

La spectroscopie des gaz

La spectroscopie à transformée de Fourier est une méthode efficace de détermination de la composition chimique des gaz. Elle fait intervenir le proche infrarouge pour l'élaboration des mélanges d'essence ou les prévisions météorologiques, et la lumière visible en astronomie. Les trois articles qui suivent présentent plusieurs applications de cette technologie; le quatrième aborde le principe de l'interféromètre et les notions mathématiques utiles pour interpréter les résultats.

Photo de la nébuleuse Helix prise par le télescope Hubble (NASA, STScI)

Le compteur de photons

Dans les années 60, la spectroscopie à transformée de Fourier (FTS) était surtout utilisée pour le développement de télescopes mais elle a rapidement trouvé bien d'autres applications, notamment pour le contrôle des substances chimiques dans l'industrie. Affinée et améliorée, cette technologie est toujours à la base des télescopes à haute définition, qui sont presque capables de compter les photons à l'unité. Aujourd'hui, ces télescopes explorent les confins de l'univers pour nous révéler les secrets de la matière.

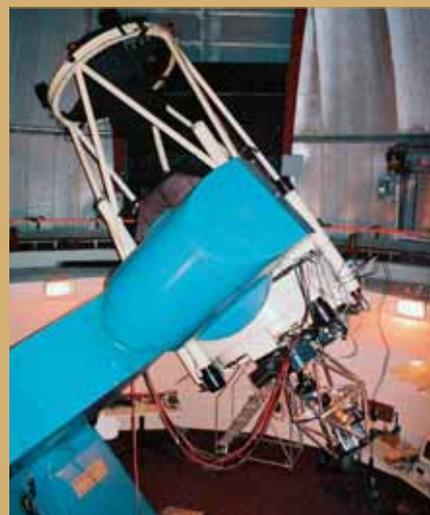
À la fin de l'année 2000, l'université québécoise de Laval et ABB ont lancé un projet commun de conception d'un instrument devant équiper le télescope terrestre d'un diamètre de 1,6 m de l'observatoire du mont Mégantic, au Canada ¹; l'instrument fut testé pour la première fois en février 2004. Par son nombre de pixels (1,7 million) et son champ de vision (12 minutes d'arc), ce spectro-imageur à transformée de Fourier (IFTS) est de loin le plus grand instrument (133 × 80

× 80 cm, environ 110 kg) jamais utilisé sur un télescope terrestre et le seul à fonctionner dans la bande visible; il se compose d'un module innovant de FTS fonctionnant en mode pas à pas, de deux caméras CCD à couplage de charges, de deux miroirs de sortie et d'un ensemble objectif collimateur, dont ABB assure l'intégration complète.

Il fallait impérativement optimiser le débit et les capacités de transmission de cet instrument pour permettre aux astronomes de collecter le maximum de photons. Son fonctionnement sur un spectre de 350–950 nm est adapté à la sensibilité des deux caméras CCD de 1340 × 1300 pixels, en sortie de l'interféromètre. L'interférence se produisant sur la longueur d'onde visible, une commande mécanique est nécessaire sur la gamme des nanomètres. Une platine piézoélectrique de déplacement sans frottement a été conçue pour contrôler l'angle et la position du miroir mobile de 76 mm de l'interféromètre. Un système sophistiqué de métrologie laser mesure par lecture optique la position et l'angle du miroir 8000 fois par seconde. Un ordinateur dédié détermine les corrections à appliquer aux actionneurs piézoélectriques afin de stabiliser les images de franges d'interférence et d'optimiser le contraste enregistré par les caméras CCD.

La conception du double port de sortie (2 CCD) repose sur l'utilisation de miroirs plats et la position désaxée du faisceau. Jamais encore mis en pratique auparavant, ce montage réduit le nombre de rayons réfléchis rencontrés par le faisceau. Le revêtement de la lame séparatrice est constitué d'un ensemble diélectrique multicouche sophistiqué qui module fortement la lumière dans la gamme d'ondes spécifiée, sans engendrer d'absorption indésirable. Les sept lentilles servant à la collima-

¹ Le télescope de l'observatoire canadien du mont Mégantic utilise un spectro-imageur à transformée de Fourier mis au point par ABB.

