

研 究 報 告

令和 8 年 4 月 6 日

公益財団法人 前田記念工学振興財団

理 事 長 岸 利 治 殿

研究代表者

所 属 : 早稲田大学

氏 名 : 阮 坤林

研究課題名 : 近赤外分光スペクトルを用いた締固めたベントナイトの含水比推定手法
の提案

助成金額 : 1 0 0 万円

研究実施期間 : 自 令和 7 年 4 月 1 日 ~ 至 令和 8 年 3 月 3 1 日

近赤外分光スペクトルを用いた

締固めたベントナイトの含水比推定手法の提案

Proposal of a Method for Estimating Water Content Ratio of Compacted Bentonite
Using Near-Infrared Spectroscopy

早稲田大学創造理工学部 助教 阮坤林

(研究計画ないし研究手法の概略)

1. はじめに

日本では、原子力発電により生じた高レベル放射性廃棄物を安全に処分する方法として、地下 300 m 以深に埋設する地層処分が提案されている。地層処分ではガラス固化した放射性廃棄物を周辺の岩盤から隔離するために、ベントナイトを締め固めて作製した緩衝材が用いられる。締固めたベントナイト緩衝材の品質を管理するうえで、含水比は重要な指標である。含水比の測定には、これまで炉乾燥法などの質量比に基づく測定手法が用いられてきたが、非破壊・面的・連続的に評価できない。地下の広大な空間で安全で効率的に含水比の測定を行うためには、迅速・非破壊・面的・連続的な測定手法の開発が必要である。

近赤外分光法は、物質に近赤外光を照射して、反射もしくは透過における近赤外線吸収を測定し、そのスペクトルから分子の構造の同定や存在量の定量を行う手法である。近赤外分光スペクトルにより含水状態を分析できる原理は、水分子が特異な近赤外線吸収特性を示すことに由来する¹⁾。本研究では、近赤外分光スペクトルと PLS 回帰を用いて検量モデルを構築し、締め固めたベントナイトの含水比推定手法を提案する。そして、本研究で提案する手法の妥当性を検証するために、検量モデルから得られる含水比を実際の含水量と比較する。

2. 試料および装置

2.1. 使用した試料および供試体作製手法

使用した試料は山形県月布産の Na 型ベントナイトクニゲル V1 (クニミネ工業製、以下 KV1 とする) である。KV1 を選定したのは、地層処分における緩衝材に用いるベントナイト材料の有力候補の一つであるためである。表 1 は試料の基本的性質を示したものである。スペクトルの測定に使用した供試体は、静的締固めにより作製した。

まず乾燥炉により 110℃で 24 時間以上で炉乾燥させた KV1 に、目標含水比約 6-20%の範囲で、スプレーによる加水で調整し、密閉した袋の中で 1 週間以上養生した。その後、直径 28 mm、高さ 10 mm のモールドに、目標乾燥密度がそれぞれ 1.6, 1.7, 1.8, 1.9 Mg/m³ になるように湿潤試料を測り入れ静的締固めを行った。このように含水比および乾燥密度を変化させた供試体を合計 95 個作成した。図 1 は試料および供試体の外観を示したものの、図 2 は作成した供試体の含水比および乾燥密度の関係も示したものである。

表 1 試料の基本的性質

土粒子の密度 ρ_s (Mg/m ³)	2.76
液性限界 w_L (%)	536.4
塑性限界 w_P (%)	34.7
液性指数 I_P	501.8
メチレンブルー吸着量 Q_s (mmol)	82
自然含水比 w (%)	9.6

