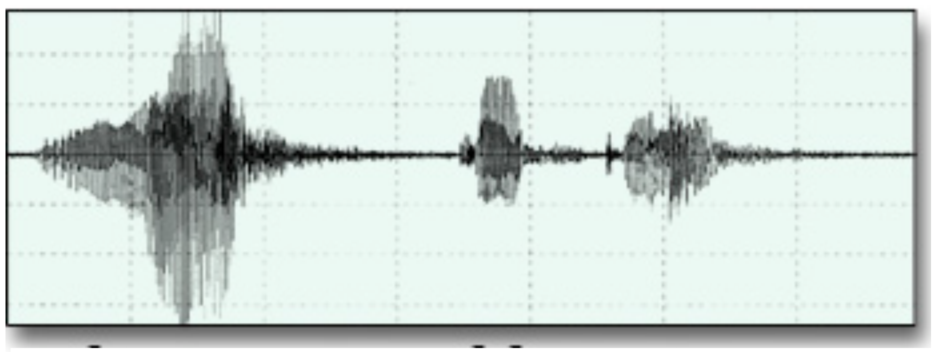
traitement de donnée
la *transformée de Fourier*

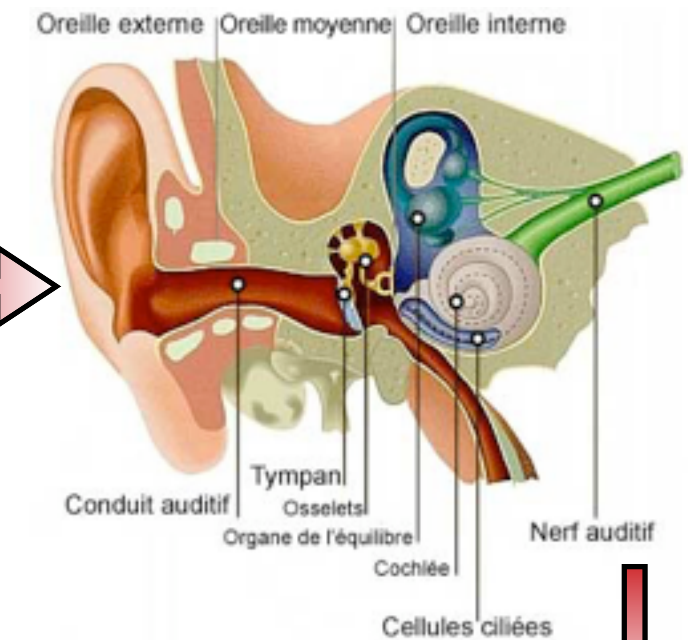
Marc-André Delsuc
IGBMC - Strasbourg

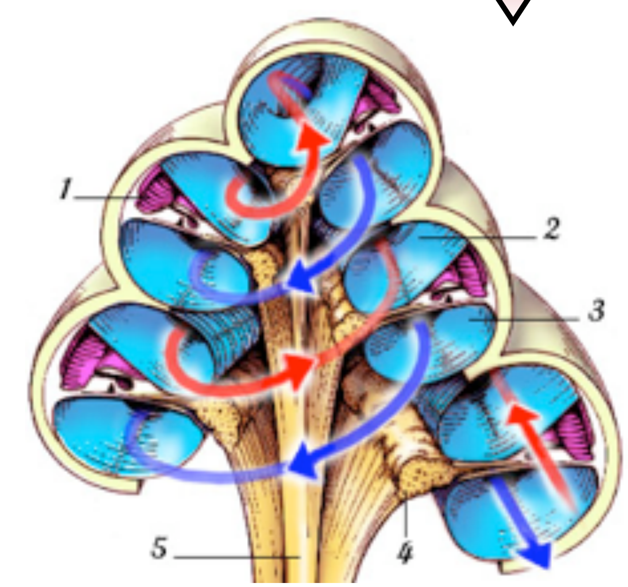
Le phénomène sans les mathématiques

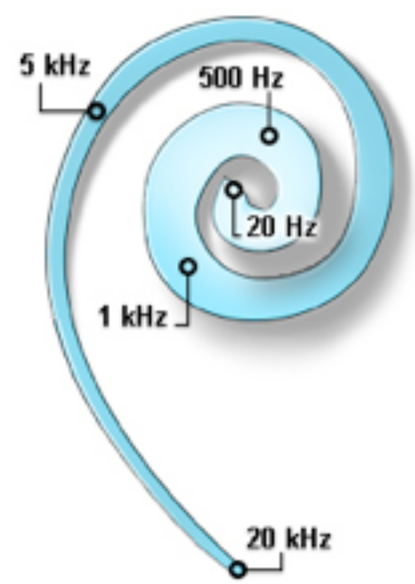
- la notion de fréquence
  - un phénomène périodique - la période - l'inverse de la période
  - période : ..., l'année, le jour, le tour de stade, la milliseconde, ...
- la transformation
  - représentation en périodes // représentation en fréquences
    - ... tous les onze ans, 3 par jour, ...
  - les deux représentation seraient équivalentes ?
- la détection
  - retrouver les fréquences présentes

un exemple









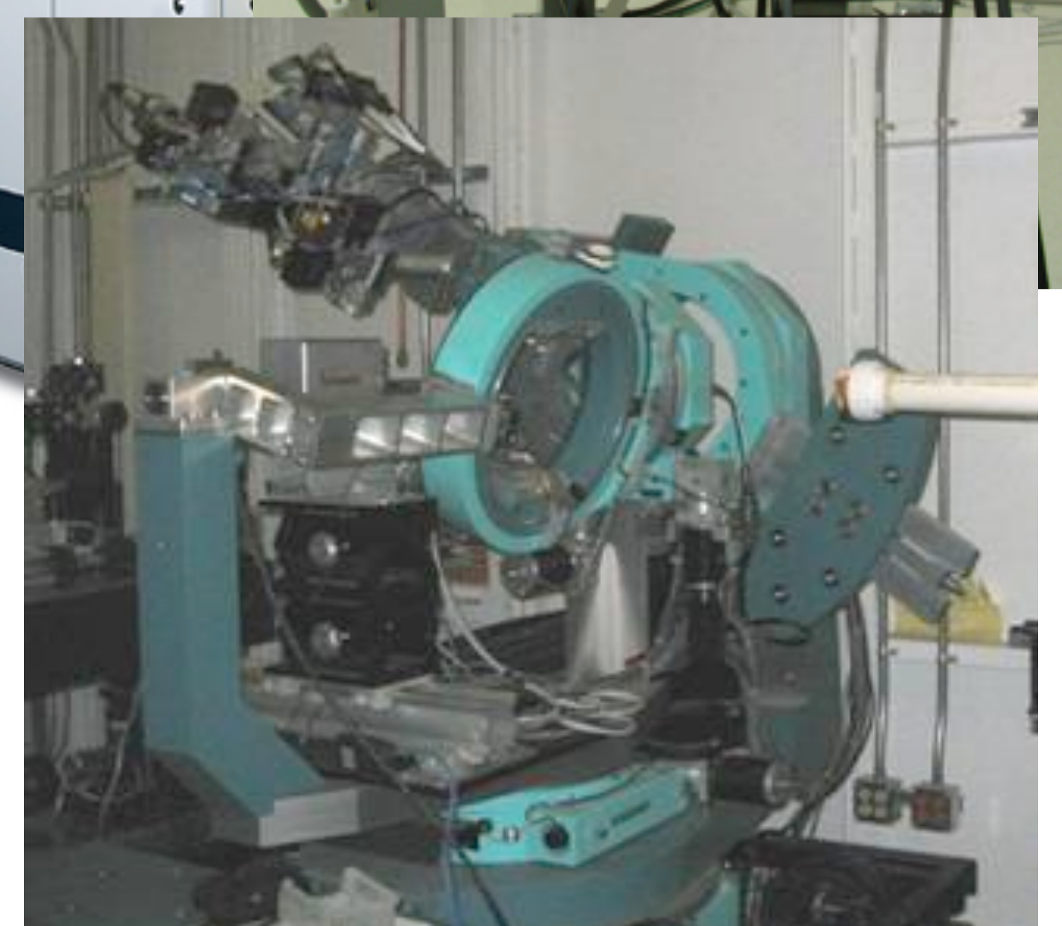
Deux représentations

Cochlée !

es exemples







- Masse
- Infrarouge
- rayons X
- RMN

statistiques internet

- Transformée de Fourier
  - 63 800 pages
  - transformé**e** de Fou**r**ier 9,7% de fautes d'orthographe
  - Fourier transform 0,14% !!!
- Résonance Magnétique Nucléaire
  - 127 000 pages
  - dont TF 15%
- Spectrométrie de Masse
  - 127 000 pages
  - dont TF 1,75%
- InfraRouge
  - 27 000 pages
  - dont TF 60%

http://talklikeaphysicist.com/wp-content/uploads/2008/04/image-135.jpg

Jean Baptiste Joseph Fourier
(21 Mars 1768 – 16 Mai 1830)

La définition mathématique

$$f(t) \ : \ \mathbb{R} \to \mathbb{C}$$
$$F(\nu) \ : \ \mathbb{R} \to \mathbb{C}$$

$$\mathcal{F} : f(t) \overset{\mathcal{F}}{\mapsto} F(\nu)$$

$$F(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-2i\pi\nu t} dt$$

$$e^{-2i\pi\nu t} = \cos(-2\pi\nu t) + i\sin(-2\pi\nu t)$$

$$F(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)\cos(-2\pi\nu t) dt$$

Transformée en cosinus

comment comprendre cette définition (1)

- La transformée de Fourier correspond à une changement de point de vue des données
  - il n'y a pas de modification de la quantité d'information (nous verrons qu'elle est inversible)

- Les deux représentations sont dites "réciproques"
  - temps - fréquence $t \quad \leftrightarrow \quad \nu$
  - espace - fréquence spatiale $(x, y, z) \quad \leftrightarrow \quad (h, k, l)$

