

Densidade Espectral ou Espectro de Potências e a Autocorrelação

1. Transformada de Fourier de processos estacionários.

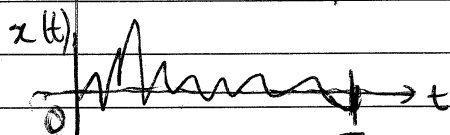
[contexto: análise de sinais; séries temporais]

Seja $X(t)$ um processo estocástico cujas realizações $\{x(t)\}$ estão definidas no intervalo $0 \leq t \leq T$:

$$x(t) = \begin{cases} \neq 0 & 0 \leq t \leq T \\ = 0 & t < 0, \quad t > T \end{cases}$$

Para cada realização $x(t)$, escrevemos a SÉRIE DE FOURIER:

$$x(t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_{n,x} e^{+i \frac{n\bar{n}}{T} \cdot t} \quad (1) \quad \boxed{\frac{n\bar{n}}{T} = \omega_n}$$



$$\text{onde } A_{n,x} = \frac{1}{T} \int_0^T e^{-i \omega_n t} x(t) dt \quad (2)$$

2- Identidade de Parseval [obtida pelo $A_{n,x}$]
(para cada realização)

$$\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} |A_{n,x}|^2 = \frac{1}{T} \int_0^T |x(t)|^2 dt \quad (3)$$

Para $X(t)$ um processo estocástico $\Rightarrow A_{n,x}$ é uma VARIÁVEL ESTOQUÍSTICA
e a identidade acima, valendo para cada realização, vale também para a soma delas e

portanto, vale para a MÉDIA:

$$(4) \left[\sum_n \frac{1}{2} \langle |A_n x|^2 \rangle_{\{x\}} = \frac{1}{T} \int_0^T \langle |X(t)|^2 \rangle_{\{x\}} dt \stackrel{\text{ESTACIONÁRIO}}{\downarrow} = \langle |X(0)|^2 \rangle_{\{x\}} \right]$$

onde $\langle \dots \rangle_{\{x\}}$ indica a média de ensemble e

para a segunda igualdade, usamos que o processo é estacionário:

$$\langle X(t) X^*(t) \rangle_{\{x\}} = \langle X(0) X^*(0) \rangle_{\{x\}} \equiv \langle |X|^2 \rangle$$

No caso de interesse: $X(t) \Rightarrow e^{ikx(t)}$ $X(t) = \text{posição da partícula}$

Interpretação da expressão (4) acima:

Definição:

$$\sigma^2(t) \equiv \langle (X(t) - \langle X(t) \rangle) \cdot (X^*(t) - \langle X^*(t) \rangle) \rangle_{\{x\}} =$$

$$= \langle X(t) X^*(t) \rangle_{\{x\}} - \langle X(t) \rangle_{\{x\}} \langle X^*(t) \rangle_{\{x\}}$$

$$= \langle |X(t)|^2 \rangle_{\{x\}} - \langle X(t) \rangle_{\{x\}} \langle X^*(t) \rangle_{\{x\}} = \sigma^2(t)$$

$$\left[\sigma^2(t) = \sigma^2 = \langle |X(0)|^2 \rangle_{\{x\}} = \sum_n \langle \frac{1}{2} |A_n x|^2 \rangle_{\{x\}} \right] (5)$$

processo
ESTACIONÁRIO
de MÉDIA ZERO

PARSEVAL

ou seja: a identidade de Parseval exprime a variância do processo estacionário como a soma sobre TODAS as componentes de Fourier. Cada uma destas componentes corresponde à contribuição para σ^2 da onda (plana) de frequência ω_n .

Por outro lado, podemos afirmar que o conhecimento de σ^2 leva à soma (ou integral) sobre a contribuição de todas as frequências, tomada a média sobre todas as realizações.

