# การจำแนกข้าวหอมมะลิออกจากข้าวพันธุ์อื่นด้วยเทคนิคสเปคโตรสโคปีอินฟราเรดย่านใกล้

# Classification of Hom Mali rice from the other rice varieties by FT-NIR spectroscopy

**อารีรัตน์ อิ่มศิลป์* ปิยรัตน์ สิริธัญกิจ และ รจนา ประสิทธิ์**
โรงเรียนการเรือน มหาวิทยาลัยราชภัฏสวนดุสิต

**บทคัดย่อ**

งานวิจัยนี้มีวัตถุประสงค์เพื่อประยุกต์ใช้เทคนิคสเปคโตรสโคปีอินฟราเรดย่านใกล้มาสร้างสมการสำหรับทำนายการจำแนกกลุ่มข้าวหอมมะลิออกจากกลุ่มข้าวปริมาณอะมิโลสต่ำ ปานกลาง และสูงด้วยวิธีการวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก (Principal component analysis; PCA) และการวิเคราะห์จำแนกกลุ่มด้วยการถดถอยกำลังสองน้อยที่สุด (Partial least square-discriminant analysis; PLS-DA) ช่วงจำนวนคลื่นที่ 10,000-4,000 $cm^{-1}$ผลการทดลองพบว่าการวิเคราะห์องค์ประกอบหลักสามารถจำแนกสเปคตรัมข้าวกล้องที่ผ่านการปรับแต่งสเปคตรัมด้วยวิธีการปรับแก้การกระเจิงแบบผลคูณ (Multiplicative scatter correction; MSC) ออกเป็น 4 กลุ่ม ได้แก่ กลุ่มข้าวหอมมะลิ ข้าวกลุ่มปริมาณอะมิโลสต่ำ ปานกลาง และสูง แต่ไม่สามารถจำแนกข้าวพันธุ์ชัยนาท 1 ออกจากข้าวหอมมะลิได้ สำหรับการสร้างสมการการทำนายการจำแนกข้าวหอมมะลิออกจากข้าวกลุ่มอื่นด้วยการถดถอยน้อยที่สุด พบว่าสมการที่เหมาะสม คือ สมการที่สร้างขึ้นจากการปรับแต่งสเปคตรัมด้วยวิธีการปรับความแปรปรวนให้เป็นมาตรฐาน (Standard normal variate; SNV) ช่วงจำนวนคลื่น 10,000-4,000 $cm^{-1}$ โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มตัวแปรเดิมเป็นตัวแปรใหม่ได้ 5 แฟกเตอร์ โดยมีค่า $R^2_{cal}$, $RMSE_{cal}$, $R^2_{val}$, $RMSE_{val}$และค่าความถูกต้องของการจำแนกกลุ่ม (Correctly classified) เท่ากับ 0.79, 0.17, 0.69, 0.21 และ 66.46% ตามลำดับ

**คำสำคัญ:** การจำแนกกลุ่ม, ข้าวหอมมะลิ, การวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก, การวิเคราะห์การจำแนกกลุ่มด้วยการถดถอยกำลังสองน้อยที่สุด

**Abstract**

The aim of this research was to apply the FT-NIR spectroscopy in the wavenumberranges of 10,000-4,000 $cm^{-1}$ for prediction the model to classifyHom Mali rice from low, intermediate and high amylose rice group by principal component analysis (PCA) and partial least square-discriminant analysis (PLS-DA). The results showed that, PCA could be classified the spectrum of brown rice transformed with multiplicative scatter correction (MSC) into four groups; Hom Mali rice, low, intermediate and high amylose rice

* ผู้ประสานงานหลัก (Corresponding Author)
e-mail: areerat_ims@dusit.ac.th,aimsil73@gmail.com

groups. However, this model was unable to classify Hom Mali rice from Chai Nat1 variety. For PLS-DA classification model, the best performance of PLS-DA model for classifying Hom Mali rice from the other groups was the NIR spectra which it was pretreated by the standard normalvariate (SNV) in the wavenumber ranges of 10,000-4,000 $cm^{-1}$. This model represented the five factors which the $R^2_{cal}$, $RMSE_{cal}$, $R^2_{val}$, $RMSE_{val}$ and correctly classification were 0.79, 0.17, 0.69, 0.21 and 66.46%, respectively.
**Keywords:** Classification, Hom Mali rice, PCA, PLS-DA

**บทนำ**

ข้าวหอมมะลิ (Hom Mali rice) เป็นข้าวเจ้าประเภทข้าวปริมาณอะมิโลสต่ำ (Low amylose rice group) ประกอบด้วยพันธุ์ข้าวที่สำคัญ 2 พันธุ์ ได้แก่ ข้าวพันธุ์ขาวดอกมะลิ 105 (KhaoDawk Mali 105, KDML105) และข้าวพันธุ์กข15 (Rice Department 15, RD15) ข้าวหอมมะลิเป็นข้าวที่มีลักษณะเฉพาะ คือ มีกลิ่นหอม ลักษณะเนื้อสัมผัสของข้าวสุกนุ่ม คุณลักษณะเหล่านี้ทำให้ข้าวหอมมะลิได้รับความนิยมจากลูกค้าทั้งภายในประเทศและต่างประเทศ ส่งผลให้มีมูลค่าสูงกว่าข้าวประเภทอื่น ๆ ข้าวหอมมะลิจึงมีความสำคัญต่อเศรษฐกิจของประเทศไทยเป็นอย่างสูง (กรมการค้าต่างประเทศ กระทรวงพาณิชย์, 1997, หน้า 3)จากการที่ประเทศไทยมีความหลากหลายทางสายพันธุ์ข้าว ประกอบกับข้าวหอมมะลิของไทยมีมูลค่าสูงแต่มีผลผลิตต่ำ จึงเป็นเหตุจูงใจให้ผู้ประกอบการนำข้าวพันธุ์อื่นที่มีลักษณะทางกายภาพหรือสมบัติทางเคมีกายภาพที่คล้ายกับข้าวหอมมะลิมาผสมกับข้าวหอมมะลิ ทำให้คุณภาพการหุงต้ม รับประทาน และการแปรรูปของข้าวหอมมะลิมีคุณภาพลดลง ส่งผลให้เกิดการร้องเรียนจากลูกค้า (กรมการค้าต่างประเทศ, 2555, ออนไลน์) ในปัจจุบันผู้ประกอบการค้าข้าวจึงนิยมใช้วิธีการตรวจดีเอ็นเอ (DNA analysis) แบ่งกลุ่มข้าวหอมมะลิออกจากข้าวประเภทอื่น โดยที่การตรวจดีเอ็นเอนั้นเป็นวิธีการที่ให้ผลแม่นยำ แต่มีค่าใช้จ่ายสูง และใช้เวลานานส่งผลให้การซื้อขายข้าวในเชิงพาณิชย์เกิดความล่าช้า (Kim, Rhyu, Kim & Lee, 2003)

