Kramers–Kronig transformation

content

Version 0.0.1

Date 12.06.2023

Choe KangRok

I. Introduction

Python package to compute Kramers-Kronig relations through a triangular linear sum. If you want to copy and modify my code, feel free to do so.

I will update the method using FFT (Fast Fourier Transform) to speed up my API and add other functions later. If you have recommendations about this, please contact me via the email below.

e-mail : chlrkdfhr@gamil.com

Kramers-Kronig 관계를 삼각형 선형결합을 통해 계산하는 Python 패키지입니다. 코드를 수정하고 싶다면 자유롭게 하셔도 됩니다.

FFT (고속 푸리에 변환)를 사용하여 메소드를 업데이트하고 API를 더 빠르게 만들고, 다른 기능도 추가할 예정입니다. 추천 사항이 있다면 아래 이메일로 연락해 주십시오.

e-mail : chlrkdfhr@gamil.com

II. Theory

1. Kramers–Kronig relation

$f(x) = f_1(x) + if_2(x)\ \ (f_1(x), f_2(x) \in \mathbb{R})$ 라고 한다면 f_1,f_2은 다음 두 관계를 만족한다. 이 관계를 Kramers–Kronig relation이라고 부른다.

$$f_1(x) = \frac{1}{\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f_2(x')}{x'-x}dx' \qquad \text{(수식1)}$$

$$f_2(x) = -\frac{1}{\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f_1(x')}{x'-x}dx' \qquad \text{(수식2)}$$

만약 이 함수가 x=0에서 대칭이라면(f_1은 우함수,f_2은 기함수) 다음 관계식을 만족한다. 이는 0부터 적분한다는 특성상 물리적 상황에서 자주 사용되는 수식이다. 예를 들어 광학 계수 같은 경우를 들 수 있다.

$$f_1(x) = \frac{2}{\pi}\mathcal{P}\int_{0}^{\infty}\frac{x'f_2(x')}{x'-x}dx' \qquad \text{(수식3)}$$

$$f_2(x) = \frac{2x}{\pi}\mathcal{P}\int_{0}^{\infty}\frac{f_1(x')}{x'-x}dx' \qquad \text{(수식4)}$$

2. Triangular transformation method

우리가 측정으로 얻을 수 있는 대부분의 데이터는 이산적이다. 이산적인 데이터에서 k-k relation을 통해 허수부나 실수부를 얻어내기 위해서는 다음과 같은 방법이 필요하다.

해당 함수는 선형적이므로 그림.1과 같이 높이는 y값이고, 밑변은 옆의 값에 겹쳐져 있는 삼각형 함수의 합으로 나타낼 수 있다. 따라서 해당 삼각 함수를 k-k transformation한 후 선형적으로 더하면 결과적으로 원하는 데이터를 얻을 수 있다.

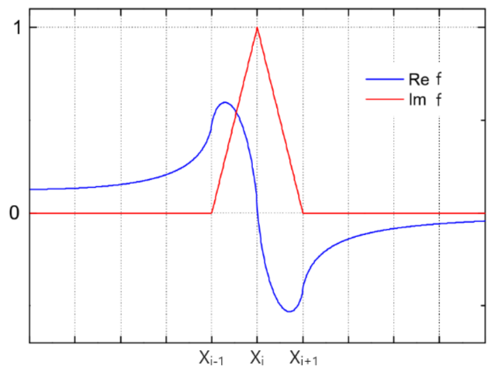

그림. 1 Triangular method of k-k transformation

삼각형 함수의 높이를 1이라고 두자. k-k transformation후 높이 만큼을 곱해주면 원하는 함수가 된다. 삼각형 함수의 방정식은 다음과 같다.

$$f^{\wedge}(x') = \begin{cases} (x' - x_{i-1})/(x_i - x_{i-1}) & , \quad x_{i-1} < x' < x_i \\ (x_{i+1} - x')/(x_{i+1} - x_i) & , \quad x_i < x' < x_{i+1} \\ 0 & , \quad otherwise \end{cases}$$

위의 삼각형 함수를 수식1부터 수식4까지를 이용하여 변환하면 다음과 같다.

$$f_1(x) = \frac{1}{\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f_2{}^{\wedge}(x')}{x'-x}dx' \quad \Rightarrow \quad f_1{}^{\wedge}(x) = \frac{1}{\pi}\left[\frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} ln\left|\frac{x_i - x}{x_{i-1} - x}\right| + \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i} ln\left|\frac{x_{i+1} - x}{x_i - x}\right| + (x_{i+1} - x_{i-1)}\right]$$

$$f_2(x) = -\frac{1}{\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f_1{}^{\wedge}(x')}{x'-x}dx' \quad \Rightarrow \quad f_2{}^{\wedge}(x) = -\frac{1}{\pi}\left[\frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} ln\left|\frac{x_i - x}{x_{i-1} - x}\right| + \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i} ln\left|\frac{x_{i+1} - x}{x_i - x}\right| + (x_{i+1} - x_{i-1)}\right]$$

$$f_1(x) = \frac{2}{\pi}\mathcal{P}\int_{0}^{\infty}\frac{x' f_2{}^{\wedge}(x')}{x'^2 - x^2}dx' \quad \Rightarrow \quad f_1{}^{\wedge}(x) = \frac{1}{\pi}\left[\frac{g(x_{i-1}, x)}{x_i - x_{i-1}} - \frac{x_{i+1} - x_{i-1}}{x_{i+1} - x_i}\frac{g(x_i, x)}{x_i - x_{i-1}} + \frac{g(x_{i+1}, x)}{x_{i+1} - x_i}\right]$$

