

(19)日本国特許庁(JP)

(12)公開特許公報(A)

(11)特許出願公開番号

特開2022-73083  
(P2022-73083A)

(43)公開日 令和4年5月17日(2022.5.17)

(51)Int.Cl.		F I				テーマコード(参考)
G 0 6 T	7/00	(2017.01)	G 0 6 T	7/00	2 5 0	2 G 0 0 1
G 0 1 N	23/2055	(2018.01)	G 0 1 N	23/2055		5 L 0 9 6
			G 0 6 T	7/00	6 1 0	

審査請求 未請求 請求項の数 11 O L (全 21 頁)

(21)出願番号	特願2020-182859(P2020-182859)	(71)出願人	301023238
(22)出願日	令和2年10月30日(2020.10.30)		国立研究開発法人物質・材料研究機構 茨城県つくば市千現一丁目2番地1
(出願人による申告)平成30年度、国立研究開発法人 科学技術振興機構、未来社会創造事業、「材料開発のバ ーチャルスクリーニングとハイスループット合成・評価 のワークフローの実証」委託研究開発、産業技術力強化 法第17条の適用を受ける特許出願		(71)出願人	899000068 学校法人早稲田大学 東京都新宿区戸塚町1丁目104番地
		(74)代理人	100218062 弁理士 小野 悠樹
		(74)代理人	100093230 弁理士 西澤 利夫
		(72)発明者	山下 晶洸 東京都新宿区戸塚町1丁目104番地 学 校法人早稲田大学内

最終頁に続く

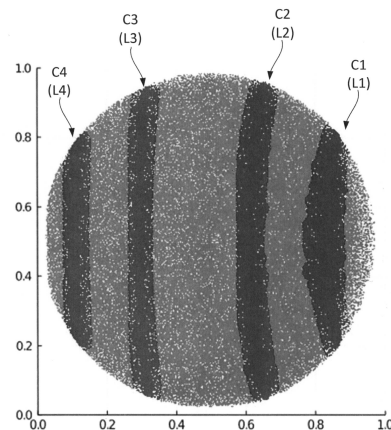
(54)【発明の名称】画像処理方法、画像処理装置、X線回折装置およびプログラム

(57)【要約】

【課題】平面画像から所望する領域を簡便な方法で分離する。

【解決手段】平面画像を構成する各画素に対応する位置に当該画素の画素値に応じた個数で座標平面に分布する複数の点に対して、密度に基づくクラスタリングを実行することで、前記複数の画素の各々についてクラスタに属するか否かを識別する画像処理方法。

【選択図】図6



## 【特許請求の範囲】

## 【請求項 1】

平面画像を構成する各画素に対応する位置に当該画素の画素値に応じた個数で座標平面に分布する複数の点に対して、密度に基づくクラスタリングを実行することで、前記複数の画素の各々についてクラスタに属するか否かを識別する

画像処理方法。

## 【請求項 2】

前記クラスタリングにおいては、DBSCANが利用され、  
前記複数の画素の各々について、当該画素に対応する点を中心として所定の半径で画定される範囲内に存在する点の個数と所定の閾値とを比較することで、当該画素が前記クラスタに属するか否かを識別し、

前記クラスタは、前記閾値以上の個数で存在する複数の点で形成される

請求項 1 の画像処理方法。

## 【請求項 3】

前記閾値は、前記複数の画素にわたる画素値の平均と前記範囲の面積との積に応じて設定される

請求項 2 の画像処理方法。

## 【請求項 4】

前記半径は、前記平面画像について許容される誤差に応じて設定される

請求項 2 または請求項 3 の画像処理方法。

## 【請求項 5】

前記半径と、前記クラスタを形成する複数の点の個数とは、前記座標平面に対するOPTICSの結果に応じて設定される

請求項 2 の画像処理方法。

## 【請求項 6】

前記平面画像は、対象物で回折されたX線の強度の分布を表す回折画像である

請求項 1 から請求項 5 の何れかの画像処理方法。

## 【請求項 7】

前記複数の画素のうち前記クラスタに対応する領域について積分をすることで、回折チャートを作成する

請求項 6 の画像処理方法。

## 【請求項 8】

前記平面画像には、前記複数の画素の各々について、当該画素の画素値から 1 画素について想定され得るノイズの期待値を引いた値に応じた個数の点を分布させる

請求項 1 から請求項 7 の何れかの画像処理方法。

## 【請求項 9】

平面画像を構成する各画素に対応する位置に当該画素の画素値に応じた個数で座標平面に分布する複数の点に対して、密度に基づくクラスタリングを実行することで、前記複数の画素の各々についてクラスタに属するか否かを識別する分類部を具備する

画像処理装置。

## 【請求項 10】

対象物で回折されたX線を検出するX線検出装置と、

前記検出されたX線の強度の分布を表す回折画像を生成する画像生成部と、

前記回折画像を構成する各画素に対応する位置に当該画素の画素値に応じた個数で座標平面に分布する複数の点に対して、密度に基づくクラスタリングを実行することで、前記複数の画素の各々についてクラスタに属するか否かを識別する分類部と、

前記複数の画素のうち前記クラスタに対応する領域について積分をすることで、回折チャートを作成する処理部と

を具備するX線回折装置。

## 【請求項 11】

10

20

30

40

50

平面画像を構成する各画素に対応する位置に当該画素の画素値に応じた個数で座標平面に分布する複数の点に対して、密度に基づくクラスタリングを実行することで、前記複数の画素の各々についてクラスタに属するか否かを識別する分類部としてコンピュータシステムを機能させるプログラム。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、各種の画像を処理する技術に関する。

【背景技術】

【0002】

画像から目的となる領域を分離する技術が従来から提案されている。例えば、非特許文献1には、回折画像から回折像を表す領域とノイズを表す領域とを分離する技術が開示されている。具体的には、学習済みモデル（畳み込みニューラルネットワーク）を利用して回折像を表す領域とノイズを表す領域とが分離される。

【先行技術文献】

【非特許文献】

【0003】

【非特許文献1】 Dipendra Jha, 他6名, “Peak Area Detection Network for Directly Learning Phase Regions from Raw X-ray Diffraction Patterns”

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0004】

しかし、非特許文献1の技術では、学習済みモデルを生成するにあたり、回折像と背景ノイズとを分離した回折画像に関する教師データ（学習用データ）を大量に準備する必要がある手間がかかるという問題がある。以上の事情を考慮して、本発明では、平面画像から所望する領域を簡便な方法で分離することを目的とする。

【課題を解決するための手段】

【0005】

上記の課題を解決するため、本発明の画像処理方法は、平面画像を構成する各画素に対応する位置に当該画素の画素値に応じた個数で座標平面に分布する複数の点に対して、密度に基づくクラスタリングを実行することで、前記複数の画素の各々についてクラスタに属するか否かを識別する。

【発明の効果】

【0006】

本発明の画像処理方法によれば、大量の学習用データを必要とすることなく、画素値が高い画素が密に存在する部分（所望する領域）をクラスタとして分離することができる。すなわち、平面画像から所望する領域を簡便な方法で分離することが可能である。

【図面の簡単な説明】

【0007】

【図1】 第1実施形態に係るX線回折装置の構成を例示するブロック図である。

【図2】 第1実施形態に係る制御装置の機能を例示するブロック図である。

【図3】 回折画像を示す図である。

【図4】 比較例に係る回折チャートを示す図である。

【図5】 第1実施形態に係る回折画像に対応する座標平面を示す図である。

【図6】 第1実施形態に係るクラスタリング後の座標平面を示す図である。

【図7】 第1実施形態に係る座標平面に対するOPTICSの結果（Reachability Plot）を示す図である。

【図8】 第1実施形態に係るクラスタ領域についての積分の結果を示す図である。

【図9】 第1実施形態に係る回折チャートを示す図である。

【図10】 第1実施形態に係る制御装置が実行する処理のフローチャートである。

【図 1 1】第 3 実施形態に係るクラスタリング後の回折画像を示す図である。

【図 1 2】第 3 実施形態に係る回折チャートを示す図である。

【図 1 3】第 3 実施形態に係る回折チャート（背景ノイズの除去後）を示す図である。

【発明を実施するための形態】

【0008】

#### ＜第 1 実施形態＞

図 1 は、本発明の第 1 実施形態に係る X 線回折装置 50 の構成を例示するブロック図である。X 線回折装置 50 は、対象物で回折される X 線を観測することで、当該対象物の結晶の状態（例えば結晶構造や結晶化の度合い）を解析する装置である。図 1 に例示される通り、X 線回折装置 50 は、X 線検出装置 100 と処理装置 200 とを具備する。

