วารสารสมาคมวิศวกรรมเกษตรแห่งประเทศไทย
ปีที่ 27 ฉบับที่ 1 (2564) 52-61
Available online at www.tci-thaijo.org /index.php/TSAEJ

บทความวิจัย

ISSN 1685-408X (Print)

การสร้างสมการเทียบมาตรฐานโดยใช้อุณหภูมิตัวอย่างเป็นตัวแปรต้นเพื่อทำนายความชื้นของข้าวด้วยเทคนิคอินฟราเรดย่านใกล้

The Development of Calibration Equation Using Sample Temperature as the Independent Variable to Predict Moisture Content of Rice by Near Infrared Technique

รณฤทธิ์ ฤทธิรณ[1]*, ลลิตา ออมสิน[1], สุรีพร ณรงค์วงศ์วัฒนา[1]

Ronnarit Rittiron[1]*, Lalita Aomsin[1], Sureeporn Narongwongwattana[1]

[1]ห้องปฏิบัติการ Near Infrared technology, ภาควิชาวิศวกรรมการอาหาร, คณะวิศวกรรมศาสตร์ กำแพงแสน, มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์, นครปฐม, 73140

[1]Near Infrared Technology Laboratory, Department of Food Engineering, Faculty of Engineering at Kamphaeng Saen, Kasetsart University, Nakhon Pathom, 73140

*Corresponding author: Tel: +66-8-5917-1017, Fax: +66-34-281-098, E-mail: fengror@ku.ac.th

บทคัดย่อ

ข้าวเป็นพืชเศรษฐกิจที่สำคัญของประเทศไทย โดยประเทศไทยเป็นผู้ส่งออกข้าวอันดับสองของโลกรองจากประเทศอินเดีย ปัจจัยสำคัญที่มีผลต่อระยะเวลาการเก็บรักษาข้าวขาว คือ ความชื้น หากข้าวมีความชื้นสูงจะส่งผลให้ระยะเวลาในการเก็บรักษาสั้นลง เทคนิคอินฟราเรดย่านใกล้ (Near Infrared; NIR) จึงเป็นเทคนิคที่น่าสนใจในการวิเคราะห์ความชื้น เนื่องจากสามารถใช้ตรวจสอบคุณภาพโดยไม่ทำลายตัวอย่าง ไม่ใช้สารเคมี ใช้งานง่าย และรวดเร็ว อย่างไรก็ดี ความถูกต้องของสมการทำนายความชื้นด้วยเทคนิค NIR ขึ้นกับอุณหภูมิของตัวอย่าง หากอุณหภูมิของตัวอย่างไม่คงที่ โดยปกติจะต้องสร้างสมการทำนายโดยใช้การชดเชยอุณหภูมิ ซึ่งวิธีนี้ต้องใช้ตัวอย่างในการสร้างสมการมาก ดังนั้นงานวิจัยนี้จึงต้องการสร้างสมการเทียบมาตรฐานโดยใช้อุณหภูมิตัวอย่างเป็นตัวแปรต้นเพื่อทำนายความชื้นของข้าวขาวด้วยเทคนิค NIR ในระบบการวัดแบบสะท้อนกลับ ที่ช่วงความยาวคลื่น 1200-2400 nm สมการจะถูกสร้างขึ้นด้วยวิธีการถดถอยเชิงเส้นพหุคูณ (Multiple Linear Regression; MLR) จากตัวอย่างข้าวจำนวน 46 ตัวอย่าง และทดสอบความถูกต้องของสมการด้วยตัวอย่างจำนวน 33 ตัวอย่าง จากผลการทดลองพบว่าสมการที่สร้างให้ค่าความผิดพลาดมาตรฐานในการทำนายความชื้น (Standard Error of Prediction; SEP) เท่ากับ 0.29% ค่าความผิดพลาดเฉลี่ย (Bias) เท่ากับ 0.05% จากนั้นได้ทำการทดสอบเสถียรภาพของสมการทำนายค่าความชื้นที่สร้างจากวิธี MLR โดยการลดจำนวนตัวอย่างลง พบว่าสามารถลดจำนวนตัวอย่างที่ใช้ในการสร้างสมการลงได้เหลือ 22 ตัวอย่าง ให้ค่า SEP เท่ากับ 0.28% ค่า Bias เท่ากับ -0.07% โดยสมการทำนายความชื้นที่สร้างโดยใช้อุณหภูมิตัวอย่างเป็นตัวแปรต้นสามารถทำนายค่าความชื้นได้ไม่แตกต่างกับค่าความชื้นจริงอย่างมีนัยสำคัญที่ระดับความเชื่อมั่น 95%

คำสำคัญ: อินฟราเรดย่านใกล้, ความชื้น, ชดเชยอุณหภูมิ

Abstract

Milled rice is an important industrial crop for Thailand's economy because Thailand is the second exporter of milled rice in the world followed by India. The important factor for shelf life of milled rice is moisture content. The shelf life will be shorter if milled rice has high moisture content. Near Infrared (NIR) technique is an interesting method for moisture analysis because NIR is nondestructive internal quality method, no chemicals, simple and rapid method. However, the accuracy of calibration equation for moisture content determination depends on the temperature of sample. Thus, it is necessary to develop the calibration equation with temperature compensation, which requires many samples to develop calibration equation, if sample temperature is not stable. Therefore, this research aims to develop the calibration equation using sample temperature as the independent variable to predict moisture content of milled rice in reflectance mode at wavelength region of 1200–2400 nm. Calibration equations

Received: May 22, 2020
Revised: August 21, 2020
Accepted: October 20, 2020
Available online: January 20, 2021

were developed by Multiple Linear Regression (MLR) obtained from 46 milled rice samples and validated the calibration equation with 33 milled rice samples. From the results, it was found that the calibration equation could predict moisture content with standard error of prediction (SEP) 0.29%, average of difference between the actual moisture content and the predicted values (Bias) 0.05%. In addition, in order to study the stability of MLR equation it was found that the number of samples used in the equation could be reduce to 22 samples and provided the SEP values 0.28%, Bias values -0.07%. The calibration equation using sample temperature as the independent variable to predict moisture content of milled rice could predict the moisture content without significant difference from actual values at 95% confidence level.

