

令和元年5月22日現在

機関番号：82626

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2017～2018

課題番号：17K18409

研究課題名(和文) 粒子群の基礎物性に関する2D-3D変換技術の開発

研究課題名(英文) 2D-3D conversion technology for physical properties of particle assembly

研究代表者

上田 高生 (Ueda, Takao)

国立研究開発法人産業技術総合研究所・エネルギー・環境領域・研究員

研究者番号：20760284

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：粒子や結晶、細胞、空隙等の離散体は、社会のあらゆる場面に存在し、その構造に関心が寄せられることが多い。離散体が3次元である以上、体積等の3次元物性(3D物性)が重要となるが、一般的に3D物性は計測が難しい。そのため、顕微鏡等によって計測可能な、断面積等の2次元物性(2D物性)で代替することが多い。しかし、2D物性と3D物性の間には大きな差がある。

2D物性から3D物性を推定する技術を開発した。具体的には、様々な形状の3D粒子モデルを作成し、計測された2D物性を近似するような粒子モデルの組合せを遺伝アルゴリズム(生物進化を模倣した最適化手法)により見つけることで3D物性を推定する。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本技術は、(1)様々な形状の離散体に適用でき、(2)任意の3D物性を推定できる点で既往の技術から大きく飛躍しており学術的意義が大きい。また、顕微鏡による離散体の構造分析を行う幅広い分野に活用できるため社会的意義も大きい。具体例を挙げると以下の分野での応用が期待される。製造分野(各種製品中の粒子・結晶、製品内のポイド等)、材料分野(合金の結晶、複合材のフィラー、繊維強化樹脂の繊維等)、医療分野(生体組織の細胞等)、食品分野(食品内の空隙等)、地質分野(岩石の結晶、鉱石の鉱物相等)。

研究成果の概要(英文)：Accurate assessment of three-dimensional (3D) particle characteristics, such as particle shape and size distribution, is a basic requirement in various fields. In practice, however, two-dimensional (2D) characteristics are often measured instead of 3D. A conversion method which simultaneously estimates multiple 3D characteristics from measurable multiple 2D counterparts is here proposed. Briefly, the method consists of the following steps: numerical creation of 3D particle models; computation of 3D and 2D parameter distributions of the model particles to establish a conversion database; and determination of the optimal combination of the 3D particle models to fit the measured 2D parameter distributions, using the genetic algorithm. The method is novel in two respects: (i) versatility, as it is applicable to various types of particles, and (ii) convenience, as multiple parameters can be estimated at once.

研究分野：粉体工学

キーワード：ステレオロジー 2D-3D変換 遺伝アルゴリズム

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

(1) 固体粒子の集合体である粒状材料の体積、形状、表面積などの基本的な 3D 性状の把握は多くの分野で必要とされている。実務上は、3D 性状を直接的に計測することが困難又は現実的でないケースがあり、そのような場合は 2D 測定で代替せざるを得ない。しかし、2D 実測値から 3D 実態を正しく予測することは通常は困難である。例えば楕円体粒子の断面は、その位置によって様々な形となる。これを頻度分布で表すと、1 つの 3D 真値に対して 2D 実測値はバラつきを持った分布となる。多数の粒子からなる粒子群を対象とすると、この様な 2D-3D 間のバイアスが複合的に作用するため、2D 実測値から 3D 実態を予測することは容易ではない。

(2) 2D 実測から 3D 実態の推定については「ステレオロジー」という分野で様々な手法が提案されてきたが、幾何学的に計算可能な楕円体等の規則形状粒子の特定指標を対象としているなどの制約が多く、汎用性に乏しい問題があった。

2. 研究の目的

本研究の目的は、複数の 2D 実測値から 3D 実態を予測する手法 (2D-3D 変換法) の開発である。

3. 研究の方法

(1) 2D-3D 変換法の開発

開発する 2D-3D 変換法の概要は、様々な形状の 3D 粒子モデルをシミュレートし、粒子モデルの 2D・3D 指標を計算してデータベース化して、観測した 2D 値を最も良く近似するような粒子モデルの組合せを見つけることで 3D 指標を推定する。すなわち、本手法の根幹は数値解析プログラムの開発である。

