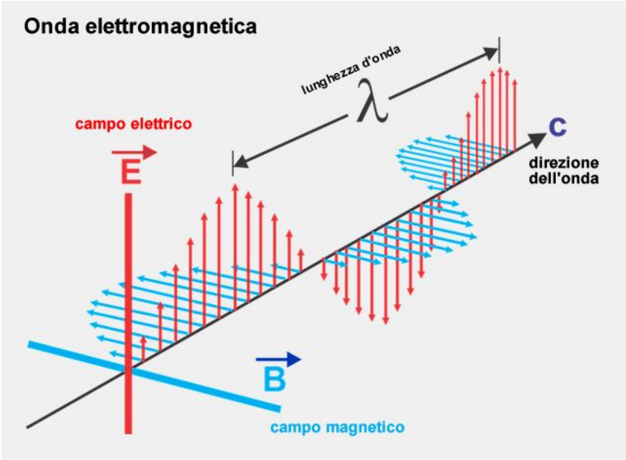
Cenni sulle trasformate di Fourier

Laura Magistrale in Biotecnologie Mediche
CV Nanobiotecnologie

A.A. 2020-21

alberto.cassetta@ic.cnr.it - 0403757525

Fenomeni Periodici

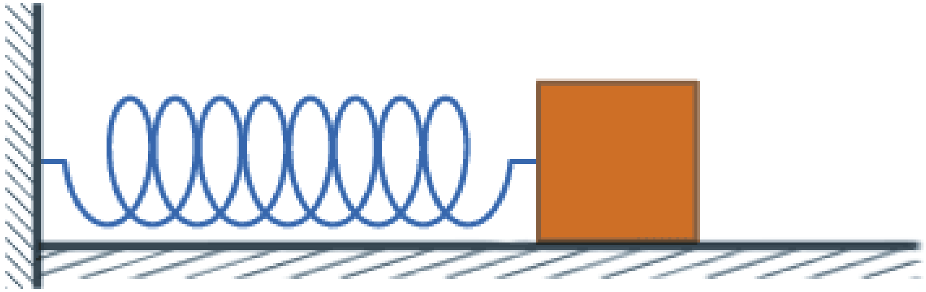


Per fenomeni (fisici) periodici intendiamo degli eventi che si ripetono con regolarità nel tempo e/o nello spazio

Le onde, meccaniche o elettromagnetiche sono un esempio classico di fenomeno periodico.

Il moto di un oscillatore armonico (corpo attaccato ad una molla che si muove senza attriti) è descritto dalla seguente funzione periodica:

$$S(t) = A \cos(\omega t + \varphi)$$



Una funzione che si ripete uguale a se stessa per t= **T** $\frac{2\pi}{|\omega|}$

(T = periodo; ω = frequenza; A = ampiezza, φ = fase)

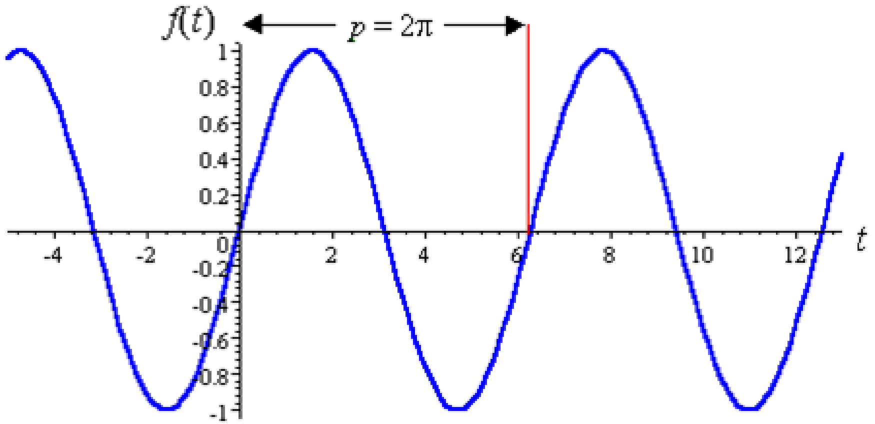
Funzioni Periodiche - 1

Definiamo come funzione periodica di **periodo T**, una qualsiasi funzione per cui valga la seguente relazione:

$$f(x) = f(x+T)$$

Ovvero la funzione *f(x)* assume lo stesso valore per valori di x = x + nT (n = 0, 1 … ∞)

Esempi classici sono le funzioni trigonometiche:

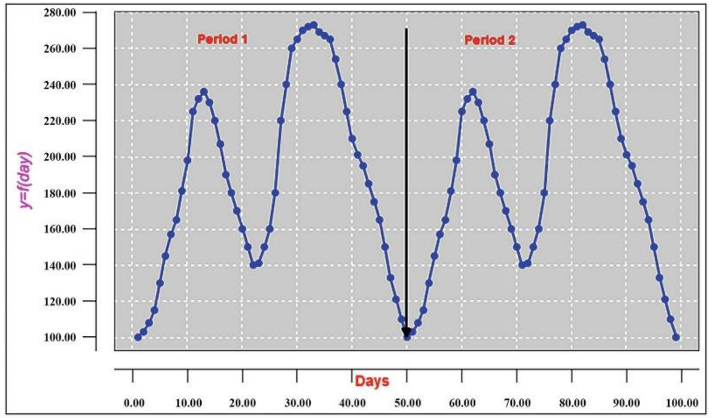


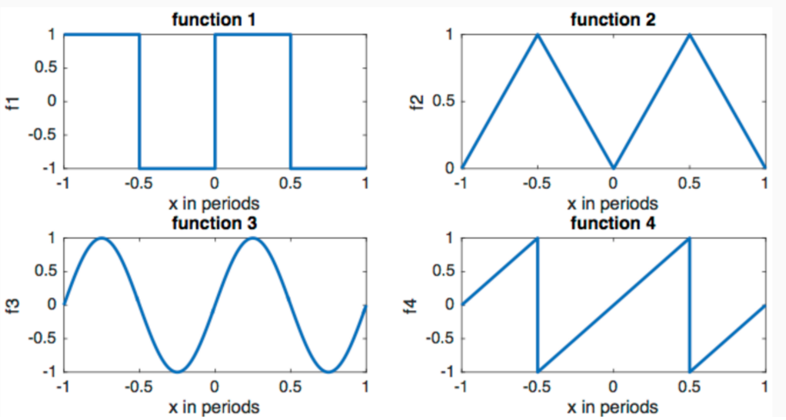
La funzione seno è una funzione periodica di periodo = 2π

Il periodo può essere un periodo temporale, come in determinati fenomeni luminosi, ma anche spaziale come in un reticolo cristallino.

Funzioni Periodiche - 2

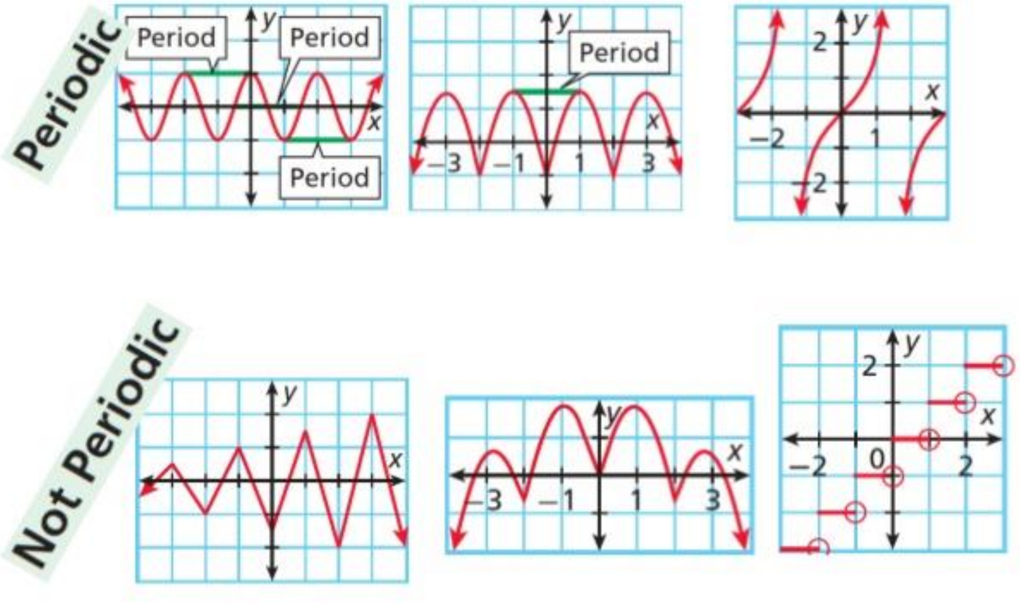
Le funzioni periodiche possono essere semplici, come le funzioni sin(x) e cos(x) ma anche più complesse (a volte molto complesse!)





Trigonometric Functions:

Periodic functions are functions that repeat exactly in regular intervals called **cycles** . The length of the cycle is called its **period** .

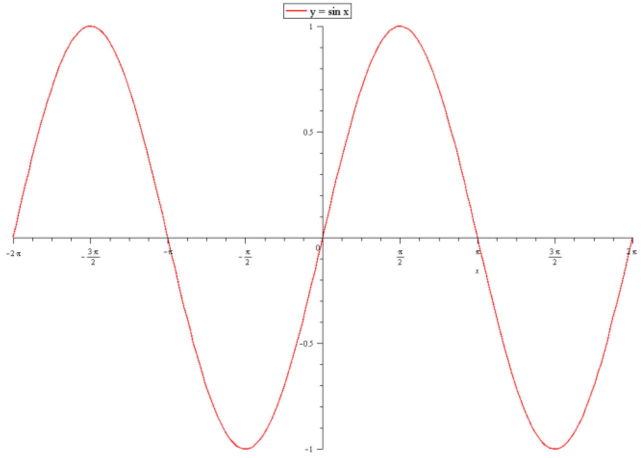


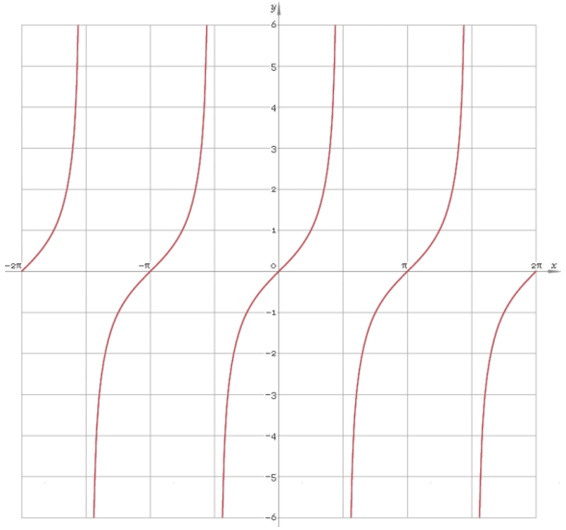
Funzioni Periodiche - 3

E’ importante fare attenzione al ***Dominio*** della funzione, ovvero l’intervallo in cui la funzione è definita.

