



รายงานการวิจัยฉบับสมบูรณ์

การประเมินปริมาณโพแทสเซียมในดิน ด้วยเทคนิคเนียร์อินฟราเรด (NIR)
The evaluation of Potassium content in soil by Near Infrared.

โดย

นางสาวจุฑามาศ ไกรเพิ่ม

นางอัจฉิมา พงษ์จินดา

นางสาวกรรณก เปี่ยมหมื่นไวย

ทะเบียนวิจัยเลขที่ 62-63-09-08-030000-010-108-05-23

สำนักวิทยาศาสตร์เพื่อการพัฒนาที่ดิน

กรมพัฒนาที่ดิน กระทรวงเกษตรและสหกรณ์

ตุลาคม พ.ศ.2564

แบบรายงานผลการวิจัยฉบับสมบูรณ์

ทะเบียนวิจัยเลขที่..... 62-63-09-08-030000-010-108-05-23.....

ชื่อแผนงานวิจัย/โครงการวิจัย..... การประเมินปริมาณโพแทสเซียมในดิน ด้วยเทคนิคเนียร์อินฟราเรด (NIR)
The evaluation of Potassium content in soil by Near Infrared.....

ชื่อผู้รับผิดชอบ..... นางสาวจุฑามาศ ไกรเพิ่ม.....

หน่วยงาน..... สำนักวิทยาศาสตร์เพื่อการพัฒนาที่ดิน.....

ที่ปรึกษาโครงการ..... หน่วยงาน..... สำนักวิทยาศาสตร์เพื่อการพัฒนาที่ดิน..... กรมพัฒนาที่ดิน.....

ผู้ร่วมดำเนินการ..... นางสาวอัจฉิมา พงษ์จินดา และนางสาวกรรณก เปี่ยมหมื่นไวย.....

หน่วยงาน..... สำนักวิทยาศาสตร์เพื่อการพัฒนาที่ดิน.....

เริ่มต้นเดือน..... ตุลาคม พ.ศ.2562..... สิ้นสุดเดือน..... กันยายน พ.ศ.2563.....

รวมระยะเวลาทั้งสิ้น..... 2 ปี.....

สถานที่ดำเนินการ..... ห้องปฏิบัติการกลุ่มวิทยบริการ สำนักวิทยาศาสตร์เพื่อการพัฒนาที่ดิน.....

ค่าใช้จ่ายในการดำเนินงานทั้งสิ้น

ปีงบประมาณ	งบบุคลากร	งบดำเนินการ	รวม (บาท)
2562	-	ค่าสารเคมีในการวิเคราะห์, ค่าวัสดุสำนักงาน (ค่ากระดาษ, ค่าหมึกพิมพ์, ค่าถ่ายเอกสารและเข้าเล่มรายงาน), ค่าวัสดุอื่นๆ	206,000
2563	-	ค่าสารเคมีในการวิเคราะห์, ค่าวัสดุสำนักงาน (ค่ากระดาษ, ค่าหมึกพิมพ์, ค่าถ่ายเอกสารและเข้าเล่มรายงาน), ค่าวัสดุอื่นๆ	206,000
รวมตลอดโครงการ			412,000

แหล่งงบประมาณที่ใช้..... ทุนงบประมาณแผ่นดินประจำปี 2562-2563 สำนักงานคณะกรรมการวิจัยแห่งชาติ (วช.)
พร้อมนี้ได้แนบรายละเอียดประกอบตามแบบฟอร์มที่กำหนดมาด้วยแล้ว

ลงชื่อ.....
(.....)

ผู้รับผิดชอบโครงการ

ลงชื่อ.....
(.....)

ประธานคณะทำงานกลั่นกรองโครงการวิจัยระดับหน่วยงาน
วันที่.....เดือน.....พ.ศ.....

ทะเบียนวิจัยเลขที่ 62-63-09-08-030000-010-108-05-23

ชื่อแผนงานวิจัย/โครงการวิจัย การพัฒนาเทคนิคการวิเคราะห์ดินและสิ่งปรับปรุงดิน

กลุ่มชุดดินที่ - ชุดดิน -

สถานที่ดำเนินการ ห้องปฏิบัติการกลุ่มวิทยบริการ สำนักวิทยาศาสตร์เพื่อการพัฒนาที่ดิน กรมพัฒนาที่ดิน

ผู้ร่วมดำเนินการ

ภาษาไทย

1. นางสาวจุฑามาศ ไกรเพิ่ม
2. นางอัจฉิมา พงษ์จินดา
3. นางสาวกรกนก เปี่ยมหมื่นไวย

ภาษาอังกฤษ

- Ms.Juthamard Kaiphoem
Mrs.Audjima Phongjinda
Ms.Kornkanok Priammuenwai

การประเมินปริมาณโพแทสเซียมในดินด้วยเทคนิคเนียร์อินฟราเรด

นางสาวจุฑามาศ ไกรเพิ่ม นางอัจฉิมา พงษ์จินดา และนางสาวกรรณก เปี่ยมหมื่นไวย
Juthamard Kaiphoem, Audjima Phongjinda, Kornkanok Priammuenwai

บทคัดย่อ

โพแทสเซียมเป็นธาตุอาหารหลักที่จำเป็นต่อการเจริญเติบโตของพืชชาตุนึ่ง พืชที่ขาดโพแทสเซียมมักเหี่ยวง่าย แคระแกร็น ใบล่างเหลือง และเกิดรอยไหม้ตามขอบใบ ส่งผลกระทบต่อกรเจริญเติบโตและผลผลิตของพืช การวิเคราะห์ค่าโพแทสเซียมในดินจึงมีความจำเป็นอย่างยิ่งเพื่อการแนะนำอัตราปุ๋ยแก่พืช โดยประสิทธิภาพในการให้ปุ๋ยขึ้นอยู่กับกรประเมินผลการวิเคราะห์ดินที่แม่นยำและกรได้รับการจัดการปุ๋ยได้ตรงตามเวลาที่เหมาะสม แต่ในปัจจุบัน วิธีการตรวจสอบดินมีขั้นตอนในการเตรียมตัวอย่างและกระบวนการทางเคมีหลายขั้นตอนทำให้ใช้ระยะเวลาานาน งานวิจัยนี้จึงมีวัตถุประสงค์เพื่อพัฒนาวิธีการวิเคราะห์ดินในการทำนายปริมาณโพแทสเซียมด้วยเทคนิคเนียร์อินฟราเรด โดยนำตัวอย่างดินจำนวน 1,070 ตัวอย่าง มาวัดสเปกตรัมแสงในช่วงความยาวคลื่น 780-2,560 นาโนเมตร ด้วยวิธีการตรวจวัดแบบสะท้อนกลับแพร่กระจาย (Diffuse reflection) ก่อนนำไปวิเคราะห์ค่าทางเคมี ดำเนินกรสร้างสมการโดยใช้วิธีวิเคราะห์การถดถอยกำลังสองน้อยที่สุดบางส่วน (PLSR) และทำการเปรียบเทียบค่าที่ได้จากการทำนายกับค่าที่วัดได้จากวิธีมาตรฐานโดยการตรวจสอบแบบ Cross validation สมการที่สร้างขึ้นประกอบด้วย สมการจากกลุ่มตัวอย่างทั้งหมดที่ไม่มีการแยกปริมาณของอนุภาคดิน, สมการจากกลุ่มตัวอย่างที่มีอนุภาคดินเหนียว $\leq 20\%$, $21-40\%$, $41-60\%$ และ $>60\%$ ตามลำดับ พบว่าค่าสัมประสิทธิ์ในการทำนาย (R^2) ของสมการมีค่าเท่ากับ 0.54, 0.71, 0.87, 0.90 และ 0.97 ตามลำดับ โดยสมการที่สร้างจากกลุ่มตัวอย่างที่มีอนุภาคดินเหนียว $21-40\%$, $41-60\%$ และ $>60\%$ มีค่าความแม่นยำของสมการ (RPD) เท่ากับ 3.15, 3.22 และ 5.99 ตามลำดับ แสดงให้เห็นว่าสมการที่สามารถใช้ในการทำนายค่าปริมาณโพแทสเซียมในดินได้อย่างมีประสิทธิภาพ คือ สมการที่สร้างจากกลุ่มตัวอย่างที่มีอนุภาคขนาดดินเหนียวตั้งแต่ 21% ขึ้นไป ($R^2 > 0.87$) โดยเฉพาะอย่างยิ่ง สมการที่สร้างขึ้นจากกลุ่มตัวอย่างที่มีอนุภาคดินเหนียว $>60\%$ ($R^2 = 0.97$) ให้สมการเทียบมาตรฐานที่มีค่า R^2 สูงสุดและมีแนวโน้มที่ดีที่สุดในการทำนายค่าปริมาณโพแทสเซียมในดิน (RPD=5.99) อย่างไรก็ตามควรมีการศึกษาเพิ่มเติมด้วยการใช้ตัวอย่างดินที่มี specific land use เพื่อให้ได้สมการที่มีความแม่นยำสูงขึ้น และสามารถนำไปประยุกต์ใช้ได้อย่างกว้างขวางต่อไป

คำสำคัญ (TH): ธาตุอาหารพืช, เนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี, ปริมาณอนุภาคดินเหนียว

Abstract

Potassium is one of the most important macronutrients for plant growth. Potassium-deficient plants tend to wilt easily, become stunted, yellow lower leaves, and burn along the leaf margins affects to the growth and productivity of plants. Potassium content analysis in soil is essential for recommending fertilizer rates to plants. The effective fertilizing of plants depends on the accurately evaluation of soil analysis results and timely fertilization management. At the present, the soil analysis method involves several steps in sample preparation and take a long time in chemical processes cause spend more times for all process. Therefore, this study aims to develop the soil analysis technique to predict potassium content by near infrared spectroscopy technique. The 1,070 soil samples were collected and acquired for NIR spectra in the range 780-2,560 nm with diffuse reflectance mode. Partial Least Square Regression models were developed to predict available Potassium in the soil samples. Cross validation comparison of the predicted and the actual values (using standard methods) was performed. The created models consist of model was developed from the all sample, model of the samples with ≤ 20 , 21-40, 41-60 and $>60\%$ clay content, respectively. It was found that the predictive coefficients (R^2) of the models were 0.54, 0.71, 0.87, 0.90 and 0.97, respectively. The accuracy of the equations (RPD) were developed from the samples containing 21-40%, 41-60%, and $>60\%$ clay content were 3.15, 3.22 and 5.99, respectively. They were evident that the models of the samples with more than 20% clay contents size ($R^2 > 0.87$) could be effectively predicted soil potassium content. Especially, the equations developed from samples with $>60\%$ clay contents ($R^2 = 0.97$) showed the highest R^2 values and the best tendency to predict soil potassium content (RPD=5.99). However, further studies by using soil samples with specific land use are needed to obtain high accurately equations and can be applied widely in the future

Key words (EN): Plant nutrient, Near Infrared spectroscopy, Clay Particle

หลักการและเหตุผล

โพแทสเซียมเป็นธาตุอาหารหลักที่จำเป็นต่อการเจริญเติบโตของพืชชนิดหนึ่ง มีความสำคัญในการสร้างและการเคลื่อนย้ายอาหารพวกแป้งและน้ำตาล ไปเลี้ยงส่วนที่กำลังเติบโต และส่งไปเก็บไว้เป็นเสบียงที่หัวหรือที่ลำต้น ดังนั้นพืชพวกอ้อย มะพร้าว และมันสำปะหลัง จึงต้องการโพแทสเซียมสูงมาก หากพืชขาดธาตุโพแทสเซียม หัวจะลีบ มะพร้าวไม่มัน และอ้อยก็ไม่ค่อยมีน้ำตาล เป็นต้น พืชที่ขาดโพแทสเซียมมักเหี่ยวง่าย แคร่แกร็น ใบล่างเหลือง และเกิดรอยไหม้ตามขอบใบ การวิเคราะห์ค่าโพแทสเซียมในดินจึงมีความจำเป็นอย่างยิ่งเพื่อการแนะนำอัตราปุ๋ยแก่พืช โดยประสิทธิภาพในการให้ปุ๋ยกับพืชขึ้นอยู่กับการประเมินผลการวิเคราะห์ดินที่แม่นยำและการได้รับการจัดการปุ๋ยตรงตามเวลาที่เหมาะสม แต่ในปัจจุบัน ห้องปฏิบัติการวิเคราะห์ดินของกรมพัฒนาที่ดิน มีตัวอย่างดินที่ต้องทำการวิเคราะห์ปริมาณโพแทสเซียมจำนวนมาก ซึ่งการวิเคราะห์ปริมาณโพแทสเซียมในห้องปฏิบัติการทั่วไป ใช้วิธีสารละลายสกัด $1N NH_4OAc$, pH7 (Jackson, 1958) เป็นวิธีหนึ่งที่นิยมและให้ความแม่นยำสูง แต่วิธีการตรวจสอบมีขั้นตอนในการเตรียมตัวอย่างและกระบวนการทางเคมีหลายขั้นตอน ใช้เวลานานในการตรวจสอบ ดังนั้น การพัฒนาวิธีวิเคราะห์ที่ทำให้ใช้เวลารวดเร็ว ประหยัดค่าใช้จ่ายและลดการใช้สารเคมี จึงมีความจำเป็น ทั้งเพื่อสนับสนุนการให้บริการวิเคราะห์ดินหรือสนับสนุนด้านการวิจัยต่างๆ

