

信号強度から反射率への変換

サンプル測定時の信号を SS、サンプル測定時のダークを SD、白色校正板の測定データを WS、白色校正板のダークを WD として、以下のように計算される。

$$\text{透過率} = (\text{SS} - \text{SD}) / (\text{WS} - \text{WD})$$

後述するスムージング処理は、透過率(反射率)、吸光度、吸光度 1 次微分、吸光度 2 次微分、透過率、透過率 1 次微分、透過率 2 次微分のそれぞれの過程で計算することができるが、FITSS では透過率(反射率)の時点において計算されたスムージングの後にその後のスペクトル処理を行う。

スムージング処理におけるアルゴリズム

FITSS では、スムージング処理は反射率の段階で計算される。吸光度を出力する際には、信号強度から反射率が計算され、その時に設定されたスムージングの条件により処理が行われる。そして、その後吸光度が計算されて、見かけ上スムージング処理された吸光度が出力される。ここで、吸光度の段階でスムージング処理の計算を行う場合と、反射率の段階でスムージング処理を行ってから吸光度を計算する場合では、計算結果が異なるので注意が必要である。

スムージング処理の計算は次のとおりである。カレントチャンネルに対して ($N/2$) (N はスムージング処理に設定した整数) チャンネル分の左右のチャンネルとカレントチャンネルのすべてを合計した平均を計算する。つまり、スムージング 2 では自身と左右 1 チャンネルずつの 3 チャンネルの平均値、スムージング 4 では自身と左右 2 チャンネルずつの合計 5 チャンネルの平均値、…となる。したがって、左右の端波長のチャンネルでは計算できない部分が生じる。その部分には、左右で最も端の有効数字が埋め込まれる。例えば、ここでは、最短波長を 588nm、その 1 チャンネル長い波長を 590nm として全チャンネルを 2 チャンネル単位で分割して 256 チャンネルとすると、最長波長は 1098nm、その 1 チャンネル短い波長を 1096nm とする。スムージング 2 では最短波長 588nm と 1098nm は計算できないので、そこにはそれぞれ隣の波長の 590nm と 1096nm の値が埋め込まれる。スムージング 4 では 588nm と 590nm、1098nm と 1096nm が計算できないので、それぞれ最左 2 チャンネル分には 592nm の数値が、最右 2 チャンネル分には 1096nm の値が埋め込まれる。これら埋め込まれた数字は、吸光度への計算、さらに 1 次微分、2 次微分でも有効な数字として計算されていく。

反射率から吸光度への変換

本測定法は拡散反射法であるため、本来はクベルカームンク関数により吸光度を計算するべきであるが、一般的に（線形近似とみなして）反射率から求められるランバートベールの法則により吸光度が計算されている。R を反射率とすると以下のように計算される。

$$\text{吸光度} = \text{Log} (1/R)$$

反射率や吸光度からの微分処理

微分処理の段階ではスムージングは行われず、セグメントとギャップサイズの指定みが有効な引数となる。つまり、反射率のスムージング計算数値が反映され、これにより処理される。以下にギャップサイズ 0 指定でのアルゴリズムを説明する。

1 次微分処理

以下のルールで反射率や吸光度データから計算される。セグメントを N とする。

カレントチャンネルの 1 次微分計算結果 = (カレントチャンネルの (N セグメント / 2) チャンネル前 (前とは自身よりも短波長側を示す) の数値) - (カレントチャンネルの数値) となるが、この場合の数値とはスムージング処理された反射率や吸光度である。例えば、セグメント 14 では 602nm のチャンネルにおける計算結果は、以下のように計算される。

$$(588\text{nm} \text{ の吸光度}) - (602\text{nm} \text{ の吸光度}) = (602\text{nm} \text{ の 1 次微分値})$$

つまり、この場合は 590nm から 600nm の間のチャンネルには 1 次微分計算の結果が存在しない。

上記計算により 1 次微分の計算結果が得られる。しかし、最も左側の波長ではカレントチャンネルの (N セグメント / 2) チャンネル前のチャンネルの中の値が存在しないため計算できない。この部分については計算を行わず、その範囲の中で最も長波長側の有効数値、つまりセグメント 2 では、590nm、セグメント 4 では 592nm、…セグメント 14 では 602nm の 1 次微分計算結果が埋め込まれる。

2 次微分処理

1 次微分処理により計算された数値から 2 次微分計算が行われる。2 次微分では 1 次微分の数値を元に以下の

ように計算される。つまり、2次微分における計算は1次微分とは全く反対側のデータを参照しながら引き算を実施する。

カレントチャンネルの2次微分計算結果 = (カレントチャンネルの数値) - (カレントチャンネルの (N セグメント / 2) チャンネルうしろの (うしろとは自身よりも長波長側を示す) の数値)

