

การใช้เทคนิค Near Infrared Spectroscopy (NIRS) ในการหาความชื้น และโปรตีนของแป้งสาลี

Determination of Moisture Content and Protein in Wheat Flour by Near Infrared Spectroscopy

ณรงค์พันธุ์ รัตนปนัดดา¹

¹คณะวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี มหาวิทยาลัยราชภัฏสวนดุสิต

E-mail: nrp447@yahoo.com

บทคัดย่อ

ตัวอย่างแป้งสาลีที่ใช้ในงานวิจัยนี้มี 3 ประเภท คือ แป้งสาลีเอนกประสงค์ แป้งสาลีทำเค้ก และแป้งสาลีทำขนมปัง นำมาวิเคราะห์ค่าทางเคมี พบว่า ปริมาณโปรตีนในแป้งสาลีอยู่ในช่วงร้อยละ 8.19 - 20.91 และปริมาณความชื้นในแป้งสาลีอยู่ในช่วงร้อยละ 10.09 - 13.68 นำปริมาณโปรตีนและปริมาณความชื้นที่ได้จากการวิเคราะห์ทางเคมีมาใช้ในการสร้างสมการสำหรับทำนายด้วยวิธี Multiple Linear Regression (MLR) และ Partial Least Square Regression (PLSR) พบว่าสมการที่สร้างด้วยวิธี Multiple Linear Regression (MLR) ให้ความแม่นยำในการทำนายค่าโปรตีนมากกว่า เนื่องจากมีค่า Standard Error of Calibration (SEC) และ Standard Error of Prediction (SEP) ที่ใกล้เคียงกัน คือ 0.72 และ 0.71 ส่วนการทำนายปริมาณความชื้นพบว่าสมการที่สร้างด้วยวิธี Partial Least Square Regression (PLSR) จะมีความแม่นยำในการทำนายร้อยละ 95.43 ซึ่งสูงกว่าสมการ Multiple Linear Regression (MLR) คือมีความแม่นยำร้อยละ 94.14 ดังนั้นสมการที่สร้างด้วยวิธี Partial Least Square Regression (PLSR) มีความเหมาะสมที่ใช้ในการทำนายปริมาณความชื้นในแป้งสาลีมากกว่า

Abstract

Three types of wheat samples used for this research are all purpose, cake and bread flour. Fifty samples of them were chemically analyzed of which the result showed the amount of protein content and moisture content in the range of 8.19 - 20.91% and 10.09 - 13.68% respectively. The protein and moisture content obtained from the chemical analysis were calibrated for equation by Multiple Linear Regression method (MLR) and Partial Least Square Regression method (PLSR). It is found that the Multiple Linear Regression method is more accurate in predicting the amount of protein content because the Standard Error of Calibration (SEC) and Standard Error of Prediction (SEP) are quite close, that is, 0.72 and 0.71. Meanwhile, the prediction of moisture content, according to the Partial Least Square Regression (PLSR), the accuracy of prediction comes

out at 95.43%, while the Multiple Linear Regression method (MLR) of which the accuracy is 94.14%. As the result, it may be concluded that the equation calibrated by the Partial Least Square Regression method (PLSR) is, of course, more appropriate to implement for the prediction of the moisture content in wheat flour.

คำสำคัญ: ความชื้น (moisture content), เนียร์อินฟราเรดสเปกโตรสโกปี (Near Infrared Spectroscopy), โปรตีน (Protein), แป้งสาลี (Wheat Flour)

บทนำ

อุตสาหกรรมผลิตแป้งสาลี ได้กลายเป็นอุตสาหกรรมที่สำคัญอุตสาหกรรมหนึ่งในประเทศไทย เพราะประเทศไทย จำเป็นต้องนำเข้าข้าวสาลีเพิ่มมากขึ้นทุกปี จนกระทั่งปัจจุบันนี้มูลค่าการนำเข้าในช่วงเวลา 6 เดือนสูงถึง 21 ล้านเหรียญสหรัฐ อุตสาหกรรมผลิตแป้งสาลีในประเทศไทย ได้ดำเนินการมานานกว่า 50 ปี มีผู้ผลิตรวม 8 บริษัท คือ บริษัท กิงส์ มิลล์, สกก่าจัน, สยามฟลาวาล้าแป้ง, อุตสาหกรรมแป้งสาลีไทย, ยูโนเด็คฟลาวมิลล์, ที เอส ฟลาวมิลล์, บางกอกฟลาวมิลล์ และ บริษัท นิสชิน เอสทีซี ฟลาวมิลล์ จำกัด คุณสมบัติที่เป็นสิ่งบ่งชี้คุณภาพของแป้งสาลีอย่างหนึ่ง คือ ปริมาณ โปรตีนและความชื้น การตรวจสอบคุณภาพเป็นวิธีการตรวจสอบที่ค่อนข้างยุ่งยากและใช้เวลาในการตรวจสอบมาก มีค่าใช้จ่ายสูงและส่งผลกระทบต่อสิ่งแวดล้อม จึงได้มีการพัฒนาวิธีการตรวจสอบที่รวดเร็วในการวิเคราะห์โปรตีน เช่น Dumas combustion method แต่เป็นวิธีการทดสอบที่ทำลายตัวอย่างและเกิดผลเสียกับสิ่งแวดล้อม จึงมีวิธีการตรวจสอบที่กำลังได้รับความนิยมในปัจจุบันคือ เทคนิค Near Infrared Spectroscopy (NIRS) เป็นการตรวจวัดด้วยวิธีที่รวดเร็ว (Rapid Method) ไม่ทำลายตัวอย่าง ประหยัดค่าใช้จ่ายและไม่สร้างมลพิษให้กับสิ่งแวดล้อม

