<u>การใช้โปรแกรม The Unscrambler X 10.5 ในการทำ</u>

Principal component analysis (PCA)

The Unscrambler X 10.5 เป็นโปรแกรมที่ใช้ในการวิเคราะห์ข้อมูลหลายตัวแปร (Multivariate data analysis) เพื่อเข้าใจความสัมพันธ์ระหว่างตัวแปรในชุดข้อมูลขนาดใหญ่ ซึ่งเป็นวิธีที่ง่าย แม่นยำ และรวดเร็ว โดย ข้อมูลที่สามารถนำเอาเข้ามาวิเคราะห์ด้วยโปรแกรมนี้ สามารถเป็นได้ทั้งข้อมูล spectrum หรือข้อมูลตัวเลขที่ได้ จาก chemical และ physical โดยรายงานฉบับนี้จะกล่าวถึง ขั้นตอนในการทำ data-preprocessing และการ ทำ PCA-score plot

Principal component analysis (PCA) เป็นการวิเคราะห์ข้อมูลที่เหมาะกับกลุ่มตัวอย่าง (data set) ขนาดใหญ่ และในข้อมูลตัวอย่างนั้นมีรายละเอียดของข้อมูลอยู่จำนวนมาก การทำ PCA จะช่วยให้สามารถแยก ความแตกต่างจากตัวอย่างหนึ่งออกจากอีกตัวอย่างหนึ่งได้โดยอาศัยตัวแปรที่สัมพันธ์กันในกลุ่มตัวอย่าง ซึ่งจะช่วย เป็นพื้นฐานในการวิเคราะห์ขั้นสูงหรือการวิเคราะห์เพื่อจำแนกประเภท เช่นการทำ SIMCA, PLS-R หรือ PLS-DA ได้ โดยในคู่มือการใช้งานฉบับนี้ จะกล่าวถึงการวิเคราะห์ตัวอย่างจากข้อมูล spectrum โดยการทำ PCA เพื่อแยก ความแตกต่างของกลุ่มตัวอย่าง โดยข้อมูลที่นำเข้ามาวิเคราะห์ประกอบด้วย

	Variable 1	Variable 2	Variable 3
Object 1			
Object 2	X1	X2	X3
Object 3			
Object 4			

- Spectrum ซึ่งแทนด้วย object

- Variable ซึ่งแทนด้วย frequency (wavenumber) ซึ่ง frequency ที่เราสนใจใช้วิเคราะห์ในครั้งนี้ คือช่วง 4000–400 cm⁻¹



Score plot จะใช้ในการอธิบายว่าตัวอย่างที่นำเข้ามาวิเคราะห์ต่างหรือไม่ต่างกัน จะประกอบด้วย point ซึ่ง หมายถึง spectrum และกลุ่มของ spectrum ที่กระจายตัวอยู่เรียกว่า swarm of spectrum โดยแกน PC ที่ ลากผ่านกลุ่ม swarm of spectrum มากที่สุด จะได้เป็น PC1 และ PCA score plot ที่ได้ จะสัมพันธ์กับ variable หรือ frequency ที่ให้ผลดีที่สุดต่อการแยก เมื่อได้แกน PC2 แล้วจากนั้นบริเวณจุด center of mean scattering ในแนวตั้งฉากกับ PC1 จะได้เป็น PC2 ซึ่งจะช่วยในการอธิบายว่า variable ที่มีอิทธิพลถัดมาเพื่อ ช่วยในการแยก ในกรณีที่ spectrum มี error หรือมี scattering สูง อาจต้องใช้ PC3, PC4... เพื่อช่วยในการ แยก ตามลำดับ



Loading plot ใช้ในการอธิบายกลุ่มของ spectrum ใน PCA score plot โดยจะเป็นตัวบอกว่า variable หรือ frequency ไหนที่มีความสัมพันธ์กันและให้ผลดีที่สุดต่อการแยก โดยค่า loading ที่สูงจะสัมพันธ์กัน variable (frequency) ใน PCA score plot ซึ่งการอ่านผล loading จะสัมพันธ์กับ PCA score plot และจะต้องใช้ใน การอ่านผลคู่กันเสมอ โดยพิจารณาจากแกนค่าบวกและลบในการแยก ข้อมูลที่ผ่านการทำ preprocessing แบบไม่ derivative จะอ่านผล loading แกนค่าบวกสัมพันธ์กับแกน PCA score plot ค่าบวก และ loading แกนค่าลบสัมพันธ์กับแกน PCA score plot ค่าลบ

<u>ในเอกสารคู่มือฉบับนี้จะอธิบายการทำ PCA ของตัวอย่าง 2 กลุ่ม ได้แก่ A และ C</u>

<u>การทำ PCA จาก 2 ตัวอย่าง</u>

- 1. Import ข้อมูล spectrum ของแต่ละกลุ่มตัวอย่างเข้ามา (ในตัวอย่างประกอบด้วยข้อมูลกลุ่ม A และ C)
 - a. เลือกไฟล์ Import data
 - b. เลือก OPUS จะปรากฏหน้าต่าง OPUS Import
 - c. เลือก Browse เพื่อ import สเปคตรัมเข้ามา
 - d. เลือก OK

U N	ew Project [Not Saved] - The	Unscrambler X		
File	Edit View Inse New Ctrl+N	ert	Plot Tasks Tools Help		
	Close Ctrl+W				
1 0 E	Import Data Save Ctrl+S Save As Export Print Ctrl+P		Unscrambler X Unscrambler US Data ASCII Design-Expert		
	Security	-	Excel Matlab RAP-ID		
_	Exit		JCAMP-DX NetCDF Perten-DX GRAMS	OPUS Import Browse For Folder Look In: Browse File name X Finst X Leat X	2
Projec Login Versio	t name; New Projec A supatcharee		OPUS Brimrose Indico OMNIC VARIAN CLASS-PA & SpectrOn Guided Wave NIRO JSON NSAS PerkinElmer Durb.lin	Deselect all Number of files selected: 0 Preview spectra OK Cancel OK	
Versic Useril Path 3	n: 10.3-46461.632 D: supatcharee@SL javed: 1 Notes ts Bruker (*.00x, *.0x, *.	→ :-) @ @ @	DeltaNu VisioTec MicroNIR ^{tor} Pro JEOL Database	e for IR, NIR and Raman instruments including Matrix, MPA, Alpha, Vector, IFS, MultiRAM	

- e. เลือกข้อมูลสเปคตรัมโดยคลิกที่ File name (1)
- f. เลือก Auto select matching spectra (2)
- g. เลือก Sample naming จะปรากฏหน้าต่าง Sample Naming (3)
- h. เลือก Include file name และ
- i. Include file extension
- j. เลือก OK

rus import				? ×						
Look in: D:\Data Ur	ns\A		Bro	wse	Sample Naming	×				
File name	×	First X	Last X		Sample name	The second se				
	1142	3000 789	800 3391		C lookuda fila nama					
	1142	3000 789	800 3391	-						
12 A	1142	3000 789	800 3391		Include file extension					
V 13 A	1142	3000 789	800 3391		In the back and a second a such as					
V 14 A	1142	3000.789	800.3391							
V 17 A	1142	3000,789	800.3391		Include timestamp					
V 18_A	1142	3000.789	800.3391							
V 19_A	1142	3000.789	800.3391							
V 22_A	1142	3000.789	800.3391							
1 23 A	1142	3000 789	800 3391	-	UK Cance					
Deselect all		Nu	umber of files se	lected:						
Auto select match	ing spectra		Sample na	ming						
Proto soloci matori			[] Internalat							
_ rieview specua	OK	Cancel		- ···						
		CONCON								
						ี⊂ เข้ามา			(0)	
		File name		x 1142 1142	mport ข้อมูลกลุ่ม A และ (<u>Fest X Last X</u> <u>3000 758 800.3391</u> <u>10.0</u> <u>10.0</u>	2 เข้ามา x 1142 1142	First X 3000.789 3000.789	Last X 800.3391 800.3391	Î.	
		File name V 10_A 11_A V 12_A		X 1142 1142 1142	mport ข้อมูลกลุ่ม A และ (<u>Fest X Last X</u> 3000 799 800 3391 3000 799 800 3391 2000 799 800 3391 12,C	มข้ามา x 1142 1142 1142	First X 3000.789 3000.789 3000.789	Last X 800.3391 800.3391 800.3391	Ĥ	
		File name V 10_A V 11_A V 12_A V 13_A		X 1142 1142 1142 1142 1142	mport ข้อมูลกลุ่ม A และ (<u>Fet X Lat X</u>) 5000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 12,C 3000 789 800 3391	C เข้ามา x 1142 1142 1142 1142	First X 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789	Last X 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391	× III	
		File name V 10_A V 11_A V 12_A V 13_A V 14_A		X 1142 1142 1142 1142 1142 1142	mport ข้อมูลกลุ่ม A และ (2 เข้ามา 1142 1142 1142 1142 1142	First X 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789	Last X 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391	× III	
		File name V 10_A V 11_A V 12_A V 13_A V 14_A V 17_A		X 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142	mport ข้อมูลกลุ่ม A และ (2 เข้ามา x 1142 1142 1142 1142 1142 1142	First X 3000 789 3000 789 3000 789 3000 789 3000 789 3000 789	Last X 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391	Ĩ	
		File name V 10_A V 11_A V 12_A V 13_A V 14_A V 14_A V 18_A		X 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 114	First X Last X ค Iterame V 10.0 5000 758 8003391 10 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0	C เข้ามา 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 114	First X 3000,789 3000,789 3000,789 3000,789 3000,789 3000,789 3000,789	Last X 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391		
		File name V 10_A V 11_A V 12_A V 12_A V 14_A V 14_A V 17_A V 18_A V 19_A		X 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 114	mport ข้อมูลกลุ่ม A และ (C เข้ามา x 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142	First X 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789	Last X 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391	A H	
		File name VI 10_A VI 11_A VI 12_A VI 13_A VI 14_A VI 19_A VI 19_A VI 22_A		X 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 114	Import ข้อมูลกลุ่ม A และ (First X ได้ 100 11.0 3000 778 800.3391 11.0 10.0 11.0 3000 778 800.3391 11.0 10.0 11.0 10.0 3000 778 800.3391 11.0 10.0 11.0 10.0 11.0 10.0 11.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 10.0 <td>5 เข้ามา 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 114</td> <td>First X 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789</td> <td>Last X 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391</td> <td></td> <td></td>	5 เข้ามา 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 114	First X 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789	Last X 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391		
		Fle name 9 10_A 9 11_A 9 12_A 9 13_A 9 14_A 9 15_A 9 19_A 9 22_A 19 23_A 9 23_A		X 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 114	Propert ข้อมูลกลุ่ม A และ (8000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 900 3391 3000 789 900 3391 3000 789 900 3391 3000 789 900 3391 3000 789 900 3391 3000 789 900 3391 3000 789 900 3391 3000 789 900 3391 3000 789 900 3391 3000 789 900 789	C เข้ามา 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142	First X 3000 789 3000 789	Last X 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391	× v	
		File name V 10_A V 11_A V 12_A V 13_A V 14_A V 14_A V 14_A V 19_A V 22_A Deselect a	4	X 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 114	Import ข้อมูลกลุ่ม A และ (First X Import ข้อมูลกลุ่ม A และ (5000 729 500 3391 3000 729 500 3391 3000 729 500 3391 3000 729 500 3391 3000 729 500 3391 3000 729 500 3391 3000 729 500 3391 3000 729 500 3391 3000 729 500 3391 3000 729 500 3391 3000 729 500 3391 3000 729 500 3391 3000 729 19.0 700 729 19.0 700 729 19.0 700 729 19.0 700 729 19.0 700 729 19.0 700 729 19.0 700 729 19.0 700 729 19.0 700 729 19.0 700 729 19.0 700 729 19.0 700 729 10.0 700 729 10.0 700 729 10.0 700 729 10.0	ร เข้ามา 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 114	First X 3000,789 3000,789 3000,789 3000,789 3000,789 3000,789 3000,789 3000,789 3000,789 3000,789	Last X 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 ber of files selects	× 4	
		File name V 10_A V 11_A V 12_A V 13_A V 13_A V 13_A V 13_A V 13_A V 12_A V 12_A V 12_A V 12_A V 13_A V 22_A Decelect a V V Auto select	at matching spectra	X 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 114	First X Last X Image: Control in the state of the st	หย้ามา x 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142	First X 3000 789 3000 789 3000 789 3000 789 3000 789 3000 789 3000 789 3000 789 3000 789 3000 789	Lest X 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.3	* III	
		File name Ø 10_A Ø 11_A Ø 12_A Ø 14_A Ø 19_A Ø 19_A Ø 22_A Deselect a Ø Acto select Preview sp	at matching spectra	X 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 114	Propert ข้อมูลกลุ่ม A และ (8000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 3391 3000 789 800 381	ב וּשָּׁראַאַר א א א א א א א א א א א א א	First X 3000 789 3000 789 3000 789 3000 789 3000 789 3000 789 3000 789 3000 789 3000 789 3000 789	Lest X 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.200 800.200 800.2000 800.2000 800.2000 800.2000 800.2000 800.2000 800.2000 800.2000 800.2000 800.20000	* 11 * 12 * 12	
		File name Ø 10,A Ø 11,A Ø 12,A Ø 13,A Ø 14,A Ø 14,A <td< td=""><td>a matching spectra spectra</td><td>x 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142</td><td>Import ข้อมูลกลุ่ม A และ (Fint X Last X 000789 003391 000789 003391 000789 003391 000789 003391 000789 003391 000789 003391 000789 003391 000789 003391 000789 003391 000789 003391 000789 003391 000789 003391 000789 003391 000789 003391 000789 003391 000789 003391 000789 003391 000789 003391 Semple naming I 12.C Value for files selected 30 I 12.C Semple naming A Ato select Three pointe htterpolate htterpolate Preview spont</td><td>C เข้ามา X 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 11</td><td>First X 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789</td><td>Last X 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391</td><td></td><td></td></td<>	a matching spectra spectra	x 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142	Import ข้อมูลกลุ่ม A และ (Fint X Last X 000789 003391 000789 003391 000789 003391 000789 003391 000789 003391 000789 003391 000789 003391 000789 003391 000789 003391 000789 003391 000789 003391 000789 003391 000789 003391 000789 003391 000789 003391 000789 003391 000789 003391 000789 003391 Semple naming I 12.C Value for files selected 30 I 12.C Semple naming A Ato select Three pointe htterpolate htterpolate Preview spont	C เข้ามา X 1142 1142 1142 1142 1142 1142 1142 11	First X 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789 3000.789	Last X 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.3391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391 800.391		