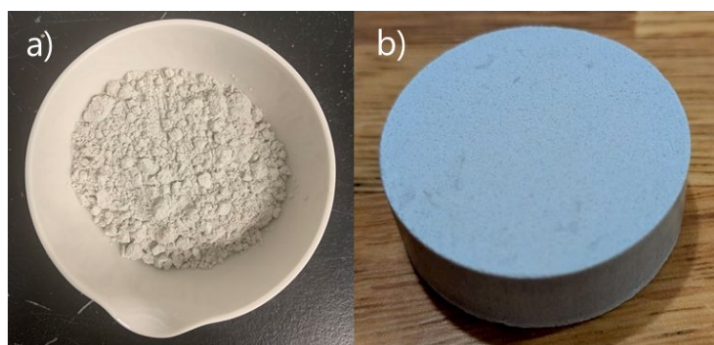


図 1 試料・供試体の外観：a)KV1, b) 静的締固め供試体

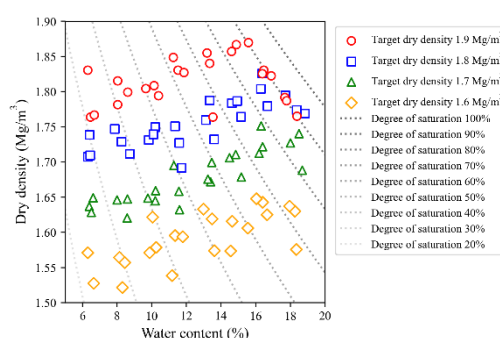


図 2 供試体の含水比と乾燥密度

2.2. 使用した装置および解析方法

使用した装置は近赤外分光センサ NIRONE S2.2 (Spectral Engines 製) である。図 3 は、近赤外分光センサおよび、スペクトル測定の様子を示したものである。測定波長は 1750-2150 nm, 測定間隔は 2 nm (スペクトル変数: 201 個) である。本波長領域を選択したのは、1900 nm 付近に水分子の分子振動に由来する吸収帯が確認できるためである¹⁾。スペクトルの測定は、供試体の直径約 28 mm に対して、測定範囲が直径 20 mm のフロントチューブオプティクスを取り付けて行った。供試体のスペクトルは、標準白色板 Spectralon (Labsphere 製) に対する試料の反射率を算出した。式(1)は反射率 R の算出式である。

$$R_{\lambda} = \frac{S_{\lambda} - D_{\lambda}}{B_{\lambda} - D_{\lambda}} \quad (3)$$

ここで λ は波長(nm), S は供試体の反射強度, B は標準白色版の光強度, D はセンサの内部信号である。

スペクトル測定後は、供試体の含水比を推定する解析を行った。図 4 は解析の流れを示したものである。はじめに測定したスペクトルデータを、学習データと検証用データをランダムに 80:20 に分割し、学習データから PLS 回帰により含水比推定の検量モデルを作成した。その際に、Savitzky-Golay 法によるスムージング(11 フレーム)と SNV による正規化で前処理を行った¹⁾。またクロスバリデーション(Leave-one-out 法)で最適な潜在変数を決定した。次に、決定係数, RMSE, 作成したモデルの詳細から含水比の推定精度を評価した。最後にランダム分割を 100 回繰り返し、決定係数と RMSE の平均を算出し、サンプリングのばらつきを低減させた。

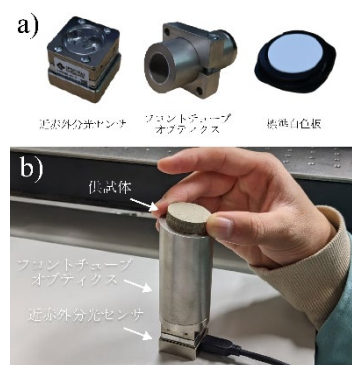


図 3 装置の外観および測定の様子

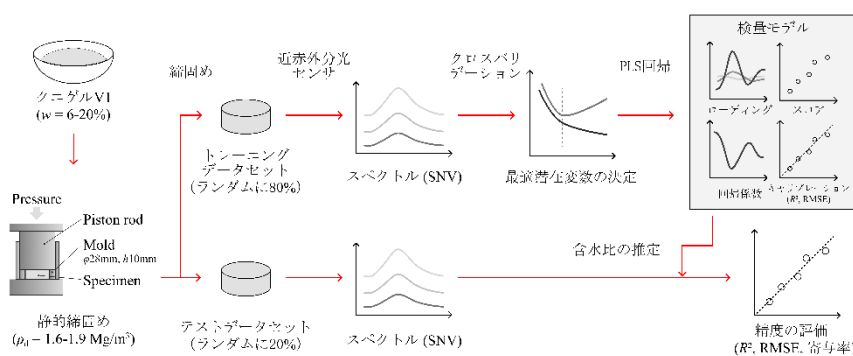


図 4 解析の流れ

(実験調査によって得られた新しい知見)

