

# Алгоритм вычисления площади пика

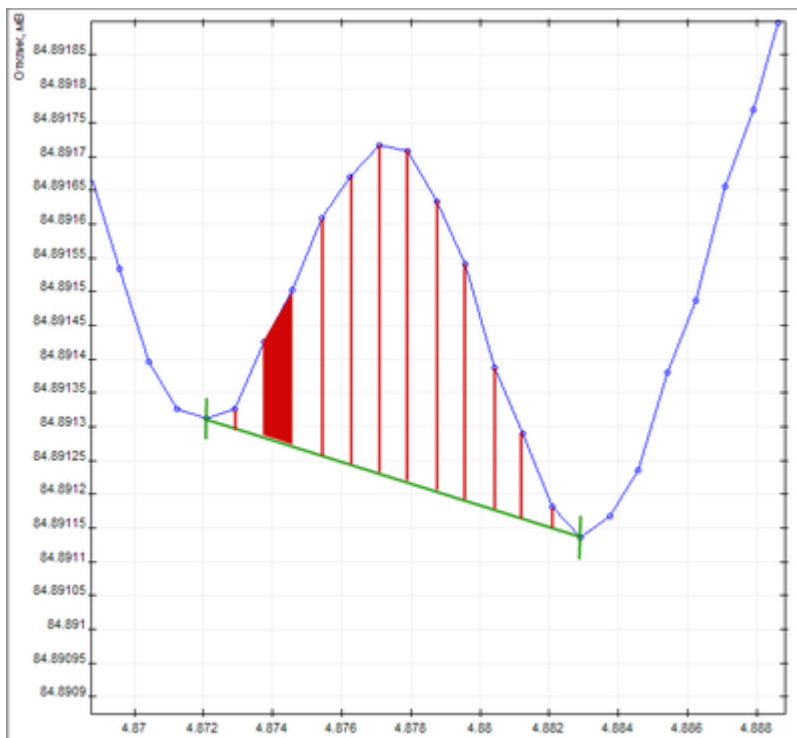
## Представление чисел

Выборки сигнала детектора приходят из прибора в виде чисел с плавающей запятой одинарной точности (float).

В этом же формате они сохраняются в файле-хроматограмме.

При расчёте площадей, а также во всех последующих операциях используются числа с плавающей запятой двойной точности (double).

## Площадь пика

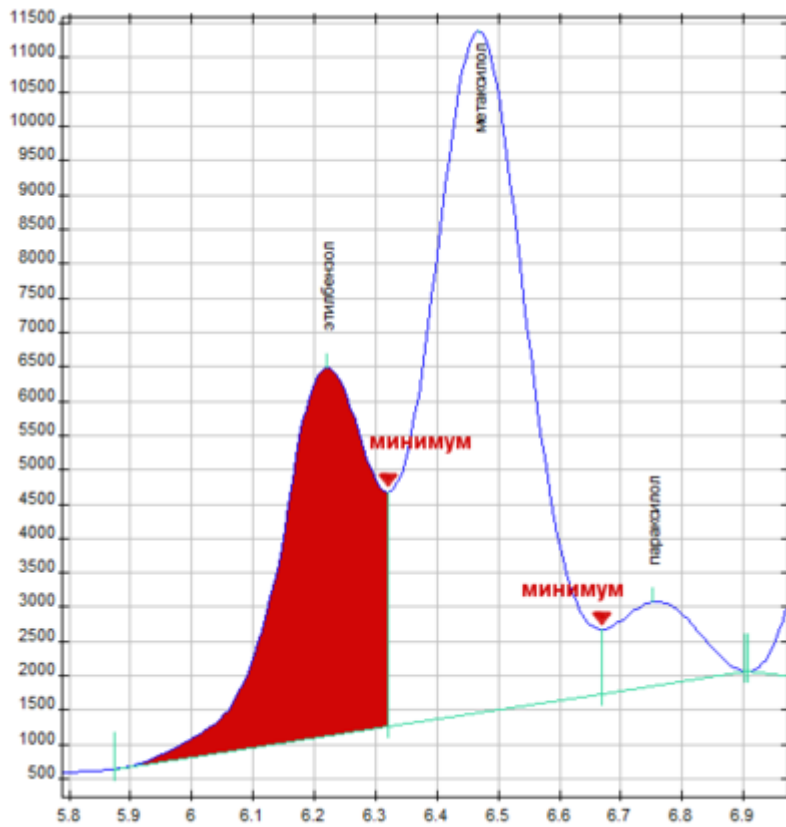


Площадь пика считается методом трапеций.

