} a je přirozené očekávat, že pro distribuce bude platit

$$\lim_{n \rightarrow \infty} T_{f_n} = T_f. \quad (\text{A.6})$$

Zde musíme říci, co to znamená, když posloupnost distribucí $\{T_n\}_{n=1}^{\infty}$ konverguje k distribuci T , tj. $\lim_{n \rightarrow \infty} T_n = T$:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} T_n = T \iff \text{pro každou } \varphi \in \mathbf{D} \text{ platí } \lim_{n \rightarrow \infty} \langle T_n, \varphi \rangle = \langle T, \varphi \rangle. \quad (\text{A.7})$$

(Na pravé straně v (A.7) se jedná už o posloupnost čísel.)

Vraťme se ke vztahu (A.6). Tento vztah skutečně platí. Ve vztahu (A.6) je každá distribuce T_{f_n} regulární a i jejich limita je regulární distribuce. Může však nastat případ, kdy limita posloupnosti regulárních distribucí je singulární distribuce.

Vezměme posloupnost funkcí $\delta_n(t)$ definovaných vztahem (3.3) v kapitole 3. Každá z těchto funkcí určuje regulární distribuci T_{δ_n} :

$$\langle T_{\delta_n}, \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \delta_n(t) \varphi(t) dt = \int_0^{\frac{1}{n}} n \varphi(t) dt. \quad (\text{A.8})$$

Pak (viz. 2.vlastnost z paragrafu (3.3) kapitoly 3) je pro každou $\varphi \in D$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \langle T_{\delta_n}, \varphi \rangle = \varphi(0) = \langle \delta, \varphi \rangle, \quad (\text{A.9})$$

tudíž

$$\lim_{n \rightarrow \infty} T_{\delta_n} = \delta.$$

Tedy limitou regulárních distribucí T_{δ_n} je singulární Diracova distribuce δ . Vztah (A.9) lze napsat ve tvaru

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \langle T_{\delta_n}, \varphi \rangle = \langle \lim_{n \rightarrow \infty} T_{\delta_n}, \varphi \rangle = \langle \delta, \varphi \rangle. \quad (\text{A.10})$$

Volíme-li ve vztahu (A.10) $\varphi \in D$ tak, že $\varphi(t) = 1$ na $\langle 0, 1 \rangle$, pak vztah (A.10) je matematicky korektním správným zápisem vztahu (3.2) z kapitoly 3, který jak jsme tam řekli není z matematického hlediska správný.

Poznámka 4 Budiž T libovolná distribuce a $f(t)$ nějaká funkce. Součin funkce $f(t)$ s distribucí T definujeme následovně:

Součinem $f(t) \cdot T$ rozumíme distribuci, která každé funkci $\varphi \in D$ přiřazuje číslo pomocí vztahu

$$\langle f(t) \cdot T, \varphi(t) \rangle = \langle T, f(t)\varphi(t) \rangle. \quad (\text{A.11})$$

Speciálně, je-li $T = \delta_{t_0}$, pak má (A.11) tvar

$$\langle f(t) \cdot \delta_{t_0}, \varphi(t) \rangle = \langle \delta_{t_0}, f(t)\varphi(t) \rangle = f(t_0)\varphi(t_0) = f(t_0)\langle \delta_{t_0}, \varphi \rangle,$$

z čehož dostáváme, že

$$f(t) \cdot \delta_{t_0} = f(t_0) \cdot \delta_{t_0}.$$

Srovnej se vztahem (3.15) v kapitole 3.

A.5 Vícerozměrné distribuce

Distribuce definované v Definici 1 lze nazvat „jednorozměrné distribuce“ resp. distribuce jedné proměnné, neboť prostor funkcí D , se skládá z funkcí jedné proměnné.

Nyní situace v paragrafech A.1 - A.4 zobecníme na případ funkcí n proměnných, přičemž pro nás bude důležitý případ $n = 2$.

Definice 2 Prostor $D = D(\mathcal{R}^n)$ je množina funkcí n -proměnných, definovaných na \mathcal{R}^n , mající na \mathcal{R}^n spojitě parciální derivace všech řádů. Dále pro každou funkci z D požadujeme, aby byla rovna nule vně nějaké omezené množiny $K \subset \mathcal{R}^n$. O takové funkci říkáme, že je to funkce s **omezeným nosičem**

Poznámka 5 Množina $K \subset \mathcal{R}^n$ není, přirozeně, jedna a táž pro všechny funkce $\varphi \in D$.

Definice 3 Spojitý lineární funkcional na prostoru $D = D(\mathcal{R}^n)$, nazýváme n -rozměrnou distribucí, resp. distribucí n -proměnných, nebo také **zobecněnou funkcí** n -proměnných.

Pro n -rozměrné distribuce platí vše, co bylo řečeno v případě jednorozměrných distribucí v paragrafech A.3 a A.4. Proto jen stručně a omezíme se na případ $n = 2$.

A.5.1 Regulární distribuce dvou proměnných

Nechť $f(x_1, x_2)$ je funkce definovaná na \mathcal{R}^2 , která je lokálně integrovatelná. Pomocí funkce f definujeme regulární distribuci

$$T_f : D(\mathcal{R}^2) \rightarrow \mathcal{R}$$

vztahem

$$\langle T_f, \varphi \rangle = \iint_{\mathcal{R}^2} f(x_1, x_2)\varphi(x_1, x_2) dx_1 dx_2 \quad \text{pro } \varphi \in D(\mathcal{R}^2). \quad (\text{A.12})$$

Nevlastní integrál na pravé straně vždy konverguje, neboť funkce φ má omezený nosič.

A.5.2 Singulární distribuce dvou proměnných

Pro $\varphi \in D(\mathcal{R}^2)$ definujeme **Diracovu distribuci** δ_2 (resp. $\delta_2(t_1, t_2)$) vztahem

$$\langle \delta_2, \varphi \rangle = \varphi(0, 0) \quad (\text{A.13})$$

a Diracova distribuce v bodě (t_0, τ_0) je definována vztahem

$$\langle \delta_2(t_0, \tau_0), \varphi \rangle = \varphi(t_0, \tau_0) . \quad (\text{A.14})$$

Linearita funkcionálu definovaného vztahem (A.13) se ověří snadno. Pro $k_1, k_2 \in \mathcal{R}$ je

$$\langle \delta_2, k_1\varphi_1 + k_2\varphi_2 \rangle = k_1\varphi_1(0, 0) + k_2\varphi_2(0, 0) = k_1\langle \delta_2, \varphi_1 \rangle + k_2\langle \delta_2, \varphi_2 \rangle ,$$

což jsme měli dokázat.

Dále platí, viz paragraf 7.6.2,

$$\langle \delta_2, \varphi \rangle = \iint_{\mathcal{R}^2} \delta_2(t_1, t_2)\varphi(t_1, t_2) dt_1 dt_2 = \varphi(0, 0) .$$

Cvičení 1 Přepište poznámku 4 pro dvourozměrné distribuce. Speciálně ukažte, že

$$f(t, \tau) \cdot \delta_2(t_0, \tau_0) = f(t_0, \tau_0) \cdot \delta_2(t_0, \tau_0) . \quad (\text{A.15})$$

Dodatek B

Rychlá FT (FFT)

B.1 Úvod

V kapitole 5 jsme ukázali, jak se FT prakticky provádí, tj. odvodili jsme vztahy pro DFT a inverzní DFT. Ukázali jsme, že DFT je zobrazení, které vektoru

$$\vec{a} = (a_0, a_1, \dots, a_{N-1}) \in \mathcal{R}^N$$

přiřazuje vektor

$$\vec{A} = (A_0, A_1, \dots, A_{N-1}) \in \mathcal{R}^N$$

pomocí vztahů

$$A_n = \sum_{k=0}^{N-1} a_k e^{-\frac{2\pi i n k}{N}}, \quad n = 0, 1, \dots, N-1. \quad (\text{B.1})$$

Ze vztahu (B.1) vidíme, že k získání jednoho čísla A_n je třeba provést N násobení, takže k získání celého vektoru \vec{A} potřebujeme provést alespoň N^2 operací. Jelikož DFT aproximuje FT tím přesněji, čím větší je číslo N , je přirozené volit číslo N co možná největší. Ovšem z druhé strany, pro značně velká N je pro provedení DFT třeba vysoký počet operací. Je-li např. $N \sim 10^5$ pak pro provedení DFT potřebujeme $\sim 10^{10}$ operací, což je již značně velký počet, i když máme k dispozici rychlé počítače.

DFT se používá (jak jsme řekli úvodem) k zpracování signálů a její rychlé provádění, v nejlepším případě výpočet v reálném čase, je velmi žádoucí. Ukážeme zde postup, jehož autory jsou J.W.Cooley a J.W.Tukey, který umožňuje vypočítat DFT pouze s $N \log N$ operacemi. Pro $N = 10^5$ pak místo 10^{10} operací potřebujeme pouze $10^5 \log 10^5 = 5 \cdot 10^5$ operací, což představuje ohromné zrychlení výpočtu. Proto se tento algoritmus nazývá **rychlá (fast) FT**, krátce **FFT**.

B.2 Princip FFT

Označme

$$w = e^{\frac{-2\pi i}{N}}. \quad (\text{B.2})$$

Pak vztah (B.1), tj. DFT, má tvar

$$A_n = \sum_{k=0}^{N-1} a_k w^{nk}. \quad (\text{B.3})$$

Poznámka 6 Vztah (B.3) můžeme interpretovat následovně: Pomocí daných čísel a_0, a_1, \dots, a_{N-1} sestavíme mnohočlen

$$P(x) = a_0 + a_1 x + \dots + a_{N-1} x^{N-1} = \sum_{k=0}^{N-1} a_k x^k, \quad (\text{B.4})$$

stupně $N - 1$. Dosadíme-li do (B.4) za

$$x = w^n = e^{\frac{-2\pi i n}{N}}$$

dostáváme

$$A_n = P(w^n), \quad n = 0, 1, \dots, N - 1. \quad (\text{B.5})$$

Tedy stanovení souřadnic vektoru \vec{A} znamená výpočet funkčních hodnot polynomu $P(x)$ v N bodech: $1, w, w^2, \dots, w^{N-1}$.

Volme $N = 2^z$, z je přirozené. Napišme

$$\begin{aligned} A_n &= a_0 w^0 + a_1 w^n + a_2 w^{2n} + \dots + a_{N-2} w^{n(N-2)} + a_{N-1} w^{n(N-1)} = \\ &= [a_0 w^0 + a_2 w^{2n} + \dots + a_{N-2} w^{n(N-2)}] + w^n [a_1 w^0 + a_3 w^{2n} + \dots + a_{N-1} w^{n(N-2)}], \end{aligned}$$

výraz jsme tedy rozdělili na násobky **sudých** a **lichých** mocnin w^n a z lichých jsme vytkli w^n .

Označme dále

$$u = w^2 \quad \text{a} \quad M = \frac{N}{2} \quad (\Rightarrow \frac{N-2}{2} = M-1). \quad (\text{B.6})$$

Pak

$$A_n = [a_0 u^0 + a_2 u^n + \dots + a_{N-2} u^{n(M-1)}] + w^n [a_1 u^0 + a_3 u^n + \dots + a_{N-1} u^{n(M-1)}]. \quad (\text{B.7})$$

Vidíme, že na pravé straně v (B.7) pro $n = 0, 1, \dots, \frac{N}{2} - 1$ představují závorky členy DFT dvou vektorů

$$\vec{a}_s = (a_0, a_2, \dots, a_{N-2}) \quad \text{a} \quad \vec{a}_l = (a_1, a_3, \dots, a_{N-1}).$$

Každý z nich má $\frac{N}{2}$ složek a čísla A_n , pro $n = 0, 1, \dots, \frac{N}{2} - 1$ se z těchto členů snadno zkombinují dosazením do (B.7) takto:

Položme

$$B_n = a_0 u^0 + a_2 u^n + \dots + a_{N-2} u^{n(M-1)}, \quad C_n = a_1 u^0 + a_3 u^n + \dots + a_{N-1} u^{n(M-1)}. \quad (\text{B.8})$$

Pak pro $n = 0, 1, 2, \dots, \frac{N}{2} - 1$ máme

$$A_n = B_n + w^n C_n. \quad (\text{B.9})$$

První polovinu čísel A_n tedy získáme dekompozicí problému na dva problémy téhož typu, ale poloviční velikosti. Zbývá určit druhou polovinu čísel A_n , pro $n = M, M + 1, \dots, N - 1$.

Zde přichází **základní trik Cooley - Tukeyova algoritmu:**

Protože z (B.2) a (B.6) plyne, že

$$w^N = 1$$

a

$$u^M = 1,$$

pak platí:

$$1 = u^0 = u^M, u = u^{M+1}, \dots, u^j = u^{M+j}, \dots, u^{M-1} = u^{N-1}, \quad (\text{B.10})$$

Dosaďme do (B.7) za $n = M + j$, $j = 0, 1, \dots, M - 1$.

Dostaneme

$$A_{M+j} = [a_0 u^0 + a_2 u^{M+j} + \dots + a_{N-2} u^{(M+j)(M-1)}] + \\ + w^{M+j} [a_1 u^0 + a_3 u^{M+j} + \dots + a_{N-1} u^{(M+j)(M-1)}],$$

což vzhledem ke vztahům (B.10) dává

$$A_{M+j} = [a_0 u^0 + a_2 u^j + \dots + a_{N-2} u^{j(M-1)}] - w^j [a_1 u^0 + a_3 u^j + \dots + a_{N-1} u^{j(M-1)}] = B_j - w^j C_j.$$

Použili jsme ještě rovnost

$$w^{M+j} = -w^j, \quad (\text{B.11})$$

neboť

$$w^{M+j} = e^{\frac{-2\pi i}{N}(M+j)} = e^{\frac{-2\pi i}{N}(\frac{N}{2}+j)} = e^{-\pi i} e^{\frac{-2\pi i j}{N}} = -w^j.$$

Výrazy v závorkách, představující diskrétní Fourierovy obrazy vektorů \vec{a}_s, \vec{a}_l jsou tytéž, jako ve výrazu (B.7), takže je nemusíme znovu počítat.

Zopakujme stručně ještě jednou celý postup.

Máme určit čísla $A_n, n = 0, 1, \dots, N - 1$ daná vztahem (B.1) pomocí čísel a_0, a_1, \dots, a_{N-1} . K tomu určíme čísla $B_n, C_n, n = 0, 1, \dots, \frac{N}{2} - 1$ ze vztahů (B.8). Potom položíme

$$A_n = B_n + w^n C_n \quad \text{pro } n = 0, 1, \dots, \frac{N}{2} - 1 \\ A_{\frac{N}{2}+n} = B_n - w^n C_n \quad \text{pro } n = 0, 1, \dots, \frac{N}{2} - 1. \quad (\text{B.12})$$

B.3 Počet operací při provedení FFT

Nechť N je počet souřadnic vektoru $\vec{a} = (a_0, a_1, \dots, a_{N-1})$. Označme $t(N)$ počet operací, potřebných pro provedení FFT na tento vektor. Zřejmě $t(1) = 1$. Pak pro stanovení všech čísel B_n a $C_n, n = 0, 1, \dots, \frac{N}{2} - 1$ potřebujeme $2t(\frac{N}{2})$ operací - provádíme dvakrát FFT s vektory „délky“ $\frac{N}{2}$. Pak pro $t(N)$ dostáváme

$$t(N) \leq 2t\left(\frac{N}{2}\right) + qN, \quad (\text{B.13})$$

kde qN zahrnuje počet operací potřebných k určení čísel A_n z čísel B_n a C_n .

