

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特 許 公 報(B2)

(11) 特許番号

特許第5798526号
(P5798526)

(45) 発行日 平成27年10月21日(2015.10.21)

(24) 登録日 平成27年8月28日(2015.8.28)

(51) Int.Cl.

F I

GO 1 N 23/207 (2006.01)

GO 1 N 23/207

GO 1 N 23/205 (2006.01)

GO 1 N 23/205

請求項の数 11 (全 17 頁)

(21) 出願番号	特願2012-159863 (P2012-159863)	(73) 特許権者	000250339
(22) 出願日	平成24年7月18日(2012.7.18)		株式会社リガク
(65) 公開番号	特開2014-20925 (P2014-20925A)		東京都昭島市松原町3丁目9番12号
(43) 公開日	平成26年2月3日(2014.2.3)	(74) 代理人	100114258
審査請求日	平成26年7月24日(2014.7.24)		弁理士 福地 武雄
		(74) 代理人	100125391
			弁理士 白川 洋一
		(72) 発明者	伊藤 和輝
			東京都昭島市松原町3丁目9番12号 株
			式会社リガク内
		(72) 発明者	上エ地 義徳
			東京都昭島市松原町3丁目9番12号 株
			式会社リガク内

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 X線分析装置、X線分析システム、X線分析方法およびX線分析プログラム

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

画素ごとに決まる離散データのX線強度分布を分布既知の第1の面から分布未知の第2の面へ変換するX線分析装置であって、

第1の面上において画素を特定する格子点および前記格子点間の中間点をノードとして、第2の面へ投影する投影部と、

前記投影されたノードにより特定される投影画素を表わす多角形が前記第2の面上の各画素と重複する領域の面積を算出することで、前記投影画素を表わす多角形が前記第2の面上の各画素に対して占める占有率を算出する占有率算出部と、

前記占有率に基づいて、前記第1の面上の画素内のX線強度を前記第2の面上の画素へ分配し、X線強度分布を変換する変換部と、を備えることを特徴とするX線分析装置。

10

【請求項2】

前記第1の面上の画素は、座標軸に平行な直線により区画されていることを特徴とする請求項1記載のX線分析装置。

【請求項3】

前記投影部、占有率算出部および変換部は、いずれも実数計算を行なうことを特徴とする請求項1または請求項2記載のX線分析装置。

【請求項4】

前記投影部は、前記格子点間を等間隔に $1/n$ (n = 整数) に分ける点をノードとして前記第2の面へ投影することを特徴とする請求項1から請求項3のいずれかに記載のX線

20

分析装置。

【請求項 5】

前記占有率に基づいて、前記第 1 の面上の画素内の X 線強度を前記第 2 の面上の画素へ分配するためのテーブルを作成するテーブル作成部を更に備え、

前記変換部は、前記作成されたテーブルを用いて、X 線強度を前記第 1 の面上の分布から前記第 2 の面上の分布へ変換することを特徴とする請求項 1 から請求項 4 のいずれかに記載の X 線分析装置。

【請求項 6】

前記占有率算出部は、各画素について並列処理で前記占有率を算出することを特徴とする請求項 1 から請求項 5 のいずれかに記載の X 線分析装置。

10

【請求項 7】

前記第 1 の面を X 線の検出器の実際の検出面とし、前記第 1 の面上の画素を前記実際の検出面の画素とし、

前記第 2 の面を X 線の検出器の理想の検出面とし、前記第 2 の面上の画素を前記理想の検出面の画素として、前記 X 線強度分布の変換によりデータの補正を行なうことを特徴とする請求項 1 から請求項 6 のいずれかに記載の X 線分析装置。

【請求項 8】

スキャン方向に並列に配置された複数の検出器と、

請求項 7 記載の X 線分析装置と、を備え、

前記 X 線分析装置は、前記検出器により得られたデータに対して前記補正を行なうことを特徴とする X 線分析システム。

20

【請求項 9】

半球面上に配置された複数の検出器と、

請求項 7 記載の X 線分析装置と、を備え、

前記 X 線分析装置は、前記検出器により得られたデータに対して前記補正を行なうことを特徴とする X 線分析システム。

【請求項 10】

画素ごとに決まる離散データの X 線強度分布を分布既知の第 1 の面から分布未知の第 2 の面へ変換する X 線分析方法であって、

第 1 の面上において画素を特定する格子点および前記格子点間の中間点をノードとして、第 2 の面へ投影するステップと、

30

前記投影されたノードにより特定される投影画素を表わす多角形が前記第 2 の面上の各画素と重複する領域の面積を算出することで、前記投影画素が表わす多角形が前記第 2 の面上の各画素に対して占める占有率を算出するステップと、

前記占有率に基づいて、前記第 1 の面上の画素内の X 線強度を前記第 2 の面上の画素へ分配し、X 線強度分布を変換するステップと、を含むことを特徴とする X 線分析方法。

【請求項 11】

画素ごとに決まる離散データの X 線強度分布を分布既知の第 1 の面から分布未知の第 2 の面へ変換する X 線分析プログラムであって、

第 1 の面上において画素を特定する格子点および前記格子点間の中間点をノードとして、第 2 の面へ投影する処理と、

40

前記投影されたノードにより特定される投影画素を表わす多角形が前記第 2 の面上の各画素と重複する領域の面積を算出することで、前記投影画素を表わす多角形が前記第 2 の面上の各画素に対して占める占有率を算出する処理と、

前記占有率に基づいて、前記第 1 の面上の画素内の X 線強度を前記第 2 の面上の画素へ分配し、X 線強度分布を変換する処理と、をコンピュータに実行させることを特徴とする X 線分析プログラム。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

50

本発明は、画素ごとに決まる離散データのX線強度分布を分布既知の第1の面から分布未知の第2の面へ変換するX線分析装置、X線分析システム、X線分析方法およびX線分析プログラムに関する。

【背景技術】

【0002】

画像データは通常2次元であるが、観測・測定空間を考えた場合、3次元の直交座標系上のデータとみなすことができる。また、検出器によって測定されたデータは、画素ごとに不連続な値をとり、離散データとして空間的に離散的な情報として表現される。

