

## 四連装 PILATUS の較正と二次元データの一次元化 (2)

名古屋工業大学 先進セラミックス研究センター

井田隆

### 2. 座標変換

以下, PILATUS 検出器のピクセル座標  $(X, Y)$  と散乱ビームの回折角  $2\theta$ , 方位角  $\phi$  を関係づける形式について述べる。

#### 2-1 座標の定義と関係式

入射ビームの進行方向を  $+x$ , 回折計の奥行き方向を  $+y$ , 高さ方向を  $+z$  とし, 試料中心位置を原点とする直交座標 Cartesian coordinate 系  $(x, y, z)$  を考える。二次元検出素子受光面の中心の位置する角度を  $2\Theta$  と設定した時に, 二次元検出面上での位置を, 中心を原点として, 試料側から回折ビームの進行方向に向かって右方向を  $+\xi$ , 上方向を  $+\eta$  とする座標  $(\xi, \eta)$  で表す。

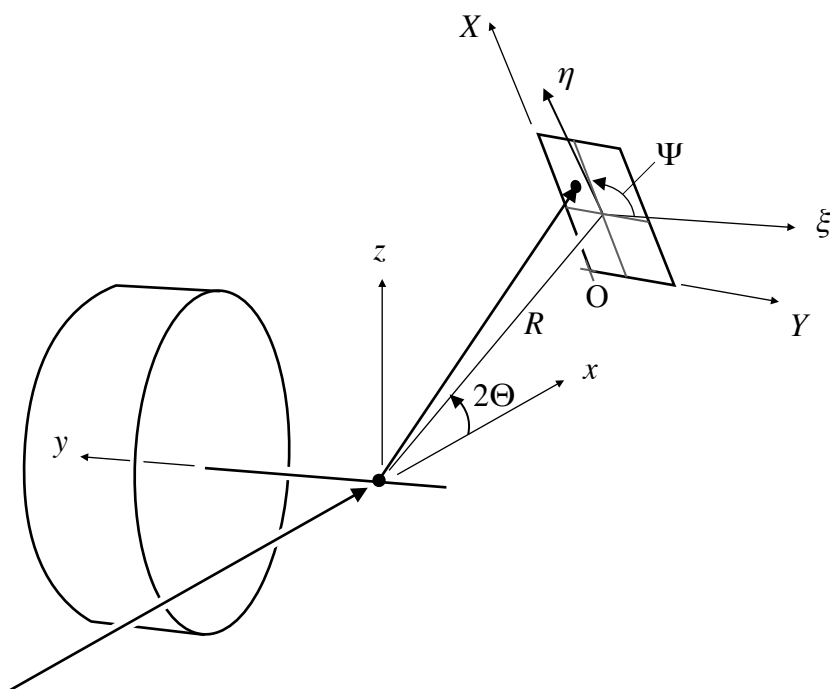


Fig. 2.1.1 Schematic illustration of the definition of coordinates.

Fig. 2.1.1 には表示していないが、 $2\Theta = 0^\circ$  のときの  $z$  軸周りの回転として振り角 shaking angle  $\Phi_p$  を導入し、引き続きゴニオメータ軸周りの回転に頷き角 nodding angle  $\Delta 2\Theta$  を含めて  $2\Theta$  と表現することとする。平面型検出器を使っている限り、方程式は二次形式になるので、二次方程式の解の公式を使って解けるはずであることは変わらない。二次元検出

面上の位置  $\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$  は、 $2\Theta = 0^\circ$  のときの位置：

$$\begin{pmatrix} \cos \Phi_p & -\sin \Phi_p & 0 \\ \sin \Phi_p & \cos \Phi_p & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R \\ -\xi \\ \eta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p \\ R \sin \Phi_p - \xi \cos \Phi_p \\ \eta \end{pmatrix}$$

を  $-y$  軸周りに回転させたものとする。二次元検出面上の位置を表す方程式は、

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos 2\Theta & 0 & -\sin 2\Theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin 2\Theta & 0 & \cos 2\Theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p \\ R \sin \Phi_p - \xi \cos \Phi_p \\ \eta \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} (R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p) \cos 2\Theta - \eta \sin 2\Theta \\ R \sin \Phi_p - \xi \cos \Phi_p \\ (R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p) \sin 2\Theta + \eta \cos 2\Theta \end{pmatrix} \quad (2.1.1)$$

と書ける。ただし、カメラ半径（検出面中心位置までの距離）を  $R$  とする。検出器のピクセル位置としては水平方向を  $\xi$  軸とし、 $2\Theta = 0^\circ$  のときにダイレクトビームの中心が当たる位置を原点とする。

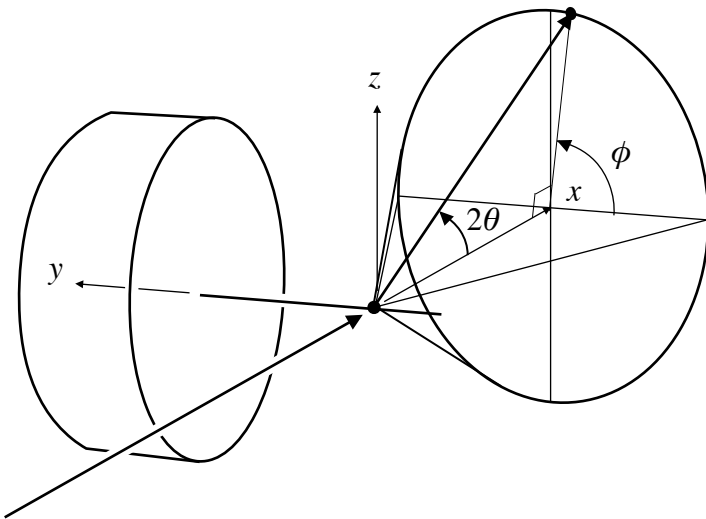


Fig. 2.1.2 Schematic illustration of the definition of coordinates (2).

