講義：実用電子分光法講座

微分フィルターってなんだ

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
e-mail : himajin@nirim.go.jp

(1996 年 12 月 26 日受理)

プロセッサ付きの装置やソフトウェアパッケージなどの普及で、だれでも手軽に測定データに対する微分処理が出来るようになってきた。しかし、利用している微分法がどのようなものなのかを把握しないと、得られた結果の正しい解釈も不可能となる。本稿では、荷重移動平均法としての微分処理（微分フィルター）について、その正体と使用上の注意をなるべく図を多用して解説する。また、Savitzky-Golay 平滑化微分フィルターに関して、使用の最適化についても簡単に説明し、また適正使用の指針を示す。

What is "differential filter"

Sei FUKUSHIMA
National Institute for Research in Inorganic Materials
1-1 Namiki, Tsukuba, Ibaraki 305m JAPAN
e-mail : himajin@nirim.go.jp

For using differential filter correctly and obtainning usefull results, the theory and nature of differential filters are given in this lecture with more figures and less formulas. In general, it is so important that user must understand well about the relationship between the step width of data points, the total points of data and the behavior of filter at frequency domain (transfer function). In addition, the reference data concerned with the optimized condition for using Savitzky-Golay smoothing differncial filter is presented briefly.

1．年寄りの繰り言

最近は、装置付属のソフトウェアに色々なデータ処理機能が付属するようになってきた。また、市販のソウトウェアパッケージも高機能化がすすみ、高度なデータ処理もかなり手軽に出来るようになってきたようである。筆者のように、何かデータ処理を行おうと考えた場合に処理ルーチンから総て手作りで行わないと満足しない老人族は、高効率を要求する最近の研究事情にはぼちぼちそぐわなくなりつつある。

この様に、便利で手軽なデータ処理が誰にでも可能になってきた反面、ソフトウェアのブラックボックス化も進みつつある。多くのソフトでは専門知識を持たなくても利用できるように工夫がこらされているはずで（筆者はあまり利用しないので、よくは知らない）、また、そうでなければ有用なソフトとは言えないのが本来であろう。しかし現実には、まだまだあちらこちらに落とし穴が存在している様である。この落とし穴に関する議論は、処理方法の本質的な部分に直結するのであるが、一方で「重箱の隅」的な論議ととらえられかねないし、実際にそのレベルであることが多い。

微分処理に関しても、多くの人はほとんどなにも悩まずに手元のルーチンを利用しているに違いない。それでよい場合もある。しかし、ダメな場合も存在するのである。そして、スペクトルに対するより高度な議論を行おうとする場合には、やはりこの部分もある程度意識して頂く必要がある。

コンピュータに取り込まれたスペクトルの様な離散変数に対する微分処理にとっても、平滑化に関する議論と同様に S/N が大変重要な問題となる。しかし、同じ様な移動平均法

であるにも関わらず、微分と平滑化では異なる部分も存在する。

今回、このような小文をお示しすることとなった発端は、異なったソフトウェアで同じ（はずの）データを処理すると結果のタテ軸の値が一致しないという事と、結果の S/N が違うように見える事であった[1]。これらの疑問を出発点として、Savitzky-Golay の平滑化微分フィルターを中心に話を進めてみよう。ただし、話を簡単にするために、ここで議論するスペクトルデータは、総て等間隔での測定で得られたものの限らせていただく。

2．微分にはＹ談が重要

同じ荷重移動平均法でありながら、微分と平滑化で結果の取り扱いのもっとも異なる点が縦軸の問題である。これは、本誌の前号に大変わかり易い説明[2]が掲載されているため屋上屋を重ねるの感があるが、簡単に復習しておいても良いであろう。

まず、注意しておかねばならないのは、もとのスペクトルと微分されたスペクトルとはタテ軸の単位が異なっているということである。これは、微分の大元の定義に戻ると理解が容易である。教科書をひもとくと、ある関数 y = f(x)の微分とは、

$$\frac{dy}{dx} = \lim_{\varDelta x \to 0} \frac{f(x + \varDelta x) - f(x)}{\varDelta x} \quad \cdots(1)$$

と書いてある。この場合の f(x)は連続な関数であって、コンピュータの中のデータの様にとびとびの値を持ったものではない。そのため、x-y 座標平面の上に f(x)のグラフを書いた場合（その多くは曲線となるわけであるが)、グラフの上の２点は好きなだけ近づけることが出来るわけである（一致させるのとは違う事に注意)。これが⊿x → 0 のイメージであり、解析学の教科書で最初にけつまずく箇所の一つである。

ところがコンピュータ中のデータの場合、等間隔に並んだデータ（離散変数）であるから最小測定ステップ⊿e が存在する。すなわち、コンピュータで測定したスペクトル上では、どんなになめらかに書いたとしても、(1)式と同じ事を行う場合にはスペクトル上の２点は⊿e より近づける事はできない。したがって離散変数の場合、(1)を書き直せば

$$\frac{dy}{dx} \fallingdotseq \lim_{\varDelta x \to \varDelta e} \frac{f(x + \varDelta x) - f(x)}{\varDelta x} = \frac{f(x + \varDelta e) - f(x)}{\varDelta e} \quad \cdots(2)$$

となる。この(2)式の右側をみると、測定データにおける隣同士の強度差を最小測定間隔で割った式になっている。つまり、微分されたスペクトルの縦軸は、もとのスペクトルの縦軸を横軸の単位でわり算した単位を持っているのである。

この「⊿e でわり算している」という点は、どんな微分処理でも忘れてはいけない。なにを隠そう、筆者もこの点をすっかり失念した展開をしてしまい、後で記録を読んで大いに反省させられたものである。というのは、Savitzky-Golay の平滑化法や平滑化微分法に代表される荷重移動平均法では、事があらわに表に出ないからである。

移動平均や荷重移動平均により平滑化や微分を行う事は、平均をとる区間に対して一次関数や二次関数などの多項式を最小二乗法によりフィッティングさせていることと同等である。これは、色々なところで解説されているのでよくご存じであろう[3]。

例えば、二次関数を用いた５点平滑化を考える場合であると、まず、一続きのデータの中から隣り合った５個のデータ点を取り出し、それを$\{x_{-2}, x_{-1}, x_0, x_1, x_2\}$とする。これに対して、$(i, x_i)$（ただし、i = -2, -1, 0, 1, 2)を考え、関数 $f(i) = a \cdot i^2 + b \cdot i + c$ を最小二乗法でフィッティングする。これにより、$c = (q_1 \cdot x_{-2} + q_2 \cdot x_{-1} + q_3 \cdot x_0 + q_4 \cdot x_1 + q_5 \cdot x_2)/q_0$ あるいは $b = (v_1 \cdot x_{-2} + v_2 \cdot x_{-1} + v_3 \cdot x_0 + v_4 \cdot x_1 + v_5 \cdot x_2)/v_0$ を与える係数列$\{q_i\}$あるいは$\{v_i\}$が得られる。この c を与える係数列$\{q_i\}$が Savitzkey-Golay の２次式５点平滑化フィルターであり、b を与える係数列$\{v_i\}$が Savitzkey-Golay の２次式５点平滑化微分フィルターということになる。

さて、では「⊿e でわり算している」はどこへ消えたのであろうか？

実は、$\{x_{-2}, x_{-1}, x_0, x_1, x_2\}$に対して、$(i, x_i)$（ただし、i = -2, -1, 0, 1, 2)を考えたところに混乱のもとが存在するのである。この操作は、x_i と x_{i+1} との間隔に対して、本来⊿e だったはずのものを、(i+1) - i = 1 で置き換えているのである。もとのデータに対して多項式をフィッティングすることで新しい点を決めるのであるから、多項式の各係数はスペクトルデータ個々に対して違うのが本来であろう。しかし、データ間隔を１と規格化することにより、データに依存しない係数列$\{q_i\}$あるいは$\{v_i\}$が与えられる処に、この方法の実用性が存在するのである。

再度、(2)に立ち戻って考えてみよう。デ

ータ間隔を規格化するということは、(2)の一番右側の分母を１とすることと同じである。すなわち

$$\frac{dy}{dx}\cdot\Delta e \fallingdotseq \frac{f(x+\Delta e)-f(x)}{\Delta e}\cdot\Delta e$$

$$= \frac{f(x+\Delta e)-f(x)}{1} \qquad ...(3)$$

ということであって、データ間隔の規格化は、真の結果に対して測定間隔がかかった結果を与えることに相当する。したがって、異なるデータ間隔のスペクトル同士を同一条件の荷重移動平均による微分処理をして比較する場合であると、それぞれの結果の縦軸を測定間隔でわり算する必要があることがわかるであろう。

市販のソフトウェアパッケージには、この点をきちんと解説して取り扱ったものもある。例えばMICROCAL Software社のOriginであると、マニュアル[4)]には

$$\frac{dy}{dx} \fallingdotseq \frac{1}{2}\left(\frac{y_{i+1}-y_i}{x_{i+1}-x_i}+\frac{y_i-y_{i-1}}{x_i-x_{i-1}}\right) \qquad ...(4)$$

とある。これは、等間隔データの場合であると $x_{i+1}-x_i = x_i - x_{i-1} = \Delta e$ となるから

$$\frac{dy}{dx} \fallingdotseq \frac{1}{2}\left(\frac{y_{i+1}-y_{i-1}}{\Delta e}\right) = \frac{1}{\Delta e}\left(\frac{y_{i+1}-y_{i-1}}{2}\right) \qquad ...(5)$$

