

## บทที่ 3 วิธีดำเนินการวิจัย

### 3.1 วัตถุประสงค์ สารเคมี และอุปกรณ์

#### 3.1.1 วัตถุประสงค์

ตัวอย่างข้าวเปลือก จำนวน 60 ตัวอย่าง ประกอบด้วยข้าวเปลือกหอมมะลิ จำนวน 50 ตัวอย่าง ข้าวกลุ่มปริมาณแอมิโลสต่ำ 3 ตัวอย่าง ได้แก่ ข้าวพันธุ์หอมคลองหลวง ข้าวพันธุ์ปทุมธานี 1 และข้าวพันธุ์พิษณุโลก 1 ข้าวกลุ่มปริมาณแอมิโลสปานกลาง จำนวน 2 ตัวอย่าง ได้แก่ ข้าวพันธุ์สุพรรณบุรี 2 และสุพรรณบุรี 60 และข้าวกลุ่มปริมาณแอมิโลสสูง จำนวน 5 ตัวอย่าง ประกอบด้วยข้าวพันธุ์ชัยนาท 1 พันธุ์ชัยนาท 2 พันธุ์เหลืองประทิว 123 พันธุ์พิษณุโลก 2 และพันธุ์ปทุมธานี 60 โดยตัวอย่างข้าวทั้งหมดเพาะปลูกในปี พ.ศ. 2552 จากศูนย์วิจัยข้าว และศูนย์เมล็ดข้าวต่าง ๆ ในประเทศไทย แสดงดังตารางที่ 3.1

ตารางที่ 3.1 ตัวอย่างข้าวที่เก็บรวบรวมสำหรับการทดลอง

กลุ่มข้าว	พันธุ์ข้าว	อักษรย่อ	แหล่งเพาะปลูก	จำนวนตัวอย่าง
ข้าวหอมมะลิ	1. ข้าวดอกมะลิ 105 2. กข15	1. KDML105 2. RD15	ศูนย์วิจัยข้าว และศูนย์เมล็ดพันธุ์ข้าว	50
ปริมาณแอมิโลสต่ำ	1. หอมคลองหลวง 2. ปทุมธานี 1 3. พิษณุโลก 1	1. HKLG 2. PTN1 3. PL1		
ปริมาณแอมิโลสปานกลาง	1. สุพรรณบุรี 2 2. สุพรรณบุรี 60	1. SPR2 2. SPR60	1. ศูนย์วิจัยข้าวสุพรรณบุรี 2. ศูนย์วิจัยข้าวสุพรรณบุรี	1 1
ปริมาณแอมิโลสสูง	1. ชัยนาท 1 2. ชัยนาท 2 3. เหลืองประทิว 123 4. พิษณุโลก 2 5. ปทุมธานี 60	1. CNT1 2. CNT2 3. LPT123 4. PL2 5. PTN60	1. ศูนย์วิจัยข้าวชัยนาท 2. ศูนย์วิจัยข้าวชัยนาท 3. ศูนย์วิจัยข้าวพิษณุโลก 4. ศูนย์วิจัยข้าวพิษณุโลก 5. ศูนย์เมล็ดพันธุ์ข้าวนครสวรรค์	1 1 1 1 1
จำนวนตัวอย่างทั้งหมด				60

#### 3.1.2 สารเคมี

- 3.1.2.1 เอทานอล 95%
- 3.1.2.2 กรดอะซิติก
- 3.1.2.3 กรดไฮโดรคลอริก
- 3.1.2.4 ไอโอดีน
- 3.1.2.5 โพแทสเซียมไอโอดด์
- 3.1.2.6 โพแทสเซียมไฮดรอกไซด์
- 3.1.2.7 โซเดียมไฮดรอกไซด์
- 3.1.2.8 บรอมไทมอลบลู 0.025%
- 3.1.2.9 โพแทสเซียมไอโอดมาตรฐาน

