主成分分析法による粒子形状の分類

遠藤茂寿・空閑良寿
古閑二郎・山口賢治

理化学研究所 粉粒体工学研究室[†]

ムライト質ビーズの粒子形状の分類に主成分分析法を適用した。粒子の2次元像から求められるパラメータとして長短度、円形度などの形状指数および偏角関数のフーリエ係数を採用した。形状指数の間には相関関係が得られ、それより指数は四つに類型化できた。しかしフーリエ係数では相関関係が弱かった。

それらのパラメータのうち non-holomorphic な像に対しても定義できる8種類を選択し、同様に解析した。第1主成分は長短度と、第2主成分は輪郭の凹凸と関係づけられた。また、それらの全分散に対する寄与率は84%であった。傾斜回転円板により形状にもとづいて分離した二つのムライト質粒子群の分類を試みた。二つの主成分で構成されるパターン空間は形状の分類に有効であることを示した。

緒言

粒子形状の数量的表現は、形状の分類、識別において重要であり、粒状製品の品質管理などの実操作においても有益である。多くの形状指数⁴⁾も数量的表現であるが、それらは形状の種々異なる側面を表している。実用上、数少ない特性値、代表値で表示することが望まれる。“Particle Signature”⁸⁾をはじめ従来よりそのような試みが行われている^{1,4)}が十分ではない。

粒子の2次元投影像から得られる円形度、長短度などの種々の形状指数は、各粒子ごと異なる値をとり、またそれらの間に互いに相関関係をもつ多変量データ⁹⁾である。統計的な手法は多変量データの解析に対して有効である。著者らは、主成分分析法⁹⁾を用い形状指数を少数の統計量に要約することを既報で検討した²⁾。そこでは、形状が全く異なり分布も広い豊浦砂と木材チップの粒子を対象にした。それによれば、これまで提案されている指数群の一部に相関関係があり、2~3の主成分により形状の評価、分類が可能であると考えた。

本報では、ムライト質ビーズを用い、比較的球形に近い粒子形状の分類に対して主成分分析法を適用した。投影面積径などの代表径にもとづく形状指数群¹¹⁾および粒子輪郭の偏角関数のフーリエ係数^{8,5,12)}群を変量として取り上げ解析した。変量間の相関関係にもとづいて主成分を求めた。これを円形度(球形度)の異なる2群に分級、選別したムライト質ビーズに適用した。二つの主成分で構成されるパターン空間内においてそれらの分類を行い、その有効性を検討した。

1. 粒子形状の測定

本報において解析の対象にした形状指数は、粒子の2次元像から得られる長短度、代表径の比、代表径の変動係数¹¹⁾および輪郭の偏角関数のフーリエ係数^{8,5,12)}である。Table 1にその定義などの一覧を示す。それらは、ランダムに配向した粒子を写真撮影し、2次元像の輪郭座標をディジタイザーで読み取り、計算処理して求めた。読み取り方法、平滑化、補間などのデータ処理法および代表径、形状指数の算出法についての詳細は既報^{2,6,7)}と同様である。

用いた粒子は、8~7 mesh (2.38~2.83 mm) にフルイ分けられたムライト質ビーズである。その写真を Fig. 1に示す写真のように試料粒子の形状が球形に近いことがわかる。この粒子(以後 F 粒子と呼ぶ)を杉本ら¹⁰⁾の用いたものと同様な傾斜回転円板により4~5回繰り返し分級して円形度(球形度)の異なる2群の粒子、すなわち球形側粒子(S粒子)と非球形側粒子(NS粒子)を得た⁶⁾。F粒子、S粒子、NS粒子について約50個ずつ測定を行った。なお、傾斜回転円板の分級条件は、傾斜角4.5°、回転速度6.5 rpmであった。

2. 主成分分析法による形状指数の解析

2・1 代表径にもとづく形状指数

Table 1に示す1)~9)の形状指数に対し、木材チップを試料にして主成分分析⁹⁾(Appendix 参照)した結果を Fig. 2 および Table 2 に示す。各木材チップについて合成された形状指数のうち固有値の大きい二つ、すなわち第1主成分 $f_i^{(1)}$ と第2主成分 $f_i^{(2)}$

