

高く、その反射光を非線形フィードバック回路であるレーザにさらにフィードバックしてしまったことにある。

検出器からの反射は、レーザに戻らないように、少し傾けて検出器を置けばよかったのだが、厳密な科学計測の現場においては、レーザと検出器を向かい合わせに置かなければならないような状況が頻繁にある。

コンパクトディスク (CD) や、「共焦点レーザ走査顕微鏡」と呼ばれる新しい科学計測器はそのような例であり、アイソレータと呼ばれる部品を用いてカオスを防ぐ手立てがなされる。コンピュータグラフィックスでは愉快的カオスも、科学計測では悩みの種になるのである。

参考文献

- 1) ジェイムズ・グリック著、大貫昌子訳、『カオス—新しい科学をつくる』、新潮出版、(1987)
- 2) 河田 聡、『コンピュータを用いた計測データ解析の新しい考え方』、トライボロジスト、vol.41, No.3, pp219~222, (1996)
- 3) 河田 聡、『分析におけるソフトウェアⅡデータ処理の基礎知識：さらに高度な処理』、ぶんせき(日本分析化学会誌)、No.252, pp962~967, (1995)

第3章

フーリエ変換からウェーブレット変換、
MARS(移動自己回帰系)の基礎

変化する信号の 周波数解析

変化する信号を追いかけて、その性質を解析するもっとも一般的な手法は、周波数解析であり、ここではフーリエ変換が活躍している。本章では、フーリエ変換に関する基礎知識を読者がもっているものと仮定し、フーリエ変換の適用限界とそれをエレガントに克服して現実の計測データに刻々対応することのできる周波数解析手法について述べる。ウェーブレット変換やMARSなどの新しい解析法についてもわかりやすく解説する。

3.1 スペクトルとフーリエ変換の復習

フーリエ変換は、図3.1の系から説明がはじまる。これは、ばね定数が k のばねに質量 m のおもりがぶら下がっているとき、これをひっぱって離すと、図中に示すようにおもりの位置が周期的に上下することを示す物理実験の図である。ばねの振動方程式は、上下方向を y 軸にとり、時間軸を t とすると、

$$m \frac{d^2 y(t)}{dt^2} = ky(t) \quad \dots\dots\dots (3.1)$$

なる2次微分方程式で表され、その一般解は、

$$y(t) = ae^{j(\omega t + \phi)} \quad \dots\dots\dots (3.2)$$

である。式(3.2)は周期関数であり、実部のみなら、

$$y(t) = a \cos(\omega t + \phi) \quad \dots\dots\dots (3.3)$$

となる。ここで a と ϕ は任意であり、最初にばねをひっぱった位置と最初にばねを離したときの速度を初期値として、それらの値は決まる。 ω は振動の周波数であり、

図3.1 質量 m の物体の運動方程式

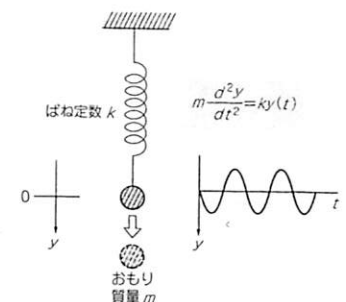
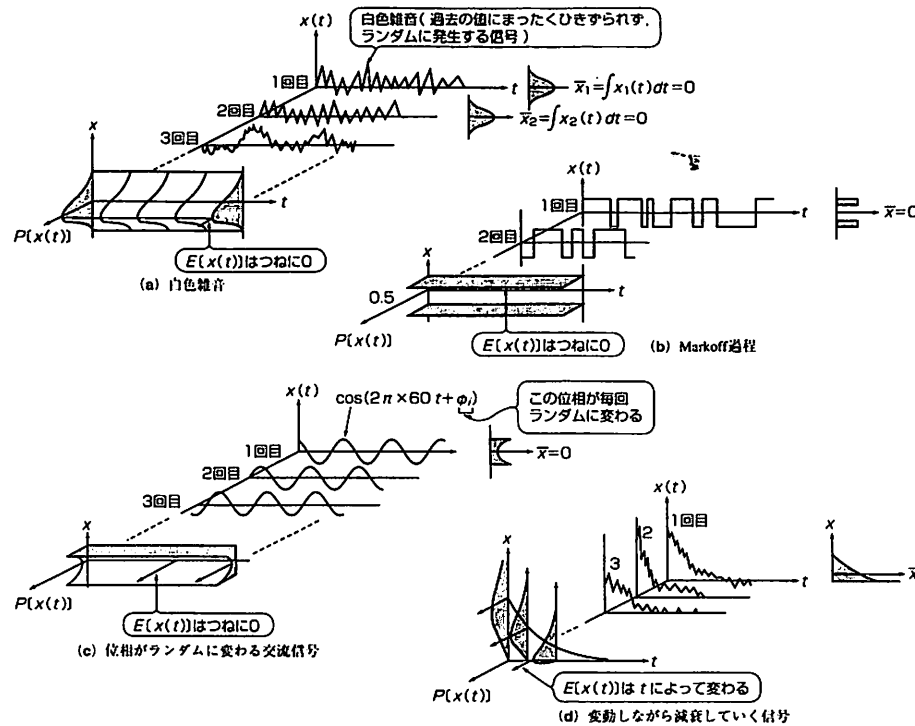


図2.6 四つの確率過程の例とその $E[x(t)]$, $P[x(t)]$ 

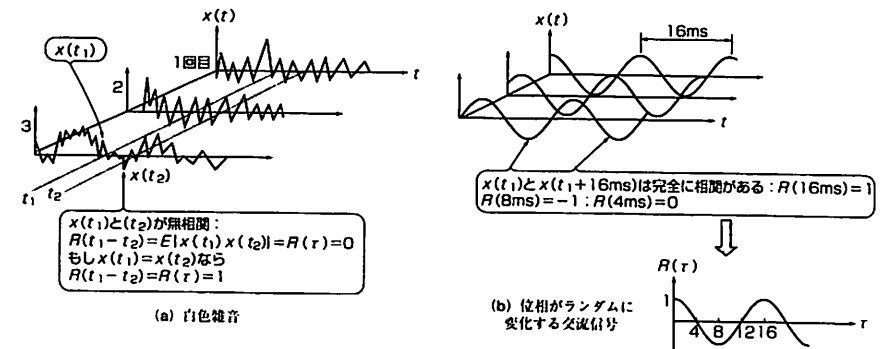
さらに、式(2.7)の自己相関が、特定の二つの時刻 t_1, t_2 に依存せず、その時間間隔 τ のみで決まるとき、この確率過程は自己相関に関して定常的であるといい、式(2.7)は、

$$R(t_1, t_2) = R(\tau) \quad \dots\dots\dots (2.10)$$

のように表現される。

さて、図2.6のうち二つの例について、その自己相関関数を調べてみよう(図2.7)。図(a)の白色雑音とMarkoff過程は、異なる二つの時刻に出る信号は理想的には互いに無関係で、予測不可能なので $R(\tau) = 0$ となる。ところが、図(b)の位相がランダムな交流信号は、その周期である τ_0 だけ離れた二つの時刻の値を測ると、それらは必ず同じ値をとる。それらは、波が進行するにしたがい正負反転して振動するが、常に同じ値をとるので、その積の期待値である自己相関 $R(\tau_0)$ は、 $E[x(t)]$ と同じで、必ず正の値をとることになる。一方、半波長ずれた2点では $R(\tau_0/2)$ は負の値をとり、1/4波長ずれた2点では $R(\tau_0/4)$ は0となる。

