



ใบรับรองวิทยานิพนธ์
บัณฑิตวิทยาลัย มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

วิทยาศาสตร์มหาบัณฑิต (พัฒนาผลิตภัณฑ์อุตสาหกรรมเกษตร)

ปริญญา

พัฒนาผลิตภัณฑ์อุตสาหกรรมเกษตร

พัฒนาผลิตภัณฑ์

สาขา

ภาควิชา

เรื่อง การตรวจสอบคุณภาพผลิตภัณฑ์ขนมขบเคี้ยวด้วยเทคนิคสเปกโตรสโกปี
ย่านใกล้อินฟราเรด

Determination of Snack Food Quality by Near Infrared Spectroscopy

นามผู้วิจัย นางสาวนพกร ปัญญาวัฒน์โช

ได้พิจารณาเห็นชอบโดย

อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก

(รองศาสตราจารย์ธงชัย สุวรรณสิขณน์, Ph.D.)

อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ร่วม

(อาจารย์ศุมาพร เกษมสำราญ, Ph.D.)

อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ร่วม

(อาจารย์ยัวร์ณี ธนะแพทย์, M.S.)

หัวหน้าภาควิชา

(รองศาสตราจารย์อนุวัตร แจ่มชัด, Ph.D.)

บัณฑิตวิทยาลัย มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์รับรองแล้ว

(รองศาสตราจารย์กัญจนา วีระกุล, D.Agr.)

คณบดีบัณฑิตวิทยาลัย

วันที่ เดือน พ.ศ.

สิงสีงอี มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

วิทยานิพนธ์

เรื่อง

การตรวจสอบคุณภาพผลิตภัณฑ์ขนมขบเคี้ยวด้วยเทคนิคสเปกโตรสโกปีย่านใกล้อินฟราเรด

Determination of Snack Food Quality by Near Infrared Spectroscopy

โดย

นางสาวนพกร ปัญญาวัชรชิโล

เสนอ

บัณฑิตวิทยาลัย มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

เพื่อความสมบูรณ์แห่งปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต (พัฒนาผลิตภัณฑ์อุตสาหกรรมเกษตร)

พ.ศ. 2553

ลิขสิทธิ์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

นพกร ปัญญาวัชชีโล 2553: การตรวจสอบคุณภาพผลิตภัณฑ์ขนมขบเคี้ยวด้วยเทคนิค
สเปกโตรสโคปีย่านใกล้อินฟราเรด ปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต
(พัฒนาผลิตภัณฑ์อุตสาหกรรมเกษตร) สาขาพัฒนาผลิตภัณฑ์อุตสาหกรรมเกษตร
ภาควิชาพัฒนาผลิตภัณฑ์ อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก: รองศาสตราจารย์
ธงชัย สุวรรณสิขณน์, Ph.D. 241 หน้า

ตลาดขนมขบเคี้ยวมีการขยายตัวอย่างต่อเนื่องตามจำนวนประชากรรวมทั้งกำลังซื้อ
ที่ปรับตัวสูงขึ้น จนในปัจจุบันมีมูลค่าการตลาดแต่ละปีมากกว่า 10,000 ล้านบาท การพัฒนา
วิธีการตรวจสอบคุณภาพที่มีความสะดวกรวดเร็วและเป็นประโยชน์ในการยกระดับคุณภาพให้
เป็นที่ยอมรับของผู้บริโภคมากยิ่งขึ้น ด้วยเหตุนี้งานวิจัยนี้จึงมีวัตถุประสงค์เพื่อนำเทคนิค
สเปกโตรสโคปีย่านใกล้อินฟราเรด (NIRS) มาใช้ในการตรวจสอบคุณภาพผลิตภัณฑ์ขนม
ขบเคี้ยวที่ทำจากมันฝรั่ง โดยทำการตรวจสอบปัจจัยคุณภาพในเรื่องปริมาณความชื้น (Mc)
ค่าออกเตอร์ แอคทีวิตี (a_w) ปริมาณไขมัน ค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ (TBA) และปริมาณ
โมโนโซเดียมกลูตาเมต (MSG) โดยสมการทำนายปริมาณความชื้น ค่า a_w ปริมาณไขมัน
ใช้ตัวอย่างในการสร้างสมการแต่ละสมการ จำนวน 150 ตัวอย่าง ในขณะที่สมการทำนายค่า TBA
ปริมาณ MSG ใช้ตัวอย่างจำนวน 100 , 110 ตัวอย่าง ตามลำดับ นำตัวอย่างดังกล่าวมาทำการวัดค่า
การดูดกลืนแสงด้วยเครื่อง NIRS โดยใช้ rotating cup ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร
และนำไปทำการวัดค่าคุณภาพดังกล่าว ผลการศึกษาเมื่อนำข้อมูลสเปกตรัม NIR ที่ผ่านการปรับแต่ง
ด้วยวิธีอนุพันธ์อันดับสองกับข้อมูลที่ได้จากการวิเคราะห์ค่าคุณภาพมาสร้างสมการหาความสัมพันธ์
ด้วยวิธี Partial Least Square Regression (PLS) และวิธี Moving Window Partial Least Square
Regression (MWPLS) พบว่า สมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี MWPLS มีความเหมาะสมมากกว่าวิธี PLS
โดยให้ค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (R) ในการทำนายค่า Mc ค่า a_w ปริมาณไขมัน ค่า TBA ค่า MSG
เท่ากับ 0.99, 0.98, 0.98, 0.95 และ 0.98 ตามลำดับ และให้ค่าความคลาดเคลื่อนจากการทำนายด้วย
ตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (SEP) เท่ากับ 0.26%, 0.02, 0.35%, 0.12 mg malonaldehyde/
kg และ 0.40 g/100 g ตามลำดับ จากผลการทดลองที่ได้สรุปได้ว่าสามารถนำเทคนิค NIRS มาใช้
ในการตรวจสอบคุณภาพผลิตภัณฑ์ขนมขบเคี้ยว

Nopphakorn Panyawatchilo 2010: Determination of Snack Food Quality by Near Infrared Spectroscopy. Master of Science (Agro-Industrial Product Development), Major Field: Agro-Industrial Product Development, Development of Product Development. Thesis Advisor: Associate Professor Thongchai Suwonsichon, Ph.D. 241 pages.

The market of snack food is growing depend upon the population and demand. Nowadays the market share of snack food is about 10,000 million Bath. Developing convenient and rapid method for monitoring snack quality is very useful to impose acceptable quality for consumer. The main objective of this research is to investigate the potential of near infrared spectroscopic (NIRS) technique for the predicting the moisture content (Mc), water activity (a_w), fat, thiobarbituric acid number (TBA) and monosodium glutamate (MSG) in snack food. Four sample sets of snack food, 150 experimental units are employed for calibration development of Mc, a_w and fat. Two sample sets of snack food, 100, 110 experimental units are employed for calibration development of TBA, MSG. All samples were scanned by NIRS in the region of 1100-2500 nm with rotating cup. Their spectra were pretreated by the second derivative (2 D) method. Both NIR spectra and analyte data were correlated to develop the optimum calibration models by the partial least square (PLS) regression and the moving window partial least square (MWPLS) regression. The results showed that the MWPLS could generate suitable models for quality evaluation of Mc, a_w , fat, TBA and MSG. The calibration equation of those analytes provided the correlation coefficients (R) 0.99, 0.98, 0.98, 0.95 and 0.98, respectively. The calibration equation of those analytes provided the standard errors of prediction (SEP) 0.26%, 0.02, 0.35%, 0.12 mg malonaldehyde/kg and 0.40 g/100 g, respectively. According to these results, NIR is potentially applied to determine quality of snack food.

Student's signature

Thesis Advisor's signature

กิตติกรรมประกาศ

ขอกราบขอบพระคุณ รองศาสตราจารย์ ดร.ธงชัย สุวรรณสิขณันต์ ประธานกรรมการ
ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ ดร.ศุมาพร เกษมสำราญ และ อาจารย์วราวุฒิ ณะแพสย์ อาจารย์ที่ปรึกษา
วิทยานิพนธ์ ที่ได้กรุณาให้คำแนะนำในระหว่างดำเนินการวิจัย การค้นคว้าวิจัย ตลอดจนการตรวจ
แก้ไขวิทยานิพนธ์จนกระทั่งเสร็จสมบูรณ์ และกราบขอบพระคุณ ดร.ทานตะวัน พิทักษ์ ประธาน
การสอบวิทยานิพนธ์ ดร.ปิติพร ฤทธิเรืองเดช อาจารย์ผู้ทรงคุณวุฒิภายนอก ที่กรุณาตรวจแก้ไข
เพื่อให้วิทยานิพนธ์ฉบับนี้สมบูรณ์ยิ่งขึ้น

ขอกราบขอบพระคุณอาจารย์ภาควิชาพัฒนาผลิตภัณฑ์ทุกท่านที่ได้อบรมสั่งสอนและ
มอบความรู้อันเป็นประโยชน์อย่างยิ่งในการนำไปใช้ประโยชน์ต่อไป และขอกราบขอบพระคุณ
เจ้าหน้าที่ภาควิชาพัฒนาผลิตภัณฑ์ทุกท่านที่ได้ให้ความช่วยเหลือและให้คำแนะนำต่างๆ

ด้วยความดีหรือประโยชน์อันใดเนื่องจากวิทยานิพนธ์เล่มนี้ขอบแต่คุณพ่อ คุณแม่
ครูอาจารย์ และ โรงเรียนเบญจมราชูทิศ ที่ได้อบรมและให้กำลังใจผู้วิจัยมาตลอดในทุกเรื่อง
หากวิทยานิพนธ์ฉบับนี้มีความผิดพลาดประการใด ข้าพเจ้าขออภัยและขอน้อมรับไว้แต่เพียงผู้เดียว

นพกร ปัญญาวัฒชิโล

เมษายน 2553

สารบัญ

หน้า

สารบัญ	(1)
สารบัญตาราง	(2)
สารบัญภาพ	(6)
คำอธิบายสัญลักษณ์และคำย่อ	(28)
คำนำ	1
วัตถุประสงค์	2
การตรวจเอกสาร	3
อุปกรณ์และวิธีการ	35
อุปกรณ์	35
วิธีการ	37
ผลและวิจารณ์	56
สรุปและข้อเสนอแนะ	218
เอกสารและสิ่งอ้างอิง	220
ภาคผนวก	226
ภาคผนวก ก	ขั้นตอนการวัดค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว ที่ทอดเอง และตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ซื้อจากท้องตลาด ด้วยเครื่อง Near Infrared Reflectance (NIR) Spectroscopy
ภาคผนวก ข	วิธีการวิเคราะห์รูปภาพทางด้านเคมีและกายภาพ
ประวัติการศึกษา และการทำงาน	241

สารบัญตาราง

ตารางที่		หน้า
1	มูลค่าทางการตลาดของขนมขบเคี้ยวในปีแต่ละประเภทในปี พ.ศ. 2552	5
2	ปริมาณและมูลค่าการส่งออกของผลิตภัณฑ์ขนมขบเคี้ยวของไทย ในปี พ.ศ. 2543 – พ.ศ. 2552	5
3	ข้อกำหนดของผลิตภัณฑ์ขนมขบเคี้ยว	6
4	การตรวจสอบส่วนประกอบหลักของอาหารโดยใช้เทคนิค NIR	8
5	แสดงตำแหน่งแถบในสเปกตรัมย่านใกล้อินฟราเรดที่สำคัญ	9
6	แนวทางการอธิบายความสามารถของสมการ Calibration ด้วยค่า RPD	27
7	อุตสาหกรรมอาหารที่มีการนำเครื่อง NIR มาใช้ในการตรวจสอบคุณภาพ	28
8	การใช้ประโยชน์เทคนิค NIR ในประเทศไทย	30
9	แนวทางการอธิบายความสามารถของสมการแคลิเบรชันด้วยค่า R (ค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์)	44
10	ข้อมูลค่าสูงสุด ค่าต่ำสุด ค่าเฉลี่ยและค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานในเรื่องปริมาณ ความชื้นของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว	56
11	ข้อมูลค่าสูงสุด ค่าต่ำสุด ค่าเฉลี่ย และค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานในเรื่อง ค่าวอเตอร์ แอคทีวิตีของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว	57
12	ค่า R, ค่า SEC ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าความชื้นของตัวอย่าง ขนมขบเคี้ยวด้วยวิธีทางสถิติ PLS ที่ช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร	68
13	เปรียบเทียบค่า R, ค่า SEP, ค่า RPD และค่า Bias ของสมการที่สร้างขึ้น เพื่อทำนายค่าปริมาณความชื้นด้วยวิธีทางสถิติ PLS	72
14	ค่า R และค่า SEC ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณความชื้น ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS	77
15	เปรียบเทียบค่า R, ค่า SEP, ค่า RPD และค่า Bias ของสมการที่สร้างขึ้น เพื่อทำนายค่าปริมาณความชื้นด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS	84
16	เปรียบเทียบค่า R, SEC, R, SEP, RPD, Bias ของสมการทำนายค่าปริมาณ ความชื้นที่ดีที่สุดที่สร้างขึ้นด้วยวิธีทางสถิติ PLS, MWPLS	86

สารบัญตาราง (ต่อ)

ตารางที่		หน้า
17	ค่า R และค่า SEC ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าอวเตอร์ แอคทิวิตี้ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยวิธีทางสถิติ PLS	89
18	เปรียบเทียบค่า R, ค่า SEP, ค่า RPD และค่า Bias ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าอวเตอร์ แอคทิวิตี้ด้วยวิธีทางสถิติ PLS	92
19	ค่า R และค่า SEC ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าอวเตอร์ แอคทิวิตี้ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS	97
20	เปรียบเทียบค่า R, ค่า SEP, ค่า RPD และค่า Bias ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าอวเตอร์ แอคทิวิตี้ด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS	104
21	เปรียบเทียบค่า R, SEC, R, SEP, RPD, Bias ของสมการทำนายค่าอวเตอร์ แอคทิวิตี้ที่ดีที่สุดที่สร้างขึ้นด้วยวิธีทางสถิติ PLS และ MWPLS	106
22	ข้อมูลค่าสูงสุด ค่าต่ำสุด ค่าเฉลี่ย และค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานในเรื่องปริมาณไขมันของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว	107
23	ค่า R และค่า SEC ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณไขมันของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยวิธีทางสถิติ PLS	117
24	เปรียบเทียบค่า R, ค่า SEP, ค่า RPD และค่า Bias ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณไขมันด้วยวิธีทางสถิติ PLS	121
25	ค่า R และค่า SEC ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณไขมันของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS	126
26	เปรียบเทียบค่า R, ค่า SEP, ค่า RPD และค่า Bias ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณไขมันด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS	130
27	เปรียบเทียบค่า R, SEC, R, SEP, RPD, Bias ของสมการทำนายค่าปริมาณไขมันที่ดีที่สุดที่สร้างขึ้นด้วยวิธีทางสถิติ PLS และ MWPLS	131
28	ข้อมูลค่าสูงสุด ค่าต่ำสุด ค่าเฉลี่ย และค่าพิสัยในเรื่องค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ (TBA) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว	132
29	ค่า R และค่า SEC ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่า TBA ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยวิธีทางสถิติ PLS	143

สารบัญตาราง (ต่อ)

ตารางที่		หน้า
30	เปรียบเทียบค่า R, ค่า SEP, ค่า RPD และค่า Bias ของสมการที่สร้างขึ้น เพื่อทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ด้วยวิธีทางสถิติ PLS	154
31	ค่า R และค่า SEC ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS	159
32	เปรียบเทียบค่า R, ค่า SEP, ค่า RPD และค่า Bias ของสมการที่สร้างขึ้น เพื่อทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS	160
33	เปรียบเทียบค่า R, SEC, R, SEP, RPD, Bias ของสมการทำนาย ค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ที่ดีที่สุดที่สร้างขึ้นด้วยวิธีทางสถิติ PLS, MWPLS	161
34	ข้อมูลค่าสูงสุด ค่าต่ำสุด ค่าเฉลี่ย และค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานในเรื่อง ค่าปริมาณโปรตีนของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว	171
35	ค่า R และค่า SEC ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณโปรตีนของ ตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยวิธีทางสถิติ PLS	175
36	เปรียบเทียบค่า R, ค่า SEP, ค่า RPD และค่า Bias ของสมการที่สร้างขึ้น เพื่อทำนายค่าปริมาณโปรตีนด้วยวิธีทางสถิติ PLS	180
37	ค่า R และค่า SEC ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณโปรตีนของ ตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS	185
38	เปรียบเทียบค่า R, ค่า SEP, ค่า RPD และค่า Bias ของสมการที่สร้างขึ้น เพื่อทำนายค่าปริมาณโปรตีนด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS	188
39	เปรียบเทียบค่า R, SEC, R, SEP, RPD, Bias ของสมการทำนายค่าปริมาณ โปรตีนที่ดีที่สุดที่สร้างขึ้นด้วยวิธีทางสถิติ PLS, MWPLS	189
40	ข้อมูลค่าสูงสุด ค่าต่ำสุด ค่าเฉลี่ย และค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานในเรื่องปริมาณ โมโนโซเดียมกลูตาเมตของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว	199
41	เปรียบเทียบค่า R, ค่า SEP, ค่า RPD และค่า Bias ของสมการที่สร้างขึ้น เพื่อทำนายปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตด้วยวิธีทางสถิติ PLS	204

สารบัญตาราง (ต่อ)

ตารางที่		หน้า
42	ค่า R และค่า SEC ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายปริมาณโมโนโซเดียม กลูตาเมตของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยวิธีทางสถิติ PLS	204
43	ค่า R และค่า SEC ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายปริมาณโมโนโซเดียม กลูตาเมตของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS	209
44	เปรียบเทียบค่า R, ค่า SEP, ค่า RPD และค่า Bias ของสมการที่สร้างขึ้น เพื่อทำนายปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS	214
45	เปรียบเทียบค่า R, SEC, R, SEP, RPD, Bias ของสมการทำนายปริมาณ โมโนโซเดียมกลูตาเมตที่ดีที่สุดที่สร้างขึ้นด้วยวิธีทางสถิติ PLS, MWPLS	216
46	ช่วงข้อมูลของปริมาณความชื้น ค่า a_w ปริมาณไขมัน ค่า TBA ปริมาณ โปรตีน และค่า MSG ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว	218

สารบัญภาพ

ภาพที่	หน้า
1	แสดงถึงส่วนประกอบของเครื่องภายในของเครื่อง NIR ประเภทการส่องผ่านและการส่องผ่านสะท้อน 12
2	แบบวิธีการวัดด้วย NIR สเปกโทรสโคปี (a.) การส่องผ่าน (transmittance) (b) การส่องผ่านสะท้อน (transflectance) (c) การสะท้อนแบบแพร่ (diffuse transflectance) (d) อินเทอร์แอคแทนซ์ (interactance) (e) การส่องผ่านตัวอย่างที่มีการกระเจิงแสง (transmittance through scattering medium) 13
3	แผนผังขั้นตอนในการวิเคราะห์ข้อมูลและสร้างสมการทำนายจากสเปกตรัมที่วัดได้จากเครื่องมือ NIR 15
4	เปรียบเทียบสเปกตรัมที่ยังไม่ผ่านการปรับแต่งกับสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) 17
5	เปรียบเทียบสเปกตรัมที่ยังไม่ผ่านการปรับแต่งกับสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First Derivative) 19
6	เปรียบเทียบสเปกตรัมที่ยังไม่ผ่านการปรับแต่งกับสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second Derivative) 20
7	เปรียบเทียบสเปกตรัมที่ยังไม่ผ่านการปรับแต่งกับสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC 21
8	ตัวอย่างขนมขบเคี้ยวประเภทมันฝรั่งที่ซื้อจากซูเปอร์มาเก็ต 35
9	ตัวอย่างขนมขบเคี้ยวประเภทมันฝรั่งที่ขึ้นรูปแล้วที่ยังไม่ได้ผ่านการทอด (Pellet) 35
10	ขั้นตอนการสร้างสมการที่ใช้ในการทำนายค่าคุณภาพทางเคมีและกายภาพโดยการหาความสัมพันธ์ทางสถิติระหว่างการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR กับการวิเคราะห์ค่าทางเคมีและการตรวจสอบความแม่นยำของสมการที่สร้างขึ้น 45
11	แผนภาพแสดงจำนวนสมการที่ได้จากการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีต่างๆ และนำมาสร้างสมการทำนายค่าคุณภาพทางเคมีและกายภาพด้วยวิธีทางสถิติ Partial Least Squares Regression (PLS) และ Moving Window Partial Least Squares Regression (MWPLS) 46

สารบัญภาพ

ภาพที่		หน้า
12	สเปกตรัมดิบเริ่มต้นของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมตัวอย่างในข้อ 2.1 จำนวน 150 หน่วยตัวอย่างที่วัดด้วยเครื่อง NIR ตั้งแต่ช่วง 1100-2500 นาโนเมตร	58
13	ลักษณะสเปกตรัมที่ยังไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมตัวอย่างในข้อ 2.1 ซึ่งได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร	59
14	ลักษณะสเปกตรัมที่ยังไม่ผ่านการปรับแต่งสำหรับตัวอย่างชุด Calibration และ Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมในข้อ 2.1	60
15	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างชุด Calibration และตัวอย่างชุด Validation	60
16	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตรเปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง	61
17	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) ของตัวอย่างชุด Calibration และชุด Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว	62
18	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง	62

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่		หน้า
19	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) ของตัวอย่างชุด Calibration และตัวอย่างชุด Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว	63
20	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง	64
21	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC ของตัวอย่างชุด Calibration และ Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว	65
22	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง	65
23	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนาย ค่าปริมาณความชื้น ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่าง กลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 หน่วยตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่ง ด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second Derivative)	69
24	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนาย ค่าปริมาณความชื้น ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่าง กลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 หน่วยตัวอย่าง ของสมการไม่ผ่านการปรับแต่ง สเปกตรัม	69
25	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนาย ค่าปริมาณความชื้น ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 nm ของตัวอย่างกลุ่ม สร้างสมการ จำนวน 100 หน่วยตัวอย่างของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วย Smoothing	70

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่		หน้า
26	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้นายค่าปริมาณความชื้นในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 หน่วยตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี 1 D	70
27	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าปริมาณความชื้น ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 หน่วยตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC	71
28	ค่าปริมาณความชื้นของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)	73
29	ค่าปริมาณความชื้นของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)	73
30	ค่าปริมาณความชื้นของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)	74
31	ค่าปริมาณความชื้นของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First Derivative) ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)	74

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่		หน้า
32	ค่าปริมาณความชื้นของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี MSC ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)	75
33	ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าปริมาณความชื้นจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative)	79
34	ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการ (Regression coefficient) ที่ใช้ในการทำนายค่าปริมาณความชื้นในตัวอย่างขนมขบเคี้ยว ที่ช่วงความยาวคลื่น 1320-1400, 1800-1980 นาโนเมตร จากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี 2 D	79
35	ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าปริมาณความชื้นจากสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม	80
36	ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าปริมาณความชื้นจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing)	81
37	ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าปริมาณความชื้นจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative)	82
38	ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าปริมาณความชื้นจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC	83
39	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าวอเตอร์ แอคทีวี่ ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 ตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี 2 D	89

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่		หน้า
40	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าวอเตอร์ แอคทิวิตี ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 ตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC	90
41	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าวอเตอร์ แอคทิวิตี ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 ตัวอย่าง ของสมการที่ไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม	90
42	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าวอเตอร์ แอคทิวิตี ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 ตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing)	91
43	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าวอเตอร์ แอคทิวิตี ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 ตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี 1 D	91
44	ค่าวอเตอร์ แอคทิวิตีของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second Derivative) ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)	93
45	ค่าวอเตอร์ แอคทิวิตีของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)	93

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่	หน้า	
46	ค่าวอเตอร์ แอคทิวิตี้ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)	94
47	ค่าวอเตอร์ แอคทิวิตี้ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First Derivative) ของตัวอย่างตรวจสอบความถูกต้อง	94
48	ค่าวอเตอร์ แอคทิวิตี้ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี MSC ของตัวอย่างตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)	95
49	ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าวอเตอร์ แอคทิวิตี้จากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative)	99
50	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าวอเตอร์แอคทิวิตี้ในช่วงความยาวคลื่น 1130-1180, 1310-1370, 1380-1430, 2038-2108 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 หน่วยตัวอย่างของสมการที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative)	99
51	ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าวอเตอร์ แอคทิวิตี้จากสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม	100
52	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าวอเตอร์ แอคทิวิตี้ในช่วงความยาวคลื่น 1330-1420, 1648-1688, 2290-2400 nm ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 หน่วยตัวอย่างของสมการที่ไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม	100

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่		หน้า
53	ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าวอเตอร์ แอคทिवิตี้จากสเปกตรัม ที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี Smoothing	101
54	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression coefficient) ที่ใช้ทำนาย ค่าวอเตอร์ แอคทिवิตี้ในช่วงความยาวคลื่น 1330-1420, 1648-1688, 2290-2400 nm ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 หน่วยตัวอย่างของสมการที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing)	101
55	ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าวอเตอร์ แอคทिवิตี้จากสเปกตรัม ที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First Derivative)	102
56	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression coefficient) ที่ใช้ทำนาย ค่าวอเตอร์ แอคทिवิตี้ในช่วงความยาวคลื่น 1330-1420, 1648-1688, 2290-2400 nm ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 หน่วยตัวอย่างของสมการที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative)	102
57	ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าวอเตอร์ แอคทिवิตี้จากสเปกตรัม ที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี MSC	103
58	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression coefficient) ที่ใช้ทำนาย ค่าวอเตอร์ แอคทिवิตี้ในช่วงความยาวคลื่น 1314-1410, 2288-2400 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 หน่วยตัวอย่างของสมการที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี MSC	103
59	สเปกตรัมของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมในข้อ 5.1 จำนวน 150 หน่วย ตัวอย่างด้วยเครื่อง Near Infrared Spectroscopy	108
60	ลักษณะสเปกตรัมที่ยังไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว ที่ผ่านการเตรียมตัวอย่างในข้อ 5.1 ซึ่งได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR	109

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่		หน้า
61	ลักษณะสเปกตรัมที่ยังไม่ผ่านการปรับแต่งสำหรับตัวอย่างชุด Calibration และ Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมในข้อ 5.1	109
62	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างชุด Calibration และตัวอย่างชุด Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมในข้อ 5.1	110
63	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่งของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมในข้อ 5.1	110
64	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) ของตัวอย่างชุด Calibration และชุด Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมในข้อ 5.1	111
65	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี 1 D ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการเตรียมในข้อ 5.1 ที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง	112
66	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) ของตัวอย่างชุด Calibration และตัวอย่างชุด Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมในข้อ 5.2	113
67	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมในข้อ 5.2 ที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง	113
68	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC ของตัวอย่างชุด Calibration และ Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการเตรียมในข้อ 5.2	114

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่	หน้า	
69	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมตัวอย่างในข้อ 5.2 ซึ่งได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง	114
70	ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าปริมาณไขมันในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการจำนวน 100 ตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative)	117
71	ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าปริมาณไขมันในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการจำนวน 100 ตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี MSC	118
72	ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าปริมาณไขมันในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการจำนวน 100 ตัวอย่าง ของสมการที่ไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม	118
73	ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าปริมาณไขมันในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการจำนวน 100 ตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing)	119
74	ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าปริมาณไขมันในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการจำนวน 100 ตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative)	119
75	ค่าปริมาณไขมันของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง	122

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่	หน้า
76 ค่าปริมาณไขมันของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม	122
77 ค่าปริมาณไขมันของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)	123
78 ค่าปริมาณไขมันของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative) ของตัวอย่างตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)	123
79 ค่าปริมาณไขมันของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี MSC ของตัวอย่างตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)	124
80 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าไขมันจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative)	127
81 ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการ (Regression coefficient) ที่ใช้ในการทำนายค่าไขมันในตัวอย่างขนมขบเคี้ยว ที่ช่วงความยาวคลื่น 1300-1400, 1600-1800 นาโนเมตร จากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (2 D)	127
82 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าไขมันจากสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม	128

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่	หน้า
83 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าไขมันจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing)	128
84 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าไขมันจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative)	129
85 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าไขมันจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC	129
86 สเปกตรัมของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมตัวอย่างในข้อ 4.1 จำนวน 100 หน่วยตัวอย่างที่วัดด้วยเครื่อง NIR ตั้งแต่ช่วง 1100-2500 นาโนเมตร	133
87 ลักษณะสเปกตรัมที่ยังไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมตัวอย่างในข้อ 4.1 ซึ่งได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร	134
88 ลักษณะสเปกตรัมที่ยังไม่ผ่านการปรับแต่งสำหรับตัวอย่างชุด Calibration และ Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมในข้อ 4.1	135
89 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างชุด Calibration และตัวอย่างชุด Validation	135
90 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง	136
91 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) ของตัวอย่างชุด Calibration และชุด Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว	137

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่	เนื้อหา	หน้า
92	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 nm เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง	137
93	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second Derivative) ของตัวอย่างชุด Calibration และตัวอย่างชุด Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว	138
94	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (2 D) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง	139
95	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC ของตัวอย่างชุด Calibration และ Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว	140
96	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง	140
97	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าไทโอบาร์บิทริก แอซิด นัมเบอร์ ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 80 หน่วยตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative)	143
98	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าไทโอบาร์บิทริก แอซิด นัมเบอร์ ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 80 หน่วยตัวอย่างของสมการไม่ผ่านการปรับแต่ง	144
99	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าไทโอบาร์บิทริก แอซิด นัมเบอร์ ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 80 หน่วยตัวอย่าง ด้วยวิธีที่ Smoothing	144

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่	หน้า
100	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 80 หน่วยตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative) 145
101	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร จำนวน 80 หน่วยตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC 145
102	ค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation) 148
103	ค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งไม่ผ่านการปรับแต่งของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation) 149
104	ค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation) 150
105	ค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (1 D) ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง 151
106	ค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการ MSC ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง 152

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่		หน้า
107	ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ จากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (2 D)	155
108	ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการ (Regression coefficient) ที่ใช้ในการทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ในตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ช่วงความยาวคลื่น 1300-1400, 1600-1800 นาโนเมตร จากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี 2 D	156
109	ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จาก MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ จากสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม	156
110	ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่า TBA จากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี Smoothing	157
111	ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่า TBA จากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี 1 D	157
112	ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ จากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี MSC	158
113	สเปกตรัมดิบเริ่มต้นของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมตัวอย่างในข้อ 5.1 จำนวน 150 หน่วยตัวอย่าง ที่วัดด้วยเครื่อง NIR ตั้งแต่ช่วง 1100-2500 นาโนเมตร	162
114	ลักษณะสเปกตรัมที่ยังไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมตัวอย่างในข้อ 5.1 ซึ่งได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร	163
115	ลักษณะสเปกตรัมที่ยังไม่ผ่านการปรับแต่งสำหรับตัวอย่างชุด Calibration และ Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมตัวอย่างในข้อ 5.1	163

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่		หน้า
116	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างชุด Calibration และตัวอย่างชุด Validation	164
117	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง	164
118	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (1 D) ของตัวอย่างชุด Calibration และชุด Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว	165
119	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง	166
120	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) ของตัวอย่างชุด Calibration และตัวอย่างชุด Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว	167
121	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง	167
122	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC ของตัวอย่างชุด Calibration และ Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว	168
123	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง	168

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่		หน้า
124	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนาย ค่าปริมาณโปรตีนในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่ม สร้างสมการ จำนวน 100 หน่วยตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี การหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative)	171
125	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนาย ค่าปริมาณโปรตีนในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่าง กลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 หน่วยตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่ง ด้วยวิธี Smoothing	172
126	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนาย ค่าปริมาณโปรตีน ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่าง กลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 หน่วยตัวอย่าง ของสมการ ไม่ผ่านการปรับแต่ง	172
127	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้นำค่าปริมาณ โปรตีนในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้าง สมการ จำนวน 100 หน่วยตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี 1 D	173
128	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนาย ค่าปริมาณโปรตีนในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่าง กลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 หน่วยตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่ง ด้วยวิธี MSC	173
129	ค่าปริมาณโปรตีนของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับ ค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม ด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบ ความถูกต้อง (Validation)	176
130	ค่าปริมาณโปรตีนของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับ ค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งไม่ผ่านการปรับแต่ง สเปกตรัมของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)	176

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่	หน้า
131 ค่าปริมาณโปรตีนของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับ ค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม ด้วยวิธีการทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างกลุ่ม ตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)	177
132 ค่าปริมาณโปรตีนของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับ ค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม ด้วยวิธี 1 D ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง	177
133 ค่าปริมาณโปรตีนของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับ ค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม ด้วยวิธี MSC ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)	178
134 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายปริมาณโปรตีนจากสเปกตรัม ที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative)	182
135 ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอย (Regression coefficient) ที่ใช้ในการทำนายค่าปริมาณ โปรตีนในตัวอย่างขนมขบเคี้ยว ในช่วงความยาวคลื่น 1646-1746, 1814-1872, 2190-2230, 2240-2260, 2294-2320 นาโนเมตร จากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่ง ด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative)	182
136 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายปริมาณโปรตีนจากสเปกตรัม ที่ไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม	183
137 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายปริมาณโปรตีนจากสเปกตรัมที่ผ่าน การปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing)	183
138 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายปริมาณโปรตีนจากสเปกตรัมที่ผ่าน การปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative)	184

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่		หน้า
139	ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายปริมาณโปรตีนจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี MSC	184
140	สเปกตรัมดิบเริ่มต้นของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมตัวอย่างในข้อ 6.1 จำนวน 110 หน่วยตัวอย่าง ที่วัดด้วยเครื่อง NIR ตั้งแต่ช่วง 1100-2500 นาโนเมตร	190
141	ลักษณะสเปกตรัมเริ่มต้นที่ยังไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมตัวอย่างในข้อ 6.1 ซึ่งได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร	191
142	ลักษณะสเปกตรัมที่ยังไม่ผ่านการปรับแต่งสำหรับตัวอย่างชุด Calibration และ Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมในข้อ 6.1	191
143	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างชุด Calibration และตัวอย่างชุด Validation	192
144	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง	192
145	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative) ของตัวอย่างชุด Calibration และชุด Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว	193
146	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง	194
147	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ของตัวอย่างชุด Calibration และตัวอย่างชุด Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว	195

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่		หน้า
148	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง	195
149	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC ของตัวอย่างชุด Calibration และ Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว	196
150	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง	196
151	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 88 หน่วยตัวอย่างของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี 2 D	200
152	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายปริมาณ MSG ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 88 หน่วยตัวอย่างของสมการที่ไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม	200
153	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตรของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 88 หน่วยตัวอย่างของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี Smoothing	201
154	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้นายปริมาณ MSG ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 88 หน่วยตัวอย่างของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี 1 D	202
155	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายปริมาณ MSG ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 88 หน่วยตัวอย่างของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC	202

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่		หน้า
156	ค่าปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งการหาอนุพันธ์อันดับสองของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)	205
157	ค่าปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง	205
158	ค่าปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง	206
159	ค่าปริมาณ MSG ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative) ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง	206
160	ค่าปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี MSC ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง	207
161	ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายปริมาณ MSG จากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative)	211
162	ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมต ด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative)	211

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่		หน้า
163	ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตจากสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม	212
164	ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing)	212
165	ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative)	213
166	ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี MSC	213
ภาพผนวกที่		
ก1	ตัวอย่าง Pellet ประเภทโปแต๊	229
ก2	ตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการทอด	229
ก3	ตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการทอดแล้วนำไปบรรจุในถุงพลาสติกประเภทโพลีเอสเตอร์ชนิดที่มีซิปล	230
ก4	ตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการปั่นนาน 5 วินาที	230
ก5	นำตัวอย่างที่ผ่านการปั่นบรรจุลงใน Rotating cup ก่อนทำการวิเคราะห์ด้วยเครื่อง NIR	230
ก6	เครื่อง Near Infrared Spectroscopy (BRAN+LUEBBE, InfraAlyzer 500, Norderstedt, Germany)	231
ข1	ภาพเครื่องวอเตอร์ แอคติวิตีไฮ้ NOVASINA รุ่น RS 232	234

คำอธิบายสัญลักษณ์และคำย่อ

NIRS	=	Near infrared spectroscopy
PLSR	=	Partial least squares regression
MWPLSR	=	Moving window partial least squares regression
F	=	Factor
R_{cal}	=	Correlation coefficient of calibration
R_{val}	=	Correlation coefficient of validation
SEC	=	Standard Error of calibration
SEP	=	Standard Error of validation
RPD	=	Ratio of standard error of prediction to standard deviation
MSC	=	Multiplicative scatter correction
1D	=	First derivative
2D	=	Second derivative
A_w	=	Water Activity
TBA	=	Thiobarbituric acid number
MSG	=	Monosodium glutamate

การตรวจสอบคุณภาพผลิตภัณฑ์ขนมขบเคี้ยวด้วยเทคนิค

สเปกโตรสโกปีย่านใกล้อินฟราเรด

Determination of Snack Food Quality by Near Infrared Spectroscopy

คำนำ

ขนมขบเคี้ยว คือ อาหารที่รับประทานเล่นระหว่างอาหารมื้อหลัก ลักษณะเด่นของขนมขบเคี้ยวในปัจจุบัน คือ น้ำหนักน้อย รับประทานง่าย จัดเป็นอาหารที่ให้พลังงานสูง ทั้งนี้ ในปัจจุบันขนมขบเคี้ยวมีการขยายตัวอย่างต่อเนื่องตามจำนวนประชากร รวมทั้งกำลังซื้อที่ปรับตัวสูงขึ้น จนปัจจุบันตลาดขนมขบเคี้ยวมีมูลค่าตลาดสูงถึงประมาณปีละ 10,000 ล้านบาท อย่างไรก็ตาม แม้ว่าตลาดขนมขบเคี้ยวจะมีการขยายตัวอย่างต่อเนื่อง แต่ตลาดขนมขบเคี้ยวเองก็มีปัญหาและอุปสรรคหลายประการ ไม่ว่าจะเป็นสภาพตลาดที่มีการแข่งขันค่อนข้างรุนแรง ทั้งในส่วนของขนมขบเคี้ยวที่ผลิตภายในประเทศรวมทั้งขนมขบเคี้ยวที่นำเข้าจากต่างประเทศ ดังนั้น จึงต้องมีการตรวจสอบคุณภาพทางด้านกายภาพและเคมี ก่อนที่จะมีการนำสินค้าออกสู่ตลาดไปถึงมือผู้บริโภค เพื่อให้ผลิตภัณฑ์ขนมขบเคี้ยวมีคุณภาพตรงตามมาตรฐานที่กำหนด ด้วยเหตุนี้ การตรวจสอบค่าปัจจัยคุณภาพด้านปริมาณความชื้น, ค่าวอเตอร์แอกติวิตี (Water Activity) ค่าโปรตีน ค่าไขมันค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด (Thiobarbituric acid number; TBA) และค่าปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมต (MSG) ของผลิตภัณฑ์ขนมขบเคี้ยวจึงมีความสำคัญ โดยในปัจจุบันการวิเคราะห์ปัจจัยคุณภาพในแต่ละด้านด้วยวิธีทางเคมีเป็นการตรวจสอบที่ทำลายตัวอย่าง ใช้เวลานาน ทำให้การผลิตเกิดความล่าช้า การนำเทคนิค Near Infrared Spectroscopy (NIRS) มาทำการตรวจสอบปริมาณความชื้น, ค่าวอเตอร์แอกติวิตี, ค่าโปรตีน ค่าไขมัน ค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิดและค่าปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตของผลิตภัณฑ์ขนมขบเคี้ยวเป็นอีกวิธีหนึ่งที่ทำให้ได้ข้อมูลที่รวดเร็วมากขึ้น ในส่วนของการตรวจสอบค่าคุณภาพด้วยเครื่อง NIR จะประกอบไปด้วย 2 ขั้นตอนหลัก คือ ขั้นตอนแรกเป็นการสร้างสมการที่ใช้ในการทำนายค่าคุณภาพที่ทำการศึกษา (Calibration) จากนั้นจึงทำขั้นตอนการตรวจสอบความถูกต้อง (Validation) ของสมการที่ได้ว่ามีความเหมาะสมในการทำนายค่าคุณภาพหรือไม่ ทั้งนี้ ในปัจจุบันมีกลุ่มนักวิจัยที่ทำการศึกษาเกี่ยวกับการตรวจสอบคุณภาพของผลิตภัณฑ์ขนมขบเคี้ยว โดยใช้เทคนิค NIR เช่น Cecila and Luis (2009) ใช้เทคนิค NIR ในการตรวจสอบคุณภาพของมันฝรั่งแผ่นทอดกรอบ โดยทำการตรวจสอบคุณภาพในเรื่องปริมาณไขมันและปริมาณความชื้น สำหรับสมการทำนายในเรื่องปริมาณความชื้น มีค่า R เท่ากับ 0.97 และมีค่า SEC เท่ากับ 0.3% ส่วนสมการทำนายปริมาณไขมันมีค่า R เท่ากับ 0.96 และค่า SEC เท่ากับ 1.6%

วัตถุประสงค์

1. เพื่อศึกษาคุณภาพทางเคมีและกายภาพของตัวอย่างนมขบเคี้ยวในเรื่องปริมาณความชื้น ค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี ค่าปริมาณไขมัน ค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ ค่าปริมาณโปรตีน ค่าปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมต
2. เพื่อสร้างสมการทำนายที่เหมาะสมในการทำนายค่าคุณภาพทางเคมีและกายภาพของตัวอย่างนมขบเคี้ยวในเรื่องปริมาณความชื้น ค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี ค่าปริมาณไขมัน ค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ ค่าปริมาณโปรตีน ค่าปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมต
3. เพื่อตรวจสอบความถูกต้องของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายคุณภาพทางเคมีและกายภาพของตัวอย่างนมขบเคี้ยวในเรื่องปริมาณความชื้น ค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี ค่าปริมาณไขมัน ค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ ค่าปริมาณโปรตีน ค่าปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมต

การตรวจเอกสาร

ขนมขบเคี้ยว (Snack) หมายถึง อาหารที่กินระหว่างมื้อ, อาหารมือเบา หรืออาหารที่ทานระหว่างมื้ออาหารปกติ (Webster's New Ninth Collegiate Dictionary)

ขนมขบเคี้ยว

ขนมขบเคี้ยว คือ อาหารที่ใช้รับประทานเล่นระหว่างอาหารมื้อหลัก ลักษณะเด่นของขนมขบเคี้ยวในปัจจุบัน คือ น้ำหนักน้อย เก็บรักษาง่าย จัดเป็นอาหารที่ให้พลังงานสูง (Gordon, 1990) เอชี นิลเสน (บริษัทวิชัยการค้า) ได้แบ่งเซกเมนต์ขนมออกได้กว้างๆ ดังนี้

1. ขนมขึ้นรูป (Extrude) มูลค่าใหญ่ที่สุด คือ 4,816 ล้านบาท (สัดส่วน 33.8%) เป็นขนมที่ทำจากแป้งอบกรอบ เช่น แป้งข้าวเจ้า แป้งข้าวเหนียว แป้งสาลี แป้งข้าวโพด และเพิ่มรสชาติโดยการปรุงรสด้วยส่วนผสมอื่นๆ เช่น รสซอส รสสาหร่าย เป็นต้น ปัจจุบันสินค้าที่เป็นผู้นำตลาดได้แก่ คอนเน่ (11.7%) ตะวัน (7.4%) สแน็คแจ๊ค (7.6%) ปาปริก้า (6.3%) แจ็คซ์ (4.9%) โปเต้ (4.40%) เป็นต้น
2. มันฝรั่งชนิดแผ่น (Potato Chip) มูลค่าประมาณ 4,745 ล้านบาท (สัดส่วน 33.3%) เป็นขนมมันฝรั่งสไลด์ทอดปรุงรสรสชาติต่างๆ เช่น รสมันฝรั่งแท้ รสบาร์บีคิว เป็นต้น ปัจจุบันสินค้าที่เป็นผู้นำตลาดได้แก่ เลย์ (69.90%) เทสโต (19.2%) และมันฝรั่งพริงเกิล (7.6%) เป็นต้น
3. อาหารว่างจากเนื้อปลาหรือปลาสวรรค์ (Fish Snack) มูลค่าประมาณ 1,304 ล้านบาท (สัดส่วน 9.2%) เป็นขนมที่ทำจากปลาที่ผ่านกระบวนการย่าง ปรุงรส เป็นรสชาติต่างๆ ปัจจุบันสินค้าที่เป็นผู้นำตลาดได้แก่ ทาโร (68.5%) ฟิชโซ (15.1%) และเบนโตะ (3.3%)
4. ถั่ว (Peanut) มูลค่าประมาณ 1,255 ล้านบาท (สัดส่วน 8.8%) ได้แก่ ผลิตภัณฑ์จากถั่วประเภทต่างๆ เช่น ถั่วลิสง ถั่วลิสงคั่ว เม็ดมะม่วงหิมพานต์ อัลมอนต์ ปรุงรสรสชาติต่างๆ ปัจจุบันสินค้าที่เป็นผู้นำตลาดได้แก่ โก้โก้ (32.0%) ทองการ์เด็นท์ (28.3%) และเจดีย์ถั่ว (11.5%)

5. ข้าวเกรียบกุ้ง (Prawn cracker) มูลค่าประมาณ 826 ล้านบาท (สัดส่วน 5.6%) เป็นขนมที่ทำจากแป้งและปรุงรสชาดกุ้ง ปัจจุบันสินค้าที่เป็นผู้นำตลาดได้แก่ ฮานามิ (64.3%) คาลบี้ (6.6%) และมโนราห์ (5.6%) เป็นต้น

6. ข้าวอบกรอบ (Rice Cracker) มูลค่าประมาณ 556 ล้านบาท (สัดส่วน 3.9%) เป็นขนมที่ทำจากข้าวหอมมะลิอบกรอบปรุงรส ปัจจุบันสินค้าที่เป็นผู้นำตลาดได้แก่ โคโชะ (79.2%) และชินมัย (9.8%) เป็นต้น

7. อื่นๆ เช่น ปลาหมึก ข้าวโพด เป็นต้น มูลค่าประมาณ 748 ล้านบาท (สัดส่วน 5.2%) ได้แก่ ผลิตภัณฑ์ปลาหมึกปรุงรสต่างๆ ปัจจุบันสินค้าที่เป็นผู้นำตลาดได้แก่ เบนโตะ เต้าทง สกวิคกี้ สำหรับข้าวโพด (Popcorn) ได้แก่ ผลิตภัณฑ์ข้าวโพดคั่ว ปรุงรสชาดต่างๆ เช่น รสเนย รสกาแฟ รสคาราเมล ปัจจุบันสินค้าที่เป็นผู้นำตลาดได้แก่ โตโร Alet ทือป

นิรนาม (2552) ได้สรุปเกี่ยวกับมูลค่าทางการตลาดของผลิตภัณฑ์ขนมขบเคี้ยวไว้ดังแสดงในตารางที่ 1

ตารางที่ 1 มูลค่าทางการตลาดของขนมขบเคี้ยวแต่ละประเภทในปี พ.ศ. 2552

ประเภทขนมขบเคี้ยว	มูลค่าการตลาด (ล้านบาท)
มันฝรั่งแผ่น	4500
ขนมจิ้งจรูป	5250
ถั่ว	3700
ข้าวเกรียบกุ้ง	826
ปลาเส้น	900-1000

ที่มา: นิรนาม (2552)

อย่างไรก็ตามแม้ว่าตลาดขนมขบเคี้ยวจะมีการขยายตัวอย่างต่อเนื่อง แต่ตลาดขนมขบเคี้ยวเองก็มีปัญหาและอุปสรรคหลายประการ ไม่ว่าจะเป็นสภาพตลาดที่มีการแข่งขันค่อนข้างรุนแรง ทั้งในส่วนของขนมขบเคี้ยวที่ผลิตภายในประเทศ รวมทั้งขนมขบเคี้ยวที่นำเข้าจากต่างประเทศ โดยในปัจจุบันมีผู้ประกอบการจากต่างประเทศหลายรายที่เข้ามาร่วมลงทุน และใช้ประเทศไทยเป็นฐานการผลิตขนมขบเคี้ยวเพื่อการส่งออกในภูมิภาคเอเชีย ทั้งนี้ เนื่องจากการตลาดภายในประเทศมีการแข่งขันกันอย่างรุนแรงส่งผลให้ผู้ประกอบการหันไปเพิ่มบทบาทในการส่งออกมากยิ่งขึ้น การส่งออกผลิตภัณฑ์ขนมขบเคี้ยวของไทยในหลายปีที่ผ่านมาได้มีการขยายตัวเพิ่มขึ้นอย่างต่อเนื่อง เนื่องจากผลิตภัณฑ์เป็นที่ยอมรับทางด้านรูปแบบ และรสชาติจากผู้บริโภคในต่างประเทศ โดยมูลค่าการส่งออกเพิ่มขึ้นจาก 170.1 ล้านบาท ในปี พ.ศ. 2534 มาเป็น 702.4 ล้านบาท ในปี พ.ศ. 2542 โดยมีอัตราการขยายตัวเฉลี่ยร้อยละ 39.12 ต่อปี โดยที่ประเภทของผลิตภัณฑ์ขนมขบเคี้ยวที่มีมูลค่าการส่งออกสูงสุด คือ ขนมขบเคี้ยวประเภทอาหารปรุงแต่งที่ทำมาจากธัญพืชประเภทถั่ว ดังแสดงในตารางที่ 2 (สิริมา, 2544)

ตารางที่ 2 ปริมาณและมูลค่าการส่งออกของผลิตภัณฑ์ขนมขบเคี้ยวของไทย
ในปี พ.ศ. 2543 - พ.ศ. 2552

ปี	ข้าวเกรียบ		มันฝรั่งทอดกรอบ		ถั่วลิสงอบ		รวม	
	ปริมาณ (ตัน)	มูลค่า (ล้านบาท)	ปริมาณ (ตัน)	มูลค่า (ล้านบาท)	ปริมาณ (ตัน)	มูลค่า (ล้านบาท)	ปริมาณ (ตัน)	มูลค่า (ล้านบาท)
2543	2474.8	111.1	83.5	2.8	1069.5	56.2	3627.8	170.1
2544	3115.3	179.5	22.7	1.6	922.1	49.7	4060.1	230.8
2545	5591.3	276.1	64.8	3.2	802.5	41.9	6458.6	312.2
2546	4626.5	255.0	113.0	6.4	768.7	42.9	5508.2	304.3
2547	4420.9	303.4	45.1	3.7	1082.8	47.1	5548.8	354.2
2548	5699.8	356.0	60.4	6.7	781.2	49.3	6541.4	412.0
2549	8497.3	496.5	40.5	5.3	1034.0	72.2	9571.8	574.0
2550	6213.0	614.6	115.2	13.9	650.3	59.5	6978.5	688.0
2551	7198.4	620.3	135.0	15.2	806.5	66.9	8139.9	702.4
2552	5050.3	427.4	52.2	6.7	700.4	62.7	5802.9	496.8

ที่มา: กรมเศรษฐกิจการพาณิชย์ กระทรวงพาณิชย์

จากที่กล่าวมาจะพบว่า อุตสาหกรรมขนมขบเคี้ยวจัดเป็นตลาดแข่งขันแบบเสรี ซึ่งจะเป็นข้อดีของผู้ประกอบการ แต่ในอีกด้านหนึ่งกลับเป็นจุดอ่อนของอุตสาหกรรมเพราะทำให้ผู้ประกอบการรายอื่นสามารถเข้าสู่ตลาดได้ง่าย ทำให้เป็นอุตสาหกรรมที่มีการแข่งขันกันรุนแรงมาก ขณะที่ขนมขบเคี้ยวเป็นสินค้าที่มีอายุการใช้งานต่ำ แต่ผู้บริโภคต้องการความสดใหม่ของผลิตภัณฑ์อย่างต่อเนื่อง ทำให้ความภักดีของผู้บริโภคต่ำ ดังนั้น ปัจจัยที่สำคัญประการหนึ่งในการอยู่รอดของอุตสาหกรรมขนมขบเคี้ยว คือ มาตรฐานคุณภาพและความปลอดภัยในการผลิต โดยมาตรฐานคุณภาพและความปลอดภัยในการผลิตเมื่อเทียบกับต่างประเทศแล้ว ยังไม่สามารถแข่งขันกับประเทศอื่นได้ โดยเฉพาะประเทศที่พัฒนาแล้ว ด้วยเหตุนี้จึงมีความจำเป็นที่จะต้องให้ความสำคัญกับเรื่องดังกล่าว โดยเฉพาะในเรื่องการตรวจสอบคุณภาพทางเคมีและทางกายภาพของผลิตภัณฑ์ขนมขบเคี้ยวก่อนที่จะมีการนำสินค้าออกสู่ตลาดไปถึงมือผู้บริโภค ทั้งนี้ เพื่อให้ผลิตภัณฑ์ขนมขบเคี้ยวมีคุณภาพตรงตามมาตรฐานที่กำหนด ดังนั้น การตรวจสอบค่าปัจจัยคุณภาพด้านปริมาณความชื้น, ค่าวอเตอร์แอกติวิตี (Water Activity), ค่าโปรตีน ค่าไขมันและค่าไทโอบาร์บิทรอิก แอซิด (Thiobarbituric acid number; TBA) และปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตของผลิตภัณฑ์ขนมขบเคี้ยวจึงมีความสำคัญ

ปัจจัยที่ใช้ในการพิจารณาคุณภาพของผลิตภัณฑ์ขนมขบเคี้ยว

ในการพิจารณาคุณภาพของผลิตภัณฑ์ขนมขบเคี้ยว จะพิจารณาจากความชื้น ปริมาณน้ำมัน และปริมาณเกลือในผลิตภัณฑ์สุดท้าย ดังแสดงในตารางที่ 3

ตารางที่ 3 ข้อกำหนดของผลิตภัณฑ์ขนมขบเคี้ยว

ปัจจัยคุณภาพ	ช่วงการวิเคราะห์ (%)	
	น้อยสุด	มากที่สุด
ความชื้น	10.0	12.0
โปรตีน	7.5	9.0
ไขมัน	0.3	0.9
ไฟเบอร์	0.3	0.5
เกลือ	0.1	0.5

ที่มา: Gordon (1990)

ปัญหาในการวิเคราะห์ค่าคุณภาพของขนมขบเคี้ยว

จากปัญหาในการวิเคราะห์ค่าคุณภาพทางกายภาพและเคมี จึงได้มีการศึกษาวิธีการอื่นๆ ที่สามารถนำมาใช้ในการแก้ปัญหาดังกล่าว ทั้งนี้ พบว่าเทคนิคสเปกโตรสโกปีย่านใกล้อินฟราเรด น่าจะเป็นอีกทางเลือกหนึ่งที่สามารถนำมาใช้ในการวัดค่าคุณภาพของผลิตภัณฑ์ขนมขบเคี้ยวแบบ ไม่ทำลายตัวอย่าง ซึ่งเทคนิคดังกล่าว (Phil, 2007) ได้กล่าวถึงข้อดี ดังนี้

1. ความรวดเร็วในการวิเคราะห์ โดยที่การวัดในแต่ละตัวอย่างจะใช้เวลาในการวัดไม่เกิน 2 นาที ในขณะที่การวิเคราะห์ค่าคุณภาพทางกายภาพและทางเคมีใช้เวลาหลายชั่วโมงหรือเป็นวัน
2. ต้นทุนต่อหน่วยการวิเคราะห์มีราคาถูก เนื่องจากใช้ผู้ทำการวิเคราะห์เป็นจำนวนน้อย และไม่ต้องใช้สารเคมีในการวิเคราะห์จึงจัดเป็นวิธีที่ไม่ก่อให้เกิดมลพิษต่อสิ่งแวดล้อม
3. เป็นวิธีที่เหมาะสมสำหรับนำไปควบคุมคุณภาพในกระบวนการผลิต เนื่องจากสามารถทำการติดตั้งเครื่องดังกล่าวได้ง่าย โดยที่สามารถติดตั้งเครื่องเข้าไปในระบบของกระบวนการผลิตได้โดยไม่ต้องสุ่มตัวอย่างออกมาวิเคราะห์นอกกระบวนการผลิต
4. เป็นวิธีการตรวจสอบที่ไม่ทำลายตัวอย่าง ทำให้ตัวอย่างที่ผ่านการตรวจสอบแล้วสามารถนำไปจำหน่าย ส่งออก หรือบริโภคต่อได้
5. มีความสะดวกและปลอดภัยต่อการใช้งาน เนื่องจากในการปฏิบัติไม่จำเป็นต้องใช้ผู้ที่มีประสบการณ์ ทั้งนี้ เนื่องจากสามารถปฏิบัติการตามคู่มือได้ทันที

เทคนิค Near Infrared Spectroscopy (NIRS)

หลักการพื้นฐานของเทคนิค NIR

Ozaki *et al.* (2007) ได้อธิบายว่า เทคนิค Near Infrared Spectroscopy (NIRS) เป็นเทคนิคทางสเปกโตรสโกปีเทคนิคหนึ่งที่ใช้ในการประเมินคุณภาพทางเคมีและทางกายภาพของอาหาร และผลิตภัณฑ์อาหาร โดยมีความยาวคลื่นอยู่ในช่วง 780-2500 นาโนเมตร หรือที่จำนวนคลื่น

12,500-4,000 cm^{-1} โดยเป็นเทคนิคที่เกิดจากการดูดกลืนคลื่นแสงแบบ Overtone และ Combination แล้วทำให้โมเลกุลเกิดการสั่นที่ความถี่สูง และโมเลกุลจะถูกกระตุ้นจากสภาวะพื้น (Ground vibration level) ไปยังสภาวะกระตุ้น (Excited vibration level) ซึ่ง (Osborne *et al.*, 1993) กล่าวว่าปริมาณการดูดกลืนพลังงานแสง (Absorbance) จะเป็นไปตามกฎของเบียร์-ลัมเบิร์ต (Beer-Lambert) กล่าวคือ พลังงานของแสงเมื่อผ่านเข้าไปในตัวอย่งจะถูกดูดกลืนไว้โดยองค์ประกอบทางเคมีในตัวอย่ง ความเข้มของแสงที่ผ่านออกมาจะเป็นสัดส่วนกับปริมาณองค์ประกอบทางเคมี สารอินทรีย์ที่เกิดขึ้นในลักษณะนี้ เช่น CH, NH และ OH โดยส่วนประกอบหลักของอาหารที่ใช้เทคนิค NIR ในการตรวจสอบ ดังแสดงในตารางที่ 4 และแสดงตำแหน่งแถบในสเปกตรัมอินฟราเรดย่านใกล้ที่สำคัญ

ศุมาพร (2552) กล่าวว่า สเปกโตรสโคปีย่านใกล้ หรือ NIRS เป็นการศึกษาอันตรกิริยาระหว่างรังสีอินฟราเรดย่านใกล้ (NIR radiation) กับสสาร สสารที่สามารถเกิดอันตรกิริยากับรังสีอินฟราเรดย่านใกล้ คือ สสารที่โมเลกุลประกอบด้วยพันธะไฮโดรเจน (X-H) อะตอม X ได้แก่ C, O, N, S ฯลฯ อันตรกิริยาดังกล่าวคือ การที่โมเลกุลดูดกลืนรังสีอินฟราเรดย่านใกล้เข้าไป ซึ่งจะมีผลต่อการสั่นของพันธะต่างๆ ของโมเลกุล ระดับการดูดกลืนรังสีอินฟราเรดย่านใกล้ของสสารที่มีความยาวคลื่นต่างๆ จะปรากฏในสเปกตรัม NIR เพื่อนำไปประมวลผลในการวิเคราะห์เชิงปริมาณและคุณภาพต่อไป

ตารางที่ 4 การตรวจสอบส่วนประกอบหลักของอาหารโดยใช้เทคนิค NIR

ส่วนประกอบที่วัด	งานวิจัย	ที่มา
น้ำ	น้ำเป็นปัจจัยแรกที่ทำการศึกษาโดยใช้เทคนิค NIR	Martens (1982)
โปรตีน	Williams <i>et al.</i> ทำการศึกษาโปรตีน น้ำมัน น้ำ และแป้งในข้าวสาลีที่ผ่านการบด	Birth (1963)
ไขมันหรือน้ำมัน	ในปัจจุบันไขมันเป็นปัจจัยที่วัดเป็นประจำในโรงงาน	Bjarno (1981)
ซูโครส (Sucrose)	ซูโครสเป็นปัจจัยที่สำคัญต่อสุขภาพ	DeMenna (1998)

ตารางที่ 4 (ต่อ)

ส่วนประกอบที่วัด	งานวิจัย	ที่มา
อาหารสด (ผลไม้, น้ท)	Kawano, Saranwong and other ได้แสดงให้เห็นว่า NIR สามารถ นำมาใช้ในการวัดผลิตภัณฑ์ที่มี ความชื้นสูงได้	Kawano <i>et al.</i> (1995)
น้ำผึ้ง	ทำการวัดน้ำตาลในน้ำผึ้งและ ในผลิตภัณฑ์อื่นๆ	Martin (1992)
ลูกกวาด, ชอคโกแลต	ปริมาณนิโคตินซึ่งมีความสัมพันธ์ กับส่วนประกอบในชอคโกแลต	McClure (2001)
เบียร์	โดยทั่วไปปริมาณเอทานอลในเบียร์ ไวน์และสปิริตสามารถใช้ NIR ในการวิเคราะห์ได้	Osborne (1986)

ตารางที่ 5 แสดงตำแหน่งแถบในสเปกตรัมย่านใกล้อินฟราเรดที่สำคัญ

ความยาวคลื่น (นาโนเมตร)	ชนิดแถบ	โมเลกุล
874	โอเวอร์โทนอันดับสามของC-H	เบนซีน
910	โอเวอร์โทนอันดับสามของC-H	โปรตีน
928	โอเวอร์โทนอันดับสามของC-H	น้ำมัน
990	โอเวอร์โทนอันดับสองของO-H	แป้ง
1020	คอมบิเนชันของ N-H + amide I	โปรตีน
1143	โอเวอร์โทนอันดับสองของC-H	อะโรมาติก
1140	โอเวอร์โทนอันดับหนึ่งของO-H	แป้ง ซูโครส
1450	โอเวอร์โทนอันดับหนึ่งของO-H	แป้ง น้ำ
1480	โอเวอร์โทนอันดับหนึ่งของO-H	กลูโคส
1490	โอเวอร์โทนอันดับหนึ่งของO-H	เซลลูโลส

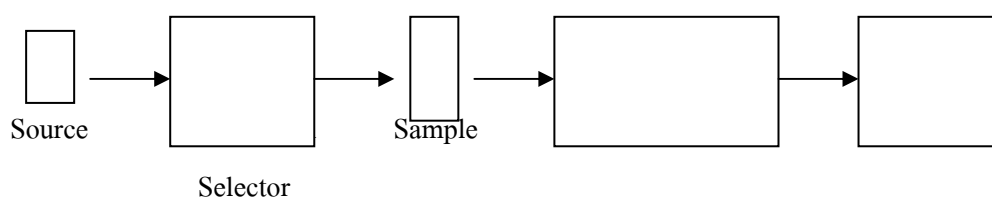
ตารางที่ 5 (ต่อ)

ความยาวคลื่น (นาโนเมตร)	ชนิดแถบ	โมเลกุล
1510	โอเวอร์โทนอันดับหนึ่งของN-H	โปรตีน
1528	โอเวอร์โทนอันดับหนึ่งของO-H	แป้ง
1580	โอเวอร์โทนอันดับหนึ่งของO-H	แป้ง กลูโคส
1685	โอเวอร์โทนอันดับหนึ่งของC-H	อะโรมาติก
1780	โอเวอร์โทนอันดับหนึ่งของC-H	เซลลูโลส
1980	คอมบิเนชันของ N-H + amide II	โปรตีน
2050	คอมบิเนชันของ N-H + amide II	โปรตีน
2080	คอมบิเนชันของ O-H + ben.	ซูโครส แป้ง
2180	คอมบิเนชันของ N-H amideI+ amide II	โปรตีน
2252	คอมบิเนชันของO-H+ben.	แป้ง
2336	คอมบิเนชันของ C-H + ben.	เซลลูโลส

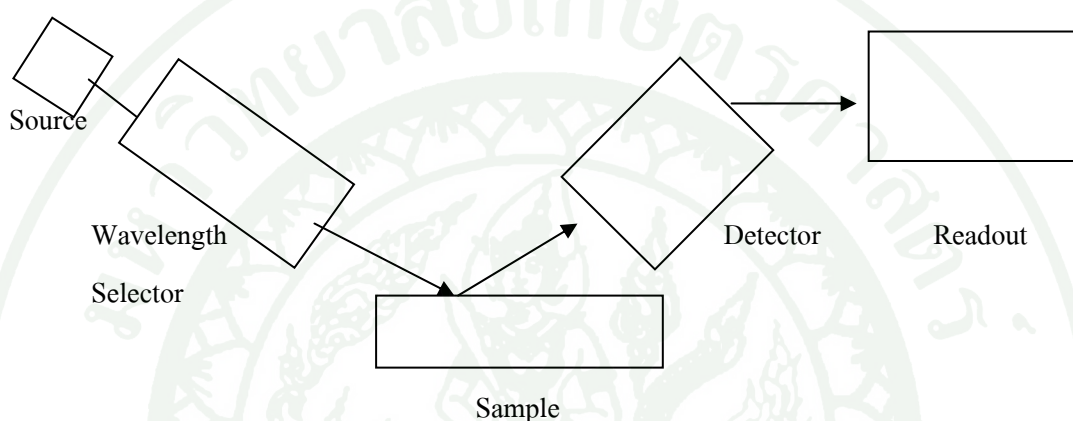
ที่มา: ศุมาพร (2009)

ส่วนประกอบของเครื่อง NIR

Mcclure and Satoru (2007) อธิบายว่าส่วนประกอบของเครื่อง NIR ประกอบไปด้วย 3 ส่วนหลักๆ คือ แหล่งกำเนิดแสง (NIR source) โมโนโครเมเตอร์ (Monochromator) เซลล์ใส่ตัวอย่าง (Sample cell) และเครื่องวัดแสง (Detector) โดยจะรวมส่วนประกอบต่างๆ เข้าด้วยกัน อย่างไรก็ตามการจัดส่วนประกอบเหล่านี้จะแตกต่างกันไปในเครื่องมือแต่ละประเภท แต่โดยพื้นฐานของเครื่องแต่ละประเภทจะแบ่งเป็น 2 ประเภท คือ แบบส่องผ่าน (Transmittance) และแบบสะท้อน (Reflectance) ซึ่งประกอบไปด้วยส่วนประกอบดังแสดงในภาพที่ 1



a) การส่องผ่าน (Transmittance)



b) การส่องผ่านสะท้อน (Reflectance)

ภาพที่ 1 แสดงถึงส่วนประกอบของเครื่องภายในของเครื่อง NIR ประเภทการส่องผ่าน และการส่องผ่านสะท้อน

ที่มา: Phil (2007)

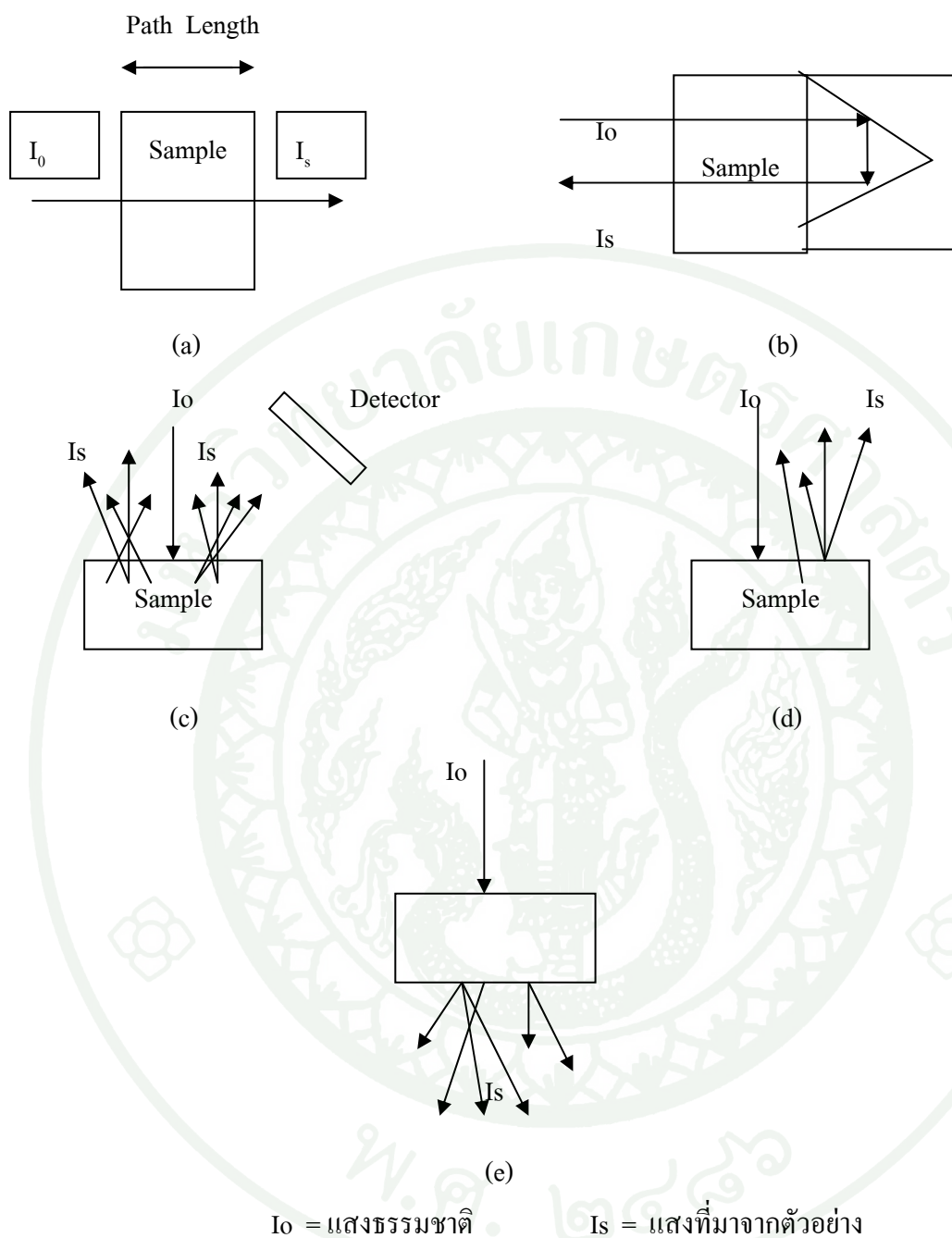
ประเภทของเครื่อง NIR

McClure and Satoru (2007) ได้แบ่งประเภทของเครื่องไว้ ดังนี้ คือ 1) เครื่อง NIR แบบ Diodes array โดยแบ่งออกเป็นหลายชนิด เช่น เครื่องประเภท Emitting Diode Arrays (EDA) เครื่องประเภทนี้นิยมใช้กันทั่วไปตามท้องตลาด และสามารถนำมาประยุกต์ใช้ในอุตสาหกรรมอาหารหลากหลายประเภท, เครื่อง Emitting Diode ประเภทอื่นๆ โดย (McClure, 2002) ทำการผลิตเครื่อง NIR แบบพกพา ซึ่งประกอบไปด้วย diodes 3 ตัว เพื่อใช้สำหรับประเมินปริมาณคลอโรฟิลล์และความชื้น โดยที่เครื่องดังกล่าวสามารถวัดที่ความยาวคลื่น 700, 880 และ 940 นาโนเมตร,

เครื่องประเภท Photodiode Detector Arrays (PDA) โดยเครื่องประเภทนี้สามารถใช้ในการวัดความยาวคลื่นในช่วง 200-1000 นาโนเมตร แต่จะเกิดสัญญาณรบกวนมากในช่วงคลื่นที่ต่ำกว่า 450 นาโนเมตร และมากกว่า 900 นาโนเมตร 2) เครื่อง NIR แบบ Interference Filters ซึ่งแบ่งออกเป็นได้หลายชนิด เช่น Fixed Filters โดยเครื่อง NIR ที่ใช้ในระยแรกจะเป็นประเภทนี้ แต่จะมีความสามารถจำกัดในการให้จำนวนคลื่น, Wedge interference filters เครื่องประเภทนี้จะให้ช่วงความยาวคลื่นที่กว้าง 3) เครื่อง NIR แบบ Moving Grating โดยเครื่องประเภทนี้จะวัดความเข้มของแสงครั้งละ 1 ความยาวคลื่น ตามมุมของเกรตติงที่เปลี่ยน 4) เครื่อง NIR แบบ Interferometer จะเป็นการวัดความเข้มของแสงในช่วงที่ทำการศึกษาทุกความยาวคลื่นพร้อมกันในรูปแบบของ Interferometer แล้วจึงนำข้อมูลที่ได้มาผ่านการแปลงสัญญาณเป็นค่าสเปกตรัมที่แต่ละความยาวคลื่น

เทคนิคการวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่อง NIR

อนุพันธ์ (2545) เมื่อนำตัวอย่างมาฉายแสงในย่านใกล้อินฟราเรด จะมีปฏิกิริยาหลายแบบเกิดขึ้นได้แก่ a) การส่องผ่าน (Transmittance) b) การส่องผ่านสะท้อน (Transflectance) c) การสะท้อนแบบแพร่ (Diffuse transflectance) d) อินเทอร์แอคแตนซ์ (Interactance) e) การส่องผ่านตัวอย่างที่มีการกระเจิงแสง (Transmittance through scattering medium) ดังแสดงในภาพที่ 2



ภาพที่ 2 แบบวิธีการวัดด้วย NIR สเปกโทรสโคปี (a) การส่องผ่าน (Transmittance) (b) การส่องผ่านสะท้อน (Transflectance) (c) การสะท้อนแบบแพร่ (Diffuse transflectance) (d) อินเทอร์แอคแทนซ์ (Interactance) (e) การส่องผ่านตัวอย่างที่มีการกระเจิงแสง (transmittance through scattering medium)

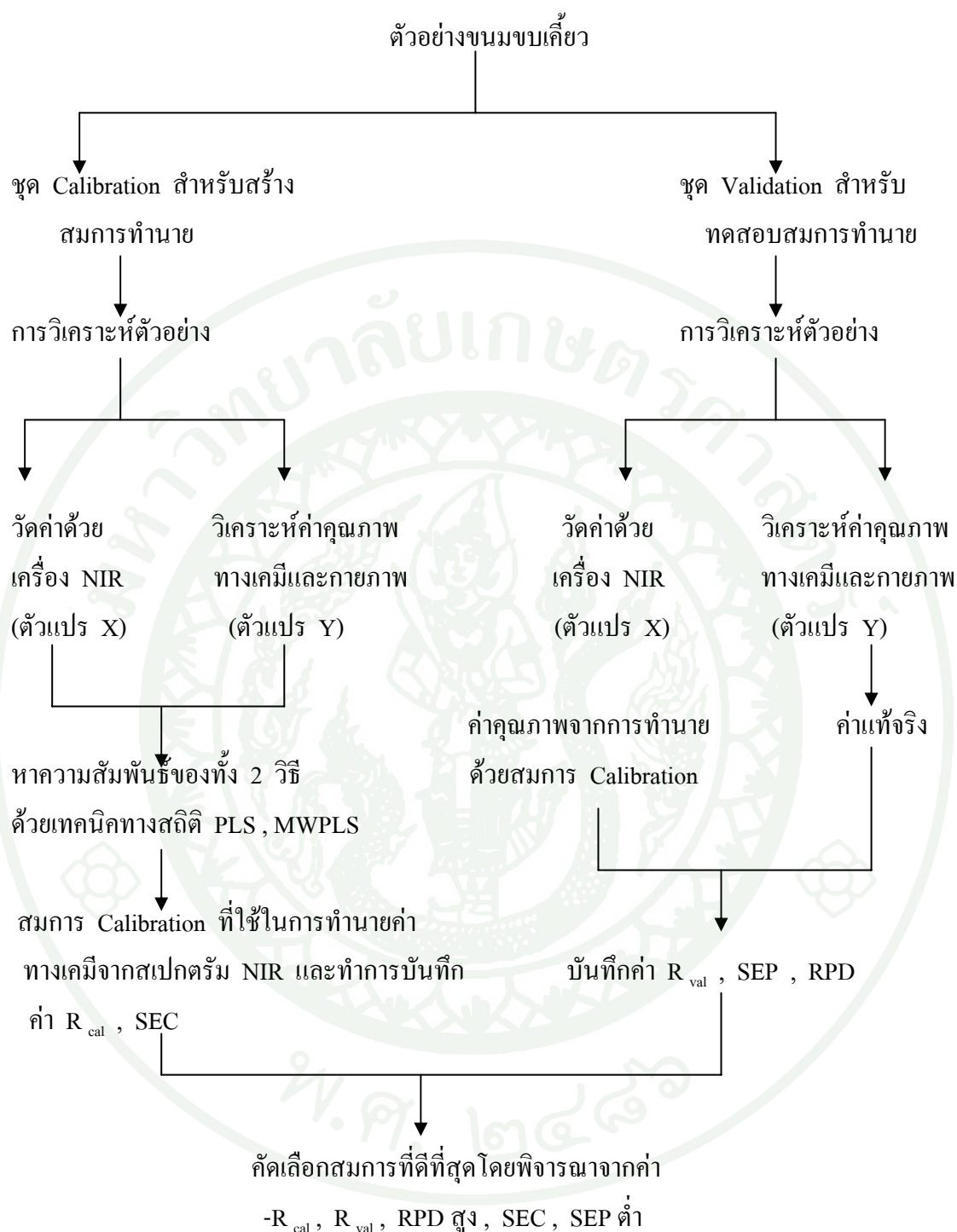
ที่มา: ศิวลักษณ์ และอนุพันธ์ (2552)

หลักการทำงานของเครื่อง NIR

เครื่อง NIR มีหลักการทำงานโดยเริ่มจากคลื่นแสงจากแหล่งกำเนิดแสง (Light source) ส่องผ่านมาและตกกระทบลงบนตัวอย่าง แล้วทำให้โมเลกุลของสารที่เป็นองค์ประกอบทางเคมีของตัวอย่างเกิดการสั่นและดูดกลืนคลื่นแสงไว้บางส่วน แสงส่วนที่เหลือจะสะท้อนหรือส่องผ่านจากตัวอย่างออกไปยังตัวรับแสง (NIR detector) ซึ่งตัวรับแสงจะทำหน้าที่ส่งสัญญาณไฟฟ้าไปยังคอมพิวเตอร์ แล้วคอมพิวเตอร์จะทำการแปลงสัญญาณทางไฟฟ้าให้อยู่ในรูปของ NIR spectrum หลังจากนั้นนำข้อมูลการดูดกลืนแสงของ NIR spectrum มาทำการวิเคราะห์ข้อมูลด้วยวิธีทาง Chemometric

การสร้างสมการทำนายและการตรวจสอบความถูกต้องของสมการทำนายที่สร้างขึ้น

การวิเคราะห์ข้อมูลเพื่อสร้างสมการทำนายประกอบด้วย 2 ขั้นตอน คือ ขั้นตอนการสร้างสมการที่ใช้ในการทำนาย และขั้นตอนการตรวจสอบความถูกต้องของสมการที่สร้างขึ้น ดังแสดงในภาพที่ 3

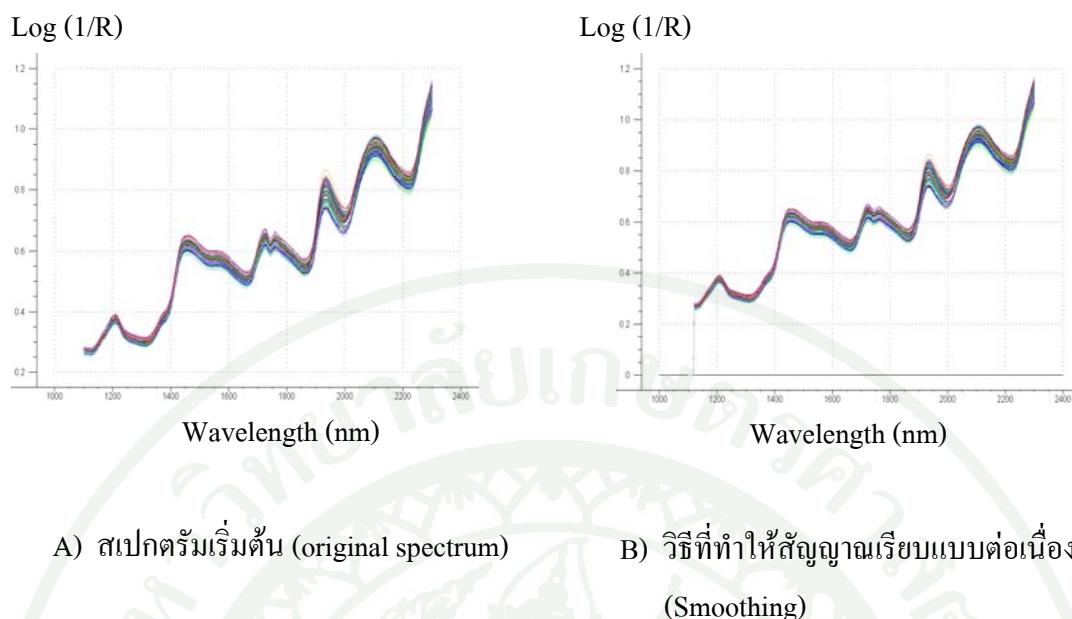


ภาพที่ 3 แผนผังขั้นตอนในการวิเคราะห์ข้อมูลและสร้างสมการทำนายจากสเปกตรัม
ที่วัดได้จากเครื่องมือ NIR

