実用電子分光法講座

ノイズ、S／N、そして平滑化　II

福島　整
科学技術庁無機材質研究所超高圧力ステーション　〒305 茨城県つくば市並木1-1
(1995年10月24日受け付け)

S/Nに関するSeahの提案を紹介するとともに、信号伝達論等を基にそれに対する考察を進めた。その結果、信号自体が持つ本質的な変動に対して決められるS/Nと、与えられたスペクトルデータのS/Nとは、統計的な意味が異なる。すなわちSeahの提案は、信号の持つ本質的な変動を示すものであり、スペクトルの「質の良し悪し」を決める尺度では無い。したがって、スペクトルの「質の良し悪し」を示すためのS/Nの決定には、基準としての真のスペクトルとの比較が必要である。その為には、与えられたデータから真のスペクトルを推定しなければならない。

1．SeahらによるS/Nの評価法

前回に示した３報の報文[1,2,3]のうち、それらの基礎となっている報告は1988年にRev. Sci. Instrum.に発表されたものである[1]。この内容を中心に、Seahらの提案を簡単に紹介してみたい。

Seahらの目的とするところは、S/Nを評価することで装置の性能の比較をしたいということである。したがって、前回の解説に述べたような信号伝達論に基づく様々な細かい議論はほとんどなされていない。ノイズ自体に対するモデルとしては、最初からポアッソン過程を採用している。

むしろ、実測から装置性能比較のためのデータを出すには、装置に依存する点をまず明確にせねばならない。その為にSeahらは、使用する試料としてスパッタクリーニングした金属Cuの表面を用いることとした上で、検討対象をAESに絞って次の６点を議論した。