と書き直す事ができる。これは、まさに１次式あるいは２次式によるSavitzkey-Golayの２次式５点平滑化微分フィルターの結果をデータ間隔でわり算した式である。

このように、微分フィルターによる処理をした場合であると、縦軸（Ｙ軸）に関する議論（Ｙ軸談義、すなわちＹ談）に注意を払うことが大変重要なのである。

３．微分とFourier変換

さて、この手の議論にどうしても欠かせないのがFourier変換である。「基礎知識が無いから...」などと気弱なことをおっしゃる向きには、例えば拙稿[3)]をご覧ありたい。そこでの議論がイメージ的にでも把握できれば、これからここで展開される議論も十分理解出来るはずである。

Fourier変換を用いると、荷重移動平均による平滑化とは、低周波成分をそのままに高周波成分を減衰させる操作（ローパスフィルターと呼ばれる）であることが示される。ノイズ成分は、普通のスペクトルデータでは高周波成分で影響が大きいため、その部分だけ減衰させることで影響を目立たなくしようとするのである。ここで、注意しておかねばならないのは、ノイズ＝高周波成分ではないことである。低周波領域ではノイズよりも本来のデータの成分の強度がずっと高いため、ノイズの影響がわかりにくくなっているだけの話である。

では、Fourier変換により周波数空間でみた微分とはどのようなものであろうか。これに対しては、残念ながら少々数学のお世話にならねばならない。

微分処理でも平滑化処理にしても、荷重移動平均法に分類される方法であれば一般に次のような式で表される。すなわち、処理されるデータを$\{x_n\}$、処理された結果を$\{y_n\}$、平滑化あるいは微分の為の係数を$\{c_n\}$とすると

$$y_n = \sum_{k=-K}^{K} c_k \cdot x_{n-k} \qquad ...(6)$$

と表される。この式で表される処理方法は、非巡回型ディジタルフィルターと呼ばれる。さて、この式のx_nに対し$x_n = \exp(j\omega n)$を代入することを考えよう。ここで、jは虚数単位である。また、ωは角周波数でFourier変換された後の周波数空間の横軸をなすものであるが、ここでは気にする必要はない。実際に代入してみると

$$y_n = \sum_{k=-K}^{K} c_k \cdot x_{n-k} = \sum_{k=-K}^{K} c_k \cdot \exp[j\omega(n-k)]$$

$$= \exp(j\omega n)\cdot\sum_{k=-K}^{K} c_k \cdot \exp(-j\omega k) \qquad ...(7)$$

となり、代入した関数$\exp(j\omega n)$が変化せずにそのままシグマ記号の前に出てくる事がわかる。数学の世界では、関数$\exp(j\omega n)$が(6)で与えられる系の固有関数であると言う。また、(7)に現れる$\Sigma\, c_k \cdot \exp(-j\omega k)$は系の伝達関数と呼ばれる。この関数の周波数空間での形（Fourier変換された結果）が、$\Sigma\, c_k$というディジタルフィルターの特性を与えるのである。

さらにここで注意しておきたい事は、(7)で示された$\Sigma\, c_k \cdot \exp(-j\omega k)$というのが$\Sigma\, c_k$のFiurier変換を与える式となっている事である。つまり、$\Sigma\, c_k \cdot \exp(-j\omega k)$をωに対する関数と見なすと、それは$\Sigma\, c_k$のFourier変換なのである。これは余談ではあるが、注意しておくと役にたつ。

さて、微分フィルターも$\Sigma\, c_k$の形で表されるのであるから、固有関数は(7)と同様やはり$\exp(j\omega k)$である。そうすると、伝達関数はどうなるであろうか。これは、大変簡単に求めることが出来て、

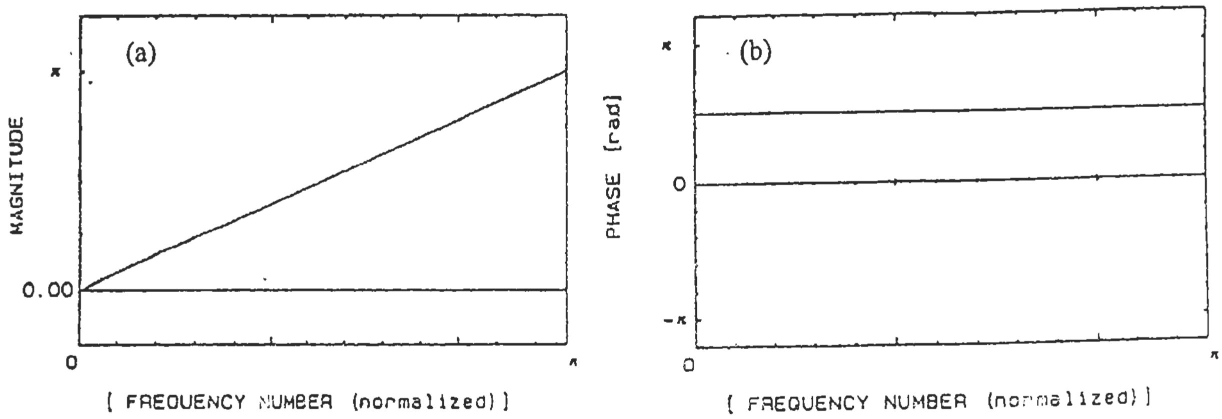


Fig.1　Transfer function of differential operation　(a) magnitude　(b) phase

$$\frac{d}{dk}\cdot\exp(j\ \omega\ k) = j\ \omega\cdot\exp(j\ \omega\ k) \qquad ...(8)$$

となる。これは、(6), (7)の議論とまったく同じで、関数 exp(j ω k)は両辺で不変であるから固有関数であり、したがって微分 d/dk に対応する伝達関数は j ωである。この関数は

$$j\,\omega = \omega\ (\cos \pi/2 + j\cdot\sin \pi/2) \qquad ...(9)$$

と書き直せる事から容易に想像がつかれると思うが、周波数空間では周波数（横軸）に対する単純な1次関数である。（さらに、すべての周波数領域で位相を 90 度進める役割をするのであるが、ここでの議論には重要ではない。）この様子を Fig.1 に示す。

Fig.1 よりわかる重要なことが、二つある。

一つ目は、微分することは、もとのデータの面積強度を０にすること、あるいはもとのデータの定数関数成分を０にすることと等しい。微分の伝達関数 j ωは、ω=0 のとき０である。したがって、もとのデータの ω=0 に相当する成分（定数関数成分）を０にしてしまうのである。あるいは、もとのデータを Fourier 変換した結果において、ω=0 の成分の大きさはもとのデータの面積強度（積分）に相当することが数学の教えるところである。

もう一つは、微分する事は高周波成分を強調すること、すなわちノイズの強調だということである。伝達関数は、Fig.1 の様に高い周波数ほど大きな成分を持っている。したがって、もとのデータを Fourier 変換した結果にこの伝達関数をかけてやると、高い周波数成分ほど強調されてしまうのである。S/N の悪いデータを単純に微分すると、ノイズだらけのグシャグシャな結果しか得られない元凶がここにある。

以上の議論を、もう少し視覚的に捉えてみよう。Fig.2(a)は、通常の Lorentz 関数の例であり.(b)はその Fourier 変換のマグニチュード、Fig.2(c)は(a)の微分を式で求めたものであり(d)はその Fourier 変換である。先ほどからの議論や以前の講義 [3]でおわかりの通り、Fig.2(c)の Fourier 変換の結果を Fig.2(a)の Fourier 変換の結果でわり算すると（Fig.2(d)を Fig.2(b)でわり算するのではない）、微分の伝達関数が求まるはずである。その結果が Fig.3(a)である（縦軸はノーマルで対数プロットではないことに注意）。有限区間のデータであることからの高周波成分への影響のおかげで中央部の周波数成分が異常に高くなってしまっている。この部分の位置を Fig.2(b)と比較してみると、ちょうど真ん中のグラフが折れ曲がってデコボコになっている部分に対応していることがわかる。この部分は、データが有限区間であることに起因する部分であって、処理上の問題ではない。しかしこれでは見にくいので、この部分をカットしたのが Fig.3(b)である。カットした部分より左側（有限区間であることの影響がほとんど無い部分）をみると、確かに直線的な伝達関数であることが見て取れるであろう。

ここまでの議論で、微分処理は大変ノイズに弱い事がなんとなくわかって頂けたのではないかと思う。したがって、ノイズの影響を押さえながら手軽に微分したいという要求に対するものとして、Savitzky-Golay の平滑化微分フィルターの様な色々な方法が提案されているわけである。

