



รายงานการวิจัย เรื่อง

การใช้เทคนิคสเปกโตรสโคปีอินฟราเรดย่านใกล้ในการวิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมีและ
การปลอมปนของน้ำตาลมะพร้าวและน้ำตาลโตนด

Using near infrared spectroscopy analysis for determination of chemical constituents
and adulterations of coconut and Palmyra palm sugars

ภายใต้ชุดโครงการวิจัยเรื่อง

การพัฒนาวิธีการตรวจสอบคุณภาพของผลิตผลการเกษตร และผลิตภัณฑ์
อาหารอย่างรวดเร็วด้วยเทคนิคสเปกโตรสโคปีอินฟราเรดย่านใกล้

Development in rapid methods to predict the properties of agricultural produces
and food products through near infrared spectroscopy

ผู้วิจัย

ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. เอกพันธ์ แก้วมณีชัย

ได้รับทุนอุดหนุนการวิจัยจาก

สถาบัน วิจัยและพัฒนา มหาวิทยาลัยศิลปากร ประจำปีงบประมาณ พ.ศ 2556

ปีที่ดำเนินการเสร็จ พ.ศ 2558

กิตติกรรมประกาศ

ผู้วิจัยขอขอบคุณสถาบันวิจัยและพัฒนา มหาวิทยาลัยศิลปากร ที่ให้การสนับสนุนงบประมาณในการทำวิจัย และให้คำปรึกษาในระหว่างการดำเนินโครงการ และขอขอบคุณภาควิชาเทคโนโลยีอาหารที่เอื้อเฟื้อสถานที่ในการทำวิจัยให้กับโครงการวิจัย

ชื่อโครงการ การใช้เทคนิคสเปกโตรสโคปีอินฟราเรดย่านใกล้ในการวิเคราะห์
องค์ประกอบทางเคมีและการปลอมปนของน้ำตาลมะพร้าวและน้ำตาลโตนด
ชื่อผู้วิจัย ผศ.ดร.เอกพันธ์ แก้วมณีชัย (หัวหน้าโครงการ)
คณะวิศวกรรมศาสตร์และเทคโนโลยีอุตสาหกรรม
มหาวิทยาลัยศิลปากร

แหล่งทุนอุดหนุนการวิจัย งบประมาณแผ่นดินประจำปี 2556

สถาบันวิจัยและพัฒนา มหาวิทยาลัยศิลปากร

ปีที่เสร็จ พ.ศ.2558

ประเภทการวิจัย การวิจัยประยุกต์

สาขาวิชา เกษตรศาสตร์และชีววิทยา กลุ่มวิชา อุตสาหกรรมเกษตร

บทคัดย่อ

น้ำตาลมะพร้าวเป็นผลิตภัณฑ์ทางการเกษตรที่สำคัญของประเทศไทย การพัฒนาวิธีการตรวจสอบคุณภาพน้ำตาลมะพร้าวให้มีความถูกต้องแม่นยำและรวดเร็วจะเป็นประโยชน์ต่ออุตสาหกรรมการแปรรูปน้ำตาลมะพร้าว จึงได้ทำการศึกษาเพื่อประยุกต์ใช้เทคนิคสเปกโตรสโคปีอินฟราเรดย่านใกล้ (NIR) กับการควบคุมคุณภาพน้ำตาลมะพร้าวสดและน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวในด้านองค์ประกอบทางเคมีและการปลอมปน โดยเมื่อใช้เทคนิค NIR ที่ช่วงคลื่น $12480-4000\text{ cm}^{-1}$ และทำการปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมด้วยเทคนิคคณิตศาสตร์ร่วมกับการสร้างสมการด้วยเทคนิค partial least squares regression (PLS) พบว่าสมการที่ใช้ทำนายปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมด ปริมาณกลูโคส ฟรุคโตส ซูโครส ค่า pH ปริมาณกรดที่ไทเทรตได้ และปริมาณความชื้นของน้ำตาลมะพร้าวสดนั้นมีค่า coefficients of determination (R^2) เท่ากับ 0.956, 0.925, 0.967, 0.814, 0.937, 0.893 และ 0.957 ตามลำดับ และผลการสร้างแบบจำลองทำนายการปลอมปนน้ำเชื่อม (สารละลายซูโครส) ในน้ำตาลมะพร้าวสดที่ระดับการปลอมปน 10, 25, 50, 75 และ 100% (w/w) พบว่า เทคนิค principal component analysis (PCA) ยังไม่มีประสิทธิภาพเพียงพอในการแยกความแตกต่างระหว่างน้ำตาลมะพร้าวสดกับน้ำตาลมะพร้าวสดปลอมปนด้วยน้ำเชื่อมได้ แต่การใช้เทคนิค PLS นั้นสามารถแยกความแตกต่างระหว่างน้ำตาลมะพร้าวสดกับน้ำตาลมะพร้าวสดที่มีการปลอมปนด้วยน้ำเชื่อมตั้งแต่ 50% (w/w) ขึ้นไปได้ สำหรับสมการ

ทำนายปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมด ปริมาณกลูโคส ฟรุกโตส ซูโครส ค่า pH ปริมาณกรดที่ไทเทรตได้ และปริมาณความชื้นของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวที่สร้างด้วยเทคนิค PLS นั้นมีค่า R^2 เท่ากับ 0.689, 0.773, 0.925, 0.881, 0.819, 0.826 และ 0.723 ตามลำดับ ส่วนการสร้างแบบจำลองทำนายการปลอมปนน้ำตาลทราย (ซูโครส) ในน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวที่ระดับการปลอมปน 25 และ 50% (โดยน้ำหนักของของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมด) พบว่า การใช้เทคนิค PCA ยังไม่สามารถแยกความแตกต่างระหว่างน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวแท้และน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวปลอมปนด้วยน้ำเชื่อมได้ แต่การใช้เทคนิค PLS สามารถใช้แยกความแตกต่างระหว่างน้ำตาลมะพร้าวแท้และน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวที่มีการปลอมปนน้ำตาลทรายในระดับ 25 และ 50% ได้ จากผลดังกล่าวชี้ให้เห็นว่าเทคนิค NIR สามารถนำมาประยุกต์ใช้ในการตรวจสอบคุณภาพของน้ำตาลมะพร้าวได้

น้ำตาลโตนดเป็นอีกผลิตผลทางการเกษตรที่สำคัญของประเทศไทย การพัฒนานวัตกรรมตรวจสอบคุณภาพน้ำตาลโตนดให้มีความถูกต้องแม่นยำและรวดเร็วจะเป็นประโยชน์ต่ออุตสาหกรรมการแปรรูปน้ำตาลโตนด จึงได้ทำการศึกษาเพื่อประยุกต์ใช้เทคนิค NIR กับการควบคุมคุณภาพน้ำตาลโตนดสดในด้านองค์ประกอบทางเคมี โดยเมื่อใช้เทคนิค NIR ที่ช่วงคลื่น $12480-4000\text{ cm}^{-1}$ และทำการปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมด้วยเทคนิคคณิตศาสตร์ร่วมกับการสร้างสมการด้วยเทคนิค PLS พบว่าสมการที่ใช้ทำนายปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมด ค่า pH ปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ ปริมาณกรดที่ไทเทรตได้และปริมาณความชื้น มีค่า R^2 เท่ากับ 0.898, 0.737, 0.414, 0.484 และ 0.391 ตามลำดับ

คำสำคัญ : น้ำตาลสด, น้ำตาลมะพร้าว, น้ำตาลโตนด, อินฟราเรดย่านใกล้, องค์ประกอบเคมี, การปลอมปน

**Using near infrared spectroscopy analysis for determination of chemical constituents
and adulterations of coconut and Palmyra palm sugars**

Assistant Professor Eakaphan Keowmaneechai (Project Leader)

Faculty of Engineering And Industrial Technology Silpakorn University

Research Grants Fiscal Budget of Year 2012

Research and Development Institute, Silpakorn University

Year of completion 2015

Type of research Applied Research

Subjects (based *NRCT*) Agriculture and Biology, Agro-Industry

Abstract

Coconut sugar is an important agricultural produce of Thailand. The development of an accurate and rapid technique for quality evaluation of coconut sugars will be useful for the coconut sugar processing industry. Therefore, application of near-infrared spectroscopy (NIR) technique for quality control of coconut jaggery and crystallized coconut sugar in terms of chemical constituents and adulterations was investigated in this study. The NIR was performed by using the wavenumber region of 12480-4000 cm^{-1} . Pretreated NIR spectra were used to develop the calibration equations by partial least squares regression (PLS). Results showed that the calibration equations for predicting total soluble solids (TSS), glucose, fructose, sucrose, pH, titratable acidity (TA) and moisture content in coconut jaggery provided the coefficients of determination (R^2) as 0.956, 0.925, 0.967, 0.814, 0.937, 0.893 and 0.957, respectively. The calibration models for discriminating adulterations with sucrose solutions in coconut jaggery at the levels of 10, 25, 50, 75 and 100% (w/w) revealed that principal component analysis (PCA) could not discriminate authentic coconut jaggery from the adulterated ones. However, PLS model was able to indicate the adulteration level of more than 50% in coconut jaggery. For crystallized coconut sugar, results showed that the calibration equations for TSS, glucose, fructose, sucrose, pH, TA and moisture content provided R^2 as 0.689, 0.773, 0.925, 0.881, 0.819, 0.826 and 0.723, respectively. The calibration

models for discriminating adulterations with sucrose in crystallized coconut sugar at the levels of 25 and 50% (by weight of TSS) indicated that PCA model could not discriminate authentic and crystallized from the adulterated ones. However, PLS model was able to discriminate the sugars with and without the adulterations. According to all of the results, the NIR technique can be applied for inspecting quality of coconut sugar.

Palmyra palm sugar is another important agricultural produce of Thailand. The development of an accurate and rapid technique for quality evaluation of Palmyra palm sugars will be useful for the Palmyra palm processing industry. Therefore, application of NIR technique for quality control of Palmyra palm jaggery in terms of chemical constituents was investigated in this study. The NIR was performed by using the wavenumber region of 12480-4000 cm^{-1} . Pretreated NIR spectra were used to develop the calibration equations by PLS. Results showed that the calibration equations for predicting TSS, pH, reducing sugar content, TA and moisture content in Palmyra palm jaggery provided the R^2 as 0.898, 0.737, 0.414, 0.484 and 0.391, respectively.

Key word: jaggery, palm sap, coconut sugar, palm sugar, adulteration,
near infrared spectroscopy

สารบัญเรื่อง

หน้า

กิตติกรรมประกาศ

บทคัดย่อ

สารบัญตาราง

สารบัญภาพ

บทที่ 1

1.1 ความเป็นมาและความสำคัญของปัญหา 1

1.2 วัตถุประสงค์ 2

1.3 ขอบเขตของการวิจัย 2

บทที่ 2

2.1 น้ำตาลมะพร้าว 3

2.2 องค์ประกอบของน้ำตาลมะพร้าวสด 3

2.3 การผลิตน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว 5

2.4 องค์ประกอบของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว 6

2.5 ปัจจัยที่มีผลต่อคุณภาพน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว 7

2.6 ไม่เคี้ยว 9

2.7 เทคนิคสเปกโตรสโคปีอินฟราเรดย่านใกล้ (NIR) 9

2.8 การวิเคราะห์ทางเคมีและทางกายภาพโดยใช้เทคนิค NIR 11

2.9 การประยุกต์ใช้เทคนิค NIR ในวิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมี 16

2.10 การประยุกต์ใช้เทคนิค NIR ในวิเคราะห์การปลอมปน 19

บทที่ 3

3.1 วัตถุประสงค์ 27

3.2 สารเคมี 27

3.3 อุปกรณ์และเครื่องมือ 28

3.4 วิธีการทดลอง 29

	หน้า
บทที่ 4	
4.1 ผลการทดลองและวิจารณ์ผลการทดลอง	38
4.1.1 การศึกษาการใช้เทคนิค NIR ในการวิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมีของ น้ำตาลมะพร้าวสด	38
4.1.2 การศึกษาการใช้เทคนิค NIR ในการตรวจสอบการปลอมปนของ น้ำตาลมะพร้าวสด	58
4.1.3 การศึกษาการใช้เทคนิค NIR ในการวิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมีของ น้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว	64
4.1.4 การศึกษาการใช้เทคนิค NIR ในการตรวจสอบการปลอมปนของ น้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว	83
บทที่ 5	88
5.1 สรุปผลการทดลอง	88
5.2 ข้อเสนอแนะ	89
เอกสารอ้างอิง	90
ภาคผนวก	97

สารบัญตาราง

ตารางที่		หน้า
2.1	สมบัติและองค์ประกอบของน้ำตาลมะพร้าวสด	4
2.2	สมบัติและองค์ประกอบของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว	6
2.3	ประสิทธิภาพของสมการทำนาย โดยพิจารณาจากค่า R และ R ²	16
2.4	การแบ่งกลุ่มตัวอย่างตามระดับการปลอมปนในน้ำผึ้ง	22
2.5	ผลของแบบจำลองแบ่งกลุ่มที่สร้างด้วยวิธี DPLS โดยใช้ข้อมูลสเปกตรัมที่แตกต่างกัน	25
2.6	ผลของการแยกตัวอย่างด้วยวิธี DPLS ในตัวอย่างที่ใช้สร้างแบบจำลอง	25
4.7	ค่าทางเคมีและค่าสถิติเบื้องต้นของน้ำตาลมะพร้าวสด	38
4.8	ค่าทางสถิติของสมการทำนายปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมดจากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ ของน้ำตาลมะพร้าวสด	42
4.9	ค่าทางสถิติของสมการทำนายปริมาณน้ำตาลกลูโคสจากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ ของน้ำตาลมะพร้าวสด	44
4.10	ค่าทางสถิติของสมการทำนายปริมาณน้ำตาลฟรุคโตสจากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ ของน้ำตาลมะพร้าวสด	45
4.11	ค่าทางสถิติของสมการทำนายปริมาณน้ำตาลซูโครสจากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ ของน้ำตาลมะพร้าวสด	46
4.12	ค่าทางสถิติของสมการทำนายค่า pH จากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ ของน้ำตาลมะพร้าวสด	51
4.13	ค่าทางสถิติของสมการทำนายปริมาณกรดที่ไทเทรตได้จากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ ของน้ำตาลมะพร้าวสด	54
4.14	ค่าทางสถิติของสมการทำนายปริมาณความชื้นจากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ ของน้ำตาลมะพร้าวสด	56
4.15	ค่าทางสถิติของแบบจำลองทำนายปริมาณการปลอมปนน้ำเชื่อมจากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ ของน้ำตาลมะพร้าวสด	62
4.16	ค่าทางเคมีและค่าสถิติเบื้องต้นของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว	64

ตารางที่		หน้า
4.17	ค่าทางสถิติของสมการทำนายปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมดจากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว	66
4.18	ค่าทางสถิติของสมการทำนายปริมาณน้ำตาลกลูโคสจากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว	69
4.19	ค่าทางสถิติของสมการทำนายปริมาณน้ำตาลฟรุคโตสจากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว	70
4.20	ค่าทางสถิติของสมการทำนายปริมาณน้ำตาลซูโครสจากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว	71
4.21	ค่าทางสถิติของสมการทำนายค่า pH จากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว	76
4.22	ค่าทางสถิติของสมการทำนายปริมาณกรดที่ไทเทรตได้จากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว	78
4.23	ค่าทางสถิติของสมการทำนายปริมาณความชื้นจากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว	81
4.24	ค่าทางสถิติของสมการทำนายปริมาณการปลอมปนน้ำตาลทรายจากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว	86

