

基于B样条的主动轮廓线法测量液滴接触角

裴念强¹, 郭开华¹, 李廷勋¹, 刘杰²

(1. 中山大学工学院, 广东, 广州, 510275; 2. 上海交通大学机械与动力工程学院, 上海, 200030)

摘要: 接触角是研究表面浸润性的一个重要参数, 传统的液滴接触角测量采用 ADSA (axisymmetric drop-shape analysis) 技术, 假定液滴完全对称, 然后利用边检测技术提取液滴的边线。显然, 由于表面性质的多样性, 液滴完全对称的假定是不合理的。本文利用图像识别中通常采用的 Snake 法测量液滴接触角, 可以同时测量前进与后退角。为了减少控制点的个数、提高控制点的灵活性以及减小运算量, 文章引入3次B样条作为Snake的轮廓线。为了准确得到接触点, 将轮廓线作了对称处理。

关键词: 主动轮廓线; 蛇模型; B样条; 接触角; 液滴

中图分类号: TP 391

文献标识码: A

文章编号: 1001-4160(2007)10-1383-1385

Measure drop contact angle based B-spline active contour

Pei Nianqiang¹, Guo Kaihua¹, Li Tingxun¹ and Liu Jie²

(1. School of Engineering, Sun Yat-sen University, Guangzhou, 510275, Guangdong, China; 2. Mechanical Engineering & Automation, Shanghai Jiaotong University, Shanghai, 200030, China)

Abstract: Contact angle is important parameter in investigating surface wetting. Traditional contact angle measure method takes ADSA technology. It assumes liquid drop is absolute axisymmetric and edge detection module is used. Obviously, since variety of surface property, the assumption of absolute axisymmetric drop isn't rational. Snake method which is used in image distinguish is taken to measure drop contact angle. It can measure both advanced and receded angle. To reduce number of control point, improve flexibility and reduce calculation quantity, thrice B spline is introduce to be contour line. For obtain the precise contact point, the symmetry coordinate of contour is create.

Key words: active contour line, snake, B spline, contact angle, liquid drop

Pei NQ, Guo KH, Li TX and Liu J. Measure drop contact angle based B-spline active contour. Computers and Applied Chemistry, 2007, 24(10):1383-1385.

1 引言

在表面化学中, 液体的界面特性非常重要, 学者们已经开发了众多的方法去表征、测量液体的界面特征, 接触角是其中最重要的一个^[1,2]。通过接触角可以揭示液体与之接触的固体、气体之间, 作用力之大小以及液体在相关固体表面浸润能力的强弱。此外, 接触角还可提供许多信息, 包括表面的亲疏水性、固体表面异质、表面粗糙度、固体的表面能、液体的线张力等^[3-5]。因此精确的测量接触角就成为一项至关重要的工作。

液滴测量技术是精确度较高的一种接触角测量技术, 无需直接接触液体, 因此已广泛用于接触角的测量, 特别是一些高压液体、高温测定以及反应活性剂等实验较为困难的场合。理论上, 只要拍摄下悬滴或躺滴的照片, 通过在接触点引出曲线的切线, 就可以使用测角器测得接触角的大小。然而, 这种手工的方法, 即使是非常有经验的人, 误差也在

$\pm 3^\circ$ ^[6], 而且重复性差。随着计算科学的发展, 许多新的液滴接触角分析的方法被开发出来后, 结果也越来越准确, 测量的精度也越来越高。

最初, 人们把躺滴当作球形的近似接触角的一部分, 然而这种假设往往是不准确的, 由于重力作用会使得液滴变形, 使不成球状。Bashforth 和 Adams^[1]考虑了此点, 当时计算机还不发达, 他们利用表格描述了液滴的近似形状; Rotenberg、Neumann 以及 Hoorfar^[7,8]等将之进一步完善并发展成 ADSA 法, 该法使用图像处理技术中的边检测技术, 从液滴图像中提取液滴的轮廓。假定实验中的液滴形状符合 Laplace 方程并且是轴对称的, 理论上由 Laplace 方程描述的曲线形状, 就与液滴实际的外形基本吻合, 因此, 接触角就可以通过计算接触点的斜率而得到。具体的计算过程可以在文献[8-11]中找到。已经证明 ADSA 法测量对称液滴接触角的精确度较高, 重复性好。但是由于固体表面的不均匀以及