回折角  $2\theta$ 、方位角  $\phi$  の回折ビームは半頂角  $2\theta$  の円錐面に沿って進行し、その進行方向は

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r \cos 2\theta \\ -r \sin 2\theta \cos \phi \\ r \sin 2\theta \sin \phi \end{pmatrix} \quad (2.1.2)$$

と表される。

式 (2.1.1), (2.1.2) から, ゴニオメータ角  $2\theta$  を変化させたとき, 回折ビームと検出面の交点の位置の変化を表す方程式は

$$\begin{cases} r \cos 2\theta = (R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p) \cos 2\Theta - \eta \sin 2\Theta \\ r \sin 2\theta \cos \phi = -R \sin \Phi_p + \xi \cos \Phi_p \\ r \sin 2\theta \sin \phi = (R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p) \sin 2\Theta + \eta \cos 2\Theta \end{cases} \quad (2.1.3)$$

となる。ただし, 各辺の二乗和をとれば,

$$\begin{aligned} r^2 &= \left[ (R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p) \cos 2\Theta - \eta \sin 2\Theta \right]^2 + (-R \sin \Phi_p + \xi \cos \Phi_p)^2 \\ &\quad + \left[ (R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p) \sin 2\Theta + \eta \cos 2\Theta \right]^2 \\ &= (R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p)^2 \cos^2 2\Theta - 2(R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p) \eta \cos 2\Theta \sin 2\Theta + \eta^2 \sin^2 2\Theta \\ &\quad + (-R \sin \Phi_p + \xi \cos \Phi_p)^2 \\ &\quad + (R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p)^2 \sin^2 2\Theta + 2(R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p) \eta \sin 2\Theta \cos 2\Theta + \eta^2 \cos^2 2\Theta \\ &= (R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p)^2 + \eta^2 + (-R \sin \Phi_p + \xi \cos \Phi_p)^2 \\ &= R^2 + \xi^2 + \eta^2 \end{aligned} \quad (2.1.4)$$

の関係から,

$$r = \sqrt{R^2 + \xi^2 + \eta^2} \quad (2.1.5)$$

の関係が常に成立することも確認できるだろう。このことを用いれば, 式 (2.1.3) の関係は,

$$\begin{cases} \sqrt{R^2 + \xi^2 + \eta^2} \cos 2\theta = (R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p) \cos 2\Theta - \eta \sin 2\Theta \\ \sqrt{R^2 + \xi^2 + \eta^2} \sin 2\theta \cos \phi = -R \sin \Phi_p + \xi \cos \Phi_p \\ \sqrt{R^2 + \xi^2 + \eta^2} \sin 2\theta \sin \phi = (R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p) \sin 2\Theta + \eta \cos 2\Theta \end{cases}$$

のうち, 二つの式で表現できる。この3つの式のうち1つ目の式として選択すべきなのは, 方位角  $\phi$  を含んでいない

$$\sqrt{R^2 + \xi^2 + \eta^2} \cos 2\theta = (R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p) \cos 2\Theta - \eta \sin 2\Theta \quad (2.1.6)$$

である。この方程式を解きさえすれば  $\xi, \eta$  から,  $2\theta$  を確定することができる。もう一つ残る二つの式のうちやや単純な

$$\sqrt{R^2 + \xi^2 + \eta^2} \sin 2\theta \cos \phi = -R \sin \Phi_p + \xi \cos \Phi_p \quad (2.1.7)$$

の方を選ぶ。

PILATUS 検出器の出力では、水平に設置した場合に正面から見て右方向を  $X$  ( $X=0, \dots, 486$ )、下方向を  $Y$  ( $Y=0, \dots, 194$ ) とする座標がとられる。これは大多数の二次元画像データの形式がとる順序と同じである（真空管型二次元表示デバイスが一次元情報を二次元に展開する際に自然に選択された方向性と思われる）。検出器の傾きは、正面から見て反時計回りの回転を正の角度  $\Psi$  で表せば、以下のように表現されるだろう。（ $\xi, \eta$ ）と原点位置  $(X_0, Y_0)$ 、任意のピクセル座標  $(X, Y)$  との間には、

$$\begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \Psi & -\sin \Psi \\ \sin \Psi & \cos \Psi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X - X_0 \\ Y_0 - Y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (X - X_0) \cos \Psi - (Y_0 - Y) \sin \Psi \\ (X - X_0) \sin \Psi + (Y_0 - Y) \cos \Psi \end{pmatrix} \quad (2.1.8)$$

$$\begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_0 \\ Y_0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \cos \Psi & \sin \Psi \\ \sin \Psi & -\cos \Psi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_0 + \xi \cos \Psi + \eta \sin \Psi \\ Y_0 + \xi \sin \Psi - \eta \cos \Psi \end{pmatrix} \quad (2.1.9)$$

