

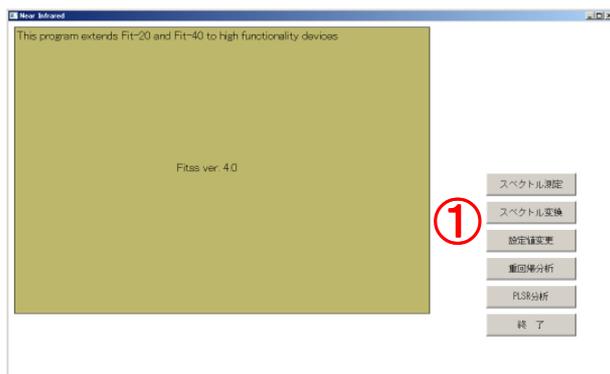
スペクトル測定

- ・ FITSSプログラムを起動する前に、測定器とパソコンをケーブルで接続してください。接続には、以下のケーブル等が必要になります。

1. ステレオピンジャック(オス)とシリアル9ピン(メス)から構成されるケーブル

2. USBシリアル変換ケーブルまたはコネクタ

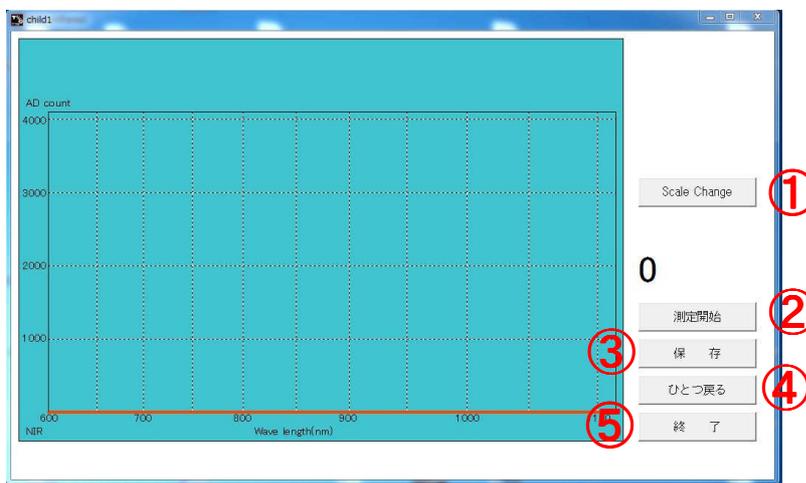
- ・ USBシリアル変換ケーブル等には、使用に際してドライバーをインストールしてください。



- ・ メインメニューから「スペクトル測定」ボタンをクリックします。カレントウインドウになっていない場合は、もう一度「スペクトル測定」ボタンをクリックしてください。



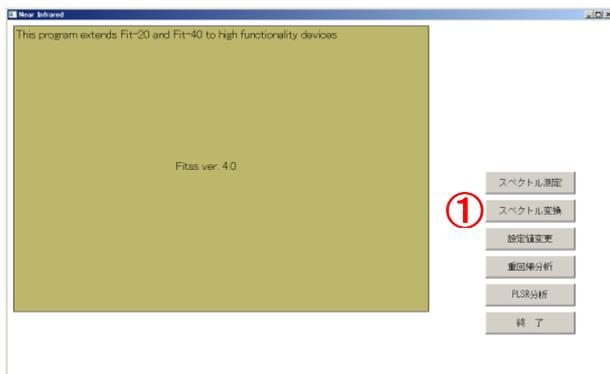
- ・ comport番号を選択するダイアログボックスが表示されますので、USBシリアル変換ケーブルが接続されているUSBポートのcomport番号(ラジオボタン)を選択してください。comport番号は、使用しているパソコンのデバイスマネージャーで確認してください。



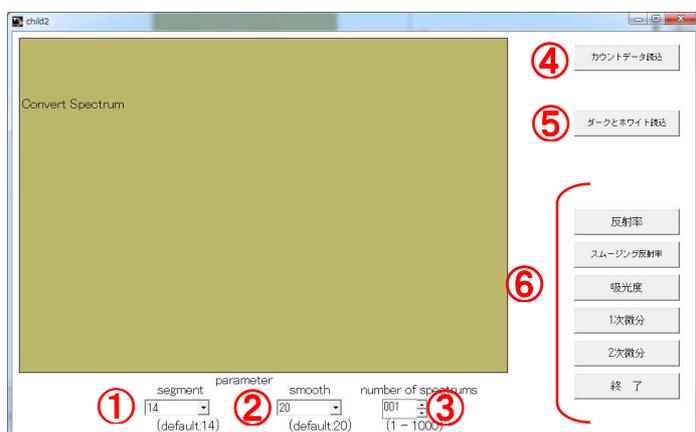
- ①Scale Change (波長軸のスケールを変更する) 測定器に搭載される分光器ユニットは、大きく分けてvisible type(可視領域)とnir type(近赤外を含む領域)の2種類があります。分光器ユニットに応じて切り替えてください。ただし、波長は分光器により異なるため、この画面意表示される波長は大まかなものです。
- ②測定開始 スペクトル測定を始める場合は、ここをクリックしてから測定器での操作を行ってください。赤線グラフが最後に測定されたスペクトル、青線グラフがそれ以前に測定されたスペクトルの結果を示します。なお、測定器で使用しているADコンバーターは0-4096の値を取りますので、スペクトルデータとしてそれ以上となった場合は、そのスペクトルは友好ではありません。
- ③保存 測定したスペクトルデータを保存する場合は、ここをクリックしてデータを保存してください。データはコンマ区切り(,)の.txt型式で保存されます。測定の途中でエラーが発生すると、保存していないデータは消えてしまいますので、こまめな保存をお勧めします。
- ④一つ戻る スペクトル測定操作を誤った場合等、現在のスペクトル(赤いグラフ)を破棄した場合は、このボタンをクリックしてください。1 スペクトル分前に戻ります。
- ⑤終了 スペクトル取得操作を終了する場合はクリックしてください。
- その他注意事項 スペクトル測定操作を終了した場合や途中でエラーが発生した場合は、FITSSを完全に終了して、再度起動してください。それまでの測定データ等がメモリーに残っているため、スペクトル測定操作が正常に行えません。
- EXCELで保存したスペクトルデータを確認やCSVファイルに変換する場合は以下の手順で行ってください。

EXCELを起動 ⇒ ファイルを開く ⇒ ファイルの種類をすべてのファイル(*.*)に指定する ⇒ 所定のデータ(.txt)ファイルを開く ⇒ テキストファイルウィザード1/3で、「カンマやタブなどの区切られた文字…」を選択する。
 ⇒ テキストファイルウィザード2/3で、カンマをチェックする ⇒ 次へ
 ⇒ 完了 ⇒ ファイルが開かれる ⇒ ファイル ⇒ 名前をつけて保存
 ⇒ CSV(カンマ区切り) (*.csv)を選択 ⇒ 保存

スペクトル変換



- ①メインメニューから「スペクトル変換」ボタンをクリックします。カレントウインドウになっていない場合は、もう一度「スペクトル変換」ボタンをクリックしてください。