เทคนิค Near Infrared Spectroscopy (NIRS) เป็นการวิเคราะห์ตัวอย่างโดยใช้สมบัติการดูดกลืนแสง ในย่านใกล้อินฟราเรดช่วงความยาวคลื่นระหว่าง 785 - 2650 นาโนเมตร ทำให้โมเลกุลเกิดการสั่นสะเทือนที่ความถี่สูงและเกิดการดูดกลืนรังสีไว้ ซึ่งปริมาณการดูดกลืนแสงจะเป็นไปตามกฎของเบียร์-แลมเบิร์ต (Beer-Lambert's law) คือ พลังงานของคลื่นแสงเมื่อผ่านเข้าไปในตัวอย่าง พลังงานจะถูกดูดกลืนไว้โดยองค์ประกอบทางเคมีในตัวอย่าง ความเข้มแสงที่ผ่านออกมาโดยทั่วไปจะเป็นสัดส่วนกับปริมาณขององค์ประกอบทางเคมีนั้น (Osborne และคณะ, 1993)

ในปี 1993 Osborne และคณะ ได้ทำการศึกษาพบว่าในข้าวสาลีปริมาณความชื้นและปริมาณโปรตีน จะมีความสัมพันธ์กัน คือ ข้าวสาลีที่มีความชื้นสูงจะทำให้การอ่านค่าโปรตีนในข้าวสาลีผิดไปจากความเป็นจริงมาก ค่าความชื้นที่เหมาะสมในข้าวสาลี คือ 13 - 14% ที่ให้ผลการอ่านค่าองค์ประกอบทางเคมีมีความถูกต้องและแม่นยำ นอกจากนี้ได้มีการนำเทคนิค NIRS มาใช้ในการตรวจสอบปริมาณโปรตีนในอาหารหลากหลายชนิด เช่น ข้าวบาร์เลย์ ข้าวมอลต์ ข้าวโอ๊ต (Gunasekaran, 2001) และการตรวจสอบปริมาณโปรตีนในข้าวด้วยเครื่อง NIRS จะมีความสัมพันธ์กับความยาวคลื่นในช่วง 2180 นาโนเมตร (Iwamoto และคณะ, 1986) โดยโมเลกุลที่มีการดูดกลืนคลื่นแสงในช่วง NIR จะมีอะตอมของไฮโดรเจนเป็นองค์ประกอบ (H) เช่น พันธะ O-H ในน้ำ พันธะ N-H พบในโปรตีน และพันธะ C-H พบมากในน้ำมัน จากนั้นทำการปรับแต่งสเปกตรัมที่ได้จากการวัด และนำสเปกตรัมที่ทำการปรับแต่งแล้วกับผลที่ได้จากการวัดด้วยวิธีทางเคมี มาหาความสัมพันธ์เพื่อสร้างสมการ โดยใช้วิธีทางสถิติ Multiple Linear Regression (MLR)

และ Partial Least Square (PLS) เพื่อให้ได้สมการที่เหมาะสมที่สุดในการวิเคราะห์สเปกตรัมเพื่อคำนวณออกมาเป็นค่าทางเคมีและให้ค่าที่มีความแม่นยำที่สุด ทั้งนี้ขึ้นอยู่กับจำนวนตัวอย่างและความแม่นยำของค่าทางเคมีที่นำมาใช้ในการประมวลผลข้อมูลเพื่อสร้างสมการ

งานวิจัยครั้งนี้มีวัตถุประสงค์ในการนำเทคนิค NIRS มาใช้ในการวิเคราะห์ปริมาณโปรตีนและความชื้นในแป้งสาลี ผลงานวิจัยที่น่าจะมีประโยชน์ต่อภาคอุตสาหกรรมในการวัดปริมาณโปรตีนและความชื้นได้อย่างรวดเร็วไม่เป็นมลพิษกับสิ่งแวดล้อมและประหยัดค่าใช้จ่ายในการวิเคราะห์ทางเคมี

วัตถุประสงค์

เพื่อศึกษาความเป็นไปได้ของการใช้เทคนิค NIRS ในการวิเคราะห์ปริมาณโปรตีนและความชื้นในแป้งสาลี

วิธีการศึกษา

1. ตัวอย่างแป้งสาลี

แป้งสาลีที่ใช้ในการทดลองมีจำนวน 50 ตัวอย่าง เป็นแป้งสาลี 3 ชนิด ที่มีปริมาณโปรตีน การใช้งาน และบริษัทผู้ผลิตแตกต่างกัน

- แป้งสาลีชนิดทำเค้ก
- แป้งสาลีชนิดเอนกประสงค์
- แป้งสาลีชนิดทำขนมปัง

2. การวิเคราะห์ปริมาณโปรตีนและความชื้นของแป้งสาลี

- วิเคราะห์หาปริมาณโปรตีน โดยวิธี Kjeldahl Method (AOAC, 2000)
- วิเคราะห์ปริมาณความชื้น โดยวิธี Oven Drying Method (AOAC, 2000)

โดยทำการทดลองตัวอย่างละ 3 ครั้ง

3. การวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่อง NIR Spectroscopy ยี่ห้อ Foss (NIR Systems 6500, NIR Systems Inc., Maryland, USA)

นำตัวอย่างแป้งสาลีใส่ใน Round Cup สร้างวิธีการวัดโดยกำหนดลักษณะที่ใส่ตัวอย่าง รุ่นเครื่อง และช่วงความยาวคลื่นที่ต้องการ ทำการวัด Reference และวัดค่าการดูดกลืนแสง ทำการบันทึก Spectrum

4. การสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์

นำสเปกตรัมจากการบันทึกมาทำการแปลงข้อมูล และทำการจัดกลุ่มข้อมูล เพื่อลดผลกระทบจากปัจจัยต่างๆ และ noise หรือ error จากการวัดที่ปรากฏในสเปกตรัม เปรียบเทียบวิธีแปลงข้อมูล โดยใช้วิธีทางสถิติและใช้ค่าทางเคมีเป็นตัวแปรตามและ Absorbance ที่แปลงแล้วเป็นตัวแปรอิสระ สร้างสมการที่ใช้ทำนายค่าทางเคมีจากสเปกตรัม NIR โดยการสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ ด้วยวิธี Multiple Linear Regression (MLR) และ Partial Least Square Regression (PLSR) ทำการคัดเลือกสมการที่เหมาะสมโดยพิจารณาจากค่า Standard Error of Calibration (SEC) และค่า Standard Error of Prediction (SEP)

