

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特許公報(B2)

(11) 特許番号

特許第3683295号
(P3683295)

(45) 発行日 平成17年8月17日(2005.8.17)

(24) 登録日 平成17年6月3日(2005.6.3)

(51) Int. Cl.⁷

F I

GO 1 N 23/227
// GO 1 T 1/29

GO 1 N 23/227
GO 1 T 1/29

C

請求項の数 6 (全 13 頁)

<p>(21) 出願番号 特願平6-218902 (22) 出願日 平成6年9月13日(1994.9.13) (65) 公開番号 特開平7-174720 (43) 公開日 平成7年7月14日(1995.7.14) 審査請求日 平成13年9月10日(2001.9.10) (31) 優先権主張番号 P4331317:5 (32) 優先日 平成5年9月15日(1993.9.15) (33) 優先権主張国 ドイツ(DE)</p> <p>前置審査</p>	<p>(73) 特許権者 590000248 コーニンクレッカ フィリップス エレクトロニクス エヌ ヴィ Koninklijke Philips Electronics N. V. オランダ国 5621 ペーアー アインドーフエン フルーネヴァウツウェッハ 1 Groenewoudseweg 1, 5621 BA Eindhoven, The Netherlands</p> <p>(74) 代理人 100072051 弁理士 杉村 興作</p> <p>(74) 代理人 100100125 弁理士 高見 和明</p> <p style="text-align: right;">最終頁に続く</p>
--	--

(54) 【発明の名称】 位置依存スペクトル評価の試験方法

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

試験地帯の物質のスペクトル又はスペクトル分布を決定し、複数の位置について、複数のスペクトル値を有する各スペクトルを測定する試験方法において、

a) 各スペクトルの一連のスペクトル値によって形成したスペクトルベクトルを、前記位置に応じて行もしくは列に配置して、データ行列を形成するステップと、

b) 第1行列および第3行列がスペクトルに依存する特異ベクトルで構成され、第2行列が対角行列となり、第1、第2、第3行列の積が前記データ行列となるように、前記データ行列の特異値分解を行うステップと、

c) 前記第1、第2、第3行列の少なくとも1個を評価するステップとを具備し、
スペクトルが既知である物質を識別するために、

a) 当該スペクトルのスペクトル値によって形成したスペクトルベクトルと、各前記特異ベクトルとの内積をそれぞれ計算し、

b) 前記内積の各値を重み付け係数として、各前記特異ベクトルを線形結合し、

c) 前記線形結合で得られたベクトルを、既知の前記スペクトルのスペクトルベクトルと比較することを特徴とする位置依存スペクトル評価の試験方法。

【請求項 2】

前記第2行列の有意でない要素を、前記第1行列の列のうち該要素に対応する列、および、前記第3行列の行のうち該要素に対応する列に存在するベクトルとともに取り除くことを特徴とする請求項1記載の位置依存スペクトル評価の試験方法。

10

20

【請求項 3】

貨物検査における所定物質の検出に用いることを特徴とする請求項 1 又は 2 記載の位置依存スペクトル評価の試験方法。

【請求項 4】

スペクトルが既知である物質の空間分布を決定するために、

a) 当該スペクトルのスペクトル値によって形成したスペクトルベクトルと、各前記特異ベクトルとの内積をそれぞれ計算し、

b) 前記第 2 行列および前記位置に応じたベクトルからなる行列とともに係数を考慮して、当該物質の空間分布を決定することを特徴とする請求項 1 または 2 記載の位置依存スペクトル評価の試験方法。

10

【請求項 5】

試験地帯内の空間分布が既知の複数物質のうち少なくとも一つのスペクトルを決定するために、物質の各々の空間分布を決めるベクトルが位置依存ベクトルによる内積を受けるとともに、当該物質のスペクトルが、係数、第 2 行列およびスペクトル依存ベクトルからなる行列から決定されることを特徴とする請求項 1 または 2 記載の位置依存スペクトル評価の試験方法。

【請求項 6】

請求項 1 記載の試験方法を実施する装置において、

a) 複数個のボクセルについてスペクトルをそれぞれ測定する測定装置と、

b) 各スペクトルの一連のスペクトル値からなるスペクトルベクトルを、前記位置に応じて行または列に配置して、データ行列を形成する手段と、

c) 第 1 行列および第 3 行列がスペクトルに依存する特異ベクトルで構成され、第 2 行列が対角行列となり、第 1、第 2、第 3 行列の積が前記データ行列となるように、前記データ行列の特異値分解を行う手段と、

d) 前記第 1、第 2、第 3 行列の少なくとも 1 個を評価する手段とを具備することを特徴とする位置依存スペクトル評価の試験装置。

20

【発明の詳細な説明】

【0001】

【産業上の利用分野】

本発明は、試験地帯の物質のスペクトル又はスペクトル分布を決定し、複数の位置について、複数のスペクトル値を有する各スペクトルを測定する試験方法およびその方法を行なう試験装置に関するものである。

30

【0002】

【従来の技術】

欧州特許公報 E P - O S 4 6 2 6 5 8 には、この種の試験方法が開示してあり、爆薬や薬品など所定物質の検出のために荷物検査に用い得る従来の試験装置においては、荷物片の多数の位置（以後ボクセルと呼ぶ）について運動量転換スペクトルを測定し、かかるスペクトルを、識別すべき物質のスペクトルと個々に比較する。適応例においては、荷物片、すなわち、対応したスペクトルが測定されたボクセル内に探索すべき物質が実際に存在している、と仮定することができる。

