

การวัดปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้และค่า pH ด้วยระบบเนียร์อินฟราเรด  
สเปกโทรสโกปีแบบอินไลน์และออฟไลน์สำหรับมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองเพื่อ  
กระบวนการแปรรูป

EVALUATION OF TOTAL SOLUBLE SOLIDS AND PH BY INLINE AND  
OFFLINE NIR SPECTROSCOPY SYSTEMS FOR NAMDOKMAI  
SITHONG MANGOES FOR PROCESSING



วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชาวิศวกรรมเกษตร

คณะวิศวกรรมศาสตร์

สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

พ.ศ.2566

KMITL-2023-EN-M-100-002

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

EVALUATION OF TOTAL SOLUBLE SOLIDS AND PH BY INLINE AND  
OFFLINE NIR SPECTROSCOPY SYSTEMS FOR NAMDOKMAI  
SITHONG MANGOES FOR PROCESSING



NPHATSANAN SAKSANGIUM

A THESIS SUBMITTED IN PARTIAL FULFILLMENT  
OF THE REQUIREMENT FOR THE DEGREE OF

MASTER OF ENGINEERING IN AGRICULTURAL ENGINEERING

SCHOOL OF ENGINEERING

KING MONGKUT'S INSTITUTE OF TECHNOLOGY LADKRABANG

2023

KMITL-2023-EN-M-100-002

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



COPYRIGHT 2023

SCHOOL OF ENGINEERING

KING MONGKUT'S INSTITUTE OF TECHNOLOGY LADKRABANG

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า

ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

หัวข้อวิทยานิพนธ์	การวัดปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้และค่า pH ด้วยระบบเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีแบบอินไลน์และออฟไลน์สำหรับมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองเพื่อกระบวนการแปรรูป
นักศึกษา	นางสาวณภัสนันท์ ศักดิ์เสงี่ยม
รหัสประจำตัว	61601194
ปริญญา	วิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต
สาขาวิชา	วิศวกรรมเกษตร
พ.ศ.	2566
อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์	ศ.ดร.ปานมันัส ศิริสมบุญ

### บทคัดย่อ

เทคนิคเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี ใช้วิเคราะห์หองค์ประกอบ หรือคุณภาพของตัวอย่างได้อย่างรวดเร็วโดยไม่ทำลายตัวอย่าง ในการแปรรูปมะม่วงมีการวัดปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้และค่า pH ของมะม่วง เพื่อตรวจสอบความหวานและความเป็นกรดต่างของเนื้อมะม่วง แต่การวัดแบบดั้งเดิมเป็นวิธีทำลายตัวอย่างและทำได้เพียงสุ่มตัวอย่างเท่านั้น ดังนั้นจึงศึกษาความเป็นไปได้ในการใช้เทคนิคเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีทั้งแบบอินไลน์และออฟไลน์ มาทำนายปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้และค่า pH ของตัวอย่างมะม่วงพันธุ์น้ำดอกไม้สีทองเพื่อใช้ในกระบวนการแปรรูปจำนวน 252 ผล ในการสแกนแบบอินไลน์มะม่วงจะถูกส่งมาทางสายพานลำเลียงแล้วสแกนขณะเคลื่อนที่โดยใช้เครื่อง fiber optic spectrometer ผ่านอินทิเกรตติ้งสเปียร์ วัดการสะท้อนแบบแพร่ การสแกนแบบออฟไลน์ใช้เครื่อง FT-NIR spectrometer วัดการสะท้อนแบบแพร่ หลังจากสแกนแบบอินไลน์และออฟไลน์ สเปกตรัมของตัวอย่างถูกคำนวณให้เป็นสเปกตรัมการดูดซับคลื่น นำตัวอย่างที่สแกนแล้วไปวัดปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้และค่า pH โดยใช้วิธีแฟร็กโทมิเตอร์และ pH meter ตามลำดับ แล้วนำค่าที่วัดได้สร้างความสัมพันธ์กับข้อมูลสเปกตรัมการดูดซับแสงเพื่อการพัฒนาแบบจำลอง โดยวิธี partial least squares (PLS) regression โดยผลที่ได้จากแบบจำลองแบบอินไลน์ซึ่งใช้ช่วงความยาวคลื่นระหว่าง 200–1100 nm เพื่อทำนายปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ค่าสัมประสิทธิ์การพิจารณา ( $r^2$ ) ของการทำนาย เท่ากับ 0.60 และค่ารากที่สองของความคลาดเคลื่อนเฉลี่ยยกกำลังสองของการทำนาย (RMSEP) เท่ากับ 1.68 %Brix และค่าความคลาดเคลื่อนเฉลี่ย เท่ากับ 0.21 %Brix ด้วยจำนวน PLS factor เท่ากับ 3 ส่วนแบบจำลองการทำนายค่า pH ได้ค่าพิจารณา  $r^2$  ของการทำนาย เท่ากับ 0.73 RMSEP เท่ากับ 0.34 และค่าความคลาดเคลื่อนเฉลี่ย เท่ากับ -0.01 ด้วยจำนวน PLS factor เท่ากับ 7 และผลได้จากแบบจำลองแบบ

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ออฟไลน์เพื่อทำนายปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ที่ช่วงความยาวคลื่น 12500-4000  $\text{cm}^{-1}$  ได้  $r^2$  ของการทำนายเท่ากับ 0.51 ค่า RMSEP เท่ากับ 2.03 %Brix และค่าความคลาดเคลื่อนเฉลี่ย เท่ากับ 0.39 %Brix ส่วนแบบจำลองการทำนายค่า pH แบบออฟไลน์ที่ช่วงความยาวคลื่น 12500-4000  $\text{cm}^{-1}$  ได้  $r^2$  ของการทำนาย เท่ากับ 0.56 ค่า RMSEP เท่ากับ 0.50 และค่าความคลาดเคลื่อนเฉลี่ย เท่ากับ 0.04 แบบจำลองที่สร้างขึ้นมีคุณภาพเพียงพอที่จะนำไปปรับปรุงโดยเก็บตัวอย่างจริงในโรงงานแปรรูปมะม่วง



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

<b>Thesis</b>	Evaluation of Total Soluble Solids and pH by Inline and Offline NIR Spectroscopy Systems for Namdokmai Sithong Mangoes for Processing
<b>Student</b>	Miss. Nphatsanan Saksangium
<b>Student ID.</b>	61601194
<b>Degree</b>	Master of Engineering
<b>Program</b>	Agricultural Engineering
<b>Year</b>	2023
<b>Thesis Advisor</b>	Prof.Dr.Panmanas Sirisomboon

## ABSTRACT

Near infrared (NIR) spectroscopy was applied for rapid sample analysis without damaging the sample. In the mango processing industry, the total soluble solids (TSS) content and pH of mango samples should be measured to verify the sweetness and the acid-base of mango. But traditional measurement was destructive and only randomly sampling methods. Therefore, NIR spectroscopy was applied in this research to do feasibility study predict the TSS content and the pH of Namdokmai Sithong mangoes both inline and offline where total number of mango samples were 252. In inline scanning, the mangoes were conveyed on the conveyor belt for scanning using the fiber optic spectrometer combined with interacting sphere in the diffuse reflectance mode. Off-line scanning used the FT-NIR spectrometer in diffuse reflectance mode. After inline and offline scanning, the sample spectrum was transformed to absorbance spectrum and the scanned sample were measured for TSS and pH by refractometer and pH meter, respectively. The values of TSS and pH were correlated with the absorption spectrum data for model development using partial least squares (PLS) regression for prediction of TSS and pH. The inline model with wavelength range 200-1100 nm provided a coefficient of determination of validation ( $r^2$ ) of 0.60, the root mean square error of prediction (RMSEP) of 1.68 %Brix and bias of 0.21 %Brix with a PLS factors of 3. The model for predicting pH value provided the  $r^2$  of 0.73, RMSEP of 0.34 and bias of -0.01 with a PLS factors of 7. The offline model with wavenumber range 12500-4000  $\text{cm}^{-1}$  of for prediction of TSS provided

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

$r^2$  of 0.51, RMSEP of 2.03 %Brix and bias of 0.39 %Brix. The pH prediction by offline model provided the  $r^2$  of 0.57, RMSEP of 0.50 and bias of 0.04. The models created were qualified for updating in the mango processing factory by adding more samples in factory.



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

## กิตติกรรมประกาศ

วิทยานิพนธ์เล่มนี้สำเร็จได้ด้วยความกรุณาจากอาจารย์ที่ปรึกษา ศ.ดร.ปานมนัส ศิริสมบุรณ์ ที่ให้ความช่วยเหลือ ให้คำชี้แนะช่วยแก้ปัญหาตลอดจนให้ความรู้และประสบการณ์ที่ดีแก่ข้าพเจ้า

ขอขอบพระคุณศูนย์วิจัยเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับผลผลิตทางการเกษตรและอาหาร ([www.nirsresearch.com](http://www.nirsresearch.com)) และภาควิชาวิศวกรรมเกษตร สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบังที่เอื้อเฟื้ออุปกรณ์เครื่องมือทั้งหมด

ขอขอบพระคุณบริษัท ถกลศรีฟาร์ม จำกัด ที่เอื้อเฟื้อตัวอย่างในการทดลองมะม่วงน้ำดอกไม้สีทอง

สุดท้ายต้องขอขอบพระคุณบิดา มารดา และพี่น้องๆ หลักรัฐวิศวะกรรมเกษตร สาขาวิชา วิศวกรรมเกษตร คณะวิศวกรรมศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง ทุกท่านที่ช่วยเหลือและเป็นกำลังใจที่ติดตลอดมา

สำหรับคุณงามความดีอันใดที่เกิดจากวิทยานิพนธ์ฉบับนี้ ข้าพเจ้าขอมอบให้กับบิดามารดา ซึ่งเป็นที่รักและเคารพยิ่งตลอดจนครูอาจารย์ที่เคารพทุกท่านที่ได้ประสิทธิ์ประสาทวิชาความรู้และถ่ายทอดประสบการณ์ที่ดีให้แก่ข้าพเจ้า

ณภัสนันท์ ศักดิ์เสงี่ยม

# สารบัญ

บทคัดย่อ.....	I
ABSTRACT .....	III
กิตติกรรมประกาศ.....	V
สารบัญ.....	VI
สารบัญตาราง.....	VIII
สารบัญรูป.....	IX
บทที่ 1 บทนำ .....	1
1.1 ความเป็นมาและความสำคัญ.....	1
1.2 วัตถุประสงค์.....	2
1.3 ขอบเขตของการวิจัย.....	2
1.4 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ .....	2
1.5 ขั้นตอนของการดำเนินการ.....	2
บทที่ 2 ทฤษฎีที่เกี่ยวข้อง.....	5
2.1 มะม่วงเพื่อการแปรรูป.....	5
2.2 ปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ หรือค่าความหวาน.....	6
2.2.1 การวิเคราะห์ปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ด้วยเครื่อง Refractometer.....	7
2.3 ค่า pH.....	7
2.3.1 การวิเคราะห์ค่าความเป็นกรด-ด่าง หรือค่า pH ด้วยเครื่อง pH meter.....	7
2.4 เทคนิคเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี (NIR Spectroscopy).....	8
2.5 หลักการพื้นฐานของเครื่อง Near Infrared Spectroscopy .....	8
2.6 การสร้างแบบจำลอง Calibration และ การพิสูจน์แบบจำลอง Validation.....	10
2.7 การสร้างสมการโดยวิธี partial least square regression (PLS-Regression) .....	10
2.8 การปรับแต่งสเปกตรัมก่อนการวิเคราะห์โดยวิธีทางคณิตศาสตร์.....	15
2.9 การเลือกจำนวนแพคเตอร์ที่เหมาะสม .....	17
2.10 ค่าทางสถิติที่ใช้ในการพิจารณาการสร้างสมการ .....	17
2.10.1 สัมประสิทธิ์การพิจารณา (coefficient of determination, R <sup>2</sup> ).....	17
2.10.2 ค่ารากที่สองของความคลาดเคลื่อนเฉลี่ยยกกำลังสองของการพิสูจน์แบบไขว้ (root mean squared error of cross validation, RMSECV).....	18
2.10.3 อัตราส่วนระหว่าง SEP กับ SD (Ratio of SEP to the SD, RPD).....	19
2.10.4 ความคลาดเคลื่อนเฉลี่ย (Bias).....	20

## สารบัญ (ต่อ)

2.11	ประโยชน์ของเทคนิค NIR.....	20
2.12	งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง.....	21
บทที่ 3	วิธีการทดลอง .....	23
3.1	การเตรียมตัวอย่างสำหรับการทดลอง .....	23
3.2	การทดลองเบื้องต้น .....	23
3.3	การสแกนด้วยคลื่นเนียร์อินฟราเรด .....	24
3.4	การวัดปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ .....	26
3.5	การวัดค่าความเป็นกรด-ด่าง (pH).....	27
บทที่ 4	ผลการทดลอง.....	30
4.1	ผลการทดลองการทวนซ้ำและการทำซ้ำของการสแกน (repeatability and reproducibility of scanning).....	30
4.2	ผลการทดลองเพื่อสร้างแบบจำลอง .....	32
4.2.1	แบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีแบบอินไลน์และออฟไลน์.....	33
บทที่ 5	สรุปผลการทดลอง.....	49
5.1	Repeatability, Reproducibility, Repeatability of reference and $R^2_{MAX}$ .....	49
5.2	ความเป็นไปได้ในการประยุกต์ใช้แบบจำลองในโรงงานแปรรูปมะม่วง.....	49
5.3	ข้อเสนอแนะสำหรับงานวิจัยต่อไป.....	50
เอกสารอ้างอิง .....	.....	51
ภาคผนวก ก	ข้อมูลจากการทดลอง และผลการวิเคราะห์ข้อมูล.....	55
ภาคผนวก ข	การสันนิษฐานของพันธะเมื่อดูดกลืนคลื่นเนียร์อินฟราเรดที่ความยาวคลื่นต่างๆ.....	72
ภาคผนวก ค	ผลงานวิจัยที่ได้รับการตีพิมพ์เผยแพร่.....	79
ประวัติผู้เขียน.....	.....	80

## สารบัญตาราง

ตารางที่ 2.1	คุณค่าทางโภชนาการของมะม่วงน้ำดอกไม้ (100 กรัม).....	18
ตารางที่ 2.2	การแปลความหมายของค่า R และ R <sup>2</sup> .....	19
ตารางที่ 2.3	การอธิบายผลของค่า RPD.....	19
ตารางที่ 4.1	ค่าการทวนซ้ำและการทำซ้ำของการสแกน ด้วยเครื่อง FT-NIR Spectrometer และ UV-VIS NIR Spectrometer.....	30
ตารางที่ 4.2	ค่าการทวนซ้ำและ R <sup>2</sup> <sub>MAX</sub> ของการวัดปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้และ pH.....	33
ตารางที่ 4.3	ค่าสถิติของชุดข้อมูล Calibration และ Validation ที่ใช้ในการสร้างแบบจำลองเนียร์ อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีแบบอินไลน์และออฟไลน์ สำหรับการทำนาย TSS (%Brix) และ pH ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทอง.....	34
ตารางที่ 4.4	ผลการวิเคราะห์ แบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีแบบอินไลน์สร้างโดยวิธี PLS สำหรับการทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) และค่า pH ของ มะม่วงน้ำดอกไม้สีทองเพื่อการแปรรูป .....	38
ตารางที่ 4.5	ผลการวิเคราะห์ แบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีแบบออฟไลน์สร้างโดยวิธี PLS สำหรับการทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) และ ค่า pH ของ มะม่วงน้ำดอกไม้สีทองเพื่อการแปรรูป.....	40
ตารางที่ 4.6	แสดงความยาวคลื่นที่มีค่า Regression coefficient plot และ ค่า X-loading weight สูง ของแบบจำลองสำหรับการประเมินค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) และ pH แบบอินไลน์ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองเพื่อการแปรรูป.....	45
ตารางที่ 4.7	แสดงความยาวคลื่นที่มีค่า Regression coefficient plot และ ค่า X-loading weight สูง ของแบบจำลองสำหรับการประเมินค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS)และ pH แบบออฟไลน์ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองเพื่อการแปรรูป.....	48

## สารบัญรูป

รูปที่ 1.1	แผนผังแสดงขั้นตอนการศึกษา .....	5
รูปที่ 2.1	ลักษณะผิวมะม่วงที่เป็นโรคแอนแทรกโนส.....	6
รูปที่ 2.2	การส่งสัญญาณในการวัดค่า pH .....	8
รูปที่ 2.3	การกระทำของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้ากับสารต่างๆ .....	9
รูปที่ 2.4	ข้อมูลสเปกตรัมและความเข้มข้นในรูปแบบเมทริกซ์ .....	13
รูปที่ 2.5	Schematic diagram for the factorization of the spectral data matrix X .....	13
รูปที่ 3.1	มะม่วงน้ำดอกไม้สีทองเพื่อการแปรรูป.....	23
รูปที่ 3.2	การวัดแบบอินไลน์.....	25
รูปที่ 3.3	การวัดแบบออฟไลน์.....	26
รูปที่ 3.4	การวัดปริมาณของแข็งละลายน้ำได้ด้วยเครื่อง Pocket Refractometer (PAL-1 S/No L218454, Atago, Japan (ก) โดยการแบ่งเป็น 3 ส่วน หัว กลาง หาง (ข).....	27
รูปที่ 3.5	การแบ่งเป็น 3 ปีกเกอร์เท่าๆกันก่อนการวัดค่า pH (ก) และการวัดค่า pH ด้วยเครื่อง pH meter (HI8521, Hanna instruments, USA.) (ข).....	28
รูปที่ 4.1	สเปกตรัมเฉลี่ยของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองจากเครื่อง FT NIR Spectrometer.....	25
รูปที่ 4.2	สเปกตรัมเฉลี่ยของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองจากเครื่อง UV-VIS-NIR Spectrometer .....	31
รูปที่ 4.3	สเปกตรัมของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองโดยสแกนแบบอินไลน์จำนวน 252 ตัวอย่าง.....	32
รูปที่ 4.4	สเปกตรัมของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองโดยสแกนแบบออฟไลน์จำนวน 252 ตัวอย่าง .....	32
รูปที่ 4.5	ค่าสถิติความถี่จากการวัดด้วยวิธีอ้างอิง สำหรับตัวอย่างชุด Calibration ของช่วงปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (ก) pH (ค) และสำหรับตัวอย่างชุด Validation ของช่วงปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (ข) pH (ง) แบบอินไลน์และออฟไลน์ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทอง..	35
รูปที่ 4.6	การเปรียบเทียบค่าวัดจริงกับค่าที่ทำนายโดยแบบจำลองของเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับตัวอย่างชุด Calibration ของปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) (ก), pH (ค) และสำหรับตัวอย่างชุด Validation ของปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) (ข), pH (ง) แบบอินไลน์และออฟไลน์ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองเพื่อการแปรรูป.....	36
รูปที่ 4.7	กราฟ Regression coefficient plot ของแบบจำลองใช้สำหรับการประเมินค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) และ pH ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองเพื่อการแปรรูปแบบอินไลน์ (ก), (ข) และแบบออฟไลน์ (ค), (ง).....	42
รูปที่ 4.8	กราฟ X - loading weight plot ของแบบจำลองใช้สำหรับการประเมินค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) และ pH ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองเพื่อการแปรรูปแบบอินไลน์ (ก), (ข) และแบบออฟไลน์ (ค), (ง).....	44

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนลิขสิทธิ์ไว้เพื่อใช้ในการศึกษาค้นคว้าเท่านั้น ไม่อนุญาติให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า

IX  
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

# บทที่ 1

## บทนำ

### 1.1 ความเป็นมาและความสำคัญ

มะม่วง จัดเป็นไม้ผลเขตร้อนที่มีความสำคัญทางเศรษฐกิจของประเทศไทย มีพันธุ์ปลูกมากกว่า 100 พันธุ์ มะม่วงสามารถปรับตัวเข้ากับสภาพภูมิอากาศของประเทศไทยได้ดี ปลูกได้เกือบทั้งประเทศ จึงเป็นไม้ผลที่มีผู้นิยมปลูกและรับประทานมากเป็นอันดับหนึ่งของประเทศไทย [1] ประเทศไทยมีรายได้หลักส่วนหนึ่งมาจากการส่งออกสินค้าทางการเกษตรและมะม่วงเป็นสินค้าส่งออกที่มีความสำคัญเป็นลำดับต้นๆของประเทศไทยซึ่งดูได้จากปริมาณการส่งออกมะม่วงในปี 2563 ซึ่งมีมูลค่าประมาณ 1587 ล้านบาท [2] เนื่องจากมะม่วงของไทยมีรสชาติดี ทำให้ผู้บริโภคชาวต่างชาตินิยมรับประทานและเป็นที่ยอมรับ แต่ด้วยการเก็บมะม่วงในช่วงก่อนฤดูเก็บเกี่ยวมักจะพบปัญหามะม่วงที่มีรสชาติไม่หวานและเปรี้ยว จึงเกิดความเสียหายต่อการส่งออกมะม่วงของไทย ซึ่งการคัดแยกมะม่วงที่มีรสชาติดีกับมะม่วงที่มีรสชาติไม่หวานจะต้องอาศัยประสบการณ์และความชำนาญในการคัดแยกมะม่วงส่งออก และใช้ในอุตสาหกรรมการแปรรูป การนำมะม่วงมาแปรรูปก็เป็นอีกช่องทางหนึ่งในการสร้างมูลค่าของมะม่วงทั้งในประเทศและส่งออกต่างประเทศ สมบัติทางเคมีของมะม่วงที่ใช้ในการแปรรูปได้แก่ ปริมาณของแข็งละลายน้ำได้ (total soluble solids) ความเป็นกรด (acidity) และ pH เนื่องจากความหวาน ความเปรี้ยวและความจืดจะขึ้นอยู่กับปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้และค่า pH ของมะม่วง ในโรงงานอุตสาหกรรมส่วนใหญ่ แปรรูปมะม่วงเป็นน้ำมะม่วงคั้น มะม่วงกวน มะม่วงดอง มะม่วงแช่อิ่ม และมะม่วงตากแห้ง โดยมะม่วงที่นำมาแปรรูปส่วนใหญ่เป็นมะม่วงที่มีปัญหา เช่น รอยช้ำ ไกล่เน่า และเป็นโรคแอนแทรกโนส เป็นต้น โดยจะปอกเปลือกและตัดแต่งเนื้อดีมาใช้ในการกระบวนการแปรรูป จากการสำรวจ พบว่ามีโรงงานรับซื้อมะม่วงใช้ในการแปรรูปไม่น้อยกว่า 230 โรงงาน [3]

เนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี (near infrared spectroscopy, NIRS) เป็นเทคนิคหนึ่งที่ได้รับการยอมรับอย่างกว้างขวางในการวัดคุณภาพภายในของผลไม้ ซึ่งสามารถสแกนที่มะม่วงได้โดยที่ไม่ทำให้มะม่วงเกิดความเสียหาย

ดังนั้นงานวิจัยนี้จึงมุ่งเน้นศึกษาการวัดปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้และค่า pH ของมะม่วงพันธุ์น้ำดอกไม้สีทองที่ผิวเปลือกมีจุดดำกระจายประปราย สีผิวไม่สม่ำเสมอ ในช่วงอายุการเก็บเกี่ยวใกล้เคียงกัน สำหรับแปรรูปจาก บริษัทถลกศรีฟาร์ม จังหวัดเพชรบูรณ์ แบบไม่ทำลายด้วยเทคนิคเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีโดยการตรวจวัดการดูดกลืนแสงของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทอง เพื่อนำมาพัฒนาสมการทำนายปริมาณของแข็งละลายน้ำได้และค่า pH ของมะม่วง เพื่อตรวจสอบความเป็นไปได้ในการประยุกต์ใช้ในโรงงานแปรรูปมะม่วงซึ่งบริษัท ถลกศรีฟาร์ม ได้ใช้วิธีการสุ่มตรวจค่าความ

หวานก่อนเข้าสู่กระบวนการแปรรูป

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนลิขสิทธิ์ไว้สำหรับใช้ในการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า

ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

## 1.2 วัตถุประสงค์

1. เพื่อศึกษา NIR spectral characteristics ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองที่ผิวเปลือกมีจุดดำกระจายประปราย สีผิวไม่สม่ำเสมอ ในช่วงอายุการเก็บเกี่ยวใกล้เคียงกัน สำหรับการแปรรูป โดยใช้วิธีการสแกนแบบอินไลน์ และออฟไลน์

2. เพื่อศึกษาความเป็นไปได้ในการใช้เทคนิคเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีในการประเมินคุณภาพด้านปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้และค่า pH ของมะม่วงที่ผิวเปลือกมีจุดดำกระจายประปราย สีผิวไม่สม่ำเสมอ ในช่วงอายุการเก็บเกี่ยวใกล้เคียงกัน ในอุตสาหกรรมการแปรรูปโดยแบบจำลองที่ได้สามารถใช้ในการวัดในสายการผลิตและในห้องปฏิบัติการ

## 1.3 ขอบเขตของการวิจัย

1. ใช้มะม่วงน้ำดอกไม้สีทองที่ผิวเปลือกมีจุดดำกระจายประปราย สีผิวไม่สม่ำเสมอ ในช่วงอายุการเก็บเกี่ยวใกล้เคียงกัน สำหรับการแปรรูปเท่านั้น จากบริษัท ถกลศรีฟาร์ม จังหวัด เพชรบูรณ์

2. การวิจัยใช้ความยาวช่วงคลื่นเนียร์อินฟราเรด โดยการสแกนแบบอินไลน์จะใช้ความยาวช่วงคลื่นเนียร์อินฟราเรดระหว่าง 200 – 1000 nm และการสแกนแบบออฟไลน์ใช้ความยาวช่วงคลื่นเนียร์อินฟราเรดระหว่าง 800 – 2500 nm ที่ wavenumber 12500 – 4000  $\text{cm}^{-1}$

3. การวิจัยใช้วิธี PLS (partial least squares) Regression ในการสร้างแบบจำลอง

## 1.4 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

โรงงานแปรรูปมะม่วงสามารถใช้เทคนิคเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีโดยพัฒนาแบบจำลองทำนายที่ได้จากวิทยานิพนธ์นี้ เพื่อลดเวลาในการตรวจสอบโดยไม่ทำลายตัวอย่างพร้อมตรวจได้ทุกผลเพื่อสามารถประเมินปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้และค่า pH ของมะม่วงพันธุ์น้ำดอกไม้สีทองที่ผิวเปลือกมีจุดดำกระจายประปราย สีผิวไม่สม่ำเสมอ ในช่วงอายุการเก็บเกี่ยวใกล้เคียงกัน สำหรับการแปรรูป

## 1.5 ขั้นตอนของการดำเนินการ

1. ศึกษาวิธีการสแกนเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีด้วย NIR spectrometer ทั้งแบบอินไลน์และออฟไลน์และการสร้างแบบจำลอง