Keywords: Near infrared, Moisture content, Temperature compensation

1 บทนำ

ปัจจัยสำคัญที่มีผลต่อระยะเวลาการเก็บรักษาข้าวขาวคือความชื้น หากข้าวมีความชื้นสูงเกิน 14% จะส่งผลให้ข้าวเกิดการเสื่อมคุณภาพ และมีระยะเวลาในการเก็บรักษาสั้นลง วิธีมาตรฐานในการวิเคราะห์ความชื้นข้าว คือวิธีการอบ (Hot air oven) ซึ่งเป็นวิธีที่ยุ่งยาก และใช้เวลานาน นอกจากวิธีมาตรฐานแล้ว ยังได้มีการนำเครื่องวัดความชื้นแบบพกพา (Moisture meter) ซึ่งใช้หลักการวัดความต้านทาน หรือวัดค่าความจุไฟฟ้ามาใช้ในการวัดความชื้นข้าวอย่างแพร่หลาย เนื่องจากเครื่องมีขนาดเล็ก และมีราคาไม่สูงนัก อย่างไรก็ดี เครื่องที่ใช้หลักการเหล่านี้ต้องการตัวอย่างที่มีปริมาตรคงที่ น้ำหนักคงที่ ทำให้ต้องชั่ง ตวง ตัวอย่างก่อนใช้ นอกจากนี้ยังต้องสุ่มตรวจในตำแหน่งที่ต้องการทราบความชื้น และต้องมีการสัมผัสตัวอย่างขณะที่ทำการวัด จึงอาจเป็นการรบกวนสายการผลิต และมีแนวโน้มที่จะนำไปประยุกต์ใช้ในระดับอุตสาหกรรมได้ยาก เนื่องจากไม่สามารถตรวจวัดความชื้นข้าวได้อย่างต่อเนื่อง ดังนั้นเทคนิค NIR จึงเป็นทางเลือกที่น่าสนใจในการนำมาประยุกต์ใช้ในอุตสาหกรรมข้าว เนื่องจากเป็นวิธีที่รวดเร็ว ใช้งานง่าย ไม่ใช้สารเคมี ไม่ทำลายตัวอย่าง สามารถวัดตัวอย่างได้แบบต่อเนื่องในระดับอุตสาหกรรม และไม่รบกวนสายการผลิต อีกทั้งยังสามารถติดตั้งอุปกรณ์ตรวจวิเคราะห์ได้ในหลายตำแหน่ง และสามารถพัฒนาให้ทำงานแบบอัตโนมัติได้

เทคนิค NIR เป็นคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าที่ช่วงความยาวคลื่น 800–2500 nm มีศักยภาพในการตรวจสอบคุณภาพแบบไม่ทำลายตัวอย่าง โดยอาศัยการสร้างความสัมพันธ์ระหว่างค่าคุณภาพของตัวอย่างกับการดูดกลืนพลังงานขององค์ประกอบภายในตัวอย่าง (สเปกตรัม) ซึ่งจะดูดกลืนที่ตำแหน่งความยาวคลื่นจำเพาะในย่าน NIR นั้น เกิดเป็นสมการเทียบมาตรฐานทำนายค่าคุณภาพต่าง ๆ ความแม่นยำของสมการเทียบมาตรฐานขึ้นกับปัจจัยหลายประการ ปัจจัยหนึ่งที่มีความสำคัญ คือ อุณหภูมิของตัวอย่างที่ใช้ในการสร้างสมการ การเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิของตัวอย่างจะส่งผลกระทบโดยตรงต่อค่าการดูดกลืน นั่นคือ จะเกิดการย้ายตำแหน่งการดูดกลืน และมีความแปรปรวนความเข้มของสัญญาณเกิดขึ้นอีกด้วย (Campos et al. 2018) ดังนั้นอุณหภูมิจึงต้องถูกนำมาพิจารณาในการสร้างสมการ เพื่อให้สมการเทียบมาตรฐานที่สร้างขึ้นมีความถูกต้องสูง เมื่อต้องนำไปใช้กับตัวอย่างที่มีอุณหภูมิไม่คงที่ โดยวิธีที่นิยม คือ การสร้างสมการเทียบมาตรฐานโดยใช้วิธีการชดเชยอุณหภูมิ (Temperature Compensation) ซึ่งวิธีนี้จะทำให้สมการที่สร้างขึ้นสามารถทำนายตัวอย่างในอนาคตที่อุณหภูมิของตัวอย่างมีความแปรปรวนได้อย่างมีประสิทธิภาพ (Peirs et al. 2003)

Kawano et al. (1995) ได้ศึกษาการใช้เทคนิค NIR โดยการสร้างสมการแบบชดเชยอุณหภูมิด้วยวิธี Multiple Linear Regression (MLR) ในการตรวจสอบค่าบริกซ์ (Brix) ในผลพีช ต่อมาในปี 2018 Campos et al. (2018) และ Chapanya et al. (2018) ได้ศึกษาผลของการาร้างสมการแบบชดเชยอุณหภูมิเช่นกัน โดยได้ใช้ในการวิเคราะห์ปริมาณโซเดียมของแฮมแผ่น และปริมาณน้ำตาลในกากน้ำตาล (ตามลำดับ) ด้วยวิธี Partial Least Squares Regression (PLS) งานวิจัยเหล่านี้แสดงให้เห็นว่า สมการที่สร้างขึ้นโดยมีการชดเชยอุณหภูมิของตัวอย่างให้ผลการทำนายตัวอย่างในกลุ่มอุณหภูมิอื่น ๆ ได้ดีกว่าสมการที่ไม่มีการชดเชยอุณหภูมิ โดยให้ค่าความผิดพลาดมาตรฐานในการทำนาย (Root mean square error of prediction, RMSEP) ที่ต่ำกว่า อย่างไรก็ดี วิธีการสร้างสมการแบบชดเชยอุณหภูมิเหล่านี้ต้องใช้ตัวอย่างในการสร้างสมการเป็นจำนวนมาก จึงเป็นข้อจำกัดของการสร้างสมการในบางกรณี อีกวิธีหนึ่งที่น่าจะทำได้คือการสร้างสมการโดยใช้อุณหภูมิตัวอย่างเป็นตัวแปรต้น

ดังนั้นงานวิจัยนี้จึงต้องการสร้างสมการเทียบมาตรฐานโดยใช้อุณหภูมิตัวอย่างเป็นตัวแปรต้นเพื่อทำนายความชื้นของข้าวขาวด้วยเทคนิค NIR ในระบบการวัดแบบสะท้อนกลับ ที่ช่วงความยาวคลื่น 1200-2400 nm ด้วยวิธี MLR และทดสอบเสถียรภาพของสมการทำนายค่าความชื้นโดยการลดจำนวนตัวอย่างที่ใช้สร้างสมการเทียบมาตรฐาน

2 อุปกรณ์และวิธีการ

2.1 การเตรียมความชื้นของตัวอย่างข้าว

ในงานวิจัยนี้ใช้ข้าวขาวสายพันธุ์หอมมะลิ เนื่องจากเป็นสายพันธุ์ที่ผู้บริโภคส่วนใหญ่นิยมบริโภค ตัวอย่างข้าวที่ใช้จะถูกเก็บในห้องปฏิบัติการ ที่อุณหภูมิห้อง ก่อนทำการทดลองเป็นเวลาหนึ่งคืน โดยมีความชื้นเริ่มต้นประมาณ 12% ซึ่งเป็นความชื้นของข้าวขาวที่มีการซื้อขายในเชิงพาณิชย์ทั่วไป และเป็นไปตามมาตรฐาน