5. การตรวจสอบความแม่นยำของสมการที่สร้างขึ้น

เปรียบเทียบค่า Standard Error of Prediction (SEP) และ Bias เพื่อประเมินปริมาณโปรตีนและความชื้นของแป้งสาลี โดยใช้ข้อมูลใน Validation Set ซึ่งไม่ได้เป็นข้อมูลที่ใช้ในการหา Calibration Equation ทำการเปรียบเทียบค่าที่ได้จากการวิเคราะห์ทางเคมีกับค่าที่ได้จากการทำนาย

ผลการศึกษา

1. ผลการวิเคราะห์ปริมาณโปรตีนและความชื้นในแป้งสาลีทั้ง 3 ชนิดโดยวิธีทางเคมี

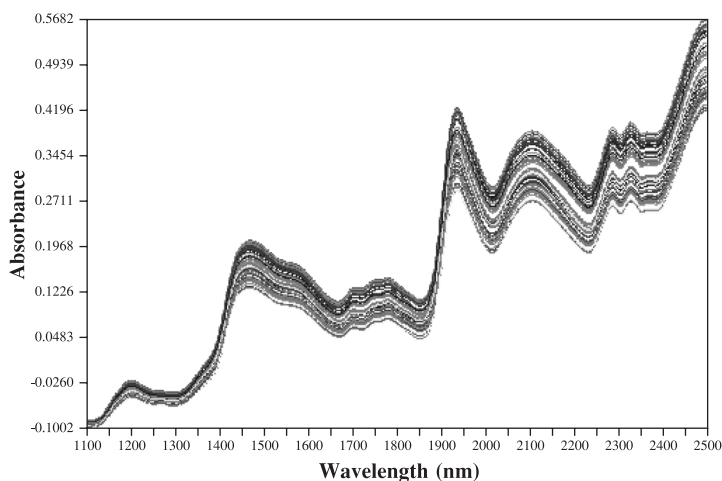
ผลการวิเคราะห์ปริมาณโปรตีนและความชื้นในแป้งสาลีด้วยวิธีทางเคมี พบว่าแป้งสาลีทำขนมปังมีปริมาณโปรตีนสูงที่สุด รองลงมาคือ แป้งสาลีเอนกประสงค์ และแป้งสาลีทำขนมเค้ก ส่วนปริมาณความชื้นของแป้งสาลีทั้ง 3 ชนิด มีปริมาณที่ใกล้เคียงกัน ดังตารางที่ 1

ตารางที่ 1 ผลการวิเคราะห์ปริมาณโปรตีนและความชื้นในแป้งสาลีแต่ละชนิดด้วยวิธีทางเคมี

ตัวอย่างแป้งสาลี	ปริมาณโปรตีน (%)	ปริมาณความชื้น (%)
แป้งสาลีเอนกประสงค์	12.94 ± 2.79	11.42 ± 0.55
แป้งสาลีทำขนมปัง	13.35 ± 2.43	11.36 ± 0.46
แป้งสาลีทำขนมเค้ก	9.09 ± 1.38	11.52 ± 2.61

2. ผลการวัดค่าการดูดกลืนแสงของแป้งสาลีด้วยเครื่อง Near Infrared (NIR) Spectrophotometer แบบสะท้อนกลับ

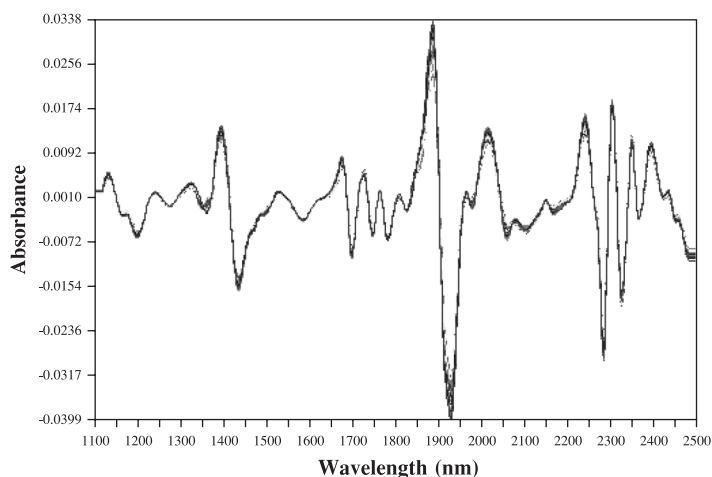
จากการวัดค่าการดูดกลืนแสงในแป้งสาลีด้วยเครื่อง Near Infrared Spectrophotometer แบบสะท้อนกลับ ผลการทดลองแสดงดังภาพต่อไปนี้



ภาพที่ 1 สเปกตรัมการดูดกลืนแสงของตัวอย่างแป้งสาลี 50 ตัวอย่าง

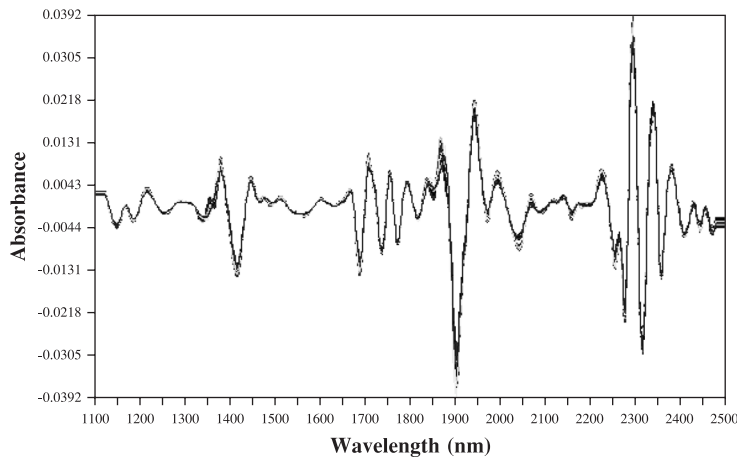
ภาพที่ 1 แสดงสเปกตรัมของตัวอย่างแป้งสาลี 3 ชนิด คือ แป้งสาลีเอนกประสงค์ แป้งสาลีทำขนมปัง และ แป้งสาลีทำเค้ก จำนวน 50 ตัวอย่าง โดยแกน x เป็นความยาวคลื่น ส่วนแกน y เป็นค่าการดูดกลืนแสง ด้วยองค์ประกอบทางเคมีที่แตกต่างกันทำให้ค่าการดูดกลืนแสงของแป้งสาลีมีค่าไม่เท่ากันในแต่ละช่วงความยาวคลื่น ซึ่งค่าการดูดกลืนแสงในแต่ละช่วงความยาวคลื่นแตกต่างกันไม่ชัดเจน จึงไม่สามารถหาความสัมพันธ์ระหว่างค่าการดูดกลืนแสงในแต่ละช่วงความยาวคลื่นกับค่าทางเคมีของแป้งสาลีได้อย่างชัดเจน จึงได้มีการแปลงข้อมูลก่อนที่จะมีการนำค่าการดูดกลืนแสงที่ได้มาทำการวิเคราะห์ในขั้นต่อไป

