

Численные методы обработки экспериментальных данных

иллюстративные примеры из практики

Алексей Юрьевич Аладышкин

доктор физико-математических наук

ведущий научный сотрудник Института физики микроструктур РАН – филиала Федерального исследовательского центра «Институт прикладной физики РАН», Нижний Новгород

ведущий научный сотрудник Центра перспективных методов мезофизики и нанотехнологии, Московский физико-технический институт, Долгопрудный

профессор базовой кафедры квантовых технологий Института общей физики им. А. М. Прохорова РАН факультета физики НИУ «Высшая школа экономики»

профессор межфакультетской базовой кафедры «Физика наноструктур и наноэлектроника» Нижегородского государственного университета им. Н. И. Лобачевского

e-mail: aladyshkinau@mipt.ru

Структура курса

- * Мотивация
- * Основные понятия теории измерений и математической статистики (I)
- * Метод наименьших квадратов. Оценка параметров линейной регрессии (I)
- * Проблема подавления высокочастотных шумов и сглаживания функций (II)
- * Проблема численного дифференцирования и поиска экстремумов при наличии шума (II)
- * Интерполяция и аппроксимация. Декомпозиция (II)
- * Основы спектрально-корреляционного анализа (III)
- * Дискретизация сигналов. Теорема Котельникова (III)
- * Основы физики шумов. Теорема Винера – Хинчина (IV)
- * Синхронное детектирование. Обнаружение слабого сигнала на фоне помех (IV)
- * Основы автоматического распознавания образов (V)
- * Проблема выравнивания двумерных изображений (V)
- * Триангуляция Делоне и разбиение Вороного (VI)
- * Статистический анализ двумерных периодических и непериодических структур (VI)

Предостережения и оговорки

- * Основная цель курса – показать применение методов математической статистики и обработки сигналов для решения конкретных физических задач
- * Курс не является систематическим изложением основ математической статистики, статистической радиофизики и теории шумов
- * Большинство примеров взяты из собственной практики

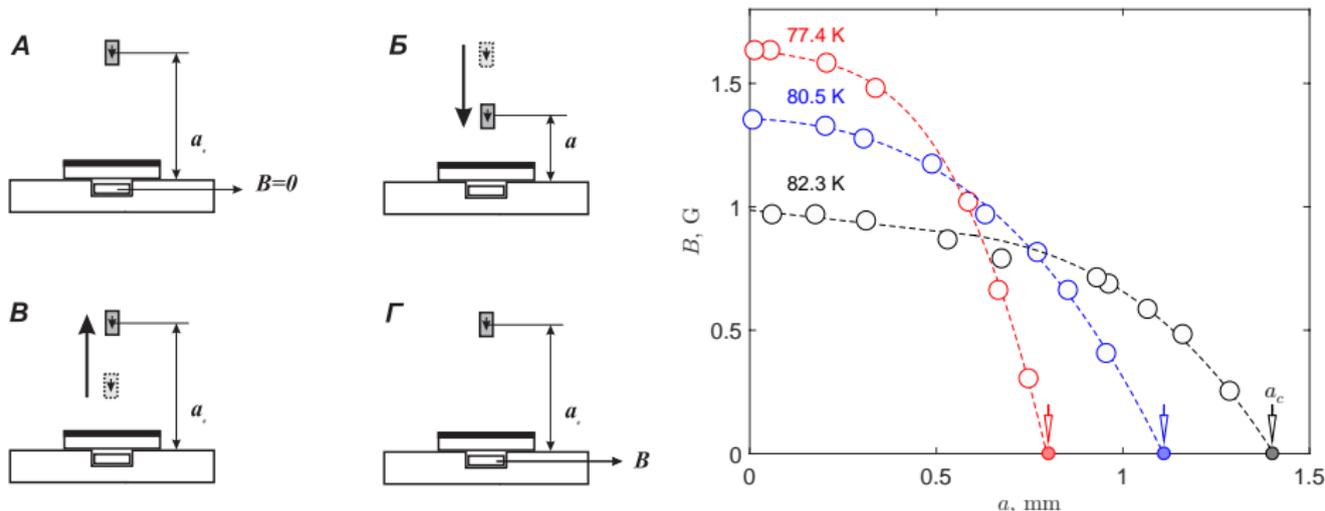
- * Имеется множество коммерческих и свободно распространяемых пакетов программ для обработки экспериментальных результатов (Python, Matlab, Mathematica, Maple, MathCad, R, Origin, SPIP, Gwyddion, WsXM, Igor, LabView...)

При решении экспериментальных задач можно пользоваться готовыми алгоритмами и не заниматься перепрограммированием всех функций, однако хорошо бы понимать принцип работы применяемых функций

- * Для иллюстрации принципов обработки данных используется среда Matlab
- * С минимальными синтаксическими изменениями все примеры могут быть переписаны на языке Python

Мотивация: обработка данных физических экспериментов

Пример: исследование температурной зависимости локального критического тока распаривания в тонких сверхпроводящих плёнках в поле магнитной частицы и определение критической высоты, соответствующей разрушению мейсснеровского состояния



Разумным вариантом определения критической высоты является экстраполяция к нулевому значению остаточного магнитного поля

А. Ю. Аладышкин, А. К. Воробьев, П. П. Вышеславцев и др. Структура смешанного состояния, индуцированного в тонкой $YBaCuO$ пленке полем малой ферромагнитной частицы // ЖЭТФ, т. 116, 1735-1749 (1999).

Мотивация: обработка данных численных экспериментов

Пример: поиск собственных значений краевой задачи на сетке методом конечных разностей

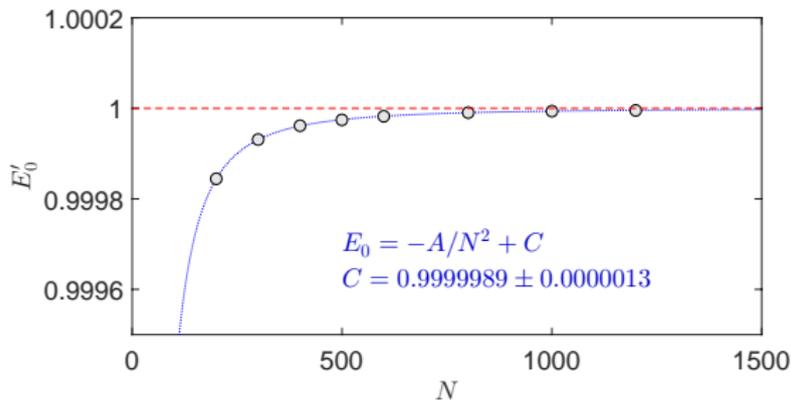
Спектр собственных значений частицы в параболической яме

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_n(x) + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \psi_n(x) = E_n \psi_n(x), \quad \text{где } E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Переход к безразмерной форме $x = ax'$, где $a = \sqrt{\hbar/m\omega}$

$$-\frac{d^2}{dx'^2} \psi_n(x') + (x')^2 \psi_n(x') = E'_n \psi_n(x'), \quad \text{где } E'_n = 2n + 1.$$

Зависимость наименьшего собственного значения E'_0 от числа узлов сетки N



Анализ зависимости результатов расчетов от числа узлов сетки и прочих параметров позволяет оценить сходимость алгоритма и точность вычислений

Лекция 1

Основные понятия теории измерений и математической статистики

Метод наименьших квадратов. Оценка параметров линейной регрессии

Основные понятия теории измерений (1)

Нормативные документы:

[1]. Guide to the expression of uncertainty in measurements. GUM 1995 with minor corrections. BIPM (Bureau International des Poids et Mesures).

[2]. Руководство по выражению неопределённости измерения / перевод с англ. под ред. В.А. Слава. – ВНИИМ им. Д.И. Менделеева. – СПб, 1999.

Измерение (англ. measurement) – совокупность действий для определения отношения одной (измеряемой) величины к другой однородной величине, принятой всеми участниками за единицу и хранящуюся в техническом средстве (средстве измерений). Измерение должно производиться согласно апробированной измерительной методике или процедуре.

Измеримая величина (англ. measurable quantity) – свойство явления или объекта, которое может выделяться качественно и определяться количественно. Термин «величина» может обозначать измеримые величины в общем смысле (температура, время, масса, концентрация) или конкретные измеримые величины (длина данного стержня, электрическое сопротивление данного провода, концентрация спирта в данном образце пива).

Истинное значение (англ. true value) – значение, соответствующее определению данной величины; иначе говоря, значение, которое могло бы быть получено при идеальном измерении. Истинное значение по природе неопределимо.

Основные понятия теории измерений (2)

Действительное значение (англ. conventional true value) – значение, приписываемое конкретной величине и принимаемое по соглашению, как имеющую неопределённость, приемлемую для данной цели. Например, рекомендованное значение скорости света – 299 792 458 м/с, рекомендованное постоянной Авогадро – 6.0221367×10^{23} моль⁻¹. Иногда действительное значение называют приписанным значением, наилучшей оценкой величины или номинальным значением.

Принцип измерения (англ. principle of measurement) – научная основа измерения. Например, применение термоэлектрического эффекта для измерения температуры, применение эффекта Джозефсона для измерения разности электрических потенциалов, применение эффекта Доплера для измерения скорости.

Метод измерения (англ. method of measurement) – логическая последовательность операций, описанная в общем виде, которая применяется при выполнении измерений, например, метод измерения замещением, четырехточечный метод, дифференциальный метод, нулевой метод.

Измеряемая величина (англ. measurand) – конкретная величина, подвергаемая измерению. Примеры: сопротивление образца при 10 К.

Влияющая величина (англ. influence quantity) – величина, которая не является предметом измерения, но влияющая на результат измерения. Примеры: температура микрометра, применяемого для измерения толщины; частота при измерении амплитуды переменного напряжения; влажность.

Основные понятия теории измерений (3)

Результат измерения (англ. result of measurement) – значение, приписываемое измеряемой величине после измерения, выражаемое произведением единицы измерения на число. При приведении результата измерения следует указывать, относится ли измеренная величина к показанию прибора, результату с учётом или без учёта поправки, к среднему нескольких значений. Полная формулировка результата измерения включает также и информацию о неопределённости измерения.

Исправленный результат измерения (англ. corrected result of measurement) – результат измерения после внесения поправки на систематическую ошибку.

Точность измерения (англ. accuracy of measurement) – близость результата измерения к истинному значению измеряемой величины.

Сходимость результатов измерений (англ. repeatability) – близость результатов последовательных измерений одной и той же величины, выполненных в одинаковых условиях. К условиям сходимости относятся одна и та же измерительная процедура, один и тот же наблюдатель, один и тот же измерительный прибор, одно и то же место и условия проведения измерений, повторение измерений в течение короткого интервала.

Воспроизводимость результатов измерений (англ. reproducibility) – близость результатов измерений одной и той же измеряемой величины, выполненных в изменённых условиях, например, различными методами или приборами, в разное время и условия проведения измерения. Изменяющиеся условия могут включать принцип измерения, метод измерения, наблюдателя, измерительный прибор, время и место измерения, условия применения.

Сходимость и воспроизводимость может выражаться через параметры, характеризующие дисперсию или стандартное отклонение результатов измерений.

Основные понятия теории измерений (4)

Неопределённость измерения (англ. uncertainty of measurements) – это параметр, связанный с результатом измерения, который характеризует дисперсию значений, которые могли бы быть обоснованно приписаны измеряемой величине. Параметром может быть стандартное отклонение или величина, кратная ему. Неопределённость измерения можно определить также как меру возможной погрешности оценённого значения измеряемой величины или как оценку, характеризующую диапазон, в пределах которого находится истинное значение измеряемой величины.

Погрешность измерения (англ. error of measurements) – отклонение результата измерения от истинного значения измеряемой величины. Поскольку истинное значение не может быть определено, на практике применяют действительное значение. Погрешность измерения равна сумме случайной погрешности и систематической погрешности.

Случайная погрешность (англ. random error) – разность результата измерения и среднего значения, которое могло бы быть получено при бесконечном большом числе повторных измерений одной и той же величины в условиях сходимости. Поскольку на практике можно выполнить только ограниченную серию измерений, можно определить только оценку случайной погрешности.

Систематическая погрешность (англ. systematic error) – разность между средним значением, которое могло бы быть получено при бесконечном большом числе повторных измерений одной и той же величины в условиях сходимости, и истинным значением измеряемой величины.

Основные понятия теории измерений (5)

Поправка (англ. correction) – значение величины, которое суммируется с неисправленным результатом измерений для устранения систематической погрешности. Поскольку систематическая погрешность не может быть определена точно, компенсация не может быть полной.

Поправочный коэффициент (англ. correction factor) – числовой коэффициент, на который умножают неисправленный результат измерения для устранения систематической погрешности. Поскольку систематическая погрешность не может быть определена точно, компенсация не может быть полной.

Эталон (англ. measurement standard, фр. etalon) – средство измерений (или комплекс средств измерений), обеспечивающее воспроизведение и хранение единицы физической величины для передачи её размера нижестоящим по поверочной схеме средствам измерений, выполненное по особой спецификации и официально утверждённое в качестве эталона. Основные виды эталонов: первичный и вторичные эталоны.

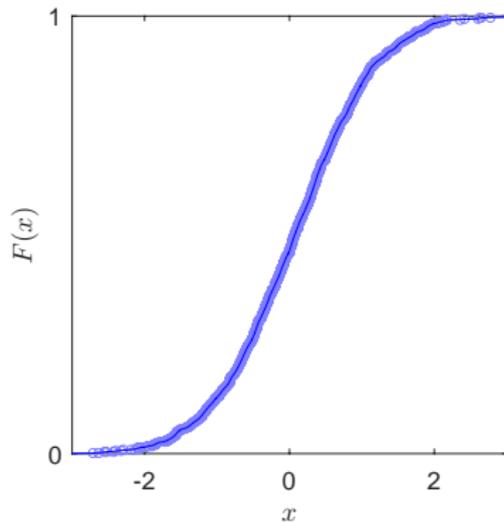
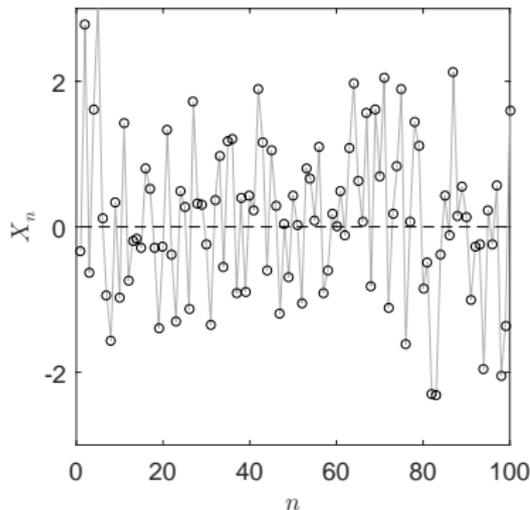
Поверка средств измерений – совокупность операций, выполняемых в целях подтверждения соответствия средств измерений метрологическим характеристикам.

Интегральная функция распределения

Пусть X – набор значений случайной величины.

Интегральная функция распределения: $F(x) \equiv P(X \leq x)$

Очевидно, что $F(x) = 0$ для $x < \min X$ и $F(x) = 1$ для $x > \max X$.



Простой алгоритм построения интегральной функции распределения в среде Matlab:

$$x = \text{sort}(X_n) \quad \text{и} \quad y = n/L,$$

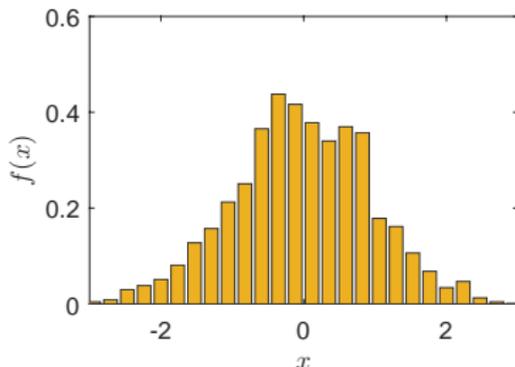
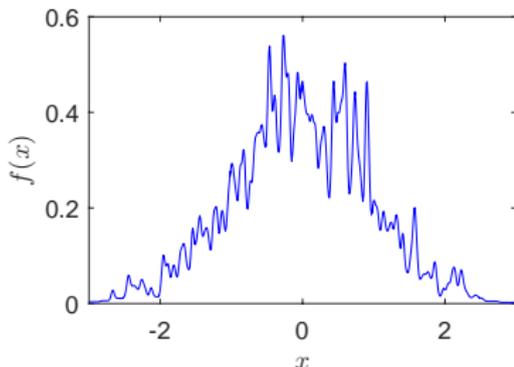
где n – порядковый номер элемента после сортировки, L – длина реализации.

Дифференциальная функция распределения.

Построение гистограмм

Дифференциальная функция распределения (плотность вероятности): $f(x) \equiv dF/dx$.

Очевидно, что $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = F(+\infty) - F(-\infty) = 1$.



Гистограмма – это дискретный вариант функции распределения, который характеризует число отсчетов f_n (абсолютное или относительное), попадающих в n -ую корзину.

Формат команды в Matlab: $f = \text{hist}(X, x_{bins})$, где X – вектор значений случайной величины, $x_{bins} = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ – вектор значений, описывающий положение центров корзин, f_k – абсолютное число отсчетов, попадающих в интервал $x_k - \delta x \leq X \leq x_k + \delta x$ (k -ая корзина).

Выборочное среднее и его статистические характеристики (1)

Математическое ожидание (англ. expectation) – понятие в теории вероятностей, означающее среднее (взвешенное по вероятностям возможных значений) значение случайной величины

$$E[x_i] = \mu.$$

Подчеркнём, что математическое ожидание μ – детерминированная (неслучайная) величина.

Для дискретных случайных величин

$$E[x_i] = \sum_{i=1}^{\infty} x_i w_i,$$

где w_i – вероятность того, что случайная переменная равна x_i .

Для непрерывных случайных величин

$$E[x_i] = \int_{-\infty}^{\infty} x w(x) dx,$$

где $w(x)dx$ – вероятность того, что случайная переменная лежит в интервале от x до $x + dx$.

Выборочное среднее и его статистические характеристики (2)

Введем выборочное среднее (англ. sample mean, empirical mean)

$$\langle x \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i,$$

где N – объём выборки или число степеней свободы (degree of freedom).

Очевидно, что выборочное среднее является **случайной величиной**.

При соблюдении определенных условий (в частности, если выборка является случайной и наблюдения являются независимыми) выборочное среднее стремится к истинному значению математического ожидания случайной величины при стремлении объёма выборки к бесконечности: $\langle x \rangle \rightarrow \mu$ при $N \rightarrow \infty$.

Несложно показать, что математическое ожидание выборочного среднего для независимых случайных величин совпадает с истинным математическим ожиданием

$$E[\langle x \rangle] = E\left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i\right] = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E[x_i] = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mu = \frac{1}{N} \cdot \mu N = \mu.$$

Вывод: оценка выборочного среднего является несмещённой.

Выборочное среднее и его статистические характеристики (3)

Дисперсия случайной величины (англ. variance) – математическое ожидание квадрата отклонения случайной величины от математического ожидания

$$D[x_i] \equiv E[(x_i - \mu)^2].$$

Дисперсия характеризует меру разброса случайной величины около среднего значения. Дисперсия является детерминированной величиной.

Для дискретных и непрерывных случайных величин имеем соотношения

$$D[x_i] = \sum_{i=1}^{\infty} (x_i - \mu)^2 w_i \quad \text{и} \quad D[x_i] = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \mu)^2 w(x) dx.$$

По определению, стандартным отклонением (англ. standard deviation) случайной величины от математического ожидания называется квадратный корень из дисперсии

$$\sigma \equiv \sqrt{D[x_i]}.$$

Функции в Matlab: $\text{mean}(X)$ – оценка выборочного среднего, $\text{var}(X)$ – оценка выборочной дисперсии, $\text{std}(X)$ – оценка стандартного отклонения.

Выборочное среднее и его статистические характеристики (4)

Пусть независимые случайные величины x_i имеют математическое ожидание μ и стандартное отклонение σ . Вычислим дисперсию выборочного среднего (англ. sample covariance)

$$D[\langle x \rangle] = E [(\langle x \rangle - \mu)^2].$$

Для вычисления дисперсии выборочного среднего упростим аргумент по формуле квадрата суммы (сумма квадратов всех слагаемых плюс перекрестные члены)

$$\begin{aligned} (\langle x \rangle - \mu)^2 &= \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mu \right)^2 = \frac{1}{N^2} \left(\sum_{i=1}^N (x_i - \mu) \right)^2 = \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N (x_i - \mu)^2 + \frac{2}{N^2} \sum_{i=1, i < j}^N \sum_{j=1}^N (x_i - \mu)(x_j - \mu). \end{aligned}$$

Далее воспользуемся свойством линейности операции математического ожидания для независимых событий

$$\begin{aligned} D[\langle x \rangle] &= E [(\langle x \rangle - \mu)^2] = E \left[\frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N (x_i - \mu)^2 + \frac{2}{N^2} \sum_{i=1, i < j}^N \sum_{j=1}^N (x_i - \mu)(x_j - \mu) \right] = \\ &= E \left[\frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N (x_i - \mu)^2 \right] + E \left[\frac{2}{N^2} \sum_{i=1, i < j}^N \sum_{j=1}^N (x_i - \mu)(x_j - \mu) \right]. \end{aligned}$$

Выборочное среднее и его статистические характеристики (5)

Следовательно, дисперсия выборочного среднего для независимых измерений равна

$$D[\langle x \rangle] = E \left[\frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N (x_i - \mu)^2 \right] = \frac{1}{N} E \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \mu)^2 \right] = \frac{\sigma^2}{N}.$$

Мы получили важный вспомогательный результат: стандартное отклонение для оценки выборочного среднего зависит от длины реализации как $1/\sqrt{N}$

$$\sigma_{\langle x \rangle} \equiv \sqrt{D[\langle x \rangle]} = \frac{\sigma}{\sqrt{N}}.$$

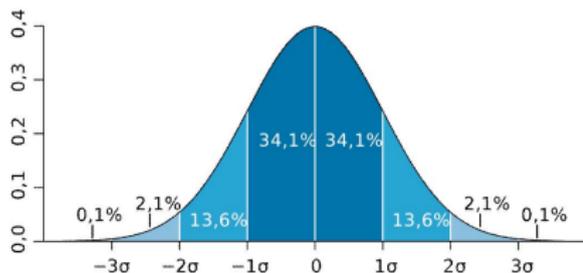
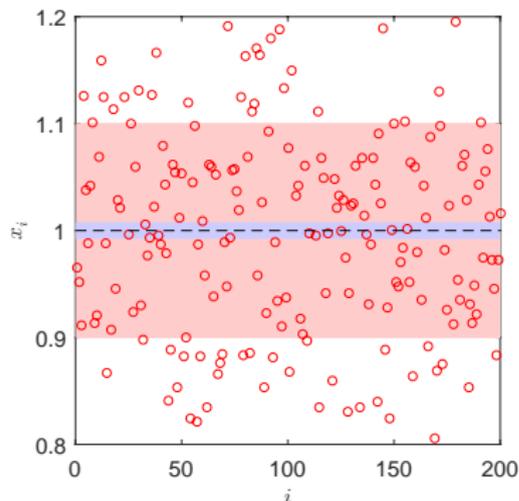
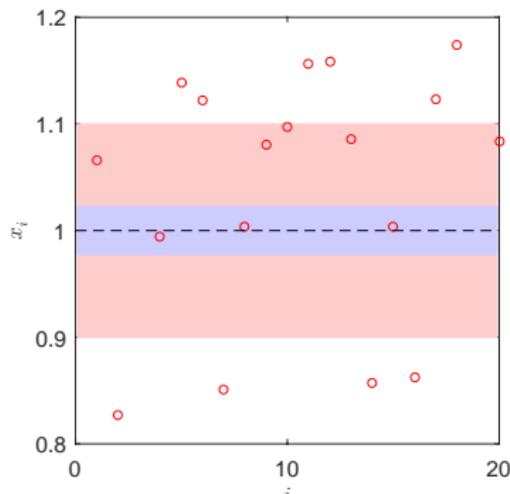
Иными словами, чем больше измерений случайной величины, тем меньше среднеквадратичное отклонение для оценки выборочного среднего.

Вывод: оценка выборочного среднего является несмещённой и состоятельной:

$$E[\langle x \rangle] = \mu \quad \text{и} \quad \sigma_{\langle x \rangle} \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad N \rightarrow \infty.$$

Иллюстрация: стандартное отклонение случайной величины и стандартное отклонение оценки среднего

Пусть случайная величина описывается гауссовским распределением:



Плотность вероятности
для нормального (гауссова) распределения:

- 68% значений – в полосе $\pm \sigma$
- 95% значений – в полосе $\pm 2\sigma$
- 99.7% значений – в полосе $\pm 3\sigma$

Доверительные интервалы

Доверительным интервалом (англ. confidence interval) параметра θ для случайной величины X с уровнем доверия p называется интервал с границами L и R , определяемый соотношением

$$P(L \leq \theta \leq R) = p.$$

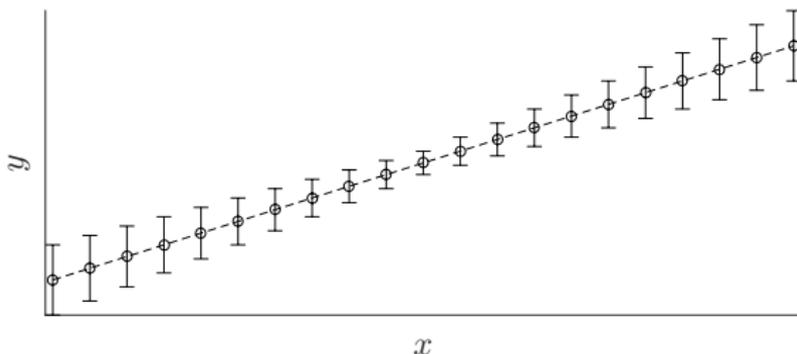
Часто используют уровни доверия 0.95 («правило двух сигм») и 0.99 («правило трёх сигм»).

Параметр $\alpha = 1 - p$ часто называют уровнем значимости (например, 0.05 или 0.01).

Граничные точки доверительного интервала L и R называются доверительными пределами.

Интуитивная интерпретация: если провести очень большое количество независимых экспериментов с построением доверительного интервала одним и тем же способом, то в 95% экспериментов доверительный интервал будет содержать оцениваемый параметр θ , а в оставшихся 5% экспериментов доверительный интервал не будет содержать θ .

Построение графиков с доверительными интервалами в Matlab: `errorbar(x, y, e)`



Выборочная дисперсия и её статистические характеристики (1)

Введем выборочную дисперсию для оценки рассеяния измеряемой случайной величины по отношению к **выборочному среднему**

$$S^2 \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \langle x \rangle)^2.$$

Очевидно, что выборочная дисперсия является случайной величиной.

Приведем это выражение к более удобному виду, добавляя и вычитая μ

$$\begin{aligned} S^2 &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left((x_i - \mu) - (\langle x \rangle - \mu) \right)^2 = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \mu)^2 - \frac{2}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \mu)(\langle x \rangle - \mu) + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\langle x \rangle - \mu)^2. \end{aligned}$$

Детерминированные величины можно вынести из-под знака суммы и упростить выражение

$$S^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \mu)^2 - 2(\langle x \rangle - \mu)(\langle x \rangle - \mu) + (\langle x \rangle - \mu)^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \mu)^2 - (\langle x \rangle - \mu)^2.$$

Выборочная дисперсия и её статистические характеристики (2)

В силу линейности операции математического ожидания для независимых случайных событий получаем

$$E[S^2] = E\left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \mu)^2 - (\langle x \rangle - \mu)^2\right] = E\left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \mu)^2\right] - E\left[(\langle x \rangle - \mu)^2\right].$$

В первом слагаемом легко выделить дисперсию случайной величины, во втором слагаемом – дисперсию оценки выборочного среднего (см. выше), поэтому

$$E[S^2] = \sigma^2 - \frac{\sigma^2}{N} = \frac{(N-1)}{N} \sigma^2.$$

Мы доказали смещённость (заниженность) оценки выборочной дисперсии.

Для перехода к несмещённой оценке дисперсии случайной величины необходимо ввести *исправленную* выборочную дисперсию по формуле

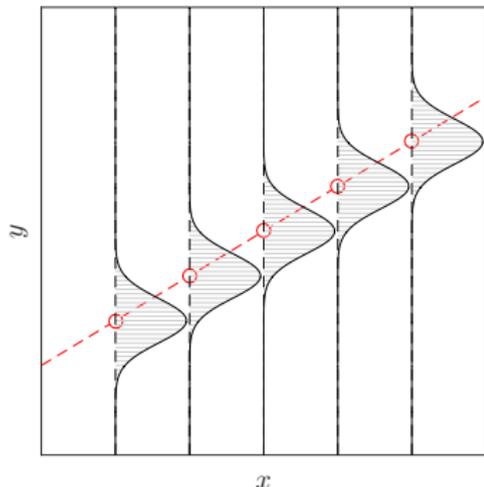
$$\tilde{S}^2 \equiv \frac{N}{(N-1)} S^2 = \frac{1}{(N-1)} \sum_{i=1}^N (x_i - \langle x \rangle)^2.$$

В этом случае $E[\tilde{S}^2] = \sigma^2$, что доказывает несмещённость оценки выборочной дисперсии случайной величины.

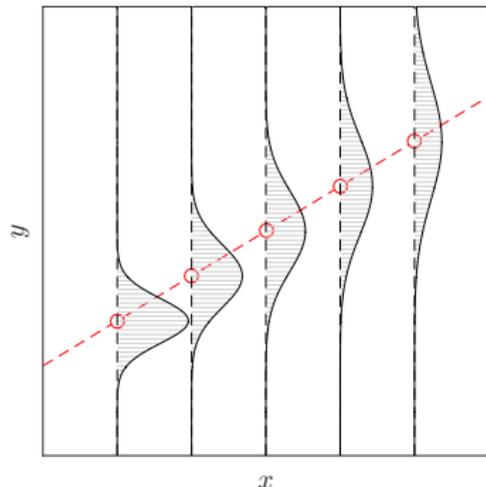
Предположение о гомоскедастичности распределения случайной величины

Гомоскедастичность (англ. homoscedasticity) – свойство, означающее постоянство условной дисперсии вектора или последовательности случайных величин, иными словами, дисперсия случайной величины одинакова во все моменты измерения. Противоположное явление носит название гетероскедастичности.

Гомоскедастичное распределение

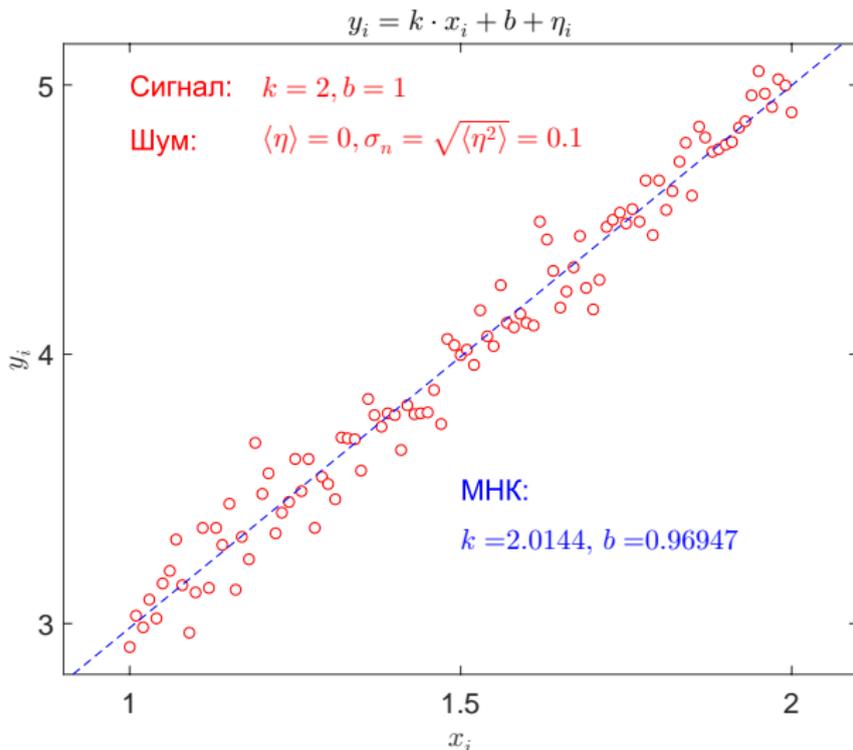


Гетероскедастичное распределение



Пример: при прецизионном измерении температурной зависимости электрического сопротивления может наблюдаться изменение интенсивности тепловых шумов с ростом температуры

Линейная регрессия (метод наименьших квадратов) и проблема оценки параметров модели



Как оценить доверительные интервалы для параметров модели: $k \pm \delta k$ и $b \pm \delta b$?

Метод наименьших квадратов (method of least squares)

Рассмотрим массив данных $\{x_i, y_i\}$ и предположим, что зависимость может быть аппроксимирована линейной функцией $y = k \cdot x + b$. Иными словами, значения y_i содержат регулярный вклад и случайный шум.

Определим коэффициенты k и b так, чтобы суммарная ошибка линейной аппроксимации была наименьшей

$$\mathcal{F}(k, b) \equiv \sum_{i=1}^N (y_i - k x_i - b)^2 \rightarrow \min.$$

Потребуем, чтобы коэффициенты k и b соответствовали локальному минимуму функционала

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial k} = 0 \quad \text{и} \quad \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial b} = 0.$$

Это позволяет получить систему уравнений в следующем виде

$$(-2) \cdot \sum_{i=1}^N x_i (y_i - k x_i - b) = 0 \quad \text{и} \quad (-2) \cdot \sum_{i=1}^N (y_i - k x_i - b) = 0.$$

Здесь и далее для краткости мы будем использовать обозначения

$$\sum x_i = \sum_{i=1}^N x_i = N \cdot \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \right) = N \cdot \langle x \rangle,$$

где $\langle x \rangle$ – среднее значение параметра x для данной выборки.

Решение системы уравнений

$$\tilde{k} = \frac{N \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{N \sum x_i^2 - \sum x_i \sum x_i} = \frac{\langle x_i y_i \rangle - \langle x_i \rangle \langle y_i \rangle}{\langle x_i^2 \rangle - \langle x_i \rangle^2} = \frac{\sum (x_i - \langle x_i \rangle) (y_i - \langle y_i \rangle)}{\sum (x_i - \langle x_i \rangle)^2},$$

$$\tilde{b} = \frac{1}{N} \cdot \left(\sum_{i=1}^N y_i - \tilde{k} \cdot \sum_{i=1}^N x_i \right) = \frac{\langle x_i^2 \rangle \langle y_i \rangle - \langle x_i y_i \rangle \langle x_i \rangle}{\langle x_i^2 \rangle - \langle x_i \rangle^2}.$$

Итак, оптимальный выбор параметров соответствует линейной аппроксимирующей функции

$$y_{app}(x) = \tilde{k} \cdot x + \tilde{b} = \frac{\langle x_i y_i \rangle - \langle x_i \rangle \langle y_i \rangle}{\langle x_i^2 \rangle - \langle x_i \rangle^2} \cdot x + \frac{\langle x_i^2 \rangle \langle y_i \rangle - \langle x_i y_i \rangle \langle x_i \rangle}{\langle x_i^2 \rangle - \langle x_i \rangle^2}.$$

Нетрудно показать, что аппроксимирующая прямая проходит через среднюю точку рассматриваемого массива $x = \langle x_i \rangle$ и $y = \langle y_i \rangle$:

$$\begin{aligned} y_{app}(\langle x_i \rangle) &= \frac{\langle x_i y_i \rangle - \langle x_i \rangle \langle y_i \rangle}{\langle x_i^2 \rangle - \langle x_i \rangle^2} \cdot \langle x_i \rangle + \frac{\langle x_i^2 \rangle \langle y_i \rangle - \langle x_i y_i \rangle \langle x_i \rangle}{\langle x_i^2 \rangle - \langle x_i \rangle^2} = \\ &= \frac{-\langle x_i \rangle^2 \langle y_i \rangle + \langle x_i^2 \rangle \langle y_i \rangle}{\langle x_i^2 \rangle - \langle x_i \rangle^2} = \frac{\langle y_i \rangle (\langle x_i^2 \rangle - \langle x_i \rangle^2)}{\langle x_i^2 \rangle - \langle x_i \rangle^2} = \langle y_i \rangle \quad \text{q.e.d.} \end{aligned}$$

Аналогично работает модель полиномиальной аппроксимации $y = a + bx + cx^2 + dx^3 + \dots$ методом наименьших квадратов.

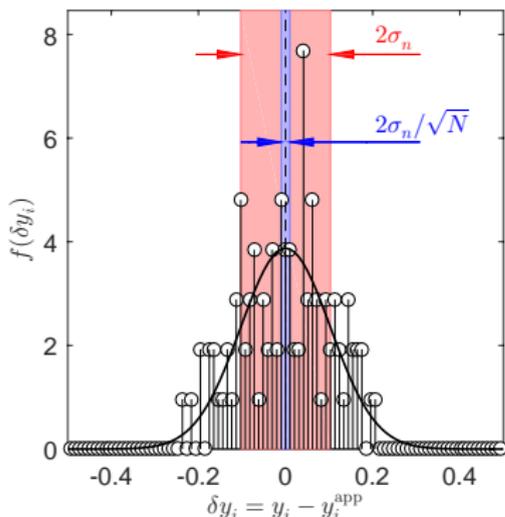
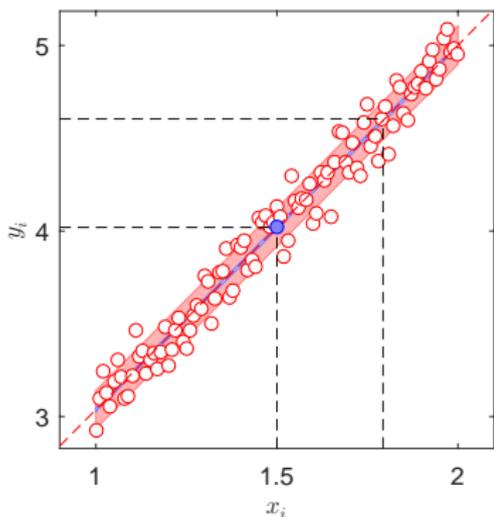
Оценка дисперсии случайной величины

Оценим дисперсию измеряемых величин от аппроксимирующей линейной зависимости, для чего введем сумму квадратов остатков (англ. error sum of squares или residual sum of squares)

$$RSS = \sum (y_i - (\tilde{k} \cdot x_i + \tilde{b}))^2,$$

тогда оценка среднеквадратичного отклонения измеряемой величины от предсказываемого значения равна

$$\sigma_n = \sqrt{\frac{RSS}{N-2}} = \sqrt{\frac{1}{(N-2)} \cdot \sum (y_i - (\tilde{k} \cdot x_i + \tilde{b}))^2}.$$



Оценка стандартного отклонения для наклона

Обсудим статистические свойства оценок наклона \tilde{k} и смещения \tilde{b} .

Введем вспомогательную детерминированную величину, определяемую значениями x_i для данной выборки

$$w_i = \frac{x_i - \langle x_i \rangle}{\sum (x_i - \langle x_i \rangle)^2}.$$

Далее нам потребуется следующие свойства, которые несложно доказать

$$\sum w_i = \frac{\sum (x_i - \langle x_i \rangle)}{\sum (x_i - \langle x_i \rangle)^2} = \frac{N \cdot \sum x_i / N - \sum \langle x_i \rangle}{\sum (x_i - \langle x_i \rangle)^2} = \frac{N \langle x_i \rangle - N \langle x_i \rangle}{\sum (x_i - \langle x_i \rangle)^2} = 0;$$

$$\sum w_i \cdot (x_i - \langle x_i \rangle) = \frac{\sum (x_i - \langle x_i \rangle)^2}{\sum (x_i - \langle x_i \rangle)^2} = 1;$$

$$\sum w_i \cdot x_i = \sum w_i \cdot (x_i - \langle x_i \rangle + \langle x_i \rangle) = \sum w_i \cdot (x_i - \langle x_i \rangle) + \sum w_i \cdot \langle x_i \rangle = 1 + 0 = 1;$$

$$\sum w_i^2 = \frac{\sum (x_i - \langle x_i \rangle)^2}{(\sum (x_i - \langle x_i \rangle)^2)^2} = \frac{1}{\sum (x_i - \langle x_i \rangle)^2} \cdot \frac{\sum (x_i - \langle x_i \rangle)^2}{\sum (x_i - \langle x_i \rangle)^2} = \frac{1}{\sum (x_i - \langle x_i \rangle)^2}.$$

Представим выражение для оценки наклона \tilde{k} в следующем виде

$$\tilde{k} = \frac{\sum(x_i - \langle x_i \rangle)(y_i - \langle y_i \rangle)}{\sum(x_i - \langle x_i \rangle)^2} = \sum w_i \cdot (y_i - \langle y_i \rangle) = \sum w_i y_i - \langle y_i \rangle \sum w_i = \sum w_i y_i.$$

В такой форме записи случайный характер оценки связан с множителем y_i .

Вычислим математическое ожидание оценки \tilde{k}

$$\begin{aligned} E[\tilde{k}] &= E\left[\sum w_i y_i\right] = \sum w_i E[y_i] = \sum w_i E[k \cdot x_i + b + \eta_i] = \sum w_i (k \cdot x_i + b + 0) = \\ &= k \sum w_i x_i + b \sum w_i = k \cdot 1 + 0 = k. \end{aligned}$$

Вычислим дисперсию оценки \tilde{k} , предполагая некоррелированный и гомоскедастичный шумовой вклад

$$\begin{aligned} D[\tilde{k}] &= D\left[\sum w_i y_i\right] = \sum D[w_i y_i] = \sum w_i^2 D[y_i] = \sum w_i^2 \cdot \sigma_n^2 = \frac{\sigma_n^2}{\sum(x_i - \langle x_i \rangle)^2} = \\ &= \frac{1}{N-1} \cdot \frac{\sigma_n^2}{\sum(x_i - \langle x_i \rangle)^2 / (N-1)} = \frac{1}{(N-1)} \cdot \frac{\sigma_n^2}{\sigma_x^2}, \end{aligned}$$

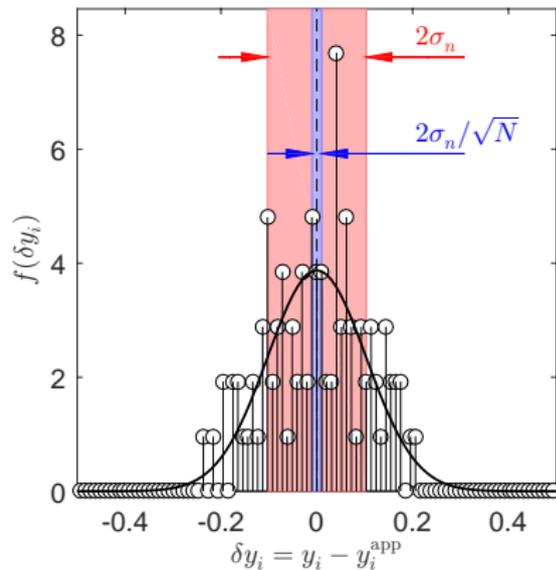
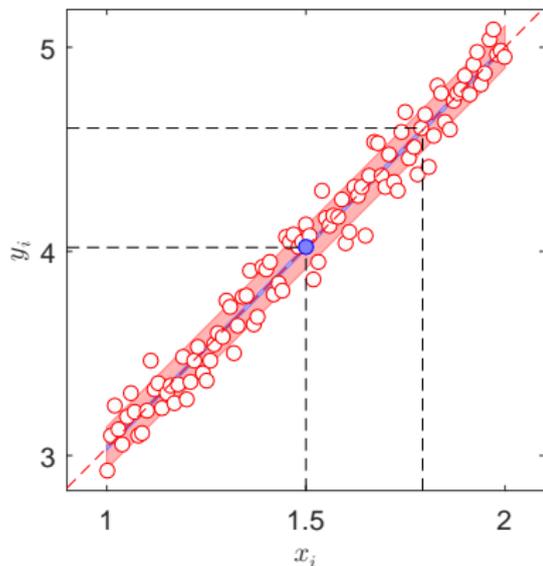
где σ_n и σ_x – среднеквадратичные отклонения для шума и x -координат точек выборки от среднего значения.

Вывод: оценка наклона является несмещённой и состоятельной ($\sigma_k \rightarrow 0$ при $N \rightarrow \infty$).

Среднеквадратичное отклонение оценки для наклона определяется квадратным корнем из дисперсии

$$\sigma_k \simeq \frac{\sigma_n / \sqrt{N}}{\sigma_x} \quad \text{для } N \gg 1,$$

Можно дать простую интерпретацию этому соотношению – стандартное отклонение для наклона определяется отношением ширины шумовой дорожки для среднего значения (σ_n / \sqrt{N}) и ширины распределения по горизонтальной оси.



Оценка стандартного отклонения для смещения

Оценка смещения \tilde{b} через параметр w_i

$$\tilde{b} \simeq \langle y_i \rangle - \tilde{k} \cdot \langle x_i \rangle = \frac{1}{N} \sum y_i - \langle x_i \rangle \cdot \sum w_i y_i = \sum \left(\frac{1}{N} - \langle x_i \rangle w_i \right) y_i.$$

Вычислим математическое ожидание оценки \tilde{b}

$$\begin{aligned} E[\tilde{b}] &= E \left[\sum \left(\frac{1}{N} - \langle x_i \rangle w_i \right) y_i \right] = \sum \left(\frac{1}{N} - \langle x_i \rangle w_i \right) E[y_i] = \sum \left(\frac{1}{N} - \langle x_i \rangle w_i \right) (k \cdot x_i + b) \\ &= \frac{1}{N} k \cdot \sum x_i + \frac{1}{N} \sum b - \langle x_i \rangle k \cdot \sum w_i x_i - \langle x_i \rangle b \cdot \sum w_i = k \langle x_i \rangle + b - k \langle x_i \rangle - 0 = b. \end{aligned}$$

Вычислим дисперсию оценки b и стандартное отклонение

$$\begin{aligned} D[\tilde{b}] &= D \left[\sum \left(\frac{1}{N} - \langle x_i \rangle w_i \right) y_i \right] = \sum D \left[\left(\frac{1}{N} - \langle x_i \rangle w_i \right) y_i \right] = \sum \left(\frac{1}{N} - \langle x_i \rangle w_i \right)^2 D[y_i] = \\ &= \sigma_n^2 \cdot \sum \left(\frac{1}{N} - \langle x_i \rangle w_i \right)^2 = \sigma_n^2 \cdot \left(\sum \frac{1}{N^2} - \frac{2}{N} \langle x_i \rangle \cdot \sum w_i + \langle x_i \rangle^2 \cdot \sum w_i^2 \right) = \\ &= \sigma_n^2 \cdot \left(\frac{1}{N} + \frac{\langle x_i \rangle^2}{\sum (x_i - \langle x_i \rangle)^2} \right) \simeq \frac{\sigma_n^2}{N} \cdot \left(1 + \frac{\langle x_i \rangle^2}{\sigma_x^2} \right). \end{aligned}$$

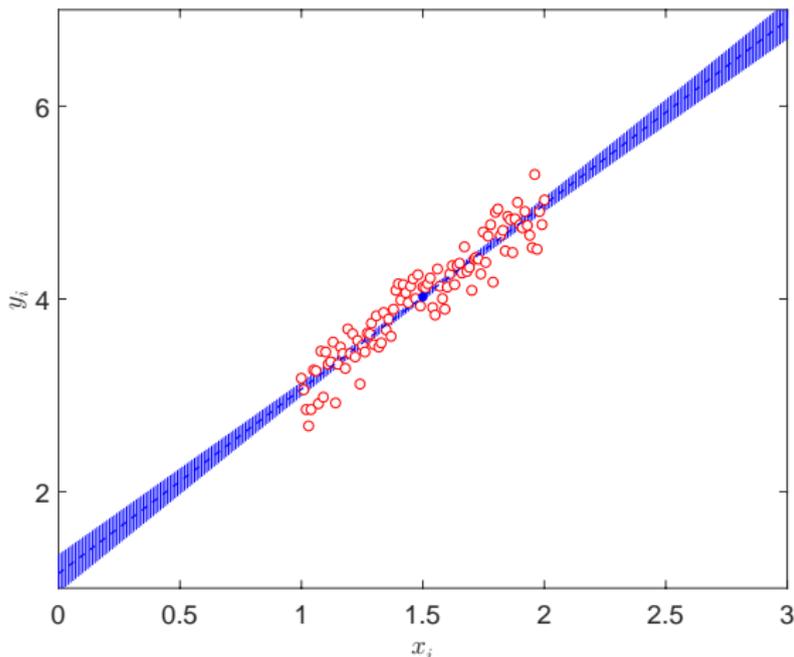
Вывод: оценка смещения является несмещенной и состоятельной.

Оценка стандартного отклонения для наклона и смещения

$$\sigma_k \simeq \frac{\sigma_n}{\sqrt{N}} \frac{1}{\sigma_x} \quad \text{и} \quad \sigma_b \simeq \frac{\sigma_n}{\sqrt{N}} \cdot \sqrt{1 + \frac{\langle x_i \rangle^2}{\sigma_x^2}} = \sqrt{\frac{\sigma_n^2}{N} + \sigma_k^2 \langle x_i \rangle^2} \quad \text{для} \quad N \gg 1.$$

Линейная аппроксимация и доверительный интервал:

$$y_{app} \simeq \langle y \rangle + \tilde{k} \cdot (x - \langle x \rangle) + \tilde{b} \quad \text{и} \quad \sigma_y \simeq \frac{\sigma_n}{\sqrt{N}} \cdot \sqrt{1 + \frac{(x - \langle x \rangle)^2}{\sigma_x^2}}.$$



POINTS OF SIGNIFICANCE

Simple linear regression

“The statistician knows...that in nature there never was a normal distribution, there never was a straight line, yet with normal and linear assumptions, known to be false, he can often derive results which match, to a useful approximation, those found in the real world.”¹

We have previously defined association between X and Y as meaning that the distribution of Y varies with X . We discussed correlation as

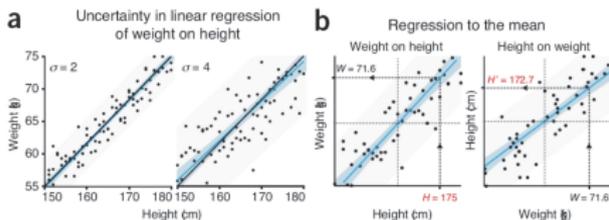


Figure 3 | Regression models associate error to response which tends to pull predictions closer to the mean of the data (regression to the mean). (a) Uncertainty in a linear regression relationship can be expressed by a 95% confidence interval (blue band) and 95% prediction interval (gray band).

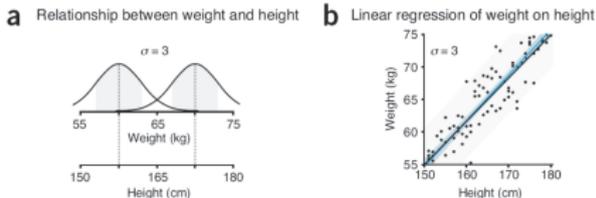


Figure 2 | In a linear regression relationship, the response variable has a distribution for each value of the independent variable. (a) At each height, weight is distributed normally with s.d. $\sigma = 3$. (b) Linear regression of $n = 3$ weight measurements for each height. The mean weight varies as $\mu(\text{Height}) = 2 \times \text{Height}/3 - 45$ (black line) and is estimated by a regression line (blue line) with 95% confidence interval (blue band). The 95% prediction interval (gray band) is the region in which 95% of the population is predicted to lie for each fixed height.

When the errors have constant variance σ^2 , we can model the uncertainty in regression parameters. In this case, b_0 and b_1 have means β_0 and β_1 , respectively, and variances $\sigma^2(1/n + \bar{X}^2/s_{XX})$ and σ^2/s_{XX} , where $s_{XX} = (n - 1)s_X^2$. As we collect X over a wider range, s_{XX} increases, so the variance of b_1 decreases. The predicted value $\hat{y}(x)$ has a mean $\beta_0 + \beta_1 x$ and variance $\sigma^2(1/n + (x - \bar{X})^2/s_{XX})$. Additionally, the mean square error (MSE) = $\text{SSE}/(n - 2)$ is an unbiased estimator of the error variance (i.e., σ^2). This is identical to how MSE is used in ANOVA to estimate the within-group variance, and it can be used as an estimator of σ^2 in the equations above to allow us to find the standard error (SE) of b_0 , b_1 and \hat{y}_x . For example, $\text{SE}(\hat{y}(x)) = \sqrt{\text{MSE}(1/n + (x - \bar{X})^2/s_{XX})}$.

Промежуточные выводы

- Среднеквадратичные отклонения для оценок параметров модели определяются стандартным отклонением остаточного члена (т. е. пропорциональны интенсивности шума).
- Чем больше число отсчетов (длина реализации N), тем меньше стандартные отклонения от средних значений.
- Чем больше дисперсия аргумента, тем меньше стандартные отклонения оценок наклона и смещения от средних значений.
- Среднеквадратичное отклонение для наклона не зависит абсолютных значений аргументов.
- Среднеквадратичное отклонение для смещения зависит от среднего значения $\langle x_i \rangle$ и потому наименьшее рассеивание будет наблюдаться для центрированной зависимости ($\langle x_i \rangle = 0$).

Функции `polyfit` и `fit` в среде Matlab

Пусть X – вектор значений аргумента, Y – вектор значений измеряемой величины.

Функция $p = \text{polyfit}(X, Y, n)$ выдает значения коэффициентов полиномиальной аппроксимации $(a_n, a_{n-1}, \dots, a_0)$ многочленом n -ой степени: $Y = p_n X^n + p_{n-1} X^{n-1} + \dots + p_0$.

Функция $Y_{app} = \text{polyval}(p, X_{app})$ генерирует аппроксимирующую функцию в точках X_{app} .

Функция $f = \text{fit}(X, Y, \text{type})$ выдает значения коэффициентов и соответствующие доверительные интервалы при полиномиальной аппроксимации n -ой степени

параметр $\text{type} = 'poly1', 'poly2', \dots 'poly9'$ в зависимости от степени аппроксимирующего полинома

Пример использования:

```
 $f = \text{fit}(X, Y, 'poly1')$ 
```

Linear model Poly1:

$$f(x) = p1 * x + p2$$

Coefficients (with 95% confidence bounds):

$$p1 = 2 (1.993, 2.007)$$

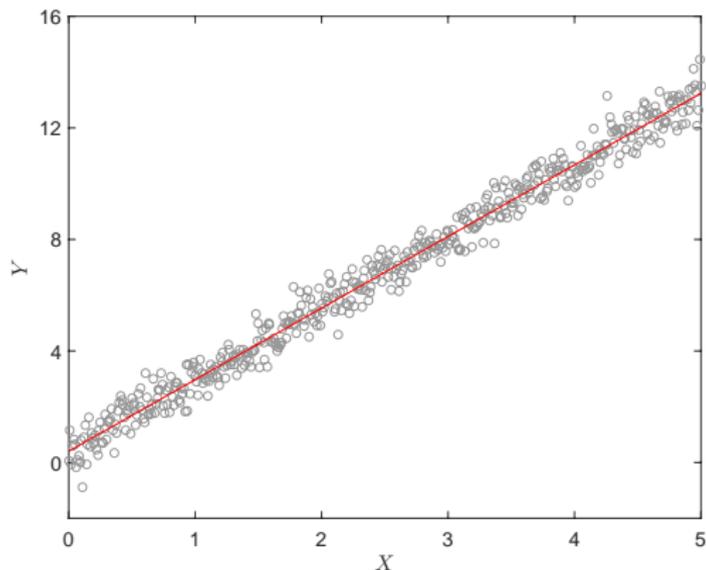
$$p2 = 3 (2.958, 3.043)$$

Задачи

Дан набор однотипных N файлов, содержащих одномерный массив данных X и Y (первый и второй столбцы). Предполагая, что зависимость Y от X описывается линейной функцией

$$Y = k \cdot X + b + \sigma \cdot \eta,$$

определить характер и интенсивность шума, ожидаемые значения и доверительный интервал для наклона (k) и смещения (b) для отдельных реализаций и для ансамбля реализаций. По возможности сравните оценки параметров, определяемые аналитическими формулами из лекции, и оценками с помощью встроенных функций в пакетах прикладных программ.

