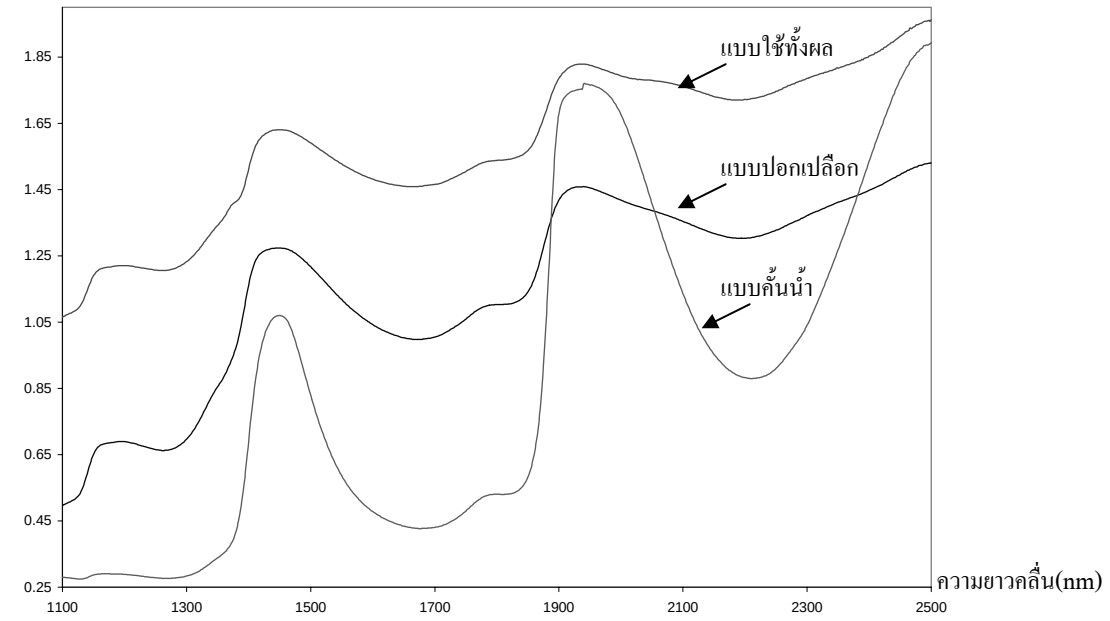
ผลและการวิจารณ์

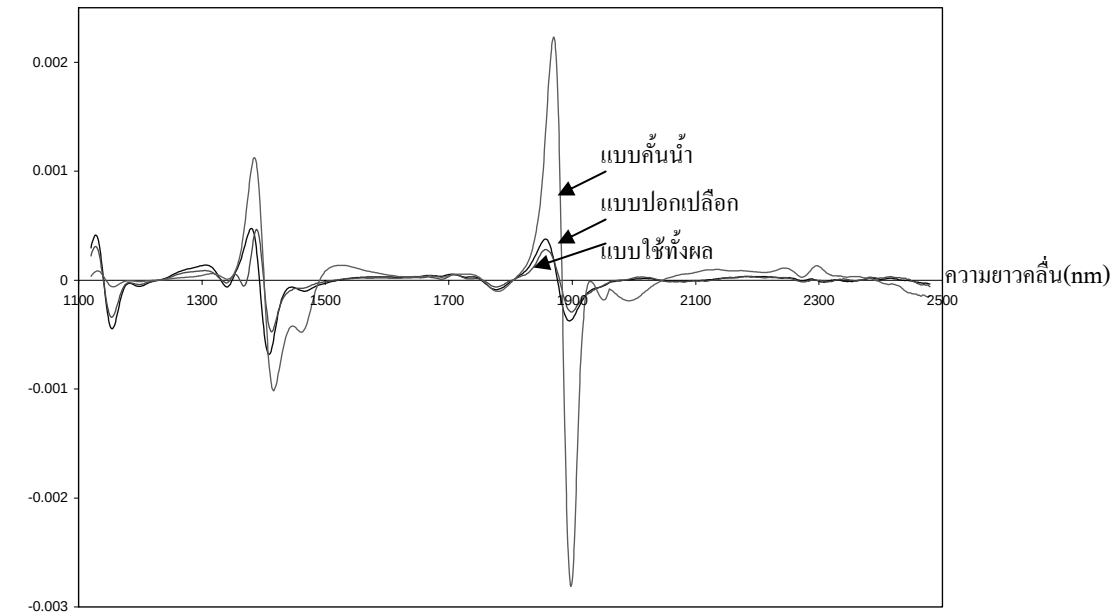
1. ลักษณะสเปกตรัมและค่าทางเคมีของผลแก้วมังกร

1.1 ลักษณะสเปกตรัม

ลักษณะสเปกตรัมของผลแก้วมังกร ที่วัดได้จากเครื่อง NIR Near Infrared Spectrophoto meter ยี่ห้อ Bran+Luebbe รุ่น InfraAlyzer 500 แสดงได้ดังภาพที่ 15 สเปกตรัมของผลแก้วมังกรแบบปอกเปลือกจะมีการดูดกลืนแสงที่ช่วงความยาวคลื่นตั้งแต่ 1100 นาโนเมตร ถึงประมาณ 1850 นาโนเมตร สูงกว่าสเปกตรัมของน้ำคั้นผลแก้วมังกร เมื่อพิจารณาสเปกตรัมจะพบความเด่นชัดของยอดสเปกตรัมที่ความยาวคลื่น 1420 และ 1910 นาโนเมตรสอดคล้องกับสเปกตรัมของน้ำ (Saranwong *et al*., 2001) เกิดจากการดูดกลืนของน้ำ หรือในที่นี้จะเรียกว่าพีคน้ำ ซึ่งโดยทั่วไปในผลไม้จะพบได้เด่นชัด กล่าวคือ มีลักษณะเป็ตัวอย่างที่มีน้ำเป็นองค์ประกอบ และด้วยอิทธิพลของน้ำ ทำให้ไม่สามารถมองเห็นพีคอื่นได้อย่างชัดเจน นอกจากนั้นพีคที่ได้จะมีลักษณะเป็นพีคที่มีฐานกว้าง (Broad band) ทำให้ไม่สามารถระบุพีคได้ชัดเจน ก่อนทำการสร้างสมการ Calibration จึงมีการใช้ วิธีการทางคณิตศาสตร์ เพื่อช่วยในการปรับแต่งสเปกตรัมเพื่อให้เกิดการแยกพีคอื่นๆออกมา วิธีที่เลือกใช้คือ การหาอนุพันธ์อันดับที่สอง (second derivative) ซึ่งวิธีนี้ช่วยให้สเปกตรัมเห็นพีคหลายพีคที่ชัดเจนมากขึ้น โดยที่พีคนั้นยังอยู่ที่ความยาวคลื่นเดิม เพียงแต่พีคมีการกลับข้างจากที่เคยอยู่ในช่วงค่าลบ ก็สลับไปอยู่ข้างบวก และจากค่าบวก ก็จะสลับไปอยู่ค่าลบ นอกจากนี้แล้ว วิธีนี้ยังช่วยในการกำจัดสัญญาณรบกวน (Noise) ที่เกิดขึ้นระหว่างการสแกนได้ (อนุพันธ์, 2545) สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วย การหาอนุพันธ์อันดับที่สอง ของผลแก้วมังกรแสดงได้ดังภาพที่ 16



<u>ภาพที่</u> 15 สเปกตรัมผลแก้วมังกร จากเครื่อง NIR Near Infrared Spectrophoto meter ยี่ห้อ Bran+Luebbe รุ่น InfraAlyzer 500



<u>ภาพที่</u> 16 Second derivative สเปกตรัมผลแก้วมังกร

1.2 ค่าทางเคมีของผลแก้วมังกร

จากการที่วัดค่าเคมีของผลแก้วมังกรที่มีความหลากหลาย โดยตัวอย่างที่นำมานั้นได้ซื้อจากหลายแหล่งคือ ตลาดไท ตลาดปฐมมงคล และตลาดโอเดียนนครปฐม ซึ่งมีลักษณะ ตั้งแต่ยังไม่สุกเต็มที่ จนถึงระยะที่สุกพร้อมบริโภคได้ ซึ่งเป็นลักษณะที่ดีต่อการสร้างสมการ Calibration เพราะทำให้ได้ค่าที่มีช่วงที่กว้าง เหมาะแก่การเป็นตัวแทนเพื่อสร้างสมการในการทำนายค่าตัวอย่างที่ไม่ทราบค่า (Kawano, 2002) ค่าต่างๆแสดง ดังตารางที่ 3

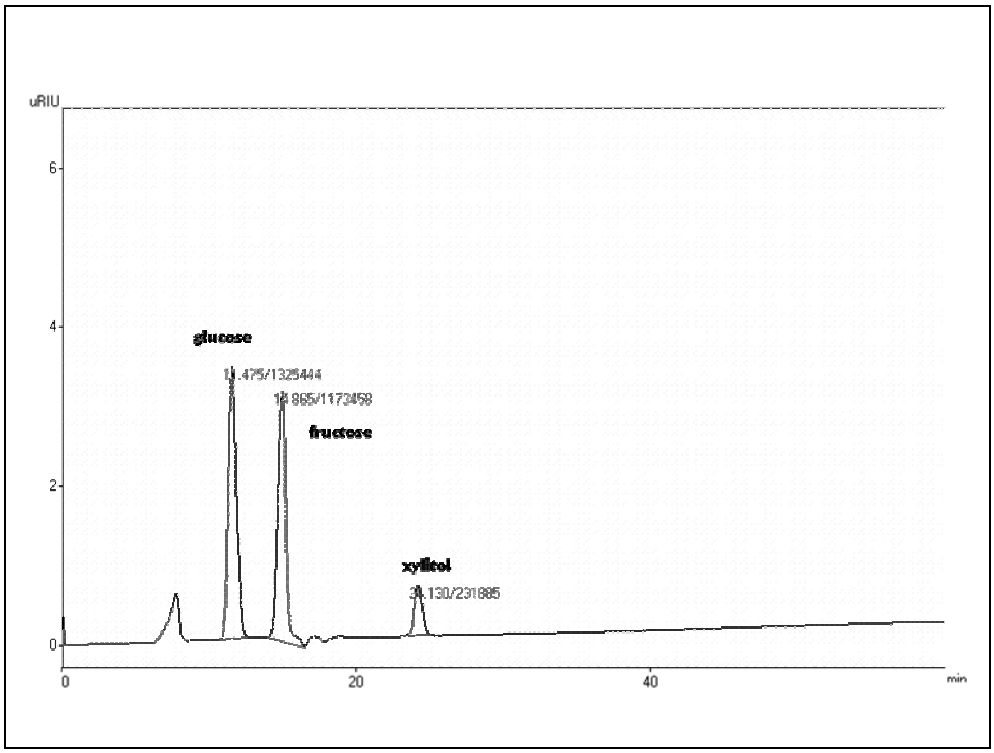
ค่าทางเคมีของปริมาณกรดของแบบทั้งผล, แบบปอกเปลือก และ แบบคั้นน้ำ มีค่าสูงสุดเท่ากับ 0.467 ค่าต่ำสุดเท่ากับ 0.095 และค่าเฉลี่ยเท่ากับ 0.239 ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานเท่ากับ 0.085

ปริมาณของแข็งที่ละลายได้ ของแบบทั้งผล และแบบปอกเปลือก และ แบบคั้นน้ำ มีค่าสูงสุดเท่ากับ 14.4 ค่าต่ำสุดเท่ากับ 6.6 และค่าเฉลี่ยเท่ากับ 10.27 ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานเท่ากับ 1.44

จากการวิเคราะห์ชนิดของน้ำตาลในน้ำคั้นแก้วมังกร ด้วยวิธี HPLC (High Performance Liquid Chromatography) พบว่าแก้วมังกรมีน้ำตาลโมเลกุลเดี่ยวสองชนิด คือ น้ำตาลกลูโคส และ ฟรุกโตส และมีน้ำตาลซูโครสน้อยมาก แสดง ดังภาพที่ 17

ตารางที่ 3 ค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ และปริมาณกรด ของแก้วมังกรทั้ง 3 แบบ

ค่าทางเคมี		แบบทั้งผล, แบบปอกเปลือก และแบบใช้น้ำคั้น (160 ตัวอย่าง)
ปริมาณกรด(%)	ค่าสูงสุด	0.467
	ค่าต่ำสุด	0.095
	ค่าเฉลี่ย	0.239
	SD	0.085
ปริมาณของแข็งที่ละลายได้(%)	ค่าสูงสุด	14.40
	ค่าต่ำสุด	6.60
	ค่าเฉลี่ย	10.27
	SD	1.44



ภาพที่ 17 กราฟการวิเคราะห์ชนิดน้ำตาลในผลแก้วมังกรโดยวิธี HPLC

2 <u>การสร้างสมการ Calibration เพื่อทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ ปริมาณกรด ของผลแก้วมังกรแบบใช้ทั้งผล ปอกเปลือก และคั้นน้ำ ด้วยวิธี Multiple Linear Regression (MLR)</u>

2.1 การสร้างสมการเพื่อทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ในผลแก้วมังกรแบบใช้ทั้งผล ปอกเปลือก และคั้นน้ำ ด้วย วิธี Multiple Linear Regression (MLR)

การสร้างสมการ Calibration ด้วยวิธีการนี้ เป็นการสร้างสมการหาความสัมพันธ์ระหว่างการดูดกลืนที่ความยาวคลื่นต่างๆกับค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ โดยสร้างสมการถดถอย (ธงชัย, 2545) ค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้จากกลุ่มตัวอย่างที่ใช้ในการสร้างสมการ (Calibration) และทดสอบสมการกับกลุ่มตัวอย่างที่ใช้ในการทดลอง (Validation) แสดงได้ดังตารางที่ 4

กลุ่ม Calibration ค่าทางเคมีของปริมาณของแข็งที่ละลายได้ของแบบทั้งผล มีค่าสูงสุดเท่ากับ 14.40 ค่าต่ำสุดเท่ากับ 6.60 และค่าเฉลี่ยเท่ากับ 10.59 ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานเท่ากับ 1.595, แบบปอกเปลือก มีค่าสูงสุดเท่ากับ 13.65 ค่าต่ำสุดเท่ากับ 7.75 และค่าเฉลี่ยเท่ากับ 10.48 ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานเท่ากับ 1.574 และ แบบคั้นน้ำ มีค่าสูงสุดเท่ากับ 14.40 ค่าต่ำสุดเท่ากับ 6.60 และค่าเฉลี่ยเท่ากับ 10.23 ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานเท่ากับ 1.460

กลุ่ม Validation ค่าทางเคมีของปริมาณของแข็งที่ละลายได้ของแบบทั้งผล มีค่าสูงสุดเท่ากับ 12.95 ค่าต่ำสุดเท่ากับ 8.25 และค่าเฉลี่ยเท่ากับ 10.20 ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานเท่ากับ 1.315, แบบปอกเปลือก มีค่าสูงสุดเท่ากับ 12.95 ค่าต่ำสุดเท่ากับ 8.75 และค่าเฉลี่ยเท่ากับ 10.46 ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานเท่ากับ 1.120 และ แบบคั้นน้ำ มีค่าสูงสุดเท่ากับ 12.95 ค่าต่ำสุดเท่ากับ 8.20 และค่าเฉลี่ยเท่ากับ 10.27 ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานเท่ากับ 1.372

การที่ค่าทางเคมีของทั้ง 3 แบบไม่เท่ากันเพราะว่าได้มีการตัดสเปกตรัมบางส่วนออกไป เนื่องจากลักษณะของสเปกตรัมแตกต่างจากกลุ่มมากอย่างเห็นได้ชัดเจน ในการนำมาสร้างสมการอาจทำให้การสร้างสมการไม่แม่นยำ และในการแบ่งกลุ่มทั้งสองกลุ่มทำการแบ่งกลุ่มแบบสุ่มค่าจึงแตกต่างกัน

ตารางที่ 4 ค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ของแก้วมังกรทั้ง 3 แบบที่แบ่งกลุ่ม Calibration และ กลุ่ม Validation

ปริมาณของแข็งที่ละลายได้(%)		แบบทั้งผล (129 ตัวอย่าง)	แบบปอกเปลือก (158 ตัวอย่าง)	แบบคั้นน้ำ (160 ตัวอย่าง)
กลุ่ม Calibration	ค่าสูงสุด	14.40	14.40	14.40
	ค่าต่ำสุด	6.60	7.75	6.60
	ค่าเฉลี่ย	10.59	10.20	10.23
	SD	1.595	1.387	1.460
กลุ่ม Validation	ค่าสูงสุด	12.95	13.65	12.95
	ค่าต่ำสุด	8.25	8.5	8.20
	ค่าเฉลี่ย	10.20	10.46	10.27
	SD	1.315	1.468	1.372

รายละเอียดของสมการ เพื่อทำนายปริมาณของแข็งที่ละลายได้ ในแต่ละแบบที่สร้างด้วยวิธีการนี้ แสดงค่าอยู่ในตารางที่ 5 จากตารางพบว่า ในผลแก้วมังกรแบบใช้น้ำคั้นนั้น สมการมีความแม่นยำในการทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ดีกว่าแบบอื่นๆ โดยดูจากค่า SEP ที่ต่ำกว่าแบบอื่น และค่า Bias หรือค่าเฉลี่ยที่แสดงความผิดพลาด ในการทำนายค่าจากสมการกับค่าจริงที่วัดได้มีค่าต่ำกว่าเช่นเดียวกัน ส่วนสมการ Calibration ที่ได้มีความแม่นยำที่ค่อนข้างดี โดยค่า R มีค่าค่อนข้างสูง และความยาวคลื่นแรกของแบบน้ำคั้น ซึ่งเป็นพจน์ที่สำคัญในสมการ ก็มีความยาวคลื่นที่ใกล้เคียงกับความยาวคลื่นประมาณ 1200 นาโนเมตร สอดคล้องกับ Osborne และคณะ (1993) ที่รายงานความยาวคลื่นของน้ำตาลกลูโคสที่ 1198 นาโนเมตร จากค่าผลการทดลองที่ได้จะเห็นว่า สมการของการทดลองแบบใช้ทั้งผลนั้น สมการยังทำนายค่าได้ไม่ดี ดูจากค่า R ที่ต่ำและ SEP ที่ได้จากการนำสมการไปทำนายค่า มีค่าค่อนข้างสูง ซึ่งเป็นเพราะในการสแกนผลแก้วมังกรโดยเครื่อง NIR Near Infrared Spectrophoto meter ยี่ห้อ Bran+Luebbe รุ่น InfraAlyzer 500 ที่ความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร นั้น สามารถทะลุลงไปในผลแก้วมังกรได้น้อย อาจจะผ่านทะลุลงไปในเนื้อของแก้วมังกรได้น้อยจึงทำให้ความสัมพันธ์กับค่าทางเคมีต่ำ ซึ่งสอดคล้องกับการทดลองที่ ใช้แบบน้ำคั้น สมการที่ได้มีค่าดี รองลงมาเป็นแบบปอกเปลือก และ แบบใช้ทั้งผลตามลำดับ การเลือกความยาวคลื่นแรกของค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ ในแต่ละแบบการทดลองแสดงได้ดังภาพที่ 18, 19 และ 20

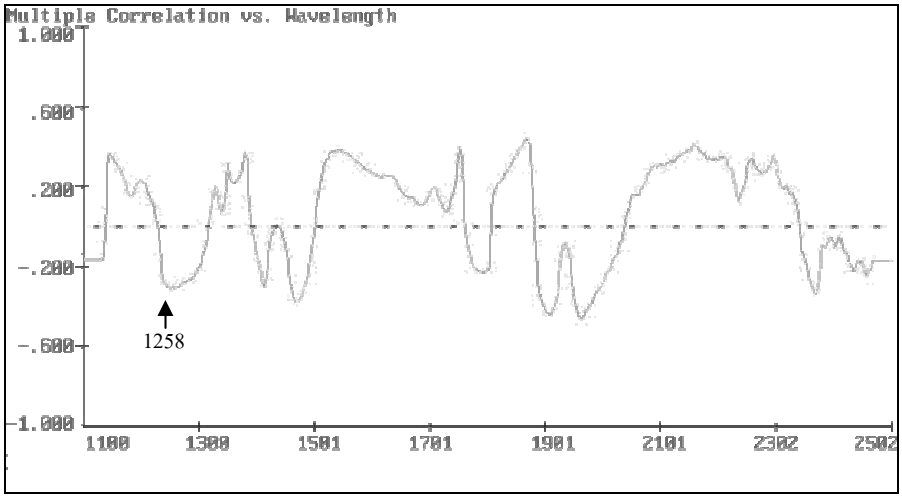
ตารางที่ 5 ผลจากการสร้างสมการ Calibration ด้วยวิธี MLRเพื่อทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ ของผลแก้วมังกรแบบใช้ทั้งผล ปอกเปลือก และคั้นน้ำ

ลักษณะ	ความยาวคลื่น (นาโนเมตร)	Calibration		Validation		
		SEC[1]	R^2	SEP[3]	R^2	Bias
ใช้ทั้งผล	1258 1962 1754 2110	1.41	0.503	1.06	0.633	0.168
ปอกเปลือก	1272 1194 1664 1740	0.854	0.851	0.906	0.589	-0.045
น้ำคั้น	1208 2270 2440 1320	0.900	0.794	0.538	0.923	0.023