- 2. จะปรากฏข้อมูลสเปคตรัมที่ Import เข้ามา ประกอบด้วย
 - a. กลุ่มของชุดข้อมูล A และ C หรือจะเรียกว่า data set หรือ data matrix (1)
 - b. Column แสดงค่า Wavenumber (2)
 - c. Row แสดงชื่อสเปคตรัมกลุ่มตัวอย่าง (3)

2

T 🚑 🔜 📩 🙆		_										
U Marine	19_A.25	3		3000.789	2998.861	2996.932	2995.004	2993.075	2991.147	2989.218	2987.29	2985.361
19_A.25				1	2	3	4	5	6	,	8	9
15_C.21	10_A.17	1 _A.17	1	0.2269	0.2269	0.2269	0.2269	0.2269	0.2269	0.2269	0.2289	0.2
	11_A.18	1 _A.18	2	0.2306	0.2306	0.2306	0.2306	0.2306	0.2306	0.2306	0.2327	0.
	12_A.19	1A.19	3	0.1694	0.1694	0.1694	0.1694	0.1694	0.1694	0.1694	0.1699	0
	13_A.2	1A.2	4	0.1018	0.1018	0.1018	0.1018	0.1018	0.1018	0.1018	0.1053	0
_	14_A.20	1A.20	5	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2096	0
	17_A.23	1 _A.23	6	0.3125	0.3125	0.3125	0.3125	0.3125	0.3125	0.3125	0.3141	0
	18_A.24	1 A24	7	0.1652	0.1652	0.1652	0.1652	0.1652	0.1652	0.1652	0.1669	C
	19_A.25	1: A.25	8	0.1537	0.1537	0.1537	0.1537	0.1537	0.1537	0.1537	0.1545	(
	1_A.0	1 A.0	9	0.1135	0.1135	0.1135	0.1135	0.1135	0.1135	0.1135	0.1155	(
	20 A.26	2 A.26	10	0.1538	0.1538	0.1538	0.1538	0.1538	0.1538	0.1538	0.1559	(
	22 A.28	2 A.28	11	0.2207	0.2207	0.2207	0.2207	0.2207	0.2207	0.2207	0.2227	1
	23 A 29	2 A 29	12	0.2721	0.2721	0.2721	0.2721	0.2721	0.2721	0.2721	0.2726	
	24 A.3	2 A.3	13	0.2637	0.2637	0.2637	0.2637	0.2637	0.2637	0.2637	0.2661	
	25 A 30	2 A 30	14	0.3282	0.3282	0.3282	0.3282	0.3282	0.3282	0.3282	0.3288	
	26 A 31	2 A 31	15	0.2429	0.2429	0.2429	0.2429	0.2429	0.2429	0.2429	0.2465	
	27 A 32	2 A 32	16	0,3572	0.3572	0.3572	0.3572	0.3572	0,3572	0.3572	0.3604	
	28 A 33	2 A 33	17	0.5127	0.5127	0.5127	0.5127	0.5127	0.5127	0.5127	0.5171	
	29 4 34	2 434	18	0.4482	0.4482	0.4482	0.4482	0.4482	0.4482	0.4482	0.4499	
	32 4 37	3 4 37	19	0.2611	0.2611	0.2611	0.2611	0.2611	0.2611	0.2611	0.2622	
	33 4 38	3 4 38	20	0 3037	0 3037	0 3037	0 3037	0.3037	0 3037	0.3037	0.3037	
	34 4 39	3 4 39	21	0.4126	0.4126	0.4126	0.4126	0.4126	0.4126	0.4126	0.4142	
	37 4 41	3 441	22	0.5655	0.5655	0.5655	0.5655	0.5655	0.5655	0.5655	0.5687	
	38 0 42	3 442	22	0.4243	0.4243	0.4243	0.4243	0.3033	0.4243	0.4243	0.4256	
	29 4 42	24 142	20	0.2624	0.2624	0.7574	0.7275	0.7674	0.7275	0.7275	0.7230	
	3 4 10	3 4 10	24	0.2024	0.2024	0.2024	0.2024	0.1970	0.2024	0.1820	0.2043	
	40 0 44	4 44	25	0.1029	0.1029	0.1029	0.1029	0.1029	0.1029	0.1029	0.1042	
•	13 A 7	A A 7	20	0.3090	0.3090	0.3090	0.3090	0.3090	0.3090	0.3090	0.3097	
ndor: Bruker(OPUS)	44 4 9	1 49	2/	0.3373	0.3373	0.3373	0.3373	0.3575	0.3575	0.3573	0.3562	-
me : 19_A.25	45 4 9	4 40	20	0.2040	0.2040	0.2040	0.2040	0.2040	0.2950	0.2040	0.2850	
e : 38 X 1142	40_4.5	4 4.5	29	0.2858	0.2658	0.2858	0.2858	0.2858	0.2858	0.2858	0.2869	
urce file : G:\ansa Beam	4_A.17	5 A 12	30	0.2834	0.2834	0.2834	0.2834	0.2834	0.2634	0.2834	0.2859	
nge: 3000.789-800.33	0_A.12	5 A 12	31	0.2869	0.2869	0.2869	0.2869	0.2869	0.2869	0.2869	0.2891	
e status: Editable 🖕	0_A.13	5 A 13	32	0.2275	0.2275	0.2275	0.2275	0.2275	0.2275	0.2275	0.2316	0
	7 A 14	17 A.14	33	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2102	0

BL 4.1 IR Spectroscopy and Imaging

Synchrotron Light Research Institute (Public Organization)

- 3. เมื่อ import data เข้ามาแล้วและต้องการ plot graph เพื่อดูลักษณะสเปคตรัมของกลุ่มตัวอย่าง สามารถ ทำได้โดย
 - a. คลิกขวา เลือก Plot
 - b. เลือก Line จะปรากฏหน้าต่าง Line Plot-Scope
 - c. กำหนด data matrix ที่ต้องการ Plot graph
 - d. Plot type เลือก Sample
 - e. เลือก OK จะปรากฏเส้น spectrum ของกลุ่มตัวอย่างที่เราเลือก plot





ine Plot -	Scope	? 🔀
Data Matrix	[15_C.21 {55x1142}	•
Advanc	ed	Define
Plot type	e: Sample Vanable OK Canc	el

- เนื่องจากชื่อไฟล์ spectrum จะแสดงใน column ที่ 2 เสมอ แต่เมื่อทำ data preprocess แล้ว column ที่ 2 จะหายไป ดังนั้นจึงควร copy column ที่ 2 มาวางใน column แรก และลบ column ที่ 2 ทิ้งไป ซึ่งทำได้โดย
 - a. เลือก column ที่ 2
 - b. คลิกขวา เลือก copy
 - c. นำไปวางแทนที่ใน column ที่ 1