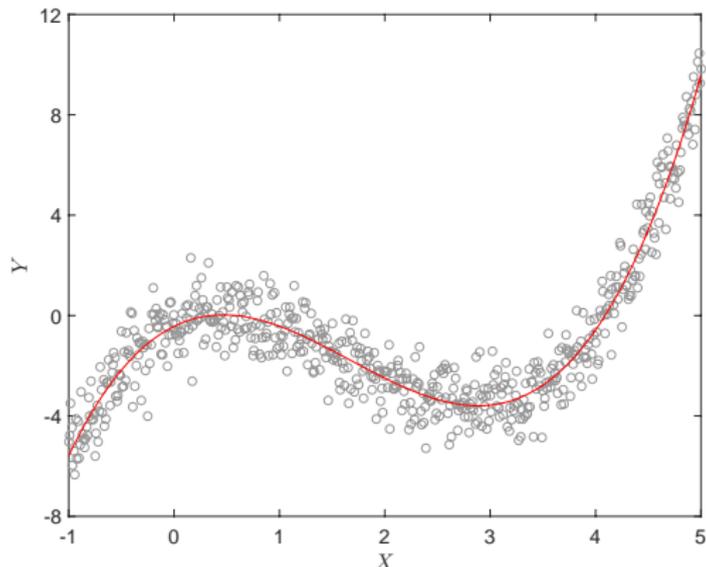


Задачи

Дан набор однотипных N файлов, содержащих одномерный массив данных X и Y (первый и второй столбцы). Предполагая, что зависимость Y от X описывается полиномиальной функцией

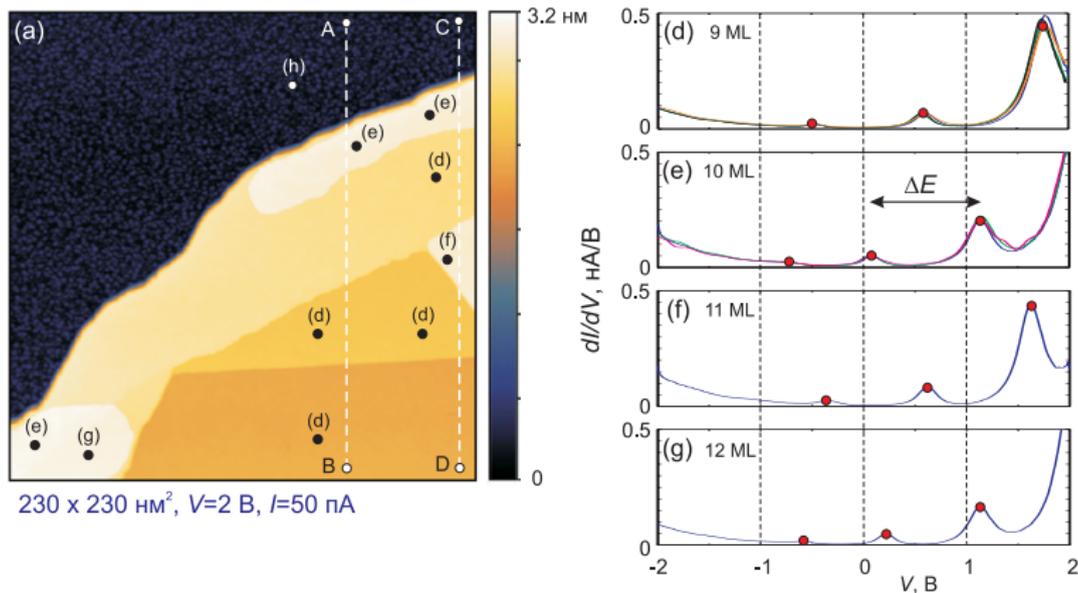
$$Y = a_n X^n + a_{n-1} X^{n-1} + \dots + a_1 X + a_0 + \sigma \cdot \eta$$

с неизвестной степенью многочлена n , определить характер и интенсивность шума, ожидаемые значения и доверительные интервалы для коэффициентов a_0, \dots, a_n для отдельных реализаций и для ансамбля реализаций.



Пример 1: оценка толщины смачивающего слоя Рв

Уставщиков, Путилов, Аладышкин, *Туннельная интерферометрия и измерение толщины ультратонких металлических плёнок Рв(111)* // Письма в ЖЭТФ, т. 106, 476-482 (2017)

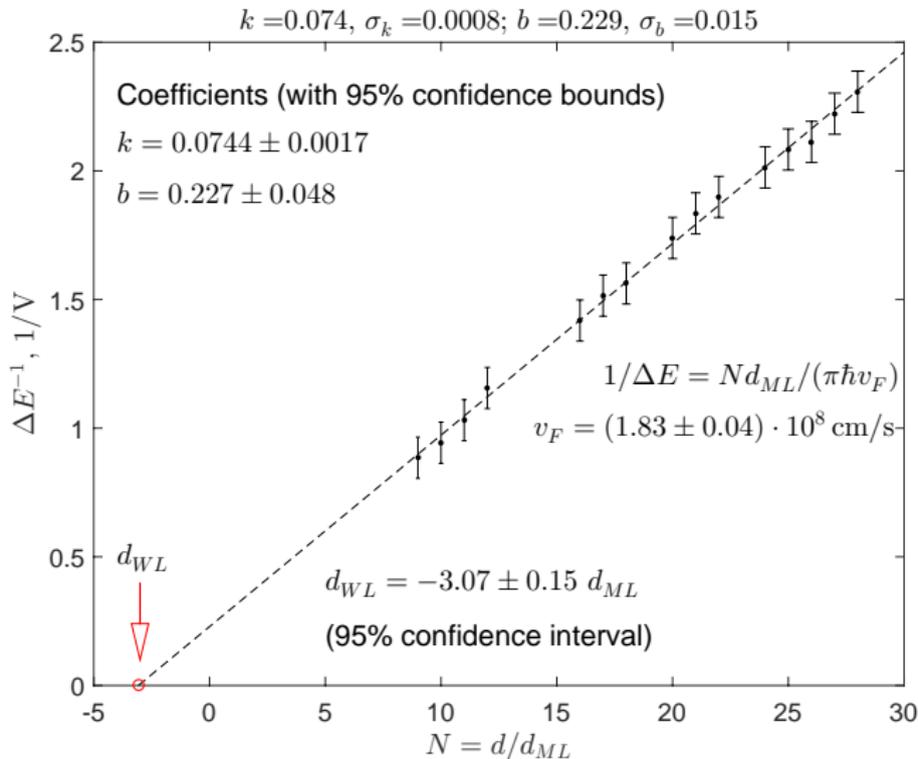


Спектр уровней размерного квантования в пленке толщины D

$$E_n = E_0 + \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m^*} \simeq E_F + \hbar v_F \cdot \left(\frac{\pi n}{D} - k_F \right) \implies \Delta E \equiv E_{n+1} - E_n = \frac{\pi \hbar v_F}{D}$$

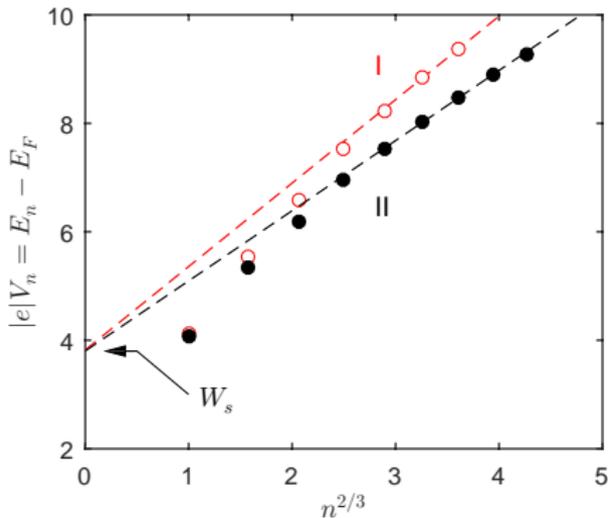
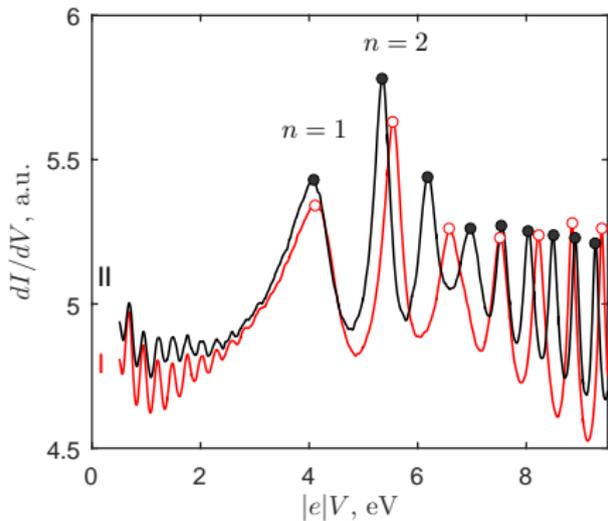
Пример 1: оценка толщины смачивающего слоя Рв

$$\Delta E = \frac{\pi \hbar v_F}{d_{WL} + N \cdot d_{ML}} \quad \text{или} \quad \frac{1}{\Delta E} = \frac{d_{WL} + N \cdot d_{ML}}{\pi \hbar v_F}.$$



Пример 2: оценка работы выхода

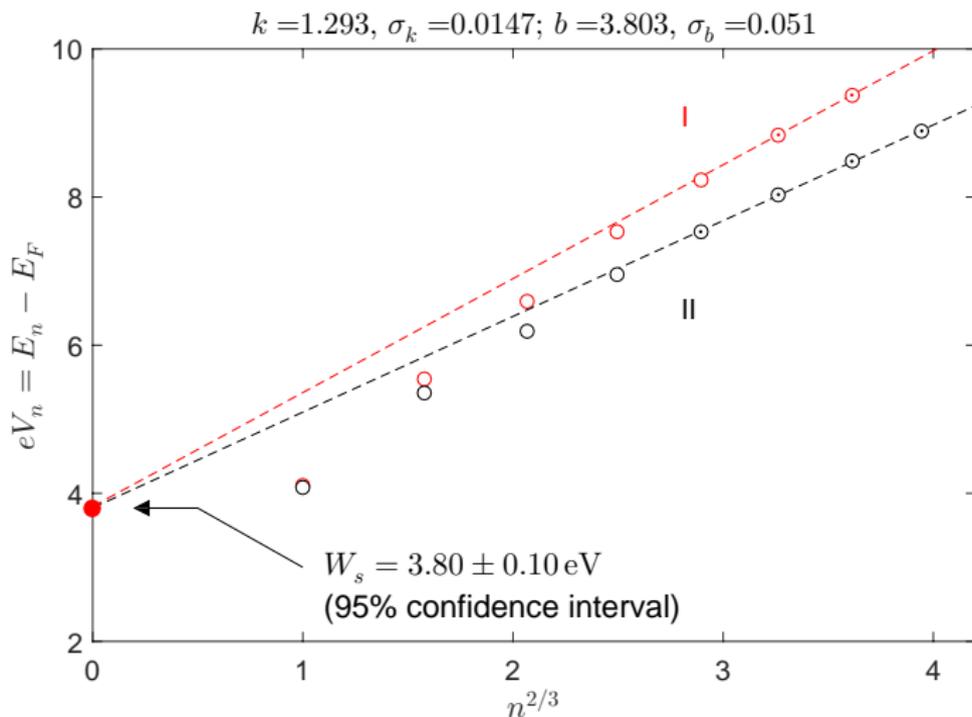
Aladyshkin, *Quantum-well and modified image-potential states in thin Pb(111) films: an estimate for the local work function* // *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 32, 435001 (2020)



Энергия эмиссионных резонансов

$$|e|U_n = W_s + \alpha \cdot F^{2/3} \cdot n^{2/3} \quad \text{для } n \gg 1.$$

Пример 2: оценка работы выхода



Пример 3: оценка константы электрон-фононного взаимодействия по данным ARPES

A. Y. Tupchaya, L. V. Bondarenko, A. A. Yakovlev, A. N. Mihalyuk, D. V. Gruznev, N. S. Denisov, A. V. Matetsky, A. Yu. Aladyshkin, A. V. Zotov, A. A. Saranin, *2D system incorporating perforated Mg sheet sandwiched between Pb layer and Si(111)* // Applied Surface Science, vol. 589, 152951 (2022)

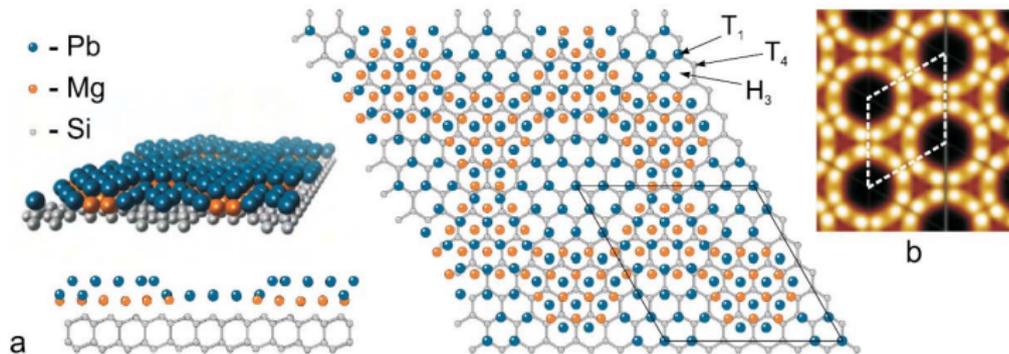
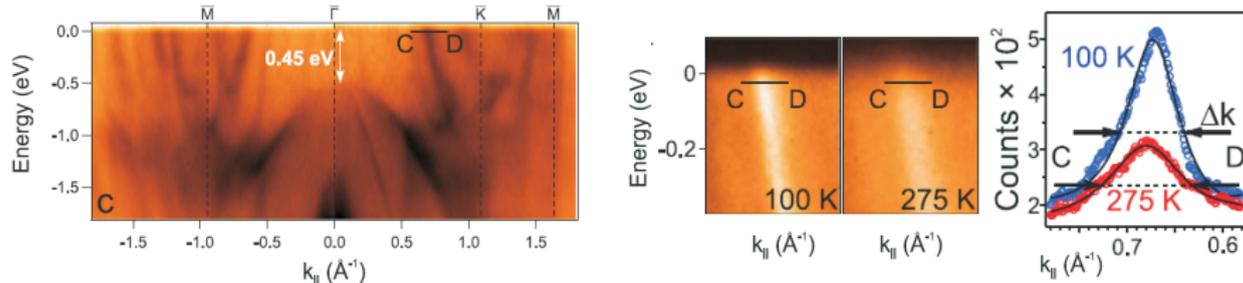


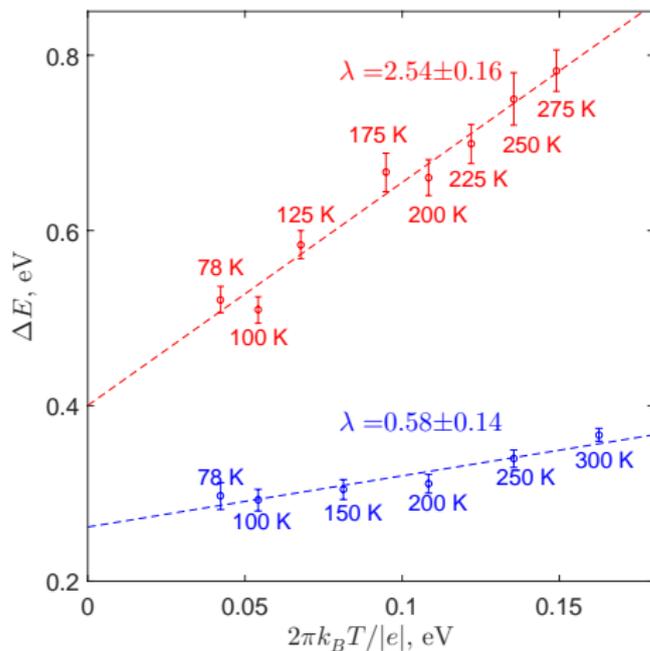
Fig. 4. (a) Ball-and-stick (top and side views) and isometric view of the structural model for the 6×6 -(Mg, Pb) surface. (b) Simulated empty state STM image (+0.5 V).



Пример 3: оценка константы электрон-фононного взаимодействия по данным ARPES

Оценка постоянной электрон-фононного взаимодействия

$$\Delta E = \left. \frac{dE}{dk} \right|_{E_F} \cdot \Delta k \quad \text{и} \quad \lambda = \frac{1}{2k_B T} \frac{d\Delta E}{dT}$$



Оценка наклона с
95%-доверительным интервалом

Si(111)-6x6-(Pb,Mg)

Si(111)-Pb

- Как правило, детальный статистический анализ экспериментальных данных является избыточным, если речь идет о качественных наблюдениях.
- Детальный статистический анализ имеет смысл только при обработке экспериментальных данных метрологического качества, когда можно минимизировать влияние «инструмента» и исследовать материальные характеристики образцов высокого качества.
- Нужно понимать, как работают формулы, зашитые в стандартные пакеты отработки результатов (Matlab, Origin, Maple, Mathematica) и области их применимости.
- Для нестандартных случаев (например, гетероскедастичное распределение) для оценки доверительных интервалов следует действовать по определению.

Лекция 2

Проблема численного дифференцирования и поиска экстремумов при наличии шума

Интерполяция, аппроксимация и декомпозиция

Среднее арифметическое и среднее медианное

Среднее арифметическое

$$\langle x \rangle = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x_n$$

Вычисление среднего значения в Matlab: `mean(X)`

Среднее арифметическое набора чисел – число, сумма квадратов расстояний от которого до всех чисел из набора минимальна.

Пример: пусть $X = [10, 11, 10, 12, 11, 9, 12, 10, 1000]$ – выборка с одним явным **выбросом**.

Очевидно, что среднее $\langle x \rangle = 120.5$ существенно отличается от всех элементов в выборке.

Среднее медианное или медиана: такое число, что половина из элементов выборки не меньше него, а другая половина не больше.

Вычисление медианы: упорядочим выборку по возрастанию элементов, тогда для нечётного числа элементов в выборке медианой называют средний элемент

$$\text{sort}(X) = [9, 10, 10, 10, 11, 11, 12, 12, 1000] \rightarrow \text{медиана} = x_{(N-1)/2} = 11$$

Для чётного числа элементов в выборке медианой часто называют среднее арифметическое двух центральных элементов $(x_{(N-1)/2} + x_{(N-1)/2+1})/2$.

Вычисление медианного значения в Matlab: `median(X)`

Интерполяция

Интерполяция – в вычислительной математике метод нахождения неизвестных промежуточных значений некоторой функции, по имеющемуся дискретному набору её известных значений. Как правило, интерполяцией называют такую разновидность аппроксимации, при которой кривая построенной функции проходит точно через имеющиеся точки данных.

1. Кусочно-линейная интерполяция – интерполяция неизвестной функции $Y = f(X)$ линейной функцией $y = k \cdot x + b$ на каждом участке между любыми двумя узлами (X_n, Y_n) и (X_{n+1}, Y_{n+1}) .

Пример: $Y_{int} = \text{interp1}(X, Y, X_{int})$, где X и Y – аргумент и значение интерполируемой функции, X_{int} – вектор значений, в которых требуется определить значение функции.

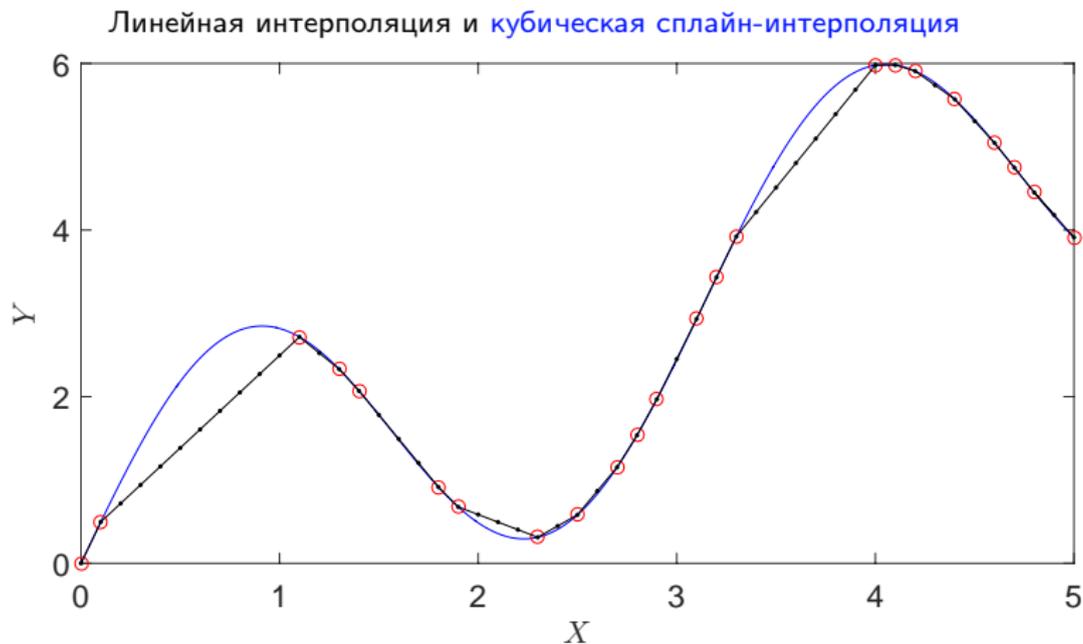
2. Кубическая сплайн-интерполяция – интерполяция неизвестной функции $Y = f(X)$ кубической зависимостью вида $y = a_3 x^3 + a_2 x^2 + a_1 x + a_0$ на каждом участке между любыми двумя узлами (X_n, Y_n) и (X_{n+1}, Y_{n+1}) . Кубическая сплайн-интерполяция проходит точно через все узлы исходной зависимости и обеспечивает непрерывность интерполируемой функции вместе с первой и второй производными.

Пример: $Y_{int} = \text{spline}(X, Y, X_{int})$, где X и Y – аргумент и значение интерполируемой функции, X_{int} – вектор значений, в которых требуется определить значение функции.

Интерполяцию разумно использовать приведения зависимости с пропущенными или неравномерно расположенными узлами к зависимости с эквидистантно расположенными узлами.

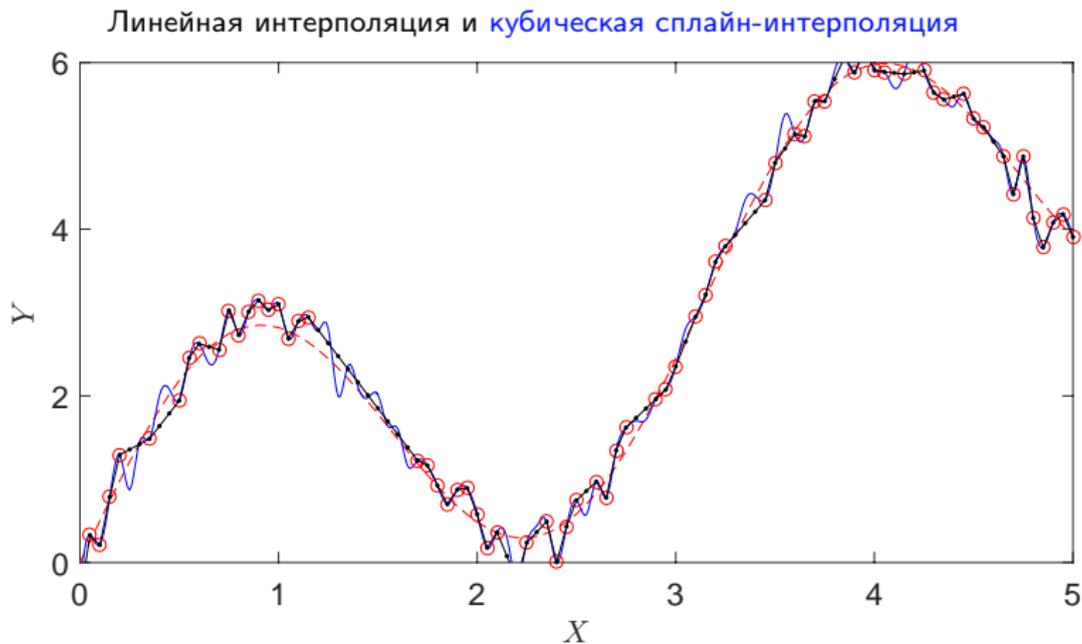
Сравнение линейной и кубической сплайн-интерполяции для зависимости с неравномерным расположением точек

Модельная функция: $Y = X + 2 \sin X$ (○)



Сравнение линейной и кубической сплайн-интерполяции при наличии шума

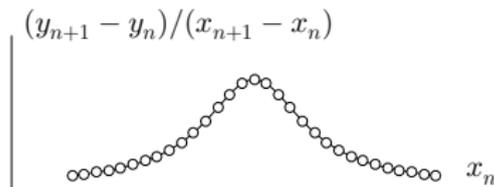
Модельная функция: $Y = X + 2 \sin X + 0.2 \cdot \eta(X)$ (○)



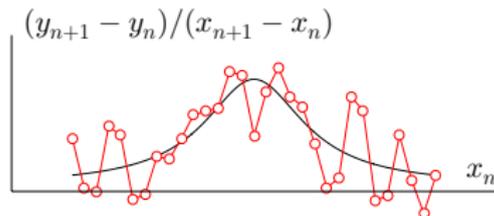
Шум может приводить к неадекватной интерполяции!

Проблема численного дифференцирования при наличии шума

Гладкая функция без «шума»: $dYdX = \text{gradient}(Y)/\Delta X$, где $\Delta X = X_{n+1} - X_n$



Гладкая функция + высокочастотный «шум»: $dYdX = \text{gradient}(Y)/\Delta X$



Вывод 1: проблема дифференцирования функции на сетке при наличии шума является некорректной математической задачей и в общем случае решения не имеет.

Вывод 2: перед тем, как дифференцировать массивы экспериментальных данных, результаты измерений нужно «сгладить», фильтруя высокочастотные шумы аппаратными средствами или численными методами.

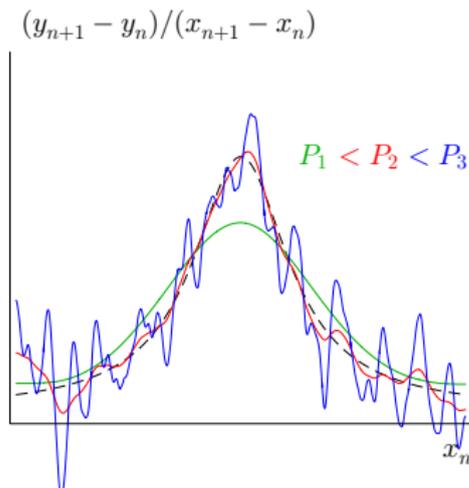
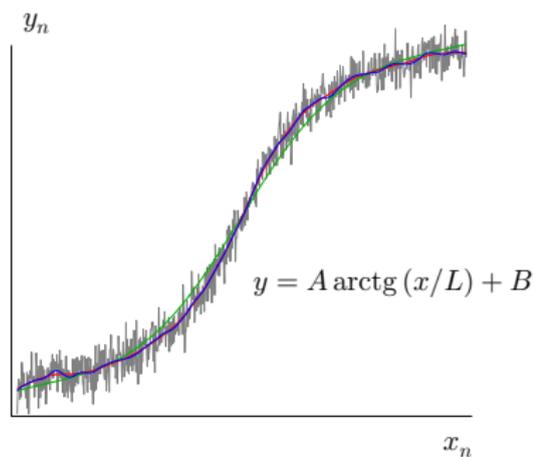
Сглаживающая кубическая сплайн-аппроксимация

Пусть X_n и Y_n – массив экспериментальных данных, где $n = 1, \dots, N$.

Сглаживающая функция $f(X_n)$, имеющая на каждом участке вид кубического сплайна, минимизирует функционал

$$\mathcal{F} = P \cdot \sum_{n=1}^N |f(X_n) - Y_n|^2 + (1 - P) \cdot \sum_{n=1}^N |f''(x)|^2.$$

Параметр $0 \leq P \leq 1$ характеризует меру сглаживания: чем меньше P , тем более гладкой является функция $f(X_n)$.



Для $P \neq 1$ сглаживающая функция не проходит через узлы исходного массива данных!

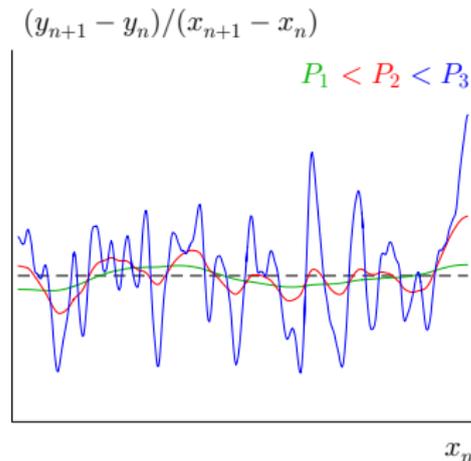
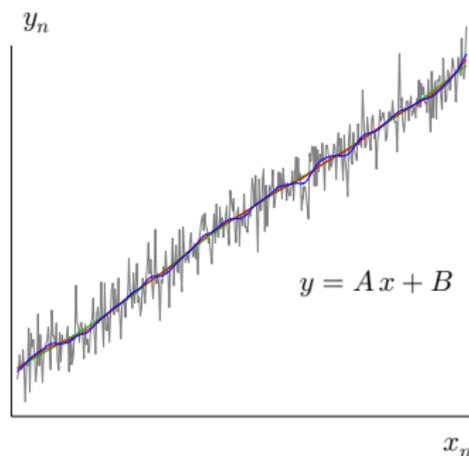
Функция csapp в Matlab

Пусть X – вектор значений аргумента, Y – вектор значений измеряемой величины.

Функция $coeff = csaps(X, Y, P)$ возвращает значения коэффициентов сплайна

$Y_{app} = fnval(coeff, X)$ – построение сглаживающего сплайна для функции

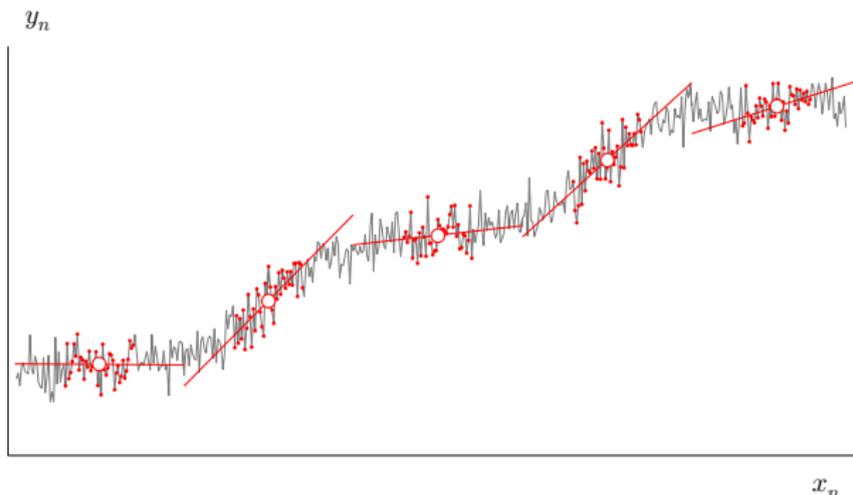
$dYdX_{app} = fnval(fnder(coeff), X)$ – вычисление производной



Скольльзящий полиномиальный фильтр (фильтр Савицкого-Голея)

Пусть X – вектор значений аргумента, Y – вектор значений измеряемой величины.

Идея фильтрации заключается в выделении подмассивов $X(n_0 - L : n_0 + L)$ и $Y(n_0 - L : n_0 + L)$ длиной $2L + 1$ значений с центром в точке с индексом n_0 и аппроксимации полученной выборки полиномом n -степени.



Функция `sgolayfilt` в Matlab

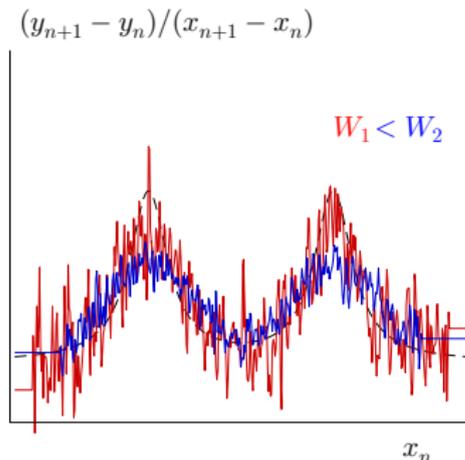
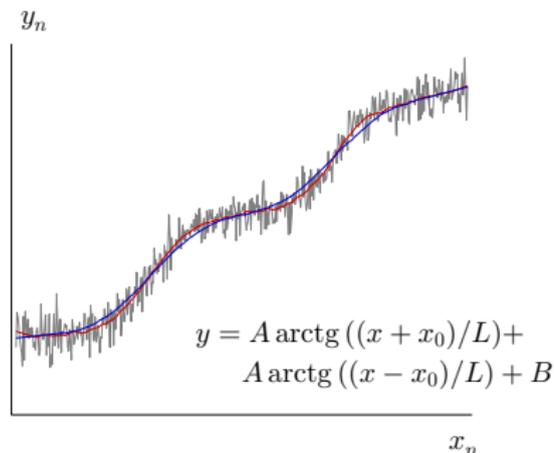
Пусть X – вектор значений аргумента, Y – вектор значений измеряемой величины.

Функция $Z = \text{sgolayfilt}(Y, n, W)$ возвращает значения сглаженной функции

n – порядок полинома, используемого для локальной аппроксимации

$W = 2L + 1$ – ширина «окна» для локальной аппроксимации в точках

$W_x = W \cdot \Delta X$ – ширина «окна» в реальных единицах



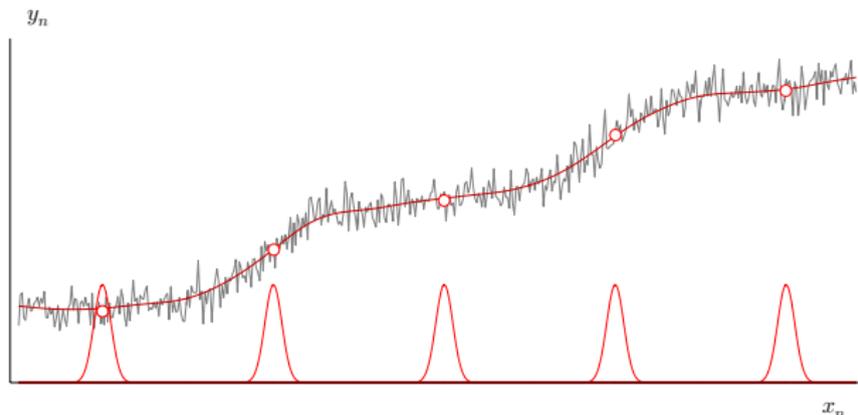
Скользящий гауссовский фильтр (1)

Пусть X – вектор значений аргумента, Y – вектор значений измеряемой величины.

Гауссова функция шириной σ с центром в точке X_0

$$G(X - X_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{1}{2} \cdot \frac{(X - X_0)^2}{\sigma^2}\right).$$

Сглаженное значение функции в точке n_0 : $Y_{app,n} = \sum_{n'} Y_{n'} \cdot G(X_n - X_{n'})$



Скольльзящий гауссовский фильтр (2)

Определим сглаженный сигнал $Y_{app}(x)$ следующим образом

$$y_{app}(x) \equiv \int y(x') G(x - x') dx' = \int y(x') \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x - x')^2}{2\sigma^2}\right) dx'.$$

Вычислим пространственный фурье-спектр сглаженной функции

$$\begin{aligned} \hat{y}_{app}(k) &\equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} y_{app}(x) e^{-ikx} dx = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int f(x') \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(x - x')^2}{2\sigma^2} - ikx\right) dx \right\} dx'. \end{aligned}$$

Сделаем замену переменных по внутреннему интегралу: $t = x - x'$, тогда

$$\hat{y}_{app}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int y(x') \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{t^2}{2\sigma^2} - ikt\right) dt \right\} e^{-ikx'} dx'.$$

Выделим в показателе экспоненты полный квадрат

$$\left(-\frac{t^2}{2\sigma^2} - ikt\right) = -\left(\frac{t}{\sqrt{2}\sigma} + \frac{ik\sigma}{\sqrt{2}}\right)^2 - \frac{k^2\sigma^2}{2}.$$

Скольльзящий гауссовский фильтр (3)

После выделения во внутреннем интеграле полного квадрата получаем

$$\begin{aligned}\hat{y}_{app}(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int y(x') \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\left(\frac{t}{\sqrt{2}\sigma} + \frac{ik\sigma}{\sqrt{2}}\right)^2\right) dt \right\} \exp\left(-\frac{k^2\sigma^2}{2}\right) e^{-ikx'} dx' \\ &= \exp\left(-\frac{k^2\sigma^2}{2}\right) \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int y(x') e^{-ikx'} dx'\right) \simeq \exp\left(-\frac{k^2\sigma^2}{2}\right) \cdot \hat{y}(k).\end{aligned}$$

или

$$\hat{y}_{app}(k) \simeq \exp\left(-\frac{k^2\sigma^2}{2}\right) \cdot \hat{y}(k).$$

Таким образом, за счёт множителя $e^{-k^2\sigma^2/2}$ в спектре сглаженной функции будут подавлены высокочастотные гармоники, которые присутствуют в фурье-спектре исходной функции $\hat{y}(k)$.

Используя критерий отсечки $k^2\sigma^2 \gtrsim 1$, получаем, что при скольльзящей гауссовой фильтрации с параметром σ будут подавлены компоненты с пространственными масштабами $\lambda \lesssim \sigma$.

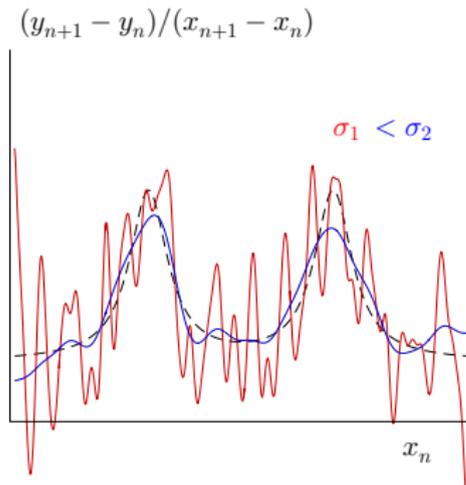
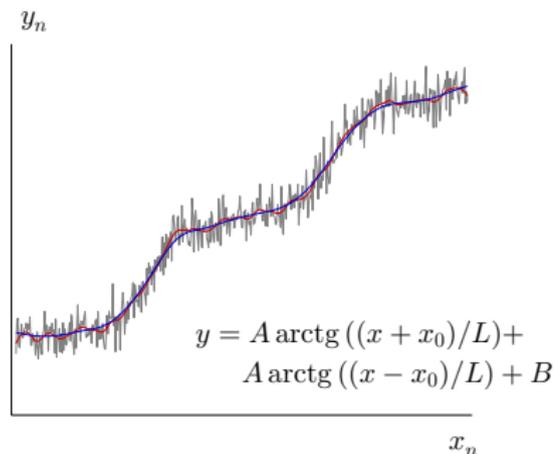
Функция `imgaussfilt` в Matlab

Пусть X – вектор значений аргумента, Y – вектор значений измеряемой величины.

Функция $Z = \text{imgaussfilt}(Y, W)$ возвращает значения сглаженной функции

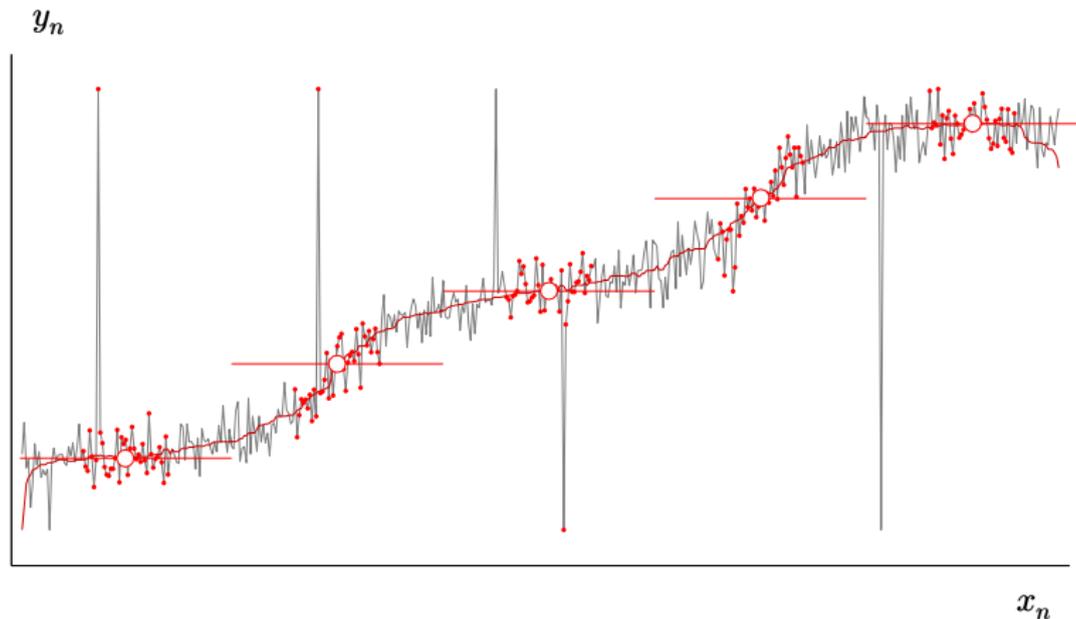
W – ширина окна для сглаживания (стандартное отклонение) в точках

$W_x = W \cdot \Delta X$ – ширина окна для сглаживания в реальных единицах



Скользящая медианная фильтрация

Медианная фильтрация – эффективная процедура обработки сигналов, подверженных воздействию импульсных помех и выбросов.



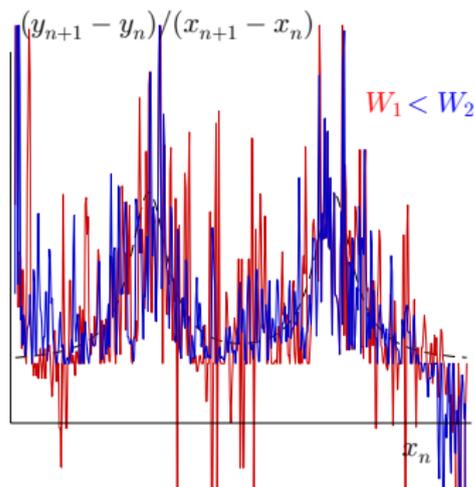
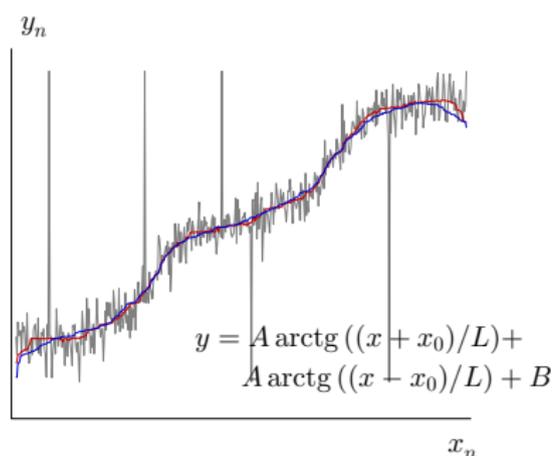
Функция medfilt1 в Matlab

Пусть X – вектор значений аргумента, Y – вектор значений измеряемой величины.

Функция $Z = \text{medfilt1}(Y, W)$ возвращает медианное значение функции в пределах окна

W – ширина окна для сглаживания в точках

$W_x = W \cdot \Delta X$ – ширина окна для сглаживания в реальных единицах



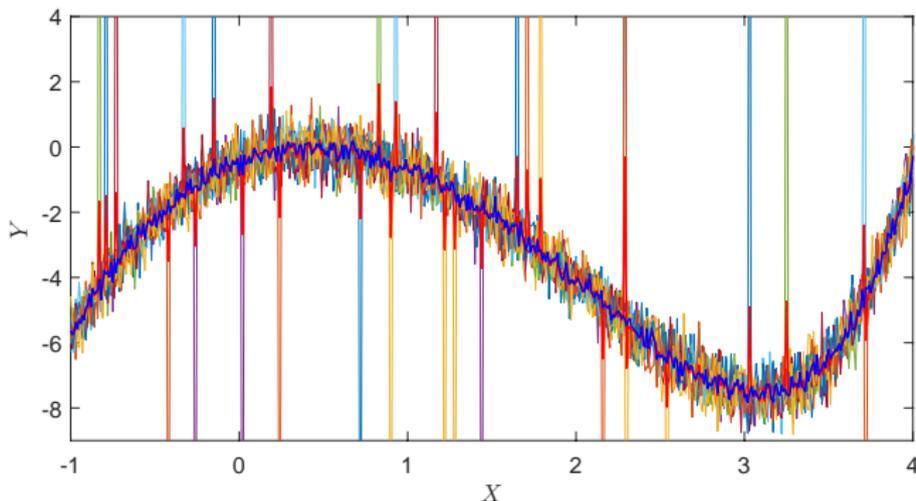
Усреднение по ансамблю реализаций: функции `mean` и `median`

Для уменьшения интенсивности шумов по отношению к регулярной составляющей сигнала можно проводить усреднение по ансамблю реализаций:

пусть Y – массив данных, имеющий размер $L \times N$, где L – длина реализации, N – число реализаций (файлов)

среднее арифметическое $\tilde{Y} = \text{mean}(Y, 2)$ показано толстой красной линией

среднее медианное $\tilde{Y} = \text{median}(Y, 2)$ показано толстой синей линией



Вывод: медианное усреднение менее чувствительно к наличию выбросов.

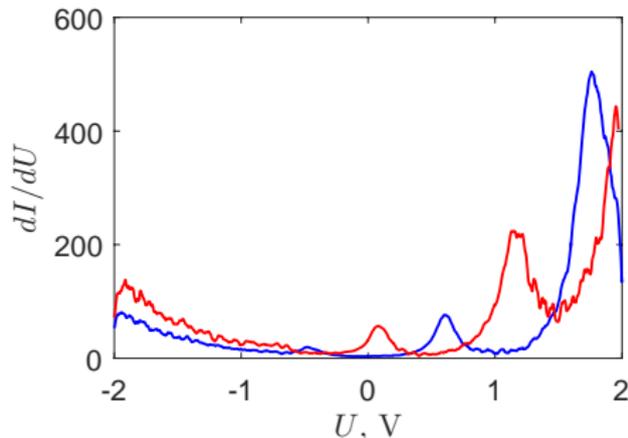
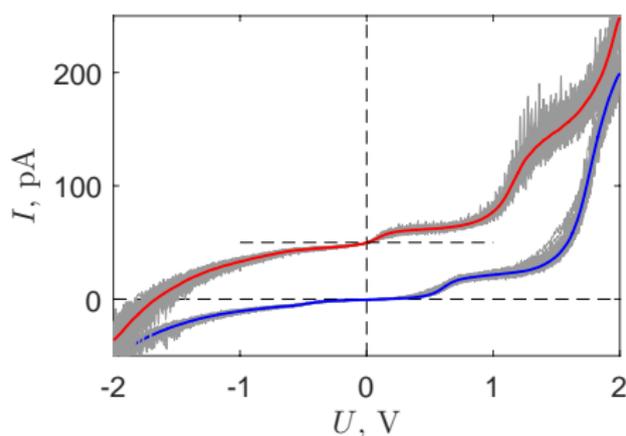
Пример: исследование туннельных спектров

Анализ локальных электронных свойств поверхности $\text{Pb}(111)/\text{Si}(111)7 \times 7$ для участков разной толщины (объём выборки – 50 линий)

Процедура анализа: вычисление медианного среднего по ансамблю \rightarrow сглаживание средней линии $I = I(U)$ скользящим гауссовым фильтром шириной 20 мВ \rightarrow численное дифференцирование и получение спектра дифференциальной туннельной проводимости $dI/dU(U)$

Участки с локальной толщиной **12 монослоев** и **13 монослоев** плёнки $\text{Pb}(111)$ с учётом толщины смачивающего слоя $3d_{ML}$, где $d_{ML} = 0.286$ нм – толщина монослоя для поверхности $\text{Pb}(111)$

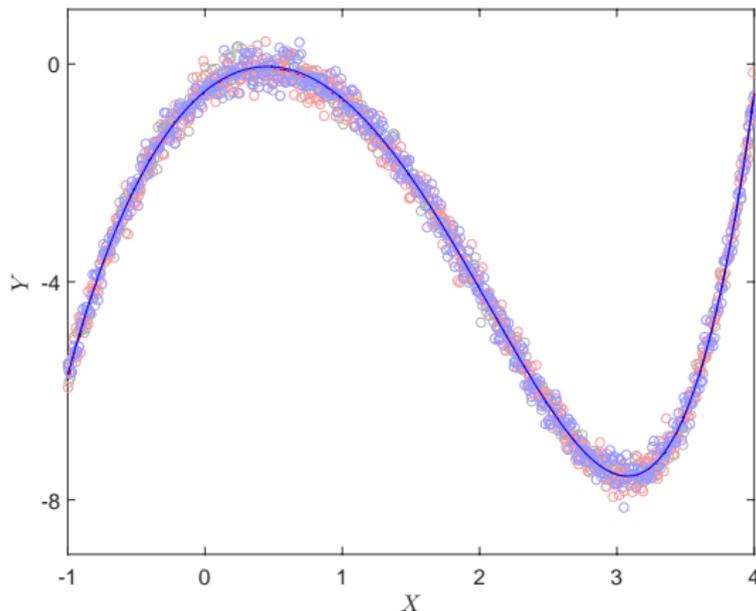
Пример обработки: усреднение по ансамблю \rightarrow скользящее гауссово сглаживание усреднённой характеристики с шириной окна 20 мВ \rightarrow численное дифференцирование



Задачи

Для массивов данных, описанных в задачах из предыдущей лекции, для каждой реализации требуется устранить высокочастотные шумы различными способами и затем вычислить производную dY/dX для каждой реализации.

Для тех же массивов данных требуется усреднить данные по ансамблю реализаций (среднее арифметическое и среднее медианное) и для усредненных характеристик вычислить производную $d\langle Y \rangle/dX$ и найти экстремумы.



Спрямяющие координаты

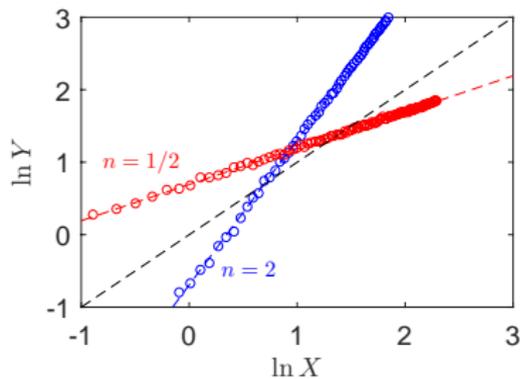
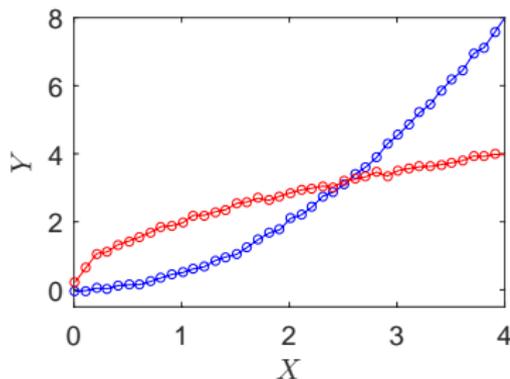
Для того, чтобы убедительно показать, что экспериментальная зависимость Y от X описывается простой функциональной зависимостью, необходимо найти такое преобразование координат $\tilde{X} = g(X)$ и $\tilde{Y} = f(Y)$, чтобы \tilde{X} и \tilde{Y} были связаны линейной зависимостью.

Новые координаты \tilde{X} и \tilde{Y} часто называются спрямяющими координатами.

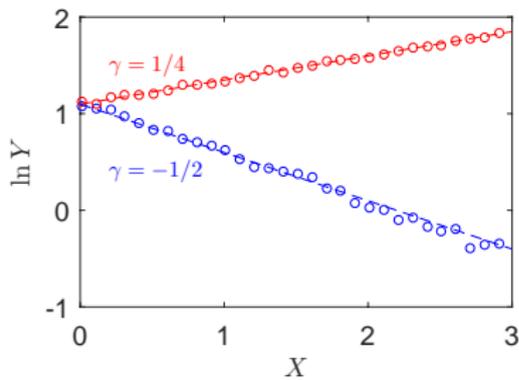
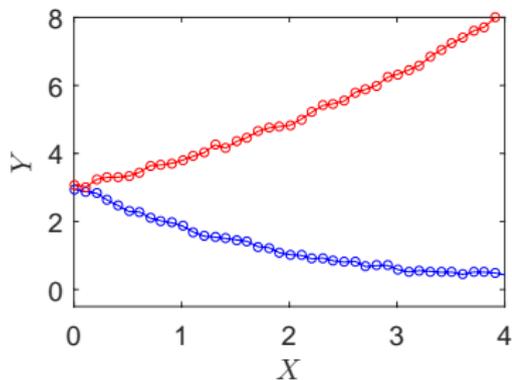
Внимание – после нелинейного преобразования шумы могут стать гетероскедастичными!

Важные примеры:

1. Если $Y = A \cdot X + B$ (линейная функция), то спрямяющими координатами являются X и Y (тривиальный случай)
2. Если $Y = A \cdot X^n$ (степенная функция), то спрямяющими координатами являются $\ln X$ и $\ln Y$, поскольку $\ln Y = \ln A + n \cdot (\ln X)$



3. Если $Y = A \cdot e^{\gamma X}$ (экспоненциальная функция), то спрямляющими координатами являются X и $\ln Y$, поскольку $\ln Y = \ln A + \gamma \cdot X$



4. Если $Y = A \cdot \ln(\gamma \cdot (X - X_0))$ (логарифмическая функция), то спрямляющими координатами являются $X - X_0$ и $e^{Y/A}$, поскольку $\exp(Y/A) = \gamma \cdot (X - X_0)$.

5. Более сложные случаи требуют особого подхода и изобретательности, например, для функции $Y = A + B \cdot X^{2/3}$ спрямляющими координатами являются $Y - A$ и $X^{2/3}$.

Контрольный вопрос: теплоемкость твёрдого тела при низких температурах описывается зависимостью $C = aT + bT^3$. Как выбрать спрямляющие координаты для определения параметров a и b ?

Аппроксимация данных стандартными зависимостями (1)

Пусть X – вектор значений аргумента, Y – вектор значений измеряемой величины.

Предположим, что ожидаемая функциональная зависимость Y от X совпадает с одной из стандартных функций 'poly1'–'poly9', 'exp1', 'exp2', 'fourier1'–'fourier8', 'gauss1'–'gauss9', 'rat02'–'rat55', 'power1', 'power2', 'sin1'–'sin8', 'cubicspline'

Функция для определения параметров аппроксимирующей зависимости

$$f = \text{fit}(X, Y, \text{type})$$

$CI = \text{confint}(f, \text{level})$ – матрица параметров, определяющих верхнюю и нижнюю границу доверительных интервалов для каждого коэффициента (по умолчанию по 95% уровню)

Аппроксимация данных стандартными зависимостями (2)

Пример: разложение функции на сумму двух гауссовских функций $f = \text{fit}(X, Y, \text{'gauss2'})$

$f =$ General model Gauss2:

$$f(x) = a1 \cdot \exp(-((x-b1)/c1)**2) + a2 \cdot \exp(-((x-b2)/c2)**2)$$

Coefficients (with 95% confidence bounds):

$$a1 = 1.985 (1.959, 2.011)$$

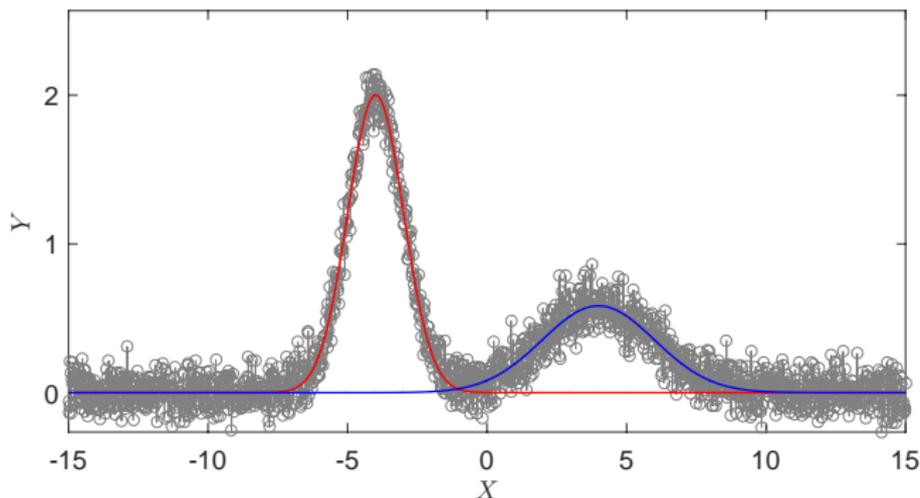
$$a2 = 0.5932 (0.5751, 0.6112)$$

$$b1 = -3.988 (-4.003, -3.973)$$

$$b2 = 4.015 (3.944, 4.086)$$

$$c1 = 1.404 (1.383, 1.425)$$

$$c2 = 2.862 (2.761, 2.963)$$



Аппроксимация данных модельными зависимостями, определяемыми пользователем: функции `fit` и `fittype`

Пусть X – вектор значений аргумента, Y – вектор значений измеряемой величины.