การแปลงข้อมูลด้วยวิธีอนุพันธ์สามารถลดการซ้อนทับกันของจุดยอดสเปกตรัมและให้จุดยอดที่เด่นชัดมากขึ้น ดังแสดงในภาพที่ 2 นอกจากนี้ยังลดผลกระทบที่ทำให้ค่าการดูดกลืนแสงของสเปกตรัมเพิ่มขึ้นตลอดทั้งช่วงความยาวคลื่น ที่ทำการศึกษา (Osborne และคณะ, 1993) โดยสามารถเลือกการแปลงผลโดยการคำนวณอนุพันธ์ได้ทั้ง 3 ระดับ ในงานวิจัยนี้จะเลือกการแปลงผลโดยใช้อนุพันธ์อันดับที่ 2 และอันดับที่ 3 ในการจัดกลุ่มตัวอย่าง



ภาพที่ 2 สเปกตรัมอนุพันธ์อันดับที่ 2 ของตัวอย่างแป้งสาลี 50 ตัวอย่าง

จากภาพที่ 2 และ 3 เป็นอนุพันธ์อันดับที่ 2 และ อนุพันธ์อันดับที่ 3 ของสเปกตรัม จะสามารถช่วยชดเชยให้ Base Line และสเปกตรัมที่ได้ให้ดีขึ้น เพราะการแปลงข้อมูลโดยใช้อนุพันธ์อันดับที่ 2 เป็นการหาการเปลี่ยนแปลงความชันของสเปกตรัม ซึ่งสามารถแยกฟีกที่เหลื่อมซ้อนทับกันอยู่ออกมาให้ชัดเจน



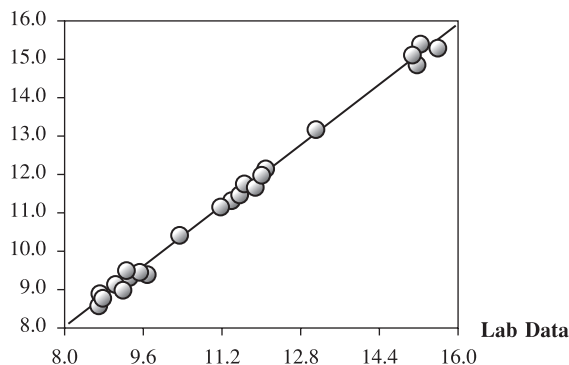
ภาพที่ 3 สเปกตรัมอนุพันธ์อันดับที่ 3 ของตัวอย่างแป้งสาลี 50 ตัวอย่าง

3. การสร้างสมการทำนายค่าโปรตีนในตัวอย่างแป้งสาลีโดยใช้วิธี Multiple Linear Regression (MLR)

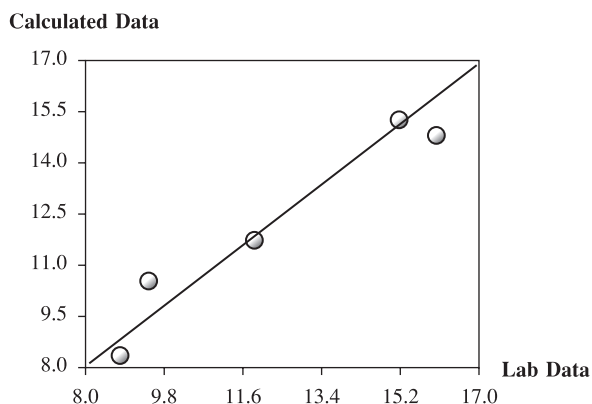
การวิเคราะห์หาสมการ Calibration ของตัวอย่างโปรตีนในแป้งสาลี โดยใช้วิธี MLR กลุ่มตัวอย่าง Calibration ใช้ 38 ตัวอย่าง Validation 5 ตัวอย่าง จากการวิเคราะห์โดยใช้โปรแกรมวิเคราะห์สเปกตรัมช่วงใกล้อินฟราเรด (NSAS) พบว่าการดูดกลืนแสงที่ความยาวคลื่น 1398, 1606, 610, 1612, 1614, 1618 และ 2056 นาโนเมตร คือ ค่า R เท่ากับ 0.90 และ ค่า SEC เท่ากับ 0.72 เนื่องจากที่ความยาวคลื่น 2056 สอดคล้องกับ Absorption band ของสารกลุ่มโปรตีน (เม้น อมรสิทธิ์ และอมร เพชรสม, 2534) โดยนำข้อมูลที่ได้จากอนุพันธ์อันดับที่ 4 มาทำการสร้างสมการ ได้ผลดังภาพที่ 4 และสมการ Calibration ของโปรตีนที่ได้จากการวิเคราะห์โดยใช้โปรแกรม NSAS คือ

$$\begin{aligned} \% \text{ Protein} = & 7.76 - 9292.49 \log^4 (1/R_{1614}) + 413.76 \log^4 (1/R_{2056}) + 845.09 \log^4 (1/R_{1398}) \\ & + 1470.24 \log^4 (1/R_{1612}) - 3379.41 \log^4 (1/R_{1618}) + 2813.25 \log^4 (1/R_{1606}) + 974.99 \log^4 (1/R_{1610}) \end{aligned}$$