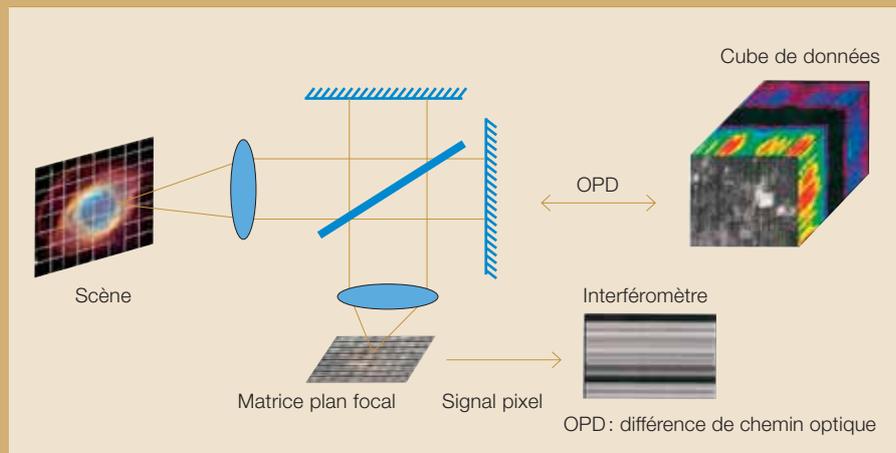


tion et au renvoi d'images répondent aux besoins de collimation de la lumière et assurent également la fonction d'étalement du point panchromatique sous la seconde d'arc, au plan de l'image. Près d'un million de spectres indépendants peuvent être capturés à partir de la scène observée, soit environ mille fois plus qu'avec les spectromètres multi-objets ou imageurs classiques. Le facteur de transmission total du système est supérieur à 60% (30% par CCD) à 500 nm, grâce à l'utilisation d'un détecteur à rendement quantique de 90%. Un record dans la discipline! Les caméras sont refroidies à l'azote liquide, ce qui atténue considérablement le bruit de lecture (3 électrons) et garantit une très grande sensibilité: pas de doute, l'instrument est bien capable de compter un à un les photons!

Près d'un million de spectres indépendants peuvent être capturés à partir de la scène observée.

Un spectro-imageur produit des cubes de données: outre les deux coordonnées spatiales de la source de lumière,

2 Représentation schématique d'un IFTS produisant un cube de données.



il enregistre la longueur d'onde (ou énergie) du photon. En d'autres termes, les multiples images de la scène sont enregistrées sur différentes longueurs d'onde pour constituer un cube de données 2.

La richesse des données collectées par l'IFTS a sa contre-partie: le temps de mesure. L'acquisition d'un cube peut prendre quelques minutes... ou plusieurs heures selon les paramètres retenus! Pour autant, les astronomes ayant l'habitude de patienter avant que la lumière rencontre leurs instruments, ce délai n'est pas jugé gênant.

L'instrument est encore en phase de mise en service sur le télescope de Mégantic. Les astronomes devraient en disposer en 2006 pour mener différents programmes scientifiques. ABB espère que l'intérêt témoigné par la publication de nombreux articles scientifiques sur le sujet ouvrira des perspectives de réalisation d'autres interféromètres, adaptés à la génération actuelle de grands télescopes terrestres (>10 m) ou à de futures stations spatiales.

Frédéric J. Grandmont
frederic.j.grandmont@ca.abb.com

L'œil sur le cyclone

La composition chimique de l'atmosphère se modifie rapidement sous l'action des émissions de gaz. Des mesures précises et fiables de la concentration et de la localisation géographique de ces gaz sont par conséquent primordiales pour comprendre les effets à long terme des changements induits sur le climat et l'environnement de la planète.

Chaque molécule possède une « empreinte digitale » dans le spectre infrarouge, qui peut être visualisée par spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier (FTIR). Les données fournies par les satellites équipés d'analyseurs ABB permettent de mieux comprendre et d'anticiper les risques environnementaux.

Les rejets croissants de gaz à effet de serre (GES) dus à l'activité humaine modifient la composition et les propriétés de l'atmosphère. Les effets sur l'environnement – réchauffement planétaire, dégradation de la couche d'ozone et de la qualité de l'air... – sont dramatiques. (cf. « Analyse de Fourier et effet de serre » en p. 71). Le réchauffement de la planète accélère l'évaporation des eaux, qui provoque à son tour un accroissement de la moyenne mondiale des précipitations. Il est probable que l'humidité du sol s'amenuise dans de nombreuses régions et que les pluies torrentielles soient de plus en plus fréquentes. Les évolutions climatiques et de la qualité de l'air ont également des retombées économiques et sociales majeures: des conditions météorologiques extrêmes présentent un risque direct pour les populations, encore davantage pour leurs moyens de pro-

duction. Il nous faut donc disposer d'outils d'acquisition de données plus puissants pour accroître notre capacité à prévoir précisément ces phénomènes et améliorer les modèles atmosphériques des scientifiques. C'est l'objectif de l'activité *ABB Analytical* qui, à Québec, fabrique des spectromètres à transformée de Fourier (FTS) embarqués dans des satellites d'observation météo.

