

報告番号	乙 第 5194 号
------	------------

近赤外分光法による木材の非破壊計測

名古屋大学図書	
和	1253605

土川 覚

1 9 9 7

目 次

第1章 序論	1
第2章 試料の表面構造が近赤外吸収スペクトルに及ぼす影響	6
2. 1 緒言	6
2. 2 実験装置および方法	6
2. 2. 1 実験装置	6
2. 2. 2 供試材および実験方法	7
2. 3 実験結果および考察	8
2. 3. 1 照射面の組織構造が吸光度に及ぼす影響	8
2. 3. 2 照射面の表面粗さが吸光度に及ぼす影響	9
2. 3. 3 臨界拡散厚さの波長依存性	10
2. 3. 4 散乱係数および吸光係数の波長依存性	11
2. 4 加工面粗さと細胞体の構成状況を理論的に考慮に入れた実験式	12
2. 5 結言	16
第3章 指向特性モデルと光路モデル	17
3. 1 緒言	17
3. 2 供試材および実験方法	17
3. 3 モデルの構成および計算式	18
3. 3. 1 仮道管群における近赤外光の拡散反射・透過指向特性	18
(a) 指向特性モデル：タイプD	18
(b) 指向特性モデル：タイプR	18
(c) 指向特性モデル：タイプM	19
3. 3. 2 光路モデルの計算における基本的な考え方	19
(a) 各細胞壁への照射光の割り付け	19
(b) 入射面から外へ放射される光の割合	22
3. 3. 3 半無限仮道管群における拡散反射光漏出率 $S(\theta)$	24
(a) タイプDの場合	24
(b) タイプRの場合	27
(c) タイプMの場合	27
3. 4 計算結果	29
3. 5 結言	30
第4章 反射光および透過光に関する包括的な理論体系の構築	32
4. 1 緒言	32
4. 2 供試材および実験方法	32
4. 3 実験結果および考察	33
4. 3. 1 拡散反射光の挙動と Kubelka-Munk の関係式	33
4. 3. 2 透過光の挙動と Kubelka-Munk の関係式	34
4. 3. 3 透過光に対しても適用可能な放射に関する一般化された入出力の関係式	35
(a) 基本的な考え方	35
(b) 平行光成分を考慮した拡散過程モデル	36
(c) n 乗余弦放射強度モデル	36
(d) 試料内平均光路長の計算	37

(e) 放射に関する一般化された入出力の関係式に基づく 透過光強度の計算式	4 0
4. 3. 4 計算結果および n に関する考察	4 1
4. 4 結言	4 5
 第5章 近赤外分光法による含有水分検量線の作成	 4 6
5. 1 緒言	4 6
5. 2 実験方法	4 6
5. 2. 1 供試材	4 6
5. 2. 2 臨界拡散厚さの計測	4 6
5. 2. 3 水分傾斜をもたない試料の含有水分に関する検量線の作成	4 6
5. 2. 4 水分傾斜をもつ試料の含水率予測精度	4 7
5. 2. 5 水分傾斜の状況が含水率予測値に及ぼす影響についての検討	4 7
5. 3 検量線の作成とその評価	4 8
5. 3. 1 重回帰分析に基づいた検量線の作成	4 8
5. 3. 2 検量線作成の手順および予測精度評価指標	4 9
5. 3. 3 検量線の作成条件	5 0
5. 4 結果および考察	5 0
5. 4. 1 臨界拡散厚さに及ぼす含有水分の影響	5 0
5. 4. 2 全供試樹種が含まれた試料母集団に関する検量線の予測精度	5 2
5. 4. 3 樹種別の試料母集団に関する検量線の予測精度	5 4
5. 4. 4 試料中の水分傾斜が含有水分の予測値に及ぼす影響	5 7
5. 4. 5 水分傾斜の状況が含水率予測値に及ぼす影響	5 9
5. 5 結言	6 0
 第6章 近赤外分光法による繊維走行・表面粗さ検量線の作成	 6 1
6. 1 緒言	6 1
6. 2 実験方法	6 1
6. 2. 1 測定試料	6 1
6. 2. 2 試料の吸光度測定方法	6 2
6. 3 検量線作成に関する問題点と対策	6 2
6. 3. 1 入射光と照射面繊維走行のなす角 θ を計測の対象とする場合	6 2
6. 3. 2 表面粗さを計測の対象とする場合	6 3
(a) 問題点	6 3
(b) θ と R'_y の組合せが吸光度に及ぼす影響	6 4
6. 4 検量線の作成手順	6 6
6. 4. 1 入射光と照射面繊維走行のなす角 θ に関する検量線 の作成と予測精度の評価	6 6
6. 4. 2 表面粗さ R'_y に関する検量線の作成と予測精度の評価	6 7
6. 5 結果および考察	6 7
6. 5. 1 入射光と照射面繊維走行のなす角 θ に関する検量線	6 7
(a) 検量線の作成と予測精度	6 7
(b) θ に関する検量線における選択波長	6 9
(c) θ に関する検量線に影響を及ぼす因子としての表面粗さ R'_y	6 9

6. 5. 2 表面粗さ R'_y に関する検量線	7 0
(a) 検量線の作成と予測精度	7 0
(b) ND フィルタの効用	7 1
6. 6 結言	7 4
第 7 章 結論	7 5
謝辞	7 9
引用文献	8 0

記号一覧

- A : 拡散反射光捕捉率を考慮した吸光度
 A_1 : 検量線評価用試料の実測値
 A_2 : 検量線評価用試料の実測値
 A_0 : 通常の測定によって得られる吸光度
 \bar{A} : 検量線評価用試料の実測値の平均
 A_p : 検量線評価用試料の実測値
 $A_{RT}(d)$: Kubelka-Munkの関係式から求められる吸光度(表面鏡を試料下面に密着させた場合)
 $A_{RTsum}(d)$: 放射に関する一般化された入出力の関係式から求められる吸光度(表面鏡を試料下面に密着させた場合)
 A_{sum} : 加工面粗さと細胞体の構成状況を考慮に入れた実験式に基づいて計算される吸光度
 A_{TT} : 表面粗さの2層構造モデルに基づいて計算される吸光度
 a_0 : 重回帰式における平均値調整用係数
 a_n : 重回帰式における偏回帰係数
 c : 拡散反射光捕捉率
 d : 試料厚さ
 d_1 : 試料内部の水分分布をモデル的に具現した試料上部の厚さ
 d_2 : 試料内部の水分分布をモデル的に具現した試料下部の厚さ
 \bar{d} : 放射に関する一般化された入出力の関係式に代入される等価厚さ
 \hat{d} : 入射光がすべて拡散した場合の等価厚さ \bar{d}
 d_{cr} : 臨界拡散厚さ
 d_{m1} : 半無限仮道管群から放射される拡散反射光モデルのパラメータ(図3-5参照)
 d_{m2} : 半無限仮道管群から放射される拡散反射光モデルのパラメータ(図3-5参照)
 $dP_{1\theta}$: 均等拡散状態($n=1$)における dP_θ
 $dP_{n\theta}$: n 乗余弦放射強度モデルにおける dP_θ
 dP_θ : 微小面 dS から θ 方向の傘状微小立体角内に発散する放射束
 dS : 試料照射面に対して平行な面内における微小面
 dv : 半無限仮道管群の任意の微小面積から放射される拡散反射光の微小量
 dx : 照射方向に対する試料の微小厚さ
 $d\xi$: 微小厚さ dx 内における θ 方向の光路長
 $\overline{d\xi}$: 微小厚さ dx 内の平均光路長(平行光成分を考慮した拡散過程モデルに n 乗余弦放射強度モデルを組み込んだ場合)
 $\overline{d\xi_d}$: 微小厚さ dx 内の平均光路長(均等拡散状態の場合)
 $\overline{d\xi_p}$: 微小厚さ dx 内の平行光成分の平均光路長(平行光成分を考慮した拡散過程モデルの場合)
 $\overline{d\xi_{sc}}$: 微小厚さ dx 内の散乱光成分の平均光路長(平行光成分を考慮した拡散過程モデルの場合)
 E : 半無限仮道管群から放射される拡散反射光モデルのパラメータ(式3.13参照)
 I : 拡散反射光強度
 I_0 : 入射光強度
 I_A : 加工面粗さと光学的に等価な薄膜の直下に実質木部が存在する領域から放射される拡散反射光の強度
 I_{BL} : 加工面粗さと光学的に等価な薄膜を透過して細胞内こう表面に達した光に起因する拡散反射光の強度

I_{BM} : 加工面粗さと光学的に等価な薄膜の直下に細胞内こうが存在する領域における当該薄膜から放射される拡散反射光の強度
 I_d : 半無限仮道管群の微小面積において、 i 層の細胞壁層を透過した照射光によって生じる拡散反射光の強度
 I_{ds} : 半無限仮道管群の任意の微小面積から放射される拡散反射光全体の強さ
 I_{nor} : 微小面 dS の法線方向の放射強度
 $I_{n\theta}$: 微小面 dS における θ 方向の放射強度
 $I_p(d)$: 放射に関する一般化された入出力の関係式から求められる平行透過光の強度
 $I_{pT}(d)$: 試料をいったん透過した平行光成分が表面鏡によって反射され、これに由来して試料表面から放射される光の強度
 $I_{RT}(d)$: Kubelka-Munkの関係式から求められる拡散反射光強度(表面鏡を試料下面に密着させた場合)
 $I_{sc}(d)$: 放射に関する一般化された入出力の関係式から求められる拡散透過光の強度
 $I_{scT}(d)$: 試料をいったん透過して散乱光となった成分が表面鏡によって反射され、これに由来して試料表面から放射される光の強度
 I_{sum} : 加工面粗さと細胞体の構成状況を考慮に入れた実験式によって求められる全拡散反射光の強度
 I_T : 光学的に十分に厚い試料から放射される全拡散反射光の強度
 $I_{Tsum}(d)$: 表面鏡によって反射された透過光に由来して試料表面から放射される光の強度
 I_{TT} : 表面粗さの2層構造モデルに基づいて計算される反射光の強度
 I_u : 加工面粗さと細胞体の構成状況を考慮に入れた実験式と放射に関する一般化された入出力の関係式から求められる反射光の強度
 i : 照射光あるいは拡散反射光が実質的に透過した細胞壁層数
 K : 照射方向の単位長さ当たりの吸光係数
 $L1_i$: 半無限仮道管群から放射される拡散反射光モデルのパラメータ(式3.35参照)
 $L2_i$: 半無限仮道管群から放射される拡散反射光モデルのパラメータ(式3.36参照)
 l : 細胞壁端面からの距離
 l_{is} : 積分球底面と試料表面間の距離
 MC : 含水率
 MC_1 : 試料内部の水分分布をモデル的に具現した試料上部の含水率
 MC_2 : 試料内部の水分分布をモデル的に具現した試料下部の含水率
 MC_{pr} : 検量線評価用試料の含水率予測値
 MV : 単位体積当たりの含水量
 MCC : 検量線作成用試料の実測値と回帰による予測値との間の重相関係数
 m : 加工面粗さと光学的に等価な薄膜の厚さに関する定数
 N : 放射輝度
 n : n 乗余弦放射強度モデルにおける指数
 n_p : 検量線評価用試料数
 P : 放射束
 PSD : 検量線評価用試料の実測値標準誤差
 P_{ALL} : 微小面 dS から微小厚さ dx 内に入射する全放射束
 $P(p)$: 半無限仮道管群の任意の細胞壁面に照射される光に由来する拡散反射光の強度
 $P(p)_e$: 半無限仮道管群における任意の細胞壁に照射された光に由来する拡散反射光強度のうちで、入射面から放射される光
 $P(p)_L$: 半無限仮道管群における所定の区間の細胞内こう表面で生じる拡散反射光の強度
 $P(p)_\theta$: 半無限仮道管群における所定の区間の細胞内こう表面で生じる拡散反射光のうちで、入射面から放射される光

p : 照射光あるいは拡散反射光が実質的に透過できる細胞壁層数
 P_p : 回帰による予測値
 R_c : 2次放射光寄与率
 R'_y : ナイフエッジ型触針を用いて測定された表面粗さの最大高さ
 RW : 仮道管横断面の半径方向の平均寸法
 RW_1 : 細胞内こう横断面の半径方向の平均寸法
 RW_2 : 細胞壁横断面の半径方向の平均寸法
 $R(d)$: Kubelka-Munkの関係式による反射率
 $RA(0, l)$: 細胞壁に遭遇せずに細胞内こうから直接放射される拡散反射光の割合
 $RA(p, l)$: 細胞内こう表面で生じた拡散反射光のうち、半無限仮道管群を透過して放射光となる割合
 $RA_1(p, l)$: 細胞内こう表面で生じた拡散反射光のうち、半無限仮道管群を透過して1次放射光となる割合
 $RA_2(p, l)$: 細胞内こう表面で生じた拡散反射光のうち、半無限仮道管群を透過して2次放射光となる割合
 r : 検量線評価用試料の実測値と検量線による予測値との間の相関係数
 r_d : 半無限仮道管群から放射される拡散反射光モデルのパラメータ(図3-5参照)
 S : 照射方向の単位長さ当たりの散乱係数
 S_{cw} : 木口面実質木部面積率
 SD_i : 半無限仮道管群から放射される拡散反射光モデルのパラメータ(式3.14参照)
 SM_i : 半無限仮道管群から放射される拡散反射光モデルのパラメータ(式3.34参照)
 SEC : 回帰推定の標準誤差
 SEP : 予測値標準誤差
 $S(\theta)$: 拡散反射光漏出率
 T_{ND} : NDフィルタの透過率
 TS_0 : 半無限仮道管群から放射される拡散反射光モデルのパラメータ(図3-5参照)
 TS_p : 半無限仮道管群から放射される拡散反射光モデルのパラメータ(図3-6参照)
 TW : 仮道管横断面の接線方向の平均寸法
 TW_1 : 細胞内こう横断面の接線方向の平均寸法
 TW_2 : 細胞壁横断面の接線方向の平均寸法
 $T(d)$: Kubelka-Munkの関係式による透過率
 t : 加工面粗さと光学的に等価な薄膜の厚さ
 \hat{t} : 放射に関する一般化された入出力の関係式に代入される等価薄膜の厚さ
 X : Kubelka-Munkの関係式におけるパラメータ(式2.5参照)
 x : 試料照射面からの距離
 x_n : 重回帰式における説明変量
 Y : 重回帰式における目的変量

 α : Kubelka-Munkの関係式におけるパラメータ(式2.6参照)
 β : Kubelka-Munkの関係式におけるパラメータ(式2.7参照)
 ε_i : 半無限仮道管群から放射される拡散反射光モデルのパラメータ(式3.37参照)
 γ : 半無限仮道管群から放射される拡散反射光モデルのパラメータ(図3-5参照)
 φ : 半無限仮道管群から放射される拡散反射光モデルのパラメータ(図3-5参照)
 φ_p : 半無限仮道管群から放射される拡散反射光モデルのパラメータ(図3-6参照)
 κ : 試料内で透過光が拡散する角度に関する係数
 λ : 照射波長
 μ : 半無限仮道管群から放射される拡散反射光モデルのパラメータ(図3-5参照)
 θ : 入射光と照射面繊維走行のなす角度

- ρ : 表面粗さの2層構造モデルに基づいて計算される反射光強度 I_{r} の減光率に関する係数
- τ : 半無限仮道管群から放射される拡散反射光モデルのパラメータ(図3-5参照)
- τ_p : 半無限仮道管群から放射される拡散反射光モデルのパラメータ(式3.16参照)
- ψ : 試料内で透過光が拡散する角度
- $\overline{\xi}$: 試料内平均光路長(平行光成分を考慮した拡散過程モデルに n 乗余弦放射強度モデルを組み込んだ場合)

図表一覧

第2章

- 図2-1 : 光学系の骨子
- 図2-2 : シトカスプルースの近赤外吸収スペクトル
- 図2-3 : 入射光と照射面繊維走行のなす角 θ が吸光度に及ぼす影響
- 図2-4 : 表面粗さ(最大高さ; R'_y)と吸光度の関係
- 図2-5 : 試料厚さ(d)と吸光度の関係
- 図2-6 : 各波長における散乱係数と吸光係数
- 図2-7 : 試料表層部の断面図
- 図2-8 : 加工面粗さと細胞体の構成状況を考慮に入れた実験式と実測値の比較
- 表2-1 : 各波長における拡散反射光漏出率 $S(\theta)$
- 表2-2 : 各波長における m の値

第3章

- 図3-1 : 仮道管横断面の平均寸法
- 図3-2 : 指向特性モデル
- 図3-3 : 光路モデル (タイプD)
- 図3-4 : 仮道管群から放射される光のモデル
- 図3-5 : $p=0$ の場合の拡散反射光モデル
- 図3-6 : 仮道管群から放射される拡散反射光のモデル
- 図3-7 : 拡散反射光漏出率の現実値(白印)と理論値(黒印)
- 表3-1 : 各波長領域の指向特性モデルと2次放射光寄与率

第4章

- 図4-1 : 試料厚さ(d)と吸光度の関係 (表面鏡なし)
- 図4-2 : 試料厚さ(d)と吸光度の関係 (表面鏡あり)
- 図4-3 : 放射に関する一般化された入出力の関係式の成立過程
- 図4-4 : 平行光成分を考慮した拡散過程モデル
- 図4-5 : n 乗余弦放射強度モデル
- 図4-6 : 試料内平均光路長の算出に関する概念図
- 図4-7 : 試料厚さ(d)が吸光度および透過率に及ぼす影響 (表面鏡あり)
- 図4-8 : 各波長における n および K/S
- 図4-9 : 近赤外光の挙動を記述するモデルの体系

第5章

- 図5-1 : 試料内の水分分布をモデル的に表現した試料
- 図5-2 : シトカスプルースの近赤外吸収スペクトル
- 図5-3 : 最良検量線作成の手順
- 図5-4 : 臨界拡散厚さ(d_{cr})に及ぼす含水率の影響
- 図5-5 : 含水率が臨界拡散厚さ(d_{cr})に及ぼす影響
- 図5-6 : 含水率実測値と予測値の相関
- 図5-7 : 単位体積当たりの含水量実測値と予測値の相関
- 図5-8 : 選択波長数による各評価指数の変化
- 図5-9 : 全乾時における平均密度と予測値標準誤差(SEP)の関係
- 図5-10 : 水分傾斜をもつ試料の予測値標準誤差(SEP)
- 図5-11 : モデル試料の水分状況が含水率予測値に及ぼす影響
- 表5-1 : 供試材の一覧

- 表 5－2：全供試樹種が含まれる母集団に関する含有水分検量線の予測精度
 表 5－3：樹種別の試料母集団に関する含有水分検量線の予測精度 (目的変量：含水率)
 表 5－4：樹種別の試料母集団に関する含有水分検量線の予測精度 (目的変量：単位体積当たりの含水量)

第 6 章

- 図 6－1：入射光と照射面繊維走行のなす角 θ が吸光度に及ぼす影響
 図 6－2：最大高さ (R'_y) と吸光度の関係
 図 6－3：表面粗さの 2 層構造光学モデル
 図 6－4： θ 実測値と予測値の相関
 図 6－5：各波長における θ と吸光度の単相関および近赤外吸収スペクトル
 図 6－6：表面粗さが θ の予測値に及ぼす影響
 図 6－7： R'_y 実測値と予測値の相関
 表 6－1： θ に関する検量線の予測精度 (検量線作成用試料母集団の分割なし)
 表 6－2： θ に関する検量線の予測精度 (検量線作成用試料母集団を 2 分割して作成)
 表 6－3：表面粗さ (R'_y) に関する検量線の予測精度 (ND フィルタなし)
 表 6－4：表面粗さ (R'_y) に関する検量線の予測精度 (ND フィルタあり)

第1章 序論

産業においては、これまで、資源の循環あるいは環境の保全という問題を積極的に考慮することがほとんどなかった。この概念を現在の社会体系に矛盾なく組み入れることは、地球レベルでの生態学的均衡を視野に入れて、自律調和型システムを再構築するために解決を急がなければならない課題となっている。そのような要請に応えうる資源は生物材料を措いては存在せず、なかんずく、木材は循環資源としての高い能力を顕在的にも潜在的にも備えている貴重な素材である。このような状況を背景にして木材の積極的な活用をはかり、これを高度に無駄なく利用することが現今の最重要課題の一つとして挙げられている。しかしながら、生物材料は自然界において生み出される素材としての制約を伴っており、金属やプラスチックのような均一な性質を期待することはできないため、材料としての利用を極限にまで高めようとするときには、個々の状況を的確に判断したうえで、それぞれに対してもっとも適切と思われる処置を加えることが必要とされる。このためにも、まず素材としての木材のさまざまな状況を正しく評価することがたいせつな前提となる。

たとえば、木材を建築材料として使用する場合には、強度や負荷応答と密接に関連した含水率、繊維走行などに着目して、これらが所定の基準を満足していることを確認することが部材として供給する際の不可欠な作業となる。また、金属などを対象とする工業分野でも、材料の加工を行いながらインプロセスでそれに関する情報を検出して刻々に最適な処置を講ずる生産方式が実現されつつあるが、木材を対象とする場合にはとくにそのような方式による利点が大きく発揮されるものと思われる。ルータで切削加工を行うときには、加工材の樹種や含水率を正しく知ることはもちろん、切削箇所の局所的な繊維走行や節、割れを刻々検出して、工具の回転方向、速度、その他の条件を適切に管制することが理想とされる。また、家具・調度品などに利用される場合には、上記の諸因子に加えて製品の品質を大きく左右する材表面の加工粗さを、各工程において適切にモニタリングすることが重要となる。

このように、木材の物理的ならびに化学的構成に関するさまざまな情報を正確・迅速・簡便に把握することは、これを材料としていろいろな状況下で使用する場合には不可避の課題となる。とくに、木材は生物体としての組織構造を保った状態、すなわちあるがままの状態で使用されることが一般的であるから、非破壊的に上述の試料情報を入手できる測定系を確立することが絶対的に必要となる。非破壊計測においては、その目的を達成するためにさまざまな形の物理的エネルギーが加えられ、これによって生起される現象が計測に利用される。具体的には、X線から長波に至る電磁波、中性子線、機械的振動、磁気、熱、電気などの物理的エネルギーを用いて、電磁誘導、反射、透過、浸透、漏洩などの物理的現象あるいはその結果に着目することが考えられる^{1,2)}。これまでに、木材を対象とするさまざまな非破壊計測手法が提案・開発されており³⁾、その一部はすでに実用化されているが、下に述べるようにいまだ多くの問題点を抱えており、普及が阻まれているのが現状である。

含有水分の非破壊計測に関しては数多くの研究例があり^{4,8)}、いろいろな測定方式が開発されている。とくに、高周波容量方式、直流抵抗方式、誘電率方式などによる測定システムは工場における通常の生産ラインで採用されている場合が多い。ところが、これらの諸方式は

対象とする材料の密度、樹種によって特性が変化するので、その差異を考慮して機器補正しなければ、有効な測定精度を得ることができない。また、試料の寸法・形状によって測定値が変動することも指摘されており⁹⁾、十分に確立された手法であるとは現状では言い難い。一方、繊維走行の非破壊計測に関しても、誘電率¹⁰⁾や光による反射率の変化^{11,12)}に着目して情報を入手しようとする研究例はあるものの、その可能性を言及するにとどまっているものがほとんどである。海外では、マイクロ波を用いた繊維走行検出装置の実用化が報告されているが¹³⁾、国内においては目視による検査がいまだ主流である。また、加工面粗さの評価は、ほとんどが汎用の触針式表面粗さ計によって行われている。しかしながら、これは測定の対象として木材のような細胞構造体を元来想定しておらず、また、測定には長時間を要する。したがって、生産現場での使用、すなわちインプロセス計測に耐えうる方法ではない。実際の加工工程においては、目視・触手などの官能検査によって表面粗さを判断するという状況におかれている。

このように、木材を対象とする現在の非破壊計測は、いずれの測定項目に関しても手法・測定システムともに満足すべき状況にない。冒頭に述べた目的を遂行するためには、従来法による発想とはまったく異なる新たな視点に立ってこれらの問題に取り組む必要がある。また、木材の加工および使用に際して留意すべき特性因子は単一ではなく前述のように複数の項目にわたるから、個々の特性をそれぞれ別の手法に基づいて個別に測定することは実用的でなく不都合も多い。単一の物理的エネルギーまたは現象によっていくつかの特性を同時に一括把握できる非破壊計測システムを構築することが強く望まれている。

本研究では、光を木材に照射し、反射あるいは透過に伴う諸現象を追究することによって上記の目的を達することができるのではないかと考え、800～2500nmの波長域をもつ近赤外光に着目した。この領域の光を利用した分光法として近赤外分光法 (Near Infrared Spectroscopy; NIRS) があり、従来から化学成分の分析に用いられてきた^{14,21)}。この方式においても見られるように、近赤外光を試料に照射して、試料から放射される反射または透過光を検出すると、特定の分光スペクトルが得られる。スペクトル中に見られる吸収は、そのほとんどが分子あるいは結晶格子の振動エネルギー準位間の遷移に基づいて生じる基準振動 (近赤外領域より波長の長い赤外光吸収) の倍音振動や結合振動によるものである。このため、測定物質中の各構成成分すなわち各種官能基に対応して特定波長に吸収が生じ、その吸収量の変化に着目することによって定量・定性分析を実施することが可能となる。

近赤外領域は、赤外領域 (2500～25000nm) に比較して吸収強度はるかに微弱である。そのため、赤外法のように試料を KBr 粉末に分散させて希釈するなどの前処理を施す必要がほとんどない。これは、試料中の高濃度成分を直接測定できること、換言すれば、試料を広義の非破壊で計測することが可能であることを意味する。とくに、近赤外領域における水のモル吸収係数は、赤外領域におけるその 1/1000 程度であるため、木材のように水を多量に含むことがある材料を測定対象とする場合には、とりわけ有益な手段になることが予想される。近赤外分光法では測定結果が近赤外光の反射あるいは透過スペクトルとして得られるから、複数個の特定波長における吸収量の変化に着目してこれらを適当な統計的手法で処理することにより、試料内のいろいろな成分を同時に定量分析することができる。また、比較的エネルギーの低い電磁波を用いるために、人体および試料が測定中に損傷を受けることがほと

んどないことも本法の大きな特色である。このように、多くの利点をもつ近赤外分光法は、すでに食品²²⁻²⁸⁾、薬品²⁹⁻³⁰⁾、製紙³¹⁻³⁴⁾などの分野においてはオンライン成分分析装置として実用化されており、正確さ、迅速性の点からも近年とくに注目を浴びている。

ところが、近赤外分光法を非破壊計測手法として木材に適用することは、種々の可能性を包含しているにもかかわらず、これまでほとんど試みられていなかった^{35,36)}。これは、従来法の測定対象には粉体あるいは液体の形態をとらせることが多かったために、木材のような固体を対象とする場合とは根本的に違った観点に立つ広義の非破壊計測の概念が必要とされていたことに起因する。近赤外分光法がこれまでもっとも広範に活用されてきた食品関連の分野では、分析中に試料の化学的特性が変化せず、分析後にも試料が食に供しうる状態にある場合の計測を、非破壊計測として定義している³⁷⁾。そのため、測定値に大きく影響する試料の物理的特性(粒径、充填密度など)をできる限り均一な状態にして計測することが本法を実施する際の重要な前提とされていた。また、食品関連以外の分野においても、上記の概念をそのまま取り入れて本法の化学的な定量分析としての有効性にのみ着目した研究・開発が行われてきた³⁸⁻⁴²⁾。

木材を測定の対象とする場合には、このような広義の非破壊計測を実施することは許されない。すなわち、生物体としての組織構造を保った集合体として、あるがままの状態での計測(狭義の非破壊計測)が要求される。この状況下では、さまざまな物理的構成に関する情報も測定値に当然含まれてしまうから、従来とは異なった見地から測定結果を解釈する必要がある。その反面、試料の物理的構成の相異に基づいた出力スペクトルの変化を単なる外乱として忌避するのではなく、それ自体に関する有益な情報源としてこれを肯定的に受け容れることも可能となる。すなわち、従来法のように試料を粉体化せずに計測することが可能となれば、試料の化学的構成に関する評価項目に加えて、試料の物理的構成に関する情報をも視野に入れて本法を活用できる途が拓かれる。試料内部の物理的構成を計測対象とすることは、これまでの近赤外分光法の常識の枠をはずすもので、これが実現されることによって得られる利得はきわめて大きいものと思われる。

本研究は、このような背景のもとで実施されたものであり、全体は大きく2部に分かれている。まず、第1章は序論であって、従来の研究状況、本研究の目的と意義、本論文の内容について述べている。続いて前半の第2~4章は、近赤外分光法を木材の物理的構成を認知できる手法として積極的に活用するための基盤を構築するもので、試料内部における近赤外光の挙動を解明するとともに、本法によって得られる情報についてその由来と特性を明らかにしている。これらの結果をふまえて後半の第5および6章では、含有水分、繊維走行、あるいは表面粗さなど所望の試料情報を取得するための手順と解析手法に関する検討が行われ、好適結果を得るための指針が示されている。以下に、各章の概要を説明する。

本研究においては、近赤外平行光を試料に照射し、試料表面から放射される拡散反射光を捕捉して吸収スペクトルという出力形式で試料情報を入手している。したがって、木材を測定の対象とする場合には、まず試料照射面の表面および表面直下の構造が問題とされる。そこで第2章では、入射光と照射面繊維走行のなす角 θ および表面粗さ(最大高さ; R_p)が近赤外吸収スペクトルに及ぼす影響を検討した。上記のパラメータを系統的に変化させた試料を実測することによって、近赤外光が物理的構成に関する情報の検出にも有効に活用できる可

能性を確認し、木材の非破壊計測の新手法としてこれを導入するための基礎資料を充足した。近赤外領域における光の散乱・反射・吸光・透過の諸様相が波長によって大きく変化することが見出されたので、本研究で使用する近赤外分光分析装置の計測可能深さを検討するために臨界拡散厚さ d_{cr} の概念を導入してこれを実測し、一方、試料内における近赤外光の挙動を包括的に記述する指標として吸光係数ならびに散乱係数に着目し、いろいろな条件下における測定値を求めた。その結果、これらの諸因子は照射波長域によって特徴的に変化し、近赤外領域(800~2500nm)における光の基本的な特性が3領域(I: 800~1400nm、II: 1400~1860nm、III: 1860~2500nm)に大別して表現できることが示された。さらに、前述の実験結果を拡散反射の概念に基づいて統一的に理解することを試み、加工面粗さと細胞体の構成状況を考慮に入れた実験式を提案してその妥当性と特性を確かめた。この検討過程において、機械加工により被った表層部の破壊が比較的軽微な場合 ($R'_y < 70\mu\text{m}$) には、該部が厚さ一定の薄膜と等価な光学的役割を果たしていることとみてよいことを示し、等価薄膜 t についても考察した。また、細胞内こう表面で生じる拡散反射光の挙動が単純ではないことを見きわめ、この状況を拡散反射光漏出率 $S(\theta)$ で代表させた。本法を木材に適用しようとする際には等価薄膜 t や拡散反射光漏出率 $S(\theta)$ などの光学的特性を把握することが重要である。

第3章では、木材内部における近赤外光の挙動を正しく理解するために木材を仮道管の集合体とみなし、 θ および照射波長域に対応して出現する散乱・反射・吸光・透過の連鎖過程を詳細に検討した。まず、前述の波長3領域(I、II、III)に対応した拡散反射および透過指向特性に関するモデル(指向特性モデル)を提案した。次に、仮道管群全体から放射される光の状況が過不足なく具現されるような光路系のモデル(光路モデル)を構成した。この光路モデルに前記の指向特性モデルを組み込むことによって、実測結果を矛盾なく説明できることを明らかにした。照射波長と θ をいろいろに変更して仮道管群における光の挙動をシミュレートし、 $S(\theta)$ を予測してみたところ、それらは拡散反射光吸光度の実測値から関係式を介して求めた第2章記載の $S(\theta)$ の値とよく一致することが確かめられた。

以上の諸検討によって、試料表面近傍の構造が拡散反射光の測定値に及ぼす影響が、はじめて理解されるに至った。しかしながら、試料全域にわたる光の挙動、とりわけ透過光の光学的特性がどのような事情によってもたらされたかは、なお推定の域を脱しておらず、理想的な光散乱吸収体を前提とする Kubelka-Munk の関係式⁴³⁻⁴⁶⁾を木材を対象としてそのまま適用することには多大の疑念がもたれた。そこで第4章では拡散反射光と透過光を包括する首尾一貫した理論体系について考究した。表面鏡を試料下面に密着させることによって試料上面から放射される拡散反射光と試料下面から放射される拡散透過光を同時計測することに成功し、この実測結果に基づいて、拡散反射光と透過光の挙動を正しく記述できる包括的な理論体系を新たに構築して、木材を光散乱吸収体という立場から矛盾なく説明できる基盤を確立した。まず、試料内部における近赤外平行光の拡散過程モデルならびにこれに組み込まれる n 乗余弦放射強度モデルを提案し、これらに立脚して試料内平均光路長を算出した。さらに、この平均光路長から得られる等価厚さの概念を Kubelka-Munk の関係式に導入することによって、放射に関する一般化された入出力の関係式を構築し、波長に応じて異なる近赤外光の挙動を統一的に表現することを試みた。放射に関する一般化された入出力の関係式により得られる吸光度計算値は、実測値とほぼ一致し、提案した一連の光学モデルと等価厚さ試料の

概念の妥当性が裏付けられた。これらの知見に基づいた $S(\theta)$ の計算値は、実測値にきわめて近い値を示す。

第5章では、生物体としての組織構造を保った、あるがままの状態の木材に対して含有水分(含水率および単位体積あたりの含水量)の非破壊定量分析を行った結果が述べられている。まず、含水率による臨界拡散厚さ d_{cr} の変動を確認した後に、水分傾斜をもたないさまざまな樹種の含有水分検量線を重回帰分析によって作成した。従来の含有水分測定手法においては、いずれも樹種による補正が必要とされていたが、本方式では説明変量(選択波長)およびその数を適切に選定することにより、いくつかの樹種を包括する予測精度の高い単一の検量線を作成できるようになった。続いて、水分傾斜をもつ試料に関する含水率の予測精度を求め、本法の適用可能範囲を検討した。 d_{cr} を考慮して、試料厚さに応じた適切な波長を説明変量として選択するべきであることが示唆されている。

第6章では、第2~4章で得られた諸結果を念頭に置いて、木材の物理的構成に関する情報を本法によって正しく把握する手順について検討を行った。入射光と照射面繊維走行のなす角 θ ならびに表面粗さ(最大高さ; R'_y)に関する検量線を重回帰分析によって作成する場合の問題点を明らかにし、これに関する対策を一連の光学モデルに基づいて逐一追究した。この実験は、本法の実際的な応用を想定して、 θ と R'_y が両者とも広範囲にわたって交雑している試料母集団を対象に実施されているが、本法によって予測精度の高い θ の検量線を作成するためには、正反射光の動向に留意して試料母集団の特性を把握することが必要であり、この点を勘案した場合には、十分な精度で θ の予測が実施可能になることが確かめられた。また、試料表層部をより現実的に即していると思われる2層構造モデルによって表現し、これを既述の光学モデルに導入してみたところ、 R'_y と吸光度の関係が理論的にも非線形であることが確認された。この関係をふまえて、 R'_y の範囲を適当に分割してそれぞれの区間で有意な検量線を作成することがたいせつである。また、正反射光の影響を低減させるとともに、試料表層部から放射される光が反射光中に占める割合を高めることを目的として、ND フィルタを積分球底面に介在させて近赤外吸収スペクトルを測定することも試み、これに基づいた検量線を作成した。

