

## ウェーブレット変換を利用した成分分析法について

The Analyzing Technology for Liquid Objects Using Wavelet Transformation

○工藤芳規, 一條健司, 成田明子, 吉岡良雄

○KUDOU Yoshinori, ICHIJO Kenji, NARITA Akiko, YOSHIOKA Yoshio

弘前大学

Hirosaki University

**キーワード:** 成分分析(component analysis), ウェーブレット変換(wavelet transformation),  
赤池情報量基準(Akaike Information Criterion)

**連絡先:** 〒036-8224 弘前市文京町3 弘前大学大学院 理工学研究科 吉岡研究室  
吉岡良雄, Tel.: (0172)48-2101, Fax.: (0172)39-3513, E-mail: [slyoshi@eit.hirosaki-u.ac.jp](mailto:slyoshi@eit.hirosaki-u.ac.jp)

### 1. はじめに

混合物質の組成を解析する手法の1つに、分光法がある。これは、物質に光吸収特性がある事を利用し、対象物質の光吸収スペクトルから物質を同定し、定量を行う手法である。本研究では、分光解析システムにおけるソフトウェア開発を行う。

本研究における分光解析システムは、測定装置、前処理部、解析部、結果表示部で構成される。これを図1に示す。まず測定装置を用いて解析対象の光吸収スペクトルを測定し、前処理部で測定データの取り込みを行う。次に、解析部では、測定データおよび予め蓄積してある既知の物質のデータ(以下、参照データ)を元に、解析対象に含まれる物質と含有比を求める。測定データ、参照データのスペクトルを解析する手法としては多変量解析が考えられるが、本研究ではスペクトルの特徴をよりよく捉えるために、スペクトルをウェーブレット変換し、解析を行う。最後にその結果を結果表示部でグラフ表示する。本研究の目的は、図1

のシステムにおける解析部の処理手順を定め、プログラムを作成し、処理結果を確認することである。さらに、多変量解析との比較・検討を行う。解析処理の確認には、人工的に作成した仮想的な物質のスペクトルデータを用いる。

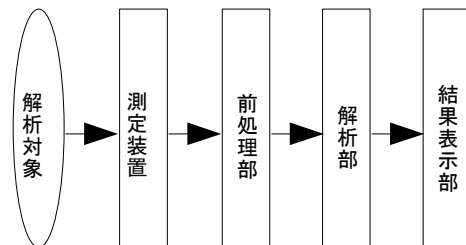


図1. システム構成

### 2. 解析の処理手順

#### 2.1. 波長-角周波数変換

前処理部から入力される吸光度は、波長に依存するデータとして与えられる。これを以下の式を用いて角周波数に依存するデータに変換する。

$$\omega = 2\pi \frac{c}{\lambda} \quad (1)$$

$\omega$ : 角周波数,  $\lambda$ : 波長,  $c$ : 光速

## 2.2. 補間

2.1.で得られたデータに対してスプライン補間を行い、等間隔の角周波数と、それに対する吸光度を求める。これは、測定データと参照データは同じ角周波数に対するデータでなければならぬためである。

## 2.3. ウェーブレット変換

2.2.で求めたデータをウェーブレット変換する。ウェーブレット変換とは時間-周波数解析の手法の1つであり、ここでは光吸収スペクトルを共振周波数  $\Omega$  と緩和周波数幅  $\Delta\omega$  に分離して、スペクトルの特徴をとらえるために用いる。変換式を式(2)に示す。マザーウェーブレット関数  $\psi_0(\omega)$  は、物質の光吸収に関係のあるローレンツ関数に基づいている。

$$W(\Omega, \Delta\omega) = \int f(\omega) \psi_{\Omega, \Delta\omega}(\omega) d\omega \quad (2)$$

$$\psi_{\Omega, \Delta\omega}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{\Delta\omega/2}} \psi_0\left(\frac{\omega - \Omega}{\Delta\omega/2}\right)$$

$$\psi_0(\omega) = \begin{cases} \frac{1}{8} \left\{ \cos \frac{\pi}{2}(\omega - 1) - 1 \right\} & (-3 \leq \omega < -1) \\ -\frac{3\omega^2 - 1}{(\omega^2 + 1)^3} & (-1 \leq \omega \leq 1) \\ \frac{1}{8} \left\{ \cos \frac{\pi}{2}(\omega + 1) - 1 \right\} & (1 < \omega \leq 3) \\ 0 & (\omega < -3, 3 < \omega) \end{cases}$$

