



Title	Spline FunctionによるESR Imaging用Deconvolution
Author(s)	大野, 桂一
Citation	北海道大學工學部研究報告, 114, 33-40
Issue Date	1983-05-31
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/41793
Type	departmental bulletin paper
File Information	114_33-40.pdf



Spline Function による ESR Imaging 用 Deconvolution

大 野 桂 一

(昭和 57 年 12 月 27 日受理)

Spline-Based Deconvolution for ESR Imaging

Keiichi OHNO

(Received December 27, 1982)

Abstract

A deconvolution method is used for ESR imaging, in which ESR spectrum is divided into piecewise functions and each function is approximated to a cubic spline function and then deconvoluted using the momentum of the resolution function. By computer simulations, the optimal conditions for use of this method, the limitations, the properties against noise are estimated. The obtained results shows that the method works best when the width of piecewise function is equivalent to that of the resolution function and is very strong against noise.

1. 序 論

試料内の常磁性種がどのような分布をしているかは興味のあるところである。最近そのための測定方法とそれを用いた研究が行われ始めた。¹⁻⁸⁾ プロトンの空間分布を測定する NMR Imaging についてはすでに医療面で実用化され、X 線による CT-スキャナー (断層映像法) を機能面で凌駕する勢いである。⁹⁻¹³⁾ ESR Imaging では医療用として実用可能になるには解決すべき点が多く、完成までには時間を要するが、現在通常の ESR としての応用範囲は物理、化学、生物から最近では考古学の年代測定まで幅広く用いられているので、この ESR Imaging の測定方法が確立されれば、多くの応用が考えられるところである。すなわち、生体膜や薄膜の透過や拡散、放射線損傷や生成物の分布、流動高速化学反応の生成、減衰機構、金属や触媒などの表面拡散、気相や燃焼反応の機構等、ラジカル空間分布の情報が有益である学問分野は多方面にわたっている。最近、我々は硫酸酸性水溶液凍結ガラスの円筒試料に放射線照射をし、生成した捕捉水素原子の動径密度分布と 2 液混合流動による高速化学反応の測定に ESR Imaging を応用することに成功した。¹⁻⁵⁾

NMR Imaging では、歴史的に見るとまず最初に試みられた方法は静磁場勾配を用いる方法であった。⁹⁾ 磁場勾配を用いるため通常の高分解能の条件は消え、均一度の悪い磁場下での共鳴となるので一般には 1 本線の共鳴吸収線を考えれば十分となる。2 次元 image を得るには、その平面上で磁場勾配を回転させ、CT-スキャナーで用いられているアルゴリズムを使用し、変換すれば良い。Hinshaw は sensitive point method と呼ばれる方法を考え出した。^{10,11)} 磁場勾配をかけるとある空間

位置(1軸だけの磁場勾配では平面)のみは磁場が静磁場だけとなり、それ以外の空間領域では静磁場に磁場勾配からの寄与が加わる。勾配発生用の両コイルに流れる電流をある周波数で変調すると、勾配からの寄与分はその変調周波数で変調される。そして変調された信号は変調周波数成分を除くフィルターで除去すると、静磁場のみの領域(sensitive point あるいは plane)による信号となる。3座標軸に対して同様の操作を行えば、この方法によりデータ処理なしに、直接空間分布が求められる。この方法の欠点は、sensitive point を掃引するのに時間がかかること、空間分解能(磁場勾配の大きさとスペクトルの線幅による)が悪いこと、および感度が低いことである。その後、パルス NMR を利用する方法が種々工夫された¹³⁾ 特にその中で、2座標軸の磁場勾配をかけることにより決定される sensitive line に対して、その line に平行に第3の磁場勾配を加えると同時に、その空間位置に対応する全共鳴周波数成分を含むパルス RF を入力する方法がある。それから得られる free induction decay の Fourier 変換したものは、空間分布に対応した各周波数の成分強度を示す。医療用 NMR Imaging の開発を目ざす時には、瞬時に image が得られることが大切である。なぜなら生体は常時変化しているからである。したがっていかに image を得る所要時間を短くし、real time に近づけるかが重要な鍵となる。

