

## ノイズ、S/N、そして平滑化 Ⅲ

福島 整

科学技術庁無機材質研究所 超微細構造解析ステーション  
〒305 茨城県つくば市並木1-1

平滑化の議論では、Fourier変換を用いた周波数空間での議論が必須である。そのため、まずいくつかの例を用いて、ピークとノイズの周波数空間における様子を示す。次に、平滑化の手法として一般的な移動平均法及び荷重移動平均法 (Savitzky-Golay法) について具体的に説明する。また、これらの方法は、いずれも非巡回型デジタルフィルタとして分類されることを紹介する。あわせて適当な例に対して、その周波数空間での特性を求めてみる。

## 1. ピークの形とFourier変換

このタイトルを見た瞬間、特に「Fourier変換」という単語だけで、すでに読む気を失われた方もおられるかもしれない。しかし、普段何気なく使われている様々な道具の中にも、Fourier変換の概念と全く同じものがいくつもある。ほとんどの方がなんの抵抗もなく使用されているわけで、ことさら身構える必要はまったく無い。

典型的なものは、ラジオのダイヤルである。「電波が波である」ということぐらいは、それほど抵抗なく広く知られた事実であろう。その電波(波)個々の周波数をメモったダイヤル表示板は、まさに飛び交っている電波をFourier変換したものをプロットする場合の横軸の表示に相当するのだ。縦軸は電波の強度である。

これを理解するのすらも難しいとおっしゃるのであれば、確かにFourier変換を理解するのは難しいかもしれない。しかし、電波の周波数とダイヤル目盛りの対応付けが理解出来る方は、間違いなくFourier変換の基本的な概念が把握出来ている。

Fourier変換を実際に厳密な解析や論理展開に用いようとするのであれば、数式をある程度操作出来なければならず、そうするとあの嫌らしい複素積分を理解しなければならない。しかし、単にFourier変換をツールとして利用するのであれば、基礎的な概念だけをしっかりと理解するだけで良い。必要な計算はパソコンがやってくれる。そして多くの場合、それで十分なのである。

さて、Fig.1を見て頂きたい。(a)はピーク形状などでよくお馴染みの、ローレンツ関数であり、(b)はそのFourier変換である。本当はFourier変換の結果は複素数であるため、簡単には表示できない。そのため、結果として与えられる複素数の絶対値だけを使って表示を行う事がよく行われる。実際、通常の利用にはこれで十分である。ただし、場合によっては高周波数側((b)の右側の部分)の部分ま

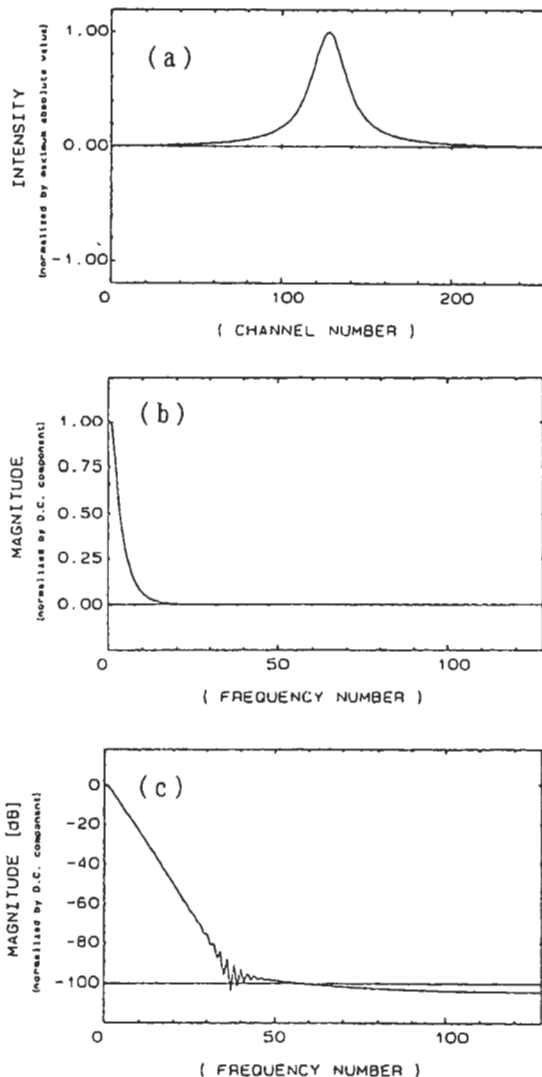


Fig.1 (a) Lorentz curve  
(b) Fourier transformation of (a)  
(c) smi-logarithm plot of (b)

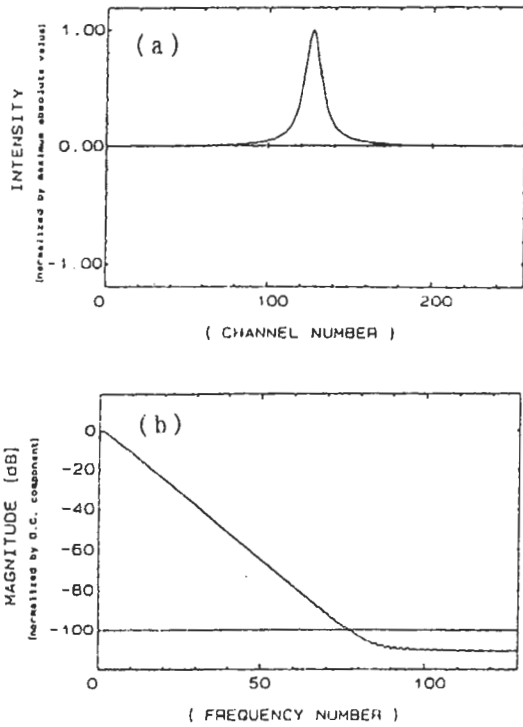


Fig.2 (a) Lorentz curve whose width is the half of Fig.1(a)  
(b) Fourier transformation of (a)