### 3.1.3 เครื่องมือที่ใช้ในการวิจัย

3.1.3.1 เครื่องกะเทาะเปลือก	Satake, Model SB	ญี่ปุ่น
3.1.3.2 เครื่องขัดสี	Satake, Model SKB	ญี่ปุ่น
3.1.3.3 เครื่องคัดขนาดเมล็ดข้าว	Satake, TRG05A	ญี่ปุ่น
3.1.3.4 เครื่องวัดค่าการดูดกลืนแสง	Shimadzu, UV-1601	ญี่ปุ่น
3.1.3.5 เครื่องสเปกโตรสโคปีอินฟราเรดย่านใกล้ (FT-NIR spectroscopy)	Buchi NIRLab N-200	สวิตเซอร์แลนด์
3.1.3.6 เครื่องวิเคราะห์ไนโตรเจนแบบดูมาส (Nitrogen combustion analyzer)	Leco model FP-2000	อเมริกา
3.1.3.7 เครื่องวัดความหนืดอย่างรวดเร็ว (Rapid visco analyzer; RVA)	Model 3-D	ออสเตรเลีย
3.1.3.8 ชุดสกัดไขมัน	Foss, model 1043	สวีเดน
3.1.3.9 เครื่องชั่งชนิดละเอียด	Mettler, AE 50	ญี่ปุ่น
3.1.3.10 ตู้อบลมร้อน (Hot air oven)	Memmert	เยอรมัน
3.1.3.11 เครื่องบด (Udy Miller)	Udy, Cyclotec	อเมริกา
3.1.3.12 โถดูดความชื้น (Air-tight desiccator)	Memmert	เยอรมันนี
3.1.3.13 เครื่องแก้ว		

## 3.2 วิธีการดำเนินการวิจัย

### 3.2.1 การรวบรวมตัวอย่างข้าว

ตัวอย่างที่นำมาใช้ในการทดลองรวบรวมจากศูนย์วิจัยข้าวและศูนย์เมล็ดข้าวต่าง ๆ ในประเทศไทย ปีการเพาะปลูกพ.ศ. 2552 ประกอบด้วยข้าวหอมมะลิ ข้าวกลุ่มปริมาณแอมิโลสต่ำ ข้าวกลุ่มปริมาณแอมิโลสปานกลาง และข้าวกลุ่มปริมาณแอมิโลสสูง ข้าวเปลือกแต่ละตัวอย่างจะถูกนำมาทำความสะอาดด้วยเครื่องทำความสะอาด (Rice pre-cleaner equipment) เพื่อกำจัดข้าวเมล็ดลีบ เศษฟาง เศษหญ้า และสิ่งเจือปนต่าง ๆ จากนั้นนำตัวอย่างข้าวเปลือกมาบรรจุในถุงพลาสติกชนิดโพลีโพรพิลีน (Polypropylene) ความหนา 70 ไมโครเมตร ผนัง 5 กิโลกรัม ปิดปากถุงให้สนิทด้วยเครื่องปิดผนึกพลาสติก นำถุงพลาสติกบรรจุข้าวเปลือกไปเก็บรักษาที่อุณหภูมิประมาณ 10°C จนกว่าจะนำมาทดลอง

### 3.2.2 การเตรียมวัตถุดิบข้าวสารขนาดเต็มเมล็ด

นำตัวอย่างข้าวเปลือกแต่ละตัวอย่างมาตั้งทิ้งไว้ที่อุณหภูมิห้อง นาน 24 ชั่วโมง เพื่อปรับความชื้นของตัวอย่างข้าวเปลือกให้สมดุล จากนั้นนำข้าวเปลือก จำนวน 100 กรัม มากะเทาะเปลือกด้วยเครื่องกะเทาะเปลือก (Satake, Model SB, ญี่ปุ่น) จำนวน 1 ครั้ง จะได้ข้าวกล้อง จากนั้นนำตัวอย่างข้าวกล้องแต่ละตัวอย่างไปขัดขาวด้วยเครื่องขัดขาวแบบลูกหิน (Satake, Model SKB) นาน 2 นาที นำข้าวสารมาคัดแยกข้าวหักและปลายข้าวออกด้วยเครื่องคัดขนาดเมล็ดข้าวแบบตะแกรงกลม (Satake, TRG 05A) ใช้ตะแกรงกลมเบอร์ 5.2 ปรับมุมวางรองรับข้าวหักประมาณ 30° นาน 1 นาที จนได้เฉพาะข้าวสารขนาดเต็มเมล็ด จากนั้นนำข้าวสารขนาดเต็มเมล็ดที่เตรียมได้แต่ละตัวอย่างมาบรรจุแบบสุญญากาศในซองลามิเนตไسخชนิด NY/LLDPE และนำมาเก็บที่อุณหภูมิห้อง จนกว่าจะนำมาวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่องสเปกโตรสโคปีอินฟราเรดย่านใกล้

