

Informatique - Programmation

Projet 1 – Traitement d'un spectre expérimental

L'objectif du projet est de réaliser plusieurs manipulations et analyses sur les données d'un spectre d'émission expérimental présenté sur la figure 1 et dont les valeurs sont stockées dans le fichier **P1-spectre.txt**. Ce spectre correspond à une partie de la décomposition en longueur d'onde du rayonnement émis par un plasma d'hydrogène/argon dans un réacteur micro-ondes utilisé pour le dépôt de diamant.

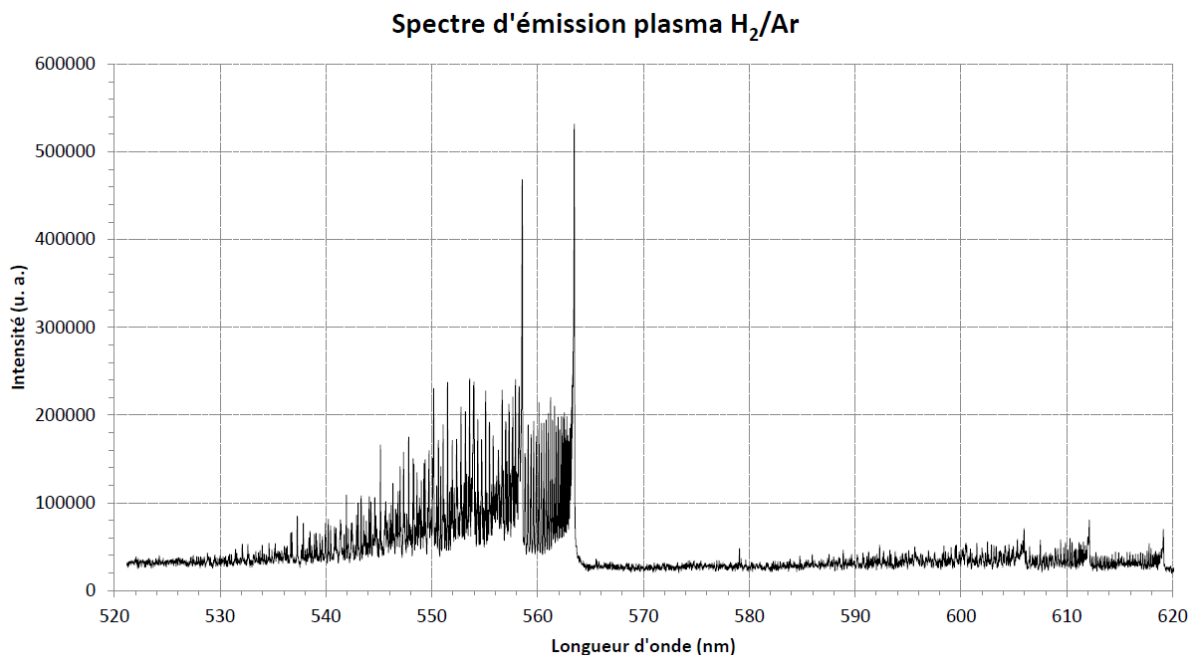


Illustration 1: Spectre expérimental utilisé pour le projet. Graphe réalisé sur Excel à partir du fichier de points P1-spectre.txt.

Le projet est décomposé en trois étapes obligatoires et une étape facultative (bonus) :

1. Lecture du fichier de points.
2. Filtrage du spectre par une méthode de moyenne mobile.
3. Détection des raies.
4. Bonus (facultatif) : tri par valeurs décroissantes des intensités des raies.

Chaque étape doit être validée par un des enseignants (une clé par étape).

1. Lecture du fichier de points

Le fichier P1-spectre.txt contient les données du spectre étudié lors du projet. La première valeur en première ligne correspond au nombre de points du spectre. Elle est suivie des valeurs de longueur d'onde en nm (colonne de gauche) et des intensités relatives en unités arbitraires ("u.a.", colonne de droite).