Предположим, что ожидаемая функциональная зависимость Y от X не совпадает ни с одной из стандартных функций 'poly1'–'poly9', 'exp1', 'exp2', 'fourier1'–'fourier8', 'gauss1'–'gauss9', 'rat02'–'rat55', 'power1', 'power2', 'sin1'–'sin8', 'cubicspline'

В нестандартном случае можно ввести свою подгоночную функцию, например, функцию Лоренца с центром в точке x_0 и шириной Γ

$$f(x) = A \cdot \frac{\Gamma^2}{(x - x_0)^2 + \Gamma^2}.$$

Для аппроксимации экспериментальных данных используется следующий набор команд

`MyFunc = fittype('A * B^2 / ((x - C)^2 + B^2)')` и
`f = fit(X, Y, MyFunc, 'StartPoint', [A0 B0 C0])`

A_0, B_0, C_0 – начальные значения параметров

$a = f.A, b = f.B, c = f.C$ – оптимальные значения параметров

`CI = confint(f, level)` – матрица параметров, определяющих верхнюю и нижнюю границу доверительных интервалов для каждого коэффициента (по умолчанию по 95% уровню)

Декомпозиция: сумма лоренцевских функций

Пример применения пользовательской функции

```
MyFunc = fitttype('a * b^2 / ((x - c)^2 + b^2) + d * e^2 / ((x - f)^2 + e^2)')
```

```
f = fit(X, Y, MyFunc, 'StartPoint', [a_0 b_0 c_0 d_0 e_0 f_0])
```

Coefficients (with 95% confidence bounds):

a = 1.984 (1.953, 2.015)

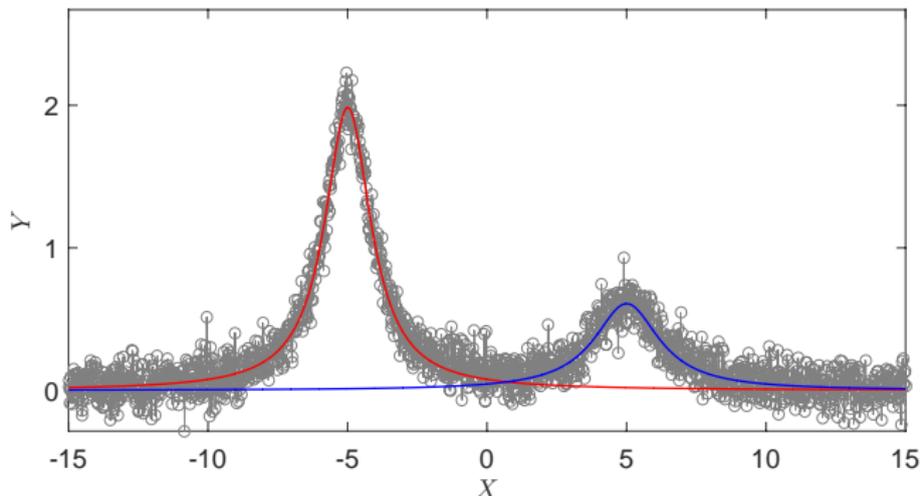
d = 0.6087 (0.5822, 0.6351)

b = 1.01 (0.9866, 1.032)

e = 1.42 (1.331, 1.509)

c = -4.993 (-5.009, -4.978)

f = 5.002 (4.94, 5.063)

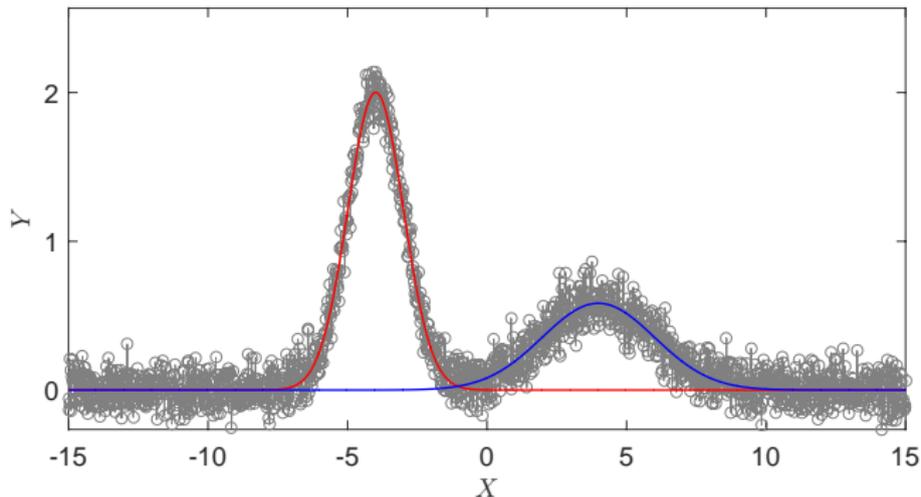


Задачи

Дан набор однотипных N файлов, содержащих одномерный массив данных X и Y (первый и второй столбцы).

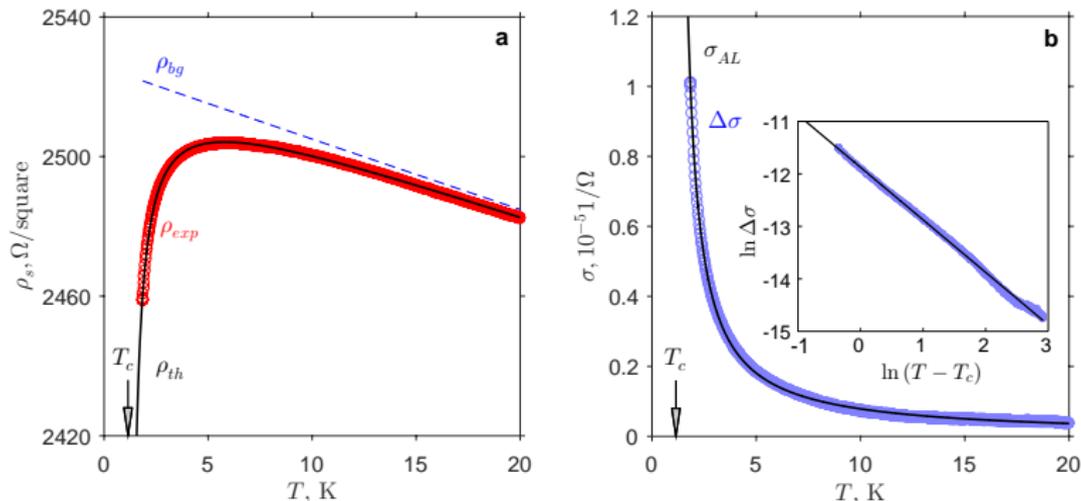
Предполагая, что зависимость Y от X может быть представлена в виде комбинации локализованных пиков и аддитивного шума, оценить параметры пиков (средние значения и доверительные интервалы для амплитуды, положения и ширины).

Определить, являются ли пики гауссовыми или лоренцевыми.



Пример: оценка критической температуры сверхпроводящего перехода

A. Y. Tupchaya, L. V. Bondarenko, A. A. Yakovlev, A. N. Mihalyuk, D. V. Gruznev, N. S. Denisov, A. V. Matetsky, A. Yu. Aladyshkin, A. V. Zotov, A. A. Saranin, *2D system incorporating perforated Mg sheet sandwiched between Pb layer and Si(111)* // Applied Surface Science, vol. 589, 152951 (2022)



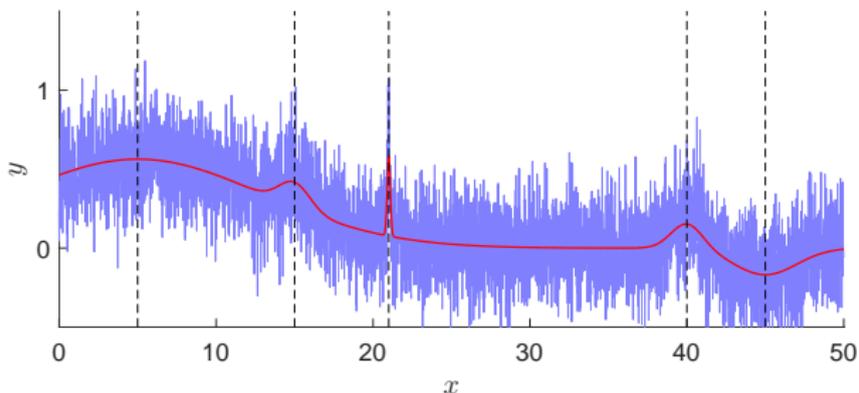
Модельная зависимость сопротивления в нормальном состоянии с учётом флуктуаций

$$\rho_{th}(T) = \frac{1}{\alpha + \beta \cdot T + \sigma_{AL}(T)}, \quad \text{где } \sigma_{AL} = A \cdot \left(\frac{e^2}{16\hbar} \right) \cdot \frac{T_c}{(T - T_c)}.$$

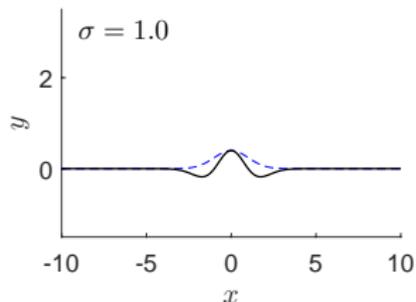
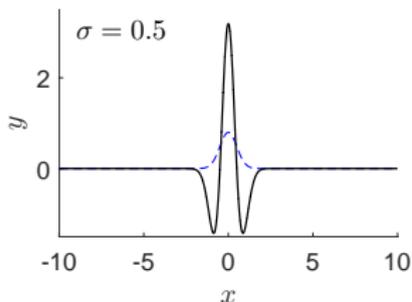
Оценка критической температуры с 95%-доверительным интервалом: $T_c = 1.15 \pm 0.01$ К.

Проблема поиска экстремумов при наличии шума (1)

Тестовая последовательность – набор максимумов и минимумов различной ширины при наличии интенсивного шума (стандартное отклонение $\sigma_n = 0.2$).

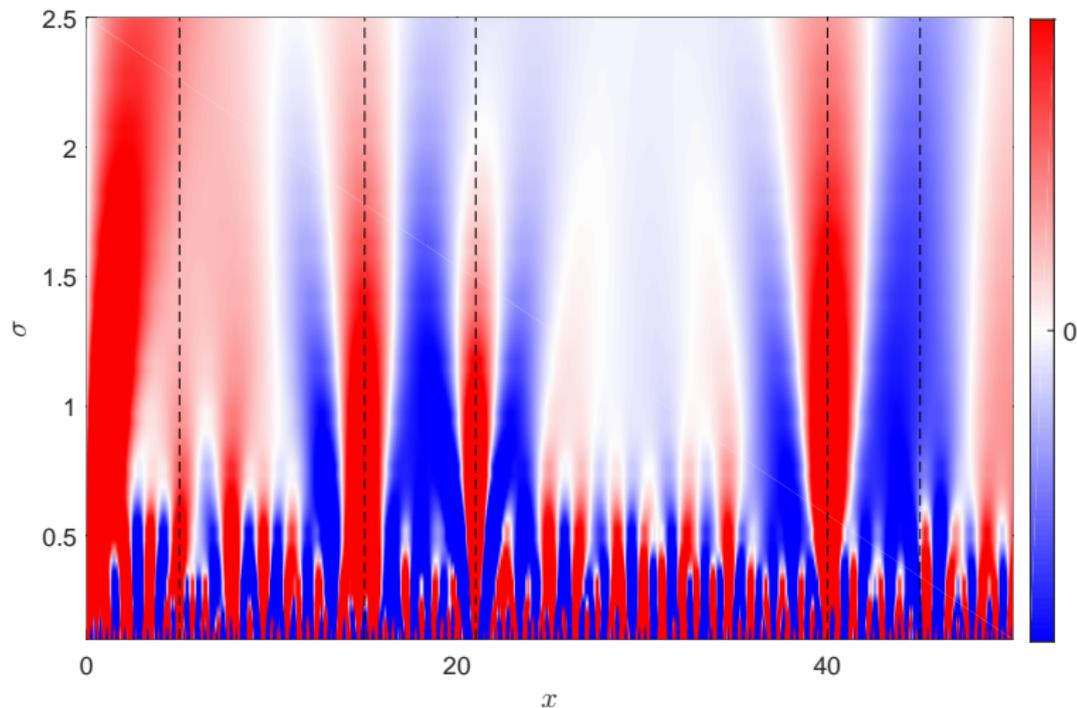


Возможный способ решения – свертка с локализованной функцией переменного масштаба, например, с «мексиканской шляпой» – второй производной гауссовой функции



Проблема поиска экстремумов при наличии шума (2)

Результат прямого вычисления свёртки исходной последовательности и «мексиканской шляпы» переменной ширины σ – **основная идея вейвлет-анализа**



Протяженные вертикальные полосы указывают на наличие экстремумов функции

Ковариация и линейный коэффициент корреляции

Ковариация определяется как математическое ожидание произведения отклонений случайных величин X и Y и является совместным центральным моментом второго порядка

$$\text{cov}(X, Y) = E[(X - \langle X \rangle) \cdot (Y - \langle Y \rangle)] = E[X \cdot Y] - E[X] \cdot E[Y].$$

Свойства ковариации:

1. Для совпадающих аргументов ковариация эквивалентна дисперсии случайной величины: $\text{cov}(X, X) = D[X]$ и $\text{cov}(Y, Y) = D[Y]$.
2. Ковариация двух независимых случайных величин X и Y равна нулю, поскольку $E[X \cdot Y] = E[X] \cdot E[Y]$.
3. Абсолютная величина ковариации двух случайных величин X и Y не превышает среднего геометрического их дисперсий: $|\text{cov}(X, Y)| \leq \sqrt{D[X] \cdot D[Y]}$ (неравенство Коши-Буняковского).
4. Ковариация имеет размерность, равную произведению размерности случайных величин, и поэтому зависит от единиц измерения. Данная особенность ковариации затрудняет её использование в целях корреляционного анализа.

Коэффициент корреляции Пирсона $\rho(X, Y)$ – мера линейной зависимости двух случайных величин X и Y

$$\rho(X, Y) = \frac{\text{cov}(X, Y)}{\sigma_X \cdot \sigma_Y} = \frac{\sum(X - \langle X \rangle) \cdot (Y - \langle Y \rangle)}{\sqrt{\sum(X - \langle X \rangle)^2 \cdot \sum(Y - \langle Y \rangle)^2}}.$$

Свойства коэффициента корреляции

1. Коэффициенты корреляции Пирсона можно записать в виде симметричной матрицы размером 2×2

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho(X, X) & \rho(X, Y) \\ \rho(Y, X) & \rho(Y, Y) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \rho(X, Y) \\ \rho(X, Y) & 1 \end{pmatrix},$$

поскольку $\rho(Y, X) = \rho(X, Y)$ и $\rho(X, X) = \rho(Y, Y) = 1$.

2. Коэффициент корреляции $\rho(X, Y)$ изменяется от минус единицы до плюс единицы.

3. Можно показать, что

$$\rho(X, Y) = k \cdot \frac{\sigma_X}{\sigma_Y},$$

где k – коэффициент наклона в модели линейной регрессии $Y = k \cdot X + b + \eta$.

Поскольку отношение коэффициента регрессии к среднеквадратичному отклонению σ_Y не зависит от единиц измерения параметра Y , коэффициент корреляции $\rho(X, Y)$ не зависит от единиц измерения!

Функция $[R, P, L, U] = \text{corrcoef}(X, Y)$, где X и Y – два массива входных данных,

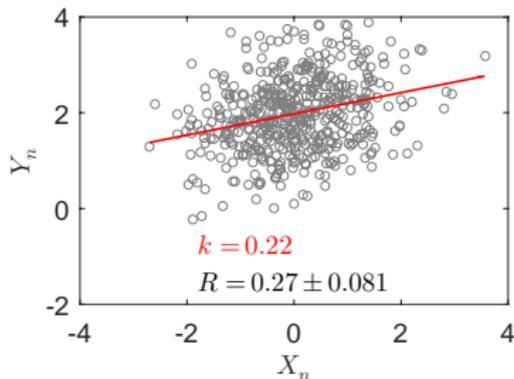
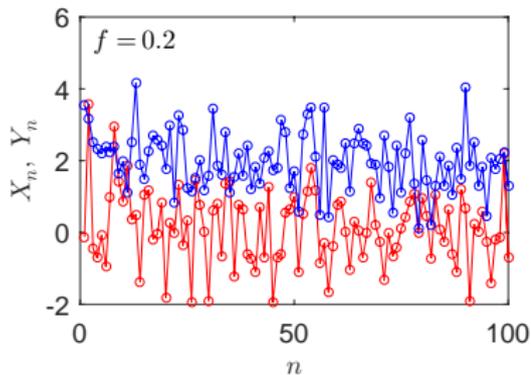
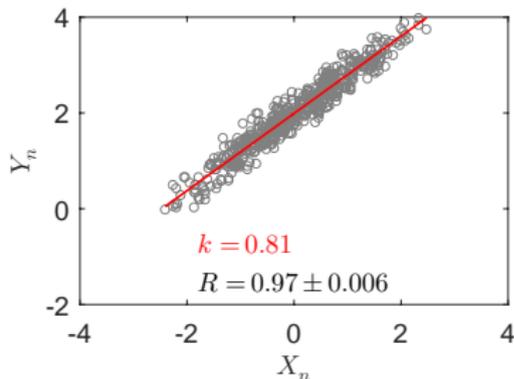
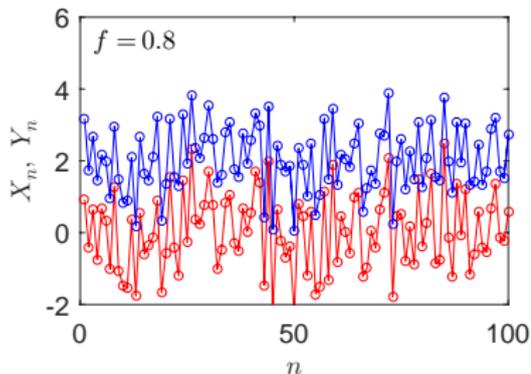
R – матрица коэффициентов корреляции,

P – матрица p -значений, характеризующих статистическую значимость,

L и U – матрицы коэффициентов, определяющих нижнюю границу (lower bound) и верхнюю границу (upper bound) доверительных интервалов (по умолчанию предполагается 95% уровень значимости для каждого коэффициента)

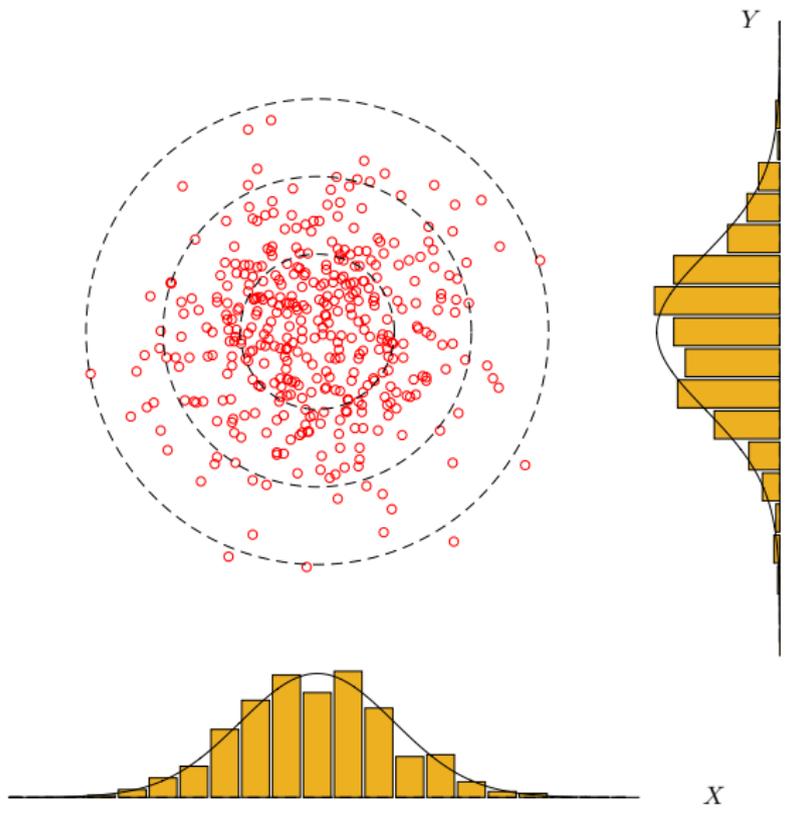
Пример: X и X' – две случайных независимых последовательности, соответствующих нормальному распределению со стандартным отклонением $\sigma = 1$ и нулевым средним

$Y = 2 + f \cdot X + (1 - f) \cdot X'$ – линейная комбинация, где f – весовой множитель.



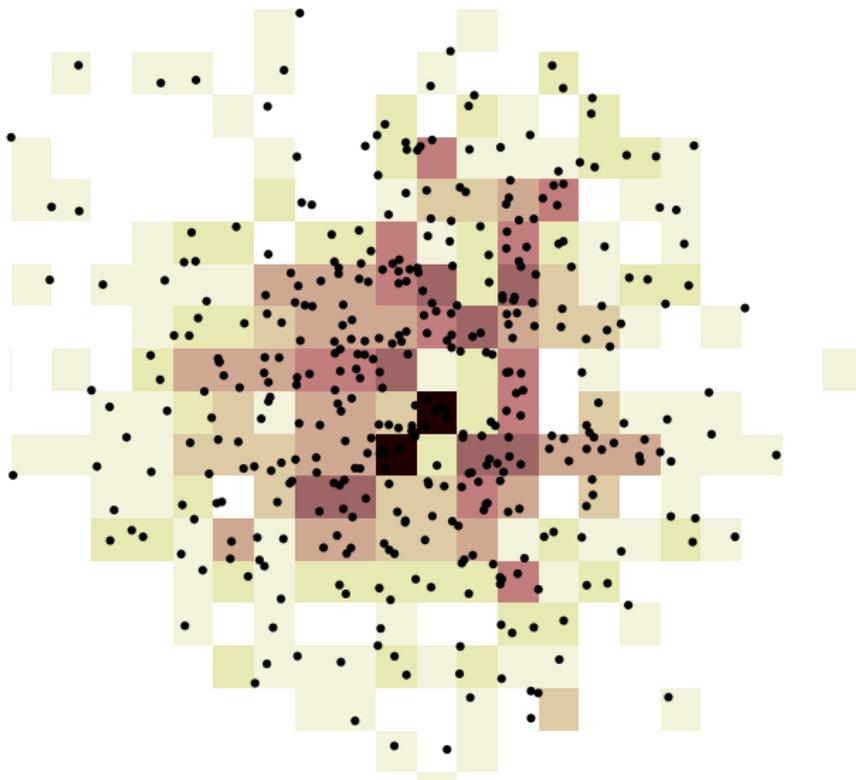
Построение гистограмм для двумерных распределений

Пример построения для $N = 21$



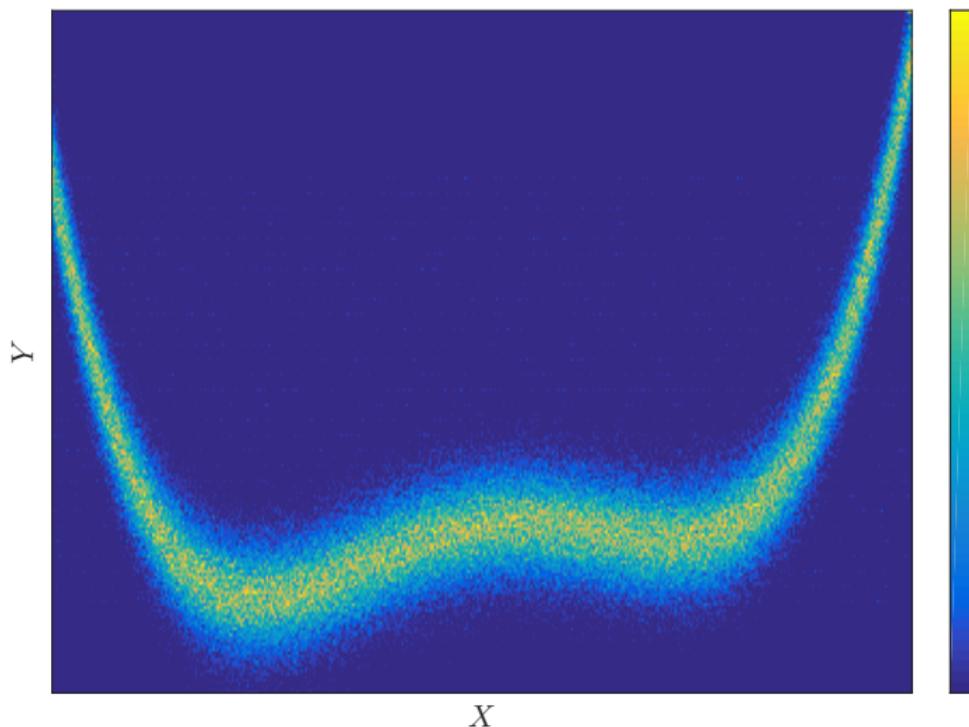
Построение гистограмм для двумерных распределений

Функция `hist2d(X, Y, N)`, где X и Y – случайные величины, N – число корзин



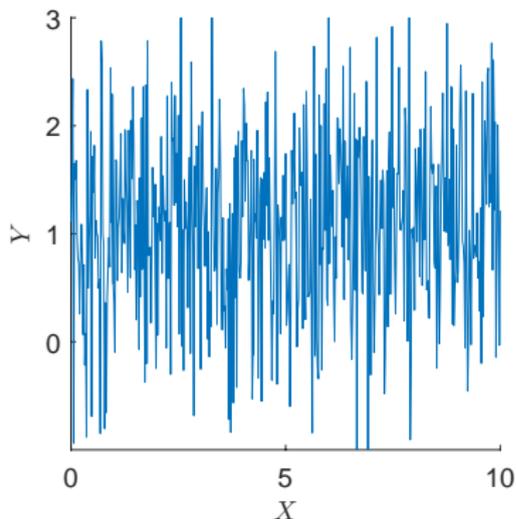
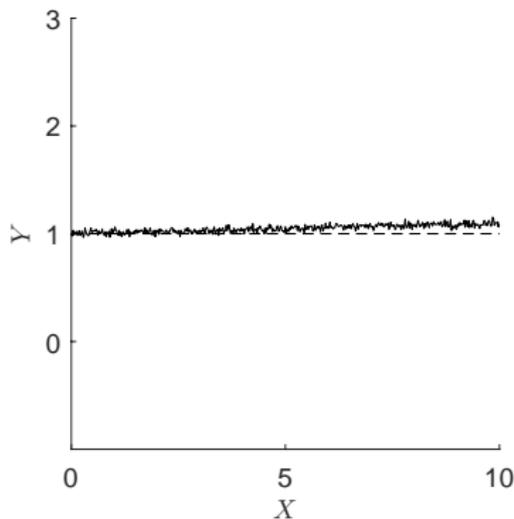
Построение гистограмм для двумерных распределений

Для ансамбля реализаций можно построить двумерную гистограмму, при этом цвет точек будет соответствовать относительной частоте найти данное значение функции Y для заданного значения аргумента X



Открытый вопрос для самостоятельной работы

Как можно ввести критерий надежного (статистически значимого) обнаружения линейного роста на фоне интенсивного шума?



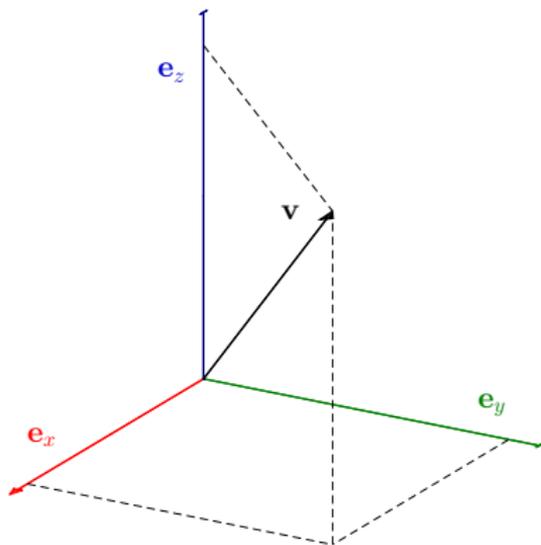
Лекция 3

Основы спектрально-корреляционного анализа детерминированных сигналов

Дискретизация сигналов и теорема Котельникова-Шеннона об отсчётах

И. С. Гоноровский, Радиотехнические цепи и сигналы. М.: Радио и связь. – 1986. – 512 с.

Разложение по ортонормированному базису (1)



Разложение вектора по базису

$$\mathbf{v} = v_x \mathbf{e}_x + v_y \mathbf{e}_y + v_z \mathbf{e}_z$$

Условие ортогональности

$$(\mathbf{e}_x \cdot \mathbf{e}_y) = 0, \quad (\mathbf{e}_x \cdot \mathbf{e}_z) = 0 \quad \text{и} \quad (\mathbf{e}_y \cdot \mathbf{e}_z) = 0$$

Можно раскладывать функции по бесконечномерному базису $\varphi_n(x)$ при условии ортогональности базисных функций

$$(\varphi_n(x) \cdot \varphi_m(x)) = C \delta_{n,m}.$$

Примеры ортогональных функций: тригонометрические функции, функции Бесселя, сферические функции, полиномы Лагерра, Эрмита, Чебышёва и т. д.

Разложение по ортонормированному базису (2)

Функции

$$\dots e^{-2i\omega_1 t}, e^{-i\omega_1 t}, 1, e^{i\omega_1 t}, e^{2i\omega_1 t}, \dots$$

образуют ортогональную систему функций на интервале $T = 2\pi/\omega_1$. В самом деле,

$$\begin{aligned} \int_{-T/2}^{T/2} e^{in\omega_1 t} e^{im\omega_1 t} dt &= \int_{-T/2}^{T/2} e^{i(n-m)\omega_1 t} dt = \frac{1}{i(n-m)\omega_1} e^{i(n-m)\omega_1 t} \Big|_{-T/2}^{T/2} = \\ &= T \frac{\sin \pi(n-m)}{\pi(n-m)} = T \delta_{n,m}. \end{aligned}$$

Следовательно, произвольная периодическая функция $s(t)$ с периодом T может быть однозначно разложена в ряд по базисным функциям с **положительными и отрицательными частотами** (комплексная форма ряда Фурье)

$$s(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{in\omega_1 t}, \quad \text{где} \quad c_n = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} s(t) e^{-in\omega_1 t} dt \quad \text{и} \quad \omega_1 = \frac{2\pi}{T}.$$

Разложение по ортонормированному базису (3)

Функции

$$1, \sin \omega_1 t, \cos \omega_1 t, \sin 2\omega_1 t, \cos 2\omega_1 t, \dots$$

образуют ортогональную систему функций на интервале $T = 2\pi/\omega_1$.

$$\begin{aligned} \int_{-T/2}^{T/2} \cos(n\omega_1 t) \cos(m\omega_1 t) dt &= \frac{1}{2} \int_{-T/2}^{T/2} \cos(n-m)\omega_1 t dt + \frac{1}{2} \int_{-T/2}^{T/2} \cos(n+m)\omega_1 t dt = \\ &= \frac{T}{2} \frac{\sin \pi(n-m)}{\pi(n-m)} + \frac{T}{2} \frac{\sin \pi(n+m)}{\pi(n+m)} = \frac{T}{2} \delta_{n,m} + \frac{T}{2} \delta_{n,-m}. \end{aligned}$$

Аналогично доказывается ортогональность остальных базисных функций.

Следовательно, произвольная периодическая функция $s(t)$ с периодом T может быть однозначно разложена в ряд по базисным функциям с **положительными частотами** (тригонометрическая форма ряда Фурье)

$$s(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos n\omega_1 t + b_n \sin n\omega_1 t),$$

где

$$a_n = \frac{2}{T} \int_{-T/2}^{T/2} s(t) \cos n\omega_1 t dt, \quad b_n = \frac{2}{T} \int_{-T/2}^{T/2} s(t) \sin n\omega_1 t dt \quad \text{и} \quad \omega_1 = \frac{2\pi}{T}.$$

Гармонический анализ периодических сигналов (1)

Итак, произвольная периодическая функция может быть разложена в ряд Фурье

$$s(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{in\omega_1 t}, \quad \text{где} \quad c_n = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} s(t) e^{-in\omega_1 t} dt. \quad (*)$$

Здесь T – период, $\omega_1 = 2\pi/T$ – основная частота, $\omega = n\omega_1$ – спектр частот.

Коэффициенты разложения c_n в общем виде имеют действительную и мнимую части

$$c_n = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} s(t) \cos(n\omega_1 t) dt - i \cdot \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} s(t) \sin(n\omega_1 t) dt = \frac{1}{2} (a_n - ib_n).$$

Очевидно, что $Re c_n = a_n/2$ – чётная функция n и $Im c_n = -b_n/2$ – нечётная функция n .

Альтернативная форма записи:

$$c_n = |c_n| e^{i\theta_n},$$

где $|c_n|$ – чётная функция n и фаза θ_n – нечётная функция n .

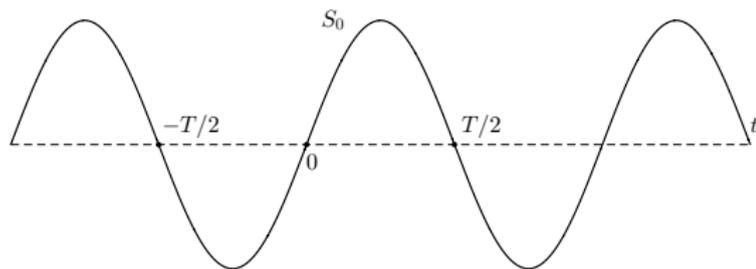
Разложение (*) может быть приведено к тригонометрической форме:

$$\begin{aligned} s(t) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} |c_n| e^{i(n\omega_1 t + \theta_n)} = |c_0| + \sum_{n=1}^{\infty} 2|c_n| \cos(n\omega_1 t + \theta_n) = \\ &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos n\omega_1 t + b_n \sin n\omega_1 t). \end{aligned}$$

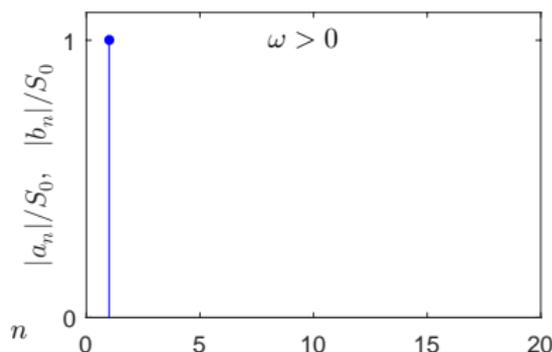
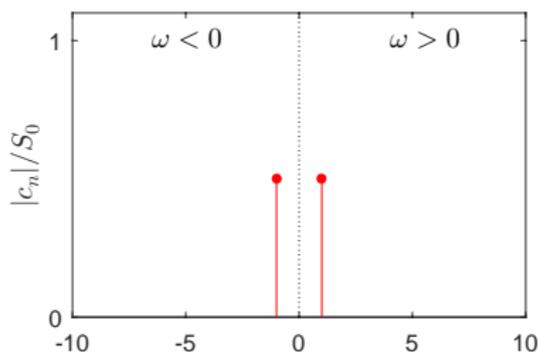
Гармонический анализ периодических сигналов (2)

Пример: фурье-спектр сигнала гармонического сигнала $s(t) = S_0 \sin \omega t$. Выберем начало отсчета времени на переднем фронте сигнала.

Для нечётного сигнала спектр будет чисто мнимым:

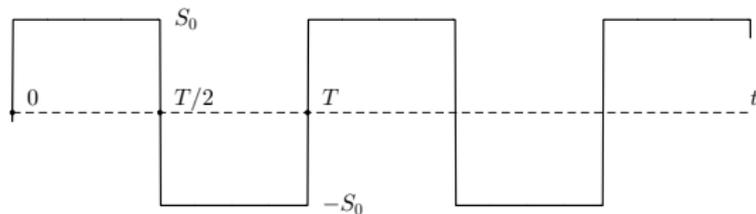


$$\begin{aligned} c_n &= \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} s(t) \cos(n\omega_1 t) dt - i \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} s(t) \sin(n\omega_1 t) dt = -i \frac{S_0}{T} \int_{-T/2}^{T/2} \sin\left(\frac{2\pi t}{T}\right) \sin\left(\frac{2\pi n t}{T}\right) dt \\ &= -i \frac{S_0}{2T} \int_{-T/2}^{T/2} \cos\left(\frac{2\pi(n-1)t}{T}\right) dt + i \frac{S_0}{2T} \int_{-T/2}^{T/2} \cos\left(\frac{2\pi(n+1)t}{T}\right) dt = -i \frac{S_0}{2} \cdot (\delta_{n,1} + \delta_{-n,1}). \end{aligned}$$



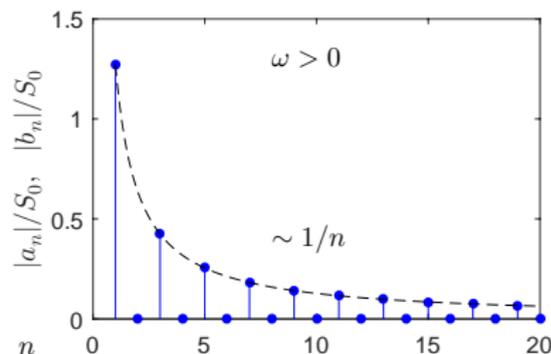
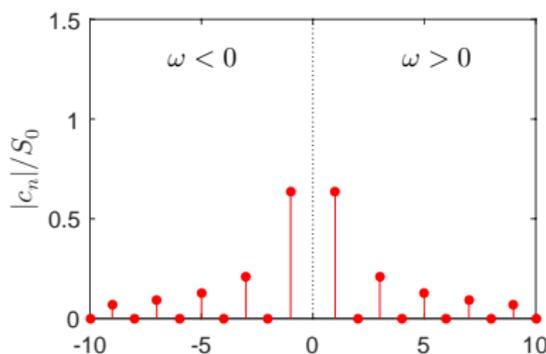
Гармонический анализ периодических сигналов (3)

Пример: фурье-спектр сигнала в виде симметричного меандра, S_0 – амплитуда сигнала. Выберем начало отсчета времени на переднем фронте сигнала.



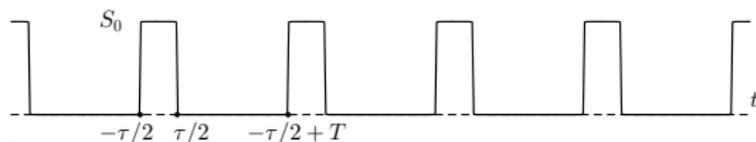
Для нечётного сигнала $s(t)$ спектр будет чисто мнимым:

$$\begin{aligned} c_n &= -i \cdot \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} s(t) \sin(n\omega_1 t) dt = -i \cdot \frac{S_0}{T} \int_{-T/2}^0 (-1) \sin(n\omega_1 t) dt - i \cdot \frac{S_0}{T} \int_0^{T/2} (+1) \sin(n\omega_1 t) dt \\ &= -i \cdot \frac{2S_0}{T} \frac{1}{n\omega_1} \left(1 - \cos\left(n\omega_1 \frac{T}{2}\right) \right) = -i \cdot S_0 \cdot \frac{(1 - \cos \pi n)}{\pi n}. \end{aligned}$$



Гармонический анализ периодических сигналов (4)

Пример: фурье-спектр сигнала в виде последовательности униполярных прямоугольных импульсов, S_0 – амплитуда сигнала. Выберем начало отсчета времени в середине импульса.



Для чётного сигнала $s(t)$ спектр будет чисто действительным:

$$c_0 = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} s(t) dt = S_0 \frac{1}{T} \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt = S_0 \frac{\tau}{T},$$

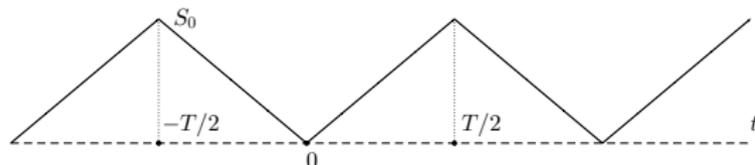
$$\begin{aligned} c_n &= \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} s(t) \cos(n\omega_1 t) dt - i \cdot \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} s(t) \sin(n\omega_1 t) dt = \frac{S_0}{T} \int_{-\tau/2}^{\tau/2} \cos(n\omega_1 t) dt = \\ &= \frac{S_0}{T} \frac{1}{n\omega_1} \sin(n\omega_1 t) \Big|_{-\tau/2}^{\tau/2} = \frac{S_0}{2\pi n} \left(\sin\left(n\omega_1 \frac{\tau}{2}\right) - \sin\left(-n\omega_1 \frac{\tau}{2}\right) \right) = \frac{S_0}{\pi n} \sin\left(n\omega_1 \frac{\tau}{2}\right). \end{aligned}$$

Таким образом, мы получили фурье-представление последовательности униполярных прямоугольных импульсов

$$s(t) = S_0 \cdot \left\{ \frac{\tau_0}{T} + \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \sin\left(\frac{n\omega_1 \tau}{2}\right) \cos(n\omega_1 t) \right\}.$$

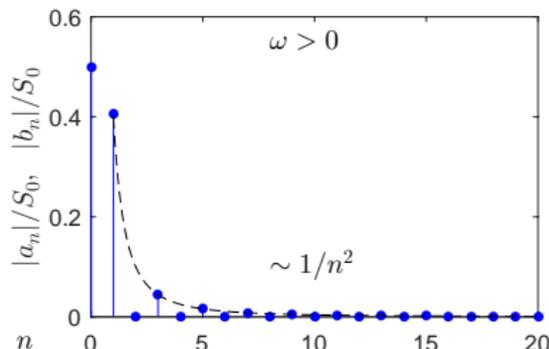
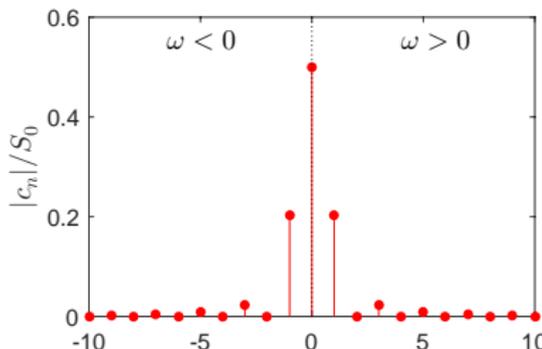
Гармонический анализ периодических сигналов (5)

Пример: фурье-спектр сигнала в виде пилообразного сигнала. Выберем начало отсчета времени в точке минимума.



Для чётного сигнала $s(t)$ спектр будет чисто действительным:

$$\begin{aligned} c_n &= \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} s(t) \cos(n\omega_1 t) dt = \frac{2}{T} \int_0^{T/2} \frac{t}{T/2} S_0 \cos(n\omega_1 t) dt = -\frac{4S_0}{T^2} \frac{1}{n\omega_1} \int_0^{T/2} \sin(n\omega_1 t) dt = \\ &= \frac{4S_0}{T^2} \frac{1}{(n\omega_1)^2} \cos(n\omega_1 t) \Big|_0^{T/2} = S_0 \cdot \frac{(1 - \cos \pi n)}{(\pi n)^2}. \end{aligned}$$



Из-за отсутствия разрывов компоненты затухают быстрее ($\sim 1/n^2$), чем для меандра ($\sim 1/n$).

Гармонический анализ непериодических сигналов: прямое и обратное преобразования Фурье

Переход от периодических сигналов к непериодическим (дискретный спектр \rightarrow сплошной):

(i) Анализ периодических и непериодических процессов во времени

$$\mathcal{F}[y(t)] \equiv \hat{y}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} y(t) e^{-i\omega t} dt \quad \text{и} \quad y(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{y}(\omega) e^{+i\omega t} d\omega,$$

где $\omega = 2\pi/T$ – угловая частота, $f = 1/T$ – линейная частота.

(ii) Анализ одномерных периодических и непериодических состояний в пространстве

$$\mathcal{F}[y(x)] \equiv \hat{y}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} y(x) e^{-ikx} dx \quad \text{и} \quad y(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{y}(k) e^{+ikx} dk,$$

где $k = 2\pi/\lambda$ – волновой вектор, λ – длина волны.

Мы используем несимметричную форму преобразования Фурье с коэффициентами 1 и $(2\pi)^{-1}$.

Иногда используется симметричная форма с коэффициентами $1/\sqrt{2\pi}$.

Основные свойства преобразования Фурье (1)

1. Взаимная согласованность прямого и обратного преобразований Фурье

$$\begin{aligned} y(t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{y}(\omega) e^{i\omega t} d\omega = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{\infty} y(t') e^{-i\omega t'} dt' \right) e^{i\omega t} d\omega = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} y(t') dt' \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega(t-t')} d\omega \right) = \int_{-\infty}^{\infty} y(t') \delta(t-t') dt' = y(t). \end{aligned}$$

2. Линейность преобразования Фурье

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[a \cdot f(t) + b \cdot g(t)] &= \int_{-\infty}^{\infty} (a \cdot f(t) + b \cdot g(t)) \cdot e^{-i\omega t} dt = \\ &= a \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt + b \int_{-\infty}^{\infty} g(t) e^{-i\omega t} dt = a \cdot \hat{f}(\omega) + b \cdot \hat{g}(\omega). \end{aligned}$$

Основные свойства преобразования Фурье (2)

3. Преобразование Фурье и дифференцирование

$$\begin{aligned}\mathcal{F}[y'(t)] &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d}{dt} y(t) \right) e^{-i\omega t} dt = - \int_{-\infty}^{\infty} y(t) \left(\frac{d}{dt} e^{-i\omega t} \right) dt = \\ &= i\omega \int_{-\infty}^{\infty} y(t) e^{-i\omega t} dt = i\omega \hat{y}(\omega).\end{aligned}$$

$$\mathcal{F}[y'(x)] = - \int_{-\infty}^{\infty} y(x) \left(\frac{d}{dx} e^{-ikx} \right) dx = ik \int_{-\infty}^{\infty} y(x) e^{-ikx} dx = ik \hat{y}(k).$$

$$\mathcal{F}[y''(t)] = (i\omega)^2 \hat{y}(\omega) = -\omega^2 \hat{y}(\omega) \quad \text{и} \quad \mathcal{F}[y''(x)] = (ik)^2 \hat{y}(k) = -k^2 \hat{y}(k).$$

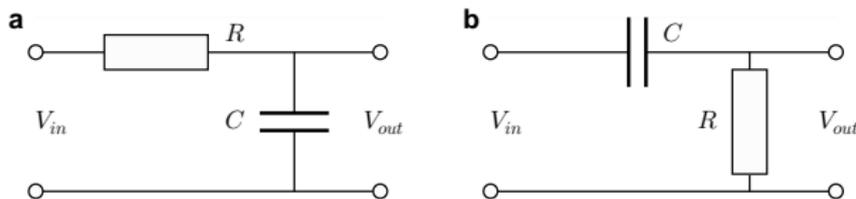
4. Преобразование Фурье и интегрирование

$$\mathcal{F} \left[\int y(t) dt \right] = \frac{1}{i\omega} \hat{y}(\omega) \quad \text{и} \quad \mathcal{F} \left[\int y(x) dx \right] = \frac{1}{ik} \hat{y}(k).$$

Сравните фурье-спектры меандра и пилообразного сигнала (с. 7 и 9)

Интегрирующие и дифференцирующие RC-цепи

Напомним, что время зарядки/разрядки конденсатора определяется параметром $\tau = RC$.



1. Интегрирующая RC-цепочка (рисунок а) – фильтр низких частот (ФНЧ)

$$V_{out}(\omega) = I(\omega) \cdot \frac{1}{i\omega C} = V_{in}(\omega) \cdot \frac{1/(i\omega C)}{R + 1/(i\omega C)} = V_{in}(\omega) \cdot \frac{1}{1 + i\omega RC} \simeq \\ \simeq V_{in}(\omega) \cdot \frac{1}{i\omega \tau} \quad \text{при } \omega\tau \gg 1.$$

Сигнал на выходе пропорционален **интегралу** от сигнала на входе по времени.

2. Дифференцирующая RC-цепочка (рисунок b) – фильтр высоких частот (ФВЧ)

$$V_{out}(\omega) = I(\omega) \cdot R = V_{in}(\omega) \cdot \frac{R}{R + 1/(i\omega C)} = V_{in}(\omega) \cdot \frac{i\omega RC}{1 + i\omega RC} \simeq V_{in}(\omega) \cdot i\omega \tau \quad \text{при } \omega\tau \ll 1.$$

Сигнал на выходе пропорционален **производной** от сигнала на входе по времени.

Свёртка (конволюция) и корреляционная функция (1)

1. Взаимной корреляционной функцией двух функций $f(t)$ и $g(t)$ называется операция

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(t + \tau) g(\tau) d\tau.$$

2. Автокорреляционная функция есть

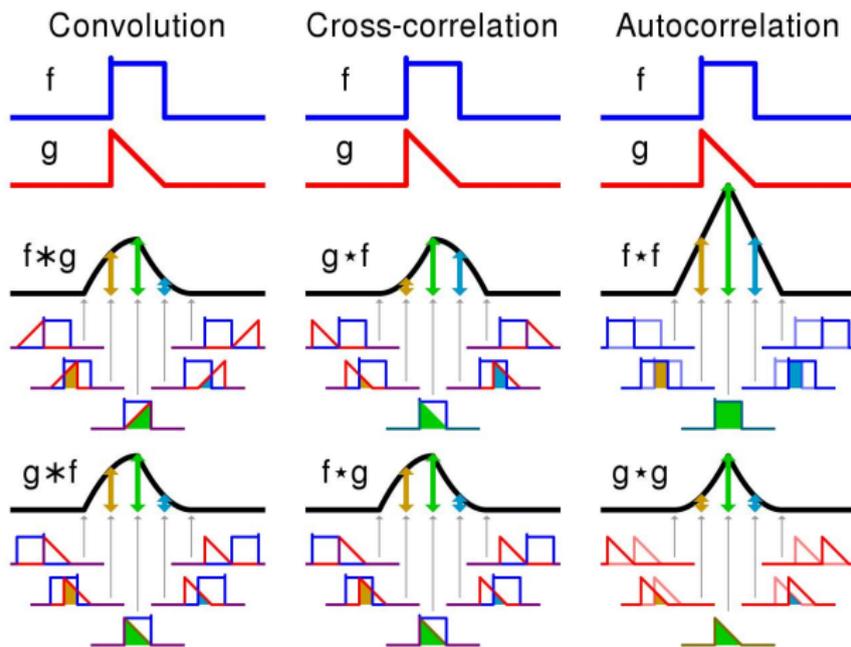
$$\int_{-\infty}^{\infty} f(t + \tau) f(t) dt.$$

3. Свёрткой (конволюцией) двух функций $f(t)$ и $g(t)$ называется операция

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(t - \tau) g(\tau) d\tau.$$

соответствующую взаимнокорреляционной функции $f(t)$ и $g(-t)$. Операцию свёртки можно интерпретировать как «схожесть» одной функции с отражённой и сдвинутой копией другой.

Свёртка (конволюция) и корреляционная функция (2)



https://ru.wikipedia.org/wiki/Взаимнокорреляционная_функция

Основные свойства преобразования Фурье (3)

5. Теорема о свёртке

$$\begin{aligned}\mathcal{F}\left[\int_{-\infty}^{\infty} f(t-t')g(t')dt'\right] &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{\infty} f(t-t')g(t')dt'\right) e^{-i\omega t} dt = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} g(t') dt' \cdot \left(\int_{-\infty}^{\infty} f(t-t') e^{-i\omega t} dt\right) = \int_{-\infty}^{\infty} g(t') dt' \cdot \hat{f}(\omega) e^{-i\omega t'} = \\ &= \hat{f}(\omega) \cdot \int_{-\infty}^{\infty} g(t') e^{-i\omega t'} dt' = \hat{f}(\omega) \cdot \hat{g}(\omega).\end{aligned}$$

6. Преобразование Фурье от произведения двух функций

$$\begin{aligned}\mathcal{F}[f(t) \cdot g(t)] &= \int_{-\infty}^{\infty} f(t)g(t) e^{-i\omega t} dt = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \cdot \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{g}(\omega') e^{i\omega' t} d\omega'\right) e^{-i\omega t} dt = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{g}(\omega') \cdot \left(\int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i(\omega-\omega')t} dt\right) d\omega' = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(\omega - \omega') \cdot \hat{g}(\omega') d\omega'.\end{aligned}$$

Основные свойства преобразования Фурье (4)

7. Преобразование Фурье и сдвиг

$$\begin{aligned}\mathcal{F}[y(t - t_0)] &= \int_{-\infty}^{\infty} y(t - t_0) e^{-i\omega t} dt = \int_{-\infty}^{\infty} y(t') e^{-i\omega t' - i\omega t_0} dt' = \\ &= e^{-i\omega t_0} \int_{-\infty}^{\infty} y(t') e^{-i\omega t'} dt' = e^{-i\omega t_0} \hat{y}(\omega).\end{aligned}$$

$$\mathcal{F}[y(x - x_0)] = \int_{-\infty}^{\infty} y(x - x_0) e^{-ikx} dx = e^{-ikx_0} \hat{y}(k).$$

8. Нулевая фурье-компонента пропорциональна «площади» под кривой анализируемой функции

$$\hat{y}(\omega)\Big|_{\omega=0} = \int_{-\infty}^{\infty} y(t) dt \quad \text{и} \quad \hat{y}(k)\Big|_{k=0} = \int_{-\infty}^{\infty} y(x) dx.$$

Перед применением преобразований Фурье полезно вычесть постоянную составляющую, для того, чтобы понизить амплитуду нулевой гармоники и усилить высшие гармоники.

Основные свойства преобразования Фурье (5)

9. Важные примеры

$$\mathcal{F}[\delta(t)] = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(t) e^{-i\omega t} dt = 1$$

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

$$\mathcal{F}[\cos(at)] = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{e^{iat} + e^{-iat}}{2} \right) e^{-i\omega t} dt = \pi \delta(\omega - a) + \pi \delta(\omega + a)$$

$$\mathcal{F}[\sin(at)] = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{e^{iat} - e^{-iat}}{2i} \right) e^{-i\omega t} dt = -i\pi \delta(\omega - a) + i\pi \delta(\omega + a)$$

$$\mathcal{F}[e^{-at^2}] = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-at^2} e^{-i\omega t} dt = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-\omega^2/a}$$

Контрольный вопрос: как получить фурье-образ $\sin(at)$ из фурье-образа $\cos(at)$ (или наоборот), используя свойство о фурье-спектре производной?

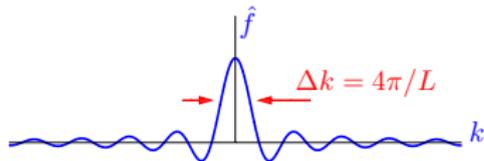
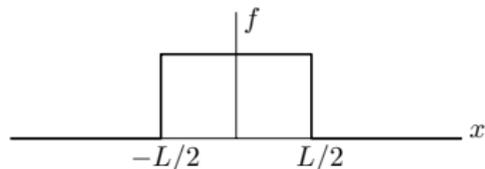
Основные свойства преобразования Фурье (4)

10. Если функция локализована в ограниченной области времени (или пространства)

$$y(t) = \text{rect}(L) = \begin{cases} 1 & \text{при } |t| \leq L/2, \\ 0 & \text{при } |t| > L/2, \end{cases}$$

где L – размер области локализации, то

$$\hat{y}(\omega) = \int_{-L/2}^{L/2} e^{-i\omega t} dt = \left(\frac{e^{-i\omega t}}{-i\omega} \right)_{-L/2}^{L/2} = L \cdot \frac{\sin(\omega L/2)}{(\omega L/2)} = L \cdot \text{sinc} \left(\frac{\omega L}{2} \right).$$



11. Соотношение неопределенностей для функции $y(x)$ и ее фурье-образа $\hat{y}(k)$

$$\left(\frac{1}{\|y(t)\|^2} \int_{-\infty}^{\infty} (t - t_0)^2 |y(t)|^2 dt \right) \cdot \left(\frac{1}{\|\hat{y}(\omega)\|^2} \int_{-\infty}^{\infty} (\omega - \omega_0)^2 |\hat{y}(\omega)|^2 dk \right) \geq \frac{1}{(4\pi)^2},$$

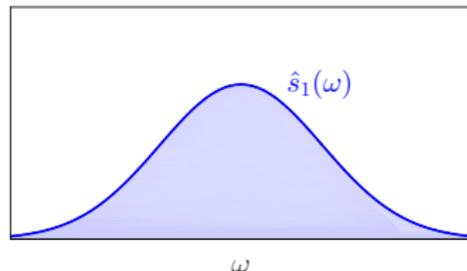
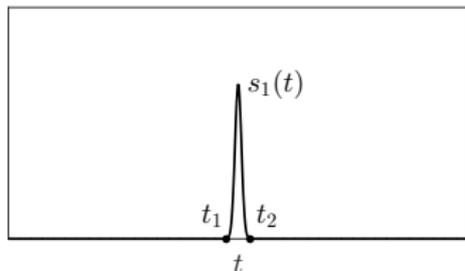
где $\|y(\omega)\|$ – норма для квадратично-интегрируемой функции $\|y(t)\| = \int |y(t)|^2 dt$.