ESR Imaging では事情が異なる。一般に固相では ESR スペクトルの線幅はかなり広いものが多い、液相や気相のスペクトルには比較的狭い線幅のものが多い。したがって液相や気相においては NMR のように、1本線スペクトルとして imaging 処理が可能となる。しかし、(1) 超微細相互作用により数本に分離したもの(充分離れて1本線として扱える場合もある)、(2) 分離した多重項スペクトルの各線幅がそれぞれ異なるもの、(3) 異方性を含む無定形スペクトル、(4) 数種類の常磁性種のスペクトルが重畳するもの等は処理が難しい。(1)の多重項スペクトルの場合であっても、等方性超微細相互作用による時は、Fourier 変換により deconvolution を行うことが可能である。²⁵⁾ (2)および(4)の場合には sensitive point method の方が現在のところ実用性があるように思えるが、まだ1本線を基礎にして議論および実験をしており、今後の詳細な比較検討が必要である。⁹⁾ すなわち、線型の重なり合った2本スペクトルで考察してみると、やはり deconvolution が必要になるからである。しかも一般論として、Fourier 変換を用いる方法のような数学的処理法はコンピュータにおいて処理されるので、将来のコンピュータの発達(高速化と大容量化)と共に処理時間が無視出来る程になる可能性が大である。これに比べて sensitive point method は高速化する余地が少ない。したがって長い将来を考えれば、ソフトウェアの開発によりコンピュータを利用する方法を発展させるべきであると思われる。

一般に数学的処理による imaging では deconvolution を行うと noise が増加する。最近 Deutsch と Beniaminy は X 線回折用の noise に強い deconvolution 法を報告している。¹⁴⁾ そこで、これを用いて ESR Imaging の deconvolution を行い、適用する際の最適条件の決定と効果の評価を計算機実験で行ったので、ここに報告する。

2. Spline 関数を用いた deconvolution の原理

観測される分布関数 $J(t)$ は、真の分布関数 $J_0(t)$ と分解能関数 $K(t)$ の convolution で得られる。

$$J(t) = \int_{-\infty}^{\infty} K(p) J_0(t-p) dp, \quad (1)$$

$J_0(t)$ は Taylor 展開出来るものとする。

$$J_o(t-s) = J_o(t) - J_o'(t)s + \frac{1}{2}J_o''(t)s^2 - \frac{1}{6}J_o'''(t)s^3 + \dots \quad (2)$$

これを式(1)に代入すると,

$$J(t) = J_o(t)M_0 - J_o'(t)M_1 + \frac{1}{2}J_o''(t)M_2 - \frac{1}{6}J_o'''(t)M_3 + \dots, \quad (3)$$

M_m は分解能関数の第 m 次モーメントである。

$$M_m = \int_{-\infty}^{\infty} t^m K(t) dt. \quad (4)$$

そこで $J_o(t)$ を図1のごとくに, 短冊型の spline の関数の和によって近似する。

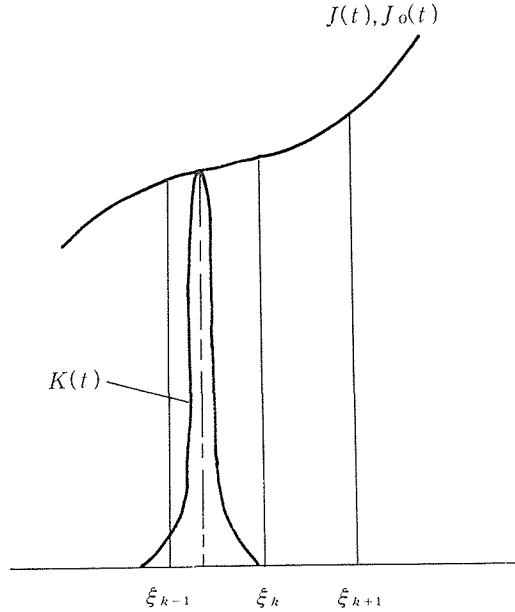


図1 $J(t)$, $J_o(t)$, $K(t)$ および短冊型関数

$$J_o(t) = \sum_{k=1}^{n-1} S_k(t) \quad (5)$$

ここで,

$$S_k(t) = \begin{cases} 0 & t < \xi_k \\ a_k t^3 + b_k t^2 + c_k t + d_k & \xi_k \leq t < \xi_{k+1} \\ 0 & t \leq \xi_{k+1} \end{cases}, \quad (6)$$

$\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k, \xi_{k+1}, \dots$ は式(6)の節である。