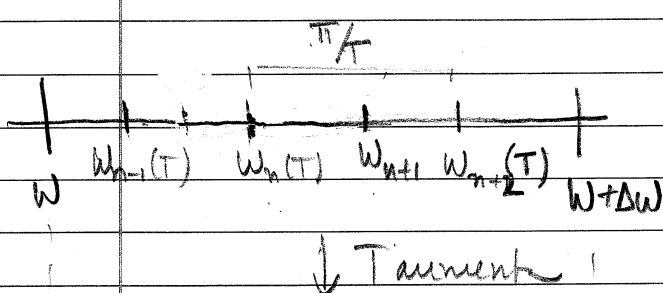
A questão que pode ser colocada então é: como obter a distribuição destas frequências que contribuem para σ^2 ?

↑
[o valor médio associado a cada frequência]

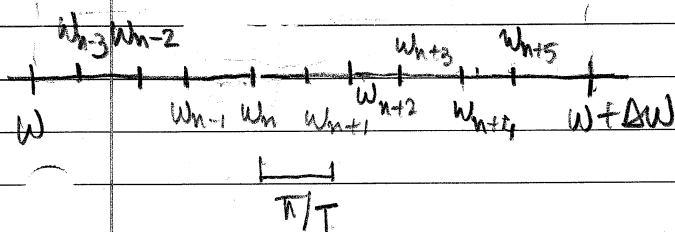
ou seja: queremos determinar a "DENSIDADE ESPECTRAL" $S(\omega)$ das flutuações, definida de forma que em uma "janela" $\Delta\omega$

$$S(\omega) \Delta\omega = \sum_{\omega_n \leq \frac{\pi\omega}{T} \leq \omega + \Delta\omega} \frac{1}{2} \langle |A_{n\omega}|^2 \rangle \quad (6)$$

" ω_n "



Note: esta corresponde a apenas uma parte da soma total que aparece na identidade de Parseval.



$$\omega_n = \frac{n\pi}{T}$$

$$\Delta\omega_n = \omega_{n+1} - \omega_n = \frac{\pi}{T}$$

A resposta a esta questão é obtida através do Teorema de Wiener - Kinchin:

$$\left[S(\omega) = \frac{2}{\pi} \operatorname{Re} \left[\int_0^{\infty} e^{-i\omega\tau} g_1(\tau) d\tau \right] \right] \quad (7)$$

onde

$$g_1(\tau) = \langle x^*(0) x(\tau) \rangle \quad (8)$$

... para o processo estacionário de média zero. Ou seja:

$S(\omega)$ é obtida através da transformada de Fourier de $g_1(\tau)$

$S(\omega)$ pode ser obtida diretamente do experimento

DEMONSTRAÇÃO

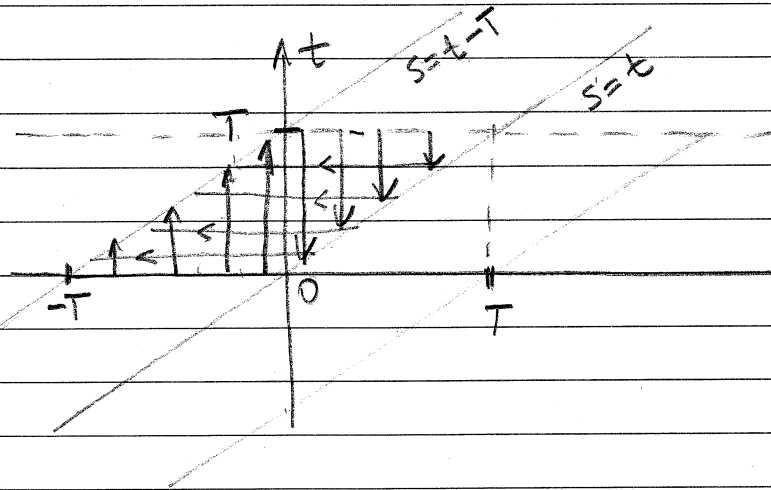
Partindo da expressão (2), pg 7:

$$\begin{aligned} \langle |A_{m,x}|^2 \rangle &= \frac{1}{T^2} \left\langle \int_0^T e^{-i(\omega_0/T)t} X(t) dt \int_0^T e^{+i(\omega_0/T)t'} X^*(t') dt' \right\rangle \\ &= \frac{1}{T^2} \int_0^T dt \int_0^T dt' e^{-\frac{i\omega_0}{T}(t-t')} \langle X(t) X^*(t') \rangle \end{aligned}$$

