

# AR 過程に基づくピーク推定による FID の変換： 周波数と減衰率の同時推定

<sup>1</sup> 千葉工業大学工学部電気電子情報工学科

<sup>2</sup> 千葉工業大学工学部生命環境科学科

村田 恵介<sup>1</sup>, 河合 剛太<sup>2</sup>, 久保田 一<sup>1</sup>

## FID transformation by peak estimation based on AR process : simultaneous estimation of fequency and decay factor

<sup>1</sup> Dept. Elecl., Elecs. and Comp. Eng., Fac. Eng., Chiba Inst. Tech.

<sup>2</sup> Dept. Life Env. Sci., Fac. Eng., Chiba Inst. Tech.

Keisuke Murata<sup>1</sup>, Gota Kawai<sup>2</sup>, Hajime Kubota<sup>1</sup>

**Abstract** It is possible to transform a one-dimensional FID into a two-dimensional spectrum which consists of frequency domain and decay factor, if the Laplace transform is applied. In this case, a NMR signal is shown as a peak on two dimensions. A method based on the AR process, which is commonly used for this approach, has a problem that large error occurred if applied for a spectrum with many peaks. In the present study, we applied the Multi-Staged Pole Estimation with High-Precise Peak Estimation method to the analysis of one-dimensional FID. It was shown that frequency and decay factor were estimated precisely.

### 1 序論

通常、FID の解析は、フーリエ変換を用いて周波数領域のスペクトルに変換することによって行っているが、ラプラス変換を用いれば、周波数領域と減衰率の領域からなる二次元のスペクトルに変換することができる。しかし、数値ラプラス変換は一般的に困難であることが知られている [1]。このラプラス変換におけるピークを求める方法としては、Padé-Laplace 法や線形予測を用いる方法をはじめとするさまざまな方法 [2] があるが、いずれの方法も最終的にピークを求めるときに因数分解による求根操作が必要となり、ピークの数が多い場合は、ここで大きな誤差が生じることが問題であった。

今回は、推定系の多段化と帯域分割による AR (自己回帰) 過程に基づく高精度なピーク推定法と NMR への応用について報告する。これらの方法は、ピーク数の増大による誤差の現象に効果がある。

AR 過程とは、線形予測などが適用可能であるための信号の性質である。NMR における FID のモデルとして用いられており、デジタルフィルタではフィードバック要素を含んだ無限インパルス応答長フィルタによって表現される。

また、ランダム初期値、焼きなまし法を用いた局所最適解の問題へのアプローチについても合わせて報告する。また、NMR データに適用した際の結果によってその有用性を示す。

---

keywords : データ処理, ピーク推定, 減衰率, 自己回帰過程  
著者ふりがな : むらた けいすけ, かわい ごうた, くぼた はじめ

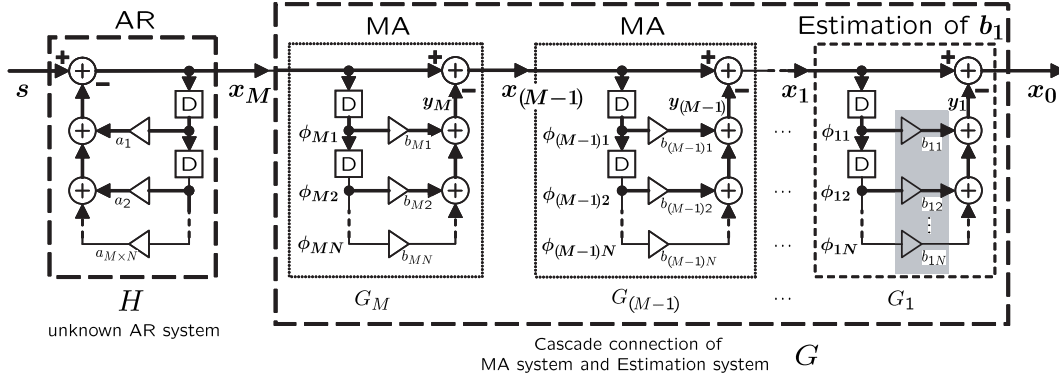


Fig. 1: Block diagram of MSPEAR : Derive NMR peaks as peaks of unknown AR system with digital filter by mean square estimation. Decrease estimation error by multi-staged cascade connected estimation system( $G : G_M, \dots, G_1$ ).