- スペクトル変換ウインドウが開きます。
- ①parameter segment (セグメントサイズ) を設定します。セグメントは、2次微分処理する際に、自身のチャンネルから離れるチャンネルの距離をチャンネル単位で設定します。1次微分処理の時は自身よりも短波長側が2次微分処理の時は自身よりも長波長側がこの値により計算されます。初期値としてsegment 14が入力されています。これは、1次微分処理の時は自身よりも短波長側へ7チャンネル、2次微分処理の時は自身よりも長波長側へ7チャンネル分の計算が行われることを示しています。この設定を変える場合は変更してください。なお、この設定は、反射率、スムージング、吸光度の計算には影響されません。
- ②parameter smooth (スムージングサイズ) を設定します。反射率から吸光度に変換する際に、この設定値(チャンネル数)で移動平均処理が行われます。初期値は20チャンネルです(自身のチャンネルに対して短波長側へ10チャンネル、長波長側へ10チャンネルの処理)。
- ③number of spectrum(スペクトル数)ファイルから読み込んで計算処理するスペ

クトル数を入力します。スペクトルデータは、測定時にランプ点灯時測定したデータ(256個)と消灯時のサンプルダークデータ(256個)の一組で1スペクトルとしてください。

- ④カウントデータ読み込み ファイルを読み込むウインドウが開きます。スペクトル変換に用いるデータ、つまり測定器とパソコンを接続してFITTSアプリケーションにより保存した12ビットカウントデータ(サンプルデータであり、ADコンバータにより変換した0-4096の値となるRAWデータであり、csv形式のデータファイル)を指定してください。スペクトル測定により保存したデータファイルはtxtファイルなっていますので、それをエクセル等で読み込んで、保存する時にcsv形式を指定して出力してください。1行目は256個のダークデータ、2行目は光源点灯時のサンプルデータとして、この2行で1つのスペクトルデータとなります。以下に、エクセルで読み込んだCSVファイルの事例を示します。

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L		M	N	O	P
1	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958
2	927	927	927	927	927	927	927	927	927	927	927	927	927	927	927	927	927
3	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958
4	916	916	916	916	916	916	916	916	916	916	916	916	916	916	916	916	916
5	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958
6	973	990	1021	1077	1134	1190	1247	1294	1350	1397	1453	1499	1499	1499	1499	1499	1499
7	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958
8	934	901	1003	1060	1143	1195	1246	1293	1335	1375	1413	1451	1451	1451	1451	1451	1451
9	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958
10	926	891	990	973	952	932	1001	1057	1092	1084	1106	1125	1125	1125	1125	1125	1125
11	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958
12	885	897	931	957	1004	1039	1072	1101	1130	1154	1178	1205	1205	1205	1205	1205	1205
13	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958	958

- ⑤ダークとホワイト読み込み 測定器のEEPROMに保存されている白色校正板データと同一のデータをcsvファイルとして作成して読み込みます。また、同一ファイルの中に、ダークデータ(光源を点灯しないで白色校正板を測定したデータ)も含めます。測定器のEEPROMの中の白色校正板ダークデータは、一つの値として保存されていますので、この値を256チャンネル分に引き伸ばします。エクセルシートで説明すると1行目は引き伸ばした256チャンネル分のダークデータ、2行目は白色校正データとなります。エクセルシートでの事例を以下に示します。

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P
1	657	657	657	657	657	657	657	657	657	657	657	657	657	657	657	657
2	946	946	946	946	946	946	946	946	946	946	946	946	946	946	946	946
3																
4																

- ⑥各スペクトルに変換 「反射率」、「スムージング反射率」、「吸光度」、「1次微分」、「2次微分」のボタンをクリックすると、それぞれに変換されたスペクトルがcsv形式で保存されます。測定器本体及びFITSSアプリケーションでは、AD変換されたデータは、このボタンの順番で上から下へ変換されていきます。

設定値変更画面

このメニュー画面では、本体のEEPROMに保存されている環境設定データなどを変更できます。内臓されているEEPROMを書き換える場合は、ケースの蓋を開ける必要があります。また、書き換えにはPICKit2またはPICKit3の製品本体が必要であり、製品に付属するソフトウェアとドライバーのインストールも求められます。

この画面での設定変更の操作及びPickit2による書き込みによる一連の操作は、測定器本体のEEPROMを上書きします。そのため、事前にPICKit2プログラマ(図1)等を用いて、事前に現在のEEPROMのデータを読み出して保存しておいてください。



図1 Pickit2プログラマ

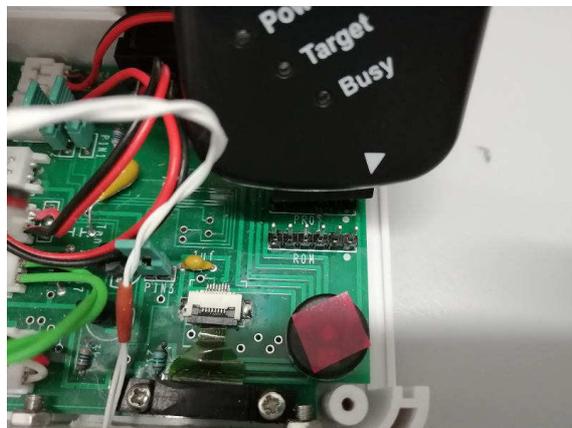


図2 ポジションマークをあわせる

測定器本体からEEPROMデータの読み出す

Pickit2を用いて測定器本体からEEPROMデータの読み出す方法は以下のとおりです。

ケースの裏蓋を開けて、2つの6ピンコネクタが確認できるようにします。このうち、ROMと記載のある6ピンを使用します。基板のポジションマークとPICKit2プログラマのマークをあわせて(図2)、6ピンにプログラマを差し込みます。この時にプログラマと測定器本体や他の部品が緩衝するようであれば、付属の6ピンアダプタを装着して下さい。

Pickit2アプリケーションソフトを起動させて、メニューバーDevice FamilyからEEPROM→24LCを選択します。さらに、その下のEEPROMS/24LC ConfigurationのDeviceをクリックして24LC256を選択します。接続されたEEPROMを認識しないようであれば、メニューバーのTOOL→Check Communicationから再度認識を試みてください。ウインドウ中央やや上部にあるReadボタンを押して、EEPROM内のデータを読み出します。緑色のバーが右へ延びて読み出しが完了します。次に上部メニューバーのFile→Export Hexにて、読み出したデータをパソコン内へファイルとして保存します。この時にファイル名として、例えば「読み出しデータ」等とファイル名を分かりやすい名前にしてください。この時のファイルの拡張子は、.hexとなります。ファイルの中身は16進数の文字列ですが、メモ帳などでも開くことができます。

測定器本体へEEPROMデータを書き込む

Pickit2プログラマを用いて測定器本体へEEPROMデータを書き込む方法は以下のとおりです。

上記のEEPROMデータの読み出し方法と同様に6ピンにPICKit2プログラマを接続して、PICKit2の書き込みアプリケーションソフトを起動します。書き込む場合は、事前に測定器本体の基板上的ジャンパーピン「PIN1、PIN2」(図3)を抜いて外しておいてください。