2. เตรียมตัวอย่างมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองที่เป็นผิวเปลือกมีจุดดำกระจายประปราย สีผิวไม่สม่ำเสมอ ในช่วงอายุการเก็บเกี่ยวใกล้เคียงกัน สำหรับการแปรรูป ได้มาจากบริษัท ถกลศรีฟาร์ม โดย

แบ่งออกเป็น 3 ขนาด ได้แก่ ขนาดเล็ก ขนาดกลาง และขนาดใหญ่ ตามที่ทางบริษัทคัดแยกขนาดมาให้พร้อมทั้งเขียนหมายเลขลงบนตัวอย่างในห้องปฏิบัติการ

2.1 นำตัวอย่างมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองมา 3 ผล มาทำ overall precision test

3. นำตัวอย่างมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองแต่ละขนาดมาเตรียมสแกนแบบอินไลน์และออฟไลน์ด้วยเครื่อง UV-VIS-NIR Spectrometer (Avantes, Netherlands) ที่ช่วงคลื่น 200-1100 nm และเครื่อง FT-NIR Spectrometer (MPA, Bruker, Germany) ที่ช่วงคลื่น 12500-4000  $\text{cm}^{-1}$  (800-2500 nm) ตามลำดับ

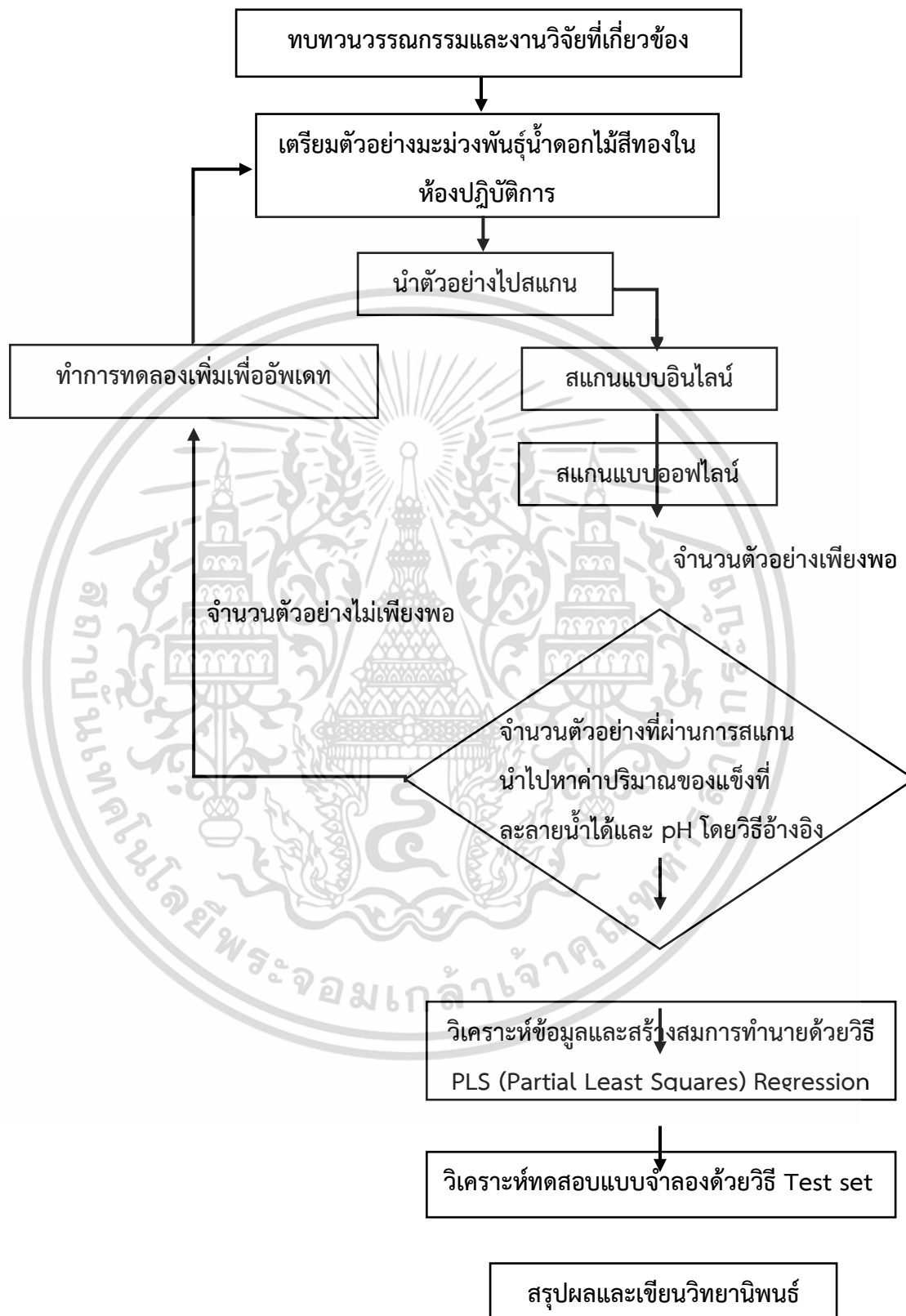
4. นำตัวอย่างที่ผ่านการสแกนไปหาค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้และค่า pH โดยวิธีอ้างอิงด้วยเครื่อง Refractometer PAL-1, Atago, Japan) และ เครื่อง pH meter

5. สร้างแบบจำลองความสัมพันธ์ระหว่างค่าปริมาณของแข็งละลายน้ำได้และค่า pH โดยวิธี partial least square (PLS) Regression โดยใช้โปรแกรม Unscrambler X และใช้โปรแกรม OPUS version 7.0.129 ทั้งนี้ใช้ข้อมูลเชิงแสง (สเปกตรัม) ที่ไม่มีการจัดการสเปกตรัมเบื้องต้นและมีการจัดการสเปกตรัมเบื้องต้น

6. วิเคราะห์ผล

7. สรุปผลและเขียนวิทยานิพนธ์

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

## รูปที่ 1.1 แผนผังแสดงขั้นตอนการศึกษา

### บทที่ 2

## ทฤษฎีที่เกี่ยวข้อง

### 2.1 มะม่วงเพื่อการแปรรูป

#### 2.1.1 ลักษณะทั่วไปของมะม่วง [4]

มะม่วงน้ำดอกไม้ เป็นผลไม้ยืนต้นขนาดใหญ่ เป็นทรงพุ่มทึบ ใบใหญ่ยาวรี ดอกเป็นช่อมีสีขาวนวล มีกลิ่นหอม ผลมีลักษณะรูปทรงรี ผิวเปลือกบาง ผลอ่อนมีสีเขียว มีรสชาติเปรี้ยวมาก ผลสุกมีสีเหลือง เนื้อนุ่มมีสีเหลือง มีเนื้อแน่นนุ่มฉ่ำน้ำ มีรสชาติหวานฉ่ำ มีกลิ่นหอม จะมีเมล็ดแข็งแบนบางหรืออยู่ข้างในเนื้อ มะม่วงน้ำดอกไม้ปลูกกันมาก มีหลายสายพันธุ์ ได้แก่ มะม่วงน้ำดอกไม้เบอร์ 4 มะม่วงน้ำดอกไม้สีทอง มะม่วงน้ำดอกไม้สีม่วง และมะม่วงน้ำดอกไม้มัน เป็นต้น

#### ตารางที่ 2.1 คุณค่าทางโภชนาการของมะม่วงน้ำดอกไม้ (100 กรัม) [5]

คุณค่าทางโภชนาการของมะม่วงน้ำดอกไม้	ปริมาณ
พลังงาน	60.0 กิโลแคลอรี
คาร์โบไฮเดรต	15.9 กรัม
ฟอสฟอรัส	15.0 กรัม
โปรตีน	0.6 กรัม
ไขมัน	0.3 กรัม
วิตามินซี	36.0 มิลลิกรัม
ใยอาหาร	0.5 กรัม
วิตามินเอ	133 IU
ธาตุเหล็ก	0.6 มิลลิกรัม
แคลเซียม	10 มิลลิกรัม

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

### 2.1.2 โรคแอนแทรกโนสในมะม่วง [6]

แอนแทรกโนสเป็นชื่อโรคพืช ซึ่งมีรากคำศัพท์มาจากภาษากรีก 2 คำ คือ anthrax อ่านว่า แอนแทรก แปลว่า ถ่านหิน nosos อ่านว่า โนโซส แปลว่า โรค มาผสมรวมกัน เป็นคำเรียกชื่อโรคที่เกิดกับต้นพืชว่า โรคแอนแทรกโนส ซึ่งนักวิชาการจัดว่าเป็นโรคที่ทำให้ความเสียหายต่อพืชผลทางการเกษตรมากที่สุดทั่วโลก โดยเฉพาะในเขตร้อนและเขตกึ่งร้อนของโลกเพราะปัจจัยที่เชื้อโรคชอบคืออุณหภูมิค่อนข้างร้อนและความชื้นสูง เรียกว่า สภาพร้อน-ชื้น โรคแอนแทรกโนสเกิดได้ทั้งก่อนและหลังการเก็บเกี่ยวของมะม่วง สาเหตุเกิดจากเชื้อราที่เรียกชื่อทางวิชาการว่า Colletotrichum spp. เชื้อรานิดนี้ สามารถเข้าทำลายมะม่วงได้ทุกส่วน ลักษณะอาการของโรค เริ่มจากจุดแผลแห้งเล็กๆสีน้ำตาลแล้วค่อยๆเข้มขึ้นขยายออกเป็นวงกลมหรือวงรีซ้อนกันเป็นชั้นๆ อาการของโรคจะเห็นชัดเจนในระยะที่ผลเริ่มสุกเมื่อมีความชื้นสูง



รูปที่ 2.1 ลักษณะผิวมะม่วงที่เป็นโรคแอนแทรกโนส

## 2.2 ปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ หรือค่าความหวาน

ของแข็งทั้งหมดที่ละลายได้ (total soluble solids, TSS) หมายถึง ปริมาณของแข็งที่ละลายได้ในน้ำทั้งหมดใช้บ่งชี้ความเข้มข้นของอาหารเหลว เช่น น้ำเชื่อม น้ำผลไม้เข้มข้น ของแข็งที่ละลายได้ในน้ำคั้นจากผักและผลไม้ เป็นผลรวมของของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมด ได้แก่ น้ำตาลชนิดต่างๆ เช่น น้ำตาลซูโครส กรดอินทรีย์ เช่น กรดซิตริก และแร่ธาตุต่างๆ [7]

น้ำตาล (sugar) เป็นชื่อเรียกทั่วไปของคาร์โบไฮเดรตชนิดละลายน้ำ และมีรสหวาน ส่วนใหญ่ใช้ประกอบอาหาร น้ำตาลเป็นคาร์โบไฮเดรตที่ประกอบด้วยธาตุคาร์บอน ไฮโดรเจน และออกซิเจน

[8] น้ำตาลมีหลายชนิด เช่น ซูโครส กลูโคส และฟรุกโตส เป็นต้น น้ำตาลที่พบในมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองมากที่สุด คือ น้ำตาลซูโครส มีสูตรโมเลกุล  $C_{12}H_{22}O_{11}$  (ประมาณ 21.0 กรัมต่อมะม่วง 100 กรัม)  
 [9] เนื่องจากน้ำตาลเป็นของแข็งที่สามารถละลายน้ำได้ ดังนั้น การวัดค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้จากปริมาณน้ำตาลในมะม่วงจึงมีความสัมพันธ์กับค่าความหวานของมะม่วง

กรดซิตริก (citric acid) เป็นกรดอินทรีย์ (organic acid) ซึ่งเป็นกรดอ่อน (weak acid) มีสูตรโมเลกุล  $C_6H_{10}O_8$  พบตามธรรมชาติในอาหารหลายชนิดได้แก่ พืชตระกูลส้ม (citrus) เช่น ส้ม มะนาว และผลไม้หลายชนิด เช่น มะม่วง ฝรั่ง เป็นต้น ใช้ในการปรับสมดุลของค่า pH ในอาหาร

### 2.2.1 การวัดค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ด้วยเครื่อง Refractometer [10]

Refractometer เป็นเครื่องมือวัดที่ใช้กันอย่างกว้างขวางในอุตสาหกรรมอาหาร มีประโยชน์ในการใช้วัดค่าความเข้มข้นของสารละลาย เช่น ปริมาณน้ำตาลในน้ำคั้นจากผลไม้สด น้ำเชื่อม เครื่องดื่ม เช่น ค่าที่ได้มีหน่วยเป็น องศาบริกซ์ (เปอร์เซ็นต์น้ำตาลโดยน้ำหนักต่อน้ำหนัก)

การใช้ refractometer วัดน้ำคั้นจากผัก ผลไม้ หรือน้ำผลไม้ เป็นการวัดค่า total soluble solids หรือปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมด มีหน่วยเป็นเปอร์เซ็นต์ เพราะในน้ำผลไม้ประกอบด้วยน้ำตาลชนิดต่างๆ ซึ่งละลายได้ในน้ำ เช่น กลูโคส (glucose) และซูโครส (sucrose) นอกจากน้ำตาลแล้ว ในน้ำผลไม้ยังมีกรดอินทรีย์ ที่ละลายในน้ำได้ดี เช่น กรดซิตริก และวิตามินซี ซึ่งค่าที่วัดได้ เป็นค่ารวมของความเข้มข้นน้ำตาลทุกชนิด และกรดอินทรีย์ที่ละลายได้ในน้ำผลไม้

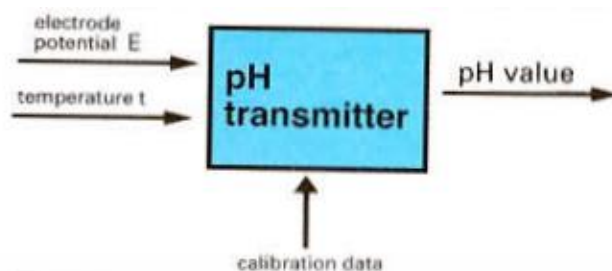
## 2.3 ค่า pH [11]

ค่าความเป็นกรด-ด่าง หรือค่า pH เป็นสัญลักษณ์ที่ใช้เพื่อบอกระดับความมากน้อยของความเป็นกรด หรือด่างของสารละลาย ในทางวิทยาศาสตร์ pH มีค่า  $pH = -\log [H^+]$  โดยที่  $[H^+]$  คือความเข้มข้นของไฮโดรเจนไอออน ซึ่งค่า pH สัมพันธ์โดยตรงกับอัตราส่วนของไฮโดรเจนไอออนและไฮดรอกซิลไอออน ถ้าสารละลายมีไฮโดรเจนไอออนมากจะยิ่งเป็นกรดมาก แต่ถ้าปริมาณไฮดรอกซิลไอออน มีมากกว่าไฮโดรเจนไอออนสารละลายนั้นจะเป็นด่าง และถ้าไอออนทั้งสองมีปริมาณเท่ากัน สารละลายนั้นก็จะเป็กลาง ซึ่งค่า pH สามารถวัดได้จากกรดซิตริกของเนื้อมะม่วง และค่า pH ที่พบในมะม่วงน้ำดอกไม้สีทอง อยู่ในช่วง 3-6

### 2.3.1 การวัดค่าความเป็นกรด-ด่าง หรือค่า pH ด้วยเครื่อง pH Meter [12]

pH Meter เป็นเครื่องมือวัดค่า pH ของสารละลาย โดยใช้หลักการวัดค่าความต่างศักย์ไฟฟ้าของไอออนระหว่างอิเล็กโทรดอ้างอิง (reference electrode) กับอิเล็กโทรดสำหรับวัด (indicator electrode) ซึ่งค่าความต่างศักย์ที่ได้ เกิดจากการวัดความเข้มข้นของไฮโดรเจนไอออน ( $H^+$ ) หรือ

ไฮโดรเนียมไอออน ( $H_3O^+$ ) ซึ่งจะถูกเปลี่ยนให้เป็นความต่างศักย์ไฟฟ้า และแสดงค่าออกมาเป็น pH ดังแสดงในภาพที่ 2.2



รูปที่ 2.2 แสดงการส่งสัญญาณในการวัดค่า pH [12]

## 2.4 เทคนิคเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี (NIR Spectroscopy) [13]

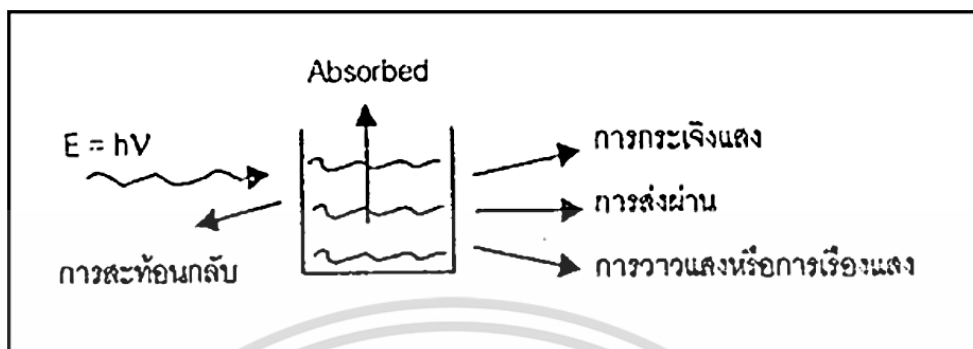
เทคนิคเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี (near infrared spectroscopy) เป็นเทคนิคที่ใช้หลักการอันตรกิริยา (interaction) เมื่อคลื่นเนียร์อินฟราเรด (ความยาวคลื่นระหว่าง 700-2500 nm) ที่ส่องไปยังวัสดุ เช่น ผลผลิตทางเกษตรและอาหาร ทำให้พันธะทางเคมีภายในวัสดุ โดยเฉพาะอย่างยิ่งพันธะ O-H, C-H และ N-H ของวัสดุ ดูดซับคลื่นและทำให้เกิดการสั่นสะเทือนของพันธะ โดยการเปลี่ยนระดับพลังงานข้ามชั้นมากกว่า 1 ชั้น (overtone) หรือเกิดจากการสั่นสะเทือนข้าม 1 ชั้น (fundamental vibration) พร้อมกันของพันธะตั้งแต่ 2 พันธะขึ้นไป ทำให้ได้ผลรวมของการสั่น (combination vibration) เครื่องมือที่ใช้เรียกว่าสเปกโตรมิเตอร์ (spectrometer) ซึ่งมีแหล่งแสงที่ให้ช่วงคลื่นเนียร์อินฟราเรด ปกติเป็นหลอดทังสเตนฮาโลเจน (tungsten halogen) ตัวตรวจวัด (detector) ในเครื่องสเปกโตรมิเตอร์ทำจากสารต่างๆ ไม่เหมือนกันขึ้นกับช่วงคลื่นที่ต้องการตรวจวัด วิธีการจัดวางตัวอย่างเพื่อการสแกนด้วยสเปกโตรมิเตอร์ สามารถทำได้หลายวิธี เช่น วิธีสะท้อน (reflectance) เป็นต้น

## 2.5 หลักการพื้นฐานของเครื่อง Near Infrared Spectroscopy [13]

หลักการของสเปกโทรสโกปี คือ เมื่อลำแสงของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าผ่านเข้าไปยังสารละลายหรือวัตถุ จะมีแสงบางส่วนถูกดูดกลืน (absorbed) บางส่วนผ่านทะลุออกไป (transmitted) บางส่วนเกิดการสะท้อน (reflected) บางส่วนเกิดการวาวแสงหรือการเรืองแสง (fluorescence or phosphorescence) และบางส่วนอาจเกิดการกระเจิงแสง (scattered) ดังแสดงในภาพที่ 2.3 สเปกโทรสโกปีมีกฎของการดูดกลืนแสงที่สำคัญที่เกี่ยวข้องอยู่ 2 กฎ คือ

1. กฎของแลมเบิร์ต (Lambert's law) กล่าวว่า "แสงสีเดียว" (monochromatic light) หมายถึง แสงที่มีความยาวคลื่นเดียวผ่านตัวกลางเนื้อเดียว (homogeneous) เป็นสัดส่วนของความ

เข้มแสงที่ถูกตัวกลางดูดกลืนไว้ โดยไม่ขึ้นอยู่กับความเข้มแสงเริ่มต้น และความเข้มของแสงจะถูกแต่ระดับของตัวกลางดูดกลืนไว้ในสัดส่วนที่เท่ากัน



รูปที่ 2.3 การกระทำของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้ากับสารต่างๆ [13]

2. กฎของเบียร์ (Beer's law) กล่าวว่า “เมื่อแสงที่มีความยาวคลื่นเดียวผ่านตัวกลางเนื้อเดียวสัดส่วนของความเข้มของแสงที่ถูกตัวกลางดูดกลืนไว้จะแปรโดยตรงกับปริมาณของตัวกลางที่ดูดกลืนแสงนั้น” ในทางปฏิบัติปริมาณความเข้มของแสงที่ถูกดูดกลืนจะขึ้นอยู่กับทั้งความเข้มของสารละลาย และความหนาของสารละลายที่ลำแสงส่องผ่าน จึงต้องรวมกฎทั้งสองเข้าด้วยกัน เรียกว่า กฎของเบียร์-แลมเบิร์ต เขียนในรูปสมการได้ดังนี้

$$A = \frac{I_0}{I} = \epsilon bc \quad (2.1)$$

เนื่องจาก T (Transmittance)

$$T = \frac{I}{I_0} \quad (2.2)$$

เพราะฉะนั้น

$$A = \log \frac{I_0}{I} = \epsilon bc = \log \frac{1}{T} \quad (2.3)$$

เมื่อ  $I$  = ความเข้มของแสงความยาวคลื่นเดียวที่ส่งผ่านออกมา

$\epsilon$  = สัมประสิทธิ์ของการดูดกลืนแสง ปกติเปลี่ยนแปลงตามความยาวคลื่น และอุณหภูมิ

$I_0$  = ความเข้มของแสงก่อนผ่านตัวกลางเมื่อ  $b = 0$

$b$  = ความหนาของตัวกลางในหน่วยเซนติเมตร

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

$c$  = ความเข้มข้นของสารในหน่วย โมล/ลิตร

$A$  = ค่าการดูดกลืนแสง (absorbance)

โมเลกุลของสารแต่ละชนิดมีความสัมพันธ์กับช่วงความยาวคลื่นที่แตกต่างกันเนื่องจากการจัดเรียงโครงสร้างของโมเลกุลต่างกัน นอกจากนี้ในแต่ละโมเลกุลจะสัมพันธ์กับความยาวคลื่นมากกว่า 1 ช่วง เช่น โมเลกุลของน้ำ ( $H_2O$ ) มีความสัมพันธ์กับความยาวคลื่น 4 ช่วง คือ 760 970 1450 และ 1940 nm ดังนั้นถ้าทำการทดสอบที่ช่วงความยาวคลื่นดังกล่าวจะสามารถหาปริมาณน้ำภายในตัวอย่างได้

## 2.6 การสร้างแบบจำลอง Calibration และ การพิสูจน์แบบจำลอง Validation [14]

2.6.1 การสร้างแบบจำลอง Calibration ต้องมีการกำหนดตัวแปรอิสระ (independent variables) และตัวแปรตาม (dependent variables) ตัวแปรอิสระที่ใช้สร้างแบบจำลอง คือค่าที่อ่านได้จากสเปกตรัม NIR เช่น ค่า  $\log(1/R)$  เป็นต้น และตัวแปรตาม คือค่าอ้างอิงที่ได้จากการวิเคราะห์ในห้องปฏิบัติการ เช่น ความชื้นในแป้ง ที่หาด้วยวิธีการ oven drying method สิ่งที่สำคัญที่สุดคือการหาตัวแปรอิสระที่มีความสัมพันธ์กับค่าตัวแปรตามที่จะทำการวิเคราะห์คุณภาพการคัดเลือกหา ซึ่งตัวแปรอิสระสามารถแบ่งได้เป็น 2 วิธีหลักๆ คือ

2.7.1.1 Wavelength selection เป็นการคัดเลือกตัวแปรอิสระที่น่าจะมีความสัมพันธ์กับตัวแปรตามที่จะทำการวิเคราะห์ เทคนิคในการเลือกมีหลายเทคนิค เช่น เลือกจากความรู้อาณา หรือเอกสารอ้างอิงที่บ่งบอกถึงช่วงความยาวคลื่นที่คาดว่าจะมีความสัมพันธ์กับค่าที่จะทำการวิเคราะห์ หรืออาจจะใช้เทคนิคทางสถิติในการคัดเลือกความยาวคลื่นที่คาดว่าจะมีความสัมพันธ์ เช่น multiple regression หรือการสร้าง correlogram เป็นการสร้างกราฟความสัมพันธ์ระหว่างแกน X และแกน Y เมื่อแกน X คือความยาวคลื่น และแกน Y คือค่าความสัมพันธ์อย่างง่ายของความสัมพันธ์ระหว่าง optical data ที่ความยาวคลื่นนั้นกับค่าที่วิเคราะห์ที่หาได้ด้วยวิธีการวัดค่าอ้างอิง ซึ่งช่วยให้นักวิจัยสามารถคัดเลือกความยาวคลื่นที่มีความเป็นไปได้ที่จะสัมพันธ์กับค่าที่วิเคราะห์ ซึ่งการสร้างแบบจำลอง calibration แบบอาศัยหลักวิธีการคัดเลือกตัวแปรอิสระและวิธีการทางสถิติมาช่วยในการสร้างแบบจำลอง ได้แก่ simple linear regression และ multiple linear regression

2.7.1.2 Full spectrum analysis เป็นวิธีการคัดเลือกความยาวคลื่นที่เหมาะสม (selective wavelength) จากความยาวคลื่นทั้งหมดที่มีในสเปกตรัม หรือความยาวคลื่นตลอดช่วงทั้งหมด มาใช้ในการสร้างแบบจำลอง calibration ดังวิธีที่ได้กล่าวมาแล้วบางครั้งอาจเกิดข้อผิดพลาดได้ถ้ามีการสร้างแบบจำลองที่ไม่ถูกต้องอาจเกิดปัญหาทำให้ค่าทำนายต่ำกว่าหรือสูงกว่าที่แท้จริง

(over estimation) อันเนื่องมาจากการเกิดความคลาดเคลื่อนจากการสร้างแบบจำลอง (interference) หรือเกิดปัญหาเมื่อมีจำนวนตัวอย่างที่ใช้ในการสร้างแบบจำลองเพื่อทำนายมีน้อยทำให้ได้สมการที่มีตัวแปรอิสระมากเกินไปในแบบจำลอง ทำให้ข้อมูลไม่น่าเชื่อถือ (over fitting) การใช้ข้อมูลทั้งหมดในทุกความยาวคลื่นของสเปกตรัมเป็นอีกหนทางหนึ่งในการแก้ไขปัญหาดังกล่าว อย่างไรก็ตามปัญหาที่มีอยู่ คือการที่มีตัวแปรอิสระมากเกินไปและการใช้วิธีทางสถิติในการจัดกลุ่มแยกประเภทตัวแปรที่มีความเกี่ยวข้องกัน และทำการสร้างตัวแปรใหม่ที่เกิดมาจากตัวแปรเดิมจะช่วยให้แก้ปัญหาดังกล่าวได้ วิธีทางสถิติที่นิยมใช้ ได้แก่ principal components regression (PCR), principal components analysis (PCA) และ partial least squares (PLS) regression

