Savitzky–Golay filter

Um filtro Savitzky-Golay é um filtro digital que pode ser aplicado a um conjunto de pontos de dados digitais com a finalidade de suavizar os dados, ou seja, aumentar a precisão dos dados sem distorcer a tendência do sinal. Isto é conseguido, em um processo conhecido como convolução, ajustando subconjuntos sucessivos de pontos de dados adjacentes a um polinômio de baixo grau pelo método de mínimos quadrados lineares. Quando os pontos de dados estão igualmente espaçados, uma solução analítica para as equações de mínimos quadrados pode ser encontrada, na forma de um único conjunto de "coeficientes de convolução" que pode ser aplicado a todos os subconjuntos de dados, para fornecer estimativas do suavizado sinal, (ou derivadas do sinal suavizado) no ponto central de cada subconjunto. O método, baseado em procedimentos matemáticos estabelecidos, foi popularizado por Abraham Savitzky e Marcel J. E. Golay, que publicaram tabelas de coeficientes de convolução para vários polinômios e tamanhos de subconjuntos em 1964. Alguns erros nas tabelas foram corrigidos. O método foi estendido para o tratamento de dados bidimensionais e tridimensionais.

A ideia básica por trás do filtro Savitzky-Golay é ajustar polinômios locais aos dados ao longo de uma janela de dados móvel e, em seguida, usar esses polinômios para estimar o valor suavizado em um determinado ponto. Apresenta as propriedades de baixíssimo custo computacional do algoritmo de filtragem e invariância da fase para não deformar picos. O filtro opera em uma janela de dados de tamanho fixo que se move ao longo do conjunto de dados. A largura desta janela é um parâmetro importante que afeta o grau de suavização. Dentro de cada janela de dados, o filtro ajusta um polinômio de determinado grau aos pontos de dados. Isso é feito usando uma técnica de mínimos quadrados, que ajusta o polinômio de forma a minimizar o erro quadrático entre os dados reais e os valores estimados pelo polinômio. Uma vez que o polinômio é ajustado, ele é usado para estimar o valor suavizado em um ponto central dentro da janela de dados. Este valor suavizado substitui o valor original do ponto de dados. A janela de dados então se move para o próximo conjunto de pontos de dados, e o processo é repetido até que toda a série de dados seja suavizada.

Suponha os dados consistem de um conjunto de pontos , com valores de igualmente espaçados por . O filtro consiste em ajustar uma janela de (5, no exemplo a seguir) pontos por um polinômio de grau (3 i.e.).

Correção multiplicativa de espalhamento

A correção de espalhamento multiplicativo é um método de transformação utilizado para compensar os efeitos aditivos e/ou multiplicativos em dados espectrais. Este método remove a influência de efeitos físicos nos espectros, tais como o tamanho de partícula, a rugosidade e opacidade, os quais não trazem informações químicas sobre as amostras e introduz variações espectrais como o deslocamento da linha de base. Para isto fazer a correção, o método MSC assume que cada espectro é determinado pelas características químicas da amostra somadas às características físicas indesejadas.

Padronização normal de sinal