ขั้นตอนการสร้างสมการทำนาย

สมการทำนายสร้างโดยการนำตัวอย่างที่มีข้อมูลสเปกตรัมเริ่มต้นที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร มาหาความสัมพันธ์กับค่าคุณภาพที่ศึกษาด้วยวิธีทางสถิติ แต่ข้อมูลสเปกตรัมเริ่มต้นที่วัดได้อาจมีความแปรปรวนมาก เนื่องจากปัจจัยต่างๆ ได้แก่ ขนาดอนุภาคของตัวอย่าง (Particle size) ความชื้นในตัวอย่าง (Moisture content) และอุณหภูมิ โดยปัจจัยดังกล่าวจะมีความสัมพันธ์โดยตรงกับการกระเจิงแสง ซึ่งตัวอย่างที่มีความชื้นจะมีสเปกตรัมที่มีการดูดกลืนสูงในช่วงความยาวคลื่นของน้ำ จึงส่งผลเหมือนกับดิ่งให้การดูดกลืนที่ความยาวคลื่นใกล้เคียงสูงตามไปด้วย ในขณะที่ขนาดของอนุภาคที่แตกต่างกันเป็นสาเหตุให้การกระเจิงแสงของตัวอย่างแตกต่างกันไป กล่าวคือ ตัวอย่างที่มีขนาดอนุภาคที่เล็กจะให้สเปกตรัมที่มีการดูดกลืนแสงตลอดช่วงความยาวคลื่นต่ำกว่าสเปกตรัมของตัวอย่างที่มีขนาดอนุภาคใหญ่กว่า โดยผลดังกล่าวจะส่งผลให้สเปกตรัมที่สร้างขึ้นมีความแม่นยำในการทำนายลดลง ดังนั้น จึงมีการนำวิธีทางคณิตศาสตร์มาใช้ในการปรับแต่ง NIR Spectra ก่อนนำไปทำการสร้างสมการทำนาย วิธีการในการปรับแต่งสเปกตรัมเริ่มต้นมีหลายวิธี เช่น วิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) วิธี Multiplicative scatter correction (MSC) (อนุพันธ์, 2545)

1. วิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) วิธีนี้เป็นวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบที่นิยมใช้ ซึ่งจะเลือกใช้ในกรณีที่ข้อมูลมีสัญญาณรบกวนมากไม่เรียบ หรือต้องการทำให้สัญญาณเรียบและยังคงรูปร่างของสเปกตรัมเหมือนสเปกตรัมเริ่มต้น หรือเมื่อสเปกตรัมเริ่มต้นมียอดแหลมเป็นจำนวนมาก หลักการของวิธีนี้คือ กำหนดจำนวนข้อมูลในช่วงความยาวคลื่น ($n = 2m + 1$) และนำข้อมูลสเปกตรัม ($\log(1/R)$) ในช่วงที่กำหนด โดยเริ่มจากข้อมูล จำนวน $2m + 1$ จุดแรก มาหาสมการโพลิโนเมียลที่สามารถนำมาคำนวณค่าสเปกตรัมที่แต่ละจุด หรือแต่ละความยาวคลื่นในช่วงได้ใกล้เคียงที่สุด โดยวิธี least square เมื่อได้สมการแล้วนำมาคำนวณค่าสเปกตรัมที่จุดศูนย์กลางช่วง แล้วนำค่าที่คำนวณไปแทนค่าสเปกตรัมเดิมที่จุดหรือความยาวคลื่นนั้น ค่าที่คำนวณได้นี้ถือว่าเป็นค่าที่ใกล้เคียงค่าจริงมากกว่าสเปกตรัมเริ่มต้นที่ถูกแทนที่ เนื่องจากสัญญาณรบกวนได้ถูกกำจัดออกไปแล้ว ขั้นตอนต่อไปคือ เลื่อนช่วงที่เท่ากันนี้ไปทางขวา 1 จุด แล้วทำซ้ำตามขั้นตอนดังกล่าวจนช่วงความยาวคลื่นถูกเลื่อนไปจนครอบคลุมความยาวคลื่น สเปกตรัมที่สร้างขึ้นใหม่จะมีจำนวนข้อมูลในส่วนต้นและส่วนท้าย หายไปเท่ากับ m จุด (m คือ จำนวนของจุดทั้งสองด้านของจุดศูนย์กลาง) (อนุพันธ์, 2545)



ภาพที่ 4 เปรียบเทียบสเปกตรัมที่ยังไม่ผ่านการปรับแต่งกับสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing)

ที่มา: William (2007)

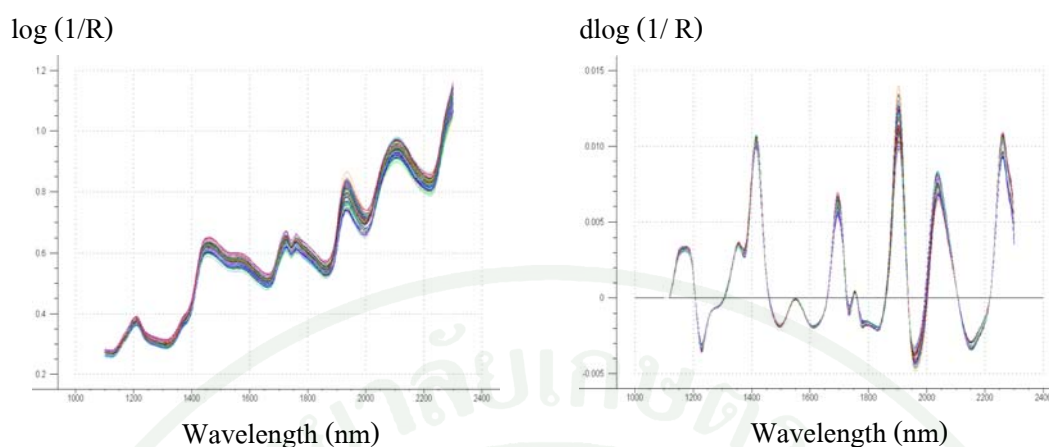
Bo Hong (2008) ใช้วิธีการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ก่อนนำมาสร้างสมการในการทำนายปริมาณไนโตรเจนทั้งหมดในใบข้าวสาลี และสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธีการปรับแต่งสเปกตรัมดังกล่าวมีค่า R เท่ากับ 0.887 ซึ่งเป็นสมการที่ดีที่สุด Cheng and Yu-Xia (2008) ประเมินความสดของเนื้อหมูโดยใช้เทคนิค NIR และได้ทำการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ก่อนทำการสร้างสมการซึ่งพบว่าสมการดังกล่าวเป็นสมการที่ดีที่สุด (Yaohua Hu *et al.*, 2008) ประเมินส่วนประกอบของกรดไขมันโดยใช้เทคนิค NIR ซึ่งใช้วิธีการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ซึ่งพบว่าสมการที่สร้างขึ้นมีค่า R เท่ากับ 0.95 และค่า SEC เท่ากับ 0.87 Rae-Kwang (Cho, 2008) ทำการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) และวิธีการทำอนุพันธ์ที่สอง (Second derivative) ในการสร้างระบบการตรวจสอบคุณภาพของเมล็ดธัญพืชด้วยเทคนิค NIR จากผลการสร้างสมการที่ได้พบว่า สมการที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัมด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ให้ค่า R เท่ากับ 0.85 ซึ่งดีกว่าสมการที่สร้างจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการทำอนุพันธ์ที่สอง (Second derivative)

2. การทำอนุพันธ์ (Derivative transformation)

การหาอนุพันธ์ของสเปกตรัมเป็นวิธีที่ใช้ประโยชน์ในการแก้ปัญหาค่าการซ้อนทับกันของจุดยอดในสเปกตรัมและการเลื่อนขึ้นของสเปกตรัมและการเลื่อนขึ้นของสเปกตรัม ข้อดีของการใช้วิธีนี้ คือ ในการวิเคราะห์สเปกตรัมเพื่อสร้างสมการ Calibration นั้น ถ้าใช้ $\log(1/R)$ ที่ความยาวคลื่นต่างๆ ในสมการ ค่า $\log(1/R)$ เหล่านั้นจะมีความสัมพันธ์ต่อกันสูง ซึ่งจะทำให้สมการไม่น่าเชื่อถือ แต่การใช้อนุพันธ์ (Derivative) ของ $\log(1/R)$ แทน $\log(1/R)$ นั้น จะไม่เกิดปัญหาดังกล่าว แต่ข้อเสีย คือ สเปกตรัมที่ได้จะมีผลจากสัญญาณรบกวนมากขึ้น เนื่องจากสัญญาณรบกวนมักจะเป็นจุดยอดเล็กๆ บนสเปกตรัม ซึ่งอนุพันธ์ (Derivative) มีผลให้จุดยอดแยกจากกันอย่างชัดเจนขึ้น จึงทำให้สัญญาณรบกวนเหล่านี้ยังคงอยู่ด้วย ดังนั้น วิธีที่ดี คือ ให้ปรับสเปกตรัมให้เรียบก่อนการวิเคราะห์ด้วยวิธีอนุพันธ์ (Derivative) (อนุพันธ์, 2545)

2.1 วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative)

วิธีนี้จะช่วยแก้ปัญหาค่าที่สเปกตรัมมีค่าเพิ่มขึ้นตลอดช่วงความยาวคลื่น (การเลื่อนตัวของสเปกตรัมตามแนวแกน Y) ในวิธีอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) เป็นการนำค่า $\log(1/R)$ ที่ความยาวคลื่นใกล้เคียงกันมาลบกัน โดยจะให้ความหมายเป็นค่าความชันของสเปกตรัมที่แต่ละความยาวคลื่นซึ่งทำให้แปลความหมายยาก โดยวิธีนี้จะใช้ได้ผลกับตัวอย่างที่มีเนื้อสม่ำเสมอ เช่น แป้งสาลีที่บดจนละเอียดและมีการกระจายตัวของอนุภาคสม่ำเสมอทั่วถึง (อนุพันธ์, 2545)



A) สเปกตรัมเริ่มต้น (Original spectrum)

B) วิธีอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative)

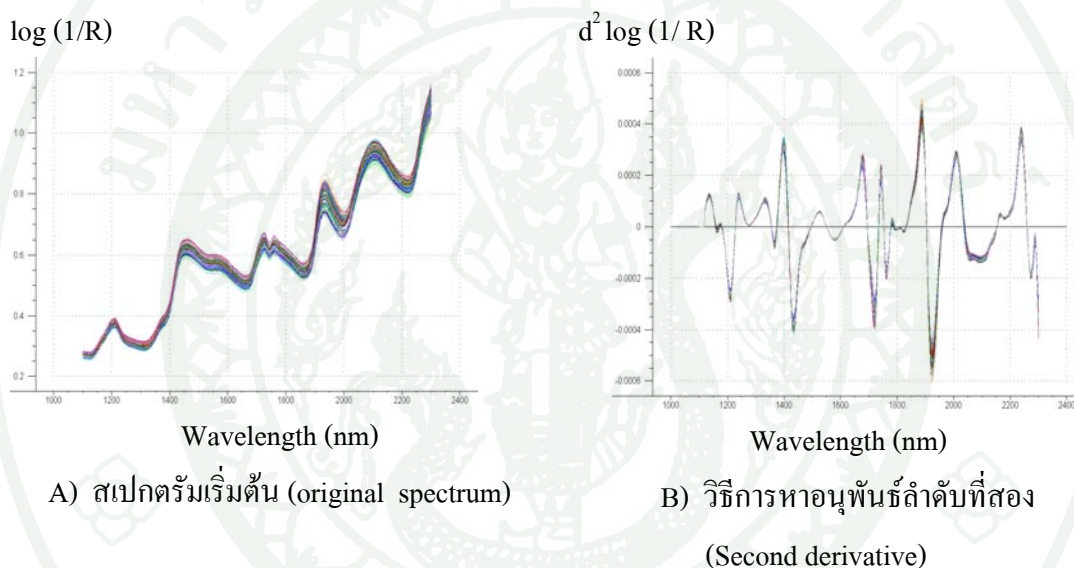
ภาพที่ 5 เปรียบเทียบสเปกตรัมที่ยังไม่ผ่านการปรับแต่งกับสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative)

ที่มา: William (2007)

Anmin Huang *et al.* (2008) ใช้วิธีการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First Derivative) ในการทำนายปริมาณไฮโมเซลลูโลสของไม้ไผ่ Chinese fir, Paulownia and Poplar Ronnarit (2008) ทำการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First Derivative) ก่อนการสร้างสมการในการทำนายปริมาณไนโตรเจนทั้งหมดในดินโดยใช้วิธีการเตรียมตัวอย่างแบบรวดเร็วโดยใช้เทคนิค NIR และพบว่า สมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธีการดังกล่าวมีประสิทธิภาพในการทำนายปริมาณไนโตรเจนทั้งหมด Sonthisuk *et al.* (2008) ทำการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) และวิธีอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second Derivative) ก่อนทำการสร้างสมการในการตรวจสอบคุณภาพของมังคุดโดยใช้เทคนิค NIR พบว่า สมการที่ทำการปรับแต่งด้วยวิธีอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) มีความเหมาะสมในการทำนายมากกว่าสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative)

2.2 วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative)

วิธีนี้จะช่วยลดผลกระทบจากการกระเจิงแสง ทั้งที่เป็นผลเชิงบวกที่ทำให้ขนาดของสเปกตรัมเพิ่มขึ้นคงที่ตลอดช่วงความยาวคลื่น และผลเชิงลบที่ทำให้ขนาดสเปกตรัมเพิ่มขึ้นตามความยาวคลื่น โดยจุดเด่นของวิธีนี้ คือ เป็นการแยกจุดยอดที่เหลื่อมซ้อนกันในสเปกตรัมออกจากกัน และจะให้จุดยอดตรงกับจุดยอดของสเปกตรัมดั้งเดิมแต่จะเป็นจุดยอดที่กลับหัว วิธีอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) ใช้ได้ผลดีกับตัวอย่างที่มีขนาดอนุภาคต่างๆ ผสมผสานกันอยู่ (อนุพันธ์, 2545)



ภาพที่ 6 เปรียบเทียบสเปกตรัมที่ยังไม่ผ่านการปรับแต่งกับสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative)

ที่มา: William (2007)

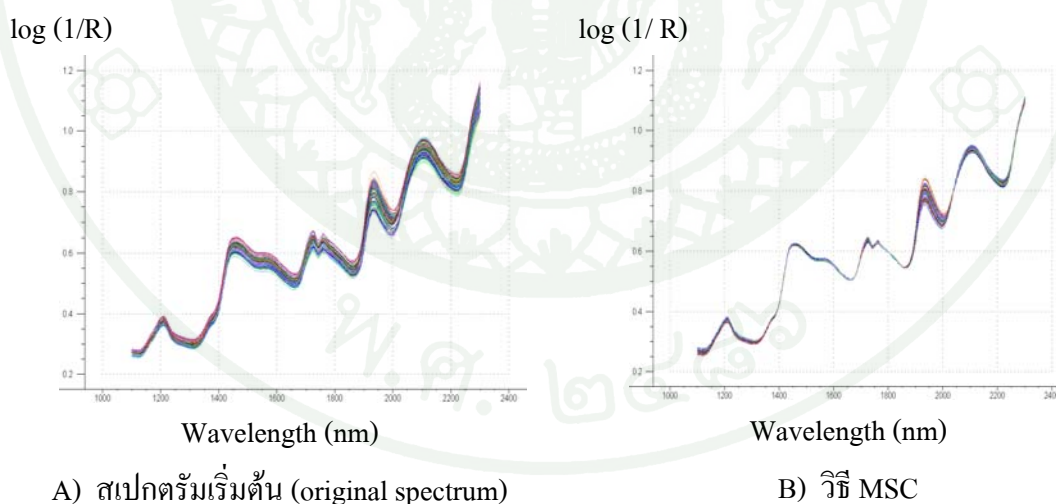
Roger *et al.* (2008) ใช้วิธีการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First Derivative) และวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second Derivative) ก่อนนำมาสร้างสมการในการทำนายปริมาณเนื้อเยื่อในไม้ยืนต้น พบว่า สมการที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second Derivative) มีค่า R^2 และ SEC เท่ากับ 0.83 และ 1.93 ซึ่งเป็นค่าที่ดีกว่าสมการที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับ

ที่หนึ่ง (First Derivative) Yoshitane *et al.* (2008) ใช้วิธีการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second Derivative) ก่อนการสร้างสมการในการทำนายปริมาณส่วนผสมของข้าวสาลีซึ่งใช้เป็นวัตถุดิบในการผลิตเส้นโซบะแห้งด้วยเทคนิค NIR

โดยพบว่าจากสมการดังกล่าวให้ค่า R^2 เท่ากับ 0.997 และค่า SEC, SEP เท่ากับ 1.8% และ 2.2% ตามลำดับ

3. วิธี Multiplicative scatter correction (MSC)

เป็นเทคนิคทางสถิติที่สร้างขึ้นมาเพื่อลดผลที่เกิดจากการกระเจิงแสงต่อ NIR สเปกตรัมที่ได้จากการวัดแบบ diffuse reflectance และแบบ transmission โดยทั่วไปการกระเจิงแสงจะทำให้ความชันโดยรวมของสเปกตรัมเปลี่ยนไป ซึ่งเปรียบเสมือนว่าสเปกตรัมถูกทำให้หมุนรอบจุดที่ความยาวคลื่นต่ำสุดของสเปกตรัม ข้อควรระวัง คือ ถ้าใช้ MSC กับสเปกตรัมในตัวอย่างกลุ่ม Calibration ก็ต้องใช้ MSC กับตัวอย่างที่จะนำมาประเมินค่าทางเคมีในอนาคตด้วย และการใช้ MSC จะให้ผลได้ดีที่สุดถ้ามีการปรับแก้การเลื่อนตัวของสเปกตรัมก่อน (อนุพันธ์, 2545)



ภาพที่ 7 เปรียบเทียบสเปกตรัมที่ยังไม่ผ่านการปรับแต่งกับสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC

ที่มา: William (2007)

Sumaporn *et al.* (2008) ทำการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี MSC และวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second Derivative) ก่อนสร้างสมการในการจัดกลุ่มของน้ำนมแท้และน้ำนมปลอม โดยผลที่ได้พบว่า สมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี MSC มีประสิทธิภาพมากกว่าสมการที่สร้างขึ้น โดยผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second Derivative) โดยให้ค่า R เท่ากับ 0.964

ข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการต่างๆ จะถูกนำมาสร้างสมการทำนาย โดยมีรายละเอียดของขั้นตอนการสร้างสมการ ดังนี้

3.1 นำตัวอย่างทั้งหมดที่มีข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่ง และมีข้อมูลการวิเคราะห์ค่าคุณภาพด้วยวิธีทางเคมี มาแบ่งแบบสุ่มเป็น 2 กลุ่ม คือ กลุ่มตัวอย่างสร้างสมการทำนาย และกลุ่มตัวอย่างตรวจสอบความถูกต้องของสมการที่สร้างขึ้น

3.2 กำหนดให้ข้อมูลสเปกตรัมที่ความยาวคลื่นต่างๆเป็นตัวแปรอิสระ (X) ส่วนข้อมูลค่าคุณภาพที่วิเคราะห์ด้วยวิธีการมาตรฐานเป็นตัวแปรตาม (Y) ทั้งในกลุ่มตัวอย่างสร้างสมการและกลุ่มตรวจสอบความถูกต้องของสมการ

3.3 นำข้อมูลตัวแปรอิสระ (X) และตัวแปรตาม (Y) ของกลุ่มตัวอย่างสร้างสมการ มาหาความสัมพันธ์กันด้วยวิธีทางสถิติ โดยสิ่งสำคัญ คือ การหาตัวแปรอิสระที่น่าจะมีความสัมพันธ์กับค่าตัวแปรตามที่ทำการศึกษา ซึ่งการคัดเลือกหาตัวแปรอิสระ สามารถแบ่งได้เป็น 2 วิธีหลักๆ ได้แก่

ก. วิธีการคัดเลือกความยาวคลื่น (Wavelength selection methods) เป็นอีกวิธี ที่ทำการคัดเลือกตัวแปรอิสระเฉพาะความยาวคลื่นที่มีความสัมพันธ์กับตัวแปรตามที่ทำการศึกษา ซึ่งเทคนิคทางสถิติที่ใช้ในการคัดเลือกความยาวคลื่นที่คาดว่าจะมีความสัมพันธ์ได้แก่

1) Simple Linear Regression (SLR) การสร้างสมการทำนายโดยใช้วิธี SLR เป็นการเลือกค่าการดูดกลืนแสงที่สัมพันธ์กับค่าที่ต้องการวิเคราะห์เพียงความยาวคลื่นเดียว ซึ่งทำให้ค่า R ที่ได้มีค่าต่ำ จึงไม่นิยมนำมาใช้ในการสร้างสมการทำนาย

2) Multiple Linear Regression (MLR) คือ สมการการถดถอยที่ใช้ตัวแปรอิสระมากกว่า 1 ตัวในการประมาณค่าตัวแปรตาม ซึ่งทำให้สมการที่ได้ลดความผิดพลาดในการประมาณค่าลง แต่สมการทำนายที่สร้างขึ้นอาจเกิดปัญหาในเรื่องความคลาดเคลื่อนจากการสร้างสมการหรือสมการที่ได้มีตัวแปรอิสระมากเกินไปทำให้ข้อมูลไม่น่าเชื่อถือ

ข. วิธีการใช้ความยาวคลื่นตลอดช่วง (Full spectrum method) เป็นวิธีการคัดเลือกหาช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (Selective wavelength) จากความยาวคลื่นทั้งหมด มาใช้ในการสร้างสมการทำนาย โดยใช้วิธีการทางสถิติในการจัดกลุ่มตัวแปรอิสระที่มีความเกี่ยวข้องกันให้อยู่ในกลุ่มเดียวกัน หรือทำการสร้างตัวแปรใหม่จากกลุ่มตัวแปรเดิม วิธีการสถิติที่นิยมใช้ เช่น Partial Least Square (PLS) Regression วิธีการวิเคราะห์ข้อมูลสเปกตรัม โดยนำค่าองค์ประกอบทางเคมีมาเชื่อมโยงเข้าไว้ด้วยกัน เพื่อนำมาใช้ในการสร้างแฟลคเตอร์ โดย Sumaporn (2005) อธิบายวิธีการสถิติ PLS ว่าเป็นเทคนิคในการวิเคราะห์ข้อมูลแบบหลายตัวแปร โดยการสร้างแฟลคเตอร์จากสมการเชิงเส้นตรงจากข้อมูลสเปกตรัมเริ่มต้น และนำแฟลคเตอร์ที่ได้ไปใช้ในการสร้างสมการถดถอย โดยแฟลคเตอร์ที่ได้จากการสร้างสมการด้วยวิธี PLS ต้องสามารถอธิบายความแปรปรวนของข้อมูลและเกี่ยวข้องกับการประเมินค่าทางเคมี วัดดูประสงค์ของ PLS เพื่อต้องการลดจำนวนข้อมูลสเปกตรัมที่มีความสัมพันธ์กับค่าทางเคมีเท่านั้นที่จะถูกนำมาใช้ในการทำนายค่าทางเคมี เพื่อสามารถประเมินค่าทางเคมีได้ถูกต้องมากขึ้น

ค. วิธีอื่นๆ

จากวิธีการสร้างสมการด้วยวิธี PLS สามารถสร้างสมการทำนายค่าคุณภาพที่มีความถูกต้องแม่นยำ เป็นที่นิยม อีกทั้งยังมีการนำมาใช้อย่างกว้างขวาง แต่ก็มีปัญหาที่เกิดจากการสร้างสมการด้วยวิธี PLS เนื่องจากการนำช่วงความยาวคลื่นที่ไม่มีความสัมพันธ์กับข้อมูลทางเคมีมาใช้ในการสร้างสมการด้วย ดังนั้น จึงอาจก่อให้เกิดปัญหา Overfitting ได้ด้วยเหตุนี้ Jiang *et al.* (2002) จึงทำการพัฒนาวิธีการคัดเลือกหาช่วงความยาวคลื่นที่มีความสัมพันธ์กับค่าคุณภาพด้วยโปรแกรม in-house-written in MATLAB และเรียกว่าวิธี Moving Window Partial Least (MWPLS) Regression ซึ่ง Sumaporn (2005) ได้อธิบายว่า คือ วิธีการเลือกช่วงความยาวคลื่นสำหรับวิเคราะห์สเปกตรัมที่มีความซับซ้อน เนื่องจากเป็นสเปกตรัมของตัวอย่างที่มีหลายองค์ประกอบ โดยวิธีนี้ได้มีการพิสูจน์แล้วว่าสามารถเลือกช่วงความยาวคลื่นที่ให้สมการที่มีประสิทธิภาพสูง วิธี MWPLS จะมีการกำหนดให้มี 1 หน้าต่างสเปกตรัมขนาด X_i (X_i data point) ซึ่งมีขนาดเมตริกซ์

m แถว h คอลัมน์ แล้วให้นำหน้าต่างสเปกตรัมเคลื่อนที่ไปตามสเปกตรัมตลอดช่วงความยาวคลื่น โดยที่หน้าต่างสเปกตรัมจะเคลื่อนที่ไปที่ละ 1 data point ตำแหน่งข้อมูลทีหน้าต่างเคลื่อนที่ไปถึงก็จะนำไปสร้างสมการด้วยวิธี PLS ที่ค่าแฟคเตอร์ต่างๆ แล้วทำการคำนวณหาค่าเฉลี่ยของค่า log (Sum of Squared Residual: SSR) ในแต่ละหน้าต่างสเปกตรัมที่แต่ละแฟคเตอร์จากสมการ PLS ที่ได้ และนำไปเขียนกราฟโดยให้แกน X เป็นความยาวคลื่น และแกน Y เป็นค่า log (SSR) กราฟแต่ละเส้นแสดงค่า log (SSR) ที่ได้จากการคำนวณในแต่ละแฟคเตอร์ แล้วทำการพิจารณาเพื่อเลือกช่วงความยาวคลื่นของสเปกตรัมที่มีความสัมพันธ์กับค่าทางเคมีโดยเลือกช่วงกราฟที่มีค่า log (SSR) ต่ำๆ เพื่อนำมาสร้างสมการทำนายที่ดีที่สุด

3.4 ทำการเลือกสมการทำนายค่าคุณภาพที่เหมาะสม ซึ่งสามารถพิจารณาได้จาก ระดับความสัมพันธ์ของตัวแปรอิสระและตัวแปรตาม โดยวัดจากค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (Correlation coefficient; R) ซึ่งมีค่าระหว่าง -1 ถึง 1 ถ้า R มีค่าสูง หมายถึง ตัวแปรอิสระมีอิทธิพลมากกับตัวแปรตาม ถ้า R มีค่าต่ำแสดงว่าตัวแปรทั้งสองมีความสัมพันธ์กันต่ำด้วย และพิจารณาความน่าเชื่อถือของการประมาณค่าของสมการจากค่าความคลาดเคลื่อนในการทำนายของกลุ่มตัวอย่างสร้างสมการทำนาย (Standard Error of Calibration; SEC) ซึ่งควรจะมีค่าต่ำๆ วิธีการคำนวณหาค่า R และค่า SEC ดังแสดงในสมการที่ (1) และ (2) ตามลำดับ เนื่องจาก Standard Error of Calibration (SEC) คือ ค่าความผิดพลาดมาตรฐานในการทำนายของกลุ่ม โดยแสดงถึงการที่สมการที่สร้างขึ้นจะนำมาใช้ในการทำนายต่อไปในอนาคตได้ดีหรือไม่

$$R = \frac{\sum XY - n\bar{X}\bar{Y}}{\sqrt{(\sum X^2 - n\bar{X}^2)(\sum Y^2 - n\bar{Y}^2)}}$$

$$SEC = \frac{n}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n-2} (Y_i - b_0 - b_1 X_i)^2}}$$

เมื่อ	X	=	ข้อมูลค่าการดูดกลืนแสง (ตัวแปรอิสระ)
	Y	=	ข้อมูลค่าคุณภาพ (ตัวแปรตาม)
	n	=	จำนวนตัวอย่าง

3.5 ขั้นตอนการตรวจสอบความถูกต้องของสมการที่สร้างขึ้น

การตรวจสอบความถูกต้องของสมการที่สร้างขึ้นด้วยกลุ่มตัวอย่างตรวจสอบความถูกต้อง มีจุดประสงค์เพื่อใช้ในการวัดประสิทธิภาพของสมการ ซึ่งวิธีการตรวจสอบที่นิยมใช้ได้แก่

ก. วิธี Full cross validation จัดเป็นวิธีการตรวจสอบภายใน (Internal validation) ซึ่งกลุ่มตัวอย่างที่นำมาใช้ในการตรวจสอบต้องเป็นตัวอย่างชุดเดียวกับตัวอย่างในกลุ่มสร้างสมการ จะวัดผลจากการพิจารณาค่าความคลาดเคลื่อนจากการทำนาย และค่าความแตกต่างระหว่างค่าที่ได้จากการทำนายด้วยสมการที่สร้างขึ้นกับข้อมูลที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธีมาตรฐาน ถ้าข้อมูลที่ได้จากทั้งสองวิธีมีค่าไม่แตกต่างกันแสดงว่าสมการที่สร้างขึ้นมีประสิทธิภาพสูง การตรวจสอบความแม่นยำด้วยวิธีนี้มักใช้กับการวิเคราะห์ทางสถิติแบบ PLS และใช้ในกรณีที่มีตัวอย่างจำนวนน้อย

ข. วิธี Prediction testing เป็นวิธีการทดสอบโดยนำตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Test set) มาประเมินค่าของสมการทำนายที่สร้างขึ้น โดยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้องที่นำมาวิเคราะห์ต้องมีวิธีการเตรียมตัวอย่าง การวัดค่าด้วยเครื่อง NIR และวิธีการแปลงข้อมูลสเปกตรัมเหมือนกับชุดข้อมูลของตัวอย่างในกลุ่มสร้างสมการ และตัวอย่างชุดดังกล่าวจะต้องมีค่าคุณภาพที่ต้องการประเมินอยู่ในช่วงของกลุ่มตัวอย่างสร้างสมการ ทั้งนี้ จะทำการพิจารณาค่าที่ทำนายได้จากเครื่อง NIR กับค่าที่วิเคราะห์ได้จริงจากวิธีทางเคมี ถ้าค่าความคลาดเคลื่อนจากการทำนายต่ำ แสดงว่าสมการที่สร้างขึ้นมีความแม่นยำสูง

การตรวจสอบความถูกต้องของสมการที่สร้างขึ้นมีรายละเอียดของขั้นตอน ดังนี้

3.5.1 นำตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้องของสมการมาทำการทดสอบความแม่นยำของสมการที่สร้างขึ้นในข้อ 2.3.1

3.5.2 ทำการคัดเลือกสมการทำนายค่าคุณภาพที่เหมาะสม และมีความถูกต้องในการทำนายค่าคุณภาพด้วยการพิจารณาความคลาดเคลื่อนจากการทำนายด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Standard Error of Prediction; SEP) และค่าความแตกต่างระหว่างค่าที่ทำนายได้จากสมการที่สร้างขึ้นกับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริง (Bias) โดยทั้งค่า SEP และ Bias ควรมีค่าต่ำๆ วิธีการคำนวณหาค่า SEP และ Bias ดังแสดงในสมการที่ (3) และ (4) ตามลำดับ

$$SEP = \sqrt{\frac{\sum (X-Y)^2 - \frac{(\sum (X-Y))^2}{n}}{n-1}}$$

$$\text{Bias} = \frac{\sum (X - Y)}{N}$$

เมื่อ	X	คือ	ข้อมูลค่าที่วัดจริง (Actual value)
	Y	คือ	ข้อมูลค่าทำนาย (Predicted value)
	n	คือ	จำนวนตัวอย่าง

Standard Error of Prediction (SEP) คือ ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานของผลต่างระหว่างค่าที่ได้จากเครื่อง NIR และค่าที่ได้จากวิธีมาตรฐาน โดยสามารถหาได้จากสูตรดังแสดงในสมการที่ (3) SEP ควรจะคำนวณจากผลของการทำนายของกลุ่มตัวอย่างซึ่งไม่ได้ใช้ในการสร้างสมการ Calibration โดยกลุ่มตัวอย่างดังกล่าวจะเรียกว่ากลุ่ม Prediction หรือกลุ่ม Validation โดยที่ตัวอย่างในกลุ่ม Validation ควรจะเป็นตัวอย่างประเภทเดียวกัน (William, 2007)

Bias คือ ค่าที่แสดงถึงความแตกต่างระหว่างค่าที่ได้จากวิธีมาตรฐานและค่าที่ทำนายได้จากเครื่อง NIR และใช้เป็นตัวชี้วัดถูกต้องของสมการ Calibration (William, 2007)

นอกจากนี้ภายหลังจากการเลือกสมการแคลิเบรชัน (Calibration) ที่ดีที่สุดแล้ว ยังทำการประเมินผลความสามารถของสมการ Calibration ได้ด้วยค่าทางสถิติ Ratio of standard error Performance to standard deviation (RPD) โดย RPD เป็นสัดส่วนระหว่างค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานของค่าทางเคมีและค่า SEP ของตัวอย่างในกลุ่มที่ใช้ในการตรวจสอบความแม่นยำของสมการ Calibration ทั้งนี้ แนวทางการอธิบายความสามารถของสมการ Calibration ด้วยค่า RPD ดังแสดงในตารางที่ 5 (William, 2001) วิธีการคำนวณหาค่า RPD ดังแสดงในสมการดังนี้

$$RPD = \frac{SD}{SEP}$$

เมื่อ SD คือ ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานของชุดข้อมูลตรวจสอบความถูกต้อง

ตารางที่ 6 แนวทางการอธิบายความสามารถของสมการ Calibration ด้วยค่า RPD

ค่า RPD	การคัดแยกกลุ่มตัวอย่าง (Classification)	การประยุกต์ใช้เพื่อวิเคราะห์เชิงปริมาณ
0.0 - 2.3	แย่มาก (very poor)	ไม่แนะนำให้ใช้ (Not recommended)
2.4 - 3.0	ไม่ดีพอ (poor)	การแบ่งระดับปริมาณอย่างหยาบ (very rough screening)
3.1 - 4.9	ปานกลาง (fair)	การแบ่งระดับปริมาณ (screening)
5.0 - 6.4	ดี (very good)	การควบคุมคุณภาพ (quality control)
6.5 - 8.0	ดีมาก (very good)	การควบคุมกระบวนการ (process control)
8.1 ขึ้นไป	ยอดเยี่ยม (excellent)	ทุกงาน (any application)

ที่มา: William (2001)

การประยุกต์ใช้เทคนิค NIR ในอุตสาหกรรมเกษตร

William (2007) ได้กล่าวว่า ช่วงความยาวคลื่นของ Near Infrared อยู่ระหว่าง 700-3000 นาโนเมตร แต่เนื่องจากข้อจำกัดของดีเทกเตอร์ (Detectors) เครื่อง NIR ส่วนใหญ่จะไม่สามารถวัดสเปกตรัมที่มีความยาวคลื่นมากกว่า 2500 นาโนเมตรได้ แต่ในขณะเดียวกันก็มีความสนใจในการศึกษาเรื่องอินฟราเรดย่านกลาง (mid-infrared) โดย Mid-infrared จะมีความยาวคลื่นอยู่ในช่วง 2,500-25,000 นาโนเมตร

จุดเริ่มต้นของ NIR เริ่มขึ้นโดย William Herschel ค้นพบพลังงานรังสีแม่เหล็กไฟฟ้าความถี่ย่านอินฟราเรด (Infrared radiation) ว่าเป็นแสงที่อยู่ถัดไปจากแสงสีแดง และมีพลังงานสูงกว่าแต่ไม่สามารถมองเห็นสเปกตรัม (spectrum) ได้ โดยเป็นพลังงานอย่างหนึ่งที่แตกต่างจากแสงธรรมดา ในกลางศตวรรษที่ 19 จึงเริ่มมีทฤษฎีที่เกี่ยวข้องกับสเปกตรัมที่เกิดจากคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้า (electromagnetic spectroscopy) ในปี ค.ศ. 1882 Professor Rowland ได้ส่งเสริมให้ผลิตเครื่องสเปกโตรสโคปที่มีลักษณะเป็นสเปกโตรกราฟ (spectrograph) และสเปกโตรมิเตอร์ (Spectrometer) ในปี ค.ศ. 1930 รัฐบาลเยอรมันและอังกฤษได้มีผู้ศึกษานำลิคซัลไฟด์ (Lead-Sulphide) เป็นสารประกอบมาทำเป็นเซมิคอนดักเตอร์ (Semiconductor) ที่มีศักยภาพสูงใช้เป็นดีเทกเตอร์ (detector)

ของเครื่อง NIR ในปี ค.ศ. 1970 เครื่องมือที่ใช้เทคนิค NIR เริ่มเข้าสู่ตลาดในเชิงพาณิชย์ และมีการเจริญเติบโตอย่างรวดเร็วในด้านการตรวจวิเคราะห์เชิงปริมาณของความชื้น โปรตีน น้ำมัน ในการพัฒนาสมการ Calibration ในปี ค.ศ. 1985 เครื่อง NIR เริ่มมีไมโครโพรเซสเซอร์ (microprocessors) และหน่วยความจำที่สามารถใช้ประโยชน์ได้หลายอย่าง และสมการ Calibration ที่สร้างขึ้นสามารถเก็บได้ สามารถใส่ข้อมูลได้อย่างมีประสิทธิภาพ นอกจากนี้ยังสามารถทำการวิเคราะห์ผลได้ (วารุณี, 2545)

Kawano (2002) กล่าวว่า มีงานวิจัยจำนวนมากที่มีการนำเทคนิค NIR มาประยุกต์ใช้เป็นวิธีการที่ใช้ประเมินคุณภาพของผลิตภัณฑ์อาหาร ดังแสดงในตารางที่ 5 ที่แสดงให้เห็นถึงการนำ NIR มาประยุกต์ใช้ในอุตสาหกรรมอาหาร โดยในช่วงเริ่มต้นได้นำเทคนิค NIR มาใช้ในการวิเคราะห์ผลิตภัณฑ์ เช่น ข้าวสาลี ถั่ว ข้าว ต่อจากนั้นจึงมีการนำมาประยุกต์ใช้อย่างกว้างขวาง รวมทั้งอาหารที่ผ่านการบวนการผลิต เครื่องดื่ม ผลไม้และผัก

ตารางที่ 7 อุตสาหกรรมอาหารที่มีการนำเครื่อง NIR มาใช้ในการตรวจสอบคุณภาพ

ผลิตภัณฑ์	ปัจจัยคุณภาพที่ทำการวัด
(เมล็ดพืช ถั่ว)	
ข้าวบาร์เลย์	โปรตีน, ความชื้น, โลซีน, กรดอะมิโน, เบต้ากลูเคน
ข้าวสาลี	โปรตีน, ความชื้น, เถ้า
เมล็ดฝ้าย	ความชื้น, กลูโคส, ฟรุคโตส
ชาเขียว	โปรตีน, ความชื้น, ไนโตรเจนทั้งหมด, คาเฟอีน, เทนิน, กรดอะมิโนอิสระทั้งหมด
ต้นฮอป	ความชื้น, น้ำมันที่จำเป็น
เมล็ดพืชชนิดหนึ่งใช้ผลิตน้ำมัน	ไขมัน, คลอโรฟิลล์
ถั่ว	โปรตีน, แป้ง
พริกไทย	แคปไซซิน
ข้าว	แป้ง (อะไมโลส), โปรตีน, ความชื้น, เถ้า, กรดอะมิโน
เมล็ดถั่วเหลือง	โปรตีน, ความชื้น, ไขมัน
เมล็ดทานตะวัน	ไขมัน, ความชื้น, ไฟเบอร์
ข้าวสาลี	แป้ง, โปรตีน, ความชื้น, เถ้า, ความแข็ง, กรดอะมิโน, ค่าสี

ตารางที่ 7 (ต่อ)

ผลิตภัณฑ์	ปัจจัยคุณภาพที่ทำการวัด
(ผลิตภัณฑ์เกี่ยวกับนม)	
ชีส	ไขมัน, โปรตีน, ปริมาณของแข็ง, ความชื้น
นม	ความชื้น, ไขมัน, โปรตีน, แลคโตส, เคซีน
น้ำมันสีจางที่เหลือจากการทำเนยแข็ง (เนื้อ)	ความชื้น, ไขมัน, โปรตีน, แลคโตส
ปลาบด	ปริมาณน้ำเสีย
ผลิตภัณฑ์จากเนื้อ (เครื่องดื่ม)	โปรตีน, ความชื้น, ไขมัน, เกลือ, แคลอรี
เบียร์	แอลกอฮอล์
น้ำเชื่อม	ฟรุกโตส, ปริมาณของแข็ง
น้ำผลไม้	กลูโคส, ฟรุกโตส, กลูโคส
สาเก	แอลกอฮอล์, กรด, กรดอะมิโน, ปริมาณน้ำตาลทั้งหมด
นมถั่วเหลือง	โปรตีน, ความชื้น
ไวน์	แอลกอฮอล์, ปริมาณที่สกัดได้, น้ำตาล
(อาหารที่ผ่านการกระบวนการผลิต)	
ขนมปัง	โปรตีน, ความชื้น, ไขมัน
บิสกิต	ไขมัน, ซูโครส, แป้ง, ความชื้น
ผลิตภัณฑ์จากธัญพืช	ไฟเบอร์
โกโก้	โปรตีน, ไขมัน, แป้ง
น้ำมันที่บริโภคได้	ไอโอดีนนมเบอร์
ซอสถั่วเหลือง	เกลือ, ไนโตรเจน, แอลกอฮอล์, กรดแลกติก, กรดกลูตามิก, กลูโคส
(ผักและผลไม้)	
แอปเปิ้ล	บริกซ์
แคนตาลูป	ปริมาณของแข็งที่ละลายน้ำได้
มะม่วง	บริกซ์

ตารางที่ 7 (ต่อ)

ผลิตภัณฑ์	ปัจจัยคุณภาพที่ทำการวัด
หัวหอม	บrix, ความชื้น
ส้ม	บrix
พีช	บrix
อ้อย	ไฟเบอร์, ความชื้น, บrix

ที่มา: Kawano (2002)

วารุณี (2552) กล่าวว่าจากการสำรวจการใช้ประโยชน์ของเทคนิค NIR ในประเทศไทยในปัจจุบัน เริ่มมีความต้องการมากขึ้นกว่า 10 ปีที่แล้ว โดยส่วนใหญ่จะใช้ในงานวิเคราะห์ด้านปริมาณ (qualitative analysis) ในลักษณะของ rapid analytical routine method ทั้งนี้ เป็นการใช้ประโยชน์ที่เกี่ยวข้องกับอุตสาหกรรมเกษตรและอาหารเป็นส่วนใหญ่ ดังแสดงในตารางที่ 7

ตารางที่ 8 การใช้ประโยชน์เทคนิค NIR ในประเทศไทย

อุตสาหกรรม	ชนิดของวัตถุดิบและผลิตภัณฑ์	องค์ประกอบทางเคมีที่วิเคราะห์
มันสำปะหลัง	มันแผ่นและมันอัดเม็ด	ความชื้น โปรตีน คาร์โบไฮเดรต เส้นใย จีเถ้า
อาหารสัตว์และสัตว์น้ำ	วัตถุดิบ (ข้าวโพด ข้าวสาลี ปลาป่น กระดุกป่น ถั่วเหลืองป่น ปลาขี้ขาว)	ความชื้น โปรตีน ไขมัน เส้นใย จีเถ้า
แป้ง (ข้าวสาลีและอื่นๆ)	วัตถุดิบและผลิตภัณฑ์สำเร็จ	ความชื้น โปรตีน คาร์โบไฮเดรต เส้นใย จีเถ้า กลูเต็น
นมและผลิตภัณฑ์นม	นํ้านมดิบ นมผง นมหวาน	ความชื้น โปรตีน คาร์โบไฮเดรต ไขมัน
น้ำมันพืช	วัตถุดิบ (ถั่วเหลือง รำข้าว)	ความชื้น โปรตีน น้ำมัน กรดไขมันอิสระ

ที่มา: วารุณี (2552)

จากที่กล่าวมาจะเห็นได้ว่าเทคนิค NIR สามารถนำมาประยุกต์ใช้ในอุตสาหกรรมต่างๆ ได้นอกจากนี้อุตสาหกรรมขนมขบเคี้ยวเป็นอุตสาหกรรมหนึ่งที่น่าสนใจที่มีการศึกษาเพื่อนำเทคนิค NIR มาประยุกต์ใช้ในการตรวจสอบคุณภาพของขนมขบเคี้ยว ดังจะเห็นได้จากที่มีนักวิจัยหลายท่านได้ทำการศึกษาเพื่อทำการตรวจสอบคุณภาพทางเคมีของผลิตภัณฑ์ขนมขบเคี้ยว ซึ่งสามารถทำการตรวจสอบได้หลายปัจจัยได้แก่ ค่าปริมาณความชื้น ค่าวอเตอร์ แอคติวิตี (Water Activity) ค่าปริมาณไขมัน ค่าปริมาณโปรตีน ค่าไทโอบาร์บิทริก แอซิด (thiobarbituric acid number) ค่าปริมาณผงชูรส

การวิเคราะห์ปริมาณความชื้น

Cecilia and Luis (2009) ศึกษาการประยุกต์ใช้ NIR และ MIR ในการควบคุมคุณภาพของ มันฝรั่งทอดกรอบ วัตถุประสงค์ของงานวิจัยนี้เป็นการใช้เทคนิค NIR และ MIR และใช้เทคนิค เคโมเมตริกซ์ (chemometrics) เพื่อใช้ในการประเมินปริมาณไขมันและปริมาณความชื้นในมันฝรั่งทอดกรอบ โดยจะใช้ตัวอย่างมันฝรั่งทอดกรอบจากท้องตลาด จำนวน 15 ยี่ห้อ (โดยจำนวนตัวอย่างดังกล่าวจะครอบคลุมปริมาณความชื้นและปริมาณไขมัน) ซึ่งบรรจุอยู่ในถุงปริมาณ 50-60 กรัม นำมาบดด้วยโกรนแล้วบรรจุในถุงพลาสติกและเก็บไว้ในที่มืดแสงจนกว่าจะนำไปทำการวิเคราะห์ โดยจะทำการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี Multiplicative scatter correction (MSC) และนำไปทำการวิเคราะห์ด้วยวิธี Partial Least Square Regression (PLSR) สมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายปริมาณความชื้นจะให้ค่า correlation coefficient (r) เท่ากับ 0.99 และค่า standard error of cross-validation (SECV) เท่ากับ 0.17 จากผลการทดลองสรุปได้ว่า เทคนิค NIR สามารถนำมาประยุกต์ใช้ใน อุตสาหกรรมมันฝรั่งทอดกรอบได้อย่างมีประสิทธิภาพ เนื่องจากเป็นวิธีการที่มีความสะดวก รวดเร็ว และสมการที่ได้มีความถูกต้องและแม่นยำ

Hans Buning-Pfaue (2003) ได้ทำการวิเคราะห์ปริมาณน้ำในอาหารโดยใช้เทคนิค NIR โดยในงานวิจัยครั้งนี้ใช้ NIR ในช่วงความยาวคลื่น 730-2300 นาโนเมตร และใช้วิธีทางสถิติดังนี้ วิธี MLR (เพื่อหาความสัมพันธ์ระหว่างค่าที่ได้จากเครื่อง NIR และค่าที่วิเคราะห์โดยวิธีการทางเคมีของตัวอย่าง) วิธี PCA (Principal Component Analysis) วิธี PLS (เพื่อสร้างสมการทำนายปัจจัยที่ทำการศึกษา) และใช้วิธีการปรับแต่งสเปกตรัมก่อนทำการสร้างสมการด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative) และการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) และวิธี Multiplicative scatter correction (MSC) เพื่อช่วยลดการผิดพลาดในเรื่องของขนาดของตัวอย่าง

โดยพิจารณาจากค่า SEC, SEP, Bias, R ว่าสมการที่สร้างขึ้นมีความเหมาะสมในการทำนายค่าที่ทำการศึกษาหรือไม่ จากผลการศึกษาพบว่าสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายปริมาณความชื้นของตัวอย่างอาหารแห้งมีค่า R เท่ากับ 0.94, ค่า SEP เท่ากับ 0.83, ค่า Bias เท่ากับ 0.8 และสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายปริมาณความชื้นในตัวอย่างที่มีความชื้นสูงมีค่า R เท่ากับ 0.36, ค่า SEP เท่ากับ 1.72, ค่า Bias เท่ากับ 1.04

Givens *et al.* (1997) ศึกษาการสร้างสมการทำนายปริมาณความชื้นของผลิตภัณฑ์ขนมขบเคี้ยว โดยพบว่าความยาวคลื่นที่ตำแหน่ง 1949 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับปริมาณน้ำมาก

การวิเคราะห์ค่าวอเตอร์ แอคติวิตี (Water Activity)

Delwiche *et al.* (1991) พบว่า ที่ความยาวคลื่น 1930 นาโนเมตร จะมีความสัมพันธ์กับการเปลี่ยนแปลงของค่าวอเตอร์ แอคติวิตี (Water Activity) ในตัวอย่างแป้งมากกว่าการเปลี่ยนแปลงปริมาณน้ำ นอกจากนี้ยังพบว่าวิธีการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second Derivative) ในช่วงความยาวคลื่น 1900-1950 นาโนเมตร มีความถูกต้องมากกว่าที่ 2 ความยาวคลื่นคือ ที่ 1910 และ 1930 นาโนเมตรสำหรับแป้ง

การวิเคราะห์ปริมาณไขมัน

Cecilia and Luis (2009) ศึกษาการประยุกต์ใช้ NIR ในการตรวจสอบปริมาณไขมันในมันฝรั่งทอดกรอบ โดยใช้ตัวอย่างมันฝรั่งทอดกรอบจากท้องตลาด จำนวน 15 ยี่ห้อ นำมาบดด้วยโกร่งแล้วนำมาบรรจุในถุงพลาสติกและเก็บไว้ในที่ที่มืดแสงจนกว่าจะนำไปทำการวิเคราะห์ โดยจะทำการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี Multiplicative scatter correction (MSC) และนำไปทำการวิเคราะห์ด้วยวิธี Partial Least Square Regression (PLS) และสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายปริมาณไขมัน จะให้ค่า correlation coefficient (r) เท่ากับ 0.98 และค่า standard error of cross-validation (SEC) เท่ากับ 1.21 นอกจากนี้ได้มีการพัฒนาสมการสำหรับทำนายปริมาณไขมันในผลิตภัณฑ์อาหารเข้า (ขนมปัง, บิสกิต และอาหารเข้า) ได้อย่างมีประสิทธิภาพ (Osborne, 1988)

ทั้งนี้ จะพบว่า การหาปริมาณไขมันด้วยเทคนิค NIR นั้นสามารถทำได้ เนื่องจาก Osborne (1993) แสดงให้เห็นว่า การดูดกลืนของไขมันหรือน้ำมันมีความสัมพันธ์กันอย่างสูงกับพันธะ CH_2 ที่โอเวอร์โทนอันดับที่สอง (Second overtone) ที่ความยาวคลื่น 1200 นาโนเมตร และกับ CH_2 ที่โอเวอร์โทนอันดับที่หนึ่ง (First overtone) ที่ความยาวคลื่น 1734 , 1765 นาโนเมตร

Osborne (1988) ศึกษาพบว่าเป็นไปได้ในการสร้างสมการ Calibration สำหรับทำนายปริมาณไขมันในผลิตภัณฑ์อาหารเข้าที่มีส่วนประกอบที่หลากหลาย และพบว่าสเปกตรัม NIR ของไขมันหรือน้ำมันซึ่งมีความสัมพันธ์กับพันธะ CH_2 (Second overtone) ที่ความยาวคลื่น 1200 นาโนเมตร และ CH_2 (First overtone) ที่ความยาวคลื่น 1734, 1765 นาโนเมตร และ CH_2 (stretch bend) ที่ความยาวคลื่น 2310 นาโนเมตร และ 2345 นาโนเมตร

Yookyung and Sandra (2009) ศึกษาการทำนายปริมาณกรดไขมันในผลิตภัณฑ์อาหารเข้าที่ผ่านการบด โดยใช้ความยาวคลื่นในช่วง 400-2498 นาโนเมตร และใช้วิธีทางสถิติ Partial Least Squares Regression (PLS) ในการสร้างสมการทำนาย จากผลการทดลองพบว่า สมการที่มีความเหมาะสมที่สุดในการทำนายปริมาณ Trans-fatty acids สร้างขึ้นจากการใช้ความยาวคลื่นในช่วง 700- 2498 นาโนเมตร โดยสร้างขึ้นจากกลุ่มตัวอย่าง จำนวน 84 ตัวอย่างที่นำมาสร้างสมการที่นำมาสร้างสมการทำนาย (Calibration) และกลุ่มตัวอย่างที่นำมาทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการทำนาย (Validation) จำนวน 27 ตัวอย่าง และผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) พบว่า สมการที่สร้างขึ้นมีค่า RPD เท่ากับ 4.8 และ SEP เท่ากับ 0.7% และ R^2 เท่ากับ 0.97 และสมการที่เหมาะสมที่สุดในการทำนายปริมาณ cis-fatty acid ใช้ความยาวคลื่นในช่วง 1100-2498 นาโนเมตร และ 700-2498 นาโนเมตร มีค่า RPD เท่ากับ 4.0, ค่า SEP เท่ากับ 0.88 %, 0.90% ตามลำดับ และค่า R^2 เท่ากับ 0.94

การวิเคราะห์ปริมาณโปรตีน

Kamishikiryo *et al.* (1991) แสดงให้เห็นว่าที่ความยาวคลื่น 2180 นาโนเมตร ใช้ในการประเมินปริมาณโปรตีนในอาหารโดยมีความถูกต้องสูง และที่ความยาวคลื่นดังกล่าวจะไม่มีอิทธิพลของเกลือ ซูโครส กรดอะมิโน น้ำมัน และอุณหภูมิเข้ามาเกี่ยวข้อง

Wang *et al.* (1998) แสดงให้เห็นถึงความเป็นไปได้ในการใช้เทคนิค NIR ในการทำนายปริมาณโปรตีนโดยทำการประเมินคุณภาพของสารละลายโอวาลบูมิน (Ovalbumin solutions) ทั้งนี้ทำการวัดตัวอย่างดังกล่าวที่อุณหภูมิ 45-80 °C ในช่วง 4900-44550 cm^{-1} จากผลการทดลองพบว่าที่ความยาวคลื่น 4850, 4600 cm^{-1} มีความสัมพันธ์กับพันธะ N-H

การวิเคราะห์ค่าไทโอบาร์บิทูริกแอซิด (Thiobarbituric Acid Number)

Motoyama *et al.* (2006) ทำการประเมินเพอร็อกซิเดชันของกรดไขมันไม่อิ่มตัวด้วยเทคนิค NIR ทั้งนี้ โดยทำการวัดค่า 2-thiobarbituric acid number (TBA) และทำการสร้างสมการสำหรับทำนายค่าดังกล่าวด้วยเทคนิค MLR โดยใช้ความยาวคลื่นในช่วง 400-2500 นาโนเมตร จากผลการทดลองที่ได้พบว่าสมการที่สร้างขึ้นเพื่อการทำนายค่าดังกล่าวให้ค่า R เท่ากับ 0.96 และพบว่าที่ความยาวคลื่นที่ตำแหน่ง 1426, 1470, 1594, 2074 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับพันธะ O-H

การวิเคราะห์ปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมต (Monosodium glutamate)

ผงชูรส (Monosodium glutamate) จัดเป็นวัตถุที่ใช้ปรุงแต่งรสอาหารชนิดหนึ่ง โดยผงชูรสเป็นสารเคมีที่เรียกว่า โมโนโซเดียมกลูตาเมต ซึ่งเป็นเกลือของกรดกลูตามิก โดยมีสูตรโมเลกุล คือ $\text{C}_5\text{H}_9\text{NO}_4$ ทั้งนี้ Inmaculada *et al.* (2005) ทำการตรวจสอบกรดอะมิโน กรดแอสพาทิก (aspartic) กรดกลูตามิก ไกลซีน ฟีนอลานีน วาลีน ไลซีน โพลีน และไทโรซีน ในผลิตภัณฑ์อาหารสัตว์ด้วยเทคนิคสเปกโตรสโคปีย่านใกล้อินฟราเรด (NIRS) โดยใช้หัววัดแบบไฟเบอร์ออปติก (Fiber-optic) ทำการสร้างสมการทำนายปริมาณดังกล่าวด้วยวิธีทางสถิติ PLS จากผลการสร้างสมการทำนายค่าดังกล่าวพบว่า ให้ค่า R อยู่ในช่วง 0.81-0.96 สำหรับสมการทำนายปริมาณกรดกลูตามิก ให้ค่า R เท่ากับ 0.85 ค่า SEC และ SEP เท่ากับ 0.06%, 0.13% ตามลำดับ

อุปกรณ์และวิธีการ

อุปกรณ์

วัตถุดิบ

ตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่นำมาศึกษามี 2 ประเภท ดังนี้

1. ตัวอย่างขนมขบเคี้ยวประเภทมันฝรั่งที่ซื้อจากซูเปอร์มาเก็ตในเขตจังหวัดกรุงเทพมหานครและนนทบุรี ในปี พ.ศ. 2551 ดังแสดงในภาพที่ 8
2. ตัวอย่างขนมขบเคี้ยวประเภทมันฝรั่งที่ขึ้นรูปแล้วที่ยังไม่ได้ผ่านการทอด (Pellet) ดังแสดงในภาพที่ 9



ภาพที่ 8 ตัวอย่างขนมขบเคี้ยวประเภทมันฝรั่งที่ซื้อจากซูเปอร์มาเก็ต



ภาพที่ 9 ตัวอย่างขนมขบเคี้ยวประเภทมันฝรั่งที่ขึ้นรูปแล้วที่ยังไม่ได้ผ่านการทอด (Pellet)

อุปกรณ์ในการวิเคราะห์คุณภาพ

1. เครื่อง Near Infrared Reflectance (NIR) Spectrophotometer ยี่ห้อ BRAN + LUEBBE รุ่น InfraAlyzer 500 ประเทศเยอรมันนี
2. เครื่องชั่งละเอียด 4 ตำแหน่ง ยี่ห้อ Satorius รุ่น BS 224 S ประเทศเยอรมันนี
3. ตู้อบไฟฟ้าชนิดควบคุมอุณหภูมิได้ ยี่ห้อ Binder รุ่น FD 115 ประเทศสวิตเซอร์แลนด์
4. ตู้ควบคุมอุณหภูมิ ยี่ห้อ LabTech LCT-1035C Constant Temperature รุ่น BWS ประเทศเยอรมันนี
5. เครื่องวัดค่าวอเตอร์แอคทิวิตี (Water Activity) ยี่ห้อ NOVASINA รุ่น RS 232 ประเทศสวิตเซอร์แลนด์
6. เครื่อง Soxtec ยี่ห้อ Tecator รุ่น 2050 ประเทศสวิตเซอร์แลนด์
7. เครื่องย่อยโปรตีน ยี่ห้อ Tecator รุ่น 2006 ประเทศสวิตเซอร์แลนด์
8. เครื่องกลั่นโปรตีน ยี่ห้อ Buchi รุ่น Distillation Unit B-324 ประเทศสวิตเซอร์แลนด์
9. เครื่องให้ความร้อนขณะกลั่น (heating mantle)
10. เครื่องแก้วที่ใช้สำหรับกลั่น
11. เครื่อง Vacuum Oven ยี่ห้อ Heraeus รุ่น vacutherm ประเทศเยอรมันนี
12. เครื่อง Vortex ยี่ห้อ Vortex รุ่น GENIE 2 ประเทศเยอรมันนี
13. เครื่อง High Performance Liquid Chromatography (HPLC) ยี่ห้อ Agilent รุ่น 1100 Series ประเทศเยอรมันนี

14. อุณหภูมิประเภทโพลีเอสเตอร์

โปรแกรมที่ใช้คำนวณและวิเคราะห์ผลทางสถิติ

1. โปรแกรมสำเร็จรูปที่ใช้ในการคำนวณผลทางสถิติ Unscrambler[®] version 8.0 ประเทศนอร์เวย์
2. โปรแกรม in-house-written MWPLS ทำงานในโปรแกรม MATLAB[®] version 7.0 ประเทศสหรัฐอเมริกา อนุเคราะห์โดย Prof. Yukihiro Ozaki (Jiang, Berry, Siesler and Ozaki, 2002)
3. โปรแกรม SESAME เวอร์ชัน 3.1 ประเทศเยอรมนี

วิธีการ

การศึกษาในครั้งนี้ แบ่งออกเป็น 6 ส่วน ดังนี้

- ส่วนที่ 1 วิธีการเตรียมตัวอย่างขนมขบเคี้ยว
- ส่วนที่ 2 สร้างสมการทำนายที่เหมาะสมในการทำนายค่าความชื้นและค่าออกเตอร์ แอคทีวิตี ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว
- ส่วนที่ 3 สร้างสมการทำนายที่เหมาะสมในการทำนายค่าไขมันของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว
- ส่วนที่ 4 สร้างสมการทำนายที่เหมาะสมในการทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว
- ส่วนที่ 5 สร้างสมการทำนายที่เหมาะสมในการทำนายค่าโปรตีนของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว

ส่วนที่ 6 สร้างสมการทำนายค่าที่เหมาะสมในการทำนายปริมาณผงชูรสของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว

1. วิธีการเตรียมตัวอย่างขนมขบเคี้ยว

นำตัวอย่างขนมขบเคี้ยวประเภทมันฝรั่งที่ขึ้นรูปแล้วที่ยังไม่ได้ผ่านการทอด (pellet) มาทอดด้วยเครื่องทอดไฟฟ้าที่อุณหภูมิ 90 องศาเซลเซียส นาน 9 วินาที ภายหลังการทอดนำมาวางพักไว้นาน 3 นาทีแล้ว จึงนำมาบรรจุในถุงพลาสติกประเภทโพลีเอสเตอร์ชนิดที่มีซิปล โดยบรรจุถุงละ 35 กรัม เพื่อเตรียมนำไปทำการศึกษาในขั้นตอนต่อไป

2. การสร้างสมการทำนายที่เหมาะสมในการทำนายค่าปริมาณความชื้นและค่าวอเตอร์แอคทิวิตี ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว

2.1 ขั้นตอนการเตรียมตัวอย่าง

นำตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการทอดและบรรจุไว้ในถุงพลาสติกประเภทโพลีเอสเตอร์ โดยไม่ต้องปิดปากถุง และวางไว้ในตู้ควบคุมอุณหภูมิที่อุณหภูมิ 25 องศาเซลเซียส เป็นเวลา 0 วัน ถึง 13 วัน และเก็บตัวอย่างขนมขบเคี้ยวดังกล่าวมาเพื่อทำการศึกษา จำนวนวันละ 10 ตัวอย่าง รวมเป็นจำนวนทั้งหมด 140 หน่วยตัวอย่าง และขนมขบเคี้ยวประเภทเดียวกันที่สุ่มซื้อมาจากซูเปอร์มาร์เก็ตในเขตกรุงเทพมหานคร จำนวน 10 หน่วยตัวอย่าง ซึ่งจะได้ตัวอย่างรวมทั้งสิ้น 150 หน่วยตัวอย่าง ตัวอย่างแต่ละตัวอย่างจะสุ่มจากในถุงบรรจุซึ่งมีปริมาณ 35 กรัม มาทำการปั่นด้วยเครื่องปั่น นาน 5 วินาที และวางทิ้งไว้ในตู้ควบคุมอุณหภูมิ 25 องศาเซลเซียส แล้วจึงนำตัวอย่างที่ผ่านการปั่นปริมาณ 18 กรัม มาบรรจุลงใน Rotating cup (ดังแสดงในภาพผนวกที่ ก5) ก่อนนำไปวัดค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยเครื่อง NIR และวัดค่าปริมาณความชื้นและค่าวอเตอร์แอคทิวิตีต่อไป

2.2 การวัดค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยเครื่อง NIR

นำตัวอย่างขนมขบเคี้ยวทั้งหมด 150 หน่วยตัวอย่างที่ผ่านการปั่นแล้ว และวางทิ้งไว้ที่อุณหภูมิ 25 องศาเซลเซียส จำนวน 18 กรัม ในข้อ 1. มาทำการวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่อง NIR ยี่ห้อ BRAN + LUEBBE รุ่น InfraAlyzer 500 ประเทศเยอรมนี โดยทำการวัดค่าที่อุณหภูมิ 25 องศาเซลเซียส ทำการบันทึกค่าการดูดกลืนแสงที่ได้ในช่วงคลื่นอินฟราเรด 1100-2500 นาโนเมตร ห่างช่วงละ 2 นาโนเมตร เพื่อนำไปสร้างกราฟของสเปกตรัมระหว่างค่า $\log(1/R)$ และค่าความยาวคลื่น ด้วยโปรแกรมสำเร็จรูปทางคอมพิวเตอร์ SESAME รุ่น 3.1 ดังแสดงในภาพผนวกที่ ก1 ก่อนนำไปวิเคราะห์หาความสัมพันธ์กับค่าความชื้น และค่าวอเตอร์ แอคติวิตีเพื่อสร้างสมการทำนายในข้อ 2.4 ต่อไป

2.3 การวัดค่าความชื้น และค่าวอเตอร์ แอคติวิตี

จากตัวอย่างทั้งหมดจำนวน 150 หน่วยตัวอย่างที่ผ่านการวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่อง NIR ในข้อ 2.2 จะนำมาวัดค่าปริมาณความชื้นและค่าวอเตอร์ แอคติวิตีตามวิธีการดังนี้

- การหาปริมาณความชื้น โดยจะสุ่มตัวอย่างมาปริมาณ 2 กรัม เพื่อนำมาหาปริมาณความชื้นตามวิธีการของ AOAC (2000) ดังแสดงในภาคผนวกที่ ข1 บันทึกปริมาณความชื้นร้อยละของน้ำหนัก โดยทำการวัดค่าตัวอย่างละ 3 ซ้ำ และนำค่าดังกล่าวมาหาค่าเฉลี่ย แล้วนำไปหาความสัมพันธ์กับข้อ 2.2 ก่อนที่จะนำไปสร้างสมการทำนายในข้อ 2.5

- การหาค่าวอเตอร์ แอคติวิตี (Water Activity) โดยจะสุ่มตัวอย่างมาปริมาณ 1 กรัม มาทำการวัดค่าวอเตอร์ แอคติวิตีด้วยเครื่องวัดค่าวอเตอร์ แอคติวิตี (Water Activity) ยี่ห้อ NOVASINA รุ่น RS 232 ประเทศสวิตเซอร์แลนด์ แล้วทำการบันทึกค่าวอเตอร์ แอคติวิตีที่ได้ โดยทำการวัดค่าตัวอย่างละ 3 ซ้ำ และนำค่าดังกล่าวมาหาค่าเฉลี่ย แล้วนำไปหาความสัมพันธ์กับข้อ 2.2 ก่อนที่จะนำไปสร้างสมการทำนายในข้อ 2.5 ต่อไป

2.4 การปรับแต่งสเปกตรัมก่อนการวิเคราะห์

ภายหลังจากการนำตัวอย่างไปวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่อง NIR จะได้สเปกตรัม ซึ่งก่อนทำการสร้างสมการจะทำการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการต่างๆ ดังนี้

- 1) สเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง
- 2) วิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing)
- 3) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative)
- 4) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative)
- 5) วิธี Multiplicative scatter correction (MSC)

2.5 การสร้างสมการที่เหมาะสมในการทำนายค่าปริมาณความชื้นและค่าแอดเวอร์ แอคทีวิตีของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว

จากข้อมูลที่ได้จากวัดค่าการดูดกลืนแสงในข้อ 2.2 และการวัดค่าความชื้นและค่าแอดเวอร์ แอคทีวิตีของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวในข้อ 2.3 นำมาทำการสร้างสมการทำนาย โดยนำข้อมูลค่าการดูดกลืนแสงในรูป $\log(1/R)$ ที่ได้จากการวัดด้วยเครื่อง NIR มาผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการต่างๆ ได้แก่ วิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) วิธี Multiplicative scatter correction (MSC) และสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง มากำหนดให้เป็นตัวแปรอิสระ (X) และกำหนดให้ค่าความชื้นและค่าแอดเวอร์ แอคทีวิตี ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากข้อ 2.2 เป็นตัวแปรตาม (Y) แล้วนำมาหาความสัมพันธ์กันด้วยวิธีการทางเคโมเมตริกซ์ (Chemometric) แบบการวิเคราะห์เชิงปริมาณ ซึ่งวิธีการสร้างสมการทำนายค่าคุณภาพทางเคมีประกอบด้วย 2 ขั้นตอนที่สำคัญ คือ ขั้นตอนการสร้างสมการทำนายและขั้นตอนการตรวจสอบความถูกต้องของสมการทำนาย โดยมีรายละเอียดการสร้างสมการทำนายของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว ดังนี้

2.5.1 ขั้นตอนการสร้างสมการทำนาย

ก. นำตัวอย่างขนมขบเคี้ยวทั้ง 150 หน่วยตัวอย่างมาแบ่งแบบสุ่มออกเป็น 2 กลุ่ม ได้แก่ ตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการทำนาย (Calibration set) จำนวน 100 หน่วย ตัวอย่าง และตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้องของสมการ (Validation set) จำนวน 50 หน่วย ตัวอย่าง เพื่อใช้ในการตรวจสอบความแม่นยำของสมการที่สร้างขึ้น ดังแสดงในภาพที่ 10 โดยให้ตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการมีค่าคุณภาพทางเคมีครอบคลุมค่าในกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง

ข. นำตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ (Calibration set) จำนวน 100 หน่วย ตัวอย่าง มาทำการวิเคราะห์หาความสัมพันธ์ระหว่างค่าการดูดกลืนแสง และค่าคุณภาพทางเคมี เพื่อสร้างสมการที่เหมาะสมในการทำนายค่าความชื้น และค่าอวอเตอร์ แอคทีวิตี ด้วยวิธีสถิติดังนี้

1) วิธี Partial Least Square (PLS) Regression ในโปรแกรม Unscrambler ® version 8.0 และใช้วิธีการคัดเลือกตัวแปรอิสระหรือช่วงความยาวคลื่นที่น่าจะมีความสัมพันธ์กับค่าความชื้น และค่าอวอเตอร์ แอคทีวิตี ที่ทำการวิเคราะห์มาจัดกลุ่มตัวแปรใหม่ จากข้อมูลค่าการดูดกลืนแสงที่ความยาวคลื่นต่างๆ

2) วิธี Moving Window Partial Least Square (PLS) Regression ด้วยโปรแกรม in-house-written in MATLAB version 7.0 ซึ่งใช้วิธีการคัดเลือกความยาวคลื่นจากกราฟความสัมพันธ์ระหว่างค่า log (SSR) ที่แต่ละความยาวคลื่น โดยเลือกช่วงความยาวคลื่นที่ให้ค่า log (SSR) ต่ำ

ค. บันทึกค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (Correlation coefficient; R) และค่าความคลาดเคลื่อนจากการทำนายของกลุ่มตัวอย่างสร้างสมการ (Standard Error of Calibration; SEC) ของสมการทำนายแต่ละสมการที่สร้างขึ้น

ง. ทำการคัดเลือกหาสมการทำนายค่าคุณภาพทางเคมีที่เหมาะสม โดยพิจารณาเลือกจากสมการที่ให้ค่า R เข้าใกล้ 1 มากที่สุด และให้ค่า SEC ต่ำ (Hruschka, 1990; Cozzolino *et al.*, 2004) สำหรับสมการทำนายค่าคุณภาพทางเคมีของขนมขบเคี้ยวที่เหมาะสม กำหนดให้มีค่า R สูงกว่า ± 0.80 ขึ้นไป

หลังจากทำการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี ที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First Derivative) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) วิธี Multiplicative scatter correction (MSC) นำสเปกตรัมดังกล่าวมาทำการสร้างสมการเพื่อหาความสัมพันธ์กับค่าทางเคมีและกายภาพ โดยใช้วิธีทางสถิติ 2 วิธีดังนี้

1. วิธี Partial Least Squares Regression (PLS) ทั้งนี้ จะได้สมการทั้งหมดจำนวน 5 สมการ ที่สร้างจากสเปกตรัม 5 แบบ ดังนี้

1.1 สเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง แล้วนำมาหาความสัมพันธ์กับค่าปริมาณ ความชื้นและค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี ด้วยวิธี PLS

1.2 สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี ที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) แล้วนำมาหาความสัมพันธ์กับค่าปริมาณความชื้นและค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี ด้วยวิธี PLS

1.3 สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) แล้วนำมาหาความสัมพันธ์กับค่าปริมาณความชื้นและค่าวอเตอร์ แอคทีวิตีด้วยวิธี PLS

1.4 สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) แล้วนำมาหาความสัมพันธ์กับค่าปริมาณความชื้นและค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี ด้วยวิธี PLS

1.5 สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC แล้วนำมาหาความสัมพันธ์กับค่า ปริมาณความชื้นและค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี ด้วยวิธี PLS

แล้วทำการพิจารณาความเหมาะสมของสมการทำนายที่สร้างขึ้น โดยพิจารณาจากค่า สัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (R ; Coefficient of correlation) ดังต่อไปนี้ หากค่า R อยู่ในช่วง 0.96-0.98 แสดงว่าสมการที่สร้างขึ้นสามารถนำไปประยุกต์ใช้ได้หลายกรณี รวมทั้งในงานประกันคุณภาพ ด้วย หากค่า R เท่ากับ 0.99 แสดงว่าสมการที่สร้างขึ้นมีประสิทธิภาพดีเยี่ยม และค่าความคลาดเคลื่อน ของสมการในการทำนายค่าคุณภาพที่ทำการศึกษา (Standard Error of Calibration; SEC) (Williams, 2007)

2. วิธี Moving Window Partial Least Squares (MWPLS) Regression โดยจะได้สมการทั้งหมด 5 สมการ ที่สร้างจากสเปกตรัม 5 แบบ คือ

2.1 สเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่งแล้วนำมาหาความสัมพันธ์กับค่าปริมาณความชื้น และค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี้ ด้วยวิธี MWPLS

2.2 สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) แล้วนำมาหาความสัมพันธ์กับค่าปริมาณความชื้น และค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี้ ด้วยวิธี MWPLS

2.3 สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) แล้วนำมาหาความสัมพันธ์กับค่าปริมาณความชื้น และค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี้ ด้วยวิธี MWPLS

2.4 สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) แล้วนำมาหาความสัมพันธ์กับค่าปริมาณความชื้น และค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี้ ด้วยวิธี MWPLS

2.5 สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC แล้วนำมาหาความสัมพันธ์กับค่าปริมาณความชื้นและค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี้ ด้วยวิธี MWPLS

จากขั้นตอนนี้จะได้สมการทั้งหมด 10 สมการ ดังแสดงในภาพที่ 11

แล้วทำการพิจารณาความเหมาะสมของสมการทำนายที่สร้างขึ้น โดยพิจารณาจากค่า R (ค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์) ได้ดังแสดงในตารางต่อไปนี้

ตารางที่ 9 แนวทางการอธิบายความสามารถของสมการแคลิเบรชันด้วยค่า R (ค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์)

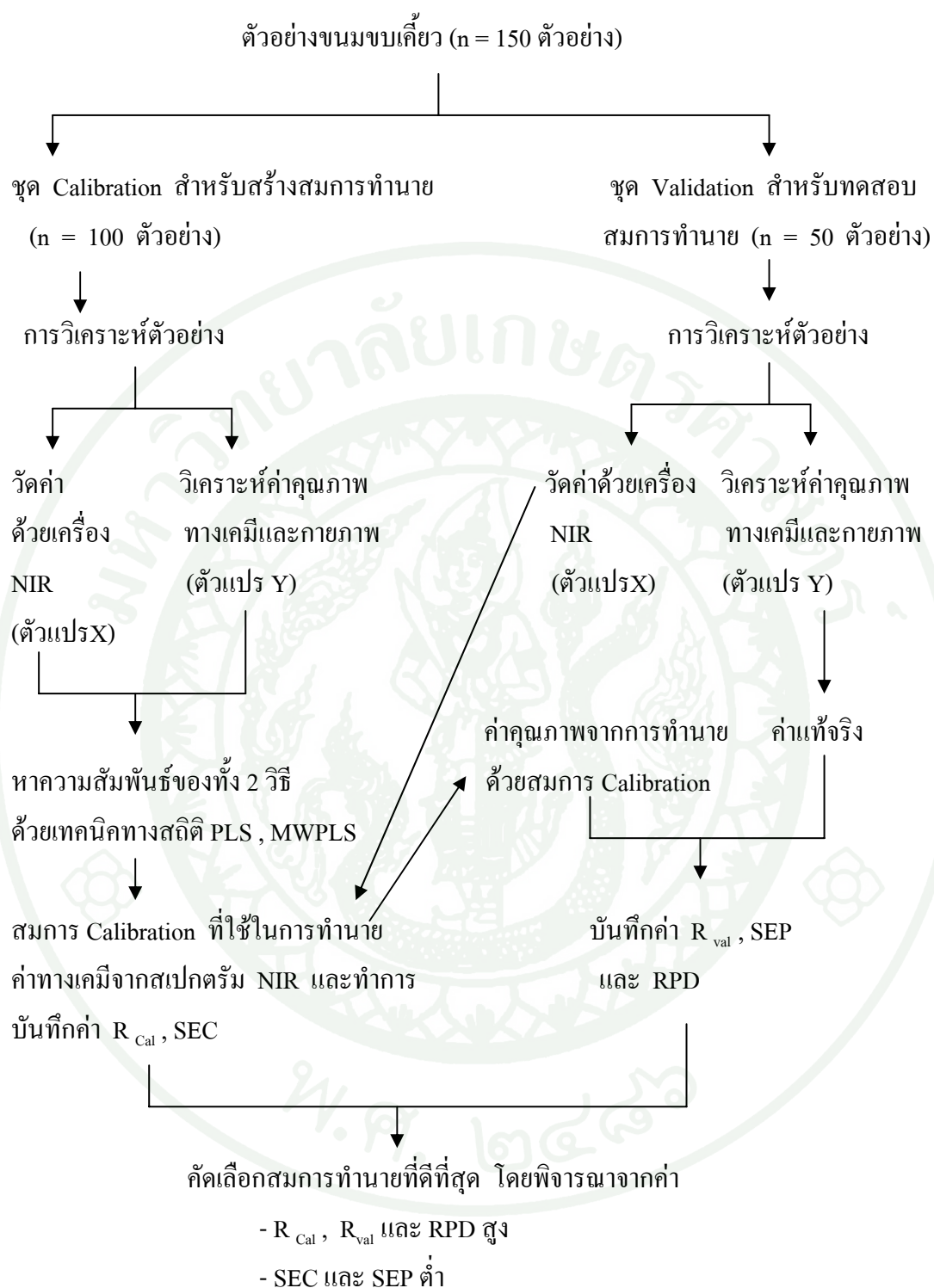
ค่า R	ความสามารถของสมการแคลิเบรชัน
± 0.5	ไม่ควรใช้ในการทำนาย
$\pm 0.51 - 0.70$	ความสัมพันธ์ไม่ดีพอ
$\pm 0.70 - 0.80$	การทำนายเพื่อการแบ่งระดับปริมาณอย่างหยาบ
$\pm 0.81 - 0.90$	การทำนายเพื่อแบ่งระดับปริมาณหรือประมาณค่าเบื้องต้น
$\pm 0.91 - 0.95$	การทำนายเพื่องานวิจัยและงานทั่วไป
$\pm 0.96 - 0.98$	การทำนายเพื่อการประกันคุณภาพ
± 0.99	ทุกงาน

ที่มา: William (2001)

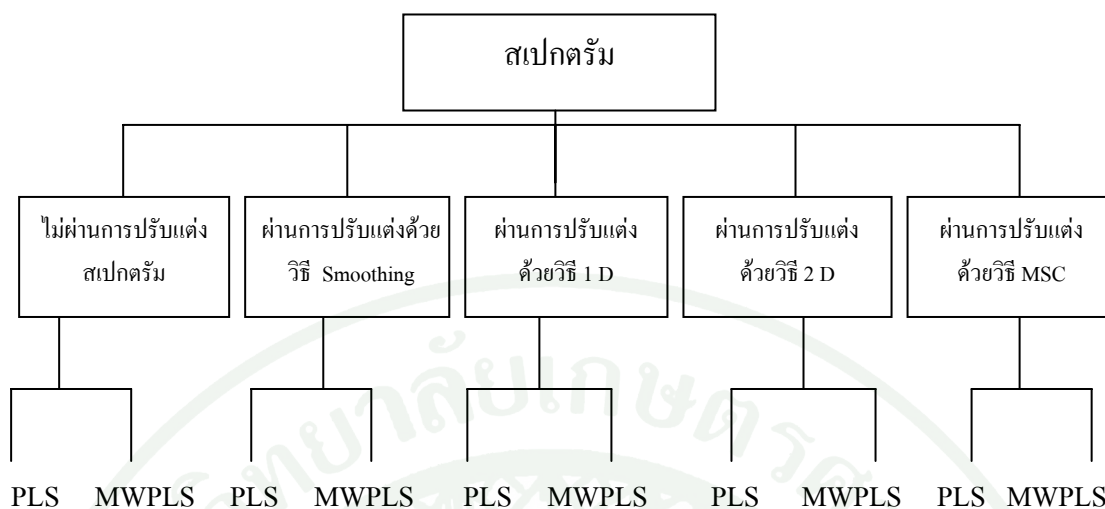
2.5.2 ขั้นตอนการตรวจสอบความถูกต้องของสมการทำนายค่าปริมาณความชื้นและค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี้ที่สร้างขึ้น

