

СПЕКТРОСКОПИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

УДК 535.343.4

Адаптивный фильтр Савицкого—Голея для уменьшения шума в спектрах поглощения газовых смесей

А.В. Борисов¹, А. Алтынбеков¹, А. Вотинцев¹,
В.Г. Тютерев^{1, 2}, Ю.В. Кистенев^{✉ 1, 2*}

¹Национальный исследовательский Томский государственный университет
634050, г. Томск, пр. Ленина, 36

²Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН
634055, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1

Поступила в редакцию 11.03.2025;
после доработки 20.03.2025;
принята к печати 21.03.2025

Количественный анализ спектров поглощения газовых смесей затруднен из-за влияния шума. Для стандартных фильтров осуществляются выбор параметров газовых смесей во всем анализируемом спектральном диапазоне; параметры, оптимальные для сильных линий поглощения, не являются оптимальными для слабых линий, и наоборот. Нами предложен и на примере фильтра Савицкого—Голея реализован подход к созданию адаптивного фильтра, объединяющий оконную версию стандартного фильтра с методом независимых компонент для подавления шумов в экспериментальных спектрах. Численно смоделирована фильтрация модельных спектров поглощения приземной атмосферы, соответствующих лету средних широт, в диапазоне 100–1000 ГГц с использованием адаптивного варианта фильтра. Сравнивалась эффективность адаптивного и стандартного фильтров Савицкого—Голея с использованием количественного критерия близости двух спектральных кривых. Экспериментально оценена эффективность предложенного варианта фильтра: а) для комнатного воздуха с содержанием водяного пара 10000 ppm и б) смеси SO₂ с концентрацией 200 ppm с азотом. Измерены спектры поглощения этих образцов в области 500–700 ГГц, вычислена их сумма и оценена концентрация SO₂ методом разрешения многомерных кривых. Показано, что относительная погрешность восстановления концентрации SO₂ после подавления шума с помощью адаптивного фильтра Савицкого—Голея была в 3,7 раза меньше по сравнению с использованием стандартного фильтра. Предложенный вариант адаптивного фильтра Савицкого—Голея позволяет повысить эффективность подавления шумов в экспериментальных спектральных данных.

Ключевые слова: терагерцовая абсорбционная спектроскопия, газоанализ атмосферы, фильтрация шумов, фильтр Савицкого—Голея, адаптивный спектральный фильтр; IR and terahertz molecular absorption spectroscopy, adaptive spectral filter, Savitzky–Golay filter.

Введение

Инфракрасная и терагерцовая (ТГц) абсорбционная спектроскопия широко используется при исследовании молекулярной атмосферы. Количественный анализ спектров поглощения газовых смесей затруднен из-за шума в экспериментальных данных. Существует ряд методов уменьшения уровня шума, реализуемых на стадии накопления экспериментальных данных или их предварительной обработки.

Простым и эффективным способом уменьшения уровня шума и увеличения отношения сигнал/шум является усреднение сигнала по времени. Поскольку

шумовая составляющая уменьшается пропорционально квадратному корню от времени усреднения [1], время накопления сигнала желательно выбирать максимально большим, но в реальной жизни оно ограничено долговременными дрейфами экспериментального устройства. Оптимальное время накопления может быть оценено с помощью подхода Аллана [2]. Недостатком данного подхода является необходимость проведения последовательности измерений с различным временем накопления.

В методе спектроскопии с периодической модуляцией несущей частоты оптического излучения уменьшение шума достигается путем регистрации сигнала на выходе газовой камеры на частоте второй гармоники, где влияние шума меньше [3]. Недостатком метода является более сложная, по сравнению со спектроскопией с амплитудной модуляцией интерпретация экспериментальных результатов из-за регистрации спектральной функции, которая лишь косвенно связана с реальной формой линии

* Алексей Владимирович Борисов (borisov@phys.tsu.ru); Алмат Алтынбеков (A-Altynbekov@mail.tsu.ru); Алексей Вотинцев (valeksei1810@mail.tsu.ru); Владимир Григорьевич Тютерев (vladimir.ty@gmail.com, vladimir.tyuterev@univ-reims.fr); Юрий Владимирович Кистенев (yuk@iao.ru).

поглощения. Также используются более сложные методы измерения сигналов, такие как балансное детектирование, двухлучевое детектирование [4].

Для снижения уровня шума на стадии обработки экспериментальных данных широко применяются аппаратные и цифровые методы фильтрации [5–10]. С помощью аппаратной фильтрации можно обрабатывать экспериментальный сигнал в режиме реального времени, но есть ограничение по количеству настраиваемых параметров [8, 11]. Компьютерная цифровая фильтрация осуществляется после записи экспериментальных данных в устройство их накопления и хранения, однако позволяет широко варьировать как алгоритмы фильтрации, так и их параметры. Это является причиной популярности цифровых фильтров. Цифровые фильтры, такие как фильтры скользящего среднего [12, 13], Гаусса [14], Савицкого–Голея [15–18], часто используются при анализе данных абсорбционной спектроскопии. Их недостаток состоит в том, что параметры выбираются для всего анализируемого спектрального диапазона. Это приводит к тому, что параметры фильтра, оптимальные для сильных линий поглощения, не являются оптимальными для слабых линий и наоборот [15].

Адаптивные фильтры [11, 15, 20, 21] более эффективны, поскольку они учитывают локальные особенности обрабатываемых сигналов. Например, адаптивный вариант фильтра Савицкого–Голея, предложенный в работе [21], регулирует локальное спектральное разрешение путем нахождения локальных экстремумов в обрабатываемом сигнале. Это означает, что выбросы в наборе данных могут восприниматься таким фильтром как полезный сигнал. Фильтр Калмана – популярный вариант адаптивного фильтра [19], но он требует знания исходного (незашумленного) спектрального сигнала [22].

Цель настоящей работы – представить подход к созданию адаптивных фильтров с использованием комбинации оконной версии стандартного фильтра и метода независимых компонент (МНК). Особенностью предложенного варианта адаптивного фильтра является то, что поиск его оптимальных параметров не требует знания исходного спектрального сигнала. Данный подход был реализован на основе фильтра Савицкого–Голея.