**2.7.2 การพิสูจน์แบบจำลอง Validation** หลังจากที่ได้สร้างแบบจำลองแล้ว ต้องมีการทดสอบประสิทธิภาพของแบบจำลองนั้นก่อนนำไปใช้งานจริง ซึ่งการทดสอบแบบจำลองที่นิยมมี 2 วิธีคือ

2.7.2.1 Full cross validation เป็นการทดสอบแบบจำลองภายในคือ ตัวอย่างที่นำมาทดสอบแบบจำลองเป็นตัวอย่างชุด validation ทั้งหมด ที่ใช้สร้างแบบจำลองประเมินค่าทางเคมีนั่นเอง มีขั้นตอนดังนี้

1. ตัดตัวอย่างชุด validation ตัวที่ 1 ออกจากชุดตัวอย่าง
2. ใช้ตัวอย่างชุด validation ที่เหลือทำการสร้างแบบจำลอง
3. นำแบบจำลองที่ได้ไปประเมินค่าทางเคมีของตัวอย่างชุด validation ตัวที่ 1 ที่ตัดออก
4. ใส่ตัวอย่าง ตัวที่ 1 กลับคืนเข้าไปยังชุด validation
5. ตัดตัวอย่างตัวที่ 2 ออกจากชุดตัวอย่างชุด validation แทน
6. ทำขั้นตอนข้างต้นจนครบทุกตัวอย่างจากนั้นทำการหาค่า root mean square error of cross validation (RMSECV)

2.7.2.2 Test set validation วิธีนี้จะทดสอบแบบจำลองแบบภายนอกโดยการเตรียมตัวอย่างชุดใหม่มาทำการวิเคราะห์ในสภาวะการทดลองเช่นเดียวกับชุดตัวอย่างชุด validation เรียกชุดตัวอย่างที่นำมาทดลองแบบจำลองนี้ว่า ชุดทดสอบ (test set) ตัวแปรอิสระ (X) มากกว่าหนึ่งตัวในการประมาณค่าตัวแปรตาม (Y) สิ่งที่ต้องระวังคือปริมาณค่าทางเคมีที่ใช้ทดสอบต้องอยู่ในช่วงมาตรฐานหลังจากได้สเปกตรัมจากชุดทดสอบก็นำค่าที่ได้ไปคำนวณหาปริมาณค่าทางเคมีจากแบบจำลองจากนั้นดูผลการคำนวณที่ได้จากค่าทางสถิติ

## 2.8 การสร้างสมการโดยวิธี partial least square regression (PLS-Regression)

[14]

เป็นเทคนิคที่ใช้ในการวิเคราะห์ข้อมูลแบบตัวแปรหลายตัวแปร โดยการสร้างปัจจัยแบบสมการเชิงเส้นตรงจากข้อมูลของสเปกตรัมเริ่มต้น และนำปัจจัยที่ได้ไปใช้ในการสร้างสมการถดถอย โดยปัจจัยที่ได้จากการสร้างแบบจำลองด้วยวิธีสถิติ PLS ต้องสามารถอธิบายความแปรปรวนของข้อมูล และเกี่ยวข้องกับการประเมินค่าทางเคมีในเวลาเดียวกัน

วัตถุประสงค์นี้จำเป็นต้องวัดตัวอย่างจำนวนมาก สำหรับการแสดงผลทางคณิตศาสตร์ของการเปลี่ยนแปลงในชุดข้อมูลทั้งสอง เมทริกซ์ของข้อมูลและไอเกนเวกเตอร์ของข้อมูลเหล่านั้นจะถูกสร้างขึ้น ไอเกนเวกเตอร์เหล่านี้เรียกว่าแฟคเตอร์หรือองค์ประกอบเบื้องต้น ซึ่งสามารถใช้สำหรับการทำนายความเข้มข้นแทนสเปกตรัมดั้งเดิมเนื่องจากมีข้อมูลที่เกี่ยวข้องทั้งหมดของระบบที่ศึกษา

การลดตัวแปรนี้มีประโยชน์อย่างชัดเจน ข้อมูลที่เกี่ยวข้องเชิงการวิเคราะห์จากชุดข้อมูลขนาดใหญ่ได้ ถูกบีบอัดเป็นแฟคเตอร์ซึ่งจะถูกใช้สำหรับการคาลิเบรชัน

ในกรณีของคาลิเบรชัน PLS ไอเกนเวกเตอร์จะถูกเก็บโดยเรียงลำดับจากมากไปหาน้อย แฟคเตอร์แรกบ่งบอกถึงการเปลี่ยนแปลงหลักของสเปกตรัม มีความสำคัญที่มากที่สุดสำหรับแบบจำลองคาลิเบรชัน และเมื่อจำนวนแฟคเตอร์เพิ่มขึ้นแม้แต่การเปลี่ยนแปลงเล็กน้อยในโครงสร้างข้อมูลก็จะถูกบ่งชี้ ซึ่งมีผลสำคัญที่ตามมาของการประเมินสเปกตรัม นั่นคือจำนวนแฟคเตอร์ที่น้อยลงส่วนใหญ่จะบ่งชี้การเปลี่ยนแปลงที่สำคัญของโครงสร้างของสเปกตรัม ขณะที่จำนวนแฟคเตอร์สูงขึ้น ส่วนใหญ่จะแสดงถึงส่วนที่เป็นสัญญาณรบกวนของสเปกตรัม

ในตัวอย่างนี้มีตัวอย่างคาลิเบรชัน  $M$  ตัวอย่างและ มี  $N$  ความยาวคลื่น ผลสเปกตรัมจะถูกเขียนเป็น  $(M,N)$  เมทริกซ์นี้จะเทียบเท่ากับข้อมูลสเปกตรัม เมทริกซ์  $X$  ในทางเดียวกันค่าองค์ประกอบทั้งหมดชนิด  $L$  จะเขียนลงไปเป็น  $(M,L)$  เมทริกซ์ของข้อมูลความเข้มข้นการเลือกจำนวนแฟคเตอร์ที่เหมาะสมมีความสำคัญมาก สำหรับคุณภาพของแบบจำลอง PLS

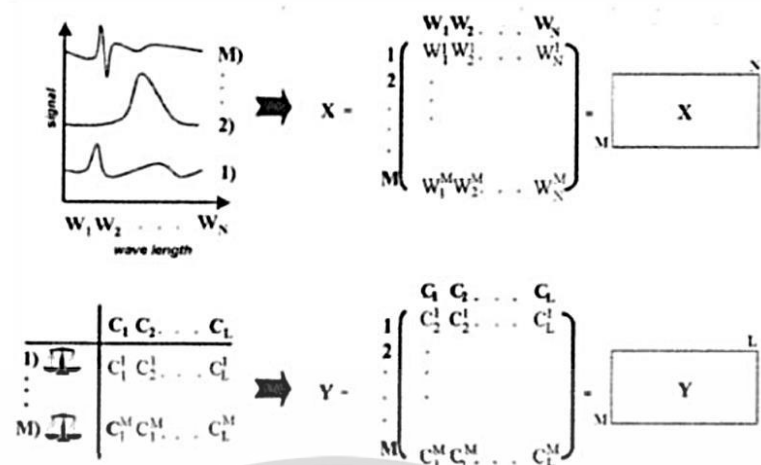
ใน PLS regression ข้อมูลสเปกตรัมเมทริกซ์  $X$  และข้อมูลความเข้มข้นเมทริกซ์  $Y$  ถูกลดเหลือเพียง 2-3 แฟคเตอร์ เมทริกซ์ดั้งเดิมจึงแสดงเป็นผลรวมของ  $A$  ผลคูณของสิ่งที่เรียกว่า scores vector  $t_i$  กับ loading vector  $p_i$  หรือ  $q_i$  ตามลำดับ

$$\text{ข้อมูลสเปกตรัม } X = t_1 p_1 T + t_2 p_2 T + t_3 p_3 T + \dots + t_R p_R T + F$$

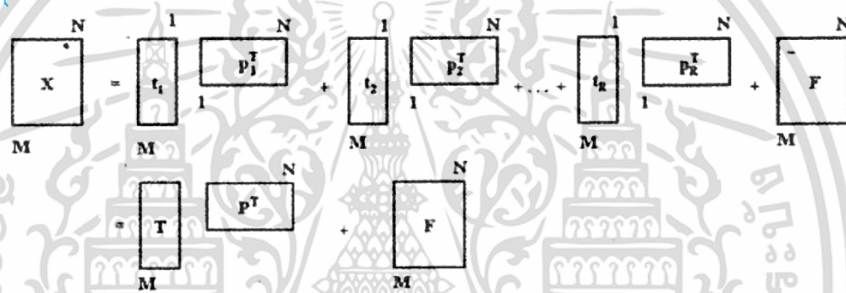
$$\text{ข้อมูลความเข้มข้น } Y = t_1 q_1 T + t_2 q_2 T + t_3 q_3 T + \dots + t_R q_R T + G$$

ในทุกกรณี score และ loading จะแสดงเป็น vector

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ 2.4 ข้อมูลสเปกตรัมและความเข้มข้นในรูปแบบเมทริกซ์



รูปที่ 2.5 Schematic diagram for the factorization of the spectral data matrix X

ค่า R แสดงถึง จำนวน factor และ T หมายถึง Transpose ของแต่ละ loading vector F และ G คือ เมทริกซ์ของ error (residual metrices) ของข้อมูลสเปกตรัมและข้อมูลความเข้มข้นตามลำดับ ค่าเหล่านี้สอดคล้องกับการเปลี่ยนแปลงโครงสร้างของข้อมูล ซึ่งไม่ได้คำนึงถึงในการสร้างแฟคเตอร์ (factorization)

โดยทั่วไปจำนวนของค่าการดูดซับที่ได้จากการวัดจะมากกว่าตัวเลขขององค์ประกอบที่แสดงให้เห็น ดังนั้นระบบนี้คือ “over-determined” จึงสามารถไม่เพียงแต่จะสร้างความสัมพันธ์กับจุดของข้อมูลสเปกตรัมจุดเดียว เช่น จุดสูงสุดของการคาลิเบรชันแบบตัวแปรเดียว แต่ยังมี ความสัมพันธ์กับโครงสร้างข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมด ข้อมูลชุดคาลิเบรชันด้วยวิธีนี้จะมีค่าข้อมูลที่ได้มากกว่าการคาลิเบรชันด้วยวิธีตัวแปรเดียวมาก นอกจากนี้ยังมีความเป็นไปได้ที่จะหาตัวแปรที่ ผิดปกติในระหว่างการวิเคราะห์ และสามารถตัดสินใจได้ว่าองค์ประกอบของสิ่งรบกวนที่ไม่รู้ค่า ซึ่งไม่มีความสัมพันธ์กับชุดของข้อมูลทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงของสเปกตรัมตรงข้ามกับการคาลิเบรชันแบบตัวแปรเดียว ด้วยเหตุนี้แถบการดูดซับที่ซ้อนทับกัน (overlapping bands) สามารถที่จะแยก

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ออกจากกันได้ ในสเปกตรัม トラบิตที่มีความแปรปรวนในรูปร่างของสเปกตรัมน้อย ในทำนองเดียวกันสามารถรับรู้ถึงโครงสร้างของสเปกตรัมบริเวณที่มีสัญญาณรบกวนมากได้ ซึ่งนำไปสู่การปรับปรุงการทำนายความเข้มข้นสารให้แม่นยำ

ใน PLS regression เบื้องต้นข้อมูลจะถูกทำให้เป็นองค์ประกอบหลัก (principal components) แล้วจะคำนวณหา scores vectors จากข้อมูลสเปกตรัมและข้อมูลความเข้มข้น ซึ่งวิธีการจะครอบคลุม (robust) ต่อความไม่ถูกต้องของค่าการวัดค่าอ้างอิงและการวัดค่าตัวอย่าง

ความสำคัญพิเศษของ PLS regression สำหรับการวิเคราะห์สมบัติทางเคมีเกิดจากการสร้างแฟกเตอร์ (factorization) ของข้อมูล X และ Y โดยไม่เป็นอิสระต่อกันและเกิดขึ้นพร้อมกันเมื่อประเมินสเปกตรัมของการดูดซับที่สามารถที่จะประมาณว่าการเปลี่ยนแปลงของข้อมูลสเปกตรัมมีต้นกำเนิดจากความแปรปรวนของความเข้มข้นที่สอดคล้องกันนั้นหมายความว่า การเปลี่ยนแปลงของข้อมูลสเปกตรัมควรจะไปสู่การเปลี่ยนแปลงที่สอดคล้องกันของสเปกตรัม เพราะฉะนั้น scores vectors ของเมทริกซ์ของข้อมูลความเข้มข้นและข้อมูลสเปกตรัมควรจะเหมือนกัน อย่างไรก็ตามในกรณีของตัวอย่างจริง ถ้าเมทริกซ์นั้นถูกลดขนาดลงโดยวิธีการทางคณิตศาสตร์อย่างบริสุทธิ์ นั่นคือเป็นอิสระ ค่าคลาดเคลื่อนในการเตรียมตัวอย่างและในวิธีอ้างอิงที่ใช้ในการวัดค่าความเข้มข้นและการเกิดดริฟท์ (drift) ของเครื่องวัดและสัญญาณรบกวนในสเปกตรัมจะก่อให้เกิดความแตกต่างของ scores vectors ดังนั้นในวิธี PLS จะสมมติว่า scores vectors ที่เหมือนกัน (identical) สำหรับชุดข้อมูลทั้งสองที่จำนวนแฟกเตอร์ใดๆซึ่งจะถูกเลือกเมื่อค่าความคลาดเคลื่อนจากค่าเริ่มต้นมีค่าน้อยที่สุด เป็นการประนีประนอมระหว่างความเหมาะสมของแฟกเตอร์ที่ใช้ในการอธิบายตัวอย่างและความสัมพันธ์ที่เพิ่มขึ้นในระหว่างชุดข้อมูล

อัลกอริธึมที่มีชื่อว่า PLS1 เพียงแค่นำค่าความเข้มข้นของเพียงหนึ่งองค์ประกอบทางเคมีมาพิจารณาข้อมูลอื่นๆทั้งหมดจะถูกตีความว่าเป็นสิ่งรบกวน นั่นคือ Y-เมทริกซ์ของข้อมูลความเข้มข้นเป็นเวกเตอร์เดียว ส่วนในอัลกอริธึม PLS2 ความเข้มข้นขององค์ประกอบทุกอย่างในระบบจะถูกนำมาพิจารณาในการคาลิเบรชัน สำหรับการทำนายตัวอย่างใหม่แบบจำลองนี้ไปสู่การวิเคราะห์องค์ประกอบทุกอย่างในเวลาเดียวกัน ตรงกันข้ามการคาลิเบรชันแบบ PLS1 ข้อมูลทั้งหมดของเมทริกซ์ ความเข้มข้นจะถูกนำมาสัมพันธ์กันกับข้อมูลสเปกตรัม โดยทั่วไปแล้วการทำนายแบบ PLS2 จะให้ผลลัพธ์ที่ไม่ดีเท่ากับการทำนายแบบ PLS1 จากเหตุผลดังกล่าวโดยทั่วไปจึงแนะนำให้ใช้อัลกอริธึม PLS1 ในการวิเคราะห์ระบบที่มีหลายองค์ประกอบ อัลกอริธึมแบบนี้ก็สามารถถูกนำมาประยุกต์ใช้อย่างประสบความสำเร็จในทุกองค์ประกอบ ดังนั้นแบบจำลองนี้ใช้สำหรับทุกองค์ประกอบที่ถูกสร้างขึ้น เช่นเดียวกับแบบอัลกอริธึม PLS2

## 2.9 การปรับแต่งสเปกตรัมก่อนการวิเคราะห์โดยวิธีทางคณิตศาสตร์ [15]

การแปลงข้อมูลสเปกตรัมที่ได้จากเครื่อง NIR มีบางปัจจัยที่ทำให้สเปกตรัมมีความแตกต่างกัน ส่งผลต่อสมการที่สร้างขึ้นมีความแม่นยำในการทำนายลดลง ดังนั้นการแปลงข้อมูลสเปกตรัมโดยวิธีการทางคณิตศาสตร์ ถือเป็นวิธีหนึ่งที่จะช่วยให้ขั้นตอนการสร้างสมการการทำนายมีความแม่นยำขึ้น วิธีการทางคณิตศาสตร์ที่นิยมใช้ได้แก่

**2.9.1 Smoothing** เป็นวิธีการปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมเพื่อลดสัญญาณรบกวน จากภายนอก ทำให้เส้นสเปกตรัมราบเรียบต่อเนื่องขึ้น วิธีที่นิยมใช้คือ

**2.9.1.1 Savitzky-Golay smooth** เป็นอีกหนึ่งวิธีที่นิยมมาก ใช้ในกรณีที่ข้อมูลมีสัญญาณรบกวนมาก ต้องการให้สัญญาณเรียบและยังคงรูปร่างของสเปกตรัมเหมือนเดิม คำนวณโดยการปรับสเปกตรัมด้วยพหุนามโดยใช้การถดถอยกำลังสองน้อยที่สุด เพื่อให้ได้สมการที่ต่อเนื่องและเป็นตัวแทนของข้อมูลในช่วงดังกล่าว [16]

**2.9.3 Multiple scatter correction (MSC)** เป็นเทคนิคทางคณิตศาสตร์ที่สร้างขึ้นมาเพื่อลดผลที่เกิดจากการกระเจิงแสง (scattered light) ต่อสเปกตรัม NIR ที่ได้จากการวัดแบบการสะท้อนแพร่ และแบบส่องผ่าน โดยทั่วไปการกระเจิงแสงจะทำให้ความชันโดยรวมของสเปกตรัมเปลี่ยนไป วิธีการของ MSC ก็คือการหมุนสเปกตรัมของแต่ละตัวอย่างให้มาตรงกับสเปกตรัมเฉลี่ย ขั้นตอนการหมุน โดยการหาค่าคงที่ค่าหนึ่งมาลบออกจากสเปกตรัมเพื่อลดผลจากการเลื่อนตัวของสเปกตรัม และต้องหาค่าคงที่อีกค่าหนึ่งมาหารค่าการดูดกลืนแสงของทุกๆ จุด (ความยาวคลื่น) เพื่อปรับค่ามุมเอียงของพีคต่างๆของสเปกตรัมให้ตรงกับสเปกตรัมเฉลี่ย [17] ดังสมการ

$$X_{MSC} = U + V(X_i) \quad (2.4)$$

เมื่อ  $X_{MSC}$  คือ ค่า MSC ของการดูดกลืนแสงของแต่ละตัวแปร

$X_i$  คือ ค่าการดูดกลืนแสงของแต่ละตัวแปร

$U, V$  คือสัมประสิทธิ์จะถูกเลือก เพื่อปรับความแตกต่างระหว่างสเปกตรัมที่เปลี่ยนแปลงแล้ว กับสเปกตรัมเฉลี่ยน้อยที่สุด

**2.9.4 Standard Normal Variate (SNV)** เป็นวิธีการกำจัดอิทธิพลของการกระเจิงแสง อีกวิธีหนึ่ง สำหรับการวัดด้วยวิธีการสะท้อนแบบแพร่ (diffuse reflectance) ซึ่งโดยทั่วไปจะทำให้เกิดสเปกตรัมที่แตกต่างกันอันเนื่องมาจากการกระจายตัวที่ไม่สม่ำเสมอของอนุภาคในตัวอย่าง ซึ่งแสดงให้เห็นว่าเกิดการกระเจิงแสงที่สูงและเป็นสาเหตุให้เกิดความแปรปรวน ส่วนใหญ่ในข้อมูลที่วัดได้ การปรับความแปรปรวนให้เป็นมาตรฐาน โดยวิธีนี้มักจะใช้คู่กับการปรับแนวโน้มของเส้นสเปกตรัม (detrending) โดยการใช้การปรับแก้ด้วย SNV ก่อนแล้ว จึงตามด้วย detrending หรือการลดความโน้มเอียงเส้นสเปกตรัม โดยผลจากการปรับแก้ ด้วยวิธีนี้จะคล้ายคลึงกับการปรับแก้ด้วยวิธี MSC แต่จะ

แตกต่างกันตรงวิธี SNV ไม่จำเป็นต้องใช้สเปกตรัมอ้างอิงเหมือนวิธี MSC ที่ต้องใช้สเปกตรัมเฉลี่ยเป็นค่าอ้างอิง

**2.9.5 Derivative** เป็นการหาความชันของเส้นสเปกตรัม เพื่อแก้ปัญหาพีคที่มีฐานกว้าง (broad peak) เนื่องจากการซ้อนทับกันของพีค (overlapping) และอิทธิพลจากการยกตัวของเส้นสเปกตรัม (base line shift) ที่เกิดจากการกระเจิงแสง (scattering light) เมื่อแสงตกกระทบที่ตัวอย่างทำให้แสงเปลี่ยนทิศทาง ซึ่งมีผลต่อการดูคลื่นแสงที่ความยาวคลื่นต่างๆ [18] โดยการแปลงข้อมูลสเปกตรัมด้วยอนุพันธ์อันดับที่ 1 (first derivative) สามารถลดปัญหาการเพิ่มขึ้นอย่างคงที่ของค่าการดูคลื่นแสงของสเปกตรัมตลอดช่วงความยาวคลื่นตามแกน Y ทำให้เส้นสเปกตรัมเลื่อนมาชิดกันแต่พีคของสเปกตรัมยังมีฐานกว้าง จึงไม่สามารถแยกพีคออกจากกันอย่างชัดเจนได้ อีกทั้งวิธีอนุพันธ์อันดับที่ 1 ให้ความหมายเป็นค่าความชันของสเปกตรัมแต่ละความยาวคลื่นซึ่งทำให้แปลความหมายได้ยาก แต่การแปลงข้อมูลด้วยอนุพันธ์อันดับที่ 2 (second derivative) สามารถลดผลกระทบที่ทำให้สเปกตรัมมีขนาดเพิ่มขึ้นตลอดช่วงความยาวคลื่นตามแกน Y ที่ชัดเจนกว่าวิธีอนุพันธ์อันดับที่ 1 และแยกพีคสเปกตรัมที่มีการซ้อนทับกันออกจากกันอย่างชัดเจน ทำให้ทราบตำแหน่งความยาวคลื่น แต่สเปกตรัมมีลักษณะหัวกลับลงมาด้านล่าง ดังนั้นการคำนวณการแปลงข้อมูลสเปกตรัมด้วยอนุพันธ์อันดับที่ 2 จึงเป็นที่นิยมมากกว่าวิธีอนุพันธ์อันดับที่ 1 โดยการเพิ่มอันดับของอนุพันธ์สูงขึ้นก็จะได้สเปกตรัมที่มีความซับซ้อนมากขึ้น ซึ่งอาจเป็นข้อมูลที่ตีในการวิเคราะห์เชิงคุณภาพ แต่การทำอนุพันธ์ที่สูงเกินไปทำให้อัตราส่วนระหว่างสัญญาณวัดกับสัญญาณรบกวน (signal to noise ratio) ลดลงเนื่องจากแถบสัญญาณรบกวนมักมีรูปร่างแคบชัน ดังนั้นเมื่อแปลงข้อมูลสเปกตรัมด้วยอนุพันธ์สเปกตรัมที่ได้ของสัญญาณรบกวนจึงมี amplitude เด่นชัดมากยิ่งขึ้นจนสามารถรบกวนการวิเคราะห์ได้

**2.9.6 Normalization** เป็นวิธีการปรับแก้กลุ่มของสเปกตรัมเพื่อให้ได้ สเปกตรัมมีจุดสำคัญที่เด่นชัด และเป็นการกำจัดความแปรปรวนอันเนื่องมาจากปัจจัยต่างๆที่ไม่ต้องการออกไปซึ่งจะช่วยให้สามารถศึกษาทำความเข้าใจความสัมพันธ์ระหว่างสเปกตรัมกับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้ดีขึ้นหรือเป็นการลดความซับซ้อนของข้อมูล

วิธีการแปลงข้อมูลสเปกตรัมที่ดีที่สุดก็คือ วิธีที่ทำให้สามารถวิเคราะห์ได้ อย่างไรก็ตามไม่มีกฎตายตัวแน่นอนสำหรับการตัดสินใจเลือกวิธีที่จะใช้ ในการแปลงข้อมูล วิธีที่ดีที่สุดคือการลองผิดลองถูกในการทดลองใช้แต่ละวิธีจนกว่าจะได้ สมการทำนายที่แม่นยำที่สุด โดยต้องเข้าใจความหมายและคำนึงถึงข้อดีข้อเสียของแต่ละวิธี ให้ชัดเจน

## 2.10 การเลือกจำนวนแฟคเตอร์ที่เหมาะสม [19]

ในโปรแกรม PLS regression ข้อมูลสเปกตรัมและข้อมูลความเข้มข้นจะถูกเปลี่ยนแปลงในรูปแบบของเมทริกซ์และลดลงเป็นแฟคเตอร์จำนวนไม่มาก จำนวนแฟคเตอร์ ในแบบจำลองเคโมเมตริกจะถูกเรียกว่า “rank” การหาจำนวน rank มีความสำคัญกับคุณภาพในการวิเคราะห์ การเลือกจำนวนแฟคเตอร์ที่น้อยเกินไปจะนำไปสู่การอธิบายที่ไม่เพียงพอเกี่ยวกับการเปลี่ยนแปลงในข้อมูลสเปกตรัมและความเข้มข้น “under fitting” มีเพียงความสัมพันธ์เพียงเล็กน้อย ระหว่างสองชุดข้อมูล และผลจากการวิเคราะห์จากแบบจำลองนี้จะไม่เพียงพอ ถ้าเลือกแฟคเตอร์จำนวนมากเกินไป แบบจำลองจะพยายามที่จะคิดรวม แม้การเปลี่ยนแปลงน้อยที่สุดในชุดข้อมูล เช่น สัญญาณรบกวนในสเปกตรัม แบบจำลองจะเป็นแบบ “over fitting” วิธีนี้ข้อมูลสเปกตรัมที่ไม่เกี่ยวข้องกันตัวอย่างจะถูกรวมอยู่ในแบบจำลอง แบบจำลองเหล่านี้จะมีคลาดเคลื่อนของผลการวิเคราะห์ ดังนั้นทุกๆ แบบจำลอง PLS มีจำนวนแฟคเตอร์ที่เหมาะสมซึ่งรับประกันว่ามีคลาดเคลื่อนผิดพลาดน้อยที่สุดที่เป็นไปได้ในการวิเคราะห์ มีแนวทางหลายอย่างที่นำไปสู่การหาจำนวนแฟคเตอร์ที่เหมาะสมสำหรับแบบจำลองบางอย่าง เป็นค่าเฉลี่ยของคลาดเคลื่อนของการทำนาย RMSECV ของการพิสูจน์แบบไขว้ หรือ RMSEP ของการพิสูจน์แบบชุดทดสอบ ต้องมีค่าต่ำสุดจึงจะได้จำนวนแฟคเตอร์ที่เหมาะสม ในทางตรงข้ามค่าของ สัมประสิทธิ์ของการพิจารณา  $R^2$  มีค่าสูงสุด ดังนั้นจำนวนแฟคเตอร์ที่เหมาะสมสำหรับแบบจำลองสามารถหาได้อย่างง่ายดายคือค่า  $R^2$  และค่าคลาดเคลื่อนเฉลี่ยของการทำนาย จากนั้นพล็อตค่าเหล่านี้โดยให้แกนนอนเป็นจำนวนแฟคเตอร์ จำนวนแฟคเตอร์ที่เหมาะสมเมื่อมีค่าตามที่กล่าวมามีค่าที่เหมาะสม(น้อยสุด) หรือจะไม่เปลี่ยนแปลงอย่างมีนัยสำคัญเมื่อมีจำนวนแฟคเตอร์สูงขึ้น ถ้ามีจำนวนแฟคเตอร์ที่มากและได้ผลการทำนายที่ดีเหมือนกับที่มีจำนวนแฟคเตอร์น้อย จะแนะนำให้เลือกแบบจำลองที่มีจำนวนแฟคเตอร์น้อยสุด

