

化学シフトを識別する産業用 MRI の画像化シミュレーション

Imaging Simulation for Identifying the Chemical Shift in Industrial MRI

○秋田敏宏, 渡辺祐典, 二田祐一, 栗田宏明, 佐藤宏明, 田山典男

○ Toshihiro Akita, Yusuke Watanabe, Yuichi Futada, Hiroaki Kurita,
Hiroaki Sato, Norio Tayama

岩手大学工学部

Faculty of Engineering, Iwate University

キーワード:核磁気共鳴(Nuclear Magnetic Resonance), 画像再構成(Image Reconstruction),
自由減衰信号(Free Induction Decay Signal), 化学シフト(Cheical Shift),
多重 MRI システム(Multi-MRI system),

連絡先:〒020-8551 盛岡市上田 4-3-5 岩手大学工学部電気電子工学科田山研究室
田山典男, Tel.&Fax.: (019)621-6382, E-mail: tayama@pipe.elc.iwate-u.ac.jp

1. はじめに

MRI(Magnetic Resonance Imaging ; 核磁気共鳴画像化法)は医療分野を中心に利用されている. 1973 年に Lauterbur によって最初の核磁気共鳴イメージング(NMR-Imaging)法であるズーグマトグラフィ(zeugmatography)¹⁾が考案されて以来, 高速で高品質な画像を得るための研究が今日も多く研究者によってなされている. 特に医療分野では X 線 CT のように放射線を使用しないため被爆の危険がなく安全であることから注目されており, MRI 診断装置が広く普及している.

産業分野においては, 安価に画像を再構成して対象となる物体の内部構造を得たいという要求は高い. また, 対象物体を構成

する物質を特定することについても要求が高い. 装置を安価にするためには, 良好な画像が得られハードウェアの構成を簡単にすることが有効である.

現在利用されている医療用 MRI の多くは, 静磁場マグネットとして超伝導材料(高磁場用)や永久磁石(低磁場用)を利用している. 前者の場合, 静磁場の維持費を含め高価である. 後者の場合, 磁場が低くなるが維持費がないため安価となる.

また, 物質を特定することに関しては, NMR 法がすでに有機化合物を対象とした分子構造解析の分野で発達している. NMR 法では, 核種の種類によって特定の周波数において共鳴現象が起こることや, 核の化学結合の性質の相違によって生じる化学シフトと呼ばれる共鳴周波数のずれを利用し

て、対象物体に含まれる原子や分子を特定することができる²⁾。現在の医療用 MRI では生体に多く含まれる水分に着目しており検出感度のよい水素原子が主な測定対象となっているが、原理的には他の核種に対する測定も可能である。つまり、測定対象となる核種を共鳴させる周波数を含む RF(ラジオ)波パルスを対象領域に照射することによって、NMR スペクトルを検出することができる。しかしながら、従来の MRI システムでは、ある 1 種類の核種を対象にして、傾斜磁場を用いることによって空間内の各所で異なる周波数で共鳴現象を引き起こして、NMR 信号の発生部位を特定している。従って、複数の核種の強度分布を同時に画像再構成することは不可能である。しかし、もし傾斜磁場を用いずに NMR 信号の発生部位を特定することができるならば、複数の核種を同時に検出できる MRI システムを構成することが可能となるであろう。これを「多重 MRI システム」と呼ぶ。

本研究室では、従来の CT 手法より大幅に再構成計算量を削減する新しい CT 手法の FMR(Fast Model Reconstruct; 高速モデル再構成)法を提案している^{3), 4)}。FMR 法を用いると、極少数方向の投影データにより、高速に画像再構成できる。上述の NMR 現象において、この FMR 法を適用し磁化分布を再構成する方法として組み合わせるならば、複数の核種分布を同時に検出する多重 MRI システムが構成できることを計算機シミュレーションにより提示した⁵⁾⁻⁷⁾。

