

A TRANSFORMADA DE FOURIER EM BASIC

Maurício Gomes Constantino* e Gil Valdo José da Silva#

Departamento de Química - Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto - Universidade de São Paulo - Av. Bandeirantes, 3900 - 14040-901 - Ribeirão Preto - SP

Recebido em 26/1/99; aceito em 27/4/99

THE FOURIER TRANSFORM (FFT) IN BASIC. In this paper we describe three computer programs in Basic language about the Fourier transform (FFT) which are available in the Internet site <http://artemis.ffclrp.usp.br/SoftwareE.htm> (in English) or <http://artemis.ffclrp.usp.br/softwareP.htm> (in Portuguese) since October 1998. Those are addresses to the Web Page of our Laboratory of Organic Synthesis. The programs can be downloaded and used by anyone who is interested on the subject. The texts, menus and captions in the programs are written in English.

Keywords: Fourier transform; FFT; Basic; NMR.

Este artigo apresenta três programas em linguagem Basic sobre a transformada de Fourier, que estão disponíveis no "site" da Internet <http://artemis.ffclrp.usp.br/softwareP.htm> (em português) ou <http://artemis.ffclrp.usp.br/softwareE.htm> (em inglês) (partes da "Web Page" de nosso Laboratório de Síntese Orgânica) desde outubro de 1998 para serem copiados e usados por quem se interesse pelo assunto. Os textos dos programas estão escritos em inglês para torná-los mais universalmente utilizáveis.

A transformada de Fourier é um processo matemático extensamente utilizado hoje em dia em espectrometria de RMN, de IV, etc., na forma do engenhoso processo de cálculo digital simplificado, desenvolvido por vários autores¹, denominado FFT (Fast Fourier Transform). A simplificação introduzida por esse algoritmo reduz as operações necessárias de N^2 multiplicações complexas para $N \log_2 N$ multiplicações (N é o número de pontos da função a ser transformada).

Essencialmente a transformada de Fourier consiste em, dada uma quantidade h como função do tempo $[h(t)]$, determinar a correspondente quantidade H como função da frequência $[H(f)]$, geralmente como um número complexo que também indica a fase, e vice-versa: dada $H(f)$, determinar $h(t)$. Neste artigo referimo-nos, naturalmente, a cálculo numérico, onde $h(t)$ é uma coleção de N números que indicam, por exemplo, a intensidade em função do tempo de certa função periódica; a transformada de Fourier correspondente será outra coleção de N números que indicarão a intensidade de cada frequência presente na função periódica original. Inversamente, se forem conhecidas as intensidades das frequências, a transformada fornecerá a função $h(t)$.

Um exemplo simples seria a voz de uma pessoa emitindo um som determinado por, digamos, 1 segundo. A voz provoca uma oscilação do ar, que pode ser captada por um microfone, convertida em oscilação elétrica, e gravada. Um computador pode "ler" essa oscilação como uma coleção de pontos (números) que indicam a intensidade em função do tempo; a transformada de Fourier, aplicada a esses "pontos", fornecerá um "mapa" das várias frequências que compõem o som da voz, na forma de uma função *intensidade x frequência*. Se na função original o tempo é em segundos, na transformada a frequência será em Hz.

Algo semelhante ocorre, por exemplo, no espectrômetro de RMN. O aparelho capta uma oscilação eletromagnética emitida pelos núcleos dos átomos e grava essa oscilação como uma

coleção de números que indicam a intensidade em função do tempo. A transformada de Fourier fornecerá um "mapa" das frequências que compõem a oscilação, mapa esse que chamamos de "espectro" de RMN.

Na literatura há muitos trabalhos que apresentam explicações bem detalhadas sobre vários aspectos da transformada de Fourier. Recomendamos em especial o livro *Numerical Recipes*², de onde foi retirada a rotina básica para elaboração de nossos programas. Não nos estenderemos, portanto, em maiores considerações sobre a transformada em si.