สินค้าเกษตรที่กำหนดไว้ว่า ข้าวขาวต้องมีความชื้นไม่เกิน 14% โดยตัวอย่างข้าวจะถูกนำมาเตรียมให้มีความชื้นต่างกัน เพื่อให้ครอบคลุมความชื้นที่จะสามารถพบได้ในอนาคต โดยการนำข้าวใส่ถุงพร้อมทั้งพรมน้ำให้ตัวอย่างข้าว แล้วทำการเขย่าทุก ๆ 15 นาที จนครบ 3 ชั่วโมง ซึ่งการเตรียมตัวอย่างให้มีระดับความชื้นแตกต่างกันมีวิธีดำเนินการดังนี้ คือ ไม่พรมน้ำให้ตัวอย่าง (28 ตัวอย่าง) พรมน้ำปริมาณ 71.5 g (28 ตัวอย่าง) และพรมน้ำปริมาณ 150 g (28 ตัวอย่าง) รวมทั้งหมด 84 ตัวอย่าง ปริมาณน้ำที่เติมให้ตัวอย่างข้าวสามารถคำนวณได้จากสมการที่ (1)

$$\text{ปริมาณน้ำที่ต้องเติม} = \frac{A \times (B - C)}{100 - B} \quad (1)$$

เมื่อ A คือ น้ำหนักตัวอย่างข้าวปริมาณ 1500 g
B คือ ความชื้นของตัวอย่างข้าวหลังพรมน้ำ
C คือ ความชื้นของตัวอย่างข้าวก่อนพรมน้ำ
(ภาควิชาวิศวกรรมอาหาร คณะวิศวกรรมศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง. 2555)

จากนั้นนำตัวอย่างมาแบ่งใส่ถุงซิปล็อค ดัง Figure 1 เพื่อป้องกันความชื้นของตัวอย่างเปลี่ยนแปลง โดยเก็บตัวอย่างข้าวไว้ 1 คืน ก่อนการวัดสเปกตรัม

Figure 1 The rice samples were divided and kept into zipper bag.

2.2 การเตรียมอุณหภูมิของตัวอย่างข้าว

อุณหภูมิของตัวอย่างข้าวเป็นตัวแปรสำคัญที่ส่งผลต่อความถูกต้องของสมการเทียบมาตรฐานวิเคราะห์ความชื้นข้าว ดังนั้นเพื่อให้สมการที่สร้างมีความถูกต้องสูงสุด จึงต้องทำการเตรียมตัวอย่างข้าวให้มีอุณหภูมิครอบคลุมอุณหภูมิที่อาจจะพบได้ในอนาคต คือ 25°C, 30°C, 35°C และ 40°C โดยตัวอย่างข้าวที่อุณหภูมิ 25°C จะถูกควบคุมอุณหภูมิด้วยเครื่องปรับอากาศในห้องปฏิบัติการ ตัวอย่างที่อุณหภูมิ 30°C, 35°C และ 40°C จะถูกเตรียมด้วยวิธีการอบลมร้อน (Hot air oven) โดยการนำตัวอย่างข้าวเข้าตู้อบลมร้อนที่อุณหภูมิ 30°C, 35°C และ 40°C เป็นเวลา 30 นาที จากนั้นจะค่อย ๆ นำตัวอย่างข้าวออกมาเทใส่ถ้วยใส่ตัวอย่างแบบปิด (Closed cup) ดัง Figure 2 พร้อมทั้งเกลี่ยตัวอย่างข้าวให้เรียบเสมอขอบ Closed cup เพื่อให้การบรรจุข้าวมีความเรียบสม่ำเสมอ แล้ววัดอุณหภูมิจริงในหน่วยองศาเซลเซียสด้วยเครื่องวัดอุณหภูมิแบบอินฟราเรด (IRtek รุ่น IR50i) ที่มีความแม่นยำ ±1°C โดยเครื่องจะอยู่เหนือ Closed cup ประมาณ 1 ft เมื่อวัดอุณหภูมิเรียบร้อยแล้ว ให้ทำการปิดฝา Closed cup เพื่อวัดสเปกตรัมต่อไป จำนวนตัวอย่างจากการเตรียมความชื้นและอุณหภูมิแสดงดัง Table 1

Figure 2 Pouring the rice samples into the closed cup for measuring the absorbance.

Table 1 Moisture content of rice sample prepared for different temperature

Temperature (Hot air oven)	Actual moisture contents (%)		
	Original sample	Spraying 71.5 grams of water	Spraying 150 grams of water
25°C	12.46 ± 0.41	16.49 ± 0.39	20.31 ± 0.16
30°C	12.29 ± 0.15	16.81 ± 0.13	20.65 ± 0.11
35°C	12.17 ± 0.13	17.15 ± 0.11	20.35 ± 0.30
40°C	12.15 ± 0.17	17.03 ± 0.10	20.11 ± 0.10

จาก Table 1 แสดงค่าเฉลี่ย และส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของค่าความชื้นจริงของตัวอย่างในแต่ละกลุ่มที่ถูกเตรียมขึ้นในสภาวะความชื้น 3 ระดับ และในอุณหภูมิที่ต่างกัน 4 ระดับ คือ 25°C, 30°C, 35°C และ 40°C ซึ่งจากตารางจะเห็นว่า ความความชื้นที่เตรียมได้มีค่าใกล้เคียงกับค่าที่ได้คำนวณไว้ข้างต้น คือ 12%, 16% และ 20%

2.3 การวัดสเปกตรัม

สเปกตรัมข้าวจะถูกวัดโดยเครื่อง Spectrastar 2400, Analytical Technologies Australia Pty Ltd, Australia ที่ช่วงความยาวคลื่น 1200-2400 nm ซึ่งมีความละเอียดข้อมูล (Data interval) เท่ากับ 1 nm มีความสามารถในการวัดตัวอย่าง 0.8 วินาทีต่อการ Scan 1 ครั้ง ในระบบการวัดแบบสะท้อนกลับ (Reflectance mode) ตัวอย่างข้าวจะถูกนำไปใส่ Closed cup แล้วปิดฝา จากนั้นนำเข้าเครื่อง Spectrometer เพื่อวัดค่าการดูดกลืนแสง (Figure 3) ซึ่งตัวอย่างข้าวจะถูกวัด 1 ซ้ำ แบบ Rotational motion หลายตำแหน่ง เพื่อนำมาเฉลี่ยเป็นสเปกตรัมของตัวอย่างข้าวนั้น

Figure 3 Spectral measurement by Near Infrared spectrometer.

2.4 การวิเคราะห์ความชื้นของข้าว

ตัวอย่างข้าวจะถูกนำมาวิเคราะห์ค่าความชื้นด้วยวิธีการมาตรฐาน โดยการนำตัวอย่างข้าวที่ผ่านการวัดสเปกตรัมแล้วปริมาณ 30 g เทใส่ถ้วยฟอยล์ แล้วนำไปอบในตู้อบลมร้อนที่อุณหภูมิ 105°C เป็นเวลา 15 ชั่วโมง จากนั้นนำตัวอย่างออกมาพักให้อุณหภูมิคงที่ใน Desiccator เป็นเวลา 30 นาที นำตัวอย่างไปชั่งน้ำหนัก และคำนวณหาค่าความชื้นฐานเปียกดังสมการที่ (2)

$$\%MC_{wetbasis} = \frac{\text{น้ำหนักก่อนอบ} - \text{น้ำหนักหลังอบ}}{\text{น้ำหนักก่อนอบ}} \times 100 \quad (2)$$