10

【0009】

X 線検出装置 100 は、対象物で回折される X 線を検出可能な機器である。X 線検出装置 100 には、公知の任意の機器が採用される。例えば、X 線検出装置 100 は、照射部 11 と検出部 12 とを含む。照射部 11 は、対象物に入射角  $\theta$  で X 線を照射する照射機器である。

【0010】

検出部 12 は、対象物に照射された X 線のうち、当該対象物で回折された X 線を検出する検出機器である。第 1 実施形態では、X 線を検出する検出面を有する 2 次元検出器が検出部 12 として利用される。検出面は、結晶面の傾き  $\chi$  を表す軸と回折角  $2\theta$  を表す軸とが張る座標平面に対応する。例えば、検出面には位置（座標）毎に X 線を検出可能な検出素子が配置される。具体的には、検出部 12 は、検出面における位置毎に、当該位置で検出された X 線の強度を表す信号（以下「検出信号」という）S を生成する。すなわち、検出信号 S は、回折角  $2\theta$  と結晶面の傾き  $\chi$  との組み合わせ毎に検出された X 線の強度を表す信号である。

20

【0011】

処理装置 200 は、X 線検出装置 100 が生成した検出信号 S から対象物の結晶の状態を解析するための機器である。第 1 実施形態の処理装置 200 は、制御装置 21 と入力装置 22 と表示装置 23 と記憶装置 24 とを具備するコンピュータシステムで実現される。例えばパーソナルコンピュータ等の情報端末が処理装置 200 として利用される。

【0012】

入力装置 22 は、利用者による操作を受付ける。例えば利用者が操作する操作子等が入力装置 22 として利用される。表示装置 23 は、各種の情報を表示する。例えば、液晶ディスプレイ等が表示装置 23 として例示される。

30

【0013】

制御装置 21 は、例えば CPU (Central Processing Unit) 等の単数または複数の処理回路で構成され、処理装置 200 の各要素を統括的に制御する。記憶装置 24 は、例えば磁気記録媒体または半導体記録媒体等の公知の記録媒体で構成された単数または複数のメモリであり、制御装置 21 が実行するプログラムと制御装置 21 が使用する各種のデータとを記憶する。

【0014】

図 2 は、記憶装置 24 に記憶されたプログラムを制御装置 21 が実行することで実現される機能を例示するブロック図である。図 2 に例示される通り、第 1 実施形態の制御装置 21 は、画像生成部 211 とチャート作成部 213 とを実現する。

40

【0015】

画像生成部 211 は、X 線検出装置 100 が生成した検出信号 S から回折画像 G（「平面画像」の例示）を生成する。図 3 は、画像生成部 211 が生成した回折画像 G の一例である。回折画像 G は、複数の画素で構成される。回折画像 G は、検出面に対応する。すなわち、回折画像 G の各画素の位置は、結晶面の傾き  $\chi$  を表す軸と回折角  $2\theta$  を表す軸とが張る座標平面内の各座標に対応する。各画素には、検出面における当該画素に対応する位置で検出された検出信号 S が表す X 線の強度に応じた画素値に設定される。各画素の画素値

50

はX線の強度に比例する。なお、検出信号Sは、回折画像Gを構成する複数の画素毎に生成されるとも換言できる。

#### 【0016】

回折画像Gには、対象物の結晶の状態を表す回折像が含まれる。例えば、局所的に明るい部分（以下「回折線」という）Lにより回折像が構成される。図3では、4つの弧状の回折線L（L1-L4）により回折像が構成される場合を例示する。回折像は、画素値が高い画素が密に存在する部分である。一方で、回折画像Gのうち回折像以外の部分は背景ノイズが含まれる部分である。背景ノイズは、例えば迷光やX線検出装置100に起因するノイズである。したがって、回折画像G以外の部分は、画素値が高い画素が疎密な部分（すなわち画素値が低い画素が密な部分）であるとも換言できる。

10

#### 【0017】

回折画像Gは回折チャートの生成に利用される。回折チャートは、回折角 $2\theta$ 毎にX線の強度を表したグラフである。ここで、回折画像Gの全体（具体的には複数の回折線Lを全て含むように指定された1つの領域）から回折チャートを生成する構成（以下「比較例1」という）を想定する。すなわち、比較例1では、回折像に加えて回折像以外の部分（すなわち背景ノイズを表す部分）も含む領域から回折チャートが生成される。具体的には、回折画像Gの全体について、所定の軸（例えば結晶面の傾き $\chi$ を表す軸）で積分することで、回折チャートが作成される。図4は、比較例1により生成された回折チャートが示されている。図4の回折チャートには、回折像を表す複数のピーク（以下「回折ピーク」という）P1-P4と、背景ノイズを表す部分とが含まれる。各回折ピークPは、1個の回折線Lに対応する。

20

#### 【0018】

回折ピークP（例えばピーク位置および半値幅）から対象物の結晶の状態が特定される。しかし、背景ノイズが含まれると、回折ピークPを正確に特定できない。したがって、対象物の結晶の状態を高精度に推定できないという問題がある。以上の事情を考慮して、本発明では、画像生成部211が生成した回折画像Gから背景ノイズの影響を除去した後に回折チャートを作成する。

#### 【0019】

チャート作成部213は、画像生成部211が生成した回折画像Gから回折チャートを作成する。第1実施形態のチャート作成部213は、座標生成部311と分類部313と処理部315とを含む。座標生成部311および分類部313は、回折画像Gから回折像と回折像以外の部分とを分離する要素である。処理部315は、分離された回折像から回折チャートを作成する要素である。

30

#### 【0020】

具体的には、座標生成部311は、回折画像Gに対応する座標平面（「回折座標平面」という）を生成する。図5は、回折座標平面の一例である。回折座標平面は、回折角 $2\theta$ に対応する軸と結晶面の傾き $\chi$ に対応する軸とで張る座標平面である。具体的には、座標生成部311は、各画素に対応する位置に当該画素の画素値（すなわち検出信号Sが表すX線の強度）に応じた個数で点が分布するように回折座標平面を生成する。例えば、画素値が10である画素については、当該画素に対応する位置に10個の点が登録される。以上の説明から理解される通り、回折座標平面には、各画素に対応する位置に当該画素の画素値に応じた密度で点が配置される。なお、回折画像Gおよび回折座標平面は記憶装置24に記憶される。

40

#### 【0021】

分類部313は、回折画像Gを構成する複数の画素の各々についてクラスタに属するか否かを識別する。具体的には、回折座標平面に分布する複数の点に対して、密度に基づくクラスタリングを実行することで、各画素がクラスタに属するか否かが識別される。例えば、DBSCAN（Density-based spatial clustering of applications with noise）が密度に基づくクラスタリングとして好適に利用される。DBSCANは、複数の点の集合について密に存在する領域をクラスタとして特定する。複数の点の集合のうちクラスタ以

50

外の領域は点が疎密に存在する領域である。すなわち、DBSCANは、複数の点の集合を密な領域と疎密な領域とに分離する手法であるとも換言できる。なお、DBSCANではクラスタ数を事前に設定することは不要である。

#### 【0022】

第1実施形態におけるDBSCANを利用したクラスタリングは、以下の通りである。複数の画素の各々について、当該画素に対応する点から所定の半径（以下「探索距離」という）で画定される領域（以下「探索範囲」という）が設定される。すなわち、画素毎に探索範囲が設定されるとも換言できる。そして、探索領域内に存在する点の個数と、所定の閾値（以下「最小近接点数」という）とが比較される。そして、コア点、到達可能点および外れ値の何れかに各点が分類される。なお、最小近接点数は、密な領域を形成するのに必要となる点の最小値である。

10

#### 【0023】

コア点 : 探索範囲内に最小近接点数を上回る点が存在する。  
到達可能点 : 探索範囲内に存在する点は最小近接点数を下回るが、探索範囲内にコア点が存在する。  
外れ値 : 探索範囲内に存在する点も最小近接点数を下回り、かつ、探索範囲内にコア点が存在しない。

#### 【0024】

コア点を中心とした探索範囲内に存在する点に対応する画素は、当該コア点に対応する画素と同じクラスタ（本発明における「クラスタ」の例示）に属する。到達可能点に対応する画素は、当該到達可能点に存在するコア点に対応する画素と同じクラスタ（本発明における「クラスタ」の例示）に属する。一方で、外れ値に対応する画素は、クラスタには属さない。以上の処理により、全ての画素についてクラスタに属するか否かが識別されるまで、回折座標平面内の全ての画素に対応する点について分類が繰り返し実行される。