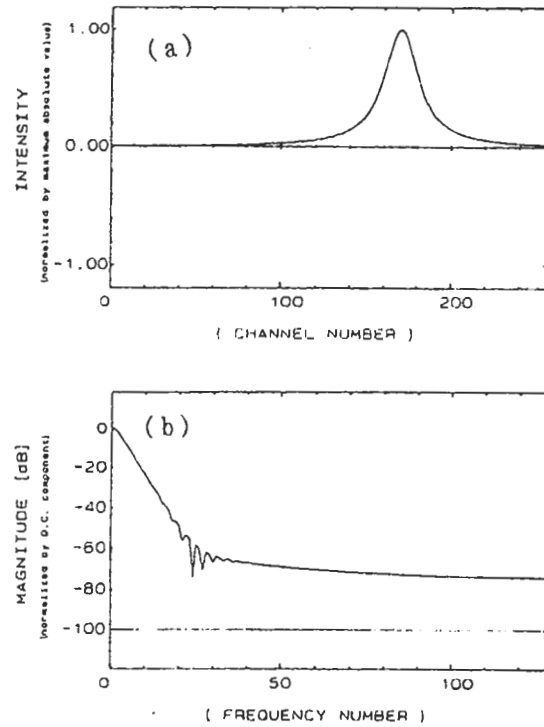


Fig.3 (a) Lorentz curve slightly shifted  
(b) Fourier transformation of (a)

でしっかり表示させたい為に縦軸を対数にとることがある。それを(c)に示す。

ここで注意しておきたいのは、「形のおおまかな部分は、低周波数領域（図の左側の部分）できまる」事、「形の細かい部分は、高周波数領域（図の右側）できまる」事である。したがって、形が細かい部分できまる場合、例えば同じ形のピークでも幅が細くなればなるほど、高い周波数成分の寄与が大きくなってくる。Fig.2を見て頂きたい。(a)はFig.1と同じローレンツ関数であるが、幅が半分である。(b)は(a)のFourier変換であるが、Fig.1(c)と比較して頂ければわかるとおり、Fig.2(b)の傾斜がFig.1(c)よりずいぶん緩く、右側もかなり持ち上がっている事がわかるだろう。

高周波成分は、測定データ自体の区間全体に対する対称性が悪くなるにしたがって、どんどん増えていく。例えば、Fig.1は、ピークが区間の真ん中に存在し、データは全区間で対称である。しかし、ピークの形も幅も変えずに（同じ式で）位置だけ中心からずらすと、とたんに高周波成分が増える。Fig.3(a)は、Fig.1と同じピークだが、位置を中心から若干ずらしてある。そうすると、それだけで高周波成分がどっさり増えることが(b)を見るとあきらかにわかる。これは、測定データの強さがその区間の両端で大きく違うことが、主な原因である。したがって、測定区間の両端の

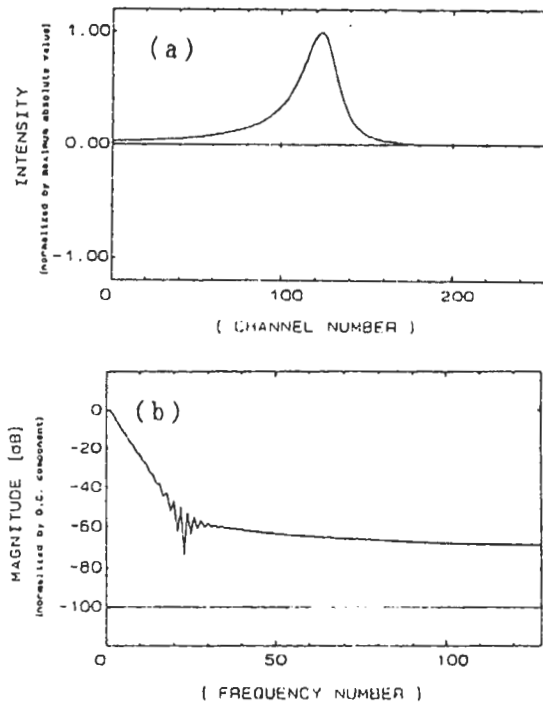


Fig.4 (a) A peak given by Doniach-Sunjic formula ( $\alpha=0.7$ )  
(b) Fourier transformation of (a)

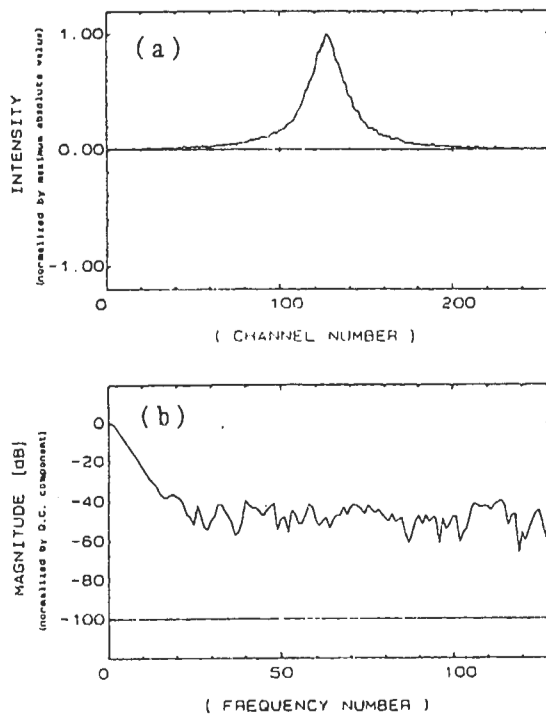


Fig.5 (a) Fig.1(a) with noise (1% at peak top)  
(b) Fourier transformation of (a)