ปัจจุบันเทคนิคสเปคโตรสโคปีอินฟราเรดย่านใกล้ (Near infrared spectroscopy) ช่วงความยาวคลื่น 780-2,500นาโนเมตร ที่มีการสั่นแบบโอเวอร์โทน (Overtone vibration) และการสั่นแบบผลรวม (Combination vibration) ของพันธะเคมีในโมเลกุล อาทิเช่นC-H, O-H, N-Hซึ่งมีความสัมพันธ์กับปริมาณและชนิดขององค์ประกอบต่าง ๆ ในข้าวได้ถูกนำมาใช้ร่วมกับวิธีทางเคโมเมตริกซ์ (Chemometrics) เพื่อวิเคราะห์ข้อมูลจากสเปคตรัมซึ่งเทคนิคนี้สามารถนำมาประยุกต์ใช้ในการจำแนกข้าว และตรวจสอบการปลอมปนข้าวพันธุ์ต่าง ๆได้ และกำลังได้รับความนิยมและการยอมรับเป็นอย่างสูง เนื่องจากเป็นการวิเคราะห์ที่ไม่ทำลายตัวอย่าง รวดเร็ว และลดการใช้สารเคมี (Delwiche, Bean, Miller, Webb & Williams, 1995) Osborne, Martens, Thomson &Fearn (1993) ศึกษาความเป็นไปได้ในการจำแนกความแตกต่างของข้าวพันธุ์บาสมาติออกจากข้าวเมล็ดยาวจำนวน 100 ตัวอย่างด้วยเทคนิคสเปคโตรสโคปีอินฟราเรดย่านใกล้ ผลการศึกษาพบว่าสามารถจำแนกข้าวพันธุ์บาสมาติออกจากกลุ่มข้าวพันธุ์เมล็ดยาวได้ Ootake&Kokot (1998) สามารถจำแนกข้าวเหนียวออกจากข้าวเจ้าด้วยเทคนิค FT-NIR ส่วน Kwon & Cho (1998) วิเคราะห์ความแตกต่างของข้าวพันธุ์ต่าง ๆ ที่จำหน่ายภายในประเทศโดยใช้เทคนิคสเปคโตรสโคปีแบบการถ่ายภาพ (Image processingwith a CCD camera and near infrared spectroscopy technique) ผลการศึกษาพบว่า

เทคนิคนี้สามารถจำแนกข้าวที่มีรูปร่างแตกต่างกันได้แม่นยำถึง 90%นอกจากนี้ในประเทศญี่ปุ่น Rittiron, Saranwong& Kawano (2005) วิเคราะห์การปลอมปนข้าวญี่ปุ่นโดยใช้เทคนิคสเปคโตรส - โคปีอินฟราเรดย่านใกล้แบบส่องผ่าน โดยใช้วิธีการวัดแบบทีละเมล็ด ผลการศึกษาพบว่าสามารถแยกข้าวผสมออกจากข้าวบริสุทธิ์ได้โดยใช้ปริมาณโปรตีนเป็นตัวชี้บ่งในการแยกการปลอมปนดังกล่าว

จากเหตุผลดังกล่าวข้างต้นจึงมีความเป็นไปได้ในการนำเทคนิคสเปคโตรสโคปีอินฟราเรดย่านใกล้มาใช้จำแนกข้าวหอมมะลิออกจากข้าวกลุ่มอื่น โดยมีวัตถุประสงค์เพื่อสร้างสมการทำนายสำหรับการจำแนกข้าวหอมมะลิออกจากข้าวกลุ่มอื่นด้วยวิธีการวิเคราะห์องค์ประกอบหลักและ การวิเคราะห์จำแนกกลุ่มด้วยการถดถอยกำลังสองน้อยที่สุด

**อุปกรณ์และวิธีการ**

**1. การเก็บรวบรวมตัวอย่างข้าว**

ตัวอย่างข้าว จำนวน 60 ตัวอย่าง ประกอบด้วยข้าวเปลือกหอมมะลิ จำนวน 50 ตัวอย่าง ได้แก่ข้าวพันธุ์ขาวดอกมะลิ 105 และข้าวพันธุ์กข15 ข้าวกลุ่มอะมิโลสต่ำ 3 ตัวอย่าง ได้แก่ ข้าวพันธุ์หอมคลองหลวง พันธุ์ปทุมธานี 1 และพันธุ์พิษณุโลก 1 ข้าวกลุ่มอะมิโลสปานกลาง จำนวน 2 ตัวอย่าง ได้แก่ ข้าวพันธุ์สุพรรณบุรี 2 และพันธุ์สุพรรณบุรี 60 และข้าวกลุ่มอะมิโลสสูง จำนวน 5 ตัวอย่าง ประกอบด้วยข้าวพันธุ์ชัยนาท 1 พันธุ์ชัยนาท 2 พันธุ์เหลืองประทิว 123 พันธุ์พิษณุโลก 2 และพันธุ์ปทุมธานี 60 แสดงดังตารางที่ 1 โดยตัวอย่างข้าวทั้งหมดเพาะปลูกในปี พ.ศ. 2552 จากศูนย์วิจัยข้าวและศูนย์เมล็ดพันธุ์ข้าวต่าง ๆ ในประเทศไทย นำข้าวเปลือกแต่ละตัวอย่างทำความสะอาดด้วยเครื่องทำความสะอาด (Rice pre-cleaner equipment) เพื่อกำจัดข้าวเมล็ดลีบ เศษฟาง เศษหญ้า และสิ่งเจือปนต่าง ๆ จากนั้นนำตัวอย่างข้าวเปลือกมาบรรจุในถุงพลาสติกชนิดพอลิโพรพิลีน (Polypropylene) ถุงละ 5 กิโลกรัม ปิดปากถุงให้สนิทด้วยเครื่องปิดผนึกพลาสติก นำถุงพลาสติกบรรจุข้าวเปลือกไปเก็บรักษาในเครื่องทำความเย็นอุณหภูมิประมาณ $10^{o}$C จนกว่าจะนำมาทดลอง

**ตารางที่ 1** ตัวอย่างข้าวเปลือกที่ใช้ในการวิจัย

| กลุ่มข้าว | พันธุ์ข้าว | แหล่งที่มา | จำนวนตัวอย่างข้าว |
|---|---|---|---|
| ข้าวหอมมะลิ | 1.ข้าวพันธุ์ขาวดอกมะลิ 105 | 1. ภาคเหนือตอนล่างจากศูนย์วิจัยข้าว จ. ชัยนาท และจ.พิษณุโลก, ศูนย์เมล็ดพันธุ์ข้าวจ.ลพบุรี และจ.นครสวรรค์ | 11 |
| | 2. ข้าวพันธุ์กข15 | 2. ภาคกลางจากศูนย์วิจัยข้าวจ.สุพรรณบุรี และจ. ปทุมธานี | 9 |
| | | 3. ภาคอีสานตอนบนจากศูนย์วิจัยข้าวจ. มหาสารคาม, จ.ร้อยเอ็ด, จ.สกลนคร, จ. อุดรธานี และศูนย์เมล็ดพันธุ์ข้าว จ.นครพนม | 14 |
| | | 4. ภาคอีสานตอนล่างจากศูนย์วิจัยข้าวจ.ศีรษะเกษ, จ.อุบลราชธานี,จ.สุรินทร์, จ.นครราชสีมา และศูนย์เมล็ดพันธุ์ข้าวจ.ยโสธร และจ.อำนาจเจริญ | 16 |
| อะมิโลสต่ำ | 1. ข้าวพันธุ์หอมคลองหลวง | 1. ศูนย์วิจัยข้าวจ.พิษณุโลก | 1 |
| | 2. ข้าวพันธุ์ปทุมธานี 1 | 2. ศูนย์วิจัยข้าวจ.ปทุมธานี | 1 |
| | 3. ข้าวพันธุ์พิษณุโลก 1 | 3. ศูนย์วิจัยข้าวจ.พิษณุโลก | 1 |
| อะมิโลสปานกลาง | 1. ข้าวพันธุ์สุพรรณบุรี 2 | 1. ศูนย์วิจัยข้าวจ.สุพรรณบุรี | 1 |
| | 2. ข้าวพันธุ์สุพรรณบุรี 60 | 2. ศูนย์วิจัยข้าวจ.สุพรรณบุรี | 1 |
| อะมิโลสสูง | 1. ข้าวพันธุ์ชัยนาท 1 | 1. ศูนย์วิจัยข้าวจ.ชัยนาท | 1 |
| | 2. ข้าวพันธุ์ชัยนาท 2 | 2. ศูนย์วิจัยข้าวจ.ชัยนาท | 1 |
| | 3. ข้าวพันธุ์เหลืองประทิว 123 | 3. ศูนย์วิจัยข้าวจ.พิษณุโลก | 1 |
| | 4. ข้าวพันธุ์พิษณุโลก 2 | 4. ศูนย์วิจัยข้าวจ.พิษณุโลก | 1 |
| | 5. ข้าวพันธุ์ปทุมธานี 60 | 5. ศูนย์วิจัยข้าวจ.พิษณุโลก | 1 |
| | | **Total rice samples** | **60** |