20

#### 【0025】

なお、実際には、DBSCANでは、外れ値に対応する画素は、自身のみが所属するクラスタとして識別される。すなわち、全ての画素が何らかのクラスタに分類される。そこで、外れ値に対応する画素が所属するクラスタ（すなわち背景ノイズを表すクラスタ）は、目的となるクラスタではないから、処理の対称から除外する。具体的には、所定のクラスタサイズ（以下「最小クラスタサイズ」という）が設定され、回折座標平面における複数のクラスタのうち最小クラスタサイズを下回るクラスタ（すなわちノイズを表すクラスタ）については処理の対称から除外する。なお、クラスタサイズは、クラスタに所属する点の個数である。以上の説明から理解される通り、最小クラスタサイズ以上の個数で存在する複数の点で形成される1以上のクラスタ（本発明における「クラスタ」の例示）が抽出される。探索範囲と最小近接点数（「閾値」の例示）と最小クラスタサイズとの設定方法については後述する。

30

#### 【0026】

以上の説明から理解される通り、各画素に画素値（検出信号Sの強度）に応じた点の個数を設定することで、複数の画素を密度に基づいてクラスタリングすることが可能になる。

#### 【0027】

図6は、クラスタリング後の回折座標平面である。図6における濃色の部分がクラスタC（最小クラスタサイズ以上のクラスタ）に対応する。図6では、回折画像Gの全ての画素について複数（4個）のクラスタC1-C4が形成される場合を例示する。回折画像Gのうち各クラスタCは、画素値が高い画素が密に存在する部分である。すなわち、各クラスタCは1個の回折線L（すなわち回折ピークP）に相当する。回折画像Gにおいて形成された複数のクラスタC1-C4の集合が回折像に相当する。

40

#### 【0028】

一方で、回折画像GのうちクラスタC以外の領域（以下「非目的領域」）は、画素値が高い画素が疎密な部分（すなわちクラスタCと比較して画素値が低い部分）である。図6における淡色の部分が非目的領域に対応する。非目的領域は、背景ノイズを表す部分である

50

とも換言できる。以上の説明から理解される通り、分類部 313 は、回折画像 G から、画素値が高い画素が密に存在する部分（クラスタ）と、画素値が高い画素が疎密な部分（非目的領域）とに分離する要素である。したがって、回折画像 G から回折像を表す部分と背景ノイズを表す部分とが分離される。

#### 【0029】

DBSCANにおいて使用される探索距離、最小近接点数および最小クラスタサイズの具体的な設定方法について詳述する。例えば、設定方法 1 および設定方法 2 が例示される。

#### 【0030】

##### <設定方法 1>

設定方法 1 は、回折画像 G における回折像が明確に確認できる場合に採用され得る。例えば、回折像と背景ノイズとの強度差（画素値の差）が十分に大きい場合に適用される。

#### 【0031】

##### (1) 探索距離

探索距離は、回折画像 G について許容される誤差（許容誤差）に応じて設定される。なお、許容誤差は、回折画像 G の全体に対して回折角  $2\theta$  について許容される誤差である。許容誤差は、例えば X 線検出装置 100 の仕様や測定条件等に応じて利用者により適宜に決定される。具体的には、許容誤差に対応するピクセル長（画素の個数）が探索距離として設定される。探索距離は、「許容誤差 / 1 画素あたりの分解能」で算出される。許容誤差が  $0.5^\circ$  であり、1 画素あたりの分解能が  $0.0193^\circ$  である場合を想定する。以上の場合には、 $0.5^\circ / 0.0193^\circ = 26$  が探索距離として特定される。

#### 【0032】

##### (2) 最小近接点数

最小近接点数は、回折画像 G の画素値に応じて設定される。例えば、回折画像 G における 1 画素あたりの画素値の平均値を算出する。そして、1 画素あたりの平均値と探索領域の面積（探索距離 × 探索距離 ×  $\pi$ ）との積が最小近接点数として特定される。

#### 【0033】

##### (3) 最小クラスタサイズ

(2) で特定した最小近接点数に応じた値が最小クラスタサイズとして設定される。典型的には、最小近接点数と同等の値が最小クラスタサイズとして設定される。

#### 【0034】

##### <設定方法 2>

設定方法 2 は、回折画像 G における回折像が不明確な場合に採用され得る。例えば、回折像と背景ノイズとの強度差（画素値の差）が小さい場合に設定方法 2 が採用される。

#### 【0035】

設定方法 2 では、回折座標平面に分布する複数の点に対して OPTICS (Ordering Points To Identify the Clustering Structure) を実行する。OPTICS は、DBSCAN と同様に、密度に基づくクラスタリングの手法である。OPTICS では、DBSCAN で使用される探索距離および最小近接点数について様々な値を設定した際に、どのようにクラスタが形成されるのかを把握することができる。具体的には、OPTICS では、各点についてコア点になるために必要な最小距離が特定される。OPTICS においても、DBSCAN と同様に、探索距離および最小近接点数が使用される。

#### 【0036】

OPTICS において設定される探索距離は任意である。例えば、上述した<設定方法 1>における (1) 探索距離と同程度の値や、回折画像の回折線における回折角  $2\theta$  を表す軸方向における大きさと同程度の値が OPTICS の探索距離として設定される。ただし、計算コストを考慮しない場合には、回折画像の大きさと同程度の値や無限大を探索距離としてもよい。なお、OPTICS における探索距離は、DBSCAN の探索距離として検討する距離の上限であるとも換言できる。

#### 【0037】

OPTICS において設定される最小近接点数は、DBSCAN において設定を予定して

いる最小近接点数と同様の値である。OPTICSの最小近接点数は、2以上の値であれば任意である。例えば、上述した＜設定方法1＞における(2)最小近接点数と同程度の値や $1/4 \sim 1/2$ 程度の値がOPTICSの最小近接点数として設定される。

#### 【0038】

図7は、回折座標平面に対するOPTICSの結果を表すグラフ(Reachability Plot)である。縦軸のReachabilityはコア点になるために必要な最小距離を表す。一方で、横軸のcluster-orderingは各点を識別するための識別子(点の位置を表す情報)を表す。Reachability Plotでは、複数のピークと、ピーク間に位置する谷の部分(以下「谷部分」という)Kが存在する。谷部分K(Reachabilityの変位が少ない部分)は、回折座標平面において点が密な領域(すなわち回折画像Gのクラスタに相当する領域)に対応する。したがって、回折像における回折線Lと同様の個数の谷部分Kが存在し得る。図7では、4つの谷部分K1-K4が存在する。一方で、ピークの部分は、回折座標平面において点が疎密な領域(すなわち非目的領域)に対応する。

#### 【0039】

##### (1) 探索距離

探索距離は、Reachability Plotにおける谷部分Kの最小距離に応じて設定される。複数の谷部分のうち最小距離が最も大きい谷部分K2の最小距離に応じて探索距離が設定される。谷部分K2は、例えば、各谷部分Kについて1点あたりの最小距離の平均値を算出し、複数の谷部分K1-K4にわたり当該平均値を比較することで、特定される。または、利用者が目視でReachability Plotから谷部分K2を特定してもよい。そして、例えば谷部分K2の最小距離(例えば1点あたりの平均値)を少し上回る値が探索距離として設定される。または、利用者が目視で谷部分K2における最小距離を確認することで探索距離を設定してもよい。最小距離が最も大きい谷部分K2(すなわち複数の谷部分Kのうち最もクラスタを形成しにくい谷部分K2)の最小距離に応じて探索距離を設定することで、回折画像Gを構成する全ての回折線Lを分離することができる。なお、最小距離が最も大きい谷部分Kを特定する方法や、谷部分Kを利用して探索距離を特定する方法は以上の例示に限定されない。

#### 【0040】

##### (2) 最小クラスタサイズ

最小クラスタサイズは、Reachability Plotにおける谷部分Kの幅(横軸方向の長さ)に応じて設定される。なお、横軸方向の長さは点の個数と等しい。具体的には、複数の谷部分K1-K4のうち幅が最も小さい谷部分K1の幅に応じて最小クラスタサイズが設定される。例えば、谷部分K1の幅と等しい値に最小クラスタサイズが設定される。なお、Reachability Plotにおける谷部分Kの特定には、公知の画像解析技術が任意に利用される。

#### 【0041】

以上の説明から理解される通り、設定方法2では、探索距離と最小クラスタサイズとがOPTICSの結果に応じて設定される。なお、設定方法2では、OPTICSで使用した最小近接点数と同様の値がDBSCANの最小近接点数として使用される。