40

【0003】

しかしながら、既知の装置は、なお、一連の制限を呈しており、a) 探索すべき物質が、そのボクセルについて運動量転換スペクトルを支配する程度の高濃度以上にボクセル内に存在しない場合には、その存在を表示し難く、識別すべき物質が、例えば箔などの形で、多数のボクセル間に分布しているが、一辺が数 cm の正方形もしくは立方体と考えられる各ボクセル内には低濃度でしか存在していない場合には、荷物片内に実在するその物質の全量が比較的大きい場合でも、その物質の存在は表し難く、b) 試験地帯に種々の物質が存在していても、各ボクセル、すなわち、組合わせた運動量転換スペクトルが単一物質によって支配されておれば、その運動量転換スペクトルから、まず、その物質を、ついで、その空間分布を決定し得るが、一般に、かかる条件は満たされず、空間分布は決定し得

50

ず、c) 前述の仮定は未知の物質のスペクトルの決定を可能にするかも知れないが、かかる物質は、通例、多数のボクセル間に分布しており、いずれかのボクセルで支配的にはなっていないので、かかる決定は不可能である。

【0004】

【発明が解決しようとする課題】

したがって、従来のこの種の試験装置によっては、対象物内に多量に存在していても、その濃度が局所では支配的でない物質の検出は困難であった。

【0005】

本発明の目的は、スペクトルの集団評価を行なう試験方法、すなわち、試験地帯における物質が多数のボクセル間に分布しており、単一ボクセル内で支配的でない場合でも、スペクトル又はスペクトル分布の識別もしくは決定を可能にする試験方法を提供することにある。この目的は、前述した種類の試験方法に基づき、a) 各スペクトルの一連のスペクトル値によって形成したスペクトルベクトルを、前記位置に応じて行もしくは列に配置して、データ行列を形成するステップと、

10

b) 第1行列および第3行列がスペクトルに依存する特異ベクトルで構成され、第2行列が対角行列となり、第1、第2、第3行列の積が前記データ行列となるように、前記データ行列の特異値分解を行うステップと、

c) 前記第1、第2、第3行列の少なくとも1個を評価するステップとを具え、
スペクトルが既知である物質を識別するために、

a) 当該スペクトルのスペクトル値によって形成したスペクトルベクトルと、各前記特異ベクトルとの内積をそれぞれ計算し、

20

b) 前記内積の各値を重み付け係数として、各前記特異ベクトルを線形結合し、

c) 前記線形結合で得られたベクトルを、既知の前記スペクトルのスペクトルベクトルと比較することによって達成される。

【0006】

その説明に入る前に、本明細書における用語を規定しておく。「行列」は、行と列とからなる数値の方形領域を意味するものとする。「対角行列」は、行数と列数とが等しい正方形行列であって、主対角線上に位置する要素(第1行の第1要素、第2行の第2要素等)のみが零以外の数値を持ち得るものとする。「(m × n)行列」は、m行およびn列からなる行列である。「転置行列」は、行と列とを入れ替えた行列である。行列を表す記号は、大文字、例えばXとする。転置行列を表す記号は、大文字に冪指数Tを付して例えば X^T とする。

30

【0007】

「ベクトル」は、分離した数値の列からなり、一次元行列と見做せる量を意味するものとし、かかるベクトルが行列の行もしくは列と同じであれば、行ベクトルもしくは列ベクトルとも呼ぶ。特異値の分解によって形成した第1行列の列ベクトルおよび特異値の分解によって形成した第3行列の行ベクトルは特異ベクトルとも呼ぶ。

【0008】

2ベクトルの内積は、一方のベクトルの第1要素に他方のベクトルの第1要素を乗算し、一方のベクトルの第2要素に他方のベクトルの第2要素を乗算し、以下同様にして各乗算の積を合計する。内積の結果、すなわち、スカラー積は一つの数値となる。さらに、各ベクトルの自身とのスカラー積が数値1となり、他のベクトルとのスカラー積が零となる場合は正常ベクトルであり、行列の行ベクトルもしくは列ベクトルが正常であれば、行正常行列もしくは列正常行列となる。

40

【0009】

本発明は、試験地帯に生ずるスペクトルの異なる物質の数は、スペクトルを構成するスペクトル値の数より小さく、また、スペクトルが決定される位置すなわちボクセルの数より小さい、という仮定に基づいたものである。

【0010】

データ・行列が、例えば、列方向にスペクトル情報を含むとともに、行方向に空間情報

50

を含んでいる場合に、これらの情報は、本発明による特異値分解によって3行列間に分布しているため、容易に評価される。データ行列におけるスペクトル・ベクトルにかかる配置においては、第1行列が特異ベクトル(列ベクトル)中の空間情報を含み、第3行列が特異ベクトル(行ベクトル)中のスペクトル情報を含んでいる。