收稿日期: 2006-10-21; **修回日期:** 2006-12-28

基金资助: 科技部国际科技合作重点项目计划 (AMS 轨迹探测器热控制系统的研制); 广东省自然科学基金资助项目 (05003274)

作者简介: 裴念强 (1975—) 男, 山东人, 博士, 流体力学专业。

郭开华 (1956—), 男, 教授、博导。

粗糙,液滴很少完全对称,因此 ADSA 技术总是会有偏差,计算在左右 2 个接触点的斜率其接触角不相等。当需要分别测量液滴的前进角与后退角时,ADSA 技术也没办法。而且 ADSA 法是基于如 Sobel、Canny、Laplace 等边缘检测技术,因此 ADSA 法的准确性依赖于图像的质量,以及使用何种检测技术,如果图像的对比不很强烈的话,依靠边缘检测分离图像将会失效。因此,Neumann 等又提出了 APF (automated polynomial fitting, APF) 法。APF 法从更高倍的图像中,利用 Gaussian Laplace 边缘检测技术提取液滴的外形,然后找到一个多项式曲线与实验得到的曲线基本吻合,进而计算接触点处接触角。但是正如文献[12]所说,接触角的精确度依赖于多项式的维数以及坐标点的选取,因此,也会受人为因素的影响。

为了更精确地测量液滴接触角,有人提出了采用 3 次 B 样条的 Snake 算法。是基于活动轮廓线的方法,具有更高的图像分辨力,是现今图形图像领域的研究热点。

2 B-Snake 模型

自 1987 年 Kass^[13] 提出 Snake (又称为主动轮廓线模型) 模型以来,各种基于 Snake 的图像分割、图像识别法蓬勃发展起来。Snake 模型的基本思想就是以构成一定形状的控制点为模板,通过模板自身的弹性形变,与图像局部特征相匹配而达到调和,即能量函数的极小化,而分割图像。再进一步分析模板,识别图像。

2.1 Snake 基本模型

主动轮廓能量最小公式的基本前提,是使其内能和势能的加权和最小,来确定参数化曲线。内能决定轮廓的扩张或光滑程度,势能定义于图像区域,且在对象边界的图像边缘处达到极小值。对总能量取最小值得到内力和势力。内力使曲线保持在一起且不过度弯曲。外力将曲线引向目标对象边界。为找到对象边界,首先在图像区将参数曲线初始化,然后两力作用,将之移动到势能最小点。

在数学上,主动轮廓为曲线:

$$X(s) = (x(s), y(s)), s \in (0, 1) \quad (1)$$

该曲线通过图像的空间区域到达如下能量泛函数的极小值点:

$$E_{\text{Snake}} = \int_0^1 E_{\text{int}}(X(s)) + E_{\text{image}}(X(s)) \quad (2)$$

其中第一项为内能泛函,定义如下:

$$E_{\text{int}}(X) = \frac{1}{2} \int_0^1 \left\{ \alpha(s) \left| \frac{\partial X}{\partial s} \right|^2 + \beta(s) \left| \frac{\partial^2 X}{\partial s^2} \right|^2 \right\} ds \quad (3)$$

内能函数的一阶偏导称为弹性能量,阻止曲线的伸展;二阶偏导称为弯曲能量,使曲线具有刚性。 $\alpha(s)$ 和 $\beta(s)$ 分别用于控制模型扩张和弯曲的强度。式(2)第二项称为势能,在基本 Snake 模型中取 $E_{\text{image}}(X) = -|\nabla I(X(s))|^2$ 。在能量极小化时,弹性能量驱使轮廓线成为光滑曲线或直线,弯曲能量把轮廓线压成一个圆形,而势能轮廓线靠向图像高梯度的位置,Snake 模型就在 3 种能量作用下工作。

2.2 B-Snake 算法

B-Snake 算法用 B 样条函数来拟合轮廓。根据 $Z+1$ 个控制点 $Q[0] \sim Q[M]$, B 样条由 $n-2$ 个 3 次多项式组成,每段由最靠近的 4 个控制点控制。

$$X_i(s) = 1/6 [s^3 \ s^2 \ s \ 1] \begin{bmatrix} -1 & 3 & -3 & 1 \\ 3 & -6 & 3 & 0 \\ -3 & 6 & 3 & 0 \\ 1 & 4 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q[i] \\ Q[i+1] \\ Q[i+2] \\ Q[i+3] \end{bmatrix} \quad i \in (0, 1, 2, \dots, Z) \quad (4)$$