**2. การเตรียมวัตถุดิบข้าวกล้องขนาดเต็มเมล็ด**

นำตัวอย่างข้าวเปลือกแต่ละตัวอย่างมาตั้งทิ้งไว้ที่อุณหภูมิห้อง นาน 24 ชั่วโมง เพื่อปรับความชื้นให้สมดุลย จากนั้นจึงนำข้าวเปลือกมากะเทาะเปลือกเป็นข้าวกล้อง นำข้าวกล้องมาคัดแยกข้าวหักและปลายข้าวออกจากกันด้วยเครื่องคัดขนาดเมล็ดข้าวแบบตะแกรงกลมจนได้เฉพาะข้าวกล้องขนาดเต็มเมล็ด นำข้าวกล้องขนาดเต็มเมล็ดที่เตรียมได้แต่ละตัวอย่างบรรจุแบบสุญญากาศในซองลามิเนตใสชนิด NY/LLDPE มาชั่งน้ำหนักตัวอย่างละ 5 กิโลกรัม เก็บรักษาที่อุณหภูมิห้อง

**3. การวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเทคนิคสเปคโตรสโคปีอินฟราเรดย่านใกล้**

นำตัวอย่างข้าวกล้องขนาดเต็มเมล็ดทั้ง 60 ตัวอย่าง (ตารางที่ 1) ที่เตรียมไว้ในข้อ 2 มาชั่งน้ำหนักในจานเพาะเชื้อ (Petri dish) ประมาณ 80 กรัม และวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่องสเปคโตรโฟโตมิเตอร์อินฟราเรดย่านใกล้ (FT-NIR spectroscopy, BuchiNIRLab N-200) ช่วงจำนวนคลื่นที่ 10,000-4,000 $cm^{-1}$ทำการวัดด้วยหลักการสะท้อนแสง (Reflectance) ที่อุณหภูมิ 25$^{o}$C โดยเริ่มที่ความยาวคลื่นต่ำที่สุดและเพิ่มขึ้นช่วงละ 2 นาโนเมตร ของแต่ละหน่วยตัวอย่าง ค่าการดูดกลืนแสงที่วัดได้จำนวน 701 ค่า ในรูปของลอการิทึม (log 1/reflectance) และบันทึกด้วยโปรแกรม NIRCalรุ่น 5.21 โดยทำการวัดตัวอย่างละ 3ซ้ำ

**4. การปรับแต่งสเปคตรัม**

นำข้อมูลสเปคตรัมอินฟราเรดย่านใกล้ที่บันทึกไว้ด้วยโปรแกรม NIRCalไปวิเคราะห์ข้อมูลจากโปรแกรม Unscramblerรุ่น X 10.1 (CAMO software, ASA, Norway) ด้วยไฟล์ข้อมูลในรูปแบบ JCAMP-DX ทำการเฉลี่ยสเปคตรัมอินฟราเรดย่านใกล้ จากนั้นนำสเปคตรัมอินฟราเรดย่านใกล้ที่หาค่าเฉลี่ยแล้วมาปรับแต่งสเปคตรัมก่อนการวิเคราะห์ด้วยวิธีการแปลงค่าอนุพันธ์อันดับสองโดยใช้วิธีการปรับเรียบแบบซาวิตซ์กีโกเลย์ทุกช่วงความยาวคลื่น 10 นาโนเมตร (Savitzky-Golay algorithm: left and right side in 10 nm gap size of the second derivative) วิธีการปรับแก้การกระเจิงแบบผลคูณ และวิธีการปรับความแปรปรวนให้เป็นมาตรฐาน นอกจากนี้ยังปรับแต่งสเปคตรัมอินฟราเรดย่านใกล้ด้วยวิธีการปรับแก้การกระเจิงแบบผลคูณร่วมกับวิธีการแปลงค่าอนุพันธ์เป็นอันดับสองโดยใช้วิธีการปรับเรียบแบบซาวิตซ์กีโกเลย์ทุกช่วงความยาวคลื่น 10 นาโนเมตร (MSC + Savitzky-Golay second derivative: 10 nm averaging for left and right side) และวิธีการปรับความแปรปรวนให้เป็นมาตรฐานร่วมกับวิธีการแปลงค่าอนุพันธ์เป็นอันดับสองโดยใช้วิธีการปรับเรียบแบบซาวิตซ์กีโกเลย์ทุกช่วงความยาวคลื่น 10 นาโนเมตร (SNV + Savitzky-Golay second derivative: 10 nm averaging for left and right side) อีกด้วย

**5. การสร้างสมการทำนายสำหรับแบ่งกลุ่มข้าวหอมมะลิออกจากข้าวกลุ่มอื่นด้วยวิธีการวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก**

นำสเปคตรัมอินฟราเรดย่านใกล้ที่ผ่านการหาค่าเฉลี่ย การปรับแต่งสเปคตรัม และการตรวจสเปคตรัมที่ผิดปกติแล้ว มาสร้างสมการทำนายสำหรับแบ่งกลุ่มข้าวหอมมะลิออกจากข้าวกลุ่มอื่นที่ไม่ใช่ข้าวหอมมะลิด้วยวิธีการวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก จากนั้นพิจารณาความสัมพันธ์ระหว่างค่าน้ำหนักปัจจัย (PCA loading) และคะแนนปัจจัย (PCA score) บนแกนองค์ประกอบหลัก (Principal component; PC) โดยค่าน้ำหนักปัจจัยใช้ในการอธิบายโครงสร้างของข้อมูลในรูปแบบความสัมพันธ์ของตัวแปร และค่าคะแนนปัจจัยอธิบายโครงสร้างของข้อมูลในรูปแบบความสัมพันธ์ของตัวอย่าง ซึ่งแสดงถึงความคล้ายหรือความแตกต่างของตัวอย่าง โดยแต่ละตัวอย่างมีค่าคะแนน (Score) ในแต่ละ PC ซึ่งค่าเหล่านี้แสดงให้เห็นถึงตำแหน่งของตัวอย่างตามแกน PC โดยตัวอย่างที่มีค่าคะแนนใกล้เคียงกันในแกน PC เดียวกันมีความคล้ายกัน ในทางตรงกันข้ามตัวอย่างที่มีค่าคะแนนแตกต่างกันมากมีค่าคะแนนของตัวแปรเดิมนั้นแตกต่างกันด้วย (ธงชัย สุวรรณสิชณน์และปิติพร ฤทธิเรืองเดช, 2552, หน้า 6-1 ถึง 6-33)