① 入射電子ビームの加速エネルギー。

これは、もっとも代表的な条件として5keVをとり、以後の議論をしている。

② 入射電子ビームの電流。

これは、スペクトル全体の質に大きな影響を与える。したがって、装置のレスポンスのリニアな条件範囲で設定することになる。

③ ピーク強度とバックグラウンド強度の信号取り出し角に対する依存性。

Fig.1[1]に示す915eV近傍のCuのスペクトルに対して、ピーク値P、バックグラウンド値B

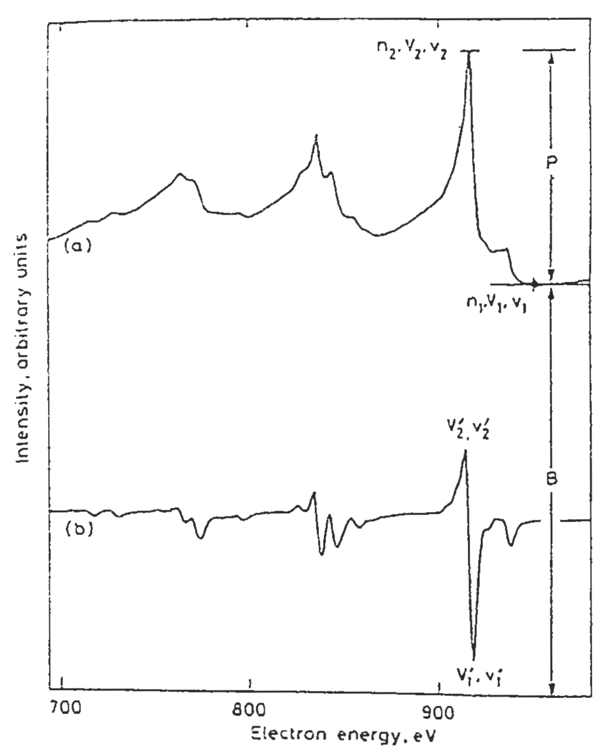

Fig.1[1] Definition of several parameters by Seah et al. on Cu LMM

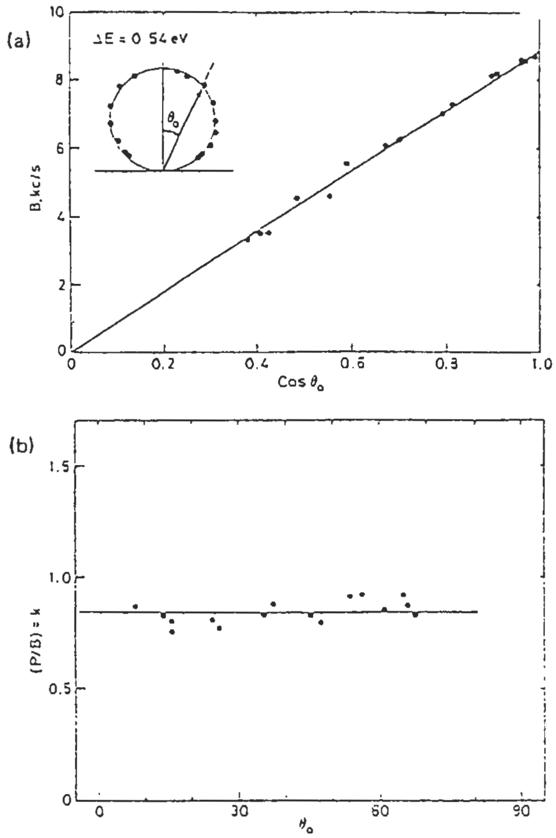

Fig.2[1] Dependance of Parameters P and B at Fig.1 on signal take off Angle θ_o, obtained by VG ESCALAB II

を図の様に定義した場合のそれぞれの値の試料表面に対する信号取り出し角θ_oに関する依存性はcosθ_oに関して直線的であり、比は一定となる（Fig.2[1]）。これから、$\theta_o \leqq 70$ deg以下では、一つの角度条件で意味のあるデータが取れる事になる。

④ P,Bのビーム入射角度に対する依存性。

例えばFig.3[1]の様に変化するが、これは取り込み立体角にも依存する。

⑤ 取り込み立体角（アパーチャーの大きさなど）。

これは、エネルギー分解能を決めるパラメータで、P,B比とは例えばFig.4[1]の様な関係を示す。

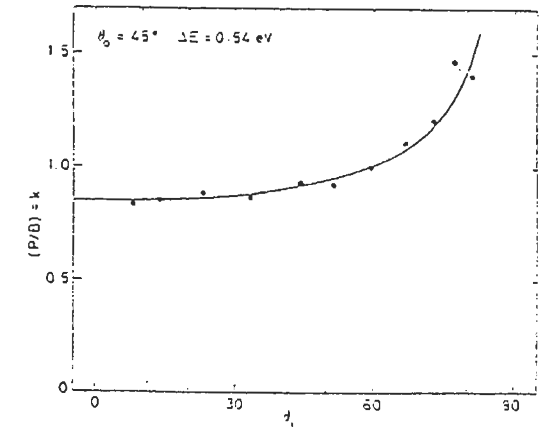

Fig.3[1] Dependance of parameters P and B at Fig.1 on incident angle θ_i of primary beam