【0011】

第2行列すなわち対角行列は、主対角線に沿ってのみ零以外の値、すなわち、分解によって生じた特異値を含み、それらの特異値は、第1群および第2群に再分割することができ、第1群の特異値は、第2群の特異値より有意に大きい。第1群の有意の特異値は、試験地帯に有意に存在する物質の数に対応する。

【0012】

この情報、スペクトル、有意の特異値の数は、例えば、食料品の製造については重要である。通常、試験地帯には単一の物質のみが存在し、したがって、単一の有意の特異値のみが生ずる。しかしながら、第2行列における第2の有意の特異値の存在は、試験地帯における第2の物質、例えば、製造過程で破損したプラスチック器具の破片の存在を示す。

【0013】

理想的な場合には、対角行列は、試験地帯に存在する無視し得ない低濃度の物質と同数の零以外の値の行列要素を主対角線中に含んでおり、そのことから、第2行列の主対角線中に位置する零値の行列要素の一つとして同じ列もしくは行に位置する第1行列の列ベクトルおよび第3行列の行ベクトルは、簡単に消去することができる。

【0014】

しかしながら、実際には、測定中に生ずるノイズなどの付加的な影響を受けて、これらの値は零値に達せず、零以外の値に達するが、成分によって生ずる値より有意に小さい。

【0015】

したがって、本発明の他の領域に要する数学的労力を低減するために、第2行列の主対角線中の非有意要素が消去され、したがって、第1行列の同一列もしくは第3行列の同一行に存在するベクトルも消去される。第1もしくは第3の行列において消去される列もしくは行のベクトルはノイズのみを含んでいるので、かかる削減によっては計算の正確さは有意の影響を受けない。したがって、削減を受けた3行列を互いに乗算すると、その積は、データ行列の無ノイズ円滑化例と説明される行列を構成する。

【0016】

既知スペクトルを有する物質を識別するようにした場合、
スペクトルが既知である物質を識別するために、
a) 当該スペクトルのスペクトル値によって形成したスペクトルベクトルと、各前記特異ベクトルとの内積をそれぞれ計算し、
b) 前記内積の各値を重み付け係数として、各前記特異ベクトルを線形結合し、
c) 前記線形結合で得られたベクトルを、既知の前記スペクトルのスペクトルベクトルと比較する。

【0017】

この場合、既知スペクトルの物質、例えば、荷物片内部の爆薬を、その小部分が種々のボクセル中に存在するに過ぎないように分布している場合にも、識別し得るようにする。したがって、この例は、特に荷物検査に適しており、荷物検査中に所定物質を検出するのに適用することを特徴とした例もある。

【0018】

データ・行列の特異値分解から生ずる行列は、試験地帯における物質の空間分布の決定を、その物質およびその物質のスペクトルが既知の場合に可能にする。

【0019】

したがって、本発明の実施例においては、スペクトルが既知である物質の空間分布を決定するために、

a) 当該スペクトルのスペクトル値によって形成したスペクトルベクトルと、各前記特異ベクトルとの内積をそれぞれ計算し、

10

20

30

40

50

b) 前記第 2 行列および前記位置に応じたベクトルからなる行列とともに係数を考慮して、当該物質の空間分布を決定する。

【0020】

したがって、その空間分布の決定には、試験地帯に存在する物質に対する進んだ知識を有し、スペクトルに基づいて識別し得ることが必要であり、かかる状態は食料品検査の場合に存在する。

【0021】

特異値分解から生ずる第 2 行列が、試験地帯における空間分布既知の物質のスペクトル・ベクトルの決定を可能にすることもあり得る。したがって、試験地帯内の空間分布が既知の複数物質のうち少なくとも一つのスペクトルを決定するために、物質の各々の空間分布を決めるベクトルが位置依存ベクトルによる内積を受けるとともに、当該物質のスペクトルが、係数、第 2 行列およびスペクトル依存ベクトルからなる行列から決定される。

10

【0022】

本発明による試験方法を行う装置は、

a) 複数個のボクセルについてスペクトルをそれぞれ測定する測定装置と、

b) 各スペクトルの一連のスペクトル値からなるスペクトルベクトルを、前記位置に応じて行または列に配置して、データ行列を形成する手段と、

c) 第 1 行列および第 3 行列がスペクトルに依存する特異ベクトルで構成され、第 2 行列が対角行列となり、第 1、第 2、第 3 行列の積が前記データ行列となるように、前記データ行列の特異値分解を行う手段と、

20

d) 前記第 1、第 2、第 3 行列の少なくとも 1 個を評価する手段とを具備することを特徴とする。

【0023】

【実施例】

以下に図面を参照して実施例につき本発明を詳細に説明する。図 1 における参照数字 1 は、X 線ビーム 2 を放出する X 線源を表し、X 線ビーム 2 は、ペンシルビームもしくは開口角の小さい円錐の表面の形状にすることができる。この X 線ビームは、荷物片となし得る対象物 3 を照射するが、人体や食料品も同じようにして試験することができる。対象物 3 内においては、X 線ビーム 2 が、就中、弾性的散乱 X 線を発生させるが、周知のように、レイリー散乱とも呼ばれる弾性的散乱の場合には、散乱過程の後にも X 線量子がそのエネルギーを失わない。