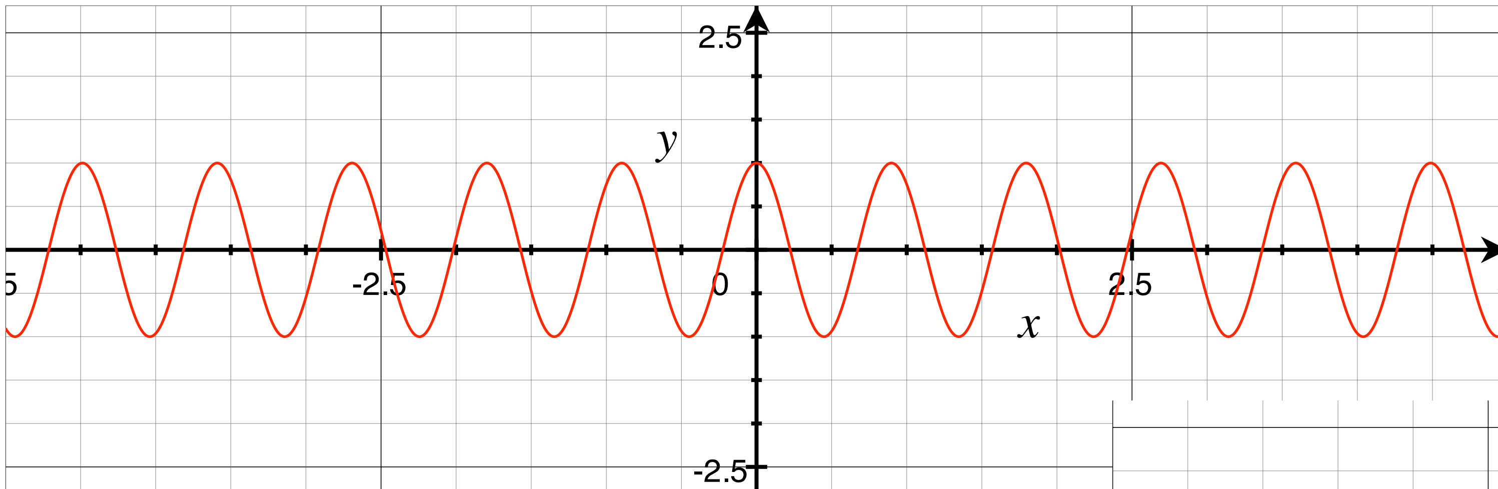
- les unités sont inverses :

$$sec \leftrightarrow Hz$$

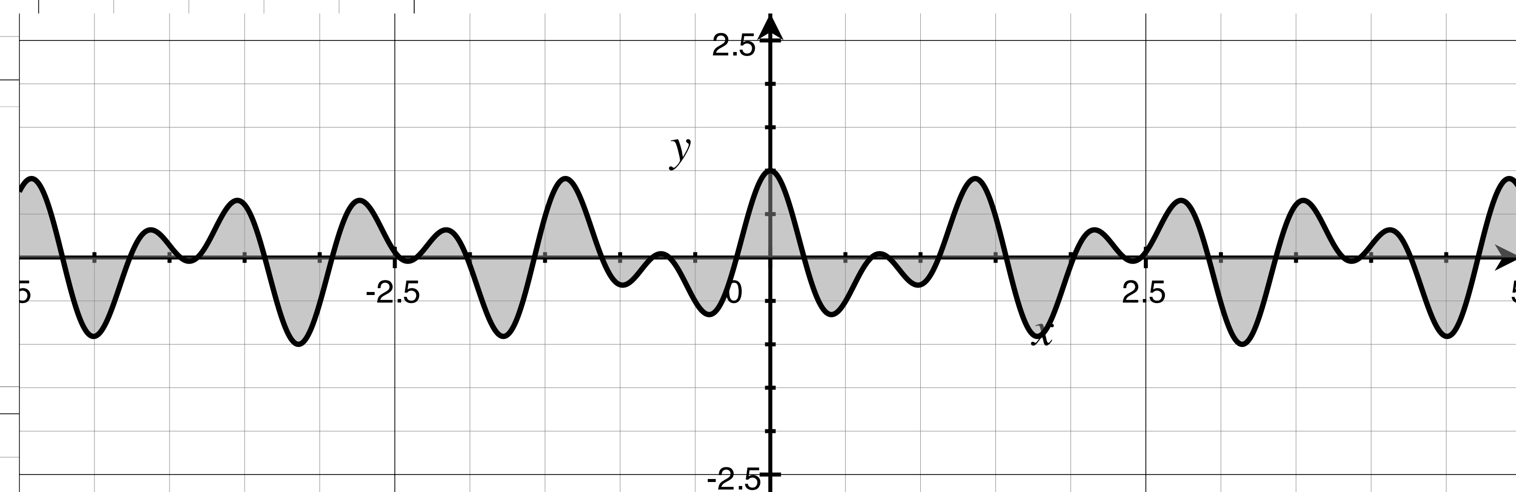
$$cm \leftrightarrow cm^{-1}$$

comment comprendre cette définition (2)

$f(t)$

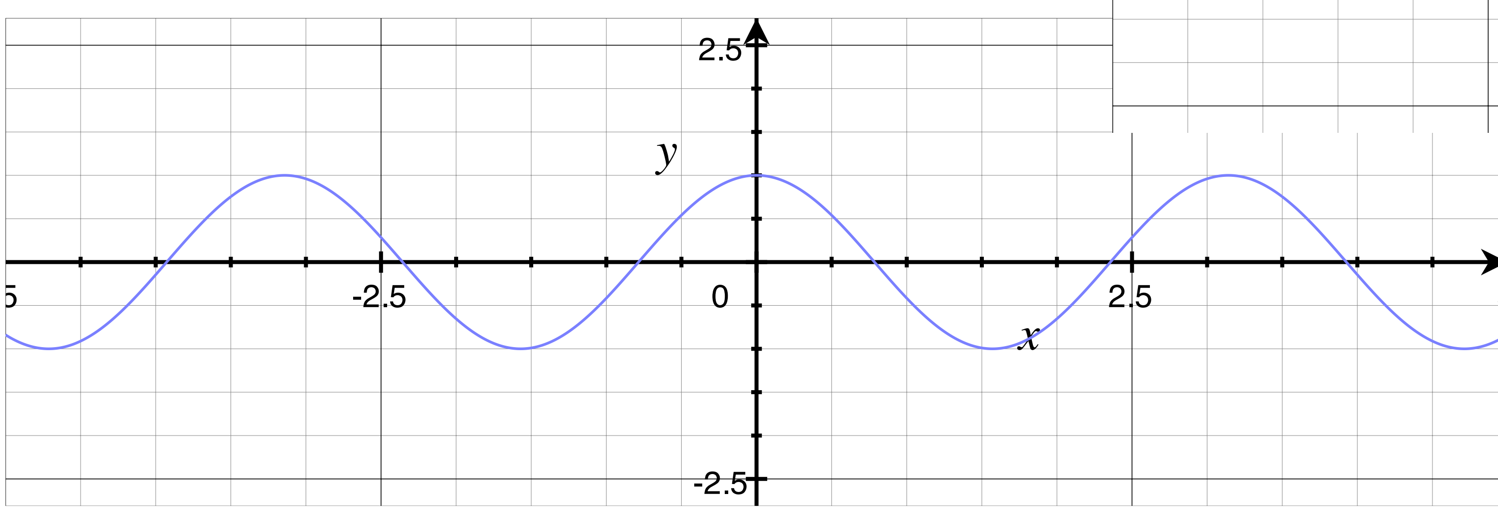


$$F(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)\cos(-2\pi\nu t)dt$$



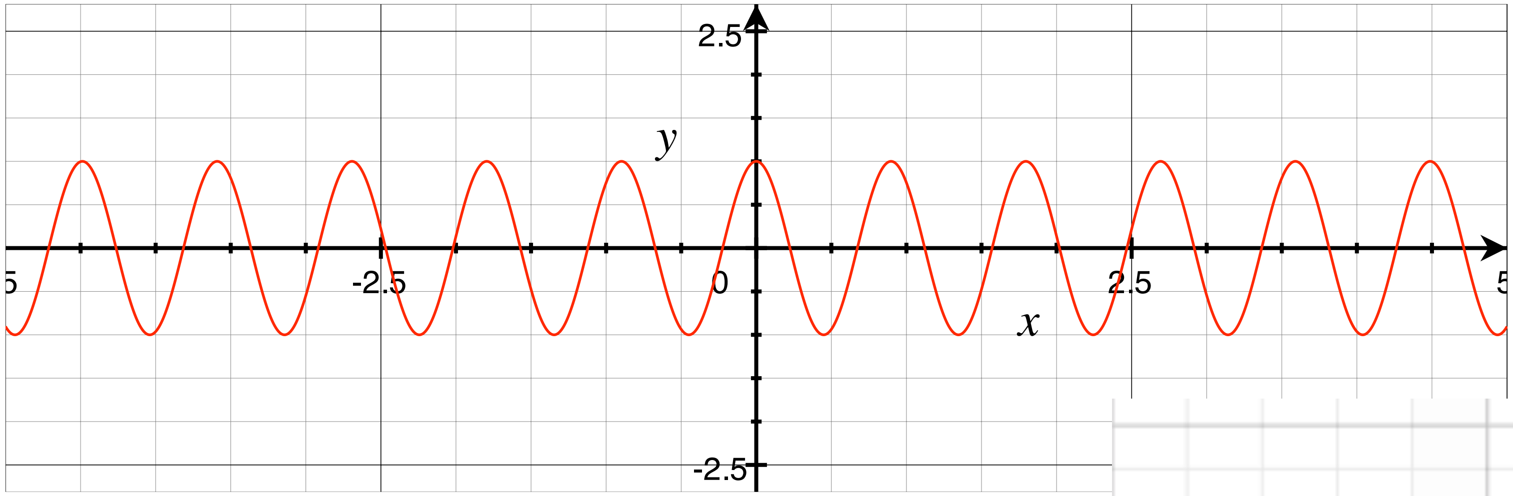
$\times$

$\cos(-2\pi\nu t)$

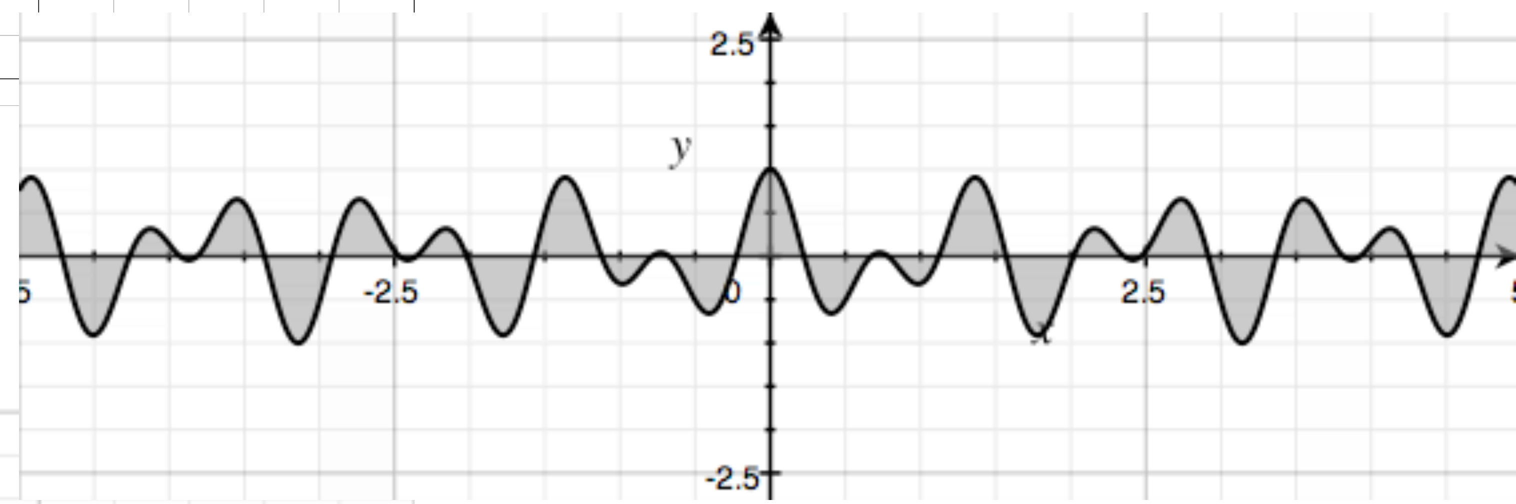


comment comprendre cette définition (3)

