Análisis de la transformada de Fourier y de la convolución de señales en instrumentación de procesos químicos mediante Mathcad

J.L. GUIÑÓN, V. PÉREZ-HERRANZ, J. GARCÍA-ANTON Y E. ORTEGA. UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE VALENCIA.

Introducción

La transformada de Fourier (FT) es una herramienta matemática que convierte una señal en el dominio del tiempo o en el espacio, en su equivalente en el dominio de la frecuencia o de la frecuencia espacial. En el pasado la FT era un proceso tedioso implicado sobre una distribución continua de datos y era sólo utilizada cuando no había otra técnica alternativa. Actualmente con ayuda de los ordenadores, y la denominada transformada de Fourier discreta (DFT) y la transformada de Fourier rápida (FFT) (nombre del algoritmo computacional para evaluar rápidamente la DFT), se realiza de forma más conveniente el análisis frecuencial de señales en tiempo discreto. Hoy en día, la mayor parte de datos procedentes de la instrumentación de procesos químicos son discretos (digitales) es decir obtenidos a intervalos regulares de tiempo y, por tanto, no es de extrañar el auge creciente que ha experimentado la instrumentación basada en la transformada de Fourier.

La convolución es un concepto que tiene significado en diferentes situaciones físicas. Así la convolución describe el proceso que causa la difusión o la perdida de nitidez de las señales obtenidas en procesos químicos. Por ejemplo, cuando se obtienen datos cromatográficos o espectroscópicos, la señal global observada es el resultado del propio compuesto químico, modificada por la perturbación debida a los parámetros físicos del instrumento tales como el volumen muerto del detector o la rendija del espectrómetro respectivamente. Por tanto la señal de salida del instrumento será la convolución de la señal inicial con la distorsión del instrumento.

En términos matemáticos la función que da la respuesta h(t) como función de la señal de entrada, f(u), y de la perturbación, g(t-u), se denomina convolución, cuya expresión viene dada por la ecuación:

$$h(t) = f(t) * g(t) \equiv \sum_{u=-\infty}^{\infty} f(u)g(t-u)$$

donde la operación de la convolución se denota con un asterisco. La convolución es una de las propiedades intrínsecas de la DFT, que establece que la convolución en el dominio del tiempo es equivalente a la multiplicación en el dominio de la frecuencia y viceversa. Si F(f) y G(f) son las respectivas DFT de f(t) y de g(t), en términos matemáticos se puede escribir:

$$f(t) \xleftrightarrow{DFT} F(f) \quad \text{y} \quad g(t) \xleftrightarrow{DFT} G(f)$$

entonces

$$f(t) * g(t) \xleftrightarrow{DFT} F(f)G(f)$$

La aplicación de la transformada de Fourier y de la convolución se efectúa del modo siguiente. Se calculan las *DFT, F(f)* y *G(f) de f(t)* y *g(t)* respectivamente, a continuación se obtiene una nueva función, P(f), multiplicando punto a punto las funciones F(f) y G(f). Finalmente la transformada de Fourier inversa de P(f) conduce a la función h(t).

Alternativamente, el proceso inverso a la convolución se denomina deconvolución. Mediante este proceso es posible reconstruir la señal verdadera a partir de la señal de salida con ayuda de una función filtro impulsional. Consideremos, por ejemplo, que se quiera medir la señal y(t) tal como un cromatograma o un espectro, con mínima distorsión. La señal final medida s(t) será la convolución de y(t) con la función respuesta r(t) debida a la distorsión instrumental:

$$s(t) = y(t) * r(t)$$

Sean S(f), Y(f) y R(f) las respectivas DFT de s(t), y(t) y r(t).
De acuerdo con el principio de la convolución se puede calcular:

$$Y(f) = \frac{S(f)}{R(f)}$$

Finalmente la transformada de Fourier inversa de Y(f), permite calcular la señal de interés corregida de la distorsión, y(t).

El paquete de software Mathcad contiene las funciones FFT y IFFT que realizan las transformadas rápidas de Fourier directa e inversa respectivamente. En este documento se hace uso de Mathcad para simular el proceso de convolución y deconvolución de señales en instrumentación de procesos químicos.

Resultados

En la Figura 1 se observa una señal gaussiana f(t), típica de un muestreo de datos cromatográficos o espectroscópicos. La Figura 2 muestra dos funciones filtro g1(t) y g2(t) que distorsionan la señal original. La Figura 3 muestra que la convolución de la señal original f(t) con la función filtro g1(t) conduce a una nueva señal, s1(t), similar a la original pero desplazada del origen del eje X (tiempo), debido a la distorsión producida por el filtro. La Figura 4 muestra que la convolución de la señal original f(t) con la función filtro de mayor anchura g2(t), conduce a una señal, s2(t), de mayor intensidad pero distorsionada por el solapamiento de las bandas.

La Figura 5 muestra la señal, s(t), resultante de la convolución de una señal de fluorescencia con la señal excitatriz de un pulso láser. La deconvolución de la señal medida, y(t), Figura 6, permite reconstruir la señal inicial de un proceso de fluorescencia típico.

Conclusión

Con el software Mathcad se describen dos aplicaciones de la transformada de Fourier en instrumentación de procesos químicos: Mediante la convolución se analiza el efecto de la función filtro (el volumen muerto en cromatografía y la anchura de rendija en espectrometría) y el efecto de la diferencia de fase entre la señal y la perturbación. Con la deconvolución se puede reconstruir la señal de fluorescencia inducida por pulsos láser.