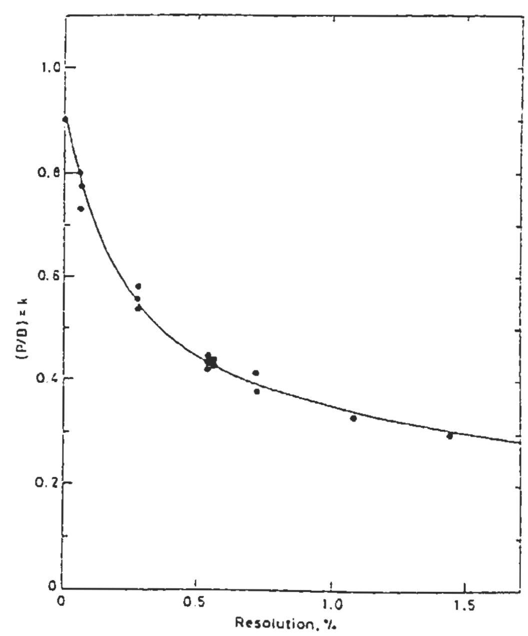

Fig.4[1] Dependance of ratio P/B at Fig.1 on resolution of equipment

⑥ Bにのみ影響を与える分光系内部での散乱電子（いわゆるゴミ電子）。

以上の点の考察から、このP,Bは、ビーム電流値、検出系、測定法（信号取り込み立体角、入射角、取り出し角等）に依存した定義可能なノイズを伴っていると結論づけている。
実際のS/Nに対してする検出系別の議論では、４つの方式（パルスカウント、アナログ、ブランキングによる変調、微分）に分けて式を導出している。もちろん、ポアッソン過程の仮定が大前提であり、ノイズは分布の分散の平方根で与えられている。

a. パルスカウント方式

この場合が、最も単純明快な式となる。すなわち計数率nおよび測定時間tでは、信号強度S=nt、ノイズ$N=(nt)^{1/2}$となる。これから一定時間計数した場合のS/Nは

$$S/N = (nt)/(nt)^{1/2} = (nt)^{1/2} \qquad \ldots(1)$$

と書ける。一方、計数系に指数関数型のダンピング（時定数τ）がかかった場合であると、計数率に対するダンピングによる影響をならして考えることになる。計数率nに対して、ダンピングの影響をならすと

$$S = \int_0^{\infty} ne^{-t/\tau}dt = n\tau \qquad \ldots(2)$$

となる。一方、ノイズ$N=n^{1/2}$に対してダンピングをかけると、自乗和を考えればよいから

$$N^2 = \int_0^{\infty}(n^{1/2}\cdot e^{-t/\tau})^2dt = n\tau/2 \qquad \ldots(3)$$

である。したがって、この場合のS/Nは

$$S/N = (2n\tau)^{1/2} \qquad \ldots(4)$$

実際の測定装置では、さらに計数効率の問題が入る。計数効率はエネルギーの関数であり、この影響を係数としてnにかける必用がある。

b. アナログ方式

まず、信号強度に対応したチャネルエレクトロンマルチプライヤ（CMS）の出力電流は、計数率nとCMSの観測している係数効率Dおよびゲインgで与えられる。また、この出力電流の分散（これがノイズに相当する）は、入力信号（n×D×g）およびゲインに対する波高分布曲線p(g)の分散の自乗和で与えられる。この場合、ゲインの平均gおよびその分散var(g)は、

$$\bar{g} = \int g\cdot p(g)dg/\int p(g)dg \qquad \ldots(5)$$

$$var(g) = \int (g-\bar{g})^2p(g)dg/\int p(g)dg \qquad \ldots(6)$$

低ゲイン時では波高分布は指数関数的になることから、$p(g)=p_0e^{-g/g_0}$とすると、$\bar{g} = g_0$および$var(g)=g_0{}^2$で与えられることがわかる。これから、ある時間計数した場合の強度SとノイズNは、

$$S = ndg_0t \qquad \ldots(7)$$

$$N^2 = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{出力電流の分散}}}{nDt\cdot var(g)} + \underset{\substack{\uparrow \\ \text{ゲインの分散}}}{var(g)\cdot nDt}$$

$$= 2nDt\cdot g_0{}^2 \qquad \ldots(8)$$

したがって、S/Nは

$$S/N = nDtg_0/(2nDtg_0{}^2)^{1/2}$$
$$= (nDt/2)^{1/2} \qquad \ldots(9)$$

で現せる。また、さらに時定数τのある系であれば、先のパルスカウント方式の議論と全く同じようにして、時定数を考慮しなくてすむ系より$2^{1/2}$倍S/Nの値が大きくなるから、

