

Elementi di Modelli e Metodi Matematici della Fisica

U.G. Aglietti

Dipartimento di Fisica, Università di Roma "La Sapienza"

Le note presentate nelle pagine che seguono hanno carattere non commerciale ed informale e possono contenere errori ed inesattezze, delle quali il lettore è avvertito preliminarmente da parte dell'autore. Quest'ultimo si dichiara non responsabile delle eventuali conseguenze derivanti da ciò.

Contents

Chapter 1

Trasformata di Fourier Discreta (TFD)

La Trasformata di Fourier Discreta (*TFD*) e' una versione discreta, finito-dimensionale, delle usuali Serie di Fourier (*SF*) e Trasformate di Fourier (*TF*). La *TFD* consente di comprendere le idee alla base delle *SF* e delle *TF* tramite semplici calcoli di natura puramente algebrica, senza dovere affrontare problemi di convergenza e di stabilita' dei limiti. La Trasformata di Fourier Discreta coinvolge infatti soltanto somme *finite*, mentre la Serie di Fourier coinvolge integrali su segmenti e somme di serie di funzioni, e la Trasformata di Fourier richiede di calcolare integrali impropri, estesi a tutta la retta reale. Seguendo quindi il vecchio principio romano del *divide et impera*, cominciamo la nostra trattazione di serie ed integrali di Fourier partendo dal caso piu' semplice possibile, discreto finito-dimensionale.

1.1 Definizione e Prime Proprieta'

La *Trasformata di Fourier Discreta* e' una mappa dallo spazio vettoriale complesso N -dimensionale \mathbb{C}^N , $N \geq 1$, in se stesso,

$$\begin{aligned} F : \mathbb{C}^N &\rightarrow \mathbb{C}^N \\ x &\mapsto Fx, \end{aligned} \tag{1.1}$$

definita come:

$$(Fx)_k \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{s=0}^{N-1} \exp\left(i \frac{2\pi}{N} k s\right) x_s; \tag{1.2}$$

con

$$k = 0, 1, 2, \dots, N-1; \tag{1.3}$$

dove

$$x \equiv (x_0, x_1, \dots, x_{N-1}) \in \mathbb{C}^N. \tag{1.4}$$

Abbiamo indicizzato per comodita' le componenti dei vettori partendo da zero anziche', come abitualmente, da uno; si tratta semplicemente di una diversa convenzione. In inglese, la TFD viene detta *Discrete Fourier Transform (DFT)*. Tale trasformazione e' ampiamente

utilizzata in fisica, ingegneria, geologia, ecc. Vediamo, per N generico, l'espressione delle componenti dell'immagine $y \equiv Fx$:

$$y_0 = \frac{1}{\sqrt{N}} [x_0 + x_1 + x_2 + \cdots + x_{N-1}]; \quad (1.5)$$

$$y_1 = \frac{1}{\sqrt{N}} \left[x_0 + \exp\left(\frac{2\pi i}{N}\right) x_1 + \exp\left(2\frac{2\pi i}{N}\right) x_2 + \cdots + \exp\left((N-1)\frac{2\pi i}{N}\right) x_{N-1} \right];$$

$$y_2 = \frac{1}{\sqrt{N}} \left[x_0 + \exp\left(2\frac{2\pi i}{N}\right) x_1 + \exp\left(4\frac{2\pi i}{N}\right) x_2 + \cdots + \exp\left(2(N-1)\frac{2\pi i}{N}\right) x_{N-1} \right];$$

.....

$$y_{N-1} = \frac{1}{\sqrt{N}} \left[x_0 + \exp\left((N-1)\frac{2\pi i}{N}\right) x_1 + \cdots + \exp\left((N-1)^2\frac{2\pi i}{N}\right) x_{N-1} \right]; \quad (1.6)$$

La prima componente dell'immagine, y_0 , "assomiglia" alla media aritmetica delle componenti del vettore x di partenza, in quanto coinvolge la somma di tutte le sue componenti, diviso \sqrt{N} come conseguenza della nostra scelta della normalizzazione. Nella seconda componente dell'immagine, y_1 , già cominciano a comparire gli esponenziali oscillanti che, fisicamente, fanno pensare ad un'interferenza tra le componenti del vettore x . Al crescere dell'indice k dell'immagine y_k , tali oscillazioni diventano più fitte. In termini fisici, questo vuol dire che, all'aumentare di k , andiamo a vedere il contributo a frequenze progressivamente crescenti contenuto in x .