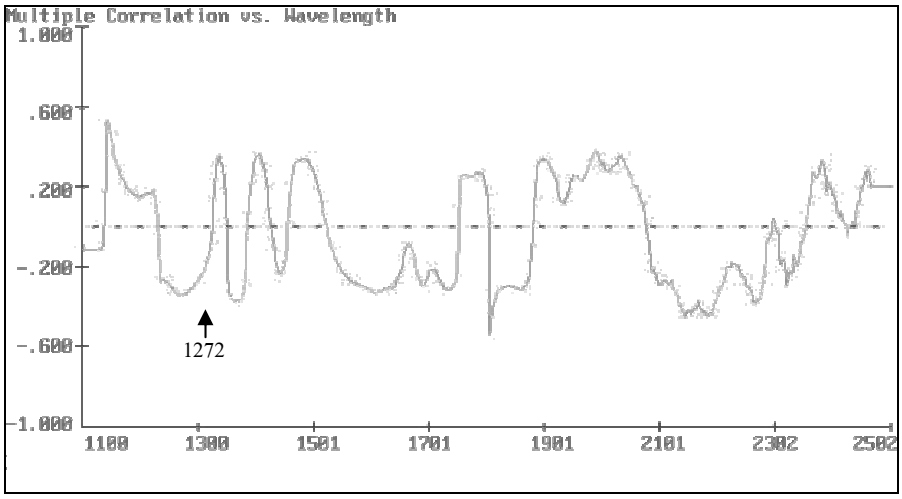
[1]SEC = Standard Error of Calibration

[2]R = Regression coefficient

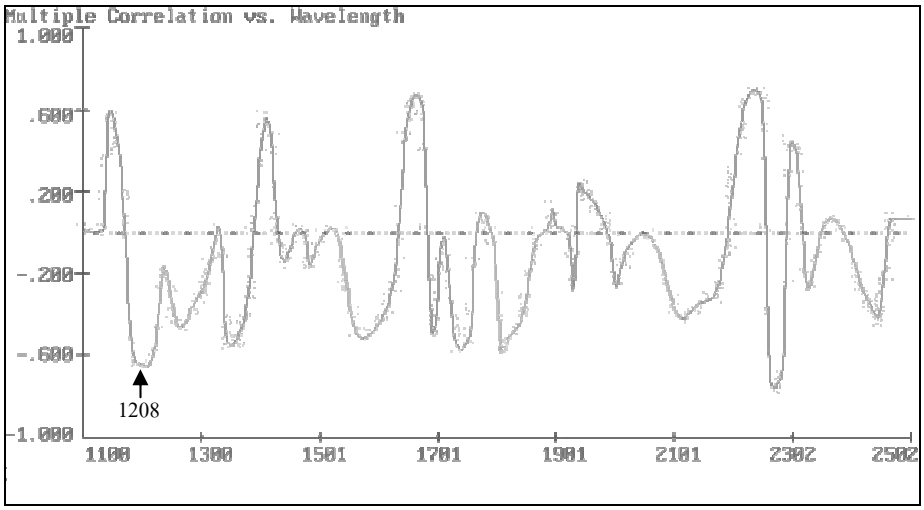
[3]SEP = Standard Error of Prediction



ภาพที่ 18 กราฟ Second derivative correlation ที่ใช้สำหรับเลือกความยาวคลื่นของเทอมแรกใน การหาสมการ Calibration ทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ด้วยวิธี MLR แบบใช้ทั้งผล



ภาพที่ 19 กราฟ Second derivative correlation ที่ใช้สำหรับเลือกความยาวคลื่นของเทอมแรกใน การหาสมการ Calibration ทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ด้วยวิธี MLR แบบปอกเปลือก



ภาพที่ 20 กราฟ Second derivative correlation ที่ใช้สำหรับเลือกความยาวคลื่นของเทอมแรกในการหาสมการ Calibration ทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ด้วยวิธี MLR แบบคั้นน้ำ

ค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ที่ดีที่สุดของทั้งสามแบบการทดลอง คือ

- แบบใช้ทั้งผล

$$\%Brix = 5.985+197.793\ (d^2\log 1/R_{1258})-456.383\ (d^2\log 1/R_{1962})+941.836\ (d^2\log 1/R_{1754}) -274.704\ (d^2\log 1/R_{2110})$$

- แบบปอกเปลือก

$$\%Brix = 12.118-1021.457\ (d^2\log 1/R_{1272})-1332.95\ (d^2\log 1/R_{1806})+1362.936\ (d^2\log 1/R_{1330}) -798.115\ (d^2\log 1/R_{2190})$$

- แบบคั้นน้ำ

$$\%Brix = 1.865-1948.299(d^2\log 1/R_{1208})-274.076(d^2\log 1/R_{2270})+57.014(d^2\log 1/R_{1892}) +599.655(d^2\log 1/R_{1320})$$

2.2 การสร้างสมการเพื่อทำนายค่าปริมาณกรด ในผลแก้วมังกรแบบใช้ทั้งผล ปอกเปลือก และคั้นน้ำ ด้วยวิธี Multiple Linear Regression (MLR)

ค่าปริมาณกรด ในผลแก้วมังกร ทั้งสามแบบของกลุ่มที่ใช้ในการสร้างสมการ และทดสอบสมการ แสดงได้ดังตารางที่ 6

กลุ่ม Calibration ค่าทางเคมีของปริมาณกรดได้ของแบบทั้งผล มีค่าสูงสุดเท่ากับ 0.467ค่าต่ำสุดเท่ากับ 0.095 และค่าเฉลี่ยเท่ากับ 0.236 ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานเท่ากับ 0.090, แบบปอกเปลือก มีค่าสูงสุดเท่ากับ 0.420 ค่าต่ำสุดเท่ากับ 0.095 และค่าเฉลี่ยเท่ากับ 0.236 ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานเท่ากับ 0.082 และแบบคั้นน้ำ มีค่าสูงสุดเท่ากับ 0.467 ค่าต่ำสุดเท่ากับ 0.095 และค่าเฉลี่ยเท่ากับ 0.240 ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานเท่ากับ 0.085

กลุ่ม Validation ค่าของปริมาณกรดของแบบทั้งผล มีค่าสูงสุดเท่ากับ 0.412 ค่าต่ำสุดเท่ากับ 0.095 และค่าเฉลี่ยเท่ากับ 0.251 ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานเท่ากับ 0.096 , แบบปอกเปลือก มีค่าสูงสุดเท่ากับ 0.467 ค่าต่ำสุดเท่ากับ 0.095 และค่าเฉลี่ยเท่ากับ 0.231 ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานเท่ากับ 5.766 และแบบคั้นน้ำ มีค่าสูงสุดเท่ากับ 0.433 ค่าต่ำสุดเท่ากับ 0.095 และค่าเฉลี่ยเท่ากับ 0.235 ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานเท่ากับ 0.086

ตารางที่ 6 ค่าปริมาณกรด ของแก้วมังกรทั้ง 3 แบบที่แบ่งกลุ่ม Calibration และ กลุ่ม Validation

ปริมาณกรด(%)		แบบทั้งผล (131 ตัวอย่าง)	แบบปอกเปลือก (158 ตัวอย่าง)	แบบคั้นน้ำ (160 ตัวอย่าง)
กลุ่ม Calibration	ค่าสูงสุด	0.467	0.467	0.467
	ค่าต่ำสุด	0.095	0.095	0.095
	ค่าเฉลี่ย	0.236	0.238	0.240
	SD	0.090	0.087	0.085
กลุ่ม Validation	ค่าสูงสุด	0.412	0.401	0.433
	ค่าต่ำสุด	0.095	0.095	0.095
	ค่าเฉลี่ย	0.251	0.237	0.235
	SD	0.096	0.079	0.086

สมการ Calibration ที่สร้างด้วยวิธี MLR ทำการสร้างโดยกำหนดความยาวคลื่นแรกที่มีความสัมพันธ์ กับค่าปริมาณกรด ทำการเลือกความยาวคลื่นแรกโดยอาศัย Correlation plot ซึ่งเป็นกราฟที่สร้างจากการหาความสัมพันธ์ของค่าปริมาณกรดในแต่ละความยาวคลื่น เพื่อช่วยในการเลือกความยาวคลื่นแรกของค่าปริมาณกรดในแต่ละแบบการทดลองแสดงได้ดังภาพที่ 21, 22 และ 23

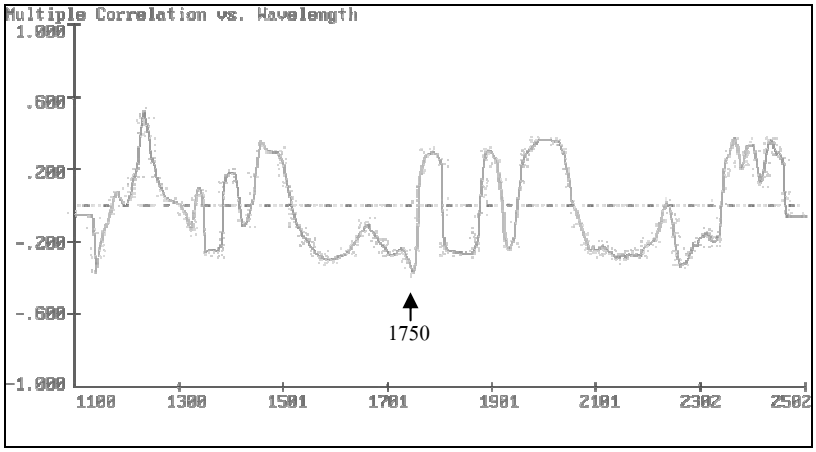
ตารางที่ 7 ค่าสถิติที่เป็นผลจากสมการ Calibration ที่สร้างด้วยวิธี MLR เพื่อทำนายค่าปริมาณกรด ของผลแก้วมังกรแบบใช้ทั้งผล ปอกเปลือก และคั้นน้ำ

ลักษณะ	ความยาวคลื่น (นาโนเมตร)	Calibration		Validation		
		SEC[1]	R^2	SEP[3]	R^2	Bias
ใช้ทั้งผล	1750 1232 1346 1330	0.0740	0.597	0.0604	0.78	-0.0008
ปอกเปลือก	1772 1236 1620 1794	0.0664	0.711	0.0709	0.629	-0.0138
น้ำคั้น	1408 1680 2250 2300	0.0586	0.736	0.0493	0.812	-0.0010

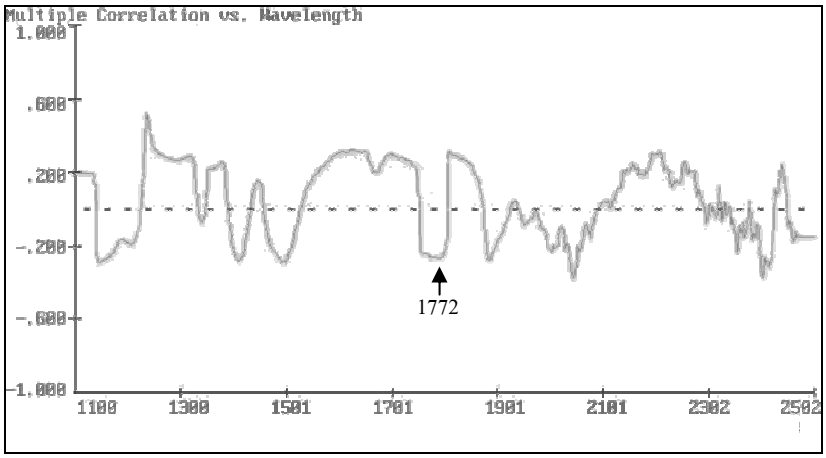
[1]SEC = Standard Error of Calibration

[2]R = Regression coefficient

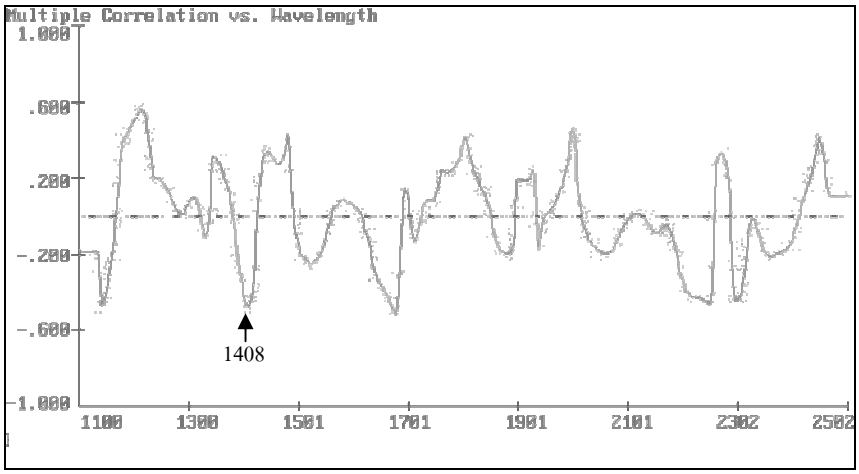
[3]SEP = Standard Error of Prediction



ภาพที่ 21 กราฟ Second derivative correlation ที่ใช้สำหรับเลือกความยาวคลื่นของเทอมแรกใน การหาสมการ Calibration ทำนายค่าปริมาณปริมาณกรดได้ด้วยวิธี MLR แบบใช้ทั้งผล



ภาพที่ 22 กราฟ Second derivative correlation ที่ใช้สำหรับเลือกความยาวคลื่นของเทอมแรกใน การหาสมการ Calibration ทำนายค่าปริมาณปริมาณกรดได้ด้วยวิธี MLR แบบปอกเปลือก



ภาพที่ 23 กราฟ Second derivative correlation ที่ใช้สำหรับเลือกความยาวคลื่นของเทอมแรกในการหาสมการ Calibration ทำนายค่าปริมาณปริมาณกรดได้ด้วยวิธี MLR แบบคั้นน้ำ

จากภาพที่ 21, 22 และ 23 ความสัมพันธ์ระหว่างปริมาณกรด ในแต่ละความยาวคลื่น มีน้อยแต่พบพีคที่เห็นเด่นชัดเจน เมื่อสร้างสมการ Calibration เพื่อทำนายค่าปริมาณกรด สมการที่ดีที่สุดที่สร้างด้วยวิธีการนี้ แสดงค่าได้ดังตารางที่ 7 จากตารางที่แสดงพบว่า สมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณกรดในผลแก้วมังกรทั้งสามแบบ ทำนายค่าได้ค่อนข้างดี ดูจากค่า SEP ที่ต่ำ และค่า R สูง แสดงให้เห็นว่า ปริมาณกรด มีความสัมพันธ์ในแต่ละความยาวคลื่น ค่าของสมการที่ดีที่สุดนั้นเป็นแบบใช้น้ำคั้น ซึ่งอาจเป็นเพราะในการสแกนผลแก้วมังกรโดยเครื่อง NIR Near Infrared Spectrophoto meter ยี่ห้อ Bran+Luebbe รุ่น InfraAlyzer 500 ที่ความยาวคลื่น 1100-2500นาโนเมตร นั้น สามารถทะลุลงไปในผลแก้วมังกรได้น้อย อาจจะผ่านทะลุลงไปในเนื้อของแก้วมังกรได้น้อยและข้อมูลในสเปกตรัมที่ได้จะเป็นการดูดกลืนของส่วนประกอบในเปลือกร่วมกับการดูดกลืนในเนื้อที่ต้องการจึงทำให้ความสัมพันธ์กับค่าทางเคมีต่ำทำให้ค่าของแบบใช้ทั้งผลและแบบปอกเปลือกค่าต่ำกว่า แต่ค่าของแบบใช้ทั้งผลจะดีกว่าแบบปอกเปลือก อาจจะเนื่องมาจากข้อจำกัดของเครื่อง NIR Spectrophotometer ในระบบ Reflectance ที่มีความแม่นยำในการวัดค่าที่ความเข้มข้นของสารประมาณ 0.5-1 กรัมต่อลิตร (Osborne, 1993) และเนื่องด้วยแก้วมังกร มีปริมาณกรดที่น้อยมาก โดยเฉลี่ยอยู่ที่ประมาณร้อยละ 0.23 วิธีนี้จึงอาจไม่มีประสิทธิภาพมากพอในการจะตรวจสอบ หาปริมาณของกรดของแก้วมังกร เมื่อนำมาสร้างสมการเพื่อหาความสัมพันธ์ระหว่างค่าปริมาณกรดที่ไตเตรทได้จริง กับสเปกตรัมที่วัดได้จากเครื่อง จึงได้ค่าความสัมพันธ์ที่ไม่ดี

ค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ที่ดีที่สุดของทั้งสามแบบการทดลอง คือ

- แบบใช้ทั้งผล

$$\%Acidity = -0.056-0.739\ (d^2\log 1/R_{1750})+278.538\ (d^2\log 1/R_{1232})-22.394\ (d^2\log 1/R_{1346}) +18.016\ (d^2\log 1/R_{1330})$$

- แบบปอกเปลือก

$$\%\ Acidity = -0.116+7.774\ (d^2\log 1/R_{1772})+153.786\ (d^2\log 1/R_{1236})+123.525\ (d^2\log 1/R_{1620}) +63.483\ (d^2\log 1/R_{1794})$$

- แบบคั้นน้ำ

$$\%\ Acidity = 0.907-9.016(d^2\log 1/R_{1408})-447.106(d^2\log 1/R_{1680})+107.717(d^2\log 1/R_{2250}) -17.441(d^2\log 1/R_{2300})$$

3 <u>การสร้างสมการ Calibration เพื่อทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ ปริมาณกรด ของผลแก้วมังกรแบบใช้ทั้งผล ปอกเปลือก และคั้นน้ำ ด้วยวิธี Partial Least Square Regression (PLSR)</u>

จากการสร้างสมการ Calibration ด้วยวิธี PLSR มีการสร้างสมการแบบ Test set โดยเลือกทั้งช่วงความยาวคลื่น และสร้างสมการโดยการตัดช่วงความยาวคลื่นแล้ววิเคราะห์เปรียบเทียบ เพื่อให้ได้สมการที่ดีที่สุด ได้ผลต่างๆดังนี้

3.1 การสร้างสมการเพื่อทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ ในผลแก้วมังกรแบบใช้ทั้งผล ปอกเปลือก และคั้นน้ำ ด้วยวิธี Partial Least Square Regression (PLSR)

การสร้างสมการเพื่อทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ของผลแก้วมังกรทั้ง 3 แบบ เพื่อที่จะใช้ในการทำนายค่าได้ดี จะอาศัยวิธีต่างๆเพื่อช่วยในการเลือกช่วงความยาวคลื่น วิธีที่ใช้ในการเลือกช่วงความยาวคลื่นหนึ่งคือ การเลือกช่วงความยาวคลื่นโดยอ้างอิงจากสมการ MLR ซึ่งคือช่วงที่ครอบคลุมความยาวคลื่นของสมการที่ดีที่สุดที่สร้างจากวิธี MLR (Saranwong ,2001) ส่วนการเลือกช่วงความยาวคลื่นจากวิธี MWPLSR คือ เลือกช่วงความยาวคลื่นที่มีค่าความผิดพลาดในการทำนายต่ำที่สุด โดย Moving Window Partial Least (MWPLSR) Regression แสดงค่าความผิดพลาดระหว่างค่าจริงและค่าทำนาย ในรูปของ Log(SSR) (Sums of Squares Residues) ดังภาพที่ 24 จากภาพความยาวคลื่นที่ถูกเลือกเพื่อสร้างสมการพบว่าเป็นความยาวคลื่นที่ใกล้เคียงกัน และสุดท้ายการเลือกช่วงความยาวคลื่นจากเอกสารอ้างอิง ซึ่งอ้างอิงจากงานวิจัยของ Sohn และคณะ (2000) ที่รายงานความยาวคลื่นในสมการซึ่งสร้างด้วยวิธี MLR เพื่อทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ใน ผลแอปเปิ้ล ความยาวคลื่นที่ใช้คือ 1872, 2144, 1412, 1444, 2128, 2260 และ 2264 นาโนเมตรพบว่าการเลือกบางช่วงความยาวคลื่นเพื่อสร้างสมการ Calibration สามารถทำให้ได้สมการที่ทำนายค่าได้แม่นยำขึ้น ดูจากค่า SEP ที่ต่ำลง และค่า R ที่สูงขึ้น

ผลการเลือกช่วงความยาวคลื่นในแก้วมังกรแบบใช้ทั้งผล พบว่าการสร้างสมการด้วยการเลือกช่วงความยาวคลื่นด้วยวิธี MLRให้ผลดีที่สุด แบบปอกเปลือกเลือกช่วงความยาวคลื่นด้วยวิธี MWPLSRส่วนแบบคั้นน้ำนั้นการใช้ช่วงความยาวคลื่นจากเอกสารอ้างอิงให้ผลที่ดีที่สุด

การสร้างสมการเพื่อทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ในผลแก้วมังกรทั้ง 3 แบบด้วยวิธี PLSR แสดงค่าดังตารางที่ 8 การทำนายปริมาณของแข็งที่ละลายได้ ด้วยสมการที่ดีที่สุด กับค่าที่วัดได้จริง ดังแสดงในภาพที่ 25

ตารางที่ 8 ค่าสถิติจากสมการ Calibration ที่สร้างด้วยวิธี PLSR เพื่อทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ผลแก้วมังกรทั้งแบบใช้ทั้งผล แบบปอกเปลือก และ แบบคั้นน้ำ