สารบัญภาพ

ภาพที่		หน้า
2.1	แถบการดูดกลืนแสงในช่วง NIR	10
2.2	ระบบการวัด NIR	11
2.3	สเปกตรัมการดูดกลืนแสง NIR โดย (a) สเปกตรัมเริ่มต้น, (b) สเปกตรัมที่ปรับแต่งด้วยวิธีอนุพันธ์อันดับหนึ่ง และ (c) สเปกตรัมที่ปรับแต่งด้วยวิธีอนุพันธ์อันดับสอง	14
2.4	สเปกตรัมการดูดกลืนแสง NIR ของน้ำเบียร์	18
2.5	สเปกตรัมการดูดกลืนแสงของตัวอย่างน้ำผึ้งแท้และตัวอย่างน้ำผึ้งที่มีการปลอมปนด้วย jaggery syrup	21
2.6	กราฟคะแนนของตัวแปร PC 2 ตัวแปรที่แสดงตัวอย่างกลุ่มที่ 1	22
2.7	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มข้นของ jaggery syrup ที่ปลอมปนอยู่จริงและค่าที่ทำนายได้จากเทคนิค NIR ในตัวอย่างน้ำผึ้ง	23
2.8	สเปกตรัมการดูดกลืนแสงของตัวอย่างน้ำผึ้งแท้และตัวอย่างน้ำผึ้งที่มีการปลอมปนด้วย HFCS	24
2.9	กราฟค่าการทำนายด้วยวิธี DPLS ของตัวอย่างน้ำผึ้งแท้และตัวอย่างน้ำผึ้งที่มีการปลอมปน ด้วย HFCS	26
3.10	sample cell สำหรับใช้วัดสเปกตรัม NIR ของตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวสด	29
3.11	การวัดสเปกตรัม NIR ของน้ำตาลมะพร้าวสด ด้วยเครื่องสเปกโตรโฟโตมิเตอร์อินฟราเรดย่านใกล้	30
3.12	การวัดสเปกตรัม NIR ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว	34
4.13	สเปกตรัมการดูดกลืนแสง NIR ของน้ำตาลมะพร้าวสดจำนวน 174 ตัวอย่าง	40
4.14	ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายค่า TSS ของน้ำตาลมะพร้าวสดที่สร้างจาก ข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค MSC	43
4.15	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่า TSS ที่วัดได้จริงกับค่า TSS ที่ทำนายได้ของ น้ำตาลมะพร้าวสด	43

ภาพที่		หน้า
4.16	ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายปริมาณกลูโคสในน้ำตาลมะพร้าวสดที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D กับ SNV	48
4.17	ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายปริมาณฟรุกโตสในน้ำตาลมะพร้าวสดที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 2D	48
4.18	ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายปริมาณซูโครสในน้ำตาลมะพร้าวสดที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D กับ SNV	49
4.19	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างปริมาณกลูโคสที่วัดได้จริงกับปริมาณกลูโคสที่ทำนายได้ของน้ำตาลมะพร้าวสด	49
4.20	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างปริมาณฟรุกโตสที่วัดได้จริงกับปริมาณฟรุกโตสที่ทำนายได้ของน้ำตาลมะพร้าวสด	50
4.21	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างปริมาณซูโครสที่วัดได้จริงกับปริมาณซูโครสที่ทำนายได้ของน้ำตาลมะพร้าวสด	50
4.22	ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายค่า pH ของน้ำตาลมะพร้าวสดที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค MSC	52
4.23	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่า pH ที่วัดได้จริงกับค่า pH ที่ทำนายได้ของน้ำตาลมะพร้าวสด	53
4.24	ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายปริมาณ TA ในน้ำตาลมะพร้าวสด โดยสร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D	55
4.25	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างปริมาณ TA ที่วิเคราะห์ได้จริงกับปริมาณ TA ที่ทำนายได้ของน้ำตาลมะพร้าวสด	55
4.26	ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายปริมาณความชื้นในน้ำตาลมะพร้าวสดที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 2D	57
4.27	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างปริมาณความชื้นที่วิเคราะห์ได้จริงกับปริมาณความชื้นที่ทำนายได้ของน้ำตาลมะพร้าวสด	58
4.28	สเปกตรัมการดูดกลืนแสงของน้ำตาลมะพร้าวสดแท้และน้ำตาลมะพร้าวสดที่มีการปลอมปนด้วยน้ำเชื่อม	59

ภาพที่		หน้า
4.29	กราฟคะแนนของตัวแปร PC1 และ PC2 ของตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวสดแท้และน้ำตาลมะพร้าวสดที่มีการปลอมปนด้วยน้ำเชื่อม	60
4.30	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าจริงกับค่าทำนายของปริมาณน้ำเชื่อม 0-100% (w/w) ที่ปลอมปนอยู่ในน้ำตาลมะพร้าวสดของตัวอย่างกลุ่มสร้างแบบจำลอง	63
4.31	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าจริงกับค่าทำนายของปริมาณน้ำเชื่อม 0-100% (w/w) ที่ปลอมปนอยู่ในน้ำตาลมะพร้าวสดของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบแบบจำลอง	63
4.32	สเปกตรัมการดูดกลืนแสง NIR ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวจำนวน 120 ตัวอย่าง	65
4.33	ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายค่า TSS ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D+SNV	67
4.34	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่า TSS จริงที่วัดได้กับค่า TSS ที่ทำนายได้ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว	68
4.35	ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายปริมาณกลูโคสของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D กับ MSC	72
4.36	ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายปริมาณฟรุคโตสของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค MSC	73
4.37	ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายปริมาณซูโครสของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D	73
4.38	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างปริมาณกลูโคสที่วัดได้จริงกับปริมาณกลูโคสที่ทำนายได้ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว	74
4.39	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างปริมาณฟรุคโตสที่วัดได้จริงกับปริมาณฟรุคโตสที่ทำนายได้ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว	74
4.40	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างปริมาณซูโครสที่วัดได้จริงกับปริมาณซูโครสที่ทำนายได้ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว	75

ภาพที่		หน้า
4.41	ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายค่า pH ของน้ำตาลมะพร้าว เคี้ยวที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D	77
4.42	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่า pH ที่วัดได้จริงกับค่า pH ที่ทำนายได้ ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว	77
4.43	ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายค่า TA ของน้ำตาลมะพร้าว เคี้ยวที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D กับ SNV	79
4.44	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่า TA จริงที่วิเคราะห์ได้กับค่า TA ที่ ทำนายได้ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว	80
4.45	ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายปริมาณความชื้นของน้ำตาล มะพร้าวเคี้ยวที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 2D	82
4.46	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างปริมาณความชื้นที่วิเคราะห์ได้จริงกับ ปริมาณความชื้นที่ทำนายได้ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว	82
4.47	สเปกตรัมการดูดกลืนแสงของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวแท้และน้ำตาลมะพร้าว เคี้ยวที่มีการปลอมปนด้วยน้ำตาลทราย	83
4.48	กราฟคะแนนของตัวแปร PC1 และ PC3 ของตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว แท้และน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวที่มีการปลอมปนด้วยน้ำตาลทราย	84
4.49	ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายปริมาณการปลอมปนน้ำตาล ทรายในน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่ง ด้วยเทคนิค 1D กับ SNV	86
4.50	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าจริงกับค่าทำนายของปริมาณการ ปลอมปนน้ำตาลทรายที่ระดับ 25% และ 50%	87
4.51	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าจริงกับค่าทำนายของปริมาณการ ปลอมปนน้ำตาลทรายที่ระดับ 25% และ 50%	87

บทที่ 1

บทนำ

1.1 ความสำคัญ ที่มาของปัญหาที่ทำการวิจัย

การทำน้ำตาลมะพร้าวและน้ำตาลโตนดถือเป็นอุตสาหกรรมในครัวเรือนที่ดำเนินสืบทอดกันมาเป็นระยะเวลายาวนานในประเทศไทย แหล่งผลิตที่สำคัญอยู่ในเขตภูมิภาคภาคกลางตอนล่าง โดยเฉพาะจังหวัดสมุทรสงคราม สมุทรสาคร ราชบุรี และเพชรบุรี วัตถุดิบสำคัญที่ใช้ผลิตน้ำตาลมะพร้าวและน้ำตาลโตนดคือน้ำตาลสดจากดอกหรือจั่นของต้นมะพร้าวและต้นตาลโตนด น้ำตาลสดที่เก็บเกี่ยวได้นั้นสามารถนำไปผ่านกระบวนการแปรรูปเป็นผลิตภัณฑ์ได้หลากหลาย อาทิเช่น การแปรรูปเป็นผลิตภัณฑ์น้ำตาลมะพร้าวสดและน้ำตาลโตนดสดพร้อมบริโภค หรือผ่านกระบวนการต้มเคี่ยวด้วยความร้อนเพื่อผลิตเป็นน้ำตาลมะพร้าวเคี่ยวและน้ำตาลโตนดเคี่ยว เป็นต้น แต่ปัญหาที่พบและส่งผลกระทบต่อคุณภาพของผลิตภัณฑ์คือน้ำตาลสดซึ่งเป็นวัตถุดิบในการผลิตที่ได้จากการเก็บเกี่ยวนั้นมีความแปรปรวนทางด้านองค์ประกอบทำให้มีคุณภาพไม่สม่ำเสมอ รวมถึงพบปัญหาการปลอมปนต่างๆ เช่น น้ำและน้ำตาลซูโครสหรือน้ำตาลทรายลงในน้ำตาลมะพร้าวสด การเติมเบะแซและน้ำตาลทรายลงในน้ำตาลเคี่ยว ดังนั้น การควบคุมคุณภาพของน้ำตาลสดซึ่งเป็นวัตถุดิบหลักโดยการตรวจสอบองค์ประกอบทางเคมี ได้แก่ ปริมาณน้ำ ซูโครส กลูโคส ฟรุคโตส และปริมาณกรดทั้งหมด (total acidity) ซึ่งเป็นองค์ประกอบที่บ่งบอกถึงคุณภาพของวัตถุดิบน้ำตาลมะพร้าวสดได้ จะช่วยควบคุมคุณภาพของผลิตภัณฑ์น้ำตาลมะพร้าวแปรรูปได้เป็นอย่างดี

โดยปกติการวิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมี ได้แก่ ปริมาณน้ำ ซูโครส กลูโคส ฟรุคโตส และปริมาณกรดทั้งหมด จะใช้วิธีการทางเคมีซึ่งมีข้อเสียหลายประการ คือ ใช้ระยะเวลานานในการวิเคราะห์และสามารถวิเคราะห์ได้เพียงครั้งละองค์ประกอบ มีค่าใช้จ่ายในการวิเคราะห์ค่อนข้างสูงและสารเคมีที่ใช้ในการวิเคราะห์ อาจเป็นอันตรายต่อสุขภาพและเป็นพิษต่อสิ่งแวดล้อม ซึ่งหากสามารถหาวิธีที่ใช้วิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมีได้ ครั้งละหลายองค์ประกอบ มีความรวดเร็ว ถูกต้องแม่นยำ โดยไม่ใช้สารเคมีมาทดแทนวิธีการวิเคราะห์แบบดั้งเดิมได้ จะช่วยให้การผลิตน้ำตาลมะพร้าวสดและน้ำตาลมะพร้าวแปรรูปมีคุณภาพและประสิทธิภาพเพิ่มขึ้น ซึ่งเทคนิคสเปกโตรสโกปีอินฟราเรดย่านใกล้ (Near-Infrared Spectroscopy, NIR) เป็นเทคนิควิเคราะห์ที่มีการใช้กันอย่างแพร่หลายในปัจจุบัน เนื่องจากเป็นวิธีวิเคราะห์แบบไม่ทำลายตัวอย่าง (non-destructive analysis technique) ให้ผลวิเคราะห์ที่

ถูกต้อง แม่นยำ รวดเร็ว ในการวิเคราะห์ที่ไม่ใช้สารเคมี มีค่าใช้จ่ายในการวิเคราะห์ต่อตัวอย่างต่ำ และสามารถวิเคราะห์ได้หลายองค์ประกอบในในครั้งเดียว จึงเป็นเทคนิคที่น่าจะนำมาประยุกต์ใช้ในการวิเคราะห์ปริมาณน้ำ น้ำตาลซูโครสและปริมาณกรดทั้งหมดในน้ำตาลสดได้ โดยมีรายงานวิจัยมากมายที่แสดงถึงความสามารถและประสิทธิภาพของเทคนิค NIR ในการตรวจสอบปริมาณน้ำ น้ำตาลและปริมาณกรดทั้งหมดในน้ำผลไม้ เช่น น้ำส้ม (Cen และคณะ, 2007) น้ำแบร์เบอร์รี่ (Shao และคณะ, 2007; Xie และคณะ, 2009) น้ำบ๊วย (Chen และคณะ, 2006) น้ำส้มสายชูที่ผลิตจากข้าว (Liu และคณะ, 2008) ได้เป็นอย่างดี อย่างไรก็ตามยังไม่มีงานวิจัยที่ศึกษาถึงความสามารถในการใช้เทคนิค NIR ในการวิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมีของน้ำตาลมะพร้าวและน้ำตาลโตนดมาก่อน ดังนั้น การวิจัยในโครงการนี้จึงเป็นสิ่งที่น่าสนใจและจะเป็นประโยชน์ต่ออุตสาหกรรมเกษตรของประเทศไทย ในปัจจุบันอุตสาหกรรมน้ำตาลมะพร้าวและน้ำตาลโตนดมีผู้ประกอบการรายใหญ่มากขึ้นและได้มีการกำหนดมาตรฐานผลิตภัณฑ์ชุมชนแล้ว ควรมีหน่วยงานของรัฐให้บริการการวิเคราะห์ด้วย NIR เนื่องจากยังไม่มีวิธีวิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมีเฉพาะวิธีใด ที่สามารถพิสูจน์เอกลักษณ์น้ำตาลมะพร้าวและน้ำตาลโตนดได้ชัดเจน

1.2 วัตถุประสงค์ของการวิจัย

เพื่อศึกษาวิธีการใช้เทคนิค NIR ในการวิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมีและตรวจสอบการปลอมปนของน้ำตาลมะพร้าวและน้ำตาลโตนด ทั้งที่เป็นน้ำตาลสดและที่เป็นน้ำตาลเคี้ยว

1.3 ขอบเขตของการวิจัย

- 1.3.1 วัตถุประสงค์ที่ทำการศึกษา ได้แก่ น้ำตาลมะพร้าวสดและน้ำตาลโตนดสดที่ซื้อมาจาก ผู้จำหน่ายน้ำตาลสดในจังหวัด ราชบุรี เพชรบุรี สมุทรสาคร และสมุทรสงคราม
- 1.3.2 ศึกษาการใช้เทคนิค NIR ในการวิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมีของน้ำตาลมะพร้าวสดและน้ำตาลโตนดสด
- 1.3.3 ศึกษาการใช้เทคนิค NIR เพื่อตรวจสอบการปลอมปนของน้ำตาลมะพร้าวสดและน้ำตาลโตนดสด
- 1.3.4 ศึกษาการใช้เทคนิค NIR ในการวิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมีของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวและน้ำตาลโตนดเคี้ยว
- 1.3.5 ศึกษาการใช้เทคนิค NIR เพื่อตรวจสอบการปลอมปนของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวและน้ำตาลโตนดเคี้ยว

