บทที่ 3

วิธีดำเนินการวิจัย

3.1 การเตรียมผลทุเรียนสำหรับการทดลอง

การเก็บตัวอย่างทุเรียนพันธุ์หมอนทองจาก อำเภอมะขาม จังหวัด จันทบุรี ทำโดยสุ่มต้นทุเรียนที่ออกดอก จากนั้นรอวันที่ดอกบานนำป้ายพลาสติกผูกติดกับขั้วดอกพร้อมเขียนระบุวันที่ดอกบานรวมทั้งหมด 500 ดอก แล้วปล่อยให้ทุเรียนเจริญเติบโต

3.1.1 การเก็บเกี่ยวทุเรียนที่อายุต่างๆ

สุ่มเก็บทุเรียนจำนวน 25 ผล 6 ครั้ง เพื่อตรวจสอบคุณภาพ ดังนี้

เมื่อทุเรียนครบ 80 วันหลังดอกบานสุ่มเก็บทุเรียนรวม 25 ผล

เมื่อทุเรียนครบ 90 วันหลังดอกบานสุ่มเก็บทุเรียนรวม 24 ผล

เมื่อทุเรียนครบ 100 วันหลังดอกบานสุ่มเก็บทุเรียนรวม 25 ผล

เมื่อทุเรียนครบ 110 วันหลังดอกบานสุ่มเก็บทุเรียนรวม 25 ผล

เมื่อทุเรียนครบ 120 วันหลังดอกบานสุ่มเก็บทุเรียนรวม 25 ผล

เมื่อทุเรียนครบ 127 วันหลังดอกบานสุ่มเก็บทุเรียนรวม 25 ผล

3.2 เครื่องมือและอุปกรณ์

1. เครื่อง FT-NIR Spectrometer (MPA, Bruker Ltd., Germany) (ภาพที่ 3.1)
2. เครื่อง Visible and NIR Short wavelength Diode Array Spectrometer (FQA-NIR Gun, Shizuoka Shibuya Seiki, Hamamatsu, Japan) (ภาพที่ 3.2)
3. เครื่อง Longwave linear variable filter spectrometer (MICRONIR JDSU, USA) (ภาพที่ 3.3)
4. เครื่องวัดปริมาณของแข็งที่ละลายได้ (Brix Refractometer, ATAGO Pock PAL-1, Japan) (ภาพที่ 3.4)
5. เครื่อง Microcentrifuge (Spectrafuge 7M, Labnet, USA) (ภาพที่ 3.5)

6. เครื่องวัดเนื้อสัมผัส รุ่น (TA HD Plus, Texture Analyzer, Stable Micro System, London, UK) (ภาพที่ 3.6)
7. ตู้อบลมร้อน (ULM 500, Memmert, USA) (ภาพที่ 3.7)
8. เครื่องบด (OKU SAN NO, Malaysia) (ภาพที่ 3.8)
9. เครื่องชั่ง ความละเอียด 0.001 g (SHIMADZU BX300) และความละเอียด 0.0001 g (AR2140 Adventurer, OHAUS, USA) (ภาพที่ 3.9)
10. ป้ายพลาสติก สายรัดพลาสติก ตะกร้า ปากกา เป็นต้น
11. เครื่องแก้วต่างๆ เช่น บีกเกอร์ หลอดทดลอง เป็นต้น

ภาพที่ 3.1 เครื่อง FT-NIR Spectrometer (MPA, Bruker Ltd., Germany)

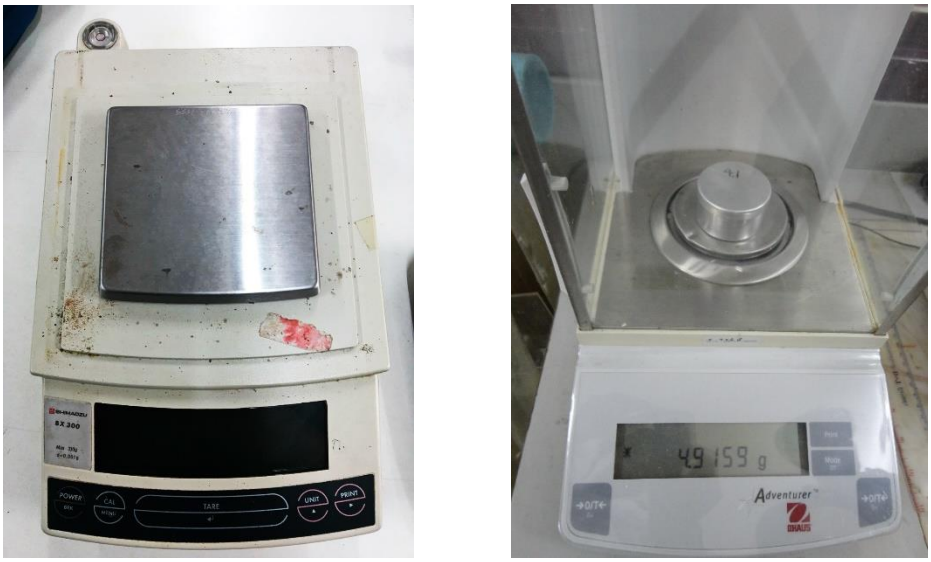
ภาพที่ 3.2 เครื่อง Visible and NIR Short wavelength Diode Array Spectrometer (FQA-NIR Gun, Shizuoka Shibuya Seiki, Hamamatsu, Japan)