第7章には、本研究の結論が述べられている。

第2章 試料の表面構造が近赤外吸収スペクトルに及ぼす影響

2. 1 緒言

序論にも述べたとおり、従来の近赤外分光法 (Near Infrared Spectroscopy; NIRS) による非破壊計測は、化学的な定量分析としての有効性に着目したものがほとんどであり、測定値に大きく影響する試料の物理的特性 (粒径、充填密度など) を均一な状態にして計測 (広義の非破壊計測) することが重要な前提とされていた。しかし、木材を測定対象とする場合には、生物体としての組織構造を保った状態の集合体を計測すること (狭義の非破壊計測) が要求される。この状況下では測定値にさまざまな物理的特性の情報も包含されてしまうために、試料の定量分析を目的とする場合には従来法とは異なった測定値の処理を行うことが必要となる。その反面、上記の事実は、本法によって試料の物理的構成に関する情報 (表面粗さ、繊維走行など) 自体の検出が可能になることを示唆する。

本章は、非破壊計測として有効な近赤外分光法を木材に適用し、試料の化学的構成に関する情報だけでなく、物理的構成に関する情報をも得ることを目的とした研究の視点を示すものである。ここでは、まず近赤外光照射面の表面構造に注目し、試料表層部ならびに直下の状況が近赤外吸収スペクトルに及ぼす影響について検討を加える。試料の物理的構成に関するパラメータとして、繊維走行および表面粗さに着目し、これらを系統的に変更した試料を測定した。続いて、いろいろな厚さをもつ試料の近赤外吸収スペクトルを測定し、近赤外分光分析装置の計測可能深さを意味する臨界拡散厚さおよび試料内における近赤外光の挙動に関する包括的な指標である吸光係数ならびに散乱係数を求めた。さらに、上記の実測結果に基づいて、加工面粗さと細胞体の構成状況を理論的に考慮に入れた実験式を提案して、その妥当性と特性を検討した。これらによって、本法を木材に適用するための基礎資料を充足するとともに、試料内部における近赤外光の挙動を正しく理解するための着眼点を明確にする。

2. 2 実験装置および方法

2. 2. 1 実験装置

本研究では試料表面に近赤外光を照射し、試料から放射される拡散反射光を捕捉してその近赤外吸収スペクトルを計測することにより、いろいろな解析を進める。実験に用いた装置は、ブラン・ルーベ社製の近赤外分光分析計インフラライザ500型で、その光学系の骨子は図2-1のようである。本装置の光源はタングステン・ハロゲンランプで、これから放射された光が回折格子で分光される。分光された近赤外単色光は、図2-1(a)に示すように試料表面に対して垂直に照射される。試料内部に侵入した光は、散乱、反射、吸光、透過などを繰り返し、再び試料表面から拡散反射光として放射される。拡散反射光は積分球の内壁によって捕捉され、1回ないし複数回反射した後に、最終的にはPbS (硫化鉛) 検出器に到達し、強度 I として測定される。本装置では、試料表面からの正反射光は、積分球入射光口から放出されてその影響が排除されるので、拡散反射光のみの情報が得られる。次に、図2-1(b)のように、入射光の照射方向を変えることによって入射光が直接に積分球内で捕捉されるようにして、その強度 I_0 を測定する。 I と I_0 の強度比として、吸光度 A_0 は次の(2.1)式で定義される。

$$A_0 = -\log \frac{I}{I_0} \quad (2.1)$$

入射光に対する拡散反射光の強さが減少すると、 A_0 は大きくなる。照射波長を連続的に変化させて A_0 を測定し、波長を横軸とする近赤外吸収スペクトルを求める。

先にも述べたように本装置による測定では、試料表面から放射される正反射光成分は通常検出されない。ところが、本研究で用いる木材試料は入射光と一定角度をなす細胞壁の集まりによって照射面が構成されており、入射光と照射面繊維走行のなす角 θ (図2-3参照) が 45° 以上であれば細胞壁からの正反射光成分が拡散反射光成分とともに積分球で検出されてしまう可能性がある。正反射光は、拡散反射光のように試料内部での散乱・反射・吸光・透過といった過程を経て放射されるものではなく、巨視的にみて反射の法則に従う光である。このように、性質のまったく異なる光を同時に取り扱うことは解析を複雑化させてしまう恐れがあるから、拡散反射光だけを検出できるシステムを構成しなければならない。ここでは、積分球底面と試料表面間の距離 l_{is} を9mmとして、正反射光成分が積分球内で検出されることを防止することにした。このような場合における積分球による拡散反射光 I の捕捉率を c ($0 \leq c \leq 1$) とすると、当該装置が算出表示する吸光度 A は、

$$\begin{aligned} A &= -\log \frac{cI}{I_0} \\ &= A_0 - \log c = A_0 + |\log c| \end{aligned} \quad (2.2)$$

となり、 A は A_0 よりも常に $|\log c|$ だけ高い値をとる。なお、照射面積は検出器の性能を考慮して、波長によって $2 \sim 4 \text{ cm}^2$ の範囲内で変化するように設計されている。

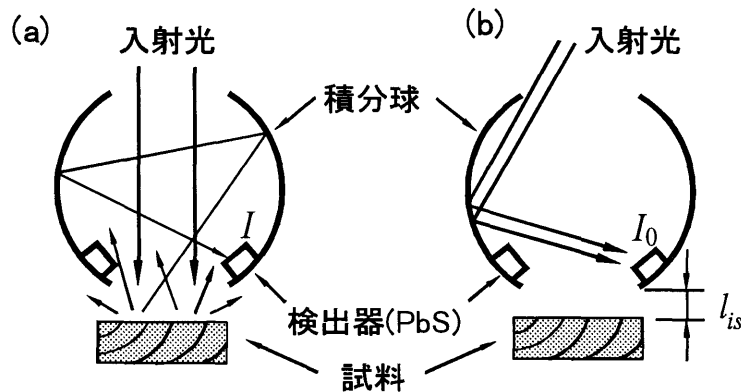


図2-1 光学系の骨子

2. 2. 2 供試材および実験方法

供試材として、シトカスプルス (*Picea sitchensis* Carr.、含水率:6.7%、全乾状態における密度: 0.45 g/cm^3 、平均年輪幅:0.99mm、晩材率:18%)を用いた。

この装置では図2-1にも示したように、入射光は試料表面に対して垂直に照射される。入射光と照射面繊維走行のなす角度 θ を 0° (木口面)、 15° 、 30° 、 45° 、 60° 、 90° (まさ目面、板目面)とし、それぞれについてさまざまな粗さをもつ試料を作成して吸光度を測定した。試

料寸法は、照射を受ける面が25mm×25mm、厚さが20mmである。なお、試料表面粗さの評価には0.7mm幅のナイフエッジ型触針を使用して⁴⁷⁾、組織粗さがおおむね排除された条件のもとで最大高さ(R'_y)を求め、加工面粗さの値を単独に得られるようにした。測定試料の照射面は、ミクロトームによってこれをいったん平滑に仕上げた後に、サンドペーパーでこれを適宜ランダムな方向に研削加工し、所望の粗さを実現させた。

また、この装置において得られる拡散反射光が、試料のどの程度の深さまでの情報を含んでいるかということを確認するために、厚さ d が $19\mu\text{m} \leq d \leq 9030\mu\text{m}$ であるまさ目面試料(照射面寸法は、25mm×25mm)を準備し、それぞれの近赤外吸収スペクトルを求めた。さらに、これらの実測値から2.3.4で述べるKubelka-Munkの関係式に基づいてシトカスプールの吸光係数 K および散乱係数 S を求めた。

なお、(2.2)式における c の値を検討するため、 $l_{is}=0\text{mm}$ ($c=1$)および $l_{is}=9\text{mm}$ の場合に得られた吸光度を比較し、後者の c が0.42であることを確認した。以上の測定を、1) 800～2500 nmまで10nm間隔、2) 1100～2500nmまで2nm間隔、の2通りの波長設定で行った。

2. 3 実験結果および考察

2. 3. 1 照射面の組織構造が吸光度に及ぼす影響

図2-2は近赤外吸収スペクトルの実測例で、照射面が木口、板目、およびまさ目の場合の結果である。それぞれの表面がもつ R'_y は $8.8\mu\text{m}$ 、 $8.2\mu\text{m}$ 、 $8.7\mu\text{m}$ でほぼ等しい。また、図中には従来の研究^{16,19,21)}により帰属が決定している代表的な吸収波長およびリファレンス波長(特別な吸収との連関をもたないことが一般的に認められている波長)が併示されている。赤外吸収スペクトルと比較すると、その分布形状は広がりをもったもので、右上がりになっている。近赤外領域に出現する吸収帯は、赤外領域における各種官能基の倍音振動や結合振動に基づくものであり、これらが重なり合って存在するために図のような特徴のある曲線を呈する。

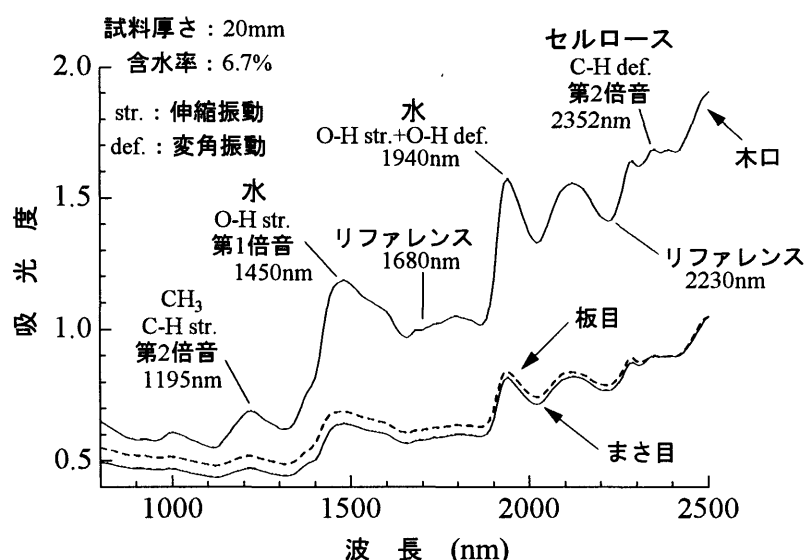


図2-2 シトカスプールの近赤外吸収スペクトル

スペクトルの分布形状は、いずれの照射面についてもほぼ等しく、同一物質であることに対する正当な応答がなされているとみてよいが、吸光度自体はまさ目、板目、木口の順に大きくなっており、それぞれの照射面の表面構造の違いを反映している。すなわち、木口面の場合には繊維走行と照射方向がほぼ一致しており、いったん表層部を透過した光は実質木部に遭遇せずに仮道管中空部を通過して材内に深く進入するため、吸光度が大きくなるものと思われる。一方、板目面、まさ目面においては、入射光の大部分が実質木部に直接照射されるため木口面に比べると拡散反射光量が多くなり、したがって吸光度が小さく表れる。板目面は、まさ目面よりも若干吸光度が高いが、これは放射組織の軸線方向と照射方向が一致することによると察せられる。このように、吸光度は照射面の組織構造によって大きく影響を受けることがわかった。

そこで、いくつかの代表波長に着目して、入射光と照射面繊維走行のなす角 θ と吸光度の関係を確かめてみた。結果を図2-3に示す。各試料の R'_y はほぼ等しく、平均値は $7.5\mu\text{m}$ である。 θ が大きくなると吸光度は連続的に低減するが、とくに長波長の場合にはその変化率が僅かに大きくなる。

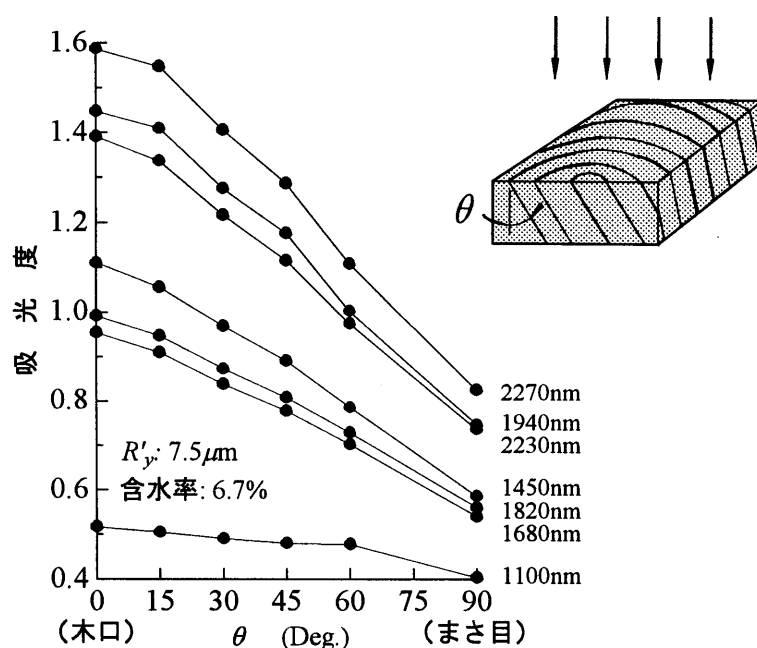


図2-3 入射光と照射面繊維走行のなす角 θ が吸光度に及ぼす影響

2. 3. 2 照射面の表面粗さが吸光度に及ぼす影響

次に、試料表面粗さ R'_y により吸光度がどのように影響を受けるかを調べた。図2-4がその結果で、図中の白丸、黒丸、および黒三角はそれぞれ $\theta=0^\circ$ (木口面)、 45° および 90° (まさ目面)の試料に関する吸光度の実測値を示す。また、図2-4の(a)、(b)、(c)は、着目した波長がそれぞれ2230nm、1680nm、1100nmの場合における結果を表している。図からわかるように、 R'_y が吸光度に及ぼす影響は θ および照射波長によってかなり異なる。 θ が小さいほどそ

して長波長になるほど R'_y の変化に対して吸光度が敏感に反応し、 R'_y が大きくなるとともに吸光度は急激に減少する。 θ が大きい $\theta=90^\circ$ では各波長ともに吸光度はむしろ僅かに増加する傾向がうかがわれ、また $\theta=0^\circ$ でも波長が短い場合(1100nm)には吸光度の R'_y に対する変化はかなり小さくなる。以上は $R'_y<70\mu\text{m}$ の範囲での実測結果であり、 $R'_y>100\mu\text{m}$ を含む試料に関しては、第6章で詳述する。

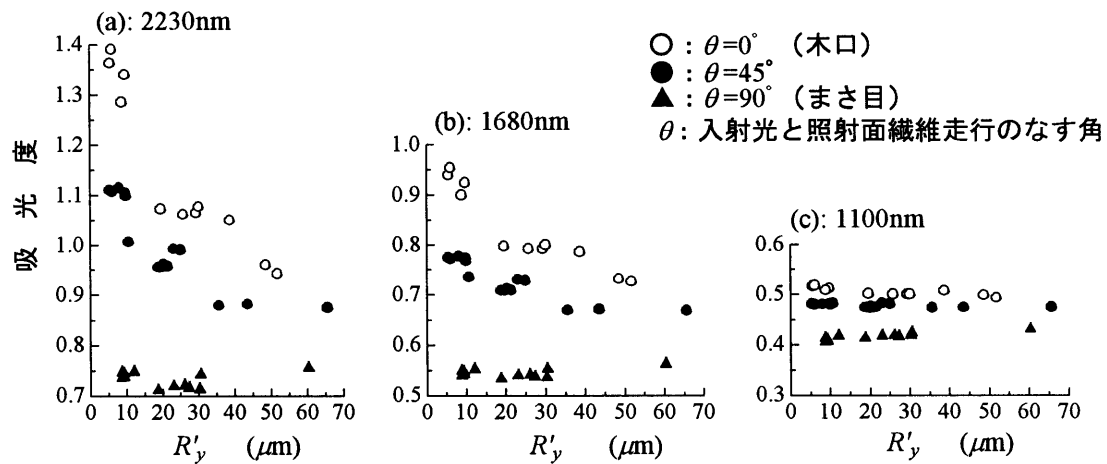


図2-4 表面粗さ（最大高さ; R'_y ）と吸光度の関係

2. 3. 3 臨界拡散厚さの波長依存性

次に、材厚 d と吸光度の関係を図2-5に示す。照射面はまさ目で、 R'_y の平均は $8.7\mu\text{m}$ とほぼ一定である。図中、白四角、黒四角およびバツ印はそれぞれ2230nm、1680nm、1100nmの波長に関する吸光度の実測値を示す。いずれの波長においても d が大きくなると急激に吸光度

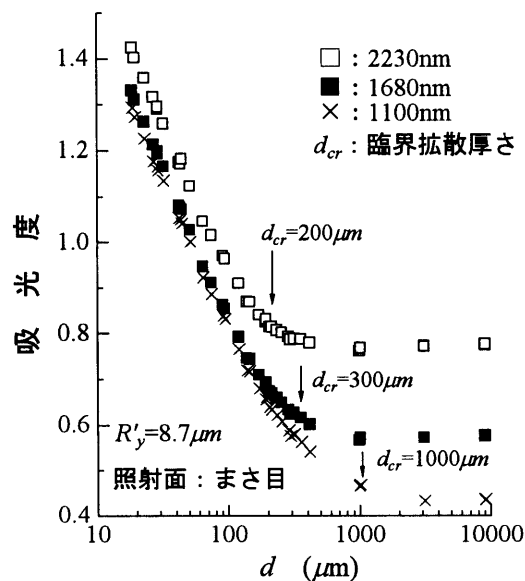


図2-5 試料厚さ(d)と吸光度の関係

が小さくなり、ある一定の値に漸近する。一定の吸光度を示すとみなしうる臨界の d に着目し、これを d_{cr} とするとこれは飽和状態に達した十分な拡散反射光を得るのに必要な最小限の材厚である。このような考え方は、透過光に着目したBirth⁴⁸⁾によってもなされているが、ここでは実測された d_{cr} を臨界拡散厚さと呼ぶことにする。図から推定されるように、 d_{cr} は2230 nm、1680 nm、1100 nmに関してそれぞれ200 μm 、300 μm 、1000 μm 前後の値をもつ。 d_{cr} が小さいと、吸光度に占める試料表面近傍の情報の割合が大きくなるから、長波長になるほど R_y に対して吸光度が敏感に反応するはずである。図2-4における(a)、(b)、(c)の各図には、このような状況を物語る相違が明確に現れており、得られる情報の波長依存性を示唆するものとして興味深い。図2-5において照射波長が1100 nmの場合には、とくに光が材内深くにまで達しているのがわかる。これは、Browneら⁴⁹⁾による透過率の測定結果とも矛盾していない。したがってこの場合には、図2-4-(c)のように吸光度が表面粗さによってほとんど左右されなくなってしまう。試料表面加工層の影響を受けずに材内情報を正しく得るためには、1100 nm近傍の波長を用いるのが有効である。

2. 3. 4 散乱係数および吸光係数の波長依存性

木材を理想的な光散乱吸収体とすると、厚さ d なる材の光の透過率が $T(d)$ 、反射率が $R(d)$ である場合に、Kubelka-Munkの関係式⁴⁶⁾を適用して次の式が導かれる。すなわち、照射方向の単位長さ当りの吸光係数を K 、散乱係数を S とすると、

$$T(d) = \frac{\beta}{\alpha \sinh X + \beta \cosh X} \quad (2.3)$$

$$R(d) = \frac{\sinh X}{\alpha \sinh X + \beta \cosh X} \quad (2.4)$$

ここで、

$$X = \beta S d \quad (2.5)$$

$$\alpha = \frac{K + S}{S} \quad (2.6)$$

$$\beta^2 = \alpha^2 - 1 \quad (2.7)$$

近赤外光が一様に実質木部に照射される場合、すなわち照射面がまさ目面の場合の吸光度実測値をKubelka-Munkの関係式にそのまま適用して、散乱係数 S および吸光係数 K を算出した。本測定装置では、試料の表面から放出される拡散反射光を積分球で捕捉することによってその吸光度を求める。したがってここでは、確実に近赤外光が試料下面にまで達しているとみなしうる試料厚さ、すなわち前項で述べた臨界拡散厚さ d_{cr} 以下の試料を計算の対象としたが、この範囲で得られた S と K の値は、材厚によってはほとんど変化しなかった。そこで、 d_{cr} 以下のいろいろな材厚に関する K および S の平均値をもって、本試料(シトカスプルス)の吸光係数ならびに散乱係数とした。

図2-6はシトカスプルスの S および K を波長を横軸として示したもので、図中の太線は臨界拡散厚さ以下のいろいろな材厚に関する S の平均値を、また細線は同様の K を表す。図からわかるように、 S および K には明かな波長依存性が認められるが、それらの動向を近赤外

領域についてまとめると、次に示す3領域に大別できる。

領域Ⅰ(800～1400nm) : S は一定に近い値(6.5～6.8/mm)を示す。 K は0に近い。

領域Ⅱ(1400～1860nm) : S は波長が長くなるとともに小さくなる。 K は各波長の吸収特性に対応して変化するが、その値はおおむね1/mm以下である。

領域Ⅲ(1860～2500nm) : S は波長が長くなるとともに小さくなる。 K は各波長の吸収特性に対応して変化する、その値は他領域よりも大きくなる。

従来から近赤外波長領域を分子の振動パターンによって分類する方式があり^{14,21)}、800～1100nmは2次倍音域、1100～1800nmは1次倍音域、1800～2500nmは結合音域にそれぞれ対応するものとされている。 S および K からみた分類がこれにほぼ一致しているのは興味深い。

2.3.1および2.3.2で示したように、木材の近赤外吸収スペクトルは試料の物理的構成の態様に呼応して変化するから、その特性を正しく把握することによって試料がもつ繊維走行、表面粗さなどの情報が入手できるようになることが予見される。 d_{cr} 、 S 、 K が照射波長によって特徴的に変化するため、所望の試料情報およびこれを得たい部位に応じて波長の選択を適切に行うことがたいせつである。

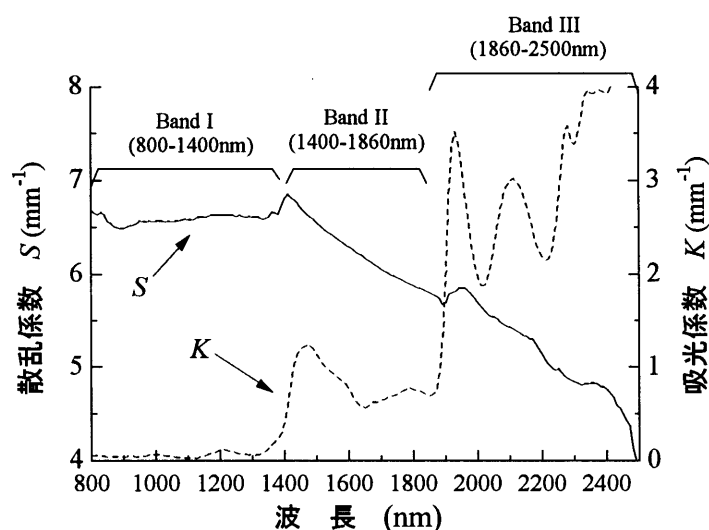


図2-6 各波長における散乱係数と吸光係数

2. 4 加工面粗さと細胞体の構成状況を理論的に考慮に入れた実験式

前項までの検討によって試料表面構造(入射光と照射面繊維走行のなす角度 θ 、試料表面粗さ R'_y)は、照射波長とともに、吸光度を支配する重要な因子の一つであることが明らかにされた。ここでは、出現する諸現象を拡散反射の概念に基づいて統一的に理解することを試み、 R'_y と θ が光学的に果たす役割に関して考察を加える。

図2-4において、 $\theta=90^\circ$ (まさ目面、すなわち試料全表面が実質木部)の場合の試料の全拡散反射光強度 I_T は加工面粗さにほとんど依存しない値を示すことが判明したので、これを基準として θ あるいは R'_y の各条件に対応する拡散反射光強度を求めることにする。

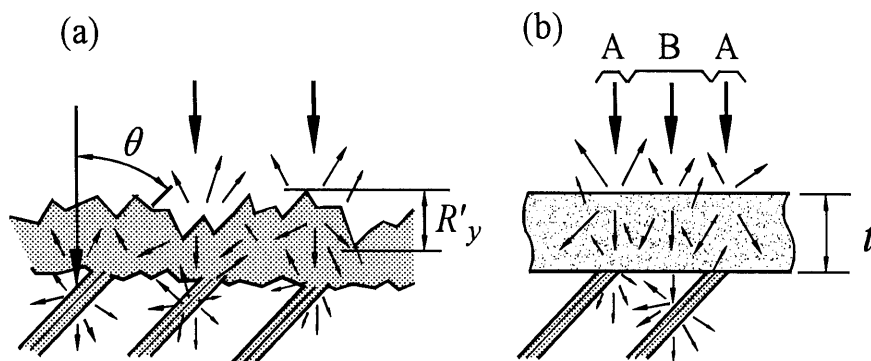


図2-7 試料表層部の断面図

図2-7-(a)に示すように、試料は入射光に対して θ なる繊維走行をもち、所定の加工面粗さを伴うものとする。やや大胆ではあるが、図2-7-(b)のように加工面粗さを光学的に一定の厚さ t をもった照射面がまさ目の薄膜(等価薄膜)に置き換えて拡散反射光強度を算出し、このモデルと現実結果との対比を行う。ところで、加工によって破壊を被った試料表層部の微細構造を表現するより正確なモデルとしては、たとえば、上記等価薄膜の概念を発展させてこれを照射面がまさ目である薄膜部とその上部に存在する照射面が木口である薄層部から形成される2層構造とする考え方を提案しているが、その詳細については第6章に譲る。ここでは、試料の表面粗さが比較的小さい($R'_y < 70\mu\text{m}$)範囲に対して、照射面がまさ目である単純な薄膜を対応させ、吸光度に及ぼす加工面粗さと繊維走行の相互作用についての理解を深める。まず、 t と R'_y の関係を

$$t = mR'_y \quad (2.8)$$

とおく。ここで m は定数である。この薄膜に接して $R'_y = 0$ の理想的な組織構造面が存在すると想定した。

図2-7-(b)に示すように、薄膜下に実質木部が存在する領域Aと、細胞内こうが存在する領域Bとに分けてそれぞれの領域における拡散反射光の状況を考える。

領域Aの様相は、実質木部が直接薄膜下に存在するため、光学的にはまさ目面と同様なふるまいをすると考えられる。また、薄膜下の理想組織構造部の受光面積は θ によって変化するが、薄膜との接触面積率は θ によらず一定で、木口面実質木部面積率 S_{cw} と等しい。したがって、この部位に由来する拡散反射光強度 I_A は、

$$\begin{aligned} I_A &= S_{cw} I_T \\ &= S_{cw} R(\infty) I_0 \end{aligned} \quad (2.9)$$

となる。ここに、 I_T は、十分に厚い層からの拡散反射光であるから、

$$I_T = R(\infty) I_0 \quad (2.10)$$

である。

一方、領域Bでは薄膜下部に細胞内こうが存在するため、薄膜からの拡散反射光と細胞内こう部からの拡散反射光を考慮しなければならない。前者に由来する光の強度を I_{BM} 、後者のそれを I_{BL} とする。Kubelka-Munkの関係式から I_{BM} は、

$$I_{BM} = (1 - S_{cw})R(t)I_0 \quad (2.11)$$

となる。 I_{BL} は、薄膜を透過して繊維走行が θ の細胞内こう表面(まさ目表面に同質と想定)に達した光に起因する拡散反射光に関するもので、これが再度薄膜を逆方向に透過し試料表面から放射されて検知される。ここで、細胞内こう表面で生じた拡散反射光のうち、対向する細胞壁で遮断されずに薄膜下部に達する率を拡散反射光漏出率と呼び、これを $S(\theta)$ とすると、 I_{BL} は、

$$I_{BL} = S(\theta)(1 - S_{cw})R(\infty)\{T(t)\}^2 I_0 \quad (2.12)$$

となる。

以上より、試料表面から放射される全拡散反射光強度 I_{sum} は、

$$\begin{aligned} I_{sum} &= I_A + I_{BM} + I_{BL} \\ &= S_{cw}R(\infty)I_0 + (1 - S_{cw})R(t)I_0 + S(\theta)(1 - S_{cw})R(\infty)\{T(t)\}^2 I_0 \end{aligned} \quad (2.13)$$

になる。

θ が 0° であるまさ目面を対象とする場合にも上記の考え方はそのまま適用できる。その場合には I_{sum} は I_A のみによって構成され、 I_{BM} と I_{BL} は0となる。したがって、表面粗さ R'_y をもつ、繊維走行が θ の試料の吸光度(表示値) A_{sum} は、積分球による拡散反射光捕捉率 c を考慮すると、

$$\begin{aligned} A_{sum} &= \log \frac{I_0}{cI_{sum}} \\ &= \log \left[S_{cw}R(\infty) + (1 - S_{cw})R(mR'_y) + S(\theta)(1 - S_{cw})R(\infty)\{T(mR'_y)\}^2 \right]^{-1} - \log c \end{aligned} \quad (2.14)$$

と表すことができる。

(2.14)式では、 m および $S(\theta)$ が未知数である。そこで、いろいろな表面粗さをもつ試片に関する吸光度実測値と(2.14)式から計算される吸光度の差平方和が最小になるような m と $S(\theta)$ を求め、これを実現値とした。このようにして、上記の等価薄膜モデルによって R'_y と A_{sum} の関係を表す実験式が求められる。なお、今回の測定に用いたシトカスプルーは、 $S_{cw}=16.9\%$ である。また、このモデルにおいては薄膜も完全な光散乱吸収体であると仮定して、 S および K は2.3.4で算出された値を採用した。

図2-8は、加工面粗さと細胞体の構成状況を考慮に入れた実験式を実測値と比較して示したものである。照射波長は2230nmである。 $\theta=0^\circ$ 、 45° 、 60° のいずれに関しても、実験式の傾向はほぼ実測値のそれと一致しており、加工面粗さをある一定厚さの薄膜とみなす考え方がおおむね正しいことを裏付けている。ここで、粗さに関する m の値は図中に示したように1.3~2.5となっており、光学的に R'_y を上まわる厚さの薄膜が理想組織構造面上に存在するとみられる。図において想定される薄膜の厚さが図2-5の d_{cr} を越えると、吸光度は一定値をとることになる。図2-8において吸光度が一定に達するときの mR'_y の値を求めてみたところ、たとえば照射波長が2230nmで $\theta=60^\circ$ の場合には $170\mu\text{m}$ となり、図2-5の d_{cr} と矛盾しない結果が得られた。

θ の影響を表す拡散反射光漏出率 $S(\theta)$ については、表2-1のような値となった。 θ が小さいほど $S(\theta)$ は小さくなっており、木口面に近いほど拡散反射光が少ないという常識的な結果が得られている。

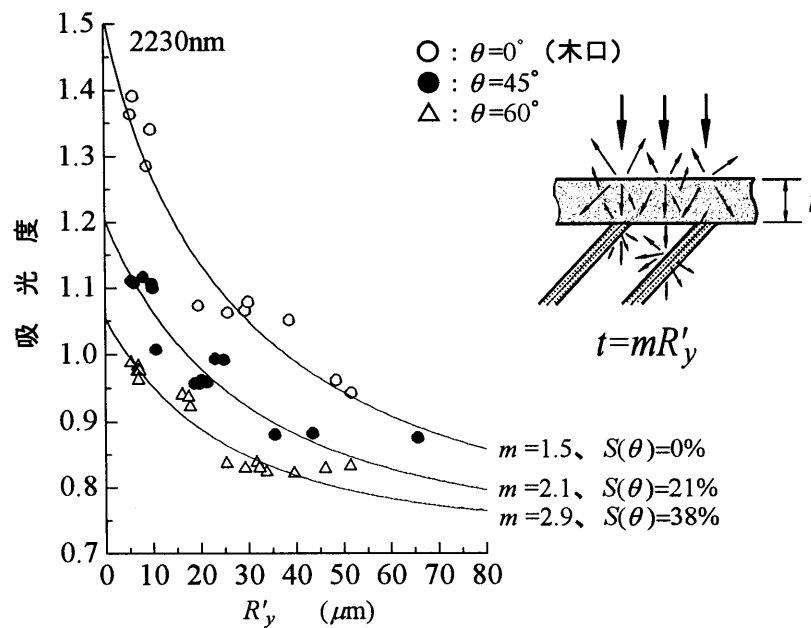


図2-8 加工面粗さと細胞体の構成状況を考慮
に入れた実験式と実測値の比較

表2-2は各条件に関する m を一覧にして示したものである。照射波長が1680nmの場合の m は1.2～3.5となっており、2230nmの結果と類似している。しかし、1100nmの場合にはすべての θ について $m=0.0$ となった。これは、2.3.2および2.3.3で述べたように、加工面粗さの存在が光学的には無視されうる状況にあることを意味している。近赤外分光法を木材に適用しようとするときには、 t (すなわち m)および $S(\theta)$ を光学的に正しく理解することが重要である。この点についての詳細な検討は次章以降で行う。

表2-1 各波長における拡散反射光漏出率 $S(\theta)$

波長 (nm)	$S(\theta)$ (%)						
	θ (Deg.)	0	15	30	45	60	90
2230		0	3	9	21	38	100
1680		22	28	36	47	59	100
1100		83	86	89	94	100	100

表2-2 各波長における m の値

波長 (nm)	m					
	θ (Deg.)	0	15	30	45	60
2230		1.5	1.2	1.5	2.1	2.9
1680		1.8	1.2	1.4	2.1	3.5
1100		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

2. 5 結言

近赤外分光法によって木材の非破壊計測を行うことを目的として、まず試料の表面構造が近赤外吸収スペクトルに及ぼす影響について検討した。得られた結論は以下のとおりである。

(1) 試料照射面の表面構造の違いによって吸光度は大きく変化し、入射光と照射面繊維走行のなす角 θ が大きいほど吸光度は低くなる。この傾向はとくに長波長側で顕著である。また、加工面粗さ(最大高さ; R'_y)も吸光度に大きく影響を及ぼし、 $R'_y < 70\mu\text{m}$ の範囲では粗さが大きくなるにしたがって吸光度は小さくなる。 θ が小さいほど、また長波長になるほど粗さに対して吸光度は敏感に変化する。これらの測定結果は、試料の物理的構成と出力スペクトルの関係を正しく把握することによって、 θ および R'_y を検出できる可能性を期待させるものである。

(2) 十分な拡散反射光を得るのに必要な最小限の厚さ、すなわち臨界拡散厚さ d_{cr} は長波長になるほど小さくなる。

(3) 散乱係数 S および吸光係数 K は波長依存性を示し、それらの様相は3つの近赤外領域 (I : 800~1400nm、II : 1400~1860nm、III : 1860~2500nm) に分類できる。結論の(1)にみられる波長依存性は、 d_{cr} 、 S 、および K の特性を把握することによってはじめて理解される。木材試料の光学的特性を正しく理解したうえで、所望の試料情報およびこれを得たい部位に応じて波長を適切に選択することが重要である。

(4) 加工面粗さと細胞体の構成状況を理論的に考慮に入れた実験式を提案し、実測値と比較してその妥当性を確かめた。波長領域IIおよびIIIでは、試片のもつ加工面粗さはその最大高さを若干上まわる厚さをもつ薄膜(まさ目面と同質)と光学的に等価であり、波長領域Iではこの等価薄膜の厚さが0となる場合がある。一方、 θ の影響は拡散反射光漏出率 $S(\theta)$ によってもたらされるが、 $S(\theta)$ は細胞内こう表面で生じる拡散反射光の挙動で決定される。上記の検討を通じて、現実の $S(\theta)$ の値を評価することがはじめて可能になった。

第3章 指向特性モデルと光路モデル

3. 1 緒言

前章では、繊維傾斜角および表面粗さが異なる木材試料の近赤外吸収スペクトルを測定した結果について詳述し、これらの諸因子が実測値(吸光度)に及ぼす影響について検討した。その結果、試料の化学的構成に関する情報を検出するために開発された近赤外分光法が、上記の物理的構成に関する情報の検出手段としてもきわめて有効であることが確認された。さらに、加工面粗さと仮道管の構成を理論的に考慮に入れた実験式を提案して、その妥当性と特性を確かめた。この検討過程において、細胞内こう表面で生じる拡散反射光の挙動が単純ではないことが見いだされ、その特性を把握することが本法を木材に適用するうえには欠かせないことがわかった。