の関係がある。

## 2-2 ピクセル座標 $X, Y$ からの回折角 $2\theta$ と方位角 $\phi$ の導出

ピクセル原点位置  $(X_0, Y_0)$  と傾げ角  $\Psi$  が確定すれば、式 (2.1.8) から

$$\xi = (X - X_0) \cos \Psi - (Y_0 - Y) \sin \Psi \quad (2.2.1)$$

$$\eta = (X - X_0) \sin \Psi + (Y_0 - Y) \cos \Psi \quad (2.2.2)$$

を用いてピクセル座標  $(X, Y)$  から座標  $(\xi, \eta)$  を求めることは容易である。以下、座標  $(\xi, \eta)$  から回折角  $2\theta$  と方位角  $\phi$  を求める形式を導く。

式 (2.1.6) を解けば

$$2\theta = \arccos \frac{(R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p) \cos 2\theta - \eta \sin 2\theta}{\sqrt{R^2 + \xi^2 + \eta^2}} \quad (2.2.3)$$

となる。逆余弦関数  $\arccos x$  は、余弦関数  $\cos x$  の逆関数である。一般的に逆三角関数は複数の解を持つが、ここでは  $0 \leq 2\theta < \pi$  であるから、式 (2.2.3) のみで  $2\theta$  の値が一意に確定する。このことを明確にするために、 $y = \cos x$  に関する  $x$  の解のうち  $0 \leq x \leq \pi$  を満たす値（主値 principal value）を

$$x \equiv \text{Arccos } y \quad (2.2.4)$$

と定義することにして、

$$2\theta = \text{Arccos} \frac{(R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p) \cos 2\theta - \eta \sin 2\theta}{\sqrt{R^2 + \xi^2 + \eta^2}} \quad (2.2.5)$$

と表現することとする。

一方で、式 (2.1.7) から

$$\phi = \arccos \frac{-R \sin \Phi_p + \xi \cos \Phi_p}{\sqrt{R^2 + \xi^2 + \eta^2} \sin 2\theta} \quad (2.2.6)$$

なので、この式から  $\phi$  を求めれば良い。ただし、

$$S = \sin(\text{Arccos } C) \Rightarrow S = \sin \alpha, C = \cos \alpha, 0 \leq \alpha \leq \pi$$

$$\Rightarrow S = \sqrt{1 - C^2}$$

の関係から,

$$\begin{aligned} \phi &= \arccos \frac{-R \sin \Phi_p + \xi \cos \Phi_p}{\sqrt{R^2 + \xi^2 + \eta^2} \sin 2\theta} \\ &= \arccos \left\{ \frac{-R \sin \Phi_p + \xi \cos \Phi_p}{\sqrt{R^2 + \xi^2 + \eta^2}} \left[ \sin \left( \operatorname{Arccos} \frac{(R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p) \cos 2\theta - \eta \sin 2\theta}{\sqrt{R^2 + \xi^2 + \eta^2}} \right) \right]^{-1} \right\} \\ &= \arccos \left\{ \frac{-R \sin \Phi_p + \xi \cos \Phi_p}{\sqrt{R^2 + \xi^2 + \eta^2}} \left[ 1 - \left( \frac{(R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p) \cos 2\theta - \eta \sin 2\theta}{\sqrt{R^2 + \xi^2 + \eta^2}} \right)^2 \right]^{-1/2} \right\} \\ &= \arccos \left[ \frac{-R \sin \Phi_p + \xi \cos \Phi_p}{\sqrt{R^2 + \xi^2 + \eta^2}} \left( \frac{R^2 + \xi^2 + \eta^2 - \left[ (R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p) \cos 2\theta - \eta \sin 2\theta \right]^2}{R^2 + \xi^2 + \eta^2} \right)^{-1/2} \right] \\ &= \arccos \left[ \frac{-R \sin \Phi_p + \xi \cos \Phi_p}{\sqrt{R^2 + \xi^2 + \eta^2 - \left[ (R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p) \cos 2\theta - \eta \sin 2\theta \right]^2}} \right] \\ &\Rightarrow \phi = \arccos \frac{-R \sin \Phi_p + \xi \cos \Phi_p}{\sqrt{R^2 + \xi^2 + \eta^2 - \left[ (R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p) \cos 2\theta - \eta \sin 2\theta \right]^2}} \quad (2.2.7) \end{aligned}$$

なので、 $2\theta$  を含まない形式で  $\phi$  を求めることもできる。式 (2.2.7) の形式は式 (2.2.6) の形式と比較すると、並列プロセッサを使用した演算の際に有効である可能性がある。

式 (2.2.6) と (2.2.7) のいずれを用いるにしても、 $0 \leq \phi < 2\pi$  あるいは  $-\pi \leq \phi < \pi$  であるから、これらの式のみでは正しい  $\phi$  の値は確定しない。 $y = \cos x$  に関する  $x$  の解のうち  $0 \leq x \leq \pi$  を満たすもの (主値) を

$$x \equiv \operatorname{Arccos} y \quad [0 \leq x \leq \pi] \quad (2.2.8)$$

と定義すると,

$$x = -\operatorname{Arccos} y \quad [-\pi \leq x \leq 0] \quad (2.2.9)$$

に対応する解も導く必要がある。

幸運なことに、この解の導出は容易である。式 (2.1.3) から

$$r \sin 2\theta \sin \phi = (R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p) \sin 2\theta + \eta \cos 2\theta \quad (2.2.10)$$