O principal objetivo de nossos programas é de natureza pragmática. Pretendemos, com eles, dar um exemplo prático de como elaborar certas rotinas para obter um efeito desejado, sendo esses exemplos completos dentro de seus objetivos, sem deixar pontas desatadas.

A linguagem Basic é a mais simples das linguagens de programação, e pode ser aprendida com rapidez e facilidade. O *Visual Basic*³ desenvolvido pela *Microsoft*® é muito versátil e incorpora inúmeras vantagens próprias de outras linguagens, tornando-se em método ideal para elaboração de programas relativamente pequenos, principalmente se desenvolvidos por pessoas cujo objetivo principal em pesquisa esteja voltado para outros aspectos, sendo a programação uma ferramenta e não um objetivo em si, como é o nosso caso. Decidimos experimentar a elaboração de programas de FFT em Basic, e ficamos surpresos com a qualidade dos resultados, em boa parte devida, naturalmente, à grande rapidez e capacidade de memória dos computadores usados hoje em dia.

Procuramos, dentro de limites razoáveis, explorar a grande variedade de recursos do *Visual Basic*® nesses programas, para ampliar sua utilidade como exemplos. Em um dos programas, por exemplo, não dimensionamos variáveis na seção de Declarações; todos os dados que pretendíamos usar em outras rotinas foram armazenados em *Lists*, *Labels*, etc. Nos outros programas, ao contrário, fizemos extenso uso das variáveis dimensionadas para serem usadas em várias rotinas diferentes, sem recorrer a *Lists*. Muito variados, também, são os exemplos de como fazer gráficos, como traçar escalas, fazer ampliações, obter dados, movimentar os gráficos, etc. Atendendo a nossos objetivos didáticos, evitamos repetir rotinas, procurando sempre usar métodos alternativos para vários tipos de procedimentos. Ao mesmo tempo, evitamos também a utilização de métodos desnecessariamente complexos, optando sempre pelas soluções mais simples que nos ocorreram.

A seguir apresentamos sumariamente as características de cada um dos três programas.

* e-mail: mgconsta@usp.br

e-mail: gvjdsilv@usp.br

FFT SpecMusEV

Este programa, inicialmente, gera dados correspondentes a várias funções periódicas, desde simples $\text{sen } x$, $\text{cos } x$, onda quadrada e onda triangular, até funções múltiplas que são o resultado da soma de até 10 funções $\text{sen } x_n$ ou $\text{cos } x_n$. Os “dados” referidos acima correspondem ao valor da função especificada para 1024 pontos, distribuídos uniformemente ao longo de uma “janela” arbitrária de 1 segundo; é traçado um gráfico desses pontos, permitindo a “visualização” da função periódica. Em seguida esses dados são submetidos ao cálculo da transformada de Fourier, e o resultado é mostrado em outro gráfico, que pode ser (lembrando que o resultado é uma coleção de números complexos) do *módulo* ou *vetor* r , somente da parte imaginária, somente da parte real, ou parte real e imaginária simultaneamente. Usando esse último gráfico, por exemplo, fica muito fácil ver que (com fase $\phi = 0$) a função $\text{sen } x$ produz resultado somente na parte imaginária, enquanto a função $\text{cos } x$ apresenta resultado somente na parte real; alterando os valores das fases na função original, pode-se ver facilmente a alteração correspondente de intensidade nas partes real e imaginária.

A Figura 1 mostra a tela inicial apresentada pelo programa, onde já se pode ver como a transformada de Fourier determinou corretamente as frequências presentes na função múltipla original, definida pela fórmula

$$f(t) = \sum_n a_n \times \text{Sen}(2\pi v_n t + \phi_n)$$

$$v_n = b_n \times (n^\circ \text{ de ciclos})$$

e pelos parâmetros visíveis na parte esquerda da tela. As amplitudes correspondentes a cada frequência são também facilmente avaliadas (correspondendo ao parâmetro “a” da tabela). Naturalmente, os parâmetros podem ser alterados à vontade para produzir uma enorme variedade de resultados.