そこで本章では、木材内部における近赤外光の挙動を正しく理解するために木材を仮道管の集合体とみなし、入射光と照射面繊維走行のなす角 θ および照射波長に対応して出現する散乱・反射・吸光・透過の連鎖過程をモデル化することを試みた。モデルの構成において必要とされる木材の光学的特性を正しく指定するためには、波長領域に応じて特徴的に変化する散乱係数および吸光係数の実態と照射光の拡散反射・透過指向特性の連関を認識する必要がある。このような点をふまえて、実測結果に矛盾しないモデルを体系的に表現することを試み、仮道管群における近赤外光の挙動を十分な精度で近似できる指向特性モデルならびに光路モデルを新たに提案した。これらのモデルに基づき、いろいろな照射条件における仮道管群からの拡散反射光漏出率 $S(\theta)$ を計算してみたところ、それらは加工面粗さと仮道管の構成を理論的に考慮に入れた実験式を活用して実測値から求められた前章の $S(\theta)$ の値とよく一致することが確かめられた。

3. 2 供試材および実験方法

本章で示す実測値は、いずれも第2章の実験結果によるものである。一連の実験に供されたシトカスプールの仮道管横断面に関する平均的な寸法を図3-1に示す。

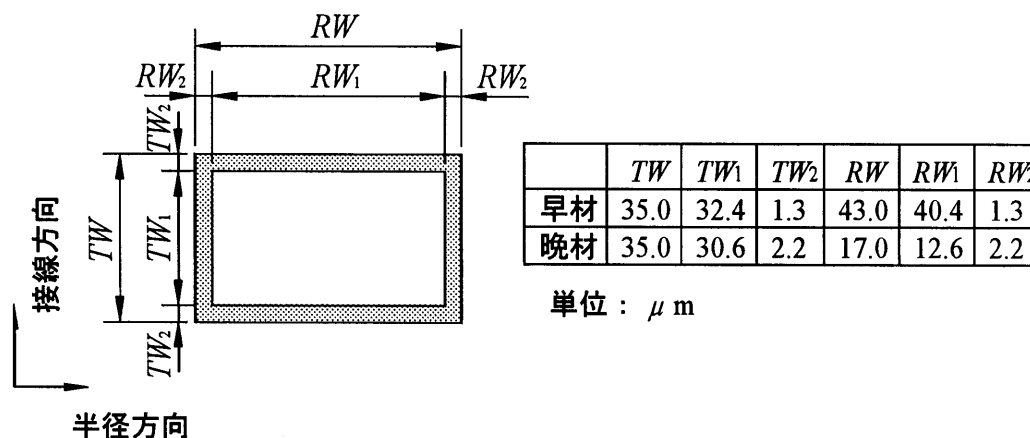


図3-1 仮道管横断面の平均寸法

3. 3 モデルの構成および計算式

3. 3. 1 仮道管群における近赤外光の拡散反射・透過指向特性

細胞壁への入射光は実質木部内で散乱、吸収され、また微視的な表面構造をもつ実質木部境界面で正反射されるために、細胞内こう表面における反射光および透過光は方向および強さに分布(指向特性)を有するものになる。したがって、仮道管群に照射された近赤外光の反射・透過指向特性は、第2章に示した波長領域Ⅰ～Ⅲにおける散乱係数 S と吸光係数 K の様相と密接な関連をもつと思われる。近赤外光が単一の細胞壁において示す指向特性を直接的な実験によって確かめることは困難であるため、ここでは実測された S と K の傾向に矛盾しないような3つのタイプをもつ指向特性モデルを提案する。これらのモデルは、実質木部内に侵入した光によって生じる拡散反射光および透過光に関するものである。さらに、仮道管群における拡散反射光の挙動を記述する光路モデルをこの指向特性モデルに立脚して構成することを試み、得られる計算結果について検討を加える。なお、実質木部境界面における正反射光成分の挙動に関しては3.3.2で述べるように、ここでは考慮する必要がない。

本モデルでは、反射光についてはその方向および強さの分布を考えるとし、透過光に関しては便宜上その指向特性をこれと等価であるとみなしうる一つの集中した方向で代表させる。また、スプルースを構成している組織のなかでその構成率がもっとも高いのは仮道管であるから、以下では試料を単純に仮道管の集合体とみなして解析を行う。さらに、個々の仮道管長は無限であると仮定する。

(a) 指向特性モデル：タイプD

領域Ⅰ(800～1400nm)では、前章で示したように K は0に近いから、試料内で光がほとんど吸収されずに散乱のみを生じる。したがって、細胞壁に照射された光は図3-2-(a)に示すような均等な拡散反射光 (**Diffusely reflected light**)、すなわち入射角によらず試料表面に接する球状の強度分布特性をもつ反射光となる。この場合、材内に侵入した光の代表方向は照射面に対して垂直となり、各細胞壁で拡散反射を繰返す。近赤外光の短波長領域でこのような拡散反射を生じた例がじゃがいも⁴⁸⁾について報告されている。なお、図3-2にモデル表現された拡散反射光は、光が一つの細胞壁に遭遇してから次の細胞壁へ至る区間を一つの単位とし、その単位区間内での散乱・反射・吸収・透過過程の総合結果として各細胞壁表面に図の状況が出現したことを表している。

(b) 指向特性モデル：タイプR

領域Ⅲ(1860～2500nm)では、タイプDとは対照的に試料内で光が吸収されやすく、また散乱しにくい状況にある。したがって、試料内からの反射光も均等に拡散することはなく、入射角の影響を受けたいわば半拡散反射的な指向特性をもつと考えられる。試料内からの半拡散反射光に関しては、キセノンランプを光源としてまさ目板の表面特性を調べた実験において、入射光(入射角60°および45°)の試料表面への垂直な投影が繊維走行と一致するように照射したときにラグビーボール状の反射指向特性が出現した例⁵⁰⁾が報告されている。ここではそれに類似した状況を図3-2-(c)に示すような正反射光 (**Regular reflected light**)の光路上に中心をもつ球冠として近似表現し、球の破線部分を除いた残りがラグビーボール状の反射

光に相当するとした。また、透過光に関しても光の拡散性が低減することを考慮して、その進行方向は入射光方向と同方向であるとした。領域Ⅲに対するこのようなモデルは、長波長領域で光の正反射特性が強く現れやすい事実に対応している。

(c) 指向特性モデル：タイプM

領域Ⅰと領域Ⅲにはさまれる領域Ⅱ (1400～1860nm)では、タイプDとタイプRの中間的 (Medium) な挙動を示す図3-2-(b)のようなモデルを想定するのが妥当であろう。すなわち、正反射方向と照射面垂直方向の二等分線上に中心をもつ球冠として拡散反射光を表現し、透過光は入射光方向と照射面垂直方向の二等分線の延長上を進行すると考える。したがって、細胞壁を透過するたびに光の挙動はタイプDに近づいてゆく。極端な場合として、入射角がある限界を越えて大きくなると、光が1層目の実質木部を透過するだけで以後の透過光の挙動は図3-2-(a)で示されるタイプDのふるまいをすると考える。このように途中でタイプが移行する現象はタイプD、Rでも生じる可能性があるが、ここでは透過光の散乱性が波長領域によって異なる事実をふまえて、上記2タイプの場合は入射角によらずそれぞれ一定方向に光が仮道管群内を透過するとして実質上さしつかえないものと考えた。

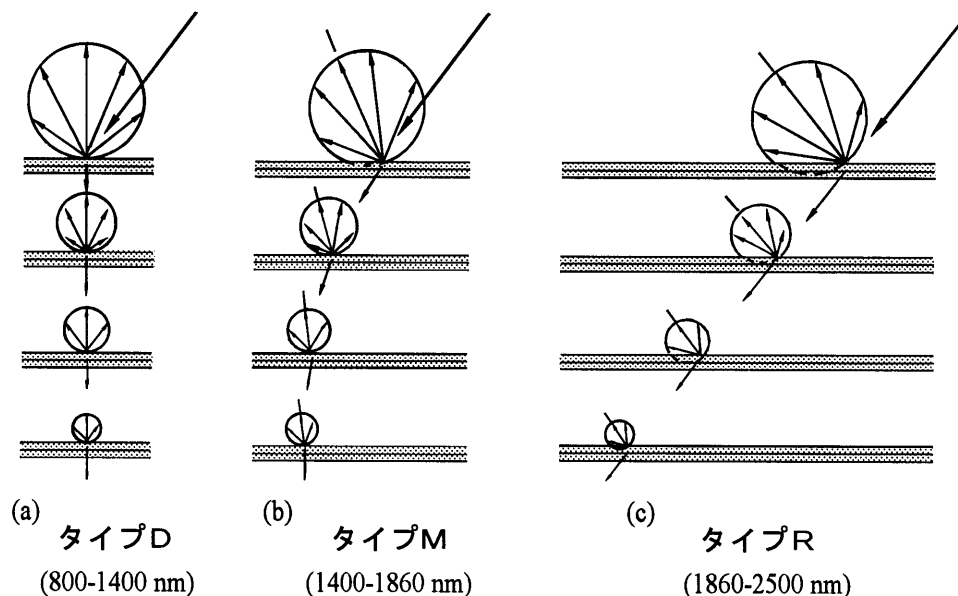


図3-2 指向特性モデル

3. 3. 2 光路モデルの計算における基本的な考え方

(a) 各細胞壁への照射光の割り付け

図3-3のように一つの切り口面CCをもち入射光と照射面繊維走行のなす角が θ ($0^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$)である仮道管群を対象とし、この半無限仮道管群に3.3.1の各タイプの拡散反射・透過特性が適用された場合について検討を行う。このように組織構造を保ったままの木材を対象として近赤外分光法による非破壊計測を行おうとするときには、得ようとする情報が物理的なもの(表面構造、繊維走行など)であるか化学的なもの(成分、含水率など)であるかを問わず、

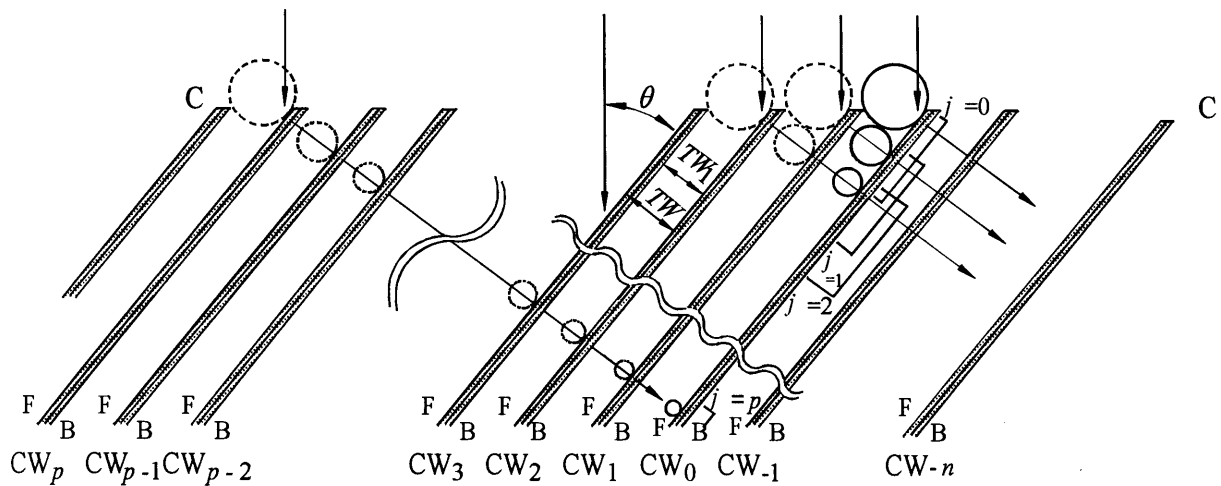


図3-3 光路モデル（タイプD）

θ が吸光度に及ぼす影響を正しく知ることがぜひとも必要とされる。この θ と吸光度の関係は、細胞内こう表面で生じる拡散反射光とこのうち切り口面CCから外へ放射される分の比である拡散反射光漏出率 $S(\theta)$ によって関係づけられる。したがって、ここでは $S(\theta)$ を算出することに主眼をおく。また、図3-3において入射光によって直接照射される細胞内こう表面をF面、その反対側をB面と呼ぶ。

ところで一般的には試料境界面で反射される正反射光成分も反射指向特性に大きく関与するために、 $S(\theta)$ を計算する際にはこれに関する配慮が不可欠である。しかしながら、 $45^\circ \geq \theta$ では正反射光成分は細胞内こう表面で反射を繰り返しながら材深くに侵入するから $S(\theta)$ に関与しない。 θ が 45° を越えて大きくなると正反射光の一部が照射面から放射されるようになるが、入射角が小さい、すなわち θ が大きいほど木材の正反射光成分はFresnelの式^{45,51)}に従って急激に小さくなる傾向を示すから、正反射光成分の存在が $S(\theta)$ に及ぼす影響は大きくならない。したがって本報においては、指向特性モデルならびに光路モデルを、この成分を除外して構成することにした。

切り口面CCに垂直な入射光はまず細胞壁F面の一部を直接照射するが、さらに透過と反射を繰返すことによって近隣のかんりの範囲の細胞壁を間接的に照射する。ここでは連続する細胞壁群 $CW_m, \dots, CW_{-1}, CW_0, CW_1, \dots, CW_p$ のそれぞれが光学的に等しい役割を果たす一連の単位要素であるとして、計算上受けもつべき分の照射光を各単位要素に割り付け、これらの重ね合わせによって全体の状況が過不足なく具現されるような総合的な光路系のモデルを構成して計算を行う。すなわち、仮道管群のうち任意の一つの細胞壁とそのF面に着目して、考慮の対象となる分の直接あるいは間接照射光を想定する。これらの照射光に関する拡散反射光をF面の各部位について算定し、このうちのどのような割合が試料の外へ放射されるかを見積もる。ただし、照射光あるいは拡散反射光が細胞壁を実質的に透過できる能力は p 層までとし、 $p+1$ 層目では光が遮断されてしまうと仮定する。

細胞壁のF面に対する照射光の割り付けは便宜的なものであるから、一通りに限定されるわけではない。ここでは、図3-3において着目した CW_0 のF面に割り付けるべき分は、CCに入射してのち CW_0 に到達するまでに他の細胞壁(CW_1, CW_2 など)での拡散反射の過程をまったく含まずに、直接あるいは透過過程のみを経て照射される光の成分であるとし、これによ

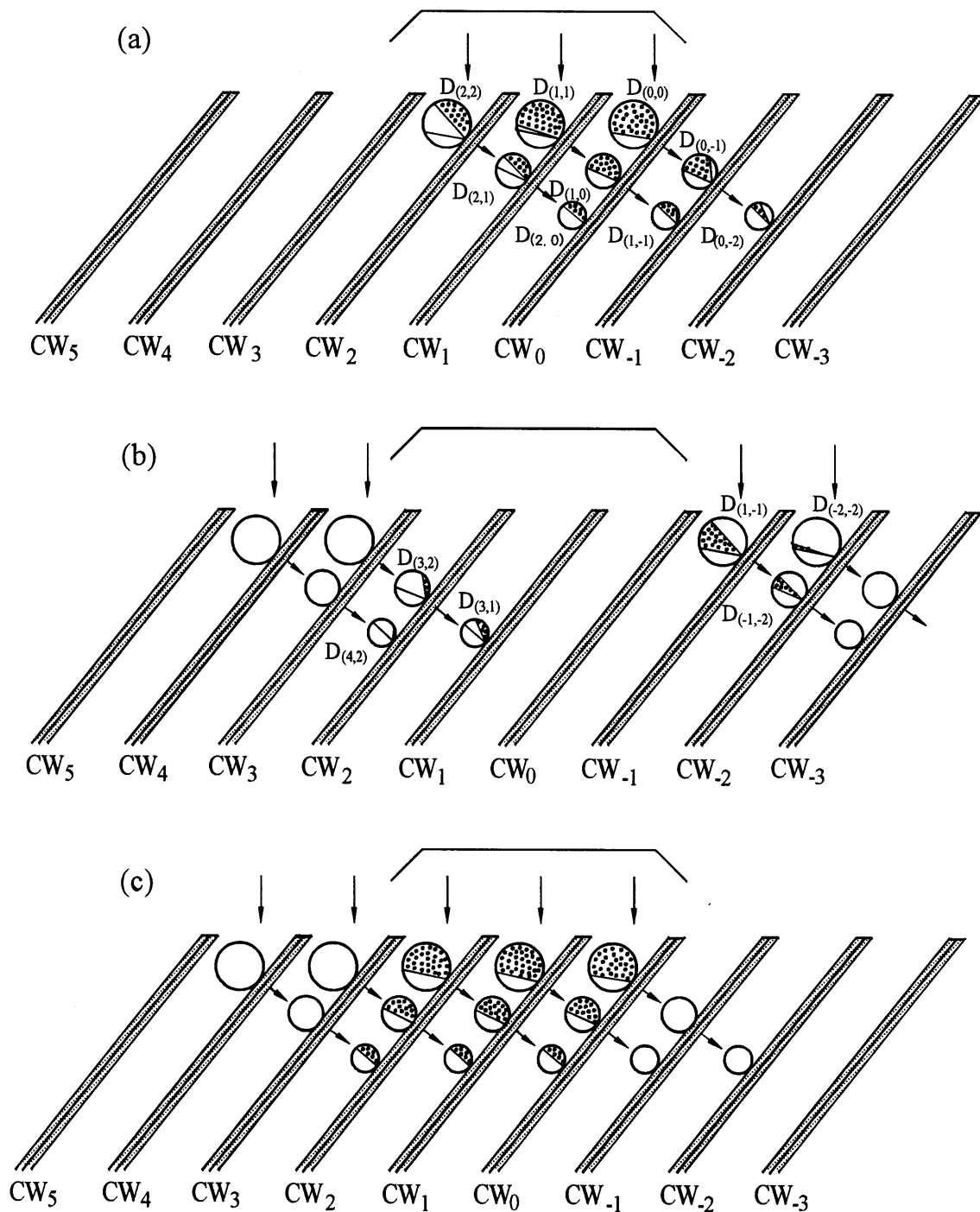


図3-4 仮道管群から放射される光のモデル（タイプD）

ってCW₀のF面に生じる拡散反射（図中の実線の球）と以後の挙動を検討の対象とする。

図3-4はこのような考え方についての理解を助けるためのもので、説明を簡単にするために $p=2$ とした。CW₀～CW₃間の切り口表面に強度 I_0 の入射光が照射された場合に、各細胞壁F面で生じる拡散反射光の状況は、たとえばタイプDについては図3-4-(a)のようになる。 $p=2$ であるため、入射光が直接照射された細胞壁面から数えて3層目までにのみ拡散反射光が生じる。また、その拡散反射光自身は細胞壁を2層まで透過することができるが、3層目で遮断されてしまう。したがって、CW₂～CW₂間のF面に着目すると、当該入射光に対して図のよ

うな拡散反射光 ($D_{(2,2)} \sim D_{(0,-2)}$) が生じるが、このうち仮道管群による反射過程をまったく含まずに $CW_0 \sim CW_3$ 間から放射される可能性をもつもの (以下、1次放射光と称する) は、各放射光のうちの点々部の一部に限られる。

次に近隣の仮道管群に注目すると、図3-4-(b)に示すように、 CW_4 、 CW_3 、 CW_{-1} 、 CW_{-2} に照射された光によって生じる拡散反射光 ($D_{(4,2)} \sim D_{(-2,-2)}$) においても点々部の一部が $CW_0 \sim CW_3$ 間からの1次放射光となる可能性をもつ。結局、図3-4-(a)、(b)における点々部の和が $CW_0 \sim CW_3$ 間の1次放射光に関与することになる。ところで、 CW_1 の $D_{(1,1)}$ をみると CW_0 の $D_{(0,0)}$ より点々部が少ないが、その差の分は隣接する $CW_3 \sim CW_4$ 間からの1次放射光に関与している。一方、 CW_{-2} の $D_{(-2,-2)}$ からは、それと同じ分の光が $CW_0 \sim CW_1$ 間における1次放射光のために供給されている。同様に、 $D_{(2,1)}$ と $D_{(-1,-2)}$ 、 $D_{(4,2)}$ と $D_{(1,-1)}$ などの点々部を合わせると、それぞれ $D_{(1,0)}$ 、 $D_{(2,0)}$ など CW_0 のF面に生じる拡散反射光の点々部と同等となる。したがって $p=2$ の場合、連続した仮道管群において $CW_0 \sim CW_3$ 間から放射される光について考えるときには、図3-4-(c)に示すように CW_1 、 CW_2 でも CW_0 のF面における拡散反射光の状況と同様であると考えて計算し、それらを総和すればよいことになる。ここでは、1次放射光についてのみ例示したが、 $D_{(0,0)}$ 、 $D_{(1,0)}$ および $D_{(2,0)}$ が CW_1 、 CW_2 のB面で反射されてふたたび CW_0 に照射される分に関する放射光 (以下、2次放射光と称する) についても同様に扱うことができる。

実際には3次的にこれら光の状態を考える必要があるが、仮道管群の立体構造により紙面に対して垂直方向に対してもまったく同じ考え方が適用できる。したがって細胞壁 CW_0 から放射される光は、入射光の細胞壁透過能を意味する p を考慮して $CW_0 \sim CW_{p+1}$ 間での挙動に着目し、その区間における光の収支を計算することによって算出される。

(b) 入射面から外へ放射される光の割合

次に、図3-4-(c)のような拡散反射光を対象として、入射面から外へ放射される光の割合を求めるための基本的な考え方を示す。

入射光と照射面繊維走行のなす角は θ であるとし、ここでもタイプDの拡散反射の場合を例示するが、説明上 $p=0$ の場合について述べる。仮道管の縦断面が図3-5-(a)のような形状をもつ場合に、細胞壁端面からの距離が l である微小面積 $RW_1 dl$ (RW_1 は紙面垂直方向の細胞内こう寸法、図3-5-(b)参照) に着目し、この部分からの拡散反射光 (図3-4の $D_{(0,0)}$ など) をその中央部に接する直径 $2r_d$ の球で表す。この拡散反射光を図中の $q-q'$ 面 (細胞壁との角度 γ) でみた状況が図3-5-(b)で、その切り口の直径 d_{m1} は次式で表される。

$$d_{m1} = 2r_d \sin \gamma \quad (3.1)$$

$p=0$ であるため、直径 $2r_d$ の拡散反射光のうち細胞壁に遭遇せずに細胞内こうから直接に放射される割合 $RA(0, l)$ を求めればよいことになる。図3-5(a)、(b)において dv を $p-p'$ 面近傍の立体的な微小量 (斜線部) とすると、 $RA(0, l)$ は同図における拡散反射光の実線部に相当するから、

$$RA(0, l) = \frac{1}{I_{ds}} \int_0^{\varphi} \int_{-\tau}^{\tau} dv \quad (3.2)$$

となる。ここで、 I_{ds} は拡散反射光全体の強さ (図における球の体積) で、

$$I_{ds} = \frac{4}{3} \pi r_d^3 \quad (3.3)$$

であり、

$$\begin{aligned} dv &= \frac{1}{3} d_{m1}^3 \cos^4 \mu d\mu d\gamma \\ &= \frac{8}{3} r_d^3 \sin^3 \gamma \cos^4 \mu d\mu d\gamma \end{aligned} \quad (3.4)$$

である。したがって、(3-2)式は、

$$RA(0, l) = \frac{4}{\pi} \int_0^\varphi \int_0^\tau \sin^3 \gamma \cos^4 \mu d\mu d\gamma \quad (3.5)$$

となる。ここに、

$$\tau = \tan^{-1} \left(\frac{RW_1 / 2}{d_{m2}} \right) \quad (3.6)$$

である。また、 ϕ については、

$$\phi = \pi - \sin^{-1} \left(\frac{TW_1}{TS_0} \right) \quad : 0 \leq l \leq TW_1 \tan \theta \text{ の場合}$$

$$\phi = \sin^{-1} \left(\frac{TW_1}{TS_0} \right) \quad : l > TW_1 \tan \theta \text{ の場合(図3-5 (a))} \quad (3.7)$$

であり TS_0 と d_{m2} は次式で表される。

$$TS_0 = \sqrt{l^2 + \frac{(TW_1)^2}{\cos^2 \theta} - 2TW_1 l \tan \theta} \quad (3.8)$$

$$d_{m2} = \frac{l \cos \theta}{\cos(\gamma - \theta)} \quad (3.9)$$

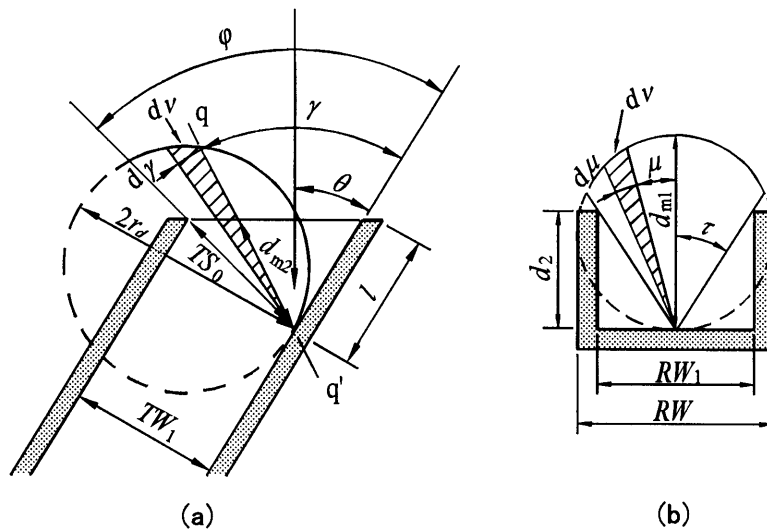


図3-5 $p=0$ の場合の拡散反射光モデル

3. 3. 3 半無限仮道管群における拡散反射光漏出率 $S(\theta)$

3.3.2に示された光路モデルの考え方にに基づき、半無限仮道管群における拡散反射光漏出率 $S(\theta)$ を求める。拡散反射光および透過光の挙動は、3.1で示した指向特性モデルに従うものとし、また、それぞれの光は細胞壁を p 層だけ透過できるものとする。

(a) タイプDの場合

図3-3には、 CW_0 のF面に直接、あるいは1～ p 層の細胞壁($CW_1 \sim CW_p$)を透過して照射された光によって生じた拡散反射光が実線の球で示されている。また CW_0 以外の各細胞壁F面で照射光に対して生じる拡散反射光が、破線の球で示されている。これらの拡散反射光は3.3.1でも述べたように、各細胞壁からの透過光が次の細胞壁F面に達するまでの区間を一つの単位(厚さ TW)と考え、当該単位区間内での光の散乱・反射・吸収・透過の結果、F面に出現したものとして表されている。また、これら各細胞壁に割り付けられている照射光は、3.3.2でも述べたように、入射面から CW_0 に到達するまでの間に他の面での拡散反射の過程をまったく含んでいないものに限定されている。

したがって微小面積 $RW_1 dI$ において、 i 層(厚さ iTW)透過した照射光によって生じる拡散反射光強度 I_d は、入射光強度を I_0 とすると、

$$I_d = T(iTW)R(TW)I_0RW_1 \sin \theta dI \quad (3.10)$$

ここで、 T および R は光の透過率および反射率で、第2章における図2-6とKubelka-Munkの関係式によって求められる。 CW_0 に遭遇した入射光のそれぞれは、それまでに透過した細胞壁数 i に対応した(3-10)式の強度をもつ拡散反射光になり、それらが図3-3に示した CW_0 上の区間 $i=0 \sim p$ にわたって出現する。タイプDの拡散反射光の場合は、透過光の代表進行方向が入射角によらず細胞壁面に対して垂直であるため、細胞壁F面の部位によっては $i=0 \sim p$ のいくつかの影響を受けた拡散反射光が重なり合って生じる。 i に注目すれば、

$$iTW \tan \theta \leq l \leq iTW \tan \theta + \frac{TW_1}{\sin \theta \cos \theta} \quad (3.11)$$

の範囲で i 層透過した照射光に対応する拡散反射光が生起する。以上をまとめると、着目した1つの細胞壁 CW_0 のF面に照射される光に由来する拡散反射光強度 $P(p)$ は次式のように表される。

$$P(p) = \sum_{i=0}^p \int_{SD_i}^{SD_i+E} T(iTW)R(TW)I_0RW_1 \sin \theta dI \quad (3.12)$$

ここに、

$$E = \frac{TW_1}{\sin \theta \cos \theta} \quad (3.13)$$

$$SD_i = iTW \tan \theta \quad (3.14)$$

ただし、 $i=0,1,2,\dots,p$ である。

この(3-12)式の $P(p)$ のすべてが試料の外へ放射されるわけではなく、実際に測定されるのは CW_0 に対向する仮道管群によって散乱・反射・吸収されたのちに試料表面から放射される拡散反射光である。そこでまず、細胞内こう表面で生じた拡散反射光のうち、仮道管群を透過して1次放射光となる割合 $RA_1(p,l)$ を考える。図3-6において、 CW_0 層の細胞壁端面からの

距離が l である部位における拡散反射光を対象とし、微小面積 RW_1dl に関する $RA_1(p,l)$ を3.3.2の考え方を拡張して算出すると以下ようになる。

$$RA_1(p,l) = \frac{4}{\pi} \int_0^\varphi \int_0^\tau \sin^3 \gamma \cos^4 \mu d\mu d\gamma + \frac{4}{\pi} \int_0^\varphi \int_0^{\tau_p} \sin^3 \gamma \cos^4 \mu T \left(\frac{d_{m2}}{\cos \mu} \right) d\mu d\gamma \\ + \frac{4}{\pi} \int_\varphi^{\varphi_p} \int_0^{\tau_p} \sin^3 \gamma \cos^4 \mu T \left(\frac{d_{m2}}{\cos \mu} \right) d\mu d\gamma \quad (3.15)$$

ここに、

$$\tau_p = \tan^{-1} \left(\frac{RW_1/2 + pRW}{d_{m2}} \right) \quad (3.16)$$

$$\varphi_p = \pi - \sin^{-1} \left(\frac{TW_1 + pTW}{TS_p} \right) \quad : 0 \leq l \leq (TW_1 + pTW) \tan \theta \text{ の場合}$$

$$\varphi_p = \sin^{-1} \left(\frac{TW_1 + pTW}{TS_p} \right) \quad : l > (TW_1 + pTW) \tan \theta \text{ の場合} \quad (3.17)$$

$$TS_p = \sqrt{l^2 + \frac{(TW_1 + pTW)^2}{\cos^2 \theta} - 2(TW_1 + pTW)l \tan \theta} \quad (3.18)$$

(3-15)式の右辺第1項は、 CW_0 で生じた拡散反射光のうち、細胞壁に一度も遭遇せずに入射面から放射される光の割合を示す。また第2項は、図3-6に示された角度範囲SEC1から紙面の垂直方向に存在する仮道管群を透過して放射される光の割合を、さらに第3項は同図の範囲SEC2から放射される光の割合を示す。なお、 τ_p は図3-6には示されていないが、図3-5-(b)の τ に対応するものであって、図3-6の紙面垂直方向に p 層透過する光を考慮するうえで必要となる。

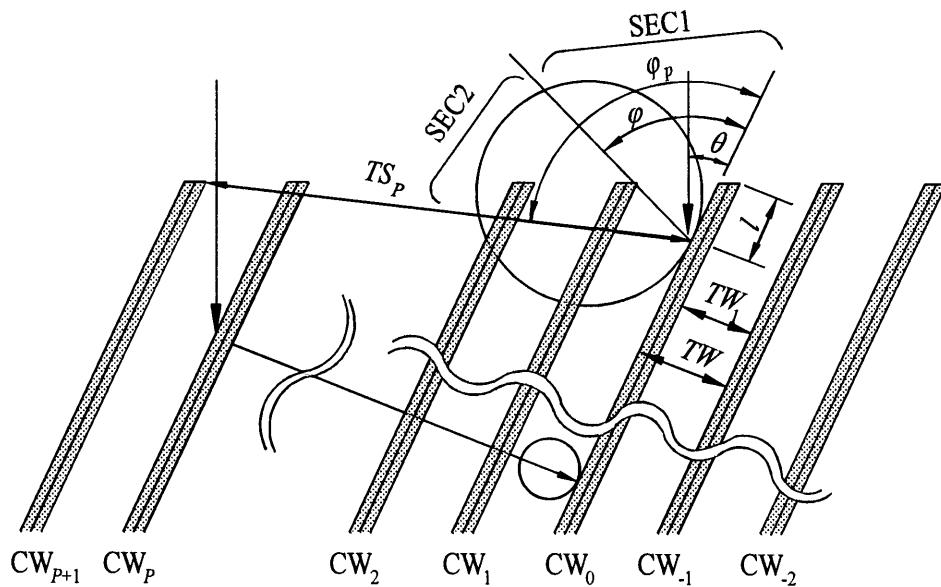


図3-6 仮道管群から放射される拡散反射光のモデル（タイプD）

さらに、これら拡散反射光の一部は $CW_1 \sim CW_{p+1}$ の細胞壁B面で反射され、再び CW_0 に照射されることによって新たな拡散反射光になるから、このうち2次放射光となる割合 $RA_2(p, l)$ を次に考える。ここでは、2次放射光に関与する分（たとえば $p=2$ の場合には、図3-4-(c)に示す拡散反射光 ($D_{(0,0)}$ など)の空白部と点々部の一部 ($[1-RA_1(p, l)]$ の割合となる)に相当する)の指向特性を CW_0 に対して垂直な方向で代表させ、計算の単純化をはかった。この光は $CW_1 \sim CW_{p+1}$ で反射され、ふたたび CW_0 に照射される。その挙動は CW_0 に対向して $\{(l/\tan \theta) - TW_1\}$ の厚さをもつ試料表面 (CW_1 のB面)における反射として一括表現されうる。この段階でも、光の指向特性を CW_0 に対して垂直な方向に限定する。これによってまた $CW_0, CW_{-1}, CW_{-2}, \dots, CW_{-p}$ の各F面で拡散反射光が生じるから、それらを一括して CW_0 のF面に反射率 $R(\infty)$ に対応する拡散反射光が現れるとする。このようにして形成された新たな拡散反射光の一部が仮道管群を透過して2次放射光となり、この一連の現象が無限に繰り返されるために、結局 $RA_2(p, l)$ は次式で表される。

$$\begin{aligned}
 RA_2(p, l) = & \{1 - RA_1(p, l)\} R\left(\frac{l}{\tan \theta} - TW_1\right) R(\infty) RA_1(p, l) R_c \\
 & + \{1 - RA_1(p, l)\}^2 \left\{ R\left(\frac{l}{\tan \theta} - TW_1\right) \right\}^2 \{R(\infty)\}^2 RA_1(p, l) R_c \\
 & + \{1 - RA_1(p, l)\}^3 \left\{ R\left(\frac{l}{\tan \theta} - TW_1\right) \right\}^3 \{R(\infty)\}^3 RA_1(p, l) R_c + \dots
 \end{aligned} \quad (3.19)$$

ただし、拡散反射光の代表進行方向に対向する細胞壁が存在しない場合 (すなわち $l < TW_1 \cdot \tan \theta$)には、

$$RA_2(p, l) = 0 \quad (3.20)$$

である。また、 R_c は近赤外光の拡散反射・透過指向特性によって変化する係数で、これを2次放射光寄与率 ($R_c: 0 \leq R_c \leq 1$)と称する。タイプDの場合は、吸光係数がほぼ0で材内での吸収はないとみてよいから $R_c=1$ である。1次放射光と2次放射光による分を合わせて $RA(p, l)$ とすると、

$$\begin{aligned}
 RA(p, l) &= RA_1(p, l) + RA_2(p, l) \\
 &= \frac{RA_1(p, l)}{1 - \left[\{1 - RA_1(p, l)\} R\left(\frac{l}{\tan \theta} - TW_1\right) R(\infty) \right]}
 \end{aligned} \quad (3.21)$$