さらに、もとのデータの測定点間隔をつめる為に補間法を用いて推定した場合、推定されたデータを微分すると推定誤差が増幅され

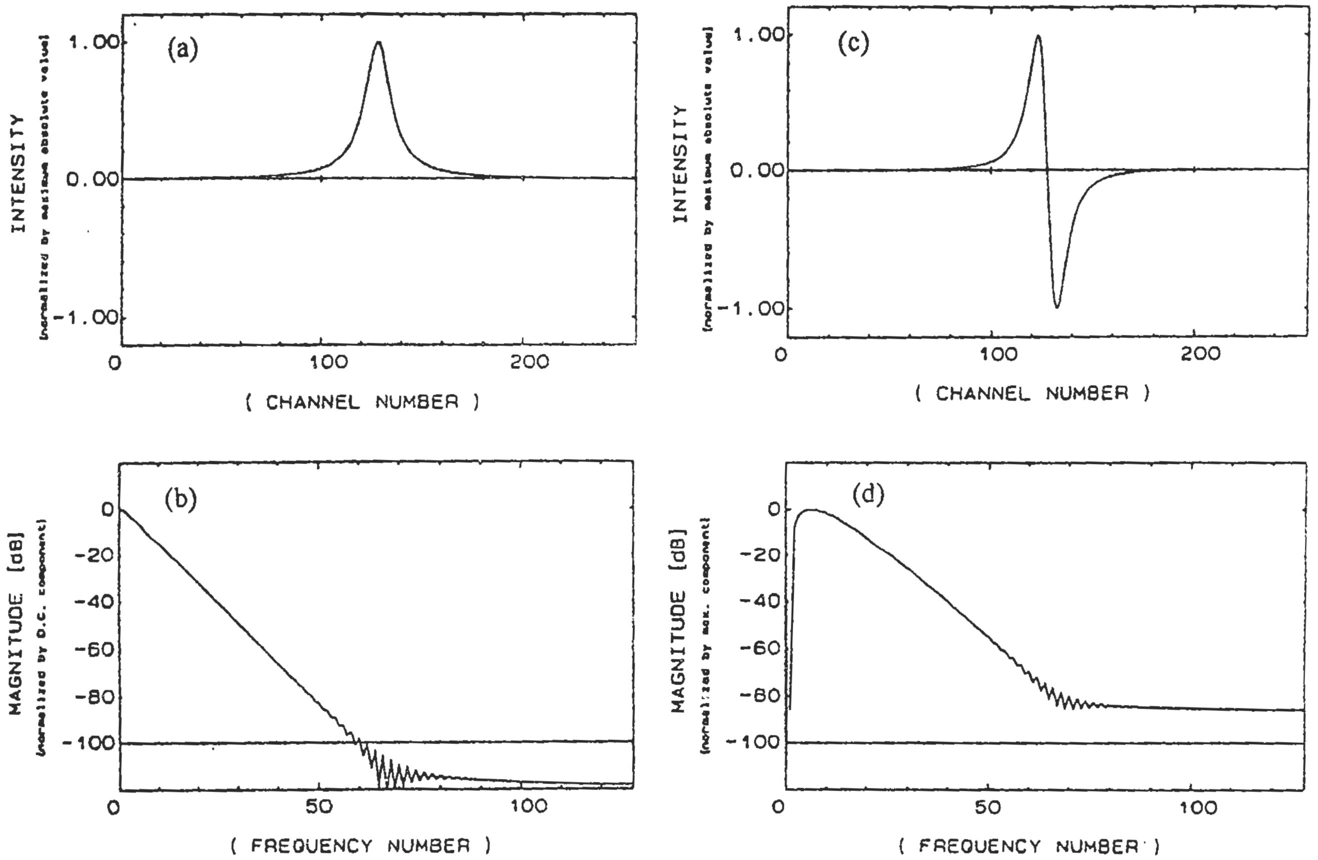


Fig.2 Lorentz curve and its differntial (a) original (b) Fourier transformation of (a) (c) differential of (a) (d) Fourier transformation of (c)

てしまう例が示されていた前号の解説[2]の後半の部分も、以上の事から説明が出来る。「補間して推定されたデータが正確でない」ということは、本来なめらかであるはずのデータに微少なデコボコを作ってしまうことと同じである。微少なデコボコは高い周波数成分を大量に含んでおり、微分による高周波成分の強調作用により、ノイズと似たような結果を与えるのである。

しかし一方で、この欠点は有用な特性であることも忘れてはならない。スペクトルが持っている微細構造に依存した微少な変化は、やはりノイズと同様に高周波成分を大量に含んでいる。したがって、微分をかければこの微細な変化を明確にすることができるのである。ただし、もとのデータの S/N が十分良い

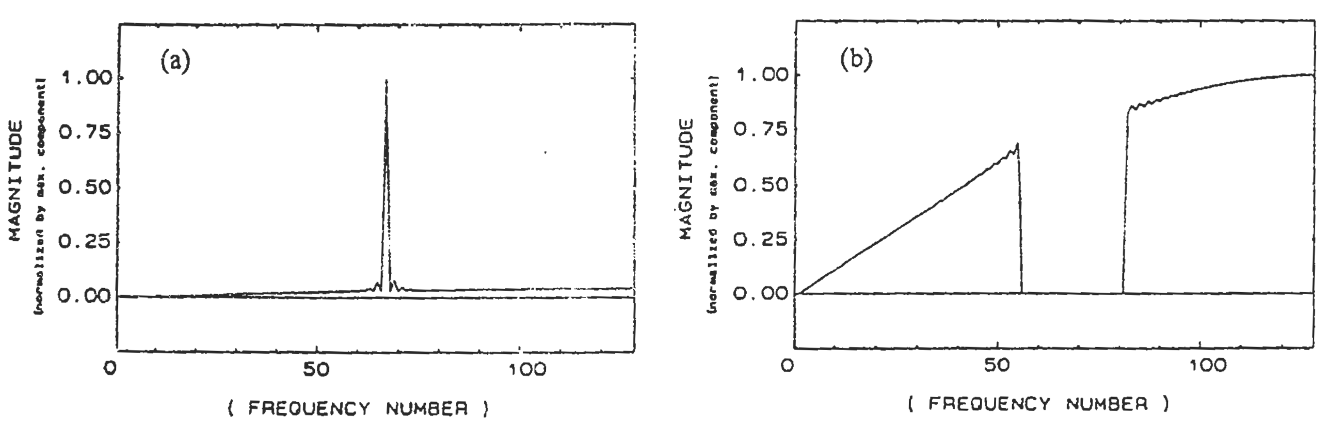


Fig.3 (a) A calculation result of Fig.2(d) divided by Fig.2(b) at frequency domain
(b) re-plot of (a) without a part which has abnormal magnitude

（微細な変化に起因する高周波数成分がノイズに起因するものより十分に大きい）ことが絶対条件であることは言うまでもない。

4．感覚的な間隔のお話

2.の議論から、データ処理においては測定点の間隔が重要な意味を持つことが実感されたであろう。普段コンピュータによって扱われているようなスペクトルデータは、「有限長の離散変数」と呼ばれる。この離散変数を扱った議論では、この様に変数の間隔をそのまま考慮する場合と規格化して考える場合とが存在するため、注意しないと混乱してしまう。

これから先の議論は、Origin の様な点間隔の値まで用いる方法ではなく、Savitzky-Golay の平滑化微分フィルターの様な間隔を規格化した方法を対象とする。間隔を規格化するような処理法ではが結果の縦軸に違いが出たが、これは結果を間隔の値で割ってやることで簡単に補正が出来る。では、影響はそれだけであろうか。

よく受ける質問の一つに、「同じスペクトルを粗いステップで測定した場合と細かいステップで測定した場合、微分処理の条件（点数）はどうすればよいか」というものがある。この問題に答えることがこの小文の最終的な目的でもあるのだが、その前に、粗いステップでの測定と細かいステップでの測定が、本質的になにを意味しているか、また間隔を規格化した場合にはどのような問題に置き換わるかを考えてみよう。

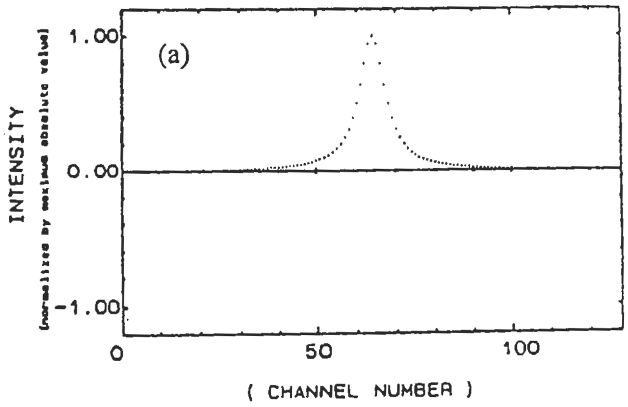
まず、基礎知識として簡単な数式を示しておく。例えば、Fig.2 の(a)と(b)の様な Fourier 変換操作を行ったときの、この二つの横軸の点間隔を対応づける関係式は次の様になる。すなわち、元の全点数 n 点のデータの点間隔を $\triangle e$ としたとき、その Fourier 変換された周波数空間の横軸における i 番目の周波数成分 ω_i，および間隔 $\triangle\omega$ は

$$\omega_i = \frac{2\pi}{\triangle e}\cdot\frac{i}{n}$$

$$\triangle\omega = \frac{2\pi}{n\cdot\triangle e} \qquad \text{...(10)}$$

となることが、どの教科書にも書かれている。ただし、周波数空間での変換結果の形状は全領域の真ん中を中心として左右対称となるため、通常の図示では 0（直流成分）から真ん中の周波数 $\omega_k = \pi / \triangle e$ までが示される（したがって、プロットされる点数は元のデータの半分、すなわち n/2 点のプロットとなるのである）。この ω_k を、ナイキスト周波数と呼ぶ。

