บทที่ 4

ผลการทดลองและอภิปรายผล

ตอนที่ 1 ผลการทดลองการตรวจสอบด้วย Near Infrared Spectroscopy (NIRS)

4.1 ผลการเปรียบเทียบวิธีวิเคราะห์และวิธีทางคณิตศาสตร์ที่ช่วยปรับสเปกตรัม ในการสร้างสมการ calibration เพื่อประเมินปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) ของส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก ดังแสดงไว้ในตารางที่ 4.1

ตารางที่ 4.1 การเปรียบเทียบวิธีวิเคราะห์และวิธีทางคณิตศาสตร์ที่ช่วยปรับสเปกตรัม ในการสร้างสมการ calibration เพื่อประเมินปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) ของส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

Regression	Scatter	R	SEC	SEP	Bias	RPD
MPLS	None 1	0.934	0.5062	0.494	0.097	2.289
	None 2	0.946	0.4854	0.447	0.158	2.940
	NSDV 1	0.946	0.5257	0.456	0.111	2.890
	NSDV 2	0.935	0.4778	0.492	0.145	2.704
	MSC 1	0.931	0.5274	0.494	0.094	2.670
	MSC 2	**0.944**	**0.5047**	**0.494**	**0.094**	**3.021**
PCR	None 1	0.920	0.6018	0.558	0.204	2.328
	None 2	0.928	0.6244	0.513	0.121	2.552
	NSDV 1	**0.936**	**0.5955**	**0.515**	**0.207**	**2.524**
	NSDV 2	0.924	0.6213	0.534	0.155	2.451
	MSC 1	0.919	0.5980	0.567	0.216	2.287
	MSC 2	0.922	0.6365	0.539	0.155	2.432

ตารางที่ 4.1 (ต่อ)

Regression	Scatter	R	SEC	SEP	Bias	RPD
MLR	None 1	0.949	0.7027	0.481	0.105	2.746
	None 2	0.938	0.7049	0.502	0.104	2.631
	NSDV 1	0.948	0.6902	0.464	0.103	2.847
	NSDV 2	0.945	0.7017	0.568	0.157	2.326
	MSC 1	0.955	0.7167	0.451	0.122	2.718
	MSC 2	0.922	0.7064	0.574	0.158	2.301

R = correlation coefficient

SEC = standard error of calibrations

SEP = standard error of prediction

MPLS =Modified Partial Least Squares

MLR = Multiple Linear Regression

PCR= Principal Pomponent Regression

Bias= The average of difference between actual value and NIR value

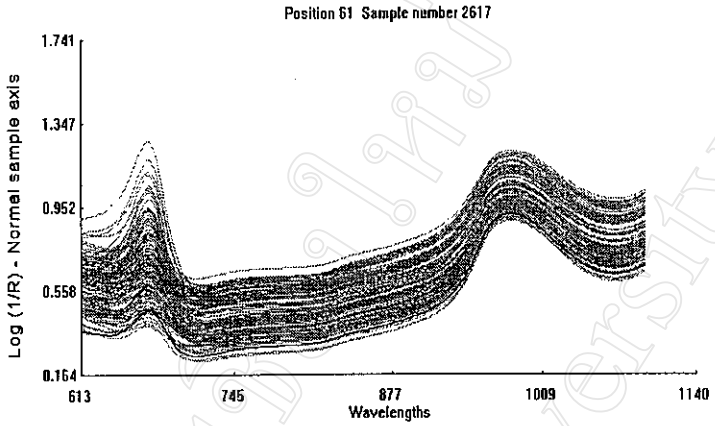
RPD= The ratio of standard deviation of reference data in validation set to SEP

None= No scatter correction applied to the spectra; 1= first derivative ; 2= second derivative

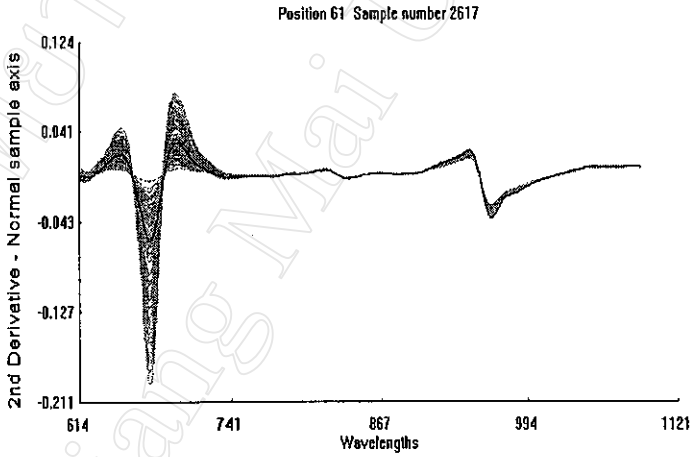
NSDV=Normal Standard Detrending Variance ; 1= first derivative ; 2= second derivative

MSC= Multiplicative Scatter Correction; 1= first derivative ; 2= second derivative

การสร้างสมการ calibration จากเทคนิค MPLS PCR และ MLR ได้นำวิธีทางคณิตศาสตร์ช่วยในการแปลงข้อมูลที่เป็นสเปกตรัม เพื่อลดปัจจัยที่มีผลต่อสเปกตรัม เนื่องจากสเปกตรัมของผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก เป็น original data ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.1 peak จะไม่ชัดเจน ดังนั้นเมื่อนำเอาวิธีคณิตศาสตร์ทำการแปลงข้อมูลโดยวิธี second derivative สเปกตรัมที่ได้จะมีรูปร่างต่างไปจากสเปกตรัมเริ่มต้น ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.2 เพราะเป็นการหาความชันของสเปกตรัมสองครั้งเพื่อแยก peak ออกมาให้ชัดเจนมากขึ้น



ภาพที่ 4.1 spectrum (original data) ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

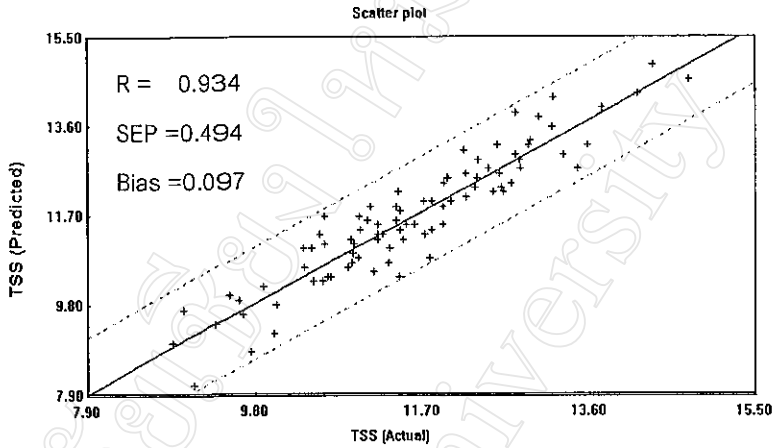


ภาพที่ 4.2 spectrum (derivative data) ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

จากการศึกษาในการวิเคราะห์ทางสถิติด้วยวิธี MPLS โดยใช้ค่าการดูดกลืนแสงที่มีความยาวช่วงคลื่นแสงตลอดช่วงคลื่น 700 -1100 nm ซึ่งที่มีความสัมพันธ์กับค่า TSS ในผลส้มทั้งผลมีเปลือก พบว่าวิธี MPLS ได้สมการ calibration 6 สมการ ดังแสดงไว้ในตารางที่ 4.1 และมีการใช้วิธีทางคณิตศาสตร์มาช่วยในการแปลงข้อมูลที่เป็นสเปกตรัม ได้สมการที่ 1 เป็น None 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.934 ค่า SEC เท่ากับ 0.5062 ค่า SEP เท่ากับ 0.494 ค่า Bias

เท่ากับ 0.097 และค่า RPD เท่ากับ 2.289 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.3 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.1

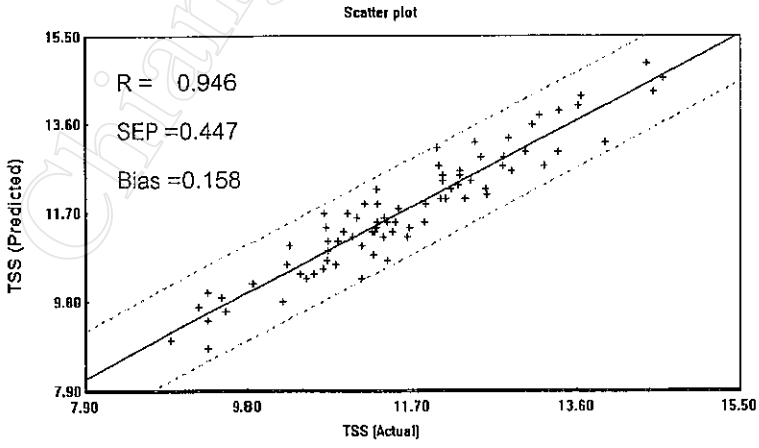
$TSS = 11.4196-5.4615 \log (1/R_{700})-5.9.9383 (1/R_{702})\ldots\ldots-234.4346 (1/R_{1086})\ldots\ldots\ldots\ldots(4.1)$



ภาพที่ 4.3 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MPLS) None first derivative ผลสัมพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

สมการที่ 2 เป็น None 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.946 ค่า SEC เท่ากับ 0.4854 ค่า SEP เท่ากับ 0.447 ค่า Bias เท่ากับ 0.158 และค่า RPD เท่ากับ 2.940 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.4 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.2

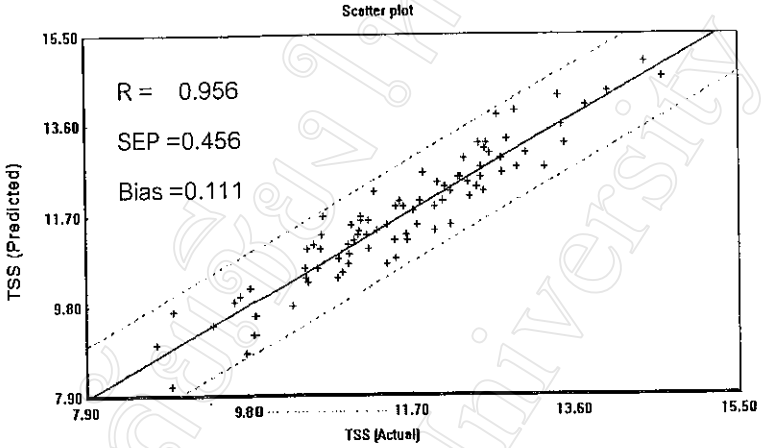
$TSS = 10.0858 -6.4459 \log (1/R_{700})-6.9581\log (1/R_{702})\ldots+149.6070 \log (1/R_{1090})\ldots\ldots(4.2)$



ภาพที่ 4.4 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MPLS)

สมการที่ 3 เป็น NSDV 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.946 ค่า SEC เท่ากับ 0.5257 ค่า SEP เท่ากับ 0.456 ค่า Bias เท่ากับ 0.111 และค่า RPD เท่ากับ 2.890 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.5 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.3

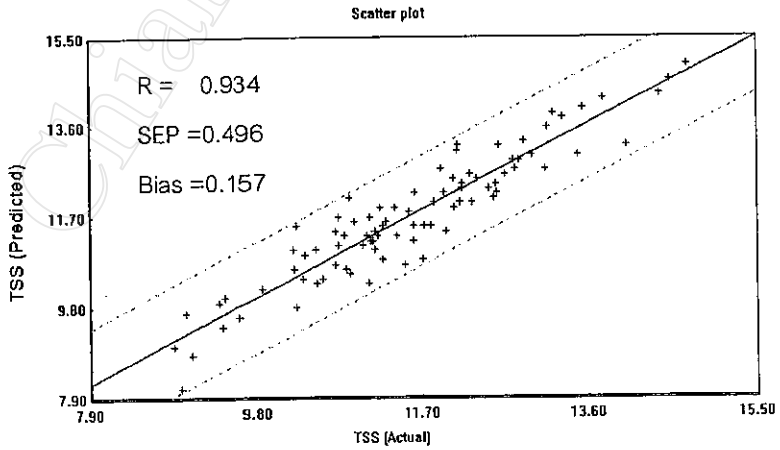
$TSS = 2.9585-5.6086 \log (1/R_{700})-6.2667 \log (1/R_{702})\ldots\ldots\ldots-2.7819 \log (1/R_{1090})\ldots\ldots(4.3)$



ภาพที่ 4.5 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MPLS) NSDV first derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

สมการที่ 4 เป็น NSDV 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.934 ค่า SEC เท่ากับ 0.4778 ค่า SEP เท่ากับ 0.486 ค่า Bias เท่ากับ 0.157 และค่า RPD เท่ากับ 2.704 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.6 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.4

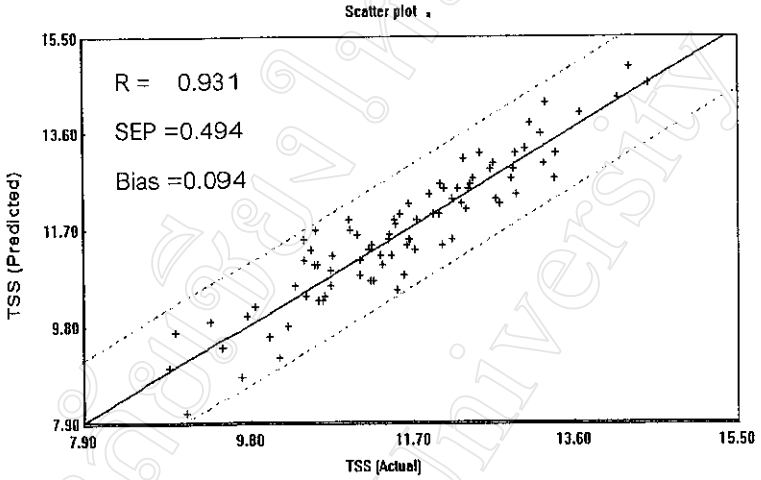
$TSS = 15.5678-1.6404 \log (1/R_{700})-17.639 \log (1/R_{702})\ldots\ldots\ldots+83.2851 \log (1/R_{1090})\ldots.(5)$



ภาพที่ 4.6 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MPLS) NSDV second derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

สมการที่ 5 เป็น MSC 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.931 ค่า SEC เท่ากับ 0.5274 ค่า SEP เท่ากับ 0.494 ค่า Bias เท่ากับ 0.094 และค่า RPD เท่ากับ 2.704 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.7 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.5

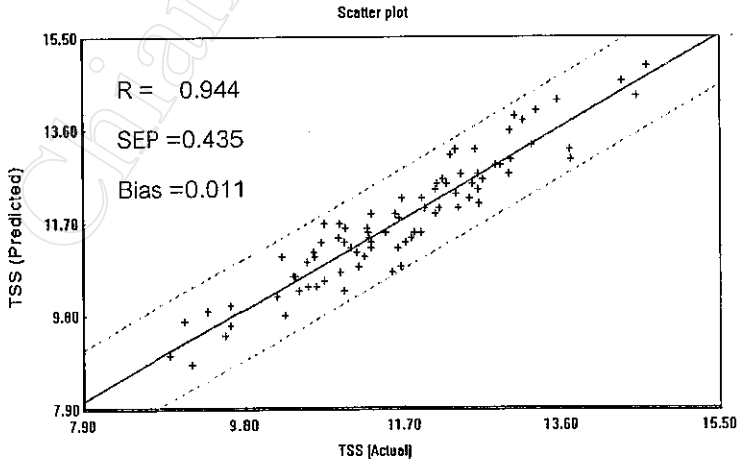
$$TSS = 12.5719 - 0.8019 \log (1/R_{700}) - 0.185 \log (1/R_{702}) \ldots\ldots\ldots + 593.0917 \log (1/R_{1090}) \ldots (4.5)$$



ภาพที่ 4.7 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MPLS) first derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

สมการที่ 6 เป็น MSC 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.944 ค่า SEC เท่ากับ 0.5047 ค่า SEP เท่ากับ 0.435 ค่า Bias เท่ากับ 0.110 และค่า RPDเท่ากับ 3.021 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.8 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.6

$$TSS = 12.9703 - 7.7390 \log (1/R_{700}) - 7.9088 \log (1/R_{702}) \ldots\ldots\ldots - 0.5965 \log (1/R_{1090}) \ldots\ldots (4.6)$$



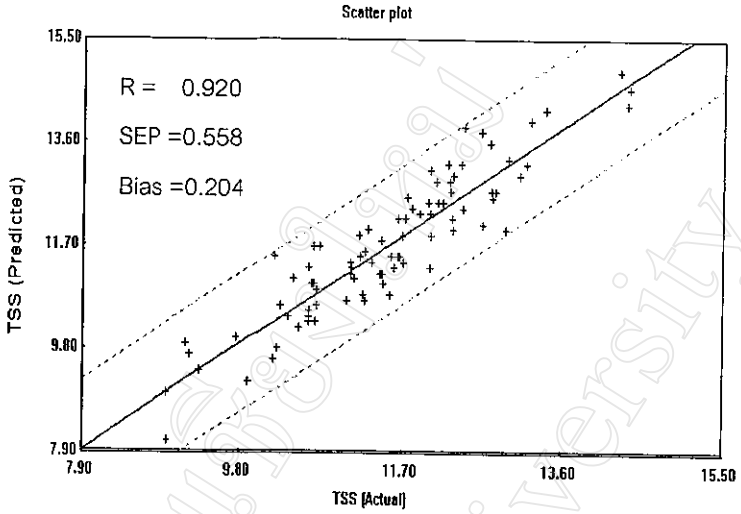
ภาพที่ 4.8 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MPLS) second derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

จากการเปรียบเทียบสมการ calibration ที่สร้างขึ้นมาจากวิธี MPLS ตลอดช่วงความยาวคลื่น 700-1100 nm เพื่อใช้ในการทำนาย ปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) ในผลส้มเขียวหวานพันธุ์สายน้ำผึ้งทั้งผลมีเปลือก ค่าสถิติที่ใช้ตรวจสอบสมการ calibration ถูกต้องและสามารถนำไปใช้งานได้หรือไม่ คือค่า SEP เป็นค่าที่ได้จากการเปรียบเทียบค่า TSS ที่ได้จากเครื่อง NIR spectroscopy และค่า TSS ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธี reference method มีความถูกต้องมากน้อยแค่ไหน ควรมีค่าน้อยๆ ค่า Bias เป็นค่าเฉลี่ยของการทำนายค่า TSS ด้วยเครื่อง NIR spectroscopy กับค่าเฉลี่ยของ ค่า TSS ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธี reference method ว่ามีความแตกต่างกันหรือไม่ รวมทั้ง ค่า R เป็นค่าความสัมพันธ์ระหว่างค่าที่วัดได้จากเครื่อง NIR spectroscopy กับค่าที่วัดได้จากวิธี reference method ควรมีค่าเข้าใกล้ 1 และค่า RPD เป็นอัตราส่วนระหว่างค่า SD ของค่า TSS ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธี reference method กับค่า SEP ควรมากกว่า 3 ถึงแสดงว่าสมการ calibration มีความเหมาะสม ที่จะนำเครื่อง NIR มาใช้ในการทำนาย TSS ได้

สมการ calibration ที่ให้ค่าการทำนายที่เหมาะสม คือ สมการที่ 6 เป็น MSC 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.944 ค่า SEC เท่ากับ 0.5047 ค่า SEP เท่ากับ 0.435 ค่า Bias เท่ากับ 0.110 และค่า RPD เท่ากับ 3.021 สมการ calibration ที่เลือกนำมาประเมินค่า TSS โดยใช้ MSC ซึ่งเป็นวิธีทางคณิตศาสตร์เพื่อช่วยปรับแต่งสเปกตรัมที่เกิดจากการกระเจิงแสง ในขณะที่ทำการวัดสเปกตรัม และใช้ 2 Derivative เพื่อแยกจุดยอดที่เหลื่อมซ้อนกัน ในสเปกตรัมให้ออกจากกัน และลดผลกระทบที่ทำให้สเปกตรัมมีขนาดเพิ่มขึ้นตลอดช่วงความยาวคลื่น

จากการศึกษาในการวิเคราะห์ทางสถิติด้วยวิธี PCR โดยใช้ค่าการดูดกลืนแสงที่มีความยาวช่วงคลื่นแสงตลอดช่วงคลื่น 700-1100 nm ซึ่งที่มีความสัมพันธ์กับค่า TSS ในผลส้มทั้งผลมีเปลือก พบว่าวิธี PCR ได้สมการ calibration 6 สมการ ดังตารางที่ 4.1 โดยมีการใช้วิธีทางคณิตศาสตร์มาช่วยในการแปลงข้อมูลที่เป็นสเปกตรัม ได้สมการที่ 1 เป็น None 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.920 ค่า SEC เท่ากับ 0.6018 ค่า SEP เท่ากับ 0.558 ค่า Bias เท่ากับ 0.204 และค่า RPD เท่ากับ 2.328 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.9 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.7

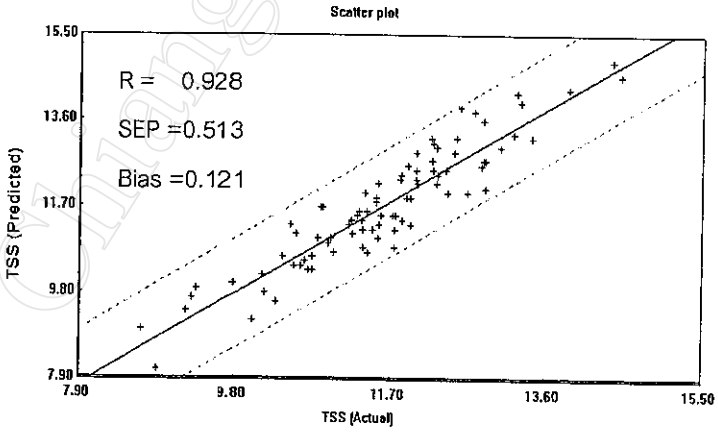
$$TSS = 9.5984-66.6727 \log (1/R_{700})-20.33259 \log (1/R_{702})\ldots\ldots-29.2866 \log (1/R_{1090})\ldots..(4.7)$$



ภาพที่ 4.9 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (PCR) None first derivative ผลสัมพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

สมการที่ 2 เป็น None 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.928 ค่า SEC เท่ากับ 0.6244 ค่า SEP เท่ากับ 0.513 ค่า Bias เท่ากับ 0.158 และค่า RPD เท่ากับ 2.940 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.10 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.8

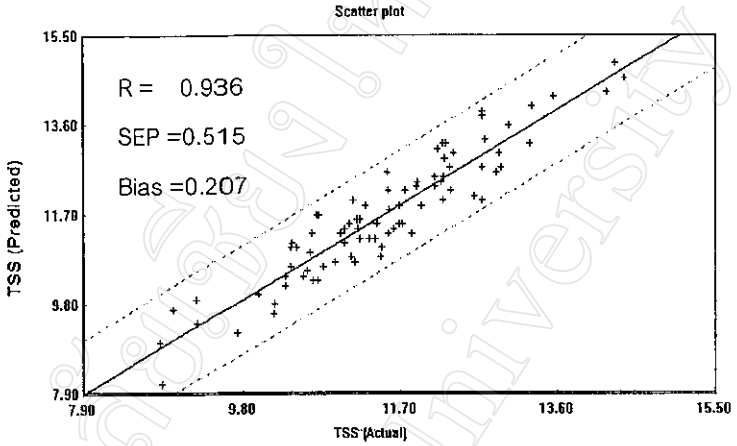
$$TSS = 7.7+42.4977 \log (1/R_{700})-5.2004 \log (1/R_{702})\ldots\ldots+77.6040 \log (1/R_{1090})\ldots\ldots..(4.8)$$



ภาพที่ 4.10 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (PCR) None second derivative ผลสัมพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

สมการที่ 3 เป็น NSDV 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.936 ค่า SEC เท่ากับ 0.5955 ค่า SEP เท่ากับ 0.515 ค่า Bias เท่ากับ 0.207 และค่า RPD เท่ากับ 2.524 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.11 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.9

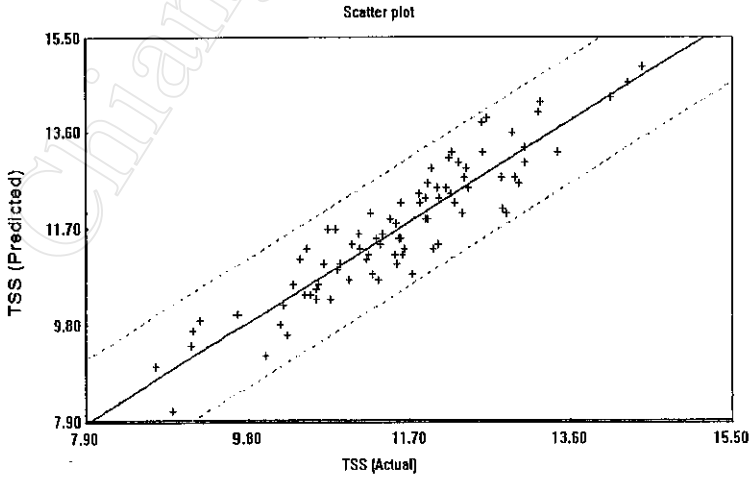
$$TSS = 6.2700-29.8784 \log (1/R_{700})-10.1977 \log (1/R_{702})\ldots\ldots+4.3231 \log (1/R_{1090})\ldots.(4.9)$$



ภาพที่ 4.11 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (PCR) NSDV first derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

สมการที่ 4 เป็น NSDV 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.924 ค่า SEC เท่ากับ 0.6213 ค่า SEP เท่ากับ 0.534 ค่า Bias เท่ากับ 0.155 และค่า RPD เท่ากับ 2.451 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.12 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.10

