



evropský
sociální
fond v ČR



EVROPSKÁ UNIE



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost

INVESTICE
DO ROZVOJE
VZDĚLÁVÁNÍ

Inovace bakalářského studijního oboru Aplikovaná chemie

Reg. č.: CZ.1.07/2.2.00/15.0247



EVROPSKÁ UNIE



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost

INVESTICE
DO ROZVOJE
VZDĚLÁVÁNÍ

APLIKACE POČÍTAČŮ V MĚŘÍCÍCH SYSTÉMECH PRO CHEMIKY s využitím *LabView*



10 Lab View - Sběr dat (pokračování)

11 Analýza dat a zpracování signálu



evropský
sociální
fond v ČR



EVROPSKÁ UNIE



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost

INVESTICE
DO ROZVOJE
VZDĚLÁVÁNÍ

Čítače a časovače (counters/timers)

Čítače, resp. časovače jsou běžnou součástí multifunkčních karet.



Čítače slouží k počítání (pulzního) signálu z externího zdroje (např. optické závory - lze využít např. pro počítání výrobků)



Počítá-li se interní signál (např. zdroj hodinového kmitočtu), hovoříme o časovači – slouží k určení časového intervalu

Kromě vstupů signálu, který se počítá, bývají čítače osazeny i výstupem, který lze využít ke generování signálů s pulzními průběhy



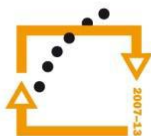
evropský
sociální
fond v ČR



EVROPSKÁ UNIE



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost

INVESTICE
DO ROZVOJE
VZDĚLÁVÁNÍ

Čítače a časovače (counters/timers)

Čítače obvykle pracují s TTL signálem, monitorují přechod z jednoho TTL stavu do druhého.

Čítač lze obvykle naprogramovat tak, že může detekovat

- náběhovou hranu signálu, tedy přechod z log. 0 do log. 1, nebo jeho
- sestupnou hranu, nebo
- obojí (vzestupnou i sestupnou hranu).

Čítač je charakterizován

- maximální frekvencí čítaného signálu („nevidí“ impulsy které uvedenou frekvenci převyšují)
- S tím souvisí i nejmenší povolená šířka TTL pulsu
- Čítač čítá od nuly do určité nejvyšší hodnoty – ta je dána šířkou datového registru čítače, např. 32-bitový čítač počítá od nuly do 4294967295, poté nastane opět nula => je nutné na toto pamatovat a buďto zajistit, že tato situace nemůže nastat, nebo je ji třeba ošetřit v software



evropský
sociální
fond v ČR



EVROPSKÁ UNIE



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY

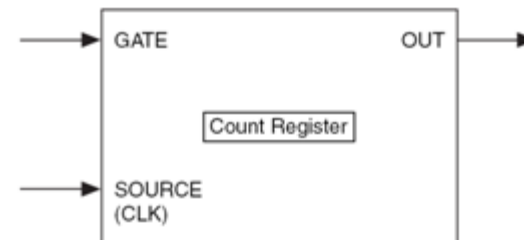


OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost

INVESTICE
DO ROZVOJE
VZDĚLÁVÁNÍ

Čítače a časovače (counters/timers)

Čítač má dva vstupy a výstup



Vstup GATE kontroluje čítání. Naprogramovat lze následující chování čítače v závislosti na vstupu GATE:

- No gating – čítání je spouštěno a ukončováno softwarově, tj. bez použití GATE.
- Level gating – čítání je povoleno, je-li na vstupu GATE log. 0 nebo log. 1.
- Edge-triggered gating – čítání je zahájeno hranou(náběžnou nebo sestupnou) pulsu na vstupu GATE

Na vstup SOURCE (CLK) se přivádí počítaný TTL signál. Count register ukládá aktuální hodnotu čítače. Na aktuální hodnotu se lze dotazovat pomocí software.

Výstup OUT lze různě naprogramovat, aby v závislosti na stavech vstupu GATE a SOURCE (CLK) generoval puls nebo sérii pulsů.



