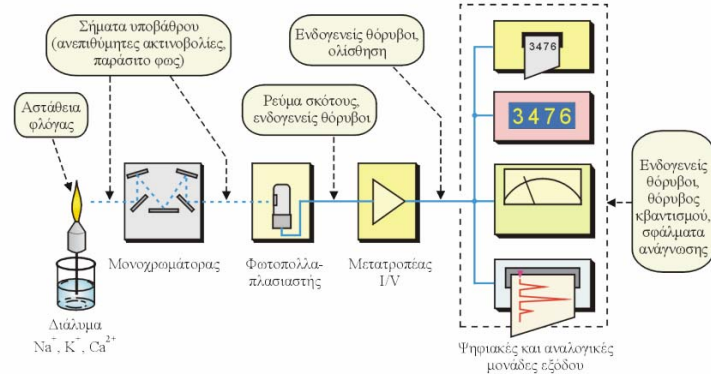


Σήματα και θόρυβος

Σήμα (signal) είναι ο φορέας στον οποίο κωδικοποιείται η ζητούμενη πληροφορία κατά τη διαδικασία μιας μέτρησης.

Θόρυβος (noise) ορίζεται το σύνολο των ανεπιθύμητων πληροφοριών, οι οποίες συνοδεύουν το σήμα και υποβαθμίζουν την ορθότητα και την ακρίβεια μιας μέτρησης.



Κ. Ευσταθίου: Μαθήματα Χημικής Οργανολογίας / 5

Ορθός και αντίστροφος μετασχηματισμός Fourier

Από τα μαθηματικά: Κάθε μορφή καμπύλης μπορεί να αποδοθεί επακριβώς ή με τον επιθυμητό βαθμό ακρίβειας ως άθροισμα αρμονικών ημιτονικών σειρών.

Το παραπάνω στις φυσικές επιστήμες συνεπάγονται το εξής: Κάθε σήμα της μορφής $h(t)$ [μεταβολή μια φυσικής παραμέτρου ως προς το χρόνο] μπορεί να αποδοθεί από μια συνάρτηση της μορφής $H(f)$ [μεταβολή μιας φυσικής παραμέτρου ως προς τη συχνότητα].

Οι συναρτήσεις $h(t)$ και $H(f)$ είναι **δύο διαφορετικές μορφές της ίδιας πληροφορίας**. Ενώ η $h(t)$ μας δίνει το σήμα, η $H(f)$ μας δίνει τα ημιτονικά συστατικά του σήματος. Η μετάβαση από τη μία μορφή στην άλλη πραγματοποιείται μέσω του ορθού και του αντίστροφου μετασχηματισμού Fourier:

Ορθός μετασχηματισμός Fourier:
$$H(f) = \int_{-\infty}^{+\infty} h(t) [\cos(2\pi ft) - j \sin(2\pi ft)] dt$$

Αντίστροφος μετασχηματισμός Fourier:
$$h(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} H(f) [\cos(2\pi ft) + j \sin(2\pi ft)] df$$

Συμβολικά:
$$H(f) = F \{h(t)\}$$

$$h(t) = F^{-1} \{H(f)\}$$

Κ. Ευσταθίου: Μαθήματα Χημικής Οργανολογίας / 5

Ορθός και αντίστροφος μετασχηματισμός Fourier

Κατηγορίες σημάτων:

1. Περιοδικά σήματα άπειρης διάρκειας

2. Περιοδικά σήματα πεπερασμένης διάρκειας ή μη περιοδικά σήματα

Κάθε σήμα της πρώτης κατηγορίας μπορεί να αποδοθεί από πεπερασμένο ή άπειρο αριθμό όρων με βάση την εξίσωση:

$$h(t) = \frac{A_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} A_n \cos(2\pi n f t) + \sum_{m=1}^{\infty} B_m \sin(2\pi m f t)$$

όπου:

$A_0/2$: η συνεχής συνιστώσα (μηδενική συχνότητα) του σήματος $h(t)$ (αν υπάρχει).

A_1, A_2, \dots, A_n και B_1, B_2, \dots, B_n : πλάτη ημιτονικών όρων (συντελεστές Fourier).

f ($n = m = 1$): θεμελιώδης (fundamental) συχνότητα.

nf, mf ($n, m: 2, 3, \dots$): η 2η, 3η ... κ.λπ. αρμονική συχνότητα (harmonics).

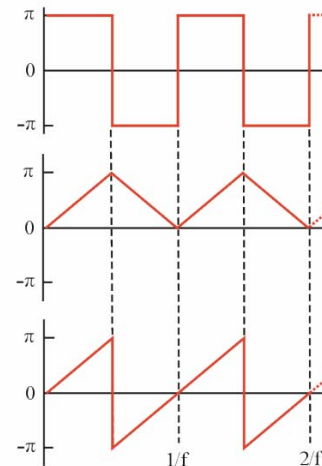


Jean Baptiste Joseph
Baron Fourier
(1768-1830)

Κ. Ευσταθίου: Μαθήματα Χημικής Οργανολογίας / 5

Τυπικά παραδείγματα σειρών Fourier

Γραφική παράσταση σήματος $h(t)$ Σειρά Fourier ($x = 2\pi ft$)



1. Τετραγωνικό σήμα

$$h(t) = 4 \left(\frac{\sin x}{1} + \frac{\sin 3x}{3} + \frac{\sin 5x}{5} + \dots \right)$$

2. Τριγωνικό σήμα

$$h(t) = \frac{\pi}{2} - \frac{4}{\pi} \left(\frac{\cos x}{1^2} + \frac{\cos 3x}{3^2} + \frac{\cos 5x}{5^2} + \dots \right)$$

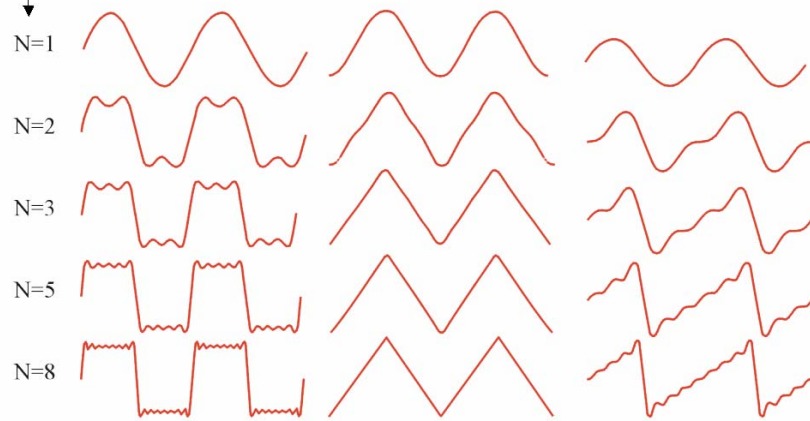
3. Πριονωτό σήμα

$$h(t) = 2 \left(\frac{\sin x}{1} - \frac{\sin 2x}{2} + \frac{\sin 3x}{3} - \dots \right)$$