## 2.4. ピーク検出

ウェーブレット変換して得られたデータに対し、ピーク検出を行う。これは、次の手順でピークの位置とその値に注目して解析を進めるためである。 $\Omega$  と  $\Delta\omega$  を軸にもつ座標平面で、あるウェーブレット係数  $W(\Omega_1, \Delta\omega_1)$  に注目した時に、その値が近傍のどの係数よりも大きければピークであると判定する。

## 2.5. 参照データ選択

検出したピークと参照データのピークから、式(3)で表される Priority  $S$  を求め、その値を元に解析対象を構成していると考えられる物質の候補を選択する。ただし、現状では候補を選択する基準が定まっていないため、全ての参照データを候補としている。

$$S = \sum_{p=1}^Q \frac{(j_p - j_p')^2 + (k_p - k_p')^2}{W_p \cdot [W_p']} \quad (3)$$

$$[W_p'] = \begin{cases} W_p' & \text{if } W_p' \leq W_p \\ W_p & \text{if } W_p' > W_p \end{cases}$$

$Q$ : 参照データのピーク数

$W_p(j, k)$ : 解析対象のピーク

$W_p'(j', k')$ : 参照データのピーク

$j, j'$ : 共振周波数

$k, k'$ : 緩和周波数幅

## 2.6. 含有物質・含有比の決定

$M$  を、2.5.で選択した参照データの個数とする。 $N$  ( $1 \leq N \leq M$ ) 個の参照データを組み合わせて、それらの含有比をラグランジュの未定係数法によって求める。すなわち、含有比  $c_n$  ( $1 \leq n \leq N$ ) を未知数に持つ  $N$  元 1 次連立方程式を解く。そして、求めた含有比、解析対象のウェーブレット係数  $W(j, k)$ 、各参照データのウェーブレット係数  $h_n(j, k)$  から、式(4)で表される AIC(Akaike Information Criterion)の値を求める。

$$AIC = J \cdot K \cdot \ln \left[ \frac{1}{J \cdot K} \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^K \left\{ W(j, k) - \sum_{n=1}^N c_n \cdot h_n(j, k) \right\}^2 \right] + 2N \quad (4)$$

AICとは、ある測定データと、複数のパラメータから成るモデルとの適合度を考える時、少ないパラメータ数で適合度の高いモデルを選択する際の指標の1つである。とり得る全ての組み合わせに

ついて AIC の値を求め、それが最小となる時の含有物質・含有比が、最適なものであるとする。

### 3. 解析処理の確認

作成した解析プログラムの処理結果を確認するために、5つの仮想的な物質のスペクトルを人工的に作成し、それらを組み合わせることで解析対象のスペクトルを作成した。図2～6に作成した仮想的な物質A～Eのスペクトルを示す。