となる。したがって、着目した1つの細胞壁 CW_0 のF面に照射された光に由来する拡散反射光強度 $P(p)$ のうちで入射面から放射される分 $P(p)_e$ は次式で表される。

$$P(p)_e = \sum_{i=0}^p \int_{SD_i}^{SD_i+E} RA(p, l) T(iTW) R(TW) I_0 R W_1 \sin \theta dl \quad (3.22)$$

以上の結果に基づいて、拡散反射光漏出率 $S(\theta)$ を計算する。半無限仮道管群における $CW_0 \sim CW_{p+1}$ 間の細胞内こう表面から放射される拡散反射光強度 $P(p)_\theta$ は、細胞壁を p 層透過しうる入射光が照射された場合には、

$$P(p)_\theta = (p+1)P(p)_e \quad (3.23)$$

である。一方、 $CW_0 \sim CW_{p+1}$ 間の細胞内こう表面で生じる拡散反射光は、

$$P(p)_L = (p+1)R(\infty)I_0\left(\frac{TW_1}{\cos\theta}\right)RW_1 \quad (3.24)$$

で表される。

したがって、拡散反射光漏出率 $S(\theta)$ は、

$$\begin{aligned} S(\theta) &= \frac{P(p)_\theta}{P(p)_L} \\ &= \frac{\sin\theta\cos\theta}{TW_1R(\infty)} \sum_{i=0}^p \int_{SD_i}^{SD_i+E} RA(p,l)T(iTW)R(TW)dl \end{aligned} \quad (3.25)$$

となる。

(b) タイプRの場合

次に、タイプRについて考える。

$0 < l \leq 2TW_1 \tan\theta$ の場合には、 $RA_1(p,l)$ は次式で表される。

$$\begin{aligned} RA_1(p,l) &= \frac{4}{\pi} \int_{\pi/2-\theta}^{\varphi} \int_0^{\tau} \cos^3(\pi-\theta-\gamma) \cos^4 \mu d\mu d\gamma \\ &\quad + \frac{4}{\pi} \int_{\pi/2-\theta}^{\varphi} \int_0^{\tau_p} \cos^3(\pi-\theta-\gamma) \cos^4 \mu T\left(\frac{d_{m2}}{\cos\mu}\right) d\mu d\gamma \\ &\quad + \frac{4}{\pi} \int_{\pi/2-\theta}^{\varphi_p} \int_0^{\tau_p} \cos^3(\pi-\theta-\gamma) \cos^4 \mu T\left(\frac{d_{m2}}{\cos\mu}\right) d\mu d\gamma \end{aligned} \quad (3.26)$$

また、 $2TW_1 \tan\theta < l$ の場合には、次式となる。

$$RA_1(p,l) = \frac{4}{\pi} \int_{\pi/2-\theta}^{\varphi} \int_0^{\tau} \cos^3(\pi-\theta-\gamma) \cos^4 \mu T\left(\frac{d_{m2}}{\cos\mu}\right) d\mu d\gamma \quad (3.27)$$

タイプRの場合には、3.3.1でも示したように拡散反射光の代表進行方向が正反射方向であるため、散乱・反射・透過を繰返すうちに2次放射光は材内に吸収されてしまうと予想される。したがって(3.19)式において $R_c=0$ とおくと、

$$RA(p,l) = RA_1(p,l) \quad (3.28)$$

となる。したがって、

$$P(p)_e = \sum_{i=0}^p \int_{SR_i}^{SR_i+E} RA(p,l)T\left(\frac{iTW}{\sin\theta}\right)R\left(\frac{iTW}{\sin\theta}\right)I_0RW_1 \sin\theta dl \quad (3.29)$$

ここに、

$$SR_i = \frac{iTW}{\sin\theta\cos\theta} \quad (3.30)$$

である。以下、タイプDと同様にして $S(\theta)$ が求められる。

(c) タイプMの場合

さらに、タイプMの場合を考える。このタイプでは、光が細胞壁を通過するたびにその進

行方向が変化する状況を計算過程においても考慮する必要がある。したがって、 $RA_1(p, l)$ は次式で表される。

$$RA_1(p, l) = \frac{4}{\pi} \int_0^\varphi \int_0^\tau \sin^3 \varepsilon_i \cos^4 \mu d\mu d\gamma + \frac{4}{\pi} \int_0^\varphi \int_0^{\tau_p} \sin^3 \varepsilon_i \cos^4 \mu T\left(\frac{d_{m2}}{\cos \mu}\right) d\mu d\gamma \\ + \frac{4}{\pi} \int_\varphi^{\varphi_p} \int_0^{\tau_p} \sin^3 \varepsilon_i \cos^4 \mu T\left(\frac{d_{m2}}{\cos \mu}\right) d\mu d\gamma \quad (3.31)$$

ここに、

$$\varepsilon_i = \left(\frac{\pi}{2} - \theta\right) \frac{1}{2^{i+1}} + \gamma \quad (3.32)$$

ただし、 $i=1, 2, \dots, p-1, p$ である。

ε_i は(3-15)式中の γ に相当するものである。

タイプDと同様に $RA_2(p, l)$ を考慮しなければならない。3.3.1にも示したように、タイプMはある程度透過光が直進性をもつと考えられるから、ここでは $R_c=0.5$ とおいた。 CW_0 に由来する拡散反射光強度 $P(p)_e$ は、

$$P(p)_e = \int_0^E RA(p, l) R \left\{ \frac{TW}{\cos\left(\frac{\pi}{4} - \frac{\theta}{2}\right)} \right\} I_0 RW_1 \sin \theta dl \\ + \sum_{i=1}^p \int_{SM_i}^{SM_i+E} RA(p, l) T(L1_i) R(L2_i) I_0 RW_1 \sin \theta dl \quad (3.33)$$

ここに、

$$SM_i = TW \tan \theta + TW \sum_{n=1}^i \tan \left\{ \left(\frac{\pi}{2} - \theta\right) \frac{1}{2^n} \right\} \quad (3.34)$$

$$L1_i = TW \sum_{n=1}^i \frac{1}{\cos\left\{(\pi/2 - \theta) / 2^n\right\}} \quad (3.35)$$

$$L2_i = \frac{TW}{\cos\left\{(\pi/2 - \theta) / 2^{i+1}\right\}} \quad (3.36)$$

である。(3-34)～(3-36)式もタイプMの特性を考慮することによって導かれた。以下、タイプDと同様にして $S(\theta)$ が求められる。

ところで、このモデルはタイプDおよびRの折衷形で、光が細胞壁を透過するたびにその進行方向が変化し、最終的には細胞壁に対して垂直方向に進行するようになる。したがって θ が非常に小さいときには、細胞壁を1層透過するだけで透過光の進行方向がタイプDと同様に細胞壁に対して垂直な方向になってしまうと考えられる。そこでタイプMの特殊な場合としてこのような挙動を示すものをタイプM'と呼ぶことにする。タイプM'の場合には、(3-31)式において、 ε_i については次式による値が用いられなければならない。

$$\varepsilon_0 = \frac{\pi}{4} - \frac{\theta}{2} + \gamma \quad : i=0 \text{ の場合}$$

$$\varepsilon_i = \gamma \quad : i \geq 1 \text{ の場合} \quad (3.37)$$

また、この場合には $P(p)_e$ の計算においても、(3-33)式の代わりに(3-22)式が用いられる。

3. 4 計算結果

前章で示した3つの近赤外領域の代表波長(1100nm、1680nm、2230nm)について3.3で述べた計算を実施し、拡散反射光の仮道管群漏出率 $S(\theta)$ が θ に対してどのように変化するかを検討した。この計算を行う際には入射光が透過しうる試料厚さ、すなわち3.3.2～3.3.3における細胞壁数 p を定める必要がある。ここでは、1100nm、1680nm、および2230nmの波長に関する臨界拡散厚さがそれぞれ1000 μm 、300 μm 、200 μm であるという第2章の結果、および細胞寸法 TW が35 μm であることを考慮して、1100nmでは $p=40 (>1000/35)$ 、1680nmでは $p=15 (>300/35)$ 、2230nmでは $p=10 (>200/35)$ としてそれぞれの計算を行った。

各波長に関する $S(\theta)$ の計算値を図3-7に黒印で示す。式(3-19)中の R_c については、先にも述べたように1100nmに対して $R_c=1$ 、2230nmに対して $R_c=0$ とし、1680nmに対してはタイプMの場合 $R_c=0.5$ 、タイプM'の場合 $R_c=1$ とした。一方、図3-8に白印で示された点は同じ条件に関する現実値で、前章の手法によって加工面粗さと細胞体の構成状況を考慮に入れた実験式と吸光度実測値から求められた値である。ただし、1100nmに関する実験式の m 値は、前章で算出された0の代わりに、領域Ⅱ、およびⅢに属する波長の m の平均値($\theta=0^\circ$ 、 15° 、 30° 、 45° 、 60° に対し、それぞれ $m=1.6$ 、 1.2 、 1.5 、 2.1 、 3.2)を適用した。1100nmにおいては、試料表面構造が吸光度にほとんど影響を及ぼさないため、 $m=0$ でも $m=1.2\sim 3.2$ でも計算結果に大差は生じないが、領域Ⅰ(800～1400nm)に含まれる他の波長に関する m の算出値が必ずしも0でな

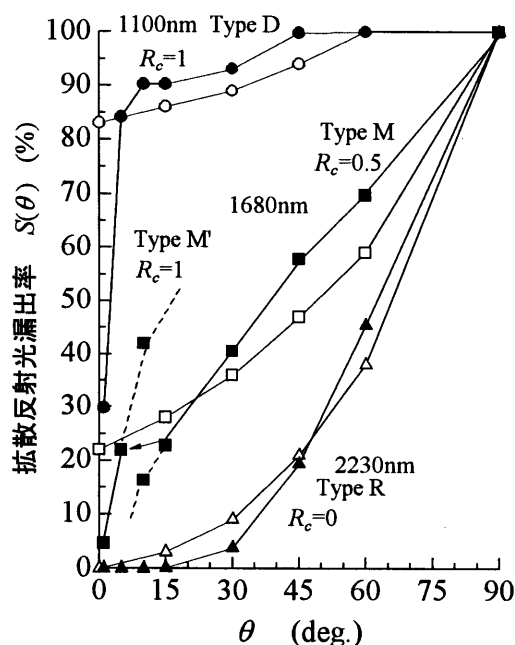


図3-7 拡散反射光漏出率の現実値（白印）と理論値（黒印）

いことを考慮して上記の処置をとった。

図3-7の白印を黒印と比較してみると、1100nm (タイプD)、2230nm (タイプR)ともに計算値と現実値はほぼ一致しており、今回提案した指向特性モデルおよび光路モデルが領域ⅠおよびⅢにおける光の挙動を見積もるものとして妥当であることを裏付けている。詳細にみると、1100nmの場合には θ が 0° 、すなわち照射面が木口に近づくとき計算値は急激に減少し、と隔たっている。これは、仮道管の長さを無限として計算し、実際に仮道管の終端部で生じた拡散反射光の影響を無視したことによるとと思われる。

1680nmにおいては、 $\theta \geq 15^\circ$ ではタイプMの計算値 ($R_c=0.5$)が現実値とよく一致しているが、 $\theta \leq 10^\circ$ では両者の差が広がる傾向にある。一方、タイプM'をみると、 $\theta=5^\circ$ では現実値とほぼ一致した値になっているが、 $\theta \geq 10^\circ$ では現実値とは離れた値をとるようになる。したがって、 $\theta=10^\circ$ 近傍は光の挙動がタイプMからタイプM'に変化する遷移領域であるとみられる。 $\theta=5^\circ$ における細胞壁1層の透過距離が $402\mu\text{m}$ 、同様に $\theta=10^\circ$ においては $202\mu\text{m}$ であり、これらが1680nmにおける臨界拡散厚さ($300\mu\text{m}$)近傍の値であることは興味深い。

以上の結果を近赤外光の反射および透過指向特性、ならびに2次放射光寄与率 (R_c) に着目して整理すると、表3-1のように要約される。

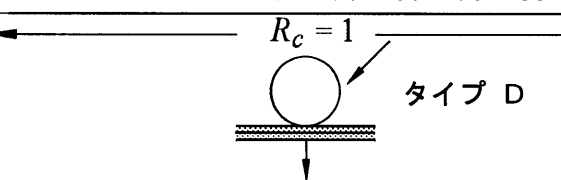
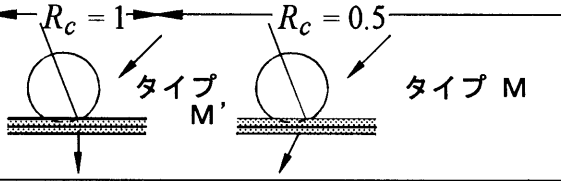
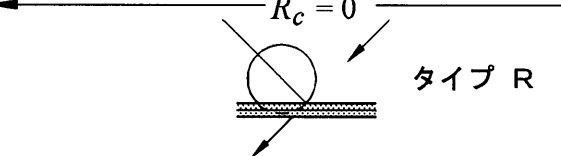
θ (Deg.)	0	10	20	30	40	50	60	70	80	90
領域Ⅰ (800 - 1400 nm)										
領域Ⅱ (1400 - 1860 nm)										
領域Ⅲ (1860 - 2500 nm)										

表3-1 各波長領域の指向特性モデルと2次放射光寄与率

3. 5 結言

木材を仮道管の集合体とみなして、これに照射された近赤外光の散乱・反射・吸光・透過の連鎖過程に関する首尾一貫したモデルの体系を構成し、木材内部における近赤外光の挙動と拡散反射・透過指向特性を総合的に理解できるようにした。得られた結論は以下のとおりである。

(1) 波長領域に対応した散乱係数 S と吸光係数 K の様相を考慮にいれて、近赤外光の拡散反射および透過指向特性に関するモデルを提案した。この指向特性モデルは波長領域に対応し

た3つの類型をもち、半無限仮道管群における近赤外光の挙動を記述する光路モデルを構成するための基盤となるものである。

(2) 半無限仮道管群における任意の一つの細胞壁に着目し、これに直接あるいは間接的に照射される光によって生じる拡散反射光の光路の重ね合わせによって、仮道管群全体から放射される光の状況が過不足なく具現されるような光路系のモデルを提案した。

(3) 細胞内こう表面で生じた拡散反射光のうち照射面から放射される光の強度を、細胞壁各部位ごとに指向特性モデルと光路モデルにしたがって逐一計算することができる式を構成した。さらに、それらを総和して拡散反射光漏出率 $S(\theta)$ を求める式を各波長領域ごとに導いた。

(4) (3)の諸式に従って、領域Ⅰ、Ⅱ、Ⅲの代表波長(1100nm、1680nm、2230nm)における $S(\theta)$ を算出した。計算結果は、いずれの波長においても加工面粗さと細胞体の構成状況を考慮に入れた実験式と吸光度実測値から求められた $S(\theta)$ の現実値とほぼ一致し、今回提案した指向特性モデルおよび光路モデルが木材内部における近赤外光の挙動と拡散反射・透過指向特性を表すものとして妥当であることが裏付けられた。

第4章 反射光および透過光に関する包括的な理論体系の構築

4. 1 緒言

前章までの諸検討によって、試料表面近傍の構造が近赤外吸収スペクトルに及ぼす影響が実験的に把握され、また、木材試料に照射された近赤外光の挙動に関するモデルも構築されて、試料内部における状況が一貫した視点のもとで理解できるようになった。ところで、これらに関する考察において基本とした光学的理論体系は、Kubelka-Munkの関係式(以下、K-M関係式と略称する)であった。粉体・固体試料を測定対象とした分光学的研究は、この関係式を基礎として構築されているものがほとんどであり、木材に関しても例外ではない⁵²⁻⁵⁷⁾。たとえば、赤外光を試料に照射して、得られる拡散反射光と試料の表面性状の関係を調べたZavarinら^{53,54)}による報告においても、Kubelka-Munk理論が成立することを前提とした測定結果の解釈が示されている。このK-M関係式は、Lambertの余弦法則^{58,59)}に従う理想的な光散乱吸収体、たとえば均一な粒径の粉体試料などにおける光の反射および透過の挙動を表現するもので、入射光が散乱光であることを前提としている。

本研究で対象とする近赤外光に関しても、前章までは木材試料内における近赤外光の挙動に関する諸特性、すなわち、散乱係数、吸光係数と反射率、透過率との関係などはすべてこのK-M関係式に基づく考え方で表現できるものとし、さらに、反射光や透過光の指向特性に関しては実験結果に矛盾しないモデル(指向特性モデル)を導入して解析を進めてきた。状況はこれらの光学モデルによっておおむね理解されるようになったが、実際に得られる近赤外吸収スペクトルは試料表面から放射される拡散反射光のみを情報源とするものであるため、照射波長に応じて発現される指向特性モデルの特徴がどのような事情によってもたらされたかはなお推定の域を脱していなかった。このような現象をより深く洞察しようとするとき、実際には考慮すべき問題点が2つある。まず第1に、木材のように試料実質の準微視的な粗密が顕在する組織構造をもつ試料は、必ずしも理想的な光散乱吸収体とは認め難いということである。さらに第2点として、入射光は現実にはK-M関係式が前提としている散乱光ではなくて、平行光である場合がほとんどであり、本研究で使用している装置の光学系も例外ではないという事実である(2.2.1参照)。

したがって、木材に代表される生物材料内部の情報を近赤外分光法によって正しく得ようとする場合には、上記の2点を包括できる解析の基盤を確立することがぜひとも必要とされる。本章では、木材試料に平行入射光を照射した場合の反射光と透過光の挙動を、Kubelka-Munkの関係式を発展させた新たな考え方で説明することを試み、その妥当性を検討する。

4. 2 供試材および実験方法

供試材は第2章で用いたものと同様で、材厚(d)を多段階に変更したシトカスプルースのまき目板試料($19\mu\text{m} \leq d \leq 9030\mu\text{m}$)である。

本研究で使用している近赤外分光分析計は、試料から放射される拡散反射光のみを積分球によって捕捉するシステムになっており、実測される吸光度は(2.2)式によって算出される。したがって、試料下面から放射される透過光に関する情報を直接検出することはできない。そこで本実験では、試料下面に表面鏡を密着させた状態での近赤外吸収スペクトルを測定し

た。試料下面から放射される透過光が表面鏡によって反射されるため、この光の一部は試料内と表面鏡の間を1～複数回繰返し反射した後に照射面(上面)から放射される。このように拡散反射光に加えて拡散透過光も間接的に捕捉する条件で吸光度を実測し、第2章に示した通常状態(表面鏡を使用しない状態)での吸光度実測値と比較することによって透過光の挙動を把握しようとした。測定波長は800～2500nmで、測定波長間隔は10nmであった。

4. 3 実験結果および考察

4. 3. 1 拡散反射光の挙動とKubelka-Munkの関係式

第2および3章における解析でKubelka-Munkの関係式(K-M関係式)を適用したことをふまえて、まず木材試料内部の光の動向が同式によって表現できることを期待し、その妥当性を実測結果に基づいて検討した。検討は、拡散反射光と透過光のそれぞれについてなされなければならないが、最初に、拡散反射光の挙動について調べた結果を述べる。

図4-1に代表波長(900nm、1100nm、1680nm、2230nm)における試料厚さ d と吸光度の関係を示す。ここで示す吸光度実測値(表面鏡なし)は、第2章の実験で求められたものである。図中の丸印と角印は実測値で、実線は図2-6の K および S を採用した各波長ごとのK-M関係式による吸光度計算値である。図から明らかなように、いずれの波長でも吸光度実測値と計算値はほぼ一致した。この結果は、まさ目面に対して垂直に近赤外光が照射された場合には、木材内部の拡散反射光の挙動をK-M関係式で表現してもさしつかえないことを意味している。

このように4.1で指摘した2つの問題点は、拡散反射光に対してほとんど影響を及ぼさないとみてよい。しかも、かなり広範な材厚に関してもK-M関係式が適用可能であるといえる。とくに、 $d < 40\mu\text{m}$ 、すなわちほぼ細胞壁1層以下に相当する厚さの試料であっても、理論におおむね対応した拡散反射光が生じているのは興味深い結果である。

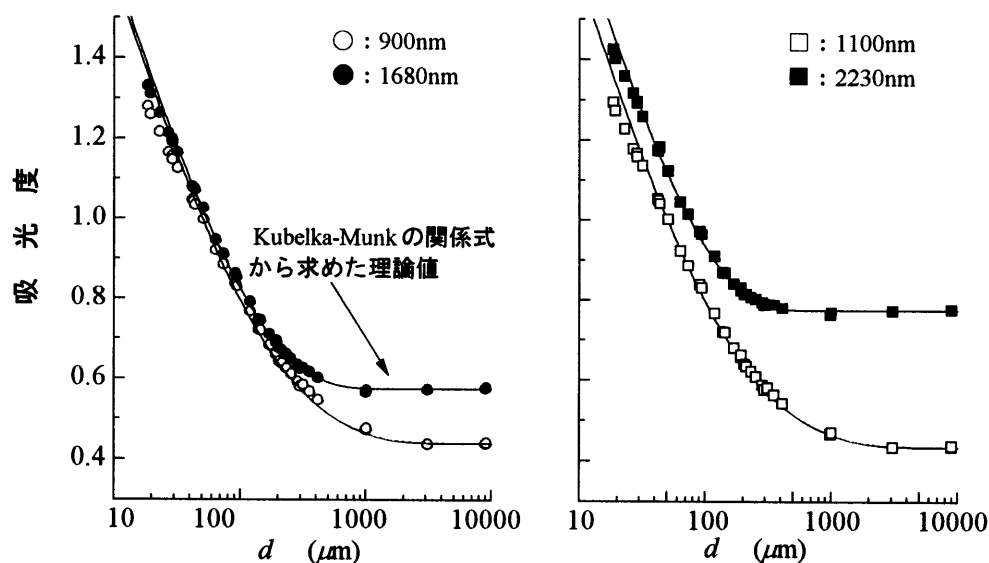


図4-1 試料厚さ(d)と吸光度の関係(表面鏡なし)

4. 3. 2 透過光の挙動とKubelka-Munkの関係式

次に、透過光の挙動について調べる。本研究で使用している測定装置では透過光を直接測定することができないため、先にも述べたように表面鏡を試料下面に密着させることによって間接的にこれを計測しようとした。

入射光強度を I_0 、Kubelka-Munk理論による厚さ d の試料の反射率を $R(d)$ 、透過率を $T(d)$ とする(2.3.4参照)。両者はいずれも図2-6の K および S の値を用いて計算される。表面鏡を密着させた場合に測定される光の強度 $I_{RT}(d)$ は、以下のように表される。

$$\begin{aligned} I_{RT}(d) &= I_0 R(d) + I_0 \{T(d)\}^2 + I_0 R(d) \{T(d)\}^2 + I_0 \{R(d)\}^2 \{T(d)\}^2 + \dots \\ &= I_0 \left[R(d) + \frac{\{T(d)\}^2}{1 - R(d)} \right] \end{aligned} \quad (4.1)$$

上式第1項は、拡散反射光の強度、同第2項は、試料をいったん透過した後に表面鏡によって反射された光に由来して試料表面から放射される光の強度を表す。したがって、これに対応する吸光度 $A_{RT}(d)$ は、本計測システムにおける反射光捕捉率を c とすると、

$$\begin{aligned} A_{RT}(d) &= \log \frac{I_0}{c I_{RT}(d)} \\ &= \log \left[R(d) + \frac{\{T(d)\}^2}{1 - R(d)} \right]^{-1} - \log c \end{aligned} \quad (4.2)$$

となる。

図4-2に表面鏡がある場合の吸光度実測値と(4.2)式を用いて計算した $A_{RT}(d)$ 曲線を示す。丸あるいは角印が実測値を表す。図から明らかなように、いずれの波長においても吸光度実測

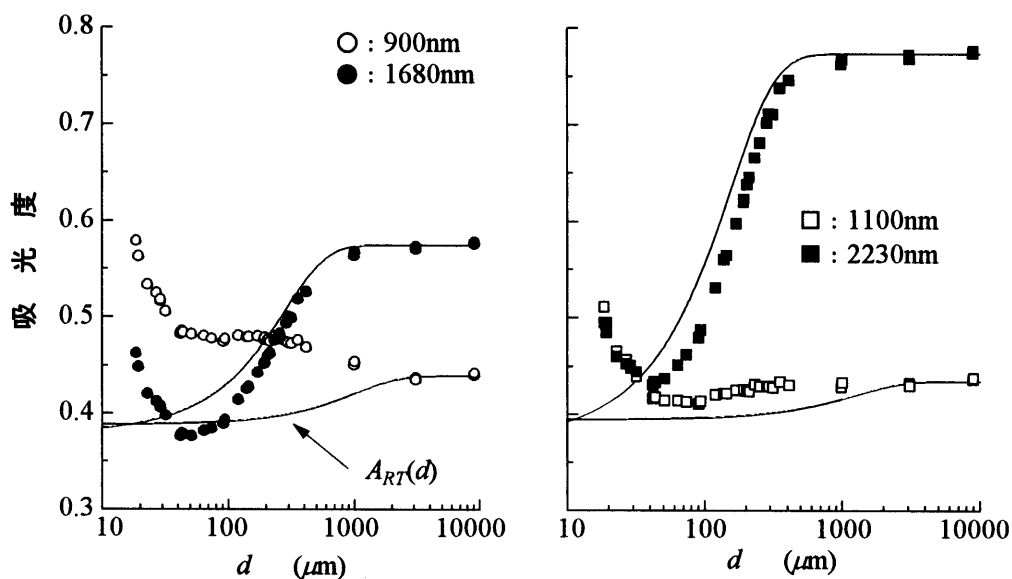


図4-2 試料厚さ(d)と吸光度の関係 (表面鏡あり)

値と $A_{RT}(d)$ は、 $d < 1000\mu\text{m}$ では一致せず、しかも両者の様相は波長に応じてかなりの相違を示す。また、 $d > 1000\mu\text{m}$ で検出される光は、実際にはほとんど拡散反射光 ($I_0R(d)$) のみである。この場合の d が臨界拡散厚さよりも十分大きいことを考えると、以上の結果は、透過光の挙動がK-M関係式によって単純には表現できず、波長によって特異的に変化することを意味している。

4. 3. 3 透過光に対しても適用可能な放射に関する一般化された入出力の関係式

このように、拡散反射光の挙動はK-M関係式で表現することができるが、透過光にはこの考え方がそのままでは当てはまらないことがわかった。これは、K-M関係式を導入する際の前提である均等拡散の概念を、透過光にそのまま適用することに無理があると考えられる。そこで次に、透過光の挙動をも正しく把握することを目的として、平行入射光であることを考慮した拡散過程モデルならびに従来形の均等拡散の考え方を修正発展させた放射強度モデルを新しく提案し、これらから試料内平均光路長を計算して放射に関する一般化された入出力の関係式を導く。なお、拡散反射光の挙動がK-M関係式で記述できることを考慮して、ここで検討するモデルならびに関係式もK-M関係式を基本としてこれを一般化する形で構成する。

(a) 基本的な考え方

ここで提案しようとする放射に関する一般化された入出力の関係式の成立過程を図4-3に示す。拡散反射光の測定に使用される試料は、一般には密なる光散乱吸収体であることが多い。そのため、入射光が平行光であっても試料内に光が侵入するとすぐ散乱し、K-M関係式を適用して実際上は問題がない。しかし、木材のような試料はその組織構造から見て必ずしも、試料厚さ d が小さい場合には透過光の全てが拡散光になることは期待できない。このように光の侵入深さに応じて拡散の状況が変化する実情に対応できるように、ここでは d をパラメータとして平行光成分を考慮に入れた拡散過程モデルを提案する。

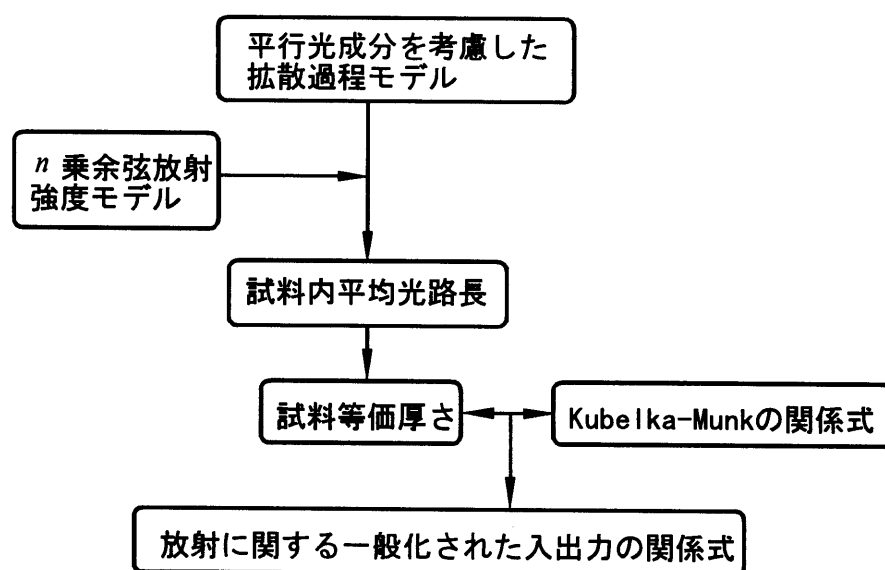


図4-3 放射に関する一般化された入出力の関係式の成立過程

また4.3.2の結果を考慮すると、試料内における散乱光の放射状況についても、均等な拡散状態を前提にして考察をすすめることが必ずしも妥当でないと判断される。そこで本研究では、散乱光の放射強度特性を柔軟に表現できる n 乗余弦放射強度モデルを考え、これを上記の拡散過程モデルに組み込むことによって、このような一般的な状況下にある木材試料内において散乱あるいは吸光の式に関与する有効な光路長、すなわち試料内平均光路長を計算できるようにする。

さらに、平均光路長によって得られる試料等価厚さという概念をK-M関係式に導入することにより、放射に関する一般化された入出力の関係式を構築し、試料内における近赤外光の動向を正しく把握することを試みた。なお、今回提案する光学特性モデルにおいては、吸光係数 K 、および散乱係数 S は d によらず一定であるとした。

(b) 平行光成分を考慮した拡散過程モデル

まず、平行光を照射した場合の、試料照射面から距離 x における部位での光の挙動を考える。図4-4-(a)のように、 x に対して光の反射方向および透過方向にそれぞれ微小厚さ dx をとる。 x に垂直な面内の微小面 dS に着目すると、前述のように光の反射方向の dx では、 dS からの放射束は均等な拡散状態になると考えて差し支えない。一方、透過方向の dx では入射光の直進性が高いために、光が試料内に侵入して間もない地点では、平行光成分を含んでいると考えられる。そこで、図4-4-(b)に示すように角度 2ψ 内のみ光が拡散し、この ψ が x とともに変化して、

$$0 \leq x \leq \frac{\pi}{2\kappa} \text{ の場合、 } \psi = \kappa x$$

$$x > \frac{\pi}{2\kappa} \text{ の場合、 } \psi = \frac{\pi}{2} \quad (4.3)$$

で表されるような平行光成分を考慮した拡散過程モデルを想定する。ここで κ は係数である。

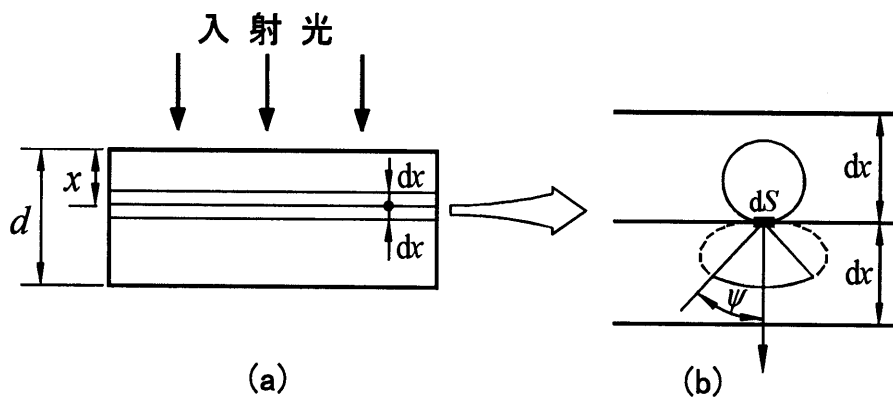


図4-4 平行光成分を考慮した拡散過程モデル

(c) n 乗余弦放射強度モデル

次に、試料の光散乱吸収体としての特性を考える。一般には試料内部の放射強度に対してLambertの余弦法則を適用するが、ここでは透過光の放射強度特性を幅広く表現するために、

コンピュータグラフィックスの分野におけるPhong⁶⁰⁾のモデルに類似した分布則を採用する。すなわち、試料照射面に対して平行な面内における微小面 dS を考えた場合に、 θ 方向の放射強度 $I_{n\theta}$ を、

$$I_{n\theta} = I_{nor} \cos^n \theta \quad (4.4)$$

とおき、以下、このモデルを n 乗余弦放射強度モデルと称する。式中 I_{nor} は、 dS の法線方向($\theta = 0^\circ$)の放射強度を示す。 n 乗余弦放射強度モデルを画くと図4-5のようになる。反射光にはK-M関係式を適用することができるために、その指向特性はLambertの余弦法則で表され、 $n = 1$ で dS に接する球状の指向特性となるが、透過光の指向特性については n の値によって実情に対応させる。

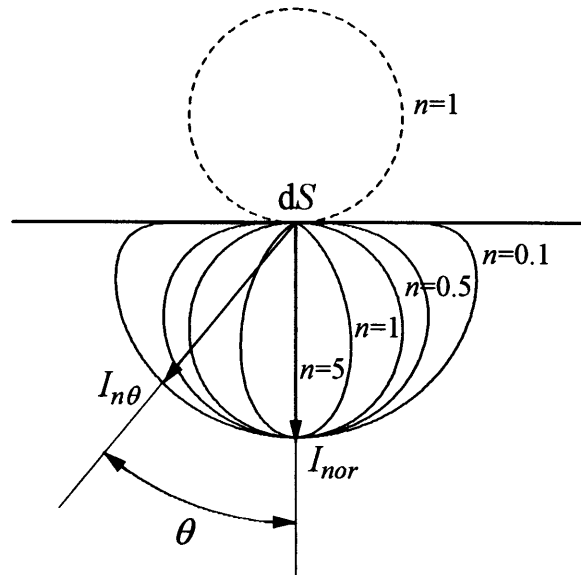


図4-5 n 乗余弦放射強度モデル

(d) 試料内平均光路長の計算

以上示した2つの光学特性モデルに基づいて、透過方向 dx 内での巨視的な平均光路長を求める。まず、 dx 内での θ 方向の光路長 $d\xi$ を求めると、図4-6のように、

$$d\xi = \frac{dx}{\cos \theta} \quad (4.5)$$

となる。また、 dx に入射する放射束 P の角分布を $\frac{\partial P}{\partial \theta}$ とすると、 θ 方向の相対強度は、 dS から dx 内に入射する全放射束を P_{ALL} とすれば、

$$\frac{1}{P_{ALL}} \frac{\partial P}{\partial \theta} d\theta$$

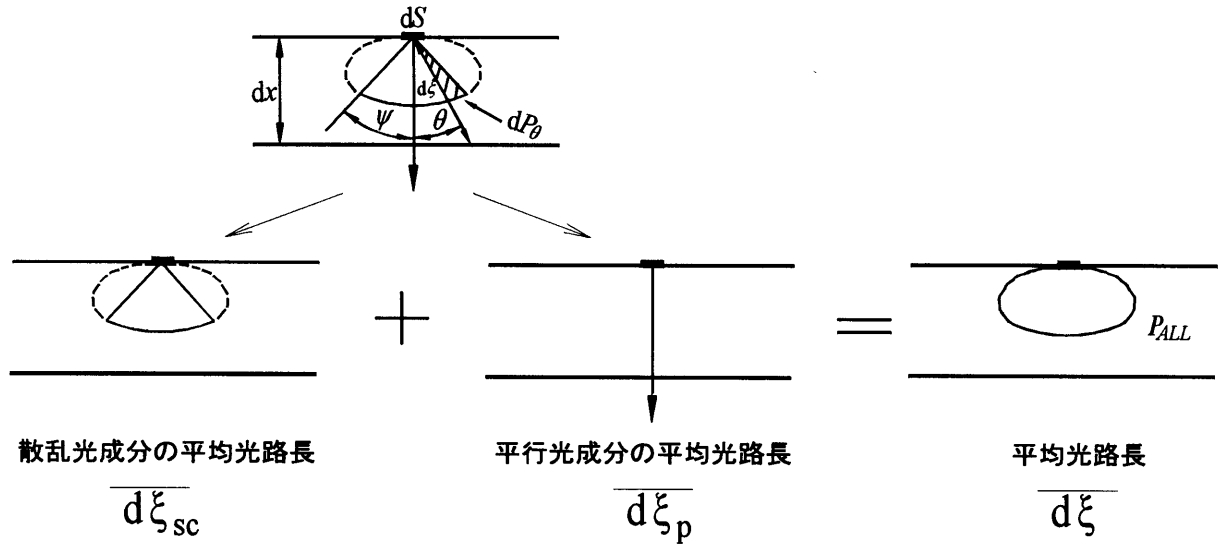


図4-6 試料内平均光路長の算出に関する概念図

となる。放射束 P が均等に散乱しているならば、 dx 内での光路長の平均値 $\overline{d\xi_d}$ は、

$$\begin{aligned}\overline{d\xi_d} &= \int_0^{\pi/2} \frac{d\xi}{P_{ALL}} \frac{\partial P}{\partial \theta} d\theta \\ &= dx \int_0^{\pi/2} \frac{1}{P_{ALL} \cos \theta} \frac{\partial P}{\partial \theta} d\theta\end{aligned}\quad (4.6)$$