Материалы и методы

Стандартный фильтр Савицкого–Голея имеет два параметра: порядок аппроксимирующего многочлена и размер скользящего окна w . Для удобства зафиксируем один из параметров: пусть порядок многочлена равен единице. Идея предлагаемого алгоритма адаптивной фильтрации (см. рис. 1) заключается в следующем.

1. Экспериментальный спектр поглощения $S^E(v)$, измеренный в некотором интервале перестройки спектрометра, обрабатывается фильтром Савицкого–Голея с произвольно выбранным значением w . В результате вычисляется отфильтрованный спектр $S^{SG}(v, w)$.

2. Выберем произвольный спектральный интервал $v_0 \pm \Delta v$ в пределах диапазона перестройки спектрометра и обозначим части спектров $S^E(v)$ и $S^{SG}(v, w)$, описанных выше, в этом интервале как $S^E(v, v_0, \Delta v)$ и $S^{SG}(v, v_0, \Delta v, w)$ соответственно (здесь $w, v_0, \Delta v$ – параметры оптимизации).

3. Представим спектры $S^E(v, v_0, \Delta v)$ и $S^{SG}(v, v_0, \Delta v, w)$ в виде матрицы

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} S^{SG}(v, v_0, \Delta v, w) \\ S^E(v, v_0, \Delta v) \end{pmatrix} \quad (1)$$

и применим МНК к полученной матрице. Результатом будет новая матрица

$$\tilde{\mathbf{M}} = \text{ICA}(\mathbf{M}) = \begin{pmatrix} S^{\text{ref}}(v, v_0, \Delta v, w) \\ S^R(v, v_0, \Delta v, w) \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Особенностью МНК является способность разделять два сигнала, обладающих существенно разными статистическими свойствами, когда могут быть проведены два измерения суперпозиции этих сигналов с разными весами, изменяющимися независимо между измерениями [1]. МНК может быть применен к формуле (1), поскольку $S^E(v, v_0, \Delta v)$ состоит из регулярной функции (фактического спектра поглощения $S(v)$) и случайного шума; отфильтрованный спектр $S^{SG}(v, v_0, \Delta v, w)$ также представляет собой комбинацию тех же спектров, но в другом соотношении. Если использованный спектр идеальный, то спектр $S^{SG}(v, v_0, \Delta v, w)$ не будет содержать шумовую составляющую и должен совпадать с $S(v)$. Тогда спектр $S^{\text{ref}}(v, v_0, \Delta v, w)$ также будет совпадать с $S(v)$, а спектр $S^R(v, v_0, \Delta v, w)$ – содержать только шумовую составляющую.

4. Оценка соответствия разложения (1) идеальному варианту при использовании МНК может быть проведена на основе подходящего количественного критерия близости между спектральными кривыми $S^{SG}(v, v_0, \Delta v, w)$ и $S^{\text{ref}}(v, v_0, \Delta v, w)$. Вариант такого критерия [24, 25]:

$$r(S^{SG}(v, v_0, \Delta v, w), S^{\text{ref}}(v, v_0, \Delta v, w)) = \frac{\sum_v |S^{\text{ref}}(v, v_0, \Delta v, w) - S^{SG}(v, v_0, \Delta v, w)|}{\frac{1}{2} \sum_v |S^{\text{ref}}(v, v_0, \Delta v, w) + S^{SG}(v, v_0, \Delta v, w)|}, \quad (3)$$

где суммирование производится в диапазоне частот $v_0 \pm \Delta v$ с заданным шагом вычислительной сетки dv .

5. При двумерной минимизации функционала $r(S^{SG}(v, v_0, \Delta v, w), S^{\text{ref}}(v, v_0, \Delta v, w))$ по параметрам оптимизации Δv и w будет получен наилучший вариант фильтра Савицкого–Голея $S^{SG}(v, v_0, \Delta v, w)$ для экспериментального сигнала $S^E(v, v_0, \Delta v)$. Выбирая $v = v_0$ в спектре $S^{SG}(v, v_0, \Delta v, w)$, можно получить оптимальное значение $S^{aSG}(v)$ на частоте v_0 , наиболее близкое к значению $S(v_0)$. Параметр w не может быть меньше dv .

6. Выполняя этапы 1–5 во всем диапазоне частот спектрометра, можно получить спектр $S^{aSG}(v)$, наиболее близкий к $S(v_0)$.

Схема работы предложенного алгоритма на дискретной сетке показана на рис. 2. Основные этапы:

1) вычисляются значения $S^{aSG}(v)$ для граничных частот $v_{\min}$, $v_{\max}$;

2) внутри вложенных циклов по изменяемым на заданной сетке параметрам v_0 , Δv , w вычисляется функция $S^{SG}(v, v_0, \Delta v, w)$, а функция $S^E(v, v_0, \Delta v)$ извлекается из $S^E(v)$;