Mudança de variável: $t - t' \equiv s$

$$\Rightarrow \begin{cases} ds = -dt' \\ t' = 0 \rightarrow s = t \\ t' = T \rightarrow s = t - T \end{cases}$$

$$\langle |A_{n,x}|^2 \rangle = -\frac{1}{T^2} \int_0^T dt \int_t^{t-T} ds \langle X(t) X^*(t-s) \rangle e^{-\frac{i\omega_n}{T} s}$$



corresponde
a este sentido
de integração:
para cada t fixo $[0, T]$
 s é integrado entre
 t e $t-T$

Trocando a ordem de integração:

$$\langle |A_{n,x}|^2 \rangle = -\frac{1}{T^2} \left\{ \underbrace{\int_0^{-T} ds \int_0^{s+T} dt e^{-\frac{i\omega_n}{T} s} \langle X(t) X^*(t-s) \rangle}_{\equiv I_1} + \underbrace{\int_0^T ds \int_T^{s-T} dt e^{-\frac{i\omega_n}{T} s} \langle X(t) X^*(t-s) \rangle}_{\equiv I_2} \right\}$$

para cada s
fixo $\in [0, -T]$,
 t é integrado
 $0 \rightarrow s+T$

para cada s
fixo $\in [0, T]$,
 t é integrado
 $T \rightarrow s$

Para I_2 : $t' = t-s$

$$\begin{cases} dt' = dt \\ t=T \rightarrow t'=T-s \\ t=s \rightarrow t'=0 \end{cases}$$

$$I_2 = -\int_0^T ds \int_0^{T-s} dt' e^{-\frac{i\omega_n}{T} s} \langle X(t'+s) X^*(t') \rangle$$

Para I_1 : $S^1 = -S$

$$I_1 = - \int_0^T ds' \int_0^{T-s'} dt e^{+i\omega_0 s'} \langle x(t) x^*(t+s') \rangle$$

Como estas !

$$\begin{aligned} \langle |A_{n,x}|^2 \rangle &= + \frac{1}{T^2} \left[\int_0^T ds \int_0^{T-s} dt e^{+i\frac{2\pi}{T}st} \langle X(t) X(t+s) \rangle + \right. \\ &\quad \left. + \int_0^T ds \int_0^{T-s} dt e^{-i\frac{2\pi}{T}st} \langle X(t+s) X^*(t) \rangle \right] \\ &\equiv K_1 + K_2 \end{aligned}$$

$$K_1 = \langle X(t) X^*(t+s) \rangle = \langle X(0) X^*(s) \rangle$$

↑
ESTACIONARIO

$$\Rightarrow K_1^* = \langle x(s) x^*(0) \rangle = K(s)$$

$$K_2 = \langle X(t+s) X^*(t) \rangle \underset{\text{ESTACIONÁRIO}}{=} \langle X(s) X^*(0) \rangle \int \frac{|K_1 - K_2|}{\dots}$$

$$\Rightarrow \langle |A_{\omega, x}|^2 \rangle = \frac{1}{T^2} \int_0^T ds \int_0^{T-s} dt \left[e^{i \frac{\omega}{T} s} K^*(s) + e^{-i \frac{\omega}{T} s} K(s) \right]$$