整个样条曲线可以表示为: $X(s) = \sum_{i=0}^Z c_i(s) Q(i)$, 其中 $c_i(s)$ 为基函数,相邻段的交点称为节点。

传统 Snake 的内力包括曲线的一阶和二阶导数,分别表示曲线的弹性和刚性。但是在实际数字图像处理中,曲线往往以离散形式出现,由此计算得到的一阶和二阶导数通常是不连续的,大大影响曲线的光滑性,同时也很难确定内力参数 $\alpha(s)$ 、 $\beta(s)$ 。而 B 样条,特别是 3 次 B 样条函数,由于其每个节点两侧的一阶和二阶导数均连续,且不多的控制点即可表示较多的数据点,因此通过 B 样条,既省内力,又便于控制整条曲线的进化。

由于省了内力,因此, B-Snake 的能量形式只与图像力有关。在最优化能量方法上,采用基于梯度的与区域的能量结合的方法^[14],定义活动边界为 C (如图 1 所示),基于梯度的图像能可以用下式表示:

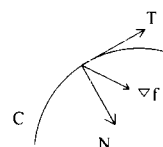


Fig. 1 Boundary curve.

图 1 边界曲线

$$E_{\text{edge}} = \oint_C k \cdot (\nabla f(r) \times dr) \quad (5)$$

根据格林公式,式(5)可以变换为:

$$E_{\text{edge}} = \iint_S T_e(f) ds \quad (\text{令 } T_e\{f\} = \nabla \cdot \nabla f(s))$$

同样基于区域的图像能可以表示为:

$$E_{\text{region}} = \iint_S T_r\{f\} ds \quad (6)$$

因此总的图像能就可以表示为式(7) (其中: $f_u = \alpha T_e\{f\} + (1 - \alpha) T_r(f)$):

$$E_{\text{image}} = \iint_S f_u(s) ds = \oint_C f_u^*(x, y) dx \quad (7)$$

2.3 边界条件

为了使用 B-Snake 方法测量液滴与固体表面的接触角,还需要定义液滴与固体表面接触的起始点,这样求起始点的斜率就可以得出接触角的大小。为了自动侦测接触点,可以沿固液接触面做实际液滴轮廓线的对称镜像,在对称点处测量接触角。液滴图像的样条函数使用公式(4),而对称镜像

的轮廓线函数为:

$$X_{\text{ref}}(s) = \sum_{i=0}^Z c_i^{\text{ref}}(s) Q(i) \quad (8)$$

其中 c_i^{ref} 为实际图像轮廓线控制点的对称坐标。因此,接触角就可以表示为:

$$\theta = 1/2 \left(\arctan \frac{dX(s)}{dx} + \arctan \frac{dX_{\text{ref}}(s)}{dx} \right) \quad (9)$$

以式(9)计算接触角可以避免因底板水平产生的测量误差。

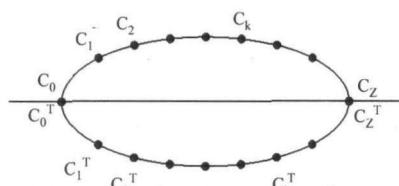


Fig. 2 B-Snake contour control points.

图2 B-Snake 轮廓线控制点

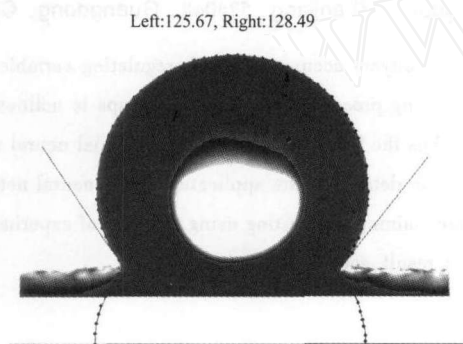


Fig. 3 Measure drop contact angle by B-Snake.