$f(t)$

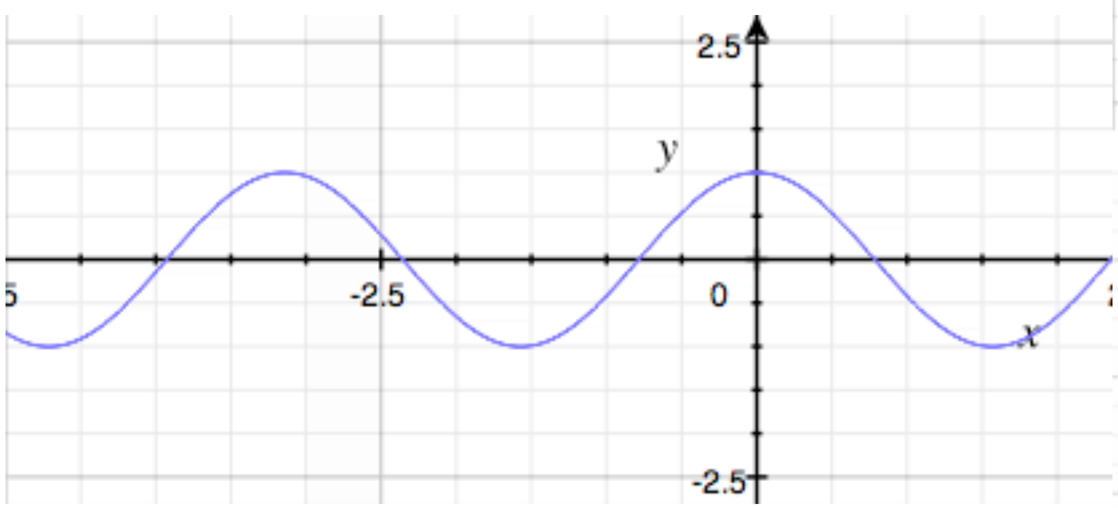


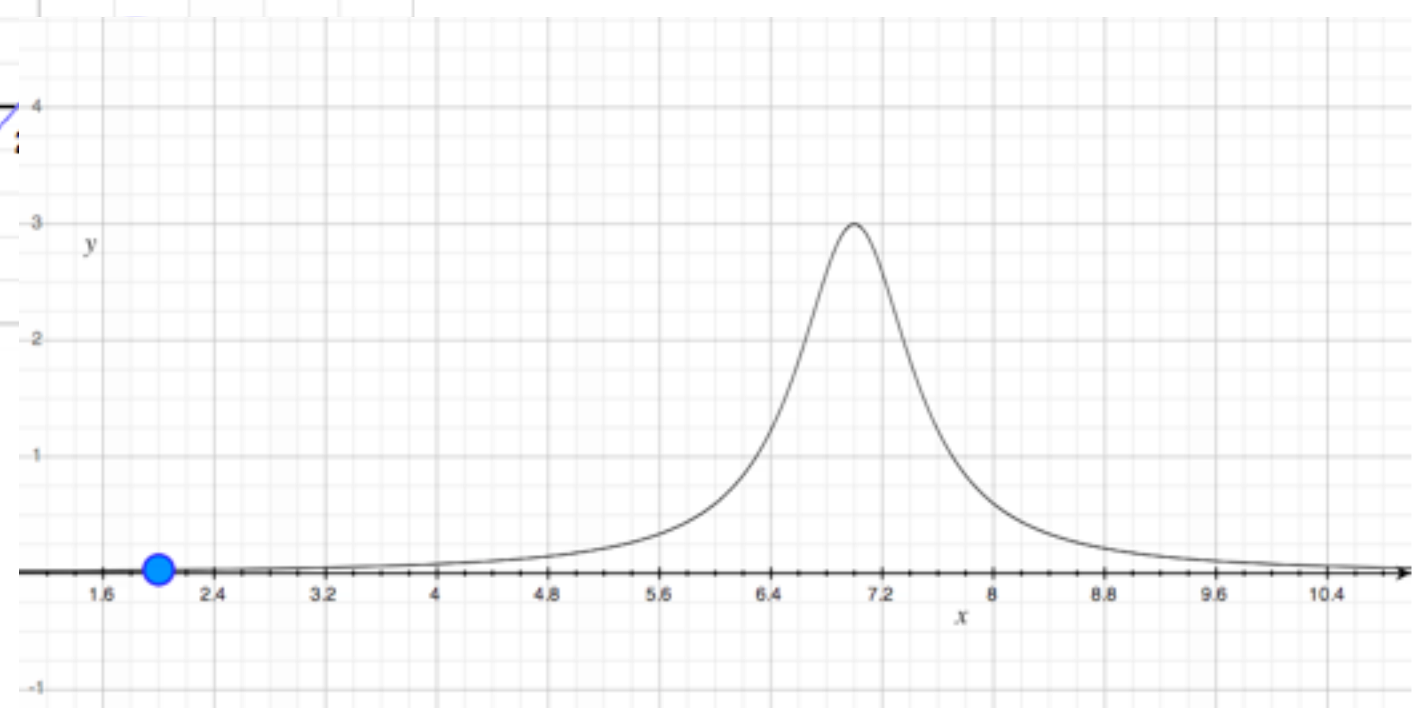
$$F(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)\cos(-2\pi\nu t)dt$$



$\times$

$\cos(-2\pi\nu t)$

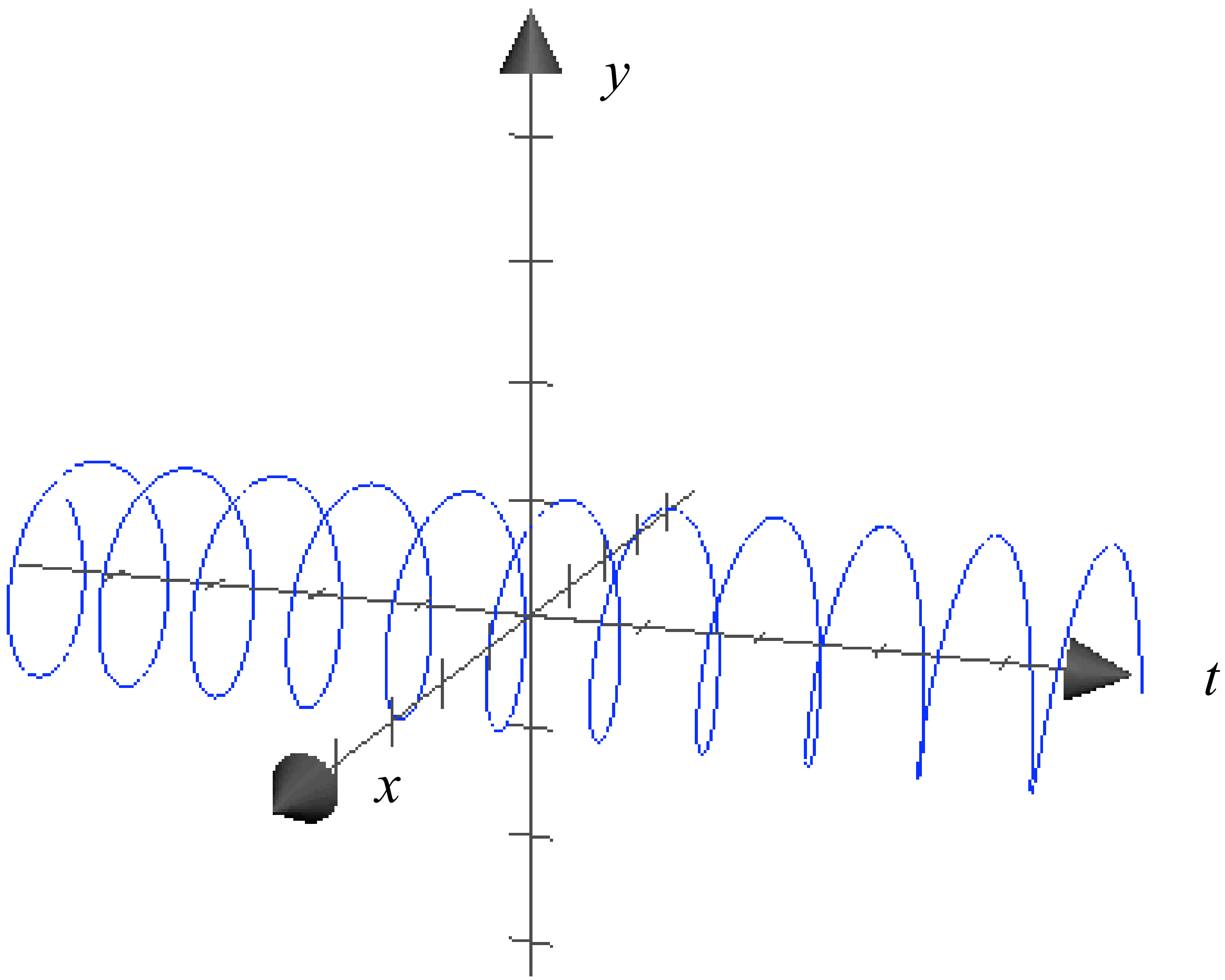




Nombres complexes (1)

- Notation complexe

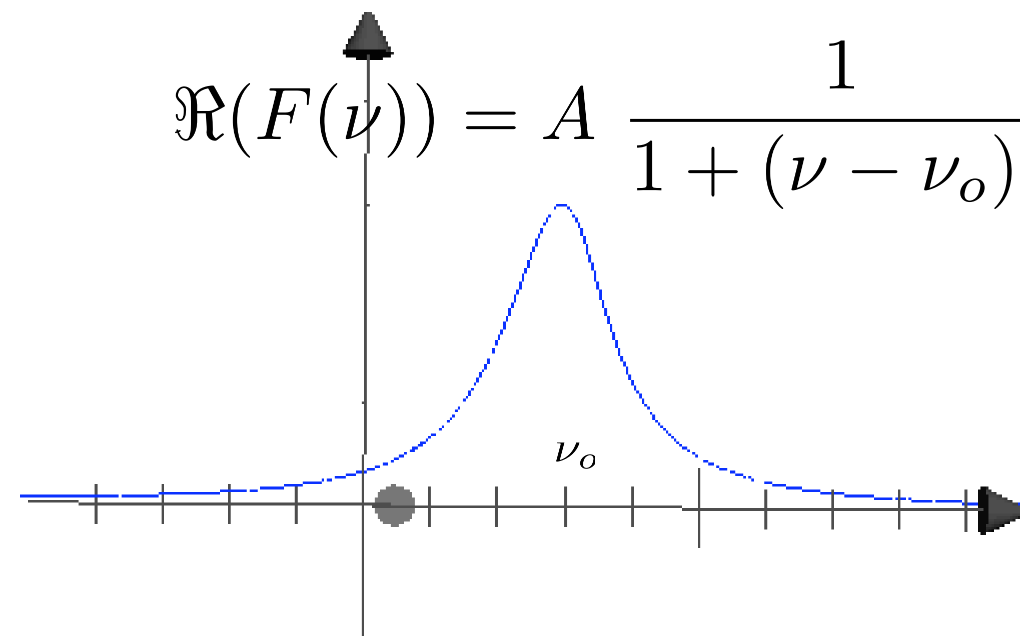
$$
\begin{aligned}
e^{i\theta} &= \cos(\theta) + i\sin(\theta) \\
e^{-2i\pi\nu t} &= \cos(-2\pi\nu t) + i\sin(-2\pi\nu t)
\end{aligned}
$$