## 2 提案する推定手法

提案手法は大きく分けて2種類ある．ひとつは求根精度を高めるためのもの(2.1, 2.4 参照)で，もうひとつは大域的最適解を求めるためのもの(2.2, 2.3 参照)である．

信号処理アルゴリズムの多くは実信号に対するものであることが多い．しかし，NMR によって quadrature 検出された FID 信号は複素信号であるので，処理するには複素 FID 信号を実 FID 信号に変換する前処理が必要となる．FID 信号の中で必要な情報は初期位相補正済みのスペクトルに含まれるから，用いる実 FID 信号はこの情報を含んでいればよい．そこで，位相補正済みのスペクトルを逆フーリエ変換して得られる実信号(疑似 FID 信号, pFID)を以下の解析に用いた．

### 2.1 AR 過程に基づく多段極推定法 [3]

AR 過程に基づく多段極推定法: Multi-Staged Pole Estimation based on AR process (以下, MSPEAR) は, 推定系をより低次数の MA (移動平均) フィルタの縦続構成とすることによって, 高次多項式の求根精度を向上させることができる手法である．単純に高い次数  $M \times N$  次の線形予測の結果からピーク推定を行う場合, 誤差が大きすぎるため, 小さな次数  $N$  の推定系を  $M$  段縦続接続してしてピーク推定することによって, 誤差を小さくすることができる．

MSPEAR のアルゴリズムを Table.1 に示す．ただし,  $L+1$  は FID 信号の長さ,  $x_M$  は入力信号ベクトル,  $\Psi_k$ ,  $\Phi_k$  は入力信号行列,  $b_k$  は推定したフィルタ係数ベクトル,  $\tilde{b}_k = [1, -b_k^T]^T$  である． $\lambda_k^\pm$  は  $\text{Im}[\lambda_k^+ + \lambda_k^-] = 0$  および  $\text{Im}[\lambda_k^+ \lambda_k^-] = 0$  を満たす未知 AR システムの極である．また Factorize( $c$ ) は,  $c = [c_1 \dots c_N]$  としたとき  $1 + c_1 q + c_2 q^2 + \dots + c_N q^N = 0$  の根  $\lambda = [\lambda_1 \dots \lambda_N]$  を求める操作である．なお, 以下では得られた多項式から根(ピーク)を求める方法として, Jenkins-Traub 法 [7] を用いることにする．MSPEAR のアルゴリズムをブロック図として表したものを Fig.1 に示す．

Table. 1: Algorithm of MSPEAR

```

INPUT:  $x_M$ ;
OUTPUT:  $\lambda_1, \dots, \lambda_M$ ;
 $b_2, \dots, b_M \leftarrow 0$ ;  $e \leftarrow 0$ ;
Do:
  For  $k = M, \dots, 2$  do:
     $x_{k-1} \leftarrow \Psi_k \tilde{b}_k$ ;
  End
   $b_1 \leftarrow (\Phi_1^T \Phi_1)^{-1} \Phi_1^T x_0$ ;
  For  $k = 2, \dots, (M-1)$  do:
     $b_k \leftarrow b_{(k+1)}$ ;
  End
   $b_M \leftarrow b_1$ ;
  If  $\|x_0\| \simeq e$  then break;
   $e \leftarrow \|x_0\|$ 
End
For  $k = 1, \dots, M$  do:
   $\lambda_k \leftarrow \text{Factorize}(b_k)$ ;
End

```

## 2.2 ランダム初期値による方法 [4]

MSPEAR は初期値によって異なる局所最適解を導く．そこで，初期値をランダムに設定し結果を何回か求め，その結果 pFID と推定したピークから再構成した FID との二乗誤差が最も小さいものを解とするのがランダム初期値を用いる方法 (MSPEAR-RI) である．これによって，大域的最適解を求めることが出来る．

## 2.3 焼きなまし法による方法 [5]

MSPEAR によって求められた解を，焼きなまし法を用いて再び MSPEAR の初期値として採用する方法 (MSPEAR-SA) である．これによって，大域的最適解を求めることが出来る．

この手法は，2.2 と同様に局所最適解の問題に対して有効であるが，各種パラメータ調整が経験に依存すること，良質な解を得ようとすると計算コストが指数関数的に高まることなどの問題がある．

## 2.4 帯域分割極推定法 [6]

帯域分割極推定法：Frequency-Division Pole Estimation based on AR process (以下，FDPEAR) は，入力信号を適当な  $D$  個の帯域に分割して，それぞれの帯域においてピークを求めることにより，高次多項式の求根精度を向上させることができる手法である．この手法は帯域ごとに線形予測を用いるため，初期値に依存しない．

MSPEAR では，周波数的に偏っているピークを求めることが難しいことが問題となっているが，FDPEAR は FID によく見られるこのような信号のピークを求める際に特に有効である．なお，FDPEAR は MSPEAR と組み合わせることも可能である．