- Après avoir proposé un algorithme visuel, réaliser un programme en C permettant de lire le fichier de données expérimentales. Le nombre de points du spectre sera stocké

dans la variable **npt** ; les valeurs de longueur d'onde dans un tableau de type double **lambda** et les valeurs des intensités relatives dans un tableau de type double **intens**.

- A partir de votre programme, écrire dans un nouveau fichier **P1-spectre-lu.txt** les valeurs de longueur d'onde (colonne de gauche) et d'intensité relative (colonne de droite). Vérifier que les valeurs entre les fichiers P1-spectre.txt et P1-spectre-lu.txt sont bien identiques.
- Importer les valeurs de votre fichier **P1-spectre-lu.txt** dans Excel (ou tout autre logiciel tableur, par exemple LibreOffice) puis reproduire la figure 1 :
 - Sélectionner l'onglet données → A partir du texte → choisir le bon fichier et importer → choisir 'délimité' → séparateur 'espace' → format des données en colonne : cliquer sur 'Avancé' → séparateur de décimale '.' et non virgule → Terminer en choisissant la cellule où débutera le tableau.
 - Créer un graphe tel que celui présenté en figure 1 à partir des données importées sous excel.
Astuce 1 : choisir le type 'nuage de points' en affichant uniquement les traits reliant les points
Astuce 2 : pour sélectionner une longue série de données en colonne, se placer sur la première cellule, puis Ctrl + Maj + flèche bas
 - Une fois le graphe créé et mis en forme, vous pouvez le sélectionner et l'enregistrer au format pdf pour l'envoyer ou l'utiliser. Par exemple, pour réaliser la figure 1, le graphe a été enregistré au format pdf, puis un outil de capture d'écran a permis de l'enregistrer en image.

2. Filtrage des valeurs par moyenne mobile

On constate sur la figure 1 qu'une partie du spectre est bruitée (présence de signaux parasites) notamment lorsque les valeurs d'intensité sont faibles. Plusieurs méthodes permettent de supprimer ou lisser ce bruit, on parle alors de filtre. Nous proposons ici d'étudier un filtre numérique par moyenne mobile (ou moyenne glissante).

Un filtre par moyenne mobile remplace une valeur donnée $v(i)$ par la moyenne des $2N$ valeurs aux alentours du point i . La valeur filtrée $\bar{v}(i)$ dépend des valeurs $v(i-N), \dots, v(i-1), v(i), v(i+1), \dots, v(i+N)$ où chaque valeur est pondérée d'un facteur p :

$$\bar{v}(i) = \sum_{j=-N}^N p(j) v(i+j)$$

La somme des facteurs de pondération doit être égale à 1. Si le même poids est donné à chaque valeur alors $p(j)$ est identique pour tous les points et il vaut $1/(2N+1)$ car il y a $(2N+1)$ points utilisés pour la moyenne. Plus l'intervalle est grand, plus le filtre est efficace.

- En vous aidant de l'algorithme proposé sur la figure 2, réaliser à la suite de votre programme un filtre par moyenne mobile sur les valeurs d'intensité relative. Le nombre N sera demandé à l'utilisateur et le même poids ($1/(2N+1)$) sera appliqué aux valeurs pour le calcul de la moyenne. Les valeurs filtrées seront stockées dans le tableau **intensf**.
- A la suite de votre programme, écrire dans un nouveau fichier **P1-spectre-filtre.txt** les valeurs de longueur d'onde (1^{ère} colonne) et d'intensité relative non filtrée (2^{ème} colonne) et filtrée (3^{ème} colonne).
- Exécuter votre programme avec $N = 10$. Tracer les valeurs filtrées et non filtrées sur un même graphe Excel.

Questions :

- Quel est l'effet du filtre ? Quels en sont les avantages et inconvénients ?
- Quel est l'influence de N ?
- Que se passe-t-il aux extrémités du spectre filtré ? Quelle est l'origine du problème et quelles en seraient les solutions ?