Ze vztahu (B.13) pak lze odvodit, že

$$t(N) \leq cN \log N, \quad (\text{B.14})$$

kde c je nějaká (kladná) konstanta.

Odvození vztahu (B.14): Připomeňme, že při provádění FFT volíme vždy $N = 2^z$, z je přirozené. Pak $z = \log_2 N$. Vztah (B.14) odvodíme tak, že z -krát použijeme vztah (B.13), tedy:

$$\begin{aligned}
 t(N) &\leq qN + 2t\left(\frac{N}{2}\right) \leq qN + 2\left[q\frac{N}{2} + 2t\left(\frac{N}{4}\right)\right] = \\
 &= qN + qN + 2^2t\left(\frac{N}{4}\right) \leq 2qN + 2^2\left[q\frac{N}{4} + 2t\left(\frac{N}{8}\right)\right] = \\
 &= 3qN + 2^3t\left(\frac{N}{8}\right) \leq \dots \leq qzN + 2^z t(1) = \\
 &= qN \log_2 N + N \cdot 1 \leq cN \log N,
 \end{aligned}$$

kde konstanta c obsahuje ostatní konstanty, které vznikly např. přechodem od $\log_2 N$ k $\log N$ s použitím vzorce $\log_2 N = \frac{\log N}{\log 2}$.

Dodatek C

Gramova-Schmidtova ortonormalizace a chromatogramy

V tomto dodatku se seznámíme s matematickými prostředky, které jsou potřebné a výhodné při konstrukci chromatogramů, viz paragraf 6.5.

K dobrému porozumění Gramově-Schmidtově ortonormalizační metodě (GSO) je třeba, aby čtenář ovládal (resp. si zopakoval) následující pojmy z [9], str. 223-246: pojem lineárního prostoru (zejména prostor \mathbb{R}^d), lineární kombinace vektorů, lineární závislosti a nezávislosti vektorů, báze, dimenze, pojem lineárního podprostoru, matice a operace s nimi. Z [8] str. 128-131 jsou potřebné pojmy skalárního součinu, kolmosti (ortogonálnosti) vektorů, norma vektoru, průmět vektoru a z [8], str. 102 vlastní čísla a vlastní vektory.

V dalším textu budeme pracovat výhradně s lineárním prostorem \mathbb{R}^d a jeho podprostory.

C.1 Základní pojmy

C.1.1 Podprostory \mathbb{R}^d a jejich ortonormální báze

Nechť $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \dots, \vec{b}_n$ jsou lineárně nezávislé vektory z \mathbb{R}^d , (tj. $n \leq d$). Množina všech lineárních kombinací těchto vektorů tvoří lineární podprostor, který budeme značit P_n . Dimenze podprostoru P_n je rovna n , tj. $\dim P_n = n$. Je-li $n = d$, pak zřejmě $P_n = \mathbb{R}^d$.

O vektorech $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \dots, \vec{b}_n$ říkáme, že generují podprostor P_n . Protože jsme předpokládali, že jsou lineárně nezávislé, pak tvoří bázi P_n . Každý lineární prostor, mající jednu bázi, má nekonečně mnoho bází. Mezi nimi jsou pro naše cíle nejvhodnější tzv. **ortonormální báze**.

Definice C.1 Nechť vektory $\{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \dots, \vec{e}_n\}$ tvoří bázi podprostoru P_n . Platí-li

$$\vec{e}_i \cdot \vec{e}_j = \begin{cases} 0 & \text{pro } i \neq j \\ 1 & \text{pro } i = j, \end{cases} \quad (\text{C.1})$$

kde $i, j = 1, 2, \dots, n$, nazýváme tuto bázi **ortonormální bází** podprostoru P_n .

Poznámka C.1 Prvky ortonormální báze jsou tvořeny navzájem kolmými (ortogonálními) vektory jednotkové délky. Jestliže vynecháme podmínku

$$\vec{e}_i \cdot \vec{e}_i = \|\vec{e}_i\|^2 = 1, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

tj. podmínku jednotkové délky, dostáváme **ortogonální bázi**.

Výhoda ortonormální báze spočívá v následujícím. Necht' $\vec{u} \in P_n$ a $\{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \dots, \vec{e}_n\}$ je ortonormální báze P_n . Vyjádříme-li \vec{u} jako lineární kombinaci vektorů ortonormální báze, tj.

$$\vec{u} = u_1\vec{e}_1 + u_2\vec{e}_2 + \dots + u_n\vec{e}_n = \sum_{i=1}^n u_i\vec{e}_i, \quad (\text{C.2})$$

pak pro souřadnice u_j vektoru \vec{u} **vzhledem k této bázi** platí

$$u_j = \vec{u} \cdot \vec{e}_j, \quad j = 1, 2, \dots, n. \quad (\text{C.3})$$

Tento vztah obdržíme z (C.2) skalárním vynásobením obou stran rovnosti vektorem \vec{e}_j , $j = 1, 2, \dots, n$, tj.

$$\vec{u} \cdot \vec{e}_j = \sum_{i=1}^n u_i(\vec{e}_i \cdot \vec{e}_j) = u_j,$$

kde jsme v sumě na pravé straně využili (C.1).

C.1.2 Změna báze

Necht' $\{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \dots, \vec{e}_n\}$ je báze podprostoru P_n a vektory $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \dots, \vec{b}_n$ dány vztahy

$$\vec{b}_i = \sum_{j=1}^n \alpha_{ij}\vec{e}_j, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (\text{C.4})$$

Tedy každý vektor \vec{b}_i , $i = 1, \dots, n$ je lineární kombinací vektorů báze a koeficienty α_{ij} těchto lineárních kombinací tvoří matici

$$\mathbf{A} = (\alpha_{ij})$$

řádu n . Je-li tato matice **regulární**, pak vektory $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \dots, \vec{b}_n$ tvoří rovněž bázi prostoru P_n . Důkaz lze ponechat čtenáři jako cvičení.

Definice C.2 Matici $\mathbf{A} = (\alpha_{ij})$ nazýváme maticí přechodu od báze $\{\vec{e}_i\}$ k bázi $\{\vec{b}_i\}$.

C.1.3 Ortogonální rozklad vektoru

Necht' P_n je podprostor R^d a mějme vektor $\vec{v} \notin P_n$. Naším cílem je rozložit vektor \vec{v} na součet dvou vektorů \vec{p} a $\vec{\sigma}$ tak, aby $\vec{p} \in P_n$ a $\vec{\sigma} \perp P_n$ (vektor \vec{p} ležel v P_n a $\vec{\sigma}$ byl kolmý k P_n), tj.

$$\vec{v} = \vec{p} + \vec{\sigma}, \quad (\text{C.5})$$

$$\vec{p} \in P_n, \quad (\text{C.6})$$

$$\vec{\sigma} \perp P_n. \quad (\text{C.7})$$

Nejprve k podmínce (C.7). Vektor $\vec{\sigma} \in R^d$ je kolmý na podprostor P_n právě tehdy, je-li kolmý na každý vektor z P_n . Tato podmínka je splněna, je-li vektor $\vec{\sigma}$ kolmý ke každému vektoru nějaké libovolně zvolené báze P_n . (Dokažte!)

Nechť $\{\vec{e}_1, \dots, \vec{e}_n\}$ je **ortonormální báze** podprostoru P_n . Pak \vec{o} musí být kolmý ke každému vektoru \vec{e}_i , $i = 1, \dots, n$, tj.

$$\vec{o} \cdot \vec{e}_i = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (\text{C.8})$$

Z (C.5) máme

$$\vec{o} = \vec{v} - \vec{p} \quad (\text{C.9})$$

a z (C.6) zase

$$\vec{p} = \sum_{i=1}^n p_i \vec{e}_i. \quad (\text{C.10})$$

Konečně z (C.8) dostáváme

$$\vec{o} \cdot \vec{e}_i = (\vec{v} - \vec{p}) \cdot \vec{e}_i = \vec{v} \cdot \vec{e}_i - \vec{p} \cdot \vec{e}_i = 0. \quad (\text{C.11})$$

Protože $\vec{p} \cdot \vec{e}_i = p_i$, viz. (C.3), z (C.10) plyne

$$p_i = \vec{v} \cdot \vec{e}_i \quad \text{pro } i = 1, 2, \dots, n. \quad (\text{C.12})$$

Tímto máme určeny souřadnice vektoru \vec{p} v bázi $\{\vec{e}_i\}$. Souřadnice vektoru \vec{o} určíme ze vztahu (C.9), tj. z

$$\vec{o} = \vec{v} - \vec{p}.$$

POZOR! Při numerické realizaci výpočtu souřadnic vektoru $\vec{o} = (o_1, \dots, o_d) \in \mathbb{R}^d$ musíme mít na paměti, že vektory ortonormální báze \vec{e}_i jsou prvky \mathbb{R}^d , tzn., že

$$\vec{e}_i = (e_{i1}, \dots, e_{id}) \in \mathbb{R}^d, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

a

$$\vec{p} = \sum_{i=1}^n p_i \vec{e}_i = \left(\sum_{i=1}^n p_i e_{i1}, \dots, \sum_{i=1}^n p_i e_{id} \right) \in \mathbb{R}^d,$$

kde k -tá souřadnice vektoru $\vec{o} \in \mathbb{R}^d$ je dána vztahem

$$o_k = v_k - p_k = v_k - \sum_{i=1}^n p_i e_{ik}, \quad k = 1, 2, \dots, d. \quad (\text{C.13})$$

Z výše uvedeného vyplývá, že je výhodné pracovat s podprostory, které jsou opatřeny ortonormálními bázemi. Je-li podprostor zadán jinou než ortonormální bází, je tedy třeba umět nalézt příslušnou ortonormální bázi tohoto podprostoru. To bude předmětem následujícího paragrafu.

C.2 Gramova-Schmidtova ortonormalizace (GSO)

Nechť $\vec{u}_1, \vec{u}_2, \dots, \vec{u}_n$ jsou lineárně nezávislé vektory z \mathbb{R}^d , které tvoří bázi podprostoru $P_n \subset \mathbb{R}^d$, ($\dim P_n = n \leq d$).

Definujme vektory

$$\vec{e}_1, \vec{e}_2, \dots, \vec{e}_n \in \mathbb{R}^d$$

následujícím rekurentním postupem:

$$\begin{aligned}
\vec{e}_1 &= \frac{1}{\|\vec{u}_1\|} \vec{u}_1, \\
\vec{e}_2 &= \frac{1}{\|\vec{u}_2 - (\vec{e}_1 \cdot \vec{u}_2) \vec{e}_1\|} [\vec{u}_2 - (\vec{e}_1 \cdot \vec{u}_2) \vec{e}_1], \\
\vec{e}_3 &= \frac{1}{\|\vec{u}_3 - (\vec{e}_1 \cdot \vec{u}_3) \vec{e}_1 - (\vec{e}_2 \cdot \vec{u}_3) \vec{e}_2\|} [\vec{u}_3 - (\vec{e}_1 \cdot \vec{u}_3) \vec{e}_1 - (\vec{e}_2 \cdot \vec{u}_3) \vec{e}_2], \\
&\vdots \\
\vec{e}_i &= \frac{1}{\|\vec{u}_i - \sum_{k=1}^{i-1} (\vec{e}_k \cdot \vec{u}_i) \vec{e}_k\|} [\vec{u}_i - \sum_{k=1}^{i-1} (\vec{e}_k \cdot \vec{u}_i) \vec{e}_k], \quad i = 4, 5, \dots, n.
\end{aligned} \tag{C.14}$$

Vektory definované vztahy (C.14) tvoří ortonormální bázi podprostoru P_n , neboť:

- (i) Vektory $\vec{e}_1, \dots, \vec{e}_n$ jsou lineárními kombinacemi vektorů $\vec{u}_1, \dots, \vec{u}_n$ s regulární maticí přechodu, takže podle paragrafu C.1.2 generují tentýž podprostor P_n .
- (ii) $\|\vec{e}_i\| = 1$ pro $i = 1, 2, \dots, n$ jak je ihned vidět ze vztahů (C.14) (ve jmenovatelích zlomků jsou normy příslušných vektorů).
- (iii) O správnosti vztahu

$$\vec{e}_i \cdot \vec{e}_j = 0 \quad \text{pro } i \neq j$$

se lze přesvědčit přímým výpočtem skalárního součinu, který zde nebudeme provádět. Místo toho objasníme princip, jak vztahy (C.14) vznikly.

První vztah v (C.14) je jasný, vektor \vec{u}_1 jsme vynásobili převrácenou hodnotou jeho normy a tím jsme dostali jednotkový vektor \vec{e}_1 , který je lineární kombinací vektoru \vec{u}_1 . Vektor \vec{e}_2 konstruujeme tak, aby byl lineární kombinací vektorů \vec{e}_1 a \vec{u}_2 (a tím i lineární kombinací vektorů \vec{u}_1 a \vec{u}_2), byl kolmý na vektor \vec{e}_1 a měl délku 1, tedy

$$\vec{e}_2 = \vec{u}_2 + \alpha \vec{e}_1 \tag{C.15}$$

a

$$\vec{e}_1 \cdot \vec{e}_2 = 0, \quad \|\vec{e}_2\| = 1.$$

Z podmínky ortogonality určíme koeficient α :

$$\vec{e}_1 \cdot \vec{e}_2 = \vec{e}_1 \cdot (\vec{u}_2 + \alpha \vec{e}_1) = \vec{e}_1 \cdot \vec{u}_2 + \alpha = 0$$

a z toho

$$\alpha = -(\vec{e}_1 \cdot \vec{u}_2)$$

a po dosazení do (C.15) dostáváme

$$\vec{e}_2 = \frac{\vec{u}_2 - (\vec{e}_1 \cdot \vec{u}_2) \vec{e}_1}{\|\vec{u}_2 - (\vec{e}_1 \cdot \vec{u}_2) \vec{e}_1\|}.$$

Podobně třetí vztah v (C.14) dostaneme tak, že hledáme \vec{e}_3 ve tvaru

$$\vec{e}_3 = \vec{u}_3 + \alpha\vec{e}_1 + \beta\vec{e}_2, \quad \|\vec{e}_3\| = 1$$

tak, aby

$$\vec{e}_1 \cdot \vec{e}_3 = 0 \quad \wedge \quad \vec{e}_2 \cdot \vec{e}_3 = 0,$$

tj.

$$\vec{e}_1 \cdot \vec{u}_3 + \alpha + \beta \cdot 0 = 0 \quad \wedge \quad \vec{e}_2 \cdot \vec{u}_3 + \alpha \cdot 0 + \beta = 0,$$

takže, $\alpha = -(\vec{e}_1 \cdot \vec{u}_3)$, $\beta = -(\vec{e}_2 \cdot \vec{u}_3)$ a tudíž

$$\vec{e}_3 = \frac{\vec{u}_3 - (\vec{e}_1 \cdot \vec{u}_3)\vec{e}_1 - (\vec{e}_2 \cdot \vec{u}_3)\vec{e}_2}{\|\vec{u}_3 - (\vec{e}_1 \cdot \vec{u}_3)\vec{e}_1 - (\vec{e}_2 \cdot \vec{u}_3)\vec{e}_2\|}.$$

Tímto způsobem obdržíme ortonormální bázi podprostoru P_n , generovaného původně zadanými lineárně nezávislými vektory $\vec{u}_1, \vec{u}_2, \dots, \vec{u}_n$.