เนียร์อินฟราเรดสเปกโตรสโคปีเป็นเทคนิคที่อาศัยความแตกต่างของการดูดซับแสงในช่วงความยาวคลื่นย่านเนียร์อินฟราเรด ซึ่งเป็นช่วงความยาวคลื่นตั้งแต่ 750 – 2,500 นาโนเมตร อาศัยหลักการสั่นสะเทือนของสสารที่ประกอบด้วยพันธะไฮโดรเจน (X-H) โดยอะตอม X ได้แก่ C, O, N และ S ซึ่งแสงเนียร์อินฟราเรดมีผลต่อการสั่นของพันธะต่างๆ ในโมเลกุล และการดูดกลืนแสงที่ต่างกัน จึงทำให้สามารถวิเคราะห์สารทั้งในเชิงปริมาณและคุณภาพ และสามารถวิเคราะห์หองค์ประกอบที่ต้องการศึกษาได้ในเวลาเดียวกัน จึงเป็นเทคนิคที่สามารถวิเคราะห์ตัวอย่างได้อย่างรวดเร็ว ไม่ยุ่งยาก ไม่มีการทำลายตัวอย่าง ไม่มีการใช้สารเคมี ทำให้ตอบโจทย์ได้ดีในด้านของความรวดเร็วในการวิเคราะห์ มีความแม่นยำ ลดต้นทุนในการใช้สารเคมีในระยะยาวได้ และการไม่ทำลายสิ่งแวดล้อม โดยในประเทศไทยมีการศึกษาด้านการใช้เทคนิคเนียร์อินฟราเรดในการตรวจวิเคราะห์ และทำนายด้านอื่นๆ ทั้งทางภาคการเกษตรและอุตสาหกรรม เช่น การประเมินไนโตรเจนในใบอ้อย การประเมินคุณภาพการสีของข้าว การหาองค์ประกอบเพื่อดูความสุกในผักและผลไม้ (Kurz et al., 2010) การวิเคราะห์คุณภาพดิน (Liu et al., 2009) ฯลฯ แต่รายงานการวิจัยและการวิเคราะห์สมบัติของตัวอย่างดินด้วยเทคนิคเนียร์อินฟราเรดในประเทศไทยยังมีไม่กว้างขวาง ส่วนใหญ่มักศึกษาด้วยตัวอย่างจำนวนน้อย หรือตัวอย่างเก็บมาจากพื้นที่ศึกษาที่จำเพาะ ไม่สามารถที่จะนำมาประยุกต์ใช้ในวงกว้างได้ (Sudduth and Hummel, 1993) เนื่องจากยังเป็นเทคนิคใหม่ทางด้านวิเคราะห์ตัวอย่างดินในประเทศไทย เพราะข้อจำกัดในเรื่องของราคา และองค์ความรู้ทางด้านหลักการวิเคราะห์ ตลอดจนการจัดการข้อมูลสเปกตรัมด้วยวิธีทางเคมีเมตริกแบบต่างๆ (Dardenne และคณะ, 2000)

ในการศึกษาครั้งนี้ ผู้วิจัยได้ศึกษาเปรียบเทียบวิธีการวิเคราะห์ปริมาณโพแทสเซียมในดินด้วยเทคนิคเนียร์อินฟราเรดกับการวิเคราะห์ด้วยวิธีการสกัดด้วยน้ำยา NH_4OAc ซึ่งเป็นวิธีมาตรฐานที่มีใช้อยู่ทั่วไปในห้องปฏิบัติการ โดยใช้ปัจจัยด้านความแตกต่างของปริมาณอนุภาคดินเหนียวมาเป็นกรณีศึกษา เนื่องจากเนื้อดินแต่ละประเภทจะมีสมบัติทางองค์ประกอบอินทรีย์ อินทรีย์ที่แตกต่างกัน ซึ่งมีผลต่อความแม่นยำของสมการที่ทำนายได้ การประเมินปริมาณโพแทสเซียมที่ได้จากการศึกษาวิจัยครั้งนี้ เป็นการพัฒนาเทคนิคการวิเคราะห์ในระดับที่สูงขึ้น ซึ่งจะเป็นประโยชน์อย่างมากต่อผู้ปฏิบัติงานในห้องปฏิบัติการวิเคราะห์ดิน

วัตถุประสงค์

เพื่อศึกษาการใช้เทคนิคเนียร์อินฟราเรด (Near Infrared Spectroscopy; NIRS) ในการประเมินปริมาณโพแทสเซียมในดิน โดยใช้เกณฑ์ของปริมาณอนุภาคดินเหนียวเป็นปัจจัยในการสร้างสมการ

การตรวจสอบเอกสาร

1. ความสำคัญของปริมาณโพแทสเซียมในดินทางการเกษตร

โพแทสเซียมเป็นธาตุอาหารหลักที่จำเป็นต่อการเจริญเติบโตของพืช เป็นส่วนสำคัญสำหรับกระบวนการต่างๆ ของเซลล์พืช ช่วยในการสังเคราะห์น้ำตาลและแป้ง การเคลื่อนย้ายแป้งและน้ำตาลจากใบไปยังผล กระบวนการสังเคราะห์แสงและการหายใจ เพิ่มปริมาณกรดอินทรีย์และไนโตรเจนที่ใช้ในกระบวนการสร้างโปรตีน โครงสร้างของเอนไซม์ทำให้พืชแข็งแรง สามารถต้านทานโรคและส่งเสริมคุณภาพของผลผลิต ในดินโดยทั่วไปจะมีธาตุโพแทสเซียมเป็นองค์ประกอบอยู่ในปริมาณที่มากกว่าธาตุไนโตรเจนและฟอสฟอรัส เนื่องจากหินและแร่หลายชนิดเป็นวัตถุดิบกำเนิดดิน (Osatapa Y., 2003) จะมีโพแทสเซียมเป็นองค์ประกอบอยู่ด้วย ดินประเภทต่างๆ จะมีโพแทสเซียมเป็นองค์ประกอบอยู่ในปริมาณที่แตกต่างกัน ทั้งนี้ขึ้นอยู่กับปัจจัยหลายๆ ประการ โดยเฉพาะอย่างยิ่งวัตถุดิบกำเนิดดิน กล่าวคือ ถ้าวัตถุดิบกำเนิดดินมีสัดส่วนและปริมาณของแร่เฟลด์สปาร์และไมกาอยู่จำนวนมาก จะทำให้ดินมีปริมาณโพแทสเซียมเป็นองค์ประกอบอยู่มากด้วย ทั้งนี้เพราะแร่ทั้งสองชนิดนี้เมื่อสลายตัวกลายเป็นดินจะให้โพแทสเซียมตกค้างอยู่ในดินในส่วนที่เรียกว่า ดินเหนียว หรือแร่ดินเหนียว จึงมักพบอยู่เสมอว่าดินที่มีเนื้อละเอียดหรือมีอนุภาคดินกลุ่มขนาดดินเหนียวเป็นองค์ประกอบอยู่มากจะมีโพแทสเซียมในปริมาณมากกว่าดินที่มีเนื้อหยาบกว่า โพแทสเซียมที่เป็นองค์ประกอบในดินเนื้อหยาบ หรือดินทราย ปริมาณส่วนใหญ่จะอยู่ในรูปของเศษแร่ที่อยู่ในลักษณะกำลังผุพัง สลายตัวอยู่ หรือยังมีสภาพเป็นเศษแร่ก้อนเล็กๆ ที่ยังไม่ได้ผุพัง ส่วนในดินเนื้อละเอียด หรือดินเหนียว โพแทสเซียมจะอยู่ในรูปที่เป็นองค์ประกอบรวมกันกับอนุภาคขนาดดินเหนียว ทั้งนี้ส่วนหนึ่งจะเป็นองค์ประกอบอยู่ในโครงสร้างของแร่ดินเหนียวและโพแทสเซียม บางส่วนจะอยู่ในสภาพไอออนบวก

(K⁺) ดูดซับอยู่กับผิวของคอลลอยด์ตรงส่วนที่มีประจุไฟฟ้าลบ ซึ่งไอออนส่วนนี้ถือว่าอยู่ในสภาพที่แลกเปลี่ยนได้ และอีกส่วนหนึ่งอยู่ในสภาพที่ถูกตรึงอยู่ในดิน อาจกล่าวได้ว่าแหล่งของโพแทสเซียมที่สำคัญคือ หินและแร่ชนิดต่างๆ ที่มีโพแทสเซียมเป็นองค์ประกอบ และเป็นวัตถุดิบกำเนิดดินนั่นเอง ดังนั้นดินที่มีเนื้อละเอียด เช่น ดินเหนียว จึงมีปริมาณของธาตุ โพแทสเซียมสูงกว่าดินพวกเนื้อหยาบ เช่น ดินทราย ดินร่วนปนทราย ปริมาณโพแทสเซียมที่เป็นประโยชน์ในดิน จะมีปริมาณมากหรือน้อย ขึ้นอยู่กับองค์ประกอบหลายอย่าง เช่น Cation Exchange Capacity (CEC) ปริมาณของแร่ดินเหนียวหรือประเภทเนื้อดินฯ

2. หลักการและเทคโนโลยีด้านเนียร์อินฟราเรด (Near-infrared spectroscopy, NIRS)

2.1 หลักการพื้นฐานของเทคนิคเนียร์อินฟราเรดสเปกโตรสโกปี

คลื่นแสงเนียร์อินฟราเรด เป็นคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าที่มีช่วงความยาวคลื่นตั้งแต่ 650-2,500 นาโนเมตร พลังงานของคลื่นแสง NIR จะอยู่ในช่วงที่สอดคล้องกับการสั่นของพันธะภายในโมเลกุล หากการสั่นของพันธะใดเกิดขึ้นที่ความถี่ที่ตรงกับความถี่ของคลื่นแสง NIR ก็จะทำให้เกิดการดูดกลืนขึ้น เทคนิคเนียร์อินฟราเรดสเปกโตรสโกปี (Near Infrared Spectroscopy) จึงเป็นเทคนิคที่ใช้หลักการอันตรกิริยา (Interaction) เมื่อคลื่นเนียร์อินฟราเรดที่ส่องไปยังวัตถุ ทำให้พันธะทางเคมีภายในวัตถุ โดยเฉพาะอย่างยิ่งพันธะ O-H, C-H และ N-H ของวัตถุดูดซับคลื่น และทำให้เกิดอาการสั่นสะเทือนของพันธะ โดยการเปลี่ยนระดับพลังงานข้ามชั้นมากกว่า 1 ชั้น (Overtone) หรือเกิดจากการสั่นสะเทือนข้าม 1 ชั้น (Fundamental vibration) พร้อมกันของพันธะตั้งแต่ 2 พันธะขึ้นไป ทำให้ได้ผลรวมของการสั่น (Combination vibration) (Osborne et al., 1993b) การสั่นของพันธะในลักษณะต่างๆ จะมีการดูดกลืนพลังงานที่เป็นเฉพาะของมัน เนื่องจากโมเลกุลหนึ่งๆ มีพันธะได้หลายแบบ ซึ่งแต่ละพันธะก็มีรูปแบบการสั่นได้อีกหลายรูปแบบทำให้โมเลกุลหนึ่งๆ จะแสดงการดูดกลืนแสงเนียร์อินฟราเรดได้หลายช่วงคลื่น พร้อมกัน ลักษณะการดูดกลืนแสงจะเกิดเป็นแถบ (band) หรือพีค (peak) แสดงถึงพลังงานคลื่นแสงเนียร์อินฟราเรดที่ถูกดูดกลืน ซึ่งสามารถวัดได้ใน 4 รูปแบบ คือรูปแบบความเข้มแสงที่ส่องผ่าน (Transmission) รูปแบบความเข้มแสงสะท้อนออกมา (Reflection) รูปแบบที่แสงจากแหล่งกำเนิดแสงตกกระทบตัวอย่าง ผ่านตัวอย่างลงไปตกกระทบแผ่นเซรามิก ทอง หรืออะลูมิเนียมในชั้นใต้สุด แล้วสะท้อนกลับมายัง detector (Transflection) และรูปแบบที่แสงจากแหล่งกำเนิดแสงส่องผ่านลงมายังตัวอย่างในวงแหวนด้านนอก แล้วแสงที่สะท้อนออกมาจากเนื้อตัวอย่างถูกส่งไปยัง detector บริเวณส่วนกลาง fiber optics probe (Interaction) แล้วนำค่าความเข้มแสงที่ได้ในแต่ละความยาวคลื่นมาเขียนกราฟ โดยให้แกน X เป็นค่าความยาวคลื่น แกน Y เป็นค่าการดูดกลืนแสง จะได้กราฟการดูดกลืนแสงของตัวอย่างนั้นๆ กราฟที่ได้เรียกว่า เนียร์อินฟราเรดสเปกตรัม (NIR spectrum) โมเลกุลของสารแต่ละชนิดมีความสามารถในการดูดกลืนแสงที่ความยาวคลื่นต่างกัน เมื่อวัดค่าการดูดกลืนแสงของสารแต่ละชนิด จึงได้สเปกตรัมที่มีลักษณะต่างกัน (ธีรยุทธและวรวรรณ, 2548) สเปกตรัมสามารถบอกถึงลักษณะของสารและในขณะเดียวกันจะบอกถึงปริมาณของสารนั้นได้ สารอินทรีย์ที่ตอบสนองต่อแสง

อินฟราเรดจะมี H-atom เป็นองค์ประกอบ เช่น O-H จะพบในโครงสร้างของโมเลกุลน้ำ N-H พบในโครงสร้างของโมเลกุลโปรตีน และ C-H พบในโครงสร้างของโมเลกุลแป้ง ไขมันและน้ำตาล ยิ่งแสงถูกดูดซับมากเท่าใด ก็ยิ่งกลายเป็นค่าการดูดซับมากขึ้นเท่านั้น

2.2 เครื่องมือและอุปกรณ์ของ NIRs

ส่วนประกอบของเครื่อง NIRs ที่สำคัญได้แก่ (1) แหล่งกำเนิดแสง (light source) เป็นแหล่งให้พลังงานแสง (2) โมโนโครมาเตอร์ (monochromator) เป็นอุปกรณ์แยกความยาวคลื่นแสงออกเป็นแต่ละความยาวคลื่นโดยอาศัยเกรตติ้ง (grating) ที่มีช่องผ่านแสงเข้าและแสงออก เพื่อควบคุมให้อยู่ในช่วงความยาวคลื่นที่ต้องการ (3) ตำแหน่งที่วางตัวอย่าง (sample cell) โดยที่แสงจะกระทำกับตัวอย่างในรูปแบบที่ต้องการวิเคราะห์ (4) ตัวตรวจวัดสัญญาณ (detector) เป็นอุปกรณ์ที่วัดความเข้มของแสงหรือค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่าง (5) ระบบอ่านสัญญาณ (read out) เป็นตัวแปลค่าออกมา อาจเป็นตัวเลข หรือเป็นเส้นกราฟ แล้วบันทึกผลด้วยคอมพิวเตอร์ การเตรียมตัวอย่างและการจัดวางตัวอย่างสำหรับการสแกนเพื่อให้ได้สเปกตรัมที่น่าเชื่อถือ ซึ่งการเตรียมตัวอย่างควรเตรียมให้มีสภาพใกล้เคียงกับตัวอย่างดั้งเดิมให้มากที่สุด มีการควบคุมอุณหภูมิ ความชื้นและควรมีการเลือกอุปกรณ์ใส่ตัวอย่างที่เหมาะสม ซึ่งมีทั้งเซลล์ใส่ตัวอย่างที่เป็นผง เซลล์ใส่ตัวอย่างที่มีลักษณะคล้ายแป้งเปียก เซลล์ใส่ตัวอย่างที่เป็นของเหลว หรือเป็นอุปกรณ์วางผลไม้ เป็นต้น

