

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 Vlnočety	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 $f(x)$	176
D.5.2	Graf funkce $f(x, y)$	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