Per esempio, per la funzione sin(x) è definita nell’intervallo ($-\infty, \infty$) ed ha periodo $\mathrm{T} = 2\pi$

La funzione tan(x) non è definita per $x = \frac{\pi}{2} + k\pi$, ed ha periodo T = $k\pi$ ma non nei punti in cui non è definita





Operazioni tra funzioni periodiche - 1

La somma, la differenza, il prodotto e il rapporto di due funzioni periodiche non generano necessariamente una funzione periodica.

Tuttavia:
1) Se ad una funzione periodica sommiamo un termine noto, o trasliamo la funzione di un certo valore, la funzione risultante è ancora periodica con lo stesso periodo:
Sia $f(x)$ periodica di periodo T, la funzione $g(x) = f(x+q) + v$ è ancora una funzione periodica di periodo T

2) Se una funzione periodica è moltiplicata per un numero a, la funzione risultante è ancora periodica con lo stesso periodo. Ovvero la funzione $g(x) = af(x)$ è ancora una funzione periodica di periodo T

3) Se in una funzione periodica la variabile è moltiplicata per un numero b, la funzione risultante è ancora periodica ma di periodo pari a $\frac{T}{|b|}$
Sia $f(x)$ periodica di periodo T_f, la funzione $g(x) = f(bx)$ è ancora una funzione periodica di periodo $\boldsymbol{T_g = \frac{T_f}{|b|}}$

Operazioni su funzioni periodiche - 2

Per prima cosa va definito il minimo comune multiplo (***mcm***) dei dei periodi.
Considerando che il periodo T è in generale un numero reale (es: π), il mcm di due periodi è il numero reale più piccolo che differisce dai numeri dati per *coefficienti moltiplicativi* ***interi***.

Siano dati due numeri reali ***a*** e ***b***, il mcm(a,b) ***c*** è il numero reale più piccolo per cui esistono due numeri interi *m* e *n* tali che

$$\boldsymbol{c} = m\boldsymbol{a} \qquad\qquad \boldsymbol{c} = n\boldsymbol{b}$$

Per esempio, siano $T_1 = \frac{\pi}{3}$ e $T_2 = \frac{\pi}{2}$, che possiamo scrivere come: $T_1 = \frac{2\pi}{6}$ e $T_2 = \frac{3\pi}{6}$

Il mcm(T_1, T_2) si ottiene ricercando il numero reale più piccolo ottenibile moltiplicando sia T_1 che T_2 per opportuni numeri interi:

$$\text{mcm(T1, T2)} = \text{mcm}\left(\frac{2\pi}{6}, \frac{3\pi}{6}\right) = \frac{6\pi}{6} = \pi$$

Ovvero date due funzioni periodiche $f_1(x)$ e $f_2(x)$ di periodicità rispettivamente T_1 e T_2, la condizione $f_1(x) = f_1(x+T)$ e $f_2(x) = f_2(x + T)$ sarà contemporaneamente soddisfatta per T = mcm(T_1, T_2) [in questo caso π]

Operazioni su funzioni periodiche - 3

Date due funzioni periodiche *f(x)* e *g(x)* con periodo rispettivamente T*f* e T*g* e definite sullo stesso dominio, avremo che :

1) Se il quoziente del rapporto $\frac{T_f}{T_g}$ **= 1**, la somma algebrica, il prodotto e il quoziente di *f(x)* e *g(x)* è una funzione periodica di Periodo $T = T_f = T_g$

2) Se il quoziente del rapporto $\frac{T_f}{T_g}$ è un **numero razionale**, la somma algebrica, il prodotto e il quoziente di *f(x)* e *g(x)* è una funzione periodica di Periodo $T = \mathrm{mcm}(T_f, T_g)$

3) Se il quoziente del rapporto $\frac{T_f}{T_g}$ è un **numero irrazionale**, la somma algebrica, il prodotto e il quoziente di *f(x)* e *g(x)* **NON** è una funzione periodica

Operazioni su funzioni periodiche - Esempi

1) La funzione $cos\ (\omega t + \ \alpha)$ è periodica con periodo T = $\frac{2\pi}{|\omega|}$

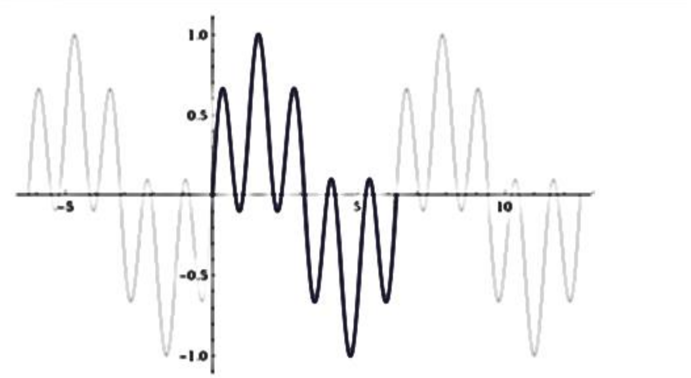
2) La funzione *f(x) = sin (3x) cos (2x)* è periodica con periodo 2π

   Infatti le funzioni seno e coseno hanno periodo 2π

   La funzione *sin (3x)* avrà quindi periodo $\frac{2\pi}{3}$

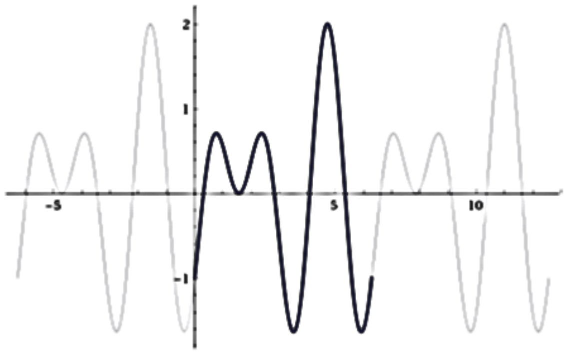
   La funzione *cos (2x)* avrà periodo $\frac{2\pi}{2}$ = π

   Il mcm ($\frac{2\pi}{3}$, π) = mcm ($\frac{2\pi}{3}$, $\frac{3\pi}{3}$) = $\frac{6\pi}{3}$ = 2π



3) La funzione *f(x) = sin (3x) - cos (2x)* è periodica con periodo 2π

   Pur essendo una funzione decisamente diversa ha una periodicità uguale alla funzione precedente



4) La funzione sin(πx)sin(x) non è periodica (T_f/T_g non è razionale) (2/2π)

Serie Numeriche

Consideriamo una **successione** di numeri (reali) a_1, a_2, …, a_n, definiamo come serie di a_n la somma degli infiniti numeri a_n e la indichiamo con:

$$\sum_{n=1}^{\infty} a_n$$

Questa somma può essere **divergente** per n $\to \infty$ come la serie (n intero positivo)

$$\sum_{n=0}^{\infty} n$$

Oppure può **convergere** ad un numero, come la serie(n $\to \infty$):

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}$$

Che converge al numero di Nepero (o Eulero) ***e***

Serie di funzioni

Così come esistono serie come sommatoria di infiniti termini numerici, esistono serie come sommatoria di infinite funzioni:

$$\sum_i f_n(x)$$

Una serie di funzioni è a sua volta una funzione: $F(x) = \sum_i f_n(x)$ ed ha, come ogni funzione un suo campo di definizione, per esempio:

$\sum_n x^n$ E' definita su tutto il campo Reale

$\sum_n \frac{1}{x^n}$ E' definita su tutto il campo Reale ma non in 0

Anche una serie di funzioni può essere convergente o meno, la convergenza può esistere in un insieme ristretto di valori di *x*:

Per esempio: $\sum_{n=0}^{\infty} x^n$

Converge a $\frac{1}{1-x}$ per *x* compreso nell'intervallo (-1, 1)

Diverge o oscilla per *x* compreso tra $(-\infty, -1]$ e $[1, \infty)$

Serie di funzioni – casi importanti

Serie di Potenze (polinomio di grado n): $a_0 + a_1 x \quad + a_2 x^2 + \ldots + a_n x^n$

Serie di Taylor $f(x) = f(x_0) + \frac{d[f(x_0)]}{dx}\frac{(x-x_0)}{1!} + \frac{d^2[f(x_0)]}{dx^2}\frac{(x-x_0)^2}{2!} + \ldots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d^n[f(x_0)]}{d^n}\frac{(x-x_0)^n}{n!}$

Usata per approssimare una funzione nelle vicinanze di x_0 con un polinomio

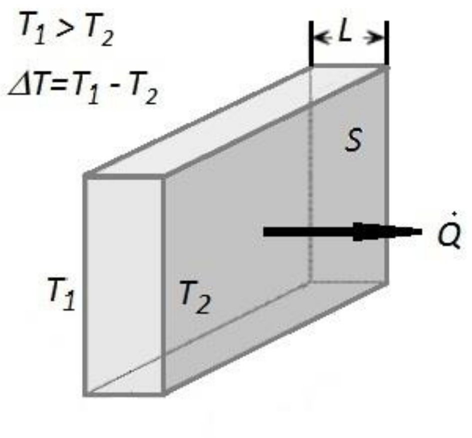
Serie Trigonometriche $\frac{a_0}{2} + \sum_n [\, a_n \cos(nx) + b_n \sin(nx)]$

(periodica, T=2/π)

Serie di Fourier - Introduzione

Jean Baptiste Joseph Fourier (1768 – 1830) formulò nel 1822 i fondamenti di quella che sarà nota come Analisi di Fourier, nel corso di uno studio sul calore: *La teoria analitica del calore*.