ภาพที่ 3.3 เครื่อง Longwave linear variable filter spectrometer (MICRONIR, JDSU, USA)

ภาพที่ 3.4 เครื่องวัดปริมาณของแข็งที่ละลายได้ (Brix Refractometer, ATAGO Pock PAL-1, Japan)

ภาพที่ 3.5 เครื่องวัดเนื้อสัมผัส รุ่น (TA HD Plus, Texture Analyzer, Stable Micro System, London, UK)

ภาพที่ 3.6 เครื่องบด (OKU SAN NO, Malaysia)



(a) (b)

ภาพที่ 3.7 เครื่องชั่ง (a) ความละเอียด 0.001 g (SHIMADZU BX300) และเครื่องชั่ง (b) ความละเอียด 0.0001 g (AR2140 Adventurer, OHAUS, USA)

ภาพที่ 3.8 เครื่อง Microcentrifuge (Spectrafuge 7M, Labnet, USA)

ภาพที่ 3.9 ตู้อบลมร้อน (ULM 500, Memmert, USA)

3.3 วิธีการ

3.3.1 การสแกนด้วยเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี

(a) (b)

ภาพที่ 3.10 การสุ่มสแกนทุเรียนบนต้นด้วยเครื่อง Visible and NIR Short wavelength Diode Array Spectrometer (a) และ Longwave linear variable filter spectrometer (b)

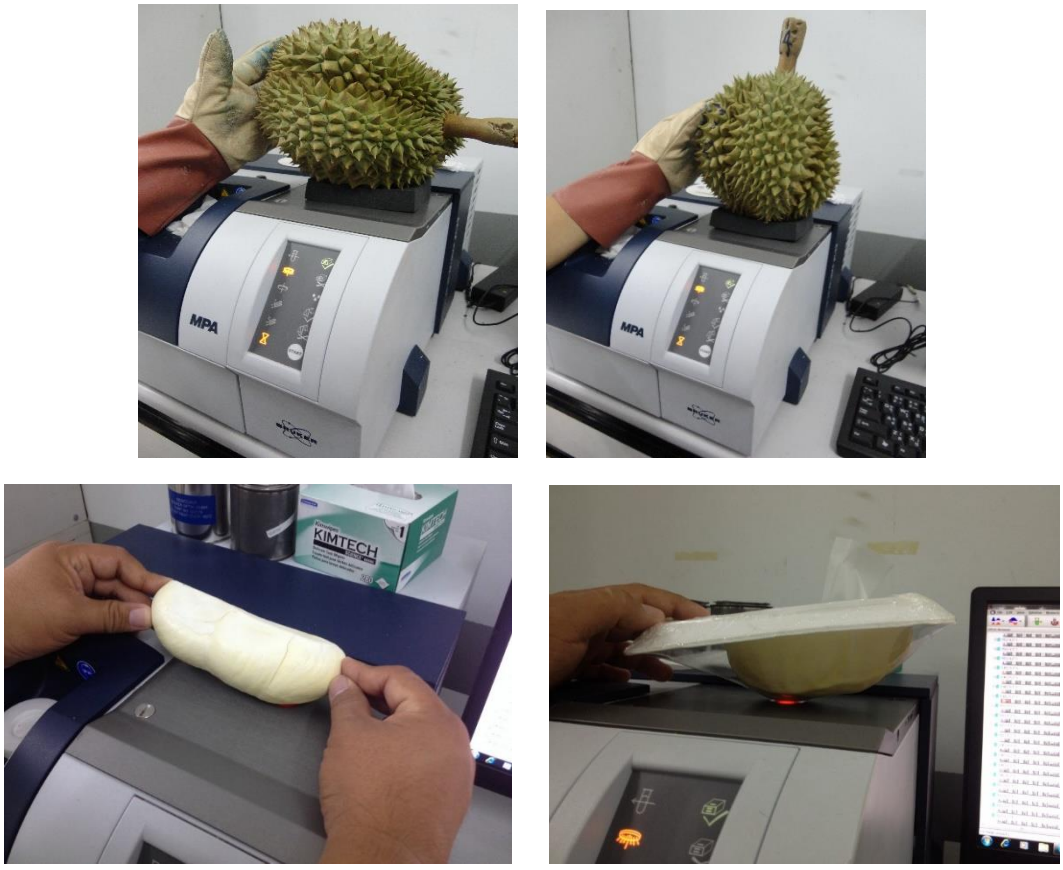
นำเครื่อง Visible and NIR Short wavelength Diode Array Spectrometer และ Longwave linear variable filter spectrometer สุ่มสแกนผลทุเรียนบนต้นจำนวนครั้งละ 25 ลูก จำนวน 6 ครั้ง ดั่งภาพที่ 3.10 เมื่อทุเรียนมีอายุ 80 90 100 110 120 และ 127 หลังดอกบาน และทำการป้ายยาเอทีฟ่อน ก่อนออกจากสวน เพื่อกำหนดเวลา 3 วันให้ทุเรียนสุก นำผลทุเรียนมาไว้ที่ศูนย์วิจัยเนียร์อินฟราเรดสเปคโตรสโคปีสำหรับผลผลิตทาง