このように、位相がランダムに変わる交流信号は、ある瞬間の出力値は決定論的には決め

図2.7 自己相関関数 $R(\tau)$ 

られないが、自己相関関数をとると、図2.7(b)に示したように、各時間間隔 τ に対して決定論的な値が得られる。自己相関関数も、やはり期待値なのである。

科学計測の代表例である可視光の検出は、光の振動数が速すぎて、それに追従できる検出器がないため、普通、その自己相関を検出信号として得る。図2.8(b)は、入射光をそのまま検出した場合、図(b)は回折格子によって光を分光した場合、図(c)は干渉計によって2光束干渉を行った場合の光検出強度を、それぞれ示している。

図2.8(a)は $E[x^2(t)] = R(0)$ を、図(b)は $E[\sum x(t + m\tau_0)x(t + n\tau_0)] = \sum R(m\tau_0)$ を、図(c)は $E[\sum x(t)x(t + \tau)] = R(\tau)$ を、検出結果として得る。図(b)における τ_0 は、隣り合う二つのスリットからの回折光の検出器に届く時間差を表しており、多数のスリットに関して、 m で総和をとることによって、出力は波長 $\lambda_0 = c \times \tau_0$ の光だけが選ばれて検出される(c は

図2.8 光の検出法と得られる信号

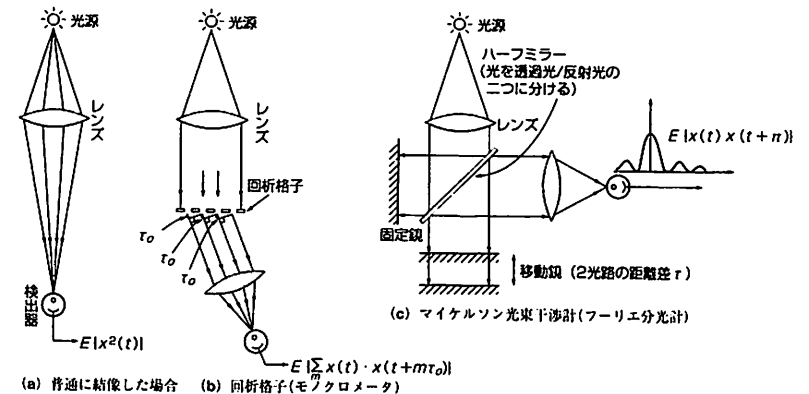


図2.4 確定過程——取りうる値と確率分布

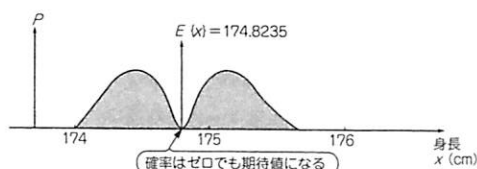
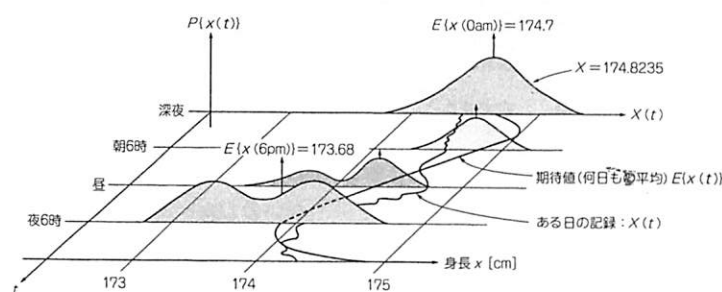


図2.5

確率はゼロでも期待値になる

(x) , $E[x(t)]$ は、決定論の数値をとる。

たとえば、決定論では $x = 174.8235$ といえば、 x は完全に(100%)174.8235になるが、確率論では $x = 174.8235$ なる確率 p が25%とか、0%とかいう。

ところが、期待値 $E[x] = 174.8235$ といえば、期待値は100%, $x = 174.8235$ である。たとえ、 $x = 174.8235$ なる確率 p が0%でも、期待値としては決定論的に $E[x] = 174.8235$ となりうる(図2.5)。ここではじめて、われわれは計測結果を「値」として決定論的に得ることができるのである。

期待値とはそれほど大切な値でありながら、その求め方は、結局のところ近似的でしかありえない。期待値とは、同じ事象を十分多く繰り返すことで、その平均値として得られる。しかし、現実には、「十分多く繰り返す」という条件は満たされない。それが、誤差要因となる。いずれにしろ、多くの場合の測定とは、知らず知らずにこの期待値を求めていることにはほかならない。

2.4 エルゴード性と自己相関関数

同じ現象を何回も繰り返して期待値を求める代わりに、実際には、有限時間内には確率過程のパラメータが変わらないものとして、時間平均をとることが多い。ここで、期待値(ア

ンサンブルアベレージ: Ensemble Average)

$$E[x(t)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x_n(t) \quad \dots\dots\dots (2.5)$$

の代わりに、時間平均(Time Average)

$$x(t) = \frac{1}{T} \int_t^{t+T} x(t) dt \quad \dots\dots\dots (2.6)$$

が用いられる。このように、時間平均を期待値に置き換えても変わらないような確率過程をエルゴディック(Ergodic)であるといい、エルゴード的であるという。

信号がカオス的にならないかぎり、多くの現象では、局所的には、エルゴード的であるとみなしても、そう悪くはない。

ここで、図2.6に示す代表的な四つの信号(あるいは雑音)について、そのエルゴード性を調べてみよう。図2.6(a)は、白色雑音と呼ばれるもので、その平均値は時間平均をとっても、アンサンブルアベレージをとっても、0である。図(b)は、Markoff過程と呼ばれるランダムなオンオフ信号であり、やはり、 $\bar{x}$ と $E(x)$ は等しい。また、図(c)の60Hzの交流信号も、その位相がランダムなら、エルゴディックである。

一方、図(d)はランダムに変動しながら減衰する信号を表しており、その現象はランダムであるが、 $\bar{x}$ と $E[x(t)]$ は異なり、エルゴード的ではない場合である。

図2.6の(a), (b), (c)は、互いに明らかに違う確率過程にしたがっているのに、それぞれの期待値は(さらに時間平均値も)、同じであるという結論であった。

では、これらにおいて何が違うのか? 計測信号の期待値は、式(2.5)で示したいわゆる平均値だけにかぎらない。たとえば、確率過程 $x(t)$ における二つの時間タイミング t_1 , t_2 の積の期待値、

$$R(t_1, t_2) = E[x(t_1)x(t_2)] \quad \dots\dots\dots (2.7)$$

なる値も存在する。これは、二つの時刻における信号の相関関係を示すものであり、自己相関関数と呼ばれる。

いま、 $E[x(t)] = 0$ として、 t_1 と t_2 における信号がまったく同じ値を示すなら、二つの時刻における相関は最大で、

$$R(t_1, t_2) = E[x(t_1)^2] = \sigma^2 \quad \dots\dots\dots (2.8)$$

となり、互いにまったく相関がなければ自己相関は、

$$R(t_1, t_2) = 0 \quad \dots\dots\dots (2.9)$$

となる。

2.2 測定器がつくる信号——不確定性原理とフラクタル

身長にかぎらず、あらゆる測定データは決定論的に一つの値をとることはなく、精度高く測れば測るほど、ふらふらした値をとる。信号とは、正確に測ろうとすればするほど、不確定になってくるものなのである。