Le rayonnement infrarouge thermique émis par l'atmosphère terrestre contient toutes les informations utiles sur la colonne d'air examinée. Qu'il s'agisse de mesures de la pollution, de chimie atmosphérique ou de surveillance de la couche d'ozone, la concentration des molécules est déterminée en mesurant l'absorptivité ou l'émissivité des molécules dans la bande infrarouge. Pour les applications météorologiques, le facteur

Instrumentation

d'absorption et d'émission du dioxyde de carbone à des longueurs d'onde de l'ordre de 15 micromètres permet de mesurer indirectement la température de l'atmosphère. C'est dans les «fenêtres atmosphériques» (régions du spectre où l'atmosphère est transparente à l'infrarouge) qu'il est possible de déterminer la température de la surface terrestre, tandis que la portion du spectre comprise entre 5 et 8 micromètres permet de calculer indirectement la teneur en eau ou l'humidité de l'air. Non seulement ces mesures fournissent la température ou l'humidité totale apparente au sommet de l'atmosphère, mais elles peuvent également être utiles pour récupérer des profils précis de température et de concentration de vapeur d'eau. Ce processus transforme le FTS en puissante sonde dédiée à la mesure de paramètres atmosphériques précieux pour alimenter des modèles de prévision météorologique.

Le rayonnement thermique infrarouge émis par l'atmosphère terrestre contient toutes les informations utiles sur la colonne d'air examinée.

Sondeur atmosphérique infrarouge

Les sondeurs atmosphériques infrarouges peuvent équiper deux types de satellites : ceux placés sur orbite basse, à des altitudes de 700 à 850 km, et ceux évoluant sur une orbite «géosynchrone»¹⁾, à 36 000 km de la Terre. Ces deux orbites sont utilisées pour des besoins différents mais supposent également des difficultés et des contraintes techniques distinctes. Sur orbite basse, l'engin spatial met 100 minutes pour faire le tour de la planète. Pour éviter les effets de rémanence dus à la grande vitesse à laquelle le satellite survole la surface



terrestre, le temps de mesure doit être très court et exige une haute sensibilité. Les satellites en orbite géosynchrone, au contraire, sont toujours à l'aplomb de la même zone du globe et autorisent des durées de mesure plus longues. Toutefois, la grande distance entre l'aéronef et la surface terrestre limite la quantité de lumière atteignant le capteur, ce qui impose là aussi une grande sensibilité. Par ailleurs, les sondeurs géosynchrones ne peuvent pas fournir de mesures couvrant toute la planète car ils sont «bloqués» à une latitude déterminée.

Les capteurs actuellement utilisés pour sonder l'atmosphère dans l'infrarouge thermique fonctionnent à partir d'une série de filtres à bande étroite pour fournir des informations spectrales ; or ces filtres sont en nombre limité (souvent moins de 20). En outre, compte tenu de leur nature et de la largeur de la couverture spectrale requise, les bandes de spectre ne sont pas contiguës, d'où une perte d'information dans les intervalles. Les son-

deurs infrarouges basés sur un spectromètre dispersif ou un spectromètre FTS offrent une vision spectrale beaucoup plus complète : par exemple, le sondeur infrarouge CrIS²⁾ (*Cross-Track Infrared Sounder*) sera doté de plus de 1300 canaux spectraux et pourra mesurer des profils de température avec une résolution verticale de 1 km et une précision proche du degré Celsius. Sa référence spectrale embarquée – une diode laser monochromatique – garantira en outre la grande stabilité de la mesure pendant toute la durée de la mission. Enfin, la technologie FTS est particulièrement robuste et fiable, deux qualités essentielles aux missions d'observation de longue durée.

