

学 位 審 査 報 告 書

(ふ り が な) 氏 名	ふかざわ じゅん 深澤 隼
学位 (専攻分野)	博 士 (理 学)
学 位 記 番 号	理 博 第 号
学位授与の日付	平成 年 月 日
学位授与の要件	学 位 規 則 第 4 条 第 1 項 該 当
研 究 科 ・ 専 攻	理学研究科 化学専攻
(学位論文題目) 核磁気共鳴分光法における信号の統計を利用した信号の雑音判定及び除去	
論 文 調 査 委 員	(主査) 竹腰清乃理 教授 谷村 吉隆 教授 松本 吉泰 教授

理 学 研 究 科

(続紙 1)

京都大学	博 士 (理 学)	氏名	深澤 隼
論文題目	核磁気共鳴分光法における信号の統計を利用した信号の雑音判定及び除去		
(論文内容の要旨) 本論文で申請者は、固体核磁気共鳴分光法において、ノイズの判定あるいは除去を行うための新しい統計学的なデータ処理法を開発することを目標に研究を行った。その結果、PSDW 法、PCW 法という二種類の新しい統計学的データ処理法を開発した。以下で、それら二つのデータ処理法の性質・特徴およびそれらの正当性を示すための予備実験および検証実験に関して簡単に述べる。 今回の研究では申請者は主にスペクトルの位相成分に注目し、その統計指標を用いてノイズの判定あるいは除去を試みた。申請者は最初に、このように NMR 信号のデータを強度絶対値と位相に分けて考えることに問題がないかどうかの確認を以下の様に行った。まず、ノイズ部分の各データ点の、信号の強度絶対値と位相の分布を解析し、それらがそれぞれ、レイリー分布および連続一様分布という、両者に相関が無い場合に統計学的に予測される分布であることを観測した。次に、スペクトルの各点において強度絶対値と位相の別々の積算を行い、強度絶対値平均と、位相の余弦の平均を別々に求め、それらの積を計算した。得られた積と通常の前算スペクトルを比較し、双方間に大きな歪みがないことを示した。このようにノイズの強度絶対値と位相との間に相関がないことを実験によって示し、強度絶対値と位相の分割解析が問題がないことを示した。 次に、提案した位相の標準偏差の大きさを NMR スペクトルのデジタル化した各点で求めるという手法を試みた。位相の分布関数を定式化し、実際に測定したスペクトルのデータを用いて解析を行い、シグナルの大小が標準偏差の大小に密接に関わっていることを示した。また、この標準偏差から確実性測度 (measure of certainty) という指標を求め、これが前算スペクトルとよく似た形をとることを示した。さらに、この確実性測度の絶対値を加重値として前算スペクトルに掛け合わせる位相標準偏差加重 (phase-standard-deviation weighted, PSDW) NMR スペクトルという手法を考案した。PSDW NMR スペクトルが前算スペクトルと比べて信号雑音比 (SNR) が向上していることを示した。 また次に、位相の相関係数の大きさを各点で求める手法を試みた。これは NMR を測定するときに照射するラジオ波パルスの位相を、前算の各測定毎に、例えば 1° 程度の微少な量で変えながらスペクトルを測定し、各周波数での位相と照射ラジオ波パルスとの間の相関係数を求めるものである。実際に測定したスペクトルのデータを用いてこれを行い、シグナルの大小が相関係数の大小に密接に関わっていることを示した。また、この相関係数の絶対値を加重値として用いた、位相共分散加重 (phase-covariance weighted, PCW) NMR スペクトルという手法を考案し、これが前算スペクトルと比べて SNR が向上していることを示した。 さらに、この PSDW および PCW 各手法の性能を検証するため、NMR スペクトルにしばしば現れるインコヒーレントなシグナルを含むスペクトルにこれらを適用すること、および、正規分布的に発生させた乱数を用いた計算による観測可能なシグナル閾値の計算という二つの方法で検証を行った。その結果、これら 2 手法が前算よりもノイズ除去能力および弱いシグナルの観測能力に優れていることを示した。			

(続紙 2)

(論文審査の結果の要旨)

本論文で申請者は、NMR のデータ処理における新しい統計学的データ処理法を2種類開発した。この研究は、NMR という現象そのものにとって本質的な問題である信号雑音比、感度が低いという問題に関する研究であり、本手法が一般の NMR 装置に装備されることで NMR 測定を行っている多くの研究者達の助けになるであろう。またこの方法は特に S N R の悪い固体 NMR 法に有用であり、今後材料化学、生物化学などへの応用が期待される。

具体的な研究内容に関しては、これまでの NMR 測定においては統計学的手法といえば、積算、および積算後のスペクトルの時間成分や周波数成分に関する統計解析しか行われてこなかったのに対し、積算前の各スペクトル間の統計を取るという手法を採ったという点に新規性がある。申請者は特にスペクトルの位相成分に注目し、まずこれを信号の強度成分から分離して解析することに問題がないことを示す予備実験を行った。フーリエ変換後のスペクトルのノイズ部分の信号強度および位相の統計を取り、それらがレイリー分布および均一分布であることを示し、そこからノイズが二次元等方的正規分布をしていることを示し、さらにシグナルが弱いながら存在している部分でも位相の統計を取り、それを理論式から導かれる分布線形と比較し、またさらに強度絶対値平均と位相の余弦の平均の積のプロットと、積算スペクトルの線形を比較し、その間に大きな歪みがないことから分離解析に問題がないことを示した。

次に、各スペクトルの周波数 ν の各点での位相成分の標準偏差を求め、それをスペクトルのノイズ判定に用いるという手法(phase-standard-deviation weighted, PSDW 法)を開発した。これは積算スペクトルに標準偏差から求められる確実性測度の絶対値を掛けることによって行われ、これがノイズの除去に有効であることを示した。

次に、NMR 測定の際に用いられる 90° パルスの照射位相とスペクトル位相の相関関係を測定し、得られた相関係数係数を確実性測度と同様に適用し、これがやはりノイズ除去に有効であることを示した(phase-covariance weighted, PCW 法)。

さらに、これら2手法をインコヒーレントなシグナルを含むスペクトルに適用し、そのようなノイズが良く除かれることを示した。このようなノイズは放送局が近くにある場合や、近くに NMR 装置がある場合などに現れ、しばしば巨大なノイズを生じる。従って、PSDW/PCW によりこのようなノイズが除去出来ることは有用性が高い。

申請者はさらに、両方法を検討するために正規分布に基づいた乱数を用いてノイズを評価するという計算を行い、PSDW 法および PCW 各手法が単純積算よりもより弱いシグナルが観測できることを示した。従って、両方法の適用で、より短時間でスペクトルの観測ができるようになることが示された。この2手法はあらゆる NMR 測定法とも組み合わせることが可能であり、また積算結果と併用してノイズ判断を行うことができる画期的なものである。

以上のように本論文が扱っている研究内容は学位論文として十分なものである。よって、本論文は博士(理学)の学位論文として価値あるものと認める。また、平成 23 年 1 月 18 日論文内容とそれに関連した口頭試問を行った。その結果合格と認めた。

要旨公開可能日： 年 月 日以降