C.3 Generování chromatogramů s použitím GSO

Existuje několik metod, které umožňují z naměřených interferogramů sestavit příslušné chromatogramy, viz § 6.5 těchto skript.

V tomto paragrafu popíšeme metodu, používající GSO, která je ve srovnání s jinými metodami mnohem citlivější a potřebuje méně početních operací.

C.3.1 Popis metody

Naměřený interferogram je vektorem z prostoru R^d , kde d je počet naměřených dat v interferogramu.

Nejprve naměříme jistý počet **interferogramů pozadí** (mobilní fáze, v případě plynové chromatografie nosného plynu). Tyto interferogramy generují v R^d podprostor P_n . Označme je $\{\vec{b}_1, \dots, \vec{b}_n\}$. Pokud jsou lineárně nezávislé, tvoří bázi P_n . Jsou-li lineárně závislé, pak z nich vybereme maximální skupinu lineárně nezávislých vektorů. Na vektory $\{\vec{b}_1, \dots, \vec{b}_n\}$ provedeme GSO a obdržíme ortonormální bázi $\{\vec{e}_1, \dots, \vec{e}_n\}$, podprostoru P_n .

Dále měříme interferogramy se vzorkem a dostáváme vektory-interferogramy

$$\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_k.$$

Každý z těchto vektorů rozložíme podle odstavce C.1.3 na složku patřící do P_n a složku ortogonální k P_n , tj.

$$\vec{v}_j = \vec{p}_j + \vec{o}_j, \quad j = 1, 2, \dots, k.$$

Pak spočítáme délku ortogonální složky

$$y_j = \|\vec{o}_j\|, \quad j = 1, 2, \dots, k$$

a vynášíme takto získaná čísla do grafu v závislosti na **retenčním čase** nebo jiné charakteristické veličině. Takto získaný graf je hledaný **chromatogram**. Problémem je, jak vhodně

zvolit podprostor P_n , tj. kolik interferogramů pozadí použít ke generování podprostoru P_n a které. Z literatury pojednávající o použití GSO pro získání chromatogramů vyplývají následující závěry. Je doporučeno např. vynechat data nejbližší nulové dráhové diferenci (začátky interferogramů), obsahující znaky společné pro všechny interferogramy, dané charakteristikou přístroje a podmínkami snímání dané série interferogramů. Ani po tomto „odříznutí“ experimentálních dat na začátku interferogramu nejsou do analýzy zahrnuta všechna další data interferogramu, ale jeho dimenze je dále významně snížena na vybraný počet dat.

Konkrétně např. (viz [12]) z interferogramu, který obsahoval 2048 dat, bylo na základě empirických pokusů pro daný experiment zjištěno, že je optimální vynechat prvních 60 dat a dimenzi interferogramu zmenšit na 100, aniž by došlo ke ztrátě informace. Při tomto experimentu byl počet vektorů báze podprostoru P_n roven 60.

Připomeňme, že všechny tyto úpravy se dělají proto, aby se minimalizoval počet aritmetických operací, které je nezbytné pro získání chromatogramu provádět. To znamená, že je třeba optimalizovat tři parametry:

- dimenzi podprostoru P_n
- počet vynechaných dat na začátku interferogramu
- redukovanou dimenzi interferogramu.

V následujících odstavcích popíšeme stručně způsob, jak lze z naměřených interferogramů pozadí vybrat vhodné vektory, které budou generovat podprostor P_n . Tento postup je založen na singulárním rozkladu matice vzniklé z interferogramů pozadí.

C.3.2 Ortogonální matice

Definice C.3 Reálná čtvercová matice \mathbf{A} se nazývá **ortogonální** jestliže

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{E}, \quad (\text{C.16})$$

kde \mathbf{A}^T je transponovaná matice k matici \mathbf{A} .

Z definice ihned plyne, že ortogonální matice je regulární ($\det \mathbf{A} \neq 0$). Uvědomíme-li si, že řádky matice \mathbf{A}^T jsou sloupce matice \mathbf{A} a jednotková matice má jedničky na hlavní diagonále a jinde nuly, pak vztah (C.16) říká, že sloupce ortogonální matice tvoří ortonormální systém vektorů. (Poznamenejme ještě, že čtvercová matice \mathbf{A} se nazývá **symetrická**, jestliže $\mathbf{A}^T = \mathbf{A}$).

C.3.3 Singulární hodnoty matice

Budiž \mathbf{A} libovolná matice typu (n, d) (tj. má n řádků a d sloupců). Pak matice

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A}$$

je čtvercová matice řádu d , která je symetrická. Reálné symetrické matice mají nezáporná vlastní čísla. $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_d \geq 0$, která tudíž mohou být psána ve tvaru

$$\lambda_k = \sigma_k^2, \quad \sigma_k \geq 0, \quad k = 1, 2, \dots, d.$$

Pak čísla

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_d \geq 0$$

jsou nazývána **singulárními hodnotami** matice \mathbf{A} .

C.3.4 Singulární rozklad matice

Nechť \mathbf{A} je libovolná reálná matice typu (n, d) . Pak platí:

- (a) Existují ortogonální matice \mathbf{U} řádu n , ortogonální matice \mathbf{V} řádu d a „diagonální“ matice $\mathbf{\Sigma}$ typu (n, d) takové, že

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T, \quad (\text{C.17})$$

přičemž matice $\mathbf{\Sigma}$ má následující tvar:

$$\mathbf{\Sigma} = \begin{bmatrix} \mathbf{D} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{D} = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r), \quad (\text{C.18})$$

kde $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r > 0$ jsou nenulové singulární hodnoty matice \mathbf{A} a r je hodnost matice \mathbf{A} .

- (b) Nenulové singulární hodnoty matice \mathbf{A}^T jsou právě čísla $\sigma_1, \dots, \sigma_r$.

Více podrobností o singulárním rozkladu matice najde čtenář v knize [11].

Poznámka C.2 Vztah (C.17) se nazývá **singulární rozklad matice \mathbf{A}** .

Poznámka C.3 Čtvercová matice \mathbf{D} ve vztahu (C.18) má typ (r, r) a typy nulových matic v (C.18) si čtenář doplní sám tak, aby výsledný typ matice $\mathbf{\Sigma}$ byl (n, d) .

Poznámka C.4 (Důležitá!) Sloupcové vektory ortogonální matice \mathbf{V} se nazývají **singulárními vektory** matice \mathbf{A} . Tvoří ortonormální bázi prostoru \mathbb{R}^d . První sloupec matice \mathbf{V} odpovídá singulární hodnotě σ_1 , druhý σ_2 , atd.

C.3.5 Matice interferogramů pozadí

Vraťme se zpět k odstavci C.3.1. Mějme opět k naměřených interferogramů pozadí

$$\vec{b}_1, \vec{b}_2, \dots, \vec{b}_k \in \mathbb{R}^d. \quad (\text{C.19})$$

Z těchto vektorů sestavíme **matici interferogramů pozadí (MIP)**, kterou označme \mathbf{A} . Řádky této matice jsou vektory z (C.19). Matice \mathbf{A} má typ (k, d) . Nyní provedeme její singulární rozklad (C.17). Takto obdržená experimentální data, tj. matice interferogramů má **spektrum singulárních hodnot**. Toto spektrum se obvykle štěpí na dvě části. První část můžeme nazvat deterministickou částí a druhou část šumovou částí spektra. Deterministická množina singulárních hodnot bude vykazovat rychlé zmenšování těchto hodnot až na „úroveň šumu“, zatímco singulární hodnoty ze šumové části spektra budou relativně malé a téměř konstantní.

Nyní přistoupíme k určení podprostoru P_n . Vezmeme singulární hodnoty

$$\sigma_1, \dots, \sigma_n,$$

které náleží do deterministické části spektra a k nim příslušné singulární vektory

$$\vec{b}_1, \dots, \vec{b}_n$$

ze vztahu (C.17), tj. prvních n sloupců matice \mathbf{V} . Tyto vektory generují podprostor P_n , který používáme ke konstrukci chromatogramu. Poznamenejme ještě, že vektory $\vec{b}_1, \dots, \vec{b}_n$ takto obdržené (tj. pomocí singulárního rozkladu matice) jsou již ortonormální a nemusíme na ně provádět GSO.

Příklad C.1 Pro ilustraci jsme s použitím programu Mathematica 4.0 zpracovali 120 interferogramů, každý v délce 7108 údajů. Interferogramy byly získány pro vzorek těžké vody (D_2O) v kyvetě z CaF_2 , tloušťky $25\mu m$ na FTIR spektrometru IFS 66/S (Bruker, Německo) vybaveném VCD¹ modulem PMA 37 (Bruker, Německo) využívající chlazený MCT detektor (InfraRed Associates). Programem pro singulární rozklad matice jsme získali 120 singulárních hodnot matice interferogramů, které jsou vyneseny na obr. C.1 a uvedeny číselně v následující tabulce:

| | | | | | | | | |
|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|
| 20.5475 | 6.71556 | 6.68402 | 6.58004 | 6.55512 | 6.49152 | 6.44912 | 6.4273 | 6.42032 |
| 6.35527 | 6.32478 | 6.30025 | 6.26604 | 6.22764 | 6.20988 | 6.20264 | 6.14277 | 6.09631 |
| 6.0774 | 6.03756 | 6.0294 | 5.99347 | 5.96409 | 5.94193 | 5.9268 | 5.91249 | 5.88046 |
| 5.86226 | 5.82166 | 5.80368 | 5.77297 | 5.76273 | 5.74947 | 5.72641 | 5.69757 | 5.67783 |
| 5.66300 | 5.64976 | 5.62705 | 5.57995 | 5.57579 | 5.55883 | 5.51779 | 5.51317 | 5.47942 |
| 5.44943 | 5.44263 | 5.40284 | 5.39133 | 5.3622 | 5.34723 | 5.33196 | 5.32776 | 5.29062 |
| 5.27907 | 5.26443 | 5.24809 | 5.23155 | 5.19739 | 5.17137 | 5.15775 | 5.14379 | 5.12259 |
| 5.11973 | 5.09455 | 5.06399 | 5.04877 | 5.0274 | 5.02547 | 4.98017 | 4.96739 | 4.95074 |
| 4.91383 | 4.90379 | 4.88646 | 4.85452 | 4.84692 | 4.81283 | 4.80573 | 4.77662 | 4.75836 |
| 4.73284 | 4.72325 | 4.69773 | 4.67767 | 4.65336 | 4.64255 | 4.62751 | 4.59911 | 4.59014 |
| 4.57038 | 4.53369 | 4.50333 | 4.49575 | 4.48113 | 4.47279 | 4.45034 | 4.42921 | 4.41423 |
| 4.40029 | 4.38493 | 4.34272 | 4.3166 | 4.29047 | 4.27953 | 4.26506 | 4.21813 | 4.20653 |
| 4.18523 | 4.14192 | 4.13069 | 4.1001 | 4.08892 | 4.07526 | 4.03984 | 3.99654 | 3.95044 |
| 3.92859 | 3.89973 | 3.85129 | | | | | | |

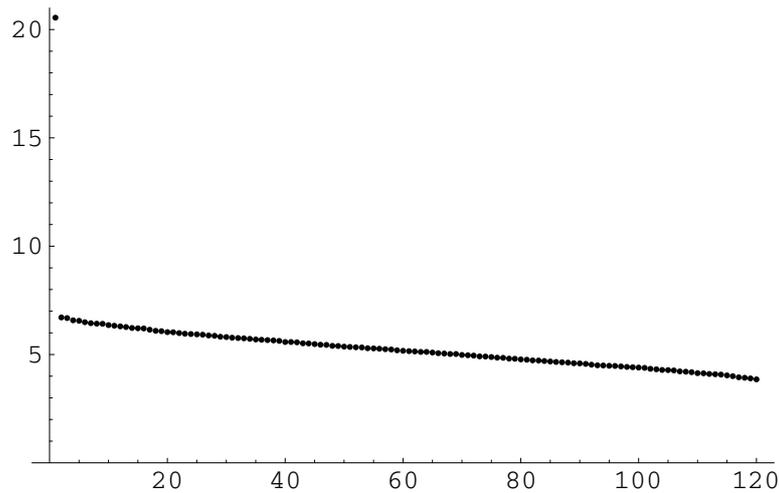
Z obrázku je patrné, že deterministická část spektra se skládá ze dvou singulárních hodnot $\sigma_1 = 20,5475$ a $\sigma_2 = 6.71556$ a zbývající singulární hodnoty tvoří šumovou část spektra, kde singulární hodnoty jsou relativně malé vzhledem k σ_1 a téměř konstantní.

V tomto případě lze za podprostor P_n (základních vektorů) vzít **dvourozměrný** podprostor P_2 , jehož báze je tvořena dvěma singulárními vektory \vec{b}_1 a \vec{b}_2 , které odpovídají singulárním hodnotám σ_1 a σ_2 . Tyto vektory, které obdržíme rovněž ze singulárního rozkladu matice interferogramů, jsou již ortonormální. Protože jsou z \mathbb{R}^{7108} nebudeme je zde uvádět.

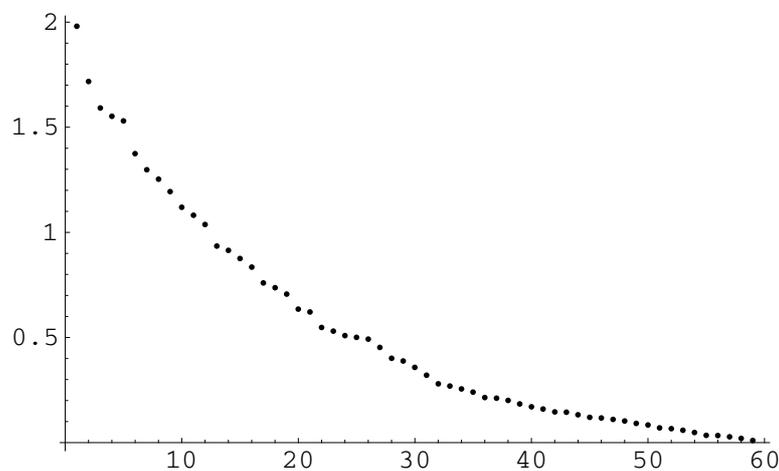
Tento příklad ukazuje, že zvolená dimenze interferogramu je příliš velká.

Dále jsme vzali náhodně jeden interferogram a rozdělili jsme jej na části po 120 datech. Z takto získaných 59 interferogramů o dimenzi 120 jsme sestavili opět matici interferogramů. Získané singulární hodnoty této MIP jsou na obr. C.2.