### 3.2.3 การวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเทคนิคสเปกโตรสโคปีอินฟราเรดย่านใกล้

นำตัวอย่างข้าวสารเต็มเมล็ดทั้ง 60 ตัวอย่าง ที่เตรียมไว้ในข้อ 2.2 มาชั่งน้ำหนักในจานเพาะเชื้อ (Petri dish) ประมาณ 80 กรัม และวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่องสเปกโตรสโคปีอินฟราเรดย่านใกล้ (FT-NIR spectroscopy, Buchi NIRLab N-200) ช่วงความยาวคลื่น 1,100-2,500 นาโนเมตร ทำการวัดด้วยหลักการสะท้อนแสง (Reflectance) ที่อุณหภูมิ 25°C โดยเริ่มที่ความยาวคลื่นต่ำที่สุดและเพิ่มขึ้นช่วงละ 2 นาโนเมตร ของแต่ละหน่วยตัวอย่าง ค่าการดูดกลืนแสงที่วัดได้จำนวน 701 ค่า จะถูกเก็บข้อมูลไว้ในรูปของลอการิทึม ( $\log 1/\text{reflectance}$ ) และบันทึกด้วยโปรแกรม NIRCal รุ่น 5.21 โดยทำการทดลองตัวอย่างละ 2 ซ้ำ

เมื่อทำการวัดค่าการดูดกลืนแสงตัวอย่างข้าวสารเต็มเมล็ดพันธุ์บริสุทธิ์ (Pure rice variety) ทั้ง 60 ตัวอย่าง เสร็จเรียบร้อยแล้ว จะทำการวัดค่าการดูดกลืนแสงของพันธุ์ข้าวที่นำมาผสมกับข้าวหอมมะลิ ได้แก่ ข้าวพันธุ์ปทุมธานี 1 (ข้าวกลุ่มปริมาณแอมิโลสต่ำ) และข้าวพันธุ์ชัยนาท 1 (ข้าวกลุ่มปริมาณแอมิโลสสูง) โดยแปรผันอัตราส่วนที่นำมาผสมกับข้าวพันธุ์ข้าวดอกมะลิ 105 (ข้าวหอมมะลิ) ในอัตราส่วนที่แตกต่างกัน แสดงดังตารางที่ 3.2

ตารางที่ 3.2 การแปรผันอัตราส่วนข้าวพันธุ์ปทุมธานี 1 และชัยนาท 1 ที่นำมาผสมข้าวพันธุ์ข้าวดอกมะลิ 105

ข้าวพันธุ์ข้าวดอกมะลิ 105 ผสมกับ ข้าวพันธุ์ปทุมธานี 1		ข้าวพันธุ์ข้าวดอกมะลิ 105 ผสมกับ ข้าวพันธุ์ชัยนาท 1	
ข้าวดอกมะลิ 105 (%)	ปทุมธานี 1 (%)	ข้าวดอกมะลิ 105 (%)	ชัยนาท 1 (%)
100	0	100	0
95	5	95	5
90	10	90	10
85	15	85	15
80	20	80	20
75	25	75	25
70	30	70	30
65	35	65	35
60	40	60	40
55	45	55	45
50	50	50	50
45	55	45	55
40	60	40	60
35	65	35	65
30	70	30	70
25	75	25	75
20	80	20	80
15	85	15	85
10	90	10	90
5	95	5	90
0	100	0	100

### 3.2.4 การวิเคราะห์คุณสมบัติทางเคมีกายภาพของข้าวสารขนาดเต็มเมล็ด

นำตัวอย่างข้าวสารขนาดเต็มเมล็ดแต่ละตัวอย่างที่ผ่านการวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่องสเปกโตรสโคปีอินฟราเรดย่านใกล้มาบดด้วยเครื่องบด ขนาด 100 เมช (Mesh) ร่อนผ่านตะแกรง และนำมาบรรจุในถุงอลูมิเนียมฟอยด์ เก็บรักษาที่อุณหภูมิห้อง เพื่อนำมาใช้ในการวิเคราะห์คุณสมบัติทางเคมีกายภาพของข้าวกล้อง ซึ่งจะทำการวิเคราะห์คุณสมบัติทางเคมีกายภาพที่สำคัญ ได้แก่

3.2.4.1 ปริมาณแอมิโลส ด้วยวิธี AACC (1999) แสดงดังภาคผนวก ก

3.2.4.2 ปริมาณโปรตีนด้วยวิธีดูมาส (Nitrogen combustion method) ด้วยวิธี AACC (2000a) แสดงดังภาคผนวก ข

3.2.4.3 ค่าความคงตัวของแป้งสุก ตามวิธีของ Cagampang, Perez & Juliano (1973) แสดงดังภาคผนวก ค