[†] 〒351 和光市広沢 2-1

Fig. 1 Photograph of Mullite beads

Table 2 Weighting coefficient for principal component of woody chip

α	ϕ_{HL}	ϕ_{RH}	ϕ_{RL}	ϕ_{RF}	ϕ_{FL}	ϕ_{FL}	σ_R	σ_F	Z	$A^{(\alpha)}$
1	0.127	0.126	0.131	0.132	0.134	0.017	-0.131	-0.129	-0.126	0.827
2	0.254	-0.158	0.131	0.002	-0.044	0.837	0.042	0.074	0.181	0.958

Table 3 Correlation coefficient of principal component with Fourier coefficient of Mullite beads

α	A_1	A_2	A_3	A_4	A_5	A_6	A_7	A_8	A_9	A_{10}	$\lambda^{(\alpha)}$	$A^{(\alpha)}$
1	.879	.479	.686	.769	.748	.808	.572	.696	.346	.586	4.551	.455
2	-.215	-.190	-.538	.327	-.224	.224	.433	.238	.731	.375	1.498	.605
3	.024	.686	-.273	-.197	.194	-.099	-.010	-.437	-.103	.461	1.046	.709
4	-.099	.270	-.033	.112	.103	.112	-.504	.007	.505	-.280	0.707	.780
5	.102	.297	-.047	.186	-.287	-.967	.434	-.163	.096	-.412	0.616	.842

Table 1 List of shape indices

- 1) $\phi_{HL} = D_H/D_L$
- 2) $\phi_{RH} = \bar{D}_R/D_H$
- 3) $\phi_{RL} = \bar{D}_R/D_L$
- 4) $\phi_{HF} = D_H/\bar{D}_F$
- 5) $\phi_{RF} = \bar{D}_R/\bar{D}_F$
- 6) $\phi_{FL} = \bar{D}_F/D_L$
- 7) $\sigma_R = [(1/\pi) \int_0^\pi (D_R(\theta) - \bar{D}_R)^2 d\theta]^{1/2} / \bar{D}_R$
- 8) $\sigma_F = [(1/\pi) \int_0^\pi (D_F(\theta) - \bar{D}_F)^2 d\theta]^{1/2} / \bar{D}_F$
- 9) $Z = D_{F\pi/2} / D_{F\min}$
- 10) A_n ($n=1, 10$); Fourier coefficient of angular bend function

where

$$D_H = \sqrt{4A/\pi} \quad D_L = L/\pi$$

$$\bar{D}_R = (1/\pi) \int_0^\pi D_R(\theta) d\theta, \quad \bar{D}_F = (1/\pi) \int_0^\pi D_F(\theta) d\theta$$

$$f_i^{(\alpha)} = \sum_{j=1}^N w_j^{(\alpha)} z_{ij} \quad (\alpha=1, 2, N=9) \quad (1)$$

から成る座標上の位置に各粒子像をプロットするとFig. 2を得る。ここで下付添字 i は粒子 i を、 j は ϕ_{HL} , σ_F などの形状指数の種類を示す。また z_{ij} は標準化した形状指数である。各形状指数に対する重み係数 $w_j^{(\alpha)}$ は Table 2 に示されている。Table 2 に示すとおり、第2主成分までの累積寄与率 $A^{(2)}$ (Eq. (A-10)) は 0.958 である。九つの指数に含まれる情報の 95% は二つの主成分に集約できる。Fig. 2 のように、第1主成分が小さくなるにしたがい、チップの形状は、正方形から扁平になり、さらに棒状へと変化している。他方、第2主成分が小さなチップほど、輪郭の凹凸や表面の毛羽立ちが顕著に認められる。すなわち、第1主成分は長短度を、第2主成分は凹凸の大きさを表している。以上のことから主成分を用いた粒子形状の分類が可能である。

比較的球形に近いムライト質ビーズに対して、同様に主成分分析法を適用した。Fig. 3 に F 粒子における主成分と形状指数との相関係数 $a_j^{(\alpha)}$

$$a_j^{(\alpha)} = (1/M) \sum_{i=1}^M z_{ij} f_i^{(\alpha)} / \lambda^{(\alpha)} \quad (2)$$