การปรับแต่งสเปกตรัมก่อนการวิเคราะห์ มีวิธีดังนี้ (1) Smoothing เป็นการหาค่าเฉลี่ยคลื่น ซึ่งสามารถลดปัญหาของสัญญาณรบกวนต่อค่าการดูดกลืนแสง โดยจะได้สเปกตรัมที่มีลักษณะเหมือนสเปกตรัมดั้งเดิม แต่จะเรียบสม่ำเสมอมากกว่า (2) Derivative เป็นการหาความชันของเส้นสเปกตรัม เพื่อแก้ปัญหาพีกที่มีฐานกว้าง (broad peak) เนื่องจากการซ้อนทับกันของพีก (overlapping) โดยการแปลงข้อมูลสเปกตรัมด้วยอนุพันธ์อันดับที่ 1 (first derivative) ทำให้เส้นสเปกตรัมเลื่อนมาชิดกัน แต่พีกของสเปกตรัมยังมีฐานกว้าง จึงไม่สามารถแยกพีกออกจากกันอย่างชัดเจนได้ ส่วนการแปลงข้อมูลด้วยอนุพันธ์อันดับที่ 2 (second derivative) สามารถแยกพีกสเปกตรัมที่มีการซ้อนทับกันออกจากกันอย่างชัดเจนทำให้ทราบตำแหน่งความยาวคลื่น แต่สเปกตรัมมีลักษณะหัวกลับลงมาด้านล่าง (3) Multiplicative Scattering Correction (MSC) เป็นการหาค่าเฉลี่ยของข้อมูลทั้งสเปกตรัม ใช้ในการลดค่าผิดพลาด

2.3 หลักการ Chemometrics การสร้างสมการ และทดสอบสมการ

Chemometrics คือ การใช้ความรู้ทางด้านเคมี ร่วมกับคณิตศาสตร์ สถิติ และตรรกวิทยา เพื่อให้กระบวนการทดสอบมีประสิทธิภาพที่ดี ให้ข้อมูลการวิเคราะห์ทางเคมี มีความน่าเชื่อถือ

การวิเคราะห์เชิงปริมาณโดยทั่วไป ต้องมีการสร้างสมการทำนายปริมาณองค์ประกอบทางเคมี มี 2 ขั้นตอนหลัก คือ

1. ขั้นตอนการสร้างสมการ (Calibration equation)

การสร้างสมการทำนาย เป็นการหาตัวแปรอิสระ (ตัวแปร X ซึ่งในการศึกษาค้นคว้าครั้งนี้คือ ความยาวคลื่น) ที่น่าจะมีความสัมพันธ์กับค่าตัวแปรตาม (ตัวแปร Y ซึ่งในการศึกษาค้นคว้าครั้งนี้คือ ค่าปริมาณโพแทสเซียมในดิน) ที่ต้องการทำนาย ในการคัดเลือกตัวแปรอิสระสามารถแบ่งออกได้เป็น 2 วิธีหลัก ได้แก่

1.1 วิธีคัดเลือกความยาวคลื่น (wavelength selection methods) เป็นวิธีการคัดเลือกตัวแปรอิสระเฉพาะความยาวคลื่นที่น่าจะมีความสัมพันธ์กับตัวแปรตาม โดยอาจคัดเลือกจากเอกสารอ้างอิง หรือใช้เทคนิคทางสถิติ เช่น การวิเคราะห์การถดถอยพหุคูณ (multiple regression analysis) หลังจากนั้นสร้างสมการทำนายโดยอาศัยหลักและวิธีการทางสถิติ เช่นการถดถอยเชิงเส้นอย่างง่าย (simple linear regression; SLR) ซึ่งเป็นการเลือกพิจารณาความสัมพันธ์เชิงปริมาณของตัวอย่างที่มีความยาวคลื่นเพียงความยาวคลื่นเดียว และการถดถอยเชิงเส้นพหุคูณ (multiple linear regression; MLR) โดยใช้ตัวแปรอิสระที่ได้จากการเลือกความยาวคลื่นมากกว่าหนึ่งความยาวคลื่นมาหาความสัมพันธ์กับตัวแปรตาม เป็นต้น แต่การเลือกความยาวคลื่นที่เหมาะสมจากความยาวคลื่นทั้งหมดอาจเกิดข้อผิดพลาด ทำให้ได้สมการที่มีประสิทธิภาพในการทำนายต่ำ เนื่องจากในการคัดเลือกตัวแปรอิสระหรือความยาวคลื่นที่เหมาะสมจากความยาวคลื่นทั้งหมดมาสร้างสมการอาจได้ข้อมูลที่ไม่ครอบคลุมมากพอ ทำให้ค่าที่ทำนายได้จากวิธีนี้มีค่าต่ำกว่าหรือสูงกว่าค่าที่แท้จริง หรือเกิดจากจำนวนตัวอย่างที่นำมาใช้ในการสร้างสมการน้อยเกินไป ทำให้ได้สมการที่มีตัวแปรอิสระมากเกินไปส่งผลให้ข้อมูลที่ได้น่าเชื่อถือ (ธงชัยและปิติพร, 2552)

1.2 วิธีการใช้ความยาวคลื่นตลอดช่วง (full spectrum methods) เป็นวิธีการคัดเลือกหาช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (selective wavelength) จากความยาวคลื่นทั้งหมดที่มีในสเปกตรัม หรือความยาวคลื่นตลอดช่วงทั้งหมด (full spectrum) มาใช้ในการสร้างสมการทำนายโดยใช้วิธีการทางสถิติในการจัดกลุ่มตัวแปรอิสระหรือความยาวคลื่นที่มีความเกี่ยวข้องกันให้อยู่ในกลุ่มเดียวกัน หรือทำการสร้างตัวแปรใหม่จากตัวแปรเดิม ซึ่งเป็นวิธีที่สามารถช่วยแก้ปัญหาการเกิด multicollinearity วิธีการทางสถิติที่นิยมใช้ ได้แก่ การถดถอยโดยใช้องค์ประกอบหลัก (principal components regression; PCR) และการถดถอยกำลังสองน้อยที่สุดบางส่วน (partial least squares regression; PLSR) (ธงชัยและปิติพร, 2552)

1.2.1 การถดถอยโดยใช้องค์ประกอบหลัก (PCR)

การทำ PCR จะเริ่มจากการวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก (principal component analysis; PCA) กับข้อมูลที่เป็นตัวแปรอิสระ (X) ที่ได้มาจากข้อมูลสเปกตรัมเพื่อลดจำนวนตัวแปรเดิมลงโดยสร้างองค์ประกอบหรือตัวแปรใหม่ ที่เรียกว่า องค์ประกอบหลัก (principal component; PC) หรือแฟกเตอร์ (factor) ก่อนแล้วจึงนำค่าของตัวแปรใหม่ที่สร้างขึ้นมาหาความสัมพันธ์กับตัวแปรตาม (Y) ที่ได้มาจากการวิเคราะห์ด้วยวิธีมาตรฐาน (reference method) เพื่อสร้างสมการโดยใช้หลักการของการวิเคราะห์การถดถอยพหุคูณ (multiple regression analysis) (ธงชัยและปิติพร, 2552)

1.2.2 การถดถอยกำลังสองน้อยที่สุดบางส่วน (PLSR)

PLSR เป็นเทคนิคการวิเคราะห์หลายตัวแปร (multivariate analysis) ซึ่งเป็นเทคนิคในการลดจำนวนตัวแปรเทคนิคหนึ่งเช่นเดียวกับวิธี PCR แต่ PLSR เป็นวิธีการวิเคราะห์ที่ข้อมูลสเปกตรัมโดยการนำข้อมูลตัวแปรตาม (Y) เข้ามาร่วมในการสร้างตัวแปรใหม่ หรือกล่าวได้ว่าการจัดกลุ่มของตัวแปรอิสระจะแปรผันตามค่าตัวแปรตาม วัตถุประสงค์ของ PLSR คือต้องการลดจำนวนข้อมูลสเปกตรัมให้ได้เฉพาะข้อมูลสเปกตรัมที่มีความสำคัญกับค่าทางเคมีเท่านั้น ที่จะถูกนำมาใช้ในการทำนายค่าทางเคมี เพื่อสามารถประเมินค่าทางเคมีได้ถูกต้องมากขึ้น และเนื่องจากการสร้างสมการ PLSR โดยใช้ความยาวคลื่นทั้งหมด เป็นการนำข้อมูลทั้งหมดของความยาวคลื่นมาใช้ในการทำนายค่าคุณภาพ ซึ่งอาจใช้ช่วงที่ไม่มีความสัมพันธ์กับข้อมูลที่ต้องการทำนาย (non-informative region)

ประสิทธิภาพของสมการทำนายที่สร้างขึ้นควรพิจารณาจากระดับความสัมพันธ์ของตัวแปรอิสระ (X) และตัวแปรตาม (Y) โดยวัดจากค่าสหสัมพันธ์ (correlation; R^2) ซึ่งมีค่าระหว่าง -1 ถึง 1 ซึ่งแนวทางการแปลความหมายแสดงดังตารางที่ 1 และพิจารณาความน่าเชื่อถือของการประมาณค่าของสมการจากค่าความคลาดเคลื่อนกำลังสองเฉลี่ยจากการทำนายด้วยตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ (root mean square error of calibration; RMSEC) ซึ่งจะต้องมีค่าต่ำๆ

ถ้ามีความสัมพันธ์ (R^2) สูง ค่าความคลาดเคลื่อนในการวิเคราะห์ (SEC) และค่าความคลาดเคลื่อนในการประเมิน (ESP) ต่ำ หมายถึงสามารถตอบสนองได้ดี หรือโดยสามารถพิจารณาสมการตามแนวทางการอธิบายความหมายของสมการคาลิเบรชันด้วยค่า R (ตารางที่ 1)

ตารางที่ 1 แนวทางการแปลความหมายค่าสหสัมพันธ์ (R); (Williams, 2007)

ค่า R	ค่า R^2	ความหมาย
± 0.5	ถึง 0.25	ไม่ควรนำมาใช้ในการทำนาย (not usable)
± 0.51 – 0.70	0.26 – 0.49	ไม่ดี ไม่สามารถใช้เป็นสมการทำนายได้ (poor correlation)
± 0.71 – 0.80	0.50 – 0.64	สามารถใช้ในการคัดเลือกเบื้องต้นได้ (rough screening)
± 0.81 – 0.90	0.66 – 0.81	สามารถใช้ในการคัดเลือก หรือตรวจคุณภาพบางอย่างได้ (screening)
± 0.91 – 0.95	0.83 – 0.90	สามารถใช้ได้ในงานหลายประเภท รวมทั้งการทำนายเพื่องานวิจัยและงานทั่วไป แต่ต้องใช้ด้วยความระมัดระวัง
± 0.96 – 0.98	0.92 – 0.96	สามารถใช้ได้ในงานหลายประเภท รวมทั้งงานประกันคุณภาพ (quality assurance)
± 0.99 ขึ้นไป	0.98 ขึ้นไป	สามารถใช้ได้ดีมากในงานทุกประเภท (any application)

2. ขั้นตอนการทดสอบความถูกต้องของสมการที่สร้างขึ้น (Validation test)

เมื่อได้สมการทำนายค่าองค์ประกอบทางเคมีแล้ว ต้องมีการทดสอบประสิทธิภาพของสมการก่อนการนำไปใช้จริง ซึ่งการตรวจสอบความถูกต้องของสมการที่สร้างด้วยกลุ่มตัวอย่างตรวจสอบความถูกต้อง มีวัตถุประสงค์เพื่อใช้ในการวัดประสิทธิภาพของสมการว่าสามารถใช้ในการทำนายค่าคุณภาพได้แม่นยำมากน้อยเพียงใด โดยวิธีการตรวจสอบความถูกต้องที่นิยมใช้ในเทคนิค NIR spectroscopy มี 2 วิธี ได้แก่ วิธี cross validation และวิธี prediction testing

2.1 วิธี cross validation เป็นวิธีหนึ่งที่ใช้ในการตรวจสอบความถูกต้องของสมการที่สร้างขึ้น โดยเป็นวิธีการตรวจสอบภายใน (internal validation) ซึ่งกลุ่มตัวอย่างที่นำมาใช้ในการตรวจสอบต้องเป็นตัวอย่างชุดเดียวกับตัวอย่างในกลุ่มที่ใช้สร้างสมการ วัดผลจากการพิจารณาค่าความคลาดเคลื่อนจากการทำนาย และค่าความแตกต่างระหว่างค่าที่ได้จากการทำนายด้วยสมการที่สร้างขึ้นกับข้อมูลที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธีทางเคมี ถ้าข้อมูลที่ได้จากวิธีทั้งสองมีค่าไม่แตกต่างกัน แสดงว่าสมการที่สร้างขึ้นมีประสิทธิภาพและความแม่นยำสูง การตรวจสอบความแม่นยำด้วยวิธีนี้มักใช้กับการวิเคราะห์ทางสถิติและ PLSR ซึ่งในการศึกษาครั้งนี้ได้ทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการที่สร้างขึ้น โดยพิจารณาจากค่าความคลาดเคลื่อนกำลังสองเฉลี่ยจากการทำนายด้วยตัวอย่างกลุ่มทดสอบสมการ (root mean square error of cross validation; RMSECV)