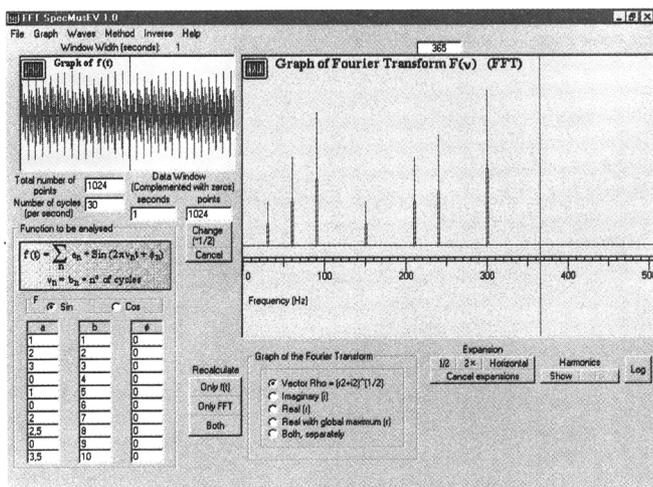


Figura 1. Tela inicial do programa FFT SpecMusEV.

A Figura 1 permite que o leitor possa ter uma idéia de outros aspectos do programa: é possível fazer expansões do gráfico, visualizar harmônicas, ver um gráfico da FFT com escala logarítmica, realizar o cálculo inverso (isto é, partindo dos dados da transformada, recalculando os dados da função original; o resultado é fornecido como gráficos e como uma tabela contendo os dados originais e os recalculados), etc.

Um aspecto bem diferente, porém, é que o programa pode ler

dados de um arquivo *.raw (que pode ser obtido a partir de um arquivo *.wav qualquer através dos programas que acompanham os kits multimedia) e calcular a correspondente transformada de Fourier. A Figura 2 mostra o resultado do cálculo realizado com o acorde inicial de “Moonlight Serenade”, de Glenn Miller: as pequenas linhas verticais mostram as harmônicas de um instrumento que está tocando “si bemol”, e o cursor (linha vertical grande) foi colocado próximo à frequência que corresponde à nota principal da melodia, mostrando que ela é um “dó” (C5). O teclado musical desenhado sob o gráfico foi construído de maneira a corresponder às frequências corretamente, permitindo fácil identificação da nota musical.

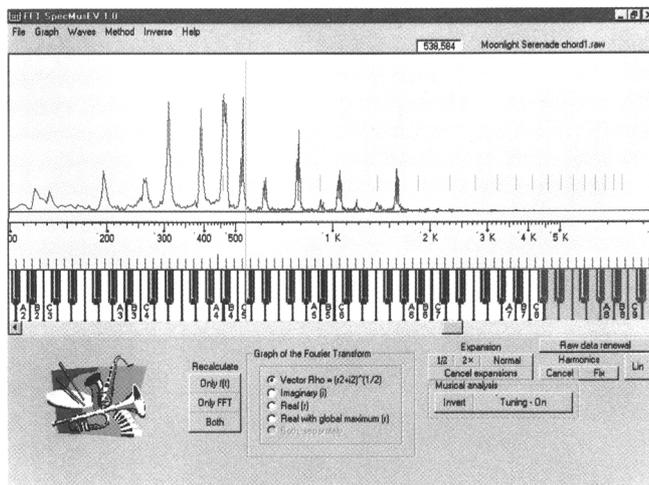


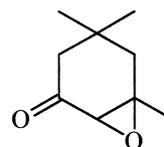
Figura 2. Transformada de Fourier de um arquivo *.raw pelo programa FFT SpecMusEV.

Devido ao método usado para armazenar dados em *Lists*, esse programa está limitado em seus cálculos a 16384 pontos. Há, naturalmente, outras limitações, mas o leitor poderá verificar que o programa é muito útil para sua finalidade didática. É possível também imprimir gráficos e gerar “bitmaps” da transformada de Fourier.