30

【0024】

試験すべき対象物 3 を超えた放射線は、好ましくは円形とする検出器装置 4 およびコリメータ装置 5 によって測定し、コリメータ装置 5 は、対象物 3 と検出器 4 との間に位置して、検出器装置 4 が、確実に、規定散乱角内の弾性散乱 X 線のみを主として指向し得るようにする。検出器装置 4 の出力信号は、増幅器 7 を介し、パルス高解析器 6 に供給する。検出器装置 4 のパルス形状出力信号は、散乱 X 線量子のエネルギーに比例した振幅を有しており、パルス高解析器 6 は、各出力パルス毎に、デジタル・データワードを発生させ、このデータワードが対応した測定値 X 線量子のエネルギーの特徴を表す。したがって、パルス高解析器 6 が供給する信号は、検出器装置 4 もしくは組合わさった検出器素子によって検出した X 線量子のエネルギー・スペクトルに対応する。一般に、検出器装置は、それぞれが所定散乱角内のみの散乱放射線によって重なり合う多数の検出器素子からなっており、その場合には、成分 6 および 7 からなる処理系統は、各検出器素子毎に設けられる。

40

【0025】

適切にプログラムしたマイクロコンピュータ（図示せず）からなる評価ユニット 10 は、メモリ 9 とともに、エネルギー・スペクトルから運動量転換スペクトルを決定し、例えばモニター 8 に表示することができる。X 線量子の運動量転換は、つぎの (1) 式に従って計算することができる。

$$x = \sin(\theta / 2) / L \quad (1)$$

50

ここに、 θ は、対応する X 線量子が散乱過程で偏向する散乱角であり、 L は、散乱放射線の波長である。値 $1/L$ はパルス高解析器 6 によって測定した X 線量子のエネルギーに比例し、また、検出器装置 4 によって検出し得る X 線量子の散乱角 θ はコリメータ装置 5 の構造によって予定されているのであるから、運動量転換は X 線量子のエネルギーもしくは対応した波長 L から、および、予定の散乱角 θ から容易に決定することができ、エネルギースペクトルは、運動量転換スペクトルに変換することができる。

【0026】

図 2 a の曲線 R_1 は、爆薬（セイスモプラスト）の運動量転換スペクトルを表し、図 2 b の曲線 R_2 は、木材の運動量転換スペクトルを表している。これらのスペクトルはいずれの場合も最大強度値に正規化してあるが、互いに実質的に相違していることが判る。異なる物質の運動量転換スペクトルのかかる相違は、試験地帯における所定物質の検出、もしくは、試験地帯におけるかかる物質の空間分布もしくはスペクトル分布の決定に対する基盤をなすものである。

10

【0027】

散乱放射線ビーム 2 は試験地帯の小部分すなわち単一ボクセルのみを覆うのであるから、放射線ビーム 2 に対して相対的に、対象物 3 を互いに直交する 2 方向、すなわち、図の紙面に対して水平および垂直の方向に置き換えて、対象物の他のボクセルを試験し得るようにし、それぞれの運動量転換スペクトルを決定し得るようにする必要がある。かかる相対移動は、図 1 には詳細に示さず、単に矢印 11 で象徴的に示してある。

【0028】

上述の試験装置は、欧州特許公報 EP - OS 4 6 2 6 5 8 とともにドイツ特許公報 DE OS 4 1 0 1 5 4 4 から知られており、したがって、詳細はこれらの公報を参照されたい。

20

【0029】

実例として、5 種類の物質（ゴム、木材、繊維、石鹼および爆薬箔）を満たした方形コンテナを試験すべき対象物 3 に用いた。 $n = 15 \times 17$ すなわち 255 個のボクセルの 2 次元ラスタを、放射線ビーム 2 に対する相対的移動によって走査し、各ボクセルについて運動量転換スペクトルを決定した。

【0030】

図 3 には、約 90 容積 % の木材および約 10 容積 % の爆薬を満たしたボクセルについて運動量転換スペクトルを示す。図 2 a および図 2 b に示したスペクトルと比較すると、比較的強いノイズが現れているが、これは、ボクセルに対する運動量転換スペクトルの測定には限られた時間しか使用し得ないのに対し、図 2 a および図 2 b に示した基準スペクトルは、1 回だけ測定した後は書庫に納めておけばよいのであるから、極めて長い測定期間内に極めて低いノイズで測定し得る、という事実に関連している。図 3 に示したスペクトルでは、該当するボクセル内に爆薬が存在しているか否かを決定するのは、実質的に不可能である。

30

【0031】

それにも拘わらず、 n 個のボクセルで決まる試験地帯に爆薬が存在するか否かの決定を可能にする試験方法を、図 4 に示し、測定したスペクトルの処理過程において評価ユニット 10 により実行するプログラムのフローチャートを参照して以下に詳述する。

40

【0032】

第 1 ステップ 101 はデータワード行列の形成である。図 3 に示したスペクトルは、所定の運動量転換について X 線量子の相対的個数を特徴づける m 個のスペクトル値からなっており、 m は例えば 1024 とする。したがって、各スペクトルは多数の数値からなっているのであるから、冒頭に述べた定義からすれば、ベクトルと考えることができる。このベクトルは、「スペクトル・ベクトル」と呼ぶものである。位置 i を有するボクセルのスペクトル・ベクトルについては、したがって、 $X_i = (x_{1i}, x_{2i}, \dots, x_{mi})$ となる。 n 個のボクセルに対する n 個のスペクトル・ベクトルをデータ・行列 X における n 個の列に配列すると、つぎの形の行列が得られる。