Сравните с соотношениями неопределенности в квантовой механике:

$$\Delta E \cdot \Delta t \gtrsim \frac{\hbar}{2} \quad \text{и} \quad \Delta p \cdot \Delta x \gtrsim \frac{\hbar}{2}.$$

Соотношение между спектрами одиночного импульса и периодической последовательностью импульсов (1)

Пусть заданы произвольный одиночный локализованный импульс $s_1(t)$ и соответствующая ему спектральная плотность $\hat{s}_1(\omega)$ – не забывайте соотношение неопределенностей



Функция

$$s(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} s_1(t - nT)$$

представляет собой периодическую функцию времени (или координаты). Периодическую функцию можно разложить в ряд Фурье, при этом коэффициенты разложения будут равны

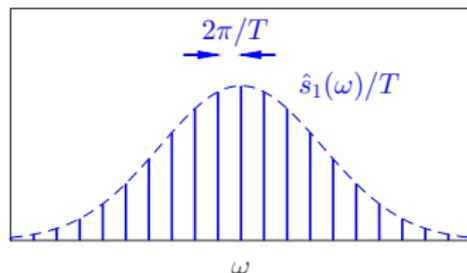
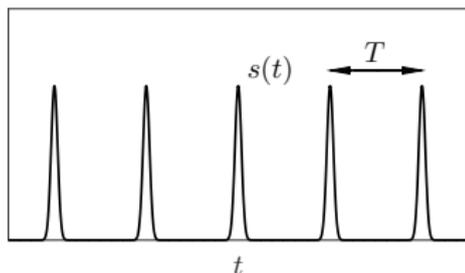
$$c_n = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} s(t) e^{in\omega_1 t} dt = \frac{1}{T} \int_{t_1}^{t_2} s_1(t) e^{in\omega_1 t} dt, \quad \text{где } \omega = n\omega_1 = \frac{2\pi n}{T}.$$

Соотношение между спектрами одиночного импульса и периодической последовательностью импульсов (2)

Спектральная плотность одиночного импульса на тех же частотах $\omega = n\omega_1$ будет равна

$$\hat{s}(\omega) \Big|_{\omega=n\omega_1} = \int_{-\infty}^{\infty} s_1(t) e^{in\omega_1 t} dt = \int_{t_1}^{t_2} s_1(t) e^{in\omega_1 t} dt.$$

Следовательно, $c_n = \hat{s}_1(n\omega_1)/T = f_1 \hat{s}_1(n\omega_1)$, где f_1 – частота следования импульсов.

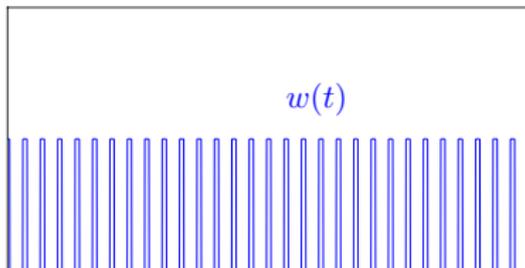
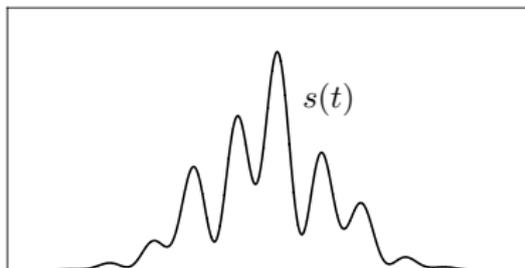


Очевидно, что с увеличением T спектральные линии сближаются и в пределе $T \rightarrow \infty$ мы переходим к спектру одиночного импульса.

Контрольные вопросы: как будет выглядеть спектр последовательности прямоугольных импульсов? как будет выглядеть спектр последовательности дельта-импульсов?

Дискретизация непрерывного сигнала (1)

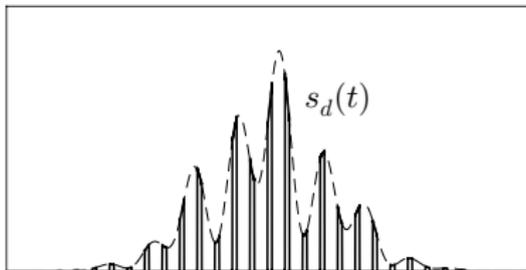
Пусть $s(t)$ – непрерывный сигнал произвольного вида



Дискретизованный сигнал (sampling) $s_d(t)$ – это выборка значений исходной функции в эквидистантно расположенные моменты времени (или координаты) с периодом T :

$$s_d(t) = s(t) \cdot w(t),$$

где $w(t)$ – оконная функция.



Дискретизация непрерывного сигнала (2)

Рассмотрим оконную функцию $w(t)$ в виде периодической последовательности прямоугольных импульсов высотой w_0 , шириной τ_0 и периодом T (с. 8)

$$\begin{aligned}w(t) &= w_0 \cdot \left\{ \frac{\tau_0}{T} + \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \sin\left(\frac{n\omega_1\tau_0}{2}\right) \cos(n\omega_1 t) \right\} = \\ &= \frac{w_0\tau_0}{T} \cdot \left\{ 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{T}{\pi n\tau_0}\right) \sin\left(\frac{\pi\tau_0 n}{T}\right) \cos\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) \right\}.\end{aligned}$$

Здесь $\omega_1 = 2\pi/T$ – угловая частота следования импульсов.

Дискретизованный сигнал можно представить в следующем виде

$$\begin{aligned}s_d(t) &= s(t) \cdot w(t) = \frac{w_0\tau_0}{T} \left\{ s(t) + 2s(t) \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{T}{\pi n\tau_0}\right) \sin\left(\frac{\pi\tau_0 n}{T}\right) \cos\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) \right\} = \\ &= \frac{w_0\tau_0}{T} \left\{ s(t) + s(t) \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{T}{\pi n\tau_0}\right) \sin\left(\frac{\pi\tau_0 n}{T}\right) \left(e^{i2\pi nt/T} + e^{-i2\pi nt/T} \right) \right\}.\end{aligned}$$

Дискретизация непрерывного сигнала (3)

Раскроем скобки и представим дискретизованный сигнал в следующем виде

$$s_d(t) = \frac{w_0 \tau_0}{T} s(t) + \frac{w_0 \tau_0}{T} \sum_{n=1}^{\infty} s(t) \cdot \left(\frac{T}{\pi n \tau_0} \right) \sin \left(\frac{\pi \tau_0 n}{T} \right) \cdot e^{j2\pi n t / T} + \\ + \frac{w_0 \tau_0}{T} \sum_{n=1}^{\infty} s(t) \cdot \left(\frac{T}{\pi n \tau_0} \right) \sin \left(\frac{\pi \tau_0 n}{T} \right) \cdot e^{-i2\pi n t / T}.$$

Используем теоремы о линейности преобразования Фурье и о сдвиге и получим спектр дискретизованного сигнала

$$\hat{s}_d(\omega) = \frac{w_0 \tau_0}{T} \hat{s}(\omega) + \frac{w_0 \tau_0}{T} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{T}{\pi n \tau_0} \right) \sin \left(\frac{\pi \tau_0 n}{T} \right) \cdot s \left(\omega - \frac{2\pi}{T} n \right) + \\ + \frac{w_0 \tau_0}{T} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{T}{\pi n \tau_0} \right) \sin \left(\frac{\pi \tau_0 n}{T} \right) \cdot s \left(\omega + \frac{2\pi}{T} n \right).$$

Во второй сумме можно сделать формальную замену $n \rightarrow -n$ и объединить два ряда

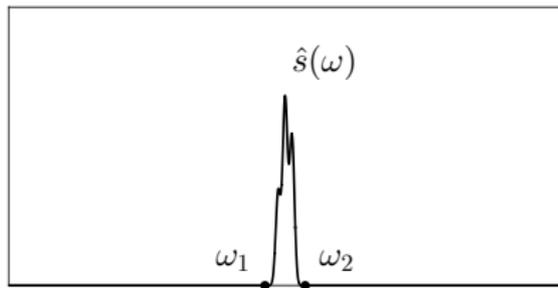
$$\hat{s}_d(\omega) = \frac{w_0 \tau_0}{T} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\frac{T}{\pi n \tau_0} \right) \sin \left(\frac{\pi \tau_0 n}{T} \right) \cdot s \left(\omega - \frac{2\pi}{T} n \right).$$

Дискретизация непрерывного сигнала (4)

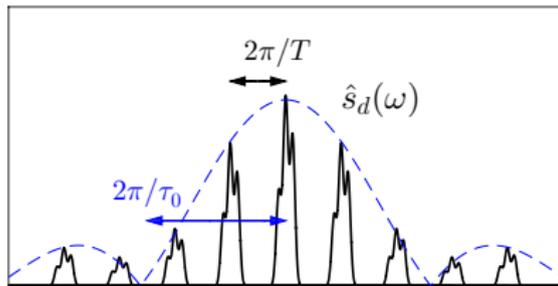
Таким образом, спектр дискретизованного сигнала представляет собой последовательность спектров исходного сигнала, сдвинутых друг относительно друга на частоту $2\pi/T$ и модулированных по закону $\sin x/x$

$$\hat{s}_d(\omega) = \frac{w_0 \tau_0}{T} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\frac{T}{\pi n \tau_0} \right) \sin \left(\frac{\pi \tau_0 n}{T} \right) \cdot s \left(\omega - \frac{2\pi}{T} n \right).$$

спектр исходного (непрерывного) сигнала



спектр дискретизованного сигнала



Вывод: перевод непрерывного сигнала в цифровую (дискретизированную) форму приводит к существенному усложнению спектра на высоких частотах (aliasing)

Разложение по ортонормированному базису (4)

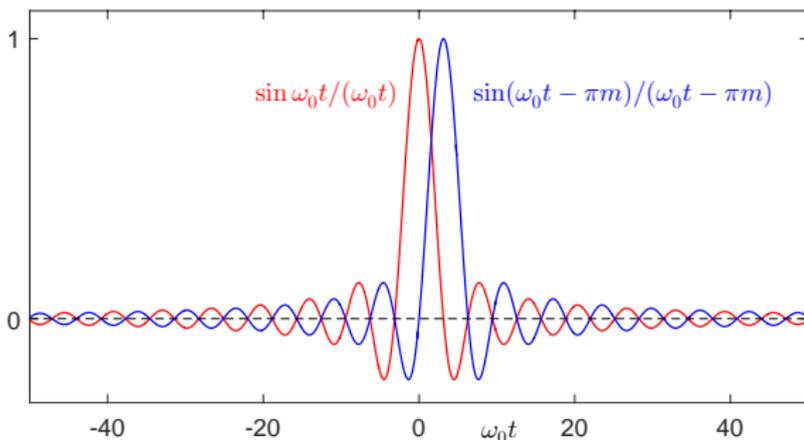
Функции вида $\sin x/x = \text{sinc } x$ (лат. sinus cardinalis)

$$f_n(t) = \frac{\sin \omega_0(t - n \cdot \Delta t)}{\omega_0(t - n \cdot \Delta t)}, \quad \text{где } \Delta t = \frac{\pi}{\omega_0}$$

с разными n образуют ортогональный набор на интервале $-\infty < t < \infty$.

Можно показать прямым вычислением, что справедливо соотношение

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(\omega_0 t - \pi n)}{(\omega_0 t - \pi n)} \cdot \frac{\sin(\omega_0 t - \pi m)}{(\omega_0 t - \pi m)} dt = \frac{\pi}{\omega_0} \delta_{n,m}.$$



sinc-функция играет важную роль в теории интерполяции на сетке эквидистантных точек

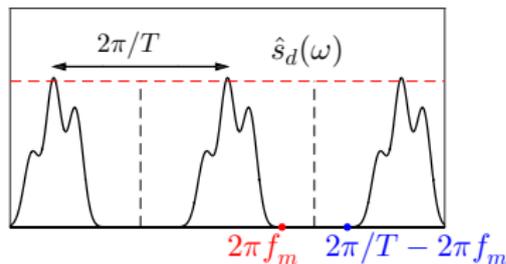
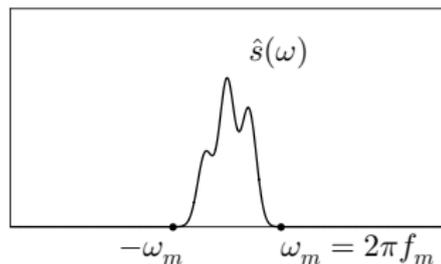
Теорема Котельникова – Найквиста – Шеннона (1)

Теорема отсчётов: если наивысшая частота в спектре функции $s(t)$ не превышает f_m , то функция $s(t)$ полностью определяется последовательностью своих значений в моменты, отстоящие друг от друга не более, чем на $\Delta t = 1/(2f_m)$ секунд:

$$s(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} s(n\Delta t) \cdot \varphi_n(t), \quad \text{где} \quad \varphi_n(t) = \frac{\sin \omega_m(t - n\Delta t)}{\omega_m(t - n\Delta t)} \quad \text{и} \quad \omega_m = 2\pi f_m.$$

Наглядная иллюстрация вместо доказательства:

Соотношение между спектрами непрерывного и дискретизованного сигнала



Для того, чтобы части фурье-спектра дискретизованного сигнала не перекрывались, необходимо выполнить условие

$$2\pi f_m < \frac{2\pi}{\Delta t} - 2\pi f_m \quad \implies \quad \Delta t < \frac{1}{2f_m}.$$

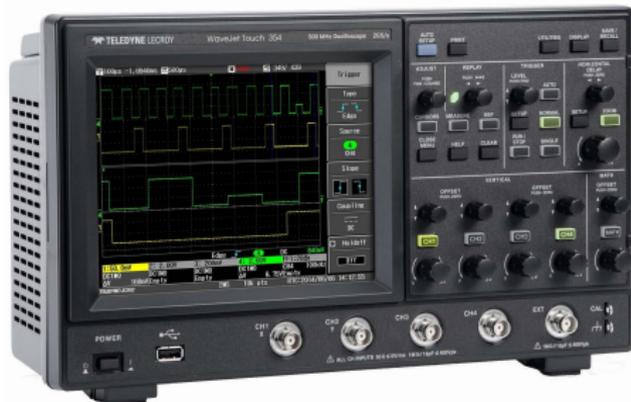
«Серединная» частота $\omega^* = \pi/T$ называется частотой Найквиста.

Теорема Котельникова – Найквиста – Шеннона (2)

Теорема отсчетов определяет предельную разрешающую частотную способность осциллографов и аналогоцифровых преобразователей



частота выборки 1 Гб/с,
предельная частота 200 МГц



частота выборки 2 Гб/с,
предельная частота 500 МГц

Предельные параметры осциллографов:

Стандартные аналоговые ЭЛТ осциллографы: 300 МГц = 0.3 ГГц

Сверхскоростные ЭЛТ осциллографы: до 5 ГГц

Цифровые стробоскопические осциллографы: до 80 ГГц

Теорема Котельникова – Найквиста – Шеннона (3)

Кодирование звуковой информации (речь, музыка):

Для того, чтобы оцифрованный сигнал содержал информацию о всем диапазоне слышимых частот исходного аналогового сигнала (20 Гц – 20 кГц) необходимо, чтобы выбранное значение частоты дискретизации составляло не менее 40 кГц.

CD-Audio:

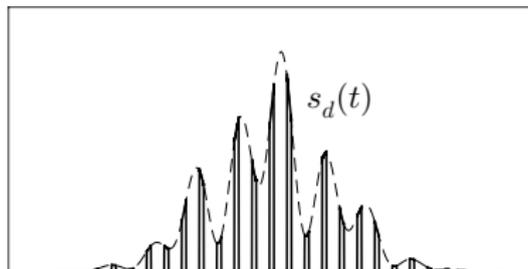
частота дискретизации – 44.1 кГц;

разрядность квантования – 16 бит (65 тыс. уровней сигнала)

DVD-Audio:

частота дискретизации – 96 кГц;

разрядность квантования – 24 бит (16 млн. уровней сигнала)



Дискретное и быстрое преобразования Фурье (1)

DFT – Discrete Fourier Transform, FFT – Fast Fourier Transform

Дискретное преобразование Фурье для вектора значений функции y_n :

$$\mathcal{F}[y_n] \equiv \hat{y}_k = \sum_{n=0}^{N-1} y_n e^{-2\pi i kn/N} \quad \text{и} \quad y_n = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \hat{y}_k e^{2\pi i kn/N},$$

где $n = 0, 1, \dots, N-1$ и $k = 0, 1, \dots, N-1$ – целочисленные индексы.

Быстрое преобразование Фурье – конкретный алгоритм наиболее быстрого вычисления дискретного преобразования Фурье для последовательности длиной $N = 2^m$ отсчётов.

Симметрия коэффициентов фурье-разложения для $k \neq 0$:

$$\hat{y}_k = \sum_{n=0}^{N-1} y_n e^{-2\pi i kn/N} = \sum_{n=0}^{N-1} y_n \left\{ \cos\left(\frac{2\pi kn}{N}\right) - i \sin\left(\frac{2\pi kn}{N}\right) \right\},$$
$$\hat{y}_{N-k} = \sum_{n=0}^{N-1} y_n e^{-2\pi i (N-k)n/N} = \sum_{n=0}^{N-1} y_n \left\{ \cos\left(-\frac{2\pi kn}{N}\right) - i \sin\left(-k \frac{2\pi kn}{N}\right) \right\},$$

откуда следует $\text{Re } \hat{y}_k = \text{Re } \hat{y}_{N-k}$ и $\text{Im } \hat{y}_k = -\text{Im } \hat{y}_{N-k}$, при этом $|\hat{y}_k| = |\hat{y}_{N-k}|$.

Вывод: в спектре дискретного преобразования Фурье возникает удвоение спектральных компонент (aliasing), расположенных симметрично относительно середины спектра $k = N/2$ (так называемая частота Найквиста).

Дискретное и быстрое преобразования Фурье (2)

Вычислим дискретное преобразование Фурье от гармонической функции

$$y_n = A \cos(2\pi f \cdot t_n) = A \cos(2\pi f \Delta t \cdot n) = \frac{A}{2} e^{2\pi i f \Delta t \cdot n} + \frac{A}{2} e^{-2\pi i f \Delta t \cdot n}.$$

После подстановки получаем

$$\hat{y}_k = \sum_{n=0}^{N-1} y_n e^{-2\pi i kn/N} = \frac{A}{2} \sum_{n=0}^{N-1} e^{2\pi i (f\Delta t - k/N) \cdot n} + \frac{A}{2} \sum_{n=0}^{N-1} e^{2\pi i (-f\Delta t - k/N) \cdot n}.$$

При выполнении условия $k = k^*$, где $k^* = N \cdot f \Delta t$, показатель каждой экспоненты в первой сумме равен нулю, поэтому

$$\hat{y}_k \Big|_{k=k^*} = \sum_{n=0}^{N-1} 1 = \frac{A}{2} N.$$

При выполнении условия $k = N - k^*$ (зеркальный пик относительно средней точки) запишем члены ряда во второй сумме в следующем виде

$$e^{2\pi i (-f\Delta t - k/N) \cdot n} = e^{2\pi i (-f\Delta t - (N - k^*)/N) \cdot n} = e^{2\pi i (-f\Delta t + k^*/N - 1) \cdot n} = e^{2\pi i (-f\Delta t + k^*)/N \cdot n} = 1,$$

следовательно,

$$\hat{y}_k \Big|_{k=N-k^*} = \sum_{n=0}^{N-1} 1 = \frac{A}{2} N.$$

Для получения амплитуды гармонического сигнала высоту одного из симметричных пиков фурье-образа нужно удваивать и делить на длину реализации N .

Дискретное и быстрое преобразования Фурье (3)

Дискретное преобразование Фурье для вектора значений функции y_n :

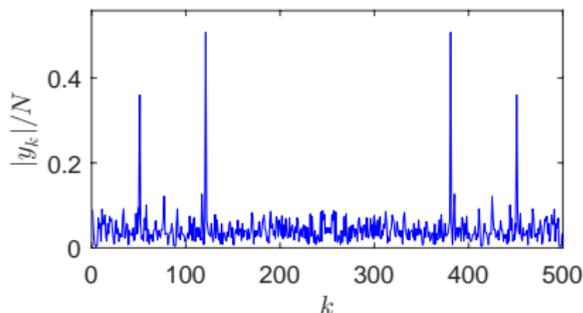
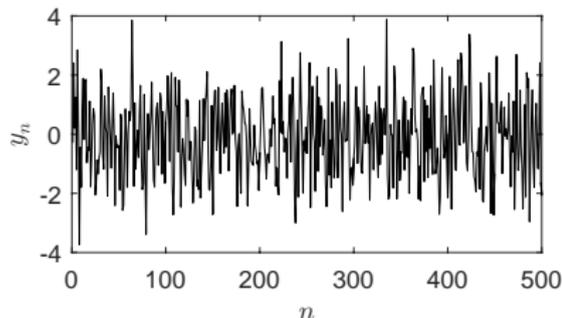
$$\mathcal{F}[y_n] \equiv \hat{y}_k = \sum_{n=0}^{N-1} y_n e^{-2\pi i k n / N} \quad \text{и} \quad y_n = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \hat{y}_k e^{2\pi i k n / N},$$

где $n = 0, 1, \dots, N-1$ и $k = 0, 1, \dots, N-1$ – целочисленные индексы.

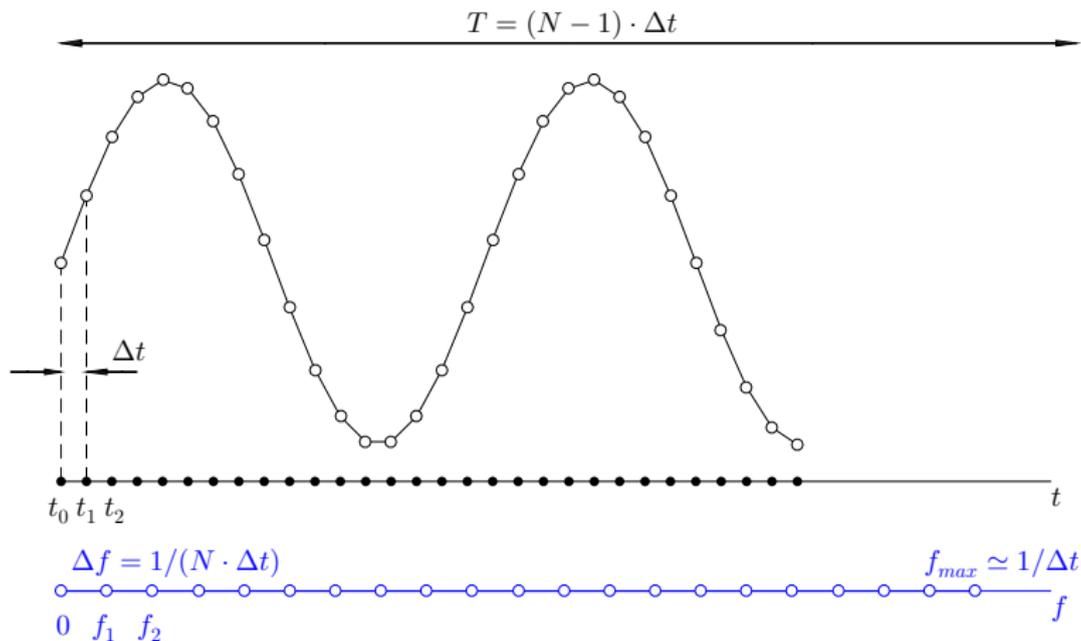
Формат команды быстрого преобразования Фурье:

$Y = \text{fft}(X)$ и $X = \text{ifft}(Y)$ – прямое и обратное преобразование

Пример: $y = 0.7 \sin(2\pi \cdot 50 \cdot t) + 1.0 \sin(2\pi \cdot 120 \cdot t) + 1.0 \text{randn}(N)$



Проблема масштабирования осей при дискретном преобразовании Фурье



Пример применения функции `fft` и `ifft` и масштабирования осей при преобразовании Фурье

Формат команды: $Y = \text{fft}(X)$ и $X = \text{ifft}(Y)$

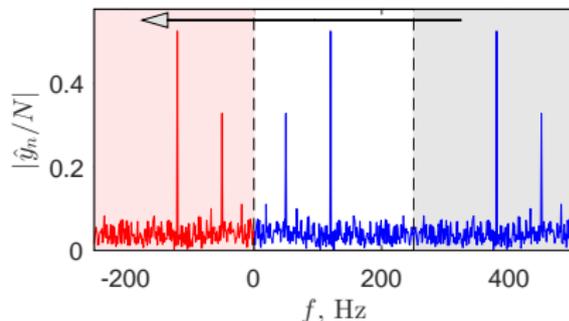
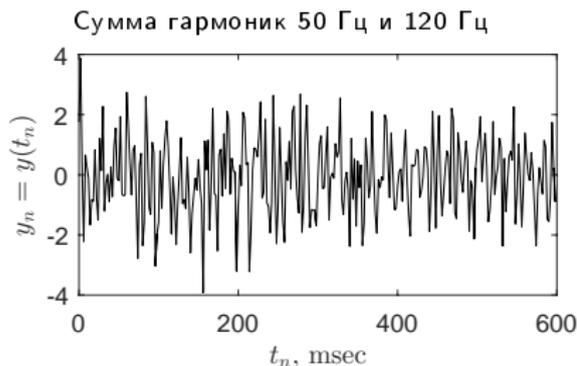
Пример: $y_n = y(t_n) = A_1 \cdot \sin(2\pi f_1 t_n) + A_2 \cdot \sin(2\pi f_2 t_n) + \text{шум}$

$t_n = [t_0, t_0 + \Delta t, \dots, t_0 + \Delta t \cdot (N - 1)]$ – вектор аргументов

$\Delta f = f_{n+1} - f_n = 1/(\Delta t \cdot N)$ – минимальная частота

$f_{\max} \simeq 1/\Delta t$ – максимальная частота (sampling frequency)

$f_{\max}/2$ – максимальная частота, которую можно разрешить для данной выборки (частота Найквиста)



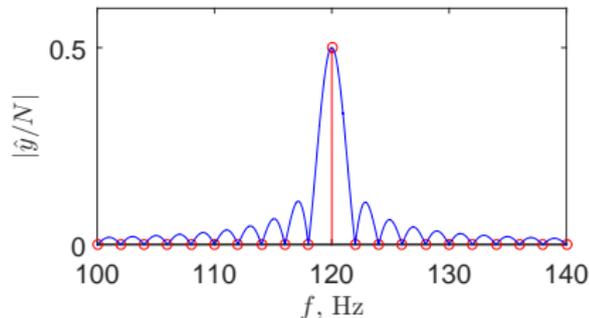
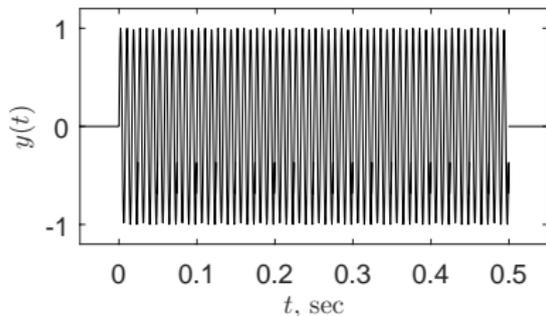
Для удобства представления результатов часто переносят высокочастотную часть спектра в области отрицательных частот, чтобы получить симметричный Фурье-спектр сигнала.

«Честное» дискретное vs. быстрое преобразование Фурье: проблема побочных лепестков

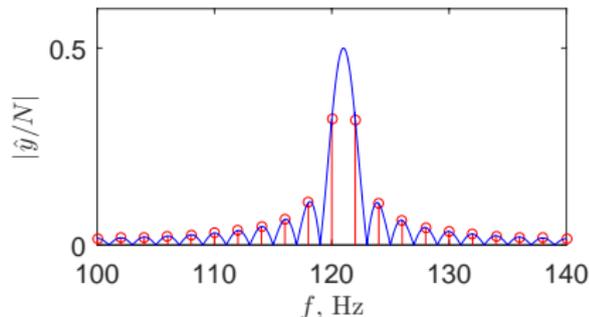
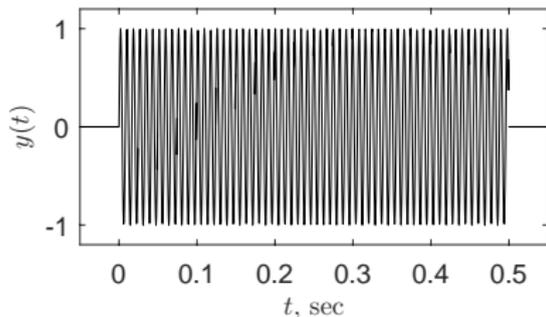
«Честное» дискретное преобразование Фурье: по определению для произвольных k

Быстрое дискретное преобразование Фурье: встроенная функция для целых k

Пример: гармонический сигнал $f_0 = 120$ Гц, $\Delta f = 2$ Гц



Пример: гармонический сигнал $f_0 = 121$ Гц, $\Delta f = 2$ Гц



Оконное преобразование Фурье

Дискретное оконное преобразование Фурье для вектора значений функции y_n :

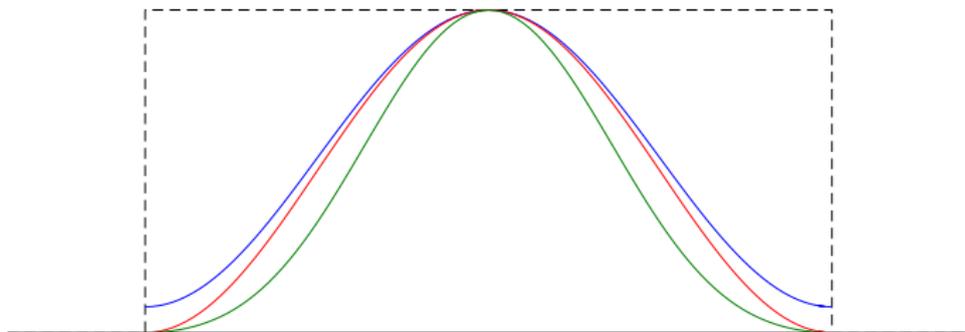
$$\mathcal{F}[y_n] = \sum_{n=0}^{N-1} y_n \cdot W_n \cdot e^{-2\pi i k n / N}.$$

где $n = 0, 1, \dots, N - 1$ и $k = 0, 1, \dots, N - 1$ – целочисленные индексы.

Оконная функция Ханна (Hann): $W_n = 0.5 \cdot (1 - \cos(2\pi n / (N - 1)))$

Оконная функция Хэмминга (Hamming): $W_n = 0.538 - 0.462 \cos(2\pi n / (N - 1))$

Оконная функция Блэкмана (Blackman): $W_n = a_0 - a_1 \cos(2\pi n / (N - 1)) + a_2 \cos(4\pi n / (N - 1))$



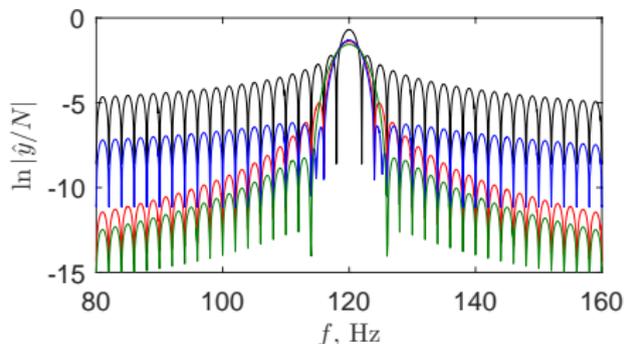
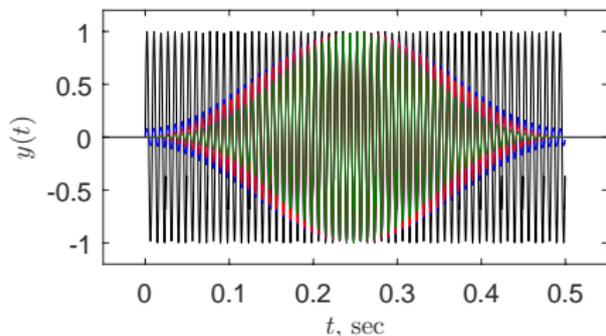
Использование оконной функции позволяет подавить интенсивность боковых «лепестков» за счет увеличения ширины центрального максимума.

Оконное преобразование Фурье: результаты

Оконная функция Ханна (Hann): $W_n = 0.5 \cdot (1 - \cos(2\pi n/(N-1)))$

Оконная функция Хэмминга (Hamming): $W_n = 0.538 - 0.462 \cos(2\pi n/(N-1))$

Оконная функция Блэкмана (Blackman): $W_n = a_0 - a_1 \cos(2\pi n/(N-1)) + a_2 \cos(4\pi n/(N-1))$



Использование оконной функции позволяет подавить интенсивность боковых «лепестков» за счет увеличения ширины центрального максимума.

Выделение узкополосного сигнала на фоне помех

Процедура фурье-фильтрации

$$\mathcal{F}[y_n] \rightarrow \hat{y}_n \rightarrow \hat{y}_n \cdot W_n \rightarrow \mathcal{F}^{-1}[\hat{y}_n \cdot W_n]$$

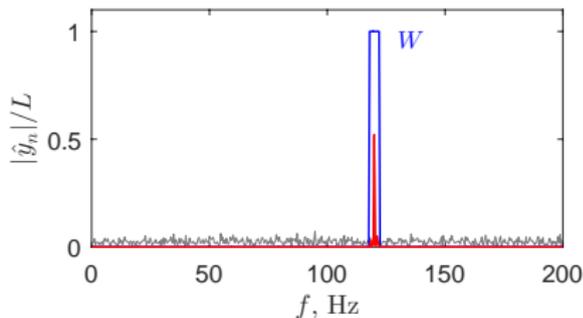
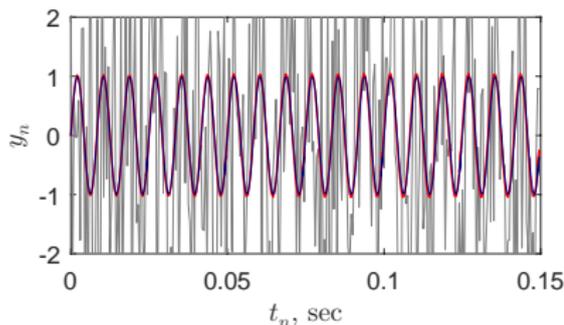
W_n – оконная функция в частотной области

Пример: $y_n = y(t_n) = A \cdot \sin(2\pi f t_n) + \sigma \cdot \eta(t_n)$

$\eta(t_n)$ – белый гауссов шум с нулевым средним

σ – стандартное отклонение шумового вклада (мера интенсивности шума)

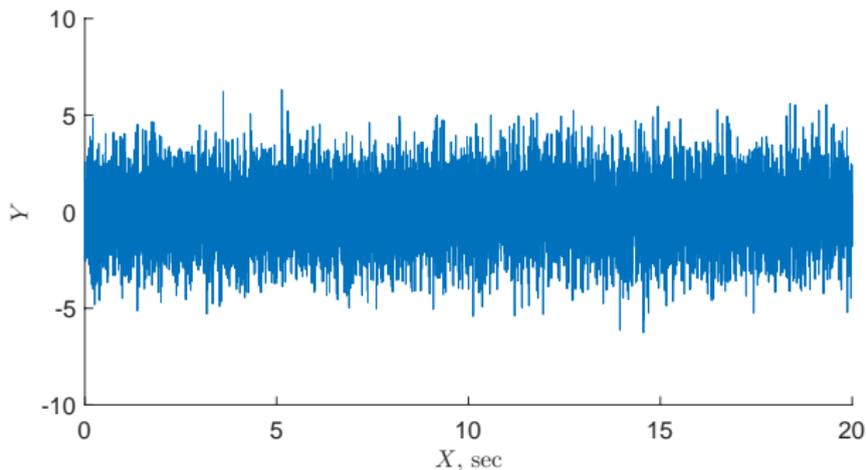
Одна гармоника 120 Гц, отношение $A/\sigma = 0.5$



Задачи

Дан набор однотипных N файлов, содержащих одномерный массив данных X и Y (первый столбец – время в секундах, второй столбец – сигнал в произвольных единицах).

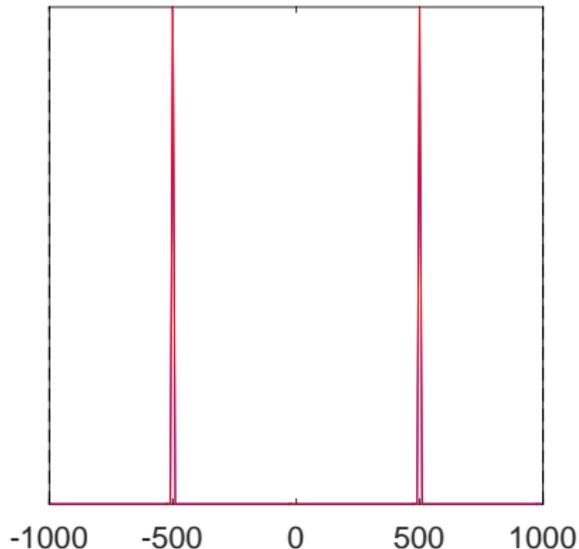
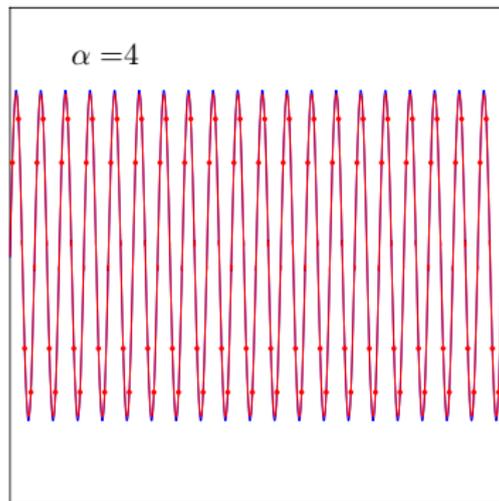
Предполагая, что зависимость Y от X может быть представлена в виде комбинации периодических сигналов и аддитивного шума, определить параметры периодического сигнала (частоту, амплитуду и относительную фазу) для каждой из реализаций и для ансамбля реализаций.



Дискретизация гармонического сигнала и форма спектра

Модель: синусоидальный сигнал с единичной амплитудой и частотой 500 Гц (синяя линия)

Параметр α равен числу точек дискретизированного сигнала на период основного сигнала

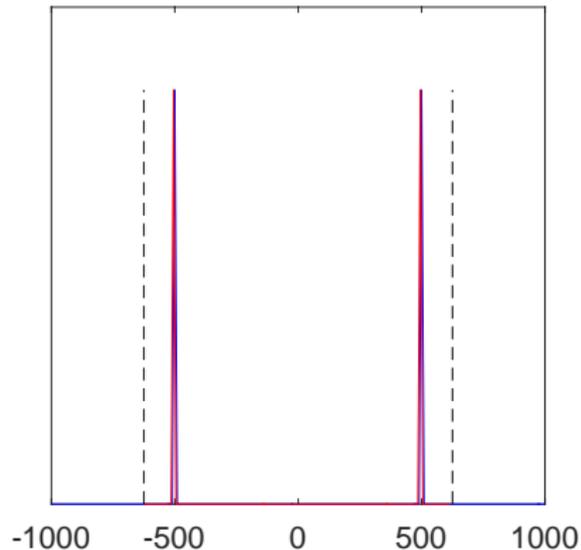
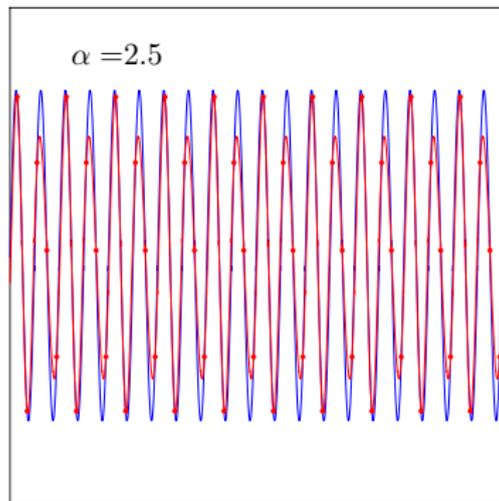


Красная линия – это кубическая сплайн-аппроксимация, проходящая через реперные точки

Дискретизация гармонического сигнала и форма спектра

Модель: синусоидальный сигнал с единичной амплитудой и частотой 500 Гц (синяя линия)

Параметр α равен числу точек дискретизированного сигнала на период основного сигнала

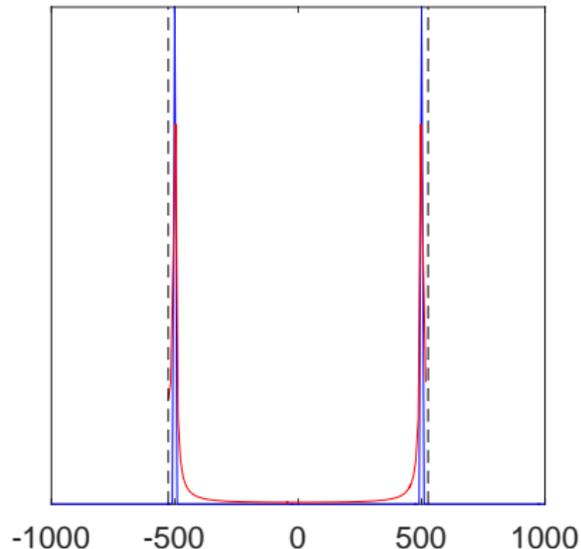
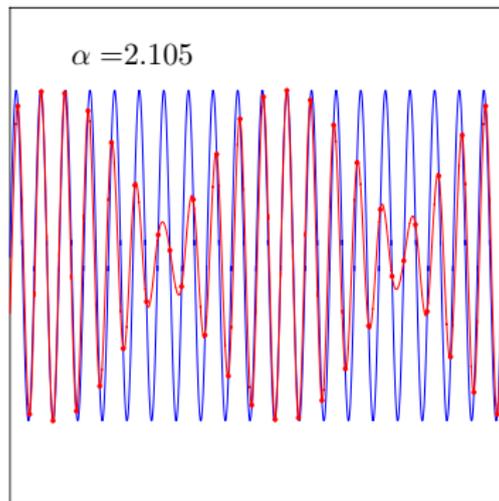


Красная линия – это кубическая сплайн-аппроксимация, проходящая через реперные точки

Дискретизация гармонического сигнала и форма спектра

Модель: синусоидальный сигнал с единичной амплитудой и частотой 500 Гц (синяя линия)

Параметр α равен числу точек дискретизированного сигнала на период основного сигнала

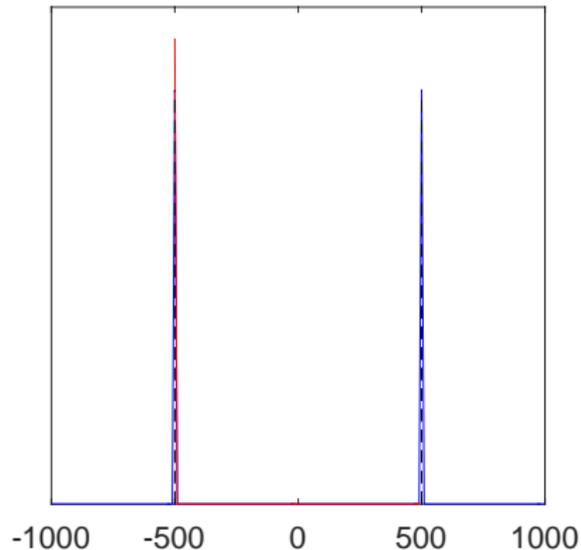
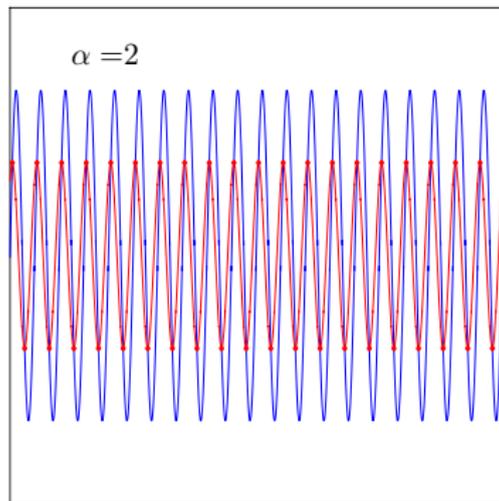


Красная линия – это кубическая сплайн-аппроксимация, проходящая через реперные точки

Дискретизация гармонического сигнала и форма спектра

Модель: синусоидальный сигнал с единичной амплитудой и частотой 500 Гц (синяя линия)

Параметр α равен числу точек дискретизированного сигнала на период основного сигнала

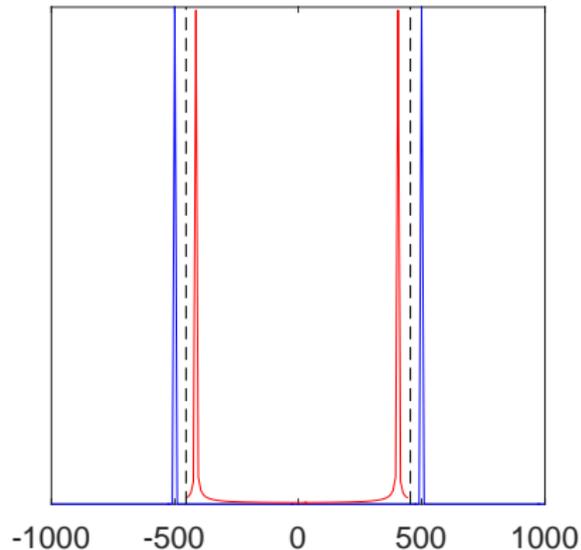
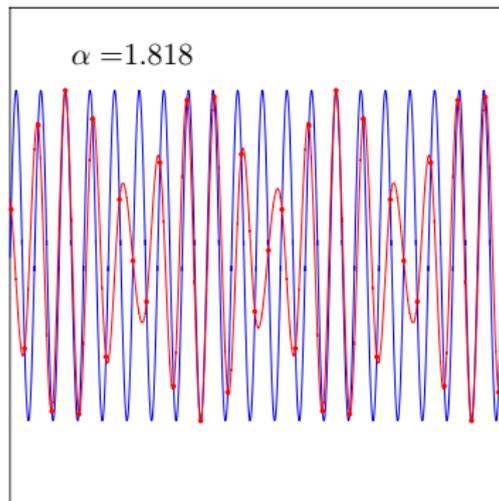


Красная линия – это кубическая сплайн-аппроксимация, проходящая через реперные точки

Дискретизация гармонического сигнала и форма спектра

Модель: синусоидальный сигнал с единичной амплитудой и частотой 500 Гц (синяя линия)

Параметр α равен числу точек дискретизированного сигнала на период основного сигнала

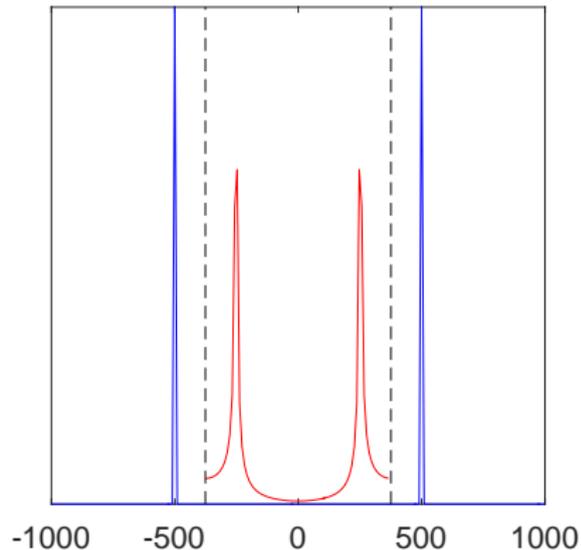
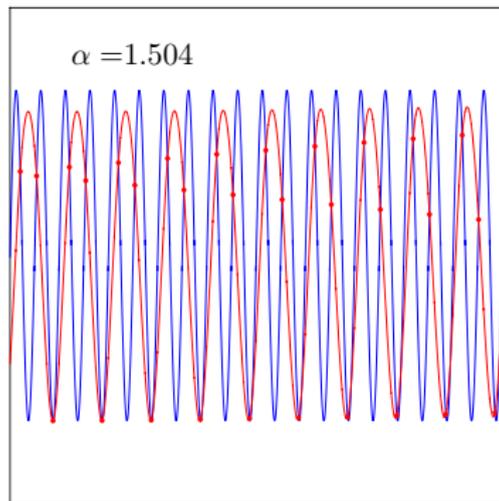


Красная линия – это кубическая сплайн-аппроксимация, проходящая через реперные точки

Дискретизация гармонического сигнала и форма спектра

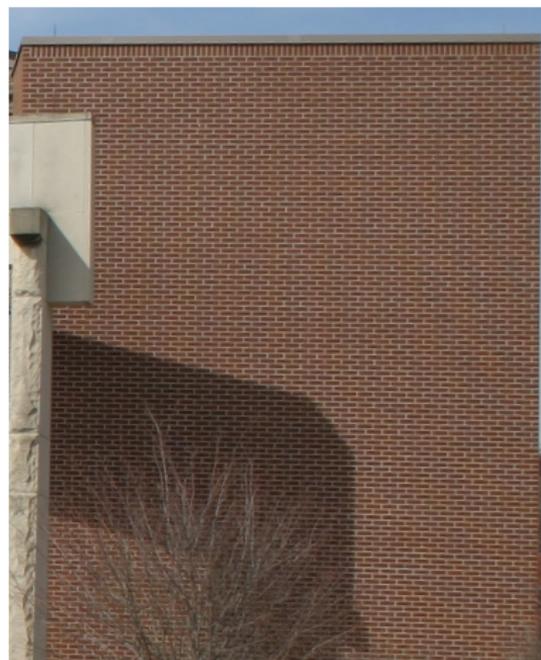
Модель: синусоидальный сигнал с единичной амплитудой и частотой 500 Гц (синяя линия)

Параметр α равен числу точек дискретизированного сигнала на период основного сигнала



Красная линия – это кубическая сплайн-аппроксимация, проходящая через реперные точки

Дискретизация изображения и муар



https://en.wikipedia.org/wiki/Nyquist-Shannon_sampling_theorem

Лекция 4

Основы спектрально-корреляционного анализа случайных сигналов

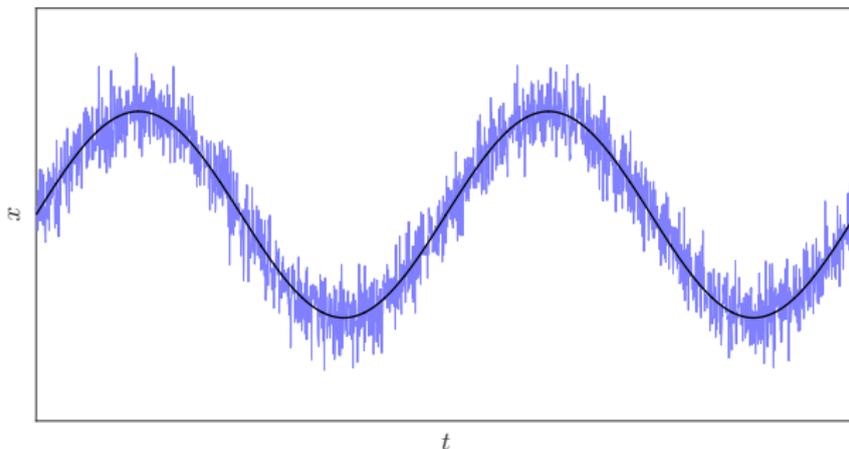
Введение в физику шумов

С. А. Ахманов, Ю. Е. Дьяков, А. С. Чиркин, *Введение в статистическую радиофизику и оптику*. М.: Наука. – 1981. – 640 с.

Случайные процессы (1)

Классификация радиотехнических сигналов и процессов

- детерминированные — сигналы, мгновенное значение которого в любой момент времени можно предсказать с абсолютной достоверностью.
- случайные — сигналы, мгновенные значения которых заранее не известны и могут быть предсказаны лишь с некоторой вероятностью, меньшей единицы.



Для случайных сигналов все параметры (выборочные среднее и дисперсия, фурье-спектр) являются случайными.

Совокупность всех возможных реализаций случайного процесса называется статистическим ансамблем или набором реализаций.

Случайные процессы (2)

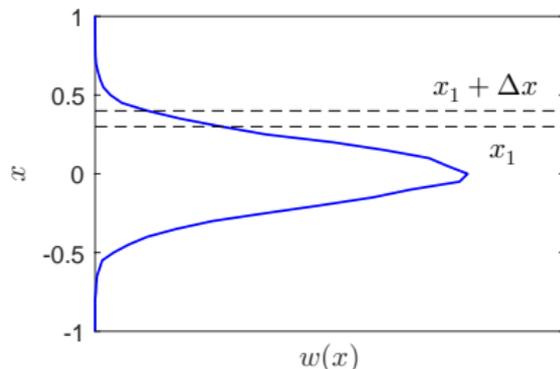
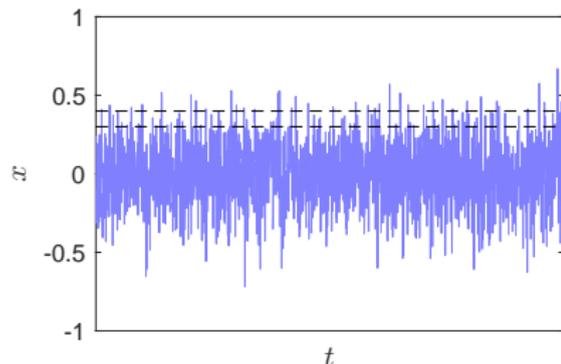
Вероятность того, что значение параметра x лежит в интервале от x_1 до $x_1 + \Delta x$

$$P_1 = P(x_1 \leq x \leq x_1 + \Delta x, t) \simeq \frac{N_1}{N},$$

где N_1 – число реализаций, для которых значения параметра в момент времени t лежат в интервале $x_1 \leq x \leq x_1 + \Delta x$, N – полное число реализаций. Статистическое описание является возможным лишь при условии, когда при увеличении числа реализаций $N \rightarrow \infty$ отношение N_1/N стремится к определенному предельному значению.

Определение плотности вероятности

$$w(x, t) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0, N \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta x} \cdot \frac{N_1(t)}{N(t)}.$$



Статистическое усреднение по ансамблю

Разделим диапазон изменения случайной величина на n интервалов, тогда

$$\begin{aligned}\langle x(t) \rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\sum_n x_n N_n}{N} = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_n \frac{x_n N_n}{N} = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_n \frac{x_n}{\Delta x} \frac{N_n}{N} \Delta x \simeq \\ &\simeq \lim_{N \rightarrow \infty} x_n \left(\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \sum_n \frac{1}{\Delta x} \frac{N_n}{N} \right) \Delta x \simeq \lim_{N \rightarrow \infty} x_n w(x, t) \Delta x.\end{aligned}$$

Для непрерывной случайной величины получаем

$$\langle x(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x w(x, t) dx.$$

Среднее значение функции от случайной переменной равно

$$\langle F(x, t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} F(x) w(x, t) dx.$$

Определение стационарного случайного процесса

$$w(x, t) = w(x) \quad \text{и} \quad \langle x(t) \rangle = \langle x \rangle.$$

Спектральные характеристики случайных процессов

По определению, автокорреляционная функция равна

$$B(t, \tau) = \langle x(t)x(t + \tau) \rangle - \langle x(t) \rangle \langle x(t + \tau) \rangle.$$

Для стационарного случайного процесса параметры $\langle x(t) \rangle$ и $\langle x(t + \tau) \rangle$ не зависят от времени, поэтому

$$B(\tau) = \langle x(t)x(t + \tau) \rangle - \langle x \rangle^2.$$

Очевидно, что автокорреляционная функция $B(\tau)$ имеет максимум при $\tau = 0$ и стремится к нулю при $\tau \rightarrow \infty$, что отражает статистическую независимость отсчетов на больших временах. Характерный интервал времени, на котором происходит заметный спад функции корреляции, называется временем корреляции.

Запишем флуктуационную компоненту стационарного случайного процесса

$$\xi(t) = x(t) - \langle x \rangle$$

и введем понятие спектральной плотности мощности шумовой (флуктуационной) компоненты

$$\langle \xi^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} G(\omega) d\omega.$$

Теорема Винера-Хинчина (1)

Теорема: спектральной плотностью мощности стационарного случайного процесса является преобразование Фурье соответствующей автокорреляционной функции.

Доказательство: Представим шумовую компоненту стационарного процесса в виде интеграла Фурье

$$\xi(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \xi(\omega) e^{i\omega t} d\omega \quad \text{и} \quad \langle \xi(\omega) \rangle = 0.$$

Для того, чтобы автокорреляционная функция стационарного случайного процесса

$$\begin{aligned} B(\tau) = \langle \xi(t)\xi(t+\tau) \rangle &= \left\langle \int_{-\infty}^{\infty} \xi(\omega) e^{i\omega t} d\omega \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \xi(\omega') e^{i\omega'(t+\tau)} d\omega' \right\rangle = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \xi(\omega)\xi(\omega') \rangle e^{i(\omega+\omega')t} e^{i\omega\tau} d\omega d\omega' \end{aligned}$$

не зависела от времени, необходимо положить

$$\langle \xi(\omega)\xi(\omega') \rangle = A(\omega) \delta(\omega + \omega'),$$

где $A(\omega)$ – произвольная функция частоты.