FFT SpecEV

Este programa mostra como a transformada de Fourier pode ser utilizada para processar os dados obtidos de um espectrômetro de ressonância magnética nuclear, transformando a curva “fid” obtida do espectrômetro em um espectro de RMN. Infelizmente as características das curvas “fid” e o formato dos arquivos são diferentes para diferentes espectrômetros; um programa que pudesse ler e manipular os dados de vários tipos de espectrômetros seria de complexidade maior do que nossos objetivos e disponibilidades permitem, de forma que julgamos mais apropriado escrever o programa para ler arquivos apenas do espectrômetro Bruker®.

Um arquivo “fid” lido com este programa é apresentado como gráficos das partes real e imaginária separadamente. Veja a Figura 3, que mostra o gráfico do arquivo “fid” correspondente ao espectro de ^1H RMN do óxido de isoforona:



Óxido de Isoforona

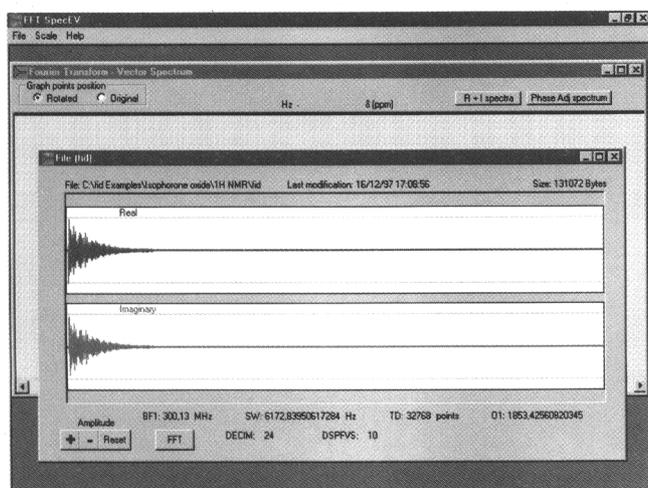


Figura 3. Curvas “fid” correspondendo ao espectro de ^1H RMN de óxido de isoforona, como apresentadas pelo programa FFT SpecEV.

Clicando em “FFT” (observar Figura 3) serão apresentados gráficos da transformada de Fourier; como no programa anterior, é possível ver gráficos de *módulo*, da parte real e da parte imaginária da transformada, ou passa-se para a etapa de *ajuste de fase*. Aqui (V. Figura 4) é mostrado inicialmente apenas o gráfico da parte real.

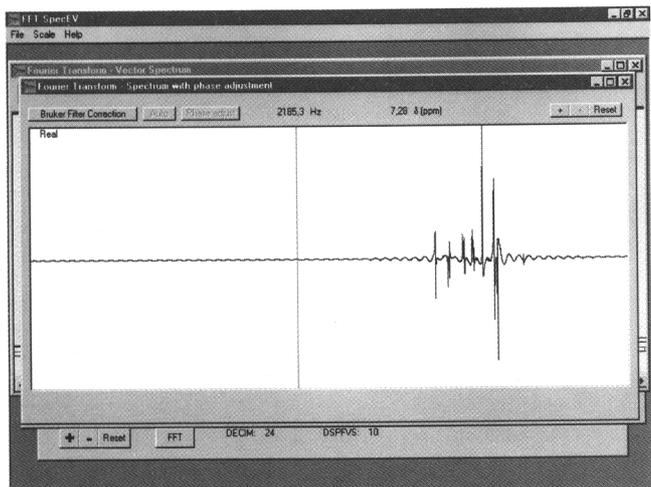


Figura 4. Espectro de ^1H RMN de óxido de isoforona antes de efetuar a correção para o filtro Bruker®, como apresentado pelo programa FFT SpecEV.