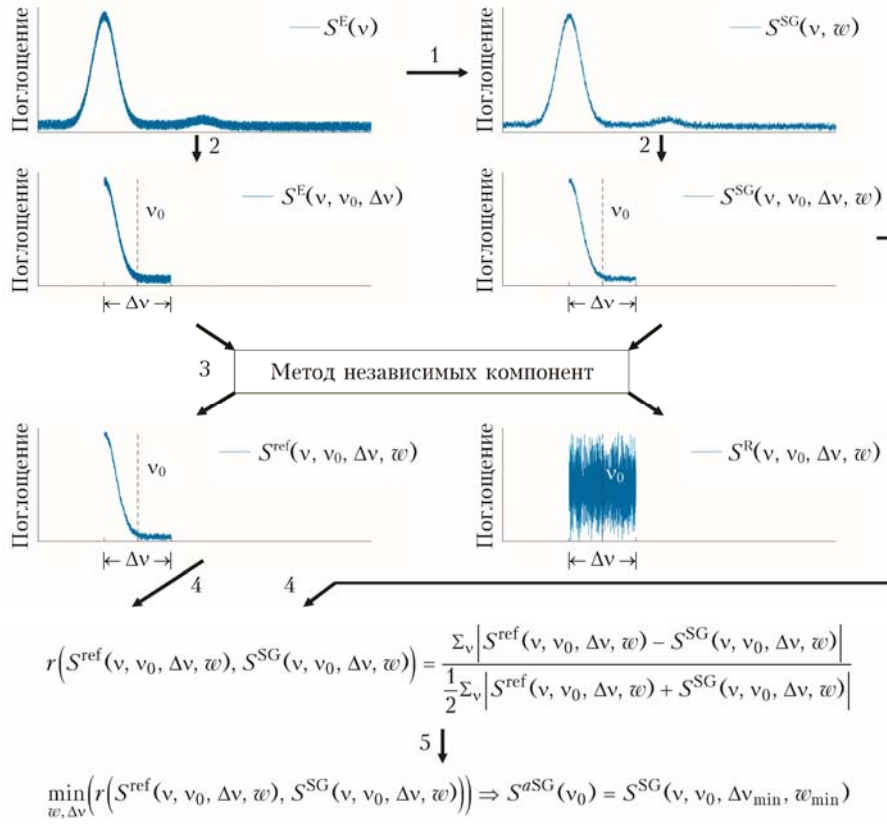


Рис. 1. Схема предлагаемого адаптивного алгоритма фильтрации шума. Здесь и далее цифрами 1–5 обозначены этапы

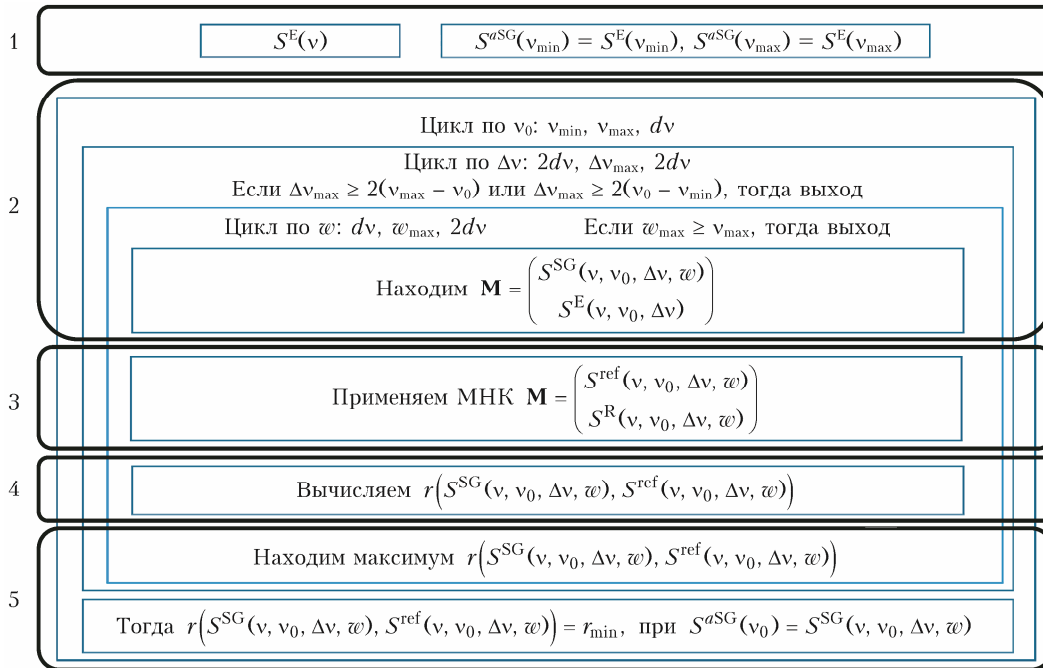


Рис. 2. Схема работы предложенного алгоритма на дискретной сетке

3) МНК применяется к функциям $S^{SG}(v, v_0, \Delta v, w)$ и $S^E(v, v_0, \Delta v)$. В результате получаем $S^{ref}(v, v_0, \Delta v, w)$ и $S^R(v, v_0, \Delta v, w)$;

4) вычисляется функционал $r(S^{SG}(v, v_0, \Delta v, w), S^{ref}(v, v_0, \Delta v, w))$;

5) определяется минимум $r(S^{SG}(v, v_0, \Delta v, w), S^{ref}(v, v_0, \Delta v, w))$ и устанавливается значение $S^{aSG}(v) = S^{SG}(v, v_0, \Delta v, w)$;

6) все циклы закрываются.

Фактически функционал $r(S^{SG}(v, v_0, \Delta v, w), S^{ref}(v, v_0, \Delta v, w))$ может быть интерпретирован как относительная погрешность экспериментального измерения формы спектральной кривой. Это означает, что данный параметр является количественным критерием эффективности применяемого фильтра.

Результаты и обсуждение

Численная проверка эффективности предложенного алгоритма была проведена для модельного спектра поглощения атмосферы $S(v)$ «лето средних широт» [26, 27] при нормальных условиях ($T = 296$ К, $P = 1$ атм) с использованием параметров базы данных HITRAN2020 [27]. Эти спектры были рассчитаны в спектральном диапазоне от $v_{min} = 100$ ГГц до $v_{max} = 1000$ ГГц с шагом вычислительной сетки $dv = 1$ ГГц. «Экспериментальные» спектры $S^E(v)$ моделировались в соответствии с формулой

$$S^E(v) = S(v) + C_{nl} R(v) \max(S(v)), \quad (4)$$

где $S(v)$ — исходный модельный спектр, представленный на рис. 1; C_{nl} — параметр, характеризующий амплитуду шума по отношению к максималь-

ному значению $S(v)$; $R(v)$ — случайная функция, изменяющаяся в диапазоне $[-0,5; 0,5]$. При отрицательных значениях $S(v) + C_{nl} R(v)$ значение $S^E(v)$ принималось равным нулю. Изменяя амплитуду шума C_{nl} от 0 до 0,1 с шагом 0,001, мы рассчитали набор данных из 10000 спектров $\{S^E(v)\}$. Примеры полученных спектров $S(v)$, $S^E(v)$, $S^{SG}(v)$, $S^{aSG}(v)$ показаны на рис. 3.