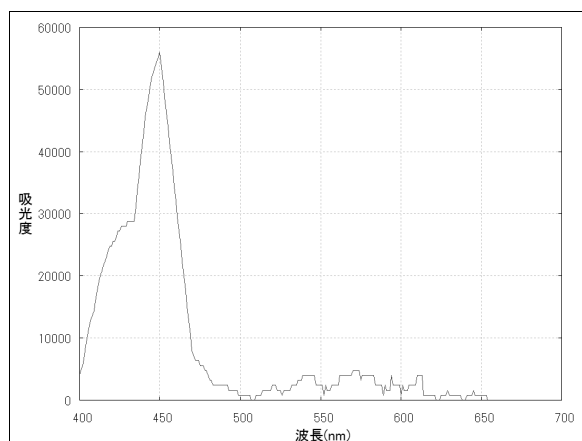


図2. 物質Aのスペクトル

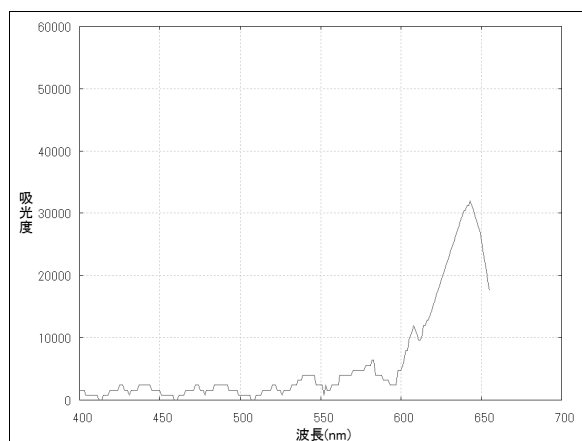


図3. 物質Bのスペクトル

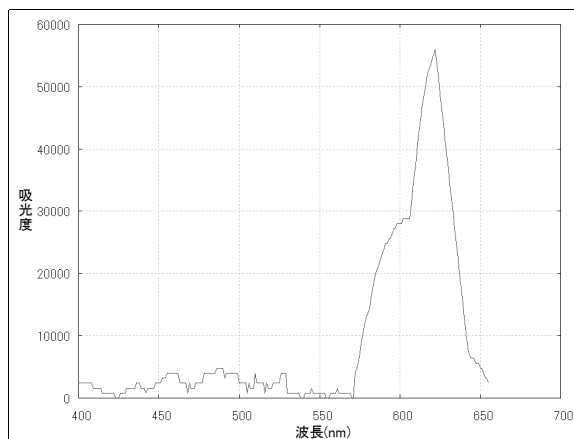


図4. 物質Cのスペクトル

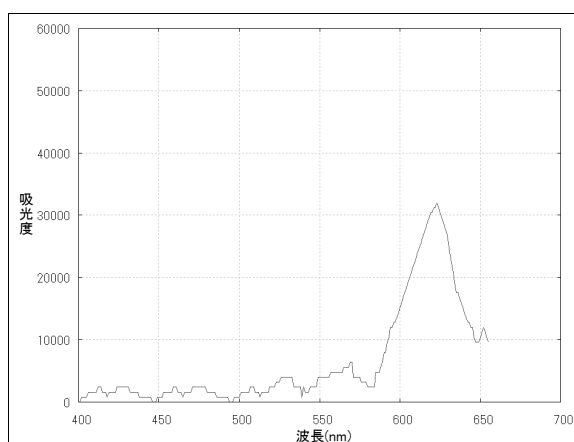


図5. 物質Dのスペクトル

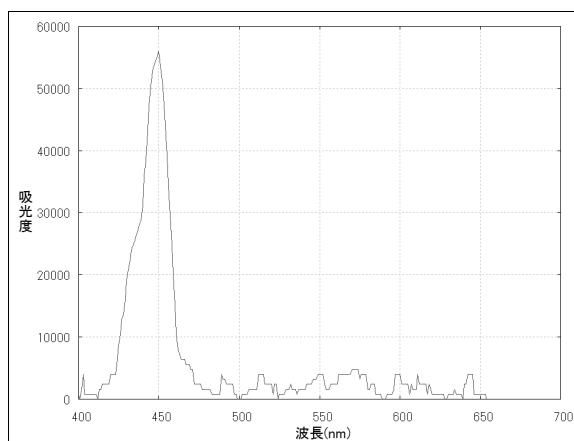


図6. 物質Eのスペクトル

解析対象が仮想的な物質A、Bをそれぞれ50%ずつ含んでいる場合の結果を以下に示す。解析対象のスペクトルは図7の様になる。これを

ウェーブレット変換した結果が図 8, ピーク検出の結果が図 9 である. 含有物質・含有比の決定の一部を表 1 に示す. これから, 想定した含有物質・含有比が得られたことが分かる.