$$S/N = (nD\tau)^{1/2} \qquad \ldots(10)$$

と現せることになる。

c. ビームブランキング変調方式

この場合、入射電子ビームをパルス化(ON/OFF変調)するわけであるから、先のb.の場合に対して入射時間が短くなった場合を考えればよい。例えば、ビームのONとOFFの間隔が同じであれば、計数時間が実質的にb.の半分とした場合に相当するから、S/Nの値は$2^{1/2}$だけ悪くなる。

$$S/N = (nDt/4)^{1/2} \qquad \ldots(11)$$

また時定数のある系であれば、(11)に対して$2^{1/2}$倍大きくなるから

$$S/N = (nDt/2)^{1/2} \quad \ldots(12)$$

d．正弦派変調による微分方式

さて、再びFig.1[1]に戻って、実測スペクトルのピークトップの計数値をn_2、バックグラウンドを与える計数値をn_1とすると、P,Bおよび比の値k(=P/B)は以下の様に与えられる。

$$P = n_2 - n_1 \qquad B = n_1$$
$$k = (n_2 - n_1)/n_1 \quad \ldots(13)$$

また、a．からc．までの議論で、総ての場合についてS/Nは定数Aを用いて

$$S/N = (Ant)^{1/2} \quad \ldots(14)$$

の形にかける事が示されている。(14)をn_1とkを用いて書き直すと、$N^2=An_1t+An_2t$であることに注意すれば$n_2=n_1\cdot k+n_1$であるから

$$S/N = A(n_2 - n_1)t/(An_1t + An_2t)^{1/2}$$
$$= (Ak^2n_1t/(2+k))^{1/2} \quad \ldots(15)$$

と現せる。

これに対して、変調用正弦波の条件とFig.1[1]の微分スペクトルから読みとった上下の振幅の様々な比等から、

$$S/N = (0.099k^2Dn_1t/(2 + 1.44k))^{1/2} \quad \ldots(16)$$

という様な式をSeahは導いている。これは、スペクトル上で5eVの間隔に相当する周期での変調をかけた場合であり、10eVでの変調ではS/Nはさらに約1.2倍改善されるとしている。また、Fig.1[1]の積分スペクトルからkの値が読みとれるから、この図の様な場合であれば

$$S/N = 0.108(Dn_1t)^{1/2} \quad \ldots(17)$$

が、求めるS/Nの式となる。

さて、入射ビームの電流値の条件は、装置の応答がリニアであるところを選ぶ事で解決できる。したがって、ビームの入射角や信号の取り出し角およびその立体角の問題を次に考慮する。

試料上のある１点から放出される信号（Auger電子やバックグラウンド）の取り出し角度θ_0に対する強度分布を$f(\theta_0)$、ビーム入射角θ_iによる依存性を$j(\theta_i)$とすると、ピーク強度n_1およびバックグラウンド強度n_2は次のように表すことが出来る。すなわち

$$n_1 = q\cdot j(\theta_i)\cdot I\cdot \int f(\theta_0)d\Omega \quad \ldots(18)$$
$$n_2 = (1+k)\cdot q\cdot j(\theta_i)\cdot I\cdot \int f(\theta_0)d\Omega \quad \ldots(19)$$

Ωの積分範囲は、分光器の取り込み立体角をとる。Iは入射ビーム電流、j(0)=f(0)=1とする。qは、ここでは950eVでの試料表面放線方向の単位立体角・単位入射ビーム電流(5keV)の信号強度とする。そうすると(15),(16),(18),(19)より、分光系の利得の総計に対して定数Fを用いて

$$S/N = F(It)^{1/2} = F(2I\tau)^{1/2} \quad \ldots(20)$$

と記述できる。

以上をまとめると、次の様になろう。

表面をスパッタクリーニングしたCuのLMMに対し、Fig.1[1]のn_1,n_2を測定することとする。この時、入射ビームエネルギーを5keVとし、θ_i,θ_0に対してFigs.2,3[1]の様なデータを準備しておく。また、パルスカウント方式を基準としてFに次の様な係数をかける。