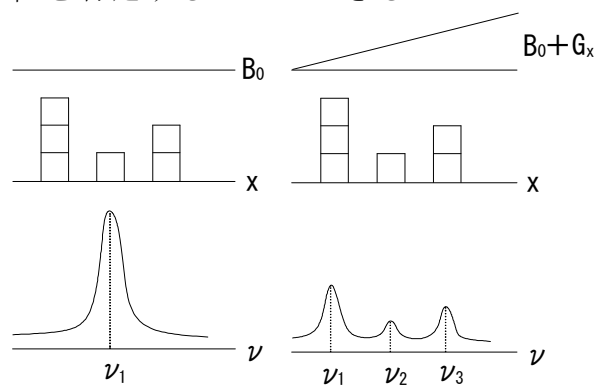
本稿では、FMR 法を利用して、複数の核種を同時に検出でき、かつ化学シフトによる官能基を識別する、安価で高速な新しい産業用の核磁気共鳴イメージングの構成手法に基づいたシミュレーションを行い、画像の評価を行ったので、以下にその概要を報告する。

2. NMR イメージング

NMR 現象は磁気モーメントをもつ様々な核種において起こる。NMR 現象を引き起こすのに必要な条件は、磁場と RF 波、核種のスピンである。磁場の与えられた空間に RF 波を照射すると特定の周波数のエネルギーを吸収する。RF 波の照射を停止すると、吸収したエネルギーを放出する。この現象は NMR 現象と呼ばれる。以下に NMR 現象を画像化する手法について述べる。

2.1 従来の NMR イメージング

NMR イメージングでは、NMR 現象の発生位置を特定する必要がある。従来のシステムでは、意図的に磁場に高低差をつけることによって、発生する信号の周波数に差をつけ、この周波数の違いによって信号発生部位を特定している。これを模式的に示すと Fig.1 のようになる。傾斜磁場 G_x を導入することによって、各位置に応じて磁場強度が異なることから核種の共鳴周波数も異なり、得られるスペクトルが位置によって周波数の違いとして現れ、信号の発生部位を特定することができる。



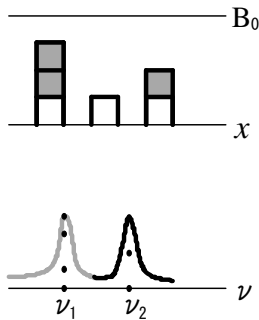
(a) 傾斜磁場なし (b) 傾斜磁場あり
 上段：磁場強度分布，中段：磁化密度分布(1核種)，下段：周波数スペクトル

図 1 傾斜磁場による信号発生部位の特定
 Fig.1 How to specify the occurrence part of NMR-signals by using gradient coils

2.2 提案する NMR イメージング

傾斜磁場を利用して信号の発生部位を特定する従来の手法は、同時に 1 種類の核種に対して適用できる。ここでは、複数の核種を同時に検出するための構成概念を示す。

NMR 現象と投影再構成法を組み合わせることによって、傾斜磁場を用いずに複数の核種の NMR 信号を特定する。本法では Fig.2 に示すように、傾斜磁場を用いないため、核種毎の共鳴周波数の違いを利用して対象物体内に含まれる原子や分子を特定する。そして、CT の画像再構成法である投影再構成法を利用して、磁化分布を画像化する。



上段：磁場強度分布，中段：磁化密度分布(2核種)，下段：周波数スペクトル

図 2 複数核種における核磁気共鳴

Fig.2 NMR in several nuclei

提案する NMR イメージングシステムの構成を Fig.3 に示す。産業用への適用に際して、装置を安価にする必要があるため静磁場マグネットに永久磁石を採用する。送信部においては、対象とする核種が核磁気共鳴を起こすために必要な周波数帯を含む RF パルスを発生させ対象空間に照射する。受信部においては、磁気センサで NMR 信号を検出し、信号増幅後に核種毎に信号を分離する。その後スペクトルを求め化学シフトを検出する。さらに画像再構成を行う。