Κ. Ευσταθίου: Μαθήματα Χημικής Οργανολογίας / 5

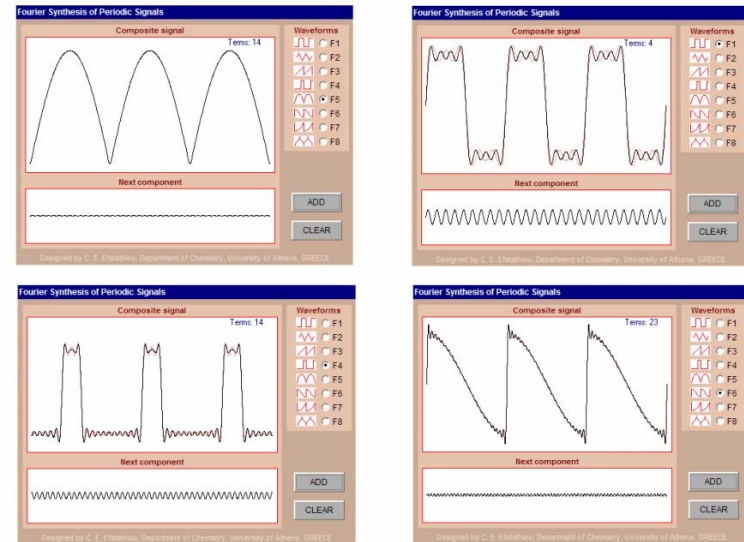
Σύνθεση περιοδικών σημάτων με σειρές Fourier

Αριθμός ημιτονικών όρων



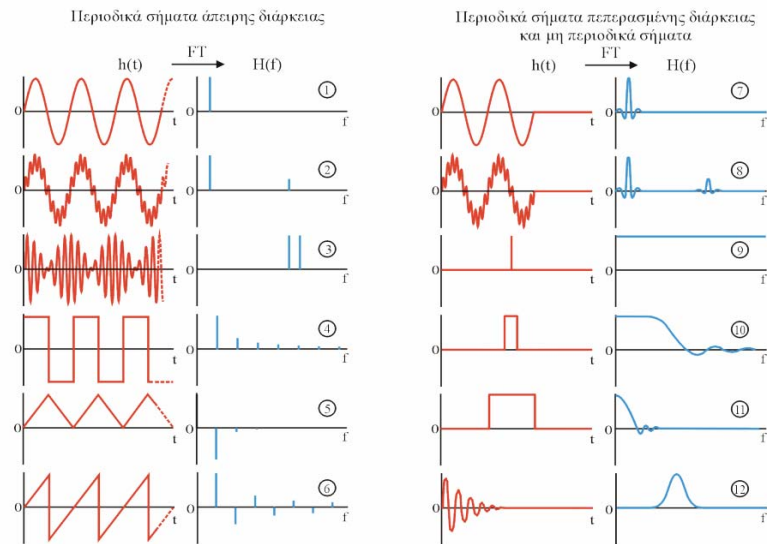
Κ. Ευσταθίου: Μαθήματα Χημικής Οργανολογίας / 5

Ένα εκπαιδευτικό applet για τη σύνθεση περιοδικών σημάτων κατά Fourier: http://www.chem.uoa.gr/applets/AppletFourier/Applet_Fourier1.html



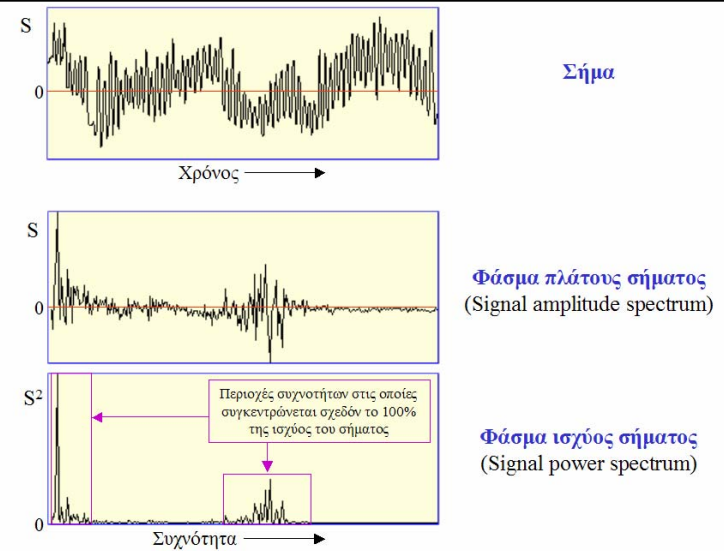
Κ. Ευσταθίου: Μαθήματα Χημικής Οργανολογίας / 5

Τυπικά παραδείγματα μετασχηματισμού σημάτων κατά Fourier



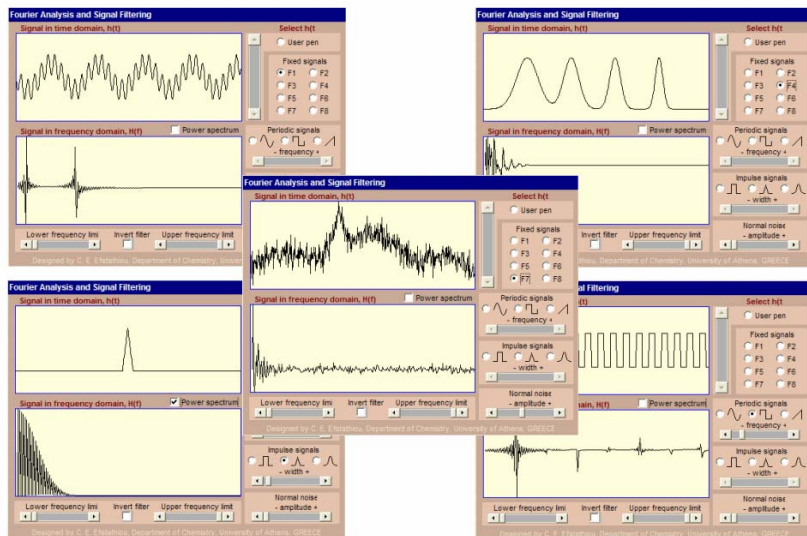
Κ. Ευσταθίου: Μαθήματα Χημικής Οργανολογίας / 5

Φάσμα πλάτους - Φάσμα ισχύος



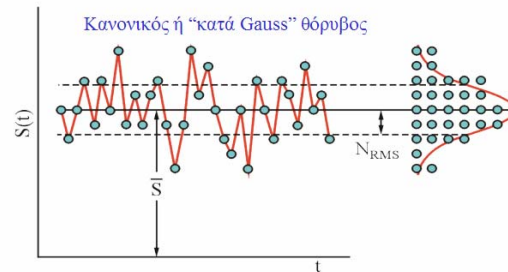
Κ. Ευσταθίου: Μαθήματα Χημικής Οργανολογίας / 5