Следует отметить, что при таком высоком уровне шума стандартный вариант фильтра Савицкого—Голея восстанавливает только сильные пики поглощения. Адаптивный фильтр восстанавливает также умеренные пики поглощения. Для наглядной демонстрации преимущества предложенного фильтра перед стандартным вариантом для всего набора модельных данных $\{S^E(v)\}$ были рассчитаны параметры (рис. 4)

$$r(S, S^E), r(S, S^{SG}), r(S, S^{aSG}). \quad (5)$$

Как показало математическое моделирование, увеличение порядка аппроксимирующего многочлена не приводит к улучшению шумоподавления, когда w мал (как в нашем случае). Примеры оценки $r(S^{SG}(v, v_0, \Delta v, w), S^{ref}(v, v_0, \Delta v, w))$ при использовании 1-го, 3-го и 5-го порядков аппроксимирующих многочленов приведены на рис. 5.

Влияние порядка полинома на эффективность фильтрации при разном уровне шума демонстрирует рис. 6, а. Расчеты были проведены для спектров, показанных на рис. 3. Очевидно, что изменение порядка полинома слабо влияет на эффективность фильтрации. Сравнительные оценки улучшения отношения сигнал/шум при применении адаптивного и стандартного вариантов фильтра Савицкого—Голея (порядок многочлена равен единице и $w \geq dv$)

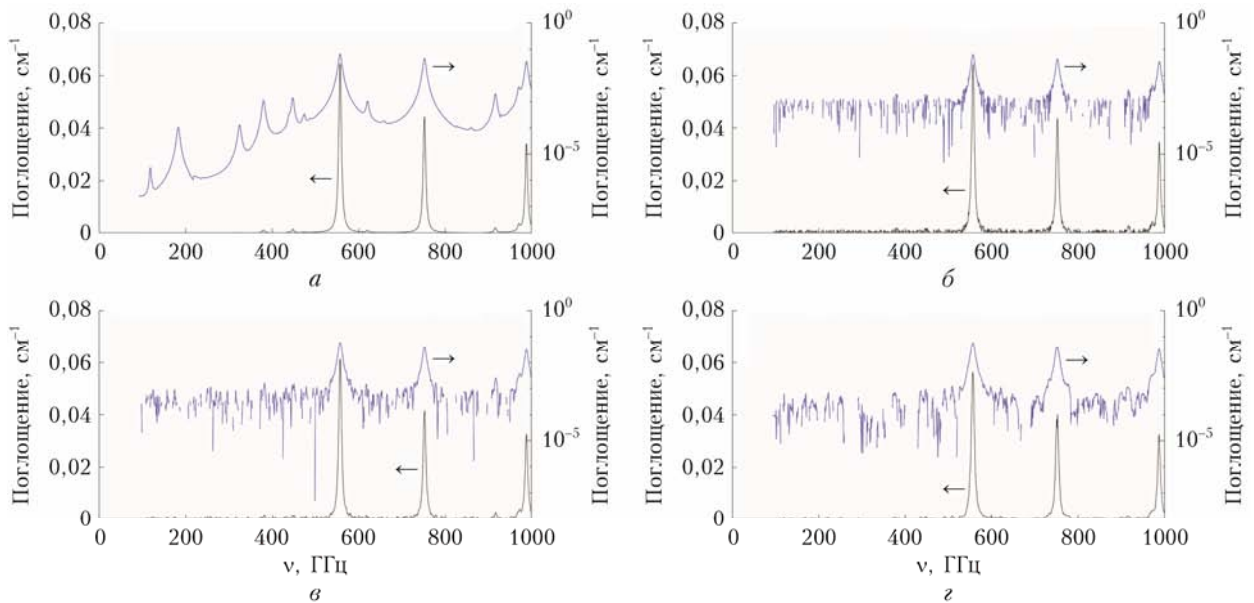


Рис. 3. Примеры спектров в линейном и логарифмическом масштабах для $C_{nl} = 0,04$: а — исходный $S(v)$; б — «экспериментальный» $S^E(v)$; в — после фильтрации $S^{SG}(v)$ с параметрами: степень полинома равна единице, $w = 15$ ГГц; г — после применения адаптивного фильтра $S^{aSG}(v)$ с $w \geq dv$ (см. цветные рисунки на сайте <http://iao.ru/ru/content/vol.38-2025/iss.5>)

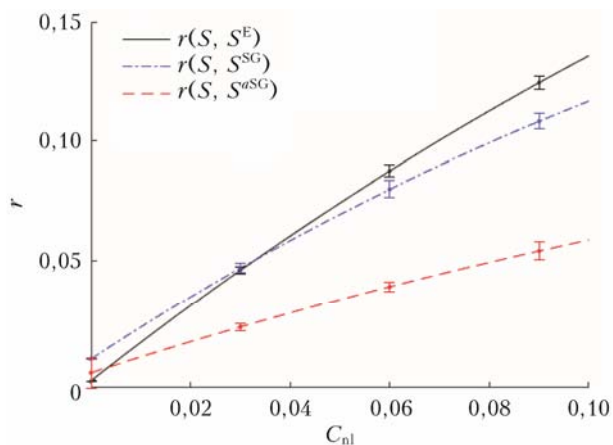


Рис. 4. Значения функционалов $r(S, S^E)$, $r(S, S^{SG})$, $r(S, S^{aSG})$, рассчитанные для всего набора данных $\{S^E(v)\}$, представленные в виде средних значений и стандартных отклонений