Теорема Винера-Хинчина (2)

При условии $\langle \xi(\omega)\xi(\omega') \rangle = A(\omega) \delta(\omega + \omega')$ получаем

$$B(\tau) = \langle \xi(t)\xi(t + \tau) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} A(\omega) \delta(\omega + \omega') e^{i(\omega + \omega')t} e^{i\omega\tau} d\omega d\omega' = \int_{-\infty}^{\infty} A(\omega) e^{i\omega\tau} d\omega.$$

Иными словами, автокорреляционная функция $B(\tau)$ является фурье-образом коррелятора.

Вычислим величину автокорреляционной функции в нуле:

$$\text{с одной стороны, } B(0) = B(\tau) \Big|_{\tau=0} = \langle \xi(t)\xi(t + \tau) \rangle \Big|_{\tau=0} = \langle \xi^2(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} G(\omega) d\omega,$$

$$\text{с другой стороны, } B(0) = B(\tau) \Big|_{\tau=0} = \int_{-\infty}^{\infty} A(\omega) d\omega,$$

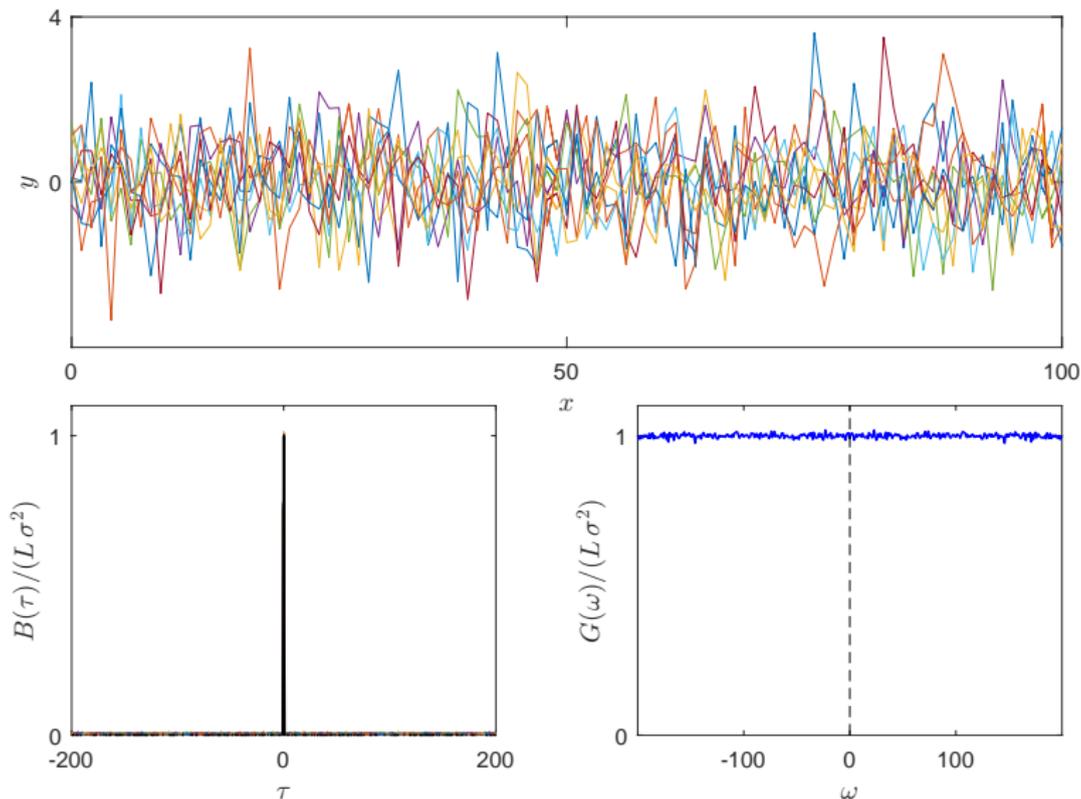
тогда $A(\omega) = G(\omega)$.

Следовательно, что спектральная плотность мощности шума $G(\omega)$ и автокорреляционная функция $B(\tau)$ связаны преобразованием Фурье

$$B(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} G(\omega) e^{i\omega\tau} d\omega \quad \text{и} \quad G(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} B(\tau) e^{-i\omega\tau} dt.$$

Теорема Винера-Хинчина (3)

Иллюстрация: пример дельта-коррелированного шума, усреднение по 100 реализациям



Вывод: Чем меньше время корреляции шумового сигнала, тем шире его спектр и наоборот.

Интенсивность шума и чувствительность измерительных приборов

Напомним определение спектральной плотности мощности шума

$$\langle \xi^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} G(\omega) d\omega.$$

Если мощность шума почти постоянна в некотором диапазоне частот от ω_1 до ω_2 и равна G_0 , то интегральная мощность шума в этой полосе равна

$$\langle \xi^2 \rangle = \int_{\omega_1}^{\omega_2} G(\omega) d\omega \simeq G_0 \cdot \Delta\omega, \quad \text{где} \quad \Delta\omega = 2\pi\Delta f.$$

Характерная амплитуда шума (стандартное отклонение) равна

$$\sigma = \sqrt{\langle \xi^2 \rangle} \simeq C \cdot \sqrt{\Delta f},$$

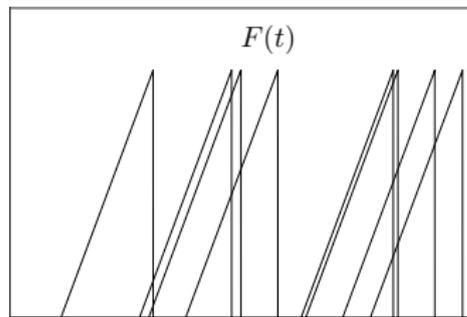
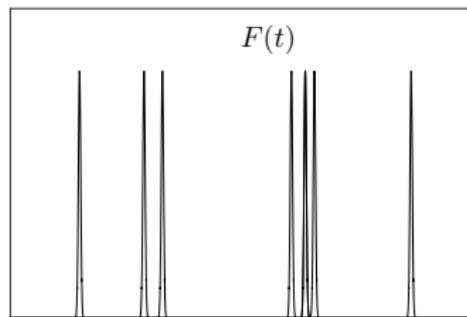
где размерность параметра C равна нВ/ $\sqrt{\Gamma\text{ц}}$ (при измерении шумового напряжения) или нА/ $\sqrt{\Gamma\text{ц}}$ (при измерении шумового тока).

Вывод: абсолютное значение амплитуды шумовой компоненты зависит от полосы частот Δf , в которой проводится измерение.

Импульсные случайные процессы (1)

Пусть случайный процесс представляет собой одиночный импульс известной формы $F(t)$ и случайным моментом появления t_0

$$x(t) = F(t - t_0).$$



Введем среднее значение и автокорреляционную функцию

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} F(t - t_0) w(t_0) dt_0, \quad B(\tau) = \langle x(t) x(t + \tau) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} F(t - t_0) F(t + \tau - t_0) w(t_0) dt_0,$$

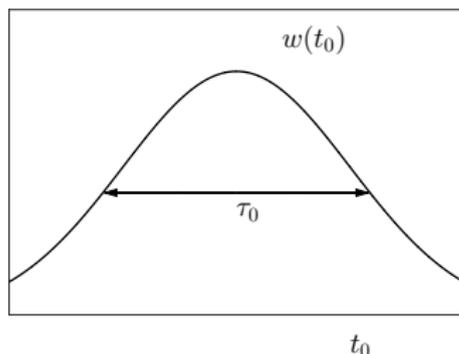
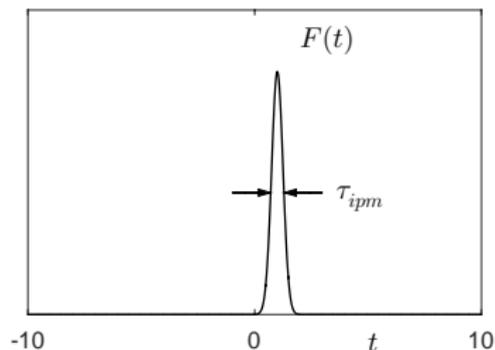
где $w(t_0)$ – распределение вероятностей случайного момента появления импульса.

Импульсные случайные процессы (2)

Пусть импульс имеет длительность τ_{ipm} , а распределение $w(t_0)$, описывающее момент появления импульса, имеет длительность τ_0 . Рассмотрим предельный случай $\tau_{ipm} \ll \tau_0$.

Если появление импульса равновероятно для любого момента на достаточно большом интервале $T \gg \tau_{ipm}$, то можно приближенно считать

$$w(t_0) = \frac{1}{T}.$$



В этом случае среднее значение не зависит от времени

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} F(t - t_0) w(t_0) dt_0 \simeq \frac{1}{T} \int_{-\infty}^{+\infty} F(t - t_0) dt_0 \simeq \frac{1}{T} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} F(\theta) d\theta.$$

Импульсные случайные процессы (3)

Автокорреляционная функция также не зависит от времени

$$B(\tau) = \langle x(t)x(t+\tau) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} F(t-t_0)F(t+\tau-t_0)w(t_0)dt_0 \simeq \frac{1}{T} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} F(\theta)F(\theta+\tau) d\theta,$$

поэтому такой процесс в пределах интервала T можно считать стационарным.

Разложим импульс в ряд Фурье $F(t) = (2\pi)^{-1} \int F(\omega)e^{i\omega t}d\omega$, тогда

$$\begin{aligned} B(\tau) &= \frac{1}{T} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega)e^{i\omega\theta} d\omega \right) \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega')e^{i\omega'(\theta+\tau)} d\omega' \right) d\theta = \\ &= \frac{1}{2\pi T} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega)F(\omega')e^{i\omega'\tau} d\omega d\omega' \cdot \frac{1}{2\pi} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega+\omega')\theta} d\theta = \\ &= \frac{1}{2\pi T} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega)F(\omega')e^{i\omega'\tau} d\omega d\omega' \delta(\omega+\omega') = \frac{1}{2\pi T} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} |F(\omega)|^2 e^{-i\omega\tau} d\omega. \end{aligned}$$

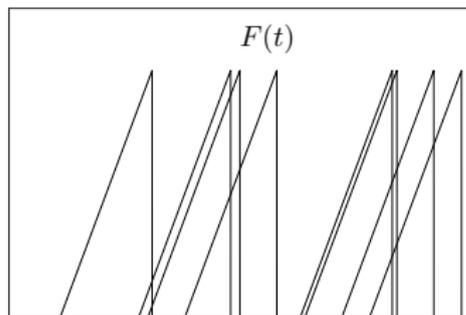
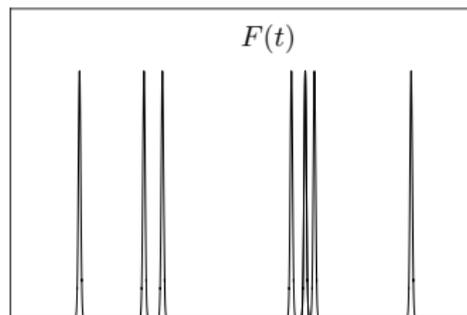
Замечание: коэффициент в этой формуле зависит от того, в каком виде записано преобразования Фурье (с коэффициентом $(2\pi)^{-1}$ или без)

Таким образом, согласно теореме Винера – Хинчина спектральная плотности мощности случайного процесса типа одиночного импульса равна $G(\omega) = (2\pi T)^{-1} |F(\omega)|^2$.

Импульсные случайные процессы (3)

Рассмотрим случайная последовательность одинаковых импульсов

$$x(t) = \sum_{p=1}^n F(t - t_p).$$



Если появление каждого импульса длительностью τ_{ipm} за большой интервал времени $T \gg \tau_{ipm}$ можно считать равновероятным и независимым, то можно показать, что спектральная плотности мощности случайного процесса равна (теорема Карсона)

$$G(\omega) = \frac{1}{2\pi T} |F(\omega)|^2 \cdot \langle n \rangle = \frac{1}{2\pi} \Omega |F(\omega)|^2,$$

где $\langle n \rangle$ – среднее число импульсов, $\Omega = \langle n \rangle / T$ – средняя частота следования импульсов.

Дробовой шум и формула Шоттки (1)

Дробовой шум – это беспорядочные флуктуации числа частиц относительно их среднего значения и вызываемые ними флуктуации тока в электрических цепях и электрических приборах.

Случай 1: предположим, что электроны движутся внутри образца с почти постоянной скоростью. Следовательно, одиночный импульс тока будет иметь форму прямоугольника с шириной $\tau_{\text{пр}}$ и амплитудой e/τ , где $\tau = d/v$ – время пролёта через образец, d – длина образца, v – средняя скорость электронов.

Фурье-спектр прямоугольного импульса длительностью τ имеет вид

$$i(\omega) = \frac{e}{\tau} \cdot \tau \cdot \frac{\sin \omega\tau/2}{\omega\tau/2} \quad \text{или} \quad |i(\omega)|^2 = e^2 \cdot \left(\frac{\sin \omega\tau/2}{\omega\tau/2} \right)^2.$$

Следовательно, спектральная плотность мощности равна

$$G(\omega) = \frac{1}{2\pi} \Omega |i(\omega)|^2 = \frac{1}{2\pi} e \langle I \rangle \cdot \left(\frac{\sin \omega\tau/2}{\omega\tau/2} \right)^2,$$

где $\langle I \rangle = e\Omega$ – средний ток.

Дробовой шум и формула Шоттки (2)

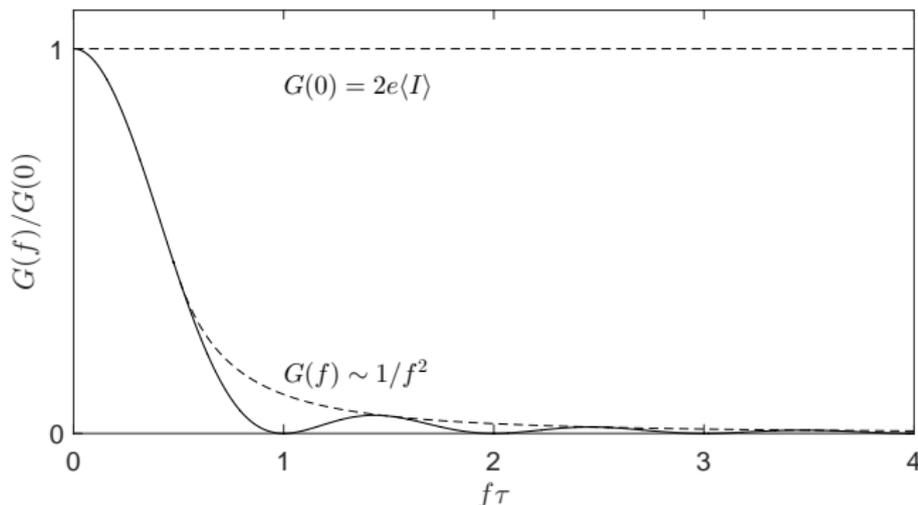
В пределе $\omega \rightarrow 0$ функция $\text{sinc}(\omega\tau/2) \rightarrow 0$ и мы приходим к формуле Шоттки (Shottky)

$$G(\omega)\Big|_{\omega \rightarrow 0} = \frac{1}{2\pi} e\langle I \rangle \quad \text{или} \quad G^+(\omega)\Big|_{\omega \rightarrow 0} = \frac{e}{\pi} \langle I \rangle.$$

Можно записать спектральной мощности дробового шума, используя обычную частоту и соотношение $G(\omega)\Delta\omega = G(f)\Delta f$: $G^+(f)\Big|_{f \rightarrow 0} = 2e\langle I \rangle$.

Формула Шоттки для среднеквадратичного отклонения флуктуирующего тока

$$\sigma_I = \sqrt{2e\langle I \rangle \cdot \Delta f}.$$



Дробовой шум и формула Шоттки (3)

Случай 2: дробовой шум в электровакуумных лампах

Вспомним выражение для плотности электрического тока: $j = env$, где n – концентрация электронов, v – скорость. Для электрона в плоском конденсаторе имеем

$$n = \frac{1}{d \cdot S} \implies i(t) \equiv j \cdot S = \frac{e}{d} v(t),$$

где S – площадь пластин, d – величина зазора.

Рассмотрим равноускоренное движение электрона в постоянном электрическом поле $\mathcal{E} = V/d$, где V – ускоряющее напряжение. Запишем уравнению Ньютона $m\ddot{z} = e\mathcal{E}$ и, пренебрегая начальной тепловой скоростью, найдем зависимость мгновенной скорости электрона от времени

$$z(t) = \frac{e\mathcal{E}}{2m} t^2 \implies v(t) = \frac{dz}{dt} = \frac{e\mathcal{E}}{m} t \quad \text{для } 0 < t < \tau,$$

где $\tau^2 = 2md/(e\mathcal{E})$ – время пролета электрона между пластинами, \mathcal{E} – электрическое поле.

Вычислим фурье-образ от функции, соответствующей току от одного электрона и имеющей вид треугольника

$$i(t) = \frac{e}{d} v(t) = \frac{2e}{\tau^2} \cdot t \quad \text{для } 0 < t < \tau.$$

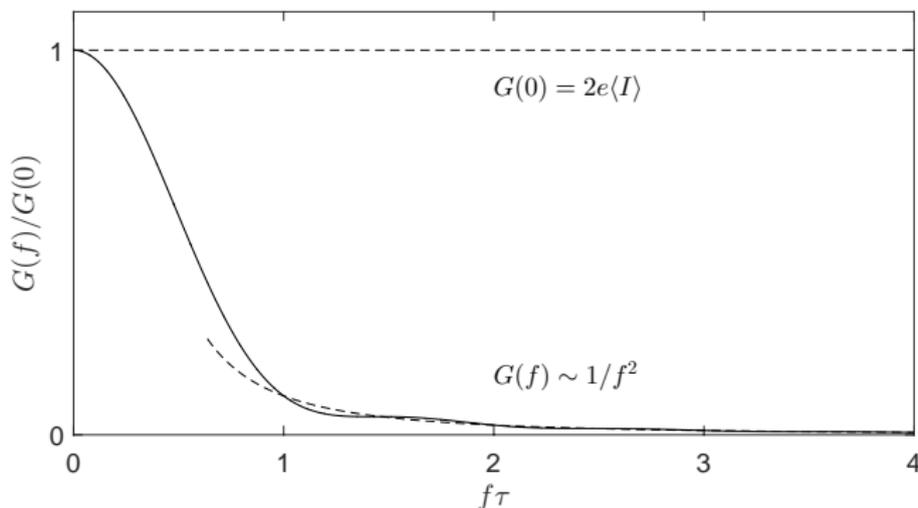
Дробовой шум и формула Шоттки (4)

Легко получить

$$i(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} i(t)e^{-i\omega t} dt = \frac{2e}{\tau^2} \int_0^{\tau} te^{-i\omega t} dt = \frac{2e}{\omega^2 \tau^2} \cdot e^{-i\omega\tau} \cdot (i\omega\tau + 1) - \frac{2e}{\omega^2 \tau^2}.$$

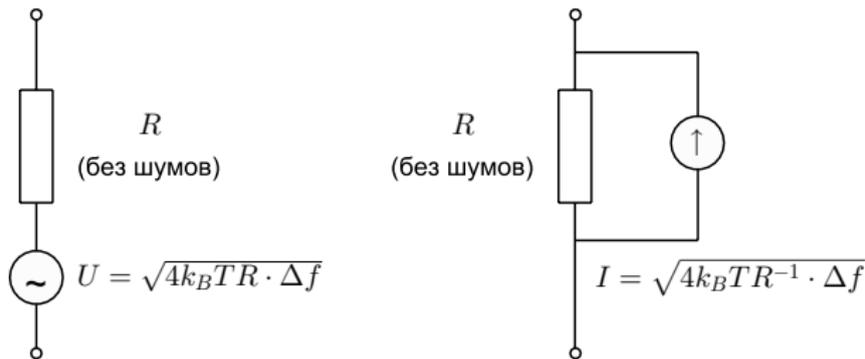
Для удобства введем параметр $\theta = \omega\tau$, равный изменению фазы за время пролёта, тогда квадрат модуля можно представить в виде $|i(\omega)|^2 = e^2 \mathcal{F}(\theta)$ и получить

$$G^+(\omega) = \frac{e}{\pi} \langle I \rangle \mathcal{F}(\theta), \quad \text{где} \quad \mathcal{F}(\theta) = \frac{4}{\theta^4} \cdot (2 + \theta^2 - 2\theta \sin \theta - 2 \cos \theta)$$



Тепловые шумы и формула Найквиста (1)

Тепловой шум был обнаружен экспериментально Дж. Джонсоном в 1928 году: в отсутствие тока, протекающего через электрическое сопротивление, среднее квадратичное напряжение на его выводах зависит от его сопротивления R , температуры T и ширины частотного диапазона Δf .



Можно показать, что спектральная плотность электродвижущей силы теплового шума:

$$S(f) = 4k_B T \cdot \frac{hf}{2k_B T} \cdot \coth\left(\frac{hf}{2k_B T}\right) \cdot \operatorname{Re} Z(f) = 2hf \cdot \frac{1 + \exp(-hf/k_B T)}{1 - \exp(-hf/k_B T)} \cdot \operatorname{Re} Z(f), \quad (*)$$

где $h = 6.63 \cdot 10^{-34}$ Дж·с – постоянная Планка, $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К – постоянная Больцмана, $Z(f)$ – комплексный импеданс участка цепи.

Формула Найквиста (*) – частный случай более общей флуктуационно-диссипационной теоремы (ФДТ), доказанной Калленом и Уэлтоном в 1951 г.

Тепловые шумы и формула Найквиста (2)

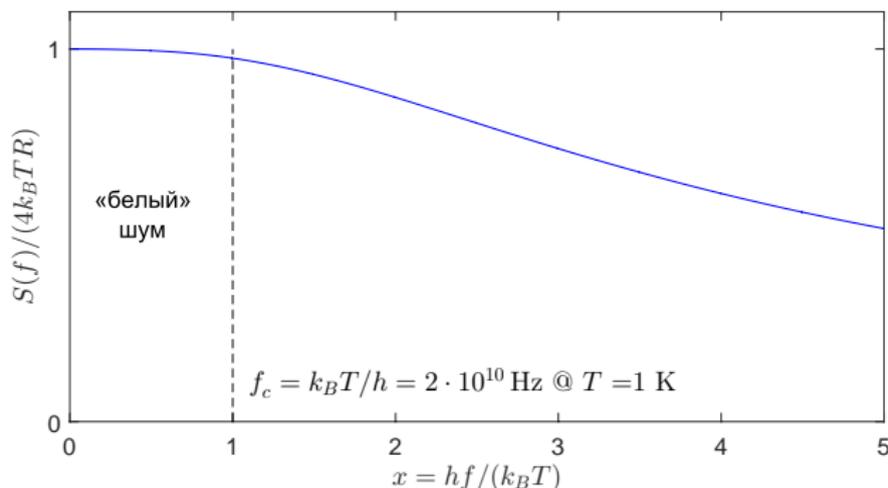
Формула Найквиста для тепловых шумов в классическом пределе ($hf \ll k_B T$)

$$S(f) \simeq 2hf \cdot \frac{1 + (1 - hf/k_B T)}{1 - (1 - hf/k_B T)} \cdot \operatorname{Re} Z(f) \simeq 4k_B TR.$$

Формула Найквиста для тепловых шумов в квантовом пределе ($hf \gg k_B T$)

$$S(f) \simeq 4 \left\{ \frac{hf}{2} + hf \cdot \exp\left(-\frac{hf}{k_B T}\right) \right\} \cdot \operatorname{Re} Z(f) \rightarrow 0.$$

Качественная зависимость спектральной плотности теплового шума от частоты:



Флуктуационно-диссипационная теорема

Если отклик системы $x(t)$ на внешнее воздействие $f(t)$ можно представить в виде

$$x(t) = \int \alpha(\tau) f(t - \tau) d\tau \quad \text{или} \quad \hat{x}(\omega) = \hat{\alpha}(\omega) \cdot \hat{f}(\omega),$$

где $\alpha(\tau)$ и $\hat{\alpha}(\omega)$ – передаточная функция (восприимчивость) во временной или частотной областях, то средний квадрат флуктуации термодинамической величины $\langle x^2 \rangle$ в состоянии термодинамического равновесия определяется мнимой частью восприимчивости

$$S_x(\omega) = \hbar \operatorname{Im} \hat{\alpha}(\omega) \cdot \coth \left(\frac{\hbar \omega}{2k_B T} \right) \quad \text{или} \quad \langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{x}^2(\omega) \cdot \hbar \operatorname{Im} \hat{\alpha}(\omega) \cdot \coth \left(\frac{\hbar \omega}{2k_B T} \right) \frac{d\omega}{2\pi}.$$

Пример 1: соотношение Эйнштейна-Смолуховского для броуновского движения

$$D = \mu k_B T, \quad \text{или} \quad \mu = \frac{v_d}{eE} \sim \frac{1}{6\pi\eta R} \quad - \text{ подвижность.}$$

Пример 2: формула Найквиста

$$S(f) = 4k_B TR \quad \text{или} \quad \sigma_V = \sqrt{\langle V^2 \rangle} = \sqrt{4k_B TR \cdot \Delta f}.$$

Пример 3: предел обнаружения классической силы

$$F_{min} = \sqrt{4k_B T \eta \cdot \Delta f}, \quad \text{где} \quad \eta \quad - \text{ коэффициент вязкого трения.}$$

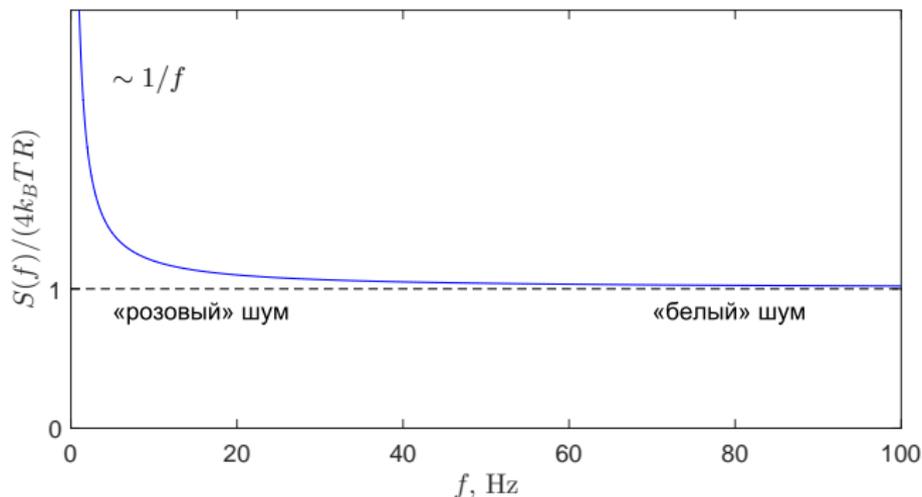
Фликкер-шум

Фликкер-шум (шум, $1/f$ -шум, эффект мерцания) – низкочастотный электронный шум, наблюдаемый практически в любых аналоговых электронных устройствах. Шум обусловлен неоднородностями в проводящей среде, генерацией и рекомбинацией носителей заряда в полупроводниках, старением и т. п. Фликкер-шум препятствует проведению точных измерений на постоянном токе.

Модельная зависимость спектральной плотности фликкер-шума

$$S(f) \simeq \frac{\text{const}}{f^\gamma} \quad \text{при } f \rightarrow 0,$$

где параметр γ обычно лежит в интервале от 0.6 до 2.



Принцип синхронного детектирования (1)

Входной сигнал имеет вид $V_{sig}(t) = V_s \sin(\omega_0 t + \theta_s)$.

Опорный сигнал встроенного генератора имеет вид $V_{ref}(t) = V_r \sin(\omega_r t + \theta_r)$.

Фазо-чувствительный детектор (phase-sensitive detector, PSD) перемножает два сигнала

$$\begin{aligned} V_{PSD}(t) &= 2 \cdot V_{sig}(t) \cdot V_{ref}(t) = \\ &= V_s V_r \cos\left((\omega_0 - \omega_r)t + (\theta_s - \theta_r)\right) - V_s V_r \cos\left((\omega_0 + \omega_r)t + (\theta_s + \theta_r)\right). \end{aligned}$$

Иными словами, в общем случае на выходе PSD-модуля возникает два переменных сигнала с разностной и суммарной частотой.

Если подобрать частоту опорного сигнала равной частоте анализируемого сигнала ($\omega_0 = \omega_r$), то на выходе PSD-модуля будет сумма постоянного и высокочастотного переменного сигнала

$$V_{PSD}(t) = V_s V_r \cos(\theta_s - \theta_r) - V_s V_r \cos(2\omega_0 t + (\theta_s + \theta_r)).$$

Если на выходе PSD-модуля поставить фильтр низких частот, который будет подавлять переменную составляющую, то тогда постоянное напряжение будет пропорционально амплитуде входного сигнала

$$\langle V_{PSD} \rangle = V_s V_r \cos(\theta_s - \theta_r).$$

Принцип синхронного детектирования (2)

Как получить абсолютную величину амплитуды и фазы анализируемого сигнала?

Способ 1: подбором частоты опорного сигнала добиться максимума постоянной составляющей (при $\theta_s = \theta_r$) или нуля (при $\theta_s = \theta_r + \pi/2$), тогда для опорного сигнала известной амплитуды V_r получаем

$$V_s = \frac{V_r}{\max V_{PSD}}.$$

Способ 2: можно ввести в схему дополнительный блок, умножающий исходный сигнал на $V_{ref}^*(t) = V_r \sin(\omega_r t + \theta_r + \pi/2)$, тогда

$$V_{PSD}^{(1)}(t) = 2 \cdot V_{sig}(t) \cdot V_r \sin(\omega_r t + \theta_r) = V_s V_r \cos(\theta_s - \theta_r) - V_s V_r \cos(2\omega_0 t + (\theta_s + \theta_r)).$$

$$\begin{aligned} V_{PSD}^{(2)}(t) &= 2 \cdot V_{sig}(t) \cdot V_r \sin(\omega_r t + \theta_r + \pi/2) = \\ &= V_s V_r \cos(\theta_s - \theta_r - \pi/2) - V_s V_r \cos(2\omega_0 t + (\theta_s + \theta_r + \pi/2)). \end{aligned}$$

После прохождения сигналами фильтра низких частот получим постоянные составляющие, соответствующие синфазной и квадратурной компонентам разностного сигнала

$$X = \langle V_{PSD}^{(1)} \rangle = V_s V_r \cos(\theta_s - \theta_r) \quad \text{и} \quad Y = \langle V_{PSD}^{(2)} \rangle = V_s V_r \sin(\theta_s - \theta_r).$$

Можно перейти к амплитуде и фазе анализируемого сигнала

$$V_s = R = \sqrt{X^2 + Y^2} \quad \text{и} \quad \theta_s = \theta_r + \arctan Y/X.$$

Принцип синхронного детектирования (3)

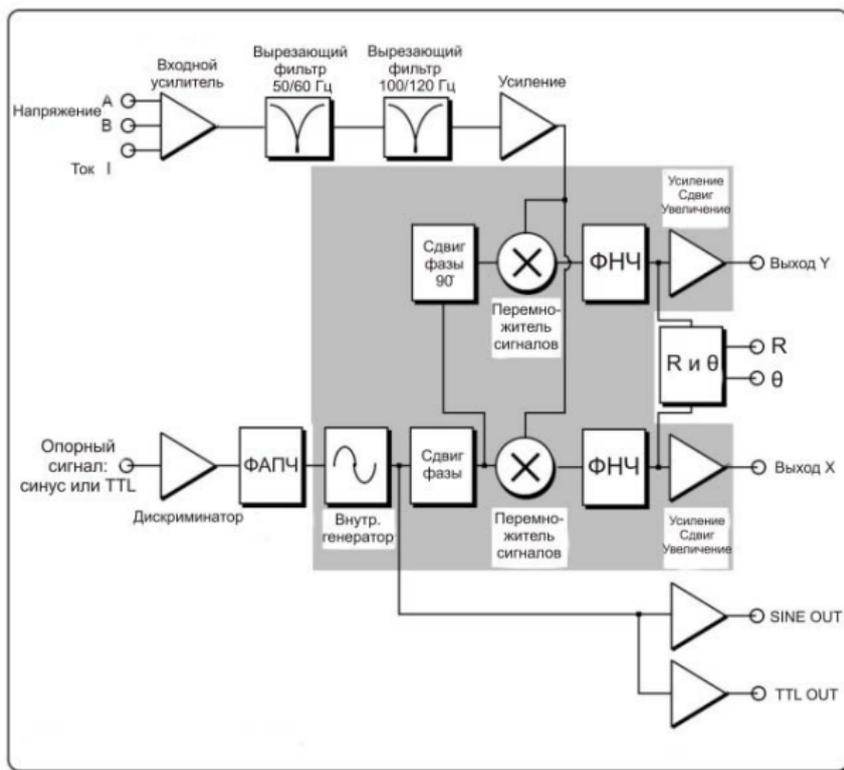
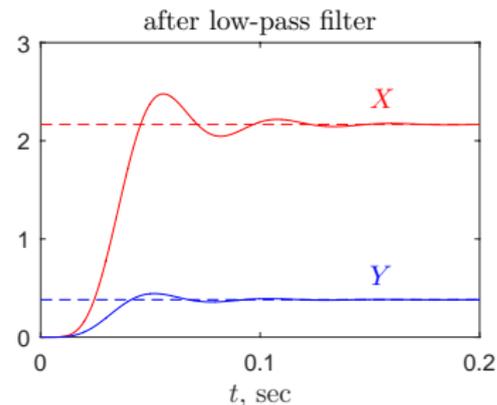
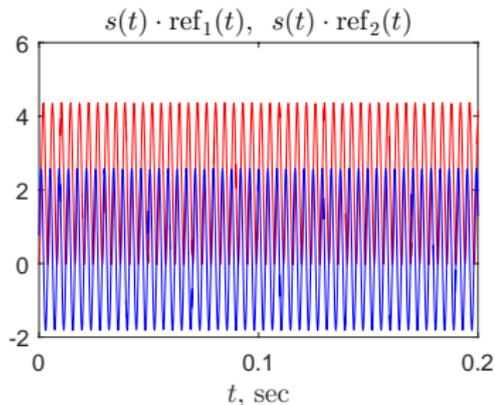
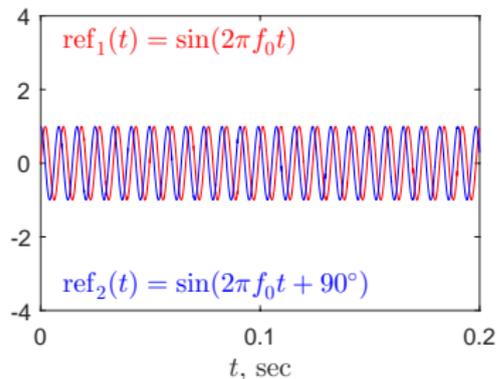
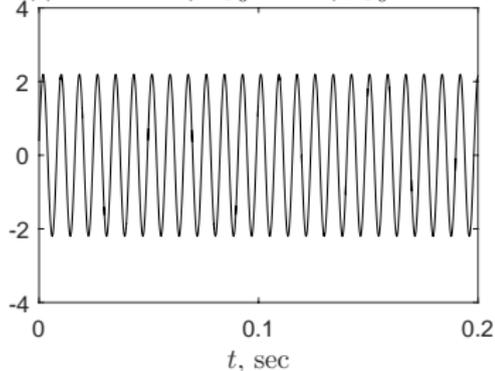


Схема взята из руководства пользователя синхронного усилителя Stanford Research SR830

Иллюстрация принципа синхронного детектирования (1)

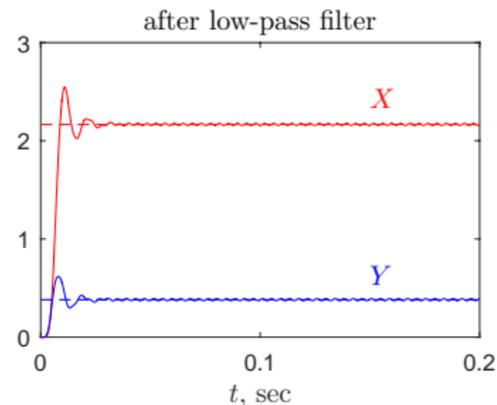
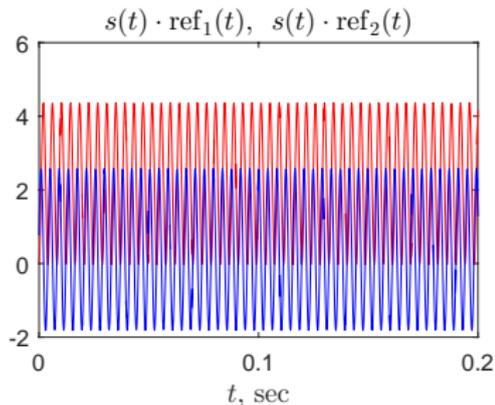
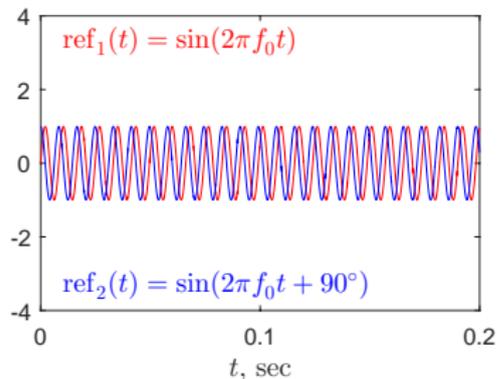
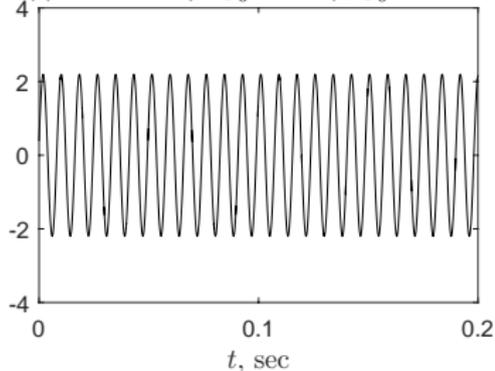
$$s(t) = 2.2 \cdot \sin(2\pi f_0 t + 10^\circ), \quad f_0 = 121 \text{ Hz}$$



Интенсивность шума: 0.0, полоса среза ФНЧ: 20 Гц $\Rightarrow A \approx 2.20 \pm 0.16$

Иллюстрация принципа синхронного детектирования (2)

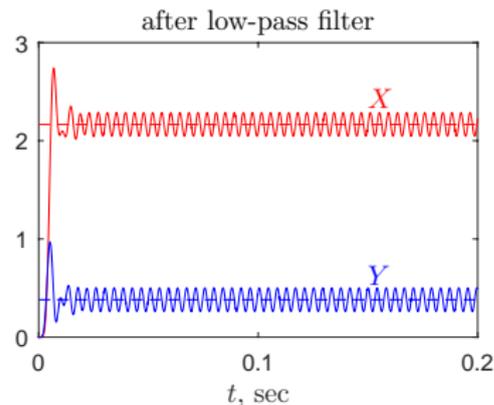
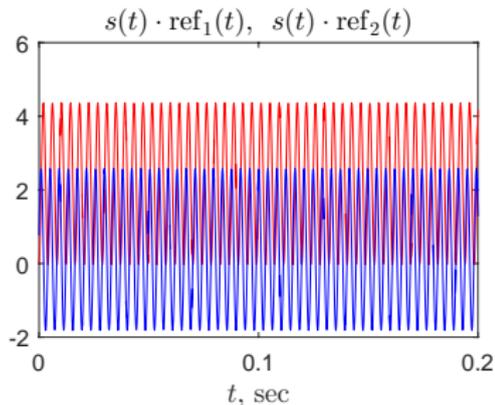
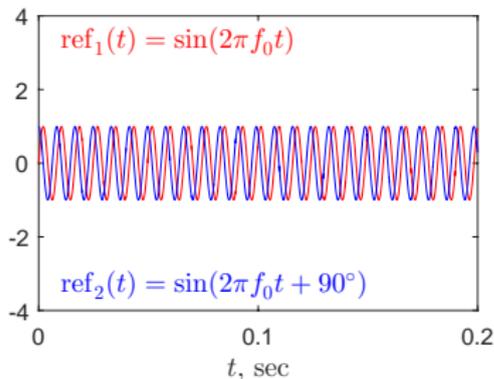
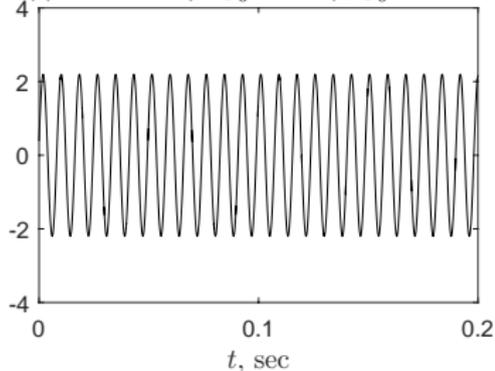
$$s(t) = 2.2 \cdot \sin(2\pi f_0 t + 10^\circ), \quad f_0 = 121 \text{ Hz}$$



Интенсивность шума: 0.0, полоса среза ФНЧ: 100 Гц $\implies A \simeq 2.20 \pm 0.07$

Иллюстрация принципа синхронного детектирования (3)

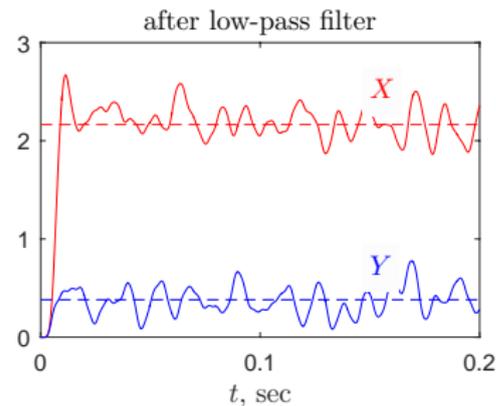
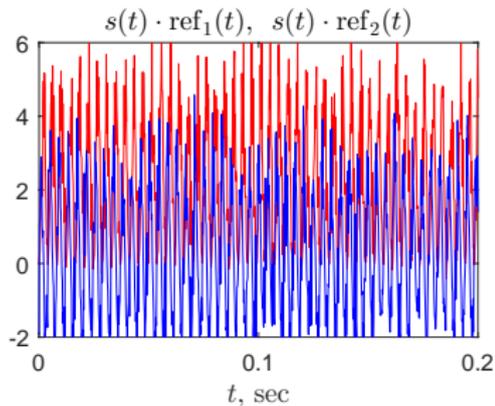
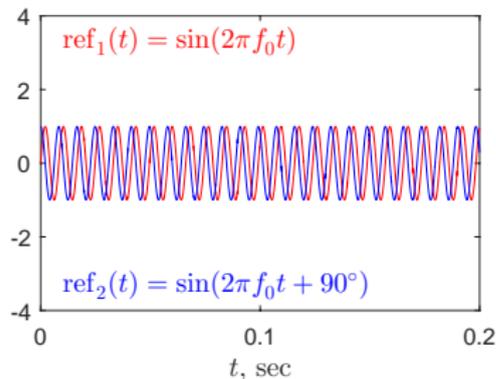
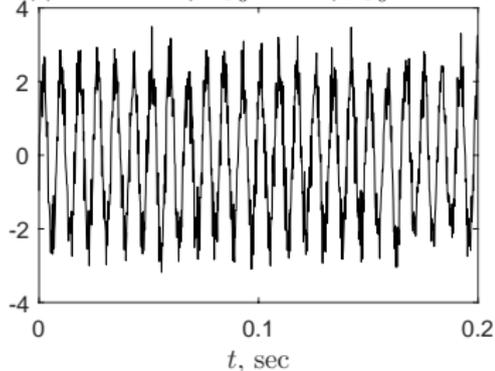
$$s(t) = 2.2 \cdot \sin(2\pi f_0 t + 10^\circ), \quad f_0 = 121 \text{ Hz}$$



Интенсивность шума: 0.0, полоса среза ФНЧ: 150 Гц $\implies A \simeq 2.20 \pm 0.10$

Иллюстрация принципа синхронного детектирования (4)

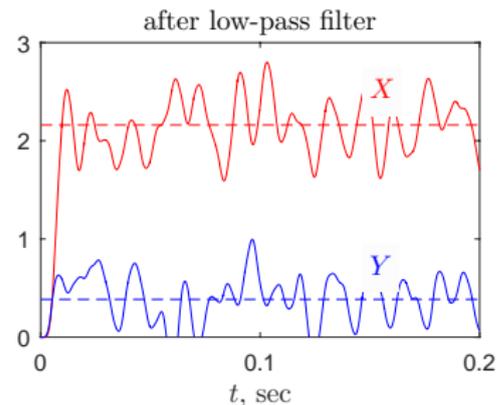
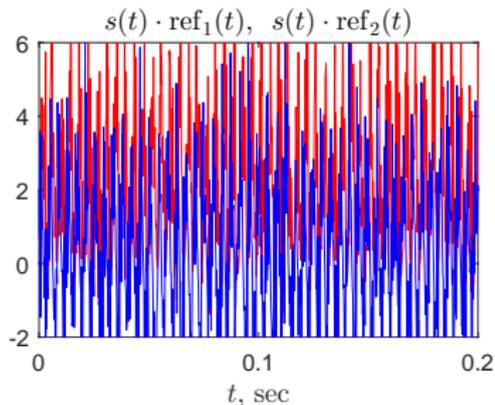
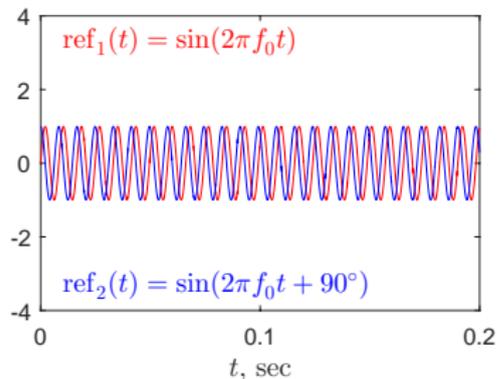
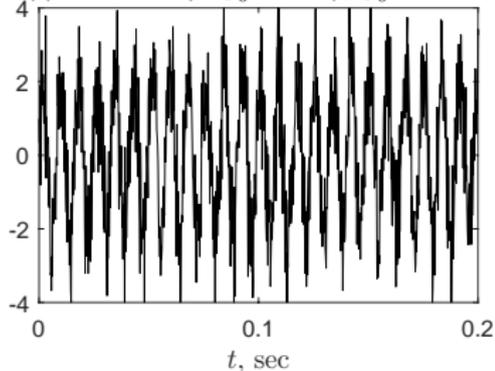
$$s(t) = 2.2 \cdot \sin(2\pi f_0 t + 10^\circ), \quad f_0 = 121 \text{ Hz}$$



Интенсивность шума: 0.5, полоса среза ФНЧ: 100 Гц $\implies A \simeq 2.20 \pm 0.16$

Иллюстрация принципа синхронного детектирования (5)

$$s(t) = 2.2 \cdot \sin(2\pi f_0 t + 10^\circ), \quad f_0 = 121 \text{ Hz}$$

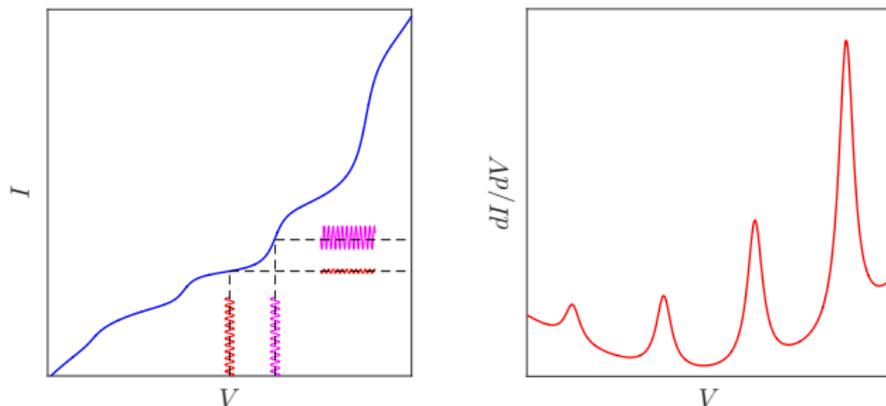


Интенсивность шума: 1.0, полоса среза ФНЧ: 100 Гц $\implies A \approx 2.21 \pm 0.29$

Синхронное детектирование и аппаратное дифференцирование

Single-point tunneling spectroscopy

Как правило, измерения статической локальной вольт-амперной ($I - V$) характеристики проводят при фиксированном положении иглы относительно поверхности образца.



Модуляционная методика: $V(t) = V_0 + V_1 \cdot \cos \omega t \implies I(t) = I_0 + I_1 \cdot \cos(\omega t + \gamma)$

$$I_1 \simeq V_1 \cdot \left(\frac{dI}{dV} \right)_{V_0}$$

Зависимость амплитуды осцилляций туннельного тока от среднего напряжения может быть исследована параллельно с измерением вольт-амперной характеристики с помощью синхронного детектора (lock-in amplifier) на частотах от 100 Гц до 15 кГц.

Лекция 5

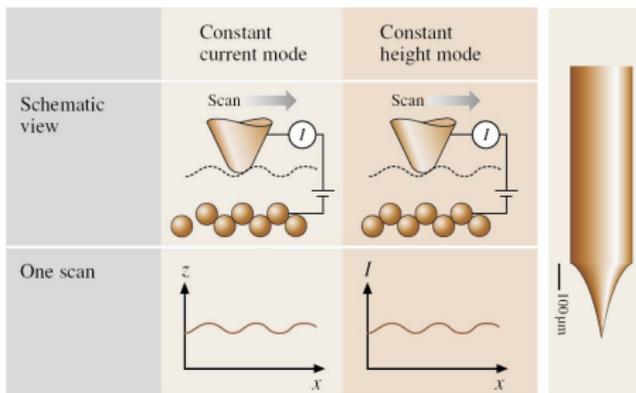
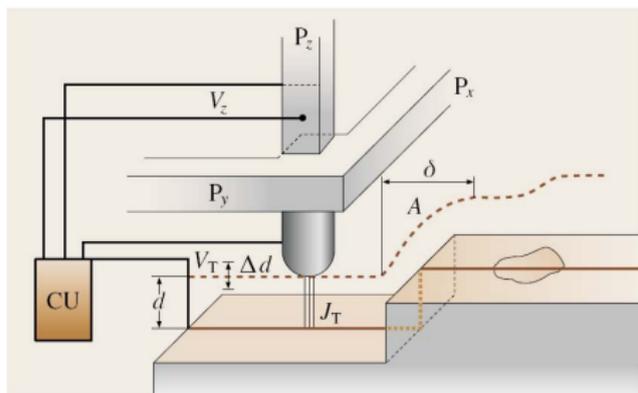
Основные методы обработки двумерных изображений

Автоматическое распознавание образов и анализ объектов на поверхности

Рекомендуемая литература:

Р. Гонсалес, Р. Вудс, С. Эддинс, *Цифровая обработка изображений в среде Matlab*. Москва: Техносфера, 2006. – 616 с.

Сканирующая туннельная микроскопия и спектроскопия



Сканирующая туннельная микроскопия в режиме заданного тока

сигнал обратной связи, изменяющий фактическую высоту иглы над поверхностью образца, интерпретируется как топографическое изображение поверхности $z(x, y) @ I = I_0$

Сканирующая туннельная микроскопия в режиме заданной высоты (применяется редко)

карта тока $I(x, y) @ z = z_0$

Туннельная спектроскопия в заданной точке

вольт-амперная характеристика $I(V)$ и дифференциальная туннельная проводимость dI/dV в фиксированной точке $x = x_0, y = y_0, z = z_0$

Сканирующая туннельная спектроскопия

топография $z(x, y)$ и карта дифференциальной туннельной проводимости $dI/dV(x, y)$ на заданной энергии $V = V_0$ и заданной высоте

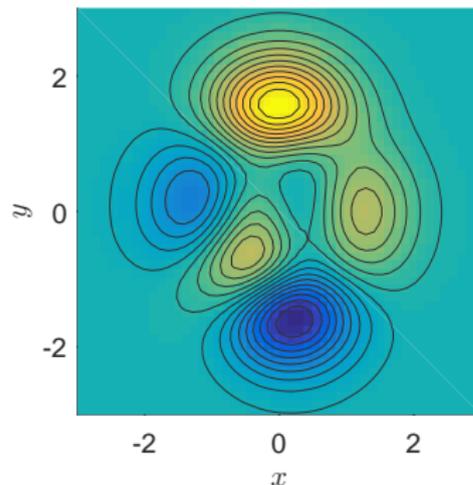
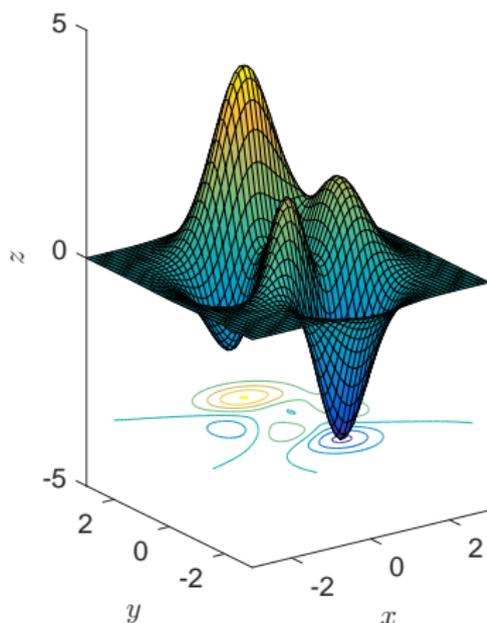
Основные формы представления функций двух переменных $z(x, y)$

Основные функции в Matlab:

`surf(x, y, z)` и `surfc(x, y, z)` – построение трёхмерной поверхности (в т.ч. с линиями уровня),

`contour(x, y, z)` и `contourf(x, y, z)` – построение линий уровня (в т.ч. с заполнением)

`image(x, y, z)` и `imagesc(x, y, z)` – построение двумерной цветовой карты

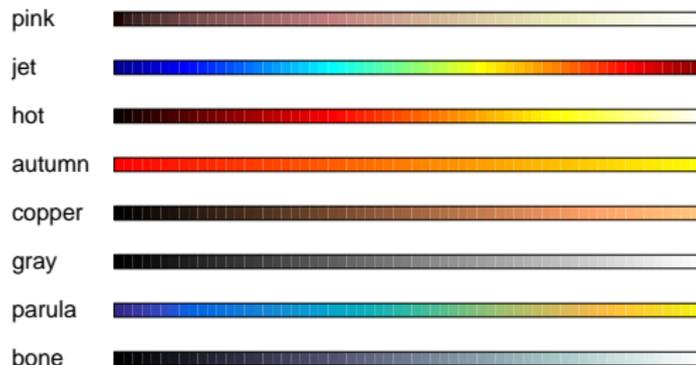


Цветовое кодирование информации (1)

Цвета в RGB-палитре задаются трехкомпонентным вектором вида $[R, G, B]$

Примеры кодирования цветов: $[0, 0, 0]$ – чёрный, $[1, 0, 0]$ – красный, $[0.5, 0, 0]$ – тёмно-красный, $[0, 1, 0]$ – ярко-зелёный, $[0, 0.5, 0]$ – тёмно-зелёный, $[0, 0, 1]$ – голубой, $[0, 0, 0.5]$ – синий, $[1, 0, 1]$ – ярко-пурпурный, $[0.7, 0, 0.7]$ – тёмно-пурпурный, $[1, 1, 0]$ – ярко-жёлтый, $[0.6, 0.6, 0]$ – тёмно-жёлтый, $[0, 1, 1]$ – циан (цвет морской волны), $[1, 1, 1]$ – белый и т. д.