New Project [Not Save	ed] - The Unscram	nbler X				
File Edit View I	nsert Plot Ta	asks Tools	Help			
F. 🥑 📕 💼 🔞 🗄	50120		• 🕅 🗮 😫	18.19	÷ [~ 🐋 🆌	
- W New Project	19 A.25		3000.789	2998.861	2996.93	
- 19_A.25			1	2	3	
⊨ 15_C.21	10_A.17	10_A.17) Undo			
Line Plot	11_A.18	11_A.18	Redo			
	12_A.19	12_A.19	1			
	13_A.2	13_A.2	Cut			
	17 A 23	17 A 23	🗋 Сору			
	18_A.24	18_A.24	Copy with H	leaders		
	19_A.25	19_A.25	Paste			
	1_A.0	1_A.0	Insert Copie	d Cells		
	20_A.26	20_A.26	Append Cop	ied Cells		
	22_A.28	22_A.28	Split Text Va	riable		
	24 A 3	24 A 3	Delete			
	25_A.30	25_A.30	Barray D	Lizzta Davis		
	26_A.31	26_A.31	Kemove Du	olicate Rows		
	27_A.32	27_A.32	Change Data	туре	•	
	28_A.33	28_A.33	Add Header			
	29_A.34	29_A.34				New Project [Not Saved] - The Unscrambler X
	3 06_m.07	02_0.01	Plot		•	File Edit View Insert Plot Tasks Tools Help
	33 A.38	33 A.38		~ ~ ~		The Edit Hen more from for for the
	33_A.38	33_A.38			-	
	33_A.38	33_A.38		97, 979 97	and the second s	
	, 33_A.38	33_A.38	<u></u>	or, or		Image: Control of the state of th
New Project [Not Sa	ved] - The Unscra	33 A 38	<u>i to i vice</u>	or, ou		Image: Construction
New Project [Not Sa ile Edit View	ved] - The Unscra Insert Plot	33_A38 ambler X Tasks Too	ls Help			Image: Second system Image: S
New Project [Not Sa File Edit View	ved] - The Unscra Insert Plot	33_A.38 ambler X Tasks Too	ls Help	29 2998	861	Image: Second
New Project [Not Sa ile Edit View View Project I New Project I 19_A.25	ved] - The Unscra Insert Plot 19_A25	33_A.38 ambler X Tasks Too	Is Help	39 2998.	861 I	$ \begin{array}{c c c c c c c c c c c c c c c c c c c $
New Project [Not Sa File Edit View Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project Project P	ved] - The Unscra Insert Plot 19_A25	ambler X Tasks Too	Is Help	39 2998. 0.2269	861 2 0.2269 0.2306	Image: Second
New Project [Not Sa File Edit View	ved] - The Unscra Insert Plot 19_A25 10_A17 11_A18 12_A19	33 A 38 ambler X Tasks Too 0_A.17 1_A.18 2_A.19	Is Help 3000.71 1 2 3	39 2998. 0.2269 0.2306 0.1694	861 2 0.2269 0.2306 0.1694	Image: Second
New Project [Not Sa File Edit View T, ♥ ■ ■ 0 19_A25 0 15_C.21	33 A38 ved] - The Unscra Insert Plot 19_A25 10_A17 11_A18 12_A19 13_A2	33 A 38 ambler X Tasks Too 0_A.17 1_A.18 2_A.19 3_A2	Is Help 3000.7 1 2 3 4	39 2998. 0.2269 0.2306 0.1694 0.1018	861 2 2 0.2269 0.2306 0.1694 0.1018	Image: Second
New Project [Not Sa File Edit View New Project New Project New Project 15_C 21	433 A38 ved] - The Unscra Insert Plot 19_A25 10_A17 11_A18 12_A19 13_A2 14_A20 14_A20	33 A38 ambler X Tasks Too 0_A17 1_A18 2_A19 3_A2 4_A20 4_A20	ls Help 3000.71 1 2 3 4 5 6	39 2998. 0.2269 0.2306 0.1694 0.1018 0.2101 0.3125	861 2 0.2269 0.2306 0.1694 0.1018 0.2101 0.3125	Image: Second
New Project [Not Sa File Edit View Vew Project New Project 15_C 21	ved] - The Unscra Insert Plot 19_A25 14,A20 17,A23 18,A24	33 A38 ambler X Tasks Too 0_A 17 1_A 18 3_A2 4_A20 7_A23 8_A24	Is Help 3000.7/ 1 2 3 4 5 6 7	39 2998. 0.2269 0.2306 0.1694 0.2101 0.3125 0.1652	861 2 0.2269 0.2306 0.1694 0.1018 0.2101 0.3125 0.1652	Image: Second
New Project [Not Sa File Edit View ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓	xed] - The Unscr Insert Plot 19_A25 10_A17 11_A18 12_A19 13_A2 14_A20 17_A23 18_A24 19_A25	33 A38 ambler X Tasks Too 0_A17 1_A18 2_A19 3_A2 4_A20 7_A23 4_A20 7_A23 4_A20 7_A23	Is Help 3000.7 1 2 3 4 5 6 7 	33 2998. 0.2269 0.2306 0.1694 0.2101 0.3125 0.1652	861 2 2 0.2269 0.2306 0.1694 0.2101 0.3125 0.1652	Image: Second
New Project [Not Sa File Edit View T. View Project New Project Den Project 15_C 21	xed] - The Unscra Insert Plot 19_A25 10_A17 11_A18 12_A19 13_A2 14_A20 17_A23 18_A24 19_A25 1_A0 20_A26	33 A38 ambler X Tasks Too 0_A17 1_A18 3_A2 4_A20 7_A23 8_A24 9_A25 _A0 0_A26	Is Help 3000.71 1 1 2 3 4 5 6 7 7 8 คีลไฟ2	2998. 0.2269 0.2306 0.1694 0.1018 0.2101 0.3125 0.1652	861 2 0.2269 0.2306 0.1018 0.2101 0.3125 0.1652	Image: Second secon
New Project [Not Sa File Edit View ♥ ♥ ■ ■ ● ● ■ New Project ■ ■ 15_C 21	ved] - The Unscra Insert Plot 19,A25 10,A17 11,A18 12,A19 14,A20 17,A23 18,A24 19,A25 1,A0 20,A26 20,A26 22,A28	33 A38 ambler X Tasks Too 0,A17 1,A18 2,A19 3,A2 4,A20 7,A23 9,A25 9,A26 9,A26 9,A27 9,A28 9,A27 9,A28 9,A27	Is Help 3000.71 1 2 3 4 4 5 6 7 7 ชื่อไฟส์	39 2998. 0.2269 0.2306 0.1694 0.1694 0.1694 0.1694 0.3125 0.3125 0.3125 0.1652 ลัสเปคต วัสเปคต	861 2 2 0.2269 0.2306 0.1694 0.0108 0.2101 0.3125 0.1652	Image: Second
New Project [Not Sa File Edit View New Project 19_A 25 B 15_C 21	ved] - The Unscra Insert Plot 19_A25 14,A20 17,A23 18,A24 19,A25 14,A20 17,A23 18,A24 19,A25 14,A20 17,A23 18,A24 19,A25 20,A26 22,A28 23,A29 24,A3	33 A38 ambler X Tasks Too 0,A17 1,A18 2,A19 3,A2 4,A20 7,A25 A0 0,A26 2,A28 3,A20	Is Help 3000.71 1 2 3 4 5 6 7 ชื่อไฟส์	39 2998. 0.2269 0.2306 0.1694 0.1018 0.2105 0.1018 0.2105 0.1125 0.1125 0.11652	861 2 0.2299 0.2306 0.1694 0.1018 0.2101 0.3125 0.1652	Image: Construction
New Project [Not Sa ile Edit View ♥ ♥ ■ ■ ♥ ♥ New Project ■ New Project ■ 15_C.21	33 A 38 ved] - The Unscra Insert Plot 19_A25 10_A17 11_A18 12_A19 13_A2 14_A20 17_A23 18_A24 19_A25 1_A0 20_A26 22_A28 23_A29 24_A3 25_A30	33 A38 ambler X Tasks Too 0 A17 1 A18 2 A19 3 A24 4 A20 7 A23 8 A24 9 A25 0 0 A26 2 A28 3 A26 4 A3	Is Help 3000.71 1 2 3 3 4 5 6 7 ชื่อไฟส ตัวอย่า	³⁹ 2998. 0.2296 0.1694 0.101 0.2101 0.2101 0.2101 0.2101 0.2101 0.2101 0.2101 0.2101 0.2101 0.2101 0.2101 0.2306 0.1692	861 2 0.2269 0.2306 0.1018 0.2101 0.3125 0.3125 0.3125 0.3125 0.3125	Image: Second secon
New Project [Not Sa iile Edit View New Project New Project 15_C 21	xed] - The Unscra Insert Plot 19_A25 10_A17 11_A18 12_A19 14_A20 17_A23 18_A24 19_A25 1_A0 20_A26 22_A28 23_A29 24_A3 25_A30 26_A31	33 A38 ambler X Tasks Too 0_A17 1_A18 2_A19 3_A29 4_A20 7_A23 8_A24 9_A25 0_A08 0_A08 0_A08 0_A08 0_A28 0_A38 5_A30 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6_A31 6	Is Help 3000.71 1 2 3 3 4 5 6 7 ชื่อไฟส์ ตัวอย่า	³⁹ 2998. 0.2269 0.2366 0.1694 0.1018 0.2101 0.1052 0.1652 ภ.1652	861 2 0.2269 0.2364 0.1694 0.1018 0.2301 0.3325 0.1652 55ม ร้อม 1	Image: Second
New Project [Not Sa File Edit View Vew Project New Project B 15_C 21	ved] - The Unscra Insert Plot 19_A25 10_A17 11_A18 12_A19 13_A2 14_A20 17_A23 18_A24 19_A25 1_A0 20_A26 22_A28 23_A29 24_A3 26_A31 27_A32 28_A31	33 A38 ambler X Tasks Too 0,A17 1,A18 2,A19 3,A22 4,A20 7,A23 8,A24 9,A25 A,00 0,A26 2,A28 3,A29 4,A3 5,A30 5,A31 7,A22	Is Help 3000.71 1 2 3 4 5 6 7 ชื่อไฟส ตัวอย่า	39 2996. 0.2269 0.2306 0.3306 0.1018 0.1018 0.1018 0.1018 0.1018 0.1018 0.1018 0.1018 0.1018 0.1018 0.1018 0.1018 0.1018 0.1018 0.1018 0.1018 0.1018 0.1012 0.1016 0.1012 0.1017	861 2 0.2269 0.2306 0.1694 0.1018 0.2101 0.3125 0.1652 รัม รัม	Image: Second
New Project [Not Sa File Edit View Ver Project New Project 19_A25 15_C 21	33 A 38 ved) - The Unserve Insert Plot 19_A25 10_A17 11_A18 12_A19 13_A22 14_A20 17_A23 18_A24 19_A25 1_A0 20_A26 22_A28 23_A29 24_A3 26_A31 27_A32 28_A33 28_A34	33 A38 ambler X Tasks Too 0,A17 1,A18 2,A19 3,A20 4,A20 4,A20 4,A20 9,A25 4,A20 0,A72 8,A24 9,A25 0,0,A26 0,A26 0,A33 9,A33 9,A33	Is Help 3000.7 1 2 3 3 4 5 6 7 ชื่อไฟส์ ตัวอย่า 15 17 18	39 2998. 0.2269 0.2306 0.1694 0.2101 0.2101 0.3125 0.1652 0.1652 0.1654 0.1652 0.1654 0.1652 0.1655 0.1652 0.1654 0.1652 0.1655 0.1652 0.1657 0.5127 0.1492 0.1492	861 2 0.2259 0.3306 0.3306 0.16194 0.3110 0.3125 0.1652 รัม ยน 0.3572 0.4492 0.4492	Image: Second
New Project [Not Se File Edit View New Project New Project 15_C.21	ved] - The Unserv Insert Plot 19_A25 10_A17 11_A18 12_A19 14_A20 17_A23 18_A24 19_A25 1_A0 20_A26 22_A28 23_A29 24_A3 26_A31 26_A31 27_A32 28_A33 29_A34 32_A37	33 A38 ambler X Tasks Too 0_A17 1_A18 2_A19 3_A29 4_A20 7_A23 8_A24 9_A25 A0 0_A0 0_A0 0_A0 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0_A3 0	Is Help 3000.71 1 2 3 4 5 6 7 ชื่อไฟส ตัวอย่า 15 17 10 19	39 2998. 0.2269 0.2306 0.2306 0.1018 0.2101 0.3115 0.16182 0.3125 0.1652 0.4612 0.5127 0.442 0.24611 0.442	861 2 0.2269 0.2306 0.1652 0.1652 รับม 1 องประว 0.5127 0.5127 0.5427 0.5127 0.5427 0.5127 0.5427	Image: Construction
New Project [Not Sa File Edit View New Project	ved] - The Unscra Insert Plot 19,A25 10,A17 11,A18 12,A19 14,A20 17,A23 18,A24 19,A25 1,A0 20,A26 22,A28 23,A29 24,A3 25,A30 26,A31 27,A32 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A33 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,A34 28,	33 A38 ambler X Tasks Too 0,A17 1,A18 2,A19 3,A28 4,A20 7,A23 9,A25 9,A25 9,A25 4,A3 5,A30 6,A33 6,A33 9,A34 2,A34 4,A3	Is Help 3000.71 1 1 2 3 4 5 6 7 7 លឺอไฟส์ 6 7 1 1 1 1 2 3 4 5 6 7 7 លឺอไฟส์ 10 10 10 11 11 12 20 21 21	39 2998. 0.2269 20306 0.2306 0.1018 0.2101 0.3125 0.1652 2 รัสเปิคต 30,3125 0.3125 2 0.5127 0.4482 0.5127 0.4482 0.3612 0.4126	861 2 0.2269 0.2306 0.1619 0.1018 0.2101 0.3125 0.1652 531 531 531 531 531 531 531 531	Image: Construction

- การวิเคราะห์ข้อมูลตัวอย่าง A และ C จะต้องทำการรวมข้อมูล spectrum ให้อยู่ใน data set เดียวกัน ซึ่งการรวมไฟล์ข้อมูล A และ C เข้าด้วยกัน ทำได้โดย
 - a. เลือก Tool
 - b. เลือก Matrix Calculator จะปรากฏหน้าต่าง
 - c. Matrix Calculator
 - d. เลือกไฟล์ข้อมูลที่ต้องการรวม
 - e. เลือก Shaping
 - f. เลือก Append
 - g. เลือก OK จะปรากฏ file ข้อมูลที่นำมารวมกัน และจะแสดงข้อมูลชื่อ spectrum ของตัวอย่าง เฉพาะใน column แรกเท่านั้น



- 6. การเปลี่ยนชื่อไฟล์ชุดข้อมูล data matrix
 - a. คลิกขวาไฟล์ข้อมูลที่ต้องการเปลี่ยนชื่อ
 - b. เลือก Rename เพื่อทำการเปลี่ยนชื่อไฟล์



- ในการวิเคราะห์ตัวอย่างนั้น ต้องมีการ define group ของตัวอย่างเพื่อให้ง่ายต่อการแสดงผล และการ define column number หรือ wavenumber เพื่อใช้ในการวิเคราะห์ตัวอย่าง ซึ่งสามารถทำได้โดย
- 8. การ Define Group ตัวอย่าง
 - a. คลิกขวา เลือก range 🗲 define range หรือ
 - b. เลือก edit **>** Define Range จะปรากฏหน้าต่าง Define Range
 - c. เลือกชุดตัวอย่างในแต่ละกลุ่มที่ต้องการ Define แล้วกำหนดชื่อ เช่น กลุ่มตัวอย่าง A และ C
 - d. กด Create จะปรากฏชื่อกลุ่มตัวอย่างด้านล่าง Row ranges
 - e. เลือก OK