式(5)を式(3)に代入し, 係数を整理すると, $J(t)$ は $J_o(t)$ の係数と異なる係数を有する spline 関数の和となる。

$$J(t) = \sum_{k=1}^{n-1} S_k(t), \quad (7)$$

$$S_k(t) = \begin{cases} 0 & t < \xi_k \\ A_k t^3 + B_k t^2 + C_k t + D_k & \xi_k \leq t < \xi_{k+1} \\ 0 & t \leq \xi_{k+1} \end{cases}. \quad (8)$$

式(6)と式(8)の係数間には下記の関係がある。

$$\begin{aligned} a_k &= A_k / M_0 \\ b_k &= B_k / M_0 + 3 a_k M_1 / M_0 \\ c_k &= C_k / M_0 + 2 b_k M_1 / M_0 - 3 a_k M_2 / M_0 \\ d_k &= D_k / M_0 + c_k M_1 / M_0 - b_k M_2 / M_0 + a_k M_3 / M_0. \end{aligned}$$

deconvolution の過程は次のごとくである。

- (1) $\{\xi_k\}$ を決めて実測の関数 (あるいは合成した convoluted 関数) $J(t)$ をいくつかの短冊型 spline 関数に分け, $\{A_k\}$, $\{B_k\}$, $\{C_k\}$ および $\{D_k\}$ を求める。
- (2) 実測の分解能関数 (あるいは合成した関数) $K(t)$ について, $M_0 \sim M_3$ を求める。
- (3) $\{a_k\}$, $\{b_k\}$, $\{c_k\}$ および $\{d_k\}$ を計算する。
- (4) $J_0(t)$ を求める。

この方法の key point は, (a) 分解能関数の線幅が広い t の領域で, $t-s \in [\xi_k, \xi_{k+1}]$ を満足させる程, 外挿 error は小さくなること, (b) $[\xi_k, \xi_{k+1}]$ で定義された $J_0(t)$ がどの位 $[\xi_{k-1}, \xi_k]$ で正確に外挿されるか, すなわちゆっくり変化する関数程外挿は良いことである。結局, 外挿 error を減少させるには節の数を減らし, $[\xi_k, \xi_{k+1}]$ を広くとれば良いわけであるが, そうすると deconvolution で得られる分布の精度が落ちる。この 2 つの相反する傾向により, total error を最少にするような, $[\xi_k, \xi_{k+1}]$ を選ぶことになる。

ここでは, 大型コンピュータ HITAC M-200 H を用い, 分布関数の型, $[\xi_k, \xi_{k+1}]$, すなわちスペクトルの分割数, 分解能関数の線幅と分布関数の幅との比, SN 等を変化させて spline-based deconvolution の ESR Imaging への応用に対する評価を行った。

真の分布関数を $J_0(t)$, これを重率として分解能関数 $K(t)$ を重ね合わせて simulated convoluted 関数 $J(t)$ を発生させておく。noise が必要の時は実測の noise スペクトルを SN に従って加えておく。そして $J(t)$ より deconvolution で得られた分布関数を $J_d(t)$ とする。 $J_0(t)$ としては, (1) 電離性粒子ビーム照射により生成するラジカルに見られる, あるいは 2 液混合流動の化学反応に見られる指数減衰曲線と, (2) 円柱状試料に現われる, 非常にゆっくり変化する楕円状分布関数の 2 つについて行う。分解能関数としては, Gaussian および Lorentzian 関数を用いた。従来 deconvolution に用いていた Fourier 変換に対しては, 指数関数曲線はかなり厳しい条件となっている。

3. Deconvolution プログラムのフローチャート

プログラムは合成スペクトルだけでなく, 実測スペクトルの deconvolution も行えるように compile した。図 2 にフローチャートを示す。これに沿って以下説明する。

- (a) PARAIN : 必要なパラメータを読み込む。
実測か, 理論スペクトルかの区別, 短冊型 spline 関数の分割数, $J(t)$, $K(t)$ の単位長さ当りの Gauss 数, 補正曲線の軸の単位。
- (b) SPECIN : 実測スペクトル $J(t)$, $K(t)$ をデジタイザーを通して読み込む。
- (c) INTEG : 通常の ESR スペクトルは共鳴吸収曲線の一次微分形で観測されるので積分する (deconvolution は微分形のままで行っても差支えない)。その後, 1024 点の等間隔データに変換する。
- (d) SMOTH : $J(t)$, $K(t)$ のスムージングを行う。10 点間隔で 5 点を選び, 3 次関数に最小二乗法で合わせて中点における値を決める。