3.2.4.4 ค่าการสลายเมล็ดข้าวในต่าง ตามวิธีของ Little, Hilder & Dawan (1958) แสดงดังภาคผนวก ง

3.2.4.5 คุณสมบัติด้านความหนืดของข้าวด้วยเครื่องวัดความหนืดอย่างรวดเร็ว ด้วยวิธี AACC (2000b) แสดงดังภาคผนวก จ

3.2.5 การวิเคราะห์ข้อมูลและการสร้างสมการที่เหมาะสมในการทำนายคุณสมบัติทางเคมีกายภาพของข้าวสารขนาดเต็มเมล็ด

#### 3.2.5.1 การวิเคราะห์ข้อมูล

ข้อมูลทางด้านคุณสมบัติทางเคมีกายภาพของข้าวสารขนาดเต็มเมล็ดแต่ละพารามิเตอร์ จะนำมาคำนวณหาค่าเฉลี่ย และส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน (ค่าเฉลี่ย  $\pm$  ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน) และนำข้อมูลที่ได้จากการทดลองมาวิเคราะห์ความแปรปรวนโดยใช้โปรแกรมสำเร็จรูป และเปรียบเทียบความแตกต่างของค่าเฉลี่ยด้วยวิธี Duncan's New Multiple Range Test (DMRT) ที่ระดับความเชื่อมั่น 95%

3.2.5.2 การสร้างสมการที่เหมาะสมในการทำนายคุณสมบัติทางเคมีกายภาพของข้าวสารขนาดเต็มเมล็ด

#### 1) การตรวจสอบข้อมูลผิดปกติ (Outlier)

ข้อมูลค่าทางเคมีของคุณสมบัติทางเคมีกายภาพของข้าวกล้องจะถูกนำมาตรวจสอบหาข้อมูลที่ผิดปกติ ซึ่งอาจตัวอย่างที่มีค่าทางเคมีสูงหรือต่ำจากการกระจายค่าทางเคมีเป็นแบบปกติ (Normal distribution) โดยจะใช้ค่าทางสถิติคะแนน t (t-score) โดยแปลงค่าทางเคมีเป็นค่าทางสถิติ t ตามวิธีของ Sirisomboon (2007) และ ฤทธิธรม (2552a) ดังสมการ

$$t_i = \frac{x_i - \bar{x}}{SD}$$

เมื่อ	$t_i$	คือ	ค่าทางสถิติ t ของตัวอย่าง i
	$x_i$	คือ	ค่าทางเคมีของตัวอย่าง i
	$\bar{x}$	คือ	ค่าเฉลี่ยทางเคมี
	SD	คือ	ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานของค่าทางเคมี

หากค่าสัมบูรณ์ของค่าทางสถิติคะแนน  $t$  ของตัวอย่างใดมีค่ามากกว่าหรือเท่ากับ 3 จะหมายถึงตัวอย่างนั้นอยู่นอกกลุ่มประชากรตัวอย่างที่สนใจ ที่ระดับความเชื่อมั่น 95% ให้พิจารณาตัดตัวอย่างนั้นทิ้ง

## 2) การปรับแต่งสเปกตรัม

นำข้อมูลสเปกตรัมอินฟราเรดย่านใกล้ (NIR spectrum) ที่บันทึกไว้ด้วยโปรแกรม NIRCal ไปวิเคราะห์ข้อมูลด้วยโปรแกรม Unscrambler รุ่น X 10.1 (CAMO software, ASA, Norway) ด้วยไฟล์ข้อมูลในรูปแบบ JCAMP-DX ทำการเฉลี่ยสเปกตรัมอินฟราเรดย่านใกล้ จากนั้นนำสเปกตรัมอินฟราเรดย่านใกล้ที่หาค่าเฉลี่ยแล้วมาปรับแต่งสเปกตรัมก่อนการวิเคราะห์ด้วยวิธีการแปลงค่าอนุพันธ์เป็นอันดับสองโดยใช้วิธีการปรับเรียบแบบซาวิตซ์กีโกเลีย่ย์ทุกช่วงความยาวคลื่น 10 นาโนเมตร (Savitzky-Golay algorithm : left and right side in 10 nm gap size of the second derivative) วิธีการปรับแก้การกระเจิงแบบผลคูณ (MSC) และวิธีการปรับความแปรปรวนให้เป็นมาตรฐาน (SNV) นอกจากนี้ยังปรับแต่งสเปกตรัมอินฟราเรดย่านใกล้ด้วยวิธีการปรับแก้การกระเจิงแบบผลคูณร่วมกับวิธีการแปลงค่าอนุพันธ์เป็นอันดับสองโดยใช้วิธีการปรับเรียบแบบซาวิตซ์กีโกเลีย่ย์ทุกช่วงความยาวคลื่น 10 นาโนเมตร (MSC + Savitzky-Golay second derivative : 10 nm averaging for left and right side) และวิธีการปรับความแปรปรวนให้เป็นมาตรฐานร่วมกับวิธีการแปลงค่าอนุพันธ์เป็นอันดับสองโดยใช้วิธีการปรับเรียบแบบซาวิตซ์กีโกเลีย่ย์ทุกช่วงความยาวคลื่น 10 นาโนเมตร (SNV + Savitzky-Golay second derivative : 10 nm averaging for left and right side) อีกด้วย