ABB travaille actuellement sous contrat avec ITT Industries pour construire des sondeurs CrIS équipant les satellites environnementaux à orbite polaire américains NPOESS (*National Polar-orbiting Operational Environmental Satellite System*). ABB développe et construit l'interféromètre et son instru-

Notes

¹⁾ Un satellite sur orbite géosynchrone semble stationnaire pour l'observateur resté à terre.

²⁾ Le sondeur CrIS remplacera le sondeur infrarouge à haute résolution (HIRS) à bord de la prochaine génération de satellites américains NPOESS. Il fournira des mesures de température et des profils d'humidité plus précis, depuis une altitude de 850 km environ. Consulter le site <http://www.ipo.noaa.gov/> pour en savoir plus.

³⁾ Le satellite SCISAT permet à une équipe de scientifiques canadiens et internationaux de mieux comprendre le phénomène d'appauvrissement de la couche d'ozone et plus particulièrement les changements observés au-dessus du Canada et de l'Arctique. L'instrument ACE-FTS embarqué par SCISAT mesure simultanément la température, les traces de gaz, les petits nuages et les aérosols trouvés dans l'atmosphère, à une altitude de 650 km. Pleinement opérationnel, ce satellite fut lancé par la NASA en août 2003.

Analyse de Fourier et effet de serre

La Terre est exposée à une grande quantité de rayonnements solaires (environ $1,7 \times 10^{17}$ W hors de l'atmosphère ou 1366 W par m², à une longueur d'onde maxi de 500 nm). Si toute cette énergie restait confinée à terre, la planète se réchaufferait très vite. Heureusement, celle-ci réfléchit presque 30 % de ces rayonnements, le reste étant absorbé par l'atmosphère (16 %), les nuages (3 %), le sol et l'eau (51 %). Ce sont pourtant ces radiations qui permettent la vie sur Terre : à l'origine de la photosynthèse des plantes, du cycle hydrologique et d'autres phénomènes naturels, cette énergie est finalement retransmise par rayonnement sur une large gamme de fréquences (avec un pic d'environ 15 micromètres dans l'infrarouge). Cependant, l'atmosphère réabsorbe approximativement 71 % du rayonnement de surface, ralentissant ainsi le refroidissement naturel de

la planète. Sans cette absorption, la température moyenne à la surface de la Terre serait de -17 °C au lieu de +15 °C. L'augmentation constatée de la concentration des GES accroît cette capacité d'absorption et, par conséquent, la température en surface : selon l'observatoire de Mauna Loa, à Hawaï, la concentration de CO₂ est passée de 313 ppm en 1960 à 375 ppm en 2005.

Afin de collecter davantage de données sur les GES, l'agence spatiale japonaise met au point le satellite d'observation GOSAT (*Greenhouse gases Observing SATellite*), équipé d'un interféromètre conçu et fabriqué par ABB. Cet instrument contribuera certainement à recueillir davantage d'informations sur les concentrations de molécules participant au phénomène de réchauffement de l'atmosphère terrestre.

Ce mécanisme d'effet de serre est connu de longue date. Son principe fut d'abord posé par Joseph Fourier en 1824, puis il fut quantifié par Svante August Arrhenius en 1896. Précisons que Fourier travaillait alors à la description mathématique de la conduction thermique et du rayonnement infrarouge : une œuvre d'autant plus complète qu'une autre de ses découvertes majeures, l'analyse de Fourier, reste encore aujourd'hui à la base de l'instrumentation permettant d'étudier l'effet de serre.

mentation de mesure ainsi que le corps noir servant à l'étalonnage radiométrique en vol de l'instrument. ABB participe également à l'élaboration des algorithmes de traitement de niveau 1.

Le sondeur CrIS pourra mesurer des profils de température avec une résolution verticale de 1 km et une précision proche du degré Celsius.

Pour fiabiliser l'instrument, le sous-module de mesure et l'électronique

sont totalement redondants. La conception des mécanismes de scrutation garantit une bonne capacité de flexion et l'absence de frottement, ce qui évite l'usure rapide des pièces en mouvement, dont pâtit souvent l'instrumentation spatiale.

Le premier instrument fut livré en novembre 2005, suivi de deux autres quelques mois plus tard.

Une longue expérience

La technologie FTIR fut à l'origine mise au point pour scruter le cosmos. Elle trouva ensuite bien d'autres applications avant d'être elle-même mise sur orbite pour observer la Terre. L'expérience d'ABB en matière de

conception et de fabrication de spectromètres FTS, qui modulent le faisceau IR sur une longueur d'onde donnée par interférence optique (cf. «Les ondes font des vagues»), remonte au début des années 70, avec la mise au point de FTS embarqués sur des ballons, suivie de plusieurs autres projets d'envergure. Cette élégante et puissante méthode d'analyse spectrale a encore de beaux jours devant elle au service des spécialistes de l'atmosphère.