ข้อควรระวังการพิสูจน์วิธีการเป็นไปได้เฉพาะการใช้สเปกตรัมของชุดตัวอย่างที่เป็นอิสระ นั่นคือ สเปกตรัมต้องไม่เป็นส่วนหนึ่งของชุดข้อมูลคาลิเบรชัน ซึ่งถ้าเป็นการพิสูจน์แบบไขว้ ตัวอย่างทั้งหมดที่ถูกวัดแต่ละตัวอย่างจะถูกดึงออกจากชุดคาลิเบรชัน “leave-out spectra” ในกรณีของการพิสูจน์แบบชุดทดสอบตัวอย่างใหม่จะถูกวัดเพื่อเป็นชุดทดสอบ

## 2.11 ค่าทางสถิติที่ใช้ในการพิจารณาการสร้างสมการ [19]

### 2.11.1 สัมประสิทธิ์การพิจารณา (Coefficient of determination, $R^2$ )

แสดงสัดส่วนของความแปรปรวนในข้อมูล X ที่สามารถอธิบายโดยความแปรปรวนในข้อมูล Y ค่าของ  $R^2$  จะเป็นบวกเสมอเช่น ถ้า  $R = 0.99$  แล้ว  $R^2 = 0.982$  หมายความว่า 98.2% ของความแปรปรวน ในข้อมูล Y และ 1.8% ของความแปรปรวนในข้อมูล X เกิดขึ้นจากตัวแปรอื่น เช่น การเตรียมตัวอย่าง วิธีการทดลองอ้างอิง และอื่นๆ ค่า  $R^2$  เป็นบวกเสมอโดยไม่คำนึงถึงเครื่องหมายของ R

ในทางปฏิบัติ  $R^2$  ให้ ข้อมูลมากกว่า R และใช้กันมากกว่า R การแปลความหมายของค่า R และ  $R^2$  แสดงดังตารางที่ 2.2

$R^2$  คำนวณ ได้จาก

$$R^2 = \left[ \frac{\sum_1^n (Y_i^{\text{meas}} - Y_i^{\text{pred}})^2}{\sum_1^n (Y_i^{\text{meas}} - \bar{Y})^2} \right] \times 100 \quad (2.5)$$

เมื่อ  $Y_i^{\text{meas}}$  คือ ค่าที่ได้จากการวิเคราะห์ทางเคมี

$Y_i^{\text{pred}}$  คือ ค่าที่ได้จากการทำนายด้วย NIRS

n คือ จำนวนตัวอย่าง

$\bar{Y}$  คือ ค่าเฉลี่ยที่ได้จากการวิเคราะห์ทางเคมี

ตารางที่ 2.2 การแปลความหมายของค่า R และ  $R^2$  [17]

R	$R^2$	ความหมาย
ถึง +/-0.5	ถึง 0.25	ไม่สามารถใช้ใน NIR calibration
+/-0.51-0.70	0.26-0.49	เป็นความสัมพันธ์ที่ไม่ดีควรรหาเหตุผล
+/-0.71-0.80	0.50-0.64	สามารถใช้ได้ สำหรับการคัดเลือกอย่างหยาบๆ
+/-0.81-0.90	0.66-0.81	สามารถใช้ได้ สำหรับการคัดเลือกและการประมาณค่าอย่างหยาบๆ
+/-0.91-0.95	0.83-0.90	ใช้ด้วยความระมัดระวังในการประยุกต์ใช้ส่วนใหญ่รวมถึงการวิจัย
+/-0.96-0.98	0.92-0.96	ใช้ในการประยุกต์ใช้ส่วนใหญ่รวมถึงการประกันคุณภาพ
+/-0.99+	0.98+	ดีเยี่ยมใช้ได้กับทุกการประยุกต์ใช้

### 2.11.2 ค่ารากที่สองของความคลาดเคลื่อนเฉลี่ยยกกำลังสองของการพิสูจน์แบบไขว้ (root mean squared error of cross validation, RMSECV)

Cross-validation สามารถใช้ตัวอย่างชุดเดียวกันกับที่ใช้ในการสร้างแบบจำลองเพื่อการทำการพิสูจน์แบบจำลอง (validation) สิ่งนี้ทำโดยชักตัวอย่างออกหนึ่งตัวอย่าง หรือกลุ่มของหลายตัวอย่างจากชุดสร้างแบบจำลองและสร้างแบบจำลองด้วย ตัวอย่างที่เหลืออยู่แล้วทำนายตัวอย่างที่ถูกกำจัดออกไป และบันทึกค่าคลาดเคลื่อนแล้วนำตัวอย่างที่ถูกกำจัดออกไปนั้นกลับมาแล้วชักตัวอย่างอื่นออกไป และทำซ้ำกระบวนการจนกระทั่งตัวอย่างทั้งหมดถูกใช้ในการพัฒนาแบบจำลอง และทำนายจะไม่มีตัวอย่างที่ถูกทำนายถูกใช้ในการพัฒนาแบบจำลองซึ่งได้ใช้ในการทำนาย ถ้าเอาออกเพียงทีละ 1 ตัวอย่างจะ เรียกว่า “full” หรือ “one-out” cross-validation ถ้านำชุดตัวอย่าง (จำนวนหลายตัวอย่าง) ออกจะ เรียกว่า “segmented” cross-validation ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน

ของความแตกต่างระหว่างค่าที่ถูกรายงานโดยเทคนิคเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีและค่าจากการวัดด้วยวิธีอ้างอิงของชุดสร้าง แบบจำลองคือ RMSECV วิธีพิสูจน์นี้เหมาะที่จะใช้กับข้อมูลที่มีจำนวนตัวอย่างน้อยๆ เช่น น้อยกว่า 100 ตัวอย่าง RMSECV คำนวณได้จากสมการ

$$\text{RMSECV} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Y_i^{\text{meas}} - Y_i^{\text{pred}})^2} \quad (2.6)$$

เมื่อ  $Y_i^{\text{meas}}$  คือ ค่าที่ได้จากการวิเคราะห์ทางเคมี

$Y_i^{\text{pred}}$  คือ ค่าที่ได้จากการทำนายด้วย NIRS

$n$  คือ จำนวนตัวอย่าง

### 2.11.3 อัตราส่วนระหว่าง SEP กับ SD (Ratio of SEP to the SD, RPD)

RPD ย่อมาจาก Ratio of (standard error of) prediction (validation) to (standard) deviation แต่เป็นส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน (SD) กับอัตราส่วนของค่าคลาดเคลื่อนมาตรฐานการทำนาย (SEP) ของข้อมูลของค่าอ้างอิงของชุดทำนาย ค่า SEP ควรต่ำกว่า SD มากๆซึ่งอัตราส่วนควรเท่ากับ 5 หรือมากกว่าบางกรณีตัวอย่างมีความสม่ำเสมอมากค่า SD จึงไม่สูงซึ่ง RPD อาจจะไม่สูง ดังนั้น RPD เท่ากับ 2.5-3.0 ก็อาจแสดงถึงการวิเคราะห์ที่แม่นยำ ถ้า SD มีค่าเพียง 0.4-0.5 ซึ่งสามารถดูได้จากตารางที่ 2.3

ตารางที่ 1.3 การอธิบายผลของค่า RPD [19]

RPD	ความหมาย	การประยุกต์ใช้
0.0-1.9	ไม่ดีเลย	ไม่แนะนำ
2.0-2.4	ไม่ดี	ใช้คัดเลือก (แบ่งกลุ่ม) แบบหยาบๆ
2.5-2.9	พอใช้	ใช้คัดเลือก (แบ่งกลุ่ม) ได้
3.0-3.4	ดี	ใช้ควบคุมคุณภาพได้
3.5-4.0	ดีมาก	ใช้ควบคุมกระบวนการได้
4.1+	ดีเยี่ยม	ได้ทุกการประยุกต์ใช้

อัตราส่วนของพิสัยควอร์ไทล์ต่อค่าความคลาดเคลื่อนกำลังสองเฉลี่ย (ratio of performance to inter-quartile range, RPIQ) ใช้ในกรณีที่ชุดตัวอย่างมีการกระจายตัวไม่สม่ำเสมอสามารถเปรียบเทียบกับค่า RPD ได้สำหรับแบบจำลองที่สร้างด้วยวิธี cross validation สามารถหาค่า RPIQ ได้จากสมการ

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

$$RPIQ = \frac{Q_3 - Q_1}{RMSECV} \quad (2.7)$$

เมื่อ RPIQ คือ อัตราส่วนของพิสัยควอร์ไทล์ต่อค่าความคลาดเคลื่อนกำลังสองเฉลี่ยของการพิสูจน์แบบไขว้

$Q_3$  คือ ค่าทำนายที่ควอร์ไทล์ที่ 3

$Q_1$  คือ ค่าทำนายที่ควอร์ไทล์ที่ 1

RMSECV คือ ค่าความคลาดเคลื่อนกำลังสองเฉลี่ยของการพิสูจน์แบบไขว้

#### 2.11.4 ความคลาดเคลื่อนเฉลี่ย (Bias) [19]

เมื่อทำนายค่าตัวแปรที่ต้องการของข้อมูลในชุดตัวอย่างทดสอบแบบจำลอง (validation set) ค่า Bias หมายถึงความแตกต่างระหว่างค่าจากการวัดด้วยวิธีอ้างอิงและค่าที่ทำนายโดยเทคนิคเนียร์ อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีและเป็นการวัดความแม่นยำโดยรวมของแบบจำลอง (calibration model) ในโลกความเป็นจริงของการค้าและอุตสาหกรรม Bias เป็นหนึ่งในสิ่งที่สำคัญมากในทางสถิติ Bias สามารถเกิดขึ้นได้แม้เมื่อค่าสถิติสัมประสิทธิ์ความสัมพันธ์และ SEP ที่แสดงว่าแบบจำลองนั้นดีเยี่ยม

#### 2.12 ประโยชน์ของเทคนิค NIR

Osborne, B.G. et al. [20] ได้กล่าวว่าเครื่องมือแต่ละประเภทต่างก็มีข้อจำกัดในการใช้งาน แต่เครื่อง NIR มีประโยชน์ และข้อดีมากกว่าเมื่อเปรียบเทียบกับการวิเคราะห์ทางเคมี หรือการวิเคราะห์ด้วยวิธีอื่น สำหรับการนำเครื่อง NIR ประยุกต์ใช้ในอุตสาหกรรมอาหารมีประโยชน์มากมาย เช่น

1. ใช้เวลารวดเร็วในการวัด สะดวกต่อการใช้งาน เนื่องจากในการปฏิบัติไม่จำเป็นต้องใช้ผู้ที่มีประสบการณ์ หรือต้องได้รับการฝึกฝนโดยเฉพาะ สามารถปฏิบัติตามคู่มือการใช้งานได้ทันที
2. ง่ายต่อการเตรียมตัวอย่าง ไม่จำเป็นต้องซึ่งตัวอย่างก่อนนำมาวัดค่า
3. การตรวจสอบเป็นแบบไม่ทำลาย ทำให้ตัวอย่างที่นำมาตรวจสอบสามารถจำหน่ายส่งออก หรือ บริโภคต่อได้ เป็นการประหยัดต้นทุนของผลิตภัณฑ์อีกทางหนึ่ง
4. ไม่ก่อให้เกิดมลภาวะเป็นพิษต่อสิ่งแวดล้อม ทำให้ลดต้นทุนในการดูแลรักษา สภาพแวดล้อม เมื่อเปรียบเทียบกับการวิเคราะห์ด้วยวิธีทางเคมี
5. ไม่จำเป็นต้องใช้สารเคมี และเครื่องแก้วทำให้สามารถลดต้นทุนในเรื่องสารเคมี และอุปกรณ์ เครื่องแก้ว

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

6. เป็นวิธีการที่เหมาะสมสำหรับนำไปควบคุมคุณภาพในกระบวนการผลิตซึ่งเป็นประโยชน์เช่นเดียวกัน กับอุตสาหกรรมอื่นที่สามารถประยุกต์ใช้เทคนิคนี้ได้

## 2.13 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

Cen and He [21] ศึกษาการใช้สเปกตรัมของแสงที่มองเห็นได้และเนียร์อินฟราเรด เทคนิคเนียร์อินฟราเรด สเปกโทรสโกปีชนิดแบบวัดการสะท้อนที่ความยาวช่วงคลื่นเนียร์อินฟราเรดระหว่าง 325 – 1075nm เพื่อใช้วิเคราะห์ปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้และค่า pH ของในน้ำส้ม โดยการสร้างสมการทำนายด้วยวิธี PLS ซึ่งมีการจัดการข้อมูลสเปกตรัมแบบ SNV พบว่าค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (R) เท่ากับ 0.98 โดยมีค่าความคลาดเคลื่อนมาตรฐานของการทำนาย (SEP) เท่ากับ 0.68 และค่ารากที่สองของความคลาดเคลื่อนเฉลี่ยยกกำลังสองของการทำนาย (RMSEP) เท่ากับ 0.73 สำหรับปริมาณของแข็งละลายน้ำได้ในส่วนของ pH มีค่า R เท่ากับ 0.96 โดยมีค่า SEP เท่ากับ 0.06 และ RMSEP เท่ากับ 0.08

Liu and He [22] วิจัยการสร้างสมการ calibration กับสมการทำนาย (prediction) ในการหาปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้และค่า pH ของน้ำส้มสายชู ที่มีการใช้หาค่าที่ถูกต้อง SW-NIR ในช่วงความยาวคลื่น 550 – 1100 nm ด้วยวิธี PLS ผลการวิเคราะห์พบว่า ปริมาณของแข็งละลายน้ำได้มีค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (R) เท่ากับ 0.999 โดยมีค่ารากที่สองของความคลาดเคลื่อนเฉลี่ยยกกำลังสองของการทำนาย (RMSEP) เท่ากับ 0.189 %Brix และค่าความคลาดเคลื่อน (Bias) เท่ากับ 0.051 %Brix ในส่วนของ pH มีค่า R เท่ากับ 0.999 โดยมีค่ารากที่สองของความคลาดเคลื่อนเฉลี่ยยกกำลังสองของการทำนาย เท่ากับ 0.008 และค่า Bias เท่ากับ  $-1.7 \times 10^{-3}$

Cao and Wu [23] ศึกษาการใช้สเปกตรัมของคลื่นที่มองเห็นได้และเทคนิคเนียร์อินฟราเรด สเปกโทรสโกปีชนิดแบบวัดการสะท้อนมาใช้วิเคราะห์ปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้และค่า pH ขององุ่นจำนวน 439 ตัวอย่างที่มาจาก 3 สายพันธุ์ โดยมีการแบ่งตัวอย่างเป็น calibration จำนวน 293 ตัวอย่าง และชุดทำนาย (prediction) จำนวน 146 ตัวอย่าง ผลจากการแบ่งตัวอย่างเป็น 2 ชุดปรากฏว่ามีความถูกต้องของข้อมูลอยู่ที่ 96.58% และมีค่า R คือ 0.978 ของค่า pH และ 0.906 ของปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ของชุดการทำนาย ซึ่งพบว่าการสร้างแบบจำลองขึ้นอยู่กับช่วงความยาวคลื่นที่มีประสิทธิภาพมากกว่า การใช้ข้อมูลสเปกตรัมช่วงความยาวคลื่นทั้งหมด

Liu and He [24] ศึกษาการใช้สเปกตรัมที่มองเห็นได้ และเทคนิคเคโมเมทริกซ์ถูกนำมาประยุกต์ใช้หาปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้และค่า pH ของไวน์ขาว ซึ่งตัวอย่างไวน์ขาวถูกสแกนด้วยเครื่องสเปกโตรมิเตอร์ ในช่วงความยาวคลื่น 325–1075 nm โดยแบ่งเป็น calibration จำนวน 240 ตัวอย่างและ 60 ตัวอย่าง ใช้เป็นชุดตรวจสอบความถูกต้อง (validation) โดยการสร้างสมการทำนายด้วยวิธี

PLS พบว่าของปริมาณของแข็งละลายน้ำได้มีค่า R เท่ากับ 0.95 ค่าSEP เท่ากับ 0.16 %Brix และค่า RMSEP เท่ากับ 0.17 %Brix ในขณะที่ค่าการทำนายของ pH มีค่า R เท่ากับ 0.94 ค่า SEP เท่ากับ 0.02 และค่า RMSEP เท่ากับ 0.02

Ali [25] ประยุกต์ใช้เนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี ในช่วงความยาวคลื่น 1,000 ถึง 2,500 nm ซึ่งเป็นการตรวจสอบแบบไม่ทำลายวัตถุด้วยการวัดค่า Brix และค่า pH ของผลกล้วย ตัวอย่างกล้วยทั้งหมด 30 ตัวอย่างถูกวัดที่ระยะสูงที่แตกต่างกัน แต่ละตัวอย่างถูกสแกนในตำแหน่งที่ต่างกันสามแห่ง (ด้านบน กลาง และล่าง) โดยแบ่งตัวอย่างออกเป็นชุดการทำนาย (prediction) และชุด calibration ซึ่งสร้างแบบจำลองด้วยวิธี PLS จากชุดข้อมูลตัวอย่างของกล้วย พบว่าแบบจำลองการทำนายค่า Brix มีค่า R คือ 0.81 และค่า RMSEP เท่ากับ 3.91 %Brix ส่วนแบบจำลองการทำนายค่า pH มีค่า R คือ 0.69 และค่า RMSEP เท่ากับ 0.36

Sharma, et al. [26] การวัดปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ของมะม่วงพันธุ์น้ำดอกไม้สีทองแบบออนไลน์และออฟไลน์ด้วยเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี ตัวอย่างมะม่วงทั้งหมด 182 ตัวอย่าง ช่วงของปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ของมะม่วงอยู่ระหว่าง 14-20 %Brix ซึ่งสร้างแบบจำลองด้วยวิธี PLS พบว่าโดยผลที่ได้จากแบบจำลองแบบออฟไลน์ซึ่งใช้ช่วงความยาวคลื่นระหว่าง 800–2500 nm เพื่อทำนายปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ ค่าสัมประสิทธิ์การพิจารณา ( $r^2$ ) ของการทำนาย เท่ากับ 0.70 และค่ารากที่สองของความคลาดเคลื่อนเฉลี่ยยกกำลังสองของการทำนาย (RMSEP) เท่ากับ 0.729 %Brix และค่าความคลาดเคลื่อนเฉลี่ย เท่ากับ 0.97 %Brix ด้วยจำนวน PLS factor เท่ากับ 8 ส่วนแบบจำลองออนไลน์ซึ่งใช้ช่วงความยาวคลื่นระหว่าง 200–1100 nm เพื่อทำนายปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ ค่าสัมประสิทธิ์การพิจารณา ( $r^2$ ) ของการทำนาย เท่ากับ 0.61 ค่า RMSEP เท่ากับ 0.726 %Brix และค่าความคลาดเคลื่อนเฉลี่ย เท่ากับ 1.24 %Brix ด้วยจำนวน PLS factor เท่ากับ 6

## บทที่ 3

### วิธีการทดลอง

#### 3.1 การเตรียมตัวอย่างสำหรับการทดลอง

นำมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองที่ผิวเปลือกมีจุดดำกระจายประปราย สีผิวไม่สม่ำเสมอ ในช่วงอายุการเก็บเกี่ยวใกล้เคียงกัน (100-110 วันนับจากดอกบาน) สำหรับการแปรรูป จาก บริษัทกลศศรีฟาร์ม จังหวัดเพชรบูรณ์ ครั้งละ 24 ผล แบ่งออกเป็น 3 ขนาด ได้แก่ เล็ก กลาง และใหญ่ จำนวน 11 ครั้ง โดยส่งมาทุกสัปดาห์ ตั้งแต่เดือนเมษายน จนถึงเดือน กรกฎาคม พ.ศ.2562 ได้ตัวอย่างมะม่วงน้ำดอกไม้สีทอง ทั้งหมด 252 ตัวอย่าง ซึ่งตัวอย่างที่ใช้ทำการสแกนแบบออฟไลน์ และแบบออนไลน์ ในการทดลอง มีขนาดเล็ก 79 ผล ขนาดกลาง 97 ผล และขนาดใหญ่ 75 ผล โดยห้องทดลองควบคุมอุณหภูมิที่  $25 \pm 2$  °C ดังรูปที่ 3.1



รูปที่ 3.1 มะม่วงน้ำดอกไม้สีทองเพื่อการแปรรูป

#### 3.2 การทดลองเบื้องต้น

3.2.1 การทำทวนซ้ำ (repeatability) และการทำซ้ำ (reproducibility) ของการสแกน และการทวนซ้ำของวิธีอ้างอิง (repeatability of reference test) และค่าสัมประสิทธิ์การพิจารณาสูงสุดของการสร้างสมการ (maximum coefficient of determination)

การทำทวนซ้ำ ของการสแกนด้วยคลื่นเนียร์อินฟราเรด คือการสแกนตัวอย่างในตำแหน่งเดิม 10 ครั้ง แล้วนำมาหาค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน (SD) ของการดูดซับคลื่นที่ 3 ความยาวคลื่น 970 เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

1440 และ 1900 นาโนเมตรของ 10 สเปกตรัมและหาค่าเฉลี่ยของ SD ของการดูดซับคลื่นของ 3 ความยาวคลื่น

การทำซ้ำ ของการสแกนด้วยเนียร์อินฟราเรด หากจากการสแกนตัวอย่างเดิม 9 ครั้ง แต่ทำการ reload ทุกครั้งแล้วนำมาหาค่า SD ของการดูดซับคลื่น ที่ความยาวคลื่น 3 ความยาวคลื่นที่เลือกไว้ 10 สเปกตรัม และหาค่าเฉลี่ยของ SD ของการดูดซับคลื่นของ 3 ความยาวคลื่น ทั้งนี้จำนวนตัวอย่างในการทำทวนซ้ำและการทำซ้ำการสแกนมีจำนวนเท่ากับ 3 ผล

การทำทวนซ้ำของวิธีอ้างอิง (Rep) เป็นตัวชี้วัดความสามารถในการทำซ้ำจากการวัดด้วยวิธีการอ้างอิง ค่านี้ถูกกำหนดโดยการคำนวณค่า SD ของความแตกต่างสูงสุดในการทำซ้ำของจำนวนตัวอย่างในขณะตรวจสอบวิธีอ้างอิง ทั้งนี้จำนวนตัวอย่างในการทำทวนซ้ำอ้างอิง เท่ากับ 3 ผล แต่ละผลทำ 3 ซ้ำ

ค่าสัมประสิทธิ์การพิจารณาสูงสุด ( $R^2_{max}$ ) จะมีค่าสูงสุดได้จะต้องไม่มีข้อผิดพลาดจากการสแกนเนียร์อินฟราเรดสเปกโตรมิเตอร์ และมีแต่ข้อผิดพลาดจากการทดลองในห้องปฏิบัติการเท่านั้น สำหรับความถูกต้องของการทดลองในห้องปฏิบัติการตามที่ Dardenne [19] ได้กล่าวไว้ว่า  $R^2_{max}$  สามารถคำนวณได้จากสูตรต่อไปนี้

$$R^2_{max} = \frac{SD_y^2 - Rep^2}{SD_y^2} \quad (3.1)$$

เมื่อ  $SD_y^2$  คือ ค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของข้อมูลชุดที่ทำการทดลองเบื้องต้น

### 3.3 การสแกนด้วยคลื่นเนียร์อินฟราเรด

#### อุปกรณ์

1. เครื่อง FT-NIR Spectrometer (MPA , Bruker Optics GmbH, Ettlingen, Germany)
2. เครื่อง UV-VIS-NIR Spectrometer (AvaSpec-ULS2048-USB2-VA-50, AVANTES, The Netherlands)
3. สายพานลำเลียง

#### 3.3.1 การวัดแบบอินไลน์

นำมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองที่ผิวเปลือกมีจุดดำกระจายประปราย สีผิวไม่สม่ำเสมอ ในช่วงอายุการเก็บเกี่ยวใกล้เคียงกัน วางบนสายพานลำเลียง ที่มีความเร็ว 0.1 m/s มาสแกนแบบอินไลน์ด้วยเครื่อง UV-VIS-NIR Spectrometer (AvaSpec-ULS2048-USB2-VA-50, AVANTES, The Netherlands) ที่ความยาวคลื่นระหว่าง 200-1100 นาโนเมตร โดยใช้การสแกนในโหมด diffuse

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

reflectance และใช้เทฟลอนเป็นวัสดุอ้างอิง ตั้งระยะหัววัดออฟติกไฟเบอร์ห่างจากตัวอย่างประมาณ 2 เซนติเมตร โคนปรับหัวตามขนาดของตัวอย่าง ให้ทุกขนาดมีระยะห่างประมาณ 2 เซนติเมตร โดยการสแกนจะทำในกล่องดำเพื่อป้องกันแสงรบกวนจากภายนอก ซึ่งการสแกนมะม่วงซีกด้านที่มาร์คอักษร A ใช้สำหรับ TSS ซีกด้านที่มาร์คอักษร B ใช้สำหรับ pH



รูปที่ 3.2 การวัดแบบออนไลน์

### 3.3.2 การวัดแบบออฟไลน์

นำตัวอย่างมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองที่ผิวเปลือกมีจุดดำกระจายประปราย สีผิวไม่สม่ำเสมอ ในช่วงอายุการเก็บเกี่ยวใกล้เคียงกัน สำหรับการแปรรูป ที่สแกนแบบออนไลน์เสร็จแล้วมาสแกนแบบออฟไลน์ด้วยเครื่อง FT-NIR Spectrometer (MPA , Bruker Optics GmbH, Ettlingen, Germany) ที่ความยาวคลื่น 12500-4000 เซนติเมตร<sup>-1</sup> (800-2500 นาโนเมตร) โดยใช้แผ่นทองเป็นวัสดุอ้างอิง และสแกน 32 ครั้งเฉลี่ยเป็น 1 สเปกตรัม สแกนในโหมดสะท้อนแบบแพร่ การสแกนจะสแกนกลางผลของมะม่วงทั้ง 2 ด้าน (A และ B) ซึ่งการสแกนมะม่วงด้าน A ใช้สำหรับวัด TSS ด้าน B ใช้สำหรับวัด pH