まず、2D-3D 変換法の 3 つの主要構成要素を開発する。すなわち、粒子サイズ・形状等の 3D 性状を任意に設定できる 3D 粒子モデルの開発、3D 粒子モデルの任意の 2D 情報を取得して統計処理するプログラムの開発、及び 遺伝的アルゴリズム(GA)による 3D 粒子モデルの最適組合せ探索プログラムの開発、である。

その後、各要素を統合して、2D 実測値から自動的に 3D 予測値を計算するプログラムを開発する。

(2) X 線 CT 解析による実験検証

X 線 CT 解析により 2D-3D 変換法の実験検証を実施する。珪砂の X 線 CT 撮像を行い、各粒子の複数の 3D 指標 (例えば、体積・表面積等) を計算する。続いて、サンプル全体の断面を取得して、2D 値 (面積・周長等) を計算する。2D 値分布から、2D-3D 変換法によって 3D 予測値を計算し、実際の 3D 値と比較検証する。

4. 研究成果

(1) 2D-3D 変換法の開発

以下の手順による 2D-3D 変換法を開発した (図 1)。

様々な形状の 3D の粒子モデルを数値解析的に作成する。

粒子モデルの 3D 物性 (体積等) 及びランダム断面解析により 2D 物性 (断面積等) を計算し、両者を関連付けた変換データベース (以下、変換 DB) を構築する。

変換対象とする粒子群の断面像を取得し、個々の粒子断面を計測して、任意の 2D 物性の分布 (以下、観測 2D 分布) を作成する。

観測 2D 物性分布を粒子モデルの組合せで近似する。まず粒子モデルの存在比率をランダムに設定した場合の 2D 物性分布を観測 2D 分布と比較する。

観測 2D 分布を最も良く近似するような粒子モデルの組み合わせを GA により決定する。

決定された粒子モデルの組み合わせに基づき、変換 DB によって、対象粒子群の 3D 物性を推定する。これにより、観測した 2D 物性 (断面積等) から 3D 物性 (体積等) を推定することができる。

ここでは数値解析的に作成した粒子モデルを用いる場合について説明したが、対象粒子群からサンプリングした実粒子の実測データを利用することもできる。その場合、変換 DB 作成の際の作業量が増える一方で、対象とする粒子群の形状特性を直接的に変換 DB に反映できるため変換精度が向上する。