New Project [Not Saved] - The Unscrambler X			
File Edit View Insert Plot Tasks Tools Help	1		
F. 🧳 🔣 📫 😧			
- U New Project A+B 3000.789 2998.861	99		
19_A25 1 2			
€ 15_C.21 10_A.17 1 0.2269 0.2269	-		
Transform 0.2306 0.2306 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.2506 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.250 0.25	-		
Input control > 0.1018 0.1018	-		
Plot 0.2101 0.2101	1		
0.3125 0.3125			
0.1652 0.1652 Banne	-		
The Dunlicate Matrix	-		
Rename Paste Range	-		
X Delete 0.2721 0.2721			
Spectra 0.2637 0.2637			
Save Matrix 0.3282 0.3282	-		
Define Units and Limits 0.3572 0.3572			
Define Range	Define Range	Define Range	
Row ranges	Row ranges	Colu Row ranges	
A 1-38		A 1-38	
		A 150	
		C 39-93	
		ชื่อกลุ่มตัวอย่างที่ define ไว้	
	A 1-38	Consideration of the define as	
A 1-38	Update Create 127		
	A+B 2998.861 2996.932 29	95.0	
Indata Create	2 3		
	6_A.13 32 0.2275 0.2275		
A+B 2998.861 2996.932	6_A13 32 0.2275 0.2275 7_A14 33 0.2101 0.2101 9_A16 34 0.4250 0.4250	20.02	
A+B 2998.861 2996.932 2 3 2 0 02275 0 02275	6_A13 32 0.2275 0.2275 7_A14 33 0.2101 0.2101 9_A16 34 0.4250 0.4250 48_A17 35 0.6108 0.6108	39-93	
A+B 2998.861 2996.932 6_A13 32 0.2275 0.2275 7_A14 33 0.2101 0.2101	6_A13 32 0.2275 0.2275 7_A14 33 0.2101 0.2101 9_A16 34 0.4250 0.4250 48_A.17 35 0.6108 0.6108 53_A38 36 0.4435 0.4435	2 39-93	

9. จะปรากฏชื่อกลุ่มตัวอย่างที่ define ไว้ด้านล่าง data matrix ที่ define

- New Project	A+B	1	3000 789	2998 861	2996 932	2995 004	2993 075	2991 147	2989 218	2987 29	2985 361
			1	2	3	4	5	6	7	8	9
H-15 C.21	10 A 17	1	0.2269	0.2269	0.2269	0.2269	0.2269	0.2269	0.2269	0.2289	0.231
A+C	11 A 18	2	0.2306	0.2306	0.2306	0.2306	0.2306	0.2306	0.2306	0.2327	0.235
E- Rowset	12 A.19	3	0.1694	0.1694	0.1694	0.1694	0.1694	0.1694	0.1694	0,1699	0.172
A		4	0,1018	0.1018	0.1018	0.1018	0.1018	0.1018	0.1018	0,1053	0,105
L C	14 A.20	1.0		0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2096	0.210
	17 A.23	6	0.3125	0.3125	0.3125	0.3125	0.3125	0.3125	0.3125	0.3141	0.31
	18 A.24	7	0.1652	0.1652	0.1652	0.1652	0.1652	0.1652	0.1652	0.1669	0.16
	19_A.25	8	0.1537	0.1537	0.1537	0.1537	0.1537	0.1537	0.1537	0.1545	0.15
	1_A.0	9	0.1135	0.1135	0.1135	0.1135	0.1135	0.1135	0.1135	0.1155	0.11
	20_A.26	10	0.1538	0.1538	0.1538	0.1538	0.1538	0.1538	0.1538	0.1559	0.15
	22 A.28	11	0.2207	0.2207	0.2207	0.2207	0.2207	0.2207	0.2207	0.2227	0.22
	23_A.29	12	0.2721	0.2721	0.2721	0.2721	0.2721	0.2721	0.2721	0.2726	0.27
	24_A.3	13	0.2637	0.2637	0.2637	0.2637	0.2637	0.2637	0.2637	0.2661	0.26
	25_A.30	14	0.3282	0.3282	0.3282	0.3282	0.3282	0.3282	0.3282	0.3288	0.33
	26_A.31	15	0.2429	0.2429	0.2429	0.2429	0.2429	0.2429	0.2429	0.2465	0.25
	27_A.32	16	0.3572	0.3572	0.3572	0.3572	0.3572	0.3572	0.3572	0.3604	0.36
	28_A.33	17	0.5127	0.5127	0.5127	0.5127	0.5127	0.5127	0.5127	0.5171	0.52
	29_A.34	18	0.4482	0.4482	0.4482	0.4482	0.4482	0.4482	0.4482	0.4499	0.45
	32_A.37	19	0.2611	0.2611	0.2611	0.2611	0.2611	0.2611	0.2611	0.2622	0.26
	33_A.38	20	0.3037	0.3037	0.3037	0.3037	0.3037	0.3037	0.3037	0.3037	0.30
	34_A.39	21	0.4126	0.4126	0.4126	0.4126	0.4126	0.4126	0.4126	0.4142	0.41
1	37_A.41	22	0.5655	0.5655	0.5655	0.5655	0.5655	0.5655	0.5655	0.5687	0.57
	38_A.42	23	0.4243	0.4243	0.4243	0.4243	0.4243	0.4243	0.4243	0.4256	0.42
A CONTRACTOR OF A CONTRACTOR OFTA CONTRACTOR O	39_A.43	24	0.2624	0.2624	0.2624	0.2624	0.2624	0.2624	0.2624	0.2645	0.26
	3_A.10	25	0.1829	0.1829	0.1829	0.1829	0.1829	0.1829	0.1829	0.1842	0.18
	40_A.44	26	0.3090	0.3090	0.3090	0.3090	0.3090	0.3090	0.3090	0.3097	0.31
	43_A.7	27	0.3373	0.3373	0.3373	0.3373	0.3373	0.3373	0.3373	0.3382	0.34
Size : 93 X 1142	44_A.8	28	0.2545	0.2545	0.2545	0.2545	0.2545	0.2545	0.2545	0.2549	0.25
Created :2/3/2562 14:34:41	45_A.9	29	0.2858	0.2858	0.2858	0.2858	0.2858	0.2858	0.2858	0.2869	0.28
	4_A.11	30	0.2834	0.2834	0.2834	0.2834	0.2834	0.2834	0.2834	0.2859	0.28
	5_A.12	31	0.2869	0.2869	0.2869	0.2869	0.2869	0.2869	0.2869	0.2891	0.29
	6_A.13	32	0.2275	0.2275	0.2275	0.2275	0.2275	0.2275	0.2275	0.2316	0.23
÷	7 A.14	33	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2102	0.21

- 10. การ define column นั้น ก่อนที่จะทำการ define column เพื่อใช้ในการวิเคราะห์ข้อมูล จะต้องทราบ ช่วงของ wavenumber ที่ต้องการใช้ในการวิเคราะห์ก่อน โดยสามารถทราบช่วง wavenumber ได้จาก การ plot graph และจดค่าตัวเลข column ที่สัมพันธ์กับ wavenumber
 - a. คลิกขวา เลือก Plot
 - b. เลือก Line จะปรากฏหน้าต่าง Line Plot-Scope
 - c. กำหนด matrix ที่ต้องการ Plot
 - d. เลือก Sample
 - e. เลือก OK

New P	roject	[Not Saved] - 1	The Unscramb	ler X									-	- F
File Ed	dit \	/iew Insert	Plot Tas	s To	ols Help									
FT, 🛷														
-U Nev	w Proje	ct	A+B		3000.789	2998.861	2996.932	2995.004	2993.075	2991.147	2989.218	2987.29	2985.361	2983.43
	19_A.2	25			1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
	15_C.1	21	10_A.17	1	0.2269	0.2269	0.2269	0.2269	0.2269	0.2269	0.2269	0.2289	0.2312	
	Part of	Transform	11 A 10		0.2306	0.2306	0.2306	0.2306	0.2306	0.2306	0.2306	0.2327	0.2356	
	4	Transform		·	0.1694	0.1694	0.1694	0.1694	0.1694	0.1694	0.1694	0.1699	0.1721	
		Input contro	1	•	0.1018	0.1018	0.1018	0.1018	0.1018	0.1018	0.1018	0.1053	0.1091	
		Plot		• k	Scatter		0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2096	0.2105	
		Export			- Per		0.3125	0.3125	0.3125	0.3125	0.3125	0.3141	0.3167	
		Export		· •	Dar		0.1652	0.1652	0.1652	0.1652	0.1652	0.1669	0.1686	
		Range		• •	= 3D Scatte	r	0.1537	0.1537	0.1537	0.1537	0.1537	0.1545	0.1562	
	1	Duplicate M	atrix	1	🖌 Line		0.1135	0.1135	0.1135	0.1135	0.1135	0.1155	0.1166	
		Rename		5	Matrix		0.1538	0.1538	0.1538	0.1538	0.1538	0.1559	0.1576	
	~	0.1.1		1	IVIGUIX		0.2207	0.2207	0.2207	0.2207	0.2207	0.2227	0.2244	
	~	Delete		1	Histogran	n	0.2721	0.2721	0.2721	0.2721	0.2721	0.2726	0.2742	
		Spectra		5	Kormal P	robability	0.2637	0.2637	0.2637	0.2637	0.2637	0.2661	0.2686	
		Save Matrix			Multiple	Scatter	0.3282	0.3282	0.3282	0.3282	0.3282	0.3288	0.3309	
	da.	Define Units	and Limite		- manipie	A L'	0.2429	0.2429	0.2429	0.2429	0.2429	0.2465	0.2501	
	里	Define Units	and Limits		Multiple	Axes Line	0.3572	0.3572	0.3572	0.3572	0.3572	0.3604	0.3645	
			28_A.33	17		<u>i.</u>	<u>ču – na</u>	ien n	<u>iru.</u> 1		0.5127	0.5171	0.5214	
			29_A.34	18	Line Plot	- Scope				-?	0.4482	0.4499	0.4525	
			32_A.37	19							0.2611	0.2622	0.2640	
			33_A.38	20	Data						0.3037	0.3037	0.3041	
			34_A.39	21	Matrix	A+B (93x1)	142}			-	0.4126	0.4142	0.4166	1
			37_A.41	22	1						0.5655	0.5687	0.5732	
			38_A.42	23	Rows	All	-	Cols Al		▼ Define	0.4243	0.4256	0.4274	
			39_A.43	24		<u> </u>					0.2624	0.2645	0.2681	
			3_A.10	25							0.1829	0.1842	0.1862	
		~ 1	40_A.44	26							0.3090	0.3097	0.3109	
			43_A.7	27	Advan	icea					0.3373	0.3382	0.3404	
ame : A+t	1142	^	44_A.8	28	Plot ty	pe: 💿 Sar	nple 🔘 Varia	able			0.2545	0.2549	0.2552	
reated :2/	3/2562	14:34:41	45_A.9	29							0.2858	0.2869	0.2884	
			4_A.11	30	H		OK		incel		0.2834	0.2859	0.2889	
			5_A.12	31	ł		UN				0.2869	0.2891	0.2915	
			6_A.13	32							0.2275	0.2316	0.2360	
		Ŧ	7 A.14	33	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2102	0.2119	
		•	•											+
nfo No	otes		## 19 A.2	5	× × Li	ne Plot	# # 15	C.21	# # A+B	И				

- 11. การ define column จะต้องมีการกำหนดช่วงที่ต้องการ define คือช่วง wavenumber ที่ต้องการ นำไปใช้ในการวิเคราะห์
 - การกำหนดช่วง column ต้องใส่ column number ที่อยู่ในช่วง wavenumber ที่เราต้องการ ใช้
 - b. ในตัวอย่างให้กำหนดช่วง column number 2 ช่วงคือ
 - ที่ 1-126 (wn. 3000-2759 cm⁻¹) และ 631-1139 (wn. 1785-806 cm⁻¹) กำหนดให้ เป็นช่วง Use คือช่วงที่ต้องการนำมาใช้ในการเปรียบเทียบ
 - ii. ที่ 1-1141 (wn. 3000-802 cm⁻¹) กำหนดให้เป็นช่วง Specific range คือช่วงทั้งหมด ของ spectrum



0.1 3000.789 2856.15 2713.439 2559.156 2410.66 2267.949 2113.667 1965.17 1820.53 1675.891 1523.537 1375.04 1243.9 1112.76 971.978 833.124