บทที่ 2

เอกสารงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

2.1 น้ำตาลมะพร้าว

น้ำตาลมะพร้าว คือ น้ำตาลสดที่เก็บเกี่ยวได้จากจั่น หรือช่อดอก หรือรวง ของต้นมะพร้าว มะพร้าวเป็นพืชในวงศ์ปาล์ม (Genus Palmaceae) มีชื่อวิทยาศาสตร์ว่า *Cocos nucifera* Linn. (เกษตร, 2541) พันธุ์ของมะพร้าวที่เหมาะสมสำหรับทำน้ำตาลและชาวสวนนิยมใช้ทำน้ำตาลคือ มะพร้าวพันธุ์กลางและพันธุ์หมูสีหรือพันธุ์หมูสีกลาย โดยจะสามารถให้น้ำตาลสดได้เมื่อต้นมะพร้าวมีอายุได้ 3-4 ปี และเริ่มมีช่อดอก อายุการออกจั่นแล้วแต่พันธุ์ที่ปลูกและการดูแลรักษา จั่นหรือรวงมะพร้าวที่จะใช้จะต้องโตเต็มที่ ไม่อ่อนหรือแก่เกินไป มีความยาวประมาณ 45-70 เซนติเมตร และกาบหุ้มจั่นยังไม่คลี่บานออก ชาวสวนจะเริ่มทำการเก็บน้ำตาลสดด้วยการโน้มจั่น แล้วจึงทำการปาดจั่น หลังจากนั้นจึงเริ่มทำการรองรับน้ำตาลสด (หลวงสมานกิจ, 2485; ศิริพร, 2519) โดยใช้กระบอกที่ใส่เปลือกไม้พะยอมหรือไม้เคี่ยมลงไปประมาณ 2-3 กรัม เพื่อช่วยให้น้ำตาลสดที่รองจากต้นไม่มีรสเปรี้ยวหรือมีกลิ่นบูดเร็วเกินไป เนื่องจากสามารถช่วยป้องกันและยับยั้งการเจริญของจุลินทรีย์ได้ (กล้าณรงค์, 2532; วิญญู, 2535; กรมส่งเสริมการเกษตร, 2544)

ฤดูที่เหมาะสมในการทำน้ำตาลมะพร้าวนั้นสามารถทำได้ทั้ง 3 ฤดู แต่น้ำตาลที่เก็บได้ในฤดูหนาวนั้นเป็นน้ำตาลเนื้อดี มีน้ำตาลมาก ส่วนในฤดูร้อน น้ำตาลที่ได้ไม่ดี เนื้อใส มีรสเปรี้ยว ส่วนน้ำตาลที่เก็บได้ในฤดูฝนจะมีคุณภาพปานกลาง (กล้าณรงค์, 2532)

ลักษณะของน้ำตาลมะพร้าวสดที่เก็บเกี่ยวได้จะมีสีขาวขุ่น โปร่งแสง มีค่าพีเอชค่อนข้างเป็นกลาง และมีความหวาน (Borse, 2006)

2.2 องค์ประกอบของน้ำตาลมะพร้าวสด

สำหรับองค์ประกอบทางกายภาพและทางเคมีของน้ำตาลสดจากมะพร้าวแสดงดังตารางที่ 2.1 ทั้งนี้องค์ประกอบและคุณภาพของน้ำตาลมะพร้าวสดนั้นสามารถเปลี่ยนแปลงไปได้ตามพันธุ์ สถานที่ปลูก เวลา และระยะเวลาในการเก็บเกี่ยว (Borse, 2006)

ตารางที่ 2.1 สมบัติและองค์ประกอบของน้ำตาลมะพร้าวสด

สมบัติและองค์ประกอบของน้ำตาลสด		ค่าที่วิเคราะห์ได้
การวิเคราะห์ของฟิลิปปินส์		
ความถ่วงจำเพาะ	1.07	
ปริมาณของแข็งทั้งหมด	17.5	กรัมต่อ 100 กรัมมิลลิลิตร
ซูโครส	16.5	กรัมต่อ 100 กรัมมิลลิลิตร
น้ำตาลอินเวอร์ท	ปริมาณเล็กน้อย	
โปรตีน	0.60	กรัมต่อ 100 กรัมมิลลิลิตร
เถ้า	0.40	กรัมต่อ 100 กรัมมิลลิลิตร
การวิเคราะห์ของอินเดีย		
ความถ่วงจำเพาะ	1.07	
น้ำ	84.42	กรัมต่อ 100 กรัมมิลลิลิตร
ซูโครส	14.60	กรัมต่อ 100 กรัมมิลลิลิตร
กัม	0.56	กรัมต่อ 100 กรัมมิลลิลิตร
อัลบูมิน	0.12	กรัมต่อ 100 กรัมมิลลิลิตร
ไขมัน	0.04	กรัมต่อ 100 กรัมมิลลิลิตร
เกลือแร่	0.26	กรัมต่อ 100 กรัมมิลลิลิตร
การวิเคราะห์ของไทย		
พลังงาน	48.0	แคลอรีต่อ 100 กรัม
ฟิโอส	5.75	
น้ำ	87.5	กรัมต่อ 100 กรัม
คาร์โบไฮเดรต	11.40	กรัมต่อ 100 กรัม
น้ำตาลทั้งหมด	18.09	กรัมต่อ 100 กรัมมิลลิลิตร
โปรตีน	0.22	กรัมต่อ 100 กรัม
ไขมัน	0.40	กรัมต่อ 100 กรัม
กรดแอสคอร์บิก	16.67-20.6	มิลลิกรัมต่อ 100 กรัมมิลลิลิตร
แคลเซียม	0.40	มิลลิกรัมต่อ 100 กรัมมิลลิลิตร

สมบัติและองค์ประกอบของน้ำตาลสด	ค่าที่วิเคราะห์ได้
ฟอสฟอรัส	15.06- 20.0 มิลลิกรัมต่อ 100 กรัมมิลลิลิตร
เหล็ก	0.18 มิลลิกรัมต่อ 100 กรัมมิลลิลิตร
วิตามินบี 1	0.016 มิลลิกรัมต่อ 100 กรัมมิลลิลิตร
วิตามินบี 2	0.006 มิลลิกรัมต่อ 100 กรัมมิลลิลิตร
วิตามินบี 3	0.48 มิลลิกรัมต่อ 100 กรัมมิลลิลิตร

ที่มา: ศิริพร (2519)

2.3 การผลิตน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

กระบวนการเคี้ยวน้ำตาลมะพร้าวเริ่มจากการเตรียมอุปกรณ์และภาชนะที่ใช้เคี้ยวให้สะอาด แล้วจึงนำน้ำตาลสดที่เก็บเกี่ยวมาได้และผ่านการกรองด้วยผ้ามีสลิน เพื่อกำจัดเศษผงแมลง และเปลือกไม้พะยอมออกแล้วมาเทลงในกระทะจนเกือบเต็มกระทะ จากนั้นจึงเร่งไฟให้แรงที่สุดเพื่อให้น้ำตาลสดในกระทะเดือดโดยเร็ว เมื่อน้ำตาลสดเดือดฟองน้ำตาลจะล้นออกนอกกระทะ ดังนั้นผู้เคี้ยวน้ำตาลจึงควรหาวิธีการป้องกันโดยการนำกงมาคลุมปากกระทะเพื่อป้องกันฟองของน้ำตาลล้นออกมา (ลลิต, 2513; วรณนา, 2536) กงนี้ทำด้วยไม้ไผ่นำมาสานให้มีความสูงประมาณ 50 เซนติเมตร และมีความกว้างเล็กกว่าความกว้างของปากกระทะเล็กน้อย แต่มีผู้เคี้ยวบางคนอาจมีวิธีป้องกันฟองน้ำตาลล้นออกมานอกกระทะ โดยการหยดน้ำมันพืชหรือน้ำมันบัวลงไปในกระทะประมาณ 2-3 หยด เมื่อน้ำตาลที่อยู่ในกระทะสัมผัสกับน้ำมันพืชหรือน้ำมันบัวที่หยดลงไปจะช่วยให้ฟองน้ำตาลยุบตัวลงทันที หรืออาจจะใช้วิธีการนำเอาใบมะพร้าวแห้งประมาณ 2-3 ใบมาวางพาดบนปากกระทะ เมื่อฟองน้ำตาลสัมผัสกับใบมะพร้าวแห้งก็จะเกิดการยุบตัวลงทันทีเช่นกัน การเคี้ยวน้ำตาลจะเคี้ยวไปจนกระทั่งมีปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมดประมาณ 82°Brix หรือเคี้ยวจนกระทั่งมีอุณหภูมิประมาณ 115-120 องศาเซลเซียส สามารถสังเกตเห็นการเปลี่ยนแปลงลักษณะปรากฏของน้ำตาลสดที่เปลี่ยนเป็นสีน้ำตาลเข้มมากขึ้น มีความหนืดและเหนียวมากขึ้น หรืออาจเรียกได้ว่าเคี้ยวน้ำตาลจนงวดได้ที่แล้ว จึงยกลงจากเตา และใช้ไม้มาคนรอบๆ กระทะเพื่อให้น้ำตาลที่เคี้ยวได้สัมผัสฟองอากาศ แล้วจึงเทลงในภาชนะเพื่อขึ้นรูป เช่น ปั้นหม้อ เป็นต้น หรืออาจนำไปทำเป็นน้ำตาลปึกแล้วแต่วัตถุประสงค์ที่ต้องการ (ศิริพร, 2519) คุณภาพของน้ำตาลขึ้นอยู่กับวิธีการเคี้ยว ซึ่งต้องใช้ทั้งความชำนาญและการสังเกต ถ้าไฟอ่อนจะทำ

ให้น้ำตาลไม่แข็ง ถ้าไฟแรงจะทำให้น้ำตาลไหม้มีสีแดง (สนิท, 2507) น้ำตาลสดที่นำไปเคี่ยวประมาณ 115 องศาเซลเซียส แล้วตกผลึกจะทำให้ได้น้ำตาลมะพร้าว (jaggery) 12-15% (Gabriel de Taffin, 1998)

น้ำตาลมะพร้าวเป็นน้ำตาลที่ยังคงมีน้ำผสมอยู่จึงขึ้นได้ง่าย เยิ้มเหลวได้เร็ว ทำให้ไม่สามารถคงลักษณะรูปร่างที่เป็นก้อนน้ำตาลปึกได้นาน ดังนั้นผู้ผลิตบางรายจึงผสมน้ำตาลลงไปเล็กน้อยในระหว่างการเคี่ยวน้ำตาลสด เนื่องจากน้ำตาลทรายมีลักษณะเป็นผลึกจึงช่วยให้น้ำตาลมะพร้าวแห้งและแข็งตัวเร็วขึ้น สามารถขึ้นรูปเป็นก้อนได้ง่าย ซึ่งปริมาณน้ำตาลทรายที่มากน้อยต่างกันจะมีผลต่อรสชาติของน้ำตาลมะพร้าว (เวณิกา และประภา, 2547)

2.4 องค์ประกอบของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

เมื่อนำน้ำตาลมะพร้าวสดมาต้มระเหยน้ำออกจะได้น้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวที่มีองค์ประกอบแสดงดังตารางที่ 2.2

ตารางที่ 2.2 สมบัติและองค์ประกอบของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

สมบัติและองค์ประกอบ	ค่าที่วิเคราะห์ได้	
อ้างโดย กล้าณรงค์ (2532)		
พลังงาน	321.60	แคลอรีต่อ 100 กรัม
ความชื้น	11.40	กรัมต่อ 100 กรัม
น้ำตาล	72.04	กรัมต่อ 100 กรัม
น้ำตาลรีดิวซิง	7.79	กรัมต่อ 100 กรัม
เพกตินและกัม	7.09	กรัมต่อ 100 กรัม
โปรตีน	0.55	กรัมต่อ 100 กรัม
เถ้า	1.13	กรัมต่อ 100 กรัม
อ้างโดย Thampan (1975)		
ความชื้น	10.92	กรัมต่อ 100 กรัม
ซูโครส	68.35	กรัมต่อ 100 กรัม
น้ำตาลรีดิวซิง	6.58	กรัมต่อ 100 กรัม
เพคตินและกัม	8.72	กรัมต่อ 100 กรัม

สมบัติและองค์ประกอบ	ค่าที่วิเคราะห์ได้	
อ้างโดย เกสร (2541)		
พลังงาน	383	กิโลแคลอรี
คาร์โบไฮเดรต	95	กรัมต่อ 100 กรัม
โปรตีน	0.4	กรัมต่อ 100 กรัม
ไขมัน	0.1	กรัมต่อ 100 กรัม
แคลเซียม	80	มิลลิกรัมต่อ 100 กรัม
ฟอสฟอรัส	43	มิลลิกรัมต่อ 100 กรัม
เหล็ก	11.4	มิลลิกรัมต่อ 100 กรัม
วิตามินเอ	280	IU ต่อ 100 กรัม
วิตามินบี 3	1	มิลลิกรัมต่อ 100 กรัม

ที่มา: ณัฐฐิวัชรยา (2549)

นอกจากนี้ Purnomo (1992) ได้รายงานส่วนประกอบของน้ำตาลมะพร้าวที่ได้มาจากการสำรวจใน 3 พื้นที่ของประเทศอินโดนีเซีย เมื่อทำการวิเคราะห์โดยใช้ HPLC พบว่า ซูโครสเป็นส่วนประกอบหลักของตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวทั้งหมด (70-90%) มีกลูโคสและฟรุคโตสอย่างละ 3-9% สำหรับองค์ประกอบอื่นๆ ที่มีในน้ำตาลขึ้นอยู่กับกรรมวิธีการผลิต คุณภาพของวัตถุดิบ และสายพันธุ์ของมะพร้าว

2.5 ปัจจัยที่มีผลต่อคุณภาพน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

น้ำตาลซูโครสซึ่งเป็นองค์ประกอบหลักในน้ำตาลมะพร้าวอาจสลายตัวหรือเปลี่ยนแปลงไปเป็นสารอื่นได้หลายวิธี ปัจจัยสำคัญที่มีผลกระทบต่อความคงตัวของน้ำตาลซูโครส (ณัฐฐิวัชรยา, 2549) มีดังนี้

ความเป็นกรด

เมื่อน้ำตาลซูโครสอยู่ในสารละลายที่ค่อนข้างเป็นกรดจะเกิดการสลายตัว กล่าวคือ โมเลกุลของน้ำตาลซูโครสซึ่งเป็นไดแซคคาไรด์ (disaccharide) จะแตกตัวออกเป็นโมโนแซคคาไรด์ (monosaccharide) 2 ชนิดคือ กลูโคสและฟรุคโตส ซึ่งเป็นปฏิกิริยาที่ต้องมีน้ำเข้ามาเกี่ยวข้อง และยังมีผลทำให้ optical rotation ของน้ำตาลเปลี่ยนจากบวกมาเป็นลบ ซึ่งเรียกว่าปฏิกิริยา

ไฮโดรไลซิส (hydrolysis) หรือ อินเวอร์ชัน (inversion) ทั้งนี้ถ้าสารละลายอยู่ในสภาวะมีความเป็นกรดสูงและมีความร้อนสูง จะพบว่ายิ่งทำให้อัตราการสลายตัวของน้ำตาลซูโครสยิ่งสูงขึ้นตามไปด้วย (ศิริพร, 2519; นิธิยา, 2544)