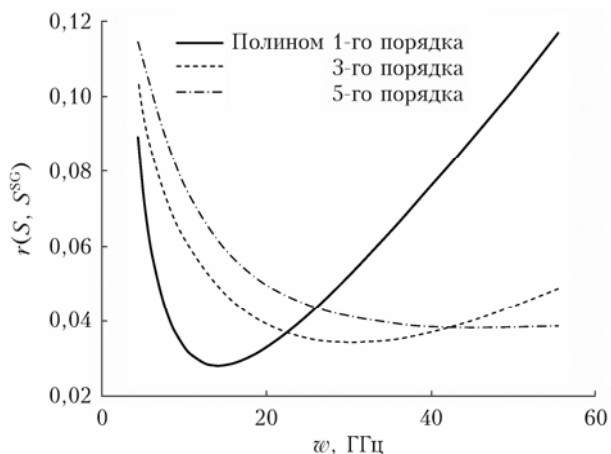


Рис. 5. Зависимость $r(S^{SG}(v, v_0, \Delta v, w)$, $S^{ref}(v, v_0, \Delta v, w)$ от размера окна

представлены на рис. 6, б, где спектральные данные были получены с помощью уравнения (4) и преобразованы в значения $I(v, L)/I_0$ с использованием закона Бугера ($I_0, I(v, L)$ — интенсивности электромагнитных волн на входе и выходе измерительной газовой ячейки спектрометра длиной L). Оценки на рис. 4–6 демонстрируют превосходство адаптивного варианта фильтра Савицкого–Голея над стандартным вариантом.

Экспериментальная проверка предложенного варианта шумоподавления была проведена с использованием ТГц-спектрометра, который включал синтезатор частот AnaPico RFS40 (Швейцария) (диапазон выходных частот 100 кГц – 40 ГГц, разрешение 10^{-3} ГГц), объединенный с умножителем частоты Seuear 82401U (диапазон выходных частот 500–750 ГГц) в качестве источник ТГц-волн и диагональной рупорной антенной (WR1.5, угол расхождения ± 8 , коэффициент усиления ≥ 25 дБ, выходная мощность ~ 3 мВт), диодный детектор Шоттки с нулевым смещением (ZBD) (Virginia Diodes Inc., США) с диагональной рупорной антенной (WR1.5,

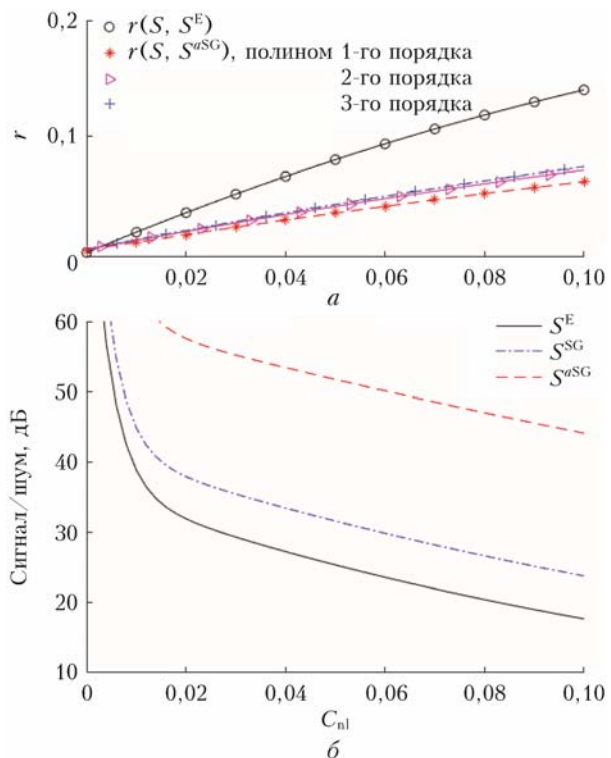


Рис. 6. Параметры $r(S, S^E)$, $r(S, S^{aSG})$, рассчитанные для полного набора данных $\{S^E(v)\}$, представленные в виде средних значений и стандартных отклонений (а); усредненные по спектральному интервалу $[v_{min}; v_{max}]$ оценки сигнал/шум, рассчитанные с учетом средних значений стандартных отклонений для $\{S^E(v)\}$ при $L = 100$ см (б)

коэффициент усиления ≈ 25 дБ) в сочетании с малошумящим синхронным усилителем SR510 (Stanford Research System, США) с типичным уровнем шума ≈ 7 нВ/Гц $^{1/2}$. Этот детектор обладает чувствительностью 1000 В/Вт при эквивалентной мощности шума ≈ 20 пВт/Гц $^{1/2}$. Выходной сигнал встроенного усилителя регистрировался двухканальным 12-битным цифровым осциллографом NI PXI-5124. Измерительная газовая ячейка имела длину 1 м, окна ячейки толщиной 5 мм были изготовлены из тефлона.

Спектры: а) газовой смеси SO_2 с концентрацией 200 ppm с азотом, б) воздуха лабораторного помещения, измеренные при нормальных условиях, представлены на рис. 7, а, б. Наибольший пик поглощения в спектре воздуха лабораторного помещения соответствует водяному пару с концентрацией около 10000 ppm (относительная влажность 60%).

Была найдена сумма экспериментальных спектров, представленных на рис. 7,

$$S^E(v) = S_{H_2O}(v) + S_{SO_2}(v). \quad (6)$$

Затем была проведена фильтрация спектра $S^E(v)$ стандартным и адаптивным вариантами фильтра Савицкого–Голея и найдены спектры $S^{SG}(v)$, $S^{aSG}(v)$. В последнем случае степень полинома и размер окна в фильтре Савицкого–Голея подбирались для каждой точки в соответствии со схемой алгоритма,