Nel risolvere l'equazione del calore, ovvero un'equazione differenziale la cui soluzione descrive il flusso di calore in un solido, in funzione della differenza di temperatura, Fourier trovò che una soluzione al problema era data da una serie trigonometrica.



Equazione di Fourier per la
CONDUZIONE TERMICA

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda}{c \cdot \rho}\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}\right) + \frac{\dot{q}}{c \cdot \rho}$$

T	=	temperatura [K]
t	=	tempo [s]
λ	=	conduttività termica [W/(m·K)]
ρ	=	densità [kg / m³]
c	=	calore specifico [kJ/(kg ·K)]
q	=	sorgente di calore [W/m³]

Serie di Fourier -1

Il problema posto da Fourier, riguarda la possibilità di esprimere una funzione periodica di periodo T, con una combinazione lineare infinita di funzioni seno e coseno (serie trigonometrica).
In sostanza:

$$f(x) = a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} [a_n \cos(nx) + b_n \sin(nx)]$$

La funzione periodica di periodo T, può essere rappresentata come una somma di infiniti termini seno e coseno. Spesso la serie viene scritta nella forma :

$$f(x) = a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} [a_n \cos(n\omega x) + b_n \sin(n\omega x)]$$

Dove $\omega = \frac{2\pi}{T}$, con T = Periodo e ω = frequenza

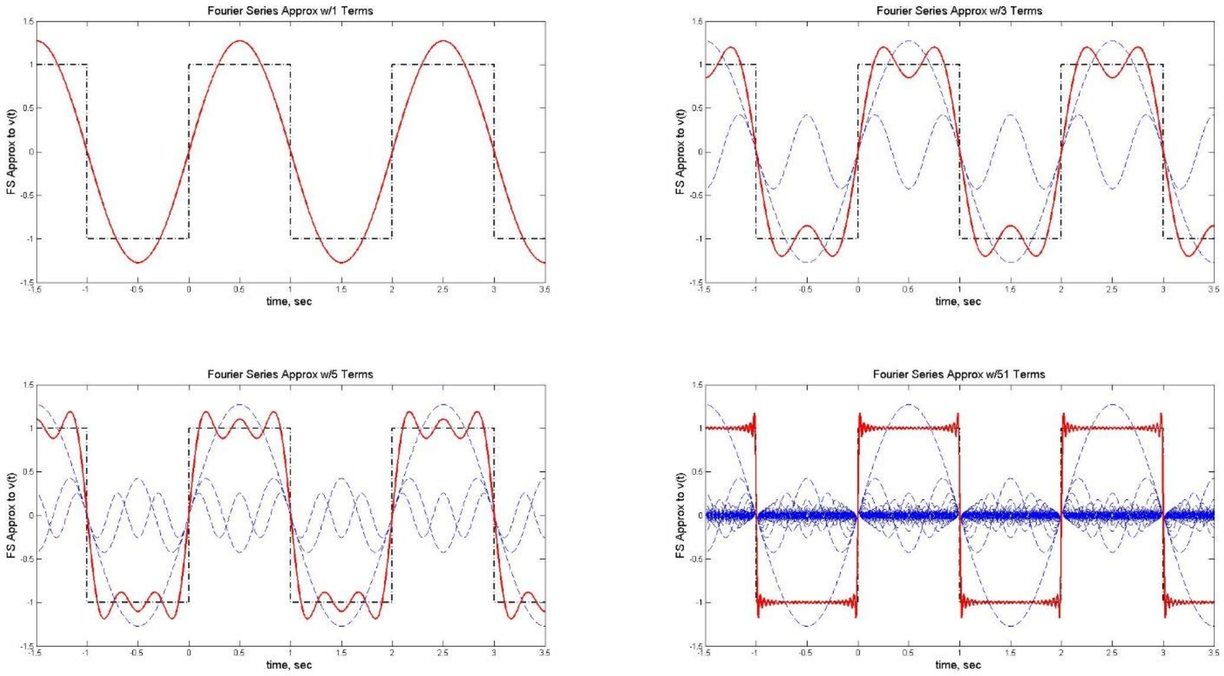
Perché *f(x)* sia esprimibile come serie di Fourier deve avere determinate proprietà, in particolare deve essere continua a tratti sul periodo (quindi non necessariamente continua)

Serie di Fourier - 2

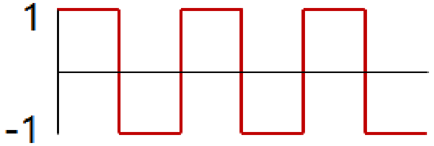
La somma di infiniti termini sinusoidali (armoniche), descrive una funzione non continua su tutto x .

Più è elevato il numero di termini sommati nella serie più l'approssimazione data dalla somma di funzioni trigonometriche si avvicina al valore esatto di *f(x)*

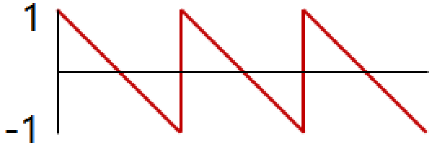
Poiché f(x) è data dalla somma di infinite armoniche si parla anche di *analisi armonica* o di *analisi di Fourier*



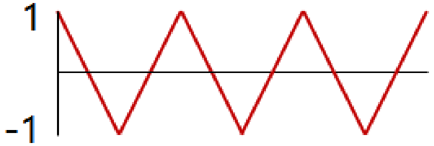
Serie di Fourier - Esempi



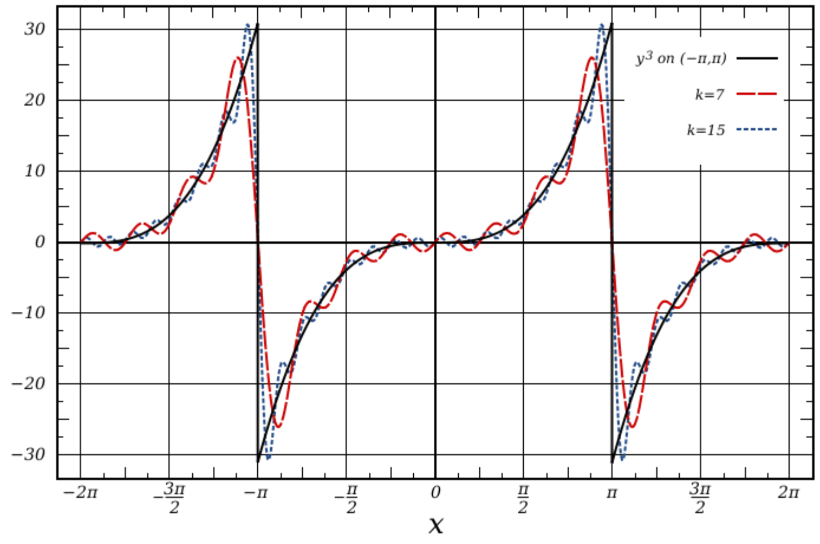
$$f(x) = \frac{4}{\pi} \sum_{n=1,3,5\ldots}^{\infty} \frac{1}{n} \sin(nx)$$



$$f(x) = \frac{2}{\pi} \sum_{n=1,2,3\ldots}^{\infty} \frac{1}{n} \sin(nx)$$



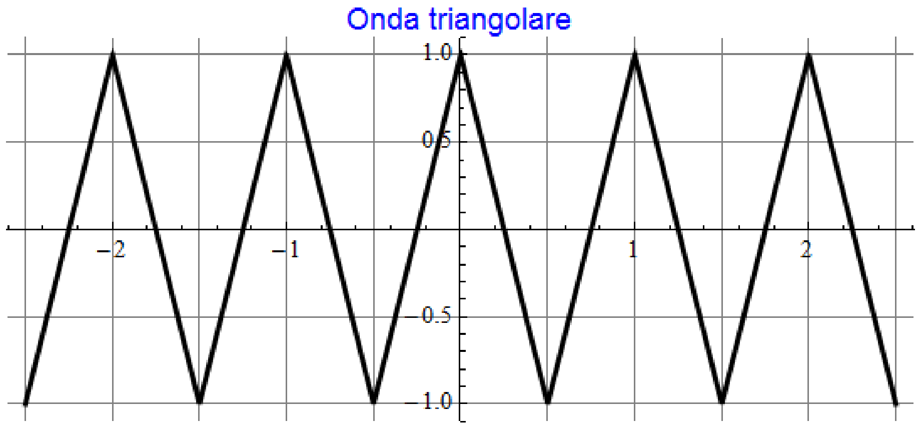
$$f(x) = \frac{8}{\pi^2} \sum_{n=1,3,5\ldots}^{\infty} \frac{1}{n^2} \cos(nx)$$