Calculated Data



ภาพที่ 4 แสดงการนำตัวอย่างชุด Calibration Set มาทดสอบการสร้างสมการด้วยวิธี MLR



ภาพที่ 5 ปริมาณโปรตีนที่ได้จากการคำนวณกับการวิเคราะห์ทางเคมี ในกลุ่มตัวอย่าง Validation ด้วยวิธี MLR

จากภาพที่ 5 ผลการประเมินค่าโปรตีนในกลุ่มตัวอย่าง Validation กับสมการที่ได้จากค่าการดูดกลืนแสงที่ความยาวคลื่น 1398 1606 1610 1612 1614 1618 และ 2056 นาโนเมตร จะมีค่า SEP เท่ากับ 0.71 และมีค่า Bias เท่ากับ 0.25 ซึ่งเมื่อทำการเปรียบเทียบแต่ละสมการที่ได้จากการคำนวณแล้วจะเห็นได้ว่าสมการที่ประกอบด้วยความยาวคลื่น 1398 1606 1610 1612 1614 1618 และ 2056 นาโนเมตร ได้ค่าที่มีความแม่นยำมากที่สุด เพราะที่ความยาวคลื่น 2056 นาโนเมตร เป็นความยาวคลื่นที่พันธะ N - H ในโมเลกุลของโปรตีนเกิดการสั่นสะเทือนที่ความถี่สูงและดูดกลืนรังสีไว้ได้ดี (Combination band region) (แม้น อมรสิทธิ์ และอมร เพชรสม, 2534) โดยเมื่อทำการเปรียบเทียบความแตกต่างระหว่างค่า SEC SEP และค่าความคลาดเคลื่อนจากการทดลอง มีค่าที่ใกล้เคียงกันมากที่สุด

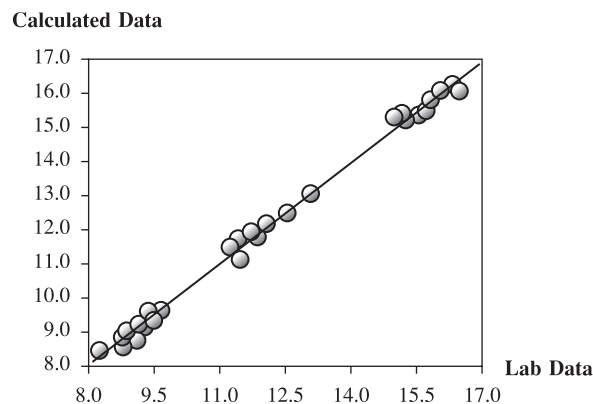
ตารางที่ 2 ผลการทดสอบการใช้สมการ MLR ในการทำนายปริมาณโปรตีน (%) ของแป้งสาลี จำนวน 5 ตัวอย่าง

ตัวอย่างแป้งสาลี	ค่าที่ได้จากการวิเคราะห์ทางเคมี	ค่าที่ได้จากสมการที่สร้างด้วยวิธี MLR	(%) ความแตกต่าง
1	8.76	8.26	5.70
2	9.05	9.10	0.55
3	9.16	8.97	2.07
4	9.44	9.62	1.93
5	11.84	11.66	1.52

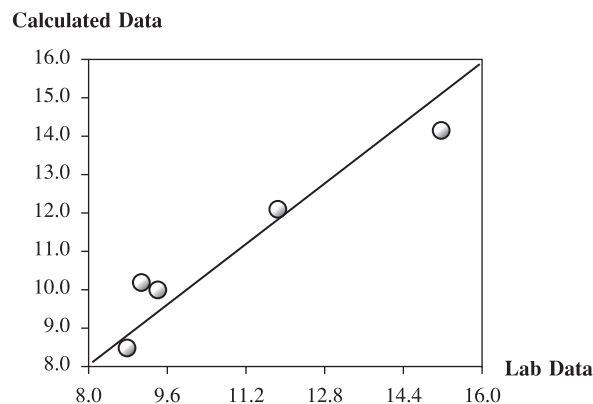
จากผลการทดสอบการใช้สมการ MLR ในการทำนายค่าโปรตีนของแป้งสาลี ดังแสดงในตารางที่ 2 พบว่าสมการที่ใช้ในการทำนายค่าโปรตีนมีความคลาดเคลื่อนน้อยอยู่ที่ร้อยละ 2.35 ซึ่งสมการที่ได้ค่อนข้างมีความแม่นยำสูงเนื่องจากตัวแปรที่นำมาใช้ในการสร้างสมการมีช่วงความยาวคลื่นที่พันธะ N-H ในโมเลกุลของโปรตีนเกิดการสั่นสะเทือนที่ความถี่สูงและดูดกลืนรังสีไว้ได้ดี Combination band region และค่าความคลาดเคลื่อนจากการทำนายมีค่าใกล้เคียงกับค่าความคลาดเคลื่อนจากการทดลอง ทำให้ค่าทางเคมีที่ได้จากการทำนายมีความแม่นยำสูง

4. การสร้างสมการทำนายค่าโปรตีนในตัวอย่างแป้งสาลีโดยใช้วิธี Partial Least Square Regression (PLSR)

เมื่อนำสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี Second derivative ที่ความยาวคลื่นในช่วง 1100 - 2500 นาโนเมตร (กลุ่มตัวแปรอิสระ) มาหาความสัมพันธ์กับค่าที่วิเคราะห์ได้ด้วยวิธีทางเคมี (ตัวแปรตาม) โดยใช้ตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ 38 ตัวอย่าง สมการสร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มตัวแปรเดิมได้ตัวแปรอิสระใหม่มี 5 ตัวแปร นำสมการที่ได้มาทำนายปริมาณโปรตีนเปรียบเทียบกับค่าทางเคมีในกลุ่มตัวอย่างที่ใช้สร้างสมการ ดังภาพที่ 6 จะได้ค่า R และ SEC เท่ากับ 0.95 และ 0.66 ตามลำดับ และนำสมการที่ได้มาทำนายปริมาณโปรตีนเปรียบเทียบกับค่าทางเคมีในกลุ่มตัวอย่างที่ใช้ในการทำนาย ดังภาพที่ 7 จะได้ค่า SEP และ Bias เท่ากับ 0.83 และ 0.49 ตามลำดับ



