

## ファイルの説明

**1-17.txt** ⇒ 測定直後のオリジナルスペクトル(17 サンプル×3 回)

ハロゲンランプ C11708M 7.2V(単4×6 本)仕様の測定器で、積算時間 100ms でマアジ干物サンプルを測定

**1-17.csv** ⇒ 1-17.txt をエクセルで読み込み、csv 形式に変換したファイル

**wave\_data.xls** ⇒ 分光器ユニットに添付されていた波長校正データ(全 256 チャンネル)

**count\_graph.ppt** ⇒ 1-17.csv と wave\_data.xls のデータからオリジナルスペクトルデータをグラフ化

**w20.csv** ⇒ 白色校正板測定データ(20ms 測定)とそのダークデータ

ダークデータとは、黒色校正であり、例えばランプ点灯しないで白色校正板を測定したものなど

1 行目にはダークデータが 256 チャンネル分貼り付けてある(すべて同じ値)

2 行目には実際にランプを点灯して白色校正板を測定したデータが貼り付けられている

白色校正板測定は、100ms では 4000 カウントを超えるため積算時間 20ms で測定

**chem.xls** ⇒ オリジナル化学分析値データ 17 サンプル分

**chem3.csv** ⇒ 化学分析データ 17 サンプル分のデータが 3 個ずつ(スペクトル測定が 3 回繰り返すため)

**D2\_1-17.csv** ⇒ FITSS アプリケーションにより、1-17.csv ファイルを 2 次微分スペクトル変換したファイル

変換時のスペクトル数は、17×3 回で、51 スペクトルを指定する

ダークとホワイトデータ読み込み時には、w20.csv ファイルを指定する

**D2\_graph.ppt** ⇒ D2\_1-17.csv と wave\_data.xls のデータから 2 次微分スペクトルデータをグラフ化

**01\_mlr.csv** ⇒ FITSS 重回帰分析メニューから、D2\_1-17.csv ファイルを用いて、重回帰分析の第 1 波長の計算結果を出力したファイル

number of spectrum(スペクトル数)は、51 個を指定する

number of wavelength(波長数)は、256 波長を指定する(重回帰分析の第 1 波長の計算時)

データファイルは、D2\_1-17.csv を指定する(重回帰分析の第 1 波長の計算時)

化学分析値データファイルは、chem3.csv を指定する(重回帰分析の第 1 波長の計算時)

01\_mlr.csv ファイルのシート中の第 1 行目の「No.」は、ピクセル No. を示す。プログラム変数の都合上波長チャンネルを指定する場合、短波長側から 0、1、2、……255 となり、第 2 行目に示すように最初のピクセル No. は 0 から始まる

k(0)は、回帰式の定数項

k(1)は、256 チャンネルそれぞれの波長を変数とした場合に波長の吸光度 2 次微分値に乗する係数値

今回は、第 1 変数のみを求めたので k(2)から k(4)は空欄となる

SEC は、それぞれの単回帰式により計算された化学分析値と推定値のあいだの誤差標準偏差

R は、colleration coefficient(相関係数)

**R(01)\_graph.ppt** ⇒ 01\_mllr.csv の相関係数 R と wave\_data.xls のデータから相関スペクトルデータをグラフ化

0-950nm には、化学分析値(脂肪含量)との強い正の相関が認められ、これは油の吸収バンド(926nm)に由来するものである

950-980nm には、化学分析値と強い負の相関が認められ、これは、970nm における水の吸収バンドによるものであり、魚肉中の脂肪と水分のあいだには負の相関関係があるためである

**01\_mlr.xls** ⇒ D2\_graph.ppt と R(01)\_graph.ppt を参考にして、01\_mlr.csv のシートに最適な第 1 波長候補

をピンク色で塗りつぶして EXCEL ファイルとした

pix No. は 143、相関係数は-0.90273(2 次微分スペクトルにおいて、油の吸収が強いとピークは負の方向に現れるので、相関係数は-(マイナス) となり、見かけ上は逆相関となる

**02\_mlr.csv** ⇒ FITSS 重回帰分析メニューから、D2\_1-17.csv ファイルを用いて、重回帰分析の第 2 波長の計算結果を出力したファイル

number of spectrum(スペクトル数)は、51 個を指定する (重回帰分析の第 2 波長の計算時)

number of wavelength(波長数)は、256 波長を指定する (重回帰分析の第 2 波長の計算時)

データファイルは、D2\_1-17.csv を指定する (重回帰分析の第 2 波長の計算時)

化学分析値データファイルは、chem3.csv を指定する (重回帰分析の第 2 波長の計算時)

固定波長は 01\_mlr.xls ファイルの結果から No. 143 を指定 (重回帰分析の第 2 波長の計算時)

**R(02)\_graph.ppt** ⇒ 02\_mlr.csv の重相関係数 R と wave\_data.xls のデータから相関スペクトルデータをグラフ化

このグラフは、第 1 波長である pix No. 143 と各波長を用いた 2 波長重回帰式の結果である

グラフでは、1000nm 以上の領域で高い相関が現れているが、これらの領域は今回使用した分光器では感度が悪く、またスペクトル変換による無効領域も含まれるため除外して、900nm 付近を第 2 波長として選択する

**02\_mlr.xls** ⇒ R(D2)\_graph.ppt を参考にして、02\_mlr.csv のシートに最適な第 1 波長候補としてピンク色で塗りつぶして EXCEL ファイルとした

2 波長重回帰検量線の作成結果は、ピンク色で塗りつぶしたとおり、pix No. 143 と pix No. 139 からなる検量線であった (pix No. 143 は、固定波長として、ダイアログボックスに指定した pix No.)

今回作成した検量線は、推定値(Y)=17.932+(pix No. 143 の吸光度 2 次微分値×-2342.38994)+(pix No. 139 の吸光度 2 次微分値×2461.275)であり、重相関係数は 0.9208、SEC=1.37%

薄黄色で塗りつぶしたセル範囲は、第 1 波長選択時の情報(固定波長として、ダイアログボックスに指定した pix No.)であり k(2)には 0 が埋め込まれ無効となる

**plot.ppt** ⇒ 2 波長検量から計算した推定値と化学分析値の関係の散布図

上記した 2 波長検量線を参考にして、D2\_1-17.csv ファイルに含まれている所定の 2 次微分スペクトルデータから、各サンプルの脂肪含量推定値を計算して、実際の化学分析値である chem.xls または chem3.csv のデータを用いて作図する