¹VCD modul - zařízení umožňující měření spekter vibračního cirkulárního dichroismu



Obrázek C.1:

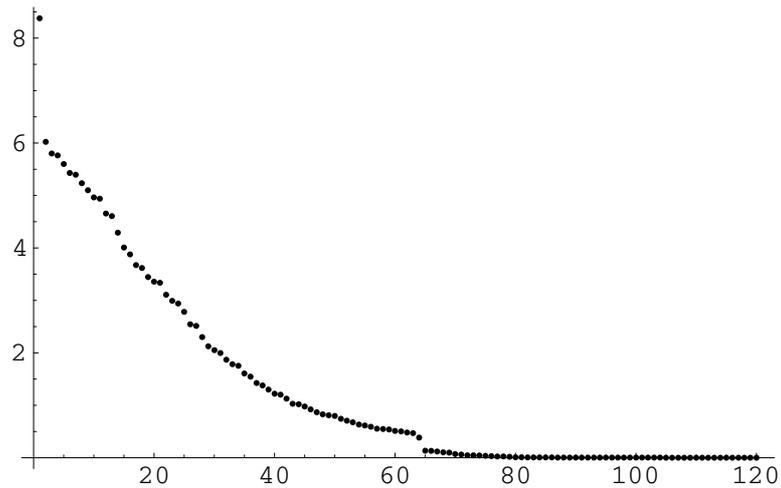


Obrázek C.2:

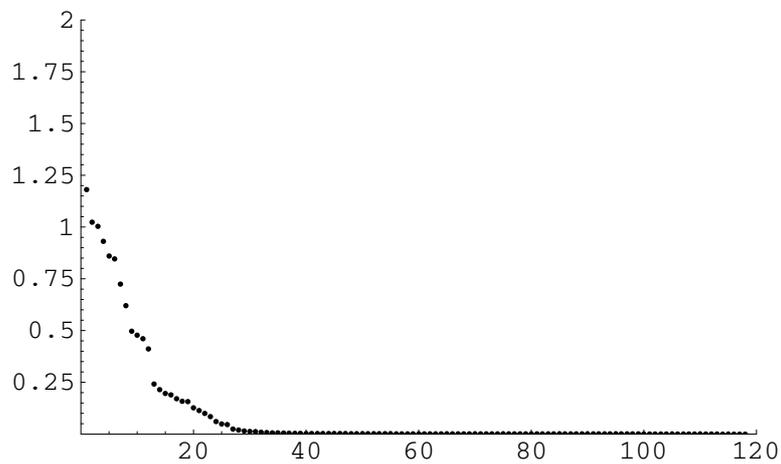
Poznamenejme, že popsanou proceduru jsme opakovali pro další tři vybrané interferogramy a výsledek byl vždy totožný s obr. C.2.

Dále jsme vzali 20 původních interferogramů o délce 7108 a ty jsme rozdělili na 1180 částí po 120 údajích. Takto získaná MIP má singulární hodnoty znázorněné na obr. C.3. Srovnáním singulárních hodnot z obr. C.2 a obr. C.3 je patrné, že na obr. C.3 je daleko ostřeji oddělena deterministická část spektra od šumové části spektra. Když jsme zvětšovali dimenzi interferogramů na 240, 480 a 1000, spektrum bylo „horší“ a blížilo se (což je logické) spektru z obrázku C.1. Tento výsledek naznačuje, dimenzi podprostoru P_n by bylo vhodné volit (přibližně) 65. Báze tohoto podprostoru by byla tvořena příslušnými 65 singulárními vektory. Redukovaná dimenze interferogramů je v tomto případě rovna 120.

Nakonec jsme z prvních 20 původních interferogramů vybrali každý desátý naměřený údaj a ty jsme pak uspořádali do redukovaných interferogramů dimenze 120. Po provedení singulárního rozkladu příslušné MIP jsme obdrželi spektrum singulárních hodnot znázorněné na obr. C.4.



Obrázek C.3:



Obrázek C.4:

Výsledek lze interpretovat tak, že výběrem každého desátého měření jsme vyloučili vzájemnou závislost blízkých měření, která je způsobována např. konstrukcí přístroje. Pro takováto „nezávislá“ data lze pak dimenzi příslušného podprostoru P_n volit rovnu 25, což je optimálnější výsledek než v předchozím případě.

Výše uvedeným textem jsme naznačili možnosti analýzy naměřených dat v interferogramech pomocí singulárního rozkladu MIP a z ní plynoucí optimální volby dimenze P_n a redukované dimenze interferogramů.

Dodatek D

Program Mathematica

V tomto dodatku se částečně seznámíme s programem Mathematica a ukážeme si jeho využití pro úlohy z FT.

Mathematica je obecný výpočetní systém a jazyk určený pro matematické a jiné aplikace. Umožňuje provádět numerické výpočty v aritmetice libovolné přesnosti, symbolické výpočty a grafické prezentace. Program může pracovat jako interpret (příkaz se přeloží a hned provede) nebo jako překladač programů psaných v jazyce Mathematica.

Základní výpočetní část programu se nazývá jádro (kernel). Jádro zabezpečuje veškeré výpočty. Uživatel ale potřebuje s jádrem komunikovat, k tomu slouží rozhraní (front end). Rozhraní v programu Mathematica je zápisník (notebook). Jádro je pro všechny typy počítačů stejné. Rozhraní se liší podle použitého počítače.

Poznámka D.1 Vlastní vyvolání programu Mathematica a popis jeho rozhraní zde nebudeme uvádět, neboť závisí na operačním systému použitého počítače (DOS, Windows, Mac, UNIX).

Poznámka D.2 V následujícím textu budeme používat zvýrazněné písmo pro text, který píše uživatel na obrazovku počítače a nezvýrazněným písmem to, co na obrazovku napíše počítač (zpracování našeho příkazu jádrem). Svislá čára | bude ve volbách označovat výběr jedné z uvedených možností.

Prostřednictvím zápisníku dáváme jádru příkaz který je označován:

In[n] := **příkaz**,

jádro nám vrací výsledek ve tvaru:

Out[n] = výsledek

(n je pořadí zadaného příkazu). Pomocí znaku % (resp. %n) se může uživatel odvolávat na předchozí výsledek (resp. n-tý výsledek).

Získáme-li například výsledky:

Out[1] = 1.23456

Out[2] = 2.34567

můžeme výše uvedené znaky použít následovně:

```
In[3]:= %1+%2,
```

pak dostaneme výsledek:

```
Out[3]=3.58023
```

Nyní si ukážeme některé možnosti programu Mathematica. Vzhledem k omezenému rozsahu těchto skriptů, ukážeme jen ty, které využijeme pro FT.

D.1 Numerické výpočty

D.1.1 Aritmetické operace

Chceme-li vypočítat hodnotu $(3.5 + 1.4)^2$, napíšeme:

```
In[1]:=(3.5+1.4)^2
```

Mathematica nám vrátí výsledek:

```
Out[1]=24.01
```

Mathematica používá následující aritmetické operace:

| | |
|--------------------|----------------------|
| x^y | obecná mocnina x^y |
| $-x$ | mínus |
| x/y | dělení |
| $x y$ nebo $x * y$ | násobení |
| $x+y$ | sčítání |

D.1.2 Matematické funkce

V Mathematice jsou argumenty všech funkcí uzavřeny v hranatých závorkách. Jména vestavěných funkcí začínají velkými písmeny.

Tabulka matematických funkcí:

| | | |
|---------------------------------|--|------------|
| Sqrt[x] | druhá odmocnina | \sqrt{x} |
| Exp[x] | exponenciála | e^x |
| Log[x] | přirozený logaritmus | $\ln x$ |
| Log[b,x] | logaritmus o základu b | $\log_b x$ |
| Sin[x], Cos[x], Tan[x] | goniometrické funkce (s argumentem v radiánech) | |
| ArcSin[x], ArcCos[x], ArcTan[x] | cyklometrické funkce | |
| n! | faktoriál ($n \in N$) | |
| Abs[x] | absolutní hodnota | |
| Random[] | náhodné číslo mezi 0 a 1 | |
| Max[x,y,...], Min[x,y,...] | maximum, minimum z čísel x, y, \dots | |

Poznámka D.3 Chceme-li používat v goniometrických funkcích argument ve stupních, musíme napsat `Sin[s Degree]` (`Degree= $\pi/180$`).

Uvedeme zde několik jednoduchých příkladů.

```
In[1]:=Log[8.4]
Out[1]=2.12823
```

```
In[2]:=10!
Out[2]=3628800
```

```
In[3]:=ArcSin[0.5]
Out[3]=0.523599
```

V tomto okamžiku se můžeme zmínit o příkazu `N[výraz,n]`, který dává numerickou hodnotu výrazu na n platných míst. Jestliže n je vynecháno, zobrazí se výsledek na šest platných míst.

```
In[4]:=Sin[30]
Out[4]=Sin[30]
```

```
In[5]:=N[%]
Out[5]=-0.988032
```

```
In[6]:=N[%4,10]
Out[6]=-0.9880316241
```

Příkazy 4 až 5 můžeme nahradit jedním příkazem:

```
In[7]:=Sin[30.0],
```

dostaneme rovnou číselnou hodnotu

```
Out[7]=-0.988032.
```

Kromě vestavěných funkcí si můžeme jednoduchým příkazem definovat libovolnou funkci:
`jm_funkce[x_] := popis_funkce`

Při definici funkce můžeme používat operátor podmínky (`/;`), potom definice funkce vypadá následovně:

```
jm_funkce[x_ /; podmínka] := popis_funkce
```

definuje funkci pouze pro x vyhovující dané podmínce

Příklad:

```
In[8]:= SinC[x_ /; x!=0] := Sin[x]/x
        SinC[x_ /; x==0] := 1.0
```

```
In[9]:=SinC[0.5]
Out[9]=0.958851
```

D.1.3 Komplexní čísla

Komplexní jednotka je označena symbolem $\dots I$.

Komplexní číslo má pak tvar $\dots x+Iy$.

Příklady:

```
In[1]:=Sqrt[-4]
```

```
Out[1]=2I
```

```
In[2]:=(4+3I)/(2-I)
```

```
Out[2]=1 + 2I
```

Tabulka operací s komplexními čísly:

| | | |
|--------------|-------------------------------------|--------------------|
| Re[z] | reálná část komplexního čísla | |
| Im[z] | imaginární část komplexního čísla | |
| Conjugate[z] | komplexně sdružené číslo | \bar{z} |
| Abs[z] | absolutní hodnota komplexního čísla | $ z $ |
| Arg[z] | argument ϕ komplexního čísla | $z = z e^{i\phi}$ |

D.2 Symbolická matematika

D.2.1 Algebraické operace

Mathematica umí pracovat se symboly. Umí zjednodušovat a upravovat výrazy, krátit zlomky, provádět substituce apod.

Například výraz $x^2 + x - 4x^2$ upraví Mathematica následovně:

```
In[1]:=x^2+x-4 x^2
```

```
Out[1]=x - 3x^2.
```

Substituci můžeme napsat příkazem:

výraz /. x->xh,y->yh,...

Tento příkaz je ekvivalentní s příkazy:

```
x=xh
```

```
y=yh
```

```
výraz.
```

Příklad:

```
In[2]:=(x+y)(x-y)^2 /.{x->3,y->1-a}
```

```
Out[2]=(4-a)(2+a)^2
```

Příkaz x=. odstraní všechny substituce.

Tabulka příkazů pro algebraické úpravy:

| | |
|-------------------------------------|---|
| Expand[výraz] | rozloží vícenásobný součin a mocninu na součet členů |
| Factor[výraz] | zapiše výraz jako minimální součin jeho činitelů |
| Simplify[výraz] | zkouší najít tvar výrazu s nejmenším počtem částí, použitím algebraických úprav |
| Apart[výraz] | rozloží výraz na parciální zlomky |
| ComplexExpand[výraz, {z1, z2, ...}] | provede zápis výrazu v algebraickém tvaru komplexního čísla. |

Druhý parametr příkazu ComplexExpand označuje komplexní proměnné. Jestliže chybí, předpokládá se, že všechny proměnné jsou reálné.

Příklady:

```
In[3]:=Expand[(x-2)^2 (1+x+2 y)]
Out[3]=4 - 3 x^2 + x^3 + 8 y - 8 x y + 2 x^2 y
```

```
In[4]:=Factor[%]
Out[4]=(-2 + x)^2 (1 + x + 2 y)
```

```
In[5]:=Simplify[x^2+2 x+1]
Out[5]=(1 + x)^2
```

```
In[6]:=Apart[(x^5-x^4-13 x^3-8 x^2-20 x-34)/((x-4)(x+2)(x^2+1))]
Out[6]=
1 - \frac{3}{-4 + x} + x - \frac{1}{2 + x} + \frac{3}{1 + x^2}
```

```
In[7]:=ComplexExpand[Exp[I x]]
Out[7]=Cos(x) + i Sin(x)
```

```
In[8]:=ComplexExpand[Exp[z],z]
Out[8]=E^{Re(z)} Cos(Im(z)) + i E^{Re(z)} Sin(Im(z))
```

D.2.2 Derivace

Obecný příkaz pro derivaci má tvar:

$$D[f, x] \text{ nebo } D[f, \{x, n\}],$$

kde f představuje funkci, x proměnnou podle které derivujem a n stupeň derivace.

Příklady:

```
In[1]:=D[x^n,x]
Out[1]=n x^{-1+n}
```

In[2] := **D**[**x**ⁿ, {**x**, 3}]
 Out[2] = (-2 + n) (-1 + n) n x⁻³⁺ⁿ

In[3] := **D**[**Log**[**b**, **x**³], **x**]
 Out[3] =
$$\frac{3}{x \log(b)}$$

In[4] := **D**[**ArcTan**[1/**x**²], **x**]
 Out[4] =
$$\frac{-2}{(1 + x^{-4}) x^3}$$

In[5] := **Factor**[%]
 Out[5] =
$$\frac{-2x}{1 + x^4}$$

D.2.3 Totální diferenciál

Obecný příkaz pro totální diferenciál má tvar:

Dt[f, volba].

Příklady:

In[1] := **Dt**[**x**ⁿ]
 Out[1] = n x⁻¹⁺ⁿ Dt[x] + xⁿ Dt[n] log(x)

In[2] := **Dt**[**x**² + **y**²]
 Out[2] = 2 x Dt[x] + 2 y Dt[y]
 totální diferenciál podle všech proměnných
 2x dx + 2y dy

In[3] := **Dt**[**a** **x**² + **b** **y**², **Constants** -> {**a**, **b**}]
 Out[3] = 2 a x Dt[x, Constants -> {a, b}] + 2 b y Dt[y, Constants -> {a, b}]

Pomocí volby Constants můžeme označit konstanty ve výrazu.