การสร้างสมการเทียบมาตรฐานเพื่อทำนายความชื้นของข้าวสารด้วยเทคนิค NIR

นำค่าความชื้นที่ได้จากวิธีมาตรฐาน และค่าการดูดกลืนแสงของข้าวที่ได้จากการวัดโดยเครื่อง NIR Spectrometer มาทำการสร้างสมการเทียบมาตรฐานทำนายความชื้น ด้วยวิธี Partial Least Squares Regression (PLS) ซึ่งเป็นการสร้างสมการแบบเต็มช่วงความยาวคลื่น (Full spectrum method) โดยใช้โปรแกรม The Unscrambler 7.10 และ วิธี Multiple Linear Regression (MLR) ด้วยโปรแกรม SPSS 12.0 for windows โดยใช้อุณหภูมิเป็นตัวแปรต้น ซึ่งสำหรับการสร้างสมการด้วยวิธี MLR จะทำการเปรียบเทียบสมการที่สร้างขึ้นจากการเลือกตัวแปรหลายวิธี ได้แก่ การเลือกตัวแปรที่สัมพันธ์กับตำแหน่งการดูดกลืนของน้ำ (manual selection) การเลือกตัวแปรแบบ stepwise และการเลือกตัวแปรแบบ forward

งานวิจัยนี้จะทำการสร้างสมการเทียบมาตรฐานแบบชดเชยอุณหภูมิเพื่อทำนายความชื้นของข้าวขาวด้วยวิธี PLS โดยหลังจากตัดตัวอย่างที่ผิดปกติออกแล้ว จะเหลือตัวอย่างที่ใช้ในการสร้างสมการทั้งหมดจำนวน 79 ตัวอย่าง (รวมตัวอย่างทั้งหมดจากความชื้นต่างกัน 3 กลุ่ม และอุณหภูมิต่างกัน 4 กลุ่ม) จากนั้นจะทำการสร้างสมการเทียบมาตรฐานทำนายความชื้นข้าวขาวโดยใช้อุณหภูมิเป็นตัวแปรต้นด้วยวิธี MLR

นอกจากนี้จะมีการทดสอบเสถียรภาพของสมการทำนายความชื้นข้าวโดยใช้อุณหภูมิเป็นตัวแปรต้น ด้วยการลดจำนวนตัวอย่างในกลุ่มที่ใช้สร้างสมการลง (Calibration set) จาก 46 ตัวอย่าง เป็น 34, 22 และ 12 ตัวอย่างตามลำดับ จากนั้นจะนำสมการเทียบมาตรฐานที่สร้างได้ไปทดสอบทำนายความชื้นกับตัวอย่างกลุ่ม Validation set เดิม จำนวน 33 ตัวอย่าง

ในการสร้างสมการเทียบมาตรฐานด้วยวิธี PLS และ MLR ตัวอย่างข้าวจะถูกแบ่งเป็น 2 กลุ่ม คือ กลุ่มที่ใช้สร้างสมการเทียบมาตรฐาน (Calibration set) และกลุ่มที่ใช้ทดสอบความถูกต้องของสมการเทียบมาตรฐาน (Validation set) ในอัตราส่วน 60:40 ซึ่งกลุ่มตัวอย่างที่ใช้ในการทดสอบความถูกต้องของสมการจะเป็นอิสระจากกลุ่มที่ใช้ในการสร้างสมการอย่างชัดเจน ซึ่งเรียกว่า separated test set

สมการเทียบมาตรฐานที่สร้างนั้น จะถูกพิจารณาผลของความถูกต้องจากค่าความผิดพลาดมาตรฐานในการทำนาย (Standard Error of Prediction; SEP) ซึ่งควรมีค่าต่ำ และค่าเฉลี่ยของผลต่างระหว่างค่าที่ได้จากวิธีมาตรฐานและค่าที่ได้จากวิธี NIR (Average of difference between actual value and NIR value; Bias) ควรมีค่าไม่แตกต่างจาก 0 อย่างมีนัยสำคัญซึ่งจะหมายความว่าค่าที่ทำนายได้จากวิธี NIR ไม่แตกต่างจากค่าจริงที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธีมาตรฐาน โดยใช้ค่าทางสถิติ paired t-test ในการทดสอบ ซึ่งสูตรที่ใช้ในการคำนวณ (Fearn, 1998) แสดงดังสมการ (3)

$$t = \frac{bias \times \sqrt{n}}{SEP} \quad (3)$$

เมื่อ n คือ จำนวนตัวอย่างในกลุ่ม Validation set

3 ผลและวิจารณ์

ข้อมูลการดูดกลืนพลังงานแสง NIR ของข้าวที่วัดด้วยเครื่อง NIR Spectrometer ที่ความยาวคลื่น 1200-2400 nm แสดงดัง Figure 4 โดยแกนนอน (X-axis) แสดงความยาวคลื่น และแกนตั้ง (Y-axis) แสดงค่าการดูดกลืนแสงของข้าว

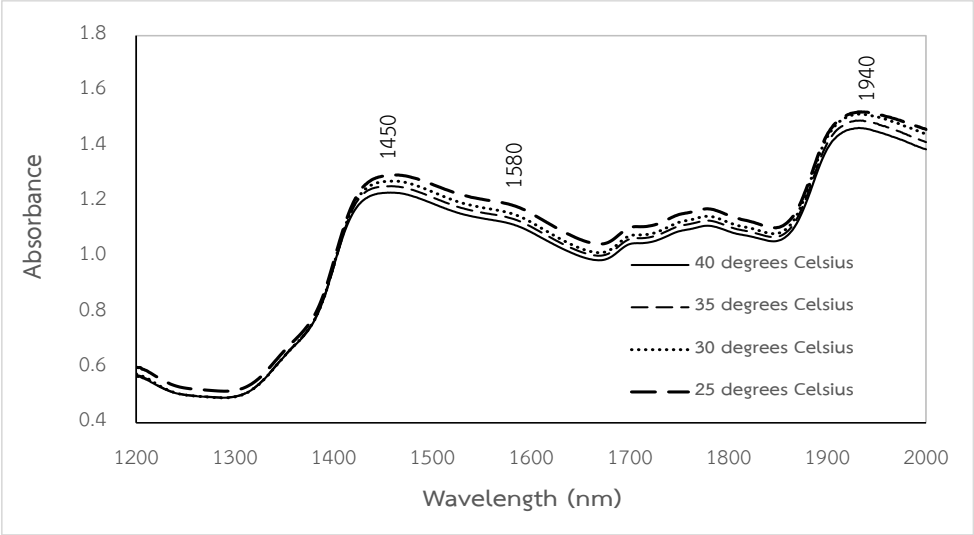

Figure 4 The original spectrum of rice from Near Infrared spectrometer at wavelength region of 1200–2400 nm.

