



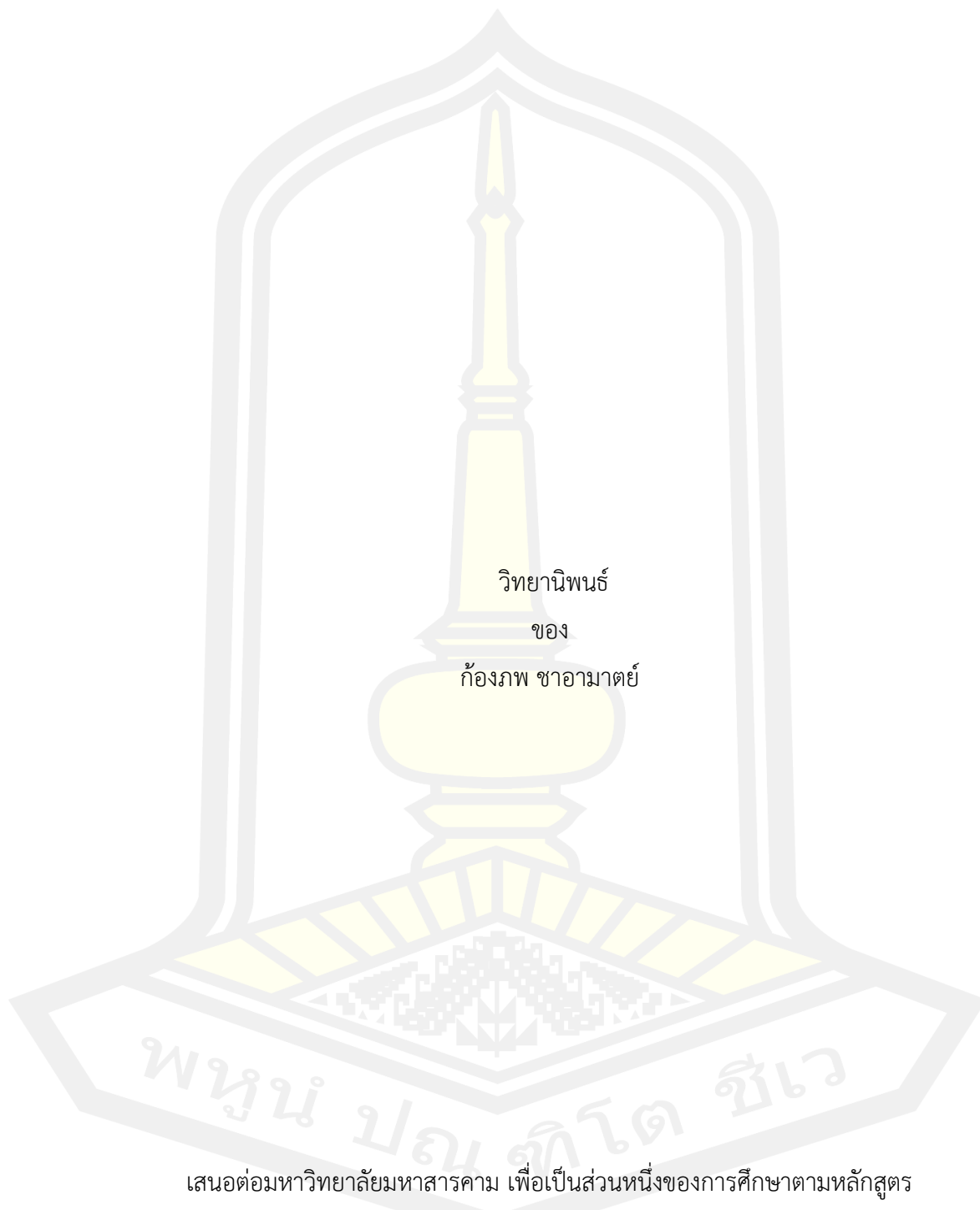
การตรวจสอบน้ำเมาและไวน์หมากเมาโดยอินพารเตยานไกล์

วิทยานิพนธ์
ของ
ก้องภพ ซาอามาตย์

เสนอต่อมหาวิทยาลัยมหาสารคาม เพื่อเป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตร
ปริญญาปรัชญาดุษฎีบัณฑิต สาขาวิชาวิศวกรรมไฟฟ้าและคอมพิวเตอร์
มกราคม 2566

ลิขสิทธิ์เป็นของมหาวิทยาลัยมหาสารคาม

การตรวจสอบน้ำเมาและไวน์หมากเมาโดยอินฟาเรดย่านใกล้



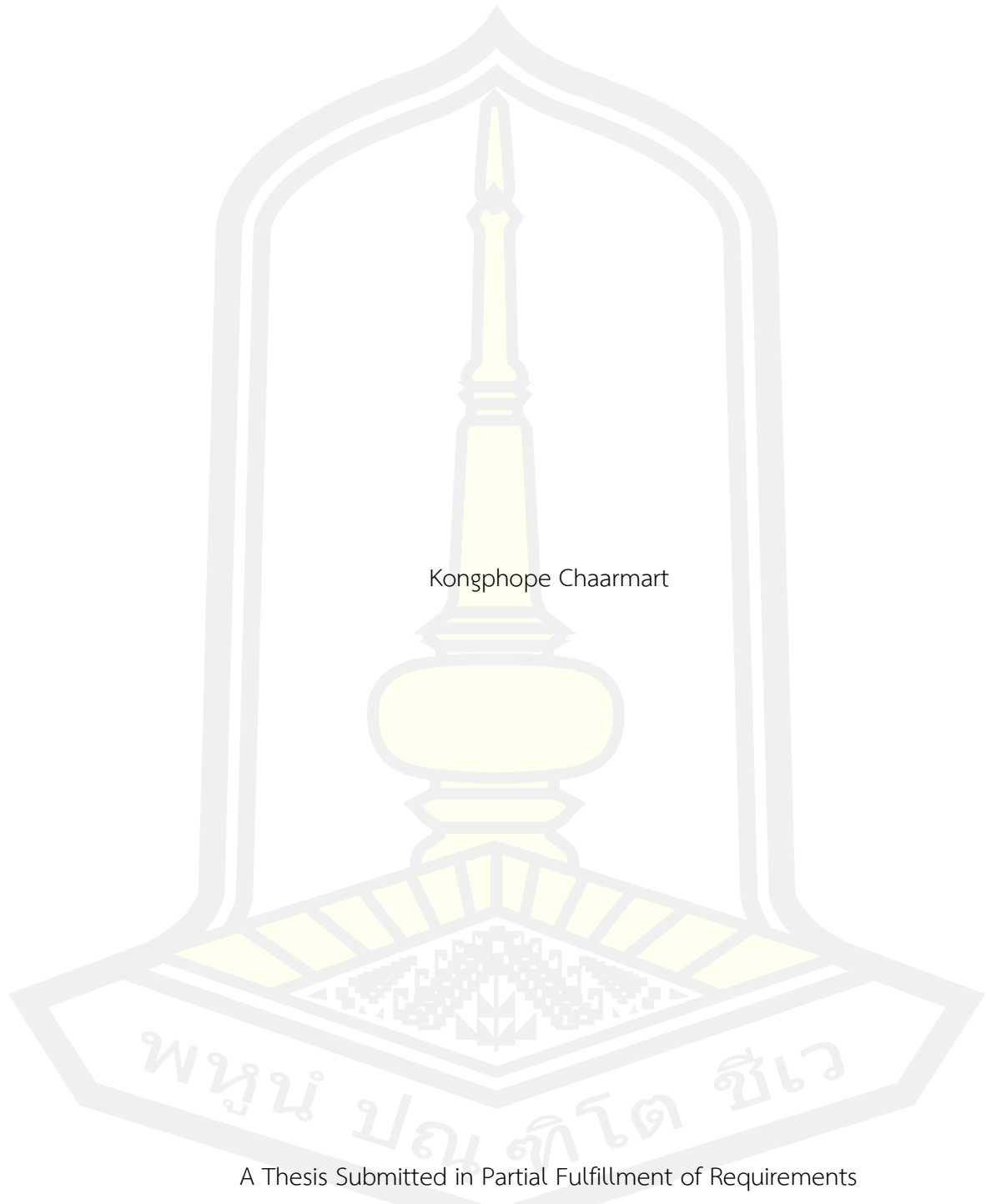
เสนอต่อมหาวิทยาลัยมหาสารคาม เพื่อเป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตร

ปริญญาปรัชญาดุษฎีบัณฑิต สาขาวิชาวิศวกรรมไฟฟ้าและคอมพิวเตอร์

มกราคม 2566

ลิขสิทธิ์เป็นของมหาวิทยาลัยมหาสารคาม

Investigation of Mao juice and Mameo wine using NIRs



Kongphope Chaarmart

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of Requirements
for Doctor of Philosophy (Electrical and Computer Engineering)

January 2023

Copyright of Maharakham University



คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์ ได้พิจารณาวิทยานิพนธ์ของนายก่อภพ ชาอามาตย์
แล้วเห็นสมควรรับเป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาปรัชญาดุษฎีบัณฑิต สาขาวิชา
วิศวกรรมไฟฟ้าและคอมพิวเตอร์ ของมหาวิทยาลัยมหาสารคาม

คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์

.....ประธานกรรมการ

(รศ. ดร. อนันต์ เครือทรัพย์ถาวร)

.....อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก

(รศ. ดร. วรวัฒน์ เสี่ยงมวิบูล)

.....กรรมการ

(รศ. ดร. ชลธิ์ โพธิ์ทอง)

.....กรรมการ

(ผศ. ดร. นิวัตร อังควิศิษฐพันธ์)

.....กรรมการ

(ผศ. ดร. ณัฐวุฒิ สุวรรณทา)

มหาวิทยาลัยขอนแก่นให้รับวิทยานิพนธ์ฉบับนี้ เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตร
ปริญญา ปรัชญาดุษฎีบัณฑิต สาขาวิชาวิศวกรรมไฟฟ้าและคอมพิวเตอร์ ของมหาวิทยาลัย
มหาสารคาม

.....
(รศ. ดร. เกียรติศักดิ์ ศรีประทีป)

คณบดีคณะวิศวกรรมศาสตร์

.....
(รศ. ดร. กริสน์ ชัยมูล)

คณบดีบัณฑิตวิทยาลัย

ชื่อเรื่อง	การตรวจสอบน้ำเฝ้าและไวน์หมากเฝ้าโดยอินฟราเรดย่านใกล้		
ผู้วิจัย	ก้องภพ ซาอามาตย์		
อาจารย์ที่ปรึกษา	รองศาสตราจารย์ ดร. วรวัฒน์ เสงี่ยมวิบูล		
ปริญญา	ปรัชญาดุษฎีบัณฑิต	สาขาวิชา	วิศวกรรมไฟฟ้าและคอมพิวเตอร์
มหาวิทยาลัย	มหาวิทยาลัยมหาสารคาม	ปีที่พิมพ์	2566

บทคัดย่อ

คุณภาพทางเคมีของน้ำเฝ้าและไวน์หมากเฝ้าได้รับการตรวจสอบคุณภาพด้วยเครื่องวิเคราะห์ปริมาณสารด้วยคลื่นแสงอินฟราเรดย่านใกล้ FT-NIR โดยสมการการสอบเทียบจะถูกสร้างขึ้นโดยวิธีการตรวจสอบข้าม (cross-validation method) เพื่อจำลองความถูกต้อง ซึ่งค่าทางสถิติที่ใช้ตรวจสอบจะประกอบด้วยสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (R) ความผิดพลาดมาตรฐานของการทำการตรวจสอบข้าม (SECV) และมีค่าความผิดพลาด (bias) โดยในการวัดค่าความหวาน (Brix) และค่าความเป็นกรดของน้ำเฝ้า อีกทั้งค่าความหวานและค่าความเป็นกรดและแอลกอฮอล์ของผลิตภัณฑ์ไวน์หมากเฝ้าจะได้รับการตรวจสอบผ่านความสัมพันธ์ของค่ามาตรฐานและการตรวจสอบข้าม ซึ่งจากการทดสอบด้วยเทคนิคอินฟราเรดย่านใกล้ พบว่าองค์ประกอบหลักคือน้ำ ซึ่งพบการดูดซึมในช่วงความยาวคลื่น IR เดียวกัน (1450 นาโนเมตร) และจากการวิเคราะห์ FT-NIR เพื่อยืนยันว่าน้ำเป็นองค์ประกอบหลัก พบว่าสเปกตรัมของน้ำเฝ้าและไวน์หมากเฝ้าถูกพบในช่วงแถบสเปกตรัมเดียวกันที่ 1450 นาโนเมตรและ 1940 นาโนเมตร และพบย่านสเปกตรัมระหว่าง 2258 ถึง 2312 นาโนเมตรในไวน์หมากเฝ้าซึ่งถูกระบุว่าเป็นฟังก์ชันของเอทานอล

คำสำคัญ : คุณภาพทางเคมี, น้ำเฝ้า, ไวน์หมากเฝ้า, สเปกโทรสโกปีใกล้อินฟราเรดย่านใกล้

พหุบัน ปณุ ทิโต ชิว

TITLE Investigation of Mao juice and Mameo wine using NIRs
AUTHOR Kongphope Chaarmart
ADVISORS Associate Professor Worawat Sa-Ngiamvibool , Ph.D.
DEGREE Doctor of Philosophy **MAJOR** Electrical and Computer
Engineering
UNIVERSITY Mahasarakham **YEAR** 2023
University

ABSTRACT

The chemical quality of juices and wine produced from mameo fruit was evaluated by Fourier transform near-infrared (FT-NIR). The calibration equation was created by the cross-validation method to be simulated the accuracy. Statistical values composed of correlation coefficient (R), standard error of cross-validation (SECV) and bias were used. Brix values and acidity values of mao juice and the Brix, acidity, and alcohol values of Mao wine products were evaluated through the standard and cross-validation relation. It was found that was observed with NIR spectrometer to be absorbed in the same IR wavelength (1450 nm) which indicated that the water is the main composition. Based on FT-NIR analysis, the spectrum latices of juices and wine were revealed in the same range of the absorption bands at 1450 nm and 1940 nm to be confirmed the water composition. Also, the FT-NIR spectra from region 2258-2312 nm in Mao wine product have been predicted to the ethanol functions.

Keyword : Chemical Quality, Mao Juice, Mao Wine, Near-Infrared Spectroscopy

กิตติกรรมประกาศ

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตร ปริญญาปรัชญาดุษฎีบัณฑิต สาขาวิชาวิศวกรรมไฟฟ้าและคอมพิวเตอร์ มหาวิทยาลัยมหาสารคาม สำเร็จได้ด้วยความเมตตากรุณา และความช่วยเหลืออย่างสูงยิ่งจากอาจารย์ที่ปรึกษา รศ.ดร.วรวัฒน์ เสงี่ยมวิบูล ที่ให้คำแนะนำให้การทำงานวิจัย วิทยานิพนธ์เผยแพร่งานตีพิมพ์ในวารสารนานาชาติ ขอขอบคุณท่านคณะกรรมการสอบ วิทยานิพนธ์ ผศ.ดร.นิวัตร อังควิศิษฐพันธ์ รศ.ดร.ชลธิ์ โพธิ์ทอง ผศ.ดร.ณัฐวุฒิ สุวรรณทา ที่ให้คำแนะนำ และชี้แนะในเรื่องของหัวข้อที่จะต้องศึกษาวิจัย การดำเนินงาน คำแนะนำในเรื่องเทคนิคการวิจัยให้มีความสมบูรณ์มากยิ่งขึ้น ห้องปฏิบัติการ Near Infrared ภาควิชาวิศวกรรมกรรมการอาหาร คณะ วิศวกรรมศาสตร์ กำแพงแสน มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ ที่ให้ใช้ห้องปฏิบัติการ ขอขอบพระคุณ รศ.ดร. อนันต์ เครือทรัพย์ถาวร ให้เกียรติเป็นประธานสอบวิทยานิพนธ์และผู้ทรงคุณวุฒิในครั้งนี้

สุดท้ายนี้ขอขอบคุณผู้บริหารมหาวิทยาลัยราชภัฏสกลนคร ขอขอบคุณสาขาไฟฟ้าและ อิเล็กทรอนิกส์ คณะเทคโนโลยีอุตสาหกรรม ในการสนับสนุนครั้งนี้ ขอขอบคุณครอบครัว คุณพ่อ คุณแม่ ภรรยา ลูกสาวและลูกชาย ที่ให้การสนับสนุน ทั้งทางด้านทุนทรัพย์ กำลังใจ เพื่อให้การเรียนต่อปริญญา เอกนี้ให้สำเร็จลุล่วงไปด้วยดี

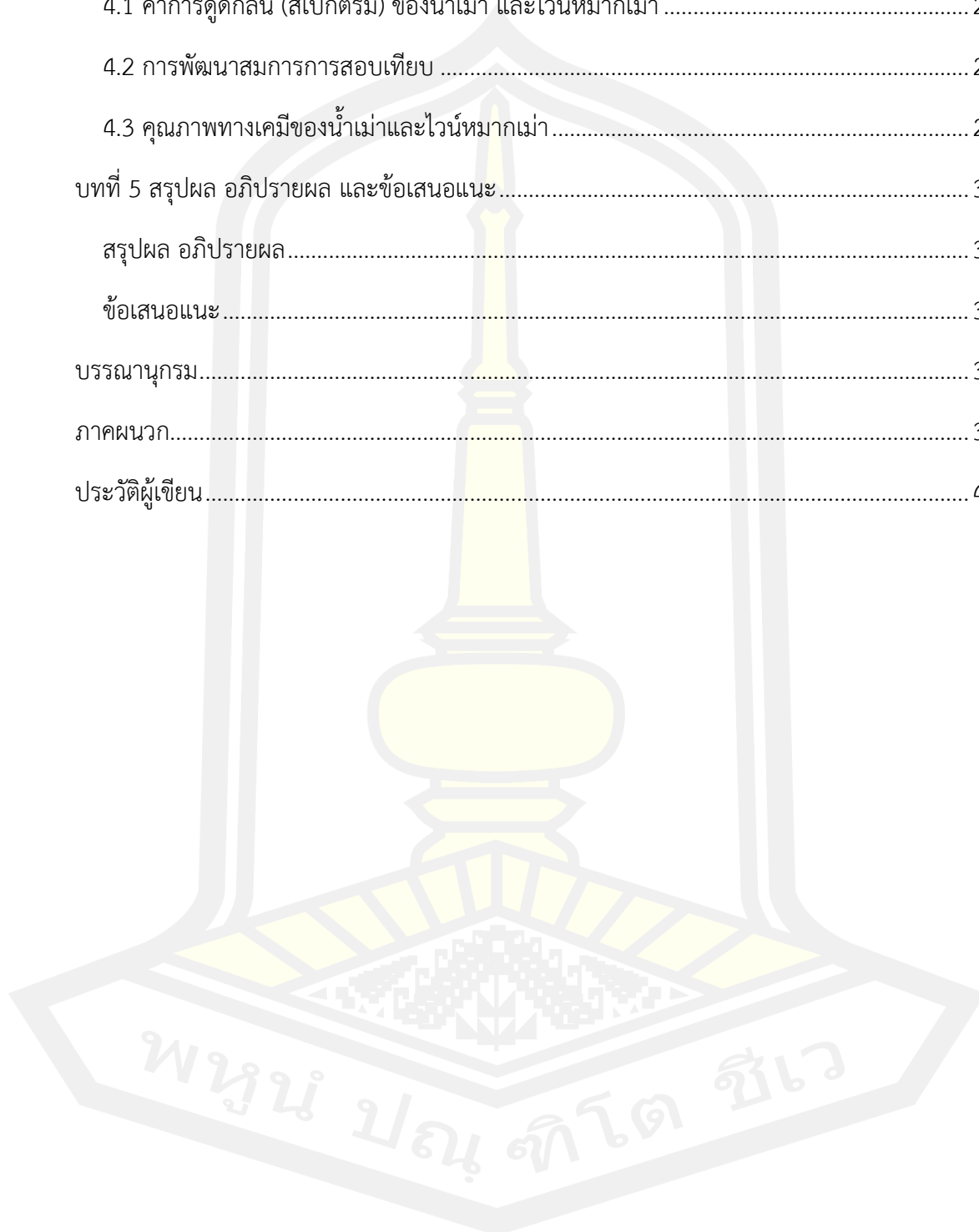
ก้องภพ ซาอามาตย์

พหุ น บณุ ทิโต ชีเว

สารบัญ

	หน้า
บทคัดย่อภาษาไทย.....	ง
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ.....	จ
กิตติกรรมประกาศ.....	ฉ
สารบัญ.....	ช
สารบัญตาราง.....	ฌ
สารบัญภาพ.....	ญ
บทที่ 1 บทนำ.....	1
1.1 บทนำ.....	1
1.2 วัตถุประสงค์.....	2
1.3 ขอบเขตงานวิจัย.....	3
1.4 ประโยชน์ที่จะได้รับ.....	3
1.4 กรอบแนวคิดในการวิจัย.....	3
บทที่ 2 ทฤษฎีที่เกี่ยวข้อง.....	4
2.1 เทคนิคอินฟราเรดย่านใกล้ (Near-infrared: NIR).....	4
2.2 เครื่องมือในการตรวจวัด.....	7
2.3 ตัวอย่างในการนำไปใช้งาน.....	8
2.4 การพัฒนาการสอบเทียบ.....	10
2.5 การประยุกต์ใช้งานในอาหาร.....	12
บทที่ 3 วิธีดำเนินการวิจัย.....	17
3.1 ผลการดำเนินงาน.....	17
3.2 ผลการวิเคราะห์ข้อมูลด้วยเทคนิค NIR.....	21

บทที่ 4 ผลการวิจัยและการอภิปราย	23
4.1 ค่าการดูดกลืน (สเปกตรัม) ของน้ำเมา และไวน์หมากเมา	23
4.2 การพัฒนาสมการการสอบเทียบ	24
4.3 คุณภาพทางเคมีของน้ำเมาและไวน์หมากเมา	25
บทที่ 5 สรุปผล อภิปรายผล และข้อเสนอแนะ	32
สรุปผล อภิปรายผล	32
ข้อเสนอแนะ	32
บรรณานุกรม	33
ภาคผนวก	38
ประวัติผู้เขียน	45



สารบัญตาราง

	หน้า
ตารางที่ 1 การประยุกต์ใช้ NIR สำหรับวิเคราะห์ผลิตภัณฑ์ธัญพืช [18].....	14
ตารางที่ 2 NIR ในการทดสอบคุณภาพของข้าวบาร์เลย์.....	16



สารบัญภาพ

	หน้า
ภาพที่ 1 กรอบแนวคิดในงานวิจัย	3
ภาพที่ 2 การดูดซับช่วงคลื่นของ NIR [19]	5
ภาพที่ 3 สเปกตรัมทั่วไปของผงซีเรียลและการดูดซับส่วนประกอบบางส่วน [18].....	6
ภาพที่ 4 การกระจายแสงจากตัวอย่างที่เป็นแป้ง [18].....	9
ภาพที่ 5 การกระจายของข้อมูล NIR กับข้อมูลอ้างอิง	11
ภาพที่ 6 ขั้นตอนการดำเนินงานวิจัย	17
ภาพที่ 7 น้ำเมาที่ใช้ในการทดลอง โดยมีระยะเวลาการเก็บรักษาตั้งแต่ 2559-2562.....	18
ภาพที่ 8 ตัวอย่างไวน์เมาที่ใช้ในการทดลองโดยมีระยะเวลาการเก็บรักษาตั้งแต่ปี 2561-2562.....	18
ภาพที่ 9 เครื่อง FT-NIR spectrometer (รุ่น MPA).....	19
ภาพที่ 10 การวัดค่าการดูดกลืนของน้ำเมา และไวน์เมาในระบบ trans flection.....	20
ภาพที่ 11 การวัดค่าการดูดกลืนของน้ำเมา และไวน์เมาด้วยเครื่องวิเคราะห์ฯ ที่ถูกพัฒนาขึ้นจากห้องปฏิบัติการ Near Infrared.....	21
ภาพที่ 12 แสดงค่าสเปกตรัมดั้งเดิมของ (a) น้ำเมา และ (b) ผลิตภัณฑ์ไวน์จากหมากเมาที่แสดงผลด้วยเครื่อง FT-NIR spectrometer	24
ภาพที่ 13 แสดงกราฟแผนภูมิจุดแบบกระจาย (scatter plot) ของการคำนวณค่าความหวานใน calibration set และ the validation set สำหรับ (a)-(b) น้ำเมา และ (c)-(d) ไวน์หมากเมาตามลำดับ.....	25
ภาพที่ 14 แสดงค่าสัมประสิทธิ์ของสมการสอบเทียบเพื่อวิเคราะห์ค่าความหวาน Brix ของ (a) น้ำเมา และ (b) ไวน์หมากเมา.....	27
ภาพที่ 15 แสดงกราฟแผนภูมิจุดแบบกระจาย (scatter plot) ของค่าแอลกอฮอล์ที่คาดการณ์ไว้ของผลิตภัณฑ์ไวน์หมากเมาใน (a) ชุดสอบเทียบ the calibration set และ (b) ชุดการตรวจสอบความถูกต้อง the validation set	28