evropský
sociální
fond v ČR



EVROPSKÁ UNIE



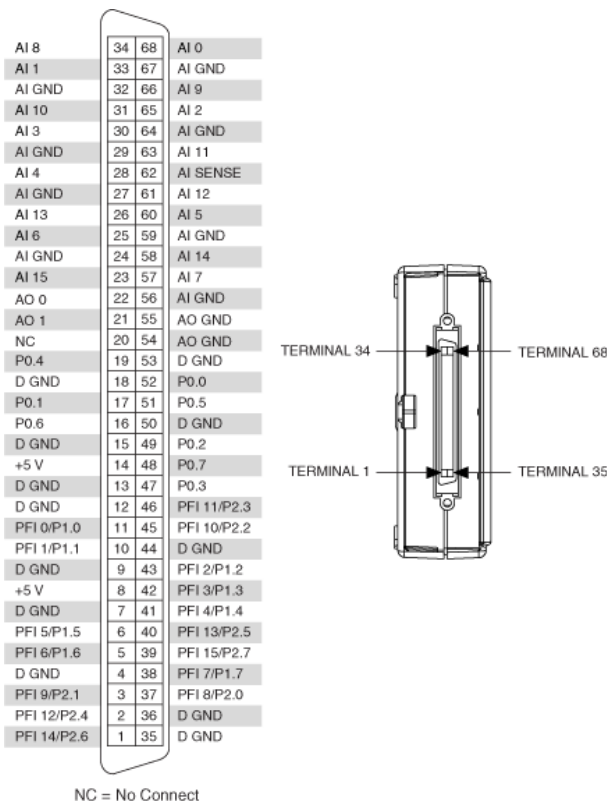
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost

INVESTICE
DO ROZVOJE
VZDĚLÁVÁNÍ

Čítače a časovače (counters/timers)



Čítačové vstupy a výstupy jsou u NI karet označeny jako PFI (programmed function interface) – lze je totiž nakonfigurovat i jako (další) digitální linky), pokud nepotřebujeme pro danou aplikaci čítač.

Counter/Timer Signal	Default Pin Number	Signal Name
CTR 0 SRC	37	PFI 8
CTR 0 GATE	3	PFI 9
CTR 0 AUX	45	PFI 10
CTR 0 OUT	2	PFI 12
CTR 0 A	37	PFI 8
CTR 0 Z	3	PFI 9
CTR 0 B	45	PFI 10
CTR 1 SRC	42	PFI 3
CTR 1 GATE	41	PFI 4
CTR 1 AUX	46	PFI 11
CTR 1 OUT	40	PFI 13
CTR 1 A	42	PFI 3
CTR 1 Z	41	PFI 4
CTR 1 B	46	PFI 11
FREQ OUT	1	PFI 14

Signály SRC/GATE/AUX jsou též označovány jako A/Z/B

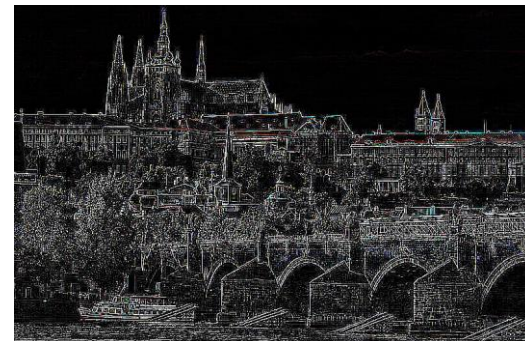
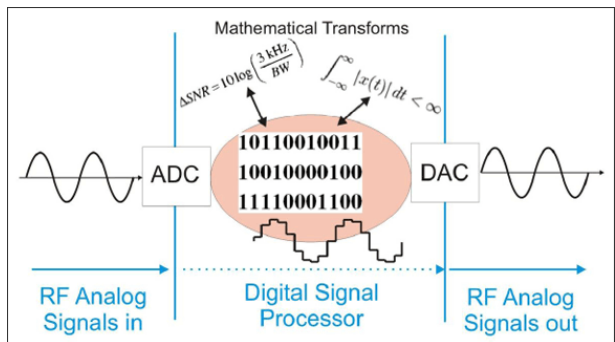
Analýza dat a zpracování signálu

Vstupní signál $\longrightarrow$ DSP $\longrightarrow$ Výstupní signál

DSP = digital signal processing, tj. digitální zpracování signálu. Jde o matematickou a algoritmickou manipulaci, jejímž cílem je extrahovat důležité informace, které jsou přenášeny signálem

Signál – fyzikální veličina, která přenáší nějakou zprávu. Zpráva může obsahovat určité množství informace

- Signál může být reprezentován popisem závislosti jednoho parametru (závislá proměnná) na parametru jiném (nezávislá proměnná). Nečastěji je jako nezávislá proměnná čas, může to být ale cokoli jiného (vlnová délka u spekter, koncentrace u kalibračních křivek apod.).



Postupy DSP jsou široce využívány i pro 2D data, např. při obrazové analýze

Purge & trap analysis of the riser pipe oil taken from the well head of the Macondo Prospect, Mississippi Canyon 252 using a Remotely Operated Vehicle (ROV). Crude oil concentration at 10ppm in salt water. Analysis performed using EPA Method 8260.