もし、身長の測定時間 Δt を1秒以下に狭めれば、身長計の出力値 h は細胞の動きや呼吸に呼応して大きく変動し、その拡がり Δh が大きくなる。測定時間 Δt を長くすると、変動 Δh は小さくなり、 h の平均値 $\langle h \rangle$ に近づく。これは、Heisenbergの不確定性原理の説明と同じであり、原子核のまわりの電子の位置(波動関数)を見つける問題と同じである。

測定器の精度を高めれば高めるほど信号のばらつきは大きくなり、測定結果は信号自身より、測定器に大きく依存してしまうことになる。このような信号の不確定性は、さまざまな科学計測の過程において日常的に経験される。

さきほどの例で、身長を測るには、普通は棒に目盛の刻まれた定規を使って測るが、頭の上には無数の髪の毛がある。そのどれをもって身長とすべきか、その選択によって、測定結果は変わる(図2.2)。精度の低い定規(カメラ)と、精度の高い定規(顕微鏡)を使った測定では、身長の測定結果は変わることになる。

また、身体が曲がっていれば、それに沿って長さを測定するべきだろうが、そのとき、測る面によって長さはずいぶん変わってしまうだろう。曲がり方も、どのくらい細かい変化までを気にするので結果は変わる。

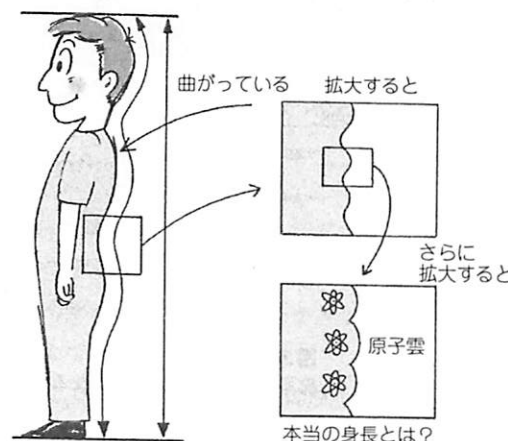
電子顕微鏡で身体の表面を観察すると、さらに細かい凹凸が見えてくる。究極は、各原子ごとの凹凸であるが(STM:走査型トンネル顕微鏡などを使う)、細かい凹凸を考慮すれば



図2.2
身長はどこで測る？

図2.3 身長を計測する。

計り方によって身長は変化する



身長はどんどん長くなってしまいう(図2.3)。

これは、これまでのユークリッド幾何学に代わる、新しい「フラクタル」科学の説明をしていることにはほかならないのだが、それが計測の本質にかかわっていることを認識してほしい。

計測対象は、測定器の精度を上げれば不確定になるということと、精度が高い計測を行おうとすることは矛盾しない。計測器の測定時間スケール(および空間スケール)の違いによって、その値が変わり、いかなる計測器もある

時間スケール、空間スケールの中での最高値(あるいは平均値)を与えているにすぎないことを認識しておきさえすればよい。

測定データは計測器の性能によって変わり、絶対的な真の値などというものは本来ありえないといってもよいかもしれない。少なくとも測定結果を示すときには、測定に用いた計測器の性能(分解能だとか、S/N比だとか、確度など)をあわせて示すべきである。

2.3 信号も雑音も確率過程——期待値をとって初めて決まる世界

さて、不確定性原理などこれまでに述べてきたようなことは、信号がある確率分布にしたがうことを暗に示している。雑音のみならず信号も時間の関数として、確率過程(random process, stochastic process) $x(t)$ で与えられる。 $x(t)$ は、時刻 t における確率変数(random variable:たとえば身長の値、サイコロの目など)を意味する。たとえ信号といえども、決定論的に、

$$x = 174.8235 \dots \dots \dots (2.4)$$

というような特定の値をとることはなく、図2.4に示すように、確率論的にとりうる値とそれに対する確率分布をもつ。

しかし、計測においては具体的な値が欲しい。人もコンピュータも、決定論の数値を必要とする。そこで期待値をとる。 x が確率変数であり、 $x(t)$ が確率過程であっても、期待値 E

測定場所の高度や測定時の大気圧による重力、大気温度や湿度によって、あるいは建物の振動などによっても身長計は誤差をとまう。

では、さらに完璧な測定環境(超高真空・極低温・無重力)中に試料(人間)を入れれば、高精度にその人の身長測定が行えるのだろうか？ もちろんナンセンスである。

計測器における雑音や、測定時における環境や外乱の影響に加えて、被測定対象自身が揺らいでいる。朝に測る身長と夜に測る身長が違うことはよく知られているが、わずかな測定時間内にも身長は伸び縮みしている。あるいは、細胞レベルでは、もっともっと複雑に生命活動を繰り返しているのだから、絶対的な身長や体重といった概念には意味がない。

揺らぎは雑音ではなく、信号そのものである。そして、信号の値は、測定器の測定時刻(タイミング)と測定時間(長さ)によって変わる。

では、揺らぎをとまう信号は、どこから生まれるのか？ ある瞬間の信号は、一瞬前の過去と無関係には存在しない。身長も含めて信号は、確率論的には期待値をとらなければ値を確定することのできない確率過程であるが、それは時間的にまったくランダムというわけではなく、必ず過去を引きずっている。これを因果律という。

時間 t の信号(たとえば身長) $h(t)$ は、その少し前の過去の身長 $h(t - \Delta t)$ に依存しており、身長の値が飛び飛びに不連続な値をとることはない。このような因果律は、1次式で表されると減衰・増加や周期性が現れるが、2次式以上の非線形式で与えられると、さらに複雑にさまざまな信号が発生する。たとえば、

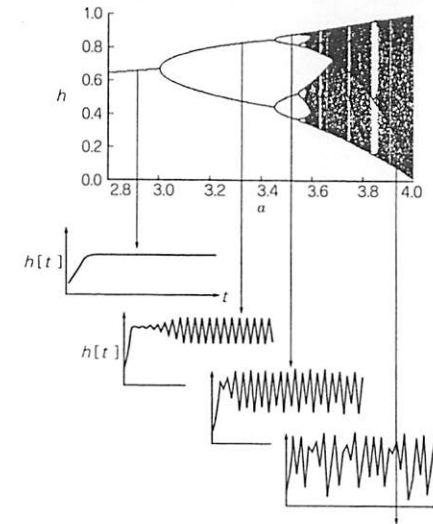
$$h(t) = ah(t - \Delta t) - bh^2(t - \Delta t) \quad \dots\dots\dots (2.1)$$

はもっとも簡単な非線形信号発生源である。ここで、 $a = b$ とすると、システムはさらに簡単になるが、このような簡単な式から複雑な信号が作られるのである。

式(2.1)の $a = b$ として a の値を変えると、図2.1に示すように、およそまったく異なる系から生まれてきたかのような、互いに異なる信号系列が生まれる。 a が0~3では信号は消えてしまい、 $a = 3 \sim 3.4$ では単一周波数の周期性をもつ。ところが、 $a = 3.4 \sim 3.5$ では四つのレベルをもつ二つの周期信号の組み合わせとなる。このあたりまでの領域では、フーリエ変換を用いた周波数解析が説得力をもつ。ところが、4あたりでは図2.1において完全な雑音状態となっている。いわゆるカオス状態である。