強さが極端に違うようなデータというのは、実は精密な処理が大変にくいのである（例えば、デプスプロファイリング・データの直接のデコンポリューションがしづらいのは、このあたりの問題がもっとも大きい．．．が、これは余談である）。

Fig.4(a)は、Doniach-Sunjicの式によるピーク形状の一例である。これは、式中のパラメータの値によって対称性が変わり、対称性のもっとも良いときはローレンツ関数と一致する。Fig.4(a)の例はもっとも対称性の悪い場合であり、そのFourier変換は、やはり高周波成分をどっさり持っていることがわかる。

さて、ではノイズはFourier変換でどのように表されるであろうか。

Fig.5(a)は、Fig.1(a)のピークに対して適当な仮定<sup>1)</sup>のもとに正規化乱数によるシミュレーションノイズをかぶせたものである。このデータをFourier変換すると(b)の様になるが、Fig.1(c)と比較するとおわりの通り図の右側（高周波数領域）の様子がずいぶん異なる。Fig.5(b)にみられるこのデコボコの部分が、ノイズ成分に相当する。したがって、この高周波数領域のデコボコの部分を落とせばノイズがとれるに違いない事も、容易に想像がつくであろう。

ただし、問題がそう簡単ではないのは物事の常であり、この場合も例外ではない。例え

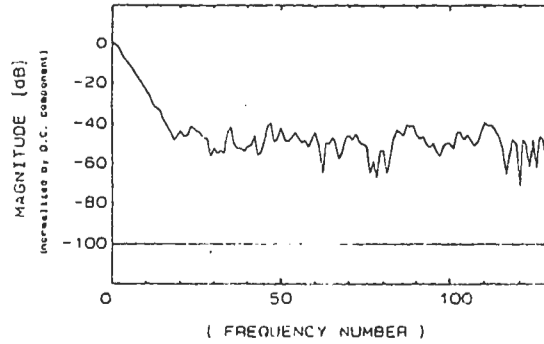


Fig.6 Fourier transformation of the curve shown in Fig.3(a) with noise (1% at peak top)

ば、Fig.3に対してFig.5と同様の条件でノイズを加えFourier変換した結果が、Fig.6である。ノイズの出方はランダムであるからパターンに若干の差があるものの、低周波領域の形はFig.5(b)とまったく変わらないのが見てとれる。しかし、Fig.1(c)とFig.3(b)を比較するとわかるとおり、もともとFig.3のピークに含まれる高周波成分はFig.1よりもずっと強い。したがって、Fig.3の場合に対してFig.1とまったく同様に高周波成分を落としても、正確な元の形の推定復元には問題が残ることが容易に理解できよう。

なお、Fourier変換について、少々補足しておこう。Fourier変換の結果は、一般に複素数であることは先に触れたとおりである。ある複素数 $z$ は、虚数単位 $j$ （ $-1$ の平方根）と二つの実数 $a, b$ を用いて

$$z = a + j \cdot b \quad \dots(1)$$

とあらわされる事はご存じであろう。この $z$ は、1組の2個の実数( $a, b$ )で表されることから、平面上の点と対応させる事ができる。すなわち、平面上に座標軸を取り、その上で点 $z$ に対応した点をとるとすると、 $\tan \theta = b/a$ なる $\theta$ をとれば

$$|z| = (a^2 + b^2)^{1/2}, \quad a = |z| \cos \theta, \\ b = |z| \sin \theta \quad \dots(2)$$

と表すことができるから、結局 $z$ は

$$z = |z| (\cos \theta + j \cdot \sin \theta) \quad \dots(3)$$

と表すことができる。Fig.1~6までは $|z|$ をプロットしていたのであって、この $|z|$ はマグニチュード等とも呼ばれる。一方、 $\theta$ もちろん周波数に対してプロットすることが出来る。これを、位相のプロット（あるいはフェーズのプロット）と呼ぶ。Fourier変換の結果は、このマグニチュードと位相の二つのプロットを組にして、初めて完全に表示される。

位相には、例えばピークを平行移動した場合の情報等が乗ってくる。Fig.1とFig.3の存

在区間を充分広くしてやると、実は高周波成分の強度の違い (Fig.1(c)とFig.3(b)の違い) はほとんどなくなる。平行移動は、位相のプロット上の変化として記述されるのである。

Fourier変換については、まったく初歩的な入門書から高度な専門書まで様々な教科書が出版されており、ここでいちいち紹介することはしない。しかし、もしちよっとだけどんなものか見てみたいと思われるのなら、例えば拙稿<sup>2)</sup>を参照されるのもよいかもかもしれない。

## 2. 移動平均による平滑化

さて、コンピューターに取り込まれたスペクトルであれ、チャートにレコーダで描かれたデータであれ、ノイズが乗っていればなめらかにしようとする人は多いであろう。その場合、データがすでに紙に描かれたものしかなければ、曲線(あるいは直線)定規を用いたりあるいはフリーハンド(!)で、なめらかな曲線(あるいは直線)を「推定しながら」引くに違いない。そして、その結果から、ピーク位置や強度を読みとり分析情報とするのである。

では、なぜ、なめらかな曲線を必要とするのであろうか。最終的に必要な情報(ピーク位置や強度など)が読みとりづらからであろう。しかし、実際になめらかになったデータからこれらの情報を取り出したとき、そのデータの信頼性(精度・正確度)がどんなものかを把握している人はどのぐらいいるだろうか。

精度は、同じ作業を何回か繰り返せば測定操作全体の精度として評価できる。問題は正確度である。いくつかの試料に対してスペクトルを測定し、その互いの変化を比較しあつての議論であれば、この問題は避けることが可能な場合も多い。しかし、そうでない場合の方が結構多いであろう。すなわち、「平滑化操作によってどの程度真のスペクトル形状が推定できているか」という問題である。そして、これは意外に意に介されてないのが現状のようである。