Fig.4 に、例として 2 つの Lorentz 関数によるピークを示そう。(a)(b)両方とも同じ幅と高さを持っているが、構成している点の間隔が(b)は(a)の 1/4 になっている。このため、(b)の全データ点数(512 点)は(a)の全点数(128 点)の 4 倍となっている。Fig.5 は、Fig.4 の二つのピークの周波数空間での形である。高周波領域も見やすいように、縦軸は対数でプロットしている。Fig.4 において、(b)の点間隔は(a)の 1/4 であるから、(9)からもわかるとおり周波数は 4 倍細かい成分まで含んでいるはずである。たしかに、Fig.5 の(a)は(b)の左側 1/4 の部分のデータしかもっていない。これは、Figs.5(a),(b)を Fig.6(a),(b)の様に書き直してみると、感覚的に理解できよう。点間隔を細かくとればとるほど、データに含まれる高周波成分がより高い周波数領域までのびていくの



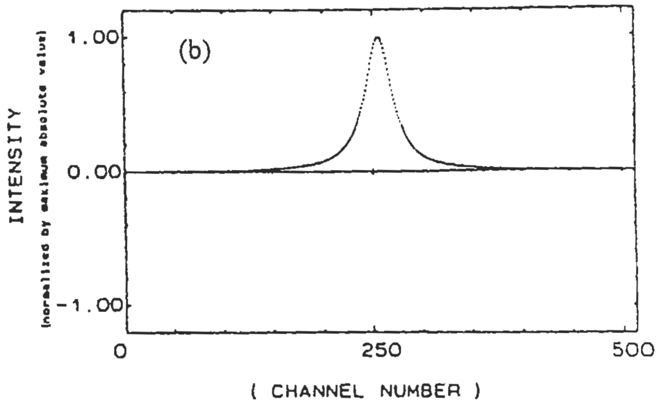


Fig.4 (a) A lorentz type peak constructed with 128 points
(b) The same peak at the same region as (a) with 512 points

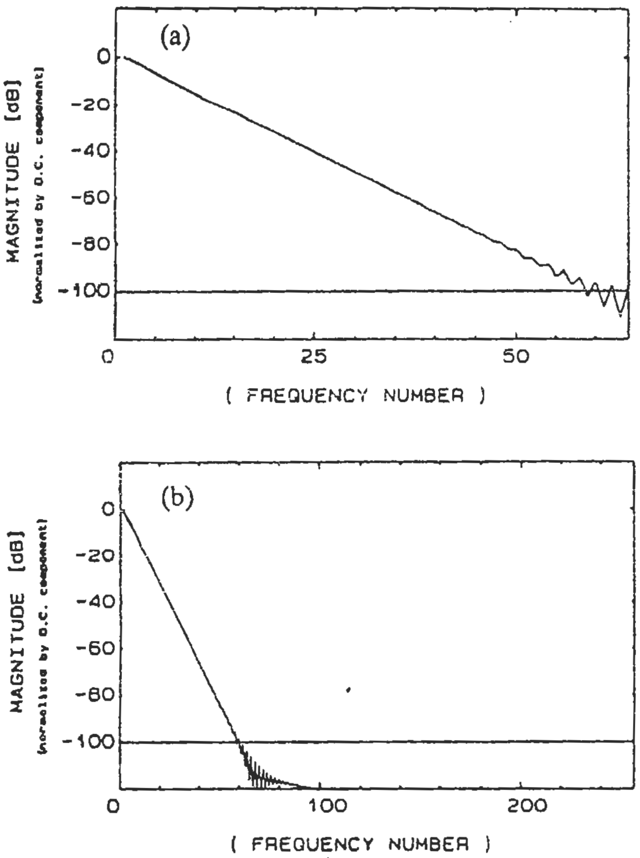


Fig.5　(a) Fourier transformation of Fig.4(a)
(b) Fourier transformation of Fig.4(b)

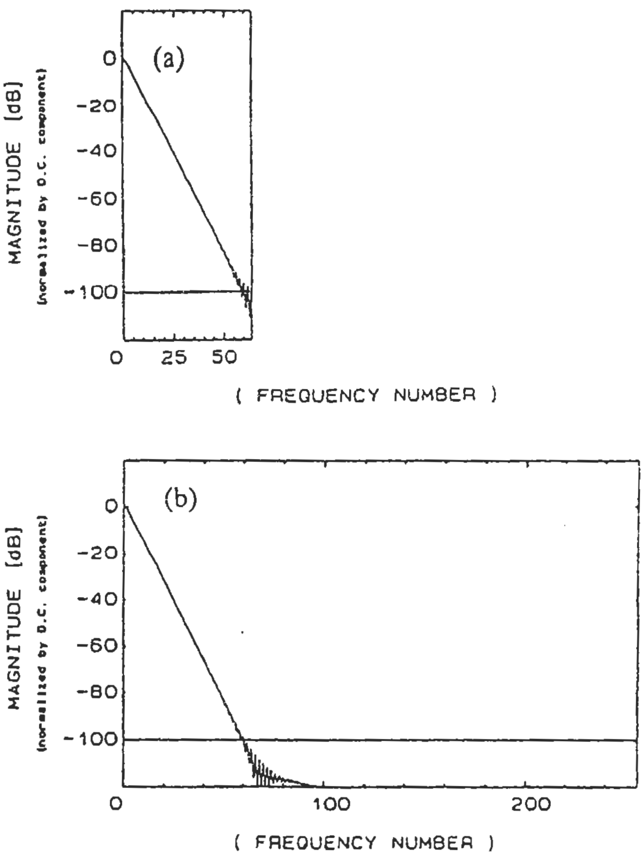


Fig.6　The re-plots of Fig.5 with the same scale of abscissa. (a) is corressponding to Fig.5(a), and (b) to Fig.5 (b)

である。

では、間隔を規格化するとどのようになるのであろうか。Figs.4(a),(b)を再度例にとろう。

間隔を規格化するということは、この二つのデータの間隔を等くするということであるから、それにあわせてプロットしなおすとFigs.7(a),(b)になる。しかし、点間隔が同じであるから、両方に含まれている周波数成分において、もっとも高い周波数も同じなのである。これが両方とも⊿eが同じだからであることは、(9)からも理解できよう。したがって、Fig.5(a),(b)そのままが正確な表示ということになる。

以上の議論から、点数を「粗くとる」「細

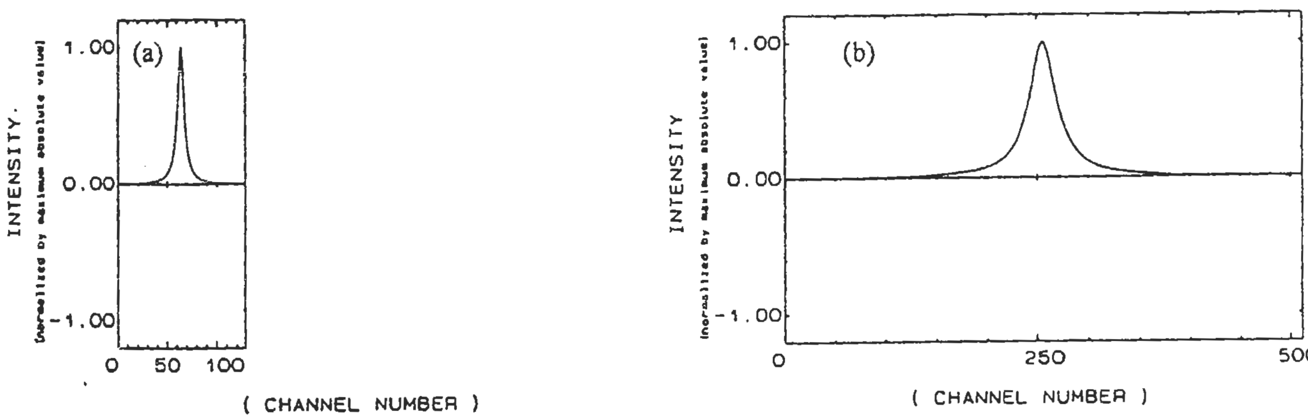


Fig.7　The re-plots of Fig.4 with the same scale of abscissa. (a) is corressponding to Fig.4(a), and (b) to Fig.4 (b)