【0003】

このような直交座標系上の離散データを同一もしくはそれより低い次元へ写像する必要が生じる場合がある。特に、写像元および写像先が離散的なデータ表現となっている写像においては、正画素かつ $\sqrt{2}$ の倍数の回転のような特別な変換では1対1の関係が成立しうる。しかし、通常は変換操作が平行移動や回転であっても、データ要素間には1対1の関係が成立しない。

【0004】

画像処理の分野において、この問題を近似的に解く手法は古くから存在し、最近傍法や双一次補間法、双三次補間法が広く用いられている。しかし、これらの手法は画素値やその積分値の保存が保証されず、画素値の位置と積分値が重要であるX線回折・散乱法への適用は必ずしも適当とは言えない。

【0005】

画素値の位置と積分値が保存される方法として、正方形の写像元の画素を写像先で長方形領域に変形する近似法が提案されている（非特許文献1～4参照）。しかし、この方法では画素値が保存されるものの、空間周波数の高周波成分に歪みが生じる。また、計数型検出器による測定値が整数に限られ、観測座標系と理想的な観測座標系が一致しない場合がある。例えば、検出器が傾いている場合などには、データ表現を整数値のみで取り扱うことによって整数値への丸め誤差が蓄積されうる。

【先行技術文献】

【非特許文献】

【0006】

【非特許文献1】M. Stanton et al., J. Appl. Cryst. 25, 549-558 (1992)

【非特許文献2】S. Barna et al., Rev. Sci. Instrum. 70, 2927-2934 (1999).

【非特許文献3】G. Huelsen, C. Bronnimann, E.F. Eikenberry, Nucl. Instrum. Methods A548, 540-554 (2005)

【非特許文献4】G. Huelsen, Ph.D thesis (2005)

【非特許文献5】K. Ito, H. Kamikubo, N. Yagi and Y. Amemiya, "Calibration method and software for image distortion and non-uniformity in CCD-based X-ray detectors utilize X-ray image-intensifier", Jpn. J. Appl. Phys. 44, 8684-8691 (2005).

【非特許文献6】A. P. Hammersley et al., Nucl. Instrum. Methods A346, 312-321 (1994)

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0007】

このような問題の解決法として、微小要素に分割する方法が提案されている（非特許文献5参照）。しかし、この方法では精度を上げると計算爆発（ $O[N^4]$ ）を起こしてしまう。また、三角形分割による方法も知られているが、（非特許文献6）、精度向上のために分割数を多くする必要が生じ計算量が膨大になってしまう。

【0008】

本発明は、このような事情に鑑みてなされたものであり、X線強度の積分値を維持して可逆的に変換でき、計算量を低減しつつ高精度にX線強度分布を変換できるX線分析装置、X線分析システム、X線分析方法およびX線分析プログラムを提供することを目的とす

10

20

30

40

50

る。

【課題を解決するための手段】

【0009】

(1) 上記の目的を達成するため、本発明のX線分析装置は、画素ごとに決まる離散データのX線強度分布を分布既知の第1の面から分布未知の第2の面へ変換するX線分析装置であって、第1の面上において画素を特定する格子点および前記格子点間の中間点をノードとして、第2の面へ投影する投影部と、前記投影されたノードにより特定される投影画素を表わす多角形が前記第2の面上の各画素と重複する領域の面積を算出することで、前記投影画素を表わす多角形が前記第2の面上の各画素に対して占める占有率を算出する占有率算出部と、前記占有率に基づいて、前記第1の面上の画素内のX線強度を前記第2の面上の画素へ分配し、X線強度分布を変換する変換部と、を備えることを特徴としている。

10

【0010】

このように本発明のX線分析装置は、第1の面上の格子点間の中間点をノードとして投影画素を表わす多角形の第2の面の各画素への占有率を算出するため、投影画素の形状に近い多角形を用いて各占有率を計算でき、高精度にX線強度分布を変換できる。また、投影画素を表わす多角形の面積計算の計算量を低減できる。また、空間分解能を保存でき、測定した物理量を維持することで、強度値を可逆的に単射として変換できる。

【0011】

(2) また、本発明のX線分析装置は、前記第1の面上の画素が、座標軸に平行な直線により区画されていることを特徴としている。これにより、効率的にX線強度分布を変換でき、計算量を低減するとともに精度を向上することができる。この場合、第1の面上の画素は、正方形または長方形である。

20

【0012】

(3) また、本発明のX線分析装置は、前記投影部、占有率算出部、テーブル作成部および変換部が、いずれも実数計算を行なうことを特徴としている。これにより、丸め誤差が生じないため計算の精度を向上できる。

【0013】

(4) また、本発明のX線分析装置は、前記投影部が、前記格子点間を等間隔に $1/n$ (n = 整数) に分ける点をノードとして前記第2の面へ投影することを特徴としている。これにより、ノードを用いて表した投影画素の形状を実際の投影画素の形状に近づけることができ、計算の精度が向上する。

30

【0014】

(5) また、本発明のX線分析装置は、前記占有率に基づいて、前記第1の面上の画素内のX線強度を前記第2の面上の画素へ分配するためのテーブルを作成するテーブル作成部を更に備え、前記変換部は、前記作成されたテーブルを用いて、X線強度を前記第1の面上の分布から前記第2の面上の分布へ変換することを特徴としている。このようにテーブルを用いて変換することで、計算量を低減でき、リアルタイムなX線強度分布の変換が可能になる。

【0015】

40

(6) また、本発明のX線分析装置は、前記占有率算出部が、並列処理で前記占有率を算出することを特徴としている。これにより、少ないパスでの計算が可能になり、計算効率を向上させることができる。また、その結果、リアルタイム性を向上できる。

【0016】

(7) また、本発明のX線分析装置は、前記第1の面をX線の検出器の実際の検出面とし、前記第1の面上の画素を前記実際の検出面の画素とし、前記第2の面をX線の検出器の理想の検出面とし、前記第2の面上の画素を前記理想の検出面の画素として、前記X線強度分布の変換によりデータの補正を行なうことを特徴としている。これにより、アライメントが十分でない場合でもX線検出データを補正できる。また、任意の場所に検出器を設定して測定し、補正したデータを利用することができる。

50

【 0 0 1 7 】

(8) また、本発明の X 線分析システムは、スキャン方向に並列に配置された複数の検出器と、(7) 記載の X 線分析装置とを備え、前記 X 線分析装置が、前記検出器により得られたデータに対して前記補正を行なうことを特徴としている。これにより、ゴニオ機構なしで一度に X 線回折データを検出して補正したデータを利用することができる。

