

สถาบันวิจัยและพัฒนา มหาวิทยาลัยศิลปากร

แบบ สว.ว 5

ชื่อโครงการ การตรวจสอบสารออกฤทธิ์ทางชีวภาพและความสามารถในการต้านอนุมูล  
อิสระในผลิตภัณฑ์เครื่องดื่มน้ำผักและน้ำผลไม้สกัดเข้มข้นเพื่อสุขภาพอย่าง  
รวดเร็วด้วยเทคนิคสเปกโตรสโกปีอินฟราเรดย่านใกล้

ชื่อผู้วิจัย ผศ.ดร.บุศราภรณ์ มหาโยธี (หัวหน้าโครงการ)  
คณะวิศวกรรมศาสตร์และเทคโนโลยีอุตสาหกรรม  
มหาวิทยาลัยศิลปากร อ.เมือง จ.นครปฐม 73000

แหล่งทุนอุดหนุนการวิจัย งบประมาณแผ่นดินประจำปี 2557 และ พ.ศ. 2558

สถาบันวิจัยและพัฒนา มหาวิทยาลัยศิลปากร

ปีที่เสร็จ พ.ศ. 2559

ประเภทการวิจัย การวิจัยประยุกต์

สาขาวิชา ภาควิชาเทคโนโลยีอาหาร

บทคัดย่อ

งานวิจัยนี้จึงมีวัตถุประสงค์เพื่อศึกษาศักยภาพของการใช้เทคนิคสเปกโตรสโกปีอินฟราเรดย่านใกล้ (near-infrared spectroscopy, NIR) ในการทำนายปริมาณสารที่ออกฤทธิ์ที่มีประโยชน์ต่อสุขภาพและความสามารถในการต้านอนุมูลอิสระในผลิตภัณฑ์เครื่องดื่มน้ำผักและน้ำผลไม้สกัดเข้มข้น โดยทำการวัดสเปกตรัมในช่วงความยาวคลื่นตั้งแต่ 800-2500 นาโนเมตร ใช้การวัดในระบบสะท้อนผ่านตัวอย่าง สร้างสมการทำนายด้วยวิธีการถดถอยกำลังสองน้อยที่สุดบางส่วน (partial least square regression, PLSR) ผลการศึกษาพบว่าสมการทำนายที่ดีที่สุดในการวิเคราะห์สมการทำนายปริมาณแอนโทไซยานินชนิด cyanidin-3-glucoside ที่ดีที่สุดให้ค่าสัมประสิทธิ์การตัดสินใจ ( $R^2$ ), ค่าความคลาดเคลื่อนในการทำนาย (RMSECV), ค่าความคลาดเคลื่อนเฉลี่ย (bias) และ ค่าสัดส่วนระหว่างส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานกับค่าความผิดพลาดมาตรฐานในการทำนายของกลุ่มทดสอบสมการ (RPD) ของชุดข้อมูล validation เท่ากับเท่ากับ 0.9037, 23.5 mg cyanidin-3-glucoside/kg sample, 0.504 และ 3.22 ตามลำดับ สมการทำนายปริมาณแอนโทไซยานิน cyanidin-3-rutinoside ที่วิเคราะห์ด้วยวิธี HPLC ที่ดีที่สุดให้ค่า  $R^2$ , RMSECV, Bias และ RPD เท่ากับ 0.8239, 26.2 mg cyanidin-3-rutinoside/kg sample, 0.0703 และ 2.38 ตามลำดับ ส่วนสมการทำนายปริมาณสารประกอบฟีนอลิกทั้งหมดที่ดีที่สุดให้ค่า  $R^2$  เท่ากับ 0.8370, RMSECV เท่ากับ 0.319 g GAE/kg sample, bias เท่ากับ 0.0598 และ RPD เท่ากับ 2.52 และสมการทำนายปริมาณวิตามินซีที่ดีที่สุด มีค่า  $R^2$  เท่ากับ 0.9860, RMSECV