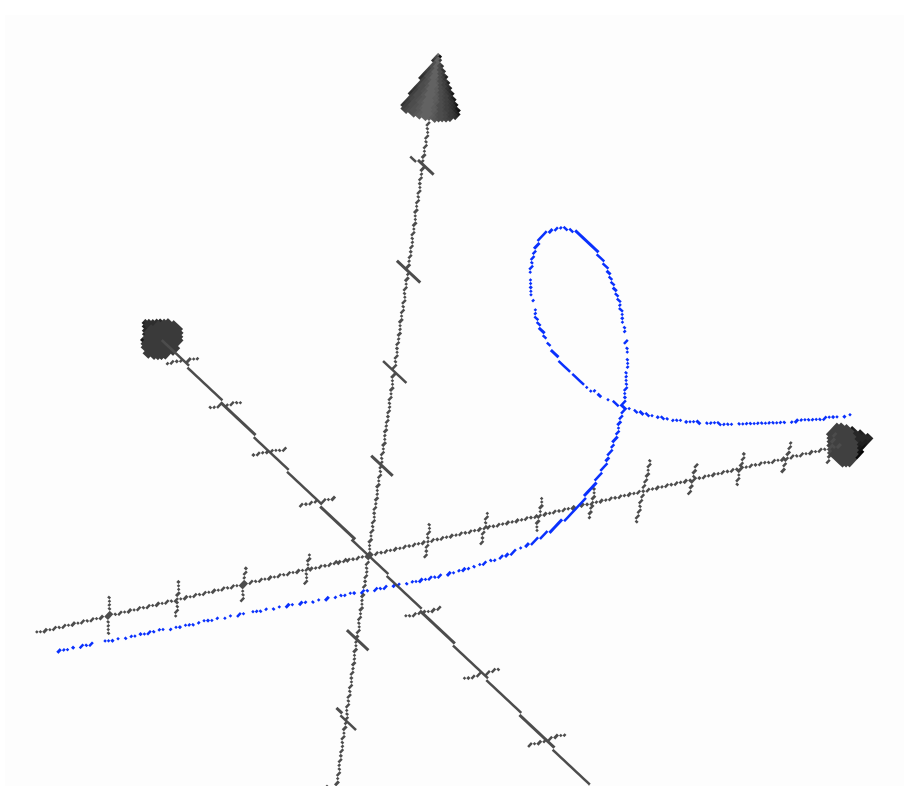
Nombres complexes (2)

- Forme de raie complexe
  - eg : Lorentzienne

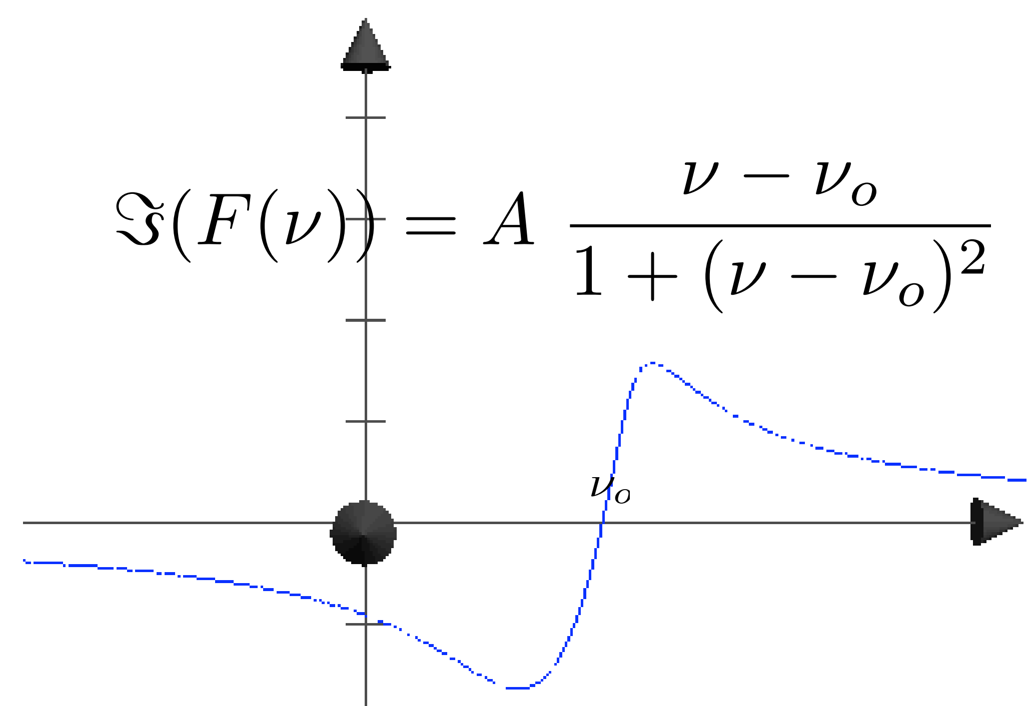
$$\Re(F(\nu)) = A\,\frac{1}{1+(\nu-\nu_o)^2}$$



$$F(\nu) \quad = \quad A\,\frac{1+i(\nu-\nu_o)}{1+(\nu-\nu_o)^2}$$



$$\Im(F(\nu)) = A\,\frac{\nu-\nu_o}{1+(\nu-\nu_o)^2}$$



Propriétés importantes (1)

- linéarité

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(f+g) &= \mathcal{F}(f)+\mathcal{F}(g) \\ \mathcal{F}(\alpha f) &= \alpha\mathcal{F}(f) \end{aligned}$$

  - la transformée de Fourier de 2 signaux additionnés
    $\Leftrightarrow$
    la somme des transformées de Fourier de chacun des signaux

  - la transformée de Fourier d'un signal multiplé
    $\Leftrightarrow$
    la multiplication de la transformée de Fourier du signal

Propriétés importantes (2)

- inversibilité
  - on peut toujours inverser (revenir) l'opération de FT

$$\mathcal{F} \quad : f \mapsto F$$
$$\mathcal{F}^{-1} \quad : F \mapsto f$$

  - la transformée de Fourier inverse est très similaire à la transformée de Fourier direct, à un signe près

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} F(\nu) e^{2i\pi\nu t} d\nu$$

  - appliquer 2 fois la FT revient à inverser l'axe

$$\mathcal{F}^2 \quad : \quad inversion$$

  - l'appliquer 4 fois est sans effet

$$\mathcal{F}^4 \quad : Id$$

Propriétés importantes (3)

- propriétés de symmétrie

la fonction	*la fonction réciproque*
paire *symmétrique autour de l'origine*	réelle
impaire *anti-symmétrique autour de l'origine*	imaginaire
réelle	paire
imaginaire	impaire
causale *nulle pour* $t < 0$	Hilbertienne *lien entre parties réelle et imaginaire*

$$G(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{F(\nu')}{\nu - \nu'} d\nu'$$

Quelques propriétés avancées

- relation de Parseval-Plancherelle
  - l'intégrale des puissances est conservée

$$\int_{-\infty}^{\infty} \|f(t)\|^2 dt = \int_{-\infty}^{\infty} \|F(\nu)\|^2 d\nu$$

- Le Premier point
  - contient l'aire de la fonction réciproque

$$\begin{aligned} F(0) &= \int_{-\infty}^{\infty} f(t)dt \\ f(0) &= \int_{-\infty}^{\infty} F(\nu)d\nu \end{aligned}$$

- Compacité
  - la transformée de Fourier est d'autant plus compacte que la fonction est étendue.
  - et réciproquement

$$\int_{-\infty}^{\infty} t^2 f(t)dt \int_{-\infty}^{\infty} \nu^2 F(\nu)d\nu \geq \frac{1}{16\pi^2}$$

pour des fonctions normalisées

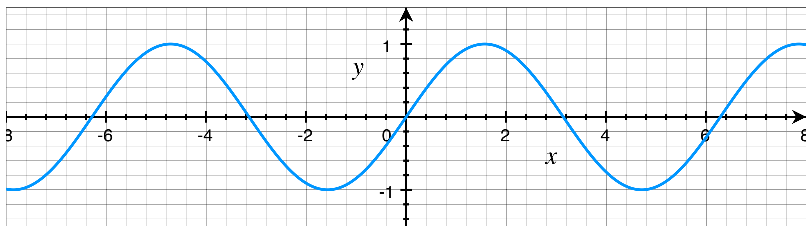
les Couples célèbres

	la fonction	*la fonction réciproque*
1	sinusoïde $e^{i\nu_o t}$	fonction delta $\delta(\nu - \nu_o)$
2	fonction porte $t \in [-1, 1] : f(t) = 1$ sinon : $f(t) = 0$	sinus cardinal $\dfrac{\sin(\pi x)}{\pi x}$
3	dilatation $f(ax)$	contraction $\dfrac{1}{\mid a \mid} F(\dfrac{\nu}{a})$
4	gaussienne de largeur σ $e^{-\frac{t^2}{\sigma}}$	gaussienne de largeur $\frac{1}{\sigma}$ $\sqrt{\pi\sigma} e^{-\sigma(\pi\nu)^2}$
5	échantillonnage de période T $\displaystyle\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(t - nT)$	échantillonnage de période $\frac{1}{T}$ $\displaystyle\frac{1}{T} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \delta(\nu - \frac{k}{T})$
6	exponentielle décroissante $e^{-a\lvert t \rvert}$	lorentzienne de largeur $\frac{1}{a}$ $\dfrac{2a}{a^2 + 4\pi\nu^2}$