Como o leitor pode observar, esse gráfico contém uma forte oscilação, que é resultante de certo filtro utilizado pelo espectrômetro Bruker®; para eliminar essa oscilação realizamos os cálculos sugeridos por Westler⁴, que afirma tê-los desenvolvido empiricamente por não ter conseguido da Bruker a informação necessária sobre os filtros. Após esses cálculos o espectro mostra-se como na parte direita da Figura 5; na janela à esquerda da mesma Figura 5 observa-se parte do espectro já com a fase parcialmente ajustada. O ajuste de fase consiste em uma combinação da parte real com a parte imaginária; em nosso programa os cálculos são feitos com as fórmulas fornecidas pelo manual do instrumento Bruker DPX-300. Após o ajuste de fase, passa-se o espectro para outra janela para prepará-lo para impressão. Na Figura 6 observa-se esse mesmo espectro, incluindo uma pequena expansão do aglomerado que aparece no centro.

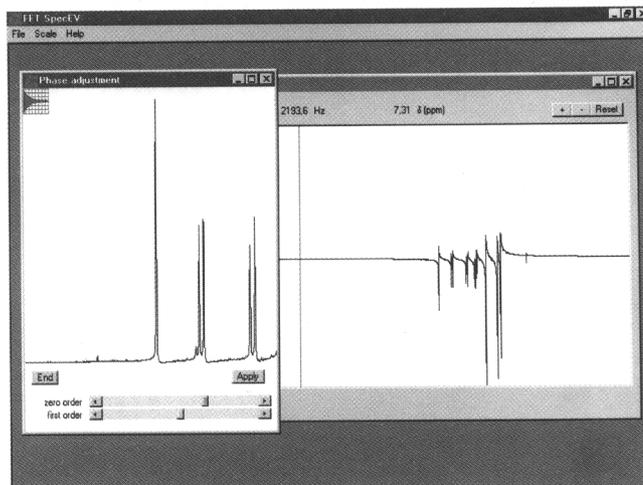


Figura 5. Espectro de ^1H RMN de óxido de isoforona durante o processo de ajuste de fase pelo programa FFT SpecEV.

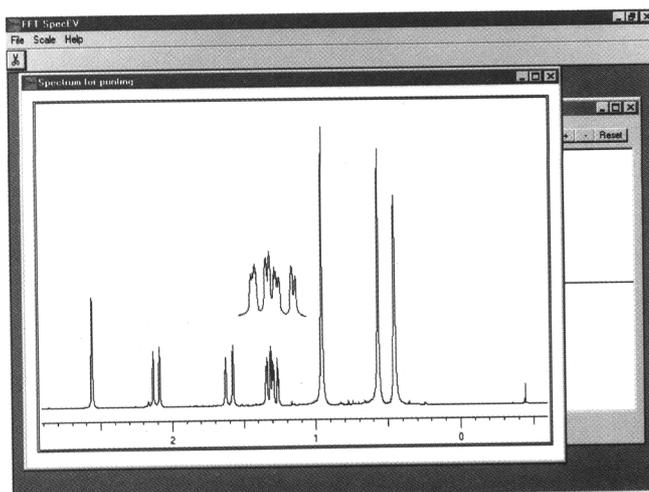


Figura 6. Espectro de ^1H RMN de óxido de isoforona já processado para impressão, pelo programa FFT SpecEV

O programa pode imprimir esse espectro, mas não foi desenvolvido com essa finalidade. Os programas que acompanham os espectrômetros são muito completos e de excelente qualidade, não há necessidade de substituição. Nosso objetivo, lembramos, é didático: lendo as rotinas, qualquer interessado pode ver e compreender como são feitos os cálculos e elaborados os gráficos e pode até, se quiser, desenvolver rotinas para atender a seus requisitos especiais. Nada disso é possível com os programas comuns, disponíveis apenas na forma de arquivos executáveis, que não podem ser lidos, interpretados nem modificados.

FFT MusEV

Com este programa é possível fazer análises, pela transformada de Fourier, de sons gravados em arquivos *.wav, os arquivos de som do Windows®. Um arquivo *.wav pode ser gravado a partir de um CD comum ou mesmo a partir de um microfone, utilizando os programas que normalmente acompanham os kits multimedia.