の関係を図示した。図のように円形度 ϕ_{HL} や ϕ_{RF} , 長短度 Z などは第1主成分と相関が強く、 ϕ_{FL} は第2主

Fig. 2 Relationship between the first principal component and the second one of woody chip

Fig. 3 Correlation of principal component with shape index of Mullite beads

成分と相関が強い。この傾向は、木材チップ、豊浦砂の場合²⁾ とほぼ同様である。9種の形状指数は互いに相関関係の強い、(i) 円形度 ϕ_{HL} , ϕ_{RF} などのグループ、(ii) 長短度 Z , σ_F のグループおよび (iii) ϕ_{FL} , (iv) σ_R の四つに分類でき、こららは 2~3 の主成分に要約できる。

2・2 偏角関数のフーリエ係数

粒子像輪郭の偏角関数のフーリエ係数 A_n は、形状の特徴パラメータになる⁴⁾。低次のフーリエ係数 A_n , $n=1 \sim 10$ に着目し、それらについて主成分を分析した。F 粒子の結果を Table 3 に示す。フーリエ係数の場合、第1主成分の寄与率は 0.45、第5主成分までの累積寄与率は 0.842 であり、形状指数の場合に比べかなり低い。これは、ランダムな2次元像から得られたフーリエ係数間にはその性質上、相関関係が弱いことによる。したが

Fig. 4 Photograph of spherical particles separated from Mullite beads by inclined rotating disk

Fig. 5 Photograph of non-spherical particles separated from Mullite beads by inclined rotating disk

Fig. 6 Shape index distributions of spherical and non-spherical particles

Table 4 Mean value and standard deviation of shape index and Fourier coefficient of spherical particles and non-spherical ones

		ψ_{HL} [-]	ψ_{FL} [-]	σ_F [-]	Z [-]	A_1 [rad]	A_2 [rad]	A_3 [rad]	A_4 [rad]
F	$\bar{x}_j$	0.885	0.912	0.047	1.144	0.027	0.104	0.093	0.088
	s_j	0.029	0.015	0.035	0.171	0.037	0.094	0.064	0.078
S	$\bar{x}_j$	0.904	0.917	0.021	10050	0.012	0.037	0.033	0.040
	s_j	0.011	0.009	0.010	0.029	0.009	0.022	0.017	0.021
NS	$\bar{x}_j$	0.859	0.901	0.075	1.267	0.049	0.176	0.102	0.103
	s_j	0.033	0.014	0.059	0.284	0.044	0.152	0.088	0.080
Circle		1	1	0	1	0	0	0	0
Simulated circle		0.994	1.002	0.004	1.029	0.001	0.007	0.005	0.021

って、 A_n , $n=1\sim 10$ の類型化および要約は困難であるが、 A_n から特徴パラメータを任意に選択できる。

3. 主成分による粒子形状の分類

ムライト質ビーズの粒子形状の分類に際して、特徴パラメータとして形状指数および偏角関数のフーリエ係数を取り上げることができる。前節で示した相関関係にもとづき、前者については ψ_{HL} , ψ_{FL} , σ_F , Z を採用する*。後者には相関関係が認められなかったが、正 m 角形では、

$$A_n = \begin{cases} 2/n & (n:m \text{ の公倍数}) \\ 0 & (n: \text{上記以外}) \end{cases} \quad (3)$$

の関係がある³⁾。三角形あるいは四角形に近い粒子像では A_3 , A_4 が他の A_n に比較して大きな値をとる。そこで、 $A_1\sim A_4$ を採用する。

* 動径と角度が 1 対 1 の対応にない形状では、展開径に関係した ϕ_{RL} , σ_R などは定義できない。また、 $\phi_{HF} = \phi_{HL}/\phi_{FL}$ である。一般的な形状を対象にするため、これらの指数は除外した。

** 両群において各形状指数が正規分布をすると仮定すると、両群の平均値の差異はいずれも検定により 1% の水準で有意となる。しかし、1 指数のみで形状分類を行った場合、NS 粒子を S 粒子として誤って分類する確率は 20~30% 程度と推定される。