D.2.4 Integrace

Obecný příkaz pro integrál má tvar:

Integrate[f, x] $\int f dx$
 Integrate[f, {x, xmin, xmax}] $\int_{xmin}^{xmax} f dx$
 Integrate[f, {x, xmin, xmax}, {y, ymin, ymax}] $\int_{xmin}^{xmax} \int_{ymin}^{ymax} f dx dy$

Příklady:

In[1] := **Integrate**[**x**ⁿ, **x**]
 Out[1] =
$$\frac{x^{1+n}}{1+n}$$
 $\int x^n dx$

| | |
|---|---------------------------------------|
| In[2]:=Integrate[x^n,{x, 0, 1}] | $\int_0^1 x^n dx$ |
| Out[2]= | |
| $\frac{1}{1+n} \frac{\text{Limit}[x^{1+n}, x \rightarrow 0, \text{Direction} \rightarrow -1]}{1+n}$ | |
| In[3]:=Integrate[x^4,{x, 0, 1}] | $\int_0^1 x^4 dx$ |
| Out[3]= $\frac{1}{5}$ | |
| In[4]:=Integrate[x^2+y^2,{x, 0, 1},{y, 0, x}] | $\int_0^1 \int_0^1 (x^2 + y^2) dx dy$ |
| Out[4]= $\frac{1}{3}$ | |
| In[5]:=Integrate[x y, {x, 0, 1}, {y, 0, x}] | $\int_0^1 \int_0^x x y dy dx$ |
| Out[5]= $\frac{1}{8}$ | |

D.2.5 Suma a součin

Obečný příkaz pro sumu má tvar:

| | |
|---|---|
| Sum[f, {i, imax}] | $\sum_{i=1}^{imax} f$ |
| Sum[f, {i, imin, imax}] | $\sum_{i=imin}^{imax} f$ |
| Sum[f, {i, imin, imax, di}] | (zde je krok roven di) |
| Sum[f, {i, imin, imax}, {j, jmin, jmax}, ...] | $\sum_{i=imin}^{imax} \sum_{j=jmin}^{jmax} \dots f$ |

Příklady:

| | |
|---|-------------------------------------|
| In[1]:=Sum[x^i/i,{i,1,7}] | $\sum_{i=1}^7 \frac{x^i}{i}$ |
| Out[1]= | |
| $x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} + \frac{x^4}{4} + \frac{x^5}{5} + \frac{x^6}{6} + \frac{x^7}{7}$ | |
| In[2]:=Sum[1/i^3,{i, 1, 5}] | $\sum_{i=1}^5 \frac{1}{i^3}$ |
| Out[2]= | |
| $\frac{256103}{216000}$ | |
| In[3]:=N[%] | (vyčíslení výsledku |
| Out[3]=1.18566 | na 6 platných míst) |
| In[4]:=Sum[i^(-3),{i, 1, Infinity}] | $\sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{x^3}$ |
| Out[4]=Sum[i^(-3), {i, 1, Infinity}] | |
| In[5]:=N[%] | (vyčíslení výsledku |
| Out[5]=1.20206 | na 6 platných míst) |

In[6]:=Sum[xⁱ y^j,{i, 1, 3},{j, 1, i}]
 Out[6]=x y + 2 x² y² + 3 x³ y³

Obečný příkaz pro součin má tvar:

| | |
|---|---|
| Product[f, {i, imax}] | $\prod_{i=1}^{imax} f$ |
| Product[f, {i, imin, imax}] | $\prod_{i=imin}^{imax} f$ |
| Product[f, {i, imin, imax, di}] | (zde je krok roven di) |
| Product[f, {i, imin, imax}, {j, jmin, jmax}, ...] | $\prod_{i=imin}^{imax} \prod_{j=jmin}^{jmax} \dots f$ |

Příklady:

| | |
|---|-----------------------|
| In[7]:=Product[x+i, {i, 1, 4}] | $\prod_{i=1}^4 x + i$ |
| Out[7]=(1 + x) (2 + x) (3 + x) (4 + x) | |
| In[8]:=Expand[%] | |
| Out[8]=24 + 50 x + 35 x ² + 10 x ³ + x ⁴ | |

D.2.6 Relační a logické operace

Tabulka relačních operátorů:

| | |
|--------|----------------------|
| x == y | rovnost |
| x != y | nerovnost |
| x > y | větší než |
| x >= y | větší nebo rovno než |
| x < y | menší než |
| x <= y | menší nebo rovno než |

Příklady:

| | |
|---|--|
| In[1]:=f[x_]:=x ³ -3 x ² +x-5 | Tímto příkazem definuji funkci $f(x) = x^3 - 3x^2 + x - 5$ |
| In[2]:=f[5]>0 | |
| Out[2]=True | |

Tabulka logických operátorů:

| | |
|--------|--------------|
| !p | negace |
| p && q | logické a |
| p q | logické nebo |

Příklady:

| | |
|---------------------------------|--|
| In[3]:=g[x_]:=D[f[x], x] | Tímto příkazem definuji derivaci funkce f(x) |
| Out[3]=1 - 6x + 3x ² | |

In[4]:=f[5]>0 && g[5]<0
 Out[4]=False

D.2.7 Řešení rovnic

Tento odstavce se bude týkat pouze rovnic, které lze řešit analyticky. Obecný příkaz pro řešení algebraických rovnic má tvar:

Solve[ls==ps, x] řeší rovnici pro x
 Solve[{ls1==ps1, ls2==ps2, ...}, {x, y, ...}] řeší soustavu rovnic pro x, y, ...

Příklady:

In[1]:=Solve[x^2+2 x-7==0, x]
 Out[1]=

$$\left\{ \left\{ x \rightarrow \frac{-2 - 4 \text{Sqrt}[2]}{2} \right\}, \left\{ x \rightarrow \frac{-2 + 4 \text{Sqrt}[2]}{2} \right\} \right\}$$

In[2]:=N[%]
 Out[2]={{x → 1.82843}, x → -3.82843}}

In[3]:=Solve[a x^2+b x+c==0,x]
 Out[3]=

$$\left\{ \left\{ x \rightarrow \frac{-b - \text{Sqrt}[b^2 - 4 a c]}{2 a} \right\}, \left\{ x \rightarrow \frac{-b + \text{Sqrt}[b^2 - 4 a c]}{2 a} \right\} \right\}$$

In[4]:=Solve[x^2+y^2==1, x+3 y==0, x, y]
 Out[4]=

$$\left\{ \left\{ x \rightarrow \frac{-3}{\text{Sqrt}[10]}, y \rightarrow \frac{1}{\text{Sqrt}[10]} \right\}, \left\{ x \rightarrow \frac{3}{\text{Sqrt}[10]}, y \rightarrow -\frac{1}{\text{Sqrt}[10]} \right\} \right\}$$

D.2.8 Řešení diferenciálních rovnic

Obecný příkaz pro řešení diferenciálních rovnic má tvar:

DSolve[difr, y[x], x] řeší diferenciální rovnici difr pro y[x],
 x bere jako nezávisle proměnnou
 DSolve[{difr1, ...}, {y1[x1, ...], ...}, x] řeší soustavu diferenciálních rovnic

Příklady:

In[1]:=DSolve[y'[x]==a y[x],y[x],x]
 Out[1]={{y[x] → E^{a x} C[1]}}

In[2]:=DSolve[{y'[x]==a y[x], y[0]==1}, y[x], x]
 Out[2]={{y[x] → E^{a x}}}

In[3]:=DSolve[y''[x]==y[x], y[x], x]
 Out[3]=

$$\left\{ \left\{ y[x] \rightarrow \frac{C[1]}{E^x} + E^x C[2] \right\} \right\}$$

```
In[4]:=DSolve[{x'[t]==y[t],y'[t]==x[t]},{x[t],y[t]},t]
Out[4]=
  {{x[t] -> (1/(2 E^t) + E^t/2) C[1] + (-1/(2 E^t) + E^t/2) C[2],
    y[t] -> (-1/(2 E^t) + E^t/2) C[1] + (1/(2 E^t) + E^t/2) C[2]}}
```

D.2.9 Limity

Obecný příkaz pro limitu má tvar:

Limit[f, x->a, volba] hledá limitní hodnotu funkce f, když x se blíží k a

Jestliže chceme počítat limitu zprava, musíme napsat volbu Direction->-1, pro limitu zleva napíšeme Direction->1. V případě, že volbu vynecháme, předpokládá se, že počítáme limitu zprava.

Příklady:

| | |
|--|---|
| In[1]:=Limit[Sin[x]/x, x->0] | $\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin x}{x}$ |
| Out[1]=1 | |
| In[2]:=Limit[1/x, x->0, Direction->-1] | $\lim_{x \rightarrow 0} \frac{1}{x}$ |
| Out[2]=Infinity | ∞ |
| In[3]:=Limit[1/x, x->0, Direction->1] | $\lim_{x \rightarrow 0} \frac{1}{x}$ |
| Out[3]=-Infinity | $-\infty$ |

D.3 Numerická matematika

Jestliže chceme řešit integrál, sumu, algebraické rovnice nebo diferenciální rovnice numericky, stačí napsat před příslušný příkaz velké N. Vyjímkou je pouze příkaz pro iterační výpočet kořenů rovnic, jeho popis si ukážem později.

D.3.1 Integrál, součet

Příklady:

| | |
|---|---|
| In[1]:=NIntegrate[Sin[Sin[x]], {x, 1, 2}] | numerická aproximace integrálu $\int_1^2 \sin(\sin x) dx$ |
| Out[1]=0.81645 | |
| In[2]:=NSum[1/i^3, {i, 1, Infinity}] | numerická aproximace sumy $\sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i^3}$ |
| Out[2]=1.20206 | |

D.3.2 Řešení rovnic

Pro numerický výpočet kořenů algebraických rovnic používá Mathematica příkaz `NSolve`, jeho použití si ukážem na příkladu. Pro ostatní funkce používá Mathematica k hledání kořenů Newtonovu metodu, příkaz má v tomto případě tvar:

| | |
|---------------------------------------|--|
| <code>FindRoot[ls==ps, {x, a}]</code> | hledá kořen rovnice Newtonovou metodou s nultou aproximací $x = a$ |
|---------------------------------------|--|

Příklady:

```
In[1]:=NSolve[x^5+x+1==0, x]
Out[1]={{x -> -0.754878}, {x -> -0.5 - 0.866025 I}, {x -> -0.5 + 0.866025 I},
        {x -> 0.877439 - 0.744862 I}, {x -> 0.877439 + 0.744862 I}}

In[2]:=FindRoot[3 Cos[x]==Log[x], {x, 1}]
Out[2]={{x -> 1.44726}}
```

D.3.3 Řešení diferenciálních rovnic

Oběcný příkaz pro numerické řešení diferenciálních rovnic má tvar:

| | |
|---|---|
| <code>NDSolve[difr, y[x], {x, xmin, xmax}]</code> | hledá řešení diferenciální rovnice pro $y[x]$ s nezávisle proměnnou x na intervalu $\langle \text{xmin}, \text{xmax} \rangle$ |
| <code>NDSolve[{difr1, ...}, {y1[x1, ...], ...}, {x, xmin, xmax}]</code> | řeší numericky soustavu diferenciálních rovnic |

Příklady:

```
In[1]:=NDSolve[{y'[x]==y[x], y[0]==1}, y, {x, 0, 2}]
Out[1]={{y -> InterpolatingFunction[{0., 2.}, <>]}}
```

`NDSolve` vrací výsledek jako objekty interpolační funkce, které jsou na výstupu označeny symbolem `<>` (tabulku uzlů a hodnot). Hodnoty výsledné funkce y mohou získat následujícím příkazem:

```
In[2]:=y[1.5]/.%
Out[2]={{4.48171}}
```

nebo si mohou zobrazit její graf:

```
In[3]:=Plot[Evaluate[y[x]/.%,1],{x,0.0,2.0}]
```

Podrobněji o zobrazování grafů viz část pojednávající o grafice odstavce D.5.

D.4 Lineární algebra

Nejdříve si zavedeme seznam objektů:

$$\{o_1, o_2, o_3, \dots, o_n\}$$

Objekty mohou být čísla, funkce, rovnice, grafy, seznamy atd. Vektory a matice budeme vyjadřovat pomocí těchto seznamů.

| | |
|---|--|
| $\{a_1, a_2, a_3, \dots, a_n\}$ | vektor (a_1, a_2, \dots, a_n) |
| $\{\{a_{11}, a_{12}, \dots, a_{1m}\}, \dots, \{a_{m1}, a_{m2}, \dots, a_{mn}\}\}$ | matice |
| | $\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix}$ |

Příklady:

In[1]:={2, -1, 2, -3} vektor (2, -1, 2, -3)

Out[1]={2, -1, 2, -3}

In[2]:=M={{1, 2}, {2, 3}} definuji matici

Out[2]={{1, 2}, {2, 3}}

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}$$

In[3]:=MatrixForm[M] zobrazí matici v maticovém tvaru

Out[3]=//MatrixForm =

$$\begin{array}{cc} 1 & 2 \\ 2 & 3 \end{array}$$

In[4]:=M[[1]] označuje první řádek matice

Out[4]={1, 2}

In[5]:=M[[1, 2]] označuje prvek m_{12} matice

Out[5]=2

Matice můžeme definovat také následujícím příkazem:

| | |
|--|---|
| Table[f(i, j), {i, imin, imax, di}, {j, jmin, jmax, dj}, ...] | imin je počáteční hodnota pro i, imax koncová hodnota a di je krok, podobně pro j. Jestliže imin a di chybí, předpokládá se, že mají hod- notu 1. |
|--|---|

DiagonalMatrix[seznam] definuje diagonální matici

Příklady:

In[6]:=K=Table[i+j, {i, 2}, {j, 2}]
Out[6]={{2, 3}, {3, 4}}

definuji matici

$$M = \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}$$

In[7]:=D=DiagonalMatrix[{1, 2, 3}]
Out[7]={{1, 0, 0}, {0, 2, 0}, {0, 0, 3}}

definuji matici

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

Nyní, když máme definované matice, můžeme provádět maticové operace.

Příklady:

In[8]:=3 M
Out[8]={{3, 6}, {6, 9}}

násobení matice skalárem

In[9]:=M.K
Out[9]={{8, 11}, {13, 18}}

násobení matic

In[10]:=Inverse[M]
Out[10]={{-3, 2}, {2, -1}}

inverzní matice

In[11]:=Det[M]
Out[11]=-1

determinant matice

In[12]:=Eigenvalues[M]
Out[12]=
$$\left\{ \frac{4 - 2 \sqrt{5}}{2}, \frac{4 + 2 \sqrt{5}}{2} \right\}$$

vlastní čísla matice

In[13]:=Eigenvectors[M]
Out[13]=
$$\left\{ \left\{ \frac{-1 - \sqrt{5}}{2}, 1 \right\}, \left\{ \frac{-1 + \sqrt{5}}{2}, 1 \right\} \right\}$$

vlastní vektory matice

Nyní ukážeme podobné příklady pro matice 3×3 .