จาก Figure 4 สามารถสังเกตเห็นตำแหน่งการดูดกลืนที่ความยาวคลื่น 1450 และ 1940 nm เป็นตำแหน่งการดูดกลืนพลังงานของพันธะ OH ของน้ำ (Osborne et al, 1993) และที่ช่วงความยาวคลื่น 1580 nm เป็นตำแหน่งการดูดกลืนของแป้ง (Osborne et al, 1993) นอกจากนั้น ยังพบการเลื่อนตัวเป็นชั้น (Baseline shift) ของเส้นสเปกตรัม และพบสัญญาณรบกวน (Noise) ที่จะทำให้สมการที่สร้างเกิดความผิดพลาดได้ ที่ช่วงความยาวคลื่น 2000 nm ดังนั้น ก่อนการสร้างสมการจึงทำการตัดค่าการดูดกลืนที่ช่วง 2001 – 2400 nm ออก รวมถึงต้องมีการปรับแต่งข้อมูลการดูดกลืนเพื่อลดอิทธิพลจากการเลื่อนตัวของสเปกตรัม เพื่อให้ได้สมการเทียบมาตรฐานมีผลการวิเคราะห์ดีที่สุด โดยใช้วิธีการทำ Smoothing ซึ่งเป็นวิธีที่ใช้ลดปัญหาของสัญญาณรบกวน ที่เป็นสาเหตุให้เส้นสเปกตรัมไม่เรียบ จะทำให้ได้สเปกตรัมที่มีลักษณะเหมือนสเปกตรัมดั้งเดิม แต่จะมีความเรียบสม่ำเสมอมากกว่า และการทำ Multiplicative Scatter Correction (MSC) เป็นวิธีการที่ช่วยลดผลจากการกระเจิงของแสง (รณฤทธิ์, 2560)

หลังจากทำการตัดตัวอย่างที่ผิดปกติ (Outlier) จากค่าจริงและค่าการดูดกลืนออกแล้ว จึงนำชุดตัวอย่างทั้ง 79 ตัวอย่างมาจัดกลุ่ม Calibration set และ Validation set ใหม่ โดยทั้ง 2 กลุ่มจะต้องมีตัวอย่างที่ถูกเตรียมความชื้นทั้ง 3 ระดับ และอุณหภูมิทั้ง 4 ระดับด้วย ค่าทางสถิติของความชื้นในตัวอย่างข้าวแสดงดัง Table 2

Table 2 Statistical value of moisture content in rice samples.

Parameter (Moisture content)	Calibration set	Validation set
Number of samples	46	33
Average (%)	16.50	16.24
Maximum (%)	20.83	20.70
Minimum (%)	11.95	12.00
Standard Deviation (%)	3.35	3.35

3.1 ผลการสร้างสมการเทียบมาตรฐานแบบชดเชยอุณหภูมิ (Temperature Compensation) เพื่อทำนายความชื้นของข้าว

สมการที่สร้างโดยการชดเชยอุณหภูมิโดยใช้ตัวอย่างที่รวมความแปรปรวนจากความชื้นต่างกัน 3 ระดับ และอุณหภูมิต่างกัน 4 ระดับ รวมทั้งสิ้น 79 ตัวอย่าง ตาม Table 2 เพื่อทำนายความชื้นด้วยวิธี PLS ที่ช่วงความยาวคลื่น 1200–2000 nm ให้ค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (Correlation Coefficient; R) เท่ากับ 0.99 ความผิดพลาดมาตรฐานในการทำนายตัวอย่างในกลุ่ม Calibration set (Standard Error of Calibration; SEC) 0.33% ความผิดพลาดมาตรฐานในการทำนายตัวอย่างในกลุ่ม Validation set (Standard Error of Prediction; SEP) 0.28%

และค่าความผิดพลาดเฉลี่ย (Bias) เท่ากับ -0.02% ดัง Scatter plots ใน Figure 5

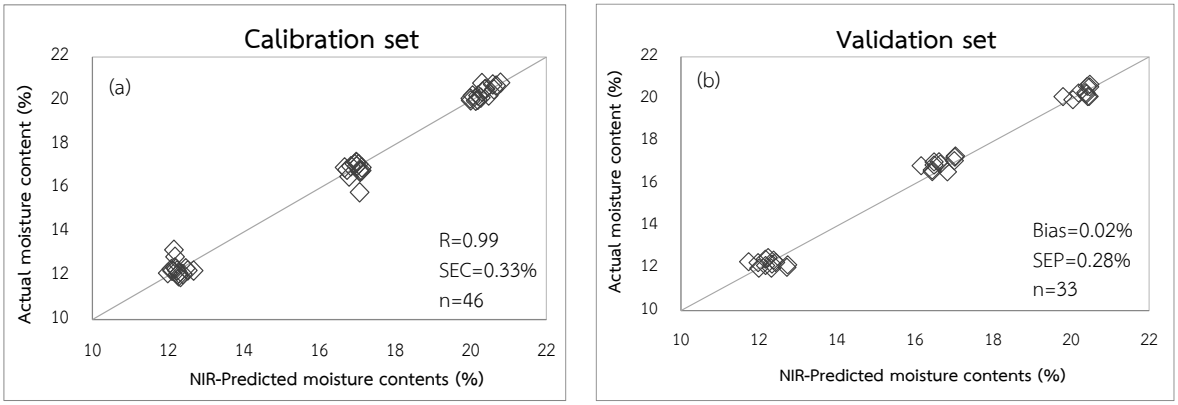

Figure 5 Scatter plots of predicted and actual moisture content of rice in (a) Calibration set and (b) Validation set.

จาก Figure 5 พบว่าข้อมูลส่วนใหญ่กระจายอยู่รอบเส้นทแยงมุม (Target line) ซึ่งเป็นเส้นที่บ่งบอกว่าค่าที่ได้จากการทำนายเทียบกับค่าที่ได้จากวิธีมาตรฐานมีค่าเท่ากัน แสดงให้เห็นว่าค่าสมการแบบชดเชยอุณหภูมิที่สร้างมีประสิทธิภาพสามารถใช้ทำนายความชื้นของข้าวได้ สัมประสิทธิ์การถดถอย (Regression Coefficient) ของสมการเทียบมาตรฐานที่สร้างแสดงดัง Figure 6

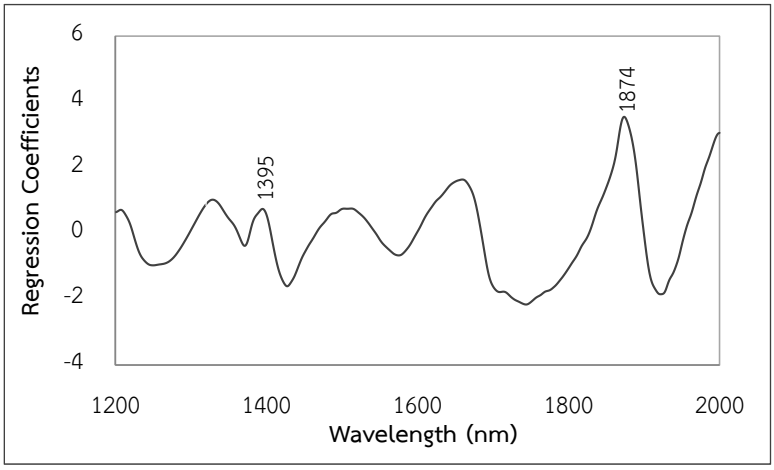

Figure 6 Regression coefficients plot of temperature compensation moisture prediction equation which developed by Partial Least Squares Regression (PLS).