【 0 0 1 8 】

(9) また、本発明の X 線分析システムは、半球面上に配置された複数の検出器と、(7) 記載の X 線分析装置と、を備え、前記 X 線分析装置が、前記検出器により得られたデータに対して前記補正を行なうことを特徴としている。これにより、ゴニオ機構なしで一度に X 線回折データを検出して補正したデータを利用することができる。

10

【 0 0 1 9 】

(1 0) また、本発明の X 線分析方法は、画素ごとに決まる離散データの X 線強度分布を分布既知の第 1 の面から分布未知の第 2 の面へ変換する X 線分析方法であって、第 1 の面上において画素を特定する格子点および前記格子点間の中間点をノードとして、第 2 の面へ投影するステップと、前記投影されたノードにより特定される投影画素を表わす多角形が前記第 2 の面上の各画素と重複する領域の面積を算出することで、前記投影画素が表わす多角形が前記第 2 の面上の各画素に対して占める占有率を算出するステップと、前記占有率に基づいて、前記第 1 の面上の画素内の X 線強度を前記第 2 の面上の画素へ分配し、X 線強度分布を変換するステップと、を含むことを特徴としている。

【 0 0 2 0 】

20

これにより、投影画素の形状に近い多角形を用いて各占有率を計算でき、高精度に X 線強度分布を変換できる。また、投影画素を表わす多角形の面積計算の計算量を低減できる。また、空間分解能を保存でき、測定した物理量を維持することで、強度値を可逆的に単射として変換できる。

【 0 0 2 1 】

(1 1) また、本発明の X 線分析プログラムは、画素ごとに決まる離散データの X 線強度分布を分布既知の第 1 の面から分布未知の第 2 の面へ変換する X 線分析プログラムであって、第 1 の面上において画素を特定する格子点および前記格子点間の中間点をノードとして、第 2 の面へ投影する処理と、前記投影されたノードにより特定される投影画素を表わす多角形が前記第 2 の面上の各画素と重複する領域の面積を算出することで、前記投影画素を表わす多角形が前記第 2 の面上の各画素に対して占める占有率を算出する処理と、前記占有率に基づいて、前記第 1 の面上の画素内の X 線強度を前記第 2 の面上の画素へ分配し、X 線強度分布を変換する処理と、をコンピュータに実行させることを特徴としている。

30

【 0 0 2 2 】

これにより、投影画素の形状に近い多角形を用いて各占有率を計算でき、高精度に X 線強度分布を変換できる。また、投影画素を表わす多角形の面積計算の計算量を低減できる。また、空間分解能を保存でき、測定した物理量を維持することで、強度値を可逆的に単射として変換できる。

【 発明の効果 】

40

【 0 0 2 3 】

本発明によれば、投影画素の形状に近い多角形を用いて各占有率を計算でき、高精度に X 線強度分布を変換できる。また、投影画素を表わす多角形の面積計算の計算量を低減できる。また、空間分解能を保存でき、測定した物理量を維持することで、強度値を可逆的に単射として変換できる。

【 図面の簡単な説明 】

【 0 0 2 4 】

【 図 1 】 本発明に係る X 線分析装置の構成を示すブロック図である。

【 図 2 】 本発明に係る X 線分析装置の動作を示すフローチャートである。

【 図 3 】 第 1 の面と第 2 の面とを示す模式図である。

50

【図４】画素の投影を示す模式図である。

【図５】ノードの投影を示す模式図である。

【図６】投影画素の多角形を示す模式図である。

【図７】投影画素の多角形が投影先の画素と重複する領域を示す模式図である。

【図８】一連の処理を示すデータフロー図である。

【図９】本発明に係るＸ線分析システムを示すブロック図である。

【図１０】検出面の補正を示す模式図である。

【図１１】モジュールにより得られたデータの補正を示す図である。

【図１２】モジュールの再配置を示す模式図である。

【図１３】平面上のデータの円筒面上への変換を示す図である。

10

【図１４】２次元データの１次元データへの変換を示す図である。

【図１５】変換された１次元データを示す図である。

【発明を実施するための形態】

【００２５】

次に、本発明の実施の形態について、図面を参照しながら説明する。説明の理解を容易にするため、各図面において同一の構成要素に対しては同一の参照番号を付し、重複する説明は省略する。

【００２６】

（Ｘ線分析装置の構成）

図１は、Ｘ線分析装置１００の構成を示すブロック図である。Ｘ線分析装置１００は、たとえば補正值のような与えられた変換情報に基づいて、画素ごとに決まる離散データのＸ線強度分布を分布既知の第１の面から分布未知の第２の面へ変換する。画素は、変換元または変換先の座標系の単位要素である。Ｘ線分析装置１００には、ＰＣを用いることができるが専用機を用いてもよい。第１の面は、変換元の面、第２の面は変換先の面を表す。図１に示すように、Ｘ線分析装置１００は、変換情報記憶部１１１、投影部１１２、占有率算出部１１３、テーブル作成部１１４、テーブル記憶部１１５、データ記憶部１１７、変換部１１８および出力部１１９を備えている。

20

【００２７】

変換情報記憶部１１１は、第１の面および画素と第２の面および画素の関係を特定する変換情報を記憶する。たとえば、変換情報には、実際の検出面の配置を特定する傾きや回転を表す値、理想的な検出面の配置を特定する値が挙げられる。

30

【００２８】

投影部１１２は、第１の面上で画素を特定する格子点および格子点間の中間点をノードとして第２の面へ投影する。第１または第２の面上の画素は、座標軸に平行な直線により区画されていることが好ましい。これにより、画素ごとに決まる離散データのＸ線強度分布を効率的に変換でき、計算量を低減するとともに精度を向上することができる。

【００２９】

投影部１１２は、画素の格子点だけでなく格子点間にある画素の辺上の点も中間点として第２の面へ投影する。これにより、投影されたノードを用いて表した多角形を理想的な投影画素に近づけることができ、計算の精度が向上する。特に、中間点は、格子点間を等間隔に $1/n$ （ n ＝整数）に分ける点であることが好ましい。