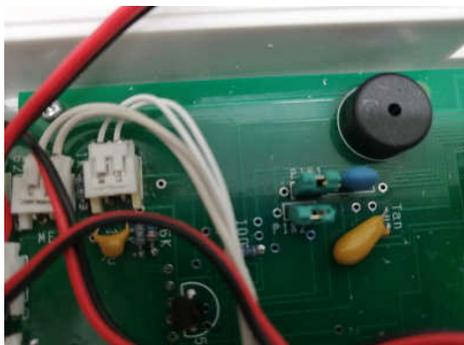


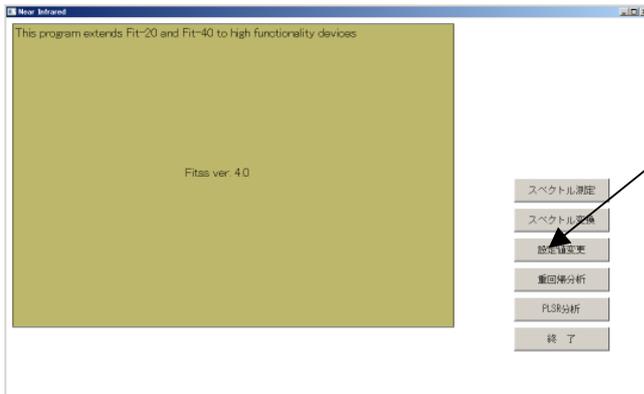
図3 「PIN1、PIN2

Pickit2アプリケーションソフトのメニューバーDevice FamilyからEEPROM→24LCを選択します。さらに、その下のEEPROMS/24LC ConfigurationのDeviceをクリックして24LC256を選択します。接続されたEEPROMを認識しないようであれば、メニューバーのTOOL→Check Communicationから再度認識を試みてください。上部メニューバーのFile→Import Hexにて、書き込みたいデータファイルを指定してPickit2アプリケーションソフトに取り込みます。なお、EEPROMデータファイルの拡張子は、.hexになっています。ウインドウ中央やや上部にあるWriteボタンを押して、測定器のEEPROMにデータを書き込みます。緑色のバーが右へ延びて読み出しを完了します。書き込み終了後、測定器FIT-20などで測定を行う場合は、基板上的のジャ

ンパーピン「PIN1、PIN2」を差し戻してください。

設定値の変更操作について

設定値変更(図X)とは、FITシリーズのデバイスの各種設定値を変更する操作であり、内部基盤のEEPROMのデータを書き換えます。メインメニューから「設定値変更」ボタンをクリックします。カレントウインドウになっていない場合は、もう一度「設定値変更」ボタンをクリックしてください。その後、「設定変更」ウインドウ(図X)が開きます。



図X メインメニュー



図X 設定値変更ウインドウ

このウインドウは、「LCDキャラクター表示変更」、「LCDデータ表示変更」、「スリープモード変更」、「再測定カウント変更」、「ホワイトデータ変更」、「ダークデータ変更」、「積算式変更」、「RS232転送モード変更」、「積算時間変更」の9個の変更ボタンと、「ファイルを開く」、「ファイルを保存」の2つのファイル操作ボタンと、その他「セーブデータ確認」ボタンで構成されています。

このうち9個の変更ボタンを操作する場合は、まず最初に「ファイルを開く」ボタンを押して測定器本体から読み出したEEPROMデータファイル(.hexファイル)を開きます。その後、各種変更ボタンにより設定値を変更して、最後に「ファイル保存」ボタンで修正後のファイルを保存してください。

「LCDキャラクター表示変更」ボタン

上から2番目のボタン「LCDデータ表示変更」ボタンを使用して、測定器本体のLCD(小型液晶)に「一般ユーザーモード」として表示させた時に、この「LCDキャラクター表示変更」によりLCDの1行目に魚種名や成分名を半角英数字カタカナで表示させることができます。10文字以内で入力してください。

「LCD(本体測定器の液晶パネル)データ表示変更」ボタン

測定毎に本体LCDに表示させるデータの種類を選択します。3種類のモードから選択できます。

- 1:試験測定モード** 測定毎に測定したサンプル256チャンネルのうち代表的な6チャンネルの12ビットカウントデータを表示します。カウントデータとは分光器が出力した電荷をADコンバーターで変換した数値であり、数字が大きいほど多くの光が戻ってきていることを示します。12ビットデータなので、変換される数値は0から4095までの値となります。LCDの上段に3個、下段に3個のデータが表示され、それぞれ左上から、pix1、pix50、pix100、pix150、pix200、pix250のデータを表示します。pixとはピクセルのことであり、分光器から出力されるデータは、1回の測定毎に短波長側からpix1～256までの256個のデータとなります。各ピクセルの正確な波長はそれぞれの分光器により異なりますが、pix1～256ではおよそ640-1060nmの範囲となります。
- 2:一般ユーザーモード** 最終的に脂肪含量を推定する検量線が作成された時には、この表示モードにより測定を繰り返します。作成された検量線を本体に保存した場合、測定により得られたスペクトル情報から、脂肪含量を計算してLCDに%表示されます。なお、LCD上段には、「LCDキャラクター表示変更ボタン」で設定したキャラクター文字が表示されます。また、この測定器は所定の積算時間で測定した時に各ピクセルのカウントデータが4095以上になった場合(光飽和した場合)に、所定の積算時間を半分にして再測定を自動的にを行います。毎回の測定毎にその繰り返し測定が行われたか否かについて、数字として1または2が末尾に表示されます。1は繰り返し測定なし、2は繰り返し測定ありです。

3:検量線作成用サンプル測定モード パソコンと測定器本体を接続してFITSSスペクトル測定モードにした場合、測定毎に測定したスペクトルを観察できますが、他のターミナルソフトを使用してパソコンと接続した場合などでもこのモードを選択することにより、LCDに表示された情報から測定したスペクトルの強度を大まかに推定することができます。測定器本体の回路の仕様により、いずれのチャンネルにおいても最大カウントデータが4095を超えるとデータが頭打ちになり、正常なスペクトルが測定できません。また、最大カウントデータがあまりにも小さすぎると、これらのデータを用いて検量線を作成したとしても良い結果が期待できません。通常は、これらをFITSSのスペクトル測定画面で確認できますが、一般ターミナルソフトを使用した場合は数字の羅列が続きますのでこれらの確認が困難となります。その場合は、このモードを使用することにより、最大値や最小値を測定器本体の液晶パネルから確認することができます。上段左側は最初の測定時における256チャンネルの中の最大値が得

られたピクセルNO.を示し、右側が再測定を実施した場合における256チャンネルの中の最大値が得られたピクセルNO.を示しています。このピクセルNo.により最大値のある大まかな波長が推測できます。そして、下段がそれぞれに対応するカウントデータを示しています。また、LCDの右端には、再測定が実施された場合に2が表示されます。再測定が実施されない場合は1が表示されます。

「スリープモード変更」ボタン

測定器にはスリープモードが設定されています。初期設定では2分間測定ボタンを押さないと、スリープモードに入ります。スリープモードでは、LCDが消灯して、さらに内部にある分光器への通電も遮断します。LCD上部の一部のアイコン表示と電源スイッチ部分の赤色LEDのみが点灯します。復帰はできないので再度電源を入れ直してください。設定画面では、1分～255分までの設定ができますので、所定の時間を分単位で、半角数字で入力してください。