Definendo il fattore di fase fondamentale

$$f = f_N \equiv e^{2\pi i/N}, \quad (1.7)$$

l'equazione (??) si riscrive nella forma relativamente più compatta:

$$(Fx)_k \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{s=0}^{N-1} f^{ks} x_s; \quad k = 0, 1, 2, \dots, N-1; \quad (1.8)$$

La mappa $F = F_N$ è una mappa di \mathbb{C}^N in se stesso, ovvero un endomorfismo di \mathbb{C}^N . Dalla definizione sopra, segue immediatamente che F è una mappa \mathbb{C} -lineare, ossia è una mappa che soddisfa la relazione funzionale:

$$F(ax + by) = aF(x) + bF(y); \quad \forall x, y \in \mathbb{C}^N; \quad \forall a, b \in \mathbb{C}. \quad (1.9)$$

La TFD può essere scritta in forma matriciale come

$$y = \hat{F}x, \quad (1.10)$$

dove per x ed y intendiamo adesso dei vettori colonna ed al membro di destra dell'equazione sopra il prodotto deve essere inteso come il prodotto righe per colonne di due matrici. La matrice \hat{F} , che rappresenta la TFD indicata con F , ha entrata generica

$$\hat{F}_{k,s} \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} f^{ks}; \quad k, s = 0, 1, \dots, N-1. \quad (1.11)$$

Scritta esplicitamente come una tabella:

$$\hat{F} = \hat{F}_N \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & f & f^2 & \cdots & f^{N-1} \\ 1 & f^2 & f^4 & \cdots & f^{2(N-1)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 1 & f^{N-1} & f^{2(N-1)} & \cdots & f^{(N-1)^2} \end{pmatrix}. \quad (1.12)$$

Si puo' ottenere una formula relativamente piu' compatta per la matrice sopra mandando [?]

$$N \rightarrow N + 1, \quad (1.13)$$

ossia considerando lo spazio hermitiano \mathbb{C}^{N+1} anziche' \mathbb{C}^N :

$$\hat{F}_{N+1} \equiv \frac{1}{\sqrt{N+1}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & f & f^2 & \cdots & f^N \\ 1 & f^2 & f^4 & \cdots & f^{2N} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 1 & f^N & f^{2N} & \cdots & f^{N^2} \end{pmatrix}. \quad (1.14)$$

Facciamo alcune osservazioni sulla struttura di questa matrice:

1. \hat{F} e' una matrice *Simmetrica*:

$$\hat{F} = \hat{F}^T. \quad (1.15)$$

In componenti:

$$\hat{F}_{k,s} = \hat{F}_{s,k}; \quad k, s = 0, 1, 2, \dots, N-1; \quad (1.16)$$

2. \hat{F} e' una matrice *Complessa*,

$$\hat{F} \neq \bar{\hat{F}}, \quad (1.17)$$

dove con la barra sopra un simbolo indichiamo la sua complessa coniugazione, i cui elementi, a meno del fattore di normalizzazione convenzionale $1/\sqrt{N}$ (vedi dopo), sono *tutti* dei fattori di fase, ossia dei numeri complessi di modulo uno,

$$|f^{ks}| = 1. \quad (1.18)$$

Gli f^{ks} sono potenze intere del fattore di fase fondamentale f , che coinvolgono il prodotto ks dell'indice k della componente $(Fx)_k$ del vettore in uscita, Fx , con l'indice s della componente x_s del vettore x in entrata;

3. La I riga di \hat{F} (o, equivalentemente, la I colonna, data la simmetria), consiste di una sequenza di uno; la II riga contiene, nell'ordine, le potenze di f a partire da f^0 fino ad arrivare ad f^{N-1} ; la III riga lista le potenze di f^2 e cosi' via, fino all'ultima riga, l' N -esima, che lista le potenze di f^{N-1} . Si produce in tal modo una interferenza tra le diverse componenti x_k del vettore x in entrata, che diviene sempre piu' severa quanto piu' andiamo giu' nella matrice \hat{F} .

1.1.1 Esempi

Un fisico e' interessato in genere alla Trasformata di Fourier Discreta per N molto grande,

$$N \gg 1, \quad (1.19)$$

tipicamente, al giorno d'oggi,

$$N = \mathcal{O}(10^{6\div 9}), \quad (1.20)$$

ed eventualmente al limite per N che va all'infinito,

$$N \rightarrow \infty, \quad (1.21)$$

nel quale la TFD si riduce *formalmente* ad una Serie o ad un Integrale di Fourier, come vedremo a suo tempo. Tuttavia, al fine di comprendere la struttura di questa trasformazione, vediamo che forma concreta assume la TFD per i valori piu' piccoli possibili di $N = 1, 2, 3, \dots$.