40

【００３０】

占有率算出部１１３は、投影されたノードにより特定される多角形が第２の面上の画素の各辺で切り分けられた形状の面積を算出することで、投影画素を表わす多角形が第２の面上の各画素に対して占める占有率を算出する。これにより、空間分解能を保存でき、測定した物理量を維持することで可逆的に単射として変換できる。

【００３１】

テーブル作成部１１４は、占有率に基づいて、第１の面上の画素内のＸ線強度を第２の面上の画素へ分配するためのテーブルを作成する。テーブル作成は並列処理で行なうことが好ましく、これにより高速な処理が可能になる。このようにテーブルを用いることで、

50

X線強度分布の変換が容易になる。一度、テーブルを作成しておけば、変換に要する計算量を低減でき、リアルタイムな変換が可能になる。テーブル記憶部115は、作成されたテーブルを記憶する。データ記憶部117は、測定データやその後の変換データを記憶する。

【0032】

変換部118は、占有率に基づいて、第1の面上の画素内のX線強度を第2の面上の画素へ分配し、X線強度分布を変換する。変換部118は、データ記憶部117から変換対象のデータを取得し、読み出したテーブルを用いて、X線強度を第1の面上の分布から第2の面上の分布へ変換する。変換された強度分布は、データ記憶部117に記憶させる。出力部119は、変換後のデータを表示画面等に出力する。

10

【0033】

なお、投影部112、占有率算出部113、テーブル作成部114および変換部118は、いずれも実数計算を行なう。これにより、丸め誤差が生じないため計算の精度を向上できる。また、内部データ表現を整数ではなく実数とすることで低線量領域においても丸め誤差の影響を受けない小モジュール間境界処理も可能となる。変換の処理は、並列処理により1パスで行なってもよい。その場合には、共有メモリにすべての計算情報を蓄積すればよい。

【0034】

(X線分析装置の動作)

上記のように構成されたX線分析装置100の動作を説明する。図2は、X線分析装置100の動作を示すフローチャートである。まず、補正值等の変換情報の入力を受け付ける(ステップS1)。次に、第1の面の画素のノードを第2の面に投影する(ステップS2)。投影されたノードで形成された多角形を第2の面の各画素により切り分けた領域の多角形の面積を算出する(ステップS3)。

20

【0035】

このようにして、投影されたノードで形成された多角形の第2の面の各画素に対する占有率を算出する(ステップS4)。そして、得られた占有率から、第1の面から第2の面へのデータの変更を表すテーブルを作成し(ステップS5)、保存しておく。なお、占有率の計算方法(Overlap計算法)については、後述する。次に、第1の面上のX線強度分布のデータを準備し、保存されたテーブルを読み出し、このテーブルを用いてX線強度分布のデータを第2の面上のデータに変換して終了する(ステップS6)。上記の動作は、コンピュータにプログラムを実行させることで可能となる。

30

【0036】

(Overlap計算法の概要)

次に、占有率の算出方法としてOverlap計算法の概要を説明する。図3は、第1の面と第2の面とを示す模式図である。図3に示す例では、試料位置400に対してX線強度分布が既知の面500(第1の面)、とX線強度分布が未知の面600(第2の面)がある。

【0037】

図4は、画素の投影を示す模式図である。図4に示すように、面500は、正方形の画素510で区画されており、面600は、正方形の画素610で区画されている。試料位置400に対して、画素510が面600に投影され、歪んだ四辺形として投影画素520が現れている。

40

【0038】

図5は、ノードの投影を示す模式図である。以下の説明では、変換元の各画素をQa~Qiで表し、変換先の各画素をRA~RIで表す。図5の例では、面500上の画素Qeの格子点511および中間点512が面600上に投影されている。格子点511は、投影点521に投影され、中間点512は、投影点522に投影されている。このように、画素のノードを投影することができる。なお、図5では、面500上の画素Qa~Qiを簡略化してa~iで表している。各a~iは、後述の(iq, jq)に対応する。また、

50

図6では、面600上の画素RA~RIを簡略化してA~Iで表している。各A~Iは、後述の(i_r, j_r)に対応する。

【0039】

図6は、投影画素の多角形を示す模式図である。上記の通り得られた投影点521、522により、面600上の投影画素520を近似した多角形530が得られる。多角形530の各辺は、面600上の画素610を区画する辺と交わっており、交点523の座標および交線631同士が交わる画素の格子点621の座標も算出することができる。

【0040】

図7は、投影画素の多角形が投影先の画素と重複する領域を示す模式図である。さらに多角形530に含まれる画素を特定しておく。上記のように求められた投影点521、522、交点523および格子点621の座標により特定される多角形の面積SA~SI(後述のS(i_r, j_r))を計算することが可能になる。そして、投影画素の多角形が投影先の画素と重複する領域の多角形全体に対する面積の割合(占有率)を算出できる。

【0041】

なお、計算を単純化するには画素は正方画素であることが好ましいが、画素は、長方形、平行四辺形、六角形等に形成されていてもよい。また、画素値の分布を平面から曲面へ変換することも可能であるが、曲面においても少なくとも各画素は平面であると仮定して計算すれば面積を算出できる。

【0042】

(Overlap計算法の詳細)

次に、データ変換のアルゴリズムとして用いるOverlap計算法の詳細を、座標を用いて説明する。この計算法では、平面にて格子点およびn分点の変換点の実数座標を与え、画素が変換されて形成された多角形の頂点、内包される変換先画素の格子点、格子との交点をすべて計算する。そして、変換先の画素と重複する多角形の面積をそれぞれ求める。なお、与えられる実数座標はすべて異なる。

【0043】

まず、各画素を原画像の座標系から変換画像の座標系に座標変換する。たとえば、変換元の画素Q(i_q, j_q)の4つの頂点をそれぞれ以下のように定義する(i_q, j_q は自然数)。

Q0: (i_q, j_q)

Q1: ($i_q + 1, j_q$)

Q2: ($i_q + 1, j_q + 1$)

Q3: ($i_q, j_q + 1$)

【0044】

変換元の座標(x, y)における変換G(x, y)により、画素Q(i_q, j_q)が画素R(i_r, j_r)に変換されるとすると(i_r, j_r は自然数)、変換画像上で4つの頂点は以下のように表せる。

R0: (i_q, j_q) + G(i_q, j_q)