で表される。これは、 $d\xi$ を微小面 dS から θ 方向の傘状微小立体角内に発散する放射束の相対強度で重み付けし、それを積分平均したもので、通常のK-M関係式に適用される平均光路長に相当する。

一方、ここで問題としているような透過光の光路長を求める場合には、図4-6に示すように、これを散乱光成分ならびに平行光成分に分離して考える必要がある。散乱光成分の平均光路長 $\overline{d\xi_{sc}}$ は、平行光成分を考慮した拡散過程モデルにおける(4.3)式および(4.6)式に基づき、

$$\overline{d\xi_{sc}} = dx \int_0^{\psi} \frac{1}{P_{ALL} \cos \theta} \frac{\partial P}{\partial \theta} d\theta \quad (4.7)$$

となる。この場合には、(4.7)式で示した積分区間以外 ($\psi \leq \theta \leq \pi/2$) で表される放射束は全て平行光成分に相当すると考える。そこで、 $d\xi = dx$ として、平行光成分の平均光路長 $\overline{d\xi_p}$ を求めると、

$$\overline{d\xi_p} = dx \int_{\psi}^{\pi/2} \frac{1}{P_{ALL}} \frac{\partial P}{\partial \theta} d\theta \quad (4.8)$$

となる。

次に、同じ図4-6において微小面 dS から θ 方向の傘状微小立体角内に発散する放射束 dP_θ を求める。まず、 dS が均等拡散面 ((4.4)式で $n=1$) の場合には、 $N(=I_{nor}/dS)$ を放射輝度とすれば、 $dP_\theta = dP_{1\theta} = I_{1\theta} 2\pi \sin \theta d\theta$

$$= 2\pi N dS \sin \theta \cos \theta d\theta \quad (4.9)$$

となり、 $dP_{1\theta}$ を $\theta=0$ から $\pi/2$ まで積分することによって全放射束を求めることができる。

一方、 n 乗余弦放射強度モデルにおいて dP_{θ} を求めると、

$$\begin{aligned} dP_{\theta} &= dP_{n\theta} = I_{n0} 2\pi \sin \theta d\theta \\ &= 2\pi N dS \sin \theta \cos^n \theta d\theta \end{aligned} \quad (4.10)$$

となり、全放射束 P_{ALL} は、

$$\begin{aligned} P_{ALL} &= \int_0^{\pi/2} 2\pi N dS \sin \theta \cos^n \theta d\theta \\ &= \frac{2\pi N dS}{n+1} \end{aligned} \quad (4.11)$$

で表される。

$$dP_{\theta} = \frac{\partial P}{\partial \theta} d\theta \quad (4.12)$$

であるから、結局、平均光路長 $\overline{d\xi}$ は(4.7)～(4.11)式より、

$$\begin{aligned} \overline{d\xi} &= \overline{d\xi_{sc}} + \overline{d\xi_p} \\ &= dx \int_0^{\psi} (n+1) \sin \theta \cos^{n-1} \theta d\theta + dx \int_{\psi}^{\pi/2} (n+1) \sin \theta \cos^n \theta d\theta \\ &= \left\{ \frac{n+1}{n} (1 - \cos^n \psi) + \cos^{n+1} \psi \right\} dx \end{aligned} \quad (4.13)$$

となる。したがって、試料内平均光路長 $\overline{\xi}$ は、

$$\begin{aligned} \overline{\xi} &= \overline{\xi_{sc}} + \overline{\xi_p} \\ &= \int_0^d \left\{ \frac{n+1}{n} (1 - \cos^n \psi) + \cos^{n+1} \psi \right\} dx \end{aligned} \quad (4.14)$$

となる。ここで、(4.14)式から明かなように、均等な拡散光 ($n=1$ 、 $\psi=\pi/2$) の場合には平均光路長($\overline{\xi} = \overline{\xi_{sc}}$)は幾何学的な試料の厚さ(d)の2倍であり、K-M理論は $d = \overline{\xi}/2$ の前提のもとに組み立てられているのであるが、 $n \neq 1$ あるいは $\overline{\xi_p} \neq 0$ の場合には必ずしもそれは成立しない。

このように一般化された状況下ではK-M関係式に試料厚さ d をそのまま投入できないことが明らかになったが、散乱あるいは吸光に関与する有効な光路長という観点から、 d に代わる等価厚さとして(4-15)式で表される \overline{d} を用いるのが妥当と思われる。

$$\begin{aligned} \overline{d} &= \frac{\overline{\xi}}{2} \\ &= \frac{1}{2} \int_0^d \left\{ \frac{n+1}{n} (1 - \cos^n \psi) + \cos^{n+1} \psi \right\} dx \end{aligned} \quad (4.15)$$

厚さ d の代りにこのような \overline{d} を用いることによって、K-M関係式は放射に関する一般化された入出力の関係式に変換される。

(e) 放射に関する一般化された入出力の関係式に基づく透過光強度の計算式

次に、実際に本測定システム (平行入射光) で得られる近赤外光の強度を、放射に関する一般化された入出力の関係式に基づいて求めてみる。

入射光強度 I_0 に対し透過光強度は、 $I_0 T(\bar{d})$ で表される。ただし $I_0 T(\bar{d})$ は均等に散乱しているとは限らないため、散乱光成分と平行光成分とに分離して考えなければならない。照射面積を A_u とすると、試料下面においては、

$$I_0 T(\bar{d}) = \frac{1}{A_u} \int_0^{A_u} P_{ALL} \quad (4.16)$$

であるから、散乱光成分の強度 $I_{sc}(d)$ は(4.10)および(4.11)式から、

$$\begin{aligned} I_{sc}(d) &= \frac{1}{A_u} \int_0^{A_u} \int_0^{\psi} 2\pi N d S \sin \theta \cos^n \theta d\theta \\ &= I_0 T(\bar{d}) (1 - \cos^{n+1} \psi) \end{aligned} \quad (4.17)$$

となる。また、 $I_0 T(\bar{d})$ のうち(4.17)式で示した積分区間以外($\psi \leq \theta \leq \pi/2$)の放射束は、(4.8)式に示したような平行光成分に相当する。したがって、その強度 $I_p(d)$ は、

$$\begin{aligned} I_p(d) &= \frac{1}{A_u} \int_0^{A_u} \int_{\psi}^{\pi/2} 2\pi N d S \sin \theta \cos^n \theta d\theta \\ &= I_0 T(\bar{d}) \cos^{n+1} \psi \end{aligned} \quad (4.18)$$

となる。

以上の点を考慮して、試料下面に表面鏡が存在する場合に得られる光の強度を計算する。試料をいったん透過した平行光成分が表面鏡によって反射され、これに由来して試料表面から強度 $I_{pr}(d)$ の光が放射されるとすると、 $I_{pr}(d)$ は次のように表される。

$$\begin{aligned} I_{pr}(d) &= I_0 T(\bar{d}) \cos^{n+1} \psi \left[T(\bar{d}) (1 - \cos^{n+1} \psi) + R(d) T(\hat{d}) + \{R(d)\}^2 T(\hat{d}) + \{R(d)\}^3 T(\hat{d}) + \dots \right] \\ &= I_0 \{T(\bar{d})\}^2 \cos^{n+1} \psi (1 - \cos^{n+1} \psi) + \frac{I_0 T(\bar{d}) T(\hat{d}) R(d)}{1 - R(d)} \cos^{n+1} \psi \end{aligned} \quad (4.19)$$

ここで、

$$\hat{d} = \frac{n+1}{2n} d \quad (4.20)$$

である。この \hat{d} は、入射光がすべて拡散した場合($\bar{\xi} = \bar{\xi}_{sc}$)の \bar{d} に相当する。(4.19)式右辺第1項は、 $I_p(d)$ のうち、表面鏡で反射された後に試料透過過程で散乱光になって試料表面から放射される分を表す。また右辺第2項は、 $I_p(d)$ のうち表面鏡で反射された後にさらに幾度か試料内での拡散反射と表面鏡での反射を繰り返して表面から放射される分を表す。試料内で一度でも拡散反射されると均等な拡散光になるために、その光が再度表面鏡で反射されて試料を透過する場合の透過率は $T(\hat{d})$ で表されることになる。なお、表面鏡で反射されて再び試料内を透過した後でも平行光状態にある成分は、本計測システムでは捕捉されないために(4.19)式ではこの成分を除外している。

次に、試料をいったん透過して散乱光となった成分が表面鏡によって反射され、これに由来して試料表面から放射される光の強度 $I_{scT}(d)$ を求めると、

$$I_{scT}(d) = I_0 T(\bar{d})(1 - \cos^{n+1} \psi) \left[T(\hat{d}) + R(d)T(\hat{d}) + \{R(d)\}^2 T(\hat{d}) + \{R(d)\}^3 T(\hat{d}) \dots \right] \\ = \frac{I_0 T(\bar{d}) T(\hat{d})}{1 - R(d)} (1 - \cos^{n+1} \psi) \quad (4.21)$$

となる。したがって、両者の和 $I_{Tsum}(d)$ は、

$$I_{Tsum}(d) = I_{pT}(d) + I_{scT}(d) \\ = I_0 T(\bar{d}) \left[T(\bar{d}) \cos^{n+1} \psi (1 - \cos^{n+1} \psi) + \frac{T(\hat{d})}{1 - R(d)} \{R(d) \cos^{n+1} \psi + 1 - \cos^{n+1} \psi\} \right] \quad (4.22)$$

実際に得られる吸光度 $A_{RTsum}(d)$ は、反射光捕捉率 c を用いて、

$$A_{RTsum}(d) = \log \frac{I_0}{c \{I_0 R(d) + I_{Tsum}(d)\}} \quad (4.23)$$

と表すことができる。

ところで、図4-2に示した測定値をみると、いずれの波長でも細胞壁1層の厚さにほぼ相当する $d \leq 40 \mu\text{m}$ では、 d が小さくなるほど吸光度が大きくなるのがわかる。これは表面鏡で反射されて再度試料を透過した後でも平行光状態にある成分が、 d が小さいほど多く存在し、本計測システムで捕捉しうる放射束、すなわち、散乱光成分が減少することに起因する。このように、 $d \leq 40 \mu\text{m}$ では平行光成分の影響が測定値に大きく反映されることを考慮して、本報では平行光成分を考慮した拡散過程モデルにおける(4.3)式の κ が波長によらず

$$\kappa = \frac{\pi}{2} \frac{1}{0.04} \quad (4.24)$$

であると仮定する。

4. 3. 4 計算結果および n に関する考察

前掲の考え方にに基づき、図4-2の実験結果に対応する理論値を算出してみた。 n 乗余弦放射強度モデルについては、 d をいろいろに変化させた場合に、吸光度実測値と(4.23)式による吸光度計算値の間の2乗平方和を最小にするような値として n を決定した。図4-7-(a)~(d)に2230 nm、1680 nm、1100 nm、900 nmに関する $A_{RTsum}(d)$ の計算結果を示す。なお、図中には $T(d)$ 、 $T(\bar{d})$ および各波長に対応する n 乗余弦放射強度分布も併せて示す。いずれの波長においても吸光度実測値と計算値はほぼ一致した傾向を示しており、今回提案した放射に関する一般化された入出力の関係式が妥当なものであることを示している。ただし、900 nmでは $d = 40 \mu\text{m}$ 前後で両者に差異が生じた。

n 乗余弦放射強度分布をみると、長波長(2230 nm)では $n > 1$ となり、透過光の指向特性は入射光方向に対して若干縦長のラグビーボール状を呈する。これは、透過光の直進性が高くなることを意味する。一方、短波長(1100 nm、900 nm)では $n < 1$ となって横偏平の形状となるために、球状の均等な拡散光に比べて入射光方向と直角方向に散乱する成分が大きくなる。第3章では、拡散反射光漏出率 $S(\theta)$ の計算過程において、透過光の代表進行方向を2230 nmでは

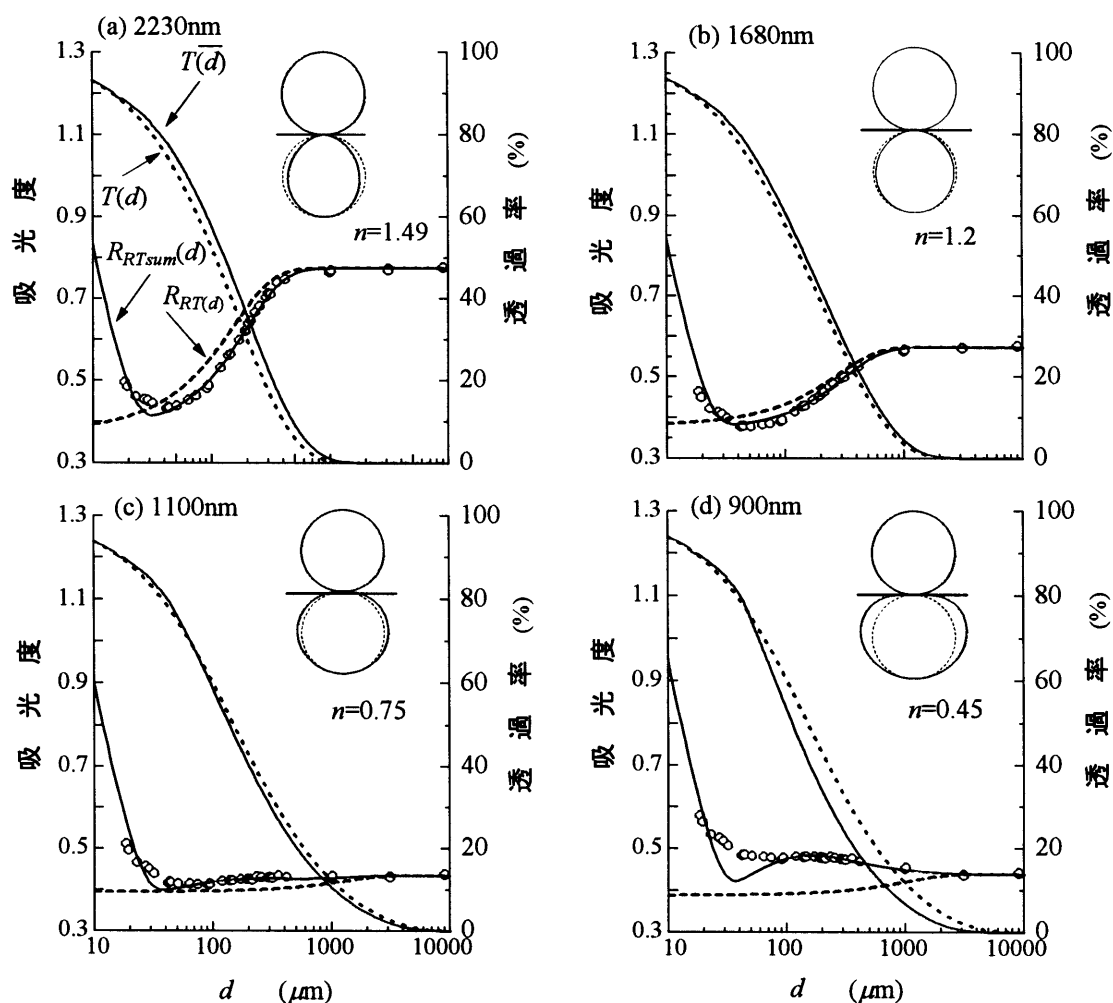


図4-7 試料厚さ (d) が吸光度および透過率に及ぼす影響
(表面鏡あり)

入射光方向と同方向(直進性が高い)とし、1100nmでは照射面に対して垂直方向である(散乱性が高い)と想定した。このような仮定の妥当性が上記の結果によって十分に裏付けられた。

次にK-M関係式を直接採用して計算される $T(d)$ と $T(\bar{d})$ を比較すると、2230nm、1680nmでは $T(d)$ よりも $T(\bar{d})$ が大きいために、均等な拡散光よりも光路長が短くなり、また、1100nm、900nmではこれが逆転して光路長が長くなることがわかる。このように、両者の関係は n 乗余弦放射強度分布に呼応するかたちで変化する。ところで、第3章では $T(d)$ を用いて $S(\theta)$ を計算したが、上記の結果から判断すると $T(\bar{d})$ を採用するのがより妥当である。この点を考慮して $S(\theta)$ を再度計算すると、1100nmでは前章よりもその値が若干小さくなり、1680nm、2230nmでは逆若干大きくなる。これは図3-7をみるとわかるように、 $S(\theta)$ の現実値に計算値がさらに近づくことになる。

図4-8に各波長における n と吸収、散乱の比を表す K/S を示す。1360nm前後で $n=1$ 、すなわ

ち透過光が均等な拡散光になり、それ以上の波長では、 n は K/S と同様な変動を呈する。また1360nm以下では短波長になるにしたがって n は漸次減少していくのがわかる。波長領域Ⅱ、Ⅲ(1400~2500nm)では、光の吸収状況に応じて透過光の指向特性が変動するために吸収されやすくなるほど直進性が高くなり、波長領域Ⅰ(800~1400nm)では入射光方向と直角方向に散乱する成分が、短波長になるほど単調に大きくなる($n=0$ ではその指向特性が半球状になる)。

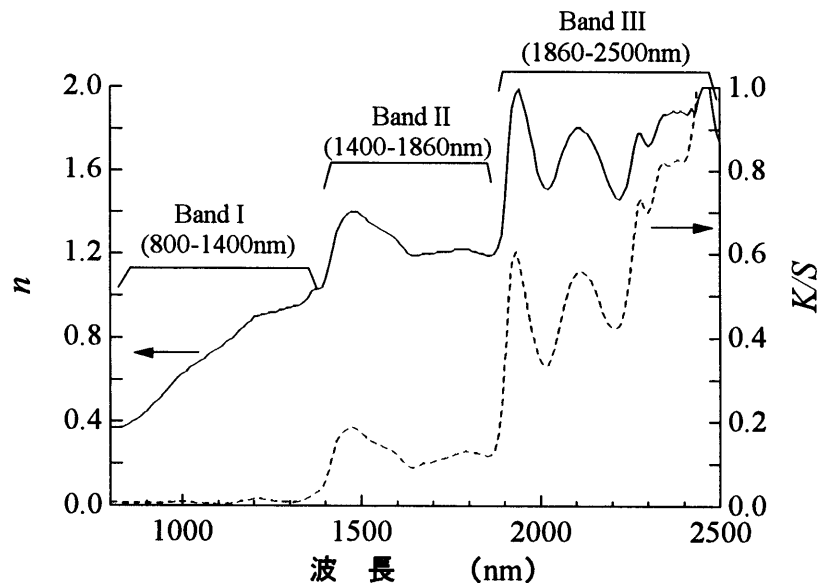


図4-8 各波長における n および K/S

ところで領域Ⅰのように、物質内でほとんど光が吸収されず散乱性が高い波長帯では、入射光方向に対して直角方向に散乱する成分がこのように均等な拡散光よりも大きくなる現象が以前から均質な粉体試料でも観察されており、「散乱性物質における光路の遠回り効果」としてButler⁶¹⁾によって注目されている。

現在でもこの現象に関しては、理論的に完全には解明されていない。ただし、Hecht⁶²⁾も述べているようなMie散乱の理論(照射波長に対して散乱粒子が大きくなる、すなわち粒子径が一定であれば波長が短くなるほど、後方散乱よりも前方散乱が大きくなる)と上記の現象との類似性は、注目すべき点であると思われる。いずれにせよ、このような現象は木材の組織構造に由来した特有なものではなく、一般的な光散乱物質でもみられるものである。したがって、今回提案した平行光成分を考慮した拡散過程モデルならびに n 乗余弦放射強度モデルに基づく試料内平均光路長の概念は、木材に限らず他の光散乱吸収体にも適用可能であると考えられる。

以上、第2~4章にわたる諸検討によって、近赤外分光法を用いて組織構造を保持したままの木材を対象とした非破壊計測を行うことができる可能性が実験的に裏付けられるとともに、試料内部における近赤外光の挙動を散乱・反射・吸光・透過の連鎖過程に関する首尾一貫したモデルによって統一的に表現することが可能になった。さらに、光散乱吸収体という見地

に立脚した場合にも本研究の結果を矛盾なく説明できるようにするために、試料内部の反射光および透過光の挙動を正しく記述する包括的な理論体系を新たに構築して、その妥当性を確認した。これまでに提案した諸モデルの連関を、図4-9に示す。近赤外分光法によって木材の非破壊計測を行う場合には、光学系、あるいは波長領域によって試料内部の光の散乱状況が異なることを十分配慮して、所望の試料情報を得るための最適条件を見いだすことが重要な前提になることをこの図は物語っている。

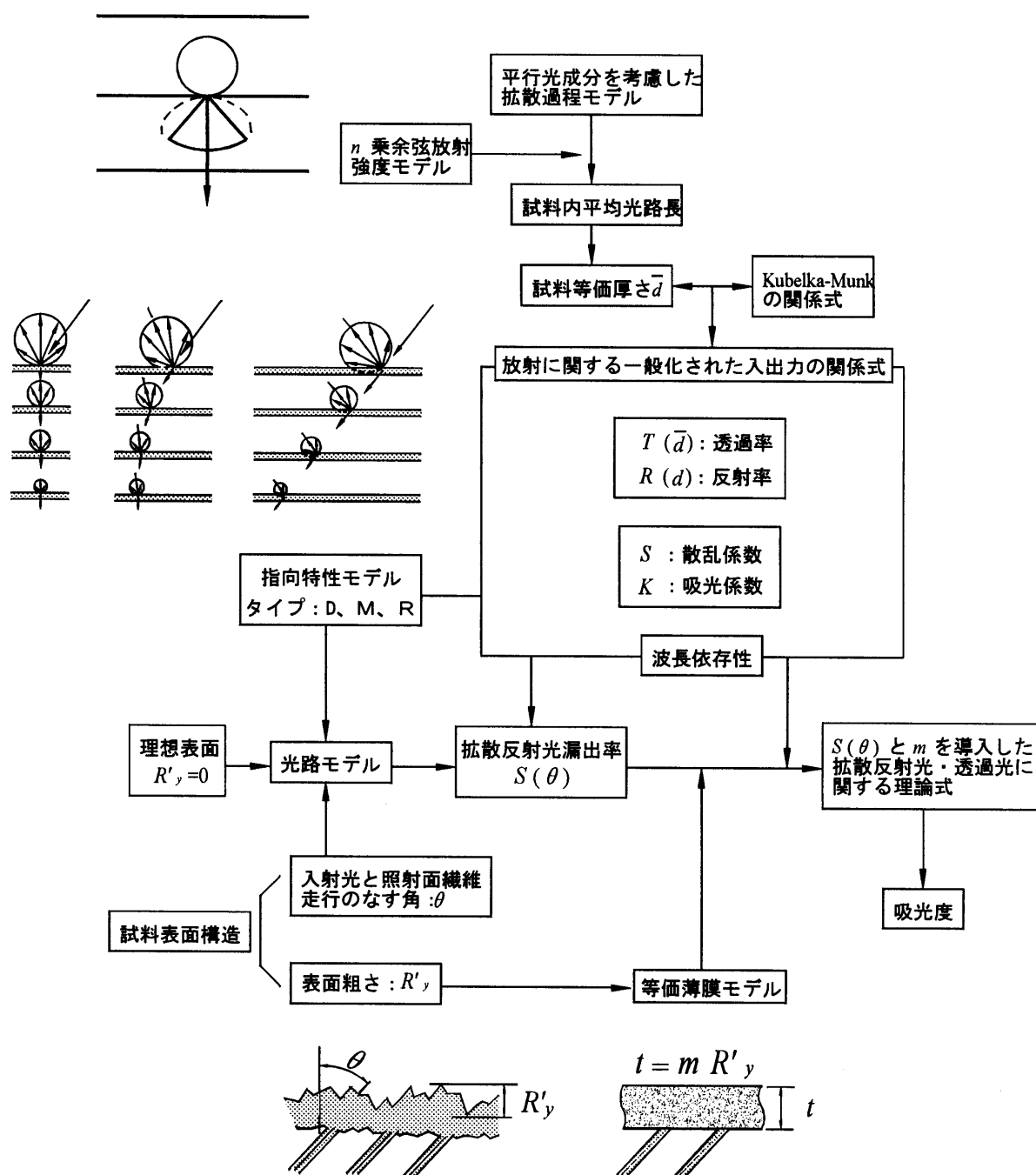


図4-9 近赤外光の挙動を記述するモデルの体系

4. 4 結言

木材試料に近赤外平行入射光を照射した場合の反射光および透過光の挙動を、Kubelka-Munkの関係式 (K-M関係式) を発展させた新たな考え方で記述することを試み、その妥当性を検討した。得られた結論は以下のとおりである。

- (1) 平行光入射に対する木材試料内部での拡散反射光の挙動は、K-M関係式で表現されうる。
- (2) 表面鏡を試料下面に密着させることによって透過光を間接的に計測した結果、透過光の挙動はK-M関係式によって単純には表現できないことがわかった。そこで、試料内部における近赤外光の動向を正しく把握するために、平行光成分を考慮した拡散過程モデルに n 乗余弦放射強度モデルを組み込んで試料内の散乱、吸収に関与する有効な光路長としての試料内平均光路長を求めた。
- (3) 試料内平均光路長から得られる等価厚さ試料の概念をK-M関係式に導入することによって、放射に関する一般化された入出力の関係式を構築した。
- (4) (2)、(3)より得られた吸光度計算値は、実測値とほぼ一致した傾向を示し、今回提案した一連の光学特性モデルの妥当性が裏付けられた。またこの結果は、前章において拡散反射光漏出率を求める際に想定した透過光の指向特性モデルの正当性を支持するものである。
- (5) 近赤外波長領域Ⅱ、Ⅲ (1400~2500nm)では光の吸収状況に応じて透過光の放射強度特性が変動し、波長領域Ⅰ (800~1400nm)では短波長になるほど単調に入射光方向と直角方向に散乱する成分が大きくなる。
- (6) 平行光成分を考慮した拡散過程モデルならびに n 乗余弦放射強度モデルに基づいた試料内平均光路長の概念は、従来の研究報告を考慮すると木材以外の光散乱吸収体に対しても広く適応可能で、拡散反射光および透過光の挙動を理解するのにきわめて有用であると考えられる。
- (7) 近赤外分光法によって木材の非破壊計測を行う場合には、光学系、あるいは波長領域によって試料内部の光の散乱状況が異なることを配慮して、所望の試料情報を得るための最適条件を見いだすことがたいせつである。

第5章 近赤外分光法による含有水分検量線の作成

5. 1 緒言

近赤外分光法は、従来、その光学的プローブとしての特性が十分に把握されないまま、化学成分の分析手段として限定的に用いられてきたが、第2～4章までの検討によって計測情報の由来を追究することができるようになり、また、本法を物理的構成を認知するための手法としても積極的に活用できる基盤が構築されるに至った。このような場をふまえ、測定を要望される主要な試料情報についてそれぞれ基礎的な検討を行うことが次の課題として重要になる。

本章では、生物体としての組織構造を保った、あるがままの状態の木材に近赤外分光法を具体的に適用する端緒として、含有水分の非破壊定量分析を行う。まず、含水率による臨界拡散厚さ(計測可能深さ)の変動を確認した後に、水分傾斜をもたないさまざまな樹種の含有水分(含水率および単位体積あたりの含水量)に関する検量線を重回帰分析によって作成し、その予測精度を比較検討した。続いて、種々の試料厚さ条件のもとで、水分傾斜をもつ試料における含水率の予測精度を求め、不均一試料に対する本法の適用可能範囲を見いだそうとした。さらに、水分傾斜をモデル的に具現した試料についても同様の実験を行い、試料内の水分状況が検量線の予測精度に及ぼす影響を明らかにした。

5. 2 実験方法

5. 2. 1 供試材

本実験に用いた樹種を表5-1に示す。スギのみは心材、辺材および心辺材混合の試料を準備し、他の樹種はいずれも心材を用いた。試料の含水率はいずれも繊維飽和点以下とした。照射面はまさ目面で、この面の寸法を30mm×30mmに統一した。

800～2500nmの近赤外光を10nm間隔(実験5.2.2)および4nm間隔(実験5.2.3、5.2.4、ならびに5.2.5)で連続的に照射してそれらの拡散反射光を測定し、各波長における吸光度を求めた。

5. 2. 2 臨界拡散厚さの計測

十分な拡散反射光を得るのに必要な最小限の試料厚さ、すなわち当該装置の計測可能深さを意味する臨界拡散厚さとその波長依存性に関しては第2章で検討した。本実験ではさらに試料中に含まれる水分量を変化させてその動向を調べることにより、得られる試料情報の発信部位を明らかにしようとした。

供試材はシトカスプルスで、厚さ d が $0.1\text{mm} < d < 5\text{mm}$ である試料を作成し、それらを全乾状態、気乾状態、ならびに繊維飽和状態でそれぞれ調湿して、各試料の近赤外吸収スペクトルを測定した。

5. 2. 3 水分傾斜をもたない試料の含有水分に関する検量線の作成

表5-1で示した各試料を、全乾状態から繊維飽和状態まで多段階に調湿し、それらの吸光度を測定した。その後、全乾法によって各試料の含水率ならびに単位体積あたりの含水量(全乾容積基準)を求めた。試料厚さを10mmに統一した。

表5-1 供試材の一覧

樹種	全乾時における平均密度 (g/cm ³)
スギ (<i>Cryptomeria japonica</i> D. Don)	0.29
シトカスプルス (<i>Picea sitchensis</i> Carr.)	0.57
ダグラスファー (<i>Pseudotsuga menziesii</i> Franco)	0.44
ブナ (<i>Fagus crenata</i> Blume)	0.68
キリ (<i>Paulownia tomentosa</i> Steudo.)	0.24
ミズナラ (<i>Quercus mongolica</i> Fisch. var.)	0.69
イチイガシ (<i>Quercus gilva</i> Blume)	0.66
チーク (<i>Tectona grandis</i> Linn.)	0.56

近赤外吸収スペクトルならびにその2次微分スペクトルからいくつかの波長を選択し、その吸光度または吸光度2次微分値を説明変量とした。そして各試料の含水率または単位体積あたりの含水量を目的変量として重回帰分析を行い、検量線を作成してその予測精度を確認した。検量線作成の詳細に関しては、5.3で述べる。

5. 2. 4 水分傾斜をもつ試料の含水率予測精度

近赤外分光法を木材含有水分の非破壊定量分析手法として活用するためには、試料内の水分傾斜を考慮することが必要となる。そこで、5.2.3で求めた検量線が、水分傾斜をもつ試料に対してどの程度正確な判定をくだしうるかを確認するための実験を行った。

供試材はシトカスプルスである。厚さが1mm、2mm、3mm、および5mmの試料を準備し、それぞれを飽水状態にした後に室内に放置して自然乾燥させることにより、これらに水分傾斜をもたせた。所定の時間間隔で、試料の吸光度ならびに質量を測定した。5.2.3の検量線が、繊維飽和点以下で調湿された試料を対象にしていることを考慮して、含水率がおおむね30%以下になった時点以降の測定値を採用し、含水率の予測精度を確かめた。

5. 2. 5 水分傾斜の状況が含水率予測値に及ぼす影響についての検討

試料内部の水分分布をモデル的に具現した試料を用いて5.2.4と同様の実験を行い、水分傾斜の状況が含水率予測値に及ぼす影響について検討した。

供試材はシトカスプルスで、 $0.05\text{mm} < d < 5\text{mm}$ のものを準備した。2つの試料をカバーガラス(厚さ0.17mm)を介して重ね合わせ、これを一体化した試料とみなした(図5-1)。試料上部(W_1)が試料全体の表層部に相当すると考える。本実験では、カバーガラスの影響は無視できるほど小さいと考えた。

試料上部(W_1)の厚さ $d_1\text{mm}$ および含水率 $MC_1\%$ 、試料下部(W_2)の厚さ $d_2\text{mm}$ および含水率 $MC_2\%$ をそれぞれパラメータとして、いろいろな水分傾斜をもつ試料をモデル的に表現した。なお、今回の実験では W_1 には気乾材を用い、実際に調湿を行ったのは W_2 のみであった。両者(W_1+W_2)を合わせた試料全体の平均含水率とその検量線予測値を求めた。

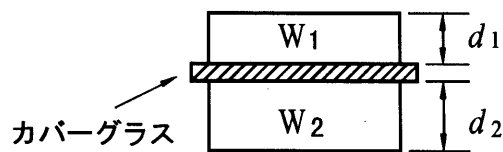


図5-1 試料内の水分分布をモデル的に表現した試料

5. 3 検量線の作成とその評価

5. 3. 1 重回帰分析に基づいた検量線の作成

近赤外分光法によって非破壊定量分析を行う場合には、重回帰分析に基づいた検量線を作成するのが一般的である。重回帰式は一般式で表すと、

$$Y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_nx_n \quad (5.1)$$

となる。ここで、 Y は目的変数、 $x_1 \sim x_n$ は説明変数、 a_0 は平均値調整用係数、 $a_1 \sim a_n$ は偏回帰係数である。本実験では先に述べたように、含水率あるいは単位体積あたりの含水量が目的変数であり、近赤外吸収スペクトル (図5-2-(a)) およびその2次微分スペクトル (図5-2-(b)) から選択されたいくつかの波長における吸光度または吸光度2次微分値が説明変数となる。