In[14]:=A={{1, 2, -1}, {2, 1, 0}, {-1, 1, 2}}
Out[14]={{1, 2, -1}, {2, 1, 0}, {-1, 1, 2}}

In[15]:=B={{1, 1, 1}, {0, 1, 0}, {1, 2, -1}}
Out[15]={{1, 1, 1}, {0, 1, 0}, {1, 2, -1}}

```

In[16]:=2 B
Out[16]={{2, 2, 2}, {0, 2, 0}, {2, 4, -2}}

In[17]:=A.B
Out[17]={{0, 1, 2}, {2, 3, 2}, {1, 4, -3}}

In[18]:=Inverse[B]
Out[18]=
  {{1/2, -(3/2), 1/2}, {0, 1, 0}, {1/2, 1/2, -(1/2)}}

In[19]:=Det[B]
Out[19]=-2

In[20]:=Eigenvalues[B]
Out[20]={1, -Sqrt[2], Sqrt[2]}

In[21]:=Eigenvectors[B]
Out[21]={{4, -1, 1}, {1 - Sqrt[2], 0, 1}, {1 + Sqrt[2], 0, 1}}

```

Příkaz pro řešení soustavy lineárních rovnic $Ax = b$ má tvar:

```
LinearSolve[A, b]
```

Příklad:

```

In[22]:=A={{ 1,2,1} ,{ -1,1,1} ,{ -2,1,2} }
Out[22]={{1, 2, 1}, {-1, 1, 1}, {-2, 1, 2}}

In[23]:=b={{ 1,2,-1} }
Out[23]={{1, 2, -1}}

In[24]:=LinearSolve[A, b]
Out[24]={{-3, 5, -6}}

```

D.5 Grafika

D.5.1 Graf funkce $f(x)$

Příkaz pro zobrazení grafu funkce jedné reálné proměnné má tvar:

| | |
|---------------------------------|---|
| Plot[f, {x, xmin, xmax}, volby] | zobrazí graf funkce $f(x)$ pro x z intervalu $\langle \text{xmin}, \text{xmax} \rangle$ |
| Show[graf, volby] | zobrazí již nakreslený graf s jinými grafickými parametry (volbami) |

Uvedeme si zde pouze některé volby:

| | |
|----------------|--|
| AspectRatio->r | poměr mezi výškou a šířkou grafu (implicitní hodnota je $2/(1 + \sqrt{5})$) |
|----------------|--|

PlotRange \rightarrow {ymin, ymax}

Axes \rightarrow True|False

AxesLabel \rightarrow {xlabel, ylabel}|None

Ticks \rightarrow {{x1,x2,...},{y1,y2,...}}

rozsah osy y bude od ymin do ymax
zobrazení nebo nezobrazení os (implicitně je True)

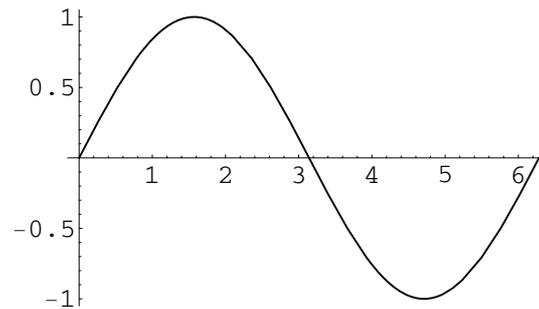
popis os (implicitně je None)

zobrazení značek a číselných hodnot

Příklady:

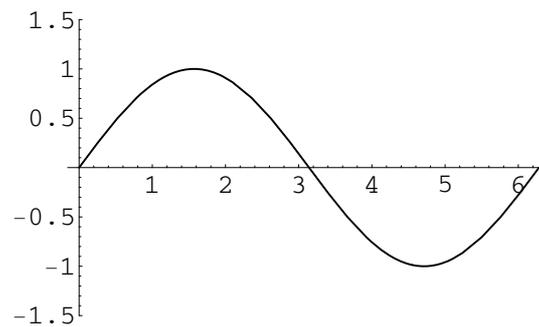
```
In[1]:=Plot[Sin[x], {x, 0, 2 Pi}]
```

Out[1] =



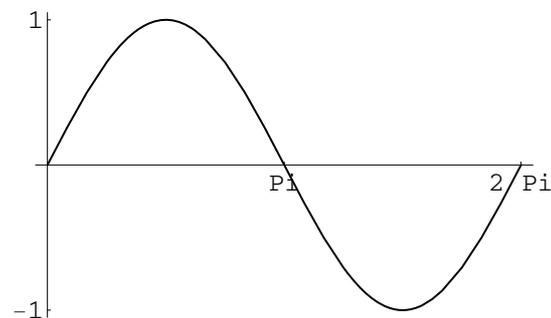
```
In[2]:=Plot[Sin[x], {x, 0, 2 Pi}, PlotRange  $\rightarrow$  {-1.5, 1.5}]
```

Out[2] =



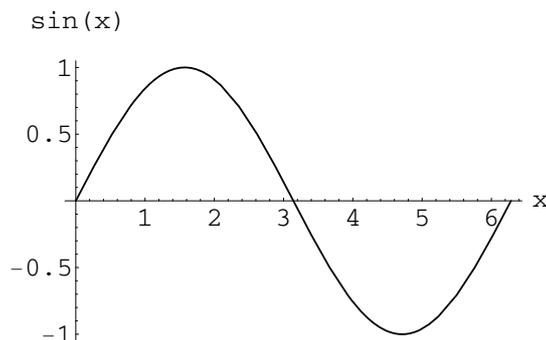
```
In[3]:=Plot[Sin[x], {x, 0, 2 Pi}, Ticks  $\rightarrow$  {{Pi, 2Pi},{-1, 1}}]
```

Out[3] =



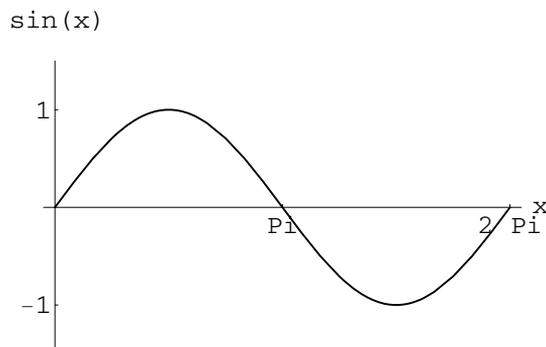
```
In[4]:=Plot[Sin[x], {x, 0, 2 Pi}, AxesLabel->{"x", "sin(x)"}]
```

```
Out[4]=
```



```
In[5]:=Plot[Sin[x], {x, 0, 2 Pi},  
PlotRange->{-1.5, 1.5},  
AxesLabel->{"x", "sin(x)"},  
Ticks->{{Pi, 2Pi},{-1, 1}}]
```

```
Out[5]=
```



D.5.2 Graf funkce $f(x, y)$

Příkaz pro zobrazení grafu funkce dvou reálných proměnných má tvar:

```
Plot3D[f, {x, xmin, xmax}, {y, ymin, ymax},  
volby]
```

zobrazí graf funkce $f(x, y)$ pro x z intervalu $\langle \text{xmin}, \text{xmax} \rangle$ a y z intervalu $\langle \text{ymin}, \text{ymax} \rangle$

```
Show[graf, volby]
```

zobrazí již nakreslený graf s jinými grafickými parametry (volbami)

Volby Axes, AxesLabel, PlotRange jsou stejné jako u příkazu Plot. Navíc můžeme použít volby:

```
PlotPoints->{xpoc, ypoc}
```

počet dělicích bodů zobrazovací sítě (xpoc je počet bodů na ose x , ypoc na ose y)

BoxRatios \rightarrow {xr, yr, zr}

poměr mezi stranami kvádru,
do kterého se graf zobrazuje (implicitní hodnota je {1, 1, 0.4})

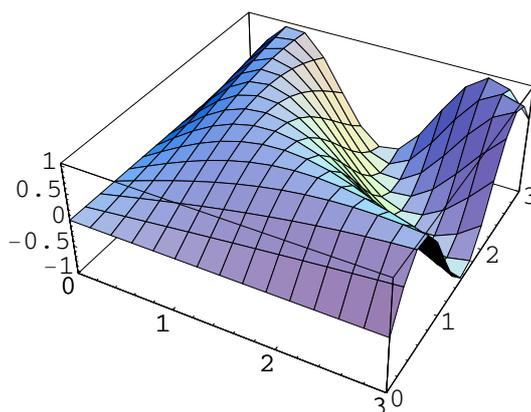
ViewPoint \rightarrow {xp, yp, zp}

souřadnice bodu, z kterého se díváme na objekt (implicitní hodnota {1.3, -2.4, 2})

Příklady:

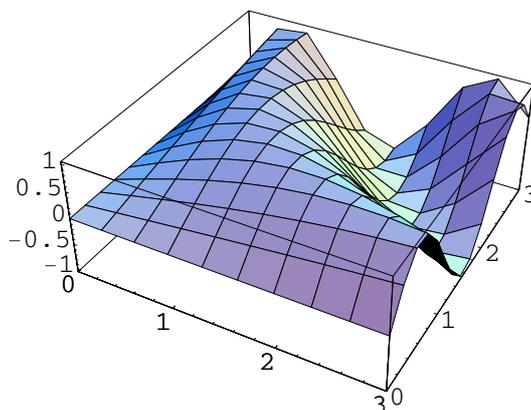
```
In[1]:=Plot3D[Sin[x y], {x, 0, 3}, {y, 0, 3}]
```

Out[1] =



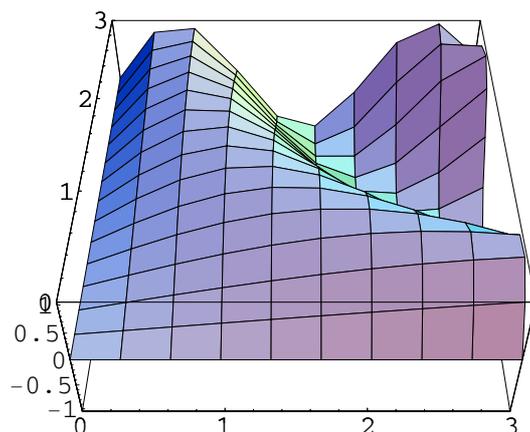
```
In[2]:=Plot3D[Sin[x y], {x, 0, 3}, {y, 0, 3}, PlotPoints  $\rightarrow$  {20, 30}]
```

Out[2] =



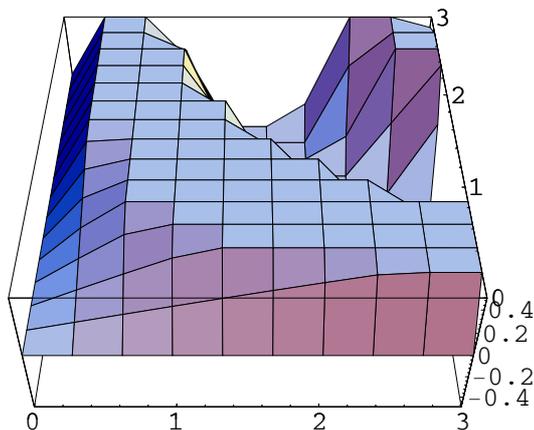
```
In[3]:=Plot3D[Sin[x y], {x, 0, 3}, {y, 0, 3},  
PlotPoints  $\rightarrow$  {20, 30},  
ViewPoint  $\rightarrow$  {0, -2, 2}]
```

Out[3] =



In[4]:=Show[%3,PlotRange->{-0.5, 0.5}]

Out[4] =



D.5.3 Graf křivky zadané parametricky

Příkaz pro zobrazení grafu funkce zadané parametricky má tvar:

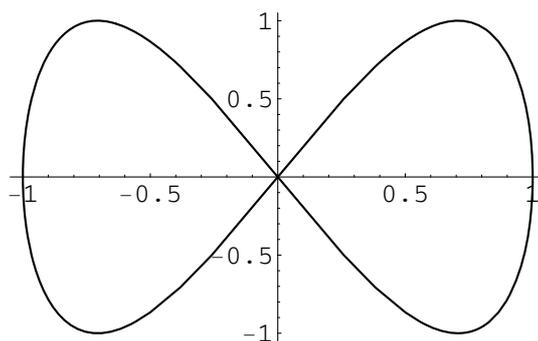
`ParametricPlot[{fx, fy}, {t, tmin, tmax}, volby]` zobrazuje parametricky zadané křivky v R^2

`ParametricPlot3D[{fx, fy, fz}, {t, tmin, tmax}, volby]` zobrazuje parametricky zadané křivky v R^3

Příklady:

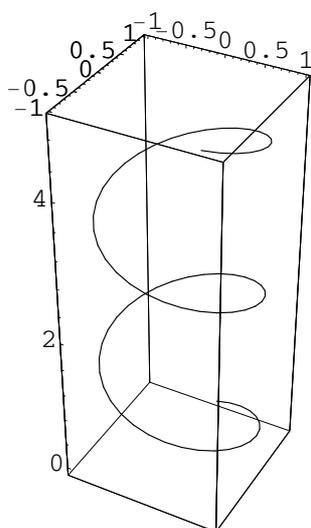
In[1]:=ParametricPlot[{Sin[t], Sin[2 t]}, {t, 0, 2 Pi}]

Out[1] =



In[2]:=ParametricPlot3D[{Sin[t], Cos[t], t/3}, {t, 0, 15}]

Out[2] =



Také zde můžeme použít volby jako v předchozích dvou odstavcích.

D.6 Čtení dat ze souboru, výpis dat do souboru

Příkazy pro čtení a výpis dat má tvar:

```
stream=OpenRead["jméno"]
```

```
Read[stream,type]
```

```
ReadList[stream,type]
```

```
stream=OpenWrite["jméno"]
```

```
stream=OpenAppend["jméno"]
```

```
Write[stream, v1, v2, ...]
```

```
Close[stream]
```

```
SetStreamPosition[stream,n]
```

otevře soubor pro čtení

přečte objekt ze souboru, type je typ načítané hodnoty, např. Number)

přečte ze souboru seznam daného typu

otevře soubor pro zápis, (pokud existoval, smaže se jeho obsah)

otevře soubor pro přidávání

vypíše posloupnost výrazů do souboru, zápis ukončí novou řádkou

uzavře příslušný soubor

nastavení čtecí a zapisovací pozice

!!jméno

vypíše obsah souboru

Předpokládejme, že máme vytvořen soubor, který jsme nazvali "soubor.dat". Soubor, do kterého budeme psát nazvěme "soubor.out". Dále předpokládejme, že v souboru "soubor.dat" jsou zapsána následující data:

```
1  2  1
3 -1  4
```

Příklady:

```
In[1]:=f1=Open["soubor.dat"]           otevře soubor "soubor.dat"
Out[1]=InputStream[soubor.dat, 3]
```

```
In[2]:=Read[f1,Number]                 přečte jedno číslo ze souboru
Out[2]=1
```

```
In[3]:=Read[f1,{Number,Number}]       přečte dvě čísla a vloží je do
Out[3]={2, 1}                           seznamu
```

```
In[4]:=SetStreamPosition[f1,0]         nastaví se na začátek sou-
Out[4]=0                                 boru
```

```
In[5]:=ReadList[f1,Number ]           přečte všechna data až do
Out[5]={1, 2, 1, 3, -1, 4}             konce souboru a uloží je do
                                         seznamu
```

```
In[6]:=ReadList[f1,{Number,Number,Number}] přečte všechna data až do
Out[6]={{1, 2, 1}, {3, -1, 4}}         konce souboru a uloží je do
                                         seznamu podle masky
```

```
In[7]:=!!soubor.dat                   vypíše celý obsah souboru
Out[7]= 1 2 1                           "soubor.dat"
        3 -1 4
```

```
In[8]:=Close[f1]                       uzavře soubor "soubor.dat"
Out[8]=soubor.dat
```

```
In[9]:=f2=OpenWrite["soubor.out"]     otevře pro zápis soubor
Out[9]=OutputStream[soubor.out,5]     "soubor.out"
```

```
In[10]:=a=0.12345
Out[10]=0.12345
```

| | |
|----------------------|---|
| In[11]:=Write[f2,a] | zapiše <i>a</i> do souboru |
| In[12]:=Close[f2] | uzavře soubor "soubor.out" |
| Out[12]=soubor.out | |
| In[13]:=!!soubor.out | vypíše celý obsah souboru "soubor.out" |
| Out[13]=0.12345 | |

D.7 Fourierova transformace

Nyní si ukážeme použití Mathematicy pro výpočty z kapitoly 4 a 5.