**6. การสร้างสมการทำนายสำหรับการแบ่งกลุ่มข้าวหอมมะลิออกจากข้าวกลุ่มอื่นด้วยวิธี PLS-DA**

การสร้างสมการทำนายสำหรับแบ่งกลุ่มข้าวหอมมะลิออกจากข้าวกลุ่มอื่นด้วยเทคนิค PLS-DA นั้นต้องมีการกำหนดตัวแปรหุ่น (Dummy variable) ให้มีค่าเท่ากับ 1 หรือ 0ในกรณีนี้สเปคตรัมอินฟราเรดย่านใกล้ของข้าวหอมมะลิจัดให้อยู่ในกลุ่มที่มีค่าเท่ากับ 1 และสปคตรัมอินฟราเรดย่านใกล้ของข้าวที่ไม่ใช่ข้าวหอมมะลิจัดให้อยู่ในกลุ่มที่มีค่าเท่ากับ 0 แสดงดังตารางที่ 2สเปคตรัมอินฟราเรดย่านใกล้ที่ผ่านการหาค่าเฉลี่ย การปรับแต่งสเปคตรัม และการตรวจสเปคตรัมที่ผิดปกติแล้วจะถูกนำมาสร้างสมการ PLS-DA เพื่อทำนายการแบ่งกลุ่มข้าวหอมมะลิออกจากข้าวกลุ่มอื่น การพิจารณาความถูกต้องของการแบ่งกลุ่มจะพิจารณาจากค่าอ้างอิงที่กำหนดขึ้น กล่าวคือการแบ่งกลุ่มข้าวหอมมะลิจะถูกต้องเมื่อมีค่าอ้างอิงอยู่ในช่วง 0.5 ถึง 1.5 และในทางตรงกันข้ามถ้าค่าอ้างอิงอยู่ในช่วง -0.5 ถึง 0.5 แสดงว่าข้าวกลุ่มนั้นเป็นข้าวกลุ่มอื่นที่ไม่ใช่ข้าวหอมมะลิ

**ตารางที่ 2** การกำหนดตัวแปรหุ่นของข้าวหอมมะลิและข้าวกลุ่มอื่นที่ไม่ใช่ข้าวหอมมะลิ

| | **ข้าวหอมมะลิ** | **ข้าวอะมิโลสต่ำ** | **ข้าวอะมิโลสปานกลาง** | **ข้าวอะมิโลสสูง** |
|---|---|---|---|---|
| ข้าวหอมมะลิ | 1 | 0 | 0 | 0 |
| ข้าวอะมิโลสต่ำ | 0 | 1 | 0 | 0 |
| ข้าวอะมิโลสปานกลาง | 0 | 0 | 1 | 0 |
| ข้าวอะมิโลสสูง | 0 | 0 | 0 | 1 |

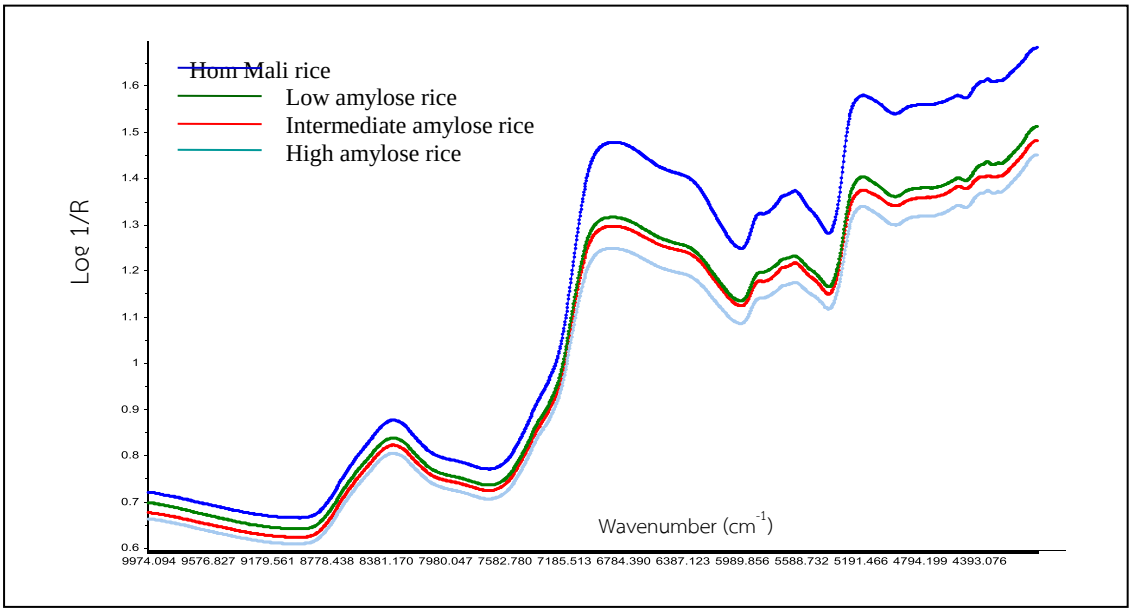
การสร้างสมการ PLS-DA สำหรับการแบ่งกลุ่มข้าวหอมมะลิออกจากข้าวกลุ่มอื่นนั้น จะแบ่งกลุ่มตัวอย่างออกเป็น 2 กลุ่ม คือ กลุ่มสำหรับสร้างสมการแคลิเบรชัน และกลุ่มตรวจสอบความถูกต้องที่ช่วงจำนวนคลื่น 10,000-4,000 $cm^{-1}$และทดสอบสมการด้วยวิธีการทดสอบความแม่นยำภายในกลุ่มทั้งหมด โดยสมการที่ดีต้องมีค่า RMSE (Root mean square of the standard error) และค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์สูง