Marc-André Soucy

marc-andre.a.soucy@ca.abb.com

Le spectre des essences

Le mélange des produits est une technique essentielle pour l'industrie du raffinage : il s'agit de la dernière étape de la transformation du pétrole brut en carburants commercialisables. Le mélangeur assemble plusieurs flux issus d'unités de traitement différentes afin de produire un carburant aux normes nationales et internationales, ou aux spécifications client. Stade ultime du raffinage, son optimisation est capitale car les bénéfices de l'amélioration d'un processus amont peuvent facilement être anéantis si un mauvais mélange produit un carburant de basse qualité ou, plus fréquemment, s'il érode la marge du raffinage par une utilisation sous-optimale de bases essence onéreuses. C'est donc à ce stade que l'optimisation du processus s'avère la plus payante.

L'envolée de la demande mondiale des produits pétroliers légers, tirée par les économies émergentes telles la Chine et l'Inde, a entraîné l'augmentation des marges de raffinage, malgré la flambée du prix du pétrole brut observée ces derniers mois. Les besoins en produits finis susceptibles de dégager de fortes marges ont remis en lumière le rôle capital de l'analyse en ligne par spectroscopie à transformée de Fourier dans le proche infrarouge (FT-NIR). Les avantages de cette technique pour les applications d'optimi-

Instrumentation

sation des produits finis à forte valeur ajoutée sont considérables, notamment dans l'élaboration des mélanges d'essence : analyses multi-propriétés et multi-flux, haut niveau de répétabilité (généralement bien supérieur à celui des analyseurs en ligne classiques), strict respect des normes ASTM (*American Society for Testing and Materials*). En outre, les analyseurs FT-NIR sont capables de modéliser non seulement les informations directes de

composition chimique, mais également les propriétés des principaux flux du procédé tels que l'octane, les aromatiques, les courbes de distillation, le cétane ou le point de trouble. Ces propriétés, souvent les plus sollicitées par les spécialistes de l'optimisation du processus ou les plus contraignantes en termes de produit fini, peuvent être extraites d'un simple spectre FT-NIR.

Cette technologie offre une précision analytique comparable à celle des référentiels ASTM servant à élaborer les modèles d'étalonnage, sous réserve d'appliquer les bonnes méthodes statistiques. Pourtant, les possibilités d'amélioration de la répétabilité de l'analyse comme de la disponibilité de l'analyseur grâce à la technologie FT-NIR ne sont en général pas appréciées à leur juste valeur, par rapport aux méthodes classiques d'optimisation du mélange par multi-analyseurs. Pour les flux d'hydrocarbures légers, par exemple, la technologie optique à très faible bruit inhérente aux spectromètres FT-NIR garantit une répétabilité analytique hors pair.

Cette exceptionnelle qualité de la mesure des propriétés de l'essence par spectromètre FT-NIR d'ABB est particulièrement utile à l'opérateur en charge du mélange. Les modifications des propriétés du mélange peuvent en effet être suivies très précisément pendant l'opération alors qu'avec une méthode d'analyse classique, elles seraient sans doute « perdues », compte tenu du bruit ou de la rareté des résultats. Ainsi, l'opérateur ou la régulation multi-variable est en mesure d'agir sur le procédé en étant convaincu de la réalité du changement observé. Enfin, l'amélioration de la répétabilité par rapport à la méthode traditionnelle permet de réduire les pertes de propriétés en resserrant le contrôle aux limites basses de fonctionnement **1**.