D.7.1 Analytické výpočty FT

Součástí programu Mathematica je soubor programů (Mathematica Packages), které rozšiřují některé okruhy Mathematicy. Jedním takovým souborem je soubor pro Fourierovu transformaci. Pomocí těchto programů lze počítat analyticky některé FT. Příkazy pro výpočet DFT jsou součástí standardní části Mathematicy, ale to si ukážeme později. Nejdříve musíme Mathematice sdělit, který soubor programů chceme používat. V našem případě napíšeme příkazy:

| | |
|---------------------------------|---|
| <<Calculus'FourierTransform' | zavedeme do paměti soubor programů pro FT |
| \$FourierFrequencyConstant=-2Pi | definuje konstantu (pro naši definici FT je potřeba tuto konstantu definovat) |

Příkazy pro FT a IFT mají tvar:

| | |
|--------------------------------|--|
| FourierTransform[s,t,ν] | $\int_{-\infty}^{\infty} s(t)e^{-2\pi i\nu t} dt$ |
| InverseFourierTransform[S,ν,t] | $\int_{-\infty}^{\infty} S(t)e^{2\pi i\nu t} d\nu$ |
| DiracDelta[t] | Diracova funkce δ |

Nyní si spočítáme některé příklady a cvičení z kapitoly 4. Tato část může sloužit také jako kontrola výsledků uvedených cvičení.

```
In[1]:= <<Calculus'FourierTransform'
In[2]:= $FourierFrequencyConstant=-2Pi
Out[2]= -2Pi
```

Příklad 4.1

| | |
|---|--|
| In[3]:= FourierTransform[Exp[-Abs[t], t, ν] | $\int_{-\infty}^{\infty} e^{- t } e^{-2\pi i\nu t} dt$ |
| Out[3]= | $\frac{2}{1 + 4\pi^2 \nu^2}$ |

Příklad 4.3

$$\begin{aligned} \text{In}[4] &:= \text{FourierTransform}[\text{Exp}[-\text{Pi } t^2], t, \nu] & \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\pi t^2} e^{-2\pi i \nu t} dt \\ \text{Out}[4] &= E^{-(\text{Pi} \nu^2)} \end{aligned}$$

Cvičení 4.1

$$\begin{aligned} \text{In}[5] &:= \text{FourierTransform}[\text{Exp}[-a t^2], t, \nu] & \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a t^2} e^{-2\pi i \nu t} dt \\ \text{Out}[5] &= \frac{\text{Sqrt}[\text{Pi}]}{\text{Sqrt}[a] E^{(\text{Pi}^2 \nu^2)/a}} \end{aligned}$$

Příklad 4.4

$$\begin{aligned} \text{In}[6] &:= \text{FourierTransform}[t \text{ Exp}[-a t^2], t, \nu] & \int_{-\infty}^{\infty} t e^{-a t^2} e^{-2\pi i \nu t} dt \\ \text{Out}[6] &= \frac{I \text{Pi}^{3/2} \nu}{a^{3/2} E^{(\text{Pi}^2 \nu^2)/a}} \end{aligned}$$

Příklad 4.5

$$\begin{aligned} \text{In}[7] &:= \text{FourierTransform}[\text{Exp}[-a \text{ Abs}[t], t, \nu] & \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a|t|} e^{-2\pi i \nu t} dt \\ \text{Out}[7] &= \frac{2a}{a^2 + 4\text{Pi}^2 \nu^2} \end{aligned}$$

Cvičení 4.3

$$\begin{aligned} \text{In}[8] &:= \text{FourierTransform}[\text{Exp}[-2 \text{ Pi } a \text{ Abs}[t], t, \nu] & \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\pi a|t|} e^{-2\pi i \nu t} dt \\ \text{Out}[8] &= \frac{4a\text{Pi}}{4a^2\text{Pi}^2 + 4\text{Pi}^2 \nu^2} \\ \text{In}[9] &:= \text{Cancel}[\%] & \text{pokracení zlomku} \\ \text{Out}[9] &= \frac{a}{\text{Pi}(a^2 + \nu^2)} \end{aligned}$$

Příklad 4.7

$$\begin{aligned} \text{In}[10] &:= \text{FourierTransform}[\text{DiracDelta}[t-t_0], t, \nu] & \int_{-\infty}^{\infty} \delta(t - t_0) e^{-2\pi i \nu t} dt \\ \text{Out}[10] &= E^{-2I \text{Pi } t_0 \nu} \end{aligned}$$

Příklad 4.9

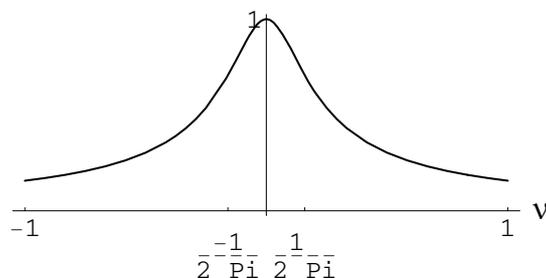
$$\begin{aligned} \text{In}[11] &:= \text{FourierTransform}[1, t, \nu] & \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\pi i \nu t} dt \\ \text{Out}[11] &= \text{DiracDelta}[\nu] \end{aligned}$$

Cvičení 4.4

```
In[12]:=Plot[Abs[1/(1+2 Pi νI)], {ν, -1.0,1.0}, AspectRatio->0.4,
  Ticks->{{-1,-1/(2 Pi),1/(2 Pi),1},{1}},
  AxesLabel->{"ν",None}]
```

graf $\left| \frac{1}{1 + 2\pi\nu i} \right|$

Out[12] =



Cvičení 4.5

```
In[13]:=FourierTransform[Cos[2 Pi ν1 t]
  Cos[2 Pi ν2 t],t,ν]
```

$$s(t) = \cos(2\pi\nu_1 t) \cos(2\pi\nu_2 t)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} s(t)e^{-2\pi i\nu t} dt$$

$$\text{Out[13]} = \frac{\text{DiracDelta}\left(\nu + \frac{-2\text{Pi}\nu_1 - 2\text{Pi}\nu_2}{2\text{Pi}}\right)}{4} +$$

$$\frac{\text{DiracDelta}\left(\nu + \frac{2\text{Pi}\nu_1 - 2\text{Pi}\nu_2}{2\text{Pi}}\right)}{4} +$$

$$\frac{\text{DiracDelta}\left(\nu + \frac{-2\text{Pi}\nu_1 + 2\text{Pi}\nu_2}{2\text{Pi}}\right)}{4} +$$

$$\frac{\text{DiracDelta}\left(\nu + \frac{2\text{Pi}\nu_1 + 2\text{Pi}\nu_2}{2\text{Pi}}\right)}{4}$$

Cvičení 4.6

```
In[13]:=FourierTransform[Exp[-2 Pi a Abs[t]]
  Cos[2 Pi ν0 t],t,ν]
```

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\pi a|t|} \cos(2\pi\nu_2 t) e^{-2\pi i\nu t} dt$$

Out[13] =

$$\frac{2 a \text{Pi}}{4 a^2 \text{Pi}^2 + 4 \text{Pi}^2 \nu^2 - 8 \text{Pi}^2 \nu \nu_0 + 4 \text{Pi}^2 \nu_0^2} +$$

$$\frac{2 a \text{Pi}}{4 a^2 \text{Pi}^2 + 4 \text{Pi}^2 \nu^2 + 8 \text{Pi}^2 \nu \nu_0 + 4 \text{Pi}^2 \nu_0^2}$$

```
In[14]:=Cancel[%]
```

pokráčí zlomky

$$\text{Out[14]} = \frac{a}{2\text{Pi} (a^2 + \nu^2 - 2\nu\nu_0 + \nu_0^2)} + \frac{a}{2\text{Pi} (a^2 + \nu^2 + 2\nu\nu_0 + \nu_0^2)}$$

D.7.2 Dekonvoluce

Nyní si ukažeme dekonvoluci pomocí programu Mathematica. Jestliže použijeme pro signál některou apodizační funkci, nemůžeme pro výpočet spektra využít programy pro analytické výpočty FT (v případě nespojitých funkcí programy selhávají). K výpočtům použijeme prosté integrace pomocí příkazu **Integrate**.

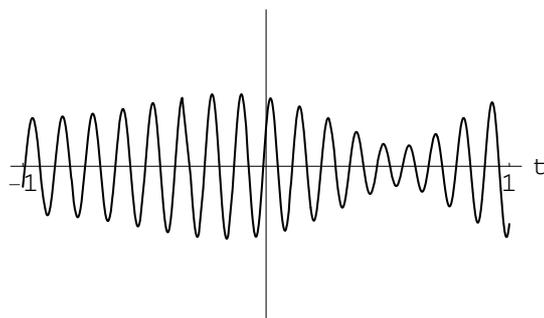
Předpokládejme, že máme signál $s(t) = \cos(17\pi t) + 0.95 \sin(16\pi t) + 0.5 \sin(17.6\pi t)$. Spektrum tohoto signálu má špatně rozlišitelné píky, použijem tedy dekonvoluci k lepší rozlišitelnosti píků.

```
In[1]:=s[t_]=Cos[17 Pi t]+0.95 Sin[16 Pi t]+      signál s(t)
          0.5 Sin[17.6 Pi t]
```

```
Out[1]=
Cos[17 Pi t] + 0.95 Sin[16 Pi t] + 0.5 Sin[17.6 Pi t]
```

```
In[2]:=Plot[s[t],{t,-1,1}, PlotRange->{-4,4},      graf signálu s(t)
          Ticks->{{-1,1},None},
          AxesLabel->{"t",None}]
```

```
Out[2]=
```



```
In[3]:=S[ν_]=Integrate[s[t] Exp[-2 Pi I ν t],      spektrum S(ν)
          {t,-1,1}]
```

```
Out[3]=...                                       výsledkem je dlouhý výraz,
          :                                       který zde nebudu uvádět
```

Po několika algebraických úpravách a výpočtech limit funkce $S(\nu)$ v bodech 8, 8.5, 8.8, dostaneme spektrum $S(\nu)$ v následujícím tvaru:

```
In[6]:=S[ν_/;(ν!=8)&&(ν!=8.5)&&(ν!=8.8)]=      spektrum S(ν)
          S[ν]
```

```
S[ν_/;(ν==8)]=0.859902
```

```
S[ν_/;(ν==8.5)]=1.03027
```

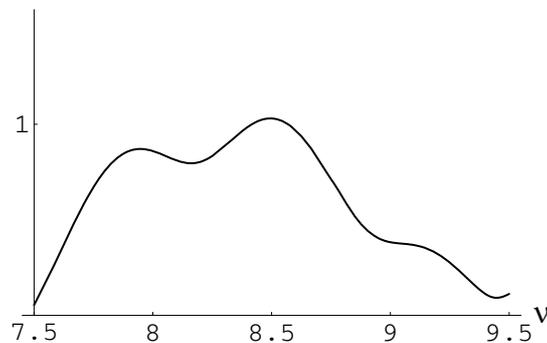
```
S[ν_/;(ν==8.8)]=0.611024
```

Out[6] =

$$\begin{aligned} & -2 E^{21\text{Pi}\nu} (48809.4 - 2757.32 I \nu - 1322.9 \nu^2 + 76.6493 I \nu^3 + \\ & \quad 8.95967 \nu^4 - 0.524472 I \nu^5) / \\ & \quad \text{Pi}(-77.44 + \nu^2)(-64 + \nu^2)(-289 + 4 \nu^2) + \\ & 2 E^{-21\text{Pi}\nu} (48809.4 - 7155. I \nu - 1322.9 \nu^2 + 206.231 I \nu^3 + \\ & \quad 8.95967 \nu^4 - 1.47553 I \nu^5) / \\ & \quad \text{Pi}(-77.44 + \nu^2)(-64 + \nu^2)(-289 + 4 \nu^2) \end{aligned}$$

In[7] := **Plot**[**Abs**[**S**[ν]],{ ν ,7.5,9.5}, graf spektra $S(\nu)$
PlotRange -> {0,1.6},
Ticks -> {{7.5,8.0,8.5,9.0,9.5},1},
AxesLabel -> {" ν ",None},
AxesOrigin -> {7.5,0.0}]

Out[7] =



In[8] := **l**[**t**_/(;(**t**>=0.0)&&(t<=0.975))] = volíme funkci $l(t)$
6 t^3 - 5.85 t^2 + 1.0

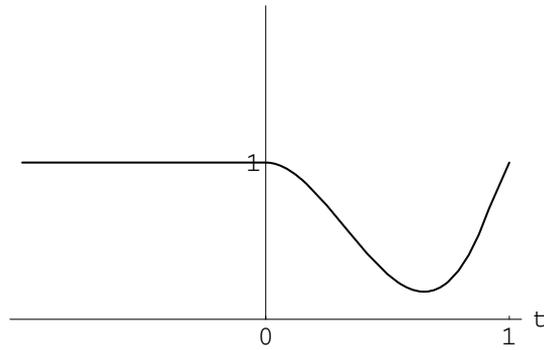
$$\mathbf{l[t_/(;t \geq 0.975)] = 1.0}$$

$$\text{Out[8]} = 1 - 5.85 t^2 + 6 t^3$$

$$\text{Out[9]} = 1.0$$

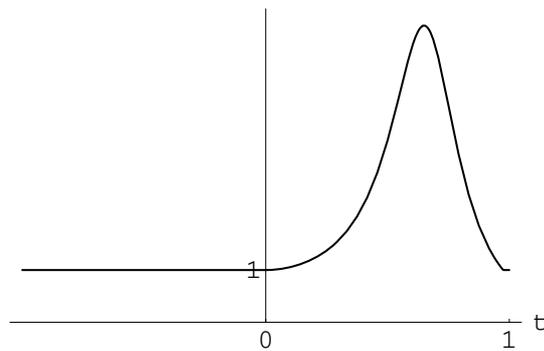
In[10] := **Plot**[**l**[**t**],{**t**,-1,1}, **PlotRange** -> {0,2}, graf funkce $l(t)$
Ticks -> {{0,1},{1}},
AxesLabel -> {"t",None}]

Out[10] =



In[11] := **Plot**[1/l[t],{t,-1,1}, **PlotRange** -> {0,6}, graf funkce $\frac{1}{l(t)}$
Ticks -> {{0,1},{1}},
AxesLabel -> {"t",None}]

Out[11] =



In[12] := **s1**[t_]=s[t]/l[t]

signál $s(t)$ nahradíme signálem $s_1(t) = \frac{1}{l(t)}s(t)$

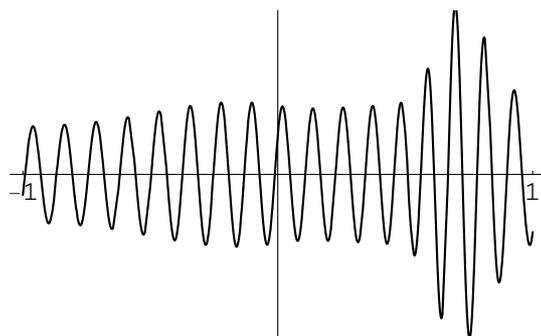
Out[12] =

$$\text{Cos}[17 \text{Pi } t] + 0.95 \text{Sin}[16 \text{Pi } t] + 0.5 \text{Sin}[17.6 \text{Pi } t]/l(t)$$