ก. นำตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation Set) จำนวน 50 ตัวอย่าง มาทำการตรวจสอบความถูกต้องและแม่นยำของสมการที่สร้างขึ้น แล้วทำการบันทึกค่าความคลาดเคลื่อนจากการทำนายด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Standard Error of Prediction; SEP) และค่าความแตกต่างระหว่างค่าที่ทำนายได้จากสมการกับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริงของแต่ละสมการ (Bias)

ข. ทำการคัดเลือกหาสมการทำนายค่าคุณภาพทางเคมีที่เหมาะสม และสามารถทำนายค่าได้ถูกต้องและแม่นยำมากที่สุด โดยพิจารณาเลือกจากสมการที่ให้ค่า SEP และ Bias ต่ำๆ (Hruschka, 1990; Cozzolino *et al.*, 2004)



ภาพที่ 10 ขั้นตอนการสร้างสมการที่ใช้ในการทำนายค่าคุณภาพทางเคมีและกายภาพ โดยการหาความสัมพันธ์ทางสถิติระหว่างการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR กับการวิเคราะห์ค่าทางเคมี และการตรวจสอบความแม่นยำของสมการที่สร้างขึ้น



ภาพที่ 11 แสดงจำนวนสมการที่ได้จากการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีต่างๆ และนำมาสร้างสมการทำนายค่าคุณภาพทางเคมีและกายภาพด้วยวิธีทางสถิติ Partial Least Squares Regression (PLS) และ Moving Window Partial Least Squares Regression (MWPLS)

3. การสร้างสมการทำนายที่เหมาะสมในการทำนายปริมาณไขมันของตัวอย่างนมขบเคี้ยว

3.1 ขั้นตอนการเตรียมตัวอย่าง

นำตัวอย่างนมขบเคี้ยวมาทำการทอดด้วยเครื่องทอดไฟฟ้าที่อุณหภูมิ 90 องศาเซลเซียส นาน 3-16 วินาที โดยทอดวินาทีละ 10 หน่วยตัวอย่างเพื่อนำมาทำการศึกษา รวมเป็นจำนวนทั้งหมด 140 ตัวอย่าง และนมขบเคี้ยวประเภทเดียวกันที่สุ่มซื้อจากซูเปอร์มาร์เก็ตในเขตกรุงเทพมหานครจำนวน 10 หน่วยตัวอย่าง ซึ่งจะได้ตัวอย่างรวมทั้งสิ้น 150 หน่วยตัวอย่าง ตัวอย่างแต่ละตัวอย่างจะสุ่มจากในถุงบรรจุซึ่งมีปริมาณ 35 กรัม มาทำการปั่นด้วยเครื่องปั่น นาน 5 วินาที และวางทิ้งไว้ที่อุณหภูมิ 25 องศาเซลเซียส แล้วจึงนำตัวอย่างที่ผ่านการปั่นปริมาณ 18 กรัม มาบรรจุลงใน rotating cup (ดังแสดงในภาพผนวกที่ ก5) ก่อนนำไปวัดค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่างนมขบเคี้ยวด้วยเครื่อง NIR และวัดค่าปริมาณไขมันต่อไป

3.2 การวัดค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยเครื่อง NIR

นำตัวอย่างขนมขบเคี้ยวทั้งหมด 150 หน่วยตัวอย่างที่ผ่านการปั่นแล้ว และวางทิ้งไว้ที่อุณหภูมิ 25 องศาเซลเซียส จำนวน 18 กรัม ในข้อ 5.1 มาทำการวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่อง NIR เช่นเดียวกับวิธีการในข้อ 2.2

3.3 การวัดค่าปริมาณไขมัน

จากตัวอย่างทั้งหมดจำนวน 150 หน่วยตัวอย่างที่ผ่านการวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่อง NIR ในข้อ 2.2 จะนำมาวัดค่าปริมาณไขมันตามวิธีการดังนี้

- การหาปริมาณไขมัน โดยจะสุ่มตัวอย่างมาปริมาณ 1 กรัม เพื่อนำมาหาค่าปริมาณไขมันตามวิธีการของ AOAC (2000) ดังแสดงในภาคผนวกที่ ข3 บันทึกปริมาณไขมันร้อยละของน้ำหนัก โดยทำการวัดค่าตัวอย่างละ 3 ซ้ำ และนำค่าดังกล่าวมาหาค่าเฉลี่ย แล้วนำไปหาความสัมพันธ์กับข้อ 5.2 ก่อนที่จะนำไปสร้างสมการทำนายในข้อ 3.5

3.4 การปรับแต่งสเปกตรัมก่อนการวิเคราะห์

ภายหลังจากการนำตัวอย่างไปวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่อง NIR จะได้สเปกตรัม ซึ่งก่อนทำการสร้างสมการจะทำการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการต่างๆ เช่นเดียวกับข้อ 2.4

3.5 การสร้างสมการที่เหมาะสมในการทำนายค่าปริมาณไขมันของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว

จากข้อมูลที่ได้จากวัดค่าการดูดกลืนแสงในข้อ 3.2 และการวัดค่าปริมาณไขมันของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวในข้อ 3.3 นำมาทำการสร้างสมการทำนาย เช่นเดียวกับข้อ 2.5

3.5.1 ขั้นตอนการสร้างสมการทำนาย

ก. นำตัวอย่างขนมขบเคี้ยวทั้ง 150 หน่วยตัวอย่างมาแบ่งแบบสุ่มออกเป็น 2 กลุ่มได้แก่ ตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการทำนาย (Calibration set) จำนวน 100 หน่วยตัวอย่าง และตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้องของสมการ (Validation set) จำนวน 50 หน่วยตัวอย่าง เพื่อใช้ในการตรวจสอบความแม่นยำของสมการที่สร้างขึ้น ดังแสดงในภาพที่ 10

ข. นำตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ (Calibration set) จำนวน 100 หน่วยตัวอย่าง มาทำการวิเคราะห์หาความสัมพันธ์ระหว่างค่าการดูดกลืนแสง และค่าคุณภาพทางเคมี เพื่อสร้างสมการที่เหมาะสมในการทำนายค่าปริมาณไขมัน เช่นเดียวกับข้อ 2.5.1

3.5.2 ขั้นตอนการตรวจสอบความถูกต้องของสมการทำนายค่าปริมาณไขมันที่สร้างขึ้น

นำตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation set) จำนวน 50 หน่วยตัวอย่าง มาทำการตรวจสอบความถูกต้องและแม่นยำของสมการที่สร้างขึ้น เช่นเดียวกับข้อ 2.5.2

4. การสร้างสมการทำนายที่เหมาะสมในการทำนายปริมาณไทโอบาร์บิทูริก แอซิดนมเบอร์ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว

4.1 ขั้นตอนการเตรียมตัวอย่าง

นำตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการทอดและบรรจุไว้ในถุงพลาสติกประเภทโพลีเอสเตอร์ โดยไม่ต้องปิดปากถุง และวางไว้ในตู้ควบคุมอุณหภูมิที่อุณหภูมิ 40 องศาเซลเซียสเป็นเวลา 1 วัน ถึง 9 วัน และเก็บตัวอย่างขนมขบเคี้ยวดังกล่าวมาเพื่อการศึกษาจำนวนวันละ 10 ตัวอย่าง รวมเป็นจำนวนทั้งหมด 90 หน่วยตัวอย่าง และขนมขบเคี้ยวประเภทเดียวกันที่สุ่มซื้อมาจากซูเปอร์มาร์เก็ตในเขตกรุงเทพมหานคร จำนวน 10 หน่วยตัวอย่าง ซึ่งจะได้ตัวอย่างรวมทั้งสิ้น 100 หน่วยตัวอย่าง ตัวอย่างแต่ละตัวอย่างจะสุ่มจากในถุงบรรจุซึ่งมีปริมาณ 35 กรัมมาทำการปั่นด้วยเครื่องปั่น นาน 5 วินาที และวางทิ้งไว้ที่อุณหภูมิ 25 องศาเซลเซียส แล้วจึงนำตัวอย่างที่ผ่านการปั่นปริมาณ 18 กรัม มาบรรจุลงใน rotating cup (ดังแสดงในภาพภาคผนวกที่ ก5) ก่อนนำไป

วัดค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยเครื่อง NIR และวัดค่าไทโอบาร์บิทริก แอซิด นัมเบอร์ต่อไป

4.2 การวัดค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยเครื่อง NIR

นำตัวอย่างขนมขบเคี้ยวทั้งหมด 100 หน่วยตัวอย่างที่ผ่านการปั่นแล้ว และวางทิ้งไว้ที่อุณหภูมิ 25 องศาเซลเซียส จำนวน 18 กรัม ในข้อ 4.1 มาทำการวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่อง NIR เช่นเดียวกับข้อ 2.2

4.3 การวัดค่าไทโอบาร์บิทริก แอซิด นัมเบอร์

จากตัวอย่างทั้งหมดจำนวน 100 หน่วยตัวอย่างที่ผ่านการวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่อง NIR ในข้อ 4.2 จะนำมาวัดค่าไทโอบาร์บิทริก แอซิด นัมเบอร์ ตามวิธีการดังนี้

- การหาค่าไทโอบาร์บิทริก แอซิด นัมเบอร์ โดยจะสุ่มตัวอย่างมาปริมาณ 10 กรัม เพื่อนำมาหาค่าไทโอบาร์บิทริก แอซิด นัมเบอร์ตามวิธีการของ AOAC (2000) ดังแสดงในภาคผนวกที่ ข5 บันทึกแล้วบันทึกค่าเป็นมิลลิกรัม malonaldehyde ต่อกิโลกรัม โดยทำการวัดค่าตัวอย่างละ 3 ซ้ำ และนำค่าดังกล่าวมาหาค่าเฉลี่ย แล้วนำไปหาความสัมพันธ์กับข้อ 8.2 ก่อนที่จะนำไปสร้างสมการทำนายในข้อ 4.5

4.4 การปรับแต่งสเปกตรัมก่อนการวิเคราะห์

ภายหลังจากการนำตัวอย่างไปวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่อง NIR จะได้สเปกตรัม ซึ่งก่อนทำการสร้างสมการจะทำการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการต่างๆ เช่นเดียวกับข้อ 2.4

4.5 การสร้างสมการที่เหมาะสมในการทำนายค่าไทโอบาร์บิทริก แอซิด นัมเบอร์ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว

จากข้อมูลที่ได้จากวัดค่าการดูดกลืนแสงในข้อ 4.2 และการวัดค่าไทโอบาร์บิทริกแอซิด นัมเบอร์ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวในข้อ 4.3 นำมาทำการสร้างสมการทำนาย เช่นเดียวกับข้อ 2.5

4.5.1 ขั้นตอนการสร้างสมการทำนาย

ก. นำตัวอย่างขนมขบเคี้ยวทั้ง 100 หน่วยตัวอย่างมาแบ่งแบบสุ่มออกเป็น 2 กลุ่มได้แก่ ตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการทำนาย (Calibration set) จำนวน 80 หน่วยตัวอย่าง และตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้องของสมการ (Validation set) จำนวน 20 หน่วยตัวอย่าง เพื่อใช้ในการตรวจสอบความแม่นยำของสมการที่สร้างขึ้น ดังแสดงในภาพที่ 10

ข. นำตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ (Calibration set) จำนวน 80 หน่วยตัวอย่าง มาทำการวิเคราะห์หาความสัมพันธ์ระหว่างค่าการดูดกลืนแสง และค่าคุณภาพทางเคมี เพื่อสร้างสมการที่เหมาะสมในการทำนายค่าปริมาณไขมัน เช่นเดียวกับข้อ 2.5.1

4.5.2 ขั้นตอนการตรวจสอบความถูกต้องของสมการทำนายค่าไทโอบาร์บิทริกแอซิด นัมเบอร์ที่สร้างขึ้น

นำตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation Set) จำนวน 20 หน่วยตัวอย่าง มาทำการตรวจสอบความถูกต้องและแม่นยำของสมการที่สร้างขึ้น เช่นเดียวกับข้อ 2.5.2

5. การสร้างสมการทำนายที่เหมาะสมในการทำนายปริมาณโปรตีนของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว

5.1 ขั้นตอนการเตรียมตัวอย่าง

นำตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการทอดและบรรจุไว้ในถุงพลาสติกประเภทโพลีเอสเตอร์ จำนวนทั้งหมด 140 หน่วยตัวอย่าง และขนมขบเคี้ยวประเภทเดียวกันที่สุ่มซื้อจากซูเปอร์มาร์เก็ตในเขตกรุงเทพมหานคร จำนวน 10 หน่วยตัวอย่าง ซึ่งจะได้ตัวอย่างรวมทั้งสิ้น 150 หน่วยตัวอย่าง ตัวอย่างแต่ละตัวอย่างจะสุ่มจากในถุงบรรจุซึ่งมีปริมาณ 35 กรัม มาทำการปั่นด้วยเครื่องปั่น นาน 5 วินาที และวางทิ้งไว้ที่อุณหภูมิ 25 องศาเซลเซียส แล้วจึงนำตัวอย่างที่ผ่านการปั่น

ปริมาณ 18 กรัม มาบรรจุลงใน rotating cup (ดังแสดงในภาพภาคผนวกที่ ก4) ก่อนนำไปวัดค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยเครื่อง NIR และวัดค่าปริมาณโปรตีนต่อไป

5.2 การวัดค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยเครื่อง NIR

นำตัวอย่างขนมขบเคี้ยวทั้งหมด 150 หน่วยตัวอย่างที่ผ่านการปั่นแล้ว และวางทิ้งไว้ที่อุณหภูมิ 25 องศาเซลเซียส จำนวน 18 กรัม ในข้อ 5.1 มาทำการวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่อง NIR เช่นเดียวกับข้อ 2.2

5.3 การวัดค่าปริมาณโปรตีน

จากตัวอย่างทั้งหมดจำนวน 150 หน่วยตัวอย่างที่ผ่านการวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่อง NIR จะนำมาวัดค่าปริมาณโปรตีน ตามวิธีการดังนี้

- การหาค่าปริมาณโปรตีน โดยจะสุ่มตัวอย่างมาปริมาณ 1 กรัม เพื่อนำมาหาค่าปริมาณโปรตีนตามวิธีการของ AOAC (2000) ดังแสดงในภาคผนวกที่ ข4 บันทึกแล้วบันทึกค่าเป็นเปอร์เซ็นต์ โดยทำการวัดค่าตัวอย่างละ 3 ซ้ำ และนำค่าดังกล่าวมาหาค่าเฉลี่ย แล้วนำไปหาความสัมพันธ์กับข้อ 5.2 ก่อนที่จะนำไปสร้างสมการทำนายในข้อ 5.5

5.4 การปรับแต่งสเปกตรัมก่อนการวิเคราะห์

ภายหลังจากการนำตัวอย่างไปวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่อง NIR จะได้สเปกตรัม ซึ่งก่อนทำการสร้างสมการจะทำการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการต่างๆ เช่นเดียวกับข้อ 2.4

5.5 การสร้างสมการที่เหมาะสมในการทำนายค่าปริมาณโปรตีนของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว

จากข้อมูลที่ได้จากวัดค่าการดูดกลืนแสงในข้อ 5.2 และการวัดค่าปริมาณโปรตีนของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวในข้อ 5.3 นำมาทำการสร้างสมการทำนาย เช่นเดียวกับข้อ 2.5

5.5.1 ขั้นตอนการสร้างสมการทำนาย

ก. นำตัวอย่างขนมขบเคี้ยวทั้ง 150 หน่วยตัวอย่างมาแบ่งแบบสุ่มออกเป็น 2 กลุ่มได้แก่ ตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการทำนาย (Calibration set) จำนวน 100 หน่วยตัวอย่าง และตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้องของสมการ (Validation set) จำนวน 50 หน่วยตัวอย่าง เพื่อใช้ในการตรวจสอบความแม่นยำของสมการที่สร้างขึ้น ดังแสดงในภาพที่ 10

ข. นำตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ (Calibration set) จำนวน 100 หน่วยตัวอย่าง มาทำการวิเคราะห์หาความสัมพันธ์ระหว่างค่าการดูดกลืนแสง และค่าคุณภาพทางเคมี เพื่อสร้างสมการที่เหมาะสมในการทำนายค่าปริมาณโปรตีน เช่นเดียวกับข้อ 2.5.1

5.5.2 ขั้นตอนการตรวจสอบความถูกต้องของสมการทำนายค่าปริมาณโปรตีนที่สร้างขึ้น

นำตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation Set) จำนวน 50 หน่วยตัวอย่าง มาทำการตรวจสอบความถูกต้องและแม่นยำของสมการที่สร้างขึ้น เช่นเดียวกับข้อ 2.5.2

6. การสร้างสมการทำนายที่เหมาะสมในการทำนายปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตในตัวอย่างขนมขบเคี้ยว

6.1 ขั้นตอนการเตรียมตัวอย่าง

นำตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการทอดที่อุณหภูมิ 90 องศาเซลเซียส นาน 9 วินาที และใส่ผงชูรสปริมาณ 1% - 5% ของหน่วยบรรจุซึ่งมีปริมาณ 35 กรัม เปอร์เซ็นต์ละ 10 หน่วยตัวอย่าง รวมเป็นจำนวนทั้งหมด 50 หน่วยตัวอย่าง และใส่ผงชูรสปริมาณ 1.2%, 1.3%, 1.8%, 1.9%, 7% ของหน่วยบรรจุซึ่งมีปริมาณ 35 กรัม เปอร์เซ็นต์ละ 2 หน่วยตัวอย่าง รวมเป็นจำนวนทั้งหมด 10 หน่วยตัวอย่าง ใส่ผงชูรสปริมาณ 1.4%, 2.4%, 2.9% ของหน่วยบรรจุซึ่งมีปริมาณ 35 กรัม เปอร์เซ็นต์ละ 3 หน่วยตัวอย่าง รวมเป็นจำนวนทั้งหมด 9 หน่วยตัวอย่าง และใส่ผงชูรส 3.4% จำนวน 1 หน่วยตัวอย่าง ใส่ผงชูรสปริมาณ 6% จำนวน 9 หน่วยตัวอย่าง และตัวอย่างที่ไม่ใส่ผงชูรสจำนวน 10 หน่วยตัวอย่าง แล้วบรรจุไว้ในถุงพลาสติกประเภทโพลีเอสเตอร์ และขนมขบเคี้ยว

ประเภทเดียวกันที่สุ่มซื้อมาจากซูเปอร์มาร์เก็ตในเขตกรุงเทพมหานคร จำนวน 20 หน่วยตัวอย่าง ซึ่งจะได้ตัวอย่างรวมทั้งสิ้น 110 หน่วยตัวอย่าง ตัวอย่างแต่ละตัวอย่างจะสุ่มจากในถุงบรรจุซึ่งมีปริมาณ 35 กรัมมาทำการปั่นด้วยเครื่องปั่น นาน 5 วินาที และวางทิ้งไว้ที่อุณหภูมิ 25 องศาเซลเซียส แล้วจึงนำตัวอย่างที่ผ่านการปั่นปริมาณ 18 กรัม มาบรรจุลงใน rotating cup (ดังแสดงในภาพผนวกที่ ก5) ก่อนนำไปวัดค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยเครื่อง NIR และวัดค่าปริมาณผงชูรสต่อไป

6.2 การวัดค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยเครื่อง NIR

นำตัวอย่างขนมขบเคี้ยวทั้งหมด 110 หน่วยตัวอย่างที่ผ่านการปั่นแล้ว และวางทิ้งไว้ที่อุณหภูมิ 25 องศาเซลเซียส จำนวน 18 กรัม ในข้อ 6.1 มาทำการวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่อง NIR เช่นเดียวกับข้อ 2.2

6.3 การวัดค่าปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมต

จากตัวอย่างทั้งหมดจำนวน 110 ตัวอย่าง ที่ผ่านการวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่อง NIR จะนำมาวัดปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมต ตามวิธีการดังนี้

- การหาปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมต โดยจะสุ่มตัวอย่างมาปริมาณ 4 กรัม เพื่อนำมาหาค่าปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมต ตามวิธีการของ Steven *et al.* (1989) ดังแสดงในภาคผนวกที่ ข6 บันทึกแล้วบันทึกค่าเป็นเปอร์เซ็นต์กลูตามิกแอซิด โดยทำการวัดค่าตัวอย่างละ 3 ซ้ำ และนำค่าดังกล่าวมาหาค่าเฉลี่ย แล้วนำไปหาความสัมพันธ์กับข้อ 6.2 ก่อนที่จะนำไปสร้างสมการทำนายในข้อ 6.5

6.4. การปรับแต่งสเปกตรัมก่อนการวิเคราะห์

ภายหลังจากการนำตัวอย่างไปวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่อง NIR จะได้สเปกตรัม ซึ่งก่อนทำการสร้างสมการจะทำการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการต่างๆ เช่นเดียวกับข้อ 2.4

6.5 การสร้างสมการที่เหมาะสมในการทำนายค่าปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว

จากข้อมูลที่ได้จากวัดค่าการดูดกลืนแสงในข้อ 6.2 และการวัดค่าปริมาณโมโนโซเดียม กลูตาเมตของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวในข้อ 6.3 นำมาทำการสร้างสมการทำนาย เช่นเดียวกับข้อ 2.5

6.5.1 ขั้นตอนการสร้างสมการทำนาย

ก. นำตัวอย่างขนมขบเคี้ยวทั้ง 110 หน่วยตัวอย่างมาแบ่งแบบสุ่ม ออกเป็น 2 กลุ่มได้แก่ ตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการทำนาย (Calibration set) จำนวน 90 หน่วยตัวอย่าง และตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้องของสมการ (Validation set) จำนวน 20 หน่วยตัวอย่าง เพื่อใช้ในการตรวจสอบความแม่นยำของสมการที่สร้างขึ้น ดังแสดงในภาพที่ 10

ข. นำตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ (Calibration set) จำนวน 90 หน่วยตัวอย่าง มาทำการวิเคราะห์หาความสัมพันธ์ระหว่างค่าการดูดกลืนแสง และค่าคุณภาพทางเคมี เพื่อสร้างสมการที่เหมาะสมในการทำนายค่าปริมาณผงชูรส เช่นเดียวกับข้อ 2.5.1

6.5.2 ขั้นตอนการตรวจสอบความถูกต้องของสมการทำนายค่าปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตที่สร้างขึ้น

นำตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation set) จำนวน 20 ตัวอย่าง มาทำการตรวจสอบความถูกต้องและแม่นยำของสมการที่สร้างขึ้น เช่นเดียวกับข้อ 2.5.2

7. สถานที่ทำการวิจัย

7.1 การวัดค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว ด้วยเครื่อง NIR รุ่น InfraAlyzer 500 ยี่ห้อ BRAN + LUEBBE ณ ศูนย์ตรวจสอบคุณภาพสินค้าโดยวิธีไม่ทำลาย ฝ่ายนาโนเทคโนโลยี และเทคโนโลยีชีวภาพ สถาบันค้นคว้าและพัฒนาผลิตผลทางการเกษตรและอุตสาหกรรมเกษตร มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ กรุงเทพฯ

7.2 การวัดค่าทางเคมีของตัวอย่างนมขบเคี้ยว ณ ภาควิชาพัฒนาผลิตภัณฑ์
คณะอุตสาหกรรมเกษตร มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ กรุงเทพฯ

7.3 การวัดค่าทางกายภาพของตัวอย่างนมขบเคี้ยว ณ ภาควิชาพัฒนาผลิตภัณฑ์
คณะอุตสาหกรรมเกษตร มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ กรุงเทพฯ

8. ระยะเวลาการทำวิจัย

ตั้งแต่เดือนมิถุนายน 2551 ถึงสิ้นสุดเดือนกรกฎาคม 2552

ผลและวิจารณ์

การสร้างสมการทำนายที่เหมาะสมในการทำนายปริมาณความชื้นและค่าออกเตอร์ แอคทีวิตี

1. การวัดค่าปัจจัยคุณภาพในเรื่องปริมาณความชื้นและค่าออกเตอร์ แอคทีวิตี

1.1 การวัดค่าปัจจัยคุณภาพในเรื่องปริมาณความชื้น

จากตัวอย่างที่ผ่านการเตรียมตัวอย่างในข้อ 1. และนำมาวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่อง NIR ในข้อ 2. ก่อนที่จะนำไปวัดค่าปริมาณความชื้นในข้อ 3. แล้วนำไปสร้างสมการทำนายปริมาณความชื้น โดยจากตัวอย่างขนมขบเคี้ยวทั้ง 150 หน่วยตัวอย่างนำมาแบ่งแบบสุ่มออกเป็น 2 กลุ่มได้แก่ ตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการทำนาย (Calibration set) จำนวน 100 หน่วยตัวอย่าง และตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้องของสมการ (Validation set) จำนวน 50 หน่วยตัวอย่าง เพื่อใช้ในการตรวจสอบความแม่นยำของสมการที่สร้างขึ้น โดยได้ผลดังแสดงในตารางที่ 10

ตารางที่ 10 ข้อมูลค่าสูงสุด ค่าต่ำสุด ค่าเฉลี่ย และค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานในเรื่องปริมาณความชื้นของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว

ชุดข้อมูล	จำนวนตัวอย่าง	ค่าสูงสุด (%wb)	ค่าต่ำสุด (%wb)	ค่าเฉลี่ย (%wb)	ค่าเบี่ยงเบน มาตรฐาน
Calibration	100	11.16	2.92	5.59	2.48
Validation	50	11.16	2.97	5.58	2.50

หมายเหตุ % wb หมายถึง การเทียบปริมาณความชื้นกับน้ำหนักรวมของของแข็ง

จากตารางที่ 10 พบว่า ตัวอย่างในกลุ่มสร้างสมการ (Calibration) มีค่าคุณภาพทางเคมีครอบคลุมค่าในกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation) เพื่อให้ข้อมูลของกลุ่มตัวอย่างทั้งสองกลุ่มมีการกระจายของค่าคุณภาพทางเคมีไปในลักษณะเดียวกัน โดยที่ตัวอย่างในกลุ่มสร้างสมการ (Calibration) จะมีขนาดข้อมูลที่กว้างพอควรและควรครอบคลุมข้อมูลของกลุ่มตัวอย่างที่เราจะศึกษาได้ (Chen *et al.*, 2007)

1.2 การวัดค่าปัจจัยคุณภาพในเรื่องค่าวอเตอร์ แอคทิวิตี

จากตัวอย่างที่ผ่านการเตรียมตัวอย่างในข้อ 1. และนำมาวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่อง NIR ในข้อ 2. ก่อนที่จะนำไปวัดค่าวอเตอร์ แอคทิวิตี ในข้อ 3. แล้วนำไปสร้างสมการทำนายค่าวอเตอร์ แอคทิวิตี โดยจากตัวอย่างขนมขบเคี้ยวทั้ง 150 หน่วยตัวอย่างนำมาแบ่งแบบสุ่มออกเป็น 2 กลุ่มได้แก่ ตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการทำนาย (Calibration set) จำนวน 100 หน่วยตัวอย่าง และตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้องของสมการ (Validation set) จำนวน 50 หน่วยตัวอย่าง เพื่อใช้ในการตรวจสอบความแม่นยำของสมการที่สร้างขึ้นโดยได้ผล ดังแสดงในตารางที่ 11

ตารางที่ 11 ข้อมูลค่าสูงสุด ค่าต่ำสุด ค่าเฉลี่ย และค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานในเรื่องค่าวอเตอร์ แอคทิวิตี ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว

ชุดข้อมูล	จำนวนตัวอย่าง	ค่าสูงสุด	ค่าต่ำสุด	ค่าเฉลี่ย	ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน
Calibration	100	0.629	0.207	0.73	0.11
Validation	50	0.628	0.209	0.36	0.11

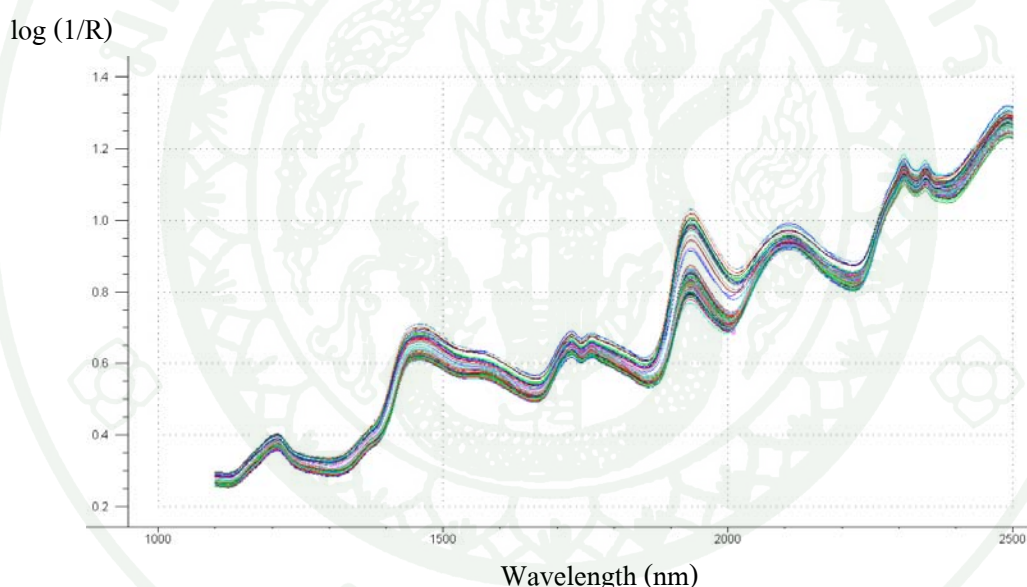
จากตารางที่ 11 พบว่า ตัวอย่างในกลุ่มสร้างสมการ (Calibration) มีค่าคุณภาพทางเคมีครอบคลุมค่าในกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation) เพื่อให้ข้อมูลของกลุ่มตัวอย่างทั้งสองกลุ่มมีการกระจายของค่าคุณภาพทางเคมีไปในลักษณะเดียวกัน โดยที่ตัวอย่างในกลุ่มสร้างสมการ (Calibration) จะมีขนาดข้อมูลที่กว้างพอควรและควรครอบคลุมข้อมูลของกลุ่มตัวอย่างที่เราจะศึกษาได้ (Chen *et al.*, 2007)

2. การวัดค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยเครื่อง NIR

การวัดค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยเครื่อง NIR โดยการบรรจุตัวอย่างของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการบดลงใน rotating cup ก่อนนำไปวัดค่าการดูดกลืนแสง

2.1 ผลการศึกษาการใช้เทคนิค NIR ในการวัดค่าความชื้นและค่าเอนเอร์ แอกทีวิตี้ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว

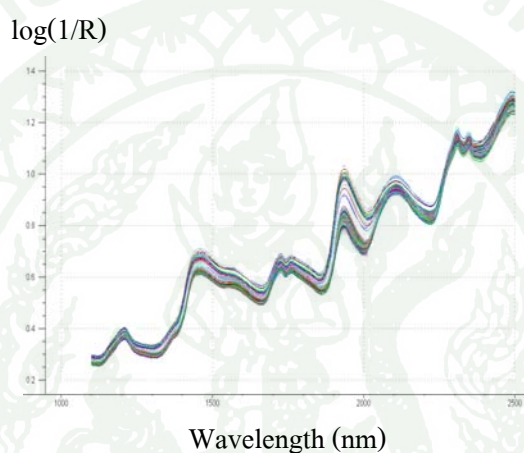
ลักษณะสเปกตรัมและค่าการดูดกลืนแสงที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านขั้นตอนการเตรียมตัวอย่างในข้อ 1 ดังแสดงในภาพที่ 9



ภาพที่ 12 สเปกตรัมดิบเริ่มต้นของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมตัวอย่างในข้อ 2.1 จำนวน 150 หน่วยตัวอย่างที่วัดด้วยเครื่อง NIR ตั้งแต่ช่วง 1100-2500 นาโนเมตร

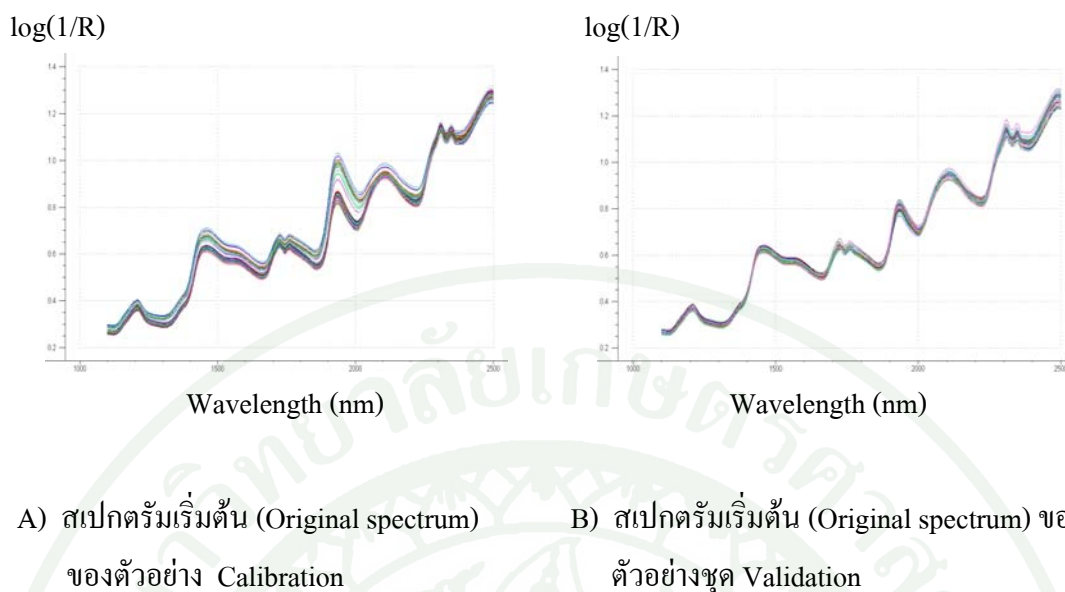
เมื่อพิจารณาจากภาพที่ 12 ลักษณะสเปกตรัมที่ได้ (Original spectrum) จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR จะมีฐานกว้าง เนื่องจากการซ้อนทับกันของจุดยอด ไม่ได้มีจุดยอดแหลมออกจากกันอย่างเด่นชัด ทำให้ยากต่อการเลือกความยาวคลื่นที่เหมาะสมที่สัมพันธ์กับค่าเคมีที่ทำการศึกษา อย่างไรก็ตามปัญหาดังกล่าวสามารถลดความคลาดเคลื่อนได้ ด้วยการปรับแต่งข้อมูลค่าการดูดกลืนแสงจากสเปกตรัมเดิม (Original spectrum) ดังนั้นการปรับแต่งสเปกตรัมจะทำให้ได้สเปกตรัมที่มี

จุดยอดชัดเจน ทำให้ทราบตำแหน่งความยาวคลื่นที่มีการสั่นของโมเลกุลมาก ในการปรับแต่งสเปกตรัมที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR มีหลายวิธี เช่น 1) วิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) 2) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) 3) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) 4) วิธี Multiplicative scatter correction (MSC) ดังแสดงในภาพที่ 13-22 ซึ่งพบว่าการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี MSC สามารถช่วยลดความคลาดเคลื่อนในเรื่องของการกระเจิงแสง และพบว่าที่แต่ละความยาวคลื่นในสเปกตรัมของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวมีความสัมพันธ์กับพันธะทางเคมีที่แตกต่างกัน

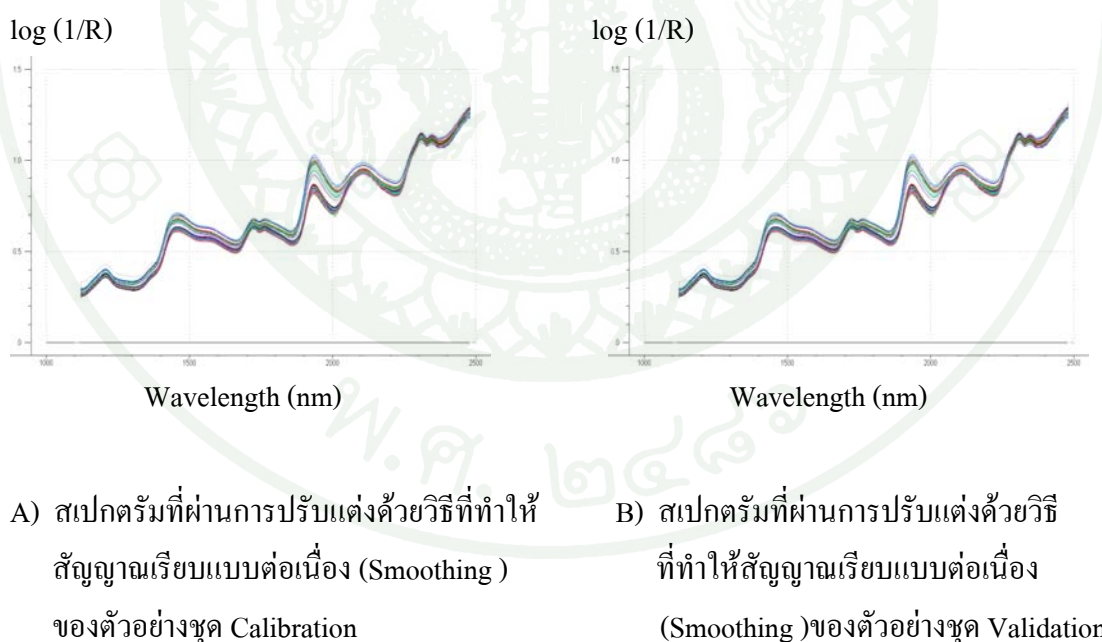


A) สเปกตรัมเริ่มต้น (Original spectrum)

ภาพที่ 13 ลักษณะสเปกตรัมที่ยังไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมตัวอย่างในข้อ 2.1 ซึ่งได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร

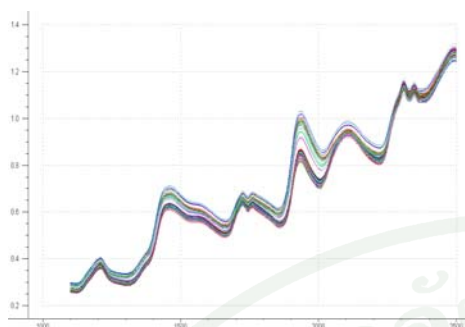


ภาพที่ 14 ลักษณะสเปกตรัมที่ยังไม่ผ่านการปรับแต่งสำหรับตัวอย่างชุด Calibration และ Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมในข้อ 2.1



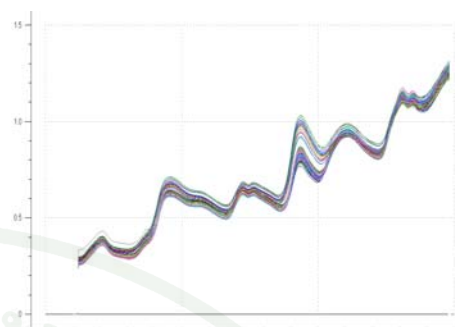
ภาพที่ 15 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างชุด Calibration และตัวอย่างชุด Validation

log (1/R)



Wavelength (nm)

log (1/R)



Wavelength (nm)

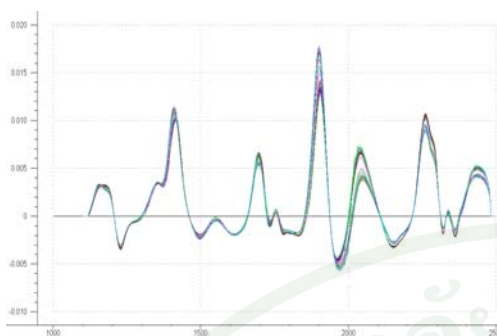
A) สเปกตรัมเริ่มต้น(Original Spectrum)

B) วิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง
(Smoothing)

ภาพที่ 16 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง

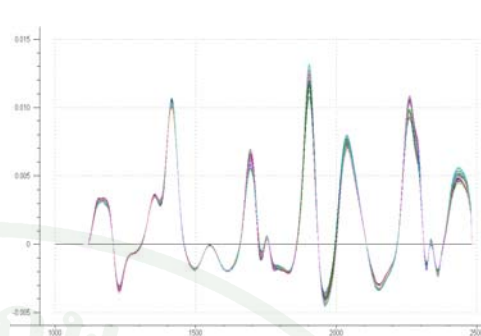
จากภาพที่ 16 เป็นการเปรียบเทียบค่าสเปกตรัมเริ่มต้นกับสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี ที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) จะเห็นได้ว่าสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี ที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) จะยังคงรักษารูปร่างของยอดแหลมในสเปกตรัมให้มีขนาดเท่ากับสเปกตรัมเริ่มต้น ไม่ว่ายอดแหลมจะมีฐานกว้างหรือแคบก็ตาม

dlog (1/R)



Wavelength (nm)

dlog (1/R)



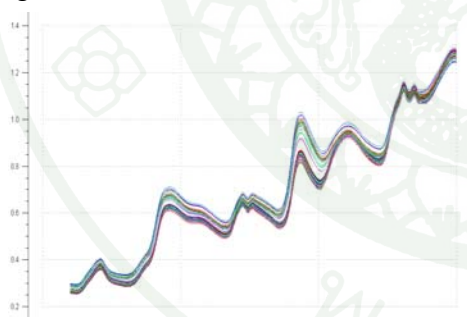
Wavelength (nm)

A) สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) ของตัวอย่างกลุ่ม Calibration

B) สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) ของตัวอย่างกลุ่ม Validation

ภาพที่ 17 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) ของตัวอย่างชุด Calibration และชุด Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว

log (1/R)



Wavelength (nm)

dlog (1/R)



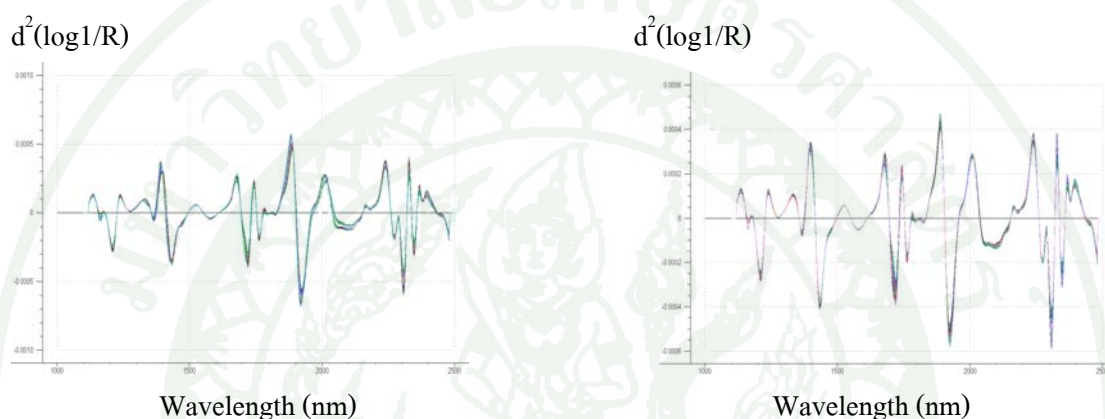
Wavelength (nm)

A) สเปกตรัมเริ่มต้น (Original spectrum)

B) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative)

ภาพที่ 18 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง

จากภาพที่ 18 เป็นการเปรียบเทียบสเปกตรัมเริ่มต้นกับสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) จะแยกจุดยอดที่เหลื่อมซ้อนกันในสเปกตรัมออกจากกัน โดยวิธีนี้จะเป็นการนำค่า $\log(1/R)$ ที่ความยาวคลื่นที่ใกล้เคียงกัน 2 ค่ามาลบกัน และจะให้ความหมายเป็นค่าความชันของสเปกตรัมที่แต่ละความยาวคลื่น ซึ่งทำให้แปลความหมายยาก แต่วิธีการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีนี้จะใช้ได้ผลกับตัวอย่างที่มีเนื้อสม่ำเสมอและมีการกระจายตัวของอนุภาคอย่างสม่ำเสมอทั่วถึง

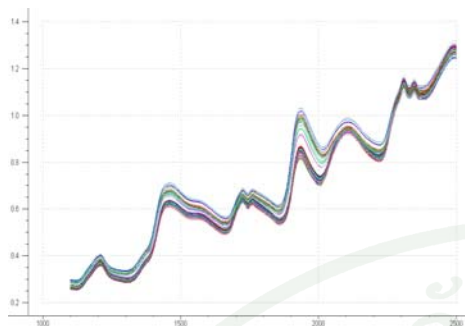


A) สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) ของตัวอย่างกลุ่ม Calibration

B) สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) ของตัวอย่างกลุ่ม Validation

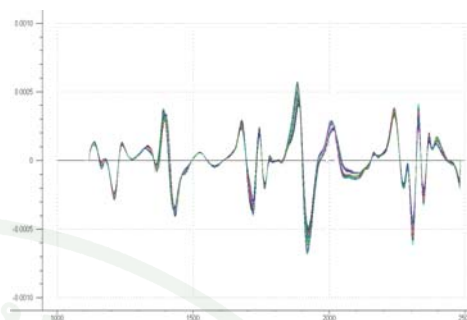
ภาพที่ 19 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) ของตัวอย่างชุด Calibration และตัวอย่างชุด Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว

$\log(1/R)$



Wavelength (nm)

$d^2(\log 1/R)$



Wavelength (nm)

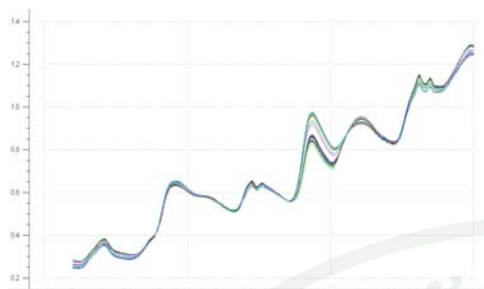
A) สเปกตรัมเริ่มต้น (Original spectrum)

B) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative)

ภาพที่ 20 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง

จากภาพที่ 20 เป็นการเปรียบเทียบสเปกตรัมเริ่มต้นกับสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) จะแยกจุดยอดที่เหลื่อมซ้อนกันในสเปกตรัมออกจากกัน โดยวิธีนี้จะทำให้จุดยอดของสเปกตรัมดั้งเดิมแต่จะเป็นจุดยอดกลับหัว ซึ่งวิธีนี้จะใช้ได้ผลดีกับตัวอย่างที่มีขนาดอนุภาคต่างๆ ผสมกัน

log (1/R)



Wavelength (nm)

log (1/R)



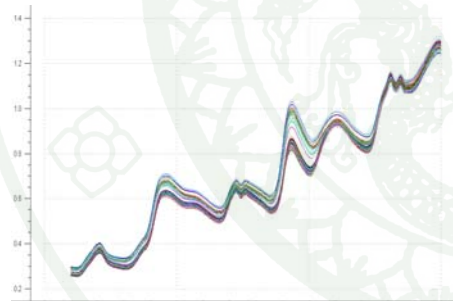
Wavelength (nm)

A) สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC
ตัวอย่างกลุ่ม Calibration

B) สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC
ของตัวอย่างกลุ่ม Validation

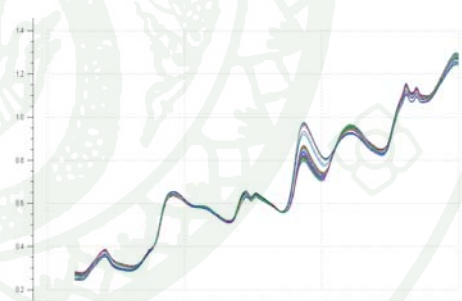
ภาพที่ 21 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC ของตัวอย่างชุด Calibration และ Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว

log (1/R)



Wavelength (nm)

log (1/R)



Wavelength (nm)

A) สเปกตรัมเริ่มต้น (Original spectrum)

B) วิธี MSC

ภาพที่ 22 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง

จากภาพที่ 22 เป็นการเปรียบเทียบสเปกตรัมเริ่มต้นกับสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC จะพบว่าสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC จะมีรูปร่างไม่แตกต่างจากสเปกตรัมเริ่มต้นมากนัก โดยวิธีการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีนี้จะช่วยลดผลที่เกิดจากการกระเจิงแสง (Scattered light) ต่อ NIR สเปกตรัมที่ได้จากการวัดแบบ diffuse reflectance และแบบ transmission

3. การสร้างสมการที่เหมาะสมในการทำนายปริมาณความชื้นและค่าแอดอร์ แอคทิวิตี้

3.1 การสร้างสมการที่เหมาะสมในการทำนายปริมาณความชื้น

ข้อมูลค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวของกลุ่มสร้างสมการจำนวน 100 หน่วยตัวอย่าง ที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ทำการบันทึกค่าห่างช่วงละ 2 นาโนเมตร จะได้ข้อมูลค่าการดูดกลืนแสง จำนวน 701 ค่า กำหนดให้เป็นตัวแปรอิสระ ตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 ตัวอย่าง ที่ผ่านการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR นำไปวิเคราะห์คุณภาพทางเคมีในเรื่องปริมาณความชื้น ข้อมูลค่าจริงที่ได้จากการวิเคราะห์ทางเคมี กำหนดให้เป็นตัวแปรตาม นำข้อมูลตัวแปรอิสระและตัวแปรตามมาหาความสัมพันธ์ด้วยวิธีทางสถิติเพื่อสร้างสมการที่ใช้ในการทำนายปริมาณความชื้น วิธีทางสถิติที่นำมาใช้สร้างสมการทำนายค่าปริมาณความชื้นได้แก่ 1) วิธี Partial Least Squares (PLS) Regression 2) วิธี Moving Window Partial Least Squares (MWPLS) ทำการเปรียบเทียบสมการที่สร้างขึ้นจากทั้ง 2 วิธี เพื่อใช้ทำนายค่าปริมาณความชื้น โดยพิจารณาจากค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (R) และค่าความคลาดเคลื่อนของสมการในการทำนายค่าปริมาณความชื้น (Standard Error of Calibration; SEC) โดยมีรายละเอียดดังนี้

3.1.1 การสร้างสมการทำนายค่าปริมาณความชื้นด้วยวิธีทางสถิติ Partial Least Squares (PLS) Regression

จากข้อมูลค่าการดูดกลืนแสงที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ที่ความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร บันทึกค่าการดูดกลืนแสงห่างช่วงละ 2 นาโนเมตร จะได้ข้อมูลจากการวัดค่า จำนวน 701 ค่า เมื่อนำข้อมูลตัวแปรอิสระมาหาความสัมพันธ์กับค่าปริมาณความชื้นด้วยการจัดกลุ่มตัวแปรเดิม เป็นตัวแปรใหม่หรือแฟกเตอร์ด้วยวิธี PLS

ก่อนทำการจัดกลุ่มตัวแปรใหม่ของข้อมูลค่าการดูดกลืนแสงที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR จะนำข้อมูลที่ได้มาทำการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีต่างๆ ได้แก่ 1) วิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) 2) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) 3) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) 4) วิธี Multiplicative scatter correction (MSC) เพื่อลดความคลาดเคลื่อนเนื่องจากปัจจัยต่างๆ

เมื่อพิจารณาสมการทำนายที่สร้างขึ้นจากช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ดังแสดงในตารางที่ 12 พบว่า สเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง และสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) และวิธี Multiplicative scatter correction (MSC) มีความเหมาะสมสำหรับการทำนายค่าปริมาณความชื้น เนื่องจากสมการทั้งหมดให้ค่า R สูงกว่า 0.9 และให้ค่า SEC ต่ำ และมีจำนวนแฟลคเตอร์ที่เหมาะสม แต่ทั้งนี้จะพบว่าสมการที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) น่าจะมีความเหมาะสมที่สุด เนื่องจากมีค่าการจัดกลุ่มตัวแปรเดิมเป็นตัวแปรใหม่ได้ 1 แฟลคเตอร์ โดยให้ค่า R เท่ากับ 0.99 และค่า SEC ต่ำที่สุดเท่ากับ 0.28 % เมื่อทำการพิจารณาค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression coefficient) ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ดังแสดงในภาพที่ 20 พบว่าที่ตำแหน่งความยาวคลื่น 1412, 1876, 1908 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับค่าปริมาณความชื้นมาก โดยที่ตำแหน่งความยาวคลื่นดังกล่าวมีข้อมูลสำคัญเกี่ยวข้องกับกลุ่มพันธะของ O-H ซึ่งสอดคล้องกับงานวิจัยของ Curcio and Petty (1951) ที่แสดงให้เห็นว่าที่ความยาวคลื่น 1940, 1450, 1190, 970 และ 760 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับน้ำบริสุทธิ์

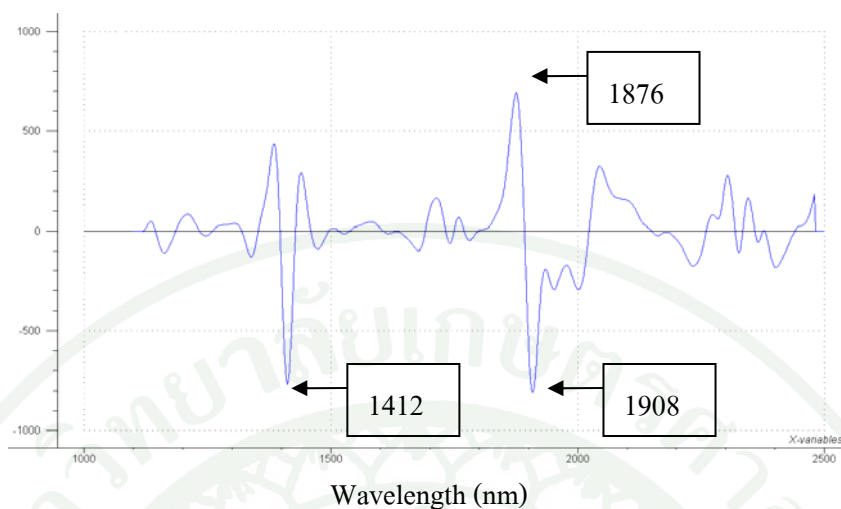
เมื่อทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง พบว่าสมการที่เหมาะสมดังกล่าวให้ค่า SEP และ Bias เท่ากับร้อยละ 0.26 และ -0.1 ตามลำดับ ดังแสดงในตารางที่ 13 และภาพที่ 28

ตารางที่ 12 ค่า R, ค่า SEC ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายปริมาณความชื้นของตัวอย่าง
ขนมขบเคี้ยวด้วยวิธีทางสถิติ PLS ที่ช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร

วิธีปรับแต่ง สเปกตรัม	วิธีการทาง สถิติ	ช่วงความยาวคลื่นที่ใช้ ในการสร้างสมการ (nm)	F	กลุ่มสร้างสมการ	
				R	SEC (%wb)
1. Original	PLS	1100 - 2500	2	0.99	0.35
2. Smoothing	PLS	1100 - 2500	2	0.99	0.34
3. 1 D	PLS	1100 - 2500	1	0.99	0.35
4. 2 D	PLS	1100 - 2500	1	0.99	0.28
5. MSC	PLS	1100 - 2500	1	0.99	0.30

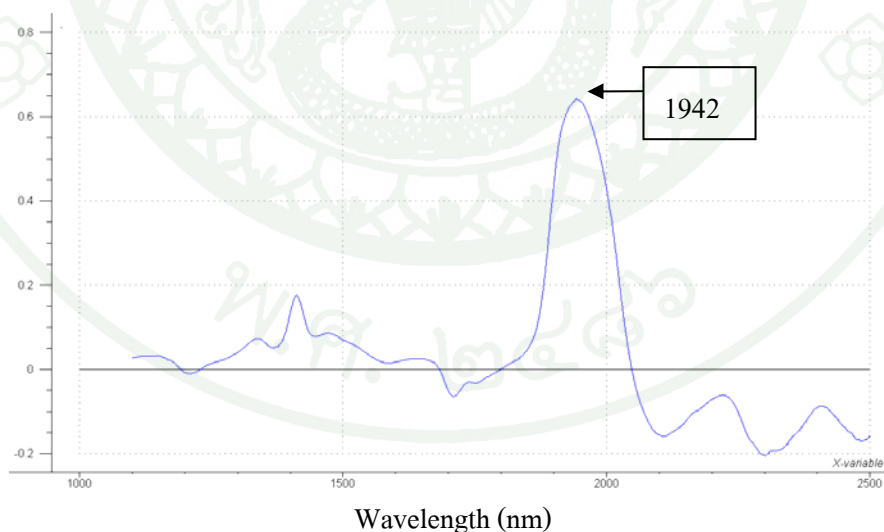
หมายเหตุ F หมายถึง จำนวนกลุ่มตัวแปรใหม่ที่ใช้ในการสร้างสมการ
R หมายถึง ค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (Coefficient of correlation)
SEC หมายถึง ค่าความคลาดเคลื่อนของสมการที่ใช้ในการทำนายค่าปริมาณความชื้น
ด้วยตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ
1D หมายถึง วิธี First derivative
2 D หมายถึง วิธี Second derivative

Regression Coefficient



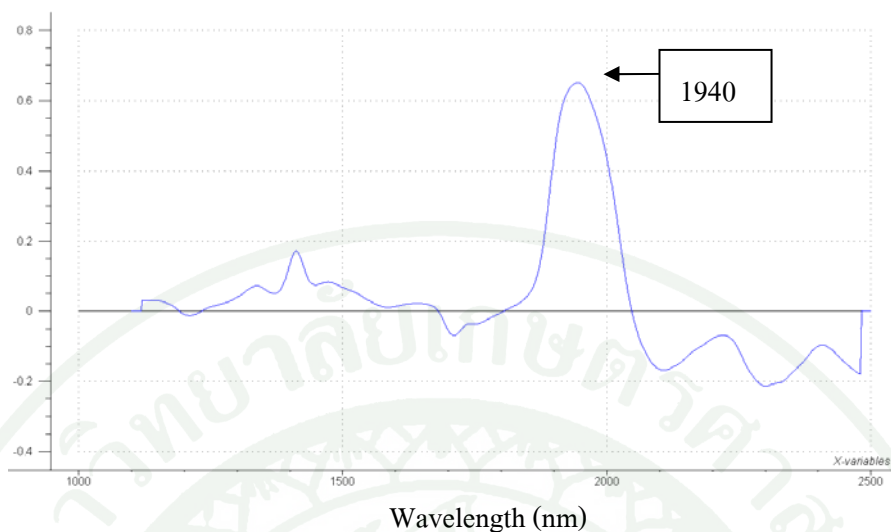
ภาพที่ 23 ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าปริมาณความชื้นในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการจำนวน 100 หน่วยตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative)

Regression Coefficient



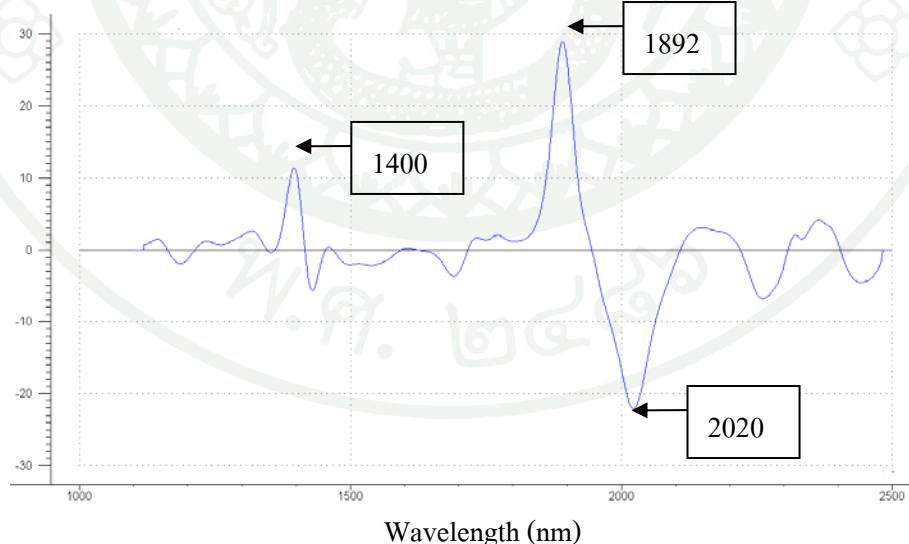
ภาพที่ 24 ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าปริมาณความชื้นในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการจำนวน 100 หน่วยตัวอย่าง ของสมการไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม

Regression Coefficient



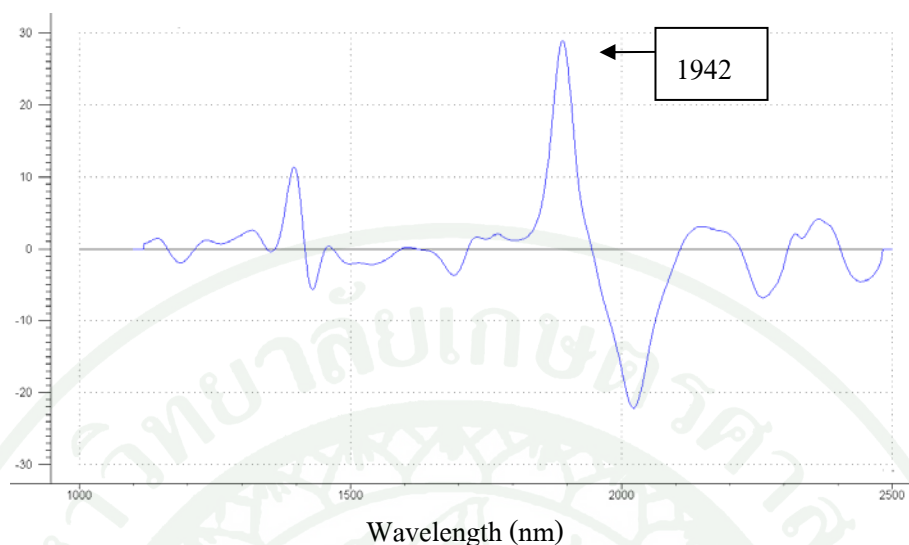
ภาพที่ 25 ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าปริมาณความชื้นในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการจำนวน 100 หน่วยตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing)

Regression Coefficient



ภาพที่ 26 ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้นายค่าปริมาณความชื้นในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการจำนวน 100 หน่วยตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี 1 D

Regression Coefficient



ภาพที่ 27 ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าปริมาณความชื้นในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการจำนวน 100 หน่วยตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC

3.1.2 การตรวจสอบความแม่นยำของสมการทำนายที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายปริมาณความชื้นซึ่งสร้างขึ้นจากวิธีทางสถิติ PLS

การตรวจสอบความแม่นยำของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายปริมาณความชื้น จะใช้ค่าทางเคมีของกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation) จำนวน 50 ตัวอย่าง ทำการเปรียบเทียบค่าที่ได้จากการทำนายด้วยสมการที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัม NIR (Predicted value) กับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริง (Actual value) การตรวจสอบความแม่นยำของสมการจะพิจารณาจากค่าความคลาดเคลื่อนจากการทำนายด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Standard Error of Prediction; SEP) และค่าความแตกต่าง (Bias) ระหว่างค่าที่ทำนายได้จากสมการกับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริงของแต่ละสมการ

ทำการตรวจสอบความแม่นยำของสมการทำนายที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณความชื้นด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง จำนวน 50 ตัวอย่าง ทำการเปรียบเทียบค่าที่ได้จากการทำนายด้วยสมการที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัม NIR (Predicted value) กับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริง ดังแสดงในตารางที่ 13 และภาพที่ 28

ตารางที่ 13 เปรียบเทียบค่า R, ค่า SEP, ค่า RPD และค่า Bias ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณความชื้นด้วยวิธีทางสถิติ PLS

วิธีปรับแต่งสเปกตรัม	วิธีทางสถิติ	ความยาวคลื่น (นาโนเมตร)	ขั้นตอน Validation			
			R	SEP (%wb)	RPD	Bias
1. Original	PLS	1100 - 2500	0.99	0.40	6.25	0.08
2. Smoothing	PLS	1100 - 2500	0.99	0.39	6.41	0.08
3. First derivative	PLS	1100 - 2500	0.99	0.37	6.76	0.05
4. Second derivative	PLS	1100 - 2500	0.99	0.31	8.06	0.03
5. MSC	PLS	1100 - 2500	0.99	0.34	7.35	0.03

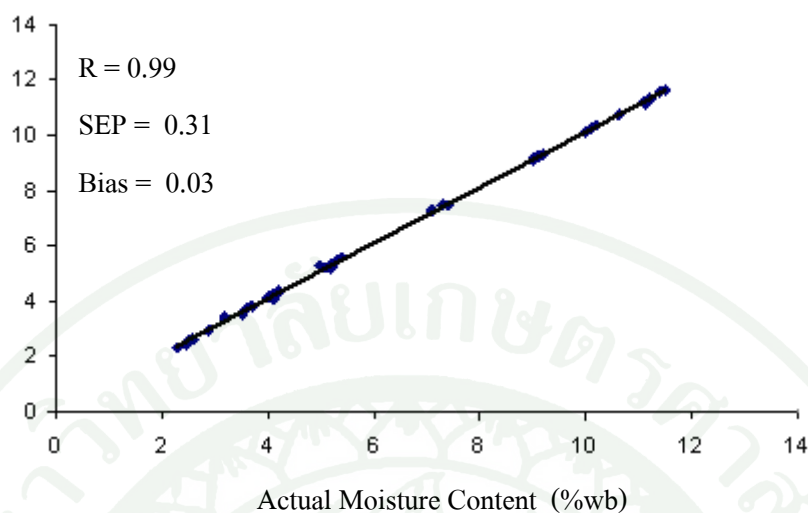
หมายเหตุ SEP หมายถึง ค่าความคลาดเคลื่อนของสมการที่ใช้ทำนายความชื้นด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)

Bias หมายถึง ค่าความแตกต่างระหว่างค่าที่ทำนายได้จากสมการที่สร้างขึ้นกับค่าที่วิเคราะห์ได้ทางเคมี

PLS หมายถึง วิธีทางสถิติ Partial Least Squares Regression

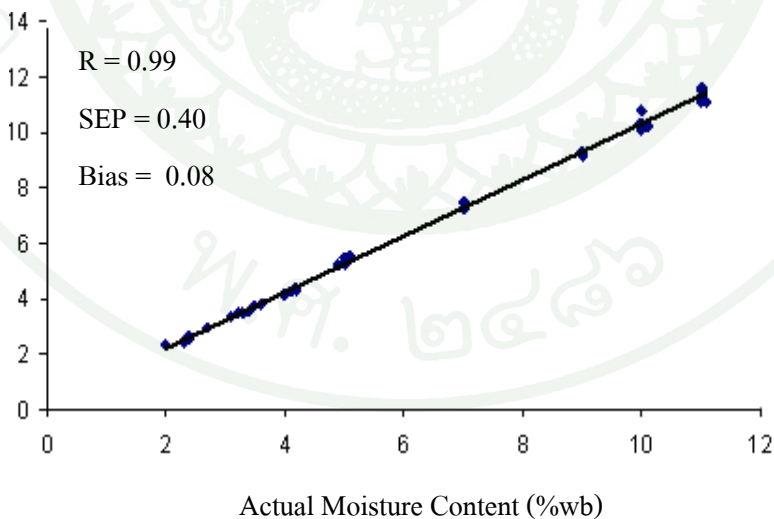
RPD หมายถึง อัตราส่วนของ SEP ต่อ SD

Predicted Moisture Content (%wb)

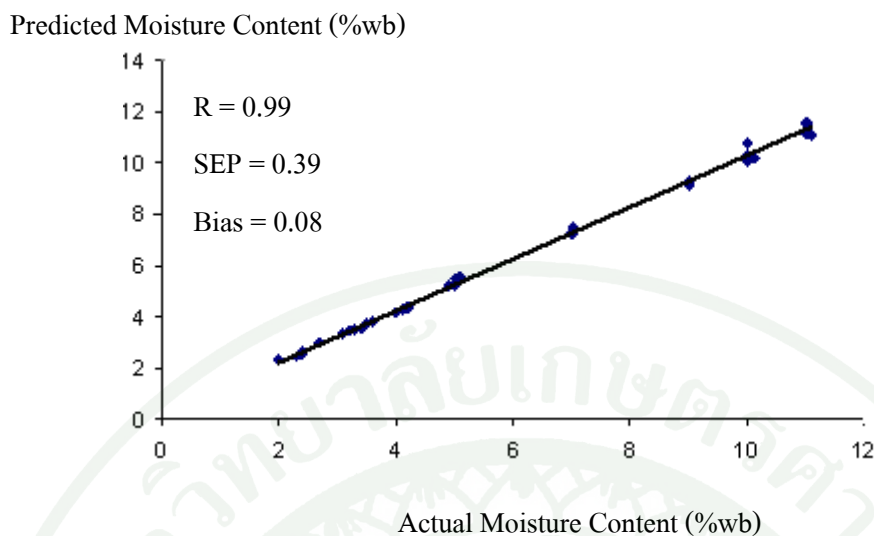


ภาพที่ 28 ค่าปริมาณความชื้นของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)

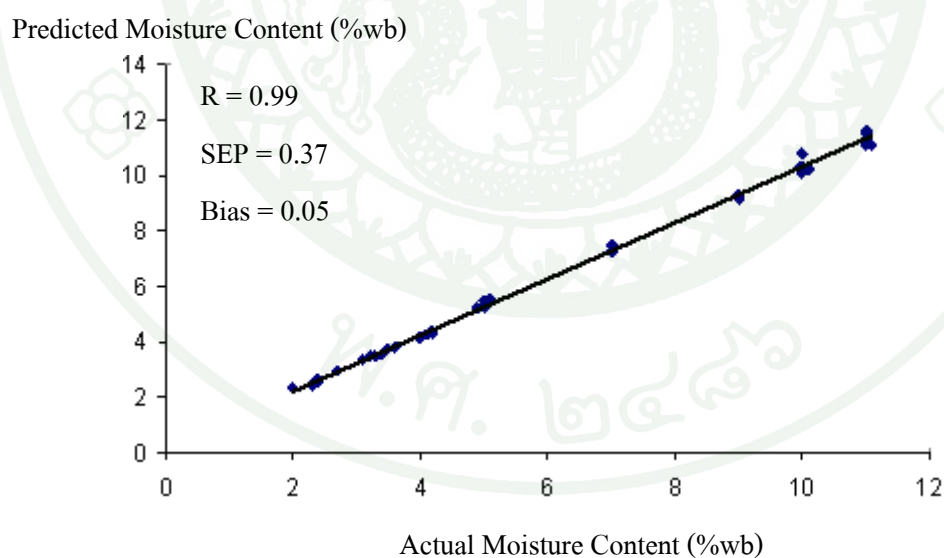
Predicted Moisture Content (%wb)



ภาพที่ 29 ค่าปริมาณความชื้นของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)

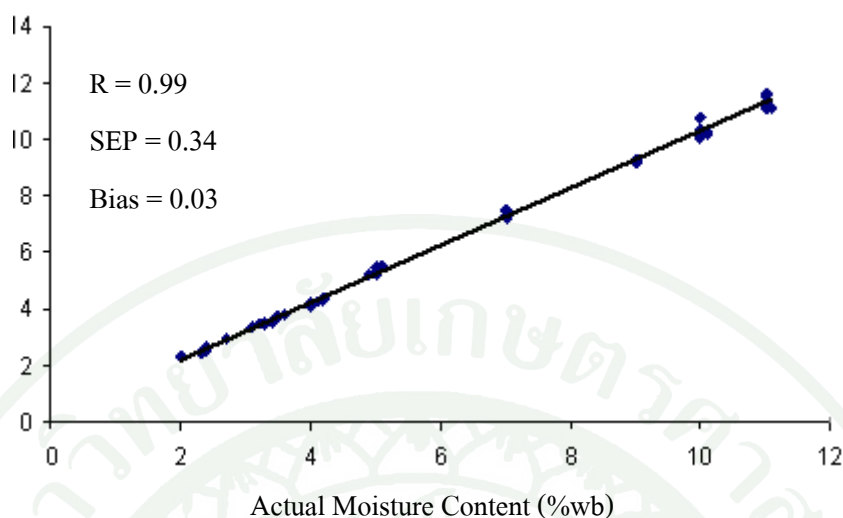


ภาพที่ 30 ค่าปริมาณความชื้นของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)



ภาพที่ 31 ค่าปริมาณความชื้นของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative) ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)

Predicted Moisture Content (%wb)



ภาพที่ 32 ค่าปริมาณความชื้นของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี MSC ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)

จากผลการสร้างสมการทำนายปริมาณความชื้นด้วยวิธีทางสถิติ PLS พบว่า สมการทำนายที่ดีที่สุดสร้างขึ้นจากวิธีสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ทั้งนี้ อาจเนื่องมาจากสเปกตรัมเริ่มต้นมีการซ้อนทับกัน มีลักษณะฐานกว้าง เนื่องจากการซ้อนทับกันของจุดยอด ไม่ได้มีจุดยอดแหลมแยกออกจากกันอย่างชัดเจน ทั้งนี้ Osborne *et al.* (1993) ได้อธิบายว่าเกิดขึ้นเนื่องมาจากการสั่นแบบโอเวอร์โทนและแบบคอมบินเนชันของการสั่นแบบพื้นฐาน ซึ่งทำให้ยากต่อการเลือกความยาวคลื่นที่เหมาะสมที่มีความสัมพันธ์กับค่าที่ทำการศึกษา ดังนั้น เมื่อนำข้อมูลสเปกตรัมเริ่มต้น ไปปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ก่อนนำไปใช้ในการสร้างสมการทำนายปริมาณความชื้นจะสามารถช่วยแก้ปัญหาดังกล่าวได้ กล่าวคือ สามารถช่วยลดความคลาดเคลื่อนของการซ้อนทับกันของจุดยอดดังกล่าวได้ ซึ่ง Osborne *et al.* (1993) กล่าวว่าวิธีการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีนี้เป็นการกำจัดฟิสิกที่ซ้อนทับกัน และลดผลกระทบจากการเลื่อนของเส้นฐาน (Baseline) ที่เกิดจากการกระเจิงแสง ทำให้ได้สเปกตรัมที่มีฐานแคบและเห็นจุดยอดแยกออกจากกันอย่างชัดเจน แต่จุดยอดของสเปกตรัมเริ่มต้นจะเปลี่ยนเป็นจุดยอดที่อยู่ตรงข้ามและตรงกับจุดยอดเริ่มต้น อนุพันธ์ (2552) อธิบายว่าวิธี Second derivative ใช้ได้ผลดีกับตัวอย่างที่มีขนาดอนุภาคต่างๆ ผสมกันอยู่ ซึ่งสอดคล้องกับตัวอย่างที่ใช้ในการวิจัยครั้งนี้

3.1.3 การสร้างสมการทำนายค่าปริมาณความชื้นด้วยวิธีทางสถิติ Moving

Window Partial Least Squares (MWPLS)

จากการนำสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการต่างๆ ได้แก่ วิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) และวิธี Multiplicative scatter correction (MSC) รวมทั้งสมการที่ไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม มาวิเคราะห์ด้วยโปรแกรม In-house-written in MATLAB เพื่อหาช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสมในการสร้างสมการ ได้ผลดังแสดงในภาพที่ 30-35 เมื่อพิจารณาจากค่า $\log(SSR)$ พบว่า ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสมที่เป็น Informative region มีหลายช่วง ดังแสดงในตารางที่ 14 และเมื่อนำช่วงความยาวคลื่นดังกล่าวมาสร้างสมการทำนายได้ผล ดังแสดงในตารางที่ 14 ซึ่งพบว่าสมการที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ในช่วงความยาวคลื่น 1320-1400, 1800-1980 นาโนเมตร ให้สมการที่เหมาะสมที่สุดในการทำนายปริมาณความชื้น โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มตัวแปรเดิมเป็นตัวแปรใหม่ได้ 1 แฟกเตอร์ และให้ค่า R และค่า SEC เท่ากับ 0.99 และ 0.24 ตามลำดับ เมื่อพิจารณาค่าสัมประสิทธิ์การถดถอย (Regression coefficient) ของสมการที่ความยาวคลื่นในช่วง 1320-1400, 1800-1980 นาโนเมตร ดังแสดงในภาพที่ 34 โดยพบว่าที่ตำแหน่งความยาวคลื่นตำแหน่ง 1400, 1904 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับปริมาณความชื้นสูง ซึ่งสอดคล้องกับงานวิจัยของ Curcio and Petty (1951) ที่แสดงให้เห็นว่าที่ความยาวคลื่น 1940, 1450, 1190, 970 และ 760 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับน้ำ

ตารางที่ 14 ค่า R และค่า SEC ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณความชื้นของตัวอย่าง
ขนมขบเคี้ยวด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS

วิธีปรับแต่งสเปกตรัม	วิธีทางสถิติ	ความยาวคลื่น (nm)	F	ขั้นตอน Calibration	
				R	SEC (%wb)
1. Original	MWPLS	1300 – 1400	3	0.99	0.34
2. Original	MWPLS	1500 – 1560	2	0.99	0.31
3. Original	MWPLS	1800 – 1900	2	0.99	0.26
4. Original	MWPLS	1300 – 1400, 1500 – 1560, 1800 – 1900	2	0.99	0.30
5. Smoothing	MWPLS	1250 – 1440	4	0.99	0.26
6. Smoothing	MWPLS	1480 – 1570	3	0.99	0.26
7. Smoothing	MWPLS	1790 – 1900	2	0.99	0.25
8. Smoothing	MWPLS	1250 – 1440, 1480 – 1570, 1790 – 1900	2	0.99	0.31
9. 1 D	MWPLS	1320 – 1380	3	0.99	0.34
10. 1 D	MWPLS	1320 – 1400	2	0.99	0.29
11. 1 D	MWPLS	1480 – 1580	2	0.99	0.25
12. 1 D	MWPLS	1800 – 1900	2	0.99	0.27
13. 1 D	MWPLS	1320 – 1380, 1480 – 1580, 1800 – 1900	2	0.99	0.27
14. 1 D	MWPLS	1320 – 1400, 1480 – 1580, 1800 – 1900	2	0.99	0.34
15. 2 D	MWPLS	1320 – 1350	2	0.99	0.35
16. 2 D	MWPLS	1800 – 1900	2	0.99	0.28

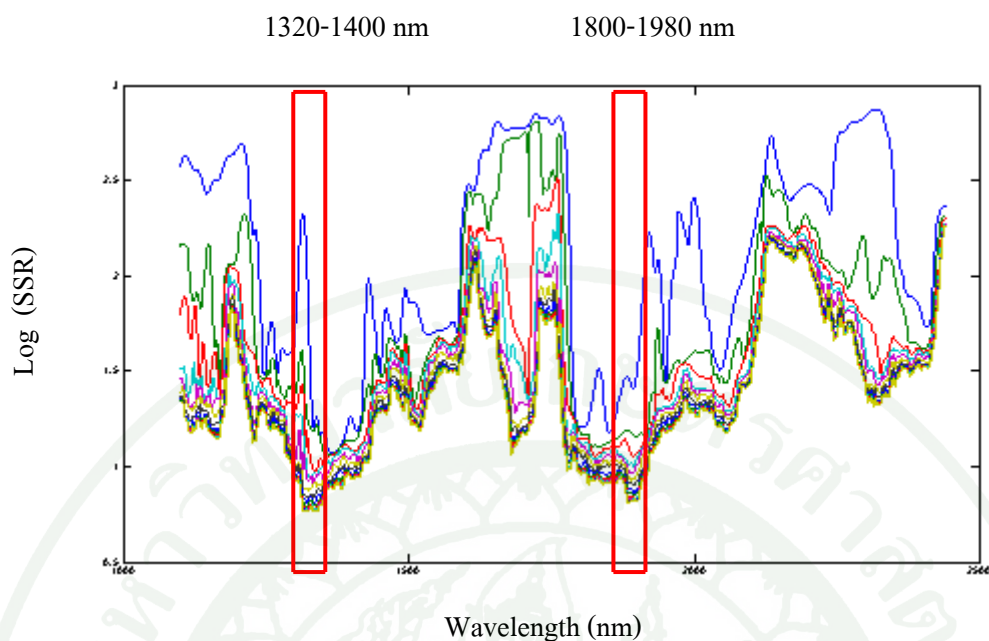
ตารางที่ 14 (ต่อ)

วิธีปรับแต่งสเปกตรัม	วิธีทางสถิติ	ความยาวคลื่น (nm)	F	ขั้นตอน Calibration	
				R	SEC (%wb)
17. 2 D	MWPLS	1320 – 1350, 1800 – 1900	1	0.99	0.25
18. 2 D	MWPLS	1320 – 1400	1	0.99	0.32
19. 2 D	MWPLS	1320 – 1400, 1800 – 1980	1	0.99	0.24
20. MSC	MWPLS	1300 – 1420	1	0.99	0.29
21. MSC	MWPLS	1500 – 1560	2	0.99	0.34
22. MSC	MWPLS	1800 – 1900	1	0.99	0.26
23. MSC	MWPLS	1300 – 1420, 1500 – 1560, 1800 – 1900	1	0.99	0.29