3. 結果と考察

図 5 は測定したスペクトルを示したものである．図 5 より，以下の 2 つの傾向が確認できる．1 つ目に，1900 nm 付近に水分子の吸収帯が確認でき，含水比によって波形が異なっていることが確認できる．2 つ目に，含水比が増加するにつれて反射率が小さいほうへベースラインがシフトしていることが確認できる．このベースライン変化は，含水比のみならず，乾燥密度等による表面構造の変化により生じていると考えられるため，含水比の信号を強調するための正規化を行った．図 6 は正規化後のスペクトルを示したものである．図 6 より，正規化を行ったことにより，ベースラインが補正され，水分子の吸収帯の変化がより明確になったことが確認できる．特に 1786, 1906, 1972, 2083 nm 付近には水分子の基準振動の倍音や結合音に由来する吸収帯が生じるとされており²⁾，同様のピークが図 6 のスペクトルでも確認できる．

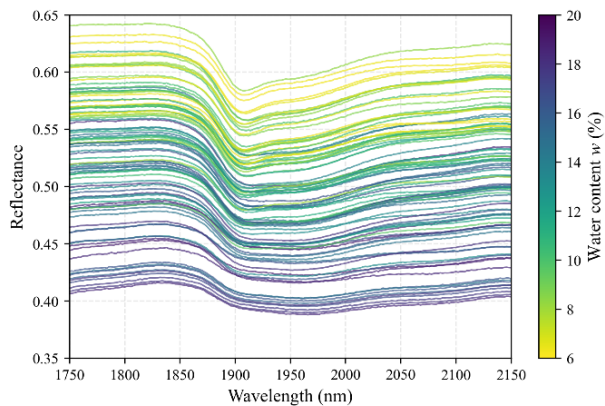


図 5 測定したスペクトル

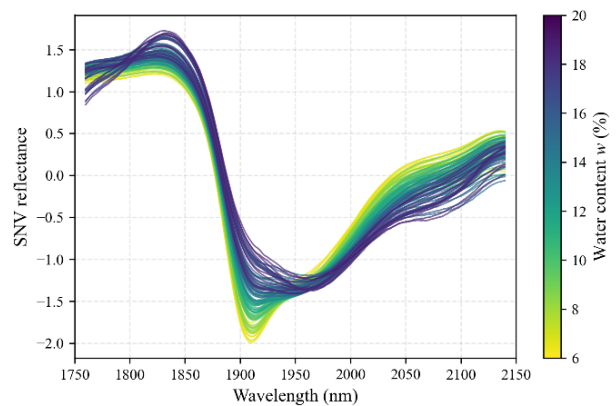


図 6 正規化後のスペクトル

図 6 の正規化後のスペクトルおよび，それに対応する含水比データを用いて，PLS 回帰により含水比を推定する検量モデルを作成した．図 7 は，最適な潜在変数を決定するためのクロスバリデーションの結果を示したものである．RMSE が最小となる潜在変数 6 を最適な潜在変数とした．また図 8 は PLS 回帰係数を示したものである．含水状態と関係の強い 1786, 1906, 1972, 2083 nm 付近のピークの値を反映したモデルであることが確認できる．