Ένα εκπαιδευτικό applet για την ανάλυση σημάτων κατά Fourier:
http://www.chem.uoa.gr/applets/AppletFourAnal/Applet_FourAnal1.html



Κ. Ευσταθίου, Μαθήματα Χημικής Οργανολογίας / 5

Λόγος “σήματος-προς-θόρυβο” (Signal-to-Noise Ratio, S/N, SNR)



$$S/N \text{ ή } SNR = \bar{S} / N_{RMS}$$

όπου:

$$N_{RMS} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (S - S_i)^2}{n}}$$

Σύνθεση θορύβων: $N_{ολ}^2 = N_1^2 + N_2^2 + \dots + N_m^2$

Ο λόγος S/N συχνά μετρείται σε decibel (dB), αλλά τότε ορίζεται ως εξής:

$$S/N \text{ (dB ισχύος)} = 10 \log (P_{\text{σήματος}} / P_{RMS \text{ θορύβου}})$$

$$S/N \text{ (dB τάσης)} = 20 \log (V_{\text{σήματος}} / V_{RMS \text{ θορύβου}})$$

$$S/N \text{ (dB έντασης)} = 20 \log (I_{\text{σήματος}} / I_{RMS \text{ θορύβου}})$$

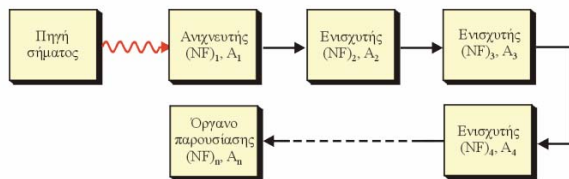
Κ. Ευσταθίου, Μαθήματα Χημικής Οργανολογίας / 5

Εικόνα θορύβου (noise figure, NF)

$$NF = \frac{(S/N)_i}{(S/N)_o} \quad \text{ή} \quad NF \text{ (σε dB)} = 20 \log \frac{(S/N)_i}{(S/N)_o}$$

Εάν $NF > 1$ τότε η μονάδα επιβαρύνει το σήμα σε θόρυβο.

Διάδοση σήματος μέσω σειράς μονάδων



$$NF = (NF)_1 + \frac{(NF)_2 - 1}{A_1} + \frac{(NF)_3 - 1}{A_1 A_2} + \dots + \frac{(NF)_n - 1}{A_1 A_2 \dots A_{n-1}}$$

Η προσπάθεια για τη μείωση του θορύβου στις μετρήσεις με ένα όργανο, πρέπει να επικεντρώνεται κυρίως στον ίδιο τον αιχνευτή και στο πρώτο στάδιο ενίσχυσης.

Κ. Ευσταθίου, Μαθήματα Χημικής Οργανολογίας / 5

Τύποι ηλεκτρικών θορύβων

A. Θεμελιώδεις (fundamental) θόρυβοι

1. Θερμικός θόρυβος (θόρυβος Johnson-Nyquist)
2. Θόρυβος βολής (shot noise)
3. Θόρυβος flicker (θόρυβος 1/f)

Γενικά χαρακτηριστικά: Ενδογενής θόρυβος, οφειλόμενος στη θερμική κίνηση φορέων ηλεκτρισμού (π.χ. των ηλεκτρονίων) και σε στατιστικά φαινόμενα. Θόρυβοι, κατά βάση “λευκοί” (ανεξάρτητοι συχνότητας). Ελαχιστοποιούνται με προσεκτικό σχεδιασμό, αλλά δεν μηδενίζονται.

B. Μη θεμελιώδεις θόρυβοι ή θόρυβοι περίσσειας (excess noise)

Θόρυβοι περιβάλλοντος (ηλεκτρικές εκκενώσεις, αναφλέξεις μηχανών εσωτερικής καύσης, θόρυβος 50 Hz ηλεκτρικού δικτύου).

Γενικά χαρακτηριστικά: Εξογενείς θόρυβοι. Μπορεί να εξαρτώνται από τον τόπο και τον χρόνο. Συχνά “έγχρωμοι” (με χαρακτηριστικό φάσμα συχνότητας). Ελαχιστοποιούνται με θωρακίσεις, φίλτρα συχνοτήτων, μικρό μέγεθος καλωδίων κ.λπ.

Γ. Ειδικού τύπου

Θόρυβος κβαντισμού (quantization noise)

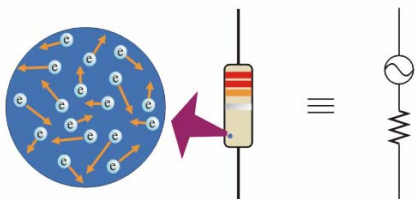
Γενικά χαρακτηριστικά: “Μοντέρνο” είδος θορύβου που προκύπτει από τη στρωγγυλοποίηση δεδομένων και την καθορισμένη διακριτική ικανότητα των αναλογικομηθιακών μετατροπέων.

Κ. Ευσταθίου, Μαθήματα Χημικής Οργανολογίας / 5

Θερμικός θόρυβος (Θόρυβος Johnson-Nyquist)

Κάθε **ωμική αντίσταση** αντιστοιχεί σε πηγή τάσης με μέση τιμή $\bar{V}_{\Theta EPM} = 0$ και τυπική απόκλιση $V_{\Theta EPM,RMS}$ που παρέχεται από τη σχέση:

$$V_{\Theta EPM,RMS} = \sqrt{4kTR\Delta f}$$



όπου:
 k: σταθερά Boltzman ($1,38 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$)
 T: η θερμοκρασία (σε K)
 R: η τιμή της σε Ohm
 Δf: το εύρος της συχνότητων (σε Hz) που λαμβάνονται υπόψη για τον υπολογισμό της RMS τιμής της τάσης.

Από την παραπάνω σχέση υπολογίζεται η RMS τιμή της ισχύος του θερμικού θορύβου:

$$P_{\Theta EPM} = (V_{\Theta EPM,RMS})^2 / R = 4kT\Delta f$$

Θερμικός θόρυβος (Θόρυβος Johnson-Nyquist)

Παράδειγμα: Ποια είναι η RMS τιμή του θερμικού θορύβου, εκπεφρασμένη σε πεχαμετρικές μονάδες, που συνοδεύει τις μετρήσεις pH στους 25 °C, εάν το ηλεκτρόδιο ύαλου έχει εσωτερική αντίσταση 1000 MΩ και το εύρος ζώνης συχνοτήτων των υπόλοιπων σταδίων ενίσχυσης είναι: (α) 100 kHz (τυπικό για κυκλώματα με τελεστικούς ενισχυτές σε ζεύξη DC) και (β) 500 Hz (περιορισμένου εύρους ζώνης συχνοτήτων).