No limits $T \rightarrow \infty$

$$\langle |A_{n,x}|^2 \rangle \approx \left[\frac{1}{T} \int_0^T ds \left[e^{i \frac{n \hbar s}{T}} \kappa^*(s) + e^{-i \frac{n \hbar s}{T}} \kappa(s) \right] \right]_{T \rightarrow \infty}$$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \sum_{n=n'}^{n''} \langle |A_n|^2 \rangle =$$

$$= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \sum_{n=n'}^{n''} \int_0^T ds \cdot 2 \operatorname{Re} \left\{ e^{-i \frac{n \pi s}{T}} K(s) \right\} \quad (9)$$

onde

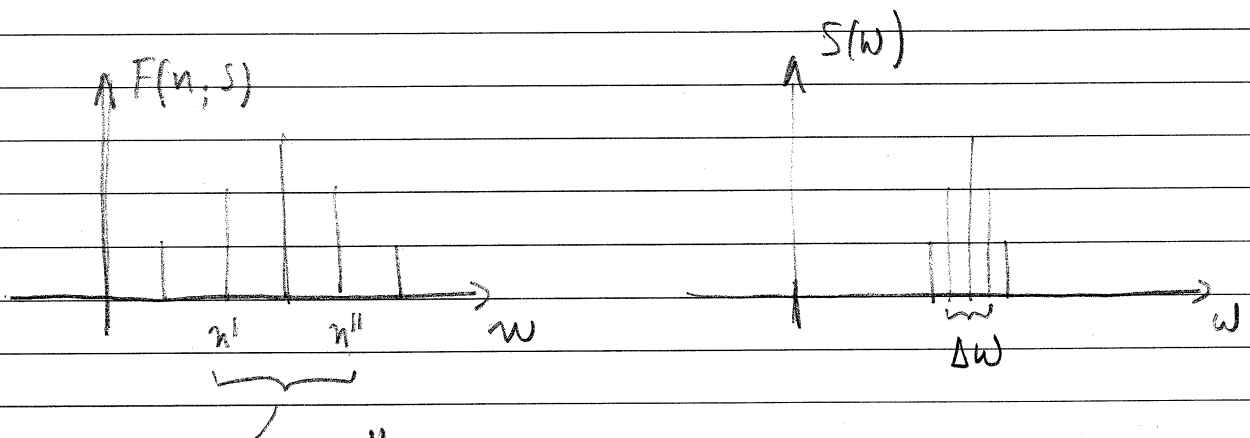
$$(1) \quad 2 \operatorname{Re} \left\{ e^{-i \frac{n \pi s}{T}} K(s) \right\} = \left[e^{i \frac{n \pi s}{T}} K^*(s) + e^{-i \frac{n \pi s}{T}} K(s) \right]$$

$$(2) \quad \text{No intervalo: } \omega < \frac{n \pi}{T} < \omega + \Delta \omega \quad \left\{ \begin{array}{l} n' = \frac{T}{\pi} \omega \\ n'' = \frac{T}{\pi} \omega + \frac{T}{\pi} \Delta \omega \end{array} \right.$$

Portanto, o número de termos nesta soma é:

$$n'' - n' = \frac{T}{\pi} \Delta \omega \rightarrow \Delta \omega = (n'' - n') \cdot \frac{\pi}{T}$$

$$\text{Para } T \rightarrow \infty \Rightarrow \Delta \omega \rightarrow 0$$



$$\frac{T}{\pi} \Delta \omega \sum_{n'}^{n''} 2 \operatorname{Re} \left\{ e^{-i \frac{n \pi s}{T}} K(s) \right\} \xrightarrow{\lim T \rightarrow \infty} 2 \operatorname{Re} \left\{ \frac{T}{\pi} e^{-i \omega s} K(s) \Delta \omega \right\}$$

$F(\omega)$ varia muito pouco no intervalo $\Delta \omega$ que é agora muito pequeno ($T \rightarrow \infty$)

$$\text{Então } \frac{1}{2} \lim_{T \rightarrow \infty} \sum_{n=n'}^{n''} \langle |A_n|^2 \rangle \approx$$

$$\sim \left[\frac{1}{T} \cdot \int_0^T ds \cdot \frac{2 \operatorname{Re}}{2} \left\{ \frac{T}{\pi} e^{-i\omega s} \cdot K(s) \right\} \cdot \Delta\omega \right]_{T \rightarrow \infty}$$

$$= \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \left[\int_0^\infty ds \left[e^{-i\omega s} \cdot \underbrace{K(s)}_{=g_1(s)} \right] \right] \cdot \Delta\omega = S(\omega) \cdot \Delta\omega$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{S(\omega)}$