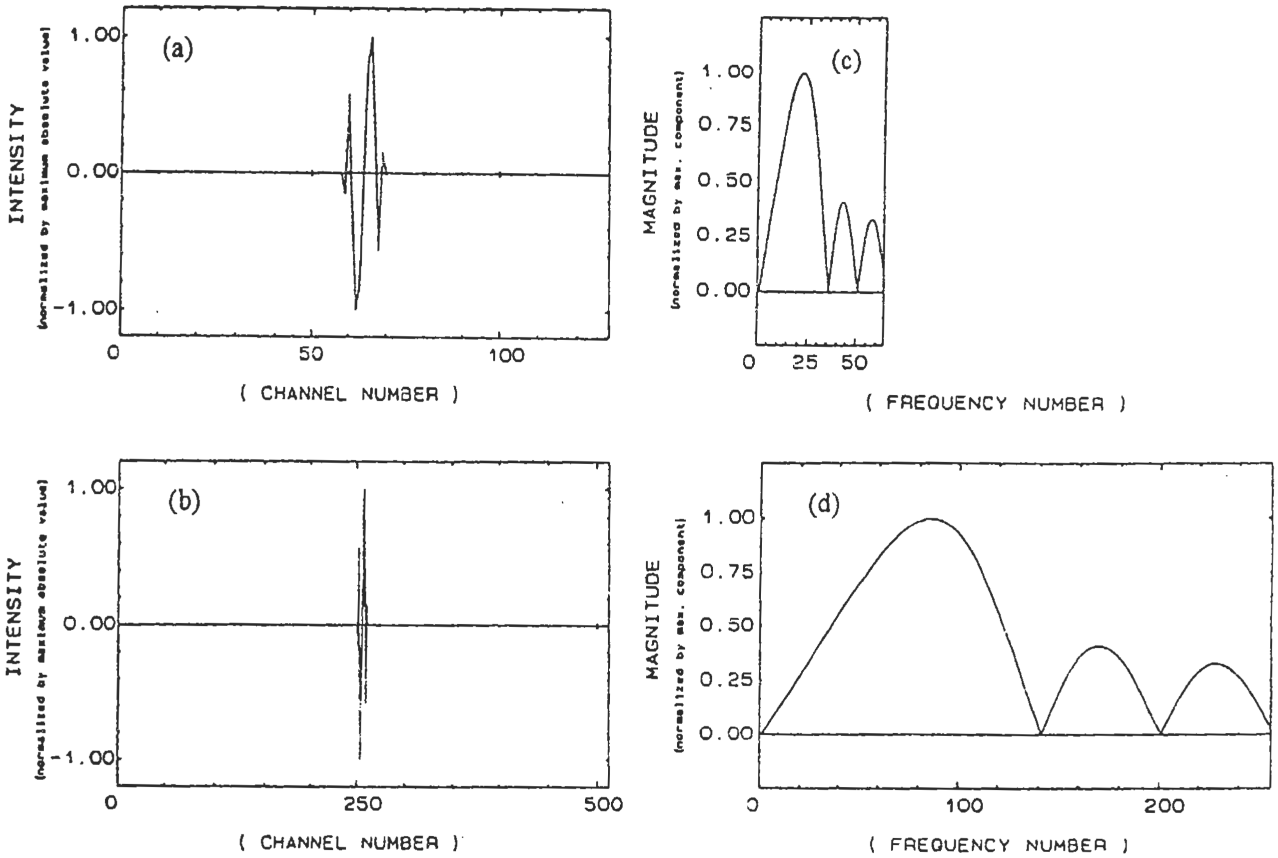


Fig.8　Savitzky-Golay 11points sextic differential filter function at the region with 128 points (a), and 512 points (b). The widths of both regions are same. (c) and (d) are the Fourier transformations of (a) and (b) respectively with the same scale of abcissa.

かくとる」ということが、実際にデータにどういう性質を持たせることになるのかが感覚的なイメージとして捉えることができたのではないかと期待している。結局、「データを細かくとる」ということは、「データの高周波成分まで正確に計測する」ということを意味する。したがって、何かさらに（微分などの）処理をする事がある場合は、点間隔を粗くとる場合よりも S/N をよくしないと、結局ノイズ成分ばかりを増やすことになりかねないのである。また、いい加減な内挿による点数の水増しも、高周波成分の正確な推定とはならないため、微分処理などで本来の信号成分以外の成分が強調されてしまったりするわけである。

次に、全点数の異なるデータに、例えば同じ点数の微分処理をした場合、どこがどのように違うかを考えてみよう。

ここまでの議論から、例えば Savitzky-Golay の平滑化微分フィルターを用いる場合であると、本来はデータ間隔を規格化した場合の議論だけで十分である。しかし、先の Lorentz 関数の時のような比較を実際にやることで、復習もかね、かつ実感を深める役に立つであろう。もちろん、結果を元のデータ間隔で補正すると（もちろん測定時のデータ間隔がどのデータでも同じなのであればその必要はないが）互いに直接比較できるデータとなることも言うまでもない。

この様な移動平均の処理に関しては、Fourier 変換したあとの形（周波数空間での伝達関数の形）をみることが一番わかりやすいのは、ここまでの議論と同じである。ということで、以下、Savitzky-Golay の 6 次 11 点平滑化微分フィルターを 128 点のデータあるいは 512 点のデータにかけた場合を例にとり、周波数空間の様子を比較してみることにする。

まず、同じ測定領域（例えば、同じエネルギー範囲）で測定間隔が異なった場合を考える（測定されたスペクトルは、Figs.4(a),(c)と同じ感じになるだろう）。これに 11 点平滑化処理をかけるというのは、この重みづけの係数からなる同じ全点数と点間隔を持つ関数と

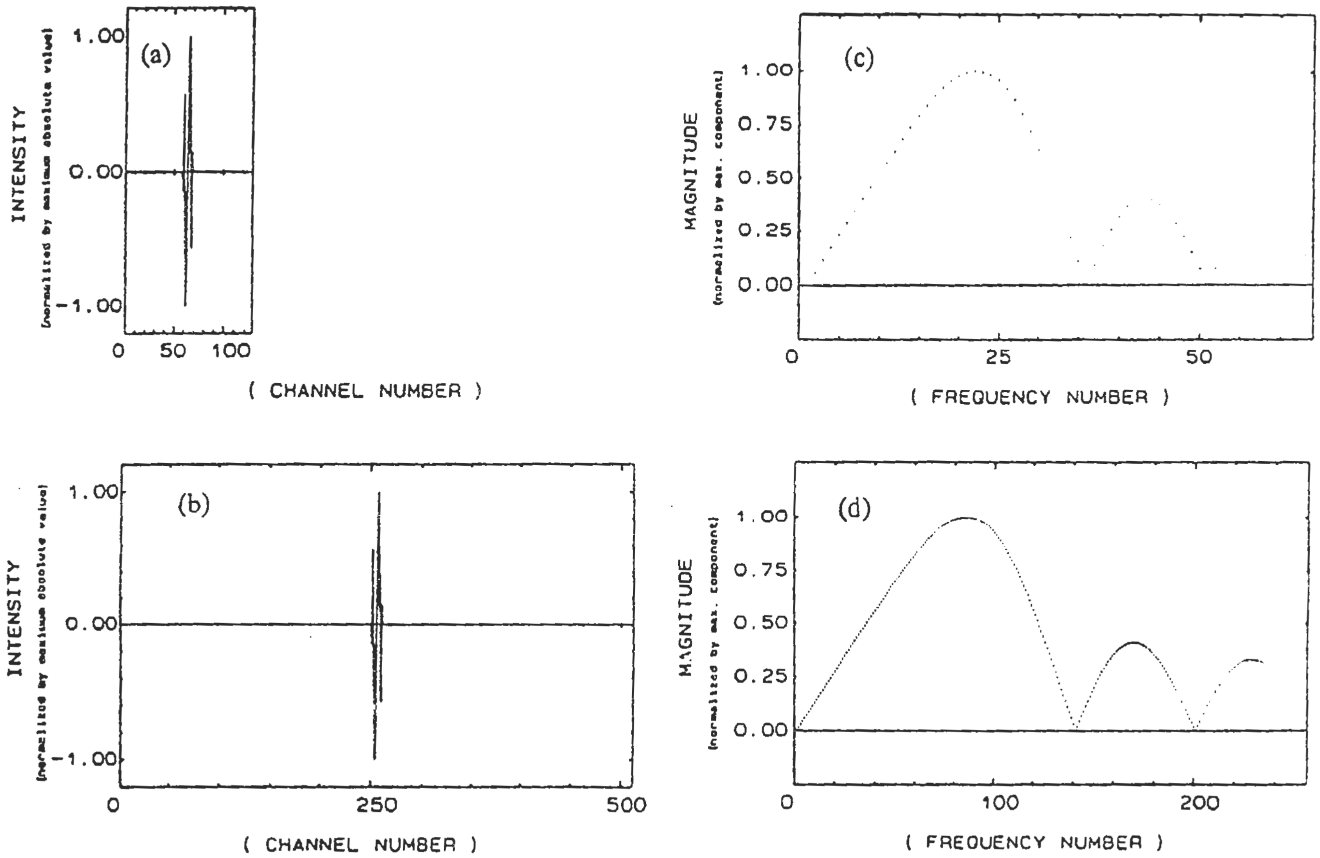


Fig.9　Savitzky-Golay 11points sextic differential filter function at the region with 128 points (a), and 512 points (b). The scales of both abcissas are same.　(c) and (d) are the Fourier transformations of (a) and (b) respectively. The widths of both regions are same.