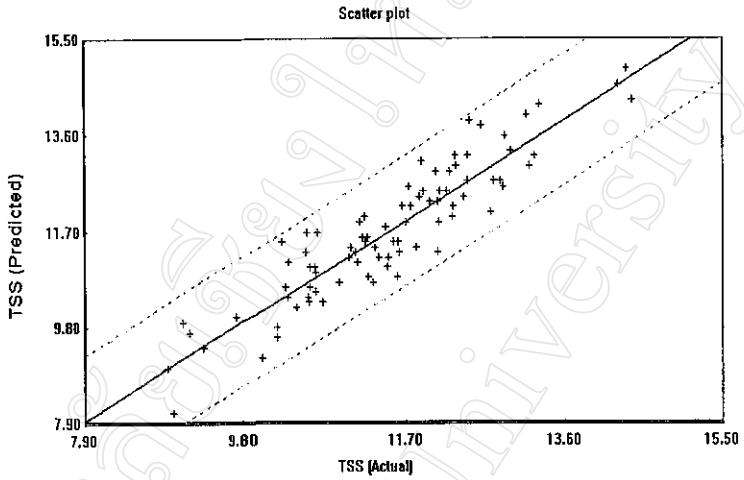
$$TSS =9..0332+3.1770 \log (1/R_{700})-4.2486 \log (1/R_{702})\ldots.+24.7792 \log (1/R_{1090})\ldots\ldots\ldots(4.10)$$



ภาพที่ 4.12 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (PCR) NSDV second derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

สมการที่ 5 เป็น MSC 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.919 ค่า SEC เท่ากับ 0.5980 ค่า SEP เท่ากับ 0.567 ค่า Bias เท่ากับ 0.216 และค่า RPD เท่ากับ 2.287 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.13 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.11

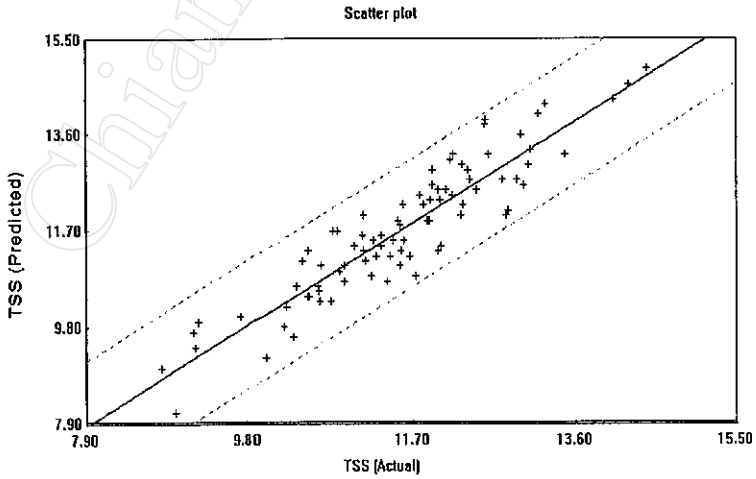
$$TSS = 11.1235-74.6521 \log (1/R_{700})-23.5037 \log (1/R_{702})\ldots+32.2907 \log (1/R_{1090}) \ldots\ldots (11)$$



ภาพที่ 4.13 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (PCR) MSC first derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

สมการที่ 6 เป็น MSC 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.922ค่า SEC เท่ากับ 0.6365 ค่า SEP เท่ากับ 0.539 ค่า Bias เท่ากับ 0.155 และค่า RPD เท่ากับ 2.432 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.14 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.12

$$TSS = 0.1858+0.2423 \log (1/R_{700})+0.2569 \log (1/R_{702}) \ldots\ldots\ldots -51.2771 \log (1/R_{1090}) \ldots\ldots (12)$$



ภาพที่ 4.14 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (PCR) MSC second derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

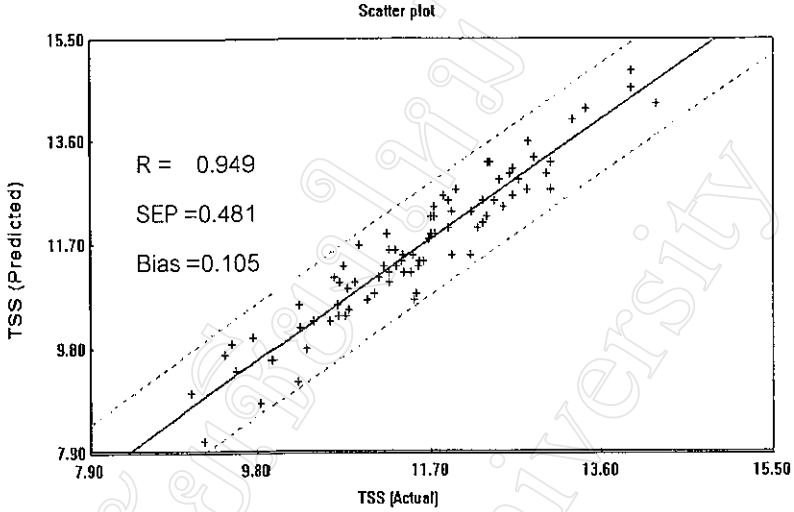
จากการเปรียบเทียบสมการ calibration ที่สร้างขึ้นมาจากวิธี PCR ตลอดช่วงความยาวคลื่น 700-1100 nm เพื่อใช้ในการทำนาย ปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) ในผลส้มเขียวหวานพันธุ์สายน้ำผึ้งทั้งผลมีเปลือก ค่าสถิติที่ใช้ตรวจสอบสมการ calibration ถูกต้องและสามารถนำไปใช้งานได้หรือไม่ คือค่า SEP เป็นค่าที่ได้จากการเปรียบเทียบค่า TSS ที่ได้จากเครื่อง NIR spectroscopy และค่า TSS ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธี reference method มีความถูกต้องมากน้อยแค่ไหน ควรมีค่าน้อยๆ ค่า Bias เป็นค่าเฉลี่ยของการทำนายค่า TSS ด้วยเครื่อง NIR spectroscopy กับค่าเฉลี่ยของ ค่า TSS ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธี reference method ว่ามีความแตกต่างกันหรือไม่ รวมทั้ง ค่า R เป็นค่าความสัมพันธ์ระหว่างค่าที่วัดได้จากเครื่อง NIR spectroscopy กับค่าที่วัดได้จากวิธี reference method ควรมีค่าเข้าใกล้ 1 และค่า RPD เป็นอัตราส่วนระหว่างค่า SD ของค่า TSS ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธี reference method กับค่า SEP ควรมากกว่า 3 ถึงแสดงว่าสมการ calibration มีความเหมาะสม ที่จะนำเครื่อง NIR มาใช้ในการทำนาย TSS ได้

สมการ calibration ที่ให้ค่าการทำนายที่เหมาะสม สามารถนำมาประเมินค่า TSS คือ สมการที่ 3 เป็น NSDV 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.936 ค่า SEC เท่ากับ 0.5955 ค่า SEP เท่ากับ 0.515 ค่า Bias เท่ากับ 0.207 และค่า RPD เท่ากับ 2.524 โดยสมการ calibration นี้ใช้ NSDV ซึ่งเป็นวิธีทางคณิตศาสตร์เพื่อช่วยปรับแต่งสเปกตรัมในขณะที่ทำการวัดสเปกตรัม โดยที่ 1 Derivative จะช่วยแก้ปัญหาที่สเปกตรัมมีค่าเพิ่มขึ้นหรือคงที่ตลอดช่วงความยาวคลื่น

จากการศึกษาในการวิเคราะห์ทางสถิติด้วยวิธี MLR โดยใช้ค่าการดูดกลืนแสงที่มีความยาวช่วงคลื่นแสงตลอดช่วงคลื่น 700-1100 nm และเลือกความยาวคลื่นที่มีความสัมพันธ์กับค่า TSS ในผลส้มทั้งผลมีเปลือก พบว่าวิธี MLR ได้สมการ calibration 6 สมการ ดังแสดงไว้ในตารางที่ 4.1 มีการใช้วิธีทางคณิตศาสตร์มาช่วยในการแปลงข้อมูลที่เป็นสเปกตรัม ได้สมการที่ 1 เป็น None 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.949 ค่า SEC เท่ากับ 0.7027 ค่า SEP เท่ากับ 0.481 ค่าBias เท่ากับ 0.105 และค่า RPD เท่ากับ 2.746 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.15 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.13

TSS = 8.6031+2594.4854 log $(1/R_{852})$ - 9.1187 log $(1/R_{700})$+318 log $(1/R_{926})$

–2953.0815 log $(1/R_{884})$.....(13)

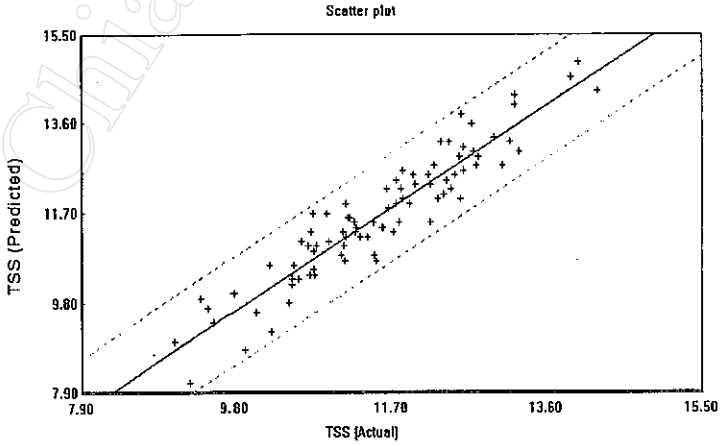


ภาพที่ 4.15 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MLR) None first derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

สมการที่ 2 เป็น None 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.938 ค่า SEC เท่ากับ 0.7049 ค่า SEP เท่ากับ 0.502 ค่า Bias เท่ากับ 0.104 และค่า RPD เท่ากับ 2.631 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในรูปที่ 4.16 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.14

TSS = 9.2169-706.7860 log$(1/R_{920})$+4468.3369 log $(1/R_{866})$-17.5768

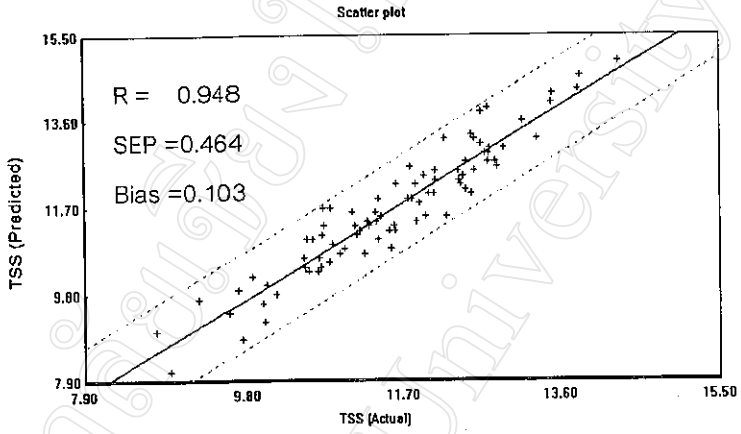
log$(1/R_{700})$ +3926.5596 log$(1/R_{880})$.....(4.14)



ภาพที่ 4.16 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MLR) None second derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

สมการที่ 3 เป็น NSDV 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.948 ค่า SEC เท่ากับ 0.6902 ค่า SEP เท่ากับ 0.464 ค่า Bias เท่ากับ 0.103 และค่า RPD เท่ากับ 2. เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.17 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.15

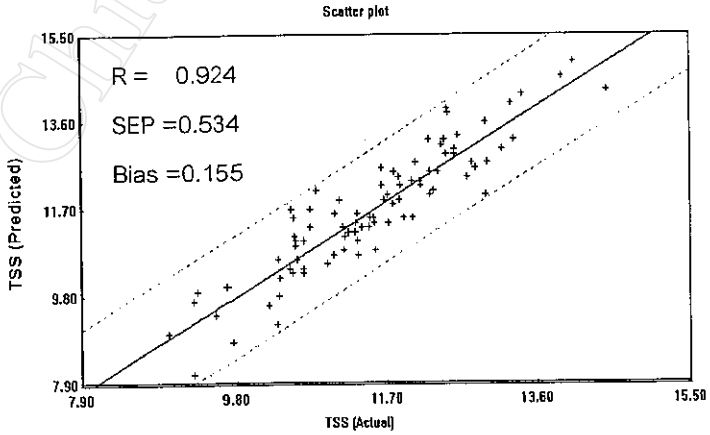
$$TSS = 8.3809-998.8589\log(1/R_{884})+1149.8597 \log (1/R_{852})-312.8415 \log(1/R_{792})-86.1818 \log(1/R_{988})-12.5915 \log(1/R_{700}) \quad ...(4.15)$$



ภาพที่ 4.17 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MLR) NSDV first derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

สมการที่ 4 เป็น NSDV 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.924 ค่า SEC เท่ากับ 0.6213 ค่า SEP เท่ากับ 0.534 ค่า Bias เท่ากับ 0.155 และค่า RPD เท่ากับ 2.451 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.18 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.16

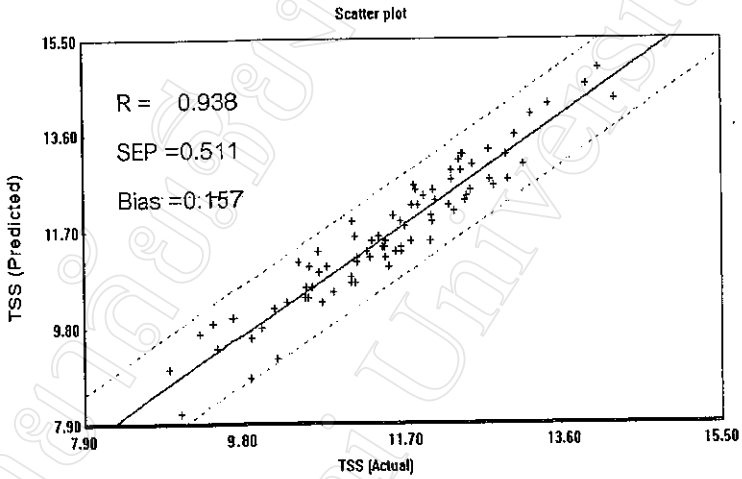
$$TSS = 14.0285+1050.5159 \log (1/R_{878}) +89.4129 \log (1/R_{860})+1268.0657 \log(1/R_{988})-8.9565 \log(1/R_{700}) \quad ...(4.15)$$



ภาพที่ 4.18 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MLR) NSDV second derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

สมการที่ 5 เป็น MSC 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.955 ค่า SEC เท่ากับ 0.5980 ค่า SEP เท่ากับ 0.567 ค่า Bias เท่ากับ 0.216 และค่า RPD เท่ากับ 2.287 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.19 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.17

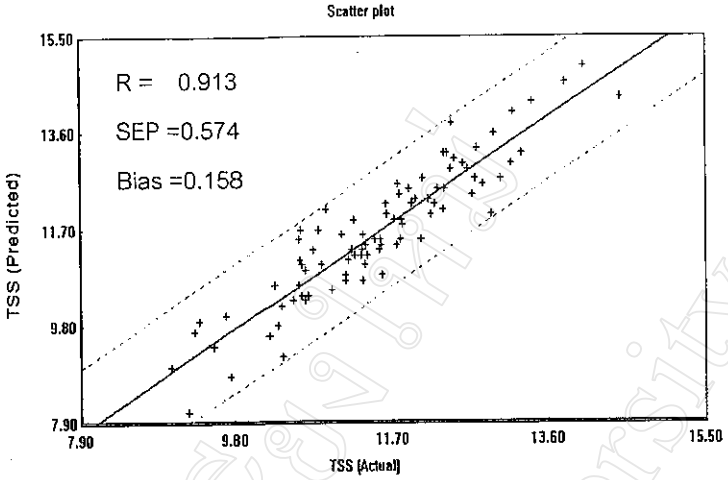
$$TSS = 13.0184+2366.8452 \log (1/R_{854}) -11.3013 \log (1/R_{700})+899.9865 \log(1/R_{1082}) -2401.9329 \log (1/R_{700}) \quad \text{....(4.17)}$$



ภาพที่ 4.19 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MLR) MSC first derivative ผลสัมพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

สมการที่ 6 เป็น MSC 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.922ค่า SEC เท่ากับ 0.6365 ค่า SEP เท่ากับ 0.539 ค่า Bias เท่ากับ 0.155 และค่า RPD เท่ากับ 2.432 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.20 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.18

$$TSS = 11.5090-21.0765 \log (1/R_{700}) +4376.8457 \log (1/R_{860})+3417.7886 \log(1/R_{878})+321.7431(1/R_{956}) \quad \text{.....(4.18)}$$

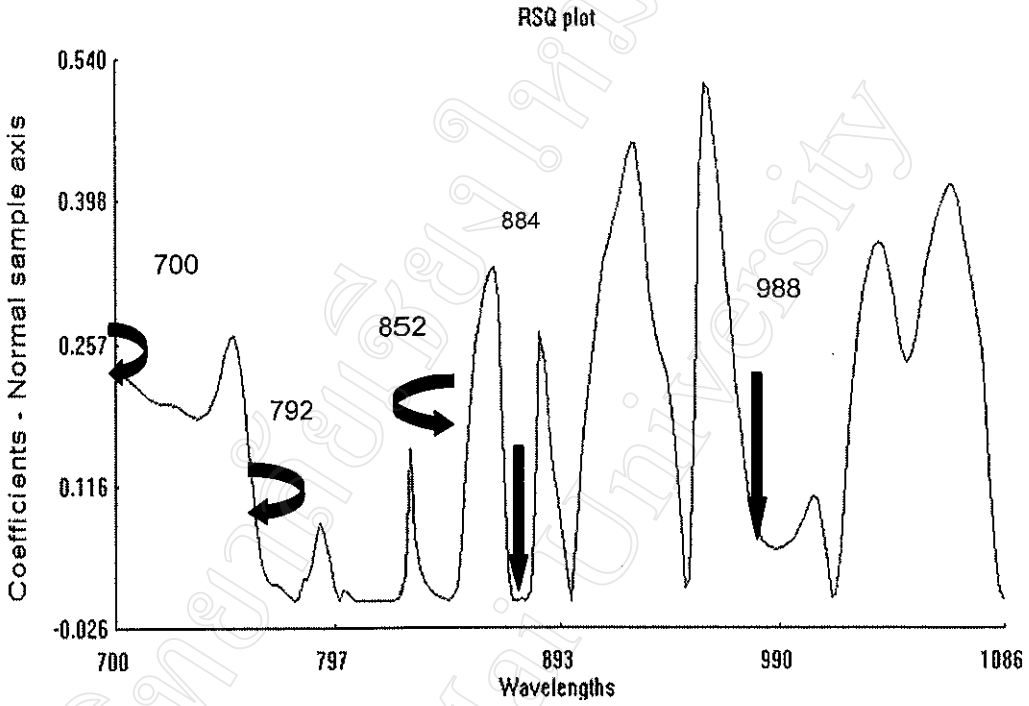


ภาพที่ 4.20 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MLR) MSC second derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

จากการเปรียบเทียบสมการ calibration ที่สร้างขึ้นมาจากวิธี MLR ตลอดช่วงความยาวคลื่น 700-1100 nm เพื่อใช้ในการทำนาย ค่า TSS ในผลส้มเขียวหวานพันธุ์สายน้ำผึ้ง ทั้งผลมีเปลือก และสามารถเลือกช่วงคลื่นที่มีความสัมพันธ์กับค่า (TSS) ค่าสถิติที่ใช้ตรวจสอบสมการ calibration ถูกต้องและสามารถนำไปใช้งานได้หรือไม่ คือ ค่า SEP เป็นค่าที่ได้จากการเปรียบเทียบค่า TSS ที่ได้จากเครื่อง NIR spectroscopy และค่า TSS ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธี reference method มีความถูกต้องมากน้อยแค่ไหน ควรมีค่าน้อยๆ ค่า Bias เป็นค่าเฉลี่ยของการทำนายค่า TSS ด้วยเครื่อง NIR spectroscopy กับค่าเฉลี่ยของ ค่า TSS ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธี reference method ว่ามีความแตกต่างกันหรือไม่ รวมทั้ง ค่า R เป็นค่าความสัมพันธ์ระหว่างค่าที่วัดได้จากเครื่อง NIR spectroscopy และค่าที่วัดได้จากวิธี reference method ควรมีค่าเข้าใกล้ 1 และ ค่า RPD เป็นอัตราส่วนระหว่างค่า SD ของค่า TSS ที่ได้จาก การวิเคราะห์ด้วยวิธี reference method กับค่า SEP ควรมีค่ามากกว่า 3 ถึงแสดงว่าสมการ calibration มีความเหมาะสมที่จะนำเครื่อง NIR มาใช้ในการทำนาย TSS ได้

สมการ calibration ที่ให้ค่าการทำนายที่เหมาะสม คือ สมการที่ 3 เป็น NSDV 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.936 ค่า SEC เท่ากับ 0.5955 ค่า SEP เท่ากับ 0.515 ค่า Bias เท่ากับ 0.207 และค่า RPD เท่ากับ 2.524 และความยาวคลื่นที่ 884, 852, 792, 988, 700 ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.21 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.19

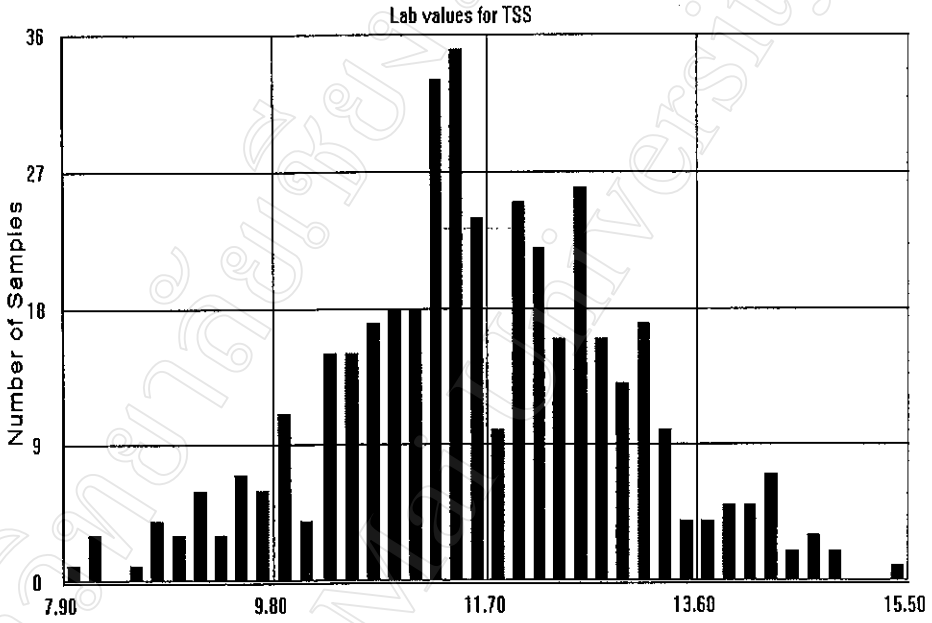
$$TSS = 8.3809-998.8589\log(1/R_{884})+1149.8597 \log (1/R_{852})-312.8415 \log(1/R_{792})-86.1818 \log(1/R_{988})-12.5915 \log(1/R_{700}) \quad \ldots(4.19)$$



ภาพที่ 4.21 การดูดกลืนแสงที่มีความสัมพันธ์กับปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

การเปรียบเทียบวิธีการวิเคราะห์ทางสถิติ ทั้ง 3 วิธี สามารถเลือกสมการ calibration ที่มีความเหมาะสม เพื่อนำมาทำนายค่า TSS ได้ 2 คือวิธี MLPS และวิธี MLR โดยวิธี MLPS มีข้อดีคือที่มีการเชื่อมโยงความสัมพันธ์ของค่าความเข้มข้นของข้อมูลที่ได้จากเครื่อง NIR spectroscopy ในการหาค่า loading weight (w) ในแต่ละแฟกเตอร์ทำให้การประเมินค่าความเข้มข้นมีความถูกต้องมากยิ่งขึ้น วิธี MLR สาเหตุที่เลือกสมการจากเทคนิค MLR เนื่องจากส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งเป็นตัวอย่างที่ประกอบไปด้วยสารหลายชนิด เพราะความรู้เกี่ยวกับการสั่นไหวของสารในแต่ละความยาวคลื่นเฉพาะ ทำให้สามารถเลือกความยาวคลื่นที่เกี่ยวข้องกับสารต่างๆ ที่มีอยู่ในผลส้มและนำมาสร้างสมการเพื่อทำนาย

แต่ถึงอย่างไรก็ตาม สมการ calibration ที่สร้างขึ้นมาจากข้อมูลปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) ของผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่วิเคราะห์ได้ เมื่อนำมาพรอตเป็นกราฟ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.22 จะเห็นได้มีการกระจายไม่สม่ำเสมอ ทำให้มีผลต่อการสร้างสมการ calibration ธงชัย (2545) กล่าวว่า ค่าทางเคมีที่ได้จากการวิเคราะห์ต้องมีการกระจายตัวอย่างสม่ำเสมอ จึงจะทำให้สมการ calibration ให้ผลการทำนายที่แม่นยำ



ภาพที่ 4.22 การกระจายตัวของปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) ของผลส้มเขียวหวานพันธุ์สายน้ำผึ้ง