「再測定カウント変更」ボタン

内蔵する分光器の256チャンネルには受光量に限界があり、その限界を超えた状態を光飽和と表現します。光飽和が発生すると、測定サンプルの結果が正しく反映されません。測定器には、最初の測定時に光飽和した場合、つまりカウントデータにおいて256チャンネルのうち、どこかのチャンネルにおいて4095カウントを超えた場合に、設定した積算時間の半分の時間で再度自動測定を行います。この再測定を行うタイミングを設定します。通常は、再測定を行う場合は4000カウント付近が適切と考えられます。この値をさらに小さくすると、安定したスペクトルが得られるようになりますが、再測定の時間が加算される確立が高くなります。また、再測定を行わない場合は4096よりも大きな数値を設定してください。設定画面では半角数字で入力してください。

「ホワイトデータ変更」ボタン

測定後の計算処理において、白色校正データは本体EEPROMに内蔵されたデータを使用します。初期設定では、すでにEEPROMに書きこまれています。これを変更する場合は実施してください。短波長側から256個の数字を半角(0-4096の範囲)、コンマ区切りでファイルを作成しておいてください(.csvファイル)。OKボタンを押して、「次は、256チャンネル分の白色校正データファイル(.csv)を選択する。」のメッセージが表示されますので、先ほどの.csvファイルを指定してください。

「ダークデータ変更」ボタン

このダイアログボックスには、3つの設定項目がありますので、すべての値を入力してOKボタンをクリックしてください。3つの設定値のうち入力されていない項目があると、その項目はそのまま反映されてエラーになります。これらの数値は半角数字で入力してください。

白色校正板のダークデータ:「ホワイトデータ変更ボタン」で設定した、「ランプ点灯時の白色データ」に対するランプ消灯時のデータを設定します。これは、256個のデータの並びではなく、1チャンネル分のデータを入力して、これを全256チャンネル分のダークデータとして使用します。この値は、対応する白色データの値よりも大きいとスペクトル処理の時にエラーになりますので、それを確認のうえ設定してください。

サンプル測定時のダーク積算時間:サンプル測定時には毎回ダークデータを測定します。そのダークデータ測定時の積算時間を設定します。初期設定では20msに設定されています。なお、搭載する分光器モジュールがC14384MAの場合は、ランプ点灯中のサンプル測定時にダークデータを測定しますので、この値は無効になります。しかし、無効文字が入力されているとEEPROM書き込み時にエラーになる可能性がありますので、20など有効な数値を入力しておいてください。

サンプルダーク調整係数:ランプ点灯時に測定した各チャンネルのカウントデータが、ランプ消灯時あるいはダークデータ測定時の値よりも小さくなると、スペクトル変換時にエラーになります。したがってこの調整係数の値を乗じることにより、ダークデータの値を低く設定することができます。初期設定では0.9が入力されています。なお、搭載する分光器モジュールがC14384MAの場合は、この値は無効になります。

「検量式変更」ボタン

このダイアログボックスでは、測定器本体に検量式を保存します。1つの定数項と5組の係数グループです。定数項は、実数を入力してください。係数グループでは、それぞれpix No.(0-255の範囲の整数)と係数(実数)を入力してください。ここで説明する「pix No.」とは、波長のチャンネル番号を示します。全256チャンネルのうち、最も短波長側から0、1、2、3、4、・・・254、255となります(プログラムの都合上、波長チャンネルの指定が0から始まりますので注意してください)。入力のない項目は0になります。PLS検量線などx変数が多い場合はファイルから入力できます。ファイルフォーマットは.csvとし、1行目にpix No.、2行目にそのpix No.に対応する係数を入力してください。エディットボックスとファイルの両方が入力された場合は、ファイル入力が優先します。xNo.3つの設定項目がありますので、すべての値を入力してOKボタンをクリックしてください。なお、定数項はエディットボックスからの入力のみが可能です。

「RS232転送モード変更」ボタン

測定器本体から、測定毎に接続するパソコンへシリアルケーブルを通じてデータ転送するモードを選択します。

1:試験測定モード(2次微分スペクトル)では、測定器本体で2次微分スペクトルに変換されたデータが転送されます。

3:検量式作成データモードでは、12ビットカウントデータが転送されます。このモードを選択した時のみ、FITSSにてグラフにデータを描画できます。初期設定では「3:検量式作成データモード」が設定されています。

4:試験測定モード(1次微分スペクトル)では、測定器本体で1次微分スペクトルに変換されたデータが転送されます。

5:試験測定モード(吸光度スペクトル)では、測定器本体で吸光度スペクトルに変換されたデータが転送されます。

6:試験測定モード(反射率スペクトル)では、測定器本体で反射率スペクトルに変換されたデータが転送されます。

なお、1、4、5、6のモードではFITSSのグラフ描画ができませんので、一般ターミナルソフトで受信してください。この場合、ポート:任意、スピード:19200、データ:8bit、パリティ:なし、ストップビット:1bit、フロー制御:なし、の設定となっており、フリーのターミナルソフト Tera Termでの実績があります。

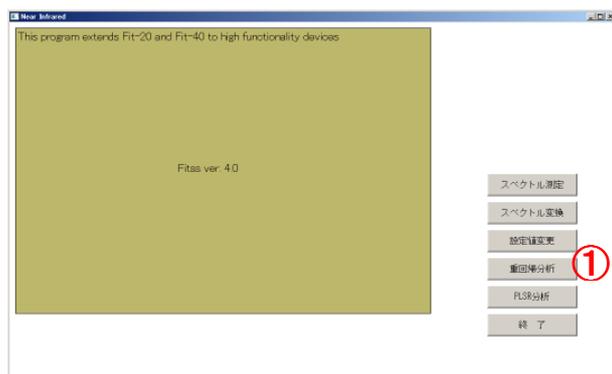
「積算時間変更」ボタン

サンプル測定時の積算時間を設定できます。10-1000の範囲で整数で入力してください。単位はmsです。

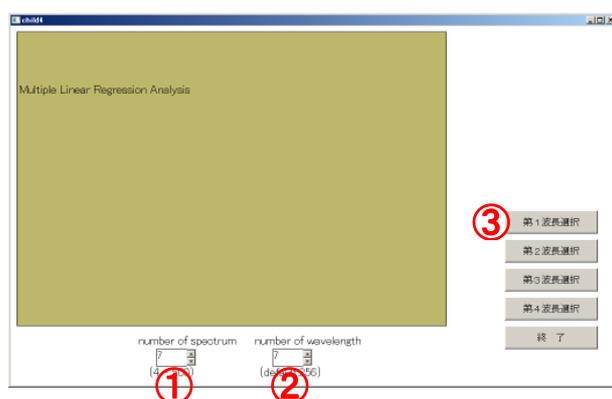
「セーブデータ確認」ボタン

測定器本体から読み出したEEPROMデータを確認できます。なお、FITSSの設定値変更画面において「ファイルを保存する」ボタンで保存されたEEPROMデータを直接開くことはできません。EEPROMデータファイルの内容を確認する場合は、保存ファイルをPickit2アプリケーションソフトで測定器本体のEEPROMに書き込み、そのEEPROMのデータを読み出したファイルを指定してください。最後に「保存して確認するためのデータファイル名を入力する」と表示されますので、新しいファイル名を指定して保存してください。このファイルは.txt形式で保存されますので、メモ帳などのソフトで開くことができます。

重回帰分析

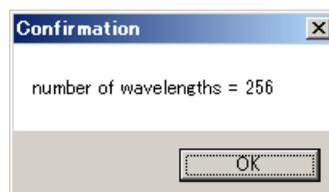
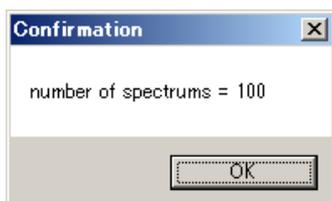