#### 【0042】

設定方法1および設定方法2の何れを採用するかは、利用者が適宜に選択し得る。設定方法1では、探索距離と最小近接点数と最小クラスタサイズとを簡便に設定できるという利点がある。一方で、設定方法2では、回折像と背景ノイズとの強度差が小さい場合でも適切な探索距離および最小クラスタサイズを設定できるという利点がある。ただし、探索距離と最小近接点数と最小クラスタサイズとの設定方法は、設定方法1および設定方法2には限定されない。なお、設定方法1および設定方法2の双方において、最小クラスタサイズは、最小近接点数以上の値であれば任意である。

#### 【0043】

なお、探索距離と最小近接点数と最小クラスタサイズとは、クラスタリングの実行前に分類部313に対して設定される。例えば、利用者が入力装置22を操作して入力した値が、探索距離、最小近接点数および最小クラスタサイズとして分類部313に設定される。



また、探索距離と最小近接点数と最小クラスサイズとを特定する要素は、処理装置 200 に搭載してもよいし、処理装置 200 とは別個の装置に搭載してもよい。

#### 【0044】

処理部 315 は、回折チャートを生成する。具体的には、処理部 315 は、回折画像 G のうちクラスタ C に対応する領域（画素の集合）から回折チャートを生成する。すなわち、回折画像 G のうち非目的領域は回折チャートに加味されない。

#### 【0045】

まず、処理部 315 は、複数のクラスタ C1-C4 の各々について所望の軸（例えば結晶面の傾き  $\chi$  を表す軸）で積分する。図 8 は、各クラスタ C についての積分の結果 W が図示されている。なお、各クラスタ C の全体を積分の対象とすることは必須ではない。例えば、クラスタ C のうち利用者が設定する任意の範囲（例えばクラスタの広がりや検出部 12 の大きさに応じて設定された範囲）に対して積分を実行してもよい。

#### 【0046】

次に、処理部 315 は、各クラスタ C に対する積分の結果 W を所望の関数（例えばガウス関数やローレンツ関数）でフィッティングする。そして、フィッティングされた曲線状の回折ピーク P1-P4 が生成される。回折ピーク P を解析することでピーク位置および半値幅が特定される。そして、対象物の結晶の状態が推定できる。以上の説明から理解される通り、複数のクラスタ C1-C4 にそれぞれが対応する複数の回折ピーク P1-P4 が生成される。なお、クラスタ C から回折ピーク P1-P4 を生成する処理には公知の任意の技術が採用される。

#### 【0047】

そして、処理部 315 は、フィッティング後の複数の回折ピーク P1-P4 を統合することで回折チャートを作成する。図 9 は、処理部 315 が生成する回折チャートである。回折画像 G のうちクラスタ C のみを積分の対象としたから、図 4 の回折チャートと比較して、背景ノイズが除去された回折チャートが生成される。処理部 315 により作成された回折チャートは表示装置 23 に表示される。なお、以上の説明では、クラスタ C の個数が 4 個の場合を例示したが、クラスタ C の個数は回折画像に応じて変更され得る。

#### 【0048】

図 10 は、第 1 実施形態の制御装置 21 が実行する処理のフローチャートである。図 10 の処理は、例えば処理装置 200 に対する利用者からの指示に応じて開始される。まず、画像生成部 211 は、検出信号 S から回折画像 G を生成する（SA1）。座標生成部 311 は、回折画像 G に対応する回折座標平面を生成する（SA2）。具体的には、各画素に対応する位置に当該画素の画素値に応じた個数で点が分布する回折座標平面が生成される。なお、実際には、回折座標平面に対応する座標データベースが記憶装置 24 に記憶される。座標データベースは、座標毎に点の個数を登録するデータテーブルである。

#### 【0049】

分類部 313 は、回折画像 G を構成する複数の画素の各々についてクラスタに属するか否かを識別する（SA3）。具体的には、回折座標平面に分布する複数の点に対して、DBSCAN を利用したクラスタリングを実行することで、各画素がクラスタに属するか否かが識別される。そして、回折画像 G を構成する複数の画素に 1 以上のクラスタが形成される。DBSCAN に使用される探索距離と最小近接点数と最小クラスサイズとは、クラスタリングを実行する前に事前に設定される。探索距離と最小近接点数と最小クラスサイズとを特定する方法は、上述した通りである。

#### 【0050】

処理部 315 は、複数のクラスタ C の各々について所望の軸で積分する（SA4）。次に、処理部 315 は、各クラスタ C に対する積分の結果を所望の関数でフィッティングする（SA5）。すなわち、クラスタ C 毎に回折ピーク P が生成される。そして、処理部 315 は、フィッティング後の各回折ピーク P を統合することで、回折チャートを作成する（SA6）。

#### 【0051】

ここで、比較例1の構成では、上述した通り、背景ノイズが含まれた回折チャート（図4の回折チャート）が生成される。したがって、比較例1の構成では、回折ピークPのピーク位置および半値幅を特定する前に、回折チャートから背景ノイズを低減する処理が必要である。例えば回折チャートに対するリーベルト解析により背景ノイズが低減される。しかし、リーベルト解析の実行においては、利用者は、背景ノイズを低減するために経験則等に基づいて多くのパラメータを入力する必要がある。したがって、利用者にとって負担が大きく、回折チャートの作成に時間もかかるという問題がある。

【0052】

それに対して、第1実施形態の構成によれば、回折座標平面に分布する複数の点に対して密度に基づくクラスタリングを実行することで、回折画像Gの複数の画素の各々についてクラスタに属するか否かを識別する。そして、回折画像Gのうちクラスタについてのみ積分を実行することで、背景ノイズが除去された回折チャートが作成される。したがって、回折チャートが作成された後に利用者の入力による背景ノイズの除去は不要である。すなわち、比較例1の構成と比較して、利用者の負担が軽減され、短時間で回折チャートを作成できる。

【0053】

比較例1では、複数の回折ピークを含む積分結果に対してフィッティング（例えばガウス関数によるフィッティング）を実行することで回折チャートを生成する。したがって、回折チャートを作成するための処理負荷が大きいという問題がある。一方で、回折ピークP毎にフィッティングが実行される第1実施形態の構成によれば、比較例1と比較して、回折チャートを作成するための処理負荷が低減される。

【0054】

回折画像Gから回折像（クラスタC）と背景ノイズ（非目的領域）とを分離するために学習済モデルを利用する構成（以下「比較例2」という）では、大量の学習用データ（回折像と背景ノイズとを分離した回折画像Gに関する教師データ）を準備する必要がある。比較例2は、例えば非特許文献1に記載された技術である。それに対して、第1実施形態の構成では、大量の学習用データが不要である。すなわち、比較例2と比較して、回折画像Gから回折像と背景ノイズとを簡便な方法で分離することが可能である。

【0055】

例えば、2値化された回折画像（すなわち白と黒の2階調に変換された回折画像）に対してDBSCANを実行してクラスタを特定する構成（以下「比較例3」という）も提案されている。比較例3は、例えば「Christian Bodenstein, 他4名, “Automatic Object Detection Using DBSCAN for Counting Intoxicated Flies in the FLORIDA Assay”」に記載された技術である。しかし、比較例3の構成では、回折画像における画素値の変化を加味したクラスタリングを実行することはできない。特に、回折チャートを作成する場合、回折ピークPの広がり（すなわちクラスタ内での画素値の変化）が加味された回折像を分離する必要がある。第1実施形態では、回折画像Gの画素値に応じた個数の点を回折画像G平面に分布させるから、画素値の変化を加味したクラスタを形成できる。すなわち、回折ピークPの広がりを適切に反映した回折チャートを生成することができる。

【0056】

<第2実施形態>

本発明の第2実施形態を説明する。なお、以下に例示する各形態において作用または機能が第1実施形態と同様である要素については、第1実施形態の説明で使用した符号を流用して各々の詳細な説明を適宜に省略する。

【0057】

想定され得る背景ノイズの期待値（検出信号Sの強度）は、X線検出装置100の仕様や測定条件により事前に算出することが可能である。以上の事情を考慮して、第2実施形態では、回折画像Gに対してクラスタリングを実行する前に背景ノイズの影響を低減する構成を例示する。

【0058】

画像生成部 211 は、第 1 実施形態と同様に、検出信号 S から回折画像 G を生成する。第 2 実施形態の座標生成部 311 は、回折画像 G を構成する複数の画素の各々について、当該画素の画素値から 1 画素について想定され得る背景ノイズの期待値を引いた値に応じた個数の点を回折座標平面に分布させる。すなわち、1 画素における背景ノイズの期待値を下回る画素については回折座標平面には登録されない。一方で、1 画素における背景ノイズの期待値を上回る画素については、当該画素の画素値から背景ノイズの期待値を引いた値に応じた個数の点が回折座標平面に登録される。