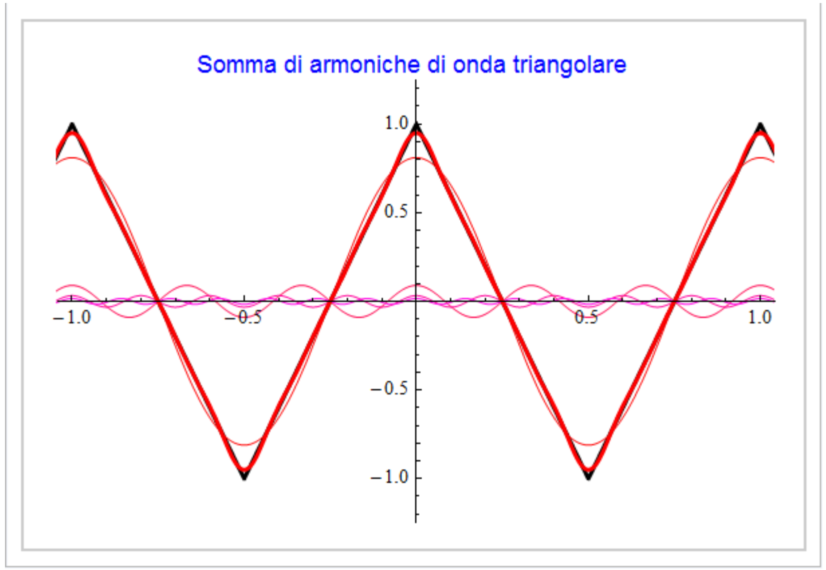


Serie di Fourier – Altri esempi

$$f(t) = A\left(1 + \frac{4}{T}t\right); \quad -\frac{T}{2} \leq t < 0$$

$$f(t) = A\left(1 - \frac{4}{T}t\right); \quad 0 \leq t < \frac{T}{2}$$





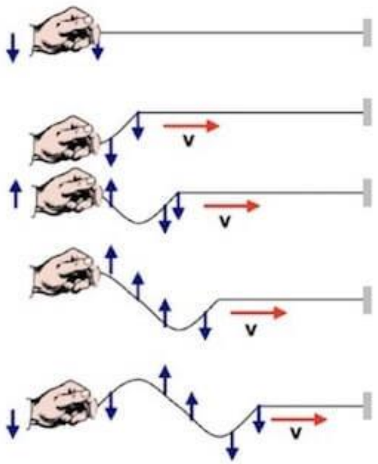
$$y(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{8}{(2n+1)^2\pi^2} \cos[\frac{2\pi(2n+1)}{T} t]$$

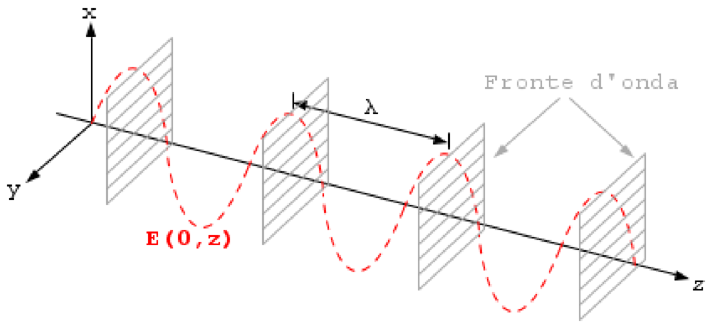
Importanza delle serie di Fourier

I fenomeni ondulatori sono particolarmente frequenti in natura:

- Onde elettromagnetiche
- Onde sonore
- Alcuni fenomeni biologici

Attraverso l’analisi di Fourier è possibile scomporre questi fenomeni nei loro elementi fondamentali, che sommati ci restituiscono il fenomeno ondulatorio ‘completo’.





Serie di Fourier - 4

$$f(x) = a_0 + \sum_{n=1}^{\infty}[a_n \cos(nx) + b_n \sin(nx)]$$

$$a_0 = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f(x)\, dx$$

$$a_n = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f(x)\cos(nx)\, dx$$

n = 1, 2, …, ∞

$$b_n = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f(x)\sin(nx)\, dx$$

Se la funzione è pari, ovvero se *f(x) = f(-x),* allora la serie si riduce a: $f(x) = a_0 + \sum_{n=1}^{\infty}[a_n \cos(nx)]$

Se la funzione è dispari, ovvero se *f(x) = -f(-x),* allora la serie si riduce a: $f(x) = \sum_{n=1}^{\infty}[b_n \sin(nx)]$

Serie di Fourier – 5

Abbiamo visto che la Serie di Fourier può essere espressa come $f(x) = a_0 + \sum_{n=1}^{\infty}[a_n \cos(nx) + b_n \sin(nx)]$

Richiamando la formula di Eulero sui numeri complessi, per cui:

$$\cos\vartheta = \frac{e^{i\vartheta} + e^{-i\vartheta}}{2} \qquad \sin\vartheta = \frac{e^{i\vartheta} - e^{-i\vartheta}}{2i}$$

Possiamo riscrivere la serie come:

$$f(x) = c_0 + \sum_{n=1}^{\infty}(c_n e^{inx} + c_{-n}e^{-inx})$$

Che si trova più spesso nella forma:

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n e^{inx}$$

Dove:

$$A_n = \frac{1}{T}\int_{-T/2}^{T/2} f(x)e^{in\omega x}dx$$

Trasformata di Fourier – Introduzione 1

In matematica una trasformata è una operazione matematica che permette di trasformare una funzione, definita su un certo dominio, in una nuova funzione definita in un dominio diverso.

Le trasformate INTEGRALI stabiliscono una relazione tra le due funzioni e hanno forma generale:

$$T[f](s) = \int_{t_1}^{t_2} K(s,t) f(t) dt$$

La funzione *K(s,t)* definisce il tipo di trasformata ed è detto il **nucleo** della trasformata
Per alcuni tipi di trasformata è possibile definire una **antitrasformata**, che stabilisce la relazione inversa:

$$f(t) = \int_{u_1}^{u_2} K^{-1}(u,t)(T[f](u)dt$$

Trasformata di Fourier – Introduzione 2

Perché ricorrere alle trasformate?

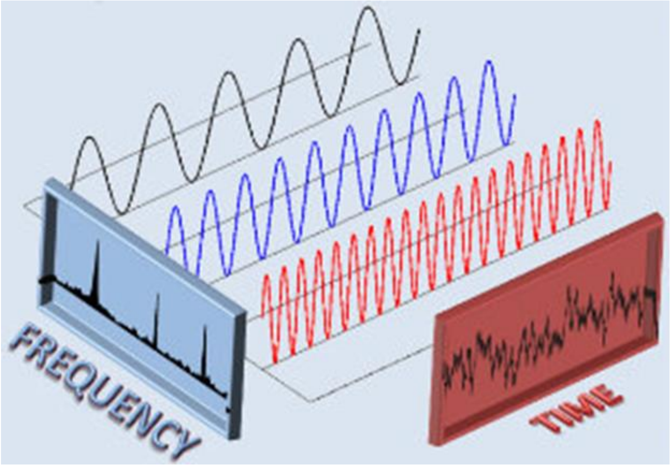
La risposta è abbastanza semplice. **Può accadere che la trattazione matematica di una certa funzione sia piuttosto complessa nella sua forma originale, è però possibile che la trattazione matematica della funzione trasformata sia invece più semplice.**
Una volta eseguito il calcolo sulla funzione trasformata, è possibile riportarla alla forma originale (anti-trasformata)

$f(x) \xrightarrow{\text{Trasformata}} T[f(x)] \longrightarrow$

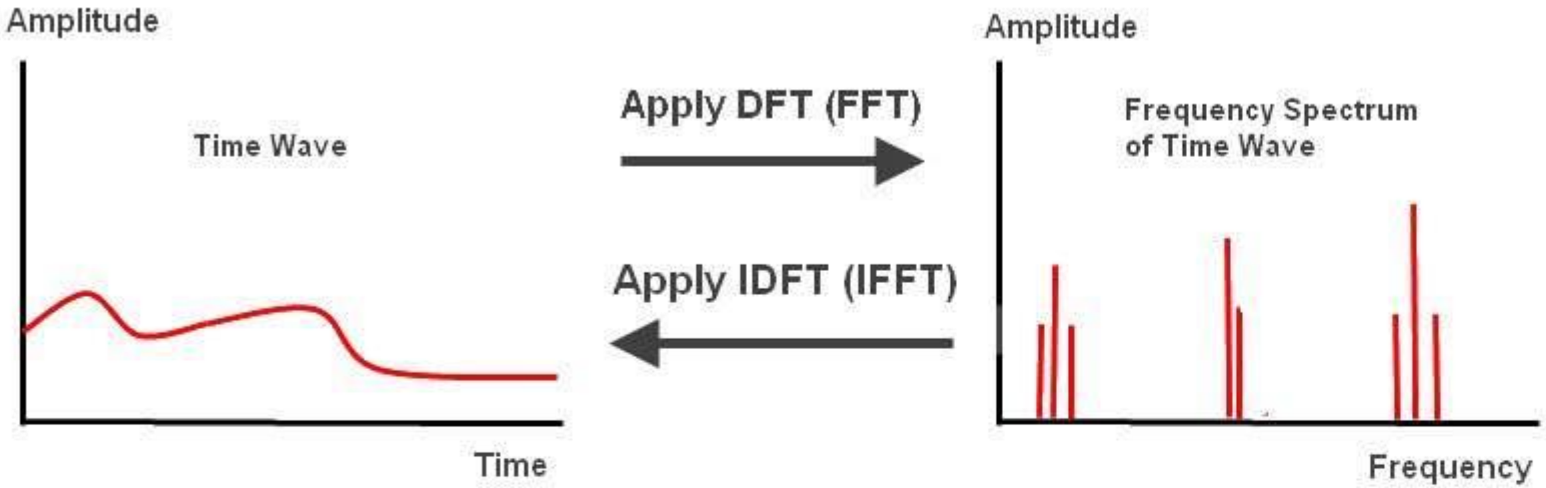
$\longrightarrow T[f(x)]' \xrightarrow{\text{Anti-trasformata}} f'(x)$

Trasformata di Fourier – introduzione 3

La trasformate di Fourier è usata largamente nell'analisi dei segnali, siano essi elettrici, acustici o altro. Utilizzando la trasformata di Fourier è possibile dividere il segnale, nelle sue componenti.