evropský
sociální
fond v ČR



EVROPSKÁ UNIE



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY

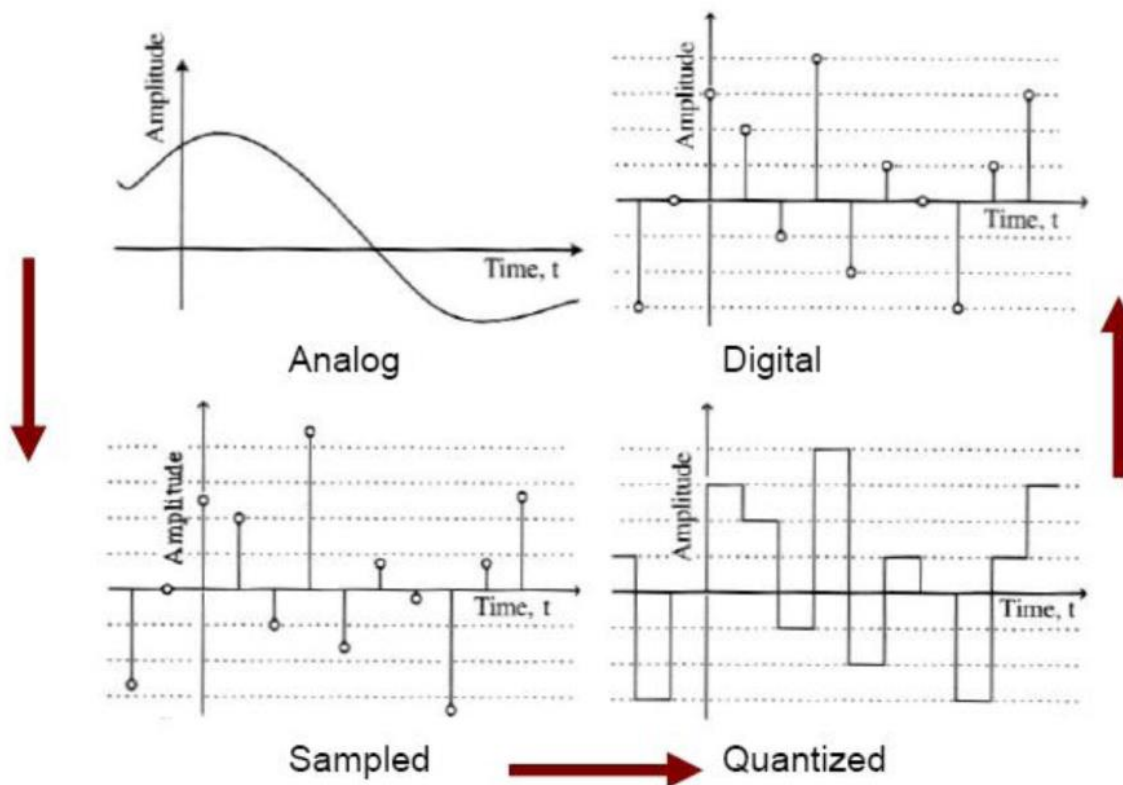


OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost

INVESTICE
DO ROZVOJE
VZDĚLÁVÁNÍ

Analýza dat a zpracování signálu

DSP systémy zpracovávají signály které jsou vzorkované,
popř. kvantované





evropský
sociální
fond v ČR



EVROPSKÁ UNIE



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY

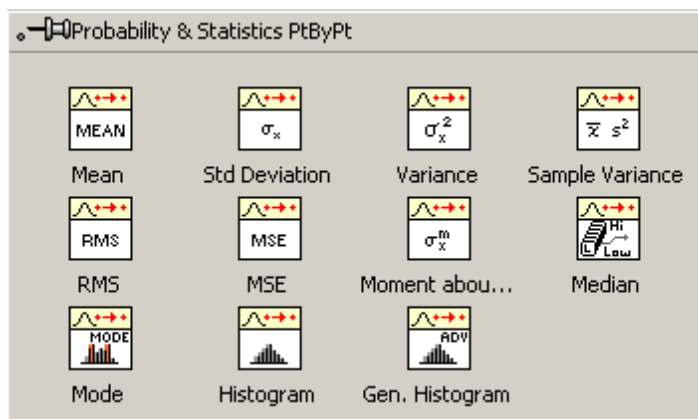


OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost

INVESTICE
DO ROZVOJE
VZDĚLÁVÁNÍ

Analýza dat a zpracování signálu – Statistické funkce v Labview

Velmi často potřebujeme zjistit statistické vlastnosti měřeného signálu (průměrnou hodnotu, střední hodnotu apod.)



