

掲示板

ノイズの振る舞いの定量的表現 (プロジェクト化の検討)

福島 整*

物質・材料研究機構 共用基盤部門分析支援ステーション 〒305-0047 つくば市千現 1-2-1
*Fukushima.sei@nims.go.jp

(2008年7月29日受理)

2008年3月(大宮)で行われた研究会で、ピーク検出、及びそれを含んだスペクトルの処理時に一般的に重要な考慮要素となるノイズの振る舞いについて、プロジェクトテーマとしての提案がなされた。ここでは、4月24日に産総研・中部センターで有志により行われた予備的な議論を基にした、第32回研究会における予備討議の結果について報告する。

Quantification of the Behavior of Noise (Preliminary Discussion for SASJ Project)

S. Fukushima*

Materials Analysis Station, Dept. Mat. Infrastructure, NIMS, 1-2-2 Sengen, Tukuba 305-0047, Japan
*Fukushima.sei@nims.go.jp

(Received: July 29, 2008)

At the meeting in Mar. 2008, the pre-standard investigation about peak detection method and the behavior of the spectral noise, which is generally important point for the data processing process, was proposed as the project theme of SASJ activity. In this report, the preliminary discussion held in 32nd meeting of SASJ (Karuizawa, June 23-24, 2008) based on the discussion at Chubu Center of AIST (April 24, 2008) will be presented.

1. 経緯

2008年3月に大宮で行われた第31回研究会に於いて、産総研中部センター・後藤敬典先生より次のような提案がなされた。すなわち、「XPSのピーク検出を一つの焦点として、スペクトルのノイズの標準的な取り扱いについてのプレスタンダード研究を、SASJのプロジェクトテーマとして取り上げられないか」ということである。これについて、その後の懇親会会場にて有志が募られ、後藤先生と報告者の他に4人程度が予備検討のメンバーになることを承諾して下さった。しかし、実際に活動を開始するにはあまりにも目標が漠然としている事から、方向性を明確にするための事前の議論が必要であろうと考えられた。そのために、この分野でも造詣の深い田

中彰博氏(アルバック・ファイ)に報告者の同行をお願いして、4月末に産総研・中部センターに後藤先生をお訪ねし、予備的な討論を行った。

その時の内容を出発点として、田中氏の提案した方法(詳細は別途報告を予定)を基にした予備実験を行った結果と併せて、プロジェクト化の可能性及び当面の方針について討議を進めた。

討議に参加したのは、後藤先生、田中氏、鈴木峰晴氏(アルバック・ファイ)、岩井秀夫氏(物材機構)、木村昌弘氏(日鉱金属)、安福秀幸氏(リコー)、瀬下洋平氏(芝浦工大)及び報告者の8名である。

2. 討論の内容

議論の最初に、後藤先生よりノイズ（あるいは、自然界の揺らぎ）に関する簡単な紹介があった。ノイズの本質に切り込むためには、分析のための計測という観点だけでなく、自然界を広く見渡すための哲学が必要であろうという含蓄の深い話であった。

今回の事の主眼は、ピーク検出手順にあるのではなく、スペクトルに伴うノイズの振る舞いの明確な定義であろうということは、産総研でのブレーンストーミングでのコンセンサスである。

これに対して、鈴木氏より別の位置づけが示された。すなわち、「実測信号に伴うノイズの振る舞いを定量的に定義することができるのであれば、今まで単なる予測であったものを、明確な根拠を持った見積もりとすることができる事になる」という指摘である。たとえば、検出限界はノイズと信号とのかねあい (S/N) で決まるが、例えば「ある信号強度のピークは、何回積算すれば識別できる（あるいは、してもできない）」などについての定量的な議論に結びつけることができるであろうという事である。すなわち、今まで教科書的な知識を根拠として推測の域を出なかったノイズの性質について、このような測定により実験的な検証ができる。その結果、実測に基づいた実用的なノイズの影響の定量化が可能であろうという事を意味する。

もともと後藤先生の提案も、データ処理の定量的精度評価のための標準ノイズデータベースというのが、その基本にあった。ということで、プロジェクトのスコープとして、ピーク検出ではなく、ノイズの取り扱い方法の定量化を主眼とすべきであろうという事で、共通の認識となった。

3. 予備実験の報告

産総研でのブレーンストーミングにおける田中氏の提案を基にした、報告者による予備実験の結果が報告された。すなわち、試料を銀とし、繰り返し測定時の表面状態を一定に保つために毎回表面をスパッタし、積算なしのスキャンでスペクトルを測定する。サイクル数をなるべく多く（今回の報告では、400回、および280回弱）とる。その結果得られる数百本に及ぶ同一条件スキャンのスペクトルについて、各測定点（エネルギー）での強度の母平均と母分散を推定する。繰り返し回数をなるべく多く取ることで、ポアソン分布の正規分布での近似をより確実なものとするとともに、得られたデータから推定される平均値と分散をより確かな推定値とすること