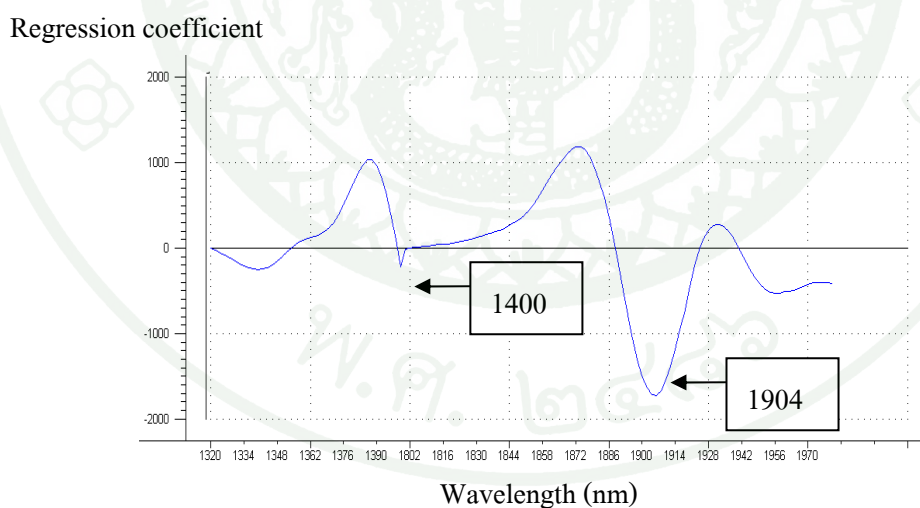
หมายเหตุ F หมายถึง จำนวนกลุ่มตัวแปรใหม่ที่ใช้ในการสร้างสมการ

R หมายถึง ค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (Coefficient of correlation)

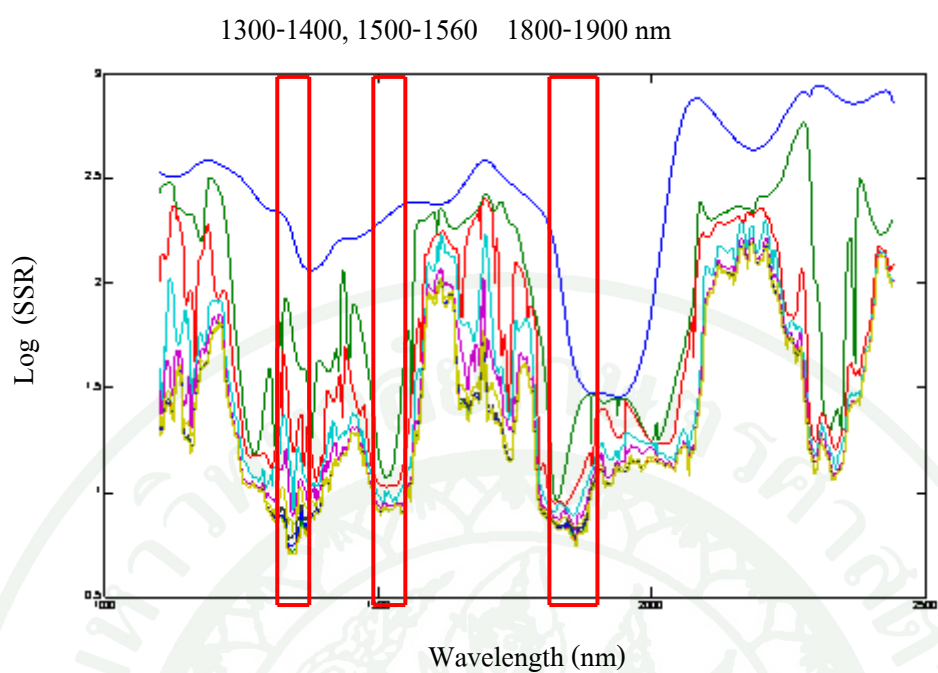
SEC หมายถึง ค่าความคลาดเคลื่อนของสมการที่ใช้ในการทำนายค่าปริมาณความชื้น
ด้วยตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ (Calibration)



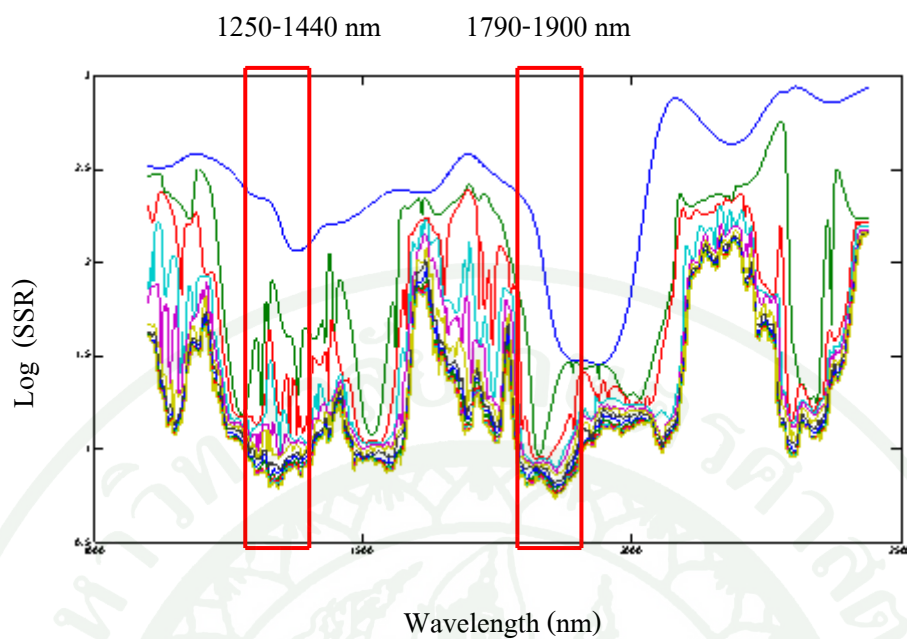
ภาพที่ 33 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าปริมาณความชื้นจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative)



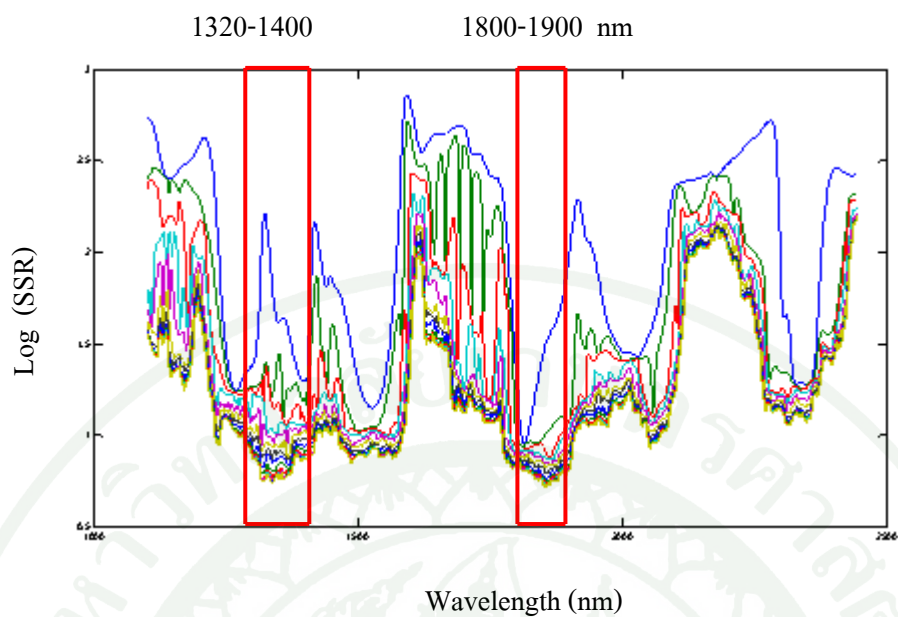
ภาพที่ 34 ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการ (Regression coefficient) ที่ใช้ในการทำนายค่าปริมาณความชื้นในตัวอย่างขนมขบเคี้ยว ที่ช่วงความยาวคลื่น 1320-1400, 1800-1980 นาโนเมตร จากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative)



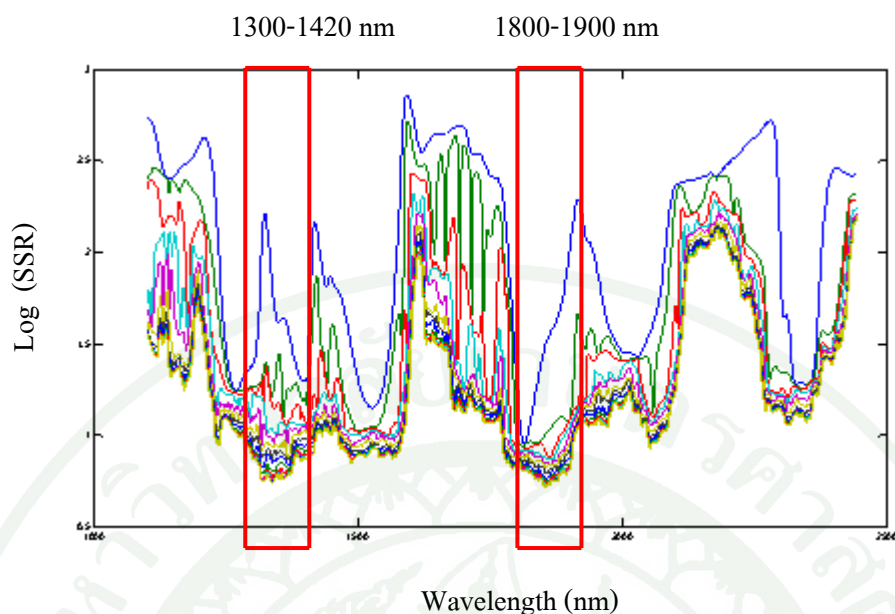
ภาพที่ 35 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าปริมาณความชื้นจากสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม



ภาพที่ 36 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าปริมาณความชื้นจากสเปกตรัม ที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing)



ภาพที่ 37 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าปริมาณความชื้นจากสเปกตรัม ที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative)



ภาพที่ 38 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าปริมาณความชื้นจากสเปกตรัม ที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี MSC

3.1.4 การตรวจสอบความแม่นยำของสมการทำนายที่สร้างขึ้นเพื่อทำนาย ปริมาณความชื้นซึ่งสร้างขึ้นจากวิธีทางสถิติ MWPLS

ทำการตรวจสอบความแม่นยำของสมการทำนายที่สร้างขึ้นเพื่อทำนาย ปริมาณความชื้นซึ่งสร้างขึ้นจากวิธีทางสถิติ MWPLS ด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบควถูกต้อง จำนวน 50 ตัวอย่าง ทำการเปรียบเทียบค่าที่ได้จากการทำนายด้วยสมการที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัม NIR (Predicted value) กับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริง ดังแสดงในตารางที่ 15

ตารางที่ 15 เปรียบเทียบค่า R, ค่า SEP, ค่า RPD และค่า Bias ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนาย
ค่าปริมาณความชื้นด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS

วิธีปรับแต่งสเปกตรัม	วิธีทางสถิติ	ความยาวคลื่น (นาโนเมตร)	ขั้นตอน Validation			
			R	SEP (%wb)	RPD	Bias
1. Original	MWPLS	1300 – 1400	0.98	0.49	5.10	-0.06
2. Original	MWPLS	1500 – 1560	0.99	0.35	7.14	-0.02
3. Original	MWPLS	1800 – 1900	0.99	0.28	8.93	0.02
4. Original	MWPLS	1300 – 1400, 1500 – 1560, 1800 – 1900	0.99	0.31	8.06	0.02
5. Smoothing	MWPLS	1250 – 1440	0.99	0.30	8.33	0.02
6. Smoothing	MWPLS	1480 – 1570	0.99	0.30	8.33	0.02
7. Smoothing	MWPLS	1790 – 1900	0.99	0.28	8.93	0.02
8. Smoothing	MWPLS	1250 – 1440, 1480 – 1570, 1790 – 1900	0.99	0.33	7.56	0.01
9. 1 D	MWPLS	1320 – 1380	0.98	0.55	4.55	-0.05
10. 1 D	MWPLS	1320 – 1400	0.99	0.34	7.35	-0.03
11. 1 D	MWPLS	1480 – 1580	0.99	0.28	8.93	0.02
12. 1 D	MWPLS	1800 – 1900	0.99	0.27	9.26	0.02
13. 1 D	MWPLS	1320 – 1380, 1480 – 1580, 1800 – 1900	0.99	0.30	8.33	0.02
14. 1 D	MWPLS	1320 – 1400, 1480 – 1580, 1800 – 1900	0.99	0.27	9.26	0.02
15. 2 D	MWPLS	1320 – 1350	0.94	0.92	2.72	-0.11
16. 2 D	MWPLS	1800 – 1900	0.99	0.32	7.81	-0.003

ตารางที่ 15 (ต่อ)

วิธีปรับแต่งสเปกตรัม	วิธีทางสถิติ	ความยาวคลื่น (นาโนเมตร)	ขั้นตอน Validation			
			R	SEP (%wb)	RPD	Bias
17. 2 D	MWPLS	1320 – 1350, 1800 – 1900	0.99	0.30	8.33	-0.005
18. 2 D	MWPLS	1320 – 1400	0.99	0.32	7.81	0.005
19. 2 D	MWPLS	1320 – 1400, 1800 – 1980	0.99	0.26	9.62	0.02
20. MSC	MWPLS	1300 – 1420	0.99	0.30	8.33	0.02
21. MSC	MWPLS	1500 – 1560	0.99	0.31	8.06	0.03
22. MSC	MWPLS	1800 – 1900	0.99	0.34	7.35	0.04
23. MSC	MWPLS	1300 – 1420, 1500 – 1560, 1800 – 1900	0.99	0.30	8.33	0.02
หมายเหตุ						
SEP	หมายถึง	ค่าความคลาดเคลื่อนของสมการที่ใช้ทำนายค่าปริมาณความชื้นด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)				
Bias	หมายถึง	ค่าความแตกต่างระหว่างค่าที่ทำนายได้จากสมการที่สร้างขึ้นกับค่าที่วิเคราะห์ได้ทางเคมี				
MWPLS	หมายถึง	วิธีทางสถิติ Moving Window Partial Least Squares				
RPD	หมายถึง	อัตราส่วนของ SEP ต่อ SD				
1 D	หมายถึง	วิธี First derivative				
2 D	หมายถึง	วิธี Second derivative				

จากการเปรียบเทียบข้อมูลของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณความชื้น ทั้ง 23 สมการในตารางที่ 15 พบว่า สมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS ที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ที่ความยาวคลื่นในช่วง 1320-1400, 1800-1980 นาโนเมตร มีความเหมาะสมและมีความแม่นยำในการทำนายปริมาณความชื้นมากที่สุด เนื่องจากมีค่า R เท่ากับ 0.99 และมีค่าความคลาดเคลื่อนของสมการทำนายค่าปริมาณความชื้นต่ำ คือ มีค่า SEC และ SEP เท่ากับ 0.24% และ 0.26% ทั้งนี้ อาจเนื่องมาจาก

สเปกตรัมเริ่มต้นมีการซ้อนทับกัน มีลักษณะฐานกว้างเนื่องจากการซ้อนทับกันของจุดยอด ไม่ได้มีจุดยอดแหลมแยกออกจากกันอย่างชัดเจน ทั้งนี้ Osborne *et al.* (1993) ได้อธิบายว่าเกิดขึ้นเนื่องมาจากการสั่นแบบโอเวอร์โทนและแบบคอมบิเนชันของการสั่นแบบพื้นฐานซึ่งทำให้ยากต่อการเลือกความยาวคลื่นที่เหมาะสมที่มีความสัมพันธ์กับค่าที่ทำการศึกษา ดังนั้น เมื่อนำข้อมูลสเปกตรัมเริ่มต้นไปปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ก่อนนำไปใช้ในการสร้างสมการทำนายปริมาณความชื้นจะสามารถช่วยแก้ปัญหาดังกล่าวได้

กล่าวคือ สามารถช่วยลดความคลาดเคลื่อนของการซ้อนทับกันของจุดยอดดังกล่าวได้ ซึ่ง Osborne *et al.* (1993) กล่าวว่าวิธีการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีนี้เป็นการกำจัดฟิสิกส์ที่ซ้อนทับกันและลดผลกระทบจากการเลื่อนของเส้นฐาน (Baseline) ที่เกิดจากการกระเจิงแสง ทำให้ได้สเปกตรัมที่มีฐานแคบและเห็นจุดยอดแยกออกจากกันอย่างชัดเจน แต่จุดยอดของสเปกตรัมเริ่มต้นจะเปลี่ยนเป็นจุดยอดที่อยู่ตรงข้ามและตรงกับจุดยอดเริ่มต้น อนุพันธ์ (2552) อธิบายว่าวิธี Second derivative ใช้ได้ผลดีกับตัวอย่างที่มีขนาดอนุภาคต่างๆ ผสมกันอยู่ ซึ่งสอดคล้องกับตัวอย่างที่ใช้ในการวิจัยครั้งนี้ และช่วงความยาวคลื่นที่นำไปสร้างสมการแล้วให้สมการทำนายปริมาณความชื้นที่มีความแม่นยำมากที่สุด คือ ช่วง 1320-1400, 1800-1980 นาโนเมตร ซึ่งจะพบว่าในช่วงดังกล่าวมีข้อมูลครอบคลุมที่เกี่ยวข้องกับปริมาณความชื้น Murray and Osborne *et al.* (1993); Perez-Vich *et al.* (1998) รายงานว่าความยาวคลื่นที่ตำแหน่ง 1400 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับการสั่นแบบโอเวอร์โทนลำดับที่หนึ่งของพันธะ O-H และที่ความยาวคลื่น 1930 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับพันธะ O-H ซึ่งมีความเกี่ยวข้องกับโมเลกุลของน้ำ

ตารางที่ 16 เปรียบเทียบค่า R, SEC, R, SEP, RPD, Bias ของสมการทำนายค่าปริมาณความชื้นที่ดีที่สุดที่สร้างขึ้นด้วยวิธีทางสถิติ PLS, MWPLS

วิธีทางสถิติ	วิธีปรับแต่ง สเปกตรัม	ขั้นตอน Calibration		ขั้นตอน Validation			
		R	SEC	R	SEP	RPD	Bias
PLS	2 D	0.99	0.28	0.99	0.31	8.06	0.03
MWPLS	2 D	0.99	0.24	0.99	0.26	9.62	0.02

จากการเปรียบเทียบค่า R, SEC, R, SEP, RPD, Bias ของสมการทำนายค่าปริมาณความชื้นที่ดีที่สุดที่สร้างขึ้นด้วยวิธีทางสถิติ PLS และ MWPLS ในตารางที่ 16 จะพบว่าสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณความชื้นด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS สามารถทำนายค่าปริมาณความชื้นได้อย่างแม่นยำกว่าวิธี PLS เนื่องจากให้ค่า R เท่ากัน คือ 0.99 และให้ค่า SEC และ SEP เท่ากับ 0.24, 0.26 ในขณะที่สมการทำนายที่สร้างขึ้นด้วยวิธี PLS ให้ค่า R, SEC, SEP เท่ากับ 0.99, 0.28, 0.31 จะเห็นได้ว่าค่า SEC และ SEP ของสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี MWPLS จะน้อยกว่า ดังนั้นสมการทำนาย ค่าปริมาณความชื้นที่สร้างขึ้นจากวิธี MWPLS จึงมีประสิทธิภาพในการทำนายค่าได้แม่นยำกว่าและสามารถนำไปใช้ได้ในทุกงาน (William, 2001)

3.2 การสร้างสมการที่เหมาะสมในการทำนายค่าวอเตอร์ แอคทิวิตี

ข้อมูลค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวของกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 หน่วยตัวอย่าง ที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ทำการบันทึกค่าห่างช่วงละ 2 นาโนเมตร จะได้ข้อมูลค่าการดูดกลืนแสง จำนวน 701 ค่า กำหนดให้เป็นตัวแปรอิสระ ตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 ตัวอย่าง ที่ผ่านการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR นำไปวิเคราะห์คุณภาพทางเคมีในเรื่องค่าวอเตอร์ แอคทิวิตี ข้อมูลค่าจริงที่ได้จากการวิเคราะห์ทางเคมีกำหนดให้เป็นตัวแปรตาม นำข้อมูลตัวแปรอิสระและตัวแปรตามมาหาความสัมพันธ์ด้วยวิธีทางสถิติเพื่อสร้างสมการที่ใช้ในการทำนายค่าวอเตอร์ แอคทิวิตี วิธีทางสถิติที่นำมาใช้สร้างสมการทำนายค่าวอเตอร์ แอคทิวิตี ได้แก่ 1) วิธี Partial Least Squares (PLS) Regression 2) วิธี Moving Window Partial Least Squares (MWPLS) ทำการเปรียบเทียบสมการที่สร้างขึ้นจากทั้ง 2 วิธี เพื่อใช้ทำนายค่าวอเตอร์ แอคทิวิตี โดยพิจารณาจากค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (R) และค่าความคลาดเคลื่อนของสมการในการทำนายค่าวอเตอร์ แอคทิวิตี (Standard Error of Calibration; SEC) โดยมีรายละเอียดดังนี้

3.2.1 การสร้างสมการทำนายค่าวอเตอร์ แอคทิวิตีด้วยวิธีทางสถิติ Partail Least Squares Regression (PLS)

จากข้อมูลค่าการดูดกลืนแสงที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ที่ความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร บันทึกค่าการดูดกลืนแสงห่างช่วงละ 2 นาโนเมตร จะได้ข้อมูลจากการวัดค่า จำนวน 701 ค่า เมื่อนำข้อมูลตัวแปรอิสระมาหาความสัมพันธ์กับค่าวอเตอร์ แอคทิวิตี ด้วยการจัดกลุ่มตัวแปรเดิม เป็นตัวแปรใหม่ หรือแฟกเตอร์ ด้วยวิธี PLS

ก่อนทำการจัดกลุ่มตัวแปรใหม่ที่ได้จากข้อมูลค่าการดูดกลืนแสงที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR จะนำข้อมูลที่ได้มาทำการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีต่างๆ ได้แก่ 1) วิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) 2) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) 3) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) 4) วิธี Multiplicative scatter correction (MSC) เพื่อลดความคลาดเคลื่อนเนื่องจากปัจจัยต่างๆ

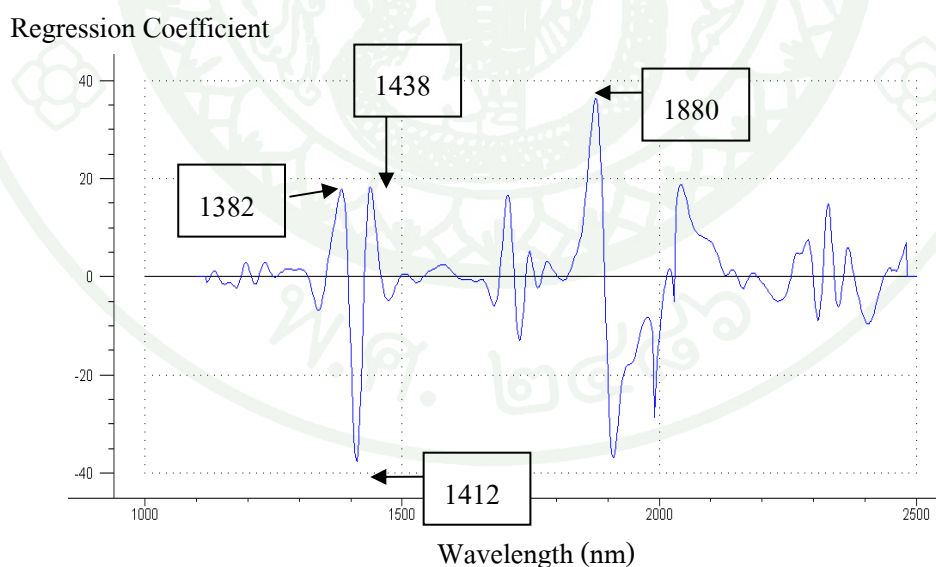
เมื่อพิจารณาสมการทำนายที่สร้างขึ้นจากช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ดังแสดงในตารางที่ 17 พบว่า สเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง และสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First Derivative) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) และวิธี Multiplicative scatter correction (MSC) มีความเหมาะสมสำหรับการทำนายค่าวอเตอร์ แอคทิวิตี เนื่องจากสมการทั้งหมดให้ค่า R สูงกว่า 0.9 และให้ค่า SEC ต่ำ และมีจำนวนแฟลคเตอร์ที่เหมาะสม แต่ทั้งนี้จะพบว่าสมการที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) น่าจะมีความเหมาะสมที่สุด เนื่องจากมีค่าการจัดกลุ่มตัวแปรเดิมเป็นตัวแปรใหม่ได้ 2 แฟลคเตอร์ โดยให้ค่า R เท่ากับ 0.97 และค่า SEC ต่ำที่สุดเท่ากับ 0.03 เมื่อทำการพิจารณาค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression coefficient) ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ดังแสดงในภาพที่ 36 พบว่าที่ตำแหน่งความยาวคลื่น 1382, 1412, 1438 และ 1880 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับค่าวอเตอร์ แอคทิวิตีมาก เนื่องจากที่ความยาวคลื่น 1412, 1438 นาโนเมตร มีข้อมูลสำคัญที่เกี่ยวข้องกับพันธะของ O-H ซึ่งสอดคล้องกับงานวิจัยของ Delwiche *et al.* (1991) ที่แสดงให้เห็นว่าที่ความยาวคลื่นดังกล่าวมีความสัมพันธ์กับการเปลี่ยนแปลงของค่าวอเตอร์ แอคทิวิตีของตัวอย่างแป้ง

เมื่อทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง พบว่า สมการที่เหมาะสมดังกล่าวให้ค่า SEP และ Bias เท่ากับร้อยละ 0.03 และ 0.003 ตามลำดับ ดังแสดงในตารางที่ 18 และภาพที่ 44

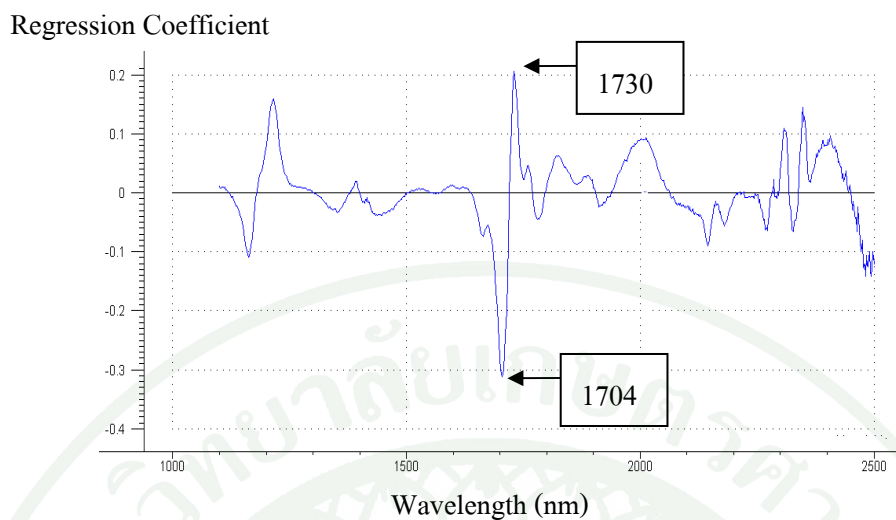
ตารางที่ 17 ค่า R, ค่า SEC ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าออกเตอร์ แอคติวิตี (aw) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยวิธีทางสถิติ PLS

วิธีปรับแต่งสเปกตรัม	วิธีการทางสถิติ	ช่วงความยาวคลื่นที่ใช้ในการสร้างสมการ (nm)	F	กลุ่มสร้างสมการ	
				R	SEC
1. Original	PLS	1100 – 2500	2	0.95	0.03
2. Smoothing	PLS	1100 – 2500	2	0.95	0.03
3. 1 D	PLS	1100 – 2500	3	0.97	0.03
4. 2 D	PLS	1100 – 2500	2	0.97	0.03
5. MSC	PLS	1100 – 2500	4	0.97	0.03

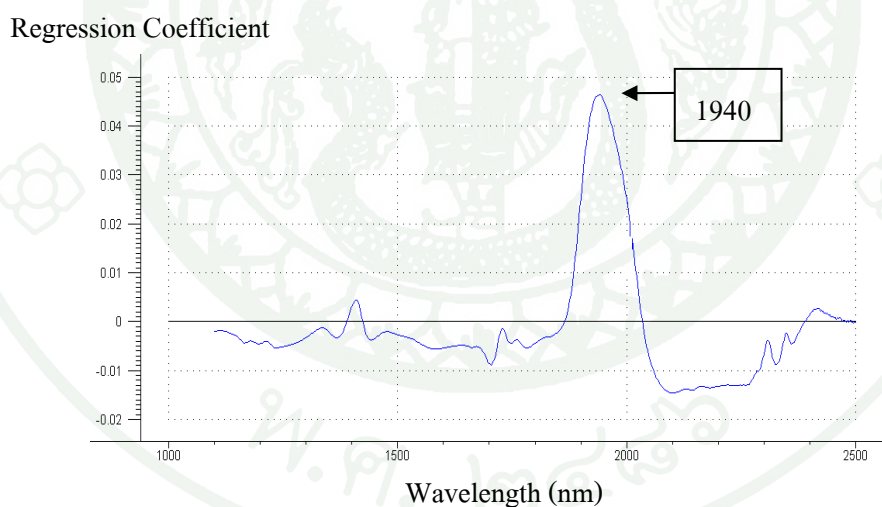
หมายเหตุ F หมายถึง จำนวนกลุ่มตัวแปรใหม่ที่ใช้ในการสร้างสมการ
 R หมายถึง ค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (Coefficient of correlation)
 SEC หมายถึง ค่าความคลาดเคลื่อนของสมการที่ใช้ในการทำนายค่าออกเตอร์แอคติวิตี (aw) ด้วยตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ



ภาพที่ 39 ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าออกเตอร์แอคติวิตีในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการจำนวน 100 ตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี 2 D

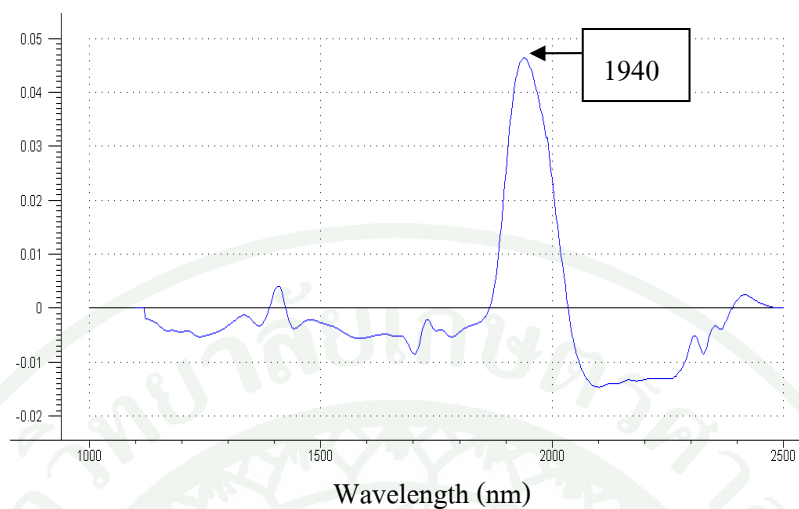


ภาพที่ 40 ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าออกเตอร์แอคทिवิตีในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการจำนวน 100 ตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC



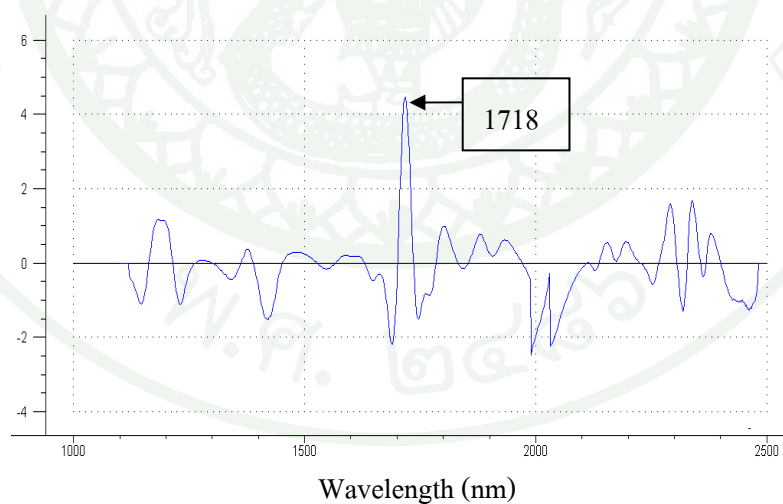
ภาพที่ 41 ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าออกเตอร์แอคทिवิตีในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการจำนวน 100 ตัวอย่าง ของสมการที่ไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม

Regression Coefficient



ภาพที่ 42 ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าแอมพลิจูดของสัญญาณในย่านความถี่ 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการจำนวน 100 ตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing)

Regression Coefficient



ภาพที่ 43 ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าแอมพลิจูดของสัญญาณในย่านความถี่ 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการจำนวน 100 ตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี 1 D

3.2.2 การตรวจสอบความแม่นยำของสมการทำนายที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี ซึ่งสร้างขึ้นจากวิธีทางสถิติ PLS

การตรวจสอบความแม่นยำของสมการทำนายที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี จะใช้ค่าทางกายภาพของกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation) จำนวน 50 ตัวอย่าง ทำการเปรียบเทียบค่าที่ได้จากการทำนายด้วยสมการที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัม NIR (Predicted value) กับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริง (Actual value) การตรวจสอบความแม่นยำของสมการจะพิจารณาจากค่าความคลาดเคลื่อนจากการทำนายด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Standard Error of Prediction; SEP) และค่าความแตกต่าง (Bias) ระหว่างค่าที่ทำนายได้จากสมการกับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริงของแต่ละสมการ

ทำการตรวจสอบความแม่นยำของสมการทำนายที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี ด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง จำนวน 50 ตัวอย่าง ทำการเปรียบเทียบค่าที่ได้จากการทำนายด้วยสมการที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัม NIR (Predicted value) กับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริง ดังแสดงในตารางที่ 18 และภาพที่ 44

ตารางที่ 18 เปรียบเทียบค่า R, ค่า SEP, ค่า RPD และค่า Bias ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี ด้วยวิธีทางสถิติ PLS

วิธีปรับแต่งสเปกตรัม	วิธีทางสถิติ	ความยาวคลื่น (นาโนเมตร)	ขั้นตอน Validation			
			R	SEP	RPD	Bias
1. Original	PLS	1100 - 2500	0.94	0.04	2.75	0.002
2. Smoothing	PLS	1100 - 2500	0.94	0.04	2.75	0.002
3. 1 D	PLS	1100 - 2500	0.96	0.03	3.67	0.004
4. 2 D	PLS	1100 - 2500	0.96	0.03	3.67	0.003
5. MSC	PLS	1100 - 2500	0.96	0.03	3.67	0.004

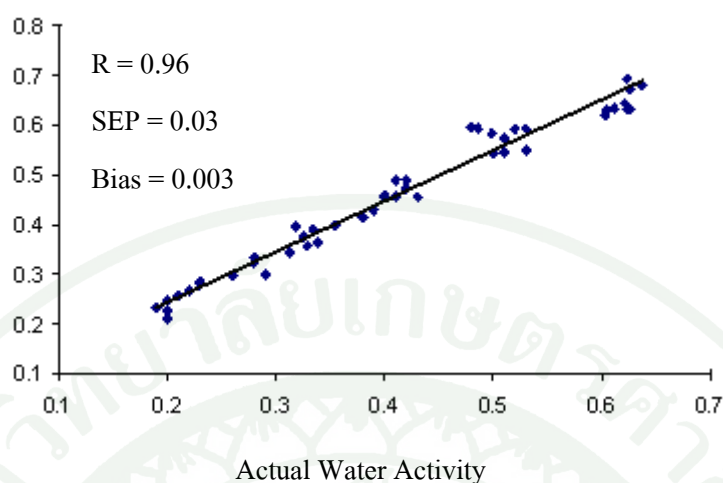
หมายเหตุ SEP หมายถึง ค่าความคลาดเคลื่อนของสมการที่ใช้ทำนายค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี ด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)

Bias หมายถึง ค่าความแตกต่างระหว่างค่าที่ทำนายได้จากสมการที่สร้างขึ้นกับค่าที่วิเคราะห์ได้ทางเคมี

PLS หมายถึง วิธีทางสถิติ Partial Least Squares Regression

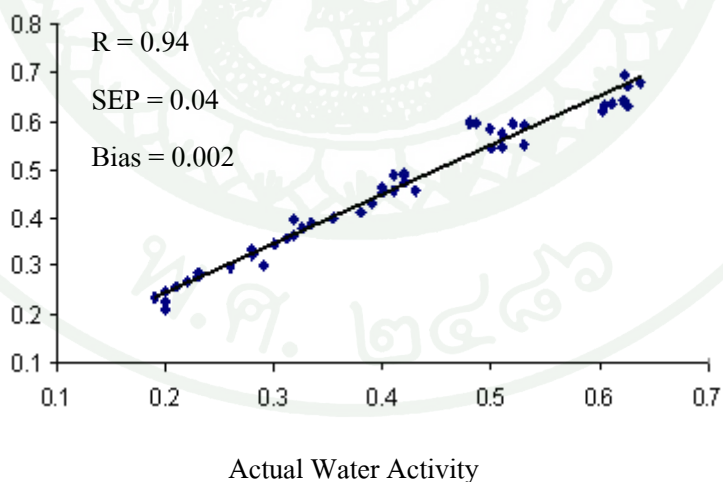
RPD หมายถึง อัตราส่วนของ SEP ต่อ SD

Predicted Water Activity



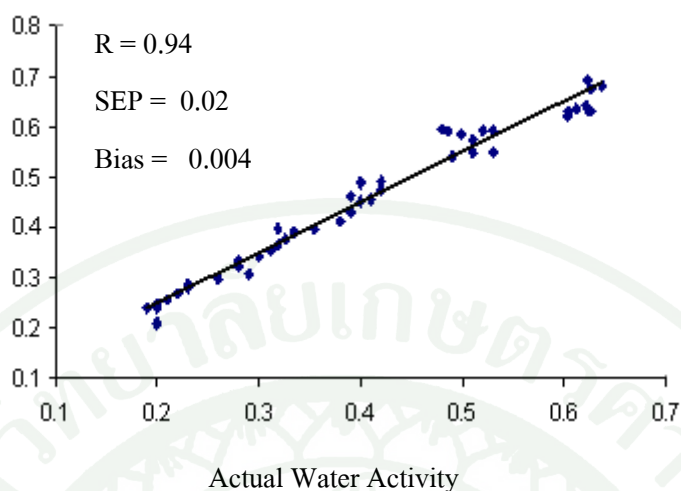
ภาพที่ 44 ค่าวอเตอร์ แอคทิวิตีของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)

Predicted Water Activity



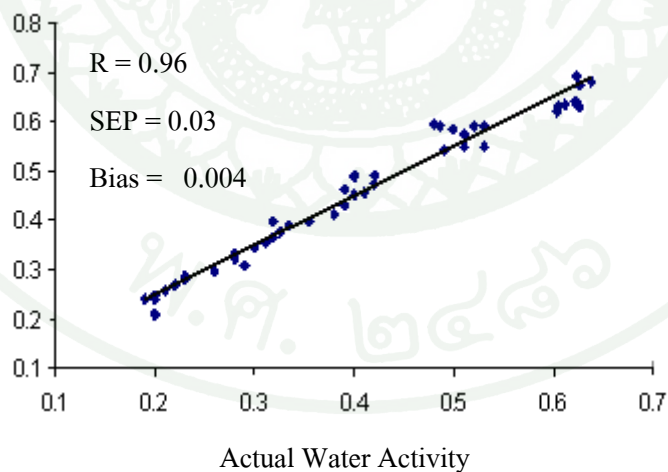
ภาพที่ 45 ค่าวอเตอร์ แอคทิวิตีของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง

Predicted Water Activity



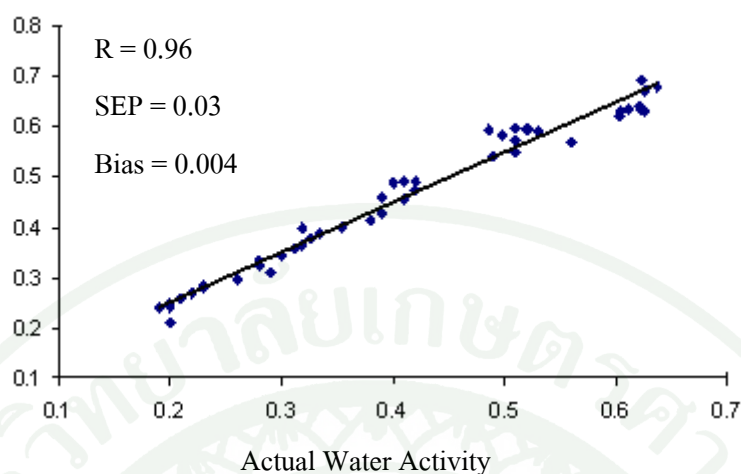
ภาพที่ 46 ค่าวอเตอร์ แอคทิวิตี้ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)

Predicted Water Activity



ภาพที่ 47 ค่าวอเตอร์ แอคทิวิตี้ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative) ของตัวอย่างตรวจสอบความถูกต้อง

Predicted Water Activity



ภาพที่ 48 ค่าวอเตอร์ แอคทีวิตีของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี MSC ของตัวอย่างตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)

จากผลการสร้างสมการทำนายค่าวอเตอร์ แอคทีวิตีด้วยวิธีทางสถิติ PLS พบว่า สมการทำนายที่ดีที่สุดสร้างขึ้นจากวิธีสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ทั้งนี้ อาจเนื่องมาจากสเปกตรัมเริ่มต้นมีการซ้อนทับกัน มีลักษณะฐานกว้าง เนื่องจากการซ้อนทับกันของจุดยอด ไม่ได้มีจุดยอดแหลมแยกออกจากกันอย่างชัดเจน ทั้งนี้ Osborne *et al.* (1993) ได้อธิบายว่าเกิดขึ้นเนื่องมาจากการสั่นแบบโอเวอร์โทนและแบบคอมบินั่นของการสั่นแบบพื้นฐาน ซึ่งทำให้ยากต่อการเลือกความยาวคลื่นที่เหมาะสมที่มีความสัมพันธ์กับค่าที่ทำการศึกษา ดังนั้น เมื่อนำข้อมูลสเปกตรัมเริ่มต้นไปปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ก่อนนำไปใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี จะสามารถช่วยแก้ปัญหาดังกล่าวได้ กล่าวคือ สามารถช่วยลดความคลาดเคลื่อนของการซ้อนทับกันของจุดยอดดังกล่าวได้ ซึ่ง Osborne *et al.* (1993) กล่าวว่า วิธีการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีนี้เป็นการจัดฟิสิกส์ที่ซ้อนทับกัน และลดผลกระทบจากการเลื่อนของเส้นฐาน (Baseline) ที่เกิดจากการกระเจิงแสง ทำให้ได้สเปกตรัมที่มีฐานแคบและเห็นจุดยอดแยกออกจากกันอย่างชัดเจน แต่จุดยอดของสเปกตรัมเริ่มต้นจะเปลี่ยนเป็นจุดยอดที่อยู่ตรงข้ามและตรงกับจุดยอดเริ่มต้น อนุพันธ์ (2552) อธิบายว่าวิธี Second derivative ใช้ได้ผลดีกับตัวอย่างที่มีขนาดอนุภาคต่างๆ ผสมกันอยู่ ซึ่งสอดคล้องกับตัวอย่างที่ใช้ในการวิจัยครั้งนี้เนื่องจากตัวอย่างขนมขบเคี้ยวจะนำมานับด้วยเครื่องปั่นก่อนนำมาทำการวิเคราะห์

3.2.3 การสร้างสมการทำนายค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี้ด้วยวิธีทางสถิติ Moving Window Partial Least Squares (MWPLS)

จากการนำสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการต่างๆ ได้แก่ วิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) และวิธี Multiplicative scatter correction (MSC) รวมทั้งสมการที่ไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม มาวิเคราะห์ด้วยโปรแกรม In-house-written in MATLAB เพื่อหาช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสมในการสร้างสมการ ได้ผลดังแสดงในภาพที่ 41-46 เมื่อพิจารณาจากค่า $\log(SSR)$ พบว่า ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสมที่เป็น Informative region มีผลหลายช่วง ดังแสดงในตารางที่ 19 และเมื่อนำช่วงความยาวคลื่นดังกล่าวมาสร้างสมการทำนายได้ผล ดังแสดงในตารางที่ 19 ซึ่งพบว่าสมการที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี Second derivative (2 D) ในช่วงความยาวคลื่น 1130-1180, 1310-1370, 1380-1430 และ 2038-2108 นาโนเมตร ให้สมการที่เหมาะสมที่สุดสำหรับการทำนายค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี้ โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มตัวแปรเดิมเป็นตัวแปรใหม่ได้ 2 แฟกเตอร์ และให้ค่า R และ SEC เท่ากับ 0.98 และ 0.33 ตามลำดับ เมื่อทำการพิจารณาค่าสัมประสิทธิ์การถดถอย (Regression coefficient) ของสมการที่ความยาวคลื่นในช่วง 1130-1180, 1310-1370, 1380-1430 และ 2038-2108 นาโนเมตร ดังแสดงในภาพที่ 41 พบว่า ที่ความยาวคลื่นตำแหน่ง 1608 และ 1676 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี้สูง ซึ่งสอดคล้องกับงานวิจัยของ Che Man and Moh (2000)

ตารางที่ 19 ค่า R และค่า SEC ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าวอเตอร์ แอคติวิตี ของตัวอย่าง
ขนมขบเคี้ยวด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS

วิธีปรับแต่งสเปกตรัม	วิธีทางสถิติ	ความยาวคลื่น (nm)	F	ขั้นตอน Calibration	
				R	SEC
1. Original	MWPLS	1330 – 1420	2	0.86	0.06
2. Original	MWPLS	1648 – 1688	2	0.88	0.05
3. Original	MWPLS	2290 – 2400	2	0.96	0.03
4. Original	CMWPLS	1330 – 1420, 1648 – 1688, 2290 – 2400	2	0.97	0.03
5. Smoothing	MWPLS	1140 – 1196	2	0.96	0.03
6. Smoothing	MWPLS	1380 – 1440	2	0.95	0.04
7. Smoothing	MWPLS	2020 – 2080	2	0.92	0.04
8. Smoothing	MWPLS	2280 – 2400	2	0.96	0.03
9. Smoothing	CMWPLS	1140 – 1196, 1380 – 1440, 2020 – 2080, 2280 – 2400	2	0.97	0.03
10. 1 D	MWPLS	1150 – 1188	2	0.91	0.05
11. 1 D	MWPLS	1220 – 1236	2	0.88	0.05
12. 1 D	MWPLS	1310 – 1410	2	0.94	0.04
13. 1 D	MWPLS	2040 – 2106	2	0.95	0.03
14. 1 D	MWPLS	2270 – 2400	2	0.96	0.03
15. 1 D	CMWPLS	1150 – 1188, 1220 – 1236, 1310 – 1410, 2040 – 2106 , 2270 – 2400	1	0.97	0.03
16. 2 D	MWPLS	1130 – 1180	2	0.95	0.03

ตารางที่ 19 (ต่อ)

วิธีปรับแต่งสเปกตรัม	วิธีทางสถิติ	ความยาวคลื่น (nm)	F	ขั้นตอน Calibration	
				R	SEC
17. 2 D	MWPLS	1310 – 1370	1	0.94	0.04
18. 2 D	MWPLS	1380 – 1430	2	0.95	0.04
19. 2 D	MWPLS	2038 – 2108	2	0.95	0.03
20. 2 D	CMWPLS	1130 – 1180, 1310 – 1370, 1380 – 1430, 2038 – 2108	2	0.98	0.03
21. MSC	MWPLS	1314 – 1410	4	0.95	0.03
22. MSC	MWPS	2288 – 2400	4	0.96	0.03
23. MSC	CMWPLS	1314 – 1410, 2288 – 2400	4	0.97	0.03

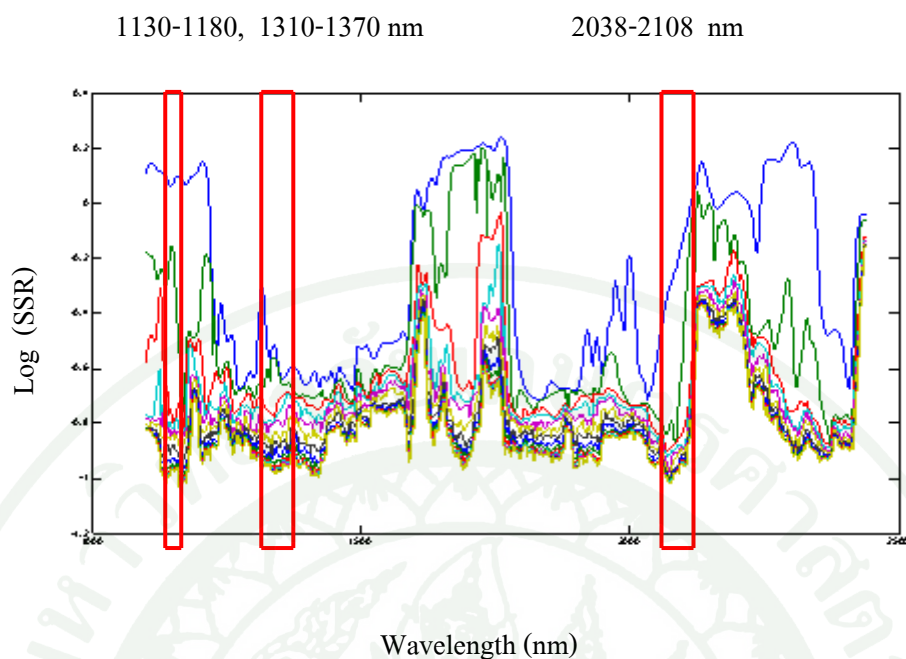
หมายเหตุ F หมายถึง จำนวนกลุ่มตัวแปรใหม่ที่ใช้ในการสร้างสมการ

R หมายถึง ค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (Coefficient of correlation)

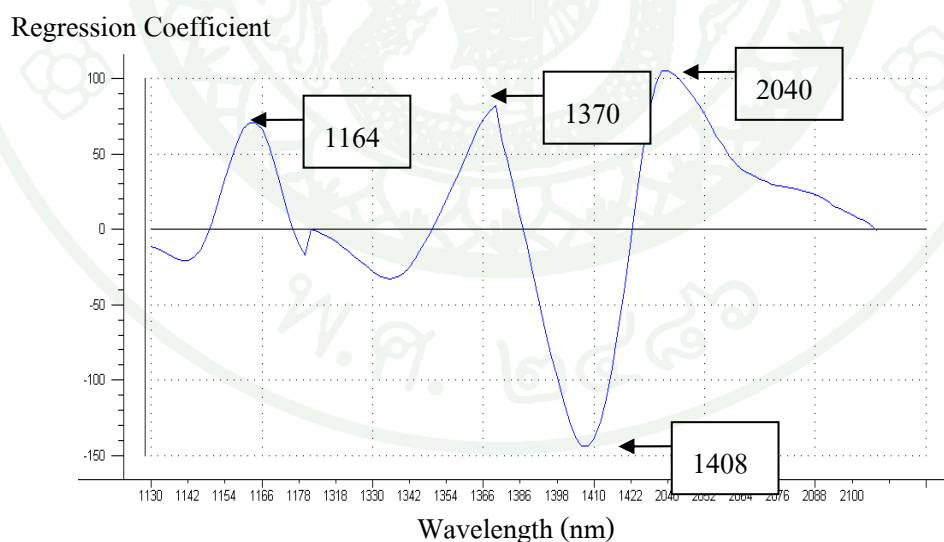
SEC หมายถึง ค่าความคลาดเคลื่อนของสมการที่ใช้ในการทำนายค่าออกเตอร์ แอคติวิตี ด้วยตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ (Calibration)

1 D หมายถึง วิธี First derivative

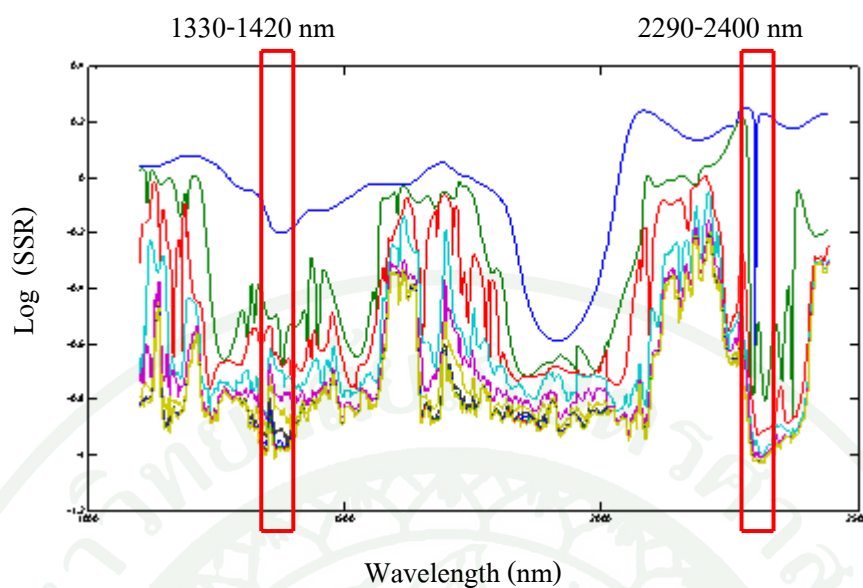
2 D หมายถึง วิธี Second derivative



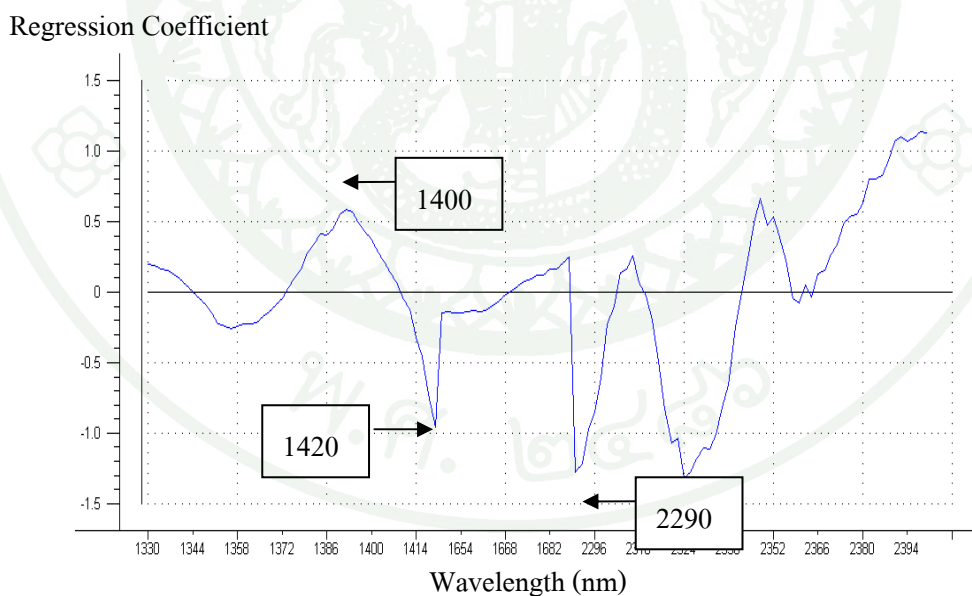
ภาพที่ 49 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี้จากสเปกตรัม ที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative)



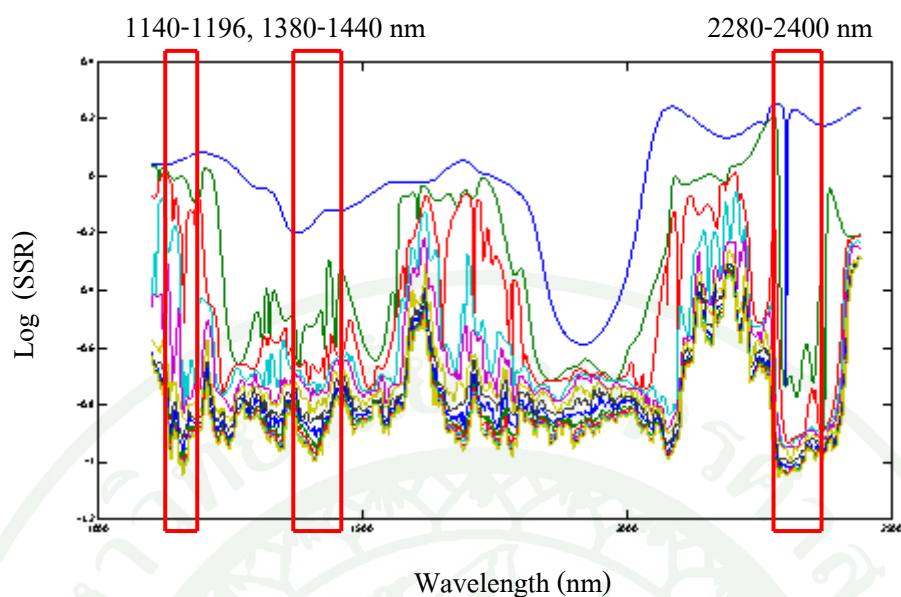
ภาพที่ 50 ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี้ในช่วงความยาวคลื่น 1130-1180, 1310-1370, 1380-1430, 2038-2108 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 หน่วยตัวอย่างของสมการที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative)



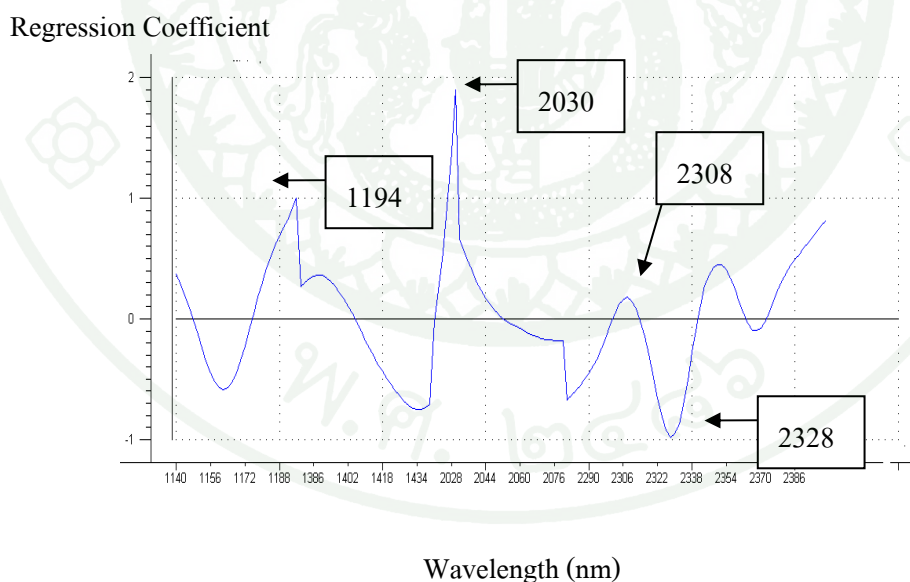
ภาพที่ 51 ความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าออกเตอร์ แอคทีวิตีจากสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม



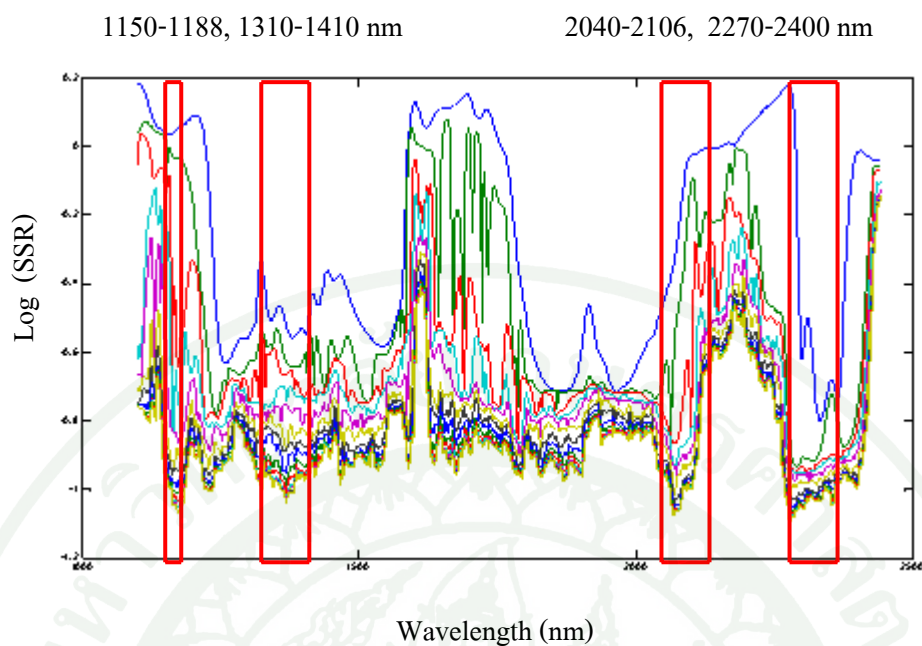
ภาพที่ 52 ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าออกเตอร์ แอคทีวิตี ในช่วงความยาวคลื่น 1330-1420, 1648-1688, 2290-2400 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 หน่วยตัวอย่าง ของสมการที่ไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม



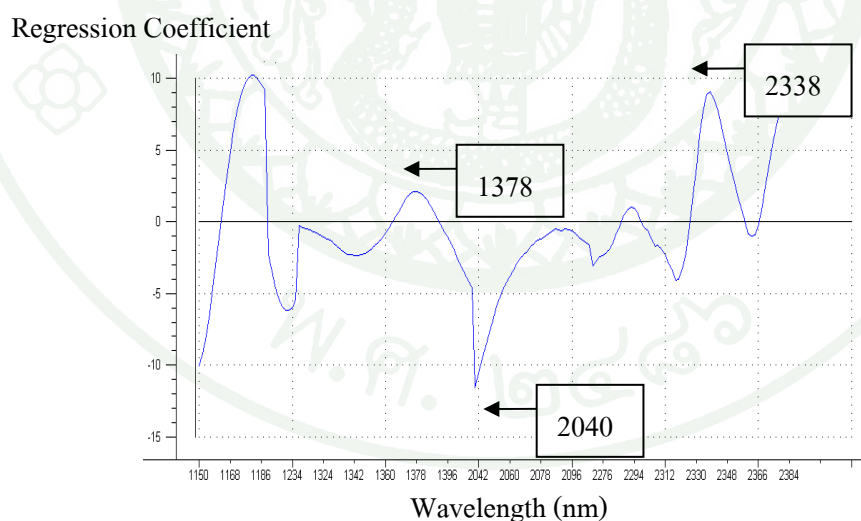
ภาพที่ 53 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าแอมพลิจูด แอคทีวิตีจากสเปกตรัม ที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing)



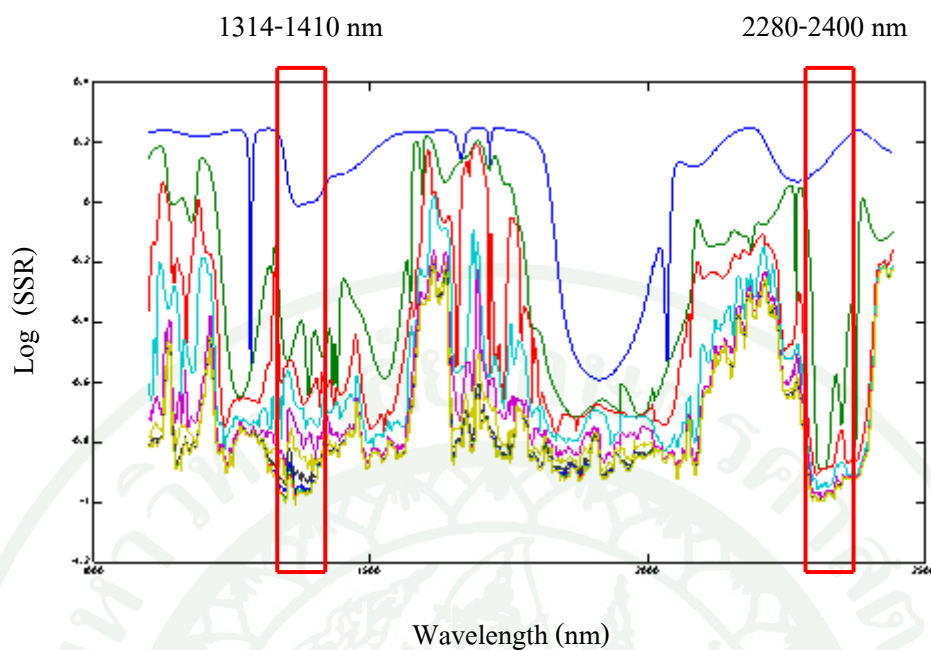
ภาพที่ 54 ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าแอมพลิจูด แอคทีวิตี ในช่วงความยาวคลื่น 1140-1196, 1380-1440, 2020-2080, 2280-2400 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 ตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing)



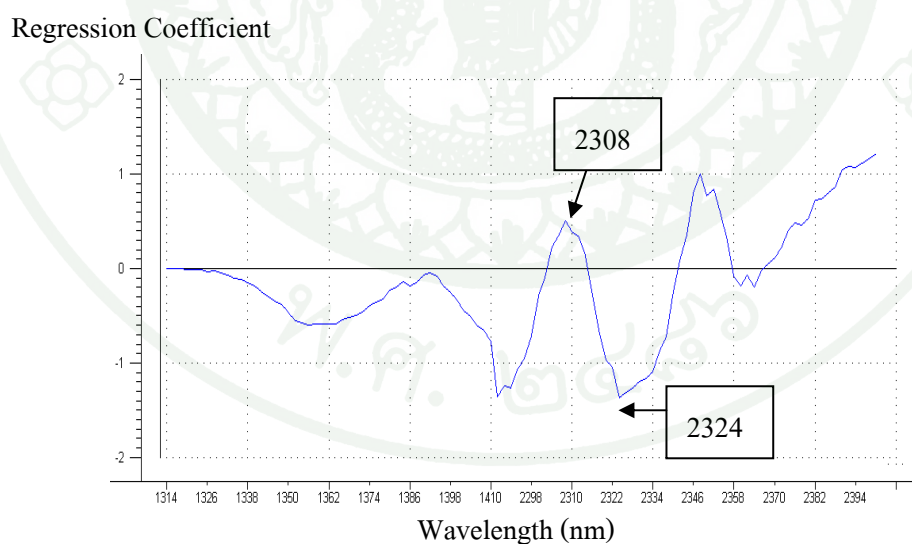
ภาพที่ 55 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าวอเตอร์ แอคทิวิตีจากสเปกตรัม ที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative)



ภาพที่ 56 ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าวอเตอร์ แอคทิวิตี ในช่วงความยาวคลื่น 1150-1188, 1220-1236, 1310-1410, 2040-2106, 2270-2400 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 ตัวอย่าง ของสมการ ที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative)



ภาพที่ 57 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าวอเตอร์ แอคทिवิตีจากสเปกตรัม ที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC



ภาพที่ 58 ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าวอเตอร์ แอคทिवิตี ในช่วงความยาวคลื่น 1314-1410, 2288-2400 นาโนเมตร ของตัวอย่าง กลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 ตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC

3.2.4 การตรวจสอบความแม่นยำของสมการทำนายที่สร้างขึ้นเพื่อทำนาย ค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี้ ซึ่งสร้างขึ้นจากวิธีทางสถิติ MWPLS

ทำการตรวจสอบความแม่นยำของสมการทำนายที่สร้างขึ้นเพื่อทำนาย
ค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี้ ซึ่งสร้างขึ้นจากวิธีทางสถิติ MWPLS ด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง
จำนวน 50 ตัวอย่าง ทำการเปรียบเทียบค่าที่ได้จากการทำนายด้วยสมการที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัม
NIR (predicted value) กับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริง ดังแสดงในตารางที่ 20

ตารางที่ 20 เปรียบเทียบค่า R, ค่า SEP, ค่า RPD และค่า Bias ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนาย
ค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี้ด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS

วิธีปรับแต่งสเปกตรัม	วิธีทางสถิติ	ความยาวคลื่น (นาโนเมตร)	ขั้นตอน Validation			
			R	SEP	RPD	Bias
1. Original	MWPLS	1330 – 1420	0.88	0.06	1.83	-0.003
2. Original	MWPLS	1648 – 1688	0.74	0.08	1.38	0.020
3. Original	MWPLS	2290 – 2400	0.96	0.03	3.67	0.004
4. Original	CMWPLS	1330 – 1420, 1648 – 1688, 2290 – 2400	0.96	0.03	3.67	0.004
5. Smoothing	MWPLS	1140 – 1196	0.95	0.04	2.75	0.001
6. Smoothing	MWPLS	1380 – 1440	0.91	0.05	2.20	0.000
						8
7. Smoothing	MWPLS	2020 – 2080	0.91	0.05	2.20	0.005
8. Smoothing	MWPLS	2280 – 2400	0.96	0.03	3.67	0.004
9. Smoothing	CMWPLS	1140 – 1196, 1380 – 1440, 2020 – 2080, 2280 – 2400	0.96	0.03	3.67	0.004
10. 1 D	MWPLS	1150 – 1188	0.85	0.06	1.83	-0.004
11. 1 D	MWPLS	1220 – 1236	0.82	0.06	1.83	0.003

ตารางที่ 20 (ต่อ)

วิธีปรับแต่งสเปกตรัม	วิธีทางสถิติ	ความยาวคลื่น (นาโนเมตร)	ขั้นตอน Validation			
			R	SEP	RPD	Bias
12. 1 D	MWPLS	1310 – 1410	0.83	0.07	1.57	-0.005
13. 1 D	MWPLS	2040 – 2106	0.93	0.04	2.75	0.006
14. 1 D	MWPLS	2270 – 2400	0.96	0.03	3.67	0.004
15. 1 D	MWPLS	1150 – 1188, 1220 – 1236, 1310 – 1410, 2040 – 2106, 2270 – 2400	0.96	0.03	3.67	0.004
16. 2 D	MWPLS	1130 – 1180	0.94	0.04	2.75	0.002
17. 2 D	MWPLS	1310 – 1370	0.93	0.05	2.20	-0.010
18. 2 D	MWPLS	1380 – 1430	0.93	0.05	2.20	0.002
19. 2 D	MWPLS	2038 – 2108	0.94	0.04	2.74	0.005
20. 2 D	MWPLS	1130 – 1180, 1310 – 1370, 1380 – 1430, 2038 – 2108	0.97	0.02	5.50	0.004
21. MSC	MWPLS	1314 – 1410	0.94	0.04	2.74	0.005
22. MSC	MWPS	2288 – 2400	0.94	0.04	2.74	0.020
23. MSC	MWPLS	1314 – 1410, 2288 – 2400	0.95	0.03	3.67	0.002

หมายเหตุ R หมายถึง ค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (Coefficient of correlation)

SEC หมายถึง ค่าความคลาดเคลื่อนของสมการที่ใช้ในการทำนายค่าแอมพลิจูด แอคทีวิตี
ด้วยตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ (Calibration)

1 D หมายถึง วิธี First derivative

2 D หมายถึง วิธี Second derivative

จากการเปรียบเทียบข้อมูลของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าแอดอร์ แอคทิวิตี้ทั้ง 23 สมการ ในตารางที่ 20 พบว่า สมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS ที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี Second derivative (2 D) ที่ความยาวคลื่นในช่วง 1130-1180, 1310-1370, 1380-1430 และ 2038-2108 นาโนเมตร มีความเหมาะสมและมีความแม่นยำในการทำนายค่าแอดอร์ แอคทิวิตี้มากที่สุด เนื่องจากมีค่า R เท่ากับ 0.98 และมีค่าความคลาดเคลื่อนของสมการทำนายค่าปริมาณความชื้นต่ำ คือ มีค่า SEC และ SEP เท่ากับ 0.03 และ 0.02 ทั้งนี้ อาจเนื่องมาจากเมื่อนำข้อมูลสเปกตรัมเริ่มต้นไปปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ก่อนนำไปใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าแอดอร์ แอคทิวิตี้ จะสามารถช่วยแก้ปัญหาการซ้อนทับกันของจุดยอดได้ กล่าวคือ สามารถช่วยลดความคลาดเคลื่อนของการซ้อนทับกันของจุดยอดดังกล่าวได้ ซึ่ง Osborne *et al.* (1993) กล่าวว่าวิธีการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีนี้เป็นการกำจัดพีคที่ซ้อนทับกัน และลดผลกระทบจากการเลื่อนของเส้นฐาน (Baseline) ที่เกิดจากการกระเจิงแสง ทำให้ได้สเปกตรัมที่มีฐานแคบและเห็นจุดยอดแยกออกจากกันอย่างชัดเจน แต่จุดยอดของสเปกตรัมเริ่มต้นจะเปลี่ยนเป็นจุดยอดที่อยู่ตรงข้ามและตรงกับจุดยอดเริ่มต้น อนุพันธ์ (2552) อธิบายว่าวิธี Second derivative ใช้ได้ผลดีกับตัวอย่างที่มีขนาดอนุภาคต่างๆ ผสมกันอยู่ ซึ่งสอดคล้องกับตัวอย่างที่ใช้ในการวิจัยครั้งนี้เนื่องจากจะมีการนำตัวอย่างขนมขบเคี้ยวไปป่นการทำการวิเคราะห์และช่วงความยาวคลื่นที่นำไปสร้างสมการแล้วให้สมการทำนายค่าแอดอร์ แอคทิวิตี้ที่มีความแม่นยำมากที่สุด คือ ช่วง 1130-1180, 1310-1370, 1380-1430 และ 2038-2108 นาโนเมตร ซึ่งจะพบว่าในช่วงดังกล่าวมีข้อมูลครอบคลุมที่เกี่ยวข้องกับค่าแอดอร์ แอคทิวิตี้ Murray and Osborne *et al.* (1993); Perez-Vich *et al.* (1998) รายงานว่าความยาวคลื่นที่ตำแหน่ง 1400 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับการสั่นแบบโอเวอร์โทนลำดับที่หนึ่งของพันธะ O-H และที่ความยาวคลื่น 1930 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับพันธะ O-H ซึ่งมีความเกี่ยวข้องกับโมเลกุลของน้ำ

ตารางที่ 21 เปรียบเทียบค่า R, SEC, R, SEP, RPD, Bias ของสมการทำนายค่าแอดอร์ แอคทิวิตี้ที่ดีที่สุดที่สร้างขึ้นด้วยวิธี PLS และ MWPLS

วิธีทางสถิติ	วิธีปรับแต่ง สเปกตรัม	ขั้นตอน Calibration		ขั้นตอน Validation			
		R	SEC	R	SEP	RPD	Bias
PLS	2 D	0.97	0.03	0.96	0.03	3.67	0.003
MWPLS	2 D	0.98	0.03	0.97	0.02	5.50	0.004

จากการเปรียบเทียบค่า R, SEC, R, SEP, RPD, Bias ของสมการทำนายค่าวอเตอร์ แอคทिवิตี้ ที่ดีที่สุดที่สร้างขึ้นด้วยวิธีทางสถิติ PLS และ MWPLS ในตารางที่ 21 จะพบว่า สมการที่สร้างขึ้น เพื่อทำนายค่าวอเตอร์ แอคทिवิตี้ ด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS สามารถทำนายค่าวอเตอร์ แอคทिवิตี้ ได้อย่างแม่นยำกว่าวิธี PLS เนื่องจากให้ค่า R เท่ากับ 0.98 และให้ค่า SEC และ SEP เท่ากับร้อยละ 0.03 และ 0.02 ตามลำดับ ส่วนวิธี PLS ให้ค่า R เท่ากับ 0.97 และให้ค่า SEC และ SEP เท่ากับร้อยละ 0.03 ดังนั้น สมการทำนายค่าวอเตอร์ แอคทिवิตี้ ที่สร้างขึ้นจากวิธี MWPLS จึงมีประสิทธิภาพในการทำนายค่าได้แม่นยำกว่าสมการทำนายค่าวอเตอร์ แอคทिवิตี้ ที่สร้างขึ้นจากวิธี PLS และเมื่อพิจารณาจากค่า R ของสมการทำนายค่าวอเตอร์ แอคทिवิตี้ ที่สร้างขึ้นสามารถแสดงถึงประสิทธิภาพของการนำสมการดังกล่าวไปใช้ได้โดยสามารถนำไปใช้ในการทำนายเพื่อการประกันคุณภาพ (Quality assurance) (William, 2001)

การสร้างสมการทำนายที่เหมาะสมในการทำนายปริมาณไขมัน

การวัดค่าปัจจัยคุณภาพในเรื่องปริมาณไขมัน

จากตัวอย่างที่ผ่านการเตรียมตัวอย่างในข้อ 3.1 และนำมาวัดค่าคาร์บอกิลีนแสงด้วยเครื่อง NIR ในข้อ 3.2 ก่อนที่จะนำไปวัดค่าปริมาณไขมันในข้อ 3.3 แล้วนำไปสร้างสมการทำนายค่าปริมาณไขมัน โดยจากตัวอย่างขนมขบเคี้ยวทั้ง 150 หน่วยตัวอย่าง นำมาแบ่งแบบสุ่มออกเป็น 2 กลุ่ม ได้แก่ ตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการทำนาย (Calibration set) จำนวน 100 หน่วยตัวอย่าง และตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้องของสมการทำนาย (Validation set) จำนวน 50 หน่วยตัวอย่าง เพื่อใช้ในการตรวจสอบความแม่นยำของสมการที่สร้างขึ้น โดยได้ผลดังแสดงในตารางที่ 22

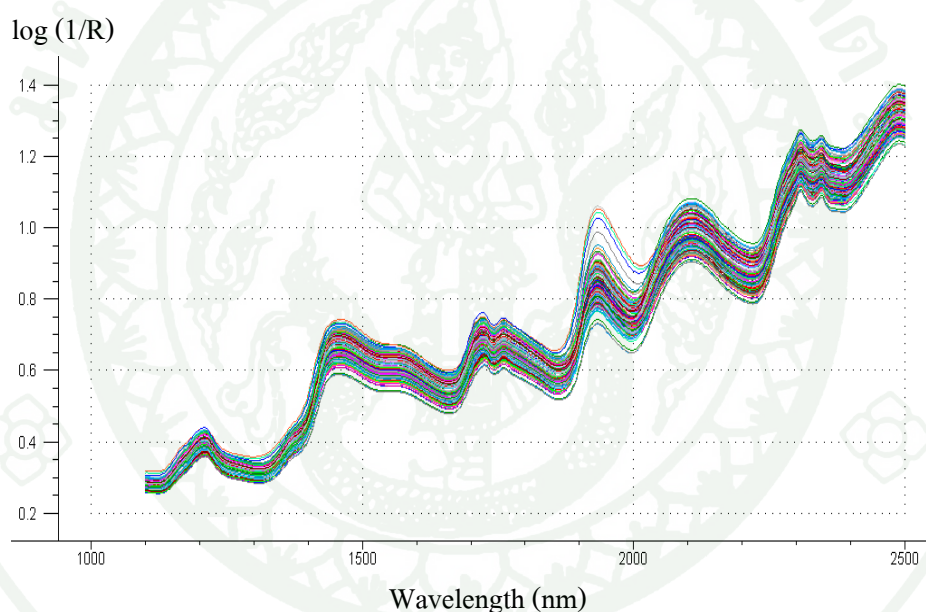
ตารางที่ 22 ข้อมูลค่าสูงสุด ค่าต่ำสุด ค่าเฉลี่ย และค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานในเรื่องปริมาณไขมันของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว

ชุดข้อมูล	จำนวน (ตัวอย่าง)	ค่าสูงสุด (%)	ค่าต่ำสุด (%)	ค่าเฉลี่ย	ค่าเบี่ยงเบน มาตรฐาน
Calibration	100	30.65	17.12	23.43	3.81
Validation	50	30.54	17.27	23.43	3.49

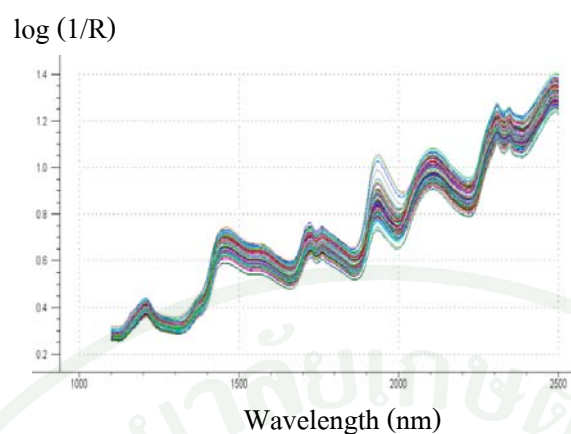
จากตารางที่ 22 พบว่า ตัวอย่างในกลุ่มสร้างสมการ (Calibration) มีค่าปริมาณไขมันอยู่ในช่วง 17.12-30.65 % ซึ่งครอบคลุมค่าในตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation) ทั้งนี้เพื่อให้ข้อมูลของกลุ่มตัวอย่างทั้งสองกลุ่มมีการกระจายค่าคุณภาพทางเคมีไปในลักษณะเดียวกัน

ผลการศึกษาการใช้เทคนิค NIR ในการวัดค่าปริมาณไขมันของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว

ลักษณะสเปกตรัมและค่าการดูดกลืนแสงที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านขั้นตอนการเตรียมตัวอย่างในข้อ 5.1 ดังแสดงในภาพที่ 56