เอนไซม์

ปฏิกิริยาจากเอนไซม์ก่อให้เกิดอินเวอร์ชันที่ส่งผลคล้ายกับกรดแต่เกิดช้ากว่า เอนไซม์สำคัญที่สามารถเปลี่ยนน้ำตาลซูโครสเป็นน้ำตาลอินเวอร์ท คือ อินเวอร์เทส (invertase) เนื่องจากการทำงานของเอนไซม์นี้ทำให้เกิดกลูโคสและฟรุกโตส ซึ่งส่งผลให้น้ำตาลมีความหนืดเพิ่มขึ้นเป็นสองเท่า โดยถ้ามีมากจะทำให้น้ำตาลเคี้ยวไม่แห้งและมีลักษณะเป็นยางคล้ายแป้งเปียก จุลินทรีย์ที่สร้างเอนไซม์ชนิดนี้ได้แก่ *Leuconostoc* (ศิริพร, 2519) นอกจากนี้ Chanthachum และ Beuchat (1997) รายงานไว้ว่า จุลินทรีย์ที่ทำให้น้ำตาลสดเปรี้ยว ได้แก่ *Acetobacter*, *Flavobacterium*, *Lactobacillus*, *Leuconostoc*, *Micrococcus* และ *Saccharomyces* เมื่อนำน้ำตาลที่เปรี้ยวไปเคี้ยวจะทำให้ได้น้ำตาลที่นุ่ม ไม่ตกผลึก และมีสีเข้ม

การป้องกันการเสื่อมเสียของน้ำตาลสดทำได้โดยการทำความสะอาดภาชนะรองรับน้ำตาลสดให้สะอาด อาจใช้เปลือกไม้เคี้ยวหรือไม้พยوم ซึ่งมีสารประกอบพวกโพลีฟีนอลช่วยป้องกันและยับยั้งการเจริญเติบโตของจุลินทรีย์ได้ (เรณูภา, 2545)

ปฏิกิริยาการเกิดสีน้ำตาล (browning reaction)

กระบวนการเคี้ยวน้ำตาลต้องอาศัยความร้อนที่สูงในระหว่างการเคี้ยว ดังนั้นจึงทำให้เกิดปฏิกิริยาการเกิดสีน้ำตาลที่ไม่เกี่ยวข้องกับเอนไซม์ (nonenzymatic browning reaction) ส่วนปฏิกิริยาการเกิดสีน้ำตาลจากเอนไซม์ (enzymatic browning) จะมีบทบาทน้อยมากเนื่องจากความร้อนจากการเคี้ยวน้ำตาลมีผลทำให้เอนไซม์เกิดการเสียสภาพ จากผลการวิเคราะห์ของ Apriyantono และคณะ (2002) แสดงให้เห็นว่า น้ำตาลซูโครส กลูโคสและฟรุกโตสเป็นน้ำตาลที่เป็นองค์ประกอบหลัก และยังพบว่ามีสารประกอบพวกสารระเหยได้ (volatile compounds) ซึ่งเป็นผลิตภัณฑ์ที่ได้จากปฏิกิริยาการเกิดสีน้ำตาล เช่น ฟูแรน ไพราซีน สารจำพวกกรดไขมันและคีโตน ปฏิกิริยาการเกิดสีน้ำตาลที่ไม่เกี่ยวข้องกับเอนไซม์ในระหว่างการเคี้ยวน้ำตาลมะพร้าวมีทั้งปฏิกิริยาคาราเมลไรเซชัน (caramelization reaction) และปฏิกิริยาเมลลาร์ด (Maillard reaction) เกิดขึ้น ปัจจัยสำคัญที่ส่งผลต่อการเปลี่ยนแปลงสีในระหว่างการเคี้ยวน้ำตาล

คือ ค่าพีเอช อุณหภูมิ ออกซิเจน ความเข้มข้นของน้ำตาลซูโครส น้ำตาลอินเวอร์ทและกรดอะมิโน (ศิริพร, 2519)

2.6 ไม้เคี่ยม

ไม้เคี่ยม (*Cotyleobium lancetatum* craih) พบมากในภาคใต้ของประเทศไทย ขึ้นส่วนของไม้จากต้นเคี่ยมที่แช่อยู่ในน้ำตาลสดสามารถป้องกันและยับยั้งการเจริญของจุลินทรีย์ที่ทำให้เกิดการหมักได้ โดยทั่วไปสารประกอบที่มีฤทธิ์ยับยั้งจุลินทรีย์ (antimicrobial) พบตามธรรมชาติในพืช สามารถชะลอการเจริญหรือทำลายจุลินทรีย์ที่ทำให้เกิดโรคในอาหารได้ สารประกอบโพลีฟีนอลิก (polyphenolic compounds) ในพืชสมุนไพร (herbaceous plant) และไม้ยืนต้น (woody plant) มีฤทธิ์ในการยับยั้งจุลินทรีย์ (Chanthachum และ Beuchat, 1997)

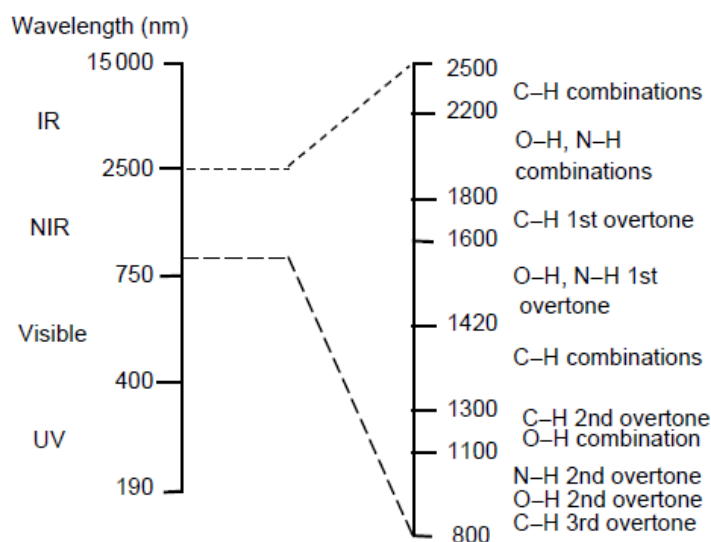
Balange และ Benjakul (2009) พบว่าแทนนินเป็นองค์ประกอบหลักที่พบในสารสกัดไม้เคี่ยม และเมื่อเปรียบเทียบการสกัดไม้เคี่ยมด้วยน้ำกับการสกัดด้วยเอทานอล พบว่าสารสกัดไม้เคี่ยมจากน้ำและเอทานอลมีปริมาณแทนนิน 251.90 และ 456.30 mg/g ตามลำดับ

Chanthachum และ Beuchat (1997) ศึกษาผลของสารสกัดจากไม้เคี่ยมที่สกัดด้วยน้ำเพื่อยับยั้งการเจริญของแบคทีเรียที่ก่อให้เกิดโรค (pathogenic bacteria) และจุลินทรีย์จากน้ำตาลโตนด (sugar palm sap) พบว่า การใช้สารสกัดไม้เคี่ยม 0.2% (w/v) สามารถยับยั้งการเจริญของจุลินทรีย์ *Acetobacter*, *Flavoacterium*, *Lactobacillus*, *Leuconostoc*, *Micrococcus* และ *Saccharomyces* จากน้ำตาลสดได้ และสารสกัดจากไม้เคี่ยมสามารถยับยั้งการเจริญของ *Listeria monocytogenes*, *Staphylococcus aureus* และ *Bacillus cereus* แต่ไม่สามารถยับยั้งการเจริญของ *Salmonella* ได้

2.7 เทคนิคสเปกโตรสโคปีอินฟราเรดย่านใกล้ (NIR)

รังสีอินฟราเรดย่านใกล้ (near infrared, NIR) เป็นสเปกตรัมแม่เหล็กไฟฟ้าที่ความยาวคลื่นระหว่าง 780-2500 nm ($12500-4000\text{ cm}^{-1}$) แสดงดังภาพที่ 2.1 พันธะภายในโมเลกุลที่สามารถดูดกลืนรังสีอินฟราเรดประกอบด้วยพันธะ O-H, C-H, C-O และ N-H ซึ่งพันธะเหล่านี้จะเกิดการเปลี่ยนพลังงานการสั่นเมื่อถูกรังสี NIR เนื่องจากความถี่ของรังสีนั้นตรงกับความถี่เฉพาะของโมเลกุลจึงทำให้โมเลกุลเกิดการสั่น ส่งผลให้มีการถ่ายโอนพลังงานทั้งหมดจากรังสีไปยังโมเลกุลซึ่งสามารถวัดได้โดยแสดงผลในรูปแบบของกราฟพลังงานกับความยาวคลื่นที่เรียกว่าสเปกตรัม ทั้งนี้รูปแบบการสั่นที่ปรากฏในพันธะเหล่านี้ประกอบด้วยการสั่นแบบยืด (stretch

vibration) และการสั่นแบบงอ (bent vibration) (Nicolai และคณะ, 2007; Osborne, 2007; Lui และคณะ, 2009; Cozzolino และคณะ, 2011; Xie และคณะ, 2011)



ภาพที่ 2.1 แถบการดูดกลืนแสงในช่วง NIR

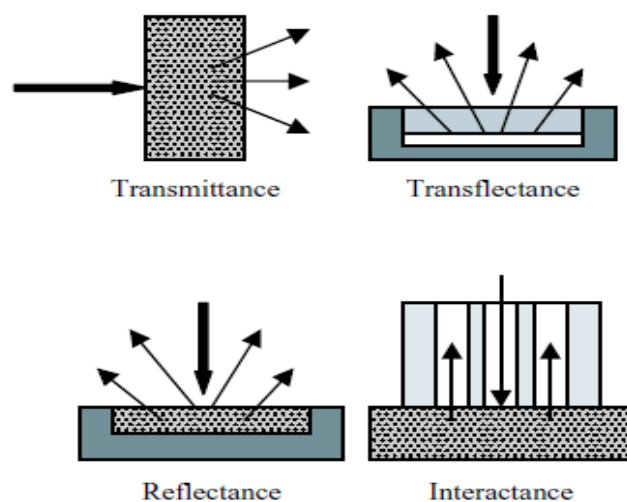
ที่มา: Osborne (2007)

เมื่อรังสี NIR ผ่านเข้าไปในตัวอย่างไม่เกิดการถูกสะท้อน (reflected) ดูดกลืน (absorbed) หรือส่งผ่าน (transmitted) ขึ้นอยู่กับองค์ประกอบทางเคมีและลักษณะทางกายภาพของตัวอย่าง โดยส่วนใหญ่การดูดกลืนแสงในช่วง NIR ของสเปกตรัมแม่เหล็กไฟฟ้าจะเป็นแถบโอเวอร์โทน (overtone) หรือคอมบิเนชัน (combination) ซึ่งมีการเปลี่ยนแปลงแบบสั่น (vibrational) และแบบหมุน (rotational) ในกรณีตัวอย่างประกอบด้วยสารโมเลกุลใหญ่และสารประกอบที่มีความซับซ้อนอย่างเช่น อาหาร จะทำให้ได้เส้นสเปกตรัมที่มีลักษณะ multiple bands และพีกมีลักษณะกว้างเตี้ย

ความยาวคลื่นในช่วง NIR สามารถแบ่งได้เป็น 2 ช่วง คือ ช่วงคลื่นสั้นที่มีความยาวคลื่น 780-1100 nm และช่วงคลื่นยาวที่มีความยาวคลื่น 1100-2500 nm การเลือกช่วงความยาวคลื่นนั้นต้องคำนึงถึงพลังงานและองค์ประกอบทางเคมีที่ต้องการวิเคราะห์ ทั้งนี้ปริมาณพลังงานในสเปกตรัมแม่เหล็กไฟฟ้าเพิ่มขึ้นเมื่อความยาวคลื่นลดลง กล่าวคือช่วงคลื่นสั้นจะมีพลังงาน

มากกว่าช่วงคลื่นยาว ดังนั้นถ้าต้องการวัดองค์ประกอบทางเคมีที่อยู่ลึกเข้าไปในเนื้อผลไม้ควรใช้ช่วงคลื่นสั้น ในทางกลับกันถ้าต้องการวิเคราะห์องค์ประกอบที่อยู่บริเวณผิวควรใช้ช่วงคลื่นยาว

ระบบที่ใช้วัด NIR ในปัจจุบันมี 4 แบบ คือ ระบบสะท้อนแสง (reflectance) ระบบส่องผ่านแสง (transmittance) ระบบอินเทอร์แอคแทนซ์ (interactance) และระบบส่องผ่านสะท้อน (transflectance) ซึ่งวิธีการวัดแต่ละแบบขึ้นอยู่กับชนิดของตัวอย่างและองค์ประกอบที่ต้องการวิเคราะห์ (ภาพที่ 2.2) (Ozaki และคณะ, 2007)



ภาพที่ 2.2 ระบบการวัด NIR

ที่มา: Ozaki และคณะ (2007)

2.8 การวิเคราะห์ทางเคมีและทางกายภาพโดยใช้เทคนิค NIR

เทคนิค NIR เป็นเทคนิคที่ใช้กันอย่างกว้างขวาง เป็นอีกทางเลือกหนึ่งที่สามารถทดแทนการวิเคราะห์ทางเคมี (wet chemistry) ได้ โดยเป็น secondary method ที่สามารถใช้ตรวจสอบทั้งในเชิงปริมาณและเชิงคุณภาพโดยอาศัยการคำนวณหรือการสร้างสมการจากความสัมพันธ์ระหว่างค่าการดูดกลืนแสงที่ได้จากการวัดด้วยเครื่อง NIR กับปริมาณหรือชนิดขององค์ประกอบที่ต้องการทำนายซึ่งได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธีมาตรฐาน (reference or standard method) ดังนั้นความแม่นยำในการทำนายค่าจึงขึ้นกับความถูกต้องของค่าทางเคมีที่ได้จากการวิเคราะห์ อีกทั้งยังสามารถใช้วัดคุณสมบัติของคุณภาพที่ซับซ้อนอย่างเช่น ลักษณะเนื้อสัมผัส และคุณภาพทางด้านประสาทสัมผัสได้ NIR เป็นเทคนิคที่มีความรวดเร็วในการวัดค่า ประหยัดเวลาการวัดในทุก

ขั้นตอนของกระบวนการผลิตอาหาร ตั้งแต่การวิเคราะห์วัตถุดิบไปจนกระทั่งถึงการตรวจสอบผลิตภัณฑ์สุดท้าย มีความเชื่อถือได้ ไม่ทำลายตัวอย่าง วิธีการเตรียมตัวอย่างไม่ยุ่งยาก ปราศจากการใช้สารเคมี สามารถวิเคราะห์ได้หลายองค์ประกอบในเวลาเดียวกัน (Jha และ Matsuoka, 2004; Woodcock และคณะ, 2007; Osborne, 2007; Liu และคณะ, 2011; Penchaiya และคณะ, 2009; Moghimi และคณะ, 2010)

สำหรับการเลือกตัวอย่างที่เหมาะสมเพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่า (calibration) นั้นต้องเลือกจากกลุ่มตัวอย่างที่เป็นตัวแทนของตัวอย่างที่จะนำมาใช้วิเคราะห์หาค่าทางเคมีในอนาคต โดยมีกระบวนการในการจัดการตัวอย่างเหมือนกับตัวอย่างในอนาคต กลุ่มตัวอย่างที่ใช้ควรมีองค์ประกอบที่สนใจในช่วงกว้าง มีแหล่งกำเนิดที่หลากหลาย และมีจำนวนตัวอย่างที่มากเพียงพอ (Ozaki และคณะ, 2007)