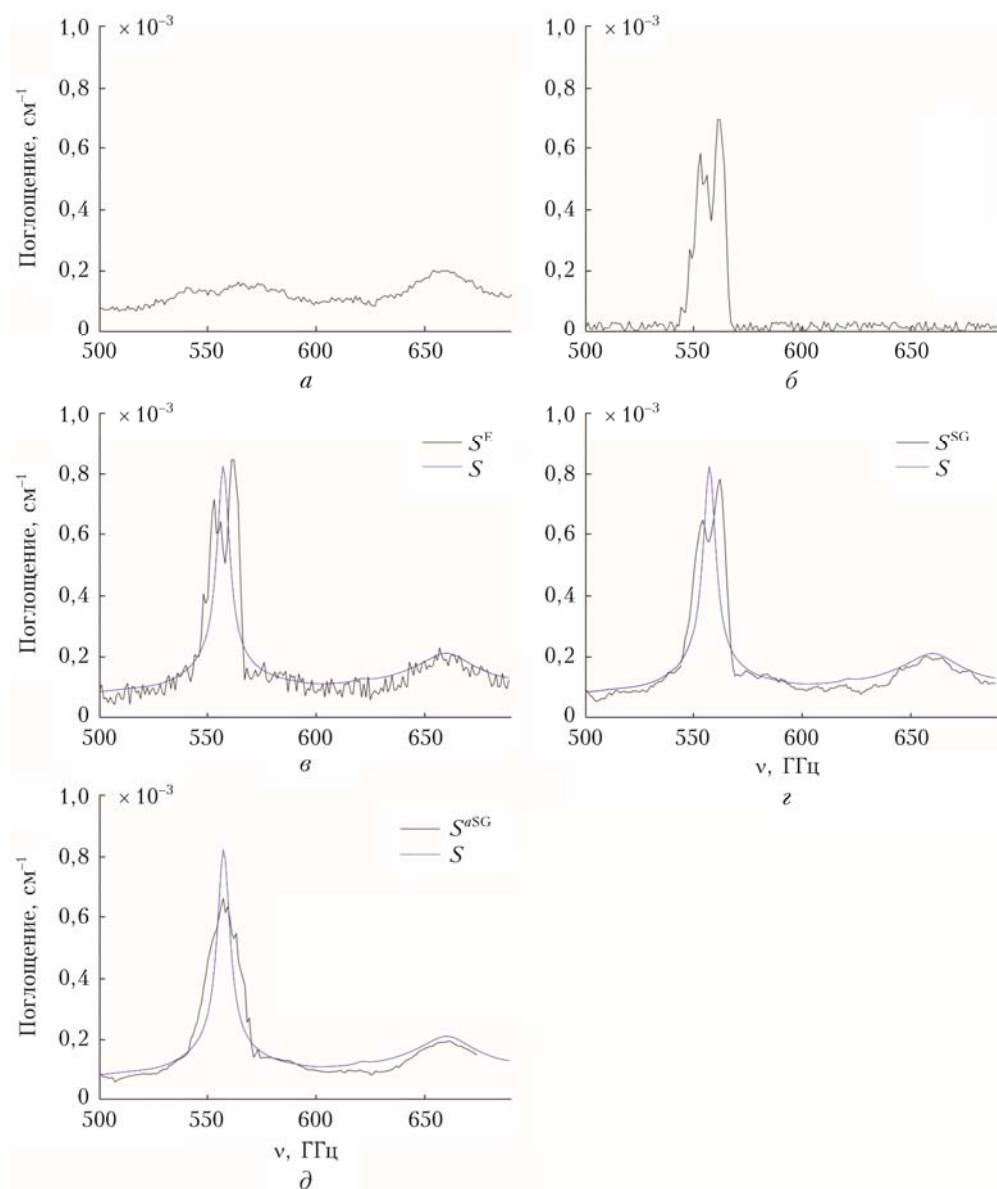


Рис. 7. Экспериментальные спектры газовой смеси SO_2 с концентрацией 200 ppm с азотом (а) и воздуха лабораторного помещения (б), измеренные при нормальных условиях (давление 1 атм и температура 296 К), и их сравнение с рассчитанным по формуле (7) модельным спектром $S(\nu)$; спектром $S^E(\nu)$, рассчитанным по формуле (6) (в); спектром $S^{SG}(\nu)$, полученным с помощью стандартного фильтра Савицкого–Голея из $S^E(\nu)$ с параметрами: степень полинома равна единице и размер окна 15 ГГц (г); спектром $S^{aSG}(\nu)$, полученным с помощью адаптивного фильтра Савицкого–Голея из $S^E(\nu)$ с $w \geq d\nu$ (д)

представленной на рис. 1 и 2. Сравнение спектров $S^E(\nu)$, $S^{SG}(\nu)$, $S^{aSG}(\nu)$ с расчетным

$$S(\nu) = C_{\text{H}_2\text{O}} S_{\text{H}_2\text{O},\text{H}}(\nu) + C_{\text{SO}_2} S_{\text{SO}_2,\text{H}}(\nu) \quad (7)$$

представлено на рис. 7, в–д. Здесь $S_{\text{H}_2\text{O},\text{H}}$ и $S_{\text{SO}_2,\text{H}}$ рассчитывались на основе данных HITRAN2020 [1] для нормальных условий ($P = 1$ атм, $T = 296$ К), $C_{\text{H}_2\text{O}} = 10000$ ppm, $C_{\text{SO}_2} = 200$ ppm.

Результаты восстановления концентрации SO_2 из спектров $S^E(\nu)$, $S^{SG}(\nu)$, $S^{aSG}(\nu)$ с использованием метода многомерного разрешения кривых [28] даны в таблице. Видно, что относительная погрешность вос-

Восстановленная методом многомерного разрешения кривых концентрация SO_2

Анализируемый спектр	Восстановленная концентрация, ppm	Относительная погрешность восстановления концентрации, %
$S^E(\nu)$	195,3	2,33
$S^{SG}(\nu)$	195,0	2,52
$S^{aSG}(\nu)$	198,6	0,68

становления концентрации SO_2 после подавления шума с помощью адаптивного варианта фильтра Савицкого–Голея в 3,7 раза меньше по сравнению со стандартным вариантом фильтра.

Заключение

Предложен и на примере фильтра Савицкого–Голея реализован подход к созданию адаптивных фильтров, основанный на использовании комбинации оконной версии стандартного фильтра с методом независимых компонент. Сравнение эффективности предложенного адаптивного и стандартного вариантов фильтра проводилось с помощью количественного критерия близости двух спектральных кривых, который может быть интерпретирован как относительная погрешность измерения формы спектральной кривой.