รูปที่ 3.3 การวัดแบบออฟไลน์

### 3.4 การวัดปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้

#### 3.4.1 การวัดด้วยเครื่อง Pocket Refractometer (PAL-1 S/No L218454, Atago, Japan)

##### อุปกรณ์

1. Pocket Refractometer (PAL-1 S/No L218454, Atago, Japan)
2. มีดปอกผลไม้
3. เขียง
4. น้ำกลั่น

##### วิธีการทดลอง

นำมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองที่ผิวเปลือกมีจุดดำกระจายประปราย สีผิวไม่สม่ำเสมอ ในช่วงอายุการเก็บเกี่ยวใกล้เคียงกัน สำหรับการแปรรูป ด้าน A ผ่าครึ่งลูกตามแนวขนานผลมะม่วง และหั่นให้ได้ 3 ส่วนโดยแบ่งเป็น หัว กลาง หาง จากนั้นนำมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองส่วนหัวมาวัดปริมาณของแข็งละลายน้ำได้ โดยการบีบที่เนื้อมะม่วงจนเกิดเป็นน้ำออกมา 2-3 หยด แล้วทำการกดวัดค่าที่เครื่อง Pocket Refractometer (PAL-1 S/No L218454, Atago, Japan) รวบรวม 2 วินาทีจะปรากฏค่าปริมาณของแข็งละลายน้ำได้ เมื่อได้ค่าทำการบันทึกผลส่วนละ 3 ครั้ง

### 3.5 การวัดค่าความเป็นกรด-ด่าง (pH)

#### 3.5.1 การวัดด้วยเครื่อง pH meter (HI8521, Hanna instruments, USA.)



ก



ข

รูปที่ 3.4 การวัดปริมาณของแข็งละลายน้ำได้ด้วยเครื่อง Pocket Refractometer (PAL-1 S/No L218454, Atago, Japan) (ก) โดยการแบ่งเป็น 3 ส่วน หัว กลาง หาง (ข)

#### อุปกรณ์

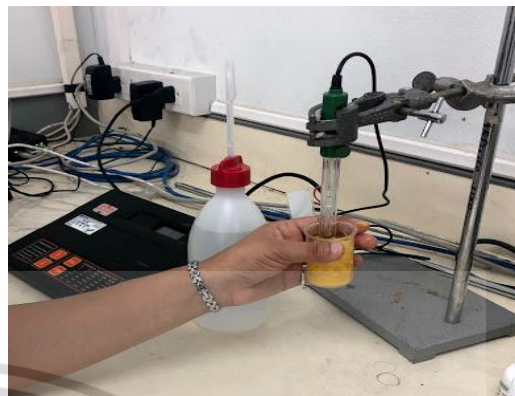
1. pH meter (HI8521, Hanna instruments, USA.)
2. มีดปอกผลไม้
3. เขียง
4. น้ำกลั่น
5. ปีกเกอร์ ขนาด 25 ml. และ 5 ml.
6. กระดาษทิชชู

#### วิธีการทดลอง

นำมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองที่ผิวเปลือกมีจุดดำกระจายประปราย สีผิวไม่สม่ำเสมอ ในช่วงอายุการเก็บเกี่ยวใกล้เคียงกัน สำหรับการแปรรูป ด้าน B ผ่าครึ่งลูกตามแนวขนานผลมะม่วง และขูดเอาเนื้อมะม่วงออกจากเปลือกมาบีบคั้นลงในปีกเกอร์ขนาด 25 ml จากนั้นนำเนื้อมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองที่อยู่ในปีกเกอร์มาแบ่งใส่ในปีกเกอร์ขนาด 5 ml ให้ได้ปริมาณเท่าๆกัน 3 ใบ แล้วทำการวัดค่า pH ที่เครื่อง pH meter (HI8521, Hanna instruments, USA.) รอประมาณ 5 วินาทีจะปรากฏค่า pH เมื่อได้ค่าทำการบันทึกผล ปีกเกอร์ละ 3 ครั้ง



ก



ข

รูปที่ 3.5 การแบ่งเป็น 3 ปีกเกอร์เท่าๆกันก่อนการวัดค่า pH (ก) และการวัดค่า pH ด้วยเครื่อง pH meter (HI8521, Hanna instruments, USA.) (ข)

การสร้างสมการทำนายมี 2 แบบ คือ แบบคละขนาดผล และแบบแยกขนาดผลของชุดข้อมูลออฟไลน์และ ชุดข้อมูลออนไลน์ ทั้งนี้ใช้ขั้นตอนเดียวกัน โดยสร้างความสัมพันธ์ระหว่างข้อมูลเชิงแสง (optical data) กับปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้และ pH โดยวิธี Partial least squares (PLS) regression

แบบออฟไลน์ใช้โปรแกรม OPUS version 7.0.129 โดยสเปกตรัมที่ใช้ยังไม่มีการจัดการสเปกตรัมเบื้องต้นจากเครื่อง MPA FT-NIR, (Bruker Optics GmbH, Ettlingen, Germany) และนำสเปกตรัมมาทำการจัดการสเปกตรัมเบื้องต้นด้วยวิธี 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 + vector normalization (SNV) และ first derivative + MSC

แบบออนไลน์ใช้โปรแกรม The Unscrambler X ใช้กับข้อมูลที่สแกนด้วยเครื่อง UV-VIS-NIR spectrometer (AvaSpec-ULS2048-USB2-VA-50, AVANTES, The Netherlands) ทั้งนี้ใช้ข้อมูลเชิงแสง (สเปกตรัม) ที่ไม่มีการจัดการสเปกตรัมเบื้องต้นหรือที่มีการจัดการสเปกตรัมเบื้องต้นโดยวิธี savitzky-golay smoothing, normalization, baseline corrections, first derivatives, second derivatives, multiplicative scatter correction (MSC), standard normal variate (SNV) และ detrending

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

พิสูจน์แบบจำลองโดยใช้วิธี test set เพื่อได้แบบจำลองที่ดีที่สุด โดยพิจารณาจาก ค่าสัมประสิทธิ์การพิจารณา (coefficient of determination,  $R^2$ ) ควรมีค่าสูง ค่ารากที่สองของความคลาดเคลื่อนเฉลี่ยยกกำลังสองของการประมาณค่า (root mean squares error of calibration, RMSEC) ควรมีค่าต่ำ ค่ารากที่สองของความคลาดเคลื่อนเฉลี่ยยกกำลังสองของการทำนาย (root mean squared error of prediction, RMSEP) ควรมีค่าต่ำที่สุด อัตราส่วนระหว่างค่าความคลาดเคลื่อนมาตรฐานของการทำนายและค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน (ratio of standard error of validation to standard deviation, RPD) ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของความคลาดเคลื่อนสำหรับการทำนาย (standard deviation of error of prediction, SEP) และ ค่าความคลาดเคลื่อนเฉลี่ย (Bias) ควรมีค่าต่ำที่สุด



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

## บทที่ 4

### ผลการทดลอง

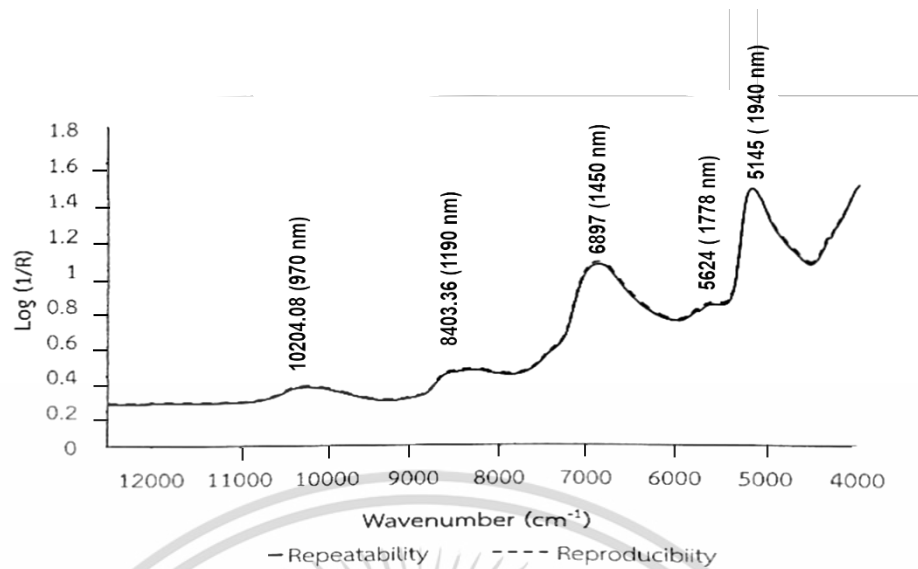
#### 4.1 ผลการทดลองการทวนซ้ำและการทำซ้ำของการสแกน (repeatability and reproducibility of scanning)

ตารางที่ 4.1 แสดงความสามารถในการทวนซ้ำบ่งบอกความเที่ยงของสเปกโตรมิเตอร์ ค่าการทวนซ้ำต่ำแสดงว่ามีความเที่ยง (precision) ในการสแกนสูง ความสามารถในการทำซ้ำบ่งบอกถึงความเที่ยงของผู้สแกนและความเป็นเนื้อเดียวกันของตัวอย่าง ความสามารถในการทำซ้ำได้ค่าต่ำแสดงว่าผู้สแกนมีความเที่ยงและตัวอย่างมีเนื้อสม่ำเสมอ

ตารางที่ 4.1 ค่าการทำซ้ำและการทวนซ้ำของการสแกน ด้วยเครื่อง FT-NIR spectrometer แบบออฟไลน์ and UV-VIS NIR spectrometer แบบอินไลน์

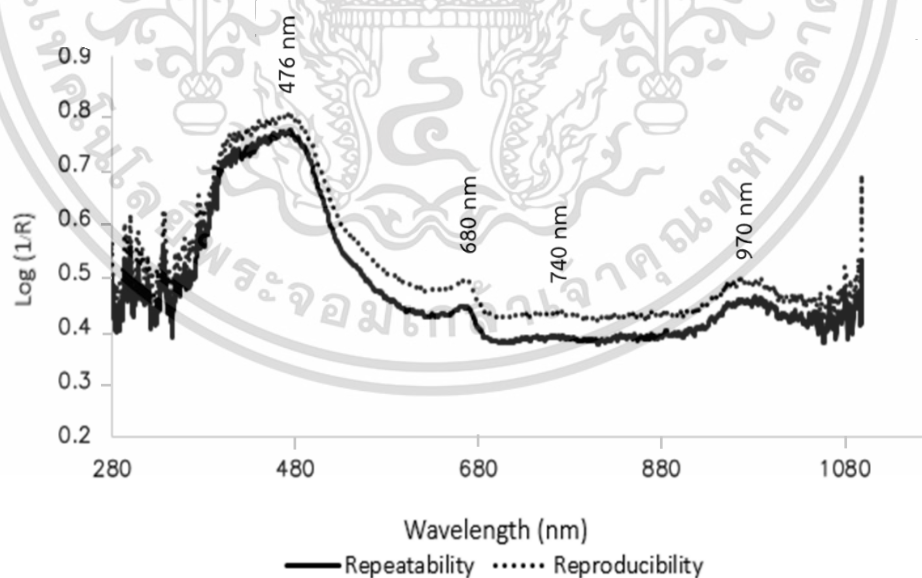
NIR	Repeatability	Reproducibility
FT-NIR	0.0019	0.0032
UV-VIS NIR	0.0053	0.0356

สเปกตรัมเฉลี่ยของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองจากเครื่อง FT-NIR Spectrometer โดยมีช่วงคลื่นที่เห็นเด่นชัด 970 และ 1940 นาโนเมตร เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ O-H เป็นโครงสร้างของน้ำ ช่วงคลื่น 1190 เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ CH<sub>3</sub> เป็นโครงสร้างของกรดอะซิติก CH<sub>3</sub>COOH จะพบที่ผลไม้รสเปรี้ยว ช่วงคลื่น 1450 เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ O-H เป็นโครงสร้างของน้ำและแป้ง ช่วงคลื่น 1780 เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ C-H เป็นโครงสร้างของ cellulose เกี่ยวข้องกับน้ำตาล ดังแสดงในรูปที่ 4.1



รูปที่ 4.1 แสดงสเปกตรัมเฉลี่ยของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองจากเครื่อง FT NIR Spectrometer

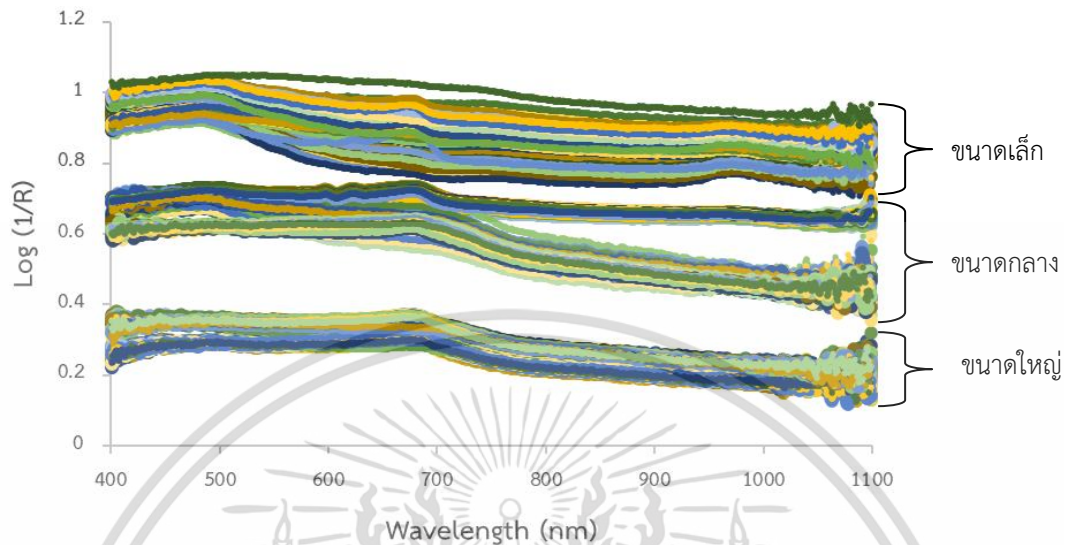
สเปกตรัมเฉลี่ยของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองจากเครื่อง UV-VIS-NIR Spectrometer โดยมีช่วงคลื่นที่เห็นเด่นชัด 476 นาโนเมตร เป็นโครงสร้างของเบต้าแคโรทีน ช่วงคลื่น 680 เป็นโครงสร้างของคลอโรฟิลล์ ช่วงคลื่น 740 เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ  $\text{CH}_3$  เป็นโครงสร้างของกรดอะซิติก  $\text{CH}_3\text{COOH}$  จะพบที่ผลไม้อรสเปรี้ยว ช่วงคลื่น 970 เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ O-H เป็นโครงสร้างของน้ำ ดังแสดงในรูปที่ 4.2



รูปที่ 4.2 แสดงสเปกตรัมเฉลี่ยของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองจากเครื่อง UV-VIS-NIR Spectrometer

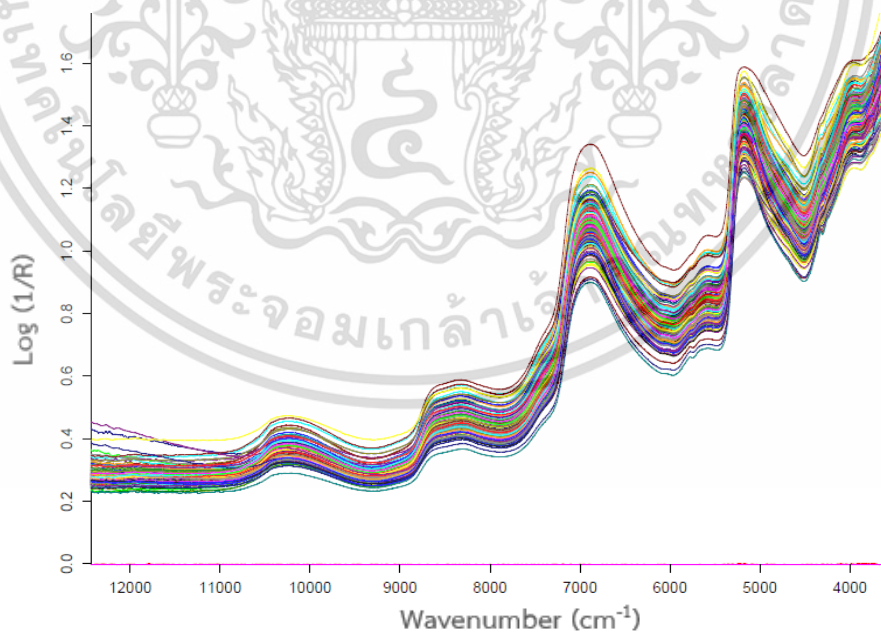
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สเปกตรัมของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองโดยสแกนแบบอินไลน์จำนวน 252 ตัวอย่าง โดยมีช่วงความยาวคลื่นที่ใช้ในช่วงระหว่าง 400-1000 นาโนเมตร ดังแสดงในรูปที่ 4.3



รูปที่ 4.3 สเปกตรัมของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองโดยสแกนแบบอินไลน์จำนวน 252 ตัวอย่าง

สเปกตรัมของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองโดยสแกนแบบออฟไลน์จำนวน 252 ตัวอย่าง โดยมีช่วงจำนวนคลื่นที่ใช้ในช่วงระหว่าง 12500-4000 เซนติเมตร<sup>-1</sup> ดังแสดงในรูปที่ 4.4



รูปที่ 4.4 สเปกตรัมของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองโดยสแกนแบบออฟไลน์จำนวน 252 ตัวอย่าง

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

จากตารางที่ 4.2 แสดงความสามารถในการทำซ้ำของวิธีอ้างอิงและ  $R^2_{max}$  ของ TSS และ pH ความสามารถในการทำซ้ำของการทดสอบอ้างอิงแสดงถึงความเที่ยงของวิธีอ้างอิง ความสามารถในการทำซ้ำของวิธีอ้างอิงต่ำแสดงว่าวิธีอ้างอิง มีความเที่ยงสูง  $R^2_{max}$  นั้นเป็น  $R^2$  ที่มีความคลาดเคลื่อนของวิธีการทดสอบอ้างอิงเท่านั้นไม่มีความคลาดเคลื่อนจากการสแกน หรืออื่นๆ ความคลาดเคลื่อนของวิธีการทดสอบอ้างอิงสำหรับ TSS เท่ากับ 2% สำหรับ pH เท่ากับ 5%

**ตารางที่ 4.2** ค่าการทวนซ้ำและ  $R^2_{MAX}$  ของการวัดปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้และ pH

Measured parameters	Repeatability of reference test	$R^2_{MAX}$
Total soluble solids	0.2657	0.98
pH	0.0827	0.95

## 4.2 ผลการทดลองเพื่อสร้างแบบจำลอง

### 4.2.1 แบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีแบบออนไลน์และออฟไลน์

#### 4.2.1.1 TSS และ pH

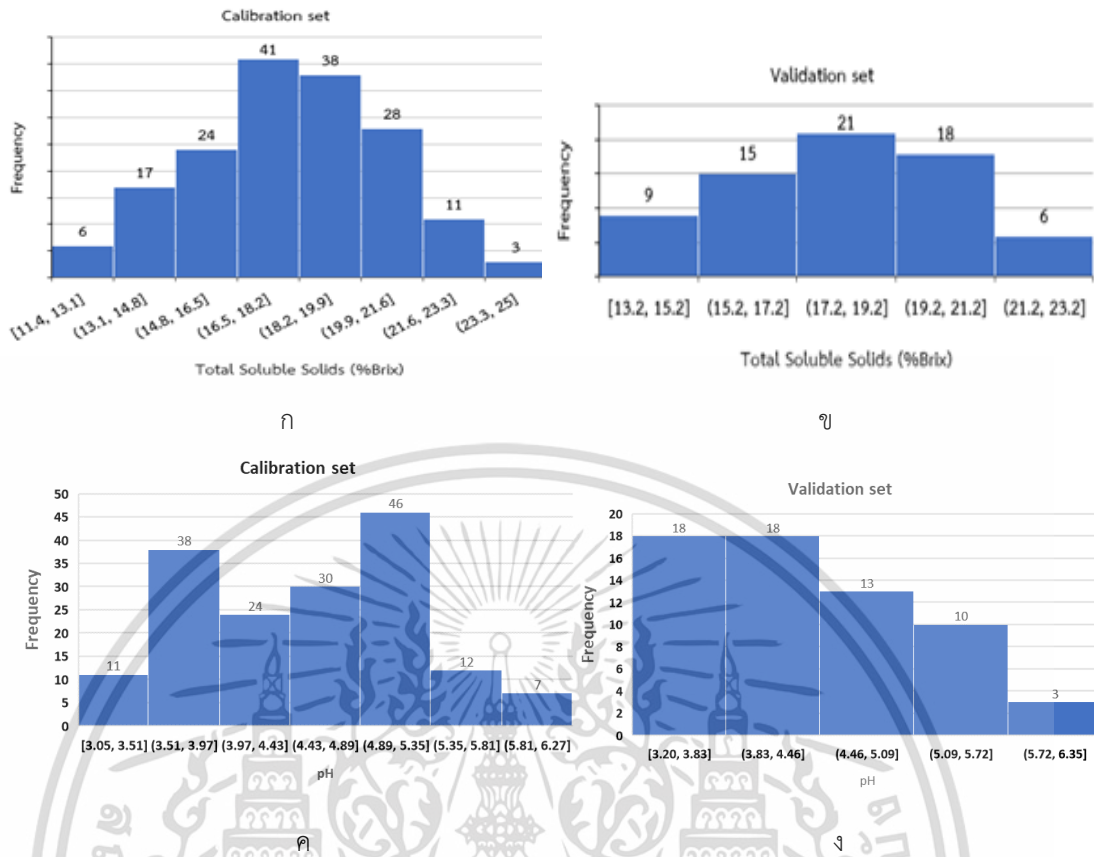
จากตารางที่ 4.3 แสดงค่าสถิติของชุดข้อมูล Calibration และ Validation ที่ใช้ในการสร้างแบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีแบบออนไลน์และออฟไลน์สำหรับการทำนายปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้และ pH ของมะม่วงผลมะม่วงน้ำดอกไม้สีทอง และรูปที่ 4.1 แสดงความถี่ของช่วงค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้และ pH จากการวัดด้วยวิธีมาอ้างอิงสำหรับชุดตัวอย่าง calibration และ validation ตามลำดับ

ตารางที่ 4.3 ค่าสถิติของชุดข้อมูล Calibration และ Validation ที่ใช้ในการสร้างแบบจำลองเนียร์ อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีแบบอินไลน์และ ออฟไลน์ สำหรับการทำนาย TSS (%Brix) และ pH ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทอง

TSS (%Brix)					
Mango size	n	Min	Max	Mean	SD
Small	74	11.65	23.20	17.94	2.61
Medium	92	11.40	23.07	17.62	2.49
Big	71	13.2	24.10	18.78	2.58
Total Cal	168	11.4	24.1	18.1	2.7
Total Val	69	13.2	22.6	18.1	2.4
pH					
Small	74	3.20	5.70	4.39	0.62
Medium	92	3.05	5.98	4.49	0.70
Big	71	3.31	5.79	4.51	0.59
Total Cal	168	3.05	5.96	4.47	0.66
Total Val	69	3.39	5.83	4.45	0.62

n คือ จำนวนผลตัวอย่าง Min คือ ค่า ที่น้อยที่สุดของตัวอย่างทั้งหมด Max คือ ค่า ที่มากที่สุดของตัวอย่างทั้งหมด Mean คือ ค่าเฉลี่ย ของตัวอย่างทั้งหมด SD คือค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของตัวอย่างทั้งหมด

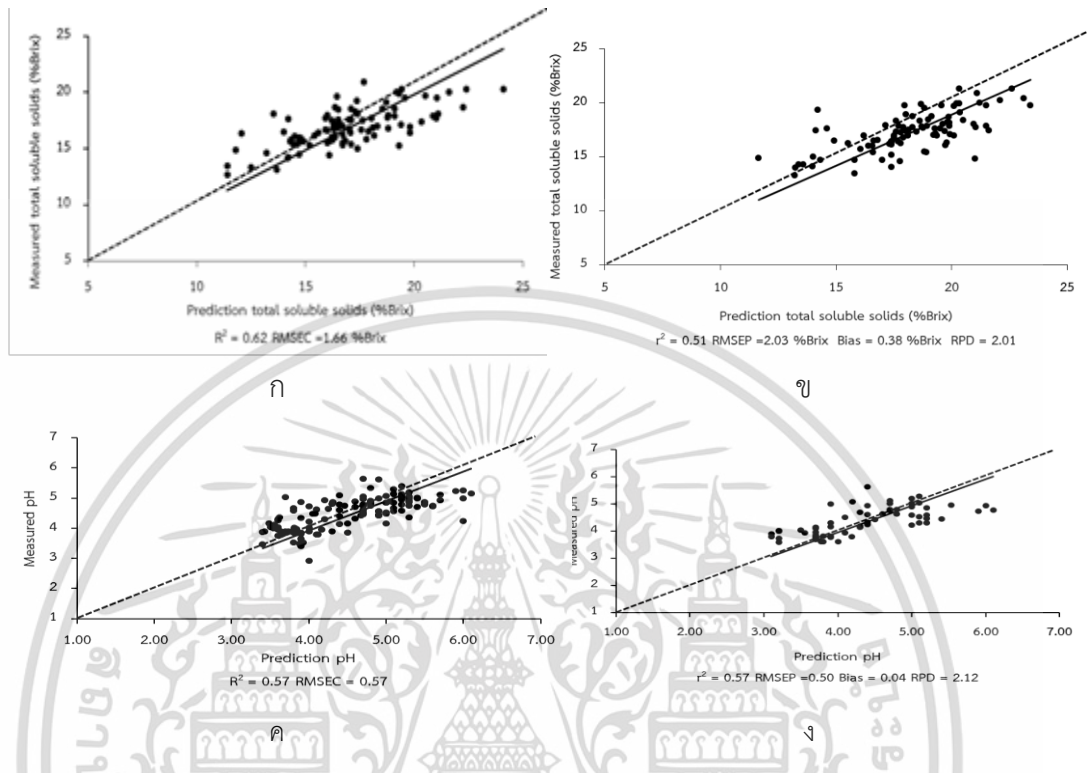
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ 4.5 ค่าสถิติความถี่จากการวัดด้วยวิธีอ้างอิง สำหรับตัวอย่างชุด Calibration ของช่วงปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (ก), pH (ค) และสำหรับตัวอย่างชุด Validation ของช่วงปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (ข), pH (ง) แบบอินไลน์และออฟไลน์ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทอง

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

การเปรียบเทียบค่าที่ทำนายโดยแบบจำลองของเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี กับค่าที่วัดด้วยวิธีอ้างอิงของชุด Calibration และ Validation แบบอินไลน์และออฟไลน์ สามารถแสดงในรูปที่ 4.4