R1: ($i_q + 1, j_q$) + G($i_q + 1, j_q$)

R2: ($i_q + 1, j_q + 1$) + G($i_q + 1, j_q + 1$)

R3: ($i_q, j_q + 1$) + G($i_q, j_q + 1$)

【0045】

さらに各辺Q0Q1、Q1Q2、Q2Q3、Q3Q0をそれぞれ分割する中間点も含めて変換する(サブピクセル化)。このように、サブピクセル化して計算することで高精度化が可能となり滑らかな画像変換が可能となる。一方で、計算量の増加は小さく抑えることができる。なお、分割は等分が好ましい。また、分割数は、計算量との兼ね合いで決めることができ、回折角の低角側では細かく、高角側では粗くすることが可能である。

【0046】

次に、変換先の座標系において、R0の各座標数値の小数点を切り捨てた最小座標Rmin(i_{rmin}, j_{rmin})およびR2の各座標数値の小数点を切り上げた最大座標

$R_{\max}(i_{\max}, j_{\max})$ を求める。各座標と変換先の頂点とは以下の関係を有する。

$R_{\min} = \text{floor}(R_0)$

$R_{\max} = \text{ceil}(R_2)$

1画素の変換先の面積の計算については、上記の2つの座標 R_{\min} 、 R_{\max} によって決まる領域内に限定することができる。

【0047】

次に、変換された画素を表わす多角形のノードおよび交点を抽出する。サブピクセル分割数を4として2分点(中点)のみを変換する場合には、辺 Q_0Q_1 上の点 Q_s を $Q_s : (i_q + 0.5, j_q)$ とすると、変換画像上では、 $R_s : (i_q + 0.5, j_q) + G$ 10
($i_q + 0.5, j_q$)と表せる。線分 R_0R_s と変換画像上の座標格子との交点を R_c と表す。また、投影画素を表わす多角形の内部にある格子点を R_I と表す。

【0048】

交点は以下のようにして求める。まず、変換された画素を表わす多角形において時計回りに順序付けされた頂点 R_i ($i = 0, \dots, n-1, R_0 = R_n$)から各辺が得られる。そして、 R_{\min} 、 R_{\max} を対角の頂点とし変換先の画素の集合により形成される領域内で画素 $R(i_r, j_r)$ の各辺が上記の n 角形の各辺と交差するか否かを判定する。このとき、以下の関係を満たす座標(i_r, j_r)を中心に(i_r, j_r)と($i_r \pm 1, j_r \pm 1$)とを結ぶ線分が n 多角形の各辺 S_i と交点を持つかどうかを判定する。

$i_{r\min} + 1 \leq i_r \leq i_{r\max} - 1$ 20

$j_{r\min} + 1 \leq j_r \leq j_{r\max} - 1$ 。

【0049】

そして、交点を持つ場合には、交点を持つ線分(交線)にどの領域に属しているかという情報を付与する。交点を持たない場合にはその線分を省く。なお、省かれた線分は、たとえば n 多角形に内包されている線分である。

【0050】

次に、変換された画素を表わす多角形を上記の交線および画素の辺で分割し、上記の多角形に囲われた領域が、変換画像上の画素とそれぞれ重なる領域を抽出(Clipping)する。分割により形成された多角形が、変換された画素を表わす多角形が変換先の画素に重複する領域となる。そして、分割により形成された多角形の頂点順のソートを行な 30
う。

【0051】

次に、変換された画素を表わす多角形が変換先の画素に重複する閉領域の面積 $S_q(i_r, j_r)$ を計算する。重複する閉領域(m 角形)の面積 S_q は、 m 角形的一方回りの順に頂点を(x_k, y_k) ($k = 1 \sim m$ の自然数)としたとき以下の公式で求められる。

【数1】

$$S_q(i_r, j_r) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^m (x_k y_{k+1} - x_{k+1} y_k)$$

40

このような計算方法により、従来法と比較して、モンテカルロ計算よりも計算量が少なく、既製の三角形分割よりも高精度な結果を得ることができる。

【0052】

次に、得られた重なり合う閉領域の面積に応じて、原画像上の画素 $Q(i_q, j_q)$ の画素値 $I(i_q, j_q)$ の変換先画素 $R(i_r, j_r)$ の画素値 $I(i_r, j_r)$ への分 50

配 (R e - d i s t r i b u t i o n) を算出する。算出は、次の式により行なうことができる。

【数 2】

$$I(i_r, j_r) = \sum_{i_q, j_q} I(i_q, j_q) \frac{S_q(i_r, j_r)}{\sum_{i_r, j_r}^q S_q(i_r, j_r)}$$

10

(\sum_{i_q, j_q} は、投影前の画素の総和、 \sum_{i_r, j_r}^q は、画素 Q の投影を表す多角形内の総和)

【 0 0 5 3 】

これにより、周りから補間処理 (interpolation) することなく画素値を変換でき、当初の情報量を減少させずに原画像がもっている空間分解能を適切に保存できる。そして、局所的にも大域的にも画素値が正確に保存される。この計算をすべての Q (i q , j q) について行なうことで変換 G (x , y) による変換画像が得られる。デジカメの写真処理技術等とは異なり、物理量の測定の場合では、画素値の正確な保存に対する要請がある。

20

【 0 0 5 4 】

(テーブルを用いたリアルタイム変換)

画像変換の処理は、テーブルを準備して効率化することができる。図 8 は、一連の処理を示すデータフロー図である。まず、予め用意された歪み計測マスクデータと試験的な測定により得られた座標変換情報を用いて、歪み・座標変換計算 3 0 3 を実行する。そして、計算により得られた座標変換の情報に基づいて O v e r l a p 計算 3 0 5 を実行し、得られた画像変換テーブル 2 3 1 を保存する。なお、マスクデータとは、板状のマスクで検出面を覆って測定したときのマスクのグリッドの投影を検出したデータを指す。

30

【 0 0 5 5 】

一方で、散乱 X 線を測定し、座標と座標に対する強度のデータを取得する。そして、保存されている画像変換テーブルを読み出し、これを用いて取得されたデータに対して画像変換処理 2 3 0 を実行する。これにより、測定時にリアルタイムで 2 次元回折像を補正したり、2 次元回折像を 1 次元データに変換したりすることができる。さらに得られたデータを、別の画像変換テーブルでさらに異なる座標系に変換することも可能である。テーブルを予め用意することで、並列処理が可能になり精度の高い計算を高速に実行できる。本発明では、ノードを用いるというロジック上の特徴だけでなく並列処理を用いたアルゴリズム上の特徴によっても処理を高速化することができる。