เมื่อทำการวัดการดูดกลืนแสง NIR ของตัวอย่างจะได้เส้นสเปกตรัมที่แสดงค่าการดูดกลืนแสงของโมเลกุลต่างๆ ที่มีอยู่ในตัวอย่างที่แต่ละความยาวคลื่น แต่เนื่องจากสเปกตรัมที่ได้จากการวัดการดูดกลืนแสง NIR ของตัวอย่างนั้นเกิดจากการรวมตัวกันของโอเวอร์โทนและคอมบิเนชันของกลุ่มฟังก์ชันต่างๆ อีกทั้งการรวมกันขององค์ประกอบเชิงซ้อนทางเคมีที่อาจมีอยู่ในตัวอย่าง ทำให้สเปกตรัม NIR มีความซับซ้อนมาก นอกจากนี้สเปกตรัม NIR ยังอาจซับซ้อนมากขึ้นจากการกระเจิงแสง ความไม่เป็นเนื้อเดียวกันของตัวอย่าง สัญญาณรบกวนในเครื่องมือ สภาพแวดล้อม และแหล่งความแปรปรวนอื่นๆ จึงทำให้สเปกตรัมที่มีลักษณะ multiple bands และพีกมีลักษณะกว้างเตี้ย นอกจากนี้ยังเป็นองค์ประกอบทางเคมีที่สำคัญของอาหารสดนั้นยังมีการดูดกลืนรังสี NIR เป็นอย่างสูง ดังนั้นสเปกตรัม NIR ที่ได้มักถูกบดบังด้วยน้ำ ส่งผลให้การระบุความยาวคลื่นจากการดูดกลืนแสงของกลุ่มฟังก์ชันเฉพาะเพื่อจำแนกองค์ประกอบทางเคมีเป็นไปได้ยาก ดังนั้นจึงมีการใช้เทคนิคทางสถิติแบบตัวแปรพหุ (multivariate statistical technique) หรือที่เรียกว่า เคมีเมตริกซ์ (chemometrics) เพื่อแยกข้อมูลลักษณะคุณภาพที่ฝังอยู่ในเส้นสเปกตรัม โดยเทคนิคนี้เป็นการใช้การวิเคราะห์ความถดถอยร่วมกับการปรับแต่งสเปกตรัมก่อนการวิเคราะห์ ซึ่งเทคนิคการปรับแต่งสเปกตรัมก่อนการวิเคราะห์ใช้เพื่อกำจัดข้อมูลที่ไม่เกี่ยวข้อง เนื่องจากเทคนิคการวิเคราะห์ความถดถอยไม่สามารถกำจัดข้อมูลดังกล่าวนี้ได้ การปรับแต่งสเปกตรัมมีหลายวิธียกตัวอย่างเช่น

- การหาค่าเฉลี่ย (averaging) เป็นการหาค่าเฉลี่ยสเปกตรัม มักดำเนินการระหว่างการวัดสเปกตรัมเพื่อลดสัญญาณรบกวนที่อาจเกิดขึ้นจากความร้อนของเครื่องตรวจจับสัญญาณ จำนวนครั้งในการสแกนขึ้นอยู่กับการใช้งาน

- การปรับเรียบ (smoothing) เทคนิคการปรับให้เรียบใช้เพื่อกำจัดสัญญาณรบกวนออกจากสเปกตรัม NIR ประกอบด้วยวิธี moving average filters และวิธีปรับเรียบแบบซาวิตซ์กีโกเลย์ (Savitzky-Golay smoothing) การปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธีนี้จะทำให้สามารถสังเกตเห็นได้ว่าเส้นสัญญาณสเปกตรัมมีความเรียบมากขึ้น

- การปรับแก้การกระเจิงแบบผลคูณ (multiple scatter correction, MSC) ช่วยให้สามารถลดผลกระทบแบบผลบวก (additive effect) และแบบผลคูณ (multiplicative effect) ในข้อมูลสเปกตรัม ทั้งนี้ระดับการกระเจิงแสงขึ้นอยู่กับความยาวคลื่นของรังสี ขนาดอนุภาค และดัชนีการหักเห วิธีนี้ช่วยให้สามารถลดผลกระทบได้ด้วยการปรับค่าการดูดกลืนแสงเพื่อให้มีค่าตรงกับสเปกตรัมเฉลี่ย

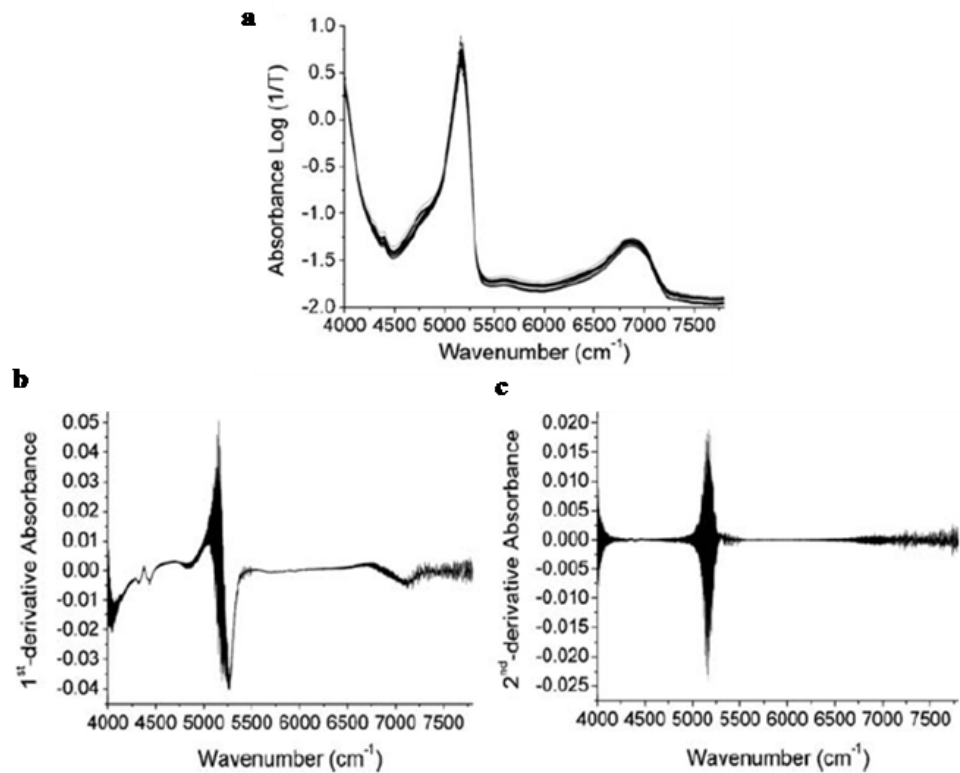
- การปรับความแปรปรวนให้เป็นมาตรฐาน (standard normal variate, SNV) เป็นเทคนิคที่สามารถกำจัดอิทธิพลของการกระเจิงแสงออกจากสเปกตรัมได้อีกเทคนิคหนึ่ง แตกต่างกับเทคนิค MSC คือไม่ต้องใช้สเปกตรัมเฉลี่ยเป็นค่าอ้างอิง เทคนิค SNV ทำโดยปรับแก้สเปกตรัมแต่ละเส้นให้มีค่าการดูดกลืนเป็นมาตรฐานเดียวกัน (normalization) คล้ายกับการคำนวณค่ามาตรฐานหรือค่า z ในทางสถิติ ดังนี้

$$A_{i(\text{SNV})} = \frac{(A_i - \bar{a}_i)}{\sqrt{\frac{\sum_{j=1}^p (A_{i,j} - \bar{a}_i)^2}{(p - 1)}}$$

โดย $A_{i,j}$ คือ ค่าการดูดกลืนที่ความยาวคลื่น j (ความยาวคลื่นมีทั้งหมด p ความยาวคลื่น) ของตัวอย่าง i

$\bar{a}_i$ คือ ค่าเฉลี่ยของค่าการดูดกลืนตลอดช่วงสเปกตรัมของตัวอย่าง i

การหาค่าอนุพันธ์ (derivative) การหาค่าอนุพันธ์ของสเปกตรัมมีประโยชน์ในแก้ปัญหาการเลื่อนขึ้นของสเปกตรัม (baseline shift) และการซ้อนทับกันของจุดยอด (ภาพที่ 2.3) โดยวิธีอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (first derivative, 1D) ช่วยแก้ปัญหาที่สเปกตรัมมีค่าคงที่เพิ่มขึ้นตลอดช่วงความยาวคลื่น (baseline offset) ส่วนวิธีอนุพันธ์อันดับสอง (second derivative, 2D) จะนิยมใช้ช่วยลดผลกระทบจากการกระเจิงแสง ทั้งที่เป็นผลเชิงบวกและผลเชิงคูณ (อนุพันธ์, 2552; Nicolai และคณะ, 2007; Xie และคณะ, 2011; Cozzolino และคณะ, 2011)



ภาพที่ 2.3 สเปกตรัมการดูดกลืนแสง NIR โดย (a) สเปกตรัมเริ่มต้น, (b) สเปกตรัมที่ปรับแต่งด้วยวิธีอนุพันธ์อันดับหนึ่ง และ (c) สเปกตรัมที่ปรับแต่งด้วยวิธีอนุพันธ์อันดับสอง
ที่มา: Liu และคณะ (2011)

สำหรับขั้นตอนการวิเคราะห์ข้อมูลสเปกตรัมเพื่อสร้างสมการทำนายค่าประกอบด้วย 2 ขั้นตอนหลัก ได้แก่ ขั้นตอนการสร้างสมการทำนายค่า (calibration) และขั้นตอนการตรวจสอบความถูกต้องของสมการทำนายค่าที่สร้างขึ้น (validation)

(1) การสร้างสมการทำนายค่า (calibration) เป็นบทบาทสำคัญของการใช้เทคนิค NIR เพราะเป็นตัวกำหนดพฤติกรรมของระบบโดยตรง ที่แสดงถึงความถูกต้องแม่นยำของการทำนายค่าและการแบ่งกลุ่มตัวอย่าง (Lin และ Ying, 2009) ขั้นตอนการสร้างสมการเริ่มจากนำตัวอย่างในกลุ่มสร้างสมการมาวิเคราะห์ตัวอย่างด้วยเทคนิค NIR และวิธีมาตรฐาน (reference method) จากนั้นนำข้อมูลค่าการดูดกลืนแสง (ตัวแปรอิสระ) และข้อมูลค่าคุณภาพ (ตัวแปรตาม)

มาหาความสัมพันธ์ด้วยเทคนิคทางสถิติ เช่น วิธี partial least square regression (PLS) เพื่อสร้างสมการทำนายที่ใช้ในการทำนายค่าคุณภาพที่ต้องการศึกษา (กรกช, 2553) ประสิทธิภาพของสมการทำนายค่าสามารถพิจารณาได้จากค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (coefficient of correlation, R) หรือค่าสัมประสิทธิ์การตัดสินใจ (coefficient of determination, R^2) ควรมีค่าเข้าใกล้ 1 และค่าความผิดพลาดมาตรฐานในการทำนายของกลุ่มตัวอย่างสร้างสมการ (standard error of calibration, SEC) ควรมีค่าต่ำ (ธนฤทธิ, 2552) สำหรับการสร้างสมการทำนายเชิงปริมาณ นิยมใช้เทคนิค step multiple linear regression (SMLR), principle component regression (PCR), partial least square regression (PLSR), artificial neural network (ANN) ส่วนการสร้างสมการทำนายเชิงคุณภาพนิยมใช้เทคนิค linear discriminant analysis (LDA), principle component analysis (PCA), K-nearest neighbors (KNN), cluster analysis (CA), discriminating partial least square (DPLS), soft independent modeling of class analogy (SIMCA), artificial neural network (ANN) และ support vector machine (SVM) (Cen และ He, 2007)

(2) การตรวจสอบความถูกต้องของสมการทำนายค่า (validation) การตรวจสอบความถูกต้องของสมการที่สร้างขึ้นด้วยกลุ่มตัวอย่างตรวจสอบความถูกต้องเพื่อใช้ในการวัดประสิทธิภาพความแม่นยำในการทำนายค่าคุณภาพของสมการ และเพื่อตรวจสอบความถูกต้องของสมการ อีกยังเป็นการกำหนดจำนวนตัวแปรที่ใช้ในการสร้างสมการทำนายเพื่อหลีกเลี่ยงการมีตัวแปรในสมการมากเกินไปซึ่งทำให้สมการไม่น่าเชื่อถือ (overfitting) (Cen และ He, 2007; Cozzolino และคณะ, 2011) วิธีการตรวจสอบความถูกต้องที่นิยมใช้ในเทคนิค NIR 2 มีวิธีคือ

1) วิธี full cross validation เป็นวิธีที่ใช้ในการตรวจสอบความถูกต้องของสมการที่สร้างขึ้น โดยเป็นการตรวจสอบภายใน (internal validation) ซึ่งกลุ่มตัวอย่างที่นำมาใช้ในการตรวจสอบต้องเป็นตัวอย่างชุดเดียวกับตัวอย่างในกลุ่มสร้าง การตรวจสอบความแม่นยำด้วยวิธีนี้มักใช้กับการวิเคราะห์ทางสถิติแบบ PLS และใช้กับกรณีที่มีตัวอย่างจำนวนน้อย 2) วิธี prediction testing เป็นวิธีการทดสอบโดยนำตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (test set) มาประเมินค่าของสมการทำนายที่สร้างขึ้น โดยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้องที่นำมาวิเคราะห์ต้องมีวิธีการเตรียมตัวอย่าง การวัดค่าการดูดกลืนแสงของสเปกตรัม สภาวะในการทดลอง รวมถึงวิธีการแปลงข้อมูลสเปกตรัมเหมือนกับชุดข้อมูลของตัวอย่างในกลุ่มสร้างสมการและที่สำคัญตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้องจะต้องมีค่าคุณภาพที่ต้องการประเมินอยู่ในช่วงของกลุ่มตัวอย่างสร้างสมการ การตรวจสอบความแม่นยำในลักษณะนี้เรียกว่า การทดสอบแบบภายนอก (external

validation) (สุพรรณิกา, 2548) ค่าสถิติที่ใช้ในการประเมินประสิทธิภาพความเหมาะสมต่อการนำไปใช้งานของสมการทำนายคือ ค่าความผิดพลาดมาตรฐานในการทำนายของกลุ่มตัวอย่างที่ใช้ในการตรวจสอบสมการ (standard error of prediction, SEP) และค่าความผิดพลาดเฉลี่ยในการทำนาย (bias) ซึ่งควรจะมีค่าต่ำ และค่า R^2 ควรมีค่าเข้าใกล้ 1 จึงจะทำให้สมการที่สร้างขึ้นมีความเหมาะสมต่อการนำเทคนิค NIR ไปประยุกต์ใช้ในการทำนายองค์ประกอบของตัวอย่างในอนาคต (ธงชัยและปิติพร, 2552)

การประเมินผลความสามารถของสมการทำนายสามารถอธิบายได้จากค่าสถิติ R และ R^2 แสดงดังตารางที่ 2.3

ตารางที่ 2.3 ประสิทธิภาพของสมการทำนาย โดยพิจารณาจากค่า R และ R^2

R	R^2	ประสิทธิภาพของสมการทำนาย
± 0.5	0.25	ไม่ควรใช้ในการทำนาย
$\pm 0.51-0.70$	0.26-0.49	ความสัมพันธ์ไม่ดีพอ
$\pm 0.71-0.80$	0.50-0.64	สามารถใช้คัดเลือกเบื้องต้นได้
$\pm 0.81-0.90$	0.65-0.81	สามารถใช้ในการคัดเลือกหรือประมาณค่าเบื้องต้น
$\pm 0.91-0.95$	0.82-0.90	สามารถใช้ตรวจสอบคุณภาพได้
$\pm 0.96-0.98$	0.92-0.96	สามารถใช้ในงานประกันคุณภาพได้
± 0.99 ขึ้นไป	0.98 ขึ้นไป	สามารถใช้ได้กับทุกงาน

