粒子の3次元形状解析と指標化

柴田 俊春*, 明 一郎*, 山口 賢治*

Three Dimensional Shape Analysis of Pebbles and Its Characterization

by

Toshiharu SHIBATA[†] Ichiro AKASHI[†]
and Kenji YAMAGUCHI[†]

To investigate geometrical parameters such as surface area and volume of particulates and shape parameters as elongation, flatness and so on, salient silhouettes of a sample of pebbles were analyzed three-dimensionally with the discrete Fourier transformation rotating about a single axis. From the results, the surface area and the volume were well correlated with a set of the sine coefficients. The Characteristic forms of pebbles were allocated in a three-dimensional space where the Fourier coefficients(parameters) were combined.

Key Words : Fourier Transform, Correlation Analysis, Shape Distribution, Surface Area, Volume

1. 緒 言

粒子形状の3次元解析は、その充填性、運動挙動、表面反応および粒子の分類などを調べる際に重要である。

この関連では、定量形態学において、確率、統計的手法で成果が修められてきている^{1,2)}。またVouk³⁾は全方位角と天頂角にわたり求めた平均投影面積が立体表面積の1/4になることを示した。これが以来投影面積と表面積の相関として利用されてきている。

方位軸、天頂軸を回転軸にして立体を回転させて、投影面積を実測することは、立体が小さくなければ必ずしも困難を伴うものではないが、一軸回転での適切な知見(CTのように立体再構成が可能)があると後の

解析が容易になる。本研究では一軸回転下での粒子投影輪郭をフーリエ変換し、立体粒子表面積、体積との関連を検討するとともにフーリエ係数を用いて形状特徴空間を調べた。

2. 実験方法と解析

粒子投影像を用いた形状解析にあって“くぼみ”を持つ粒子では、その形状解析処理が複雑化する。本文では簡単化のため非凹形状かつ凹凸の少ない河原の小石を粒体試料として代表させた。試料個数は40個である。これらの表面積、体積、かさばり度を実測した。表面積は細断方眼紙を表面に貼り付け、そのます目数によった。また体積は液体排除量換算値である。

以降の実験手順はつぎの通りである。粒子にはその最大径にあわせた延長上にチャック固定用短棒を接着した(Fig.1)。粒子を設置したときの安定面を基準(0°)とし、粒子を回転軸受けに固定し、いくつかの刻み角度で180度まで回転し、この回転角ごとに画像解析器に輪郭座標をとりこみ、粒子-固定用短棒の境界点を動径測定開始点として記録後、短棒像を切断した。

昭和63年6月6日受付

化学工学協会北海道大会にて発表(昭和62年7月)

* 北海道大学工学部応用化学科

(〒060 札幌市北区13条西8丁目)

TEL 011-716-2111 内線 6552

[†] Dept. of Applied Chemistry, Fac. of Eng., Hokkaido Univ. Sapporo 060

Fig.1 Sample setting and a selection of a base point
CG:center of gravity
MP:middle point of the maximum length
(or of Feret's diameter)

引続きこの開始点と次に述べる基準点を通る基軸から、9度刻みに動径値を40点求めた。基準点(原点)は、画像の重心CG(常法)を指定したものと、画像の最大径(基軸)の中点MPの二通りが考えられる。引続き、輪郭データを半区間離散フーリエ正弦変換法で処理する。

すなわち動径 $f(\theta)$ の正弦変換係数 B_k を使用する^{4,5)}。

$$B_k = (1/N) \sum_{\theta=0}^{N-1} f(\theta) \sin(\pi k \theta / N),$$

$$k = 0, 1, \dots, N-1 \quad (1)$$

正弦係数の使用は、別に述べた⁵⁾いくつかの利点とともに、2次元解析時の係数の収束性が良いことによった(試料粒子の次元)。試料粒子の面積、体積その他の次元を**Table 1**にまとめた。回転にともなう形状変化の様子の一例を**Fig. 2**に示した。放射線上の粒子配列はかさ指数の順である。また同一円周上の輪郭像は刻み角20度毎での平面画像の変化の様子である。