実は、曲線定規を当てはめて推定するやりかたは、けっこう正確度を確保できるのである。しかし、その議論は結構面倒くさい部分が多いので、ここではコンピューターに取り込まれたデータをなめらかにする事を考えてみよう。多くの装置付属のソフトウェアや、あるいはご自分で処理ソフトを作ろうという方が多くがまず作成してみるのが、移動平均による平滑化ではないだろうか。

移動平均とは、次のような操作である。一連の等間隔での測定データ $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ があったとしよう。この中の1点 $x_i$ に対して、その前後何点かを用いた平均を計算して置き換える操作を考える。この場合、 $x_i$ は平均する

一続きのデータの中央でなければならぬから、当然平均をとる点数は奇数となる。 $2m+1$ 点の平均を取ることにし、計算された新しい点を $X_i$ とすると

$$X_i = (x_{i-m} + x_{i-(m+1)} \dots x_{i-1} + x_i + x_{i+1} \dots x_{i+(m-1)} + x_{i+m}) / (2m+1) \\ = \sum_{k=-m}^m x_{i+k} / (2m+1) \quad \dots(4)$$

と書ける。この計算を $i=m+1 \sim n-m$ で行い、新しいデータセット $\{x_1, \dots, x_m, X_{m+1}, X_{m+2}, \dots, X_{n-(m+1)}, X_{n-m}, X_{n-(m-1)}, \dots, x_n\}$ を作成する。これを平滑化されたデータとするのである。データセットの両端 $m$ 点ずつが計算されないことにも、注意されたい。

次に、移動平均による平滑化がどのような真のスペクトルの推定法なのかを見てみよう。それには、やはり若干の数学のお世話になる必要がある。

(4)式で平均を取っているデータ $\{x_{-m}, \dots, x_m\}$ を考えよう。このデータは等間隔に並んでいるから、横軸を添字の数字そのまま取ってI-X平面上の点 $(i, x_i)$ (ただし、 $i=-m \sim m$ )と見なすことができる。これに対して $a, b$ を定数とする横軸I、縦軸Xに対する直線

$$X = a + b \cdot I \quad \dots(5)$$

を最小二乗法でフィッティングさせてみよう。ある点 $(i, x_i)$ に対して、(5)式と測定値 $x_i$ との差 $r$ は

$$r = x_i - (a + b \cdot i) \quad \dots(6)$$

である。したがって、 $x_i$ の存在区間全体、すなわち $i=-m \sim m$ での $r$ の二乗の合計(残差の二乗和)は

$$R = \sum_{i=-m}^m \{x_i - (a + b \cdot i)\}^2 \quad \dots(7)$$

となる。最小二乗法とは、この $R$ を最小にするような $a$ と $b$ を決定する事である。そのためには、(7)式の $a$ あるいは $b$ での微分が0となるように $a$ と $b$ を決めれば良い。(7)式を $a$ と $b$ でそれぞれ微分して0とおくと

$$\frac{\partial R}{\partial a} = \sum_{i=-m}^m \{x_i - (a + b \cdot i)\} = 0 \\ \frac{\partial R}{\partial b} = \sum_{i=-m}^m \{x_i - (a + b \cdot i)\} \cdot i = 0 \quad \dots(8)$$

したがって、 $a$ と $b$ について整理すると

$$a \sum_{i=-m}^m 1 + b \sum_{i=-m}^m i = \sum_{i=-m}^m x_i \\ a \sum_{i=-m}^m i + b \sum_{i=-m}^m i^2 = \sum_{i=-m}^m x_i \cdot i \quad \dots(9)$$

ところで $i=-m \sim m$ であるから、 $\sum 1 = 2m+1$ であ

り、また  $\sum i = 0$  となって、結局(9)の最初の式から  $a$  が直接求まることになる。すなわち、

$$a \cdot (2m+1) = \sum_{i=-m}^m x_i \quad \dots(10)$$

となる。これは、式(4)そのものである。

つまり移動平均法とは、一続きの  $2m+1$  点のデータに直線定規を当てはめて出来るだけうまく全体の真ん中を通るようにしたときの区間の中心を求める操作で、それを1点1ごとに繰り返して行っているのと同じなのである。ちなみに  $b$  に関しては、例えば  $m=1$  (3点のデータを処理する場合) を考えてみると、(9)の後の式から

$$b = (x_1 - x_{-1})/2 = \{(x_1 - x_0) + (x_0 - x_{-1})\}/2 \quad \dots(11)$$

となる。これは、点  $x_0$  における微分を求める式である。

結局、移動平均をとるという事は、もともとのデータの一部に対して「その部分の真の形は直線である」という仮定のもとに、真の値を「推定する」操作なのである。

### 3. Savitzky-Golayの平滑化

さて、たとえスペクトルの曲線の一部分とは言え、いくらなんでも真の形を直線と仮定するのは乱暴であろうと考える人は多いであろう。せめて、もっとも単純な曲線である二次関数ぐらいは使いたいと思うのも人情かもしれない。

実際、先ほどの移動平均の説明での計算と全く同じ最小二乗法の応用で、二次関数を仮定した場合の移動平均の式を求める事ができる。

移動平均の議論と同様にデータ  $\{x_{-m}, \dots, x_m\}$ 、すなわち点  $(i, x_i)$  (ただし、 $i = -m \sim m$ ) を考える。こんどは、これに対して二次関数

$$X = a + b \cdot i + c \cdot i^2 \quad \dots(12)$$

を最小二乗法でフィッティングさせれば良いわけである。(12)式と測定値  $x_i$  との差  $r$  は

$$r = x_i - (a + b \cdot i + c \cdot i^2) \quad \dots(13)$$

であるから、残差の二乗和  $R$  は

$$R = \sum_{i=-m}^m \{x_i - (a + b \cdot i + c \cdot i^2)\}^2 \quad \dots(14)$$

となる。(7)から(8)と同様にして

$$\frac{\partial R}{\partial a} = \sum_{i=-m}^m \{x_i - (a + b \cdot i + c \cdot i^2)\} = 0$$

$$\frac{\partial R}{\partial b} = \sum_{i=-m}^m \{x_i - (a + b \cdot i + c \cdot i^2)\} \cdot i = 0$$

$$\frac{\partial R}{\partial c} = \sum_{i=-m}^m \{x_i - (a + b \cdot i + c \cdot i^2)\} \cdot i^2 = 0 \quad \dots(15)$$