であり、さらに

$$0 < r \sin 2\theta \quad (2.2.11)$$

とみなせることから、方位角  $\phi$  のとりうる領域は式 (2.2.10) の右辺の値によって決まる。つまり式 (2.2.10) の右辺が正の値であれば  $0 < \phi < \pi$  とすれば良く、負の値であれば  $\pi < \phi < 2\pi$  あるいは  $-\pi < \phi < 0$  の値をとればよい。したがって

$$\phi_0 \equiv \operatorname{Arccos} \frac{-R \sin \Phi_p + \xi \cos \Phi_p}{\sqrt{R^2 + \xi^2 + \eta^2} \sin 2\theta}$$

$$= \text{Arccos} \frac{-R \sin \Phi_p + \xi \cos \Phi_p}{\sqrt{R^2 + \xi^2 + \eta^2 - [(R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p) \cos 2\Theta - \eta \sin 2\Theta]^2}} \quad [0 \leq \phi_0 \leq \pi] \quad (2.2.12)$$

を定義した場合に、

$$\phi = \begin{cases} \phi_0 & [0 \leq (R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p) \sin 2\Theta + \eta \cos 2\Theta] \\ -\phi_0 & [(R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p) \sin 2\Theta + \eta \cos 2\Theta < 0] \end{cases} \quad (2.2.13)$$

あるいは

$$\phi = \begin{cases} \phi_0 & [-(R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p) \tan 2\Theta \leq \eta] \\ -\phi_0 & [\eta < -(R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p) \tan 2\Theta] \end{cases} \quad (2.2.14)$$

とすれば、方位角  $\phi$  の値が確定することになる。

### 2-3 回折角 $2\theta$ と方位角 $\phi$ からのピクセル座標 $X, Y$ の導出

ピクセル原点位置  $(X_0, Y_0)$  と傾げ角  $\Psi$ 、振り角  $\Phi_p$  が確定すれば、式 (2.1.9) を用いて座標値  $(\xi, \eta)$  からピクセル座標  $(X, Y)$  を求めることは容易である。一方で、これとは逆に回折角  $2\theta$  と方位角  $\phi$  から回折斑点の位置座標  $(\xi, \eta)$  を求める手順は、振り角  $\Phi_p$  がゼロでない値をとる場合の形式を導くことは、困難な問題ではないが、煩雑 complex になる。解析的な形式が複雑になることは、計算のためのコストも嵩むことを意味する。

しかしながら、隣り合う検出器によって撮影された回折像を比較することによって検出器固有のパラメータを較正する作業を想定すると、ピクセル毎の回折角  $2\theta$  と方位角  $\phi$  が算出された場合に、「仮想的に  $\Psi = 0$ 、 $\Phi_p = 0$  である場合」の回折像の模擬ができれば良い。

例えば、PILATUS#1 の固有パラメータをなんらかの方法で決定すれば、それに基づいて任意の回折図形の各ピクセル毎に回折角  $2\theta$  と方位角  $\phi$  を求め、 $\Psi = 0^\circ$ 、 $\Delta 2\Theta = 0^\circ$ 、 $\Phi_p = 0^\circ$  の場合に撮影されると期待される理想的な模擬回折図形を作成する。次に同じ領域の回折図形を PILATUS#2 で撮影し、適当なカメラ長  $R$ 、原点位置  $X_0, Y_0$ 、傾げ角  $\Psi$  の値を仮定して同様に模擬回折図形を作成する。この図形を PILATUS#1 から得られた図形と比較して、ずれを評価する。この後は図形のずれがなるべく小さくなるようにパラメータ値を調整する操作を繰り返せばよい。もし主な4パラメータを調整した後に傾きや振りに由来する系統的なずれが現れたとみなせるのであれば、傾き角  $\Delta 2\Theta$  と振り角  $\Phi_p$  の順に調整を試みれば良い。このときに使用する回折図形データには、「ほど良い二次元的な不均一さ」のあることが要求され、この画像の含む情報量によって較正の精度が決まる。

AichiSR BL5S2 のオペレータとコーディネータは、このことを踏まえて較正データの収集をする必要があることを理解すべきである。たとえば NIST SRM660x LaB<sub>6</sub> など粒の粗い結晶性粉末試料を回転させずに撮影したときに得られるむらの強い二次元強度データは

この目的で有効と思われるが、較正のためにどのような試料を用いるべきかは、実験的に評価すべきことである。

以下「ピクセル毎の回折角  $2\theta$  と方位角  $\phi$  を決めたときに、 $\Psi = 0$ ,  $\Delta 2\Theta = 0$ ,  $\Phi_p = 0$  に対応するピクセル位置」を算出するための形式を導出する。

式 (2.1.3) から

$$\begin{aligned}\xi &= \sqrt{R^2 + \xi^2 + \eta^2} \sin 2\theta \cos \phi \\ \Rightarrow \xi^2 &= (R^2 + \xi^2 + \eta^2) \sin^2 2\theta \cos^2 \phi \\ \Rightarrow \xi^2 (1 - \sin^2 2\theta \cos^2 \phi) &= (R^2 + \eta^2) \sin^2 2\theta \cos^2 \phi \\ \Rightarrow \xi^2 &= \frac{(R^2 + \eta^2) \sin^2 2\theta \cos^2 \phi}{1 - \sin^2 2\theta \cos^2 \phi}\end{aligned}\quad (2.3.1)$$

$$\Rightarrow \xi = \pm \frac{\sqrt{R^2 + \eta^2} \sin 2\theta \cos \phi}{\sqrt{1 - \sin^2 2\theta \cos^2 \phi}}\quad (2.3.2)$$