- ①メインメニューから「重回帰分析」ボタンをクリックします。カレントウィンドウになっていない場合は、もう一度「重回帰分析」ボタンをクリックしてください。



- 重回帰分析ウィンドウが表示されます。
- ①number of Spectrum（計算するスペクトルの数）を設定する。初期値として7スペクトルが入力されているので、これから読み込むファイルに含まれるスペクトル数を事前に入力しておきます。指定できる数値は、最低4スペクトルから最大500スペクトルまでです。これ以外の数値の入力や、これから読み込む実際のファイルに含まれるスペクトル数と同一でない場合は、正常な計算が行われないうエラーとなります。入力する数値は、スピンコントロールボックスに直接入力するか、コントロールカーソルをクリックして指定してください。
- ②number of wavelength(計算する波長数)は、これから読み込むファイルに含まれるスペクトルを構成する波長数を事前に入力します。初期値として256波長数が入力されているので、変更する場合は正しい波長数を指定してください。これから読み込むファイル内にあるデータは、全てのスペクトルが同じ波長数である必要があります。入力できる波長数の範囲は、7波長から最大256波長です。
- ③第1波長選択ボタン 両者の設定が終了した後に第1波長選択ボタンをクリック

クしてください。



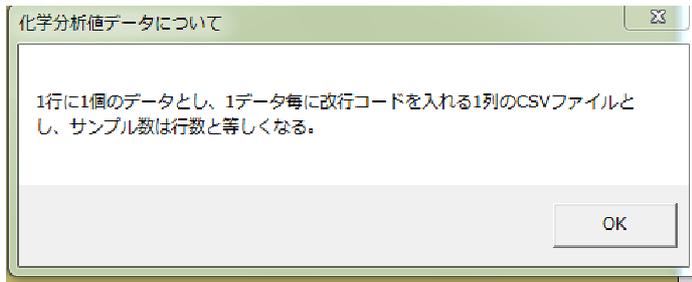
- 入力したスペクトル数と波長数を確認するメッセージが表示される。



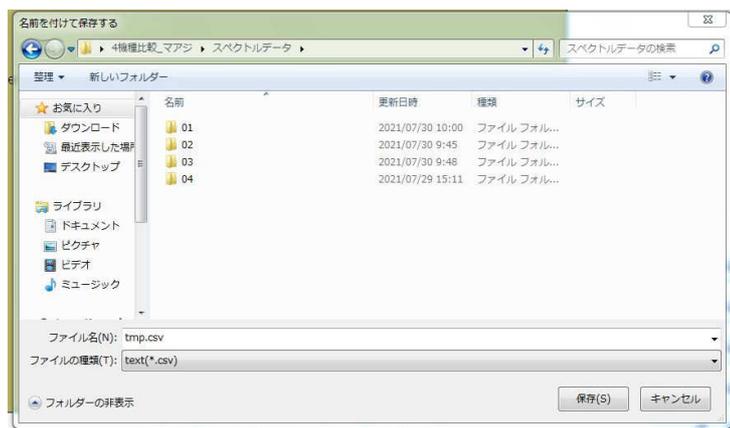
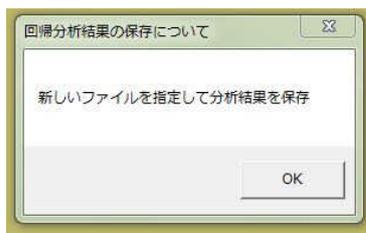
- これから読み込むスペクトルデータに関するファイルの構成についてのメッセージが表示されます。



- ファイルオープンダイアログボックスが表示されるので、データファイルが保存されているフォルダーの中のファイルを指定します。データファイルは、CSV形式で作成します。ファイル内のデータの並びは、行方向に短波長側のスペクトルデータから順番に並びます。最大波長数は256波長 (EXCELの場合はAからIVまで)、最小波長数は7波長です。また、扱うことのできるスペクトル数は7から500個までです。これらを、個々のスペクトルデータをカンマで区切り、1つのスペクトルごとに改行して、スペクトル数=行数となるCSVファイルを作成してください。FITSSスペクトル測定にて作成されたデータファイルは.txt形式なので、csvファイルへの変換作業は、EXCELで行うことが効率的です。また、ラベル(波長名、サンプル名など)は取り扱うことができませんので、作成したCSVファイルの波長、スペクトルの順番は別にメモを残してください。



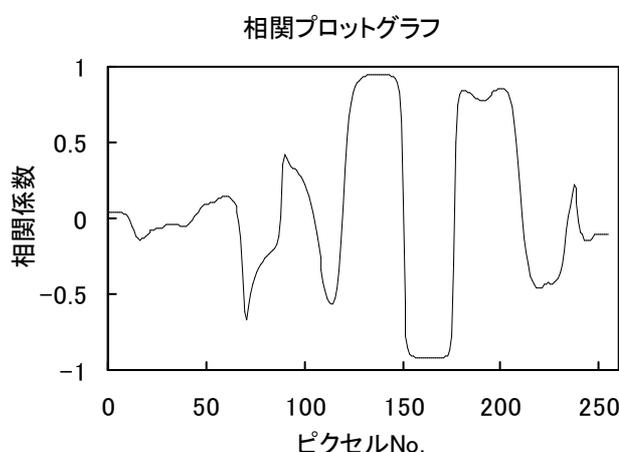
・ファイルオープンダイアログボックスが表示されるので、データファイルが保存されているフォルダーの中のファイルを指定します。データファイルは、CSV形式で作成します。ファイル中のデータの並びは、EXCEL形式で表現すれば、最も左の列の列方向に化学分析値を並べます。先ほど読み込んだスペクトルデータ数に等しい数の化学分析値データとなります。CSV形式なので、1つの化学分析値の後に改行コードが入り、次の化学分析値の後に改行コードが入り、その繰り返しとなります。化学分析値データファイルのある特定のデータと、スペクトルデータファイルの中のそれに対応する特定のデータは同じ行になります。なお、スペクトルデータファイルと同様にラベル(波長名、サンプル名など)は取り扱うことができません。



・指定したファイルから計算された統計データ(単相関係数など)のデータ数を確認するメッセージが表示されます。その後、計算された統計データファイルを保存するためのファイル保存ダイアログボックスがオープンするので、新しいファイル名を入力して保存します。