Λύση. (α)

$$V_{\Theta EPM,RMS} = \sqrt{4 \times (1,38 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}) (298 \text{ K}) (10^9 \text{ } \Omega) (10^5 \text{ s}^{-1})} = 0,00128 \text{ V}$$

Από την εξίσωση Nernst υπολογίζεται ότι στους 25 °C μια πεχαμετρική μονάδα αντιστοιχεί σε 0,05916 V, επομένως η RMS τιμή του θορύβου εκπεφρασμένη σε μονάδες pH είναι

$$(0,00128 \text{ V}) / (0,05916 \text{ V/μονάδα pH}) = \mathbf{0,022 \text{ μονάδες pH}}$$

(β) Στην περίπτωση του ηλεκτρομέτρου με ενισχυτή περιορισμένου εύρους διέλευσης ζώνης συχνοτήτων, με ανάλογο τρόπο υπολογίζεται ότι είναι $V_{\Theta EPM,RMS} = 0,000091 \text{ V}$, που αντιστοιχεί μόλις σε **0,0015 μονάδες pH**.

Θόρυβος βολής (shot noise)

Σε αντίθεση με το θερμικό θόρυβο, που υπάρχει πάντοτε σε κάθε ωμική αντίσταση είτε κυκλοφορεί ρεύμα είτε όχι, ο θόρυβος βολής εμφανίζεται όταν μακροσκοπικά παρατηρούμε ρεύμα.

Θα παρατηρηθεί σε επαφές pH, σε φωτορρέυματα φωτολυχνιών κ.λπ. και μπορεί να αποδοθεί στο ότι το ρεύμα στην ουσία αποτελεί τη μέση τιμή μιας ροής διακριτών πακέτων φορτίου.

Ουσιαστικά ο θόρυβος βολής είναι η έκφραση της τυπικής απόκλισης της στατιστικής Poisson που διέπει τη ροή ρεύματος και η RMS τιμή του αποδίδεται από την εξίσωση:

Εξίσωση Schottky:
$$I_{\text{ΒΟΛΗΣ},RMS} = \sqrt{\frac{q_e \bar{I}}{\Delta t}}$$

όπου: \bar{I} : μέση τιμή ρεύματος, q_e : το ηλεκτρικό φορτίο του ηλεκτρονίου και Δt ο χρόνος παρατήρησης ή ολοκλήρωσης (μαθηματικής) κάθε μέτρησης

Ο θόρυβος βολής μπορεί να εκφραστεί και ως συνάρτηση του φασματικού εύρους Δf, λαμβάνοντας υπόψη ότι χρόνος παρατήρησης Δt αντιστοιχεί σε φασματικό εύρος Δf = 1 / (2Δt).

$$I_{\text{ΒΟΛΗΣ},RMS} = \sqrt{2q_e \bar{I} \Delta f}$$

Θόρυβος flicker (ή θόρυβος 1/f ή "pink noise")

Ο **θόρυβος flicker** (flicker: τρεμοσβύνω) είναι ένας ενδογενής θόρυβος αβέβαιης προέλευσης. Έχει αποδοθεί σε αποσυνδέσεις-επανασυνδέσεις οπών-ηλεκτρονίων (επομένως είναι ιδιαίτερα έντονος στους ημιαγωγούς). Η ολίσηση μπορεί να θεωρηθεί ως είδος θορύβου flicker.

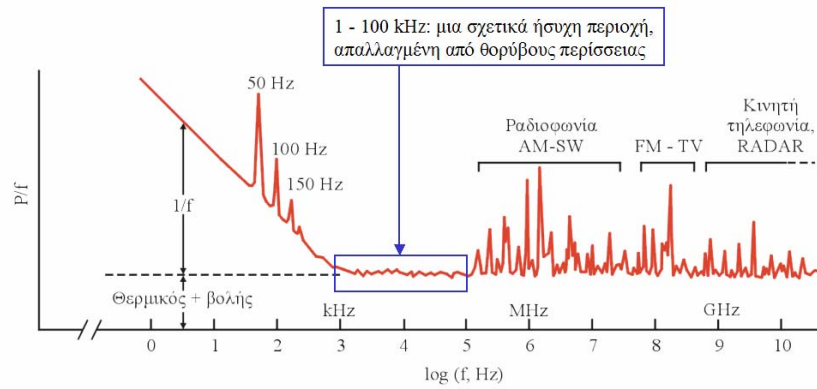
Εμφανίζεται όταν ρεύμα διέρχεται από μίγμα διαφόρων ατόμων (υλικά φωτοκαθόδων) και από κοκκώδη υλικά (π.χ. αντιστάσεις άνθρακα).

Εμφανίζεται ιδιαίτερα έντονος σε σήματα χαμηλών συχνοτήτων, με ισχύ ανάλογη του 1/fⁿ (f: συχνότητα σήματος, 0,9 ≤ n ≤ 1,35).

Δραστική αντιμετώπιση: Μεταφορά της πληροφορίας (με διαμόρφωση του σήματος) σε υψηλές συχνότητες. Μένουμε μακριά από τις μηδενικές συχνότητες (το συνεχές ρεύμα, DC).



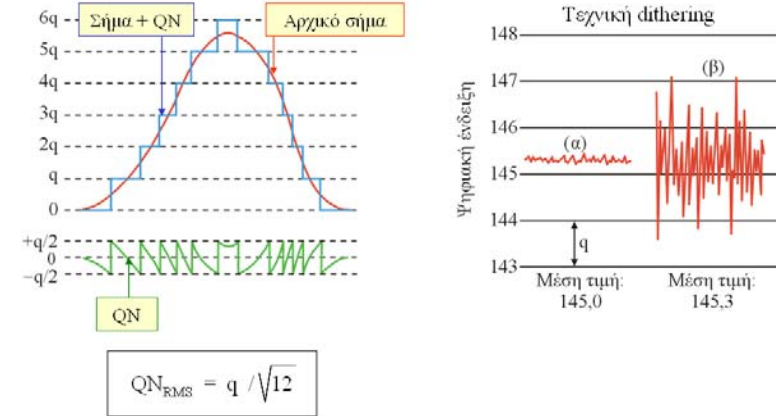
Ηλεκτρομαγνητικό φάσμα: Περιοχές θορύβου



Κ. Ευσταθίου: Μαθήματα Χημικής Οργανολογίας / 5

Θόρυβος κβαντισμού (quantization noise, QN)

Θόρυβος οφειλόμενος σε στρωγγύλευση ενδείξεων ή σε δεδομένη διακριτική ικανότητα ψηφιοποίησης αναλογικών μεγεθών.