ができる。

以上のプロセスを行うことによって、使用した装置について、様々な信号強度における信号のばらつきを数値的に得ることができる。もし、信号が基本的にポアソン分布に従うのであれば、各測定点の信号の平均強度 \bar{x} に対しその分散 σ_x^2 をプロットすると、 $\bar{x} = \sigma_x^2$ の直線近傍に集まるはずである。

図1に低分解能で測定した金属 Ag のワイドスペクトルでの $\bar{x} = \sigma_x^2$ のプロットを、図2に中程度の分解能（実用分析でよく使う程度）で測定した価電子帯スペクトルでのプロットを、典型的な例として示す。

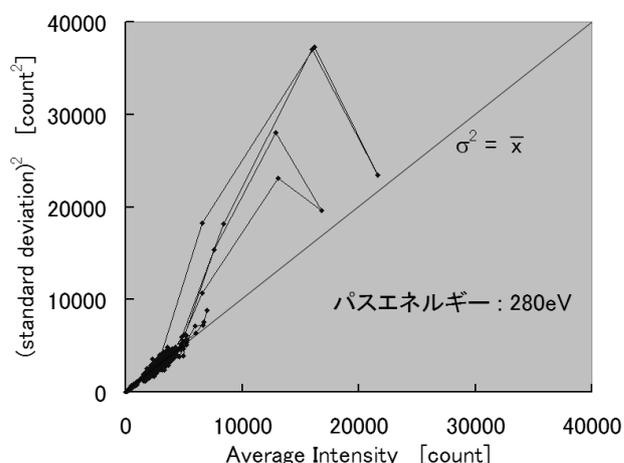


図1 金属 Ag のワイドスペクトルにおける各測定点の信号強度 \bar{x} と分散 σ_x^2 との関係。

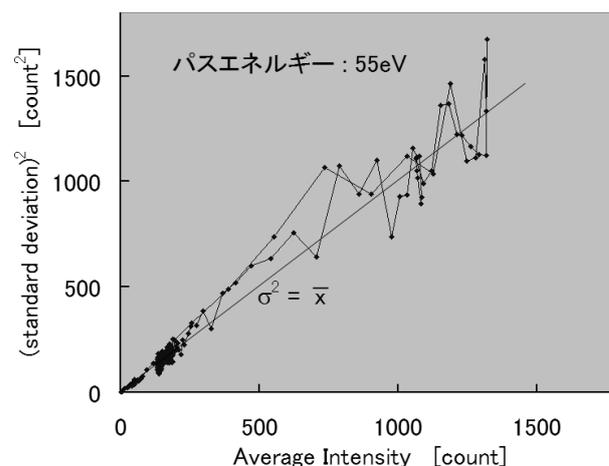


図2 金属 Ag の価電子帯スペクトルにおける各測定点の信号強度 \bar{x} と分散 σ_x^2 との関係。

図1では、強度の強いシャープなピーク近傍ではプロットが $\bar{x} = \sigma_x^2$ から大きくはずれるが、そのほかの測定点では理論と良くあった振る舞いをしていることがわかる。この大きなずれは、おそらく光源モノクロメータの熱ドリフトに起因するものであろうということで、意見の一致を見た。

これに対してさほどピーク強度の強くない(Ag 4dが測定区間に存在する)価電子帯のプロット(図2)では、全データが比較的素直に $\bar{x} = \sigma_x^2$ 近傍に集まっており、ほぼ理論通りの振る舞いをしていことが結論された。

この他の予備実験の結果と併せて検討した結果、田中氏の提案に基づいた本方法は、測定装置の与える信号が示すノイズの振る舞いが理論にあっていると見なせるかどうかを検討するのに適した手順であるとの結論に至った。

また、サイクルに対する各測定点の強度の振る舞いは、測定系の装置の安定性を検証する比較的厳しい方法にもなっている点も合意があった。すなわち、自分たちが使用している装置の重要な特性を評価してみる一つの機会を設定するという意味においても、ラウンドロビンの実施課題としておもしろいのではないかという指摘もあった。

4. 今後の方針

今回の討議の結果、田中氏の提案を基にした信号強度の振る舞いの評価法をラウンドロビン提案しても良いのではないかという結論が得られた。ただしそのためには、スコープを見直し、より実用性のアピールできる内容も盛り込むことが必要であろうということも指摘された。また、実際に用いられている様々な測定系での同様な検証を行うことは、各自が日常業務で用いている測定系の特性の厳しい評価を行うことにもなり、別の意味でも興味ある結果が得られるのではないかという指摘も得られた。

実際には、今回の意見・指摘を基に目的を再度明確に示すとともに、今回の予備実験を基に手順書を作製した上で、次回の研究会をめぐりにラウンドロビン提案を目指す(新たなプロジェクトを立ち上げる)事を想定している。このプロジェクトの実施が日本初の新たな規格の提案につながるのではという一言は、とりあえずのとりまとめを行った報告者を勇気づけてくれるものであった。今回の予備実験の結果とあわせて、まとまった具体的な報告を行い、ノイズの影響に対する定量的な取り扱いを確立する最初の一步としたい。

雑ばくな議論が出発点であったが、討議に参加して下さり有益な発言を頂いた各氏に感謝する。