การเกษตรและอาหารเป็นระยะเวลา 3 วัน ในช่วงระยะเวลา 3 วัน ก่อนทำการสแกนจะต้องทำการควบคุมอุณหภูมิ 26±2 เป็นเวลา 2-3 ชั่วโมงและทำการสแกนด้วย FT-NIR Spectrometer, Longwave linear variable filter spectrometer (MICRONIR JDSU, USA) และVisible and NIR Short wavelength Diode Array Spectrometer (FQA-NIR GUN Fantec, Japan) ตามลำดับ ทุกวัน เมื่อครบกำหนด 3 วันทุเรียนสุก ก่อนทำการทดลองควบคุมอุณหภูมิ 26±2 เป็นเวลา 2-3 ชั่วโมง จากนั้นนำไปสแกนด้วยเครื่อง FT-NIR Spectrometer, Longwave linear variable filter spectrometer (MICRONIR JDSU, USA) และ Visible and NIR Short wavelength Diode Array Spectrometer ตามลำดับ หลังจากนั้นนำไปหาเนื้อสัมผัส มวลแห้ง และความหวานด้วยวิธีทางเคมี

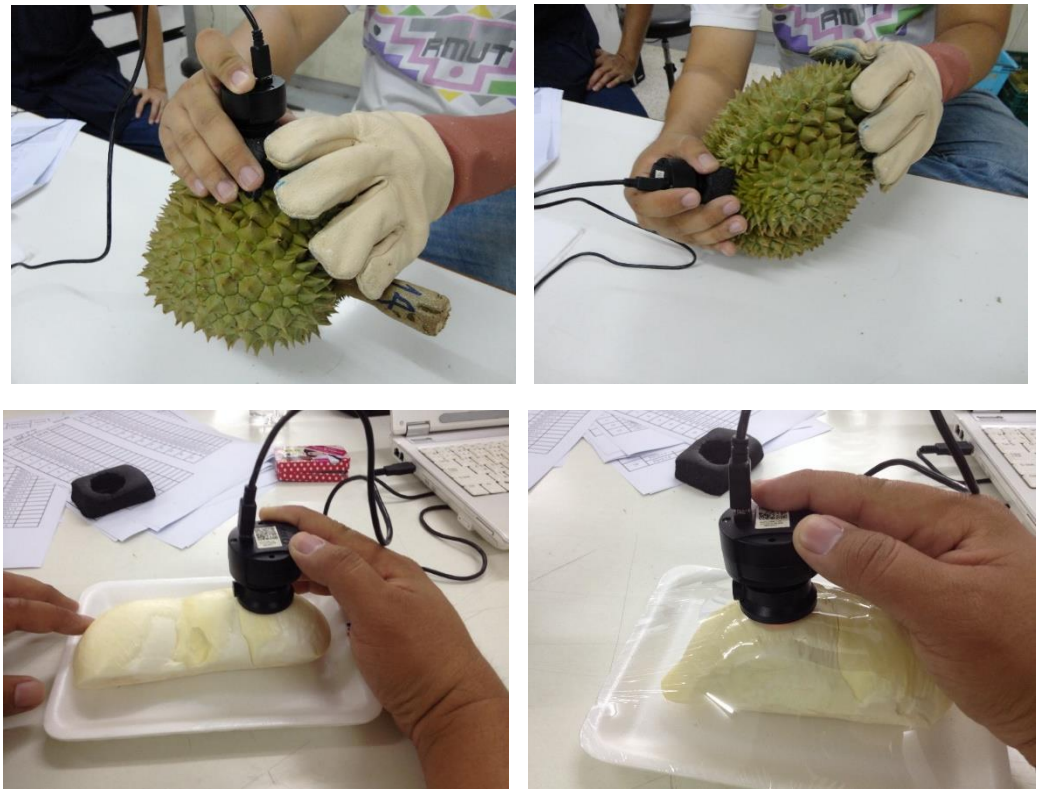
1) การสแกนด้วยเครื่อง FT-NIR Spectrometer ซึ่งมีลักษณะการวัดแบบ Diffuse Reflectance ที่ช่วงจำนวนคลื่นระหว่าง 12500-4000 cm^{-1} (ความยาวคลื่น 700-2500 nm) สแกนทุกๆ 16 cm^{-1} สแกนซ้ำ 32 ครั้งต่อ 1 สเปกตรัม โดยเลือก Sample form แบบ Integrating sphere rotating (Sphere Macrosample) โดยการสแกนที่พูทุเรียนที่ใหญ่ที่สุด ที่ก้นของลูกทุเรียน ที่เนื้อทุเรียนและที่เนื้อทุเรียนหุ้มพลาสติก ดังภาพที่ 3.11