Onde $S(\omega)$ é exatamente a densidade espectral de forma que $S(\omega) \Delta\omega$ fornece a contribuição das frequências entre ω e $\omega + \Delta\omega$ para a dispersão σ^2 (processo estacionário)

Exemplo:

Para $F_S(k, \tau) = \langle e^{-ik [X(t+\tau) - X(t)]} \rangle$ tempo longo

$$g_1(\tau) = \operatorname{Re} \left\{ F_S(k, s) e^{-i\omega_0 \tau} \right\}$$

$$= e^{-\Gamma \tau + i\omega_0 \tau}$$

↑

(ver Aula 5)

então ...

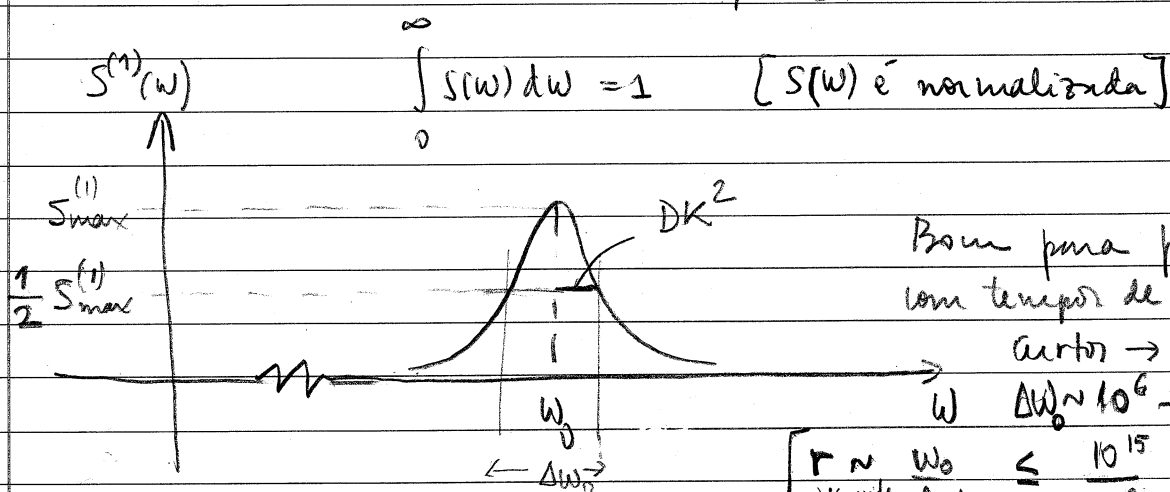
$$\begin{aligned}
 S(\omega) &= \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \int_0^{\infty} d\tau \left[e^{-i\omega\tau} g_1(\tau) \right] \\
 &= \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \int_0^{\infty} d\tau \left[e^{-\Gamma\tau - i\omega_0\tau + i\omega\tau} \right]
 \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \left(\frac{e^{-\Gamma\tau - i(\omega_0 - \omega)\tau}}{-[\Gamma + i(\omega_0 - \omega)]} \right) \Bigg|_{\tau=0}^{\infty}$$

$$= \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \left(\frac{1}{[\Gamma + i(\omega_0 - \omega)]} \right) = \frac{2}{\pi} \operatorname{Re} \left(\frac{\Gamma - i(\omega_0 - \omega)}{[\Gamma^2 + (\omega_0 - \omega)^2]} \right)$$

$$\left[S(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{[\Gamma^2 + (\omega_0 - \omega)^2]} = \frac{1}{\pi} \frac{DK^2}{(DK^2)^2 + (\omega - \omega_0)^2} \right]$$

$\Gamma = DK^2$



Lorentziana centrada na frequência ω_0 do laser

Problema:

Para macromoléculas $\omega_0 \sim 10^{10} \text{ (DK}^2\text{)}$
 Como fontes espalhadoras $\rightarrow$

Onça: $\Delta\omega_0$ pequeno... frequências baixas

A resolução requerida neste caso seria

$$\Delta\omega_0 \begin{matrix} \text{max} \\ (\Delta\omega_0 \sim 10^5 \text{ Hz}) \\ \text{min} \\ (\Delta\omega_0 \sim 1 \text{ Hz}) \end{matrix}$$

$$r_{\text{req}} \sim \frac{\omega_0}{\Delta\omega_0} \sim 10^{10} \quad \text{é muito alta!}$$

Instrumentsr
largura mínima: $\Delta\omega$
 (Hz)

Grating spectrograph

 10^5 $\sim 3 \times 10^9$

Fabry - Perot interferometer

 10^8 5×10^6 Light beating spectrometer
(1964) 10^{14} ~ 1 $\uparrow$

de fato, para

$$\omega_0 = 5 \times 10^{14} \text{ Hz}$$

$$\Delta\omega_0 = (1 - 10^5) \text{ Hz}$$

ok!

$$r_{\text{max}} = \frac{5 \times 10^{14}}{\Delta\omega_0^{\text{min}}} = \frac{5 \times 10^{14}}{3 \times 10^9} \approx 10^5 \quad \checkmark$$

$$= \frac{5 \times 10^{14}}{5 \times 10^6} = 10^8 \quad \checkmark$$

$$\approx \frac{5 \times 10^{14}}{1} \approx 10^{14} \quad \checkmark$$

Os experimentos que levam a um valor de D são baseados em $G^{(2)}$
 = nestes casos

$$\frac{G^{(2)}(\tau)}{\langle I \rangle^2} \Rightarrow g_{\text{hom}}^{(2)}(\tau) = 1 + \beta |g^{(1)}(\tau)|^2$$

Fórmula aproximada
Siegert
(Experimento Homodyne)

↑
O(1) fator geométrico

Usando a expressão para $g^{(1)}(\tau)$

$$\Rightarrow g_{\text{hom}}^{(2)}(\tau) = 1 + \beta \cdot e^{-2\Gamma\tau}$$

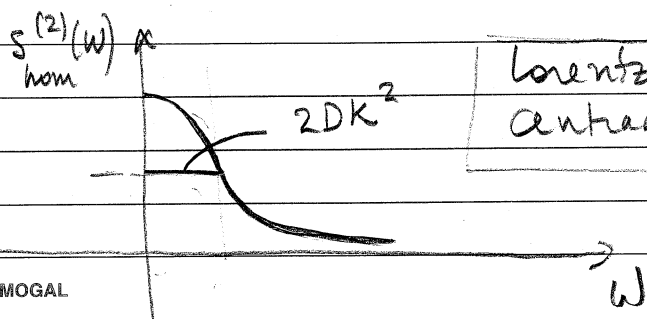
A transformada de Fourier de $g^{(2)}(\tau)$ fornece o espectro $S^{(2)}(\omega)$

$$S_{\text{hom}}^{(2)}(\omega) = \frac{2}{\pi} \operatorname{Re} \int_0^{\infty} (1 + \beta \cdot e^{-2\Gamma\tau}) \cdot e^{-i\omega\tau} d\tau$$

$$= \frac{2}{\pi} \left[f(\omega) + \beta \operatorname{Re} \left\{ \frac{e^{-2\Gamma\tau - i\omega\tau}}{(-2\Gamma - i\omega)} \right\} \right]_{\tau=0}^{\infty}$$

$$= \frac{2}{\pi} \left[f(\omega) + \beta \cdot \frac{2\Gamma}{(2\Gamma)^2 + \omega^2} \right]$$

$$S_{\text{hom}}^{(2)}(\omega) = \frac{2}{\pi} \left[f(\omega) + \beta \cdot \frac{2DK^2}{[2DK^2]^2 + \omega^2} \right]$$



Bom para análise de processos associados a tempo de relaxação longo... frequências baixas