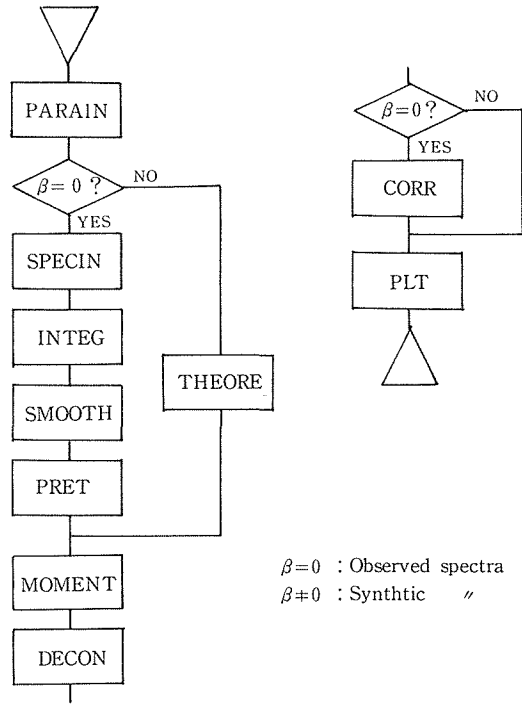


図 2 Spline-based deconvolution プログラムの
フローチャート

- (e) PRET : $K(t)$ について, 1 次モーメントの計算を行い, 零になるように非対称性を取除く。
- (f) MOMENT : $K(t)$ について, 中心から 1~3 次までのモーメントを計算する。 $M_0 = 1.0$ に normalize する。 M_1, M_3 はほぼ零になる。
- (g) DECON : $J(t)$ の短冊に区切った関数に対して 3 次の spline 関数を当てはめる。この際最小 2 乗法を適用する。 $\{A_k\}, \{B_k\}, \{C_k\}$ および $\{D_k\}$ を求める。そして $M_0 \sim M_3$ を用い, $\{a_k\}, \{b_k\}, \{c_k\}$ および $\{d_k\}$ を計算し, $J_o(t)$ を得る。
- (h) CORR : 実測スペクトルの場合には, キャビティ内の磁場勾配の分布とマイクロ波磁場強度分布により補正を行う。
- (i) PLT : $J_o(t)$ を XY プロッタに出力する。
- (j) THEORE : 合成 $J(t)$ を発生させ, 必要なら SN で決められる noise を加える。

4. 結果および考察

4.1 指数型減衰分布関数

図 3 に deconvolution の過程の各段階のスペクトルを示した。3(a)は 3(c)の真の分布関数 $J_o(t)$ と 3(b)の分解能関数 $K(t)$ をたたみ込んだ成分関数 $J(t)$ である。3(d)は deconvolution して得た関数 $J_d(t)$ であり, 3(e)は $|J(t) - J_o(t)|$ および $|J_d(t) - J_o(t)|$ である。

