Computerphysik WS 2013/2014

Prof. Dr. Roland Netz, FU Berlin

Übungsblatt 11: Fourier-Transformation

Matej Kanduc, Klaus Rinne

14. Januar 2014

Allgemeine Hinweise

Abgabetermin für die Lösungen ist

- **Sonntag, 19.01.2014, 24:00 Uhr.**

11.1 Dielektrische Spektren (8 Punkte)

11.1.1 (1 Punkt)

Lesen Sie die Daten für die im Abstand von 0,1 ps gegebene Gesamtpolarization $\vec{P}(t)$ aus dem File P.txt ein. Die Autokorrelationsfunktion $\phi(\tau)$ ist durch

$$\phi(\tau) = (T-\tau)^{-1} \int_0^{T-\tau} \vec{P}(t)\cdot\vec{P}(t+\tau)\,\mathrm{d}t = (T-\tau)^{-1} \int_0^{T-\tau} P_x(t)P_x(t+\tau)+P_y(t)P_y(t+\tau)+P_z(t)P_z(t+\tau)\,\mathrm{d}t \tag{1}$$

gegeben, wobei T die Länge der Trajektorie ist und $(T-\tau)^{-1}$ die Normierung sicherstellt. Berechnen Sie $\phi(\tau)$ für $\tau = 0$ und $\tau = 10\,\mathrm{ps}$ durch eine diskrete Summe im Realraum. Ermitteln Sie die benötigte Zeit für die Berechnung.

11.1.2 (4 Punkte)

Die Faltung in Gleichung 1 kann durch Transformation in den Frequenzraum als Produkt geschrieben und somit einfacher berechnet werden. Berechnen Sie $\phi(\tau)$ für alle Zeitpunkte bis $\tau = 1\,\mathrm{ns}$ mittels Fast Fourier Transformation (FFT). Ermitteln Sie die benötigte Zeit für die Berechnung und plotten Sie $\phi(\tau)$ im Intervall [0; 100 ps].

Sie erhalten die komplex-wertige Fourier-Transformierte $\mathcal{F}$ von P_x indem Sie den $2N$ langen Vektor $(P_x(t_0), P_x(t_1), ..., P_x(t_N), 0, ..., 0)$ mittels numpy.fft.fft transformieren. Die Rücktransformierte des Betragsquadrats von $\mathcal{F}$ liefert Ihnen bis auf Normierung die Autokorrelation von P_x. Zur Kontrolle der Normierung können Sie Ihre Ergebnisse aus 11.1.1 verwenden. Die Rücktransformation kann mit numpy.fft.ifft erfolgen.

11.1.3 (3 Punkte)

Bei Kenntnis von $\phi(\tau)$ lässt sich die dimensionslose elektrische Suszeptibilität $\chi(f)$ durch Laplace-Transformation berechnen:

$$\chi(f) = \frac{1}{3V\, k_B T \epsilon_0} \left[\phi(0) - i2\pi f \int_0^\infty e^{-2\pi i f t} \phi(t) \mathrm{d}t \right] \tag{2}$$

Berechnen Sie $\chi(f) = \chi'(f) - i\chi''(f)$ im Bereich 0,1 GHz bis 100 GHz und plotten Sie Ihre Ergebnisse für Real- und Imaginärteil semi-logarithmisch. Als obere Integrationsgrenze verwenden Sie die erste Nullstelle von $\phi(\tau)$. Als Vorfaktor benutzten Sie $\frac{1}{3V\, k_B T \epsilon_0} = 1{,}8769\,(\mathrm{e\,nm})^{-2}$. Die Laplace-Transformation können Sie mit einem geeigneten Verfahren durchführen.

11.2 Spektralanalyse mit Fensterfunktionen (6 Punkte)

Wir wollen das Frequenzspektrum des Signals folgender Funktion

$$f(x) = \sin(x) + 2\sin(0{,}6x) + 0{,}5\sin(4x), \tag{3}$$

an den Punkten $x_i = 0{,}05\, i$ für $i = 0, \ldots, N$ untersuchen.

Zur Verbesserung der Analyse kann das Signal $f(x_i)$ mit einer Fensterfunktion $w(i)$ multipliziert werden, wobei die Fensterfunktion an den Rändern verschwindet. Führen Sie mittels FFT die Spektralanalyse $|F(q)|^2$ von $f(x)$ durch,

1. ohne Fensterfunktion,
2. mit einem Trapezfenster mit linearem Anstieg von beiden Seiten im Bereich 1/10 von den Rändern und 1 in der Mitte (siehe Fig. 1a),
3. mit dem Blackman-Fenster gegeben durch $w(i) = 0{,}42 - 0{,}5\cos(2\pi i/N) + 0{,}08\cos(4\pi i/N)$ (Fig. 1b).