Κ. Ευσταθίου: Μαθήματα Χημικής Οργανολογίας / 5

Θόρυβος κβαντισμού (quantization noise, QN)

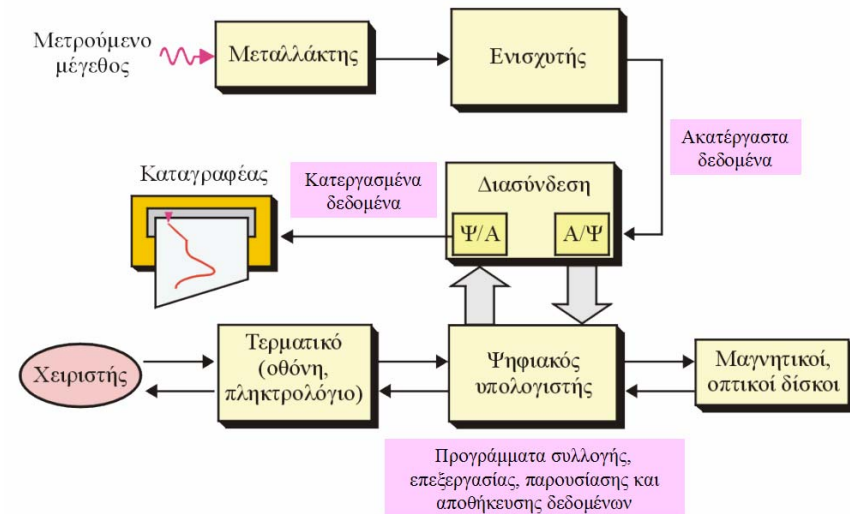
Παράδειγμα: Το δυναμικό ενός εκλεκτικού ηλεκτροδίου ιόντων φορτίου μετρείται με ψηφιακό ηλεκτρόμετρο με διακρισιμότητα τιμών 0,1 mV. Η τυπική απόκλιση μετρήσεων του δυναμικού, που αναπτύσσει σε διάλυμα NaF $1,00 \times 10^{-3} M$, βρίσκεται 0,070 mV. Να εκτιμηθεί η πραγματική (ενδογενής) τυπική απόκλιση των ενδείξεων δυναμικού του εκλεκτικού ηλεκτροδίου.

Λύση. Η τυπική απόκλιση ($\sigma_{ολ}$) που μετρήθηκε είναι η συνισταμένη δύο πηγών θορύβου (ή σφάλματος): του ενδογενούς θορύβου (σ_x) του μεταλλάκτη και του θορύβου κβαντισμού (σ_{QN}) που εισάγει η ίδια η παρουσίαση της μέτρησης. Με βάση την εξίσωση σύνθεσης θορύβων από πολλές πηγές και την εξίσωση που παρέχει την QN_{RMS} (εδώ σ_{QN}) θα είναι:

$$\sigma_x = \sqrt{\sigma_{ολ}^2 - \sigma_{QN}^2} = \sqrt{0,070^2 - (0,1 / \sqrt{12})^2} = 0,064 \text{ mV}$$

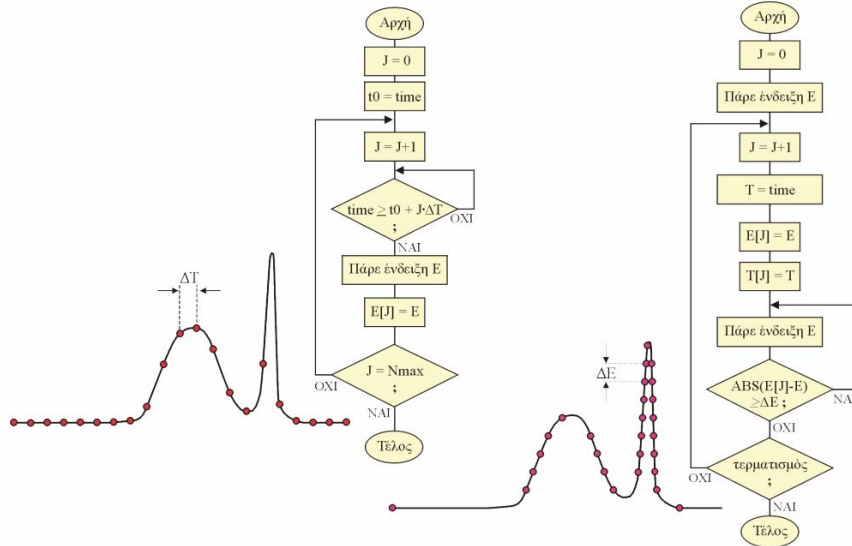
Κ. Ευσταθίου: Μαθήματα Χημικής Οργανολογίας / 5

Τεχνικές λογισμικού - Δειγματοληψία σημάτων με υπολογιστές



Κ. Ευσταθίου: Μαθήματα Χημικής Οργανολογίας / 5

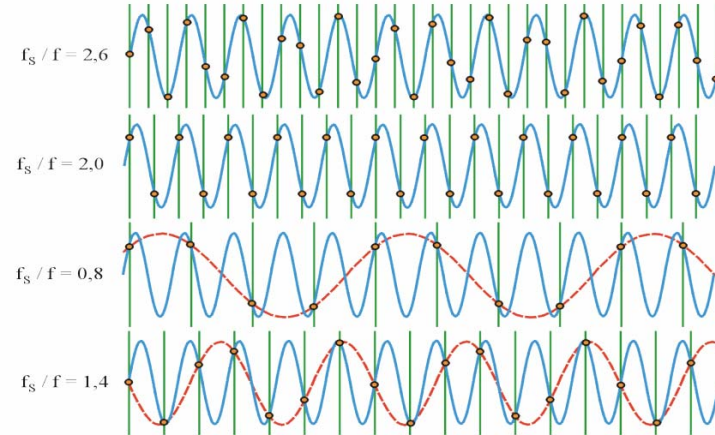
Τεχνικές λογισμικού - Δειγματοληψία σημάτων με υπολογιστές



Κ. Ευσταθίου: Μαθήματα Χημικής Οργανολογίας / 5

Θεώρημα δειγματοληψίας Nyquist

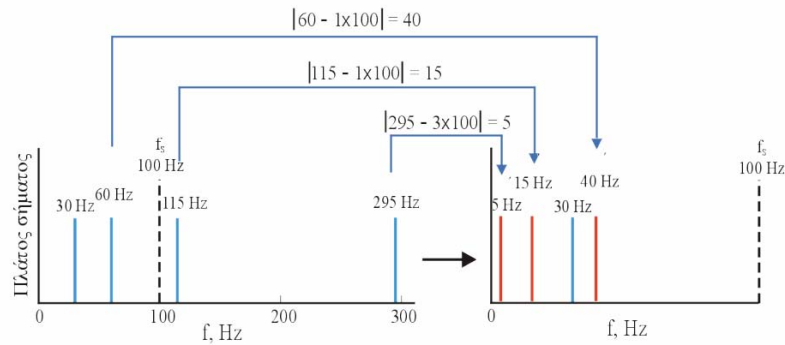
Θεώρημα Nyquist: Η ελάχιστη συχνότητα δειγματοληψίας ενός σήματος, η οποία δεν εισάγει παραμόρφωση στην υπάρχουσα πληροφορία είναι διπλάσια από τη συχνότητα της πλέον υψίσυχνης συνιστώσας του.