図 4 は $SN = 300$ の $J(t)$ に対して, 短冊への分割数 (あるいは短冊に含まれるデータ数) を変

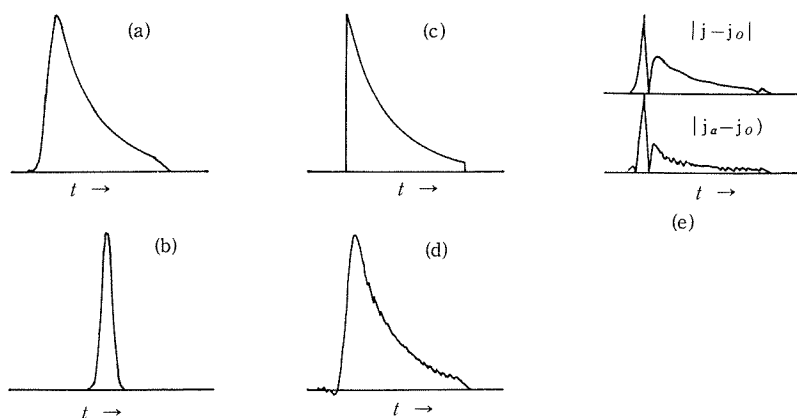


図 3 Spline-based deconvolution 過程におけるスペクトル

SN = 300
NHALF = 60

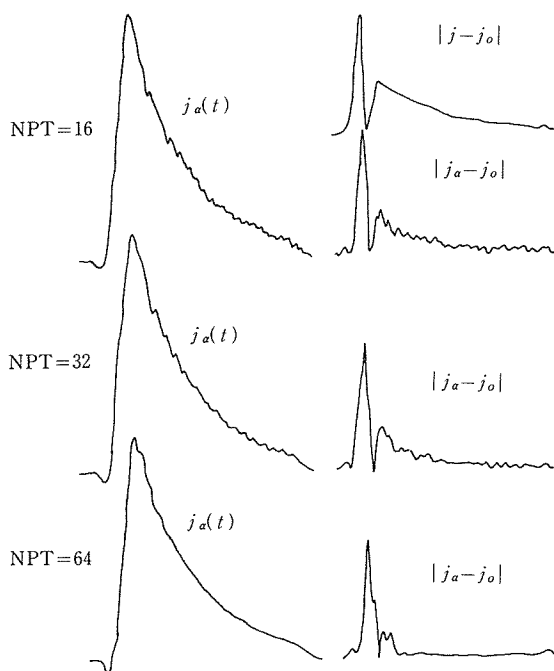


図 4 指数型減衰関数 deconvolution の
短冊型関数幅依存性

えた時の $|J_a(t) - J_o(t)|$ の変化である。立上り部分に対する deconvolution はほとんど効果がない。しかし指数減衰曲線で大切な部分は文字通り減衰部分であり、一度零に落ちてから後の部分（実際には負の部分）がそれに相当し、重要である。したがってこの部分にのみ注目して評価を行う。 NPT は短冊型関数の点数であり、上から順次幅を広く変えてある。 $K(t)$ の線幅が 60 点であることに注目すると、 $K(t)$ の線幅より狭く短冊に分割してもあまり deconvolution の効果がなく、ほぼ線幅に等しい時最大の効果を得る。それ以上広くするとまったくスペクトルが波壊されてし

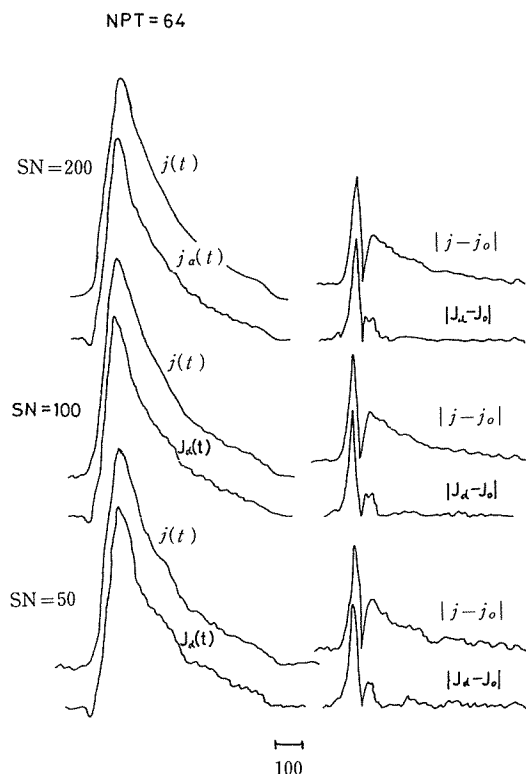


図 5 指数型減衰関数 deconvolution の SN 依存性

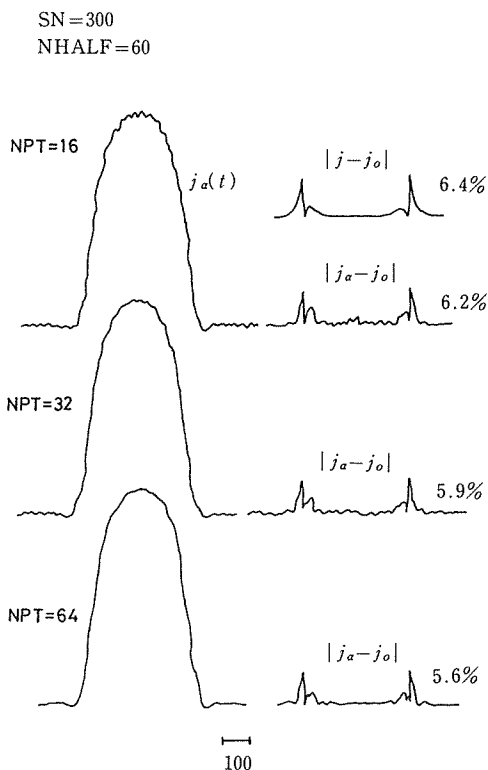


図 6 楕円分布関数 deconvolution の 短冊型関数幅依存性

まうことがわかった。線幅に等しく分割した場合には、減衰部分についていえば、ほぼ完全に $J_o(t)$ が求められることが明らかになった。

図 5 は最良の $NPT=64$ に固定し、noise level を増加させた時の様子を示している。 $SN=50$ までも noise を増しても十分に適用可能であることが判明する。Fourier 変換のみで deconvolution を行くと、 $SN=200$ 前後ですでに実用的でなくなることを考えると、spline 法が noise に対していかに強いかが明らかになる。