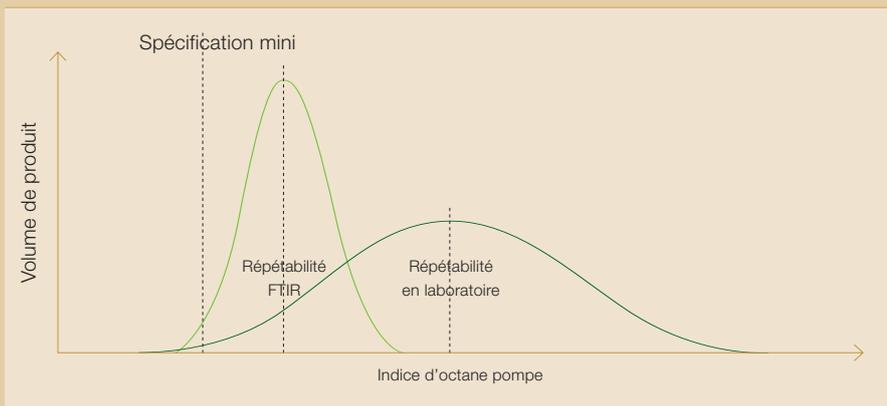
Si les pertes ne peuvent jamais être annulées, en les limitant au maximum, la marge globale de la raffinerie est considérablement améliorée.

Les instruments FTIR utilisés pour l'analyse des processus de raffinerie et l'optimisation des usines sont des analyseurs secondaires dont le fonctionnement dépend de modèles de corrélation basés sur des étalons de laboratoire ; il est donc nécessaire de valider en permanence leurs mesures par une maîtrise statistique des procédés (MSP) afin de suivre et de confronter



1 Réduction des pertes par contrôle précis du mélange

— Méthode FTIR — Méthode classique



leurs résultats aux normes de laboratoire.

Une démarche vraiment payante

Il est possible de calculer la perte de qualité « initiale » avec une précision analytique de 0,1 indice d'octane pompe. Si cette perte ne peut jamais être annulée, en la limitant au maximum, la marge globale de la raffinerie peut être considérablement améliorée. Ainsi, pour une usine produisant 100 000 barils/jour, une très légère amélioration (précision analytique de 0,02 à 0,05 indice d'octane pompe) du produit fini permet d'économiser 1,5 à 3 millions de dollars à l'année [1].

Le bon choix

La spectrométrie FTIR est actuellement la technologie la plus avantageuse en termes de prix, de performance, de

valeur ajoutée et de risque. Fondée sur l'optique, sa très grande flexibilité est particulièrement adaptée aux applications multi-flux et multi-propriétés. Elle est compatible à la fois avec des systèmes d'échantillonnage extractif in-situ et des analyseurs extractifs multi-cellules déportés sur fibre optique. Elle permet en outre une analyse multi-propriété avec de courts temps de cycle d'analyse, bien adaptée aux exigences de l'optimisation de la commande avancée des procédés. L'utilisation de la FTIR dans des centaines de sites du monde entier témoigne par ailleurs du succès de la technologie. Traditionnellement, la mesure spectroscopique pour le contrôle en ligne du produit mélangé final fut bridée par la difficulté de mise au point et de maintenance de modèles d'étalonnage stables et à toute épreuve.

Néanmoins, de récents progrès, notamment dans le contrôle optimal de la variabilité des analyseurs, ont considérablement amélioré la situation, facilitant la maintenance et la transférabilité des étalonnages. L'exploitation de nouvelles procédures de modélisation chimométrique permet désormais de minimiser la sensibilité des étalonnages aux changements de composition du mélange.

Mike Simpson

mike.b.simpson@gb.abb.com

Bibliographie

[1] *ABB Review Special Report Instrumentation & Analytics*, mai 2006, p. 54-59

Les ondes font des vagues

La lumière transmise ou émise par un gaz recèle une foule d'informations sur sa composition chimique, traduites en lignes spectrales que le spectromètre à transformée de Fourier permet d'extraire. La *Revue ABB* est l'occasion de revoir deux des principes qui se cachent derrière cet instrument : l'interférogramme et la transformée de Fourier rapide.

L'interféromètre est une invention du physicien Albert Abraham Michelson, dans les années 1880. Dans cet instrument **1**, le faisceau lumineux incident **a** est divisé en deux par une lame séparatrice semi-réfléchissante **b**. Le faisceau réfléchi parcourt deux fois la distance d_1 qui le sépare du miroir **c** pour retomber sur la séparatrice. De même, le faisceau traversant parcourt deux fois la distance d_2 de la lame au miroir **d**. En sortie **e**, les deux faisceaux interfèrent : de cette interférence sont extraites les informations spectrales.

Interférence

La propagation des ondes à partir d'un point source est représentée en **2a**. Une seconde source identique est

ajoutée en **2b** et **2c** ; les mouvements des ondes se superposent. Par endroits, ces « vagues » se combinent pour donner des ondes d'une amplitude double (interférence « constructive »). Ailleurs, elles s'annulent et forment des zones de calme (interférence « destructive »). A la différence de ces exemples en deux dimensions, l'interférence à l'intérieur d'un interféromètre se produit surtout le long d'un axe unique (en rouge sur **2**).