50

【 0 0 3 3 】

【 数 1 】

$$X = \begin{pmatrix} x_{11} & \cdots & x_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ x_{m1} & \cdots & x_{mn} \end{pmatrix}$$

したがって、 X は、 $(m \times n)$ 行列、すなわち、 m 行および n 列からなる行列である。この行列は、位置情報およびスペクトル情報を結合させ、各行は、種々のボクセルについて所定の運動量転換の位置依存性を示し、各列は、所定ボクセルについてスペクトル依存性を示す。

10

【 0 0 3 4 】

次のステップ 102 は、データ行列の 3 個の行列 U 、 G 、 V^T への特異値分解であり、かかる行列の積は、つぎの (2) 式に従ってデータ行列 X を構成する。

$$X = U G V^T \quad (2)$$

特異値分解は、就中、つぎの文献に記載されている周知の数学的手法である。

a) W. H. ゴルプ、C. F. ファンロアン共著、「行列計算」、ジョンホプキンス大学刊、バルチモア、1983年、16~20頁 b) W. H. プレス、B. P. フランネリ、S. A. チュコルスキ、W. T. ベッターリング共著「数値処方」、ケンブリッジ大学刊、1986年、52~64頁この数学的手法の分光學と組合わせた使用は、ドイツ特許公報 DE - OS 3 8 2 7 0 6 6 から知られている。

20

【 0 0 3 5 】

2 個の行列 U および V^T はつぎの形となる。

【 数 2 】

$$U = \begin{pmatrix} u_{11} & \cdots & u_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ u_{m1} & \cdots & u_{mn} \end{pmatrix} \quad \text{および} \quad V^T = \begin{pmatrix} v_{11} & \cdots & v_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ v_{n1} & \cdots & v_{nn} \end{pmatrix}$$

【 0 0 3 6 】

これは、行列 U は、データ行列 X と同様に $(m \times n)$ 行列であるのに対し、行列 V^T は、 $(n \times n)$ 方形行列であることを意味するが、これは、スペクトルを測定したボクセルの個数 n が、スペクトルもしくはスペクトルベクトルを構成するスペクトル値の個数 m より大きくない場合に限るものであり、この条件が満たされない場合には、行列 U は $(m \times m)$ 方形行列であるのに対し、行列 V^T は、 $(n \times m)$ の正常な行列である。

30

【 0 0 3 7 】

列ベクトル、すなわち、第 1 行列 U を構成する特異ベクトルは、正常ベクトルであり、自身との内積の場合に値 1 を形成し、他の列ベクトルとの内積の場合には零値を形成する。同様に、第 3 行列 V^T の特異ベクトル、すなわち、行ベクトルも正常ベクトルである。したがって、第 1 行列 U は正常行列であり、第 3 行列 V^T は正常行列である。データ・行列中のスペクトル・ベクトルが、前述したように、列ベクトルである場合には、第 1 行列の列ベクトルがスペクトルに関する情報を含んでいるのに対し、第 3 行列の行ベクトルは位置依存情報を含んでいる。もし、その代わりに、スペクトル・ベクトル X_i がデータ・行列 X の行に配置されているとすれば、第 1 行列の列ベクトルは位置情報を含み、第 3 行列の行ベクトルはスペクトルに関する情報を含むことになる。

40

【 0 0 3 8 】

第 2 行列

【 数 3 】

$$G = \begin{pmatrix} g_1^0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & g_2^0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & g_3^0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & g_n \end{pmatrix}$$

50

は冒頭に述べた定義からすれば対角行列であり、零以外の行列要素は、特異値分解から生じた特異値であり、対応する要素として同一列に位置する第1行列の列ベクトルの重み、もしくは、対角行列の組合わさった要素として同一行に位置する行ベクトルの重みを示す。図6は、対角行列Gにおける20個の最大特異値を対数目盛で大きさの順に示したものである。また、図5a乃至図5fは、6個の第1特異値とそれぞれ組合わさった第1行列Uの列ベクトル、すなわち、第1行列U内で、第2行列G内の対応する特異値として同一列に存在する列ベクトルをそれぞれ示したものである。すなわち、図5aは、最大特異値と組合わせた行列Uの列ベクトルを示し、また、図5fは、6番目の最大特異値と組合わせた列ベクトルを示す。

【0039】

10

既に述べたように、第1行列Uの列ベクトルは、スペクトル依存情報を含んでおり、したがって、各列ベクトルは、試験地帯に存在する物質のスペクトル・ベクトルの線形結合を表しており、これが、試験地帯内に存在する物質のスペクトル・ベクトルを列ベクトルの適切な線形結合によって再建し得ることの理由である。同様に、第3行列 V^T 内の行ベクトルは、位置依存密度部分を表し、例えば、この行列の第2行は、行列Uの第2列によってスペクトルを形成する抽象的成分の密度の位置依存性を表す。