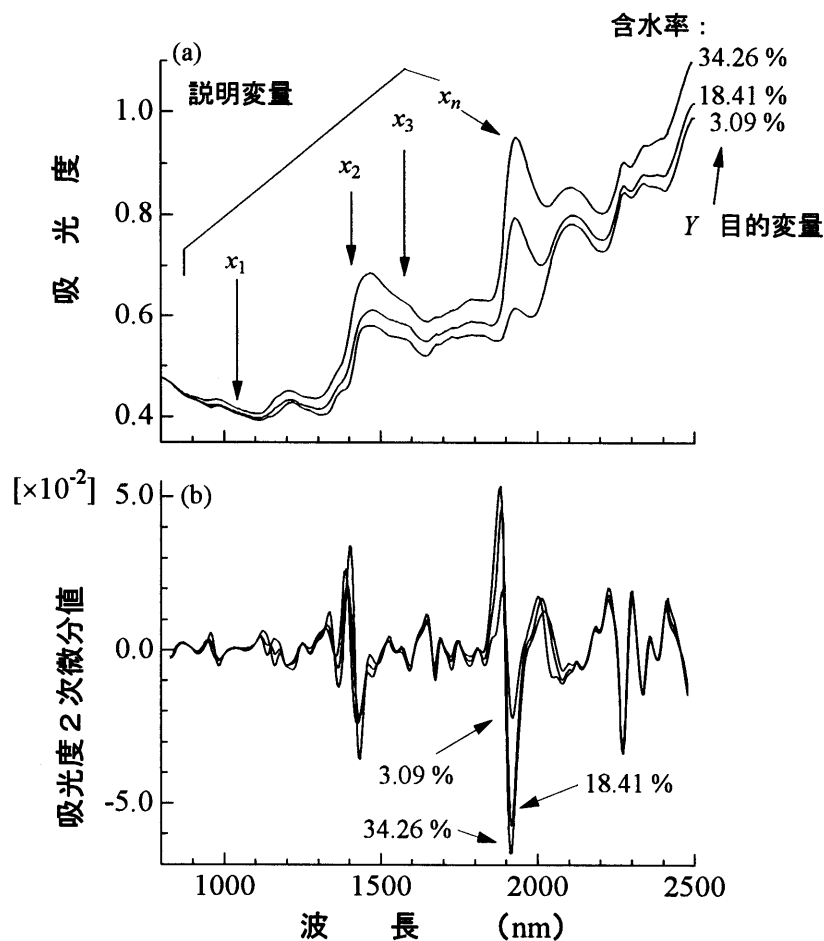


図5-2 シトカスプールの近赤外吸収スペクトル

5. 3. 2 検量線作成の手順および予測精度評価指標

本実験における検量線の作成手順の概要を図5-3に示す。

対象とする試料母集団の中から検量線作成用試料と検量線評価用試料をあらかじめ選定し、各試料の近赤外吸収スペクトルを測定する。その後、全乾法によって試料の含有水分量を測定する。検量線作成用試料における目的変量と説明変量の関係から重回帰分析によって(5.1)式の検量線を作成する。続いて、検量線の予測精度に関する評価指標を求める。まず、検量線作成用試料の実測値と回帰による予測値の間の重相関係数(Multiple Correlation Coefficient; MCC)および回帰推定の標準誤差(Standard Error of Calibration; SEC)を求める。 MCC が1に近く、また SEC が0に近いほど検量線の予測精度は一般的に高いと言える。

次に、検量線の作成に関与しない検量線評価用試料を用いて、予測値標準誤差(Standard Error of Prediction; SEP)および検量線評価用試料の実測値と検量線による予測値との間の相関係数(r)を計算する。

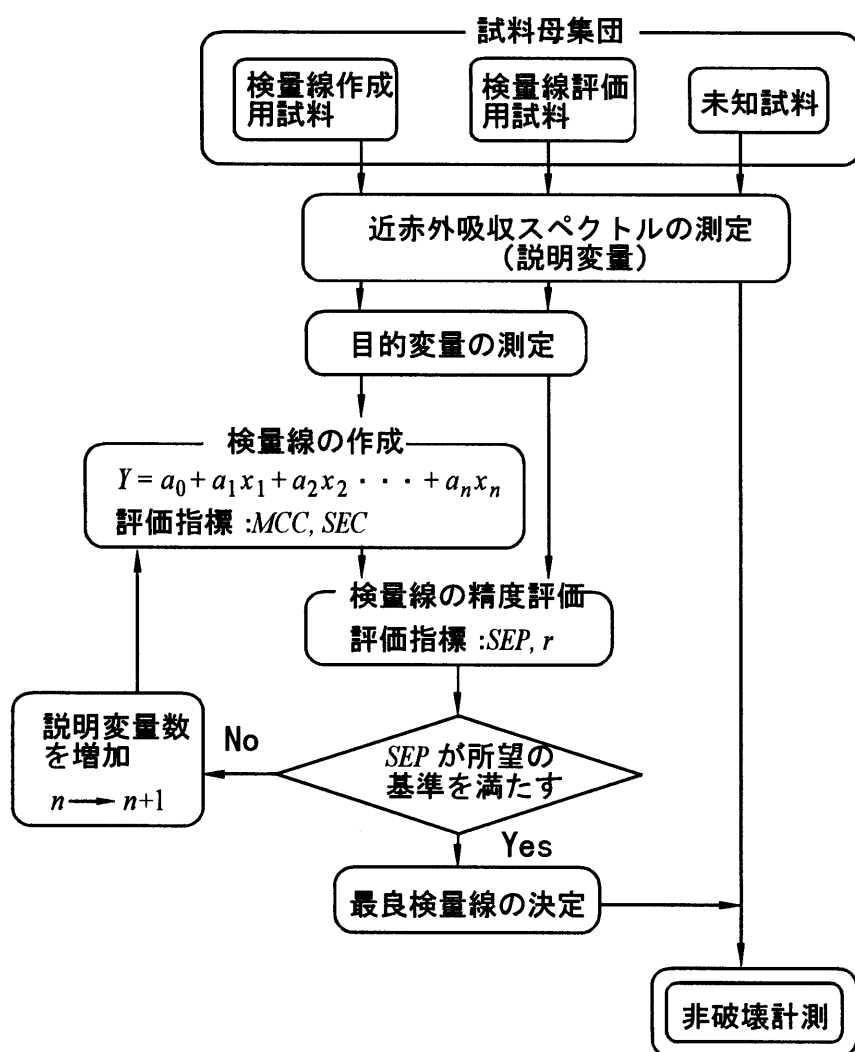


図5-3 最良検量線作成の手順

SEPは、以下の式で表される。

$$SEP = \sqrt{\frac{\sum (P_p - A_p)^2}{n_p}} \quad (5.2)$$

P_p は回帰による予測値、 A_p は試料実測値(本実験の場合は、含水率または単位体積あたりの含水量)、 n_p は検量線評価用試料の総数である。SEPは、これが小さいほど実測値を正しく推定することができる検量線であることを意味する。SEPは説明変量数の増加に伴って小さくなり、ある数で最小値を示すが、さらに説明変量数を増して重回帰分析を行うと、逆にSEPは増大してしまう。したがって、SEPが最小値を示す検量線が、予測精度のもっとも高い最良検量線となる。

ところで、重回帰分析を適用するに際して注意しなければならないことは、説明変量間で同一の情報が重複して含まれないようにする、すなわち多重共線性をもつことがないように重回帰式(検量線)を作成することである。本実験ではこのような状況を回避して最適な説明変量を決定する手段として、段階的に説明変量を選択していく変数増加法を採用した。これは、目的変量との間にもっとも高い相関を示す説明変量をまず選定して、次にこの説明変量と組み合わせた場合に他と比べて高い重相関を示す第2の説明変量を選択し、この操作を逐次行う方法である。

検量線が多重共線性をもたないようにすることを前提としたため、検量線の作成自体にかなり制限が加えられることになった。そこで本実験では、5.3.3で示す各試料母集団の構成条件に対して最大限可能な説明変量数までの範囲で検量線を作成し、個々の検量線に関する予測精度を求めた。

5. 3. 3 検量線の作成条件

対象とする試料母集団の中から、以下のように検量線作成用試料と検量線評価用試料をそれぞれ独立に選定した。

I : 全供試樹種(10種類)を含んだ検量線

検量線作成用試料 : 各樹種よりそれぞれ30個、合計300個

検量線評価用試料 : 各樹種よりそれぞれ14~20個、合計163個

II : 樹種別の検量線

検量線作成用試料 : 各樹種それぞれ30個

検量線評価用試料 : 各樹種それぞれ14~20個

5. 4 結果および考察

5. 4. 1 臨界拡散厚さに及ぼす含有水分の影響

当該装置によって情報の得られる試料深さが、含有水分によってどのように影響されるかを確認するために、第2章で示した臨界拡散厚さ(d_{cr})に着目して一連の実験を行った。

試料厚さと吸光度の関係を図5-4に示す。樹種はシトカスプルスである。図中の黒丸、白丸、黒三角はそれぞれ含水率(MC)が0.5%、10.9%、および32.9%である試料の実測値で、

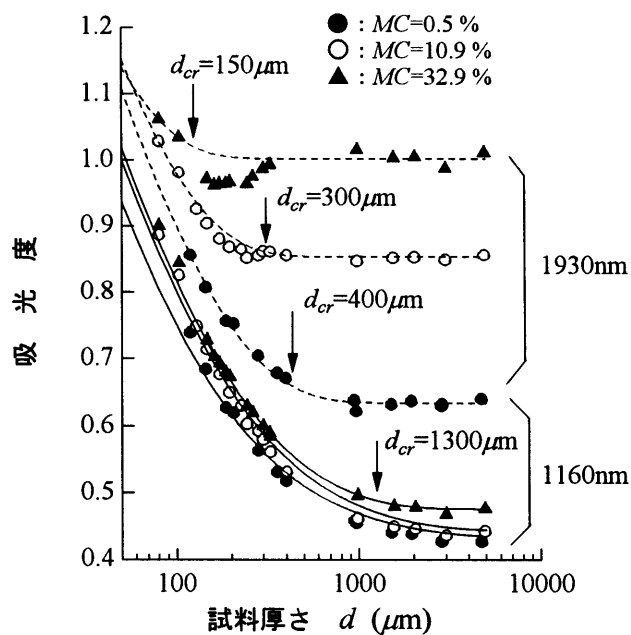


図5-4 臨界拡散厚さ (d_{cr}) に及ぼす含水率の影響

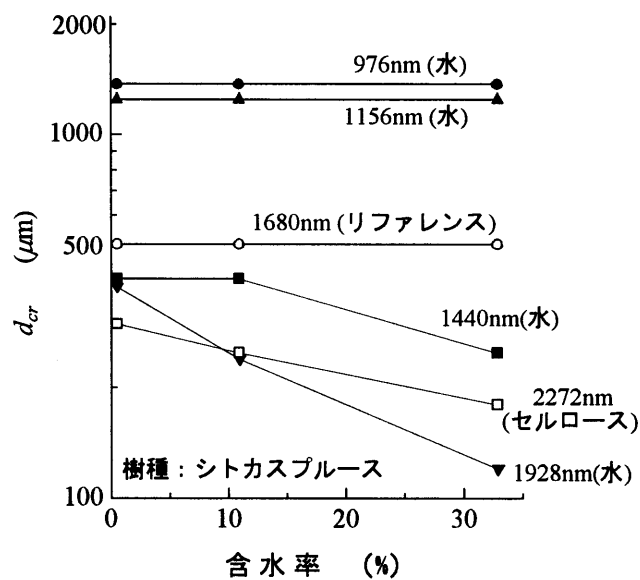


図5-5 含水率が臨界拡散厚さ(d_{cr})に及ぼす影響

水の吸収波長に相当する1160nmおよび1930nmに関する d_{cr} の動向を矢印で示す。また、図中に示された曲線は、Kubelka-Munkの関係式に基づく理論曲線で、それぞれの実測値に対応して求められたものである。図からわかるように、1160nmの場合は含水率に関係なく d_{cr} が一

定で、ほぼ1300 μm 程度である。一方、1930nmの場合には d_{cr} が含水率によって大きく変動し、全乾に近い状態 ($MC=0.5\%$)では400 μm 前後であるのに対して、繊維飽和状態 ($MC=32.9\%$)ではその値が150 μm にまで減少する。

水の他に、セルロースの吸収波長ならびにリファレンス波長にも着目し、これらに関する臨界拡散厚さが含水率によって影響を受けるようすを確かめたのが図5-5である。水以外の吸収波長でも長波長になると、含水率が増大するにつれて d_{cr} が小さくなる傾向がうかがわれる。この結果は、説明変量として短波長の測定光を採用すれば、含水率に左右されることなく一定の試料深さまでの情報を求めることができることを示唆している。詳細は5.4.4で述べる。

5. 4. 2 全供試樹種が含まれた試料母集団に関する検量線の予測精度

全供試樹種が含まれた試料母集団に関する重回帰分析の結果を表5-2に示す。目的変量が含水率(MC)あるいは単位体積あたりの含水量(MV)いずれにおいても、*印のオリジナルスペクトルよりも無印の2次微分スペクトルから説明変量を選択した場合に予測精度が高くなる。この傾向は、 MC に関する検量線で顕著である。また、オリジナルスペクトルでは説明変量が1(波長)の検量線しか作成できなかったが、2次微分スペクトルの場合には、3ないし4(波長)の説明変量からなる検量線が求められた。

表5-2 全供試樹種が含まれる母集団に関する含有水分検量線の予測精度

目的変量	検量線の作成			検量線の評価	
	選択波長 (nm)	MCC	SEC	r	SEP
含水率 (%)	1960*	0.815	5.05	0.821	4.91
	1272	0.951	2.65	0.963	2.32
	1272, 1960	0.964	2.28	0.973	2.01
	1272, 1672, 1960	0.970	2.10	0.977	1.85
単位体積あたりの含水量 ($\times 10^{-2}\text{g/cm}^3$)	1960*	0.902	2.06	0.901	2.09
	1848	0.933	1.72	0.931	1.77
	1048, 1848	0.947	1.54	0.955	1.45
	1016, 1048, 1848	0.953	1.44	0.964	1.31
	1016, 1048, 1848, 2184	0.956	1.40	0.964	1.28

MCC : 重相関係数、 SEC : 回帰推定の標準誤差

r : 検量線評価用試料の実測値と検量線による予測値との間の相関係数

SEP : 予測値標準誤差

*印 : オリジナルスペクトルから説明変量を選択

無印 : 2次微分スペクトルから説明変量を選択

次に、表中の MCC および r に注目して、目的変量による予測精度の違いについて考察をすすめる。オリジナルスペクトルから説明変量が選択された場合には、目的変量を MC から MV とすることによって予測精度が大きく改善された。これは密度の影響を排除して検量線が作成されるためであると考えられる。

しかし、説明変量が2次微分スペクトルから採用される場合には、このような状況は当てはまらない。 MCC および r から判断すると、 MC に関する検量線は、 MV に関する検量線より

も予測精度が高い。これは、オリジナルスペクトルを2回微分することによって密度の影響が除去されてしまうことと、*MV*の場合には試料の膨潤、収縮を無視し全乾比重を介してこれを算出したことに帰因すると考えられる。

上述した状況を、*MC*あるいは*MV*の実測値と、検量線による予測値を両軸として示してみたのが図5-6および5-7である。図中、白印は説明変量がオリジナルスペクトルから採用され

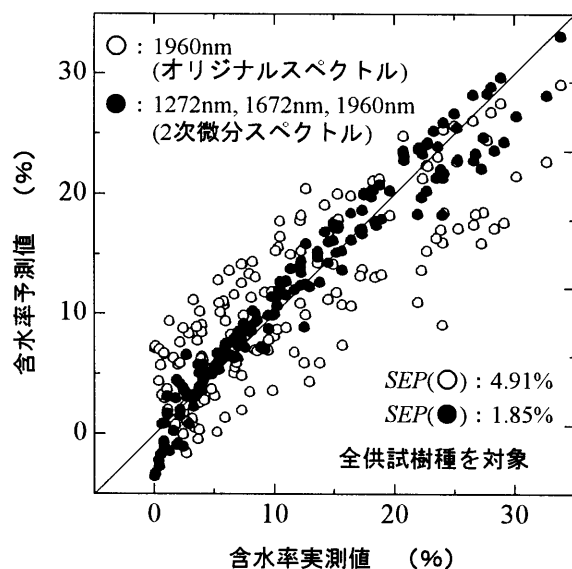


図5-6 含水率実測値と予測値の相関

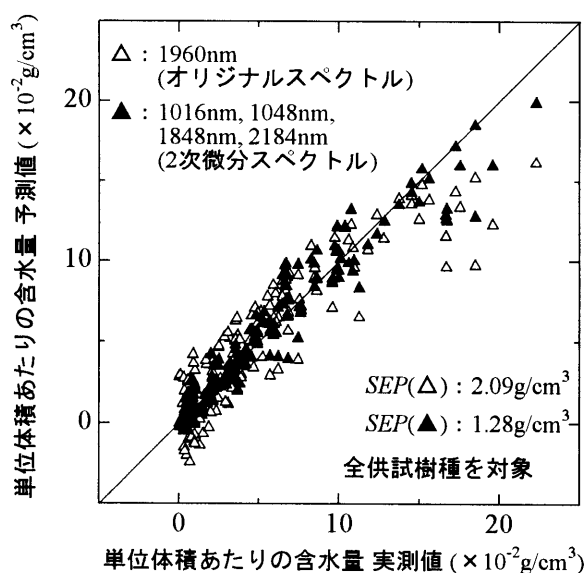


図5-7 単位体積あたりの含水量実測値と予測値の相関

た場合を表し、黒印は2次微分スペクトルから採用された場合である。説明変量が2次微分スペクトルから選択されると、両軸間の相関が向上するようすがわかる。第1章でも述べたように、木材含水率の非破壊計測には高周波容量方式、電気抵抗方式などの手法による水分計が一般には採用されているが、所定の測定精度を得るために、樹種の差異を考慮して補正することを余儀なくされている。ところが近赤外分光法ではこのような欠点が解消され、樹種を問うことなしに含水率の計測を行うことができる。加えて、全乾状態から繊維飽和点までの範囲を分割することなしに、単純な一本の検量線によって正確な測定がなされるという利点があり、新しい含水率非破壊計測方式として今後の応用が期待される。

ここで、検量線の選択波長に関しても若干の考察を行う。説明変量がオリジナルスペクトルを母体とする場合には、 MC 、 MV いずれにおいても水の吸収ピーク (1930nm) 近傍の1960 nmが選択された。一方、説明変量が2次微分スペクトルを母体とする場合には、目的変量に応じて選択波長が異なっており、それらには、セルロースの吸収帯に帰属できると考えられるもの (1272nm、1048nmなど) もいくつか含まれていた。この事実から、説明変量として有効な波長は、水の吸収そのものだけではなく木材中の構成成分に生じる何らかの変化とも関係をもつとみられ、本法のような処置によって予測精度の高い検量線が作成できることはきわめて興味深い。なお、表5-2中には各検量線の平均値調整用係数 (a_0) ならびに偏回帰係数 ($a_1 \sim a_n$) の値は記されていないが、一例として目的変量が MC で説明変量が2次微分スペクトル ($x_1=1272\text{nm}$ および $x_2=1960\text{nm}$) の場合におけるそれぞれの値を列举すると、 $a_0=-8.65$ 、 $a_1=4297.07$ 、 $a_2=-461.09$ であった。

5. 4. 3 樹種別の試料母集団に関する検量線の予測精度

試料母集団を樹種別に分離した場合に関する検量線の予測精度を表5-3および5-4に示す。目的変量が MC か MV であるかを問わず、いずれの樹種においても常に2次微分スペクトルから説明変量を選択した場合に SEP が小さくなる。また、表5-2と比較して個々の予測精度は向上する。ただし、作成可能であった検量線の数、および選択波長は樹種によってさまざまであった。 MV に関する検量線を複数個作成することができたスギ辺材に着目し、説明変量数を横軸として MCC 、 SEC 、 SEP および r を示してみたのが図5-8である。図において、説明変量数を単純に増加させることが必ずしも予測精度の改善につながっておらず、最良検量線の作成条件が、試料母集団の構成条件によって異なることが示唆されている。

次に、今回測定した樹種の全乾時における平均密度と、予測値標準誤差 (SEP) との関係を図5-9に示す。黒丸および白丸は、説明変量がそれぞれオリジナルスペクトルおよび2次微分スペクトルから選択された場合を示す。目的変量が含水率の (a) の場合には密度による SEP の違いはみられないが、説明変量を2次微分スペクトルから採用することによって、予測精度が顕著に向上するようすがうかがわれる。一方、目的変量が単位体積あたりの含水量である (b) の場合には、説明変量が2次微分スペクトルから選択されたときの SEP は、密度が大きくなるにしたがって大きくなる傾向にある。また、オリジナルスペクトルから説明変量が選択された場合にもキリとスギ心材の結果を除いて同様の傾向を示す。説明変量による SEP の違いも、キリの場合を除くと極端に変化することはなかった。

表5-3 樹種別の試料母集団に関する含有水分検量線の予測精度
(目的変量：含水率)

樹種	検量線の作成			検量線の評価	
	選択波長 (nm)	<i>MCC</i>	<i>SEC</i> (%)	<i>r</i>	<i>SEP</i> (%)
スギ(心材)	1980*	0.965	1.93	0.821	4.91
	1832	0.985	1.28	0.991	1.12
スギ(辺材)	1960*	0.979	1.70	0.985	1.48
	1832	0.990	1.16	0.998	0.58
スギ(混合)	2000*	0.973	2.26	0.977	1.49
	920, 2000*	0.973	2.30	0.988	1.49
	1832	0.990	1.37	0.994	1.07
シトカ スプルス	2000*	0.994	1.03	0.995	0.91
	980, 2000*	0.994	1.01	0.995	0.89
	1832	0.997	0.73	0.996	0.77
ダグラスファー	2000*	0.992	1.09	0.893	0.93
	1832	0.996	0.71	0.999	0.58
ブナ	2000*	0.991	1.44	0.989	1.46
	960, 2000*	0.993	1.27	0.988	1.52
	1816	0.998	0.64	0.998	0.57
キリ	1980*	0.970	2.01	0.974	1.85
	800, 1980*	0.974	1.91	0.964	1.66
	1832	0.990	1.18	0.992	1.23
ミズナラ	2000*	0.970	2.68	0.987	1.58
	1064	0.982	1.77	0.997	0.87
	1064, 1896	0.984	1.69	0.996	0.96
	936, 1064, 1896	0.985	1.65	0.994	1.10
	936, 1064, 1320, 1896	0.987	1.59	0.994	1.08
イチイガシ	1980*	0.972	2.07	0.989	1.75
	800, 1980*	0.975	1.99	0.988	1.73
	1848	0.984	1.56	0.993	1.28
チーク	1880*	0.998	1.11	0.989	1.61
	1272	0.997	0.58	0.994	1.03
	1000, 1272	0.997	0.54	0.996	0.95
	1000, 1064, 1272	0.998	0.50	0.997	0.85

MCC：重相関係数、*SEC*：回帰推定の標準誤差

r：検量線評価用試料の実測値と検量線による予測値との間の相関係数

SEP：予測値標準誤差

* 印：オリジナルスペクトルから説明変量を選択

無印：2次微分スペクトルから説明変量を選択

表5-4 樹種別の試料母集団に関する含有水分検量線の予測精度
(目的変量：単位体積当たりの含水量)

樹種	検量線の作成			検量線の評価	
	選択波長 (nm)	<i>MCC</i>	<i>SEC</i> ($\times 10^{-2}$ g/cm ³)	<i>r</i>	<i>SEP</i> ($\times 10^{-2}$ g/cm ³)
スギ(心材)	2000*	0.949	0.78	0.973	0.79
	1832	0.963	0.59	0.983	0.44
スギ(辺材)	1940*	0.980	0.54	0.981	0.51
	1768	0.984	0.44	0.986	0.42
	1768, 2008	0.987	0.42	0.989	0.37
	1768, 2008, 2328	0.987	0.42	0.987	0.40
	1768, 2008, 2328, 2344	0.989	0.39	0.979	0.51
	1752, 1768, 2008, 2328, 2344	0.990	0.38	0.980	0.50
スギ(混合)	2000*	0.980	0.64	0.987	0.51
	1832	0.985	0.56	0.990	0.43
	1832, 1896	0.989	0.50	0.991	0.40
シトカ スプルー	2000*	0.995	0.53	0.991	0.69
	800, 2000*	0.995	0.54	0.991	0.69
	1832	0.997	0.38	0.994	0.57
ダグラスファー	2000*	0.990	0.53	0.995	0.44
	1832	0.994	0.40	0.997	0.41
ブナ	2000*	0.970	1.74	0.983	0.99
	800, 2000*	0.995	0.54	0.991	0.69
	1816	0.977	1.53	0.997	0.53
キリ	1980*	0.970	2.01	0.974	1.85
	800, 1980*	0.974	1.91	0.964	1.66
	1832	0.983	0.33	0.990	0.28
ミズナラ	2000*	0.959	1.70	0.988	0.97
	800, 2000*	0.959	1.73	0.987	1.48
	1832	0.980	1.20	0.991	0.90
イチイガシ	1980*	0.969	1.44	0.981	1.19
	820, 1980*	0.972	1.40	0.983	1.13
	1848	0.981	1.14	0.990	0.95
	1848, 2136	0.998	0.92	0.992	0.84
	1144, 1848, 2136	0.990	0.84	0.992	0.87
	1144, 1848, 1960, 2136	0.992	0.80	0.994	0.77
チーク	1880*	0.987	0.65	0.990	0.86
	1272	0.994	0.42	0.994	0.54
	1272, 1896	0.995	0.41	0.995	0.54
	1272, 1832, 1896	0.996	0.36	0.991	0.71

MCC：重相関係数、*SEC*：回帰推定の標準誤差

r：検量線評価用試料の実測値と検量線による予測値との間の相関係数

SEP：予測値標準誤差

*印：オリジナルスペクトルから説明変量を選択

無印：2次微分スペクトルから説明変量を選択

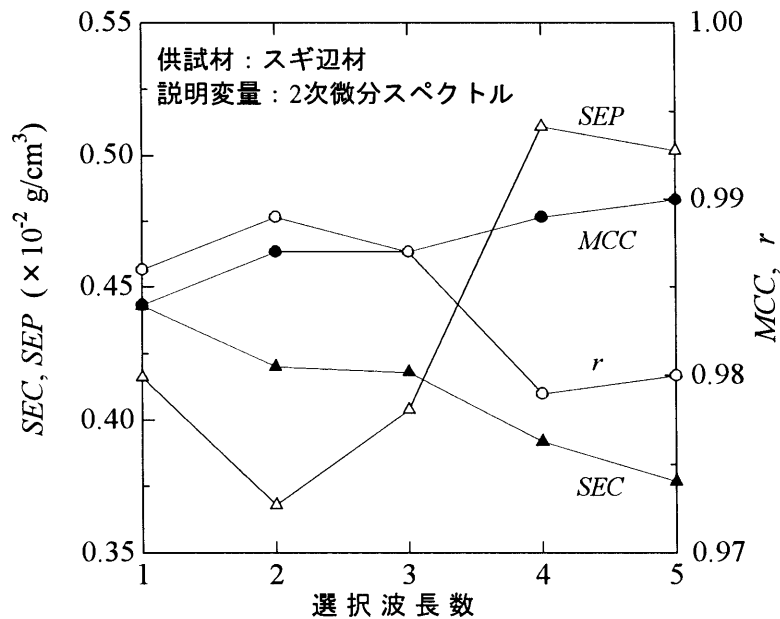


図5-8 選択波長数による各評価指標の変化

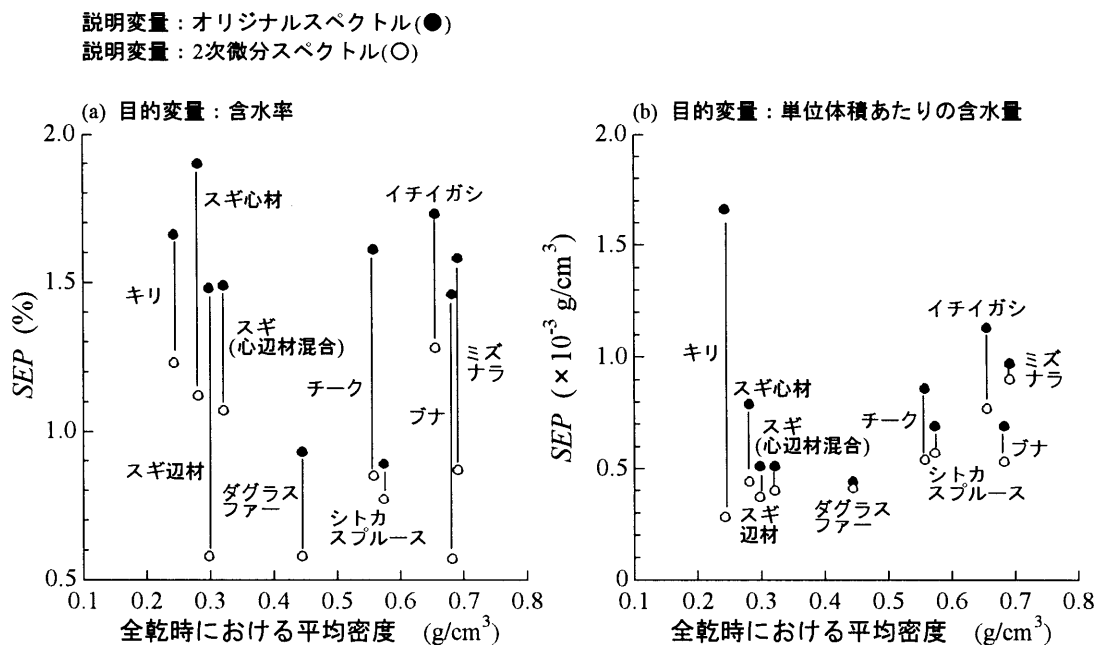


図5-9 全乾時における平均密度と予測値標準誤差 (SEP) の関係

5. 4. 4 試料中の水分傾斜が含有水分の予測値に及ぼす影響

水分傾斜のない試料を母集団として作成された検量線が、水分傾斜をもつ木材試料に適用された場合を想定して、このような状況下における含有水分の予測精度について検討した。

シトカスプルス試料に5.2.4に述べた方法で水分傾斜を与え、検量線の目的変量は含水率とし、2次微分スペクトルから説明変量を選択した。ここでは上記に関する基本的な特性を把握するために、説明変量数を1(波長)とした。説明変量の一つとして5.4.3の実験におけるシトカスプルス試料の選択波長である1832nmを選んだが、これ以外にも、含水率との単相関が高かった920nmおよび1272nmにおける吸光度2次微分値をそれぞれ別個の説明変量として採用し、検量線を作成した。このように、近赤外域の中から波長の異なるいくつかの説明変量を選択することによって、水分傾斜をもつ試料に対する含水率検量線の予測精度を、幅広く調べようとした。

試料厚さ(d)と各検量線の含水率予測値標準誤差(SEP)の関係を図5-10に示す。短波長である920nmでは、 $d=1\text{mm}$ のときに他の選択波長に比べてその予測精度が低下する。 d の増加にともなって SEP はいったん小さくなるが、 $d=5\text{mm}$ になると SEP は大きくなる。一方、選択波長が1272nmの場合には、 d の増加にともなって SEP もほぼ増加する傾向にある。1832nmを選択波長とした場合の傾向も1272nmの試料厚さにおいても SEP は若干大きくなる。

このように、選択波長によって d に対する SEP の傾向が異なるのは、5.4.1で示した臨界拡散厚さが波長によって変動することに起因すると考えられる。短波長である920nmでは、 $d=1\text{mm}$ の場合には照射された近赤外光が十分な拡散反射光を形成しないままに試料を透過してしまうため、見掛け上吸光度が大きくなり予測精度が低下する。一方、 $d=2\text{mm}$ 、および 3mm ではその値が臨界拡散厚さ以上であるために、試料内部にまで到達した光による十分な拡散反射光が検出され、 SEP は小さくなると考えられる。このため、5.2.4の方法は試料内部に自由水を含んでいる可能性があるにもかかわらず、2%以下の含水率予測精度を示したとみられる。ところが $d=5\text{mm}$ になると、試料内部にまで光が満足に到達しえず、水分に関する必要な内部情報を得ることができなくなるために SEP が増大する。

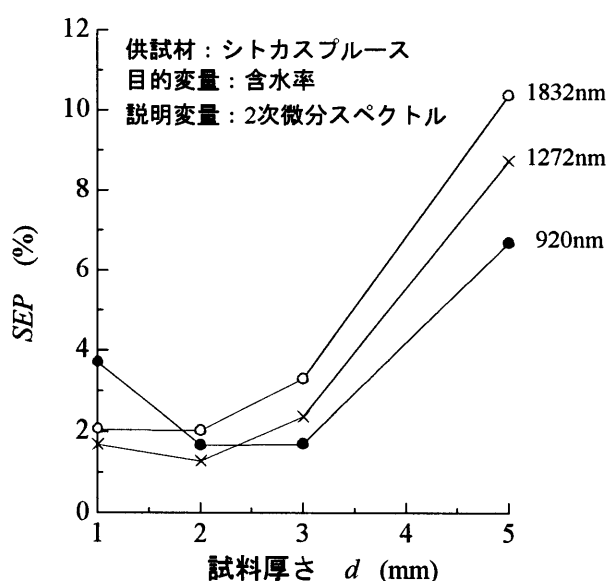


図5-10 水分傾斜をもつ試料の予測値標準誤差(SEP)

一方、選択波長が1272nmの場合には臨界拡散厚さが920nmよりも小さいから、 $d=1\text{mm}$ の場合でも2%以下の予測精度で含水率を推定できるが、試料厚さの増加にともなって内部情報を正しく把握することが困難になり、SEPは増大すると考えられる。この傾向は、臨界拡散厚さが1272nmよりもさらに小さい1832nmで顕著となる。

このように、試料厚さに応じた適切な波長を説明変量として選択することにより、水分傾斜をもつ試料の場合でもその含有水分をかなりの精度で予測することができる。

5. 4. 5 水分傾斜の状況が含水率予測値に及ぼす影響

5.2.5に述べた試料上部(W_1)の設定厚さ(d_1)が含水率予測値(MC_{pr})に及ぼす影響を、図5-11-(a)に示す。図中黒丸、バツ印、および白丸は、それぞれ2次微分スペクトルからの選択波長が920nm、1272nmおよび1832nmである場合の結果で、縦軸は検量線によって得られる含水率予測値(MC_{pr})と試料上部(W_1)の含水率実測値(MC_1)の差を表す。 d_1 が1mmに近づくにつれて、いずれの選択波長においても MC_{pr} と MC_1 との差が小さくなる。これは、 d_1 が小さいと近赤外光が試料下部(W_2)にまで到達しやすくなるために、 W_2 の水分情報が拡散反射光中に含まれるようになるが、 d_1 が大きくなると W_1 の水分情報のみしか得られないことを意味している。また、各波長の臨界拡散厚さがこれらの状況を支配する因子となるため、短波長になるほど MC_{pr} と MC_1 の差が大きくなる、すなわち MC_{pr} に W_2 の情報が加味されたものと考えられる。