となる。 $-\pi/2 \leq \phi \leq \pi/2$  のときに  $0 \leq \xi$ ,  $\pi/2 < \phi < 3\pi/2$  のときに  $\xi < 0$  という関係があるので、このケースでは複号のうち一方のみが適切な解になる。つまり、

$$\xi = \frac{\sqrt{R^2 + \eta^2} \sin 2\theta \cos \phi}{\sqrt{1 - \sin^2 2\theta \cos^2 \phi}} \quad [-\pi/2 \leq \phi < 3\pi/2]\quad (2.3.3)$$

となるはずである。

式 (2.3.3) を式 (2.1.6) に代入すれば

$$\begin{aligned}R \cos 2\Theta - \eta \sin 2\Theta &= \sqrt{R^2 + \frac{(R^2 + \eta^2) \sin^2 2\theta \cos^2 \phi}{1 - \sin^2 2\theta \cos^2 \phi} + \eta^2} \cos 2\theta \\ &= \sqrt{R^2 + \eta^2} \sqrt{1 + \frac{\sin^2 2\theta \cos^2 \phi}{1 - \sin^2 2\theta \cos^2 \phi}} \cos 2\theta \\ &= \frac{\sqrt{R^2 + \eta^2} \cos 2\theta}{\sqrt{1 - \sin^2 2\theta \cos^2 \phi}} \\ \Rightarrow R^2 \cos^2 2\Theta - 2R\eta \cos 2\Theta \sin 2\Theta + \eta^2 \sin^2 2\Theta &= \frac{(R^2 + \eta^2) \cos^2 2\theta}{1 - \sin^2 2\theta \cos^2 \phi} \\ \Rightarrow \cos^2 2\Theta - \frac{2\eta}{R} \cos 2\Theta \sin 2\Theta + \frac{\eta^2}{R^2} \sin^2 2\Theta &= \frac{\cos^2 2\theta}{1 - \sin^2 2\theta \cos^2 \phi} \left(1 + \frac{\eta^2}{R^2}\right) \\ \Rightarrow \cos^2 2\Theta - \frac{\cos^2 2\theta}{1 - \sin^2 2\theta \cos^2 \phi} - \frac{2\eta}{R} \cos 2\Theta \sin 2\Theta + \frac{\eta^2}{R^2} \left(\sin^2 2\Theta - \frac{\cos^2 2\theta}{1 - \sin^2 2\theta \cos^2 \phi}\right) &= 0\end{aligned}\quad (2.3.4)$$

となる。ここで、

$$A \left(\frac{\eta}{R}\right)^2 - 2B \left(\frac{\eta}{R}\right) + C = 0\quad (2.3.5)$$

$$A = \sin^2 2\Theta - \frac{\cos^2 2\theta}{1 - \sin^2 2\theta \cos^2 \phi}\quad (2.3.6)$$

$$B = \cos 2\Theta \sin 2\Theta \quad (2.3.7)$$

$$C = \cos^2 2\Theta - \frac{\cos^2 2\theta}{1 - \sin^2 2\theta \cos^2 \phi} \quad (2.3.8)$$

とすれば、二次方程式の解の公式から、

$$\frac{\eta}{R} = \begin{cases} \frac{B \pm \sqrt{D}}{A} & [A \neq 0, 0 \leq D] \\ \frac{C}{2B} & [A = 0] \\ \text{(no solution)} & [\text{otherwise}] \end{cases} \quad (2.3.9)$$

$$\begin{aligned} D &= B^2 - AC \\ &= \cos^2 2\Theta \sin^2 2\Theta - \left( \sin^2 2\Theta - \frac{\cos^2 2\theta}{1 - \sin^2 2\theta \cos^2 \phi} \right) \left( \cos^2 2\Theta - \frac{\cos^2 2\theta}{1 - \sin^2 2\theta \cos^2 \phi} \right) \\ &= \frac{\cos^2 2\theta}{1 - \sin^2 2\theta \cos^2 \phi} - \frac{\cos^4 2\theta}{(1 - \sin^2 2\theta \cos^2 \phi)^2} \\ &= \frac{\cos^2 2\theta (1 - \sin^2 2\theta \cos^2 \phi - \cos^2 2\theta)}{(1 - \sin^2 2\theta \cos^2 \phi)^2} = \frac{\cos^2 2\theta (\sin^2 2\theta - \sin^2 2\theta \cos^2 \phi)}{(1 - \sin^2 2\theta \cos^2 \phi)^2} \\ &= \frac{\cos^2 2\theta \sin^2 2\theta \sin^2 \phi}{(1 - \sin^2 2\theta \cos^2 \phi)^2} \end{aligned} \quad (2.3.10)$$

$$\begin{aligned} \frac{B \pm \sqrt{D}}{A} &= \frac{\cos 2\Theta \sin 2\Theta \pm \frac{\cos 2\theta \sin 2\theta \sin \phi}{1 - \sin^2 2\theta \cos^2 \phi}}{\sin^2 2\Theta - \frac{\cos^2 2\theta}{1 - \sin^2 2\theta \cos^2 \phi}} \\ &= \frac{\cos 2\Theta \sin 2\Theta (1 - \sin^2 2\theta \cos^2 \phi) \pm \cos 2\theta \sin 2\theta \sin \phi}{\sin^2 2\Theta (1 - \sin^2 2\theta \cos^2 \phi) - \cos^2 2\theta} \end{aligned} \quad (2.3.11)$$