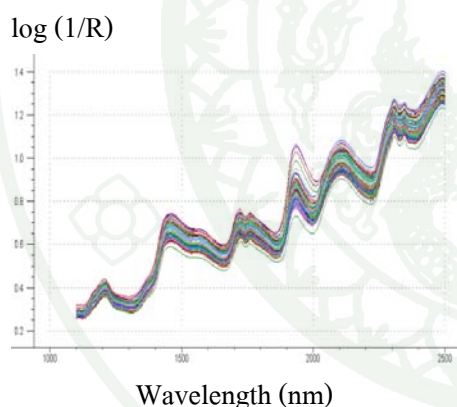


ภาพที่ 59 สเปกตรัมของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมในข้อ 5.1 จำนวน 150 หน่วย
ตัวอย่างด้วยเครื่อง Near Infrared Spectroscopy

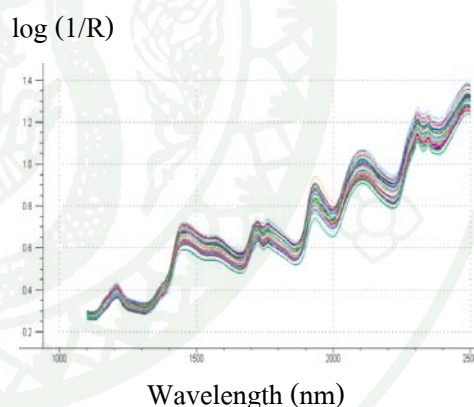


A) สเปกตรัมเริ่มต้น (Original Spectrum)

ภาพที่ 60 ลักษณะสเปกตรัมที่ยังไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมตัวอย่างในข้อ 5.1 ซึ่งได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร

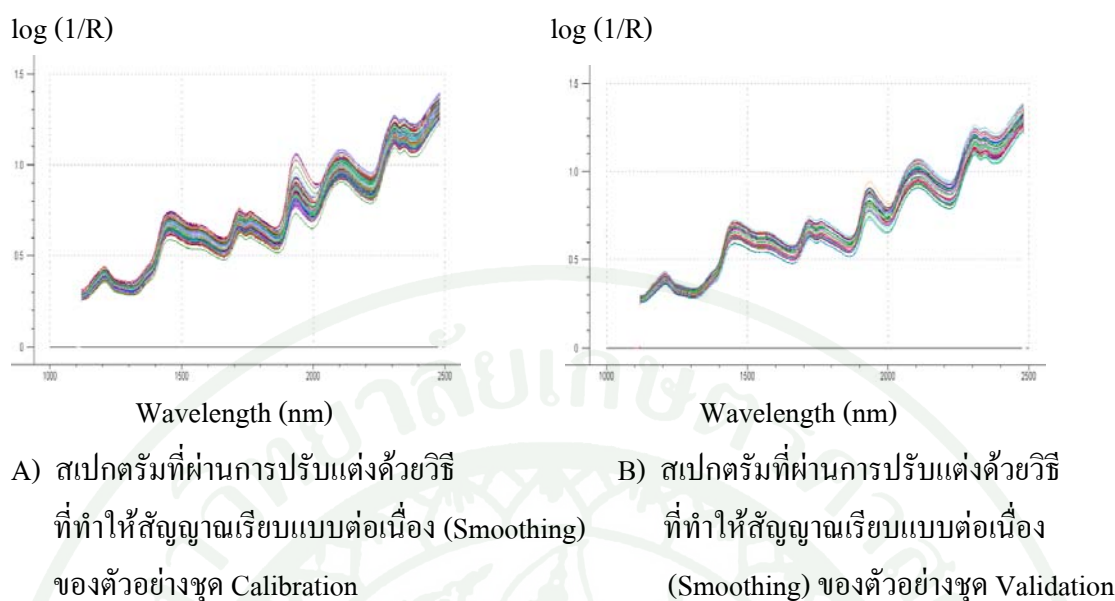


A) สเปกตรัมเริ่มต้น (Original Spectrum) ของตัวอย่าง Calibration

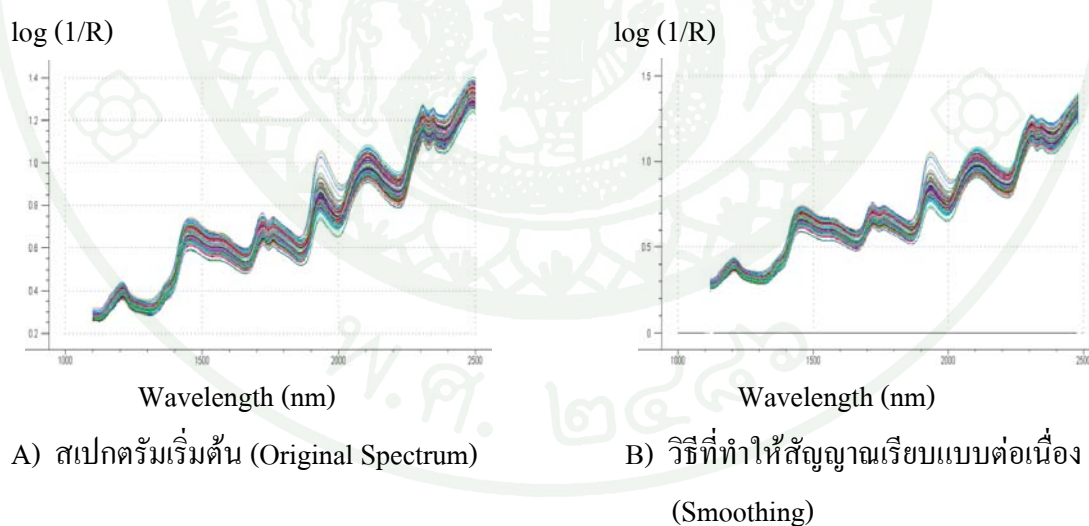


B) สเปกตรัมเริ่มต้น (Original Spectrum) ของตัวอย่างชุด Validation

ภาพที่ 61 ลักษณะสเปกตรัมที่ยังไม่ผ่านการปรับแต่งสำหรับตัวอย่างชุด Calibration และ Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมในข้อ 5.1



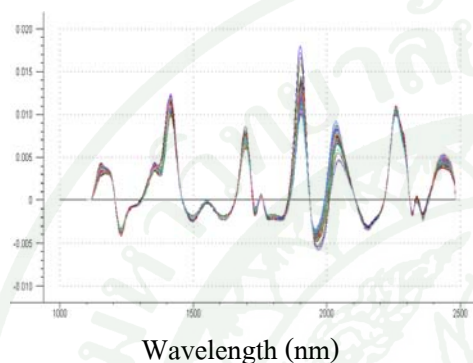
ภาพที่ 62 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างชุด Calibration และตัวอย่างชุด Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมในข้อ 5.1



ภาพที่ 63 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่งของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมในข้อ 5.1

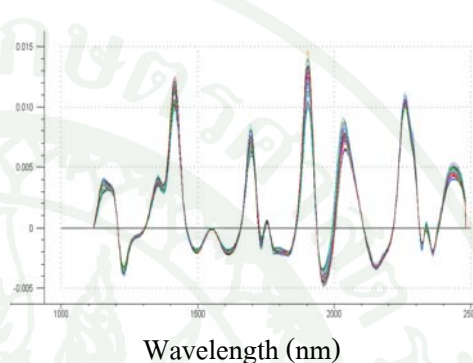
จากภาพที่ 63 เป็นการเปรียบเทียบค่าสเปกตรัมเริ่มต้นกับสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) จะเห็นได้ว่าสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) จะยังคงรักษารูปร่างของยอดแหลมในสเปกตรัมให้มีขนาดเท่ากับสเปกตรัมเริ่มต้น ไม่ว่ายอดแหลมจะมีฐานกว้างหรือแคบก็ตาม

dlog (1/R)



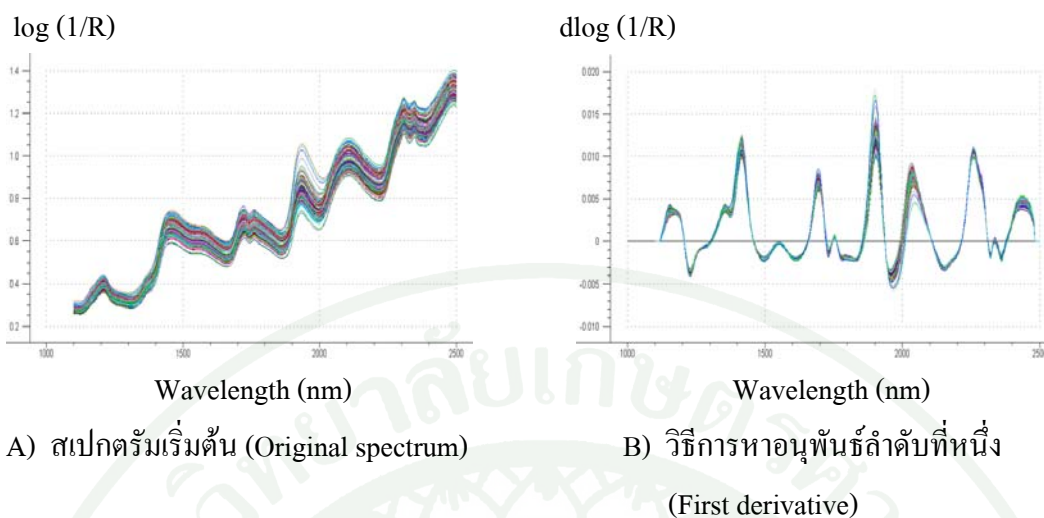
A) สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First Derivative) ของตัวอย่างกลุ่ม Calibration

dlog (1/R)



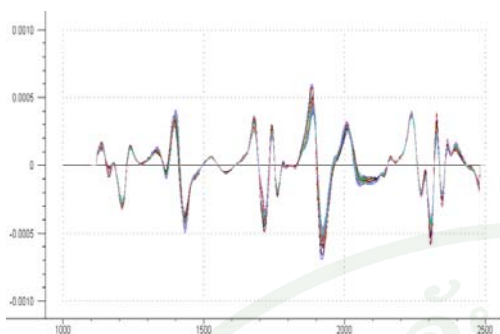
B) สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) ของตัวอย่างกลุ่ม Validation

ภาพที่ 64 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) ของตัวอย่างชุด Calibration และชุด Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมในข้อ 5.1



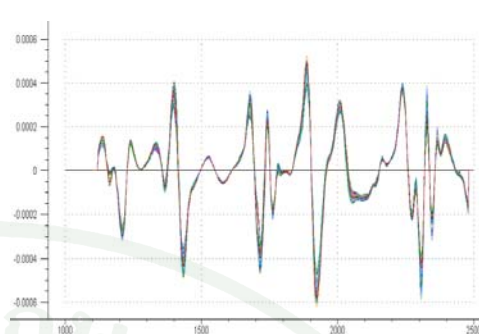
ภาพที่ 65 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี 1 D ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการเตรียมในข้อ 5.1 ที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง

จากภาพที่ 65 เป็นการเปรียบเทียบสเปกตรัมเริ่มต้นกับสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) จะแยกจุดยอดที่เหลื่อมซ้อนกันในสเปกตรัมออกจากกัน โดยวิธีนี้จะเป็นการนำค่า $\log(1/R)$ ที่ความยาวคลื่นที่ใกล้เคียงกัน 2 ค่ามาลบกันและจะให้ความหมายเป็นค่าความชันของสเปกตรัมที่แต่ละความยาวคลื่น ซึ่งทำให้แปลความหมายยากแต่วิธีการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีนี้จะใช้ได้ผลกับตัวอย่างที่มีเนื้อสม่ำเสมอและมีการกระจายตัวของอนุภาคอย่างสม่ำเสมอทั่วถึง

$d^2(\log 1/R)$ 

Wavelength (nm)

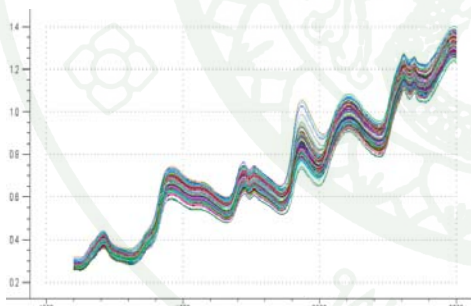
A) สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second Derivative) ของตัวอย่างกลุ่ม Calibration

 $d^2(\log 1/R)$ 

Wavelength (nm)

B) สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) ของตัวอย่างกลุ่ม Validation

ภาพที่ 66 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) ของตัวอย่างชุด Calibration และตัวอย่างชุด Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมในข้อ 5.2

 $\log(1/R)$ 

Wavelength (nm)

A) สเปกตรัมเริ่มต้น (original spectrum)

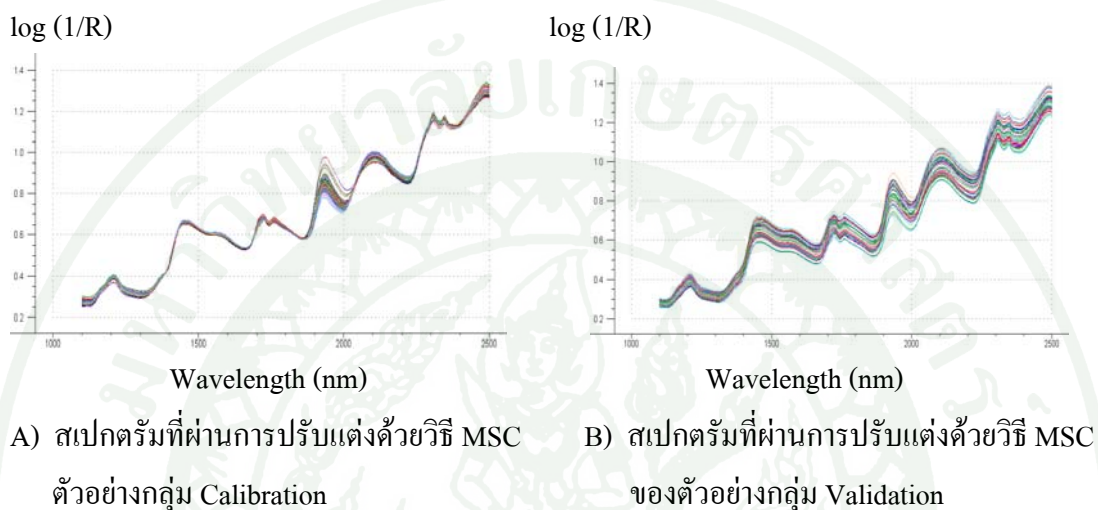
 $d^2(\log 1/R)$ 

Wavelength (nm)

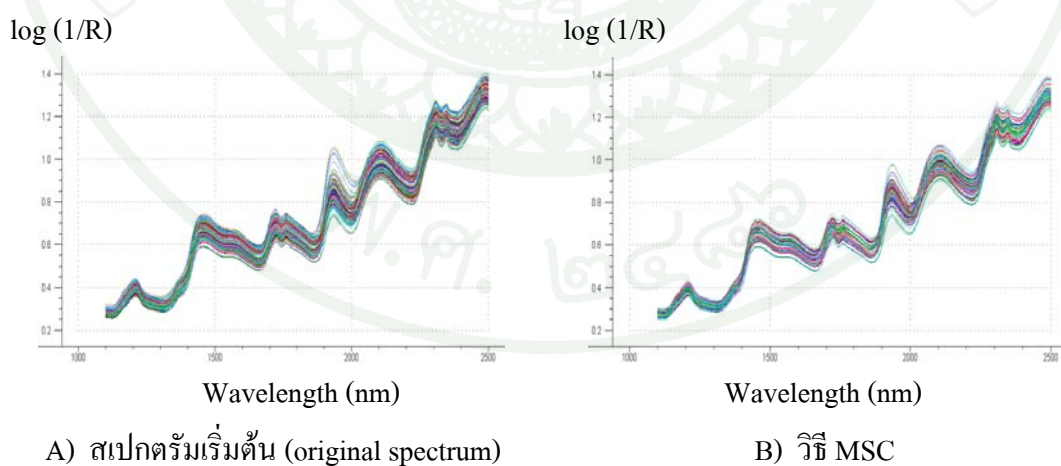
B) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative)

ภาพที่ 67 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมในข้อ 5.2 ที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง

จากภาพที่ 67 เป็นการเปรียบเทียบสเปกตรัมเริ่มต้นกับสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) จะแยกจุดยอดที่เหลื่อมซ้อนกันในสเปกตรัมออกจากกัน โดยวิธีนี้จะทำให้จุดยอดของสเปกตรัมดั้งเดิมแต่จะเป็นจุดยอดกลับหัว ซึ่งวิธีนี้จะใช้ได้ผลดีกับตัวอย่างที่มีขนาดอนุภาคต่างๆ ผสมกัน



ภาพที่ 68 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC ของตัวอย่างชุด Calibration และ Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการเตรียมในข้อ 5.2



ภาพที่ 69 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมตัวอย่างในข้อ 5.2 ซึ่งได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง

จากภาพที่ 69 เป็นการเปรียบเทียบสเปกตรัมเริ่มต้นกับสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC จะพบว่าสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC จะมีรูปร่างไม่แตกต่างจากสเปกตรัมเริ่มต้นมากนัก โดยวิธีการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีนี้จะช่วยลดผลที่เกิดจากการกระเจิงแสง (Scattered light) ต่อ NIR สเปกตรัมที่ได้จากการวัดแบบ Diffuse reflectance และแบบ transmission

การสร้างสมการทำนายที่เหมาะสมในการทำนายค่าปริมาณไขมัน

ข้อมูลค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวของกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 หน่วย ตัวอย่าง ที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ทำการบันทึกค่าในช่วงละ 2 นาโนเมตร จะได้ข้อมูลค่าการดูดกลืนแสง จำนวน 701 ค่า กำหนดให้เป็นตัวแปรอิสระ ตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 ตัวอย่าง ที่ผ่านการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR นำไปวิเคราะห์คุณภาพทางเคมีในเรื่องปริมาณไขมัน ข้อมูลค่าจริงที่ได้จากการวิเคราะห์ทางเคมีกำหนดให้เป็นตัวแปรตาม นำข้อมูลตัวแปรอิสระและตัวแปรตามมาหาความสัมพันธ์ด้วยวิธีทางสถิติเพื่อสร้างสมการที่ใช้ในการทำนายปริมาณไขมัน วิธีทางสถิติที่นำมาใช้สร้างสมการทำนายปริมาณไขมัน ได้แก่ 1) วิธี Partial Least Squares (PLS) Regression 2) วิธี Moving Window Partial Least Squares Regression (MWPLS) ทำการเปรียบเทียบสมการที่สร้างขึ้นจากทั้ง 2 วิธี เพื่อใช้ทำนายค่าปริมาณไขมัน โดยพิจารณาจากค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (R) และค่าความคลาดเคลื่อนของสมการในการทำนายค่าปริมาณไขมัน (Standard Error of Calibration: SEC) โดยมีรายละเอียดดังนี้

1. การสร้างสมการทำนายค่าปริมาณไขมันด้วยวิธีทางสถิติ Partial Least Squares (PLS) Regression

จากข้อมูลค่าการดูดกลืนแสงที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ที่ความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร บันทึกค่าการดูดกลืนแสงช่วงละ 2 นาโนเมตร จะได้ข้อมูลจากการวัดค่าจำนวน 701 ค่า เมื่อนำข้อมูลตัวแปรอิสระมาหาความสัมพันธ์กับค่าปริมาณไขมันด้วยการจัดกลุ่มตัวแปรเดิม เป็นตัวแปรใหม่หรือแฟกเตอร์ด้วยวิธี PLS

ก่อนทำการจัดกลุ่มตัวแปรใหม่ที่ได้จากข้อมูลค่าการดูดกลืนแสงที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR จะนำข้อมูลที่นำมาทำการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการต่างๆ ได้แก่ 1) วิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) 2) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative)

3) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second Derivative) 4) วิธี Multiplicative scatter correction (MSC) เพื่อลดความคลาดเคลื่อนเนื่องจากปัจจัยต่างๆ

เมื่อพิจารณาสมการทำนายที่สร้างขึ้นจากช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ดังแสดงในตารางที่ 23 พบว่าสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง และสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) และวิธี Multiplicative scatter correction (MSC) มีความเหมาะสมสำหรับทำนายค่าปริมาณไขมัน เนื่องจากสมการทั้งหมดให้ค่า R สูงกว่า 0.9 และให้ค่า SEC ต่ำ อีกทั้งยังมีจำนวนแฟกเตอร์ที่เหมาะสม แต่ทั้งนี้พบว่าสมการที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) น่าจะมีความเหมาะสมที่สุด เนื่องจากมีการจัดกลุ่มตัวแปรใหม่ได้ 8 แฟกเตอร์ และให้ค่า R เท่ากับ 0.97 และค่า SEC เท่ากับ 0.30 เมื่อทำการพิจารณาค่าสัมประสิทธิ์การถดถอย (Regression coefficient) ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ดังแสดงในภาพที่ 67 พบว่าที่ตำแหน่งความยาวคลื่น 1322, 1360 และ 1912 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับปริมาณไขมันมาก ซึ่งสอดคล้องกับงานวิจัยของ Cecilia and Luis (2009) ที่ทำการตรวจสอบคุณภาพผลิตภัณฑ์มันฝรั่งทอดในเรื่องปริมาณไขมันโดยใช้เทคนิค NIR

เมื่อทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง พบว่าสมการที่เหมาะสมดังกล่าวให้ค่า SEP และ Bias เท่ากับร้อยละ 0.40, 0.04 ตามลำดับ ดังแสดงในตารางที่ 24 และภาพที่ 75

ตารางที่ 23 ค่า R, ค่า SEC ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณไขมันของตัวอย่าง
ขนมขบเคี้ยวด้วยวิธีทางสถิติ PLS

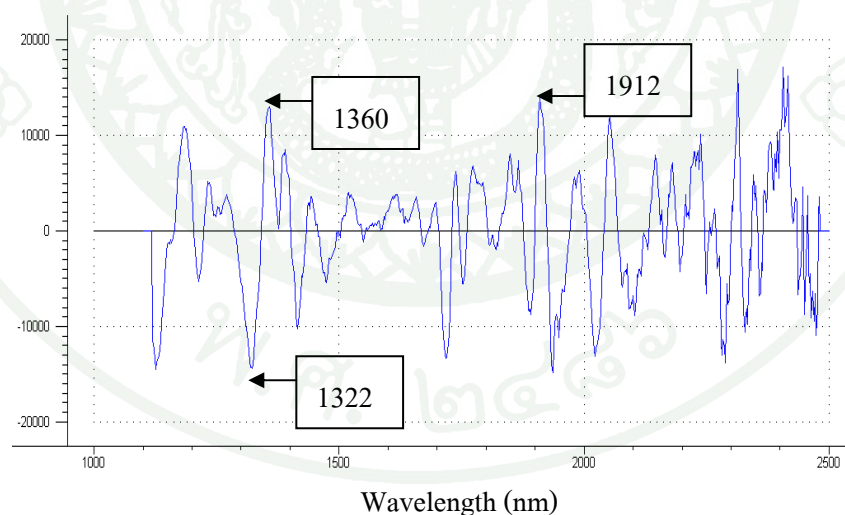
วิธีปรับแต่ง สเปกตรัม	วิธีการ ทางสถิติ	ช่วงความยาวคลื่นที่ใช้ ในการสร้างสมการ (nm)	F	กลุ่มสร้างสมการ	
				R	SEC (%)
1. Original	PLS	1100 - 2500	7	0.95	0.35
2. Smoothing	PLS	1100 - 2500	7	0.95	0.34
3. First derivative	PLS	1100 - 2500	7	0.95	0.34
4. Second derivative	PLS	1100 - 2500	8	0.97	0.30
5. MSC	PLS	1100 - 2500	5	0.96	0.32

หมายเหตุ F หมายถึง จำนวนกลุ่มตัวแปรใหม่ที่ใช้ในการสร้างสมการ

R หมายถึง ค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (Coefficient of correlation)

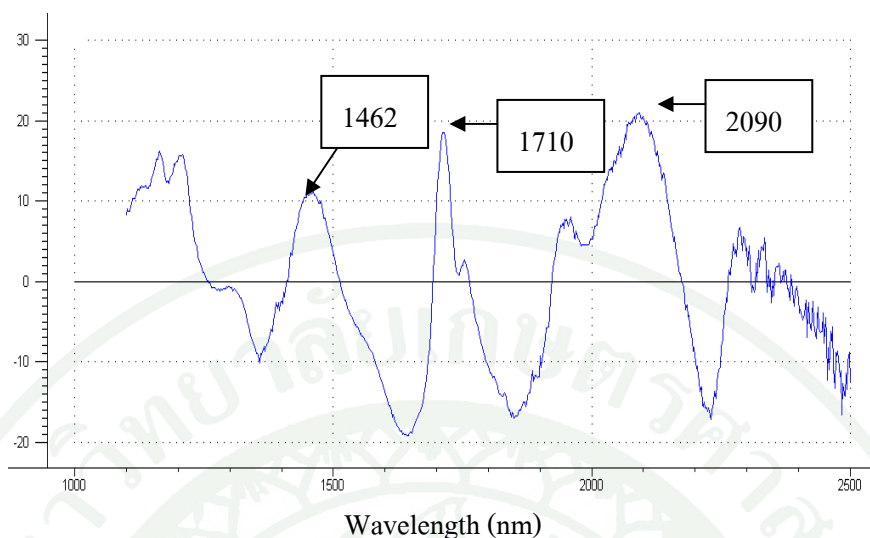
SEC หมายถึง ค่าความคลาดเคลื่อนของสมการที่ใช้ในการทำนายค่าไขมัน
ด้วยตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ

Regression Coefficient



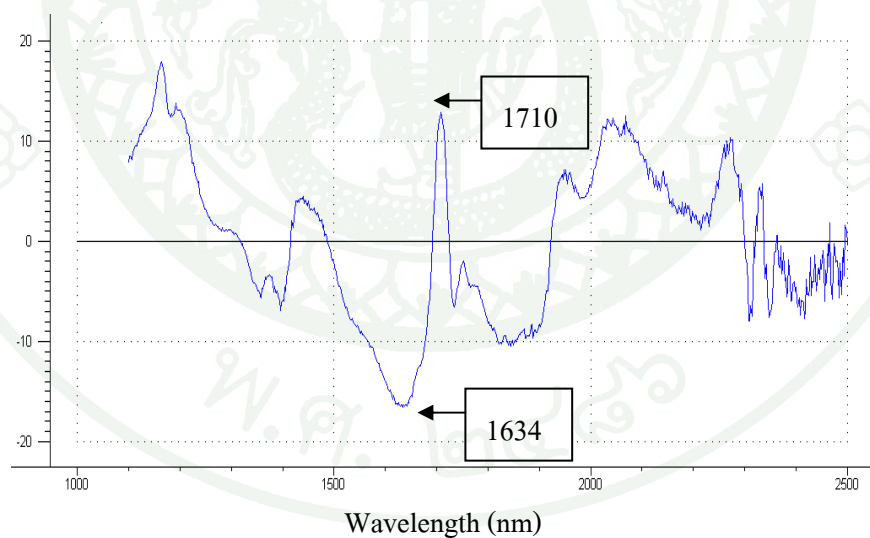
ภาพที่ 70 ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าปริมาณไขมัน
ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการจำนวน
100 ตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง
(Second derivative)

Regression Coefficient



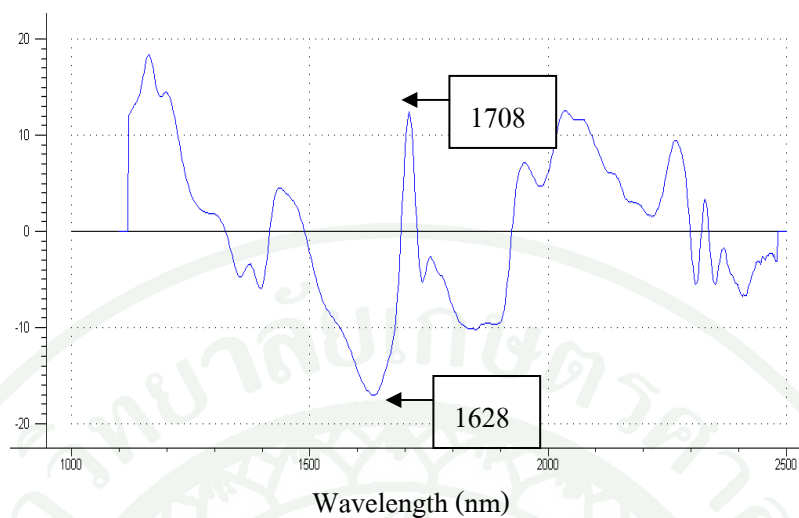
ภาพที่ 71 ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าปริมาณไขมันในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการจำนวน 100 ตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี MSC

Regression Coefficient



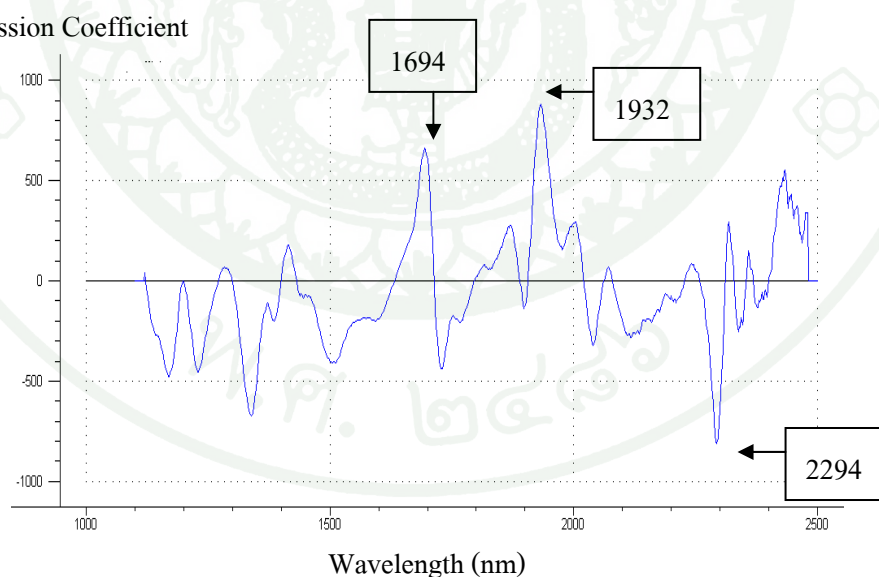
ภาพที่ 72 ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าปริมาณไขมันในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการจำนวน 100 ตัวอย่าง ของสมการที่ไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม

Regression Coefficient



ภาพที่ 73 ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าปริมาณไขมันในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการจำนวน 100 หน่วยตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing)

Regression Coefficient



ภาพที่ 74 ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าปริมาณไขมันในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการจำนวน 100 ตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative)

3.2 การตรวจสอบความแม่นยำของสมการทำนายที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณไขมันซึ่งสร้างขึ้นจากวิธีทางสถิติ PLS

การตรวจสอบความแม่นยำของสมการทำนายที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณไขมัน จะใช้ค่าทางเคมีของกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation) จำนวน 50 ตัวอย่าง ทำการเปรียบเทียบค่าที่ได้จากการทำนายด้วยสมการที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัม NIR (Predicted value) กับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริง (Actual value) การตรวจสอบความแม่นยำของสมการจะพิจารณาจากค่าความคลาดเคลื่อนจากการทำนายด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Standard Error of Prediction; SEP) และค่าความแตกต่าง (Bias) ระหว่างค่าที่ทำนายได้จากสมการกับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริงของแต่ละสมการ

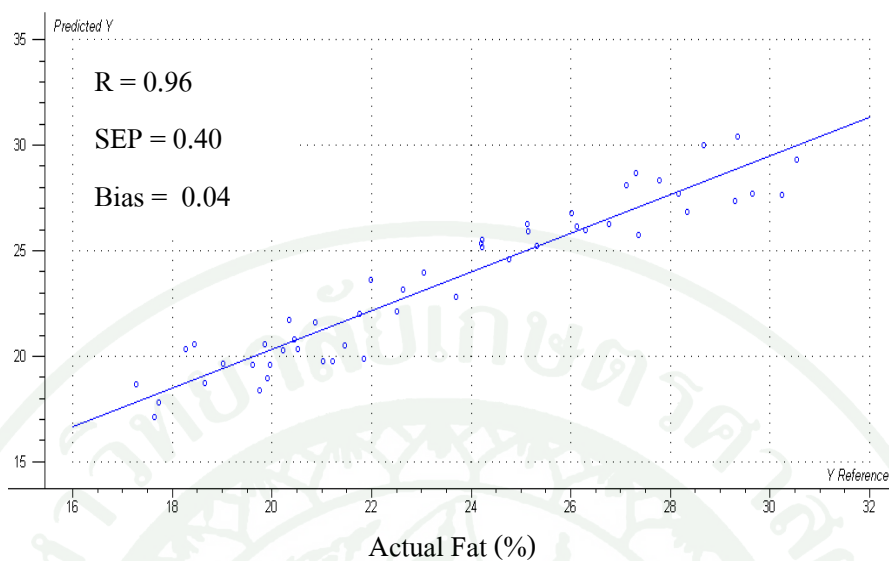
ทำการตรวจสอบความแม่นยำของสมการทำนายที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณไขมัน ด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง จำนวน 50 หน่วยตัวอย่าง ทำการเปรียบเทียบค่าที่ได้จากการทำนายด้วยสมการที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัม NIR (Predicted value) กับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริง ดังแสดงในตารางที่ 24 และภาพที่ 75

ตารางที่ 24 เปรียบเทียบค่า R, ค่า SEP, ค่า RPD และ Bias ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนาย
ค่าปริมาณไขมันด้วยวิธีทางสถิติ PLS

วิธีปรับแต่งสเปกตรัม	วิธีทางสถิติ	ความยาวคลื่น (นาโนเมตร)	ขั้นตอน Validation			
			R	SEP (%)	RPD	Bias
1. Original	PLS	1100 - 2500	0.93	0.42	8.31	-0.17
2. Smoothing	PLS	1100 - 2500	0.94	0.41	8.51	-0.19
3. 1 D	PLS	1100 - 2500	0.95	0.41	8.51	-0.04
4. 2 D	PLS	1100 - 2500	0.96	0.40	8.73	0.04
5. MSC	PLS	1100 - 2500	0.94	0.41	8.51	0.04

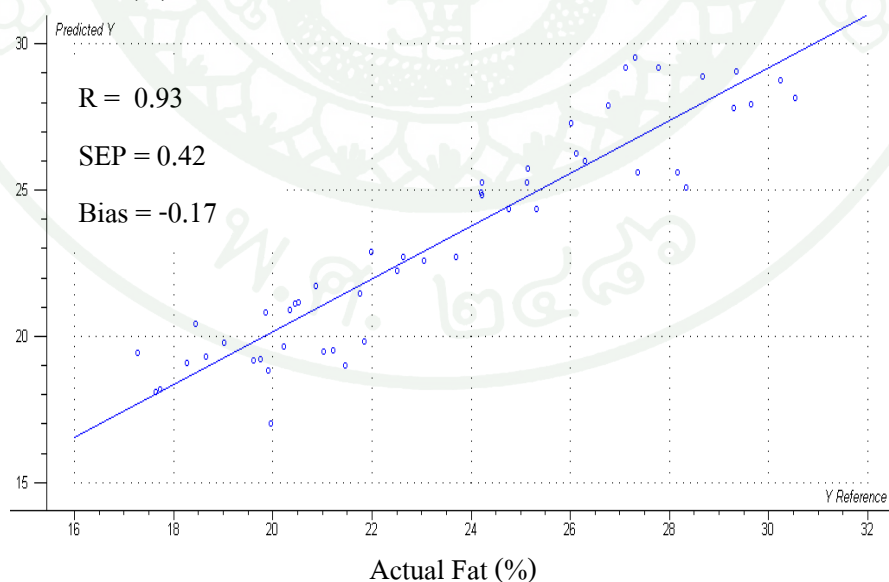
หมายเหตุ	SEP	หมายถึง	ค่าความคลาดเคลื่อนของสมการที่ใช้ทำนายค่าปริมาณไขมัน ด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)
	Bias	หมายถึง	ค่าความแตกต่างระหว่างค่าที่ทำนายได้จากสมการที่สร้างขึ้นกับ ค่าที่วิเคราะห์ได้ทางเคมี
	PLS	หมายถึง	วิธีทางสถิติ Partial Least Squares Regression
	RPD	หมายถึง	อัตราส่วนของ SEP ต่อ SD
	1 D	หมายถึง	วิธี First derivative
	2 D	หมายถึง	วิธี Second derivative

Prediction Fat (%)



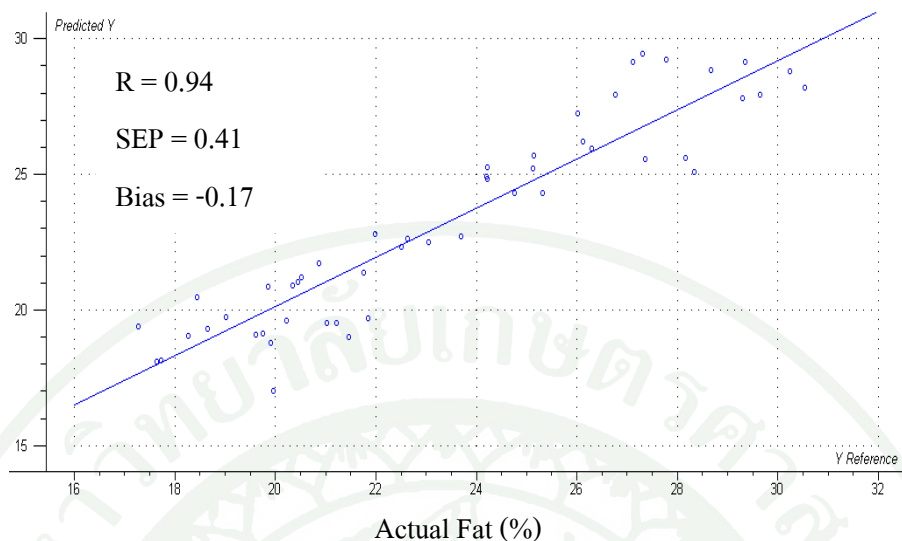
ภาพที่ 75 ค่าปริมาณไขมันของตัวอย่างนมขบเกลี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)

Prediction Fat (%)



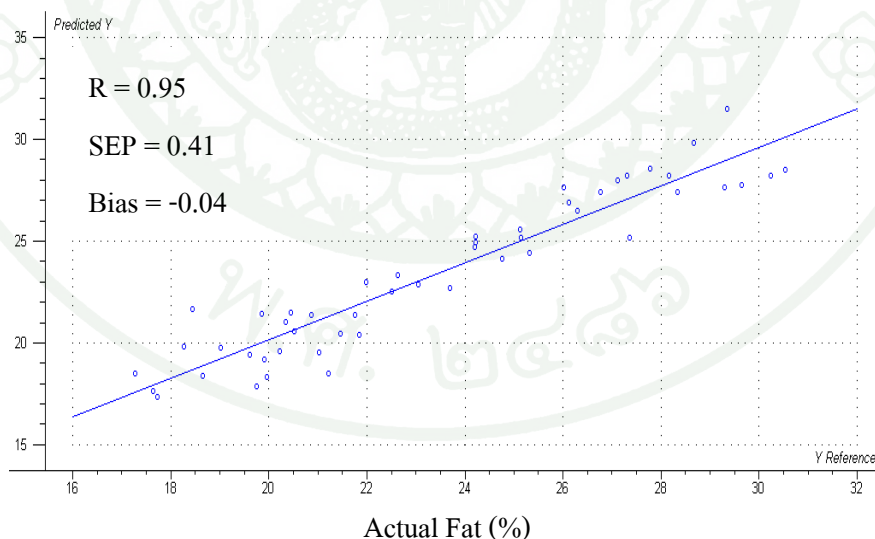
ภาพที่ 76 ค่าปริมาณไขมันของตัวอย่างนมขบเกลี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม

Prediction Fat (%)



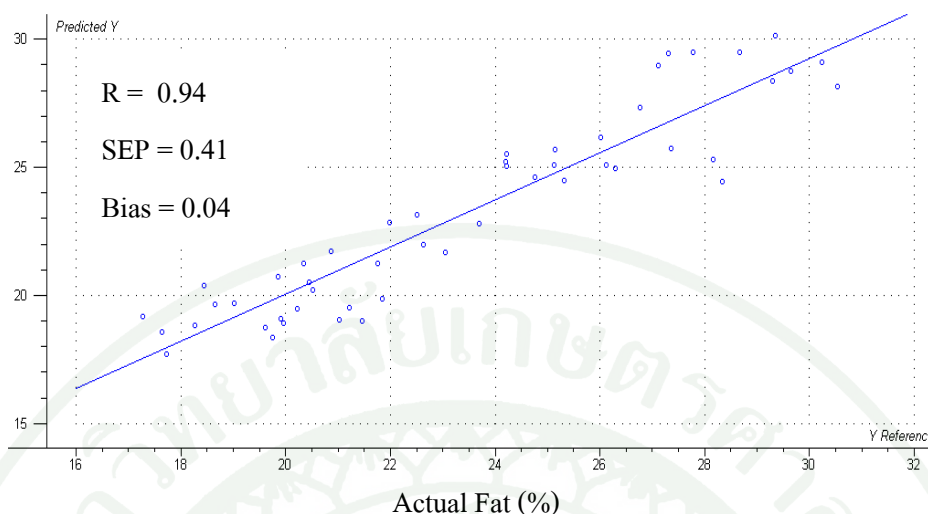
ภาพที่ 77 ค่าปริมาณไขมันของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)

Prediction Fat (%)



ภาพที่ 78 ค่าปริมาณไขมันของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative) ของตัวอย่างตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)

Prediction Fat (%)



ภาพที่ 79 ค่าปริมาณไขมันของตัวอย่างนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี MSC ของตัวอย่างตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)

จากผลการสร้างสมการทำนายปริมาณไขมันด้วยวิธีทางสถิติ PLS พบว่า สมการทำนายที่ดีที่สุด สร้างขึ้นจากวิธีสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ทั้งนี้ อาจเนื่องมาจากสเปกตรัมเริ่มต้นมีการซ้อนทับกัน มีลักษณะฐานกว้าง เนื่องจากการซ้อนทับกันของจุดยอด ไม่ได้มีจุดยอดแหลมแยกออกจากกันอย่างชัดเจน ทั้งนี้ Osborne *et al.* (1993) ได้อธิบายว่าเกิดขึ้นเนื่องมาจากการสั่นแบบโอเวอร์โทนและแบบคอมบินั่นของการสั่นแบบพื้นฐาน ซึ่งทำให้ยากต่อการเลือกความยาวคลื่นที่เหมาะสมที่มีความสัมพันธ์กับค่าที่ทำการศึกษา ดังนั้น เมื่อนำข้อมูลสเปกตรัมเริ่มต้นไปปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ก่อนนำไปใช้ในการสร้างสมการทำนายปริมาณไขมันจะสามารถช่วยแก้ปัญหาดังกล่าวได้ กล่าวคือ สามารถช่วยลดความคลาดเคลื่อนของการซ้อนทับกันของจุดยอดดังกล่าวได้ ซึ่ง Osborne *et al.* (1993) กล่าวว่าวิธีการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีนี้เป็นการกำจัดฟิสิกที่ซ้อนทับกัน และลดผลกระทบจากการเลื่อนของเส้นฐาน (Baseline) ที่เกิดจากการกระเจิงแสง ทำให้ได้สเปกตรัมที่มีฐานแคบและเห็นจุดยอดแยกออกจากกันอย่างชัดเจน แต่จุดยอดของสเปกตรัมเริ่มต้นจะเปลี่ยนเป็นจุดยอดที่อยู่ตรงข้ามและตรงกับจุดยอดเริ่มต้น อนุพันธ์ (2552) อธิบายว่าวิธี Second derivative ใช้ได้ผลดีกับตัวอย่างที่มีขนาดอนุภาคต่างๆ ผสมกันอยู่ ซึ่งสอดคล้องกับตัวอย่างที่ใช้ในการวิจัยครั้งนี้ เนื่องจากตัวอย่างนมขบเคี้ยวจะนำมาปั่นด้วยเครื่องปั่นก่อนนำมาทำการวิเคราะห์

3.3 การสร้างสมการทำนายค่าปริมาณไขมันด้วยวิธีทางสถิติ Moving Window

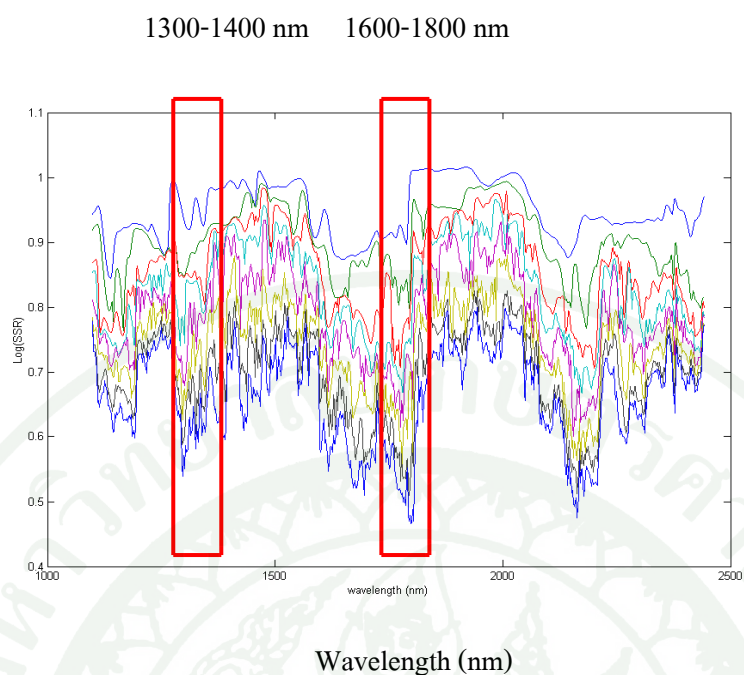
Partial Least Squares (MWPLS)

จากการนำสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการต่างๆ ได้แก่ วิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) วิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative) วิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) และวิธี Multiplicative scatter correction (MSC) รวมทั้งสมการที่ไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม มาวิเคราะห์ด้วยโปรแกรม In-house-written in MATLAB เพื่อหาช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสมในการสร้างสมการ ได้ผลดังแสดงในตารางที่ 25 เมื่อพิจารณาจากค่า $\log(SSR)$ พบว่า ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสมที่เป็น Informative region มีหลายช่วง ดังแสดงในตารางที่ 25 และเมื่อนำช่วงความยาวคลื่นดังกล่าวมาสร้างสมการทำนายได้ผลดังแสดงในตารางที่ 25 ซึ่งพบว่าสมการที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ในช่วงความยาวคลื่น 1300-1400, 1600-1800 นาโนเมตร ให้สมการที่เหมาะสมที่สุดสำหรับทำนายค่าไขมัน โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มตัวแปรเดิมเป็นตัวแปรใหม่ได้ 7 แฟกเตอร์ และให้ค่า R และ SEC เท่ากับ 0.98 และ 0.29 ตามลำดับ เมื่อพิจารณาค่าสัมประสิทธิ์การถดถอย (Regression coefficient) ของสมการที่ความยาวคลื่นในช่วง 1300-1400, 1600-1800 นาโนเมตร ดังแสดงในภาพที่ 81 พบว่า ที่ความยาวคลื่นที่ตำแหน่ง 1350, 1400, 1766 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับค่าไขมัน ซึ่งสอดคล้องกับงานวิจัยของ (Cecilia and Luis, 2009)

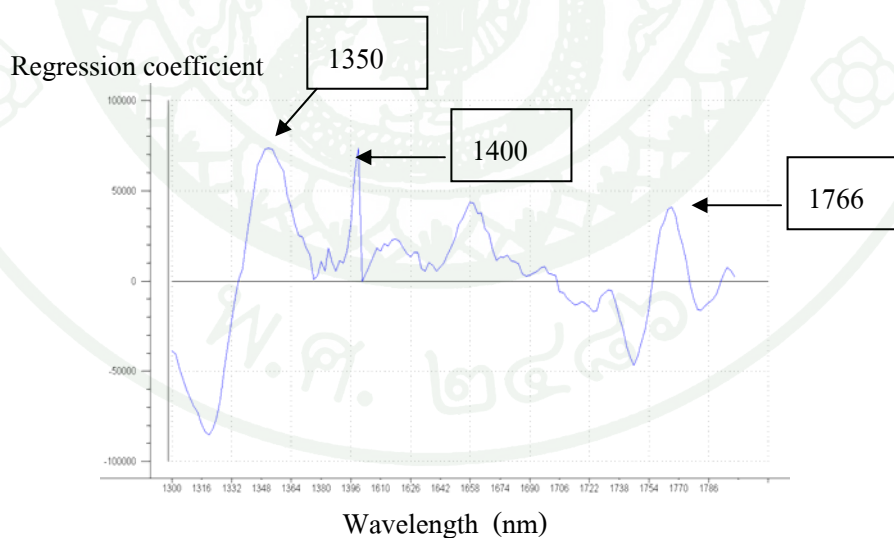
ตารางที่ 25 ค่า R และ SEC ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณไขมันของตัวอย่าง
ขนมขบเคี้ยวด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS

วิธีปรับแต่งสเปกตรัม	วิธีทางสถิติ	ความยาวคลื่น (nm)	F	ขั้นตอน Calibration	
				R	SEC (%)
1. Original	MWPLS	1650 – 1820	6	0.95	0.35
2. Smoothing	MWPLS	2040 – 2100	4	0.94	0.36
3. 1 D	MWPLS	2050 – 2100	5	0.96	0.28
4. 2 D	MWPLS	1300 – 1400	5	0.92	0.34
5. 2 D	MWPLS	1600 – 1800	9	0.95	0.30
6. 2 D	CMWPLS	1300 – 1400, 1600 – 1800	7	0.98	0.29
7. MSC	MWPLS	1450 – 1720	5	0.95	0.30
8. MSC	MWPLS	1780 – 1820	4	0.85	0.41
9. MSC	CMWPLS	1450 – 1720, 1780 – 1820	4	0.96	0.28

หมายเหตุ F หมายถึง จำนวนกลุ่มตัวแปรใหม่ที่ใช้ในการสร้างสมการ
 R หมายถึง ค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (Coefficient of correlation)
 SEP หมายถึง ค่าความคลาดเคลื่อนของสมการที่ใช้ทำนายค่าปริมาณไขมันด้วย
 ตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)
 1 D หมายถึง วิธี First Derivative
 2 D หมายถึง วิธี Second Derivative

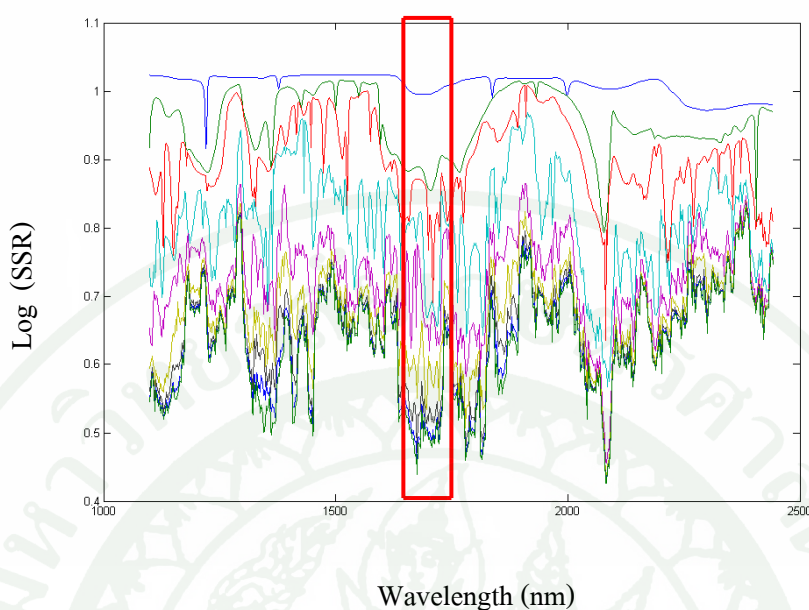


ภาพที่ 80 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าไขมันจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative)



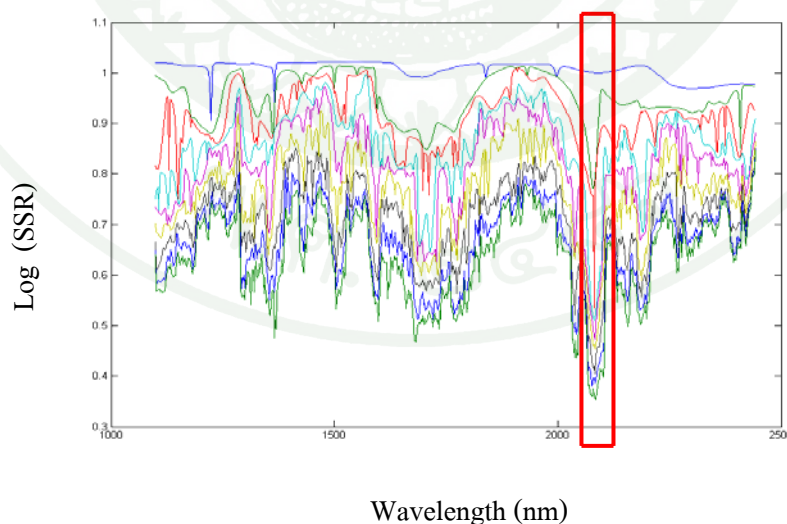
ภาพที่ 81 ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการ (Regression coefficient) ที่ใช้ในการทำนายค่าไขมันในตัวอย่างนมขบเคี้ยว ที่ช่วงความยาวคลื่น 1300-1400, 1600-1800 นาโนเมตร จากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (2 D)

1650-1820 nm

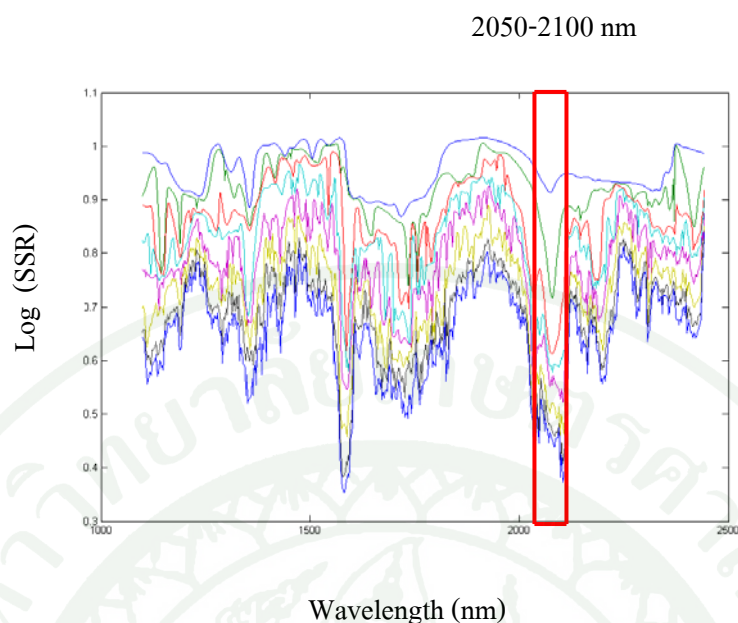


ภาพที่ 82 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าไขมันจากสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม

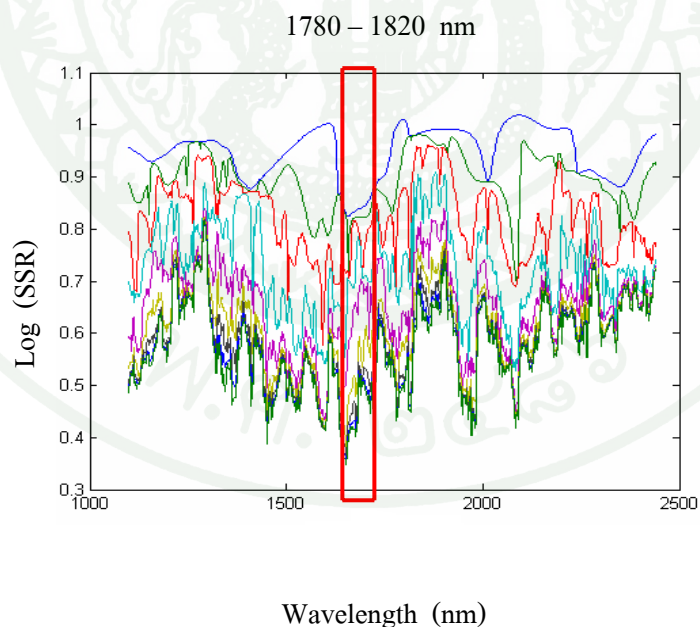
2040-2100 nm



ภาพที่ 83 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าไขมันจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing)



ภาพที่ 84 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าไขมันจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative)



ภาพที่ 85 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าไขมันจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC

3.4 การตรวจสอบความแม่นยำของสมการทำนายที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณไขมัน ซึ่งสร้างขึ้นจากวิธีทางสถิติ MWPLS

ทำการตรวจสอบความแม่นยำของสมการทำนายที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณไขมันที่สร้างขึ้นจากวิธีทางสถิติ MWPLS ด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง จำนวน 50 ตัวอย่าง ทำการเปรียบเทียบค่าที่ได้จากการทำนายด้วยสมการที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัม NIR (predicted value) กับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริง ดังแสดงในตารางที่ 26

ตารางที่ 26 เปรียบเทียบค่า R, ค่า SEP, ค่า RPD และค่า Bias ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณไขมันด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS

วิธีปรับแต่งสเปกตรัม	วิธีทางสถิติ	ความยาวคลื่น (นาโนเมตร)	ขั้นตอน Validation			
			R	SEP (%)	RPD	Bias
1. Original	MWPLS	1650 – 1820	0.94	0.39	8.95	0.04
2. Smoothing	MWPLS	2040 – 2100	0.94	0.39	8.95	0.04
3. 1 D	MWPLS	2050 – 2100	0.95	0.38	9.18	0.04
4. 2 D	MWPLS	1300 – 1400	0.90	0.42	8.31	0.04
5. 2 D	MWPLS	1600 – 1800	0.92	0.40	8.73	0.05
6. 2 D	CMWPLS	1300 – 1400, 1600 – 1800	0.97	0.35	9.97	0.02
7. MSC	MWPLS	1450 – 1720	0.94	0.39	8.95	0.04
8. MSC	MWPLS	1780 – 1820	0.85	0.41	8.51	0.05
9. MSC	CMWPLS	1450 – 1720, 1780 – 1820	0.95	0.38	9.18	0.03

หมายเหตุ SEP หมายถึง ค่าความคลาดเคลื่อนของสมการที่ใช้ทำนายค่าปริมาณไขมันด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)

Bias หมายถึง ค่าความแตกต่างระหว่างค่าที่ทำนายได้จากสมการที่สร้างขึ้นกับค่าที่วิเคราะห์ได้ทางเคมี

PLS หมายถึง วิธีทางสถิติ Partial Least Squares Regression

RPD หมายถึง อัตราส่วนของ SEP ต่อ SD

1 D หมายถึง วิธี First derivative

2 D หมายถึง วิธี Second derivative

จากการเปรียบเทียบข้อมูลของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณไขมัน ทั้ง 9 สมการ พบว่า สมการในตารางที่ 26 สมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS ที่ผ่านการปรับแต่ง สเปกตรัมด้วยวิธี Second derivative ที่ความยาวคลื่นในช่วง 1300-1400, 1600-1800 นาโนเมตร มีความเหมาะสมและมีความแม่นยำในการทำนายค่าปริมาณไขมันมากที่สุด เนื่องจากมีค่า R เท่ากับ 0.97 และมีค่าความคลาดเคลื่อนของสมการทำนายค่าปริมาณไขมันต่ำ คือ มีค่า SEC และ SEP เท่ากับ 0.29% และ 0.38% ทั้งนี้ อาจเนื่องมาจากเมื่อนำข้อมูลสเปกตรัม เริ่มต้นไปปรับแต่ง สเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ก่อนนำไปใช้ในการสร้างสมการ ทำนายค่าวอเตอร์ แอคทิวิตี้ จะสามารถช่วยแก้ปัญหาคอรัลชันของจุดยอดได้ กล่าวคือ สามารถช่วยลดความคลาดเคลื่อนของการซ้อนทับกันของจุดยอดดังกล่าวได้ ซึ่ง Osborne *et al.* (1993) กล่าวว่าวิธีการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีนี้เป็นการกำจัดฟลักที่ซ้อนทับกัน และลดผลกระทบ จากการเลื่อนของเส้นฐาน (Baseline) ที่เกิดจากการกระเจิงแสง ทำให้ได้สเปกตรัมที่มีฐานเรียบและ เห็นจุดยอดแยกออกจากกันอย่างชัดเจน แต่จุดยอดของสเปกตรัมเริ่มต้นจะเปลี่ยนเป็นจุดยอดที่อยู่ ตรงข้ามและตรงกับจุดยอดเริ่มต้น อนุพันธ์ (2552) อธิบายว่าวิธี Second derivative ใช้ได้ผลดีกับ ตัวอย่างที่มีขนาดอนุภาคต่างๆ ผสมกันอยู่ ซึ่งสอดคล้องกับตัวอย่างที่ใช้ในการวิจัยครั้งนี้ เนื่องจาก จะมีการนำตัวอย่างขนมขบเคี้ยวไปป่นการทำการวิเคราะห์ และช่วงความยาวคลื่นที่นำไปสร้าง สมการแล้วให้สมการทำนายปริมาณไขมันที่มีความแม่นยำมากที่สุด คือ ช่วง 1300-1400, 1600-1800 นาโนเมตร ซึ่งจะพบว่าในช่วงดังกล่าวมีข้อมูลครอบคลุมที่เกี่ยวข้องกับปริมาณไขมัน Murray and Osborne *et al.* (1993); Perez-Vich *et al.* (1998) รายงานว่าความยาวคลื่นที่ตำแหน่ง 1800 นาโนเมตร มีความสำคัญที่เกี่ยวข้องกับกลุ่มพันธะ C=O ของกรดไขมัน

ตารางที่ 27 เปรียบเทียบค่า R, SEC, R, SEP, RPD, Bias ของสมการทำนายค่าปริมาณไขมัน ที่ดีที่สุดที่สร้างขึ้นด้วยวิธี PLS และ MWPLS

วิธีทางสถิติ	วิธีปรับแต่ง สเปกตรัม	ขั้นตอน Calibration		ขั้นตอน Validation			
		R	SEC (%)	R	SEP (%)	RPD	Bias
PLS	2 D	0.97	0.30	0.96	0.40	8.73	0.04
MWPLS	2 D	0.98	0.29	0.97	0.35	9.97	0.02

จากการเปรียบเทียบค่า R, SEC, R, SEP, RPD, Bias ของสมการทำนายค่าปริมาณไขมันที่ดีที่สุดที่สร้างขึ้นด้วยวิธีทางสถิติ PLS และ MWPLS ในตารางที่ 27 จะพบว่า สมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณไขมันด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS สามารถทำนายค่าปริมาณไขมันได้อย่างแม่นยำกว่าวิธี PLS เนื่องจากให้ค่า R เท่ากับ 0.98 และให้ค่า SEC และ SEP เท่ากับร้อยละ 0.29 และ 0.35 ตามลำดับ ส่วนวิธี PLS ให้ค่า R เท่ากับ 0.97 และให้ค่า SEC และ SEP เท่ากับร้อยละ 0.30, 0.40 ดังนั้น สมการทำนายค่าปริมาณไขมันที่สร้างขึ้นจากวิธี MWPLS จึงมีประสิทธิภาพในการทำนายค่าได้แม่นยำกว่าสมการทำนายค่าปริมาณไขมันที่สร้างขึ้นจากวิธี PLS เมื่อพิจารณาค่า R ที่ได้จากสมการทำนายที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายปริมาณไขมันสามารถแสดงถึงประสิทธิภาพในการนำสมการดังกล่าวไปใช้ คือ สามารถนำไปใช้ในการทำนายเพื่อการประกันคุณภาพ (Quality assurance) (William, 2001)

การสร้างสมการทำนายที่เหมาะสมในค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์

1. การวัดค่าปัจจัยคุณภาพในเรื่องค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์

นำตัวอย่างที่ผ่านการเตรียมในข้อ 4.1 และนำมาวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่อง NIR ในข้อ 4.2 ก่อนนำไปวัดค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ในข้อ 4.3 แล้วนำไปสร้างสมการทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ โดยจากตัวอย่างขนมขบเคี้ยวทั้ง 100 หน่วยตัวอย่าง นำมาแบ่งแบบสุ่มออกเป็น 2 กลุ่มได้แก่ ตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการทำนาย (Calibration set) จำนวน 80 หน่วยตัวอย่าง และตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้องของสมการ (Validation set) จำนวน 20 หน่วยตัวอย่างเพื่อใช้ในการตรวจสอบความแม่นยำของสมการที่สร้างขึ้น โดยได้ผลดังแสดงในตารางที่ 28

ตารางที่ 28 ข้อมูลค่าสูงสุด ค่าต่ำสุด ค่าเฉลี่ย และค่าพิสัย ในเรื่องค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ (TBA) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว

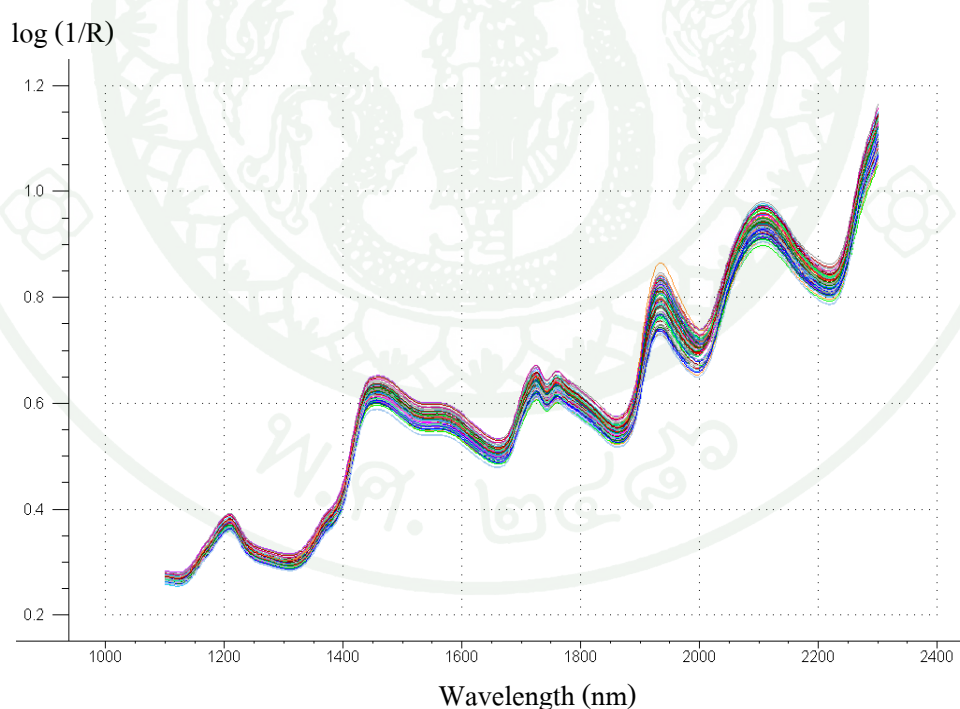
ชุดข้อมูล	จำนวนข้อมูล	ค่าสูงสุด	ค่าต่ำสุด	ค่าเฉลี่ย	ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน
Calibration	80	1.26	0.60	0.60	0.33
Validation	20	1.17	0.66	0.66	0.35

จากตารางที่ 28 พบว่า ตัวอย่างในกลุ่มสร้างสมการ (Calibration) มีค่าคุณภาพทางเคมีครอบคลุมค่าในกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation) เพื่อให้ข้อมูลของกลุ่มตัวอย่างทั้งสองกลุ่มมีการกระจายของค่าคุณภาพทางเคมีไปในลักษณะเดียวกัน โดยที่ตัวอย่างในกลุ่มสร้างสมการ (Calibration) จะมีขนาดข้อมูลที่กว้างพอควรและควรครอบคลุมข้อมูลของกลุ่มตัวอย่างที่เราจะศึกษาได้ (Chen *et al.*, 2007)

2. การวัดค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยเครื่อง

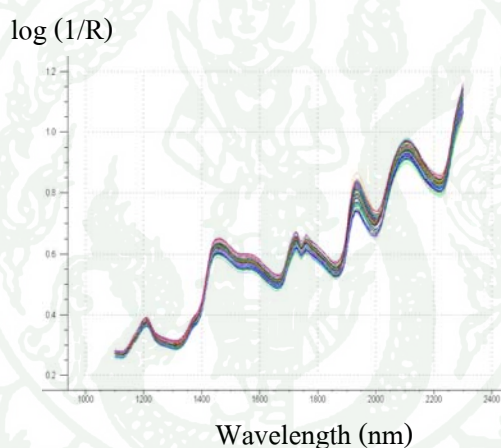
การวัดค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยเครื่อง NIR โดยการบรรจุตัวอย่างของขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการบดลงใน rotating cup ก่อนนำไปวัดค่าการดูดกลืนแสง

ลักษณะสเปกตรัมและค่าการดูดกลืนแสงที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านขั้นตอนการเตรียมตัวอย่างในข้อ 4.1 ดังแสดงในภาพที่ 77



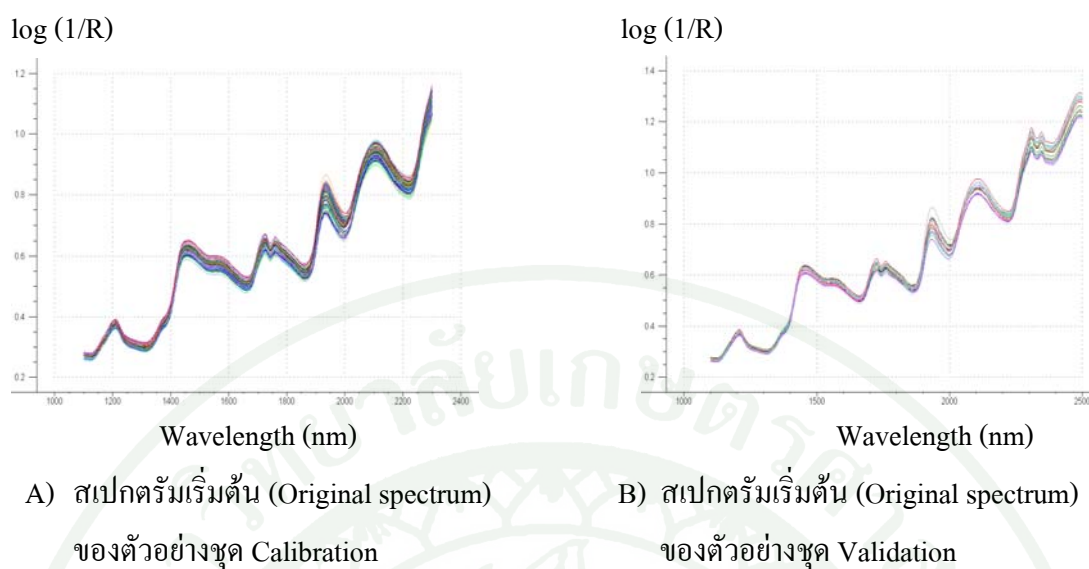
ภาพที่ 86 สเปกตรัมของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมตัวอย่างในข้อ 4.1 จำนวน 100 หน่วยตัวอย่างที่วัดด้วยเครื่อง NIR ตั้งแต่ช่วง 1100-2500 นาโนเมตร

เมื่อพิจารณาจากภาพที่ 86 ลักษณะสเปกตรัมที่ได้ (Original spectrum) จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR จะมีฐานกว้าง เนื่องจากการซ้อนทับกันของจุดยอด ไม่ได้มีจุดยอดแหลมแยกออกจากกันอย่างเด่นชัด ทำให้ยากต่อการเลือกความยาวคลื่นที่เหมาะสมที่สัมพันธ์กับค่าทางเคมีที่ทำการศึกษา อย่างไรก็ตามปัญหาดังกล่าวสามารถลดความคลาดเคลื่อนได้ ด้วยการปรับแต่งข้อมูลค่าการดูดกลืนแสงจากสเปกตรัมเดิม (Original spectrum) ดังนั้นการปรับแต่งสเปกตรัมจะทำให้ได้สเปกตรัมที่มีจุดยอดชัดเจน ทำให้ทราบตำแหน่งความยาวคลื่นที่มีการสั่นของโมเลกุลมาก ในการปรับแต่งสเปกตรัมที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR มีหลายวิธี เช่น 1) วิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) 2) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) 3) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) 4) วิธี Multiplicative scatter correction (MSC) ดังแสดงในภาพที่ 86-96

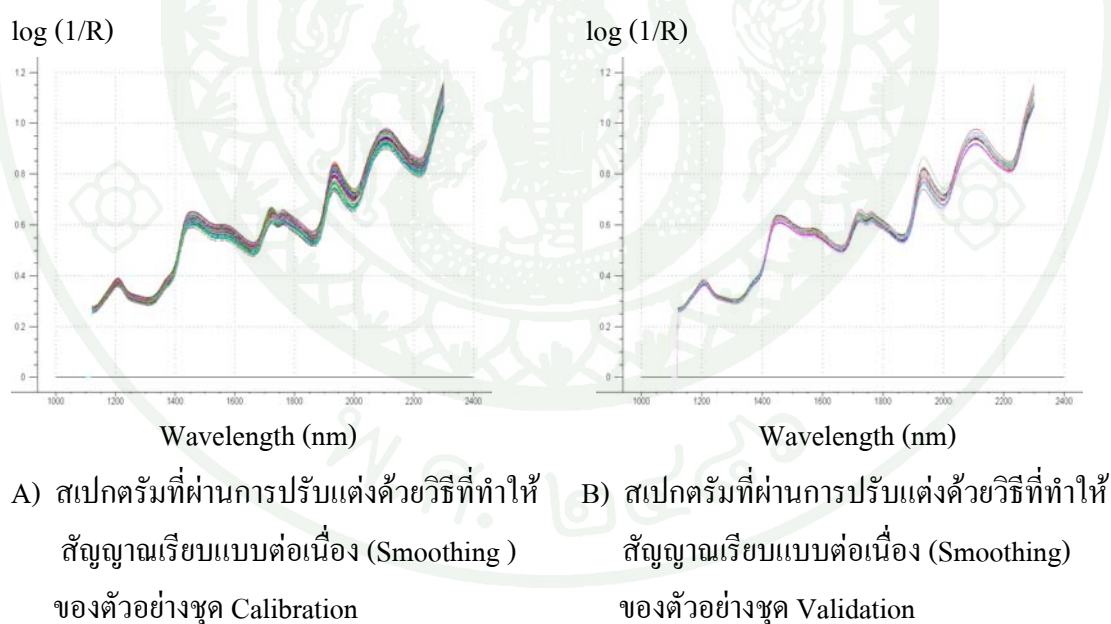


A) สเปกตรัมเริ่มต้น (Original spectrum)

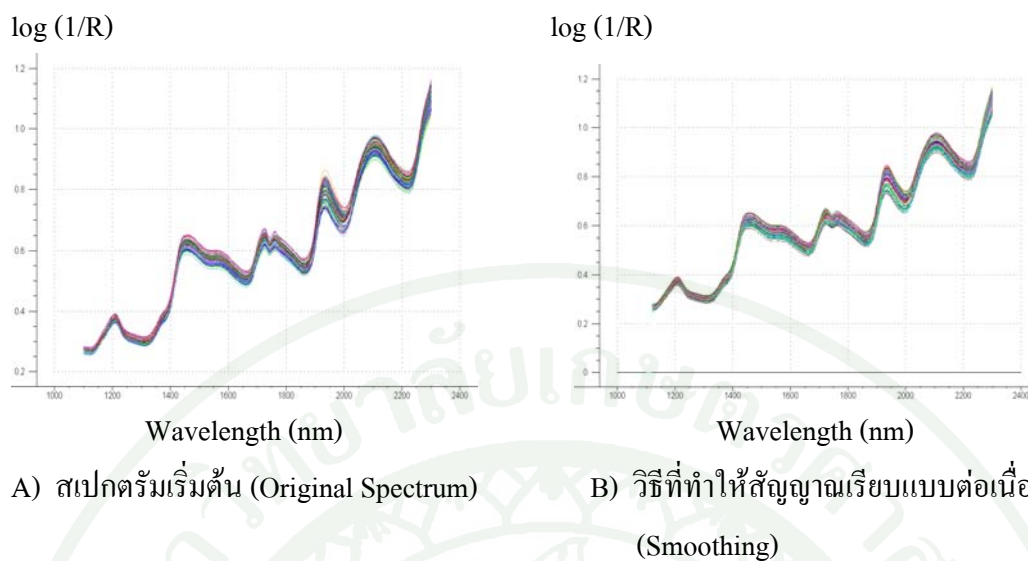
ภาพที่ 87 ลักษณะสเปกตรัมที่ยังไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมตัวอย่างในข้อ 4.1 ซึ่งได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร



ภาพที่ 88 ลักษณะสเปกตรัมที่ยังไม่ผ่านการปรับแต่งสำหรับตัวอย่างชุด Calibration และ Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมในข้อ 4.1

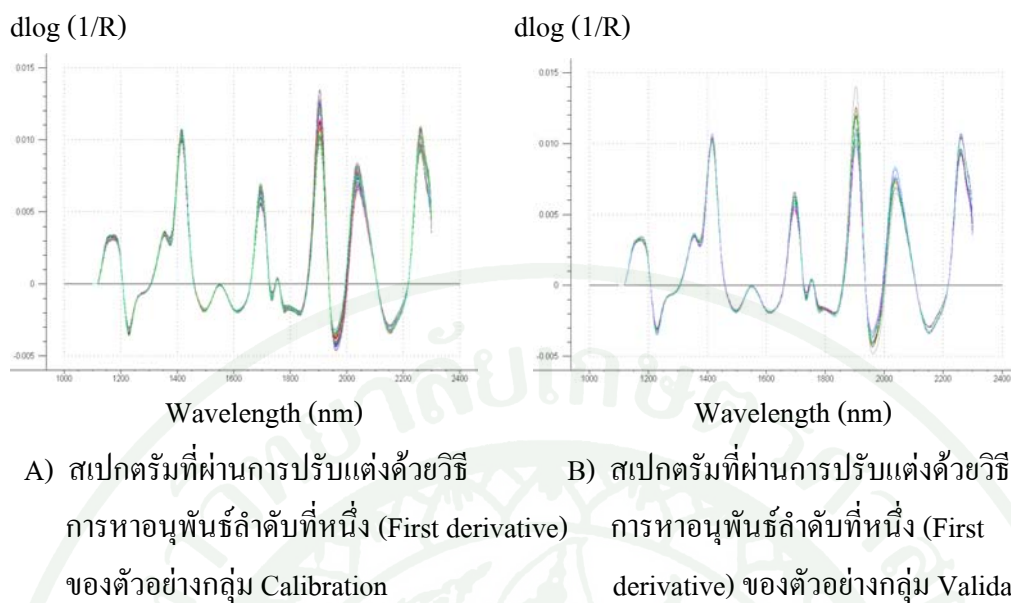


ภาพที่ 89 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างชุด Calibration และตัวอย่างชุด Validation

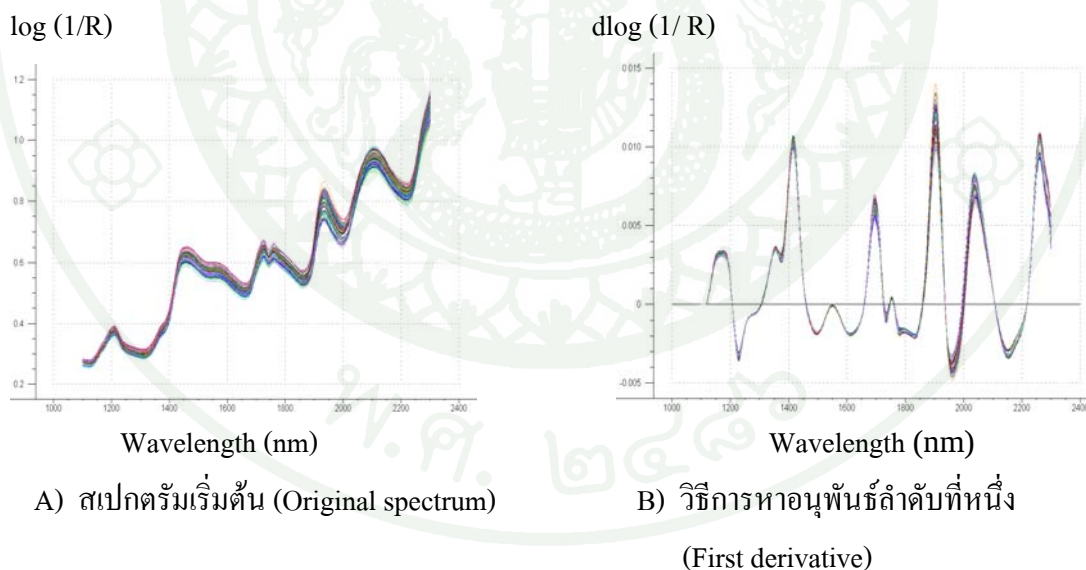


ภาพที่ 90 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง

จากภาพที่ 90 เป็นการเปรียบเทียบค่าสเปกตรัมเริ่มต้นกับสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) จะเห็นได้ว่าสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) จะยังคงรักษารูปร่างของยอดแหลมในสเปกตรัมให้มีขนาดเท่ากับสเปกตรัมเริ่มต้น ไม่ว่าจะยอดแหลมจะมีฐานกว้างหรือแคบก็ตาม