Labview disponuje celou řadou funkcí sloužících k tomuto účelu



Implementovány jsou i fitovací funkce (např. Linear fit proloží data v reálném čase metodou nejmenších čtverců a na výstup předá hodnotu směrnice, posunutí i korelační koeficient)



evropský
sociální
fond v ČR



EVROPSKÁ UNIE



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost

INVESTICE
DO ROZVOJE
VZDĚLÁVÁNÍ

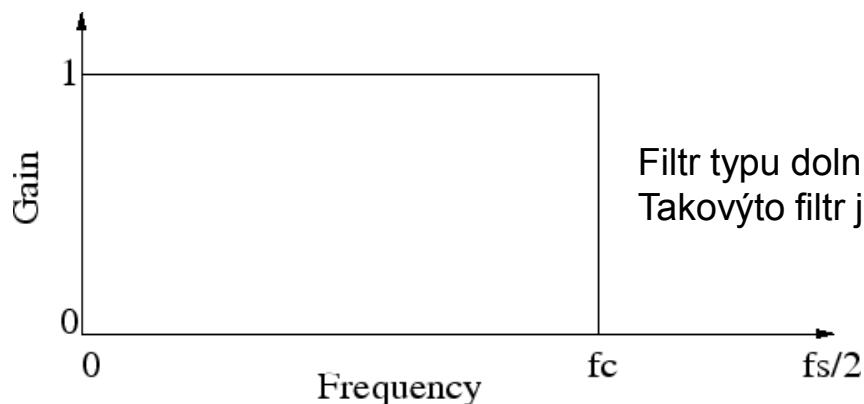
Analýza dat a zpracování signálu - Filtrace

Filtrace – nejčastěji používaná operace v DSP, cílem filtrace je:

- změna frekvenčního obsahu signálu např. odstraněním některých rušivých frekvencí
- odstranění šumu v signálu výběrem pouze určitých frekvencí, které přenáší informaci

Obvykle se se používají následující typy filtrů:

- dolní propust (lowpass filter = LPF) - odstraňuje ze signálu frekvence vyšší, než je určitá hodnota
- horní propust (highpass HPF) - odstraňuje nízké frekvence ze signálu
- pásmová propust (bandpass BPF) - propouští frekvence z určitého frekvenčního pásma
- pásmová zadrž (bandstop BSF) - zadržuje frekvence určitého frekvenčního pásma
- notch filter - odstraňuje specifickou frekvenci



Filtr typu dolní propust, ideální průběh.

Takovýto filtr je nerealizovatelný pomocí elektronických součástek



evropský
sociální
fond v ČR



EVROPSKÁ UNIE



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY

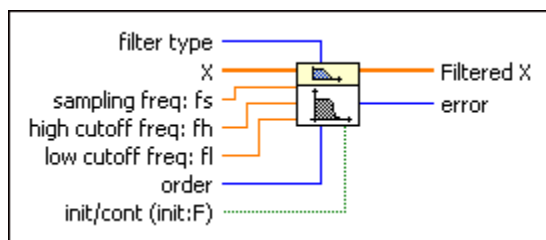


OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost

INVESTICE
DO ROZVOJE
VZDĚLÁVÁNÍ

Analýza dat a zpracování signálu - Filtrace

V analogové technice se nejčastěji využívají Butterworthovy, Čebyševovy a Besselovy filtry. Při filtraci je zadána mezní frekvence, od (nebo do) které má být signál potlačen. To se však neděje skokově, ale frekvence jsou potlačeny (atenuovány) postupně.



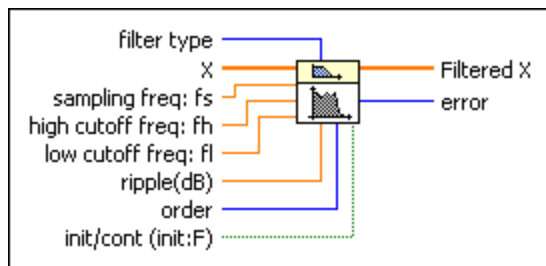
Butterworth Filter (DBL).

Filter type specifies the passband of the filter:

0 Lowpass, 1 Highpass, 2 Bandpass, 3 Bandstop

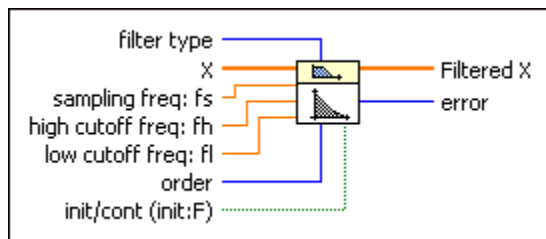
X is the input signal to filter

Butterworthův filtr má nejplošší frekvenční charakteristiku



Chebyshev Filter

Čebyševův filtr má minimální rozdíl od ideální charakteristiky filtru.