2.2 วิธี prediction testing เป็นวิธีทดสอบโดยนำกลุ่มตัวอย่างตรวจสอบความถูกต้อง (test set) มาประเมินค่าของสมการทำนายที่สร้างขึ้น โดยกลุ่มตัวอย่างตรวจสอบความถูกต้องที่นำมาวิเคราะห์ต้องมีวิธีการเตรียมตัวอย่าง การวัดค่าการดูดกลืนแสงของสเปกตรัม สภาวะในการทดลอง รวมถึงวิธีการแปลงข้อมูลสเปกตรัมเหมือนกับชุดข้อมูลของตัวอย่างในกลุ่มสร้างสมการ และที่สำคัญคือกลุ่มตัวอย่างตรวจสอบความถูกต้องจะต้องมีค่าคุณภาพที่ต้องการประเมินอยู่ในช่วงของกลุ่มตัวอย่างสร้างสมการ การตรวจสอบความแม่นยำในลักษณะนี้เรียกว่า การทดสอบแบบภายนอก (external validation) ซึ่งการพิจารณาค่าที่ทำนายได้จาก NIR spectroscopy กับค่าที่วิเคราะห์ได้จริงจากวิธีมาตรฐาน ถ้ามีค่าความคลาดเคลื่อนจากการทำนายต่ำ แสดงว่าสมการทำนายที่สร้างขึ้นมีความแม่นยำสูง การตรวจสอบความถูกต้องของสมการที่สร้างขึ้น เพื่อใช้ในการทำนายค่าคุณภาพ มีรายละเอียดของขั้นตอนดังนี้

1) นำกลุ่มตัวอย่างตรวจสอบความถูกต้องของสมการมาทำการทดสอบความแม่นยำของสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธีการทางสถิติ

2) คัดเลือกสมการทำนายที่เหมาะสม และมีความถูกต้องในการทำนาย โดยพิจารณาประสิทธิภาพของสมการที่สร้างขึ้นด้วยค่าทางสถิติได้แก่ ค่า SEP (standard error of prediction) หรือ RMSEP (root mean square error of prediction) และค่าเฉลี่ยของผลต่างระหว่างค่าที่ทำนายได้จากสมการที่สร้างขึ้นกับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริง (bias) ซึ่งผลของค่าที่ทำนายได้จากสมการมีค่าใกล้เคียงกับค่าที่วิเคราะห์ได้จริงคือ ค่า SEP, RMSEP และ bias ต้องมีค่าต่ำๆ หมายถึงสมการที่สร้างขึ้นมีประสิทธิภาพ และมีความแม่นยำสูง

สามารถนำไปใช้ในการประเมินค่าคุณภาพตัวอย่างอื่นๆ ได้ แนวทางการแปลความหมายของค่า RPD และ RER แสดงดังตารางที่ 2

ตารางที่ 2 การอธิบายผลของค่า RPD (Williams, 2007)

RPD	ความหมาย	การประยุกต์ใช้
0.0-2.3	ไม่ดีเลย	ไม่แนะนำ
2.4-3.0	ไม่ดี	ใช้คัดเลือก (แบ่งกลุ่ม) แบบหยาบๆ
3.1-4.9	พอใช้	ใช้คัดเลือก (แบ่งกลุ่ม) ได้
5.0-6.4	ดี	ใช้ควบคุมคุณภาพได้
6.5-8.0	ดีมาก	ใช้ควบคุมกระบวนการได้
8.1 ขึ้นไป	ดีเยี่ยม	ได้ทุกการประยุกต์ใช้

2.4 ปัจจัยที่มีผลต่อการวิเคราะห์ด้วย NIR

การสุ่มตัวอย่างมีความสำคัญมากที่จะทำให้ได้ผลการที่ดี ในกรณีของตัวอย่างดิน ตัวอย่างควรต้องมีความหลากหลายในเรื่องของพื้นที่ ค่าองค์ประกอบทางเคมีที่ศึกษา และควรจะมีค่าวิเคราะห์ครอบคลุมปริมาณสูงสุด และต่ำสุดของปริมาณที่ต้องการตรวจวัด การเตรียมตัวอย่างเพื่อการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคเนียร์อินฟราเรดอาจไม่จำเป็น แต่อาจมีการเตรียมตัวอย่างบ้างกับตัวอย่างบางชนิดเช่น การบด การตัด รวมถึงการควบคุมอุณหภูมิของตัวอย่าง ซึ่งขึ้นอยู่กับชนิดของตัวอย่างที่ต้องการตรวจวัด (Kawano, 2002)

อุณหภูมิของตัวอย่าง ตัวอย่างที่มีขนาดและรูปร่างเดียวกัน แต่อุณหภูมิในตัวอย่างแตกต่างกัน อาจทำให้ได้ข้อมูลสเปกตรัมที่ต่างกัน เนื่องจากอุณหภูมิของตัวอย่างมีผลโดยตรงต่อโมเลกุลของน้ำ ซึ่งความแตกต่างของสเปกตรัมนี้ อาจจะไม่สามารถสังเกตเห็นได้ชัดเจน แต่จะส่งผลกระทบต่อความแม่นยำของการวิเคราะห์ (Blanco and Valdes, 2004) ตัวอย่างเช่น การทดลองของ Hansen et al. (1991) ที่พบว่าค่าการดูดกลืนแสงที่ความยาวคลื่น 1,210 นาโนเมตร ซึ่งสัมพันธ์กับพันธะ C-H มีค่าการดูดกลืนแสงต่ำลง เมื่ออุณหภูมิของตัวอย่างเพิ่มสูงขึ้น ในการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคเนียร์อินฟราเรด ชุดของกลุ่มตัวอย่างที่วิเคราะห์ด้วยเทคนิคเนียร์อินฟราเรดที่ต้องการนำมาใช้สร้างสมการและกลุ่มทดสอบ สมการควรต้องวิเคราะห์อยู่ในที่มีสถานะเดียวกัน และควรคงที่ใกล้เคียงกับอุณหภูมิที่ใช้ในการวิเคราะห์ในอนาคต (Kawano et al., 1995)

การบรรจุ (packing) ตัวอย่างในเซลล์บรรจุที่มีการอัดตัวแน่นมาก ทำให้เกิดช่องว่างระหว่างตัวอย่างน้อย ดังนั้น ในการบรรจุตัวอย่างเพื่อการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคเนียร์อินฟราเรดจึงมีความจำเป็นต้องระวังในขณะบรรจุตัวอย่างในภาชนะที่จะใช้ในการตรวจวัด (Williams and Norris, 2001)

ตัวอย่างที่มีความชื้น (moisture content) สูง จะมีค่าการดูดกลืนแสงสูงกว่าตัวอย่างที่มีความชื้นต่ำ โดยตัวอย่างที่มีความชื้นต่ำแทบจะไม่มีค่าการดูดกลืนแสงที่ชัดเจน ตรงกันข้ามกับตัวอย่างที่มีความชื้นสูง จะมีค่าการดูดกลืนแสงสูงกว่าตัวอย่างที่มีความชื้นต่ำ (Osborne et al., 1993a)

การใช้ระยะเวลาในการวิเคราะห์ทางเคมีนาน อาจทำให้องค์ประกอบทางเคมีในตัวอย่างมีการเปลี่ยนแปลง ซึ่งอาจส่งผลกระทบต่อความแม่นยำของข้อมูลวิเคราะห์ทางเคมี (ศศิวิมล, 2553)

2.5 ข้อได้เปรียบและข้อด้อยของเทคนิค NIR เมื่อเทียบกับวิธีทางเคมีอื่นๆ

ข้อได้เปรียบของเทคนิค NIR คือ เป็นวิธีที่สามารถใช้ทดแทนการวิเคราะห์ทางเคมีได้ และในระยะยาวสามารถลดต้นทุนการผลิตได้ อีกทั้งไม่ใช้สารเคมีในการเตรียมตัวอย่าง ดังนั้นจึงเป็นมิตรกับสิ่งแวดล้อม เป็นการตรวจสอบที่ไม่ทำลายตัวอย่าง (non-destructive) รวมทั้งวิธีการเตรียมตัวอย่างไม่ยุ่งยากและใช้ตัวอย่างในปริมาณน้อย เป็นวิธีการตรวจวิเคราะห์ที่รวดเร็ว ประหยัดเวลา เชื่อถือได้และปลอดภัย การวัดสเปกตรัมแต่ละครั้งของแต่ละตัวอย่าง สามารถนำมาวิเคราะห์เพื่อทำนายสมบัติด้านต่างๆ ได้หลายด้านในเวลาเดียวกัน โดยไม่ต้องมีการวัดสเปกตรัมใหม่ และสามารถนำเครื่องเนียร์อินฟราเรดไปตรวจสอบในพื้นที่การเกษตรได้โดยตรง แต่เครื่องมือที่วิเคราะห์ด้วยเทคนิคเนียร์อินฟราเรดมีราคาแพง การสร้างสมการเพื่อนำไปใช้ในการทำนาย ต้องการผู้ที่มีทักษะความรู้ด้านคณิตศาสตร์ และสถิติขั้นสูง เพื่อคัดเลือก chemometric ที่เหมาะสม และทุกพารามิเตอร์ที่ต้องการทำนายต้องมีสมการของตนเองในการนำไปใช้ในการทำนายค่าที่สนใจ (Williams, 2007; McClure and Tsuchikawa, 2007) จึงเป็นข้อด้อยของเทคนิค NIR

3. ทบทวนเอกสารที่เกี่ยวข้องกับการใช้ NIR ในการทำนายค่าวิเคราะห์สมบัติดิน

เทคนิคเนียร์อินฟราเรดถูกใช้ครั้งแรกในช่วงกลางทศวรรษที่ 1960 ในการตรวจสอบคุณภาพของผลแอปเปิ้ล ซึ่งเทคนิคดังกล่าวยังสามารถคาดการณ์ระดับอายุของผลไม้และปริมาณน้ำตาล รวมทั้งยังสามารถใช้ในการทำนายรสชาติและเนื้อสัมผัสของผลไม้ดังกล่าวด้วย จากจุดเริ่มต้นเหล่านี้เทคนิคดังกล่าวจึงเปิดตัวเป็นที่นิยมใช้ในภาคเกษตร และอุตสาหกรรมอาหาร เนื่องจากความรวดเร็วของการวิเคราะห์ และการไม่ต้องมีการทำลายตัวอย่าง (ปานมนัส, 2556) การศึกษาวิจัยด้านการใช้เทคนิคเนียร์อินฟราเรดมาใช้ด้านวิทยาศาสตร์ทางดินได้เติบโตขึ้นอย่างรวดเร็ว (BenDor and Banin, 1995; Bowers and Hanks, 1965; Brown et al., 2006; Shepherd and Walsh, 2002; Stenberg et al., 1995) โดยการศึกษาหมักมุ่งเน้นด้านสมบัติดินพื้นฐาน เช่น อินทรีย์วัตถุในดิน เนื้อดิน ชนิดแร่ในดิน รวมทั้งธาตุอาหารต่างๆ ในดิน เนื่องจากเป็นเทคนิคที่ถูก มีค่าใช้จ่ายต่ำ ไม่มีการใช้สารเคมีตลอดจนไม่มีการทำลายตัวอย่าง (Viscarrá Rosset al., 2006) การพัฒนามีวิธีการประเมินปริมาณอินทรีย์วัตถุในดินโดยใช้เทคนิคเนียร์อินฟราเรดร่วมกับการประเมินด้วยวิธีโครโมเมตริกนั้น ได้มีการศึกษามานานโดยนักวิจัยจากที่ต่างๆ (Haaland and Thomas, 1988; Reeves et al., 2006; Barthes et al., 2008; Vasques et al., 2009) ชลันธร และสมศักดิ์ (2557) ศึกษาการใช้เทคนิคแสงอินฟราเรดย่านใกล้ในการทำนายค่าอินทรีย์วัตถุ ไนโตรเจน

ฟอสฟอรัสและโพแทสเซียมในดิน โดยการวัดแบบการส่องผ่านแบบสะท้อนที่ความยาวคลื่น 1,000-2,500 นาโนเมตร ก่อนนำไปวิเคราะห์ค่าทางเคมี แล้วนำค่าสเปกตรัมแสงและค่าเคมีที่ได้มาสร้างสมการวิเคราะห์การถดถอย (PLS) พบว่าสมการที่ได้ สามารถทำนายปริมาณอินทรีย์วัตถุ ไนโตรเจน และโพแทสเซียมในดินได้ค่อนข้างแม่นยำ โดยมีความคลาดเคลื่อนมาตรฐาน (SECV) ต่ำ แต่ในการทดลองนี้ใช้ตัวอย่างดินทดสอบจำนวนน้อย คือ 62 ตัวอย่าง และไม่ได้มีการแยกสมการตามเนื้อดิน ซึ่งเนื้อดินเป็นตัวแปรหนึ่งที่มีผลต่อการทำนายปริมาณโพแทสเซียม สอดคล้องกับงานวิจัยของ นพมณี (2558) ศึกษาการตรวจสอบความใช้ได้ของเทคนิคเนียร์อินฟราเรดในการทำนายค่าวิเคราะห์ปริมาณอินทรีย์วัตถุในดินเมื่อเทียบกับการวิเคราะห์ด้วยวิธีไดโครเมต การศึกษาใช้ตัวอย่างดินจำนวน 7,433 ตัวอย่าง พบว่า กลุ่มตัวอย่างดินทั้งหมดที่ไม่มีการแยกปริมาณของอนุภาคดินเหนียว กลุ่มตัวอย่างที่มีปริมาณอนุภาคดินเหนียว น้อยกว่า 20% กลุ่มตัวอย่างที่มีปริมาณอนุภาคดินเหนียว 20-40 % และกลุ่มตัวอย่างที่มีปริมาณของอนุภาคดินเหนียว 40-60% ได้สมการค่าลิเบรชันที่มีค่าสัมประสิทธิ์ของการพิจารณา (coefficient of determination, R^2) เท่ากับ 57.06, 72.39, 75.27 และ 76.56 ตามลำดับ จากผลการศึกษาพบว่า การวิเคราะห์ปริมาณอินทรีย์วัตถุในดิน ด้วยเทคนิคเนียร์อินฟราเรดและวิธีไดโครเมตสามารถใช้ทดแทนหรือร่วมกันได้ในห้องปฏิบัติการ แต่ควรมีการเลือกใช้สมการที่มีการแบ่งแยกเนื้อดิน เนื่องจากให้ค่าการทำนายที่มีความแม่นยำมากกว่าสมการรวมเนื้อดิน

ระยะเวลาและสถานที่ดำเนินการ

ระยะเวลาดำเนินการ ตุลาคม 2561 ถึง กันยายน 2563

สถานที่ดำเนินการ ห้องปฏิบัติการกลุ่มวิทยบริการ สำนักวิทยาศาสตร์เพื่อการพัฒนาที่ดิน กรมพัฒนาที่ดิน