となる。式 (2.3.9) の複号と式 (2.3.11) の複号は同順ではないことを注意しておく。方位角  $\phi$  の値に応じて、式 (2.3.11) の複号のどちらを選択するべきかは自明ではないが、どちらを選択すべきかすべての場合について検討すれば、常に共通の形式：

$$\frac{\eta}{R} = \frac{\cos 2\Theta \sin 2\Theta (1 - \sin^2 2\theta \cos^2 \phi) + \cos 2\theta \sin 2\theta \sin \phi}{\sin^2 2\Theta (1 - \sin^2 2\theta \cos^2 \phi) - \cos^2 2\theta} \quad (2.3.12)$$

が解となるとみなしてよいことがわかる。検討の詳細についてはここでは省略する。斑点位置の縦座標  $\eta$  の値が決まれば、斑点位置の横座標  $\xi$  の値は式 (2.3.3) で求められる。

## 2-4 ダイレクトビームスポットの関係式

減衰させたダイレクトビームを直接撮影して得られるダイレクトビームスポットは、 $2\theta = 0$ 、 $\phi$  任意の特殊例とみなすことができる。この場合には、検出器角度  $2\Theta$  (傾き角  $\Delta 2\Theta$  を含む)、カメラ長  $R$ 、検出器原点位置  $(X_0, Y_0)$ 、傾げ角  $\Psi$ 、振り角  $\Phi_P$  のすべてを明示的



に含めて、スポット位置  $(X, Y)$  を予測する式を導くことが容易い。ただし、2-3節で導いた形式と矛盾しない形式とするべきことが決定的に重要であることに注意しなければならない。

式 (2.1.3) から、 $2\theta = 0$  のダイレクトビームについて

$$\begin{cases} r = (R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p) \cos 2\Theta - \eta \sin 2\Theta \\ 0 = -R \sin \Phi_p + \xi \cos \Phi_p \\ 0 = (R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p) \sin 2\Theta + \eta \cos 2\Theta \end{cases} \quad (2.4.1)$$

である。この関係は

$$\sqrt{R^2 + \xi^2 + \eta^2} = (R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p) \cos 2\Theta - \eta \sin 2\Theta \quad (2.4.2)$$

$$0 = -R \sin \Phi_p + \xi \cos \Phi_p \quad (2.4.3)$$

の二つの式と等価である。式 (2.4.3) から、

$$\xi = R \tan \Phi_p \quad (2.4.4)$$

式 (2.4.2) から、

$$\begin{aligned} R^2 + \xi^2 + \eta^2 &= (R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p)^2 \cos^2 2\Theta \\ &\quad - 2(R \cos \Phi_p + \xi \sin \Phi_p) \eta \sin 2\Theta \cos 2\Theta + \eta^2 \sin^2 2\Theta \\ \Rightarrow R^2 \sec^2 \Phi_p + \eta^2 \cos^2 2\Theta &= R^2 \sec^2 \Phi_p \cos^2 2\Theta \\ &\quad - 2R\eta \sec \Phi_p \sin 2\Theta \cos 2\Theta \\ \Rightarrow \frac{R^2 \sec^2 \Phi_p}{\cos^2 2\Theta} + \eta^2 &= R^2 \sec^2 \Phi_p - 2R\eta \sec \Phi_p \tan 2\Theta \\ \Rightarrow \eta^2 + \frac{2R\eta \tan 2\Theta}{\cos \Phi_p} + \frac{R^2 \tan^2 2\Theta}{\cos^2 \Phi_p} &= 0 \\ \Rightarrow \left( \eta + \frac{R \tan 2\Theta}{\cos \Phi_p} \right)^2 &= 0 \\ \Rightarrow \eta = -\frac{R \tan 2\Theta}{\cos \Phi_p} \end{aligned} \quad (2.4.5)$$

このようにしてスポット位置の横座標  $\xi$  と縦座標  $\eta$  が求まれば、最後に傾きを修正するための式 (2.1.9) :

$$\begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_0 + \xi \cos \Psi + \eta \sin \Psi \\ Y_0 + \xi \sin \Psi - \eta \cos \Psi \end{pmatrix} \quad (2.1.9)$$

を用いて、現実的なダイレクトビームスポットの位置座標  $(X, Y)$  が求まる。

ここで、式 (2.4.4) と式 (2.4.5) の形式に  $\Phi_p = 0$  を代入した場合と、前節の式 (2.3.3) および (2.3.12) に  $2\theta = 0$  を代入した場合に同一の結果が得られることを確認する。式 (2.3.3) に  $2\theta = 0$  を代入すると、

$$\xi = 0 \quad (2.4.6)$$

であり、式 (2.4.4) に  $\Phi_P = 0$  を代入しても

$$\xi = 0 \quad (2.4.7)$$

となる。式 (2.3.12) に  $2\theta = 0$  を代入すると

$$\frac{\eta}{R} = \frac{\cos 2\Theta \sin 2\Theta}{\sin^2 2\Theta - 1} = -\frac{\cos 2\Theta \sin 2\Theta}{\cos^2 2\Theta} = -\tan 2\Theta \quad (2.4.8)$$