	ลักษณะ	F[4]	R[5]	SEC[6]	SEP[7]	R[5]	Bias
ทั้งผล	1100-2500	8	0.868	0.744	1.053	0.701	-0.1068
	1200-2200[1]	***8***	***0.869***	***0.739***	***0.917***	***0.762***	***0.0614***
	1260-1540+1600-2000 +2120-2360[2]	6	0.753	1.950	1.095	0.700	-0.0698
	1400-2300[3]	8	0.805	0.910	0.917	0.760	-0.0028
ปอกเปลือก	1100-2500	6	0.856	0.716	0.814	0.832	-0.235
	1100-1800[1]	10	0.819	0.585	0.918	0.827	0.063
	1100-1160+1220-1450 +1600-2000[2]	***9***	***0.834***	***0.777***	***0.831***	***0.815***	***-0.053***
	1400-2300[3]	7	0.857	0.739	0.883	0.769	-0.091
น้ำคั้น	1100-2500	***6***	***0.914***	***0.595***	***0.550***	***0.907***	***0.0839***
	1200-2300[1]	6	0.919	0.530	0.671	0.919	-0.0449
	1260-1380+1440-1880+1980-2360[2]	5	0.909	0.564	0.672	0.906	-0.1150
	1400-2300[3]	7	0.923	0.543	0.573	0.918	-0.0135

[1] ความยาวคลื่นจากสมการ MLR

[2] ความยาวคลื่นจาก MWPLSR

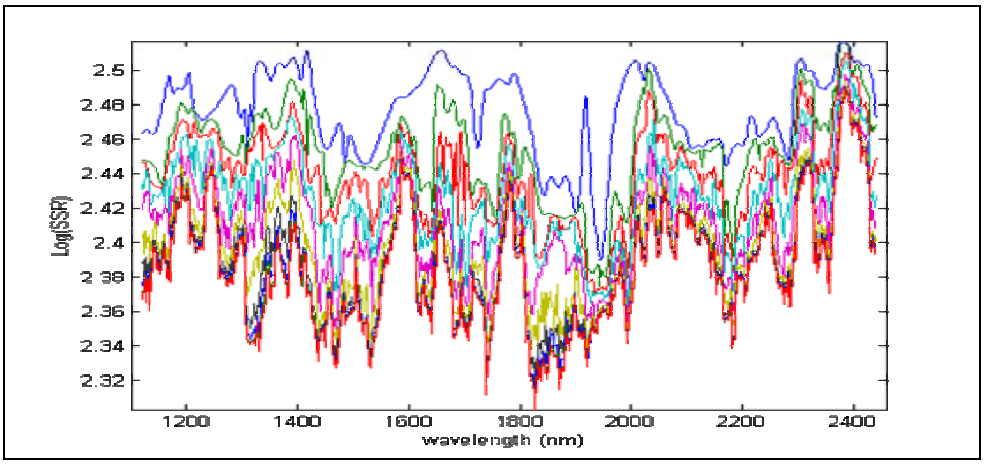
[3] ความยาวคลื่นจากเอกสารอ้างอิง

[4]จำนวน Factor ที่ใช้ในการสร้างสมการ Calibration

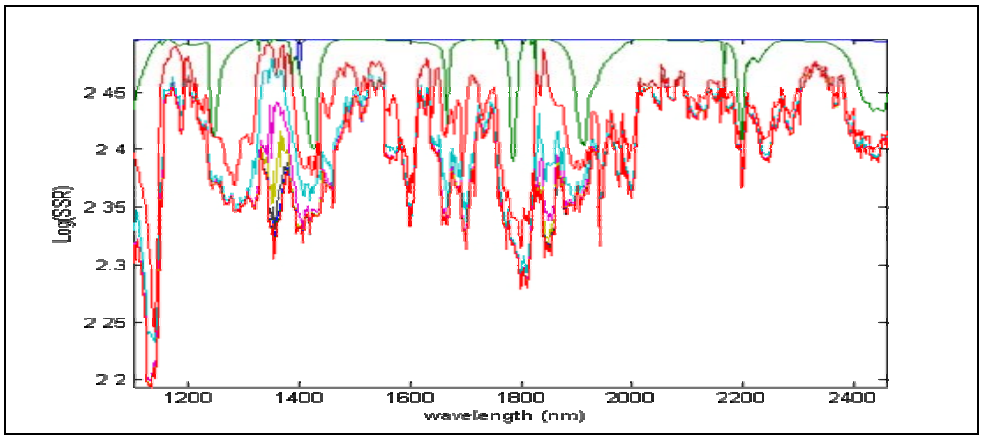
[5] Regression coefficient

[6] Standard Error of Calibration

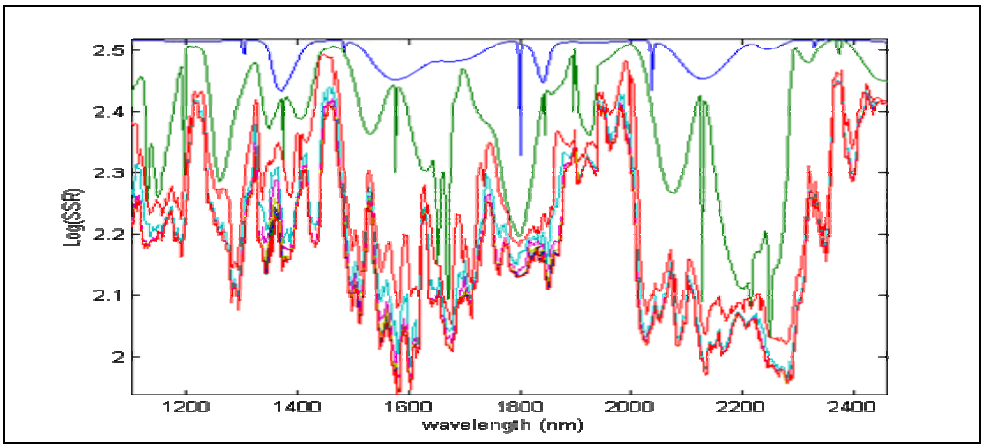
[7] Standard Error of Prediction



(ก)

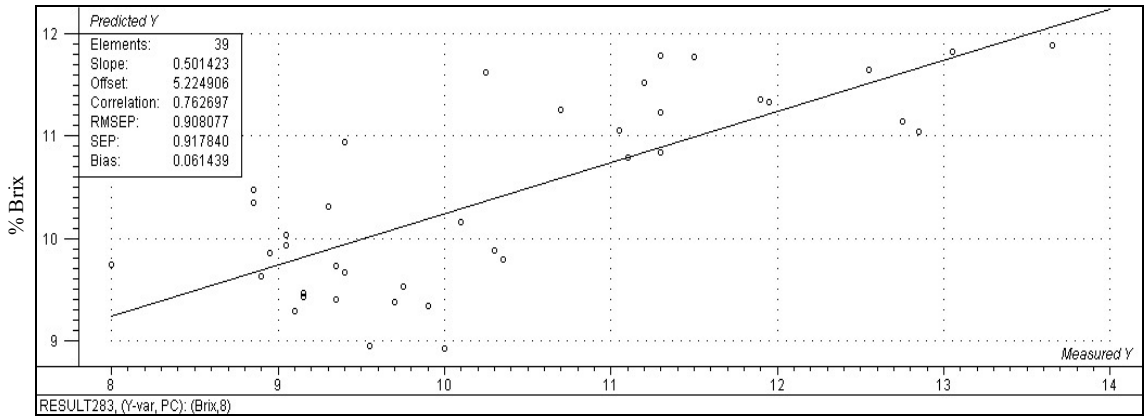


(ข)

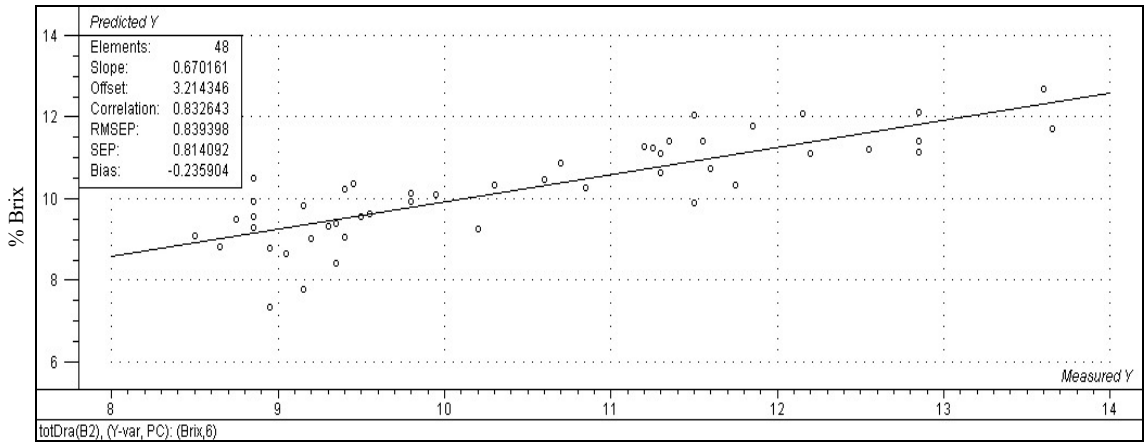


(ค)

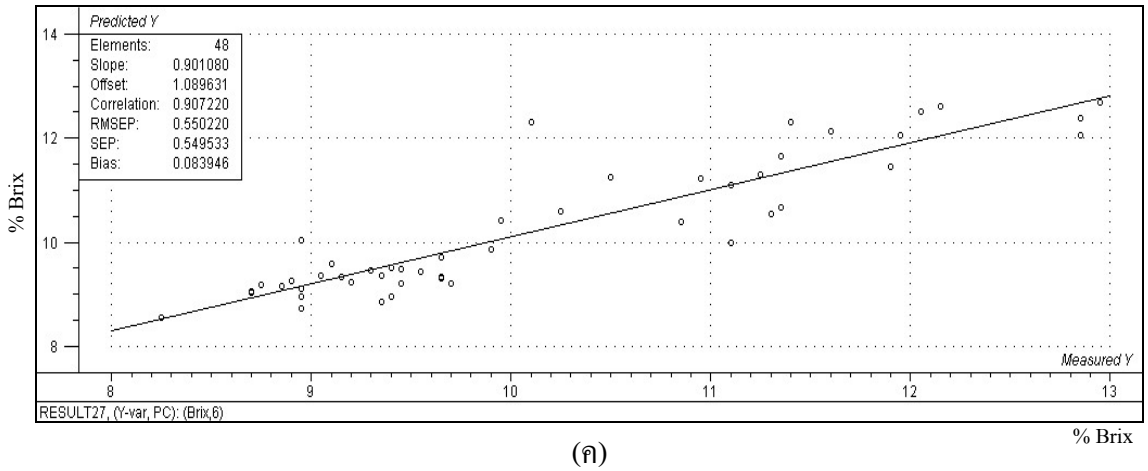
ภาพที่ 24 กราฟระหว่างค่าLog (SSR) กับช่วงความยาวคลื่น จากวิธี MWPLSR เพื่อช่วยในการเลือกช่วงความยาวคลื่น เพื่อสร้างสมการทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ในผลแก้วมังกร แบบทั้งผล (ก) ปอกเปลือก (ข) และ คั้นน้ำ (ค)



(ก)



(ข)



(ค)

<u>ภาพที่ 25</u> กราฟแสดงค่าการประเมินปริมาณของแข็งที่ละลายได้ในกลุ่ม Validation ของผลแก้วมังกรแบบทั้งผล (ก) ปอกเปลือก (ข) และ คั้นน้ำ (ค)

3.2 การสร้างสมการเพื่อทำนายค่าปริมาณกรด ในผลแก้วมังกรแบบใช้ทั้งผล ปอกเปลือก และคั้นน้ำ ด้วยวิธี Partial Least Square Regression (PLSR)

การ สร้างสมการเพื่อทำนายค่าปริมาณกรดในแก้วมังกรทั้งสามแบบนั้น ทำนายค่าได้ค่อนข้างดี และเมื่อได้เลือกบางช่วงความยาวคลื่นด้วยความยาวคลื่นจากสมการ MLR และวิธี MWPLSR (ภาพที่ 26) รวมทั้งการเลือกช่วงความยาวคลื่นจากงานวิจัยของ Sohn และคณะ (2000) ที่สร้างสมการทำนายค่าปริมาณกรดในผลแอปเปิ้ล ด้วยวิธี MLR โดยความยาวคลื่นที่ถูกเลือกในการสร้างสมการ คือ 1180, 1128, 2160, 1696, 1940, 2140, 1936, 1400 และ2200 นาโนเมตรเพื่อสร้างสมการ ผลปรากฏว่าได้ผลดีขึ้น สมการที่ดีที่สุดของแก้วมังกรของแบบใช้ทั้งผล สร้างจากการเลือกช่วงความยาวคลื่นด้วยวิธี จากเอกสารอ้างอิง แบบปอกเปลือก เลือกช่วงความยาวคลื่นจากสมการ MLR และแบบใช้น้ำคั้น เลือกช่วงความยาวคลื่นในการสร้างสมการแบบ MWPLSR จากการที่ค่าของสมการแบบใช้ทั้งผล ดีกว่า แบบปอกเปลือกนั้นน่าจะเป็นในทำนองเดียวกับการสร้างสมการแบบ MLR ค่าที่ได้จากการทำนายปริมาณกรดด้วยสมการที่ดีที่สุด กับค่าที่วัดได้จริง แสดงได้ดังภาพที่ 27 สมการที่สร้างด้วยวิธี PLSR เพื่อทำนายค่าปริมาณกรด ในผลแก้วมังกรทั้ง 3 แบบได้ค่าดังตารางที่ 9

ตารางที่ 9 ค่าสถิติจากสมการ Calibration ที่สร้างด้วยวิธี PLSR เพื่อทำนายค่าปริมาณกรดในผลแก้วมังกรทั้งแบบใช้ทั้งผล แบบปอกเปลือก และ แบบคั้นน้ำ

	ลักษณะ	F[4]	R[5]	SEC[6]	SEP[7]	R[5]	Bias
ทั้งผล	1100-2500	5	0.749	0.061	0.064	0.709	-0.0031
	1200-1800[1]	9	0.799	0.055	0.060	0.792	0.0009
	1100-1420+1480-2140+2000-2500[2]	6	0.769	0.061	0.053	0.751	-0.0100
	1100-2200[3]	***8***	***0.835***	***0.051***	***0.053***	***0.790***	***0.0289***
ปอกเปลือก	1100-2500	7	0.864	0.042	0.056	0.743	-0.0001
	1200-1800[1]	***8***	***0.809***	***0.051***	***0.052***	***0.770***	***0.0002***
	1120-1440[2]	7	0.770	0.054	0.052	0.789	0.0060
	1100-2200[3]	7	0.777	0.053	0.055	0.760	0.0076
น้ำคั้น	1100-2500	8	0.908	0.033	0.050	0.865	-0.0121
	1400-2300[1]	10	0.913	0.034	0.044	0.896	-0.0032
	1100-2300[2]	***8***	***0.917***	***0.033***	***0.039***	***0.896***	***0.0023***
	1100-2200[3]	7	0.880	0.038	0.049	0.862	-0.0004

[1] ความยาวคลื่นจากสมการ MLR

[2] ความยาวคลื่นจาก MWPLSR

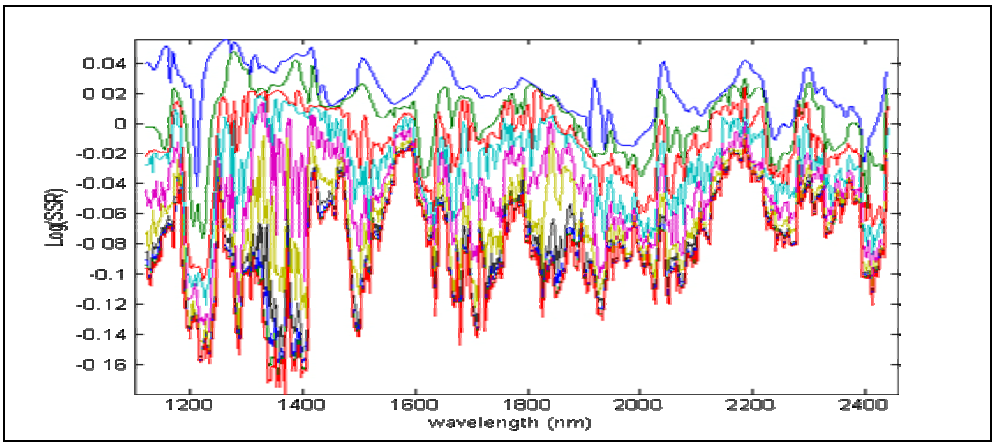
[3] ความยาวคลื่นจากเอกสารอ้างอิง

[4]จำนวน Factor ที่ใช้ในการสร้างสมการ Calibration

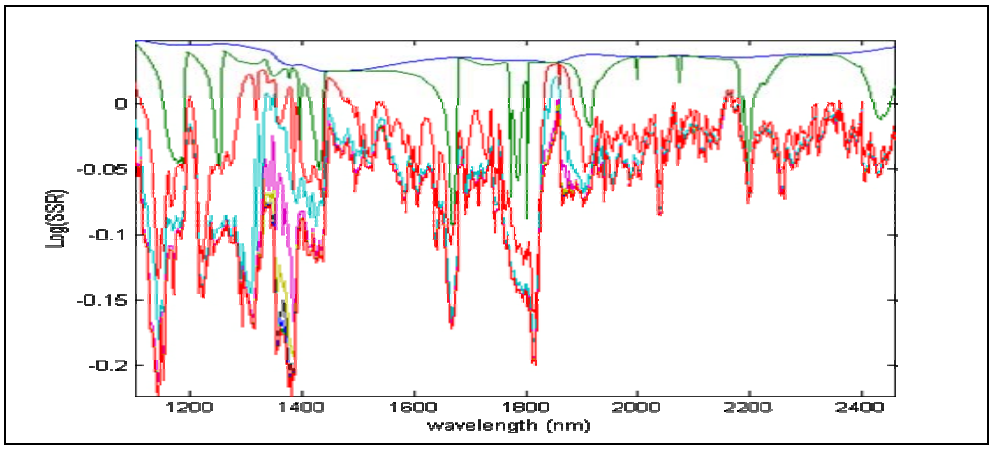
[5] Regression coefficient

[6] Standard Error of Calibration

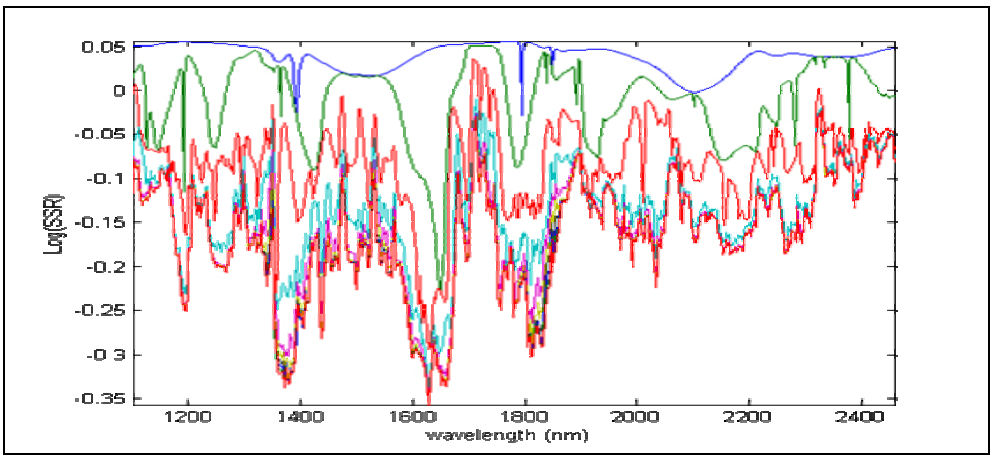
[7] Standard Error of Prediction



(ก)

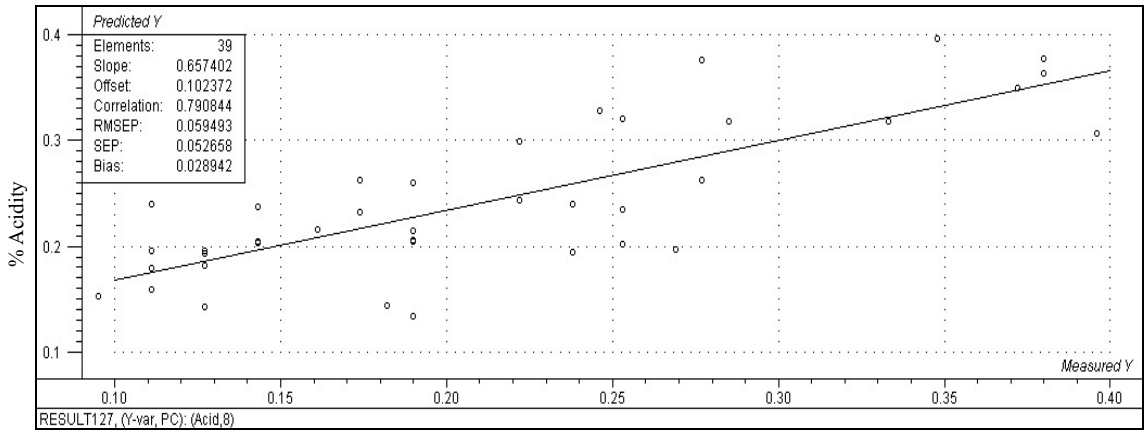


(ข)