4.2 ผลการเปรียบเทียบวิธีวิเคราะห์และวิธีทางคณิตศาสตร์ที่ช่วยปรับสเปกตรัม ในการสร้างสมการ calibration เพื่อประเมินปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) ของส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก ดังแสดงไว้ในตารางที่ 4.2

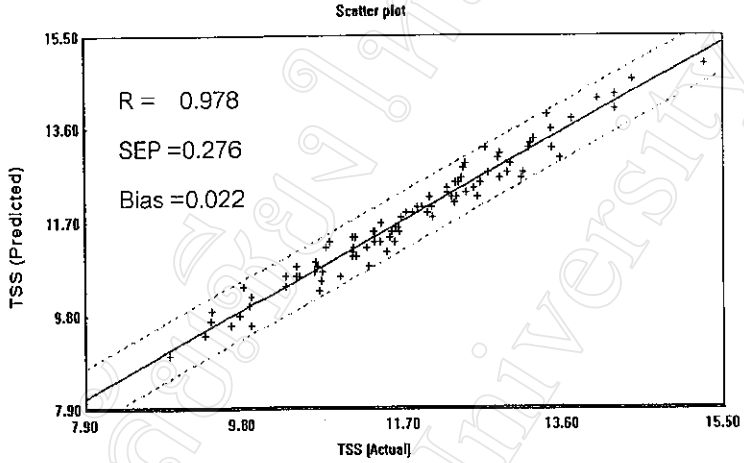
ตารางที่ 4.2 การเปรียบเทียบวิธีวิเคราะห์และวิธีทางคณิตศาสตร์ที่ช่วยปรับสเปกตรัมในการสร้างสมการ calibration เพื่อประเมินปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) ของส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

Regression	Scatter	R	SEC	SEP	Bias	RPD
MPLS	None 1	0.978	0.2979	0.276	0.022	4.681
	None 2	0.977	0.3068	0.273	0.055	4.718
	NSDV 1	0.981	0.3140	0.259	0.068	4.985
	NSDV 2	**0.981**	**0.3124**	**0.254**	**0.062**	**5.083**
	MSC 1	0.973	0.3269	0.299	0.055	4.318
	MSC 2	0.974	0.3126	0.290	0.056	4.441
PCR	**None 1**	**0.960**	**0.3904**	**0.357**	**0.024**	**3.616**
	None 2	0.957	0.4111	0.395	0.018	3.251
	NSDV 1	0.959	0.4163	0.367	0.018	3.550
	NSDV 2	0.957	0.4027	0.382	0.016	3.380
	MSC 1	0.959	0.4010	0.384	0.018	3.362
	MSC 2	0.957	0.4023	0.384	0.018	3.375
MLR	**None 1**	**0.976**	**0.5458**	**0.274**	**0.049**	**4.726**
	None 2	0.958	0.5570	0.369	0.078	3.509
	NSDV 1	0.958	0.5776	0.368	0.043	3.519
	NSDV 2	0.966	0.5648	0.355	0.036	3.648
	MSC 1	0.961	0.5786	0.366	0.043	3.538
	MSC 2	0.963	0.5661	0.350	0.049	3.700

จากการศึกษาในการวิเคราะห์ทางสถิติด้วยวิธี MPLS โดยใช้ค่าการดูดกลืนแสงที่มีความยาวช่วงคลื่นแสงตลอดช่วงคลื่น 700 -1100 nm ซึ่งที่มีความสัมพันธ์กับค่า TSS ในผลส้มทั้งผลที่ปอกเปลือก พบว่าวิธี MPLS ได้สมการ calibration 6 สมการ ดังแสดงไว้ในตารางที่ 4.2 และมีการใช้วิธีทางคณิตศาสตร์มาช่วยในการแปลงข้อมูลที่เป็นสเปกตรัม ได้สมการที่ 1 เป็น None 1 Derivative ได้ค่า R ค่า เท่ากับ 0.978 ค่า SEC เท่ากับ 0.2979 ค่า SEP เท่ากับ 0.276

ค่า Bias เท่ากับ 0.022 และค่า RPD เท่ากับ 4.681 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.23 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.20

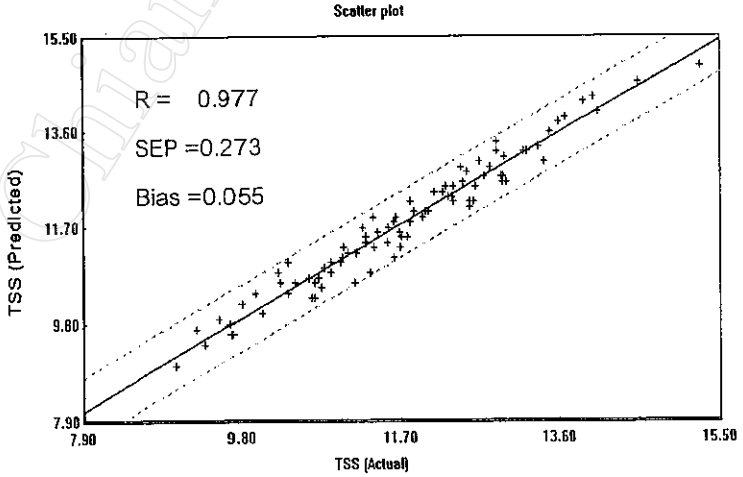
$$TSS = 3.7694-15.8719 \log (1/R_{700})-18.9323 (1/R_{702})\ldots\ldots+207.4923 \log (1/R_{1086})\ldots\ldots(4.20)$$



ภาพที่ 4.23 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MPLS) None first derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

สมการที่ 2 เป็น None 2 Derivative ได้ค่า R ค่าเท่ากับ 0.977 ค่า SEC เท่ากับ 0.3068 ค่า SEP เท่ากับ 0.273 ค่า Bias เท่ากับ 0.055 และค่า RPD เท่ากับ 4.718 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.24 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.21

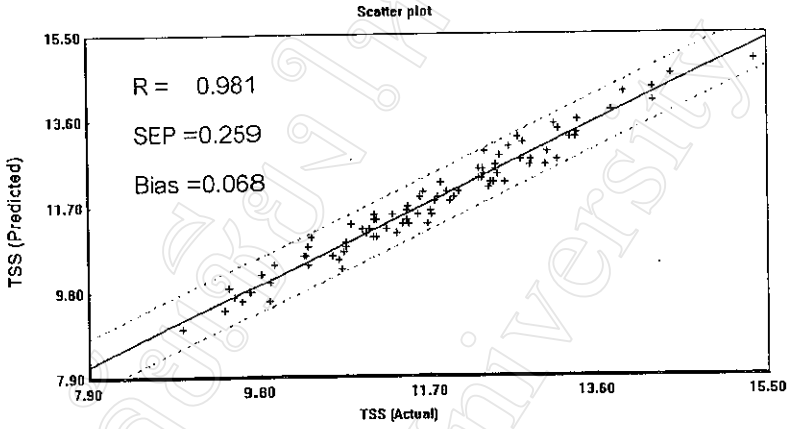
$$TSS = 9.7006+9.6420 \log (1/R_{700})+5.3077 (1/R_{702})\ldots\ldots+29.4343 \log (1/R_{1086})\ldots\ldots\ldots(4.21)$$



ภาพที่ 4.24 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MPLS) None second derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

สมการที่ 3 เป็น NSDV 1 Derivative ได้ค่า R ค่าเท่ากับ 0.981 ค่า SEC เท่ากับ 0.3140 ค่า SEP เท่ากับ 0.259 ค่า Bias เท่ากับ 0.068 และค่า RPD เท่ากับ 4.985 เมื่อนำสมการcalibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.25 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.22

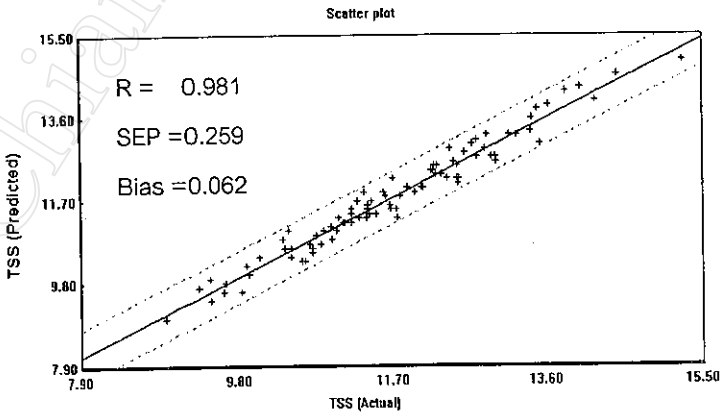
TSS = -8.6101-5.3248 log $(1/R_{700})$-6.7284 $(1/R_{702})$.....+41.0837 log $(1/R_{1086})$.....(4.22)



ภาพที่ 4.25 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MPLS) NSDV first derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

สมการที่ 4 เป็น NSDV 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.981 ค่า SEC เท่ากับ 0.3124 ค่า SEP เท่ากับ 0.254 ค่า Bias เท่ากับ 0.062 และค่า RPD เท่ากับ 5.083 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.26 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.23

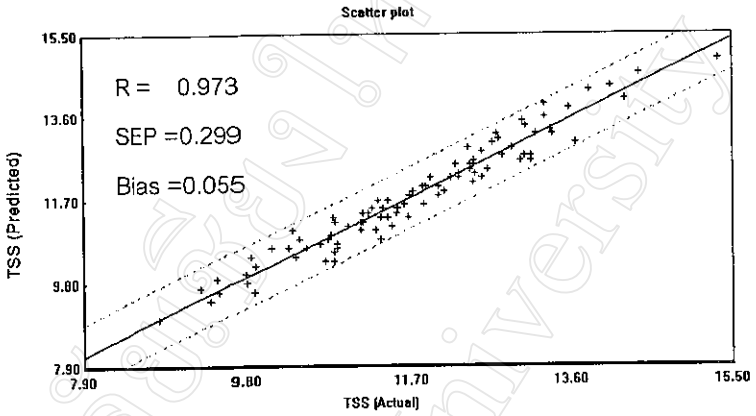
TSS = 12.2788+2.2000 log $(1/R_{700})$+0.7222 $(1/R_{702})$.....+29.6057 log $(1/R_{1086})$.....(4.23)



ภาพที่ 4.26 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MPLS) NSDV second derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

สมการที่ 5 เป็น MSC 1 Derivative ได้ค่า R ค่าเท่ากับ 0.973 ค่า SEC เท่ากับ 0.3269 ค่า SEP เท่ากับ 0.299 ค่า Bias เท่ากับ 0.055 และค่า RPD เท่ากับ 4.318 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.27 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.24

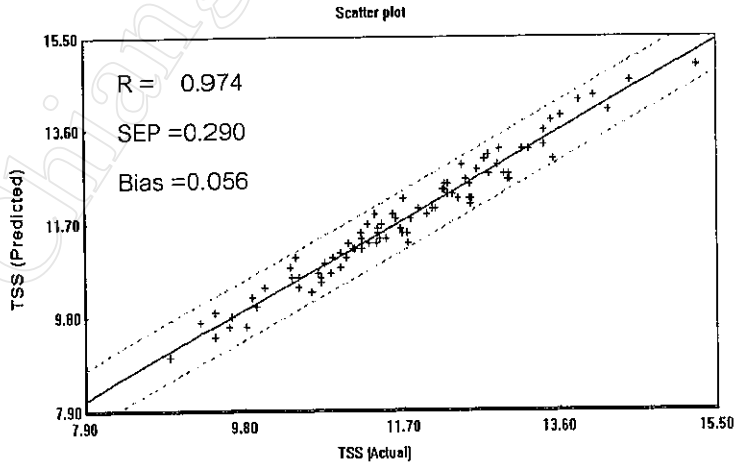
TSS = 7.9064-13.9504 log $(1/R_{700})$ .....-17.2267 $(1/R_{702}$log) +64.9150 $(1/R_{1086})$.....(4.24)



ภาพที่ 4.27 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MPLS) MSC first derivative ผลสัมพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

สมการที่ 6 เป็น MSC 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.974 ค่า SEC เท่ากับ 0.3126 ค่า SEP เท่ากับ 0.290 ค่า Bias เท่ากับ 0.056 และค่า RPD เท่ากับ 4.441 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.28 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.25

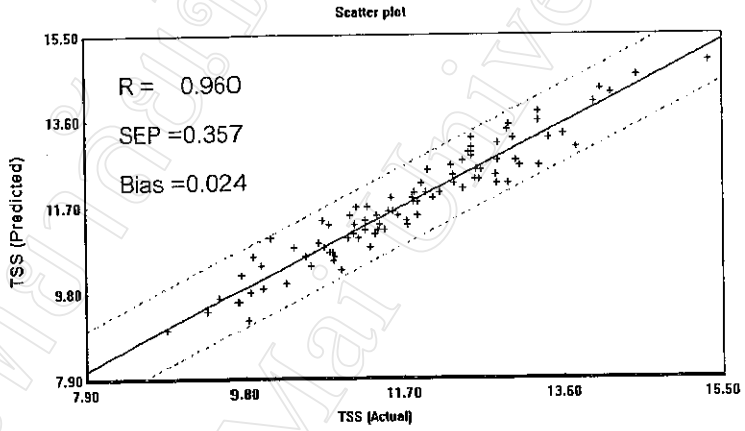
TSS = - 9.9713 +5.8298 log $(1/R_{700})$+1.9416 $(1/R_{702})$.....+82.8421 log $(1/R_{1086})$.....(4.25)



ภาพที่ 4.28 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MPLS) MSC second derivative ผลสัมพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

จากการศึกษาในการวิเคราะห์ทางสถิติด้วยวิธี PCR โดยใช้ค่าการดูดกลืนแสงที่มีความยาวช่วงคลื่นแสงตลอดช่วงคลื่น 700-1100 nm ซึ่งที่มีความสัมพันธ์กับค่า TSS ในผลส้มทั้งผลปอกเปลือก พบว่าวิธี PCR ได้สมการ 6 สมการ ดังตารางที่ 4.2 ซึ่งมีการใช้วิธีทางคณิตศาสตร์มาช่วยในการแปลงข้อมูลที่เป็นสเปกตรัม โดยสมการที่ 1 เป็น None 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.960 ค่า SEC เท่ากับ 0.3904 ค่า SEP เท่ากับ 0.357 ค่า Bias เท่ากับ 0.024 และค่า RPD เท่ากับ 3.616 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.29 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.26

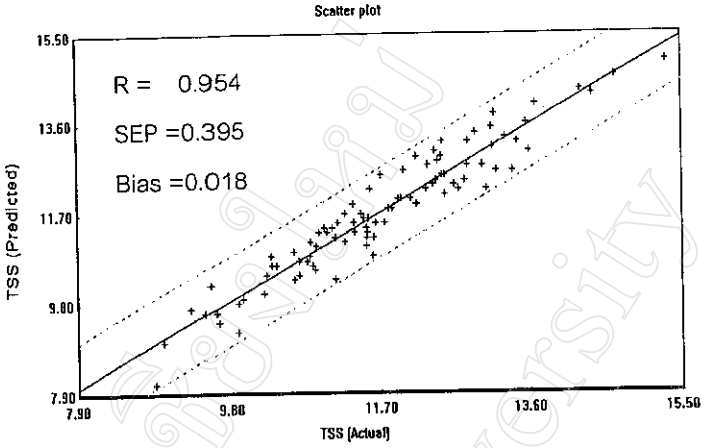
$$TSS = 10.4448+29.1435 \log (1/R_{700})-11.7516 (1/R_{702})...+107.2403 \log (1/R_{1086}).....(4.26)$$



ภาพที่ 4.29 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (PCR) None first derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

สมการที่ 2 เป็น None 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.954 ค่า SEC เท่ากับ 0.4111 ค่า SEP เท่ากับ 0.395 ค่า Bias เท่ากับ 0.018 และค่า RPD เท่ากับ 3.251 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.30 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.27

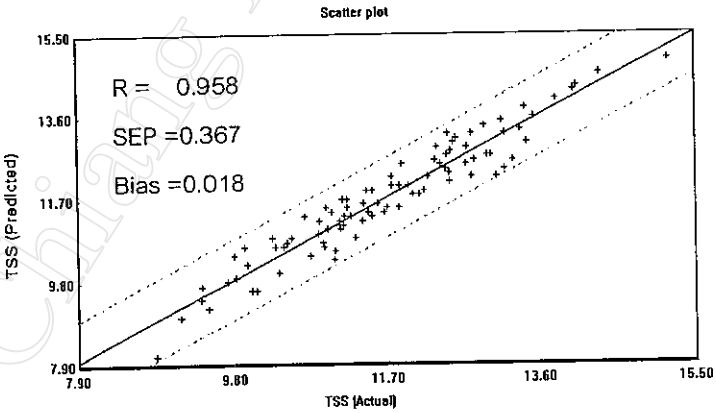
$$TSS = 7.9550 + 165.9868 \log (1/R_{700}) + 89.8988 (1/R_{702}) + .38.2164 \ldots \log (1/R_{1086}) \ldots\ldots (4.27)$$



ภาพที่ 4.30 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (PCR) None second derivative ผลสัมพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

สมการที่ 3 เป็น NSDV 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.958 ค่า SEC เท่ากับ 0.4163 ค่า SEP เท่ากับ 0.367 ค่า Bias เท่ากับ 0.018 และค่า RPD เท่ากับ 3.550 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.31 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.28

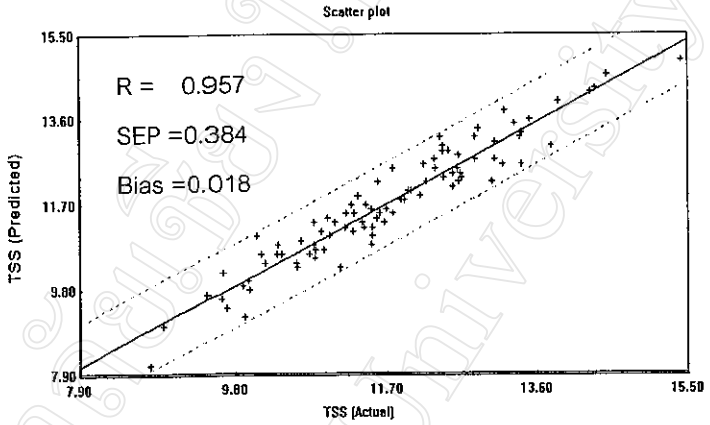
$$TSS = -18.4995 - 2.9599 \log (1/R_{700}) - 8.3193 \log (1/R_{702}) \ldots\ldots + 14.2317 \ldots \log (1/R_{1086}) \ldots\ldots (4.28)$$



ภาพที่ 4.31 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (PCR) NSDV first derivative ผลสัมพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

สมการที่ 4 เป็น NSDV 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.957 ค่า SEC เท่ากับ 0.4027 ค่า SEP เท่ากับ 0.384 ค่า Bias เท่ากับ 0.018 และค่า RPD เท่ากับ 3.380 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.32 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.29

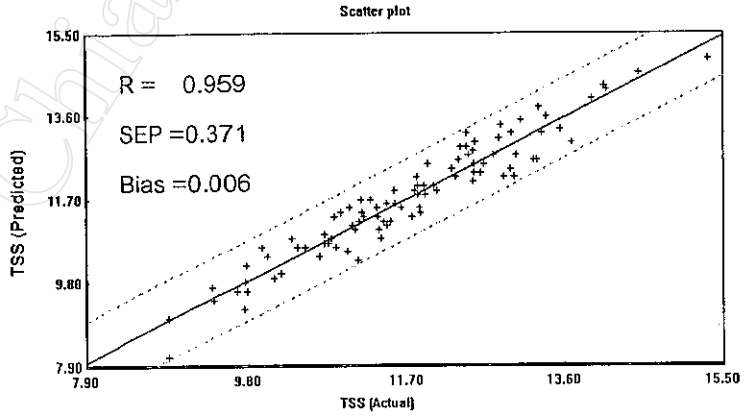
TSS = 4.9782+66.3376 log $(1/R_{700})$+32.6559 log$(1/R_{702})$.....+14.2317log $(1/R_{1086})$.....(4.29)



ภาพที่ 4.32 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (PCR) NSDV second derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

สมการที่ 5 เป็น MSC 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.959 ค่า SEC เท่ากับ 0.4010 ค่า SEP เท่ากับ 0.371 ค่า Bias เท่ากับ 0.006 และค่า RPD เท่ากับ 3.380 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.33 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.30

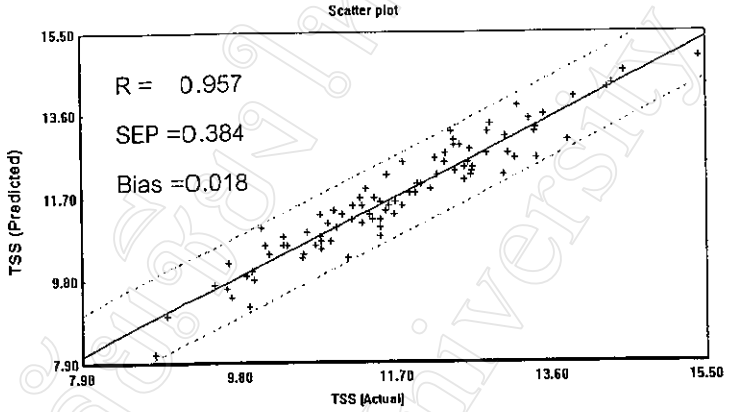
TSS =10.8224+70.8782 log $(1/R_{700})$17.6611 log$(1/R_{702})$.....+47.5080 log $(1/R_{1086})$.....(4.30)



ภาพที่ 4.33 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (PCR) MSC first derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

สมการที่ 6 เป็น MSC 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.957 ค่า SEC เท่ากับ 0.4023 ค่า SEP เท่ากับ 0.384 ค่า Bias เท่ากับ 0.018 และค่า RPD เท่ากับ 3.375 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.34 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.31

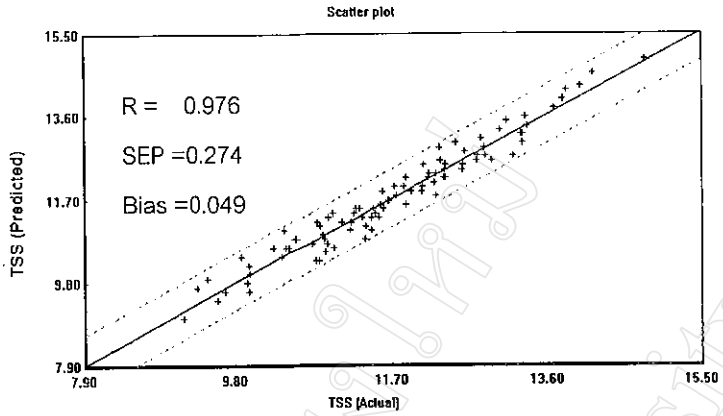
TSS=5.6155+179.1729 log $(1/R_{700})$+88.2685 log$(1/R_{702})$..+47.1686...log $(1/R_{1086})$....(4.31)



ภาพที่ 4.34 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (PCR) MSC second derivative ผลสัมพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

จากการศึกษาในการวิเคราะห์ทางสถิติด้วยวิธี MLR โดยใช้ค่าการดูดกลืนแสงที่มีความยาวช่วงคลื่นแสงตลอดช่วงคลื่น 700 -1100 nm และเลือกความยาวคลื่นที่มีความสัมพันธ์ซึ่งที่มีความสัมพันธ์กับค่า TSS ในผลส้มทั้งผลปอกเปลือก พบว่าวิธี MLR ได้สมการ calibration 6 สมการ ดังแสดงไว้ในตารางที่ 4.2 มีการใช้วิธีทางคณิตศาสตร์มาช่วยในการแปลงข้อมูลที่เป็นสเปกตรัม ได้สมการที่ 1 เป็น None 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.976 ค่า SEC เท่ากับ 0.5458 ค่า SEP เท่ากับ 0.274 ค่า Bias เท่ากับ 0.049 และค่า RPD เท่ากับ 4.726 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.35 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.32

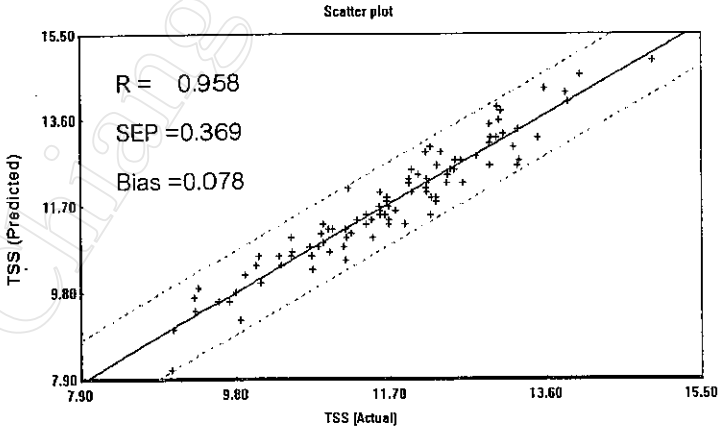
TSS = 7.0595+2604.3984 log $(1/R_{854})$–1880.6716 log $(1/R_{792})$-1341.4127 log$(1/R_{976})$+706.1049 log $(1/R_{764})$-2028.8467 log $(1/R_{1040})$-1885.8784 log $1/R_{934})$+4377.4536 log $(1/R_{1078})$..... .....(4.32)



ภาพที่ 4.35 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MLR) None first derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

สมการที่ 2 เป็น None 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.958 ค่า SEC เท่ากับ 0.5570 เท่ากับ 0.369 ค่า Bias เท่ากับ 0.078 และค่า RPD เท่ากับ 3.509 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.37 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.33

