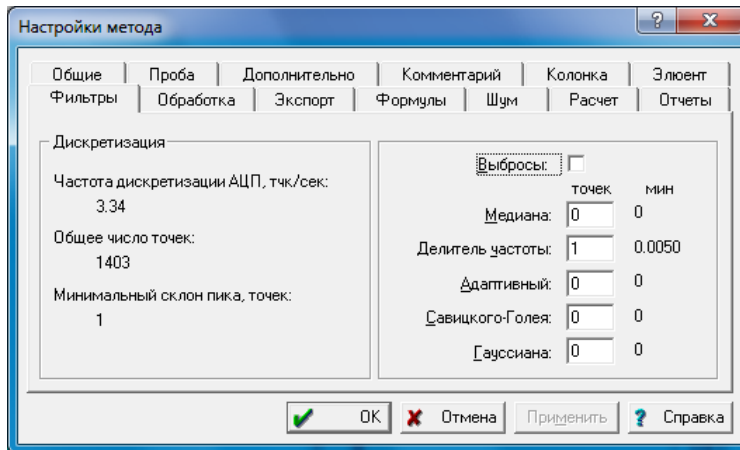


Подавление шумов путем фильтрации

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 левой области окна представлены следующие сведения:

Частота дискретизации АЦП – частота приема данных, заданная в драйвере АЦП;

Общее число точек – полное число точек во всей хроматограмме;

Минимальный склон пика – минимальное число точек от базы до вершины, обнаруженное для какого-либо из размеченных пиков.

В правой области расположены поля для ввода параметров фильтрации.

Фильтр *одиночных выбросов* (флажок **Выбросы**) изменяет первую и последнюю точку хроматограммы, а также точки, идентифицированные как одиночные выбросы. Одиночный выброс заменяется на половину суммы значений двух соседних точек. Фильтр выбросов не искажает форму хроматографических пиков.

В число фильтров включен **Делитель частоты**. Его действие состоит в замене группы точек, число которых задается в соответствующем поле, одной точкой со средним значением сигнала для этих точек. При этом эффективная величина отношения сигнал/шум возрастает примерно как квадратный корень из делителя. Использовать делитель частоты без искажения пиков можно только в том случае, если полученное при этом значение параметра **Минимальный склон пика** будет не менее 10.

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.

Величина щели для всех перечисленных фильтров задается пользователем и может быть только нечетным числом больше 1 (максимальное значение 511). При этом:

- если вводится четное число, происходит автоматическое прибавление 1;
- если вводится 1, происходит автоматическая замена на 0 (отсутствие фильтрации).

Традиционные фильтры

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 одной из соседних точек). Однако он слегка "приглаживает" вершины

пиков и ложбины между пиками и может изменять как высоту, так и площадь хроматографических пиков.

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.

Фильтр Савицкого-Голея. Применение этого фильтра состоит в построении методом наименьших квадратов аппроксимирующего полинома 3 степени для точек в пределах щели и заменой значения для центральной точки расчетной величиной 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.

Адаптивный фильтр

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.

Применение фильтров

Фильтр одиночных выбросов 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.

Выбор других фильтров в значительной степени определяется спецификой задачи и производится путем подбора типа фильтра и величины щели. 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.

Выбор ширины щели

В качестве первоначальной величины щели рекомендуется установить:

- для пиков с умеренной асимметрией – параметр **Минимальный склон пика** или значение 11, если используется оптимальный делитель частоты¹;
- для пиков с резко выраженной асимметрией (например, для капиллярного электрофореза) – ширину самого узкого пика, оцененную визуально.

Далее следует сравнить результаты фильтрации, которые получаются при изменении ширины щели в 1.5-2 раза в обе стороны. Учитывая полученный результат, можно продолжить поиск оптимального значения щели.

¹ Для фильтра **Медиана** всегда следует ориентироваться на значение параметра **Минимальный склон пика** без делителя, так как это фильтр применяется до процедуры деления частоты.