1	：	パルスカウント
$2^{1/2}$	：	アナログ増幅
2	：	ビームブランキング
3.3	：	5eV相当の変調微分

この時、異なった装置同士のS/Nは(20)で評価し互いに比較できることになる。

また、以上の議論が成立する条件として必用なその他の仮定として次の２点がある。一つは、入射ビームを切ったときのノイズが充分小さい事である。もう一つは、入射ビーム自体が持つノイズも充分小さいという仮定である。

Seahらは、以上で示した検出方式別の関係が実際に成立していることを実験で検証している。以後出された報告は、総てこの考え方が基本となっている。

２．信号伝達論におけるS/N

信号伝達論におけるS/Nの定義を、次に見てみよう。この場合、用いられるモデルや議

論の内容によって色々存在するであろうが、もっとも基本的かつよくお目にかかるのは、次のような定義である。

まず、ノイズが加法的であるという仮定が必要となる。この時、前回の最初で（(1)式）紹介した様に

$$x(t) = f(t) + n(t) \quad \ldots(21)$$

ここで$f(t)$は真の信号、$n(t)$はノイズ、$x(t)$は観測される信号である。そうすると、ある時刻t_0における観測信号のもつS/Nは、$n(t)$の二乗平均振幅を$E\{|n(t)|^2\}$として

$$S/N = |f(t_0)| \,/\, \sqrt{E\{|n(t)|^2\}} \quad ..(22)$$

で与えられる。ただし、

$$E\{|n(t)|^2\} = \lim_{T\to\infty}\left(\int_0^T n^2(t)dt\right)/T \quad \ldots(23)$$

である。この式は、加法性の仮定から$n(t)$の時間平均値が0なので、時間に対する$n(t)$の分散に等しい事もわかる。すなわち、ノイズの大きさとして意味を持つのは分散ということになる。

(23)は、また次のような意味あいをも含んでいる。

加法的なノイズであれば、ノイズ成分だけを式の上で分離して取り扱うことができる（そのための「加法性」の仮定である）。しかし、ノイズ成分の強度は一意的には決められない。t_0をとるタイミングによって、$n(t)$の値は変わるのである。

これは、前回のエルゴード仮説を思い起こすと良い。すなわち、(21)を与えるような系をm個仮定したとき、ある時間t_0に一斉にそれらの$n(t_0)$を調べてみたとしよう。すると、それらは総て同じ値ではなく、ある平均値と分散を持った分布に従う数値群として観測されるに違いない。そしてそれは、(21)に従う系一つについて、$f(t)=f(t_0)$の時の$n(t)$をm個観測した場合の結果と統計的に見分けがつかないに違いない。

この様な確率変数である$n(t)$を（ここでは、まだ$f(t)$とはなんの関係もない）理論的に扱う場合、特に周波数空間での取り扱いが問題となる。なぜならば、$n(t)$も$\{n(t)\}^2$も積分可能な保証はどこにもないからである。したがって、$n(t)$の直接的なフーリエ変換は大変考えづらい。これに対して、$n(t)$に対しある限られた時間内($0 \leqq t \leqq T$)の孤立波形に対するフーリエ変換を考え

$$N(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} n(t)\cdot\exp(-i\omega t)\ dt \quad \ldots(23)$$

をとり、さらに

$$N_{xx}(\omega) = \lim_{T\to\infty} |N(\omega)|^2 / T \quad \ldots(24)$$

を考える。$|N(\omega)|^2$は$n(t)$のパワースペクトルと呼ばれるものの一種であり、(24)はそれを時間平均した形を与えている。したがって、この様な$N_{xx}(\omega)$はパワースペクトル密度と呼ぶことが出来る。このパワースペクトル密度は、$n(t)$の自己相関関数から直接導出する事ができるのであるが、実はその過程での変数変換にエルゴード仮説が必要とされるのである。ここらへんの式の変形は教科書[4)]にゆずるとして、重要なのはこのパワースペクトル密度が二乗平均振幅と以下の式で結びついていることである。

$$E\{|n(t)|^2\} = (1/2\pi)\int_{-\infty}^{\infty} N_{xx}(\omega)d\omega \quad \ldots(25)$$