2) การสแกนด้วยเครื่อง Longwave linear variable filter spectrometer (MICRONIR JDSU, USA) ซึ่งมีลักษณะการวัดแบบ Interactance มีช่วงความยาวคลื่นระหว่าง 1150-2150 nm ทุกๆ 7 nm Integrating time 1000 μs และจำนวนตัวอย่างเพื่อหาสเปกตรัมเฉลี่ย เท่ากับ 5000 สแกน ที่เปลือกทุเรียนบริเวณพูทุเรียนที่ใหญ่ที่สุด ที่ก้นของลูกทุเรียน ที่เนื้อทุเรียนและที่เนื้อทุเรียนหุ้มพลาสติก สแกนจำนวน 2 ครั้งต่อตัวอย่าง ดังภาพที่ 3.12

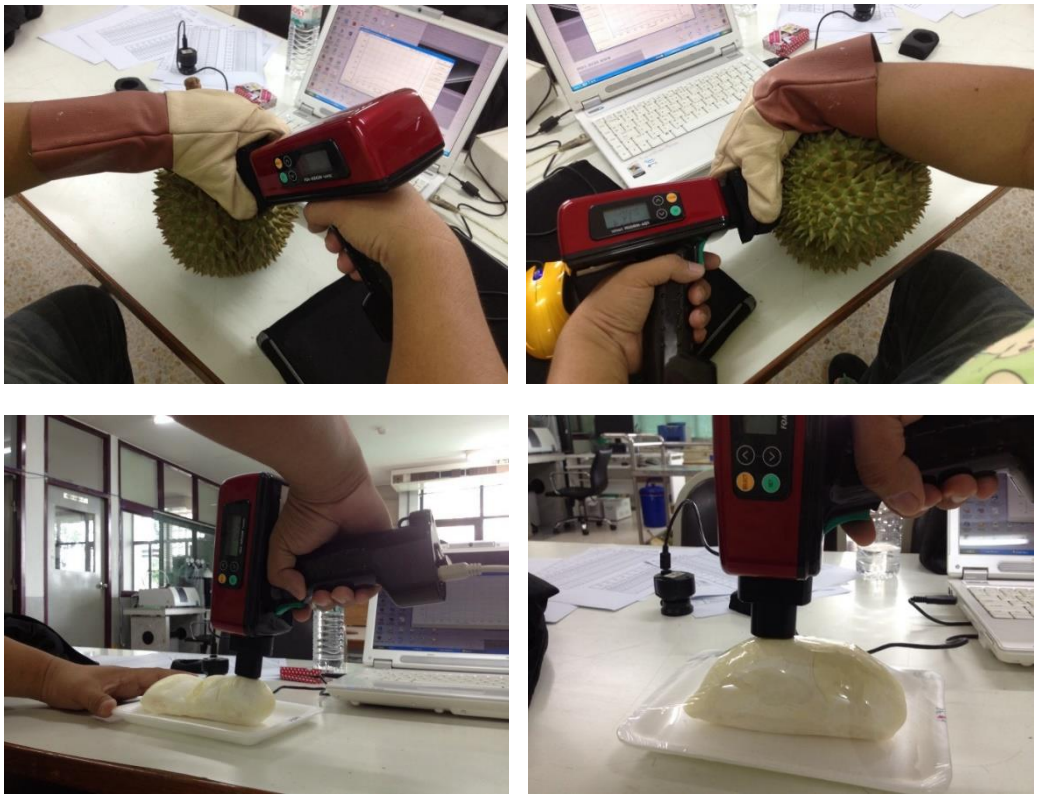
3) การสแกนด้วยเครื่อง Visible and NIR Short wavelength Diode Array Spectrometer (FQA-NIR GUN Fantec, Japan) ซึ่งมีลักษณะการวัดแบบ Interactance มีช่วงความยาวคลื่นระหว่าง 600-1100 nm ทุกๆ 2 nm integration time 25 ms คลุมเครื่องสแกนพร้อมกับตัวอย่างด้วยผ้าสีดำเพื่อป้องกันแสงรบกวนจากภายนอก โดยสแกนที่เปลือกทุเรียนบริเวณพูทุเรียนที่ใหญ่ที่สุด ที่ก้นของลูกทุเรียน ที่เนื้อทุเรียนและที่เนื้อทุเรียนหุ้มพลาสติก สแกนจำนวน 2 ครั้งต่อตัวอย่าง ดังภาพที่ 3.13