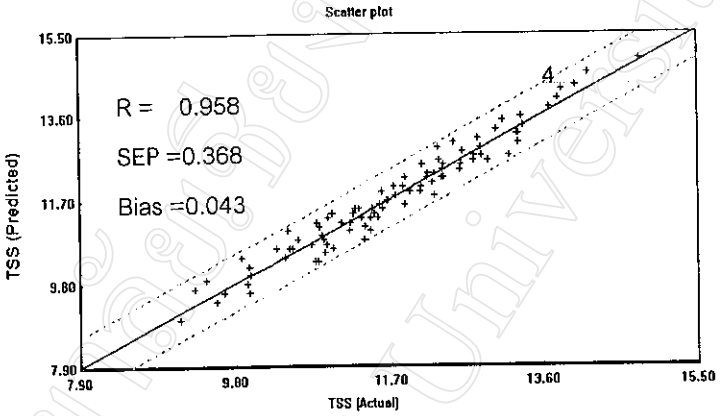
$$TSS = 10.0460-12233.0156 \log (1/R_{908})+4623.2314 \log (1/R_{924})+1417.8252 \log(1/R_{960})+9859.3662 \log (1/R_{906})+6275.3135 \log (1/R_{876})+2529.1597 \log 1/R_{1022} \quad (4.33)$$



ภาพที่ 4.36 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MLR) None second derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

สมการที่ 3 เป็น NSDV 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.958 ค่า SEC เท่ากับ 0.5776 ค่า SEP เท่ากับ 0.368 ค่า Bias เท่ากับ 0.043 และค่า RPD เท่ากับ 3.519 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.37 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.34

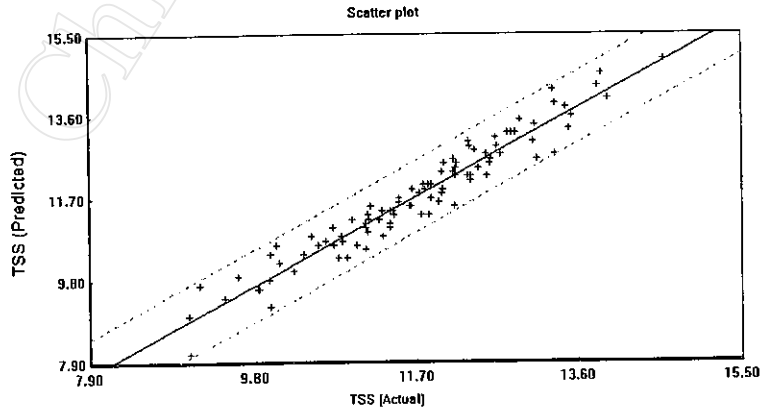
$$TSS = 5.9162+196.9348 \log (1/R_{964})-1253.5767 \log (1/R_{792})+2541.3145\log(1/R_{868}) -1051.3237 \log (1/R_{890})-654.4250 \log (1/R_{972}) \quad (4.34)$$



ภาพที่ 4.37 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MLR) NSDV first derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

สมการที่ 4 เป็น NSDV 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.966 ค่า SEC เท่ากับ 0.5648 ค่า SEP เท่ากับ 0.355 ค่า Bias เท่ากับ 0.036 และค่า RPD เท่ากับ 3.648 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.38 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.35

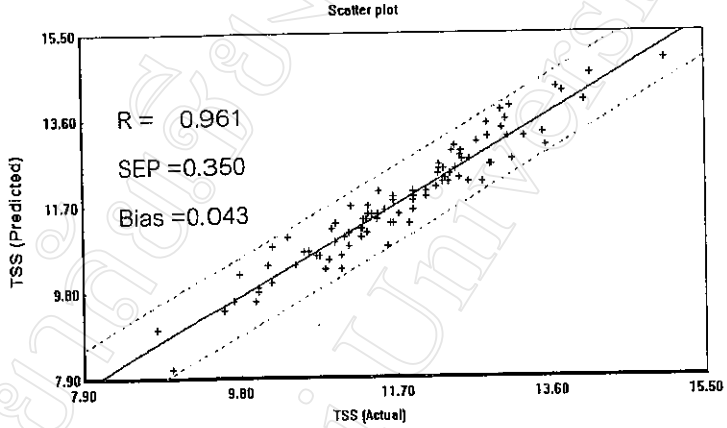
$$TSS = 18.0403+447.9653 \log (1/R_{1010}) +523.1775 \log (1/R_{960})+217904050 \log(1/R_{888})+1930 \log (1/R_{878})+1178.6615 \log (1/R_{930}) \quad (4.35)$$



ภาพที่ 4.38 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MLR) NSDV second derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

สมการที่ 5 เป็น MSC 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.961 ค่า SEC เท่ากับ 0.5786 ค่า SEP เท่ากับ 0.366 ค่า Bias เท่ากับ 0.043 และค่า RPD เท่ากับ 3.588 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.39 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.36

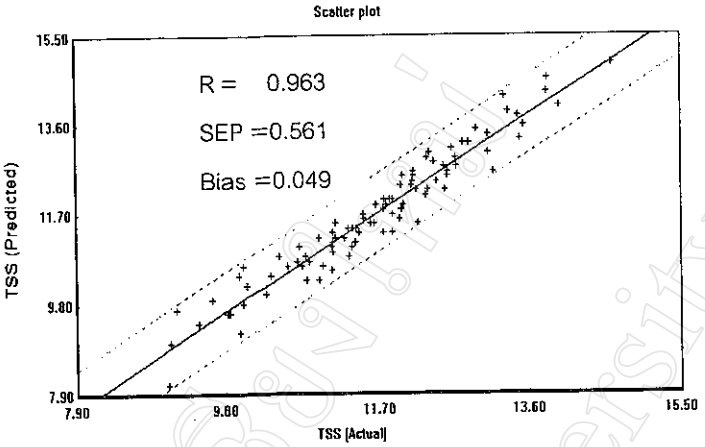
TSS = $9.9843+1900.9092\log(1/R_{908})-572.6026\log(1/R_{770})-3111.0068\log(1/R_{896})+6391.1514\log(1/R_{858})-4113.1143\log(1/R_{818})+819.0703\log(1/R_{752})$.....(4.36)



ภาพที่ 4.39 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MLR) MSC first derivative ผลสัมพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

สมการที่ 6 เป็น MSC 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.963 ค่า SEC เท่ากับ 0.5661 ค่า SEP เท่ากับ 0.350 ค่า Bias เท่ากับ 0.049 และค่า RPD เท่ากับ 3.700 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.40 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.37

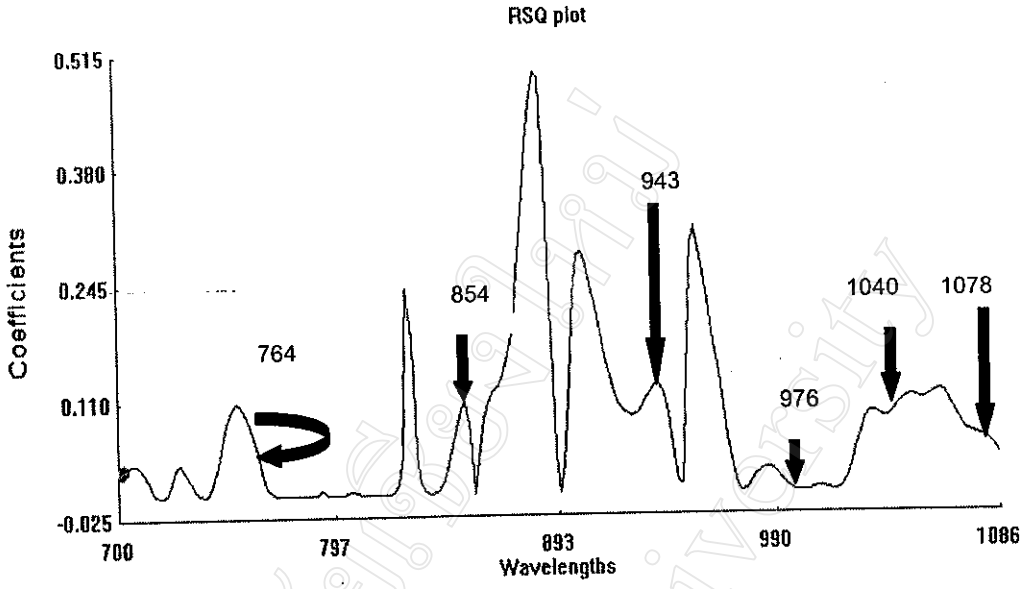
TSS = $10.3565+5153.9536\log(1/R_{878})+3199.6567\log(1/R_{930})+1416.9861\log(1/R_{960})+5923.7319\log(1/R_{888})+1229.7251\log(1/R_{1010})$.....(4.37)



ภาพที่ 4.40 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MLR) MSC second derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

จากผลการทดลอง โดยการเปรียบเทียบเทคนิควิธีการวิเคราะห์ทางสถิติ ทั้ง 3 วิธีคือ MPLS PCR และ MLR และนำวิธีการทางคณิตศาสตร์ที่มาช่วยในการแปลงข้อมูลที่เป็นสเปกตรัม เพื่อกำจัดสิ่งรบกวนที่มีอยู่ในสเปกตรัมแล้ว และมีหลักในการพิจารณาจากค่าสถิติเช่นเดียวกันกับผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งทั้งผลที่มีเปลือก พบว่าสมการ calibration ที่เหมาะสมสามารถนำมาทำนายผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งทั้งผลปอกเปลือก โดยเทคนิค MPLS ได้สมการที่ 4 ซึ่งมีการใช้เทคนิค NSDV second derivative และมีค่า R เท่ากับ 0.981 ค่า SEP เท่ากับ 0.254 ค่า Bias เท่ากับ 0.062 ค่า RPD เท่ากับ 5.083 เทคนิค PCR เป็นสมการที่ 3 ซึ่งมีการใช้ None First Derivative และมีค่า R เท่ากับ 0.960 ค่า SEP เท่ากับ 0.357 ค่า Bias เท่ากับ 0.024 ค่า RPD เท่ากับ 3.616 เทคนิค MLR เป็นสมการที่ 1 ซึ่งมีการใช้ None First Derivative และมีค่า R เท่ากับ 0.976 ค่า SEP เท่ากับ 0.274 ค่า Bias เท่ากับ 0.049 ค่า RPD เท่ากับ 4.726 โดยค่าดูดกลืนแสงที่ช่วงความยาวคลื่น 854, 972, 976, 764, 1040, 934, 1078 ที่มีความสัมพันธ์กับปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.41 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.38

$$TSS = 7.0595+2604.3984 \log (1/R_{854})-1880.6716 \log (1/R_{792})-1341.4127 \log(1/R_{976})+706.1049 \log (1/R_{764})-2028.8467 \log (1/R_{1040})-1885.8784 \log 1/R_{934})+4377.4536 \log (1/R_{1078}) \quad (4.38)$$



ภาพที่ 4.41 การดูดกลืนแสงที่มีความสัมพันธ์กับปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) ผลส้มสายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

การเลือกใช้สมการ calibration ที่ได้จาก เทคนิค MPLS และ MLR สามารถนำมาทำนายผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งทั้งผลมีเปลือกและปอกเปลือกได้อย่างเหมาะสม ซึ่งสอดคล้องกับงานวิจัยที่เลือกใช้วิธี MLR ที่ความยาวช่วงคลื่น 914, 796, 745, 789 nm ที่มีความสัมพันธ์กับปริมาณ TSS ในผลส้ม Satsuma ซึ่งมีค่า R เท่ากับ 0.98 ซึ่งให้ผลการทำนายที่แม่นยำ (Kawano, *et al* 1993) การเลือกความยาวช่วงคลื่นที่ 901, 884, 1060 nm ด้วยวิธี MLR มาทำนายค่า TSS และเปอร์เซ็นต์น้ำหนักแห้งในผลมะม่วง (Sarawong *et al*, 2001) และการเลือกใช้วิธี MLR มาทำนายค่า TSS และ TA ในผลมะม่วง (Schmilovitch, *et al* 1999)

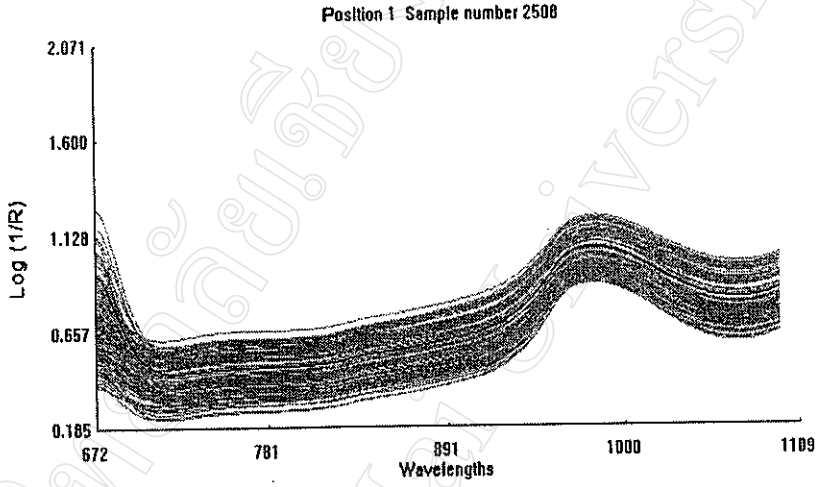
สำหรับเทคนิค PCR ที่นำมาวิเคราะห์ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งทั้งผลมีเปลือกและผลส้มที่ปอกเปลือกจะเห็นได้ว่าให้ค่าต่ำกว่าเทคนิค MPLS และ MLR ทั้งนี้เนื่องจากเทคนิค PCR หลังจากการทำ Principle Component Analysis (PCA) กับข้อมูลที่เป็นตัวแปรตัวแปรอิสระที่ได้จากข้อมูลของสเปกตรัม เพื่อสร้างองค์ประกอบหรือตัวแปรใหม่ที่เรียกว่า New Factor ก่อนแล้วจึงนำค่าของตัวแปรใหม่ที่สร้างขึ้นมาหาความสัมพันธ์กับค่า TSS ซึ่งเป็นตัวแปรตามที่ได้มาจากวิธี reference methods เพื่อสร้างสมการ calibration เมื่อเปรียบเทียบกับ MPLS และ MLR เทคนิค PCR โดยพิจารณาจากค่าสถิติแล้วค่าที่ได้ค่อนข้างต่ำ ทำให้ผลประเมินมีความแม่นยำลดน้อยลง

4.3 ผลการเปรียบเทียบวิธีวิเคราะห์และวิธีทางคณิตศาสตร์ที่ช่วยปรับสเปกตรัมในการสร้างสมการ calibration เพื่อประเมิน ปริมาณกรดที่ไตเตรทได้ (TA) ของส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก ดังแสดงไว้ในตารางที่ 4.3

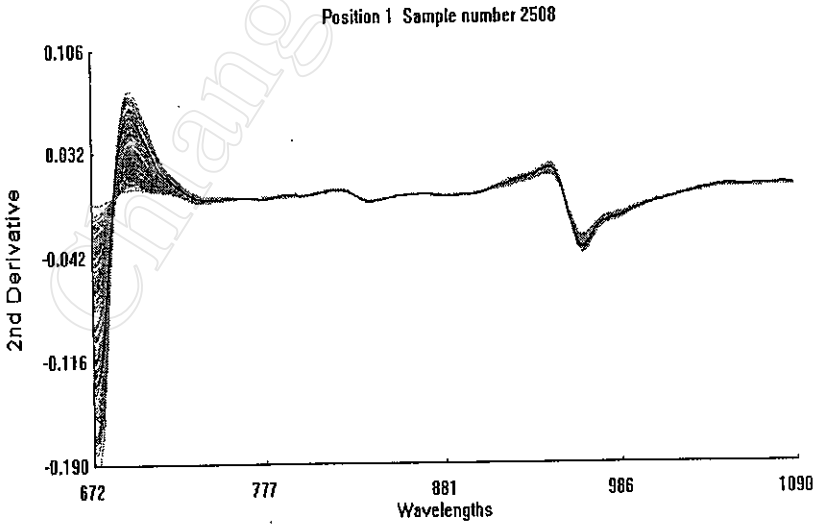
ตารางที่ 4.3 การเปรียบเทียบวิธีวิเคราะห์และวิธีทางคณิตศาสตร์ที่ช่วยปรับสเปกตรัมในการสร้างสมการ calibration เพื่อประเมินปริมาณกรดที่ไตเตรทได้ (TA) ของส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

Regression	Scatter	R	SEC	SEP	Bias	RPD
MPLS	None 1	0.636	0.0633	0.069	0.002	1.290
	None 2	0.596	0.0635	0.072	0.004	1.264
	NSDV 1	0.536	0.0678	0.070	-0.007	1.243
	NSDV 2	0.605	0.0639	0.070	-0.002	1.286
	MSC 1	0.560	0.0667	0.075	-0.002	1.160
	MSC 2	0.578	0.0631	0.073	0.005	1.205
PCR	None 1	0.544	0.0704	0.075	-0.005	1.187
	None 2	0.573	0.0700	0.073	0.000	1.205
	NSDV 1	0.513	0.0693	0.073	-0.006	1.192
	NSDV 2	0.562	0.0688	0.074	0.000	1.189
	MSC 1	0.532	0.0687	0.076	-0.003	1.145
	MSC 2	**0.563**	**0.0694**	**0.074**	**-0.001**	**1.189**
MLR	None 1	0.529	0.0649	0.073	-0.005	1.205
	None 2	0.445	0.0696	0.072	-0.012	1.208
	NSDV 1	0.584	0.0647	0.069	-0.007	1.275
	NSDV 2	0.503	0.0682	0.080	-0.006	1.125
	MSC 1	**0.600**	**0.0657**	**0.073**	**-0.003**	**1.178**
	MSC 2	0.487	0.0665	0.076	-0.005	1.171

การสร้างสมการ calibration จากเทคนิค MPLS PCR และ MLR ได้นำวิธีทางคณิตศาสตร์สามารถช่วยในการแปลงข้อมูลที่เป็นสเปกตรัม เพื่อลดปัจจัยที่มีผลต่อสเปกตรัม เนื่องจากสเปกตรัมของผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก ซึ่งเป็น original data ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.42 peak จะไม่ชัดเจน ดังนั้นเมื่อนำเอาวิธีคณิตศาสตร์ทำการแปลงข้อมูลโดยวิธี second derivative สเปกตรัมที่ได้จะมีรูปร่างต่างไปจากสเปกตรัมเริ่มต้น ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.43 เพราะเป็นการหาความชันของสเปกตรัมสองครั้งเพื่อแยก peak ออกมาให้ชัดเจนมากขึ้น



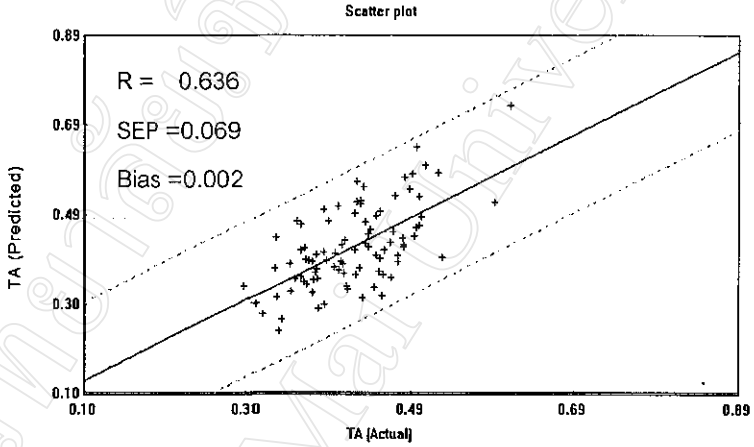
ภาพที่ 4.42 spectrum (original data) ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก



ภาพที่ 4.43 spectrum (derivative data) ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

จากการศึกษาในการวิเคราะห์ทางสถิติด้วยเทคนิค MPLS โดยใช้ค่าการดูดกลืนแสงที่มีความยาวช่วงคลื่นแสงตลอดช่วงคลื่น 700 –1100 nm ซึ่งที่มีความสัมพันธ์กับค่า TA ของผลส้มทั้งผลมีเปลือก พบว่าเทคนิค MPLS ได้สมการ calibration 6 สมการ ดังแสดงไว้ในตารางที่ 4.3 โดยมีการใช้วิธีทางคณิตศาสตร์มาช่วยในการแปลงข้อมูลที่เป็นสเปกตรัม ซึ่งได้สมการที่ 1 เป็น None 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.636 ค่า SEC เท่ากับ 0.0633 ค่า SEP เท่ากับ 0.069 ค่า Bias เท่ากับ 0.002 และค่า RPD เท่ากับ 1.290 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนาย ได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.44 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.39

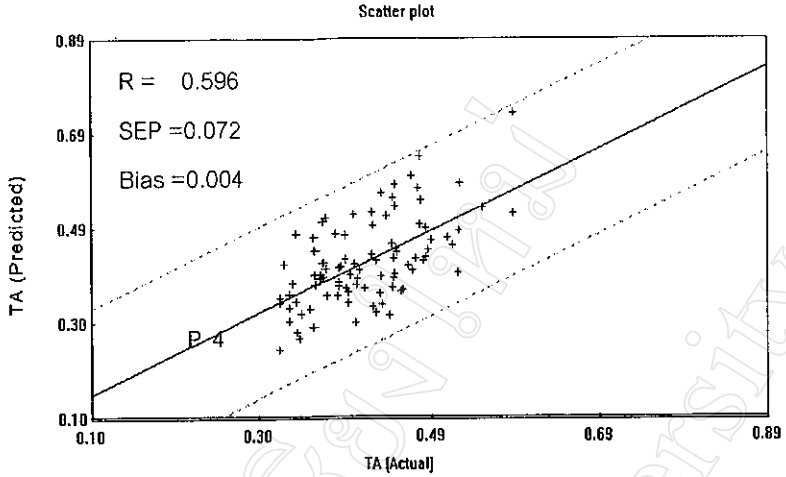
$TA = 0.1858+0.2423 \log (1/R_{700})+0.2569 \log (1/R_{702})\ldots\ldots-51.2771 \log (1/R_{1090})\ldots\ldots(4.39)$



ภาพที่ 4.44 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MPLS) None first derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

สมการที่ 2 เป็น None 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.596 ค่า SEC เท่ากับ 0.0635 ค่า SEP เท่ากับ 0.072 ค่า Bias เท่ากับ 0.004 และค่า RPD เท่ากับ 1.264 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนาย ได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.45 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.40

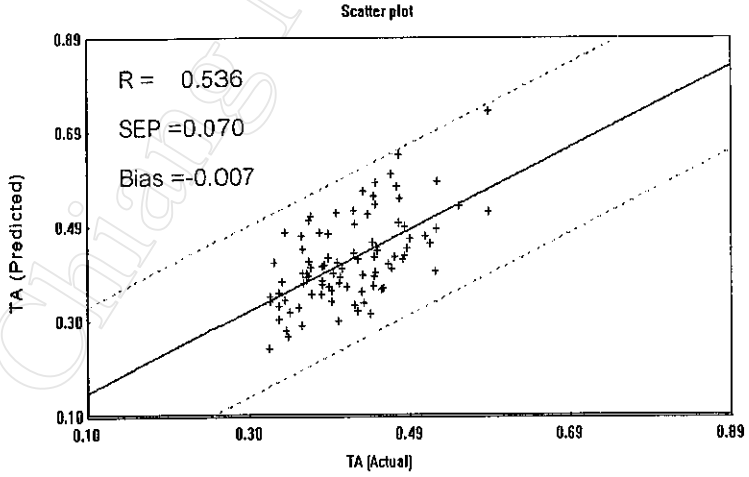
$TA = 0.1356+0.2016 \log (1/R_{700})+ 0.2257 \log (1/R_{702})\ldots\ldots+3.5755 \log (1/R_{1090})\ldots\ldots(4.40)$



ภาพที่ 4.45 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MPLS) None second derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

สมการที่ 3 เป็น NSDV 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.536 ค่า SEC เท่ากับ 0.0678 ค่า SEP เท่ากับ 0.070 ค่า Bias เท่ากับ –0.007 และค่า RPD เท่ากับ 1.243 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.46 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.41

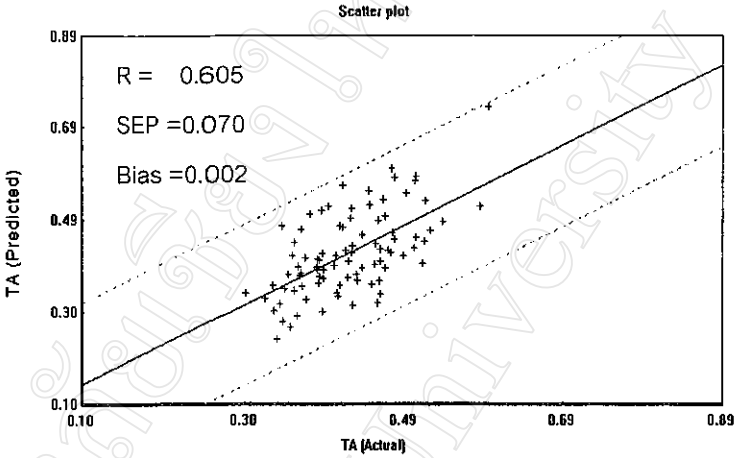
$$TA = 0.3163 - 0.0598 \log(1/R_{700}) - 0.0723 \log(1/R_{702}) \ldots\ldots + 1.7835 \log(1/R_{1086}) \ldots\ldots (4.41)$$



ภาพที่ 4.46 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MPLS) NSDV first derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