ภาพที่ 16 แสดงค่าสัมประสิทธิ์ของสมการเทียบมาตรฐานสำหรับวิเคราะห์ค่าแอลกอฮอล์ของไวน์
หมากเม่า..... 29

ภาพที่ 17 แสดงกราฟแผนภูมิจุดแบบกระจาย (scatter plot) ของการคาดการณ์ค่าความเป็น
กรดในชุดสอบเทียบและชุดตรวจสอบความถูกต้องสำหรับ (a)-(b) น้ำเม่าและ (c)-(d) ไวน์หมากเม่า
ตามลำดับ..... 30

ภาพที่ 18 แสดงค่าสัมประสิทธิ์สมการมาตรฐานสำหรับวิเคราะห์ค่าความเป็นกรดของน้ำเม่า 31



บทที่ 1

บทนำ

1.1 บทนำ

หมากเมา (Mamao) หรือเมา (Mao) คือผลไม้ประจำท้องถิ่นและเป็นสิ่งบ่งชี้ทางภูมิศาสตร์ (Geographical Indications : GI) ของจังหวัดสกลนครพบมากในแถบเทือกเขาภูพานเป็นพืชเศรษฐกิจที่สำคัญของจังหวัดเพราะสามารถนำมาแปรรูปเป็นผลิตภัณฑ์อยู่ในรูปของน้ำผลไม้และไวน์ โดยเฉพาะพันธุ์เมาหลวงซึ่งกระบวนการผลิตไวน์หมากเมาของจังหวัดสกลนครอยู่ในรูปกลุ่มสหกรณ์ และวิสาหกิจชุมชนเป็นธุรกิจวิสาหกิจขนาดกลางและขนาดย่อมจึงมีข้อวิตกกังวลในเรื่องของเครื่องมือที่จะนำมาช่วยในกระบวนการผลิตและขาดเทคนิคหรือวิธีการที่นำมาตรวจสอบคุณภาพของวัตถุดิบ ส่งผลต่อคุณภาพผลิตภัณฑ์ไม่ได้ตามมาตรฐานการผลิตและความมั่นใจของผู้บริโภค [1] ปัจจุบัน มีงานวิจัยเสนอเทคนิควิธีการตรวจสอบค่าพารามิเตอร์ต่างๆและคุณสมบัติทางเคมีของไวน์ด้วยตัวตรวจจับ (Sensor) ร่วมกับวิธีอื่นไม่ว่าจะเป็น การใช้เซนเซอร์แสง (Optical sensors) ร่วมกับกล้อง [2] มีวัตถุประสงค์ในการวัดหาปริมาณออกซิเจนที่แทรกซึมเข้าไปในถังไม้โอ๊คโดยใช้เซนเซอร์แสง ร่วมกับกล้องความละเอียดสูงเป็นการศึกษาหาปริมาณความชื้นของไม้โอ๊คเปียกและแห้งที่มีผลต่อการแพร่กระจายของออกซิเจน จากผลการศึกษาพบว่าการอิมตัวของน้ำในไม้เป็นปัจจัยที่ส่งผลให้การแพร่กระจายของออกซิเจนผ่านไม้ลดลงตามช่วงของการบ่มไวน์ด้วยค่า OTR (Oxygen Transmission Rate) จมูกอิเล็กทรอนิกส์ (Electronic nose) และลิ้นอิเล็กทรอนิกส์ (Electronic tongue) เป็นเทคนิควิธีที่สามารถนำมาวิเคราะห์ แยกแยะหรือระบุความแตกต่างของไวน์แต่ละชนิด ในกรณี [3] เสนอจมูกอิเล็กทรอนิกส์ในการแยกกลิ่นหอม (aromas) ของไวน์ด้วย metal oxide gas sensor ทำงานร่วมกับ digital microfluidic (DMF) ทำการแยกแยะความแตกต่างต่อการตอบสนองชั่วคราวของเซ็นเซอร์ของไวน์ทั้ง 7 ชนิด จากการทดลองมีคุณสมบัติสองอย่างของไวน์ที่ชี้ให้เห็นถึงความแตกต่างกันคือจากการตอบสนองชั่วคราวและจากการแมป (mapped) เข้ากับการพล็อตแบบ 2D และในงานวิจัยด้านลิ้นอิเล็กทรอนิกส์ [4-5] งานวิจัยเสนอการคัดแยกไวน์ขาวและไวน์แดงด้วยวิธี machine learning , artificial neural network (ANN) ร่วมกับโมเดลหรือเครื่องมือในการวิเคราะห์ เช่น Principal Component Analysis (PCA) , Soft Independent Modeling Class Analogy (SIMCA) and Partial Least Squares (PLS) regression for the classification of the wine and quantification of the grape ตามลำดับ จากที่ได้กล่าวมา เป็นเทคนิควิธีที่สามารถคัดแยกและระบุชนิดของไวน์ได้จริงแต่มีข้อเสียคือบางเทคนิคต้องเตรียมสารในการตรวจสอบ ต้องทำการตรวจวัดค่าพารามิเตอร์ในห้องปฏิบัติการและต้องใช้ตัวตรวจจับร่วมกับการพยากรณ์ (Prediction)

ทำให้เกิดความยุ่งยาก ซับซ้อนทางเทคนิค อย่างไรก็ตาม ยังมีเทคนิคที่สามารถนำมาใช้ในการตรวจวัดค่าพารามิเตอร์ต่างๆ มีหลักการทำงานโดยการส่องแสงผ่านเข้าไปยังสารละลายหรือวัสดุสาร เกิดการดูดกลืนแสงในช่วงแสงใกล้อินฟราเรดทำให้โมเลกุลของสารเกิดการสั่นที่ความถี่สูง ในการสั่นของพันธะต่างๆเกิดขึ้นในช่วงความยาวคลื่นแตกต่างกันซึ่งเป็นเทคนิคการตรวจสอบแบบไม่ทำลาย (Nondestructive) คือเทคนิคอินฟราเรดย่านใกล้ (Near-infrared: NIR) [6] ข้อดี ใช้งานง่าย มีความรวดเร็วในการวิเคราะห์ (15-90 s) แม่นยำ มีความน่าเชื่อถือ ไม่ต้องใช้สารเคมีหรือใช้น้อย สามารถวัดองค์ประกอบหรือคุณสมบัติของผลผลิตทางการเกษตร อาหาร ได้หลายองค์ประกอบพร้อมกัน [7-8] อย่างในกรณี การวัดหาค่าองค์ประกอบของเมล็ดคาโนลา [9] การหาค่าความชื้นของถั่วลิสง [10] การวัดองค์ประกอบทางเคมีของก๊าซ [11-12] การวิเคราะห์ปริมาณแอมโมเนียในยางพารา [13] การตรวจจับสิ่งปลอมปนในน้ำมัน [14] ตรวจสอบคุณภาพของมะเขือเทศเซอร์หลังการเก็บเกี่ยว [15] นอกจากนี้ที่กล่าวมา, เทคนิค NIR ยังสามารถนำมาใช้ในการวิเคราะห์ค่าพารามิเตอร์ต่างๆในโรงงานวิจัยของ [16] พัฒนาเครื่องมือวัดแบบพกพาในการวัดความสูงอมขององุ่น ค่าความหวาน (Brix) , pH, ความเข้มข้นของสาร anthocyanin ค่าพารามิเตอร์ที่ได้ยืนยันความถูกต้องด้วยแบบจำลอง root mean square error of calibration (RMSEC) , root mean square error of validation (RMSEV) , R^2 (multiple correlation index) จากงานวิจัยนี้สามารถวัดค่าความหวานและค่าความเป็นกรด-ด่าง (Potential of Hydrogen ion : pH) ขององุ่นได้ แต่สารต้านอนุมูลอิสระ (anthocyanin) ต้องอาศัยเทคนิคอื่นที่มีความแม่นยำมาช่วยในการตรวจวัดเพื่อความถูกต้องยิ่งขึ้น งานวิจัย [17] ศึกษาผลกระทบการเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิในสเปกตรัม NIR ของไวน์เพราะอุณหภูมิเป็นปัจจัยที่มีผลต่อการสั่นสะเทือนและความถี่ของพันธะโมเลกุล ทดสอบกับไวน์แดงและไวน์ขาวที่อุณหภูมิที่แตกต่างกัน ผลการทดลองพบว่าความยาวของสเปกตรัมที่ประมาณ 970 นาโนเมตร และที่ 1,400 นาโนเมตรมีผลต่อพันธะ O-H ส่วนการสอบเทียบ PLS มีแนวโน้มจะผกผันเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้น

จากด้านบนที่ได้กล่าวมา การตรวจสอบคุณภาพหรือการหาค่าพารามิเตอร์จึงเป็นกระบวนการที่สำคัญดังนั้นงานวิจัยนี้จึงมีวัตถุประสงค์เพื่อตรวจวัดหาค่าพารามิเตอร์ของน้ำเฝ้าและไวน์หมากเฝ้าโดยใช้เทคนิค NIR ร่วมกับการทำนายหรือแยกคุณลักษณะด้วย PLS

1.2 วัตถุประสงค์

1. เพื่อศึกษาเทคนิคอินฟราเรดย่านใกล้
2. เพื่อทำการตรวจสอบค่าพารามิเตอร์ของน้ำเฝ้าและไวน์หมากเฝ้า

1.3 ขอบเขตงานวิจัย

1.3.1 ขอบเขตแหล่งที่มาของหมากเมา

1.3.1.1 หมากเมา อำเภอกุฉินารายณ์ จังหวัดสกลนคร

1.3.1.2 หมากเมา อำเภอนองวอซอ จังหวัดอุดรธานี

1.3.2 ขอบเขตค่าพารามิเตอร์

1.3.2.1 ค่าพารามิเตอร์ในน้ำเมาที่ทำการตรวจวัด ได้แก่ ค่าความหวาน (Brix) และค่าระดับความเป็นกรดของสาร (Acidity)

1.3.2.2 ค่าพารามิเตอร์ในไวน์หมากเมาที่ทำการตรวจวัด ได้แก่ Brix Acidity สีและเปอร์เซ็นต์ของแอลกอฮอล์

1.4 ประโยชน์ที่จะได้รับ

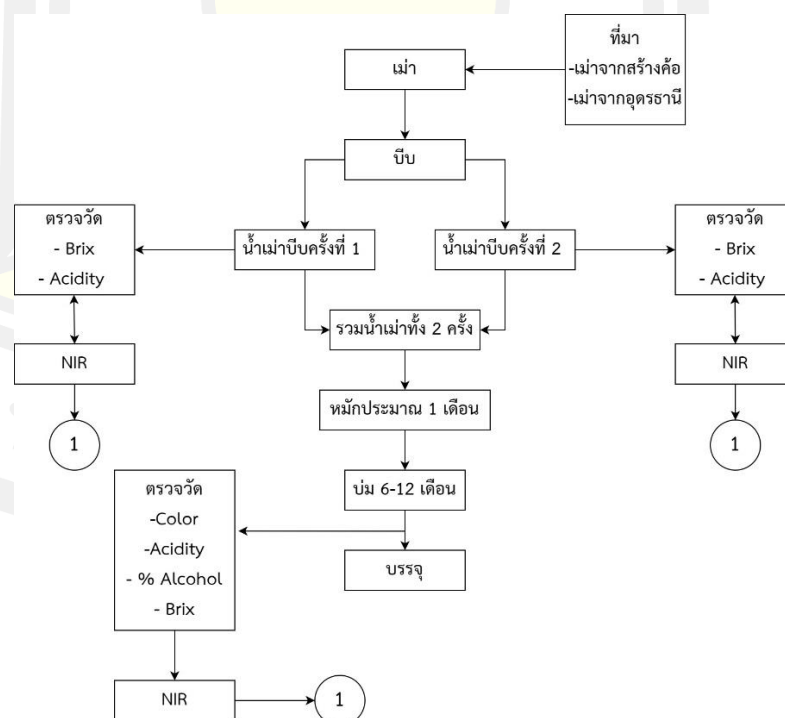
1.4.1 ได้ทราบค่าพารามิเตอร์ของน้ำเมาและไวน์หมากเมาสำหรับใช้ผลิตผลิตภัณฑ์

1.4.2 สามารถแยกเกรดของผลิตภัณฑ์ได้

1.4.3 ผู้บริโภคมีความมั่นใจในข้อมูลประกอบการตัดสินใจ

1.4.4 สามารถนำข้อมูลที่ได้จากการตรวจวัดไปใช้ในการบำรุงรักษาต้นพันธุ์ของเมา

1.4 กรอบแนวคิดในการวิจัย



ภาพที่ 1 กรอบแนวคิดในงานวิจัย

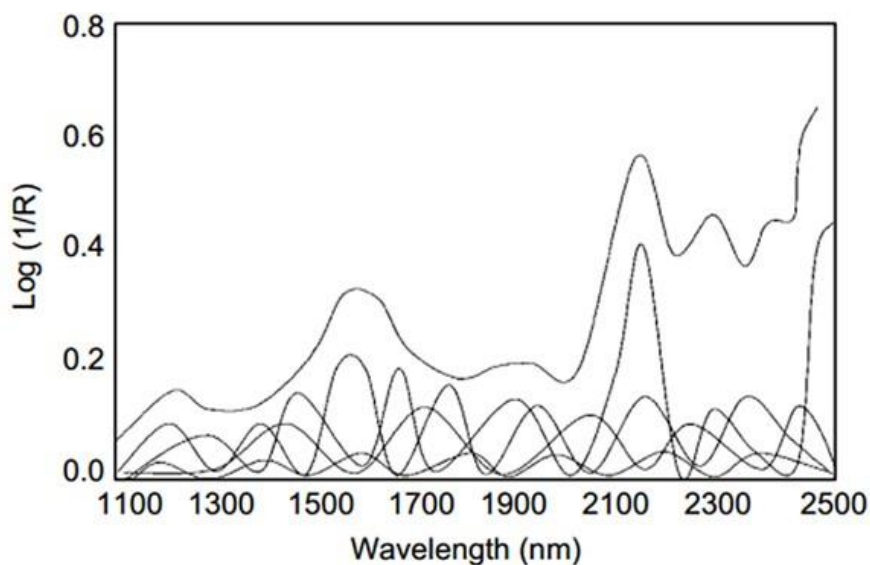
บทที่ 2

ทฤษฎีที่เกี่ยวข้อง

ในบทนี้จะกล่าวถึงทฤษฎีที่เกี่ยวข้องในงานวิจัย การตรวจสอบน้ำเมาและไวน์หมากเมาโดยอินฟราเรดย่านใกล้ (Near-infrared: NIR) ประกอบด้วยเนื้อหาที่เกี่ยวข้อง เครื่องมือ การประมวลผล ข้อมูลล่วงหน้าเทคนิคการถดถอย การวิเคราะห์เชิงคุณภาพ การประยุกต์ใช้งานของ NIR และ เทคนิคพีชชีลोजิก โดยมีรายละเอียดดังนี้

2.1 เทคนิคอินฟราเรดย่านใกล้ (Near-infrared: NIR)

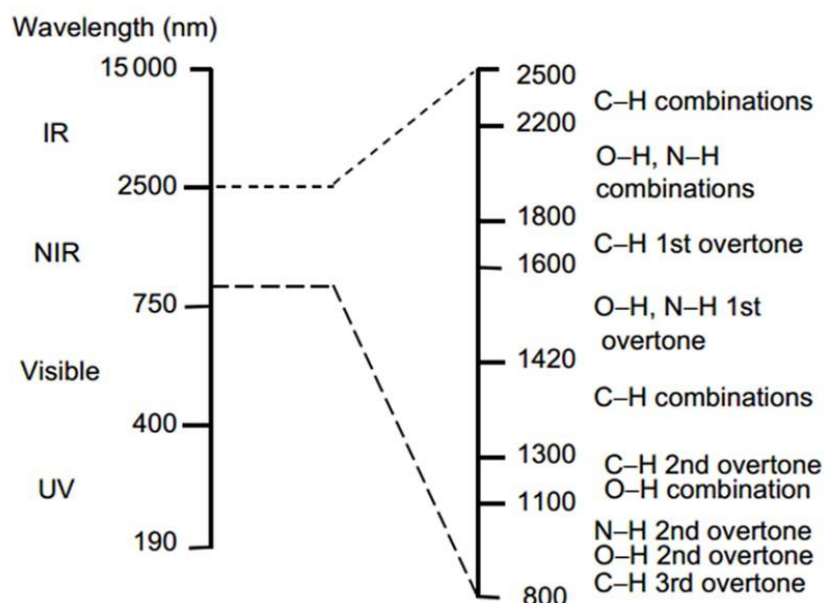
การทำงานของอินฟราเรดย่านใกล้ขึ้นอยู่กับการดูดซับคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าที่อยู่ช่วงความยาวคลื่นระหว่าง 780–2500 nm. อินฟราเรดย่านใกล้ในอุตสาหกรรมอาหาร (NIR spectra of foods) นั้นประกอบด้วยแถบคลื่นความถี่วิทยุที่เกิดจากการสั่นสะเทือนของ C-H, O-H และ N-H ความเข้มของส่วนประกอบในอาหารประเภท น้ำ โปรตีน ไขมันและคาร์โบไฮเดรตสามารถกำหนดและตรวจสอบได้โดยการวัดปริมาณจากการใช้เทคโนโลยีอินฟราเรดย่านใกล้ โดยรูปแบบตัวอย่างของอาหารเหล่านี้จะถูกเปลี่ยนรูปทางเคมีเป็นข้อมูลสเปกตรัมที่แสดงถึงคุณสมบัติทางกายภาพเช่นอนุภาคขนาดเล็กและอนุภาคที่มีลักษณะคล้ายกัน โดยการตรวจสอบโดยใช้เทคโนโลยีอินฟราเรดย่านใกล้ทำให้การตรวจด้วยกล้องจุลทรรศน์แบบดั้งเดิมได้กลายมาเป็นวิธีการเป็นที่ได้รับความนิยมลำดับที่สอง ผลการศึกษาเกี่ยวกับการแพร่กระจายและความซับซ้อนของสเปกตรัมในเชิงฟิสิกส์นั้นจะถูกดำเนินการโดยใช้หลักคณิตศาสตร์ที่เรียกว่าหลักคณิตศาสตร์หลายตัวแปร (Chemometrics) อินฟราเรดย่านใกล้ถูกใช้เป็นฟังก์ชันหรือส่วนประกอบในวิธีการวิเคราะห์หาส่วนประกอบของอาหาร ข้อได้เปรียบที่สำคัญของเทคโนโลยีอินฟราเรดย่านใกล้คือไม่จำเป็นต้องมีการเตรียมตัวอย่างอาหารมาทดสอบ ดังนั้นการวิเคราะห์จะสามารถทำได้อย่างง่าย สะดวกและรวดเร็วมาก (ประมาณ 15 ถึง 90 วินาที) และนอกจากนั้นเทคโนโลยีนี้ยังสามารถที่จะดำเนินการออนไลน์ได้อีกด้วย หนึ่งในจุดแข็งของเทคโนโลยีอินฟราเรดย่านใกล้ คือสามารถวัดและตรวจสอบองค์ประกอบของอาหารหลายๆอย่างพร้อมกันได้ ส่วน ข้อจำกัดที่สำคัญของ อินฟราเรดย่านใกล้ในการวิเคราะห์อาหารคือสิ่งที่ต้องพึ่งพาวิธีการอ้างอิงที่แม่นยำ



ภาพที่ 2 การดูดซับช่วงคลื่นของ NIR [19]

อินฟราเรดย่านใกล้เป็นส่วนหนึ่งของสเปกตรัมแม่เหล็กไฟฟ้าในช่วงความยาวคลื่นระหว่าง 780 nm ถึง 2500 nm ดังภาพประกอบที่ 2.1 ทำหน้าที่เป็นคลื่นที่มีคุณสมบัติของการเคลื่อนที่แบบฮาร์มอนิกอย่างง่าย (Simple harmonic motion) พิจารณาในแง่ของคุณสมบัติ 2 อย่าง คือ 1. ความถี่ของการสั่นสะเทือน และ 2. ความยาวคลื่น พันธะเคมีระหว่างอะตอมในโมเลกุลสั่นสะเทือนในการสั่นสะเทือนครั้งแรกนั้นจะมีลักษณะเป็นการเคลื่อนที่แบบเรียบง่าย การเคลื่อนที่ของแต่ละอะตอมอาจถือว่าการเคลื่อนที่อย่างอิสระโดยคำนึงถึงจุดศูนย์กลางมวลของโมเลกุลแทนที่จะเป็นมวลที่ยึดติดกับสปริง ความถี่การสั่นสะเทือนนั้นเป็นการทำงานของมวลอะตอมสองมวลคือ m_1 และ m_2 ความแข็งแรงของพันธะ k และรวมถึงการมีความสัมพันธ์แบบพาราโบลาระหว่างพลังงานศักย์และระยะระหว่างอะตอม เมื่อความถี่ของรังสีตรงกับโมเลกุลที่สั่นสะเทือนจะมีการถ่ายโอนพลังงานสุทธิจากการแผ่รังสีไปยังโมเลกุลซึ่งสามารถวัดได้เป็นผลต่อของพลังงานเมื่อเทียบกับความยาวคลื่นที่เรียกว่าสเปกตรัม ดังภาพประกอบที่ 2.2

พหุ มณู ที โด ชี เว



ภาพที่ 3 สเปกตรัมทั่วไปของผงซีเรียลและการดูดซับส่วนประกอบบางส่วน [18]

