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.

O artigo de Savitzky e Golay é um dos artigos mais citados na revista Analytical Chemistry e é classificado por essa revista como um de seus "10 artigos seminais", dizendo "pode-se argumentar que o surgimento da análise analítica controlada por computador instrumento pode ser rastreado até este artigo".

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