Численно моделировались спектры поглощения атмосферы лета средних широт в спектральном диапазоне 100–1000 ГГц для нормальных условий ($T = 296$ К, $P = 1$ атм). с шагом вычислительной сетки $dv = 1$ ГГц. Показано, что стандартный вариант фильтра Савицкого–Голея имеет смысл использовать при уровне шума $C_{nl} > 0,033$, а предложенный в настоящей работе адаптивный вариант эффективен при $C_{nl} > 0,002$.

Ограничения предложенного адаптивного алгоритма фильтрации шума в отношении параметров Δv и w заключаются в следующем. Параметр w не может быть меньше dv . С увеличением параметра w значение функционала (3) должно уменьшаться. В противном случае использование фильтра Савицкого–Голея становится нецелесообразным. В соответствии с этим оптимизацию фильтра путем увеличения параметра w следует проводить до тех пор, пока не будет достигнут минимум функционала (3) при фиксированных параметрах v_0 и Δv .

Экспериментальная проверка предложенного варианта шумоподавления была проведена с помощью ТГц-спектрометра. Для компонентного анализа использовали комбинацию спектров, измеренных ТГц-спектрометром в: а) газовой смеси SO_2 с концентрацией 200 ppm с азотом и б) воздухе лабораторного помещения, содержащем водяной пар с концентрацией ~ 100000 ppm (измерения проводились при нормальных условиях). Оценки относительной погрешности определения концентрации SO_2 с использованием метода разрешения многомерных кривых показывают, что после снижения шума с помощью адаптивного варианта фильтра Савицкого–Голея она была в 3,7 раза меньше, чем при использовании стандартного фильтра.

Предложенный подход может быть использован для создания адаптивного варианта других цифровых фильтров.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2024-557 от 25.04.2024).

Список литературы

1. Cox J.A. Signal-to-noise ratio dependence on frame time, time delay and integration (TDI), and pulse shaping // *Opt. Eng.* 1982. V. 21, N 3. P. 528–536. DOI: 10.1117/12.7972941.

2. Barnes J.A., Chi A.R., Cutler L.S., Healey D.J., Leeson D.B., Mcgunigal T.E., Mullen J.A., Smith W.L., Sydnor R.L., Vessot R.F.C., Winkler G.M.R. Characterization of frequency stability // *IEEE T. Instrum. Meas.* 1971. N 2. P. 105–120. DOI: 10.1109/tim.1971.5570702.
3. Fell A.F. Biomedical applications of derivative spectroscopy // *TrAC-Trend. Anal. Chem.* 1983. V. 2, N 3. P. 63–66. DOI: 10.1016/0165-9936(83)85010-9.
4. Jingsong Li., Benli Yu., Weixiong Zhao, Weidong Chen. A review of signal enhancement and noise reduction techniques for tunable diode laser absorption spectroscopy // *Appl. Spectrosc. Rev.* 2014. V. 49, N 8. P. 666–691. DOI: 10.1080/05704928.2014.903376.
5. Zhang L., Li Y., Wei Y., Wang Z., Zhang T., Gong W., Zhang Q. Enhancement of direct absorption spectroscopy utilizing an improved particle swarm algorithm // *Photonics.* 2022. V. 9, N 6. P. 412. DOI: 10.3390/photonics9060412.
6. Chabuda A., Durka P., Żygierewicz J. High frequency SSVEP-BCI with hardware stimuli control and phase-synchronized comb filter // *IEEE T. Neur. Sys. Reh.* 2017. V. 26, N 2. P. 344–352. DOI: 10.1109/TNSRE.2017.2734164.
7. Martinek R., Zidek J. Use of adaptive filtering for noise reduction in communications systems // *International Conference on Applied Electronics.* Pilsen, Czech Republic. 2010. P. 1–6.
8. Lita I., Visan D.A., Oprea S., Cioc B.I. Hardware design for noise reduction in data acquisition modules // *30th International Spring Seminar on Electronics Technology.* 2007. P. 462–466. DOI: 10.1109/ISSE.2007.4432900.
9. Thenua R.K., Agrawal S.K. Hardware implementation of adaptive algorithms for noise cancellation // *Int. J. Inf. Elect. Eng.* 2012. V. 2, N 2. P. 1–4.
10. Li J., Yu B., Zhao W., Chen W.A. Review of signal enhancement and noise reduction techniques for tunable diode laser absorption spectroscopy // *Appl. Spectrosc. Rev.* 2014. V. 49, N 8. P. 666–691. DOI: 10.1080/05704928.2014.903376.
11. Gusheng Zhang, He Hao, Yichen Wang, Ying Jiang, Jinhui Shi, Jing Yu, Xiaojuan Cui, Jingsong Li, Sheng Zhou, Benli Yu. Optimized adaptive Savitzky–Golay filtering algorithm based on deep learning network for absorption spectroscopy // *Spectrochim. Acta A:* 2021. V. 263. P. 120187. DOI: 10.1016/j.saa.2021.120187.
12. Tanji Jr A.K., de Brito M.A., Alves M.G., Garcia R.C., Chen G.L., Ama N.R. Improved noise cancelling algorithm for electrocardiogram based on moving average adaptive filter // *Electronics.* 2021. V. 10, N 19. P. 2366. DOI: 10.3390/electronics10192366.
13. Azami H., Mohammadi K., Bozorgtabar B. An improved signal segmentation using moving average and Savitzky–Golay filter // *J. Signal Inf. Proc.* 2012. V. 3, N 1. P. 39–44. DOI: 10.4236/jsip.2012.31006.
14. Kumar A., Sodhi S.S. Comparative analysis of gaussian filter, median filter and denoise autoencoder // *7th International Conference on Computing Sustainable Global Development.* 2020. P. 45–51. DOI: 10.23919/INDIACom49435.2020.9083712.
15. Schmid M., Rath D., Diebold U. Why and how Savitzky–Golay filters should be replaced // *ACS Measurement Science Au.* 2022. V. 2, N 2. P. 185–196. DOI: 10.1021/acsmesuresciau.1c00054.
16. Rinnan E., Van Den Berg F., Engelsen S.B. Review of the most common pre-processing techniques for near-infrared spectra // *TrAC-Trend. Anal. Chem.* 2009. V. 28, N 10. P. 1201–1222. DOI: 10.1016/j.trac.2009.07.007.

