Femtoszekundum időfelbontású kinetikai mérések direkt dekonvolúciója

Kiegészítő anyag 1. A konvolúcióról

A konvolúció két függvény között értelmezett lineáris művelet. Legegyszerűbben úgy szemléltethető, mint egy adatsorozat (egyik függvényből vett minta) súlyozott mozgó átlagának számítása egy adott súlyfüggvény (a másik függvényből vett minta) alapján.

Legyen az $f(t)$ függvényből vett minta $f_1, f_2, \ldots. f_{10}$, a súlyfüggvény értékei pedig rendre $w_{+1}, w_{+2}, w_0, w_{-1}, w_{-2}$:

$f(t)$:	f_1	f_2	f_3	f_4	f_5	f_6	f_7	f_8	f_9	f_{10}
$w(t)$:				w_2	w_1	w_0	w_{-1}	w_{-2}		
a mozgó átlag 6. adata:						a_6				

Az a_6 mennyiséget a következőképpen számítjuk ki:

$$a_6 = w_2 f_4 + w_1 f_5 + w_{20} f_6 + w_{-1} f_7 + w_{-2} f_8$$

A fentiek alapján általában felírhatjuk a súlyozott mozgó átlag n-edik adatát, ha a súlyfüggvényt úgy toljuk el, hogy annak középső w_0 értéke mindig az f_n alá kerüljön (w_0-t éppen az f_n-el szorozzuk a súlyozott átlag képzéséhez). Képletben:

$$a_n = \sum_{i=n-2}^{n+2} w_{n-i} f_i$$

A fenti példában a w súlyfüggvény mindenütt zérus értékű volt a (–2, 2) intervallumon kívül. Ha ezt figyelembe vesszük, akkor az összegzést kiterjeszthetjük a (–∞, ∞) intervallumba:

$$a_n = \sum_{i=-\infty}^{\infty} w_{n-i} f_i \qquad \text{(DK)}$$

A fenti összeggel előállított a_n sorozatot nevezzük diszkrét konvolúciónak. Ha az f_i (és egyúttal a w_i) adatok közötti osztásrészt végtelen kicsinek választjuk, akkor a (DK) összegből eljuthatunk folytonos függvények integráljához:

$$a(t) = \int_{-\infty}^{\infty} w(t-t')\, f(t')\, dt' \qquad \text{(FK)}$$

Ezt az integrált nevezzük folytonos konvolúciónak. Ebben $a(t)$ értékeit úgy kapjuk, hogy a $g(t')$ függvényt a $w(t-t')$ súlyokkal megszorozva integráljuk úgy, hogy a t' változó szerint „végigtoljuk” a súlyfüggvényt az f függvényen. Ha a súlyfüggvény integrálja (normája) éppen 1:

$$\int_{-\infty}^{\infty} w(t)\, dt = 1,$$

akkor azt mondjuk, hogy $w(t)$ *egyre normált*. Ilyenkor az $a(t)$ konvolúció éppen a súlyozott átlag, ezért egyúttal a normája is változatlan marad:

$$\int_{-\infty}^{\infty} a(t)\, dt = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)\, dt$$

Az f és w függvények közti (FK) integrált, a konvolúciót szokás egy külön szimbólummal, ⊗-el jelölni. Ekkor az (FK) integrál

$$a = w \otimes g$$

alakban írható fel röviden.