จาก Figure 6 สามารถสังเกตเห็นตำแหน่งการดูดกลืนที่ความยาวคลื่น 1395 และ 1874 nm ซึ่งเป็นตำแหน่งการดูดกลืนของน้ำ (ศุมาพร, 2548)

3.2 ผลการสร้างสมการเทียบมาตรฐานโดยใช้อุณหภูมิเป็นตัวแปรต้นเพื่อทำนายความชื้นของข้าว

การสร้างสมการโดยใช้อุณหภูมิในหน่วยองศาเซลเซียสเข้ามาเป็นส่วนหนึ่งของสมการทำนาย จะถูกสร้างขึ้นด้วยวิธี MLR ที่ช่วงความยาวคลื่น 1200–2000 nm โดยอาศัยโปรแกรม SPSS ตัวอย่างที่ใช้ในการสร้างสมการเป็นตัวอย่างชุดเดียวกับการสร้างสมการด้วยวิธี PLS ผลการสร้างสมการโดยใช้อุณหภูมิเป็นตัวแปรต้นแสดงดัง Table 3

Table 3 Statistical results of MLR equations with using temperature as the independent variable.

Variables selection methods	Calibration set		Validation set		
	R	SEC (%)	Bias (%)	SEP (%)	Paired t-test
Manual selection[A]	0.94	1.17	0.01*	1.06	0.054
Regression Coefficients[B]	0.99	0.46	0.15	0.32	2.693
Stepwise	**0.94**	**0.38**	**0.05***	**0.29**	**0.990**
Forward	**0.94**	**0.38**	**0.05***	**0.29**	**0.990**

[A] Select the variable based on O-H bonds absorption at wavelength of 1450 and 1940 nm (Osborne et al, 1993).
[B] Select the variable according to the regression coefficient (Figure 6) by choosing the position of O-H bonds absorption at 1395 and 1874 nm.
R: Correlation coefficient of calibration set.
SEC: Standard Error of Calibration.
Bias: Average of difference between actual moisture values and predicted moisture values.
SEP: Standard Error of Prediction.
*The calibration equation could predict the moisture content without significant difference from actual values at 95% confidence level

จาก Table 3 จะเห็นว่าค่า SEP ของสมการ MLR แบบ Stepwise และ Forward นั้นให้ผลการทำนายที่ดีที่สุด โดยทั้งสองวิธีให้ค่า SEP เท่ากับ 0.29% และเมื่อทำการวิเคราะห์ด้วยวิธี Paired t–test พบว่า ค่าความชื้นที่ทำนายได้ไม่แตกต่างจากค่าความชื้นจริงที่ได้จากวิธีมาตรฐานอย่างมีนัยสำคัญ ที่ระดับความเชื่อมั่น 95% โดยมีตัวแปรและสัมประสิทธิ์ในสมการที่สร้างแสดงดัง Table 4

Table 4 Regression coefficient from MLR equation to predict the moisture content of rice with temperature as the independent variable.

Variables selection methods	Calibration equation (MLR)
Manual selection[A]	$\%Mc = -518.80+296.31A_{1450}+106.06A_{1940}-0.25T_C$
Regression Coefficients[B]	$\%Mc = -258.41+31.14A_{1395}+39.74A_{1427}+102.64A_{1874}+52.94A_{1922}-.20T_C$
Stepwise	$\mathbf{\%Mc = -191.09+70.07A_{1382}+116.29A_{1891}-0.22T_C}$
Forward	$\mathbf{\%Mc = -191.09+70.07A_{1382}+116.29A_{1891}-0.22T_C}$

[A] Select the variable based on O-H bonds absorption at wavelength of 1450 and 1940 nm (Osborne et al, 1993).
[B] Select the variable according to the regression coefficient (Figure 6) by choosing the position of O-H bonds absorption at 1395 and 1874 nm.

จาก Table 4 จะสังเกตเห็นว่า ตัวแปรที่มีอิทธิพลของสมการวิเคราะห์ปริมาณความชื้นที่ถูกเลือกอัตโนมัติทั้งวิธี Stepwise และ Forward ซึ่งทำให้สมการ MLR ให้ผลการวิเคราะห์ดีที่สุด และถึงแม้จะเป็นวิธีการที่มีการเลือกตัวแปรเข้าสู่สมการถดถอยที่ต่างกัน แต่จะเห็นว่าตัวแปรที่ทั้ง 2 วิธี ใช้ตัวแปรที่ตำแหน่งการดูดกลืนเดียวกัน คือ ที่ตำแหน่ง 1382 และ 1891 nm โดยทั้งสองเป็นตำแหน่งการดูดกลืนของน้ำ (ศุมาพร, 2548) ซึ่งเป็นตำแหน่งที่มีอิทธิพลต่อสมการทำนายความชื้น Scatter plots ของสมการที่สร้างด้วยวิธี Stepwise หรือ Forward แสดงดัง Figure 7

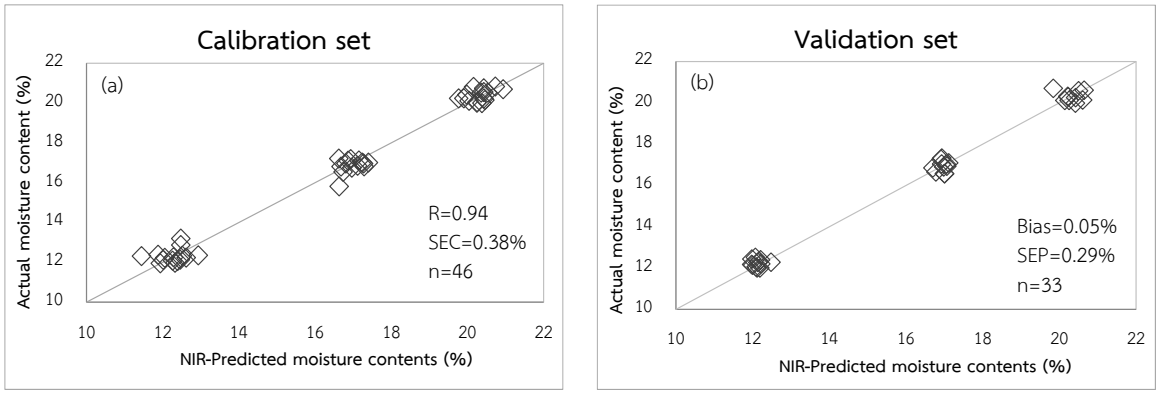

Figure 7 Scatter plots of MLR equation between predicted and actual moisture content of rice developed by stepwise regression or forward selection in (a) Calibration set (b) and Validation set.