このように、信号と雑音はどちらも、同じ式(2.1)から発生する。このほんのちょっとしたパラメータ値の違いで、信号に見えたり雑音になったりする。第2、第3の周期的信号が発生する領域では、信号の予測が簡単であり、70年周期で地震が起こるとか、まことしやかにいわれるが、横軸のパラメータ a が少し変わるだけでカオス状態になるのであって、フーリ

図2.1 式(2.1)の a に対する出力信号の違い(周期状態、カオス状態)



エ解析がいかに心許ないものか、よく気をつけてかからなければならない。

状態の急な変化とさらにその臨界点あたりの不安定な変化は、気体から液体、固体の間の転移(相転移)、アモルファスから結晶化、最近の超流動や超伝導、生命現象などにおいて非線形な複雑系としてよく知られるが、それらはパラメータ a を温度や圧力などとして、式(2.1)のような非線形式で表現される因果律に従うのである。

ここに、信号と雑音は別の物理・数学ではなく、同じ式をもとにして与えられるものであると結論づけることができる。信号と雑音は、本当に紙一重なのであり、周期信号も白色雑音も同じ式(2.1)で与えられる。コンピュータで色々なデータのシミュレーションをするとき、重要なプログラムである乱数発生プログラムも簡単な非線形離散式で与えられる。

$$I_{j+1} = aI_j \pmod{C} \quad \dots\dots\dots (2.2)$$

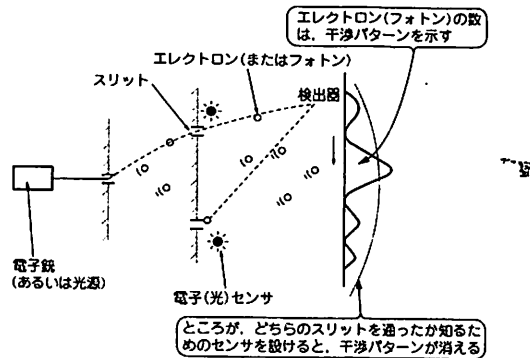
ただし、 $a \pmod{\beta}$ は a を β で割ったときの剰余を表す。

式(2.1)はカオス理論の最初に出てくる式と同じで、閉じられた島におけるある年 t の鼠の総数を $h(t)$ 、年間増加率を a としたときに、 Δt を1年とすれば、

$$h(t + \Delta t) = ah(t) (1 - h(t)) \quad \dots\dots\dots (2.3)$$

で与えられる¹⁾。

図1.14 Youngの干渉実験



う実験であるが、そこで個々の単一の電子(あるいは光子)は、それぞれ片方のスリットしか通らないはずなのに、なぜ干渉強度を与えるのかを調べるというものである。

この実験は、残念ながら成功しない。粒子がどちらを通ったかを知るために、スリット近傍(あるいは背後)に電子(あるいは光)検出器を設ける。この検出器によって、電子(光子)がどちらのスリットを通過したかがわかるのだが、残念ながら、それと引き替えに、干渉パターンは消え去るのである。これは、測定計測プローブが信号を変えてしまうために生じる。結局、この実験はプローブの存在を教えてくれていることにしかなかったのである。

計測することが計測対象を変えてしまい得ることを十分に認識しておけば、そのことを積極的に利用することによって、新たな計測手法が生まれ得る。図1.2の新しい計測系の形態、アクティブフィードバックは、まさに、このことを実践する形態なのである。

参考文献

- 1) 河田聡, 「物理計測における最近の信号回復論」, 『応用物理』, Vol. 55, pp.2~23, (1986)
- 2) 山崎弘郎, 石川正俊編著, 「センサフュージョン-実世界の能動的な理解と知的再構成-」, コロナ社, (1992)
- 3) 河田聡, 南茂夫, 「科学計測のための画像データ処理」, CQ出版(株), (1994)
- 4) 河田聡編, 「新しい光学顕微鏡 第一巻 レーザ顕微鏡の理論と実際」, 学際企画, (1995)
- 5) 沢田嗣郎, 「光音響分光法とその応用-PAS」, 学会出版センタ, (1982)

第2章

カオス/フラクタル理論が重要になってくる

信号と雑音の発生メカニズム

これまでの計測学やデータ処理の教科書では、「測定すべき信号には雑音加わって計測されるのでそれを除去することが必要である」と説明されている。たしかに、どんなに高級な計測器も完璧ではなく、必ず雑音を含んでしまう。

本章では、この信号と雑音の理論を述べるわけだが、これまでの教科書にあるような、決定論的な信号と確率論(あるいは確率過程論)的な雑音について論じるのではなく、それらがともに同じ発生のメカニズムをもっているながら、まるで別の取り扱いをしてもよいこと、あるいは、新しい科学計測学においてはそれらを共通に取り扱うことが必要となりつつあることなどについて説明する。

そこに含まれるカオス、フラクタル、不確定性など、現代科学の存在を感じ取っていただきたい。従来の現象論的取り扱いによる雑音の理論ではなく、発生メカニズムをその理論として考える。

2.1 信号と雑音は同じ生まれ —— 身長データの精度とカオス

身近な例として、身長測定を考えてみよう。たとえば、デジタル表示機能をもつ身長測定機によれば、ある人の身長は174.8235cmと表示される。しかし彼は、ふつう自分を175cmであるという。それは、身長測定機による測定結果がそんなに正確でないことを、みんなが知っているからである。

たかが身長計に、0.0001cm(=1μm)の精度などはあるはずがない。検出系のエレクトロニクスの雑音は、それ以上の値の変動を与える。しかし、この身長計のA-D変換器は、雑音であろうと信号であろうと、とにかく7桁の精度を示してしまふ。

では、最高級の低雑音回路からなる身長計を使えばよいのか? それもあまり意味はない。

計測を制御系が支援することによる計測制御の一体化である。物を目で見えるために、その近くに首を動かし、必要なら手に取ってみる。小さければ、物体を指先でぐるぐる回してみる〔図1.11 (b)〕。似ているように見えて、じつはこれらは逆である。あるいは両者の融合といってもかまわない。

1.8 計測プローブのインピーダンス — 計っているのか計られているのか？

科学計測に機械計測や電気計測と大きな違いがあるとすれば、それは科学計測においては、得られる信号がことのほか微弱であったり、ことのほか大きな雑音が混入していたり、測っている信号自身が過度に不安定であったりと、要するにきわめて厳しい条件下にあることにある。

このような厳しい計測環境は、オシロスコープによる電気信号の測定においても、われわれは経験している。電気信号をオシロスコープによって計測するとき、測定点にプローブを当てて測るが、信号源があまりに微弱なら（すなわち、出力インピーダンスが非常に高ければ）、プローブからオシロスコープへと電流が流れ出て（オシロスコープの入力インピーダンスが相対的に低い）、その結果として測定点における信号の電圧が変わってしまう（図1.12）。

プローブ（すなわちセンサ）を用いて測ることにより、信号は必ずこのように揺らぐ。普段はあまりこのことを問題にしなくてもよいのは、プローブのインピーダンスが回路のインピ