Примеры стандартных цветовых палитр в Matlab



```
Colormap_pink = [ 0.11 0.00 0.00,  
                 0.19 0.10 0.10,  
                 ...  
                 1.00 1.00 1.00 ]
```

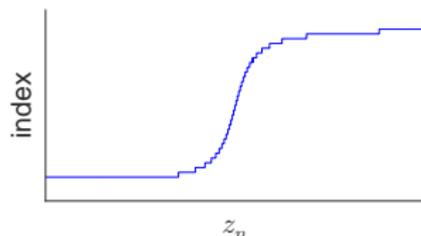
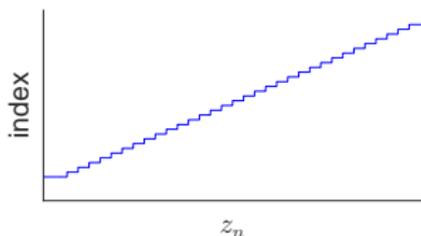
Цветовое кодирование информации (2)

Можно задать любую цветовую схему



Важно помнить: не все цветовые схемы одинаково хороши в цветном и чёрно-белом варианте

Правило преобразования значений функции в цветовую шкалу ($z_n \rightarrow index$) может быть линейным или нелинейным



Пример линейного преобразования вектора значений z_n в цветовую шкалу для N -мерной цветовой палитры

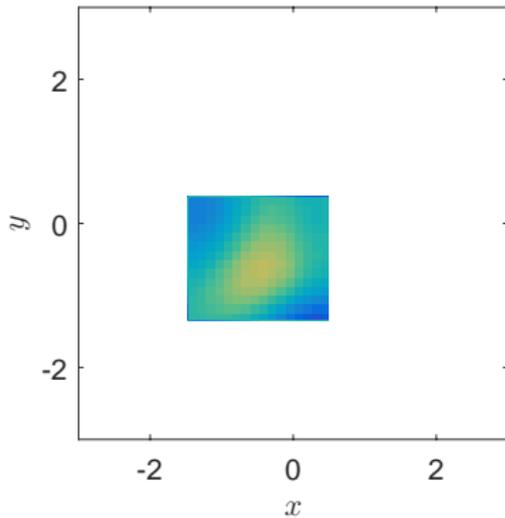
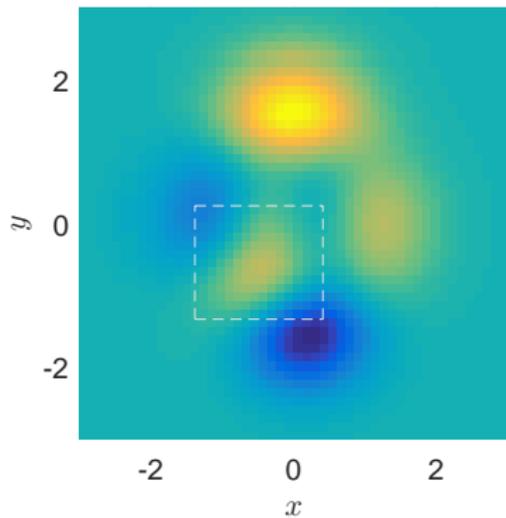
$$index = \begin{cases} 1 & z_n < z_{\min} \\ 1 + (N - 1) \cdot (z_n - z_{\min}) / (z_{\max} - z_{\min}) & z_{\min} \leq z_n \leq z_{\max} \\ N & z_n > z_{\max} \end{cases}$$

Интерактивное выделение объектов мышкой

Запрос параметров выделенной области прямоугольной формы

Функция в Matlab: `output = getrect()`

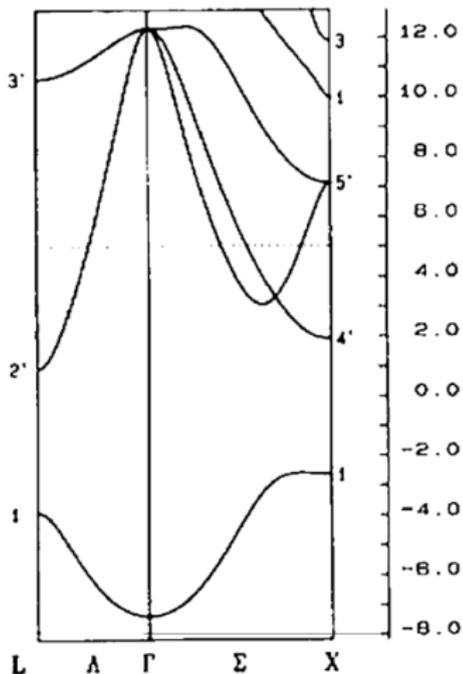
Структура выходных данных: `output = [x0 y0 width height]`,
где x_0 и y_0 – координаты левого нижнего угла, *width* и *height* – ширина и высота области



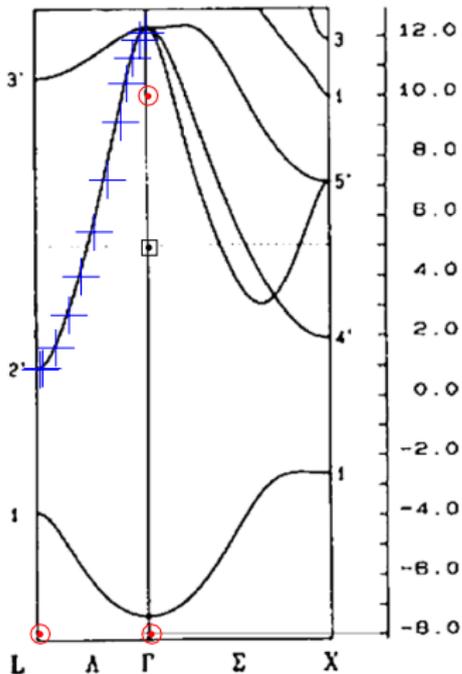
После однократного щелчка выделяется область нулевой ширины и высоты – т.е. точка

Ручная оцифровка «чужих» графиков (1)

Оригинальный график (кривой):
электронный спектр для объёмного Рb

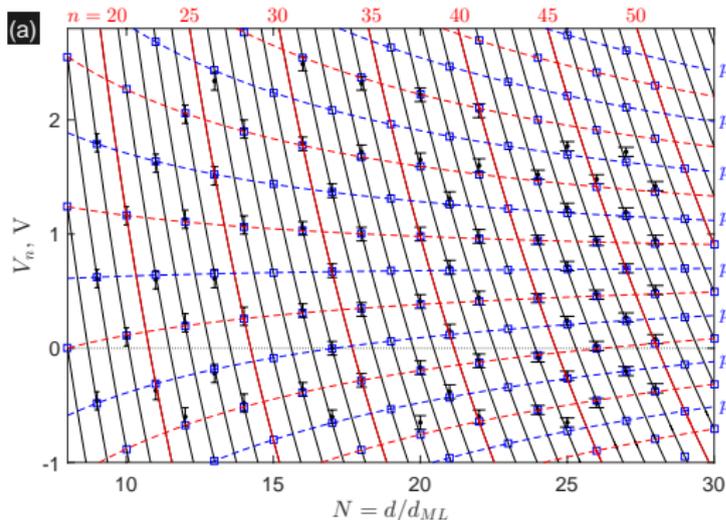


После ручного выбора
реперных точек и точек на графике



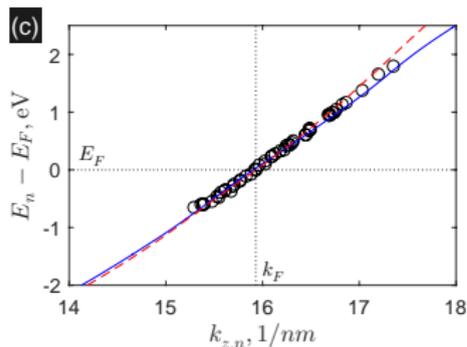
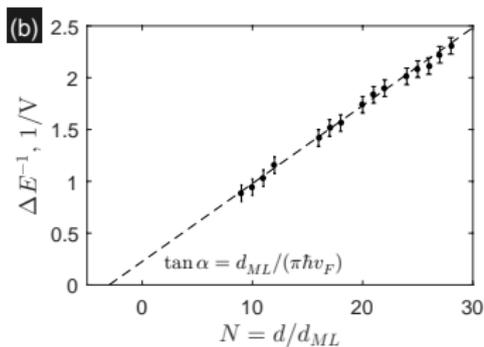
Papaconstantopoulos, *Handbook of the band structure of elemental solids. From Z = 1 to Z = 112*. Springer, 2nd ed. – 2015. – 655 p.

Ручная оцифровка «чужих» графиков (2)



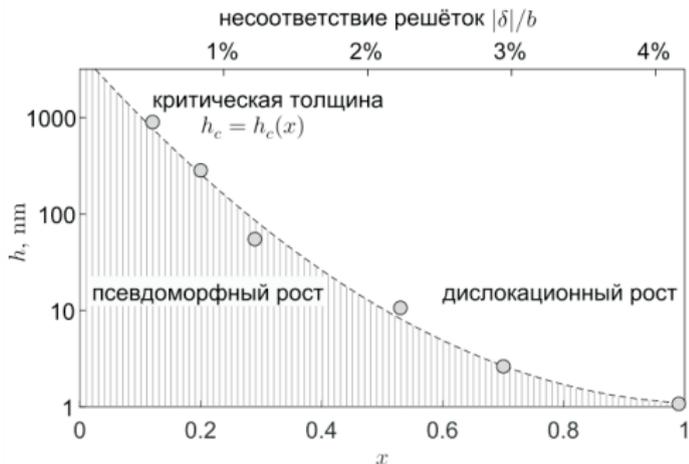
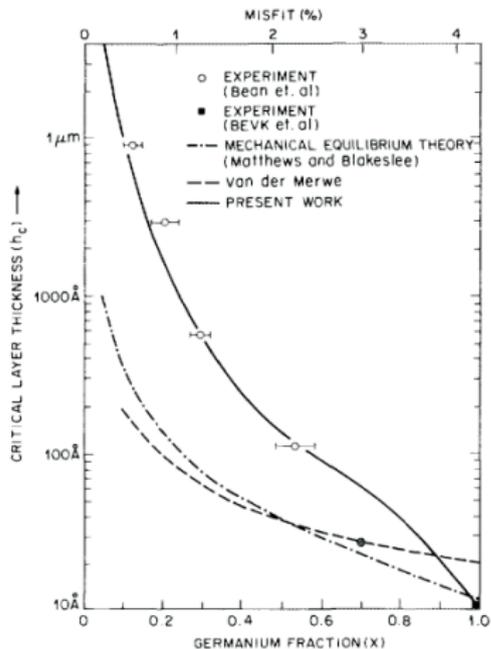
Сопоставление экспериментального спектра для Pb(111), полученного методом LT-STs, с «чужими» теоретическими расчетами (пунктирная и сплошная линии на рисунке с)

Уставщиков, Путилов, Аладышкин, Туннельная интерферометрия и измерение толщины ультратонких металлических плёнок Pb(111) // Письма в ЖЭТФ, т. 106, 476-482 (2017).



Ручная оцифровка «чужих» графиков (3)

Подготовка иллюстраций для диссертаций, обзоров или учебников



R. People and J. C. Bean, *Calculation of critical layer thickness versus lattice mismatch for $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ strained layer heterostructures* // Appl. Phys. Lett., vol. 47, 322 (1985); Appl. Phys. Lett., vol. 49, 229 (1986).

Ручная оцифровка «чужих» графиков (4)

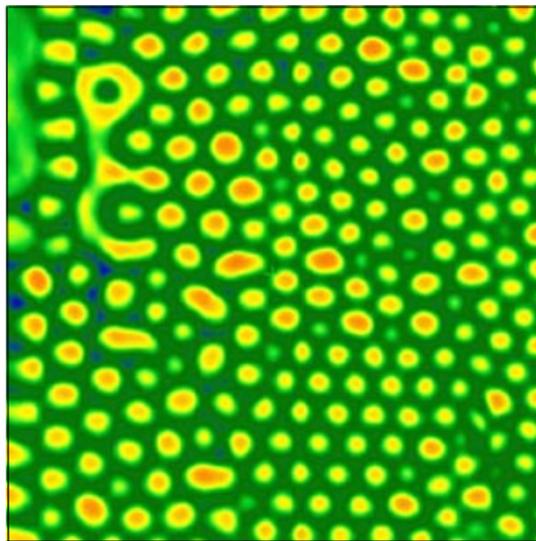
Доменная структура в плёнке железо-иттриевого граната (YIG), размер кадра $31 \times 31 \text{ мкм}^2$
(изображение взято с сайта <https://www.nt.mdt-si.ru/resources/scan-gallery>)

Пример импорта двумерных изображений:

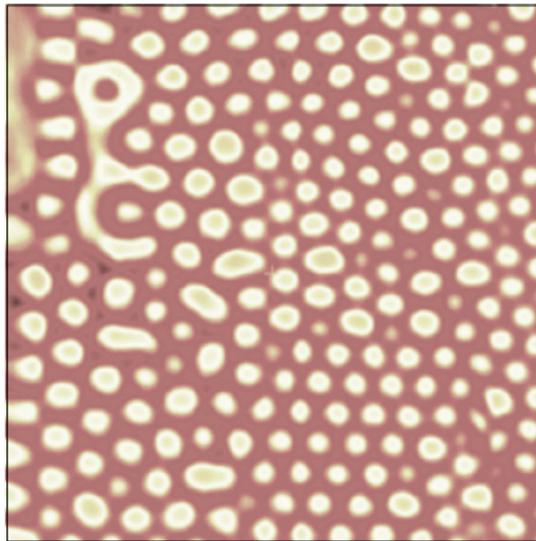
`Image_RGB = imread('Image_original.jpg')` и `Image_grayscale = rgb2gray(Image_RGB)`

преобразование $Z = 0.2989 \cdot R + 0.5870 \cdot G + 0.1140 \cdot B$

Оригинальный график



Импортированные данные



Устранение глобального наклона: вычитание прямой или плоскости (1)

Пусть $z = z(x, y)$ – исходное искаженное топографическое изображение.

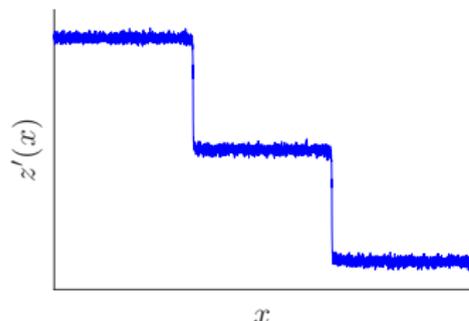
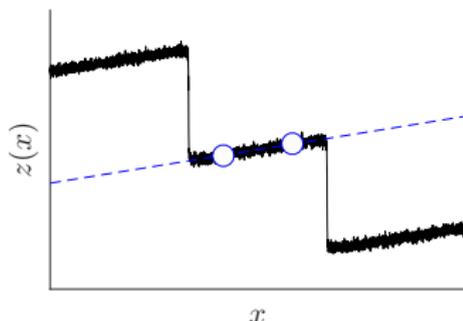
Пусть $z_{app} = ax + by + c$ – аппроксимирующая плоскость, проходящая через точки (x_1, y_1, z_1) , (x_2, y_2, z_2) и (x_3, y_3, z_3)

Решение системы уравнений для двумерного случая

$$a = \frac{(z_1 - z_3) \cdot (y_2 - y_3) - (z_2 - z_3) \cdot (y_1 - y_3)}{(x_1 - x_3) \cdot (y_2 - y_3) - (x_2 - x_3) \cdot (y_1 - y_3)}$$

$$b = \frac{(z_2 - z_3) \cdot (x_1 - x_3) - (z_1 - z_3) \cdot (x_2 - x_3)}{(x_1 - x_3) \cdot (y_2 - y_3) - (x_2 - x_3) \cdot (y_1 - y_3)} \quad \text{и} \quad c = z_3 - a \cdot x_3 - b \cdot y_3$$

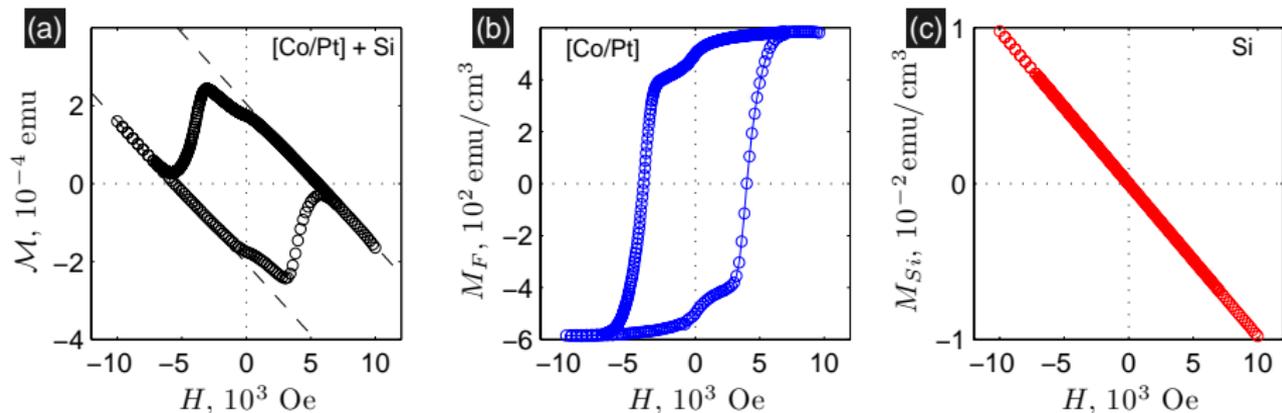
Исправленное топографическое изображение $z' = z(x, y) - (a \cdot x + b \cdot y + c)$



Устранение глобального наклона: вычитание прямой или плоскости (2)

Устранять наклон требуется не только при обработке топографических изображений

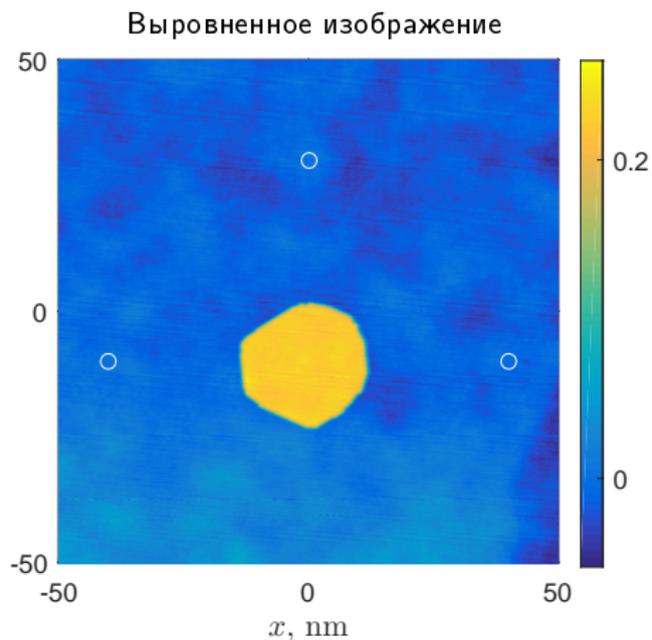
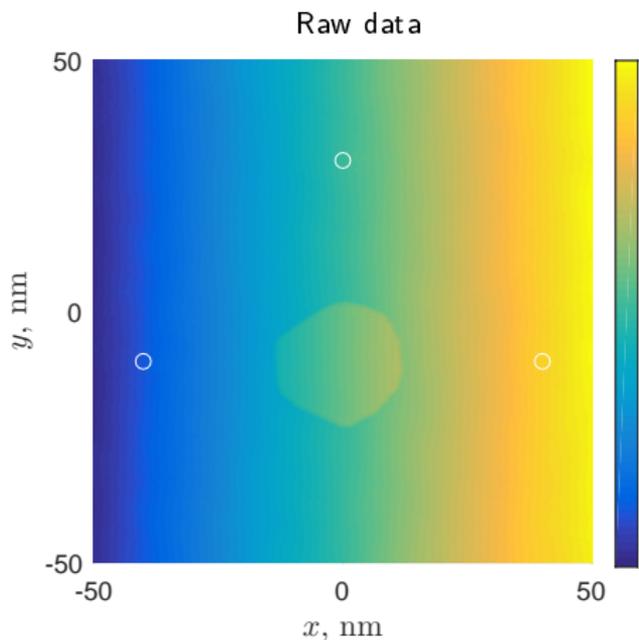
Типичная процедура обработки результатов SQUID-магнитометрии



Линейный наклон зависимости намагниченности M от внешнего магнитного поля H обусловлен диамагнитной реакцией Si подложки (восприимчивость $\chi \simeq -3 \times 10^{-6}$).

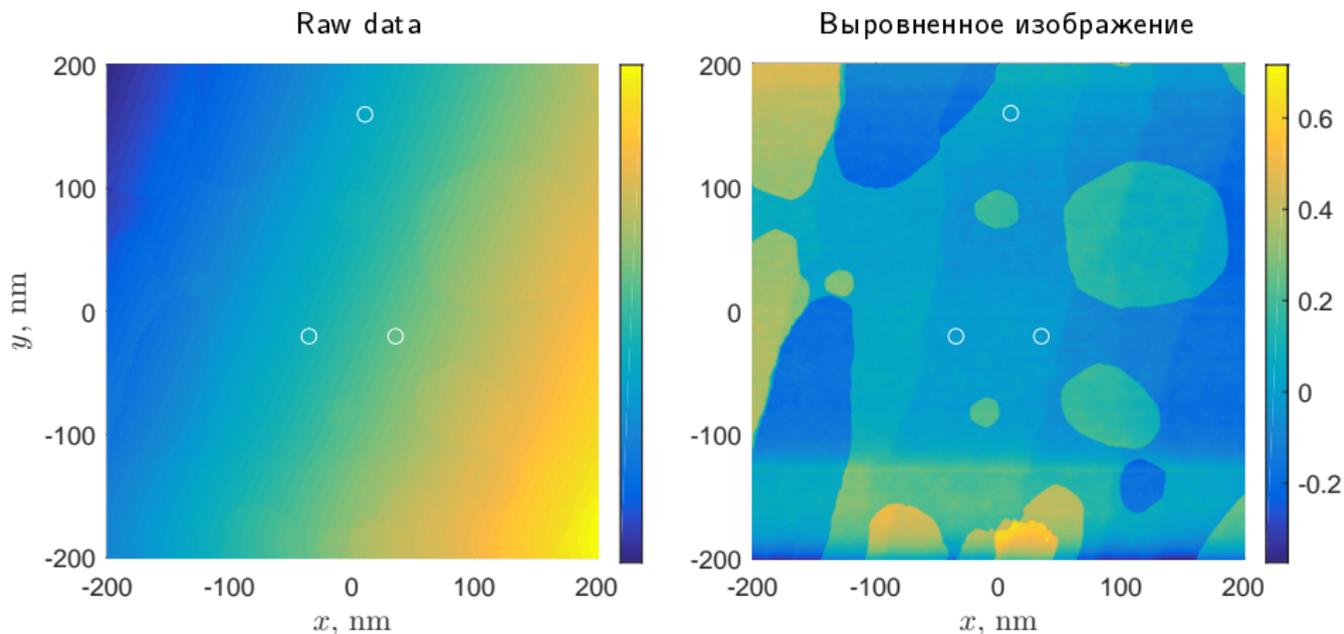
Устранение глобального наклона: вычитание прямой или плоскости (3)

Террасы на поверхности Pb(111)/Si(111) 7×7



Устранение глобального наклона: вычитание прямой или плоскости (4)

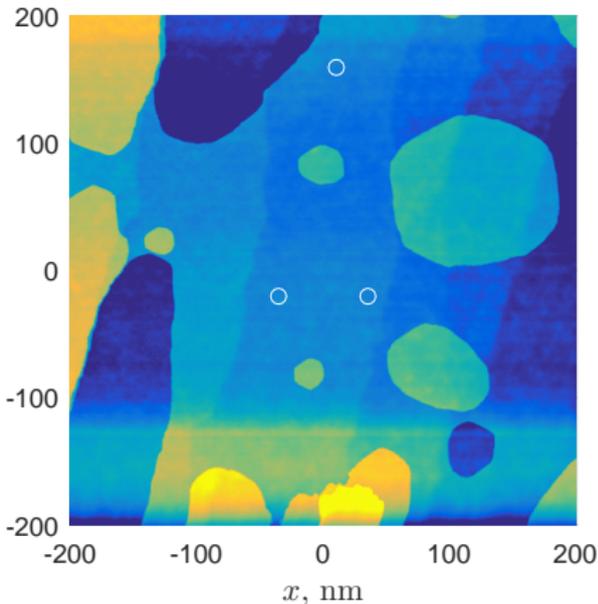
Террасы на поверхности Pb(111)/Si(111) 7×7



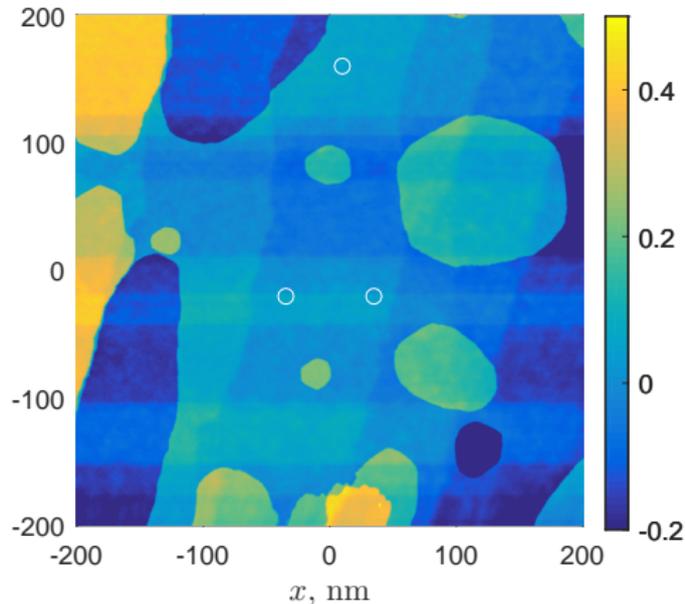
Простое вычитание плоскости не всегда может устранить аппаратные артефакты топографического изображения, связанные с крипом и нелинейностью пьезосканера (особенно для продолжительных измерений)

Выравнивание по рядам (linewise correction) (1)

Выровненное изображение 1



Выровненное изображение 2



Оценка медианного значения для каждой линии вдоль направления быстрого сканирования

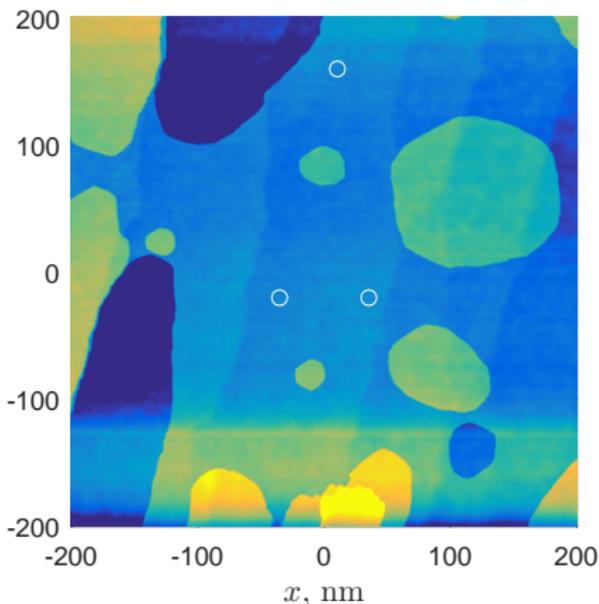
$$\Delta z(y_n) = \text{median} \left(z(x, y_n) \right)_{y_n = \text{const}}$$

Выровненное изображение

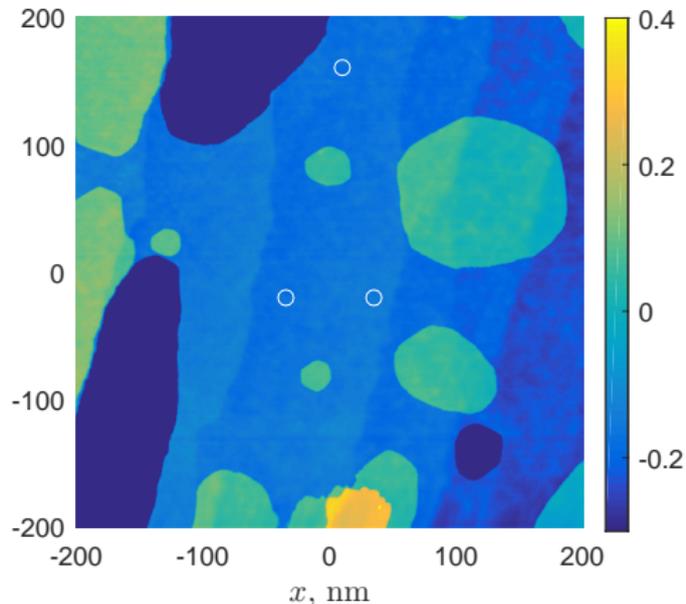
$$z'(x, y_n) = z(x, y_n) - \Delta z(y_n)$$

Выравнивание по рядам (linewise correction) (2)

Выровненное изображение 1



Выровненное изображение 2



Оценка разницы высот для каждой линии вдоль направления быстрого сканирования

$$\delta z(x, y_n) = z(x, y_{n+1}) - z(x, y_n)$$

Выровненное изображение

$$z'(x, y_n) = z(x, y_n) - \sum_{m=1}^n \text{median}(\delta z(x, y_m))$$

Наклон поверхности и ориентация плотноупакованных граней (фасеток) (1)

Каноническое уравнение плоскости $A \cdot x + B \cdot y + C \cdot z + D = 0$

Уравнение аппроксимирующей плоскости $z = a \cdot x + b \cdot y + c$

Коэффициенты: $A = a$, $B = b$, $C = -1$ и $D = c$

Единичный вектор внешней нормали:

$$\begin{aligned} \mathbf{n} &= \frac{-A}{\sqrt{A^2 + B^2 + C^2}} \mathbf{e}_x + \frac{-B}{\sqrt{A^2 + B^2 + C^2}} \mathbf{e}_y + \frac{-C}{\sqrt{A^2 + B^2 + C^2}} \mathbf{e}_z = \\ &= \frac{-a}{\sqrt{a^2 + b^2 + 1^2}} \mathbf{e}_x + \frac{-b}{\sqrt{a^2 + b^2 + 1^2}} \mathbf{e}_y + \frac{1}{\sqrt{a^2 + b^2 + 1^2}} \mathbf{e}_z. \end{aligned}$$

Направляющие косинусы:

$$\cos \alpha = \frac{-a}{\sqrt{a^2 + b^2 + 1^2}}, \quad \cos \beta = \frac{-b}{\sqrt{a^2 + b^2 + 1^2}}, \quad \cos \gamma = \frac{1}{\sqrt{a^2 + b^2 + 1^2}}.$$

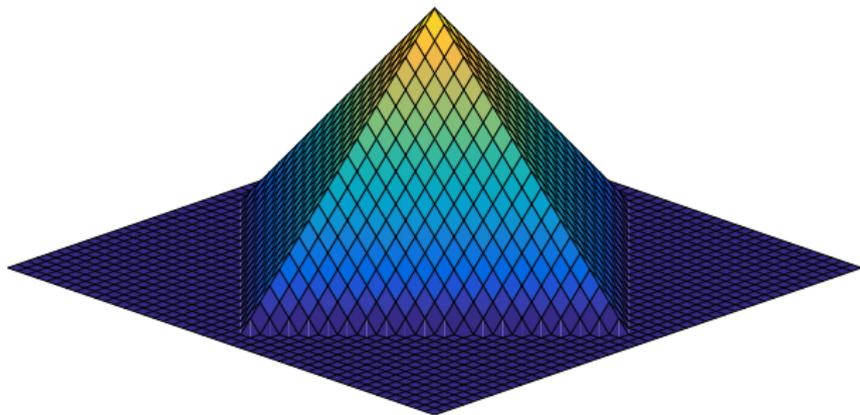
Угол между двумя плоскостями с векторами \mathbf{n}_1 и \mathbf{n}_2

$$\cos \theta = (\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2).$$

Наклон поверхности и ориентация плотноупакованных граней (фасеток) (2)

Пример: кристалл с плоскостями типа $\{111\}$

Уравнение поверхности: $z = 1 - |x| - |y|$



Уравнение нормалей для всех граней: $\mathbf{n} = \pm \mathbf{e}_x / \sqrt{3} \pm \mathbf{e}_y / \sqrt{3} + \mathbf{e}_z / \sqrt{3}$.

Угол между нормальными противоположных граней: $\cos \varphi = (\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2) = -1/3 - 1/3 + 1/3 = -1/3$,
поэтому $\varphi = \arccos(-1/3) = 109.5^\circ$

Угол между плоскостями: $180^\circ - 109.5^\circ = 70.5^\circ$

Устранение глобального наклона: поворот в трёхмерном пространстве (1)

Альтернативный подход: поворот вместо вычитания

Пусть $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ – вектор нормали для аппроксимирующей плоскости, тогда $\gamma = \arccos n_z$.

Пусть ось вращения задана единичным вектором $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$, тогда матрица преобразования имеет вид

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} \cos \gamma + v_x^2 (1 - \cos \gamma) & v_x v_y (1 - \cos \gamma) - v_z \sin \gamma & v_x v_z (1 - \cos \gamma) + v_y \sin \gamma \\ v_x v_y (1 - \cos \gamma) + v_z \sin \gamma & \cos \gamma + (1 - \cos \gamma) v_y^2 & v_y v_z (1 - \cos \gamma) - v_x \sin \gamma \\ v_x v_z (1 - \cos \gamma) - v_y \sin \gamma & v_y v_z (1 - \cos \gamma) + v_x \sin \gamma & \cos \gamma + (1 - \cos \gamma) v_z^2 \end{pmatrix}$$

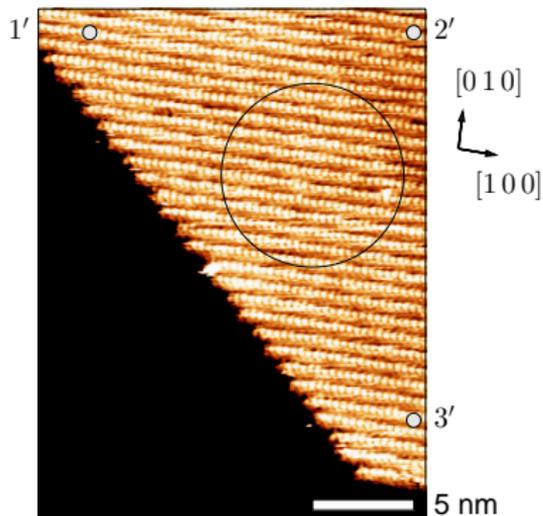
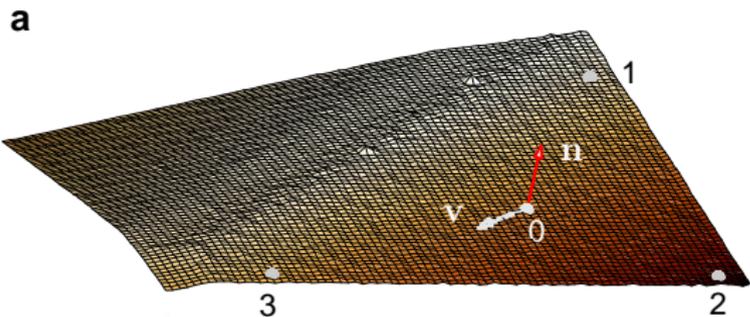
Для оси вращения, параллельной оси x , имеем $v_x = 1$, $v_y = 0$ и $v_z = 0$, поэтому

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \gamma & -\sin \gamma \\ 0 & \sin \gamma & \cos \gamma \end{pmatrix}$$

Устранение глобального наклона: поворот в трёхмерном пространстве (2)

Кристаллиты оксидированной меди с поверхностями типа $\{1\ 1\ 4\}$:

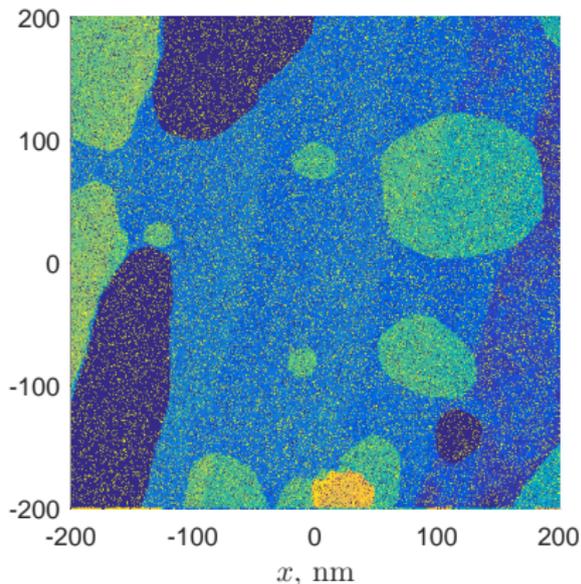
наклон порядка 15° по отношению к плоскости сканирования



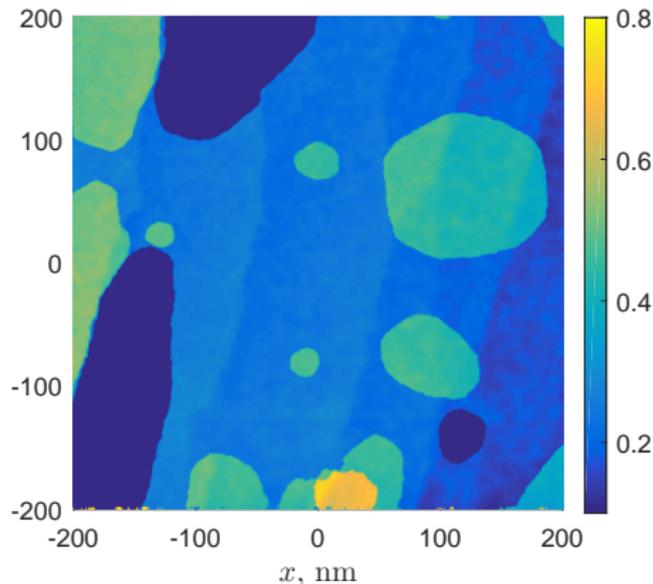
Aladyshkin, Chaika, unpublished (2024)

Медианная фильтрация зашумленных изображений

Зашумленное изображение



Улучшенное изображение



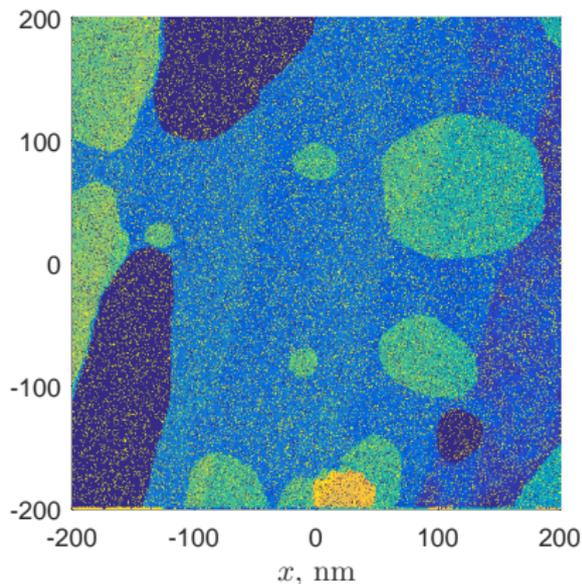
Добавляем к изображению шум типа «соль и перец»: $B = \text{imnoise}(A, \text{'salt \& pepper'}, 0.2)$.

Медианная фильтрация в пределах окна шириной W_x и W_y : $C = \text{medfilt2}(B, [W_x, W_y])$.

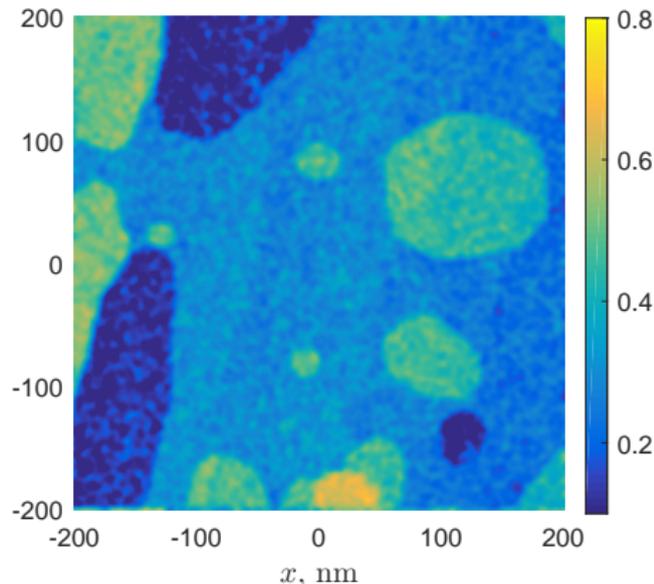
Пример обработки: медианная фильтрация в пределах окна 5×5

Гауссова фильтрация зашумленных изображений (1)

Зашумленное изображение



Улучшенное изображение



Добавляем к изображению шум типа «соль и перец»: $B = \text{imnoise}(A, \text{'salt \& pepper'}, 0.1)$.

Гауссова фильтрация в пределах окна шириной W : $C = \text{imgaussfilt}(B, W)$.

Пример обработки: гауссова фильтрация (blurring) в пределах окна шириной 3 пиксела

Гауссова фильтрация зашумленных изображений (2)

см. также лекцию 2

Пусть $z(x, y)$ – исходное зашумленное изображение, содержащее мелкомасштабные шумы.

Рассмотрим гауссову функцию с центром в точке x', y'

$$G_{\sigma}(x - x', y - y') = \frac{1}{(\sqrt{2\pi} \sigma)^2} \exp\left(-\frac{(x - x')^2}{2\sigma^2} - \frac{(y - y')^2}{2\sigma^2}\right),$$

где σ – стандартное отклонение (ширина фильтра).

Сглаженное изображение (blurring)

$$z_{filt}(x, y) = \iint z(x', y') G_{\sigma}(x - x', y - y') dx' dy'.$$

Фурье-образ от свёртки представляет собой произведение фурье-образов интегрируемых функций

$$\hat{z}_{filt}(k_x, k_y) = \hat{z}(k_x, k_y) \cdot \hat{G}_{\sigma}(k_x, k_y)$$

или

$$\hat{z}_{filt}(k_x, k_y) = \hat{z}(k_x, k_y) \cdot \exp\left(-\frac{|k|^2 \sigma^2}{2}\right), \text{ где } |k| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \text{ – модуль волнового вектора.}$$

За счёт множителя $e^{-|k|^2 \sigma^2 / 2}$ в спектре сглаженной функции будут подавлены высокочастотные шумы ($|k| \sigma \gg 1$), которые присутствуют в спектре исходной функции.

Выделение вклада кристаллической структуры на фоне шумов и глобального наклона образца (1)

Рассмотрим разность двух сглаженных изображений с разными параметрами сглаживания σ_1 и $\sigma_2 > \sigma_1$

$$D(x, y) = \iint z(x', y') \cdot \frac{1}{(\sqrt{2\pi}\sigma_1)^2} \exp\left(-\frac{(x-x')^2}{2\sigma_1^2} - \frac{(y-y')^2}{2\sigma_1^2}\right) dx' dy' - \iint z(x', y') \cdot \frac{1}{(\sqrt{2\pi}\sigma_2)^2} \exp\left(-\frac{(x-x')^2}{2\sigma_2^2} - \frac{(y-y')^2}{2\sigma_2^2}\right) dx' dy'.$$

Фурье-спектр разностного сигнала может быть записан в виде

$$\hat{D}(k_x, k_y) = \hat{z}(k_x, k_y) \cdot \exp\left(-\frac{|k|^2\sigma_1^2}{2}\right) - \hat{z}(k_x, k_y) \cdot \exp\left(-\frac{|k|^2\sigma_2^2}{2}\right) \simeq \hat{z}(k_x, k_y) \cdot \begin{cases} |k|^2(\sigma_2^2 - \sigma_1^2)/2 & \text{при } |k|\sigma_{1,2} \ll 1; \\ \exp(-|k|^2\sigma_1^2/2) & \text{при } |k|\sigma_1 \gtrsim 1. \end{cases}$$

Следовательно, операция вычисления разности двух сглаженных изображений (difference-of-gaussians) эквивалентна фильтрации высокочастотных шумов и вычислению лапласиана от сглаженного изображения

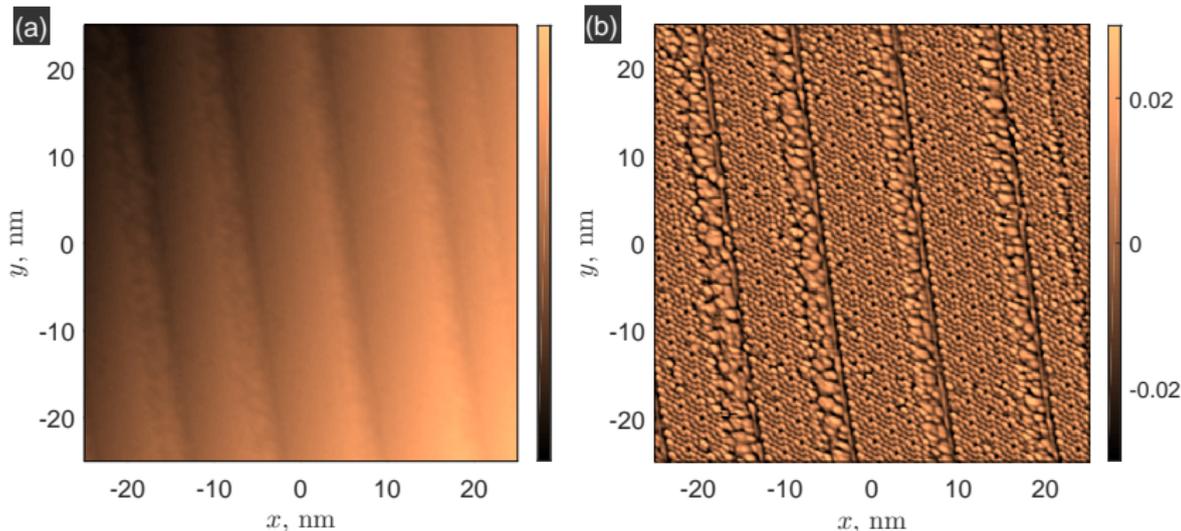
$$D(x, y) \propto -\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) z_{filt}(x, y).$$

Выделение вклада кристаллической структуры на фоне шумов и глобального наклона образца (2)

Анализ двумерных распределений

$$D(x, y) \propto - \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) z_{\text{filt}}(x, y).$$

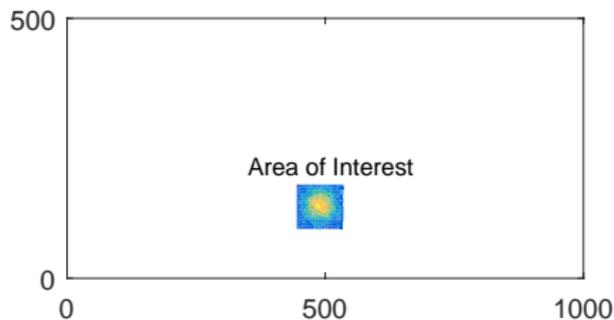
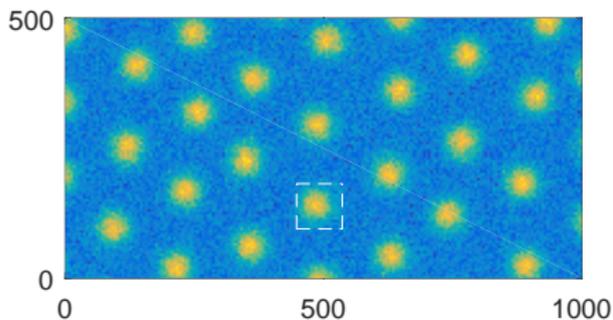
Поверхность Si(5 5 6) (размер кадра $40 \times 40 \text{ нм}^2$, $\sigma_1 = 0.5 \text{ пкс}$, $\sigma_2 = 2 \text{ пкс}$):



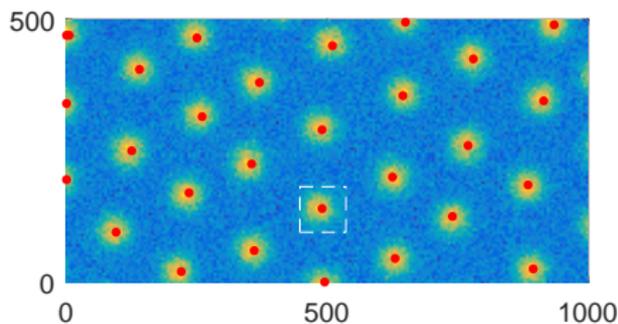
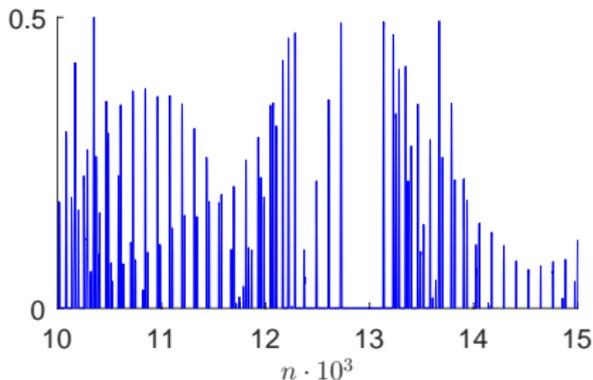
Aladyshkin, Chaika, unpublished (2024)

Поиск заданных объектов на изображениях

Исходное изображение – зашумлённая карта дифференциальной проводимости $z(x, y)$, соответствующая искаженной гексагональной вихревой решётке



Вычисление кросс-корреляционной функции: $output = \text{normxcorr2}(z_{AOI}, z)$;



«Улучшение изображений» с помощью оператора Лапласа: одномерный случай

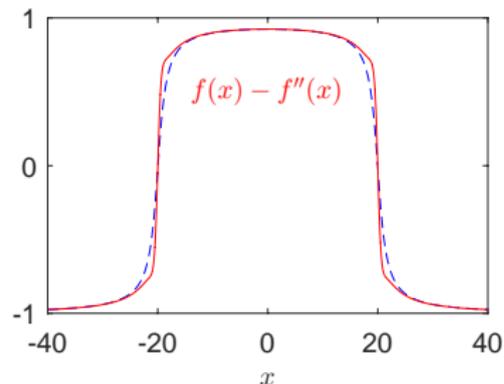
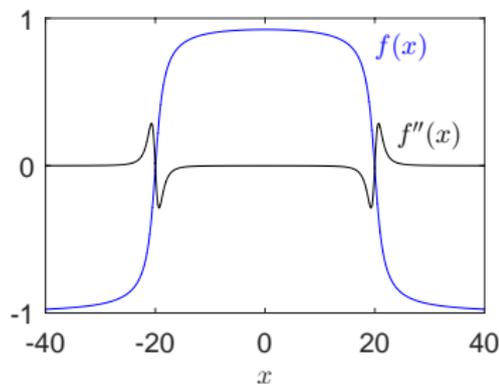
Идея увеличения резкости для непрерывной функции: $f(x) \rightarrow f(x) - f''(x)$.

Для функции на сетке имеем

$$f_n \rightarrow f_n - \frac{(f_{n-1} - 2f_n + f_{n+1}))}{(\Delta x)^2}$$

Вычисление второй производной с помощью матрицы $w = [1, -2, 1]$:

$$B = \text{imfilter}(A, w, 'replicate') / (\Delta x)^2$$



«Улучшение изображений» с помощью оператора Лапласа: двумерный случай

Фильтрующая маска для вычисления второй производной на сетке

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & -4 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{или} \quad \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -8 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Фильтрация изображения: $B = A - \text{imfilter}(A, w, 'replicate')$

Исходное изображение



Улучшенное изображение

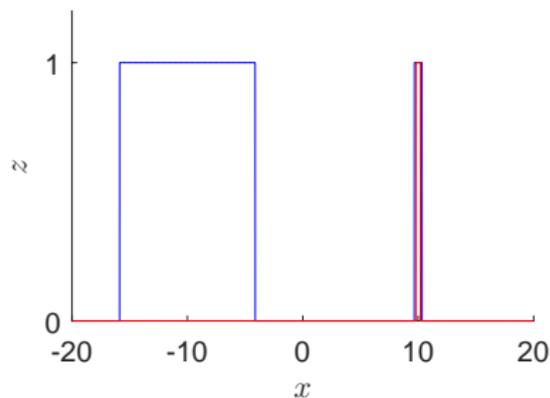
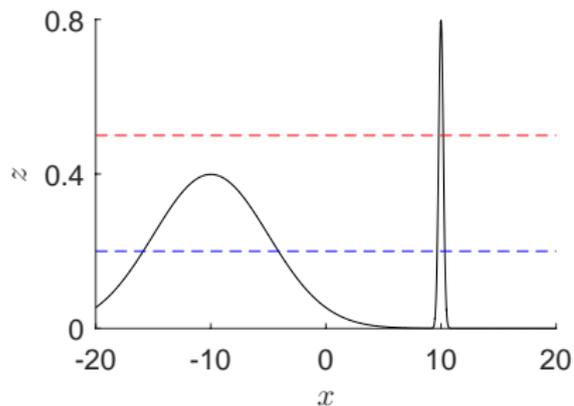


Перевод изображения в двоичный формат (1)

Перевод изображения в двоичный формат, состоящий из нулей и единиц, позволяет провести более глубокий морфологический анализ, используя стандартные функции.