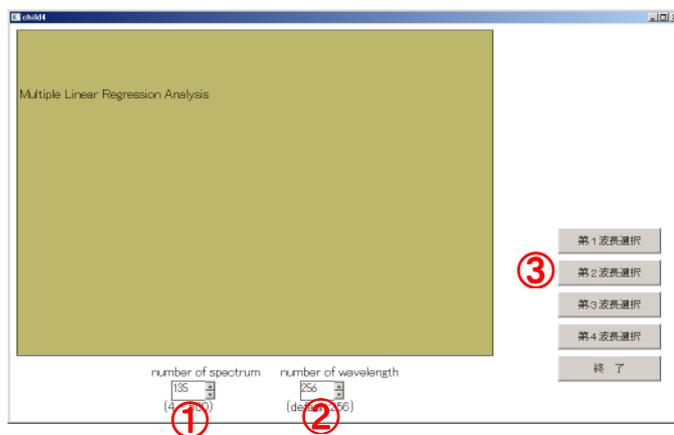
No.	K(0)	K(1)	K(2)	K(3)	K(4)	SEC	R
0	8.269249	30.27086	0	0	0	4.568323	0.038568
1	8.269249	30.27086	0	0	0	4.568323	0.038568
2	8.269249	30.27086	0	0	0	4.568323	0.038568
3	8.269249	30.27086	0	0	0	4.568323	0.038568
4	8.269249	30.27086	0	0	0	4.568323	0.038568
158	20.39948	-1027.86	0	0	0	1.807698	-0.91851
159	20.76482	-953.619	0	0	0	1.792786	-0.9199
160	21.25932	-899.345	0	0	0	1.778608	-0.92159
161	21.81598	-861.438	0	0	0	1.774615	-0.9213
162	22.3353	-833.034	0	0	0	1.777767	-0.92111
251	-71.5112	-769.641	0	0	0	4.545338	-0.10729
252	-71.5112	-769.641	0	0	0	4.545338	-0.10729
253	-71.5112	-769.641	0	0	0	4.545338	-0.10729
254	-71.5112	-769.641	0	0	0	4.545338	-0.10729
255	-71.5112	-769.641	0	0	0	4.545338	-0.10729

- 統計データを保存したCSVファイルを開きます。最も左の列(No.)は、ピクセル番号を示します。この場合は、256波長データで計算したので、0番目から255番目までの各ピクセル(波長No.)が表示されます。その右列のK(0)は、各ピクセルのデータを用いた単相関式における定数項を示します。一般式 $y=ax+b$ のbの部分です。その右列のK(1)は同式のaの部分を示す単回帰式の係数となります。この場合は第1波長のみの選択なのでK(2)、K(3)、K(4)は計算されず0が埋め込まれます。その右列のSECは化学分析値と推定値の差(誤差)の標準偏差を示します。標準偏差計算式の分母はn-1で計算されています。最右列のRは今回計算された単回帰式における化学分析値と推定値のあいだの相関係数を示します。これらの統計データは、指定した波長数(この場合は256)だけ計算されます。



- 第1波長選択時のデータを解析するためには、この時点でエクセルまたはパワーポイントを用いて相関プロットグラフの作成をお勧めします。今回のデータでは、魚の脂肪含量を化学分析値として用いており、事前にスペクトルデータを吸光度2次微分スペクトルに変換してあります。そのため、脂肪の吸収バンドでは2次微分スペクトルと化学分析値との相関係数は吸収が強いほど値が低くなります。したがって、グラフは示していませんが、脂肪の吸収バンドにおける2次微分スペクトルは、マイナス方向に強く現れます。したがって、上記グラフのように脂肪の吸収バンドである926nm付近(ピクセルNo. 150~175)に強い負の相関が認められます。上記相関プロットグラフにおけるピクセルNo. 130-150及びピクセルNo. 175-200の正の相関係数が高いバンドは、2次微分スペクトル変換において脂肪吸収バンドのサイドローブが両サイドに発生しており、その影響で化学分析値との逆相関が見かけ上高く現れています。また、ピクセルNo. 200-220付近において逆相関が高いのは、魚肉中の水分の吸収と脂肪含量化学分析値の関係が現れているためです。これは、サイドローブとは異なり実在する成分に基づく現象なので、キャリブレーションモデル(検量線式)の波長として採用することも可能ですが、今回は脂肪含量の推定が目的なので直接的な脂肪の吸収バンドであるピクセルNo. 150~175の中から1つ目の波長を探します。第1波長の決定は、

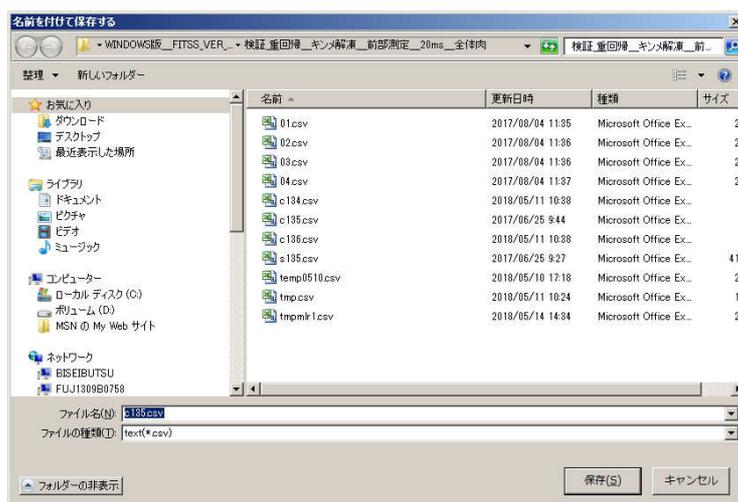
ピクセルNo. 150-175の範囲で両サイドに近い部分の波長をさけて、最も逆相関係数の高い波長を選択します。実際には、グラフデータを見ながら最適な波長（ピクセルNo.）を選択します。今回は、上記したエクセルシートのピクセルNo. 160(青色塗り)を選択することにします。



- 第2波長の選択に進む場合は、①、②の条件を第1波長の選択条件と同様にした状態で、③第2波長選択ボタンをクリックします。その後、第1波長選択の時と同様にスペクトルデータファイルと化学分析値データファイルをオープンするダイアログボックスが開きますので、第1波長選択時と同じファイルを指定します。



- 次に選択固定する第1波長のピクセルNo.を入力するダイアログボックスが表示されるので、第2波長を計算する際に固定する波長をピクセルNo.で指定します。例として、前述した相関スペクトルグラフから、固定するピクセルNo.は160を指定します。OKボタンをクリックすると入力した固定波長のピクセルNo.を確認するダイアログボックスが表示されますので、OKボタンをクリックします。