図1.12 信号を測ることで信号が変わってしまう

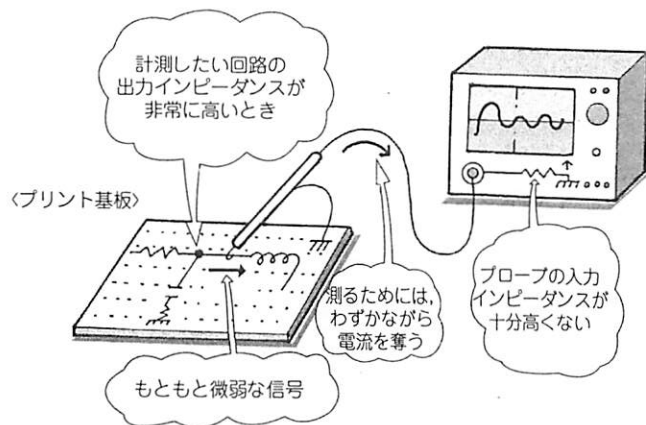


図1.13
必要な信号を測ると……

ーダンスに比べて十分に高く、オシロスコープは測定回路からほとんど電流を奪わないためである。

しかし、正確には、プローブをつなぐことによって回路は必ず変わり、信号はプローブがないときとはわずかであっても必ず異なる。つまり、オシロスコープによる波形観察の実験は、プローブ自身のインピーダンス測定の実験にすらなりかねないのである。

信号を計測・検出するためには、信号源からほんのわずかな信号をもらってきて、それを分析することになる。料理の味見と同じである。ところが科学計測においては、この例のように、測定すべき信号がきわめて微弱であることが多い。このような場合、計測器がその信号をわずかでも吸い取ると、信号源自身が狂ってしまう（図1.13）。

そこで、プローブを通して得られた信号から、プローブがないときに得られるであろう信号を求めなければならない。これは、非線形系の逆問題を解くことになり、簡単なことではない。あるいは、物理学における多体粒子系の解法問題と同じ話であり、逆問題の本質を扱っていることになる。

1.9 Youngの干渉実験

—— フォトン、電子は、なぜ干渉するのか？

よく知られる物理（量子力学）の実験に、Youngの干渉実験がある。これは、図1.14に示すように、一つの電子銃（あるいは光源）から出て、二つのスリットを通過して検出面に到達する電子（あるいは光子）は、検出器面において明暗が相互に変わる干渉パターンを描くとい

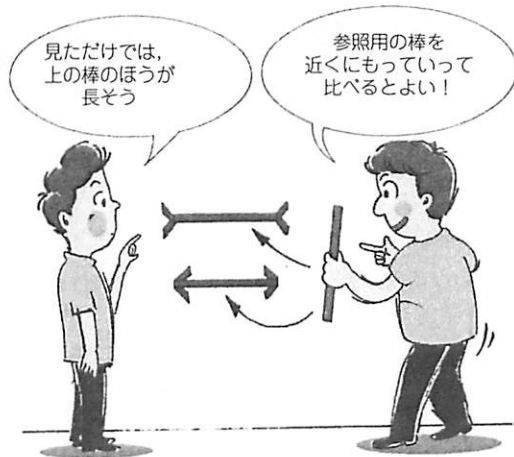


図1.9
棒の長さの計り方

1.7 アクティブ制御機構をもつ計測システム

最新の計測技法では、アクティブフィードバック回路をそのシステムの中にもっている(図1.2)。昔のデータ処理(オフライン)を含む計測系においては、得られた実験結果からいかに巧みに必要とする情報を、コンピュータや手計算で引き出すかがたいせつであった。

しかし、処理速度が圧倒的に高速化してきた現在では、計測されてさらに計算処理されたデータ結果を分析して、それを再び測定方法、測定環境にフィードバックする。その結果、より精度の高い計測結果が得られる。いわゆるアクティブフィードバック回路が形成されるわけで、ここにおいて計測と制御が一体化する。

ふたたび身近な例を示す。図1.10は、濃淡の空間変化が非常に小さい画像である。これをそのままじっと見ているだけでは、その濃淡の変化の程度がわからない。そこで、この絵を窓を通して見て、絵を横に走らせてみる。すると、窓の中の明暗が変化するので、濃淡があることがわかる。この絵の移動速度を変えて、それによる明暗の変化の程度を知ることから、濃淡の分布が正確にわかる。

最近のインバータ方式ではできないが、少し以前の蛍光灯なら、首を素早く振りながら蛍光灯を見ると、蛍光灯が点滅していることがわかった。先に述べた恐竜の例では、応答がなければ叩いたりつねったりした。これらもアクティブ計測の一つといえる。

制御のために計測が援用されるのが、従来の計測と制御の一体化の発想であった。たとえば、ロボットには必ず目が必要である。人間の手が物をつかむときは、目でその距離を追わ

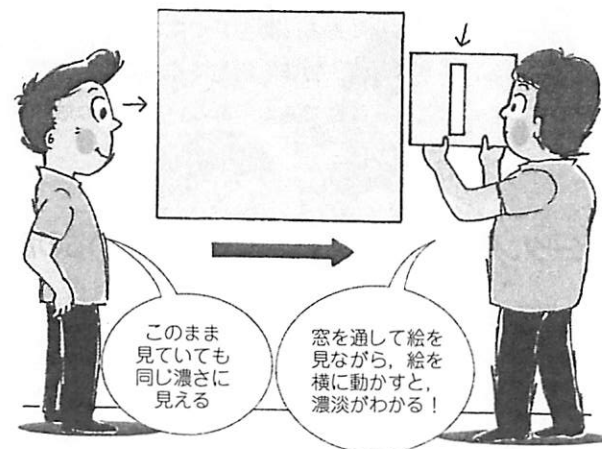


図1.10
変化の小さな信号の
ダイナミック検出法

なければならないし、手が近づくと、指先は物に触れるのを感じながら、手が折れたり物が壊れないように優しくそれをつかむ。視覚センサと触覚センサが、手と指の運動の制御を支援しているのである[図1.11(a)]。

しかし、ここで述べている新しい科学計測のあり方においては、計測と制御の関係が逆で、

図1.11 「制御のための計測」と「計測のための制御」

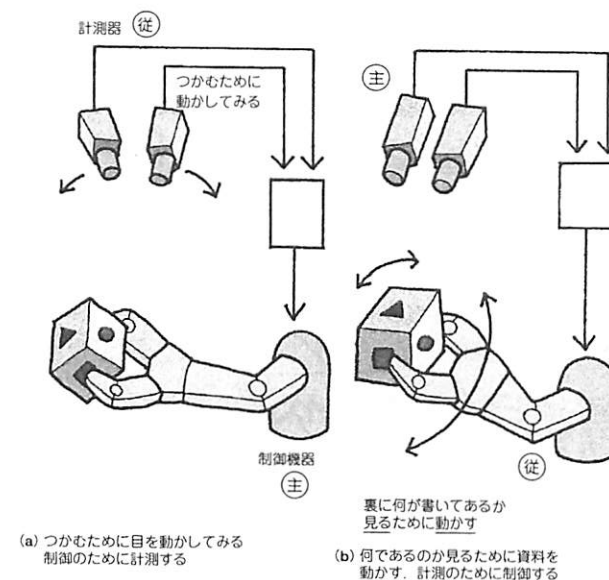
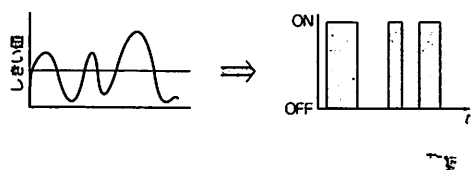