รูปที่ 4.6 การเปรียบเทียบค่าวัดจริงกับค่าที่ทำนายโดยแบบจำลองของเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับตัวอย่างชุด Calibration ของปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) (ก), pH (ค) และสำหรับตัวอย่างชุด Validation ของปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) (ข), pH (ง) แบบอินไลน์และออฟไลน์ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองเพื่อการแปรรูป

จากตารางที่ 4.4 ผลการวิเคราะห์ แบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีแบบอินไลน์สร้างโดยวิธี PLS สำหรับการทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) และค่า pH ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองเพื่อการแปรรูป จะเลือกใช้ช่วงความยาวคลื่นที่ 400 – 1030 นาโนเมตร ขนาดของมะม่วงที่นำมาวิเคราะห์ได้แก่ ขนาดเล็ก กลาง ใหญ่ และรวม จะใช้แฟคเตอร์ทั้งหมด 6, 3, 5 และ 3 แฟคเตอร์ ตามลำดับ โดยข้อมูลชุด Calibration มีค่า  $R^2$  ขนาดเล็ก กลาง ใหญ่ และรวม เท่ากับ 0.72 0.34 0.57 และ 0.60 ตามลำดับ ค่า RMSEC ขนาดเล็ก กลาง ใหญ่ และรวม เท่ากับ 1.35 2.03 1.62 และ 1.68 %Brix ตามลำดับ และชุดข้อมูล Validation ค่า  $r^2$  ขนาดเล็ก กลาง ใหญ่ และรวม เท่ากับ 0.61 0.29 0.51 และ 0.53 %Brix ตามลำดับ ค่า RMSEP ขนาดเล็ก

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

กลาง ใหญ่ และรวม เท่ากับ 1.61 2.14 1.86 และ 1.07 %Brix ตามลำดับ Bias ขนาดเล็ก กลาง ใหญ่ และรวม เท่ากับ -0.01 0.02 0.05 และ 0.21 %Brix ตามลำดับ RPD ขนาดเล็ก กลาง ใหญ่ และรวม เท่ากับ 1.61 1.17 1.34 และ 2.43 ตามลำดับ ซึ่งนำค่า  $r^2$  ของชุด Validation มาแปลความหมายขนาดเล็กล ใหญ่ และรวม อยู่ในช่วง 0.50 – 0.64 ได้ความหมายว่ายอมรับได้สำหรับการแบ่งกลุ่มอย่างหยาบๆ ส่วนขนาดกลางอยู่ในช่วง 0.26 – 0.49 ได้ความหมายว่ามีความสัมพันธ์ที่ไม่ดีเนื่องจากมะม่วงด้าน A ที่ได้มามีรอยขีดและค่อนข้างจะเสีย และนำค่า RPD มาอธิบายความหมายขนาดเล็กล กลาง และใหญ่ อยู่ในช่วง 0.0 -1.9 ได้ความหมายว่าไม่ดีเลย ไม่แนะนำนำมาแบ่งกลุ่ม ส่วนขนาดรวม อยู่ในช่วง 2.0 -2.4 ได้ความหมายว่าไม่ดี แต่สามารถแบ่งกลุ่มได้แบบหยาบๆ

สำหรับการทำนายค่า pH จะเลือกใช้ช่วงความยาวคลื่นที่ 700 – 1000 นาโนเมตร ขนาดของมะม่วงที่นำมาวิเคราะห์ได้แก่ ขนาดเล็ก, กลาง, ใหญ่ และ รวม จะใช้แพคเตอร์ทั้งหมด 7 6 6 และ 4 แพคเตอร์ ตามลำดับ โดยข้อมูลชุด Calibration มีค่า  $R^2$  ขนาดเล็ก กลาง ใหญ่ และรวม เท่ากับ 0.78 0.78 0.36 และ 0.73 ตามลำดับ ค่า RMSEC ขนาดเล็ก กลาง ใหญ่ และรวม เท่ากับ 0.32 0.32 0.45 และ 0.34 ตามลำดับ และชุดข้อมูล Validation ค่า  $r^2$  ขนาดเล็ก กลาง ใหญ่ และรวม เท่ากับ 0.67 0.65 0.37 และ 0.66 ตามลำดับ ค่า RMSEP ขนาดเล็ก กลาง ใหญ่ และรวม เท่ากับ 0.41 0.40 0.49 และ 0.33 ตามลำดับ Bias ขนาดเล็ก กลาง ใหญ่ และรวม เท่ากับ 0.00 0.00 0.01 และ -0.01 ตามลำดับ RPD ขนาดเล็ก กลาง ใหญ่ และรวม เท่ากับ 1.71 1.75 1.73 และ 2.12 ตามลำดับ ซึ่งนำค่า  $r^2$  ชุด Validation มาแปลความหมายขนาดเล็กล กลาง และรวม อยู่ในช่วง 0.66 – 0.81 ได้ความหมายว่ายอมรับได้สำหรับการแบ่งกลุ่มและการประเมินค่าอย่างหยาบๆ ส่วนขนาดใหญ่อยู่ในช่วง 0.26 – 0.49 ได้ความหมายว่ามีความสัมพันธ์ที่ไม่ดีเนื่องจากมะม่วงที่ได้มาส่วนซีกด้าน B บริเวณช่วงหัว ผิวมะม่วงมีสีคล้ำ [19] และนำค่า RPD มาอธิบายความหมายขนาดเล็กล กลาง และใหญ่ อยู่ในช่วง 0.0 -1.9 ได้ความหมายว่าแบบจำลองไม่ดีเลยไม่แนะนำนำมาแบ่งกลุ่มส่วนขนาดรวมอยู่ในช่วง 2.0 -2.4 ได้ความหมายว่าไม่ดี แต่สามารถแบ่งกลุ่มได้แบบหยาบๆ [19]

ตารางที่ 4.4 ผลการวิเคราะห์ แบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีแบบอินไลน์สร้างโดยวิธี PLS สำหรับการทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) และค่า pH ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองเพื่อการแปรรูป

Type	Pretreatment	Regions (nm)	PLS factor	Calibration		Validation			
				R <sup>2</sup>	RMSEC (%Brix)	r <sup>2</sup>	RMSEP (%Brix)	Bias (%Brix)	RPD
TSS	Raw spectra_small		6	0.72	1.35	0.61	1.61	-0.01	1.61
	Raw spectra_medium		3	0.34	2.03	0.29	2.14	0.02	1.17
	Raw spectra_big	400-1030	5	0.57	1.62	0.51	1.86	0.05	1.34
	PLS_SmoothingGolay+DerivativeSG_second_poly2_10_10		3	0.60	1.68	0.53	1.07	0.21	2.43
pH	Raw spectra_small		6	0.78	0.32	0.67	0.41	0.00	1.71
	Raw spectra_medium	700-1000	6	0.78	0.32	0.65	0.40	0.00	1.75
	Raw spectra_big		4	0.36	0.45	0.37	0.49	0.01	1.73
	Raw spectra		7	0.73	0.34	0.66	0.33	-0.01	2.12

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

จากตารางที่ 4.5 ผลการวิเคราะห์ แบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีแบบออฟไลน์สร้างโดยวิธี PLS สำหรับการทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) และ ค่า pH ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองเพื่อการแปรรูปจะเลือกใช้ช่วงคลื่นที่ 10715.2 - 8038.3  $\text{cm}^{-1}$  และ 7158.9-5369.2  $\text{cm}^{-1}$  ขนาดของมะม่วงที่นำมาวิเคราะห์ได้แก่ ขนาดเล็ก กลาง ใหญ่ และรวม จะใช้แฟคเตอร์ทั้งหมด 7 5 6 และ 5 แฟคเตอร์ ตามลำดับ โดยข้อมูลชุด Calibration มีค่า  $R^2$  ขนาดเล็ก กลาง ใหญ่ และรวม เท่ากับ 0.49 0.51 0.62 และ 0.62 ตามลำดับ ค่า RMSEC ขนาดเล็ก กลาง ใหญ่ และรวม เท่ากับ 1.82 1.62 1.61 และ 1.66 %Brix ตามลำดับ และชุดข้อมูล Validation ค่า  $r^2$  ขนาดเล็ก กลาง ใหญ่ และรวม เท่ากับ 0.33 0.39 0.55 และ 0.51 %Brix ตามลำดับ ค่า RMSEP ขนาดเล็ก กลาง ใหญ่ และรวม เท่ากับ 1.96 1.62 2.01 และ 2.03 %Brix ตามลำดับ Bias ขนาดเล็ก กลาง ใหญ่ และรวม เท่ากับ 0.87 0.45 0.39 และ 0.38 %Brix ตามลำดับ RPD ขนาดเล็ก กลาง ใหญ่ และรวม เท่ากับ 1.94 1.82 2.02 และ 2.01 ตามลำดับ ซึ่งนำค่า  $r^2$  ของชุด Validation มาแปลความหมายขนาดใหญ่อะรวมอยู่ในช่วง 0.50 – 0.64 ได้ความหมายว่ายอมรับได้สำหรับการแบ่งกลุ่มอย่างหยาบๆ ส่วนขนาดเล็กและกลางอยู่ในช่วง 0.26 – 0.49 ได้ความหมายว่ามีความสัมพันธ์ที่ไม่ดีเนื่องจากมะม่วงที่ได้มาซีกด้าน A ของขนาดกลางมีรอยขีดและค่อนข้างจะเสีย ส่วนขนาดเล็ก ผิวมะม่วงจุดที่สแกนผิวค่อนข้างขรุขระมีจุดดำ [19] และนำค่า RPD มาอธิบายความหมายขนาดเล็กและกลาง อยู่ในช่วง 0.0 -1.9 ได้ความหมายว่าไม่ดีเลย ไม่แนะนำนำมาแบ่งกลุ่ม ส่วนขนาดใหญ่และรวมอยู่ในช่วง 2.0 -2.4 ได้ความหมายว่าไม่ดี แต่สามารถแบ่งกลุ่มได้แบบหยาบๆ [19]

สำหรับการทำนายค่า pH จะเลือกใช้ช่วงคลื่นที่ 7506-4242.9  $\text{cm}^{-1}$  ใช้ขนาดของมะม่วงที่นำมาวิเคราะห์ได้แก่ ขนาดเล็ก, กลาง, ใหญ่ และรวม จะใช้แฟคเตอร์ทั้งหมด 5 3 7 และ 4 แฟคเตอร์ ตามลำดับ โดยข้อมูลชุด Calibration มีค่า  $R^2$  ขนาดเล็ก กลาง ใหญ่ และรวม เท่ากับ 0.57 0.64 0.56 และ 0.57 ตามลำดับ ค่า RMSEC ขนาดเล็ก กลาง ใหญ่ และรวมเท่ากับ 0.57 0.64 0.56 และ 0.50 ตามลำดับ และชุดข้อมูล Validation ค่า  $r^2$  ขนาดเล็ก กลาง ใหญ่ และรวม เท่ากับ 0.46 0.53 0.57 และ 0.57 ตามลำดับ ค่า RMSEP ขนาดเล็ก กลาง ใหญ่ และรวม เท่ากับ 0.48 0.89 0.49 และ 0.50 ตามลำดับ Bias ขนาดเล็ก กลาง ใหญ่ และรวม เท่ากับ 0.05 0.04 0.04 และ 0.04 ตามลำดับ RPD ขนาดเล็ก กลาง ใหญ่ และรวม เท่ากับ 1.38 1.89 1.76 และ 2.12 ตามลำดับ ซึ่งนำค่า  $r^2$  ของชุด Validation มาแปลความหมายขนาดเล็ก อยู่ในช่วง 0.26 – 0.49 ได้ความหมายว่ามีความสัมพันธ์ที่ไม่ดีเนื่องจากมะม่วงที่ได้มาซีกด้าน B ผิวมะม่วงที่จุดสแกนมีรอยกัดของแมลงและจุดดำเล็กๆ ส่วนขนาดกลาง ใหญ่ และรวม อยู่ในช่วง 0.50 – 0.64 ได้ความหมายว่ายอมรับได้สำหรับการคัดเลือกอย่างหยาบๆ [19] และนำค่า RPD มาอธิบายความหมาย

ขนาดเล็กลงและใหญ่ อยู่ในช่วง 0.0 -1.9 ได้ความหมายว่าไม่ดีเลย ไม่แนะนำนำมาแบ่งกลุ่ม ส่วนขนาดรวมอยู่ในช่วง 2.0 -2.4 ได้ความหมายว่าไม่ดี แต่สามารถแบ่งกลุ่มได้แบบหยาบๆ [19]

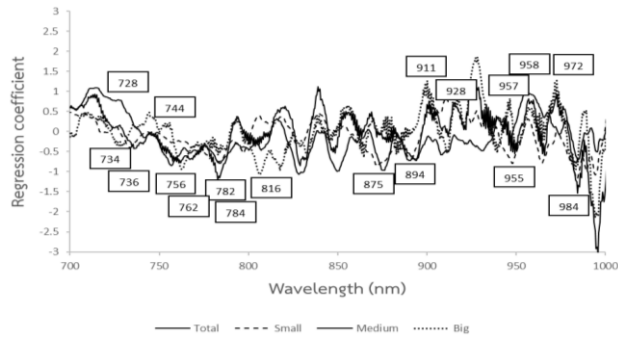
**ตารางที่ 4.5** ผลการวิเคราะห์ แบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีแบบออฟไลน์สร้างโดยวิธี PLS สำหรับการทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) และ ค่า pH ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองเพื่อการแปรรูป

Type	Spectral range	Pre treatment	PLS Factor	Calibration Set		Validation Set			
				R <sup>2</sup>	RMSEC (%Brix)	r <sup>2</sup>	RMSEP (%Brix)	Bias (%Brix)	RPD
TSS	10715.2-8038.3 และ 7158.9-5369.2	smoothing+snv_Small	7	0.49	1.82	0.33	1.96	0.87	1.94
		Raw spectrum_Medium	5	0.51	1.62	0.39	1.62	0.45	1.82
		1st + msc_Big	6	0.62	1.61	0.55	2.01	0.39	2.02
		First Derivative +MSC_Total	5	0.62	1.66	0.51	2.03	0.38	2.01
		First Derivative_Small	5	0.49	0.57	0.46	0.48	0.05	1.38
pH	7506-4242.9	smoothing+snv_Medium	3	0.62	0.64	0.53	0.89	0.04	1.89
		smoothing	7	0.60	0.56	0.57	0.49	0.04	1.76
		First Derivative + Straight line Substraction_Total	4	0.57	0.57	0.57	0.50	0.04	2.12

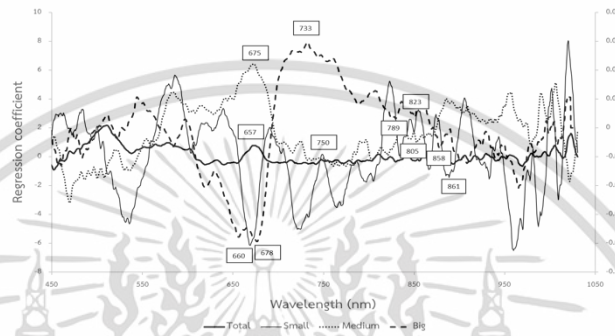
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

รูปที่ 4.7 (ก), (ข) แสดงค่า Regression coefficient plot ของแบบจำลองสำหรับการประเมินค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้และ pH ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองเพื่อการแปรรูปแบบอินไลน์ และตารางที่ 4.6 แสดงความยาวคลื่นที่มีค่า Regression coefficient โดยค่า Regression coefficient ที่สูงที่สุดอยู่ที่ความยาวคลื่น 928 955 965 984 1014 1019 และ 1022 นาโนเมตร ตามลำดับ ซึ่งเป็นการสันนิษฐานพันธะทางเคมีของพันธะ C-H str. third overtone O-H str. second overtone ref.  $2 \times \text{C-H str.} + 3 \times \text{C-H ref.}$  และ C-H str. fourth overtone ref. ตามลำดับ ดังนั้นจึงสรุปได้ว่าการสันนิษฐานของ O-H และ C-H มีผลสูงต่อการทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้และ pH

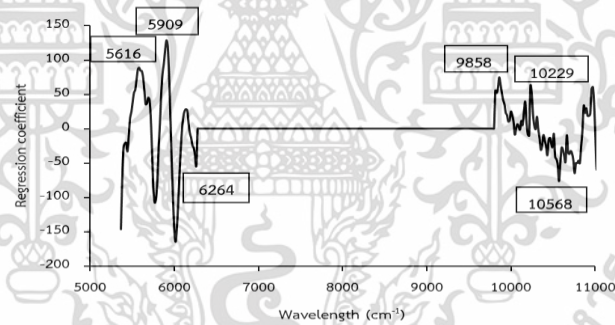
รูปที่ 4.7 (ค), (ง) แสดงค่า Regression coefficient ของแบบจำลองสำหรับการประเมินค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้และ pH ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองเพื่อการแปรรูปแบบออฟไลน์ และตารางที่ 4.7 แสดงความยาวคลื่นที่มีค่า Regression coefficient สูง โดยค่า Regression coefficient ที่สูงที่สุดอยู่ที่จำนวนคลื่น 5909 และ 5199 เซนติเมตร<sup>-1</sup> เป็นการสันนิษฐานพันธะทางเคมีของพันธะ C-H str. First overtone. และ O-H str. +O-H def. ดังนั้นจึงสรุปได้ว่าการสันนิษฐานของ C-H และ O-H มีผลต่อการทำนายปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้และ pH



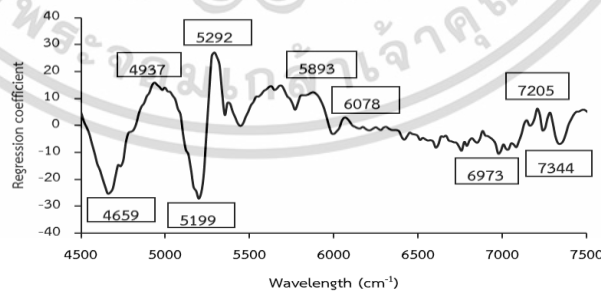
ก



ข



ค



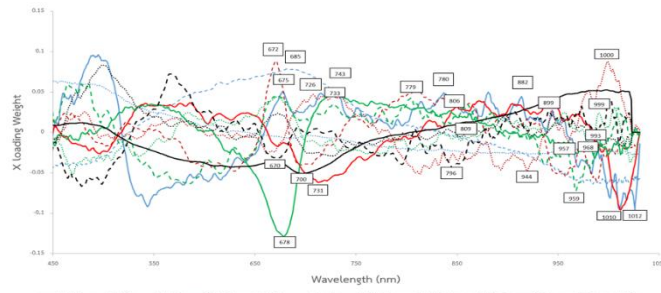
ง

รูปที่ 4.7 กราฟ Regression coefficient plot ของแบบจำลองใช้สำหรับการประเมินค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) และ pH ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองเพื่อการแปรรูปแบบออนไลน์ (ก), (ข) และแบบออฟไลน์ (ค), (ง)

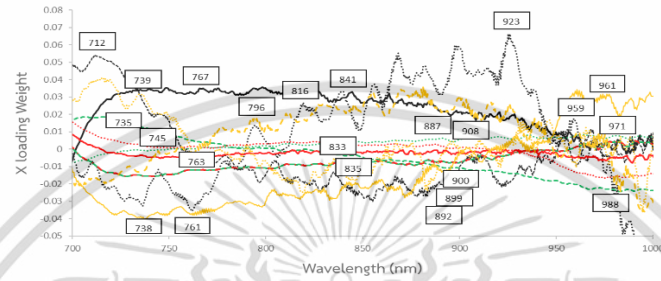
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

รูปที่ 4.8 (ก), (ข) แสดงค่า X-loading weight ของแบบจำลองสำหรับการประเมินค่า ปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้และ pH ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองเพื่อการแปรรูปแบบอินไลน์ และ ตารางที่ 4.6 แสดงความยาวคลื่นที่มีค่า X-loading weight สูง โดยค่า X-loading weight ที่สูงที่สุด ของ PLS แพคเตอร์ 1 มีการสั่นสะเทือนมากที่สุดอยู่ที่ความยาวคลื่นได้แก่ 700 731 733 841 882 900 911 และ 955 นาโนเมตร เป็นการสั่นสะเทือนพันธะทางเคมีของพันธะ C-H str. fourth overtone ref. O-H Combination ref. C-H str. third overtone ref. และ O-H str. second overtone ตามลำดับ ค่า X-loading weight ที่สูงที่สุดของ PLS แพคเตอร์ 2 มีการ สั่นสะเทือนมากที่สุดอยู่ที่ความยาวคลื่นได้แก่ 743 779 809 883 892 923 971 และ 1012 นาโนเมตร เป็นการสั่นสะเทือนพันธะทางเคมีของพันธะ C-H str. fourth overtone ref. O-H str. second overtone ref. C-H str. third overtone ref. และ  $2 \times \text{C-H str.} + 3 \times \text{C-H def.}$  ตามลำดับ ค่า X-loading weight ที่สูงที่สุดของ PLS แพคเตอร์ 3 มีการสั่นสะเทือนมากที่สุดอยู่ที่ ความยาวคลื่นได้แก่ 796 812 899 959 957 964 966 968 และ 968 นาโนเมตร เป็นการ สั่นสะเทือนพันธะทางเคมีของพันธะ O-H str. third overtone O-H Combination ref C-H str. third overtone ref. และ O-H str. second overtone ref. ตามลำดับ ดังนั้นจึงสรุปได้ว่าการ สั่นสะเทือนของ O-H และ C-H มีผลต่อการทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้และ pH

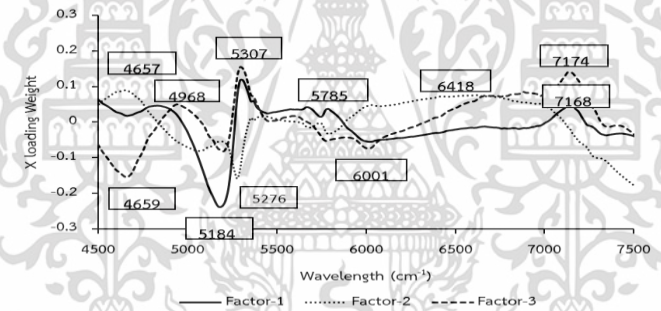
รูปที่ 4.8 (ค), (ง) แสดงค่า X-loading weight ของแบบจำลองสำหรับการประเมินค่า ปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้และ pH ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองเพื่อการแปรรูปแบบออฟไลน์ และ ตารางที่ 4.7 แสดงความยาวคลื่นที่มีค่า X-loading weight สูง โดยค่า X-loading weight ที่สูงที่สุด ของ PLS แพคเตอร์ 1 มีการสั่นสะเทือนมากที่สุดอยู่ที่จำนวนคลื่น 5184 และ 6264 เซนติเมตร<sup>-1</sup> ตามลำดับเป็นการสั่นสะเทือนพันธะทางเคมีของพันธะ O-H str. +O-H def. และ O-H str. First overtone และค่า X-loading weight ที่สูงที่สุดของ PLS แพคเตอร์ 2 มีการสั่นสะเทือนมากที่สุดอยู่ที่จำนวนคลื่น 5276 และ 10668 เซนติเมตร<sup>-1</sup> ตามลำดับ เป็นการสั่นสะเทือนพันธะทางเคมีของ พันธะ O-H str. +  $2 \times \text{C-O str.}$  และ O-H str. second overtone และค่า X-loading weight ที่สูง ที่สุดของ PLS แพคเตอร์ 3 มีการสั่นสะเทือนมากที่สุดอยู่ที่จำนวนคลื่น 5307 และ 9874 เซนติเมตร<sup>-1</sup> ตามลำดับเป็นการสั่นสะเทือนพันธะทางเคมีของพันธะ O-H str. +  $2 \times \text{C-O str.}$  และ  $2 \times \text{C-H str.} + 3 \times \text{C-H def.}$  ดังนั้นจึงสรุปได้ว่าการสั่นสะเทือนของ O-H และ C-H มีผลต่อการ ทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้และ pH



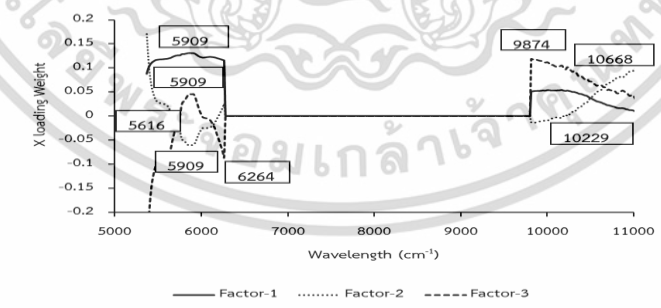
ก



ข



ค



ง

รูปที่ 4.8 กราฟ X - loading weight plot ของแบบจำลองใช้สำหรับการประเมินค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) และ pH ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองเพื่อการแปรรูปแบบอินไลน์ (ก), (ข) และแบบออฟไลน์ (ค), (ง)

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 4.6 แสดงความยาวคลื่นที่มีค่า Regression coefficient plot และ ค่า X-loading weight สูง ของแบบจำลองสำหรับการประเมินค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) และ pH แบบอินไลน์ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองเพื่อการแปรรูป

Type	Wavelength (nm)	Wavelength (nm) referred form reference [20]	Bond vibration	Structure	Source	Model
pH	700	738	C-H str. fourth overtone	CH <sub>3</sub> COOH	XL-2	Total
TSS	731				XL-1	Small
TSS	733	740	C-H str. fourth overtone	CH <sub>3</sub> COOH	XL-1	Medium
	743				RC	Big
TSS	779	760	O-H str. third overtone	H <sub>2</sub> O	XL-2	Medium
	796				XL-3	Big
pH	796				XL-2	Total
TSS	809				XL-2	Big
pH	812	840	O-H Combinati on	Sucrose	RC	Small
	841				RC	Small
TSS	882	900	C-H str. third overtone	CH <sub>3</sub> COOH	XL-3	Medium
TSS	883				XL-2	Small
pH	892				RC	Total
TSS	899				XL-2	Big
pH	900				XL-1	Big

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 4.6 แสดงความยาวคลื่นที่มีค่า Regression coefficient plot และ ค่า X-loading weight สูง ของแบบจำลองสำหรับการประเมินค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) และ pH แบบอินไลน์ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองเพื่อการแปรรูป (ต่อ)

Type	Wavelength (nm)	Wavelength (nm) referred form reference [20]	Bond vibration	Structure	Source	Model
pH	911	900	C-H str. third overtone	CH <sub>3</sub> COOH	RC	Small
					XL-1	Small
					XL-3	Big
	923				XL-2	Big
	928				XL-2	Big
TSS	955				XL-1	Big
pH	955				RC	Medium
TSS					XL-3	Small
pH	957		O-H str. second overtone	Sucrose	RC	Small
pH		960			XL-2	Small
TSS					RC	Small
	959				XL-3	Total
pH	964				XL-1	Small
TSS	965				RC	Big

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 4.6 แสดงความยาวคลื่นที่มีค่า Regression coefficient plot และ ค่า X-loading weight สูง ของแบบจำลองสำหรับการประเมินค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) และ pH แบบอินไลน์ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองเพื่อการแปรรูป (ต่อ)