12. Define column เพื่อกำหนดกลุ่มสเปคตรัมตัวอย่าง A และ C

- a. เลือก column สุดท้าย
- b. คลิกขวา
- c. เลือก Insert
- d. เลือก Category Variable

w Project	A+B		815,7673	813.8387	811.9102	809.9817	808.0532	806.1246	804,1961	802.2676	800.3391	
19 A.25			1134	1135	1136	1137	1138	1139	1140	1141	1142	
15_C.21	10_A.17	1	0.0860	0.0878	0.0852	0.0852	0.0852	0.0852	0.0852	0.0852	0.0852	
A+C	11_A.18	2	0.1602	0.1553	0.1532	0.1532	0.1532	0.1532	0.1532	0.1532	0.1532	
Bowset	12_A.19	3	0.1840	0.1817	0.1815	0.1815	0.1815	0.1815	0 1815	0 1815	0.1815	
	13_A.2	4	0.1014	0.0890	0.0774	0.0774	0.0774	0.0	Create Colur	nn Range	0.0774	
	14_A.20	5	0.2131	0.2150	0.2172	0.2172	0.2172	0.2	Unde		0.2172	
	17_A.23	6	0.1397	0.1470	0.1495	0.1495	0.1495	0.1	Undo		0.1495	
	18_A.24	7	0.0972	0.0984	0.0987	0.0987	0.0987	0.0	Redo		0.0987	
	19_A.25	8	0.1554	0.1586	0.1636	0.1636	0.1636	0.1	C .4		0.1636	
	1_A.0	9	-0.0282	-0.0340	-0.0335	-0.0335	-0.0335	-0.0:	Cut		0.0335	
	20_A.26	10	0.1263	0.1327	0.1376	0.1376	0.1376	0.1	Copy		0.1376	
	22_A.28	11	0.1164	0.1281	0.1376	0.1376	0.1376	0.1	Copy with H	eaders	0.1376	
	23_A.29	12	0.1303	0.1319	0.1299	0.1299	0.1299	0.1	0		0.1299	
	24_A.3	13	0.1960	0.1968	0.1995	0.1995	0.1995	0.1	Paste		0.1995	
	25_A.30	14	0.0910	0.0994	0.1077	0.1077	0.1077	0.1	Insert Copies	d Cells	0.1077	
	26_A.31	15	0.1447	0.1432	0.1366	0.1366	0.1366	0.13	Append Con	ied Cells	0.1366	
	27_A.32	16	0.2161	0.2184	0.2179	0.2179	0.2179	0.2	C. D. T. AVC.		0.2179	
	28_A.33	17	0.2888	0.2797	0.2711	0.2711	0.2711	0.2	Split Text/Ca	tegory variable	0.2711	
	29_A.34	18	0.1074	0.1015	0.0996	0.0996	0.0996	0.0 ×	Delete		0.0996	
	32_A.37	19	0.1517	0.1448	0.1327	0.1327	0.1327	0.13	Remove Dur	licate Rows	0.1327	
	33_A.38	20	0.1821	0.1865	0.1878	0.1878	0.1878	0.1			0.1878	
	34_A.39	21	0.1913	0.1890	0.1860	0.1860	0.1860	0.1	Fill		0.1860	
	37_A.41	22	0.2073	0.2097	0.1				Insert		0.2094	
	38_A.42	23	0.2044	0.2071	0.3	Row(s)/	Column(s).				0.2101	
	39_A.43	24	0.1129	0.1161	0.	Catalan	Madahla		Append		0.1153	
	3_A.10	25	0.1627	0.1715	0.	Categor	y variable		Change Data	Туре	0.1786	
	40_A.44	26	0.1295	0.1319	0.1342	0.1342	0.1342	0.1			0.1342	
D.	43_A.7	27	0.0625	0.0600	0.0592	0.0592	0.0592	0.0	Make Heade	r	0.0592	
1142	44_A.8	28	0.0498	0.0605	0.0654	0.0654	0.0654	0.0	Plot		0.0654	
/3/2562 14:34:41	45_A.9	29	0.1679	0.1591	0.1537	0.1537	0.1537	0.1	FICE		0.1537	
	4_A.11	30	0.1281	0.1321	0.1388	0.1388	0.1388	0.1388	0.1388	0.1388	0.1388	
	5_A.12	31	0.2600	0.2599	0.2643	0.2643	0.2643	0.2643	0.2643	0.2643	0.2643	
_	6_A.13	32	0.1172	0.1238	0.1331	0.1331	0.1331	0.1331	0.1331	0.1331	0.1331	
	7 A.14	33	0.0805	0.0954	0.1105	0.1105	0.1105	0.1105	0.1105	0.1105	0.1105	

- e. จะปรากฏหน้าต่าง Category Name
- f. เลือก Specify levels to be based on a collection of row set
- g. เลือก Add ตัวอย่างทุกกลุ่มไปช่องด้านขวามือ
- h. เลือก OK



	A.D.	1	7000 010	011 0100	000 0017	000.0500	000 1040	004 1001	000 0070	01140	000 0001	
New Project	A+B		813.838/	811.9102	809.9817	808.0532	806.1246	804.1961	802.26/6	C1142	800.3391	
15_A.25	10 0 17	1	0.0979	1136	0.0952	1130	1139	0.0952	0.0953	1142	0.0952	
A+B	11 4 18	2	0.1553	0.0052	0.0032	0.1532	0.0652	0.0032	1532	A	0.1532	
- Rowset	12 4 19	3	0.1817	0.1815	0.1815	0.1815	0.1815	0.181	1552	A	0.1815	
- A	13 A 2	4	0.0890	0.0774	0.0774	0.0774	0.0774	0.077	Å	A	0.0774	
B	14 A.20	5	0.2150	0.2172	0.2172	0.2172	0.2172	0.2172	2172	A	0.2172	
Line Plot	17_A.23	6	0.1470	0.1495	0.1495	0.1495	0.1495	0.1495	0.1495	A	0.1495	
	18_A.24	7	0.0984	0.0987	0.0987	0.0987	0.0987	0.0987	0.0987	A	0.0987	
	19_A.25	8	0.1586	0.1636	0.1636	0.1636	0.1636	0.1636	0.1636	A	0.1636	
	1_A.0	9	-0.0340	-0.0335	-0.0335	-0.0335	-0.0335	-0.0335	-0.0335	A	-0.0335	
	20_A.26	10	0.1327	0.1376	0.1376	0.1376	0.1376	0.1376	0.1376	A	0.1376	
	22_A.28	11	0.1281	0.1376	0.1376	0.1376	0.1376	0.1376	0.1376	A	0.1376	
	23_A.29	12	0.1319	0.1299	0.1299	0.1299	0.1299	0.1299	0.1299	A	0.1299	
	24_A.3	13	0.1968	0.1995	0.1995	0.1995	0.1995	0.1995	0.1995	A	0.1995	
	25_A.30	14	0.0994	0.1077	0.1077	0.1077	0.1077	0.1077	0.1077	A	0.1077	
	26_A.31	15	0.1432	0.1366	0.1366	0.1366	0.1366	0.1366	0.1366	A	0.1366	
	27_A.32	16	0.2184	0.2179	0.2179	0.2179	0.2179	0.2179	0.2179	A	0.2179	
	28_A.33	1/	0.2/9/	0.2/11	0.2/11	0.2/11	0.2/11	0.2/11	0.2711	A	0.2/11	
	23_A.34	10	0.1015	0.0990	0.0990	0.0996	0.0996	0.0996	0.0990	A	0.0996	
	33 4 38	20	0.1865	0.1878	0.1878	0.1878	0.1878	0.1878	0.1878	A	0.1878	
	34 4 39	21	0.1890	0.1860	0.1860	0.1860	0.1860	0.1860	0.1860	<u>^</u>	0.1860	
	37 A.41	22	0.2097	0.2094	0.2094	0.2094	0.2094	0.2094	0.2094	A	0.2094	
	38 A.42	23	0.2071	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	A	0.2101	
	39 A.43	24	0.1161	0.1153	0.1153	0.1153	0.1153	0.1153	0.1153	A	0.1153	
	3_A.10	25	0.1715	0.1786	0.1786	0.1786	0.1786	0.1786	0.1786	A	0.1786	
	40_A.44	26	0.1319	0.1342	0.1342	0.1342	0.1342	0.1342	0.1342	A	0.1342	
A 6	43_A.7	27	0.0600	0.0592	0.0592	0.0592	0.0592	0.0592	0.0592	A	0.0592	
A+B A	44_A.8	28	0.0605	0.0654	0.0654	0.0654	0.0654	0.0654	0.0654	A	0.0654	
1:2/3/2562 14:34:41	45_A.9	29	0.1591	0.1537	0.1537	0.1537	0.1537	0.1537	0.1537	A	0.1537	
	4_A.11	30	0.1321	0.1388	0.1388	0.1388	0.1388	0.1388	0.1388	A	0.1388	
	5_A.12	31	0.2599	0.2643	0.2643	0.2643	0.2643	0.2643	0.2643	A	0.2643	
-	6_A.13	32	0.1238	0.1331	0.1331	0.1331	0.1331	0.1331	0.1331	A	0.1331	
+	7 A.14	33	0.0954	0.1105	0.1105	0.1105	0.1105	0.1105	0.1105	A	0.1105	1
Natas	## 10 6 2	e	W At D	en Plat	w +++ 15 /	C 21	× A.P		At Line Die		1	-
INOLES	15_A.2	2	LI	ne riot	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	0.21	A THE ATO	~	Line Fic	s	1	
									_			
 ลบ col 	umn สุ	ุเดท้า	ายออก			J						
 คลิกขว[.] 	าใน co	lum	in สุดเ	ก้าย								
a. ลบ col b. คลิกขว	umn สุ าใน co	ุโดท lum	ายออก in สุดา	ก้าย	C							

13. จะปรากฏ column ของตัวอย่างแต่ละกลุ่มเพิ่มขึ้นมา

- a. ลบ column สุดท้ายออก b. คลิกขวาใน column สุดท้าย c. เลือก delete

File Edit View Insert	Plot Tasks	To	ols Help		Coll Station							
New Project		^	913 9397	811 9102	809 9817	808.0532	806 1246	804 1961	802 2676	C11	42	800 3391
	A10		1135	1136	1137	1138	1139	1140	1141	CII	1142	1143
B 15 C.21	10 A 17	1	0.0878	0.0852	0.0852	0.0852	0.0852	0.0852	0.085		Constant	aluma Danas
A+C	11 A 18	2	0.1553	0.1532	0.1532	0.1532	0.1532	0.1532	0.153		Create	olumn Kange
Barrent Boweat	12 A 19	3	0.1817	0.1815	0.1815	0.1815	0.1815	0.1815	0.181	5	Undo	
	13_A.2	4	0.0890	0.0774	0.0774	0.0774	0.0774	0.0774	0.077-	C	Redo	
	14 A.20	5	0.2150	0.2172	0.2172	0.2172	0.2172	0.2172	0.217	-	Redu	
· C	17_A.23	6	0.1470	0.1495	0.1495	0.1495	0.1495	0.1495	0.149	×	Cut	
	18_A.24	7	0.0984	0.0987	0.0987	0.0987	0.0987	0.0987	0.098	B	Conv	
	19_A.25	8	0.1586	0.1636	0.1636	0.1636	0.1636	0.1636	0.163	-	Connection	the Librard and
	1_A.0	9	-0.0340	-0.0335	-0.0335	-0.0335	-0.0335	-0.0335	-0.033		Copy wi	th Headers
	20_A.26	10	0.1327	0.1376	0.1376	0.1376	0.1376	0.1376	0.137		Paste	
	22_A.28	11	0.1281	0.1376	0.1376	0.1376	0.1376	0.1376	0.137		Insert Cr	opied Cells
	23_A.29	12	0.1319	0.1299	0.1299	0.1299	0.1299	0.1299	0.129		Annend	Conied Cells
	24_A.3	13	0.1968	0.1995	0.1995	0.1995	0.1995	0.1995	0.199		Append	Copied Cells
	25 A.30	14	0.0994	0.1077	0.1077	0.1077	0.1077	0.1077	0.107		Split Tex	t/Category Varia
	26_A.31	15	0.1432	0.1366	0.1366	0.1366	0.1366	0.1366	0.136	×	Delete	
	27 A.32	16	0.2184	0.2179	0.2179	0.2179	0.2179	0.2179	0.217		Remove	Duplicate Rowr
	28 A.33	17	0.2797	0.2711	0.2711	0.2711	0.2711	0.2711	0.271		Kennove	Dupileate Nows
	29_A.34	18	0.1015	0.0996	0.0996	0.0996	0.0996	0.0996	0.099		Fill	
	32_A.37	19	0.1448	0.1327	0.1327	0.1327	0.1327	0.1327	0.132		Insert	
	33 A.38	20	0.1865	0.1878	0.1878	0.1878	0.1878	0.1878	0.187			
	34 A.39	21	0.1890	0.1860	0.1860	0.1860	0.1860	0.1860	0.186		Append	
	37_A.41	22	0.2097	0.2094	0.2094	0.2094	0.2094	0.2094	0.209-		Change	Data Type
	38_A.42	23	0.2071	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.210		Malanti	
	39_A.43	24	0.1161	0.1153	0.1153	0.1153	0.1153	0.1153	0.115		маке не	eader
	3 A 10	25	0.1715	0.1786	0.1786	0.1786	0.1786	0.1786	0.178		Plot	
	40_A.44	26	0.1319	0.1342	0.1342	0.1342	0.1342	0.1342	0.1342	A		0.1342
▼▼1	1 43_A.7	27	0.0600	0.0592	0.0592	0.0592	0.0592	0.0592	0.0592	A		0.0592
lame : A+B	44_A.8	28	0.0605	0.0654	0.0654	0.0654	0.0654	0.0654	0.0654	A		0.0654
reated :2/3/2562 14:34:41	45_A.9	29	0.1591	0.1537	0.1537	0.1537	0.1537	0.1537	0.1537	A		0.1537
	4_A.11	30	0.1321	0.1388	0.1388	0.1388	0.1388	0.1388	0.1388	A		0.1388
	5_A.12	31	0.2599	0.2643	0.2643	0.2643	0.2643	0.2643	0.2643	A		0.2643
	6_A.13	32	0.1238	0.1331	0.1331	0.1331	0.1331	0.1331	0.1331	A		0.1331
*	7 0 14	33	0.0954	0.1105	0.1105	0.1105	0.1105	0.1105	0.1105			0.1105