เท่ากับ 1,630.00 mg ascorbic acid/kg sample, Bias เท่ากับ 351 และค่า RPD เท่ากับ 8.65 ในส่วนความสามารถในการต้านอนุมูลอิสระ FRAP มีค่า  $R^2$  เท่ากับ 0.7604, RMSECV เท่ากับ 5.62 mmol FeSO<sub>4</sub>/kg sample, Bias เท่ากับ 0.037 และค่า RPD เท่ากับ 2.04 สมการทำนายปริมาณไลโคปีนของน้ำมะเขือเทศสกัดเข้มข้นยี่ห้อคาโกเมะที่เหมาะสมให้ค่า  $R^2$ , RMSECV, Bias และ RPD เท่ากับ 0.9122, 1.69 mg lycopene/g sample, 0.0367 และ 3.38 ตามลำดับ ส่วนสมการทำนายปริมาณสารประกอบฟีนอลิกทั้งหมดที่ดีที่สุดให้ค่า  $R^2$  เท่ากับ 0.6544, RMSECV เท่ากับ 0.592 g GAE/kg sample, bias เท่ากับ 0.000279 และ RPD เท่ากับ 1.70 และสมการทำนายปริมาณวิตามินซีที่ดีที่สุด มีค่า  $R^2$  เท่ากับ 0.8896, RMSECV เท่ากับ 15,500 mg ascorbic acid/kg sample, Bias เท่ากับ -328 และค่า RPD เท่ากับ 3.01 พบว่าสมการทำนายความสามารถในการต้านอนุมูลอิสระ (DPPH) ที่มีความเหมาะสมที่สุดให้ค่า  $R^2$  เท่ากับ 0.4086, RMSECV เท่ากับ 11.3 mmol Trolox equivalents (TE) /kg sample, Bias เท่ากับ 3.76 และค่า RPD เท่ากับ 1.38 ตามลำดับ ในตัวอย่างน้ำทับทิมสกัดเข้มข้นนั้น ผลการสร้างสมการทำนายปริมาณสารประกอบฟีนอลิกทั้งหมดที่เหมาะสมที่สุดให้ค่า  $R^2$  เท่ากับ 0.8682, RMSECV เท่ากับ 10.2 g GAE/L, bias เท่ากับ 0.135 และ RPD เท่ากับ 1.96 และสมการทำนายค่าความสามารถในการต้านอนุมูลอิสระ (DPPH) ที่เหมาะสมที่สุดให้ค่า  $R^2$  เท่ากับ 0.8384, RMSECV เท่ากับ 846 mL PJ/mol DPPH, bias เท่ากับ -63.6 และ RPD เท่ากับ 2.49 จะเห็นได้ว่าเทคนิค NIR มีความเป็นไปได้ในการนำมาใช้ติดตามปริมาณสารที่ออกฤทธิ์ที่มีประโยชน์ต่อสุขภาพและความสามารถในการต้านอนุมูลอิสระในน้ำมัลเบอรี่สกัดเข้มข้น น้ำมะเขือเทศสกัดเข้มข้น และน้ำทับทิมสกัดเข้มข้นได้

คำสำคัญ : ฤทธิ์การต้านอนุมูลอิสระ, วิธีการตรวจสอบแบบไม่ทำลายตัวอย่าง, เครื่องดื่มเพื่อสุขภาพ

Research Title Rapid determination of bioactive compounds and antioxidant capacity in concentrated vegetables and fruits juice using near infrared spectroscopy

Researcher Assistant Professor Busarakorn Mahayothee  
Faculty of Engineering and Industrial Technology, Silpakorn University

Research Grants Fiscal Budget of Year 2014 and 2015

Research and Development Institute, Silpakorn University

Year of completion 2016

Type of research Applied research

Subjects (based NRCT) Food Technology

#### Abstract

The objective of this study was to evaluate the feasibility of using FT-NIR spectroscopy to determine the bioactive compounds and antioxidant capacities of concentrated vegetables and fruits juice. Spectrum acquisition was made at wavelength from 800 to 2500 nm in a transmittance mode using an FT-NIR spectrometer. Partial least square regression with a test set validation and full cross validation was performed to develop calibration models. The best models achieved for the anthocyanins content (cyanidin-3-glucoside) gave  $R^2$  of 0.9037, RMSECV of 23.5 mg cyanidin-3-glucoside/kg sample, bias of 0.504 and RPD of 3.22. Therefore, the best models achieved for the anthocyanins content (cyanidin-3-rutinoside) gave  $R^2$  of 0.8239, RMSECV of 26.2 mg cyanidin-3-rutinoside/kg sample, bias of 0.0703 and RPD of 2.38. Besides, the best models achieved for the total phenolic compound gave  $R^2$  of 0.8370, RMSECV of 0.319 g GAE/kg sample, bias of 0.0598 and RPD of 2.52. Thus, the best models achieved for the vitamin c gave  $R^2$  of 0.9860, RMSECV of 1,630.00 mg ascorbic acid/kg sample, bias of 351 and RPD of 8.65, while the best prediction model for FRAP assay was attained with  $R^2$  of 0.7604, RMSECV of 5.62 mmol  $\text{FeSO}_4$ /kg sample, bias of 0.037 and RPD of 2.04 respectively. For concentrated tomato juice: the best model was achieved for the lycopene content with  $R^2$  of 0.9122, RMSECV of 1.69 mg lycopene/g sample, Bias of

0.0367, and RPD of 3.38. Therefore, the best models achieved for the total phenolic compound gave  $R^2$  of 0.6544, RMSECV of 0.592 g GAE/kg sample, bias of 0.000279 and RPD of 1.70. Thus, the best models achieved for the vitamin c gave  $R^2$  of 0.8896, RMSECV of 15,500 mg ascorbic acid/kg sample, bias of -328 and RPD of 3.01, while the best prediction model for DPPH radical scavenging capacity was attained with  $R^2$  of 0.4086, RMSECV 11.3 mmol Trolox equivalents (TE) /kg sample, bias of 3.76 and RPD of 1.38 respectively. For concentrated pomegranate juices: the total phenolic compounds was accurately determined using NIRS with  $R^2$  of 0.8682, RMSECV of 10.2 g GAE/L, Bias of 0.135, and RPD of 1.96, Finally, the best prediction model for an antioxidant capacity( $EC_{50}$ ) with  $R^2$  of 0.8384, RMSECV of 846 mL PJ/mol DPPH, bias of -63.6 and RPD of 2.49. In conclusion, the NIRS has a potential for monitoring the bioactive compounds and antioxidant capacities of concentrated mulberry juice, concentrated tomato juice and concentrated pomegranate juice.

Keywords : Antioxidant activity, Non-destructive method, Healthy drink