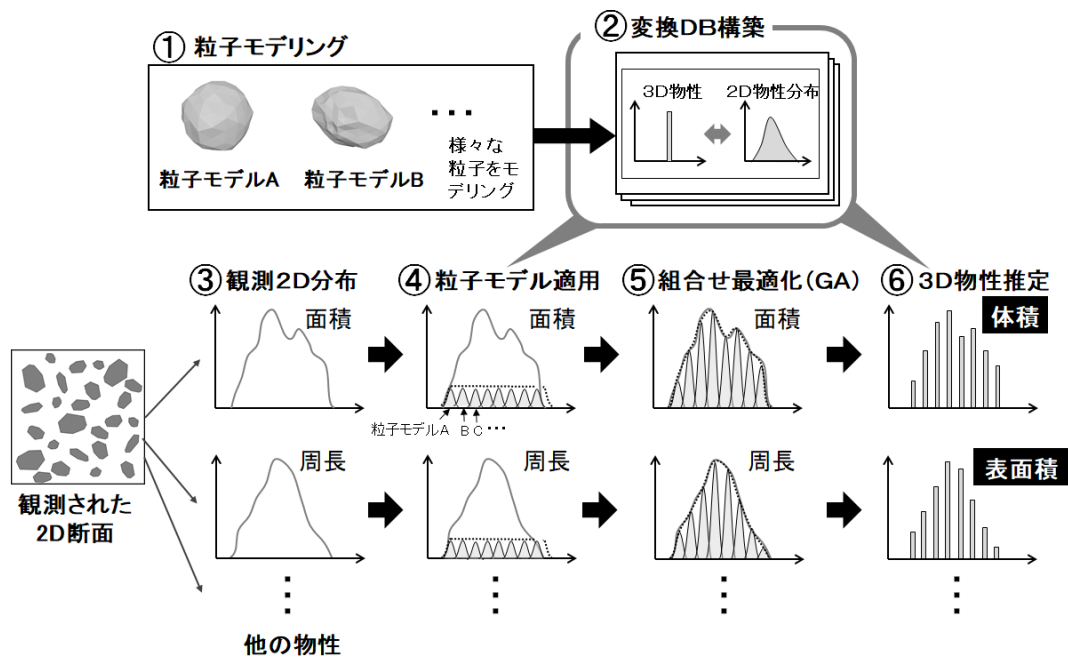


図1 2D-3D変換法の概要(上田, クリーンテクノロジー, 2019)

(2) 実験検証

実験検証に0.21~1.40mmの粒径を持つ珪砂を使用した。珪砂を円筒形樹脂容器(径7.5mm、高さ20mm)に詰め、X線CT撮影を行った。撮影装置は、島津製作所製の「inspeXio SMX-100CT」撮影画像サイズは512×512画素、解像度は0.017mm/画素である。

X線CTにより取得した3次元の密度分布から、個々の粒子を分離識別するためのポスト処理を行った。ポスト処理には、日本ビジュアルサイエンス(株)製のソフトウェア「ExFact VR Revision 2.1」を利用した。容器の情報を削除し、粒子と間隙を大津法により2値化して粒子部分を抽出し、Watershed法により粒子を分離識別した。この状態で殆どの粒子は識別できたが、複数の粒子が結合されたまま認識したものや、容器周辺の粒子で容器を削除した際にデータが部分欠損してしまったものは目視により排除して、21631個の良好な粒子データを取得した。ポスト処理後の粒子サンプルの例を図2に示す。なお、ポスト処理を容易にするため、篩い分けした珪砂をサイズ毎にX線CT撮影を行ったが、2D-3D変換の検証においてはそれらを混合して幅広い粒径分布の粒子群として利用した。

推定する3D指標は任意に選択することが可能だが、今回は4つの3D指標、すなわち表面積 Q_1 、体積 Q_2 、長/中軸長比 Q_3 、及び長/短軸長比 Q_4 を選択し、各粒子について計算した。対応する2D指標は3D指標と関連の強いものが望ましいため、3つの指標すなわち、断面積 P_1 、周長 P_2 、及び長/短軸長比 P_3 として、各粒子データのランダムな位置の切断面について計算した。

変換DB構築のため、50個の粒子をランダムにサンプリングして、2D及び3Dの指標を計算した。

観測した P_1 、 P_2 、 P_3 から、開発した2D-3D変換法によって Q_1 、 Q_2 、 Q_3 、 Q_4 を推定した結果を図3に示す。サイズに係る指標である表面積 Q_1 、体積 Q_2 については高い精度で推定できた。一方で形状に係る指標である長/中軸長比 Q_3 、長/短軸長比 Q_4 については、どちらも推定できているものの精度に改善の余地がある。

今後の課題は、形状に係る指標の推定精度向上である。今回は3D指標の軸長比を推定するために2D指標の軸長比を使用した。が、そもそも2D及び3Dの形状指標間の関連性は解明されていない。形状に係る2D・3D指標間の関連性を明らかにして、所望の3D指標を推定するの