**ผลและวิจารณ์ผลการทดลอง**

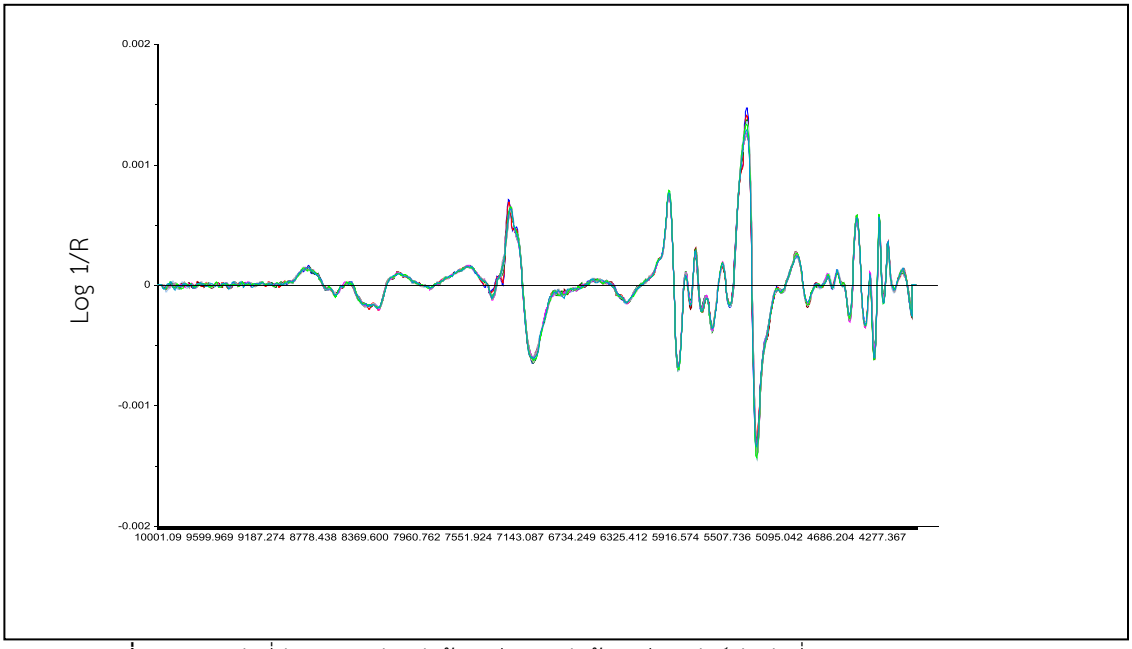
**1. ลักษณะสเปคตรัมของข้าวกล้องขนาดเต็มเมล็ดเมื่อวัดด้วยเครื่องสเปคโตรสโคปีอินฟราเรดย่านใกล้**

การวัดค่าการดูดกลืนแสงของข้าวกล้องขนาดเต็มเมล็ดด้วยเครื่องสเปคโตรสโคปีอินฟราเรดย่านใกล้ในช่วงจำนวนคลื่น 10,000-4,000 $cm^{-1}$ลักษณะของสเปคตรัมเริ่มต้น (Original spectrum)ของข้าวกล้องหอมมะลิ ข้าวกลุ่มที่มีปริมาณอะมิโลสต่ำ ปานกลาง และสูง แสดงดังภาพที่ 1 พบว่าลักษณะรูปแบบของสเปคตรัมข้าวกล้องหอมมะลิที่ได้จากการวัดด้วยเครื่องสเปคโตรสโคปีอินฟราเรดย่านใกล้มีค่าการดูดกลืนแสงหรือค่า log 1/R สูงกว่าข้าวกลุ่มที่มีปริมาณอะมิโลสต่ำ ปานกลาง และสูง ตามลำดับ ซึ่ง Osborne, Martens, Thomson &Fearn (1993) รายงานว่าค่าการดูดกลืนแสงของสเปคตรัมที่แตกต่างกันอาจมีสาเหตุมาจากองค์ประกอบภายในของข้าวแต่ละกลุ่มที่แตกต่างกัน

จากภาพที่ 1 พบว่าลักษณะสเปคตรัมซ้อนทับกันของพีค และพีคแยกออกจากกันไม่ชัดเจน อาจเป็นผลจากเกิดการกระเจิงแสงเมื่อตกกระทบกับตัวอย่าง เนื่องจากตัวอย่างข้าวกล้องเต็มเมล็ดมีขนาดไม่เท่ากัน ซึ่งมีผลต่อการสร้างสมการทำนายการแบ่งกลุ่มตัวอย่างข้าว ดังนั้นจึงต้องปรับแต่งสเปคตรัมด้วยวิธีการต่าง ๆ เช่น วิธีการแปลงค่าอนุพันธ์อันดับที่สอง การปรับแก้การกระเจิงแบบผลคูณ วิธีการปรับความแปรปรวนให้เป็นมาตรฐาน การปรับแก้การกระเจิงแบบผลคูณร่วมกับการแปลงค้าด้วยวิธีอนุพันธ์อันดับที่สอง และวิธีการปรับความแปรปรวนให้เป็นมาตรฐานร่วมกับการแปลงค่าด้วยวิธีอนุพันธ์อันดับที่สอง ภาพที่ 2 แสดงการปรับแต่งสเปคตรัมด้วยวิธีการแปลงค่าด้วยวิธีอนุพันธ์อันดับที่สอง พบว่าสเปคตรัมที่ได้มีฐานแคบ และจุดยอดแยกกันอย่างชัดเจนแต่มีลักษณะกลับหัวลงมาด้านล่าง โดยพบว่าแต่ละความยาวคลื่นมีความสัมพันธ์กับพันธะเคมีที่แตกต่างกัน คือ จำนวนคลื่นที่ 6,900 $cm^{-1}$มีความสัมพันธ์กับพันธะ O-H ในโมเลกุลน้ำของข้าวซึ่งมีปริมาณความชื้นประมาณ 13-14% และจำนวนคลื่นที่ 5,102, 5,128, 4,761, 4,063 และ 4,019 cm-1 มีความสัมพันธ์กับ O-H, C-O และ C-H ในสตาร์ช (Osborne, Martens, Thomson &Fearn, 1993, pp. 77-83; Workmand&Weyer, 2008, p. 239-262)




**ภาพที่ 1**ลักษณะของสเปคตรัมเริ่มต้นเฉลี่ย (Original spectrum) ของข้าวกล้องหอมมะลิขนาดเต็มเมล็ด ข้าวกลุ่มอะมิโลสต่ำ ปานกลาง และสูงที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่องสเปคโตรสโคปีอินฟราเรดย่านใกล้ในช่วงจำนวนคลื่น 10,000-4,000 $cm^{-1}$