Vergleichen Sie die Ergebnisse für $N = 2000$ und $N = 10000$ und plotten Sie das Spektrum log-linear. Kommentieren Sie den Einfluss der Fenster und der Datenlänge N. Was erwarten Sie für $N \to \infty$?

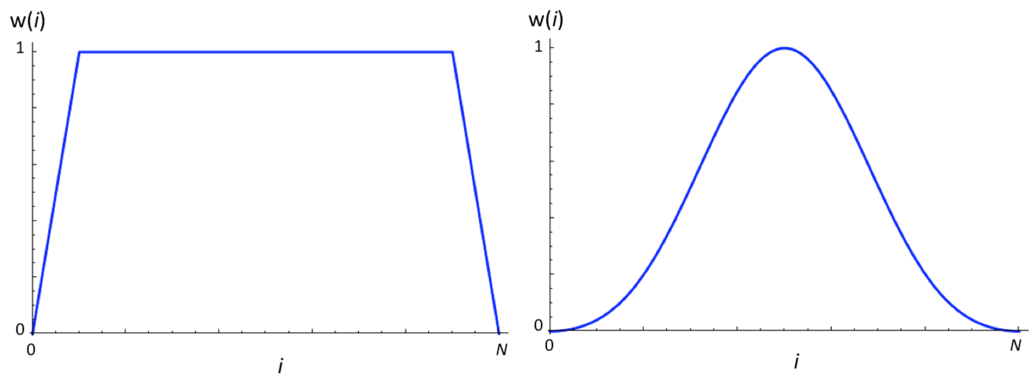

Abbildung 1: Fensterfunktionen (a) Trapezoidal, (b) Blackman.

11.3 Rauschfilterung (6 Punkte)

Wir nehmen an, dass das gesuchte Signal $s(t)$ mit weißem Rauschen $n(t)$ überlagert gemessen wird

$$c(t) = s(t) + n(t). \tag{4}$$

Als gesuchtes Signal verwenden wir

$$s(t) = \exp\left[-5(t - 1{,}5)^2\right] + 0{,}5\exp\left[-2(t - 3)^4\right], \tag{5}$$

und das Rauschen stellen wir durch Zufallszahlen zwischen $-0{,}5$ und $0{,}5$ da. Die Zufallszahlen können Sie mit `random.random()` generieren.

- **Aufgabe 11.3.1 (1 Punkt):** Erzeugen Sie das Signal auf dem Intervall zwischen $t = 0$ und $t = 5$ mit einer Zeitauflösung von $\Delta t = 0{,}02$ und plotten Sie es.
- **Aufgabe 11.3.2 (1 Punkt):** Plotten Sie $|C(\omega)|^2$ des Gesamtsignals $c(t)$. Im Frequenzraum gilt $C(\omega) = S(\omega) + N(\omega)$. Wo zeigt sich im Gesamtspektrum das Originalsignal?

In einer vereinfachten Version eines Wiener Filters, nehmen wir an, dass ab einer gewissen Frequenz $\omega > \omega_0$ das gesuchte Signal verschwindet und nur noch das Rauschen auftritt. In diesem Bereich bestimmen wir die Amplitude des Rauschens $|N(\omega)|^2 = \text{const.}$ Im gesamten Spektrum werden alle Beiträge oberhalb von ω_0 auf null gesetzt. Alle Beiträge mit niedriger Frequenz werden mit einem Filterfaktor reskaliert:

$$\Phi(\omega) = \frac{|C(\omega)|^2 - |N(\omega)|^2}{|C(\omega)|^2}. \tag{6}$$

Das gefilterte Spektrum $S'(\omega)$ lautet

$$S'(\omega) = \begin{cases} C(\omega)\Phi(\omega) & \text{für } |\omega| < \omega_0, \\ 0 & \text{für } |\omega| \geq \omega_0, \end{cases} \tag{7}$$

und dient nach Rücktransformation zu $s'(t)$ als Approximation von $s(t)$.

- **Aufgabe 11.3.3 (4 Punkte):** Wählen Sie ω_0 geeignet und bestimmen Sie $|N(\omega)|^2$. Benutzen Sie den Wiener Filter (Gl.7), wie beschrieben, und plotten Sie $s'(t)$ gemeinsam mit $s(t)$ und $c(t)$.