ภาพที่ 3.11 การสแกนด้วยเครื่อง FT-NIR Spectrometer (MPA, Bruker Ltd., Germany)



ภาพที่ 3.12 การสแกนด้วยเครื่อง Longwave linear variable filter spectrometer (MICRONIR JDSU, USA)



ภาพที่ 3.13 การสแกนด้วยเครื่อง Visible and NIR Short wavelength Diode Array Spectrometer (FQA-NIR Gun, Shizuoka Shibuya Seiki, Hamamatsu, Japan)

3.4 การตรวจวัดคุณภาพเนื้อทุเรียน

3.4.1 ลักษณะเนื้อสัมผัส (Texture)

วัดค่าแรงกดของพูทุเรียนโดยดัดแปลงจาก (Voon et al., 2006) ด้วยเครื่องวัดเนื้อสัมผัส รุ่น TA.HD. Plus (ภาพที่ 3.4) โดยใช้หัวกดทรงกระบอกปลายเรียบเส้นผ่าศูนย์กลาง 5 mm กดลงบนพูทุเรียนด้วยความเร็วก่อนกดและหลังกด เป็น 2, 1 และ 5 mm/min ให้หัวกดลึกลงไป 10 มิลลิเมตร และทำการวัดแรงที่กระทำเป็นค่า (Rupture force: N) (Average firmness: N/mm) (Toughness: Nmm) (Average penetrating force: N) (Penetrating energy: Nmm) การวัดจะวัดที่เนื้อทุเรียนกลางพู

3.4.2 ความชื้นและความหวาน

นำเนื้อทุเรียนที่ผ่านการวัดเนื้อสัมผัสจำนวน 80 g มาปั่นด้วยเครื่องบดให้ละเอียด (OKU SAN NO, Malaysia) แบ่งออกเป็น 2 ส่วน ส่วนที่ 1 วัดความชื้นโดยใช้เนื้อทุเรียนปริมาณ 5 g จำนวน 2 ซ้ำ วัดโดยใช้เครื่องชั่ง ความละเอียด 0.0001 g (AR2140 Adventurer, OHAUS, USA)

โดยใช้ตู้อบลมร้อนที่อุณหภูมิ 60 °C อบจนกระทั่งน้ำหนักคงที่ ส่วนที่ 2 วัดความหวาน โดยใช้เนื้อทุเรียน 1 ส่วน ต่อน้ำ 3 ส่วน โดยปริมาตร ผสมให้เข้ากันแล้วนำไปปั่นเหวี่ยงด้วยเครื่อง Microcentrifuge (Spectrafuge 7M, Labnet, USA) ที่ความเร็วรอบ 6000 rpm เป็นเวลา 10 min วัดปริมาณของแข็งที่ละลายได้ (Soluble solids content) ซึ่งเป็นเสมือนความหวานของเนื้อทุเรียนโดยรินน้ำส่วนบนที่เป็นของเหลวใสลงใน Digital Refractometer (Pal1, ATAGO, Japan) ทั้งนี้ต้องคูณค่าที่ได้ด้วย 4 (สุดารัตน์ 2536)