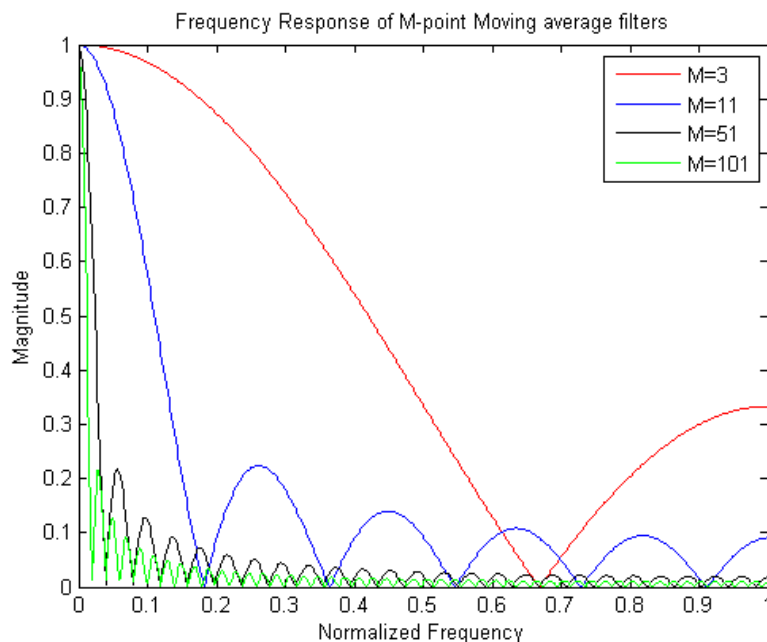
Bessel Filter

Besselův filtr je charakterizován maximálně lineární fázovou odezvou

Analýza dat a zpracování signálu - Filtrace

Filtr plovoucí (klouzavý) průměr = moving (running) average

Počítá se průměr z daného vzorku a M vzorků předchozích.
Používá se pro potlačení periodického rušení superponovaného na konstantní signál, potlačení krátkodobých výkyvů časové řady (vyhlazování trendu)



- Filtr zachovává nižší frekvence a potlačuje vyšší
- Často se používá opakovaně (několik průchodů)



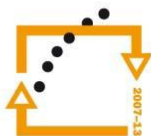
evropský
sociální
fond v ČR



EVROPSKÁ UNIE



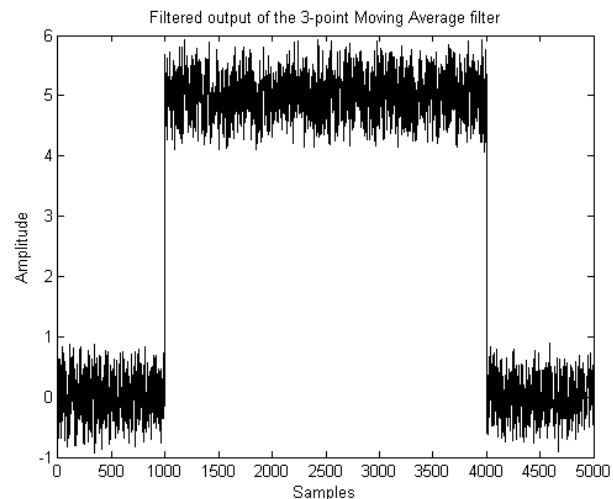
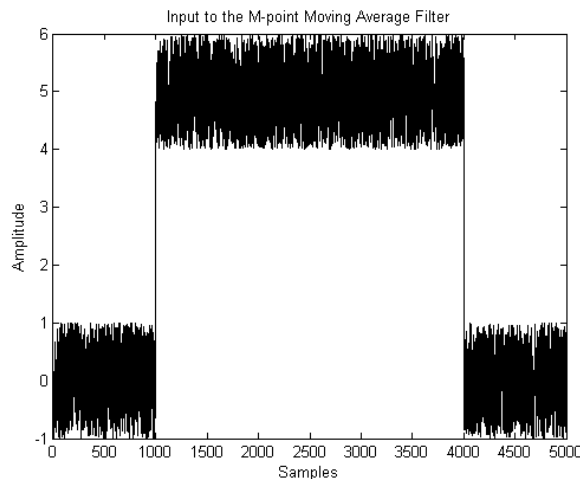
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