O arquivo *.wav é lido e apresentado na forma de um gráfico, como se pode ver na Figura 7. Clicando em “Play” pode-se ouvir o som correspondente ao gráfico.

Na Figura 7 é apresentado o gráfico correspondente à abertura do “Capricho Italiano”, de Tchaikowski, que é um solo em

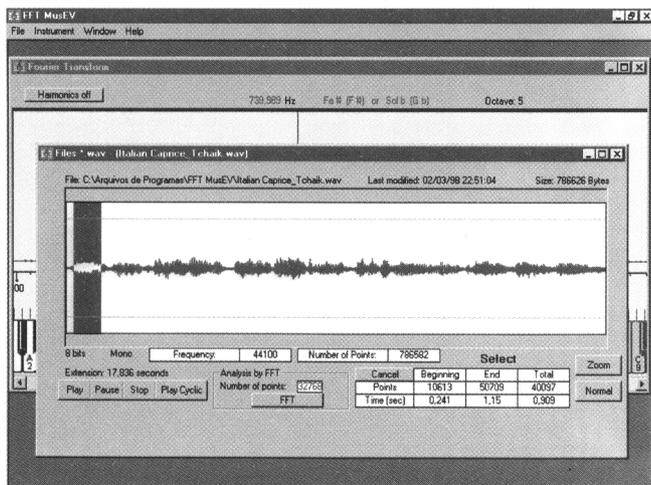


Figura 7. Gráfico de um arquivo *.wav apresentado pelo programa FFT MusEV, mostrando uma parte já selecionada e pronta para ser submetida à transformada de Fourier.

estilo militar de um instrumento de metal (provavelmente um trompete em fá ou em mi – o leitor certamente perdoará nossa ignorância musical, que não nos permite resolver essa dúvida); uma única nota (a primeira) está selecionada nesse gráfico, e a Figura 8 mostra a transformada correspondente a esse som. O leitor, possivelmente, ficará surpreso com a grande riqueza de harmônicos desses instrumentos de metal. Na Figura 8 o cursor (longa linha vertical) foi colocado próximo à frequência fundamental (correspondente ao som que se ouve), mostrando que a nota executada é um “mi” (mi4 ou E4), e as pequenas linhas verticais mostram as harmônicas dessa frequência.

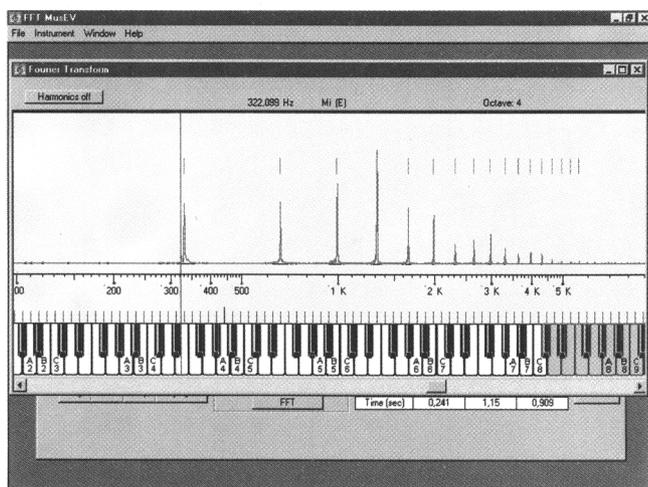


Figura 8. Gráfico da transformada de Fourier da parte selecionada na Figura 7, mostrando as frequências harmônicas, pelo programa FFT MusEV

Na Figura 9 é mostrado o gráfico da transformada de Fourier correspondente à terceira nota do “Chorinho Didático nº 6” de Altamiro Carrilho, de gravação executada pelo próprio compositor; trata-se de uma única nota musical (C6, segundo a partitura) executada apenas pela flauta. É bem visível o contraste entre as Figuras 8 e 9; o som da flauta é muito mais “puro”, apresentando apenas pequena quantidade de harmônicos. Na Figura 9 o cursor foi colocado exatamente sobre a frequência de C6, mostrando que nessa gravação foi utilizado um padrão de afinação diferente do usado no programa (A4 em 440 Hz);

de fato, a nota executada pela flauta encontra-se aproximadamente a meio caminho entre C6 e C#6.