40

【 0 0 5 6 】

一回テーブルを作ってしまうと、そこを通して変換するのは 1 パスであり計算量を低減できる。なお、測定のコンフィグレーションを変えたときには、コンフィグレーションに合わせてテーブルを変えればよい。積分強度を保存した離散データ間の座標変換 (または幾何補正) を高速に計算することによって、複数のモジュールによって構成される X 線検出器のデータ合成や平面座標、円筒座標、球座標の座標間の変換や平面データの球面への投影などの計算を高精度かつ高速に行なうことができる。

【 0 0 5 7 】

(X 線検出の補正)

図 9 は、X 線分析システム 5 0 を示すブロック図である。図 9 に示すように、X 線分析

50

システム 50 は、検出器 70、検出器制御装置 80、計測装置 90 およびデータ解析装置 100 を備えている。

【0058】

検出器 70 は、たとえば半導体検出器であり、外部からのトリガ信号により機能し、X 線強度を検出する。検出器制御装置 80 は、検出器 70 を制御する装置である。計測装置 90 は、ユーザにより操作され、計測のための外部制御機器を制御する。データ解析装置 100 は、実質的には X 線分析装置 100 を構成する。各装置は、特別な計算機を用意しなくても、通常の PC で十分であるが、専用機を用いればさらに処理速度を上げることができる。

【0059】

X 線分析システム 50 で検出データを適正に補正するためには、検出器 70 が理想的な位置からどの程度傾いているか等の補正值（変換情報の一種）を予め把握しておく必要がある。このような補正值は、装置の設計を規定のものとし、出荷時に決めた値を用いることとしてもよいし、使用者が調整したコンフィグレーションの補正值を用いてもよい。

【0060】

補正值には、検出器 70 の試料からの距離、試料に対する傾きと検出器周りの回転を表す数値が挙げられる。なお、レンズの場合には、板状のマスキの細かいグリッド（穴）の投影のレンズの有無による変化でレンズの収差等を把握することができる。また、正常な位置であれば X 線はコーン状に散乱されるため、X 線回折像の投影が真円から楕円に歪んでいる程度で傾斜を測定できる。なお、ある座標系のデータを他の座標系に移すことをデータの変換といい、何らかの物理情報について理想値からのずれを取り除く変換を補正という。

【0061】

上記の例では、測定前のアライメントを前提としているが、アライメント無しで X 線を測定することもできる。測定時の誤差や取り付けによる精度誤差という人間では調整できない部分を補正值で調整することを前提にし、使用者がラフにコンフィグレーションを設定した状態でも、補正值を把握していれば適正な強度補正を行なうことができる。

【0062】

図 10 は、検出面の補正を示す模式図である。面 500（第 1 の面）を検出器 70 の検出面とし、面 600（第 2 の面）を X 線の検出器の理想の検出面とする。そして、上記の X 線強度分布の変換によりデータの補正を行なう。これにより、アライメントが十分でない場合でも X 線検出データを補正できる。また、任意の場所に検出器を設定して測定し、補正したデータを利用することができる。

【0063】

（モジュール間の位置補正）

上記の補正処理は、モジュール間の位置補正にも用いることができる。図 11 は、モジュールにより得られたデータの補正を示す図である。検出器が、複数のモジュールにより形成されている場合、各モジュールは所定の配置となるように設置されているが、実際のモジュール 550 は少しずつ位置の誤差を有する。たとえば、図 11 の例では、モジュール 550 の長手方向と短手方向がそれぞれが一致すべきベクトル x_{ij} と y_{ij} から回転している。この回転角度のように、理想的なモジュール 650 の位置に対する実際のモジュール 550 の位置を予め把握しておき、上記の測定データの変換処理により実際の位置で検出されたデータを理想位置のものに補正することが可能である。

【0064】

また、X 線の散乱データからモジュールを再配置することもできる。図 12 は、モジュール 550（～）の再配置を示す模式図である。既知の X 線の光学系に対して得られた測定データから理想的な X 線強度分布になる配置とのずれを把握し、物理的配置に対してモジュールの再配置を行なうことができる。このように多モジュール構成された検出器の効率的かつ高精度な再配置が可能である。

【0065】

10

20

30

40

50

(平板から円筒面、球面、またその逆)

上記のように画素値の変換処理は、測定データの補正に応用できるが、さらに補正により得られたデータを必要に応じて異なる面間で変換することができる。図 1 3 は、平面 5 0 0 上のデータの円筒面 6 0 0 上への変換を示す図である。さらに円筒面上のデータを球面上のデータに変換することも可能である。なお、曲面上のデータの変換を扱う場合であっても、各画素は平面であると近似して計算すれば、上記の O v e r l a p 計算法を適用できる。

【 0 0 6 6 】

(2 次元データから 1 次元データ)

上記のように異なる平面間のデータの変換だけでなく、2 次元データを 1 次元データに変換することもできる。図 1 4 は、2 次元データの 1 次元データへの変換を示す図である。図 1 4 に示す 2 次元データを円環平均処理によって 1 次元化する場合のように観測座標系が入射・散乱 X 線の座標系に対して傾いている場合でも、空間分解能を損なうことなく変換処理を行なうことが可能である。この場合には、2 次元上の画素 5 6 0 の画素値を所定の円環領域 6 6 0 内の画素値に変換することで 1 次元化できる。図 1 5 は、変換された 1 次元データを示す図である。

【 0 0 6 7 】

(複数の検出器の配置例)

複数の検出器をスキャン方向に並列に配置した構成でデバイリング等の測定を行ない、検出器により得られたデータに対して補正を行なってもよい。これにより、ゴニオ機構なしで一度に X 線回折データを検出して補正したデータを利用することができる。このように測定光学系として、フリー配置で測定し、データを補正して用いることができる。なお、複数の検出器をスキャン方向に直交する方向に並べて測定を行なうこともできる。また、複数の検出器を半球面上に並べて測定してもよい。