Κ. Ευσταθίου: Μαθήματα Χημικής Οργανολογίας / 5

Θεώρημα δειγματοληψίας Nyquist

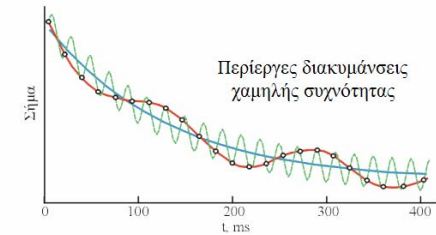
$$\text{Ψευδής συχνότητα: } f' = |f - k f_s|$$



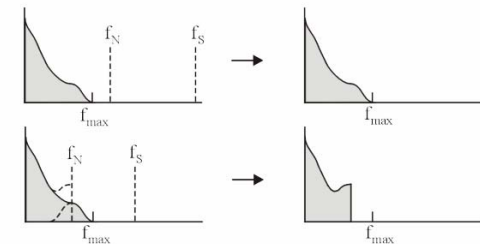
Κ. Ευσταθίου: Μαθήματα Χημικής Οργανολογίας / 5

Συνέπειες κακής δειγματοληψίας

1. Περιέργα σήματα:



2. Παραμόρφωση λόγω “φασματικής αναδίπλωσης” (spectral folding)



Κ. Ευσταθίου: Μαθήματα Χημικής Οργανολογίας / 5

Δραστική αντιμετώπιση aliasing

1. Με φασματική ανάλυση του σήματος καθορίζεται το ανώτερο όριο (f_{\max}) χρήσιμων συχνοτήτων.
2. Πέρασμα του σήματος μέσω βαθυπερατού φίλτρου (anti-aliasing filter) με συχνότητα αποκοπής f_{\max} , για να αποκοπούν κατά το δυνατόν όλες οι συχνοτήτες (μεγαλύτερες της f_{\max}) που θα μπορούσαν να “αναδιπλωθούν” και να μολύνουν το σήμα εκ δειγματοληψίας.
3. Δειγματοληψία του δείγματος με συχνότητα ίση (ή καλύτερα) μεγαλύτερη της $2f_{\max}$.

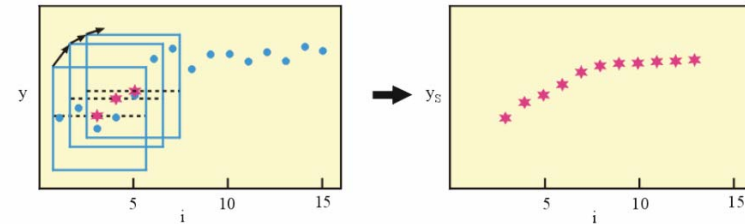
Εξομάλυνση σημάτων: Μέθοδος κινούμενης μέσης τιμής (KMT)

Εφαρμόζεται σε σήματα που έχουν δειγματοσθεί ως ισοαπέχοντα σημεία, δηλ.:

$$x_{i+1} - x_i = \text{σταθερό}$$

Και για το k σημείο ισχύει:

$$(y_k)_s = \frac{\sum_{i=-m}^m y_{k+i}}{2m+1}$$



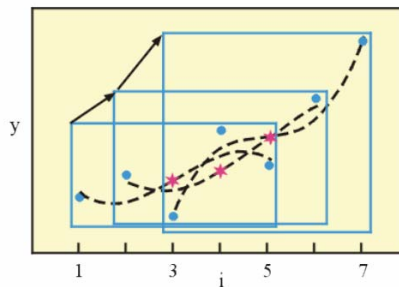
Εξομάλυνση σημάτων: Μέθοδος Savitzky-Golay (S-G)

Εφαρμόζεται σε σήματα που έχουν δειγματοσθεί ως ισοαπέχοντα σημεία, δηλ.:

$$x_{i+1} - x_i = \text{σταθερό}$$

Αρχή: Πλαίσιο με ομάδα περιττού αριθμού σημείων ($2m+1 \geq 5$) σαράννει τα σημεία. Σε κάθε ομάδα υπολογίζεται πολυώνυμο n-βαθμού ($n \geq 2$). [πολυωνυμικό φίλτρο]

Ως εξομαλυμένη τιμή που αντιστοιχεί στο κεντρικό σημείο της ομάδας λαμβάνεται η τιμή που υπολογίζεται από το πολυώνυμο (θεωρητική τιμή).



Εξομάλυνση σημάτων: Μέθοδος Savitzky-Golay (S-G)

Η μέθοδος S-G μπορεί να διεξαχθεί κατά πολύ απλό τρόπο **χωρίς** να απαιτείται η πραγματοποίηση προσαρμογής ελάχιστων τετραγώνων για τον προσδιορισμό των συντελεστών του πολυωνύμου για **κάθε ομάδα δεδομένων**.

Ο υπολογισμός της εξομαλυμένης τιμής ανάγεται σε προσδιορισμό μέσης τιμής αλλά με **στατιστικό βάρος**, έτσι είναι:

$$(y_k)_s = \frac{\sum_{i=-m}^m a_i y_{k+i}}{N_F}$$

Παράδειγμα:

$$(y_k)_s = \frac{-2 \times y_{k-3} + 3 \times y_{k-2} + 6 \times y_{k-1} + 7 \times y_k + 6 \times y_{k+1} + 3 \times y_{k+2} - 2 \times y_{k+3}}{21}$$

όπου: **-2, +3, +6, +7, +6, +3, -2**: συντελεστές βάρους και **21**: το άθροισμά τους

Εξομάλυνση σημάτων: Μέθοδος Savitzky-Golay (S-G)

Τυπικοί συντελεστές πολυωνυμικών φίλτρων για εξομάλυνση τιμών

| k | 2m+1: | 13 | 11 | 9 | 7 | 5 |
|---|------------------|-----|-----|-----|----|----|
| Τιμές a _k για απλή εξομάλυνση (πολύωνυμο 2ου/3ου βαθμού) | | | | | | |
| -6 | | -11 | | | | |
| -5 | | 0 | -36 | | | |
| -4 | | 9 | 9 | -21 | | |
| -3 | | 16 | 44 | 14 | -2 | |
| -2 | | 21 | 69 | 39 | 3 | -3 |
| -1 | | 24 | 84 | 54 | 6 | 12 |
| 0 | | 25 | 89 | 59 | 7 | 17 |
| 1 | | 24 | 84 | 54 | 6 | 12 |
| 2 | | 21 | 69 | 39 | 3 | -3 |
| 3 | | 16 | 44 | 14 | -2 | |
| 4 | | 9 | 9 | -21 | | |
| 5 | | 0 | -36 | | | |
| 6 | | -11 | | | | |
| | N _F : | 143 | 429 | 231 | 21 | 35 |