17. *Sadeghi M., Behnia F., Amiri R.* Window selection of the Savitzky–Golay filters for signal recovery from noisy measurements // *IEEE T. Instrum. Meas.* 2020. V. 69, N 8. P. 5418–5427. DOI: 10.1109/TIM.2020.2966310.
18. *Zimmermann B., Kohler A.* Optimizing Savitzky–Golay parameters for improving spectral resolution and quantification in infrared spectroscopy // *Appl. Spec.* 2013. V. 67, N 8. P. 892–902. DOI: 10.1366/12-06723.
19. *Kistenev Y.V., Shapovalov A.V., Vrazhnov D.A., Nikolaev V.V.* Kalman filtering in the problem of noise reduction in the absorption spectra of exhaled air // *Proc. SPIE.* 2016. V. 10035. P. 72–77. DOI: 10.1117/12.2249139.
20. *Kalambet Y., Maltsev S., Kozmin Y.* Noise filtering: The ultimate solution? // *Analytics.* 2011. T. 1, № 1. C. 50–56.
21. *Dombi J., Dineva A.* Adaptive Savitzky–Golay filtering and its applications // *Int. J. Adv. Intell. Parad.* 2020. V. 16, N 2. P. 145–156. DOI: 10.1504/IJAIP.2020.107011.
22. *Leleux D.P., Claps R., Chen W., Tittel F.K., Harman T.L.* Applications of Kalman filtering to real-time trace gas concentration measurements // *Appl. Phys.* 2002. V. 74. P. 85–93. DOI: 10.1007/s003400100751.
23. *Hyvärinen A., Oja E.* Independent component analysis: Algorithms and applications // *Neur. Netw.* 2000. V. 13, N 4–5. P. 411–430. DOI: 10.1016/S0893-6080(00)00026-5.
24. *Altynbekov A.A., Borisov A.V., Skiba V.E., Kistenev Y.V.* The possibility of increasing the efficiency of terahertz absorption spectra noise reduction using a sliding window variant of Savitzky–Golay filter // *Proc. SPIE.* 2023. V. 12920. P. 239–244. DOI: 10.1117/12.3009811.
25. *Kistenev Y.V., Kuzmin D.A., Sandykova E.A., Shapovalov A.V.* Quantitative comparison of the absorption spectra of the gas mixtures in analogy to the criterion of Pearson // *Proc. SPIE.* 2015. V. 9680. P. 797–804. DOI: 10.1117/12.2205606.
26. *Gordon I.E., Rothman L.S., Hargreaves R.J., Hasemi R., Karlovets E.V., Skinner F.M., Conway E.K., Hill C., Kochanov R.V., Tan Y., Wcislo P., Finenko A.A., Nelson K., Bernath P.F., Birk M., Boudon V., Campargue A., Chance K.V., Coustenis A., Drouin B.J., Flaud J.-M., Gamache R.R., Hodges J.T., Jacquemart D., Mlaver E.J., Nikitin A.V., Perevalov V.I., Rotger M., Tennyson J., Toon G.C., Tran H., Tyuterev V.I.G., Adkins E.M., Baker A., Barbe A., Camu E., Császár A.G., Egorov O., Fleisher A.J., Fleurbaey H., Foltynowicz A., Furtenbacher T., Harrison J.J., Hartmann J.-M., Horneman V.-M., Huang X., Karman T., Karns J., Kassi S., Kleiner I., Kofman V., Kwabia-Tchana F., Lee T.J., Long D.A., Lukashchuk A.A., Lyulin O.M., Makhnev V.Yu., Matt W., Massie S.T., Melosso M., Mikhailenko S.N., Mondelain D., Müller H.S.P., Naumenko O.V., Perrin A., Polyansky O.L., Raddaoui E., Raston P.L., Reed Z.D., Rey M., Richard, Tóbiás R., Sadiek I., Schwenke D.W., Starikova E., Sung K., Tamassia F., Tashkun S.A., Vander Auwera J., Vasilenko I.A., Vigasin A.A., Villanueva G.L., Vispoel B., Wagner G., Yachmenev A., Yurchenko S.N.* The HITRAN2020 molecular spectroscopic database // *J. Quant. Spectros. Radiat. Transfer.* 2022. V. 277. P. 107949.
27. *Hitran on the web.* URL: <https://hitran.iao.ru/> (last access: 20.12.2024).
28. *De Juan A., Tauler R.* Multivariate Curve Resolution: 50 years addressing the mixture analysis problem – a review // *Anal. Chim. Acta.* 2021. V. 1145. P. 59–78. DOI: 10.1016/j.aca.2020.10.051.

A.V. Borisov, A.A. Altynbekov, A.P. Votintsev, V.I.G. Tyuterev, Yu.V. Kistenev. **Adaptive Savitzky–Golay filter for denoising gas mixture absorption spectra.**

Quantitative analysis of the gas mixture absorption spectra is complicated by noise. The parameters of standard filters are related to the entire analyzed spectral range. This means that the filter parameters being optimal for strong absorption lines are not optimal for weak absorption lines and vice versa. An approach to create adaptive filter for denoising experimental spectra based on the combination of a windowed version of a standard filter with the independent component analysis is suggested and implemented with the Savitzky–Golay filter as an example. The numerical simulation was carried out at normal conditions for the absorption spectra of the model of mid-latitude summer atmosphere in the 100–1000 GHz spectral range. The efficiency of the suggested adaptive and the standard versions of Savitzky–Golay filter was compared using a quantitative criterion of the proximity between two spectral curves. Experimental validation of efficiency of the suggested adaptive Savitzky–Golay filter was conducted on the example of 200 ppm SO₂ and 10000 ppm H₂O gas mixture. The SO₂ concentration was evaluated using multivariate curve resolution method. The relative error in the concentration retrieved after noise reduction by this filter was 3.7 times less compared to the standard Savitzky–Golay filter. Thus, the suggested adaptive Savitsky–Goley filter makes it possible to increase the efficiency of noise suppression in experimental spectral data.