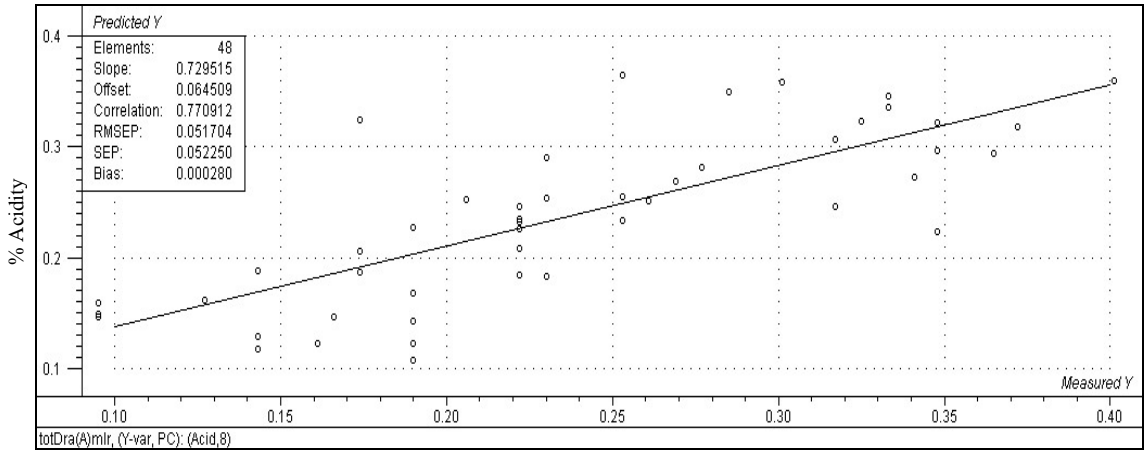


(ค)

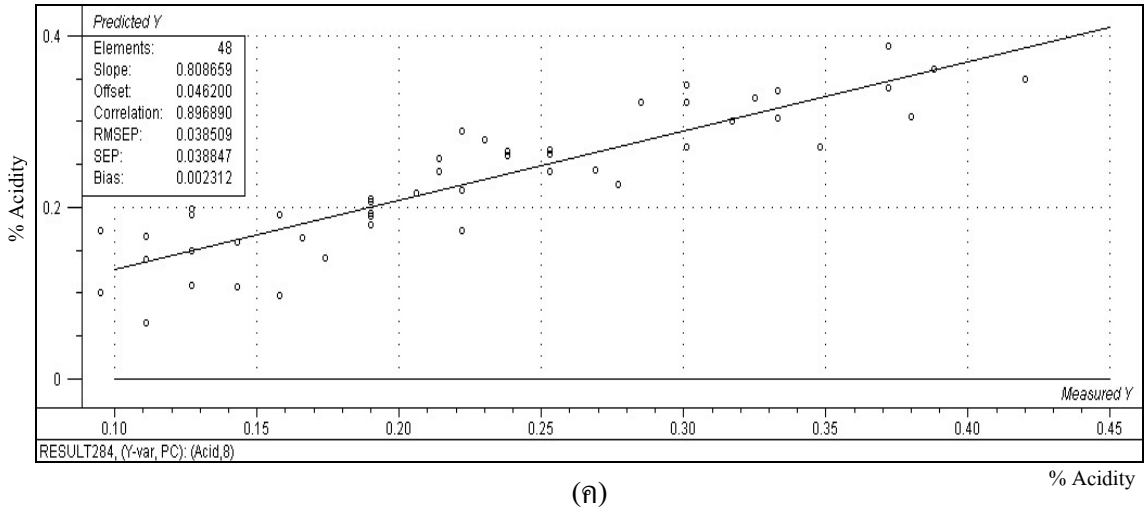
ภาพที่ 26 กราฟระหว่างค่า Log (SSR) กับช่วงความยาวคลื่น จากวิธี MWPLSR เพื่อช่วยในการเลือกช่วงความยาวคลื่น เพื่อสร้างสมการทำนายค่าปริมาณกรดในผลแก้วมังกร แบบทั้งผล (ก) ปอกเปลือก (ข) คั้นน้ำ (ค)



(ก)



(ข)



(ค)

<u>ภาพที่ 27</u> ค่าการประเมินปริมาณกรดในกลุ่ม Validation ของผลแก้วมังกร
แบบทั้งผล (ก) ปอกเปลือก (ข) คั้นน้ำ (ค)

4 <u>การสร้างสมการ Calibration เพื่อทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ และปริมาณกรด ของผลแก้วมังกรแบบใช้ทั้งผล และปอกเปลือก ที่อายุการเก็บเกี่ยวต่างกัน ด้วยวิธี Multiple Linear Regression (MLR)</u>

ในส่วนนี้ศึกษาการสร้างสมการในการทำนายค่าผลแก้วมังกรที่มีอายุการเก็บเกี่ยวที่แตกต่างกันได้ เนื่องจากในการเก็บเกี่ยวแก้วมังกรโดยทั่วไปแล้วจะเป็นแบบสุ่มซึ่งไม่สามารถกำหนดวันเก็บเกี่ยวได้แน่นอน จึงทำให้ค่าทางเคมีมีช่วงที่กว้าง จึงต้องใช้ผลแก้วมังกรที่มีอายุเก็บเกี่ยวที่แตกต่างกันแต่ยังอยู่ในช่วงที่บริบูรณ์อยู่เพื่อจะได้เป็นตัวแทนผลแก้วมังกรที่ต้องการทำนายต่อไป

ค่าทางเคมีของปริมาณกรดของแบบทั้งผล และ แบบปอกเปลือกที่อายุการเก็บเกี่ยว 42 วัน มีค่าสูงสุดเท่ากับ 0.427 ค่าต่ำสุดเท่ากับ 0.177 และค่าเฉลี่ยเท่ากับ 0.311 ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานเท่ากับ 0.048

ค่าทางเคมีของปริมาณกรดของแบบทั้งผล และ แบบปอกเปลือกที่อายุการเก็บเกี่ยว 45 วัน มีค่าสูงสุดเท่ากับ 0.317 ค่าต่ำสุดเท่ากับ 0.146 และค่าเฉลี่ยเท่ากับ 0.223 ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานเท่ากับ 0.036

ค่าทางเคมีของปริมาณกรดของแบบทั้งผล และ แบบปอกเปลือกที่อายุการเก็บเกี่ยว 48 วัน มีค่าสูงสุดเท่ากับ 0.299 ค่าต่ำสุดเท่ากับ 0.115 และค่าเฉลี่ยเท่ากับ 0.189 ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานเท่ากับ 0.034

ค่าทางเคมีของปริมาณกรดของแบบทั้งผล และ แบบปอกเปลือกที่อายุการเก็บเกี่ยว 42-48 วัน มีค่าสูงสุดเท่ากับ 0.427 ค่าต่ำสุดเท่ากับ 0.115 และค่าเฉลี่ยเท่ากับ 0.241 ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานเท่ากับ 0.065

ปริมาณของแข็งที่ละลายได้ ของแบบทั้งผล และแบบปอกเปลือกที่อายุการเก็บเกี่ยว 42 วัน มีค่าสูงสุดเท่ากับ 14 ค่าต่ำสุดเท่ากับ 10 และค่าเฉลี่ยเท่ากับ 11.66 ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานเท่ากับ 0.812

ปริมาณของแข็งที่ละลายได้ ของแบบทั้งผล และแบบปอกเปลือกที่อายุการเก็บเกี่ยว 45 วัน มีค่าสูงสุดเท่ากับ 14.25 ค่าต่ำสุดเท่ากับ 10 และค่าเฉลี่ยเท่ากับ 11.98 ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานเท่ากับ 0.923

ปริมาณของแข็งที่ละลายได้ ของแบบทั้งผล และแบบปอกเปลือกที่อายุการเก็บเกี่ยว 48 วัน มีค่าสูงสุดเท่ากับ 15.05 ค่าต่ำสุดเท่ากับ 11 และค่าเฉลี่ยเท่ากับ 12.41 ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานเท่ากับ 0.771

ปริมาณของแข็งที่ละลายได้ ของแบบทั้งผล และแบบปอกเปลือกที่อายุการเก็บเกี่ยว 42-48 วัน มีค่าสูงสุดเท่ากับ 15.05 ค่าต่ำสุดเท่ากับ 10 และค่าเฉลี่ยเท่ากับ 12.02 ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานเท่ากับ 0.890ได้ค่าดังตารางที่10

ตารางที่ 10 ค่าทางเคมีของแก้วมังกรที่อยู่ในช่วงเก็บเกี่ยวต่างกัน

ค่าทางเคมี		42 วัน (120 ตัวอย่าง)	45 วัน (120 ตัวอย่าง)	48 วัน (120 ตัวอย่าง)	42-48 วัน (360 ตัวอย่าง)
ปริมาณกรด(%)	ค่าสูงสุด	0.427	0.317	0.299	0.427
	ค่าต่ำสุด	0.177	0.146	0.115	0.115
	ค่าเฉลี่ย	0.311	0.223	0.189	0.241
	SD	0.048	0.036	0.034	0.065
ปริมาณของแข็งที่ละลายได้(%)	ค่าสูงสุด	14	14.25	15.05	15.05
	ค่าต่ำสุด	10	10	11	10
	ค่าเฉลี่ย	11.66	11.98	12.41	12.02
	SD	0.812	0.923	0.771	0.890

4.1 การสร้างสมการเพื่อทำนายค่าปริมาณของของแข็งที่ละลายได้ในผลแก้วมังกรแบบใช้ทั้งผล และปอกเปลือก ด้วย วิธี Multiple Linear Regression (MLR)

สำหรับค่าทางเคมีในแต่ละกลุ่มนั้น กลุ่ม Calibration ค่าทางเคมีของปริมาณของแข็งที่ละลายได้ของแบบทั้งผล มีค่าสูงสุดเท่ากับ 14.75 ค่าต่ำสุดเท่ากับ 10.00 และค่าเฉลี่ยเท่ากับ 12.058 ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานเท่ากับ 0.857 และ แบบปอกเปลือก มีค่าสูงสุดเท่ากับ 15.00 ค่าต่ำสุดเท่ากับ 10.00 และค่าเฉลี่ยเท่ากับ 12.029 ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานเท่ากับ 0.912

กลุ่ม Validation ค่าทางเคมีของปริมาณของแข็งที่ละลายได้ของแบบทั้งผล มีค่าสูงสุดเท่ากับ 15.05 ค่าต่ำสุดเท่ากับ 10.05 และค่าเฉลี่ยเท่ากับ 11.925 ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานเท่ากับ 0.96 และ แบบปอกเปลือก มีค่าสูงสุดเท่ากับ 15.05 ค่าต่ำสุดเท่ากับ 10.00 และค่าเฉลี่ยเท่ากับ 11.99 ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานเท่ากับ 0.841 ในตารางที่ 11

ตารางที่ 11 ค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ของแก้วมังกรที่อยู่ในช่วงเก็บเกี่ยวต่างกันที่แบ่งกลุ่ม Calibration และ กลุ่ม Validation

ปริมาณของแข็งที่ละลายได้(%)		แบบทั้งผล (360 ตัวอย่าง)	แบบปอกเปลือก (360 ตัวอย่าง)
กลุ่ม Calibration	ค่าสูงสุด	14.750	15.000
	ค่าต่ำสุด	10.000	10.000
	ค่าเฉลี่ย	12.058	12.029
	SD	0.857	0.912
กลุ่ม Validation	ค่าสูงสุด	15.050	15.050
	ค่าต่ำสุด	10.050	10.000
	ค่าเฉลี่ย	11.925	11.990
	SD	0.960	0.841

สมการที่ได้ เพื่อทำนายปริมาณของแข็งที่ละลายได้ ทั้งสองแบบที่สร้างด้วยวิธีการนี้ แสดงค่าได้ดังตารางที่ 12 จากตารางพบว่า ในผลแก้วมังกรแบบใช้ปอกเปลือก สมการมีความแม่นยำในการทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ดีกว่าแบบใช้ทั้งผล แต่ค่าสมการที่ได้ยังมีความแม่นยำต่ำ โดยในการทำนายค่าจากสมการกับค่าจริงที่วัดได้มีค่า R ใกล้เคียงกันที่แบบปอกเปลือก อยู่ที่ 0.530 และ แบบใช้ทั้งผลอยู่ที่ 0.441 แต่ยังมีค่า SEP ที่ยังสูงอยู่อาจจะเป็นเพราะค่าทางเคมีที่ห่างกันมากแต่การกระจายตัวน้อยคือค่าทางเคมีเกาะกลุ่มกัน และความยาวคลื่นแรกของทั้งสองแบบการทดลอง ก็มีความยาวคลื่นที่ใกล้เคียงกัน คือที่ความยาวคลื่นประมาณ 1200 นาโนเมตร สอดคล้องกับ Osborne และคณะ (1993) ที่รายงานความยาวคลื่นของน้ำตาลกลูโคสที่ 1198 นาโนเมตรได้ค่าดังภาพที่ 28 และ29

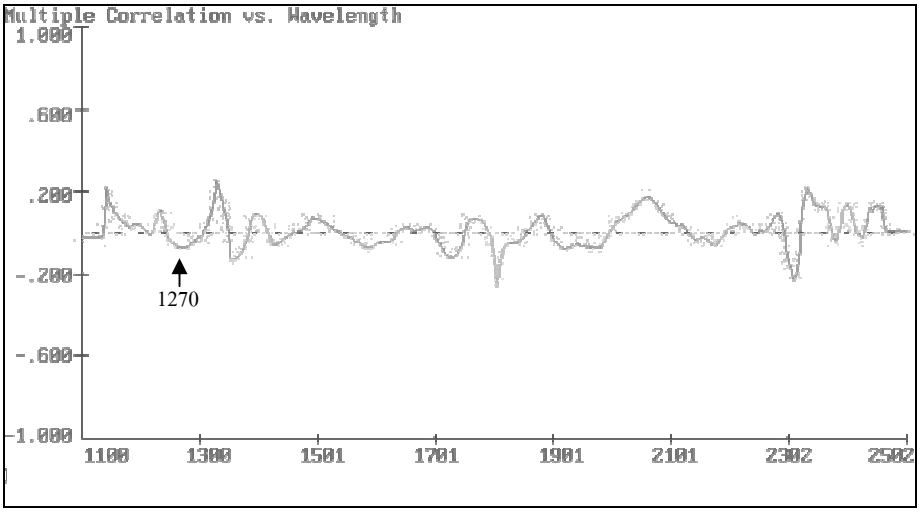
ตารางที่ 12 ผลจากสมการ Calibration เพื่อทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ ของผลแก้วมังกร แบบใช้ทั้งผล และปอกเปลือก

ลักษณะ	ความยาวคลื่น (นาโนเมตร)	Calibration		Validation		
		SEC[1]	R^2	SEP[3]	R^2	Bias
ใช้ทั้งผล	1270 2308 2058 1314	0.772	0.439	0.862	0.441	0.126
ปอกเปลือก	1180 1258 1666 1636	0.694	0.658	0.713	0.530	0.0227

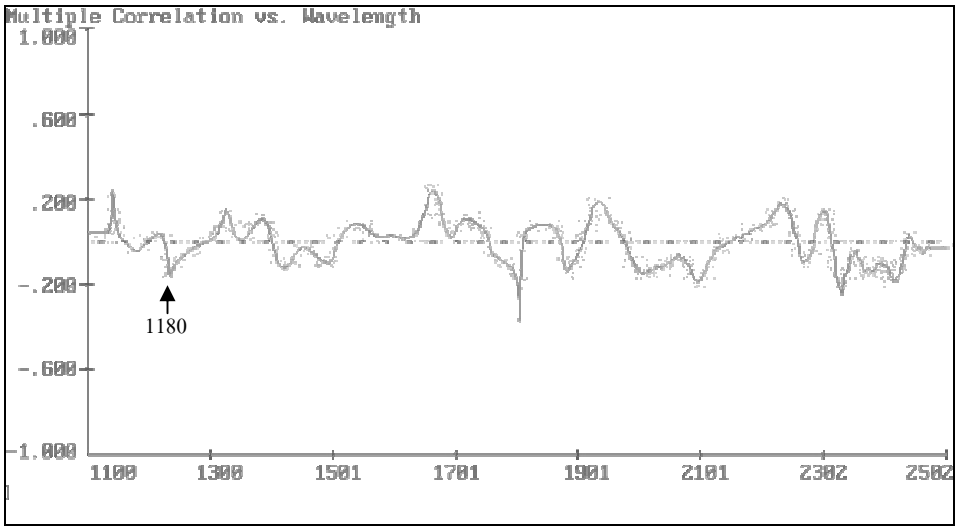
[1]SEC = Standard Error of Calibration

[2]R = Regression coefficient

[3]SEP = Standard Error of Prediction



ภาพที่ 28 กราฟ Second derivative correlation ที่ใช้สำหรับเลือกความยาวคลื่นของเทอมแรกใน การหาสมการ Calibration ทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ด้วยวิธี MLR แบบใช้ทั้งผล



ภาพที่ 29 กราฟ Second derivative correlation ที่ใช้สำหรับเลือกความยาวคลื่นของเทอมแรกใน การหาสมการ Calibration ทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ด้วยวิธี MLR แบบปอกเปลือก

สมการ Calibration ทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ที่ดีที่สุดของทั้งสองแบบการทดลอง คือ

- แบบใช้ทั้งผล

$$\%Brix = 9.169-287.835\ (d^2\log 1/R_{1270})-240.444\ (d^2\log 1/R_{2308})+339.779\ (d^2\log 1/R_{2058}) +279.941(d^2\log 1/R_{1314})$$

- แบบปอกเปลือก

$$\%Brix = 12.698-306.488\ (d^2\log 1/R_{1180})-823.396\ (d^2\log 1/R_{1258})+1147.239\ (d^2\log 1/R_{1666}) -935.31\ (d^2\log 1/R_{1636})$$

4.2 การสร้างสมการเพื่อทำนายค่าปริมาณกรด ในผลแก้วมังกรแบบใช้ทั้งผล และปอกเปลือก ด้วยวิธี Multiple Linear Regression (MLR)

ค่าทางเคมีในแต่ละกลุ่มคือ กลุ่ม Calibration ค่าทางเคมีของปริมาณกรดของแบบทั้งผล มีค่าสูงสุดเท่ากับ 0.428 ค่าต่ำสุดเท่ากับ 0.129 และค่าเฉลี่ยเท่ากับ 0.245 ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานเท่ากับ 0.064 และ แบบปอกเปลือก มีค่าสูงสุดเท่ากับ 0.424 ค่าต่ำสุดเท่ากับ 0.125 และค่าเฉลี่ยเท่ากับ 0.243 ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานเท่ากับ 0.064

กลุ่ม Validation ค่าทางเคมีของปริมาณกรดของแบบทั้งผล มีค่าสูงสุดเท่ากับ 0.408 ค่าต่ำสุดเท่ากับ 0.1152 และค่าเฉลี่ยเท่ากับ 0.230 ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานเท่ากับ 0.067 และ แบบปอกเปลือก มีค่าสูงสุดเท่ากับ 0.427 ค่าต่ำสุดเท่ากับ 0.115 และค่าเฉลี่ยเท่ากับ 0.236 ค่าเบี่ยงเบนมาตราฐานเท่ากับ 0.065 ได้ค่าดังตารางที่ 13

ตารางที่ 13 ค่าปริมาณกรด ของแก้วมังกรที่อยู่ในช่วงเก็บเกี่ยวต่างกันที่แบ่งกลุ่ม Calibration และ กลุ่ม Validation

ปริมาณกรด(%)		แบบทั้งผล (360 ตัวอย่าง)	แบบปอกเปลือก (360 ตัวอย่าง)
กลุ่ม Calibration	ค่าสูงสุด	0.427	0.424
	ค่าต่ำสุด	0.129	0.125
	ค่าเฉลี่ย	0.245	0.243
	SD	0.063	0.064
กลุ่ม Validation	ค่าสูงสุด	0.408	0.427
	ค่าต่ำสุด	0.115	0.115
	ค่าเฉลี่ย	0.230	0.236
	SD	0.067	0.066

จากการสร้างสมการ Calibration เพื่อทำนายค่าปริมาณกรดแสดงค่าได้ดังตารางที่ 14 พบว่าสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณกรดในผลแก้วมังกรทั้งสองแบบ ทำนายค่าได้ค่อนข้างดี ดูจากค่า SEP ที่ไม่ค่อยสูง และค่า R สูง สอดคล้องกับ Correlation plot แสดงให้เห็นว่า ปริมาณกรด มีความสัมพันธ์ในแต่ละความยาวคลื่นซึ่งเห็นพีคได้เด่นชัด และค่าการกระจายของค่าทางเคมีค่อนข้างจะมีการกระจายตัวดีจึงทำให้ค่าของสมการที่ออกมาดีและสมการที่ดีที่สุดนั้นเป็นแบบปอกเปลือก แต่ค่าไม่แตกต่างกันมาก ซึ่งอาจจะเนื่องมาจากข้อจำกัดของเครื่อง NIR Spectrophotometer ในระบบ Reflectance ที่มีความแม่นยำในการวัดค่าที่ความเข้มข้นของสารประมาณ 0.5-1 กรัมต่อลิตร (Osborne, 1993) และเนื่องด้วยแก้วมังกร มีปริมาณกรดที่น้อยมาก โดยเฉลี่ยอยู่ที่ประมาณร้อยละ 0.23 วิธีนี้จึงอาจไม่มีประสิทธิภาพมากพอในการจะตรวจสอบ หาปริมาณของกรดของแก้วมังกร ได้ค่าดังภาพที่ 30 และ 31