Fig. 3は従来の相当径をパラメータとして含む面積

Fig.2 Sketch of silhouettes of a sample of pebbles in step-wise rotations

Table 1 Dimension of pebble samples

No.	Vol. [cc]	Area [cm ²]	Bulkiness [mm]			L.B.T [cc]	L.B.T/Vol. [—]
			Length	Breadth	Thick.		
1	13.5	31.2	48.0	29.0	18.5	25.8	1.91
2	15.5	33.7	48.5	34.0	18.5	31.5	1.97
3	11.2	28.5	44.0	25.0	18.0	19.8	1.77
4	11.0	28.1	37.5	33.5	16.0	20.1	1.83
5	11.1	26.3	39.0	26.5	20.0	20.7	1.86
6	7.5	21.1	41.0	22.5	15.0	13.8	1.84
7	24.5	50.4	68.0	33.0	20.0	44.9	1.83
8	7.9	19.8	37.5	21.0	15.0	11.8	1.50
9	13.0	34.8	52.5	32.5	16.5	28.2	2.17
10	19.5	40.7	54.0	30.0	21.0	34.0	1.74
11	9.0	26.4	41.0	31.0	13.0	16.5	1.84
12	10.0	25.7	36.0	27.5	15.0	14.8	1.48
13	8.0	22.6	36.0	28.0	15.0	15.1	1.89
14	19.0	40.8	59.5	28.0	20.5	34.2	1.80
15	10.5	30.1	41.0	36.0	14.5	21.4	2.04
16	5.7	19.6	35.5	25.5	10.0	9.0	1.59
17	8.9	23.0	37.5	25.0	16.0	15.0	1.68
18	8.3	24.5	44.0	25.0	15.0	16.5	1.99
19	12.5	30.2	41.5	32.5	18.0	24.3	1.94
20	19.0	32.8	51.5	29.0	24.0	35.8	1.89
22	19.0	40.3	48.0	29.5	20.0	28.3	1.49
23	7.8	20.0	31.0	23.0	19.0	13.6	1.74
25	10.0	27.2	42.5	29.5	17.0	21.3	2.13
26	8.6	21.8	39.5	20.5	18.0	14.6	1.70
27	16.0	38.8	45.0	49.0	19.5	43.0	2.69
28	8.9	23.9	41.0	29.0	15.0	17.8	2.00
29	11.0	26.2	39.5	24.5	23.0	22.3	2.02
30	19.0	40.3	42.5	35.5	29.0	43.8	2.30
31	12.0	32.1	61.0	25.0	17.5	26.7	2.22
32	8.9	22.1	33.0	28.0	19.5	18.0	2.02
33	16.5	38.0	52.5	34.5	18.5	33.5	2.03
34	16.0	38.1	47.5	38.0	18.5	33.4	2.09
37	17.5	35.5	39.5	36.0	27.0	38.4	2.19
42	6.2	19.8	37.0	22.5	14.5	12.1	1.95
45	19.0	44.5	55.0	45.5	15.5	38.8	2.04
46	14.0	34.7	48.5	34.5	17.5	29.3	2.09
47	13.5	36.9	50.0	28.0	25.5	35.7	2.64
50	8.0	20.4	31.5	28.0	14.5	12.8	1.60
51	15.0	41.6	50.0	48.5	11.5	27.9	1.86
52	17.0	37.7	54.5	33.0	15.5	27.9	1.64

推定法の一つでもある体積と面積の実測関係である。おおよそ2/3乗の関係が成立している。

Fig.3 Original data (pebbels)
— Relation between surface area and volume —

3. 解析結果

フーリエ解析を行った際、基準点の違いが係数におよぼす効果を比較した。**Fig. 4** はデータの一致が良くない例(形状の不規則性が強くあらわれる3角形)を示した。(正弦)係数中特に大きい値を持つ低次の奇調和数成分には、大きな差は見られず、どちらも形状の特徴を共通的に示していると考え、以降の処理の多くは、長軸中点を基準点とした。

ついで、目的とするフーリエ係数を用いる表面積、体積の見積りを実施した。**Fig. 5** は **Table 1** に示した試料中の数例について、実測面積と刻み角10度のフーリエ係数全体(18×40個)の2乗和との相関である。面積と変換係数2乗和間の線形相関は Parseval の相関に準じている。積和を求めた際、基準点のちがいによる相関係数の差は1%程度であり基準点の違いは区別できない。**Fig. 6** は表面積で見られた2次元の場合と

Fig. 4 Comparison of Fourier sine coefficients according to the different base points(origin)

Fig. 5 Surface area of pebbles
- Two origins (CG and MP) show almost same results for surface area estimation via radius vectors -

Fig. 6 Volume of pebbles

Fig. 7 Flatness-factor loading for volume estimation

の類推を3次元に拡張して3乗和をとった体積の場合である。この点綴結果にばらつきがあり、二つの相関係数も表面積の際より差は大きくなっているとはいえ、全体としては直線性が読みとれる。ばらつきに影響を与える因子はフーリエ解析の結果、主に粒子の偏平性によるものと考えられた。次にこの効果を補正する。フーリエ変換を用いる2次元形状解析での形の分類^{6,7)}ではたした長短度の働きのように、3次元形状の偏平度修正因子 F はフーリエ係数を用いると次のように書ける。

$$F = \frac{\sum_k \left\{ \frac{B(4k+1)}{B(4k+3)} \right\}_{\theta=0}}{\sum_k \left\{ \frac{B(4k+1)}{B(4k+3)} \right\}_{\theta=90}} \quad (2)$$