Dans les années 60, la spectroscopie à transformée de Fourier (FTS) était surtout utilisée pour le développement de télescopes mais elle a rapidement trouvé bien d'autres applications, notamment pour le contrôle des substances chimiques dans l'industrie.

En **2b**, la distance entre les sources – ou la différence de longueur de parcours $2(d_1 - d_2)$ – est un multiple de la longueur d'onde. L'interférence constructive maximale se produit le long de l'axe. En **2c**, la distance est raccourcie d'une moitié de longueur d'onde, provoquant une interférence destructive. Plus généralement pour ce type de source mono-

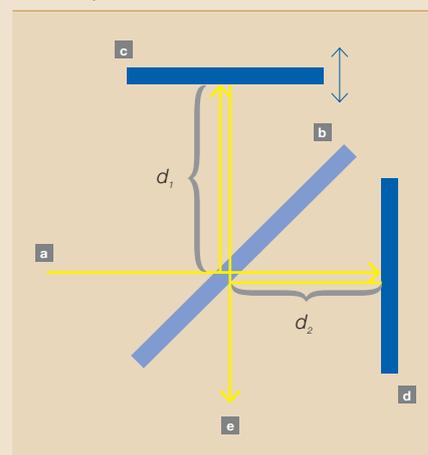
chromatique, la puissance du signal à un point quelconque de l'axe varie sinusoidalement en fonction de la différence de parcours, à une longueur d'onde identique à celle du signal.

$$I(d_1, \lambda) = \frac{I_0}{2} \left\{ 1 + \cos \left\{ 2\pi \frac{2(d_1 - d_2)}{\lambda} \right\} \right\}$$

I_0 est l'amplitude du rayon incident **1a** et λ sa longueur d'onde. L'utilisation d'un détecteur en sortie d'interféromètre **1e** et la variation de d_1 permettent de tracer cette fonction (« interférogramme ») et de calculer I_0 et λ .

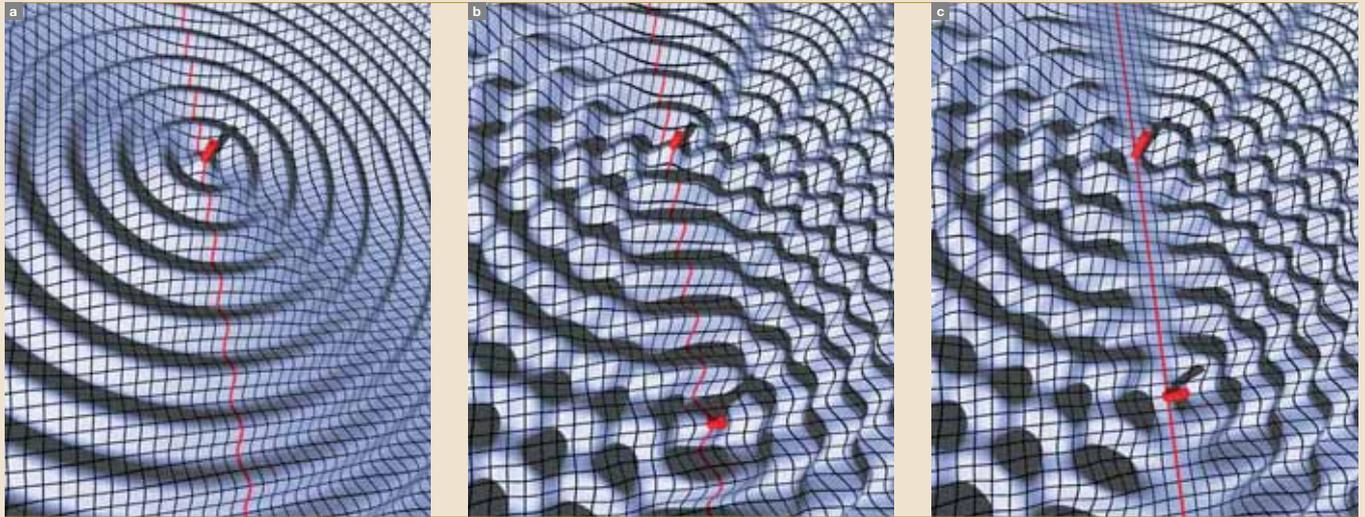
Le signal de mesure réel présente généralement une large gamme de fréquences superposées. L'interférogramme