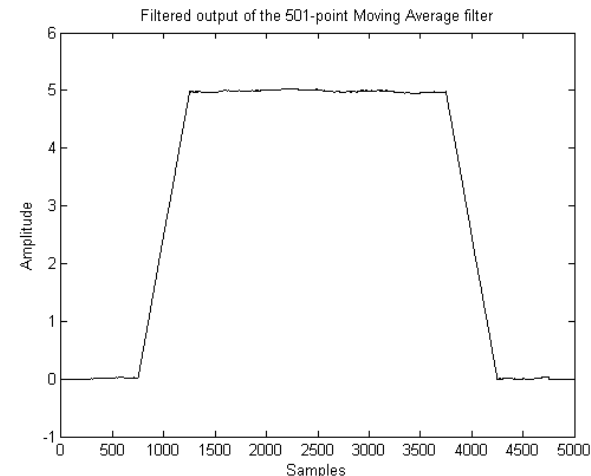
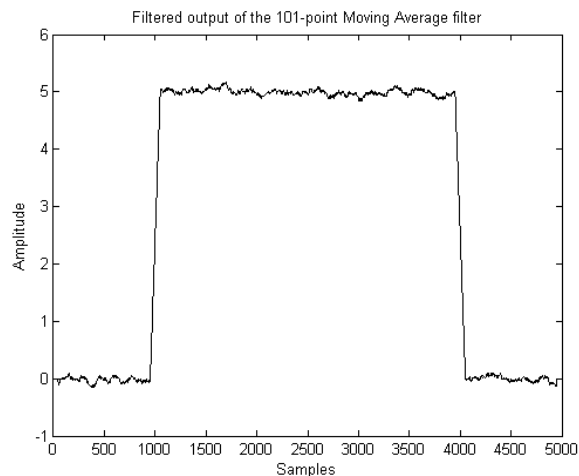
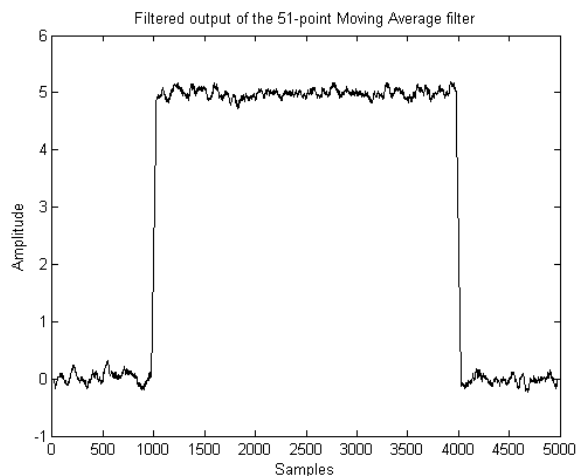
OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost

INVESTICE
DO ROZVOJE
VZDĚLÁVÁNÍ

Filtrace - filtr plovoucí (klouzavý) průměr

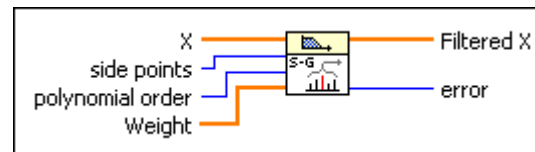


Vyhlazení obdélníkového signálu filtrem typu plovoucí průměr. Vyšší počet vzorků snižuje šum, ale zešikmuje hranu pulzu. Plovoucí průměr je optimálním filtrem pro tuto úlohu (potlačení šumu je při určitém stupni zešikmení hrany u jiných filtrů horší)



Analýza dat a zpracování signálu - Filtrace

Savitzki – Golay filter



- Snahou je potlačit šum při co nejnižším zkreslení signálu.
- Podobně jako u plovoucího průměru je filtrace založena na zpracování daného vzorku a určitého počtu vzorků předchozích.
- Vzorky však nejsou průměrovány, ale **proloženy polynomem určitého stupně**.
- Pokud je stupeň polynomu roven jedné, činnost filtru poskytuje analogické výsledky jako filtr typu plovoucí průměr.

Teorie byla publikována v časopise Analytical Chemistry a jde o jednu z nejcitovanějších prací všech dob:

Savitzky, A.; Golay, M.J.E. (1964). "Smoothing and Differentiation of Data by Simplified Least Squares Procedures". Analytical Chemistry 36 (8): 1627–39. doi:10.1021/ac60214a047.

Analýza dat a zpracování signálu - Konvoluce

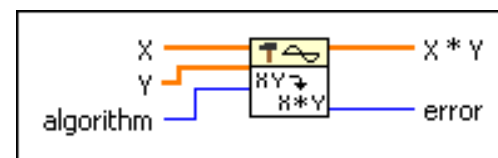
Konvoluce je matematická operace daná vztahem:

$$(f * g)(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(n)g(x-n)dn$$

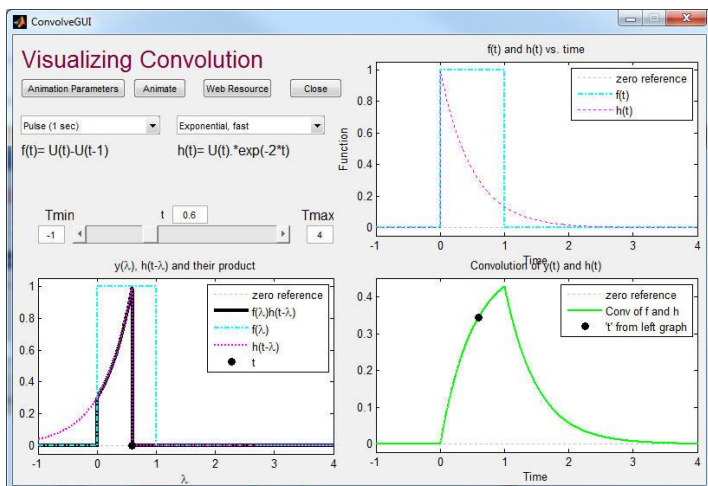
Kombinuje tedy dvě funkce a poskytuje funkci třetí. Funkce $g(x)$ se nazývá konvoluční jádro. Konvoluce se využívá k výpočtu (zjištění) tvaru výstupního signálu, vzniklého ze vstupního signálu po průchodu nějakým systémem (zpravidla filtrem), který mění jeho průběh. V této souvislosti je konvoluční jádro označováno jako tzv. impulsní charakteristika systému. Tato veličina udává, jak systém odpoví na tzv. *jednotkový Diracův impuls*.