要するに、理論的に取り扱い易い性質を持ったノイズ強度の定義が、(22)の分母に来ているわけである。

この(22)式は取り扱い易く、例えば平滑化などの操作によって$f(t)$を推定する為の議論においては、平滑化の操作を表す線形演算子$\mathcal{S}$を用いると(21)は

$$\mathcal{S}\cdot x(t) = \mathcal{S}\cdot f(t) + \mathcal{S}\cdot n(t) \quad \ldots(26)$$

となり、(22)は

$$S/N(\mathcal{S}) = |\mathcal{S}\cdot f(t_0)| \,/\, \sqrt{E\{|\mathcal{S}\cdot n(t_0)|^2\}} \quad \ldots(27)$$

となる。この$S/N(\mathcal{S})$を最大にするような$\mathcal{S}$を決定すれば、最適な平滑方法が定まることになる。この考え方から、$f(t)$が既知であるような場合であると、最も最適な$\mathcal{S}$は$f(t)$の形そのもの（実際的には時系列上で反転させた$f(-t)$の形になるが）である事が導かれる。この様にして決められた$\mathcal{S}$を、マッチドフィ

ルターと呼ぶ。　また$f(t)$が未知である場合には、基本的に最小二乗の原理が用いられる。このあたりの議論については、最終的にはアプリオリに$f(t)$の形状や導関数が分かっている事が具体的な結果を得るために必要であり、完全に未知の$f(t)$に対する議論というのはみあたらない。

さて(22)をあらためてじっくりと眺めてみると、二乗平均振幅というのが分散と同じ事を示しているのであるから、実は先のSeahの議論の出発点と結果的にはまったく同じ事を示しているのに気がつかれると思う。すなわち、ある信号においてその強度をＩとし、その分散をσ^2とすると

$$S/N = I/|\sigma| \qquad ...(28)$$

であり、さらにもし信号がポアッソン過程に従うのであれば$\sigma^2=I$であるから

$$S/N = \sqrt{I} \qquad ...(29)$$

となるのである。

３．結局どうするか

さて、以上の話でSeahの考え方の基本も信号伝達論の教えるところも同じであることが分かってきた。では(28)の本質は一体なんであろうか。

信号強度は、ある確率分布に従う母集団より任意にサンプリングされたものである。したがって、(28)はその母集団の平均値と分散より計算されるものであり、母集団を特徴づけるものである。そうすると先のSeahの提案は、装置の形式により生ずる母集団のもともとからの歪みを分類したものであって、やはり母集団に対する推定値を求めているものとみなすことができる。

一方で、目の前に置かれたスペクトルデータのノイズの度合いをS/Nとして表すことは、与えられたスペクトルが真のスペクトルからノイズによりどの程度歪んでいるかを示そうとすることである。したがって、与えられたスペクトルから真のスペクトルを推定し、その差を見なければならない。

では、真のスペクトルの推定はどの様にすればよいのであろうか。その考察の第一歩として、真の信号強度の推定について考えてみよう。

ある一定の条件下で、一つの現象を何回か観測して一連のデータ{x1,x2,...xn}を得たとしよう。この一連のデータを含む母集団の平均値（測定されたデータの平均値ではない）が、求めたい真の値であると仮定するのである。

測定された一連のデータは一つの分布をなし、それから平均値と分散が１つ決められる。したがって、「一連のデータを取る」という事を何回か繰り返すと、その回数分だけ平均値が得られる。この平均値のセットも、ある分布を示すだろう。この「平均値の示す分布」の性質が出来るだけ望ましくなるような「一連のデータからの平均値の決定法」が判れば、よりよく真の値（母集団の平均値）が推定できるに違いない。