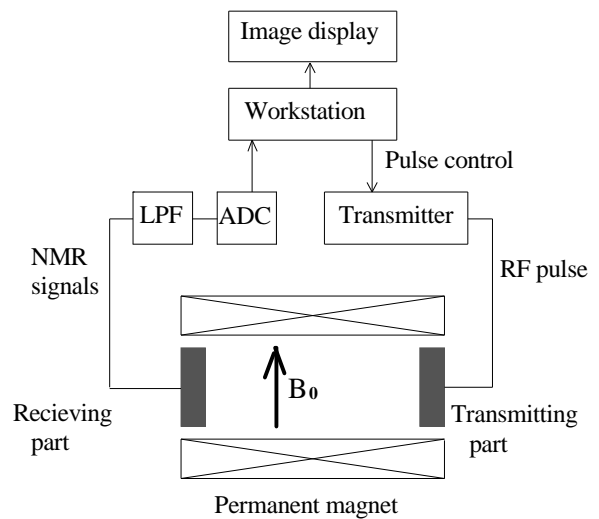


図 3 提案する NMR イメージングシステムの構成

Fig.3 Proposed hardware construction of NMR-imaging system

3. NMR 信号および画像再構成

NMR 信号の基本的な関係式は次式である。

$$\omega = 2\pi \nu = \gamma B \quad (1)$$

ここで、 ω は角周波数、 ν は周波数、 γ は回転磁気比、 B は静磁場強度である。 γ は核種固有の値であるため、 B の値に応じて ν も核種によって決まった値をとる。

B を一定とすれば、得られる信号から、様々な核種のスペクトルが得られる。共鳴周波数は核種毎に異なるため、注目する核種の共鳴周波数成分の信号だけを取り出せばよい。そうすれば、同時に複数の核種の NMR 信号を検出できる。

3.1 検出信号

NMR 信号として 90° パルス後の FID 信号を用いる。RF パルスの照射軸上において、その各点での磁化密度分布 $m(x, y)$ をその軸に沿って線積分した値は、その軸上における対象核種の FID 信号 $s(t)$ となる。複数の核種を対象とした場合の FID 信号 $s(t)$ は次

式のように表せる。

$$s(t) = \sum_{i=1}^N \int_0^L m_i(x, y) \exp(-i\gamma_i B t / T_{2(i)}^*) dl \quad (2)$$

ここで、 T_2^* は横緩和時間、 L は送受信間距離である。添え字 i は核種の種類を表しており N 個の核種に関する式である。

提案する産業用 NMR イメージングシステムでは、傾斜磁場がないためそれぞれの核種の共鳴周波数によって指数関数的に減衰する信号が得られる。

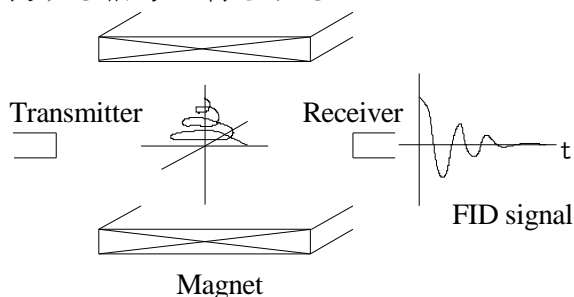


図 4 自由減衰信号
Fig.4 FID signal

3.2 化学シフト

核の化学結合の性質によって、NMR の共鳴周波数にずれが生じる。これは化学シフトと呼ばれている。対象とする核の化学結合の共鳴周波数を ν 、基準物質の共鳴周波数を ν_r とすると、両者の周波数の差は次式のように表される。