สมการที่ 4 เป็น NSDV 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.605 ค่า SEC เท่ากับ 0.0639 ค่า SEP เท่ากับ 0.070 ค่า Bias เท่ากับ –0.002 และค่า RPD เท่ากับ 1.286 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.47 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.42

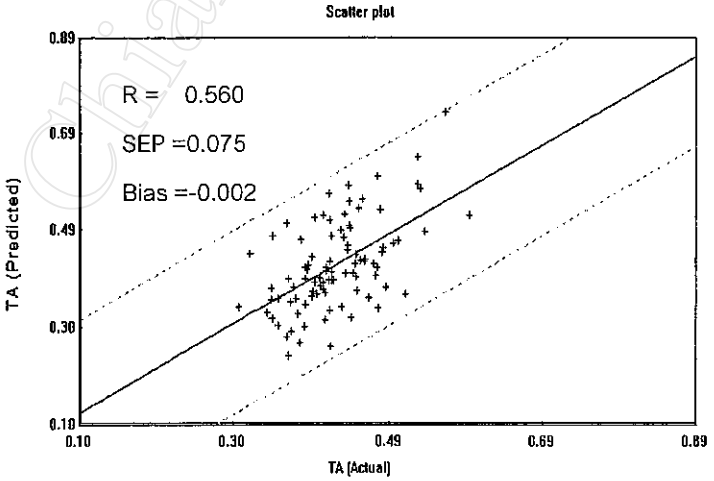
$$TA = 0.3596+0.0050 \log (1/R_{700})+0.052 \log (1/R_{702})\ldots\ldots\ldots+0.3840 \log (1/R_{1086})\ldots\ldots\ldots(4.42)$$



ภาพที่ 4.47 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MPLS) NSDV second derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

สมการที่ 5 เป็น MSC 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.560 ค่า SEC เท่ากับ 0.0667 ค่า SEP เท่ากับ 0.075 ค่า Bias เท่ากับ –0.002 และค่า RPD เท่ากับ 1.160 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.48 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.43

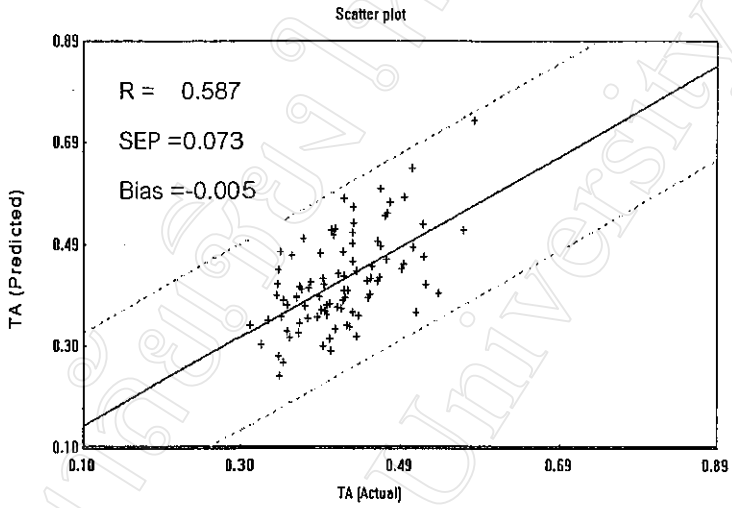
$$TA = 0.3271-0.0218 \log (1/R_{700})-0.0231 \log (1/R_{702})\ldots+17.9306 \log (1/R_{1086})\ldots\ldots\ldots(4.43)$$



ภาพที่ 4.48 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MPLS) MSC first derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

สมการที่ 6 เป็น MSC 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.587 ค่า SEC เท่ากับ 0.0631 ค่า SEP เท่ากับ 0.073 ค่า Bias เท่ากับ 0.005 และค่า RPD เท่ากับ 1.205 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.49 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.44

$$TA = -0.0007-0.3404 \log (1/R_{700})-0.3588 \log (1/R_{702})\ldots\ldots\ldots-0.38082 \log (1/R_{1086})\ldots\ldots\ldots(4.44)$$



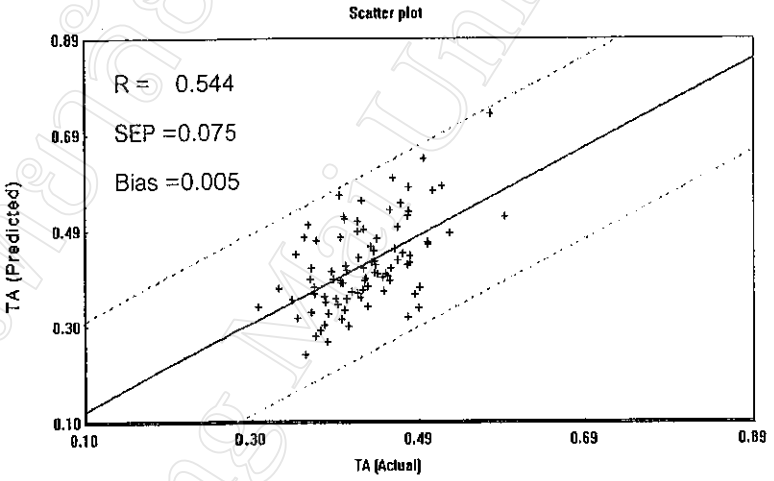
ภาพที่ 4.49 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MPLS) MSC second derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

จากการเปรียบเทียบสมการ calibration ที่สร้างขึ้นมาจากเทคนิค MPLS ตลอดช่วงความยาวคลื่น 700-1100 nm เพื่อใช้ในการทำนาย ปริมาณกรดที่ไตเตรทได้ (TA) ในผลส้มเขียวหวานพันธุ์สายน้ำผึ้งทั้งผลมีเปลือก ค่าสถิตที่ใช้ตรวจสอบสมการ calibration ถูกต้องและสามารถนำไปใช้งานได้หรือไม่ คือค่า SEP เป็นค่าที่ได้จากการเปรียบเทียบค่า TA ที่ได้จากเครื่อง NIR spectroscopy และค่า TA ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธี reference method มีความถูกต้องมากน้อยแค่ไหน ควรมีค่าน้อยๆ ค่า Bias เป็นค่าเฉลี่ยของการทำนายค่า TA ด้วยเครื่อง NIR spectroscopy กับค่าเฉลี่ยของ ค่า TA ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธี reference method ว่ามีความแตกต่างกันหรือไม่ รวมทั้ง ค่า R เป็นค่าความสัมพันธ์ระหว่างค่าที่วัดได้จากเครื่อง NIR spectroscopy กับค่าที่วัดได้จากวิธี reference method ควรมีค่าเข้าใกล้ 1 และค่า RPD เป็นอัตราส่วนระหว่างค่า SD ของค่า TA ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธี reference method กับค่า SEP ควรมากกว่า 3 ถึงแสดงว่าสมการ calibration มีความเหมาะสม ที่จะนำเครื่อง NIR มาใช้ในการทำนาย TA ได้

สมการ calibration ที่ให้ค่าการทำนายที่เหมาะสม คือ สมการที่ 1 เป็น None 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.636 ค่า SEC เท่ากับ 0.0633 ค่า SEP เท่ากับ 0.069 ค่า Bias เท่ากับ 0.002 และค่า RPD เท่ากับ 1.290

จากการศึกษาในการวิเคราะห์ทางสถิติด้วยเทคนิค PCR ได้ค่าการดูดกลืนแสงที่มีความยาวช่วงคลื่นแสงตลอดช่วงคลื่น 700-1100 นาโนเมตร ซึ่งที่มีความสัมพันธ์กับค่า TA ของผลส้มทั้งผลมีเปลือก พบว่าเทคนิค PCR ได้สมการ calibration 6 สมการ ดังแสดงไว้ในตารางที่ 4.3 โดยมีการใช้วิธีทางคณิตศาสตร์มาช่วยในการแปลงข้อมูลที่เป็นสเปกตรัม ได้สมการที่ 1 เป็น None 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.544 ค่า SEC เท่ากับ 0.0704 ค่า SEP เท่ากับ 0.075 ค่า Bias เท่ากับ –0.005 และค่า RPD เท่ากับ 1.187 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.50 และ เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.45

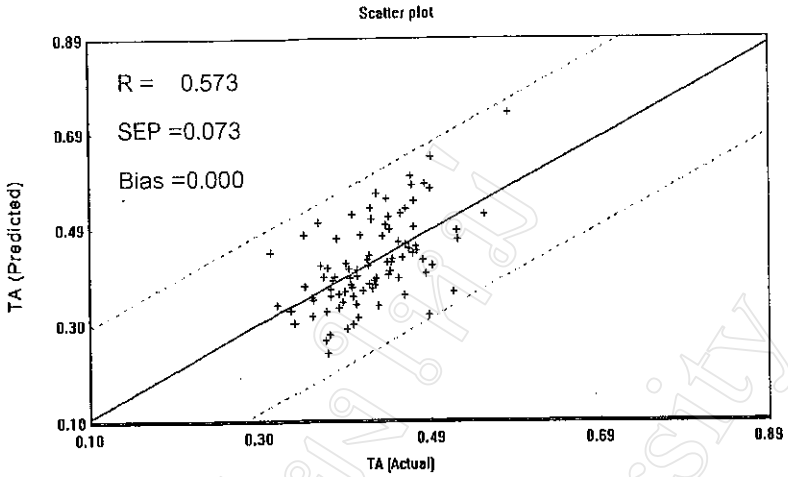
$$TA = 0.2108-1.4095 \log (1/R_{700})-0.7584 \log (1/R_{702})\ldots\ldots\ldots+4.3220 \log (1/R_{1086})\ldots\ldots\ldots(4.45)$$



ภาพที่ 4.50 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (PCR) None first derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

สมการที่ 2 เป็น None 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.573 ค่า SEC เท่ากับ 0.0700 ค่า SEP เท่ากับ 0.073 ค่า Bias เท่ากับ 0.000 และค่า RPD เท่ากับ 1.205 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.51 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.46

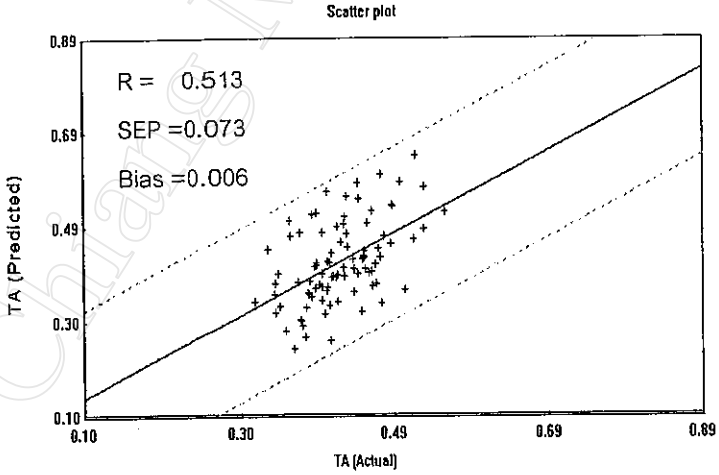
$$TA = 0.1444+4.5149 \log (1/R_{700})-0.0051 \log (1/R_{702})\ldots\ldots-3.4117 \log (1/R_{1086})\ldots\ldots\ldots(4.46)$$



ภาพที่ 4.51 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (PCR) None second derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

สมการที่ 3 เป็น NSDV 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.513 ค่า SEC เท่ากับ 0.0693 ค่า SEP เท่ากับ 0.073 ค่า Bias เท่ากับ –0.006 และค่า RPD เท่ากับ 1.192 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.52 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.47

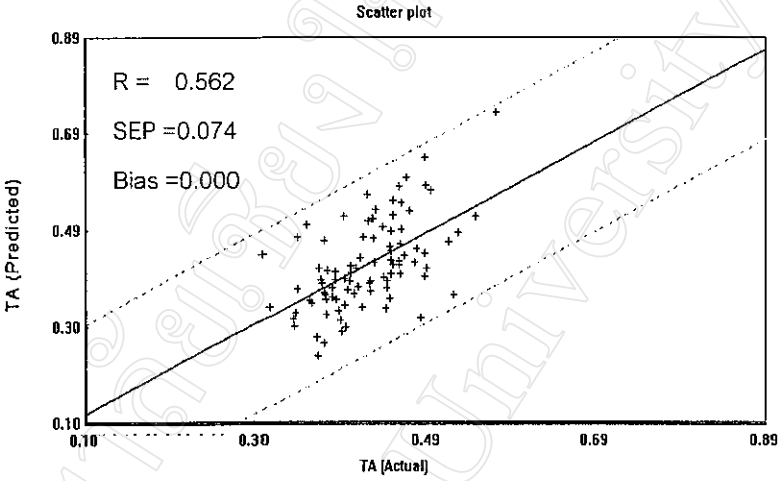
$$TA = -0.1316+0.7844 \log (1/R_{700})-0.1605 \log (1/R_{702})\ldots\ldots+2.0316 \log (1/R_{1086})\ldots\ldots(4.47)$$



ภาพที่ 4.52 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (PCR) NSDV first derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

สมการที่ 4 เป็น NSDV 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.562 ค่า SEC เท่ากับ 0.0688 ค่า SEP เท่ากับ 0.074 ค่า Bias เท่ากับ 0.000 และค่า RPD เท่ากับ 1.189 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.53 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.48

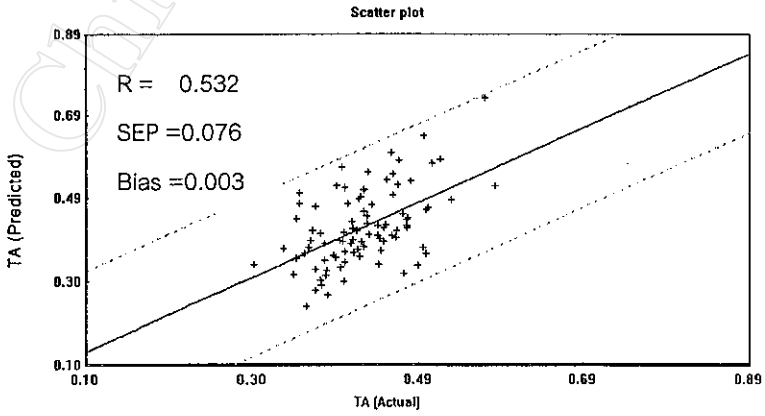
$TA = 0.0265+1.1900 \log (1/R_{700})-0.1416 \log (1/R_{702})\ldots\ldots\ldots\ldots-.6941 \log (1/R_{1086})\ldots\ldots(4.48)$



ภาพที่ 4.53 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (PCR) NSDV second derivative ผลสัมพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

สมการที่ 5 เป็น MSC 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.532 ค่า SEC เท่ากับ 0.0687 ค่า SEP เท่ากับ 0.076 ค่า Bias เท่ากับ –0.003 และค่า RPD เท่ากับ 1.145 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.54 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.49

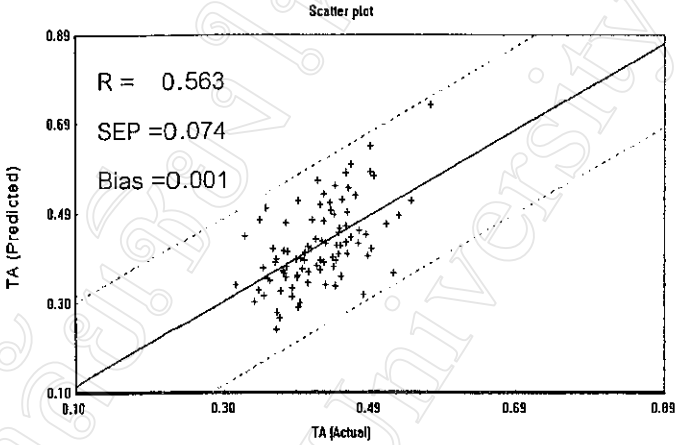
$TA = -0.1126-3.5321 \log (1/R_{700})-1.5504 \log (1/R_{702})\ldots\ldots\ldots\ldots+4.770 \log (1/R_{1086})\ldots\ldots(4.49)$



ภาพที่ 4.54 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ vali dation set (PC MSC first derivative ผลสัมพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

สมการที่ 6 เป็น MSC 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.563 ค่า SEC เท่ากับ 0.0694 ค่า SEP เท่ากับ 0.074 ค่า Bias เท่ากับ –0.001 และค่า RPD เท่ากับ 1.189 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.55 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.50

$$TA = -0.0529+2.9353 \log (1/R_{700})-0.8414 \log (1/R_{702})\ldots\ldots\ldots-2.9750 \log (1/R_{1086})\ldots\ldots\ldots(4.50)$$



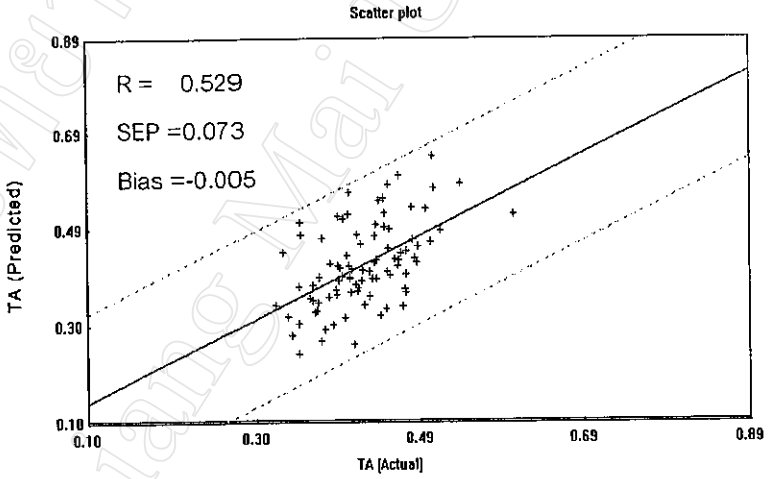
ภาพที่ 4.55 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (PCR) MSC second derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

จากการเปรียบเทียบสมการ calibration ที่สร้างขึ้นมาจากเทคนิค PCR ตลอดช่วงความยาวคลื่น 700-1100 nm เพื่อใช้ในการทำนาย ปริมาณกรดที่ไตเตรทได้ (TA) ในผลส้มเขียวหวานพันธุ์สายน้ำผึ้งทั้งผลมีเปลือก ค่าสถิติที่ใช้ตรวจสอบสมการ calibration ถูกต้องและสามารถนำไปใช้งานได้หรือไม่ คือค่า SEP เป็นค่าที่ได้จากการเปรียบเทียบค่า TA ที่ได้จากเครื่อง NIR spectroscopy และค่า TA ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธี reference method มีความถูกต้องมากน้อยแค่ไหน ควรมีค่าน้อยๆ ค่า Bias เป็นค่าเฉลี่ยของการทำนายค่า TA ด้วยเครื่อง NIR spectroscopy กับค่าเฉลี่ยของ ค่า TA ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธี reference method ว่ามีความแตกต่างกันหรือไม่ รวมทั้ง ค่า R เป็นค่าความสัมพันธ์ระหว่างค่าที่วัดได้จากเครื่อง NIR spectroscopy กับค่าที่วัดได้จากวิธี reference method ควรมีค่าเข้าใกล้ 1 และค่า RPD เป็นอัตราส่วนระหว่างค่า SD ของค่า TA ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธี reference method กับค่า SEP ควรมากกว่า 3 ถึงแสดงว่าสมการ calibration มีความเหมาะสม ที่จะนำเครื่อง NIR มาใช้ในการทำนาย TA ได้

สมการ calibration ที่ให้ค่าการทำนายที่เหมาะสม คือ สมการที่ 2 เป็น None 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.573 ค่า SEC เท่ากับ 0.0700 ค่า SEP เท่ากับ 0.073 ค่า Bias เท่ากับ 0.000 และค่า RPD เท่ากับ 1.205

จากการศึกษาในการวิเคราะห์ทางสถิติด้วยวิธี MLR ได้ค่าการดูดกลืนแสงที่มีความยาวช่วงคลื่นแสงตลอดช่วงคลื่น 700-1100 nm และเลือกความยาวคลื่นที่มีความสัมพันธ์ซึ่งที่มีความสัมพันธ์กับค่า TA ในผลส้มทั้งผลมีเปลือก พบว่าวิธี MLR ได้สมการ calibration 6 สมการ ดังตารางที่ 4.3 มีการใช้วิธีทางคณิตศาสตร์มาช่วยในการแปลงข้อมูลที่เป็นสเปกตรัม ได้สมการที่ 1 เป็น None 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.529 ค่า SEC เท่ากับ 0.0649 ค่า SEP เท่ากับ 0.073 ค่า Bias เท่ากับ –0.005 และค่า RPD เท่ากับ 1.205 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.56 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.51

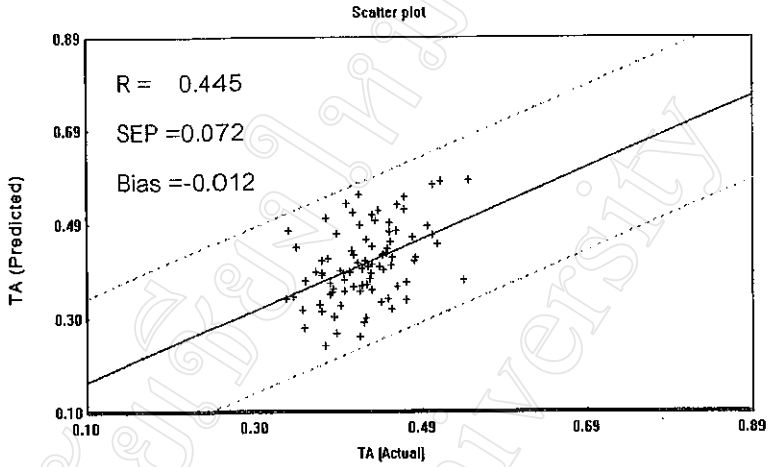
$$TA = 8.6031+2594.4854 \log (1/R_{852})-9.1187 \log (1/R_{700})+318.6882 \log (1/R_{926}) -2953.0815 \log(1/R_{884}) \quad (4.51)$$



ภาพที่ 4.56 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MLR) None first derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

สมการที่ 2 เป็น None 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.445 ค่า SEC เท่ากับ 0.0696 ค่า SEP เท่ากับ 0.072 ค่า Bias เท่ากับ –0.012 และค่า RPD เท่ากับ 1.208 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.57 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.52

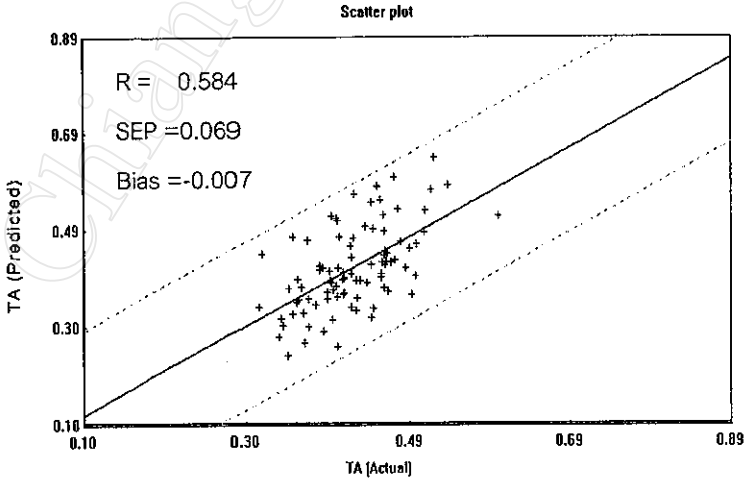
TA = 8.6031-706.7860 log(1/R_{920})+4486.3369 log (1/$R8_{806}$)-17.5568 log (1/$R8_{706}$)+3926.5596 log (1/$R8_{880}$).....(4.52)



ภาพที่ 4.57 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MLR) None second derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

สมการที่ 3 เป็น NSDV 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.584 ค่า SEC เท่ากับ 0.0647 ค่า SEP เท่ากับ 0.069 ค่า Bias เท่ากับ –0.007 และค่า RPD เท่ากับ 1.275 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.58 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.53

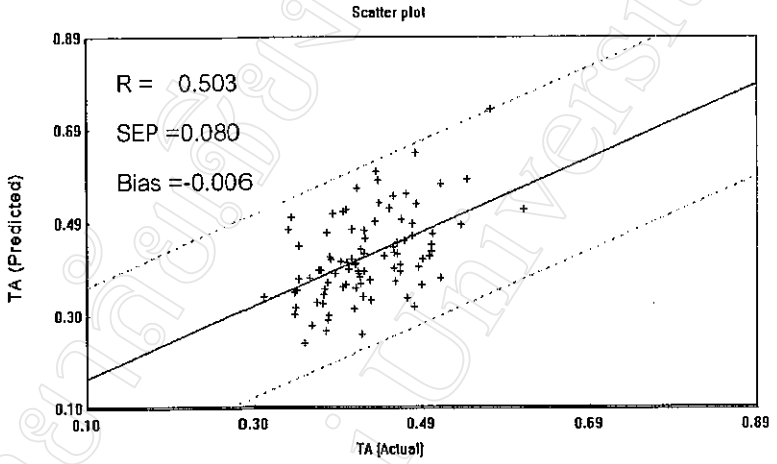
TA = 9.2169-998.9589 log(1/R_{884})+ 1149.8597 log (1/$R8_{852}$)-312.8415 log(1/R_{792}) – 86.1818 log(1/R_{998})-12.5615 log(1/R_{700}).....(4.53)



ภาพที่ 4.58 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MLR) NSDV first derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

สมการที่ 4 เป็น NSDV 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.503 ค่า SEC เท่ากับ 0.0682 ค่า SEP เท่ากับ 0.080 ค่า Bias เท่ากับ –0.006 และค่า RPD เท่ากับ 1.125 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.59 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.54