【0059】

1 画素における背景ノイズの期待値は、例えば、1 画素あたりのノイズの検出頻度 [count/pixel/s] と露光時間 [s] との積である。なお、1 画素あたりのノイズの検出頻度は X 線検出装置 100 の仕様書を参照する。ただし、背景ノイズの期待値の算出方法は任意である。例えば、検出頻度 [count/pixel/s] と露光時間 [s] との積に所定の係数を乗じた値を 1 画素あたりの背景ノイズの期待値としてもよい。

【0060】

そして、分類部 313 は、第 1 実施形態と同様に、回折座標平面に分布する複数の点に対してクラスタリングを実行することで、回折画像 G の各画素をクラスタに属するか否かを識別する。したがって、回折画像 G からクラスタ C が特定される。処理部 315 は、第 1 実施形態と同様に、回折画像のうちクラスタ C から回折チャートを作成する。

【0061】

第 2 実施形態では、特に、各画素の画素値から背景ノイズの期待値を引いた値に応じた個数の点を回折座標平面に分布させるから、背景ノイズの影響が十分に低減された回折チャートを作成することが可能である。1 画素における背景ノイズの期待値を下回る画素については回折座標平面には登録されないから、回折座標平面を生成する処理負荷も低減される。

【0062】

なお、背景ノイズの期待値が十分に小さい場合には、第 2 実施形態の構成は採用しなくてもよい。背景ノイズの期待値が十分に小さい場合とは、例えば、例えば回折画像 G の複数の画素のうち画素値が最小（ただし 0 を除く）である画素の画素値よりも、背景ノイズの期待値が 1 桁以上小さい場合である。

【0063】

＜第 3 実施形態＞

第 1 実施形態では、分類部 313 が分離したクラスタ C が回折ピーク P に相当する場合を例示した。しかし、回折像と背景ノイズとの強度差が小さい場合には、図 11 に例示される通り、背景ノイズを表す画素の一部がクラスタ C3 として特定されることもある。以上の事情を考慮して、第 3 実施形態では、分類部 313 が分離した複数のクラスタ C のうち背景ノイズを表すクラスタ C3 を除外して回折チャートを作成する構成を例示する。

【0064】

以下、分類部 313 が分離したクラスタ C が背景ノイズを表すクラスタ C であるか否かを識別する方法を例示する。例えば、クラスタリングを実行した後の回折座標平面または回折画像 G を利用者が目視で確認することで、クラスタ C が背景ノイズを表すクラスタ C であるか否かを識別してもよい。

【0065】

または、制御装置 21 が、回折座標平面のうちクラスタ C に対応する範囲に存在する点の個数と、所定の閾値とを比較することで、当該クラスタ C が背景ノイズを表すクラスタ C であるか否かを識別してもよい。回折座標平面のうちクラスタ C に対応する範囲に存在する点の個数が所定の閾値を下回る場合には、当該クラスタ C が背景ノイズであると識別される。所定の閾値は、例えば DBSCAN で利用される最小近接点数に応じて設定される。具体的には、最小近接点数を上回る値が閾値として設定される。

【0066】

なお、分類部 313 が分離した複数のクラスタ C1-C3（背景ノイズを表すクラスタ C3 も

10

20

30

40

50

含む) について積分した後に、背景ノイズを除去してもよい。図12は、分類部313が分離した複数のクラスタC (図11に示される3つのクラスタ領域) について積分をした結果を表す。

【0067】

図12に例示される通り、複数のクラスタC1-C3に対する積分結果には、背景ノイズを表す部分 (楕円で囲まれた部分) と、各回折ピークPとが含有される。図12の積分結果から背景ノイズを表す部分における強度の平均値 (以下「ノイズ平均値」という) を算出する。そして、各回折ピークPからノイズ平均値を引くことで、クラスタとして分離された背景ノイズを除去する。図13は、背景ノイズを除去した後にフィッティングをした回折チャートである。図13に例示される通り、各回折ピークPから背景ノイズが低減されることが確認できた。なお、複数のクラスタC1-C3に対する積分結果から背景ノイズを表す部分を特定する方法は、任意である。例えば、利用者が目視で特定してもよいし、公知の画像解析技術により特定してもよい。

【0068】

なお、設定方法1で探索距離と最小近接点数と最小クラスタサイズとを設定してクラスタリングを実行した結果、背景ノイズを表すクラスタCが存在する場合には、適切な探索距離と最小近接点数と最小クラスタサイズとを再度設定した後にクラスタリングを実行してもよい。

【0069】

<変形例>

以上に例示した各形態は多様に変形され得る。具体的な変形の態様を以下に例示する。以下の例示から任意に選択された2以上の態様を適宜に併合することも可能である。

【0070】

(1) 前述の各形態では、密度に基づくクラスタリングとしてDBSCANを利用したが、密度に基づくクラスタリングの手法はDBSCANには限定されない。例えば、HDBSCAN (Hierarchical Density-Based Spatial Clustering) やDENCLUE (Density Based Clustering) を利用してもよい。公知のクラスタリング技術が任意に採用される。

【0071】

(2) 前述の各形態では、画素値が高い画素が密に存在する部分と、画素値が高い画素が疎密な部分とを回折画像Gから分離する構成を例示したが、処理の対象となる平面画像は回折画像Gには限定されない。例えば、指紋認証に使用される指紋を撮像した画像、X線を対象物に照射して撮像されたX線画像、または、CT (Computed Tomography) やMRI (Magnetic Resonance Imaging) により撮像された画像等の各種の平面画像に対して本発明を利用することが可能である。以上の説明から理解される通り、任意の平面画像が本発明の処理の対象となり得る。

【0072】

(3) 前述の各形態において、処理装置200の制御装置21の機能を複数の装置で実現してもよい。例えば、画像生成部211とチャート作成部213とを別個の装置に搭載してもよい。また、制御装置21が画像生成部211とチャート作成部213とは異なる機能も実現してもよい。なお、分類部313を搭載する装置が本発明に係る「画像処理装置」の例示である。

【0073】

(4) 前述の各形態に係る画像処理装置の機能は、各形態での例示の通り、CPU等の処理回路とプログラムとの協働により実現される。前述の各形態に係るプログラムは、コンピュータが読取可能な記録媒体に格納された形態で提供されてコンピュータにインストールされ得る。記録媒体は、例えば非一過性 (non-transitory) の記録媒体であり、CD-ROM等の光学式記録媒体 (光ディスク) が好例であるが、半導体記録媒体または磁気記録媒体等の公知の任意の形式の記録媒体も包含される。

【0074】

10

20

30

40

50

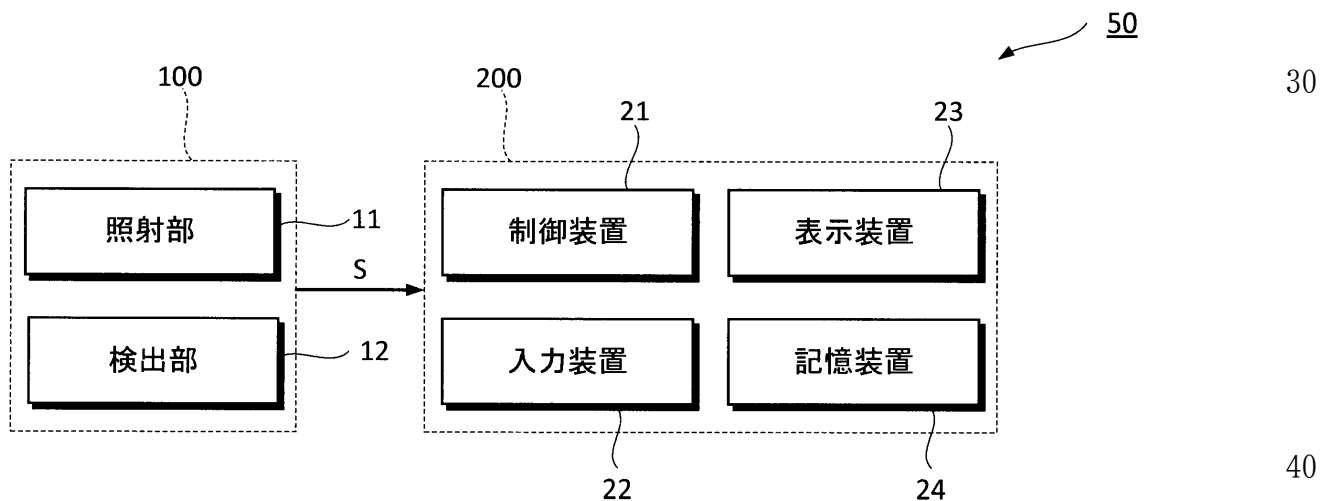
(5) 分類部 3 1 3 が行う処理は、平面画像を構成する各画素に対応する位置に当該画素の画素値に応じた個数で座標平面に分布する複数の点に対して、密度に基づくクラスタリングを実行することで、複数の画素の各々についてクラスタに属するか否かを識別する画像処理方法としても特定される。