$$\nu - \nu_r = \frac{\gamma B}{2\pi} (\sigma_r - \sigma) \quad (3)$$

ここで、 σ は遮蔽定数である。

また、 ^1H 、 ^{13}C 、 ^{31}P など多くの核の場合には、化学シフト $\nu - \nu_r$ は、核種の共鳴周波数自身に比較すると非常に小さいために、 10^6 倍して、ppm 単位で化学シフトを表す。

$$(\nu - \nu_r) / \nu_r \times 10^6 \quad (4)$$

化学シフト現象を利用することによって、

複数の官能基を含む NMR 信号から特定の官能基の磁化を抽出することができる。

3.3 磁化

複数の核種を含む FID 信号から核種毎の磁化 m_i を求める。式(2)において微小領域における FID 信号は次式のようになる。

$$\begin{aligned} s(t) &= \sum_{i=1}^N m_i \exp(-i2\pi \nu_i B t) \exp(-t/T_{2(i)}^*) \\ &= \sum_{i=1}^N m_i \exp(-i\omega_i t) \exp(-t/T_{2(i)}^*) \end{aligned} \quad (5)$$

核種の基準各周波数 ω_{0i} 成分を掛け合わせることで核種毎の FID 信号に分離する。いま FID 信号に含まれる角周波数成分をまとめて ω とすると、

$$\begin{aligned} \exp(-i\omega t) \cdot \exp(i\omega_{0i} t) &= \exp\{-i(\omega - \omega_{0i})t\} \\ &= \cos\{(\omega - \omega_{0i})t\} - i \sin\{(\omega - \omega_{0i})t\}. \end{aligned} \quad (6)$$

LPF によって実数成分、虚数成分に対して周波数解析を行い、核種毎の磁化 m_i を求める。また、それぞれの周波数解析の結果から核の化学結合の種類毎の磁化を求める。

3.4 画像再構成

当研究室では、ウェーブレット標本化モデルと特異値分解を組み合わせることで、極少数方向のデータで高速に画像を再構成する FMR(Fast Model Reconstruct)法を提案している。従来の CT 手法より大幅に再構成計算量を削減できる。

3.4.1 FMR 法

投影値 p は、対象領域の強度値 $f(x, y)$ を透過線に沿って線積分した値であり、次式のように表される。

$$p = \int_0^L f(x, y) dl \quad (7)$$

$$\begin{aligned}
&= \int_0^L \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{n-1} f(x_i, y_j) \cdot W(x-x_i) \cdot W(y-y_j) dl \\
&= \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{n-1} f(x_i, y_j) \cdot \int_0^L W(x-x_i) \cdot W(y-y_j) dl \\
&= \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{n-1} f(x_i, y_j) \cdot C_{ij} \tag{8}
\end{aligned}$$

ここで、 $W(x)$ は標準化関数である。

そして、透過性ビームを対象空間に照射することによって得られる投影値ベクトル p と再構成係数行列 C^+ との積で、再構成画像を得ることができる。

$$f = C^+ p \tag{9}$$

ここで、投影の方向が変わっても一様に透過する性質を保持する一様透過型 2次元スキャン方式を導入する。一様透過性が保持されているならば、行毎にどの画素においても一連の各ビームに対する画像再構成係数の並びが同じになる。ゆえに、行毎に一つの再構成係数行列 C^+ で画像再構成が可能である。

3.4.2 NMR イメージングへの FMR 法の適用

NMR イメージングにおいて、NMR 信号は式(2)で示したとおり各点の磁化密度分布 $m(x, y)$ を線積分した値がその軸上における FID 信号となる。式(2)の減衰成分 $\exp(-\gamma_i Bt / T_{2(i)}^*)$ を取り除くと式(7)と同様の式となる。つまり、核種の磁化密度分布が X 線 CT における強度値に対応させることができる。