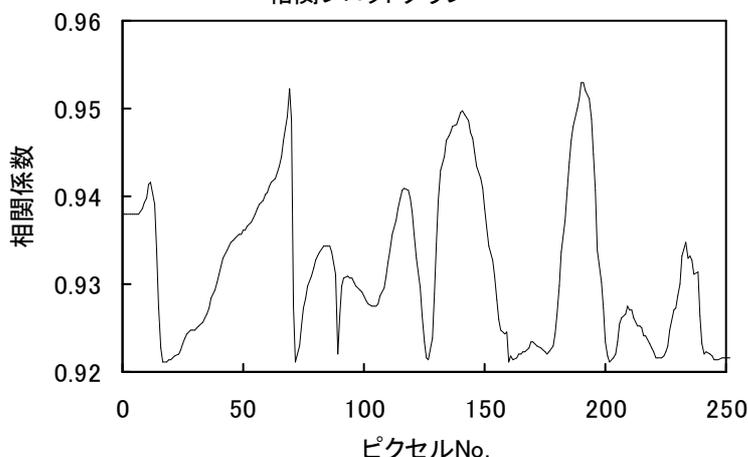


・第2波長まで計算された結果を保存するためのダイアログボックスが開きますので、新しいファイル名を入力して保存します。

No.	K(0)	K(1)	K(2)	K(3)	K(4)	SEC	R
0	30.93429	-924.897	139.6512	0	0	1.586214	0.937879
1	30.93429	-924.897	139.6512	0	0	1.586214	0.937879
2	30.93429	-924.897	139.6512	0	0	1.586214	0.937879
3	30.93429	-924.897	139.6512	0	0	1.586214	0.937879
4	30.93429	-924.897	139.6512	0	0	1.586214	0.937879
~~~~~							
159	23.90198	-5934.1	5346.861	0	0	1.741617	0.924594
160	21.25932	-899.345	0	0	0	1.778608	0.921219
161	22.44991	1039.296	-1856.41	0	0	1.773002	0.921736
162	21.91701	-352.102	-507.047	0	0	1.777173	0.921351
163	22.14559	-341.772	-503.761	0	0	1.77562	0.921494
~~~~~							
189	-0.08647	-1520.4	-767.278	0	0	1.411995	0.951109
190	-1.41157	-1539.67	-824.426	0	0	1.386616	0.952894
191	-2.02676	-1540.8	-870.856	0	0	1.385544	0.952969
192	-2.38662	-1541.19	-922.508	0	0	1.399198	0.952014
193	-3.40261	-1564.63	-1014.75	0	0	1.41003	0.951249
194	-3.56541	-1577.06	-1086.45	0	0	1.442011	0.948952
~~~~~							
251	37.42288	-902.385	159.4473	0	0	1.77576	0.921481
252	37.42288	-902.385	159.4473	0	0	1.77576	0.921481
253	37.42288	-902.385	159.4473	0	0	1.77576	0.921481
254	37.42288	-902.385	159.4473	0	0	1.77576	0.921481
255	37.42288	-902.385	159.4473	0	0	1.77576	0.921481

・第2波長まで計算されたCSVファイルを開きます。K(0)の列は定数項です。K(1)の列は、今回固定波長として指定したピクセルNo. (No. 160)における係数となります。この場合では列方向に256個(0-255)の係数が示されており、これは選択する第2波長のピクセルNo.により固定波長(No. 160)の係数が異なるためです。K(2)の列は、最左列(ピクセルNo.)を第2波長とした場合の係数になります。今回は、No. 160を第1波長としたためNo. 160における第2波長の係数には0が埋め込まれています。今回は、第3波長、第4波長の計算処理を行っていないので、K(3)、K(4)の列には0が埋め込まれます。また、SECは第1波長と第2波長選択時の誤差標準偏差、Rは同様に重相関係数を示しています。

相関プロットグラフ



・第2波長選択時の相関プロットグラフを作成します。微分処理の影響があるため、両サイドの波長(No. 0-30、No. 230-250)付近の波長は選択しないようにします。この

場合は、No. 191を中心とするピークとNo. 69を中心とするピークにおいて重相関係数が高くなっています。しかし、No. 69ではピークがシャープなので、内部センサー感度のずれなどにより推定精度に影響が出る可能性があります。ここでは、第2波長としてNo. 191を選択します(上記エクセルシートの青色塗り部分)。

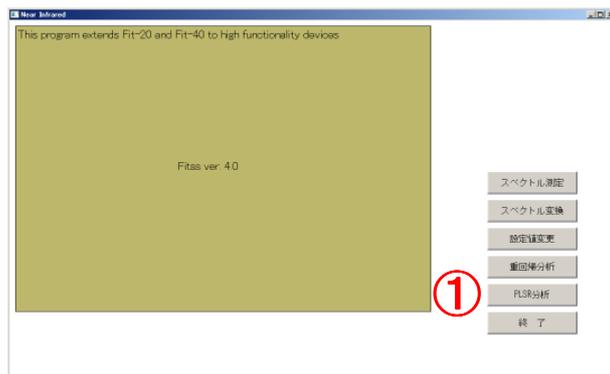
したがって、この事例のここまでの重回帰式などの統計情報は以下のとおりです。

$$\text{脂肪含量推定値 (y)} = -2.027 + (-1504.8 * (\text{pix160})) + (-870.856 * (\text{pix191}))$$

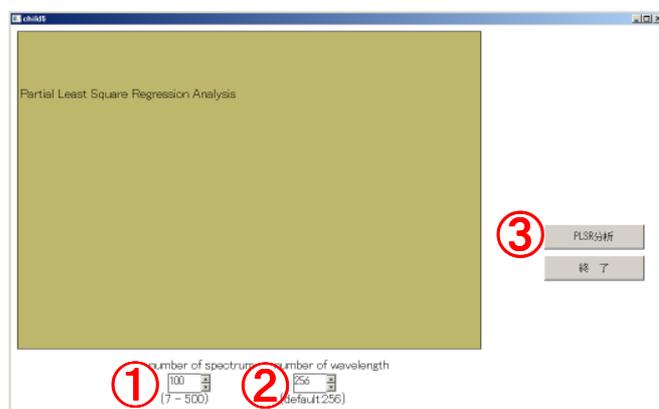
$$\text{SEC} = 1.39\% \quad \text{重相関係数 } R = 0.953$$

・以後、第3波長と第4波長までは同様の操作を繰り返します。本ソフトウェアでは第5波長以降のデータを求めることはできません。

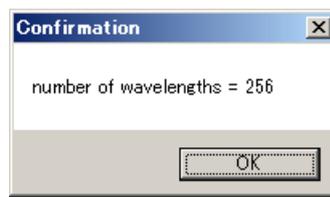
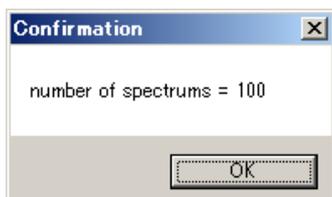
## PLS 分析



- メインメニューから「PLS分析」ボタンをクリックします。カレントウインドウになっていない場合は、もう一度「PLS分析」ボタンをクリックしてください。



- PLS分析ウインドウが表示される。
- ①number of Spectrum (計算するスペクトルの数) を設定する。初期値として100スペクトルが入力されているので、これから読み込むファイルに含まれるスペクトル数を事前に入力しておいてください。指定できる数値は、最低7スペクトルから最大500スペクトルまでです。これ以外の数値の入力や、これから読み込むファイルに含まれるスペクトル数と同一でない場合は、正常な計算が行われないうエラーとなります。入力する数値は、スピンコントロールボックスに直接入力するか、コントロールカーソルをクリックして指定してください。