อุปกรณ์และวิธีการ

อุปกรณ์และสารเคมีในการวิเคราะห์

1. อุปกรณ์วิทยาศาสตร์ และเครื่องแก้ว ที่ใช้ในห้องปฏิบัติการวิเคราะห์ดิน
2. สารเคมีต่างๆ ได้แก่ Ammonium acetate, สารละลายมาตรฐานโพแทสเซียม ความเข้มข้น 1,000 มิลลิกรัมต่อลิตร, Sodium hexametaphosphate และ Anhydrous sodium carbonate
4. เครื่องมือวิทยาศาสตร์ ได้แก่ เครื่องชั่งไฟฟ้าทศนิยม 2 และ 4 ตำแหน่ง, เครื่อง Flame photometer, เครื่อง NIR spectrometer แบบตั้งโต๊ะ (FT-NIR spectrometer), เครื่องเขย่า

วิธีการ

1. การเตรียมตัวอย่างเพื่อใช้ในการวิจัย

คัดเลือกกลุ่มตัวอย่างดินที่ต้องการนำมาศึกษา โดยการเลือกจากตัวอย่างดินของเกษตรกรและนักวิจัยจากพื้นที่ต่างๆ ทั่วประเทศ ที่ส่งเข้ารับการวิเคราะห์ในห้องปฏิบัติการกลุ่มวิทยบริการ สำนักวิทยาศาสตร์เพื่อการพัฒนาที่ดิน กรมพัฒนาที่ดิน ในช่วงปี 2560-2562 จำนวน 1,070 ตัวอย่าง เตรียมตัวอย่างดินโดยการผึ่งดินให้แห้งในที่ร่ม (air dried) จากนั้นบดตัวอย่างดิน แล้วร่อนดินผ่านตะแกรงขนาด 2 mm เก็บใส่ขวดพลาสติกเพื่อรอการนำตัวอย่างดินไปวิเคราะห์ค่าทางเคมีต่อไป

2. การวัดค่าการดูดกลืนแสงเนียร์อินฟราเรด

การวัดด้วยวิธีเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี (Near Infrared Spectroscopy: NIRS) งานวิจัยนี้ได้ทำการวัดสเปกตรัมการดูดซับคลื่นแสงในช่วงเลขคลื่น $12,800-3,900\text{ cm}^{-1}$ (ความยาวคลื่น 780-2,560 nm) ด้วยเครื่อง FT-NIR Spectrometer (MPA, Bruker, German) ทำการสแกนตัวอย่างโดยการนำตัวอย่างดินใส่ลงในถ้วยใส่ตัวอย่าง (sample cell) ที่มีพื้นที่รับแสงด้านล่างทำจากควอตซ์ (Quartz) ใส่ตัวอย่างให้กระจาย สม่ำเสมอ และอัดให้แน่น เป็นการวัดตัวอย่างโดยวิธีการตรวจวัดแบบสะท้อน (Reflectance) ทำการวัดสเปกตรัมซ้ำในแต่ละตัวอย่าง จำนวน 2 ซ้ำ (duplicates)

3. การวิเคราะห์ปริมาณโพแทสเซียมในดินทางเคมี และการวิเคราะห์ขนาดของอนุภาคดิน

การวิเคราะห์ปริมาณโพแทสเซียมที่เป็นประโยชน์ในดิน ด้วยวิธีการสกัดดินด้วยสารละลายสกัด 1N Ammonium acetate, pH7 (Jackson, 1958) แล้ววัดด้วยเครื่อง Flame Photometer โดยกลุ่มตัวอย่างทั้งหมดครอบคลุมปริมาณโพแทสเซียมที่จะวัดเป็นช่วงกว้าง เพื่อให้ครอบคลุมค่าวิเคราะห์โพแทสเซียมในดินของตัวอย่างที่ต้องการวัดเพื่อใช้งานจริง ในการวิเคราะห์ขนาดของอนุภาคดิน (particle size distribution) โดยใช้วิธี Hydrometer Method เพื่อแบ่งกลุ่มการทดลองตามขนาดอนุภาคดิน ให้ตัวอย่างทั้งหมดที่นำมาศึกษาครอบคลุมมวลของอนุภาคอินทรีย์ 3 กลุ่มขนาด คือ กลุ่มที่มีอนุภาคทราย (sand) กลุ่มที่มีอนุภาคทรายตะกอน หรืออนุภาคทรายแป้ง (silt) และกลุ่มที่มีอนุภาคดินเหนียว (clay)

4. การสร้างสมการเบื้องต้นสำหรับทำนายปริมาณโพแทสเซียมในดินและการทดสอบสมการ

บันทึกข้อมูลการวิเคราะห์ปริมาณโพแทสเซียมในดินจากการวิเคราะห์ทางเคมีตามวิธีมาตรฐาน และปริมาณอนุภาคดินเหนียว (% clay) ลงในเส้นสเปกตรัมของแต่ละตัวอย่าง ใช้วิธีการสร้างสมการด้วยโปรแกรม OPUS version 7.0 โดยใช้เทคนิค Partial Least Square Regression (PLSR) เพื่อทำนายปริมาณโพแทสเซียม แล้วทำการเปรียบเทียบค่าทำนายกับค่าที่วัดได้จากวิธีมาตรฐานด้วยวิธีการตรวจสอบแบบ cross validation เริ่มต้นจากการใช้กลุ่มตัวอย่างดินที่มีการตัดค่านอกกลุ่มออกแล้ว มาสร้างสมการค่าลิเบรชัน โดยตัดข้อมูลตัวอย่างออกทีละกลุ่ม (กลุ่มละ 5%) เพื่อใช้เป็นชุดทดสอบความถูกต้องของสมการ และใช้กลุ่มตัวอย่างที่เหลือเป็นชุดสร้างสมการทำนาย หลังจากนั้นนำกลุ่มตัวอย่างกลุ่มแรกกลับเข้ามาในฐานข้อมูลของตัวอย่างทั้งหมด และทำการสุ่ม

เลือกกลุ่มตัวอย่าง 5% ใหม่อีกครั้ง ทำเช่นนี้ จนหมดชุดตัวอย่าง เมื่อกระบวนการจบ ทุกตัวอย่างจะผ่านการถูกนำมาใช้เป็นชุดสร้างสมการทำนาย และทดสอบความถูกต้องของสมการทั้งหมด

4.1 การสร้างสมการทำนาย (Calibration)

นำข้อมูลค่าการดูดกลืนแสงจากสเปกตรัมเนียร์อินฟราเรดของตัวอย่างดินที่วัดได้จากเครื่อง FT-NIR spectrometer มาหาความสัมพันธ์กับปริมาณโพแทสเซียมที่วัดด้วยวิธีมาตรฐานในห้องปฏิบัติการ ซึ่งเป็นการวิเคราะห์ความสัมพันธ์ของค่าการดูดกลืนแสงจากสเปกตรัมที่ได้กับค่าจริงทางเคมี โดยการสร้างสมการเทียบมาตรฐาน ประกอบด้วยขั้นตอนการวิเคราะห์และการพิจารณาข้อมูลที่ผิดปกติ เป็นการกำจัดข้อมูลที่มีความผิดปกติออกจากกลุ่ม (outlier) จากข้อมูลสเปกตรัมของทุกตัวอย่าง จากนั้นทำการปรับแต่งสเปกตรัมเพื่อเป็นการลดอิทธิพลของตัวอย่างวิเคราะห์ เช่น การซ้อนทับกันของแถบการดูดกลืนแสงขององค์ประกอบทางเคมีอื่นๆ ของตัวอย่าง ซึ่งเป็นปัจจัยที่ทำให้สเปกตรัมแตกต่างกัน โดยการจัดการทางคณิตศาสตร์ด้วยวิธีทางเคมีเมตริก (Chemometric) แบบต่างๆ ได้แก่ First Derivative, Standard Normal Variant (SNV), Multiplicative Scattering Correction และ First Derivative + Standard Normal Variant (SNV), จากนั้นทำการสร้างสมการคาลิเบรชัน โดยใช้เทคนิค Partial Least Square Regression (PLSR) เปรียบเทียบสมการที่สร้างขึ้นโดยพิจารณาเลือกสมการทำนายที่ดีที่สุด พิจารณาจากค่าสหสัมพันธ์ของสมการ (R^2) ควรมีค่าเข้าใกล้ 1 ค่าความคลาดเคลื่อนจากการทำนายด้วยตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ (RMSEE) และค่าความแตกต่างระหว่างค่าที่ทำนายได้จากสมการกับค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริง (bias) ควรมีค่าต่ำ และควรมีค่าความแม่นยำในการทำนาย (RPD) สูงเพื่อให้ได้สมการที่ดีที่สุดสำหรับการทำนายปริมาณโพแทสเซียมในดิน

4.2 การทดสอบความถูกต้องของสมการที่สร้างขึ้น (validation)

เพื่อเป็นการยืนยันความถูกต้องและความเหมาะสมของสมการคาลิเบรชันในการทำนายปริมาณโพแทสเซียมในดินด้วยเทคนิคเนียร์อินฟราเรดที่ได้พัฒนาขึ้น ในการนำมาใช้ทดแทนหรือวิเคราะห์ร่วม/ควบคู่กับการวิเคราะห์ตัวอย่างในห้องปฏิบัติการวิธีเดิม โดยทำการเปรียบเทียบค่าทำนายกับค่าที่วัดได้จากวิธีมาตรฐานด้วยวิธีการตรวจสอบแบบ cross validation (การตัดตัวอย่างออกทีละกลุ่ม กลุ่มละ 5% เพื่อใช้เป็นชุดทดสอบความถูกต้องของสมการ และใช้กลุ่มตัวอย่างที่เหลือเป็นชุดสร้างสมการทำนาย) เป็นการนำสเปกตรัมของตัวอย่างที่ทราบค่าทางเคมีแล้ว มาทำนายด้วยสมการที่สร้างขึ้น จากนั้นประเมินความถูกต้องแม่นยำของสมการที่สร้างขึ้น โดยการพิจารณาจาก ค่าความคลาดเคลื่อนจากการทำนาย (root mean square error of cross validation: RMSECV) และค่าความแตกต่างระหว่างค่าที่ได้จากการทำนายด้วยสมการที่สร้างขึ้นกับข้อมูลที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธีทางเคมี (RPD) ถ้าข้อมูลที่ได้จากวิธีทั้งสองมีค่าไม่แตกต่างกัน แสดงว่าสมการที่สร้างขึ้นมีประสิทธิภาพและความแม่นยำสูง

ผลการศึกษา

1. ข้อมูลของตัวอย่างที่ศึกษา, ผลการวิเคราะห์ปริมาณโพแทสเซียมในดินทางเคมีด้วยวิธีมาตรฐาน

จากการวิเคราะห์ตัวอย่างดิน จำนวน 1,070 ตัวอย่าง ในการศึกษาครั้งนี้ ผู้วิจัยได้ใช้ปัจจัยเรื่องปริมาณอนุภาคดินเหนียวมาเป็นเกณฑ์ในการศึกษา เพื่อให้ได้สมการที่มีความจำเพาะและมีประสิทธิภาพในการทำนายมากขึ้น และเพื่อให้การสร้างสมการใช้กลุ่มข้อมูลที่ดี ผู้วิจัยได้มีการตัดข้อมูลกลุ่มที่มีค่านอกกลุ่มออกจากกลุ่มตัวอย่างทดสอบ (outlier) จากการศึกษาพบว่า มีข้อมูลจำนวนหนึ่งที่เป็นข้อมูลที่มีค่าปริมาณโพแทสเซียมที่สูงผิดปกติไปจากกลุ่ม และมีลักษณะของสเปกตรัมที่เป็นปัญหา ดังนั้นหลังจากตัดค่านอกกลุ่มออกแล้ว เหลือตัวอย่างจำนวน 829 ตัวอย่าง แบ่งออกเป็น 5 กลุ่มศึกษา ดังนี้

กลุ่มที่ 1 เป็นกลุ่มตัวอย่างดินทั้งหมดที่ไม่มีการแยกปริมาณของอนุภาคดินเหนียว จำนวน 829 ตัวอย่าง ครอบคลุมค่าปริมาณโพแทสเซียมในดิน โดยมีค่าต่ำสุดและสูงสุด เท่ากับ 3 และ 287 mg kg^{-1} ตามลำดับ (ตารางที่ 3)

กลุ่มที่ 2 คัดเลือกกลุ่มตัวอย่างดินเฉพาะที่มีปริมาณอนุภาคดินเหนียว (% clay) $\leq 20\%$ จากตัวอย่างดินกลุ่มที่ 1 ซึ่งกลุ่มตัวอย่างนี้มีจำนวนทั้งหมด 171 ตัวอย่าง โดยมีค่าปริมาณโพแทสเซียมในดินต่ำสุดและสูงสุด เท่ากับ 3 และ 75 mg kg^{-1} ตามลำดับ (ตารางที่ 3)

กลุ่มที่ 3 คัดเลือกกลุ่มตัวอย่างดินเฉพาะที่มีปริมาณอนุภาคดินเหนียว (% clay) 21-40% จากตัวอย่างดินกลุ่มที่ 1 ซึ่งกลุ่มตัวอย่างนี้มีจำนวนทั้งหมด 116 ตัวอย่าง โดยมีค่าปริมาณโพแทสเซียมในดินต่ำสุดและสูงสุด เท่ากับ 10 และ 170 mg kg^{-1} ตามลำดับ (ตารางที่ 3)

กลุ่มที่ 4 คัดเลือกกลุ่มตัวอย่างดินเฉพาะที่มีปริมาณอนุภาคดินเหนียว (% clay) 41-60% จากตัวอย่างดินกลุ่มที่ 1 ซึ่งกลุ่มตัวอย่างนี้มีจำนวนทั้งหมด 97 ตัวอย่าง โดยมีค่าปริมาณโพแทสเซียมในดินต่ำสุดและสูงสุด เท่ากับ 23 และ 286 mg kg^{-1} ตามลำดับ (ตารางที่ 3)

กลุ่มที่ 5 คัดเลือกกลุ่มตัวอย่างดินเฉพาะที่มีปริมาณอนุภาคดินเหนียว (% clay) $> 60\%$ จากตัวอย่างดินกลุ่มที่ 1 ซึ่งกลุ่มตัวอย่างนี้มีจำนวนทั้งหมด 47 ตัวอย่าง โดยมีค่าปริมาณโพแทสเซียมในดินต่ำสุดและสูงสุด เท่ากับ 17 และ 331 mg kg^{-1} ตามลำดับ (ตารางที่ 3)