いちいち  $\sum$  記号を書くのが面倒臭いので、教科書<sup>3)</sup>などの例にならって例えば  $\sum x_i$  を  $[x_i]$ 、 $\sum i^2$  を  $[i^2]$  などと書く(もちろん  $i = -m \sim m$  での総和である)ことにし、 $[i]$  と  $[i^3]$  が 0 になることに注意して(15)式を整理すれば

$$\begin{aligned} (2m+1) \cdot a + [i^2] \cdot c &= [x_i] \\ [i^2] \cdot b &= [x_i \cdot i] \\ [i^2] \cdot a + [i^4] \cdot c &= [x_i \cdot i^2] \quad \dots(16) \end{aligned}$$

この連立一次方程式から形式的に  $a$  をもとめてやると

$$a = \frac{([i^4] \cdot [x_i] - [i^2] \cdot [x_i \cdot i^2])}{((2m+1) \cdot [i^4] - [i^2] \cdot [i^2])} \quad \dots(17)$$

となる。

(17)式は一見複雑そうに見えるが(実際これから一般式を導出すると結構面倒なのであるが)、具体的な平滑化の点数をいれて考えてみると、それほど難しい式では無いことがわかるであろう。

例として、もっとも簡単な  $m=2$  (5点平滑化)の場合を調べてみよう。

まず(17)式の分母は

$$\begin{aligned} (2 \cdot 2 + 1) \cdot (16 + 1 + 0 + 1 + 16) \\ - (4 + 1 + 0 + 1 + 4) \cdot (4 + 1 + 0 + 1 + 4) &= 5 \cdot 34 - 10 \cdot 10 \\ &= 70 \end{aligned}$$

である。次に分子であるが

$$\begin{aligned} (16 + 1 + 0 + 1 + 16) \cdot \sum x_i - (4 + 1 + 0 + 1 + 4) \cdot \sum (x_i \cdot i^2) \\ = 34 \cdot \sum x_i - 10 \cdot \sum (x_i \cdot i^2) \\ = \sum (34 - 10 \cdot i^2) \cdot x_i \\ = (34 - 10 \cdot 4) \cdot x_{-2} + (34 - 10 \cdot 1) \cdot x_{-1} \\ + (34 - 10 \cdot 0) \cdot x_0 + (34 - 10 \cdot 1) \cdot x_1 + (34 - 10 \cdot 4) \cdot x_2 \\ = (-6) \cdot x_{-2} + 24 \cdot x_{-1} + 34 \cdot x_0 + 24 \cdot x_1 + (-6) \cdot x_2 \end{aligned}$$

と、書き直せる事がわかる。したがって  $m=2$  (5点平滑化)の場合の(17)式は、最終的に

$$a = \frac{(-3) \cdot x_{-2} + 12 \cdot x_{-1} + 17 \cdot x_0 + 12 \cdot x_1 + (-3) \cdot x_2}{35}$$

となる。例えば、 $b_{-2} = b_2 = -3$ 、 $b_{-1} = b_1 = 12$ 、 $b_0 = 17$ 、 $\sum b_i = g (= 35)$  とすると、一連の等間隔での測定データ  $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$  に対して5点平滑化を行う場合

$$X_i = \sum_{k=-2}^2 b_k \cdot x_{i+k} / g \quad \dots(18)$$

という計算をやれば良い事になる。これは各点に重みを付けて平均を取る操作であるから(4)の移動平均に対して荷重移動平均と呼ばれ、重み係数  $b_i$  のテーブルを公表したSvitzkyらの論文<sup>4)</sup>に基づいて、Savitzky-Golay法とも呼ばれる。ただし、彼らの最初の論文<sup>4)</sup>のテーブルには、若干の誤りがある<sup>5)</sup>。

ちなみに(16)式から、二次関数を用いた場合のSavitzky-Golay法の各係数の一般式を求める事が可能である。この場合、 $\sum i^4$  の公式が必要であるが、通常の教科書にはなかなか

見つからないのが難点である。以下に  $\Sigma i^4$  の公式と、 $a, b, c$  それぞれの一般式を示しておく。

$$\Sigma_{i=1}^m i^4 = m(m+1)(2m+1)(3m^2+3m-1)/30 \dots (19)$$

$$a = \sum_{i=-m}^m \frac{3(3m(m+1)-1-5 \cdot i^2)}{(4m^2-1)(2m+3)} \cdot x_i \dots (20)$$

$$b = \sum_{i=-m}^m \frac{6(4m(m+1)-3) \cdot i}{(4m^2-1)m(m+1)(2m+3)} \cdot x_i \dots (21)$$

$$c = \sum_{i=-m}^m \frac{3(15 \cdot i^2 - 5m(m+1))}{(4m^2-1)m(m+1)(2m+3)} \cdot x_i \dots (22)$$

以上のことから、二次関数だけでなく、三次関数、四次関数などのより高次の関数でも同様の操作を行うことが可能であることも容易に理解できると思う。もっとも一般式を求めようとする、三次関数であれば  $\Sigma i^3$  の公式が、四次関数であれば  $\Sigma i^4$  の公式がさらに必要となり、結構面倒である（あまりきれいな式にはならない）。したがって通常は(17)式に相当するような式を導出し、それをそのままルーチンとしてプログラムに組み込んで使うのがもっとも現実的なやりかたである。