การทดลองครั้งนี้เพื่อวัดค่าความชื้นของเนื้อทุเรียน โดยใช้ ตู้อบแห้งแบบลมร้อน (ULM 500, Memmert, USA) เขียนหมายเลขที่ aluminum can นำใส่โถดูดความชื้น เป็นเวลาอย่างน้อย 30 นาที จำนวน 50 กระป๋อง ทำการชั่งน้ำหนัก aluminum can และบันทึกค่า นำเนื้อทุเรียนที่ปั่น มาชั่งน้ำหนักประมาณ 0.5 g และบันทึก ค่า และเข้าตู้อบที่อุณหภูมิ 60-65 °C เมื่อครบ 6 ชั่วโมง จึงนำตัวอย่างออกจากตู้อบแห้ง ใส่โหลดูดความชื้น ทิ้งไว้ ให้เย็นประมาณ 10-15 นาที จากนั้นชั่งน้ำหนัก และบันทึกค่า และทุก 3ชั่วโมง ทุกครั้งที่เอาออกจากตู้อบต้อง ใส่โหลดูดความชื้น ทิ้งไว้ ให้เย็นประมาณ 10-15 นาที จากนั้นชั่งน้ำหนัก จนกว่าน้ำหนักจะคงที่ โดยมีค่าความแตกต่างระหว่างครั้งที่วัดกับครั้งที่วัดต่อมาไม่เกินระหว่าง 0.003-0.005 g แล้วมาคำนวณหา %MC และ %DM

$$MC\ (\%) = \frac{(W1-W2)\times 100}{W1} \qquad (3.1)$$

$$DM\ (\%) = 100 - (MC)\ (\%) \qquad (3.2)$$

3.5 การวิเคราะห์ข้อมูล

3.5.1 การวิเคราะห์ลักษณะของสเปกตรัม

การตรวจดูความผิดปกติของสเปกตรัมดั้งเดิม หากพบบางเส้นอยู่ในตำแหน่งผิดปกติจากกลุ่มจดบันทึกและพิจารณาตัดข้อมูล นอกจากนี้ยังวิเคราะห์จากแถบการดูดซับคลื่นที่ปรากฏในสเปกตรัมโดยพิจารณาให้สอดคล้องกับองค์ประกอบที่มีในตัวอย่าง (รณฤทธิ์ ฤทธิรณ 2555) วิธีการเลือก Outlier ของสเปกตรัม ในโปรแกรม (OPUS version 7.0.129) การเลือก Outlier พิจารณาจากขีดจำกัดของค่าระยะ Mahalonobis คือ ความแตกต่างระหว่างสเปกตรัมของตัวอย่างกับค่าเฉลี่ยของทุกสเปกตรัมของชุด Calibration การคำนวณจะพิจารณาบนพื้นฐานของการกระจายของสเปกตรัมของชุด Calibration ทั้งหมด ซึ่งจะต้องคำนวณค่าเฉลี่ยและค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน สมมุติว่าการกระจายเป็นแบบระฆังคว่ำ ขีดจำกัดด้านหนึ่งจะครอบคลุมความเป็นไปได้ 99.999% ค่าขีดจำกัดของระยะ Mahalanobis

ที่คำนวณโดยวิธีการนี้จะทำให้แน่ใจว่าระยะ Mahalanobis ของสเปกตรัมเกือบทั้งหมดหรือทั้งหมดมีค่าต่ำกว่าขีดจำกัดนี้ ถ้าเกินขีดจำกัดก็จะเป็น Outlier

3.5.2 การวิเคราะห์ค่านอกกลุ่ม

การตรวจสอบพิสัยของค่าทางเคมี เป็นการตรวจสอบการกระจายค่าทางเคมีของประชากรกลุ่มตัวอย่าง หากตัวอย่างมีค่าทางเคมีสูงหรือต่ำจากการกระจายค่าทางเคมีแบบปกติ (Normal distribution) ตัวอย่างเหล่านั้นอาจไม่อยู่ในกลุ่มประชากรที่สนใจ หากค่าสัมบูรณ์ของค่าทางสถิติคะแนน **t** ตัวอย่างใดมีค่ามากกว่า 3 หมายถึงตัวอย่างนั้นอยู่นอกกลุ่มประชากรตัวอย่างที่สนใจที่ระดับความเชื่อมั่น 99 เปอร์เซ็นต์ ให้พิจารณาตัดตัวอย่างนั้นทิ้ง (รณฤทธิ์ ฤทธิรณ 2555)