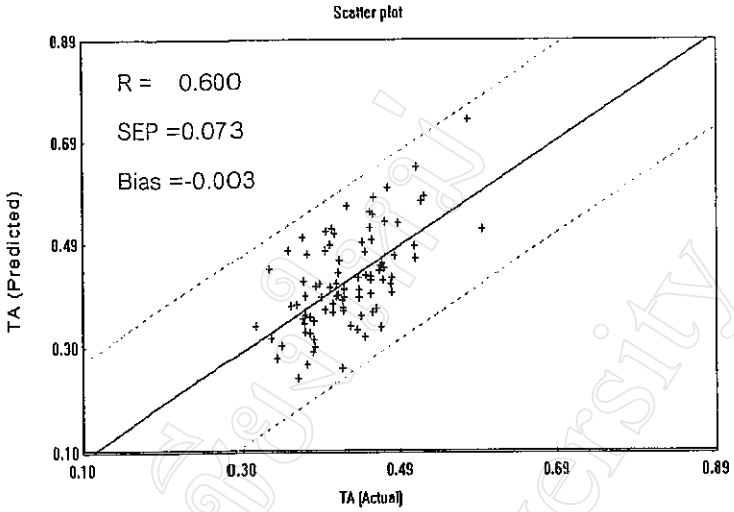
$$TA = 8.3809+1050.5159 \log (1/R_{878})+89.4129 \log (1/R_{956})1268.0657 \log(1/R_{860})-8.9565 \log(1/R_{700}) \quad (4.54)$$



ภาพที่ 4.59 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MLR) NSDV second derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

สมการที่ 5 เป็น MSC 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.600 ค่า SEC เท่ากับ 0.0657 ค่า SEP เท่ากับ 0.073 ค่า Bias เท่ากับ –0.003 และค่า RPD เท่ากับ 1.178 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.60 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.55

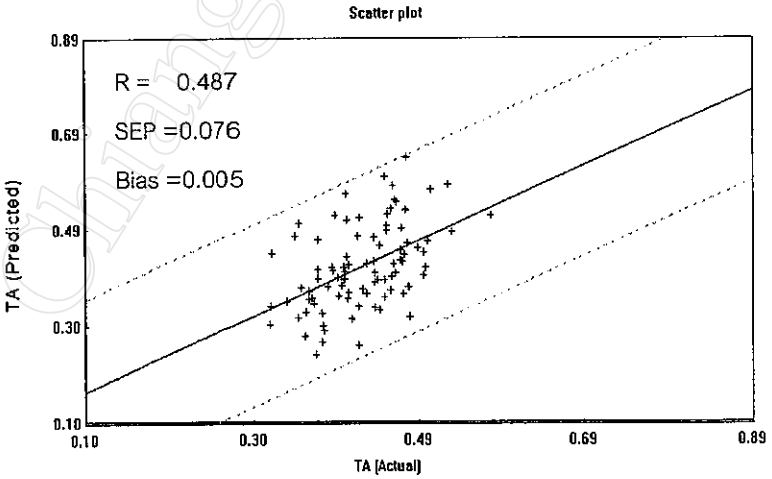
$$TA = 14.0285+23366.8452 \log(1/R_{854})-11.3013 \log (1/R_{700})+899.9865 \text{ Log } (1/R_{1082})-2401.9329 \log (1/R_{878}) \quad (4.55)$$



ภาพที่ 4.60 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MLR) MSC first derivative ผลสัมพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

สมการที่ 6 เป็น MSC 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.487 ค่า SEC เท่ากับ 0.0665 ค่า SEP เท่ากับ 0.076 ค่า Bias เท่ากับ –0.005 และค่า RPD เท่ากับ 1.171 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.61 เขียนเป็นสมการได้ ดังสมการที่ 4.56

$$TA = 13.0184 - 21.0765 \log(1/R_{700}) + 4376.84577 \log(1/R_{860}) + 3417.7886 \log(1/R_{878}) + 321.743 \log(1/R_{956}) \quad (4.56)$$

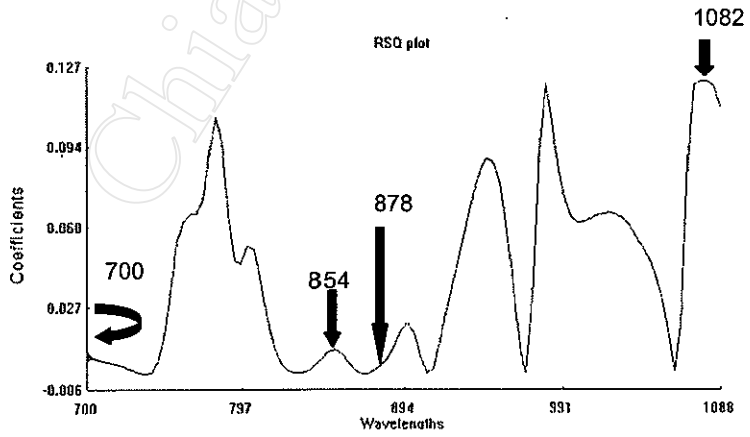


ภาพที่ 4.61 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MLR) MSC second derivative ผลสัมพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

จากการเปรียบเทียบสมการ calibration ที่สร้างขึ้นมาจากวิธี MLR ตลอดช่วงความยาวคลื่น 700-1100 nm เพื่อใช้ในการทำนาย ค่า TA ในผลส้มเขียวหวานพันธุ์สายน้ำผึ้งทั้งผลมีเปลือก และสามารถเลือกช่วงคลื่นที่มีความสัมพันธ์กับค่า (TA) ค่าสถิติที่ใช้ตรวจสอบสมการ calibration ถูกต้องและสามารถนำไปใช้งานได้หรือไม่ คือ ค่า SEP เป็นค่าที่ได้จากการเปรียบเทียบค่า TA ที่ได้จากเครื่อง NIR spectroscopy และค่า TA ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธี reference method มีความถูกต้องมากน้อยแค่ไหน ควรมีค่าน้อยๆ ค่า Bias เป็นค่าเฉลี่ยของการทำนายค่า TA ด้วยเครื่อง NIR spectroscopy กับค่าเฉลี่ยของ ค่า TA ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธี reference method ว่ามีความแตกต่างกันหรือไม่ รวมทั้ง ค่า R เป็นค่าความสัมพันธ์ระหว่างค่าที่วัดได้จากเครื่อง NIR spectroscopy และค่าที่วัดได้จากวิธี reference method ควรมีค่าเข้าใกล้ 1 และ ค่า RPD เป็นอัตราส่วนระหว่างค่า SD ของค่า TA ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธี reference method กับค่า SEP ควรมีค่ามากกว่า 3 ถึงแสดงว่าสมการ calibration มีความเหมาะสม ที่จะนำเครื่อง NIR มาใช้ในการทำนาย TA ได้ สมการที่ 5 MSC 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.600 ค่า SEC เท่ากับ 0.0657ค่า SEP เท่ากับ 0.073 ค่า Bias เท่ากับ –0.003 และค่า RPD เท่ากับ 1.178

สมการ calibration ที่สร้างขึ้นมาได้จากเทคนิค MLR เป็นสมการที่ 5 ซึ่งมีการใช้ MSC 1 Derivative และมีค่า R เท่ากับ 0.600 ค่า SEP เท่ากับ 0.073 ค่า Bias เท่ากับ –0.003 ค่า RPD เท่ากับ 1.178 โดยค่าดูดกลืนแสงที่ช่วงความยาวคลื่น 854,700,1082,878, ที่มีความสัมพันธ์กับปริมาณกรด ที่ไตเตรทได้ (TA) ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.62 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.57

$$TA = 14.0285+23366.8452 \log(1/R_{854})-11.3013 \log(1/R_{700})+899.9865 \log(1/R_{1082})-2401.9329 \log(1/R_{878}) \quad (4.57)$$



ภาพที่ 4.62 การดูดกลืนแสงที่มีความสัมพันธ์กับปริมาณกรดที่ไตเตรทได้(TA) ผลส้มสายน้ำผึ้งที่มีเปลือก

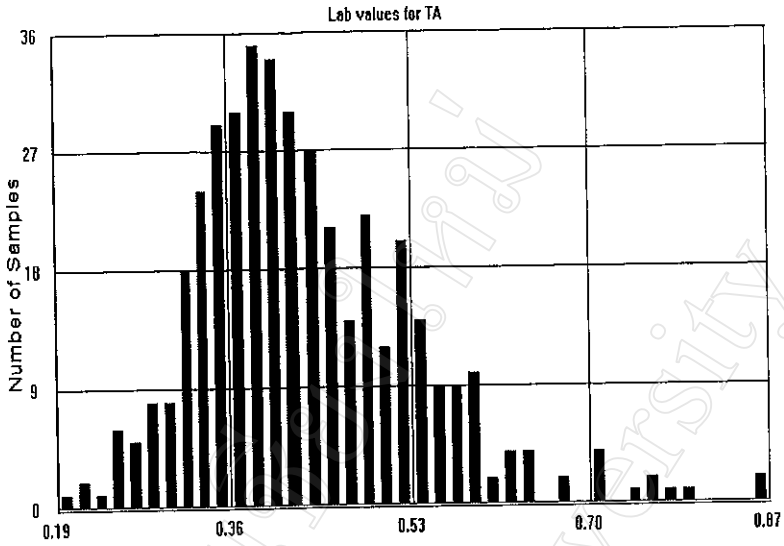
หลักในการพิจารณาจากค่าสถิตที่ใช้ตรวจสอบสมการ calibration นั้นถูกต้องและสามารถนำไปใช้งานได้หรือไม่ คือ ค่า SEP เป็นการเปรียบเทียบ ค่า TA ด้วยเครื่องมือ NIR spectroscopy และค่า TA ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธี Reference Method มีความถูกต้องมากน้อยแค่ไหน ซึ่งควรมีค่าน้อยๆ โดยคำนวณได้จากสูตรดังนี้สมการ calibration ที่ให้ค่าการทำนายที่เหมาะสม

จากผลการทดลอง โดยการเปรียบเทียบเทคนิควิธีการวิเคราะห์ทางสถิติ ทั้ง 3 เทคนิค คือ MPLS PCR และ MLR และนำวิธีการทางคณิตศาสตร์ที่มาช่วยในการแปลงข้อมูลที่เป็นสเปกตรัม เพื่อกำจัดสิ่งรบกวนอื่นๆที่มีอยู่ในสเปกตรัมแล้ว พบว่าสมการ calibration ที่ได้จากเทคนิคการ MPLS เป็นสมการที่ได้จากสมการที่ 1 ซึ่งไม่มีการใช้เทคนิค แปลงข้อมูล และมีค่า R เท่ากับ 0.636 ค่า SEP เท่ากับ 0.0698 ค่า Bias เท่ากับ 0.002 ค่า RPD เท่ากับ 1.290

สมการ calibration ที่สร้างขึ้นมาได้จากเทคนิค PCR เป็นสมการที่ 2 ซึ่งไม่มีการใช้เทคนิคแปลงข้อมูล โดยใช้ second derivative และมีค่า R เท่ากับ 0.573 ค่า SEP เท่ากับ 0.073 ค่า Bias เท่ากับ 0.000 ค่า RPD เท่ากับ 1.205

สมการ calibration ที่สร้างขึ้นมาได้จากเทคนิค MLR เป็นสมการที่ 5 ซึ่งมีการใช้ MSC First Derivative และมีค่า R เท่ากับ 0.600 ค่า SEP เท่ากับ 0.073 ค่า Bias เท่ากับ –0.003 ค่า RPD เท่ากับ 1.178 โดยค่าดูดกลืนแสงที่ช่วงความยาวคลื่น 854, 700, 1082, 878, ที่มีความสัมพันธ์กับปริมาณกรด ที่ไตเตรทได้ (TA)

สำหรับสมการที่ได้จากเทคนิค MLPS PCR และ MLR ให้ผลการทำนายค่า TA ได้ไม่แม่นยำนัก ทั้งนี้เนื่องจากค่า TA ที่ได้จากการวิเคราะห์ที่นำมาสร้างสมการ calibration ไม่มีการกระจายตัวอย่างสม่ำเสมอ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.63 อย่างไรก็ตามสมการ calibration ที่สร้างขึ้นโดยใช้ข้อมูลทางเคมีเป็นปริมาณกรดที่ไตเตรทได้ (TA) ในผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งมีเปลือกข้อมูลที่ได้ไม่กระจายอย่างสม่ำเสมอจึงมีผลทำให้สมการ calibration เมื่อนำมาทำนายทำให้ไม่สามารถให้ผลการทำนายได้แม่นยำ ดังนั้นข้อมูลที่ได้จากการวิเคราะห์ต้องมีจำนวนมากและกระจายครอบคลุม รวมทั้งต้องมีความถี่ที่เท่ากันจึงจะทำให้สมการ calibration ที่สร้างขึ้นมามีความสัมพันธ์กันสูง



ภาพที่ 4.63 การกระจายตัวของปริมาณกรดที่ไตเตรทได้ (TA) ของผลส้มเขียวหวานพันธุ์สายน้ำผึ้ง

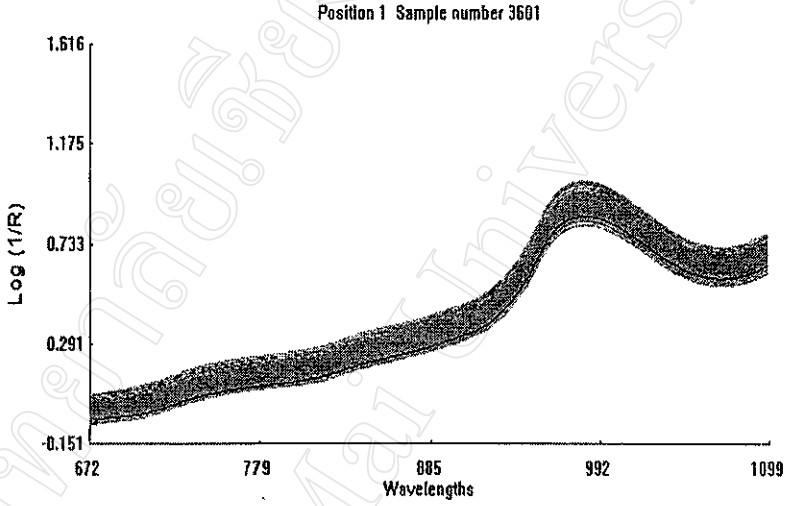
4.4 ผลการเปรียบเทียบวิธีวิเคราะห์และวิธีทางคณิตศาสตร์ที่ช่วยปรับสเปกตรัมในการสร้างสมการ calibration เพื่อประเมิน ปริมาณกรดที่ไตเตรทได้ (TA) ของส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก ดังแสดงไว้ในตารางที่ 4.4

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Chiang Mai University

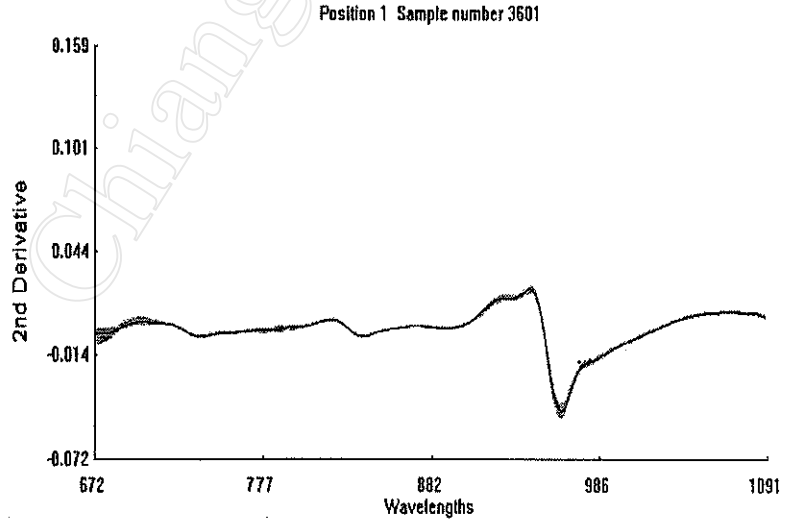
ตารางที่ 4.4 การเปรียบเทียบวิธีวิเคราะห์และวิธีทางคณิตศาสตร์ที่ช่วยปรับสเปกตรัมในการสร้างสมการ calibration เพื่อประเมินปริมาณกรดที่ไตเตรทได้ (TA) ของส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

Regression	Scatter	R	SEC	SEP	Bias	RPD
MPLS	None 1	0.550	0.0574	0.074	-0.003	1.203
	None 2	0.471	0.0615	0.071	-0.004	1.225
	NSDV 1	0.420	0.0618	0.078	-0.001	1.141
	NSDV 2	0.434	0.0589	0.075	0.006	1.187
	MSC 1	**0.561**	**0.0579**	**0.070**	**0.005**	**1.271**
	MSC 2	0.432	0.0628	0.075	-0.001	1.187
PCR	None 1	0.423	0.0699	0.073	-0.005	1.205
	None 2	0.351	0.0702	0.079	-0.001	1.114
	NSDV 1	0.425	0.0674	0.078	-0.005	1.115
	NSDV 2	**0.471**	**0.0698**	**0.072**	**-0.011**	**1.208**
	MSC 1	0.420	0.0680	0.077	-0.002	1.130
	MSC 2	0.471	0.0697	0.072	-0.011	1.208
MLR	None 1	0.704	0.0689	0.063	0.001	1.413
	None 2	**0.771**	**0.0634**	**0.057**	**0.002**	**1.526**
	NSDV 1	0.679	0.0716	0.068	-0.001	1.353
	NSDV 2	0.502	0.0739	0.066	-0.004	1.288
	MSC 1	0.545	0.0742	0.070	-0.001	1.200
	MSC 2	0.536	0.0716	0.067	-0.005	1.254

การสร้างสมการ calibration จากเทคนิค MPLS PCR และ MLR ได้นำวิธีทางคณิตศาสตร์สามารถช่วยในการแปลงข้อมูลที่เป็นสเปกตรัม เพื่อลดปัจจัยที่มีผลต่อสเปกตรัม เนื่องจากสเปกตรัมของผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่มีเปลือก ซึ่งเป็น original data ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.64 peak จะไม่ชัดเจน ดังนั้นเมื่อนำเอาวิธีคณิตศาสตร์ทำการแปลงข้อมูลโดยวิธี second derivative สเปกตรัมที่ได้จะมีรูปร่างต่างไปจากสเปกตรัมเริ่มต้น ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.65 เพราะเป็นการหาความชันของสเปกตรัมสองครั้งเพื่อแยก peak ออกมาให้ชัดเจนมากขึ้น



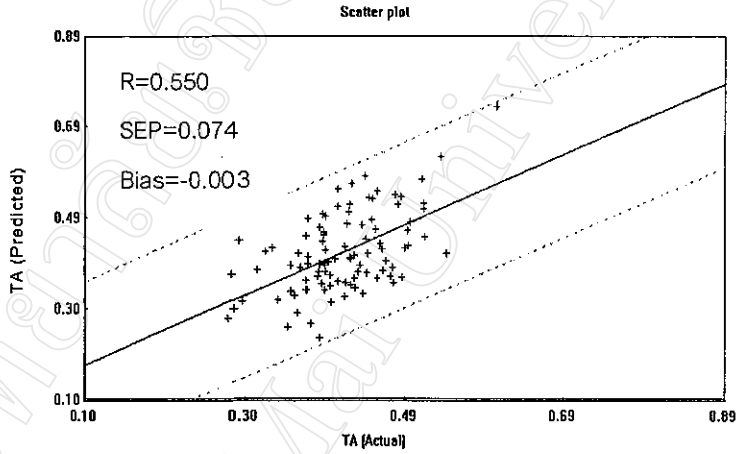
ภาพที่ 4.64 spectrum (original data) ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก



ภาพที่ 4.65 spectrum (derivative data) ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

จากการศึกษาในการวิเคราะห์ทางสถิติด้วยวิธี MPLS โดยใช้ค่าการดูดกลืนแสงที่มีความยาวช่วงคลื่นแสงตลอดช่วงคลื่น 700 -1100 นาโนเมตร ซึ่งที่มีความสัมพันธ์กับค่า TA ของผลส้มทั้งผลปอกเปลือก พบว่าวิธี MPLS ได้สมการ calibration 6 สมการ ดังแสดงไว้ในตารางที่ 4.4 โดยมีการใช้วิธีทางคณิตศาสตร์มาช่วยในการแปลงข้อมูลที่เป็นสเปกตรัม ซึ่งได้สมการที่ 1 เป็น None 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.550 ค่า SEC เท่ากับ 0.0574 ค่า SEP เท่ากับ 0.074 ค่า Bias เท่ากับ –0.003 และค่า RPD เท่ากับ 1.203 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนาย ได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.66 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.58

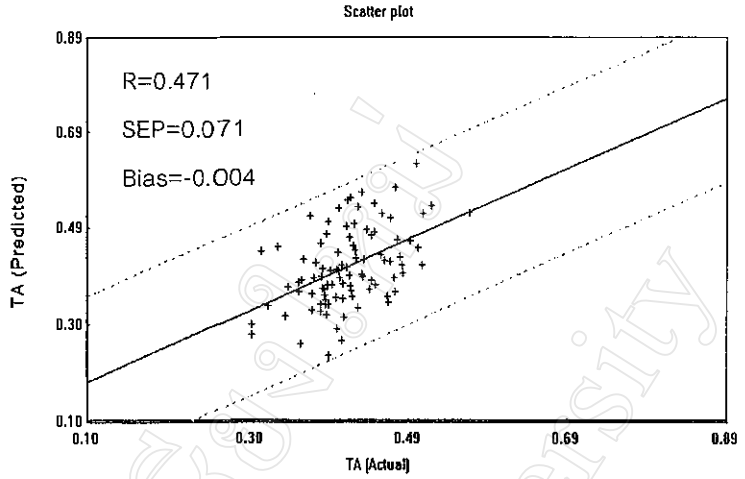
.TA = -0.3913+7.0090 log $(1/R_{700})$+6.5716 log $(1/R_{702})$....-64.1617 log $(1/R_{1090})$.....(4.58)



ภาพที่ 4.66 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MPLS) None first derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

สมการที่ 2 เป็น None 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.471 ค่า SEC เท่ากับ 0.0615 ค่า SEP เท่ากับ 0.071 ค่า Bias –0.003 และค่า RPD เท่ากับ 1.225 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนาย ได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.67 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.59

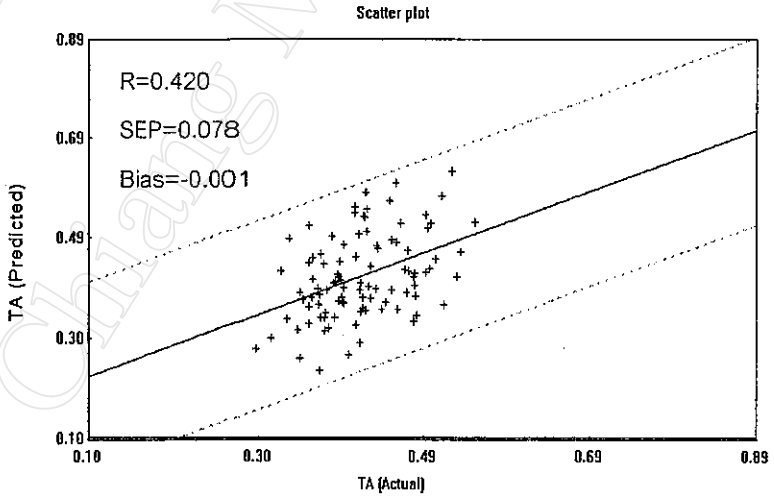
.TA = -0.3913+7.0090 log $(1/R_{700})$+6.5716 log $(1/R_{702})$.....-64.1617 log $(1/R_{1090})$.....(4.59)



ภาพที่ 4.67 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MPLS) None second derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

สมการที่ 3 เป็น NSDV 1 Derivative ได้ค่า R ค่าเท่ากับ 0.420 ค่า SEC เท่ากับ 0.0618 ค่า SEP เท่ากับ 0.078 ค่า Bias –0.001 และค่า RPD เท่ากับ 1.141 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนาย ได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.68 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.60

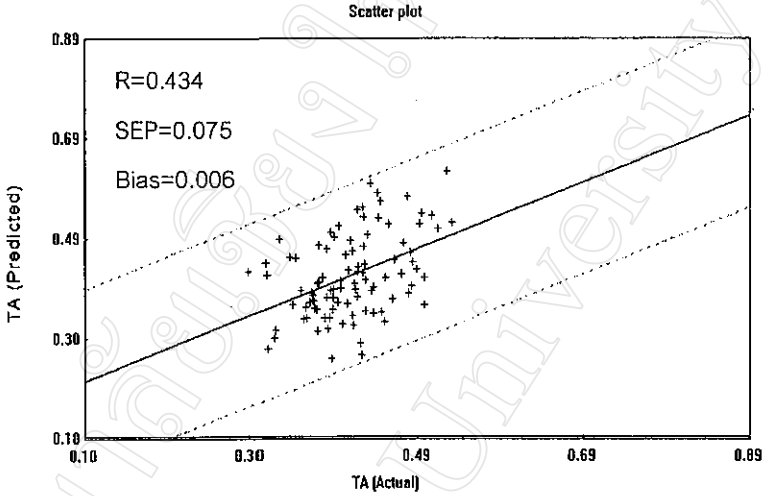
$$TA = -0.1020+3.7800 \log (1/R_{700})+3.9914 \log (1/R_{702})\ldots\ldots\ldots-2.3579 \log (1/R_{1090})\ldots\ldots(4.60)$$