ที่มา: ดัดแปลงจาก William (2007)

2.9 การประยุกต์ใช้เทคนิค NIR ในวิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมี

การวิเคราะห์ปริมาณน้ำตาลในผักสด ผลไม้สด น้ำผักและน้ำผลไม้เป็นสิ่งสำคัญที่ใช้ในการประเมินคุณภาพของผลิตภัณฑ์ได้ (Rodriguez-Saona และคณะ, 2001) ในปัจจุบันมีการประยุกต์ใช้เทคนิค NIR ในการวิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมีของผลิตภัณฑ์ต่างๆ มากมาย

Schmilovitch และคณะ (2000) ประยุกต์ใช้เทคนิค NIR ในการวัดสมบัติด้านสรีรวิทยา (physiological properties) ของมะม่วงพันธุ์ Tommy Atkins โดยใช้ปริมาณของแข็งที่ละลายได้ (total soluble solid, TSS) และปริมาณกรดที่ไทเทรตได้ (titratable acidity, TA) เป็นดัชนีในการตรวจสอบ ทำการวัดในระบบสะท้อนแสงในช่วงความยาวคลื่น 1200-2400 nm แล้วสร้างสมการ

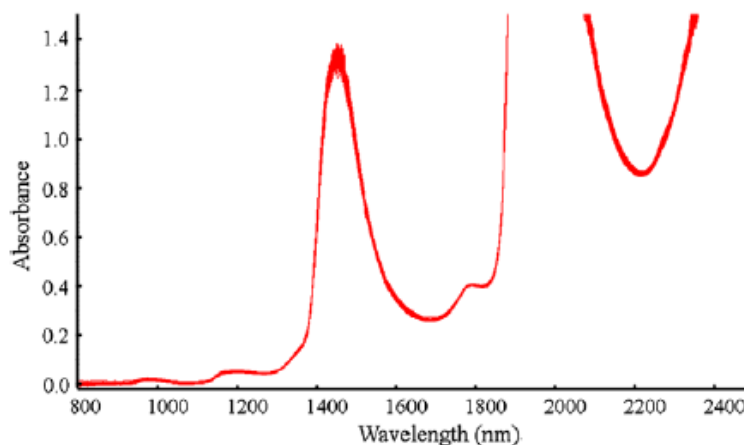
ทำนายด้วยเทคนิค multiple linear regression (MLR), principle component analysis (PCA) และ partial least square (PLS) พบว่า สมการทำนายค่า TSS และ TA ที่ดีที่สุดนั้นได้จากการสร้างสมการด้วยเทคนิค MLR กับข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี 2D ให้ค่า R^2 เท่ากับ 0.9276 และ 0.6085 และค่า SEP เท่ากับ 1.223 และ 0.161 ตามลำดับ

Jha และ Matsuoka (2004) ใช้เทคนิค NIR ในการวิเคราะห์ค่า acid-brix ratio (ABR) ในน้ำมะเขือเทศ โดยค่า ABR เป็นค่าที่แสดงถึงความเปรี้ยว (titratable acids) และความหวาน (ปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมด) ซึ่งเป็นปัจจัยสำคัญในการยอมรับของผู้บริโภค โดยวัดค่าการดูดกลืนแสงที่ความยาวคลื่น 703.25-1124.8 nm ทั้งนี้การเลือกใช้ความยาวคลื่นให้เหมาะสมต่อการสร้างสมการเป็นสิ่งสำคัญที่ส่งผลต่อประสิทธิภาพของสมการ ดังนั้น Jha และ Matsuoka (2004) จึงได้ทำการเปรียบเทียบสมการทำนายค่า ABR ที่สร้างโดยใช้ข้อมูลสเปกตรัมที่ความยาวคลื่นแตกต่างกัน 7 ช่วง ดังนี้ 703.3-775.0 nm, 778.3-846.3 nm, 849.5-917.0 nm, 920.2-987.1 nm, 990.3-1056.4 nm, 1059.5-1124.8 nm และ 703.3-1124.8 nm จากการทดลองพบว่า สมการที่ได้จากการใช้ข้อมูลในช่วงความยาวคลื่น 1059.5-1124.8 nm เป็นสมการที่ดีที่สุด โดยให้ค่า R สูงที่สุด (0.92) และให้ค่า SEC และ SEP ต่ำที่สุด (0.009)

Tewari และคณะ (2008) ทำการทดลองโดยใช้เทคนิค NIR ในการวิเคราะห์หาปริมาณน้ำตาลกลูโคส ฟรุคโตส และซูโครสในตัวอย่างน้ำส้ม 22 สายพันธุ์ พบว่า ได้สมการทำนายค่าที่มีประสิทธิภาพดีคือ มีค่า R^2 สูง (0.996) และมีค่า SEP เท่ากับ 0.621 และเมื่อทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการโดยใช้ตัวอย่างน้ำส้ม 50 ตัวอย่างพบว่า มีค่า SEP เท่ากับ 0.874

เช่นเดียวกับ Xie และคณะ (2009) ศึกษาการประยุกต์ใช้เทคนิค NIR ในการตรวจสอบปริมาณน้ำตาลในน้ำเบอรี่ (bayberry juice) โดยวิเคราะห์ปริมาณน้ำตาลกลูโคส ฟรุคโตส และซูโครสในน้ำเบอรี่จำนวน 120 ตัวอย่าง และทำการวัดค่าการดูดกลืนแสง NIR ด้วยระบบส่องผ่าน (transmission) ที่ความยาวคลื่น 800-2400 nm เนื่องจากมีการดูดกลืนของน้ำที่สูงในช่วง 1850-2050 nm และ 2350-2400 nm จึงไม่ใช้ข้อมูลสเปกตรัมในช่วงดังกล่าวมาสร้างสมการทำนายค่า (ภาพที่ 2.4) เมื่อเปรียบเทียบสมการทำนายค่าที่สร้างด้วยเทคนิค PLS โดยใช้ข้อมูลสเปกตรัมของน้ำเบอรี่ 3 รูปแบบ คือ สเปกตรัมเดิม (raw) สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี 1D และสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี 2D พบว่า สมการทำนายปริมาณน้ำตาลกลูโคส ฟรุคโตส และซูโครสในน้ำเบอรี่ที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี 2D เป็นสมการที่ดีที่สุด โดยให้ค่า R^2 เท่ากับ 0.85492, 0.96364 และ 0.99321 ค่า root mean square error of

calibration (RMSEC) เท่ากับ 0.0625, 0.114 และ 0.0866 และค่า root mean square error of prediction (RMSEP) เท่ากับ 0.095, 0.217 และ 0.108 ตามลำดับ



ภาพที่ 2.4 สเปกตรัมการดูดกลืนแสง NIR ของน้ำเบย์เบอริ

ที่มา: Xie และคณะ (2009)

Xie และคณะ (2011) ยังได้วิเคราะห์ปริมาณกรดที่ไทเตรตได้ในน้ำเบย์เบอริที่ได้จากเบย์เบอริ 14 สายพันธุ์ ที่มีพื้นที่การเพาะปลูกที่แตกต่างกัน 9 แห่ง จำนวน 129 ตัวอย่าง ทำการวัดค่าการดูดกลืนแสง NIR ด้วยระบบส่องผ่านในช่วงคลื่น $12500\text{--}4000\text{ cm}^{-1}$ ทั้งนี้ข้อมูลสเปกตรัมที่ได้จากช่วง $5405\text{--}4878\text{ cm}^{-1}$ และช่วง $4255\text{--}4000\text{ cm}^{-1}$ มีการดูดกลืนแสงของน้ำที่สูงและมีสัญญาณรบกวน (noise) จึงไม่นำช่วงสเปกตรัมเหล่านี้มาใช้ในการสร้างสมการ และมีการเปรียบเทียบสมการทำนายปริมาณกรดที่ไทเตรตได้โดยการใช้ข้อมูลสเปกตรัมในการสร้างสมการด้วยเทคนิค PLS ที่แตกต่างกัน 5 ช่วง ดังนี้ $12500\text{--}10000\text{ cm}^{-1}$, $12500\text{--}5405\text{ cm}^{-1}$, $10000\text{--}5405\text{ cm}^{-1}$, $4878\text{--}4255\text{ cm}^{-1}$ และใช้ข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมด สมการที่เหมาะสมที่สุดที่ใช้ในการทำนายปริมาณกรดที่ไทเตรตได้คือ สมการที่ได้จากการใช้ข้อมูลในช่วงความยาวคลื่น $10000\text{--}5405\text{ cm}^{-1}$ เนื่องจากมีค่า R สูงกว่าสมการที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมช่วง $4878\text{--}4255\text{ cm}^{-1}$ และมีค่าความแตกต่างระหว่างค่า RMSEC และ RMSEP น้อยกว่าเมื่อเทียบกับอีก 3 สมการที่ใช้ข้อมูลสเปกตรัมในช่วงความยาวคลื่นที่แตกต่างกัน โดยมีค่า R เท่ากับ 0.8959 ค่า RMSEC เท่ากับ 2.24 g/L และค่า RMSEP เท่ากับ 2.89 g/L

Sinija และ Mishra (2011) ศึกษาการประยุกต์ใช้เทคนิค NIR ในการวิเคราะห์ปริมาณความชื้นในตัวอย่างชาเขียวที่มีลักษณะเป็นเม็ด (green tea granules) ด้วยระบบส่องผ่านสะท้อนแสง ในช่วงคลื่น $12000-4000\text{ cm}^{-1}$ แล้วสร้างสมการด้วยเทคนิค PLS โดยข้อมูลสเปกตรัมเดิมและข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค vector normalization, constant offset elimination และ 1D พบว่า สมการทำนายปริมาณความชื้นที่ดีที่สุดสร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านปรับแต่งด้วยเทคนิค vector normalization ซึ่งให้ค่า R^2 เท่ากับ 0.997 และค่า root mean square error of cross validation (RMSECV) เท่ากับ 0.83

นอกจากนี้ยังมีการใช้เทคนิค NIR ในการวิเคราะห์องค์ประกอบในผลิตภัณฑ์อื่นๆ อีกมากมาย เช่น Xie และ Ying (2009) ใช้เทคนิค NIR ร่วมกับวิธี least squares support vector machine (LS-SVM) เพื่อศึกษาการเปลี่ยนแปลงคุณภาพของน้ำมะเขือเทศในระหว่างการเก็บรักษา Sorol และคณะ (2010) ได้วิเคราะห์ค่า Brix ในน้ำอ้อยด้วยเทคนิค visible และ NIR Zhu และคณะ (2010) ทำการวัดปริมาณของแข็งที่ละลายได้และค่า conductivity ในน้ำแอปเปิ้ลด้วยเทคนิค NIR และวิธี PLS Mireei และคณะ (2010) ได้วิเคราะห์ปริมาณของแข็งที่ละลายได้และปริมาณความชื้นในอินทผลัมสายพันธุ์ Mazafati ด้วยเทคนิค NIR ร่วมกับวิธี PLS เป็นต้น จากตัวอย่างดังกล่าวแสดงให้เห็นว่าสามารถประยุกต์ใช้เทคนิค NIR ในการวิเคราะห์ปริมาณของแข็งที่ละลายได้ ปริมาณน้ำตาล ปริมาณกรดต่างๆ และความชื้นได้ โดยสามารถใช้การวิเคราะห์ทั้งตัวอย่างน้ำผลไม้และผลไม้ เทคนิค NIR ช่วยลดระยะเวลาในการวิเคราะห์และมีค่าใช้จ่ายต่ำ อีกทั้งยังเป็นการวิเคราะห์แบบไม่ทำลายตัวอย่าง ดังนั้นเทคนิค NIR จึงเป็นหนึ่งในตัวเลือกของวิธีที่ใช้ในการควบคุมคุณภาพในอุตสาหกรรมอาหารได้ (Moghimani และคณะ, 2010; Xie และคณะ, 2011)

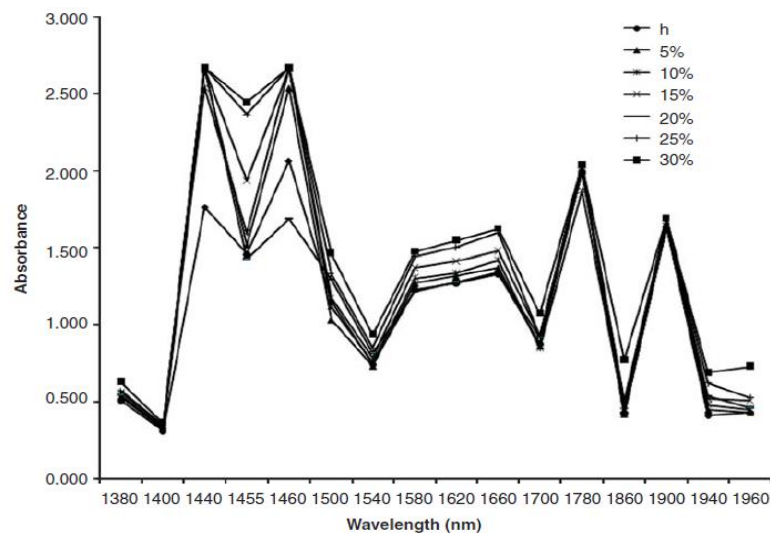
2.10 การประยุกต์ใช้เทคนิค NIR ในวิเคราะห์การปลอมปน

ปัญหาเรื่องการปลอมปนของอาหารนั้นมีมาตั้งแต่ประมาณปี 1800 โดยส่วนใหญ่มักเกี่ยวข้องกับการติดฉลากที่ไม่ถูกต้อง และการปลอมปน (economic adulteration) ในผลิตภัณฑ์อาหารที่มีราคาสูงเพื่อหลอกลวงผู้บริโภค ยกตัวอย่างเช่น การแทนที่ส่วนผสมหรือองค์ประกอบในอาหาร แคบางส่วนหรือทั้งหมด เพื่อลดต้นทุนและอาจส่งผลให้ผลิตภัณฑ์อาหารด้อยลง (Hargin, 1996) อาหารที่ไม่มีการปลอมปน (authentic food) นั้นต้องมีลักษณะเป็นไปตามรายละเอียดที่ผู้ผลิตได้ให้ไว้ ซึ่งรวมไปถึงแหล่งกำเนิด สายพันธุ์ของส่วนประกอบต่างๆ ตลอดจนกระบวนการผลิตอาหาร (Downey, 1998) ถึงแม้ว่าการปลอมปนนั้นจะไม่ค่อยเป็นอันตรายต่อสุขภาพ แต่เป็น

การปลอมปนเพื่อการค้าโดยมีความต้องการของผู้บริโภคในด้านสินค้ามูลค่าสูงเป็นตัวขับเคลื่อน ซึ่งเป็นปัจจัยสำคัญที่ทำให้เกิดผลกำไรที่ผิดกฎหมาย ด้วยเหตุนี้อุตสาหกรรมการแปรรูปอาหาร และหน่วยงานที่ทำหน้าที่ดูแลในด้านนี้จึงได้ผลักดันวิธีการวิเคราะห์เพื่อที่จะยืนยันความถูกต้องของผลิตภัณฑ์อาหาร (Lees, 1994; Gayo และ Hale, 2007)

การตรวจสอบการปลอมปนอาหารใช้วิธีการทางเคมีโดยการวิเคราะห์องค์ประกอบที่มีอยู่ในอาหารนั้นมักใช้เวลานาน มีค่าใช้จ่ายสูง ดังนั้นจึงได้มีการประยุกต์ใช้เทคนิค NIR ร่วมกับการวิเคราะห์ข้อมูลหลายตัวแปร (multivariate data analysis) เพื่อตรวจสอบการปลอมปนของอาหาร เนื่องจากเป็นวิธีที่ง่าย รวดเร็ว และมีค่าใช้จ่ายที่ต่ำ (Zhu และคณะ, 2010)