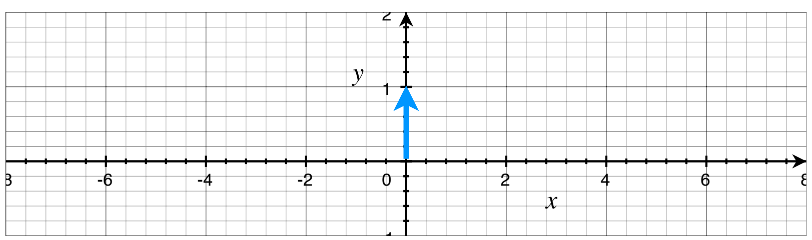
voir aussi http://en.wikipedia.org/wiki/Fourier_transform

le bestiaire

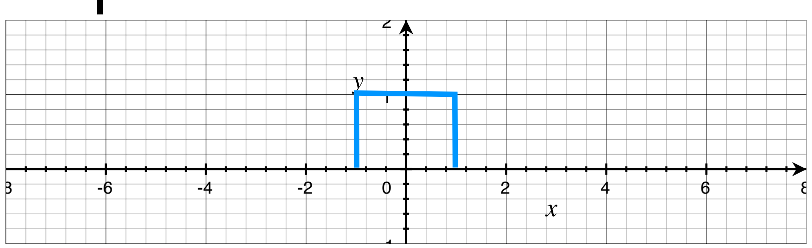
- sinusoïde



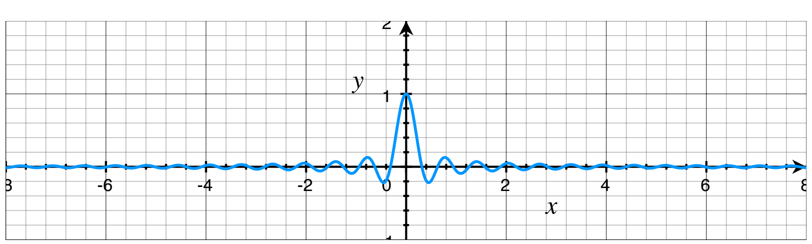
- delta



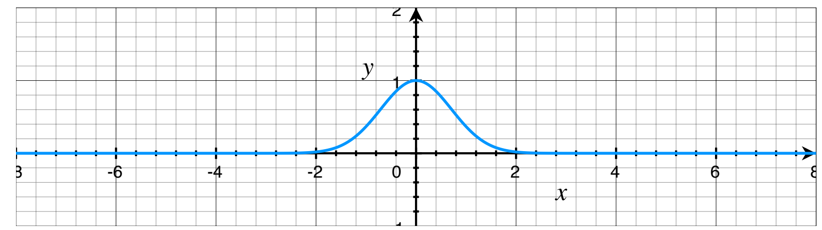
- porte



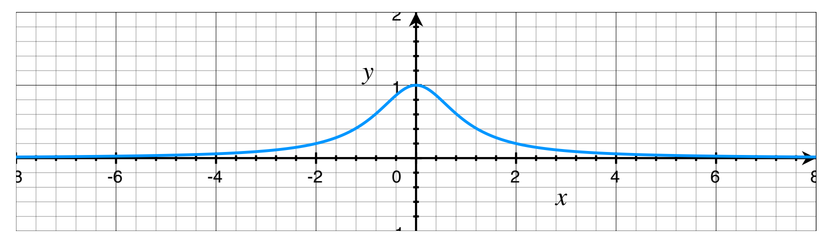
- sinus cardinal



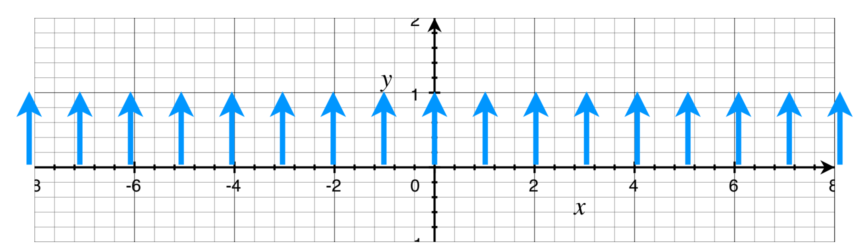
- gaussienne



- lorentzienne



- échantillonnage

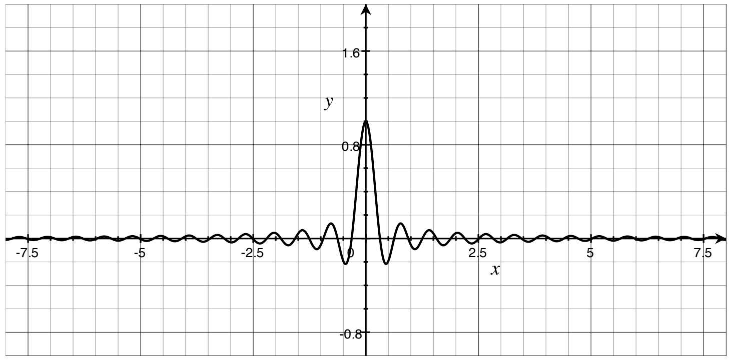


La Convolution

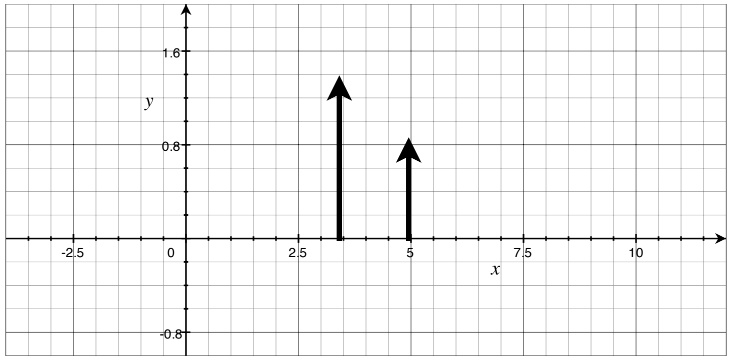
- Forme mathématique
  - $h()$: convolution de $f()$ et de $g()$
  - formule équivalente dans l'espace réciproque

$$\begin{aligned}
h(t) &= (f * g)(t) = (g * f)(t) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau) g(t-\tau) d\tau \\
\text{et } H &= \mathcal{F}(h)\ldots \\
\text{alors} & \\
H(\nu) &= F(\nu) G(\nu)
\end{aligned}$$

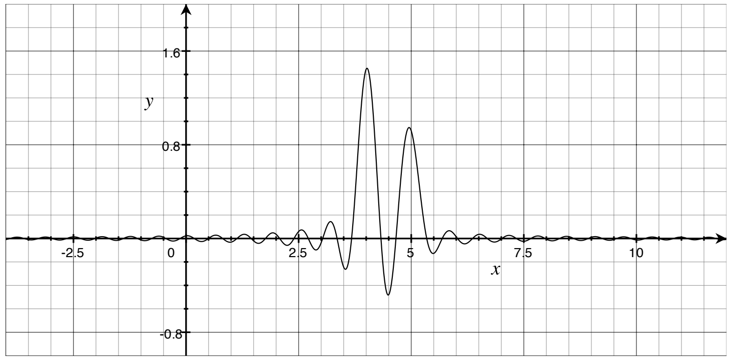
- Concrètement
  - la forme de $f()$ est appliquée à $g()$
  - inversement



$*$



$=$



quelques remarques (1)

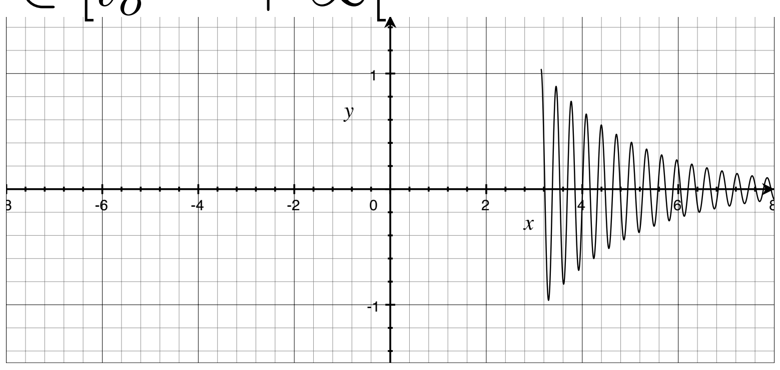
- multiplication (modulation) par $\cos(\nu_o t)$
  - convolution par 2 delta écartée de $2\nu_o$
  - => dédoublement partiel de tous les signaux
  - vibrations - 50Hz - moteurs - ...

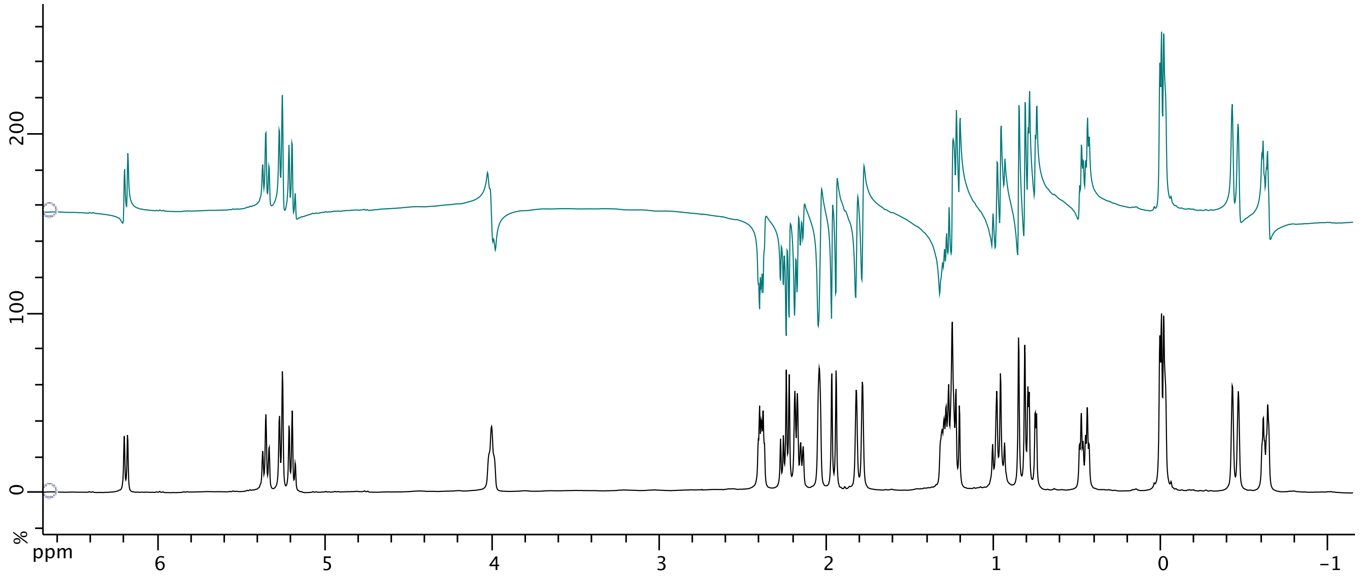
- modulation d'un signal par un autre
  - modulation croisée
    - apparition de signaux à la somme et la différence des fréquences
  - modulation d'un signal par lui même (non linéarité)
    - apparition de fréquences multiples

quelques remarques (2)

- Erreur sur t_o
  - => convolution du spectre par $e^{i\nu t_o}$
  - rotation de la phase proportionnel à la fréquence
  - correction de phase