【0040】

図5a乃至5fは、行列G内の対応した特異値が小さい程、列ベクトルに関連したノイズが顕著になることを明瞭に示している。図5fに示した6番目の最大特異値に対応する列ベクトルは、実際に、ノイズ以外の有用な情報を最早含んでいない。したがって、5種類 20の物質が存在した試験地帯については、対応するスペクトル情報を有する5個の列ベクトルのみが存在することになる。

【0041】

本発明は、一般に、互いにずれたスペクトルを有するr種類の物質が試験地帯内に存在する場合には、特異値分解によって対角行列の正確に5個の有意行列要素すなわち特異値が形成される、という事実の認識に基づいている。理想的な測定条件においては、その他の特異値は零となるが、実際には、この条件は満たされておらず、したがって、他の特異値がノイズおよび他の測定誤差に依存した値を有する。しかしながら、図6に明瞭に示されているように、5種類の物質に対応するr個の第1特異値以外は、有意に小さい。

【0042】

30

したがって、対角行列の対応する列もしくは行において有意の特異値が組合わされる列数もしくは行数まで3個の行列U, Gおよび V^T を削減することが可能であり、また、数学的労力の削減の故に有用である。この段階は、図4のステップ103で実行する。これは、例えば、対角行列の第3行もしくは第3列の特異値が有意でない場合には、行列Uの第3列ベクトルおよび部分ベクトル V^T の第3行ベクトルを消去しなければならないことを意味する。さらに、各行列を特異値の大きさによって仕分けし、この仕分けが特異値分解によって行なわれない場合には、最大特異値にそれぞれ対応した列ベクトルおよび行ベクトルを第1行列の第1列および第3行列の第1行に配置するようにするのも有用である。かかる削減により、行列Uおよび V^T は、つぎの行列 U_r および V_r^T となる。

【0043】

40

【数4】

$$U_r = \begin{pmatrix} u'_{11} & \dots & u'_{1r} \\ \vdots & & \vdots \\ u'_{m1} & \dots & u'_{rn} \end{pmatrix} \quad \text{および} \quad V_r^T = \begin{pmatrix} v'_{11} & \dots & v'_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ v'_{r1} & \dots & v'_{rn} \end{pmatrix}$$

ここに U_r は $(m \times r)$ 行列であり、 V_r^T は $(r \times n)$ 行列である。行列 U_r の列ベクトルは行列Uの列ベクトルとそれぞれ同一であり、同様に、行列 V_r^T の各行ベクトルは行列Uの行ベクトルとそれぞれ同一である。行列 G_r は、r個の有意値、すなわち、r行およびr列のみを有する対角行列となる。

【0044】

50

【数 5】

$$G_r = \begin{pmatrix} g'_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & g'_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & g'_3 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & g'_r \end{pmatrix}$$

特異値 g_1 乃至 g_r は、行列 G の特異値 g_1 乃至 g_n のうちの r 個の最大値である。3 個の行列 U_r 、 G_r および V_r^T の積から得られる行列 X_r は、データ行列 X に極めて近似し、円滑化した例を構成している。

【0045】

図 4 のステップ 104 および 106 で行なう次のステップは、行列 U_r に存在する列ベクトルの線形結合により、探索すべき部分、例えば、図 2 a に示した基準スペクトル R_i を有する爆薬の基準スペクトル R_i の可能な最良近似を表すスペクトル S_i を決定することである。この行列の列ベクトル U_j ($j = 1 \cdots r$) は正常ベクトルである、という事実の故に、この行列 U のスペクトル依存性を表す各列ベクトルを線形結合に適合させる係数もしくは荷重率は、成分 u_{1j} 、 u_{2j} 、 \cdots 、 u_{mj} からなるこの列ベクトルの、探索すべき部分の基準スペクトル R_i を表すベクトルとの内積によって得られる。したがって、係数 c_{ij} については、つぎの (3) 式が成り立つ。

$$c_{ij} = R_i \cdot U_j \quad (3)$$

ここに「 \cdot 」は内積を示す。(3) 式に従った計算は、行列 U_r の r 個の列ベクトル全部に対して図 4 のステップ 104 で実行する。

【0046】

係数 c_{ij} を計算した後、この係数を、図 4 のステップ 105 で、基準スペクトル R_i の可能な最良近似を表す線形結合 S_i の形成に用いる。線形結合 S_i は、つぎの式 $S_i = c_{ij} U_j$ に従って計算し、ついで、 $j = 1$ 乃至 $j = r$ として総和を求める。

【0047】

引続き、ステップ 106 において比較を行ない、上述のようにして、形成した総和が基準ベクトル R_i に対し、少なくとも近似的に対応しているか否かを確認する。図 7 には、爆薬について、基準ベクトル $R_i = R_1$ と、式 (3) および (4) に従って計算した総和ベクトル S_i とを示すが、基準ベクトル R_i は点線だけで示してある。極めて良好な対応が得られているが、これは、物質 i 、例えば爆薬が試験地帯内で識別されたことを意味する。

【0048】

基準ベクトル R_i と総和ベクトル S_i とが少なくとも近似的に対応しているか否かの評価は、各スペクトル値毎に、 R_i と S_i との差を形成して自乗し、このようにして計算した自乗値を全スペクトル値について相加したときに自動的に遂行される。この総和の平方根を基準スペクトル R_i のスペクトル値の和で割って、曲線 R_i より下の領域を求め、このようにして求めた値が警報閾値以下に低下した場合には、 S_i と R_i との間に適切な対応が得られ、探索すべき物質を検出したことになる。その場合には、ステップ 107 において、例えば聴覚もしくは視覚の警報を駆動し、ステップ 108 において、スペクトル R_i および S_i を、例えば図 1 のモニタ 8 に表示する。