の畳み込み演算（convolution）に相当する[3]。まあ、そういう難しい話は置いておいて、結局この場合の平滑化微分に相当する関数は、Figs.8(a),(b)の様になる。(a)が 128 点、(b)が 512 点の場合である。いずれも微分点数は 11 点であるので、間隔が狭い場合関数の存在範囲も狭い事がわかる。これらの Fourier 変換の結果が Figs.8(c),(d)であるが、(d)の方が高周波成分を４倍多く含んでいるのでこの様な図となる。

これから、例えば Figs.6(a),(b)を重ね合わせて見て頂けるとさらに理解しやすくなると思うが、点間隔の大きいデータに 11 点微分をかける（Fig.6(a)に Fig.8(c)を掛けるのとほぼ同じ）場合と、点間隔の小さいデータに 11 点微分をかける（Fig.6(b)に Fig.8(d)を掛ける）場合の違いを予想できる。すなわち、Fig.6(b)に Fig.8(d)を掛ける場合の方が、Fig.6(a)に Fig.8(c)を掛ける場合よりも、データに含まれている主要な信号成分（Fig.6(a)あるいは(c)における左側からおりてくる直線の部分）に対するよけいな構造をつくらない（Fig.8(c)あるいは(d)の右側のデコボコの部分では、Fig.6(b)に Fig.8(d)を掛ける場合の方が、あまり Fig.6(b)左側の直線の部分かからない）ことがわかる。これは、もともとの信号成分に微分操作に必要な変形だけを与え、他の変形を加えないことを意味する。つまり、ひずみの少ないより正確な結果が得られるだろうと予測できる。

一方、同じ元のデータが同じ点間隔の場合であればどうであろうか。この場合、測定スペクトルは Fig.7(a)あるいは(b)のケースとなる。これは、同一スペクトル上の幅広いピークとシャープなピークに対する微分処理の影響の違いの検討とよく似たケースであることに気がつかれると思う。さて、Fig.7(a)あるいは(b)に対応する微分関数は Fig.9(a)および(b)の様になり、その Fourier 変換は、Fig.9(c)および(d)の様になる。Fig.7 の場合と同様、Fourier 変換された結果は全点数だけが違うものの、一番右側の周波数の値は同じであるた

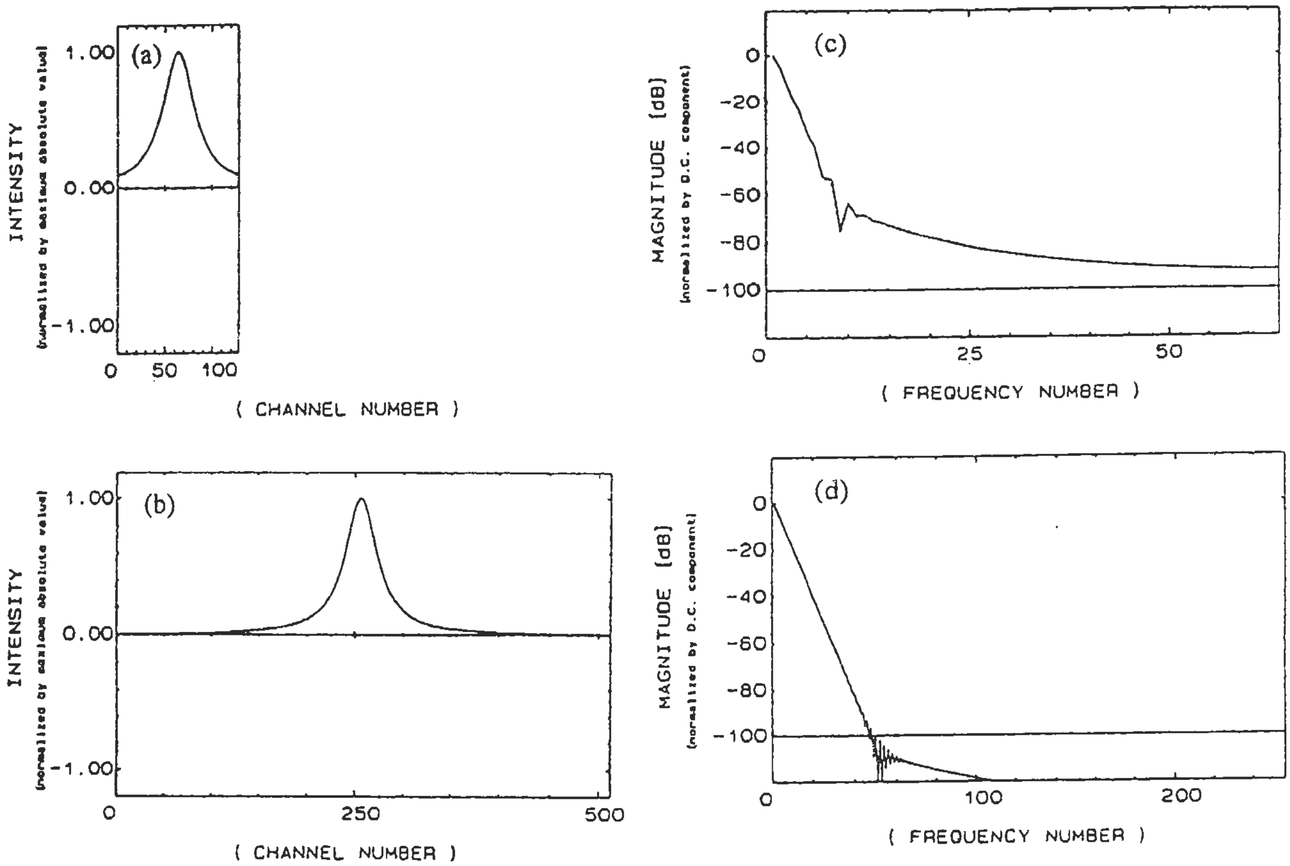


Fig.10　Two same Lorentz curves with same width of step and with differnt width of region, (a) 128 points, (b) 512 points. (c) and (d) are the Fourier transformations of (a) and (b) respectively. The widths of both regions are same.

め、グラフの幅は同じになる。

この Figs. 9 (c),(d)が Fig.5(a),(b)にどう作用するかは、先のケースと同様にして検討できる。やはり重ね合わせてみると良いが、Fig.5(b)に対する Fig.9(d)の影響（幅の広いピークに対する処理の影響）の方が、もう片方よりも信号成分に不必要な変形を加えない様に見える。つまり、一見すると幅の広いピークの方が受ける影響が少ないだろうと見えるのである。

実は、この結論は、平滑化だけの場合であると正しい。しかし、微分の場合は正しくないのであるが、それは後で議論しよう。

ついでにもう一つ、間隔の話とはちと離れるが、同じピークを同じ点間隔で測定した場合、ピーク幅に対する測定領域は測定結果にどう影響するかを示そう。Fig.10 は半値幅 40 点の Lorentz 関数であるが、(a)は測定点が 128 点、(b)は 512 点である。この二つのデータの Fourier 変換がそれぞれ(c)および(d)である。測定点間隔が同じであるから、最高高周波数も同じであるため、(c)と(d)の全領域は同じである。これを見て一目瞭然であるが、(d)の方が低周波成分もより緻密であり、よけいな高周波成分も少ない。(c)の高周波成分が多いのは、要するに元のデータが本来持っていた裾の信号を測定領域を小さくすることで省略したしまったためなのである。したがって、データ処理時の困難さをいやがおうにも高めてくれる高周波成分を不必要に強調したデータを得ないためにも、スペクトルのデータはなるべく広くとるべきなのである。これをして、手抜きをしてはいけない教訓として頂きたい。

参考までに、Fig.11 に Savitzky-Golay の 6 次平滑化微分フィルターの周波数空間での形（伝達関数）が点数によってどう変わるかを示しておく。点数が増えると、左側の一番大きな山の幅が小さくなり、その右側のデコボコの部分が増えていくことがわかる。この左側の一番大きな山が微分の役割を果たし、その右側は総て高周波成分を減衰させる（つま

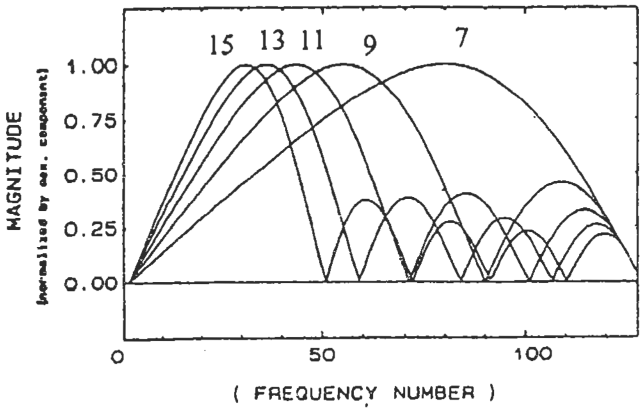


Fig.11　The changes of transfer function of Savitzky-Golay sextic differential filter function due to the difference of filtering points.

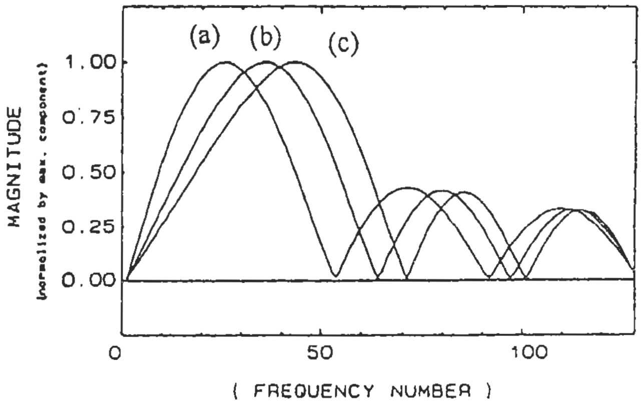


Fig.12　The changes of transfer function of Savitzky-Golay differential filter function due to the difference of degree of prinomial. (a) 7 points quadratic, (b) 9 points quartic, (c) 11 points sextic.