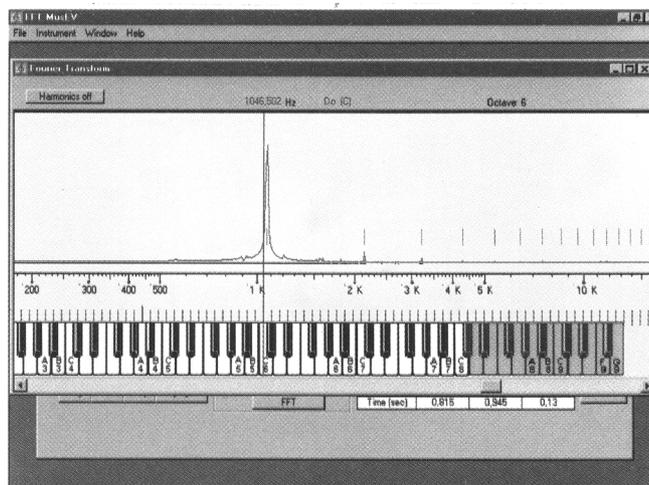


Figura 9. Gráfico similar ao da Figura 8, correspondendo agora a um som de flauta, pelo programa FFT MusEV.

O leitor pode facilmente perceber a versatilidade do programa para análises de sons musicais. Deve-se notar que o teclado apresentado aqui é ativo, podendo emitir sons de vários instrumentos selecionáveis pelo menu correspondente.

CONCLUSÃO

Os programas apresentados dão um exemplo bem completo e variado de como utilizar a transformada de Fourier para diferentes finalidades. Como estão escritos em Basic, o leitor tem acesso a todas as rotinas livremente, podendo compreender, adaptar, aperfeiçoar, modificar ou mesmo copiar as rotinas para usá-las em outros programas. Uns poucos comentários escritos dentro das próprias rotinas podem auxiliar a compreensão. Mesmo quem não se interesse pelo assunto principal (a transformada de Fourier) pode aproveitar os programas para aprender ou enriquecer seus conhecimentos de Basic para fazer gráficos, ler arquivos, etc. Um grande número de pesquisadores acha que programação de computadores é assunto demasiado complexo, e fica à mercê dos programadores profissionais que são extraordinariamente competentes mas nem sempre compreendem (ou conhecem, ou valorizam) os problemas específicos de todos os pesquisadores. Esperamos com este trabalho estar também contribuindo para encorajar pesquisadores a desenvolverem seus próprios programas, mesmo que pequenos, para resolverem problemas específicos com maior eficiência e rapidez.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à FAPESP e ao CNPq pelo apoio financeiro, e ao Prof. Dr. Léo Degrève por valiosas sugestões.

REFERÊNCIAS E NOTAS

1. Como observado na referência 2, pg. 391, o algoritmo para FFT tornou-se conhecido nos anos 60 através do trabalho de J. W. Cooley, J. W. Tukey e R. L. Garwin, mas outros autores já haviam desenvolvido o sistema muitos anos antes, como é o caso de Danielson e Lanczos (1942).
2. Press, W. H.; Flannery, B. P.; Teukolsky, S. A.; Vetterling, W. T.; *Numerical Recipes*, Cambridge University Press, Cambridge, 1986.

3. O Visual Basic é fornecido ao usuário em várias versões mais ou menos completas. Utilizamos a versão Visual Basic 5.0 "Professional"; se o leitor utilizar uma versão menos completa poderá sentir falta de alguns recursos.
4. Westler, W. M.; Abildgaard, F.; *DMX Digital Filters and Non-Bruker Offline Processing III*, July 16, 1996. Texto proveniente da *University of Wisconsin*, localizado através da Internet, pelo "site" <http://www.nmrfam.wisc.edu/Personnel/milo.html>