そのためには、まず「平均値の示す分布」の平均値と母集団の平均値の差が無い事が望ましい。この差（偏差）のが最小の推定量（値）が、統計学で言うところの不偏推定量である。

また、「平均値の示す分布」が不偏推定量を与える分布であっても、その分散が大きいと、やはり実用上不安が大きい。したがって、分散が出来るだけ小さくなる方が望ましい。その様な分布を与える推定量が有効推定量である。

しかし、有効推定量を求めるには、母集団の分布（確率分布）が判っていなければならない。多くの場合アプリオリに判っている事は無いため、他の手を考える事となる。この為に、線形演算（加重平均）で求められる不偏推定量のうちで分散が最小となるような推定量を考えるのである。これが、最良線形不偏推定量である。何故加重平均にこだわるかは、統計学の教科書を参照されたい。

さて、以上の様な推定量の概念を用いると、統計学が母集団の分布形に関係なく、単純平均が最良線形不偏推定量として用いる事が出来ることを保証してくれる事がわかる。すなわち、単純平均が「最も良い真の値の推定法」なのである。同様に通常の方法で計算される分散（平均値からの差の二乗和を、全点数－１で割ったもの）が、もっともよい母分散の推定値となることも示される。

これは、極めて便利で有り難い結論と言えよう。すなわち、ドリフトの無い装置で測定

するのであれば、時間をかけて観測すればするほど、得られた結果はより真に近いことを保証してくれているからである。したがって、十分時間をかけて測定したスペクトルは、「その装置にとっての」真のスペクトルとみなす事ができるのである。

この結論からすると、例えば非常に安定した装置で長時間かけて測定されたスペクトルのデータベースと、十分正確なスペクトルの補正法（エネルギー位置と強度に対する）が存在するのであれば、測定スペクトルとデータベース中のスペクトルの差からS/Nを決定することが可能である事になる。近い将来、これは現実に可能になるであろう（と、強く望んでいる）。しかし、現状では残念ながらこれは不可能である。

結局、なんらかの方法で与えられたスペクトルのみから真のスペクトルを推定する事が必要となってくる。すなわち、信号伝達論で言うところの信号復元が必要なわけであり、その代表的なものが平滑化である。

4．終わりに

以上、今回はS/Nに関するSeahの提案を紹介するとともに、それに対する考察を進めた。

その結果、信号自体が持つ本質的な変動に対して決められるS/Nと、与えられたスペクトルデータのS/Nとは、統計的に見て意味が異なることを示した。すなわちSeahの提案は、信号の持つ本質的な変動を示すものであり、スペクトルの「質の良し悪し」を決める尺度では無いのである。

スペクトルの「質の良し悪し」を示すためのS/Nの決定には、基準としての真のスペクトルとの比較が必要である。その為には、与えられたデータから真のスペクトルを推定しなければならない。

次回は、スペクトル形状の推定法としての平滑化について、ディジタルフィルタ（荷重移動平均法）を中心に論ずる事にする。

参考文献

1) M.P.Seah and C.P.Hunt, *Rev. Sci. Instrum.*, 59 2, 217 (1988)

2) M.P.Seah and P.J.Cumpson, *J. Elect. Spect.*, 61, 291 (1993)

3) M.P.Seah and C.P.Hunt, *NPL report*, DMM(A)101 (1993)

4) 例えば南茂夫，喜利元貞，桜井捷海，「機器分析のたるのコンピュータ入門」（講談社サイエンティフィック，1982）のp.140からの説明が分かり易い。

The bases of noise, S/N and smoothing - II

Sei FUKUSHIMA
National Institute for Research in Inorganic Materials
1-1 Namiki, Tsukuba, Ibaraki 305, JAPAN

Summarizing of the discussion about S/N by Seah et al. and the discussions about S/N based upon the signal processing theory are presented. S/N decided by estimation of average and variance of original population is intrinsically differ from S/N of an spectrum data. S/N by Seah et al. is corresponding to the former, and it is not able to use as an index of quality of an spectrum data. S/N as an index of quality of an measured spectrum data should be decided by comparison with a true spectrum as a standard for estimation which is estimated from that measured spectrum.