1. *Spazio Vettoriale Complesso Unidimensionale.* E' il caso piu' semplice di tutti, che ci aspettiamo essere banale,

$$N = 1. \quad (1.22)$$

I vettori hanno una sola componente in questo caso, e si scrivono nella forma

$$x = (x_0); \quad y = (y_0). \quad (1.23)$$

Definendo

$$y \equiv Fx, \quad (1.24)$$

poiche'

$$f \equiv e^{2\pi i/N} = 1 \quad \text{per} \quad N = 1, \quad (1.25)$$

la TFD risulta essere data da

$$y = x, \quad (1.26)$$

ovvero

$$y_0 = x_0. \quad (1.27)$$

In questo caso, la TFD si riduce alla mappa identita' in \mathbb{C} . Osserviamo che il determinante della TFD e' uno:

$$\det F_{N=1} = 1; \quad (1.28)$$

2. *Spazio Vettoriale Complesso Bidimensionale,*

$$N = 2. \quad (1.29)$$

In questo caso l'esponenziale oscillante base, del quale la TFD coinvolge le potenze intere, e' dato da

$$f \equiv e^{2\pi i/N} = e^{\pi i} = -1 \quad \text{per} \quad N = 2. \quad (1.30)$$

Osserviamo che esso e' reale, come nel caso precedente $N = 1$; e' evidente che si tratta di casi "eccezionali", in quanto, per N generico, il fattore di fase f ha una parte immaginaria non nulla. La TFD ha la forma esplicita:

$$\begin{aligned} y_0 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x_0 + x_1); \\ y_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x_0 - x_1). \end{aligned} \quad (1.31)$$

La trasformazione sopra descrive una rotazione *impropria* dello spazio \mathbb{C}^2 , in quanto essa ha determinante eguale a meno uno:

$$\det F_{N=2} = -1. \quad (1.32)$$

Poiche' i coefficienti che entrano nel sistema di equazioni sopra sono tutti reali, la trasformazione puo' essere ristretta da \mathbb{C}^2 ad \mathbb{R}^2 , ossia al piano *reale*. A causa della realta' dei coefficienti, infatti, l'immagine di un qualsiasi vettore a componenti reali, e' ancora un vettore a componenti reali. Se uno o piu' coefficienti della trasformazione hanno invece una parte immaginaria differente da zero, allora l'immagine di un vettore in \mathbb{R}^2 non e' in generale in \mathbb{R}^2 , ma in \mathbb{C}^2 . In quest'ultimo caso, se vogliamo una mappa di uno spazio *in se stesso*, e non in uno spazio differente piu' grande, *dobbiamo* prendere \mathbb{C}^2 anche come spazio di partenza;

3. Spazio Vettoriale Complesso Tridimensionale,

$$N = 3. \quad (1.33)$$

Riducendo tutti gli angoli θ ad esempio entro l'intervallo

$$-\pi < \theta \leq \pi, \quad (1.34)$$

la TFD si scrive in questo caso:

$$\begin{aligned} y_0 &= \frac{1}{\sqrt{3}}(x_0 + x_1 + x_2); \\ y_1 &= \frac{1}{\sqrt{3}}(x_0 + e^{+2\pi i/3} x_1 + e^{-2\pi i/3} x_2); \\ y_2 &= \frac{1}{\sqrt{3}}(x_0 + e^{-2\pi i/3} x_1 + e^{+2\pi i/3} x_2). \end{aligned} \quad (1.35)$$

Proponiamo come esercizi al lettore di calcolare il determinante della TFD sopra e di calcolare la trasformazione inversa $y \rightarrow x$.

1.1.2 Osservazioni

Facciamo alcune osservazioni sulla Trasformata di Fourier Discreta.