## 3 方法

7残基の DNA (GpCpGpTpApGpC) を  $^{31}\text{P}$ -NMR で測定した際に得られた FID 信号に対して 2.2 で示した MSPEAR-RI を用いて解析を行った．分光計は Bruker 社製 AMX-500 型，測定周波数は 202.46 MHz ( $^{31}\text{P}$ -NMR)，測定温度は 298K，試料濃度 0.54mM，積算回数は 200 回であった．

また，観測信号のサンプル数は 4096，MSPEAR-RI の繰り返し回数を 1000 回とし，1000 通りのランダム初期値を用い，各段の次数  $N = 16$ ，段数  $M = 8$  とした．比較対象として各シグナルの半値幅の逆数から緩和時間を求める標準的な方法 (Lorentzian 近似) を用いた．

## 4 結果と考察

Fig.2 の上側に得られた周波数-減衰率プロットを，下側に FFT によって得られたスペクトルを示す．図にはスペクトルにおける代表的な 7 つのピークに対応するピークのみが

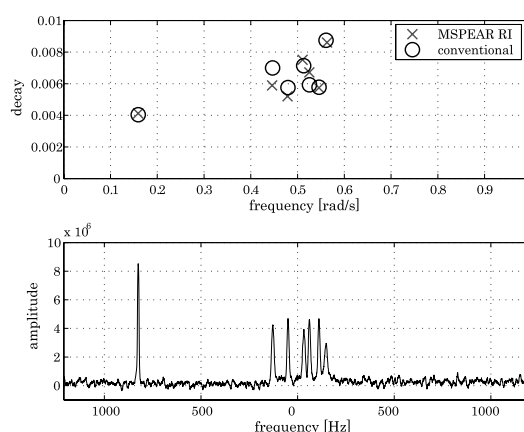


Fig. 2: Result of analysis of the  $^{31}\text{P}$  NMR data : [top]  $\times$ :estimated peaks,  $\circ$ :peaks from Lorentzian approx.; [bottom] FFT spectrum.

示されており，その他のピークは減衰率が大きいいため図には示されていない．二乗誤差は MSPEAR-RI が  $3.54 \times 10^{-3}$ ，比較手法が  $4.12 \times 10^{-3}$  となった．MATLAB によって記述し Pentium4 2.4GHz を使用した場合，計算時間は約 48 分であった．

スペクトルとの比較より，求められたピークは妥当であるといえる．また，MSPEAR-RI と従来法によるピークはおおむね一致した．これらのピークの振幅を求めるには，FID とそれぞれのピークとの相関を用いればよい [2]．

最小二乗法によるピーク推定は，出力の二乗誤差を最小にするようにパラメータを推定する方法であり，一般的に二乗誤差が最小となるパラメータが必ずしも好ましいものである保障はない．一度に推定しようとするピークの個数が増えるに従ってこの傾向は顕著になる．このような理由で，推定されたピークが真のピークに近いかどうかを知ることは出来ず，ピークの良否を判断する規範がないことが問題点である．また，本来はピークの個数をあらかじめ知っておく必要がある．ピークの個数を求めるには赤池情報量基準 [8] などを用いる方法が知られているが，実際には困難であるため，ピークの個数は多めにしてピークを推定しておき，その後スペクトルと見比べて具体的にピークを確定する方法が現実的であると考えられる．

今後は，2.4 に示した帯域分割極推定法の NMR に対する結果について検討する予定である．また，DOSY における拡散係数を推定するためにこれらの手法を用い，その結果についても検討する予定である．

#### 参考文献

- [1] 市川哲，“離散フーリエ変換と数値ラプラス変換についての再考”，信学論 A Vol. J85-A No.5 pp.615-621 2002.
- [2] D. N. Rutledge, Signal treatment and signal analysis in NMR, Elsevier Science Ltd., 1996.
- [3] 村田恵介, 久保田一，“AR 過程に基づく高精度な極推定法と NMR 構造解析への応用”，信学論 A Vol. J91-A No.8 pp.772-781 2008.
- [4] “Global optimization for pole estimation in NMR” , Proc. of 22nd IEICE SIP Symposium, Nov, 2007.
- [5] K. Murata, H. Kubota, “The automatic pole estimation in the NMR data analysis” , Proc. of 2nd SCME, May, 2008.
- [6] 村田恵介, 久保田一，“帯域分割構成による AR 過程に基づく NMR 極推定の高分解能化”，電子情報通信学会 2008 総合大会講演論文集, A-4-5, Mar, 2008.
- [7] Saul A. Teukolsky, et al., Numerical Recipes in C++: The Art of Scientific Computing, Cambridge Univ Pr (Sd), 2002.
- [8] 赤池弘次, 赤池情報量基準 AIC, 共立出版, 2007.