Fig.5 に示すような 2次元スキャン方式を導入することで一様照射性を保持し、磁化 m から FMR 法によって画像再構成が可能となる。

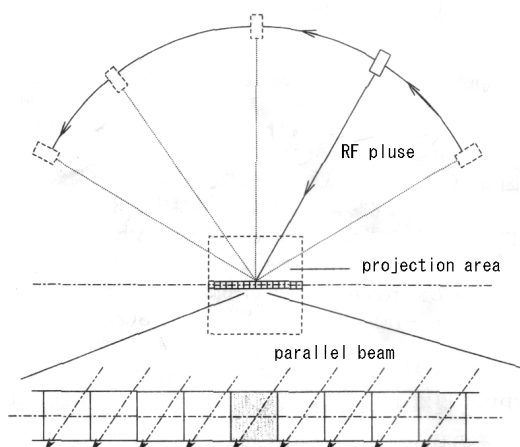


図 5 一様照射性を保持する 2次元スキャン方式

Fig.5 Two dimensional projection scanning to maintain nature to irradiate uniformly

4. シミュレーションおよび結果

4.1 シミュレーション設定

NMR イメージングはさまざまな核種が対象となるが、本研究では次の 4 核種を対象核種とした。

- ^1H … 検出感度がよく、現在最もよく利用されている核種
- ^{13}C … 有機化合物を特定するためにも利用されている。現在でも比較的よく利用されている核種。
- ^{15}N … 爆薬系に含まれる核種であり、危険物検査に有効となりうる核種。
- ^{31}P … 生理学の分野で重要とされる核種。食品や植物における非破壊検査に有効となりうる核種。

また ^1H に対しては、テトラメチルシラン (TMS) を基準物質として、酢酸 (CH_3COOH) からメチル基 ($-\text{CH}_3$) およびカルボキシル基 ($-\text{COOH}$) の磁化を識別して検出する可能性についてシミュレーションを行った。

静磁場については、均一磁場を有するものとしている。

RF 波の照射領域に応じて、磁化 m は空間

的な広がりをもつ．そこで投影値 p と sinc 関数を用いて，次式によって磁化 m を算出した．

$$m(i) = \sum_{j=-n}^n p(i+j) \cdot \text{sinc}(i) \quad (10)$$

$p(i+j)$ が計測範囲を超えるとき，

$$p(i+j) = 0.00$$

$$m(i) < 0 \text{ のとき, } m(i) = 0.00. \quad (11)$$

4.2 シミュレーション結果

FID 信号を核種ごとに分離して $^1\text{H-NMR}$ のスペクトルを求めた結果を Fig.6 および Table.1 に示す．

(周波数分解能：0.061Hz)

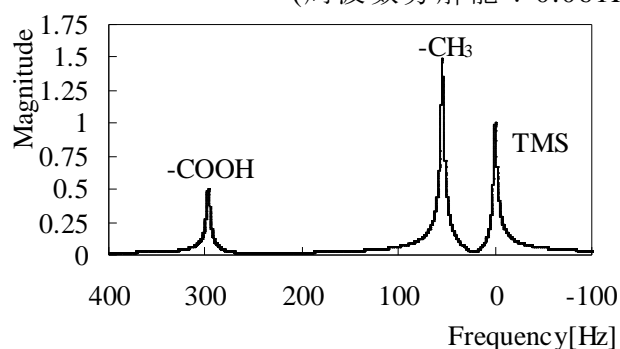


図 6 $^1\text{H-NMR}$ スペクトル
Fig.6 $^1\text{H-NMR}$ spectrum

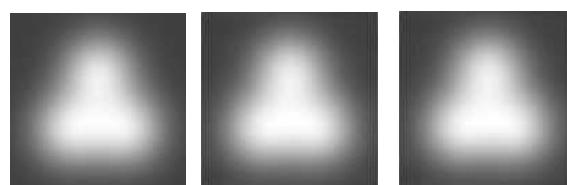
Table.1 Spectrum data sheet
表 1 スペクトルデータ