## 3) การสร้างสมการเพื่อทำนายที่เหมาะสมในการทำนายคุณสมบัติทางเคมี

กายภาพของข้าวสารขนาดเต็มเมล็ดด้วยวิธีการถดถอยกำลังสองน้อยที่สุดบางส่วน หรือ PLSR

การสร้างสมการ PLSR เพื่อทำนายคุณสมบัติทางเคมีกายภาพของข้าวสารขนาดเต็มเมล็ด ได้แก่ ปริมาณแอมิโลส ปริมาณโปรตีน ค่าความคงตัวของเจล ค่าการสลายเมล็ดข้าวในสารละลายต่าง และคุณสมบัติด้านความหนืด จำนวน 102 ตัวอย่าง ซึ่งรวมทั้งจำนวนตัวอย่างข้าวพันธุ์บริสุทธิ์ และตัวอย่างที่ได้จากการผสมข้าวพันธุ์ปทุมธานี 1 และข้าวพันธุ์ชัยนาท 1 กับข้าวพันธุ์ขาวดอกมะลิพันธุ์ ได้กำหนดให้ค่าเคมีของคุณสมบัติทางเคมีกายภาพของข้าวกล้องเป็นตัวแปรตาม (ตัวแปร Y) และสเปกตรัมอินฟราเรดย่านใกล้เป็นตัวแปรอิสระ (ตัวแปร X) จากนั้นให้เรียงลำดับค่าทางเคมีหรือตัวแปรตาม (ตัวแปร Y) จากค่าน้อยไปมาก และแบ่งข้อมูลออกเป็น 2 กลุ่ม ได้แก่ กลุ่มสร้างสมการ (Calibration) และกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation) ด้วยอัตราส่วนตัวอย่างข้าวสารกลุ่มสร้างสมการต่อตัวอย่างข้าวสารกลุ่มตรวจสอบความถูกต้องเท่ากับ 2:1 หลังจากนั้นทำการตรวจสอบสเปกตรัมอินฟราเรดย่านใกล้ที่ผิดปกติ (Outlier) ด้วยวิธีการวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก หรือ PCA หากตัวอย่างอยู่นอกกลุ่มตัวอย่างส่วนใหญ่ให้พิจารณาตัดสเปกตรัมอินฟราเรดย่านใกล้ทิ้ง

เมื่อตรวจสอบข้อมูลที่ผิดปกติทั้งจากค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ด้วยวิธีมาตรฐานและสเปกตรัมอินฟราเรดย่านใกล้แล้ว นำข้อมูลกลุ่มตัวแปรอิสระ (ตัวแปร X) และตัวแปรตาม (ตัวแปร Y) มาหาความสัมพันธ์ด้วยการสร้างสมการโดยใช้วิธี PLSR ที่ช่วงความยาวคลื่น 1,100-2,500 นาโนเมตร และทดสอบสมการด้วยวิธีการทดสอบความแม่นยำภายในกลุ่มทั้งหมดหรือฟูลครอสแวลิดะชัน (Full cross validation) โดยใช้ตัวอย่างทั้งหมด เพื่อตรวจสอบการปรับแต่งสเปกตรัม และช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสมในการสร้างสมการแคลิเบรชัน ทำการพิจารณาความ



เหมาะสมของสมการ PLSR ที่สร้างขึ้นจากค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (R) และค่าความคลาดเคลื่อนของสมการ PLSR (SEC) โดยสมการที่ดีต้องมีค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์สูงและค่าความคลาดเคลื่อนของสมการ PLSR ต่ำ (Williams & Norris, 2001)