Diracův impuls, Diracovo delta nebo Diracova delta-funkce se dá neformálně popsat jako funkce, která má v nule hodnotu nekonečno a všude jinde nulovou. Je značena řeckým písmenem delta. Její integrál přes celý prostor je roven jedné.

Horní graf ukazuje odezvu systému na Diracův impuls (tj. nekonečně úzký signál) – tato odezva – exponenciálně klesá. Zelený graf získaný pomocí konvoluce ukazuje odezvu systému na pulz s konečnou šířkou



1D Convolution (DBL)





evropský
sociální
fond v ČR



EVROPSKÁ UNIE



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY

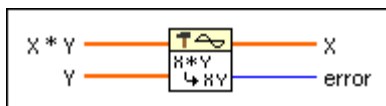


OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost

INVESTICE
DO ROZVOJE
VZDĚLÁVÁNÍ

Analýza dat a zpracování signálu - dekonvoluce

Opačným procesem ke konvoluci je dekonvoluce:



1D Deconvolution (DBL)

Dekonvoluce využívá Fourierovou transformaci (viz dále), protože platí:

Implementace dekonvoluce v Labview pracuje ve čtyřech krocích:

1. Spočítá Fourierovou transformaci vstupního signálu $X * Y$
2. Spočítá Fourierovou transformaci vstupního signálu Y
3. Spočítá podíl $h = F(X * Y) / F(Y)$
4. Provede inverzní Fourierovu transformaci, kterou se získá X

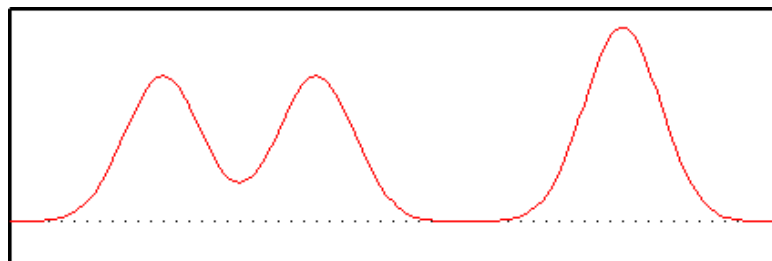
Dekonvoluce je numericky nestabilní operace a může vést k chybám, Uvedený algoritmus je však velmi spolehlivý.

Analýza dat a zpracování signálu – Fourierova transformace, frekvenční spektrum

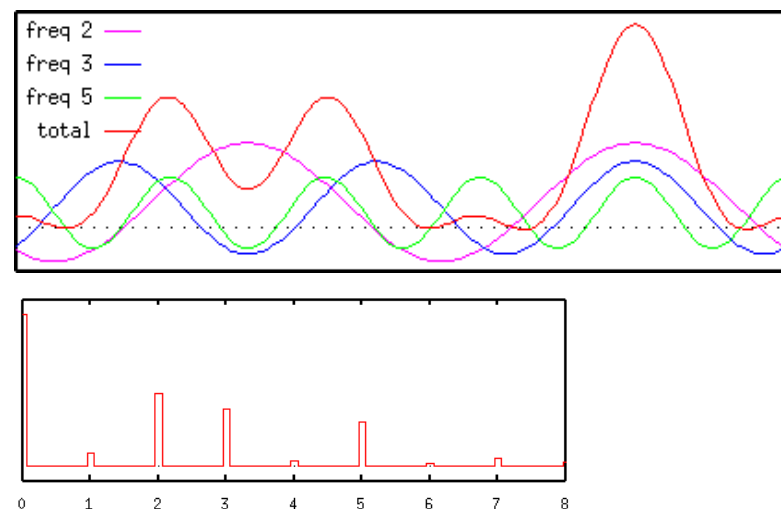
Fourierova je matematická operace daná vztahem:

$$f(t) = (\mathcal{F}^{-1}F)(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) e^{i\omega t} d\omega.$$

- ⇒ Každá 1D funkce se dá vyjádřit jako vážený součet (integrál) mnoha sinusovek a kosinusovek a též i komplexních exponenciál (díky Eulerově vztahu $\exp(i\xi) = \cos \xi + i \sin \xi$)



=



Příklad: 1D funkce vlevo se dá vyjádřit superpozicí sinusových průběhů vpravo nahoře, vpravo dole jsou průběhy vyjádřeny frekvencemi výše uvedených sinusovek (na ose X) a jejich amplitudami (na ose Y) => **frekvenční spektrum**