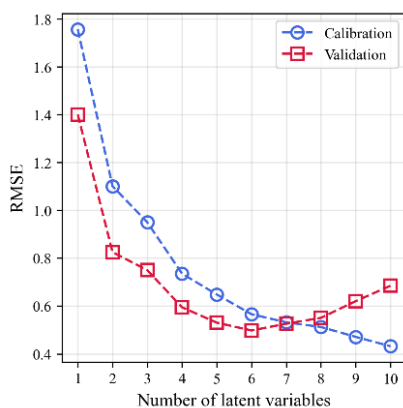


図 7 クロスバリデーションの結果

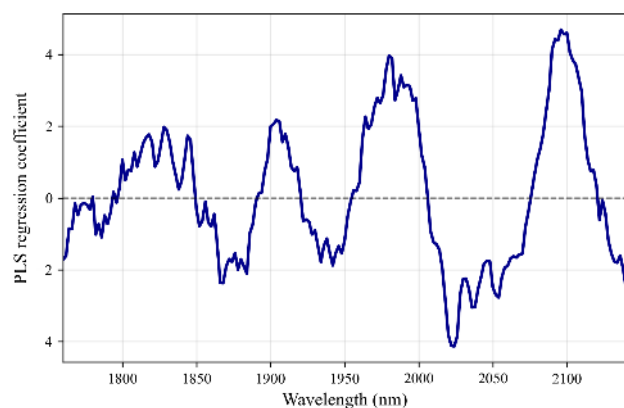


図 8 PLS 回帰係数

図 9 は作成した検量モデルをもとに含水比を推定した結果の一例を示したものである。また 100 回の平均決定係数 R^2 は 0.964 ± 0.013 ，RMSE は $0.687 \pm 0.116\%$ であった。実際の含水比測定試験としても，十分に高い精度であると言える。高精度な推定精度の根拠を明確にするために，検量モデルの詳細データである PLS ローディングも算出した。図 10 は PLS ローディングのうち，第 1 主成分（PC1）および第 2 主成分（PC2）を示したものである。PC1 と PC2 では，それぞれ 1906, 1972, 2083 nm 付近のピークが確認でき，含水状態の情報を主成分として適切に抽出できていることが，高精度な推定につながったと考えられる。

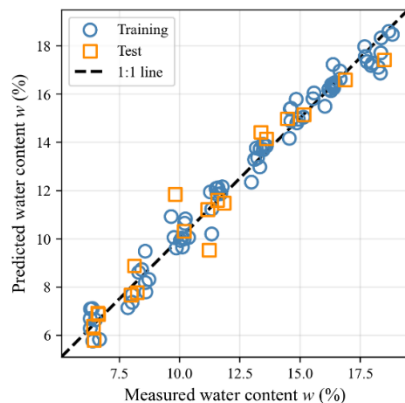


図 9 推定結果の一例

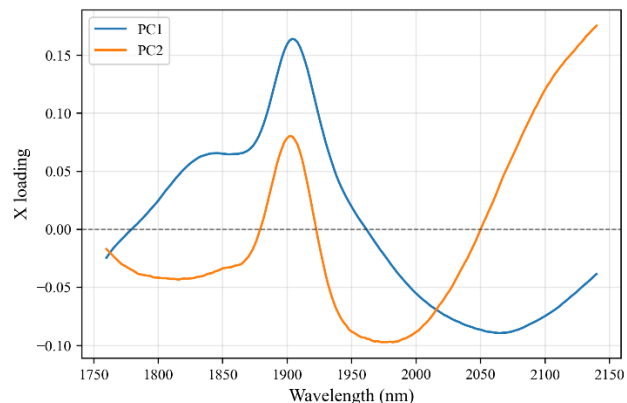


図 10 PLS ローディングの一例（PC1, PC2）

4. 結論

本研究では，近赤外分光スペクトルと PLS 回帰を用いて，締め固めたベントナイトの含水比を推定する検量モデルを構築し，推定精度を評価した。本手法は決定係数が 0.964 ± 0.013 ，RMSE が $0.687 \pm 0.116\%$ と高い精度で含水比を推定できることが明らかとなった。その要因として，1900 nm 付近の水分子の吸収帯，特に 1906, 1972, 2083 nm 付近のピークを検量モデルで抽出できているからである。本研究で提案する近赤外分光スペクトルと PLS 回帰を用いた含水比推定モデルは，次世代の迅速で非破壊な含水比測定手法となりうる。

参考文献

- 1) Ozaki, Y., Huck, C., Tsuchikawa, S., Engelsen, S.B.: Near-Infrared Spectroscopy Theory, Spectral Analysis, Instrumentation, and Applications. Springer Singapore, 2021, 593 p.
- 2) Bizovská, V., Pálková, H., Madejová, J.: Near-infrared study of water adsorption on homo-ionic forms of montmorillonite, Clays Clay Miner., Vol. 64, pp. 571-585, 2016.