まず、F 粒子を傾斜回転円板により分級して得た S 粒子群と NS 粒子群の写真を Figs. 4, 5 に示す。写真のように S 粒子は球形に近く、NS 粒子には不規則形状の粒子が多く含まれている。両群における各特徴パラメータの差異を Table 4 に示す。またその分布の一例を Fig. 6 に示す。Table 4 のようにそれぞれの平均値には明らかな差異が認められる。しかし、表および図より両群の分布の重なりがみられ、各指数のみによる形状の分類、識別は大きな誤差を含むことが予想される**。

Fig. 2 のように、形状指数の 1 次結合で与えられる主成分による分類が可能であった。ここで採用した 8 種類の指数の主成分を用いてムライト質ビーズの分類を試みる。分析は試料粒子の形状を代表している F 粒子を対象に行った。その結果、得られた指数と主成分との相関係数 $a_j^{(\alpha)}$ 、固有値 $\lambda^{(\alpha)}$ および累積寄与率 $A^{(\alpha)}$ を Table 5 に、 $a_j^{(\alpha)}$ を Fig. 7 に示した。第 2 主成分の $A^{(\alpha)}$ は、0.84、第 3 主成分まで含めると 0.9 になり、採用したパラメータが、2 ないし 3 の主成分にまとめられる。図のように第 1 主成分は円形度あるいは長短度に関係した特

Table 5 Correlation coefficient of principal component with shape index and Fourier coefficient of Mullite beads

α	ϕ_{HL}	ϕ_{FL}	σ_F	Z	A_1	A_2	A_3	A_4	$\lambda^{(\alpha)}$	$A^{(\alpha)}$
1	-.958	-.690	.696	.563	.776	.768	.678	.775	4.414	0.552
2	.140	.564	.697	.807	-.457	.582	-.420	-.345	2.307	0.840
3	.167	.383	-.003	.082	-.161	-.090	.471	.323	0.541	0.908
4	.014	.099	.041	-.086	.94	.102	.363	-.452	0.365	0.953

性を、第2主成分は輪郭の凹凸の大きさに関係した特性を表している。また、第3主成分は、指数との相関は低い、Eq. (3) で示されるフーリエ係数の性質から大きな凹凸や角部の数に関係した情報が含まれている。

以上の結果に基づき、S粒子群、NS粒子群の分類に第1主成分、第2主成分を用いる。両群の粒子について $f^{(1)}, f^{(2)}$ を算出し、 $f^{(1)}, f^{(2)}$ -パターン空間を構成すると Fig. 8 を得る。なお重み係数 $w_j^{(\alpha)}$ は、Table 5 の $a_j^{(\alpha)}, \lambda^{(\alpha)}$ から

$$w_j^{(\alpha)} = a_j^{(\alpha)} / \lambda^{(\alpha)} \quad (4)$$

により算出される。 $f^{(1)}$ と Z との相関は正であるため、Fig. 2 とは逆に Fig. 8 では $f^{(1)}$ が大きくなると偏平になる。また、 $f^{(2)}$ と ϕ_{FL} とは負の相関にあるため、 $f^{(2)}$ が小さい程凹凸が大きい。図中の $(\frac{1}{-1})$ は、 $f^{(1)}, f^{(2)}$ の平均の位置および標準偏差の大きさを示す。図のように主成分のパターン空間内でS粒子群とNS粒子群とが明確に分離されている。傾斜回転円板で分級、選別した球形度の異なる粒子群は、第1および第2主成分を用いて分類できる。

ところで傾斜回転円板はおもに粒子の転がりを利用して球形粒子を選別する¹⁰⁾ものである。Table 4 のようにS粒子の各パラメータは、NS粒子に比べ球(円)に近い値を示す。そこで主成分における球との比較を行う。同様な重みを用いて球の主成分を求め、Fig. 8 にプロットした。図のようにS粒子群は、NS粒子群に比べ球(円)に近く位置しているが、球とも離れて分布している。この原因の一つとして像のデジタル化にともなう誤差が考えられる。Table 4 に示した球(円)をデジタル化したシミュレーション結果⁷⁾を図中にプロットした。真球とは大差ない位置にあり、デジタル化による誤差は主な原因ではない。Table 4 のように真球の場合、 $\phi_{HL} = \phi_{FL} = Z = 1$ 、他は0である。各平均値は真球に比べ差があり、したがって球形側粒子にも楕円体状のものや表面に凹凸を有する粒子が含まれている。