り、平滑化の効果）役割をしていると考えて良い。そうすると、点数が増えるほど平滑化の効果が強くなり、これによる歪みも大きくなることが予想できる。

また、Fig.12 に 2 次 7 点、4 次 9 点、6 次 11 点の伝達関数を示す。一番大きな山の左側の形が直線に近いこと（あるいは Fig.3(b)の左側の部分に近いこと）が、正確な微分結果を与えるかどうかを支配する。そしてそれは、フィルターの次数（何次の関数を仮定した微分か）できまるのである。

5．Savitzky-Golay平滑化微分フィルターの使用最適条件

さて、以上色々と理屈をこねてきたが、この小文をお読みの方の多くは「理屈よりもどうすればちゃんと使えるか、具体的な条件を教えて欲しい」と考えておられるにちがいない。その疑問にある程度お答えすべく、シミュレーションによる使用条件の検討を行ってみた結果について、以下に簡単に示しておこう。

通常、平滑化微分フィルターを利用する場合は同じデータで測定点間隔が異なる場合が問題になるケースは少ないであろう。したがって、データの S/N とピークの幅の広い狭いで使用条件がとうかわるかに焦点を絞った。また、ピークの形状になにを用いるかの問題があるが、今回は裾の広い Lorentz 関数を対象とした。

まず、平滑化微分フィルターであるが、基本的には任意の次数と点数（もちろん奇数であり）、次数によって下限が決まる）で重み係数を発生できる様なルーチンを作製した。ただし、計算過程での精度がどの程度であればよいかの予想がつかなかったため、重みづけ係数と規格化係数は総て整数（一組の数値は総て互いに素であるようにする）で発生させた。しかし、使用したのが N^{88}-BASIC であるため整数精度が 12 桁しかとれず、6 次では 15 点が上限であった。8 次では 1 点しかとれなかったため、それ以上の次数は対象からはずした。また、2 次および 4 次は、31 点まで発生させた。

シミュレーション用のピークは、全点数を 256 点とし、ピークの最大強度が 100, 400, 2500, 10000, 40000, 250000 および 1000000、かつに半値幅が 5 点、10 点、20 点および 30 点になるように発生させた。さらに、別に独立に発生させた平均値 0 分散 1 のガウス分布に従うとみなせる乱数とピークの各点の強度の平方根との積をその点にさらに加える事で、ノイズ付きのピークとした。

もとの（ノイズのない）ピークの関数型がわかっているので、その微分も解析的に求められる。それを真の答えとし、微分フィルターをかけた結果とを比較することで、フィルターの次数と点数の条件の善し悪しを判別することが出来る。ただし、結果はノイズの出方にも左右されるため、同じピーク条件での計算を各々について 10 回行い、その平均をとることで結果を評価することとした。

さて、結果である。大量のデータを総て示すのも煩わしいので、要点だけを示しながら話を進めることにしよう。なはともあれ、まず Fig.13 を見ていただきたい。2 つの図いず

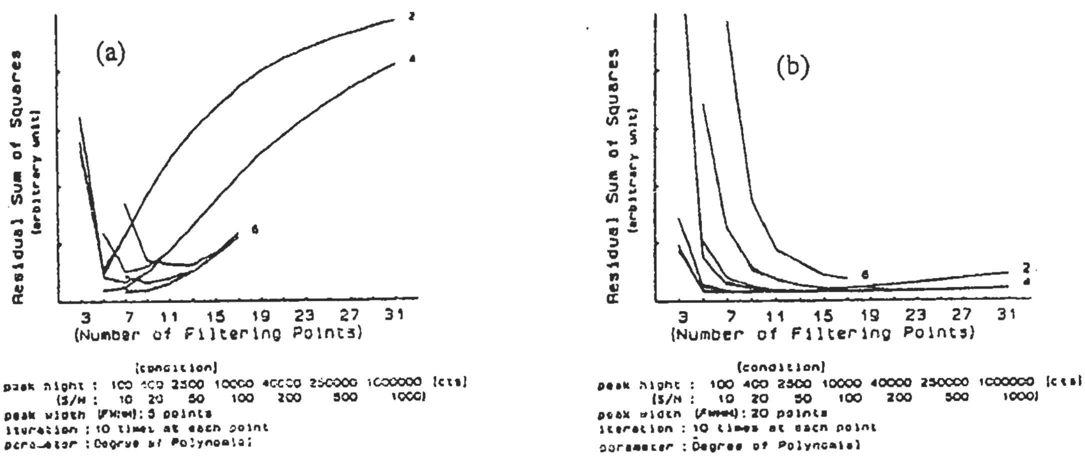


Fig.13　The changes of the normalized residual sum of squares obtained from the simulation results with Lorentz type peak assumed several width and several S/N condtions. (a) FWHM of peak　was 5 points, (b) 20 points.

れも、縦軸は結果と答えの一致度（規格化された残差二乗和、小さいほど一致が良いとみなす）で、横軸はフィルターの項数（微分点数）である。Fig.13(a)は幅 5 点のピーク、(b)は幅 20 点のピークでの結果である。

この二つをみると、次の 2 点がわかる。

まず一つ目は、（幅 20 点のピークにおける 6 次の条件だけは少々厳しいものの）それぞれの次数の条件で最適な点数があるということである。

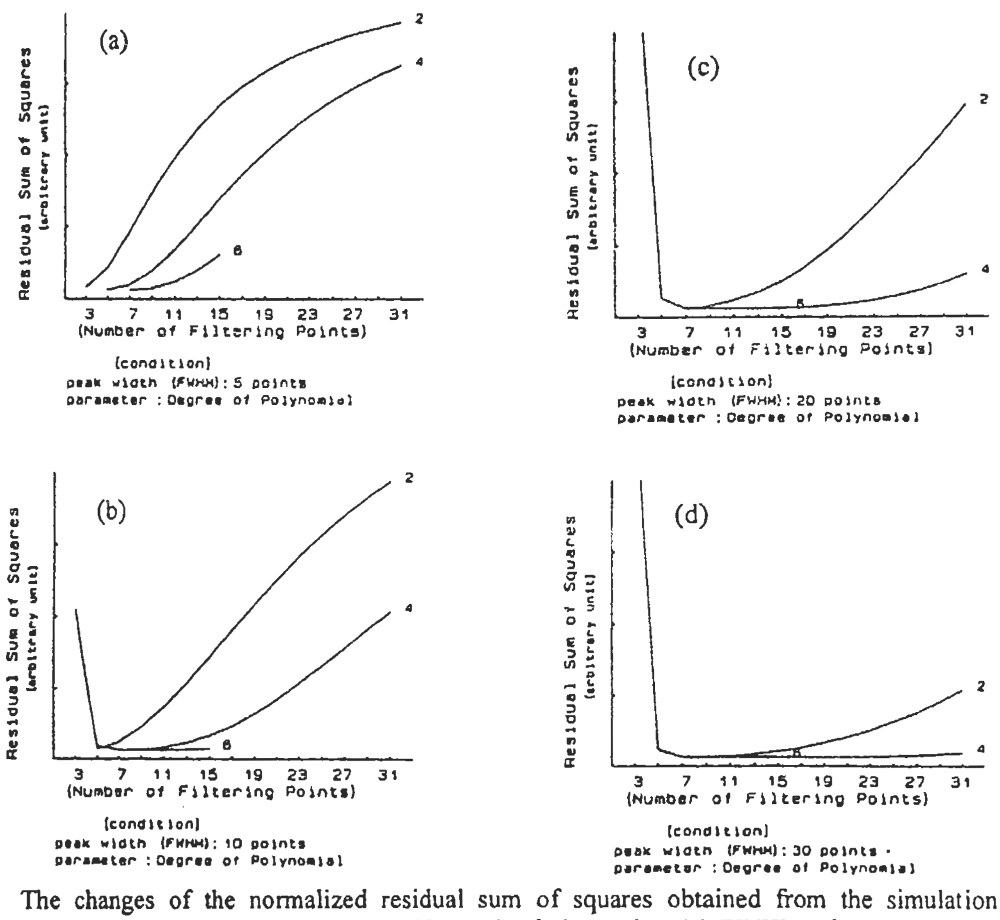


Fig.14　The changes of the normalized residual sum of squares obtained from the simulation results with Lorentz type peak assumed several width and without simulation noise. (a) FWHM of peak　was 5 points, (b) 10 points, (c) 20 points, (d) 30 points.