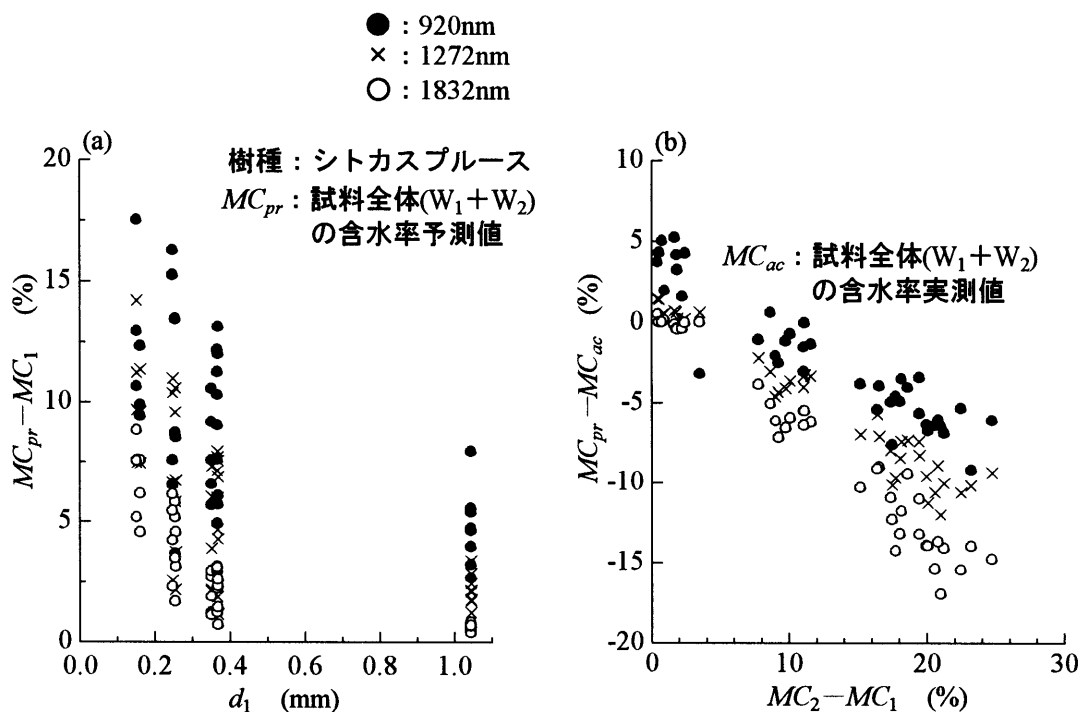


図5-11 モデル試料の水分状況が含水率予測値に及ぼす影響

次に、試料上部の含水率(MC_1)と下部含水率(MC_2)の差が含水率予測値に及ぼす影響を明らかにしたのが図5-11-(b)である。図中、黒丸、バツ印、および白丸は、2次微分スペクトルからの選択波長がそれぞれ920nm、1272nmおよび1832nmである場合の結果で、縦軸は含水率予測値(MC_p)と W_1 および W_2 から求めた試料全体の含水率実測値(MC_{ac})の差を表す。 MC_2 と MC_1 の差が小さく、また短波長になるほど含水率予測値は実測値に近づくようすがうかがえる。ただし、 MC_2 と MC_1 の差が0に近い場合、すなわち水分傾斜がない場合には、5.4.2で作成したシトカスプールの最良検量線における選択波長が1832nmであったことから推測されるように、この波長でもっとも予測精度が高くなる。

5. 5 結言

近赤外分光法を木材の非破壊定量分析手法として具体的に適用する最初の例として、含有水分に関する検量線を作成した。得られた結論は、以下のとおりである。

- (1) 十分な拡散反射光を得るのに必要な最小限の試料厚さ、すなわち臨界拡散厚さが含水率によって変化するようすは、照射波長によって異なる。とくに、臨界拡散厚さが含水率によって変動しない水の吸収波長も存在する。
- (2) 本実験のように組織構造を保持した木材に本法を適用する場合にも、説明変量(選択波長)およびその数を適切に選定すれば、含有水分に関する予測精度の高い検量線を作成することができる。この検量線は樹種による補正をまったく必要とせず、また、全乾状態から繊維飽和状態までの含有水分を単純な一本の直線によって予測できるという特長を有する。本実験(供試樹種が10種類)では、目的変量が含水率で説明変量を2次微分スペクトルから選択したときに、その予測値標準誤差が1.85%であった。説明変量がオリジナルスペクトルから選ばれた場合に比べて、それが2次微分スペクトルから採用された場合の方が検量線の予測精度が向上し、この傾向は、目的変量が含水率の場合に顕著である。
- (3) 水分傾斜をもつ試料を測定対象とする場合には、臨界拡散厚さを考慮してその試料厚さに応じた適切な波長を説明変量として選択することがたいせつである。
- (4) 試料上部(W_1)の含水率(MC_1)と下部(W_2)の含水率(MC_2)との間に相違がある場合を想定して段階的に含水率を変化させたモデルによる実験を行い、 MC_1 をもつ部分の厚さおよび MC_2 と MC_1 の差が、含水率予測値に影響を及ぼすようすを明らかにした。 MC_2 と MC_1 の差が存在する場合には、選択波長が短いほど含有水分の予測精度が向上する。

第6章 近赤外分光法による繊維走行・表面粗さ検量線の作成

6. 1 緒言

本研究では、近赤外吸収スペクトルが試料の物理的構成によっても大きく影響を受けることに注目し、この特性を正しく把握すれば所望の試料情報を非破壊で入手できるのではないかという考えに基づいて一連の実験・考察をすすめてきた。第2～4章においては、繊維走行、表面粗さなどの物理的特性が吸光度に及ぼす影響が詳細に調べられ、非破壊定量分析を実施するための基礎資料が積み重ねられた。また、第5章では、組織構造を保った状態の木材を対象とした場合にも、近赤外吸収スペクトルから試料の物理的態様に応じた説明変量を適切に選択することにより、含有水分に関する予測精度の高い検量線が作成できることを明らかにした。

本章では、入射光と照射面繊維走行のなす角および表面粗さに関する検量線を重回帰分析によって作成することを試み、最適な検量線を作成するための要件ならびに予測精度の水準を検討することによって、試料の物理的構成に関する情報を定量的に正しく把握できる手法を確立することを目指した。

6. 2 実験方法

6. 2. 1 測定試料

供試材として、シトカスプルスを用いた。本実験を通して、試料の含水率を一定 (12.1%) とした。入射光と照射面繊維走行のなす角 θ ならびに表面粗さ (最大高さ; R'_y) を多段階に変更した試料を作成した。試料寸法は照射面が30mm×30mm、厚さが10mmである。なお試料の物理的構成の違いに着目した第2章の実験に供した試料の場合には、照射面をいったんミクロトームで仕上げた後にサンドペーパーで加工して表面粗さを変えたが、本研究では実際的な応用を想定して、丸のこによる切断面を測定の対象とした。試料母集団の個体総数は397個で、299個を検量線の作成に用い、残りの98個を検量線の評価用に充てた。検量線作成用試料・評価用試料ともに、 θ および R'_y が適当な分布をもつように調整した。

近赤外光による計測に先立ち、試料側面における θ を万能投影機を用いて実測した。また、触針式表面形状測定器によって表面粗さを測定した。吸光度が表面性状の僅かな変化によっても影響を受けるという事実、ならびに機械加工によって破壊された木材表層部の実態を電子顕微鏡で観察した結果を考慮して、ここでは表面性状の変化を反映しやすい指標の一つである最大高さ (R'_y) によって表面粗さを代表させることにした。表面粗さは、0.7mm幅のナイフエッジ型触針を使用して、最大高さ (R'_y) で評価した。

検量線によって推定しようとする θ および R'_y は、同一試料内でも測定箇所によって異なった実測値を示すことが多い。本実験では、実測値自体がもつ標準誤差を考慮して状況を評価するために、検量線評価用の各試料を測定箇所を変えて2度ずつ実測し、それらの値によってPooled Standard Deviation (PSD) を計算した。PSDは以下の式で表される。

$$PSD = \sqrt{\frac{\sum_j \sum_i (A_i - \bar{A})^2}{n_p}} = \sqrt{\frac{\sum_j (A1 - A2)^2}{2n_p}} \quad (6.1)$$

n_p : 検量線評価用試料総数、 $A1$ 、 $A2$: 各試料の実測値、 $\bar{A} : \frac{A1 + A2}{2}$

6. 2. 2 試料の吸光度測定方法

700～2500nmの近赤外光を10nm間隔で試料に照射して各波長における吸光度を求めた。本実験では光反射型ニュートラルデンシティフィルタ (NDフィルタ) を用いた実験も行った。これまでの実験では、細胞内こう表面から放射される正反射光成分が装置内蔵の積分球によって検出されるのを防ぐために、試料と積分球底面間の距離を9mmに保って測定を行っていた。本実験の場合には、試料—NDフィルタ間での繰り返し反射のために最終的に積分球で捕捉される反射光量がかなり減少することも配慮して、すべての実験を通じて積分球底面に試料を密着させて吸光度を測定し、両者の間に介在させたフィルタの有無による検量線の予測精度の相異を比較した。

6. 3 検量線作成に関する問題点と対策

本実験で対象とする目的変量は、いずれも試料の物理的構成に関する因子であるから、試料の化学的構成を目的変量とした従来の手順にならって簡単に検量線を作成できるとは限らない。ここでは、繊維走行ならびに表面粗さに関する検量線を作成する場合についてそれぞれの問題点を検討し、予測精度の高い検量線を実現させるために、目的変量の特性に対応してどのような方策を講ずるべきかを考察する。

6. 3. 1 入射光と照射面繊維走行のなす角 θ を計測の対象とする場合

まず、入射光と照射面繊維走行のなす角 θ を対象として検量線を作成する場合について考える。図6-1は、 θ と吸光度の関係を示した例で、黒角、白角、白丸、黒丸はそれぞれ2230 nm、1680nm、1100nm、900nmの波長に関する結果である。第2章で示した同様の図(図2-4)においては試料の表面粗さがほぼ一定($R'_y=7.5\mu\text{m}$)であったが、本実験では、 $31\mu\text{m} \leq R'_y \leq 293\mu\text{m}$ という広範囲にこれを分布させた。図6-1において、いずれの波長の場合にも θ が大きくなるとともに吸光度が減少するようすは明らかであるが、波長が長くなるほど、また、 θ が小さいほど吸光度にばらつきが生じている。これは、波長が長いと臨界拡散厚さが小さく、また、 θ が小さいと拡散反射光漏出率 $S(\theta)$ が小さいために、ともに表面層の影響が強く現れるためである。また、いずれの波長においても $\theta=45^\circ$ 近傍を境界として、 θ の変化に対する吸光度の傾向に若干の相異が認められる。今回の測定では試料を積分球底面に密着させて測定したため、 $45^\circ < \theta < 90^\circ$ では、拡散反射光とともに僅かではあるが正反射光が検出されてしまう。正反射光は、試料内部には侵入せずに表面から放射される光であるから、拡散反射光のように試料の物理的・化学的構成に原因した透過・吸収・散乱の過程をもっていない。一方、 $0^\circ \leq \theta \leq 45^\circ$ では拡散反射光のみが検出される。このように、反射光強度として得られる情報の光学的な由来が二つの区間で異なるために、 θ に対する吸光度の傾向が $\theta=45^\circ$

で変化すると考えられる。

以上の結果から判断すると、近赤外分光法によって θ の検量線を作成する場合には、表面粗さの影響を回避することがまず肝要であり、そのためには説明変量を短波長から選択しなければならない。また、本実験で求める検量線は、(5.1)式で示した線形重回帰式であるから、説明変量と目的変量の関係がなるべく線形であることが望ましい。ここで示す θ に対する吸光度の変化は線形に近いので、 $0^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$ の θ のすべての範囲を対象とした場合にも、おおむねは満足できる検量線が求められるものと予想されるが、予測精度をさらに向上させるために、まず $0^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$ に対応する検量線を作成した後に、この検量線を用いて反射光の光学的過程が変化する $\theta = 45^\circ$ で母集団を2つに区分し、それぞれの領域であらためて検量線を作成し直して最終的な測定を行うのが好ましい。

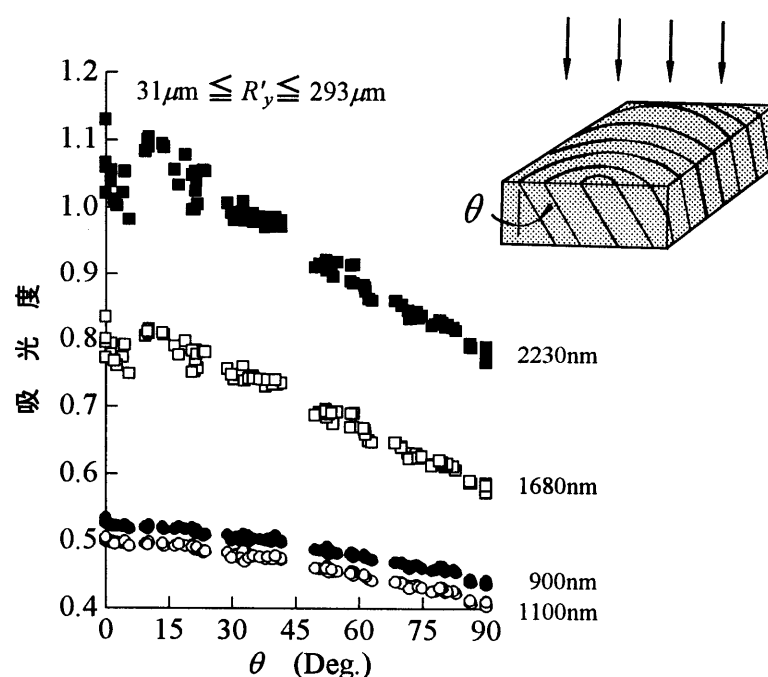


図6-1 入射光と照射面繊維走行のなす角 θ が吸光度に及ぼす影響

6. 3. 2 表面粗さを計測の対象とする場合

(a) 問題点

次に、表面粗さ(最大高さ; R'_y)を対象とする場合について考える。表面粗さに対する吸光度の動向に着目して検量線を作成する場合にも、 θ は吸光度を大きく左右する要因であるから、その影響を排除できそうもない。したがって、まず6.3.1の検量線を用いて対象とする試料が占める θ の範囲をあらかじめ限定しておく処置が必要となる。問題はそれだけではない。図6-2は R'_y と吸光度の関係を示した例で、黒丸が実測結果である。図6-2における吸光度の値は図2-4における値と必ずしも一致していないが、これは、測定系における $l_{\text{光}}$ の相異に起因している。(a)は $57^\circ < \theta < 63^\circ$ 、照射波長 $\lambda = 2230\text{nm}$ で、(b)は $82^\circ < \theta < 88^\circ$ 、 $\lambda = 900\text{nm}$ の場合で

ある。 R'_y が $65\mu\text{m}$ を越えると、 R'_y に対する吸光度の挙動は複雑な様相を示すようになり、その状況は θ および λ によって大きく異なる。他の θ と λ の条件における吸光度も、図6-2-(a)、(b)のいずれかのパターンの変動を示す。このような挙動を示す説明変量に対して通常の手法にしたがって R'_y の検量線を作成しても、予測精度の高いものが得られないことは明白である。

そこで、表面粗さ R'_y に関する有意な検量線を実現させる可能性を見いだすために、これまでに提案した一連の光学モデルに基盤をおいて各波長領域における θ と R'_y の相互干涉について検討を加え、理論的な予測を活用して事態に対応する新たな方式の導入を試みる。

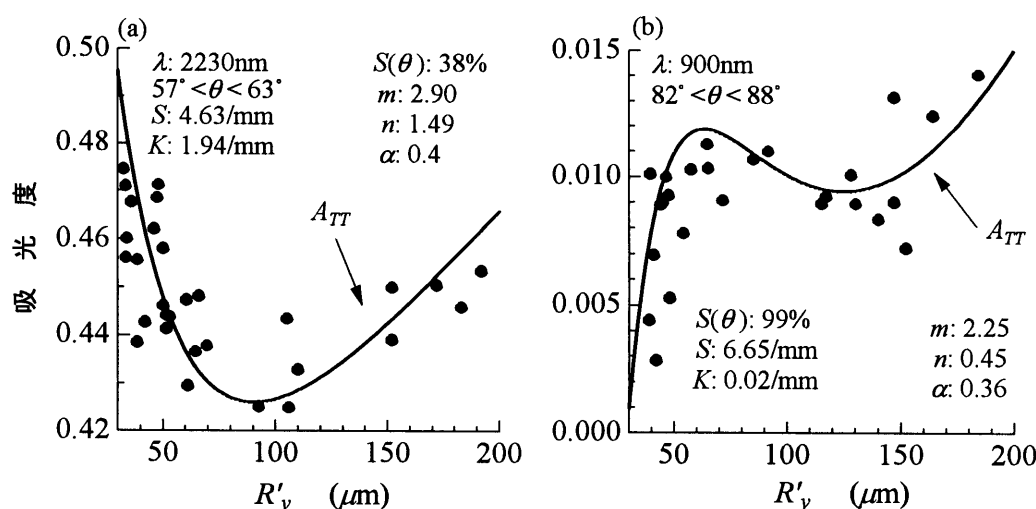


図6-2 最大高さ(R'_y)と吸光度の関係

(b) θ と R'_y の組合せが吸光度に及ぼす影響

拡散反射光漏出率 $S(\theta)$ ならびに試料内平均光路長 $\bar{\xi}$ は、照射面の繊維走行や照射波長によって特徴的に変化することが第2～4章において明らかにされている。ここに $S(\theta)$ は細胞内こう表面で生じた拡散反射光のうち、対向する細胞壁で遮断されずに試料表面から放射される光の割合であり、 $\bar{\xi}$ は試料内の散乱、吸収に関与する有効な光路長である。このように、木材においては透過光の挙動がKubelka-Munkの関係式によっては単純に表現できないことに留意しなければならない。試料厚さ d の代わりに(4.15)式で示される \bar{d} を放射に関する一般化された入出力の関係式に適用する必要がある。一方、機械加工によって破壊された木材の表層部を、照射面がまさ目で光学的に一定の厚さ t をもった薄膜とみなせば、この等価薄膜は(2.8)式で表わされる

測定試料の R'_y はほとんどが $40\mu\text{m}$ 以上であるから本実験で用いた装置の平行入射光 (強度 I_0)はすべて試料表層部で拡散光になると仮定すると、(2.8)式で表されるような表面構造を持ち、入射光と照射面繊維走行のなす角が θ である試料表面から放射される反射光強度 I_{θ} は、

$$I_u = I_0 \left\{ R(t) + \frac{S(\theta)R(\infty)[T(\hat{t})]^2}{1 - S(\theta)R(t)R(\infty)} \right\} S_{cw} + R(\infty)(1 - S_{cw}) \quad (6.2)$$

で表される。また、

$$\hat{t} = \frac{n+1}{2n}t \quad (6.3)$$

である。 n は、 n 乗余弦放射強度モデルにおける定数である。 R および T はKubelka-Munkの関係式における反射率、および透過率を表す。 S_{cw} は測定試料の木口面実質木部面積率である。

図6-2の実測値の傾向を詳細に検討したところ、機械加工によってはげしく破壊された木材表層部の実情をより正しく反映させるためには、照射面がまさ目である表層薄膜（(2.8)式）に以下のような微視構造を付与するのが好ましいと判断された。すなわち、機械加工によって破壊された表層部を図6-3に示すモデルのように、照射面がまさ目である薄膜部(TLE)とその上部に存在する擬似的な木口の薄層部(TLC)から形成される2層構造で代表させる。ただし、TLCの断面積は無視できるほど小さい。

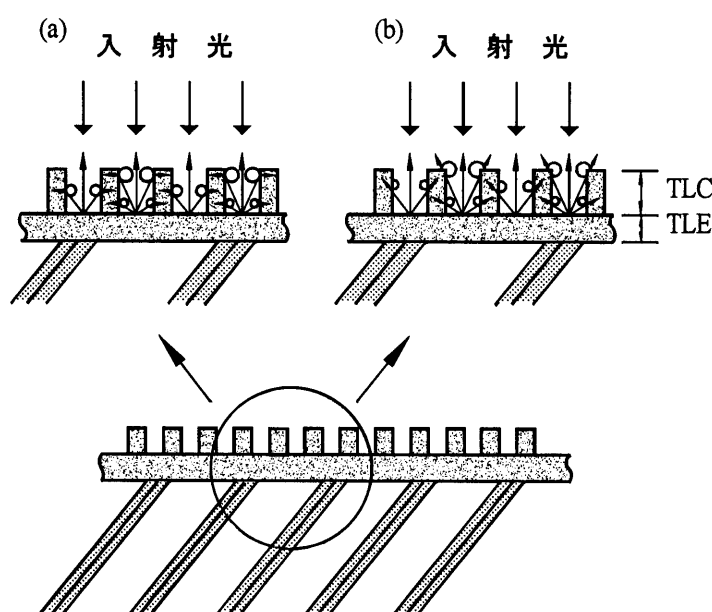


図6-3 表面粗さの2層構造光学モデル

図のように、平行光が試料表面に照射されると、TLEから球状の指向特性をもった拡散反射光が放射される。照射光が領域Ⅰ(800~1400nm)の場合には吸光係数が0に近いために、TLEからの拡散反射光がTLCによって吸収される量は僅かであるけれども、いったんTLCに当たった光は図6-3-(a)のようにTLCの面に対して垂直方向に進行してしまう。したがって、TLCすなわち R'_y が大きくなるにつれて試料表面から上方に放射される拡散反射光量は減少し、吸光度は大きくなる。一方、照射光が領域Ⅱ(1400~1860nm)およびⅢ(1860~2500nm)の場合には、吸光係数が大きくなり光の直進性が高くなる。したがって、TLEから放射される拡散反射光がTLCに遭遇すると、その強度を弱めながら透過・反射を繰り返して試料表面から放射

される (図6-3-(b))。

このように、いずれの波長領域においてもTLCが大きくなるにしたがって反射光強度は減少するため、得られる吸光度は増加する。図6-3のような光学モデルに基づいた I_{tt} の減光率が $\exp(-\rho R'_y)$ で表されると、試料から放射される反射光強度 I_{TT} は、

$$I_{TT} = I_{tt} \exp(-\rho R'_y) \quad (6.4)$$

となり、吸光度 A_{TT} は、

$$A_{TT} = \log\left(\frac{I_0}{I_{TT}}\right) \text{ となる。} \quad (6.5)$$

分割された θ のおおのこの範囲における $S(\theta)$ の平均値を、第3章に基づいて算出した。続いて、いろいろな表面粗さをもつ試片に関する吸光度実測値と(6.4)式から計算される吸光度の差平方和が最小になるような m と ρ を求めた。 n は、第4章で求められた値を用いた。図6-2に示した実線は、上記の各パラメータを(6.2)～(6.4)式に適用した場合の計算結果で、いずれの条件においても実測値の動向とほぼ対応した変動を示している。表面粗さが小さい場合($R'_y < 100\mu\text{m}$)には、TLEから放射される拡散反射光に及ぼすTLCの影響が小さいために、吸光度はTLEおよび細胞内こう部における光の動向を直接反映したものとなる。したがって、 θ および照射波長によって特徴的に変化する m 、 $S(\theta)$ 、および n の各パラメータによって吸光度の動向が支配される。この点については、第2章で詳細に述べたとおりである。一方、表面粗さが大きい場合($R'_y > 100\mu\text{m}$)にはTLCの影響が無視できなくなり、減光率 $\exp(-\rho R'_y)$ が吸光度の動向を左右する大きな要因となる。したがって、いずれの θ および照射波長においても R'_y が大きい範囲では R'_y が大きくなるとともに吸光度は増加する。このように、 R'_y と吸光度の関係が理論的に明らかにされたので、この結果に対応するようにあらかじめ R'_y の範囲を適当に分割することができれば、それぞれの区域で予測精度の高い検量線を作成する方式が具現できるはずである。

6. 4 検量線の作成手順

本実験では、複数の物理的構成に関する情報が交雑した母集団への近赤外分光法の適用可能性を明らかにする。ここでは、6.3における検討結果を考慮して検量線を作成する具体的な手順について述べる。

6. 4. 1 入射光と照射面繊維走行のなす角 θ に関する検量線の作成と予測精度の評価

検量線の作成に用いた299個の試料は、 R'_y および θ が $31\mu\text{m} \leq R'_y \leq 293\mu\text{m}$ 、 $0^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$ の範囲にあり、評価に用いた98個の試料は、 $33.5\mu\text{m} \leq R'_y \leq 250\mu\text{m}$ 、 $0^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$ であった。また、 $\theta > 45^\circ$ において検出される正反射光成分の影響を考慮して、試料母集団を $\theta = 45^\circ$ で2分割してそれぞれの θ の範囲で検量線を作成することも試みた。

検量線の評価にあたっては含水率の場合と同様に、重相関係数(MCC)、回帰推定の標準誤差(SEC)、予測値標準誤差(SEP)および評価用試料における実測値と予測値との間の相関係数(r)に着目した。なお、 θ に関しては、 $\pm 5^\circ$ 以内の予測精度を目標値とした。多重共線性の排除に留意して、変数増加法により検量線を作成した。

6. 4. 2 表面粗さ R_y に関する検量線の作成と予測精度の評価

R_y については、6.4.1と同じ試料母集団をあらかじめ θ によって分割し、それぞれの母集団に対して検量線を求めた。 θ は、 $0^\circ \leq \theta \leq 5^\circ$ 、 $5^\circ < \theta \leq 15^\circ$ 、 $15^\circ < \theta \leq 25^\circ$ 、 $25^\circ < \theta \leq 35^\circ$ 、 $35^\circ < \theta \leq 45^\circ$ 、 $45^\circ < \theta < 55^\circ$ 、 $55^\circ \leq \theta < 65^\circ$ 、 $65^\circ \leq \theta < 75^\circ$ 、 $75^\circ \leq \theta < 85^\circ$ 、および $85^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$ の10区間に分割した。

試料母集団がもつ θ の範囲を限定しても、6.3で述べたように R_y に関する有意な検量線を作成できる可能性は低い。各 θ の範囲における R_y と吸光度の関係を複数の代表波長に対して調べたところ、 $0^\circ \leq \theta < 65^\circ$ では図6-2-(a)のパターンの動向を示し、 $\theta \geq 65^\circ$ では図6-2-(b)のパターンの動向を示すことが明らかになった。これらの結果に基づいて、 $0^\circ \leq \theta < 65^\circ$ では、 R_y の範囲を2つに区分してそれぞれの範囲で検量線を作成した。また、 $\theta \geq 65^\circ$ では、 R_y の範囲を3つに区分して検量線を作成した。

ところで、試料からの正反射光が検出されると、吸光度実測値は(6.4)式による計算値を下まわってしまう。また、表面粗さは試料表層部の状況を表す指標であるから、表面に近い部位から放射される光が反射光中に占める割合を高めることが望まれる。これらを考慮して、光反射型ニュートラルデンシティフィルタ (NDフィルタ) を積分球底面に介在させる手法も試みた。NDフィルタは、ガラスにCrをコーティングしたもので、Crの厚さによって透過光と反射光の割合が規定される。試料から放射される正反射光は、NDフィルタによって反射されて再度試料に照射されるから、これが直接検出される割合は低減する。また放射される光は、NDフィルタと試料表層間で繰返し反射され、それに伴って光の到達深さは浅くなっていくから、試料表層部からもたらされる情報量が相対的に増大する。透過率 T_{ND} が10%、20%、40%、60%、および80%のNDフィルタを準備したが、ここでは最適な $T_{ND}=20\%$ のフィルタを使用した実験結果について述べる。

6. 5 結果および考察

6. 5. 1 入射光と照射面繊維走行のなす角 θ に関する検量線

(a) 検量線の作成と予測精度

θ に関する検量線の作成結果を、表6-1に示す。検量線に多重共線性をもたせないようにしたため、説明変量数が1(波長)のもの以外は求められなかったが、各評価指標を見れば明らかのように検量線としての予測精度は非常に高い。 $0^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$ に関するSEPは 4.31° で、実測値の測定誤差であるPSDの 1.57° を 2.74° だけ上まわる好結果を示している。 θ の実測値と予測値との相関を図6-4に示す。両者間の相関は $r=0.989$ で相当に高いが、 θ の大きさによって予測精度に若干の差が生じているのがわかる。

予測精度の向上について検討するために、まず、検量線評価用試料を $0^\circ \leq \theta < 45^\circ$ と $45^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$ に2分割し、双方の角度範囲に関して先に得られた検量線のSEPと r を求めてみた。結果を表6-1に併記したが、 $0^\circ \leq \theta < 45^\circ$ ではSEPが当初の目標値を越え 5.23° になってしまった。

次に、検量線作成用試料を同様に2分割し、それぞれの母集団に関して独立に検量線を求めた結果を表6-2に示す。この場合も、説明変量数が1である検量線のみが作成可能であった。選択波長は、いずれも $0^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$ に関する検量線(表6-1)と同じ1120nmであったが、SEPが向上し、どちらの角度範囲でも目標の予測精度($\pm 5^\circ$ 以内)を満足する結果が得られた。

表6-1 θ に関する検量線の予測精度
(検量線作成用試料母集団の分割なし)

θ の範囲	選択波長	MCC	SEC	r	SEP	PSD
$0^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$	1120 nm	0.987	4.69°	0.989	4.31°	1.57°
				0.945	5.23°	1.75° *1
				0.980	3.13°	1.43° *2

MCC : 重相関係数、SEC : 回帰推定の標準誤差

r : 検量線評価用試料の実測値と検量線による予測値との間の相関係数

SEP : 予測値標準誤差、PSD : Pooled standard deviation

検量線評価試料における θ の範囲 : $0^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$ (無印)

: $0^\circ \leq \theta \leq 45^\circ$ (*1)

: $45^\circ < \theta \leq 90^\circ$ (*2)

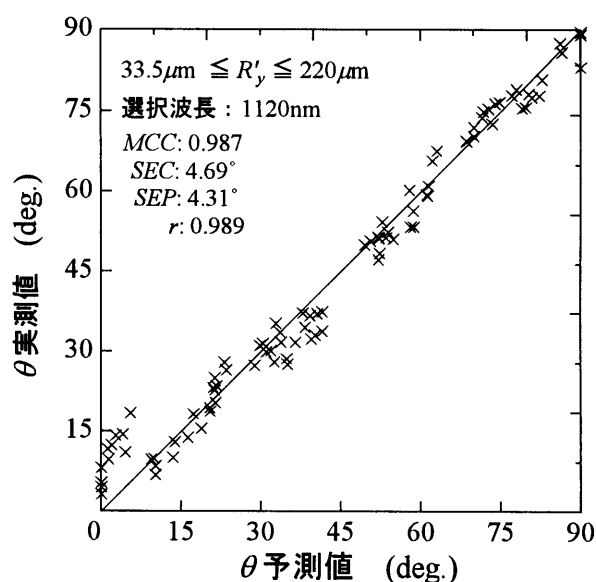


図6-4 θ 実測値と予測値の相関

表6-2 θ に関する検量線の予測精度
(検量線作成用試料母集団を2分割して作成)

θ の範囲	選択波長	MCC	SEC	r	SEP	PSD
$0^\circ \leq \theta < 45^\circ$	1120 nm	0.911	5.57°	0.949	4.70°	1.75°
$45^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$	1120 nm	0.975	3.11°	0.980	2.79°	1.43°

MCC : 重相関係数、SEC : 回帰推定の標準誤差

r : 検量線評価用試料の実測値と検量線による予測値との間の相関係数

SEP : 予測値標準誤差、PSD : Pooled standard deviation

以上の結果をまとめると、近赤外分光法によって θ を精度よく予測するためには、まず表6-1に示した検量線によっておおよその値、すなわち測定試料の θ が 45° より大きいかそれ以下であるかを把握し、その後表6-2に示した検量線で θ を正しく推定する2段方式をとるのがよいことになる。同一の選択波長であるから、実際には検量線の偏回帰係数を変更して再計算する手順を追加するだけである。このような方式にしたがって求められたSEPは 3.87° 、 r は0.991であった。

(b) θ に関する検量線における選択波長

次に、説明変量として選択された1120nmの波長がもつ特性に関して若干の考察を行う。各波長における吸光度と θ の単相関を求めてみたところ、図6-5の実線のような結果が得られた。相関は、いずれの波長においても高いが、とくに970～1150nmの範囲で相関係数の絶対値がもっとも高い値を示している。また、その変動は図中に破線で示されたスプルース試料の近赤外吸収スペクトルの動向にほぼ対応している。

試料内における近赤外光の挙動は、散乱係数ならびに吸光係数の相違に対応して、3つの領域に分類できることが2.3.4で明らかにされている。なかでも領域Ⅰ(800～1400nm)に属する近赤外光は、試料内でほとんど吸収されずに散乱し、試料深くまで侵入することができる。図6-5は、このように領域Ⅰの波長を説明変量として採用することにより、表面粗さの影響を回避して、 θ に関する予測精度の高い検量線を作成することが可能になることを物語っている。

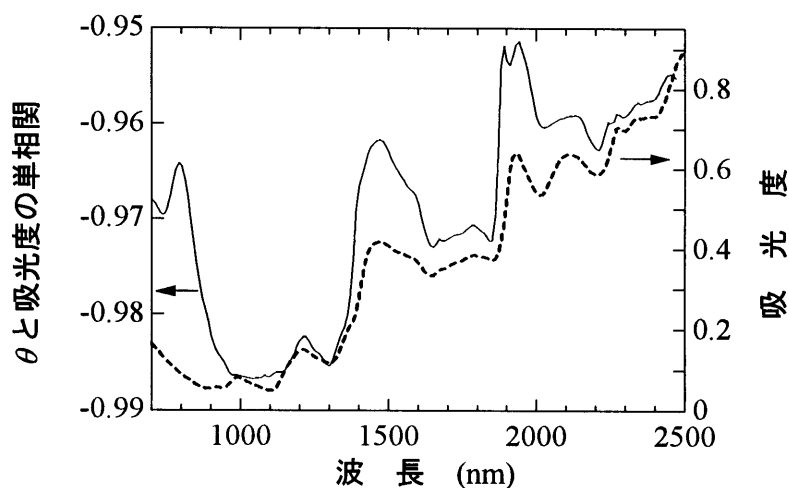


図6-5 各波長における θ と吸光度の単相関
および近赤外吸収スペクトル

(c) θ に関する検量線に影響を及ぼす因子としての表面粗さ R_y

試料母集団は、 θ の分布の他に表面粗さ R_y の広範な分布を伴っている。ここでは、 R_y の存在が θ に関する検量線の予測精度を劣化させている状況を明らかにし、より好ましい計測条

件を設定するための一助とする。

図6-6は、検量線評価用試料の R'_y (実測値) を横軸として θ の予測値と実測値の差を示したグラフで、(a)が $0^\circ \leq \theta < 45^\circ$ 、(b)が $45^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$ に関するものである。図中バツ印は試料母集団の構成条件を $0^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$ とした場合の結果であり(表6-1参照)、黒丸は $0^\circ \leq \theta \leq 45^\circ$ 、白丸は $45^\circ < \theta \leq 90^\circ$ (表6-2参照)に対する検量線による結果を示す。母集団の構成条件が限定されると、検量線の予測精度が向上するのは既述のとおりである。 $0^\circ \leq \theta < 45^\circ$ (図6-6-(a))では、 R'_y が大きくなると θ の予測値と実測値との差が大きくなる。すなわち、予測精度が低下する。これは R'_y が θ と吸光度の関係を乱す存在となっていると考えることで理解できる。

$45^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$ (図6-2-(b))では、逆に R'_y が小さいと予測精度が低下する傾向にある。これまでの諸検討で、 $45^\circ < \theta < 90^\circ$ の場合には細胞内こう表面からの正反射光成分が積分球内で捕捉される可能性があることを指摘した。表面粗さが小さいほど、試料照射面の細胞内こう表面が比較的平滑な組織形態を保っているために、正反射光量が大きくなりやすい。これが R'_y が小さくても予測精度を低下させる原因と考えられる。このように、表面粗さが θ に関する検量線に及ぼす影響は θ ならびに測定系によって特徴的に変化するから、これらの点を考慮して検量線を作成する必要が認められる。