สำหรับการเปลี่ยนแปลงของพลังงานที่ต้องมีการเปลี่ยนระหว่างสองระดับพลังงานนั้น สัมพันธ์และเชื่อมโยงโดยตรงกับความถี่ของพลังงานคูณด้วยค่า h (อ้างอิงจาก Planck's constant) สำหรับการเคลื่อนที่แบบฮาร์มอนิกอย่างง่ายนั้นการดูดซับหรือการปล่อยพลังงานสามารถเกิดขึ้นได้ หากมันสอดคล้องกับการเปลี่ยนแปลงระหว่างคู่ของระดับพลังงานที่อยู่ติดกัน และเนื่องด้วยโมเลกุลเกือบทั้งหมดในตัวอย่างโดยปกติจะมีระดับพลังงานต่ำสุดคือ 0 ซึ่งนั่นก็หมายความว่า การเปลี่ยนแปลงที่เป็นไปได้เพียงอย่างเดียวก็คือจาก 0 ถึง 1 และในกรณีนี้ก็เรียกได้ว่าการเปลี่ยนแปลงพื้นฐาน โมเดลฮาร์มอนิกอย่างง่ายไม่สามารถที่จะอธิบายการสั่นสะเทือนของพันธะเคมีได้ดีพอเพราะ อะตอมที่สูงที่สุดอันหนึ่งได้ผลักดันให้พวกมันเข้าใกล้กันมากขึ้นและในทางตรงข้ามอีกซั้วหนึ่งโมเลกุลก็จะแยกตัวออกจากกัน ในกรณีที่ต้องการจะทำให้การจำลองเหมือนจริงมากยิ่งขึ้นนั้นการเปลี่ยนระดับพลังงานจาก 0 ถึง 2, 0 ถึง 3 ฯลฯ นั้นสามารถเกิดขึ้นได้โดยเราจะเรียกเหตุการณ์นี้ว่าลำดับที่ 1 ที่ 2 และอื่นๆไปเรื่อยๆ ยิ่งค่าเบี่ยงเบนของพันธะฮาร์มอนิกมีค่ามากเท่าไรความเข้มของย่านความถี่สูงและพันธะแอนฮาร์มอนิกก็ยิ่งจะเพิ่มมากขึ้นเท่านั้นโดยส่วนใหญ่แล้วมักจะเกี่ยวข้องกับอะตอมที่มีลักษณะเบาอย่างเช่นไฮโดรเจนและอะตอมที่มีลักษณะที่หนักขึ้นมาหน่อยเช่นคาร์บอนไนโตรเจนออกซิเจน Anharmonic bond คือพันธะที่เกี่ยวข้องกับอะตอมที่มีลักษณะเบามากเช่นไฮโดรเจนและอะตอมที่หนักกว่าเช่นคาร์บอนไนโตรเจนหรือออกซิเจน ในขณะที่ความถี่ในการสั่นสะเทือนของโมเลกุลที่มีลักษณะซับซ้อนนั้นเชื่อมโยงและเกี่ยวพันกับการเคลื่อนไหวของอะตอมทั้งหมด กลุ่มอะตอมที่มีการเคลื่อนไหวโดยแอมพลิจูดขนาดใหญ่จะถูกจัดอยู่ในกลุ่มพวก $-ON$, $-NH_2$ และอื่นๆ โดยลักษณะของความถี่นั้นจะคล้ายคลึงกับความถี่ของโมเลกุลของกลุ่มอื่นๆแนวคิดความถี่ของกลุ่มลักษณะนี้เป็น

แนวคิดพื้นฐานของการวิเคราะห์โดยอินฟราเรด (IR) และมีความสัมพันธ์พื้นฐานกับพลังงานเส้นโค้งที่มีศักยภาพในตัวเองซึ่งเป็นการวิเคราะห์โดยใช้ อินฟราเรดย่านใกล้ เช่นกัน จำนวนกลุ่มของโมเลกุลสามารถคำนวณได้จากจำนวนพิกัดที่ต้องการเพื่ออธิบายโมเมนต์ทั้งหมดของโมเลกุลพิกัด $3n$ อธิบายตำแหน่งโมเลกุลของอะตอม n ซึ่ง 3 แสดงถึงการสั่นสะเทือนการเคลื่อนไหว (2 ในกรณีที่เป็นเส้นตรง) ดังนั้นจึงเป็นไปได้ที่จะมีโหมดการสั่นสะเทือนที่ $3n-6$ ($3n-5$ หากเป็นแบบเส้นตรง) นอกจากนี้การดูดซับสามารถเกิดขึ้นได้หากการสั่นสะเทือนของโมเลกุลมาพร้อมกับการเปลี่ยนแปลงในช่วงเวลาไดโพล เช่น โมเลกุลไฮโดรเจนคลอไรด์ การดูดซับอีกประเภทหนึ่งของอินฟราเรดย่านใกล้จะเกิดขึ้นหากมีการสั่นสะเทือนสองสามครั้งขึ้นไป จะเห็นได้อย่างชัดเจนว่าสเปกตรัมของ อินฟราเรดย่านใกล้ซับซ้อนกว่า สเปกตรัมอินฟราเรดทั่วไป แต่อย่างไรก็ตามการสั่นสะเทือนของโมเลกุลก็ยังส่งผลต่อลักษณะความถี่ต่างๆที่เกิดขึ้น

2.2 เครื่องมือในการตรวจวัด

การใช้อินฟราเรดย่านใกล้ให้ประสบความสำเร็จนั้นขึ้นอยู่กับทางเลือกใช้เครื่องมือที่ถูกต้อง โดยเครื่องมือ นั้น มีสามประเภทคือ

2.2.1 Monochromators Grating monochromators ใช้เพื่อวัดสเปกตรัมที่มองเห็นได้ทั้งหมดซึ่งรวมถึงอินฟราเรดย่านใกล้ อุปกรณ์นี้สามารถใช้ได้ทั้งการส่งผ่านรังสีและการสะท้อนรังสีกลับ จัดได้ว่าเป็นเครื่องมือที่มีความหลากหลายมากที่สุด โดยทั่วไปแล้วมักใช้โมโนโครมเพื่อการวิจัยหรือเมื่อต้องการใช้แอปพลิเคชันที่หลากหลาย เครื่องตรวจจับมีทั้งหมดสามแบบด้วยกันคือ 1. เครื่องตรวจจับซิลิคอนครอบคลุมช่วง 400-1100 nm 2. อินเดียมแกลเลียมอาร์เซไนด์ครอบคลุมช่วง 800-1700 nm และ 3. ตะกั่วในช่วง 1100-2500 nm ซึ่งเครื่องมือบางอย่างนั้นอาจมีทั้งเครื่องตรวจจับซิลิคอนและตะกั่วในตัวเดียวกัน (ให้ช่วงความยาวคลื่น 400-2500 nm) เครื่องมืออีกหนึ่งประเภทที่ถูกใช้กับอินฟราเรดย่านใกล้ คือ Acousto-Optically Tunable Filter : AOTF ข้อดีของเครื่องมือนี้คือความยาวคลื่นมีความเสถียรและมีการประกอบชิ้นส่วนที่แน่นอน ไม่มีชิ้นส่วนไหนที่สามารถเคลื่อนหลุดออกมาได้

2.2.2 Diode Array Spectrometers ฟังก์ชันของอุปกรณ์นี้เป็นทั้งแหล่งกำเนิดแสงและระบบตรวจสอบความยาวคลื่นอยู่ช่วง 400-1700 nm อุปกรณ์ชิ้นนี้สามารถเก็บข้อมูลอย่างรวดเร็ว (สเปกตรัมต่อหนึ่งวินาที) ซึ่งคุณสมบัติเหล่านี้มีประโยชน์อย่างยิ่งเมื่อต้องการปริมาณงานจำนวนมากหรือต้องการความเร็วเป็นพิเศษ

2.2.3 เครื่องมือตัวกรองหรือ Filter Instruments เป็นเครื่องมือที่หาง่ายและมีราคาถูกมักประกอบด้วยแผ่นกรองประมาณหกถึงยี่สิบแผ่น ใช้ในการตรวจสอบการดูดซับโปรตีน ความชื้น และ

น้ำมันในผลิตภัณฑ์ทางการเกษตร เครื่องมือตัวกรองได้รับการออกแบบสำหรับการวิเคราะห์สารเพียงบางประเภทเท่านั้นซึ่งสามารถใช้ได้ทั้งในห้องปฏิบัติการและทางออนไลน์

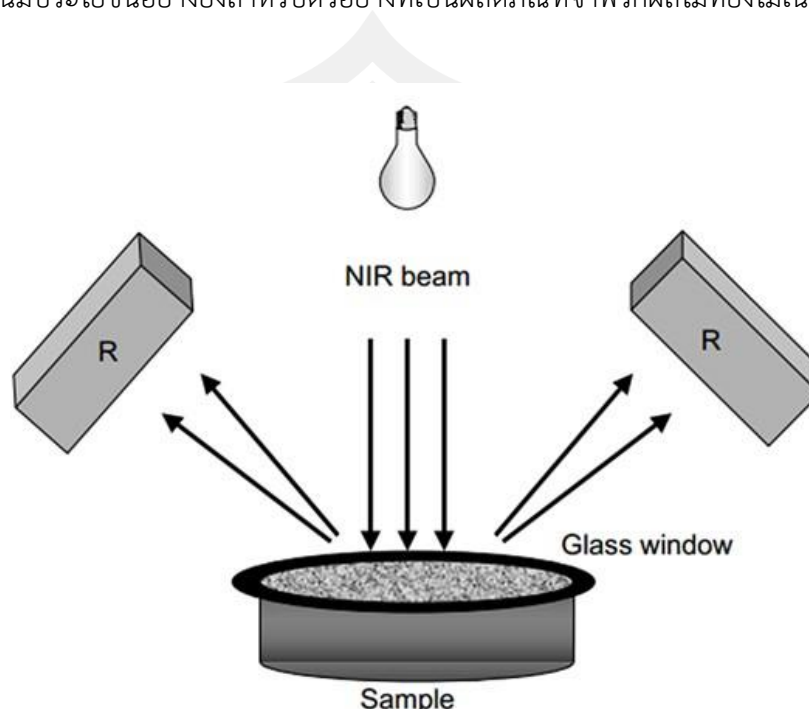
2.3 ตัวอย่างในการนำไปใช้งาน

การประยุกต์ใช้อินฟราเรดย่านใกล้ในการวิเคราะห์อาหารสามารถเป็นไปได้อย่างหลากหลายเนื่องจากมีเทคนิคการนำเสนอตัวอย่างที่แตกต่างกันออกไป การนำเสนอตัวอย่างนั้นมีเทคนิคสำหรับตัวทดลองประเภทของเหลว สารละลาย ผงหรือของแข็ง ทุกชนิด

2.3.1 การส่งผ่านรังสี (Diffuse Transmittance) รังสีที่ส่งผ่านออกไปนั้นอาจจะถูกโต้ตอบโดยถูกการดูดซับสะท้อนหรือส่งผ่านไปอีก ในการทดลองสเปกโทรสโกปีนั้นได้มีการปล่อยรังสีออกไปและรังสีจะถูกส่งผ่าน ดังนั้นกฎของเบียร์ (Beer's law) จึงได้กำหนดความเข้มข้นของสารละลายต่างๆออกมา สำหรับตัวอย่างของเหลวที่มีลักษณะใสเช่น เบียร์ แป้งร้อนละลาย ไวน์หรือน้ำมันพืช ก็ได้ถูกกำหนดไว้ว่าต้องสามารถให้รังสีทะลุผ่านออกไปได้ ตัวอย่างเช่น Halsey [20] ได้ละลายสารละลายมาตรฐานของเอทานอลในน้ำเพื่อทดสอบปริมาณแอลกอฮอล์ในเบียร์ ข้อสังเกตคือความเข้มข้นของอินฟราเรดย่านใกล้ที่ค่อนข้างต่ำทำให้มันไม่เจือจางในตัวทำละลาย

2.3.2 การกระจายแสง (Diffuse Reflectance) ของพื้นผิวที่มีลักษณะเรียบเช่นแก้ว การแผ่รังสีส่วนใหญ่จะถูกสะท้อนกลับจากพื้นผิวและไม่มีการดูดซับใดๆเกิดขึ้น ในบริเวณ 1100–2500 nm ปริมาณการกระจายมีเส้นทางที่ยาวมากสามารถส่งผ่านได้ถึง 1 ซม. เรียกว่าการกระจายแบบกระเจิงเนื่องจากการแผ่รังสีที่เกิดขึ้นส่วนใหญ่จะถูกสะท้อนกลับ หากเราทดลองด้วยพื้นผิวที่ด้าน (โดยไม่มีการเจาะเข้าไปในตัวอย่าง) ผลลัพธ์ที่ได้จะมีความแตกต่างออกไป เช่น การสะท้อนแบบไม่มีการดูดซับเกิดขึ้น อย่างไรก็ตามหากรังสีบางส่วนแทรกซึมเข้าไปในพื้นผิว แต่ละอนุภาคจะสามารถดูดกลืนและส่งผ่านรังสีไปได้อีกครั้ง รังสี (R) นั้นมีสัมพันธ์กับความเข้มข้น (C) ในลักษณะที่คล้ายคลึงกับกฎของเบียร์ เช่น $\log I/R = kc$ เป็นปัจจัยที่รวมทั้งการดูดซับและเส้นทางการเดินทางของรังสี การทดสอบการกระจายของรังสีอินฟราเรดย่านใกล้ถูกแสดงอยู่ใน ภาพประกอบที่ 2.3 การวิเคราะห์การกระจายของตัวทดลองที่มีลักษณะเป็นผงคัดผงในเซลล์ตัวอย่างขนาด 1 เซนติเมตรด้วยอุปกรณ์ที่เรียกว่าควอทซ์ จากนั้นเซลล์ตัวอย่างจะถูกนำไปวางไว้ในเครื่องมือที่มีการส่องสว่างด้วยรังสีอินฟราเรดย่านใกล้ เครื่องมือตรวจจับถูกตั้งค่าไว้ที่ 45 องศา และยิงลำแสงตกกระทบหรือเครื่องตรวจจับเพียงจุดเดียว รูปทรงกลม ในการทดลองการแพร่กระจายสามารถปรับให้ใช้กับของเหลวได้โดยวางแผ่นกระเบื้องเซรามิกไว้ใต้ตัวอย่างการถ่ายโอนรังสีจะถูกส่งผ่านตัวอย่างกลับมาจากเซรามิก จากนั้นส่งกลับผ่านตัวอย่างก่อนที่จะถึงเครื่องตรวจจับทรานสเฟกชัน (Transflectance) คือการผสมคำระหว่างคำว่า การส่งผ่าน (transmittance) และการสะท้อนซึ่งทรานสเฟกชันนั้นถูกใช้ในการทดลอง

เกี่ยวข้องกับการส่องสว่างและการตรวจจับจุดหรือแยกด้านข้างบนพื้นผิวของวัตถุ โดยปกติแล้วการทดลองชนิดนี้มีประโยชน์อย่างยิ่งสำหรับตัวอย่างที่เป็นผลิตภัณฑ์จำพวกผลไม้ที่ยังไม่เน่าเสีย



ภาพที่ 4 การกระจายแสงจากตัวอย่างที่เป็นแป้ง [18]

2.3.3 เครื่องเก็บตัวอย่างแบบออนไลน์ (On-line Samplers) โดยหลักการแล้วอุปกรณ์นี้ต้องมีขนาดกะทัดรัดและทนทาน ค่าใช้จ่ายต้องค่อนข้างต่ำแต่มีความรวดเร็วและมีความสามารถในการวัดการวิเคราะห์หรือหาคุณสมบัติของสิ่งที่ต้องการบนตัวอย่างได้อย่างมีประสิทธิภาพ อีกทั้งผลลัพธ์ที่ได้จะต้องมีความถูกต้องและมีเสถียรภาพอย่างเช่นเครื่องมืออินฟราเรดย่านใกล้ ทั่วไป การวิเคราะห์ โดยอินฟราเรดย่านใกล้ (NIR) ออนไลน์แบ่งออกเป็นสามประเภท

2.3.3.1 รีโมทเซ็นเซอร์ (Remote Sensor) อุปกรณ์อินฟราเรดย่านใกล้ชนิดนี้เป็นอุปกรณ์ออนไลน์ตัวแรกที่คิดค้นขึ้นโดย Edgar และ Hindle ของ บริษัท Infrared Engineering Co ในสหราชอาณาจักร รีโมทเซ็นเซอร์จะถูกฝังอุปกรณ์ที่เรียกว่าเกิล เข้าไป ข้อดีของเครื่องมือคือมีราคาถูกและติดตั้งง่ายแต่ก็มีข้อจำกัดคือมีความไวต่อสัญญาณรบกวน การเปลี่ยนแปลงของแสง การเปลี่ยนแปลงฝุ่นที่สะสมบนพื้นผิว และการเปลี่ยนแปลงความชื้นในบรรยากาศ ดังนั้นอุปกรณ์ชนิดนี้จึงได้รับการออกแบบมาเป็นพิเศษสำหรับการใช้งานออนไลน์ เมื่อเร็ว ๆ นี้ในประเทศออสเตรเลียได้มีการประยุกต์ใช้ NIR spectroscopy เพื่อตรวจสอบการพัฒนาแป้งขนมปังได้มีการพัฒนาขึ้นใหม่โดย Wesley et al [21] สิ่งประดิษฐ์ชนิดนี้มีความเร็วในการสแกนสูงมาก (หนึ่งสเปกตรัมต่อวินาที)

2.3.3.2 By-pass Sampler ถูกใช้เพื่อควบคุมองค์ประกอบของตัวกวน (เช่นข้าวสาลีผสม) ในระหว่างกระบวนการผสมนั้นจำเป็นมากที่จะต้องทำการปริมาณวัดก่อนเพื่อไม่ให้กระบวนการผสมข้าวสาลีนั้นนานเกินไป โดยทั่วไปแล้วเครื่องมืออินฟราเรดย่านใกล้แบบโฮลเกรนจะยิ่งรังสีทะลุผ่านเซลล์ตั้งนั้นจึงค่อนข้างง่ายที่จะปรับให้เข้ากับการใช้งานออนไลน์ Infratec 1225 Whole Grain Analyzer รุ่นออนไลน์นั้นมีวางจำหน่ายทั่วไป เครื่องเก็บตัวอย่างของอินฟราเรดย่านใกล้แบบออนไลน์ถูกพัฒนาขึ้นเป็นครั้งแรกเพื่อวัดปริมาณโปรตีนของสสารชนิดผงและได้ชื่อว่าเป็นหนึ่งในอุปกรณ์ที่ได้รับความนิยมมากที่สุด กลูเทนอบแห้ง (Dried gluten) คือสิ่งที่สามารถพบได้ทั่วไปในแถบยุโรป ผู้คนนิยมทานกลูเทนอบแห้งเพราะมีโปรตีนสูง เครื่องมืออินฟราเรดย่านใกล้แบบออนไลน์สามารถที่จะตรวจหาโปรตีนจากอาหารชนิดนี้ได้อย่างรวดเร็วและแม่นยำ [22]

2.3.3.3 เครื่องมือวัดไฟเบอร์ออปติก เครื่องมือวัดไฟเบอร์ออปติกมีคุณสมบัติที่หลากหลายที่สุดในการวิเคราะห์อาหารออนไลน์ รวมถึงผลิตภัณฑ์นมเนื้อผลไม้เบียร์และขนมขบเคี้ยว จุดมุ่งหมายของการใช้เครื่องมือวัดไฟเบอร์ออปติกอินฟราเรดย่านใกล้ (NIR) คือใช้เพื่อตรวจสอบการเปลี่ยนแปลงโครงสร้างของสสารจำพวกแป้ง [23]

2.4 การพัฒนาการสอบเทียบ

ในการวิเคราะห์อินฟราเรดย่านใกล้เปรียบเทียบค่ามีฟังก์ชันพื้นฐานอยู่ 3 อย่างในเชิงเคมีวิเคราะห์หนึ่งก็คือ 1. การแยก 2. การระบุ 3. การหาปริมาณ ดังนั้นการหาสมการเปรียบเทียบค่าสำหรับแต่ละแอปพลิเคชันจึงเป็นขั้นตอนที่สำคัญที่สุดในการวิเคราะห์ที่ให้ความเชื่อถือและแม่นยำ อย่างไรก็ตามในเนื้อหาต่อไปนี้จะแสดงให้เห็นถึงภาพรวมของเทคนิคที่ใช้รวมถึงรายละเอียดเพิ่มเติม [24]

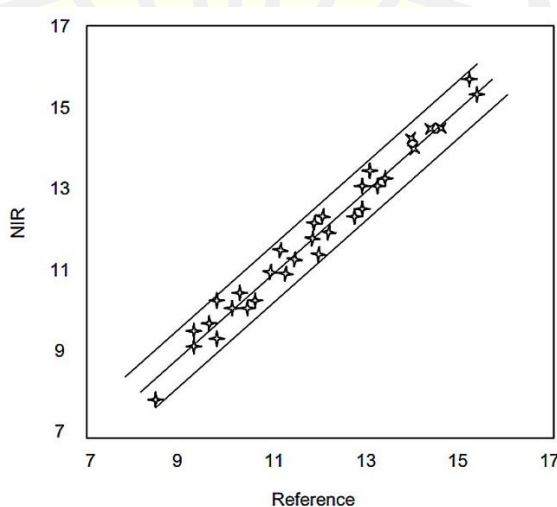
2.4.1 การประมวลผลข้อมูลล่วงหน้า (Data Preprocessing)

ปัจจัยเชิงปริมาณที่สำคัญที่สุดในสเปกตรัมการสะท้อนของอินฟราเรดย่านใกล้คือขนาดอนุภาคของตัวอย่าง $\log(1/R)$ จะเพิ่มขึ้นเมื่ออนุภาคมีขนาดที่เพิ่มขึ้น ตัวอย่างเช่น ดินข้าวสาลีชนิดเดียวกันที่มีอนุภาคที่แตกต่างกันจะส่งผลให้สเปกตรัมที่ได้นั้นมีความแตกต่างกันไปด้วย [25-26] การแก้ไขขนาดของอนุภาคนั้นสามารถทำได้ได้โดยการทดลองเชิงปฏิบัติมากกว่าเชิงทฤษฎี แต่มีนักฟิสิกส์จำนวนมากที่เลือกที่จะใช้ทฤษฎีที่เรียกว่าทฤษฎีอนุพันธ์ อนุพันธ์อันดับหนึ่ง $\frac{d(\log 1/R)}{d\lambda}$ คือความชันของสเปกตรัมที่ความยาวคลื่นเท่ากับ λ และคำนวณเป็นความแตกต่างระหว่าง $\log 1/R$ ที่ความยาวคลื่นทั้งสองจุดอยู่ติดกันหรือมากกว่านั้น ซึ่งข้อมูลจะถูกปรับให้เป็นไปตามค่าเฉลี่ยตามพื้นที่ของสเปกตรัมที่ถูกกำหนดโดยขนาดของเซ็กเมนต์ ส่วนความแตกต่างระหว่างช่วงความยาวนั้นเรียกว่า

ช่องว่าง ส่วนอนุพันธ์อันดับสอง $\frac{d^2(\log I/R)}{d\lambda^2}$ คือความแตกต่างระหว่างอนุพันธ์อันดับที่สองที่อยู่ติดกัน คณิตศาสตร์เชิงอนุพันธ์ได้อธิบายโดยใช้หลักสัญกรณ์ (notation) (คำสั่งอนุพันธ์, ช่องว่าง, เซ็กเมนต์, การทำให้เป็นไปตามหลักค่าเฉลี่ยครั้งที่สอง) เช่น (2, 8, 8, 1) แสดงให้เห็นถึงอนุพันธ์อันดับสองที่มีระยะห่างของช่องว่าง 16 nm และเซ็กเมนต์ 16 nm อนุพันธ์เหล่านี้มีคุณสมบัติที่เป็นข้อได้เปรียบอยู่ 2 ข้อคือ 1. ความละเอียดของวงที่ทับซ้อนกัน 2. การสลายตัวของพื้นหลัง ผลกระทบของขนาดอนุภาคนั้นสามารถที่จะแก้ไขได้โดยการแก้ไขการกระจายแบบทวีคูณ [27] การแก้ไขการกระจายแบบหลายขั้นตอนทำได้โดยการคำนวณสเปกตรัมเฉลี่ยของชุดตัวอย่างและหมุนแต่ละสเปกตรัมตัวอย่างเพื่อให้เส้นการถดถอยที่วาดผ่านนั้นสอดคล้องกับเส้นการถดถอยที่ลากผ่านสเปกตรัมเฉลี่ย [28]

2.4.2 โครงสร้างประชากรตัวอย่าง (Sample Population Structuring)