- ②number of wavelength(計算する波長数)は、これから読み込むファイルに含まれるスペクトルを構成する波長数を事前に入力します。初期値として256波長数が入力されているので、変更する場合は正しい波長数を指定してください。これから読み込むファイル内にあるデータは、全てのスペクトルが同じ波長数としてください。入力できる波長数の範囲は、7波長から最大256波長です。
- ③PLS分析ボタン 両者の設定が終了した後にPLS分析ボタンをクリックしてください。



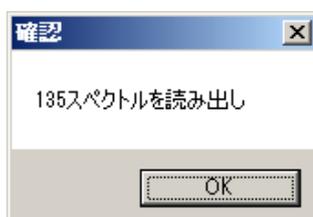
- 入力したスペクトル数と波長数を確認するメッセージが表示されます。



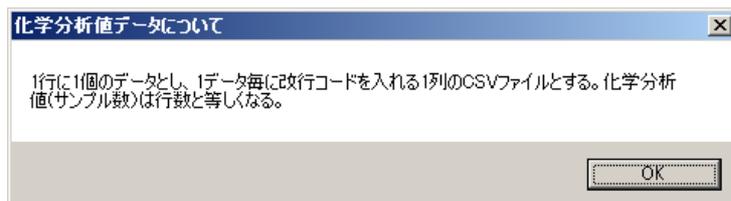
- これから読み込むスペクトルデータに関するファイルの構成についてのメッセージが表示されます。



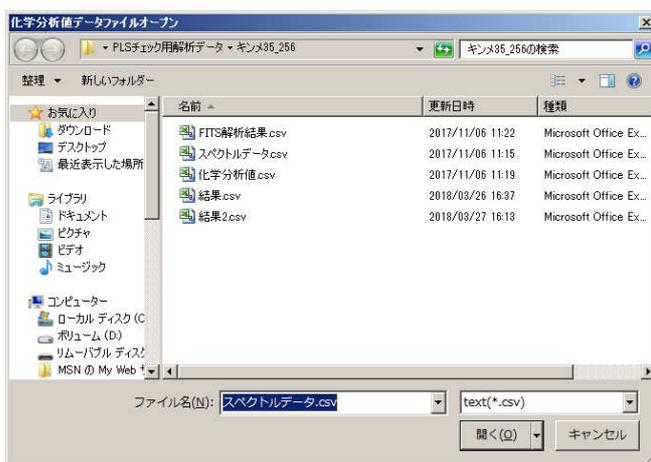
- ファイルオープンダイアログボックスが表示されるので、データファイルが保存されているフォルダーの中のファイルを指定します。データファイルは、CSV形式で作成します。ファイルのデータの並びは、行方向に短波長側のスペクトルデータから順番に並びます。最大波長数は256波長 (EXCELの場合はAからIVまで)、最小波長数は7波長です。また、扱うことのできるスペクトル数は7から500個までです。これらを、個々のスペクトルデータをカンマで区切り、1つのスペクトルごとに改行して、スペクトル数=行数となるCSVファイルを作成してください。この作業は、EXCELで行うと効率的です。また、ラベル(波長名、サンプル名など)は取り扱うことができませんので、作成したCSVファイルの波長、スペクトルの順番は別にメモを残してください。



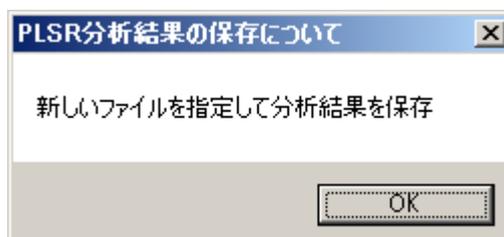
- 指定したファイルから読み出したスペクトル数を確認するメッセージが表示されます。



- これから読み込むファイル、つまり先ほど読み込んだスペクトルデータに対応する化学分析値に関するファイルについてのメッセージが表示される。



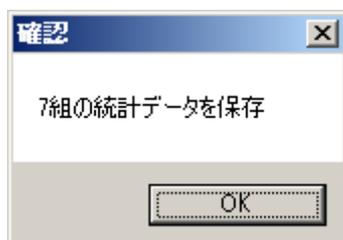
- ファイルオープンダイアログボックスが表示されるので、データファイルが保存されているフォルダーの中のファイルを指定します。データファイルは、CSV形式で作成します。ファイル中のデータの並びは、EXCEL形式で表現すれば、最も左の列の列方向に化学分析値を並べます。先ほど読み込んだスペクトルデータ数に等しい数の化学分析値データとなります。CSV形式なので、1つの化学分析値の後に改行コードが入り、次の化学分析値の後に改行コードが入り、その繰り返しとなります。化学分析値データファイルのある特定のデータと、スペクトルデータファイルの中のそれに対応する特定のデータは同じ行になります。なお、スペクトルデータファイルと同様にラベル(波長名、サンプル名など)は取り扱うことができません。



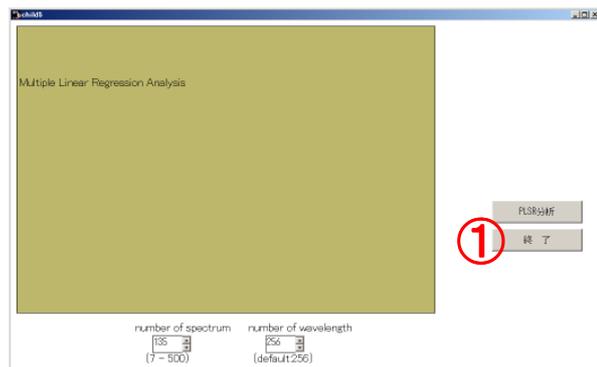
- 指定したファイルから読み出した化学分析値の数を確認するメッセージと解析結果のファイルを保存するメッセージが表示されます。



- ・ファイルセーブダイアログボックスが表示されるので、解析結果ファイルを保存するフォルダーを選択しファイル名を入力します。結果ファイルは、CSV形式で作成されます。



- ・結果ファイルを保存したメッセージが表示されます。7組の統計データとは、PLS第1成分から第7成分までの計算結果が保存されたことを意味します。この成分数は固定であり、増減指定はできません。結果ファイルはCSV形式で保存されていますので、EXCELなどで確認できます。



- ・①最後に終了ボタンをクリックします。

- ・右表は、分析結果CSVファイルをエクセルでオープンした例です。A1:A2のセルに表示されたcomp 1-1は、PLS第1主成分のみで計算された結果をそのセル以下に示されます。その時の推定値と化学分析値の間の相関係数がR(A3)として計算され、この時は-0.356 (A4) と計算されました。その下

comp	1-1
R	-0.35634
SEC	4.637841
Ca	-1.40894
	-1.40894
yHat	6.171267
	6.185128
comp	1-2
R	0.955636
SEC	2.368024
Ca	-3.93627
	-3.93627
yHat	8.080246
	8.148708
	7.955418
comp	1-3
R	0.94057
SEC	1.552573
Ca	7.848357
	7.848357
yHat	8.698153
	8.73706
	8.548847
comp	1-4
R	0.959845
SEC	1.280942
Ca	4.732662

のセル(A5)はSEC(誤差の標準偏差)が計算されます。PLS第1主成分のみでSECを計算した時に4.637(A6)と計算されました。なお、SEC計算式の分母は単純に $n-1$ で計算されます。その下のCaと表示されたセル(A8)以下のデータは、PLS第1主成分のみで計算された場合の各波長における係数bが示されます。FITSSが、PLS分析のときに読み込んだスペクトルデータにおける最も左側の波長に対応する係数から順番に、下方向に表示されます。つまり、FITSSで計算に用いた波長と同数の係数が表示されます。なお、FITSSでは、 $q$ ( $y$ のローディング)と $w$ (各波長データに対するローディングウェイト)をそれぞれ表示することはできません。その下のyHatと表示されたセル以下のデータは、PLS第1主成分のみで計算された場合の推定値が表示されます。FITSSが、PLS分析のときに読み込んだ化学分析値データの順番に、それに対応するサンプルにおける推定値が順番に下方向に表示されます。つまり、FITSSで計算に用いた化学分析値データと同数の推定値データが表示されます。

それ以下のcomp 1-2は、PLS第1主成分と第2主成分で計算された結果が、そのセル以下に示されます。comp 1-3は、同様にPLS第1主成分から第3主成分を用いて計算された結果が示され、以下は同様に最終的にはcomp 1-7(PLS第1から第7まで)まで表示されます。PLS第7成分以降の分析を指定することはできません。