ภาพที่ 4.68 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MPLS) NSDV first derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

สมการที่ 4 เป็น NSDV 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.434 ค่า SEC เท่ากับ 0.0589 ค่า SEP เท่ากับ 0.075 ค่า Bias 0.006 และค่า RPD เท่ากับ 1.187 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนาย ได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.69 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.61

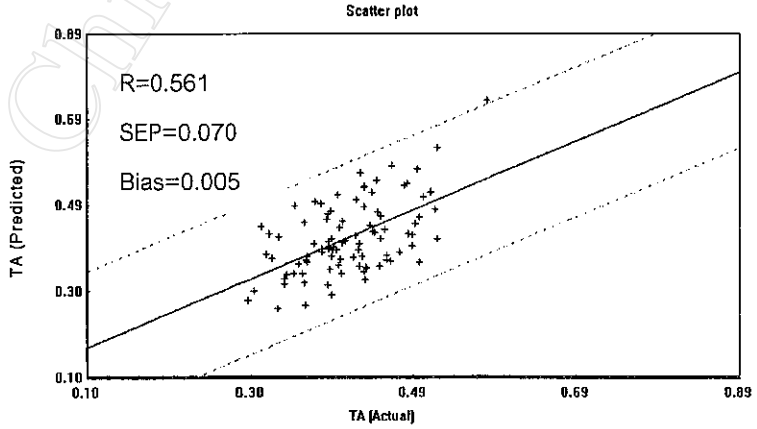
$$TA = 0.6358+3.9761 \log (1/R_{700})+2.7222 \log (1/R_{702})\text{.....}-14.4139 \log (1/R_{1086})\text{....}(4.61)$$



ภาพที่ 4.69 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MPLS) NSDV second derivative ผลสัมพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

สมการที่ 5 เป็น MSC 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.561 ค่า SEC เท่ากับ 0.0579 ค่า SEP เท่ากับ 0.070 ค่า Bias 0.005 และค่า RPD เท่ากับ 1. เมื่อนำสมการ calibration มาทำนาย ได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ภาพที่ 4.70 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.62

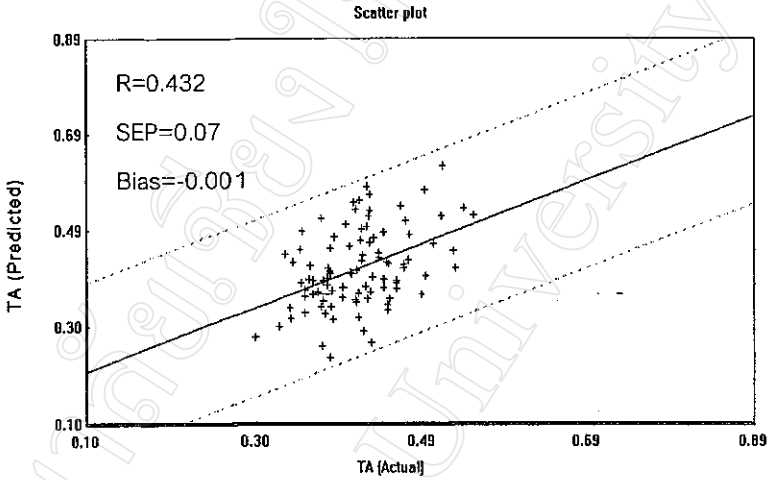
$$TA = 1.5786+13.5352 \log (1/R_{700})+12.3589 \log (1/R_{702})\text{....}+20.9925 \log (1/R_{1086})\text{....}(4.62)$$



ภาพที่ 4.70 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MPLS) MSC first derivative ผลสัมพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

สมการที่ 6 เป็น MSC 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.432 ค่า SEC เท่ากับ 0.0628 ค่า SEP เท่ากับ 0.075 ค่า Bias -0.001 และค่า RPD เท่ากับ 1.187 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนาย ได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.71 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.63

$$TA = 0.1424+9.9669 \log (1/R_{700})+8.5512 \log (1/R_{702})\text{.....}-25.5752 \log (1/R_{1086})\text{...}(4.63)$$



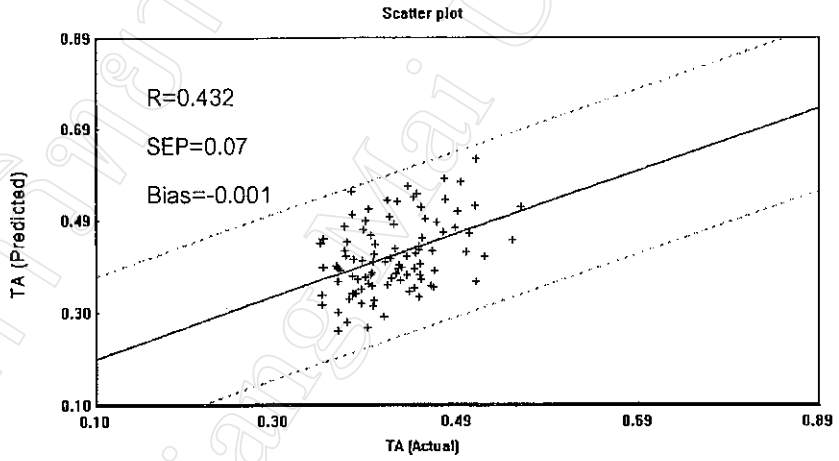
ภาพที่ 4.71 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MPLS) MSC second derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

จากการเปรียบเทียบสมการ calibration ที่สร้างขึ้นมาจากเทคนิค MPLS ตลอดช่วงความยาวคลื่น 700-1100 nm เพื่อใช้ในการทำนาย ปริมาณกรดที่ไตเตรทได้ (TA) ในผลส้มเขียวหวานพันธุ์สายน้ำผึ้งทั้งผลปอกเปลือก ค่าสถิติที่ใช้ตรวจสอบสมการ calibration ถูกต้องและสามารถนำไปใช้งานได้หรือไม่ คือค่า SEP เป็นค่าที่ได้จากการเปรียบเทียบค่า TA ที่ได้จากเครื่อง NIR spectroscopy และค่า TA ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธี reference method มีความถูกต้องมากน้อยแค่ไหน ควรมีค่าน้อยๆ ค่า Bias เป็นค่าเฉลี่ยของการทำนายค่า TA ด้วยเครื่องมือ NIR spectroscopy กับค่าเฉลี่ยของ ค่า TA ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธี reference method ว่ามีความแตกต่างกันหรือไม่ รวมทั้ง ค่า R เป็นค่าความสัมพันธ์ระหว่างค่าที่วัดได้จากเครื่องมือ NIR spectroscopy กับค่าที่วัดได้จากวิธี reference method ควรมีค่าเข้าใกล้ 1 และค่า RPD เป็นอัตราส่วนระหว่างค่า SD ของค่า TA ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธี reference method กับค่า SEP ควรมากกว่า 3 ถึงแสดงว่าสมการ calibration มีความเหมาะสม ที่จะนำเครื่องมือ NIR มาใช้ในการทำนาย TA ได้

สมการ calibration ที่ให้ค่าการทำนายที่เหมาะสม คือสมการที่ 1 เป็น None 1 derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.550 ค่า SEC เท่ากับ 0.0574 ค่า SEP เท่ากับ 0.074 ค่า Bias เท่ากับ –0.003 และค่า RPD เท่ากับ 1.203

จากการศึกษาในการวิเคราะห์ทางสถิติด้วยวิธี PCR โดยใช้ค่าการดูดกลืนแสงที่มีความยาวช่วงคลื่นแสงตลอดช่วงคลื่น 700-1100 nm ซึ่งที่มีความสัมพันธ์กับค่า TA ของผลส้มทั้งผลปอกเปลือก (peeled fruit) พบว่าวิธี PCR ได้สมการ 6 สมการ ดังตารางที่ 4.4 ซึ่งมีการใช้วิธีทางคณิตศาสตร์มาช่วยในการแปลงข้อมูลที่เป็นสเปกตรัม โดยสมการที่ 1 เป็น None 1 derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.423 ค่า SEC เท่ากับ 0.0699 ค่า SEP เท่ากับ 0.073 ค่า Bias เท่ากับ -0.005 และ ค่า RPD เท่ากับ 1.205 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนาย ได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.72 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.64

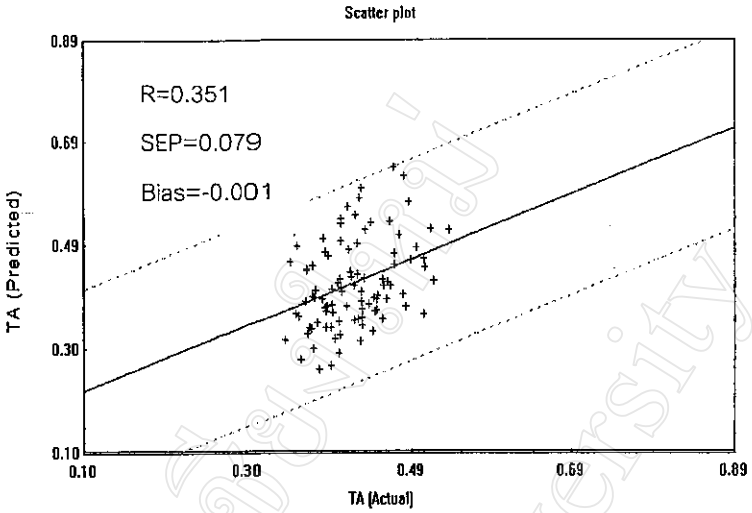
$$TA = 0.1899+17.1616 \log (1/R_{700})+10.9046 \log (1/R_{702})...+5.5609 \log (1/R_{1090}).....(4.64)$$



ภาพที่ 4.72 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MPLS) None first derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

สมการที่ 2 เป็น None 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 351 ค่า SEC เท่ากับ 0.0702 ค่า SEP เท่ากับ 0.079 ค่า Bias –0.001 และค่า RPD เท่ากับ 1.114 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนาย ได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.73 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.65

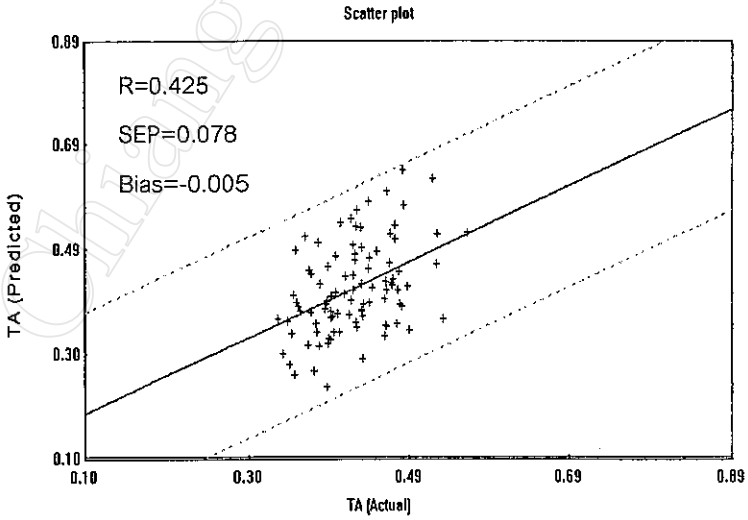
$$TA = -0.5196+11.3405 \log (1/R_{700})+9.2219 \log (1/R_{702}).....+2.7077 \log (1/R_{1086})....(4.65)$$



ภาพที่ 4.73 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MPLS) None second derivative ผลสัมพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

สมการที่ 3 เป็น NSDV 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.425 ค่า SEC เท่ากับ 0.0674 ค่า SEP เท่ากับ 0.078 ค่า Bias –0.005 และค่า RPD เท่ากับ 1.115 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนาย ได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.74 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.66

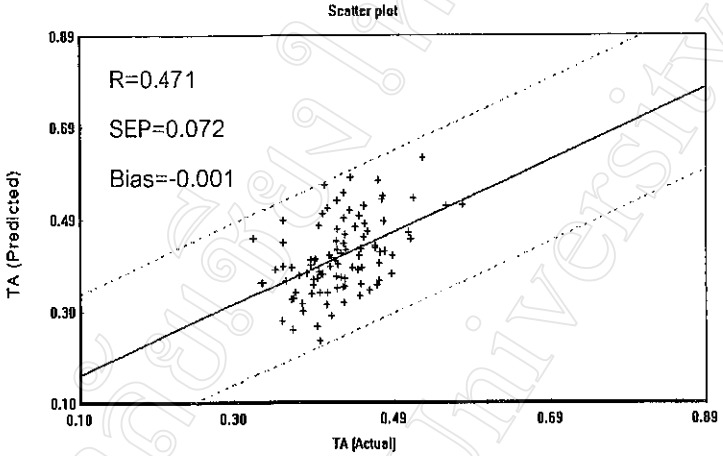
$$TA = 0.8689+9.9847 \log (1/R_{700})+6.3674 \log (1/R_{702})\text{.....}-2.5641 \log (1/R_{1090})\text{.....} \quad (4.66)$$



ภาพที่ 4.74 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MPLS) NSDV first derivative ผลสัมพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

สมการที่ 4 เป็น NSDV 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.471 ค่า SEC เท่ากับ 0.0698 ค่าSEP เท่ากับ 0.072 ค่า Bias 0.006 และค่า RPD เท่ากับ 1.208 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนาย ได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.75 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.67

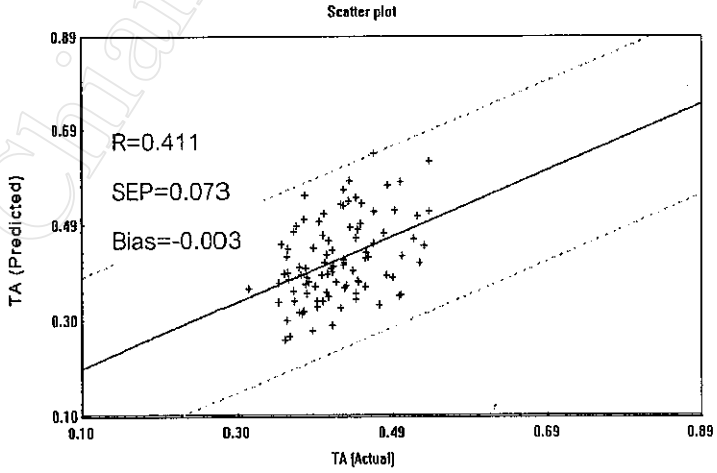
$$TA = 0.0368+11.5321 \log (1/R_{700})+7.2088 \log (1/R_{702})\ldots\ldots\ldots+0.6335 \log (1/R_{1086})\ldots.(4.67)$$



ภาพที่ 4.75 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MPLS) NSDV second derivative ผลสัมพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

สมการที่ 5 เป็น MSC 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.420 ค่า SEC เท่ากับ 0.0680 ค่า SEP เท่ากับ 0.077 ค่า Bias –0.002 และค่า RPDเท่ากับ 1.130 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนาย ได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.76 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.68

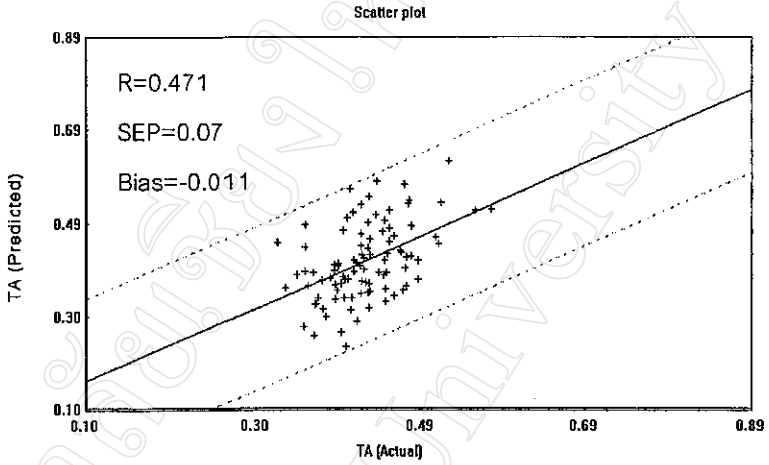
$$TA = 1.7521+17.0471 \log (1/R_{700})+11.1792 \log (1/R_{702})\ldots\ldots+5.4869 \log (1/R_{1086})\ldots.(4.68)$$



ภาพที่ 4.76 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MPLS) MSC first derivative ผลสัมพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

สมการที่ 6 เป็น MSC 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.471 ค่า SEC เท่ากับ 0.0697 ค่า SEP เท่ากับ 0.072 ค่า Bias –0.001 และค่า RPD เท่ากับ 1.208 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนาย ได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.77 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.69

$$TA = 0.0624+31.7258 \log (1/R_{700})+19.7682 \log (1/R_{702}).....+1.6896 \log (1/R_{1086}).....(4.69)$$



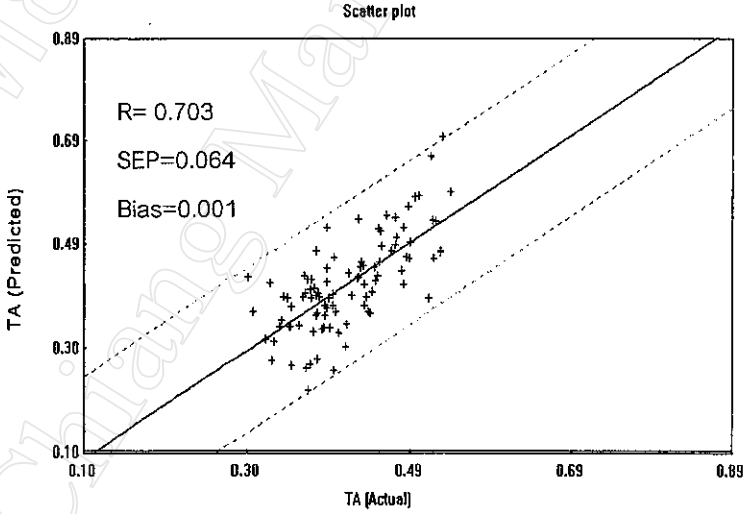
ภาพที่ 4.77 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MPLS) MSC second derivative ผลสัมพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

จากการเปรียบเทียบสมการ calibration ที่สร้างขึ้นมาจากเทคนิค PCR ตลอดช่วงความยาวคลื่น 700-1100 nm เพื่อใช้ในการทำนาย ปริมาณกรดที่ไตเตรทได้ (TA) ในผลส้มเขียวหวานพันธุ์สายน้ำผึ้งทั้งผลปอกเปลือก ค่าสถิติที่ใช้ตรวจสอบสมการ calibration ถูกต้องและสามารถนำไปใช้งานได้หรือไม่ คือค่า SEP เป็นค่าที่ได้จากการเปรียบเทียบค่า TA ที่ได้จากเครื่องมือ NIR spectroscopy และค่า TA ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธี reference method มีความถูกต้องมากน้อยแค่ไหน ควรมีค่าน้อยๆ ค่า Bias เป็นค่าเฉลี่ยของการทำนายค่า TA ด้วยเครื่อง NIR spectroscopy กับค่าเฉลี่ยของ ค่า TA ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธี reference method ว่ามีความแตกต่างกันหรือไม่ รวมทั้ง ค่า R เป็นค่าความสัมพันธ์ระหว่างค่าที่วัดได้จากเครื่อง NIR spectroscopy กับค่าที่วัดได้จากวิธี reference method ควรมีค่าเข้าใกล้ 1 และค่า RPD เป็นอัตราส่วนระหว่างค่า SD ของค่า TA ที่ได้จาก การวิเคราะห์ด้วยวิธี reference method กับค่า SEP ควรมากกว่า 3 ถึงแสดงว่าสมการ calibration มีความเหมาะสม ที่จะนำเครื่องมือ NIR มาใช้ในการทำนาย TA ได้

สมการ calibration ที่ให้ค่าการทำนายที่เหมาะสมปริมาณกรดที่ไตเตรทได้ (TA) ในผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งทั้งผลปอกเปลือก คือ สมการที่ 6 เป็น MSC 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.471 ค่า SEC เท่ากับ 0.0697 ค่า SEP เท่ากับ 0.072 ค่า Bias –0.001 และค่า RPD เท่ากับ 1.208

จากการศึกษาในการวิเคราะห์ทางสถิติด้วยวิธี MLR ได้ค่าการดูดกลืนแสงที่มีความยาวช่วงคลื่นแสงตลอดช่วงคลื่น 700-1100 nm ซึ่งที่มีความสัมพันธ์กับค่า TA ของผลส้มทั้งผลปอกเปลือก พบว่าวิธี MLR ได้สมการ 6 สมการ ดังแสดงไว้ในตารางที่ 4.4 ซึ่งมีการใช้วิธีทางคณิตศาสตร์มาช่วยในการแปลงข้อมูลที่เป็นสเปกตรัม โดยสมการที่ 1 เป็น None 1 derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.703 ค่า SEC เท่ากับ 0.0689 ค่า SEP เท่ากับ 0.063 ค่า Bias 0.001 และค่า RPD เท่ากับ 1.413 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.78 ดังสมการที่ 4.70

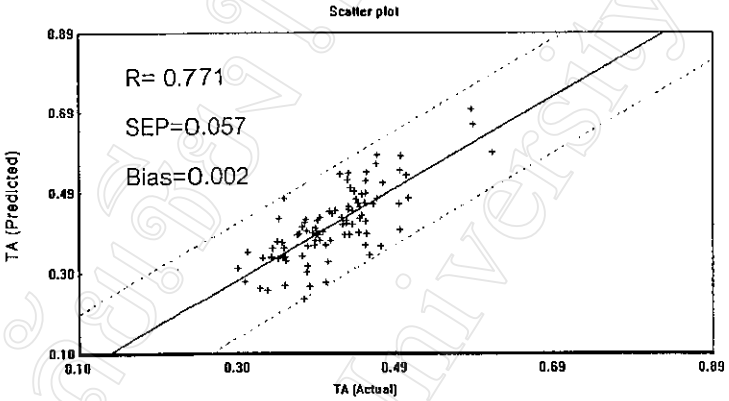
$$TA = 0.3176+250.7815 \log (1/R_{858})- 471.4590 \log(1/R_{806})+277.6053 \log 1/R_{1068})+114.8695 \log (1/R_{784}) \quad (4.70)$$



ภาพที่ 4.78 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MLR) None first derivative ผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

สมการที่ 2 เป็น None 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.771 ค่า SEC เท่ากับ 0.0634 ค่า SEP เท่ากับ 0.057 ค่า Bias เท่ากับ 0.002 และค่า RPD เท่ากับ 1.526 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.79 ดังสมการที่ 4.71

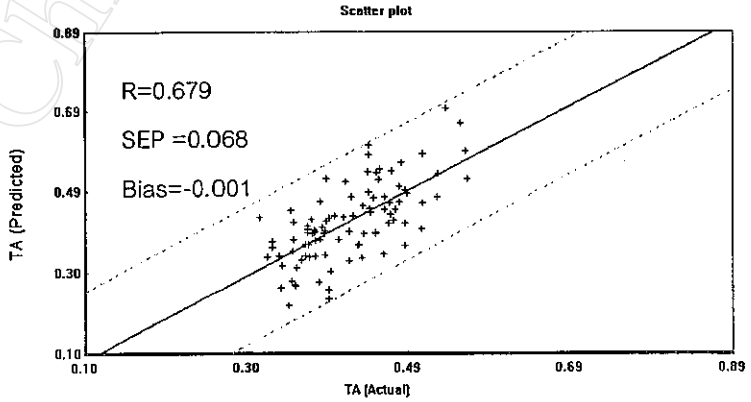
$$TA = 0.3176-86.8620 \log(1/R_{1068})+884.2503 \log(1/R_{868})-401.1638 \log(1/R_{704})+348.8411 \log(1/R_{700}) \quad (4.71)$$



ภาพที่ 4.79 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MLR) None second derivative ผลสัมพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

สมการที่ 3 เป็น NSDV 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.679 ค่า SEC เท่ากับ 0.0716 ค่า SEP เท่ากับ 0.068 ค่า Bias เท่ากับ–0.001 และค่า RPD เท่ากับ 1.353 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.80 ดังสมการที่ 4.72

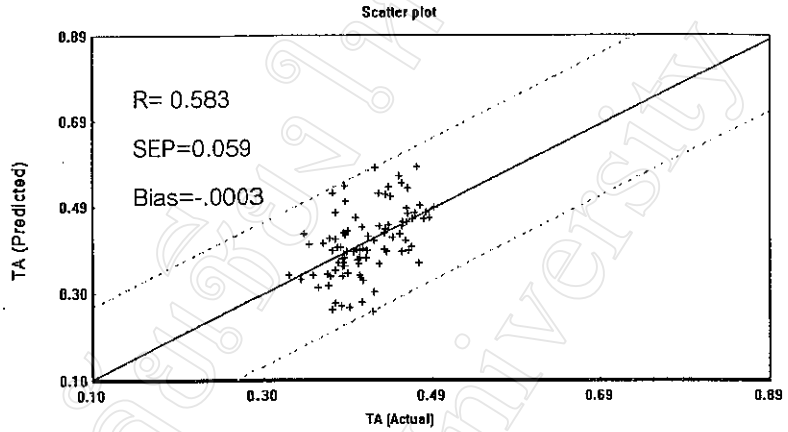
$$TA = -0.331-26.4619 \log(1/R_{942})-59.2239 \log(1/R_{1016})-31.2677 \log(1/R_{968})+17.2677 \log(1/R_{700})+128.2374 \log(1/R_{858})-63.9867 \log(1/R_{724}) \quad (4.72)$$



ภาพที่ 4.80 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MLR) NSDV first derivative ผลสัมพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