ภาพที่ 6 การนำตัวอย่างชุด Calibration Set มาทดสอบการสร้างสมการด้วยวิธี PLSR



ภาพที่ 7 ปริมาณโปรตีนที่ได้จากการคำนวณกับการวิเคราะห์เคมี ในกลุ่มตัวอย่าง Validation ด้วยวิธี PLSR

ตารางที่ 3 ผลการทดสอบการใช้สมการ PLSR ในการทำนายปริมาณโปรตีนของแป้งสาลี จำนวน 5 ตัวอย่าง

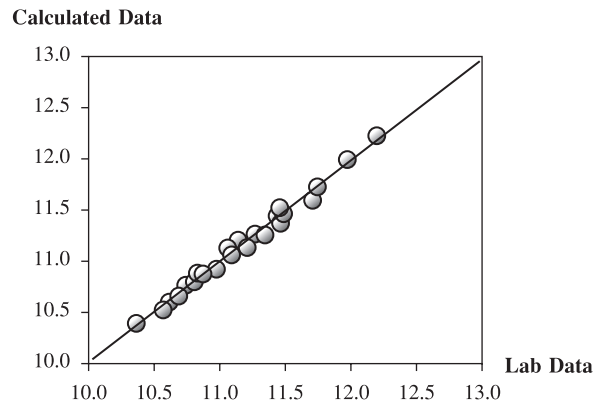
ตัวอย่างแป้งสาลี	ค่าที่ได้จากการวิเคราะห์ทางเคมี	ค่าที่ได้จากสมการที่สร้างด้วยวิธี PLSR	(%) ความแตกต่าง
1	8.76	8.75	0.11
2	9.05	9.18	1.43
3	9.16	9.09	0.76
4	9.44	9.68	2.54
5	11.84	10.80	8.10

จากผลการทดสอบโดยใช้สมการ PLSR ในการทำนายปริมาณโปรตีนของแป้งสาลี ดังตารางที่ 3 พบว่าสมการที่ใช้ในการทำนายปริมาณโปรตีนมีความคลาดเคลื่อนเฉลี่ยอยู่ที่ร้อยละ 2.58 ซึ่งมีความคลาดเคลื่อนในการทำนายมากกว่าสมการที่สร้างด้วยวิธี MLR เนื่องจากความแตกต่างของค่า SEC และ SEP ที่มากกว่าทำให้ค่าที่ได้จากการทำนายมีความแม่นยำน้อยกว่า และจำนวนตัวแปรต้นที่มากพอในการสร้างสมการด้วยวิธี MLR

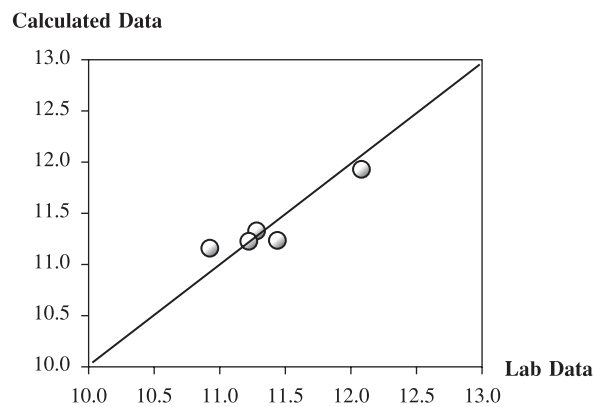
5. การสร้างสมการทำนายค่าความชื้นในตัวอย่างแป้งสาลีโดยใช้วิธี Multiple linear regression (MLR)

การวิเคราะห์หาสมการ Calibration ของความชื้นในตัวอย่างแป้งสาลี โดยใช้วิธี Multiple Linear Regression (MLR) โดยใช้ Calibration 41 ตัวอย่าง และ Validation 5 ตัวอย่าง จากการวิเคราะห์โดยใช้โปรแกรมวิเคราะห์สเปกตรัมช่วงใกล้อินฟราเรด (NSAS) โดยเลือกความยาวคลื่นหลายๆค่า ให้ผลแสดงดังในตารางที่ 4 พบว่าการดูดกลืนแสงที่ความยาวคลื่น 1392 2184 และ 2402 นาโนเมตร มีค่า Multiple Correlation Coefficient (R) เท่ากับ 0.61 ค่า SEC และ SEP เท่ากับ 0.33 และ 0.69 ตามลำดับ โดยใช้วิธีอนุพันธ์อันดับที่ 2 และอนุพันธ์อันดับที่ 3 ในการแปลงข้อมูลก่อนนำมาวิเคราะห์ และมีค่า Bias เท่ากับ 0.03 โดยมีค่าน้อยกว่าสมการอื่นๆ เพราะที่ความยาวคลื่น 2184 นาโนเมตร เป็นความยาวคลื่นที่พันธะ O-H ในโมเลกุลของน้ำเกิดการสั่นสะเทือนที่ความถี่สูงและดูดกลืนรังสีไว้ได้ดี (Combination band region) (แม้น อมรสิทธิ์ และอมร เพชรสม, 2534) ส่วนที่ความยาวคลื่น 1392 นาโนเมตร เป็นความยาวคลื่นที่พันธะ O-H ในโมเลกุลของน้ำเกิดการสั่นสะเทือนที่ความถี่สูงและดูดกลืนรังสีไว้ได้เช่นกัน (First overtone region) (แม้น อมรสิทธิ์ และอมร เพชรสม, 2534)

$$\% \text{ Moisture} = 9.58 + 874.38 \log^2 (1/R_{1392}) - 1105.34 \log^2 (1/R_{2184}) + 628.91 \log^2 (1/R_{2402})$$