Un fenomeno ondulatorio (acustico, elettromagnetico) può essere rappresentato da una funzione definita nel dominio del tempo, questa funzione può essere opportunamente trasformata in una nuova funzione definita nel dominio delle frequenze (analisi spettrale)



Da un dominio ad un altro dominio

trasformazione

SUONO

Nuova rappresentazione (altezze, ritmo, tempi)

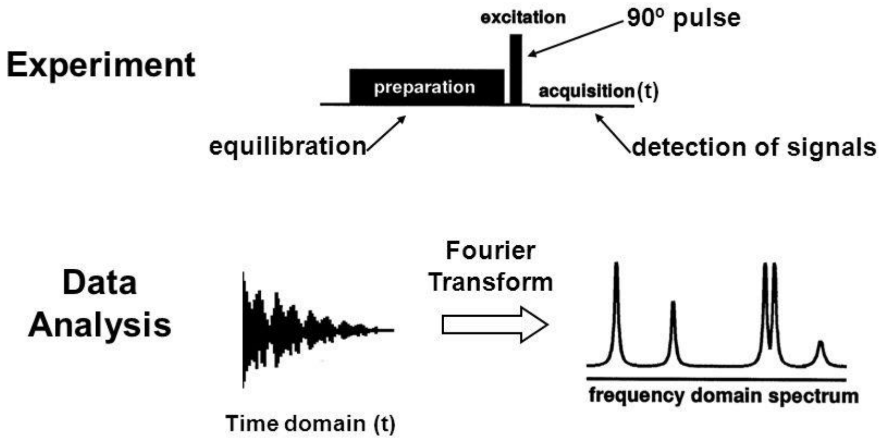
Un altro esempio

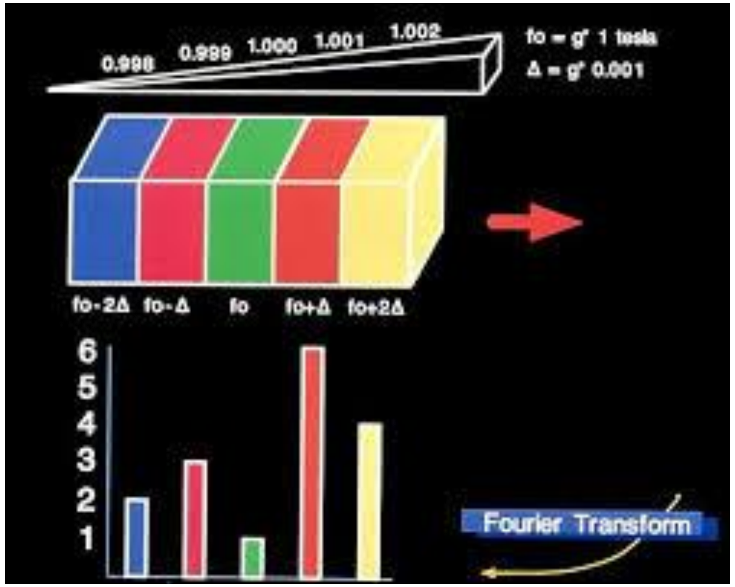
S.S. 14 Km 163,5 Basovizza (Trieste)

Latitudine: 45.643841 | **Longitudine:** 13.849806

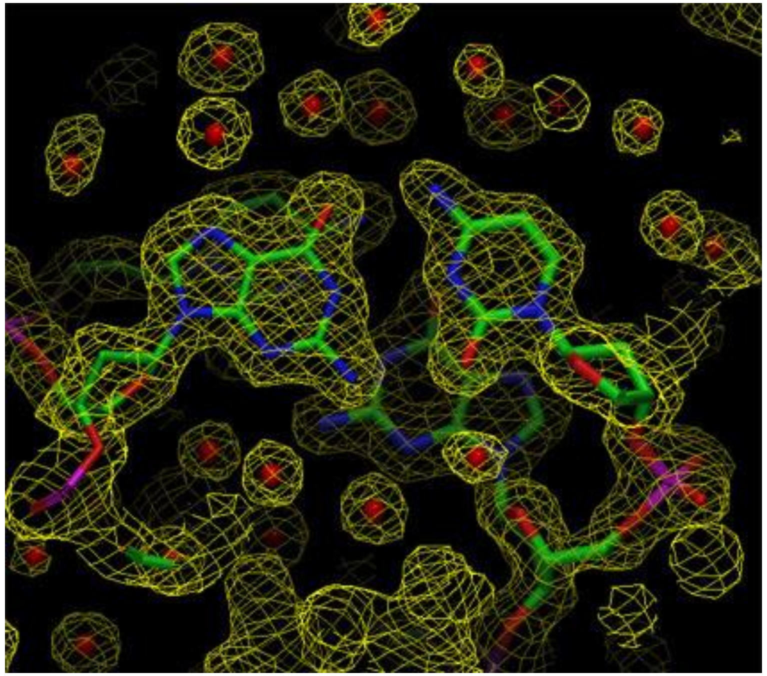
Applicazioni

The Pulse FT NMR Experiment

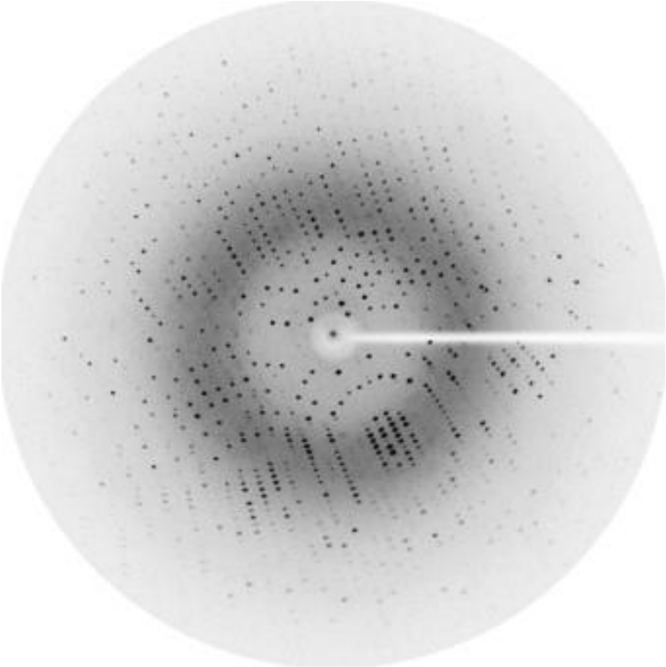




FT In Biologia strutturale



Densità Elettronica
(spazio reale)



Fattori di Struttura
(spazio reciproco)

Trasformata di Fourier - definizione

Sia data una funzione, non necessariamente periodica, ma continua a tratti e assolutamente integrabile
Se, per ogni ω definito nel campo reale esiste finito l'integrale improprio:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(t)e^{-i\omega t}dt$$

La funzione f(x) è trasformabile secondo Fourier e la sua trasformata di Fourier (FT) sarà data da:

$$FT[\,f(t)\,] = \mathbf{T(\omega)} = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)e^{-i\omega t}dt \quad \forall\, \omega \in \mathbb{R}$$

Si passa dal dominio in t al dominio in ω

Funzione continua a tratti: *funzione che possiede un numero finito di punti x_n per cui esistono i limiti:*

$$\lim_{x \to x_0^+} f(x) \qquad\qquad \lim_{x \to x_0^-} f(x)$$

Funzione assolutamente integrabile: *funzione per cui esiste ed è finito l'integrale improprio:*

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

Trasformata di Fourier – Antitrasformata

Come si vede il campo di applicabilità della trasformata di Fourier è ben più ampio di quello delle serie di Fourier. Infatti la funzione f(x) non deve necessariamente essere periodica.

Non tutte le funzioni sono però trasformabili, devono essere soddisfatte le condizioni precedentemente date.

Inoltre se la funzione è trasformabile secondo Fourier e sia essa T(ω), si può definire la sua **antitrasformata** (FT^{-1}):

$$FT^{-1}[T(\omega)] = \boldsymbol{f(t)} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} T(\omega)e^{i\omega t}d\omega \quad \forall\, \omega \in \mathbb{R}$$

In sostanza l'antitrasformata è la operazione inversa della trasformata, anche se è un'operazione assolutamente generica, ovvero data f(x) se ne può calcolare sia la trasformata che la sua antitrasformata, che sono in relazione tra loro:

$$\mathbf{T^{-1}(\omega) = \frac{1}{2\pi}T(-\omega)}$$

Trasformata di Fourier – Linearità

Linearità: *siano f(x) e g(x) due funzioni trasformabili secondo Fourier, allora lo è anche una qualsiasi combinazione lineare di f(x) e g(x)*, ovvero:

$$FT[afx(x) + bg(x)](\omega) = aT(\omega) + bU(\omega)$$

Con FT[f(x)] = T(ω) e FT[(g(x)] = U(ω)

La Trasformata di Fourier è quindi un **Operatore Lineare**

Trasformata di Fourier - Riscalamento

Riscalamento: *Sia **a** un numero reale diverso da zero, avremo che:*

$$FT[f(ax)] = \frac{1}{|a|}\, T\left(\frac{\omega}{a}\right)$$

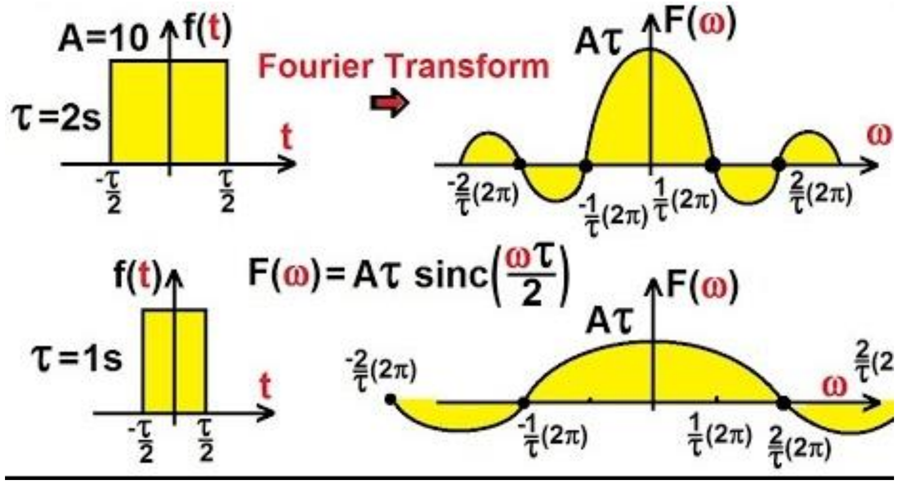
Se $a = -1$, abbiamo:

$$FT[f(-x)] = T(-\omega)$$

Consideriamo la funzione f(x) detta a finestra, per cui:

$f(x) = A$ *per* $-\frac{T}{2} < x < \frac{T}{2}$ *e* 0 *per ogni altro valore di x*

$$FT[f(x)] = A^* \frac{\sin(\frac{x}{T})}{\frac{x}{T}}$$



Trasformata di Fourier – Traslazione e Modulazione

Traslazione: *Sia dato un numero reale a, se la funzione f(t) è trasformabile secondo Fourier*, avremo che:

$$\boldsymbol{FT[f(x-a)] = T(\omega)\, e^{-ia\omega}}$$

La relazione opposta:

Modulazione: siano date le condizioni precedenti, avremo che

$$\boldsymbol{FT\left[f(x)\, e^{iat}\right] = T(\omega\ - a)}$$

Nota:
<u>La relazione di Traslazione è particolarmente utile in cristallografia, dove ***a*** può essere un vettore del reticolo cristallino (di tipo n$\vec{\boldsymbol{r}}$)</u>

Trasformata di Fourier – derivata e coniugazione

Derivata: *Sia f(x) una funzione trasformabile secondo Fourier e derivabile*

$$\boldsymbol{FT[\,f'(x)] = i\omega\, T(\omega)}$$

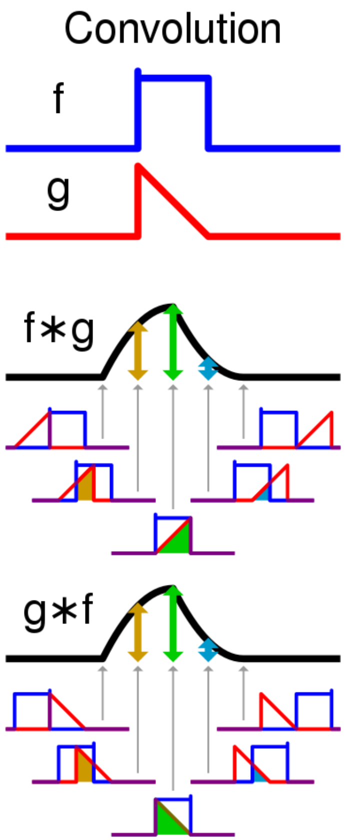
Coniugazione*: Sia f(x) una funzione definita nel campo complesso e trasformabile secondo Fourier:*

$$\boldsymbol{FT\left[\,\overline{f(x)}\,\right] = \overline{T(-\omega)}}$$

Dove $\overline{f(x)}$ *è la funzione complessa e coniugata di f(x), e* $\overline{T(-\omega)}$ *e la funzione complessa e coniugata di T(-*ω*)*

Convoluzione di due funzioni

Matematicamente, la convoluzione di due funzioni di una variabile consiste nell'integrazione del prodotto di due funzioni (integrabili) in cui una funzione viene moltiplicata per una seconda funzione a sua volta traslata di un certo valore.



La convoluzione di due funzioni si indica con: **f(t) * g(t)**

Matematicamente:

$$h(x) = (f * g)(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x-t)\, g(t)\, dt$$

vale anche:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x-t)\, g(t)\, dt = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)\, g(x-t)\, dt$$

Ovvero:

$$(f * g)(x) = (g * f)(x)$$

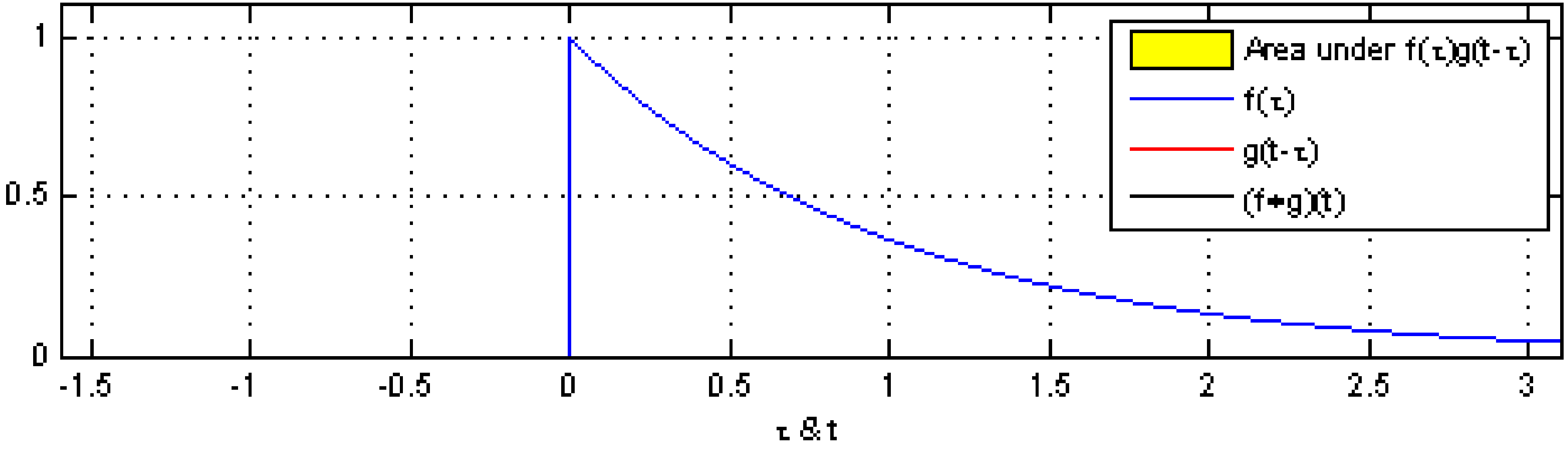
La convoluzione è quindi commutativa.

Significato di una convoluzione - 1

La convoluzione di due funzioni fornisce una nuova funzione in cui una ogni valore di una funzione data viene *pesata* ('perturbata') dall'altra funzione.

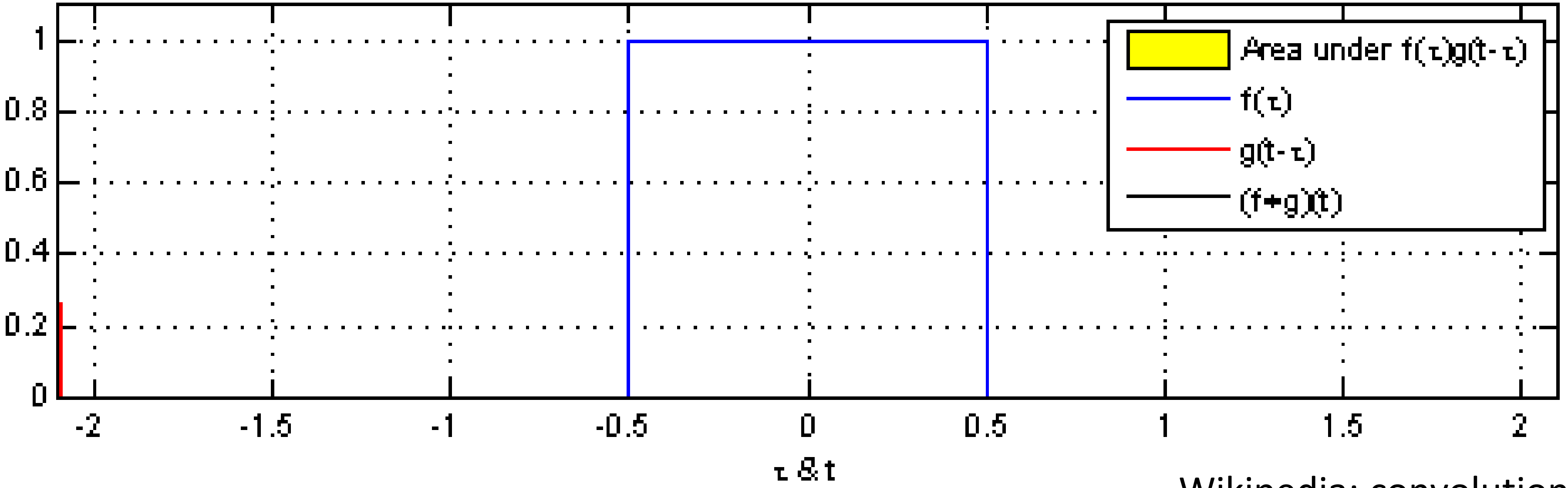
$$(f * g)(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)\, g(x-t)\, dt$$

La funzione *g(x-t)* è la 'funzione peso' della *f(t)* nell'operazione di convoluzione



Wikipedia: convolution

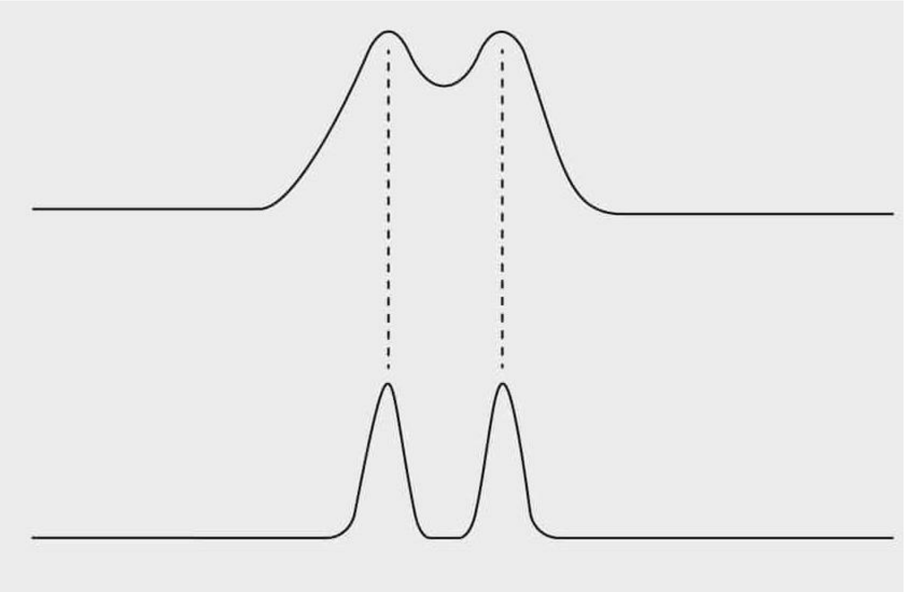
Significato di una convoluzione - 2



Wikipedia: convolution

La convoluzione h(x) di due funzioni f(t) e g(t) esprime l'effetto di una funzione sulla 'forma' dell'altra funzione

Esempio di convoluzione



Un esempio:
Nella misurazione di uno spettro di assorbimento, la misura risente della dimensione finita delle fenditure di ingresso questo causerà un allargamento delle righe dello spettro dipendente dalla larghezza delle fenditure. Questo causa una perdita di risoluzione dello spettro.