3.5.3 การเตรียมสเปกตรัมของเนื้อทุเรียนที่ไม่หุ้มหรือหุ้มด้วยพลาสติกฟิล์มเพื่อการสร้างสมการในการทำนาย

ก่อนที่นำสเปกตรัมไปสร้างสมการในการทำนาย จำเป็นต้องแปลงข้อมูลก่อนนำไปสร้างแบบจำลองในการทำนาย ดังนี้

1) สเปกตรัมจากเครื่อง FT-NIR Spectrometer ไม่ต้องมีการแปลงไฟล์ใดๆ
2) สเปกตรัมจากเครื่อง Visible and NIR Short wavelength Diode Array Spectrometer จำเป็นต้องเปลี่ยนลักษณะการวัดแบบ Interactance ให้เป็น Absorbance ในโปรแกรม Ca Maker ซึ่งจะได้ข้อมูลเป็น Text File จากนั้นนำไป Export ให้เป็นไฟล์ Unscramble X (Camo, Norway)

3.5.4 การสร้างแบบจำลองเชิงปริมาณในการทำนาย ใน (OPUS version 7.0.129) การสร้างแบบจำลองการทำนายเชิงปริมาณทำโดยสร้างความสัมพันธ์ระหว่างข้อมูลเชิงแสง (Optical data) เนื้อสัมผัส มวล แห้ง และความหวาน ที่วัดด้วยวิธีมาตรฐาน โดยวิธี Partial least squares regression (PLSR) โดยใช้โปรแกรม (OPUS version 7.0.129) ทั้งนี้ใช้ข้อมูลเชิงแสง (สเปกตรัม) ที่ไม่มีการจัดการสเปกตรัมเบื้องต้นหรือที่มีการจัดการสเปกตรัมเบื้องต้นโดยวิธี constant offset elimination, straight line subtraction, vector normalization (SNV), min-max normalization, multiplicative scattering correction, first derivative, second derivative, first derivative + straight line subtraction, first derivative + SNV และ first derivative + MSC พิสูจน์แบบจำลองโดยใช้วิธี Test set validation เมื่อได้แบบจำลองจะคัดเลือกแบบจำลองที่ดีที่สุดโดยพิจารณาจากค่ารากที่สองของความคลาดเคลื่อนเฉลี่ยยกกำลังสองของการทำนาย (root mean squared error of prediction; RMSEP) ที่ต่ำที่สุด จากนั้นจะบันทึกค่า

สัมประสิทธิ์การตัดสินใจ (coefficients of determination; R^2), RMSEP อัตราส่วนระหว่างค่าความคลาดเคลื่อน เฉลี่ยกับค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน (Ratio of standard error of validation to the standard deviation; RPD), ค่าความผิดพลาดเฉลี่ย (bias) และบันทึกค่า regression coefficient และ X-loading weight ที่จำนวนคลื่นต่างๆ หรือความยาวคลื่นต่างๆ

3.5.5 การสร้างแบบจำลองเชิงปริมาณในการทำนาย ใน Unscramble X

การสร้างแบบจำลองการทำนายเชิงปริมาณทำโดยสร้างความสัมพันธ์ระหว่างข้อมูลเชิงแสง (Optical data) เนื้อสัมผัส มวลแห้ง และความหวาน ที่วัดด้วยวิธีมาตรฐาน โดยวิธี Partial least square regression (PLSR) โดยใช้โปรแกรม Unscramble X ทั้งนี้ใช้ข้อมูลเชิงแสง (สเปกตรัม) ที่ไม่มีการจัดการสเปกตรัมเบื้องต้นหรือที่มีการจัดการสเปกตรัมเบื้องต้นโดยวิธี min-max-range normalization, first derivative (5, 11 และ 21 points), second derivative (5, 11 และ 21 points), Baseline-offset, vector normalization (SNV), SNV + Detrending, Detrending, multiplicative scattering correction (MSC) พิสูจน์แบบจำลองโดยใช้วิธี Test set validation เมื่อได้แบบจำลองจะคัดเลือกแบบจำลองที่ดีที่สุดโดยพิจารณาจากค่า RMSEP ที่ต่ำที่สุด จากนั้นจะบันทึกค่า R^2, RMSEP, RPD, bias และบันทึกค่า regression coefficient และ X-loading weight ที่จำนวนคลื่นต่างๆ หรือความยาวคลื่นต่างๆ

3.5.6 การวิเคราะห์เชิงคุณภาพ แบบ Soft Independent Modeling of Class Analogy (SIMCA)