จากการวิเคราะห์สถิติพรรณนาของกลุ่มตัวอย่างที่ศึกษา พบว่ากลุ่มตัวอย่างที่ศึกษามีปริมาณโพแทสเซียมในดินครอบคลุมตั้งแต่ 3-331 mg kg^{-1} ซึ่งจะเห็นได้ว่า ตัวอย่างที่ศึกษาครอบคลุมปริมาณโพแทสเซียมในช่วงกว้าง เพื่อให้สมการที่ได้สามารถใช้ได้จริงในอนาคต (ตารางที่ 3)

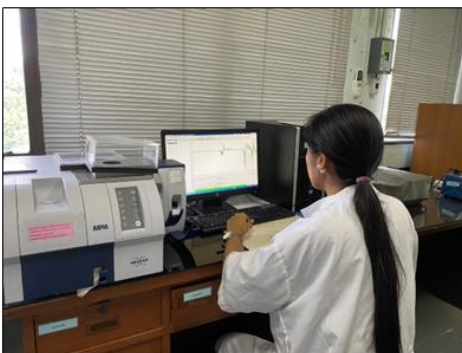
ตารางที่ 3 สถิติพรรณนาของปริมาณโพแทสเซียมในดินจากกลุ่มตัวอย่างดินที่ศึกษา

กลุ่มทดสอบ	ปริมาณโพแทสเซียม (mg kg^{-1})				จำนวนตัวอย่าง
	Min	Max	Mean	SD	
ตัวอย่างดินทั้งหมด	3	287	82	58	829
ปริมาณอนุภาคดินเหนียว $\leq 20\%$	3	75	27	15	171
ปริมาณอนุภาคดินเหนียว 21-40%	10	170	71	34	116
ปริมาณอนุภาคดินเหนียว 41-60%	23	286	112	58	97
ปริมาณอนุภาคดินเหนียว $> 60\%$	17	331	172	62	47

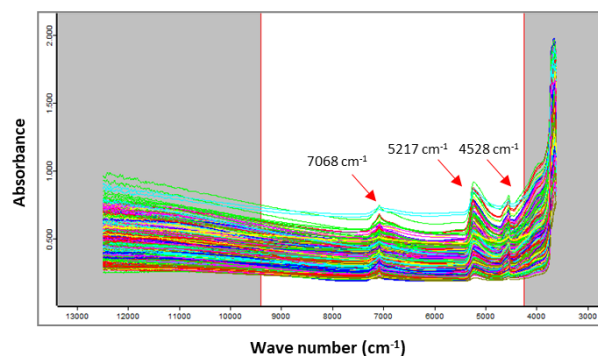
2. ผลการวัดสเปกตรัมด้วยเทคนิคเนียร์อินฟราเรด

เมื่อนำตัวอย่างดินมาสแกนในช่วงเลขคลื่น $12,800\text{--}3,900\text{ cm}^{-1}$ (ความยาวคลื่น $780\text{--}2,560\text{ nm}$) จะได้สเปกตรัม ดังในรูปที่ 1 (a, b) พบว่า มีช่วงของการดูดกลืนแสงของตัวอย่างดิน ที่เห็นได้ชัดเจนอยู่ 3 ตำแหน่ง คือ ที่ประมาณเลขคลื่น $7,068\text{ cm}^{-1}$ ($1,414\text{ nm}$), $5,217\text{ cm}^{-1}$ ($1,916\text{ nm}$) และ $4,528\text{ cm}^{-1}$ ($2,208\text{ nm}$) เป็นช่วงการดูดกลืนของพันธะ N-H (first overtone), C=O (second overtone) และ C-H + C=O ซึ่งเป็นส่วนประกอบหลักของอินทรีย์วัตถุในดินทั้งสิ้น

ดังนั้น จากสเปกตรัมที่ได้ ผู้วิจัยเลือกใช้ข้อมูลเฉพาะช่วงเลขคลื่นที่ประมาณ $9,300\text{--}4,300\text{ cm}^{-1}$ (ความยาวคลื่น $1,075\text{--}2,325\text{ nm}$) ซึ่งมีสัญญาณรบกวนต่ำมาใช้ในการสร้างสมการทำนาย เพื่อให้ผลการสร้างสมการทำนายปริมาณโพแทสเซียมที่แม่นยำที่สุด และเป็นช่วงของเลขคลื่นของสเปกตรัมที่มีข้อมูลการดูดกลืนเพียงพอที่จะนำไปสร้างสมการเทียบมาตรฐาน นอกจากนี้การสร้างสมการเทียบมาตรฐานจะได้จากเส้นสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมให้เหมาะสม และเลือกช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสมแล้ว



(a) เครื่อง FT-NIR spectrometer (NIR)



(b) ช่วงย่านคลื่นของสเปกตรัมที่ถูกเลือก

ภาพที่ 1 ภาพแสดงการวิเคราะห์ปริมาณโพแทสเซียมในดินด้วยเทคนิคเนียร์อินฟราเรด (a) เครื่อง FT-NIR spectrometer (NIR) (b) ช่วงย่านคลื่นของสเปกตรัมที่ถูกเลือก

3. การสร้างสมการสำหรับทำนายปริมาณโพแทสเซียมในดินและการทดสอบความถูกต้องของสมการ

ในการสร้างสมการเพื่อใช้ทำนายปริมาณโพแทสเซียมในดินให้ได้สมการที่มีความจำเพาะและมีประสิทธิภาพในการทำนายมากขึ้น จำเป็นต้องใช้กลุ่มข้อมูลที่ดี ซึ่งทำโดยการตัดข้อมูลกลุ่มที่มีค่านอกกลุ่มออกจากกลุ่มตัวอย่างทดสอบ (โดยข้อมูลสเปกตรัมของตัวอย่างดินที่มีค่า Mahalanobis distance statistical > 3.0 จัดถูกเป็นกลุ่มของข้อมูลที่มีค่านอกกลุ่ม) หลังจากนั้นทำการปรับแต่งสเปกตรัมเพื่อลดความคลาดเคลื่อนจากการวิเคราะห์ โดยการจัดการทางคณิตศาสตร์ด้วยวิธีทางเคโมเมตริกแบบต่างๆ ได้แก่ First Derivative, Vector Normalization และ First Derivative and Vector Normalization จากนั้นจึงสร้างสมการคาลิเบรชัน (calibration) โดยใช้เทคนิค Partial Least Square Regression (PLSR) และการทดสอบความถูกต้องของสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธีการตรวจสอบแบบ cross validation (การตัดตัวอย่างออกทีละกลุ่ม กลุ่มละ 5% เพื่อใช้เป็นชุดทดสอบความถูกต้องของสมการ และใช้กลุ่มตัวอย่างที่เหลือเป็นชุดสร้างสมการทำนาย) รายละเอียดดังนี้

ตารางที่ 4 แสดงประสิทธิภาพของสมการคาลิเบรชัน (Calibration) ในแต่ละกลุ่มตัวอย่างที่ถูกสร้างขึ้น

ชนิดของสมการ	R ²	RMSEE	RPD	ทริทเมนต์
ตัวอย่างดินทั้งหมด	0.54	39.30	1.48	First derivative
ปริมาณดินเหนียว ≤20%	0.71	8.27	1.85	First derivative
ปริมาณดินเหนียว 21-40%	0.87	12.50	3.15	First derivative
ปริมาณดินเหนียว 41-60%	0.90	14.00	3.22	First derivative + SNV
ปริมาณดินเหนียว >60%	0.97	10.80	5.99	SNV

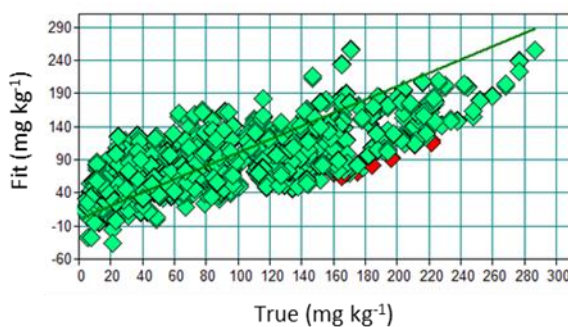
ตารางที่ 5 แสดงประสิทธิภาพของการทดสอบความถูกต้องของสมการที่สร้างขึ้น (validation)

ชนิดของสมการ	R ²	RMSECV	RPD	Bias	ทริทเมนต์
ตัวอย่างดินทั้งหมด	0.49	41.50	1.40	0.18	First derivative
ปริมาณดินเหนียว ≤20%	0.64	9.02	1.67	-0.10	First derivative
ปริมาณดินเหนียว 21-40%	0.84	13.50	3.01	0.21	First derivative
ปริมาณดินเหนียว 41-60%	0.88	15.20	3.12	0.44	First derivative + SNV
ปริมาณดินเหนียว >60%	0.95	13.70	4.49	-0.96	SNV

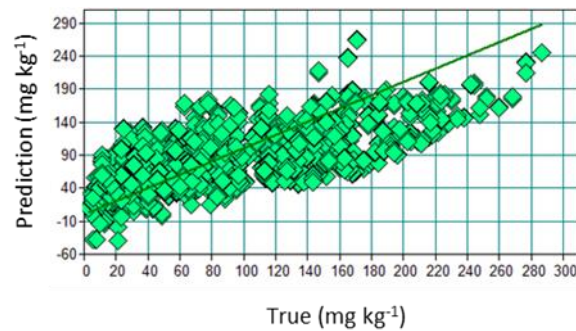
3.1 สมการเทียบมาตรฐานจากกลุ่มตัวอย่างดินทั้งหมดที่ไม่มีการแยกตามปริมาณอนุภาคดินเหนียว

กลุ่มตัวอย่างทั้งหมด จำนวน 1,070 ตัวอย่าง หลังการกำจัดข้อมูลที่มีความผิดปกติออกจากกลุ่มแล้ว เหลือตัวอย่างจำนวน 829 ตัวอย่าง ทำการปรับแต่งสเปกตรัมเพื่อลดความคลาดเคลื่อนจากการวิเคราะห์ จากนั้นทำการสร้างสมการคาลิเบรชัน ผลการวิเคราะห์ทางสถิติด้วย PLSR ของกลุ่ม Calibration set มีค่า $R^2 = 0.54$, RMSEE = 39.30 และ RPD = 1.48 (ภาพที่ 2 (a) และตารางที่ 4) ถือว่าสมการคาลิเบรชันดังกล่าว มีประสิทธิภาพไม่เพียงพอ ไม่สามารถใช้เป็นสมการทำนายได้

ในส่วนการทดสอบความถูกต้องของสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี cross validation นั้น จากผลการวิเคราะห์ทางสถิติด้วย PLSR ของสมการ validation มีค่า $R^2 = 0.49$, RMSECV = 41.50, RPD = 1.40 และ Bias = 0.18 (ภาพที่ 2 (b) และตารางที่ 5) ทั้งนี้พบว่าทั้งสมการ calibration และสมการ validation มีค่า R^2 , RPD ต่ำ และมีค่า RMSECV สูง เนื่องจากตัวอย่างดินทั้งหมดได้เก็บรวบรวมจากตัวอย่างดินที่ส่งเข้าวิเคราะห์ในห้องปฏิบัติการ ซึ่งมีความหลากหลายทั้งในด้านวัตถุต้นกำเนิดของดิน ชนิดของเนื้อดิน การกระจายตัวของอนุภาคดิน การใช้ประโยชน์ที่ดินและมีการจัดการดินที่แตกต่างกัน ซึ่งปัจจัยต่างๆ ดังกล่าวข้างต้น ล้วนแล้วแต่มีผลต่อการดูดกลืนแสงและการสะท้อนกลับของแสง ซึ่งส่งผลต่อคุณภาพของข้อมูลสเปกตรัมที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคเนียร์อินฟราเรด



(a) สมการ Calibration



(b) สมการ Validation

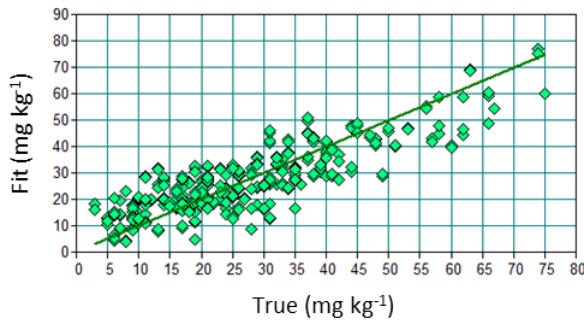
ภาพที่ 2 แสดงความสัมพันธ์ของปริมาณโพแทสเซียมในดินที่ได้จากการวิเคราะห์จริงจากกลุ่มตัวอย่างดินทั้งหมด (a) ความสัมพันธ์ของสมการ Calibration (b) ความสัมพันธ์ของสมการ Validation

3.2 สมการคาลิเบรชันโดยพิจารณาปัจจัยด้านปริมาณอนุภาคดินเหนียว

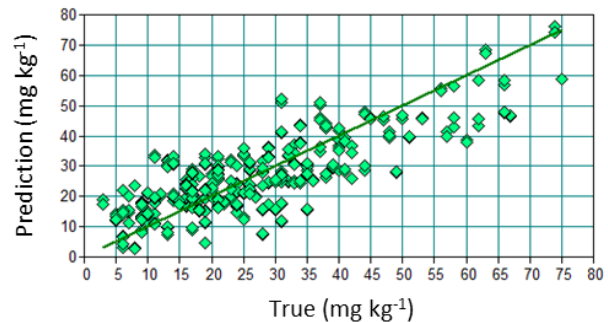
เพื่อให้สมการคาลิเบรชันที่ได้มีประสิทธิภาพมากที่สุด ผู้วิจัยได้ใช้ปัจจัยด้านปริมาณของอนุภาคดินเหนียวเข้ามาเกี่ยวข้อง โดยได้แบ่งกลุ่มตัวอย่างที่ศึกษาออกเป็นกลุ่มต่างๆ ตามปริมาณของอนุภาคดินเหนียว