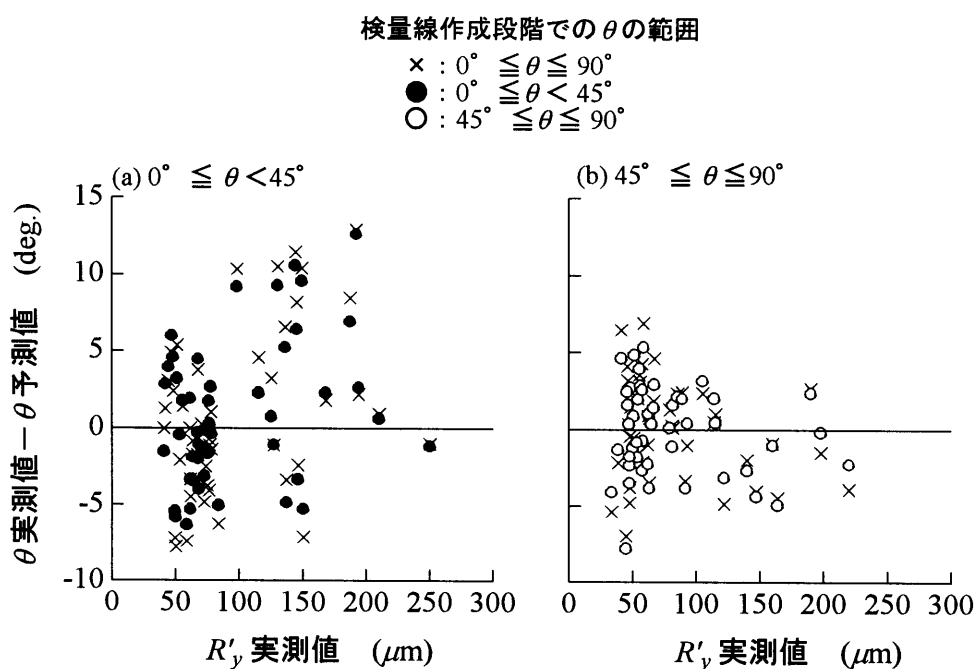


図6-6 表面粗さが θ の予測値に及ぼす影響

6. 5. 2 表面粗さ R'_y に関する検量線

(a) 検量線の作成と予測精度

R'_y の検量線に関しては、 θ の影響を考慮してあらかじめ試料母集団を6.4.2で記したように10分割し、さらに R'_y の範囲を2ないし3分割してこれを作成した。通常の測定によって得られた重回帰分析の結果を表6-3に示し、NDフィルタを使用した測定によって得られた結果を表

6-4に示す。 θ に関しては、説明変量数が1の検量線しか作成できなかったが、 R'_y については説明変量数2についても作成可能となる。検量線評価用試料における R'_y の実測値と予測値の間の相関 r が、危険率5%で有意であったものに*印を付した。 $55^\circ \leq \theta < 65^\circ$ における R'_y 検量線(フィルタなし)の実測値と予測値の相関を、図6-7に示す。 R'_y の範囲をあらかじめ分割することについては実施上の問題が残されているが、粗さ範囲が限定された試料に関しては表6-3および6-4のSEPをPSDと比較すれば明らかなように、おおむね満足できる検量線が作成できることが確かめられた。

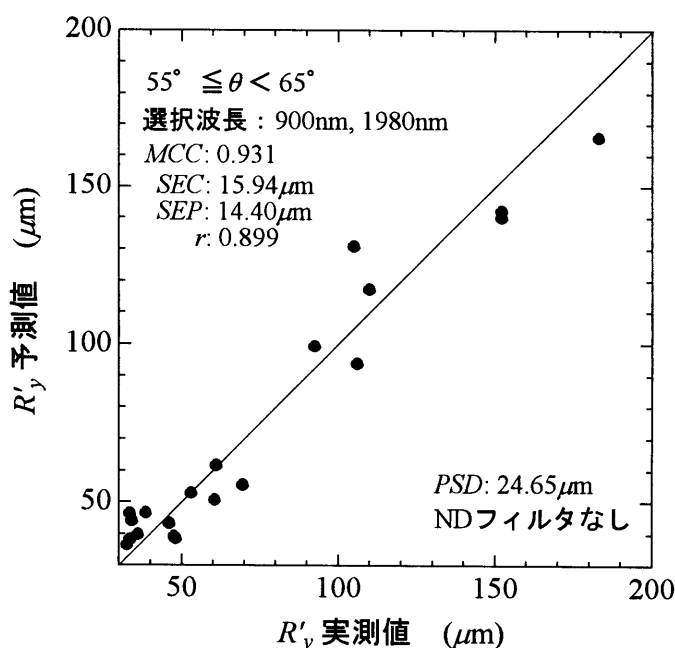


図6-7 R'_y 実測値と予測値の相関

(b) NDフィルタの効用

表6-3および6-4より、NDフィルタがない場合には $\theta < 65^\circ$ で有意な検量線が作成されやすく、またNDフィルタがある場合には $\theta \geq 55^\circ$ で有意な検量線になることがわかる。このような結果は、NDフィルタと試料間の繰返し反射によって正反射光を拡散反射光へと変換することにより、検量線の予測精度が向上する場合があることを示している。一方、NDフィルタを使用することによって、得られる反射光量が減少するため、通常の測定においても試料から放射される光が少ない場合(とくに、 $\theta < 45^\circ$)には、逆に予測精度が低下する。

このような結果は、測定試料の繊維走行をあらかじめ把握することによってNDフィルタ使用の適否を見きわめ、その後に表面粗さに関する検量線を作成する必要があることを示唆している。

表 6-3 表面粗さ (R'_y) に関する検量線の予測精度 (ND フィルタなし)

θ の範囲	R'_y の範囲(μm)	選択波長(nm)	MCC	SEC (μm)	r	SEP (μm)	PSD (μm)	
$0^\circ \leq \theta < 5^\circ$	$51 \leq R'_y \leq 98$	1380	0.886	6.23	0.916	5.92	11.35	*
	$115 \leq R'_y \leq 250$	860, 2500	0.541	42.59	0.479	47.68	22.33	
$5^\circ < \theta \leq 15^\circ$	$41 \leq R'_y \leq 92$	1900	0.888	7.09	0.887	6.75	3.16	*
	$111 \leq R'_y \leq 174$	1860	0.748	17.46	0.783	14.46	28.28	*
$15^\circ < \theta \leq 25^\circ$	$31 \leq R'_y \leq 89$	1440	0.728	12.06	0.405	11.33	5.17	
	$157 \leq R'_y \leq 235$	2500	0.936	9.92	0.948	7.66	16.20	*
$25^\circ < \theta \leq 35^\circ$	$34 \leq R'_y \leq 80$	900, 1460	0.810	9.10	0.825	11.33	10.37	*
	$123 \leq R'_y \leq 250$	820, 2500	0.820	32.55	0.791	26.92	12.37	*
$35^\circ < \theta \leq 45^\circ$	$44 \leq R'_y \leq 82$	1100, 1400	0.729	9.52	0.942	9.34	7.05	*
	$111 \leq R'_y \leq 230$	1080, 1940	0.974	10.22	0.975	9.01	13.31	*
$45^\circ < \theta < 55^\circ$	$41 \leq R'_y \leq 93$	1400, 2500	0.739	10.95	0.743	9.76	7.43	*
	$114 \leq R'_y \leq 215$	800, 2500	0.777	25.34	0.777	21.15	27.05	*
$55^\circ \leq \theta < 65^\circ$	$33 \leq R'_y \leq 93$	1520	0.627	11.24	0.747	8.05	8.01	*
	$93 \leq R'_y \leq 192$	900, 1980	0.931	15.94	0.899	14.40	24.65	*
$65^\circ \leq \theta < 75^\circ$	$38 \leq R'_y \leq 73$	700, 1900	0.549	8.14	0.846	6.16	10.41	
	$73 \leq R'_y \leq 85$	860	0.944	2.08	0.962	1.37	9.20	*
	$100 \leq R'_y \leq 190$	1140, 2480	0.922	14.52	0.863	13.62	25.40	*
$75^\circ \leq \theta < 85^\circ$	$39 \leq R'_y \leq 75$	1040	0.339	11.64	0.632	8.52	9.06	
	$75 \leq R'_y \leq 115$	1360	0.211	21.37	0.258	18.30	19.14	
	$117 \leq R'_y \leq 184$	840	0.750	14.97	0.831	11.90	25.95	*
$85^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$	$34 \leq R'_y \leq 73$	780	0.390	8.36	0.308	9.10	3.63	
	$75 \leq R'_y \leq 81$	700	0.346	6.47	0.284	5.42	14.65	
	$81 \leq R'_y \leq 130$	1080	0.922	10.58	0.955	7.35	11.94	

*印 : MCC と r が危険率 5 % で有意

表 6-4 表面粗さ (R'_y) に関する検量線の予測精度 (ND フィルタあり)

θ の範囲	R'_y の範囲(μm)	選択波長(nm)	MCC	SEC (μm)	r	SEP (μm)	PSD (μm)	
$0^\circ \leq \theta < 5^\circ$	$51 \leq R'_y \leq 98$	1340	0.897	5.94	0.913	5.82	11.35	*
	$115 \leq R'_y \leq 250$	840, 2460	0.311	47.11	0.162	52.98	22.33	
$5^\circ < \theta \leq 15^\circ$	$41 \leq R'_y \leq 92$	1460	0.746	10.25	0.631	11.30	3.16	*
	$111 \leq R'_y \leq 174$	1080, 1460	0.900	6.93	0.855	7.54	28.28	*
$15^\circ < \theta \leq 25^\circ$	$31 \leq R'_y \leq 89$	1980	0.741	11.82	0.425	11.34	5.17	
	$157 \leq R'_y \leq 235$	2460	0.874	13.66	0.919	9.62	16.20	*
$25^\circ < \theta \leq 35^\circ$	$34 \leq R'_y \leq 80$	860, 1580	0.828	8.69	0.912	5.49	10.37	*
	$123 \leq R'_y \leq 250$	840, 2460	0.733	38.72	0.840	26.05	12.37	*
$35^\circ < \theta \leq 45^\circ$	$44 \leq R'_y \leq 82$	1400	0.654	10.29	0.537	10.37	7.05	
	$111 \leq R'_y \leq 230$	1100	0.700	29.55	0.865	23.87	13.31	
$55^\circ < \theta < 55^\circ$	$41 \leq R'_y \leq 93$	1400	0.539	13.12	0.512	12.44	7.43	
	$114 \leq R'_y \leq 215$	800, 2440	0.738	27.20	0.738	23.70	27.05	*
$55^\circ \leq \theta < 65^\circ$	$33 \leq R'_y \leq 93$	1680	0.641	11.08	0.724	8.30	8.01	*
	$93 \leq R'_y \leq 192$	960	0.890	18.39	0.909	16.99	24.65	*
$65^\circ \leq \theta < 75^\circ$	$38 \leq R'_y \leq 73$	900, 1540	0.732	6.63	0.869	4.81	10.41	*
	$73 \leq R'_y \leq 85$	1120	0.992	0.81	0.997	0.50	9.20	*
$75^\circ \leq \theta < 85^\circ$	$100 \leq R'_y \leq 190$	1300, 2420	0.948	11.94	0.909	11.52	25.40	*
	$39 \leq R'_y \leq 75$	940	0.676	9.12	0.723	7.51	9.06	
$75^\circ \leq \theta < 85^\circ$	$75 \leq R'_y \leq 115$	920, 1040	0.847	13.62	0.898	11.23	19.14	*
	$117 \leq R'_y \leq 184$	900, 2460	0.942	8.60	0.957	6.25	25.95	*
$85^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$	$34 \leq R'_y \leq 73$	860	0.588	7.34	0.474	8.55	3.63	
	$75 \leq R'_y \leq 81$	800	0.841	3.72	0.854	2.98	14.65	*
	$81 \leq R'_y \leq 130$	1000	0.899	12.57	0.935	8.71	11.94	*

*印 : MCC と r が危険率 5 % で有意

6. 6 結言

近赤外分光法によって、木材の物理的構成に関する情報を定量的に正しく把握することを目的として、入射光と照射面繊維走行のなす角 θ 、ならびに表面粗さ (最大高さ; R_y) の検量線を重回帰分析によって作成することを試みた。得られた結論は以下のとおりである。

(1) 検量線の作成に先立ち、 θ と説明変量 (各波長の吸光度) の関係を調べた。いずれの波長においても、 θ が大きくなるにしたがって吸光度は減少するが、波長が長くなるほど表面粗さの影響を受けて吸光度にばらつきを生じる。また、 $45^\circ < \theta < 90^\circ$ では、試料から放射される正反射光成分が検出されてしまうため、 $\theta = 45^\circ$ 近傍を境界として、 θ に対する吸光度の変動が若干異なった傾向を示すようになる。近赤外分光法によって予測精度の高い θ の検量線を作成するためには、このような点に留意して試料母集団の特性を把握することが必要である。

(2) (1)の結果をふまえて θ に関する検量線を作成した (説明変量: 1120nm)。 $0^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$ の試料母集団を対象にした検量線によって、測定試料の θ が 45° 以上であるか以下であるかをあらかじめ推定し、それぞれに対して検量線の偏回帰係数を求め直して θ を求めた。このような手順にしたがうと、予測値標準誤差 (SEP) は 3.87° となり、評価用試料における実測値と予測値との相関 (r) は 0.991 となった。本法によって、 θ の予測が十分な精度で実施可能になることが明らかにされた。

(3) 領域 I (800~1400nm) の波長を説明変量として採用することにより、表面粗さの影響を回避して、 θ に関する予測精度の高い検量線を作成することができる。また、表面粗さが θ の検量線に及ぼす影響は、 θ が占める範囲によって特徴的に変化する。これらの点を考慮して、試料母集団の実情に即した検量線を作成することが好ましい。

(4) R_y に対する吸光度の動向は、 θ および照射波長によって特徴的に変化する。状況を正しく把握するために、機械加工によって破壊された表層部を2層構造モデルによって表現し、これまでに提案された一連の光学モデルに準拠して、各波長領域における θ と R_y の組合せが吸光度に及ぼす影響について検討した。その結果、 R_y と吸光度の関係は非線形であることが明らかになった。 R_y の範囲を適当に分割して、それぞれの区域で有意な検量線を作成することが肝要である。

(5) (4)の結果をふまえて、 R_y に関する検量線を作成した。正反射光の影響を低減させるとともに、試料表面に近い部位から放射される光が反射光中に占める割合を高めることを目的として、NDフィルタを積分球底面に介在させて吸光度を測定し、これによって検量線を作成することも試みた。フィルタがない通常の測定では、 $\theta < 65^\circ$ で有意な検量線が作成されやすく、またNDフィルタを用いた測定では、 $\theta \geq 55^\circ$ で有意な検量線になることが明らかになった。この結果は、測定試料の繊維走行を先に測定し、その結果に基づいてNDフィルタ使用の適否を判定したうえで、表面粗さに関する検量線を作成する必要があることを示唆している。

第7章 結論

本研究は、循環資源としての木材を有効利用するうえで必要不可欠な非破壊計測に関して、新たな可能性を見いだすとともにその具体的な適用に対する基盤を確立するために行われた。すなわち、近赤外分光法を従来なかった視点で発展させることによって、木材に関する物理的・化学的な情報を正確・迅速・簡便に把握できることを見出し、解析の基礎と応用に関する一連の実験ならびに考察を行った。従来法は、試料中の化学成分のみに関する情報を得る目的で用いられることがほとんどであったため、これを適用するにあたっては、測定値に大きく影響する試料の物理的特性(粒径、充填密度など)をできる限り均一な状態にして計測すること(広義の非破壊計測)が重要な前提とされていた¹⁹⁾。しかしながら、木材を測定の対象とする場合には、生物体としての組織構造を保った集合体を計測すること(狭義の非破壊計測)が要求される。それを実施したときには化学的構成と物理的構成に関する情報が混在したまま出力されてしまう事態を招く。これは、反面、試料の物理的構成に基づいた出力スペクトルの変化を単なる外乱としてではなく、有益な情報源として積極的にとらえる立場がありうることを示唆する。すなわち、試料を粉体化せずに計測することが可能となれば、試料内の化学的構成に関する評価項目に加えて、これまで近赤外分光法の対象と考えられていなかった試料の物理的構成に関する情報をも視野に入れて本法を活用することができるようになる。

本研究は、このような背景に基づいて実施されたものであって、得られた結論は以下のとおりである。

1. 試料の物理的構成が近赤外吸収スペクトルに及ぼす影響について検討を行った。入射光と照射面繊維走行のなす角 θ および表面粗さ(最大高さ; R'_y) を系統的に変化させたシトカスプルス試料を測定することにより、これらの因子および照射波長に応じて吸光度が特徴的に変化するようすが明らかにされた。これらの検討によって、近赤外光が試料の物理的構成に関する情報の検出にも有効に活用できる可能性が確かめられた。

2. 近赤外領域における光の散乱・反射・吸光・透過によってもたらされる様相が波長によって大きく変化する事実を見出した。近赤外分光分析装置の計測可能深さを意味する臨界拡散厚さ d_{cr} を導入して検討を行い、また試料内における近赤外光の挙動を包括的に記述する指標である吸光係数 K ならびに散乱係数 S を求めた。これらの諸因子は波長依存性を示し、様相は3つの近赤外領域(I: 800~1400nm、II: 1400~1860nm、III: 1860~2500nm)に分類できることがわかった。このような光学的特性を正しく理解したうえで、所望の試料情報およびそれを得たい部位に応じて波長を適切に選択することが重要となる。

3. 実験結果を拡散反射の概念に基づいて統一的に理解することを試み、加工面粗さと細胞体の構成状況を理論的に考慮に入れた実験式を提案して、その妥当性と特性を確かめた。この検討過程において、機械加工によって被った表層部の破壊が比較的軽微な場合($R'_y < 70\mu\text{m}$)には、木材表層部を照射面がまさ目である厚さ t の薄膜として光学的に記述できることがわ

かった。すなわち、波長領域ⅡおよびⅢでは、試片のもつ加工面粗さはその最大高さを若干上まわる厚さをもつ薄膜と光学的に等価であり、波長領域Ⅰではこの等価薄膜の厚さが0となる場合がある。一方、 θ の影響は、細胞内こう表面で生じた拡散反射光のうち対向する細胞壁で遮断されずに薄膜下部に達する率として定義されている拡散反射光漏出率 $S(\theta)$ によって理解される。 t および $S(\theta)$ で代表される光学的特性を把握することが、近赤外分光法を木材に適用するうえには欠かせない。

4. 木材を仮道管の集合体とみなして、これに照射された近赤外光の散乱・反射・吸光・透過の連鎖過程に関する首尾一貫したモデルの体系を構成し、木材内部における近赤外光の挙動と拡散反射・透過指向特性を総合的に理解できるようにした。まず、 K と S の様相を考慮に入れて前述の3領域(Ⅰ、Ⅱ、Ⅲ)に対応した拡散反射光および透過光に関する指向特性モデルを提案した。続いて、半無限仮道管群における任意の一つの細胞壁に着目し、これに直接あるいは間接的に照射される光によって生じる拡散反射光の光路の重ね合わせによって、仮道管群全体から放射される光の状況が過不足なく具現されるような光路系モデルを提案した。

5. 光路モデルに指向特性モデルを組み込むことによって、細胞内こう表面で生じた拡散反射光のうち照射面から放射される光の強度を、細胞壁各部位ごとに逐一計算することができる式を構成した。さらに、それらを総和して、拡散反射光漏出率 $S(\theta)$ を求める式を各波長領域ごとに導いた。計算結果は、加工面粗さと細胞体の構成状況を理論的に考慮に入れた実験式と吸光度実測値から求められた $S(\theta)$ の現実値とほぼ一致し、提案した指向特性モデルおよび光路モデルが木材内部における近赤外光の挙動と拡散反射・透過指向特性を表すものとして妥当であることが裏付けられた。

6. 表面鏡を試料下面に密着させることによって、試料上面から放射される拡散反射光と試料裏面から放射される拡散透過光を同時計測することを試みた。その結果、平行光入射に対する木材試料内部での拡散反射光の挙動は、広範な材厚に対して Kubelka-Munk の関係式(K-M 関係式)⁴³⁾で表現されうるが、透過光の挙動はこれによっても単純に表現できないことが見出された。

7. 拡散反射光と透過光の挙動を正しく記述できるような包括的な理論体系を構築し、木材を光散乱吸収体という立場で矛盾なく解釈できる基礎概念を確立した。すなわち、平行光成分を考慮した拡散過程モデルに n 乗余弦放射強度モデルを組み込んで試料内の散乱、吸収に関与する有効な光路長としての試料内平均光路長を求め、続いて、これから得られる等価厚さ試料の概念を K-M 関係式に導入することによって、放射に関する一般化された入出力の関係式を構築した。得られた吸光度計算値は、実測値と一致した傾向を示す。また、これらの知見に基づいて $S(\theta)$ を計算すると、実測値にきわめて近い値が得られる。

8. n 乗余弦放射強度モデルの指数 n について、実験結果に矛盾しないような値を算出することによって、試料内部における光の拡散状況が波長に応じて特徴的に変化する様相を明ら

かにした。近赤外波長領域ⅡおよびⅢ(1400~2500nm)では光の吸収状況に応じて透過光の放射強度特性が変動し、波長領域Ⅰ(800~1400nm)では短波長になるほど単調に入射光方向と直角方向に散乱する成分が大きくなる。

9. 平行光成分を考慮した拡散過程モデルならびに n 乗余弦放射強度モデルに基づいた試料内平均光路長の概念は、木材以外の光散乱吸収体に対しても広く適応可能で、拡散反射光および透過光の挙動を理解するのにきわめて有用であることが明らかにされた。近赤外分光法によって非破壊計測を行う場合には、光学系、あるいは波長領域によって試料内部の光の散乱状況が異なることを配慮して、所望の試料情報を得るための最適条件を見いだすことがたいせつである。

10. あるがままの状態の木材を対象とする含有水分(含水率および単位体積あたりの含水量)の非破壊定量分析の手法について検討し、これを実施した。水分傾斜をもたないさまざまな樹種(10種類)の含有水分検量線を重回帰分析によって作成した結果、説明変量(選択波長)およびその数を適切に選定することにより、樹種による補正をまったく必要としない予測精度の高い検量線が作成できた。目的変量が含水率で説明変量を2次微分スペクトルから選択したときに、その予測値標準誤差(SEP)は1.85%であった。説明変量がオリジナルスペクトルから選ばれた場合に比べて、それが2次微分スペクトルから採用された場合の方が検量線の予測精度が向上するが、この傾向は、目的変量が含水率の場合に顕著であった。

11. 水分傾斜をもつ試料に関する含水率の予測精度を求め、本法の適用可能範囲を検討した。臨界拡散厚さ d_c を考慮して試料厚さに応じた適切な波長を説明変量として選択することが肝要である。試料上部の含水率(MC_1)と下部の含水率(MC_2)との間に相違がある場合を想定して段階的に含水率を変化させたモデルによる実験を行い、 MC_1 をもつ部分の厚さおよび MC_2 と MC_1 の差が、含水率予測値に影響を及ぼすようすを明らかにした。 MC_2 と MC_1 の差が存在する場合には、選択波長が短いほど含有水分の予測精度が向上する。

12. 入射光と照射面繊維走行のなす角 θ に関する検量線を重回帰分析によって作成する場合の問題点と対策を一連の光学モデルに基づいて追究した。いずれの波長においても、 θ が大きくなるにしたがって吸光度は減少するが、波長が長くなるほど表面粗さの影響を受けて吸光度にばらつきを生じる。また、 $45^\circ < \theta < 90^\circ$ では、試料から放射される正反射光成分が検出されてしまうため、 $\theta = 45^\circ$ 近傍を境界として、 θ に対する吸光度の変動が若干異なった傾向を示すようになる。近赤外分光法によって予測精度の高い θ の検量線を作成するためには、このような点に留意して試料母集団の特性を把握することが必要である。

13. 上記12の結果をふまえて、 θ に関する検量線を作成した(説明変量:1120nm)。 $0^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$ の試料母集団を対象にした検量線によって、測定試料の θ が 45° 以上であるか以下であるかをあらかじめ推定し、それぞれに対して検量線の偏回帰係数を求め直して θ を算出した。このような手順にしたがうと、 $SEP=3.87^\circ$ となり、評価用試料における実測値と予測値との相

関は 0.991 となった。このように、本法によって θ の予測が十分な精度で実施可能になることが明らかにされた。

1 4. 表面粗さの影響を回避して θ に関する予測精度の高い検量線を作成するためには、波長領域 I から説明変量を採用することが好ましい。また、表面粗さが θ の検量線に及ぼす影響は、 θ が占める範囲によって特徴的に変化することがわかった。これらの点を考慮して、試料母集団の実情に即した検量線を作成しなければいけない。

1 5. 表面粗さ (最大高さ; R_y) に関する検量線を重回帰分析によって作成する場合の問題点と対策を一連の光学モデルに基づいて追究した。広範な R_y に対する吸光度の動向を正しく把握するために、機械加工によって破壊された表層部を 2 層構造モデルによって表現し、一連の光学モデルに準拠して R_y が吸光度に及ぼす影響について検討した。 R_y と吸光度の関係は非線形であり、有意な検量線を作成するためには、 R_y の範囲を適当に分割して分析処理を行うことが重要な鍵となる。

1 6. 上記 15. の結果をふまえて、 R_y に関する検量線を作成し、本法によって R_y の予測が可能となることを明らかにした。また、ND フィルタを積分球底面に介在させて吸光度を測定し、これによって正反射光の影響を低減させるとともに、試料表面に近い部位から放射される光が反射光中に占める割合を高める試みも行った。フィルタがない通常の測定では、 $\theta < 65^\circ$ で有意な検量線が作成されやすく、また ND フィルタを用いた測定では、 $\theta \geq 55^\circ$ で有意な検量線になる。この結果は、測定試料の繊維走行を先に測定し、その結果に基づいて ND フィルタ使用の適否を判定したうえで、表面粗さに関する検量線を作成する必要があることを示唆している。

以上のように、本研究によって光学的プローブとしての近赤外分光法の特徴が実験的ならびに理論的に明らかにされ、本法を木材の新しい非破壊計測手法として活用できる基盤が確立された。

謝辞

本研究を遂行するにあたり、終始ご懇篤なるご指導とご鞭撻を賜った名古屋大学農学部 堤 成晃 教授に深甚なる謝意を捧げます。

また、本研究のとりまとめにあたり、周密なご指導を賜った名古屋大学農学部奥山 剛 教授、木村志郎 助教授、ならびに横地秀行 教官に深く感謝申し上げます。

さらに、本研究について有益なご助言を賜った愛媛大学農学部林 和男 教授に深く感謝申し上げますとともに、種々のご協力をいただいた名古屋大学農学部井上絹代 技官ならびに生物材料機械学講座の諸兄姉に厚くお礼申し上げます。

引用文献

- 1) 日本機械学会編：“機械工学便覧 基礎編 応用編”、丸善、B3-161 (1989).
- 2) 日本機械学会編：“計測法シリーズ3 非破壊計測技術”、朝倉書店、(1990).
- 3) 祖父江信夫：木材学会誌、**39**(9), 973-979 (1993).
- 4) Keylwerth, R.; Noack, D.: *Holz als Roh- und Werkstoff*, **14** 162-172 (1956).
- 5) Walters, E. O.: *Forest Product Journal*, **22**(2), 52-60 (1972).
- 6) James, W. L.: *Wood Science*, **13**(4), 185-195 (1981).
- 7) Forrer, J. B.: *Forest Product Journal*, **34**(7/8), 34-38 (1984).
- 8) 日本機械学会編：“湿度・水分計測と環境のモニタ”、技報堂出版、306-311 (1992).
- 9) 小玉牧夫：ウッドミック、**10**(4), 55-57 (1992).
- 10) Samson, M.: *Forest Product Journal*, **34**(7/8), 27-32 (1984).
- 11) Matthews, P. C.: *Proceedings of 2nd International Conference of Scanning Technology in Sawmilling*, XI-1-13 (1987).
- 12) 祖父江信夫、服部 貴：木材工業、**48**(1), 18-20 (1993).
- 13) Martin, P. et al: *Wood Science Technology*, **21**, 361-371 (1987).
- 14) 間宮真佐人：化学工業資料、**29**, 25-39 (1961).
- 15) Williams, P.; Norris, K. Ed.: “Near-Infrared Technology in the Agricultural and Food Industries”, American Association of Cereal Chemists, (1987).
- 16) Osborne, B.; Fearn, T.: “Near Infrared Spectroscopy in Food Analysis”, Longmann Scientific & Technical, (1988).
- 17) 三浦 剛、尾崎幸洋：化学工業、**41**(6), 506-514 (1990).
- 18) 尾崎幸洋、岩橋慎夫：現代化学、**12**, 36-42 (1992).
- 19) 岩元睦夫、河野澄夫、魚住 純：“近赤外分光法入門”、幸書房、(1994).
- 20) 河野澄夫：分光研究、**44**(5), 225-235 (1995).
- 21) 尾崎幸洋、河田 聡編：“日本分光学会 測定法シリーズ3 2 近赤外分光法”、学会出版センター、(1996).
- 22) 岩元睦夫：日本食品工業学会誌、**27**(9), 464-472 (1980).
- 23) Norris, K. H.; Williams, P. C.: *Cereal Chemistry*, **61**(2), 158-165 (1984).
- 24) Lanza, E.; Li, B. W.: *Journal of Food Science*, **49**, 995-998 (1984).
- 25) 岩元睦夫、魚住 純：日本食品工業学会誌、**32**(9), 685-695 (1985).
- 26) 小宮建作、飯田 裕：計測と制御、**27**(11), 993-997 (1988).
- 27) 三浦 剛：食品と科学、**9**, 101-108 (1988).
- 28) 宮本久美：食品流通技術、**24**, 60-64 (1995).
- 29) Ciurczak, E. W.: *Applied Spectroscopy Review*, **23**, 147-149 (1987).
- 30) 大屋 洋、永井真澄、澤田 実、金谷充清：分析化学、**37**, T128-132 (1988).
- 31) 本間忠一：“センサ実用事典”、フジ・テクノシステム、884-904 (1987).
- 32) Schultz, T. P.; Burns, D. A.: *Tappi Journal*, **5**, 209-212 (1990).
- 33) Borga, P.; Hämäläinen, M.; Theander, O.: *Holzforschung*, **46**(4), 299-303 (1992).
- 34) Tsuchikawa, S.; Hayashi, K.; Tsutsumi, S.: *Mokuzai Gakkaishi*, **37**(8), 758-760 (1991).
- 35) Kniest, C.: *Holz als Roh- und Werkstoff*, **50**, 73-78 (1992).
- 36) Hoffmeyer, P.; Pedersen, J. G.: *Holz als Roh- und Werkstoff*, **53**, 165-170 (1995).
- 37) Dull, G. G.: *Journal Food Protection*, **41**, 50-53 (1978).
- 38) Weyer, L. G.: *Journal of Applied Polymer Science*, **31**, 2417-2431 (1986).
- 39) Ghosh, S.; Cannon, M. D.; Roy, R. B., *Textile Research Journal*, **60**, 167-174 (1990).
- 40) Rohrbach, B. G.: *Trends in Analytical Chemistry*, **10**, 269-275 (1991).
- 41) Ben-Dor, E.; Banin, A.: *Soil Science Society of America Journal*, **59**, 364-372 (1995).
- 42) Drennen, J. K.; Lodder, R. A.: *Journal of Pharmaceutical Science*, **79**, 62-66 (1990).
- 43) Kubelka, P.; Munk, F.: *Zeitschrift für technische Physik*, **12**, 593-601 (1931).
- 44) Kubelka, P.: *Journal of the Optical Society of America*, **38**(5), 448-457 (1948).

- 45) 間宮真佐人：分光研究、**25**(2), 99-117 (1976).
- 46) 柴田和雄：“日本分光学会 測定法シリーズ4 微小スペクトル変化の測定”、学会出版センター、3-9 (1996).
- 47) 林 和男、木村志郎、野村美里：木材学会誌、**37**(3), 185-190 (1981).
- 48) Birth, G. S.: *Journal of Food Science*, **43**, 916-925 (1978).
- 49) Browne, F. L.; Simonson, H. C.: *Forest Product Journal*, **7**(10), 308-314 (1957).
- 50) 松浦邦男、上谷芳昭：日本建築学会計画系論文報告集、**388**, 15-22 (1988).
- 51) Kortüm, G.: “Reflectance Spectroscopy”, Springer-Verlag, 5-13 (1969).
- 52) Michell, A., J.; Garland, C. P.; Nelson, P., J.; *Journal of Wood Chemistry & Technology*, **9**, 85-103 (1989).
- 53) Zavarin, E.; Jones, S., J.; Cool, L., G.; *Journal of Wood Chemistry & Technology*, **10**(4), 495-513 (1990).
- 54) Zavarin, E.; Cool, L., G.; Jones, S., J.; *Journal of Wood Chemistry & Technology*, **11**(1), 41-56 (1990).
- 55) Michell, A., J.: *Journal of Wood Chemistry & Technology*, **11**, 33-40 (1991).
- 56) Evans, P. D.; Michell, A., J.; Schmalzl, K., J.: *Wood Science & Technology*, **26**, 151-163 (1992).
- 57) Michell, A., J.: *Wood Science & Technology*, **27**, 69-80 (1993).
- 58) Kortüm, G.: “Reflectance Spectroscopy”, Springer-Verlag, 25-33 (1969).
- 59) 大谷義彦：“大学課程 照明光学”、オーム社、6 (1992).
- 60) Phong, B. T.: *ACM. Siggraph Computer Graphics*, **13**(6), 311-317 (1975).
- 61) Butler, W. L.: *Journal of the Optical Society of America*, **52**(3), 292-299 (1962).
- 62) Hecht, H. G.: *Journal of Research of the National Bureau of Standards-A. Physics and Chemistry*, **80A**(4), 567-583 (1976).

報文目録

1. Tsuchikawa, S; Hayashi, K; Tsutsumi, S.: “Application of Near-Infrared Spectrophotometry to the Determination of Fiber Orientation and Moisture Content of Wood”, *Mokuzai Gakkaishi*, **37**(8), 758-760 (1991).
2. 土川 覚、林 和男、堤 成晃：「近赤外分光法による木材の非破壊計測（第1報） 試料表面構造の影響」、木材学会誌、**38**(2), 128-136 (1992).
3. 土川 覚、堤 成晃：「近赤外分光法による木材の非破壊計測（第2報） 近赤外照射光の仮道管群における挙動と拡散反射・透過指向特性」、木材学会誌、**42**(4), 343-353 (1996).
4. 土川 覚、堤 成晃：「近赤外分光法による木材の非破壊計測（第3報） 平行入射光に関する反射光および透過光の挙動」、木材学会誌、**42**(8), 733-742 (1996).
5. 土川 覚、鳥居美里、堤 成晃：「近赤外分光法による木材の非破壊計測（第4報） 含有水分に関する検量線」、木材学会誌、**42**(8), 743-754 (1996).
6. Tsuchikawa, S.; Hayashi, K.; Tsutsumi, S.: “Nondestructive Measurement of the Subsurface Structure of Biological Material Having Cellular Structure by Using Near-Infrared Spectroscopy”, *Applied Spectroscopy*, **50**(9), 1117-1124 (1996).
7. 土川 覚、堤 成晃：「近赤外分光法による木材の非破壊計測（第5報） 試料の物理的構成に関する情報の検量線」、木材学会誌、**43**(2), (1997). —掲載予定—

参考論文目録

1. 横地秀行、土川 覚、木村志郎：「回転丸のこの振動特性（第1報） 前進波と後進波の振幅の相違」、木材学会誌、**34**(6), 491-499 (1988).
2. 土川 覚、横地秀行、木村志郎：「回転丸のこの振動特性（第2報） Lock-in 現象」、木材学会誌、**35**(4), 306-312 (1989).
3. 横地秀行、土川 覚、木村志郎：「鋸歯モデルを有する円板の振動特性および円板周縁まわりの流れ特性（第1報） 鋸歯モデルを四角柱とした場合のその間隔と幅の比」、木材学会誌、**36**(11), 936-943 (1990).
4. Tsuchikawa, S; Hayashi, K; Tsutsumi, S.: "Application of NIRS to Wood", Making Light Work: Advances in Near infrared Spectroscopy, VCH, 569-576 (1992).
5. 横地秀行、土川 覚、木村志郎：「回転丸のこの振動特性（第3報） 非線形振動および連成振動について」、木材学会誌、**39**(7), 776-782 (1993).
6. 横地秀行、土川 覚、木村志郎：「回転丸のこの振動特性（第4報） 共振振動数の非線形性について」、木材学会誌、**39**(7), 783-787 (1993).
7. 横地秀行、木村志郎、土川 覚：「回転丸のこの振動特性（第5報） 歯数およびスリットの振動振幅、放射音への影響」、木材学会誌、**40**(2), 148-157 (1994).