1. Il fattore

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \quad (1.36)$$

davanti alla sommatoria e' la nostra scelta della normalizzazione "simmetrica", come vedremo a breve. Sono possibili anche altre scelte: si puo' ad esempio rimuovere quel fattore o sostituirlo con $1/N$;

2. La TFD e' una Trasformata Lineare *non locale*, nel senso che ogni componente $(Fx)_k$ del vettore immagine Fx dipende da *tutte* le componenti x_s del vettore di partenza x . Non c'e' infatti alcuna entrata nulla nella matrice \hat{F} . Il prototipo di trasformazione locale e' invece la trasformazione identica — rappresentata dalla matrice identita' — oppure, piu' in generale, una trasformazione rappresentata da una matrice diagonale, nella quale ogni componente del vettore in uscita dipende solamente dalla componente corrispondente del vettore in entrata;
3. Il parametro N e' in intero fissato qualsiasi — definisce la dimensione dello spazio vettoriale complesso su cui agisce la TFD. Come abbiamo detto, nelle applicazioni spesso esso viene preso molto grande,

$$N \gg 1, \quad (1.37)$$

di fatto il piu' grande possibile con le risorse di calcolo a disposizione. Vi sono successioni di valori di N per le quali il numero degli esponenziali sopra da calcolare, al variare di k e di s in tutto il loro range, e' minimizzato. In questo caso la TFD diviene computazionalmente piu' efficiente e viene chiamata *Trasformata di Fourier Veloce* — Fast Fourier Transform (FFT) in inglese [?].

1.1.3 Esercizi

Come primo esercizio, calcoliamo la TFD del vettore \bar{x} che ha tutte le componenti eguali ad uno:

$$\bar{x} = (1, 1, \dots, 1) \in \mathbb{C}^N. \quad (1.38)$$

La componente zero dell'immagine e' data da

$$(F\bar{x})_0 = \frac{N}{\sqrt{N}} = \sqrt{N}. \quad (1.39)$$

Per le altre componenti, con indice $k \geq 1$, si ha invece

$$(Fx)_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{s=0}^{N-1} \exp\left(\frac{2\pi i}{N} ks\right) = \frac{1 - \exp(2\pi ik)}{1 - \exp(2\pi ik/N)} = 0, \quad (1.40)$$

in quanto il numeratore,

$$1 - \exp(2\pi i k), \quad (1.41)$$

si annulla per qualsiasi

$$k = 1, 2, \dots, N - 1, \quad (1.42)$$

mentre il denominatore,

$$1 - \exp\left(\frac{2\pi i}{N} k\right), \quad (1.43)$$

sempre per gli stessi valori di k , non si annulla mai. Abbiamo usato la formula per la somma di una serie geometrica finita (N termini):

$$\sum_{k=0}^{N-1} z^k = \frac{1 - z^N}{1 - z}; \quad z \in \mathbb{C}; \quad z \neq 1. \quad (1.44)$$

Nel complesso, la TFD del vettore \bar{x} sopra, avente tutte le componenti eguali ad uno, e' data dal vettore che ha solo la prima componente non nulla

$$F\bar{x} = \left(\sqrt{N}, 0, 0, \dots, 0\right). \quad (1.45)$$

Vi e' una interferenza distruttiva completa, prodotta dagli esponenziali oscillanti, in tutte le componenti dell'immagine in cui cio' puo' accadere (per la componente zero questo e' *a priori* impossibile).

Immaginiamo ora di fare il limite $N \rightarrow +\infty$ sulle formule ottenute, ossia di calcolare la TFD di un vettore con un numero progressivamente crescente di componenti, tutte eguali ad uno. In accordo alla formula sopra, mentre si generano altre componenti nulle nel vettore $F\bar{x}$, la prima componente diverge, in quanto

$$(F\bar{x})_0 = \sqrt{N} \rightarrow \infty. \quad (1.46)$$

Dimostreremo a breve che la divergenza sopra non dipende dalla nostra scelta della normalizzazione della TFD, ma e' *intrinseca* al limite $N \rightarrow \infty$.

Suggeriamo al lettore di esercitarsi calcolando la TFD dei vettori della base canonica di \mathbb{C}^N ,

$$e_i \equiv (0, \dots, 0, 1_i, 0, \dots, 0); \quad i = 0, 1, 2, \dots, N-1. \quad (1.47)$$

1.2 Trasformata Inversa

L'*Inversa della Trasformata di Fourier Discreta (ITFD)*,

$$\begin{aligned} F^{-1} : \mathbb{C}^N &\rightarrow \mathbb{C}^N \\ y &\mapsto F^{-1}y, \end{aligned} \quad (1.48)$$

e' data dalla formula:

$$(F^{-1}y)_k \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{s=0}^{N-1} \exp\left(-i \frac{2\pi}{N} k s\right) y_s; \quad (1.49)$$

con, al solito,

$$k = 0, 1, \dots, N-1. \quad (1.50)$$

La verifica che si tratta *effettivamente* dell'inversa e' un semplice calcolo algebrico:

$$\begin{aligned}
x_k &\stackrel{?}{=} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{s=0}^{N-1} \exp\left(-i \frac{2\pi}{N} k s\right) y_s = \\
&= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{s=0}^{N-1} \exp\left(-i \frac{2\pi}{N} k s\right) \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=0}^{N-1} \exp\left(+i \frac{2\pi}{N} s l\right) x_l = \\
&= \sum_{l=0}^{N-1} K_{k-l} x_l = x_k;
\end{aligned} \tag{1.51}$$

dove abbiamo scambiato l'ordine delle sommatorie su l e su s (entrambe finite) ed abbiamo definito il nucleo:

$$K_h \equiv \frac{1}{N} \sum_{s=0}^{N-1} \exp\left(-\frac{2\pi i}{N} h s\right) = \frac{1}{N} \frac{1 - \exp(-2\pi i h)}{1 - \exp(-2\pi i h/N)} = \delta_{h,0}, \tag{1.52}$$

dove $\delta_{h,0} = 1$ per $h = 0$ e zero altrimenti e' il simbolo di Kronecker.

Osserviamo che l'unica differenza rispetto alla trasformata diretta F , e' che l'inversa, F^{-1} , ha un segno meno (un segno relativo) nell'argomento degli esponenziali oscillanti, ossia una complessa coniugazione dei coefficienti.

1.3 Unitarieta' della TFD

Una proprieta' fondamentale della Trasformata di Fourier Discreta e' che essa realizza una *trasformazione unitaria* nello spazio complesso \mathbb{C}^N , il che vuol dire, in sostanza, che la TFD e' una particolare *rotazione*.

Poiche' la matrice $\hat{F} = (\hat{F}_{k,l})$ e' simmetrica,

$$\hat{F}^T = \hat{F}, \tag{1.53}$$

ne segue che l'hermitiana coniugata di \hat{F} (definita come la complessa coniugata della trasposta), e' semplicemente la matrice complessa coniugata:

$$\hat{F}^\dagger \equiv \overline{\hat{F}^T} = \bar{\hat{F}} = \hat{F}^{-1}. \tag{1.54}$$

L'ultima eguaglianza segue dal fatto che, come abbiamo visto, la formula per l'inversa della TFD si ottiene semplicemente dalla formula per la TFD con la sostituzione $i \rightarrow -i$ negli esponenziali oscillanti. Eguagliando il primo membro con l'ultimo, si ricava:

$$\hat{F}^\dagger = \hat{F}^{-1}. \tag{1.55}$$

Abbiamo quindi dimostrato che la Trasformata di Fourier Discreta e' un *Operatore Unitario* nello spazio \mathbb{C}^N , per qualsiasi valore di $N = 1, 2, 3, \dots$ \square .

Come noto, le righe (o le colonne) di una matrice unitaria U hanno lunghezza unitaria e sono ortogonali fra loro.

Per rendere le formule leggermente piu' leggibili, consideriamo la TFD con $N \rightarrow N + 1$. Dall'unitarieta' sopra dimostrata, segue che gli $N + 1$ vettori

$$\begin{aligned} e_0 &\equiv (1, 1, 1, \dots, 1); \\ e_1 &\equiv (1, f, f^2, \dots, f^N); \\ e_2 &\equiv (1, f^2, f^4, \dots, f^{2N}); \\ \dots &\dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots ; \\ e_k &\equiv (1, f^k, f^{2k}, \dots, f^{kN}); \\ \dots &\dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots ; \\ e_N &\equiv (1, f^N, f^{2N}, \dots, f^{N^2}); \end{aligned} \tag{1.56}$$

formano un *sistema ortogonale completo*. La completezza segue dal fatto che sono $N + 1$ vettori a due a due ortogonali, e quindi linearmente indipendenti, entro lo spazio \mathbb{C}^{N+1} , che ha dimensione (complessa) eguale ad $N + 1$.

Osserviamo per finire che il vettore

$$e_k \equiv (1, e^{2\pi ik/N}, e^{4\pi ik/N}, \dots, e^{2\pi ikh/N}, \dots, e^{2\pi ik}) \tag{1.57}$$

puo' essere pensato come la versione discreta, finito-dimensionale, dell'esponenziale oscillante

$$e^{ikx} \text{ per } x = \frac{2\pi h}{N}, \quad h = 0, 1, \dots, N - 1. \tag{1.58}$$

Bibliography

- [1] S.M. Wong, *Computational Methods in Physics and Engineering*, II edizione, World Scientific (1997).