La convoluzione di due funzioni causa in genere un 'allargamento' della funzione originale.

Trasformata di Fourier di una convoluzione

Molto importante è la trasformata di Fourier di una convoluzione, per cui:

$$\boldsymbol{TF[f\ * g] = TF[f] \cdot TF[g]}$$

Ovvero **la trasformata di Fourier di una convoluzione è il prodotto delle convoluzioni**
Questa proprietà è molto utile e molto comoda perché in alcuni casi semplifica notevolmente il calcolo.

Inoltre:

$$TF[f\ \cdot g] = TF[f] * TF[g]$$

La trasformata di Fourier del prodotto di funzioni è la convoluzione delle trasformate delle funzioni

Infine, per l'antitrasformata:

$$TF^{-1}\{TF[f\ * g]\} = TF^{-1}\{TF[f] \cdot TF[g]\} = f * g$$

Correlazione ‘incrociata’ (*Cross-Correlation*)

La correlazione incrociata, o cross-correlation è utilizzata per valutare la similitudine di due funzioni al variare di una certa variabile:

Matematicamente:

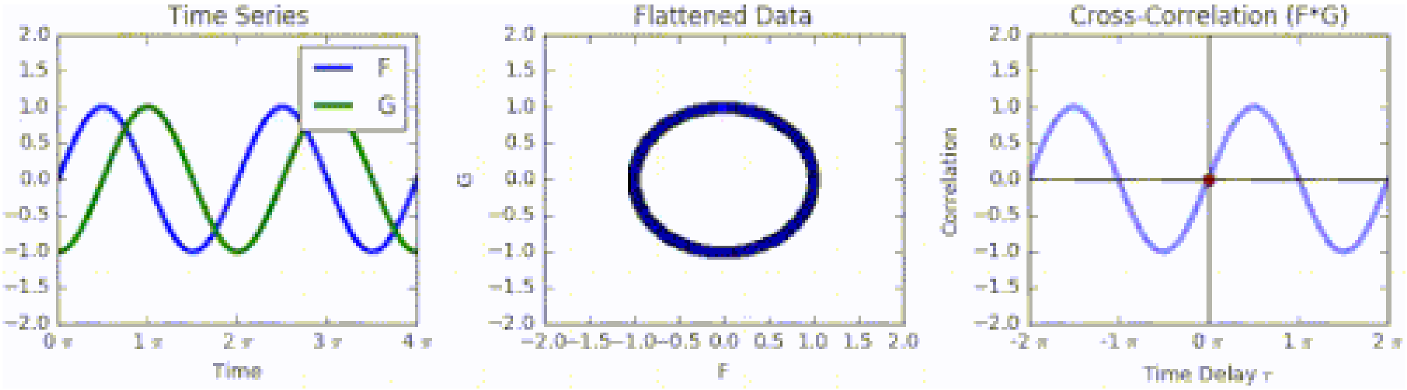
$$\boldsymbol{j(x) = (f \star g)(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{f(t)}\, g(x+t)dt}$$

Dove $\overline{\boldsymbol{f(t)}}$

Indica la funzione complessa e coniugata della funzione *g(t)*

Se la funzione è reale *f(t)* è uguale alla sua complessa coniugata

Significato della Correlazione ‘incrociata’



L’integrazione del prodotto delle due funzioni viene fatta al variare di tempo t.
Quando lo *shift* (τ) applicato determina la massima sovrapposizione delle due funzioni, allora la funzione correlazione avrà il suo valore massimo.

$$\boldsymbol{j(\tau) = (f \star g)(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{f(t)}\, g(\tau + t)dt}$$

Cross-Correlation e Convoluzione

Vale la proprietà

$$\int_{-\infty}^{\infty} \overline{f(t)}g(t+x)dt = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{f(t-x)}g(t)dt$$

Non vale la proprietà commutativa:

$$f \star g \neq g \star f$$

La formulazione è molto simile a quella della convoluzione:

$$h(x) = (f * g)(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x-t)\, g(t)\, dt$$

Convoluzione

$$j(x) = (f \star g)(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{f(t-x)}g(t)dt$$

Correlazione

Trasformata di Fourier della Correlazione ‘incrociata’

La Correlazione incrociata di due funzioni è legata alla convoluzione delle funzioni stesse dalla seguente relazione:

$$\boldsymbol{f(t) \star g(t) = \overline{f(-t)} * g(t)}$$

Di conseguenza per le proprietà della convoluzione:

$$FT[\boldsymbol{f(t) \star g(t)}] = \overline{FT[f(t)]}FT[g(t)]$$

Autocorrelazione

Definiamo come Autocorrelazione di f(t) la seguente correlazione:

$$\boldsymbol{a(x) = (f \star f)(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{f(t)}\, f(x+t)dt}$$

Cioè è la correlazione di una funzione f(t) con se stessa

L'autocorrelazione misura la similitudine di una funzione con se stessa, al variare di una certa variabile (spazio, tempo, per es.)

L'autocorrelazione è uno strumento molto potente per identificare il periodo di ripetizione di una certa funzione

Trasformata di Fourier dell'autocorrelazione - 1

Poiché

$$\boldsymbol{f(t) \star f(t)} = \overline{\boldsymbol{f(-t)}} * \boldsymbol{f(t)}$$

Ne deriva che (vedi proprietà della trasformata di Fourier, slide 33):

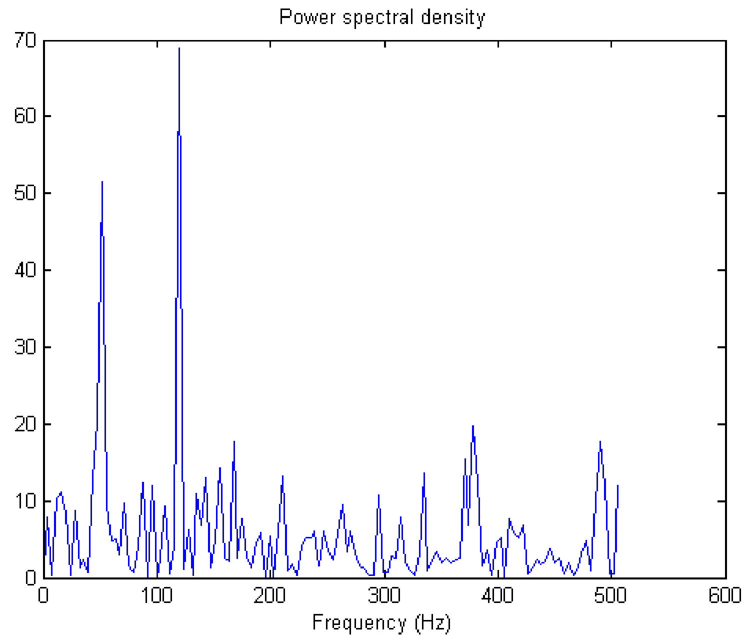
$$FT[\boldsymbol{f(t) \star f(t)}] = \overline{FT[f(t)]}FT[f(t)]$$

Ovvero il modulo quadro della trasformata di Fourier di *f(x)*

$$FT[\boldsymbol{f(t) \star f(t)}] = |\boldsymbol{FT[f(t)]}|^{\boldsymbol{2}}$$

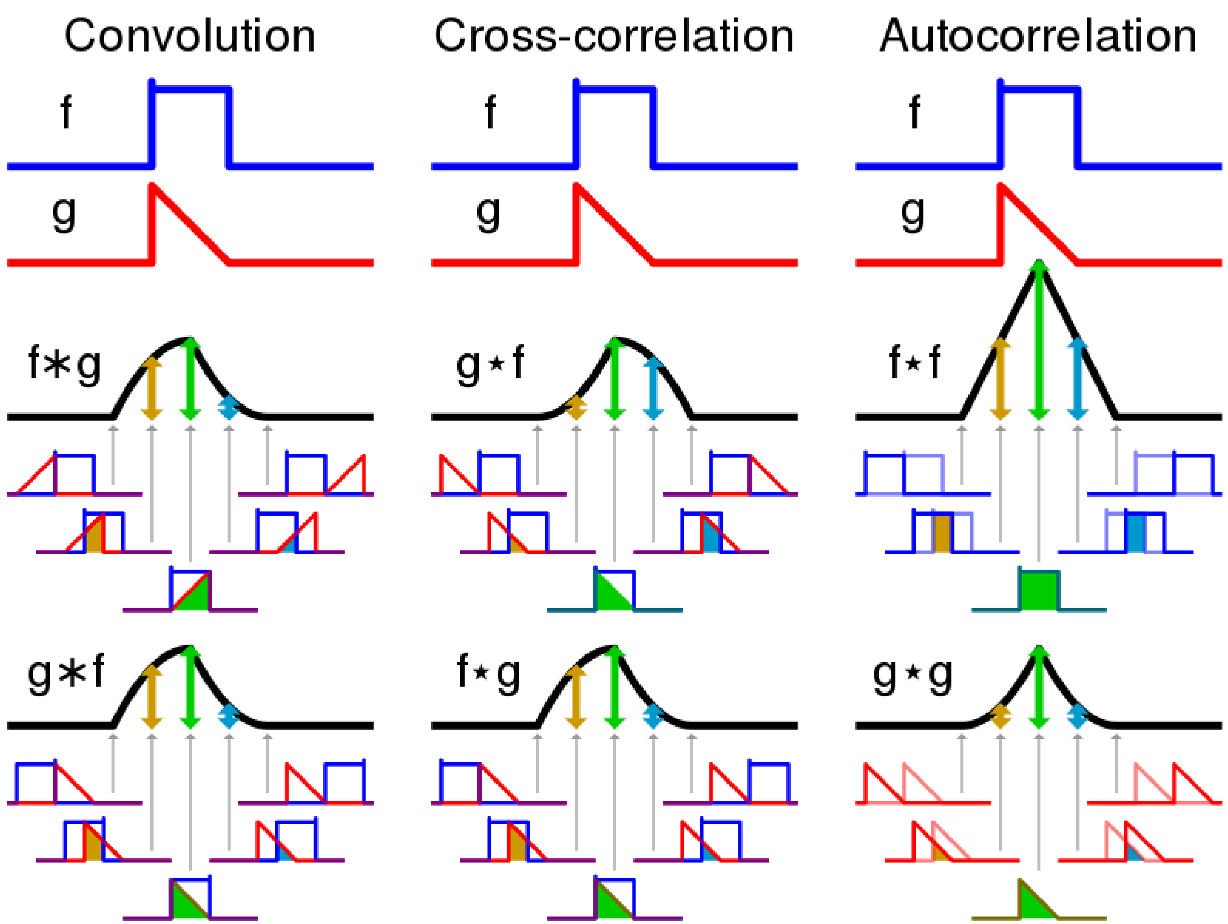
Trasformata di Fourier dell’autocorrelazione - 2