การวิเคราะห์อินฟราเรดย่านใกล้ในตัวอย่างอาหารและเกษตรกรรมขึ้นอยู่กับ การเทียบค่าและวิธีการอ้างอิงโดยใช้กลุ่มตัวอย่างซึ่งเป็นตัวแทนของความแปรปรวนทั้งหมดในประชากร เกณฑ์หนึ่งชุดจะได้รับข้อมูลการวิเคราะห์ในฐานะข้อมูลขนาดใหญ่ แต่อย่างไรก็ตามวิธีการนี้เป็นตัวเลือกที่มีค่าใช้จ่ายค่อนข้างสูง แนวคิดของการสร้างโครงสร้างประชากรได้ถูกพัฒนาขึ้นโดย Shenk และ Westerhaus [29] ระบุว่าแนวคิดหลักคือการรวบรวมข้อมูลของสเปกตรัมอินฟราเรดย่านใกล้ หรือเรียกอีกอย่างว่าการสร้างไลบรารีสเปกตรัม โดยกลุ่มตัวอย่างจำนวนมากใช้เทคนิคการวิเคราะห์จากห้องปฏิบัติการเพื่อจำแนกและกำหนดขอบเขตของการจัดเก็บของสเปกตรัมตัวอย่าง ไลบรารีสเปกตรัมสามารถใช้งานได้หลายวิธีเช่นใช้เพื่อกำหนดชุดการเทียบค่าที่เหมาะสม เพื่อตรวจสอบว่าตัวอย่างทดสอบตรงกับค่าการเทียบค่า เพื่อทำการเทียบค่าน้ำหนักเพื่อให้ได้ค่าที่เหมาะสมที่สุด ความแม่นยำในการวัด



ภาพที่ 5 การกระจายของข้อมูล NIR กับข้อมูลอ้างอิง

2.4.3 เทคนิคการถดถอย (Regression Techniques) วิธีการเทียบค่าปกติของเครื่องมืออินฟราเรดย่านใกล้คือการที่ใช้เทคนิคที่เรียกว่าการถดถอยเชิงเส้นโดยอาศัยการอ้างอิงของข้อมูลในสเปกตรัม ความยุ่งยากของกระบวนการนี้มีหลักๆอยู่ 2 ประการคือ ประการแรกคือ สเปกตรัมของอินฟราเรดย่านใกล้นั้นมีข้อมูลอยู่ในปริมาณมาก ประการที่สองคือ เนื่องจากผลกระทบของการกระจายข้อมูลอินฟราเรดย่านใกล้แบบดิบมีความสัมพันธ์กันสูงและทำให้ไม่สามารถใช้เทคนิคการถดถอยได้อย่างมีประสิทธิภาพ [30] อย่างไรก็ตามสิ่งนี้เป็นไปไม่ได้เสมอไป ตัวอย่างเช่นคุณสมบัติการทำงานมักจะไม่มีรูปแบบสเปกตรัมที่กำหนดไว้ วิธีการที่นิยมคือการลดจำนวนข้อมูลโดยการวิเคราะห์องค์ประกอบหลักแล้วดำเนินการถดถอยเชิงเส้นในองค์ประกอบหลักหากเลือกองค์ประกอบหลักโดยคำนึงถึงเพื่อลดสัมพันธ์สหสัมพันธ์จึงกลายเป็นบางส่วนกำลังสองน้อยที่สุดบางส่วน (Partial Least Square : PLS) ผลลัพธ์ที่ได้เป็นสมการสอบเทียบ สมการมีความเกี่ยวข้องกับสถิติที่กำหนดความใกล้ชิดของความพอดีของจริงและค่าที่คาดคะเนกับเส้นกำลังสองน้อยที่สุดแสดงตามภาพประกอบที่ 2.4 เพื่อตรวจหาข้อมูลที่ผิดปกติ เป็นการกระจายจุดควมมีจุดข้อมูลที่กระจายอย่างเท่าเทียมกัน

2.4.4 การวิเคราะห์เชิงคุณภาพ (Qualitative Analysis)

การวิเคราะห์เชิงคุณภาพมักถูกใช้ในการทดสอบความถูกต้องซึ่งจุดมุ่งหมายของกระบวนการนี้คือการจัดประเภท โดยกระบวนการวิเคราะห์เชิงคุณภาพนี้ได้รับความนิยมมากกว่าการวิเคราะห์เชิงปริมาณการวิเคราะห์เชิงคุณภาพได้มีการนำหลักคณิตศาสตร์มาประยุกต์ใช้ซึ่งแนวคิดนี้ได้ถูกพัฒนาขึ้นโดยมาร์ค (Mark) [31] แบบจำลองการจำแนกประเภทที่ซับซ้อนมากขึ้นนั้นสามารถทำได้โดยใช้โครงข่ายประสาทเทียม (Artificial Neural Networks: ANNs) ANN ประกอบด้วยโหนดอินพุตซึ่งได้รับข้อมูลสเปกตรัมและกระจายไปยังเลเยอร์ที่ซ่อนอยู่ของโหนดที่มีข้อมูล ข้อมูลจะถูกแปลงก่อนที่จะถูกแจกจ่ายยังชุดของโหนดเอาต์พุต สำหรับการกระจายของข้อมูลผ่านเลเยอร์ที่ซ่อนอยู่ซึ่งอาจได้รับการพิจารณาว่าเป็นฟังก์ชันที่ไม่เชิงเส้น ปัญหาการจำแนกประเภทอาหารได้รับการเผยแพร่โดย Hervas et al. [32]

2.5 การประยุกต์ใช้งานในอาหาร

2.5.1 ธัญพืชและผลิตภัณฑ์จากธัญพืช

อินฟราเรดย่านใกล้ถูกนำมาใช้สำหรับการทดสอบคุณภาพของวัสดุผสมจากกระบวนการปรับปรุงพันธุ์ข้าวสาลีตั้งแต่ปลายปี 1970 เนื่องจากอินฟราเรดย่านใกล้มีความรวดเร็วและต้นทุนต่ำ ด้วยเหตุนี้อินฟราเรดย่านใกล้จึงถูกใช้แพร่หลายในทั่วโลกเพื่อตรวจสอบปริมาณโปรตีนในข้าวสาลีทั้งนี้ทั้งนั้นเพื่อให้เกษตรกรพันธุ์สามารถคัดกรองข้าวสาลีได้อย่างเหมาะสม นอกจากนี้

ฟารเดย่านไกลล์ยังถูกใช้เพื่อการทดสอบทางเคมีอย่างแพร่หลาย โดยเฉพาะอย่างยิ่งการวัดความแข็งและความชื้น การประยุกต์ใช้อินฟารเดย่านไกลล์ในการวิเคราะห์กระบวนการปรับปรุงพันธุ์ข้าวสาลีนั้นนับได้ว่าเป็นการคาดเดาถึงคุณภาพของผลผลิต เช่น การวิเคราะห์แป้งที่เสียหาย การดูดซับน้ำ เวลาที่ใช้ในการพัฒนาแป้งและอื่นๆ แม้ว่าโปรแกรมการปรับปรุงพันธุ์บางโปรแกรมใช้อินฟารเดย่านไกลล์เพื่อตรวจสอบสิ่งที่กล่าวมาข้างต้น แต่ทั้งนี้ทั้งนั้นก็ยังไม่ได้รับการยอมรับอย่างกว้างขวางซึ่งเหตุผลก็คือการเปลี่ยนแปลงของฤดูกาลซึ่งทำให้จำเป็นต้องวัดค่าซ้ำบ่อยครั้ง ล่าสุดได้มีการพัฒนาเครื่องมือวัดคือไดโอดอาเรย์สเปกโตรมิเตอร์รุ่น DA-7000 เครื่องมือชนิดนี้สามารถทำงานได้อย่างรวดเร็วเนื่องจากไม่ต้องใช้เซลล์ตัวอย่างและจะได้รับข้อมูลสเปกตรัมอย่างรวดเร็วมาก ซึ่งโดยทั่วไปแล้วสามารถที่จะรับผลการวิเคราะห์ได้ใน 15 วินาที อินฟารเดย่านไกลล์ถูกใช้ในออสเตรเลียเพื่อกะปริมาณความต้องการปุ๋ยที่เหมาะสมของพืชและธัญพืชโดยการวิเคราะห์ไนโตรเจนและคาร์โบไฮเดรตทั้งหมดในตัวอย่างเนื้อเยื่อพืช การทดสอบเนื้อเยื่อเพื่อตรวจสอบสถานะไนโตรเจนนั้นพัฒนาขึ้นสำหรับข้าวเป็นครั้งแรก การทดสอบนี้ได้ขยายไปสู่การรวมไนโตรเจนจากต้นข้าวสาลีและฟรุกโตสซึ่งระบบการทดสอบเนื้อเยื่อนั้นจะขึ้นอยู่กับตัวอย่างพืชที่เกษตรกรถ่ายในระยะการเจริญเติบโตเฉพาะ (Zadok scale) ซึ่งถูกทำให้แห้งและวิเคราะห์โดยอินฟารเดย่านไกลล์ จากนั้นจะป้อนผลลัพธ์ไนโตรเจนและฟรุกโตสลงในฐานข้อมูลซึ่งใช้เพื่อกำหนดคำแนะนำการใส่ปุ๋ยที่เหมาะสม [33] การใช้เทคโนโลยีอินฟารเดย่านไกลล์นั้นมีจุดประสงค์เพื่อช่วยให้ผู้จัดการฟาร์มเข้าใจถึงระดับความอุดมสมบูรณ์ของพืชและสามารถแยกหรือผสมโปรตีนธัญพืชก่อนทำการส่งมอบ แนวคิดนี้ได้รับความนิยมในหลายประเทศ ราคาของข้าวสาลีจะถูกกำหนดโดยปริมาณโปรตีนซึ่ง สิ่งเหล่านี้ได้กระตุ้นให้เกษตรกรบางรายผสมโปรตีนลงในข้าวสาลีในฟาร์มเพื่อเพิ่มราคาข้าวให้สูงขึ้น การให้เทคโนโลยีอินฟารเดย่านไกลล์ในฟาร์มนั้นนับได้ว่าเป็นกลยุทธ์นี้ประสบความสำเร็จอย่างมาก จึงส่งผลให้เกษตรกรบางคนตระหนักว่าเทคโนโลยีอินฟารเดย่านไกลล์มีศักยภาพในการวิเคราะห์ตัวอย่างจำนวนมากในช่วงระยะเวลาเพียงแค่นับๆ ซึ่งนี่ก็ช่วยให้พวกเขาสามารถประเมินพืชชนิดต่างๆ เพื่อการพัฒนาที่เหมาะสมเพื่อผลกำไรรวมถึงความอุดมสมบูรณ์ในทุ่งนาอีกด้วยอินฟารเดย่านไกลล์ถูกนำมาใช้ในประเทศออสเตรเลีย แคนาดา ยุโรปและสหรัฐอเมริกาเพื่อตรวจสอบการส่งมอบข้าวสาลีและข้าวบาร์เลย์ของเกษตรกรผู้ปลูกเป็นเวลาสองทศวรรษแล้วและมีการวิจัยขั้นรับรอง เช่น Williams [34] แคนาดาเป็นประเทศแรกที่ผลิตข้าวและใช้ อินฟารเดย่านไกลล์ สำหรับการทดสอบโปรตีนและเกิดการยอมรับว่าเทคโนโลยีอินฟารเดย่านไกลล์ช่วยให้ประหยัดค่าใช้จ่ายและยังปลอดภัยต่อสิ่งแวดล้อมอีกด้วย

ตารางที่ 1 การประยุกต์ใช้ NIR สำหรับวิเคราะห์ผลิตภัณฑ์ธัญพืช [18]

Produce	Moisture	Protein	Fat	Starch	Sugars	Fiber
Bread	✓	✓	✓	✓	✓	
Biscuits			✓		✓	
Cake mixes			✓		✓	
Breakfast Cereals			✓			✓
Pasta	✓	✓	✓			
Snack foods				✓		✓

ในปี 1980 การทดสอบโปรตีนโดยกระบวนการอินฟราเรดย่านใกล้ได้กลายเป็นวิธีการตรวจสอบของ US Federal Grain Inspection Service (FGIS) และตั้งแต่นั้นเป็นต้นมาก็มีการใช้งานเป็นประจำอย่างต่อเนื่องในสหรัฐอเมริกาในการคัดแยกข้าวสาลี ตามพระราชบัญญัติปรับปรุงคุณภาพเมล็ดพืช 1986 ได้มีการแนะนำการวัดความแข็งของเมล็ดข้าวซึ่งเป็นส่วนหนึ่งของกระบวนการคัดเกรดข้าวสาลี การพิจารณาตามสเปกตรัมอินฟราเรดย่านใกล้ของเมล็ดจึงได้ถือกำเนิดขึ้น [35] Delwiche และคณะ [36] ในประเทศ สหรัฐอเมริกา ได้ทำการศึกษาการจำแนกระดับข้าวสาลีอย่างเป็นระบบสำหรับตลาดสหรัฐโดยใช้อินฟราเรดย่านใกล้ในการวัดโปรตีนและความแข็งของเมล็ดเดี่ยว และถัดมาแนวคิดนี้ได้รับการพัฒนาโดย FGIS ให้เป็นกระบวนการที่ถูกยอมรับอย่างแพร่หลาย ในยุโรปในช่วงต้นทศวรรษ 1980 ผู้ผลิตได้พบความจำเป็นในการกระตุ้นการเพาะปลูกข้าวสาลีที่มีโปรตีนสูงกว่าข้าวสาลีปกติอินฟราเรดย่านใกล้) ถูกนำมาใช้เพื่อจุดประสงค์นี้ในหลายประเทศในยุโรปรวมถึงสหราชอาณาจักรไอร์แลนด์ เยอรมนีและสวีเดน เมื่อก้าวถึงข้าวเปลือกการเก็บเกี่ยวข้าวเปลือกนั้นต้องทำให้ถูกต้องและเหมาะสมเพื่อให้ได้ผลผลิตและคุณภาพสูง ซึ่งก็สามารถทำได้โดยการประเมินโดยความชื้นของข้าว ในกรณีนี้เครื่องมืออินฟราเรดย่านใกล้ไม่เหมาะสำหรับใช้ในการทดสอบข้าวเนื่องจากข้าวจะมีความชื้นสูง แต่หลังจากที่มีการพัฒนาการพัฒนาเครื่องมือวัดค่าที่เรียกว่า NIT ได้ประสบความสำเร็จผู้ปลูกข้าวเกือบทั้งหมดออสเตรเลียก็นำเทคโนโลยีนี้มาใช้สำหรับการทดสอบความชื้นในข้าวเปลือก [37] การใช้เทคโนโลยีอินฟราเรดย่านใกล้เพื่อตรวจสอบปริมาณโปรตีนและความชื้นของข้าวสาลีในโรงงานนั้นมักมีจุดประสงค์ในเรื่องของการกำหนดราคา โดยเทคโนโลยีอินฟราเรดย่านใกล้ันได้มีความสำคัญในการแก้ไขข้อผิดพลาดต่างๆภายในโรงงาน ในปัจจุบันนี้เทคโนโลยีอินฟราเรดย่านใกล้ได้ถูกนำมาใช้เพื่อช่วยวัดปริมาณโปรตีนและความชื้นของข้าวสาลีและแบ่งอย่างแพร่หลายทั่วโลก ซึ่งก็ได้ผลตอบแทนที่ดีมากไม่ว่าจะเป็นในเรื่องของการตกลง

ราคา การวัดความแข็งของสินค้าก่อนถึงมือผู้บริโภคและอื่นๆ ซึ่งก็เป็นที่ยอมรับว่าประสิทธิภาพของเทคโนโลยีอินฟราเรดย่านใกล้เป็นมากกว่าการทดลองใหม่ที่ถูกนำมาใช้แทนการทดลองแบบดั้งเดิม แต่มันสามารถช่วยให้โรงสีและโรงงานหรือแลปต่างๆพัฒนาสินค้าได้แบบเรียลไทม์ และนอกจากข้อดีข้างต้นที่กล่าวมาแล้วนั้นเทคโนโลยีนี้ก็ยังสามารถที่จะสร้างความน่าเชื่อถือให้กับกลุ่มโรงงานต่างๆได้อีกด้วย โรงงานเบเกอรี่ขนาดใหญ่จำนวนมากใช้อินฟราเรดย่านใกล้ในการตรวจสอบคุณภาพของส่วนผสมซึ่งมันอาจเป็นไปได้ว่าในขนมปังและขนมเบเกอรี่มีส่วนผสมอื่น ๆ อยู่ เช่นชูโครส ซ็อคโกแลต ฯลฯ แต่โดยปกติแล้วจะทำการทดสอบโปรตีนและความชื้นมากกว่า เทคโนโลยีอินฟราเรดย่านใกล้สามารถใช้ในกระบวนการการตรวจหาค่าประกอบต่างๆในข้าวสาลี แป้ง และขนมปัง เช่นการตรวจหาปริมาณมวลรวมของน้ำตาลชูโครส โปรตีน หรือแม้แต่ไขมัน กล่าวถึงการอบขนมปังแล้วนั้น ในระหว่างกระบวนการอบความชื้นของแป้งจะลดลงจากจาก 18% เป็น 2% และสำหรับบิสกิตก็จะลดลงจาก 60% เป็น 40% อย่างไรก็ตามนี้ไม่ใช่เรื่องง่ายเลยที่จะตรวจสอบหาค่าได้อย่างแม่นยำเพราะการกระจายของน้ำในผลิตภัณฑ์นั้นไม่สม่ำเสมอ สำหรับอาหารจำพวกบิสกิตใช้เครื่องวัดที่เรียกว่า MM55 ซึ่งเป็นเครื่องมือทางวิศวกรรมอินฟราเรด ในตรวจสอบความชื้นของบิสกิตที่อยู่บนสายพานในระหว่างกระบวนการลำเลียงออกจากเตา ซึ่งการทดลองนี้ก็แสดงให้เห็นว่าบิสกิตชิ้นใดที่มีปริมาณความชื้นสูงและไม่เหมาะสมที่จะถูกจัดลงหีบห่อ เทคโนโลยีอินฟราเรดย่านใกล้ก็ยังคงถูกใช้ในการวิเคราะห์หาค่าความชื้นโปรตีน ไขมัน แป้ง น้ำตาลในอาหารที่ไม่ขัดสีเช่นซีเรียลพาสต้าและขนมขบเคี้ยว (ตารางที่ 1)

2.5.2 เครื่องต้ม

ข้าวบาร์เลย์นั้นได้มีการเจริญเติบโตภายใต้สภาวะที่ถูกควบคุมมันจะเกิดปฏิกิริยาทางเคมีที่มีลักษณะซับซ้อนจนกลายเป็นมอลต์ และเมื่อมอลต์ถูกผสมด้วยน้ำมันก็จะกลายเป็นของเหลวที่เรียกว่าสาโท (wort) และของเหลวชนิดนี้เองที่ถูกนำมาหมักเพื่อผลิตเบียร์ การวัดค่าน้ำนั้นได้ถูกกำหนดขึ้นมาเพื่อวัดค่าไนโตรเจน ไลซีน ปีกลูเคน และ มอลต์ที่ถูกสกัดโดยผ่านน้ำร้อน และเนื่องจากข้าวบาร์เลย์เองนั้นเป็นธัญพืชชนิดหนึ่งเทคโนโลยีอินฟราเรดย่านใกล้จึงได้ถูกนำมาใช้ในการตรวจสอบคุณภาพของเมล็ดข้าว นอกจากนั้นแล้วเทคโนโลยีอินฟราเรดย่านใกล้ก็ยัง ใช้ในการตรวจสอบคุณภาพผลไม้และตรวจสอบปริมาณแอลกอฮอล์ในไวน์และเครื่องดื่มต่างๆว่าควรมีจำหน่ายในท้องตลาดหรือไม่อีกด้วย ในส่วนของเครื่องดื่มอื่น ๆ นั้นอินฟราเรดย่านใกล้ถูกใช้ในการตรวจสอบ ปริมาณความชื้นและปริมาณน้ำตาลของของชากาแฟและน้ำผลไม้

ตารางที่ 2 NIR ในการทดสอบคุณภาพของข้าวบาร์เลย์

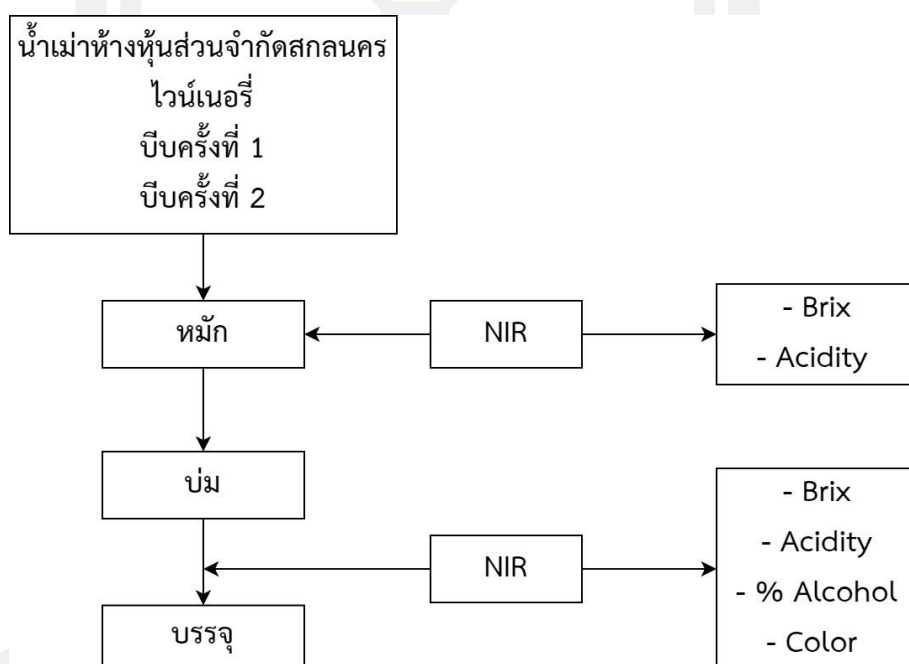
Constituent	Barley	Malt	Wort
Total nitrogen	✓	✓	
Moisture	✓	✓	
Lysine	✓		
β -Glucan	✓		
Extract	✓	✓	✓
Soluble protein			✓
Free α -amino N			✓



บทที่ 3

วิธีดำเนินการวิจัย

การวิจัยในครั้งนี้ทำการศึกษาเทคนิควิธีอินฟราเรดย่านใกล้ (NIR) เพื่อทำการตรวจสอบค่าพารามิเตอร์ของน้ำเมาและไวน์หมากเมา กลุ่มตัวอย่างของหมากเมาจาก 2 แหล่งคือ หมากเมาจากอำเภอภูพาน จังหวัดสกลนครและของอำเภอหนองวัวซอ จังหวัดอุดรธานี ทำการตรวจวัดหาค่าบ่งชี้คุณภาพ เช่น ค่าความหวาน (Brix) ค่า Acidity ค่าเปอร์เซ็นต์แอลกอฮอล์ และค่าสี ของทั้งหั่นส่วนจำกัดสกลนครไวน์เนอรี นำตัวอย่างของน้ำเมาและไวน์หมากเมาไปตรวจ โดยมีขั้นตอนการดำเนินงานวิจัยดังนี้



ภาพที่ 6 ขั้นตอนการดำเนินงานวิจัย

3.1 ผลการดำเนินงาน

จากขั้นตอนการดำเนินงานวิจัย ผู้วิจัยนำตัวอย่างไปตรวจในห้องปฏิบัติการเพื่อนำข้อมูลมาเป็นฐานของข้อมูลก่อนที่จะไปตรวจด้วยเทคนิค NIR ข้อมูลที่ได้ดังนี้

3.1.1 การวิเคราะห์ค่าคุณภาพของน้ำเมา และไวน์เมาด้วยเทคนิค Near Infrared Spectroscopy

3.1.1.1 การเตรียมตัวอย่าง

ในการศึกษาวิจัยนี้ใช้ตัวอย่างน้ำเฝ้า และไวน์เฝ้า อย่างละ 30 ตัวอย่าง โดยมีช่วงอายุการเก็บรักษาที่แตกต่างกัน กล่าวคือ น้ำเฝ้าจะมีอายุการเก็บรักษาตั้งแต่ปี 2559 -2562 โดยประกอบไปด้วยตัวอย่างที่ผ่านกระบวนการบีบครั้งที่ 1 และครั้งที่ 2 และไวน์เฝ้าจะมีอายุการเก็บรักษาตั้งแต่ปี 2561-2562 โดยประกอบไปด้วยไวน์ที่ผลิตจากน้ำเฝ้าจากกระบวนการบีบครั้งที่ 1 ครั้งที่ 2 และได้จากการผสมจากการบีบทั้ง 2 ครั้ง ทั้งนี้เพื่อให้มีช่วงความแปรปรวนของค่าความหวาน ปริมาณแอลกอฮอล์ และค่าความเป็นกรดที่ครอบคลุมตัวอย่างที่คาดว่าจะเจอในอนาคต