4. 2 楕円分布関数

円柱状試料で、常磁性種の密度分布が動径方向のみの関数である場合には、動径方向に加えた磁場勾配により得られる射影スペクトルは楕円関数になる⁴⁾。この関数は指数型減衰曲線に比べ、ゆっくり変化する関数である。しかも分解能関数がたたき込まれても、あまり変形はしない。逆にいえば、かなり広い線幅の $K(t)$ でない限り deconvolution は必要としないし、deconvolution の効果も著しくないことが予想される。

図 6 は $SN=300$ の $J(t)$ に対して deconvolution を施して得られたスペクトルで短冊のデータ点数を 16 から増して、 $K(t)$ の線幅 60 点に近づけて変化させた時のスペクトルである。右肩の百分率は $\int |J - J_o| dt / \int J_o dt$ および $\int |J_a - J_o| dt / \int J_o dt$ であり、convolute された合成関数 $J(t)$ と $J_o(t)$ との差でも 6.4% にすぎない。しかも deconvolution を施してもさほど改善が見られない。これは $J(t)$ の真の関数 $J_o(t)$ からの差異がほとんど両端の立上りに集中していることにもよる。すなわち、指数型減衰関数とも共通していえることであるが、spline 関数による deconvolution は

鋭い立上り部分に対しては無力である。これは原理の説明で述べたように, spline-based deconvolution の適用条件を立上り部分が満していないことに帰因する。

5. 結 論

X線回折等の resolution enhancement のために開発された spline-based deconvolution 法を ESR Imaging に適用した。計算機実験を行い、この方法の適用限界、最適条件、noise に対する特性等の情報を得た。得られた結果によると、スペクトルを短冊にする最適の分割方法は分解能関数の線幅に等しく区切ることである。また、この短冊幅 $[\xi_k, \xi_{k+1}]$ に比べて狭い領域で急激な変化を伴う関数では、その部分に対しては deconvolution の効果は期待出来ない。noise に対しては非常に優れた特性をこの方法は有している。 $SN=50$ という、Fourier 変換法ではとても deconvolution 出来ない場合でも適用可能である。また分割幅が広い程 noise が抑えられる。

総合すると, spline 関数による deconvolution 法は ESR Imaging に対しても優れた方法であることが判明した。したがって超微細相互作用による分離線の除去は Fourier 法で行い、線幅に対する deconvolution は spline-based deconvolution 法で行うというような, hybrid 的な使用法が最適であると思われる。

参 考 文 献

- 1) Ohno, K. : Jpn. J. Appl. Phys., **20** (1981) p. L179
- 2) Ohno, K. : J. Magn. Reson., **49** (1982) p. 56
- 3) 大野桂一 : 工学部研究報告, **107** (1982) p. 57
- 4) 大野桂一 : 工学部研究報告, **107** (1982) p. 65
- 5) Ohno, K. : J. Magn. Reson., **50** (1982) p. 145
- 6) Hoch, M. J. R. and Day, A. R. : Solid State Commun., **30** (1979) p. 211
- 7) Hoch, M. J. R. : J. Phys. C, Solid State Phys., **14** (1981) p. 5659
- 8) Herrling, T., Klimes, N., Karthe, W., Ewert, U., and Ebert, B. : J. Magn. Reson., **49** (1982) p. 203
- 9) Lauterbur, P. C. : Nature (London), **242** (1973) p. 190
- 10) Hinshaw, W. S. : Phys. Lett. A, **48** (1974) p. 87
- 11) Hinshaw, W. S. : J. Appl. Phys., **47** (1976) p. 3709
- 12) Kumar, A., Welti, D., and Ernst, R. : J. Magn. Reson., **18** (1975) p. 69
- 13) Bottomley, P. A. : Rev. Sci. Instr., **53** (1982) p. 1319
- 14) Deutsch, M. and Beniaminy, I. : Rev. Sci. Instr., **53** (1982) 1, p. 90