木材チップの一例について、図中に写真によりその位置を示した。平行四辺形に近い木材チップはこのパターン空間内においても、球およびムライト質ビーズから非常に離れた位置にある。また木材チップの平均²⁾値について同様に求めると、 $f^{(1)}=8, f^{(2)}=7.4$ であり Fig. 8

Fig. 7 Correlation of principal component with shape index of Mullite beads

Fig. 8 Classification of Mullite beads to spherical particles and non-spherical ones in the pattern space of the first two principal components

に示すことができない。以上の結果から、偏角関数のフーリエ係数を含めた形状指数群から得られる二つの主成分により粒子形状の分類が可能である。

結 言

比較的球に近い粒子形状の分類に主成分分析法を適用した。粒子の2次元像から得られる種々の代表径比、代表径の変動係数、長短度および偏角関数のフーリエ係数を用いてその可否を検討した。その結果、次の結論を得た。

1) 形状指数 $\phi_{HL}, \phi_{FL}, \sigma_F, Z$ および低次のフーリエ係数 $A_1 \sim A_4$ の1次結合で与えられる第1および第2主成分に、これらの指数に含まれる情報の大部分が集約できる。

2) 球形度の異なる二つの粒子群は、上記二つの主成分のパターン空間内で明確に分離でき、粒子形状の分類に主成分分析法が適用できる。

Appendix 主成分分析法

サンプルサイズが M である試料中の粒子 i について、 N 種類の形状指数 $x_{ij} (j=1, N)$ を測定する。 x_{ij} を平均が0、分散が1になるように標準化したデータ z_{ij}

$$z_{ij} = (x_{ij} - \bar{x}_j) / s_j \quad (A-1)$$

を得る。ここで、 $\bar{x}_j, s_j^2$ は、形状指数 j のサンプル平均、サンプル分散である。

$$\bar{x}_j = \sum_{i=1}^M x_{ij} / M \quad (\text{A-2})$$

$$s_j^2 = \sum_{i=1}^M (x_{ij} - \bar{x}_j)^2 / M \quad (\text{A-3})$$

z_{ij} の 1 次結合で合成された形状指数 f_i

$$f_i = \sum_{j=1}^N z_{ij} w_j \quad (\text{A-4})$$

すなわち主成分は全ての指数と最大の相関をもつ. j との相関係数 a_j は次式で示される.

$$a_j = (1/M) \sum_{i=1}^M z_{ij} f_i / \lambda \quad (\text{A-5})$$

指数間の相関行列 R の特性方程式

$$|R - \lambda I| = 0 \quad (\text{A-6})$$

から得られる固有ベクトルの要素が a_j であり, 固有値が λ になる. 固有値, 固有ベクトルのうち, 固有値の大きい順

$$\lambda^{(\alpha)}; \lambda^{(1)} \geq \lambda^{(2)} \geq \dots \geq \lambda^{(N)} \quad (\text{A-7})$$

に, 対応する主成分, 第 1 主成分 $f_i^{(1)}$, 第 2 主成分 $f_i^{(2)}$... を得る. 第 α 主成分の重み係数 $w_j^{(\alpha)}$ は次式である.

$$w_j^{(\alpha)} = a_j^{(\alpha)} / \lambda^{(\alpha)} \quad (\text{A-8})$$

$\lambda^{(\alpha)}$ はまた $f_i^{(\alpha)}$ の分散であり, データの全分散は

$$N = \sum_{\alpha=1}^N \lambda^{(\alpha)} \quad (\text{A-9})$$

である. 第 α 主成分に含まれる情報の割合は $\lambda^{(\alpha)} / N$ であり, その累積値, すなわち累積寄与率 $A^{(\alpha)}$ は次式である.

$$A^{(\alpha)} = \sum_{\beta=1}^{\alpha} \lambda^{(\beta)} / N \quad (\text{A-10})$$