【0049】

異なった基準スペクトルを有する他の物質を検出もしくは識別する場合には、ステップ 108 において、対応する基準スペクトルを負荷し、ステップ 104 乃至 106 の過程を繰り返す。その他の場合は、ステップ 109 においてプログラムを終了する。

【0050】

特異値分解によって得た 1 組のベクトルの範囲内での個々の物質の識別は、いくつかの点で周知の数学的回帰方法に似ているが、特異値分解は数学的安定性がより優れており、識別すべき物質のスペクトルのみが既知の場合にも遂行することができる。しかしながら、周知の回帰方法は、試験地帯に十分な量で存在するあらゆる物質のスペクトルに関する知識を必要とする。

10

20

30

40

50

【0051】

本発明の試験方法の他の利点は、試験地帯に十分な量で存在する物質がそれぞれの基準スペクトルとともに既知の場合には、物質の空間分布の決定が可能になることであり、これは、つぎの(5)式の関係が保持されているがためである。

【0052】

$$C^T D = G_r \quad (5)$$

ここに、 G_r は、ステップ102における特異値分解およびステップ103における主要要素への削減の後に得た行列であり、 C^T は、それぞれ既知の基準スペクトル R_i もしくは、既知の物質に対しステップ104に従って決定した係数によって行ベクトルを形成した($r \times r$)行列であり、試験地帯に存在する物質すべての既知のスペクトル R_1 乃至 R_r について、ステップ104の式に従い、係数を計算する補足が行なわれる。この($r \times r$)行列 D の行列要素は空間分布に関する情報を含んでおり、未知ではあるが、(5)式が代表する等式系を解くことによって決定することができる。このようにして行列 D の要素を決定した後に、つぎの(6)式に従ってその行列要素から密度分布を計算することができる。

10

【0053】

$$B = V_r D^T \quad (6)$$

ここに、 V_r は、特異値分解および有意成分への削減によって得た、行列 V^T の置き換えであり、 V_r は行と列とを交換することによって V^T から形成することができ、 r 行、 n 列の($r \times n$)行列である。行列 V_r と D^T との乗算から生ずる行列 B も($n \times r$)行列であり、それぞれ n 個の成分を有する r 個の列ベクトルからなっており、各列ベクトルは、 r 種類の物質の毎回1種類について、 n 個のボクセル中における空間分布を示している。

20

【0054】

この試験方法は、食品の製造に関して重要なものになり得るが、それは、この種の製造には、例えば、その製造に用いるプラスチック製器具からの銀が不純物として混ざることのあるチョコレートなどの物質が含まれるからである。このプラスチックおよびチョコレートの基準スペクトルは、測定してさらに蓄積し得るので、この試験方法は、チョコレート塊の中の何処でプラスチック銀が検出されるかを決定するのに用いることができる。

30

【0055】

行列 C^T におけるスペクトル情報と行列 D における空間情報との間の関係に基づき、(5)式が示すように、既知のスペクトルを有する物質の空間分布を決定し得るのみならず、既知の空間分布を有する物質のスペクトルも決定することができる。その場合には、(6)式から行列 B および V_r が判るので、 D^T に関する等式系を解くことができ、このようにして得た D^T もしくは D の値を用いれば、(5)式に示された等式系を解くことにより行列 C^T を計算することができ、その行列 C^T から、つぎの(7)式に従って行列 A を計算することができる。

【0056】

$$A = U_r C^T \quad (7)$$

この行列 A は、それぞれ m 個の成分を有する r 個の列ベクトルからなっており、各列ベクトルは r 種類の物質のうちの1種類をそれぞれ表している。

40

【図面の簡単な説明】

【図1】 本発明試験方法を実施する装置の構成を示すブロック線図である。

【図2】 a および b は異なる2物質の基準スペクトラムをそれぞれ示す線図である。

【図3】 単一評価点に対して記録したスペクトラムの例を示す線図である。

【図4】 本発明の試験方法を説明するためのフローチャートである。

【図5】 a 乃至 f は特異値分解によって得られるスペクトル依存ベクトルの例をそれぞれ示す線図である。

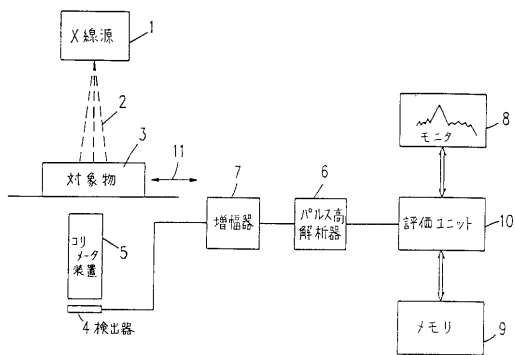
【図6】 大きさ順に配列したスペクトラム・マトリックスの素点群を対数目盛で示す線