图3 使用 B-Snake 测液滴接触角

3 图像处理

图3为蒸馏水在 HSiW/SiO₂-Teflon 表面形成的液滴图像^[15],Guifang Chen 等假定液滴为对称液滴,测得接触角为 128.7°。但是表面粗糙度、均匀度以及线张力的影响^[16],液滴不可能完全对称。使用 B-Snake 测量此液滴的接触角,左接触角为 125.67°,而右接触角为 128.49°,可见左右接触角不是完全相等。因此使 B-Snake 法测量非对称性的液滴接触角,大大扩大测量接触角的范围。

4 结果与讨论

接触角在表面与界面科学中占有重要地位,采用 B-Snake 法测量液滴的接触角,是将图形图像识别技术,应用于界面科学的新途径,这种基于 Snake 的方法,不受液滴形状的限制,也不必忽略重力对液滴产生的变形,更可用于测量非对称及动态液滴,适用范围广、精确度高、复现性好。此外,由计算图形学知道, B 样条曲线仅需不多的控制点就可以柔和剧烈变化的曲线,3 次样条具有连续的一阶和二阶导数,保证曲线光滑,减少了计算量。本文利用 B 样条 Snake

法测量液滴接触角,效果较好,可以说, B-Snake 法是测量接触角的一种有效的方法。

References

- 1 Cheng Chuanxuan. Surface Physics and Chemistry, Beijing: Scientific and Technical Literature Publishing, 1995:124-147.
- 2 Mariem Lazghab, Khashayar Saleh, Isabelle Pezron, et al. Wettability assessment of finely divided solids. Powder Technology, 2005, 157(1-3):79-91.
- 3 Ram Hanumanthu and Kathleen J. Stebe, Equilibrium shapes and locations of axisymmetric, liquid drops on conical, solid surfaces. Colloids and Surfaces A: Physicochemical Eng Aspects, 2006, 282-283:227-239.
- 4 CNC Lam, Lu JY, Neumann AM. Measuring Contact Angle, in: K Holmberg, MJ Schwuger, DO Shah (Eds.), Handbook of Applied Surface and Colloid Chemistry, Part 5: Analysis in Surface Chemistry, Wiley Europe, 2001.
- 5 Emil Chibowski and Rafael Perea-Carpio, Problems of contact angle and solid surface free energy determination. Advances in Colloid and Interface Science, 2002, 98(2):245-264.
- 6 A Bateni, Susnar SS, Amirfazli A and Neumann AW. A high-accuracy polynomial fitting approach to determine contact angles, Colloids Surf A Physicochemical Eng Aspects, 2003, 219(1-3):215-231.
- 7 Rotenberg Y, Boruvka L and Neumann AW. Determination of surface tension and contact angle from the shapes of axisymmetric fluid interfaces. J Colloid Interface Sci, 1983, 93(1):169-183.
- 8 Hoorfar M and Neumann AW. Axisymmetric drop shape analysis for the determination of surface tension and contact angle. The Journal of Adhesion, 2004, 80:727-743.
- 9 Dingle NM, Kristianto Tjptowidjojo, Basaran OA and Harris MT. A finite element based algorithm for determining interfacial tension from pendant drop profiles. Journal of Colloid and Interface Science, 2005, 286:647-660.
- 10 Dingle NM and Harris MT. A robust algorithm for the simultaneous parameter estimation of interfacial tension and contact angle from sessile drop profiles. Journal of Colloid and Interface Science, 2005, 286:670-680.
- 11 Cabezas MG, Bateni A, Montanero JM and Neumann AW. A new method of image processing in the analysis of axisymmetric drop shapes. Colloids and Surfaces A: Physicochemical Eng Aspects, 2005, 255(1-3):193-200.
- 12 Bateni A, Susnar SS, Amirfazli A and Neumann AW. A high-accuracy polynomial fitting approach to determine contact angles. Colloids Surf A, 2003, 219(1-3):215-231.
- 13 Kass M, Witkin A and Terzopoulos D. Snakes: active contour models. International Journal of Computer Vision, 1987:321-331.
- 14 Jacob M, Blu T and Unser M. Efficient energies and algorithms for parametric snakes. IEEE Trans. Image Process. 2004, 13(9):1231-1244.
- 15 Chen Guifang, Li Jing and Yang Xiangguang, et al. Surface-appropriate lipophobicity—Application in isobutene oligomerization over Teflon-modified silica-supported 12-silicotungstic acid. Applied Catalysis A: General, 2006, 310:16-23.
- 16 Kralchevsky PA and Nagayama K. Particles at fluid interfaces and membranes. Elsevier, Amsterdam, 2001:92-97.

中文参考文献

- 1 程传焯. 表面物理化学, 北京: 科学技术文献出版社, 1995: 124-147.