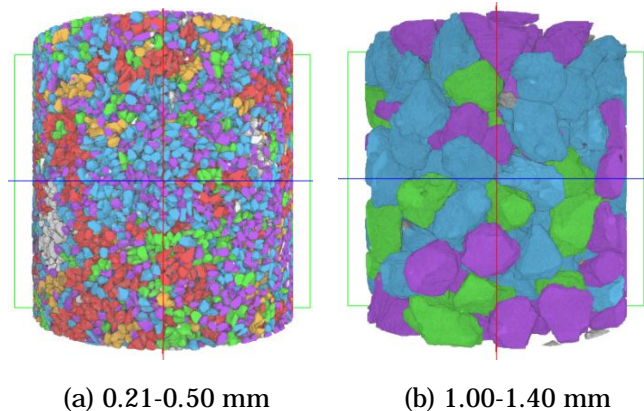


図2 粒子識別後の珪砂サンプルデータ

に適切な 2D 指標を使用することができれば、形状に係る指標の推定精度向上が期待される。

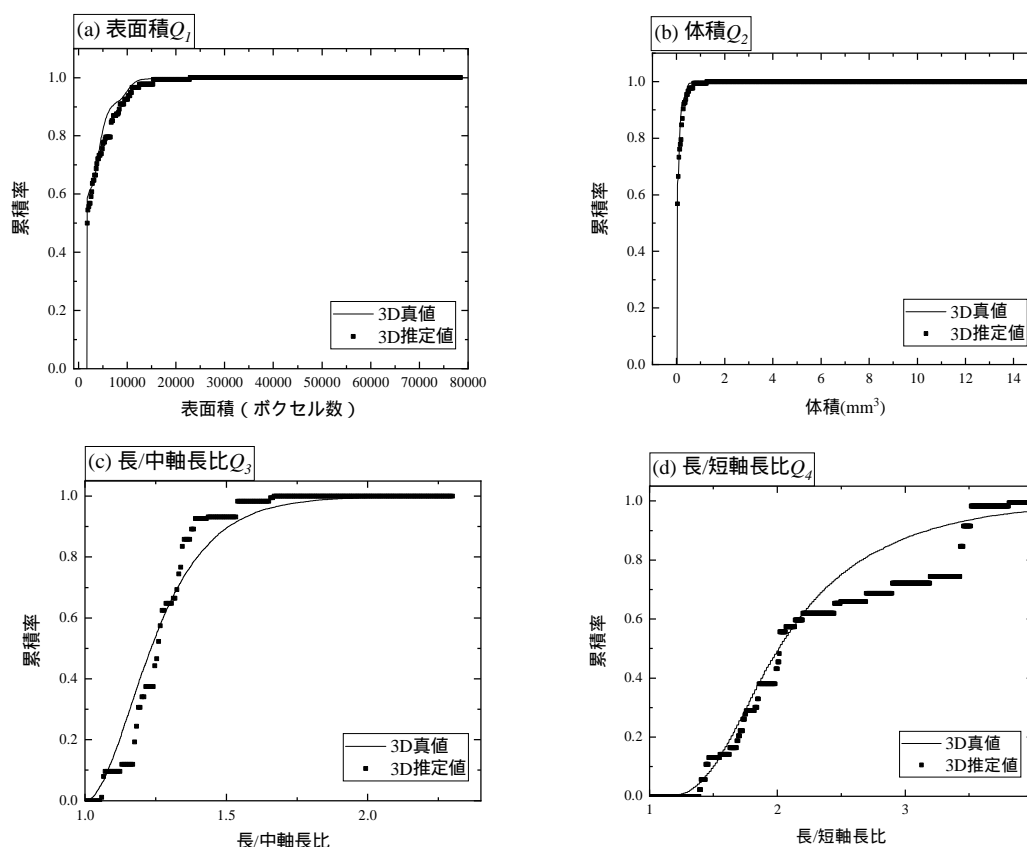


図 3 3D 指標推定結果

5 . 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計 2 件)

Takao Ueda, Tatsuya Oki and Shigeki Koyanaka, 2D-3D conversion method for assessment of multiple characteristics of particle shape and size, Powder Technology, 査読有, Vol. 343, 2019, 287-295.

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2018.11.019>

上田高生, 離散体 (粒子・結晶・細胞・空隙等) の三次元推定, クリーンテクノロジー, 査読無, 29(5), 2019, 62-64.

〔学会発表〕(計 1 件)

上田高生, 粒子群のサイズ・形状情報に関する 2D - 3D 変換技術, 粉体工学会 2018 年度秋期研究発表会, 2018.

〔産業財産権〕

○出願状況 (計 1 件)

名称: 3D パラメータ推定装置、3D パラメータ推定プログラム及び 3D パラメータ推定方法

発明者: 上田高生, 大木達也

権利者: 国立研究開発法人産業技術総合研究所

種類: 特許

番号: PCT/JP2018/036668

出願年: 2018

国内外の別: 国外

6 . 研究組織

研究代表者単独で実施した。

※科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。