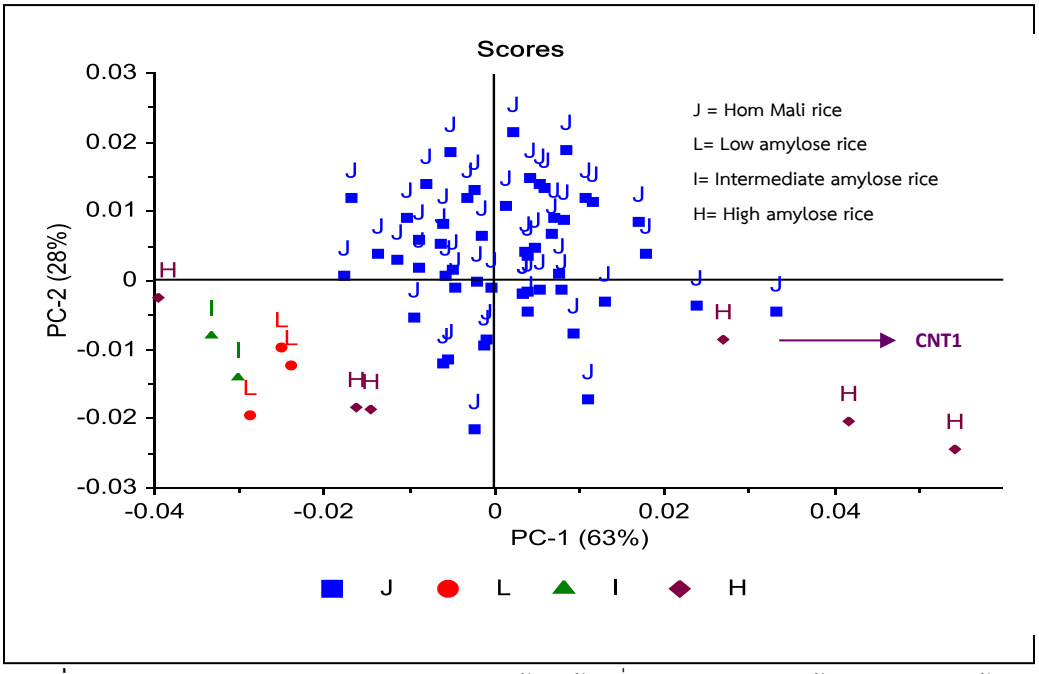



**ภาพที่ 2** สเปคตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีแปลงค่าด้วยวิธีอนุพันธ์อันดับที่สอง

**2. การสร้างสมการทำนายสำหรับการแบ่งกลุ่มข้าวหอมมะลิออกจากข้าวกลุ่มอื่นด้วยวิธีการวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก**

การสร้างสมการสำหรับการทำนายการแบ่งกลุ่มข้าวหอมมะลิออกจากข้าวกลุ่มอื่นตามคุณลักษณะของสเปคตรัมเมื่อวัดด้วยเทคนิคสเปคโตรสโคปีอินฟราเรดย่านใกล้ด้วยวิธีการวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก สามารถทำได้โดยนำสเปคตรัมที่ผ่านการปรับแต่งสเปคตรัมด้วยวิธีการต่าง ๆ ช่วงจำนวนคลื่น 10,000-4,000 $cm^{-1}$มาวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก ผลการทดลองพบว่าสเปคตรัมที่ปรับแต่งสเปคตรัมด้วยวิธีการปรับแก้การกระเจิงแบบผลคูณสามารถจำแนกข้าวหอมมะลิออกจากข้าวกลุ่มอื่นได้ชัดเจนที่สุดดังภาพที่ 3 ซึ่งแสดงการกระจายตัวของสเปคตรัมในแผนภาพค่าคะแนนปัจจัย (Score plot)ประกอบด้วย 2 องค์ประกอบ โดยสามารถอธิบายค่าความแปรปรวนรวมได้ 91% และยังพบว่าสามารถจำแนกข้าวหอมมะลิออกจากข้าวกลุ่มอะมิโลสต่ำ ปานกลาง และสูงได้ แต่ไม่สามารถจำแนกข้าวพันธุ์ชัยนาท 1 ออกจากข้าวหอมมะลิได้ สาเหตุเนื่องจากข้าวพันธุ์ชัยนาท 1 ที่นำมาใช้ในการทดลองมีอายุการเก็บรักษาไม่เกิน 4 เดือน จึงมีค่าความคงตัวของเจล (Gel consistency) ต่ำ ซึ่งเป็นลักษณะเฉพาะของข้าวพันธุ์ชัยนาท 1 ส่งผลให้สมบัติด้านความหนืดบางสมบัติใกล้เคียงกับข้าวหอมมะลิ จึงทำให้ไม่สามารถจำแนกข้าวหอมมะลิออกจากข้าวพันธุ์ชัยนาท 1 ได้ (Cheaupun, Wongpiyachon&Kongseree, 2005)

สำหรับสเปคตรัมที่ปรับแต่งด้วยวิธีการปรับความแปรปรวนให้เป็นมาตรฐาน วิธีการแปลงค่าด้วยวิธีอนุพันธ์อันดับที่สอง สเปคตรัมที่ผ่านการปรับแต่งสเปคตรัมด้วยวิธีการปรับแก้การกระเจิงแบบผลคูณร่วมกับวิธีการแปลงค่าด้วยวิธีอนุพันธ์อันดับที่สอง และสเปคตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการปรับความแปรปรวนให้เป็นมาตรฐานร่วมกับวิธีการแปลงค่าด้วยวิธีอนุพันธ์อันดับที่สอง สามารถจำแนกข้าวออกเป็น 4 กลุ่ม คือ กลุ่มข้าวหอมมะลิ ข้าวกลุ่มอะมิโลสต่ำ ข้าวกลุ่มอะมิโลสปานกลาง และข้าวกลุ่มอะมิโลสสูงได้ แต่ไม่สามารถจำแนกข้าวหอมมะลิออกจากข้าวกลุ่มอื่น ๆ ได้อย่างชัดเจน




**ภาพที่ 3** ลักษณะภาพค่าคะแนนปัจจัยของสเปคตรัมข้าวกล้องที่ปรับแต่งสเปคตรัมด้วยวิธีการปรับแก้การกระเจิง แบบผลคูณ

นอกจากนี้ยังพบว่าสเปคตรัมของข้าวกล้องที่ไม่ผ่านการปรับแต่งสเปคตรัม (No-pretreatment) สามารถจำแนกข้าวหอมมะลิออกจากข้าวกลุ่มอะมิโลสต่ำ ปานกลาง และสูงได้เช่นเดียวกัน แต่ไม่สามารถจำแนกข้าวพันธุ์ปทุมธานี 1 ข้าวพันธุ์สุพรรณบุรี 1 และข้าวพันธุ์ชัยนาท 1 ออกจากข้าวหอมมะลิได้อย่างชัดเจน ซึ่งผลการทดลองที่ได้สอดคล้องกับผลการวิจัยของ Theanjumpol, Ripon, Karabon, Suwapanit,Thanapornpoonpong&Vearasilp (2005) ศึกษาการจำแนกกลุ่มข้าวขาวดอกมะลิ 105 ออกจากข้าวพันธุ์อื่น ด้วยเทคนิคสเปคโตรสโคปีอินฟราเรดย่านใกล้และจำแนกกลุ่มข้าวด้วยวิธีการวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก ผลการวิจัยพบว่าการจำแนกกลุ่มข้าวด้วยวิธีการวิเคราะห์องค์ประกอบหลักไม่สามารถจำแนกข้าวพันธุ์กข15 และขาวดอกมะลิ 105 ออกจากข้าวพันธุ์ปทุมธานี 1 ได้

**3.การสร้างสมการสำหรับการทำนายการแบ่งกลุ่มข้าวหอมมะลิออกจากข้าวกลุ่มอื่นด้วยวิธีการวิเคราะห์จำแนกกลุ่มด้วยการถดถอยกำลังสองน้อยที่สุด หรือ PLS-DA**

สมการที่เหมาะสมสำหรับทำนายการแบ่งกลุ่มข้าวหอมมะลิออกจากข้าวกลุ่มอื่นด้วยวิธีทางสถิติ PLS-DA แสดงดังตารางที่ 3โดยพบว่าสมการที่เหมาะสมสำหรับการทำนายการแบ่งกลุ่มข้าวหอมมะลิออกจากข้าวกลุ่มอื่น คือ สมการที่สร้างขึ้นจากการปรับแต่งสเปคตรัมด้วยวิธีการปรับความแปรปรวนให้เป็นมาตรฐาน ช่วงจำนวนคลื่น 10,000-4,000 $cm^{-1}$โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มตัวแปรเดิมเป็นตัวแปรใหม่ได้ 5 แฟกเตอร์ โดยมีค่า $R^2_{cal}$, $RMSE_{cal}$, $R^2_{val}$, $RMSE_{val}$และค่าความถูกต้องของการจำแนกกลุ่ม (Correctly classified) เท่ากับ 0.79, 0.17, 0.69, 0.21 และ 66.46% ตามลำดับ ซึ่งผลการวิเคราะห์ดังกล่าวยังสามารถอธิบายได้ด้วยลักษณะภาพค่าคะแนนปัจจัยของสเปคตรัมการจำแนกกลุ่มข้าวหอมมะลิออกจากข้าวกลุ่มอื่น แสดงดังภาพที่ 4