ภาพที่ 7 น้ำเฝ้าที่ใช้ในการทดลอง โดยมีระยะเวลาการเก็บรักษาตั้งแต่ 2559-2562



ภาพที่ 8 ตัวอย่างไวน์เฝ้าที่ใช้ในการทดลอง โดยมีระยะเวลาการเก็บรักษาตั้งแต่ปี 2561-2562

ตัวอย่างทั้งหมดจะส่งมาจากจังหวัดสกลนคร โดยแบ่งออกเป็น 2 ชุด โดยชุดที่ 1 จะถูกส่งไปวิเคราะห์ค่าคุณภาพประกอบที่ห้องปฏิบัติการด้วยวิธีมาตรฐาน และอีก 1 ชุดจะถูกส่งไปวัดค่าการดูดกลืน (สเปกตรัม) ที่ห้องปฏิบัติการ Near Infrared ภาควิชาวิศวกรรมกรรมการอาหาร คณะวิศวกรรมศาสตร์ กำแพงแสน มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ และทำการวัดสเปกตรัมในวันที่ 17 กุมภาพันธ์ 2563 โดยอุณหภูมิห้องขณะที่ทำการวัดถูกควบคุมไว้ที่ 25 °C ความชื้นสัมพัทธ์ 30%

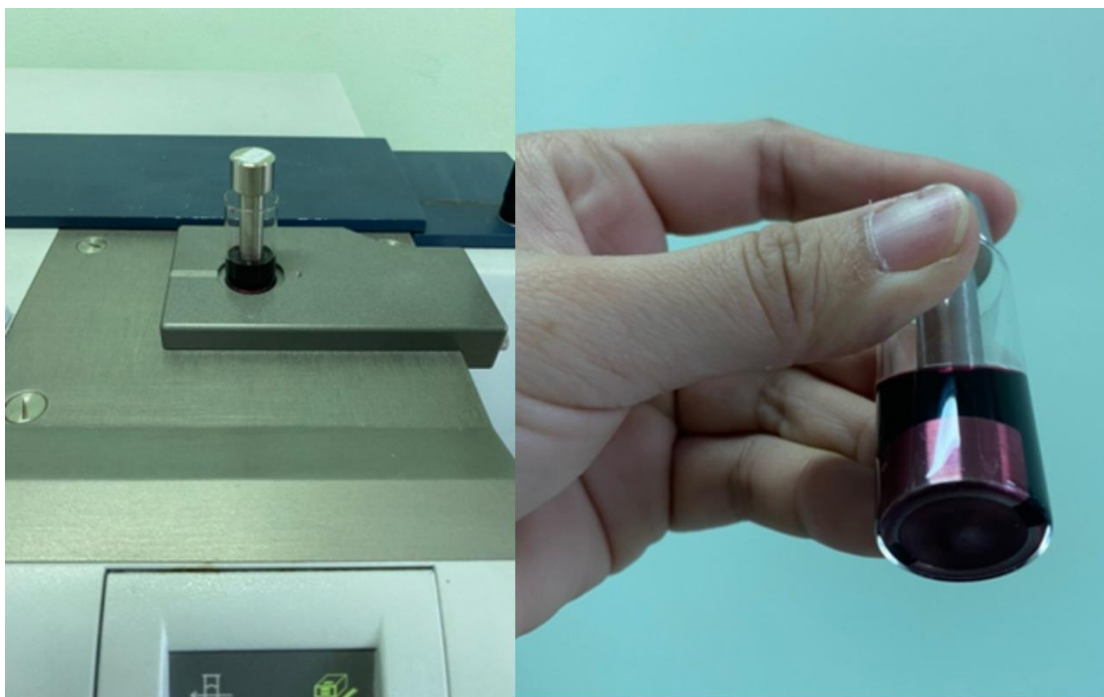
3.1.2 การวัดค่าการดูดกลืน (สเปกตรัม) ด้วยเครื่อง NIR spectrometer

นำตัวอย่างน้ำเฝ้า และไวน์เฝ้ามาวัดค่าการดูดกลืน (สเปกตรัม) ด้วยเครื่อง Near Infrared (NIR) spectrometer ซึ่งในงานวิจัยนี้จะใช้ 2 เครื่อง คือ

1. เครื่อง FT-NIR spectrometer (รุ่น MPA) ซึ่งเป็นเครื่องในเชิงพาณิชย์ (ภาพประกอบที่ 3.4) วัดค่าการดูดกลืนในช่วง 800 -2500 นาโนเมตร (เลขคลื่น 12500 – 4000 cm^{-1}) ใช้การวัดในระบบ transfection โดยตัวอย่างจะถูกเทลงในอุปรกรณ์ใส่ตัวอย่าง (vial) และปิดทับด้วย reflector เพื่อควบคุมระดับความสูงของน้ำเฝ้าและไวน์เฝ้าให้มีระยะวัดแสง (physical path length) 0.1 มิลลิเมตร (ดังภาพประกอบที่ 3.5) แสงจากแหล่งกำเนิดแสงภายในตัวเครื่องจะส่องเข้าสู่ตัวอย่าง ตัวอย่างจะดูดกลืนแสงเอาไว้ แสงส่วนที่เหลือจะส่องเข้าสู่ reflector ซึ่งทำหน้าที่ในการสะท้อนแสงกลับเข้าสู่เครื่อง และแสดงออกมาในรูปของค่าการดูดกลืนที่ความยาวคลื่นต่างๆ



ภาพที่ 9 เครื่อง FT-NIR spectrometer (รุ่น MPA)



ภาพที่ 10 การวัดค่าการดูดกลืนของน้ำเฝ้า และไวน์เฝ้าในระบบ trans flection

เครื่องวิเคราะห์คุณภาพภายในของผลิตภัณฑ์เกษตรที่ถูกพัฒนาขึ้นจากห้องปฏิบัติการ Near Infrared (NIR) ภาควิชาวิศวกรรมอาหาร คณะวิศวกรรมศาสตร์ กำแพงแสน มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ โดยมุ่งเน้นให้ได้เครื่องวิเคราะห์ที่มีราคาย่อมเยา จึงได้นำมาใช้ในการทดลองนี้ด้วย โดยเครื่องวิเคราะห์ฯ สามารถวัดค่าการดูดกลืนในช่วงความยาวคลื่น 900-1700 นาโนเมตร น้ำเฝ้า และไวน์เฝ้าจะถูกวัดในระบบ trans flection โดยการเทลงตัวอย่างลงใน petri dish ขนาดเส้นผ่าศูนย์กลาง 34 มิลลิเมตร และปิดทับด้วย reflector ที่มีระยะวัดแสง 0.1 มิลลิเมตร เช่นเดียวกับ reflector ที่ใช้สำหรับเครื่อง FT-NIR spectrometer (ภาพประกอบที่ 3.5)



ภาพที่ 11 การวัดค่าการดูดกลืนของน้ำเฝ้า และไวน้เฝ้าด้วยเครื่องวิเคราะห์ฯ ที่ถูกพัฒนาขึ้นจากห้องปฏิบัติการ Near Infrared

3.2 ผลการวิเคราะห์ข้อมูลด้วยเทคนิค NIR

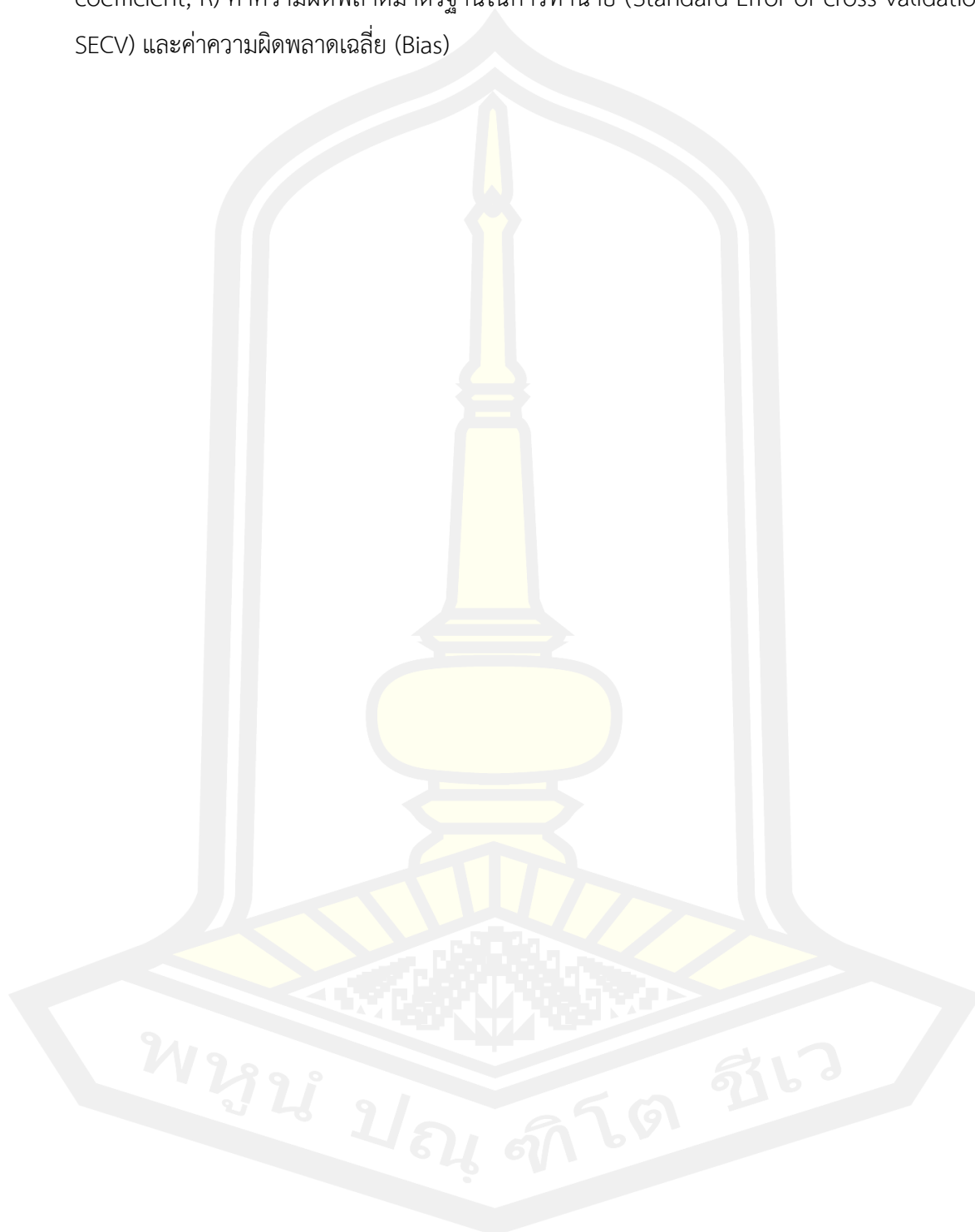
3.2.1 การวิเคราะห์ค่าคุณภาพของน้ำเฝ้า และไวน้หมากเฝ้าด้วยวิธีมาตรฐาน

ค่าคุณภาพของน้ำเฝ้า และไวน้เฝ้าจะถูกส่งไปวิเคราะห์ที่คณะทรัพยากรธรรมชาติ มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีราชมงคลอีสาน วิทยาเขตสกลนคร โดยมีช่วงเวลาในการวิเคราะห์ที่ใกล้เคียงกับวันที่ทำการวัดค่าการดูดกลืนของตัวอย่าง

3.2.2 การสร้างสมการเทียบมาตรฐาน

สมการเทียบมาตรฐานในการวิเคราะห์ค่าคุณภาพของน้ำเฝ้า และไวน้เฝ้าจะถูกสร้างขึ้นจากความสัมพันธ์ระหว่างค่าการดูดกลืนย่าน NIR และค่าคุณภาพประกอบที่วิเคราะห์ได้ด้วยวิธีมาตรฐานด้วยวิธี Partial Least Squares Regression (PLS) โดยอาศัยโปรแกรม OPUS 6.5 ซึ่งเป็น Software package ของเครื่อง FT-NIR spectrometer และโปรแกรม The unscramble (version 9.7) สำหรับเครื่องวิเคราะห์คุณภาพภายในของผลิตภัณฑ์การเกษตร และเนื่องจากตัวอย่างมีปริมาณน้อย ตัวอย่างทั้งหมดจึงถูกนำไปสร้างสมการเทียบมาตรฐานโดยวิธี cross validation กล่าวคือ ตัวอย่างนั้นๆ จะถูกนำไปสร้างสมการเทียบมาตรฐาน และจำลองเป็นตัวอย่างที่ใช้ในการทดสอบความแม่นยำของสมการที่สร้างขึ้นด้วย

ผลของการสร้างสมการแสดงในรูปค่าทางสถิติได้แก่ ค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (correlation coefficient, R) ค่าความผิดพลาดมาตรฐานในการทำนาย (Standard Error of cross validation, SECV) และค่าความผิดพลาดเฉลี่ย (Bias)

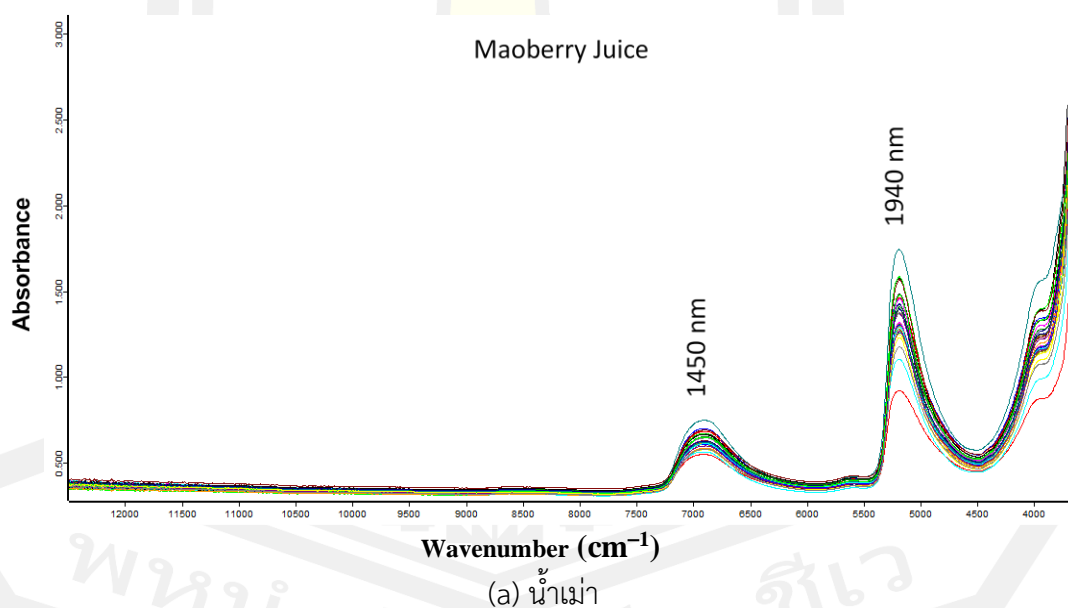


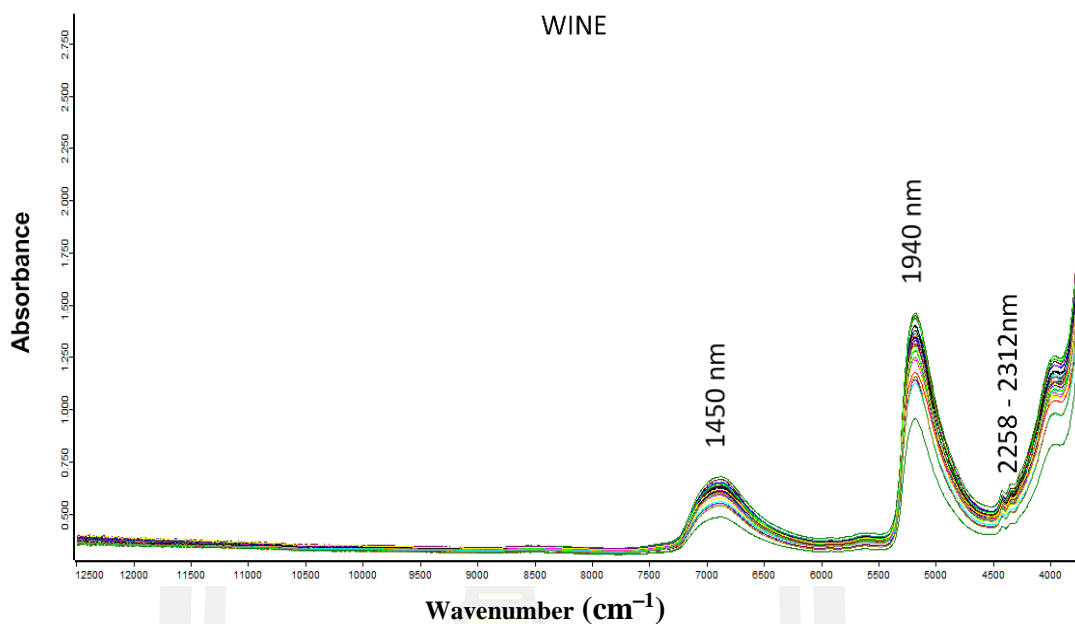
บทที่ 4

ผลการวิจัยและการอภิปราย

4.1 ค่าการดูดกลืน (สเปกตรัม) ของน้ำเม่า และไวน์หมากเม่า

ภาพประกอบที่ 4.1 แสดงค่าสเปกตรัมดั้งเดิมของ (a) น้ำเม่า และ (b) ผลิตภัณฑ์ไวน์จากหมากเม่าที่แสดงผลด้วยเครื่อง FT-NIR spectrometer ในช่วงความยาวคลื่นประมาณ 800-2500 นาโนเมตร โดยทั้งสองตัวอย่างมีลักษณะในการดูดกลืนที่เด่นชัดในย่านอินฟราเรด ที่ความยาวคลื่น 1450 นาโนเมตร ถึง 1940 นาโนเมตร ซึ่งแสดงเป็นตำแหน่งของการดูดกลืนของน้ำ ซึ่งเป็นองค์ประกอบหลักในผลิตภัณฑ์จากหมากเม่า ซึ่งจะถูกดูดซับด้วย NIR spectrometer นั้นเอง [15, 20] แต่อย่างไรก็ตาม สำหรับไวน์หมากเม่า ยังปรากฏตำแหน่งการดูดกลืนอีกตำแหน่งหนึ่งที่ 2258 – 2312 นาโนเมตร ($4427-4324\text{ cm}^{-1}$) ในขณะที่สเปกตรัมของน้ำเม่าไม่มี ทั้งนี้เนื่องจาก ตำแหน่งดังกล่าวเป็นตำแหน่งการดูดกลืนของเอทานอล [20] ที่เกิดจากกระบวนการผลิต





(b) ไวน์หมากเม่า

ภาพที่ 12 แสดงค่าสเปกตรัมดั้งเดิมของ (a) น้ำเม่า และ (b) ผลไม้หมากเม่าที่แสดงผลด้วยเครื่อง FT-NIR spectrometer

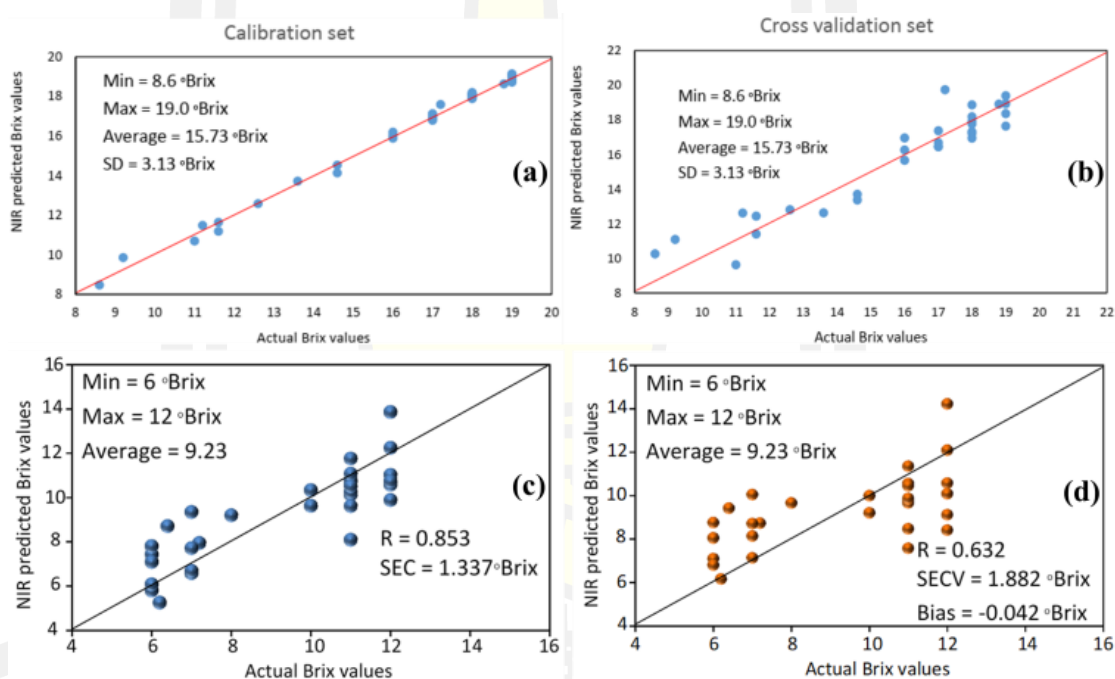
4.2 การพัฒนาสมการการสอบเทียบ

น้ำเม่าและไวน์หมากเม่าจำนวน 30 ตัวอย่าง ได้ถูกนำมาวิเคราะห์ด้วยเครื่อง FT-NIR spectrometer เพื่อวิเคราะห์คุณภาพทางเคมี ซึ่งแสดงในตารางที่ 1 และ 2 ตามลำดับ โดยการวิเคราะห์ข้อมูลในตารางที่ 1 และ 2 จะแสดงพารามิเตอร์ทางสถิติของตัวอย่างในชุดการสอบเทียบ และชุดตรวจสอบตามวิธีการตรวจสอบข้ามแบบเต็ม (cross-validation method) โดยจะสังเกตเห็นว่าเกิดเอฟเฟกต์การกระเจิงของแสงในเส้นสเปกตรัมเดิมซึ่งเป็นการเปลี่ยนแปลงพื้นฐาน นอกจากนี้การเตรียมตัวอย่างยังสามารถลดการเกิดเอฟเฟกต์ที่ไม่พึงประสงค์ต่อเส้นสเปกตรัมก่อนการพัฒนาสมการการสอบเทียบ ซึ่งจะสังเกตในตารางที่ 2 ค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (R_c) ของการสอบเทียบ calibration และ ค่ากลุ่มการตรวจสอบข้าม cross-validation (R_{cv}) ที่จะได้รับผลกระทบจากสมการสอบเทียบ และสำหรับค่า L^* , a^* , และ b^* พบความแตกต่างมากกว่า 0.5 ซึ่งจากผลลัพธ์นี้แสดงให้เห็นว่าสมการการสอบเทียบไม่เหมาะสำหรับการกำหนดค่า L^* , a^* และ b^* เนื่องจากพารามิเตอร์เหล่านี้แสดงผลต่อคุณสมบัติทางกายภาพของตัวอย่างซึ่งการตอบสนองที่เหมาะสมในกรณีนี้ควรเป็นแสงที่ที่ตามองเห็นได้ซึ่งจะอยู่ในช่วงความยาวคลื่น 400 - 700 นาโนเมตร แต่ในขณะที่ เครื่อง FT-NIR ตรวจพบความยาวคลื่นในช่วง 800 - 2500 นาโนเมตร ดังนั้นข้อมูลเฉพาะจะไม่ถูกตรวจสอบคุณภาพสีของไวน์