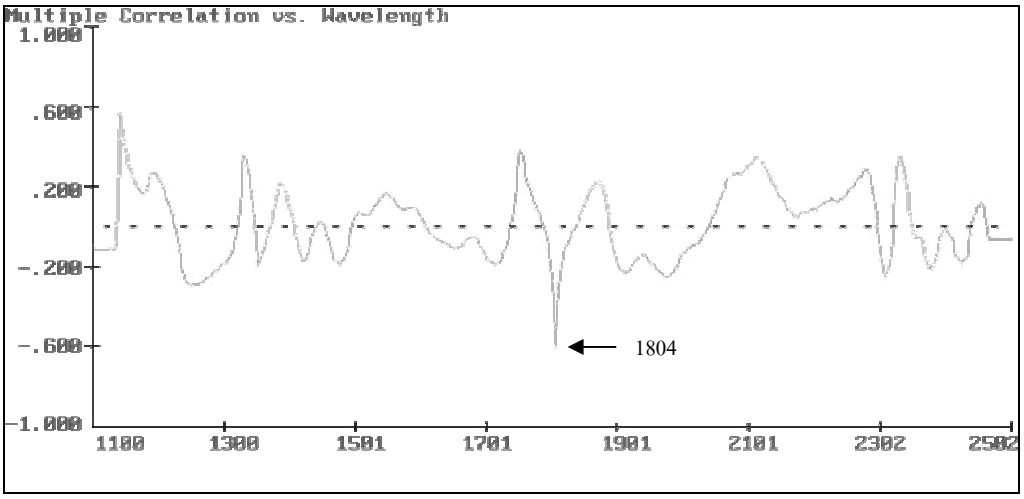
ตารางที่ 14 ผลจากสมการ Calibration เพื่อทำนายค่าปริมาณกรด ของผลแก้วมังกรแบบใช้ทั้งผลและปอกเปลือก

ลักษณะ	ความยาวคลื่น (นาโนเมตร)	Calibration		Validation		
		SEC[1]	R^2	SEP[3]	R^2	Bias
ใช้ทั้งผล	1804 1140 2108 2296	0.119	0.740	0.121	0.733	0.0129
ปอกเปลือก	1252 1804 1938 2080	0.160	0.624	0.113	0.719	0.0010

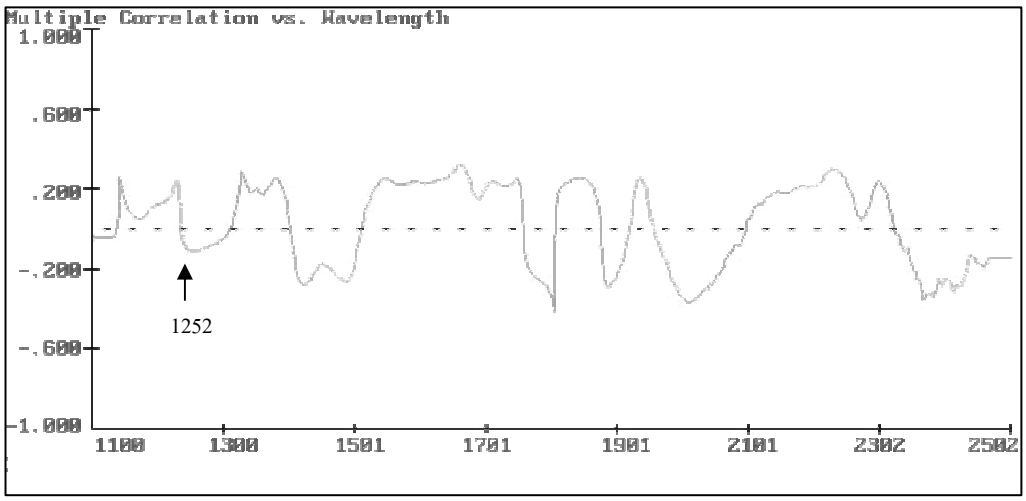
[1]SEC = Standard Error of Calibration

[2]R = Regression coefficient

[3]SEP = Standard Error of Prediction



ภาพที่ 30 กราฟSecond derivative correlation ที่ใช้สำหรับเลือกความยาวคลื่นของเทอมแรกใน การหาสมการ Calibration ทำนายค่าปริมาณปริมาณกรดได้ด้วยวิธี MLR แบบใช้ทั้งผล



ภาพที่ 31 กราฟSecond derivative correlation ที่ใช้สำหรับเลือกความยาวคลื่นของเทอมแรกใน การหาสมการ Calibration ทำนายค่าปริมาณปริมาณกรดได้ด้วยวิธี MLR แบบปอกเปลือก

สมการ Calibration ทำนายค่าปริมาณกรดที่ดีที่สุดของทั้งสองแบบการทดลอง คือ

- แบบใช้ทั้งผล

$$\%Acidity = -0.468-249.443\ (d^2\log 1/R_{1804})+31.581\ (d^2\log 1/R_{1140})+122.438(d^2\log 1/R_{2108}) -67.203(d^2\log 1/R_{2296})$$

- แบบปอกเปลือก

$$\%\ Acidity = 2.725-106.850\ (d^2\log 1/R_{1252})-162.862\ (d^2\log 1/R_{1804})+39.418\ (d^2\log 1/R_{1938}) +109.049\ (d^2\log 1/R_{2080})$$

5 <u>การสร้างสมการ Calibration เพื่อทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ ปริมาณกรด ของผลแก้วมังกรแบบใช้ทั้งผล และ ปอกเปลือกในอายุการเก็บเกี่ยวที่ต่างกัน ด้วยวิธี Partial Least Square Regression (PLSR)</u>

การสร้างสมการ Calibration ด้วยวิธี PLSR ใช้การสร้างสมการแบบ Test set โดยเลือกทั้งช่วงความยาวคลื่น และสร้างสมการโดยการตัดช่วงความยาวคลื่นแล้ววิเคราะห์เปรียบเทียบ เพื่อให้ได้สมการที่ดีที่สุด ได้ผลต่างๆดังนี้

5.1 การสร้างสมการเพื่อทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ ในผลแก้วมังกรแบบใช้ทั้งผล และปอกเปลือก ด้วยวิธี Partial Least Square Regression (PLSR)

ผลการเลือกช่วงความยาวคลื่นในแก้วมังกรแบบใช้ทั้งผลแสดงค่าได้ดังตารางที่ 15 พบว่าการสร้างสมการด้วยการเลือกช่วงความยาวคลื่นจากเอกสารอ้างอิงให้ผลดีที่สุด และแบบปอกเปลือก การเลือกช่วงความยาวคลื่นจากสมการของ MWPLSR ดังภาพที่ 32 ให้ผลที่ดีที่สุด จากจำนวน Factor ที่เลือกในการสร้างสมการ จะพบว่า จำนวน Factor ของทั้ง 2 แบบเท่ากัน จากการสร้างสมการจากการเลือกช่วงความยาวคลื่นจะเห็นว่าได้ค่าที่ดีขึ้น ดังนั้น การเลือกสมการที่สร้างโดยการเลือกช่วงความยาวคลื่นนี้อาจดีกว่าการใช้ทั้งช่วงความยาวคลื่น ผลของค่าที่ได้จากการทำนายด้วยสมการที่ดีที่สุด กับค่าจริงที่วัดได้แสดงดังภาพที่ 33

ตารางที่ 15 ค่าสถิติจากสมการ Calibration ที่สร้างด้วยวิธี PLSR เพื่อทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ในผลแก้วมังกรทั้งแบบใช้ทั้งผล และ แบบปอกเปลือก

	ลักษณะ	F[4]	R[5]	SEC[6]	SEP[7]	R[5]	Bias
ทั้งผล	1100-2500	7	0.723	0.578	0.769	0.650	-0.0714
	1200-2400[1]	***9***	***0.772***	***0.545***	***0.760***	***0.613***	***-0.0621***
	1100-1510+1680-1940+2200-2500[2]	6	0.634	0.668	0.759	0.601	0.1478
	1400-2300[3]	10	0.724	0.610	0.720	0.607	-0.0799
ปอกเปลือก	1100-2500	8	0.806	0.493	0.712	0.710	0.0499
	1100-1700[1]	10	0.748	0.595	0.589	0.735	-0.0421
	1100-1320+1580-1840+2110-2240[2]	***10***	***0.806***	***0.520***	***0.539***	***0.798***	***-0.1433***
	1400-2300[3]	7	0.773	0.562	0.629	0.718	0.0135

[1] ความยาวคลื่นจากสมการ MLR

[2] ความยาวคลื่นจาก MWPLSR

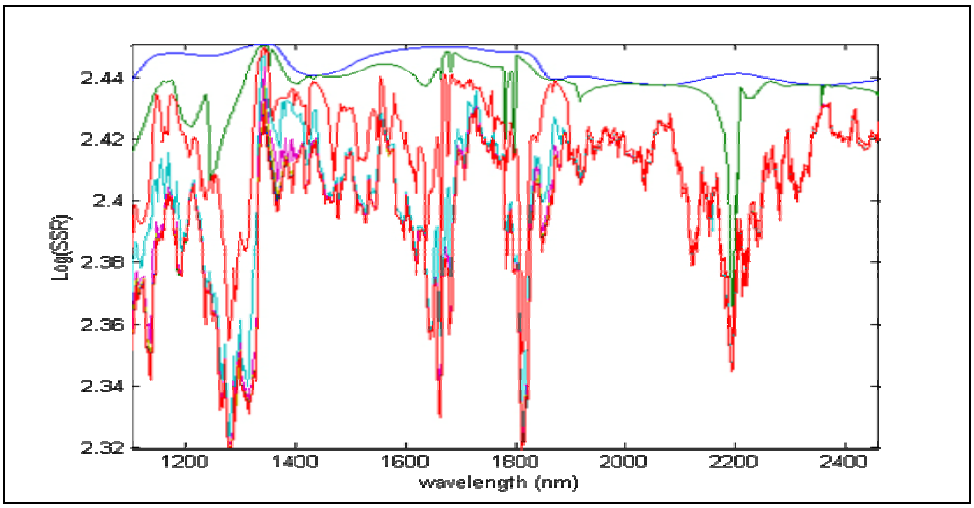
[3] ความยาวคลื่นจากเอกสารอ้างอิง

[4] จำนวน Factor ที่ใช้ในการสร้างสมการ Calibration

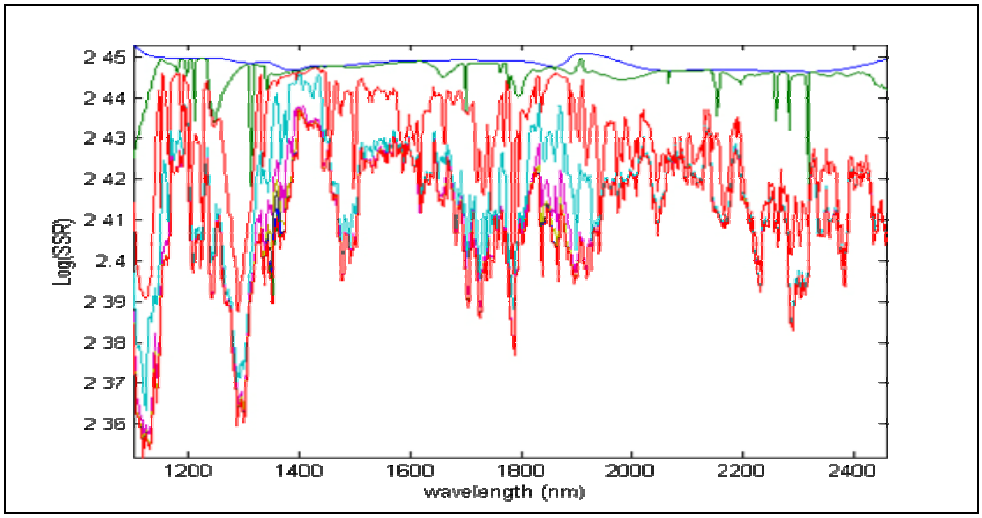
[5] Regression coefficient

[6] Standard Error of Calibration

[7] Standard Error of Prediction

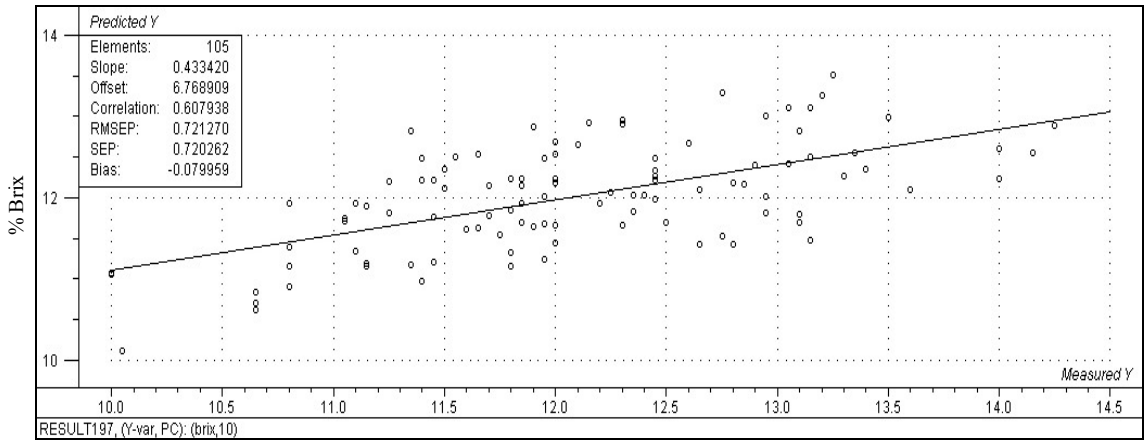


(ก)

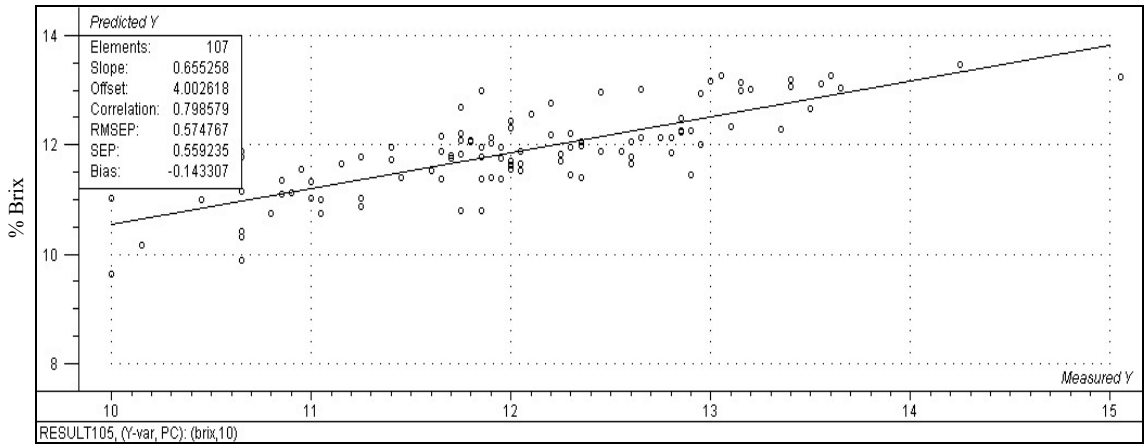


(ข)

ภาพที่ 32 กราฟระหว่างค่าLog (SSR) กับช่วงความยาวคลื่น จากวิธี MWPLSR เพื่อช่วยในการเลือกช่วงความยาวคลื่น เพื่อสร้างสมการทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ในผลแก้วมังกรในอายุการเก็บที่แตกต่างกัน แบบทั้งผล (ก) และ ปอกเปลือก (ข)



(ก) % Brix



(ข) % Brix

<u>ภาพที่ 33</u> ค่าการประเมินปริมาณของแข็งที่ละลายได้ในกลุ่ม Validation ของผลแก้วมังกร แบบทั้งผล (ก) ปอกเปลือก (ข)

5.2 การสร้างสมการเพื่อทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ ในผลแก้วมังกรแบบใช้ทั้งผล และปอกเปลือก ด้วยวิธี Partial Least Square Regression (PLSR) จากการนำจุดที่สแกน 4 จุดใน 1 ผล มาเฉลี่ยเป็นจุดเดียว

เนื่องจากสมการข้างต้นที่สร้างสมการทำนายค่าของปริมาณของแข็งที่ละลายได้นั้นค่า R ยังค่อนข้างน้อย จึงได้มีการหาวิธีในการทำให้ค่าสมการมีความแม่นยำมากขึ้นเพื่อทำให้ค่า R สูงขึ้นและค่า SEP ลดลงด้วยวิธีการดังนี้ คือ ในการสแกน1 ผลแก้วมังกรนั้นทำการสแกน 4 จุดรอบผลจุดละ 2 ซ้ำ ดังนั้นจึงเอาสเปกตรัมของทั้ง 8 สเปกตรัม มาเฉลี่ยกันให้เป็น 1 สเปกตรัม รวมทั้งค่าทางเคมีด้วย จากการที่หาความหวานเฉลี่ยทั้งผลนั้นบอกว่ามีความแตกต่างกันระหว่างด้านและจุดที่สแกนในการนำค่าทั้ง 4 จุดที่สแกนมาเฉลี่ยจะได้ค่าทางเคมีที่เฉลี่ยทั้งผลน่าจะทำให้สมการแม่นยำมากขึ้น

สมการที่ได้โดยการแบ่งกลุ่มนั้นค่า SEP มีค่าน้อยลงและค่า R มีค่าสูงขึ้นโดยสมการทำนายค่าของแข็งที่ละลายได้ ของแบบใช้ทั้งผลนั้นแบบ MLR มีค่าดีที่สุด และแบบปอกเปลือกนั้นสมการที่ดีที่สุดเป็นแบบใช้ทั้งความยาวคลื่น ผลของค่าที่ได้จากการทำนายด้วยสมการที่ดีที่สุด กับค่าจริงที่วัดได้แสดงตารางที่ 16 ผลของค่าที่ได้จากการทำนายด้วยสมการที่ดีที่สุด กับค่าจริงที่วัดได้แสดงดังภาพที่ 34

ตารางที่ 16 ค่าจากสมการ Calibration ที่สร้างด้วยวิธี PLSR เพื่อทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ และ ปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ในผลแก้วมังกรแบบใช้ทั้งผล และแบบปอกเปลือก

	ลักษณะ	F[4]	R[5]	SEC[6]	SEP[7]	R[5]	Bias
ทั้งผล	1100-2500	10	0.981	0.139	0.468	0.821	0.1140
	1200-2400[1]	***10***	***0.966***	***0.187***	***0.463***	***0.827***	***0.0924***
	1100-1510+1680-1940+ 2200-2500[2]	9	0,957	0.209	0.559	0.734	0.1347
	1400-2300[3]	4	0.743	0.486	0.646	0.620	0.0194
ปอกเปลือก	1100-2500	***10***	***0.979***	***0.149***	***0.431***	***0.844***	***0.0583***
	1100-1700[1]	6	0.805	0.445	0.504	0.721	0.1651
	1100-1320+1580-1840+ 2110-2240[2]	9	0.948	0.236	0.436	0.843	0.1566
	1400-2300[3]	9	0.969	0.182	0.520	0.761	0.0767

[1] ความยาวคลื่นจากสมการ MLR

[2] ความยาวคลื่นจาก MWPLSR

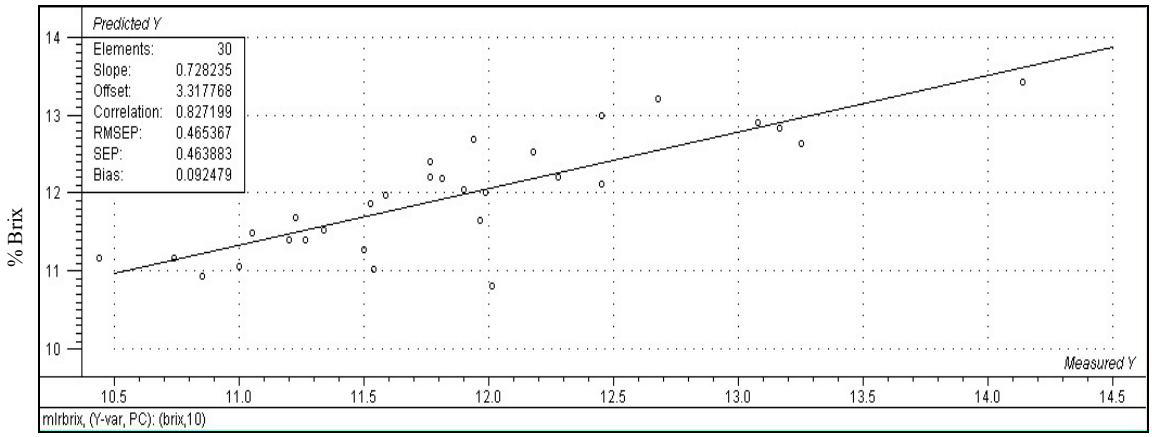
[3] ความยาวคลื่นจากเอกสารอ้างอิง

[4]จำนวน Factor ที่ใช้ในการสร้างสมการ Calibration

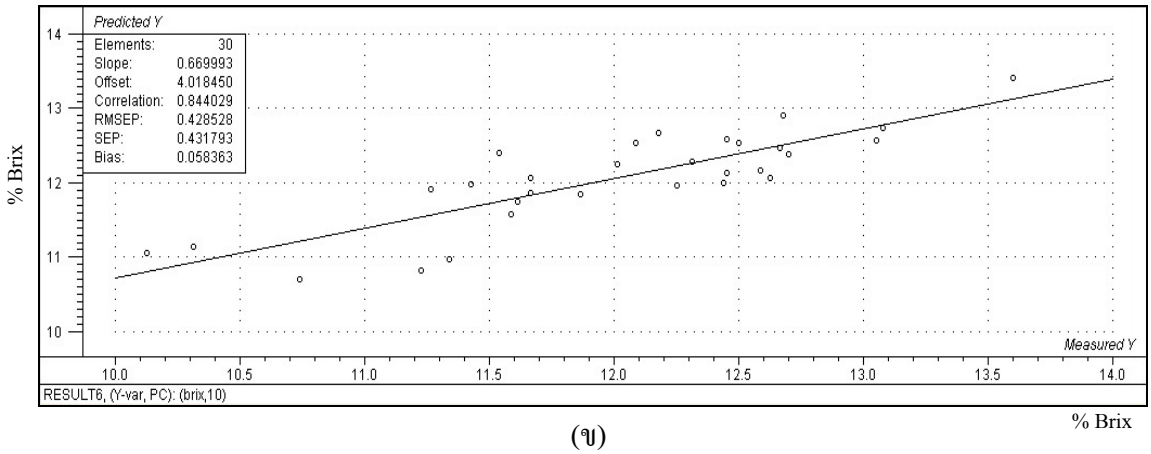
[5] Regression coefficient

[6] Standard Error of Calibration

[7] Standard Error of Prediction



(ก)