ในการสร้างสมการทำนายการแบ่งกลุ่มข้าวหอมมะลิออกจากข้าวกลุ่มอื่นด้วยวิธี PLS-DA นั้น กำหนดให้สเปคตรัมอินฟราเรดย่านใกล้ของข้าวหอมมะลิจัดให้อยู่ในกลุ่มที่มีค่าเท่ากับ 1 ในขณะที่สเปคตรัมอินฟราเรดของข้าวกลุ่มอื่นที่ไม่ใช่ข้าวหอมมะลิจัดให้อยู่ในกลุ่มที่มีค่าเท่ากับ 0 การพิจารณาความถูกต้องของการแบ่งกลุ่มพิจารณาจากค่าอ้างอิงที่กำหนดขึ้น กล่าวคือการแบ่งกลุ่มข้าวหอมมะลิถูกต้องเมื่อมีค่าอ้างอิงอยู่ในช่วง 0.5 ถึง 1.5 ในทางตรงกันข้ามถ้าอ้างอิงอยู่ในช่วง -0.5 ถึง 0.5 แสดงว่าข้าวกลุ่มนั้นเป็นข้าวกลุ่มอื่นที่ไม่ใช่ข้าวหอมมะลิ จากภาพที่ 4 พบว่าตำแหน่งของข้าวหอมมะลิ (สัญลักษณ์ J) ถูกวางอยู่ในตำแหน่งด้านขวาบนของแผนภาพค่าคะแนนปัจจัยซึ่งมีค่าอ้างอิงอยู่ในช่วง 0.5 ถึง 1.5 ในขณะที่ข้าวกลุ่มอื่น ได้แก่ ข้าวกลุ่มอะมิโลสต่ำ (สัญลักษณ์ L) ข้าวกลุ่มอะมิโลสปานกลาง (สัญลักษณ์ I) และข้าวกลุ่มอะมิโลสสูง (สัญลักษณ์ H) ถูกวางอยู่ในตำแหน่งด้านล่างซ้ายของแผนภาพคะแนนปัจจัยอยู่ในช่วง -0.5 ถึง 0.5 อย่างไรก็ตามจากแผนภาพดังกล่าวพบว่ามีการทำนายการจำแนกข้าวหอมมะลิออกจากข้าวกลุ่มอื่นมีความผิดพลาดเล็กน้อย เนื่องจากตัวอย่างข้าวดังกล่าวอยู่ในตำแหน่งที่เกินค่าอ้างอิง

นอกจากนี้ยังพบว่าสมการที่สร้างขึ้นจากการปรับแต่งสเปคตรัมด้วยวิธีการปรับแก้การกระเจิงแบบผลคูณช่วงจำนวนคลื่น 10,000-4,000 $cm^{-1}$ก็สามารถนำมาประยุกต์ใช้ในการจำแนกข้าวหอมมะลิออกจากข้าวกลุ่มอื่นได้เช่นเดียวกัน โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มตัวแปรเดิมเป็นตัวแปรใหม่ได้ 5 แฟกเตอร์ โดยมีค่า $R^2_{cal}$, $RMSE_{cal}$, $R^2_{val}$, $RMSE_{val}$และค่าความถูกต้องของการจำแนกกลุ่ม (Correctly classified) เท่ากับ 0.78, 0.17, 0.66, 0.22 และ 65.61% ตามลำดับ

**ตารางที่ 3** ค่าสถิติการจำแนกข้าวหอมมมะลิออกจากข้าวกลุ่มอื่นด้วยวิธี PLS-DA

| การปรับแต่งสเปคตรัม | จำนวนตัวอย่าง | จำนวนแฟกเตอร์ | $R^2_{cal}$ | $R^2_{val}$ | $RMSE_{cal}$ | $RMSE_{val}$ | Correctly classified (%) |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| No pre-processing[1)] | 126 | 3 | 0.70 | 0.64 | 0.20 | 0.22 | 58.88 |
| MSC[2)] | 126 | 5 | 0.78 | 0.66 | 0.17 | 0.22 | 65.61 |
| SNV[3)] | 126 | 5 | 0.79 | 0.69 | 0.17 | 0.21 | 66.46 |
| Sav.Gol_2nd derv[4)] | 126 | 3 | 0.67 | 0.56 | 0.21 | 0.25 | 56.36 |
| MSC + Sav.Gol_2nd derv[5)] | 126 | 3 | 0.68 | 0.59 | 0.21 | 0.24 | 57.20 |
| MSC + Sav.Gol_2nd derv[6)] | 126 | 3 | 0.69 | 0.60 | 0.20 | 0.24 | 58.04 |

หมายเหตุ[1)] ไม่มีการปรับแต่งสเปคตรัม

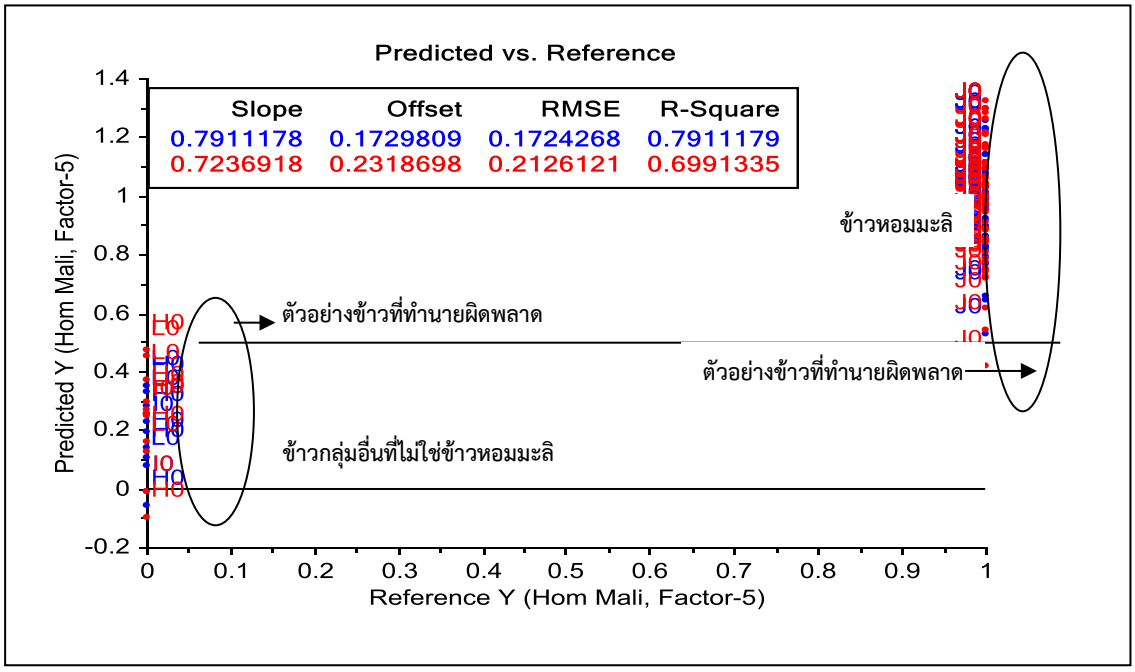
[2)] การปรับแต่งสเปคตรัมด้วยวิธีการปรับแก้การกระเจิงแบบผลคูณ