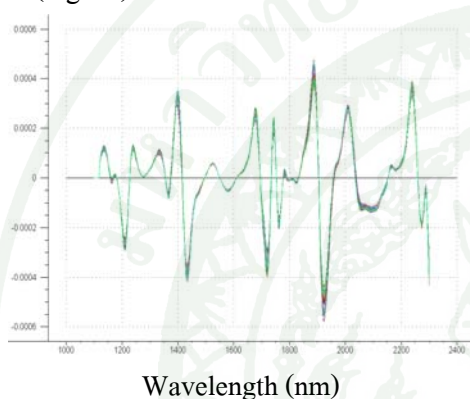
ภาพที่ 91 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) ของตัวอย่างชุด Calibration และชุด Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว



ภาพที่ 92 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง

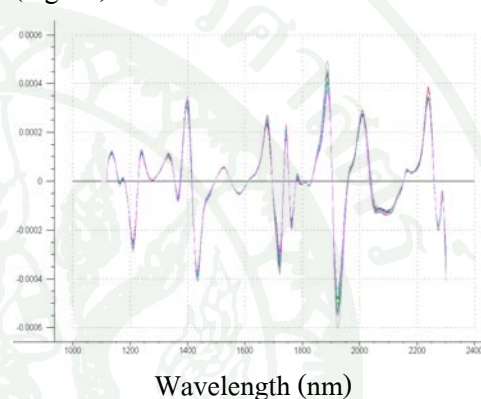
จากภาพที่ 92 เป็นการเปรียบเทียบสเปกตรัมเริ่มต้นกับสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) จะแยกจุดยอดที่เหลื่อมซ้อนกันในสเปกตรัมออกจากกัน โดยวิธีนี้จะเป็นการนำค่า $\log(1/R)$ ที่ความยาวคลื่นที่ใกล้เคียงกัน 2 ค่ามาลบกันและจะให้ความหมายเป็นค่าความชันของสเปกตรัมที่แต่ละความยาวคลื่น ซึ่งทำให้แปลความหมายยาก แต่วิธีการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีนี้จะใช้ได้ผลกับตัวอย่างที่มีเนื้อสม่ำเสมอและมีการกระจายตัวของอนุภาคอย่างสม่ำเสมอทั่วถึง

$d^2(\log 1/R)$



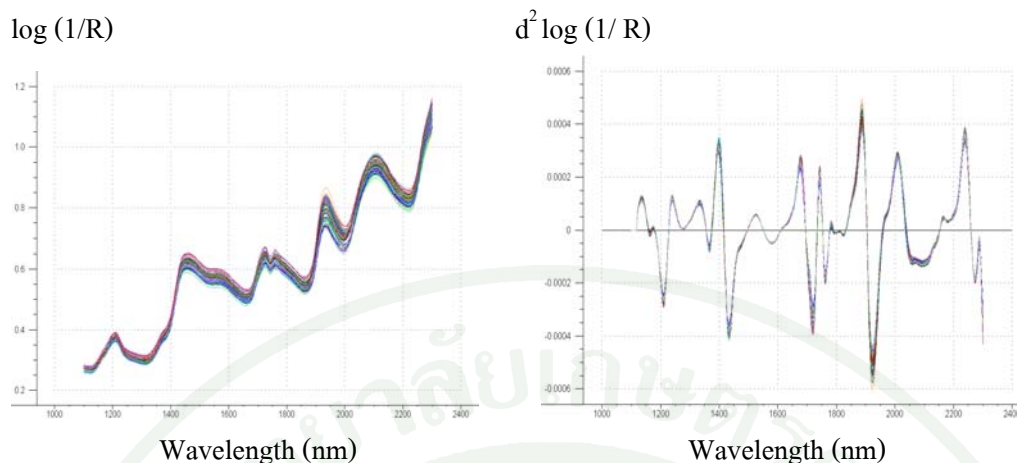
A) สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) ของตัวอย่างกลุ่ม Calibration

$d^2(\log 1/R)$



B) สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) ของตัวอย่างกลุ่ม Validation

ภาพที่ 93 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second Derivative) ของตัวอย่างชุด Calibration และตัวอย่างชุด Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว



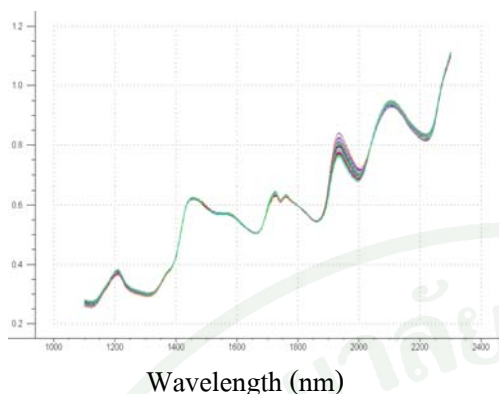
A) สเปกตรัมเริ่มต้น (original spectrum)

B) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (2 D)

ภาพที่ 94 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (2 D) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง

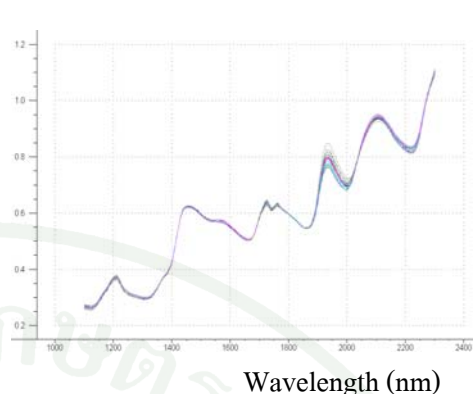
จากภาพที่ 94 เป็นการเปรียบเทียบสเปกตรัมเริ่มต้นกับสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) จะแยกจุดยอดที่เหลื่อมซ้อนกันในสเปกตรัมออกจากกัน โดยวิธีนี้จะทำให้จุดยอดของสเปกตรัมดั้งเดิมแต่จะเป็นจุดยอดกลับหัว ซึ่งวิธีนี้จะใช้ได้ผลดีกับตัวอย่างที่มีขนาดอนุภาคต่างๆ ผสมกัน

log (1/R)



A) สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC ของ ตัวอย่างกลุ่ม Calibration

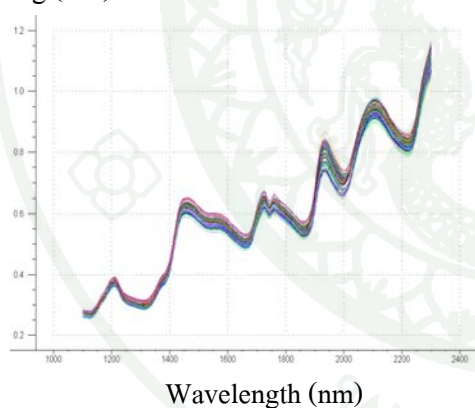
log (1/R)



B) สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี ของตัวอย่างกลุ่ม Validation

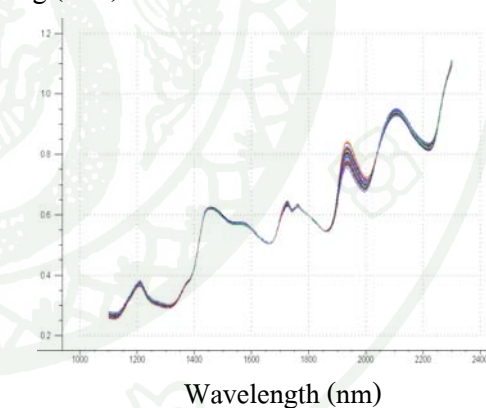
ภาพที่ 95 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC ของตัวอย่างชุด Calibration และ Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว

log (1/R)



A) สเปกตรัมเริ่มต้น (Original spectrum)

log (1/R)



B) วิธี MSC

ภาพที่ 96 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง

จากภาพที่ 96 เป็นการเปรียบเทียบสเปกตรัมเริ่มต้นกับสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC จะพบว่าสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC จะมีรูปร่างไม่แตกต่างจากสเปกตรัมเริ่มต้นมากนัก โดยวิธีการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีนี้จะช่วยลดผลที่เกิดจากการกระเจิงแสง (Scattered light) ต่อ NIR สเปกตรัมที่ได้จากการวัดแบบ Diffuse reflectance และแบบ transmission

3. การสร้างสมการที่เหมาะสมในการทำนายค่าไทโอบาร์บิฟูริก แอซิด นัมเบอร์

ข้อมูลค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวของกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 80 หน่วยตัวอย่าง ที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ทำการบันทึกค่าห่างช่วงละ 2 นาโนเมตร จะได้ข้อมูลค่าการดูดกลืนแสง จำนวน 701 ค่า กำหนดให้เป็นตัวแปรอิสระ ตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 80 ตัวอย่าง ที่ผ่านการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR นำไปวิเคราะห์ค่าคุณภาพทางเคมีในเรื่องค่าไทโอบาร์บิฟูริก แอซิด นัมเบอร์ ข้อมูลค่าจริงที่ได้จากการวิเคราะห์ทางเคมีกำหนดให้เป็นตัวแปรตาม นำข้อมูลตัวแปรอิสระและตัวแปรตามมาหาความสัมพันธ์ด้วยวิธีทางสถิติเพื่อสร้างสมการที่ใช้ในการทำนายค่าไทโอบาร์บิฟูริก แอซิด นัมเบอร์ วิธีทางสถิติที่นำมาใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าไทโอบาร์บิฟูริก แอซิด นัมเบอร์ได้แก่ 1) วิธี Partial Least Squares (PLS) Regression 2) วิธี Moving Window Partial Least Squares (MWPLS) ทำการเปรียบเทียบสมการที่สร้างขึ้นจากทั้ง 2 วิธี เพื่อใช้ทำนายค่าไทโอบาร์บิฟูริก แอซิด นัมเบอร์ โดยพิจารณาจากค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (R) และค่าความคลาดเคลื่อนของสมการในการทำนายค่าไทโอบาร์บิฟูริก แอซิด นัมเบอร์ (Standard Error of Calibration; SEC) โดยมีรายละเอียดดังนี้

3.1 การสร้างสมการทำนายค่าไทโอบาร์บิฟูริก แอซิด นัมเบอร์ ด้วยวิธีทางสถิติ

Partial Least Squares (PLS) Regression

จากข้อมูลค่าการดูดกลืนแสงที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ที่ความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร บันทึกค่าการดูดกลืนแสงห่างช่วงละ 2 นาโนเมตร จะได้ข้อมูลจากการวัดค่าจำนวน 701 ค่า เมื่อนำข้อมูลตัวแปรอิสระมาหาความสัมพันธ์กับค่าไทโอบาร์บิฟูริก แอซิด นัมเบอร์ ด้วยการจัดกลุ่มตัวแปรเดิม เป็นตัวแปรใหม่หรือแฟคเตอร์ ด้วยวิธี PLS

ก่อนทำการจัดกลุ่มตัวแปรใหม่ที่ได้จากข้อมูลค่าการดูดกลืนแสงที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR จะนำข้อมูลที่ได้มาทำการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีต่างๆ ได้แก่ 1) วิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) 2) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) 3) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) 4) วิธี Multiplicative scatter correction (MSC) เพื่อลดความคลาดเคลื่อนเนื่องจากปัจจัยต่างๆ

เมื่อพิจารณาสมการทำนายที่สร้างขึ้นจากช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ดังแสดงในตารางที่ 29 พบว่า สมการที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) มีความเหมาะสมที่สุด เนื่องจากมีค่าการจัดกลุ่มตัวแปรเดิมเป็นตัวแปรใหม่ได้ 8 แฟกเตอร์ โดยให้ค่า R เท่ากับ 0.93 และค่า SEC เท่ากับ 0.12 เมื่อทำการพิจารณาค่าสัมประสิทธิ์การถดถอย (Regression coefficient) ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ดังแสดงในภาพที่ 97 พบว่า ที่ตำแหน่งความยาวคลื่น 1144, 1384, 1406 และ 1936 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับค่าไทโอบาร์บิทูริค แอซิด นัมเบอร์มาก โดยที่ตำแหน่งความยาวคลื่นดังกล่าวมีข้อมูลสำคัญเกี่ยวข้องกับกลุ่มพันธะของ CH_2 โดยที่ตำแหน่งความยาวคลื่น 1938 นาโนเมตร มีข้อมูลสำคัญที่เกี่ยวข้องกับการเกิดออกซิเดชันในน้ำมัน ซึ่งสอดคล้องกับงานวิจัยของ Norris (1983) ที่แสดงให้เห็นว่าที่ตำแหน่งความยาวคลื่น 946, 1062 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์อย่างมากกับปริมาณไขมันในเนื้อหมู นอกจากนี้ Osborne *et al.* (1984) ได้ทำการศึกษาการใช้เทคนิค NIR ในการตรวจสอบปริมาณไขมัน ชูโครส แป้ง และน้ำในโคร์ของบิสกิต สมการ Validation และ Calibration ของโคร์ของบิสกิต พบว่า มีค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน (Standard deviation) ของไขมัน เท่ากับ 0.2 เปอเซ็นต์ ผลการทดลองที่ได้แสดงให้เห็นว่าสามารถนำเทคนิค NIR มาใช้ในการควบคุมกระบวนการผลิตอาหาร

เมื่อทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง พบว่าสมการที่เหมาะสมดังกล่าวให้ค่า SEP และ Bias เท่ากับร้อยละ 0.14, -0.13 ดังแสดงในตารางที่ 30 และภาพที่ 93

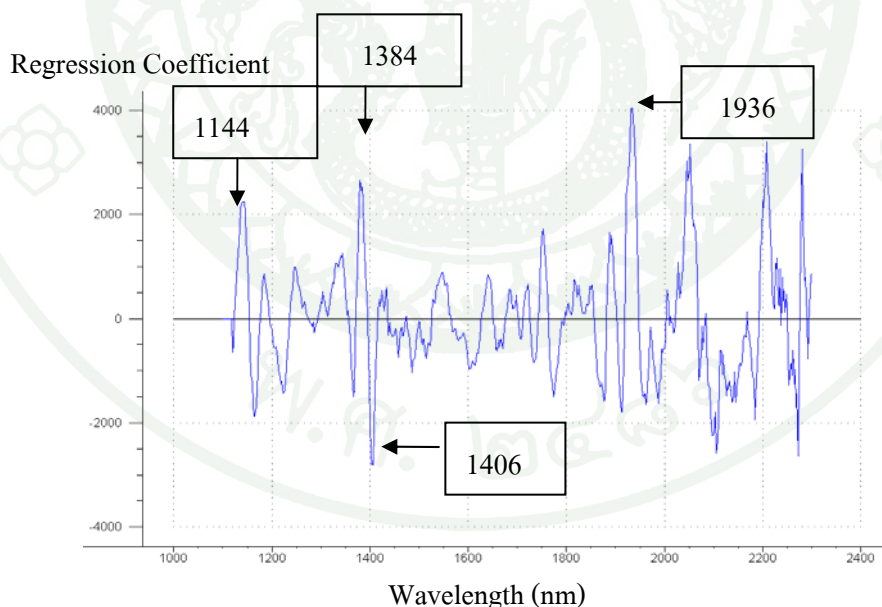
ตารางที่ 29 ค่า R, ค่า SEC ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ (TBA) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยวิธีทางสถิติ PLS

วิธีปรับแต่ง สเปกตรัม	วิธีการ ทางสถิติ	ช่วงความยาวคลื่นที่ใช้ ในการสร้างสมการ (nm)	F	กลุ่มสร้างสมการ	
				R	SEC (%)
1. Original	PLS	1100 - 2500	10	0.92	0.12
2. Smoothing	PLS	1100 - 2500	10	0.92	0.13
3. First Derivative	PLS	1100 - 2500	8	0.92	0.13
4. Second Derivative	PLS	1100 - 2500	8	0.93	0.12
5. MSC	PLS	1100 - 2500	9	0.92	0.13

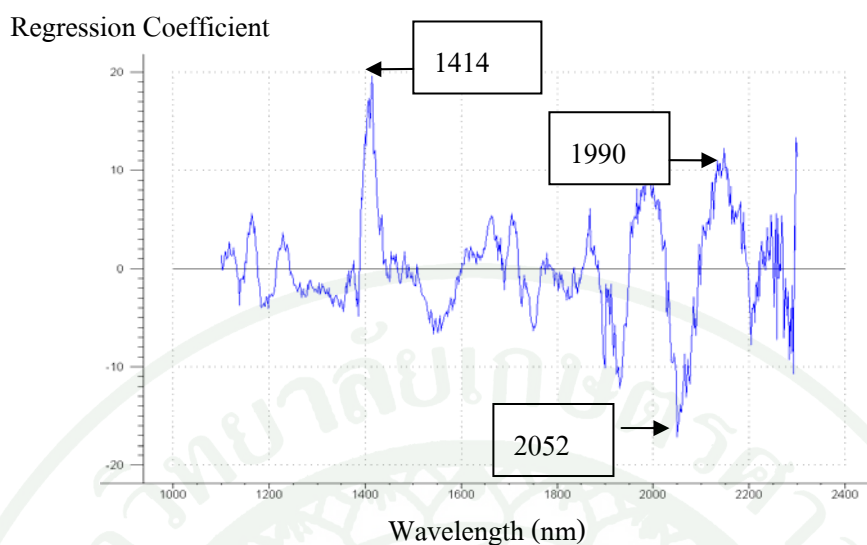
หมายเหตุ F หมายถึง จำนวนกลุ่มตัวแปรใหม่ที่ใช้ในการสร้างสมการ

R หมายถึง ค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (Coefficient of correlation)

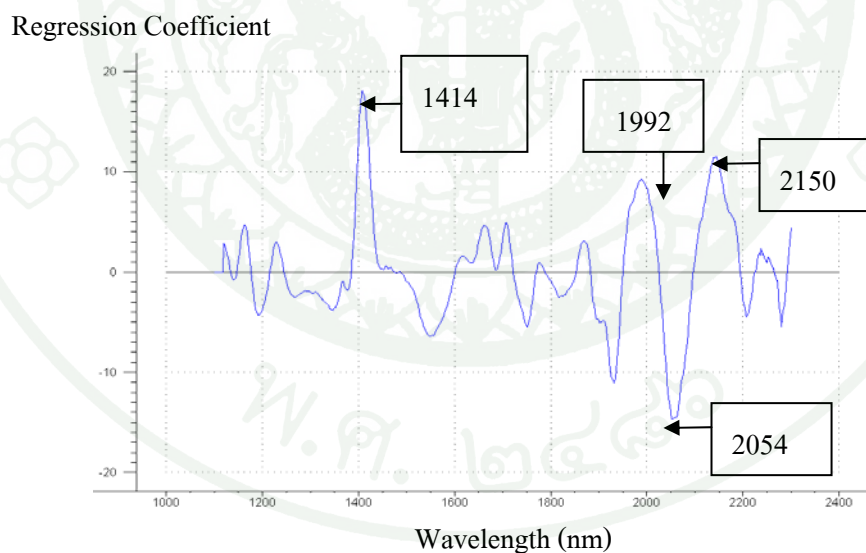
SEC หมายถึง ค่าความคลาดเคลื่อนของสมการที่ใช้ในการทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ (TBA) ด้วยตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ



ภาพที่ 97 ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 80 ตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative)

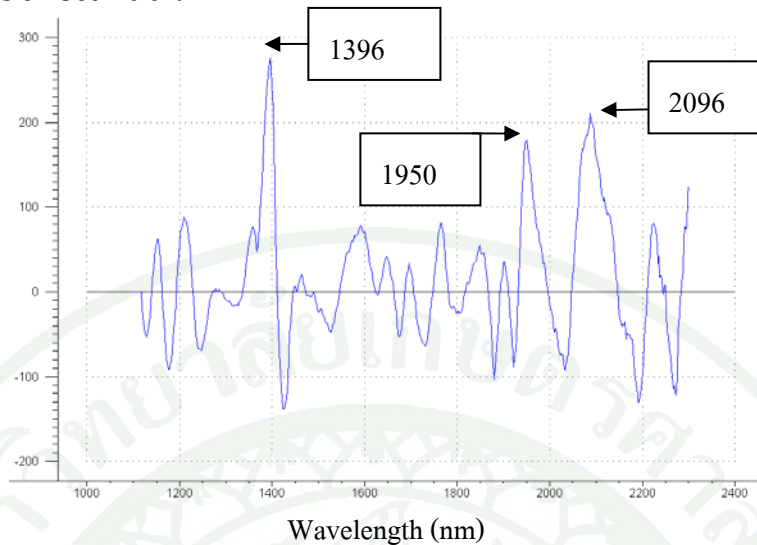


ภาพที่ 98 ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าไทโอบาร์บิทรिक แอซิด นัมเบอร์ ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 80 ตัวอย่างของสมการไม่ผ่านการปรับแต่ง



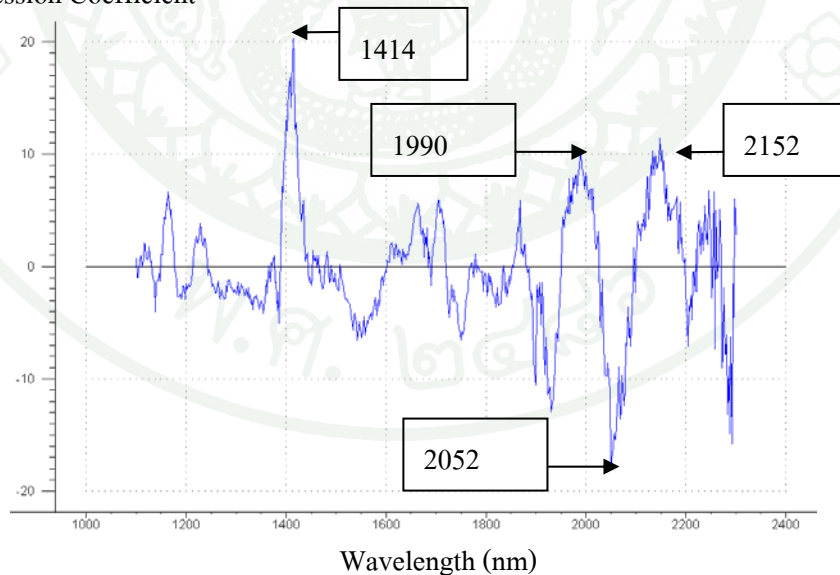
ภาพที่ 99 ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าไทโอบาร์บิทรिक แอซิด นัมเบอร์ ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 80 ตัวอย่างด้วยวิธีที่ Smoothing

Regression Coefficient



ภาพที่ 100 ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าไทโอบาร์บิทรिक แอซิด นัมเบอร์ ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 80 ตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative)

Regression Coefficient



ภาพที่ 101 ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าไทโอบาร์บิทรिक แอซิด นัมเบอร์ ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร จำนวน 80 ตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC

3.2 การตรวจสอบความแม่นยำของสมการทำนายที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าไทโอบาร์บิฟูริก แอซิด นัมเบอร์ ซึ่งสร้างขึ้นจากวิธีทางสถิติ PLS

การตรวจสอบความแม่นยำของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าไทโอบาร์บิฟูริก แอซิด นัมเบอร์ จะใช้ค่าทางเคมีของกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation) จำนวน 20 หน่วยตัวอย่าง ทำการเปรียบเทียบค่าที่ได้จากการทำนายด้วยสมการที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัม NIR (Predicted value) กับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริง (Actual value) การตรวจสอบความแม่นยำของสมการจะพิจารณาจากความคลาดเคลื่อนจากการทำนายด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Standard Error of Prediction; SEP) และค่าความแตกต่าง (Bias) ระหว่างค่าที่ทำนายได้จากสมการกับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริงของแต่ละสมการ

ทำการตรวจสอบความแม่นยำของสมการทำนายที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าไทโอบาร์บิฟูริก แอซิด นัมเบอร์ ด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง จำนวน 20 หน่วยตัวอย่าง ทำการเปรียบเทียบค่าที่ได้จากการทำนายด้วยสมการที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัม NIR (Predicted value) กับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริง ดังแสดงในตารางที่ 31 และภาพที่ 93

ตารางที่ 30 เปรียบเทียบค่า R, ค่า SEP, ค่า RPD และค่า Bias ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนาย
ค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ ด้วยวิธีทางสถิติ PLS

วิธีปรับแต่งสเปกตรัม	วิธีทางสถิติ	ความยาวคลื่น (นาโนเมตร)	ขั้นตอน Validation			
			R	SEP	RPD	Bias
1. Original	PLS	1100 – 2500	0.91	0.12	2.91	-0.06
2. Smoothing	PLS	1100 – 2500	0.91	0.12	2.91	-0.05
3. 1 D	PLS	1100 – 2500	0.91	0.15	2.33	-0.06
4. 2 D	PLS	1100 – 2500	0.92	0.14	2.40	-0.03
5. MSC	PLS	1100 – 2500	0.91	0.12	2.91	-0.06

หมายเหตุ SEP หมายถึง ค่าความคลาดเคลื่อนของสมการที่ใช้ทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก
แอซิด นัมเบอร์ ด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)

Bias หมายถึง ค่าความแตกต่างระหว่างค่าที่ทำนายได้จากสมการที่สร้างขึ้นกับ
ค่าที่วิเคราะห์ได้ทางเคมี

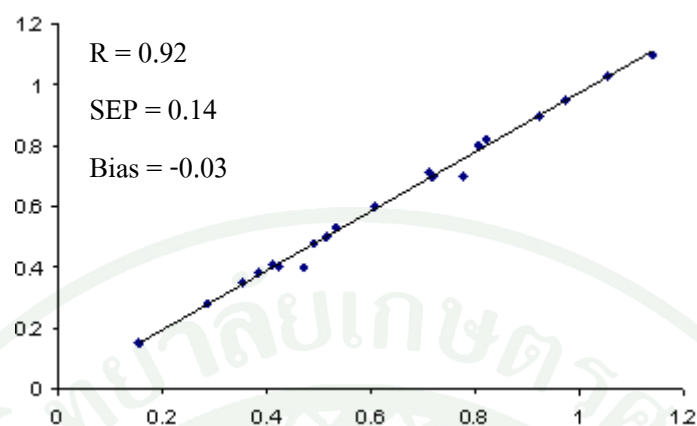
PLS หมายถึง วิธีทางสถิติ Partial Least Squares Regression

RPD หมายถึง อัตราส่วนของ SEP ต่อ SD

1 D หมายถึง วิธี First derivative

2 D หมายถึง วิธี Second derivative

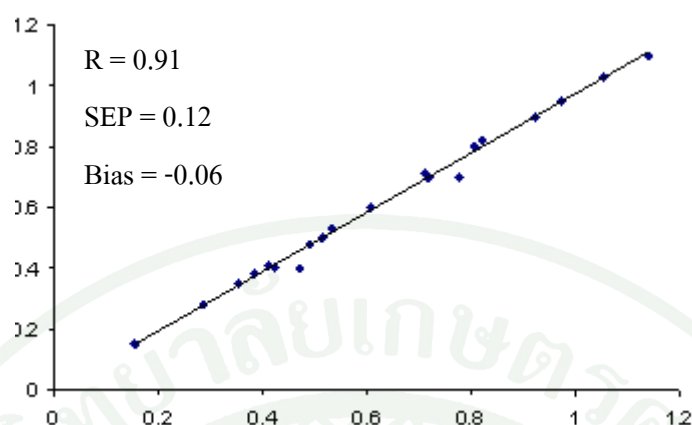
Predicted Thiobarbituric Acid Number (TBA) (mg malonaldehyde/kg)



Actual thiobarbituric acid number (TBA) (mg malonaldehyde/kg)

ภาพที่ 102 ค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)

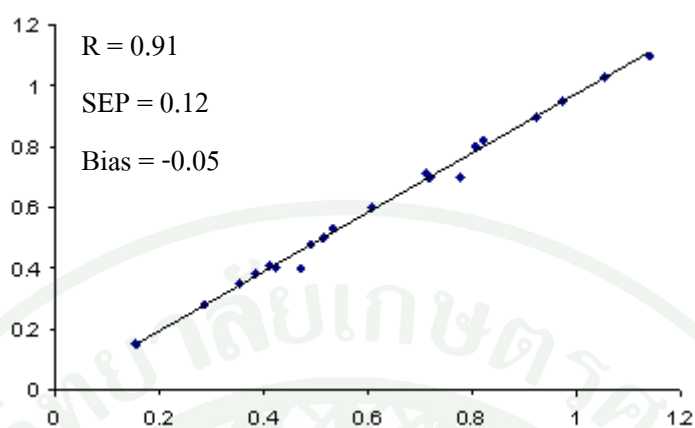
Predicted Thiobarbituric Acid Number (TBA) (mg malonaldehyde/kg)



Actual thiobarbituric acid number (TBA) (mg malonaldehyde/kg)

ภาพที่ 103 ค่าไทโอบาร์บิทริก แอซิด นัมเบอร์ ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งไม่ผ่านการปรับแต่งของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)

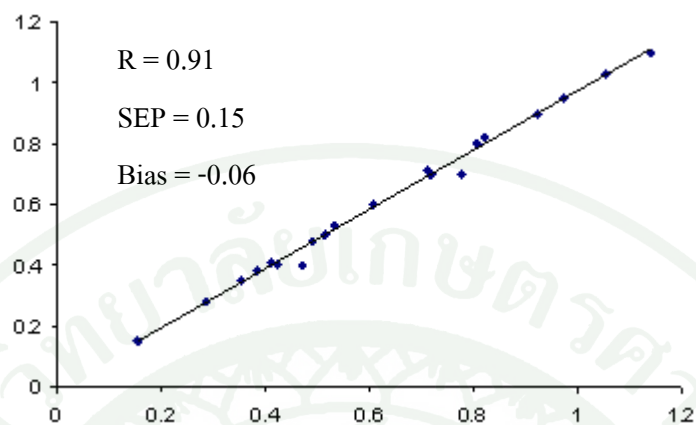
Predicted Thiobarbituric Acid Number (TBA) (mg malonaldehyde/kg)



Actual thiobarbituric acid number (TBA) (mg malonaldehyde/kg)

ภาพที่ 104 ค่าไทโอบาร์บิทริก แอซิด นัมเบอร์ ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)

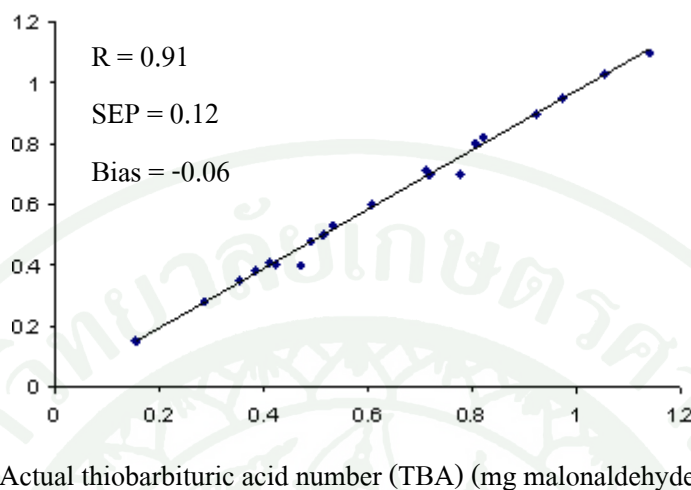
Predicted Thiobarbituric Acid Number (TBA) (mg malonaldehyde/kg)



Actual thiobarbituric acid number (TBA) (mg malonaldehyde/kg)

ภาพที่ 105 ค่าไทโอบาร์บิทริก แอซิด นัมเบอร์ ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (1 D) ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง

Predicted Thiobarbituric Acid Number (TBA) (mg malonaldehyde/kg)



ภาพที่ 106 ค่าไทโอบาร์บิทริก แอซิด นัมเบอร์ ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการ MSC ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)

จากผลการสร้างสมการทำนายค่าไทโอบาร์บิทริก แอซิด นัมเบอร์ ด้วยวิธีทางสถิติ PLS พบว่า สมการทำนายที่ดีที่สุดสร้างขึ้นจากวิธีสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ทั้งนี้ อาจเนื่องมาจากสเปกตรัมเริ่มต้นมีการซ้อนทับกัน มีลักษณะฐานกว้างเนื่องจากการซ้อนทับกันของจุดยอด ไม่ได้มีจุดยอดแหลมแยกออกจากกันอย่างชัดเจน ทั้งนี้ Osborne *et al.* (1993) ได้อธิบายว่าเกิดขึ้นเนื่องมาจากการสั่นแบบโอเวอร์โทนและแบบคอมบิเนชันของการสั่นแบบพื้นฐาน ซึ่งทำให้ยากต่อการเลือกความยาวคลื่นที่เหมาะสมที่มีความสัมพันธ์กับค่าที่ทำการศึกษา ดังนั้นเมื่อนำข้อมูลสเปกตรัมเริ่มต้นไปปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ก่อนนำไปใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าไทโอบาร์บิทริก แอซิด นัมเบอร์ จะสามารถช่วยแก้ปัญหาดังกล่าวได้ กล่าวคือ สามารถช่วยลดความคลาดเคลื่อนของการซ้อนทับกันของจุดยอดดังกล่าวได้ ซึ่ง Osborne *et al.* (1993) กล่าวว่าวิธีการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีนี้เป็นการจัดฟิสิกส์ที่ซ้อนทับกัน และลดผลกระทบจากการเลื่อนของเส้นฐาน (Baseline) ที่เกิดจากการกระเจิงแสง ทำให้ได้สเปกตรัมที่มีฐานแคบและเห็นจุดยอดแยกออกจากกันอย่างชัดเจน แต่จุดยอดของสเปกตรัมเริ่มต้นจะเปลี่ยนเป็นจุดยอดที่อยู่ตรงข้ามและตรงกับจุดยอดเริ่มต้น อนุพันธ์ (2552) อธิบายว่าวิธี Second derivative ใช้ได้ผลดีกับตัวอย่างที่มี

ขนาดอนุภาคต่างๆ ผสมกันอยู่ ซึ่งสอดคล้องกับตัวอย่างที่ใช้ในการวิจัยครั้งนี้เนื่องจากตัวอย่างขนมขบเคี้ยวจะนำมามบั่นด้วยเครื่องบั่นก่อนนำมาทำการวิเคราะห์

3.3 การสร้างสมการทำนายค่าไทโอบาร์บิฟูริก แอซิด นัมเบอร์ ด้วยวิธีทางสถิติ

Moving Window Partial Least Squares (MWPLS)

จากการนำสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการต่างๆ ได้แก่ วิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) วิธีการหาอนุพันธ์อันดับที่หนึ่ง (First derivative) วิธีการหาอนุพันธ์อันดับที่สอง (Second derivative) วิธี Multiplicative scatter correction (MSC) รวมทั้งสมการที่ไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม มาวิเคราะห์ด้วยโปรแกรม in-house-written in MATLAB เพื่อหาช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสมในการสร้างสมการ ได้ผลดังแสดงในภาพที่ 107 เมื่อพิจารณาจากค่า $\log(SSR)$ พบว่า ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสมที่เป็น informative region มีหลายช่วง ดังแสดงในตารางที่ 31 และเมื่อนำช่วงความยาวคลื่นดังกล่าวมาสร้างสมการทำนายได้ผลดังแสดงในตารางที่ 31 ซึ่งพบว่าสมการที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ในช่วงความยาวคลื่น 1300-1400, 1600-1800 นาโนเมตร ให้สมการที่เหมาะสมที่สุดในการทำนายค่าไทโอบาร์บิฟูริก แอซิด นัมเบอร์ โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มตัวแปรเดิมเป็นตัวแปรใหม่ได้ 8 แฟกเตอร์ และให้ค่า R และ SEC เท่ากับ 0.95, 0.10 และเมื่อพิจารณาค่าสัมประสิทธิ์การถดถอย (Regression coefficient) ของสมการที่ความยาวคลื่นในช่วงดังกล่าว ดังแสดงในภาพที่ 108 จะพบว่าตำแหน่งความยาวคลื่นที่ 1640 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับค่าไทโอบาร์บิฟูริก แอซิด นัมเบอร์สูง

ตารางที่ 31 ค่า R และค่า SEC ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริค แอซิด นัมเบอร์ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS

วิธีปรับแต่งสเปกตรัม	วิธีทางสถิติ	ความยาวคลื่น (nm)	F	ขั้นตอน Calibration	
				R	SEC (%)
1. Original	MWPLS	1650 – 1820	9	0.92	0.13
2. Smoothing	MWPLS	2040 – 2100	9	0.93	0.13
3. 1 D	MWPLS	2050 – 2100	8	0.93	0.12
4. 2 D	MWPLS	1300 – 1400	8	0.86	0.17
5. 2 D	MWPLS	1600 – 1800	7	0.85	0.17
6. 2 D	MWPLS	1300 – 1400, 1600 – 1800	8	0.95	0.10
7. MSC	MWPLS	1450 – 1720	9	0.94	0.11
8. MSC	MWPLS	1780 – 1820	9	0.94	0.11
9. MSC	MWPLS	1450 – 1720, 1780 – 1820	9	0.93	0.12

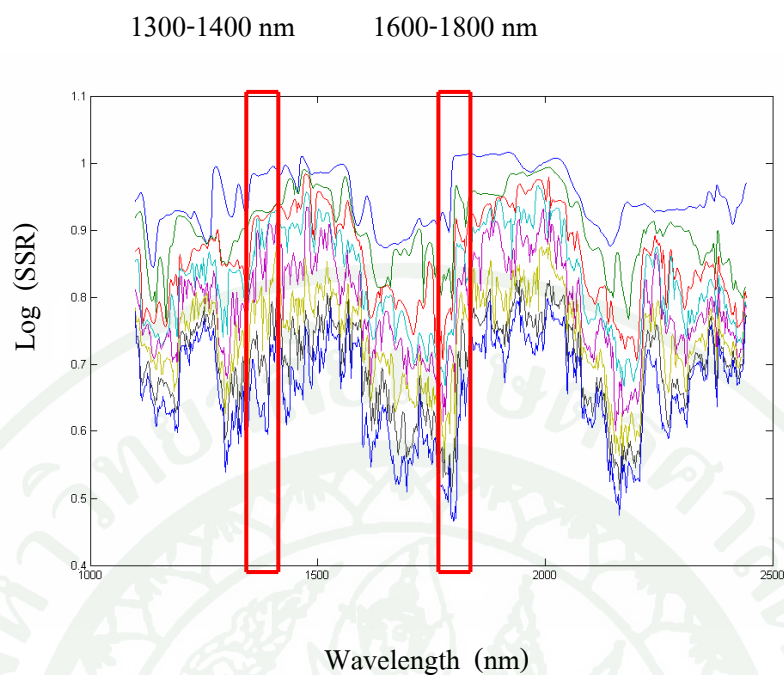
หมายเหตุ F หมายถึง จำนวนกลุ่มตัวแปรใหม่ที่ใช้ในการสร้างสมการ

R หมายถึง ค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (Coefficient of correlation)

SEC หมายถึง ค่าความคลาดเคลื่อนของสมการที่ใช้ในการทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริค แอซิด นัมเบอร์ด้วยตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ (Calibration)

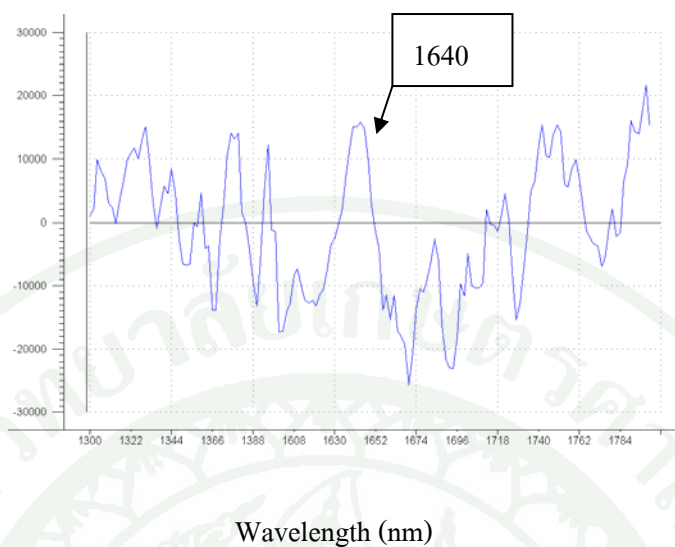
1 D หมายถึง วิธี First derivative

2 D หมายถึง วิธี Second derivative

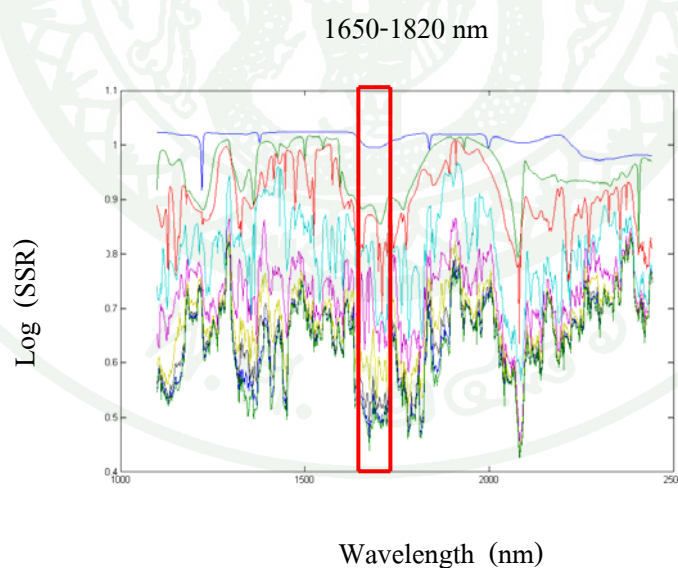


ภาพที่ 107 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ จากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (2 D)

Regression coefficient

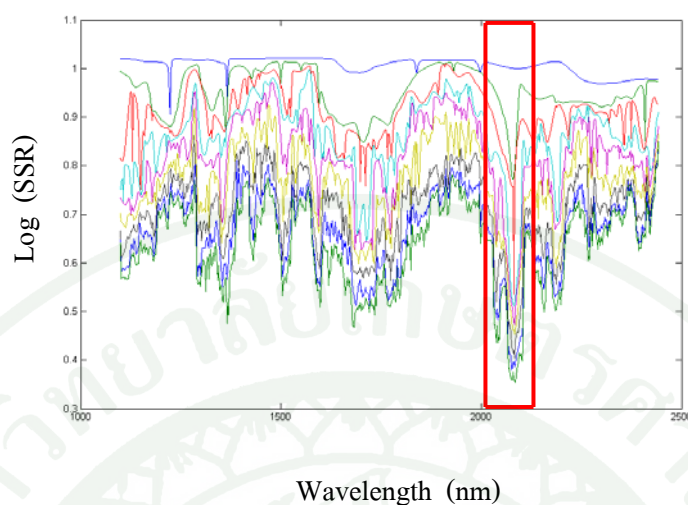


ภาพที่ 108 ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการ (Regression coefficient) ที่ใช้ในการทำนายค่าไทโอบาร์บิทรिक แอซิด นัมเบอร์ ในตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ช่วงความยาวคลื่น 1300-1400, 1600-1800 นาโนเมตร จากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี 2 D



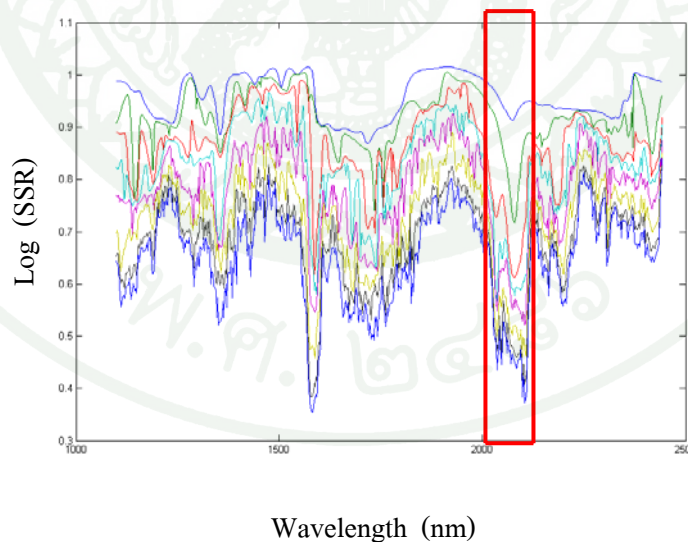
ภาพที่ 109 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าไทโอบาร์บิทรिक แอซิด นัมเบอร์ จากสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม

2040-2100 nm

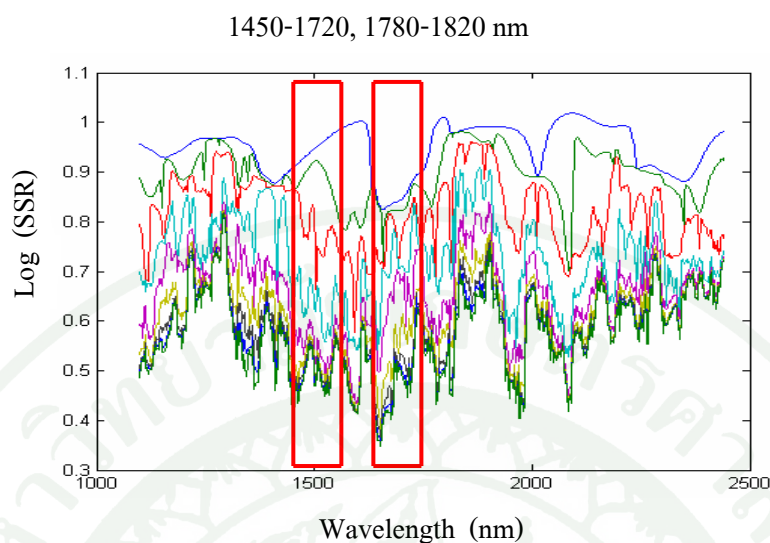


ภาพที่ 110 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่า TBA จากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี Smoothing

2050-2100 nm



ภาพที่ 111 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่า TBA จากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี 1 D



ภาพที่ 112 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ จากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี MSC

3.4 การตรวจสอบความแม่นยำของสมการทำนายที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ ซึ่งสร้างขึ้นจากวิธีทางสถิติ MWPLS

ทำการตรวจสอบความแม่นยำของสมการทำนายที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ ซึ่งสร้างขึ้นจากวิธีทางสถิติ MWPLS ด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง จำนวน 20 ตัวอย่าง ทำการเปรียบเทียบค่าที่ได้จากการทำนายด้วยสมการที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัม NIR (Predicted value) กับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริง ดังแสดงในตารางที่ 32

ตารางที่ 32 เปรียบเทียบค่า R, ค่า SEP, ค่า RPD และค่า Bias ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ ด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS

วิธีปรับแต่งสเปกตรัม	วิธีทางสถิติ	ความยาวคลื่น (นาโนเมตร)	ขั้นตอน Validation			
			R	SEP	RPD	Bias
1. Original	MWPLS	1650 – 1820	0.91	0.15	2.33	-0.04
2. Smoothing	MWPLS	2040 – 2100	0.92	0.14	2.49	-0.03
3. 1 D	MWPLS	1650 – 1850	0.92	0.13	2.68	-0.03
4. 2 D	MWPLS	1300 – 1400	0.93	0.12	2.91	-0.02
5. 2 D	MWPLS	1600 – 1800	0.84	0.21	1.66	-0.10
6. 2 D	MWPLS	1300 – 1400, 1600 – 1800	0.94	0.12	2.91	-0.02
7. MSC	MWPLS	1450 – 1720	0.93	0.11	3.17	-0.01
8. MSC	MWPLS	1780 – 1820	0.92	0.14	2.49	-0.03
9. MSC	MWPLS	1450 – 1720, 1780 – 1820	0.93	0.13	2.68	-0.02

หมายเหตุ SEP หมายถึง ค่าความคลาดเคลื่อนของสมการที่ใช้ทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ ด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)

Bias หมายถึง ค่าความแตกต่างระหว่างค่าที่ทำนายได้จากสมการที่สร้างขึ้นกับค่าที่วิเคราะห์ได้ทางเคมี

MWPLS หมายถึง วิธีทางสถิติ Moving Window Partial Least Squares Regression

RPD หมายถึง อัตราส่วนของ SEP ต่อ SD

จากการเปรียบเทียบข้อมูลของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ ทั้ง 9 สมการในตารางที่ 32 พบว่า สมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS ที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second Derivative) ที่ความยาวคลื่นในช่วง 1300-1400, 1600-1800 นาโนเมตร มีความเหมาะสมและมีความแม่นยำในการทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ มากที่สุด เนื่องจากมีค่า R เท่ากับ 0.94 และมีค่าความคลาดเคลื่อนของสมการทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ต่ำ คือ มีค่า SEC และ SEP ต่ำ คือ มีค่า SEC

และ SEP เท่ากับ 0.11 และ 0.12 ทั้งนี้ อาจเนื่องมาจากเมื่อนำข้อมูลสเปกตรัมเริ่มต้นไปปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ก่อนนำไปใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ จะสามารถช่วยแก้ปัญหาค่าที่ซ้อนทับกันของจุดยอดได้ กล่าวคือ สามารถช่วยลดความคลาดเคลื่อนของการซ้อนทับกันของจุดยอดดังกล่าวได้ ซึ่ง Osborne *et al.* (1993) กล่าวว่าวิธีการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีนี้เป็นการกำจัดพีคที่ซ้อนทับกัน และลดผลกระทบจากการเลื่อนของเส้นฐาน (Baseline) ที่เกิดจากการกระเจิงแสง ทำให้ได้สเปกตรัมที่มีฐานแคบและเห็นจุดยอดแยกออกจากกันอย่างชัดเจน แต่จุดยอดของสเปกตรัมเริ่มต้นจะเปลี่ยนเป็นจุดยอดที่อยู่ตรงข้ามและตรงกับจุดยอดเริ่มต้น อนุพันธ์ (2552) อธิบายว่าวิธี Second derivative ใช้ได้ผลดีกับตัวอย่างที่มีขนาดอนุภาคต่างๆ ผสมกันอยู่ ซึ่งสอดคล้องกับตัวอย่างที่ใช้ในการวิจัยครั้งนี้ เนื่องจากจะมีการนำตัวอย่างขนมขบเคี้ยวไปป่นการทำการวิเคราะห์

ตารางที่ 33 เปรียบเทียบค่า R, SEC, R, SEP, RPD, Bias ของสมการทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ที่ดีที่สุดที่สร้างขึ้นด้วยวิธีทางสถิติ PLS, MWPLS

วิธีทางสถิติ	วิธีปรับแต่งสเปกตรัม	ขั้นตอน Calibration		ขั้นตอน Validation			
		R	SEC (%)	R	SEP (%)	RPD	Bias
PLS	2 D	0.93	0.12	0.92	0.14	2.40	-0.03
MWPLS	2 D	0.95	0.10	0.94	0.12	2.91	-0.02

จากการเปรียบเทียบค่า R, SEC, R, SEP, RPD, Bias ของสมการทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ ที่ดีที่สุดที่สร้างขึ้นด้วยวิธีทางสถิติ PLS, MWPLS ในตารางที่ 33 จะพบว่าสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS สามารถทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ได้อย่างแม่นยำกว่าสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ด้วยวิธีทางสถิติ PLS เนื่องจากให้ค่า R เท่ากับ 0.95 และให้ค่า SEC และ SEP เท่ากับ 0.10 และ 0.12 ส่วนวิธี PLS ให้ค่า R, ค่า SEC และ SEP เท่ากับ 0.93, 0.12, 0.14 ดังนั้น สมการทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ที่สร้างขึ้นจากวิธี MWPLS จึงมีประสิทธิภาพในการทำนายค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ มากกว่าวิธี PLS เมื่อพิจารณาจากค่า R ที่ได้จากการสร้างสมการทำนายดังกล่าว แสดงถึงประสิทธิภาพในการนำสมการทำนายดังกล่าวไปใช้ คือ สามารถนำไปใช้ในงานวิจัย (Research) และงานทั่วไป (William, 2001)

การสร้างสมการทำนายที่เหมาะสมในการทำนายค่าปริมาณโปรตีน

1. การวัดค่าปัจจัยคุณภาพในเรื่องค่าปริมาณโปรตีน

จากตัวอย่างที่ผ่านการเตรียมตัวอย่างในข้อ 5.1 และนำมาวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่อง NIR ในข้อ 5.2 ก่อนที่จะนำไปวัดค่าปริมาณโปรตีนในข้อ 5.3 แล้วนำไปสร้างสมการทำนายค่าปริมาณโปรตีน โดยจากตัวอย่างขนมขบเคี้ยวทั้ง 150 หน่วยตัวอย่าง นำมาแบ่งแบบสุ่มออกเป็น 2 กลุ่มได้แก่ ตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการทำนาย (Calibration set) จำนวน 100 หน่วยตัวอย่าง และตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้องของสมการ (Validation set) จำนวน 50 หน่วยตัวอย่าง เพื่อใช้ในการตรวจสอบความแม่นยำของสมการที่สร้างขึ้น โดยได้ผลดังแสดงในตารางที่ 34

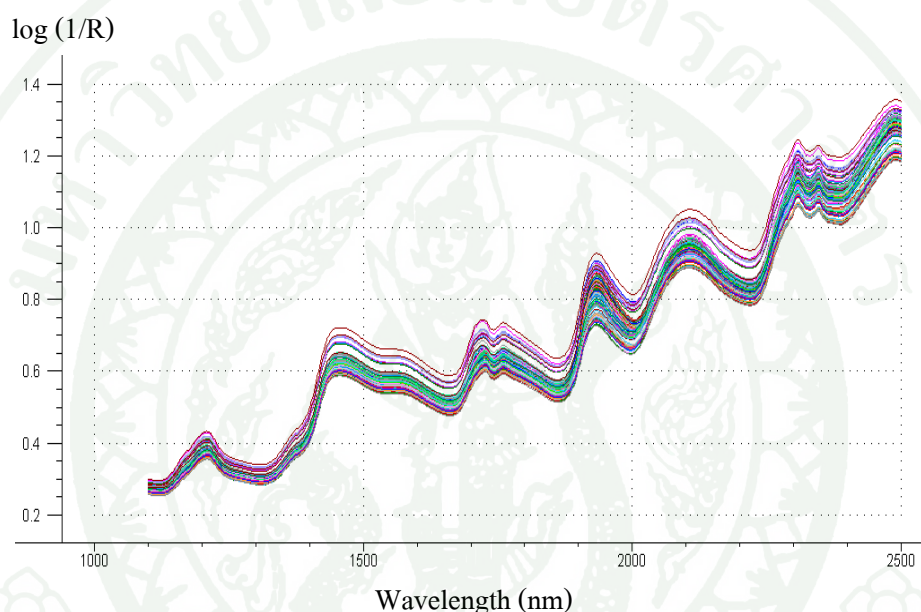
ตารางที่ 34 ข้อมูลค่าสูงสุด ค่าต่ำสุด และค่าพิสัยในเรื่องค่าปริมาณโปรตีนของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว

ชุดข้อมูล	จำนวนข้อมูล	ค่าสูงสุด (%)	ค่าต่ำสุด (%)	ค่าเฉลี่ย	ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน
Calibration	100	3.31	1.81	2.60	0.28
Validation	50	3.27	2.00	2.61	0.28

จากตารางที่ 34 พบว่า ตัวอย่างในกลุ่มสร้างสมการ (Calibration) มีค่าคุณภาพทางเคมีครอบคลุมค่าในกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation) เพื่อให้ข้อมูลของกลุ่มตัวอย่างทั้งสองกลุ่มมีการกระจายของค่าคุณภาพทางเคมีไปในลักษณะเดียวกัน โดยที่ตัวอย่างในกลุ่มสร้างสมการ (Calibration) จะมีขนาดข้อมูลที่กว้างพอควรและควรครอบคลุมข้อมูลของกลุ่มตัวอย่างที่เราจะศึกษาได้ (Chen *et al.*, 2007)

2. การวัดค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยเครื่อง NIR

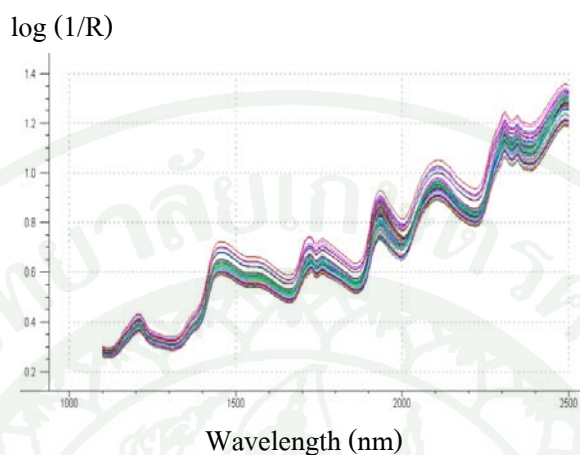
การวัดค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยเครื่อง NIR โดยการบรรจุตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการบดลงใน rotating cup ก่อนนำไปวัดค่าการดูดกลืนแสง จะได้ลักษณะสเปกตรัมและค่าการดูดกลืนแสงที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านขั้นตอนการเตรียมตัวอย่างในข้อ 5.1 ดังแสดงในภาพที่ 113



ภาพที่ 113 สเปกตรัมดิบเริ่มต้นของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมตัวอย่างในข้อ 5.1 จำนวน 150 หน่วยตัวอย่างที่วัดด้วยเครื่อง NIR ตั้งแต่ช่วง 1100-2500 นาโนเมตร

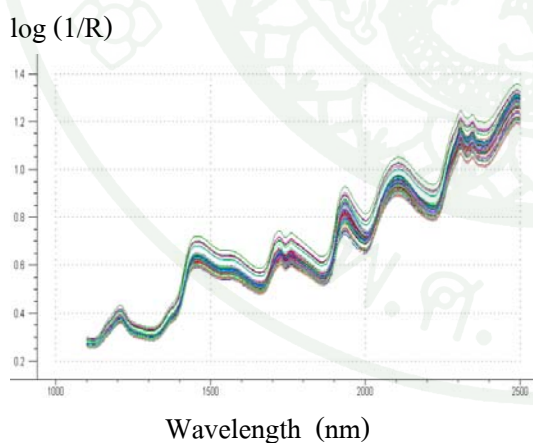
เมื่อพิจารณาจากภาพที่ 113 ลักษณะสเปกตรัมที่ได้ (Original spectrum) จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR จะมีฐานกว้าง เนื่องจากการซ้อนทับกันของจุดยอด ไม่ได้มีจุดยอดแหลมออกจากกันอย่างเด่นชัด ทำให้ยากต่อการเลือกความยาวคลื่นที่เหมาะสมที่สัมพันธ์กับค่าเคมีที่ทำการศึกษา อย่างไรก็ตามปัญหาดังกล่าวสามารถลดความคลาดเคลื่อนได้ ด้วยการปรับแต่งข้อมูลค่าการดูดกลืนแสงจากสเปกตรัมเดิม (Original spectrum) ดังนั้น การปรับแต่งสเปกตรัมจะทำให้ได้สเปกตรัมที่มีจุดยอดชัดเจน ทำให้ทราบตำแหน่งความยาวคลื่นที่มีการสั่นของโมเลกุลมาก ในการปรับแต่งสเปกตรัมที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR มีหลายวิธี เช่น 1) วิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) 2) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) 3) วิธีการหา

อนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) 4) วิธี Multiplicative scatter correction (MSC) ดังแสดง
ในภาพที่ 114-123

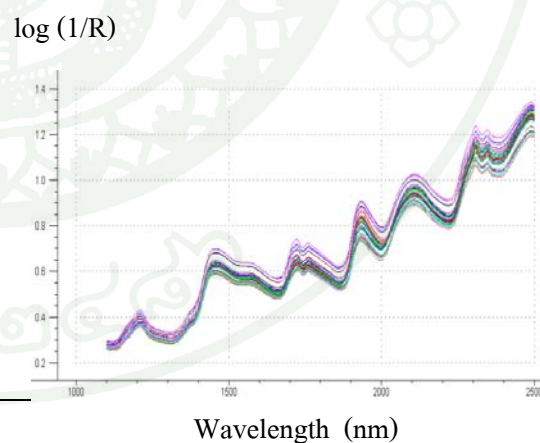


A) สเปกตรัมเริ่มต้น (Original spectrum)

ภาพที่ 114 ลักษณะสเปกตรัมที่ยังไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว
ที่ผ่านการเตรียมตัวอย่างในข้อ 5.1 ซึ่งได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR
ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร

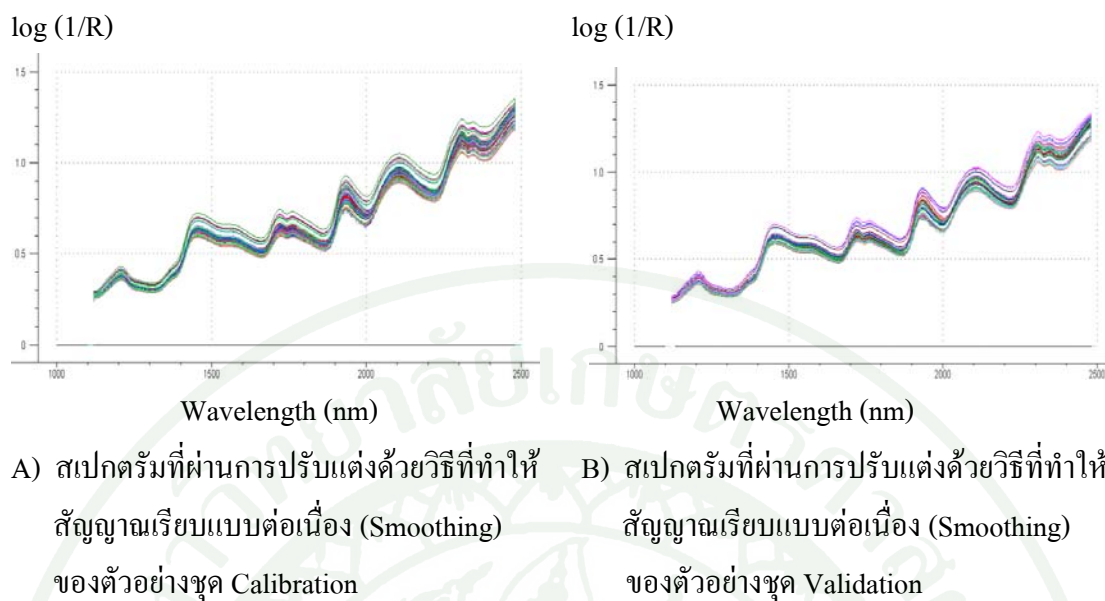


A) สเปกตรัมเริ่มต้น (Original spectrum)
ของตัวอย่างชุด Calibration

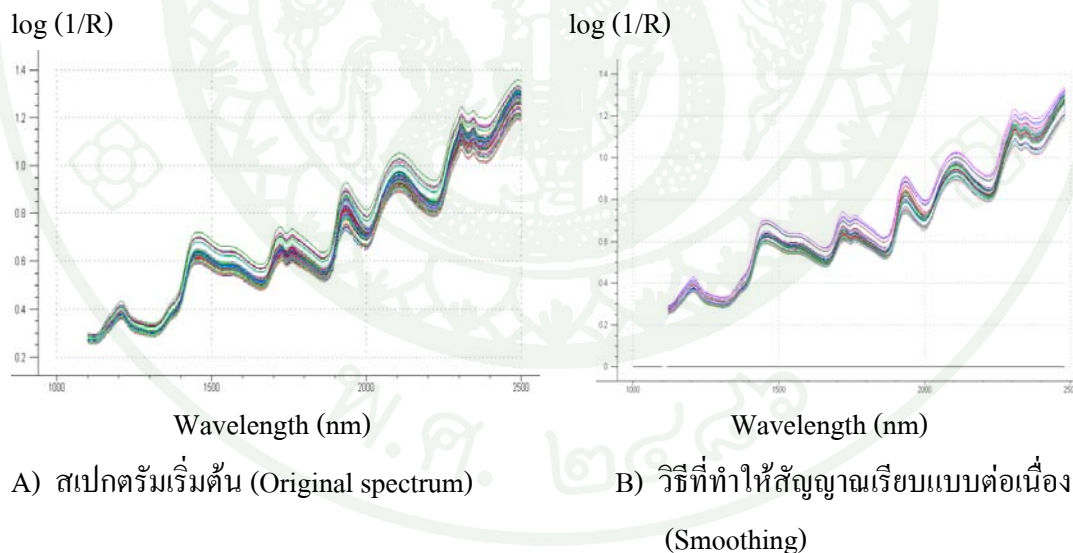


B) สเปกตรัมเริ่มต้น (Original spectrum)
ของตัวอย่างชุด Validation

ภาพที่ 115 ลักษณะสเปกตรัมที่ยังไม่ผ่านการปรับแต่งสำหรับตัวอย่างชุด Calibration
และ Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมตัวอย่างในข้อ 5.1

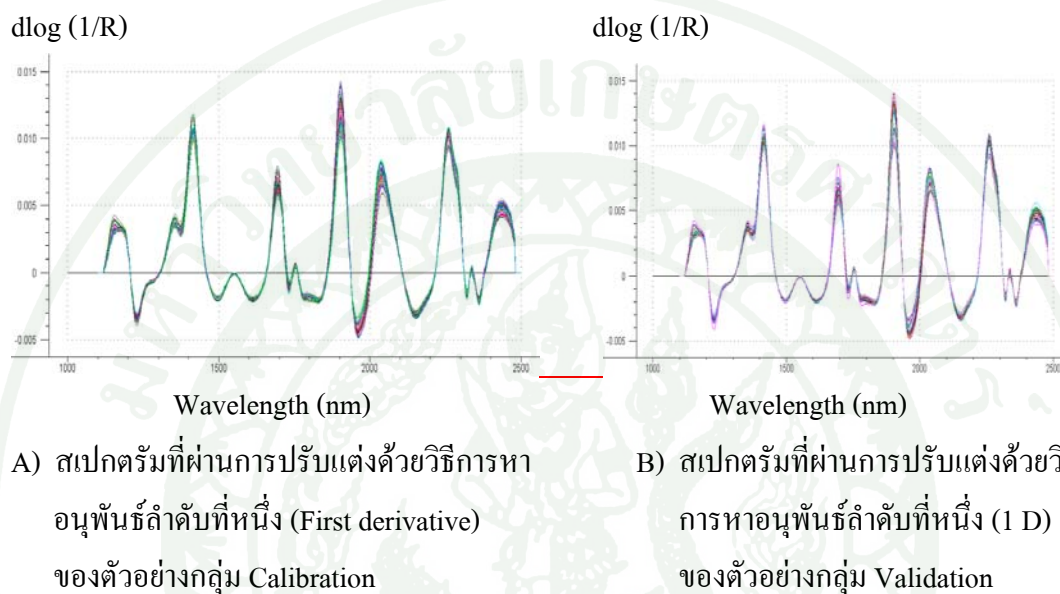


ภาพที่ 116 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างชุด Calibration และตัวอย่างชุด Validation



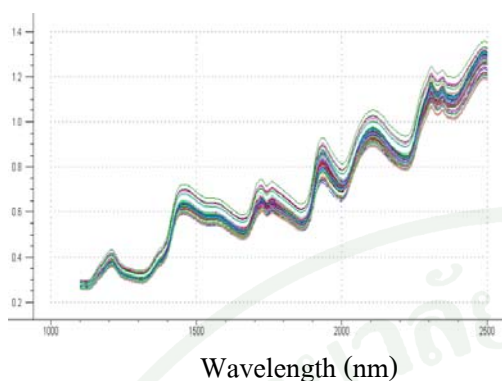
ภาพที่ 117 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง

จากภาพที่ 117 เป็นการเปรียบเทียบค่าสเปกตรัมเริ่มต้นกับสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) จะเห็นได้ว่าสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) จะยังคงรักษาขนาดของยอดแหลมในสเปกตรัมให้มีขนาดเท่ากับสเปกตรัมเริ่มต้น ไม่ว่ายอดแหลมจะมีฐานกว้างหรือแคบก็ตาม



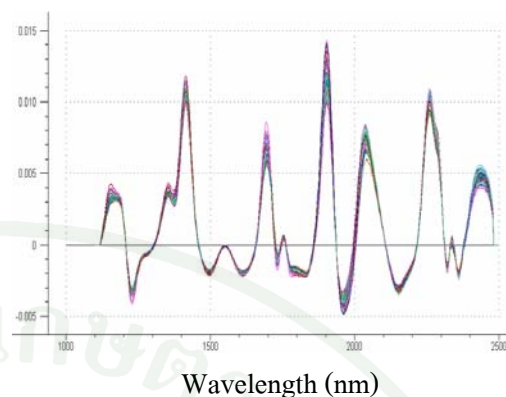
ภาพที่ 118 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (1 D) ของตัวอย่างชุด Calibration และชุด Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว

log (1/R)



A) สเปกตรัมเริ่มต้น (Original Spectrum)

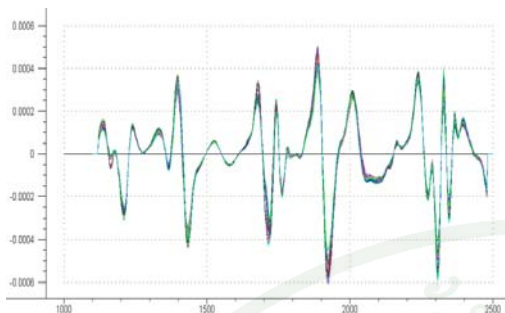
dlog (1/R)



B) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (1 D)

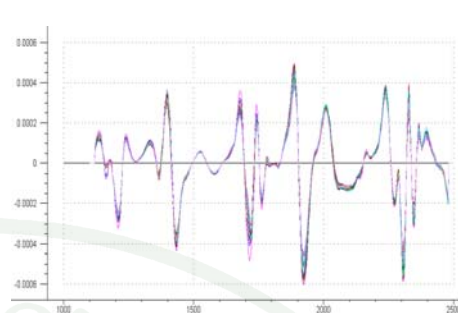
ภาพที่ 119 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง

จากภาพที่ 119 เป็นการเปรียบเทียบสเปกตรัมเริ่มต้นกับสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) จะแยกจุดยอดที่เหลื่อมซ้อนกันในสเปกตรัมออกจากกัน โดยวิธีนี้จะเป็นการนำค่า $\log(1/R)$ ที่ความยาวคลื่นที่ใกล้เคียงกัน 2 ค่ามาลบกัน และจะให้ความหมายเป็นค่าความชันของสเปกตรัมที่แต่ละความยาวคลื่น ซึ่งทำให้แปลความหมายยาก แต่วิธีการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีนี้จะใช้ได้ผลกับตัวอย่างที่มีเนื้อสม่ำเสมอและมีการกระจายตัวอนุภาคอย่างสม่ำเสมอทั่วถึง

$d^2 \log(1/R)$


Wavelength (nm)

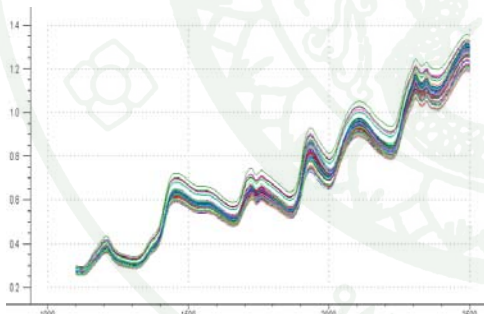
A) สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) ของตัวอย่างกลุ่ม Calibration

 $d^2 \log(1/R)$


Wavelength (nm)

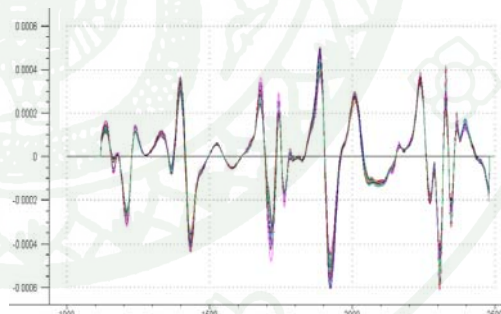
B) สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) ของตัวอย่างกลุ่ม Validation

ภาพที่ 120 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) ของตัวอย่างชุด Calibration และตัวอย่างชุด Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว

 $\log(1/R)$


Wavelength (nm)

A) สเปกตรัมเริ่มต้น (Original spectrum)

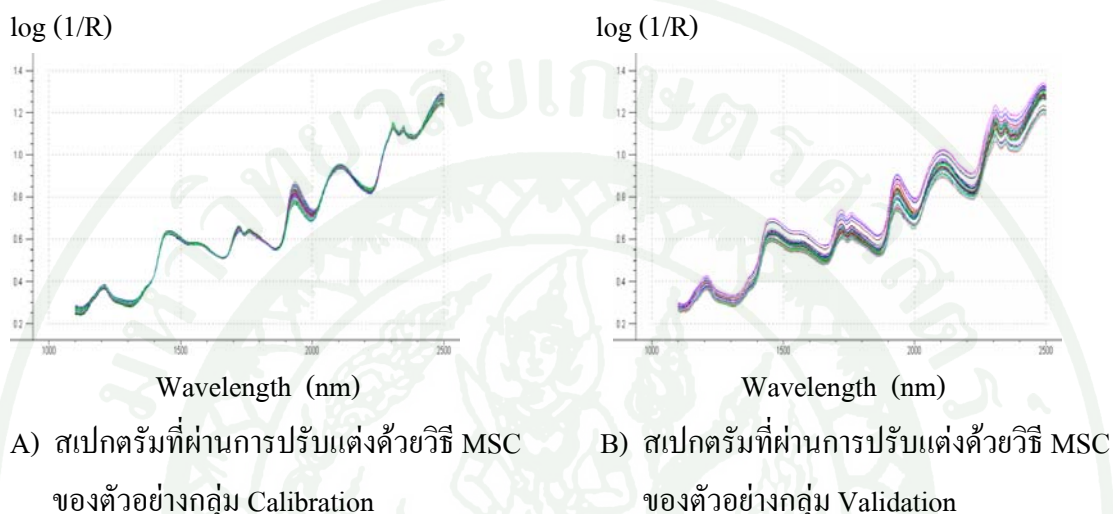
 $d^2 \log(1/R)$


Wavelength (nm)

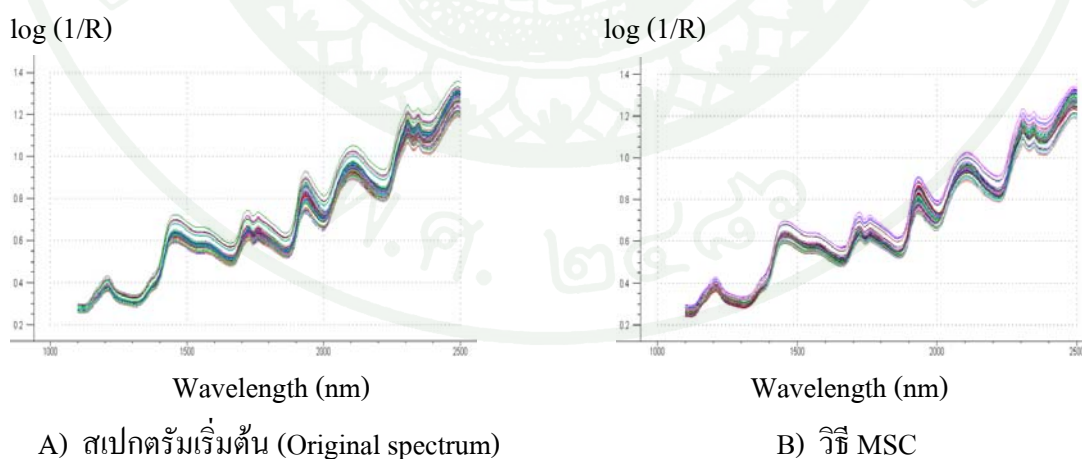
B) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative)

ภาพที่ 121 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง

จากภาพที่ 121 เป็นการเปรียบเทียบสเปกตรัมเริ่มต้นกับสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) จะแยกจุดยอดที่เหลื่อมซ้อนกันในสเปกตรัมออกจากกัน โดยวิธีนี้จะให้จุดยอดสเปกตรัมดั้งเดิมแต่จะเป็นจุดยอดกลับหัว ซึ่งวิธีนี้จะใช้ได้ผลดีกับตัวอย่างที่มีอนุภาคต่างๆ ผสมกัน



ภาพที่ 122 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC ของตัวอย่างชุด Calibration และ Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว



ภาพที่ 123 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง

จากภาพที่ 123 เป็นการเปรียบเทียบสเปกตรัมเริ่มต้นกับสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC จะพบว่าสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC จะมีรูปร่างไม่แตกต่างจากสเปกตรัมเริ่มต้นมากนัก โดยวิธีการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีนี้จะช่วยลดผลที่เกิดจากการกระเจิงแสง (Scattered light) ต่อ NIR สเปกตรัมที่ได้จากการวัดแบบ Diffuse reflectance และแบบ Transmission

3. การสร้างสมการที่เหมาะสมในการทำนายค่าปริมาณโปรตีน

ข้อมูลค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวของกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 หน่วย ตัวอย่าง ที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ทำการบันทึกค่าในช่วงละ 2 นาโนเมตร จะได้ข้อมูลค่าการดูดกลืนแสง จำนวน 701 ค่า กำหนดให้เป็นตัวแปรอิสระ ตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 ตัวอย่าง ที่ผ่านการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR นำไปวิเคราะห์คุณภาพทางเคมีในเรื่องปริมาณโปรตีน ข้อมูลค่าจริงที่ได้จากการวิเคราะห์ทางเคมี กำหนดให้เป็นตัวแปรตาม นำข้อมูลตัวแปรอิสระและตัวแปรตามมาหาความสัมพันธ์ด้วยวิธีทางสถิติเพื่อสร้างสมการที่ใช้ในการทำนายค่าปริมาณโปรตีน วิธีทางสถิติที่นำมาใช้สร้างสมการทำนายค่าปริมาณโปรตีนได้แก่ 1) วิธี Partial Least Squares (PLS) Regression 2) วิธี Moving Window Partial Least Square (MWPLS) ทำการเปรียบเทียบสมการที่สร้างขึ้นจากทั้ง 2 วิธี เพื่อใช้ทำนายค่าปริมาณโปรตีน โดยพิจารณาค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (R) และค่าความคลาดเคลื่อนของสมการในการทำนายค่าปริมาณโปรตีน (Standard Error of Calibration; SEC) โดยมีรายละเอียดดังนี้

3.1 การสร้างสมการทำนายค่าปริมาณโปรตีนด้วยวิธีทางสถิติ Partial Least Squares (PLS) Regression

จากข้อมูลค่าการดูดกลืนแสงที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ที่ความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร บันทึกค่าการดูดกลืนแสงในช่วงละ 2 นาโนเมตร จะได้ข้อมูลจากการวัดค่าจำนวน 701 ค่า เมื่อนำข้อมูลตัวแปรอิสระมาหาความสัมพันธ์กับค่าปริมาณโปรตีนด้วยการจัดกลุ่มตัวแปรเดิม เป็นตัวแปรใหม่หรือแฟกเตอร์ด้วยวิธี PLS

ก่อนทำการจัดกลุ่มตัวแปรใหม่ที่ได้จากข้อมูลค่าการดูดกลืนแสงที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR จะนำข้อมูลที่นำมาทำการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีต่างๆ ได้แก่ 1) วิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) 2) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative)

3) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) 4) วิธี Multiplicative scatter correction (MSC) เพื่อลดความคลาดเคลื่อนเนื่องจากปัจจัยต่างๆ

เมื่อพิจารณาสมการทำนายที่สร้างขึ้นจากช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ดังแสดงในตารางที่ 35 พบว่า สเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง และสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่ง ด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second Derivative) และวิธี Multiplicative scatter correction (MSC) มีความเหมาะสมสำหรับการทำนายค่าปริมาณโปรตีน เนื่องจากสมการทั้งหมด ให้ค่า R สูงกว่า 0.9 และให้ค่า SEC ต่ำ และมีจำนวนแฟกเตอร์ที่เหมาะสม แต่ทั้งนี้พบว่าสมการ ที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการที่การหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) น่าจะมีความเหมาะสมที่สุด เนื่องจากมีค่าการจัดกลุ่มตัวแปรเดิมเป็นตัวแปรใหม่ได้ 5 แฟกเตอร์ โดยให้ค่า R เท่ากับ 0.77 และค่า SEC เท่ากับ 0.16 ตามลำดับ เมื่อทำการพิจารณาค่า สัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression coefficient) ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ดังแสดงในภาพที่ 124 พบว่าที่ตำแหน่งความยาวคลื่น 1418, 1928, 1990 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์ กับค่าปริมาณโปรตีนมาก โดยที่ตำแหน่งความยาวคลื่นดังกล่าวมีข้อมูลสำคัญเกี่ยวข้องกับปริมาณ โปรตีน ซึ่งสอดคล้องกับงานวิจัยของ Hecht and Wood (1956) ที่แสดงให้เห็นว่าที่ตำแหน่ง ความยาวคลื่น 2180 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์อย่างมากกับปริมาณโปรตีนในข้าวสาลี

เมื่อทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง พบว่า สมการที่เหมาะสมดังกล่าวให้ค่า SEP และ Bias เท่ากับร้อยละ 0.21 และ 0.03 ตามลำดับ ดังแสดงในตารางที่ 36 และภาพที่ 129