（発表論文）

【学術論文】

1. Qingyuan Zhao, Kunlin Ruan, Daichi Ito, Guodong Cai, Hao Wang, Hideo Komine (2026.1) Effects of specimen preparation methods on polymer–montmorillonite interactions and hydraulic conductivity of polymer-modified bentonite–sand mixtures. *Soils and Foundations*, 66(1), 101711.
2. Kunlin Ruan, Hideo Komine, Daichi Ito, Hailong Wang, Haruya Suzuki, Qingyuan Zhao (2026.1) Effect of High-Temperature History on the Swelling Characteristics and Chemical Composition of

Kunigel-V1 Bentonite. *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering*, 152(1), 04025178.

3. Danxi Sun, Hailong Wang, Guojun Cai, Hideo Komine, Daichi Ito, Gaofeng Pan, Kunlin Ruan (2025.11) Effect of High-Temperature History on the Swelling Characteristics and Chemical Composition of Kunigel-V1 Bentonite. *Journal of Materials in Civil Engineering*, 37(11), 04025386.
4. Hao Wang, Hailong Wang, Hideo Komine, Daichi Ito, Kunlin Ruan (2025.8) Sand displacement and nonuniform swelling in sand-bentonite mixture by image processing. *Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering*, 17(8), 5099-5110.
5. 村瀬颯太, 渋江俊道, 阮坤林, 伊藤大知, 王海龍, 小峯秀雄. (2025. 9) 核磁気共鳴を用いたモンモリロナイト単位層に吸着される水分子の定量, 第16回環境地盤工学シンポジウム発表論文集, 8-4, 256-259.
- 6 Sota Murase, Te Ma, Kunlin Ruan, Daichi Ito, Hailong Wang, Hideo Komine (2025.2) Estimation of water content of compacted Kunigel-V1 bentonite using near-infrared spectra. *Soils and Foundations*, 65(1), 101545.

【国際会議論文】

1. Kunlin Ruan, Hideo Komine, Hailong Wang, Daichi Ito (2025.6) Temperature effect on water movement in bentonites during saturation. *3rd International Conference on Energy Geotechnics (ICEGT 2025)*. Paris, France.
2. Sota Murase, Toshimichi Shibue, Kunlin Ruan, Daichi Ito, Hailong Wang, Hideo Komine (2025.6) Determining water quantities and forms in clays with static ¹H-NMR. *3rd International Conference on Energy Geotechnics (ICEGT 2025)*. Paris, France.
3. Chiharu Urano, Hailong Wang, Kunlin Ruan, Hideo Komine, Daichi Ito (2025.6) Effect of sand particle size and dry density on bentonite penetration behaviours into sand voids. *3rd International Conference on Energy Geotechnics (ICEGT 2025)*. Paris, France.

【口頭発表】

1. 阮坤林 他, 締固めたクニゲル-V1 ベントナイトの膨潤圧と水分拡散に及ぼす温度履歴の影響に関する実験的研究, 令和7年度土木学会全国大会第80回年次学術講演会, 12AM2-Ve-12, 2025年9月.
2. 阮坤林, 締固めたベントナイトの四つ間隙構造及びその飽和中の膨潤-水理特性への影響, 環境地盤工学研究所, 2025年8月. (招待有り)
3. 阮坤林 他, 瞬時プロファイリング法を用いた飽和時のベントナイトの透水係数に及ぼす密度不均一性の影響, 第60回地盤工学研究発表会, 24-7-3-01, 2025年7月

その他 学生と連名発表 50 件ほど