Type	Wavelength (nm)	Wavelength (nm) referred form reference [20]	Bond vibration	Structure	Source	Model
pH	966	970	O-H str. second overtone	ROH, H <sub>2</sub> O	XL-3	Small
	968				XL-3	Medium
	971				XL-2	Medium
	984				RC	Total
	984				RC	Small
	984				RC	Medium
TSS	1012	1015	2 x C-H str. + 3 x C-H def.	CH <sub>3</sub> COOH	XL-1	Small
	1014				RC	Total
	1019				RC	Small
	1022				RC	Medium

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 4.7 แสดงความยาวคลื่นที่มีค่า Regression coefficient plot และ ค่า X-loading weight สูง ของแบบจำลองสำหรับการประเมินค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) และ pH แบบออฟไลน์ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองเพื่อการแปรรูป

Type	Wave number (cm <sup>-1</sup> )	Wave-length (nm)	Wavelength (nm) referred form reference [20]	Bond vibration	Structure	Source
TSS	10668	937	960	O-H str. second overtone	Sucrose	XL-2
	9874	1012	1015	2 x C-H str. + 3 x C-H def.	CH <sub>3</sub> COOH	XL-3
						XL-1
	6264	1596	1580	O-H str. First overtone	Starch,	RC
						XL-1
						XL-2
	5909	1692	1695	C-H str. Frist overtone	CH <sub>3</sub> COOH	XL-3
						RC
						XL-1
	pH	5307	1884	1900	O-H str. +2 x C-O str.	Starch
XL-2						
5276		1895				XL-1
5199		1923	1940	O-H str. +O-H def.	H <sub>2</sub> O	RC
	5184	1929	1940	O-H str. +O-H def.	H <sub>2</sub> O	XL-1

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

## บทที่ 5

### สรุปผลการทดลอง

#### 5.1 Repeatability, Reproducibility, Repeatability of reference and $R^2_{MAX}$

จากการทดลองโดยการหาค่า การทวนซ้ำ และ การทำซ้ำ ของการสแกนมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองเพื่อวัด TSS และ pH การสแกนออฟไลน์จะมีค่าน้อยกว่าการสแกนแบบออนไลน์ แสดงว่าการสแกนแบบออฟไลน์มีความแม่นยำสูงกว่าการสแกนแบบออนไลน์ และค่า  $R^2_{MAX}$  ของเทคนิคเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีที่ใช้วัด TSS มีค่าเท่ากับ 0.98 แสดงว่าวิธีอ้างอิงในการวัด TSS โดยใช้ Refractometer มีความคลาดเคลื่อนเพียง 2% และที่ใช้วัด pH มีค่าเท่ากับ 0.95 แสดงว่าวิธีอ้างอิงในการวัด pH โดยใช้ pH meter มีความคลาดเคลื่อนเพียง 5% ดังนั้นจึงสรุปได้ว่าวิธีการวัดของวิธีอ้างอิงสามารถนำไปใช้ในการทดลองเพื่อสร้างแบบจำลองในการทำนาย TSS และ pH

#### 5.2 ความเป็นไปได้ในการประยุกต์ใช้แบบจำลองในโรงงานแปรรูปมะม่วง

จากการทดลองพบว่าแบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีแบบออนไลน์สำหรับการทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ ซึ่งค่า  $r^2$  ของแบบจำลองของชุด Validation แบบคละขนาดมีค่าเท่ากับ 0.53 และ RPD เท่ากับ 2.43 เมื่อเทียบกับงานวิจัยของ Sharma et al. [26] สำหรับการทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ ซึ่งค่า  $r^2$  ของแบบจำลองของชุด Validation ซึ่งมีค่าเท่ากับ 0.60 และ RPD เท่ากับ 1.27 แสดงว่าแบบจำลองที่ได้สามารถใช้สำหรับแบ่งกลุ่มหยาบๆ ในขณะที่ ค่า  $r^2$  ของชุด Validation แบบแยกขนาด เล็ก กลาง และใหญ่ ไม่แนะนำใช้แบบจำลอง และ แบบจำลองการทำนายค่าความเป็นกรดต่าง ค่า  $r^2$  ของชุด Validation แบบคละขนาดมีค่าเท่ากับ 0.66 และ RPD เท่ากับ 2.12 แสดงว่าแบบจำลองที่ได้สามารถใช้สำหรับแบ่งกลุ่มและประเมินค่าได้แบบหยาบๆ ในขณะที่ ค่า  $r^2$  ของชุด Validation แบบแยกขนาด เล็ก และกลาง ไม่แนะนำใช้แบบจำลอง ส่วนขนาดใหญ่ นั้น แบบจำลองที่ได้สามารถใช้แบบแบ่งกลุ่มและประเมินค่าได้แบบหยาบๆ

แบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีแบบออฟไลน์สำหรับการทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) ซึ่งนำค่า  $r^2$  ของชุด Validation แบบคละขนาดมีค่าเท่ากับ 0.51 และ RPD เท่ากับ 2.01 เมื่อเทียบกับงานวิจัยของ Sharma et al. [26] สำหรับการทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ ซึ่งค่า  $r^2$  ของแบบจำลองของชุด Validation ซึ่งมีค่าเท่ากับ 0.70 และ RPD เท่ากับ 1.02 แสดงว่าแบบจำลองที่ได้สามารถใช้สำหรับแบ่งกลุ่มได้แบบหยาบๆ ในขณะที่ค่า  $r^2$  ของชุด Validation แบบแยกขนาด เล็ก และกลาง ไม่แนะนำใช้แบบจำลอง ส่วน ขนาดใหญ่

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น เมื่ออนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

แบบจำลองสามารถใช้แบ่งกลุ่มและประเมินค่าได้แบบหยาบๆ และส่วน ค่าความเป็นกรดต่าง (pH) ของแบบจำลองให้ค่า  $r^2$  ของชุด Validation แบบคละขนาดมีค่าเท่ากับ 0.57 และ RPD เท่ากับ 2.12 แสดงว่าแบบจำลองสามารถใช้แบ่งกลุ่มและประเมินค่าได้แบบหยาบๆ ในขณะที่ ค่า  $r^2$  ของชุด Validation แบบแยกขนาด เล็ก กลาง และใหญ่ ไม่แนะนำให้ใช้แบบจำลอง

ซึ่งเมื่อเทียบกับงานวิจัยอื่นพบว่ามะม่วงที่เป็นโรคแอนแทรกโนสซึ่งมีอาการจุดดำหรือปื้นดำ จะมีค่า  $r^2$  ของแบบจำลองของชุด Validation ที่ทำนายปริมาณของแข็งละลายน้ำได้ต่ำกว่า เนื่องจาก ระดับความรุนแรงของโรคแอนแทรกโนสมีผลต่อสเปกตรัม ยิ่งมีรอยขนาดใหญ่ สเปกตรัมการดูดซับคลื่นจะเปลี่ยนที่ช่วงความยาวคลื่นที่เห็นเด่นชัดคือช่วงคลื่น 478 และ 830 นาโนเมตร [27] และ ปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ (TSS) จะมีค่าลดลงเมื่อรอยดำแพร่กระจายใหญ่ขึ้น [28] ในขณะที่ค่า pH ช่วง 5-6 จะส่งผลให้การเจริญเติบโตของเชื้อราโตเร็วขึ้นเมื่อมะม่วงติดโรคแอนแทรกโนสไปแล้ว [29]

### 5.3 ข้อเสนอแนะสำหรับงานวิจัยต่อไป

แบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีที่ได้จากการทดลองทั้งแบบอินไลน์และออฟไลน์ สำหรับการทำนายค่าปริมาณของแข็งละลายน้ำได้สามารถนำมาแบ่งกลุ่มได้อย่างหยาบๆ และแบบจำลอง pH สามารถนำมาคัดเลือกและประเมินค่าอย่างหยาบๆได้ หากต้องการให้แบบจำลองนี้มีความครอบคลุมมีความแม่นยำและเที่ยงเพิ่มขึ้น ควรมีการเพิ่มตัวอย่าง ทั้งในฤดูและนอกฤดู ที่ลักษณะผิวของเปลือกมีรอยจุดดำกระจายซึ่งอาจเป็นอาการโรคแอนแทรกโนส สีผิวเปลือกไม่สม่ำเสมอในระดับต่างๆกัน ซึ่งถูกส่งเข้ามาแปรรูปในโรงงาน พร้อมทั้งที่มีระดับน้อยกว่าและมากกว่า

## เอกสารอ้างอิง

- [1] กรมวิชาการเกษตร. “คู่มือการปลูกมะม่วง.” [Online]. เข้าถึงได้จาก : <http://www.phitsanulok.doae.go.th/2016/images/amper/KMMango1.pdf>. 2561.
- [2] กระทรวงพาณิชย์. “ตลาดส่งออกของไทย.” [Online]. เข้าถึงได้จาก : <http://tradereport.moc.go.th/Report/Default.aspx?Report=MenucomRecode&ImExType=1&Lang=Th>. 2561.
- [3] กลุ่มส่งเสริมการเกษตร. “ผลิตภัณฑ์มะม่วง.” [Online]. เข้าถึงได้จาก : <http://www.arda.or.th/datas/file/1473755018.pdf/>. 2562.
- [4] พีชเกษตร. “มะม่วงน้ำดอกไม้สีทอง.” [Online]. เข้าถึงได้จาก : <https://puechkaset.com/>. 2562.
- [5] ลักขิกา คำศรี. “การพัฒนาผลิตภัณฑ์ใส่พายมะม่วงน้ำดอกไม้.” มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์. 2554.
- [6] กรมส่งเสริมการเกษตร. “โรคจุดดำหรือแอนแทรกโนส ในมะม่วง” [Online]. เข้าถึงได้จาก : [https://reportnews.doae.go.th/fileupload/pr\\_form/20210605enxSfkyw2XVNxXmyQlpkoH4ah8lGto5X.pdf](https://reportnews.doae.go.th/fileupload/pr_form/20210605enxSfkyw2XVNxXmyQlpkoH4ah8lGto5X.pdf). 2565.
- [7] Food Network Solution ศูนย์ข้อมูลเครือข่ายอาหารครบวงจร. “Total Soluble Solids/ของแข็งทั้งหมดที่ละลายน้ำได้.” [Online]. เข้าถึงได้จาก : <http://www.foodnetworksolution.com/wiki/word/0997/total-soluble-solids->. 2554.
- [8] วิกิพีเดีย สารานุกรมเสรี. “น้ำตาล.” [Online]. เข้าถึงได้จาก : <https://th.wikipedia.org/wiki/%E0%B8%99%E0%B9%89%E0%B8%B3%E0%B8%95%E0%B8%B2%E0%B8%A5>. 2562.
- [9] ดวงตรา กษานติกุล สายชล เกตุษาและสุรพงษ์ โกสิยะจินดา. “การเจริญเติบโตและการเปลี่ยนแปลงทางชีวเคมีของผลมะม่วง (*Mangifera indica* L.) พันธุ์น้ำดอกไม้.” วารสารวิทยาศาสตร์เกษตรแห่งประเทศไทย. 2527.
- [10] Food Network Solution ศูนย์ข้อมูลเครือข่ายอาหารครบวงจร. “Refractometer/มาตรดัชนีหักเห” [Online]. เข้าถึงได้จาก : <http://www.foodnetworksolution.com/wiki/word/0469/refractometer-%E0%B8%A1%E0%B8%B>. 2562.

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

- [11] สถาบันวิจัยวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยีแห่งประเทศไทย (วท.). “อิทธิพลของค่า pH ของอาหาร” [Online]. เข้าถึงได้จาก : <http://www.dinictech.most.go.th/online/techlist/attachFile/201310191159481.pdf>. 2562.
- [12] สุขสม แจ้งสว่าง. “หลักการวัดค่า pH และข้อควรคำนึงถึงในการใช้และบำรุงรักษา pH electrode” [Online]. เข้าได้จาก : [https://water.co.th/download/63-หลักการวัดค่า\\_pH\\_และข้อควรคำนึงถึงการใช้และ\\_บำรุงรักษา\\_pH\\_electrode.pdf](https://water.co.th/download/63-หลักการวัดค่า_pH_และข้อควรคำนึงถึงการใช้และ_บำรุงรักษา_pH_electrode.pdf). 2542.
- [13] ปานมนัส ศิริสมบุญ, 2556. “เทคโนโลยีเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับผลผลิตเกษตรและอาหาร” [Online]. เข้าได้จาก : [www.nirsresearch.com](http://www.nirsresearch.com). 2562.
- [14] ชงชัย สุวรรณสิขณน์. “การวิเคราะห์สเปกตรัม NIR ทั้งเชิงปริมาณและเชิงคุณภาพ Data Analysis of NIR Spectra: Qualitative and Quantitative Analysis.” 2545. หน้า 116 –119.
- [15] วิชัย ธีวระกุล และ และคณะ. “การประยุกต์ สเปกโตรสโกปีในเคมีอินทรีย์.” 2527. หน้า 298.
- [16] Ozaki, et al. “Near Infrared Spectroscopy in Food Science and Technology.” US: John Wiley & Sons. 2007.
- [17] Conzen, J. P. “Multivariate Calibration (A Practical Guide for Developing Method in the Quantitative Analytical Chemistry).” 2<sup>nd</sup> ed. Germany: Bruker Optik GmbH. 2006.
- [18] ชงชัย สุวรรณสิขณน์ และ ปิติพร ฤทธิเรืองเดช “การวิเคราะห์เชิงปริมาณและคุณภาพ เทคโนโลยี อินฟราเรดย่านใกล้และการประยุกต์ใช้ในอุตสาหกรรม.” สถาบันค้นคว้าและพัฒนาผลผลิตทางการเกษตรและอุตสาหกรรม มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์. 2555.
- [19] Williams. “Near-infrared Technology-Getting the Best Out of Light.” PDK Grain, Nanaimo, British Columbia, and Winnipeg, Manitoba, Canada. 2007.
- [20] B.G. Osborne, T. Fearn and P.H. Hindle. “Practical NIR spectroscopy with applications in food and beverage analysis”. Second edition. Longman Singapore Publishers. 1993.

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

- [21] Haiyan Cen, Yong He. “**Measurement of Soluble Solids Contents and pH in Orange Juice Using Chemometrics and Vis-NIRS**” J. Agric. Food Chem. 2006, 54, 7437-7443.
- [22] Fei Liu, Yong He. “**Feasibility of the use of visible and near infrared spectroscopy to assess soluble solids content and pH of rice wines**” College of Biosystems Engineering and Food Science, Zhejiang University, 268 Kaixuan Road, Hangzhou, Zhejiang Province 310029, PR China
- [23] Fang Cao, Di Wu. “**Soluble solids content and pH prediction and varieties discrimination of grapes based on visible–near infrared spectroscopy**” College of Biosystems Engineering and Food Science, Zhejiang University, 268 Kaixuan Road, Hangzhou, Zhejiang Province 310029, PR China.
- [24] Fei Liu, Yong He. “**Comparison of calibrations for the determination of soluble solids content and pH of rice vinegars using visible and short-wave near infrared spectroscopy**”. College of Biosystems Engineering and Food Science, Zhejiang University, 268 Kaixuan Road, Hangzhou, China.
- [25] Maimunah Mohd Ali. “**Prediction of total soluble solids and pH in banana using near infrared spectroscopy**” Journal of Engineering Science and Technology. 2018. 13(1):254-264.
- [26] Sneha Sharma. “**Online and Offline Measurement of Total Soluble Solids in Mango (Mangifera Indica L. CV Namdokmai Sithong) Using Near Infrared Spectroscopy**” (Master’s Thesis, Faculty of Engineering, King Mongkut’s Institute of Technology Ladkrabang, 2018, p.l.
- [27] Xuan Chu, Jiazheng Chen, Yu Tong and Shenjia Gao. “**Evaluating Growth of Colletotrichum species by Near Infrared (NIR) Hyperspectral Imagine.**”. Academy of Contemporary Agricultural Engineering Innovations, Zhongkai University of Agriculture and Engineering, China. 2019, p.257-262.

- [28] Yue Wu, Jun-Hu Cheng and Da-Wen. “Subcellular damages of *Colletotrichum asianum* and inhibition of mango anthracnose by dielectric barrier discharge plasma” School of Food Science and Engineering, South China University of Technology, Guangzhou 510641, China.
- [29] Niren Majumdar and Nakul Chandra Mandal. “Effect of pH on Mycelial Growth and Sporulation of Postharvest Pathogen *Colletotrichum gloeosporioides* (Penz.) Penz & Sacc. and *Pestalotiopsis mangiferae* (Henn.) Steyaert” International Journal of Bio-resource and Stress Management 2018. 9(3):416-420.



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



ภาคผนวก ก

## ข้อมูลจากการทดลอง และผลการวิเคราะห์ข้อมูล

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ก.1 ข้อมูลดิบการวัดค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองวัดโดย Refractometer ในการทดลองเพื่อสร้างแบบจำลองการสแกนแบบอินไลน์และออฟไลน์

Time	Sample	Total Soluble Solids (%Brix)		
		Small	Medium	Big
1	1A	13.98	17.40	17.4
	2A	13.66	16.70	18.04
	3A	13.58	16.00	18.16
	4A	12.04	17.40	17.68
	5A	14.87	16.20	18.62
	6A	14.32	14.70	17.62
	7A	14.62	14.70	16.4
	8A	16.33	14.30	14.18
2	1A	16.62	19.77	16.04
	2A	17.13	18.76	16.72
	3A	17.29	14.63	15.17
	4A	17.57	19.06	16.24
	5A	19.91	17.08	19.28
	6A	17.04	16.47	
	7A	18.99	14.83	
	8A	18.14	15.89	
	9A		15.46	
	10A		19.16	
	11A		17.79	
	12A		18.31	
3	1A	11.65	17.40	16.60
	2A	15.78	17.10	17.00
	3A	19.71	18.10	14.00
	4A	13.38	13.20	17.40
	5A	13.22	11.80	13.20

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ก.1 (ต่อ) ข้อมูลดิบการวัดค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทอง วัดโดย Refractometer ในการทดลองเพื่อสร้างแบบจำลองการสแกนแบบอินไลน์ และออฟไลน์

Time	Sample	Total Soluble Solids (%Brix)		
		Small	Medium	Big
3	6A	16.56	17.80	
	7A	19.78	17.40	
	8A	17.76	11.40	
	9A		11.40	
	10A		12.51	
	11A		14.70	
4	1A	16.70	16.50	18.78
	2A	16.20	17.60	19.90
	3A	17.70	15.90	19.57
	4A	17.50	18.80	22.61
	5A	17.10	16.00	22.25
	6A	17.90	14.50	24.10
	7A	16.80	16.50	20.94
	8A	17.10	16.10	21.10
	9A		16.50	23.40
	10A		15.40	
	11A		14.30	
	12A		17.00	
	13A		17.00	
	14A		17.80	
15A		16.20		
16A		18.10		
17A		17.90		
5	1A	18.01	18.30	21.04
	2A	20.08	17.40	18.94
	3A	19.34	19.40	21.05

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ก.1 (ต่อ) ข้อมูลดิบการวัดค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทอง วัดโดย Refractometer ในการทดลองเพื่อสร้างแบบจำลองการสแกนแบบ อินไลน์และออฟไลน์

Time	Sample	Total Soluble Solids (%Brix)		
		Small	Medium	Big
5	4A	16.36	21.50	20.32
	5A	16.82	18.70	16.37
	6A	19.87	19.80	19.41
	7A	18.46	19.70	19.61
	8A	16.15	18.90	13.54
	9A	16.35	19.20	17.97
	10A			19.54
6	1A	18.01	18.82	18.68
	2A	20.31	18.79	18.76
	3A	19.13	20.21	21.08
	4A	21.48	19.48	17.37
	5A	18.53	21.18	17.05
	6A	16.45	20.46	20.35
	7A	17.68	14.86	18.72
	8A	21.03	23.07	20.33
	9A		22.10	20.50
	10A		22.37	21.60
7	1A	22.50	18.44	21.40
	2A	23.10	20.37	22.30
	3A	20.50	19.87	21.50
	4A	22.10	18.43	20.90
	5A	23.20	17.40	20.70
	6A	21.30	20.91	21.90
	7A	19.90	19.58	20.70
	8A	20.70	22.96	22.50
	9A	20.30	16.42	23.60

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ก.1 (ต่อ) ข้อมูลดิบการวัดค่าปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทอง  
วัดโดย Refractometer ในการทดลองเพื่อสร้างแบบจำลองการสแกนแบบ  
อินไลน์และออฟไลน์

Time	Sample	Total Soluble Solids (%Brix)		
		Small	Medium	Big
7	10A	20.50	16.20	18.70
8	1A	17.80	19.10	18.30
	2A	19.60	20.01	19.20
	3A	19.90	19.37	21.10
	4A	20.80	20.87	20.50
	5A	17.90	20.37	20.60
	6A	19.90	19.90	19.51
	7A	20.50	18.89	19.71
	8A	19.70	17.57	18.94
	9A	20.70	17.30	18.56
	10A	20.10	17.34	22.05
9	1A	19.80	21.01	14.20
	2A	17.30	14.18	16.30
	3A	14.50	14.02	18.30
	4A	14.10	17.58	19.90
	5A	15.60	19.33	16.30
	6A	15.80	21.64	17.50
	7A	19.30	14.36	14.20
	8A	16.70	16.01	19.30
	9A	17.90	19.13	
	10A	20.10	20.86	

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ก.2 (ต่อ) ข้อมูลดิบการวัดค่า pH ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองวัดโดย pH meter ในการทดลองเพื่อสร้างแบบจำลองการสแกนแบบอินไลน์และออฟไลน์

Time	Sample	pH		
		Small	Medium	Big
1	1B	3.48	3.67	3.79
	2B	3.77	3.94	3.98
	3B	3.62	3.46	3.99
	4B	3.20	3.95	3.94
	5B	3.60	3.81	3.85
	6B	3.67	3.62	3.87
	7B	3.90	3.74	4.07
	8B	3.88	3.78	3.69
2	1B	3.83	3.82	4.03
	2B	3.55	3.68	4.23
	3B	3.84	3.50	4.40
	4B	4.19	4.28	4.45
	5B	4.67	3.61	4.36
	6B	3.64	4.06	
	7B	3.80	3.57	
	8B	3.70	4.44	
	9B		4.49	
	10B		3.74	
	11B		3.74	
	12B		4.32	
3	1B	3.54	3.90	3.85
	2B	3.73	4.04	4.49
	3B	4.12	3.83	3.39
	4B	3.43	4.09	3.42
	5B	3.55	3.21	3.55
	6B	3.81	3.20	

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ก.2 (ต่อ) ข้อมูลดิบการวัดค่า pH ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองวัดโดย pH meter ในการทดลองเพื่อสร้างแบบจำลองการสแกนแบบอินไลน์และออฟไลน์

Time	Sample	pH		
		Small	Medium	Big
3	7B	4.17	3.73	
	8B	3.93	3.94	
	9B		3.17	
	10B		3.05	
	11B		3.08	
4	1B	5.10	3.56	4.74
	2B	5.22	5.23	4.84
	3B	5.11	5.22	5.24
	4B	5.53	5.42	4.59
	5B	5.14	5.68	4.86
	6B	5.71	5.09	4.36
	7B	5.20	4.71	4.72
	8B	5.15	5.04	4.89
	9B		5.41	5.05
	10B		5.58	
	11B		5.25	
	12B		5.28	
	13B		5.16	
	14B		4.84	
	15B		5.19	
	16B		5.41	
	17B		4.98	
5	1B	5.56	5.53	5.04
	2B	6.11	5.10	4.74
	3B	6.00	5.06	4.41
	4B	5.32	5.96	4.81
	5B	4.99	5.94	4.87

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ก.2 (ต่อ) ข้อมูลดิบการวัดค่า pH ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองวัดโดย pH meter ในการทดลองเพื่อสร้างแบบจำลองการสแกนแบบออนไลน์และออฟไลน์

Time	Sample	pH		
		Small	Medium	Big
5	6B	5.98	6.14	4.86
	7B	5.53	6.03	4.44
	8B	4.93	5.44	4.86
	9B	5.16	5.30	4.95
	10B			4.75
6	1B	4.72	5.85	3.88
	2B	5.21	4.40	4.68
	3B	4.94	4.34	4.09
	4B	4.68	4.24	3.86
	5B	4.82	4.80	3.68
	6B	4.63	5.06	3.93
	7B	4.75	5.28	3.79
	8B	4.72	4.40	4.69
	9B		4.67	4.21
	10B		4.43	3.99
7	1B	4.68	4.83	5.39
	2B	4.79	4.82	5.22
	3B	4.03	4.81	5.44
	4B	3.92	4.63	5.08
	5B	4.27	4.73	4.91
	6B	4.10	4.53	4.81
	7B	3.84	4.42	4.73
	8B	4.07	4.66	4.74
	9B	3.84	4.51	5.05
	10B	3.78	4.93	5.71
8	1B	4.79	4.94	5.30
	2B	4.03	5.05	5.08

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ก.2 (ต่อ) ข้อมูลดิบการวัดค่า pH ของมะม่วงน้ำดอกไม้สีทองวัดโดย pH meter ในการทดลองเพื่อสร้างแบบจำลองการสแกนแบบอินไลน์และออฟไลน์

Time	Sample	pH			
		Small	Medium	Big	
8	3B	3.92	4.56	5.03	
	4B	4.10	3.90	5.02	
	5B	3.90	4.49	5.79	
	6B	3.84	3.89	5.42	
	7B	4.07	3.90	5.07	
	8B	3.84	4.91	3.31	
	9B	3.78	3.87	5.32	
	10B	4.31	4.18	3.66	
	9	1B	5.00	4.57	4.25
		2B	4.78	4.96	4.31
3B		5.03	4.97	4.05	
4B		4.90	5.30	4.60	
5B		4.42	5.18	4.30	
6B		4.87	5.29	4.46	
7B		4.80	4.26	4.08	
8B		4.68	5.11	5.05	
9B		4.99	4.72		
10B		5.00	4.81		