4.3 คุณภาพทางเคมีของน้ำเฝ้าและไวน์หมากเฝ้า

4.3.1 การวิเคราะห์ค่าความหวานหรือ ค่า Brix value

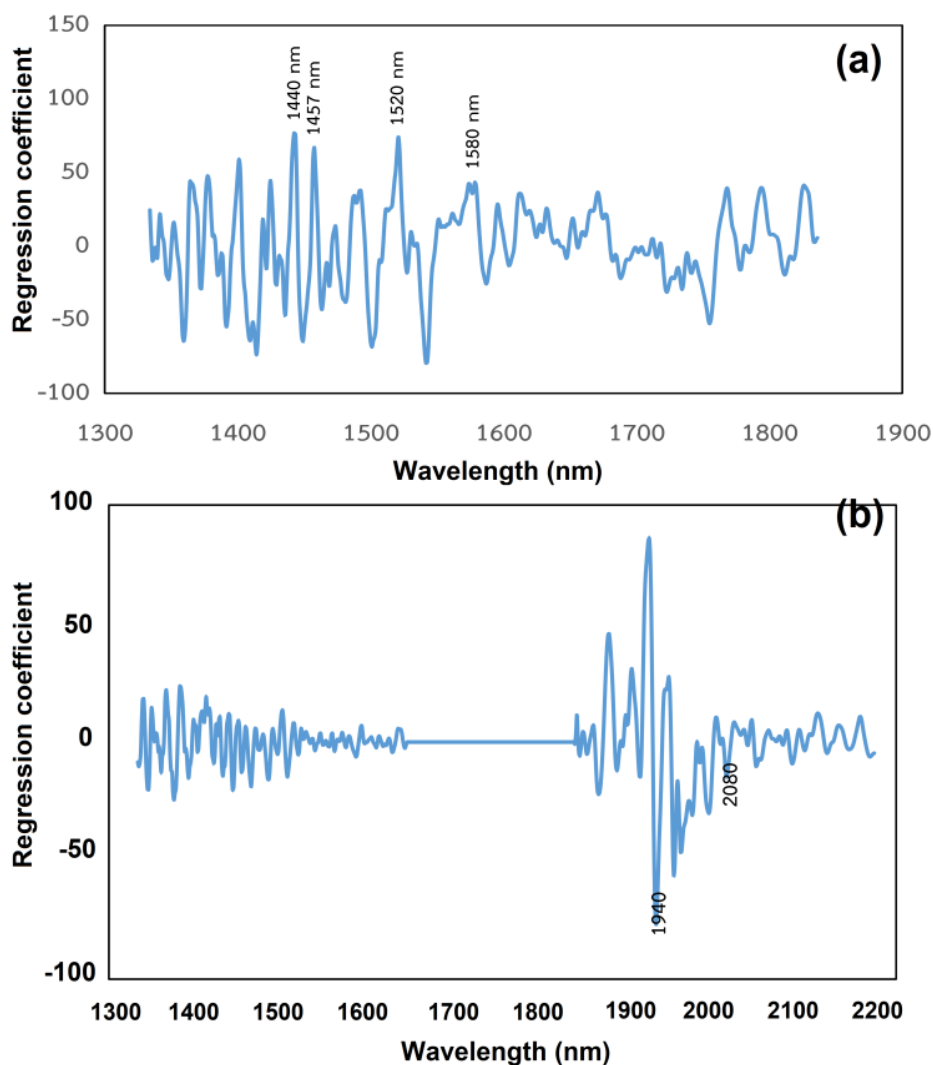
ค่า Brix หรือค่าความหวานของน้ำเฝ้าหรือไวน์หมากเฝ้า จะได้รับการตรวจสอบความหวานโดยใช้วิธี Partial Least Squares Regression (PLS) หรือวิธีการถดถอยกำลังสองน้อยที่สุด โดยอาศัยโปรแกรม OPUS 6.5 ซึ่งสมการที่ดีที่สุดสำหรับการวิเคราะห์ค่าความหวานที่อยู่ในช่วงความยาวคลื่นประมาณ 1332 ถึง 2175 นาโนเมตรนั้น สำหรับน้ำเฝ้าจะได้รับการปรับค่าเส้นสเปกตรัมให้เหมาะสมด้วยวิธีการรวมอนุพันธ์อันดับ 1 และ vector normalization (SNV) และในส่วนของไวน์หมากเฝ้าจะทำการปรับค่าเส้นสเปกตรัมด้วยค่าอนุพันธ์อันดับ 2 โดยกราฟแผนภูมิจุดแบบกระจาย (scatter plot) จะแสดงผลการสร้างสมการเทียบมาตรฐานเบื้องต้นในการวิเคราะห์ค่าความหวานในน้ำเฝ้าและไวน์หมากเฝ้า



ภาพที่ 13 แสดงกราฟแผนภูมิจุดแบบกระจาย (scatter plot) ของการคำนวณค่าความหวานใน calibration set และ the validation set สำหรับ (a)-(b) น้ำเฝ้า และ (c)-(d) ไวน์หมากเฝ้า ตามลำดับ

จากกราฟแผนภูมิจุดแบบกระจายของ calibration และ validation set พบว่าเส้นกราฟทั้งสองมีลักษณะกระจายไปทั่วเส้นทแยงมุม โดยการวิเคราะห์ข้อมูลโดยใช้เทคนิค NIR และค่าที่วิเคราะห์โดยวิธีมาตรฐานต้องสัมพันธ์กับค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (R) ข้อผิดพลาดมาตรฐานของการตรวจสอบข้าม (SECV) และค่าความผิดพลาดเฉลี่ย (Bias) ซึ่งการวิเคราะห์ค่าความหวานของน้ำ

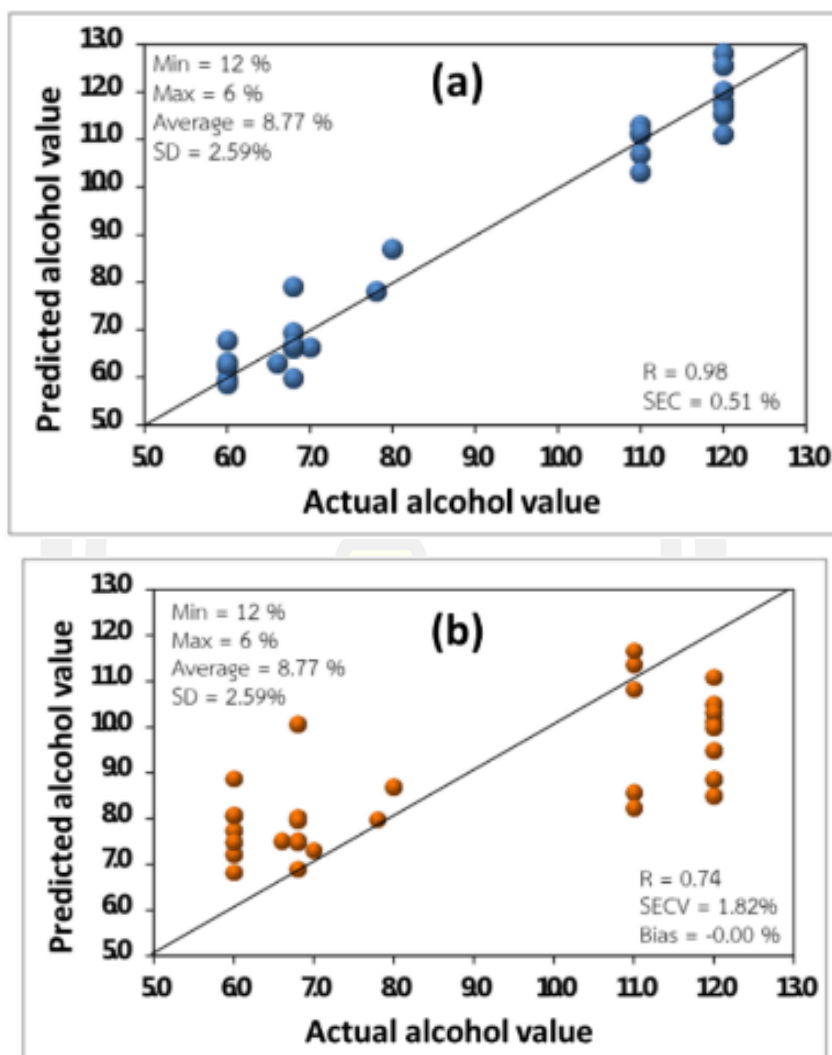
เม่า จะดำเนินการโดยเทคนิค NIR ซึ่งจะได้ค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ ความคลาดเคลื่อนมาตรฐานของ cross-validation และค่าความผิดพลาดเฉลี่ย bias ประมาณ 0.90, 0.98 °Brix และ 0.007 °Brix ตามลำดับ ภายในกลุ่มสมการของ validation set อย่างไรก็ตาม ค่าจากการทดสอบความแตกต่าง ค่าเฉลี่ยของกลุ่มตัวอย่าง 2 กลุ่มไม่อิสระ (Paired Sample T-test) พบว่าค่าความหวานที่วิเคราะห์ด้วย NIR มีค่าสัมพันธ์กับวิธีมาตรฐานอย่างมีนัยสำคัญถึง 95% สำหรับผลิตภัณฑ์ไวน์หมากเม่า ค่าความหวานซึ่งถูกวิเคราะห์ข้อมูลโดยใช้เทคนิค NIR และวิเคราะห์โดยวิธีมาตรฐานจะสัมพันธ์กับค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (R) ที่ประมาณ 0.853 และ 0.632 และค่ามาตรฐานความผิดพลาดที่ประมาณ 1.337 และ 1.882 °Brix โดยค่าสัมประสิทธิ์ของสมการมาตรฐานสำหรับการวิเคราะห์ปริมาณค่าความหวานในน้ำเม่าและไวน์หมากเม่าจะแสดงในภาพประกอบที่ 3 ซึ่งในภาพประกอบที่ 3(a) แสดงค่าสัมประสิทธิ์ของสมการสอบเทียบค่าความหวานในน้ำเม่า จากผลการวัดวิเคราะห์ พบว่าพารามิเตอร์ที่มีอิทธิพลต่อสมการมาตรฐานสำหรับการวิเคราะห์ค่าความหวานในไวน์หมากเม่า (°Brix) จะอยู่ที่ตำแหน่ง 1440 และ 1580 นาโนเมตร ซึ่งเป็นตำแหน่งการดูดกลืนของ O-H str ซึ่งแถบความถี่เกิน ลำดับที่ 1 (1st overtone bond) ได้แสดงโครงสร้างของซูโครสและน้ำตาลกลูโคส [21] ซึ่งสอดคล้องกับตำแหน่งการดูดซึมของซูโครสและกลูโคสตามที่รายงานโดย [20] ที่ตำแหน่งการดูดซึม 1457 นาโนเมตร และพารามิเตอร์อีกตัวหนึ่งที่มีอิทธิพลต่อสมการ ซึ่งก็คือตำแหน่งของการดูดซึม [20] พบว่าเป็นองค์ประกอบของน้ำตาลที่มีอยู่ในน้ำเม่าด้วยสอดคล้องกับการรายงานตำแหน่งการดูดกลืนของ O-H str. โดยพบการดูดกลืนที่ความยาวคลื่นที่ 1520 นาโนเมตร [21] ซึ่งแถบความถี่เกิน ลำดับที่ 1 (1st overtone bond) ได้แสดงโครงสร้างของแป้งซึ่งไม่ใช่ น้ำตาลกลูโคส ซูโครส หรือน้ำตาลฟรุกโตส แต่โครงสร้างแป้งหรือหรือโพลีแซ็กคาไรด์นั้นจะมีโมโนเมอร์ของน้ำตาลกลูโคสที่เชื่อมต่อกับพันธะไกลโคซิดิก ดังนั้น พารามิเตอร์นี้อาจมีความสำคัญต่อสมการการสอบเทียบที่สร้างขึ้น โดยภาพประกอบที่ 3 (b) จะแสดงค่าสัมประสิทธิ์สมการความหวานในผลิตภัณฑ์ไวน์หมากเม่า พบว่าค่าสัมประสิทธิ์ของพารามิเตอร์ที่มีอิทธิพลต่อสมการจะอยู่ในช่วง 1940 นาโนเมตร ซึ่งสอดคล้องกับตำแหน่งการดูดกลืนแสงแบบผสมของพันธะของ O-H str และ O-H def. ซึ่งเป็นพันธะหลักของน้ำ [20,21] ที่เป็นองค์ประกอบหลักในไวน์นั่นเอง นอกจากนี้ พารามิเตอร์ที่มีอิทธิพลต่อการวิเคราะห์ค่าความหวาน (°Brix) ของไวน์หมากเม่าจะพบในตำแหน่งที่ 2080 นาโนเมตร ซึ่งเป็นตำแหน่งการดูดกลืนแสง และเกิดการรวมกันของพันธะ O-H str. และ O-H def. ซึ่งเป็นโครงสร้างพันธะของน้ำตาลซูโครส [21] อีกทั้งยังพบใกล้กับตำแหน่งของการเกิดการดูดซับซูโครสที่เป็นผลึกในตำแหน่ง 2100 นาโนเมตรซึ่งสอดคล้องกับรายงานจาก [20]



ภาพที่ 14 แสดงค่าสัมประสิทธิ์ของสมการสอบเทียบเพื่อวิเคราะห์ค่าความหวาน Brix ของ (a) น้ำ
 เม่าและ (b) ไวน์หมากเม่า

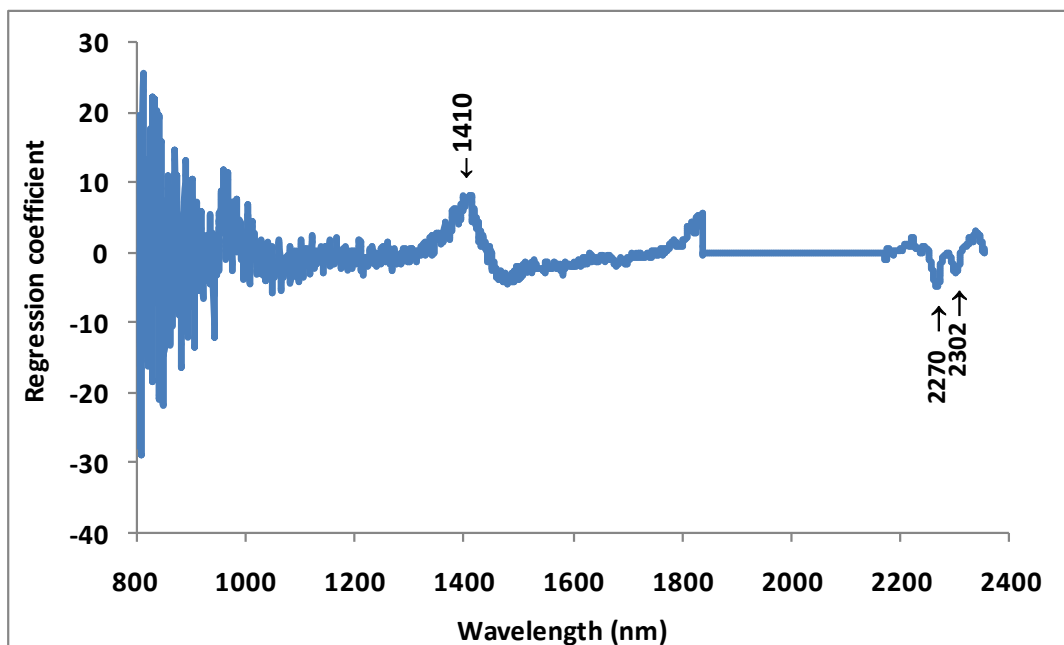
4.3.2 การวิเคราะห์แอลกอฮอล์ในไวน์หมากเม่า

ภาพประกอบที่ 4.4 แสดงกราฟแผนภูมิจุดแบบกระจัดกระจาย (scatter plot) ของชุดสอบเทียบ calibration set (a) และชุดตรวจสอบความถูกต้อง the validation set ของไวน์หมากเม่าที่จะทำการวิเคราะห์ค่าแอลกอฮอล์โดยใช้สเปกตรัมอนุพันธ์อันดับที่ 1 และวิธีการรวมเวกเตอร์แบบผสมในช่วงความยาวคลื่น 800 – 1836 นาโนเมตร แต่วิธีนี้อาจจะไม่เหมาะสมสำหรับการทำนายค่าแอลกอฮอล์ในไวน์หมากเม่า เนื่องจากค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (R) ในกลุ่มของการตรวจสอบข้าม the cross-validation มีค่าน้อยกว่า 0.75 อีกทั้งข้อผิดพลาดมาตรฐานของการตรวจสอบข้าม (SECV) มีค่าที่ 0.74 และ 1.825 ตามลำดับ



ภาพที่ 15 แสดงกราฟแผนภูมิจุดแบบกระจาย (scatter plot) ของค่าแอลกอฮอล์ที่คาดการณ์ไว้ของผลิตภัณฑ์ไวน์หมากเม่าใน (a) ชุดสอบเทียบ the calibration set และ (b) ชุดการตรวจสอบความถูกต้อง the validation set

จากภาพประกอบที่ 4.5 แสดงค่าสัมประสิทธิ์สมการมาตรฐานสำหรับวิเคราะห์ค่าแอลกอฮอล์ของไวน์หมากเม่า ซึ่งพบว่าสมการการถดถอยของสมการมาตรฐานเพื่อประมาณค่าแอลกอฮอล์ของไวน์หมากเม่าระบุไว้ในตำแหน่งความยาวคลื่นที่ 1410 นาโนเมตร มีอิทธิพลต่อค่าสมการมาตรฐานที่จะดูดกลืนแสง จะเกิดการเปลี่ยนแปลงของพันธะ O-H str ร่วมกับพันธะหมู่แอลคิล (ROH) [21-22] ซึ่งแสดงโครงสร้างของแอลกอฮอล์ในกลุ่มเอทานอล เนื่องจากพบตำแหน่งการดูดกลืนแสงที่ความยาวคลื่น 2270 นาโนเมตร และ 2303 นาโนเมตร

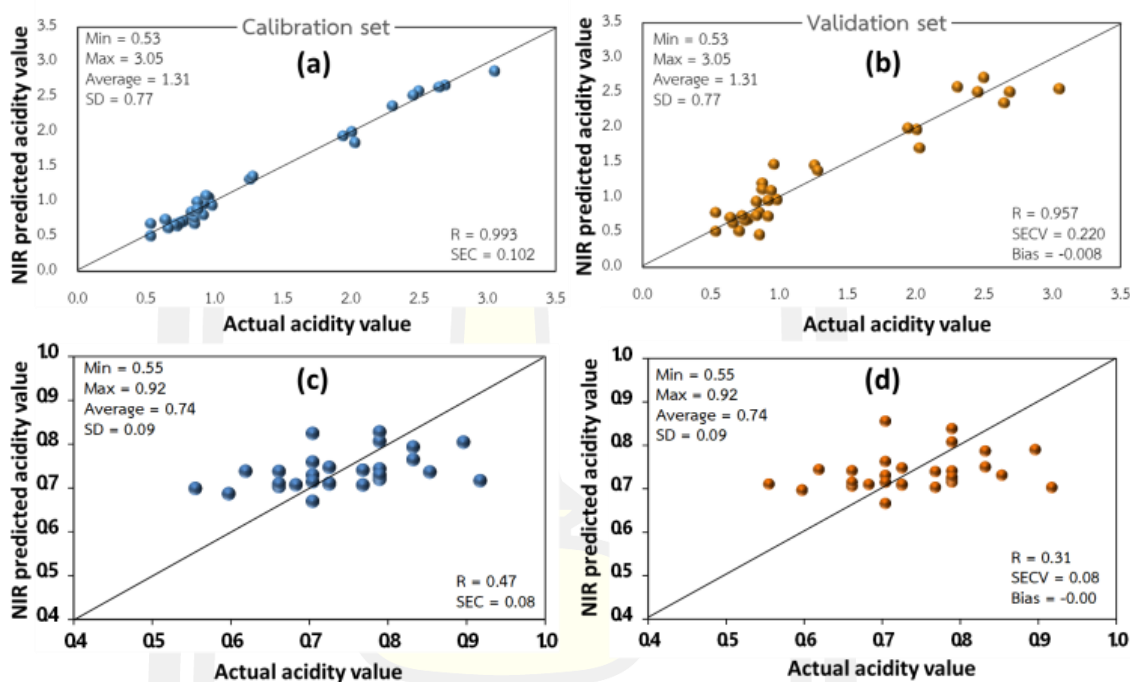


ภาพที่ 16 แสดงค่าสัมประสิทธิ์ของสมการเทียบมาตรฐานสำหรับวิเคราะห์ค่าแอลกอฮอล์ของไวน์หมากเฒ่า

4.3.3 การวิเคราะห์ค่าความเป็นกรด

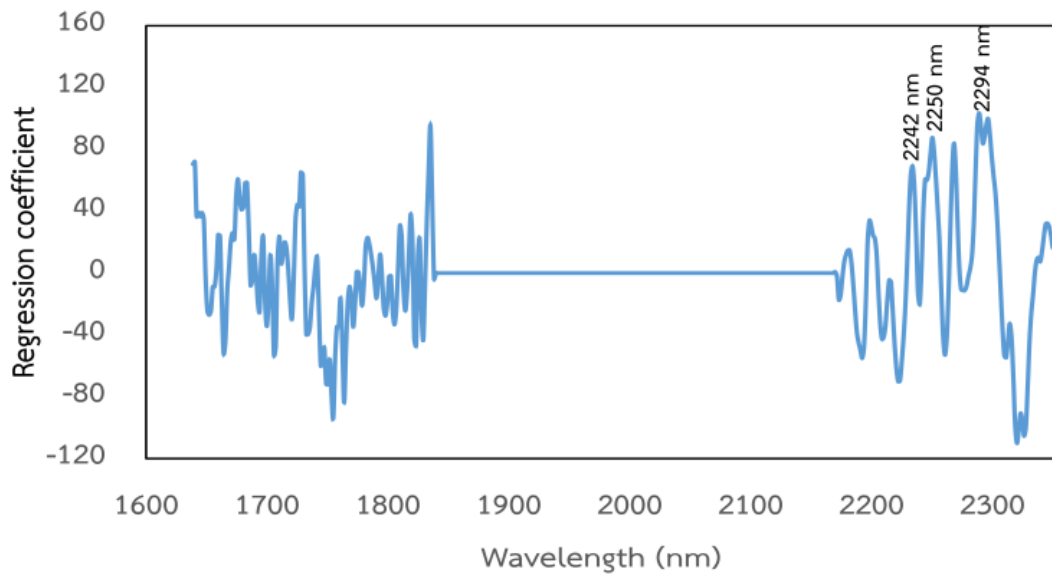
จากภาพประกอบที่ 4.6 ได้แสดงการคาดการณ์ค่าความเป็นกรดของน้ำเฒ่าและไวน์หมากเฒ่าจากชุดสอบเทียบ (รูปที่ 6(a)) และชุดตรวจสอบความถูกต้อง (รูปที่ 6(b)) ผ่านกราฟแผนภูมิจุดแบบกระจัดกระจาย (scatter plot) ซึ่งสมการที่ดีที่สุดสำหรับการวิเคราะห์ค่าความเป็นกรดนั้นจะใช้วิธีการ Vector normalization method ในช่วงความยาวคลื่น 1638 – 1828 และ 2170 – 2354 นาโนเมตร โดยผลจากการวิเคราะห์ NIR พบว่าค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (R) ข้อผิดพลาดมาตรฐานของการตรวจสอบข้าม (SECV) และค่าความผิดพลาดเฉลี่ย (Bias) มีค่าเป็น 0.92, 0.22, และ -0.008 ตามลำดับ นอกจากนี้ ยังมีค่าจากการทดสอบความแตกต่างค่าเฉลี่ยของกลุ่มตัวอย่าง 2 กลุ่มไม่อิสระ (Paired Sample T-test) และวิธีการมาตรฐาน ซึ่งถูกวิเคราะห์ด้วย NIR พบว่ามีความสัมพันธ์กันอย่างมีนัยสำคัญมีความน่าเชื่อถือถึง 95% ซึ่งสอดคล้องกับผลการวิเคราะห์ค่าความหวานนั่นเอง ในขณะที่ชุดสอบเทียบ (รูปที่ 4.6 (c)) และชุดตรวจสอบความถูกต้อง (รูปที่ 4.6 (d)) ของไวน์หมากเฒ่า สมการที่ดีที่สุดสำหรับการวิเคราะห์ค่าความเป็นกรดนั้นจะใช้วิธีการหารความชันของสเปกตรัมเริ่มต้น (the spectrum with the 1st derivative) และวิธี Vector normalization method ในช่วงความยาวคลื่นที่ 1332 – 1470 นาโนเมตร ซึ่งจากการทดลองพบว่าชุดข้อมูลอาจไม่เหมาะสมสำหรับการวิเคราะห์เนื่องจากค่า R ในกลุ่มการตรวจสอบข้ามมีค่าน้อยกว่า 0.75 ซึ่งไม่สอดคล้องกับงานวิจัยอื่นๆ ที่ใช้เทคนิค NIR ในการวิเคราะห์คุณภาพของไวน์ โดยคาดการณ์สาเหตุที่มีความเป็นไปได้