- 14. การกำหนดช่วง wavenumber ในการ define column
 - a. เลือก Edit
 - b. เลือก Define Range จะปรากฏหน้าต่าง Define Range
 - c. กำหนดช่วง Specific range
 - d. (ช่วงทั้งหมดยกเว้น Category) กด Create
 - e. ใส่หมายเลข column (ช่วง wavenumber) ที่ใช้ในการวิเคราะห์ แล้วกำหนดชื่อ use range กด
 Create
 - f. ใส่หมายเลข column สุดท้าย กำหนด Category ของชื่อ กลุ่มตัวอย่าง A และ C แล้วกด
 Create
 - g. เลือก OK



Edit View Insert P	lot Tasks Tools	Н	elp								
🕸 🔛 🖆 🔞 🖾 🏷 🍋	12 B B X 4		8	※と 🛪	<i>-</i> - - - - - - - - - -						
J New Project	Spectral ran_		3000.789	2998.861	2996.932	2995.004	2993.075	2991.147	2989.218	2987.29	2985.361
- 19_A.25		9	1	2	3	4	5	6	7	8	9
- 15_C.21	10_A.17	1	0.2269	0.2269	0.2269	0.2269	0.2269	0.2269	0.2269	0.2289	0.23
- A+C	11_A.18	2	0.2306	0.2306	0.2306	0.2306	0.2306	0.2306	0.2306	0.2327	0.23
O Cal Revent	12_A.19	3	0.1694	0.1694	0.1694	0.1694	0.1694	0.1694	0.1694	0.1699	0.17
I A	13_A.2	4	0.1018	0.1018	0.1018	0.1018	0.1018	0.1018	0.1018	0.1053	0.10
L C	14_A.20	5	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2096	0.21
E-Calumnet	17_A.23	6	0.3125	0.3125	0.3125	0.3125	0.3125	0.3125	0.3125	0.3141	0.31
Specific range	18_A.24	7	0.1652	0.1652	0.1652	0.1652	0.1652	0.1652	0.1652	0.1669	0.16
Use rance	19_A.25	8	0.1537	0.1537	0.1537	0.1537	0.1537	0.1537	0.1537	0.1545	0.1
Category	1_A.0	9	0.1135	0.1135	0.1135	0.1135	0.1135	0.1135	0.1135	0.1155	0.1
-Ivy Line Plot	20_A.26	10	0.1538	0.1538	0.1538	0.1538	0.1538	0.1538	0.1538	0.1559	0.1
	22_A.28	11	0.2207	0.2207	0.2207	0.2207	0.2207	0.2207	0.2207	0.2227	0.23
	23_A.29	12	0.2721	0.2721	0.2721	0.2721	0.2721	0.2721	0.2721	0.2726	0.2
	24_A.3	13	0.2637	0.2637	0.2637	0.2637	0.2637	0.2637	0.2637	0.2661	0.2
	25 A.30	14	0.3282	0.3282	0.3282	0.3282	0.3282	0.3282	0.3282	0.3288	0.33
	26 A.31	15	0.2429	0.2429	0.2429	0.2429	0.2429	0.2429	0.2429	0.2465	0.2
	27_A.32	16	0.3572	0.3572	0.3572	0.3572	0.3572	0.3572	0.3572	0.3604	0.3
	28_A.33	17	0.5127	0.5127	0.5127	0.5127	0.5127	0.5127	0.5127	0.5171	0.53
	29_A.34	18	0.4482	0.4482	0.4482	0.4482	0.4482	0.4482	0.4482	0.4499	0.4
	32 A.37	19	0.2611	0.2611	0.2611	0.2611	0.2611	0.2611	0.2611	0.2622	0.2
	33 A.38	20	0.3037	0.3037	0.3037	0.3037	0.3037	0.3037	0.3037	0.3037	0.3
	34_A.39	21	0.4126	0.4126	0.4126	0.4126	0.4126	0.4126	0.4126	0.4142	0.4
	37 A.41	22	0.5655	0.5655	0.5655	0.5655	0.5655	0.5655	0.5655	0.5687	0.5
	38_A.42	23	0.4243	0.4243	0.4243	0.4243	0.4243	0.4243	0.4243	0.4256	0.43
	39_A.43	24	0.2624	0.2624	0.2624	0.2624	0.2624	0.2624	0.2624	0.2645	0.26
	3_A.10	25	0.1829	0.1829	0.1829	0.1829	0.1829	0.1829	0.1829	0.1842	0.1
	40_A.44	26	0.3090	0.3090	0.3090	0.3090	0.3090	0.3090	0.3090	0.3097	0.3
•	43_A.7	27	0.3373	0.3373	0.3373	0.3373	0.3373	0.3373	0.3373	0.3382	0.34
n Set : Spectral range	^ 44_A.8	28	0.2545	0.2545	0.2545	0.2545	0.2545	0.2545	0.2545	0.2549	0.25
n Banne : 1-1141	45_A.9	29	0.2858	0.2858	0.2858	0.2858	0.2858	0.2858	0.2858	0.2869	0.28
: A+B	4_A.11	30	0.2834	0.2834	0.2834	0.2834	0.2834	0.2834	0.2834	0.2859	0.28
	5_A.12	31	0.2869	0.2869	0.2869	0.2869	0.2869	0.2869	0.2869	0.2891	0.29
	6 A 13	32	0.2275	0.2275	0.2275	0.2275	0.2275	0.2275	0.2275	0.2316	0.23
	7 A 14	33	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2101	0.2102	0.21





16. การทำ data-preprocessing

Data preprocess ในตัวอย่างนี้ จะประกอบด้วย: Baseline, MSC/EMSC, PCA โดยจะต้องทำเป็นลำดับต่อกันไป โดยเริ่มจากการทำ Baseline เพื่อปรับให้ฐานพีคมีความเรียบเสมอกัน

- a. คลิกขวา เลือก Transform
- b. <u>เลือก Baseline</u>
- c. จะปรากฏหน้าต่างให้กำหนดค่า Parameters
- d. เลือก Data Matrix ที่ต้องการทำ Baseline (1)
- e. เลือก column ที่ define ไว้ (2)
- f. เลือก Baseline offset และ (3)
- g. Linear baseline correction (3)
- h. กด Preview result เพื่อให้แสดงผล Baseline
- i. เลือก OK (4)



- 17. การทำ MSC/EMSC เป็นการทำ spectral normalization
 - a. คลิกขวาเลือก Transform
 - b. เลือก MSC/EMSC
 - c. จะปรากฏหน้าต่าง Multiplicative Scatter Correction
 - d. ที่หน้า Scope เลือก Data Matrix ที่ต้องการทำ EMSC
 - e. เลือก Column (Use) ที่ define ไว้
 - f. ที่หน้า Options เลือก Extended options
 - g. เลือก OK



- 18. การทำ Principal component analysis (PCA) เพื่อแยกความแตกต่างของตัวอย่าง A และ C
 - a. เลือก Tasks
 - b. เลือก Analyze
 - c. เลือก Principal Component Analysis
 - d. จะปรากฏหน้าต่าง Principal Component Analysis ให้กำหนดค่า Setup
 - e. กำหนดค่า Model Inputs
 - f. เลือก Data Matrix ที่
 - g. ต้องการทำ PCA และเลือก Column ที่ define ไว้
 - h. เลือก Next

File Edit View Insert Plo	t Tasks T	ools Help	_				
ाः 💜 🔡 📫 । 🕢 ⊒-100 New Project	Trans	form (789	2998.861	2996.932	2995.004	2993.0
- 19_A.25	Analy	ze I	J T	Descriptive St	atistics		
□-□ A+C	Predio	t)		Statistical Tes	ts		
Rowset	Recal	culate	=1	Moving Block	Methods		
L C	14 A.20	5	÷.	Statistical Pro	cess Control		
🖻 🛅 Columnset	17_A.23	6	4	Principal Com	ponent Analys	sis	
- Spectral range	18_A.24	7	wa.	Multivariate C	unve Resolutio	n	
Use range	19_A.25	8		indicivariace e		11m	
Category	1_A.0	9	98	Cluster Analys	515		
	20_A.26	10		Multiple Lines	ar Regression		
H- A+C_baseline	22_A.28	11		Distinctor		100	
Howset	23_A.29	12	1	Principal Com	nponent Regres	ssion	
EMSC A.C. Pasalian	24_A.3	13		Partial Least S	quares Regress	ion	
Emoc_A+C_baseine	25_A.30	14	2	L-PLS Regress	ion		
ALC Passion EMSC	26_A.31	15		Support Verte	Machine Pee	version	
Boweat	27_A.32	16		support vecto	or macrime Key	Jiessi01	
Columnet	28_A.33	17	米	Linear Discrim	ninant Analysis		
Countier	29_A.34	18	159	Support Vector	Machine Cla	crification	
	32_A.37	19	·***	Support vecto	or macrime cla	sameadon	
	33_A.38	20	0.22	0.221	17 0.221	0.22	16
	24 1 29	21	0.17	0 190	0 180	0.18	10

del Inputs			M	odel l	nputs		
eights lidation	Data Matrix	A+B_Baselin	ne_EMSC	(93x11	42}		•
ponthm	Rows	Al	•	Cols	Use range	{635} •	Define
	Mana	center data					
	V Wear						

Princip E-Se

- 19. จะปรากฏหน้าต่างให้กำหนดค่า weights
 - a. กำหนดค่า Weights
 - b. Next

Principal Component An	alysis			? 💌
⊡- Setup		Weig	hts	
Weights	Varial	ole Name	Weight	*
···· Validation	1 3000.789		1.00	
····· Algorithm	2 2998.861		1.00	
	3 2996.932		1.00	
	4 2995.004		1.00	
	5 2993.075		1.00	
	6 2991.147		1.00	-
			▼ Define	AI
	Select Advanced			
	A/(SDev+B)	A: 1.00	B: 0.00] Pareto
	Constant:	C: 1.00		
	Downweight]		
	Block weighting	Divide bloc	cks by SDev	
	Car	Back	k Next	Finish

- 20. จะปรากฏหน้าต่างให้กำหนดค่า validation
 - a. กำหนดค่า Validation
 - b. เลือก Leverage correction
 - c. Next

Model Inputs		Validation
Weights	Leverage correction	
Algorithm	Cross validation	Setup
	Uncertainty test	Number of components in uncertainty test
		Use optimal number
		O Use set number
	Test matrix	
	Data	
	Matrix	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·
	Rows	Cols Define
	Discard Residuals	

- 21. จะปรากฏหน้าต่างให้กำหนดค่า Algorithm
 - a. กำหนดค่า Algorithm
 - b. Model inputs เลือก NIPALS
 - c. Finish
 - d. กด OK
 - e. จะปรากฏหน้าต่างแสดงผลการทำ PCA



- 22. จากกราฟ PCA score plot ที่ได้ ถ้าต้องการให้แสดงสีเพื่อแยกกลุ่มตัวอย่างออก สามารถทำได้โดย
 - a. คลิกขวาบริเวณหน้าต่างแสดง PCA score plot
 - b. เลิก Sample Grouping...
 - c. จะปรากฏหน้าต่าง Sample Grouping and Labeling
 - d. เลือก Show sample groups
 - e. เลือก Row set:
 - f. Separate with (เลือก Color หรือ Both)
 - g. Labels (เลือก Group)
 - h. กด OK

0.6	
04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 <t< td=""><td>0</td></t<>	0