Εξομάλυνση σημάτων: Μέθοδος Savitzky-Golay (S-G)

Τυπικοί συντελεστές πολυωνυμικών φίλτρων για υπολογισμό 1ης παραγώγου

| Τιμές a _k για υπολογισμό 1ης παραγώγου (πολύωνυμο 2ου βαθμού) | | | | | | |
|--|------------------|-----|-----|----|----|----|
| -6 | | -6 | | | | |
| -5 | | -5 | -5 | | | |
| -4 | | -4 | -4 | -4 | | |
| -3 | | -3 | -3 | -3 | -3 | |
| -2 | | -2 | -2 | -2 | -2 | -2 |
| -1 | | -1 | -1 | -1 | -1 | -1 |
| 0 | | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| 2 | | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 |
| 3 | | 3 | 3 | 3 | 3 | |
| 4 | | 4 | 4 | 4 | | |
| 5 | | 5 | 5 | | | |
| 6 | | 6 | | | | |
| | N _F : | 182 | 110 | 60 | 28 | 10 |

Εξομάλυνση σημάτων: Μέθοδος Savitzky-Golay (S-G)

Τυπικοί συντελεστές πολυωνυμικών φίλτρων για υπολογισμό 2ης παραγώγου

| Τιμές a _k για υπολογισμό 2ης παραγώγου (πολύωνυμο 2ου/3ου βαθμού) | | | | | | |
|--|------------------|------|-----|-----|----|----|
| -6 | | 22 | | | | |
| -5 | | 11 | 15 | | | |
| -4 | | 2 | 6 | 28 | | |
| -3 | | -5 | -1 | 7 | 5 | |
| -2 | | -10 | -6 | -8 | 0 | 2 |
| -1 | | -13 | -9 | -17 | -3 | -1 |
| 0 | | -14 | -10 | -20 | -4 | -2 |
| 1 | | -13 | -9 | -17 | -3 | -1 |
| 2 | | -10 | -6 | -8 | 0 | 2 |
| 3 | | -5 | -1 | 7 | 5 | |
| 4 | | 2 | 6 | 28 | | |
| 5 | | 11 | 15 | | | |
| 6 | | 22 | | | | |
| | N _F : | 1001 | 429 | 462 | 42 | 7 |

Εξομάλυνση σημάτων: Μέθοδος Savitzky-Golay (S-G)

Με τη μέθοδο Savitzky-Golay να υπολογισθούν οι εξομαλυνμένες τιμές, όπως και οι τιμές της πρώτης και δεύτερης παραγώγου φάσματος απορρόφησης, που αποτελείται από τα ακόλουθα 40 ακατέργαστα ισοαπέχοντα σημεία. Να χρησιμοποιηθούν φίλτρα μεγέθους 7 σημείων.

| i | A | i | A | i | A | i | A | i | A |
|---|-------|----|-------|----|-------|----|-------|----|-------|
| 1 | 0,151 | 9 | 0,291 | 17 | 0,264 | 25 | 0,092 | 33 | 0,368 |
| 2 | 0,172 | 10 | 0,289 | 18 | 0,204 | 26 | 0,071 | 34 | 0,351 |
| 3 | 0,133 | 11 | 0,281 | 19 | 0,191 | 27 | 0,150 | 35 | 0,368 |
| 4 | 0,150 | 12 | 0,303 | 20 | 0,187 | 28 | 0,401 | 36 | 0,101 |
| 5 | 0,201 | 13 | 0,281 | 21 | 0,081 | 29 | 0,407 | 37 | 0,125 |
| 6 | 0,285 | 14 | 0,317 | 22 | 0,092 | 30 | 0,411 | 38 | 0,105 |
| 7 | 0,301 | 15 | 0,302 | 23 | 0,051 | 31 | 0,386 | 39 | 0,121 |
| 8 | 0,260 | 16 | 0,251 | 24 | 0,071 | 32 | 0,351 | 40 | 0,113 |

Λύση: Για το σημείο $i = 4$:

$$(y_4)_S = [(-2) \times 0,151 + 3 \times 0,172 + 6 \times 0,133 + 7 \times 0,150 + 6 \times 0,201 + 3 \times 0,285 + (-2) \times 0,301] / 21 = 0,1677$$

$$(y_4)' = [(-3) \times 0,151 + (-2) \times 0,172 + (-1) \times 0,133 + 0 \times 0,150 + 1 \times 0,201 + 2 \times 0,285 + 3 \times 0,301] / 28 = 0,0266$$

$$(y_4)'' = [5 \times 0,151 + 0 \times 0,172 + (-3) \times 0,133 + (-4) \times 0,150 + (-3) \times 0,201 + 0 \times 0,285 + 5 \times 0,301] / 42 = 0,0157$$

Για το σημείο $i = 5$:

$$(y_5)_S = [(-2) \times 0,172 + 3 \times 0,133 + 6 \times 0,150 + 7 \times 0,201 + 6 \times 0,285 + 3 \times 0,301 + (-2) \times 0,260] / 21 = 0,2121$$

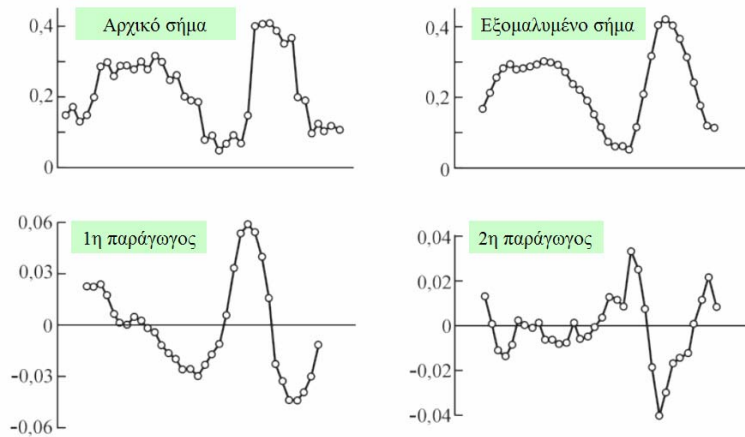
$$(y_5)' = [(-3) \times 0,172 + (-2) \times 0,133 + (-1) \times 0,150 + 0 \times 0,201 + 1 \times 0,285 + 2 \times 0,301 + 3 \times 0,260] / 28 = 0,0262$$

$$(y_5)'' = [5 \times 0,172 + 0 \times 0,133 + (-3) \times 0,150 + (-4) \times 0,201 + (-3) \times 0,285 + 0 \times 0,301 + 5 \times 0,260] / 42 = 0,0012$$