Nomenclature

A	= projected area	[m ²]
A_n	= Fourier coefficient of angular bend function	[rad]
$a_j^{(\alpha)}$	= correlation coefficient of principal component with shape index (variate) (see Eq. (A-5))	[—]
D	= diameter	[m]
$f_i^{(\alpha)}$	= principal component	[—]
I	= identity matrix	[—]
L	= perimeter	[m]
M	= sample size	[—]
N	= number of shape index (variate)	[—]

O	= zero matrix	[—]
R	= correlation matrix	[—]
s_j	= standard deviation of shape index	[—]
$w_j^{(\alpha)}$	= weighting coefficient of principal component	[—]
x_{ij}	= shape index (variate)	[—]
Z	= elongation (see Table 1)	[—]
z_{ij}	= standardized shape index (see Eq. (A-1))	[—]
$A^{(\alpha)}$	= cumulative contribution (see Eq. (A-10))	[—]
$\lambda^{(\alpha)}$	= eigenvalue of principal component	[—]
θ	= angle	[rad]
σ	= component of variation	[—]
ψ	= shape index (see Table 1)	[—]
<Superscripts>		
—	= mean	
(α)	= α -th principal component	
<Subscripts>		
F	= Feret's diameter	
H	= projected area diameter (Heywood's diameter)	
i	= particle (object) i	
j, k	= shape index (variate) j, k	
L	= perimeter diameter	
n	= order of Fourier coefficient	
R	= unrolled diameter (Martin's diameter)	

Literature cited

- 1) Beddow, J. K., A. F. Vetter and K. Sisson: *Powder Metallurgy Intern.*, **8**, 2 (1976)
 - 2) Endoh, S., J. Koga, H. Endoh and K. Yamaguchi: *Report of I.P.C.R.*, **56**, 70 (1980)
 - 3) Fong, S. T., J. K. Beddow and A. F. Vetter: *Powder Techn.*, **22**, 17 (1979)
 - 4) Koga, J. and S. Endoh: *J. Soc. Powder Tech. Japan*, **18**, 184 (1981)
 - 5) Koga, J., S. Endoh, H. Endoh and K. Yamaguchi: *Report of I.P.C.R.*, **56**, 63 (1980)
 - 6) Koga, J., S. Endoh, M. Sugimoto and K. Yamaguchi: *Kagaku Kogak Ronbunshu*, **8**, 285 (1982)
 - 7) Koga, Y., S. Endoh, J. Koga and K. Yamaguchi: *J. Soc. Power Tech. Japan*, **19**, 171 (1982)
 - 8) Meloy, T. P.: *Powder Techn.*, **16**, 233 (1977)
 - 9) Okuno, C. et al.: "Tahenryo Kaiseki Ho", Nikkagiken, Tokyo (1971)
 - 10) Sugimoto, M. and K. Yamamoto: *J. Res. Ass. of Powder Tech. Japan*, **8**, 426 (1971)
 - 11) Tsubaki, J. and G. Jimbo: *Powder Techn.*, **22**, 171 (1979)
 - 12) Zahn, C. T. and R. Z. Roskies: *IEEE Trans. Comp.*, **C-21**, 269 (1972)
- (1981 年 7 月 18 日受理; 粉体工学会昭和 56 年度春期研究発表会(大阪, 1981 年 5 月)にて発表)

Classification of Particle Shape by Principal Component Analysis Method

Shigehisa Endoh, Yoshikazu Kuga,
Jiro Koga and Kenji Yamaguchi

The Inst. of Phys. and Chem. Research, Wako, Saitama 351

The principal component analysis method was applied to the classification of particle shape of Mullite beads. The parameters measured from particle silhouette were shape indices of elongation, circularity, etc. and Fourier coefficients of angular bend function. Some of the shape indices were correlated among them and four clusters of them were obtained on the correlation space. However, the Fourier coefficients were mutually independent.

Eight parameters which can be defined for non-holomorphic shapes were selected and analyzed similarly. The first principal component was found to relate to the elongation and the second to the roughness of profile. The contribution of the two components to total variance was 84%. Two groups of Millite bead separated in shape by an inclined rotating disk were tested. The space of the two principal components was effective for shape classification.