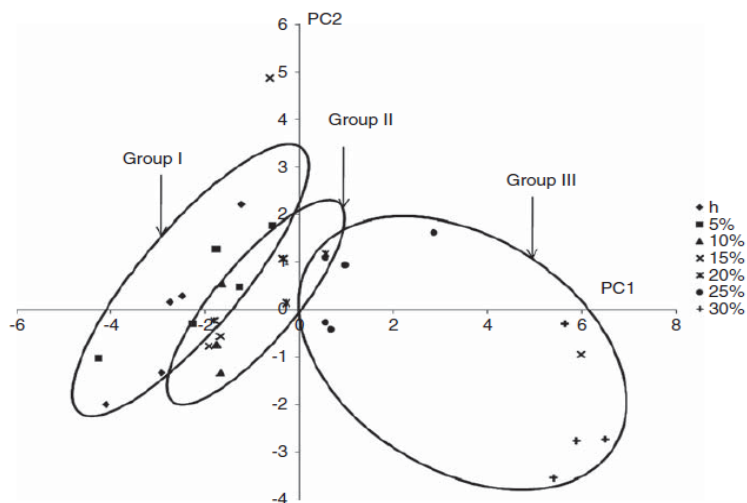
Mishra และคณะ (2010) ได้ประยุกต์ใช้เทคนิค NIR ในการตรวจสอบการปลอมปนของน้ำผึ้ง โดยการเตรียมตัวอย่างน้ำผึ้งแท้และน้ำผึ้งที่มีการปลอมปนด้วย jaggery syrup 5-30% (w/w) โดยให้ความเข้มข้นของ jaggery syrup เพิ่มขึ้นทีละ 5% (79-80°Brix) ซึ่งไซรัปนั้นเตรียมได้จากการผสม jaggery 82.2% กับน้ำ 17.8% ทั้งนี้องค์ประกอบโดยเฉลี่ยของน้ำผึ้งได้แก่ ฟรุคโตส 38.19% กลูโคส 31.28% มอลโตส 7.97% ซูโครส 4.5% น้ำตาลอื่นๆ 0.86% น้ำ 17.2% และแร่ธาตุต่างๆ ส่วนองค์ประกอบของ jaggery มีดังนี้ ซูโครส 50% น้ำตาลอินเวิร์ท 20% ความชื้น 20% และมีส่วนที่ไม่ละลายน้ำอยู่ด้วย ทำการวัดค่าการดูดกลืนแสงที่ความยาวคลื่น 1380-1960 nm ในระบบส่องผ่านสะท้อน (transflectance) สเปกตรัมการดูดกลืนแสงของน้ำผึ้งแท้และน้ำผึ้งที่มีการปลอมปนด้วย jaggery syrup แสดงดังภาพที่ 2.5 พบว่ามีการดูดกลืนแสงสูงที่ความยาวคลื่น 1440 nm, 1460 nm, 1580 nm, 1660 nm, 1780 nm และ 1900 nm ซึ่งสัมพันธ์กับพันธะ C-H โอเวอร์โทนอันดับหนึ่งของ N-H การยืดของพันธะ N-H การยืดของพันธะ C-H เซลลูโลส และพันธะ C=O ตามลำดับ



ภาพที่ 2.5 สเปกตรัมการดูดกลืนแสงของตัวอย่างน้ำผึ้งแท้และตัวอย่างน้ำผึ้งที่มีการปลอมปนด้วย jaggery syrup

ที่มา: Mishra และคณะ (2010)

Mishra และคณะ (2010) ใช้เทคนิค PCA และ PLS เพื่อทำนายการปลอมปน jaggery syrup ในน้ำผึ้งจากข้อมูลตัวอย่างน้ำผึ้งแท้และตัวอย่างน้ำผึ้งที่มีการปลอมปน พบว่า กราฟคะแนน (score plot) ของ PC1 กับ PC2 แสดงดังภาพที่ 2.6 จากภาพจะเห็นว่าความเข้มข้นของการปลอมปน jaggery syrup ในน้ำผึ้งมีแนวโน้มจากซ้ายไปขวา สำหรับระดับการปลอมปนของตัวอย่าง 3 กลุ่มแสดงดังตารางที่ 2.4 จากภาพที่ 2.6 พบว่าตัวอย่างกลุ่มที่ 1 ที่มีระดับการปลอมปนต่ำนั้นอยู่ใกล้กับแกน PC1 ในจุดภาค (quadrant) ที่สอง ส่วนตัวอย่างกลุ่มที่ 2 ที่มีระดับการปลอมปนปานกลางอยู่ทางด้านขวาของตัวอย่างกลุ่มที่ 1 และตัวอย่างกลุ่มที่ 3 ที่มีระดับการปลอมปนสูงอยู่ในจุดภาคที่หนึ่ง กล่าวคือเมื่อความเข้มข้นของ jaggery syrup เพิ่มขึ้น กราฟจะมีลักษณะแนวโน้มจากซ้ายไปขวา เมื่อเปรียบเทียบกราฟคะแนนกับกราฟน้ำหนักปัจจัยทำให้พบความแปรปรวนที่ความยาวคลื่น 1440 nm, 1460 nm, 1780 nm และ 1900 nm แสดงให้เห็นถึงความสัมพันธ์กับกลุ่ม 1 และเมื่อเปรียบเทียบสเปกตรัมการดูดกลืนแสงของฟรุกโตส (Burns และ Ciurczak, 2008) พบว่าตัวอย่างกลุ่ม 1 (ตัวอย่างน้ำผึ้งแท้และตัวอย่างน้ำผึ้งปลอมปน 5%) และฟรุกโตสมีค่าการดูดกลืนแสงที่สูงในย่านสเปกตรัมเดียวกัน เนื่องจากน้ำผึ้งมีปริมาณน้ำตาลฟรุกโตสสูง ดังนั้นจึงสรุปได้ว่าตัวอย่างที่มีการดูดกลืนแสงสูงที่ความยาวคลื่น 1440 nm, 1460 nm, 1780 nm และ 1900 nm ซึ่งเป็นตัวอย่างที่มีระดับการปลอมปนต่ำนั้นเป็นตัวอย่างแท้



ภาพที่ 2.6 กราฟคะแนนของตัวแปร PC 2 ตัวแปรที่แสดงตัวอย่างกลุ่มที่ 1 (น้ำผึ้งแท้ และ 5%),
กลุ่มที่ 2 (10%, 15% และ 20%) และกลุ่มที่ 3 (25% และ 30%)

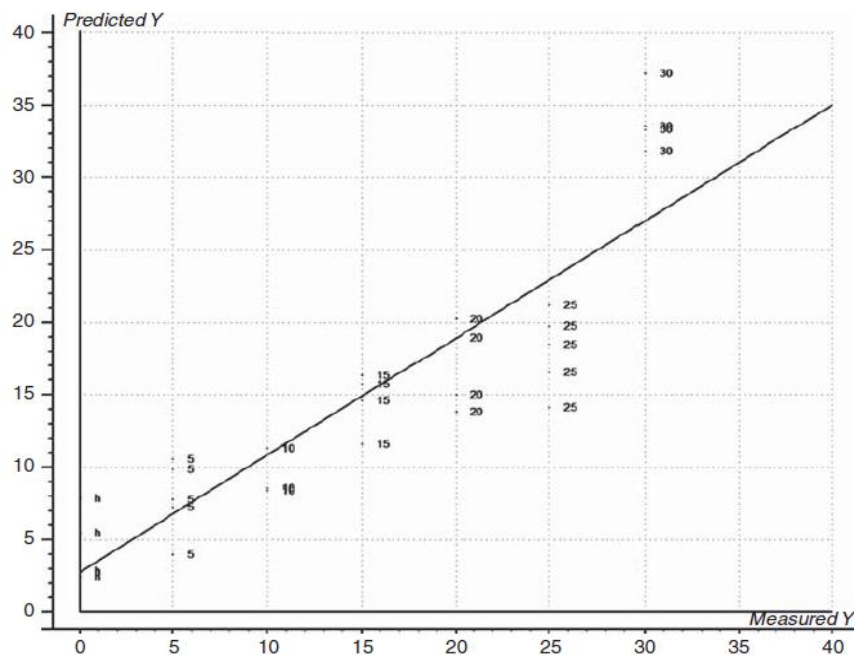
ที่มา: Mishra และคณะ (2010)

ตารางที่ 2.4 การแบ่งกลุ่มตัวอย่างตามระดับการปลอมปนในน้ำผึ้ง

ปริมาณการปลอมปน	กลุ่ม
0% (ไม่มีการปลอมปน)	ระดับการปลอมปนต่ำ (1)
5%	ระดับการปลอมปนต่ำ (1)
10%	ระดับการปลอมปนปานกลาง (2)
15%	ระดับการปลอมปนปานกลาง (2)
20%	ระดับการปลอมปนปานกลาง (2)
25%	ระดับการปลอมปนสูง (3)
30%	ระดับการปลอมปนสูง (3)

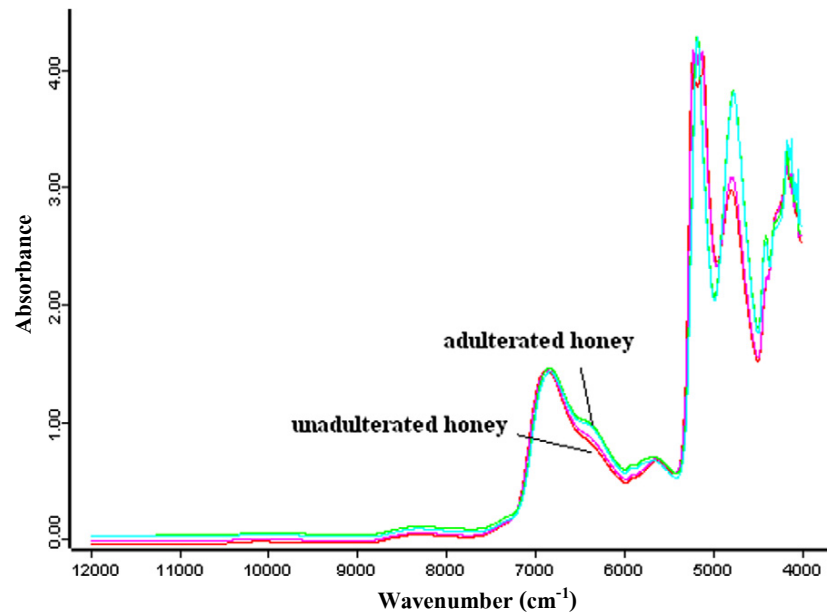
ที่มา: Mishra และคณะ (2010)

สำหรับการใช้เทคนิค PLS เพื่อทำนายการปลอมปนพบว่า สมการมีค่า R^2 เท่ากับ 0.81
ค่า SEC เท่ากับ 4.55 และค่า SEP เท่ากับ 6.45 ซึ่ง scatter plot แสดงปริมาณการปลอมปน
jaggery syrup ในน้ำผึ้งกับค่าที่ทำนายได้จากเทคนิค NIR แสดงดังภาพที่ 2.7



ภาพที่ 2.7 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มข้นของ jaggery syrup ที่ปลอมปนอยู่จริง และค่าที่ทำนายได้จากเทคนิค NIR ในตัวอย่างน้ำผึ้ง
ที่มา: Mishra และคณะ (2010)

เช่นเดียวกับ Chen และคณะ (2011) ที่ได้ทำการตรวจสอบการปลอมปนน้ำผึ้งจีนด้วยเทคนิค NIR โดยการเตรียมตัวอย่างน้ำผึ้งแท้และน้ำผึ้งที่มีการปลอมปนด้วย high fructose corn syrup (HFCS) 7-59% (w/w) วัดค่าการดูดกลืนแสงในช่วง $10000-4000\text{ cm}^{-1}$ สเปกตรัมการดูดกลืนของตัวอย่างน้ำผึ้งแท้และน้ำผึ้งที่มีการปลอมปนด้วย HFCS แสดงดังภาพที่ 2.8 พบว่าตัวอย่างดูดกลืนแสงเป็นอย่างมากที่เลขคลื่น 6851 cm^{-1} (โอเวอร์โทนอันดับหนึ่งของ O-H), 5607 cm^{-1} (โอเวอร์โทนอันดับหนึ่งของหมู่ CH_2), 5201 cm^{-1} (คอมบิเนชันของ O-H และ bend band), 4782 cm^{-1} (คอมบิเนชันของ O-H deformation band และ C-O), 4686 cm^{-1} (คอมบิเนชันของ C-H และ deformation band) และ 4182 cm^{-1} (คอมบิเนชันของหมู่ CH_2)



ภาพที่ 2.8 สเปกตรัมการดูดกลืนแสงของตัวอย่างน้ำผึ้งแท้และตัวอย่างน้ำผึ้งที่มีการปลอมปนด้วย HFCS

ที่มา: Chen และคณะ (2011)

การสร้างแบบจำลองสำหรับแบ่งกลุ่ม (discrimination model) ด้วยการใช้ตัวแปรหุ่น (dummy variable) โดยการกำหนดตัวเลขเพื่อดูว่าตัวอย่างนั้นเป็นน้ำผึ้งที่มีการปลอมปนหรือไม่ Chen และคณะ (2011) กำหนดให้ตัวอย่างน้ำผึ้งที่มีการปลอมปนเป็นหมายเลข 1 และตัวอย่างน้ำผึ้งแท้เป็นหมายเลข 2 จากนั้นจึงทำการปรับแต่งสเปกตรัมเพื่อให้แบบจำลองสำหรับแบ่งกลุ่มที่สร้างขึ้นมีความเหมาะสมต่อการนำไปใช้งานมากขึ้น และเมื่อทำการเปรียบเทียบแบบจำลองสำหรับแบ่งกลุ่ม DPLS ของน้ำผึ้งที่มีการปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมด้วยวิธีอนุพันธ์อันดับหนึ่ง การปรับค่าศูนย์กลางด้วยค่าเฉลี่ย (mean centering, MC) และ 13 smoothing point จากการใช้ข้อมูลสเปกตรัม 3 แบบ คือ ใช้ข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมด ($10000-4000\text{ cm}^{-1}$) ใช้ข้อมูลสเปกตรัมในช่วง $6000-4000\text{ cm}^{-1}$ และใช้ข้อมูลสเปกตรัมในช่วง $10000-6000\text{ cm}^{-1}$ พบว่า แบบจำลองแบ่งกลุ่มจากการใช้ข้อมูลสเปกตรัมในช่วงคลื่น $10000-6000\text{ cm}^{-1}$ สามารถแยกตัวอย่างน้ำผึ้งได้ดีกว่าการใช้ข้อมูลสเปกตรัมในย่านอื่นๆ โดยสามารถแยกได้ถูกต้อง 92.13% ดังตารางที่ 2.5

ตารางที่ 2.5 ผลของแบบจำลองแบ่งกลุ่มที่สร้างด้วยวิธี DPLS โดยใช้ข้อมูลสเปกตรัมที่แตกต่างกัน

ช่วงสเปกตรัม (cm ⁻¹)	การจำแนกที่ถูกต้อง (%)	การจำแนกผิดพลาด (%)
10000-4000	84.02	15.98
6000-4000	83.17	16.83
10000-6000	92.13	7.87

ที่มา: Chen และคณะ (2011)