- Строится базовая линия (на рисунке отмечена зелёным).
- От каждой соседних выборок сигнала (выборки сигнала обозначены синими кружками) опускается вертикальные линии до базовой.
- Строится трапеция и вычисляется её площадь (выделена красным).
- Площадь пика вычисляется как сумма трапеций, составляющих данный пик.

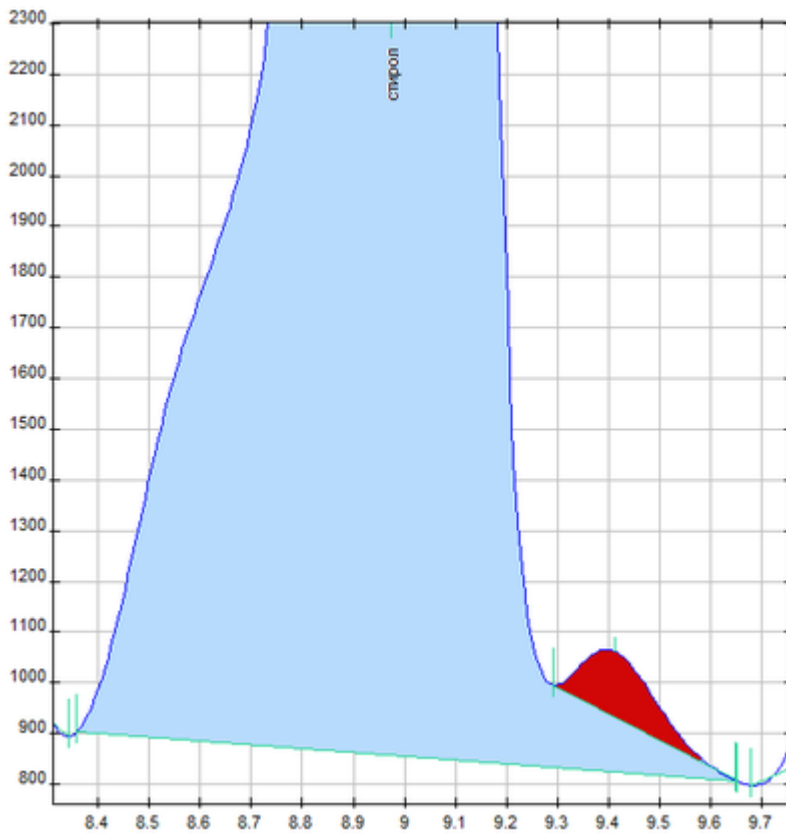
## Общая базовая линия

Пики с общей базовой линией разделяются по минимуму в долине между пиками как показано на рисунке.



### Пики - наездники

Площади основного пика и пика-наездника разделяются по базовой линии наездника.



## Погрешность определения площадей

При расчёте площади программным способом можно оценить ошибку вычисления.

Согласно формуле вычисления площади методом трапеций основная ошибка накапливается при суммировании выборок от детектора.

$$S_{\text{пика}} = \Delta t \left( \frac{1}{2} f(t_0) + \sum_{i=0}^n f(t_i) + \frac{1}{2} f(t_n) \right)$$

Тогда, ошибка, связанная с накоплением суммы выборок линейно растёт с увеличением количества выборок в пике.

Примем во внимание, что расчёт площади ведётся с помощью чисел двойной точности. Известно, что этом случае ошибка будет порядка  $2^{-52} \approx 2.20e-16$  для типа double (64 бита). Это абсолютная вычислительная ошибка для единицы. Относительная ошибка в процентах будет в 100 раз больше или  $2.2e-14$ .

Итого, относительная ошибка вычислений площади будет линейно зависеть от количества выборок (n) внутри пика по следующей формуле:

$$\varepsilon_{\text{относительная}} = 2.2 \cdot 10^{-14} * n$$

Если принять во внимание, что частота выборок у хроматографа Хромос GX-1000 20 точек в секунду, можно вычислить относительную ошибку вычисления площади пика, связанную с точностью чисел double. В формуле указана ширина пика (Ш) в минутах.

$$\varepsilon_{\text{относительная}} = 2.6 \cdot 10^{-11} * Ш$$

From:  
<http://kb.has.ru/> - База знаний Хромос

Permanent link:  
[http://kb.has.ru/soft:algoritm\\_vychislenija\\_ploschadi\\_pika](http://kb.has.ru/soft:algoritm_vychislenija_ploschadi_pika)

Last update: 2021/06/23 13:01