3.2.1 สมการคาลิเบรชันจากกลุ่มตัวอย่างดินที่มีปริมาณอนุภาคดินเหนียว $\leq 20\%$ พบว่า ในการสร้างสมการคาลิเบรชันของกลุ่มตัวอย่างที่มีอนุภาคดินเหนียว $\leq 20\%$ หลังการกำจัดข้อมูลที่มีความผิดปกติออกจากรุ่นแล้ว เหลือตัวอย่างจำนวน 171 ตัวอย่าง ทำการปรับแต่งสเปกตรัมเพื่อลดความคลาดเคลื่อนจากการวิเคราะห์ จากนั้นทำการสร้างสมการคาลิเบรชัน ผลการวิเคราะห์ทางสถิติด้วย PLSR ของกลุ่ม Calibration set มีค่า $R^2 = 0.71$, RMSEE = 8.27 และ RPD = 1.85 (ภาพที่ 3 (a) และตารางที่ 4) ซึ่งจากค่าทางสถิติ R^2 แสดงถึงความสัมพันธ์ระหว่างค่าจริงและค่าทำนายยังมีความสัมพันธ์น้อย และ RPD มีค่าต่ำ ถือว่าสมการคาลิเบรชันดังกล่าว มีประสิทธิภาพไม่เพียงพอ ไม่สามารถใช้เป็นสมการทำนายได้

ในส่วนการทดสอบความถูกต้องของสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี cross validation นั้น จากผลการวิเคราะห์ทางสถิติด้วย PLSR ของสมการ validation มีค่า $R^2 = 0.64$, RMSECV = 9.02, RPD = 1.67 และ Bias = -0.10 (ภาพที่ 3 (b) และตารางที่ 5) พบว่า สมการ validation มีค่า RPD ต่ำ หมายถึงสมการคาลิเบรชันที่สร้างขึ้นยังไม่สามารถทำนายได้อย่างแม่นยำ



(a) สมการ Calibration

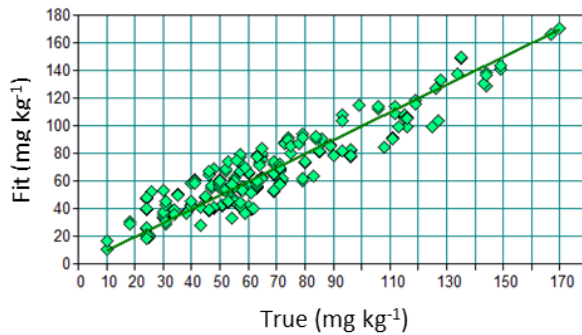


(b) สมการ Validation

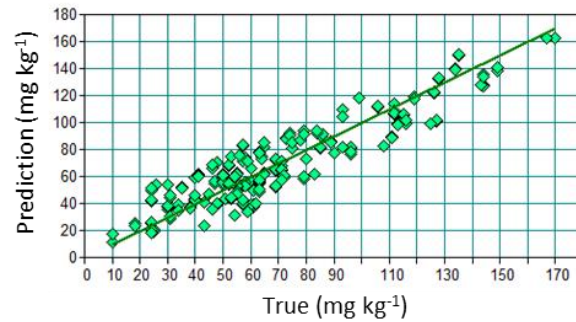
ภาพที่ 3 แสดงความสัมพันธ์ของปริมาณโพแทสเซียมในดินที่ได้จากการวิเคราะห์จริงจากกลุ่มตัวอย่างดินที่มี Clay $\leq 20\%$ (a) ความสัมพันธ์ของสมการ Calibration (b) ความสัมพันธ์ของสมการ Validation

3.2.2 สมการคาลิเบรชันจากกลุ่มตัวอย่างดิน ที่มีปริมาณอนุภาคดินเหนียว 21-40% พบว่า ในการสร้างสมการคาลิเบรชันของกลุ่มตัวอย่างที่มีอนุภาคดินเหนียว 21-40% หลังการกำจัดข้อมูลที่มีความผิดปกติออกจากรุ่นแล้ว เหลือตัวอย่างจำนวน 116 ตัวอย่าง ทำการปรับแต่งสเปกตรัมเพื่อลดความคลาดเคลื่อนจากการวิเคราะห์ จากนั้นทำการสร้างสมการคาลิเบรชัน ผลการวิเคราะห์ทางสถิติด้วย PLSR ของกลุ่ม Calibration set มีค่า $R^2 = 0.87$, RMSEE = 12.50 และ RPD = 3.15 (ภาพที่ 4 (a) และตารางที่ 4) จากค่า R^2 , RMSEE และ RPD จะถือว่าเป็นสมการคาลิเบรชันที่มีประสิทธิภาพพอใช้ สามารถใช้คัดเลือก (แบ่งกลุ่ม) ได้ มีความแม่นยำระดับปานกลาง

ในส่วนการทดสอบความถูกต้องของสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี cross validation นั้น จากผลการวิเคราะห์ทางสถิติด้วย PLSR ของสมการ validation มีค่า $R^2 = 0.84$, RMSECV = 13.5, RPD = 3.01 และ Bias = 0.21 (ภาพที่ 4 (b) และตารางที่ 5) พบว่า สมการ validation มีค่า RPD >3 หมายถึงสมการคาลิเบรชันที่สร้างขึ้นสามารถทำนายได้ระดับปานกลาง แต่สำหรับงานวิเคราะห์ทางด้านดิน RPD >3 สามารถนำมาประยุกต์ใช้งานได้



(a) สมการ Calibration

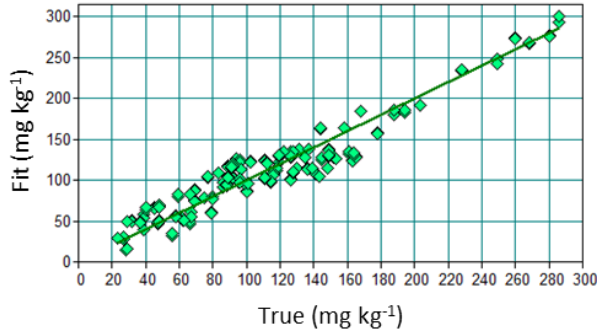


(b) สมการ Validation

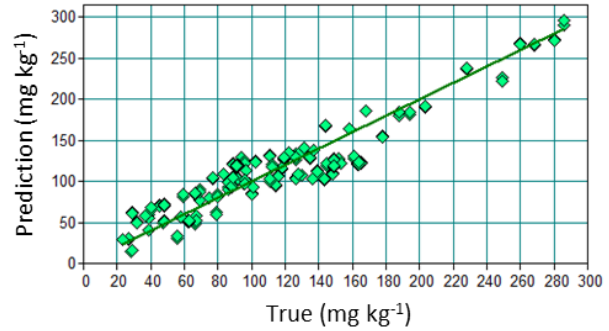
ภาพที่ 4 แสดงความสัมพันธ์ของปริมาณโพแทสเซียมในดินที่ได้จากการวิเคราะห์จริงจากกลุ่มตัวอย่างดินที่มี Clay 21-40% (a) ความสัมพันธ์ของสมการ Calibration (b) ความสัมพันธ์ของสมการ Validation

3.2.3 สมการคาลิเบรชันจากกลุ่มตัวอย่างดิน ที่มีปริมาณอนุภาคดินเหนียว 41-60% พบว่า ในการสร้างสมการคาลิเบรชันของกลุ่มตัวอย่างที่มีอนุภาคดินเหนียว 41-60% หลังการกำจัดข้อมูลที่มีความผิดปกติออก จากกลุ่มแล้ว เหลือตัวอย่างจำนวน 97 ตัวอย่าง ทำการปรับแต่งสเปกตรัมเพื่อลดความคลาดเคลื่อนจากการวิเคราะห์ จากนั้นทำการสร้างสมการคาลิเบรชัน ผลการวิเคราะห์ทางสถิติด้วย PLSR ของกลุ่ม Calibration set มี $R^2 = 0.90$, RMSEE = 14.00 และ RPD = 3.22 (ภาพที่ 5 (a) และตารางที่ 4) จากค่า R^2 แสดงถึงค่าความสัมพันธ์ระหว่างค่าจริงและค่าทำนายมีความสัมพันธ์ดี, ค่า RMSEE และ RPD แสดงให้เห็นว่าสมการมีความแม่นยำระดับปานกลาง

ในส่วนการทดสอบความถูกต้องของสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี cross validation นั้น จากผลการวิเคราะห์ทางสถิติด้วย PLSR ของสมการ validation มีค่า $R^2 = 0.88$, RMSECV = 15.20, RPD = 3.12 และ Bias = 0.44 (ภาพที่ 5 (b) และตารางที่ 5) พบว่า สมการ validation มีค่า RPD >3 หมายถึงสมการคาลิเบรชันที่สร้างขึ้นสามารถทำนายได้ระดับปานกลาง



(a) สมการ Calibration

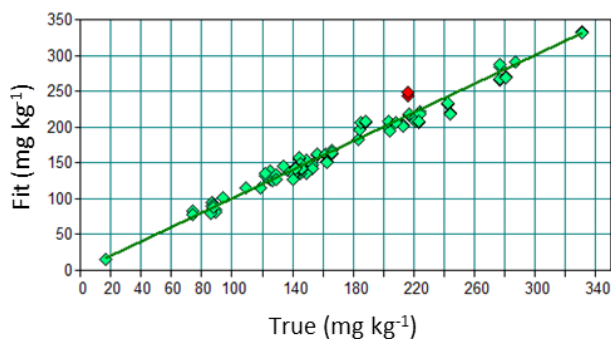


(b) สมการ Validation

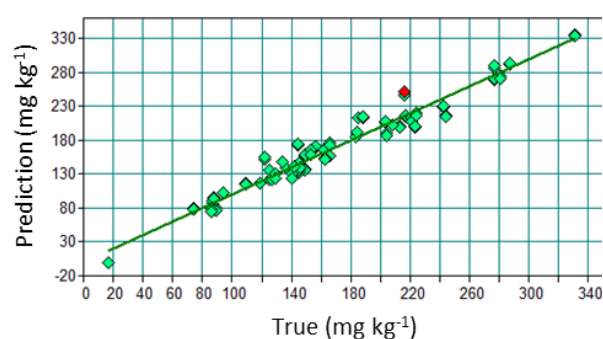
ภาพที่ 5 แสดงความสัมพันธ์ของปริมาณโพแทสเซียมในดินที่ได้จากการวิเคราะห์จริงจากกลุ่มตัวอย่างดินที่มี Clay 41-60% (a) ความสัมพันธ์ของสมการ Calibration (b) ความสัมพันธ์ของสมการ Validation

3.2.4 สมการคาลิเบรชันจากกลุ่มตัวอย่างดิน ที่มีปริมาณอนุภาคดินเหนียว >60% พบว่า ในการสร้างสมการคาลิเบรชันของกลุ่มตัวอย่างที่มีอนุภาคดินเหนียว >60% หลังการกำจัดข้อมูลที่มีความผิดปกติออกจากกลุ่มแล้ว เหลือตัวอย่างจำนวน 47 ตัวอย่าง ทำการปรับแต่งสเปกตรัมเพื่อลดความคลาดเคลื่อนจากการวิเคราะห์ จากนั้นทำการสร้างสมการคาลิเบรชัน ผลการวิเคราะห์ทางสถิติด้วย PLSR ของกลุ่ม Calibration set มี $R^2 = 0.97$, RMSEE = 10.8, RPD = 5.99 (ภาพที่ 6 (a) และตารางที่ 4) ซึ่งจากค่าทางสถิติ R^2 แสดงถึงค่าความสัมพันธ์ระหว่างค่าจริงและค่าทำนายมีความสัมพันธ์ดีมาก และมีค่า RPD สูง ซึ่งถือว่าเป็นสมการคาลิเบรชันที่มีประสิทธิภาพดี สามารถใช้ในการตรวจคุณภาพได้แต่ต้องใช้ด้วยความระมัดระวังในการประยุกต์ใช้งาน

ในส่วนการทดสอบความถูกต้องของสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี cross validation นั้น จากผลการวิเคราะห์ทางสถิติด้วย PLSR ของสมการ validation มีค่า $R^2 = 0.95$, RMSECV = 13.7, RPD = 4.49 และ Bias = -0.96 (ภาพที่ 5 (b) และตารางที่ 5) พบว่า สมการ validation มีค่า RPD สูง หมายถึงสมการคาลิเบรชันที่สร้างขึ้นสามารถทำนายได้อย่างแม่นยำ



(a) สมการ Calibration



(b) สมการ Validation

ภาพที่ 6 แสดงความสัมพันธ์ของปริมาณโพแทสเซียมในดินที่ได้จากการวิเคราะห์จริงจากกลุ่มตัวอย่างดินที่มี Clay >60% (a) ความสัมพันธ์ของสมการ Calibration (b) ความสัมพันธ์ของสมการ Validation

ผลการศึกษาที่ได้ ดังแสดงในตารางแสดงประสิทธิภาพของสมการคาลิเบรชัน (ตารางที่ 4) ซึ่งพบว่าเทคนิคเนียร์อินฟราเรดสามารถใช้ในการทำนายค่าปริมาณโพแทสเซียมในดินได้ เมื่อมีการสร้างสมการโดยพิจารณาจากปริมาณของอนุภาคดินเหนียวเป็นหลัก โดยกลุ่มตัวอย่างที่มีอนุภาคขนาดดินเหนียวตั้งแต่ 21% ขึ้นไป ให้สมการคาลิเบรชันที่มีประสิทธิภาพสูงกว่า ($R^2 = 0.87$) กลุ่มตัวอย่างที่มีอนุภาคดินเหนียว <20% ($R^2 < 0.71$) และกลุ่มตัวอย่างทั้งหมดที่ไม่ได้มีการแยกตามปริมาณของอนุภาคดินเหนียว ($R^2 = 0.54$) ดังนั้น สมการจากกลุ่มตัวอย่างที่มีอนุภาคดินเหนียว 21-40% และ 41-60% เป็นสมการคาลิเบรชันที่มีประสิทธิภาพปานกลาง สามารถใช้ในการคัดเลือก หรือตรวจคุณภาพบางอย่างได้ และสมการจากกลุ่มตัวอย่างที่มีอนุภาคดินเหนียว >60% ($R^2 = 0.97$) ถือว่าเป็นสมการคาลิเบรชันที่มีประสิทธิภาพดี สามารถใช้ในการตรวจคุณภาพได้แต่ต้องใช้ด้วยความระมัดระวังในการประยุกต์ใช้งาน