[3)] การปรับแต่งสเปคตรัมด้วยวิธีการปรับความแปรปรวนให้เป็นมาตรฐาน

[4)] การปรับแต่งสเปคตรัมด้วยวิธีการแปลงค่าด้วยวิธีอนุพันธ์อันดับที่สอง

[5)] การปรับแต่งสเปคตรัมด้วยวิธีการปรับแก้การกระเจิงแบบผลคูณร่วมกับวิธีแปลงค่าด้วยวิธีอนุพันธ์อันดับที่สอง

[6)] การปรับแต่งสเปคตรัมด้วยวิธีการปรับแก้ความแปรปรวนให้เป็นมาตรฐานร่วมกับวิธีการแปลงค่าด้วยวิธีอนุพันธ์อันดับที่สอง




**ภาพที่ 4** การจำแนกข้าวหอมมะลิออกจากข้าวกลุ่มอื่นด้วยวิธี PLS-DA จากสเปคตรัมที่ปรับแต่งด้วยวิธีการปรับความแปรปรวนให้เป็นมาตรฐาน

**สรุปผลการทดลอง**

การประยุกต์ใช้เทคนิคสเปคโตรสโคปีอินฟราเรดย่านใกล้ร่วมกับวิธีทางเคโมเมตริกซ์ สามารถจำแนกข้าวหอมมะลิออกจากข้าวกลุ่มอะมิโลสต่ำ ปานกลาง และสูงได้ เมื่อวิเคราะห์ด้วยวิธีการวิเคราะห์องค์ประกอบหลักและวิธี PLS-DA ผลการทดลองดังกล่าวยังพบว่าการเตรียมตัวอย่างข้าวขนาดเต็มเมล็ดในรูปของข้าวกล้องสามารถจำแนกข้าวหอมมะลิออกจากข้าวพันธุ์ปทุมธานี 1 ได้ ซึ่งเป็นข้าวที่อยู่ในกลุ่มปริมาณอะมิโลสต่ำเช่นเดียวกับข้าวหอมมะลิ แต่ไม่สามารถจำแนกข้าวหอมมะลิออกจากข้าวพันธุ์ชัยนาท 1 ได้

**ข้อเสนอแนะ**

การวิจัยครั้งนี้ กลุ่มตัวอย่างที่ใช้ในการวิจัยส่วนใหญ่เป็นข้าวหอมมะลิในขณะที่ตัวอย่างข้าวกลุ่มอื่นที่ไม่ใช่ข้าวหอมมะลิมีจำนวนน้อย ดังนั้น ในการวิจัยครั้งต่อไปควรเพิ่มตัวอย่างข้าวกลุ่มปริมาณอะมิโลสต่ำ ปานกลาง และสูงให้มากขึ้น เพื่อให้สมการการทำนายการจำแนกกลุ่มข้าวหอมมะลิออกจากกลุ่มข้าวดังกล่าวมีความแม่นยำมากยิ่งขึ้น

**เอกสารอ้างอิง**

กรมการค้าต่างประเทศ กระทรวงพาณิชย์. (1997). *มาตรฐานข้าวหอมมะลิไทย*. กระทรวงการต่างประเทศ.

กรมการค้าต่างประเทศ. (2555). ราคาข้าว. สืบค้นเมื่อ 3 กุมภาพันธ์, 2555, จาก http://www.dft.go.th.

ธงชัย สุวรรณสิชณณ์และปิติพร ฤทธิเรืองเดช. (2552). *การวิเคราะห์เชิงปริมาณและคุณภาพ (Qualitative and quantitative analysis)*.ใน เทคโนโลยีอินฟราเรดย่านใกล้ในอุตสาหกรรมอาหาร. สถาบันค้นคว้าและพัฒนาผลิตผลทางการเกษตรและอุตสาหกรรมเกษตร มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์. หน้า 6-2 ถึง 6-33.

Cheaupun, K., Wongpiyachon, S. &Kongseree, N. (2005).*Improving rice grain quality in Thailand*. In K. Toriyama, K.L. Heong and B. Hardy, Rice is life scientific perspective for the 21st century. Proceeding of the World Rice Research Conference, Tsukuba, Japan.

Delwiche, S., Bean, M.M., Miller, R.E., Webb, B.D. & Williams, P.C. (1995).Apparent amylose content of milled rice by near-infrared reflectance spectophotometry.*Cereal Chemistry, 72*(2), 182-187.

Kim, S.S., Rhyu, M.R., Kim, J.M. & Lee, S.H. (2003).Authentication of rice using near infrared reflectance spectroscopy.*Cereal Chemistry, 80*(3), 346-349.

Kwon, Y.K. & Cho, R.K. (1998).Identification of rice varieties using near infrared spectroscopy.*Journal of Near Infrared Spectroscopy, 6,* A67-A73.

Ootake, Y. &Kokot, S. (1998). Discrimination between glutinous and non-glutinous rice by vibrational spectroscopy. I: Comparison of FT–NIR DRIFT, PAS and Raman spectroscopy. *Journal of Near Infrared Spectroscopy, 6,* 341–249.

Osborne, B.G., Martens, B., Thomson, M. &Fearn, T. (1993). Authentication of Basmati rice using near infrared spectroscopy. *Journal of Near Infrared Spectroscopy, 1,* 77-83.

Rittiron, R., Saranwong, S. & Kawano, S. (2005). Detection of variety contamination in milled Japanese rice using a single kernel near infrared technique in transmittance mode. *Journal Near Infrared Spectroscopy, 13,* 19–25.

Theanjumpol, P., Ripon, S., Karaboon, S., Suwapanit, K., Thanapornpoonpong, S. &Verasilp, S. (2005). Aromatic Thai rice identification by near infrared reflectance spectroscopy. Conference on International Agriculture Research for Development. Stuttgart-Hohenheim, October 11-13, 2005.

Workmand, J. &Weyer, L. (2008).*Practical guide to interpretive near-infrared spectroscopy*. New York: CRC Press.

**คณะผู้เขียน**

**อาจารย์อารีรัตน์ อิ่มศิลป์**

อาจารย์ประจำหลักสูตรวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยีการอาหาร

โรงเรียนการเรือน มหาวิทยาลัยราชภัฏสวนดุสิต

e-mail:areerat_ims@dusit.ac.th หรือ aimsil73@gmail.com

**ปิยรัตน์ สิริธัญกิจ** เจ้าหน้าที่โครงการโรงสีข้าว สำนักกิจการพิเศษ มหาวิทยาลัยราชภัฏสวนดุสิต

e-mail:piya_sir@hotmail.com

**รจนา ประสิทธิ์**เจ้าหน้าที่โครงการโรงสีข้าว สำนักกิจการพิเศษ มหาวิทยาลัยราชภัฏสวนดุสิต

e-mail: rotchana_prasit@hotmail.com