【符号の説明】

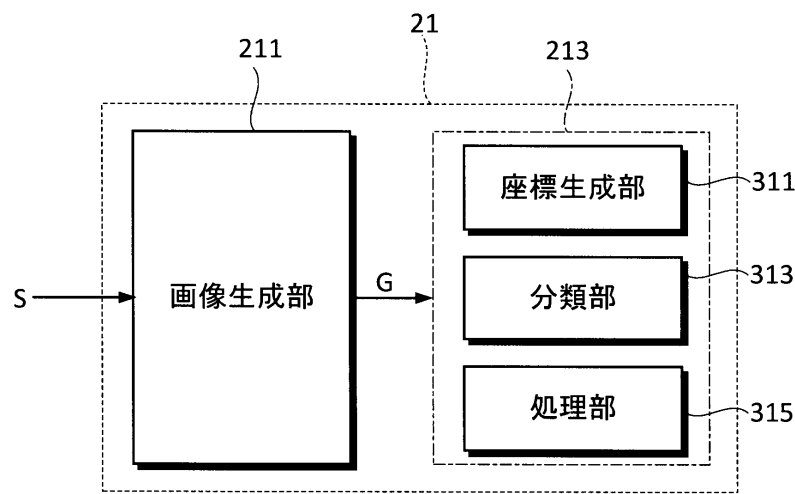
【0 0 7 5】

1 1 : 照射部  
 1 2 : 検出部  
 2 1 : 制御装置  
 2 2 : 入力装置  
 2 3 : 表示装置  
 2 4 : 記憶装置  
 5 0 : X線回折装置  
 1 0 0 : X線検出装置  
 2 0 0 : 処理装置  
 2 1 1 : 画像生成部  
 2 1 3 : チャート作成部  
 3 1 1 : 座標生成部  
 3 1 3 : 分類部  
 3 1 5 : 処理部  
 C : クラスタ  
 G : 回折画像  
 L : 回折線  
 P : 回折ピーク  
 S : 検出信号