	検出レベル	強度値 (TMS 基準)	化学シフト [Hz]	化学シフト [ppm]	化学シフト (文献値 ⁸⁾) [ppm]
TMS	2	1	0	0	0
-CH ₃	3	1.490	54.626	2.100	2.098
-COOH	1	0.507	297.241	11.425	11.42

画像に関するシミュレーション結果を Fig.7 に示す．また，原画像との正規化誤差分散 E を次式により計算し，再構成評価を行った．またその結果を Table.2 に示す．

$$E = \sqrt{\frac{\sum_{n=1}^N (F_n - f_n)^2}{\sum_{n=1}^N (F_n - F)^2}} \quad (12)$$

ここで， F は原画像の平均値， F_n は原画像の各標本点濃度， f_n は再構成画像の各標本濃度である．



(a)原画像 (b)-CH₃ (c)-COOH

図 7 再構成画像(128×128 ピクセル)

Fig.7 Reconstructed Images
(image size: 128×128pixels)

Table.2 Normalization error dispersion
表 2 正規化誤差分散

	-CH ₃	-COOH
E	5.56×10^{-2}	5.80×10^{-2}

正規化誤差分散の値が小さく，原画像と再構成画像はほぼ同様であることが分かった．したがって，磁化 m を用いて FMR 法による画像再構成が可能であり，化学シフトに基づいた官能基を良好に識別できることが分かった．

5. おわりに

本研究では，化学シフトを識別するための複数核種における産業用磁気イメージングシステムのシミュレーションを行った．このシステムの特徴をまとめると，

- ・ 静磁場マグネットとして永久磁石を用いることにより，装置が安価となる．
- ・ 傾斜磁場を用いないために，周波数スペクトルを核種の共鳴周波数に対応させることができ，同時に複数の核種における核磁気共鳴を検出できる．

- ・ 化学シフトに基づいた官能基を画像再構成で識別することができる。
- ・ 画像再構成に FMR 法を採用することで、極少数方向のデータから高速に画像再構成できる。

この手法は、食品などの静磁場を乱さないものを対象とした新しい非破壊内部検出装置の構成に役立つ可能性がある。

今後の課題として、実際の装置の構成および実験による実証がある。また、周波数スペクトルから、含まれる官能基を特定することである。

参考文献

- 1) Lauterbur,P.C.: Image Formation by Induced Local Interactions - Examples Employing Nuclear Magnetic Resonance - , Nature **242**, pp.189-190 (1973)
- 2) 核磁気共鳴医学研究会(編): NMR 医学－基礎と臨床－, pp.24-56, 丸善 (1984)
- 3) 田山典男: 産業用 3 次元 CT と 3 次元透視システム, 電子情報通信学会東北支部先端技術シンポジウム「画像工学における先端技術の動向」, pp.19-29 (2001)
- 4) 田山典男, 杜海清, 大坊真洋: 産業用実時間 3 次元 CT の画像再構成プロセッサ, 計測と制御, Vol.40, No.12, pp.907-910 (2001)
- 5) 秋田敏宏, 田山典男, 大坊真洋: 核磁気共鳴による産業用画像センシングシステムの一提案, 第 45 回自動制御連合講演会, 2A1-D4 (2002)
- 6) Toshihiro Akita , Takakazu Yonezawa , Norio Tayama, Hiroaki Kato, Masahiro Daibo: Computer Simulation on Industrial MRMI System for Inspecting Several Nuclei, WSEAS Transactions on COMPUTERS, Vol.2, July, pp.581-585 (2003)
- 7) Toshihiro Akita, Takakazu Yonezawa, Norio Tayama, Hiroaki Kato, Masahiro Daibo: Simulation of Industrial MRMI system with Un-uniformity Magnetic Field, WSEAS Transactions on SYSTEM, Vol.3, May, pp.1234-1239 (2004)
- 8) SDBSWeb:
<http://www.aist.go.jp/RIODB/SDBS/2005/1/27>