- 23. จะปรากฏกราฟ PCA score plot ที่แยกสีตามกลุ่มตัวอย่าง โดยจากกราฟจะแสดงให้เห็นว่า ในกลุ่ม ตัวอย่าง A มี outlier ที่เกิดจากตัวอย่าง B ปนอยู่ ดัวภาพ โดยการตัด outlier ออก แล้วทำกราฟ PCA ใหม่นั้น จะต้องมีการตัด spectrum ที่เป็น outlier ออก ซึ่งสามารถทำได้โดย
 - a. เลือก mark จุดที่เป็น outlier โดยเลือกจาก icon ด้านบนขวามือ ประกอบด้วย
 - b. Mark one by one

C.



d. (เมื่อต้องการลบจุดที่ mark ให้คลิกซ้ำที่จุดเดิมหรือเลือก Unmark all 🚺)



- 24. การตัด outlier ออกจากกลุ่มตัวอย่าง แล้ว plot กราฟ PCA score plot ขึ้นใหม่หลัง สามารถทำได้โดย
 - a. mark จุดที่ต้องการตัดออกแล้ว
 - b. คลิกขวาบริเวณ PCA
 - c. เลือก Recalculate
 - d. เลือก Without Marked
 - e. เลือก Sample...
 - f. จะปรากฏหน้าต่างให้ทำ Principal Component Analysis
 - g. เลือก Next



- h. หน้าต่างให้กำหนดค่า weights เลือก next
- i. หน้าต่างให้กำหนดค่า validation เลือก next
- j. หน้าต่างให้กำหนดค่า Algorithm เลือก finish

Principal Component Aria	arysis			
	Variable Name Weight 1 3000.789 1.000			
⊶ Agontrin	2 2994.661 1.00 3 2994.652 1.00 4 2995.004 1.00 5 2993.075 1.00 5 2993.477 1.00 5 2993.477 1.00 5 2993.47 1.00 6 2993.47 1.00 5 2993.47 1.00 6 2000 Altored AltSoveB) A 100 8 0.00 Contact C 100 Downweight Book sectors 5 Day	Next	t Analysis Algorithm Model inputs NIPALS Max. terations Singular Value Decomposition(SVD) Calculate exact Greadual limits Rictation method: Nane	100
Principal Component Anz Setup Model Inputs Weights Validation Algorithm	Cancel Back Need Preh		Nodel warnings Ratio of Calbrated to Validated Residual Vatance Ratio of Validated to Calibrated Residual Vatance Residual Vatance Increase Limt (h); Cancel Back Mite	0.5 ÷ 0.75 ÷ 6.0 ÷
		ext	เลือก Finish	
	Cancel Back Net Frish			

25. จะปรากฏหน้าต่างแสดงผลการทำ PCA



- 26. เมื่อต้องการให้กราฟ PCA score plot แสดงสีแยกตามตัวอย่าง สามารถทำได้โดย
 - a. คลิกขวาบริเวณหน้าต่างแสดง PCA score plot
 - b. เลิก Sample Grouping...
 - c. จะปรากฏหน้าต่าง Sample Grouping and Labeling
 - d. เลือก Show sample groups
 - e. เลือก Value of variable: Category Variables
 - f. กด OK



27. จะปรากฏหน้าต่างแสดงผลการทำ PCA score plot ที่ผ่านการตัด Outlier ออกแล้ว



BL 4.1 IR Spectroscopy and Imaging Synchrotron Light Research Institute (Public Organization)

- 28. การแสดงผลการตัด outlier ประกอบด้วยการแสดงผลในชุดข้อมูลดังนี้
 - a. แสดงข้อมูลชุดที่ไม่มี outlier (Training)
 - b. แสดงข้อมูลสเปคตรัมที่เป็น outlier

โดยสามารถเลือกให้แสดงผล spectrum ที่เป็น outlier หรือให้แสดงผลเป็น data matrix ของชุด data set ใหม่ได้ โดยหลังจากที่ mark จุดที่เป็น outlier แล้ว

- c. คลิกขวา เลือก Create Range
- d. จะปรากฏหน้าต่าง Create Range



- 29. โดยสามารถตังค่าการแสดงผลได้ดังนี้
 - ใน sample selection จะเป็นการแสดงผลชุดข้อมูล data set ใหม่ โดยสารถกำหนดให้ แสดงผล data set เป็นข้อมูลได้ 2 ลักษณะ ประกอบด้วย
 - ี้i. ถ้าต้องการให้แสดงผลชุดข้อมูลที่เป็น outlier เลือก Marked samples (Outlier)
 - ii. ถ้าต้องการให้แสดงผลชุดข้อมูลที่ไม่มี outlier เลือก Unmarked samples (Training)
 - ใน create range จะเป็นการแสดงผลชุดข้อมูลใหม่จากการเลือก data matrix ที่ต้องการ ให้แสดงผลนั้นๆ ประกอบด้วย
 - iii. เลือก Create row set as new matrix from selected data matrices เป็นการสร้าง data matrix ใหม่ขึ้นมา
 - iv. ถ้าต้องการให้การแสดงผลชุดข้อมูลใหม่ปรากฏที่ขั้นตอน Preprocess ใดๆ ให้เลือกตาม column Select ตามตารางด้านล่าง

3) เมื่อกำหนดค่าแล้ว เลือก OK

Create Range	ถ้าต้องการให้แสดงผลขุดข้อมูลที่เป็น outlier เลือก Marked samples (Outlier)
Range name Training 2	ถ้าต้องการให้แสดงผลชุดข้อมูลที่ไม่มี outlier เลือก Unmarked samples (Training)
	Create Range เลือก Create row set as new matrix from selected data matrices
Allow mis-matching samples names OK Cancel	ถ้าต้องการให้การแสดงผลขุดข้อมูลใหม่ปรากฏที่ขั้นตอน Preprocess ใดๆ ให้เลือกตาม column Select OK

- จะแสดงผลชุดข้อมูลตามที่ได้เลือกตั้งค่าไว้ จากตัวอย่าง เลือกให้ create data matrix ใหม่ ที่มี และ ไม่ มี outlier ในชุดของ data set ที่เป็น original spectrum จะได้ผลการ create range แสดงดังภาพ
 - a. โดย data matrix ที่ไม่มี outlier เรียกว่า Training set
 - b. และ data matrix ที่เป็น outlier เรียกว่า Outlier



		2000 700		0000 000		0000 075	0004 417			2005 204	000
New Project	Outliers	3000.789	2998.861	2996.932	2995.004	2993.075	2991.14/	2989.218	2987.29	2985.361	298
15_A25	40.0.00	1	2	3	4	5	6	0.000	8	9	
B AC	40_0.25	1 0.6200	0.0200	0.0200	0.0266	0.0200	0.0200	0.0200	0.0331	0.0380	
H- AC Smoothing SGolay	54_C 15	2 0.1304	0.1364	0.1304	0.1364	0.1364	0.1304	0.1364	0.1373	0.1301	
AC_SmoothingSGolay_Baseline	50 C 21	4 0.2157	0.2157	0.2157	0.2157	0.2157	0.2157	0.2157	0.2173	0.2181	-
EMSC_AC_SmoothingSGolay_I	51 C 22	5 0.1991	0.1991	0.1991	0.1991	0.1991	0.1991	0.1991	0.1998	0.2011	
B-AC_SmoothingSGolay_Baseline	52 C 35	6 0.2227	0.2227	0.2227	0.2227	0.2227	0.2227	0.2227	0.2227	0.2228	
PCA PCA	49 C.40	7 761	0,4761	0,4761	0.4761	0.4761	0,4761	0.4761	0.4815	0,4865	-
🕀 🛄 Raw data	55 C 4	8 0 3	0.2193	0.2193	0,2193	0.2193	0,2193	0,2193	0.2213	0,2224	
Columnset		ູ - ຈະ	ะแสดง	เผลชุด	ขอมูล	สเปคต	รมที่เข	Ju Ou	utlier		
Columneet		ູ່ ຈະ 	ะแสดง	เผลชุด	 ขอมูล:	สเปคต	รมที่เจ	Ju Ou	utlier		
Columnet		ູ - -	ะแสดง	เผลชุด	າວມູລ	สเปคต	เรมท์เข	Ju Ou	utlier		
Columner		 	ะแสดง	เผลชุด	 າອນູລ	สเปคต	เรมท์เจ	Ju Ou	utlier		
v Set: Outline		1 0:	ะแสดง	เผลชุด	າວມູດ	สเปคต	เรมท์เข	Ju Ou	utlier		
B Columner W Set Columner W Set Columner W Set Collers W Range : S843 W Range : S843		1	ะแสดง	เผลชุด	າ ອນູລ	สเปคต	เรมท์เร	Ju Ou	utlier		
W Set: Colliens W Range : SE-33 tric: :AC_PCA		1	ะแสดง	ผลชุด	ขอมูล	สเปคต	ารมทั่ง	ງກ Or	utlier		
Training Columneet Training Columneet Training Columneet Training Columneet Training Columneet Training Columneet Training Columneet Training Columneet Training Columneet Training Columneet Training Columneet Training Columneet Training Columneet Training Columneet Training Columneet Training Columneet Training Columneet Training Columneet Training Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columneet Columnee		1	ะแสดง	ผลชุด	ขอมูล	สเปคต	ารมทั่ง	Ju Ou	ıtlier		

31. การอ่านผลการทำ PCA ประกอบกับ loading plot

- a. คลิกขวา เลือก PCA
- b. เลือก loadings
- c. เลือก line จะปรากฏหน้าต่างแสดงกราฟ loading ดังภาพ



- 32. การอ่านผล PCA ทางแนวแกน PC1 ซึ่งแบ่งกลุ่มตัวอย่าง 2 กลุ่มออกเป็น
 - ล. ทางดานซ้ายมือของกลุ่มตัวอย่าง C คือตามแนวแกนค่าติดลบ (-) โดยจะสัมพันธ์กับ loading
 ตามแนวแกน Y ค่าลบ คือจะสัมพันธ์กับพีค 1735, 1259
 - b. ทางด้านขวามือของกลุ่มตัวอย่าง A คือตามแนวแกนค่าบวก (+) โดยจะสัมพันธ์กับ loading ตาม แนวแกน Y ค่าบวก คือจะสัมพันธ์กับพีค 1652, 1542, 1112



- 33. และเมื่อต้องการดูความแตกต่างของแต่ละกลุ่มตัวอย่าง สามารถทำได้โดยการเฉลี่ย spectrum ของแต่ละ group เพื่อเปรียบเทียบ
 - คลิกเลือก data set ที่ต้องการเฉลี่ย spectrum ในตัวอย่าง เลือก average spectrum จาก data set ชุดที่ผ่านการทำ data preprocessing มาแล้ว
 - b. คลิกขวา เลือก transform
 - c. เลือก reduce average