図1.7 非線形入出力の例



の和に対しては不透明になる場合に生じる。光の吸収量は、光の強度に比例するのではなくその2乗(または3乗)に比例する。2個(あるいは3個)の光子が吸収に必要なためである。

この原理は非線形光学として物理学の分野においてはよく知られていたが、最近のパルスレーザ(それは瞬時の出力パワーが高い)の実用化にともなって、計測の分野でも広く用いられるようになってきた。

科学計測に関連する非線形効果の入出力関係の例を図1.7に示す。とくに2値化(binartization)は、計測信号のデジタル化でもあり、非線形の究極である。あるしきい値以上の信号はON、それ以下はOFFとなる。相転移(液体と固体、超流動や超伝導)、結晶におけるドメインの反転、結晶とアモルファスなど、その例は枚挙にいとまがない。この話題を進めると、複雑系の科学になる。

1.5 間接的計測法——ハーフネーティッド計測法

一方、直接的にはどうしても出力が得られないような対象に対しては、間接的に測る方法が考えられる。たとえば、真黒な材料の光の透過率を測るためには、これまでは、それをできるだけ薄く半透明になるまでスライスして透過率を測り、そのときの厚さでノーマライズする方法がとられてきた。しかし、スライスできる薄さにも限度があり、また、こういった試料を破壊して測る方法は、科学計測においてはとくに嫌われる。

そこで、試料に光を入射して、そこから発生する熱(温度)を測ることによって、それからその物質の光に対する透過率を求めることができる(図1.8)。吸収された光が熱に変わるからである。あるいは、光の吸収による温度変化があまり小さく、周辺的环境温度の変化より小さいなら、照射する光を(たとえば)1kHzでON/OFFする。すると、1kHzで熱波もON/OFFされ、それによって、試料か周りの空気が1kHzで膨張収縮を繰り返す。これは音として、われわれの耳あるいはマイクロフォンに聞こえる(図1.8)。

このような方法は、ハーフネーティッド(ハーフンで二つの計測法が結ばれるから。この

例では、光・熱、あるいは光・音響)計測法と呼ぶことができる。上の例では、測定波長を変化させていき、普通の計測法では測ることができない真黒な物質の色(もっとも、可視域ではなく赤外のスペクトル)を計測することができる。これを光音響分光法と呼ぶ。

1.6 天秤による計測「零位法」

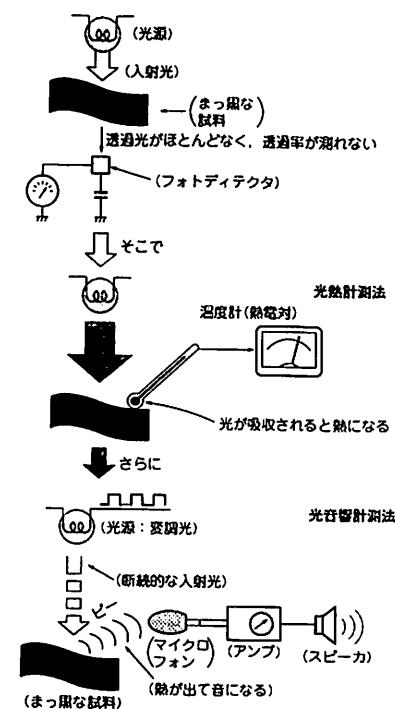
ところで、計測のもとの原点は、メジャー(measure)との比較である。日常において、ものの重さを量るときは、重量計にそれを乗せて針が指す数字を読むだろうが、それよりもシンプルな測定法は、測りたいものと同じ程度の重さのもの(その重さはあらかじめわかっている)をもってきて、それと比較することである。すなわち天秤である。

このように、被測定物との差が零(ゼロ)になるようにリファレンス(参考物)をもってきて、そのバランスを取って測定する方法を零位法と呼ぶ。

たとえば、目で見てわからないほどの長い棒の長さを計るとき、私たちは図1.9に示すように、別の棒や紐をもってきて、それと比較する。図に示す2本の棒の長さは同じだが、じっと見ているだけでは人間の目の錯覚(人間による正しくないデータ処理)によって上のほうが長く見えてしまう。もう1本、これらと同じ長さの枝のついていない棒を用意し、それぞれの近くにもっていくと、互いの長さが、この参照用の棒との比較を介して同じであることがわかる。

目で眺めているだけではなく、別の棒をもってくることによって正確な計測が行われるわけである。

図1.8 光熱計測法、光音響計測法



1.3 シングルチャネル検出法 —— スキャンニングの時代

一方、最近では、選択的に必要な信号だけが得られるような測定方法の工夫(シングルチャネル検出法)も、ときに重要と考えられている(図1.3の選択化)。そのためには、不必要な情報が完璧にカットされ、必要な情報だけが浮かび上がるような環境を測定対象に対して作る必要がある。

ロックイン検出法はその代表的な例である。測定したい対象に対してだけ何らかの方法で変調を与え、同じ周波数をもって出てくる信号を検出すると、測定対象から発する情報だけが得られる(図1.5)。

従来の光学顕微鏡の常識を覆して、試料の望む特定の断層だけを見ることのできる光学顕微鏡が、現在広く用いられるようになってきた。これは、共焦点(コンフォーカル)顕微鏡と呼ばれる^{3), 4)}。これも選択化の好例である。測定したいポイントだけにレーザー光をフォーカスして照射し、そのポイントからの変調光(散乱光、蛍光、反射光など)だけを、ピンホールを通して検出する(図1.6)。

図1.5 ロックイン検出法

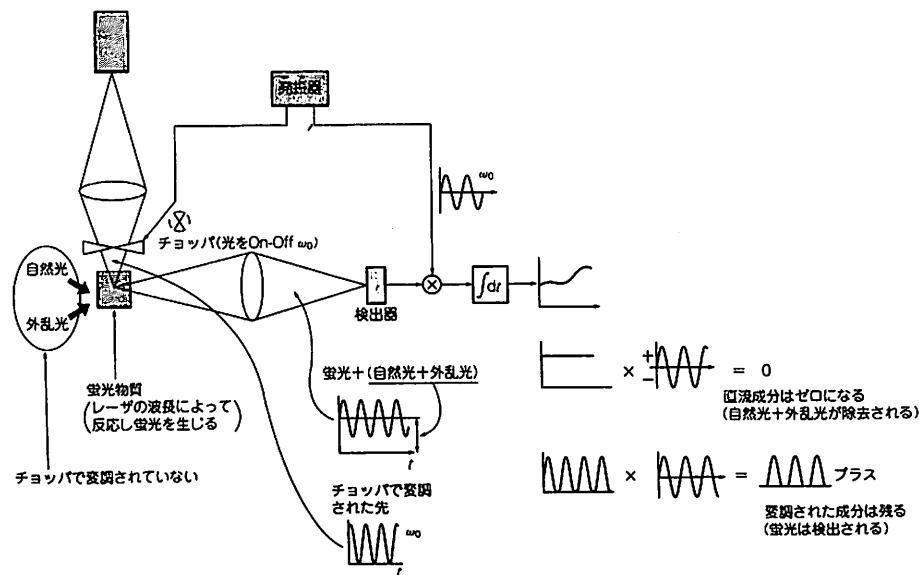
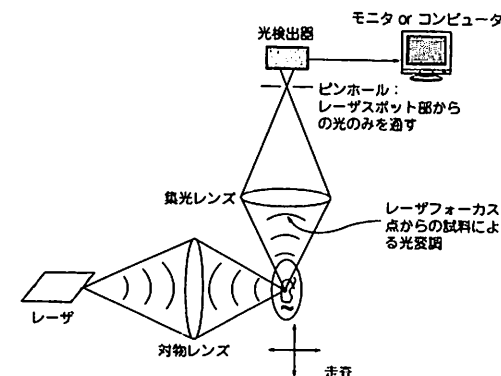