$t \in [t_o \cdots + \infty[$





la DFT

- Discrete / Digital Fourier Transform

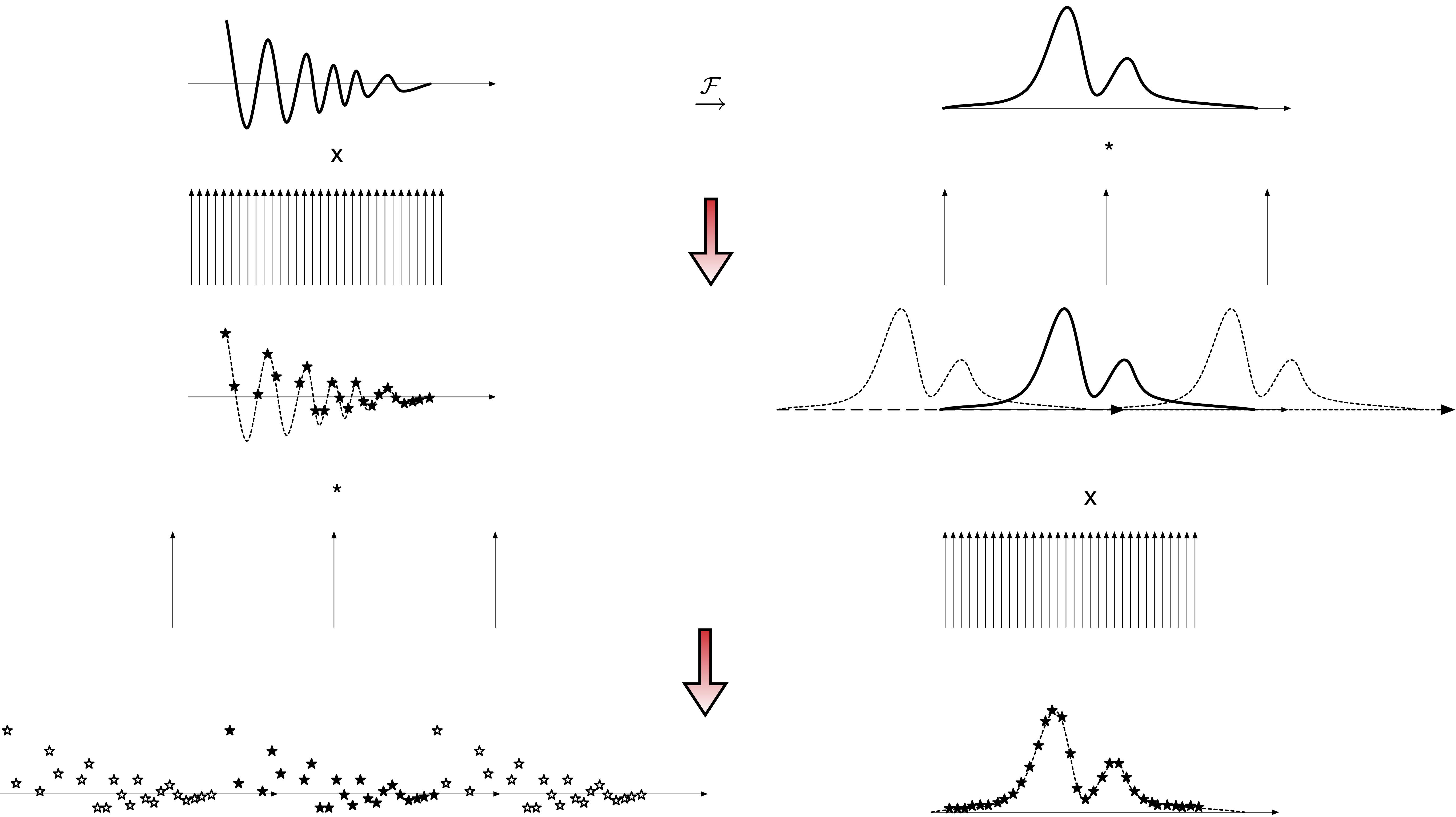
  passer de $\mathbb{R}$ et $\mathbb{C}$ à la mémoire de l'ordinateur

  - représentation des réels
  - représentation des fonctions continues
  - représentation des supports infinis

- échantillonage - périodisation
  - résout les 2 difficultés sur les fonctions
  - solution "mathématique"
  - grâce à la fonction* "échantillonnage"

* il faudrait parler de distribution

Échantillonage périodisation

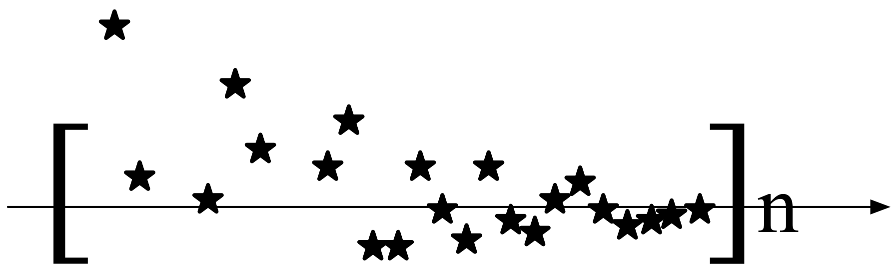


Échantillonage périodisation

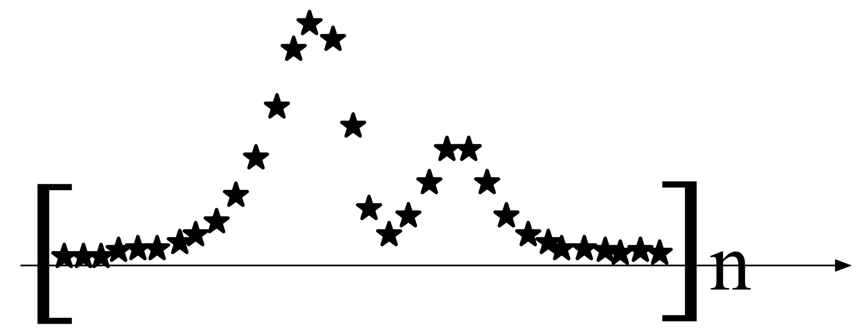
- la fonction d'échantillonnage permet de représenter de manière mathématique une série numérique informatique.
- 1^{er} temps
  - échantillonnage du FID ⇒ périodisation du spectre
- $2^{ème}$ temps
  - échantillonnage du spectre ⇒ périodisation du FID
- Difficulté
  - repliement de fréquences *aliasing*
  - périodisation en synthèse inverse (SWIFT)

DFT

$$F_n = \sum_{k=0}^{N-1} f_k e^{-i\frac{2kn\pi}{N}}$$



$\xrightarrow{\text{DFT}}$



- C’est une opération matricielle
  - exemple pour 8 points
- matrice carrée, inversible

$$\begin{pmatrix}
1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
1 & e^{-i\frac{\pi}{4}} & e^{-i\frac{2\pi}{4}} & e^{-i\frac{3\pi}{4}} & e^{-i\frac{4\pi}{4}} & e^{-i\frac{5\pi}{4}} & e^{-i\frac{6\pi}{4}} & e^{-i\frac{7\pi}{4}} \\
1 & e^{-i\frac{2\pi}{4}} & e^{-i\frac{4\pi}{4}} & e^{-i\frac{6\pi}{4}} & 1 & e^{-i\frac{2\pi}{4}} & e^{-i\frac{4\pi}{4}} & e^{-i\frac{6\pi}{4}} \\
1 & e^{-i\frac{3\pi}{4}} & e^{-i\frac{6\pi}{4}} & e^{-i\frac{\pi}{4}} & e^{-i\frac{4\pi}{4}} & e^{-i\frac{7\pi}{4}} & e^{-i\frac{2\pi}{4}} & e^{-i\frac{5\pi}{4}} \\
1 & e^{-i\frac{4\pi}{4}} & 1 & e^{-i\frac{4\pi}{4}} & 1 & e^{-i\frac{4\pi}{4}} & 1 & e^{-i\frac{4\pi}{4}} \\
1 & e^{-i\frac{5\pi}{4}} & e^{-i\frac{2\pi}{4}} & e^{-i\frac{7\pi}{4}} & e^{-i\frac{4\pi}{4}} & e^{-i\frac{\pi}{4}} & e^{-i\frac{6\pi}{4}} & e^{-i\frac{3\pi}{4}} \\
1 & e^{-i\frac{6\pi}{4}} & e^{-i\frac{4\pi}{4}} & e^{-i\frac{2\pi}{4}} & 1 & e^{-i\frac{6\pi}{4}} & e^{-i\frac{4\pi}{4}} & e^{-i\frac{2\pi}{4}} \\
1 & e^{-i\frac{7\pi}{4}} & e^{-i\frac{6\pi}{4}} & e^{-i\frac{5\pi}{4}} & e^{-i\frac{4\pi}{4}} & e^{-i\frac{3\pi}{4}} & e^{-i\frac{2\pi}{4}} & e^{-i\frac{\pi}{4}}
\end{pmatrix}$$

- Remarques

$$e^{-i\frac{4\pi}{4}} = e^{-i\pi} = -1$$

$$e^{-i\frac{2n\pi}{N}}$$

racines $n^{\text{ième}}$ de l’unité

- chaque point du spectre dépend de l’ensemble des points du signal temporel

Relations Nyquist-Shannon

- Relation de Nyquist
  - relation entre la fréquence d'échantillonnage et la largeur de la bande de fréquence analysée
  - si échantillonnage réel (sur un seul canal)

$$F_{max} = \frac{1}{\Delta t}$$

$$F_{max} = \frac{1}{2\Delta t}$$

$$SW = \frac{1}{2DW}$$

- Relation réciproque
  - le temps d'acquisition détermine la résolution en fréquence

$$t_{max} = \frac{1}{\Delta F}$$

- nombre de points

$$\begin{aligned} F_{max} &= n\Delta F \\ t_{max} &= n\Delta t \\ n &= \frac{F_{max}}{\Delta F} = \frac{t_{max}}{\Delta t} \end{aligned}$$

- relation de Gabor-Heisenberg
  - relation l'incertitude

$$t_{max}\Delta F = 1$$

Calcul de la DFT

- Implantation
  - algorithmique // matricielle
  - calcul de fonctions transcendentales // taille

- Complexité
  - pour problème de taille n
  - 1 point : n multiplications
  - le spectre : n^2 multiplications

La FFT

- Fast Fourier Transform - J.W.Cooley J.W.Tuckey 1965
- Algorithme récursif du papillon
  - chaque étape réduit la taille par 2
  - si $N = 2^K$ alors on descend en *K* itérations à l'opération pour 1 point
  - temps de calcul = *KN* = *N* $\log_2(N)$
  - nécessite $N = 2^K$

avec	$x_k : (x_0, x_1, \ldots x_{N-1})$
on note	$E(x)$ les points pairs de x_k
	$E(x)_k = x_{2m} : (x_0, x_2, \ldots x_{N-2})$
et	$O(x)$ les points impairs de x_k
	$O(x)_k = x_{2m+1} : (x_1, x_3, \ldots x_{N-1})$
	$x = E(x) + O(x)$
alors	si $k < \frac{N}{2}$
	$\mathrm{DFT}_k(x) = \mathrm{DFT}_k(E(x)) + \mathrm{DFT}_k(O(x))e^{-i\frac{2\pi k}{N}}$
	si $k \geq \frac{N}{2}$
	$\mathrm{DFT}_k(x) = \mathrm{DFT}_{k-\frac{N}{2}}(E(x)) + \mathrm{DFT}_{k-\frac{N}{2}}(O(x))e^{-i\frac{2\pi(k-N/2)}{N}}$