New Project [No Le Edit Vie	ot Sav	ed] - The Unscram Insert - Plot - T	ibler X	Tools	Help								•
i 🛷 🔡 🖆	0	insert Flot I	0363	10013	i icip								
U New Project		AC Smooth	1	3000.789	2998.86	1 2996.932	2995.004	2993.075	2991.147	2989.218	2987.29	2985.361	2983.4
- 19 A.25				1	2	3	4	5	6	7	8	9	1
15_C.21		10_A.17	1	0.3	471 0	.3461 0.345	1 0.3441	0.3426	0.3419	0.3420	0.3431	0.3456	
AC		11_A.18	2	0.3	378 0	.3364 0.334	9 0.3334	0.3314	0.3301	0.3300	0.3320	0.3367	1
AC_Smo	othing	SGc 12_A.19	3	0.3	444 0	.3430 0.341	6 0.3402	0.3383	0.3368	0.3364	0.3378	0.3414	
AC_Smo	othing	SGc 13_A.2	4	0	~ ~	0.000	0.0004	0.3187	0.3195	0.3227	0.3285	0.3361	
EMSC_A	AC_Sm	oot! 14_A.20	5	0	Smooth	ning	•	0.2889	0.2873	0.2861	0.2864	0.2890	
E-AC_Smo	othing	SGc 17_A.23	6	0 /	Norma	ize		0.3232	0.3233	0.3242	0.3261	0.3292	
Row	set	18_A.24	7	0	Derivat	ve		0.3350	0.3347	0.3351	0.3363	0.3385	
	-	Transform			A D			0.3313	0.3304	0.3304	0.3319	0.3349	
		Transform		- 1	Baselin	e		0.3077	0.3103	0.3143	0.3189	0.3231	1
anda PCA		Input control		• •	⇔z SNV			0.3252	0.3255	0.3270	0.3294	0.3326	
PCA(1)		Plot		× .	Creater			0.3240	0.3241	0.3250	0.3266	0.3290	
AC PCA		Export			w Spectro	scopic		0.2961	0.2962	0.2968	0.2984	0.3017	
	1	capore		1	H De-tren	ding		0.3585	0.3571	0.3566	0.3573	0.3595	
		Range		· 1	MSC/E	MSC		0.2932	0.2930	0.2934	0.2949	0.2983	
	1	Duplicate Matrix.			0.00			0.3557	0.3552	0.3560	0.3582	0.3622	
		Rename		1	д USC			0.2925	0.2927	0.2943	0.2975	0.3024	1
	~	Delete			Deresol	ve		0.3120	0.3123	0.3137	0.3161	0.3193	1
	~	Delete		1	- Reduce	(Average)	1	0.2433	0.2442	0.2458	0.2484	0.2520	İ
		Spectra		-	× Reduce	(Average)		0.2536	0.2544	0.2562	0.2595	0.2645	1
		Save Matrix		2	x' Transpi	ose		0.2951	0.2951	0.2951	0.2957	0.2979	
		Define Units and	Linsite		Noise			0.2532	0.2543	0.2561	0.2591	0.2640	
	100	Denne Onits and	Cirrics		- Interno	late		0.2685	0.2695	0.2716	0.2754	0.2815	
		38_A.42	23	0	Siterpo			0.2889	0.2900	0.2918	0.2945	0.2978	
III		* 39_A.43	24	0,	av Interact	ion and Square Eff	ects	0.2796	0.2801	0.2821	0.2859	0.2916	1
		3_A.10	25	0	Weight	s		0.3182	0.3180	0.3186	0.3204	0.3237	1
Set : A		^ 40_A.44	26	0	en Cantas	and Cashs		0.2828	0.2836	0.2847	0.2867	0.2899	
Bange 1-38	0	43_A.7	27	0	B Center	and scale		0.2447	0.2455	0.2471	0.2499	0.2544	1
tx : AC_Smoothing	ngSG	44_A.8	28	0	Quantil	e Normalize		0.2885	0.2895	0.2905	0.2915	0.2934	
		45_A.9	29	0	f. Comm	te General		0.3442	0.3439	0.3440	0.3450	0.3476	1
		4_A.11	30	0	x compu	te General		0.3078	0.3076	0.3082	0.3097	0.3127	1
		5_A.12	31	0 *	Fill Mis	sing		0.3200	0.3199	0.3203	0.3216	0.3239	1
III		1		1	Correla	tion Optimized Wa	irping						•

- d. จะปรากฏหน้าต่างให้กำหนดค่า parameter โดยให้กำหนดค่าดังนี้
 - i. Rows : เลือกกลุ่มตัวอย่างที่ต้องการเฉลี่ย spectrum
 - ii. Cols : เลือก USE
 - iii. Reduce along : เลือก samples
 - iv. Setting : เลือก reduce factor แล้วใส่ตัวเลขเท่ากับจำนวน spectrum ของตัวอย่าง นั้น ในตัวอย่าง กลุ่ม A มี spectrum ทั้งหมด 38 spectrum จึงใส่ค่า reduce factor เท่ากับ 38

🧭 🔡 🖆 🔞										
New Project	AC_Smooth_		3000.789	2998.861	2996.932	2995.004	2993.075	2991.147	2989.218	2987.29
- 19_A.25			1	2	3	4	5	6	7	8
- 15_C.21	10_A.17	1	0.3471	0.3461	0.3451	0.3441	0.3426	0.3419	0.3420	0
- AC	11_A.18	2	0.3378	0.3364	0.3349	0.3334	0.3314	0.3301	0.3300	0
AC_SmoothingSGc	12_A.19	3	0.3444	0.3430	0.3416	0.3402	0.3383	0.3368	0.3364	0
AC_SmoothingSGc							0.3187	0.3195	0.3227	0
EMSC_AC_Smooth	Reduce (Ave	erage)					0.2889	0.2873	0.2861	0
AL_Smoothingsuc	Data						0.3232	0.3233	0.3242	0
Howset	Mater U	C Car	athing Costau	Paralise EMCC	(02,11/2)		0.3350	0.3347	0.3351	0
	Manx	HC_Sm	ootning5Golay_	baseline_civibu	193X1142/		0.3313	0.3304	0.3304	0
The Columnset	Rows 7	A {38	} .	Cols Use	(635)	Define	0.3077	0.3103	0.3143	0
42 PCA	6						0.3252	0.3255	0.3270	0
PCA(1)							0.3240	0.3241	0.3250	0
AC_PCA	Reduce al	long		Settings			0.2961	0.2962	0.2968	0
	Vari	iables		Reduction	factor 38	÷	0.3585	0.3571	0.3566	0
	San	nples		Sample in	dex		0.2932	0.2930	0.2934	0
				loset	number of rapid	atae	0.3557	0.3552	0.3560	0
					number of replic	area	0.2925	0.2927	0.2943	0
							0.3120	0.3123	0.3137	0
	Sample inc	dex					0.2433	0.2442	0.2458	0
	Matrix					-	0.2536	0.2544	0.2562	0
	Rows [-) Cols		Define	0.2951	0.2951	0.2951	0
	1000					· Denne.	0.2532	0.2543	0.2561	0
							0.2685	0.2695	0.2716	0
			_				0.2889	0.2900	0.2918	0
			OF	< Ca	ancel		0.2796	0.2801	0.2821	0
							0.3182	0.3180	0.3186	0
et : A	40_A.44	26	0.2797	0.2806	0.2814	0.2822	0.2828	0.2836	0.2847	0
lange : 1-38	43_A.7	27	0.2417	0.2426	0.2434	0.2443	0.2447	0.2455	0.2471	0
: AC_SmoothingSG	44_A.8	28	0.2852	0.2860	0.2869	0.2877	0.2885	0.2895	0.2905	0
	45_A.9	29	0.3463	0.3458	0.3454	0.3449	0.3442	0.3439	0.3440	0
	4 A 11	30	0.3108	0.3102	0 3095	0.3089	0.3078	0.3076	0.3082	0

- ∨. กด OK
- vi. และ average spectrum กับตัวอย่างกลุ่ม C โดยทำเหมือนวิธีข้อ i-v จะได้ spectrum ที่ผ่านการ average แล้วของตัวอย่าง A และตัวอย่าง C



34. เมื่อต้องการ plot กราฟเพื่อดูลักษณะ spectrum เปรียบเทียบ 2 ตัวอย่าง ให้รวมไฟล์ตัวอย่าง A และ C
 เข้าด้วยกันก่อน โดยการทำ matrix calculator (วิธีเหมือนข้อ 5)

strix Calculator Data Batch AC_SmoothingSGolay (8: AC_SmoothingSGolay B	1 R	2	3	4	5 0.281	6 3 0.2820	7 0.2834	8
trix Calculator Data Batch AC_SmoothingSGolay (9: AC_SmoothingSGolay Bi	R			8	0.281	3 0.2820	0.2834	+ 0
Data Batch AC_SmoothingSGolay (9) AC_SmoothingSGolay Bi	R							
Batch AC_SmoothingSGolay (9) AC_SmoothingSGolay Ba	R							
AC_SmoothingSGolay (9) AC_SmoothingSGolay Ba	and a second second	lows	Cols		~			
AC_SmoothingSGolay Ba	3X1142) [All	-	Al 👻	Define				
	aseline (9 All	-	Al 💌	Define				
AC_SmoothingSGolay_Ba	aseline_E All	-	All	Define				
AC_PCA (93X1142)	All	-	All 💌	Define				
AC_SmoothingSGolay_Ba	aseline_E All	•	All 💌	Define				
AC_SmoothingSGolay_Ba	aseline_E All	-	All 💌	Define	-			
•	III			+				
Autoselected based on : Ro	ws Co	olumns						
the state of the s	. 1				-			
Linear algebra Shaping Categ	ory reshape				1			
Reshape		C	mbine					
Rows 0	🔘 Row majo	r l	Augment					
Columns 0	Column m	ajor	Append					
(Local)		6	Annend by Heade	-				
Reshape 2	X	U						
			Add category van	able				
			_					
				Close				
			_					
1	AC_PCA (93X1142) AC_smoothingSGolay_Bi AC_smoothingSGolay_Bi AC_smoothingSGolay_Bi Ac_smoothingSGolay_Bi Ac_smoothingSGolay_Bi Ac_smoothingSGolay_Bi Columns O Colu	AC_PCA (93X1142) Al AC_SmoothingSGolay_Baseline_E Al AC_SmoothingSGolay_Baseline_E Al AC_SmoothingSGolay_Baseline_E Al AC_SmoothingSGolay_Baseline_E Al Counce algebra Shaping Category reshape Reshape Rows 0 O Row majo Columns 0 O O O Column m Reshape X	AC_PCA (93X1142) All All AL AC_Smoothing SGolay_Baseline_E All AL Columns AL AC_Smoothing SGolay_Baseline_E All AL Columns Columns Columns Columns Columns Columns Columns Columns Reshape Rows Columns Columns Reshape X	AC_PCA (93X1142) All All AL AC_Smoothing SGolay_Baseline_E All AL AL	AC_PCA (93X1142) All All Define AC_SmoothingSGolay_Baseline_E All All Define AC_SmoothingSGolay_Baseline_E All All Define Atoselected based on : Rows Columns Inear algebra Shaping Category reshape Reshape Rows Columns Reshape Rows Columns Append Append Append Append Add category variable	AC_PCA (93X1142) All All All All Define AC_SmoothingSGolay_Baseline_E All All Define Ad_C_SmoothingSGolay_Baseline_E All All Define Atoselected based on: Rows Columns Reshape Reshape Rows @ Column major Append Append Append Append Append Append Append Append Add category variable	AC_PCA (93X1142) All All All Define AC_smoothingSGolay_Baseline_E All All Define AC_smoothingSGolay_Baseline_E All All Define All Columns Columns Columns Columns Columns Columns O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O O	AC_PCA (93X1142) All ▼ All ▼ Define ✓ AC_SmoothingSGolay_Baseline_E All ▼ All ▼ ✓ Main All ▼ Define ▼ Autoselected based on : Row major Combine Augent Columns ① ③ Column major Aopend Aopend Aopend by Header □ Add category variable

35. จะได้ data set ใหม่ที่มีข้อมูล average spectrum ของตัวอย่าง A + ตัวอย่าง C

New Project [Not Saved] - The Unscrambler X									
File Edit View Insert Plot Tasks Tools H	lelp								
□ ♥ 瞿 🖆 ❸ 約 🍽 🕢 🛍 🗙 📥 ● 密 🖶 鰲 図 副 探 図 象 畫子 匝 📖									
W New Project	AC_Smooth		3000.789	2998.861	2996.932	2995.004	2993.075	2991.147	2989.218
			1	2	3	4	5	6	7
15_C.21	32_A.37	1	0.3087	0.3085	0.3083	0.3081	0.3074	0.3075	0.3084
	35_C.4	2	0.2797	0.2802	0.2807	0.2811	0.2813	0.2820	0.2834
 AC_SmoothingSColay_Baseline AC_SmoothingSColay_Baseline AC_SmoothingSColay_Baseline_EMSC AC_SmoothingSColay_Baseline_EMSC C C Columnset AC_PCA AC_SmoothingSColay_Baseline_EMSC_Reduced Columnset 	← A	vei	rage spe	ctrum จ	ากตัวอย่	าง A + ต้	ัวอย่าง C		

- 36. เมื่อต้องการ plot graph เพื่อดู spectrum เปรียบเทียบ ให้เลือกที่ data set ที่ต้องการ plot
 - a. คลิกขวา เลือก Plot
 - b. เลือก Line จะปรากฏหน้าต่าง Line Plot-Scope
 - c. กำหนด matrix ที่ต้องการ Plot
 - d. เลือก Sample
 - e. เลือก OK จะปรากฏหน้าต่างแสดงกราฟ spectrum ที่ผ่านการ average แล้วเทียบตัวอย่าง A และตัวอย่าง C ซึ่งพีคที่ปรากฏมีความสัมพันธ์กันกับผลที่ได้จาก loading plot โดยจาก spectrum เฉลี่ย จะเห็นได้ว่า ตัวอย่าง A จะแสดง intensity ของพีคบริเวณ 1652, 1542 และ 1112 มากกว่าตัวอย่าง C ในทางตรงข้าม ตัวอย่าง C จะแสดง intensity ของพีคบริเวณ 1736 และ 1249 มากกว่าตัวอย่าง A





000.789 2908.22 2819.508 1754.96 1664.32 1575.607 1481.109 1388.54 1297.899 1205.33 1116.618 1022.12 935.336 846.6237