(ข)

<u>ภาพที่ 34</u> ค่าการประเมินปริมาณของแข็งที่ละลายได้ในกลุ่ม Validation ของผลแก้วมังกร แบบทั้งผล (ก) ปอกเปลือก (ข)

5.3 การสร้างสมการเพื่อทำนายค่าปริมาณกรด ในผลแก้วมังกรแบบใช้ทั้งผล และปอกเปลือก ด้วยวิธี Partial Least Square Regression (PLSR)

การสร้างสมการเพื่อทำนายค่าปริมาณกรดในแก้วมังกรทั้งสองแบบนั้น ทำนายค่าได้ค่อนข้างดี จากการแบ่งกลุ่มของสเปกตรัมแล้ว ปรากฏว่าได้ผลดี สมการที่ดีที่สุดของแก้วมังกรของแบบใช้ทั้งผล สร้างจากการเลือกใช้ตลอดช่วงความยาวคลื่นและ แบบปอกเปลือก เลือกช่วงความยาวคลื่นจาก เอกสารอ้างอิง แสดงในตารางที่ 17 การหาด้วยวิธี MWPLSR แสดงดังภาพที่ 35 ผลของค่าที่ได้จากการทำนายด้วยสมการที่ดีที่สุด กับค่าจริงที่วัดได้แสดงดังภาพที่ 36

ตารางที่ 17 ค่าจากสมการ Calibration ที่สร้างด้วยวิธี PLSR เพื่อทำนายค่าปริมาณกรดในผลแก้วมังกรทั้งแบบใช้ทั้งผล และแบบปอกเปลือก

	ลักษณะ	F[4]	R[5]	SEC[6]	SEP[7]	R[5]	Bias
ทั้งผล	1100-2500	***9***	***0.856***	***0.034***	***0.039***	***0.796***	***0.0069***
	1100-2300[1]	9	0.814	0.037	0.039	0.795	0.0070
	1100-1560+1680-1860[2]	9	0.787	0.039	0.043	0.779	-0.0060
	1100-2200[3]	7	0.791	0.038	0.042	0.788	-0.0028
ปอกเปลือก	1100-2500	5	0.804	0.038	0.040	0.801	-0.0024
	1200-2100[1]	7	0.811	0.037	0.039	0.810	0.0021
	1100-1900[2]	9	0.838	0.036	0.035	0.812	-0.0054
	1100-2200[3]	***8***	***0850***	***0.034***	***0.035***	***0.830***	***0.0008***

[1] ความยาวคลื่นจากสมการ MLR

[2] ความยาวคลื่นจาก MWPLSR

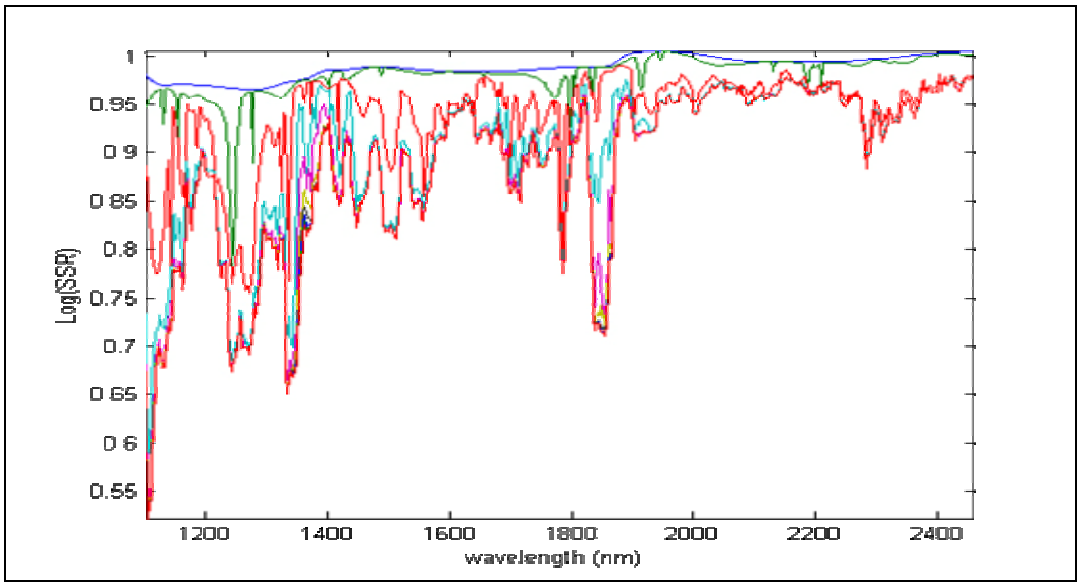
[3] ความยาวคลื่นจากเอกสารอ้างอิง

[4]จำนวน Factor ที่ใช้ในการสร้างสมการ Calibration

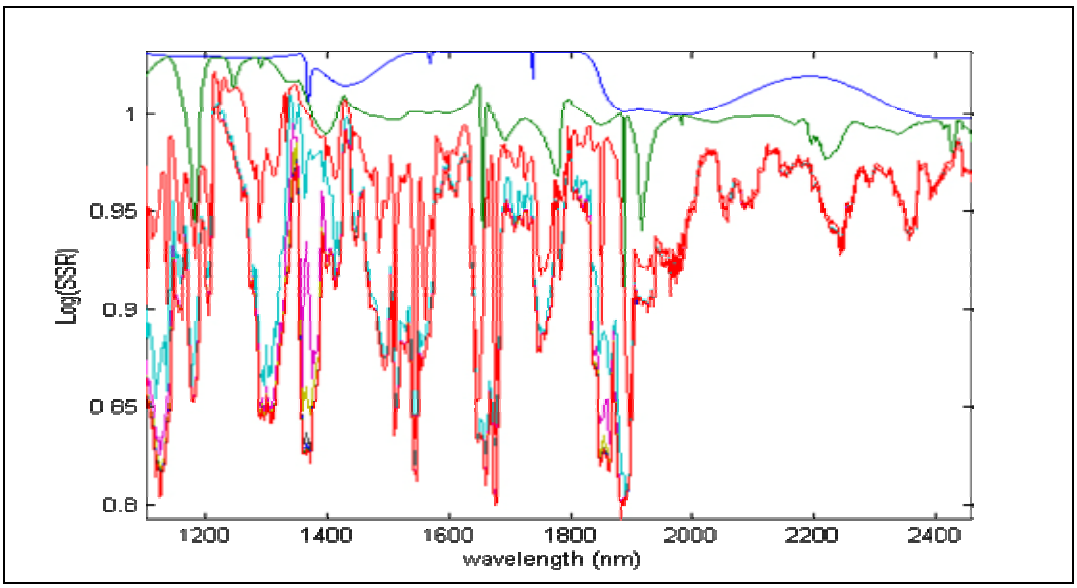
[5] Regression coefficient

[6] Standard Error of Calibration

[7] Standard Error of Prediction

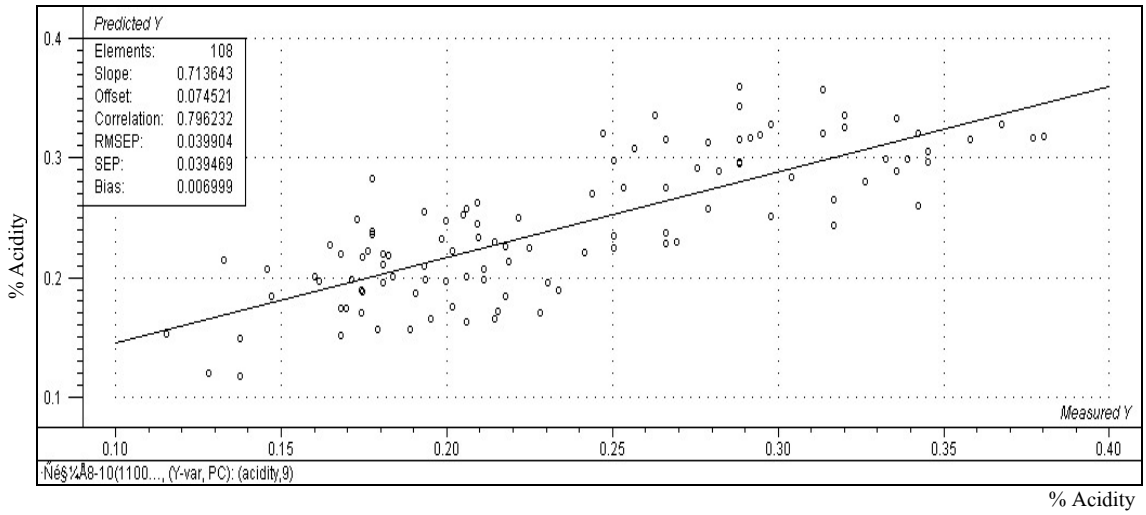


(ก)

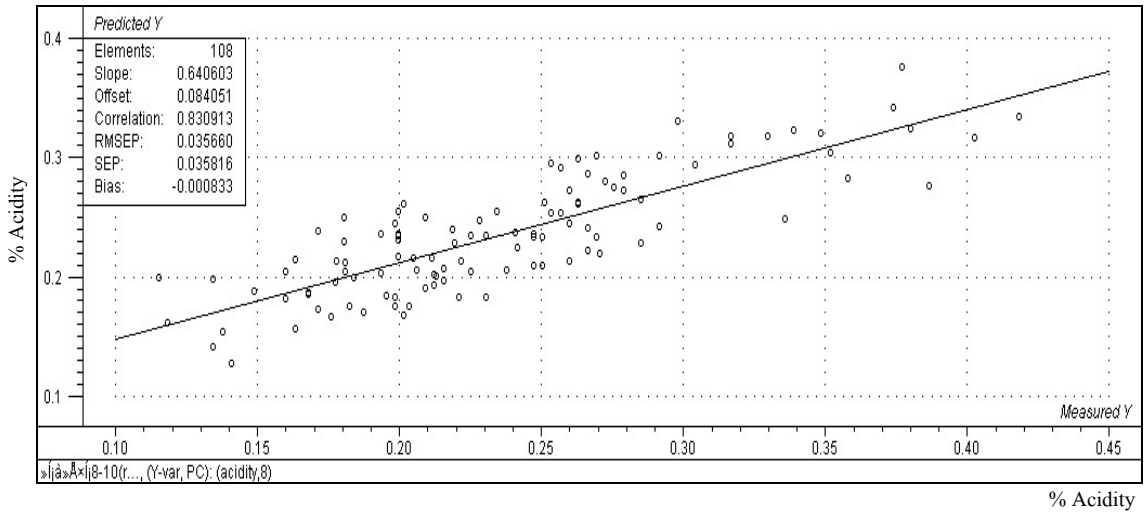


(ข)

ภาพที่ 35 กราฟระหว่างค่าLog (SSR) กับช่วงความยาวคลื่น จากวิธี MWPLSR เพื่อช่วยในการเลือกช่วงความยาวคลื่น เพื่อสร้างสมการทำนายค่าปริมาณกรดในผลแก้วมังกรในอายุการเก็บที่แตกต่างกัน แบบทั้งผล (ก) และ ปอกเปลือก (ข)



(ก)



(ข)

ภาพที่ 36 ค่าการประเมินปริมาณกรดในกลุ่ม Validation ของผลแก้วมังกร แบบทั้งผล (ก) ปอกเปลือก (ข)

5.4 การสร้างสมการเพื่อทำนายค่าปริมาณกรด ในผลแก้วมังกรแบบใช้ทั้งผล และปอกเปลือก ด้วยวิธี Partial Least Square Regression (PLSR) จากการนำจุดที่สแกน 4 จุดใน 1 ผล มาเฉลี่ยเป็นจุดเดียว

เนื่องจากสมการข้างต้นที่สร้างสมการทำนายค่าของปริมาณของกรดนั้นค่า R ยังค่อนข้างน้อย จึงได้มีการหาวิธีทำให้ค่าสมการมีความแม่นยำมากขึ้น โดยการทำให้ค่า R สูงขึ้นด้วยการสแกน 4 จุดรอบผลแก้วมังกรและจุดละ 2 ซ้ำ จากนั้นจึงนำเอาสเปกตรัมทั้ง 8 สเปกตรัมมาเฉลี่ยให้เป็น 1 สเปกตรัม รวมทั้งค่าทางเคมีด้วย จากการที่หาความหวานเฉลี่ยทั้งผลนั้นทำให้ทราบว่ามีความแตกต่างกันระหว่างด้านและจุดที่สแกน ในการนำค่าทั้ง 4 จุดที่สแกนมาเฉลี่ยจะได้ค่าทางเคมีที่เฉลี่ยทั้งผลน่าจะทำให้สมการแม่นยำมากขึ้น

สมการที่ได้โดยการแบ่งกลุ่มนั้นค่า SEP มีค่าน้อยลงและค่า R มีค่าสูงขึ้นโดยสมการทำนายค่าของกรด ของแบบใช้ทั้งผลนั้นแบบ MLR มีค่าดีที่สุดและมีจำนวน factor น้อย และแบบปอกเปลือกนั้นสมการที่ดีที่สุดเป็นแบบใช้ตามเอกสารอ้างอิง ผลของค่าที่ได้จากการทำนายด้วยสมการที่ดีที่สุด กับค่าจริงที่วัดได้แสดงในตารางที่ 18 ผลของค่าที่ได้จากการทำนายด้วยสมการที่ดีที่สุด กับค่าจริงที่วัดได้แสดงดังภาพที่ 37

ตารางที่ 18 ค่าจากสมการ Calibration ที่สร้างด้วยวิธี PLSR เพื่อทำนายค่าปริมาณกรดในผลแก้วมังกรทั้งแบบใช้ทั้งผล และแบบปอกเปลือก

	ลักษณะ	F[4]	R[5]	SEC[6]	SEP[7]	R[5]	Bias
ทั้งผล	1100-2500	4	0.863	0.026	0.042	0.863	-0.0132
	1100-2300[1]	***5***	***0.874***	***0.025***	***0.040***	***0.862***	***0.0140***
	1100-1560+1680-1860[2]	5	0.848	0.029	0.041	0.823	-0.0009
	1100-2200[3]	5	0.859	0.027	0.042	0.856	-0.0110
ปอกเปลือก	1100-2500	6	0.927	0.020	0.036	0.871	-0.0028
	1200-2100[1]	9	0.944	0.019	0.029	0.899	-0.0065
	1100-1900[2]	10	0.935	0.021	0.030	0.886	-0.0012
	1100-2200[3]	***7***	***0.909***	***0.024***	***0.029***	***0.907***	***-0.0012***

[1] ความยาวคลื่นจากสมการ MLR

[2] ความยาวคลื่นจาก MWPLSR

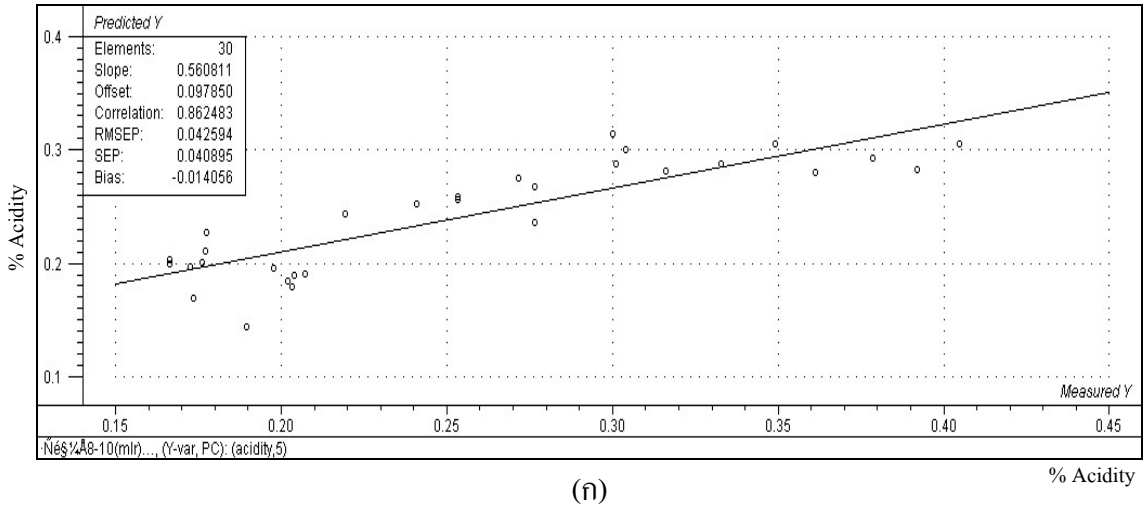
[3] ความยาวคลื่นจากเอกสารอ้างอิง

[4] จำนวน Factor ที่ใช้ในการสร้างสมการ Calibration

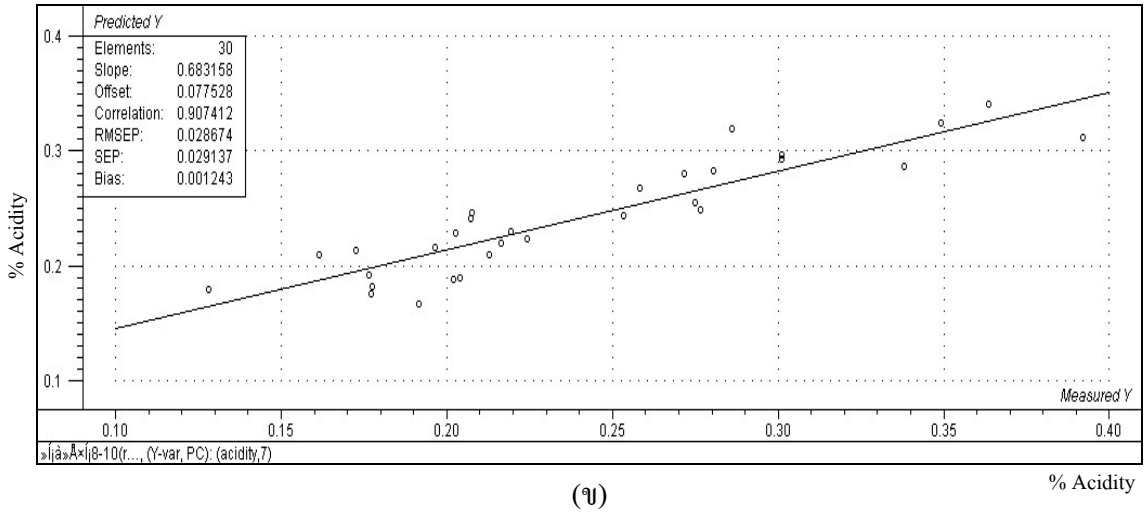
[5] Regression coefficient

[6] Standard Error of Calibration

[7] Standard Error of Prediction



(ก)



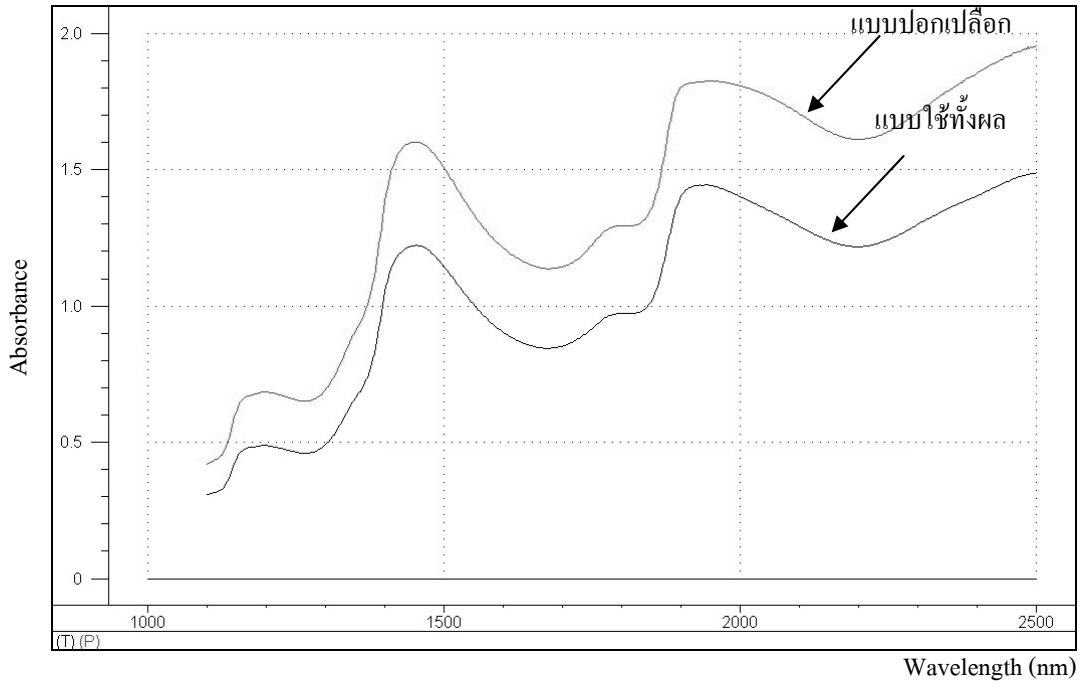
(ข)