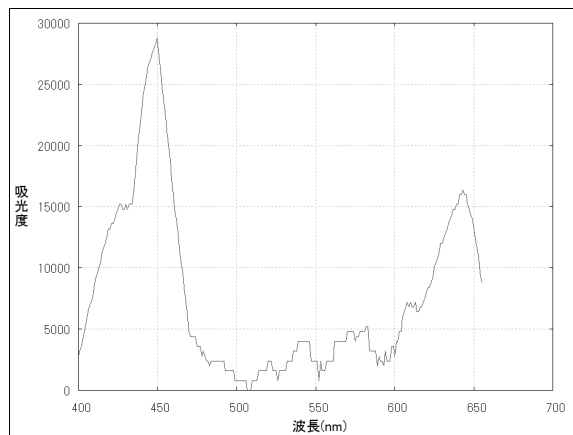


図 7. 解析対象のスペクトル

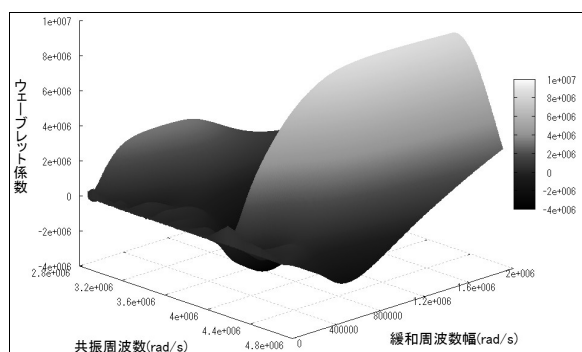


図 8. ウェーブレット係数の 3 次元グラフ

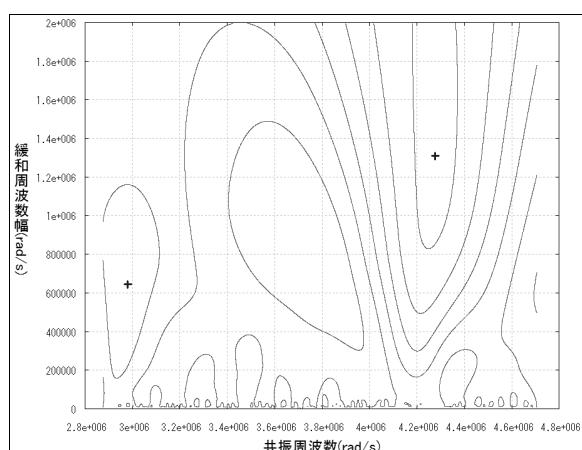


図 9. 検出したピーク(+がピーク)

表 1. 含有物質・含有比と AIC(一部)

含有物質名	含有比(%)	AIC
A	100.0	$6.21 \times 10^6$
B	100.0	$6.21 \times 10^6$
⋮	⋮	⋮
B, E	35.5, 64.5	$5.65 \times 10^6$
A, D, E	47.2, 46.2, 6.6	$5.26 \times 10^6$
A, B	50.0, 50.0	$-6.75 \times 10^6$

```
p[ 1] = 0.500000
p[ 2] = 0.500000
p[ 3] = 0.000000
p[ 4] = -0.000000
p[ 5] = -0.000000
sum  = 1.000000
```

```
p[ 1] = 0.500000
p[ 2] = 0.500000
p[ 3] = 0.000000
p[ 4] = 0.000000
sum  = 1.000000
```

\*\*\* Error square value = 0.000000

図 10. 多変量解析の処理結果

次に, 作成した解析プログラムでの処理結果と, 多変量解析での処理結果を比較した. 物質 A, B をそれぞれ 50%ずつ含むデータを解析対象とした時の多変量解析の処理結果を図 10 に示す. ここで, p[1]~p[5]が物質 A~E に対応し, 右辺が含有比である. sum は含有比の総和であり, 最後に解析結果の二乗誤差を表示している. 確認した全ての解析対象について, どちらの手法でも想定した含有物質・含有比が得られた. また, 実行時間を計測したところ, 多変量解析は約 0.2 秒程

度であったのに対し、作成した解析プログラムは約 25 秒程度であり、大きな違いがあることが分かった。

#### 4. まとめと今後の課題

分光解析システムにおいて、混合物質中の物質を同定し、定量を行う解析プログラムの開発を行った。そして、人工的に作成した仮想的な物質のスペクトルを用いて処理結果を確認し、想定した含有物質・含有比が得られた。また、多変量解析と処理結果、実行時間について比較したところ、どちらも想定した結果が得られたが、実行時間は多変量解析が約 0.2 秒、作成した解析プログラムが約 25 秒と、大きな違いがあった。今後の課題は、今回は利用しなかった **Priority** の値を用いた参照データの絞込みによる実行時間の短縮効果の検討、参照データの種類を増やし、解析が困難であると予想されるデータについて、作成した解析プログラムと多変量解析での処理結果を確認すること、求める補間点の数やウェーブレット変換のパラメータ等の検討を行うこと、実際に測定装置から得られたデータに対しての解析処理を行うことである。

#### 参考文献

- 1) 工藤 芳規: 分光解析システムのソフトウェア開発, 平成 18 年度弘前大学卒業研究
- 2) 坂本 裕昭: ウェーブレット変換を用いた分光解析システムの改善, 平成 19 年度弘前大学卒業研究