F で加重修正を行った体積相関の結果を**Fig. 7**に示す。ここで基点はすべて中央値である。修正操作により最初から線上に位置していた点は変化を受けず、修正後は偏奇している点は減少した。

4. 推定精度の問題(刻み角, 対象変換係数)

ここまでは粒子の3次元形状測定のための回転刻み角を10度にとった場合を示した。形の複雑さにも依存するとして、どの程度の刻み角が面積、体積の安定な推定に必要なか、また刻み角を増した際の不安定化の様

Fig. 8 Effect of angle-increment for projection on surface area estimation (levelled)

子を次に調べた。安定性は投影形状の取り込み数を変えることによって生じる係数とデータの分散の様子と、平均化した相関係数値を用いて評価した。

Fig. 8は従来代替的に用いられる単一面投影画像からの変換係数2乗和(白丸), および刻み角の影響を無視できるまで小さく刻んだ場合の変換係数2乗和(黒丸)である。複数面取り込みの画像からの推算値が低い値を示すのは偏平性, なし非球形性の効果を受けていることによる。刻み角の変化に伴う値の分散状態に顕著な差異はなかった。また粒子沈降, 浮上時に示す投影面積は, ここでの単一面投影画像対応の値である。投影画像の面積は変換係数の2乗和(40点変換標本)との間に良好な比例関係がある(比例係数6.84)ので, 平均投影面積と実際の表面積との比, 3.46を得た。これはVoukの値4.0と比較して小さい値であるが回転軸を長径に合わせていることによる。短径基準の回転結果を考慮すると比の値3.46は増加する(**Fig. 8**点綴相応での勾配が低下)。

Fig. 9に体積推定に関する点綴を示す。取り込み画像数3枚以上で安定になることがわかる。

Fig. 9 Effect of angle-increment for projection

$$\frac{\sum_k B(k, \theta)^3}{\sum_m \sum_k |B(k, m\pi/M)|^3} / M$$

Fig. 10 Stability of correlations or measurements

Fig. 10は刻み角の変化(取り込み画像の枚数)による表面積, 体積推定の変動を相関係数値を用いてまとめた結果である。刻み角60度ではほぼ安定になり, 30度以下では一定である。図中黒丸は刻み角10度の画像から任意枚数(3および5)のデータを取り出した結果で, 投影角をランダムに設定したことに対応する。投影角を系統的に取ることが望ましいとして, 不規則設定でも4方向程度で面積, 体積の見積が可能である。

投影像の採取画面の枚数は別として, 一画面からの動径採取点はいずれも40点であった。上に正弦変換係数の収束性の良さを述べた通り, 高次の調和数成分は値が小さく面積, 体積の推定にあたって全点を必要としないことも予想される。係数の数を切り詰めた際の

Fig. 11 Cut-off errors in estimation of surface area and volume (whole coeffs. -40)

誤差をFig. 11に示した。実験精度を考えると誤差1%以下を保証する係数個数20個程度で表面積、体積ともよい評価が可能である。

5. 3次元形状の分類

体積とフーリエ係数の相関にあつて、偏平度の効果が顕著に見られる粒子があつた。他の化学、物理的性質や現象の整理をするとき、ここで示した3次元粒子に対するフーリエ係数を用いた粒子分類は目安の一つになり得ると考える。

分類指標としては、刻まれた角度ごと、および周波数が等しい係数ごとの差、分散があげられる。

ある投影角ごとの正弦係数(対称成分)の隣りあう奇数調和数成分の差の総和 F_1 は2次元図形の長短度(2角性)のように棒状、あるいは3角形状の粒子で大きい値をとる。

$$F_1 = \sum_{\text{deg}} \sum_k \log \left| \frac{B(\text{deg}, 2k+1)}{B(\text{deg}, 2k+3)} \right| \quad (3)$$

調和数を揃え、隣接投影角の相違による係数差の合計 F_2 は不規則形状では、角度ごとの変換係数の激しい振動がみられ、このときは大きい値をとる。

$$F_2 = \sum_{\text{deg}} \sum_k \log \left| \frac{B(\text{deg}, 2k+1)}{B(\text{deg}+\text{increment}, 2k+1)} \right| \quad (4)$$