Comparaison des différentes transformées

	+	-
FT	générale échantillonnage libre	lente échantillonnage “ad-hoc”
DFT	rigoureuse pas de calibration	lente (N^2) échantillonnage régulier
FFT	rapide ($N \log(N)$) idem DFT	idem DFT $N = 2^K$ calcul global

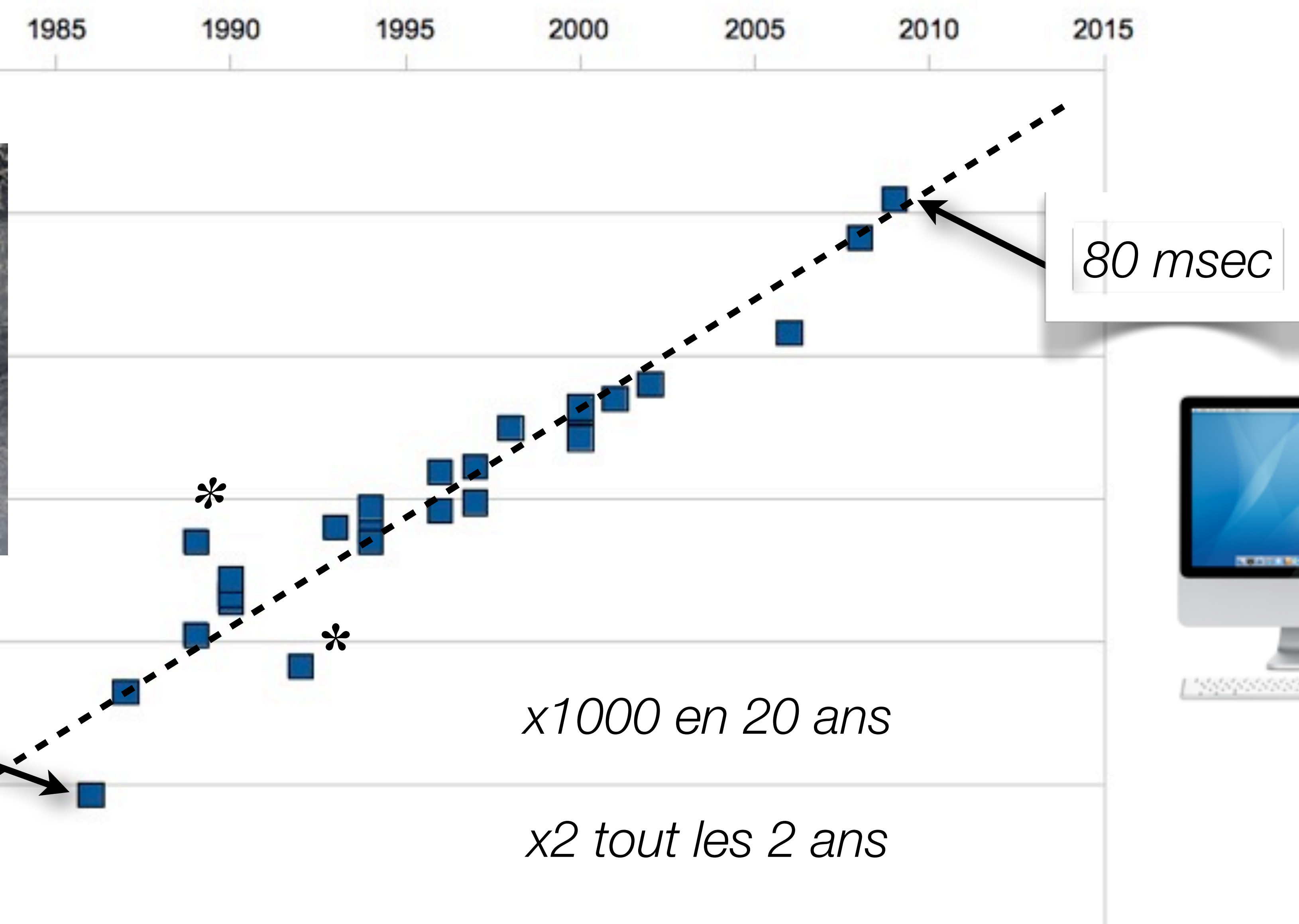
dépend de la puissance de l'ordinateur

- ordinateur : loi de Moore

- *un exemple personnel*

a 512 x 2k NMR data set.
Exponential Broadening and FT in F2
phasing, 5 points Spline base-line correction in F2
cosine apodization, zero-filling and FT in F1
phasing in F1.

µVax II

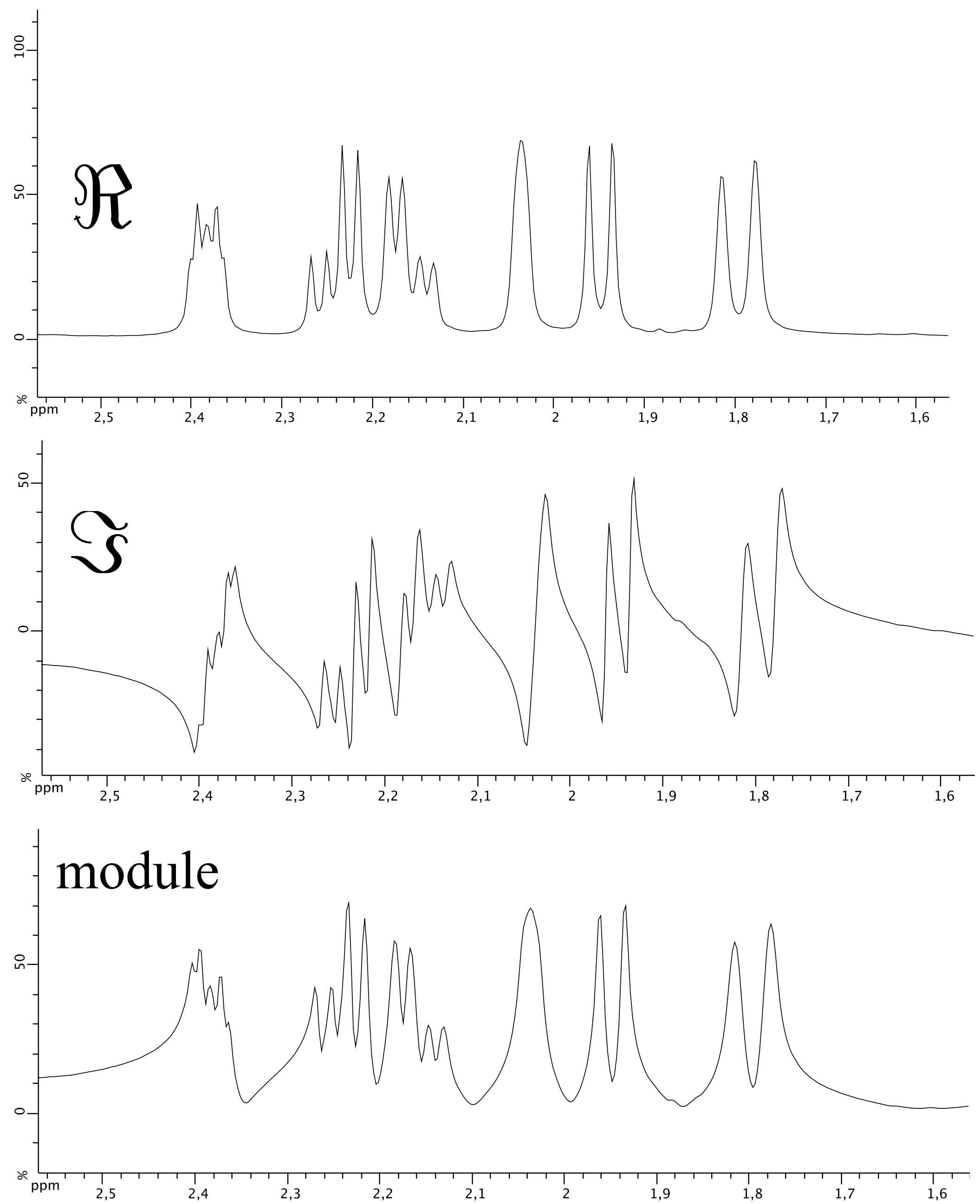


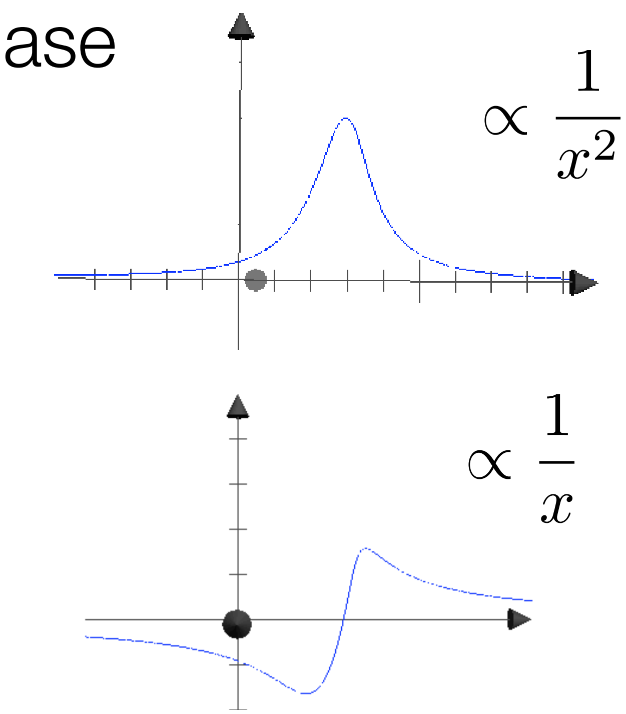
Mise en œuvre (1)