Para más información:

www.forumt.net/08-03

info@forumtecnologico.net

Telf. 902 43 00 38

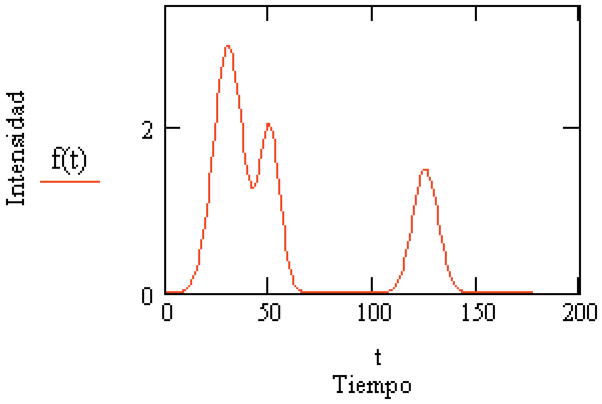

Figura 1: Señal gaussiana de un cromatograma o de un espectro.

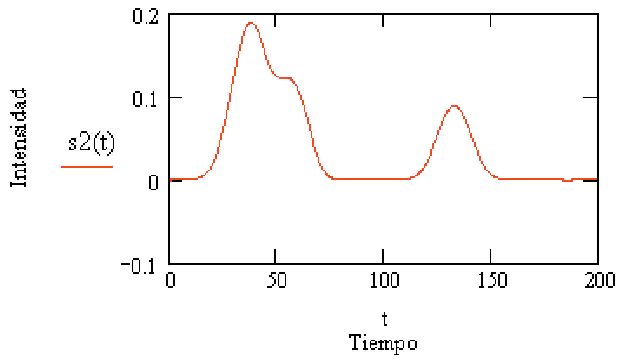

Figura 4: Convolución de f(t) y g2(t) en el dominio del tiempo.

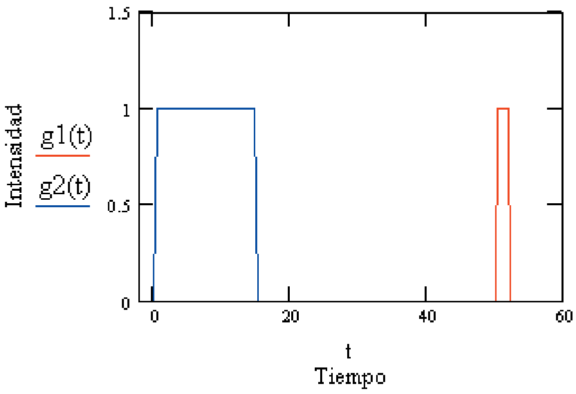

Figura 2: Funciones filtro con anchura de banda de 2 y 15 s.

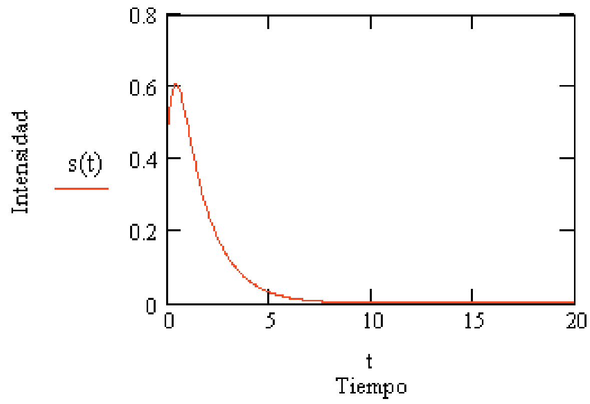

Figura 5: Convolución de la señal de fluorescencia con un pulso láser.

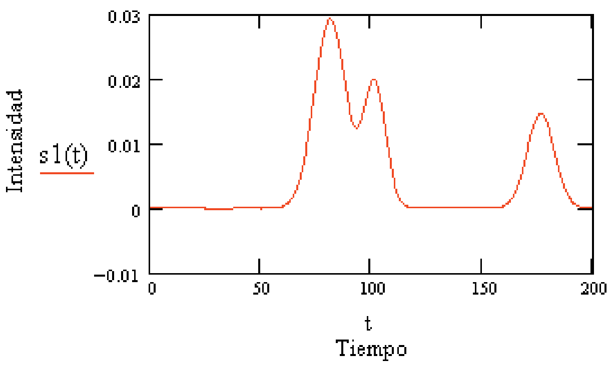

Figura 3: Convolución de f(t) y g1(t) en el dominio del tiempo.

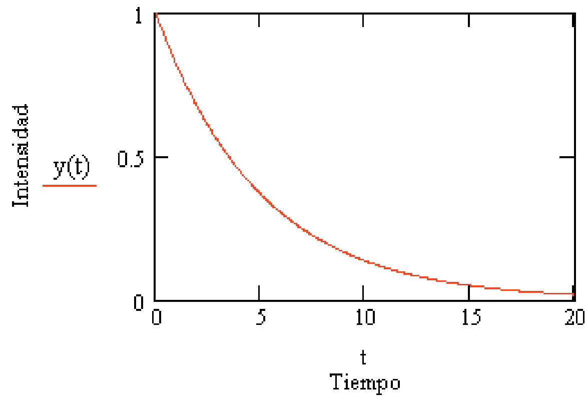

Figura 6: Deconvolución de la señal de fluorescencia.