F_1 で見られる状態をさらに区分し、角度ごとの係数の差の分散状態が異なるとした場合、次式で表現できる。

$$F_3 = \sum_{\text{deg}} \left| \frac{SB(\text{deg})}{SB_{av}} \right|$$

$$SB(\text{deg}) = \sum_k |B(\text{deg}, 2k+1) - B(\text{deg}, 2k+3)|$$

$$SB_{av} = \sum_{\text{deg}} \frac{|SB(\text{deg})|}{\text{number of planes}} \quad (5)$$

これら3個の分類指標空間に各粒子を配置した(Fig. 12)。三つの座標平面に示した包絡閉曲線は粒子位置を各々平行射影した際に見られた粒子集団の分散範囲である。この範囲から大きくはずれた試料番号15, 31, 51の粒子はそれぞれ分類指標を代表するような3次元形状でもある。 F_1 , F_2 , F_3 の何れもが小さいものは球

Fig. 12 Shape distribution of pebbles in a characteristic space (F_1, F_2, F_3)

状に近いものである。

F_1 の増加は棒状化、 F_3 は偏平化に寄与する。また F_2 が最大の値をとる粒子はFig. 4で見た不規則形状である。

以上の実験結果に基づいて、意図した粒子形状の分類ができることを示した。

なお、輪郭からの標本点(40点)採取から離散フーリエ変換を実施し、正弦(余弦)係数算出までの所用時間は、三角関数値をルックアップテーブルで準備しコンパイルベシック下で実施したとして30~40秒程度である。この時間は正、余弦係数いずれか片方、および標本点中の数字桁の有効性の薄いものを省略すること並びに使用プログラム言語の改善等でさらに短縮が可能と考える。

6. まとめ

最長径(フェレー径)を基軸にあわせ、複数の投影角で粒子画像の輪郭を求め、これをフーリエ正弦変換した係数を用いて、数%の誤差で粒子表面積と体積を評価できた。また係数を持ちて粒子の3次元的分布(分類)の様子を示した。

Nomenclature

$B_k, B(K)$: Fourier sine coefficient (1/N)	[cm]	corresponding to volume	[cm ³ or cc]
$\sum B(k, \theta)^2 $: leveled square sum(per projected face),		CG : center of gravity	[-]
corresponding to surface area	[cm ²]	deg, θ : incremented angles in rotation	
$\sum B(k, \theta)^3 $: leveled cubic sum(per projected face),		(projected angle)	[deg]

F	: flatness, Eg.(2)	[-]	m	: integer, [0, M-1]	[-]
F_1	: rodness, Eg.(3)	[-]	MP	: middle point of the maximum length (or Feret's diameter)	[-]
F_2	: irregularity, Eg.(4)	[-]	N	: sampling points for discrete Fourier transformation	[-]
F_3	: three-dimensional(3D) flatness, Eg.(5)	[-]	$S B_{av}$	: plane-averaged elongation, cf. Eg.(5)	[-]
$f(\theta')$	: distance from a centroid	[cm]	$SB(deg)$	: averaged elongation, cf. Eg.(5)	[-]
k	: integer for harmonic number	[-]	V	: volume of particles or solids	[cm ³ or cc]
M	: maximum number of sampling faces in rotation	[-]			

References

- 1) Suwa, N : "Quantitative Microscopy", (in Japanese) Iwanami-Shoten (1977)
- 2) Makishima, K. et al (trans.) : "Keiryō Keitaigaku (in Japanese)" Uchida-Rou-Kaku-Ho (1983)
(DeHoff, R. T. and F. N. Rhines : "Quantitative Microscopy", McGraw-Hill)
- 3) Vouk, V : *Nature*, **162** (4113), 330 (1948)
- 4) Shibata, T., N. Yoshiki and K. Yamaguchi : Bull. of Fac. Eng., Hokkaido Univ., #131, 21, (1986)
- 5) Shibata, T. and K. Yamaguchi : *J. Soc. Powd. Tech., Japan*, **24**, 217 (1987)
- 6) Shibata, T., M. Morikubo and K. Yamaguchi : *The Micromeritics (Funsai)*, **32**, 4 (1988)
- 7) Endoh, S., Y. Kuga, J. Koga and K. Yamaguchi : *Kagakukougaku - Ronbun - Shu*, **8**, 476 (1982)

★ 四分法の原稿を募集中!!

会誌がお手もとに届くと、まず「四分法」という方が多いようです
この人気ある四分法に気軽にご投稿されませんか……………
長さは575字以内で内容はできるかぎり粉に関連したものが
望ましいのですが、限定はいたしません。ご投稿を心よりお待ちしております。