สมการที่ 4 เป็น NSDV 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.502 ค่า SEC เท่ากับ 0.0739 ค่า SEP เท่ากับ 0.066 ค่า Bias เท่ากับ -0.004 และค่า RPD เท่ากับ 1.288 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.81 ดังสมการที่ 4.73

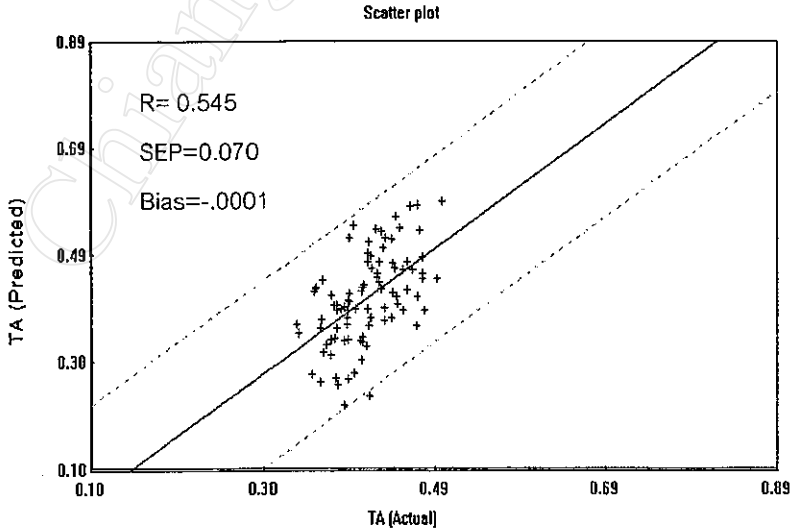
TA= 0.2724+177.7871 log $(1/R_{884})$ .....(4.73)



ภาพที่ 4.81 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MLR) NSDV second derivative ผลสัมพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

สมการที่ 5 เป็น MSC 1 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.562 ค่า SEC เท่ากับ 0.0742 ค่า SEP เท่ากับ 0.068 ค่า Bias เท่ากับ 0.001 และค่า RPD เท่ากับ 1.235 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.82 ดังสมการที่ 4.73

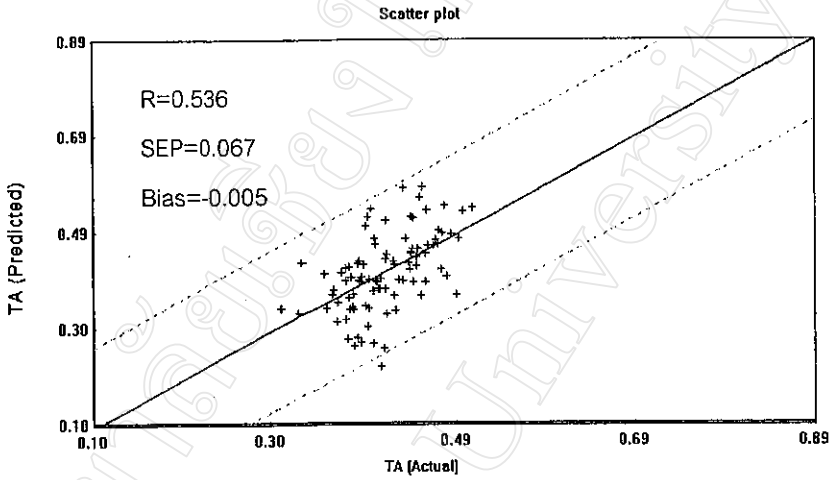
TA = 0.2724+142.1545 log $(1/R_{1072})$..... .....(4.73)



ภาพที่ 4.82 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MLR) MSC first derivative ผลสัมพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

สมการที่ 6 เป็น MSC 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.536 ค่า SEC เท่ากับ 0.0716 ค่า SEP เท่ากับ 0.067 ค่า Bias เท่ากับ –0.00 และค่า RPD เท่ากับ 1.254 เมื่อนำสมการ calibration มาทำนายได้กราฟความสัมพันธ์ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.83 ดังสมการที่ 4.74

$$TA = 0.2167 - 144.2158 \log (1/R_{896}) + 484.6657 \log (1/R_{884}) \quad (4.74)$$

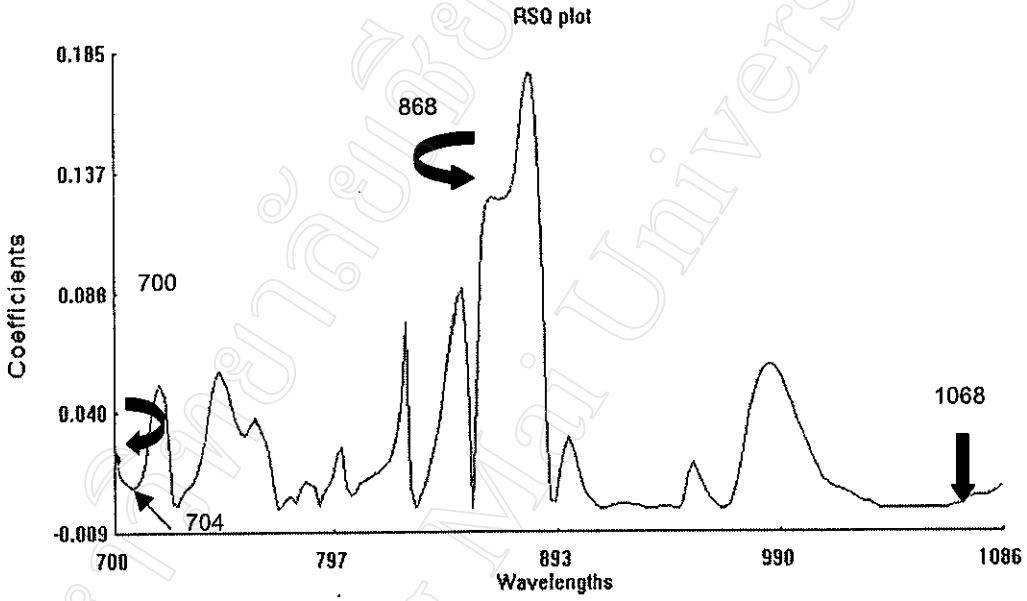


ภาพที่ 4.83 กราฟความสัมพันธ์ระหว่าง calibration set และ validation set (MLR) MSC second derivative ผลสัมพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือก

จากการเปรียบเทียบสมการ calibration ที่สร้างขึ้นมาจากวิธี MLR ตลอดช่วงความยาว คลื่น 700-1100 nm เพื่อใช้ในการทำนาย ค่า TA ในผลส้มเขียวหวานพันธุ์สายน้ำผึ้งทั้งผลปอกเปลือก และสามารถเลือกช่วงคลื่นที่มีความสัมพันธ์กับค่า (TA) ค่าสถิติที่ใช้ตรวจสอบสมการ calibration ถูกต้องและสามารถนำไปใช้งานได้หรือไม่ คือ ค่า SEP เป็นค่าที่ได้จากการเปรียบเทียบค่า TA ที่ได้จากเครื่อง NIR spectroscopy และค่า TA ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธี reference method มีความถูกต้องมากน้อยแค่ไหน ควรมีค่าน้อยๆ ค่า Bias เป็นค่าเฉลี่ยของการทำนายค่า TA ด้วยเครื่องมือ NIR spectroscopy กับค่าเฉลี่ยของ ค่า TA ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธี reference method ว่ามีความแตกต่างกันหรือไม่ รวมทั้ง ค่า R เป็นค่าความสัมพันธ์ระหว่างค่าที่วัดได้จากเครื่องมือ NIR spectroscopy และค่าที่วัดได้จากวิธี reference method ควรมีค่าเข้าใกล้ 1 และ ค่า RPD เป็นอัตราส่วนระหว่างค่า SD ของค่า TA ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธี reference method กับค่า SEP ควรมีค่ามากกว่า 3 ถึงแสดงว่าสมการ calibration มีความเหมาะสมที่จะนำเครื่องมือ NIR มาใช้ในการทำนาย TA ได้ สมการที่ 2 เป็น None 2 Derivative

ได้ค่า R เท่ากับ 0.771 ค่า SEC เท่ากับ 0.0634 ค่า SEP เท่ากับ 0.057 ค่า Bias เท่ากับ 0.002 และค่า RPD เท่ากับ 1.526 โดยค่าดูดกลืนแสงที่ช่วงความยาวคลื่น สามารถเลือกช่วงความยาวคลื่นได้ 1068, 868, 704, 700, ที่มีความสัมพันธ์กับปริมาณกรดที่ไตเตรทได้ (TA) ดังแสดงไว้ในภาพที่ 4.84 เขียนเป็นสมการได้ดังสมการที่ 4.75

$$TA = 0.3176-86.8620 \log(1/R_{1068})+884.2503 \log (1/R_{868})-401.1638 \log (1/R_{704})+348.8411 \log (1/R_{700}) \quad (4.75)$$



ภาพที่ 4.84 การดูดกลืนแสงที่มีความสัมพันธ์กับปริมาณกรดที่ไตเตรทได้(TA) ผลส้มสายน้ำผึ้งที่มีปอกเปลือก

หลักในการพิจารณาจากค่าสถิติที่ใช้ตรวจสอบสมการ calibration นั้นถูกต้องและสามารถนำไปใช้งานได้หรือไม่ คือ ค่า SEP เป็นการเปรียบเทียบ ค่า TA ด้วยเครื่องมือ NIR spectroscopy และค่า TA ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธี Reference Method มีความถูกต้องมากน้อยแค่ไหน ซึ่งควรมีค่าน้อยๆ โดยคำนวณได้จากสูตรดังนี้สมการ calibration ที่ให้ค่าการทำนายที่เหมาะสม

จากผลการทดลอง โดยการเปรียบเทียบเทคนิควิธีการวิเคราะห์ทางสถิติ ทั้ง 3 เทคนิค คือ MPLS PCR และ MLR และนำวิธีการทางคณิตศาสตร์ที่มาช่วยในการแปลงข้อมูลที่เป็น

สเปกตรัม เพื่อกำจัดสิ่งรบกวนอื่นๆ ที่มีอยู่ในสเปกตรัมแล้ว พบว่าสมการ calibration ที่ได้จากเทคนิคการ MPLS เป็นสมการที่ได้จากสมการที่ 1 ซึ่งไม่มีการใช้เทคนิคแปลงข้อมูล โดยมีค่า R เท่ากับ 0.636 ค่า SEP เท่ากับ 0.0698 ค่า Bias เท่ากับ 0.002 ค่า RPD เท่ากับ 1.290

สมการ calibration ที่สร้างขึ้นมาได้จากเทคนิค PCR เป็นสมการที่ 6 เป็น MSC 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.471 ค่า SEC เท่ากับ 0.0697 ค่า SEP เท่ากับ 0.072 ค่า Bias – 0.001 และค่า RPD เท่ากับ 1.208 สมการ calibration ที่สร้างขึ้นมาได้จากเทคนิค MLR เป็นสมการที่ 2 เป็น None 2 Derivative ได้ค่า R เท่ากับ 0.771 ค่า SEC เท่ากับ 0.0634 ค่า SEP เท่ากับ 0.057 ค่า Bias เท่ากับ 0.002 และค่า RPD เท่ากับ 1.254

หลักในการพิจารณาจากค่าสถิติที่ใช้ตรวจสอบสมการ calibration นั้นถูกต้องและสามารถนำไปใช้งานได้หรือไม่ คือ ค่า SEP เป็นการเปรียบเทียบ ค่า TA ด้วยเครื่องมือ NIR spectroscopy และค่า TA ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธี Reference Method มีความถูกต้องมากน้อยแค่ไหน ซึ่งควรมีค่าน้อยๆ โดยคำนวณได้จากสูตรดังนี้สมการ calibration ที่ให้ค่าการทำนายที่เหมาะสม

สำหรับสมการที่ได้จากเทคนิค MLPS PCR และ MLR ให้ผลการทำนายค่า TA ได้ไม่แม่นยำนัก ทั้งนี้เนื่องจากค่า TA ที่ได้จากการวิเคราะห์ที่นำมาสร้างสมการ calibration ไม่มีการกระจายตัวอย่างสม่ำเสมอ เช่นเดียวกับกับส้มสายน้ำผึ้งที่มีเปลือก อย่างไรก็ตามสมการ calibration ที่สร้างขึ้นโดยใช้ข้อมูลทางเคมีเป็นปริมาณกรดที่ไตเตรทได้ (TA) ในผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ปอกเปลือกเปลือก ข้อมูลที่ได้ไม่กระจายอย่างสม่ำเสมอจึงมีผลทำให้สมการ calibration เมื่อนำมาทำนายทำให้ไม่สามารถให้ผลการทำนายได้แม่นยำ รวมทั้งเปลือกของผลส้มซึ่งความหนาของเปลือกมีผลต่อการดูดกลืนแสงทำให้สมการที่สร้างมาจากผลส้มที่มีเปลือกให้ค่าทำนายที่ต่ำกว่า ดังนั้นข้อมูลที่ได้จากการวิเคราะห์ต้องมีจำนวนมากและกระจายครอบคลุมและต้องมีความถี่ที่เท่ากันจึงจะทำให้สมการ calibration ที่สร้างขึ้นมีความสัมพันธ์กันสูง

การวิเคราะห์ข้อมูล (data analysis) เป็นวิธีการสร้างสมการ calibration เพื่อใช้ในการทำนายค่าตัวแปรตามในเชิงปริมาณ (Quantitative analysis) เป็นการหาความเข้มข้นของปริมาณ TSS และ TA ที่มีอยู่ในผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้ง ดังนั้นการเลือกเทคนิคและวิธีการวิเคราะห์ต้องเลือกสมการ calibration ที่มีความสัมพันธ์กับค่า TSS และ TA ที่ให้ค่าการทำนายที่มีความแม่นยำสูง

ตอนที่ 2 ผลการทดลองการตรวจสอบคุณภาพของผลส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งโดยการประเมินทางด้านประสาทสัมผัส(Sensory evaluation)

จากผลการประเมินส้มพันธุ์สายน้ำผึ้ง การชิมต้องแยกความแตกต่างที่เป็นคุณลักษณะของส้มได้สำหรับเกณฑ์ที่ประเมินเป็นพื้นฐานของความชอบ โดยแบ่งออกเป็น 5 กลุ่ม จะเห็นได้ว่าผู้ประเมินสามารถแยกคุณลักษณะของส้มเขียวหวานที่บ่งบอกถึงคุณภาพ ได้แก่ ความหวาน กลิ่นและรสชาติที่ปกติ และกลิ่นหอม ดังแสดงไว้ในตารางที่ 4.5 ซึ่งมีความแตกต่างอย่างมีนัยสำคัญทางสถิติ สำหรับคุณลักษณะด้านความฉ่ำน้ำ เนื้อสัมผัส แยกได้ 3 กลุ่ม ทั้งนี้เนื่องจากลักษณะของส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ผู้ประเมินชอบต้องมีรสหวาน กลิ่นหอมและมีกลิ่นและรสชาติที่ปกติ จากการหาความสัมพันธ์ระหว่างความชอบและคุณลักษณะของส้ม ดังแสดงไว้ในตารางที่ 4.6 พบว่าความชอบมีความสัมพันธ์กับกลิ่นหอม มีค่า R^2 เท่ากับ 0.79 ซึ่งเป็นลักษณะเด่นของส้มพันธุ์สายน้ำผึ้ง กลิ่นและรสชาติที่ปกติ มีค่า R^2 เท่ากับ 0.74 แสดงว่าความชอบกับกลิ่นและรสชาติของผู้ชิมต้องเป็นกลิ่นและรสชาติที่ปกติ ไม่มีกลิ่นหมักหรือกลิ่นเหมือนเหล้าหมักเพราะน้ำตาลเริ่มเปลี่ยนเป็นแอลกอฮอล์ (เปรมปรี, 2544) สำหรับความชอบมีความสัมพันธ์ความหวาน มีค่า R^2 เท่ากับ 0.73 แสดงว่าส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งที่ผู้ชิมชอบนั้นต้องมีรสหวาน ดังนั้นคุณลักษณะที่บ่งบอกคุณภาพของส้มพันธุ์สายน้ำผึ้งต้องมี กลิ่นหอม รสหวานกลิ่นและรสชาติที่ปกติ การพิจารณาความสัมพันธ์ระหว่างผลการชิมกับค่าทางเคมี ซึ่งกำหนดคุณลักษณะแบ่งเป็น 3 คุณลักษณะ คือ ความเปรี้ยว ความหวาน และความชอบโดยรวม สำหรับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ คือ TSS TA และ TSS/TA ซึ่งการจัดคู่ลำดับความสัมพันธ์นั้นประกอบด้วย ความเปรี้ยว กับ TA มีค่า R^2 เท่ากับ 0.57 ความหวาน กับ TSS มีค่า R^2 เท่ากับ 0.459 และ ความชอบโดยรวมกับ TSS/TA มีค่า R^2 เท่ากับ 0.108 ดังแสดงไว้ในตารางที่ 4.7 เพื่อตรวจสอบการวิเคราะห์ทางเคมีมีความสัมพันธ์กับคุณลักษณะของการชิมไปในทิศทางใด เมื่อพิจารณาความสัมพันธ์ระหว่างคะแนนความเปรี้ยว กับ TA ดังแสดงไว้ในตารางที่ 4.8 พบว่า ค่า TA เพิ่มสูงขึ้นเมื่อคะแนนความเปรี้ยวจากการชิมเพิ่มขึ้น จากระดับคะแนน 1 ถึง 5 ซึ่งมีค่าเท่ากับ $0.27 \pm 0.07, 0.36 \pm 0.07, 0.40 \pm 0.08, 0.49 \pm 0.10$ และ $0.60 \pm 0.$ ตามลำดับ สำหรับความสัมพันธ์ระหว่างคะแนนความหวานกับ TSS ดังแสดงไว้ในตารางที่ 4.9 พบว่า ค่า TSS เพิ่มสูงขึ้นเมื่อคะแนนความหวานจากการชิมเพิ่มขึ้น จากระดับคะแนน 1 ถึง 5 ซึ่งมีค่าเท่ากับ 10.36 ± 1.26, 10.52 ± 1.41, 11.32 ± 1.40, 12.01 ± 1.09 และ12.55 ± 1.12

ตารางที่ 4.5 เกณฑ์การประเมินคุณภาพทางประสาทสัมผัส (n= 512)

ความชอบ[1/]	เกณฑ์การประเมินคุณภาพทางประสาทสัมผัส คะแนนที่ได้ [x/] ± SD					
	ความฉ่ำน้ำ[2/]	ความเปรี้ยว[3/]	ความหวาน[4/]	กลิ่นและรสชาติที่ปกติ[5/]	เนื้อสัมผัส[6/]	กลิ่นหอม[7/]
1	$4.20^{c} \pm 0.64$	$3.45^{a} \pm 1.24$	$2.45^{e} \pm 1.19$	$2.82^{e} \pm 1.07$	$3.49^{c} \pm 1.08$	$2.31^{e} \pm 0.92$
2	$4.31^{bc} \pm 0.58$	$3.44^{a} \pm 0.71$	$2.79^{d} \pm 0.86$	$3.15^{d} \pm 0.65$	$4.04^{b} \pm 0.62$	$2.56^{d} \pm 0.75$
3	$4.40^{b} \pm 0.52$	$3.31^{a} \pm 0.77$	$3.38^{c} \pm 0.61$	$3.80^{c} \pm 0.60$	$4.11^{b} \pm 0.62$	$3.38^{c} \pm 0.62$
4	$4.69^{a} \pm 0.46$	$3.01^{b} \pm 0.67$	$3.99^{b} \pm 0.49$	$4.31^{b} \pm 0.53$	$4.38^{a} \pm 0.63$	$4.08^{b} \pm 0.55$
5	$4.83^{a} \pm 0.38$	$2.97^{b} \pm 0.52$	$4.58^{a} \pm 0.50$	$4.91^{a} \pm 0.28$	$4.47^{a} \pm 0.50$	$4.56^{a} \pm 0.50$
F-test	**	**	**	**	**	**

** = มีความแตกต่างกันอย่างมีนัยสำคัญยิ่ง ($P \leq .01$) , n = จำนวนผลทั้งหมด

[1/] ความชอบ คือ 1=ชอบน้อยที่สุด 2=ชอบเล็กน้อย 3=ชอบปานกลาง 4=ชอบมาก 5=ชอบมากที่สุด

[2/] ความฉ่ำน้ำ คือ 1=ไม่ฉ่ำน้ำ 2=ฉ่ำน้ำเล็กน้อย 3=ฉ่ำน้ำปานกลาง 4=ฉ่ำน้ำมาก 5=ฉ่ำน้ำมากที่สุด

[3/] ความเปรี้ยว คือ 1=ไม่เปรี้ยว 2=เปรี้ยวเล็กน้อย 3=เปรี้ยวปานกลาง 4=เปรี้ยวมาก 5=เปรี้ยวมากที่สุด

[4/] ความหวาน คือ 1=ไม่หวาน 2=หวานเล็กน้อย 3=หวานปานกลาง 4=หวานมาก 5=หวานมากที่สุด

[5/] กลิ่นและรสชาติผิดปกติ คือ 1=กลิ่นและรสชาติผิดปกติ 2=กลิ่นและรสชาติปกติเล็กน้อย 3=กลิ่นและรสชาติปกติปานกลาง 4= กลิ่นและรสชาติปกติมาก 5=กลิ่นและรสชาติปกติมากที่สุด

[6/] เนื้อสัมผัส คือ 1=ชานไม่นิ่ม 2=ชานนิ่มเล็กน้อย 3=ชานนิ่มปานกลาง 4=ชานนิ่มมาก 5=ชานนิ่มมากที่สุด

[7/] กลิ่นหอม คือ 1=ไม่มีกลิ่นหอม 2=กลิ่นหอมเล็กน้อย 3=กลิ่นหอมปานกลาง 4=กลิ่นหอมมาก 5=กลิ่นหอมมากที่สุด

ตารางที่ 4.6 สหสัมพันธ์ (R^2) ระหว่างเกณฑ์การประเมินคุณภาพทางประสาทสัมผัส (n=512)

	ความชอบ	ความฉ่ำน้ำ	ความเปรี้ยว	ความหวาน	กลิ่นและรสชาติที่ปกติ	เนื้อสัมผัส	กลิ่นหอม
ความชอบ	1						
ความฉ่ำน้ำ	0.370583644	1					
ความเปรี้ยว	-0.308998492	-0.035626393	1				
ความหวาน	0.733118016	0.249873488	-0.324772075	1			
กลิ่นและรสชาติ	0.743538011	0.325806991	-0.244223682	0.536544918	1		
เนื้อสัมผัส	0.36592673	0.513441629	-0.062431446	0.111373474	0.290318506	1	
กลิ่นหอม	0.794207274	0.432757033	-0.231134548	0.58627527	0.798637377	0.402741153	1

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Chiang Mai University

ตารางที่ 4.7 สหสัมพันธ์ (R^2) ระหว่างเกณฑ์การประเมินคุณภาพทางประสาทสัมผัส และองค์ประกอบทางเคมี (n=512)

	ความชอบ	ความฉ่ำน้ำ	ความเปรี้ยว	ความหวาน	กลิ่นและรสชาติ	เนื้อสัมผัส	กลิ่นหอม	TSS	TA	TSS/TA
ความชอบ	1									
ความฉ่ำน้ำ	0.370583644	1								
ความเปรี้ยว	-0.308998492	-0.035626393	1							
ความหวาน	0.733118016	0.249873488	-0.324772075	1						
กลิ่นและรสชาติ	0.743538011	0.325806991	-0.244223682	0.536544918	1					
เนื้อสัมผัส	0.365926730	0.513441629	-0.062431446	0.111373474	0.290318506	1				
กลิ่นหอม	0.794207274	0.432757033	-0.231134548	0.58627527	0.798637377	0.402741153	1			
TSS	0.373188339	0.030570400	0.090124840	0.459635256	0.181890232	-0.028832913	0.218553203	1		
TA	-0.015342978	-0.044701052	0.579389258	-0.104184779	0.017590121	-0.040964387	0.013192133	0.41977	1	
TSS/TA	0.108214767	-0.052531965	-0.56549885	0.310199307	0.010546951	-0.106468089	0.013408574	0.040085	-0.82178	1

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Chiang Mai University

ตารางที่ 4.8 ความสัมพันธ์ระหว่างค่า TA และความเปรี้ยวจากการประเมินทางประสาทสัมผัส (n=512)

ความเปรี้ยว	ค่า TA $^{x/}$ ± SD
1	$0.27^{d} \pm 0.07$
2	$0.36^{c} \pm 0.07$
3	$0.40^{c} \pm 0.08$
4	$0.49^{b} \pm 0.10$
5	$0.60^{a} \pm 0.13$
F-test	*

* = มีความแตกต่างกันอย่างมีนัยสำคัญ ($P \leq .05$)

n = จำนวนผลทั้งหมด

ตารางที่ 4.9 ความสัมพันธ์ระหว่างค่า TSS และความหวานจากการประเมินทางประสาทสัมผัส (n=512)

ความหวาน	ค่า TSS $^{x/}$ ± SD
1	$10.36^{d} \pm 1.26$
2	$10.52^{d} \pm 1.41$
3	$11.32^{c} \pm 1.40$
4	$12.01^{b} \pm 1.09$
5	$12.55^{a} \pm 1.12$
F-test	*

* = มีความแตกต่างกันอย่างมีนัยสำคัญ ($P \leq .05$)

n = จำนวนผลทั้งหมด

มหาวิทยาลัยเชียงใหม่ Chiang Mai University