蛇足であるが、「Savitzky-Golayの二次・三次関数による平滑化」などと、二次関数と三次関数どちらでも良い様な曖昧な表現に出くわした方もいらっしゃるのではないかとと思われる。これは、次のような理由による。

三次関数として

$$X = a + b \cdot I + c \cdot I^2 + d \cdot I^3 \dots (23)$$

を用いたとすると、(13)~(15)と同様な手順を進めれば、最終的に(16)に対応する式は

$$\begin{aligned} (2m+1) \cdot a + [i^2] \cdot c &= [x_i] \\ [i^2] \cdot b + [i^4] \cdot d &= [x_i \cdot i] \\ [i^2] \cdot a + [i^4] \cdot c &= [x_i \cdot i^2] \\ [i^4] \cdot b + [i^6] \cdot d &= [x_i \cdot i^3] \dots (24) \end{aligned}$$

となる。したがって、 $a$ と $c$ に関しては(16)と同じ結果を与えるため、「二次・三次関数による平滑化」などという曖昧な表現がなされたりするのである。一方、 $b$ に関しては(16)と異なった式を与えている。したがって、一次微分に関しては、二次関数によるものと三次関数によるものは同じ形をしていない。もちろん最小二乗であてはめる関数については、次数が高くなるほど推定モデルとしてはより良いと見なせるから（実際は、そう単純ではないのだが）、一次微分に関しては、(16)式の解より(24)式の解を用いる方が、より確からしい推定モデルを用いた処理と言えるかもしれない。

#### 4. 平滑化とデジタルフィルター

さて、移動平均と代表的な荷重移動平均法

であるSavitzky-Golay法について、その概要を説明してきた。荷重移動平均法としては、このほかにSpencerの方法<sup>3)</sup>やKaiser窓<sup>6)</sup>など様々な方法が存在する。しかしそのいずれもが、(18)式と同じ形で表される。すなわち、奇数個の係数列  $\{c_n\} (n=-1, \dots, 1)$ 、ただし  $\Sigma c_n = 1$  をとれば

$$X_i = \sum_{k=-1}^1 c_k \cdot X_{i-k} \dots (25)$$

と書ける。 $c_k = 1/(2|k|+1)$  の場合が、(4)の移動平均に相当する事も明らかであろう。ここで、 $x$ の添字が $i+k$ ではなく $i-k$ に変わっていることに注意されたい。今のところ考えている  $\{c_n\}$  が左右対称の形を取っている事から、この置き換えが許されている。

さて信号伝達論では、次の様な形の式がよく取り扱われる。

$$y_n = \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k \cdot x_{n-k} + \sum_{k=1}^{\infty} d_k \cdot y_{n-k} \dots (26)$$

この式であらわされる数値処理を、信号伝達論ではデジタルフィルターと呼ぶ。右辺第2項が存在している場合を巡回型、第一項のみの場合を非巡回型と呼ぶ。(26)式において  $k > 1$  あるいは  $k < -1$  で  $c_k = 0$  とすると(25)式と一致させる事ができるから、荷重移動平均は非巡回型デジタルフィルターとして定義できる事がわかる。

ちなみに、巡回型デジタルフィルターの例はというと、もっとも簡単なものとして台形公式による積分計算がある。すなわち

$$y_{n+1} = (x_n + x_{n+1})/2 + y_n \dots (27)$$

である。これは、(26)の第一項において  $c_{-1} = c_0 = 1/2$  でその他は  $c_k = 0$ 、第二項では  $d_1 = 1$  で他は  $d_k = 0$  であるとした場合に相当する。

さて、2章及び3章の議論では、荷重移動平均の場合の横軸を規格化して考えていた。したがって、もし  $\{x_n\}, \{X_n\}$  及び  $\{c_n\}$  を整数  $n$  で与える様な連続関数  $x(m), X(m), c(m)$  が与えられれば（つまり、例えば  $x(m)$  は実数  $m$  に対する連続関数で、ある整数  $k$  に対しては  $x(k) = x_k$  となって  $\{x_n\}$  を作る事ができるということである）、 $x_k$  と  $x_{k+1}$  の間隔を  $x(k)$  と  $x(k+1)$  の間隔として定義できるから、それを  $\Delta k (=1)$  とすると(25)は

$$X(i) = \sum_{k=-1}^1 c(k) \cdot x(i-k) \cdot \Delta k \dots (28)$$

と書き直せる。もちろん、 $-1 \leq k \leq 1$  である。ここで、(28)について  $k$  の値の範囲を変えずに（つまり  $-1 \leq k \leq 1$  のままで） $k$  のとりうる値の数を増やしていったとしよう。もともとの  $k$  の取りうる個数は  $2|l|+1$  個だったわけだが、これをそれより増やしてみるわけである。そのと

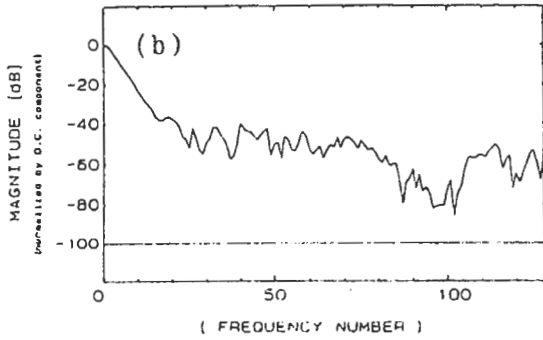
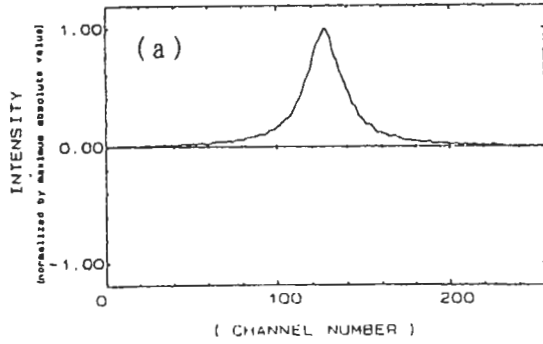