ภาพที่ 8 การนำตัวอย่างชุด Calibration Set มาทดสอบการสร้างสมการด้วยวิธี MLR



ภาพที่ 9 การประเมินค่าความขึ้นแป่งสาลิในกลุ่มตัวอย่าง Validation ด้วยวิธี MLR

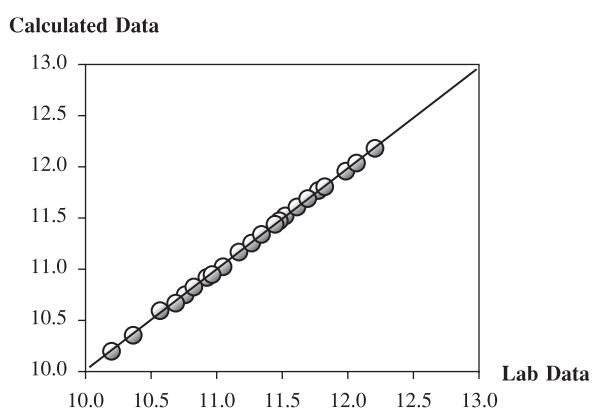
ตารางที่ 4 ผลการทดสอบการใช้สมการ MLR ในการทำนายปริมาณความขึ้นของแป่งสาลิ จำนวน 5 ตัวอย่าง

ตัวอย่างแป่งสาลิ	ค่าที่ได้จากการวิเคราะห์ทางเคมี	ค่าที่ได้จากสมการที่สร้างด้วยวิธี MLR	ร้อยละของความแตกต่าง
1	11.45	11.76	2.71
2	9.88	11.00	11.34
3	11.48	11.59	0.96
4	11.88	10.94	7.91
5	12.27	11.49	6.36

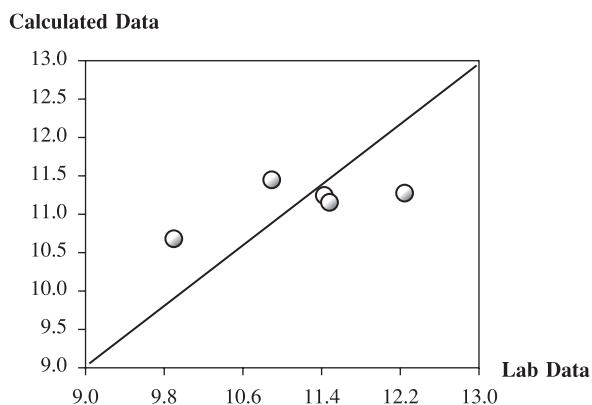
จากผลการทดสอบการใช้สมการ MLR ในการทำนายค่าความชื้นของแป้งสาลี ดังตารางที่ 4 พบว่า สมการที่ใช้ในการทำนายค่าความชื้น มีความแม่นยำเฉลี่ยอยู่ที่ร้อยละ 94.14 เมื่อพิจารณาสมการที่ได้ด้วยวิธี MLR จะเห็นได้ว่ามีตัวแปรต้น คือ ค่าการดูดกลืนแสงที่ 3 ความยาวคลื่น จึงทำให้ค่าความแม่นยำมีมากกว่าสมการ MLR ที่ใช้ทำนายค่าโปรตีน

6. การสร้างสมการทำนายค่าความชื้นในตัวอย่างแป้งสาลีโดยใช้วิธี Partial Least Square Regression (PLSR)

เมื่อนำสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี Second Derivative ที่ความยาวคลื่นในช่วง 1100 - 2500 นาโนเมตร (ตัวแปรอิสระ) มาหาความสัมพันธ์กับค่าที่วิเคราะห์ได้ทางเคมี (ตัวแปรตาม) โดยใช้ตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ 41 ตัวอย่าง สมการที่สร้างขึ้นมีตัวแปรอิสระ 5 ตัวแปร และสมการที่ได้มีค่า R ค่า SEC และ ค่า SEP เท่ากับ 0.78 0.25 และ 0.63 ตามลำดับ



ภาพที่ 10 การนำตัวอย่างชุด Calibration Set มาทดสอบการสร้างสมการด้วยวิธี PLSR



ภาพที่ 11 การประเมินค่าความชื้นแป้งสาลีในกลุ่มตัวอย่าง Validation ด้วยวิธี PLSR

ตารางที่ 5 ผลการทดสอบการใช้สมการ PLSR ในการทำนายค่าความชื้นของแป้งสาลี จำนวน 5 ตัวอย่าง

ตัวอย่างแป้งสาลี	ค่าที่ได้จากการวิเคราะห์ทางเคมี	ค่าที่ได้จากสมการที่สร้างด้วยวิธี PLSR	ร้อยละของความแตกต่าง
1	11.45	11.28	1.48
2	9.88	10.67	8.00
3	11.48	11.21	2.35
4	11.88	11.48	3.36
5	12.27	11.33	7.64

จากผลการทดสอบการใช้สมการ PLSR ในการทำนายค่าความชื้นของแป้งสาลี ดังตารางที่ 5 พบว่าสมการที่ใช้ในการทำนายค่าความชื้น มีค่าความแม่นยำเฉลี่ยอยู่ที่ร้อยละ 95.43 เนื่องจากตัวแปรต้นที่ใช้ในสมการคือ ค่าการดูดกลืนแสงในช่วงความยาวคลื่น 1100 - 2500 นาโนเมตร ซึ่งมีตัวแปรต้นในการพิจารณาที่มากพอทำให้ค่าความชื้นที่ได้จากการทำนายมีค่าความแม่นยำสูง

7. การตรวจสอบความแม่นยำของสมการที่สร้างขึ้น (Validation)

การตรวจสอบความแม่นยำของสมการจะพิจารณาจากค่าความคลาดเคลื่อนจากการทำนายด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Standard Error of Prediction) และค่า Bias สมการที่สร้างขึ้นที่มีความแม่นยำมากควรมีค่า Bias ต่ำ และค่า SEP ควรใกล้เคียงกับค่า SEC รวมทั้งพิจารณาจากค่า R และค่า SEC ที่ได้จากขั้นตอนการสร้างสมการ โดยใช้วิธี MLR และ PLSR นั้นได้ใช้ความยาวคลื่นตลอดช่วง 1100 - 2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกันแสดงผลในตารางที่ 6

