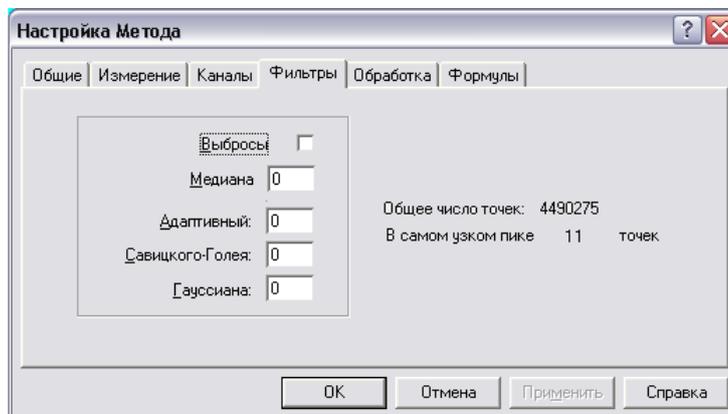


## Подавление шумов путем фильтрации

Для подавления шумов хроматографического сигнала в ПО *МультиХром* предусмотрен набор настраиваемых фильтров. Выбор фильтров и задание их параметров производится на странице **Фильтры** окна **Настройка метода**.



В программе предусмотрено несколько алгоритмов фильтрации шумов:

- фильтрация одиночных выбросов,*
- фильтрация по медиане,*
- фильтрация с помощью адаптивного фильтра,*
- фильтрация методом Савицкого-Голея,*
- фильтрация по Гауссу.*

Фильтр *одиночных выбросов* (флажок **Выбросы**) изменяет первую и последнюю точку хроматограммы, а также точки, идентифицированные как одиночные выбросы. Одиночный выброс заменяется половиной суммы значений для двух соседних точек. Фильтр одиночных выбросов не искажает форму хроматографических пиков. Его целесообразно использовать практически всегда, даже при отсутствии видимых выпадающих точек, так как он корректирует первую и последнюю точки, нередко имеющие экстремальные значения, которые при использовании опции **Показать все** задают масштабирование, далекое от оптимального для рабочей области хроматограммы.

При использовании фильтров **Медиана**, **Адаптивный**, **Савицкого-Голея**, **Гауссиана** для каждой точки хроматограммы производится замена измеренного значения величиной, полученной путем обработки измерений для группы ближайших точек, число которых задается величиной *щели*. Алгоритм обработки определяется типом фильтра.

Фильтр **Медиана**. При медианной фильтрации значения в пределах щели сортируются в порядке возрастания. Отклик, соответствующий середине щели, заменяется другим значением, попадающим в центр отсортированного массива. Этот метод хорошо сглаживает базовую линию, не меняет форму пика на склонах и очень эффективно устраняет отдельные выбросы (в этом случае выброс заменяется на одну из соседних точек). Однако он слегка "приглаживает" вершины пиков и ложбины между пиками и может изменять как высоту, так и площадь хроматографических пиков.

Фильтр **Адаптивный** использует оригинальный алгоритм предельного подавления шумов, разработанный в ЗАО «Амперсенд». При этом обеспечивается:

- минимальный доверительный интервал для каждой точки;
- максимальное подавление шума, без повреждения формы пика;
- правильная обработка резких изменений сигнала;
- правильные оценки ошибок измерения высоты и площади пика.



Адаптивный фильтр доступен при включении соответствующей опции в лицензию.

Фильтр **Савицкого-Голея**. Применение этого фильтра состоит в построении методом наименьших квадратов аппроксимирующего полинома для точек в пределах щели и заменой измерения для центральной точки расчетным значением с использованием этого полинома. Этот метод не изменяет форму, величину площади и высоты «нормальных» пиков, однако вносит значительные искажения при обработке участков с резкими перепадами амплитуды сигнала.

Фильтр **Гауссиана**. В случае использования этого фильтра вычисляется среднее взвешенное значение всех точек в пределах щели с весом, распределенным по функции Гаусса с центром в середине щели, результат используется как новое значение сигнала для этой точки.

Гауссов фильтр, по сравнению с медианным, дает лучшее визуальное сглаживание собственно пиков, но меньше сглаживает шумы базовой линии. Пики после сглаживания становятся ниже и шире, но их площадь при этом не меняется.

Величина щели вычисляется по формуле: **Число точек = (2\*Степень сглаживания + 1)**, где **Степень сглаживания** – число, заданное пользователем в поле рядом с названием метода фильтрации. Если степень сглаживания равна 0, фильтрация соответствующим способом не производится.

В качестве первоначального значения **Степени сглаживания** рекомендуется для всех фильтров, кроме **Медианы**, установить примерно четверть величины, указанной в поле **В самом узком пике**, а в случае, если предварительно использовалась процедура оптимального сжатия хроматограммы (см. раздел *Ошибка! Источник ссылки не найден./Ошибка! Источник ссылки не найден.*) – значение 5.

Далее следует сравнить результаты фильтрации, которые получаются при изменениях ширины щели в 1.5 - 2 раза в обе стороны. Учитывая полученный результат, можно продолжить поиск оптимального значения щели. Для **Медианы** рекомендуется установить 1 и не изменять это значение – в этом случае будет обеспечиваться эффективное сглаживание выбросов на базовой линии без заметного искажения вершин пиков и долин между ними.

Наилучший результат с наименьшими затратами времени на настройку процедуры фильтрации достигается при использовании фильтра **Адаптивный**, при этом, как правило, нет необходимости применять другие фильтры. Его целесообразно использовать, если требуется предельное снижение влияния шумов (увеличение отношения сигнал/шум), например, в соответствии с той или иной фармакопейной статьей или при очень низких концентрациях веществ. В других случаях можно обойтись без этой опции, приобретаемой дополнительно, выбирая тот или иной фильтр в зависимости от специфики задачи. Возможно одновременное использование нескольких фильтров, при этом программа производит обработку хроматограммы последовательно в том порядке, как это представлено в окне **Фильтры** – начиная с применения фильтра отдельных выбросов.

 Применение фильтров имеет обратимый характер: при восстановлении для всех фильтров параметров по умолчанию вновь будут представлены в полном объеме исходные данные хроматограммы, как это требуется согласно GLP.