であり、式 (2.4.5) に  $\Phi_P = 0$  を代入しても

$$\eta = -R \tan 2\Theta \quad (2.4.9)$$

となる。

なお、前節と本節のように比較的容易な式の導出であっても、本来はさらに「前節で求めた形式に  $2\theta = 0^\circ$  に近い数値を代入して数値を求める」ことと「本節で求めた形式に対して  $\Phi_P = 0^\circ$  に近い数値を代入して計算をする」ことを各種の  $2\Theta, R, X_0, Y_0, \Psi, \Phi_P, X, Y, 2\theta, \phi$  の具体的な値に対して実施して、結果を比較することが必要である。このためにはコンピュータを使わざるを得ない。たとえば Microsoft Excel<sup>TM</sup> のような「表計算ソフト」を使うべきである。現時点ではこの作業を完了していないので、筆者自身が結果の正しさに自信を持っているわけではないことを警告しておく。

## 2-5 二次元データのマッピング、擬似線形補間

デジタル化された二次元強度データを扱う限り、本来連続変数（実数）で表されるべき二次元の位置は實際上正方格子の格子点の上、あるいは正方格子によって区切られる個々の正方形の位置を特定する値に離散化された数値（整数）として取り扱うことが現実的である。しかしデジタル化は「切り捨て」を意味し、その際に導入されうる誤差のことが量子化誤差 quantization erro と呼ばれ、その誤差を解消するための多様な技術が、電気電子分野でも計算機技術の分野でも 1980 年代には既に成立していたことを「計測装置の設計者」は知るべきであろう。

AichiSR BL5S2 の 4 連装 PILAUS 検出器の較正で必要とされる写像 mapping あるいは投影 projection は線形ではなく非線形であることも注意すべきであろう。線形写像であっても強度を二次元正方格子にマッピングする処理の際に二次元強度データの本質的な変質を起こさないのは、ピクセル幅の整数倍の平行移動、 $90^\circ$  の整数倍の回転、左右および上下の反転のみに限られる。また整数で割った寸法に縮小することは必然的に情報量の低下を伴うが、この操作に紛らわしさはない。変換後のピクセル強度は、変換前の該当する複数ピクセル強度の和あるいは算術平均をとる以外に事実上選択の余地はない。

線形写像であっても拡大 expansion の際にどのようにピクセル強度を算出するかには選択の余地がある。実際上の選択肢は (1) 補間を施さないか、(2) 線形補間を施す、あるいは (3) 非線形補間を施すかの 3 通りである。このいずれを選択するかはあまり本質的なことではないように見えるが、縮小変換が情報の喪失を招くのはやむを得ないとしても、等倍の変換であれば、情報をなるべく喪失せず計算コストも高くなりすぎないタイプの変換方法が好ましい。

4 連装検出器の較正で必要とされるマッピング処理は、元来非線形の変換なので形式的に線形補間を用いることには本質的に重要な意味はないのだが、第一候補として採用することは自然であろう。ただし、ここで採用するアルゴリズムは厳密な意味では線形補間ではないので、ここでは擬似線形補間と呼ぶことにする。この処理の具体的な手順を以下に述べる。

位置  $(i, j)$  ( $i = 0, \dots, M-1; j = 0, \dots, N-1$ ) に割り当てられた横縦方向のサイズ  $\Delta X, \Delta Y$  のピクセルに強度値  $I_{ij}$  が割り当てられているとする。ただし指数  $(0, 0)$  で特定されるピクセルは左上隅のピクセルとする。ここでは単純化するために  $\Delta X = \Delta Y = 1$  とする。これは長さの単位を [pixel] とするという事と同じことである。左上隅のピクセルの中心位置を基準とした原点位置を  $(X_0, Y_0)$  とする。  $X_0$  と  $Y_0$  は一般的には非整数値をとる。

この強度値  $I_{ij}$  が、座標の変換後の非整数座標  $(X, Y)$  にマッピングされたとする。無補間のマッピングでは以下の式 (2.5.2), (2.5.3) によって整数値  $i', j'$  を算出し、指数 (添え字)  $(i', j')$  で特定されるピクセルにすべての強度  $I_{ij}$  を割り当てる。つまり

$$I_{i'j'} \leftarrow I_{i'j'} + I_{ij} \quad (2.5.1)$$

とする。指数 (添え字) を特定する数式は以下のように表現できる。

$$i' = \lfloor X - X_0 + 1/2 \rfloor \quad (2.5.1)$$

$$j' = \lfloor Y - Y_0 + 1/2 \rfloor \quad (2.5.2)$$

ここで記号  $\lfloor x \rfloor$  は  $x$  を超えない最大の整数を意味し、ガウス記号とも呼ばれる。つまり  $\lfloor x \rfloor$  は切り捨てあるいは floor と呼ばれる操作と同じであり、  $\lfloor x + 1/2 \rfloor$  は四捨五入あるいは round と呼ばれる操作と同じである。