การตรวจสอบความถูกต้องของสมการที่สร้างขึ้น ทำได้โดยนำค่าที่วิเคราะห์ได้จริงทางเคมีของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation) มาทำการเปรียบเทียบกับค่าทางเคมีที่ได้จากการทำนายด้วยสมการ PLSR ที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัมอินฟราเรดย่านใกล้ (Predicted value) กับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริง (Actual value) การตรวจสอบความถูกต้องของสมการจะพิจารณาจากค่าความคลาดเคลื่อนจากการทำนายด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Standard Error of Prediction; SEP) ค่าความแตกต่าง (Bias) ระหว่างค่าที่ทำนายได้จากสมการกับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริงของแต่ละสมการ และค่า RPD (Ratio of standard error of Performance to standard Deviation) ซึ่งเป็นสัดส่วนระหว่างค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานของค่าทางเคมีและค่า SEP ของตัวอย่างในกลุ่มที่ใช้ในการทดสอบความแม่นยำของสมการแคลิเบรชันและค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ สมการที่สร้างขึ้นที่มีความแม่นยำควรมีค่า SEP และ Bias ต่ำ แต่ควรมีค่า RPD สูง (William & Norris, 2001; วรรณฤทธิ์ ฤทธิธณ, 2552a, หน้า 7-1 ถึง 7-16)

3.2.5.3 การสร้างสมการและการตรวจสอบความแม่นยำของสมการทำนายสำหรับแบ่งกลุ่มข้าวสารหอมมะลิจากข้าวสารกลุ่มอื่นที่ไม่ใช่ข้าวหอมมะลิด้วยวิธี PCA

การสร้างสมการและการตรวจสอบความแม่นยำของสมการทำนายสำหรับแบ่งกลุ่มข้าวสารหอมมะลิจากข้าวสารกลุ่มอื่นที่ไม่ใช่ข้าวหอมมะลิตามคุณสมบัติทางเคมีกายภาพ จะนำข้อมูลค่าการดูดกลืนแสงที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่องสเปกโตรสโคปีอินฟราเรดย่านใกล้หรือสเปกตรัมอินฟราเรดย่านใกล้ จำนวน 102 ตัวอย่าง มาเป็นตัวแปรจำแนกกลุ่ม เพื่อสร้างสมการทำนายสำหรับแบ่งกลุ่มข้าวสารหอมมะลิต่อจากข้าวสารกลุ่มอื่นที่ไม่ใช่ข้าวหอมมะลิโดยใช้เทคนิคทางสถิติวิธี PCA ทำได้โดยนำสเปกตรัมอินฟราเรดย่านใกล้ที่ผ่านการหาค่าเฉลี่ย การปรับแต่งสเปกตรัม และการตรวจสอบสเปกตรัมที่ผิดปกติแล้ว มาสร้างสมการทำนายสำหรับแบ่งกลุ่มข้าวสารหอมมะลิต่อจากข้าวสารกลุ่มอื่นที่ไม่ใช่ข้าวหอมมะลิด้วยเทคนิคทางสถิติวิธี PCA จากนั้นพิจารณาความสัมพันธ์ระหว่างค่าน้ำหนักปัจจัย (PCA loading) และคะแนนปัจจัย (PCA score) บนแกนองค์ประกอบหลัก (Principal component; PC) โดยค่าน้ำหนักปัจจัยจะใช้ในการอธิบายโครงสร้างของข้อมูลในรูปแบบความสัมพันธ์ของตัวแปร และค่าคะแนนปัจจัยจะอธิบายโครงสร้างของข้อมูลในรูปแบบความสัมพันธ์ของตัวอย่าง ซึ่งจะแสดงถึงความคล้ายหรือความแตกต่างของตัวอย่าง โดยแต่ละตัวอย่างจะมีค่าคะแนน (Score) ในแต่ละ PC ซึ่งค่าเหล่านี้จะแสดงให้เห็นตำแหน่งของตัวอย่างตามแกน PC โดยตัวอย่างที่มีค่าคะแนนใกล้เคียงกันในแกน PC เดียวกัน จะมีความคล้ายกัน ในทางตรงกันข้ามตัวอย่างที่มีค่าคะแนนแตกต่างกันมากจะมีค่าคะแนนของตัวแปรเดิมนั้นแตกต่างกันด้วย (ธงชัย สุวรรณสิขณณ์ และปิติพร ฤทธิเรืองเดช, 2552, หน้า 6-1 ถึง 6-33)