- calcul en module

$$\|S(\nu)\| = \sqrt{S(\nu)S^*(\nu)}$$

  - phénomène cohérent = calcul sensible à la phase

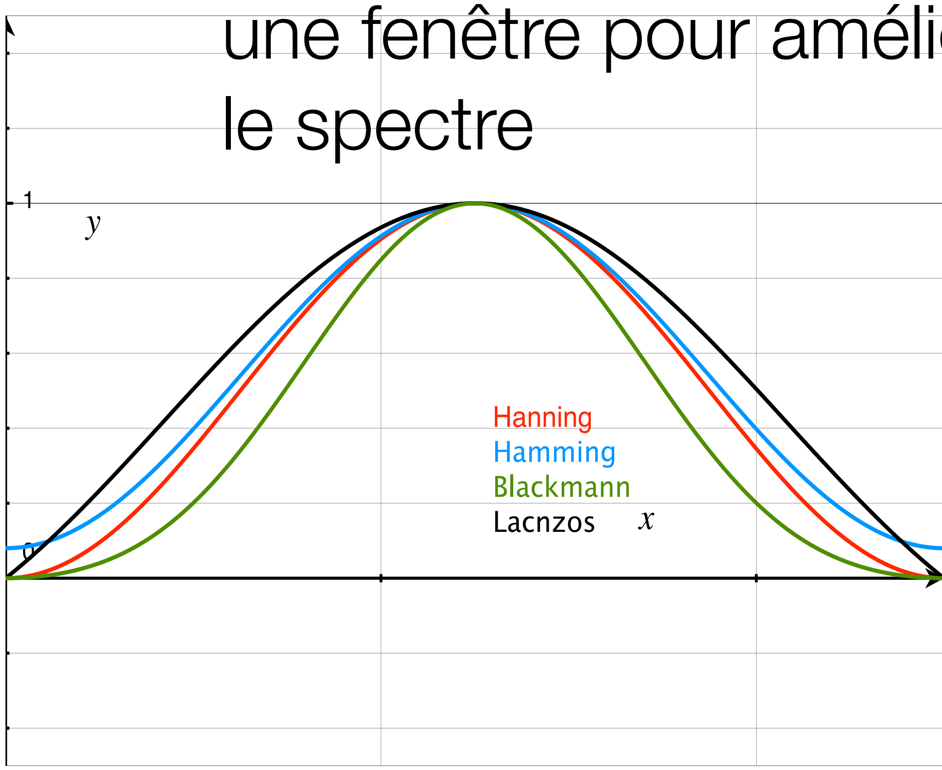


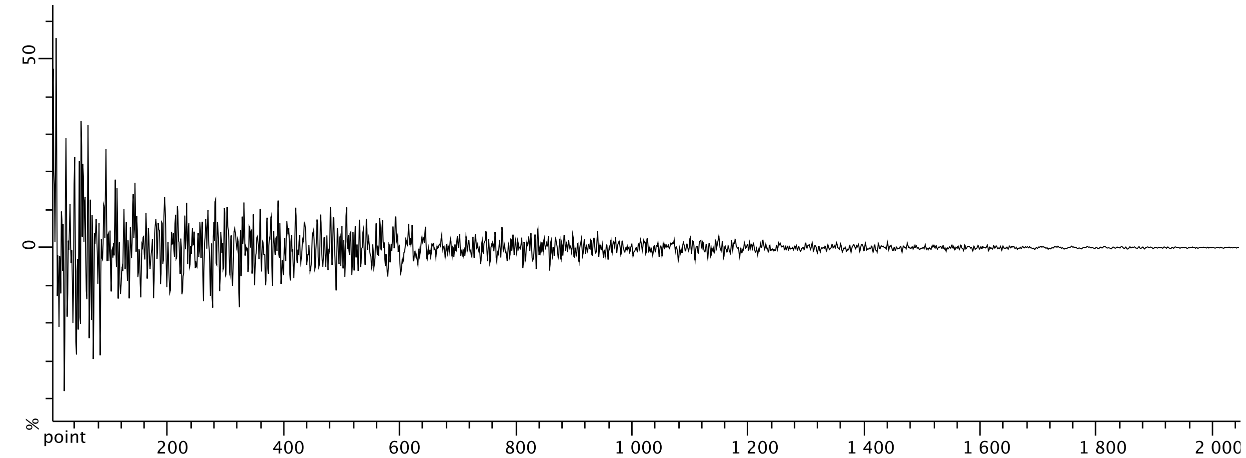


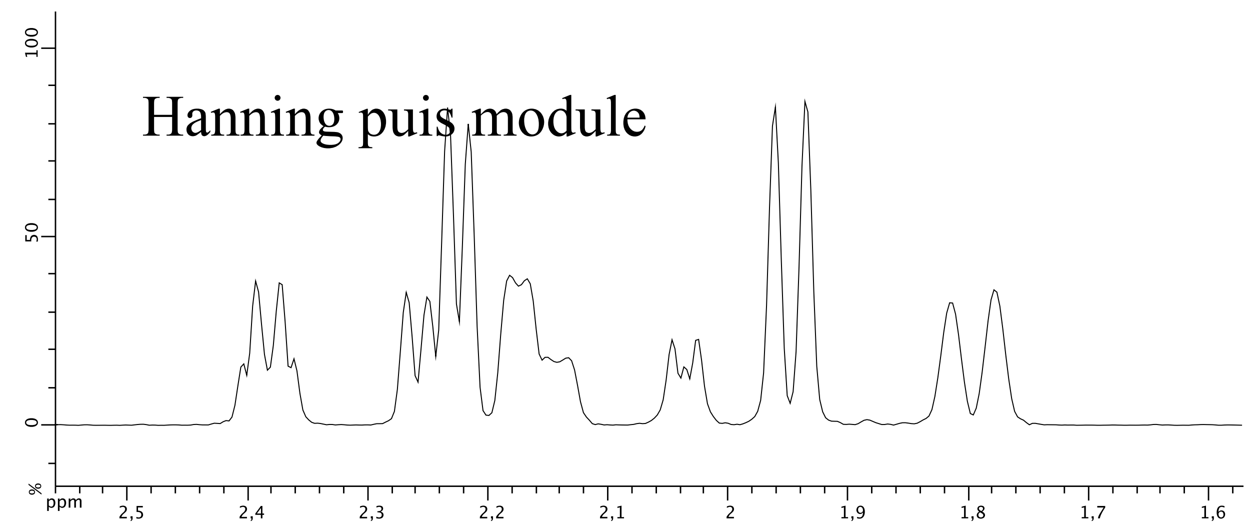
- calcul de la densité spectrale de puissance
- adapté aux signaux stationnaires
- mal adaptés aux FID

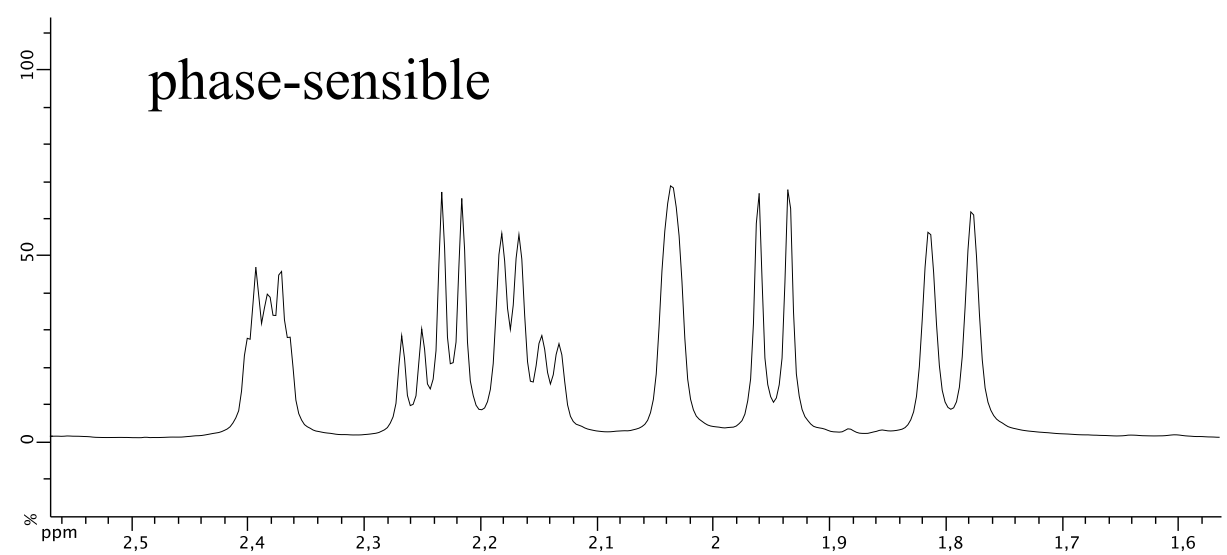
Mise en œuvre (2)

- Apodisation
  - multiplier les données par une fenêtre pour améliorer le spectre







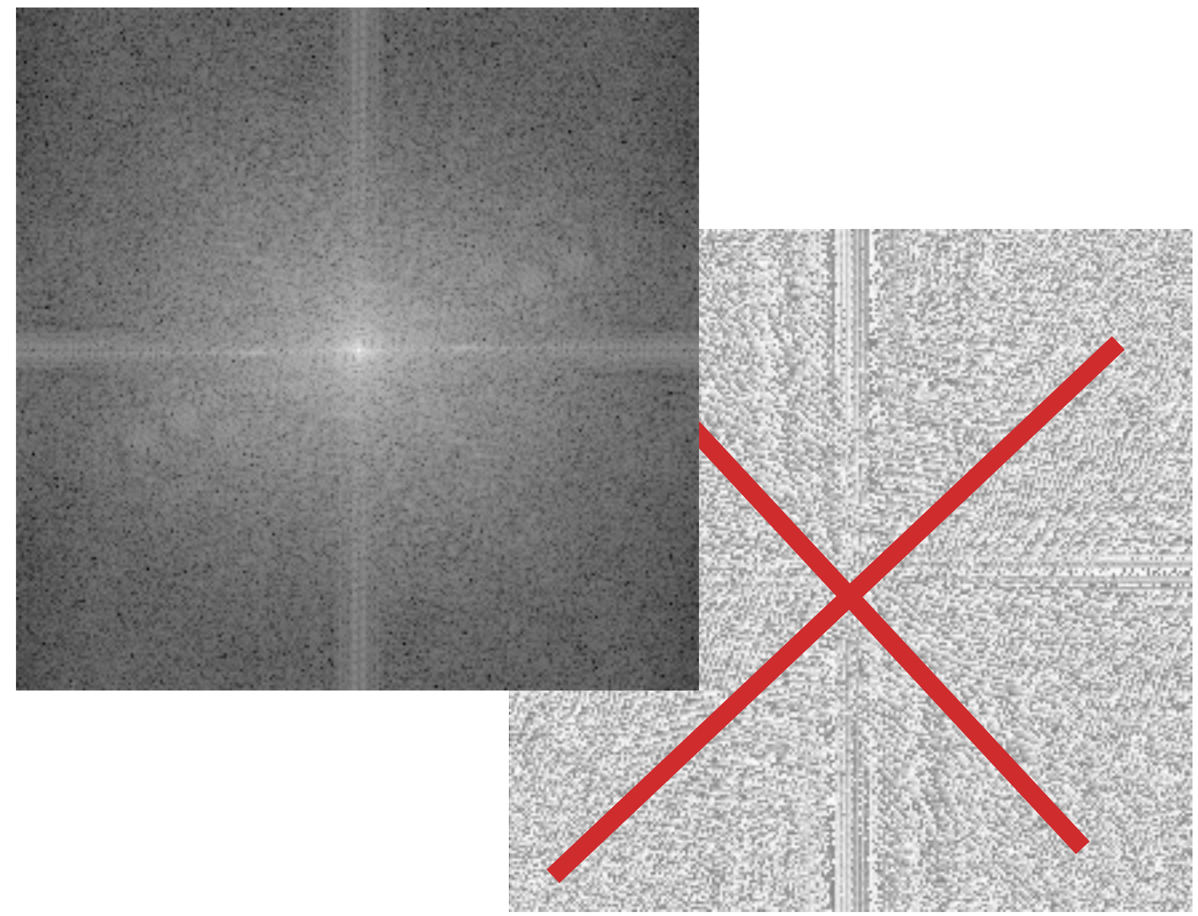


- artefacts
- forte de perte de signal dans certains cas
- modification du signal mesuré !

passage en module

$$\xrightarrow{F}$$

amplitude



phase

$$\xleftarrow{F^{-1}}$$