50

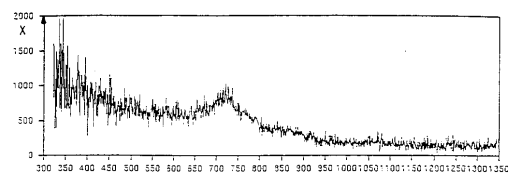
図である。

【図7】 スペクトル依存ベクトルの基準スペクトラムとの比較から計算した総和ベクトルの例を示す線図である。

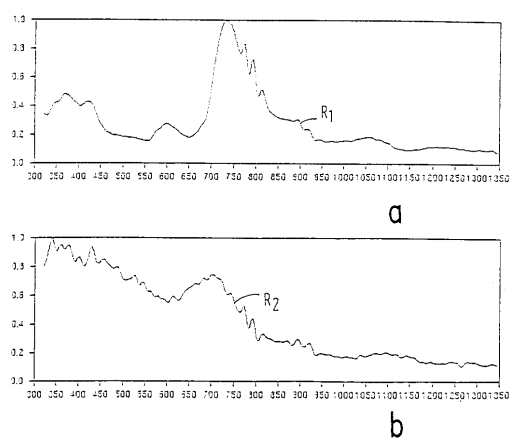
【図1】



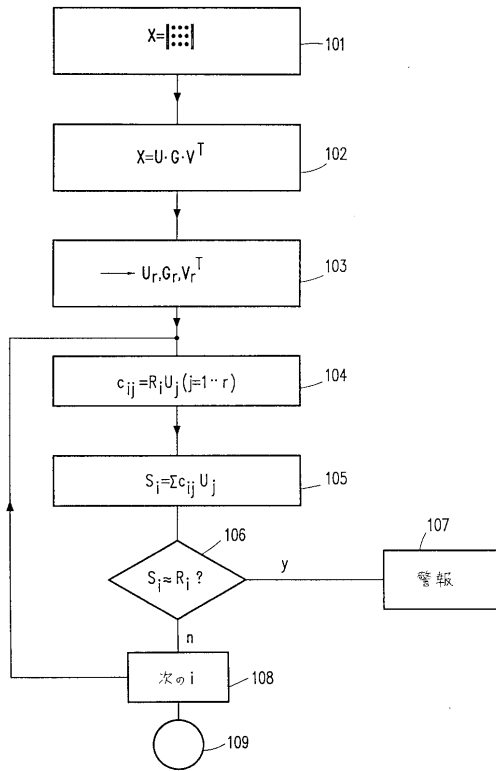
【図3】



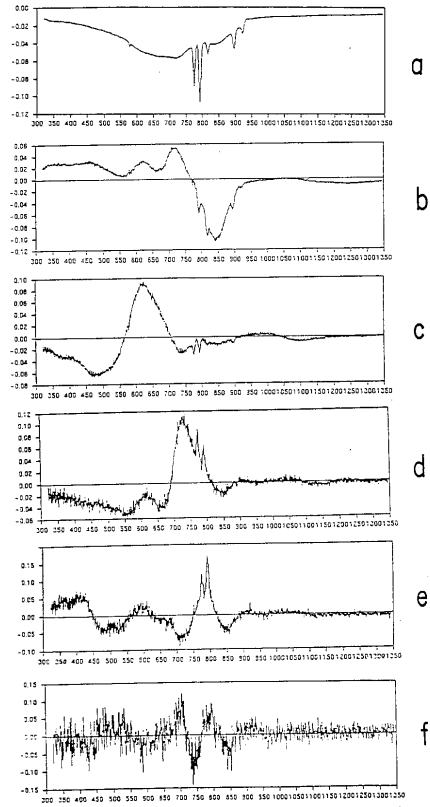
【図2】



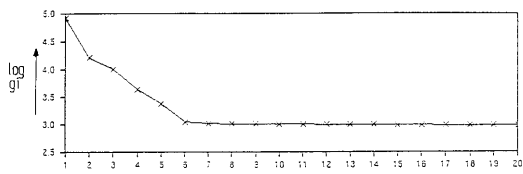
【 図 4 】



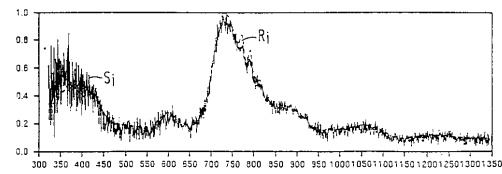
【 図 5 】



【 図 6 】



【 図 7 】



フロントページの続き

(74)代理人 100101096

弁理士 徳永 博

(74)代理人 100086645

弁理士 岩佐 義幸

(74)代理人 100107227

弁理士 藤谷 史朗

(74)代理人 100114292

弁理士 来間 清志

(74)代理人 100119530

弁理士 富田 和幸

(72)発明者 トーマス ブラッフエルト

ドイツ連邦共和国 22089 ハンブルグ シュレーゲルスヴェーク 7

審査官 高 場 正光

(56)参考文献 国際公開第92/007275 (WO, A1)

M.L.Gianelli 他4名, "Multichannel Imaging Spectrophotometer for Direct Analysis of Mixtures on TC Plates", Analytical Chemistry, 1983年, Vol.55, No.12, pp.1858-1862

(58)調査した分野(Int.Cl.⁷, DB名)

G01N23/00-23/227