ได้มากที่สุด คือ ตัวอย่างทั้งหมดจะถูกแบ่งออกเป็น 2 ชุดข้อมูล โดยชุดที่หนึ่งจะถูกนำไปวิเคราะห์ด้วยเทคนิค NIR และชุดที่สองจะถูกนำไปวิเคราะห์หึ่งค์ประกอบหรือคุณภาพทางเคมี ซึ่งชุดตัวอย่างทั้งสองยังอยู่ในชั้นกระบวนการหมักหรือยังเกิดการบ่มไม่สมบูรณ์ และเชื่อในการบ่มไว้นั้นยังมีการทำงานอยู่นั่นเอง เป็นผลทำให้ปริมาณน้ำตาล ค่าความเป็นกรด หรือปริมาณค่าแอลกอฮอล์จากทั้ง 2 ชุดตัวอย่างมีความแตกต่างกัน



ภาพที่ 17 แสดงกราฟแผนภูมิจุดแบบกระจาย (scatter plot) ของการคาดการณ์ค่าความเป็นกรดในชุดสอบเทียบและชุดตรวจสอบความถูกต้องสำหรับ (a)-(b) น้ำเมล่อนและ (c)-(d) กล้วยตามลำดับ

ค่าความเป็นกรดของน้ำเมล่อน ค่าสัมประสิทธิ์ของสมการมาตรฐานของความเป็นกรดในน้ำเมล่อนจะแสดงในภาพประกอบที่ 4.7 จากการทดลองพบว่า พารามิเตอร์ที่มีอิทธิพลต่อสมการมาตรฐานซึ่งถูกวิเคราะห์ด้วย NIR ได้แสดงค่าความเป็นกรดในช่วงความยาวคลื่น 2242 และ 2294 นาโนเมตร เพื่อพบการดูดกลืนแสง แล้วมีการเปลี่ยนแปลงของพันธะ N-H str. + NH₃⁺ def. และ พันธะ N-H str. + C=O str. ตามลำดับ โดยเฉพาะอย่างยิ่ง ตำแหน่งเหล่านี้มีการพบโครงสร้างของกรดอะมิโนรวมมากกว่า 18 ชนิดจาก 20 ชนิด [21] ซึ่งมีความสำคัญต่อสุขภาพ อีกทั้งในผลหมักกล้วย ซึ่งในตำแหน่งความยาวคลื่นที่ 2294 นาโนเมตร แสดงการดูดกลืนแสงที่เกี่ยวข้องกับวิตามินซีหรือกรดแอสคอร์บิก [20] ที่มีมากกว่า 8.97 มก. ต่อ 100 กรัม อีกด้วย



ภาพที่ 18 แสดงค่าสัมประสิทธิ์สมการมาตรฐานสำหรับวิเคราะห์ค่าความเป็นกรดของน้ำเม่า



บทที่ 5

สรุปผล อภิปรายผล และข้อเสนอแนะ

สรุปผล อภิปรายผล

คุณภาพและองค์ประกอบทางเคมี ค่าความหวาน Brix และค่าความเป็นกรดของน้ำเม่าและไวน์หมากเม่าได้รับการตรวจสอบและตรวจสอบโดยเทคนิคอินฟราเรดย่านใกล้ Near-Infrared Spectroscopy ซึ่งจากการสังเกตด้วยเครื่อง FT-NIR spectrometer พบว่าองค์ประกอบหลักของผลิตภัณฑ์ทั้งหมดจากหมากเม่าคือน้ำ นอกจากนี้ สเปกตรัมที่สังเกตได้จากเครื่อง FT-NIR มีความยาวคลื่นในช่วง 2258 ถึง 2312 นาโนเมตร จะพบในไวน์หมากเม่า อีกทั้งยังสามารถคาดการณ์ค่าแอลกอฮอล์และปริมาณของเอทานอล หรือปริมาณการผสมกันของแอลกอฮอล์ต่างชนิดได้ ในส่วนของค่าความหวานของน้ำเม่าและไวน์หมากเม่า นั้น จากการวิเคราะห์เราจะพบองค์ประกอบจากน้ำตาลซูโครสและน้ำตาลกลูโคส อีกทั้งยังพบกรดอะมิโนมากกว่า 18 ชนิด ซึ่งได้จากกระบวนการหมัก

ข้อเสนอแนะ

ควรเก็บตัวอย่างที่จะทำการตรวจสอบอยู่ในช่วงอุณหภูมิที่คงที่

บรรณานุกรม

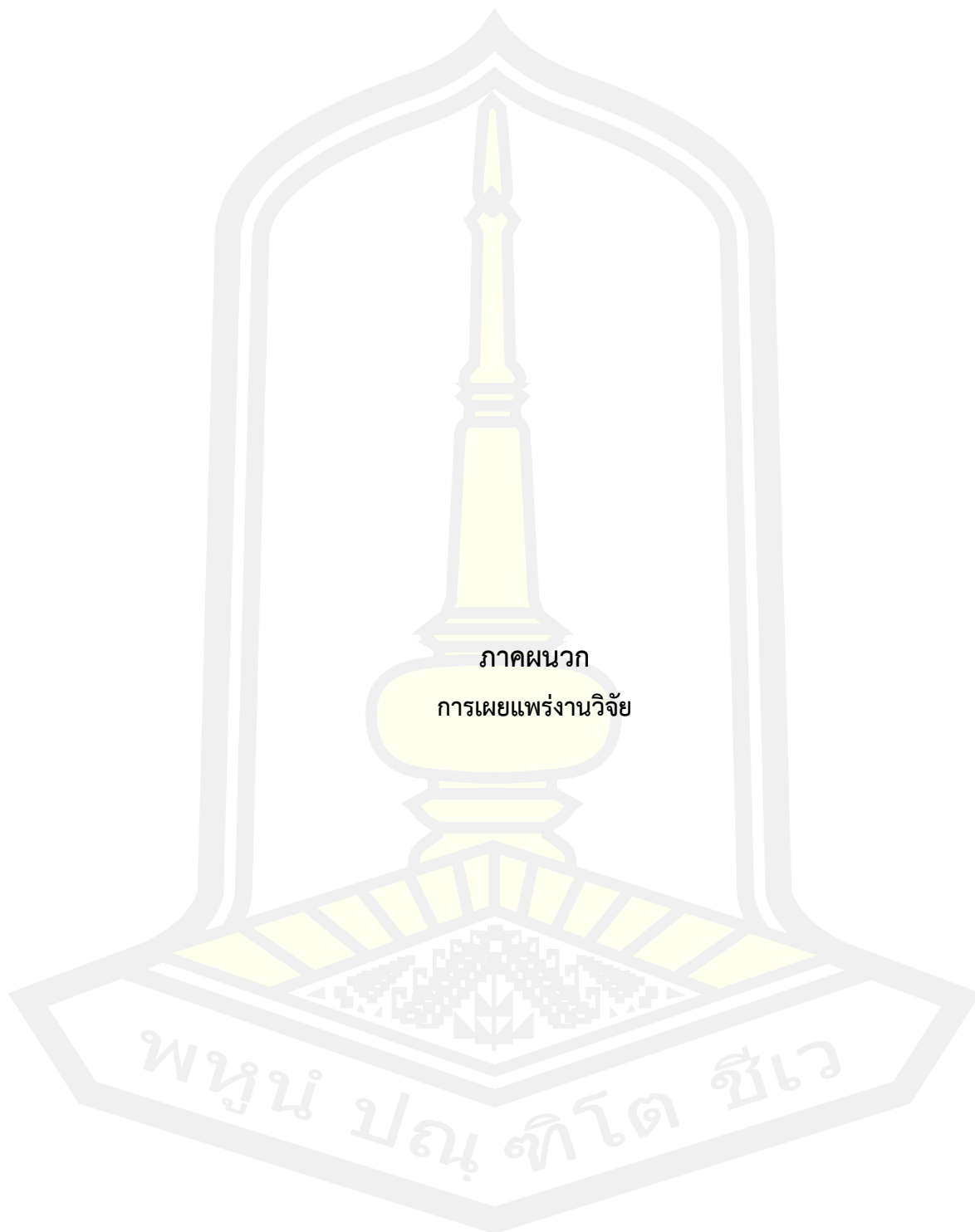


- [1] พรทิพย์ แผงจันทร์, ศิริรัตน์ เกื่อนสมบัติ, วีระวัฒน์ ตู๋ป๋อง, จุฑามาส ศรีสำราญ, วิไลศรี ลิ้มปพะยอม, กิติพร เจริญสุข, บุญเชิด วิมลสุจริต, ญาณิน สุปะมา, ศักดิ์สิทธิ์ จรรยากรณ, และวราพร วงศ์ศิริวรรณ. (2558). รายงานโครงการวิจัยและพัฒนาการผลิตมะเฝ้าพื้นที่จังหวัดสกลนคร. กรมวิชาการเกษตร: กระทรวงเกษตรและสหกรณ์.
- [2] Nevares, I., Crespo, R., Gonzalez, C., & del Alamo-Sanza, M. (2014). Imaging of oxygen transmission in the oak wood of wine barrels using optical sensors and a colour camera. *Australian journal of grape and wine research*, 20(3), 353-360.
- [3] Paknahad, M., Ahmadi, A., Rousseau, J., Nejad, H. R., & Hoorfar, M. (2017). On-chip electronic nose for wine tasting: A digital microfluidic approach. *IEEE Sensors Journal*, 17(14), 4322-4329.
- [4] Díaz, Y. Y. R., & Acevedo, C. M. D. (2014, October). Electronic tongue for wine discrimination, using PCA and ANN. In 2014 III International Congress of Engineering Mechatronics and Automation (CIIMA) (pp. 1-5). IEEE.
- [5] Gutiérrez, M., Domingo, C., Vila-Planas, J., Ipatov, A., Capdevila, F., Demming, S., ... & Jiménez-Jorquera, C. (2011). Hybrid electronic tongue for the characterization and quantification of grape variety in red wines. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 156(2), 695-702.
- [6] Osborne, B. G. (2006). Near-infrared spectroscopy in food analysis. *Encyclopedia of analytical chemistry: applications, theory and instrumentation*.
- [7] Sirisomboon, P., Deeprommit, M., Suchaiboonsiri, W., & Lertsri, W. (2013). Shortwave near infrared spectroscopy for determination of dry rubber content and total solids content of Para rubber (*Hevea brasiliensis*) latex. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, 21(4), 269-279.
- [8] Osborne, B. G. (2006). Near-infrared spectroscopy in food analysis. *Encyclopedia of analytical chemistry: applications, theory and instrumentation*.
- [9] Daun, J. K., Clear, K. M., & Williams, P. (1994). Comparison of three whole seed near-infrared analyzers for measuring quality components of canola seed. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 71(10), 1063-1068.

- [10] Sundaram, J., Kandala, C. V., Butts, C. L., & Windham, W. R. (2010). Application of NIR reflectance spectroscopy on determination of moisture content of in-shell peanuts: A non-destructive analysis. *Transactions of the ASABE*, 53(1), 183-189.
- [11] Li, X., Liang, J., Lin, S., Zimin, Y., Zhang, Y., & Ueda, T. (2012). NIR spectrum analysis of natural gas based on hollow-core photonic bandgap fiber. *IEEE Sensors Journal*, 12(7), 2362-2367.
- [12] Bakar, N. A., & Abu-Siada, A. (2017). A new method to detect dissolved gases in transformer oil using NIR-IR spectroscopy. *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation*, 24(1), 409-419.
- [13] Narongwongwattana, S., Rittiron, R., & Hock, L. C. (2015). Rapid determination of alkalinity (ammonia content) in Para rubber latex using portable and Fourier transform-near infrared spectrometers. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, 23(3), 181-188.
- [14] Moreira, M., de Franca, J. A., de Oliveira Toginho Filho, D., Beloti, V., Yamada, A. K., França, M. B. D. M., & de Souza Ribeiro, L. (2016). A low-cost NIR digital photometer based on ingaas sensors for the detection of milk adulterations with water. *IEEE Sensors Journal*, 16(10), 3653-3663.
- [15] Feng, L., Zhang, M., Adhikari, B., & Guo, Z. (2019). Nondestructive Detection of Postharvest Quality of Cherry Tomatoes Using a Portable NIR Spectrometer and Chemometric Algorithms. *Food Analytical Methods*, 12(4), 914-925.
- [16] Larrain, M., Guesalaga, A. R., & Agosin, E. (2008). A multipurpose portable instrument for determining ripeness in wine grapes using NIR spectroscopy. *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, 57(2), 294-302
- [17] Cozzolino, D., Liu, L., Cynkar, W. U., Damberg, R. G., Janik, L., Colby, C. B., & Gishen, M. (2007). Effect of temperature variation on the visible and near infrared spectra of wine and the consequences on the partial least square calibrations developed to measure chemical composition. *Analytica Chimica Acta*, 588(2), 224-230.
- [18] Birle, S., Hussein, M. A., & Becker, T. (2013). Fuzzy logic control and soft sensing applications in food and beverage processes. *Food Control*, 29(1), 254-269.

- [19] Osborne, B. G. (2006). Near-infrared spectroscopy in food analysis. Encyclopedia of analytical chemistry: applications, theory and instrumentation.
- [20] Halsey, S. A. (1985). The use of transmission and transreflectance near infrared spectroscopy for the analysis of beer. *Journal of the Institute of Brewing*, 91(5), 306-312.
- [21] Wesley, I. J., Larsen, N., Osborne, B. G., & Skerritt, J. H. (1998). Non-invasive monitoring of dough mixing by near infrared spectroscopy. *Journal of cereal science*, 27(1), 61-69.
- [22] Fearn, T., & Maris, P. I. (1991). An application of Box-Jenkins methodology to the control of gluten addition in a flour mill. *Journal of the Royal Statistical Society: Series C (Applied Statistics)*, 40(3), 477-484.
- [23] Guy, R. C. E., Osborne, B. G., & Robert, P. (1996). The application of near infrared reflectance spectroscopy to measure the degree of processing in extrusion cooking processes. *Journal of food engineering*, 27(3), 241-258.
- [24] Osborne, B. G., Fearn, T., Hindle, P. H., & Osborne, B. G. (1993). *Practical NIR spectroscopy with applications in food and beverage analysis (Vol. 2)*. Harlow: Longman Scientific & Technical.
- [25] Norris, K., & Williams, P. (1984). Optimization of mathematical treatments of raw near-infrared signal in the. *Cereal Chem*, 61(2), 158-165.
- [26] Manley, M., McGill, A. E. J., & Osborne, B. G. (1994). The effect of light scattering on NIR reflectance and transmittance spectra of wheat. *Journal of near infrared spectroscopy*, 2(2), 93-99.
- [27] Geladi, P., MacDougall, D., & Martens, H. (1985). Linearization and scatter-correction for near-infrared reflectance spectra of meat. *Applied spectroscopy*, 39(3), 491-500.
- [28] Barnes, R. J., Dhanoa, M. S., & Lister, S. J. (1989). Standard normal variate transformation and de-trending of near-infrared diffuse reflectance spectra. *Applied spectroscopy*, 43(5), 772-777.
- [29] Shenk, J. S., & Westerhaus, M. O. (1991). Populations structuring of near infrared spectra and modified partial least squares regression. *Crop Science*, 31(6), 1548-1555.

- [30] Osborne, B. G. (1988). Comparative study of methods of linearisation and scatter correction in near infrared reflectance spectroscopy. *Analyst*, 113(2), 263-267.
- [31] Shenk, J. S., Workman, J. J., Westerhaus, M. O., Burns, D. A., & Ciurczak, E. M. (1992). Handbook of Near-infrared analysis. Application of NIR spectroscopy to agricultural products, 383-431.
- [32] C. Hervas, A. Garrido, B. Lucena, N. Garcia, E. De Pedro, 'Near-Infrared Spectroscopy for Classification of Iberian Pig Carcasses Using an Artificial Neural Network', *J. Near Infrared Spectrosc.*, 2, 177 – 184 (1994).
- [33] McGrath, V. B., Blakeney, A. B., & Batten, G. D. (1997). Fructan to nitrogen ratio as an indicator of nutrient stress in wheat crops. *The New Phytologist*, 136(1), 145-152.
- [34] Williams, P. C. (1975). Application of near infrared reflectance spectroscopy to analysis of cereal grains and oilseeds. *Cereal Chemistry*.
- [35] Norris, K. H., Hruschka, W. R., Bean, M. M., & Slaughter, D. C. (1989). A definition of wheat hardness using near infrared reflectance spectroscopy. *Cereal foods world (USA)*.
- [36] Song, H., Delwiche, S. R., & Chen, Y. R. (1995). Neural network classification of wheat using single kernel near-infrared transmittance spectra. *Optical Engineering*, 34(10), 2927-2935.
- [37] Osborne, B. G., & Fearn, T. (1983). Collaborative evaluation of universal calibrations for the measurement of protein and moisture in flour by near infrared reflectance. *International Journal of Food Science & Technology*, 18(4), 453-460.
- [38] พงษ์ มีสีจ. 2553. โครงข่ายประสาทเทียมและระบบฟัซซี่, กรุงเทพฯ : มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีพระนครเหนือ
- [39] Zavala, A. H., & Nieto, O. C. (2011). Fuzzy hardware: A retrospective and analysis. *IEEE Transactions on Fuzzy Systems*, 20(4), 623-635.
- [40] Phil Williams and Karl Norris, 2001. Near Infrared Technology in the agricultural and food Industries. American Association of Cereal Chemists, Inc. Second edition, pp. 267-268



ภาควิชา
การศึกษาศาสตร์

พูน ปณฺ ทิโต ชีเว

Evaluation of Chemical Quality on Juices and Wine Produced from Mamao Fruit (Antidesma Puncticulatum Miq.) Within Near-Infrared Spectroscopy
Kongphope Chaarmart¹, Sureeporn Narongwongwattana², Ronnarit Rittiron², Worawat Sa-Ngiamvibool^{1*}¹ Faculty of Engineering, Maharakham University, Maharakham 44150, Thailand² Near Infrared Laboratory, Faculty of Engineering at Kamphaengsaen, Kasetsart University, Nakhon Pathom 73140, ThailandCorresponding Author Email: worawat.s@msu.ac.th<https://doi.org/10.18280/i2m.200502>**ABSTRACT**

Received: 6 September 2021

Accepted: 28 October 2021

Keywords:*chemical quality, Mao juices, Mao wine, near-infrared spectroscopy*

The chemical quality of juices and wine produced from Mamao fruit was evaluated by Fourier transform near-infrared (FT-NIR). The calibration equation was created by the cross-validation method to be simulated the accuracy. Statistical values composed of correlation coefficient (R), standard error of cross-validation (SECV) and bias were used. Brix values and acidity values of Mao juice and the Brix, acidity, and alcohol values of Mao wine products were evaluated through the standard and cross-validation relation. It was found that was observed with NIR spectrometer to be absorbed in the same IR wavelength (1450 nm) which indicated that the water is the main composition. Based on FT-NIR analysis, the spectrum latitudes of juices and wine were revealed in the same range of the absorption bands at 1450 nm and 1940 nm to be confirmed the water composition. Also, the FT-NIR spectra from region 2258-2312 nm in Mao wine product have been predicted to the Ethanol functions.

1. INTRODUCTION

Mamao Luang (*Antidesma puncticulatum* Miq.) is one of the geographical indications (GI) of Sakon Nakhon province, Thailand, found on Phu Phan mountain [1-4]. In addition, the Mamao Luang is the main crop used for a juice-making process (juices and wine), which is conducted by the cooperation and small and micro-community enterprise (SME) of Sakon Nakhon. The benefit of natural products is claimed the health-enhancing functional foods. However, the quality of products could be observed from the chemical composition to be demonstrated the quality of the products. Nowadays, the researcher presented several techniques to monitor various parameters and chemical properties of wine by using sensors, including optical sensors and a color camera, and to determine the moisture content of wet and dry oak wood conditions affecting oxygen transmission [5]. It was found that the water saturation in wood is a factor that affects oxygen transmission decreased on wine curing with oxygen transmission rate (OTR). For advanced method is electronic tongue; to analyze and classify the different types of wines from wine aromas with metal oxide gas sensors within the digital microfluidic (DMF) [6]. Based on the electronic tongue [7, 8], there are classification methods of white and red wine with machine learning, artificial neural network (ANN) worked with models or analysis instruments such as Principle Component Analysis (PCA), Soft Independent Modeling Class Analogy (SIMCA) and Partial Least Squares (PLS) regression for the classification of the wine and quantification of the grape sequence. All these methods can classify each type of wine, but some methods require preparation for substance testing, parameter measurement in a laboratory, and prediction, which make technical complexity. However, there is a method for measuring parameters that have the principle

of working by lighting up through the solution or substance, light absorption in near-infrared light makes the molecules of substance vibrate at high frequencies. The vibrations of various bonds occur at different wavelengths, which is a non-destructive inspection method. All of the above methods are near-infrared (NIR) spectroscopy [9]. This method could be easily carried and transferred to analytical precision for chemical identification and quantitation from spectral resolution. The advantages of this method are uncomplicated, fast (15-90 s), accurate analysis, no chemicals or fewer chemicals and can measure the compositions or properties of agricultural products, food, and various elements simultaneously [9, 10], such as measuring quality components of canola seed [11], determination of moisture content of in-shell peanuts [12], measuring the chemical composition of the gas [13, 14], determination of ammonia content in Para rubber latex [15], the detection of milk adulterations with water [16], detection of postharvest quality of Cherry tomatoes [17] and developing instruments [18] for determining ripeness including Brix, Potential of Hydrogen Ion (pH), and Anthocyanin concentration in grape wine. The parameters have been verified with a root mean square error of calibration (RMSEC), the root mean square error of validation (RMSEV), and R^2 (Multiple correlation index). This research can measure the Brix and pH in grapes, but Anthocyanin must require other techniques that are accurate to help to measure for greater accuracy. The researcher [19] studies the effect of temperature variation on the visible and NIR spectra between white and red wine because the temperature affects the vibration and frequency of molecular bonds. The results show that the length of the spectrum at approximately 970 nm and 1400 nm affected the O-H bond the PLS calibration was inversely when the temperature increased.

In this work, we used NIR spectroscopy within the Fourier

transform (FT-NIR) mode to analyzing the chemical identification and quantitation to be evaluated of chemical quality on juices and wine produced from Mamao fruit.