Fig.7 (a) smoothed Fig.5(a) curve by Savitzky-Golay method (5 points, quadratic)  
(b) Fourier transformation of (a)

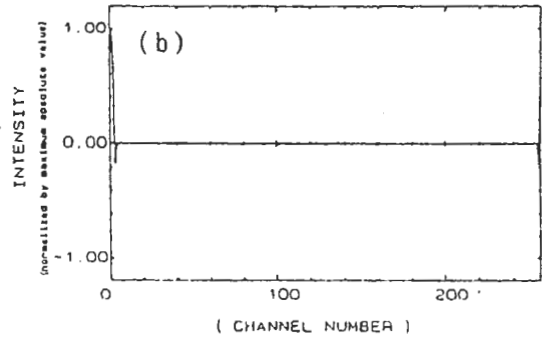
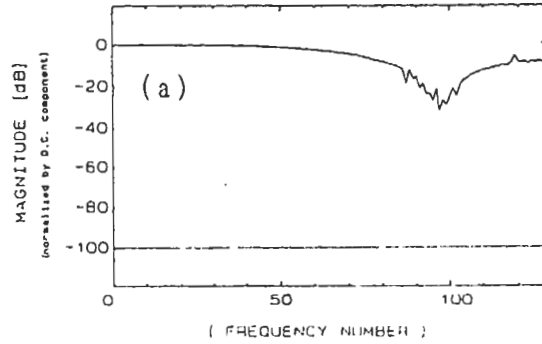


Fig.8 (a) A calculation result of Fig.7 divided by Fig.5 at frequency domain  
(b) Inverse Fourier transformation of (a)

き、もちろん各データの間隔は同じであるとする、個数を増やすと同時に  $\Delta k$  は次第に小さくなっていく。個数を無限個にすると、(28)は最終的に次のような定積分に収束することが数学によって示される。

$$X(i) = \int_{-1}^1 c(k)x(i-k)di \quad \dots(29)$$

この式は、畳み込み積分 (convolution integral) と呼ばれるものである。すなわち、荷重移動平均をとるといのは、数値的に畳み込み積分の計算をしているのと全く同じなのである。

では(29)の両辺をFourier変換してみるとどうなるであろうか。と書くと、あきらめの境地に入りたがる方もおられようが、もう少しがまんして頂きたい。というのは、Fourier変換を導入することで、(29)の積分を直接考えなくても良くなるからである。すなわち、連続関数  $x(m), X(m), c(m)$  のFourier変換をそれぞれ  $x(\omega), X(\omega), c(\omega)$  と書くことにすると、(29)は

$$X(\omega) = c(\omega) \cdot x(\omega) \quad \dots(30)$$

と、単純なかけ算になってしまうことが示されるのである。証明はどんな簡単なFourier変換の教科書にも載っているので、興味のある方はそっちを参照していただく。この(30)式は、スペクトルをFourier変換しておいて、何か適当な関数をかけて逆変換すれば、移動平均を行ったのと全く同じ結果が得られる事を示している。言い換えると、移動平均の結果がどうなるかは  $c(\omega)$  の形によって決まるのである。

試しにSavitzky-Golay法の二次関数5点平滑化の場合の  $c(\omega)$  がどのような形をしているかを、(30)式を使って調べてみよう。例えば、平滑化の対象としてFig.5(a)を用いたとする。Fig.5(a)に対して5点平滑化処理を行った結果がFig.7(a)であり、そのFourier変換がFig.7(b)に示してある。Fig.5(b)とFig.7(b)を比較すると、高周波領域 (図の右側の部分) の形がなんだか変わっている事に気がつくられると思う。Fig.7(a)のFourier変換をFig.5(a)のFourier変換でわり算した結果のマグニチュード (Fig.7(b)をFig.5(b)でわり算するのではない) を、Fig.8(a)に示す。Savitzky-Golay法の二次関数5点平滑化の  $c(\omega)$  は、こういう形をしているのである。

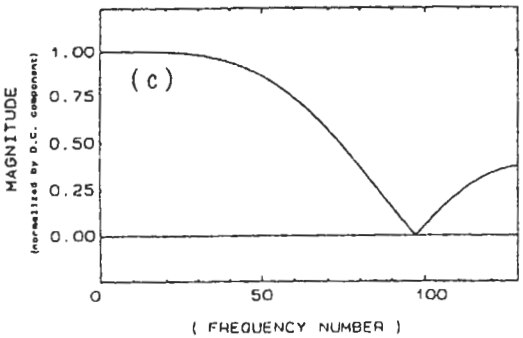
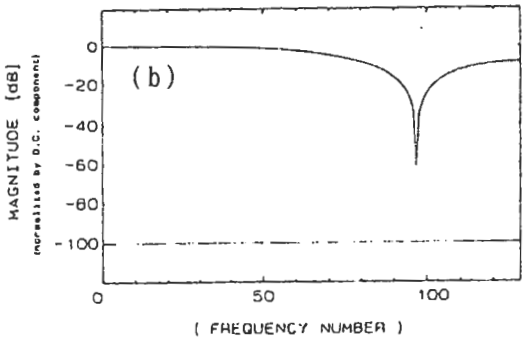
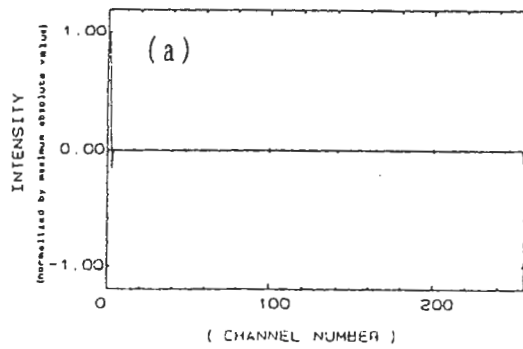