1 Principe de l'interféromètre de Michelson



Instrumentation

2 Interférence de deux mouvements d'ondes identiques : la distance entre les sources détermine la propriété constructive **b** ou destructive **c** de l'interférence observée le long de l'axe rouge. Les côtés de chaque petit carré sont égaux à un quart de longueur d'onde.



me correspondant est la somme des interférogrammes de ses composants monochromatiques.

$$I(d_1) = \int I_0(\lambda) \frac{1}{2} \left\{ 1 + \cos \left\{ 2\pi \frac{2(d_1 - d_2)}{\lambda} \right\} \right\} d\lambda$$

Un traitement supplémentaire est indispensable pour séparer ces signaux.

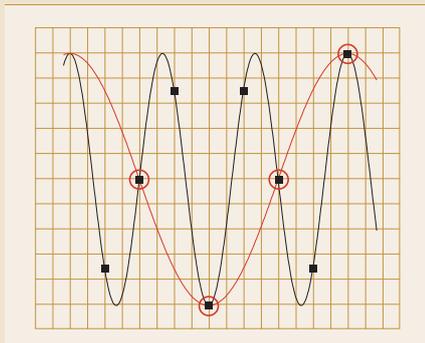
De Fourier à Fourier rapide

Au début du XIX^e siècle, le mathématicien Jean-Baptiste Joseph Fourier développe une transformation mathématique qui trace une fonction selon son spectre de fréquences :

$$F(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-2\pi i k x} dx$$

3 De faibles fréquences d'échantillonnage ne permettent pas toujours d'identifier les fréquences sans ambiguïté.

- signal original
- fréquence d'échantillonnage = 8
- fréquence d'échantillonnage = 4
- repliement du spectre pour une fréquence d'échantillonnage = 4



$f(x)$ étant la fonction à analyser et $F(k)$ son spectre de fréquences.

Généralement, l'enregistrement numérique d'un signal correspond à une série finie de nombres acquis à intervalle régulier. La transformation de Fourier discrète (TFD), dérivée de la formule générale, est la suivante :

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

f_k étant la k ème composante de la série arithmétique, F_n le n ème élément de la série de fréquences correspondante et N le nombre d'échantillons. Cet algorithme souffre néanmoins d'un inconvénient majeur : sa complexité est proportionnelle au carré de N . Son utilisation fut donc longtemps subordonnée à l'existence de puissants outils de calcul ; à défaut, il fallait se contenter d'approximations, souvent inexactes.

La lumière transmise ou émise par un gaz recèle une foule d'informations sur sa composition chimique, traduites en lignes spectrales.

Ce ne fut plus le cas en 1965 lorsque Cooley et Tukey proposèrent un algorithme rapide de calcul de la transformée de Fourier, plus souvent connu par ses initiales anglo-saxonnes FFT (*Fast Fourier Transform*).

Des algorithmes FFT pour raccourcir les temps de calcul

La perte d'information est l'une des conséquences de la diminution de la fréquence d'échantillonnage. 3 représente une courbe sinusoïdale (noire) échantillonnée à la fréquence de 8 (points noirs), puis de 4 (cercles rouges). Dans ce dernier cas, le signal échantillonné ne peut se distinguer de la courbe rouge et, par conséquent, sa TFD est identique. La courbe rouge est appelée « alias » de la noire et ce phénomène de repliement de spectre (*aliasing*) vaut pour toutes les fréquences supérieures à la moitié de la nouvelle fréquence d'échantillonnage. Une seconde TFD appliquée aux points omis donne des résultats aussi ambigus, mais la comparaison des deux TFD permet de retrouver les informations perdues. Ainsi, au lieu de calculer une TFD sur huit points, deux TFD sur quatre points sont réalisées, chacune ne nécessitant qu'un quart de la puissance de calcul nécessaire au signal original. Cette réduction se répète de façon récursive. L'algorithme FFT est par conséquent bien plus efficace lorsque le nombre d'échantillons est une puissance de deux.

Andreas Moglestue
andreas.moglestue@ch.abb.com

Pour en savoir plus sur la spectroscopie à transformée de Fourier : *ABB Review Special Report Instrumentation and Analytics*, mai 2006, p. 46-60 et 76-79