この方法を用いれば常に積分強度は保存される。しかし画像を拡大すると強度ゼロのピクセルが出現し、虫に食われたような画像になる。これは見た目が悪いというだけでなく、画像比較の際の類似性評価基準と最適化アルゴリズム、初期値の選定等に十分に注意しないと、正解を導くことすら困難になるという現実的な問題を招くであろう。

擬似線形補間ではマッピングされた点を含むピクセルだけでなく、隣接する周囲 8 ピクセルにも強度を分配する。強度を分配するためにすべきことは、以下の式 (2.5.4)–(2.5.16) の通りである。

$$f_x = X - X_0 - i' \quad (2.5.4)$$

$$f_y = Y - Y_0 - j' \quad (2.5.5)$$

この 2 つの式は、座標値の小数部あるいは整数化の際の残差を取り出すことに等しい。これらの数値は以下の範囲：

$$-\frac{1}{2} \leq f_x < \frac{1}{2} \quad (2.5.6)$$

$$-\frac{1}{2} \leq f_y < \frac{1}{2} \quad (2.5.7)$$

の値をとり、正しい位置がピクセル中心から上下左右にどれだけずれているかを意味する。そこで、以下の 9 式を用いて強度を分配する。

$$I_{i'-1,j'-1} \leftarrow I_{i'-1,j'-1} + I_{ij} \times \min(0, f_x) \times \min(0, f_y) \quad (2.5.8)$$

$$I_{i'-1,j'} \leftarrow I_{i'-1,j'} + I_{ij} \times \min(0, f_x) \times (|f_y| - 1) \quad (2.5.9)$$

$$I_{i'-1,j'+1} \leftarrow I_{i'-1,j'+1} + I_{ij} \times \min(0, f_x) \times \min(0, -f_y) \quad (2.5.10)$$

$$I_{i',j'-1} \leftarrow I_{i',j'-1} + I_{ij} \times (|f_x| - 1) \times \min(0, f_y) \quad (2.5.11)$$

$$I_{i',j'} \leftarrow I_{i',j'} + I_{ij} \times (|f_x| - 1) \times (|f_y| - 1) \quad (2.5.12)$$

$$I_{i',j'+1} \leftarrow I_{i',j'+1} + I_{ij} \times (|f_x| - 1) \times \min(0, -f_y) \quad (2.5.13)$$

$$I_{i'+1,j'-1} \leftarrow I_{i'+1,j'-1} + I_{ij} \times \min(0, -f_x) \times \min(0, f_y) \quad (2.5.14)$$

$$I_{i'+1,j'} \leftarrow I_{i'+1,j'} + I_{ij} \times \min(0, -f_x) \times (|f_y| - 1) \quad (2.5.15)$$

$$I_{i'+1,j'+1} \leftarrow I_{i'+1,j'+1} + I_{ij} \times \min(0, -f_x) \times \min(0, -f_y) \quad (2.5.16)$$

ただし、 $\min(x, y)$  は  $x$  と  $y$  のうち小さい方の値を返す二変数関数であるとする。現実のコーディングでは、これら9式をあからさまに用いるのではなく、if文を使って少し短くまとめられ、そのようなコーディングを用いた方がミスを犯しにくいであろうということを注意しておく。整数化残差（量子化誤差）の正負のパターンに応じて各ピクセルにどのように強度が分配されるかを Table 2.5.1 にまとめる。この分配法則に基づけば積分強度が維持されるだけでなく、重心の位置（一次モーメント）も維持される。

Table 2.5.1 Patterns of partitioning pixel intensity on pseudo-linear interpolation

	$f_x < 0$	$f_x < 0$	$0 \leq f_x$	$0 \leq f_x$
	$f_y < 0$	$0 \leq f_y$	$f_y < 0$	$0 \leq f_y$
$i'-1, j'-1$	$ f_x  f_y $	0	0	0
$i'-1, j'$	$ f_x (1- f_y )$	$ f_x (1- f_y )$	0	0
$i'-1, j'+1$	0	$ f_x  f_y $	0	0
$i', j'-1$	$(1- f_x ) f_y $	0	$(1- f_x ) f_y $	0
$i', j'$	$(1- f_x )(1- f_y )$	$(1- f_x )(1- f_y )$	$(1- f_x )(1- f_y )$	$(1- f_x )(1- f_y )$
$i', j'+1$	0	$(1- f_x ) f_y $	0	$(1- f_x ) f_y $
$i'+1, j'-1$	0	0	$ f_x  f_y $	0
$i'+1, j'$	0	0	$ f_x (1- f_y )$	$ f_x (1- f_y )$
$i'+1, j'+1$	0	0	0	$ f_x  f_y $

この分配アルゴリズムは一見もっともらしいかもしれないが、画像処理アルゴリズムの観点からは不満な点がある。たとえば、この方法に従っても、画像の縮尺（拡大率）を2倍以上にするとやはりゼロ強度のピクセルが出現する。これを避けるための方法の一つは、

マッピング後の標本点に対してユークリッド・ノルム Euclidian norm あるいはマンハッタン・ノルム Manhattan norm に基づくボロノイ分割 Voronoi tessellation を施して、強度データを傾斜配分する処置かもしれない。この処置は一次元強度データなら容易である。しかしこれを二次元で実現するためには現状のチューリング Turing 型, IEEE (Institute of Electrical and Electronics Engineers) 型コンピュータ・アーキテクチャに従う限り、相当な演算ステップ（計算時間）が必要になるであろうと思われる。