図1.6 共焦点顕微鏡



このようなシングルチャネル検出法は、先に述べたマルチプレックス法やマルチチャネル法と比べて、ほかのチャネルの信号の混入がないので、 S/N 比(信号と雑音の比)が高いという利点がある。

世の中を見渡すと、光学顕微鏡にかぎらず、電子顕微鏡やファクシミリ、レーザスキャナ、レーザビームプリンタなどなど、シングルチャネルのオンパレードである。写真もディジタルカメラに変わりつつあり、すでに映画は家庭用のみならず劇場用でもディジタルビデオの時代になりつつある。

もちろん、CDなどの光メモリもディジタル化され、さらに進んでDVDの時代に入入している。シングルチャネル法は、これらディジタル時代のニーズによく合っているといえる。

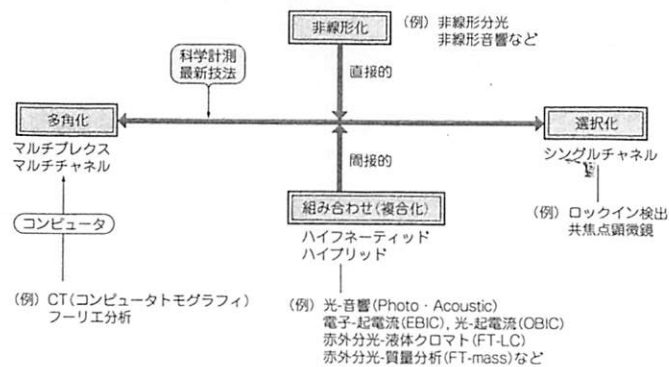
1.4 非線形効果の積極利用 —— ディジタル化への道

従来の計測法では、通信の世界と同じように、測定信号に対してほかのチャネルの信号や雑音は、加算的に混入することが多い。もし、測定対象の信号だけが2乗、3乗に増倍されるならば、ほかの信号より高感度に信号を抽出して検出することができる。このような計測法は非線形計測と呼ぶことができる。

きわめて強力な光を透明な試料に当てると、透明な試料であっても吸収が起きる。これは、二つあるいは三つのコヒーレント(coherent)な光子が同時に試料によって吸収されることで生じる現象であり、多光子吸収過程として知られる⁵⁾。

一つの光子がもつエネルギーに対しては透明な物質が、二つの光子がもつエネルギー

図1.3 科学計測の技法と形態



実用化になったという話は聞かない。

これは、先に述べたようなセンシングの多角化が不十分だったからである。X線写真における癌情報は、カルシフィケーション(石灰化)による白く小さな丸い影である。しかし、癌以外にもこのような影はあり得るし、癌が決まった形とサイズだとはかぎらない。つまり、生きた恐竜であるのかどうかを知るには情報が不足しているわけである。

そうすると、X線写真以外のセンシング技術を加える必要があろう。癌の診断をするのに、X線写真だけをいくら眺めてもダメである。血液検査や尿検査、問診、超音波診断、胃カメラ、MRIなど、あらゆる計測結果を総合的に判断するのが、もっとも信頼性が高い。

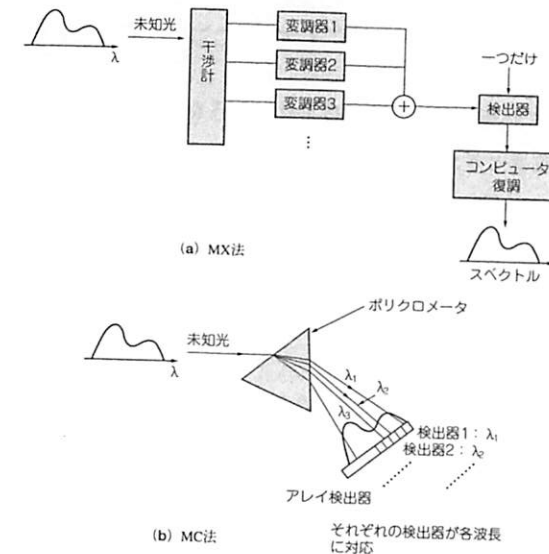
このように、複数の計測データを混沌とした状態でたくさんのセンサを使って計測し分析することを、センサフュージョンと呼ぶことがある²⁾。

科学計測の代表的な例として、物質を色(可視光とはかぎらず、多くの場合、赤外や紫外スペクトル)によって同定する分光分析法がある。分光分析においては、単一の波長(振動数)の光の強度のみを測定するのではなく、多波長の信号を同時に計測して分析するほうが、効率も信頼性も高い。

このとき、時間的に各波長を異なる変調周波数で変調し、一つの検出器を用いて検出・復調するマルチプレックス検出法(MX法: フーリエ変換分光法がこれに対応する)と、複数の光検出器を並べ(アレイディテクタと呼ばれる。CCDがその代表)、各波長を異なる検出器で独立に同時に検出するマルチチャンネル検出法(MC法: ポリクロメータがこれに対応)の二つがある(図1.4)。

ここで、MX法とMC法のどちらが望ましい計測法であるかは、計測者にとってつねに重要なテーマである。興味深いことには、その優位性は計測する光の波長域によって異なり、

図1.4 MX法とMC法



赤外光の分光に対してはMX法が、可視・紫外域の分光に対してはMC法が有利であるとされている。

なぜ、このような違いが生ずるのかは、雑音の性質による。赤外領域においては、検出器において発生する熱雑音が測定データの雑音を支配し、可視・紫外領域では、究極にはフォトン自身をもつ粒子性(光子雑音)が測定データのばらつきを支配するからである。これは、MX法は加法的雑音に対しては強いが、乗法的雑音に対しては弱いことによる。これらについては、第2章で詳しく述べる。

さて、恐竜を観察した少年は、最初は遠くから、そして近づいてぐるっと回って、最後には顕微鏡を使って観察した。これは、3次元物体を計測する際の常套手段である。3次元物体の内部計測として知られるX線CTは、先のフーリエ分光法と同様のマルチプレックス検出法であり、一方、ステレオスコピー(立体視)はマルチチャンネル検出法であるといえる。

一般に、マルチプレックス検出法は、検出後のコンピュータによる計算(線形変換: フーリエ分光ならフーリエ逆変換、CTならラドン逆変換)が必要であり、このような線形変換を受け入れるためには、雑音が加法的でなければならない。

計測によって得られる情報はつねに不十分で、そのデータを処理・解析するには、大胆な推論が必要である。不足した情報から、あるいは雑音に埋もれて汚れた信号から、いかに正しい答を得るか、あるいはいかにもっともらしい答を導くか？それが、データ処理・解析の役割であり、妙味でもある。

第六感を感じるためには、最初に、正しいデータの整理と分析が必要だが、それに加えて、計測の方法も重要である。図1.1は、一人の少年が見たことのない物体(恐竜)を計測して分析しようとしているところである。