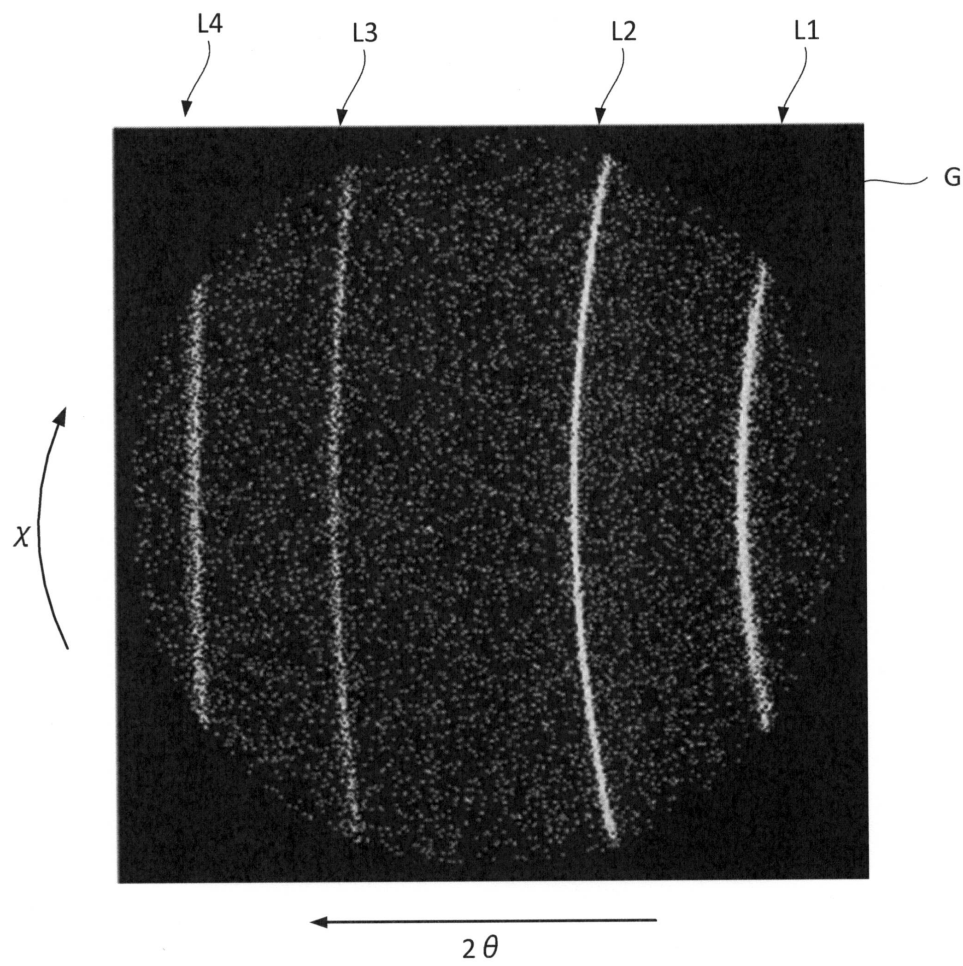
【図 1】



【図 2】



【図 3】



10

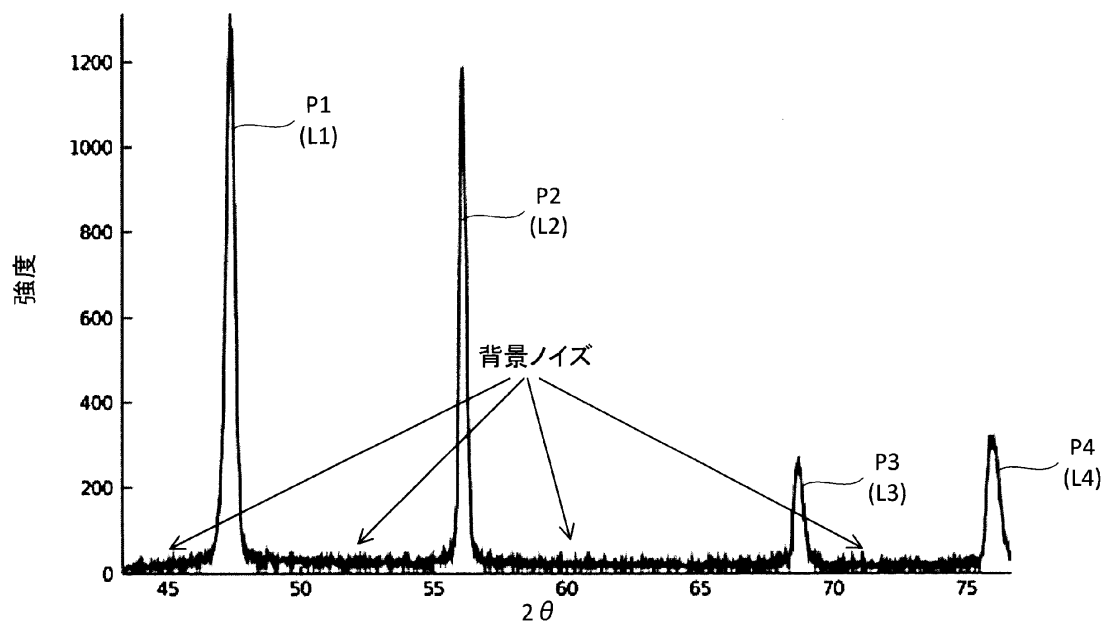
20

30

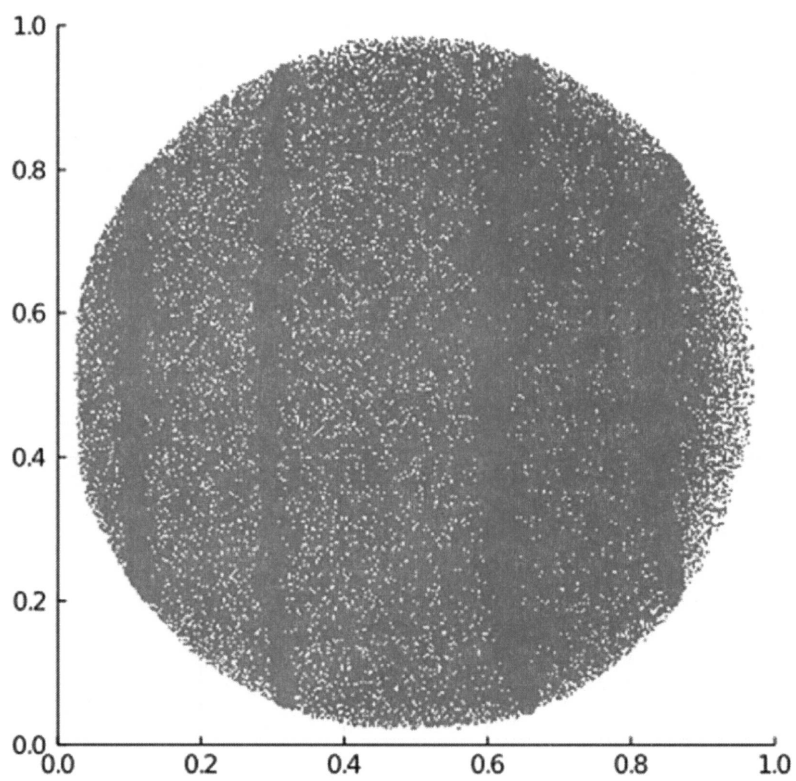
40

50

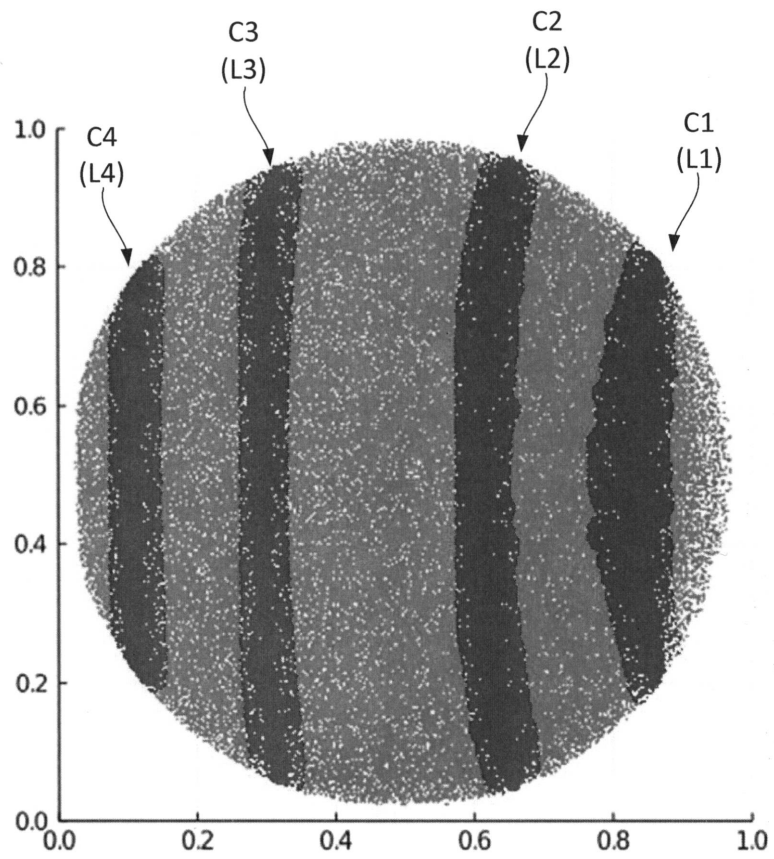
【図 4】



【図 5】

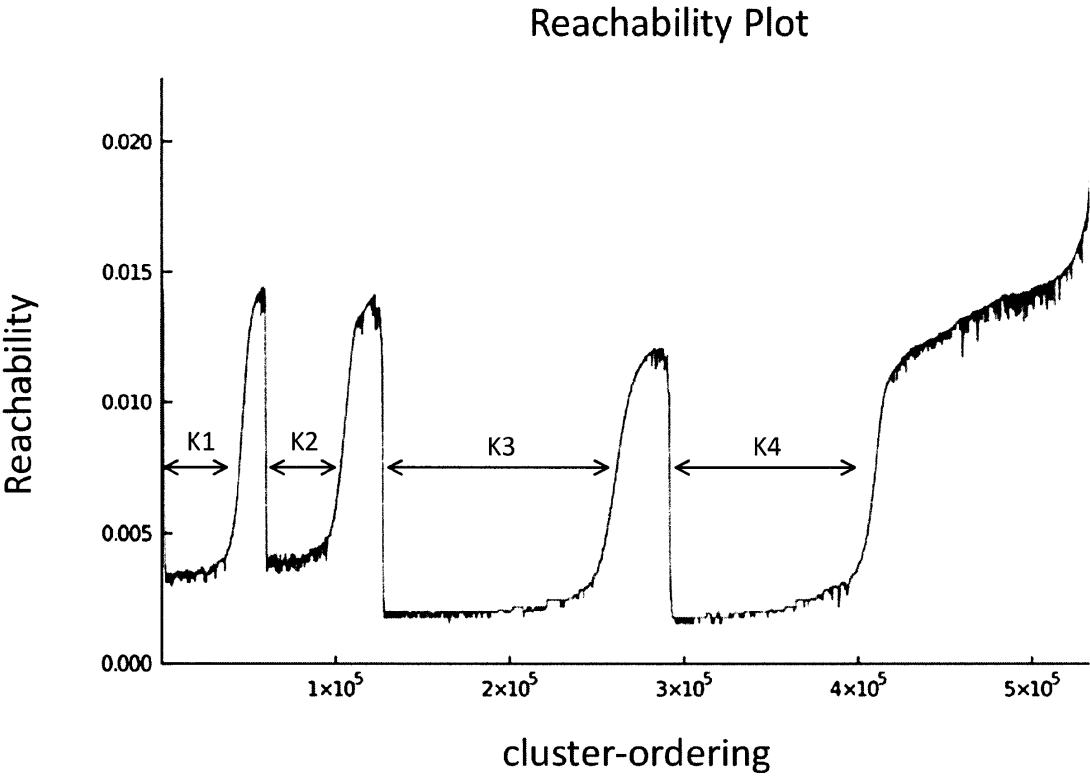


【図 6】

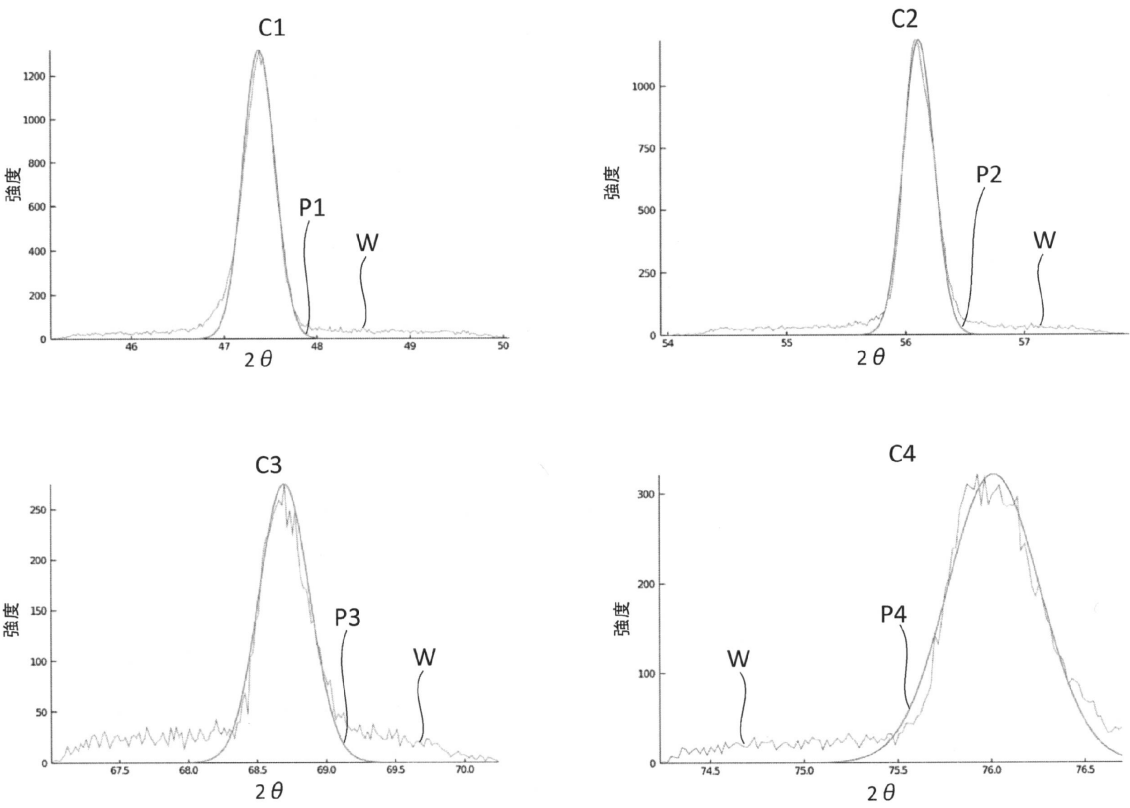




【図 7】



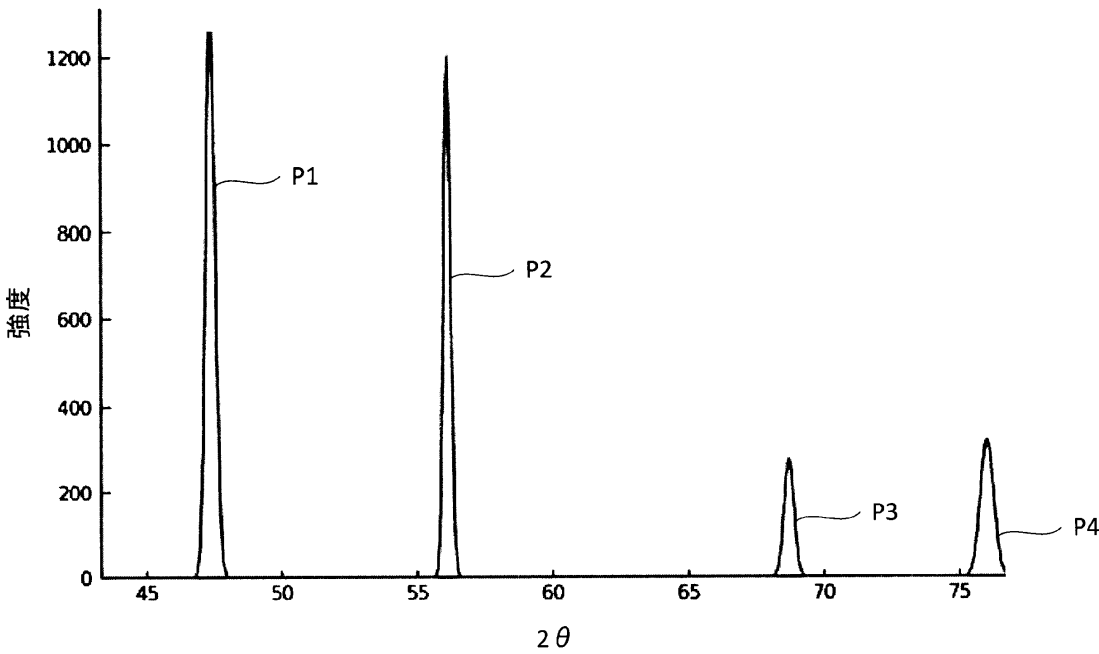
【図 8】



10

20

【図 9】

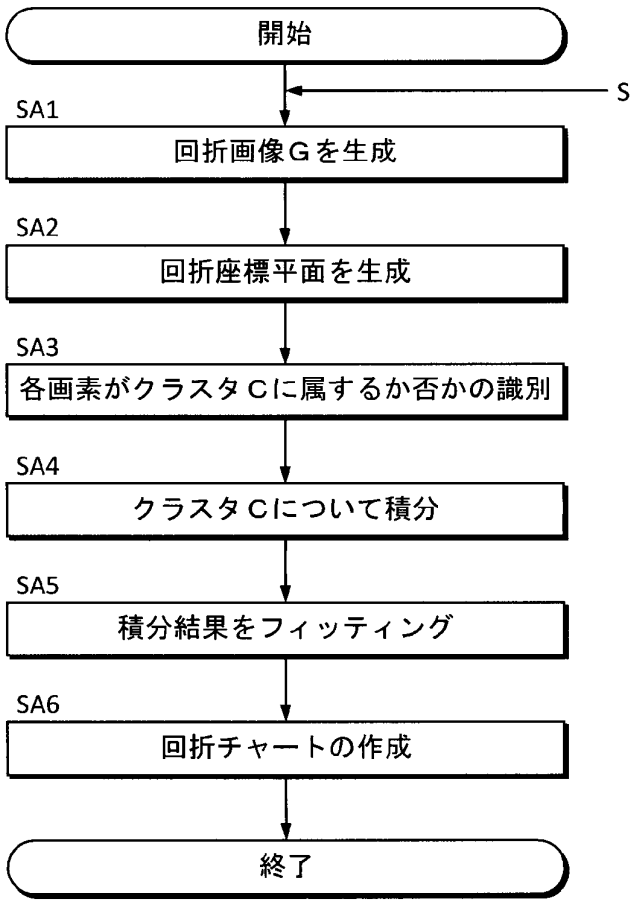


30

40

50

【図 10】



10