Пример: переход от одномерного полутонового (gray-scale) изображения к двоичному (binary) изображению

```
if  $z(n) \geq \text{threshold}$   
     $\text{image\_bw}(n) = 1$   
else  
     $\text{image\_bw}(n) = 0$   
end
```

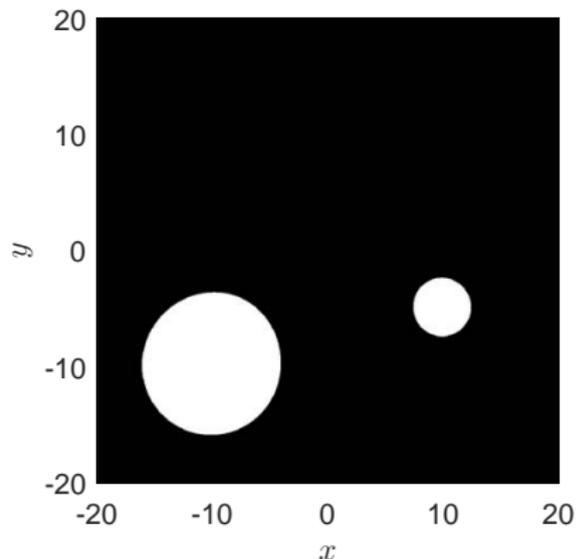
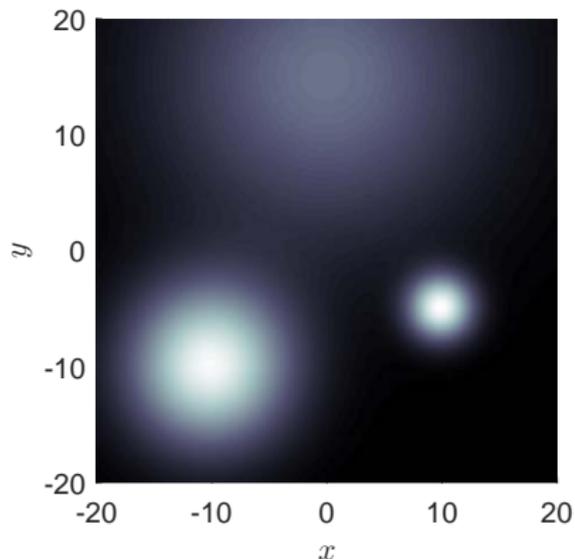


Короткая форма: $\text{image_bw} = z > \text{threshold}$

Перевод изображения в двоичный формат (2)

Пример: переход от двумерного полутонового изображения к двоичному изображению

Короткая форма: $image_bw = z > threshold$



Обнаружение точечных дефектов на изображении

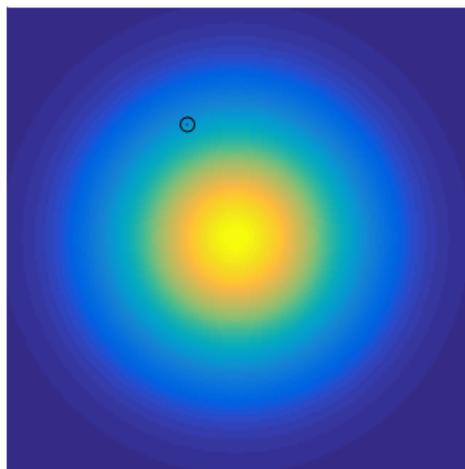
Исходное изображение $z(x, y)$ – двумерная функция Гаусса с выколотой точкой

Маска для вычисления лапласиана $w = [0 \ -1 \ 0; -1 \ +4 \ -1; 0 \ -1 \ 0]$

Отфильтрованное изображение $g = \text{abs}(\text{imfilter}(\text{double}(z), w))$

Выделение максимума $g = g \geq \text{threshold}$

Исходное изображение



Изображение точечного дефекта



Обнаружение граней

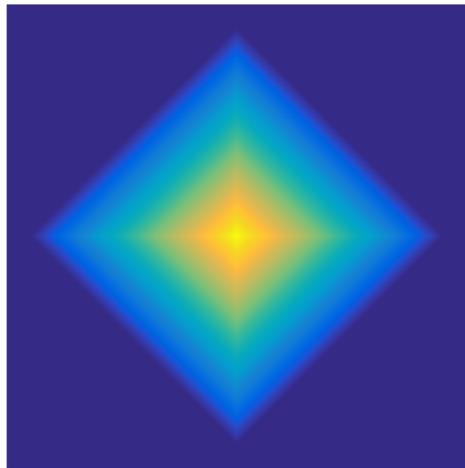
Исходное изображение $z(x, y)$ – модельное изображение пирамиды с гранями типа $\{1,1,1\}$

Маска для вычисления лапласиана $w = [0 \ -1 \ 0; -1 \ +4 \ -1; 0 \ -1 \ 0]$

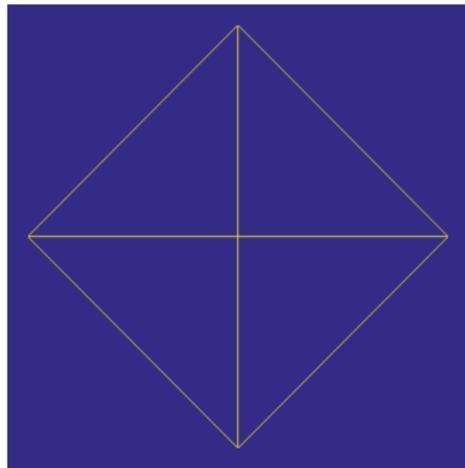
Отфильтрованное изображение $g = \text{abs}(\text{imfilter}(\text{double}(z), w))$

Выделение максимума $g = g \geq \text{threshold}$

Исходное изображение



Изображение граней



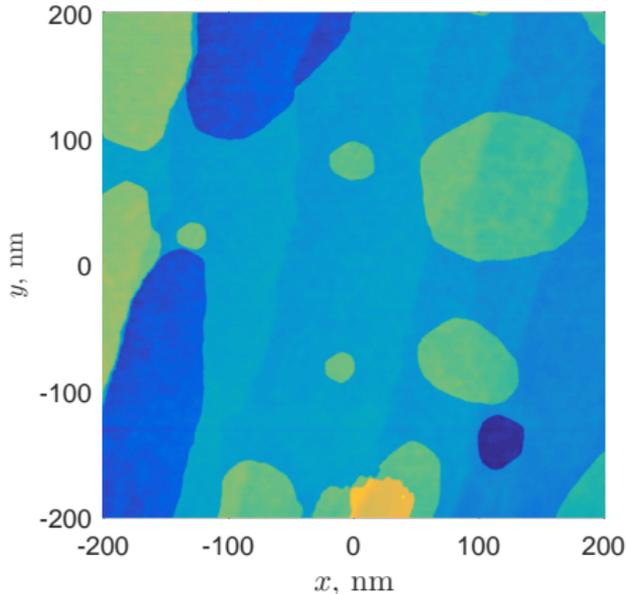
Обнаружение границ атомарно-гладких террас (1)

Исходное изображение $z(x, y)$ – выровненное топографическое изображение поверхности плёнки Pb(111)/Si(111) 7×7

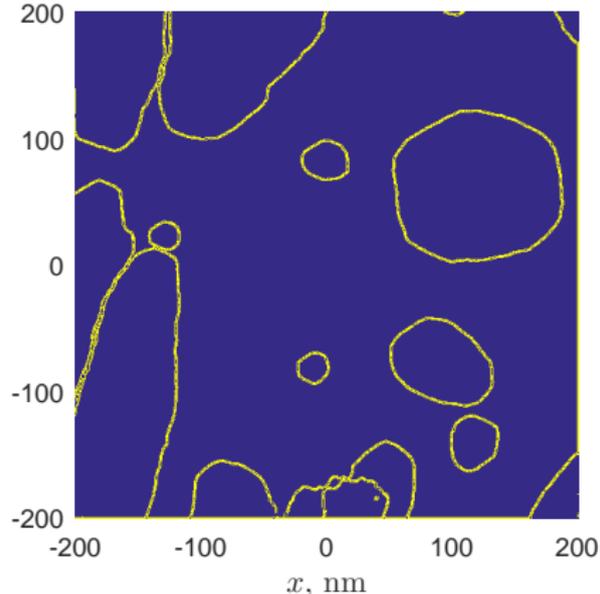
Отфильтрованное изображение $g = \text{abs}(\text{imfilter}(\text{double}(z), w))$

Выделение максимума $g = g \geq \text{threshold}$

Исходное изображение



Изображение границ террас



Обнаружение границ атомарно-гладких террас (2)

Террасы на поверхности Pb(111)/Si(111)7 × 7

Короткая форма: $image_bw = z > threshold$

Image_bw



inverted Image_bw



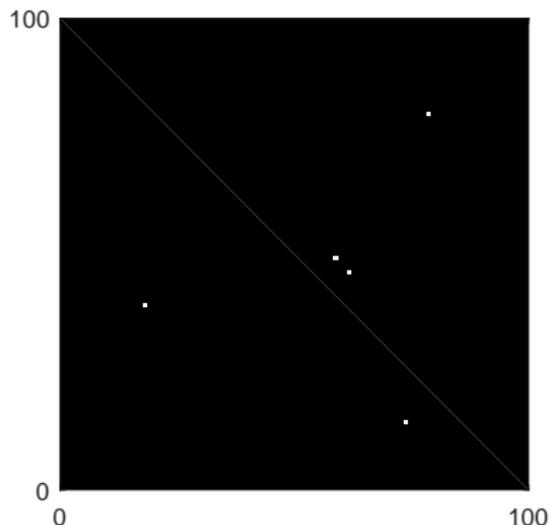
Дилатация (1)

Дилатация (dilatation) – процесс увеличения ширины линий посредством замены каждого «белого» пикселя структурообразующим элементом (*pattern*), например, в виде «крестика» или «линии»

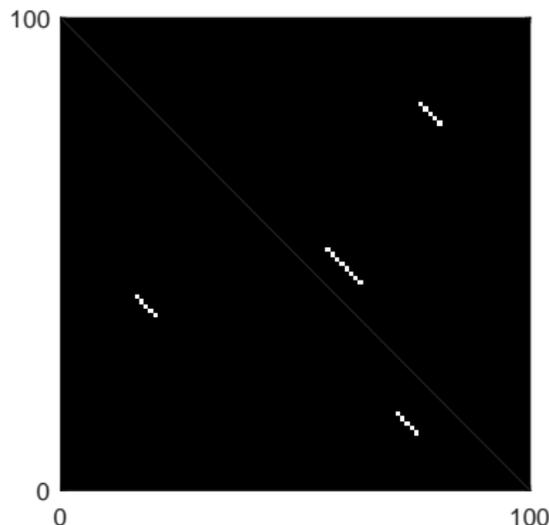
$$pattern = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{или} \quad pattern = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Пример команды `Image_new = imdilate(Image, pattern)`

Исходное изображение



После дилатации



Дилатация (2)

Дилатация позволяет, во-первых, увеличить ширину линий на изображении и, во-вторых, сделать контуры и линии замкнутыми.

Пример: получение границ террас на поверхности плёнки $\text{Pb}(111)/\text{Si}(111)7 \times 7$ в виде непрерывных линий

$$\text{pattern} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$



Эрозия или утончение линий

Формат команды:

`Image_new = bwmorph(Image, 'thin', n)` или `Image_new = bwmorph(Image, 'thin', inf)`,

где команда по удалению пикселов из линий выполняется n раз или до стабилизации изображения (`inf`)

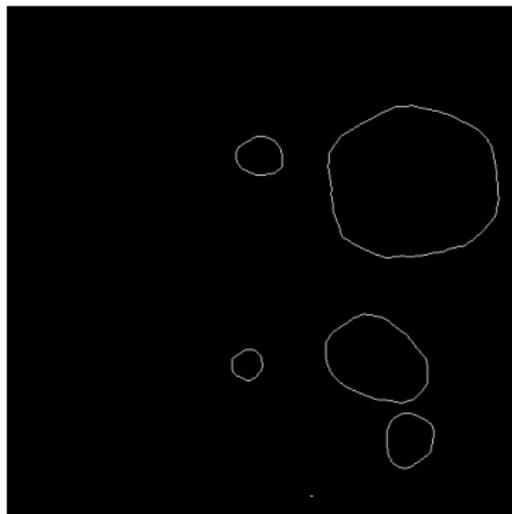


Последовательное применение операций дилатации и эрозии позволяет сделать контуры предельно тонкими, сохранив их форму, замкнутость или незамкнутость.

Удаление пограничных объектов и заполнение замкнутых контуров

Удаление пограничных объектов `Image_new=imclearborder(Image, 8)`

Заполнение замкнутых контуров `Image_new=imfill(Image, 'holes')`

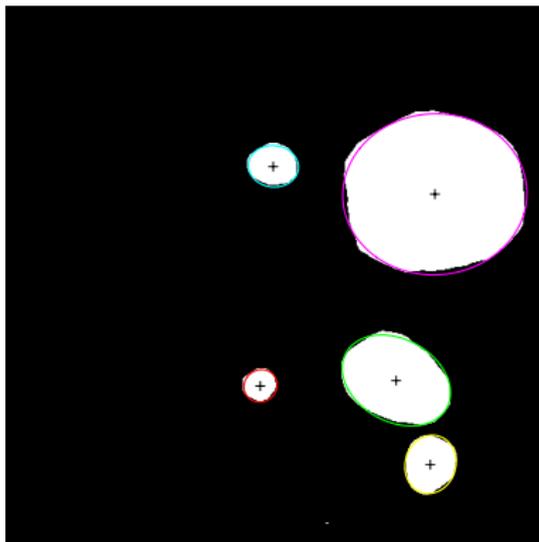


Автоматическое определение параметров объектов (1)

Определение параметров островков

```
stats = regionprops('table', Image, 'Centroid', 'MajorAxisLength', 'MinorAxisLength')
```

stats =	Centroid		MajorAxisLength	MinorAxisLength
	237.86	148.37	43.132	40.84
	250.41	352.12	63.149	54.41
	365.07	152.22	144.17	111.39
	399.85	325.52	237.34	213.71
	396.61	74.897	74.375	66.688



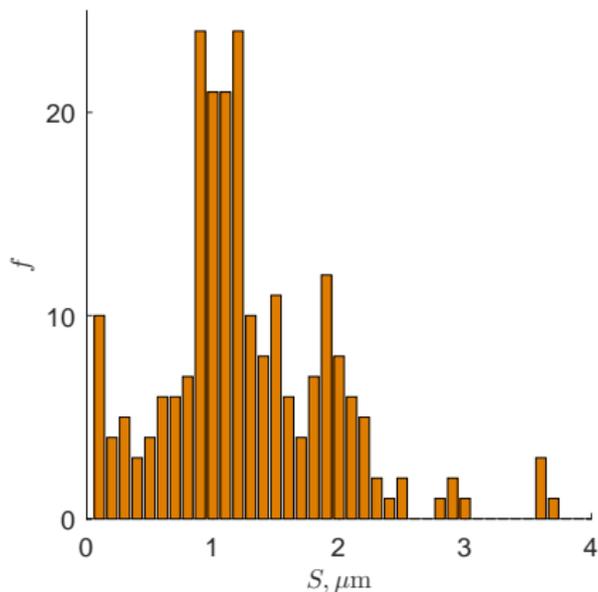
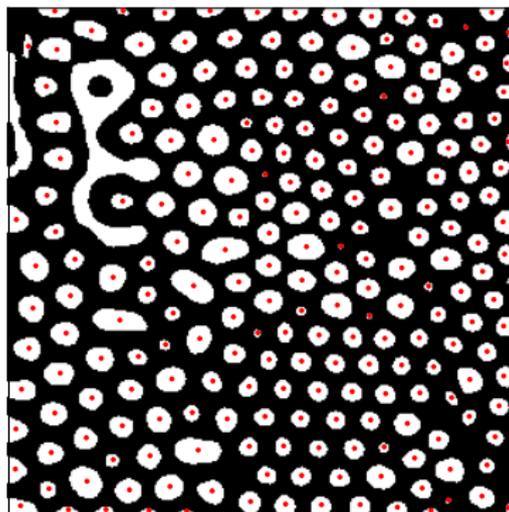
Полный набор параметров функции *regionprops*

Area, EulerNumber, Orientation, BoundingBox, Extent, Perimeter, Centroid, Extrema, PixelIdxList, ConvexArea, FilledArea, PixelList, ConvexHull, FilledImage, Solidity, ConvexImage, Image, SubarrayIdx, Eccentricity, MajorAxisLength, EquivDiameter, MinorAxisLength

Автоматическое определение параметров объектов (2)

Гранулометрия – статистический анализ островков и капель на поверхности

Доменная структура в плёнке железо-иттриевого граната (YIG), размер кадра $31 \times 31 \text{ мкм}^2$
(изображение взято с сайта <https://www.nt.mdt-si.ru/resources/scan-gallery>)



Объём выборки – 225 островков (число островков и их размер зависит от порога детектирования)

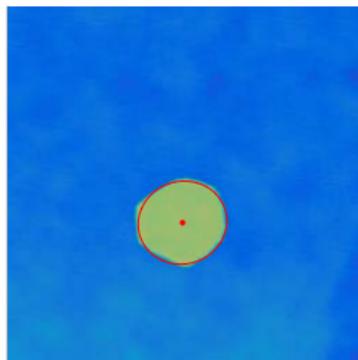
Исследование зависимости высоты моноатомных ступеней Pb(111) от напряжения (1)

Серия топографических изображений поверхности Pb(111)/Si(111) 7×7 для разных напряжений. Из-за крипа положение островка моноатомной высоты медленно дрейфует.

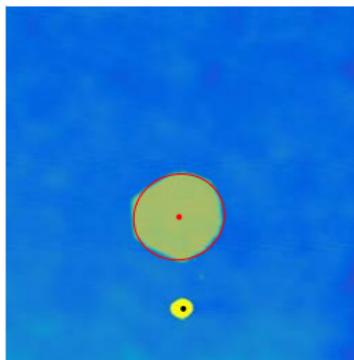
Как определить зависимость высоты террасы от напряжения?

Возможное решение – нужно построить сечение через одну и ту же точку, привязанную к структуре поверхности (например, центр «верхней» террасы):

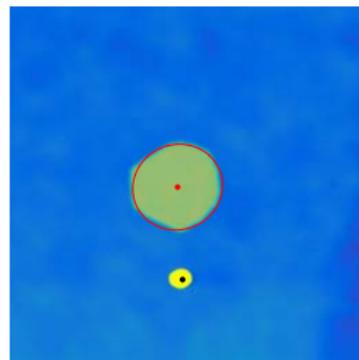
$U = 0.50 \text{ V}$



$U = 0.80 \text{ V}$



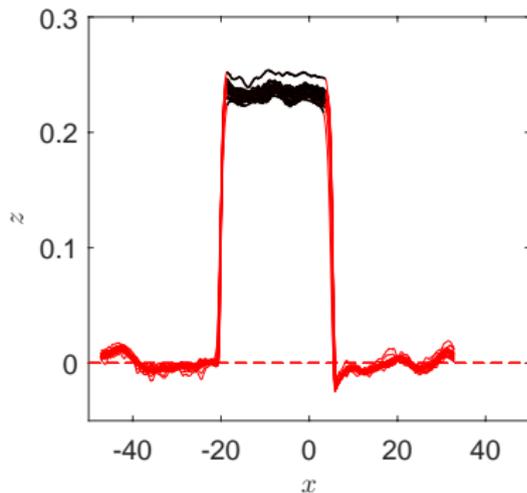
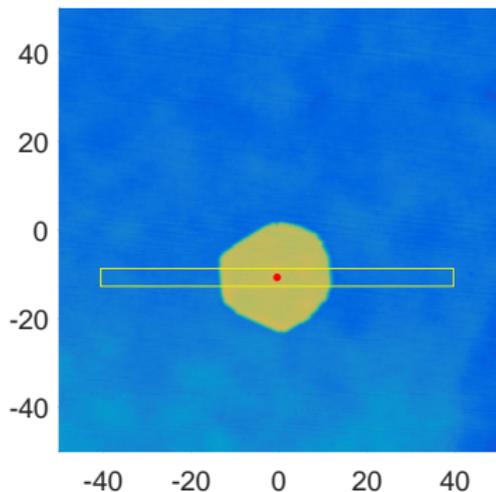
$U = 3.50 \text{ V}$



Исследование зависимости высоты монокристаллических ступеней Pb(111) от напряжения (2)

Определяем положение центра террасы и сравниваем сечения, проходящие через центр террасы, для минимизации эффекта крипа и влияния крупномасштабных вариаций высоты

Обнаружены 5% вариации видимой высоты монокристаллической ступени, обусловленные квантово-размерными эффектами, в зависимости от напряжения U



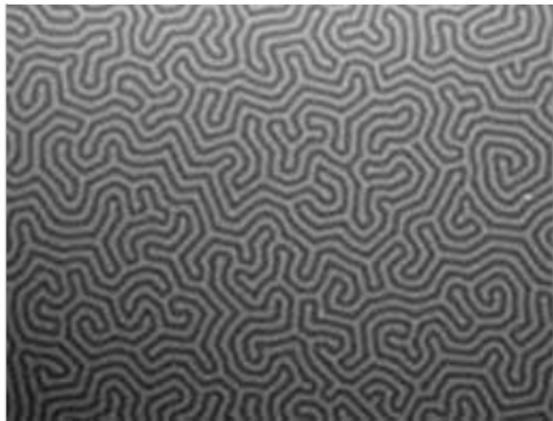
A. Yu. Aladyshkin, Oscillatory bias dependence of the visible height of the monatomic Pb(111) steps... // Journal of Physical Chemistry C, vol. 127 (27), pp. 13295–13301 (2023)

Анализ формы магнитных доменов (1)

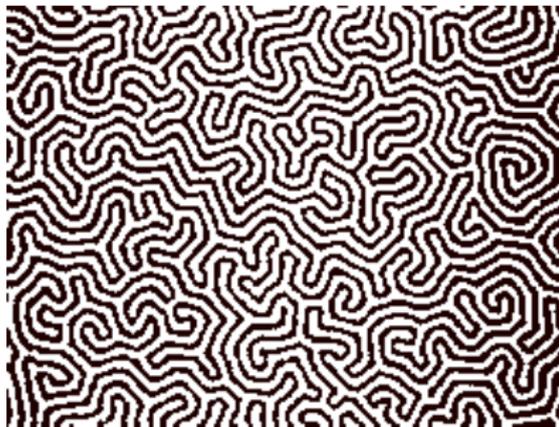
Лабиринтная доменная структура в ферромагнитной плёнке (YIG) с перпендикулярной магнитной анизотропией

Оригинальное изображение имеет небольшой градиент интенсивности вдоль вертикальной оси

Оригинальное полутоновое изображение



Выровненное двоичное изображение



Ran Wang, Ya-Xuan Shang, Rui Wu, Jin-Bo Yang and Yang Ji, *Evolution of Magnetic Domain Structure in a YIG Thin Film* // Chinese Physics Letters, vol. 33, 047502 (2016)

Анализ формы магнитных доменов (2)

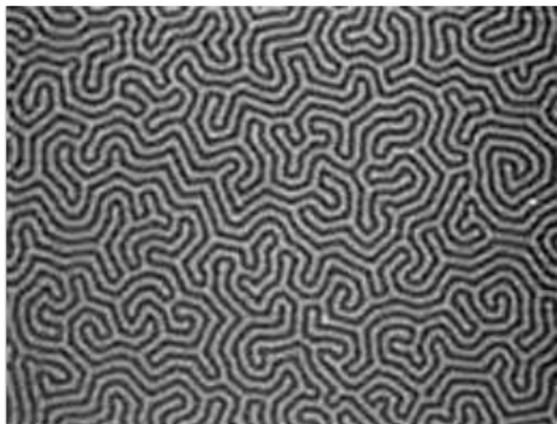
Эрозия: `image_new = bwmorph(image, 'thin', inf)`

Построение скелета: `image_new = bwmorph(image, 'skel', inf)`

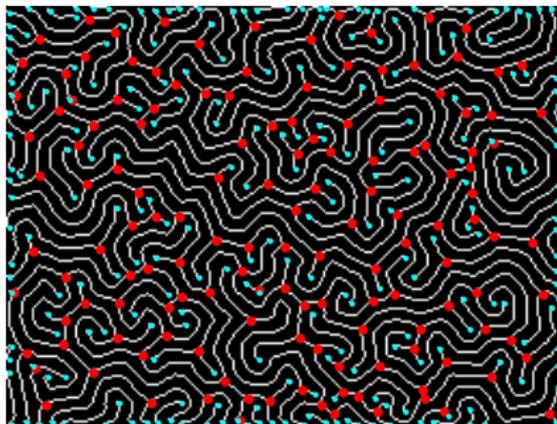
Концевые точки: `bwmorph(T, 'endpoints')` (отмечены точками цвета морской волны)

Точки ветвления: `bwmorph(T, 'branchpoints')` (отмечены красными точками)

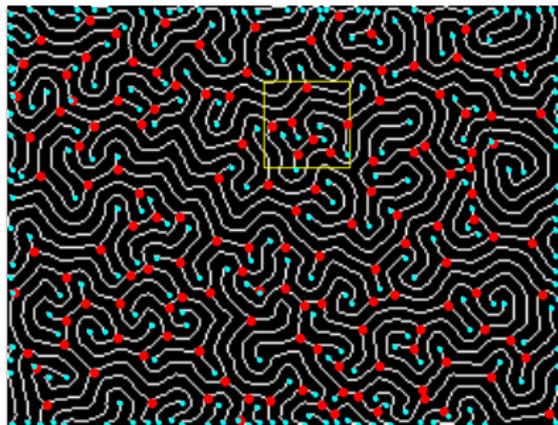
Выровненное полутоновое изображение



Скелет и особые точки



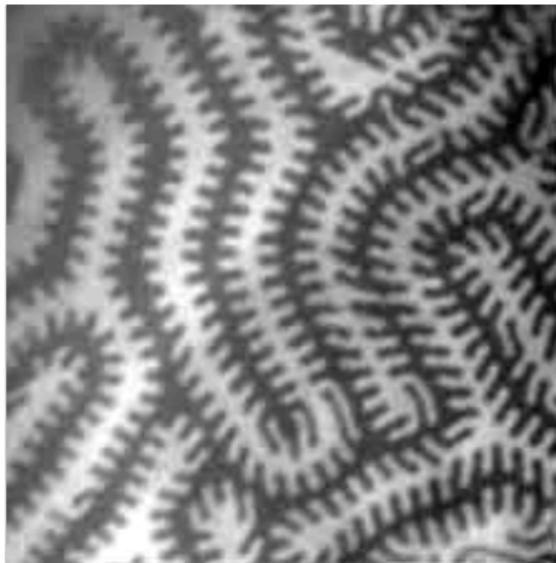
Анализ формы магнитных доменов (3)



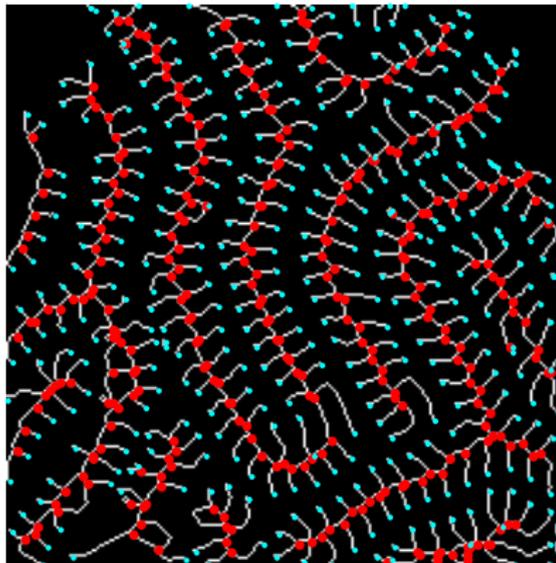
Для обнаружения дефектов скелета изображение разбивается на блоки 3×3 пикселей. После этого подсчитывается число ненулевых пикселей, находящихся вокруг центра. Пиксель в центре считается дефектом (минуцией, *minutiae*), если он сам ненулевой, и соседних ненулевых пикселей один (дефект типа «окончание») или три (дефект типа «ветвление»).

Анализ формы магнитных доменов (4)

Изображение с просторов Интернета

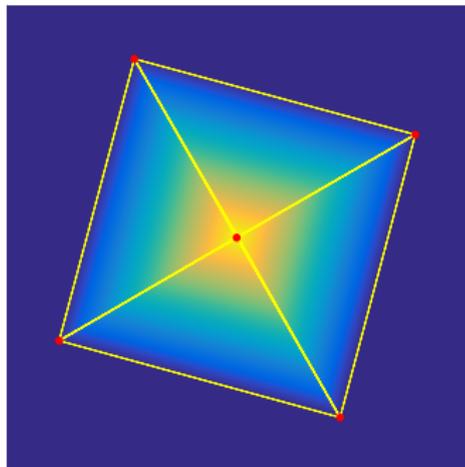


Скелет и особые точки

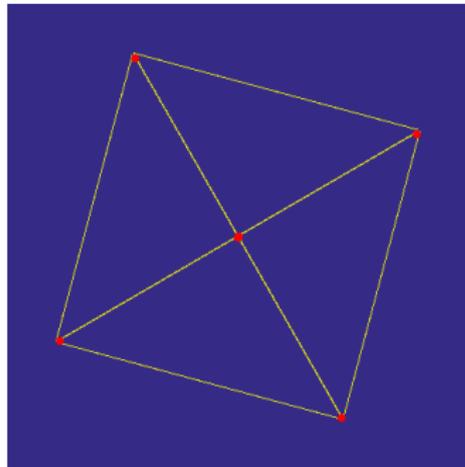


Обнаружение граней и граничных точек

Исходное изображение



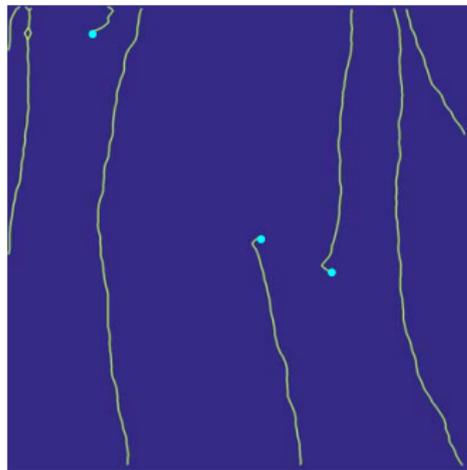
Изображение граней



Обнаружение границ террас и винтовых дислокаций

Исходное изображение – топография поверхности плёнки Pb(111)/Si(111) 7×7 , размер кадра $174 \times 174 \text{ nm}^2$.

Процедура обработки: вычитание глобального наклона → выравнивание по линиям → свертка с лапласианом или вычисление модуля градиента → медианная фильтрация (опционально) → дилатация → эрозия → определение концевых точек



Отмечены **центры винтовых дислокаций** внутри анализируемой области

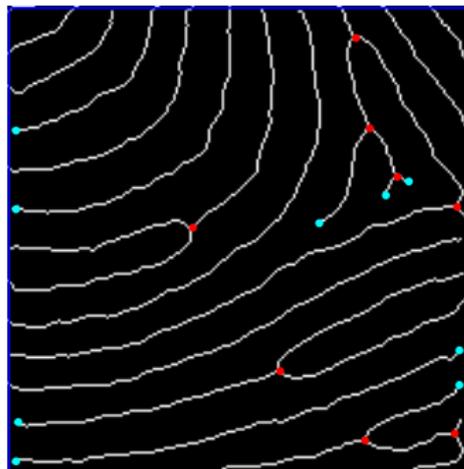
Aladyshkin, Aladyshkina, Bozhko, *Observation of hidden parts of dislocation loops in thin Pb films by means of scanning tunneling spectroscopy* // *Journal of Physical Chemistry C*, vol. 125, pp. 26814-26822 (2021)

Анализ характерных особенностей отпечатков пальцев

Изображение с просторов Интернета



Скелет и особые точки

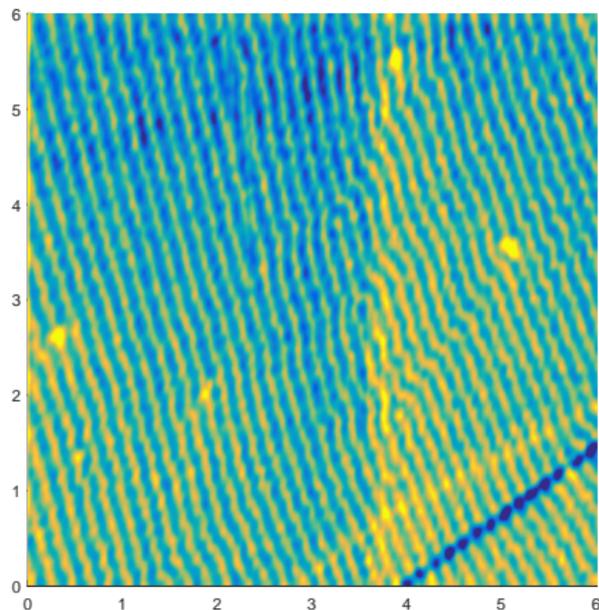
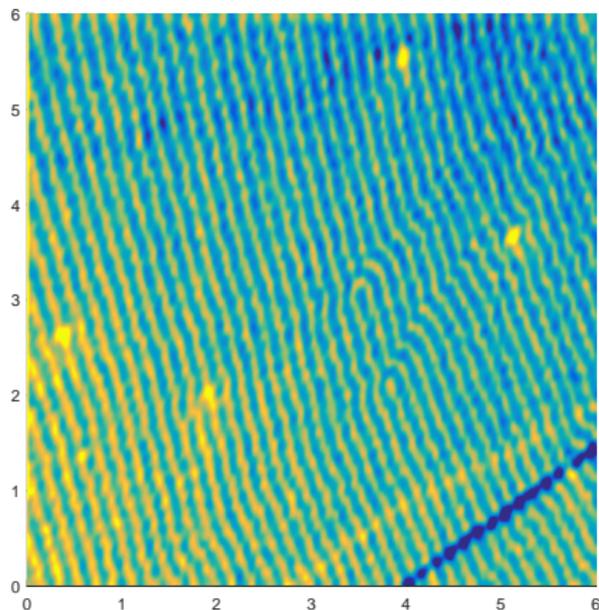


Принципы дактилоскопического анализа (согласно Википедии):

1. Улучшение качества исходного полутонового изображения отпечатка.
2. Вычисление поля ориентации папиллярных линий отпечатка.
3. Бинаризация изображения отпечатка пороговой обработкой.
4. Утончение линий изображения отпечатка до тех пор, пока линии не будут шириной 1 пиксель.
5. Выделение минуций (локальных особенностей, лат. *minutiae*) типа «окончание» и «ветвление».
6. Корреляционный анализ минуций данного отпечатка и минуций отпечатков базы данных (для опознания достаточно 65% совпадения).

Анализ трансформации доменной структуры в ферромагнитном сверхпроводнике (1)

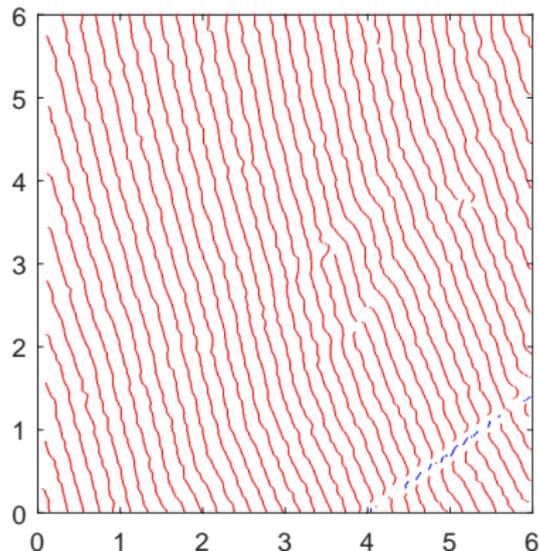
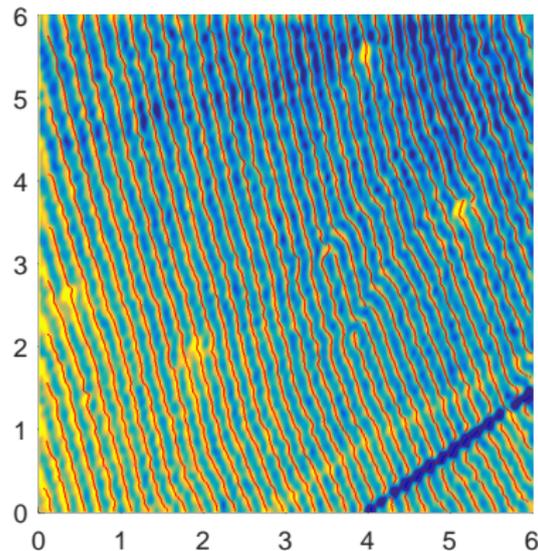
Данные низкотемпературной магнитно-силовой микроскопии при температуре около 18 К:



Stolyarov, Vagov, Aladyshkin et al., unpublished (2024)

Анализ трансформации доменной структуры в ферромагнитном сверхпроводнике (2)

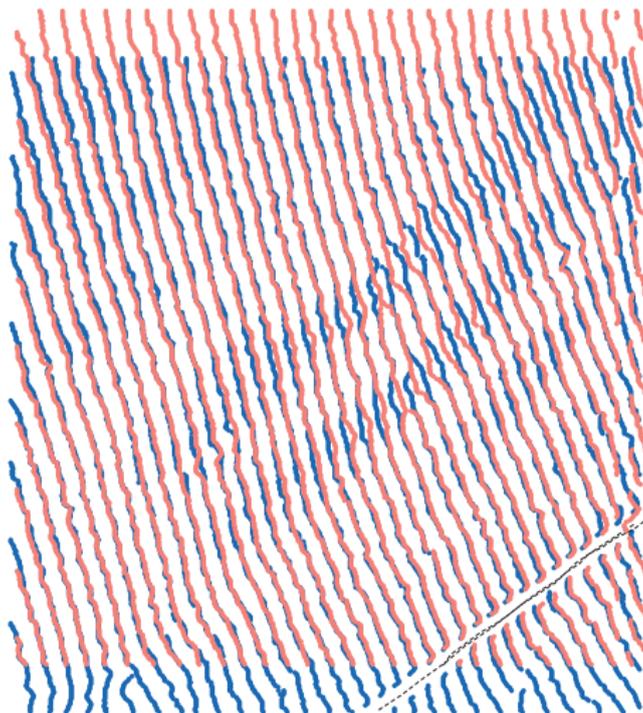
Построение скелета доменной структуры «вручную»



Stolyarov, Vagov, Aladyshkin et al., unpublished (2024)

Анализ трансформации доменной структуры (5)

Сравнение скелетов двух доменных структур для последовательных сканов



Stolyarov, Vagov, Aladyshkin et al., unpublished (2024)

Лекция 6

Статистический анализ периодических и непериодических двумерных структур

Прямое и обратное преобразования Фурье

(i) Анализ периодических процессов во времени

$$\mathcal{F}[y(t)] \equiv \hat{y}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} y(t) e^{-i\omega t} dt \quad \text{и} \quad y(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{y}(\omega) e^{+i\omega t} d\omega,$$

где ω – угловая частота.

(ii) Анализ одномерных периодических состояний в пространстве

$$\mathcal{F}[y(x)] \equiv \hat{y}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} y(x) e^{-ikx} dx \quad \text{и} \quad y(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{y}(k) e^{+ikx} dk,$$

где k – волновой вектор.

(iii) Анализ многомерных периодических состояний в пространстве

$$\mathcal{F}[y(\mathbf{r})] \equiv \hat{y}(\mathbf{k}) = \int_{-\infty}^{\infty} y(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^n \mathbf{r} \quad \text{и} \quad y(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{y}(\mathbf{k}) e^{+i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^n \mathbf{k}$$

где $\mathbf{k} = \{k_x, k_y, k_z\}$ – волновой вектор, n – размерность пространства (как правило, 2 или 3)

Дискретное преобразование Фурье: двумерный случай (1)

Дискретное преобразование Фурье для функции двух переменных

$$\mathcal{F}[z(x, y)] \equiv \hat{z}_{n', m'} = \sum_{n=0}^{N_x-1} \sum_{m=0}^{N_y-1} z(x_n, y_m) e^{-2\pi i n' n / N_x} e^{-2\pi i m' m / N_y},$$

где $n, n' = 0, \dots, N_x - 1$ и $m, m' = 0, \dots, N_y - 1$ – целочисленные индексы.

Обратное дискретное преобразование Фурье для функции двух переменных

$$\mathcal{F}^{-1}[\hat{z}_{n', m'}] \equiv z_{n, m} = \frac{1}{N} \sum_{n'=0}^{N_x-1} \frac{1}{N} \sum_{m'=0}^{N_y-1} \hat{z}_{n', m'} e^{2\pi i n' n / N_x} e^{2\pi i m' m / N_y}.$$

Дискретное преобразование Фурье переводит двумерную прямоугольную матрицу $z_{n, m}$ в двумерную матрицу $\hat{z}_{n', m'}$ такого же размера.

Масштабирование осей при преобразовании Фурье:

Пусть $x_n = [x_0, x_0 + \Delta x, \dots, x_0 + \Delta x \cdot (N_x - 1)]$ – вектор аргументов, Δx – шаг сетки по координате

$\Delta k_x = 1/(\Delta x \cdot N_x)$ – шаг сетки по волновому числу

$k_{x, max} \simeq 1/\Delta x$ – максимальное значение волнового числа

$k_{x, max}/2 \simeq 1/(2\Delta x)$ – частота Найквиста

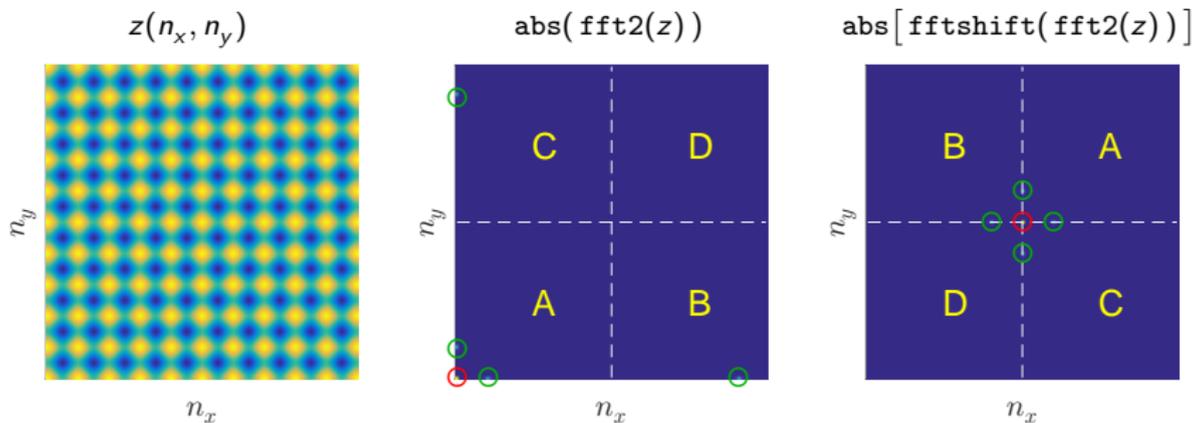
Дискретное преобразование Фурье: двумерный случай (2)

Модельная структура: квадратная решётка с периодом a

$$z(x, y) = \exp(ik_{1,x}x + ik_{1,y}y) + \exp(-ik_{1,x}x - ik_{1,y}y) + \\ + \exp(ik_{2,x}x + ik_{2,y}y) + \exp(-ik_{2,x}x - ik_{2,y}y) + \text{const};$$

Базисные волновые вектора: $\mathbf{k}_1 = k_0 \cdot \mathbf{e}_x + 0 \cdot \mathbf{e}_y$ и $\mathbf{k}_2 = 0 \cdot \mathbf{e}_x + k_0 \cdot \mathbf{e}_y$, где $k_0 = 2\pi/a$

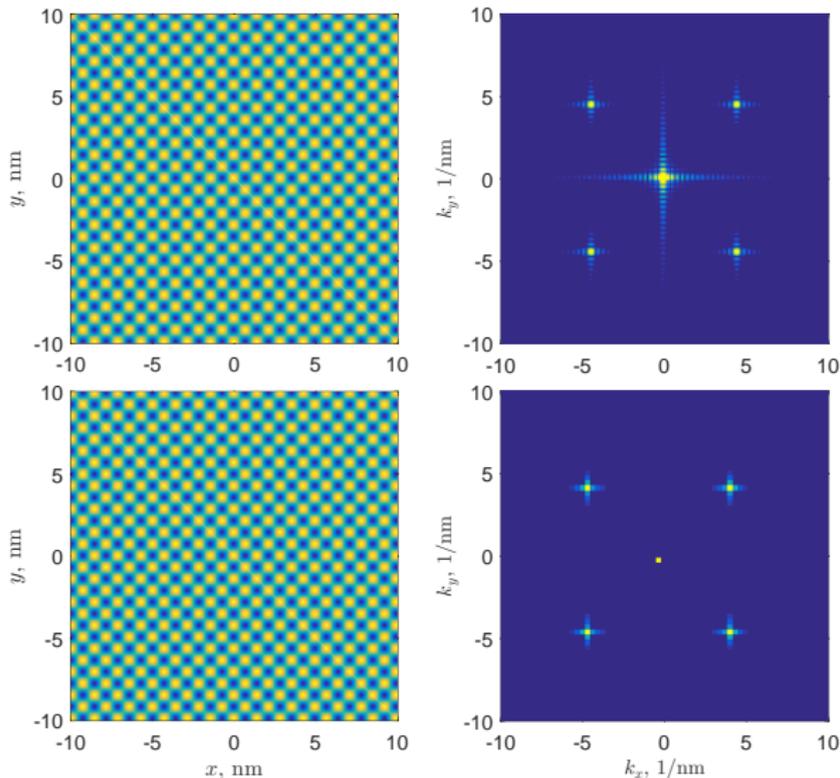
Реализация в Matlab:



Фурье-анализ двумерных периодических структур (1)

Модельная структура: квадратная решётка с периодом $a = 1$ нм, $k_0 = 2\pi/a = 6.28$ нм⁻¹

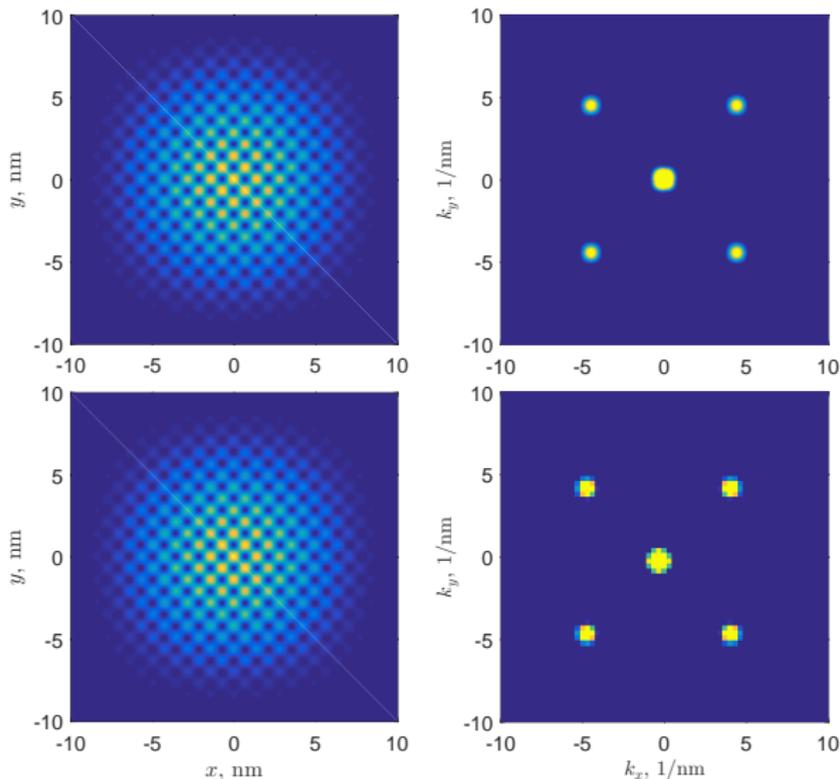
«Честное» и быстрое Фурье-преобразование без оконной функции



Фурье-анализ двумерных периодических структур (2)

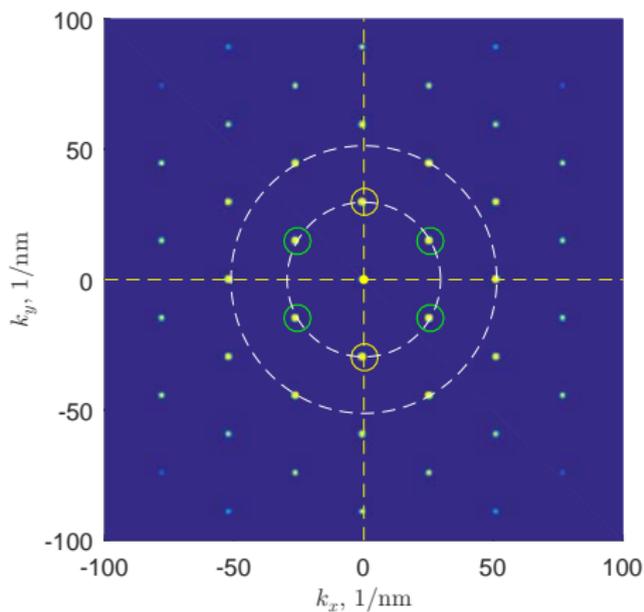
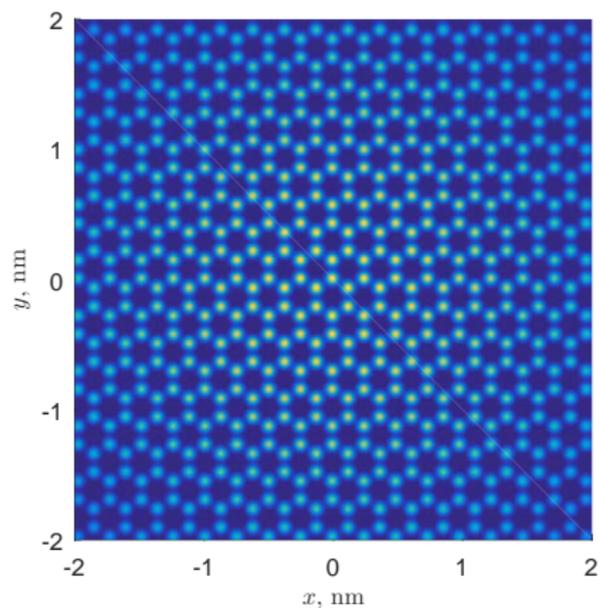
Модельная структура: квадратная решётка с периодом $a = 1$ нм, $k_0 = 2\pi/a = 6.28$ нм⁻¹

«Честное» и быстрое Фурье-преобразование с оконной функцией Блэкмана



Фурье-анализ двумерных периодических структур (3)

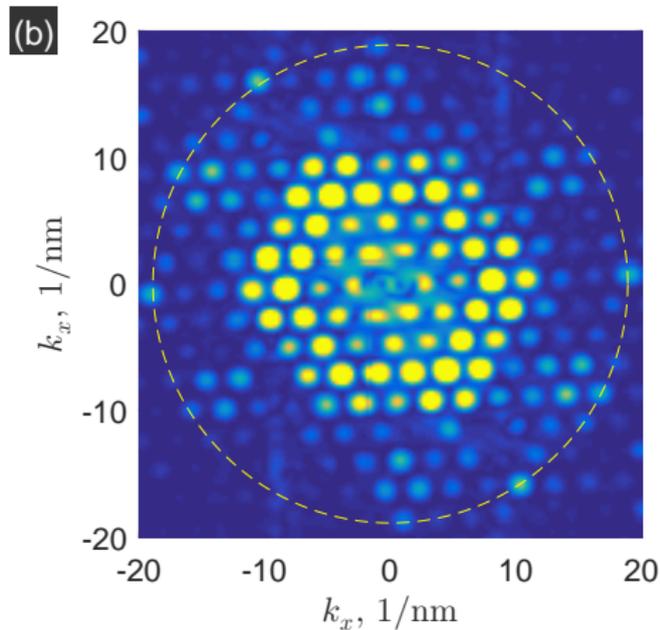
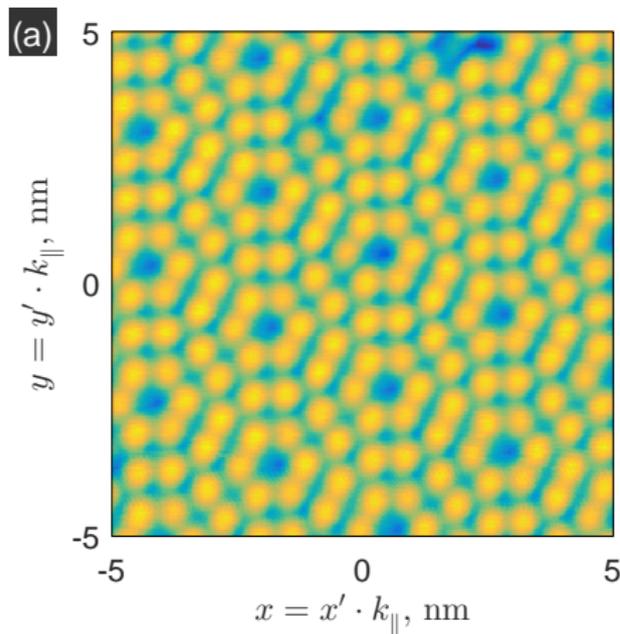
Структура идеального графена



Контрольный вопрос: как связан «размер атома» на левой картинке и скорость затухания фурье-максимумов на правой картинке?

Фурье-анализ двумерных периодических структур (4)

Структура реконструированной поверхности Si(111)7 × 7



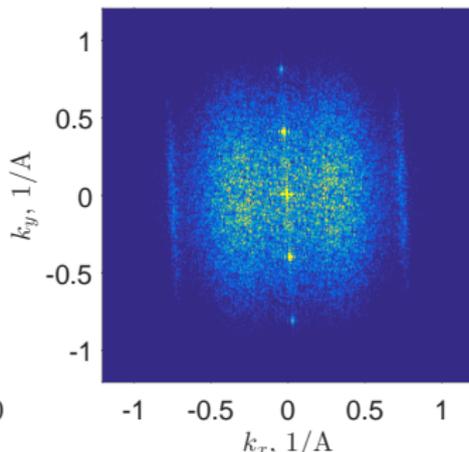
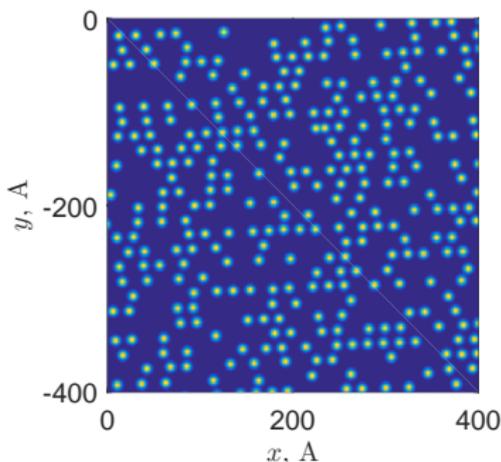
Анализ частично упорядоченных двумерных структур



Адатоны Si на поверхности Si(111)-5 × 2-Au

Olyanich, Mararov, Utas, Aladyshkin, Mihalyuk, Zotov, Saranin, C₆₀ layer growth on intact and TI-modified Si(111)5 × 2–Au // Applied Surface Science, vol. 456, 801–807 (2018)

Попытка стандартного Фурье-анализа: **не имеет смысла**



Триангуляция Делоне: определение и основные свойства



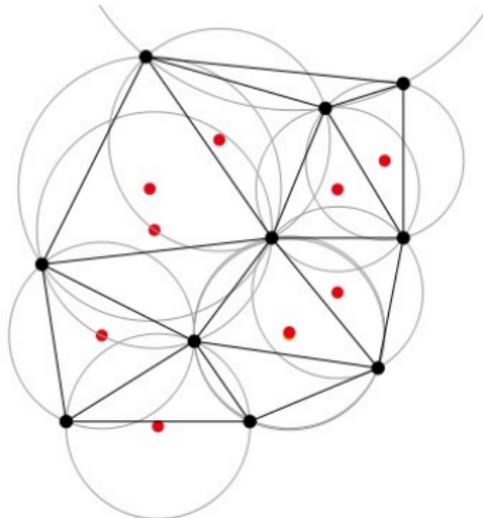
Борис Николаевич Делоне (1890-1980) – русский и советский математик, профессор МГУ, член-корреспондент АН СССР

Один из первых альпинистов СССР, мастер спорта СССР

Пик Делоне – 4070 метров

$49^{\circ}48'55''\text{N}$ $86^{\circ}35'46''\text{E}$ (Алтайские горы)

Варианты транслитерации: Delone, Delauney, De Launay



Триангуляция Делоне – метод разбиения заданного множества точек S на плоскости (узлов) на треугольники таким образом, что для любого треугольника все узлы за исключением вершин треугольника, лежат вне окружности, описанной вокруг треугольника.

Основные свойства триангуляции Делоне:

- Если никакие четыре точки не лежат на одной окружности, то триангуляция Делоне единственна.
- Триангуляция Делоне максимизирует минимальный угол среди всех углов всех построенных треугольников, тем самым избегаются «тонкие» треугольники.

Функция delauney в Matlab

Формат команды: $TRI = \text{delaunay}(X, Y)$

Входные аргументы: $X = \{x_1, x_2, x_3, \dots, x_N\}$ и $Y = \{y_1, y_2, y_3, \dots, y_N\}$ – координаты узлов

Возвращаемое значение:

$TRI =$	78	23	56
	114	115	113
	46	35	36
	\vdots	\vdots	\vdots

Оценка расстояний:

$$d_{k,m} = \sqrt{(x_k - x_m)^2 + (y_k - y_m)^2}$$

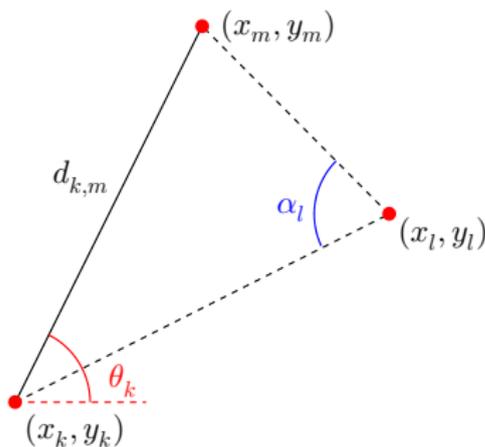
Оценка углов:

$$\theta_k = \text{arctg} \left(\frac{y_m - y_k}{x_m - x_k} \right)$$

$$\alpha_l = \arccos \left(\frac{d_{k,l}^2 + d_{m,l}^2 - d_{k,m}^2}{2d_{k,l}d_{m,l}} \right)$$

Координационное число:

число повторов данного узла в матрице TRI



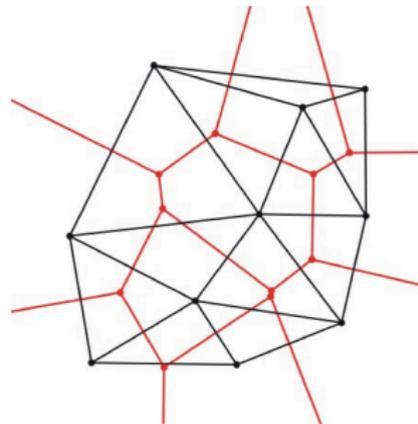
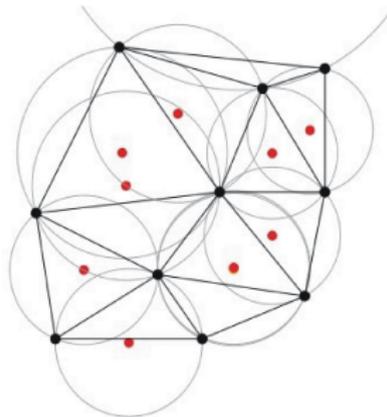
Разбиение (диаграмма) Вороного



Георгий Феодосьевич Вороной (1868-1908) – русский математик, член-корреспондент Петербургской академии наук

Варианты транслитерации: Voronoi, Voronoy

Диаграмма Вороного конечного множества точек S на плоскости представляет такое разбиение плоскости, при котором каждая область этого разбиения образует множество точек, более близких к одному из элементов множества S , чем к любому другому элементу множества (обобщение понятия ячейки Вигнера-Зейтца).



Напоминание: центр описанной окружности треугольника лежит в точке пересечения срединных перпендикуляров

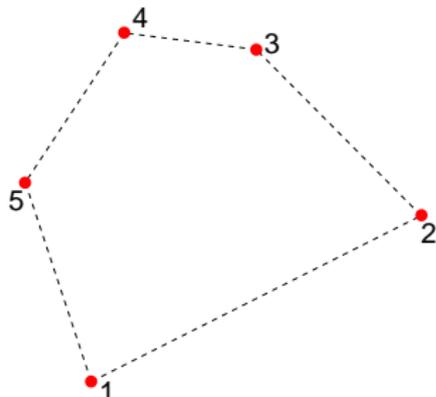
Функции voronoi и voronoin в Matlab

Формат команды: $[V_x, V_y] = \text{voronoi}(X, Y, TRI)$ и $[V, C] = \text{voronoin}(X, Y, TRI)$

Входные аргументы: $X = \{x_1, x_2, x_3, \dots, x_N\}$ и $Y = \{y_1, y_2, y_3, \dots, y_N\}$ – координаты узлов

Возвращаемые значения: V_x и V_y – координаты вершин элементарных многоугольников

$C(n, :) = [a_1, a_2, a_3, \dots]$ – координаты вершин n -го многоугольника



Площадь ориентированного многоугольника:

$$S = \left| \frac{(x_1 y_2 - y_1 x_2)}{2} + \frac{(x_2 y_3 - y_2 x_3)}{2} \dots \dots + \frac{(x_{N_1} y_N - y_{N-1} y_N)}{2} + \frac{(x_N y_1 - y_N y_1)}{2} \right|$$

Возможности разбиений Делоне и Вороного для анализа статистических свойства двумерных структур

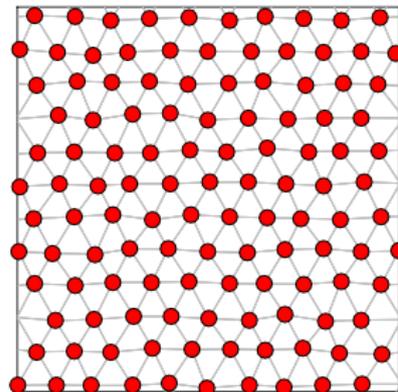
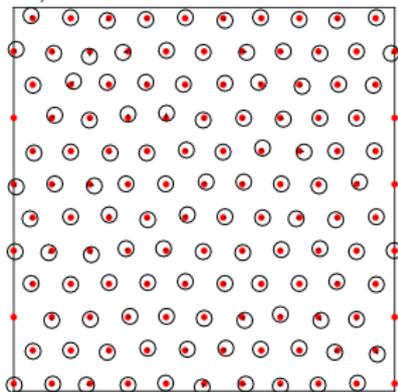
Триангуляция Делоне и диаграмма Вороного позволяют

- * определять длину и направление «связей» между соседними узлами;
- * определять координационные числа узлов;
- * определять площадь, приходящуюся на один узел;
- * получать дифференциальную функцию распределения в виде гистограмм при использовании соответствующих фильтров.