จาก Figure 7 พบว่าข้อมูลส่วนใหญ่กระจายอยู่รอบเส้นทแยงมุม (Target line) แสดงให้เห็นว่าค่าสมการที่สร้างโดยใช้อุณหภูมิของตัวอย่างเป็นตัวแปรต้น มีประสิทธิภาพสามารถใช้ทำนายความชื้นของข้าวได้ และเพื่อยืนยันว่าวิธีการดังกล่าวสามารถทำงานได้อย่างมีประสิทธิภาพแม้จะใช้จำนวนตัวอย่างน้อย จึงได้มีการลดจำนวนตัวอย่างลงเพื่อทำการตรวจสอบเสถียรภาพของสมการที่สร้าง

3.3 ผลการทดสอบเสถียรภาพจากการลดจำนวนตัวอย่างที่ใช้ในการสร้างสมการเทียบมาตรฐานทำนายความชื้นข้าว

โดยปกติแล้วในการสร้างสมการเทียบมาตรฐานทำนายความชื้นข้าวที่อุณหภูมิไม่คงที่นั้น จำเป็นต้องมีการเตรียมตัวอย่างเพื่อให้ครอบคลุมทั้งอุณหภูมิและความชื้นที่ต้องเจอในอนาคต ดังนั้นสมการเทียบมาตรฐานที่สร้างจึงจำเป็นต้องใช้ตัวอย่างเป็นจำนวนมาก ดังนั้นในงานวิจัยนี้จึงต้องการทดสอบเสถียรภาพของสมการที่สร้างโดยการลดจำนวนตัวอย่างในกลุ่ม Calibration set ลง จากเดิมที่มี 46 ตัวอย่าง ลดตัวอย่างในกลุ่ม Calibration set ลงแต่จะยังมีความแปรปรวนครบตามเดิม ซึ่งจะประกอบไปด้วย 3 กลุ่มความชื้น (12%, 16%, 20%) และแต่ละกลุ่มความชื้นมีอุณหภูมิ 4 ระดับ (25°C, 30°C, 35°C, 40°C) โดยจะกำหนดให้ตัวอย่างในกลุ่ม Validation set เป็นตัวอย่างกลุ่มเดิม จากนั้นทำการสร้างสมการ MLR โดยใช้อุณหภูมิเป็นตัวแปรต้น ด้วยวิธี Stepwise ผลการสร้างสมการแสดงดัง Table 5

Table 5 The sample number reduction results in the calibration set developed by MLR equation with temperature as the independent variable.

Number of samples	Calibration set		Validation set		
in calibration set	R	SEC (%)	Bias (%)	SEP (%)	Paired t-test
46	0.94	0.38	0.05*	0.29	0.990
34	0.99	0.38	-0.02*	0.29	-0.396
22	**0.99**	**0.44**	**-0.07***	**0.28**	**-1.436**
12	0.99	0.37	-0.18	0.41	-2.522

R: Correlation coefficient of calibration set.

SEC: Standard Error of Calibration.

Bias: Average of difference between actual moisture values and predicted moisture values.

SEP: Standard Error of Prediction.

*The calibration equation could predict the moisture content without significant difference from actual values at 95% confidence level

จาก Table 5 จะเห็นได้ว่าเมื่อลดตัวอย่างในกลุ่ม Calibration set ลง ค่าความผิดพลาดมาตรฐานในการทำนาย (Standard Error of Prediction; SEP) มีแนวโน้มเพิ่มขึ้น หรือประสิทธิภาพในการทำนายลดลง โดยเมื่อลดจำนวนตัวอย่างในกลุ่ม Calibration set ลงเหลือ 22 ตัวอย่าง ยังให้ผลการวิเคราะห์ที่ดีที่สุดเหมือนเดิม โดยมีค่า SEP เท่ากับ 0.28% ค่า Bias เท่ากับ -0.07% และเมื่อทำการวิเคราะห์ด้วยวิธี Paired t–test พบว่า ค่าความชื้นที่ทำนายได้ไม่แตกต่างจากค่าความชื้นจริงที่ได้จากวิธีมาตรฐานอย่างมีนัยสำคัญ ที่ระดับความเชื่อมั่น 95% ตัวแปรและสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายความชื้นด้วยวิธี MLR เมื่อทำการลดจำนวนตัวอย่างในกลุ่ม Calibration set ลง แสดงดัง Table 6

Table 6 The moisture equation which using Stepwise MLR method by applying temperature as the independent variable in developing the equation.

Number of samples in calibration set	Calibration equation (MLR)
46	$\%Mc = -191.09+70.07A_{1382}+116.29A_{1891}-0.22T_C$
34	$\%Mc = -193.73+56.26A_{1379}+128.11A_{1890}-0.21T_C$
22	$\mathbf{\%Mc = -194.36+76.98A_{1378}+115.85A_{1891}-0.21T_C}$
12	$\%Mc = -178.23+150.86A_{1889}-0.21T_C$
5	$\%Mc = -30.61+177A_{1375}-363.31A_{1417}-8.13A_{1886}+301.79A_{1887}$

จาก Table 6 จะสังเกตเห็นว่า ตำแหน่งการดูดกลืนของสมการ MLR ที่ให้ผลการวิเคราะห์ที่ดีที่สุด ที่ถูกสร้างด้วยวิธี Stepwise แสดงตัวแปรที่มีอิทธิพลของสมการวิเคราะห์ปริมาณความชื้นอยู่ที่ตำแหน่งการดูดกลืน 1378 และ 1891 nm โดยทั้งสองเป็นตำแหน่งการดูดกลืนของน้ำ (ศุมาพร, 2548) Scatter plots ของสมการที่สร้างด้วยวิธี Stepwise แสดงดัง Figure 8

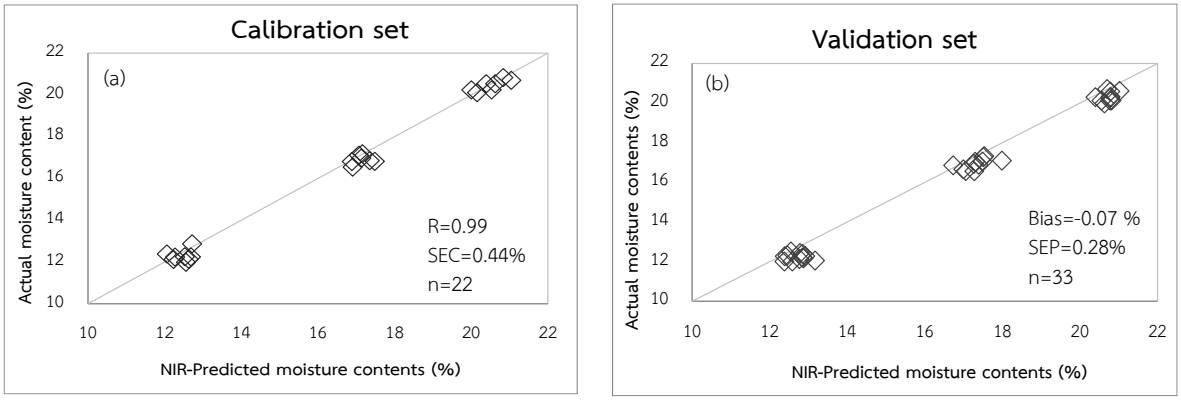

Figure 8 Scatter plots of MLR equation between predicted and actual moisture content of rice obtained from 22 samples developed by stepwise regression in (a) Calibration set (b) and Validation set.