2. MATERIAL AND METHOD

2.1 Samples

In this study, 30 samples each for juices and wine produced from Mamao fruits were used with different shelf-life ranges. Shelf life from 2016 to 2019 is juice product samples and shelf life from 2018 to 2019 is the wine product samples. Both product samples composed of the 1st order and 2nd order of squeeze processing were measured to be provided a variance range of sweetness, alcohol content, and acidity values covering samples as expected in all products. All samples were separated into two sets, one set was transported to Near Infrared Laboratory at Kasetsart University and measured by Near-Infrared Spectrometer. Each sample was measured at room temperature (25°C) and relative humidity of 30%.

2.2 Instrumentation

This study was used two instrumentations compose of Fourier transform near-infrared (FT-NIR) spectrometer (MPA model, Bruker) within wavelength range 800 – 2500 nm (around 12500 to 4,000 cm^{-1}) [15] at the Near Infrared Laboratory, Food Engineering Department, Engineering at Kamphaengsaen Faculty, Kasetsart University, Thailand. FT-NIR spectrometer measured all samples under a transfection system within a petri dish (34.00 mm of diameter) and then covered with a reflector at a physical pathlength of 0.1 mm.

2.3 Data analyses

The calibration equation for analyzing the quality of juices and wine produced from Mamao fruits was created based on the relationship between the NIR absorption region and standard quality values. Which the processing was carried by partial least squares regression (PLS) through the software package of the FT-NIR spectrometer (OPUS 6.5) and the unscramble (version 9.7) program. All analysis results were created by the cross-validation method and then used to simulate the accuracy of the created equation. Statistical values of the created equation have consisted of correlation coefficient (R), standard error of cross-validation (SECV), and bias. These values could be investigated the performance of created equations for the determination of Brix and acidity values of Mao juice and the Brix, acidity, and alcohol values of Mao wine products.

3. RESULTS AND DISCUSSION

3.1 NIR spectra for juices and wine

Figure 1 shows the original spectrum field of (a) juices and (b) wine produced from Mamao fruit as obtained within FT-NIR spectrometer in wavelength around 800-2500 nm. Both textures are the same with the dominant absorbance at the

same IR wavelength of 1450 nm and 1940 nm, which indicated the water for all produces from Mamao fruit to be absorbed with NIR spectrometer [15, 20]. It also appeared a slight absorption at around 2258-2312 nm for Mamao wine (Figure 1(b)) which was corresponding to the absorption band of Ethanol [20].

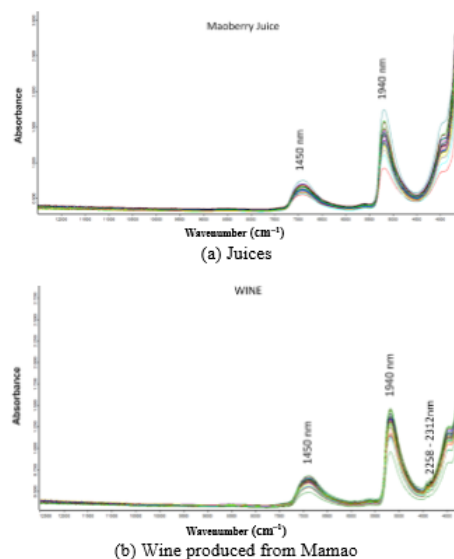


Figure 1. The original FT-NIR spectra lattices obtained from FT-NIR Spectrometer

3.2 Calibration equation development*

Mamao juices and wine products each for 30 samples were measured by FT-NIR spectrometer to be analyzed the chemical quality as shown in Tables 1 and 2, respectively. The data analysis as listed in Tables 1 and 2 were statistical parameters of the samples in the calibration set and the validation set based on the full cross-validation method. According to the original spectra, the baseline shift due to the light scattering effect has occurred. Also, sample pretreatments were used to reduce unwanted influences on spectra before developing calibration equations.

Focus on Table 2, the correlation coefficient (R) of calibration (R_c) and cross-validation (R_{cv}) groups affected onto the calibration equation for L*, a*, and b* values have been more differed with more than 0.5. This result demonstrated that the calibration equation is not suitable for L*, a*, and b* values determination since these parameters express to physical properties of the sample, which the responding with suitable in this case should be visible light in wavelength 400-700 nm. While FT-NIR spectrometer is detected the wavelength within 800-2500 nm. Hence, the specific data was affected to be not evaluated the color quality of the wine.

Table 1. Statistical parameters of the Mamao juice samples in the calibration set and the cross-validation set

Parameters	Pretreatment	Calibration set		Cross-Validation set			Factors	RPD	Region (cm ⁻¹)
		R ²	SEC	R ²	SEC _{CV}	bias			
Brix	1st derivative	0.994	0.269	0.888	1.046	0.011	6	2.99	7502.1 - 6098.1
	2nd derivative	0.935	0.825	0.888	1.048	-0.074	2	2.99	9403.7 - 6098.1, 4601.6 - 4246.7
	Vector Normalization (SNV)	0.993	0.305	0.891	1.034	-0.057	6	3.03	7502.1 - 5446.3
Acidity	1st derivative +SNV	0.995	0.254	0.901	0.984	-0.007	5	3.18	7502.1 - 5446.3
	1st derivative	0.988	0.094	0.860	0.287	-0.016	6	2.68	7502.1 - 5446.3, 4601.6 - 4246.7
	2nd derivative	0.837	0.316	0.806	0.339	0.011	1	2.27	7502.1 - 5446.3, 4601.6 - 4246.7
	Vector Normalization (SNV)	0.986	0.102	0.917	0.222	-0.008	6	3.46	6102 - 5446.3, 4601.6 - 4246.7
	1st derivative +SNV	0.995	0.059	0.903	0.239	0.022	6	3.22	6102 - 5446.3

Table 2. Statistical parameters of the Mamao wine samples in the calibration set and the cross-validation set

Parameters	Pretreatment	Region (nm)	rank	R _c	SEC	R _{cv}	SEC _{CV}	bias
Brix	2 nd derivative	1332-2175	3	0.85	1.34	0.63	1.88	-0.04
Acidity	1 st derivative + SNV	1332-1470	1	0.47	0.08	0.31	0.08	-0.00
alcohol	MSC	800-1836, 2173.4-2356.9	4	0.98	0.52	0.73	1.83	0.00
L*	1 st derivative + MSC	800-1639, 2173-2354	2	0.94	0.45	0.29	1.23	0.02
a*	1 st derivative + MSC	800-1639, 2173-2354	3	0.97	0.39	0.40	1.42	0.01
b*	1 st derivative + SNV	800-1639, 2173-2354	2	0.93	0.36	0.29	0.97	0.01
h	SNV	2173-2354	2	0.56	133.92	0.44	142.09	-2.67

3.3 Chemical quality of juices and wine produced from Mamao fruit

3.3.1 Sweetness analysis or Brix value

Brix value or sweetness of juices and wine produced from Mamao fruit was processed based on the partial least squares regression (PLS) method through OPUS 6.5 software. The best equations for analyzing the sweetness in the wavelength range 1332-2175 nm were optimized from the spectrum with the 1st derivative and vector normalization (SNV) combination method for Mao juices, and the 2nd derivative for Mao wine. All scatter plots of creating and testing of equation results through the full cross-validation method were showed in Figure 2.

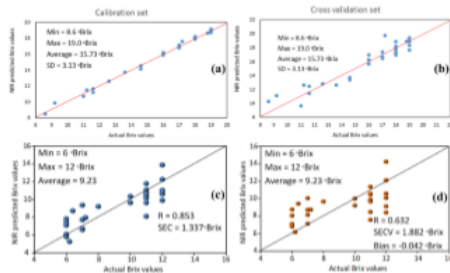


Figure 2. Scatter plots of predicted Brix values in the calibration set and the validation set for (a)-(b) juices and (c)-(d) wine produced from Mamao fruit, respectively

From scatter plots of calibration and validation graph, both

results indicated that the sampling points were tended distributed around a diagonal line. The values of data analysis via NIR techniques and values as analyzed by standard methods must be related to the correlation coefficient (R), standard error of cross-validation (SEC_{CV}) and bias mean. A sweetness analysis of Mao juices carried by NIR techniques to be obtained the correlation coefficient, standard error of cross-validation and bias of approximately 0.90, 0.98 °Brix, and 0.007 °Brix, respectively, within the group of validation set equations. However, the value from the paired t-test indicated that sweetness as analyzed with NIR and standard methods was related significantly with 95 % confidence intervals. For the Mao wine products, the values of data analysis via NIR techniques and values as analyzed by standard methods were related to the correlation coefficient (R) of around 0.853 and 0.632 and error standards of around 1.337 and 1.882 °Brix in the calibration set and cross-validation set, respectively. The coefficient of the standard equation for analyzing the amount of sweetness in juices and wine is showed in Figure 3. Figure 3(a) shows the coefficient of the calibration equation of sweetness in Mao juices. This result is noticed that the variables influencing the standard equation for analyzing the sweetness in the wine (°Brix) are located at positions 1440 and 1580 nm, which are the absorption positions of the O-H str. 1st overtone bond, which is the structure of Sucrose and Glucose sugar [21]. It also corresponds to the absorption position of Sucrose and Glucose as reported by Williams and Norris [20] and at the absorption position of 1457 nm. It is also another variable that influences the equation. It is the absorption position [20], which is also an element of sugar contained in fruits. In addition, at the absorption position 1520 nm, Osborne et al. [21] reported the absorption position of the O-H str. 1st overtone of the starch structure which not Glucose, Sucrose, or Fructose. Therefore, the starch or polysaccharide structure

in pants will be had the monomer of Glucose sugar as connected with glycosidic bond. Hence, this variable may be critical to the calibration equations that are created. Figure 3(b) shows the coefficient of the equation of sweetness in Mao wine products. The coefficient of variables influencing the equation is 1940 nm, which corresponds to the combination absorption position of the bond of O-H str. and O-H def., the main bonds of water [20, 21] are the main elements in the wine. In addition, the variable influencing the analysis of the sweetness ($^{\circ}$ Brix) of the wine is 2080 nm, which is the combination absorption position of the bond. O-H str. and O-H def., which are the bonding structures of Sucrose sugar [21] and close to the crystalline Sucrose absorption position at 2100 nm corresponding with reported from [20].

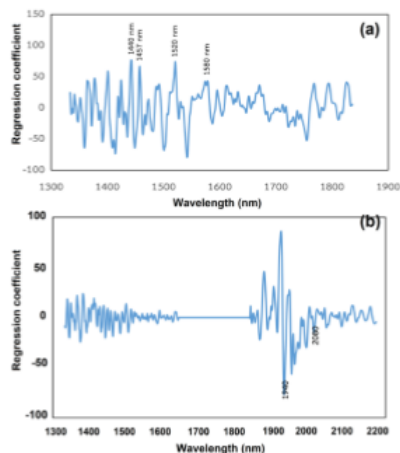


Figure 3. The coefficient of the calibration equation for analyzing Brix value of (a) juices and (b) wine produced from Mamao fruits

3.3.2 Alcohol analysis of wine product

Figure 4 shows the calibration set (a) and the validation set (b) scatter plots of Mao wine product to be analyzed of Alcohol value using the 1st derivative spectrum and vector normalization combination methods in the wavelength range of 800 – 1836 nm. This method may be not suitable for alcohol prediction due to an R-value in the cross-validation group of less than 0.75 within the correlation coefficient and standard error of cross-validation of 0.74 and 1.82%, respectively.

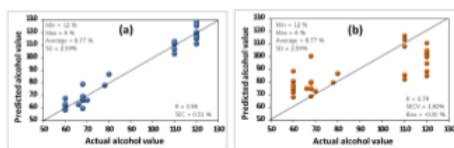


Figure 4. Scatter plots of predicted alcohol values of Mao wine product (a) the calibration set and (b) the validation set

Figure 5 shows the coefficient of the standard equation for analyzing the alcohol value of Mao wine. The regression of

the standard equation to estimate the alcohol value of Mao wine indicated the wavelength position of 1410 nm has influenced the standard equation to be absorbed of the O-H str. bond in conjunction with the Alkyl group (ROH) [21, 22]. This claimed the alcohol structure and also have the wavelength positions of 2270 nm and 2302 as yielded the ethanal absorption [20].

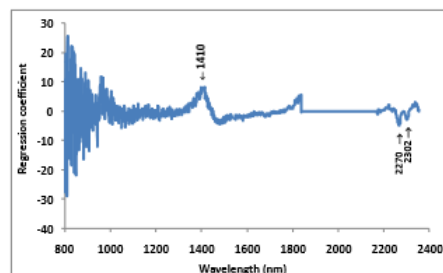


Figure 5. The coefficient of the standard equation for analyzing the alcohol value of Mao wine

3.3.3 Acidity values analysis

Figure 6 shows the prediction of acidity values of juices and wine produced from Mamao fruit within the calibration set and the validation set through the scatter plots. The calibration set (Figure 6(a)) and the validation set (Figure 6(b)) of Mao juices, the best equations for analyzing the acidity were used Vector normalization method within the wavelength range of 1638 – 1828 and 2170 – 2354 nm. Base on NIR analyzing results, the correlation coefficient, standard error of cross-validation, and bias were obtained of 0.92, 0.22, and -0.008, respectively. Also, have the value from the paired t-test as analyzed with NIR and standard methods were related significantly with the reliability of 95 % similarly with Brix values analyzing the result. While the calibration set (Figure 6(c)) and the validation set (Figure 6(d)) of Mao wine product, the best equations for analyzing the acidity were used the spectrum with the 1st derivative and vector normalization combination methods within the wavelength range of 1332 – 1470 nm. Both reports could be not good for analysis due to an R-value in the cross-validation group of less than 0.75, which is inconsistent with other research that uses NIR techniques to analyze the quality of wine. One of the most probable reasons is that all samples were divided into 2 sets, one set for NIR measurement and the other one for chemical analytical method, while fermentation or termination process is incomplete of wine and the infections contained within the sample will still be active. Accordingly, the amount of sugar, acidity, and alcohol in wine from the 2 sets are different.

Focus on acidity values of Mao juices, the coefficient of the standard equation of acidity in Mao juices was shown in Figure 7. This result is noticed that the variables influencing the standard equation for analyzing the acidity as located at NIR wavelength positions 2242 and 2294 nm to be absorbed of the N-H str. + NH₃⁺ def. bond and N-H str. + C=O str. bond, respectively. In specially, these locations are performed the structure of Amino acid [21] which important for healthy within more than 18 types from net 20 types. At wavelength positions, 2294 nm yielded the absorption as related with the Vitamin C or Ascorbic acid [20] with more than 8.97 mg per 100 g of Mao fruit.

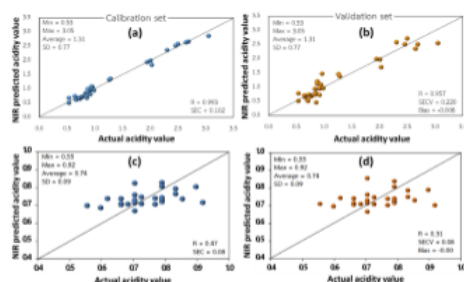


Figure 6. Scatter plots of predicted acidity values in the calibration set and the validation set for (a)-(b) juices and (c)-(d) wine produced from Mamao fruit, respectively

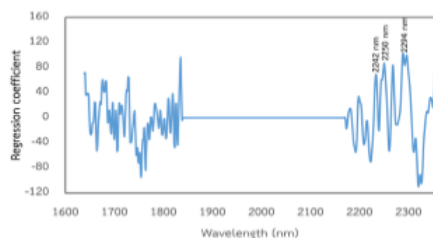


Figure 7. The coefficient of the standard equation for analyzing the acidity value of Mao juices

4. CONCLUSION

Chemical quality on juices and wine produced from Mamao fruit compose of Brix and acidity values have been evaluated by the near-infrared spectroscopy method. All produce from Mamao fruit as observed with FT-NIR spectrometer to be indicated the main composition of water. Also, the FT-NIR spectra in the wavelength 2258-2312 nm of Mao wine product could be predicted and confirmed the Ethanol function or alcohol hybridization. Brix or sweetness of Mamao fruit products as analyzed have composed of Sucrose and Glucose sugar and abundant of Amino acid more than 18 types which obtained from acidity predication process.

ACKNOWLEDGMENTS

In this work, we would like to acknowledge the Near Infrared Laboratory, Food Engineering Department, Engineering at Kamphaengsaen Faculty, Kasetsart University.

REFERENCES

[1] Butkhup, L., Samappito, S. (2008). An analysis on flavonoids contents in Mao Luang fruits of fifteen cultivars (*Antidesma bunius*), grown in northeast Thailand. *Pakistan Journal of Biological Sciences*, 11(7): 996-1002. <https://doi.org/10.3923/pjbs.2008.996.1002>

[2] Jorjong, S., Butkhup, L., Samappito, S. (2015). Phytochemicals and antioxidant capacities of Mao-Luang (*Antidesma bunius* L.) cultivars from northeastern Thailand. *Food Chemistry*, 181: 248-255. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2015.02.093>

[3] Puangpronpitag, D., Yongvanit, P., Boonsiri, P., Suttajit, M., Areejitranusorn, P., Na, H., Surh, Y. (2011). Molecular mechanism underlying anti-apoptotic and anti-inflammatory effects of Mamao (*Antidesma thwaitesianum* Müll. Arg.) polyphenolics in human breast epithelial cells. *Food Chemistry*, 127: 1450-1458.

[4] Suravanichnirachorn, W., Haruthaithanasan, V., Suwonsichon, S., Sukatta, U., Chantrapornchai, W. (2018). Stability of Mao (*Antidesma bunius* (L.) Spreng) powder in different food process models. *International Food Research Journal*, 25(6): 2666-2673.

[5] Nevares, I., Crespo, R., Gonzalez, C., Alamo-Sanza, M. (2014). Imaging of oxygen transmission in the oak wood of wine barrels using optical sensors and a colour camera. *Australian Journal of Grape and Wine Research*, 20(3): 353-360. <https://doi.org/10.1111/ajgw.12104>

[6] Paknahad, M., Ahmadi, A., Rousseau, J., Nejad, H.R., Hoorfar, M. (2017). On-chip electronic nose for wine tasting: A digital microfluidic approach. *IEEE Sensors Journal*, 17(14): 4322-4329. <https://doi.org/10.1109/JSEN.2017.2707525>

[7] Diaz, Y.Y.R., Acevedo, C.M.D. (2014). Electronic tongue for wine discrimination, using PCA and ANN. In 2014 III International Congress of Engineering Mechatronics and Automation (CIIMA), pp. 1-5.

[8] Gutiérrez, M., Domingo, C., Vila-Planas, J., Ipatov, A., Capdevila, F., Demming, S., Büttgenbach, S., Llobera, A., Jiménez-Jorquera, C. (2011). Hybrid electronic tongue for the characterization and quantification of grape variety in red wines. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 156(2): 695-702. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2011.02.020>

[9] Osborne, B.G. (2006). Near-infrared spectroscopy in food analysis. *The Encyclopedia of Analytical Chemistry*. <https://doi.org/10.1002/9780470027318.a1018>

[10] Sirisomboon, P., Deeprommit, M., Suchaiboonsiri, W., Lertsri, W. (2013). Shortwave near infrared spectroscopy for determination of dry rubber content and total solids content of Para rubber (*Hevea brasiliensis*) latex. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, 21(4): 269-279. <https://doi.org/10.1255/jnirs.1061>

[11] Daun, J.K., Clear, K.M., Williams, P. (1994). Comparison of three whole seed near-infrared analyzers for measuring quality components of canola seed. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 71(10): 1063-1068. <https://doi.org/10.1007/BF02675897>

[12] Sundaram, J., Kandala, C.V., Butts, C.L., Windham, W.R. (2010). Application of NIR reflectance spectroscopy on determination of moisture content of in-shell peanuts: A non-destructive analysis. *Transactions of the ASABE*, 53(1): 183-189. <https://doi.org/10.13031/2013.29485>

[13] Li, X., Liang, J., Lin, S., Zimin, Y., Zhang, Y., Ueda, T. (2012). NIR spectrum analysis of natural gas based on hollow-core photonic bandgap fiber. *IEEE Sensors Journal*, 12(7): 2362-2367. <https://doi.org/10.1109/JSEN.2012.2188099>

[14] Bakar, N.A., Abu-Siada, A. (2017). A new method to detect dissolved gases in transformer oil using NIR-IR

- spectroscopy. *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation*, 24(1): 409-419. <https://doi.org/10.1109/TDEI.2016.006025>
- [15] Narongwongwattana, S., Rittiron, R., Hock, L.C. (2015). Rapid determination of alkalinity (ammonia content) in Para rubber latex using portable and Fourier transform-near infrared spectrometers. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, 23(3): 181-188. <https://doi.org/10.1255/jnirs.1160>
- [16] Moreira, M., de Franca, J.A., de Oliveira Toghinho Filho, D., Beloti, V., Yamada, A.K., França, M.B.D.M., de Souza Ribeiro, L. (2016). A low-cost NIR digital photometer based on InGaAs sensors for the detection of milk adulterations with water. *IEEE Sensors Journal*, 16(10): 3653-3663. <https://doi.org/10.1109/JSEN.2016.2530873>
- [17] Feng, L., Zhang, M., Adhikari, B., Guo, Z. (2019). Nondestructive detection of postharvest quality of cherry tomatoes using a portable NIR spectrometer and chemometric algorithms. *Food Analytical Methods*, 12(1): 914-925. <https://doi.org/10.1007/s12161-018-01429-9>
- [18] Larrain, M., Guesalaga, A.R., Agosin, E. (2008). A multipurpose portable instrument for determining ripeness in wine grapes using NIR spectroscopy. *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, 57(2): 294-302. <https://doi.org/10.1109/TIM.2007.910098>
- [19] Cozzolino, D., Liu, L., Cynkar, W.U., Damberg, R.G., Janik, L., Colby, C.B., Gishen, M. (2007). Effect of temperature variation on the visible and near infrared spectra of wine and the consequences on the partial least square calibrations developed to measure chemical composition. *Analytica Chimica Acta*, 588(2): 224-230. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2007.01.079>
- [20] Williams, P., Norris, K. (2001). *Near Infrared Technology in the Agricultural and FOOD INDUSTRIES*. American Association of Cereal Chemists, Second edition, USA.
- [21] Osborne B.G., Fearn T., Hindle, P.H. (1993). *Practical NIR Spectroscopy with Applications in Food and Beverage Analysis*. Longman Singapore Publishers (Pte) Limited, Second Edition, Singapore.
- [22] Workman, J., Weyer, L. (2012). *Practical Guide and Spectral Atlas for Interpretive Near Infrared Spectroscopy*. CRC Press, Taylor & Francis Group, NW.

ประวัติผู้เขียน

ชื่อ	ก้องภพ ซาอามาตย์
วันเกิด	17 มิถุนายน 2517
สถานที่เกิด	จังหวัดอุดรธานี
สถานที่อยู่ปัจจุบัน	680/124 ถ. นิตโย ต. ชาติชุม อ. เมืองสกลนคร จ. สกลนคร 47000
ตำแหน่งหน้าที่การงาน	ผู้ช่วยศาสตราจารย์
สถานที่ทำงานปัจจุบัน	สาขาวิชาไฟฟ้าและอิเล็กทรอนิกส์ คณะเทคโนโลยีอุตสาหกรรม มหาวิทยาลัยราชภัฏสกลนคร
ประวัติการศึกษา	พ.ศ.2541 วิศวกรรมศาสตรบัณฑิต (วศ.บ.) วิศวกรรมอิเล็กทรอนิกส์ มหาวิทยาลัยภาคตะวันออกเฉียงเหนือ พ.ศ.2550 ครุศาสตรอุตสาหกรรมมหาบัณฑิต (ค.อ.ม.) วิศวกรรมไฟฟ้า มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีพระจอมเกล้าธนบุรี พ.ศ.2566 ปรัชญาดุษฎีบัณฑิต (ปร.ด.) วิศวกรรมไฟฟ้าและคอมพิวเตอร์ มหาวิทยาลัยมหาสารคาม

พหุจน์ ปณฺ ทิโต ชีเว