【 符号の説明 】

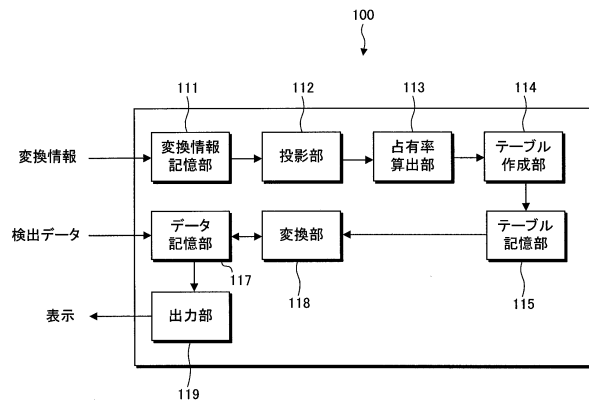
【 0 0 6 8 】

5 0	X 線分析システム	
7 0	検出器	
8 0	検出器制御装置	
9 0	計測装置	30
1 0 0	X 線分析装置 (X 線データ解析装置)	
1 1 1	変換情報記憶部	
1 1 2	投影部	
1 1 3	占有率算出部	
1 1 4	テーブル作成部	
1 1 5	テーブル記憶部	
1 1 7	データ記憶部	
1 1 8	変換部	
1 1 9	出力部	
2 3 0	画像変換処理	40
2 3 1	画像変換テーブル	
3 0 3	歪み・座標変換計算	
3 0 5	O v e r l a p 計算	
4 0 0	試料位置	
5 0 0	変換元の面 (第 1 の面)	
5 1 0	画素	
5 1 1	格子点	
5 1 2	中間点	
5 2 0	投影画素	
5 2 1、5 2 2	投影点	50

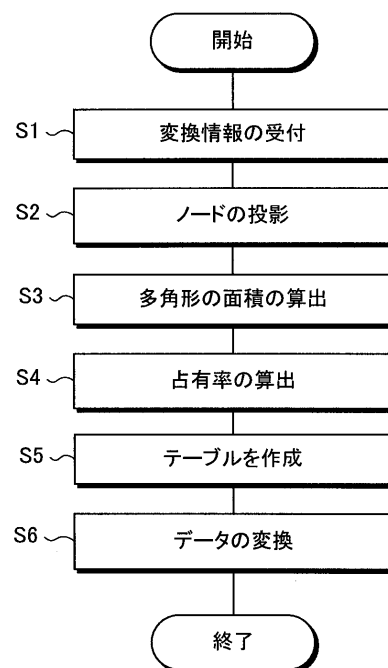
5 2 3 交点
 5 3 0 多角形
 5 5 0 モジュール
 5 6 0 画素
 6 0 0 変換先の面（第 2 の面）
 6 1 0 画素
 6 2 1 格子点
 6 3 1 交線
 6 5 0 モジュール
 6 6 0 円環領域