ภาพที่ 37 ค่าการประเมินปริมาณกรดในกลุ่ม Validation ของผลแก้วมังกร แบบทั้งผล (ก) ปอกเปลือก (ข)

5.5 การศึกษาการปรับปรุงความแม่นยำในการทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ และ ปริมาณกรดในผลแก้วมังกร แบบใช้ทั้งผล และ แบบปอกเปลือกของสมการด้วยวิธี Partial Least Square Regression (PLSR)

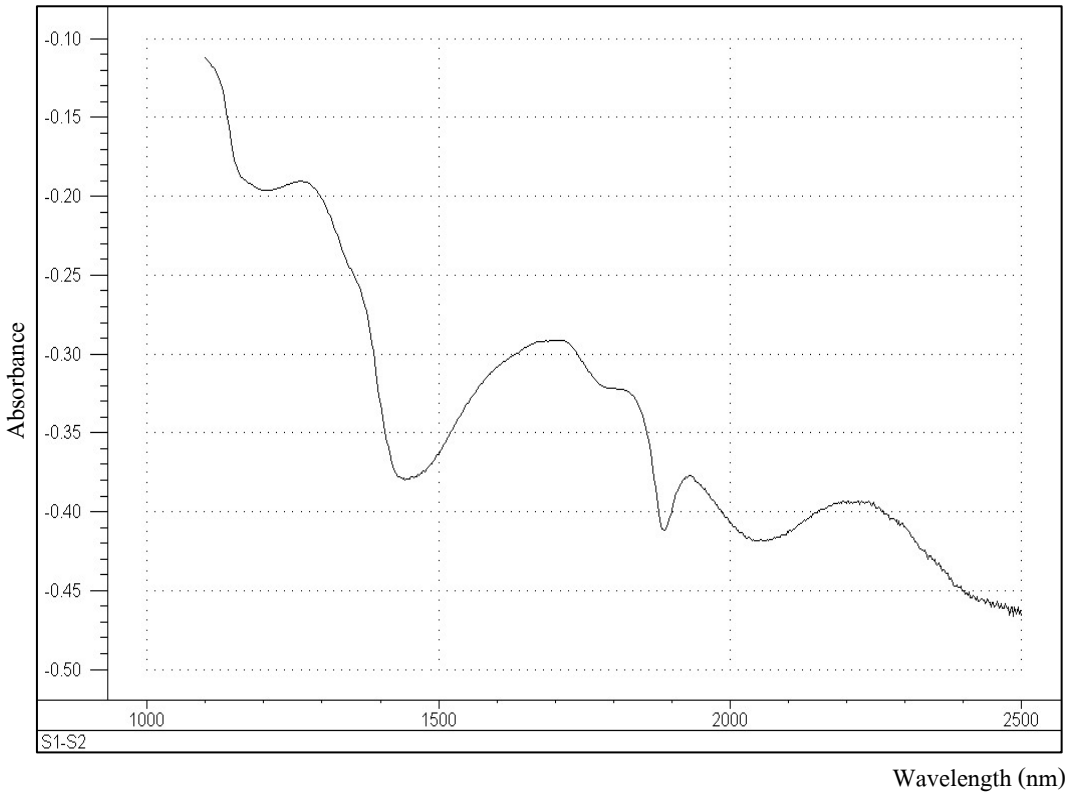
ในหัวข้อที่ผ่านมาสมการ Calibration ที่สร้างจากข้อมูลผลแก้วมังกรทั้งผลด้วยวิธี PLSR จะมีความแม่นยำต่ำสุด ซึ่งสาเหตุน่าจะมาจากอิทธิผลของเปลือกที่ดูดกลืนแสงในช่วงที่วัดทำให้ข้อมูลการดูดกลืนแสงของค่าทางเคมีในผลถูกรบกวน ดังนั้นจึงได้ศึกษาหาข้อมูลในสเปกตรัมที่สัมพันธ์กับเปลือกผล เพื่อจะได้นำมาลดอิทธิพลของเปลือกผลต่อสเปกตรัม

จากการศึกษาได้วิธีที่เหมาะสมที่สุดคือสเปกตรัมที่ได้จากการสแกนขั้นแรกแสดงดังภาพที่ 38 ขั้นแรกนำสเปกตรัมของแบบทั้งผลลบด้วยแบบปอกเปลือก จะได้สเปกตรัมของเปลือกแสดงดังภาพที่ 39 จากนั้นทำการพรีทรีตเมนต์ด้วยวิธีทำ second derivative จากนั้นดูพีคที่ชัดเจนแสดงดังภาพที่ 40 และเปรียบเทียบกับพีคที่ได้จากการทำ second derivativeของสเปกตรัมแบบทั้งผลและแบบปอกเปลือกแสดงดังภาพที่ 41 จากนั้นทำการใช้ความยาวคลื่นในช่วงพีคนั้นหารตลอดและทำทีละความยาวคลื่นแล้วหาความสัมพันธ์ แสดงดังภาพที่ 42

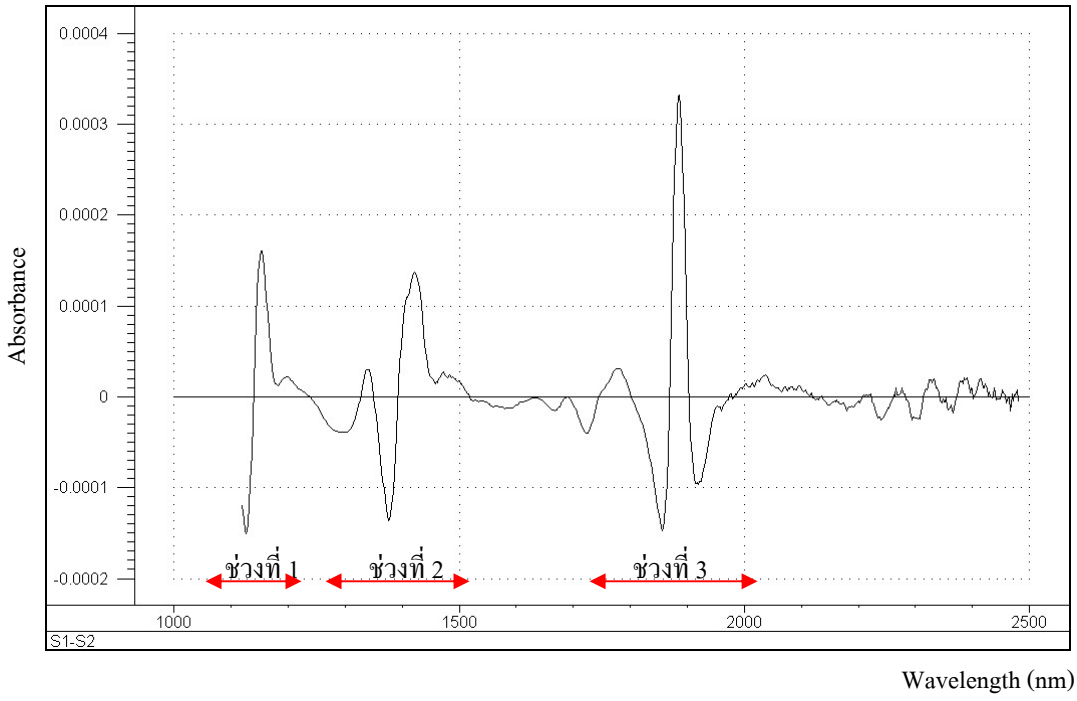


ภาพที่ 38 สเปกตรัมของแบบใช้ทั้งผล และ แบบปอกเปลือก

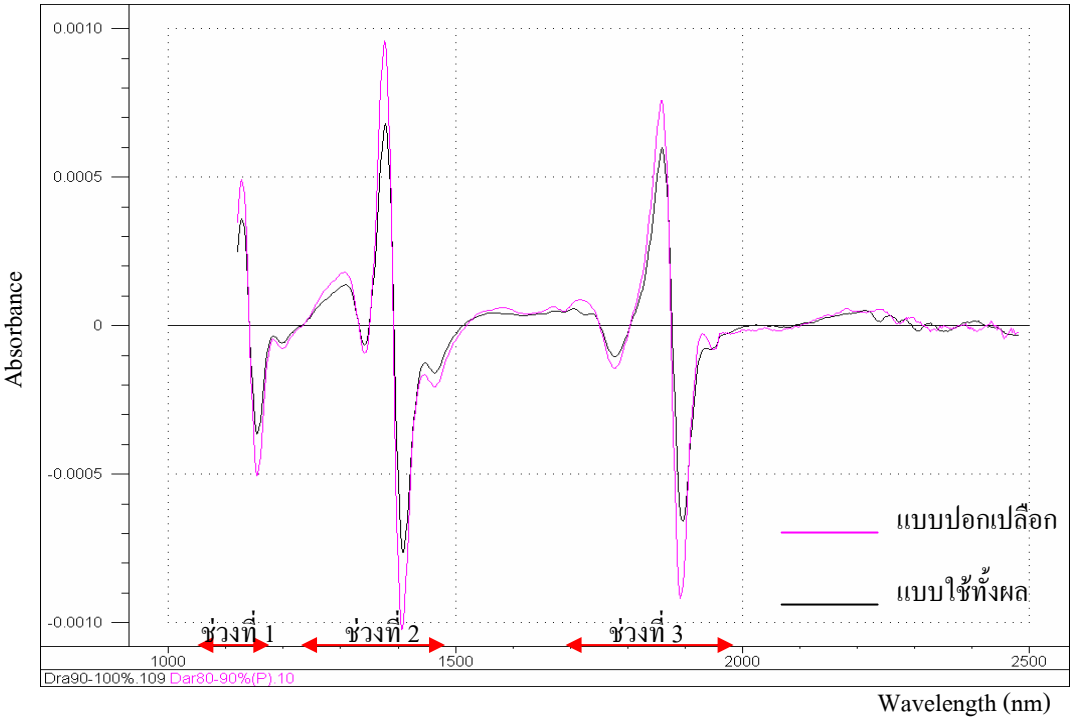
เลือกช่วงความยาวคลื่นที่มีความสัมพันธ์กับพีคของแบบใช้ทั้งผล, แบบปอกเปลือก และสเปกตรัมที่ได้จากจุดเดียวกันของแบบทั้งผลกับแบบปอกเปลือก ซึ่งช่วงที่เลือกมีสามช่วงจากพีคที่มีความสัมพันธ์กันคือ ช่วง 1128-1214, 1328-1486 และ 1758-1928 นาโนเมตรจากนั้นทำการหารด้วยความยาวคลื่นทีละความยาวคลื่นแล้วหาความสัมพันธ์จนครบช่วงความยาวคลื่น แสดงดังภาพที่ 42



ภาพที่ 39 สเปกตรัมของแบบใช้ทั้งผล ลบ แบบปอกเปลือก

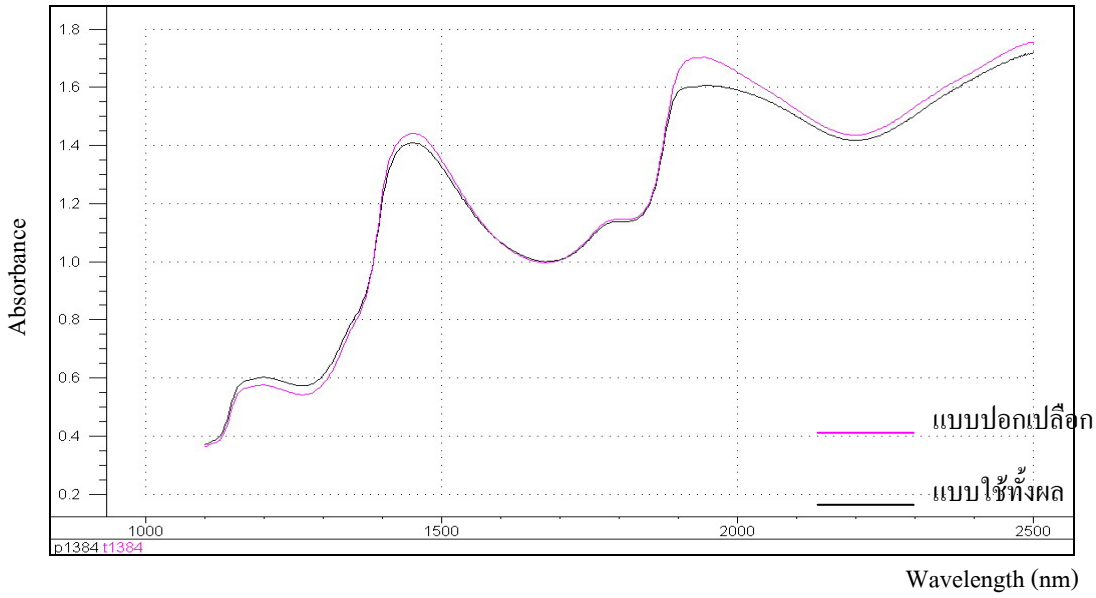


ภาพที่ 40 สเปกตรัมของแบบใช้ทั้งผล ลบ แบบปอกเปลือกทำ second derivativeแสดงให้เห็นความแตกต่างของช่วงพีค

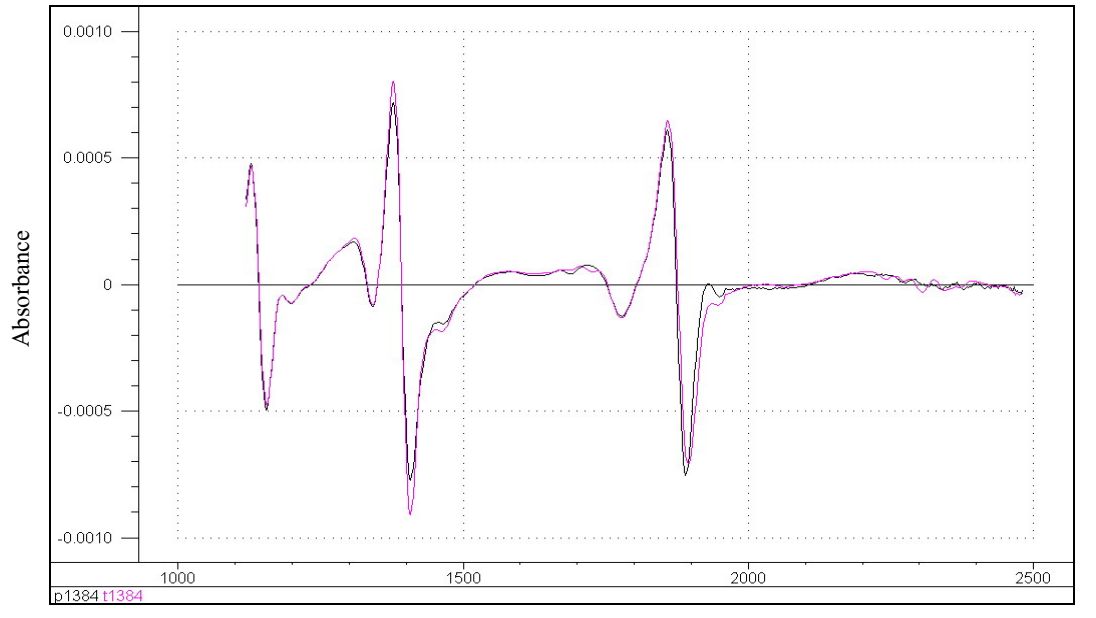


ภาพที่ 41 สเปกตรัมของแบบใช้ทั้งผล และ แบบปอกเปลือกทำ second derivativeแสดงให้เห็นความแตกต่างของช่วงพีค

สเปกตรัมที่ได้จากการหารความยาวจะพบว่าสเปกตรัมของทั้ง 2 แบบจะเคลื่อนเข้าใกล้กัน เกือบจะเป็นเส้นเดียวกัน และจากการทำ second derivative ช่วงพีคจะเข้าใกล้กันมากขึ้นดังภาพที่43



ภาพที่ 42 สเปกตรัมของแบบใช้ทั้งผล และ แบบปอกเปลือกที่ได้จากการหารด้วยความยาวคลื่นของเปลือก



ภาพที่ 43 สเปกตรัมของแบบใช้ทั้งผล และ แบบปอกเปลือกที่ได้จากการหารด้วยความยาวคลื่น ของเปลือกทำ second derivative แสดงให้เห็นความแตกต่างของช่วงพีค

วิธีการลดอิทธิพลของเปลือกในสเปกตรัมสำหรับการสร้างสมการ Calibration เพื่อทำนายค่าของแข็งที่ละลายได้นั้น จากตารางที่ 19 ผลทางสถิติระบุว่า ไม่ได้ทำให้การทำนายมีความแม่นยำมากขึ้น ผลของค่าที่ได้จากการทำนายด้วยสมการที่ดีที่สุด กับค่าจริงที่วัดได้แสดงดังภาพที่ 44

ตารางที่ 19 ปริมาณของแข็งที่ละลายได้ของการปรับปรุงค่าความแม่นยำในการทำนายค่าของสมการ Calibration ที่สร้างด้วยวิธี PLSR

Spectrum	F[4]	R[5]	SEC[6]	R[5]	SEP[7]	Bias
1100-2500	7	0.723	0.578	0.650	0.769	-0.0714
1100-2500/1384[1]	7	0.683	0.611	0.652	0.769	-0.0949
1100-2500/1486[2]	7	0.686	0.646	0.668	0.659	0.1696
1100-2500/1876[3]	7	0.698	0.599	0.655	0.765	-0.0787

[1] ช่วงความยาวคลื่นที่ได้จากการหารด้วยความยาวคลื่นที่ 1384

[2] ช่วงความยาวคลื่นที่ได้จากการหารด้วยความยาวคลื่นที่ 1384

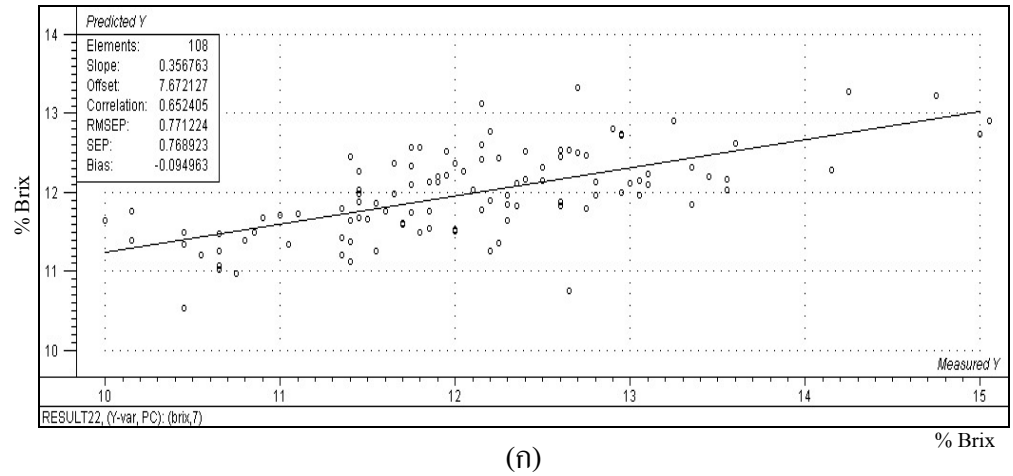
[3] ช่วงความยาวคลื่นที่ได้จากการหารด้วยความยาวคลื่นที่ 1384

[4]จำนวน Factor ที่ใช้ในการสร้างสมการ Calibration

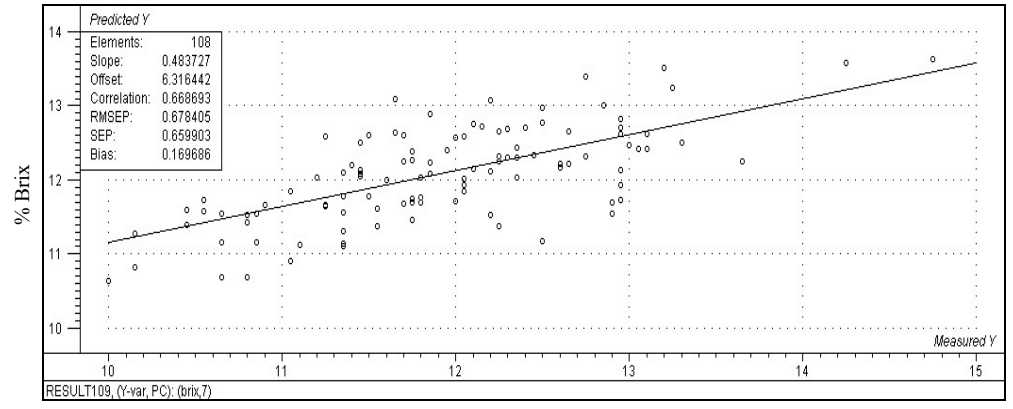
[5] Regression coefficient

[6] Standard Error of Calibration

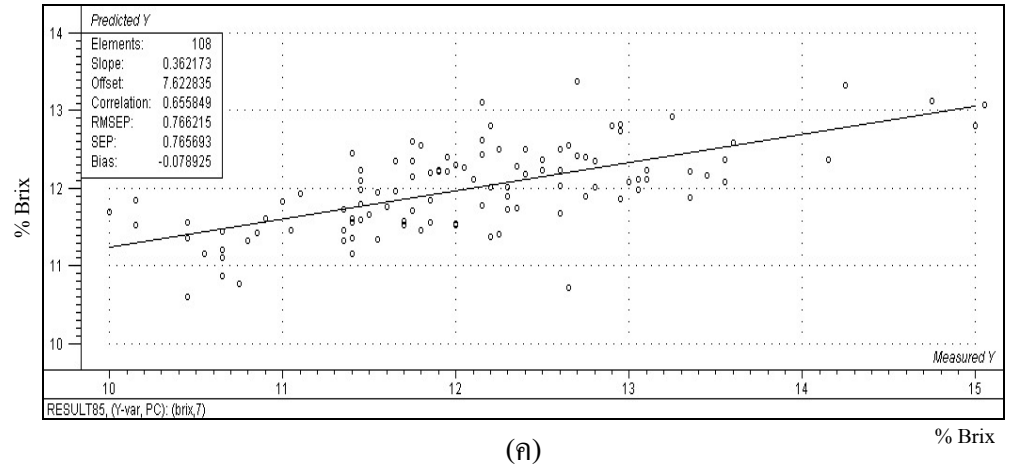
[7] Standard Error of Prediction



(ก)