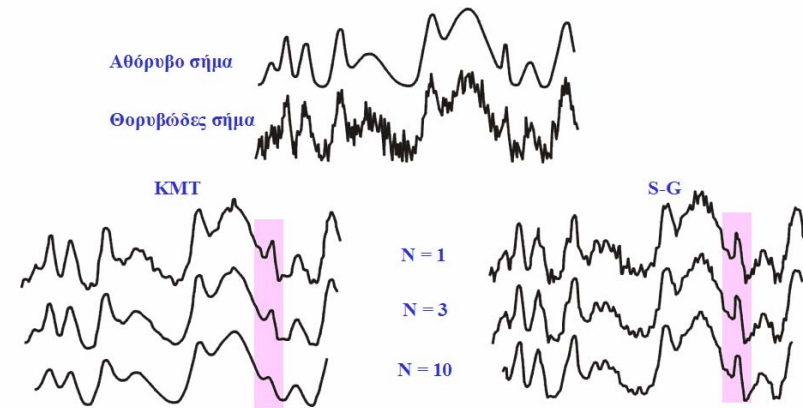
κ.ο.κ. μέχρι και το σημείο $i = 37$

Εξομάλυνση σημάτων: Μέθοδος Savitzky-Golay (S-G)

Τελικό αποτέλεσμα:

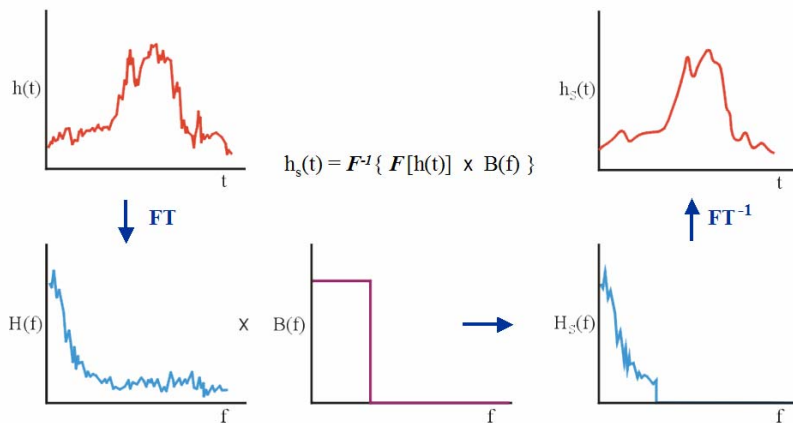


Σύγκριση “κινούμενης μέσης τιμής (KMT)” και “Savitzky-Golay (S-G)”



- Υπερβολική και ανισοβαρής η εξομάλυνση με την KMT
- Διατήρηση των “ροπών” των υφιστάμενων κορυφών με την S-G

Εξομάλυνση μέσω μετασχηματισμών Fourier (αρχή)

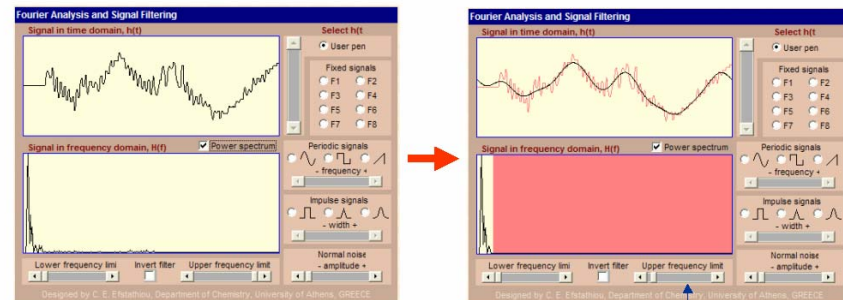


Μετασχηματισμοί Fourier και Συνέλιξη:

$$\text{Εάν } h_s(t) = h(t) * B(t), \quad \text{τότε: } F\{h_s(t)\} = F\{h(t)\} \times F\{B(t)\}$$

Επομένως: Στο χώρο συχνοτήτων η συνέλιξη δύο σημάτων μετατρέπεται σε πολλαπλασιασμό

Ένα εκπαιδευτικό applet για την εξομάλυνση σημάτων μέσω FT: <http://www.chem.uoa.gr/applets/AppletFourAnal/AppletFourAnal1.html>



Ρύθμιση ανώτερου ορίου αποδεκτών συχνοτήτων

Εξομάλυνση με λήψη μέσων μορφών σημάτων

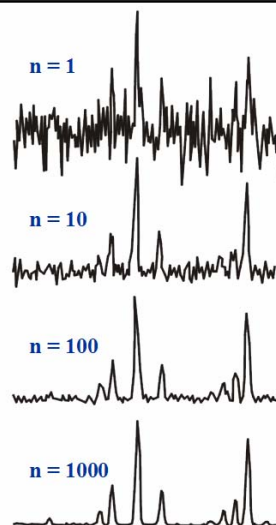
Προϋπόθεση: Δυνατότητα λήψης επαναλαμβανόμενων μορφών του σήματος.

Αρχή: Ο τυχαίος θόρυβος έχει μηδενική μέση τιμή, επομένως προστιθέμενοι θόρυβοι τείνουν να αποκτήσουν μηδενική τιμή.

Βελτίωση S/N:

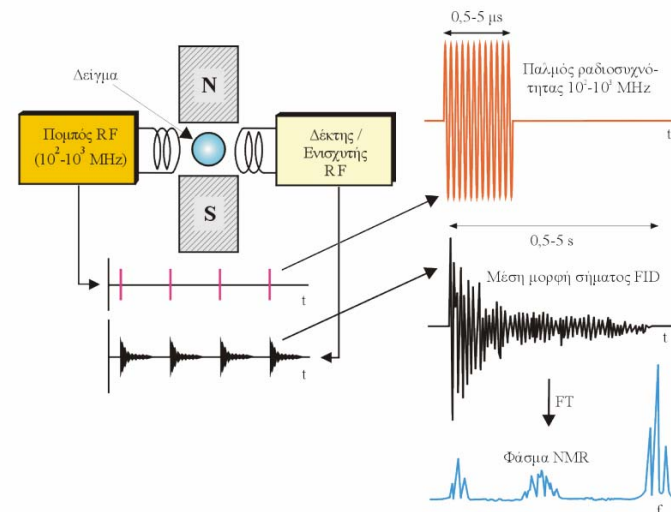
Αν ο αρχικός S/N ήταν $(S/N)_0$, τότε μετά τη λήψη της μέσης μορφής n σημάτων ο τελικός S/N θα είναι:

$$(S/N)_n = (S/N)_0 \times \sqrt{n}$$



Κ. Ευσταθίου: Μαθήματα Χημικής Οργανολογίας / 5

Εξομάλυνση με λήψη μέσων μορφών σημάτων: εφαρμογή στη φασματοσκοπία FT-NMR



Κ. Ευσταθίου: Μαθήματα Χημικής Οργανολογίας / 5

Ένα εκπαιδευτικό applet για τις λογισμικές τεχνικές εξομάλυνσης σημάτων: http://www.chem.uoa.gr/applets/AppletSmooth/Applet_Smooth.html

Κ. Ευσταθίου: Μαθήματα Χημικής Οργανολογίας / 5