しかし、最も長波長側の波長ではカレントチャンネルの (N セグメント / 2) チャンネルうしろのチャンネルが存在しないため計算できない。この部分については計算を行わず、もっとも長波長側の有効数値、つまりセグメント 2 では、1096nm、セグメント 4 では 1094nm … セグメント 14 では 1084nm の 2 次微分計算結果が埋め込まれる。また、これとは逆に、もっとも左側波長ではすべてがこの 2 次微分のアルゴリズムにより計算可能となるが、これらのチャンネルも 1 次微分の時と同じルールで意図的に同一数字が埋め込まれる。したがって、2 次微分処理後の最左と最右の波長の数値は、見かけ上、同じチャンネル数が同一数字として並ぶ。

有効チャンネルについて

1 次微分では、微分処理を行うと、左側波長（短波長側）ではスムージング処理による左側波長の無効化と微分処理による引き算のための波長無効化の両方の影響を受ける。したがって、以下のように左側波長では計算が正しく行われない（有効な微分計算が行われない）。さらに 2 次微分を行うと同様に右側でも同じ現象が発生する。その範囲は以下のとおりである。

例えば、スムージング 30 ギャップサイズ 0 指定 セグメント 30 の場合では、左右からそれぞれ 30 チャンネルずつが無効となる。

以下の表のとおり（ギャップサイズはすべて 0）なお、スムージング 0 ではどのセグメントでも影響は出ない。

スムージング	セグメント	左右の無効チャネル数	スムージング	セグメント	左右の無効チャネル	スムージング	セグメント	左右の無効チャネル
2	30	16	12	30	21	22	30	26
2	28	15	12	28	20	22	28	25
2	26	14	12	26	19	22	26	24
2	24	13	12	24	18	22	24	23
2	22	12	12	22	17	22	22	22
2	20	11	12	20	16	22	20	21
2	18	10	12	18	15	22	18	20
2	16	9	12	16	14	22	16	19
2	14	8	12	14	13	22	14	18
2	12	7	12	12	12	22	12	17
2	10	6	12	10	11	22	10	16
2	8	5	12	8	10	22	8	15
2	6	4	12	6	9	22	6	14
2	4	3	12	4	8	22	4	13
2	2	2	12	2	7	22	2	12
4	30	17	14	30	22	24	30	27
4	28	16	14	28	21	24	28	26
4	26	15	14	26	20	24	26	25
4	24	14	14	24	19	24	24	24
4	22	13	14	22	18	24	22	23
4	20	12	14	20	17	24	20	22
4	18	11	14	18	16	24	18	21
4	16	10	14	16	15	24	16	20
4	14	9	14	14	14	24	14	19
4	12	8	14	12	13	24	12	18
4	10	7	14	10	12	24	10	17
4	8	6	14	8	11	24	8	16
4	6	5	14	6	10	24	6	15
4	4	4	14	4	9	24	4	14
4	2	3	14	2	8	24	2	13
6	30	18	16	30	23	26	30	28
6	28	17	16	28	22	26	28	27
6	26	16	16	26	21	26	26	26
6	24	15	16	24	20	26	24	25
6	22	14	16	22	19	26	22	24
6	20	13	16	20	18	26	20	23
6	18	12	16	18	17	26	18	22
6	16	11	16	16	16	26	16	21
6	14	10	16	14	15	26	14	20
6	12	9	16	12	14	26	12	19
6	10	8	16	10	13	26	10	18
6	8	7	16	8	12	26	8	17
6	6	6	16	6	11	26	6	16
6	4	5	16	4	10	26	4	15
6	2	4	16	2	9	26	2	14
8	30	19	18	30	24	28	30	29
8	28	18	18	28	23	28	28	28
8	26	17	18	26	22	28	26	27
8	24	16	18	24	21	28	24	26
8	22	15	18	22	20	28	22	25
8	20	14	18	20	19	28	20	24
8	18	13	18	18	18	28	18	23
8	16	12	18	16	17	28	16	22
8	14	11	18	14	16	28	14	21
8	12	10	18	12	15	28	12	20
8	10	9	18	10	14	28	10	19
8	8	8	18	8	13	28	8	18
8	6	7	18	6	12	28	6	17
8	4	6	18	4	11	28	4	16
8	2	5	18	2	10	28	2	15
10	30	20	20	30	25	30	30	30
10	28	19	20	28	24	30	28	29
10	26	18	20	26	23	30	26	28
10	24	17	20	24	22	30	24	27
10	22	16	20	22	21	30	22	26
10	20	15	20	20	20	30	20	25
10	18	14	20	18	19	30	18	24
10	16	13	20	16	18	30	16	23
10	14	12	20	14	17	30	14	22
10	12	11	20	12	16	30	12	21
10	10	10	20	10	15	30	10	20
10	8	9	20	8	14	30	8	19
10	6	8	20	6	13	30	6	18
10	4	7	20	4	12	30	4	17
10	2	6	20	2	11	30	2	16