10

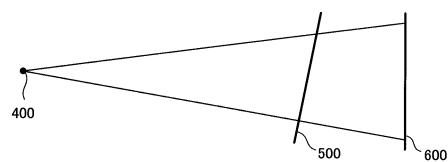
【図 1】



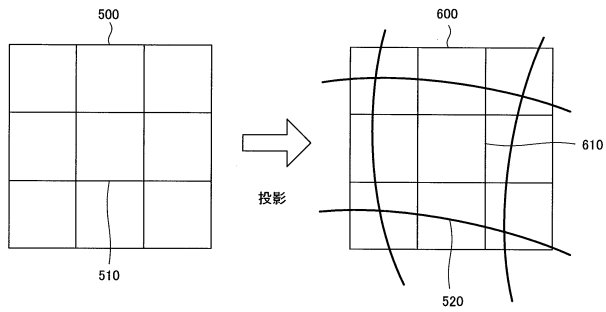
【図 2】



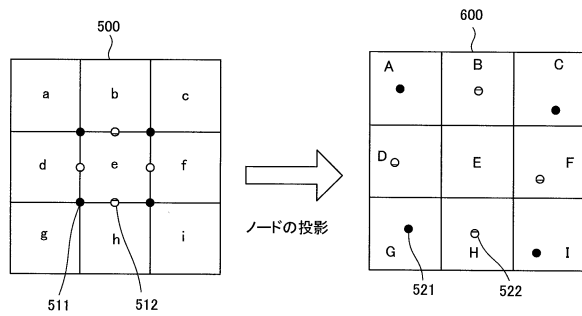
【図 3】



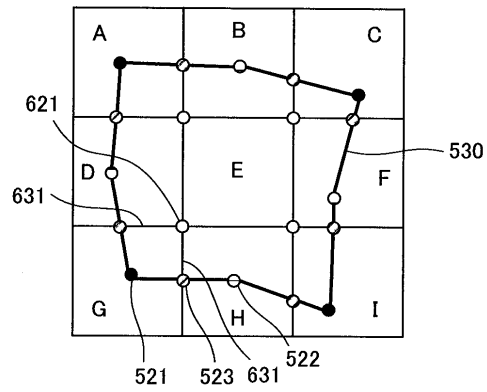
【図4】



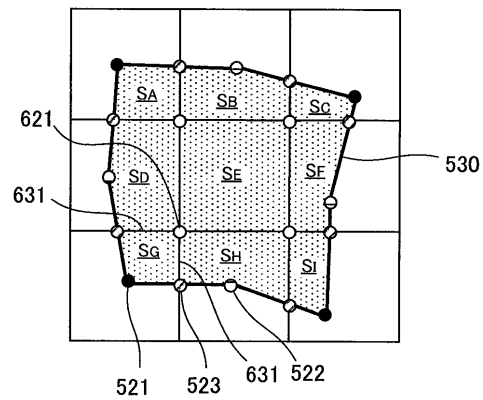
【図5】



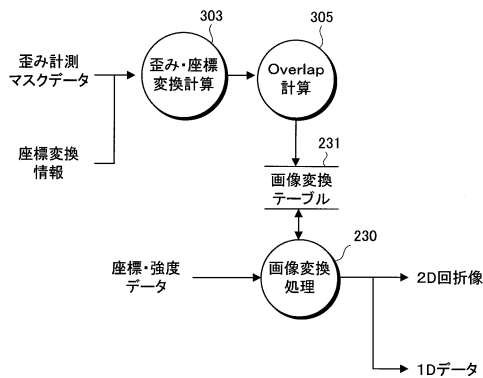
【図6】



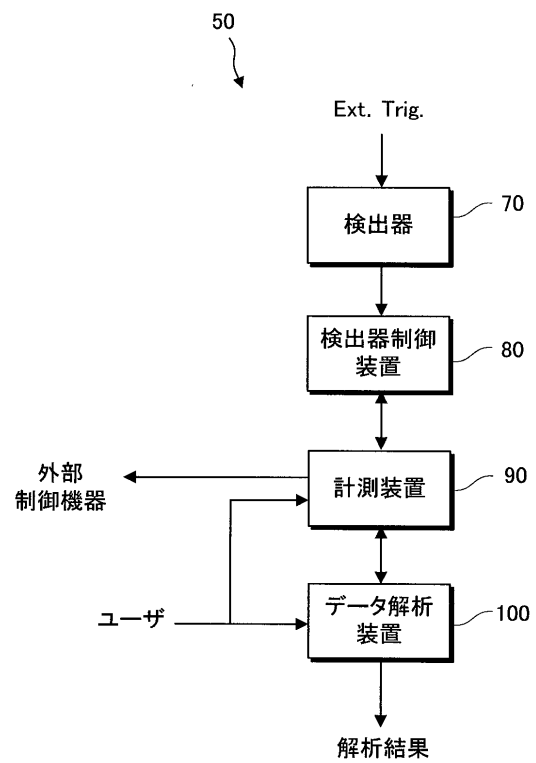
【図7】



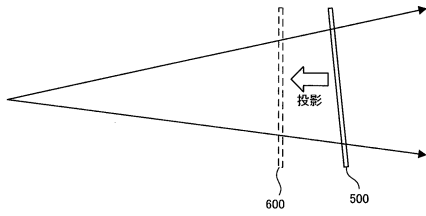
【図8】



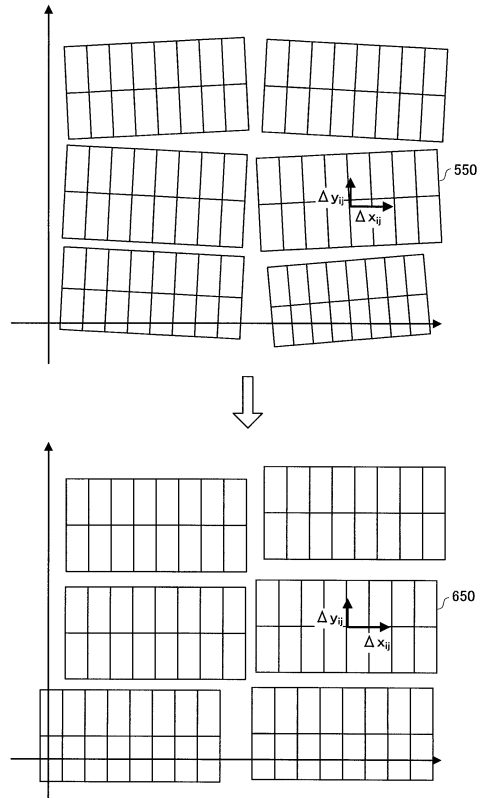
【図9】



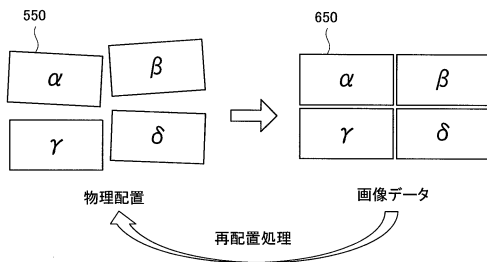
【図 10】



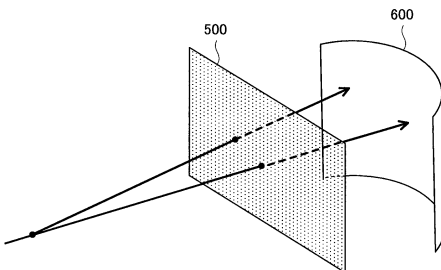
【図 11】



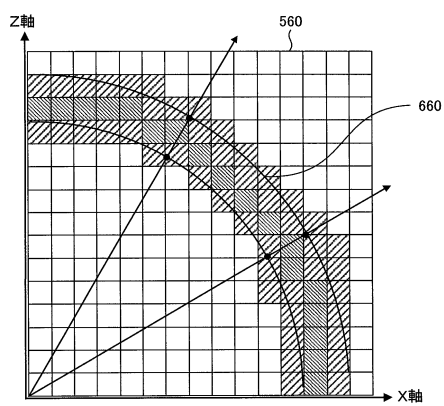
【図 12】



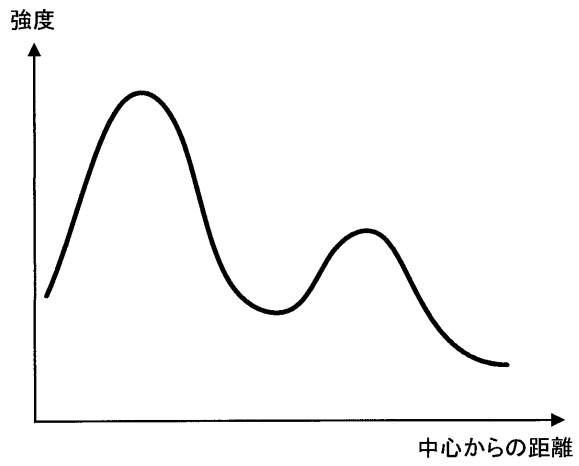
【図 13】



【図 14】



【図 15】



フロントページの続き

- (72)発明者 梶 芳 功系兆
東京都昭島市松原町3丁目9番12号 株式会社リガク内
- (72)発明者 西 邦夫
東京都昭島市松原町3丁目9番12号 株式会社リガク内

審査官 田中 洋介

- (56)参考文献 特開2010-184084(JP,A)
特開2008-257333(JP,A)
特開2005-334431(JP,A)

- (58)調査した分野(Int.Cl., DB名)
G01N 23/00 - 23/227
A61B 6/00 - 6/14
JSTPlus/JST7580(JDreamIII)