In[13] := **Plot**[s1[t],{t,-1,1},
PlotRange -> {-4.2,4.2},
Ticks -> {{-1,1},None},
AxesLabel -> {"t",None}]

graf signálu $s_1(t)$

Out[13] =



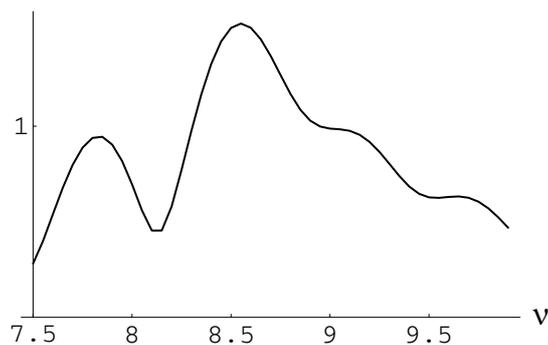
In[14] := **S1**[ν _] := **NIntegrate**[**s1**[ν] **Exp**[-2 **Pi** **I** ν **t**],
 {**t**, -1, 1}] dekonvol. spektrum $S1(\nu)$

In[15] := **data** = **Table**[{ ν , **S1**[ν]}, { ν , 7.5, 9.5}] tabulka dat dekonvolučního spektra $S1(\nu)$

Out[15] = {{7.5, 0.0885202 - 0.2668457 I}, ...
 ..., {9.9, 0.368966 + 0.288575 I}}

In[16] := **ListPlot**[**Abs**[**data**], **PlotJoined** -> **True**,
 PlotRange -> {0, 1.6},
 Ticks -> {{7.5, 8.0, 8.5, 9.0, 9.5}, {1}},
 AxesLabel -> {" ν ", **None**},
 AxesOrigin -> {7.5, 0.0}] graf dekonvolučního spektra $S1(\nu)$

Out[16] =



D.7.3 Diskrétní Fourierova transformace

Také diskrétní Fourierova transformace (DFT) je součástí programu Mathematica. Příkaz pro DFT má tvar:

| | |
|---|--|
| Fourier[{a ₀ , a ₁ , ...}] | diskrétní Fourierova transformace |
| InverseFourier[{a ₀ , a ₁ , ...}] | inverzní diskrétní Fourierova transformace |

K nakreslení diskrétního signálu {a₀, a₁, ...} použijeme příkaz:

| | |
|--|---|
| ListPlot[{{t ₀ , a ₀ }, {t ₁ , a ₁ }, ...], PlotJoined->True] | volba PlotJoined->True způsobí, že body jsou spojovány čarou |
|--|---|

Příklady:

```
In[1]:=dat=Table[N[Sin[10 2 Pi n/50]
+ (Random[]-1/2)],{n,0,49}]
```

Out[1]={-0.350701, 1.01418, ..., -1.39837} zde bude vypsáno 50 hodnot dat

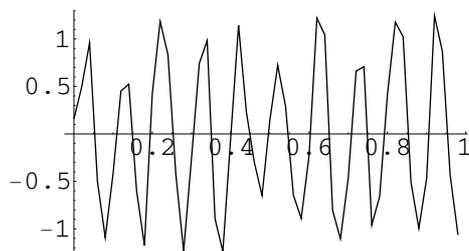
```
In[2]:=dat1=Table[{i/50,dat[[i]]}, {i,0,49}]
```

Out[2]={ {0, -0.350701}, {1, 1.01418}, ...
..., {49, -1.39837} }

```
In[3]:=ListPlot[dat1, PlotJoined->True]
```

Out[3]=

graf signálu



```
In[4]:=datf=Fourier[data]
```

Out[4]={-0.321784 + 0.I, -0.365289 + 0.364897I, ...
..., -0.365289 - 0.364897I} zde bude vypsáno 50 hodnot dat

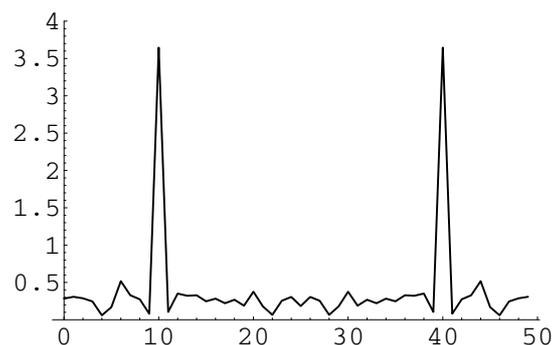
```
In[5]:=datf1=Table[{i,datf[[i]]}, {i,0,49}]
```

Out[5]={ {0, -0.321784 + 0.I},
..., {49, -0.365289 - 0.364897I} }

```
In[6]:=ListPlot[datf1, PlotJoined->True]
```

graf spektra

Out [6] =



D.7.4 Singulární rozklad matice

Příkaz pro singulární rozklad matice má tvar:

```
{U, S, V} = SingularValues[A],
```

kde A je matice, pro kterou chceme provést singulární rozklad. Do proměnné S nám program Mathematica uloží singulární hodnoty matice A , do ortogonální matice V uloží singulární vektory matice A (řádky matice jsou singulární vektory). Proměnné U , S , V odpovídají singulárnímu rozkladu $\mathbf{A} = \mathbf{U}^T \mathbf{\Sigma} \mathbf{V}$. Čtenář si snadno odvodí, jaké jsou matice \mathbf{U} a \mathbf{V} , provedeme-li rozklad $\mathbf{A} = \mathbf{U} \mathbf{\Sigma} \mathbf{V}^T$. Použití singulárního rozkladu si ukážeme na jednoduchém příkladu:

```
In[1] := A = { { 1., -1. } , { 2., 1. } , { -1., -1. } };
```

```
In[2] := MatrixForm[A]
```

```
Out[2] = 
$$\begin{pmatrix} 1. & -1. \\ 2. & 1. \\ -1. & -1. \end{pmatrix}$$

```

\mathbf{A} je matice 3×2

```
In[3] := {U, S, V} = SingularValues[A];
```

```
In[4] := MatrixForm[U]
```

```
Out[4] = 
$$\begin{pmatrix} -0.169031 & -0.845154 & 0.507093 \\ 0.948683 & -1.09484 \times 10^{-17} & 0.316228 \end{pmatrix}$$
 výpis matice  $\mathbf{U}$ 
```

```
In[5] := MatrixForm[DiagonalMatrix[S]]
```

```
Out[5] = 
$$\begin{pmatrix} 2.64575 & 0. \\ 0. & 1.41421 \end{pmatrix}$$
 výpis diagonální matice  $\mathbf{\Sigma}$ 
```

In[6]:=MatrixForm[U]

$$\text{Out}[6] = \begin{pmatrix} -0.894427 & -0.447214 \\ 0.447214 & -0.894427 \end{pmatrix}$$

výpis matice \mathbf{V}

Můžete se přesvědčit, že řádky matice \mathbf{V} jsou ortonormální.

In[7]:=U[[1]].U[[1]]

Out[7]=1.

$$(\vec{u}_1, \vec{u}_1) = 1.$$

In[8]:=U[[1]].U[[2]]

Out[8]=-2.47414 $\times 10^{-16}$

$$(\vec{u}_1, \vec{u}_2) = 0.$$

In[9]:=U[[2]].U[[2]]

Out[9]=1.

$$(\vec{u}_2, \vec{u}_2) = 1.$$

Literatura

- [1] Cartwright M.: *Fourier Methods for Mathematicians, Scientists and Engineers*, Ellis Horwood limited, London 1990.
- [2] Griffiths P.R.: *Chemical Infrared Fourier Transform Spectroscopy*, John Wiley, New York 1975.
- [3] Kučera L., Nešetřil J.: *Algebraické metody diskrétní matematiky*, SNTL Praha 1989.
- [4] Martin A. E.: *Infrared Interferometric Spectrometers*, Elsevier, Amsterdam 1980.
- [5] Strauch B.: *Infračervená spektroskopie s Fourierovou transformací. Nové směry v analytické chemii*, ed. J. Zýka, sv. IV, SNTL Praha 1988.
- [6] Zýka J. a kol.: *Analytická příručka, 2. díl*, SNTL Praha 1980.
- [7] English J.: *Pulzní metoda jaderné magnetické rezonance a její užití v MR tomografii*, *Pokroky matematiky, fyziky a astronomie*, roč.40, (1995), č.4.
- [8] Turzík D. a kol.: *Matematika II*, VŠCHT Praha 1998.
- [9] Klíč A. a kol.: *Matematika I*, VŠCHT Praha 1998.
- [10] White R.: *Chromatography / Fourier Transform Infrared Spectroscopy and Its Applications*, MARCEL DEKKER, INC. 1990.
- [11] Stoer J., Bulirsch R.: *Introduction to Numerical Analysis*, Springer-Verlag, 1993.
- [12] de Haeth J. H., Isenhour T. L.: *Reconstruction of Gas Chromatograms from Interferometric Gas Chromatography/Infrared Spectrometry Data*, *Anal. Chem.* 1977, 49, 1977-81.

Rejstřík

- δ -funkce, 24, 26, 38, 55
- δ_2 -funkce, 104, 110
 - vlastnosti, 105
- \mathcal{F}_2 -transformace, 99
- absorbance, 87
- algoritmus
 - Cooley - Tukeyovův, 151
- aliasing, 54, 55, 62, 81
- amplitudové spektrum, 43
- apodizace, 47, 81
- Cooley - Tukeyovův algoritmus, 151
- číslo
 - vlastní, 132
 - vlnové, 13
- dekonvoluce, 52
- dělič svazku, 68, 75
- detektor záření, 76
- Diracova funkce, 104
- diskretizace, 29
- diskrétní Fourierova transformace, 60
- distribuce, 24, 145
 - regulární, 145
 - dvou proměnných, 147
 - singulární, 145
 - dvou proměnných, 148
 - vícerozměrná, 147
- dvojníky, 57
- Eulerovy vzorce, 14
- fázová korekce, 82
- fázové spektrum, 43
- fázový tvar Fourierovy řady, 123
- FFT, 149
- Fourierova řada
 - fázový tvar, 123
 - komplexní tvar, 126
 - liché funkce, 121
 - sudé funkce, 121
- Fourierova transformace, 31
 - δ -funkce, 38
 - diskrétní, 60, 81
 - dvojměrná, 94
 - inverzní, 32
 - kosinová, 38, 83, 114
 - liché funkce, 37
 - periodických funkcí, 43, 112
 - rychlá, 149
 - sinová, 38, 83, 114
 - sudé funkce, 37
 - vlastnosti, 33, 36
- Fourierova transformace δ -funkce, 110
- Fourierovy koeficienty, 118
- Fourierovy řady, 116
- Fourierův obraz, 31
- Fourierův předmět, 32
- frekvence, 13, 31
 - Larmorova, 114
 - Nyquistova, 57
 - základní, 13
- FTIR spektroskopie, 87
- funkce
 - e^{it} , 14
 - $\text{sinc } t$, 15
 - apodizační, 47
 - Diracova, 24
 - Heavisideova, 17
 - impulsní, 25, 107, 110
 - jednotková, 17
 - komplexní, 31
 - konstantní, 111
 - periodická, 43, 55, 112

- dvou proměnných, 113
 - periodické, 11, 45
 - po částech spojitá, 116
 - s omezeným nosičem, 147
 - vzorkovací, 29
 - zobecněná, 24, 145
- funkcionál, 144
 - lineární, 144
- Heavisideova funkce, 17
- homogenní okrajové podmínky, 130
- impuls
 - obdélníkový, 20, 39, 45, 47
 - trojúhelníkový, 22, 41, 47
- impulsní funkce, 25, 110
- infračervený spektrometr, 65
- integrál
 - Laplaceův, 26
- integrální sinus, 16
- interferogram, 31
 - digitalizace, 78
 - jednostranný, 72
 - oboustranný, 72
- jednotková funkce, 17
- koeficienty
 - Fourierovy, 118
- komplexní tvar Fourierovy řady, 126
- konvoluce, 35, 110
 - funkcí dvou proměnných, 102
 - základní vlastnosti, 23
- konvoluce funkce, 28
- konvoluce funkcí, 19
- Laplaceův integrál, 26, 34
- Larmorova frekvence, 114
- lineární funkcionál, 144
- metoda
 - Fourierova, 130
 - modifikovaná, 140
 - pro rovnici difúze, 128
 - konvoluční, 85
 - multiplikatívni, 84
- Michelsonův interferometr, 65
- Nyquistova frekvence, 57
- Nyquistův vlnočet, 59, 79
- obdélníkový impuls, 20
- okrajové podmínky
 - homogenní, 130
 - obecné, 143
- optický dráhový rozdíl, 66, 78, 81
- Parsevalova rovnost, 127
- perioda
 - primitivní, 11
 - vektorová, 113
- periodické funkce, 11
- podmínky kompatibility, 128
- pohyblivé zrcadlo, 76
- primitivní perioda, 11
- překrývání frekvencí, 54, 56
- přístrojová křivka, 46, 47, 82
- regulární distribuce, 145
 - dvou proměnných, 147
- rychlá Fourierova transformace, 149
- řada
 - Fourierova, 116
 - liché funkce, 121
 - sudé funkce, 121
- signál, 13, 31
 - délka, 47
 - diskretizace, 54
 - konečné délky, 45
 - periodický, 31
 - spinového echa, 114
 - spojitý, 29
 - diskretizace, 106
- singulární distribuce, 145
 - dvou proměnných, 148
- sinus
 - integrální, 16
- smíšená úloha, 129
- spektrometr
 - infračervený, 65
- spektrum
 - amplitudové, 43
 - diskretní, 62

- dekonvoluční, 52
- fázové, 43
 - diskretní, 62
- obdélníkového impulsu, 40
- signálu, 31, 43
- trojúhelníkového impulsu, 42
- výkonové, 43
 - diskretní, 62
- transformace
 - Fourierova, 31
 - inverzní, 32
 - vlastnosti, 33
- transmitance, 87
- trojúhelníkový impuls, 22
- úloha
 - smíšená, 129
- vektorová perioda, 113
- věta
 - o derivaci obrazu, 34, 100
 - o jednoznačnosti, 129
 - o obrazu derivace, 33, 99
 - o obrazu konvoluce, 35, 103
 - o obrazu součinu, 35, 104
 - o translaci, 35, 100
 - o změně měřítka, 35, 101
 - zobecnění, 101
 - o maximum pro rovnici difúze, 129
- vlastní číslo, 132
- vlnočet, 13, 58, 79, 84
- vlnová délka, 78
- vlnové číslo, 13
- výkonové spektrum, 43
- vzorce
 - Eulerovy, 14
- vzorkovací funkce, 29
- vzorkovací krok, 79
- zdroj záření, 73
- zero-filling, 63, 81
- zobecněná funkce, 24, 145