［査読者との質疑応答］

堂前：データ処理していない生のスペクトルに関しては、そのS/Nを最大カウント数，最小カウント数および電子の検出方法だけからSeahの提案方法により決定することはできないのでしょうか？

著者：第３章で主張している事は、あるチャンネルで観測される信号の母集団の平均値と分散の推定（$I^{\frac{1}{2}}$で評価する）と、スペクトル単独で決まるスペクトルの「品質としてのS/N」とは異なる、ということです。

すなわち、「信号のばらつきの分散が$I^{\frac{1}{2}}$で評価出来る」とすることは、すでに信号を与える母集団の分散を適当なモデルで推定した事と同じです。一方、あるスペクトルデータだけから、そのスペクトルの持つS/Nを決めるとは、そのスペクトルの本来の形からの歪み（ほとんどはノイズによるものですが）がどのぐらいかを評価する事です（すなわちノイズによるばらつきは、$I^{\frac{1}{2}}$で表される保証が無い）。

Seahの議論は、信号を与える母集団の平均と分散が正しく推定出来たとして（ポアッソン分布に従う）、装置の形式によってその母集団がどう歪んで見えるかを示したものです。ですから、一つのチャンネルあるいは一つのスペクトルのデータ点を「長時間観測して対象としているデータの母集団の性質を推定しようとした場合」、その装置がきちんと調整されているものであればSeahの式に従った値が得られるわけです。きちんと調整されてなければ、Seahの式からはずれるのですね。

スペクトルの品質としてのS/Nは、スペクトルの真の形を基準とした場合のばらつきのマグニチュードが一つの指標になるでしょう。そして、これは必ずしも$I^{\frac{1}{2}}$に従う保証は無いのです。と言うことで、すでに測定されてしまって確定されたスペクトルの品質は、Seahの方法では議論出来ない（そもそも、目的が異なる）事になります。

いいかえれば、信号が本質的に持つばらつきの推定（母集団の分散の推定：Seahの式など）と、サンプリングされたデータがもつばらつきの大きさを与える指標を得ること（品質としてのS/N）が、今まで（著者も）混同して議論していたと言うことです。

堂前：２章の“信号伝達論におけるS/N”では一つのデータ点についてのS/Nが議論されていると思います。３章で述べている真のスペクトルが得られたとしたときの、測定スペクトルのS/Nを求める式はどのようになるのでしょうか？

著者：真のスペクトル形状をまず推定する必要があります。それを基準にして、例えば残差の表現（二乗和、χ^2値など）を用いるのが一つの方法となります。パワスペクトルの高周波領域の平均値を直流項で割った値でも良いかもしれません。今後の検討課題となるでしょう。

堂前：データ処理（例えばスムージング）によってスペクトルが本質的に持っている情報量が増えることはないはずですが、スムージング等により見かけ上のS/Nは向上すると考えていいのでしょうか？それならば、スペクトルがデータ処理によって変化しない本質的に持っている情報量を示す不変量はあるのでしょうか？

著者：見かけのS/Nという意味が、先の「サンプリングされたデータがもつばらつきの大きさ」という意味であれば、適切なスムージング（定義が難しいですが）の結果「見かけの」S/Nが向上するとして差し支えないと思います。

「本質的に持っている情報量を示す不変量」という言葉を文字通りに解釈しますと「真の信号成分による情報量」という事になります。これが得られたスペクトルだけから正確に推定できれば苦労は無いわけで、実際にはアプリオリな何らかの情報が無い限り原理的に不可能です。

したがって、なんらかの統計的な手法により「最ももっともらしいモデル」（例えば最尤モデル）を推定して、それを真の信号の代わりに用いる事になります。