Nella situazione pratica di un segnale elettromagnetico, la trasformata di Fourier dell’autocorrelazione del segnale stesso è detta Spettro del segnale (*Power Spectrum*) e rappresenta l’intensità del segnale in funzione delle diverse frequenze.



Se consideriamo la densità elettronica in un cristallo l’autocorrelazione della densità elettronica è la **funzione di Patterson**, che ha una grande importanza nella determinazione della struttura molecolare. Anche nello Small Angle X-ray Scattering (SAXS) la funzione autocorrelazione è molto importante.

Correlazioni e Convoluzioni



Funzione δ di Dirac

Sia data una funzione f(x), la **funzione δ di Dirac** è definita come una funzione capace di «estrarre» il valore della funzione nell'origine, ovvero:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) f(x) dx = f(0)$$

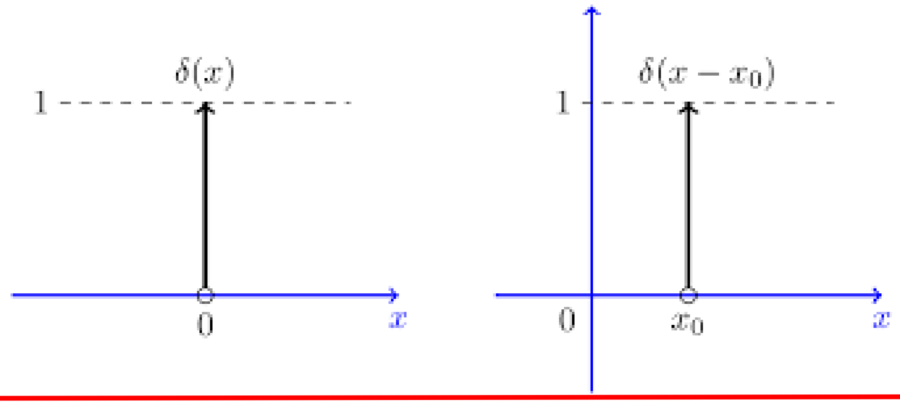
δ(x) può essere vista come una funzione (distribuzione) che ha valore 0 ovunque e ∞ nell'origine, tale che:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1$$

Si può anche definire la funzione δ di Dirac traslata di un certo valore a: δ(x-a) che avrà valore 0 ovunque tranne che per **a** dove avrà valore ∞, e quindi:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) f(x) dx = f(0)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-a) dx = 1$$

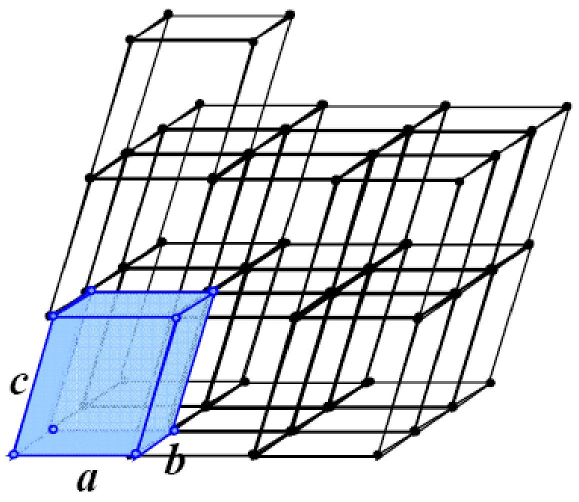


Funzione δ di Dirac e Funzione Reticolo

La funzione δ di Dirac è estremamente utile nella descrizione matematica di un reticolo cristallino, infatti volendo definire una funzione che è nulla ovunque, tranne che in alcuni punti che si ripetono regolarmente nello spazio, possiamo definire una funzione reticolo con la seguente forma:

$$L(\bar{r}) = \sum_{u,v,w=-\infty}^{\infty} \delta(\bar{r} - \bar{r}_{u,v,w})$$

Dove $\bar{r}_{u,v,w} = u\bar{a} + v\bar{b} + w\bar{c}$
$(u, v, w\ interi; \bar{a}, \bar{b}, \bar{c}\ parametri\ reticolari\ )$



Trasformata di Fourier della funzione δ di Dirac

Si può dimostrare che la trasformata di Fourier della funzione δ di Dirac è una costante e vale 1

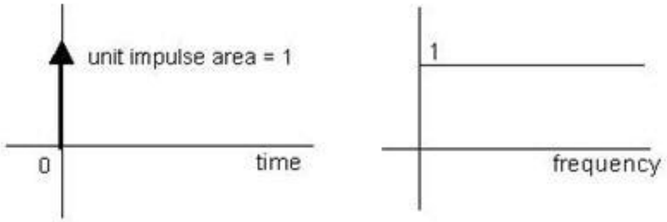
$$FT[\delta(x)] = T(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) e^{-i\omega x} dx = 1$$

$\delta(t) = 0 \quad t \neq 0$

$\delta(t) = \infty \quad t = 0$

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

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



Fourier Transform $[\delta(t)] = \delta(f) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(t) \exp^{-j\omega t} dt = 1$

Si può inoltre dimostrare che la trasformata di Fourier della funzione δ di Dirac traslata vale:

$$FT[\delta(x-\tau)] = T(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-\tau) e^{-i\omega x} dx = e^{-i\tau\omega}$$

Trasformata di Fourier della funzione Reticolo L(r)

Abbiamo visto che:

$$FT[\delta(x-\tau)] = T(\omega) = \sum_{\boldsymbol{n=1}}^{\infty} \boldsymbol{e^{-i\omega\bar{r}_n}}$$

Tenuto conto che la trasformata di Fourier è un operatore lineare applichiamo questo risultato alla funzione Reticolo (caso monodimensionale con $\bar{r}_n$ = n$\bar{a}$, n=0, 1, 2, ….)

$$\boldsymbol{FT}[\boldsymbol{L}(\bar{\boldsymbol{r}})] = FT[\sum_{n=1}^{\infty} \delta(\bar{r} - \bar{\bar{r}}_n)] = \sum_{n=1}^{\infty} FT[\delta(\bar{r} - \bar{\bar{r}}_n)] = \sum_{n=1}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\bar{r} - \bar{\bar{r}}_n)\, e^{-i\omega r} dr = \sum_{\boldsymbol{n=1}}^{\infty} \boldsymbol{e^{-i\omega\bar{r}_n}}$$

$$\boldsymbol{FT}[\boldsymbol{L}(\bar{\boldsymbol{r}})] = \sum_{\boldsymbol{n=1}}^{\infty} \boldsymbol{e^{-i\omega\bar{r}_n}}$$

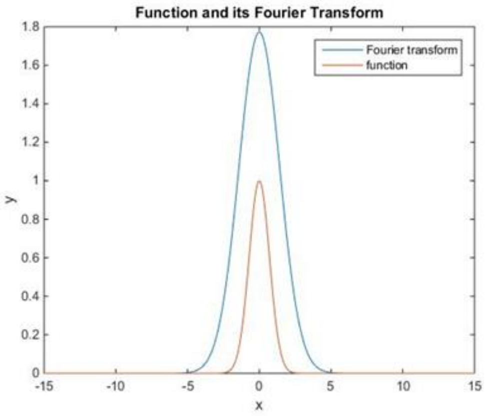
Trasformata di Fourier di una gaussiana

Definiamo come funzione gaussiana una funzione del tipo:

$$f(x) = e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$$

E' possibile dimostrare che la trasformata di Fourier della funzione gaussiana così definita è ancora una gaussiana, in particolare:

$$TF\left[e^{\frac{x^2}{2\sigma^2}}\right] = T(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{x^2}{2\sigma^2}} e^{-i\omega x} dx = \sqrt{2\pi\sigma^2} e^{-\frac{\sigma^2\omega^2}{2}}$$



Notare come la TF di una gaussiana sia sempre una gaussiana, ma «più larga»

Convoluzione di due gaussiane

Siano date due funzioni gaussiane $f_1(x)$ e $f_2(x)$ con medie e varianze rispettivamente μ_1 e ${\sigma_1}^2$ e μ_2 e ${\sigma_2}^2$

$$f_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_1} e^{\frac{-(x-\mu_1)^2}{2{\sigma_1}^2}}$$

$$f_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_2} e^{\frac{-(x-\mu_2)^2}{2{\sigma_2}^2}}$$

$$g(x) = f_1(x) * f_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_c} e^{\frac{-(x-\mu_c)^2}{2{\sigma_c}^2}}$$

$\mu_c = \mu_1 + \mu_2$; $\sigma_c^2 = \sigma_1^2 + \sigma_1^2$

La varianza definisce la 'larghezza' della gaussiana

La convoluzione di due funzioni gaussiane risulta in una nuova gaussiana che ha varianza uguale alla somma delle varianze (quindi più larga).