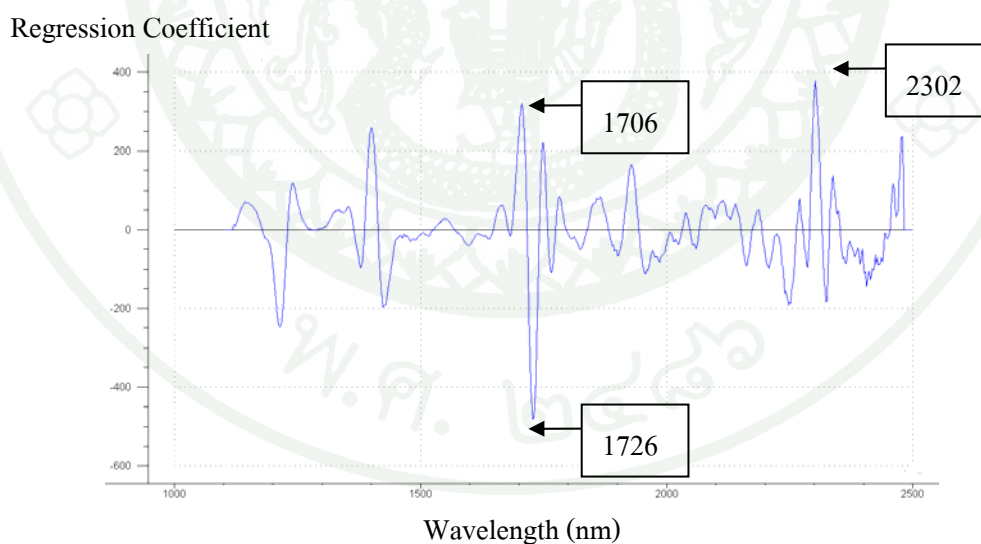
ตารางที่ 35 ค่า R, ค่า SEC ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าโปรตีนของตัวอย่างนมขบเคี้ยวด้วยวิธีทางสถิติ PLS

วิธีปรับแต่ง สเปกตรัม	วิธีการ ทางสถิติ	ช่วงความยาวคลื่นที่ใช้ใน การสร้างสมการ (nm)	F	กลุ่มสร้างสมการ	
				R	SEC (%)
1. Original	PLS	1100 - 2500	6	0.74	0.18
2. Smoothing	PLS	1100 - 2500	9	0.73	0.19
3. 1 D	PLS	1100 - 2500	4	0.73	0.19
4. 2 D	PLS	1100 - 2500	5	0.77	0.16
5. MSC	PLS	1100 - 2500	5	0.76	0.17

หมายเหตุ F หมายถึง จำนวนกลุ่มตัวแปรใหม่ที่ใช้ในการสร้างสมการ

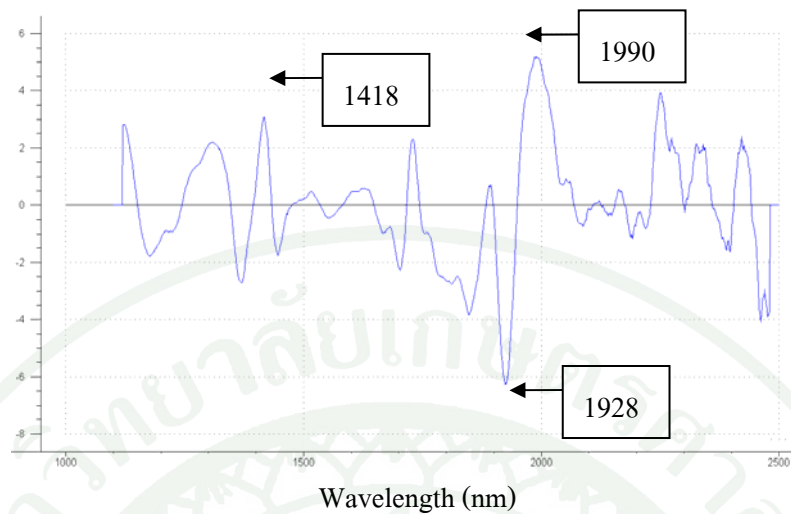
R หมายถึง ค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (Coefficient of correlation)

SEC หมายถึง ค่าความคลาดเคลื่อนของสมการที่ใช้ในการทำนายค่าปริมาณโปรตีนด้วยตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ



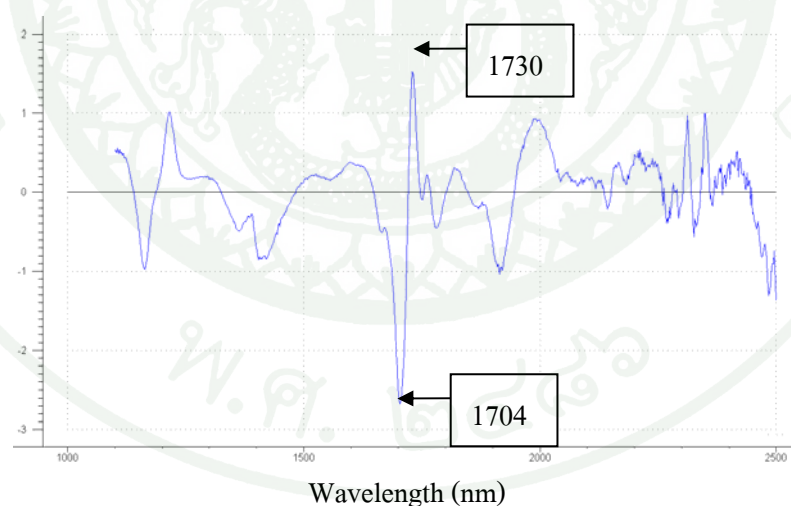
ภาพที่ 124 ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าปริมาณโปรตีนในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการจำนวน 100 ตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative)

Regression Coefficient



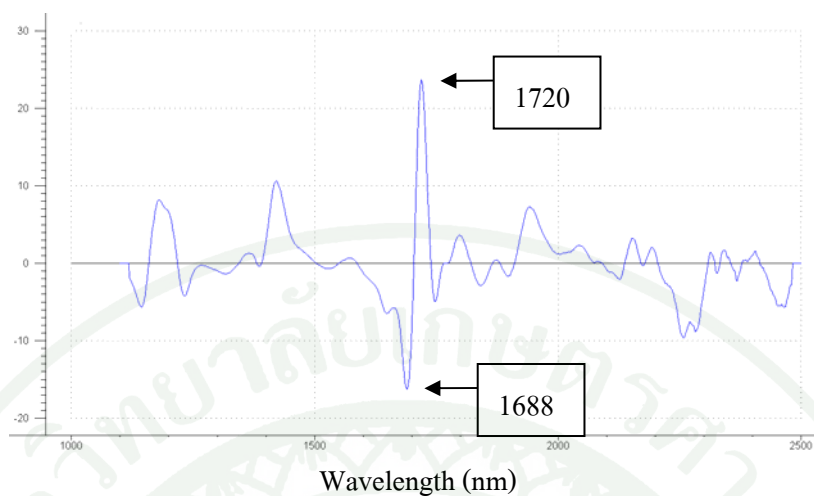
ภาพที่ 125 ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าปริมาณโปรตีนในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการจำนวน 100 ตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี Smoothing

Regression Coefficient



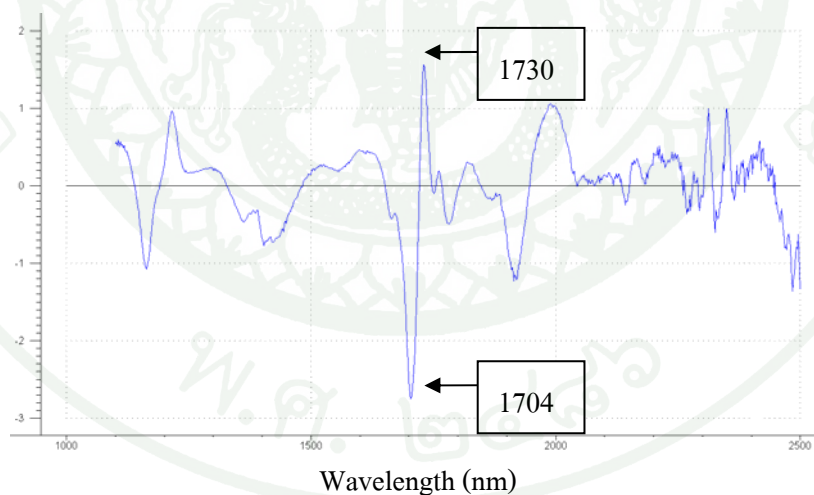
ภาพที่ 126 ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าปริมาณโปรตีน ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการจำนวน 100 ตัวอย่าง ของสมการไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม

Regression Coefficient



ภาพที่ 127 ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้นายค่าปริมาณโปรตีนในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 ตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี 1 D

Regression Coefficient



ภาพที่ 128 ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าปริมาณโปรตีนในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 100 ตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC

3.2 การตรวจสอบความแม่นยำของสมการทำนายที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณโปรตีน ซึ่งสร้างขึ้นจากวิธีทางสถิติ PLS

การตรวจสอบความแม่นยำของสมการทำนายที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณโปรตีน โดยจะใช้ค่าทางเคมีของกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation) จำนวน 50 หน่วยตัวอย่าง ทำการเปรียบเทียบค่าที่ได้จากการทำนายด้วยสมการทำนายที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัม NIR (Predicted value) กับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริง (Actual value) การตรวจสอบความแม่นยำของสมการจะพิจารณาจากค่าความคลาดเคลื่อนจากการทำนายด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Standard Error of Prediction; SEP) และค่าความแตกต่าง (Bias) ระหว่างค่าที่ทำนายได้จากสมการกับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริงของแต่ละสมการ

ทำการตรวจสอบความแม่นยำของสมการทำนายที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณโปรตีนด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง จำนวน 50 หน่วยตัวอย่าง ทำการเปรียบเทียบค่าที่ได้จากการทำนายด้วยสมการทำนายที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัม NIR (Predicted value) กับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริง ดังแสดงในตารางที่ 36 และภาพที่ 129

ตารางที่ 36 เปรียบเทียบค่า R, ค่า SEP, ค่า RPD และค่า Bias ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนาย
ค่าปริมาณโปรตีนด้วยวิธีทางสถิติ PLS

วิธีปรับแต่งสเปกตรัม	วิธีทางสถิติ	ความยาวคลื่น (นาโนเมตร)	ขั้นตอน Validation			
			R	SEP (%)	RPD	Bias
1. Original	PLS	1100 - 2500	0.75	0.19	1.47	0.04
2. Smoothing	PLS	1100 - 2500	0.72	0.21	1.33	0.03
3. 1 D	PLS	1100 - 2500	0.76	0.18	1.56	0.04
4. 2 D	PLS	1100 - 2500	0.77	0.18	1.56	0.04
5. MSC	PLS	1100 - 2500	0.74	0.19	1.47	0.04

หมายเหตุ SEP หมายถึง ค่าความคลาดเคลื่อนของสมการที่ใช้ทำนายโปรตีนด้วยตัวอย่างกลุ่ม
ตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)

Bias หมายถึง ค่าความแตกต่างระหว่างค่าที่ทำนายได้จากสมการที่สร้างขึ้นกับ
ค่าที่วิเคราะห์ได้ทางเคมี

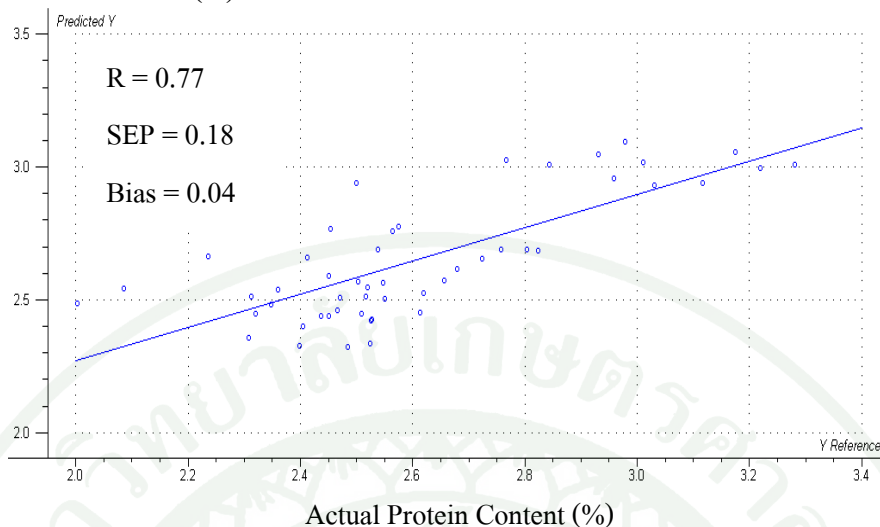
PLS หมายถึง วิธีทางสถิติ Partial Least Squares Regression

RPD หมายถึง อัตราส่วนของ SEP ต่อ SD

1 D หมายถึง วิธี First derivative

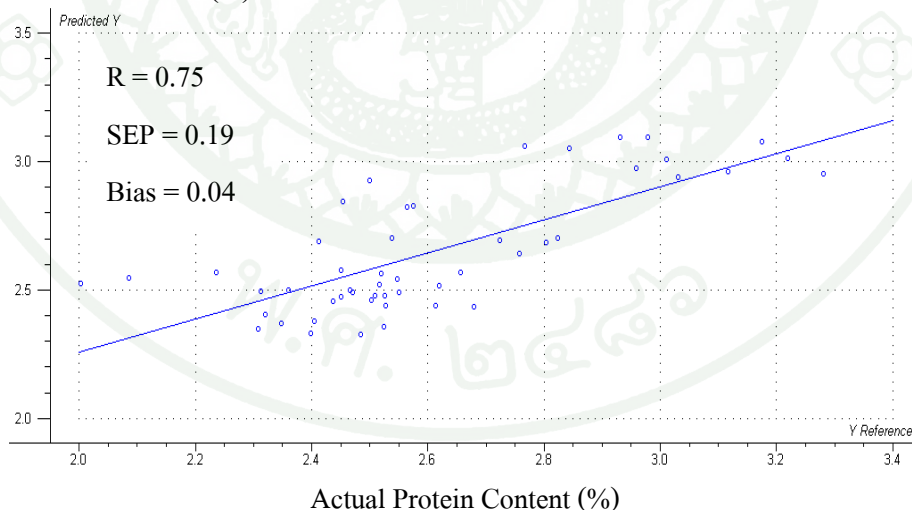
2 D หมายถึง วิธี Second derivative

Predicted Protein Content (%)



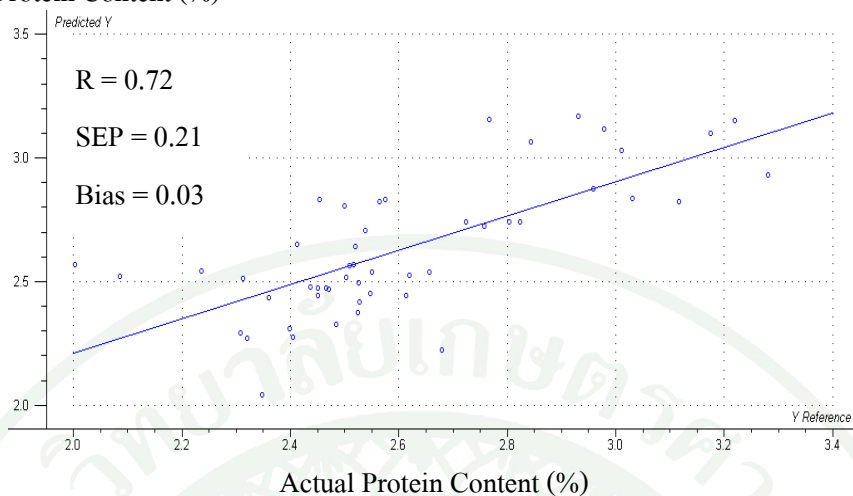
ภาพที่ 129 ค่าปริมาณโปรตีนของตัวอย่างนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)

Predicted Protein Content (%)



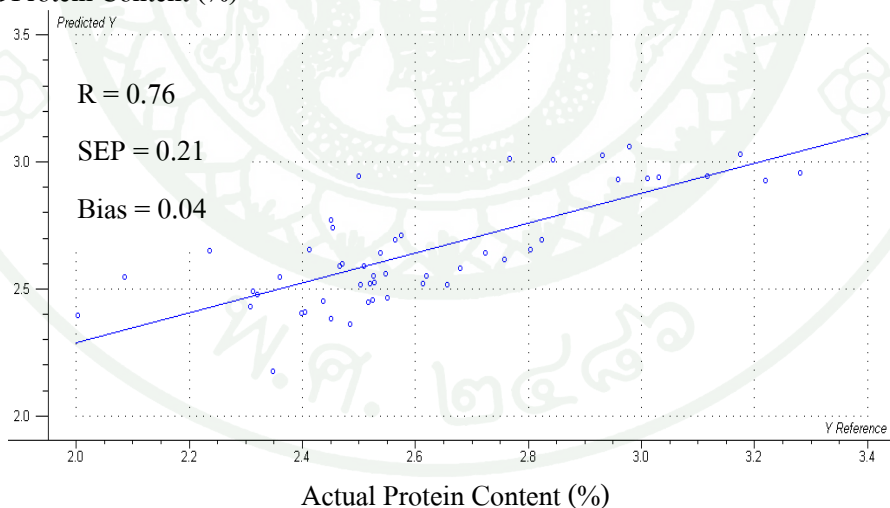
ภาพที่ 130 ค่าปริมาณโปรตีนของตัวอย่างนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)

Predicted Protein Content (%)



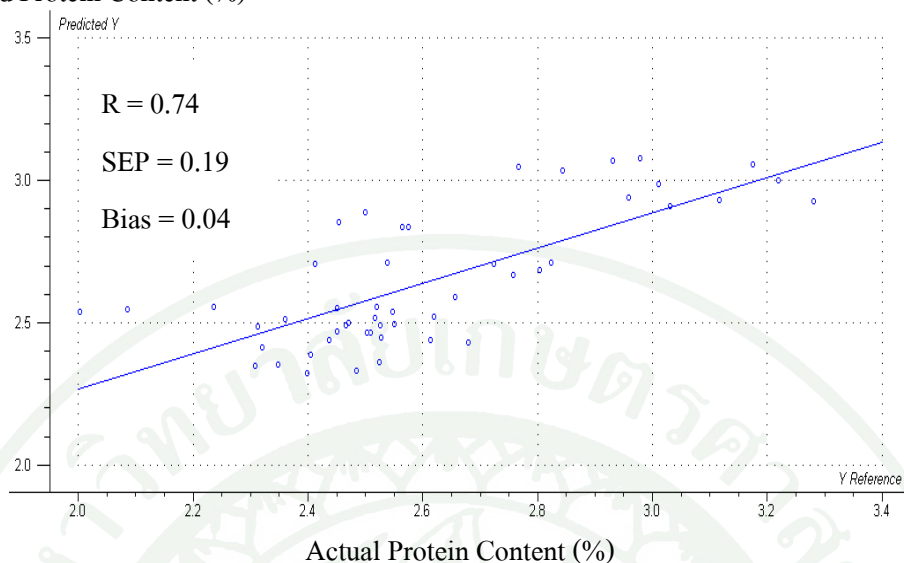
ภาพที่ 131 ค่าปริมาณโปรตีนของตัวอย่างนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)

Predicted Protein Content (%)



ภาพที่ 132 ค่าปริมาณโปรตีนของตัวอย่างนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (1 D) ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง

Predicted Protein Content (%)



ภาพที่ 133 ค่าปริมาณโปรตีนของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี MSC ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)

จากผลการสร้างสมการทำนายปริมาณโปรตีน ด้วยวิธีทางสถิติ PLS พบว่า สมการทำนายที่ดีที่สุดสร้างขึ้นจากวิธีสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ทั้งนี้ อาจเนื่องมาจากสเปกตรัมเริ่มต้นมีการซ้อนทับกัน มีลักษณะฐานกว้างเนื่องจากการซ้อนทับกันของจุดยอด ไม่ได้มีจุดยอดแหลมแยกออกจากกันอย่างชัดเจน ทั้งนี้ Osborne *et al.* (1993) ได้อธิบายว่าเกิดขึ้นเนื่องมาจากการสั่นแบบโอเวอร์โทนและแบบคอมบินั่นของการสั่นแบบพื้นฐานซึ่งทำให้ยากต่อการเลือกความยาวคลื่นที่เหมาะสมที่มีความสัมพันธ์กับค่าที่ทำการศึกษา ดังนั้น เมื่อนำข้อมูลสเปกตรัมเริ่มต้นไปปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ก่อนนำไปใช้ในการสร้างสมการทำนายปริมาณโปรตีน จะสามารถช่วยแก้ปัญหาดังกล่าวได้ กล่าวคือ สามารถช่วยลดความคลาดเคลื่อนของการซ้อนทับกันของจุดยอดดังกล่าวได้ ซึ่ง Osborne *et al.* (1993) กล่าวว่าวิธีการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีนี้เป็นการจัดฟิสิกส์ที่ซ้อนทับกัน และลดผลกระทบจากการเลื่อนของเส้นฐาน (Baseline) ที่เกิดจากการกระเจิงแสง ทำให้ได้สเปกตรัมที่มีฐานแคบและเห็นจุดยอดแยกออกจากกันอย่างชัดเจน แต่จุดยอดของสเปกตรัมเริ่มต้นจะเปลี่ยนเป็นจุดยอดที่อยู่ตรงข้ามและตรงกับจุดยอดเริ่มต้นอนุพันธ์ (2552) อธิบายว่าวิธี Second derivative ใช้ได้ผลดีกับตัวอย่างที่มีขนาดอนุภาคต่างๆ

ผสมกันอยู่ ซึ่งสอดคล้องกับตัวอย่างที่ใช้ในการวิจัยครั้งนี้เนื่องจากตัวอย่างขนมขบเคี้ยวจะนำมาปั่นด้วยเครื่องปั่นก่อนนำมาทำการวิเคราะห์ เมื่อทำการพิจารณาค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการ (Regression coefficient) ของความยาวคลื่นในช่วง 1100-2500 นาโนเมตร ดังแสดงในภาพที่ 124 พบว่า ที่ความยาวคลื่นตำแหน่ง 1706, 1726, 2302 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับปริมาณโปรตีนสูง เนื่องจากที่ความยาวคลื่น 2302 นาโนเมตร มีข้อมูลสำคัญที่เกี่ยวข้องกับคอมบินีชันของ N-H

3.3 การสร้างสมการทำนายค่าปริมาณโปรตีนด้วยวิธีทางสถิติ Moving Window Partial Least Squares (MWPLS)

จากการนำสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการต่างๆ ได้แก่ วิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) วิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative) วิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) และวิธี Multiplicative scatter correction (MSC) รวมทั้งสมการที่ไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม มาวิเคราะห์ด้วยโปรแกรม In-house- written in MATLAB เพื่อหาช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสมในการสร้างสมการ ได้ผลดังแสดงในภาพที่ 134-139 เมื่อพิจารณาจากค่า log (SSR) พบว่า ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสมที่เป็น Informative region มีหลายช่วง ดังแสดงในตารางที่ 37 และเมื่อนำช่วงความยาวคลื่นดังกล่าวมาสร้างสมการทำนายได้ผลดังแสดงในตารางที่ 37 ซึ่งพบว่าสมการที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสองในช่วงความยาวคลื่น 1646-1746, 1814-1872, 2190-2230, 2240-2260, 2294-2320 นาโนเมตร ให้สมการที่เหมาะสมที่สุดสำหรับการทำนายปริมาณโปรตีน โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มตัวแปรเดิมเป็นตัวแปรใหม่ได้ 4 แฟกเตอร์ และให้ค่า R และ SEC เท่ากับ 0.76 และ 0.18 ตามลำดับ เมื่อทำการพิจารณาค่าสัมประสิทธิ์การถดถอย (Regression coefficient) ของสมการที่ความยาวคลื่นในช่วง 1646-1746, 1814-1872, 2190-2230, 2240-2260, 2294-2320 นาโนเมตร ดังแสดงในภาพที่ 135 พบว่า ที่ความยาวคลื่นตำแหน่ง 1728, 1746 และ 2304 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับค่าปริมาณโปรตีนสูง ซึ่งสอดคล้องกับงานวิจัยของ Kamishikiryo *et al.* (1991) ที่แสดงให้เห็นว่าที่ความยาวคลื่นดังกล่าวมีความสัมพันธ์สูงสุดที่ใช้ในการประเมินปริมาณโปรตีนในอาหาร โดยที่ความยาวคลื่นดังกล่าวจะไม่มีอิทธิพลของเกลือ ซูโครส กรดอะมิโน หรือน้ำมันเข้ามาเกี่ยวข้อง

ตารางที่ 37 ค่า R และค่า SEC ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณโปรตีนของตัวอย่าง
ขนมขบเคี้ยวด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS

วิธีปรับแต่งสเปกตรัม	วิธีทางสถิติ	ความยาวคลื่น (nm)	F	ขั้นตอน Calibration	
				R	SEC (%)
1. Original	MWPLS	1100 – 1120	3	0.51	0.24
2. Original	MWPLS	1790 – 1810	3	0.47	0.25
3. Original	MWPLS	1840 – 1870	3	0.54	0.24
4. Original	MWPLS	1900 – 1920	2	0.56	0.23
5. Original	MWPLS	2140 – 2180	3	0.66	0.21
6. Original	CMWPLS	1100 – 1120, 1790 – 1810, 1840 – 1870, 1900 – 1920, 2140 – 2180	5	0.87	0.14
7. Smoothing	MWPLS	1820 – 1850	4	0.71	0.20
8. Smoothing	MWPLS	1890 – 1910	3	0.58	0.23
9. Smoothing	MWPLS	2130 – 2180	4	0.68	0.21
10. Smoothing	CMWPLS	1820 – 1850, 1890 – 1910, 2130 – 2180	8	0.74	0.18
11. 1 D	MWPLS	1100 – 1126	3	0.53	0.24
12. 1 D	MWPLS	1766 – 1796	5	0.65	0.22
13. 1 D	MWPLS	1816 – 1900	7	0.70	0.20
14. 1 D	MWPLS	2220 – 2240	4	0.69	0.20
15. 1 D	MWPLS	2260 – 2310	5	0.71	0.20
16. 1 D	CMWPLS	1100 – 1126, 1766 – 1796, 1816 – 1900, 2220 – 2240, 2260 – 2310	5	0.75	0.19

ตารางที่ 37 (ต่อ)

วิธีปรับแต่งสเปกตรัม	วิธีทางสถิติ	ความยาวคลื่น (nm)	F	ขั้นตอน Calibration	
				R	SEC (%)
17. 2 D	MWPLS	1646 – 1746	4	0.68	0.21
18. 2 D	MWPLS	1814 – 1872	6	0.72	0.20
19. 2 D	MWPLS	2190 – 2230	2	0.64	0.22
20. 2 D	MWPLS	2240 – 2260	3	0.63	0.22
21. 2 D	MWPLS	2294 – 2320	2	0.61	0.22
22. 2 D	CMWPLS	1646 – 1746, 1814 – 1872, 2190 – 2230, 2240 – 2260, 2294 – 2320	4	0.76	0.18
23. MSC	MWPLS	1100 – 1120	4	0.67	0.21
24. MSC	MWPLS	1154 – 1200	3	0.68	0.21
25. MSC	MWPLS	1670 – 1730	4	0.71	0.20
26. MSC	MWPLS	1830 – 1870	2	0.45	0.25
27. MSC	MWPLS	1894 – 1924	1	0.46	0.25
28. MSC	MWPLS	2140 – 2200	5	0.74	0.19
29. MSC	MWPLS	1100 – 1120, 1154 – 1200, 1670 – 1730, 1830 – 1870, 1894 – 1924, 2140 – 2200	12	0.75	0.19

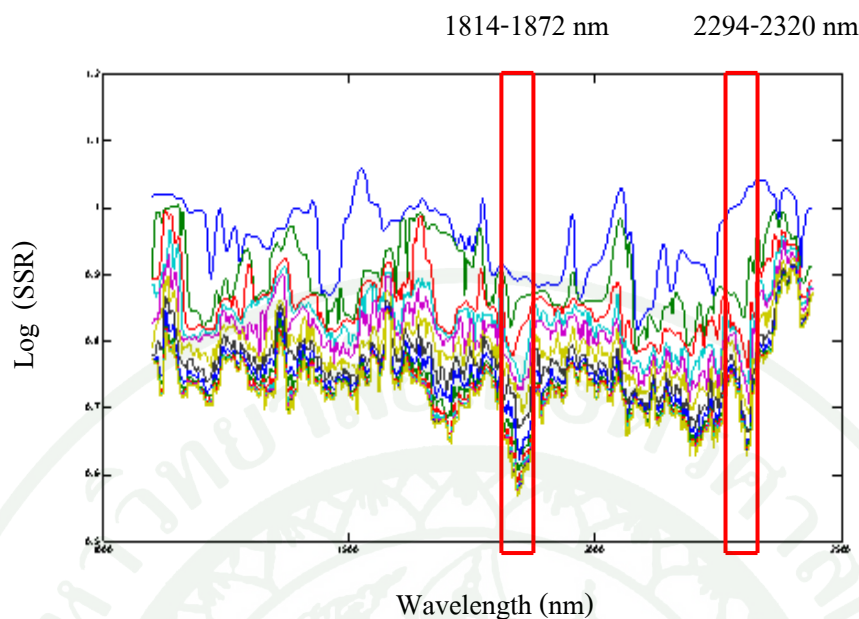
หมายเหตุ F หมายถึง จำนวนกลุ่มตัวแปรใหม่ที่ใช้ในการสร้างสมการ

R หมายถึง ค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (Coefficient of correlation)

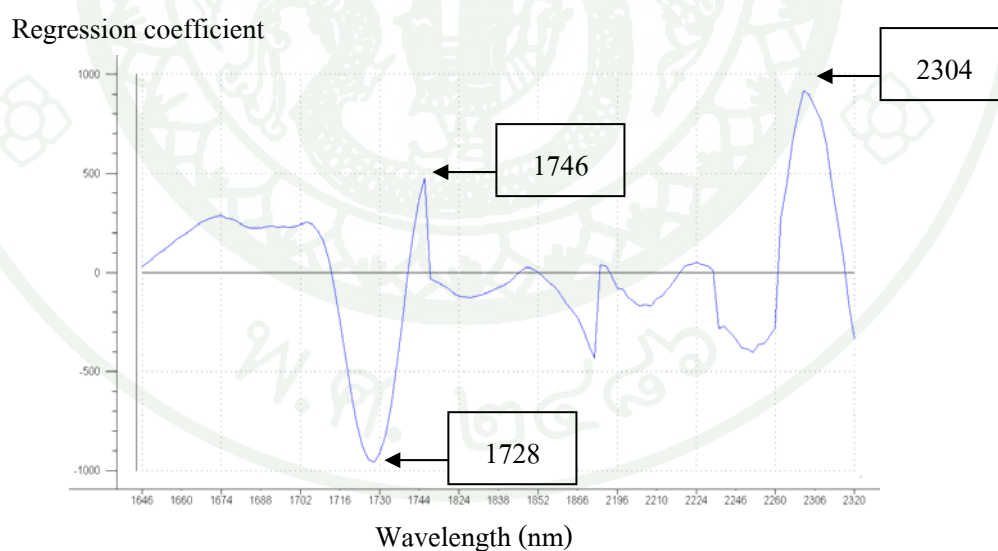
SEC หมายถึง ค่าความคลาดเคลื่อนของสมการที่ใช้ในการทำนายค่าปริมาณโปรตีน
ด้วยตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ (Calibration)

1 D หมายถึง วิธี First derivative

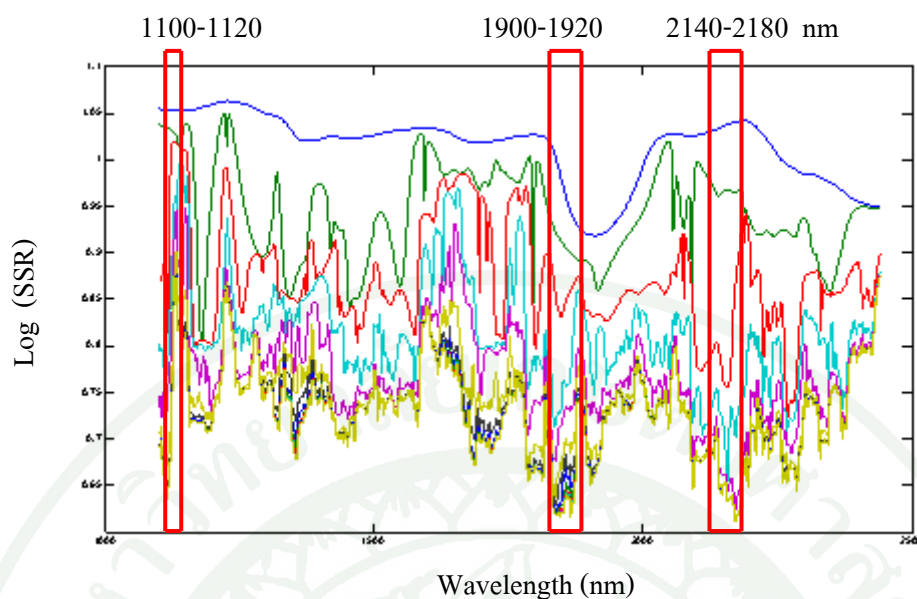
2 D หมายถึง วิธี Second derivative



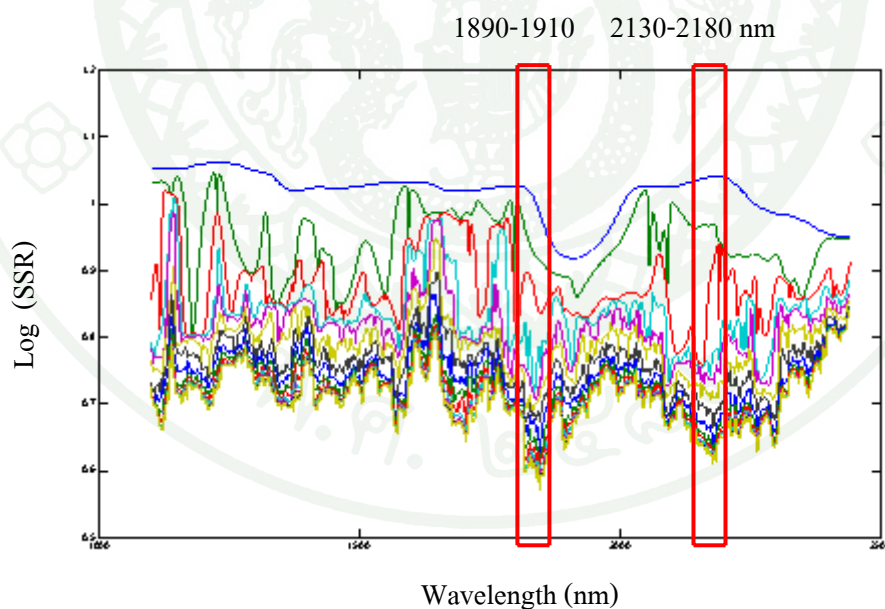
ภาพที่ 134 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าโปรตีนจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative)



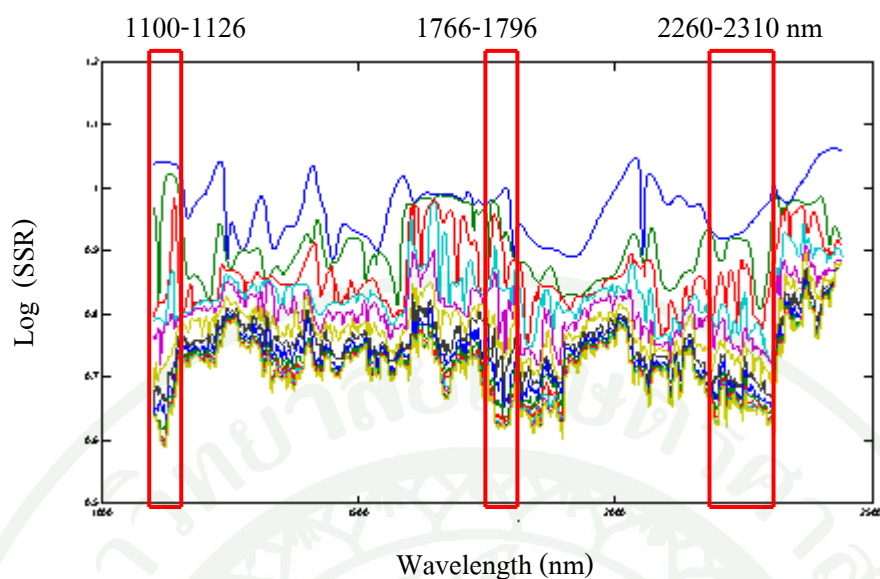
ภาพที่ 135 ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอย (Regression coefficient) ที่ใช้ในการทำนายค่าปริมาณโปรตีนในตัวอย่างขนมขบเคี้ยว ที่ช่วงความยาวคลื่น 1646-1746, 1814-1872, 2190-2230, 2240-2260, 2294-2320 นาโนเมตร จากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative)



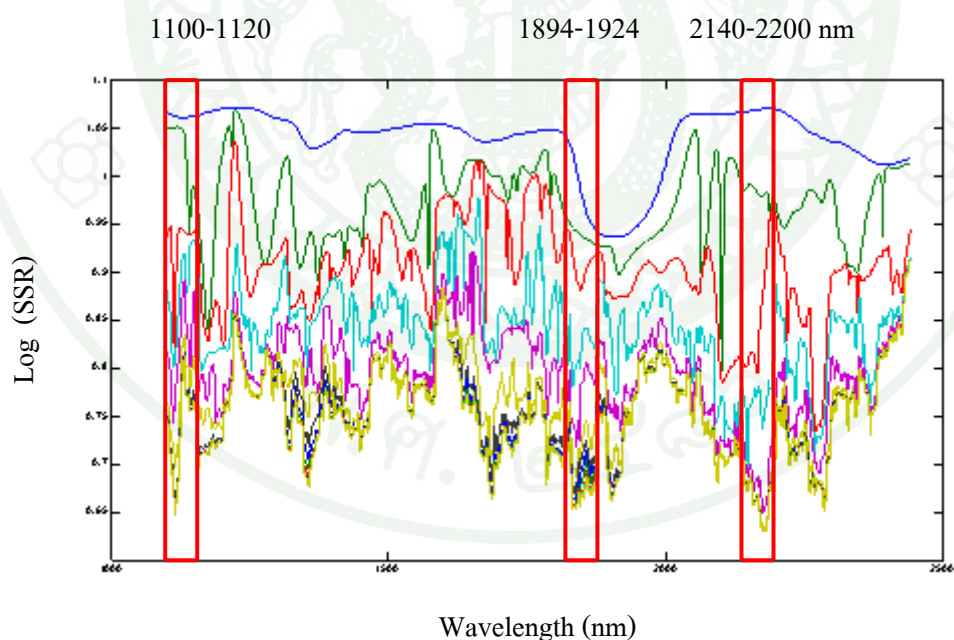
ภาพที่ 136 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าโปรตีนจากสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม



ภาพที่ 137 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าโปรตีนจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing)



ภาพที่ 138 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าโปรตีนจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative)



ภาพที่ 139 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าโปรตีนจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี MSC

3.4 การตรวจสอบความแม่นยำของสมการทำนายที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายปริมาณโปรตีน ซึ่งสร้างขึ้นจากวิธีทางสถิติ MWPLS

ทำการตรวจสอบความแม่นยำของสมการทำนายที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายปริมาณโปรตีนซึ่งสร้างขึ้นจากวิธีทางสถิติ MWPLS ด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง จำนวน 50 หน่วยตัวอย่าง ทำการเปรียบเทียบค่าที่ได้จากการทำนายด้วยสมการที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัม NIR (Predicted value) กับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริง ดังแสดงในตารางที่ 38

ตารางที่ 38 เปรียบเทียบค่า R, ค่า SEP, RPD และค่า Bias ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณโปรตีนด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS

วิธีปรับแต่งสเปกตรัม	วิธีทางสถิติ	ความยาวคลื่น (นาโนเมตร)	ขั้นตอน Validation			
			R	SEP (%)	RPD	Bias
1. Original	MWPLS	1100 – 1120	0.40	0.26	1.08	0.01
2. Original	MWPLS	1790 – 1810	0.50	0.24	1.17	-0.01
3. Original	MWPLS	1840 – 1870	0.65	0.22	1.27	0.04
4. Original	MWPLS	1900 – 1920	0.65	0.21	1.33	0.05
5. Original	MWPLS	2140 – 2180	0.70	0.20	1.40	0.01
6. Original	CMWPLS	1100 – 1120, 1790 – 1810, 1840 – 1870, 1900 – 1920, 2140 – 2180	0.68	0.23	1.22	0.04
7. Smoothing	MWPLS	1820 – 1850	0.69	0.20	1.40	0.05
8. Smoothing	MWPLS	1890 – 1910	0.65	0.21	1.33	0.04
9. Smoothing	MWPLS	2130 – 2180	0.71	0.20	1.40	0.02
10. Smoothing	MWPLS	1820 – 1850, 1890 – 1910, 2130 – 2180	0.75	0.19	1.47	0.03

ตารางที่ 38 (ต่อ)

วิธีปรับแต่งสเปกตรัม	วิธีทางสถิติ	ความยาวคลื่น (นาโนเมตร)	ขั้นตอน Validation			
			R	SEP (%)	RPD	Bias
11. 1 D	MWPLS	1100 – 1126	0.69	0.20	1.40	0.01
12. 1 D	MWPLS	1766 – 1796	0.60	0.23	1.22	0.06
13. 1 D	MWPLS	1816 – 1900	0.76	0.18	1.56	0.06
14. 1 D	MWPLS	2220 – 2240	0.59	0.24	1.17	0.05
15. 1 D	MWPLS	2260 – 2310	0.70	0.20	1.40	0.06
16. 1 D	MWPLS	1100 – 1126, 1766 – 1796, 1816 – 1900, 2220 – 2240, 2260 – 2310	0.74	0.19		0.04
17. 2 D	MWPLS	1646 – 1746	0.66	0.21	1.33	0.06
18. 2 D	MWPLS	1814 – 1872	0.74	0.19	1.47	0.05
19. 2 D	MWPLS	2190 – 2230	0.67	0.21	1.33	0.002
20. 2 D	MWPLS	2240 – 2260	0.67	0.21	1.33	0.001
21. 2 D	MWPLS	2294 – 2320	0.55	0.23	1.22	0.05
22. 2 D	MWPLS	1646 – 1746, 1814 – 1872, 2190 – 2230, 2240 – 2260, 2294 – 2320	0.75	0.19	1.47	0.04
23. MSC	MWPLS	1100 – 1120	0.36	0.33	0.85	-0.02
24. MSC	MWPLS	1154 – 1200	0.29	0.33	0.85	-0.02
25. MSC	MWPLS	1670 – 1730	0.55	0.29	0.97	0.01
26. MSC	MWPLS	1830 – 1870	0.56	0.30	0.93	-0.03
27. MSC	MWPLS	1894 – 1924	0.62	0.23	1.22	0.04

ตารางที่ 38 (ต่อ)

วิธีปรับแต่งสเปกตรัม	วิธีทางสถิติ	ความยาวคลื่น (นาโนเมตร)	ขั้นตอน Validation			
			R	SEP (%)	RPD	Bias
28. MSC	MWPLS	2140 – 2200	0.61	0.24	1.17	0.03
29. MSC	MWPLS	1100 – 1120, 1154 – 1200, 1670 – 1730, 1830 – 1870, 1894 – 1924, 2140 – 2200	0.71	0.21	1.33	0.01

หมายเหตุ	SEP	หมายถึง ค่าความคลาดเคลื่อนของสมการที่ใช้ทำนายค่าปริมาณโปรตีน ด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)
	Bias	หมายถึง ค่าความแตกต่างระหว่างค่าที่ทำนายได้จากสมการที่สร้างขึ้นกับ ค่าที่วิเคราะห์ได้ทางเคมี
	MWPLS	หมายถึง วิธีทางสถิติ Moving Window Partial Least Squares Regression
	RPD	หมายถึง อัตราส่วนของ SEP ต่อ SD

จากการเปรียบเทียบข้อมูลของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณโปรตีน ทั้ง 29 สมการ ในตารางที่ 38 พบว่า สมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี MWPLS ที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second Derivative) ที่ความยาวคลื่นในช่วง 1646-1746, 1814-1872, 2190-2230, 2240-2260, 2294-2320 นาโนเมตร มีความเหมาะสมและมีความแม่นยำในการทำนายค่าปริมาณโปรตีนมากที่สุด เนื่องจากมีค่า R เท่ากับ 0.75 และมีค่าความคลาดเคลื่อนของสมการทำนายค่าปริมาณโปรตีนต่ำ คือ มีค่า SEC และ SEP เท่ากับ 0.18% และ 0.19% ทั้งนี้ อาจเนื่องมาจากเมื่อนำข้อมูลสเปกตรัมเริ่มต้นไปปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ก่อนนำไปใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าโปรตีนจะสามารถช่วยแก้ปัญหาการซ้อนทับกันของจุดยอดได้ กล่าวคือ สามารถช่วยลดความคลาดเคลื่อนของการซ้อนทับกันของจุดยอดดังกล่าวได้ ซึ่ง Osborne *et al.* (1993) กล่าวว่าวิธีการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีนี้เป็นวิธีการกำจัดฟิสิกที่ซ้อนทับกัน และลดผลกระทบจากการเลื่อนของเส้นฐาน (Baseline) ที่เกิดจากการกระเจิงแสง

ทำให้ได้สเปกตรัมที่มีฐานแคบและเห็นจุดยอดแยกออกจากกันอย่างชัดเจน แต่จุดยอดของสเปกตรัมเริ่มต้นจะเปลี่ยนเป็นจุดยอดที่อยู่ตรงข้ามและตรงกับจุดยอดเริ่มต้น อนุพันธ์ (2552) อธิบายว่าวิธี Second derivative ใช้ได้ดีกับตัวอย่างที่มีขนาดอนุภาคต่างๆ ผสมกันอยู่ ซึ่งสอดคล้องกับตัวอย่างที่ใช้ในการวิจัยครั้งนี้เนื่องจากจะมีการนำตัวอย่างขนมขบเคี้ยวไปปั่นการทำการวิเคราะห์

ตารางที่ 39 เปรียบเทียบค่า R, SEC, R, SEP, RPD, Bias ของสมการทำนายค่าปริมาณโปรตีนที่ดีที่สุดที่สร้างขึ้นด้วยวิธีทางสถิติ PLS, MWPLS

วิธีทางสถิติ	วิธีปรับแต่ง สเปกตรัม	ขั้นตอน Calibration		ขั้นตอน Validation			
		R	SEC (%)	R	SEP (%)	RPD	Bias
PLS	2 D	0.77	0.16	0.77	0.18	1.56	0.04
MWPLS	2 D	0.76	0.18	0.75	0.19	1.47	0.04

จากการเปรียบเทียบค่า R, SEC, R, SEP, RPD, Bias ของสมการทำนายค่าปริมาณโปรตีนที่ดีที่สุดที่สร้างขึ้นด้วยวิธีทางสถิติ PLS และ MWPLS ในตารางที่ 39 พบว่า สมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณโปรตีนด้วยวิธีทางสถิติ PLS สามารถทำนายค่าปริมาณโปรตีนได้อย่างแม่นยำมากกว่าสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณโปรตีนด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS เนื่องจากให้ค่า R เท่ากับ 0.77 นอกจากนี้ยังให้ค่า SEC และ SEP เท่ากับ 0.16 และ 0.18 ตามลำดับ ในขณะที่สมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายปริมาณโปรตีนด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS ให้ค่า R เท่ากับ 0.76 ค่า SEC และ SEP เท่ากับ 0.18 และ 0.19 ตามลำดับ ดังนั้น สมการทำนายค่าปริมาณโปรตีนที่สร้างขึ้นจากวิธีทางสถิติ PLS จึงมีประสิทธิภาพในการทำนายค่าได้แม่นยำกว่าสมการทำนายค่าปริมาณโปรตีนที่สร้างขึ้นจากวิธีทางสถิติ MWPLS และจากสมการที่สร้างขึ้นเมื่อพิจารณาจากค่า R ที่ได้ ซึ่งสามารถแสดงถึงประสิทธิภาพของสมการต่อการนำไปใช้สามารถสรุปได้ว่าสมการสำหรับทำนายปริมาณโปรตีนของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวสามารถนำไปใช้ในการทำนายเพื่อการแบ่งระดับปริมาณอย่างหยาบ (Rough screening) (William, 2001) ทั้งนี้ อาจเนื่องมาจากตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่นำมาใช้ในการสร้างสมการทำนายปริมาณโปรตีนในงานวิจัยครั้งนี้มีความหลากหลายไม่เพียงพอ

การสร้างสมการทำนายที่เหมาะสมในการทำนายค่าปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมต

1. การวัดค่าปัจจัยคุณภาพในเรื่องปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมต

จากตัวอย่างที่ผ่านการเตรียมในข้อ 6.1 และนำมาวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่อง NIR ในข้อ 6.2 ก่อนนำไปวัดค่าปริมาณผงชูรสในข้อ 6.3 แล้วนำไปสร้างสมการทำนายปริมาณผงชูรส โดยจากตัวอย่างขนมขบเคี้ยวทั้ง 110 หน่วยตัวอย่าง นำมาแบ่งแบบสุ่มออกเป็น 2 กลุ่ม ได้แก่ ตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการทำนาย (Calibration set) จำนวน 90 หน่วยตัวอย่าง และตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้องของสมการ (Validation set) จำนวน 20 หน่วยตัวอย่าง เพื่อใช้ในการตรวจสอบความแม่นยำของสมการที่สร้างขึ้น โดยได้ผลดังแสดงในตารางที่ 40

ตารางที่ 40 ข้อมูลค่าสูงสุด ค่าต่ำสุด ค่าเฉลี่ย และค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานในเรื่องปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว

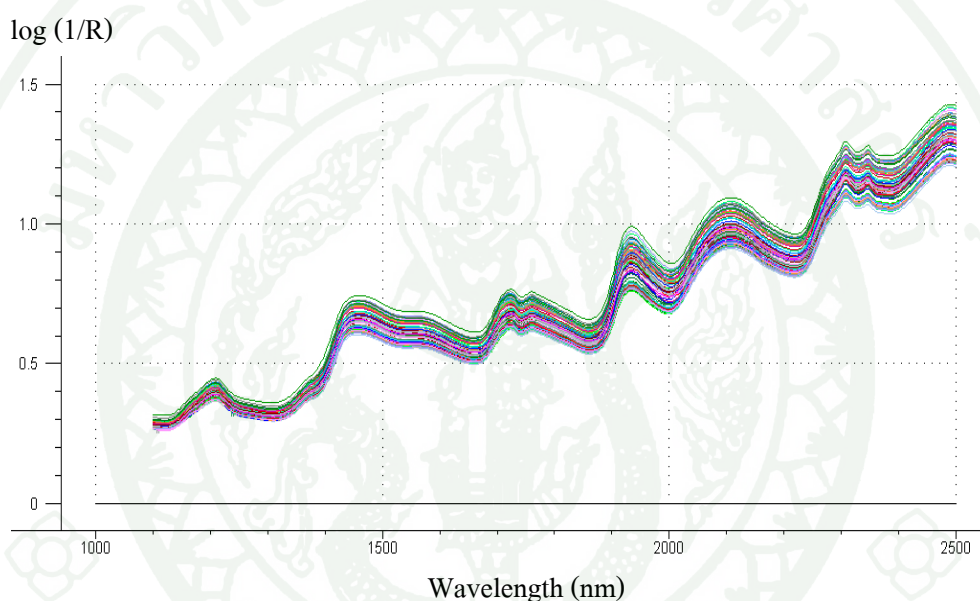
ชุดข้อมูล	จำนวนข้อมูล	ค่าสูงสุด (g/100g)	ค่าต่ำสุด (g/100g)	ค่าเฉลี่ย (g/100g)	ค่าเบี่ยงเบน มาตรฐาน
Calibration	88	4.90	0	1.69	1.48
Validation	22	4.64	0	1.69	1.50

จากตารางที่ 39 พบว่า ตัวอย่างในกลุ่มสร้างสมการ (Calibration) มีค่าคุณภาพทางเคมีครอบคลุมค่าในกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation) เพื่อให้ข้อมูลของกลุ่มตัวอย่างทั้งสองกลุ่มมีการกระจายของค่าคุณภาพทางเคมีไปในลักษณะเดียวกัน โดยที่ตัวอย่างในกลุ่มสร้างสมการ (Calibration) จะมีขนาดข้อมูลที่กว้างพอควรและควรครอบคลุมข้อมูลของกลุ่มตัวอย่างที่เราจะศึกษาได้ (Chen *et al.*, 2007)

2. การวัดค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยเครื่อง NIR

การวัดค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยเครื่อง NIR โดยการบรรจุตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการบดลงใน rotating cup ก่อนนำไปวัดค่าการดูดกลืนแสง

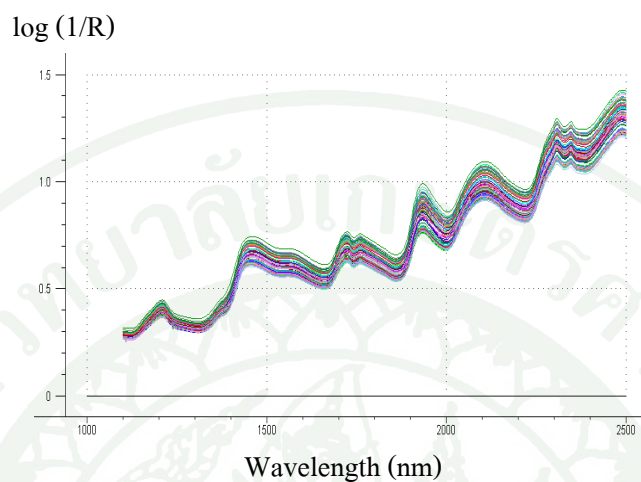
ลักษณะสเปกตรัมและค่าการดูดกลืนแสงที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านขั้นตอนการเตรียมตัวอย่างในข้อ 6.1 ดังแสดงในภาพที่ 140



ภาพที่ 140 สเปกตรัมดิบเริ่มต้นของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมตัวอย่างในข้อ 6.1 จำนวน 110 หน่วยตัวอย่างที่วัดด้วยเครื่อง NIR ตั้งแต่ช่วง 1100-2500 นาโนเมตร

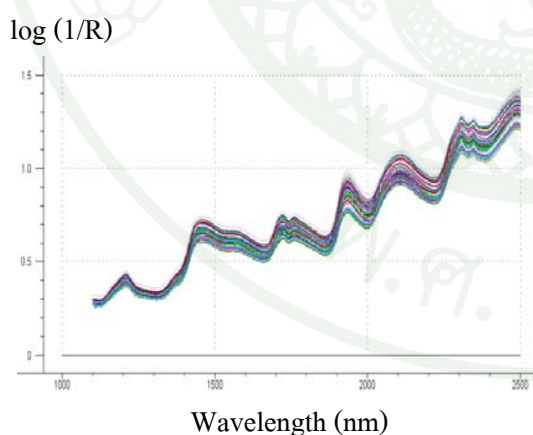
เมื่อพิจารณาจากภาพที่ 140 ลักษณะสเปกตรัมที่ได้ (original spectrum) จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR จะมีฐานกว้าง เนื่องจากการซ้อนทับกันของจุดยอด ไม่ได้มีจุดยอดแหลมแยกออกจากกันอย่างเด่นชัด ทำให้ยากต่อการเลือกความยาวที่เหมาะสมที่สัมพันธ์กับค่าเคมีที่ทำการศึกษา อย่างไรก็ตามปัญหาดังกล่าวสามารถลดความคลาดเคลื่อนได้ ด้วยการปรับแต่งข้อมูลค่าการดูดกลืนแสงจากสเปกตรัมเดิม (original spectrum) ดังนั้น การปรับแต่งสเปกตรัมจะทำให้ได้สเปกตรัมที่มีจุดยอดชัดเจน ทำให้ทราบตำแหน่งความยาวคลื่นที่มีการสิ้นของโมเลกุลมาก ในการปรับแต่งสเปกตรัมที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR มีหลายวิธี เช่น 1) วิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง

(Smoothing) 2) วิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative) 3) วิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) 4) วิธี Multiplicative scatter correction (MSC) ดังแสดงในภาพที่ 141-150

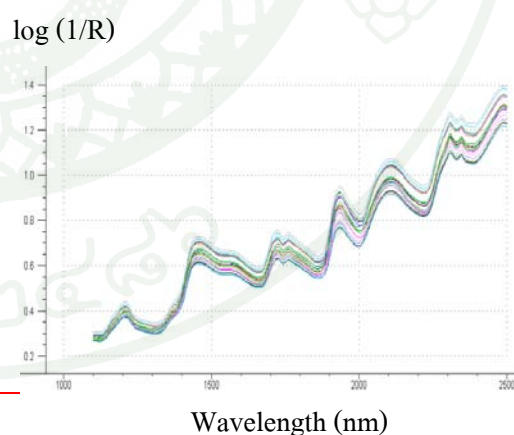


A) สเปกตรัมเริ่มต้น (Original Spectrum)

ภาพที่ 141 ลักษณะสเปกตรัมเริ่มต้นที่ยังไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว ที่ผ่านการเตรียมตัวอย่างในข้อ 6.1 ซึ่งได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร

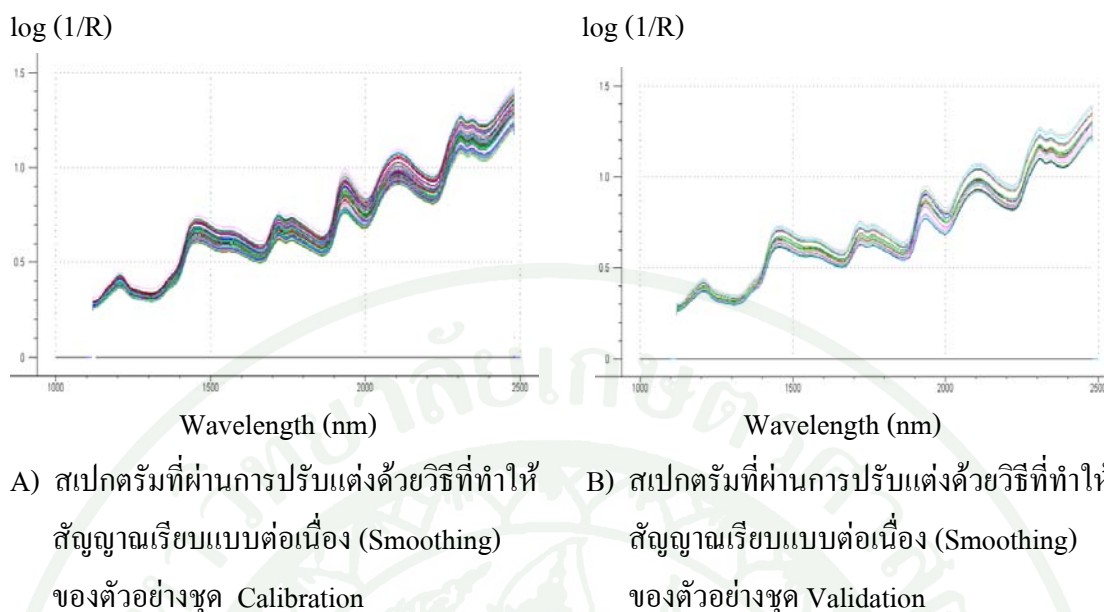


A) สเปกตรัมเริ่มต้น (Original spectrum)
ของตัวอย่างชุด Calibration

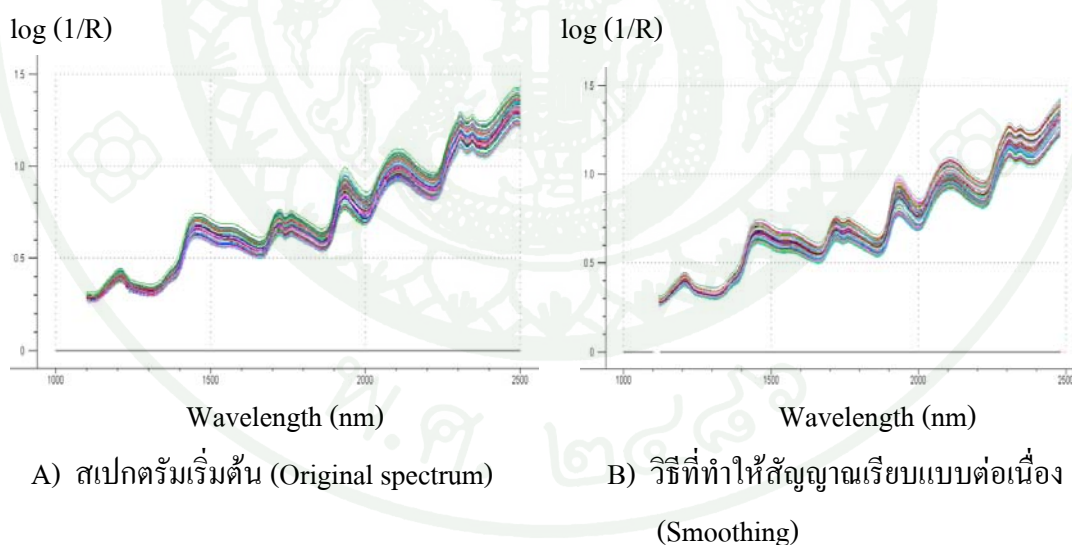


B) สเปกตรัมเริ่มต้น (Original spectrum)
ของตัวอย่างชุด Validation

ภาพที่ 142 ลักษณะสเปกตรัมที่ยังไม่ผ่านการปรับแต่งสำหรับตัวอย่างชุด Calibration และ Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการเตรียมในข้อ 6.1

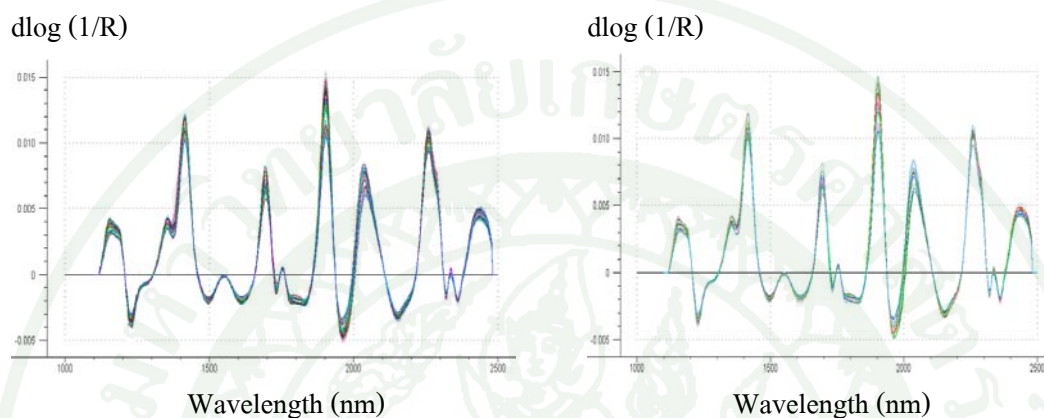


ภาพที่ 143 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างชุด Calibration และตัวอย่างชุด Validation



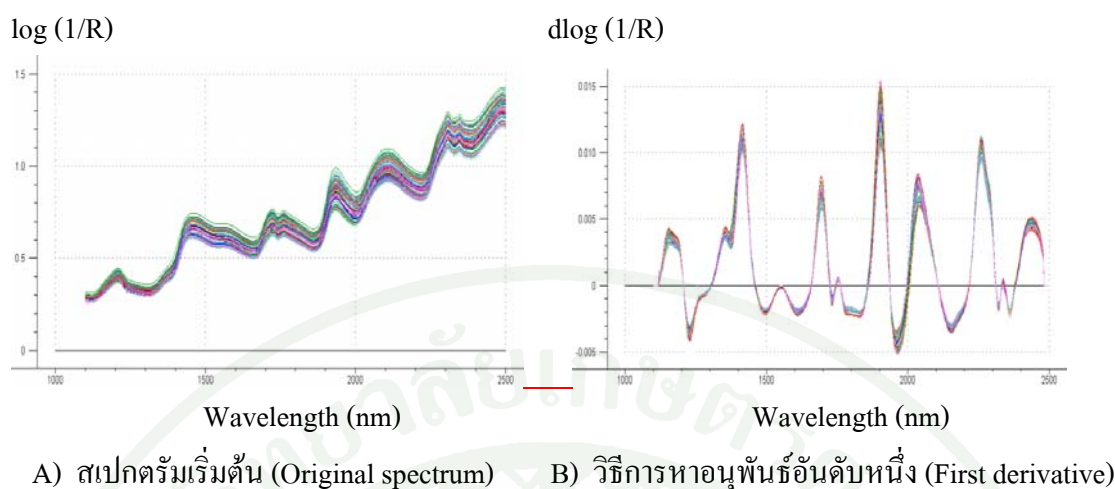
ภาพที่ 144 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง

จากภาพที่ 144 เป็นการเปรียบเทียบค่าสเปกตรัมเริ่มต้นกับสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) จะเห็นได้ว่าสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีนี้ยังคงรักษารูปร่างของยอดแหลมในสเปกตรัมให้มีขนาดเท่ากับสเปกตรัมเริ่มต้น ไม่ว่ายอดแหลมจะมีฐานกว้างหรือแคบก็ตาม



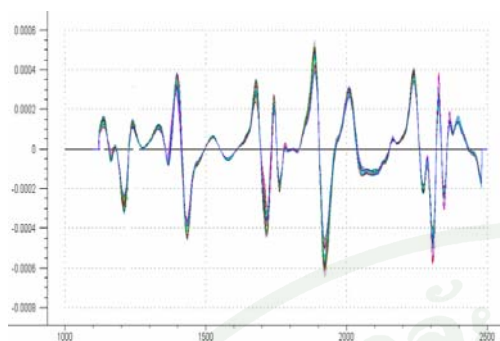
A) สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative) ของตัวอย่างกลุ่ม Calibration B) สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative) ของตัวอย่างกลุ่ม Validation

ภาพที่ 145 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative) ของตัวอย่างชุด Calibration และชุด Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว



ภาพที่ 146 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง

จากภาพที่ 146 เป็นการเปรียบเทียบสเปกตรัมเริ่มต้นกับสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative) จะแยกจุดยอดที่เหลื่อมซ้อนกันในสเปกตรัมออกจากกัน โดยวิธีนี้จะเป็นการนำค่า $\log(1/R)$ ที่ความยาวคลื่นที่ใกล้เคียงกัน 2 ค่ามาลบกันและจะให้ความหมายเป็นค่าความชันของสเปกตรัมที่แต่ละความยาวคลื่น ซึ่งทำให้แปลความหมายยากแต่วิธีการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีนี้จะใช้ได้ผลกับตัวอย่างที่มีเนื้อสม่ำเสมอและมีการกระจายตัวอนุภาคอย่างสม่ำเสมอ

$d^2(\log I/R)$ 

Wavelength (nm)

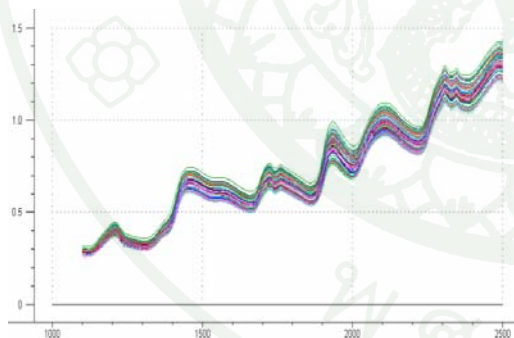
A) สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ของตัวอย่างกลุ่ม Calibration

 $d^2(\log I/R)$ 

Wavelength (nm)

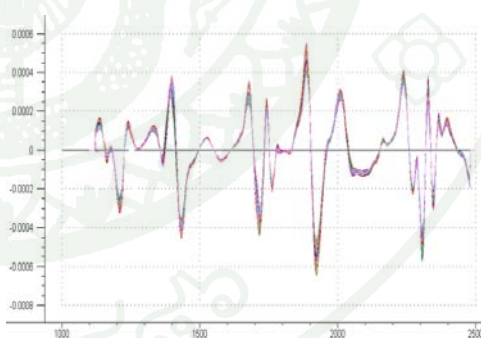
B) สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ของตัวอย่างกลุ่ม Validation

ภาพที่ 147 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ของตัวอย่างชุด Calibration และตัวอย่างชุด Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว

 $(\log I/R)$ 

Wavelength (nm)

A) สเปกตรัมเริ่มต้น (Original spectrum)

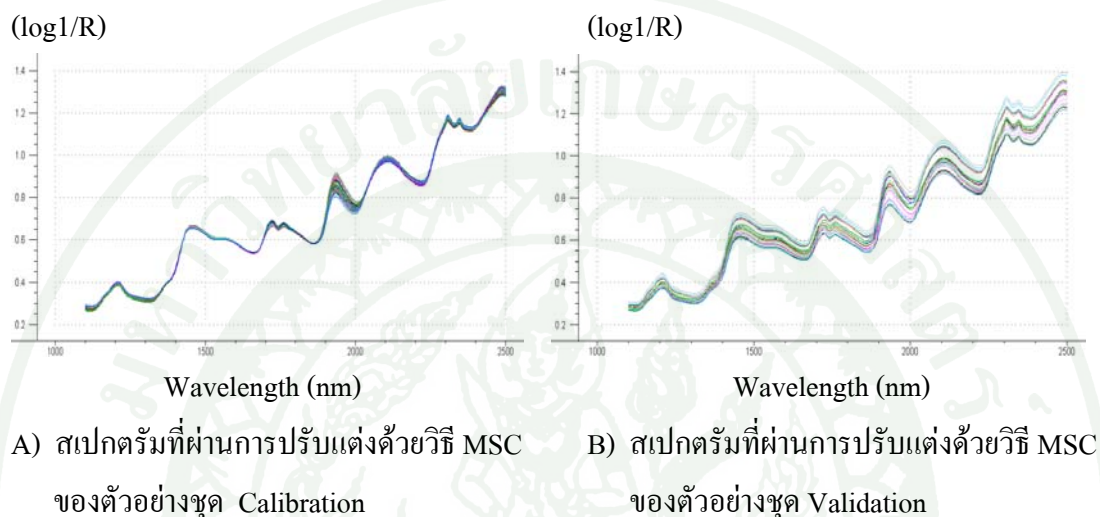
 $d^2(\log I/R)$ 

Wavelength (nm)

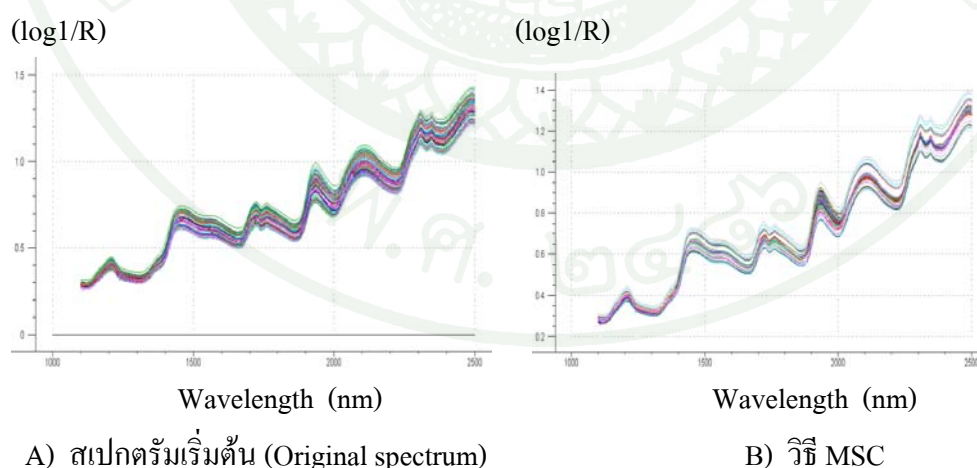
B) วิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative)

ภาพที่ 148 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง

จากภาพที่ 148 เป็นการเปรียบเทียบสเปกตรัมเริ่มต้นกับสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับสอง (Second derivative) จะแยกจุดยอดที่เหลื่อมซ้อนกันในสเปกตรัมออกจากกัน โดยวิธีนี้จะให้จุดยอดของสเปกตรัมดั้งเดิมแต่จะเป็นจุดยอดกลับหัว ซึ่งวิธีนี้จะใช้ได้ผลดีกับตัวอย่างที่มีขนาดอนุภาคต่างๆ ผสมกัน



ภาพที่ 149 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC ของตัวอย่างชุด Calibration และ Validation ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว



ภาพที่ 150 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เปรียบเทียบกับสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง

จากภาพที่ 150 เป็นการเปรียบเทียบสเปกตรัมเริ่มต้นกับสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC จะพบว่าสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC จะมีรูปร่างไม่แตกต่างจากสเปกตรัมเริ่มต้นมากนัก โดยวิธีการปรับแต่งด้วยวิธีนี้จะช่วยลดผลที่เกิดจากการกระเจิงแสง (Scattered light) ต่อ NIR สเปกตรัมที่ได้จากการวัดแบบ Diffuse reflectance และแบบ Transmission

3. การสร้างสมการที่เหมาะสมในการทำนายค่าปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมต

ข้อมูลค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวของกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 88 หน่วยตัวอย่าง ที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ทำการบันทึกค่าในช่วงละ 2 นาโนเมตร จะได้ข้อมูลค่าการดูดกลืนแสง จำนวน 701 ค่า กำหนดให้เป็นตัวแปรอิสระ ตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 88 ตัวอย่าง ที่ผ่านการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR นำไปวิเคราะห์คุณภาพทางเคมีในเรื่องปริมาณผงชูรส ข้อมูลค่าจริงที่ได้จากการวิเคราะห์ทางเคมี กำหนดให้เป็นตัวแปรตาม นำข้อมูลตัวแปรอิสระและตัวแปรตามมาหาความสัมพันธ์ด้วยวิธีทางสถิติเพื่อสร้างสมการที่ใช้ในการทำนายค่าปริมาณผงชูรส วิธีทางสถิติที่นำมาใช้สร้างสมการทำนายค่าปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตได้แก่ 1) วิธี Partial Least Squares (PLS) Regression 2) วิธี Moving Window Partial Least Squares (MWPLS) ทำการเปรียบเทียบสมการที่สร้างขึ้นจากทั้ง 2 วิธี เพื่อใช้ทำนายค่าปริมาณผงชูรส โดยพิจารณาจากค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (R) และค่าความคลาดเคลื่อนของสมการในการทำนายค่าปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมต (Standard Error of Calibration; SEC) โดยมีรายละเอียดดังนี้

3.1 การสร้างสมการทำนายค่าปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตด้วยวิธีทางสถิติ

Partial Least Squares (PLS) Regression

จากข้อมูลค่าการดูดกลืนแสงที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ที่ความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร บันทึกค่าการดูดกลืนแสงในช่วงละ 2 นาโนเมตร จะได้ข้อมูลจากการวัดค่าจำนวน 701 ค่า เมื่อนำข้อมูลตัวแปรอิสระมาหาความสัมพันธ์กับค่าปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตด้วยการจัดกลุ่มตัวแปรเดิม เป็นตัวแปรใหม่ ด้วยวิธี PLS

ก่อนทำการจัดกลุ่มตัวแปรใหม่ที่ได้จากข้อมูลค่าการดูดกลืนแสงที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR จะนำข้อมูลที่ได้มาทำการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีต่างๆ ได้แก่ 1) วิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) 2) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative) 3) วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) 4) วิธี Multiplicative scatter correction (MSC) เพื่อลดความคลาดเคลื่อนเนื่องจากปัจจัยต่างๆ

เมื่อพิจารณาสมการทำนายที่สร้างขึ้นจากช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ดังแสดงในตารางที่ 41 พบว่า สเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง และสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing), วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่หนึ่ง (First derivative), วิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) และวิธี Multiplicative scatter correction (MSC) มีความเหมาะสมสำหรับการทำนายค่าปริมาณโมโซเดียมกลูตาเมต เนื่องจากสมการทั้งหมดให้ค่า R สูงกว่า 0.9 และให้ค่า SEC ต่ำ และมีจำนวนแฟลคเตอร์ที่เหมาะสม แต่ทั้งนี้ จะพบว่าสมการที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์ลำดับที่สอง (Second derivative) น่าจะมีความเหมาะสมที่สุด เนื่องจากมีค่าการจัดกลุ่มตัวแปรเดิมเป็นตัวแปรใหม่ได้ 10 แฟลคเตอร์ โดยให้ค่า R เท่ากับ 0.97 และ 0.41 ตามลำดับ เมื่อทำการพิจารณาค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression coefficient) ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ดังแสดงในภาพที่ 65 พบว่าตำแหน่งความยาวคลื่น 1214, 1380, 1402, 1706 และ 1730 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับค่าปริมาณผงชูรสมาก โดยที่ตำแหน่งความยาวคลื่นดังกล่าวมีข้อมูลสำคัญเกี่ยวข้องกับกลุ่มพันธะของ CH_2 ซึ่งสอดคล้องกับงานวิจัยของ Norris (1983) ที่แสดงให้เห็นว่าตำแหน่งความยาวคลื่น 1700 และ 1733 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์อย่างมากกับปริมาณกรดกลูตามิกในมันฝรั่ง

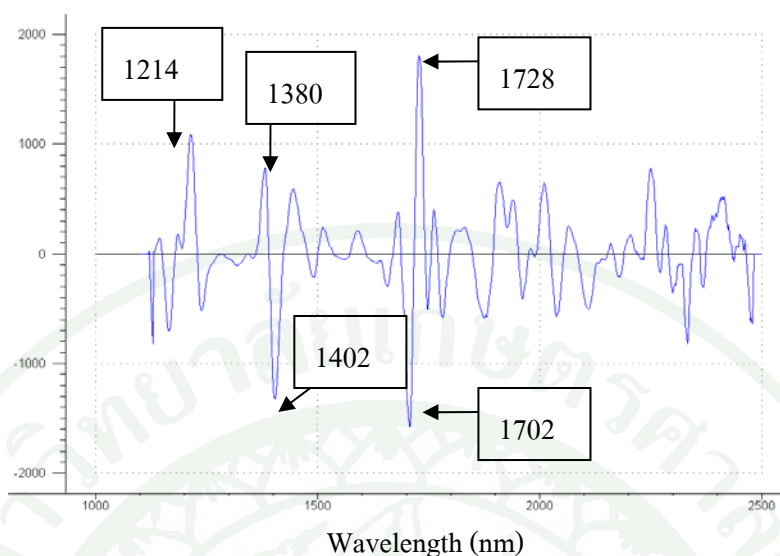
เมื่อทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง พบว่า สมการที่เหมาะสมดังกล่าวให้ค่า SEP และ Bias เท่ากับร้อยละ 0.45 และ -0.02 ตามลำดับ ดังแสดงในตารางที่ 42 และภาพที่ 156

ตารางที่ 41 ค่า R และค่า SEC ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณโมโนโซเดียม
 กลูตามตของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยวิธีทางสถิติ PLS

วิธีปรับแต่ง สเปกตรัม	วิธีการ ทางสถิติ	ช่วงความยาวคลื่นที่ใช้ ในการสร้างสมการ (nm)	F	กลุ่มสร้างสมการ	
				R	SEC
1. Original	PLS	1100 – 2500	9	0.95	0.44
2. Smoothing	PLS	1100 – 2500	9	0.95	0.45
3. 1 D	PLS	1100 – 2500	9	0.96	0.42
4. 2 D	PLS	1100 – 2500	10	0.97	0.41
5. MSC	PLS	1100 – 2500	9	0.96	0.44

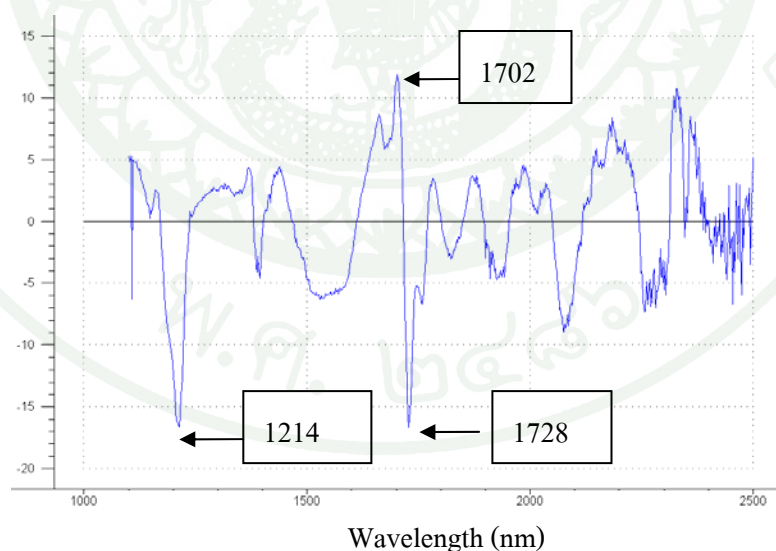
หมายเหตุ F หมายถึง จำนวนกลุ่มตัวแปรใหม่ที่ใช้ในการสร้างสมการ
 R หมายถึง ค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (Coefficient of correlation)
 SEC หมายถึง ค่าความคลาดเคลื่อนของสมการที่ใช้ในการทำนายค่าปริมาณ
 โมโนโซเดียมกลูตามตด้วยตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ (Calibration)
 1 D หมายถึง วิธี First derivative
 2 D หมายถึง วิธี Second derivative