ในส่วนการทดสอบความถูกต้องของสมการที่สร้างขึ้น (validation) นั้น พบว่าทั้งสมการที่สร้างจากกลุ่มตัวอย่างทั้งหมดที่ไม่ได้มีการแยกตามปริมาณของอนุภาคดินเหนียว และสมการที่สร้างจากกลุ่มตัวอย่างที่มีอนุภาคขนาดดินเหนียว $\leq 20\%$ ขึ้นไป มีค่า RPD ต่ำ มีประสิทธิภาพไม่เพียงพอ ไม่สามารถใช้เป็นสมการทำนายได้ แต่ในสมการที่สร้างจากกลุ่มตัวอย่างที่มีอนุภาคดินเหนียวมากกว่า 21% ขึ้นไป มีค่า RPD > 3 สูง แสดงให้เห็นว่าสมการคาลิเบรชันที่สร้างขึ้นสามารถทำนายได้ โดยเฉพาะอย่างยิ่ง สมการจากกลุ่มตัวอย่างที่มีอนุภาคดินเหนียว >60% สมการมีค่า RPD สูง สามารถทำนายได้อย่างแม่นยำ

สรุปและวิจารณ์ผลการวิจัย

การพัฒนาเทคนิคการวิเคราะห์โดยการสร้างสมการทำนายปริมาณโพแทสเซียมในดินด้วยเทคนิคเนียร์อินฟราเรด โดยใช้การวัดที่เลขคลื่น 12,800- 3,900 cm^{-1} (ความยาวคลื่น 780-2,560 nm) ประกอบด้วยสมการจากกลุ่มตัวอย่างดินทั้งหมดที่ไม่มีการแยกปริมาณของอนุภาคดินเหนียว และสมการจากการพิจารณาปัจจัยด้านปริมาณอนุภาคดินเหนียว ผลการศึกษาแสดงให้เห็นว่าเทคนิคเนียร์อินฟราเรดสามารถใช้ในการทำนายค่าปริมาณโพแทสเซียมในดินได้เมื่อมีการสร้างสมการโดยพิจารณาจากปริมาณของอนุภาคดินเหนียวเป็นหลัก โดยกลุ่มตัวอย่างที่มีอนุภาคขนาดดินเหนียวตั้งแต่ 21% ขึ้นไป ให้สมการคาลิเบรชันที่มีประสิทธิภาพสูงกว่า ($R^2 > 0.87$) กลุ่มตัวอย่างที่มีอนุภาคดินเหนียว $\leq 20\%$ ($R^2 < 0.71$) และกลุ่มตัวอย่างทั้งหมดที่ไม่ได้มีการแยกตามปริมาณของอนุภาคดินเหนียว ($R^2 = 0.54$) โดยเฉพาะสมการที่สร้างจากกลุ่มตัวอย่างที่มีอนุภาคดินเหนียว >60% มีค่าสหสัมพันธ์ของสมการสูง ($R^2 = 0.97$) และมีค่าความแม่นยำในการทดสอบสมการสูง (RPD 5.99) ถือว่าเป็นสมการคาลิเบรชันที่มีประสิทธิภาพดี สามารถทำนายได้อย่างแม่นยำ แต่ยังคงมีข้อจำกัดเนื่องจากสมการที่ไม่มีการแยกปริมาณของอนุภาคดินเหนียวยังมีประสิทธิภาพในการทำนายไม่ดี ทำให้ยังไม่ครอบคลุมการใช้งาน ดังนั้นจึงต้องมีการศึกษาเพิ่มเติมเพื่อให้ได้สมการที่มีความแม่นยำสูงขึ้น เช่น การสร้างสมการจากตัวอย่างดินที่มี specific land

use สามารถทำนายได้ครอบคลุมช่วงกว้างของปริมาณโพแทสเซียมในดิน และสามารถนำไปประยุกต์ใช้ได้อย่างกว้างขวางต่อไป เพื่อให้สามารถตรวจสอบดินได้อย่างรวดเร็ว ลดระยะเวลาดำเนินงาน ประหยัดค่าใช้จ่าย และปลอดภัยต่อผู้ปฏิบัติงานอีกด้วย

ประโยชน์ที่ได้รับและข้อเสนอแนะ

1. สมการทำนายที่สร้างจากเทคนิคเนียร์อินฟราเรดจะให้ค่าทางสถิติดีขึ้น เมื่อมีการสร้างจากฐานข้อมูลที่ใหญ่ขึ้นและมีค่าที่ต้องการทำนายที่ครอบคลุมตัวอย่างจริง ดังนั้นควรมีการพัฒนาสมการอย่างต่อเนื่อง โดยเพิ่มจำนวนตัวอย่างให้ครอบคลุมในอนาคต หรือการสร้างสมการจากตัวอย่างดินที่มี specific land use เพื่อความถูกต้อง แม่นยำในการทำนาย

2. เนื่องจากงานวิจัยมากมายจากต่างประเทศสนับสนุน สอดคล้องกันว่าเทคนิคเนียร์อินฟราเรดสามารถใช้ในการทำนายสมบัติทางเคมีด้านอื่นๆ ได้ เช่น ไนโตรเจนในดิน ปริมาณอินทรีย์วัตถุในดิน ปริมาณของอนุภาคดินเหนียวในดิน ดังนั้น ควรมีการขยายขอบเขตการศึกษาให้ครอบคลุมสมบัติด้านเคมีด้านอื่นๆ ของดินด้วย เพื่อให้สามารถเก็บรวบรวมฐานข้อมูลเคมีดินในเวลาอันรวดเร็ว และประหยัดงบประมาณ

2. เพื่อผลจากการทำนายปริมาณโพแทสเซียมในดินที่แม่นยำ ควรมีการทดสอบกับการปลูกพืชในกระถาง โดยให้เทคนิคเนียร์อินฟราเรดเป็นหนึ่งในตำรับการทดลองการใส่ปุ๋ยตามค่าวิเคราะห์ดิน และเปรียบเทียบกับตำรับที่วิเคราะห์ด้วยวิธีมาตรฐานในห้องปฏิบัติการ หรืออื่นๆ ต่อไป

การเผยแพร่ผลงานวิจัย

จัดทำรายงานการศึกษาเพื่อให้นักวิชาการที่สนใจนำไปประยุกต์ใช้ และนำไปศึกษาพัฒนาต่อยอดเพิ่มเติมต่อไป

เอกสารอ้างอิง

- ชลันธร วิชาศิลป์ และสมศักดิ์ ระย่น. 2557. การทำนายค่าอินทรีย์วัตถุ ไนโตรเจน ฟอสฟอรัสและโพแทสเซียม
ในดินโดยใช้แสงอินฟราเรดย่านใกล้. เกษตร. 42:1 (พิเศษ): 375-381.
- ธงชัย สุวรรณลิขิต. การวิเคราะห์สเปกตรัม NIR ทั้งในเชิงปริมาณและเชิงคุณภาพ, น. 99-129. ใน การอบรม
เชิงปฏิบัติการการควบคุมคุณภาพสินค้าด้วยเทคนิค near infrared spectroscopy เพื่อการแข่งขัน
ในเวทีการค้าโลก 27-28 พฤศจิกายน 2545. สถาบันค้นคว้าและพัฒนาผลิตผลทางการเกษตรและ
อุตสาหกรรมเกษตร มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์, กรุงเทพฯ.
- ธีรยุทธ วิไลวัลย์ และวรวรรณ พันธุมนาวิน. 2548. อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี. แหล่งที่มา:
http://www.chemistry.sc.chula.ac.th/course_info/2302265_04_TV/ir-265.pdf, 12 สิงหาคม
2558.
- นพมณี สุวรรณัง จิราพร สวยสม วิวัฒน์ สวยสม และกมลรินทร์ นิมนวลรัตน์. 2559. การตรวจสอบความใช้ได้ของ
เทคนิคเนียร์อินฟราเรดในการทำนายค่าวิเคราะห์ปริมาณอินทรีย์วัตถุในดิน กรณีศึกษา: ปัจจัยด้าน
ปริมาณอนุภาคดินเหนียวของดินในประเทศไทย. รายงานการวิจัย กรมพัฒนาที่ดิน.
- ปานมนัส ศิริสมบูรณ์. 2556. เทคโนโลยีเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับผลผลิตเกษตรและอาหาร.
ศูนย์เครือข่ายข้อมูลอาหารครบวงจร. แหล่งที่มา: <http://www.foodnetworksolution.com>, 8
พฤษภาคม 2557.
- ศศิวิมล มากมูล. 2553. การใช้เทคนิคเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีตรวจสอบการปนข้ามสารพันธุ์ข้าวดอก
มะลิ 105 ด้วยข้าวพันธุ์ชัยนาท 1. วิทยานิพนธ์ปริญญาโท มหาวิทยาลัยเชียงใหม่.
- Barthes, B.G., D. Brunet, E. Hien, F. Enjalric, S. Conche, G.T. Freschet, R. d'Annunzio and J.
Toucet-Louri. 2008. Determining the distributions of soil carbon and nitrogen in particle
size fractions using near-infrared reflectance spectrum of bulk soil sample. *Soil Biol.
Biochem.* 40: 1533-1537.

- Ben-Dor, E. and A. Banin. 1995. Near-infrared analysis as a rapid method to simultaneously evaluate several soil soil properties. **Soil Sci. Soc. Am. J.** 59: 364-372.
- Bowers, S.A. and R.J. Hanks. 1965. Reflection of radiant energy from soils. **Soil Sci.** 100: 130-138.
- Brown, D.J., K.D. Shepherd, M.G. Walsh, M.D. Mays and T.G. Reinsch. 2006. Global soil characterization with VNIR diffuse reflectance spectroscopy. **Geoderma.** 132: 273-290.
- Blanco, M. and D. Valdes. 2004. Influence of temperature on the predictive ability of near infrared spectroscopy models. **J. Near Infrared Spectrosc.** 12: 121-126.
- Dardenne, P., G. Sinnaeve and V. Baeten. 2000. Multivariate calibration and chemometrics for near infrared spectroscopy. **J. Near Infrared Spectrosc.** 8: 229-237.
- Haaland, D.M. and E.V. Thomas. 1988. Partial least-squares methods for spectral analyses. Relation to other quantitative calibration methods and the extraction of qualitative information. **Anal. Chem.** 60: 1193-1202.
- Hansen, S., H.E. Jensen, N.E. Nielsen and H. Svendsen. 1991. Simulation of nitrogen dynamics and biomass production in winter wheat using the Danish simulation model DAISY. **Fertilizer research.** 27: 245-259.
- Kawano, S., H. Abe and M. Iwamoto. 1995. Development of calibration equation with temperature compensation for determining the brix value in intact peaches. **J. Near Infrared Spectrosc.** 3: 211-218.
- Kawano, S. 2002. Sampling and sample presentation. In Siesler, H.W., Y. Ozaki., S. Kawata and H.M. Heise. (eds). **Near Infrared Spectroscopy: Principles, Instruments, Applications.** WILEY-VCH Verlag GmBH. Germany. Pp. 115-124.

- Kurz, C., M. Leitenberger, R. Carle, and A. Schieber. 2010. Evaluation of fruit authenticity and determination of the fruit content of fruit products using FT-NIR spectroscopy of cell wall components. **Food Chem.** 119: 806-812.
- Liu, H., Y. Zhang, and B. Zhang. 2009. Novel hyperspectral reflectance models for estimating black-soil organic matter in Northeast China. **Environ. Monit. Assess.** 154: 147-154.
- McClure, W.F. and S. Tsuchikawa. 2007. Instruments, In Y. Ozaki, ed. **Near-infrared Spectroscopy in Food Science and Technology.** John Wiley & Sons, Inc.
- Osborne, B.G., B. Mertens, M. Thompson and T. Fearn. 1993a. The authentication of basmati rice using near infrared spectroscopy. **J. Near Infrared Spectrosc.** 1: 77-83.
- Osborne, B.G., T. Fearn and P.H. Hindle. 1993b. **Practical NIR spectroscopy with Applications in Food and Beverage Analysis.** Longman Group, UK.
- Reeves, J.B.III, R.F. Follett, G.W. McCarty and J.M. Kimble. 2006. Can near or mid-infrared diffuse reflectance spectroscopy be used to determine soil carbon pool?. **Commun. Soil Sci. Plant Anal.** 37: 2307-2325.
- Shepherd, K.D. and M.G. Walsh. 2002. Development of reflectance spectral libraries for characterization of soil properties. **Soil Sci. Soc. Am. J.** 66: 988-998.
- Stenberg, B, E. Nordkvist and L. Salomonsson. 1995. Use of near infrared reflectance spectra of soils for objective selection of samples. **Soil Sci.** 159: 109-114.
- Sudduth, K. A. and J.W. Hummel. 1993. Portable, near-infrared spectrophotometer for rapid soil analysis. **Trans. ASAE.** 34: 1900-1909.

- Vasques, G.M., S. Grunwald and J.O. Sickman. 2009. Modeling of soil organic carbon fractions using visible-near-infrared spectroscopy. **Soil Sci. Soc. Am. J.** 73: 176-184.
- Viscarra Rossel, R.A., D.J.J. Walvoort, A.B. McBratney, L.J. Janik and J.O. Skjemstad. 2006. Visible, near-infrared, mid infrared or combined diffuse reflectance spectroscopy for simultaneous assessment of various soil properties. **Geoderma**. 131: 59-75.
- Williams, P.C. and K. Norris. 2001. **Near Infrared Technology in Agricultural and Food Industries**. American Association of Cereal Chemists, Inc St Paul, Minnesota USA.
- Williams, P.C. 2007. Grains and seeds, pp. 165-202. In Y. Ozaki, W.F. McClure and A.A. Christy, eds. **Near-infrared Spectroscopy in Food Science and Technology**. John Wiley & Sons.

ภาคผนวก

ตารางผนวกที่ 1 สมบัติทางเคมีและกายภาพบางประการของตัวอย่างดินที่ใช้ในการศึกษา

	Soil properties									
	pH	EC	OM	Avail. P	Avail. K	Avail. Ca	Avail. Mg	Sand	Silt	Clay
		(dS m ⁻¹)	(%)	(mg kg ⁻¹)				(%)	(%)	(%)
Min	2.6	0	0	0	3	0	0	3.8	3.4	1.8
Max	9.4	5.1	10.6	1,495	287	14,925	3,813	92.1	79.9	83.5
Mean	5.7	0.3	1.8	35	82	1,684	284	43.6	24.7	31.6
SD	1.3	0.7	1.2	107.1	58.1	2,231	401.8	20.1	10	19.2