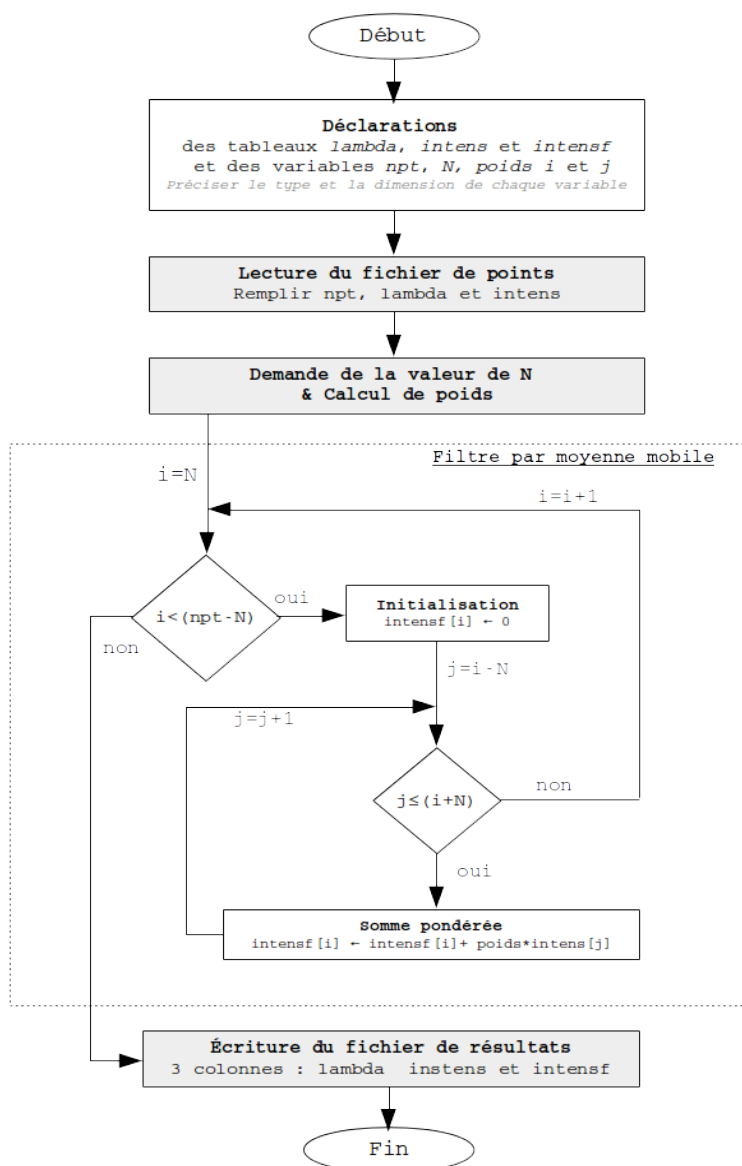


Illustration 2: Algorithme pour le filtre des données expérimentales par moyenne mobile

3. Détection des raies

Une raie correspond à un pic du spectre et permet de remonter à la nature ou l'état électronique d'une espèce chimique présente dans le milieu étudié. Il est pour cela nécessaire de connaître la longueur d'onde associée au maximum des raies.

- Proposer un algorithme et un programme permettant de détecter l'intensité maximale des raies et les longueurs d'onde associées pour un seuil d'intensité défini par l'utilisateur. Par exemple, dans notre cas, si le seuil fixé est $4 \cdot 10^5$ u.a., votre programme devra donner deux valeurs de longueur d'onde différentes et les intensités relatives associées.

4. Bonus (facultatif) : tri des valeurs des pics

Afin d'exploiter au mieux les données issues de la détections des raies, il est utile de trier les valeurs en fonction de leur intensité. Rechercher sur internet l'algorithme de tri par insertion. Coder ensuite cet algorithme à la suite de votre programme afin de trier vos valeurs par ordre décroissant d'intensité. Exporter ensuite les valeurs triées (intensités relatives et longueur d'onde associées) dans un fichier texte.