การวิเคราะห์แบบ SIMCA เป็นการวิเคราะห์โดยใช้วิธี PCA นำมาวิเคราะห์การแบ่งกลุ่มของความสุกแก่ทุเรียนตามอายุในการเก็บเกี่ยว 80 90 100 110 120 และ 127 วันหลังดอกบาน โดยนำสเปกตรัมของความสุกแก่ทุเรียนตามอายุในการเก็บเกี่ยว 80 90 100 110 120 และ 127 วันหลังดอกบาน ในชุด Calibration มาทำการวิเคราะห์โดยใช้ทำแบบจำลอง PCA เพื่อใช้ในการทำนาย จะทำให้ได้แบบจำลอง PCA ของความสุกแก่ทุเรียนตามอายุในการเก็บเกี่ยว 80 90 100 110 120 และ 127 วันหลังดอกบานนำแบบจำลอง PCA ของทั้งความสุกแก่ทุเรียนตามอายุในการเก็บเกี่ยว 80 90 100 110 120 และ 127 วันหลังดอกบานมาทำนายค่าว่าความสุกแก่ทุเรียนในชุด Validation เป็นกลุ่มอายุในการเก็บเกี่ยวใดและวิเคราะห์ว่าแบบจำลองมีความแม่นยำในการทำนายได้ถูกต้องหรือไม่

3.5.7 การวิเคราะห์เชิงคุณภาพ การวิเคราะห์แบบ PLS- DA

เป็นการวิเคราะห์โดยใช้วิธี PLS2 นำมาวิเคราะห์การแบ่งกลุ่มของความสุกแก่ทุเรียนตามอายุในการเก็บเกี่ยว 80 90 100 110 120 และ 127 วันหลังดอกบาน โดยตัวแปรต้นคือสเปกตรัมการดูดกลืนแสงช่วง NIR และตัวแปรตามคือความความสุกแก่ทุเรียนที่ได้มาตรฐานและความสุกแก่ทุเรียนที่ไม่ได้มาตรฐาน เพื่อสร้างแบบจำลองโดยตัวแปรตามในการสร้างแบบจำลองความสุกแก่ทุเรียนจะแทนด้วย 0 และ 1 (Yes =1 , No = 0) แบบจำลองที่ได้จะนำไปทำนายในชุด Validation โดยค่าที่ได้จะเป็นค่า การทำนายเทียบกับค่าที่ได้จากการวัด โดยค่าจากการทำนายค่า Y

Y > 0.5 ซึ่งมากกว่าค่าเฉลี่ย จึงจัดอยู่ในกลุ่มของ 1

Y< 0.5 ซึ่งน้อยกว่าค่าเฉลี่ยจึงจัดอยู่ในกลุ่มของ 0

ถ้าค่า Y จากการทำนายมีค่าตรงกับค่าอ้างอิงก็จะสรุปว่าการทำนายนี้ถูกต้อง

3.6 การทดสอบความแม่นยำของการวัดค่าทางเคมี

การทดสอบความแม่นยำของการวัดค่าทางเคมี โดยการวัดค่า Repeatability และค่า Reproducibility โดยค่า Repeatability (Rep) คือค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานของการวัดตัวอย่างซ้ำ โดยผู้วัดทราบว่าเป็นตัวอย่างอะไร (Duplicate sample) ซึ่งในการทดลองนี้มีการนำตัวอย่างเข้ามาวัดซ้ำเป็น ส่วนค่า Reproducibility คือค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานของการวัดตัวอย่างซ้ำ โดยผู้วัดไม่ทราบว่าตัวอย่างที่ซ้ำเป็นตัวอย่างอะไร (Blind sample) ซึ่งในการทดลองนี้มีการวัดซ้ำ2ซ้ำต่อ1ตัวอย่าง ในระหว่างการทดลอง (ไม่พร้อมกัน) ซึ่ง Dardenne (2009) [84] ได้อธิบายว่า R^2 จะสูงสุด ($\mathbf{R^2_{Max}}$) เมื่อไม่มี error ในสเปกตรัมหรือแบบจำลอง และชี้ให้เห็นว่าค่า SD_y และ Rep ก็เพียงพอที่จะใช้ตัดสินใจว่าควรสร้างแบบจำลอง NIR ต่อไปหรือไม่ ค่า $\mathbf{R^2_{Max}}$ สามารถคำนวณได้จากสมการ

$$\mathbf{R^2_{Max}} = \frac{\mathbf{SD_y^2 - Rep^2}}{\mathbf{SD_y^2}} \qquad (3.3)$$

SD_y คือ ค่า standard deviation ของค่าสารที่ตรวจสอบ (ตัวแปรตาม) ของชุด calibration