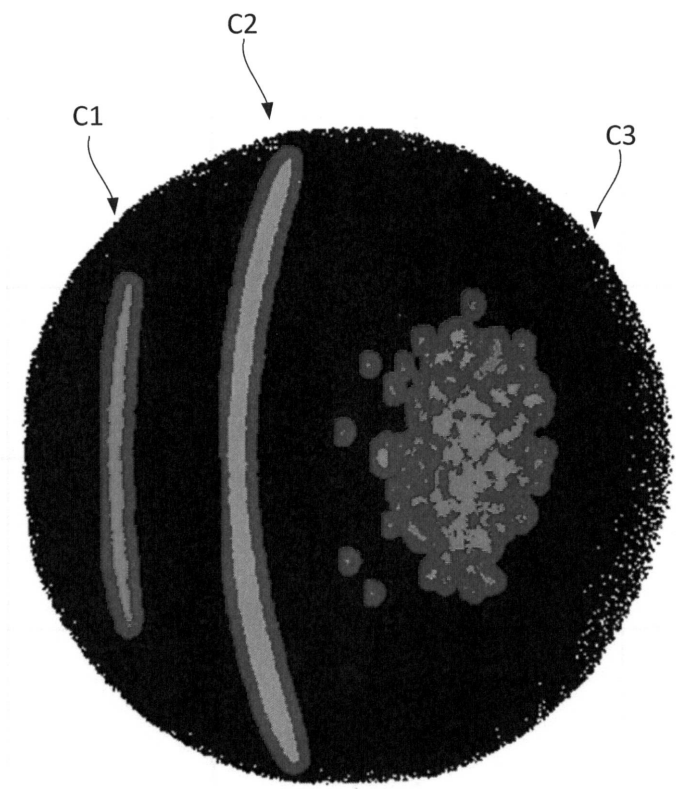
20

30

40

50

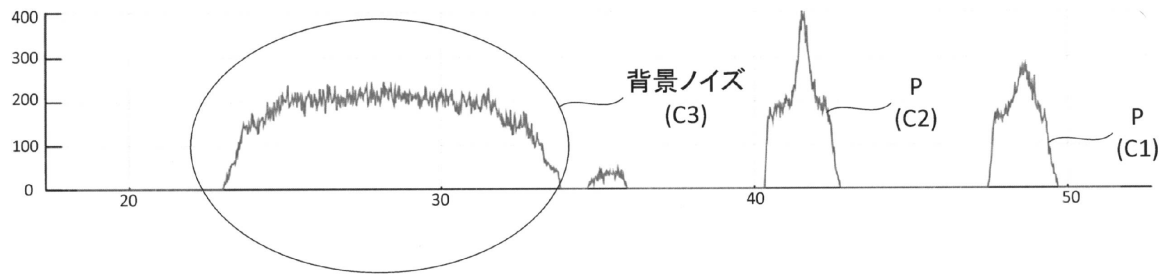
【図 1 1】



10

20

【図 1 2】



30

【図 1 3】



40

50

---

フロントページの続き

(72)発明者 朝日 透  
東京都新宿区戸塚町1丁目104番地 学校法人早稲田大学内

(72)発明者 長田 貴弘  
茨城県つくば市千現一丁目2番地1 国立研究開発法人物質・材料研究機構内

(72)発明者 柳生 進二郎  
茨城県つくば市千現一丁目2番地1 国立研究開発法人物質・材料研究機構内

(72)発明者 知京 豊裕  
茨城県つくば市千現一丁目2番地1 国立研究開発法人物質・材料研究機構内

Fターム(参考) 2G001 AA01 BA18 CA01 DA09 HA01 HA07 KA08  
5L096 BA08 BA18 EA05 EA26 FA32 FA59 FA64 FA66 FA67 FA69  
GA51 MA07