まず、遠くからぼんやり眺めるが、そのうち、近づいて虫眼鏡をもってきて見たり、違う向きからも眺めてみる。本物かどうか騙されないように、見るだけではなく触ってみる。生きているかどうかわからなければ、声をかけて答えがあるかどうか耳をすませて聞き、応答がなければ、叩いたりつねったりして反応をみる。

ただし、あまり強く叩いてはいけな。い。「死にかけている」ようならば、強く叩くことによって本当に死んでしまうかもしれないからだ。

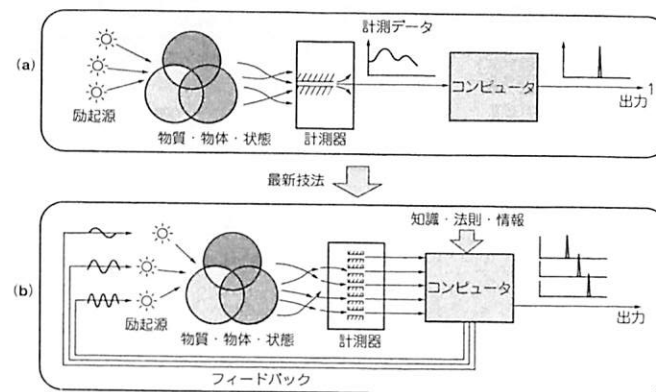
ここに、科学計測における新しいデータ処理のヒントがたくさん隠されている。複数のセンサを用いて得られる複数のデータソースから多角的・統合的に計測データを解釈すること(センサフュージョン)や、センサ側から能動的に刺激を与えて応答を見るというアクティブフィードバックなどといった基本的な概念を、これから述べる。

図1.2は、コンピュータによる計測データの処理・解析の構成図を示している。図1.2(a)は従来の計測・データ処理解析法であり、図1.2(b)はこれからの方法のコンセプトを表して

図1.1 正しく計測するためには……



図1.2 科学計測システムにおける昔と最近の技法の違い



いる。そして、図1.2(b)は計測対象の物質・物体・状態を未知の物体である恐竜に置き換え、コンピュータを少年に置き換えると、まさに図1.1の例と一致する。

従来の計測[図1.2(a)]では、コンピュータ処理がリアルタイムでは追いつかず、このようなフィードバックシステムは構成されなかった。

本章では、このような新しい計測学における要素の考え方を一つずつ解きほぐしていこう。

1.2 計測の多角化「センサフュージョン」

では具体的に、科学計測にはどのような特徴と形態があるのか。新しい科学計測には、図1.3に示すように、四つの異なる方向がある。計測の多角化、選択化、非線形効果の利用による選択的検出法、間接的検出法の四つである¹⁾。ここでは、計測の多角化から順に、それの一つずつ述べていくことにしよう。

恐竜の計測の例では、少年は恐竜を計測する手段として、目(みる)と手(触る)と耳(聞く)などのセンサを使った。このように、たくさんのセンサを使って多角的に計測することが科学計測の基本である。単一の検出器のみで測定する必要はない。

1970年代後半に、集団検診されたX線写真からコンピュータ画像処理によって自動的に癌を発見するという研究が活発に行われていた。集団検診された何百枚もの写真を手際よく1枚ずつ眺め、その中の怪しい影を次々と調べていくことは、医師にとってたいへんな労働であり、医学とはかけ離れた仕事である。もし、コンピュータがその役割を担ってくれるなら、画像処理のまさに良い応用といえる。しかし実際には、このようなプロジェクトが成功して

9.5 独立成分分析法による成分スペクトル推定	185
9.6 先験情報や経験的規範を使わない成分スペクトル推定法 : 2重固有値解析法	187
付録 FORTRAN,BASIC ユーザーのためのC言語解説	190
1. プログラムの構造	191
2. 変数の型	192
3. 型の変換	193
4. 文字変数と文字列	194
5. 配列	194
6. 変数の有効範囲	195
7. 関数(サブルーチン)間のデータの受け渡し	198
8. 算術演算子	201
9. 関係演算子	202
10. 論理演算子	203
11. ビット操作演算子	204
12. 制御構造	204
13. C++について	210
本書に登場する用語の説明	212
索引	219

第1章

センサフュージョン、シングルチャネル検出法、
ハーフネーテッド計測など

科学的な計測と データ処理の考え方

「科学計測」とは、最先端の科学技術分野での基礎・応用研究、あるいは先端技術現場における研究開発などにおいて駆使される各種計測技術のことをいう。これは、産業や医学分野で定着している工業計測や臨床医用計測などの実用計測技術の源ともなるもので、研究的側面だけでなく、実用的側面も強くもつ重要な技術である。

この科学計測も、コンピュータや計測器の処理能力の向上により、考え方が大きく変わってきた。本章では、現代の科学計測のポイントといえる計測の多角化(センサフュージョン)、選択化(シングルチャネル検出法)、非線形効果の利用による選択的検出法と間接的検出法について、解説する。

1.1 データ処理の役割は科学計測の第六感

人間には五つの感覚器官、つまり、目(視覚)、耳(聴覚)、鼻(嗅覚)、舌(味覚)、皮膚(触覚)がある。そして、マイクロフォン、フォトディテクタ、ガスセンサ、各種化学センサ、圧力センサなどの計測機器は、それらを人工的に作ったものであるといえよう。

ところがさらに、これら五つに加えて人間には、六つめの感覚である「第六感」がある。これは、ほかの五つの器官(ハードウェア)と異なり、それらから得られるデータを総合的に整理して、かつ過去に得られたデータを解析して結論を導出するソフトウェアであるといえよう。

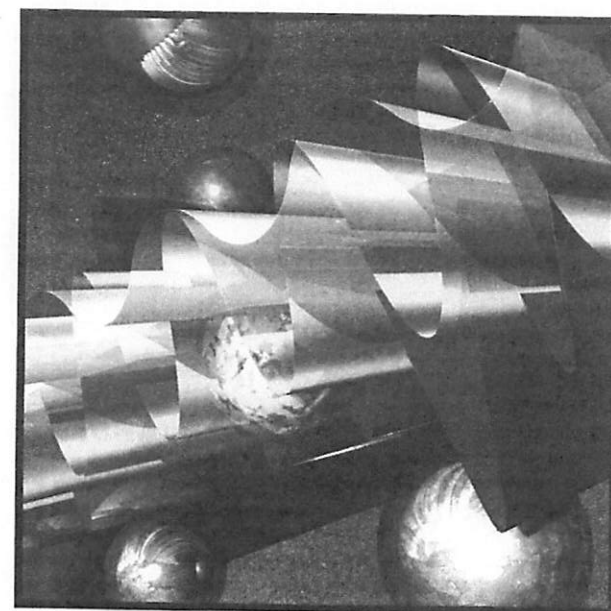
人はこれを「勘」と呼ぶが、決していいかげんなものではなく、けっこうよく当たる。それは、豊富な過去のデータの蓄積を用いた解析が役立っているからである。科学計測(Scientific instrumentation)における「データ処理・解析」は、まさにコンピュータによる第六感をめざすのである。

I/F
ESSENCE

科学計測のための データ処理入門

科学技術分野における計測の基礎技術

南 茂夫 監修 河田 聡 編著



CQ出版社