จาก Figure 8 พบว่าข้อมูลส่วนใหญ่กระจายอยู่รอบเส้น Target line แสดงให้เห็นว่า แม้จะมีการลดจำนวนตัวอย่างในการสร้างสมการลง แต่สมการยังมีประสิทธิภาพสามารถทำนายความชื้นของข้าวได้ไม่แตกต่างจากประสิทธิภาพของสมการแบบชดเชยอุณหภูมิ

เนื่องจากสเปกตรัมอินฟราเรดย่านใกล้มีความไวต่อการผันผวนของอุณหภูมิตัวอย่าง ดังนั้นในการสร้างสมการเทียบมาตรฐานเพื่อทำนายความชื้นของข้าวจึงต้องรวมความแปรปรวนของอุณหภูมิเข้าไปด้วย เพื่อให้สมการทำนายตัวอย่างในอนาคตได้อย่างมีประสิทธิภาพ ซึ่งวิธีที่นิยมใช้ในปัจจุบันคือการสร้างสมการแบบชดเชยอุณหภูมิ ในงานวิจัยนี้ได้ทำการสร้างสมการแบบชดเชยอุณหภูมิเพื่อทำนายความชื้นด้วยวิธี PLS พบว่าสมการที่สร้างให้ผลการทำนายที่ค่อนข้างแม่นยำ โดยให้ค่า SEP ต่ำถึง 0.28% อย่างไรก็ดีวิธีการสร้างสมการแบบชดเชยอุณหภูมิเพื่อทำนายความชื้นนั้นต้องมีการเตรียมตัวอย่างให้ครอบคลุมความแปรปรวนทั้งความชื้นและอุณหภูมิ ซึ่งต้องใช้ตัวอย่างเป็นจำนวนมาก

อีกวิธีที่สามารถแก้ปัญหาเรื่องอุณหภูมิของตัวอย่างไม่คงที่ ในบทความนี้ใช้อุณหภูมิเป็นตัวแปรต้น ในการสร้างสมการทำนายความชื้น โดยสามารถใช้จำนวนตัวอย่างในการสร้างสมการน้อยกว่าวิธีชดเชยอุณหภูมิ ในงานวิจัยนี้ได้ผลการสร้างสมการทำนายความชื้นโดยใช้อุณหภูมิเป็นตัวแปรต้นด้วยวิธี MLR ซึ่งเป็นวิธีที่ใช้ตัวแปรจำนวนน้อยกว่าวิธี PLS พบว่า สมการที่สร้างขึ้นให้ผลการทำนายความชื้นไม่แตกต่างจากสมการแบบชดเชยอุณหภูมิที่สร้างด้วยวิธี PLS โดยให้ค่า SEP ใกล้เคียงกันคือ 0.29% โดยพบตัวแปรที่สำคัญในสมการ MLR สอดคล้องกับการดูดกลืนของน้ำ และยังพบสัมประสิทธิ์การถดถอยของตัวแปรอุณหภูมิมีค่าเป็น -0.21 แสดงให้เห็นว่าอุณหภูมิมีการเปลี่ยนแปลงที่ผกผันกับความชื้น และจากเส้นสเปกตรัมข้าวที่แสดงใน Figure 4 การเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิในช่วงที่ศึกษาแปรผกผันกับค่าการดูดกลืนอีกด้วย

นอกจากนั้นแล้วเพื่อเป็นการตรวจสอบว่าสมการทำนายความชื้นที่ใช้อุณหภูมิเป็นตัวแปรต้นสามารถทำนายได้อย่างมีประสิทธิภาพเมื่อใช้จำนวนตัวอย่างในการสร้างสมการน้อย ในงานวิจัยนี้จึงได้ทดลองสร้างสมการทำนายความชื้นโดยการลดจำนวนตัวอย่างในการสร้างสมการลง พบว่าการลดตัวอย่างจนเหลือ 22 ตัวอย่าง ให้สมการที่มีประสิทธิภาพมากที่สุด โดยให้ค่า SEP เท่ากับ 0.28% ซึ่งผลที่ได้ไม่แตกต่างจากการสร้างสมการ

แบบชดเชยอุณหภูมิโดยใช้จำนวนตัวอย่างเต็มจำนวน (46 ตัวอย่าง)

4 สรุป

จากผลการวิเคราะห์สามารถสรุปได้ว่า วิธีการสร้างสมการทำนายความชื้นโดยใช้อุณหภูมิเป็นตัวแปรต้นมีประสิทธิภาพในการทำนายค่าความชื้นไม่แตกต่างจากวิธีมาตรฐานอย่างมีนัยสำคัญที่ระดับความเชื่อมั่น 95% โดยมีข้อดีคือสามารถใช้จำนวนตัวอย่างในการสร้างสมการน้อยกว่า เมื่อเปรียบเทียบกับวิธีสร้างสมการแบบชดเชยอุณหภูมิ (Temperature Compensation)

5 เอกสารอ้างอิง

ภาควิชาวิศวกรรมอาหาร คณะวิศวกรรมศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง. 2555. ผลของความชื้นต่อคุณสมบัติทางกายภาพของเมล็ดพริกไทยดำ. แหล่งข้อมูล: www.foodnetworksolution.com/news_and_articles/article/0271/ผลของความชื้นต่อคุณสมบัติทางกายภาพของเมล็ดพริกไทยดำ. เข้าถึงเมื่อ 15 สิงหาคม 2563.

รณฤทธิ์ ฤทธิรณ. 2560. การสร้างระบบ NIR สำหรับการวิเคราะห์ประจำวัน. นครปฐม: ภาควิชาวิศวกรรมการอาหาร คณะวิศวกรรมศาสตร์ กำแพงแสน มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์, กำแพงแสน, นครปฐม.

ศุมาพร เกษมสำราญ. 2548. ตัวแปรที่มีอิทธิผลต่อการวิเคราะห์ค่า NIR. การอบรมเชิงปฏิบัติการการตรวจสอบคุณภาพอาหารสัตว์ด้วยเทคนิค NIR Spectroscopy เพื่อการแข่งขันในเวทีการค้าโลก, 40-61. กรุงเทพฯ: สถาบันค้นคว้าและพัฒนาผลิตผลเพื่อการเกษตรและอุตสาหกรรมเกษตร มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์. 19-23 ธันวาคม 2548, กรุงเทพฯ.

Campos, M.I., Antolin, G., Debán, L., Pardo, R. 2018. Assessing the influence of temperature on NIRS prediction models for the determination of sodium content in dry-cured ham slices. Food Chemistry 257, 237-242.

Chapanya, P., Ritthiruangdej, P., Mueangmontri, R., Pattamasuwan, A., Vanichsriratana, W. 2018. Temperature Compensation on Sugar Content Prediction of Molasses by Near-Infrared Spectroscopy (NIR). An International Journal of Sugar Crops and Related Industries, 162-169.

Fearn, T. 1998. Bias, NIR news, 9(6), 4.

Kawano, S., Abe, H. and Iwamoto, M. 1995. Development of a calibration equation with temperature compensation for determining the Brix value in intact peaches. Journal of Near Infrared Spectroscopy 3, 211-218.

Osborne, B.G., Fearn, T., Hindle, P.H. 1993. Practical NIR spectroscopy: with application in food and beverage analysis. (2nd ed.). Singapore: Longman Singapore Publishers (Pte) Ltd.

Peirs, A., Scheerlinck, N., Nicolai, B.M. 2003. Temperature compensation for near infrared reflectance measurement of apple fruit soluble solids contents. Postharvest Biology and Technology 30, 233-248.