Fig.9 (a) Savitzky-Golay smoothing filter  
(5 point, quadratic)  
(b) Fourier transformation of (a)  
- semi-logarithm plot  
(c) normal plot of (b)

また、Fig.8(a)の逆Fourier変換の結果が、Fig.8(b)である。Fig.8(b)は実数関数であって、その正体は何かというと実は前章で求めた荷重移動平均の重み、すなわち

$$a = ((-3) \cdot x_{-2} + 12 \cdot x_{-1} + 17 \cdot x_0 + 12 \cdot x_1 + (-3) \cdot x_2) / 35$$

で示されている係数からなる関数{17/35, 12/35, -2/35, 0, 0, ..., 0, 0, -2/35, 12/35} (全点数はFig.5(a)と同じ)なのである。コンピュータによるFourier変換の計算方法(有限区間の離散変数Fourier変換)からくる避けられない計算誤差により、本来0であるべき点にも若干

の値が入って来ている。

また、例えばなぜ係数列を区間の真ん中に持ってきた様な{0, 0, ..., -2/35, 12/35, 17/35, 12/35, -2/35, ..., 0, 0}にならないか等は、有限区間の離散Fourier変換を用いた畳み込み演算に本質的な問題である。今は触れないが、この点には注意を払っておくと良い。

一方、Fig.9(a)は関数{17/35, 12/35, -2/35, 0, 0, ..., 0, 0, -2/35, 12/35}であり、Fig.9(b)はそのFourier変換である。Fig.9(b)とFig.8(a)がほぼ同じであることが(実際、計算精度のなせる技で完全に一致しないだけなので)、あきらかに見て取れるであろう。

以上の結果からわかることは、荷重移動平均による平滑化の特性を検討する場合、係数からなる関数のFourier変換を調べれば良いということである。もっと一般化した言い方をすると、非巡回型デジタルフィルターの周波数特性は、フィルター係数(要するに荷重移動平均の重みづけ係数である)のFourier変換で与えられるということである。

Fig.9(c)は(b)をノーマルプロットにとりなおしたものであるが、これからこの関数は低周波数側に成分を持ち、高周波数側にはあまり成分を持たない事がよくわかる。このような形の関数がかけ算されると、高周波成分がある程度落ちてしまった結果が得られる。これが、非巡回型デジタルフィルターによる平滑化の本質なのである。この様に低い周波数成分には大きく作用しない特性を持つ周波数空間での関数を与えるデジタルフィルターを、ローパスフィルターと呼ぶ。

なによりも大切なことは、荷重移動平均を行うという事は、相手がどんなデータであれ常に同じ形の関数をかけてしまうということである。したがって、本来の情報が高周波成分まである程度の大きさを持っている様な場合(要するにかなり細かい変化が重要である場合)などでは、結果として必要な情報を失ってしまうことになりかねない。ここに、平滑化処理のもっとも困難な部分が存在する。

## 5. 終わりに

今回は、平滑化の代表的な手法である移動平均及び荷重移動平均とは何かを例とともに説明し、それらが非巡回型デジタルフィルターの一種であること、その係数を与える関数の周波数特性が重要であることを説明した。

また、ピークやノイズのFourier変換による周波数空間での表示を見て頂いたことで、周波数空間でノイズや信号を考える事に対していくらか抵抗感を無くして頂いたのではないかと考えている。データ処理を理解する上では、周波数空間での取り扱いを理解する事が何にもまして重要である。与えられたデータに対して周波数空間での形がある程度推測で



きると、どのような処理が適当かの定性的な議論が可能となるからである。

したがって、実際にFourier変換の数式を用いた数学的操作を行わねば議論がまったく出来ないわけではないのである。現在では、任意のデータのFourier変換をパソコンレベルで手軽に行うことが可能であり、必要な計算をブラックボックス化しても実用的な議論する事が可能である。実際にいくつかのデータの変換を行って変換前とあわせてみることで、周波数空間でのデータの形を推測する事に慣れる事ができる。この様にして周波数空間でデータを考えるカンを養うことが、正確なデータ処理を行うセンスを得る近道と言えるかもしれない。

今回は、簡単な計算での非巡回型デジタルフィルターの周波数特性の議論のしかたをいくつかの例をあげて紹介するとともに、理

論的に最適なフィルターとは何かを示す。さらに、実際に平滑化の最適な条件の決め方を論ずる。

#### 参考文献

- [1] 福島 整 : JSA 1 p.10 (1995)
- [2] 福島 整 : ふんせき No.10 p.794 (1995)
- [3] R.W.Hamming(宮川、今井訳): 「デジタル・フィルタ」 科学技術出版社 (1980)
- [4] A.Savitzky, M.J.E.Golay: Anal.Chem. Vol.36 p.1627 (1964)
- [5] J.Steiner, Y.Termonia, J.Deltour : Anal.Chem. Vol.44 1906 (1972)
- [6] J.F.Kaiser, W.A.Reed: Rev.Sci.Instrum., Vol.48 1447 (1977)

## The bases of noise, S/N and smoothing - III

*Sei FUKUSHIMA*

*National Institute for Research in Inorganic Materials*

*1-1 Namiki, Tsukuba, Ibaraki 305, JAPAN*

For discussing about data processing, using Fourier transformation or its concept is important. So, some examples of Fourier transformation are shown. Then, primitive, but practical explanations about moving average and Savitzky-Golay method which are representative smoothing methods are presented. Those methods are classified into the nonrecursive digital filter. The shape of filter at frequency domain is shown in the case of Savitzky-Golay method, as an example.