もう一つは、(a)の方では顕著であるが、微分フィルターの次数が同じ場合、曲線は少ない点数ではばらつくものの点数が増えるにしたがってS/Nに関係なくほぼ一致する傾向を示していることである。しかも、最適な条件を与える微分点数は、S/Nにあまり左右されないことも見て取れる。また、S/Nの影響は幅の広いピークの方が厳しい事もわかる。

少ない点数の条件では、Fig.11などで示したとおり平滑化の効果が小さいためノイズの影響も大きく、結果のばらつきが目立つために、高い点数の部分の様なS/Nの違う場合の曲線同士の一致が得られないと考えられる。したがって、少ない点数の部分でもシミュレーションの繰り返し回数を十分にとれば、多い点数で場合と同様な一致度が得られるものと考えられる。

そうすると、最適条件はノイズ無しのピークに対して同様のシミュレーションをやってみれば良い事になる。その結果を、４つの半値幅の条件すべてについてFig.14に示す。(c)と(d)は変化が小さいので、縦軸を拡大してある。これを見ると、半値幅が５点の場合の一番少ない点数が最適であり、他はそれぞれ別に最適点をもっていることがわかる。これらの最適点の点数と残差二乗和の値を、Table.1にまとめておく。

Table.1を見ると、なるべく次数の高い条件が良い事が、まずわかる。これは、Fig.11で示したとおり、高い次数にするほど一番左の山の左側のスロープが直線に近づく為である。また、最適点が存在するのは、微分による高さの強調と平滑化による高さの抑制のトレードオフ点が存在するためである。これは、微分したときに出来る極大（あるいは極小）部の微分点数による変化を見てみると明らかである。

Figs.15(a),(b)は、それぞれノイズの無い半値幅5点と20点のピークに対する微分処理結果の極大値の真の値との比率をパーセントで表示したものである。100%がもとの高さであり、200%では倍の高さが結果として得られることを意味する。

これをみると、半値幅が5点のピークの場合であると、いずれも最小点数の時がもっとも100%に近く、以下極大ピークはつぶれていく一方であることがわかる。これは、最適点がそれぞれの次数条件での最小点であることと一致する。また、半値幅が20点のピークの場合であると、6次の結果は見づらいが、2次や4次では少ない微分点数では大変極大ピークが強調され、高い点数では逆につぶれていくのが明瞭に見て取れるであろう。

ということで、Table.1の結果を参照して、微分したいスペクトルの「もっとも幅の広いピーク」にあわせた条件を利用すると、望みうるもっとも正確な処理結果が得られる事となる。平滑化の場合と逆なのである。

もっとも、世の中の装置に搭載されているソフトウェアで、Savitzky-Golayの6次平滑化微分フィルターの利用が可能なものはそう多くないと考えられる。ほとんどの場合は２次であろうと思われるので、Table.1の２次の結果をご参照頂いて条件を決めると良いと考え

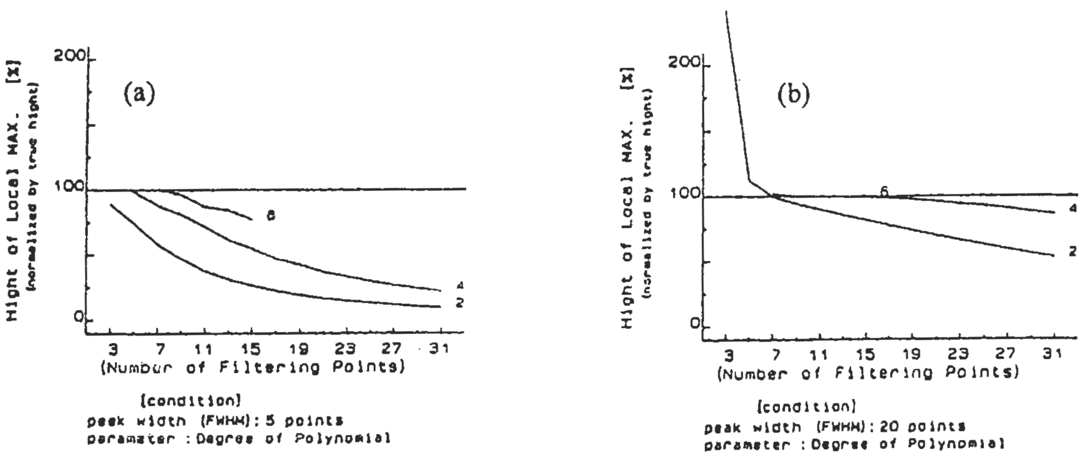


Fig.15 The changes of the hight of the local macimum on the differntial peak obtained from the simulation results with Lorentz type peak assumed several width and without simulation noise. (a) FWHM of peak was 5 points, (b) 20 points.

Table.1

The optimums condition for Svitzky-Golay smoothing differential filter are presented here. The conditions about peak width (FWHM) are shown at left column. The conditions about degree of polynomial are shown at upper row. And, the values of residual sum of squares at each optimum condition are also shown with the number of optimum filtering points.

	quadratic	quartic	sextic
FWHM = 5 points	3 points 1.77×10^{-5}	5 points 3.60×10^{-6}	7 points 1.14×10^{-6}
FWHM = 10 points	5 points 3.99×10^{-6}	7 points 1.72×10^{-7}	9 points 2.52×10^{-8}
FWHM = 20 points	7 points 1.24×10^{-7}	9 points 4.98×10^{-9}	9 points 9.43×10^{-12}
FWHM = 30 points	9 points 1.38×10^{-7}	9 points 2.07×10^{-10}	11 points 1.52×10^{-12}

Table 2

The coefficients and normalizing coefficient for filtering points of Savitzky-Golay sextic smoothing differential filter. Filtering points are shown in the left column.

7	-1　9 -45　0　45 -9　1 norm = 60
9	-254　1381 -2269 -2879　0　2879　2269 -1381　254 norm = 8580
11	-573　2166 -1249 -3774 -3084　0　3084　3774　1249 -2166　573 norm = 17160
13	-9647　27093 -12 -33511 -45741 -31380　0　31380　45741　33511　12 -27093 9647 norm = 291720
15	-78351　169819　65229 -130506 -266401 -279975 -175125　0　175125 279975　266401　130506 -65229 -169819　78351 norm = 2519400
17	-16400592599040　28079353935360　18990938903040 -9872919912960 -36784056130560 -50068262868480 -46094500846080 -27264106483200 0　27264106483200　46094500846080　50068262868480　36784056130560 9872919912960 -18990938903040 -28079353935360　16400592599040 norm = 573724701388801

る。また自作派の方々の為に、Savitzky-Golay の 6 次平滑化微分フィルターの各項の値と規格化定数の値を、7 点から 15 点に関して Table.2 に示しておこう。とにかく、結局は幅広いピークほど伝達関数の直線部の形状の善し悪しが鍵を握り（次数が高い必要があり）、正確な微分結果を得るのが結構難しいのだという実感はもって頂けたに違いない。

6．年寄りの退場

以上、かなり細かい議論を展開してみたが、実際に微分するときの注意をまとめると以下の用になろうか。

a. 微分するのであれば、データの S/N は十分とること。シャープなピークなら 1000000 カウントでほぼ理想的な結果が得られるのである事を念頭に置くと良い。

b. 点数と次数は、Table.1 を参考にして決定すると良いであろう。

c. 微分するデータは、たとえナロースペクトルであってもなるべく裾も十分に広い領域で測定すべきである。

というわけで、以上のような老婆心による言わずもがなの忠告をとりあえずの結びとし、この小文を閉じさせていただく。

参考文献

1) 児島敦子 ; Journal of Surface Analysis Vol.2 No.3 p.462 (1996)

2) 吉原一紘 ; ibid. Vol.2 No.3 p.463 (1996)

3) 福島　整 ; ibid. Vol.2 No.3 p.359 (1996)

4) ORIGIN™ ユーザーマニュアル ver.4.0j MICROCAL Software 社　p.271 (1996)

質疑応答

査読者　田沼繁夫

（ジャパンエナジー分析センター）

田沼：この講義では、データが等間隔の場合に限られていますが、不当間隔の場合はなにか論文等があったら紹介していただけませんか。不当間隔もかなり使いたいことがありますので。

著者：まず、微分フィルターを用いる方法は、数値微分の中でも特殊なものであることを知っておく必要があります。

本来の数値微分法は、補間関数の微分であたえられるのが一般的です。したがって、データが等間隔である必要はなくなるわけですね。また、精度の高い結果を得ようとするために Richardson の補外法の応用などもあります。もともとのデータがノイズを含んでいない場合、もっともなめらかな補間関数である Lagrange の補間公式を微分するのが教科書の教えるところです。また、ほとんど教科書は「精度の高い結果を得る場合には、前もってデータを滑らかにしておくこと」と書いてあるのが普通でして、どうしても大きなばらつきの避けられないデータに対しては、教科書は無力の様です。

補間関数の利用を解説している教科書[*]の一つには、（もちろんデータが十分な精度を持っている場合ですが）3 次スプライン補間関数を利用し、その微分から必要な点の微係数を求めるやり方が良い近似であると記述されています。これはもちろん、スプライン関数の隣り合ったノットの間に存在する 1 点についての計算の話であり、全体の微分の話ではありません（3 次のスプラインで補間された結果を 2 回微分しますと折れ線になる事を思い出して頂くとよいでしょう）。

したがって、不等間隔のデータに対してその微分データを求めたい場合、データ上の 1 点 1 点に対して、その周囲何点かを含む区間を設定して Lagrange の補間公式で補間し微係数を求めるという作業をする事になります。理論やシミュレーションで求めたデータ列に対して数値微分を行いたいのであれば、これが正攻法ですね。最近の高速コンピュータであれば、それほど時間はかからないとは思いますが、ルーチンは多少複雑になるでしょう。

実測データに対しては、まず十分に S/N の良いデータをとることはもちろんですが、データ上の 1 点 1 点に対してその点を含む適当な大きさの区間を設定し、適当な次数の多項式をフィッティングして

微係数を求めるというのがもっとも実用的でしょう。
また、本文中の(4)式も不等間隔データに対する一つの対応策でしょう。しかし、式の形からして、あまり間隔の大きさにばらつきがあるデータですと、精度良い結果は得られないと思います。

* A.Ralston, P.Rabinowitz (戸田英雄、小野令美訳)「電子計算機の為の数値解析の理論と応用」(上・下) ブレイン図書出版　(1986)