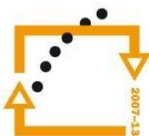
evropský
sociální
fond v ČR



EVROPSKÁ UNIE



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost

INVESTICE
DO ROZVOJE
VZDĚLÁVÁNÍ

Analýza dat a zpracování signálu – Fourierova transformace

- Fourierova transformace je základním nástrojem pro (lineární) zpracování signálů a v teorii řízení.
- Dovoluje vzájemně jednoznačný převod signálů z/do časové reprezentace $f(t)$ do/z frekvenční reprezentace $F(\xi)$.
- Umožňuje analyzovat frekvenční obsah (spektrum) signálu.
- FT je vhodná pro periodické signály.
- Když signál není periodický, potom lze použít krátkodobou FT nebo lineární integrální transformaci s bázovými funkcemi lokalizovanými v čase nebo 2D prostoru. Příkladem je vlnková transformace (wavelets), Gaborovy filtry apod.
- Pro digitalizovaná data se používá diskrétní Fourierova transformace, realizovaní algoritmy FFT (Fast Fourier Transform)

V chemii je známo využití Fourierovy transformace v infračervené spektroskopii (FTIR = Fourier transform Infrared Spectroscopy).

Využívána je ale i v RTG strukturní analýze, transmisní elektronové mikroskopii (SAED), fluorescenční spektroskopii apod.



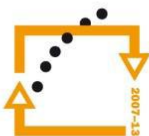
evropský
sociální
fond v ČR



EVROPSKÁ UNIE



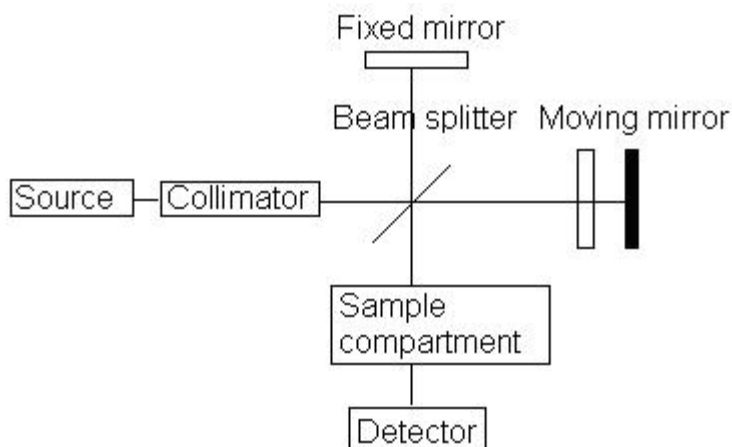
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost

INVESTICE
DO ROZVOJE
VZDĚLÁVÁNÍ

Analýza dat a zpracování signálu – Fourierova transformace – příklad FTIR



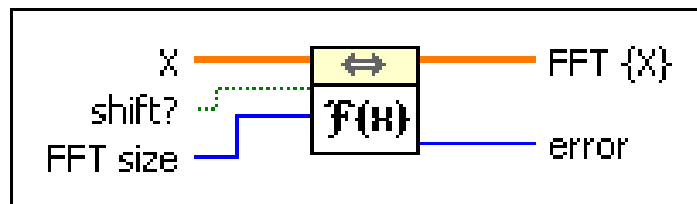
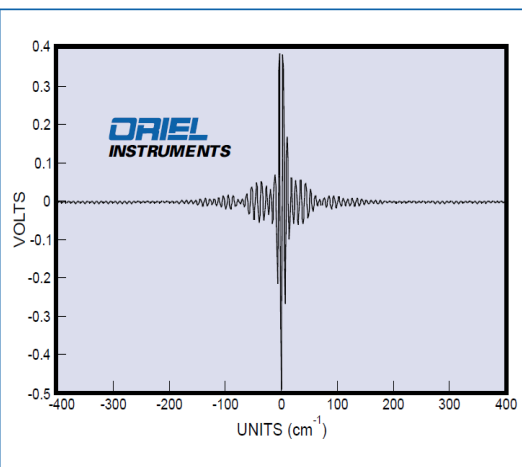
Zdrojem v FTIR spektrometru je polychromatický IR zdroj.

Zaření ze zdroje přichází na dělič paprsků, který jednu polovinu paprsků propustí k pohyblivému zrcadlu, druhá se odráží směrem k pevnému zrcadlu.

Paprsky se od obou vzájemně kolmých zrcadel zpětně odrážejí a na děliči paprsků se podle polohy pohyblivého zrcadla buď sčítají nebo odčítají; dochází k interferenci.

Rekombinovaný paprsek prochází vzorkem v kyvetovém prostoru a ty frekvence, které nebyly absorbovány, jsou přivedeny na detektor. Po zpracování interferogramu FFT dostáváme IR spektrum.

Interferogram,
Poskytující po
průchodu FFT
IR spektrum



Fast Fourierova transformace v Labview