ตารางที่ 6 ค่าเปรียบเทียบค่า R, SEC, SEP และ Bias ของแป้งสาลีที่วิเคราะห์ด้วยวิธี MLR และ PLSR

วิเคราะห์	วิธี	R	SEC	SEP	Bias
โปรตีน	MLR	0.95	0.72	0.71	0.25
โปรตีน	PLSR	0.95	0.66	0.83	0.49
ความชื้น	MLR	0.61	0.33	0.69	0.04
ความชื้น	PLSR	0.78	0.25	0.63	0.09

จากข้อมูลในตารางที่ 6 จะเห็นได้ว่าสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี MLR มีความเหมาะสมที่จะใช้ในการทำนายค่าโปรตีนในแป้งสาลีมากกว่า เนื่องจากมีค่า R เข้าใกล้ 1 และมีค่าความแตกต่างของ SEC และ SEP ที่ใกล้เคียงกัน คือ 0.72 และ 0.71 ตามลำดับ ทำให้ค่าทางเคมีที่ได้จากการทำนายมีความคลาดเคลื่อนต่ำ

ส่วนในการทำนายค่าความชื้นของแป้งสาลีนั้น เมื่อพิจารณาจากตารางที่ 5 สมการที่สร้างด้วยวิธี MLR และ PLSR จะมีค่าความแม่นยำที่ใกล้เคียงกัน เนื่องจากมีค่า SEC และ SEP ที่ใกล้เคียงกัน คือ 0.33 และ 0.69 ในสมการที่สร้างด้วยวิธี MLR และ 0.25 และ 0.63 ในสมการที่สร้างด้วยวิธี PLSR ตามลำดับ แต่จากการทดสอบใช้สมการในการวัดค่าความชื้น พบว่าสมการที่สร้างด้วยวิธี PLSR มีค่าความคลาดเคลื่อนน้อยกว่าสมการที่สร้างด้วยวิธี MLR ดังนั้นสมการที่สร้างด้วยวิธี PLSR มีความเหมาะสมในการทำนายค่าความชื้นของแป้งสาลีมากที่สุด

สรุปผลการศึกษาและข้อเสนอแนะ

1. สรุปผลการศึกษา

จากผลการทดสอบการใช้สมการในการทำนายปริมาณโปรตีนและความชื้นในแป้งสาลี พบว่าในการทำนายค่าทางเคมีทั้งสองค่า สมการที่เหมาะสมที่ใช้ในการทำนายปริมาณโปรตีน คือ สมการที่สร้างด้วยวิธี Multiple Linear Regression (MLR) เพราะในการสร้างสมการได้ตัวแปรต้นจำนวนที่มากพอคือที่ 7 ความยาวคลื่น ซึ่งเป็นความยาวคลื่นที่พันธะ N-H ในโมเลกุลของโปรตีนเกิดการสั่นสะเทือนที่มีความถี่สูงและดูดกลืนรังสีไว้ได้ดี ทำให้สมการที่สร้างด้วยวิธี Multiple Linear Regression (MLR) มีความเหมาะสมในการใช้ทำนายปริมาณโปรตีนมากกว่าส่วนในการทำนายปริมาณความชื้นของแป้งสาลีพบว่าสมการที่สร้างด้วยวิธี Partial Least Square Regression (PLSR) มีความแม่นยำในการทำนายค่าทางเคมีสูงกว่า เพราะมีช่วงความยาวคลื่นที่ใช้ในการสร้างสมการที่มาก คือ 1100 - 2500 นาโนเมตร ทำให้ตัวแปรต้นที่ใช้ในการสร้างสมการมีมากพอ ดังนั้นสมการที่สร้างด้วยวิธี Partial Least Square Regression (PLSR) จึงมีความแม่นยำมากกว่า หากต้องการให้สมการที่ได้มีความแม่นยำมากขึ้น ควรปรับเลือกค่าความยาวคลื่นที่มีความสัมพันธ์กับตัวแปรตามมาเป็นตัวแปรในสมการให้มากขึ้น

2. ข้อเสนอแนะ

ควรมีการเพิ่มจำนวนตัวอย่างที่มีความหลากหลายทั้งแหล่งผลิต ปริมาณโปรตีนและปริมาณความชื้น ในการสร้างสมการควรมีการเลือกช่วงความยาวคลื่นที่เกี่ยวข้องกับค่าทางเคมีที่ต้องการวิเคราะห์มาเป็นตัวแปรต้น รวมทั้งการควบคุมปัจจัยที่เกี่ยวข้องกับการวัดต่างๆ เช่น ขนาดอนุภาคและอุณหภูมิขณะวัด ก่อนทำการวัดค่าการดูดกลืนแสง

เอกสารอ้างอิง

- แม่น อมรสิทธิ์ และอมร เพชรสม. (2534). **Principle and Techniques of Instrument Analysis**. พิมพ์ครั้งที่ 1. กรุงเทพฯ: ห้างหุ้นส่วนจำกัด โรงพิมพ์ชวนพิมพ์.
- AOAC. (2000). **Official Method of Analysis of AOAC international**. 17th ed. The Association of Official Analytical Chemists.

- Osborne, B.G., Fearn, T. & P.H. Hindle. (1993). **Practical NIR spectroscopy with Application in Food and Beverage Analysis**. Longman Scientific & Technical.
- Gunasekaran, S. (2001). **Nondestructive Food Evaluation: Techniques to Analyze Properties and Quality Food Science and Technology**. New York: Marcel Dekker, Inc.
- Iwamoto, M., N.Kongseree, J.Uozumiand T.Suzuki. (1986). **Determination of ash content in homegrown wheat flour in Japan by near infrared diffuse reflectance analysis**. Nippon Shokuhin Kogyo Gakkaishi 38: 842 - 847.