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ก.3 (ต่อ) ผลการวิเคราะห์ด้วยวิธีทางคณิตศาสตร์เบื้องต้นของการสแกนแบบออนไลน์ที่ความยาวคลื่น 700 - 1000 นาโนเมตร ของค่า pH

	pretreatment	Regions (nm)	PLS factor	Calibration		Validation		
				R <sup>2</sup>	RMSE	RPD	RMSEP	Bias
1	PLS	700-1000	7	0.73	0.34	2.12	0.33	-0.01
2	PLS_SmoothingSGolay_NIR_poly2_7_7	700-1000	6	0.64	0.39	1.49	0.47	0.03
3	PLS_SmoothingSGolay_NIR_poly2_10_10	700-1000	6	0.66	0.38	1.49	0.47	0.04
4	PLS_SmoothingSGolay_NIR_poly3_7_7	700-1000	6	0.64	0.39	1.49	0.47	0.03
5	PLS_SmoothingSGolay_NIR_poly3_10_10	700-1000	6	0.66	0.38	1.49	0.47	0.04
6	PLS_SmoothingSGolay_NIR_poly4_7_7	700-1000	6	0.67	0.38	1.56	0.44	0.02
7	PLS_SmoothingSGolay_NIR_poly4_10_10	700-1000	6	0.66	0.39	1.56	0.45	0.03
8	PLS_SmoothingSGolay+Normalize_nir_area	700-1000	6	0.43	0.49	1.15	0.61	-0.02
9	PLS_SmoothingSGolay+Normalize_nir_unit	700-1000	6	0.45	0.49	1.15	0.61	-0.02
10	PLS_SmoothingSGolay+Normalize_nir_mean	700-1000	6	0.44	0.49	1.15	0.61	-0.02
11	PLS_SmoothingSGolay+Normalize_nir_max	700-1000	6	0.53	0.45	1.25	0.56	-0.02
12	PLS_SmoothingSGolay+Normalize_nir_range	700-1000	6	0.67	0.38	1.59	0.44	0.04
13	PLS_SmoothingSGolay+Normalize_nir_peak_1	700-1000	5	0.36	0.52	1.23	0.57	-0.02
14	PLS_SmoothingSGolay+DerivativeSG_first_poly2_5_5	700-1000	5	0.67	0.38	1.43	0.49	0.04
15	PLS_SmoothingSGolay+DerivativeSG_first_poly2_10_10	700-1000	5	0.62	0.40	1.40	0.50	0.03
16	PLS_SmoothingSGolay+DerivativeSG_second_poly2_5_5	700-1000	5	0.73	0.34	1.35	0.51	0.00

ตารางที่ ก.3 (ต่อ) ผลการวิเคราะห์ด้วยวิธีทางคณิตศาสตร์เบื้องต้นของการสแกนแบบอินไลน์ที่ความยาวคลื่น 700 - 1000 นาโนเมตร ของค่า pH

	pretreatment	Regions (nm)	PLS factor	Calibration		Validation		
				R <sup>2</sup>	RMSE	RPD	RMSEP	Bias
17	PLS_SmoothingSGolay+DerivativeSG_second_poly2_10_10	700-1000	5	0.61	0.40	1.37	0.51	0.02
18	PLS_SmoothingSGolay+Baseline_baselineoffset	700-1000	6	0.62	0.40	1.43	0.49	0.00
19	PLS_SmoothingSGolay+Baseline_linraebaseline	700-1000	6	0.62	0.40	1.43	0.49	0.01
20	PLS_SmoothingSGolay+Baseline_baselineoffset_linraebaseline	700-1000	6	0.63	0.40	1.37	0.51	0.02
21	PLS_SmoothingSGolay+SNV	700-1000	5	0.65	0.39	1.56	0.45	0.04
22	PLS_SmoothingSGolay+Detrend	700-1000	3	0.60	0.41	1.40	0.50	0.02
23	PLS_SmoothingSGolay+SNV_Detrend	700-1000	4	0.64	0.40	1.56	0.45	0.04
24	PLS_SmoothingSGolay+MSC	700-1000	3	0.40	0.51	1.32	0.53	0.02
25	PLS_SmoothingSGolay+OSC	700-1000	2	0.66	0.38	1.49	0.47	0.04
26	PLS_SmoothingSGolay+Deresolve	700-1000	7	0.68	0.38	1.49	0.47	0.04

ตารางที่ ก.4 ผลการวิเคราะห์ด้วยวิธีทางคณิตศาสตร์เบื้องต้นของการสแกนแบบอินไลน์ที่ความยาวคลื่น 400 - 1030 นาโนเมตร ของค่า pH

	pretreatment	Regions (nm)	PLS factor	Calibration		Validation		
				R <sup>2</sup>	RMSE	RPD	RMSEP	Bias
1	PLS	400-1030	7	0.73	0.32	2.12	0.33	-0.01
2	PLS_SmoothingSGolay_VIS_poly2_7_7	400-1030	7	0.71	0.35	1.67	0.41	0.01
3	PLS_SmoothingSGolay_VIS_poly2_10_10	400-1030	7	0.65	0.38	1.43	0.49	-0.01
4	PLS_SmoothingSGolay+Normalize_VIS_area	400-1030	7	0.70	0.36	1.67	0.42	0.01
5	PLS_SmoothingSGolay+Normalize_VIS_unit	400-1030	7	0.65	0.38	1.43	0.48	-0.01
6	PLS_SmoothingSGolay+Normalize_VIS_mean	400-1030	7	0.65	0.38	1.43	0.48	-0.01
7	PLS_SmoothingSGolay+Normalize_VIS_max	400-1030	7	0.65	0.38	1.43	0.48	-0.01
8	PLS_SmoothingSGolay+Normalize_VIS_range	400-1030	7	0.71	0.35	1.75	0.40	0.01
9	PLS_SmoothingSGolay+Normalize_VIS_peak_168	400-1030	5	0.51	0.45	1.43	0.49	0.00
10	PLS_SmoothingSGolay+DerivativeSG_first_poly2_5_5	400-1030	4	0.72	0.34	1.67	0.42	0.05
11	PLS_SmoothingSGolay+DerivativeSG_first_poly2_10_10	400-1030	5	0.73	0.34	1.67	0.42	0.05
12	PLS_SmoothingSGolay+DerivativeSG_second_poly2_5_5	400-1030	5	0.76	0.32	1.40	0.49	-0.03
13	PLS_SmoothingSGolay+DerivativeSG_second_poly2_10_10	400-1030	3	0.60	0.41	1.43	0.49	0.04
14	PLS_SmoothingSGolay+Baseline_baselineofset	400-1030	7	0.68	0.37	1.67	0.42	0.01
15	PLS_SmoothingSGolay+Baseline_linraebaseline	400-1030	7	0.65	0.38	1.56	0.44	0.02

ตารางที่ ก.4 (ต่อ) ผลการวิเคราะห์ด้วยวิธีทางคณิตศาสตร์เบื้องต้นของการสแกนแบบอินไลน์ที่ความยาวคลื่น 400 - 1030 นาโนเมตร ของค่า pH

	pretreatment	Regions (nm)	PLS factor	Calibration		Validation		
				R <sup>2</sup>	RMSE	RPD	RMSEP	Bias
16	PLS_SmoothingSGolay+Baseline_baselineoffset_linraebaseline	400-1030	7	0.65	0.38	1.63	0.43	0.01
17	PLS_SmoothingSGolay+SNV	400-1030	7	0.74	0.33	1.75	0.40	0.02
18	PLS_SmoothingSGolay+Detrend	400-1030	7	0.75	0.33	1.75	0.40	0.02
19	PLS_SmoothingSGolay+SNV_Detrend	400-1030	5	0.71	0.35	1.75	0.40	0.01
20	PLS_SmoothingSGolay+MSC	400-1030	6	0.71	0.35	1.75	0.40	0.01
21	PLS_SmoothingSGolay+OSC	400-1030	2	0.74	0.33	1.67	0.42	0.01
22	PLS_SmoothingSGolay+Deresolve	400-1030	7	0.70	0.35	1.71	0.41	0.01

ตารางที่ ก.5 ผลการวิเคราะห์ด้วยวิธีทางคณิตศาสตร์เบื้องต้นของการสแกนแบบอินไลน์ที่ความยาวคลื่น 700 - 1000 นาโนเมตร ของปริมาณของแข็งละลายน้ำได้ (TSS)

	pretreatment	Regions (nm)	PLS factor	Calibration		Validation		
				R <sup>2</sup>	RMSE	RPD	RMSEP	Bias
1	PLS	700-1000	5	0.59	1.70	1.17	2.22	0.18
2	PLS_SmoothingSGolay_NIR_poly2_7_7	700-1000	5	0.54	1.79	1.19	2.16	0.16
3	PLS_SmoothingSGolay_NIR_poly2_10_10	700-1000	5	0.52	1.84	1.22	2.12	0.21
4	PLS_SmoothingSGolay+Normalize_nir_area	700-1000	2	0.32	2.20	1.26	2.06	0.28
5	PLS_SmoothingSGolay+Normalize_nir_unit	700-1000	2	0.32	2.20	1.26	2.06	0.28
6	PLS_SmoothingSGolay+Normalize_nir_mean	700-1000	2	0.32	2.20	1.26	2.06	0.28
7	PLS_SmoothingSGolay+Normalize_nir_max	700-1000	2	0.32	2.20	1.26	2.06	0.28
8	PLS_SmoothingSGolay+Normalize_nir_range	700-1000	3	0.42	2.02	1.29	2.01	0.25
9	PLS_SmoothingSGolay+Normalize_nir_peak_168	700-1000	2	0.32	2.20	1.26	2.05	0.33
10	PLS_SmoothingSGolay+DerivativeSG_first_poly2_5_5	700-1000	2	0.46	1.96	1.23	2.09	0.16
11	PLS_SmoothingSGolay+DerivativeSG_first_poly2_10_10	700-1000	2	0.41	2.04	1.26	2.05	-0.02
12	PLS_SmoothingSGolay+DerivativeSG_second_poly2_5_5	700-1000	1	0.24	2.32	1.14	2.27	-0.03
13	PLS_SmoothingSGolay+DerivativeSG_second_poly2_10_10	700-1000	2	0.38	2.09	1.18	2.18	0.15
14	PLS_SmoothingSGolay+Baseline_baselineoffset	700-1000	2	0.32	2.20	1.31	1.98	0.24
15	PLS_SmoothingSGolay+Baseline_linraebaseline	700-1000	1	0.32	2.20	1.25	2.08	0.22

ตารางที่ ก.5 (ต่อ) ผลการวิเคราะห์ด้วยวิธีทางคณิตศาสตร์เบื้องต้นของการสแกนแบบอินไลน์ที่ความยาวคลื่น 700 - 1000 นาโนเมตร ของปริมาณของแข็งละลายน้ำได้ (TSS)

	pretreatment	Regions (nm)	PLS factor	Calibration		Validation		
				R <sup>2</sup>	RMSE	RPD	RMSEP	Bias
16	PLS_SmoothingSGolay+Baseline_baselineoffset_linraebaseline	700-1000	4	0.41	2.04	1.17	2.18	0.04
17	PLS_SmoothingSGolay+SNV	700-1000	4	0.46	1.96	1.31	1.98	0.21
18	PLS_SmoothingSGolay+Detrend	700-1000	3	0.45	1.98	1.29	2.01	0.26
19	PLS_SmoothingSGolay+SNV_Detrend	700-1000	3	0.45	1.98	1.29	2.01	0.26
20	PLS_SmoothingSGolay+MSC	700-1000	2	0.23	2.34	0.93	2.79	0.43
21	PLS_SmoothingSGolay+OSC	700-1000	2	0.51	1.86	1.23	2.09	0.08
22	PLS_SmoothingSGolay+Deresolve	700-1000	5	0.54	1.80	1.21	2.15	0.17

ตารางที่ ก.6 ผลการวิเคราะห์ด้วยวิธีทางคณิตศาสตร์เบื้องต้นของการสแกนแบบอินไลน์ที่ความยาวคลื่น 400 - 1030 นาโนเมตร ของปริมาณของแข็งละลายน้ำได้(TSS)

	pretreatment	Regions (nm)	PLS factor	Calibration		Validation		
				R <sup>2</sup>	RMSE	RPD	RMSEP	Bias
1	PLS	400-1030	5.00	0.49	1.91	1.32	1.95	0.09
2	PLS_SmoothingSGolay_VIS_poly2_7_7	400-1030	5.00	0.49	1.90	1.23	2.10	0.16
3	PLS_SmoothingSGolay_VIS_poly2_10_10	400-1030	5.00	0.49	1.90	1.23	2.10	0.16
4	PLS_SmoothingSGolay_VIS_poly3_7_7	400-1031	5.00	0.49	1.90	1.23	2.10	0.16
5	PLS_SmoothingSGolay_VIS_poly3_10_10	400-1032	6.00	0.55	1.78	1.23	2.10	0.06
6	PLS_SmoothingSGolay_VIS_poly4_7_7	400-1033	5.00	0.49	1.90	1.22	2.11	0.15
7	PLS_SmoothingSGolay_VIS_poly4_10_10	400-1034	5.00	0.49	1.90	1.23	2.10	0.16
8	PLS_SmoothingSGolay+Normalize_VIS_area	400-1030	5.00	0.52	1.84	1.17	2.19	0.04
9	PLS_SmoothingSGolay+Normalize_VIS_unit	400-1030	5.00	0.53	1.84	1.19	2.17	0.04
10	PLS_SmoothingSGolay+Normalize_VIS_mean	400-1030	5.00	0.52	1.84	1.17	2.19	0.04
11	PLS_SmoothingSGolay+Normalize_VIS_max	400-1030	6.00	0.55	1.79	1.15	2.24	0.06
12	PLS_SmoothingSGolay+Normalize_VIS_range	400-1030	5.00	0.58	1.72	1.20	2.13	0.06
13	PLS_SmoothingSGolay+Normalize_VIS_peak_168	400-1030	5.00	0.51	1.86	1.16	2.22	0.05

ตารางที่ ก.6 (ต่อ) ผลการวิเคราะห์ด้วยวิธีทางคณิตศาสตร์เบื้องต้นของการสแกนแบบอินไลน์ที่ความยาวคลื่น 400 - 1030 นาโนเมตร ของปริมาณของแข็งละลายน้ำได้ (TSS)

	pretreatment	Regions (nm)	PLS factor	Calibration		Validation		
				R <sup>2</sup>	RMSE	RPD	RMSEP	Bias
14	PLS_SmoothingSGolay+DerivativeSG_first_poly2_5_5	400-1030	3.00	0.59	1.72	1.17	2.22	0.26
15	PLS_SmoothingSGolay+DerivativeSG_first_poly2_10_10	400-1030	3.00	0.55	1.79	1.24	2.08	0.21
16	PLS_SmoothingSGolay+DerivativeSG_second_poly2_5_5	400-1030	2.00	0.47	1.95	1.08	2.39	0.35
17	PLS_SmoothingSGolay+DerivativeSG_second_poly2_10_10	400-1030	3.00	0.60	1.68	1.07	2.43	0.21
18	PLS_SmoothingSGolay+Baseline_baselineoffset	400-1030	7.00	0.62	1.65	1.22	2.11	0.08
19	PLS_SmoothingSGolay+Baseline_linraebaseline	400-1030	7.00	0.61	1.67	1.22	2.12	0.00
20	PLS_SmoothingSGolay+Baseline_baselineoffset_linraebaseline	400-1030	2.00	0.34	1.91	1.09	2.48	0.77
21	PLS_SmoothingSGolay+SNV	400-1030	5.00	0.59	1.71	1.27	2.03	0.09
22	PLS_SmoothingSGolay+Detrend	400-1030	5.00	0.59	1.71	1.26	2.05	0.13
23	PLS_SmoothingSGolay+SNV_Detrend	400-1030	5.00	0.59	1.71	1.27	2.03	0.11
24	PLS_SmoothingSGolay+MSC	400-1030	5.00	0.59	1.71	1.27	2.05	0.06
25	PLS_SmoothingSGolay+OSC	400-1030	2.00	0.65	1.56	1.16	2.24	0.10
26	PLS_SmoothingSGolay+Deresolve	400-1031	5.00	0.49	1.90	1.23	2.10	0.16



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ข1 การสั่นสะเทือนของพันธะเมื่อดูคลื่นคลื่นเนียร์อินฟราเรดที่ความยาวคลื่นต่างๆ [20]

wavelength (nm)	bond vibration	structure
713	C-H str. fourth overtone	benzene
738	O-H str. third overtone	ROH
740	C-H str. fourth overtone	CH <sub>3</sub>
746	C-H str. fourth overtone	CH <sub>2</sub>
747	O-H str. third overtone	ArOH
760	O-H str. third overtone	H <sub>2</sub> O
762	C-H str. fourth overtone	CH <sub>2</sub>
779	N-H str. third overtone	RNH <sub>2</sub>
790	N-H str. third overtone	ArNH <sub>2</sub>
806	N-H str. third overtone	RNH <sub>2</sub>
808	2 x N-H str. 2 x N-H def.+ 2 x C-N str.	RNHR'
815	N-H str. third overtone	RNHR'
832	2 x N-H str. 2 x N-H def.+ 2 x C-N str.	RNHR'
840	3 x C-H str. + 2 x C-C str.	benzene
874	C-H str. third overtone	benzene
880	C-H str. third overtone	CHCl <sub>3</sub>
900	C-H str. third overtone	CH <sub>3</sub>
910	C-H str. third overtone	protein
913	C-H str. third overtone	CH <sub>2</sub>
928	C-H str. third overtone	Oil
938	C-H str. third overtone	CH <sub>2</sub>
970	O-H str. second overtone	ROH, H <sub>2</sub> O
990	O-H str. second overtone	starch
1000	O-H str. second overtone	ArOH
1015	2 x C-H str. + 3 x C-H def.	CH <sub>3</sub>
1020	2 x N-H str. + 2 x amide I	protein
1020	N-H str. second overtone	ArNH <sub>2</sub>
1030	N-H str. second overtone	RNH <sub>2</sub>

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ข1 (ต่อ) การสั่นสะเทือนของพันธะเมื่อดูดกลืนคลื่นเนียร์อินฟราเรดที่ความยาวคลื่นต่างๆ [20]

wavelength (nm)	bond vibration	structure
1037	2 x C-H str. +2 x C-H def. + (CH <sub>2</sub> ) <sub>n</sub>	oil
1053	2 x C-H str. +2 x C-H def. + (CH <sub>2</sub> ) <sub>n</sub>	CH <sub>20</sub>
1060	N-H str. second overtone	RNH <sub>2</sub>
1080	2 x C-H str. + 2 x C-C str.	benzene
1097	2 x C-H str. + 2 x C-C str.	cyclopropane
1143	C-H str. second overtone	aromatic
1152	C-H str. second overtone	CH <sub>3</sub>
1170	C-H str. second overtone	HC=CH
1195	C-H str. second overtone	CH <sub>3</sub>
1215	C-H str. second overtone	CH <sub>2</sub>
1225	C-H str. second overtone	CH
1360	2 x C-H str. +2 x C-H def.	CH <sub>3</sub>
1395	2 x C-H str. +2 x C-H def.	CH <sub>2</sub>
1410	O-H str. first overtone	ROH
1415	2 x C-H str. +2 x C-H def.	CH <sub>2</sub>
1417	2 x C-H str. +2 x C-H def.	aromatic
1420	O-H str. first overtone	ArOH
1430	N-H str. first overtone	CONH <sub>2</sub>
1440	O-H str. first overtone	sucrose, starch
1440	2 x C-H str. +2 x C-H def.	CH
1446	2 x C-H str. +2 x C-H def.	aromatic
1450	O-H str. first overtone	starch, H <sub>2</sub> O
1460	N-H str. first overtone	CONH <sub>2</sub>
1471	N-H str. first overtone	CONHR
1480	O-H str. first overtone (intramol. H-bond)	glucose
1483	N-H str. first overtone	CONH <sub>2</sub>
1490	N-H str. first overtone	CONHR
1490	N-H str. first overtone (intramol. H-bond)	CONH <sub>2</sub>

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ข1 (ต่อ) การสั่นสะเทือนของพันธะเมื่อดูคลื่นเคลื่อนเนียร์อินฟราเรดที่ความยาวคลื่นต่างๆ [20]

wavelength (nm)	bond vibration	structure
1490	O-H str. first overtone (intramol. H-bond)	cellulose
1492	N-H str. first overtone	ArNH <sub>2</sub>
1500	N-H str. first overtone	NH
1510	N-H str. first overtone	protein
1520	O-H str. first overtone	CONH <sub>2</sub>
1520	N-H str. first overtone (intramol. H-bond)	ROH
1528	O-H str. first overtone (intramol. H-bond)	starch
1530	N-H str. first overtone	RNH <sub>2</sub>
1533	C-H str. first overtone	C=H
1540	O-H str. first overtone (intramol. H-bond)	starch
1570	N-H str. first overtone	-CONH-
1580	O-H str. first overtone (intramol. H-bond)	starch, glucose
1620	C-H str. first overtone	=CH <sub>2</sub>
1645	C-H str. first overtone	R-CH-CH \  / O
1660	C-H str. first overtone	<i>cis</i> -RCH=CHR <sup>1</sup>
1685	C-H str. first overtone	aromatic
1695	C-H str. first overtone	CH <sub>3</sub>
1705	C-H str. first overtone	CH <sub>3</sub>
1725	C-H str. first overtone	CH <sub>2</sub>
1740	S-H str. first overtone	-SH
1765	C-H str. first overtone	CH <sub>2</sub>
1780	C-H str. first overtone	cellulose
1820	O-H str. + 2 x C-O str.	cellulose
1900	O-H str. +2 x C-O str.	starch
1900	C=O str. second overtone	-CO <sub>2</sub> H
1908	O-H str. first overtone	POH
1920	C=O str. second overtone	CONH

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ข1 (ต่อ) การสั่นสะเทือนของพันธะเมื่อดูคลื่นเคลื่อนเนียร์อินฟราเรดที่ความยาวคลื่น  
ต่างๆ [20]

wavelength (nm)	bond vibration	structure
1940	O-H str. +O-H def.	H <sub>2</sub> O
1950	C=O str. second overtone	-CO <sub>2</sub> R
1960	N-H sym. str. +amide II	CONH <sub>2</sub>
1980	N-H sym. str. +amide II	protein
2000	2 x O-H def. +C-O def.	starch
2000	N-H sym. str. +amide II	CONH <sub>2</sub> , CONHR
2030	C+O str. second overtone	CONH <sub>2</sub>
2050	N-H sym. str. +amide II	protein
2050	N-H asym. str. +amide III	CONH <sub>2</sub>
2080	O-H str. +O-H def.	ROH, sucrose,
2100	2 x O-H def. +2 x C-O str.	starch
2110	N-H sym. str. +amide III	CONH <sub>2</sub> , CONHR
2132	N-H str. +C=O str.	amino acid
2140	=C-H str. + C=C str.	HC=CH
2150	2 x amide I +amide III	CONH <sub>2</sub>
2160	2 x amide I +amide III	CONHR
2180	2 x amide I +amide III	protein
2190	CH <sub>2</sub> asym. str. +C=O str.	HC=CH
2200	C-H str. +C=O str.	-CHO
2242	N-H str. +NH; def	amino acid
2252	O-H str. +O-H def.	starch
2276	O-H str. + C-C str.	starch
2280	C-H str. + C-H def.	CH <sub>3</sub>
2294	N-H str. +C=O str.	amino acid
2310	C-H str. + C-H def.	CH <sub>2</sub>
2323	C-H str. + C-H def.	CH <sub>2</sub>
2336	C-H str. + C-H def.	Cellulose
2347	CH <sub>2</sub> sym. str. += CH <sub>2</sub> def.	HC=CHCH <sub>2</sub>

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ข1 (ต่อ) การสั่นสะเทือนของพันธะเมื่อดูดกลืนคลื่นเนียร์อินฟราเรดที่ความยาวคลื่นต่างๆ [20]

wavelength (nm)	bond vibration	structure
2352	C-H def. second overtone	cellulose
2380	O-H def. second overtone	ROH
2461	C-H str. +C-C str.	starch
2488	C-H str. + C-C str.	starch
2500	C-H str. + C-C str.	starch



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

## The overall precision test for near infrared scanning and reference method for the determination of soluble solids content and pH of mango for processing factory

Maphatsaman Saksangiam<sup>1\*</sup> and Panmanee Sirisomboon<sup>1</sup>

<sup>1</sup>King Mongkut's Institute of Technology Ladkrabang, Department of Agricultural Engineering, Faculty of Engineering, Bangkok, Thailand

**Abstract.** Near infrared (NIR) spectroscopy is a rapid technique for non-destructive testing. Mango is popular fruit in Thailand. Therefore, the main aim of this paper is to report an overall precision of the NIR spectroscopy instruments and reference methods for determination at the beginning of the experiment for prediction model development to be in the mango applied processing factory. Results showed that the repeatability of FT-NIR spectrometer and UV-VIS-NIR spectrometer were 0.00191 and 0.00529, respectively. The reproducibility of FT-NIR spectrometer and UV-VIS-NIR spectrometer were 0.00323 and 0.00561, respectively. Repeatability of reference test of TSS and pH were 0.1657 and 0.0827. Therefore, the  $R^2_{max}$  of TSS and pH were 0.9825 and 0.9504 which indicates that it is possible to develop NIR model for prediction of total soluble solids and pH.

### 1 Introduction

Mango is a tropical fruit that is important for the economy of Thailand. There are more than 100 cultivated varieties. Mango can adapt to the climate of Thailand as well. It can grow almost the whole country. Therefore mango is a fruit plant that is popularly grown and consumed as the number one of all fruits in Thailand [1]. Thailand has a significant portion of its income from exports of agricultural products and mangoes are one of the country's most important exports, which can be seen from the amount of mangoes exported in 2018 which have worth approximately 50 million USD [2].

Because Thai mango has good taste attracting foreign consumers to eat and accept but with mango picking before the harvest season, the mango tasting is not sweet but sour. Therefore causing damage to Thai mango exports which has problems with separating sweet mango from non-sweet mango. This requires experience and expertise in sorting. The processing of mangoes is another way to make value added of mango which can be consume both domestically and internationally. The mangoes that contain a lot of water and a lot of fiber (juicy type) is suitable for processing to be beverages such as mango juice. In addition,

\* Corresponding author: [Maephatsaman.sa@gmail.com](mailto:Maephatsaman.sa@gmail.com)

## ประวัติผู้เขียน

ชื่อ-นามสกุล	นางสาวณภัสนันท์ ศักดิ์เสงี่ยม
วัน เดือน ปีเกิด	9 ตุลาคม 2535
ที่อยู่ตามทะเบียนบ้าน	82/2 หมู่ที่ 7 ตำบลท่าทราย อำเภอเมือง จังหวัด สมุทรสาคร 74000
ประวัติการศึกษา	ปีการศึกษา 2557 จบการศึกษาหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรบัณฑิต ภาควิชา วิศวกรรมเกษตร คณะวิศวกรรมศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง
ประวัติการทำงาน	พ.ศ. 2558 – 2561 วิศวกรวิจัยและพัฒนา บริษัท เอส พาเนล จำกัด พ.ศ. 2561 – 2562 วิศวกรอาวุโสพัฒนาการผลิต บริษัท พัฒน์กล (มหาชน) จำกัด พ.ศ. 2562 – 2564 รองผู้จัดการฝ่ายการตลาด บริษัท เอส พาเนล จำกัด พ.ศ. 2564 – ปัจจุบัน ผู้จัดการฝ่ายขายต่างประเทศ บริษัท ฮีตอเวย์ จำกัด
ประสบการณ์และผลงานวิจัย	พ.ศ. 2557 โครงการปริญญานิพนธ์ เรื่อง การออกแบบและพัฒนา เครื่องตัดชิ้นข้าวยัดไส้ปลา (Design and development of cutter for E-san mackerel paste in rice sandwiches) พ.ศ. 2563 ส่งผลงาน เข้าร่วมประชุม The 13th TSAE International Conference April 30 – May 1, 2020 Kantary Hotel Korat, Nakhon Ratchasima, Thailand เรื่อง The overall precision test for near infrared scanning and reference method for the determination of soluble solids content and pH of mango for processing factory.

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า  
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้