$$f_2(x) = -\frac{2x}{\pi}\mathcal{P}\int_{0}^{\infty}\frac{f_1{}^{\wedge}(x')}{x'^2 - x^2}dx' \quad \Rightarrow \quad f_2{}^{\wedge}(x) = \frac{1}{\pi}\left[\frac{g(x, x_{i-1})}{x_{i-1} - x_i} - \frac{x_{i+1} - x_{i-1}}{x_{i+1} - x_i}\frac{g(x, x_i)}{x_i - x_{i-1}} + \frac{g(x, x_{i+1})}{x_i - x_{i+1}}\right]$$

$$* \, g(x, y) = (x + y)\ln|x + y| + (x - y)\ln|x - y|$$

3. Extrapolation

정확한 값을 구하기 위해선 0부터 ∞까지 적분하여야 하지만 실제로 얻을 수 있는 데이터는 한정된 범위의 값을 가질 수밖에 없다. 따라서 해당 데이터의 범위를 제외한 부분에 대해서는 외삽(extrapolation)을 통해 추정하여 값을 넣어줄 수밖에 없다. 따라서 대부분의 경우에서 해당 값은 ∞로 갈 때 x^{-1}로 감소하고, 0으로 갈 때는 x^2으로 감소하는 식으로 외삽을 시행할 수 있다.

III. API

kk.image_to_real(list_x,list_y)

수식 1 을 이용하여 함수의 허수부를 실수부로 tranforming 해주는 함수이다.

$$f_1(x) = \frac{1}{\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f_2(x')}{x'-x}dx' \qquad \text{(수식1)}$$

list_x : transform 하고자 하는 데이터의 x 축 데이터. 데이터 형태 - list

list_y : transform 하고자 하는 데이터의 y 축 데이터. 데이터 형태 – list

결과 : 실수부의 y 축 데이터. 데이터 형태 – list

주의 : 입력되는 두 리스트의 크기는 같아야 한다. 결과로 나오는 데이터의 x 축은 입력된 x 축 데이터와 일치한다.

kk.real_to_image (list_x,list_y)

수식 2 을 이용하여 함수의 실수부를 허수부로 tranforming 해주는 함수이다.

$$f_2(x) = -\frac{1}{\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f_1(x')}{x'-x}dx' \qquad \text{(수식2)}$$

list_x : transform 하고자 하는 데이터의 x 축 데이터. 데이터 형태 - list

list_y : transform 하고자 하는 데이터의 y 축 데이터. 데이터 형태 – list

결과 : 허수부의 y 축 데이터. 데이터 형태 – list

주의 : 입력되는 두 리스트의 크기는 같아야 한다. 결과로 나오는 데이터의 x 축은 입력된 x 축 데이터와 일치한다.

kkphy.image_to_real (list_x,list_y)

수식 3 을 이용하여 함수의 허수부를 실수부로 tranforming 해주는 함수이다.

$$f_1(x) = \frac{2}{\pi}\mathcal{P}\int_{0}^{\infty}\frac{x'f_2(x')}{x'-x}dx' \qquad \text{(수식3)}$$

list_x : transform 하고자 하는 데이터의 x 축 데이터. 데이터 형태 - list

list_y : transform 하고자 하는 데이터의 y 축 데이터. 데이터 형태 – list

결과 : 실수부의 y 축 데이터. 데이터 형태 – list

주의 : 입력되는 두 리스트의 크기는 같아야 한다. 결과로 나오는 데이터의 x 축은 입력된 x 축 데이터와 일치한다. 함수의 허수부는 기함수이므로 0 으로 수렴한다. 따라서 원점에서 0 으로 수렴하는 데이터를 입력하여야 한다.

kkphy.real_to_image (list_x,list_y,x0=1)

수식 4 을 이용하여 함수의 실수부를 허수부로 tranforming 해주는 함수이다.

$$f_2(x) = \frac{2x}{\pi}\mathcal{P}\int_0^\infty \frac{f_1(x')}{x'-x}dx' \qquad \text{(수식4)}$$

list_x : transform 하고자 하는 데이터의 x 축 데이터. 데이터 형태 - list

list_y : transform 하고자 하는 데이터의 y 축 데이터. 데이터 형태 – list

x0 : 데이터의 원점 값은 따로 넣어 주어야 한다. 만약 작성하지 않는다면 1 로 외삽하여 계산된다.

결과 : 허수부의 y 축 데이터. 데이터 형태 – list

주의 : 입력되는 두 리스트의 크기는 같아야 한다. 결과로 나오는 데이터의 x 축은 입력된 x 축 데이터와 일치한다. 실수부는 우함수로 원점에서 0 으로 수렴하지 않아도 된다. 따라서 특정한 값으로 수렴된다고 가정하고 계산된다. 만약 데이터를 입력하지 않는다면 1 로 계산된다.

참고자료

[1] Alexey Kuzmenko, ‘Guide to RefFIT’ (2018)

[2] Tanner, D. B. "Use of x-ray scattering functions in Kramers-Kronig analysis of reflectance." Physical Review B 91.3 (2015): 035123.