Regression Coefficient



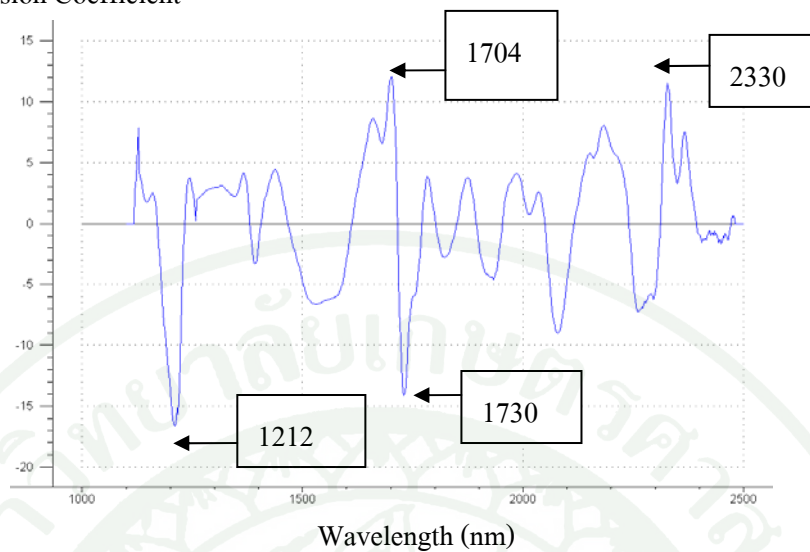
ภาพที่ 151 ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายค่าปริมาณ โมโนโซเดียมกลูตาเมตในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่าง กลุ่มสร้างสมการ จำนวน 88 ตัวอย่างของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี 2 D

Regression Coefficient

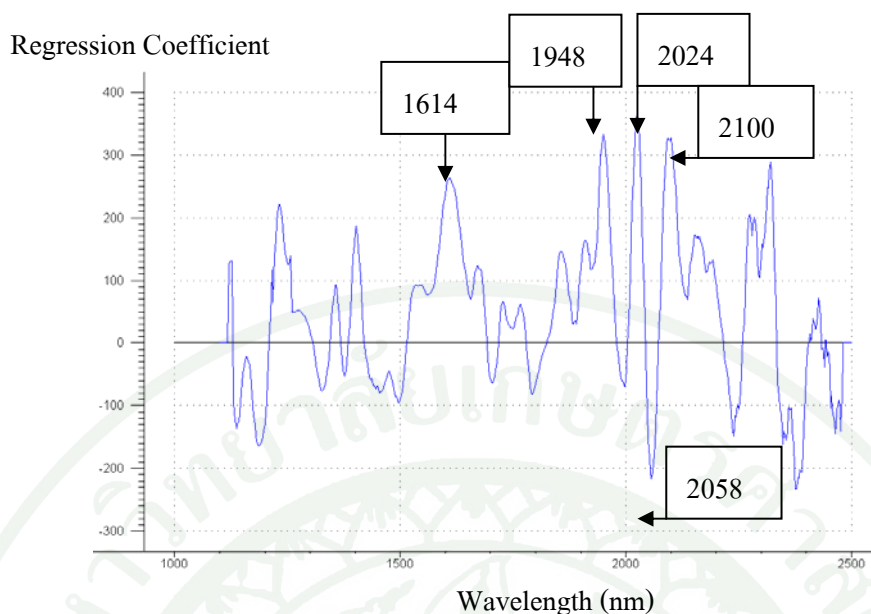


ภาพที่ 152 ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายปริมาณ โมโนโซเดียมกลูตาเมตในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่าง กลุ่มสร้างสมการ จำนวน 88 ตัวอย่างของสมการที่ไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม

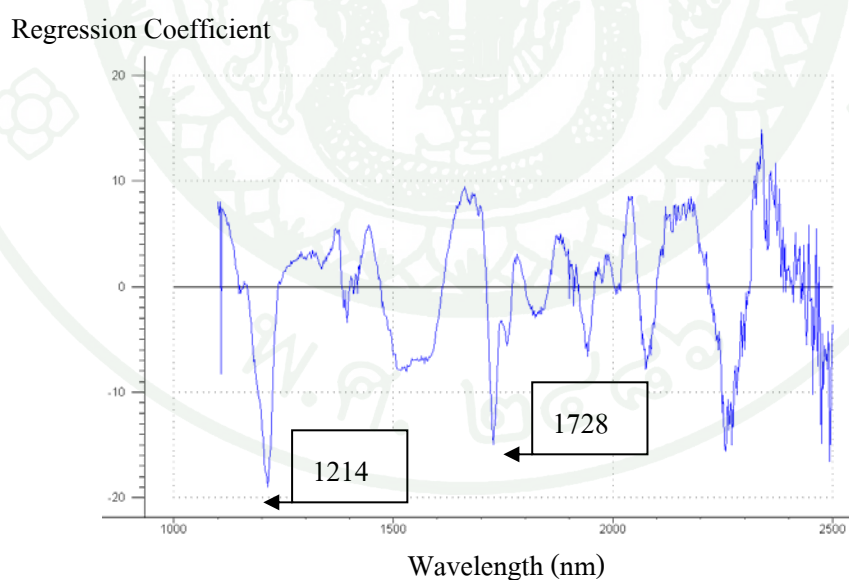
Regression Coefficient



ภาพที่ 153 ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายปริมาณ
โมโนโซเดียมกลูตาเมตในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่าง
กลุ่มสร้างสมการ จำนวน 88 หน่วยตัวอย่าง ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี
Smoothing



ภาพที่ 154 ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้นาฬิกาปริมาณ MSG ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ จำนวน 88 หน่วยตัวอย่างของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี 1 D



ภาพที่ 155 ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการถดถอย (Regression Coefficient) ที่ใช้ทำนายปริมาณ โมโนโซเดียมกลูตาเมตในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตรของตัวอย่าง กลุ่มสร้างสมการ จำนวน 88 ตัวอย่างของสมการที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC

3.2 การตรวจสอบความแม่นยำของสมการทำนายที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณ โมโนโซเดียมกลูตาเมตซึ่งสร้างขึ้นจากวิธีทางสถิติ PLS

การตรวจสอบความแม่นยำของสมการทำนายที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณ
โมโนโซเดียมกลูตาเมต จะใช้ค่าทางเคมีของกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation) จำนวน
22 หน่วยตัวอย่าง ทำการเปรียบเทียบค่าที่ได้จากการทำนายด้วยสมการทำนายที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัม
NIR (Predicted value) กับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริง (Actual value) การตรวจสอบความแม่นยำ
ของสมการจะพิจารณาจากค่าความคลาดเคลื่อนจากการทำนายด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบ
ความถูกต้อง (Standard Error of Prediction; SEP) และค่าความแตกต่าง (Bias) ระหว่างค่าที่ทำนาย
ได้จากสมการกับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริงของแต่ละสมการ

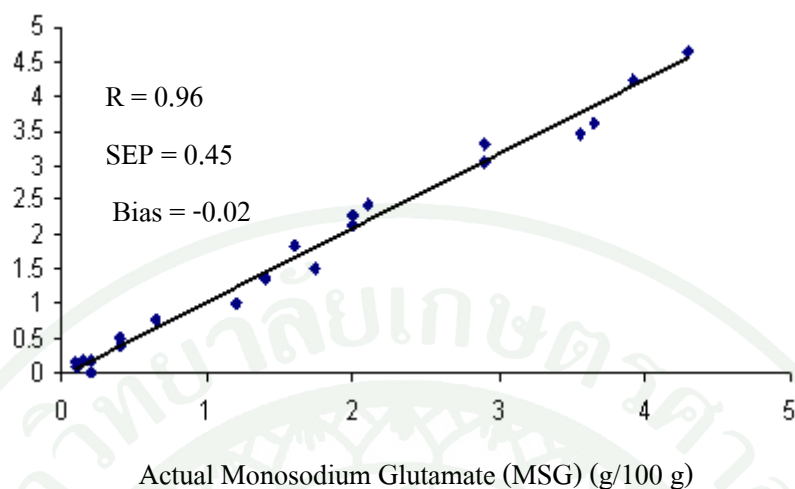
ทำการตรวจสอบความแม่นยำของสมการทำนายที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณ
โมโนโซเดียมกลูตาเมต ด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง จำนวน 22 ตัวอย่าง ทำการ
เปรียบเทียบค่าที่ได้จากการทำนายด้วยสมการทำนายที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัม NIR (Predicted value) กับ
ค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริง ดังแสดงในตารางที่ 42 และภาพที่ 156

ตารางที่ 42 เปรียบเทียบค่า R, ค่า SEP, ค่า RPD และค่า Bias ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตด้วยวิธีทางสถิติ PLS

วิธีปรับแต่งสเปกตรัม	วิธีทางสถิติ	ความยาวคลื่น (นาโนเมตร)	ขั้นตอน Validation			
			R	SEP	RPD	Bias
1. Original	PLS	1100 – 2500	0.96	0.45	3.33	-0.02
2. Smoothing	PLS	1100 – 2500	0.96	0.44	3.41	-0.03
3. 1 D	PLS	1100 – 2500	0.95	0.46	3.26	-0.02
4. 2 D	PLS	1100 – 2500	0.96	0.45	3.33	-0.02
5. MSC	PLS	1100 – 2500	0.95	0.47	3.19	-0.07

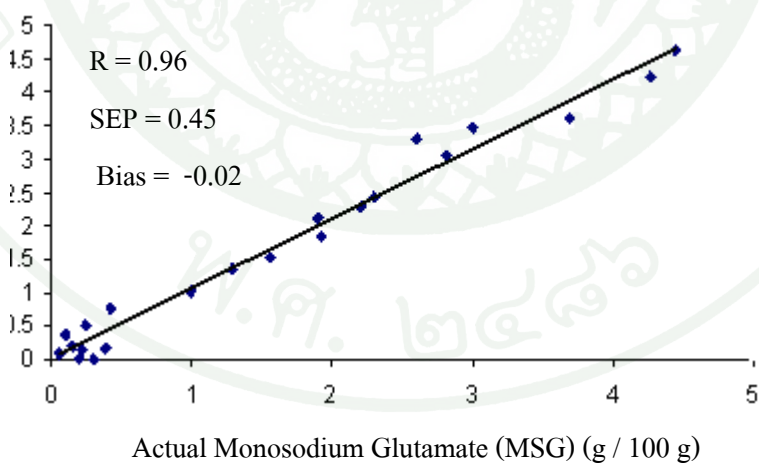
หมายเหตุ	SEP	หมายถึง	ค่าความคลาดเคลื่อนของสมการที่ใช้ทำนายปริมาณ MSG ตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)
	Bias	หมายถึง	ค่าความแตกต่างระหว่างค่าที่ทำนายได้จากสมการที่สร้างขึ้นกับค่าที่วิเคราะห์ได้ทางเคมี
	PLS	หมายถึง	วิธีทางสถิติ Partial Least Squares Regression
	RPD	หมายถึง	อัตราส่วนของ SEP ต่อ SD
	1 D	หมายถึง	วิธี First derivative
	2 D	หมายถึง	วิธี Second derivative

Predicted Monosodium Glutamate (MSG) (g/100 g)



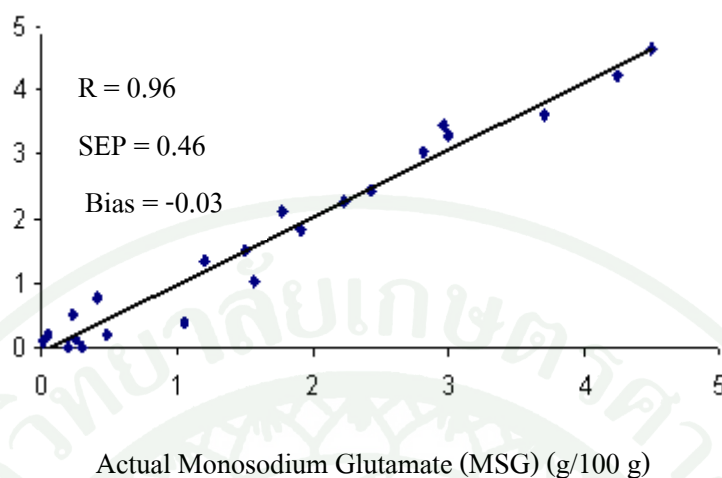
ภาพที่ 156 ค่าปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งการหาอนุพันธ์อันดับสอง (1 D) ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)

Predicted Monosodium Glutamate (MSG) (g / 100 g)



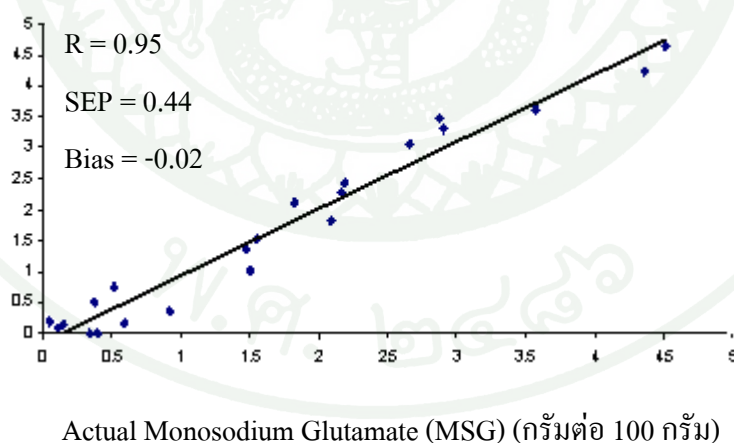
ภาพที่ 157 ค่าปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง

Predicted Monosodium Glutamate (MSG) (g/100 g)



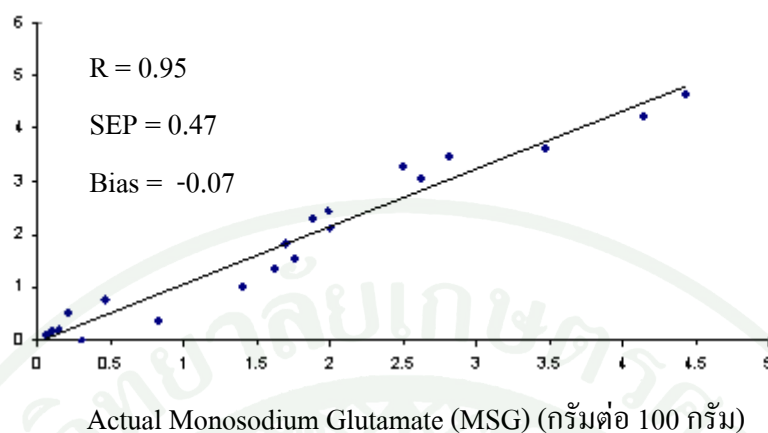
ภาพที่ 158 ค่าปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง

Predicted Monosodium Glutamate (MSG) (กรัมต่อ 100 กรัม)



ภาพที่ 159 ค่าปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative) ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง

Predicted Monosodium Glutamate (MSG) (กรัมต่อ 100 กรัม)



ภาพที่ 160 ค่าปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ PLS ซึ่งผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี MSC ของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง

จากผลการสร้างสมการทำนายปริมาณ โมโนโซเดียมกลูตาเมต ด้วยวิธีทางสถิติ PLS พบว่า สมการทำนายที่ดีที่สุดสร้างขึ้นจากวิธีสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ทั้งนี้ อาจเนื่องมาจากสเปกตรัมเริ่มต้นมีการซ้อนทับกัน มีลักษณะฐานกว้าง เนื่องจากการซ้อนทับกันของจุดยอด ไม่ได้มีจุดยอดแหลมแยกออกจากกันอย่างชัดเจน ทั้งนี้ Osborne *et al.* (1993) ได้อธิบายว่าเกิดขึ้นเนื่องมาจากการสั่นแบบโอเวอร์โทนและแบบคอมบินั่นของการสั่นแบบพื้นฐานซึ่งทำให้ยากต่อการเลือกความยาวคลื่นที่เหมาะสมที่มีความสัมพันธ์กับค่าที่ทำการศึกษา ดังนั้น เมื่อนำข้อมูลสเปกตรัมเริ่มต้นไปปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ก่อนนำไปใช้ในการสร้างสมการทำนายปริมาณ โมโนโซเดียมกลูตาเมต จะสามารถช่วยแก้ปัญหาดังกล่าวได้ กล่าวคือ สามารถช่วยลดความคลาดเคลื่อนของการซ้อนทับกันของจุดยอดดังกล่าวได้ ซึ่ง Osborne *et al.* (1993) กล่าวว่าวิธีการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีนี้เป็นการกำจัดฟิสิกส์ที่ซ้อนทับกัน และลดผลกระทบจากการเลื่อนของเส้นฐาน (Baseline) ที่เกิดจากการกระเจิงแสง ทำให้ได้สเปกตรัมที่มีฐานแคบและเห็นจุดยอดแยกออกจากกันอย่างชัดเจน แต่จุดยอดของสเปกตรัมเริ่มต้นจะเปลี่ยนเป็นจุดยอดที่อยู่ตรงข้ามและตรงกับจุดยอดเริ่มต้นอนุพันธ์ (2552) อธิบายว่าวิธี Second derivative ใช้ได้ผลดีกับตัวอย่างที่มีขนาดอนุภาคต่างๆ ผสมกันอยู่ ซึ่งสอดคล้องกับตัวอย่างที่ใช้ในการวิจัยครั้งนี้เนื่องจากตัวอย่างขนมขบเคี้ยวจะนำมาปั่นด้วย

เครื่องปั้นก่อนนำมาทำการวิเคราะห์ เมื่อทำการพิจารณาค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการ (Regression coefficient) ของความยาวคลื่นในช่วง 1100-2500 นาโนเมตร ดังแสดงในภาพที่ 151 พบว่า ที่ความยาวคลื่นตำแหน่ง 1214, 1380, 1402, 1702, 1728 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับ ปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตสูง

3.3 การสร้างสมการทำนายปริมาณ โมโนโซเดียมกลูตาเมตด้วยวิธีทางสถิติ Moving Window Partial Least Squares (MWPLS)

จากการนำสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการต่างๆ ได้แก่ วิธีที่ทำให้ สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing) วิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative) วิธีการหา อนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) และวิธี Multiplicative scatter correction (MSC) รวมทั้ง สมการที่ไม่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัม มาวิเคราะห์ด้วยโปรแกรม In-house-written in MATLAB เพื่อหาช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสมในการสร้างสมการ ได้ผลดังแสดงในภาพที่ 161-166 เมื่อพิจารณาจากค่า $\log(SSR)$ พบว่า ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสมที่เป็น Informative region มีหลายช่วง ดังแสดงในตารางที่ 43 และเมื่อนำช่วงความยาวคลื่นดังกล่าวมาสร้างสมการทำนาย ได้ผลดังแสดงในตารางที่ 43 ซึ่งพบว่าสมการที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี Second derivative (2 D) ในช่วงความยาวคลื่น 1130-1160, 1600-1630, 1640-1730 และ 1900-2000 นาโนเมตร ให้สมการที่เหมาะสมที่สุดสำหรับการทำนายปริมาณผงชูรส โดยสมการที่สร้างขึ้น มีการจัดกลุ่มตัวแปรเดิมเป็นตัวแปรใหม่ได้ 10 แฟกเตอร์ และให้ค่า R และ SEC เท่ากับ 0.97 และ 0.42 ตามลำดับ เมื่อทำการพิจารณาค่าสัมประสิทธิ์การถดถอย (Regression coefficient) ของสมการ ที่ความยาวคลื่นในช่วงดังกล่าว ดังแสดงในภาพที่ 162 พบว่า ที่ความยาวคลื่นตำแหน่ง 1608 และ 1676 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมต ซึ่งสอดคล้องกับงานวิจัยของ Che Man and Moh (2000)

ตารางที่ 43 ค่า R และค่า SEC ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายปริมาณ โมโนโซเดียมกลูตาเมต
ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS

วิธีปรับแต่งสเปกตรัม	วิธีทางสถิติ	ความยาวคลื่น (nm)	F	ขั้นตอน Calibration	
				R	SEC
1. Original	MWPLS	1120 – 1150	4	0.70	1.07
2. Original	MWPLS	1580 – 1640	4	0.71	1.04
3. Original	MWPLS	1650 – 1720	6	0.87	0.73
4. Original	MWPLS	1900 – 1970	6	0.92	0.59
5. Original	CMWPLS	1120 – 1150, 1580 – 1640, 1650 – 1720, 1900 – 1970	9	0.95	0.48
6. Smoothing	MWPLS	1140 – 1150	6	0.63	1.16
7. Smoothing	MWPLS	1500 – 1560	6	0.79	0.10
8. Smoothing	MWPLS	1580 – 1620	6	0.75	0.99
9. Smoothing	MWPLS	1900 – 1970	11	0.96	0.41
10. Smoothing	CMWPLS	1140 – 1150, 1500 – 1560, 1580 – 1620, 1900 – 1970	9	0.96	0.44
11. 1 D	MWPLS	1140 – 1170	6	0.78	0.92
12. 1 D	MWPLS	1500 – 1550	4	0.76	0.96
13. 1 D	MWPLS	1600 – 1640	5	0.76	0.96
14. 1 D	MWPLS	1900 – 1990	6	0.88	0.70
15. 1 D	CMWPLS	1140 – 1170, 1500 – 1550, 1600 – 1640, 1900 – 1990	9	0.97	0.42
16. 2 D	MWPLS	1130 – 1160	4	0.83	0.82

ตารางที่ 43 (ต่อ)

วิธีปรับแต่งสเปกตรัม	วิธีทางสถิติ	ความยาวคลื่น (nm)	F	ขั้นตอน Calibration	
				R	SEC
17. 2 D	MWPLS	1600 – 1630	3	0.57	1.22
18. 2 D	MWPLS	1640 – 1730	8	0.92	0.58
19. 2 D	MWPLS	1900 – 2000	8	0.93	0.53
20. 2 D	MWPLS	1130 – 1160, 1600 – 1630, 1640 – 1730, 1900 – 2000	10	0.98	0.39
21. MSC	MWPLS	1120 – 1200	7	0.93	0.56
22. MSC	MWPLS	1610 – 1626	3	0.63	1.15
23. MSC	MWPLS	1900 – 1940	5	0.74	0.99
24. MSC	MWPLS	1120 – 1200, 1610 – 1626, 1900 – 1940	9	0.96	0.42

หมายเหตุ F หมายถึง จำนวนกลุ่มตัวแปรใหม่ที่ใช้ในการสร้างสมการ

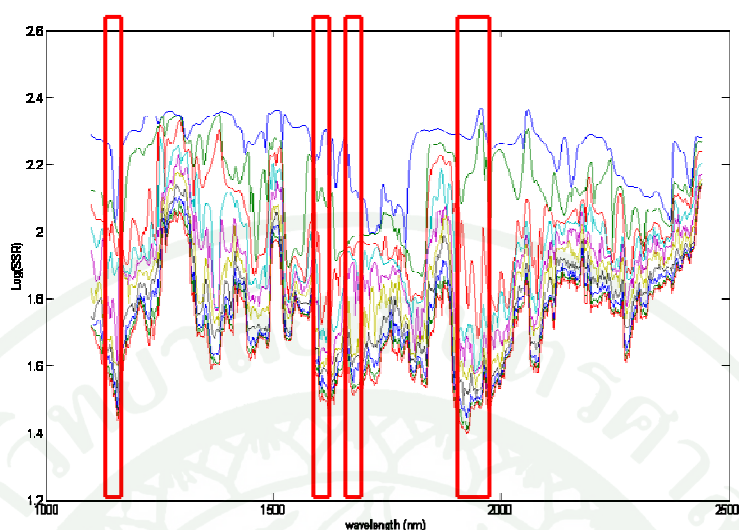
R หมายถึง ค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (Coefficient of correlation)

SEC หมายถึง ค่าความคลาดเคลื่อนของสมการที่ใช้ในการทำนายปริมาณ
โมโนโซเดียมกลูตาเมตด้วยตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ (Calibration)

1 D หมายถึง วิธี First derivative

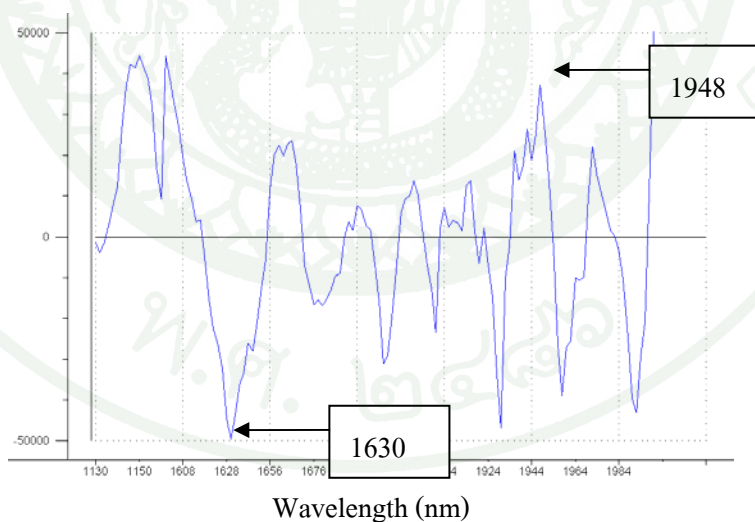
2 D หมายถึง วิธี Second derivative

1130-1160 1600-1630, 1640-1730, 1900-2000 nm



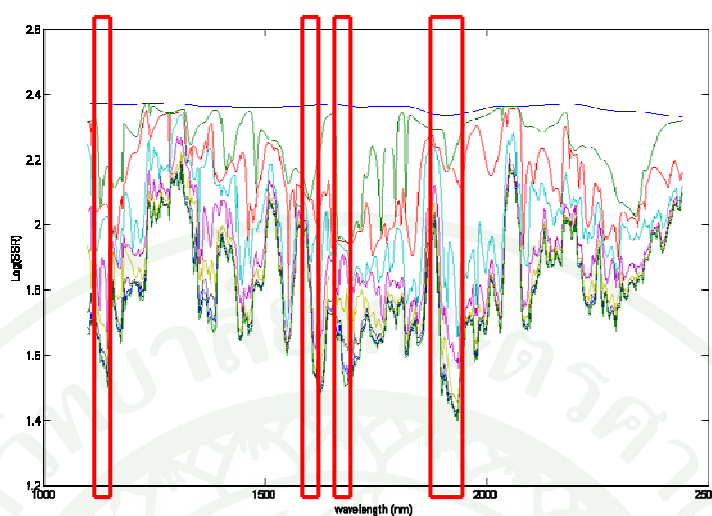
ภาพที่ 161 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายปริมาณ MSG จากสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative)

Regression coefficient



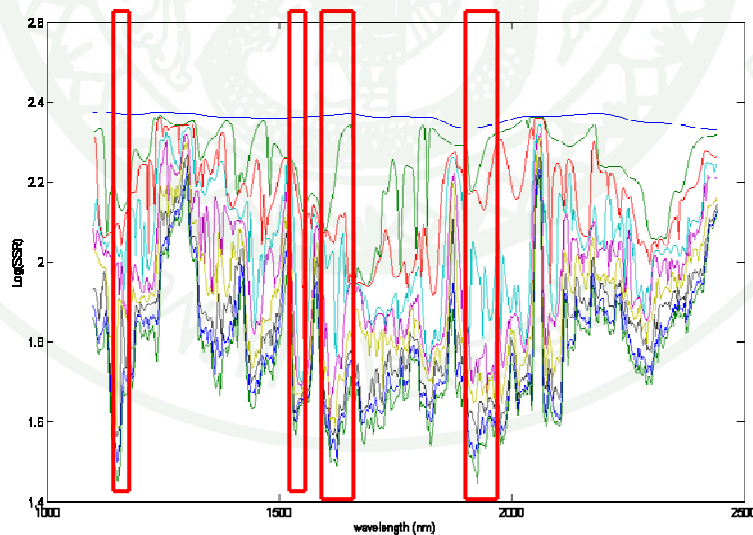
ภาพที่ 162 ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการ (Regression coefficient) ใช้ในการทำนายปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS ของสมการที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative)

1120-1150 1580-1640, 1650-1720, 1900-1970 nm



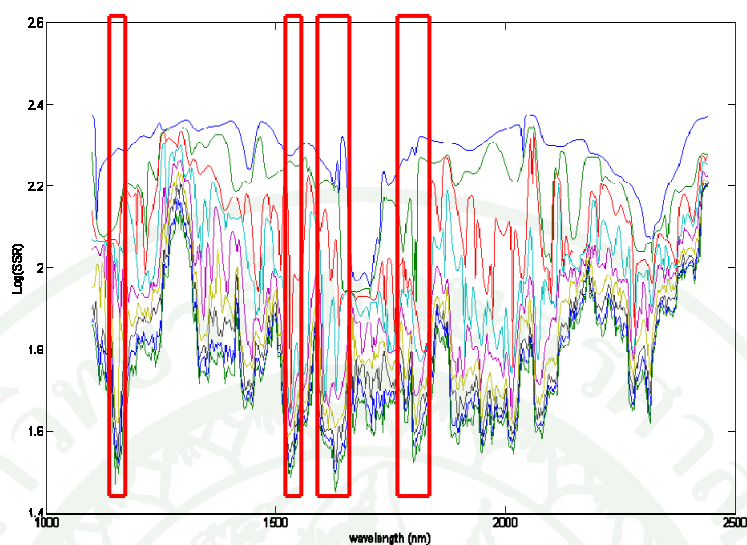
ภาพที่ 163 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายปริมาณโมโนโซเดียมนูตามดจากสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่ง

1140-1150 1500-1560, 1580-1620, 1900-1970 nm



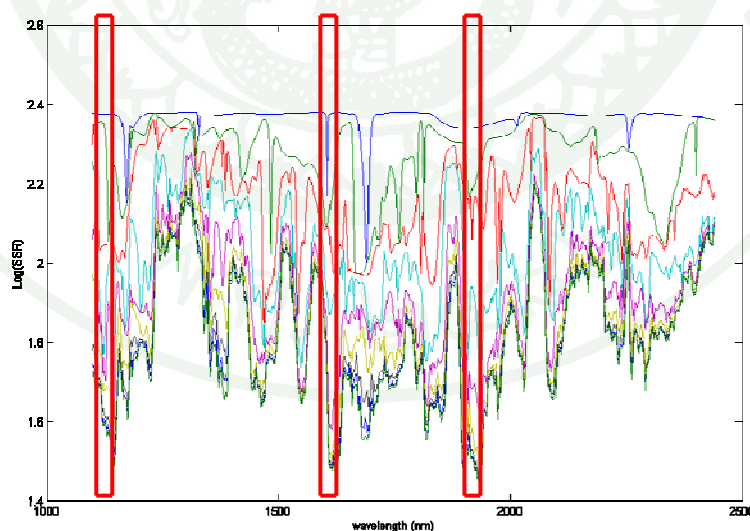
ภาพที่ 164 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายปริมาณโมโนโซเดียมนูตามดจากสเปกตรัมที่ปรับแต่งด้วยวิธีที่ทำให้สัญญาณเรียบแบบต่อเนื่อง (Smoothing)

1140-1170, 1500-1550, 1600-1640, 1900-1990 nm



ภาพที่ 165 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตจากสเปกตรัมที่ปรับแต่งด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative)

1120-1200 1610-1626 1900-1940 nm



ภาพที่ 166 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่อยู่ภายในกรอบ) ที่ทำการเลือกได้จากวิธี MWPLS เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตจากสเปกตรัมที่ปรับแต่งด้วยวิธี MSC

3.4 การตรวจสอบความแม่นยำของสมการทำนายที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายปริมาณ โมโนโซเดียมกลูตาเมตซึ่งสร้างขึ้นจากวิธีทางสถิติ MWPLS

ทำการตรวจสอบความแม่นยำของสมการทำนายค่าที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายปริมาณ
โมโนโซเดียมกลูตาเมตซึ่งสร้างขึ้นจากวิธีทางสถิติ MWPLS ด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง
จำนวน 22 หน่วยตัวอย่าง ทำการเปรียบเทียบค่าที่ได้จากการทำนายด้วยสมการที่สร้างขึ้นจาก
สเปกตรัม NIR (Predicted value) กับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริงดังแสดงในตารางที่ 44

ตารางที่ 44 เปรียบเทียบค่า R, ค่า SEP, ค่า RPD และค่า Bias ของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนาย
ปริมาณ โมโนโซเดียมกลูตาเมตด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS

วิธีปรับแต่งสเปกตรัม	วิธีทาง สถิติ	ความยาวคลื่น (นาโนเมตร)	ขั้นตอน Validation			
			R	SEP	RPD	Bias
1. Original	MWPLS	1120 – 1150	0.76	1.01	1.49	0.001
2. Original	MWPLS	1580 – 1640	0.73	1.03	1.46	-0.01
3. Original	MWPLS	1650 – 1720	0.91	0.63	2.38	-0.09
4. Original	MWPLS	1900 – 1970	0.92	0.59	2.54	-0.15
5. Original	MWPLS	1120 – 1150, 1580 – 1640, 1650 – 1720, 1900 – 1970	0.95	0.46	3.26	-0.05
6. Smoothing	MWPLS	1140 – 1150	0.56	1.22	1.23	0.10
7. Smoothing	MWPLS	1500 – 1560	0.78	0.94	1.60	-0.06
8. Smoothing	MWPLS	1580 – 1620	0.68	1.14	1.32	0.05
9. Smoothing	MWPLS	1900 – 1970	0.92	0.59	2.54	-0.12
10. Smoothing	MWPLS	1140 – 1150, 1500 – 1560, 1580 – 1620, 1900 – 1970	0.95	0.47	3.19	-0.01
11. 1 D	MWPLS	1140 – 1170	0.79	0.92	1.63	-0.06
12. 1 D	MWPLS	1500 – 1550	0.81	0.90	1.67	0.07
13. 1 D	MWPLS	1600 – 1640	0.75	1.01	1.49	0.02

ตารางที่ 44 (ต่อ)

วิธีปรับแต่งสเปกตรัม	วิธีทางสถิติ	ความยาวคลื่น (นาโนเมตร)	ขั้นตอน Validation			
			R	SEP	RPD	Bias
14. 1 D	MWPLS	1900 – 1990	0.92	0.61	2.46	-0.02
15. 1 D	MWPLS	1140 – 1170, 1500 – 1550, 1600 – 1640, 1900 – 1990	0.96	0.44	3.41	-0.02
16. 2 D	MWPLS	1130 – 1160	0.90	0.67	2.24	0.27
17. 2 D	MWPLS	1600 – 1630	0.57	1.24	1.21	0.12
18. 2 D	MWPLS	1640 – 1730	0.92	0.60	2.5	-0.09
19. 2 D	MWPLS	1900 – 2000	0.90	0.64	2.34	-0.08
20. 2 D	MWPLS	1130 – 1160, 1600 – 1630, 1640 – 1730, 1900 – 2000	0.96	0.40	3.75	-0.08
21. MSC	MWPLS	1120 – 1200	0.91	0.64	2.34	0.10
22. MSC	MWPLS	1610 – 1626	0.54	1.25	1.20	0.13
23. MSC	MWPLS	1900 – 1940	0.70	0.99	1.52	0.02
24. MSC	MWPLS	1120 – 1200, 1610 – 1626, 1900 – 1940	0.95	0.56	2.68	0.01

หมายเหตุ SEP หมายถึง ค่าความคลาดเคลื่อนของสมการที่ใช้ทำนาย MSG ด้วยตัวอย่าง
กลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation)

Bias หมายถึง ค่าความแตกต่างระหว่างค่าที่ทำนายได้จากสมการที่สร้างขึ้นกับ
ค่าที่วิเคราะห์ได้ทางเคมี

MWPLS หมายถึง วิธีทางสถิติ Moving Window Partial Least Squares Regression

RPD หมายถึง อัตราส่วนของ SEP ต่อ SD

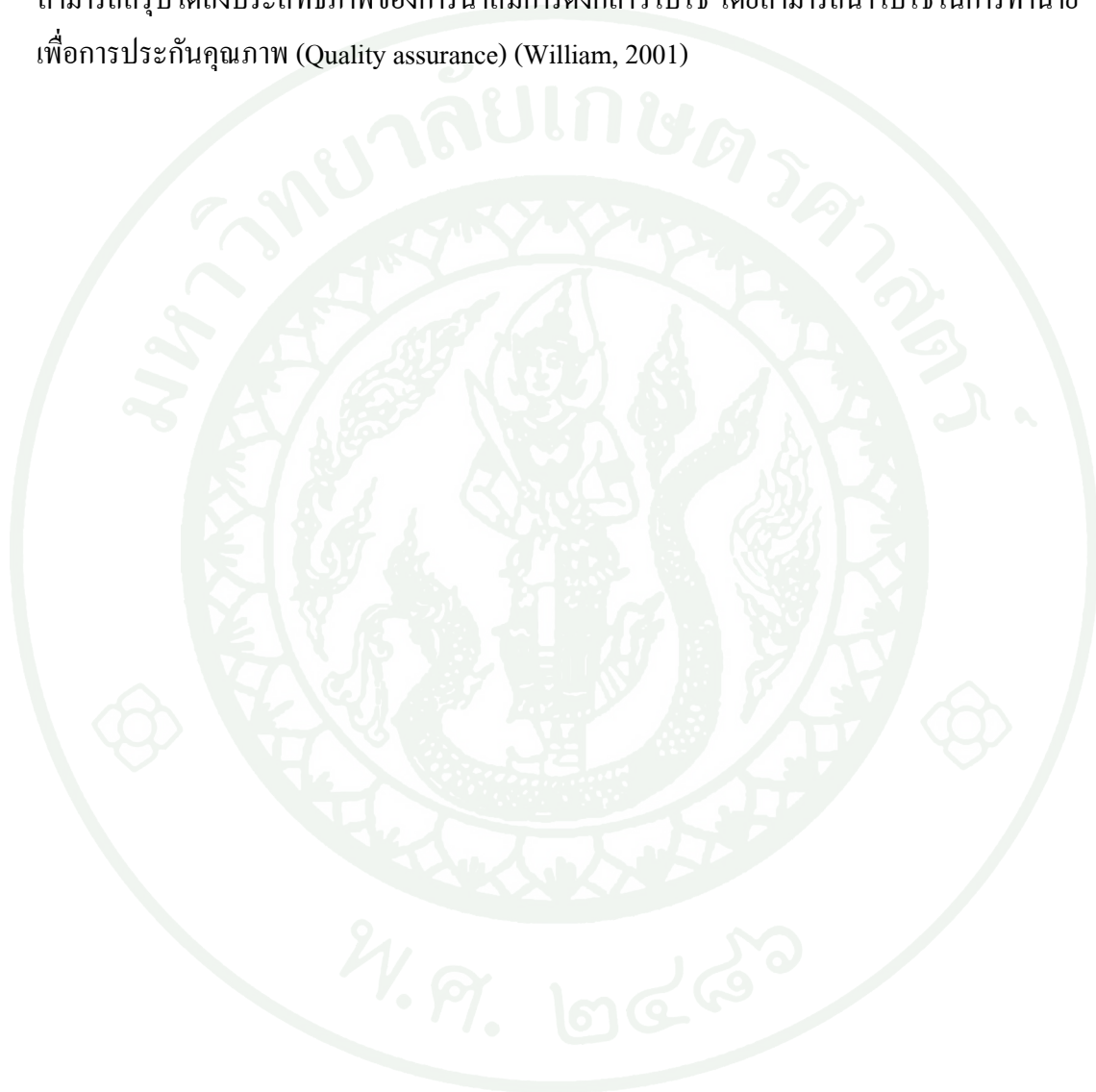
จากการเปรียบเทียบข้อมูลของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายปริมาณ โมโนโซเดียมกลูตาเมต ทั้ง 24 สมการ ในตารางที่ 44 พบว่า สมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS ที่ผ่านการปรับแต่ง สเปกตรัมด้วยวิธีการหาอนุพันธ์อันดับสอง (Second Derivative) ที่ความยาวคลื่นในช่วง 1130-1160, 1600-1630, 1640-1730, 1900-2000 นาโนเมตร มีความเหมาะสมและมีความแม่นยำในการทำนาย ปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตมากที่สุด เนื่องจากมีค่า R เท่ากับ 0.98 และมีค่าความคลาดเคลื่อน ของสมการทำนายค่าปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตต่ำ คือ มีค่า SEC และ SEP เท่ากับ 0.39 และ 0.40 ทั้งนี้ อาจเนื่องมาจากเมื่อนำข้อมูลสเปกตรัมเริ่มต้นไปปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีการหา อนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) ก่อนนำไปใช้ในการสร้างสมการทำนายปริมาณ โมโนโซเดียม กลูตาเมตจะสามารถช่วยแก้ปัญหาการซ้อนทับกันของจุดยอดได้ กล่าวคือ สามารถช่วยลดความ คลาดเคลื่อนของการซ้อนทับกันของจุดยอดดังกล่าวได้ ซึ่ง Osborne *et al.* (1993) กล่าวว่าวิธีการ ปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีนี้เป็นกำจัดฟิสิกส์ที่ซ้อนทับกัน และลดผลกระทบจากการเลื่อนของ เส้นฐาน (Baseline) ที่เกิดจากการกระเจิงแสง ทำให้ได้สเปกตรัมที่มีฐานแคบและเห็นจุดยอด แยกออกจากกันอย่างชัดเจน แต่จุดยอดของสเปกตรัมเริ่มต้นจะเปลี่ยนเป็นจุดยอดที่อยู่ตรงข้ามและ ตรงกับจุดยอดเริ่มต้น อนุพันธ์ (2552) อธิบายว่าวิธี Second derivative ใช้ได้ผลดีกับตัวอย่างที่มี ขนาดอนุภาคต่างๆ ผสมกันอยู่ ซึ่งสอดคล้องกับตัวอย่างที่ใช้ในการวิจัยครั้งนี้เนื่องจากจะมีการนำ ตัวอย่างขนมขบเคี้ยวไปดำเนินการทำการวิเคราะห์

ตารางที่ 45 เปรียบเทียบค่า R, SEC, R, SEP, RPD, Bias ของสมการทำนายปริมาณ โมโนโซเดียม กลูตาเมตที่ดีที่สุดที่สร้างขึ้นด้วยวิธีทางสถิติ PLS, MWPLS

วิธีทางสถิติ	วิธีปรับแต่ง สเปกตรัม	ขั้นตอน Calibration		ขั้นตอน Validation			
		R	SEC	R	SEP	RPD	Bias
PLS	2 D	0.97	0.41	0.96	0.45	3.33	-0.02
MWPLS	2 D	0.98	0.39	0.96	0.40	3.75	-0.08

จากการเปรียบเทียบค่า R, SEC, R, SEP, RPD, Bias ของสมการทำนายปริมาณ โมโนโซเดียม กลูตาเมตที่ดีที่สุดที่สร้างขึ้นด้วยวิธีทางสถิติ PLS, MWPLS ในตารางที่ 45 จะพบว่าสมการที่สร้างขึ้น เพื่อทำนายปริมาณ โมโนโซเดียมกลูตาเมตด้วยวิธีทางสถิติ MWPLS สามารถทำนายค่าปริมาณ ผงชูรสได้อย่างแม่นยำมากกว่าสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายค่าปริมาณผงชูรสด้วยวิธีทางสถิติ PLS เนื่องจากให้ค่า R เท่ากับ 0.98 และให้ค่า SEC และ SEP เท่ากับ 0.39 และ 0.40 ส่วนวิธี PLS ให้ค่า

R เท่ากับ 0.97 และให้ค่า SEC และ SEP เท่ากับ 0.41, 0.45 ตามลำดับ ดังนั้นสมการทำนายปริมาณ โมโนโซเดียมกลูตาเมตที่สร้างขึ้นจากวิธีทางสถิติ MWPLS จึงมีประสิทธิภาพในการทำนายค่าได้ แม่นยำกว่าสมการทำนายปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตที่สร้างขึ้นจากวิธีทางสถิติ PLS เมื่อพิจารณา จากค่า R ที่ได้จากสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมต ซึ่งเท่ากับ 0.98 สามารถสรุปได้ถึงประสิทธิภาพของการนำสมการดังกล่าวไปใช้ โดยสามารถนำไปใช้ในการทำนาย เพื่อการประกันคุณภาพ (Quality assurance) (William, 2001)



สรุปและข้อเสนอแนะ

ในการศึกษาความเป็นไปได้ในการประเมินคุณภาพผลิตภัณฑ์ขนมขบเคี้ยวด้วยเทคนิคสเปกโตรสโกปีย่านใกล้อินฟราเรดแบ่งออกเป็น 3 ส่วนได้แก่ 1) การศึกษาคุณภาพทางเคมีและกายภาพของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวในเรื่องปริมาณความชื้น ค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี (a_w) ปริมาณไขมัน ค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ (TBA) ปริมาณโปรตีนและปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมต (MSG) 2) สร้างสมการทำนายที่เหมาะสมในการทำนายค่าคุณภาพทางเคมีและกายภาพดังกล่าว 3) เพื่อตรวจสอบความถูกต้องของสมการที่สร้างขึ้นดังกล่าว จากผลการศึกษาสามารถสรุปได้ดังนี้

1. จากการศึกษาคุณภาพทางเคมีและกายภาพของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวในเรื่องปริมาณความชื้น ค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี (a_w) ปริมาณไขมัน ค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ (TBA) ปริมาณโปรตีนและปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมต (MSG) ผลการศึกษาพบว่าในช่วงข้อมูลดังแสดงในตารางที่ 46

ตารางที่ 46 ช่วงข้อมูลของปริมาณความชื้น ค่า a_w ปริมาณไขมัน ค่า TBA ปริมาณโปรตีน และค่า MSG ของตัวอย่างขนมขบเคี้ยว

ค่าคุณภาพ	N	กลุ่ม Calibration		กลุ่ม Validation	
		n1	ช่วงข้อมูล	n2	ช่วงข้อมูล
ปริมาณความชื้น (%wb)	150	100	2.92 – 11.16	50	2.97 – 11.16
ค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี	150	100	0.21 – 0.63	50	0.21 – 0.63
ปริมาณไขมัน (%)	150	100	17.12 – 30.65	50	17.27 – 30.54
ค่า TBA (mg malonaldehyde/kg)	100	80	0.60 – 1.26	20	0.66 – 1.17
ปริมาณโปรตีน	150	100	1.81 – 3.31	50	2.00 – 3.27
ค่า MSG	110	88	0 – 4.94	22	0 – 4.64

หมายเหตุ N หมายถึง จำนวนตัวอย่างทั้งหมด โดย $N = n1 + n2$

n1 หมายถึง จำนวนตัวอย่างที่ใช้ในกลุ่ม Calibration

n2 หมายถึง จำนวนตัวอย่างที่ใช้ในกลุ่ม Validation

2. ผลการสร้างสมการทำนายค่าคุณภาพทางเคมีและกายภาพ จากผลการศึกษาพบว่า จากตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ทำการศึกษาในข้อ 1 โดยมีช่วงข้อมูลดังแสดงในตารางที่ 46 เมื่อนำไปวัดค่าการดูดกลืนแสงและทำการปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมด้วยการหาอนุพันธ์อันดับสอง (2 D) จากนั้นนำข้อมูลค่าเคมีและกายภาพแต่ละค่าและข้อมูลสเปกตรัมมาหาความสัมพันธ์ด้วยวิธี Partial Least Square Regression (PLS) และวิธี Moving Window Partial Least Square Regression (MWPLS) พบว่า สมการทำนายที่สร้างขึ้นด้วยวิธี MWPLS เป็นสมการที่เหมาะสมที่สุดในการทำนายปริมาณความชื้น ค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี ปริมาณไขมัน ค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ และปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมต โดยมีค่า R และ SEP เท่ากับ 0.99 และ 0.26 % wb, 0.98 และ 0.02 , 0.98 และ 0.35%, 0.95 และ 0.12 mg malonaldehyde/ kg และ 0.98 และ 0.40 g /100 g ตามลำดับ ในขณะที่สมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี PLS เป็นสมการที่เหมาะสมที่สุดในการทำนายปริมาณโปรตีน โดยให้ค่า R และ SEP เท่ากับ 0.77 และ 0.18% ตามลำดับ ซึ่งสมการทำนายที่สร้างขึ้นด้วยวิธีที่เหมาะสมเพื่อทำนายปริมาณความชื้น ค่าวอเตอร์ แอคทีวิตี ปริมาณไขมัน ค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ ปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตสามารถนำไปประยุกต์ใช้ในการควบคุมคุณภาพได้ แต่สมการทำนายปริมาณโปรตีนสามารถนำไปใช้ในการทำนายเพื่อการแบ่งระดับปริมาณอย่างหยาบ

เอกสารและสิ่งอ้างอิง

นิรนาม. 2552. ซองละ 5 บาทสร้างตลาดหมื่นล้าน. **Thailand Industrial Today** (มีนาคม): 44-64.

สิริมา เตชะไกรศรี. 2544. การศึกษาค้นคว้าด้วยตนเองเรื่อง ปัจจัยและส่วนประสมการตลาดที่มีอิทธิพลต่อพฤติกรรมในการเลือกซื้อผลิตภัณฑ์ขนมขบเคี้ยวประเภทมันฝรั่งทอดกรอบของผู้ซื้อในเขตกรุงเทพมหานคร. วิทยานิพนธ์ปริญญาโท, มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์.

สุพรรณิกา เวียนทอง. 2548. การประเมินคุณภาพของน้ำมันปาล์มโดยใช้เครื่องฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มสเปกโตรสโกปีย่านใกล้อินฟราเรด. วิทยานิพนธ์ปริญญาโท, มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์.

ศุมาพร เกษมสำราญ. 2552. เทคโนโลยีอินฟราเรดย่านใกล้อินฟราเรดในอุตสาหกรรมเกษตร. สถาบันค้นคว้าและพัฒนาผลิตผลทางการเกษตรและอุตสาหกรรมเกษตร มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์, กรุงเทพฯ.

วารุณี ธนะแพสย์. 2545. สถานการณ์ปัจจุบันของงานวิจัยและพัฒนาการใช้ประโยชน์จากเทคนิค NIR Spectroscopy ในประเทศไทย. น.26-28. ใน วารุณี ธนะแพสย์, อนุพันธ์ เทอดวงศ์วรกุล และ ชงชัย สุวรรณดิษฐ์, ผู้รวบรวม. การอบรมเชิงปฏิบัติการการควบคุมคุณภาพสินค้าด้วยเทคนิค Near Infrared Spectroscopy เพื่อการแข่งขันในเวทีการค้าโลก. สถาบันค้นคว้าและพัฒนาผลิตผลทางการเกษตรและอุตสาหกรรมเกษตร มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์, กรุงเทพฯ.

อนุพันธ์ เทอดวงศ์วรกุล. 2545. การปรับแต่งสเปกตรัมก่อนการวิเคราะห์. น.67-97. ใน วารุณี ธนะแพสย์, อนุพันธ์ เทอดวงศ์วรกุล และ ชงชัย สุวรรณดิษฐ์, ผู้รวบรวม. การอบรมเชิงปฏิบัติการการควบคุมคุณภาพสินค้าด้วยเทคนิค Near Infrared Spectroscopy เพื่อการแข่งขันในเวทีการค้าโลก. สถาบันค้นคว้าและพัฒนาผลิตผลทางการเกษตรและอุตสาหกรรมเกษตร มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์, กรุงเทพฯ.

อนุพันธ์ เทอดวงศ์วรกุล. 2552. เทคโนโลยีอินฟราเรดย่านใกล้ในอุตสาหกรรมเกษตร.
สถาบันค้นคว้าและพัฒนาผลิตผลทางการเกษตรและอุตสาหกรรมเกษตร มหาวิทยาลัย
เกษตรศาสตร์, กรุงเทพฯ.

Birth, G.S. 1963. **Research in food instrumentation**. Instrument Society of America.

Bjarno, O.C. 1981. Meat and meat products: Multicomponent analysis of meat products.

J Assoc Off Anal Chem 64(6): 1392-1396.

Bo Hong. 2008. **Development of Portable Near Infrared Spectroscopy for Measuring total Nitrogen Contents in Fresh Rice Leaves**. The 1st Asian NIR Symposium and The 24th Japanese NIR Forum. 166-167.

Buning-Pfaue, H., R. Hartmann, S. Kehraus and C. Urban. 1988. **NIR-Spectrometrische Untersuchungen bei Lebensmitteln**. In H. Gunzler, A. H. Bahadir and R. Borsdorf (1998). (eds.), *Analytiker Taschenbuch* (Vol.18) pp.182-222. Berlin Heidelberg, New York: Springer Verlag.

Cecilia, S. and L. Rodriguez-Saona. 2009. Application of NIR and MIR Spectroscopy in quality control of potato chips. **Journal of Food Composition and Analysis** 2(5):5-7.

Chen, C., W. Cai and X. Shao. 2007. An Adaptive for selecting representative Calibration samples in the continuous wavelet domain for near-infrared Spectral analysis. **Analytical and Bioanalytical Chemistry** 387: 1041-1048.

Cozzolino, D., I. Murray, A. Chree and J.R. Scaife. 2004. **Multivariate determination of Free fatty acid and moisture in fish oil by partial least-squares regression and Near Infrared Spectroscopy**. *J.LWT*. 1-8.

- Curcio, J. and A. Petty. 1951. The near infrared absorption spectrum of liquid water. **Journal of the Optical Society of American** 41 (5): 302 -4.
- Delwiche, S.R, R.E. Pitt and K.H. Norris. 1991. Examination of starch-water and Cellulose-water interactions with near infrared (NIR) diffuse reflectance Spectroscopy. **Starch** 43 (3): 85-92.
- DeMenna, G.J. 1998. Brown Fast Food Analysis: Do not Wait for Proximate. **Food Testing and Analysis** 2(4): 16-19.
- FSANZ Report, June. 2003. **Monosodium Glutamate: A Safety Assessment.**
- Geha, R. 2000. Review of Alleged Reaction to Monosodium Glutamate and Outcome of a Multicenter Double Blind Placebo Controlled Study. **J. Nutr.** 130: 1058S.
- Gonzalez-Martin, I., N. Alvarez-Garcia and J.M. Gonzalez-Cabrera. 2005. Near-infrared spectroscopy (NIRS) with a fiber-optic probe for the amino acid composition in animal feed. **J. Talanta.** 69: 706-710.
- Hecht, K.T. and D.L. Wood. 1956. The near infrared spectrum of the peptide group. **Proceedings of the Royal Society** 235: 174-88.
- Hruschka, W.R. 1990. Data Analysis: Wavelength Selection Methods. *In* P. Williams and K. Norris. **Near-Infrared Technology in the Agricultural and Food Industries.** American Association of Cereal Chemists, Inc.
- Joint FAO/WHO Expert Committee on Food Additives. 1988. **L-Glutamic acid and its ammonium, calcium, monosodium and potassium salts. In: Toxicological of Certain Food of Certain Food Additives and Contaminants.** Cambridge University Press, New York.

- Kaffka, K.J., J. Farkas, Z. Seregely and L. Meszaros. 2002. **Monitoring the effect of ultra-high pressure preservation technology by near infrared reflectance spectroscopy.** NIR Publication, UK., Korea.
- Kamishikiryo, H., K. Hasegawa and T. Matoba. 1991. Stability of 2170 nm as a key Wavelength for protein analysis by near infrared spectroscopy. **Nippon Shokuhin Kogyo Gakkaishi** 38: 850-7.
- Kawano, S., H. Abe and M. Iwamoto. 1995. Development of a calibration equation with Temperature compensation for determining the Brix value in intact peaches. **Near Infrared Spectrosc** 3: 211-218.
- Kehraus, D.I., J.L. De Boever and E.R. Deaville. 1977. The principles, practices and Some future applications of near infrared spectroscopy for predicting the Nutritive value of foods for animals and humans. **Nutrition Research Reviews** 10: 83-114.
- Martens, H. 1982. **Understanding food research data.** Applied Science: May 38.
- Martin, K.A. 1992. **Recent advances in near-infrared reflectance spectroscopy.** Marcel Dekker Inc., New York.
- McClure, W.F. 2001. **Near Infrared Instrumentation.** In Near-Infrared Technology in the Agricultural and Food Industries, Second Edition, Phil Williams, Karl Norris, eds, 109-127. St. Paul, MN: American Association of Cereal Chemists.
- Michiyo, M., A. Masahiro, K.S. Amari and M. Mitsuru. 2006. **Evaluation of the Peroxidation of Non-Saturated Fatty Acid by Near Infrared Spectroscopy.** Japan-Korea Joint Symposium on Near Infrared Spectroscopy.

Murray, I. 1986. The NIR spectra of homologous series of organic compounds. *In* Hollo, J., K.J. Kaffka and J.L. Gonczyk, Editors, **Proceedings international NIR/NIT Conference**. Akademiai Kiado. Budapest. 13-28.

Osborne, B.G. 1988. **Determination of fat in a variety of cereal foods using NIR Spectroscopy, in Analytical Applications of Spectroscopy** Creaser C S, Davies A M C (eds). Royal Society of Chemistry, London.

_____. T. Fearn, A.R. Miller and S. Douglas. 1984. Application of near infrared Reflectance spectroscopy to the compositional analysis of biscuits and biscuit Doughs. **Journal of the Science of Food and Agriculture** 35: 99-105.

_____. and T. Fearn. 1986. **Near Infrared Spectroscopy in Food Analysis**. Essex, UK: Long-Man Scientific & Technical-Wiley.

_____. and P.H. Hordle. 1993. **Practical NIR Spectroscopy with Application in Food and Beverage Analysis**. Longman Scientific & Technical, New York.

Sumio Kawano. 2002. **NIR Applications in Industry and Future View**. น. 260. ใน วารุณี ชนะแพสย์, อนุพันธ์ เทอดวงศ์วรกุล และ ชงชัย สุวรรณลิขิตน์, ผู้รวบรวม. **การอบรมเชิงปฏิบัติการการควบคุมคุณภาพสินค้าด้วยเทคนิค Near Infrared Spectroscopy เพื่อการแข่งขันในเวทีการค้าโลก**. สถาบันค้นคว้าและพัฒนาผลิตผลทางการเกษตรและอุตสาหกรรมเกษตร มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์, กรุงเทพฯ.

Sonthisuk Teerachaichayut. 2008. **Online Near Infrared Detection of Translucent and Gamboe Mangosteen**. The 1st Asian NIR Symposium and The 24th Japanese NIR Forum. 166-167.

Tarasoff, L. and M.F. Kelly. 1993. Monosodium Glutamate: A double blind study and review. **Fd. Chem. Toxic.** 31(12): 1019.

Unidentified. 1985. **Webster's Ninth New Collegiate Dictionary**. Merriam-Webster, Inc.,
Spring-field, Massachusetts.

Wang, Y., K. Murayama, Y. Myojo, R. Tsenkova, N. Hayashi and Y. Ozaki. 1988. **J. Phys. Chem.** 102: 6655.

Walker, R. and R.J. Lupien. 2000. The Safety Evaluation of Monosodium Glutamate. **J. Nutr.** 130: 1049S.

Williams, P.C. 2001. **Implementation of Near-Infrared Technology, in Near-Infrared Technology in the Agricultural and Food Industries**, 2nd ed. by P.C. Williams and K.H. Norris. American Association of Cereal Chemists, St Paul, MN, USA, p. 163-165.

Yaohua, H. 2008. **Evaluation of Fatty Acid Composition in Intramuscular Fat by Near Infrared Spectroscopy**. The 1st Asian NIR Symposium and The 24th Japanese NIR Forum. pp. 224-225.

Yookyung, K. and E.K. Sandra. 2009. Near Infrared (NIR) Prediction of trans-Fatty Acid in Ground Cereal Foods. **Journal of Agricultural and Food Chemistry: Korea** 8187-8193.





ภาคผนวก ก

ขั้นตอนการวัดค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ทอดเอง และตัวอย่างขนมขบเคี้ยว
ที่ซื้อจากท้องตลาด ด้วยเครื่อง Near Infrared Reflectance (NIR) Spectroscopy

การวัดค่าการดูดกลืนแสง

ขั้นตอนการวัดค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยเครื่อง NIR

1. ตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ทอดเอง

- 1.1 จากตัวอย่าง Pallet ประเภทโปเต้
- 1.2 นำมาผ่านการทอด
- 1.3 นำไปบรรจุในถุง Poly Bag with Zipper
- 1.4 นำตัวอย่างที่ได้จากการเตรียมมาป็นนาน 5 วินาที
- 1.5 นำตัวอย่างที่ผ่านการป่นแล้วมาบรรจุลงใน rotating cup ก่อนนำไปทำการวัดค่า

ด้วยเครื่อง NIR



ภาพผนวกที่ ก1 ตัวอย่าง Pelle ประเภทโปเต้



ภาพผนวกที่ ก2 ตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการทอด



ภาพผนวกที่ ก3 ตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการทอดแล้วนำไปบรรจุในถุงพลาสติกประเภท โพลีเอสเตอร์ชนิดที่มีซิปป



ภาพผนวกที่ ก4 ตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ผ่านการปั่นนาน 5 วินาที



ภาพผนวกที่ ก5 นำตัวอย่างที่ผ่านการปั่นบรรจุลงใน rotating cup ก่อนทำการวิเคราะห์ ด้วยเครื่อง NIR



ภาพผนวกที่ ก6 เครื่อง Near Infrared Spectroscopy (BRAN + LUEBBE, InfraAlyzer 500, Norderstedt, Germany)

2. ตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่ซื้อจากท้องตลาด

2.1 นำตัวอย่างมาปั่นด้วยเครื่องปั่นนาน 5 วินาที

2.2 นำตัวอย่างที่ผ่านการปั่นแล้วมาบรรจุลงใน rotating cup ก่อนนำไปทำการวัดค่า

ด้วยเครื่อง NIR



วิธีการวิเคราะห์คุณภาพทางด้านเคมีและกายภาพ

การวิเคราะห์ปริมาณความชื้น (AOAC, 2000)

ขั้นตอนการเตรียมตัวอย่างสำหรับการวิเคราะห์

นำตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่บรรจุในถุงพลาสติกประเภทโพลีเอสเตอร์ ซึ่งมีปริมาณ 35 กรัม มาทำการปั่นด้วยเครื่องปั่นนาน 5 วินาที แล้วจึงนำตัวอย่างที่ผ่านการปั่นปริมาณ 18 กรัม มาบรรจุลงใน rotating cup (ดังแสดงในภาคผนวกที่ ก5) และนำไปวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในข้อ 2.2 แล้วมาทำการวิเคราะห์ปริมาณความชื้นตามขั้นตอนต่อไป

ขั้นตอนการวิเคราะห์

1. อบจนหาความชื้นชนิดอลูมิเนียมพร้อมด้วยฝาปิดในตู้อบไฟฟ้าที่อุณหภูมิ $100 \pm 5^{\circ}\text{C}$ ประมาณ 30 นาที ทำให้เย็นในเดสิคเคเตอร์ ชั่งน้ำหนักจานและฝาปิดให้ได้น้ำหนักที่แน่นอน
2. ชั่งตัวอย่างให้ได้น้ำหนักที่แน่นอนใส่ในจานอลูมิเนียม 2 กรัม นำไปอบในตู้อบไฟฟ้าที่อุณหภูมิ $100 \pm 5^{\circ}\text{C}$ นานประมาณ 5 ชั่วโมง โดยเปิดฝาอลูมิเนียมไว้เล็กน้อย จากนั้นปิดฝาอลูมิเนียมแล้วนำมาใส่ในเดสิคเคเตอร์ทิ้งไว้ให้เย็นชั่งน้ำหนักให้แน่นอน ทำการอบซ้ำจนกระทั่งได้ 30 นาที แล้วชั่งน้ำหนักจนกว่าจะได้น้ำหนักต่างกันไม่เกิน 2 มิลลิกรัม คำนวณปริมาณร้อยละของความชื้นของตัวอย่าง

สูตรการคำนวณ

$$\text{ปริมาณความชื้นร้อยละของน้ำหนักรวบรวม} = \frac{100 (W_1 - W_2)}{W_1 - W}$$

เมื่อ W = น้ำหนักของจานอลูมิเนียมพร้อมฝาปิด เป็นกรัม

W_1 = น้ำหนักของจานอลูมิเนียมพร้อมฝาปิด และตัวอย่างก่อนอบ เป็นกรัม

W_2 = น้ำหนักของจานอลูมิเนียมพร้อมฝาปิด และตัวอย่างหลังอบ เป็นกรัม

การหาค่าวอเตอร์ แอคติวิตี (Water Activity)

ขั้นตอนการเตรียมตัวอย่างสำหรับการวิเคราะห์

นำตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่บรรจุในถุงพลาสติกประเภทโพลีเอสเตอร์ ซึ่งมีปริมาณ 35 กรัม มาทำการปั่นด้วยเครื่องปั่นนาน 5 วินาที แล้วจึงนำตัวอย่างที่ผ่านการปั่นปริมาณ 18 กรัม มาบรรจุลงใน rotating cup (ดังแสดงในภาพผนวกที่ ก5) และนำไปวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในข้อ 2.2 แล้วมาทำการวิเคราะห์ค่าวอเตอร์ แอคติวิตีตามขั้นตอนต่อไปนี้

ขั้นตอนการวิเคราะห์

1. ใส่ตัวอย่างประมาณ 1 ใน 3 ลงใน cup สำหรับใส่ตัวอย่าง
2. นำ cup ใส่ในเครื่องวัดค่าวอเตอร์ แอคติวิตี ปิดฝาครอบ รอจนสัญลักษณ์สามเหลี่ยมขึ้นจนครบทั้ง 4 อัน ทำการบันทึกค่าวอเตอร์ แอคติวิตี พร้อมอุณหภูมิที่ปรากฏด้านหน้าของจอเครื่อง



ภาพผนวกที่ ข1 ภาพเครื่องวอเตอร์ แอคติวิตียี่ห้อ NOVASINA รุ่น RS 232

การวิเคราะห์ค่าปริมาณไขมัน (AOAC, 2000 หมายเลข 920.39)

สารเคมี

ปิโตรเลียมอีเทอร์

ขั้นตอนการเตรียมตัวอย่างสำหรับการวิเคราะห์

นำตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่บรรจุในถุงพลาสติกประเภทโพลีเอสเตอร์ ซึ่งมีปริมาณ 35 กรัม มาทำการปั่นด้วยเครื่องปั่นนาน 5 วินาที แล้วจึงนำตัวอย่างที่ผ่านการปั่นปริมาณ 18 กรัม มาบรรจุลงใน rotating cup (ดังแสดงในภาคผนวกที่ ก5) และนำไปวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในข้อ 3.2 แล้วมาทำการวิเคราะห์ค่าปริมาณไขมันตามขั้นตอนต่อไป

ขั้นตอนการวิเคราะห์

1. เตรียมอุปกรณ์ Cup โดยอบ Cup ในตู้อบลมร้อน และชั่งน้ำหนักที่แน่นอน บันทึกค่าไว้ เตรียม Thimber โดยล้างในปิโตรเลียมอีเทอร์ แล้วทิ้งไว้ให้แห้งในตู้ควั่น
2. ชั่งตัวอย่างหนัก 1 กรัม ใส่ในกระดวยกรองฟับแล้วใส่ใน Thimber ที่เตรียมไว้
3. ทำการเปิด Cooling รอจนน้ำใน Cooling เย็น (อุณหภูมิน้อยกว่า 20° C)
4. เปิดเครื่อง Soxtec ทั้ง 2 ปุ่ม คือ Control Unit และ Drive Unit
5. เลือกโปรแกรมสกัดไขมันที่ต้องการใช้โดยหมายเลขโปรแกรมจะอยู่ข้างหลังเครื่องหมาย # โดยจะใช้โปรแกรมหมายเลข 6
6. กดปุ่ม Heat จะมีสัญลักษณ์ * ขึ้นตรงค่าอุณหภูมิของเครื่อง Soxtec ต้องรอให้อุณหภูมิของเครื่องเท่ากับโปรแกรมที่ตั้งไว้ สังเกตจากสัญลักษณ์ * จะหายไป
7. เลื่อนกระจกด้านหน้าขึ้นเพื่อใส่ Thimber ที่มีตัวอย่างอยู่เข้ากับเครื่องโดยใช้วงแหวนที่เป็นแม่เหล็กประกอบเข้าที่ด้านบนของ Thimber เมื่อใส่จนครบให้กด เพื่อยก Thimber ขึ้น
8. ใส่ปิโตรเลียมอีเทอร์ลงใน Cup ที่ทราบน้ำหนัก และวาง Cup ลงในที่ใส่ Cup ซึ่งมี 6 ช่อง แล้วนำไปประกอบเข้าเครื่อง Soxtec ที่ด้านล่าง เลื่อนกระจกด้านหน้าลง แล้วกดปุ่มเพื่อเริ่มทำการสกัดไขมัน (ระหว่างที่เครื่องกำลังทำงานจะสังเกตเห็นเครื่องหมาย R อยู่หน้าสัญลักษณ์ #)

9. เมื่อสกัดเสร็จ จะสังเกตจากเครื่องหมาย R หายไป ให้นำเอา Cup และ Timber ออกตามลำดับโดยใช้ถุงมือจับ (ขณะที่นำ Cup ออก Timber จะถูกเลื่อนขึ้นไปด้านบน และเมื่อนำ Cup ออกแล้วให้กด ↓ เพื่อเลื่อนให้ Timber ลงมาอยู่ในตำแหน่งที่จะหยิบออกได้)

10. นำ Cup ที่ได้ไปประเหยปิโตรเลียมอีเธอร์ในตู้ควั่น เมื่อปิโตรเลียมอีเธอร์ระเหยหมดแล้ว จึงนำไปอบในตู้อบลมร้อนต่อไปเพื่อหาไขมันที่สกัดได้

11. เมื่อใช้เครื่องเสร็จแล้วให้ระบายปิโตรเลียมอีเธอร์ที่อยู่ในเครื่อง Soxtec ออก โดยนำภาชนะมารองรับที่สายยางด้านล่างของเครื่องและดึงคันโยกสีดำ ซึ่งปิโตรเลียมอีเธอร์นี้สามารถนำไปใช้ได้

12. ปิดเครื่อง Soxtec ทั้ง 2 ปุ่ม และปิดเครื่อง Cooling Bath

13. ทำความสะอาดเครื่อง Soxtec

สูตรการคำนวณ

$$\% \text{ ไขมัน } = \frac{W_3 - W_2}{W_1} * 100$$

เมื่อ W_1 = น้ำหนักตัวอย่าง (g)

W_2 = น้ำหนัก Cup (g)

W_3 = น้ำหนัก Cup ที่ผ่านระเหยปิโตรเลียมอีเธอร์ออกไปแล้ว (g)

การวิเคราะห์ค่าไทโอบาร์บิทริก แอซิด นัมเบอร์ (AOAC, 2000)

สารเคมี

1. ไทโอบาร์บิทริก แอซิด รีเอเจนต์ (Thiobarbituric Acid reagent)
2. กรดไฮโดรคลอริกเข้มข้น 4 M

ขั้นตอนการเตรียมตัวอย่างสำหรับการวิเคราะห์

นำตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่บรรจุในถุงพลาสติกประเภทโพลีเอสเตอร์ ซึ่งมีปริมาณ 35 กรัม มาทำการปั่นด้วยเครื่องปั่นนาน 5 วินาที แล้วจึงนำตัวอย่างที่ผ่านการปั่นปริมาณ 18 กรัม มาบรรจุ

ลงใน rotating cup (ดังแสดงในภาพผนวกที่ ก5) และนำไปวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในข้อ 4.2 แล้วมาทำการวิเคราะห์ค่าไทโอบาร์บิทูริก แอซิด นัมเบอร์ตามขั้นตอนต่อไปนี้

ขั้นตอนการวิเคราะห์

1. ชั่งตัวอย่างมา 10 กรัม ปั่นกับน้ำกลั่น 50 มิลลิลิตร นาน 2 นาที แล้วเทใส่ขวดสำหรับกลั่นล้างเครื่องปั่นด้วยน้ำกลั่น จำนวน 47.50 มิลลิลิตร
2. เติมสารละลายกรดไฮโดรคลอริกเข้มข้น 4 M จำนวน 2.5 มิลลิลิตร
3. นำไปกลั่นให้ความร้อนด้วยเครื่อง heating mantle กลั่นจนได้ของเหลวปริมาตร 50 มิลลิลิตร
4. ปิเปตของเหลวที่กลั่นได้มา 5 มิลลิลิตร ใส่ในหลอดที่มีฝาปิด เติมสารละลาย TBA reagent 5 มิลลิลิตร ปิดฝาเขย่า แล้วนำไปต้มในน้ำเดือดนาน 35 นาที
5. ทำ blank โดยใช้ น้ำกลั่นแทนตัวอย่าง
6. หลังครบ 35 นาทีแล้วนำหลอดไปทำให้เย็นภายใน 10 นาที แล้ววัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่องสเปกโตรโฟโตมิเตอร์ ที่ความยาวคลื่น 538 นาโนเมตร และคำนวณหาค่า TBA

สูตรการคำนวณ

$$\text{TBA number (มิลลิกรัม malonaldehyde ต่อ กิโลกรัม)} = 7.8 * \text{OD}$$

การวิเคราะห์ปริมาณโปรตีน (AOAC, 2000)

สารเคมี

1. สารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์ (NaOH) 32 %
2. สารละลายกรดบอริกเข้มข้น 4 %
3. สารละลายอินดิเคเตอร์ผสม (สารละลาย Bromocresol green และสารละลาย Methyl red)
4. กรดไฮโดรคลอริก (HCl) 0.1 M
5. กรดซัลฟูริกเข้มข้น (H₂SO₄)

6. ค่ะตะลิสต์ผสมระหว่างคอปเปอร์ซัลเฟต (CuSO_4) และโพแทสเซียมซัลเฟต (K_2SO_4) ในอัตราส่วน 0.5 ต่อ 10

ขั้นตอนการเตรียมตัวอย่างสำหรับการวิเคราะห์

นำตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่บรรจุในถุงพลาสติกประเภทโพลีเอสเตอร์ ซึ่งมีปริมาณ 35 กรัม มาทำการปั่นด้วยเครื่องปั่นนาน 5 วินาที แล้วจึงนำตัวอย่างที่ผ่านการปั่นปริมาณ 18 กรัม มาบรรจุลงใน rotating cup (ดังแสดงในภาคผนวกที่ ก5) และนำไปวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในข้อ 5.2 แล้วมาทำการวิเคราะห์ค่าปริมาณโปรตีนตามขั้นตอนต่อไปนี้

ขั้นตอนการวิเคราะห์

การย่อย

1. ชั่งตัวอย่างมา 1 กรัม อย่างละเอียดใส่ลงในหลอดย่อย
2. ใส่ค่ะตะลิสต์ที่ผสมระหว่าง CuSO_4 กับ K_2SO_4 ในอัตราส่วน 0.5 ต่อ 10 ตามลำดับ โดยใส่ในปริมาณ 10 กรัม
3. เติมกรดซัลฟูริกเข้มข้นลงไป 15 มิลลิลิตร แล้วเขย่าเบาๆ
4. ตั้งหลอดย่อยใน stand สวม exhaust manifold ลงบนส่วนบนของขวดย่อย และเปิด power เครื่องดักจับไอกรด โคนทำการย่อยในตู้ควั่นหรือตู้ที่มีการดูดอากาศ
5. ตั้ง stand หลอดย่อย และ exhaust ลงบนเครื่องย่อย (digestor) ที่ตั้งอุณหภูมิไว้ที่ 420 องศาเซลเซียสมาแล้ว และสวม Heat shields
6. ย่อยต่อไปนาน 45 นาที จนได้สารละลายที่มีสีเขียวใส โดยมีสีที่สม่ำเสมอทั้งหมด
7. ยก stand พร้อมหลอดย่อย และ exhaust มาตั้งไว้ที่ข้างๆ และทิ้งไว้ให้เย็น
8. ปิด power เครื่องย่อยแต่ยังคงเปิดเครื่องดักจับไอกรดอยู่ เพื่อดักจับไอกรดที่ยังมีอยู่ในหลอดย่อย

การกลั่นและวิเคราะห์ปริมาณ

1. เปิด power ของเครื่องหล่อเย็นก่อนทำการกลั่นอย่างน้อย 30 นาที และเปิด power ของเครื่องกลั่น
2. จากด้านหน้าจอเครื่องจะปรากฏโปรแกรมให้เลือกโดยจะมีโปรแกรมให้เลือกดังนี้
Preheat, Cleaning และ Distillation
3. เติมน้ำกลั่นในหลอดย่อยที่อยู่ด้านซ้ายมือของเครื่อง วางฟลasks ไว้สำหรับรองสายยางด้านขวา เลือกโปรแกรม Preheat จากหน้าจอเครื่อง รอจนเครื่องทำงานเสร็จ แล้วจึงนำน้ำที่เหลือจากหลอดย่อย และจากฟลask ไปทิ้ง
4. เติมน้ำกลั่นปริมาณครึ่งหลอดย่อย และวางฟลask ไว้ที่ตำแหน่งเดิมแล้วเลือกโปรแกรม Cleaning รอจนเครื่องทำงานเสร็จ แล้วจึงนำน้ำที่เหลือจากหลอดย่อย และจากฟลask ไปทิ้ง และทำซ้ำอีก 2 รอบ
5. นำหลอดย่อยที่มีตัวอย่างที่ต้องการวิเคราะห์ที่ผ่านการย่อยในขั้นตอนการย่อยดังกล่าวมาแล้วใส่แทนที่หลอดย่อยทางด้านซ้ายมือของเครื่อง และใส่กรดบอริก 4% จำนวน 25 มิลลิลิตร วางไว้ด้านซ้าย และเลือกโปรแกรม Distillation โดยเลือกใส่โซเดียมไฮดรอกไซด์ 32% 90 มิลลิลิตร
6. เมื่อกลั่นเสร็จแล้วเอาฟลask และหลอดย่อยออกจากเครื่องย่อย นำฟลask ไปไทเทรตกับสารละลายกรดไฮโดรคลอริกมาตรฐาน จนได้สารละลายเป็นสีชมพู

สูตรการคำนวณ

$$\% N = \frac{14 * (V1 - V2) * \text{normality of HCl (mol/L)} * 100}{\text{Weight of sample (mg)}}$$

V1 = ปริมาตรของกรดไฮโดรคลอริกที่ไทเทรตตัวอย่าง

V2 = ปริมาตรของกรดไฮโดรคลอริกที่ไทเทรต blank

$$\% \text{ Protein} = \% N * F$$

การวิเคราะห์หาปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมต (Steven *et al.*, 1989)

สารเคมี

1. Redry Solution
2. Derivatized Reagent
3. MeOH
4. Diluent

ขั้นตอนการเตรียมตัวอย่างสำหรับการวิเคราะห์

นำตัวอย่างขนมขบเคี้ยวที่บรรจุในถุงพลาสติกประเภทโพลีเอสเตอร์ ซึ่งมีปริมาณ 35 กรัม มาทำการปั่นด้วยเครื่องปั่นนาน 5 วินาที แล้วจึงนำตัวอย่างที่ผ่านการปั่นปริมาณ 18 กรัม มาบรรจุลงใน Rotating cup (ดังแสดงในภาพผนวกที่ ก5) และนำไปวัดค่าด้วยเครื่อง NIR ในข้อ 6.2 แล้วมาทำการวิเคราะห์ปริมาณโมโนโซเดียมกลูตาเมตตามขั้นตอนต่อไป

ขั้นตอนการวิเคราะห์

1. ชั่งตัวอย่าง 4 กรัม ใส่พลาสติกขนาด 250 มิลลิลิตร
2. ปิ่บน้ำกลั่นใส่ในตัวอย่าง 100 มิลลิลิตร แล้วเขย่านาน 30 นาที
3. นำมากรองด้วยกระดาษกรองเบอร์ 1
4. นำมากรองด้วยกระดาษกรองชนิด Nylon ขนาด 0.45 u
5. ปิ่บตัวอย่าง 10 ul ใส่ลงใน micro vial
6. ระเหยแห้งด้วย Vacum oven ที่อุณหภูมิ 37 °C นาน 20 นาที
7. เติม Redry Solution 30 ul และนำไปเขย่าให้เข้ากันด้วยเครื่อง Vortex
8. ระเหยแห้งด้วย Vacum oven ที่อุณหภูมิ 37 °C นาน 20 นาที
9. เติม Derivatized Reagent 30 ul นำไปเขย่าด้วยเครื่อง Vortex แล้วทิ้งไว้ในตู้ที่บแสง นาน 20 นาที
10. ระเหยแห้งด้วย Vacum oven ที่อุณหภูมิ 37 °C นาน 20 นาที
11. เติม MeOH 30 ul และนำไปเขย่าด้วยเครื่อง Vortex

12. ระเหยแห้งด้วย Vacuum oven ที่อุณหภูมิ 37 °C นาน 20 นาที
13. เติม Diluent 250 ul และเขย่าด้วยเครื่อง Vortex
14. ปิเปตตัวอย่างที่ได้มา 20 ul และนำไปฉีดด้วยเครื่อง HPLC

สูตรการคำนวณ

$$\text{Monosodium Glutamate (MSG) (\%)} = \% \text{ Glutamic acid} * 1.15$$

$$\% \text{ Glutamic acid} = \frac{12.5 * \text{pmol จาก Standard curve} * 147.13}{\text{น้ำหนักของตัวอย่าง} * 10^6}$$

ประวัติการศึกษา และการทำงาน

ชื่อ-นามสกุล	นางสาวนพกร ปัญญาวัชรศิโร
วัน เดือน ปี ที่เกิด	28 พฤศจิกายน พ.ศ. 2526
สถานที่เกิด	กรุงเทพมหานคร
ประวัติการศึกษา	วท.บ. (พัฒนาผลิตภัณฑ์อุตสาหกรรมเกษตร) มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ (พ.ศ. 2549)
ตำแหน่งหน้าที่การงานปัจจุบัน	-
สถานที่ทำงานปัจจุบัน	-
ผลงานดีเด่นและรางวัลทางวิชาการ	- การตรวจสอบค่าปริมาณความชื้นและค่าแอมโมเนีย แอคทีวิตีของตัวอย่างขนมขบเคี้ยวด้วยเทคนิค NIR - การตรวจสอบค่าปริมาณผงชูรสของตัวอย่าง ขนมขบเคี้ยวด้วยเทคนิค NIR
ทุนการศึกษาที่ได้รับ	ทุนอุดหนุนวิจัยมหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ ประจำปี 2551