(ข)



(ค)

<u>ภาพที่ 44</u> ค่าการประเมินปริมาณของแข็งที่ละลายได้ในกลุ่ม Validation ของผลแก้วมังกร 1100-2500/1384 (ก)1100-2500/1486 (ข) 1100-2500/1876 (ค)

อย่างไรก็ตามเมื่อใช้วิธีการลดอิทธิพลของเปลือกในการสร้างสมการ Calibration เพื่อทำนายปริมาณกรด พบว่า ค่า SEP ลดลงเล็กน้อย ค่า R มีค่าสูงขึ้นและค่า Bias ก็มีการเปลี่ยนแปลงน้อยการสมการทำนายค่ากรด ผลทางสถิติระบุว่า ไม่ได้ทำให้การทำนายมีความแม่นยำมากขึ้น ดังแสดงตารางที่ 20 ผลของค่าที่ได้จากการทำนายด้วยสมการที่ดีที่สุด กับค่าจริงที่วัดได้แสดงดังภาพที่ 45

ตารางที่ 20 ปริมาณกรดของการปรับปรุงค่าความแม่นยำในการทำนายค่าของสมการCalibration ที่สร้างด้วยวิธี PLSR

Spectrum	F[4]	R[5]	SEC[6]	R[5]	SEP[7]	Bias
1100-2500	9	0.856	0.034	0.796	0.039	-0.0025
1100-2500/1384[1]	7	0.813	0.037	0.801	0.041	-0.00047
1100-2500/1486[2]	7	0.813	0.037	0.801	0.041	-0.00047
1100-2500/1876[3]	7	0.814	0.037	0.802	0.041	0.00014

[1] ช่วงความยาวคลื่นที่ได้จากการหารด้วยความยาวคลื่นที่ 1384

[2] ช่วงความยาวคลื่นที่ได้จากการหารด้วยความยาวคลื่นที่ 1384

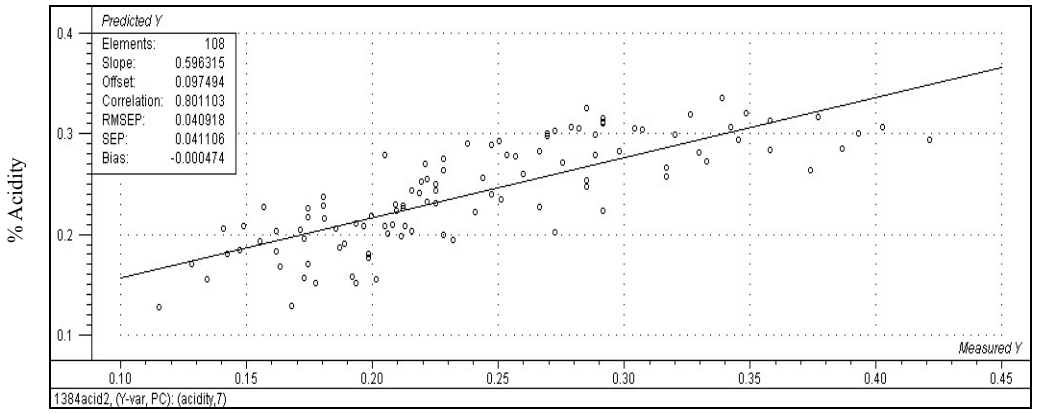
[3] ช่วงความยาวคลื่นที่ได้จากการหารด้วยความยาวคลื่นที่ 1384

[4]จำนวน Factor ที่ใช้ในการสร้างสมการ Calibration

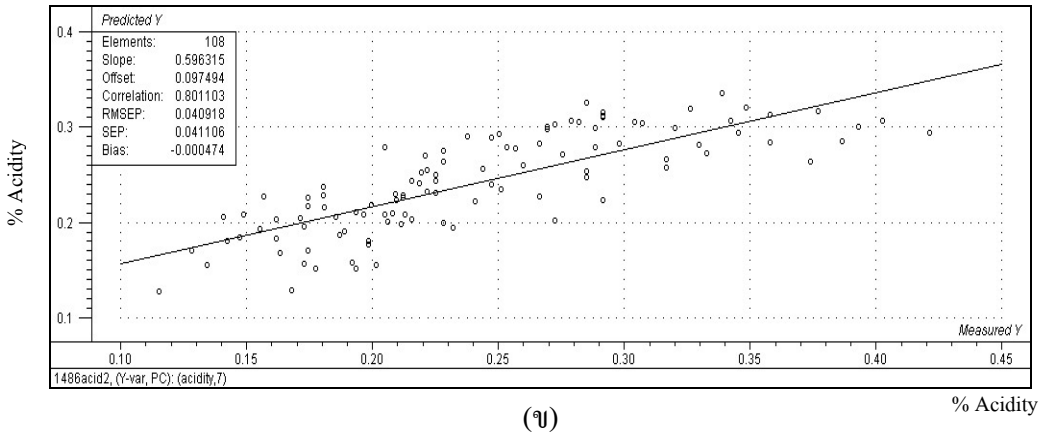
[5] Regression coefficients

[6] Standard Error of Calibration

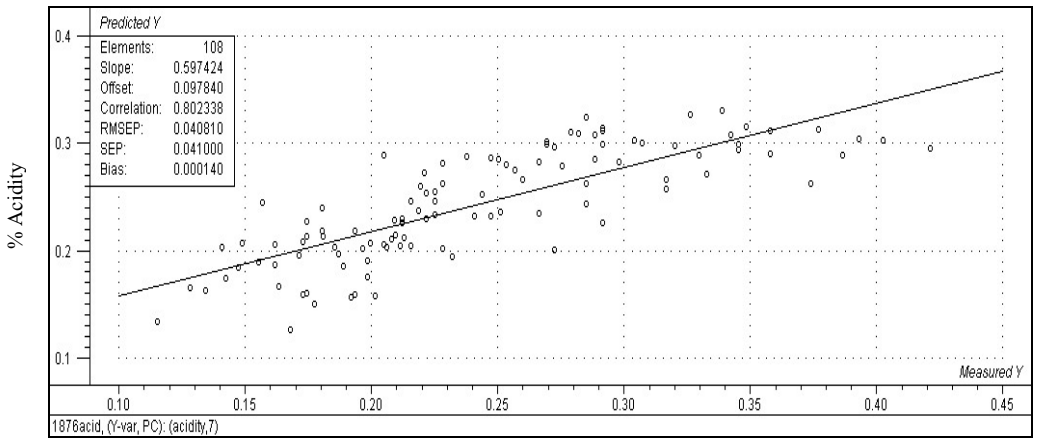
[7] Standard Error of Prediction



(ก)



(ข)



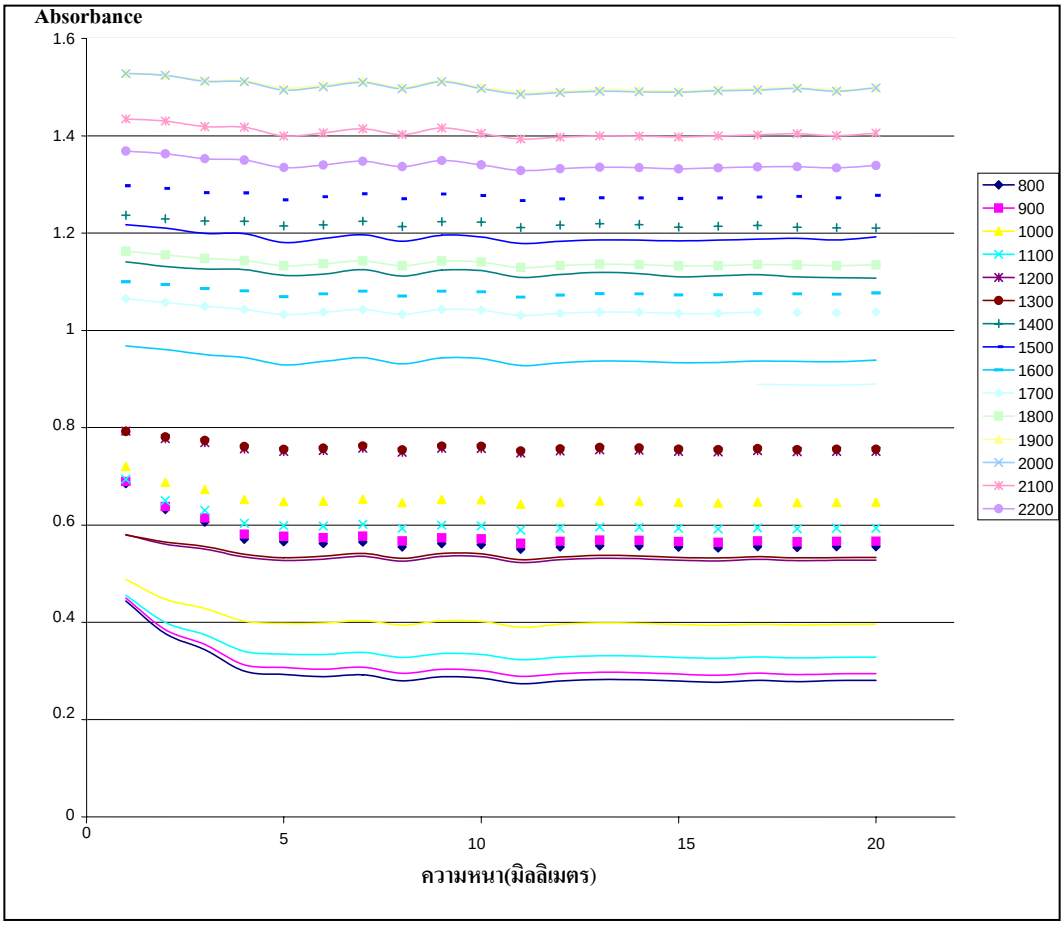
(ค)

<u>ภาพที่ 45</u> ค่าการประเมินปริมาณของกรดได้ในกลุ่ม Validation ของผลแก้วมังกร 1100-2500/1384 (ก) 1100-2500/1486 (ข) 1100-2500/1876 (ค)

6 การหาค่าความลึกของคลื่น Near Infrared Spectroscopy ที่ผ่านเข้าไปในผลแก้วมังกร

การหาค่าความลึกของคลื่น Near Infrared Spectroscopy ที่ผ่านเข้าไปในผลแก้วมังกรตั้งแต่ความยาวคลื่น 1100 – 2500 นาโนเมตร ทำโดยการเฉือนเนื้อแก้วมังกรเป็นแผ่นบางลงเป็นลำดับจากความหนาตั้งแต่ 20 นาโนเมตรจนถึง 1 นาโนเมตรและสแกนวัดหาค่า absorbance ที่ความหนาต่างๆกันดังกล่าวแล้วนำมาแสดงเป็นกราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่า absorbance กับ ความหนา โดยทำการ Plot กราฟที่ความยาวคลื่นต่าง ๆ ดังแสดงในภาพที่ 46 จากกราฟจะเห็นได้ว่าที่ความยาวคลื่นที่ 800 – 1300 นาโนเมตรจะเห็นการเปลี่ยนแปลงได้ชัดเจน กราฟจะเริ่มคงที่ที่ประมาณ 4 มิลลิเมตรและที่ความยาวคลื่น 1300 – 2500นาโนเมตรจะเห็นการเปลี่ยนแปลงได้ไม่ชัดเจน แต่กราฟจะเริ่มคงที่ประมาณ 4 มิลลิเมตรคล้ายกัน ดังนั้นคลื่น Near Infrared Spectroscopy 1100 – 2500 นาโนเมตร สามารถทะลุผ่านลงไปในผลแก้วมังกรได้ประมาณ 4 มิลลิเมตร นั่นคือเมื่อเนื้อแก้วมังกรยังมีความหนามากกว่าระยะลึกที่แสงสามารถผ่านเข้าไปได้การดูดกลืนจะมีค่าๆหนึ่งจนกระทั้งความหนาของเนื้อแก้วมังกรน้อยกว่าระยะลึกที่แสงผ่านได้ แสงจะทะลุผ่านเนื้อไปอีกด้านหมดทำให้แสงสะท้อนกลับออกมาน้อยลงการดูดกลืนแสงจึงมีค่ามากขึ้น

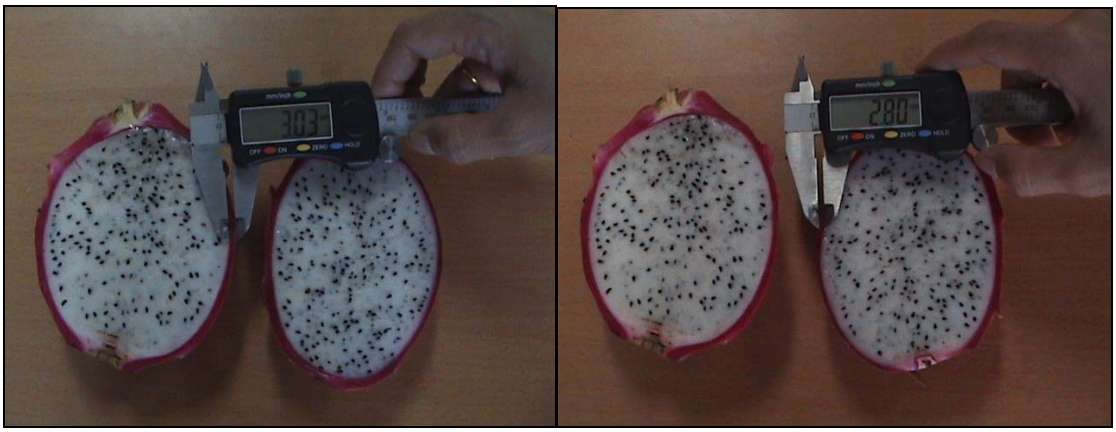
จากการทดลองที่ทำการสแกนแก้วมังกร 3 แบบ คือ แบบใช้ทั้งผล แบบปอกเปลือก และ แบบคั้นน้ำ จึงทำให้แบบคั้นน้ำได้ผลของสมการดีที่สุดเพราะสามารถวิเคราะห์ความสัมพันธ์ของสเปกตรัม ที่ความยาวคลื่นต่าง ๆ กับค่าทางเคมีได้ดีที่สุด และ รองลงมาเป็นแบบปอกเปลือกและแบบใช้ทั้งผล



ภาพที่ 46 ค่า Absorbance ในช่วงความยาวคลื่นต่างๆ ในผลแก้วมังกร

เนื่องจากการทดลองข้างต้นจะเห็นได้ว่าคลื่น Near Infrared สามารถทะลุลงไปในผลแก้วมังกรได้ที่ประมาณ 3 – 4 มิลลิเมตร ผลแก้วมังกรเมื่ออายุวันที่ทำการเก็บรักษายาวนานขึ้นเปลือกของผลแก้วมังกรจะเริ่มบางลงโดยปกติแล้วเปลือกของแก้วมังกรจะมีความหนาประมาณ 2 – 3 มิลลิเมตร ถ้าเก็บรักษานานขึ้นจะบางลงหรือประมาณ 2 มิลลิเมตร ดังภาพที่ 47

จากการทดลองความยาวคลื่น Near Infrared สามารถทะลุลงไปในผลแก้วมังกรได้ที่ประมาณ 3 – 4 มิลลิเมตร ซึ่งอาจเกิดปัญหาจากการดูดกลืนแสงของเมล็ดภายในผลแก้วมังกร จึงได้ทำการทดลองวัดระยะจากผิวเปลือกเข้าไปในเนื้อแก้วมังกร 5 มิลลิเมตรจะเจอเมล็ดของแก้วมังกรที่ 2.83 เปอร์เซ็นต์จากจำนวนการทดลอง 20 ผลซึ่งจะมีผลกระทบน้อยมากกับการทดลอง



(ก) (ข)

ภาพที่ 47 ความหนาของเปลือกอายุเก็บรักษา (ก) 1 วัน และ (ข) 7 วัน

จากผลที่ได้นี้จึงมีสมมุติฐานว่าผลแก้วมังกรที่เก็บรักษาไว้นานกว่าเปลือกจะบางลงน่าจะมีอิทธิพลของเปลือกน้อยลงและน่าจะทำให้ได้ข้อมูลการดูดกลืนแสงที่ดีขึ้น จึงศึกษาเพิ่มเติมโดยนำข้อมูลสเปกตรัมของผลแก้วมังกรที่อายุการเก็บรักษา 1 วัน (เปลือกหนา) มาสร้างสมการทำนายปริมาณของแข็งที่ละลายได้และปริมาณกรด เปรียบเทียบกับผลแก้วมังกรที่อายุการเก็บรักษา 7 วัน (เปลือกบาง)

จากการทดลองสมการทำนายค่าของแข็งที่ละลายได้จะเห็นได้ว่าค่า SEP มีค่าเปลี่ยนแปลงน้อยหรือแทบไม่เปลี่ยนแปลงและค่า R มีค่าสูงขึ้นเล็กน้อย และค่า Bias ก็แทบไม่เปลี่ยนแปลงโดยสมการทำนายค่าของแข็งที่ละลายได้ ซึ่งสรุปได้ว่าที่อายุวันการเก็บรักษาที่แตกต่างกันนั้นไม่มีผลต่อความแม่นยำของสมการที่ได้เนื่องจากการที่เปลือกบางลงแต่อนุภาคภายในเปลือกมีการเรียงตัวที่หนาแน่นมากขึ้นจึงทำให้คลื่น Near Infrared ไม่สามารถทะลุลงไปในผลแก้วมังกรได้มากขึ้น แต่ค่า R ที่มากขึ้นเล็กน้อย นั้นอาจเกิดมาจากการที่ผลแก้วมังกรเป็นผลไม้ประเภท Climacteric group ซึ่งมีการเปลี่ยนแปลงตลอดเวลาเมื่อผลแก้วมังกรอายุมากขึ้นค่าปริมาณของแข็งที่ละลายจะมากขึ้นจึงทำให้คลื่น Near Infrared สามารถถูกดูดกลืนด้วยค่าทางเคมีมากขึ้น ทำให้มีความสัมพันธ์มากขึ้น ดังแสดงในตารางที่ 21 และ ตารางที่ 22

ตารางที่ 21 สมการเพื่อทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ ในผลแก้วมังกรแบบใช้ทั้งผล ด้วยการแบ่งกลุ่มตามอายุวันเก็บรักษา ด้วยวิธี Partial Least Square Regression (PLSR)

	ลักษณะ	F[4]	R[5]	SEC[6]	SEP[7]	R[5]	Bias
1 วัน	1100-2500	5	0.746	0.566	0.575	0.568	0.2909
	1200-2400[1]	5	0.775	0.476	0.786	0.540	0.2055
	1100-1510+1680-1940+ 2200-2500[2]	5	0.705	0.528	0.784	0.568	0.2092
	1400-2300[3]	5	0.683	0.551	0.798	0.519	0.0915
7 วัน	1100-2500	7	0.840	0.361	0.776	0.579	-0.1554
	1200-2400[1]	6	0.771	0.424	0.800	0.546	-0.2009
	1100-1510+1680-1940+ 2200-2500[2]	6	0.753	0.438	0.789	0.554	-0.1252
	1400-2300[3]	7	0.812	0.427	0.808	0.402	-0.0378

[1] ความยาวคลื่นจากสมการ MLR

[2] ความยาวคลื่นจาก MWPLSR

[3] ความยาวคลื่นจากเอกสารอ้างอิง

[4]จำนวน Factor ที่ใช้ในการสร้างสมการ Calibration

[5] Regression coefficient

[6] Standard Error of Calibration

[7] Standard Error of Prediction

ตารางที่22 สมการเพื่อทำนายค่าปริมาณกรด ในผลแก้วมังกรแบบใช้ทั้งผล ด้วยการแบ่งกลุ่มตามอายุวันเก็บรักษา ด้วยวิธี Partial Least Square Regression (PLSR)

	ลักษณะ	F[4]	R[5]	SEC[6]	SEP[7]	R[5]	Bias
1 วัน	1100-2500	6	0.810	0.028	0.039	0.634	0.0086
	1100-2300[1]	6	0.709	0.032	0.040	0.663	0.0002
	1100-1560+1680-1860[2]	8	0.667	0.034	0.039	0.653	-0.0019
	1100-2200[3]	6	0.735	0.032	0.040	0.619	0.0010
7 วัน	1100-2500	5	0.725	0.079	0.063	0.670	0.0166
	1100-2300[1]	6	0.694	0.079	0.082	0.589	0.0013
	1100-1560+1680-1860[2]	7	0.659	0.079	0.088	0.585	0.0045
	1100-2200[3]	5	0.691	0.074	0.074	0.675	-0.0052

[1] ความยาวคลื่นจากสมการ MLR

[2] ความยาวคลื่นจาก MWPLSR

[3] ความยาวคลื่นจากเอกสารอ้างอิง

[4]จำนวน Factor ที่ใช้ในการสร้างสมการ Calibration

[5] Regression coefficient

[6] Standard Error of Calibration

[7] Standard Error of Prediction