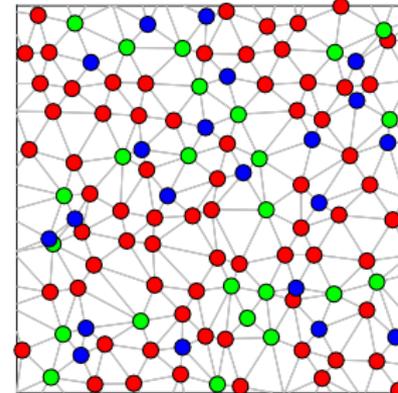
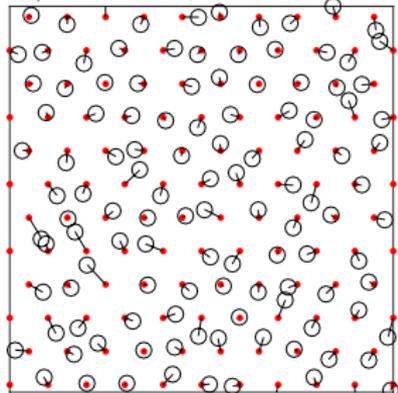
Методы, основанные на триангуляции Делоне и разбиении Вороного более чувствительны к локальным нарушениям порядка, чем анализ на основе преобразования Фурье.

Триангуляция Делоне и координационное число узлов

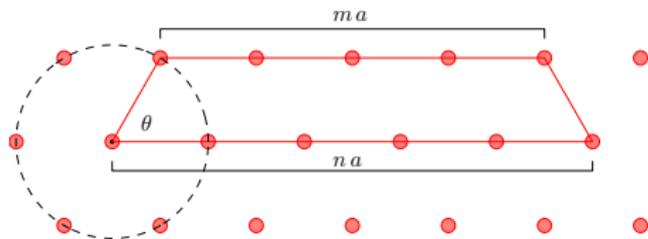
$\sigma/a = 0.05$



$\sigma/a = 0.20$



Типы двумерных кристаллических решёток



Уравнение для углов поворота:

$$na = ma + 2a \cos \theta, \quad n, m \in \mathbb{Z}$$

Допустимые решения:

$$\cos \theta = 0, \quad \pm 1/2, \quad \pm 1.$$

В кристаллах, обладающих трансляционной симметрией, могут существовать поворотные оси 1, 2, 3, 4 и 6 порядков, соответствующих допустимым углам поворота 60° , 90° , 120° , 180° и 360° :

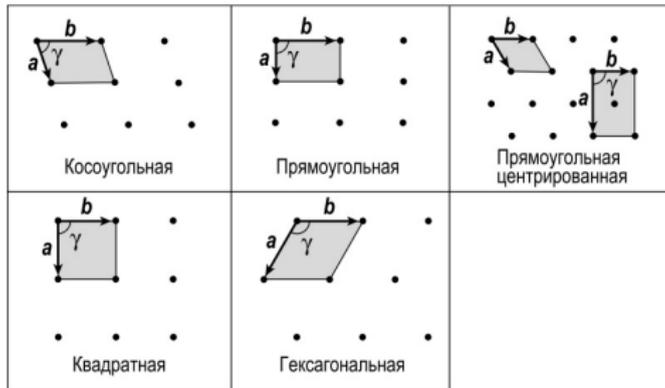
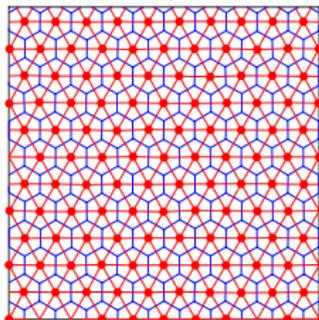


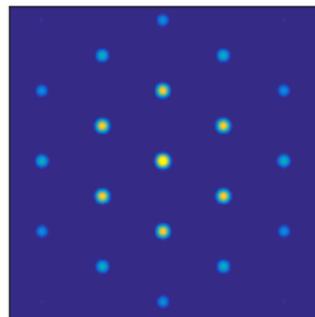
Рис. 1.3. Пять двумерных решеток Браве. Векторы a и b – векторы основных трансляций. Элементарные ячейки закрашены

Применение преобразования Фурье, разбиений Делоне и Вороного для неупорядоченной гексагональной решётки

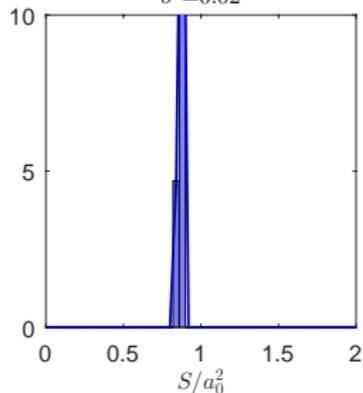
$a_0 = 200, \sigma_0 = 2$



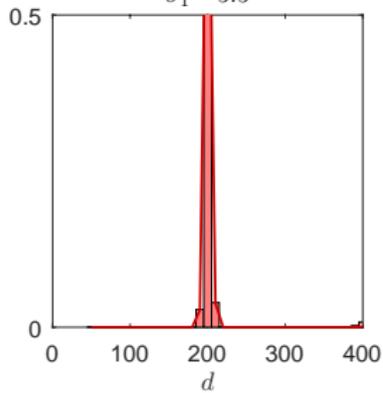
FFT



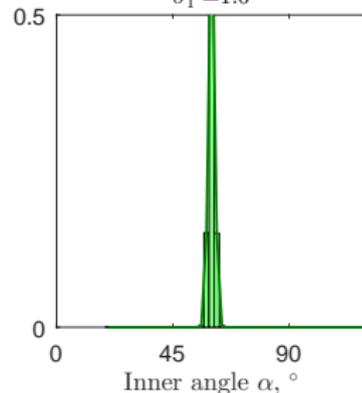
$\sigma = 0.02$



$\sigma_1 = 5.5$

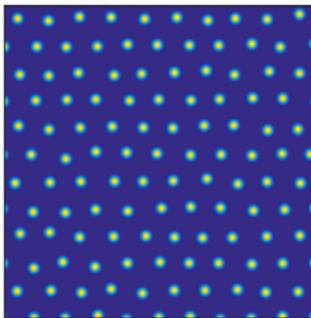
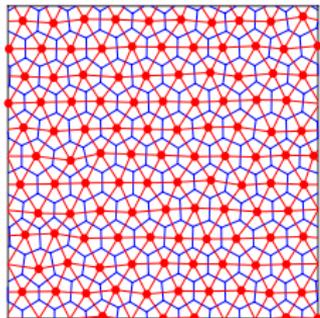


$\sigma_1 = 1.6$

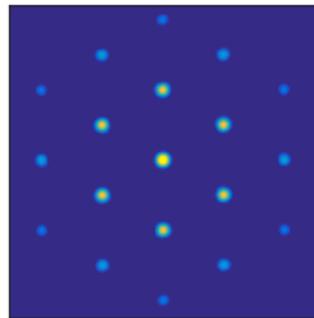


Применение преобразования Фурье, разбиений Делоне и Вороного для неупорядоченной гексагональной решётки

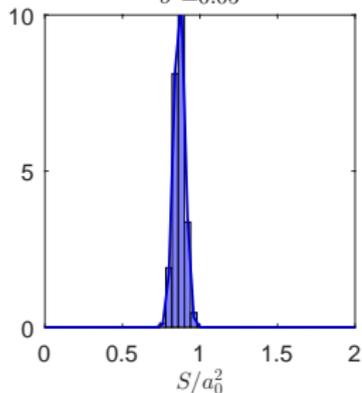
$a_0 = 200, \sigma_0 = 10$



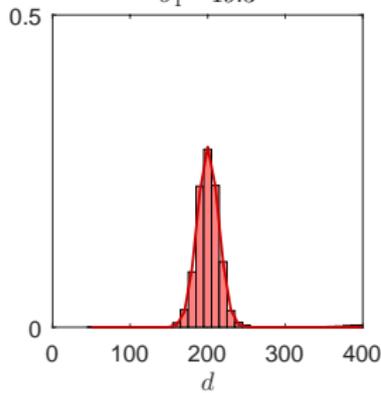
FFT



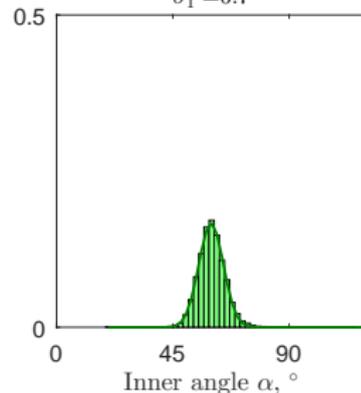
$\sigma = 0.05$



$\sigma_1 = 19.3$

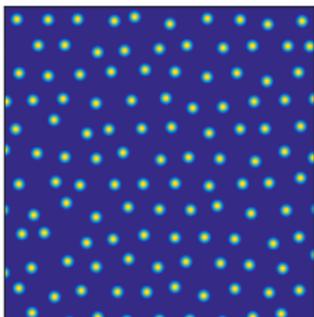
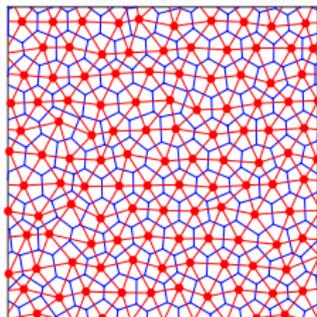


$\sigma_1 = 6.7$

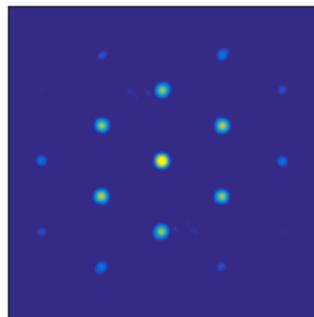


Применение преобразования Фурье, разбиений Делоне и Вороного для неупорядоченной гексагональной решётки

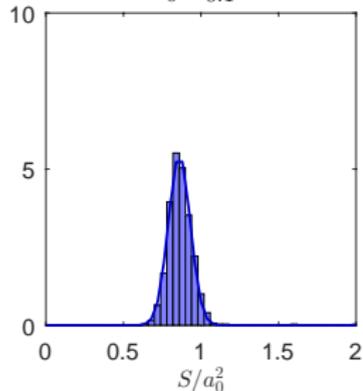
$a_0 = 200, \sigma_0 = 20$



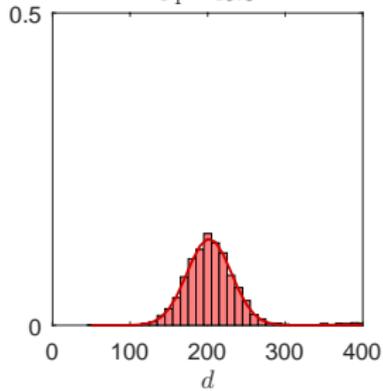
FFT



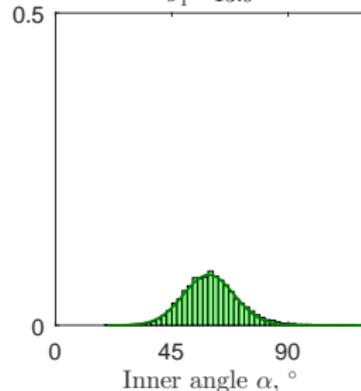
$\sigma = 0.1$



$\sigma_1 = 40.3$

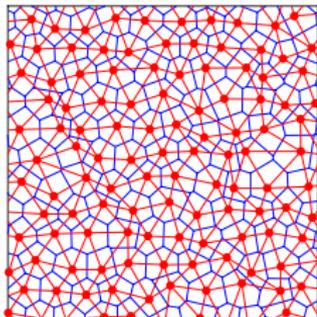


$\sigma_1 = 13.9$

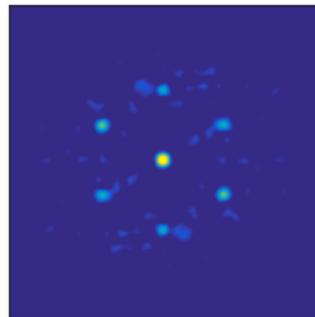


Применение преобразования Фурье, разбиений Делоне и Вороного для неупорядоченной гексагональной решётки

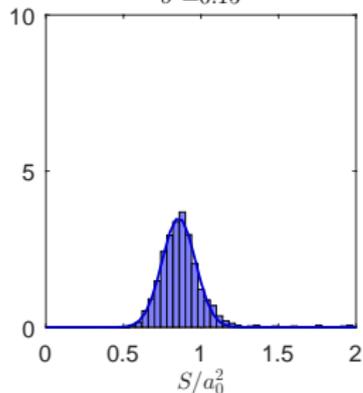
$a_0 = 200, \sigma_0 = 30$



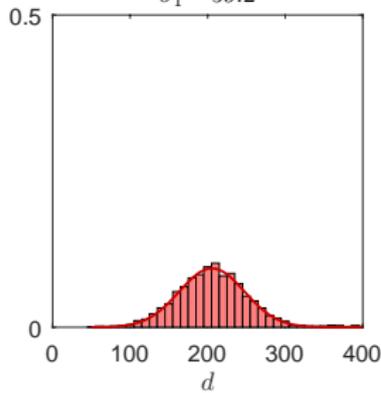
FFT



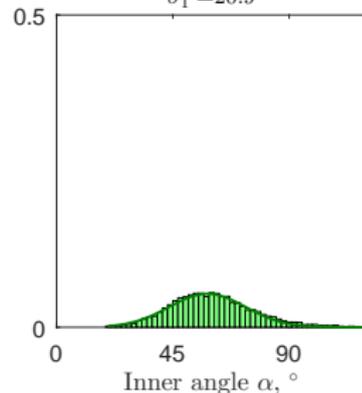
$\sigma = 0.15$



$\sigma_1 = 59.2$

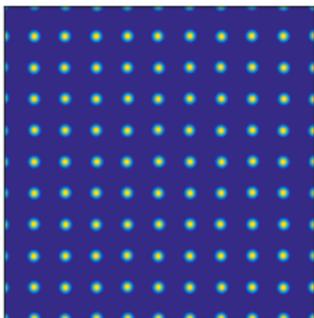
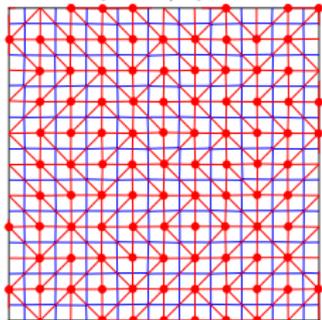


$\sigma_1 = 20.9$

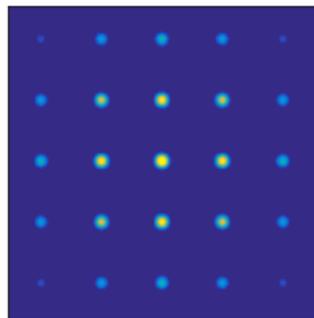


Применение преобразования Фурье, разбиений Делоне и Вороного для неупорядоченной квадратной решётки

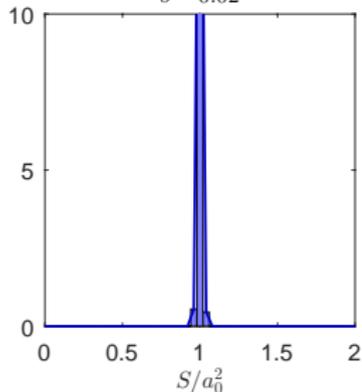
$a_0 = 200, \sigma_0 = 2$



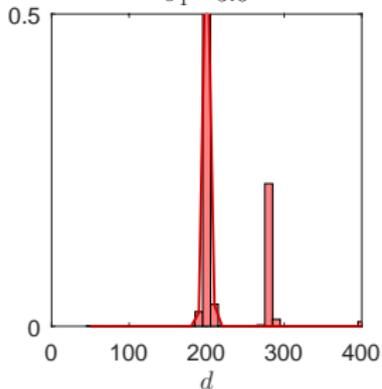
FFT



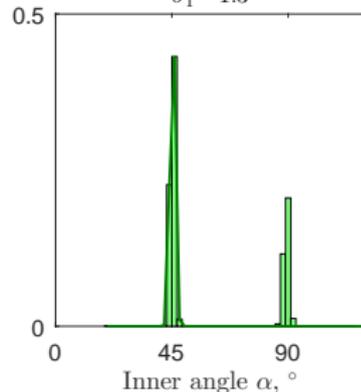
$\sigma = 0.02$



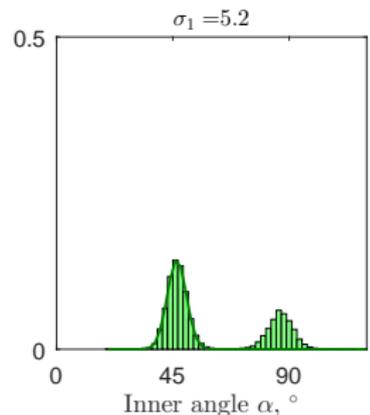
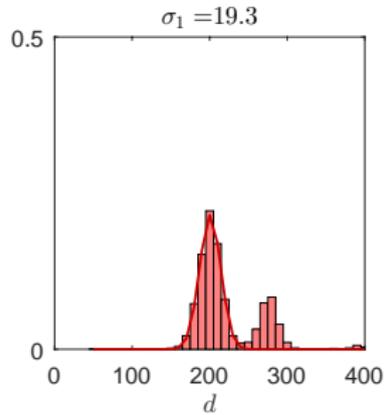
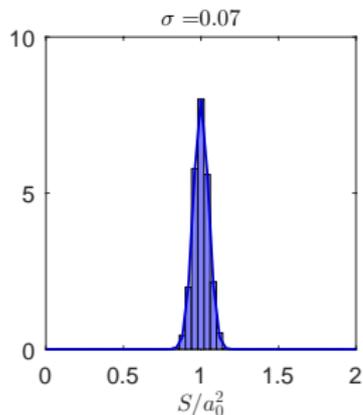
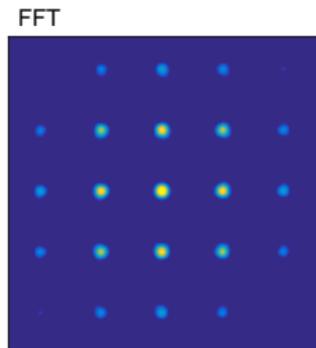
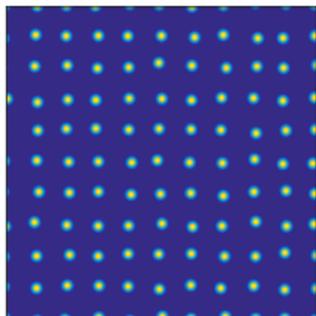
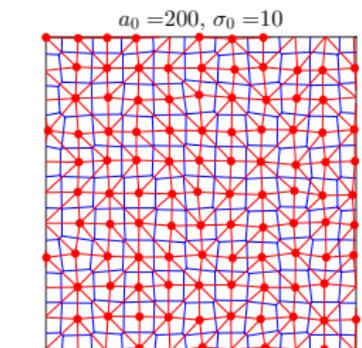
$\sigma_1 = 5.6$



$\sigma_1 = 1.3$

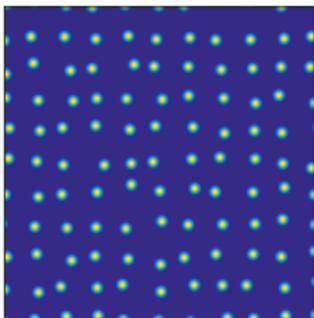
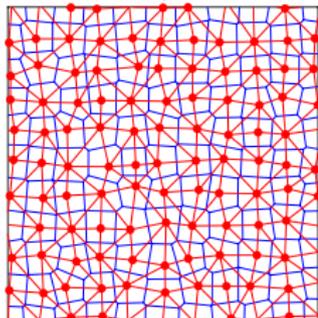


Применение преобразования Фурье, разбиений Делоне и Вороного для неупорядоченной квадратной решётки

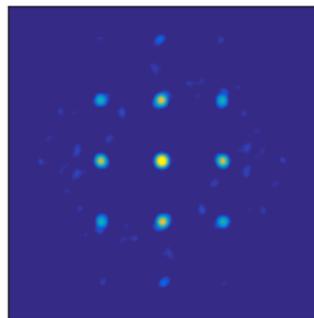


Применение преобразования Фурье, разбиений Делоне и Вороного для неупорядоченной квадратной решётки

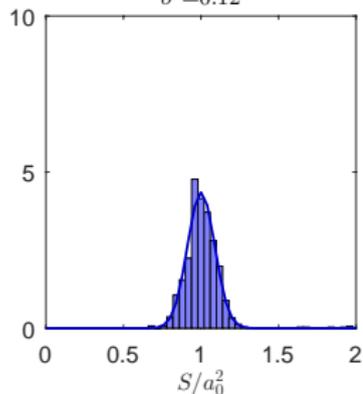
$a_0 = 200, \sigma_0 = 20$



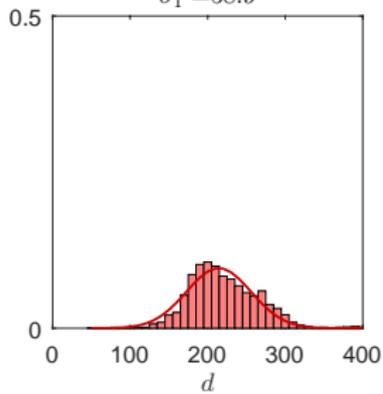
FFT



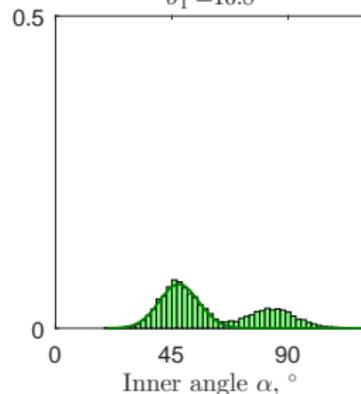
$\sigma = 0.12$



$\sigma_1 = 58.9$

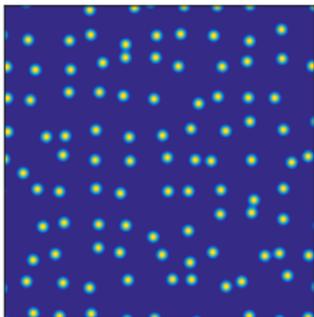
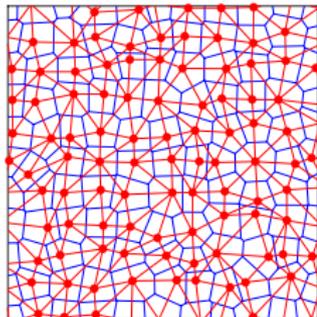


$\sigma_1 = 10.8$

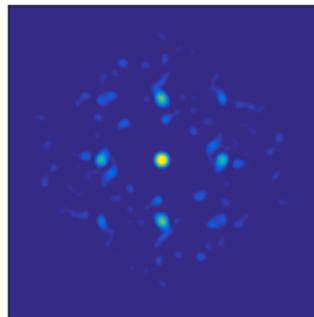


Применение преобразования Фурье, разбиений Делоне и Вороного для неупорядоченной квадратной решётки

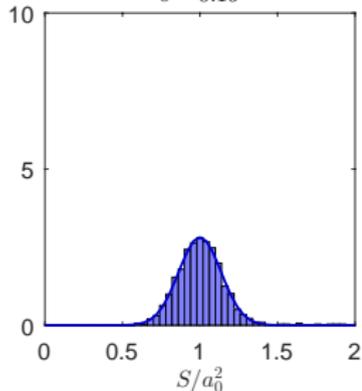
$a_0 = 200, \sigma_0 = 30$



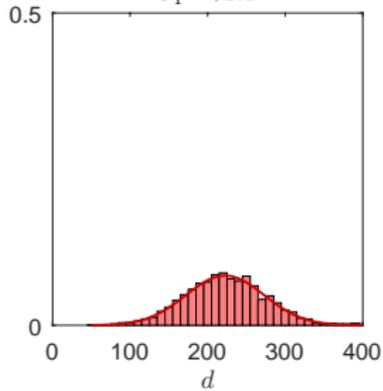
FFT



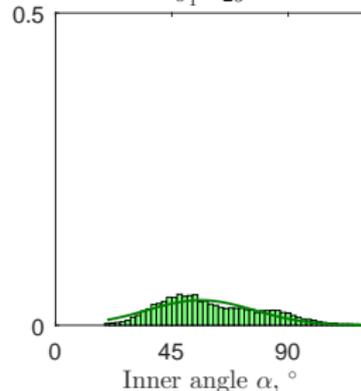
$\sigma = 0.19$



$\sigma_1 = 71.1$



$\sigma_1 = 29$



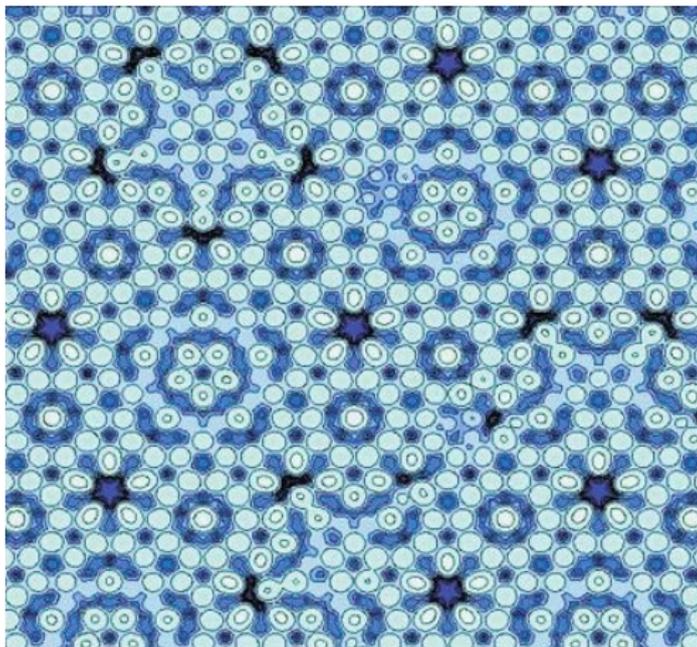
Квазикристаллы

Квазикристалл (англ. quasicrystal) – твёрдое тело, характеризующееся симметрией, запрещённой в классической кристаллографии (например, 5 или 10 порядка), и наличием дальнего порядка.

Дан Шехтман (род. 24 января 1941, Тель-Авив) — израильский физик и химик, Нобелевская премии по химии за 2011 год за открытие квазикристаллов (Al_6Mn).

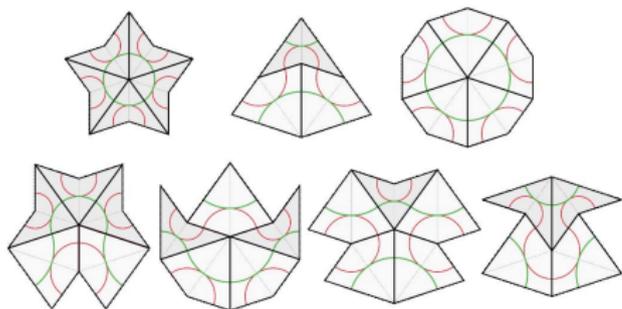
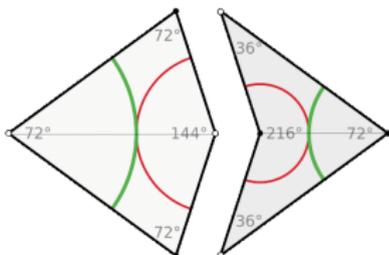


Атомная модель Al-Pd-Mn квазикристалла

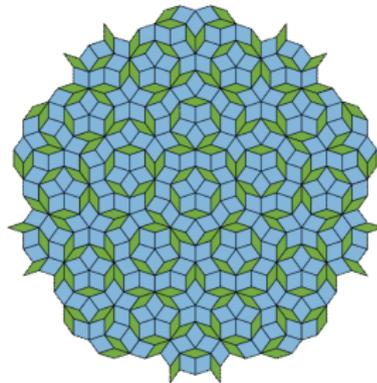
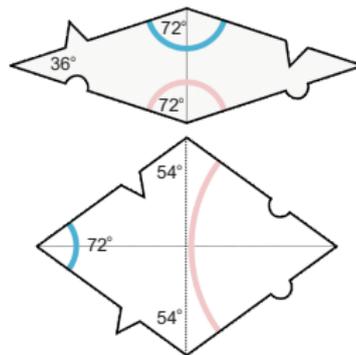


Мозаика (паркет) Пенроуза как пример квазикристалла

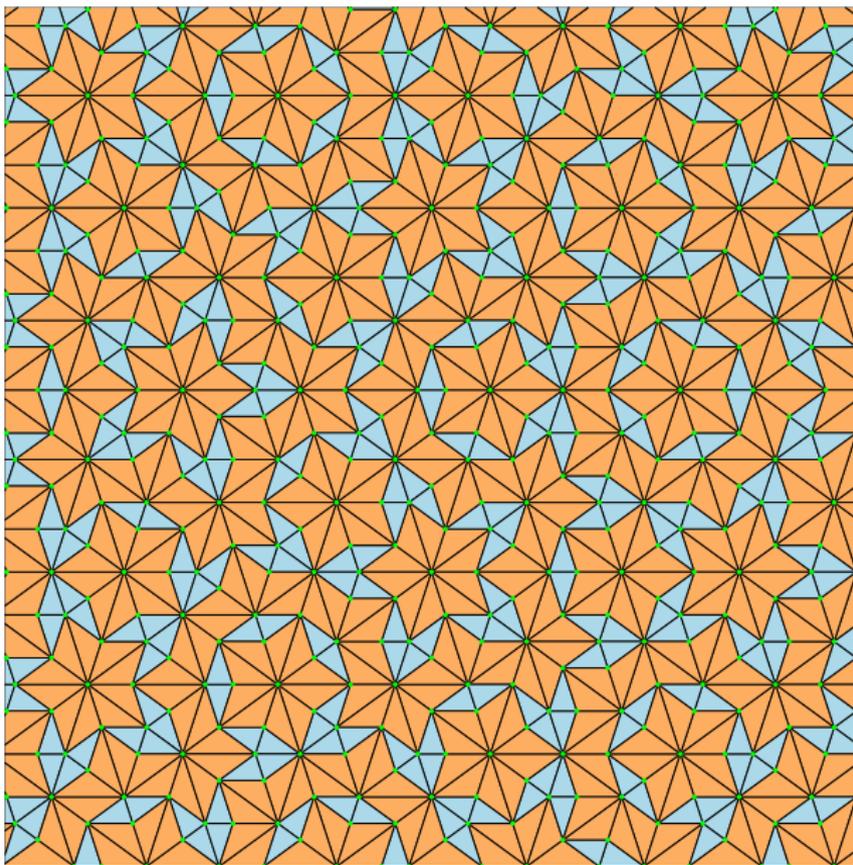
Паркет P2



Паркет P3

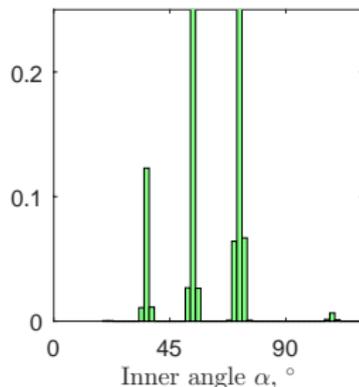
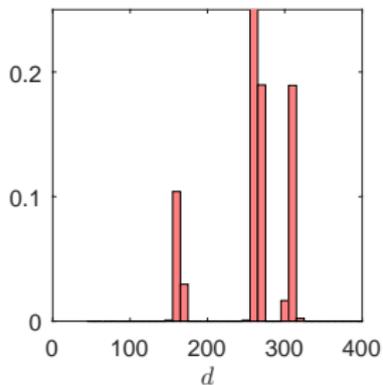
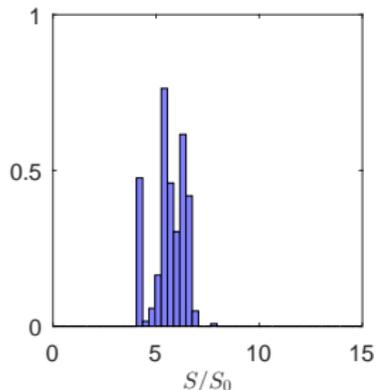
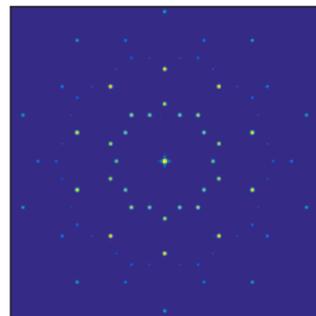
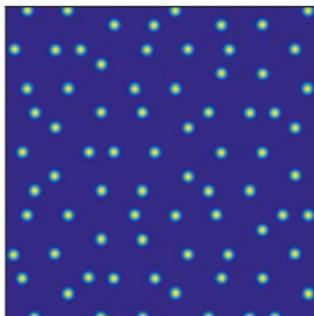
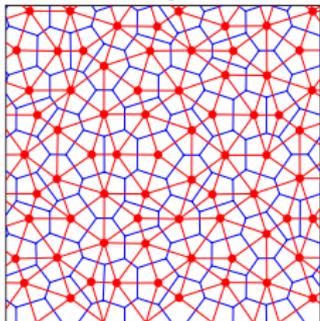


Мозаика (паркет) Пенроуза как пример квазикристалла



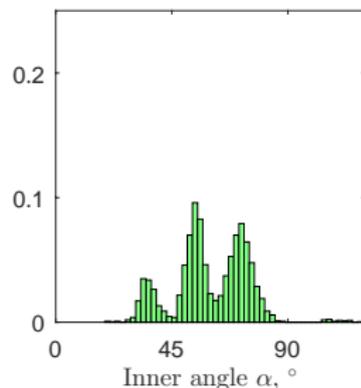
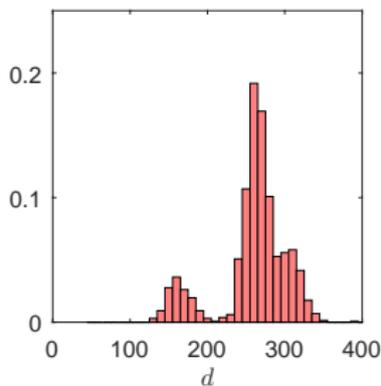
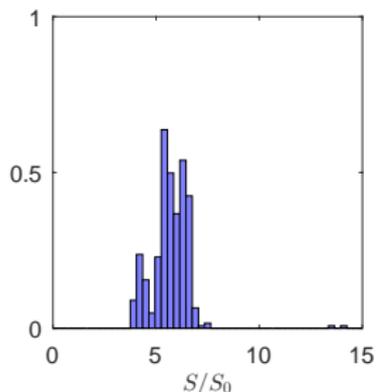
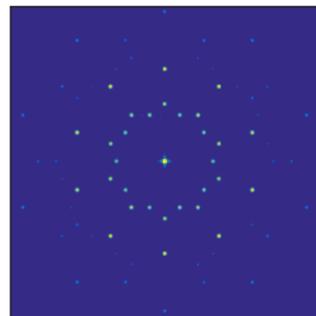
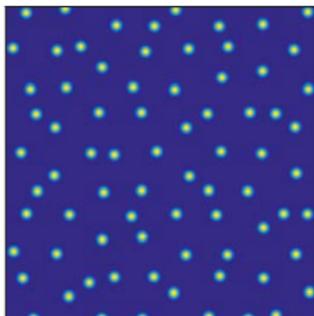
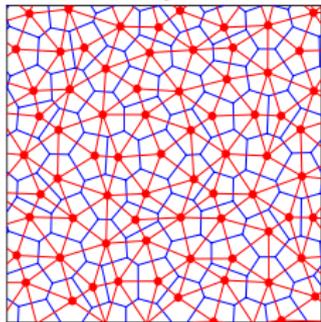
Применение преобразования Фурье, разбиений Делоне и Вороного для мозаики Пенроуза

Penrose tiling P3: $\sigma_0 = 2$



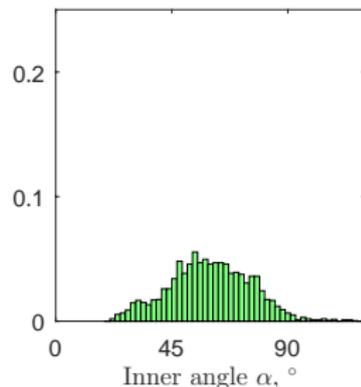
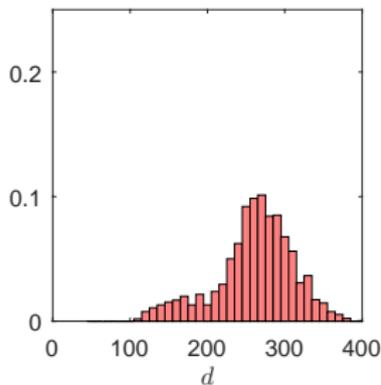
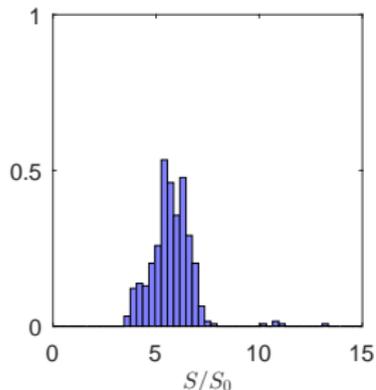
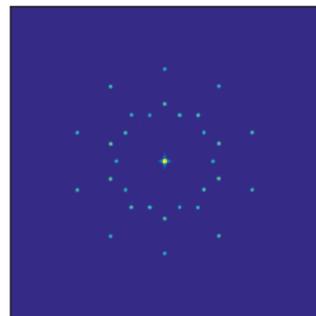
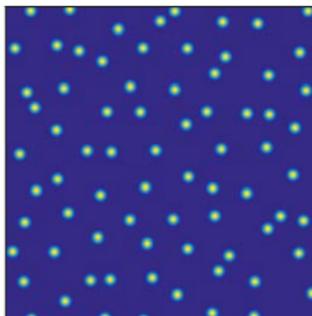
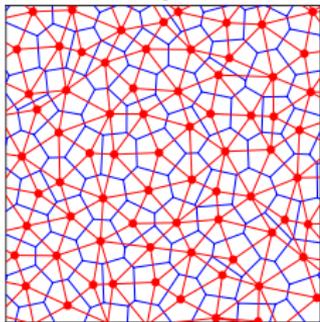
Применение преобразования Фурье, разбиений Делоне и Вороного для мозаики Пенроуза

Penrose tiling P3: $\sigma_0 = 10$

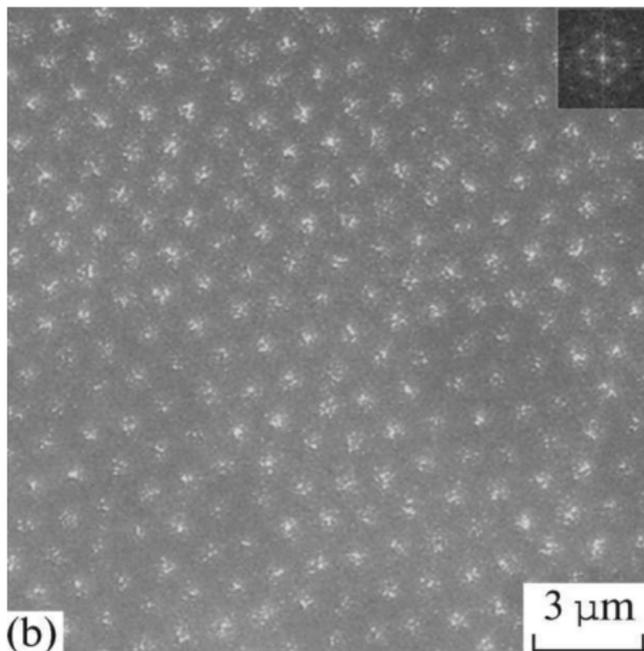


Применение преобразования Фурье, разбиений Делоне и Вороного для мозаики Пенроуза

Penrose tiling P3: $\sigma_0 = 20$



Анализ структуры вихревых решёток в сверхпроводниках второго рода



Решетка абрикосовских вихрей:
площадь на единичный вихрь

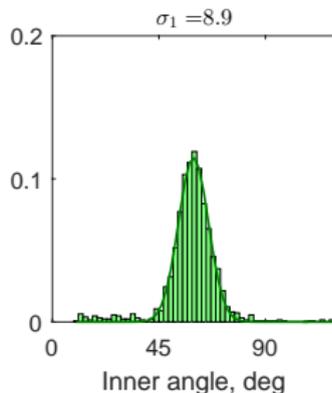
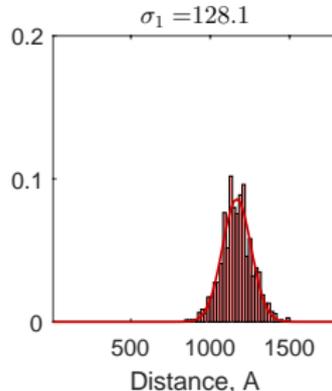
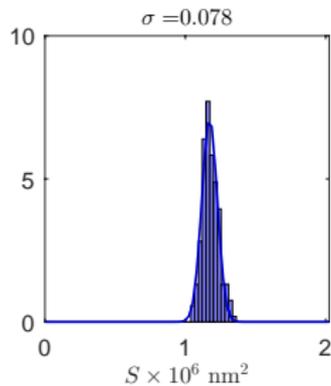
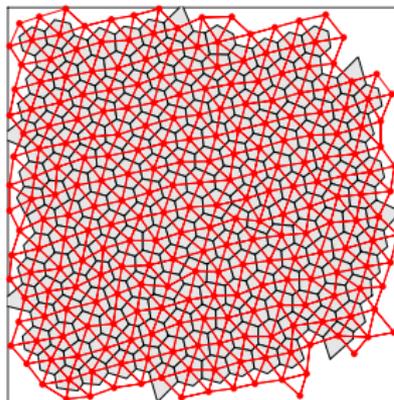
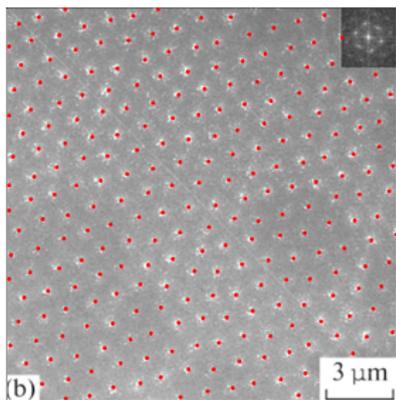
$$S = \frac{\Phi_0}{H},$$

где H – локальное магнитное поле,

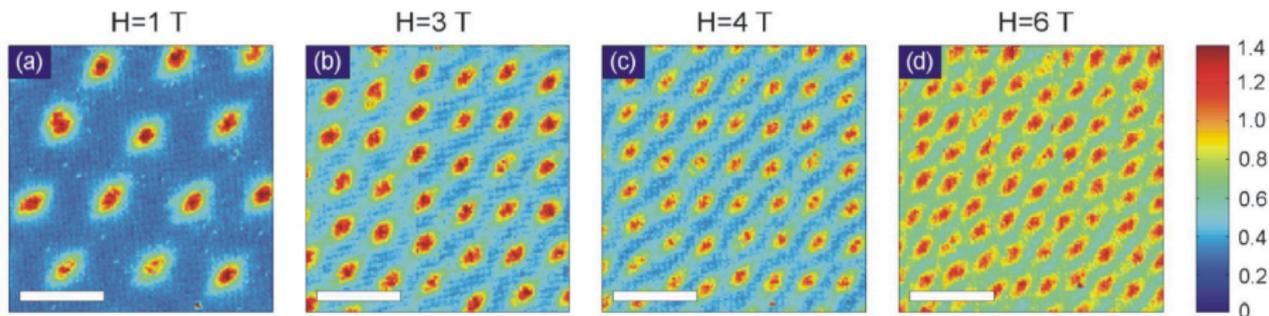
$\Phi_0 = 2 \cdot 10^{-7}$ Гс·см² – квант магнитного потока

Л. Я. Винников, А. В. Радаев, И. С. Вещунов, А. Г. Трошина, Ю. Лиу, Ч. Т. Лин, А. В. Борис, Вихревая структура в монокристаллах FeTeSe // Письма в ЖЭТФ, т. 93, 317-320 (2011).

Анализ структуры вихревых решеток в сверхпроводниках второго рода

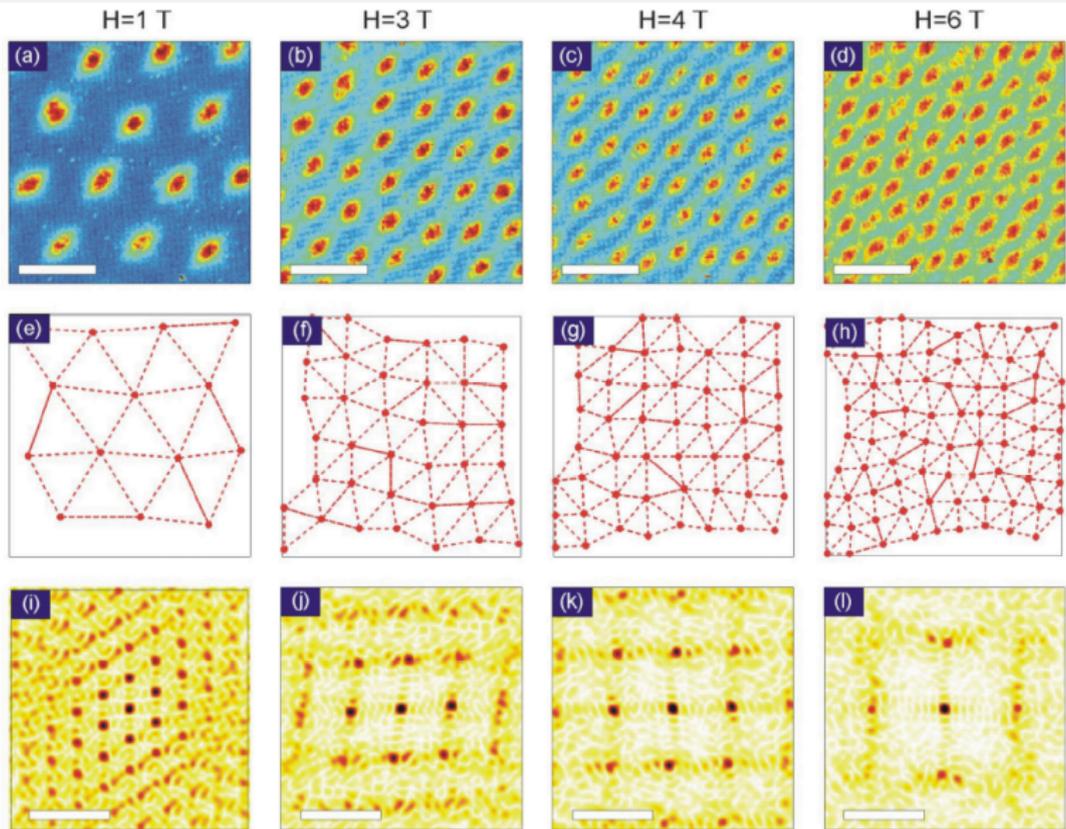


Анализ структуры вихревых решеток в сверхпроводниках второго рода

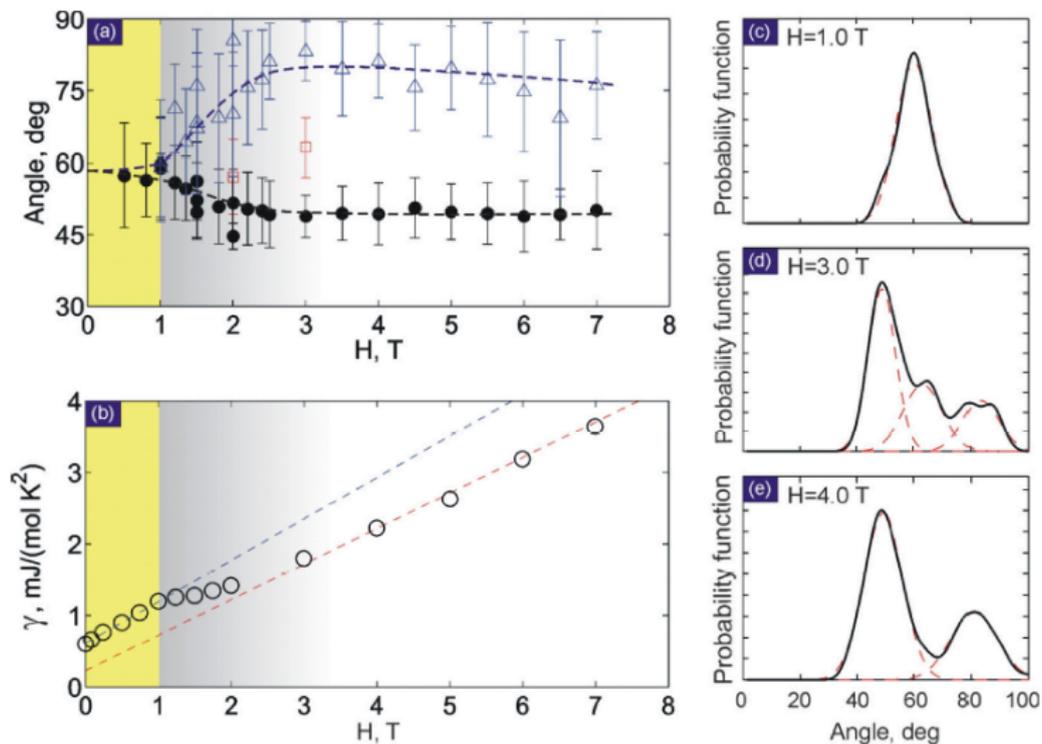


A. V. Putilov, C. Di Giorgio, V. L. Vadimov, D. J. Trainer, E. M. Lechner, J. L. Curtis, M. Abdel-Hafiez, O. S. Volkova, A. N. Vasiliev, D. A. Chareev, G. Karapetrov, A. E. Koshelev, A. Yu. Aladyshkin, A. S. Mel'nikov, and M. Iavarone, Vortex-core properties and vortex-lattice transformation in FeSe // *Physical Review B*, vol. 99, 144514 (2019).

Анализ структуры вихревых решеток в сверхпроводниках второго рода

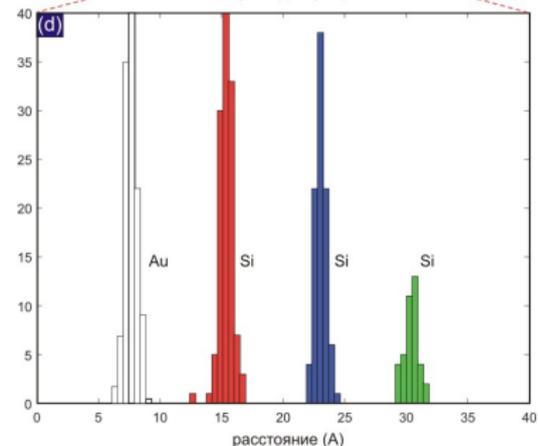
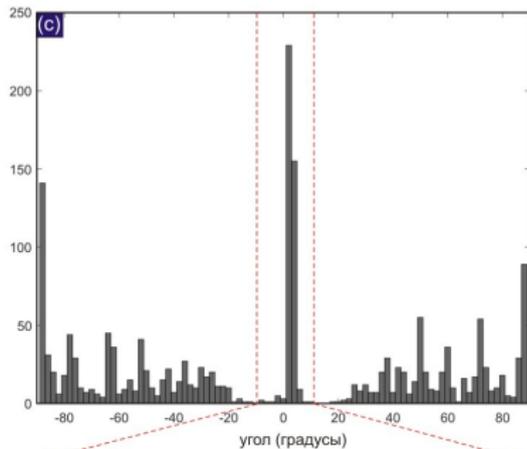
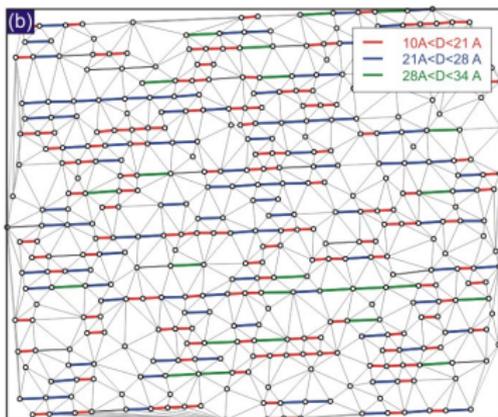
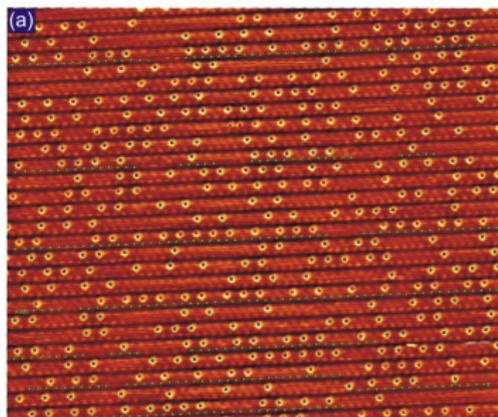


Анализ структуры вихревых решеток в сверхпроводниках второго рода

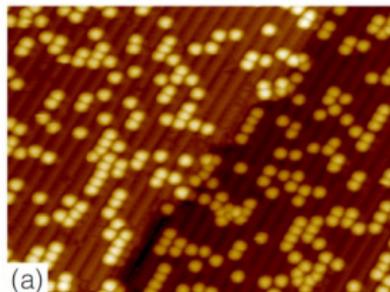


Обнаружен фазовый переход от треугольной решетки к квадратной решетке.

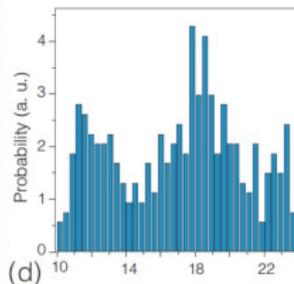
Адатоми Si на поверхности Si(111)5 × 2–Au



Молекулы C_{60} на поверхности $Si(111)5 \times 2-(Au, TI)$



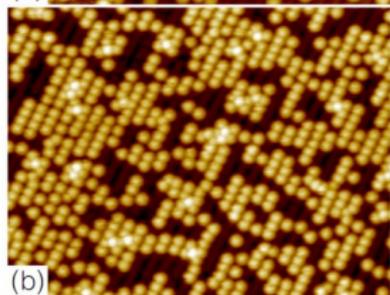
(a)



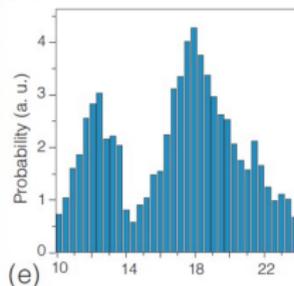
(d)

СТМ изображения размером $50 \times 40 \text{ nm}^2$ при $U = 2.0 \text{ V}$ после адсорбции C_{60} и соответствующая им функция распределения расстояния между молекулами C_{60} вдоль рядов

(a, d) 0.019 монослоя C_{60}

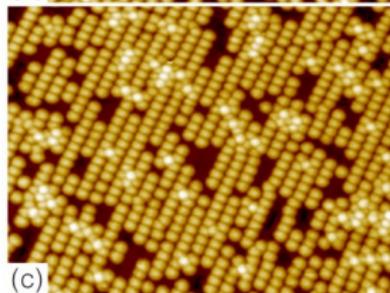


(b)

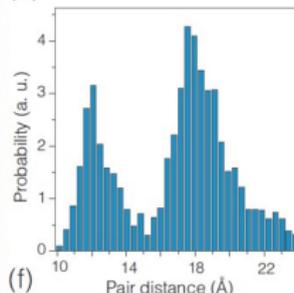


(e)

(b, e) 0.038 монослоя C_{60}



(c)



(f)

(c, f) 0.065 монослоя C_{60}