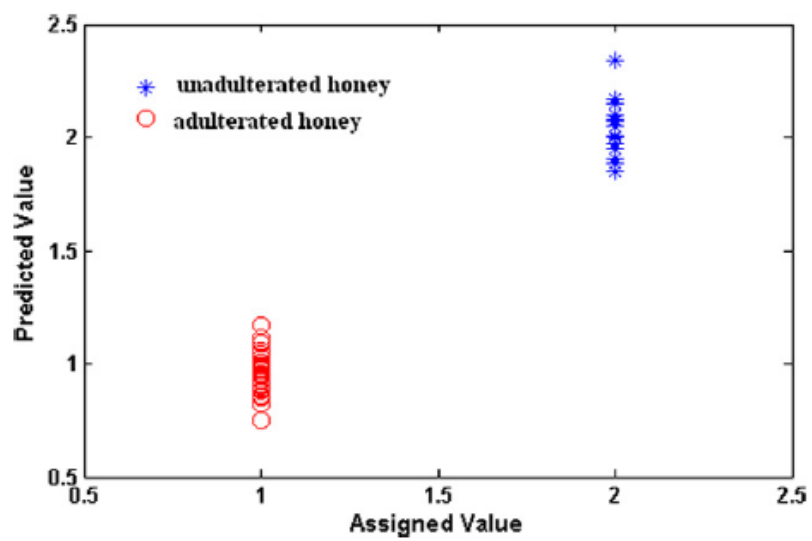
แบบจำลองแบ่งกลุ่ม DPLS ที่สร้างขึ้นสามารถแยกตัวอย่างน้ำผึ้งปลอมปนได้ถูกต้อง 95.8% และสามารถแยกตัวอย่างน้ำผึ้งแท้ได้ถูกต้อง 97.9% ดังตารางที่ 2.6

ตารางที่ 2.6 ผลของการแยกตัวอย่างด้วยวิธี DPLS ในตัวอย่างที่ใช้สร้างแบบจำลอง

	น้ำผึ้งปลอมปน	น้ำผึ้งแท้
ข้อมูลชุดสร้างแบบจำลองแบ่งกลุ่ม		
น้ำผึ้งปลอมปน	47	1
น้ำผึ้งแท้	2	46

ที่มา: Chen และคณะ (2011)

ผลการตรวจสอบความถูกต้องของแบบจำลองสำหรับแบ่งกลุ่ม DPLS ในการทำนายตัวอย่างน้ำผึ้งแท้และตัวอย่างน้ำผึ้งที่มีการปลอมปนหลังจากที่มีการปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมแล้ว โดยพิจารณาค่าทำนายในช่วง ± 0.5 จากข้อมูลตัวอย่างชุดตรวจสอบความถูกต้องของแบบจำลอง (validation set) แสดงดังภาพที่ 2.9 จากภาพแสดงให้เห็นถึงตัวอย่าง 2 กลุ่มที่มีการแยกกันอย่างชัดเจน โดยตัวอย่างน้ำผึ้งที่มีการปลอมปนจะถูกแยกอย่างถูกต้องโดยค่าทำนายอยู่ระหว่าง 0.5-1.5 และตัวอย่างน้ำผึ้งแท้มีค่าทำนายอยู่ระหว่าง 1.5-2.5



ภาพที่ 2.9 กราฟค่าการทำนายด้วยวิธี DPLS ของตัวอย่างน้ำผึ้งแท้และตัวอย่างน้ำผึ้งที่มีการปลอมปน ด้วย HFCS
ที่มา: Chen และคณะ (2011)

บทที่ 3

วิธีการดำเนินงานวิจัย

3.1 วัสดุดิบ

3.1.1 น้ำตาลมะพร้าวสด จากสวนมะพร้าวต่างๆ จังหวัดสมุทรสาครและสมุทรสงคราม นำมากรองด้วยผ้าขาวบางเพื่อกำจัดเศษไม้ และสิ่งแปลกปลอมต่างๆ จากนั้นจึงนำไปต้มจนเดือดด้วยกระทะไฟฟ้า แล้วทำให้เย็นลงทันที บรรจุในถุงพลาสติก เก็บรักษาในตู้แช่แข็งที่อุณหภูมิประมาณ -18°C จนกว่าจะนำออกมาเตรียมตัวอย่างและทำการวิเคราะห์ต่อไป ณ ห้องปฏิบัติการภาควิชาเทคโนโลยีอาหาร มหาวิทยาลัยศิลปากร

3.1.2 น้ำตาลทรายขาวบริสุทธิ์ ตราลิน บริษัทกลุ่มน้ำตาลไทยรุ่งเรือง

3.1.3 เศษไม้ที่ใช้สำหรับเติมลงในกระบอกลบน้ำตาลมะพร้าวสด ตราระหงษ์ บริษัทประติษฐ์อุตสาหกรรมพาณิชย์ จำกัด

3.2 สารเคมี

3.2.1 โซเดียมไฮดรอกไซด์ (sodium hydroxide) (Merck, Germany)

3.2.2 ฟีนอล์ฟทาลีน (phenolphthalein) (Labchem, USA)

3.2.3 โพแทสเซียมไฮโดรเจนฟทาเลต (potassium hydrogen phthalate) (Ajax, New Zealand)

3.2.4 กลูโคสมาตรฐาน (standard glucose) (Sigma, USA)

3.2.5 ฟรุคโตสมาตรฐาน (standard fructose) (Fluka, Switzerland)

3.2.6 ซูโครสมาตรฐาน (standard sucrose) (Fluka, Switzerland)

3.2.7 อะซิโตนไทรล์ (acetone) (RCI Labscan, Thailand)

3.2.8 น้ำกลั่น (distilled water) (Vunique, Thailand)

3.3 อุปกรณ์และเครื่องมือ

- 3.3.1 กระดาษกรองเบอร์ 4 ขนาด 110 mm (Whatman, UK)
- 3.3.2 กระดาษกรองใยแก้ว ขนาด 70 mm (glass microfiber filter) (Whatman, GF/C, UK)
- 3.3.3 NIR sample cup ใช้ petri dish (Duran, steriplan, Germany) ขนาด 100 mm × 15 mm
- 3.3.4 NIR sample cell สำหรับวัดตัวอย่างที่เป็นของเหลว (น้ำตาลมะพร้าวสด) มี path length 0.2 mm
- 3.3.5 หม้อต้มน้ำขนาด 16 cm (Zebra, Thailand)
- 3.3.6 กระทะไฟฟ้า ขนาด 14 นิ้ว (Emma, DBP-1400, Thailand)
- 3.3.7 เครื่องผสมอาหารแบบตั้งโต๊ะ (Kitchen Aid, SSA, USA) พร้อมหัวตีรูปใบไม้
- 3.3.8 แท่นให้ความร้อน (hot plate) (IKA, yellow MAG HS 7, USA)
- 3.3.9 เทอร์โมมิเตอร์แบบดิจิตอล (digital thermometer) (Hanna, HI 145, USA)
- 3.3.10 digital refractometer (Atago, PAL-1, Japan)
- 3.3.11 เครื่องชั่ง 2 ตำแหน่ง (Ohaus, Pioneer PA 2102, USA)
- 3.3.12 เครื่องชั่ง 4 ตำแหน่ง (Sartorius, BS 224 S, Germany)
- 3.3.13 เครื่องสเปกโตรโฟโตมิเตอร์อินฟราเรดย่านใกล้ (near-infrared spectrophotometer) (Bruker Optics, MPA, Germany)
- 3.3.14 เครื่อง high performance liquid chromatography (HPLC) (Shimadzu, RID-10A, Japan) พร้อมคอลัมน์ Luna NH₂ ขนาด 250 mm × 4.6 mm (Phenomenex, USA)
- 3.3.15 เครื่องวัดพีเอช (pH meter) (Hanna, HI 2213, USA)
- 3.3.16 เครื่องผสมแบบวอร์เท็กซ์ (vortex mixer) (Scientific Industries, G 560 E, USA)
- 3.3.17 อ่างอัลตราโซนิก (ultrasonic cleaning bath) (Bandelin, DK 512 P, Germany)
- 3.3.18 เครื่องอบแห้งแบบใช้สุญญากาศ (Eyela, VOS-300 SD, Japan)
- 3.2.19 ตู้อบลมร้อน (Binder, FED 53, Germany)
- 3.2.20 ตู้ควบคุมอุณหภูมิต่ำ (cool incubator) (Binder, KB, Germany)
- 3.2.21 ตู้แช่แข็ง (Sanyo, Japan)

3.4 วิธีการทดลอง

3.4.1 การศึกษาการใช้เทคนิค NIR ในการวิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมีของน้ำตาลมะพร้าวสด

3.4.1.1 การเตรียมตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวสด

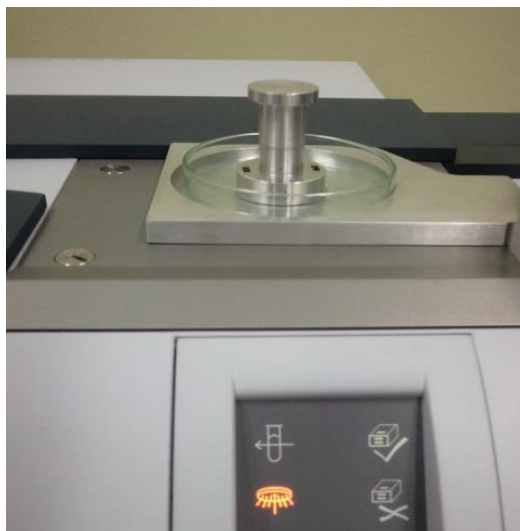
ละลายน้ำตาลมะพร้าวสดที่แช่แข็งไว้ โดยนำไปแช่ในตู้เย็นที่อุณหภูมิประมาณ 4°C จนตัวอย่างน้ำตาลสดละลายหมด แล้วกรองด้วยกระดาษกรองเบอร์ 4 เป็นจำนวน 174 ตัวอย่าง เพื่อใช้ในการวัดสเปกตรัม NIR และการวิเคราะห์ทางเคมี

3.4.1.2 การวัดสเปกตรัม NIR ของน้ำตาลมะพร้าวสด

นำตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวสดที่เตรียมไว้ในข้อ 3.4.1.1 มาปรับอุณหภูมิตัวอย่างให้ได้ 25°C ในตู้ควบคุมอุณหภูมิ (cool incubator) จากนั้นจึงนำตัวอย่างมาสแกนวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่อง NIR ที่ช่วงเลขคลื่น 12480-4000 cm^{-1} resolution 32 cm^{-1} และ 32 scan ในระบบส่องผ่านสะท้อน (transflectance) โดยเทตัวอย่างลงใน petri dish จำนวน 10 ml จากนั้นใช้ sample cell ที่มี path length ขนาด 0.2 mm ดังภาพที่ 3.10 วางลงบนตัวอย่างตามภาพที่ 3.11 ทำการวัดตัวอย่างละ 3 ซ้ำ (ทำการยก sample cell ขึ้น แล้ววางลงบนตัวอย่างใหม่) แล้วใช้ค่าเฉลี่ยข้อมูลสเปกตรัมที่ได้จากการวัดทั้ง 3 ครั้งเป็นตัวแทนข้อมูลสเปกตรัมของน้ำตาลมะพร้าวสดตัวอย่างนั้นๆ



ภาพที่ 3.10 sample cell สำหรับใช้วัดสเปกตรัม NIR ของตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวสด



ภาพที่ 3.11 การวัดสเปกตรัม NIR ของน้ำตาลมะพร้าวสด ด้วยเครื่องสเปกโตรโฟโตมิเตอร์อินฟราเรดย่านใกล้ (near-infrared spectrophotometer) (Bruker Optics, MPA, Germany)

3.4.1.3 การวิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมีของน้ำตาลมะพร้าวสด

ทำการวิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมีและค่า pH ของน้ำตาลมะพร้าวสดที่เตรียมไว้ในข้อ 3.4.1.1 ซึ่งเป็นดัชนีสำคัญที่บ่งบอกถึงคุณภาพของน้ำตาลมะพร้าวสด ได้แก่

- (1) ปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมด (total soluble solids, TSS)

ด้วย digital refractometer

- (2) ปริมาณน้ำตาลกลูโคส ฟรุคโตส และซูโครส ด้วยเครื่อง HPLC
- (3) ความเป็นกรด-ด่าง หรือค่า pH ด้วย pH meter
- (4) ปริมาณกรดที่ไทเทรตได้ (titratable acidity, TA) โดยการไทเทรต

(AOAC, 1995)

- (5) ปริมาณความชื้นด้วยเครื่องอบแห้งสุญญากาศ (AOAC, 1995)

นำค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ห้ไปคำนวณหาค่า standard error of laboratory (SEL)

เพื่อหาความคลาดเคลื่อนของการวิเคราะห์ค่าทางเคมี

3.4.1.4 การสร้างสมการทำนายของค่าประกอบทางเคมีของน้ำตาล

มะพร้าวสด

ข้อมูลสเปกตรัมที่ได้ในข้อ 3.4.1.2 ถูกนำไปทำการปรับแต่งด้วยเทคนิคทางคณิตศาสตร์ (pretreatment) 6 วิธี ได้แก่ vector normalization (SNV), multiplicative scattering correction (MSC), first derivative (1D), second derivative (2D), first derivative กับ vector normalization (1D+SNV) และ first derivative กับ multiplicative scattering correction (1D+MSC) เพื่อลดผลกระทบจากการกระเจิงแสงที่แตกต่างกันของน้ำตาลมะพร้าวสดแต่ละตัวอย่าง จากนั้นจึงทำการแบ่งข้อมูลสเปกตรัมออกเป็น 2 กลุ่ม คือ ข้อมูลสเปกตรัมที่ใช้ในการสร้างสมการ (calibration set) และข้อมูลสเปกตรัมที่ใช้การตรวจสอบความถูกต้องของสมการ (validation set) วิธีการแบ่งกลุ่มตัวอย่างทำโดยเรียงค่าทางเคมีของตัวอย่างน้ำตาลสดจากน้อยไปหามาก แล้วจึงแบ่งกลุ่มตัวอย่างในอัตราส่วน 2:1 โดย calibration set จะต้องมิตัวอย่างที่มีค่าทางเคมีต่ำที่สุดและสูงที่สุดอยู่ด้วยเพื่อให้ครอบคลุมค่าที่นำมาทำนาย นำข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมดไปสร้างสมการทำนายค่าองค์ประกอบทางเคมีของน้ำตาลมะพร้าวสดโดยอาศัยเทคนิค partial least squares regression (PLS) ในการหาความสัมพันธ์ระหว่างข้อมูลสเปกตรัมกับค่าองค์ประกอบทางเคมีที่วิเคราะห์ได้ในข้อ 3.4.1.3 ด้วยโปรแกรม OPUS version 7.0 โดยเลือกใช้ฟังก์ชัน optimize เพื่อตรวจสอบช่วงคลื่นและเทคนิคการปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมที่มีประสิทธิภาพ โดยโปรแกรมจะแสดงผลค่า root mean square error of prediction (RMSEP) จำนวนแฟคเตอร์ ช่วงคลื่น (informative region) และเทคนิคการปรับสเปกตรัมที่ใช้ ในงานวิจัยนี้เลือกพิจารณาสมการทำนายที่ให้ค่า standard error of prediction (SEP) ที่ต่ำ และให้ค่า coefficients of determination (R^2) และ RPD ที่สูง จากนั้นจึงทำการตรวจสอบค่า SEP ที่ได้ด้วยค่า unexplained error confidence limits (UECLs, T_{UE}) ซึ่งสามารถคำนวณได้จาก F-test ค่า SEP ที่ได้ควรมีค่าน้อยกว่าค่า T_{UE} ตามมาตรฐาน ISO 12099 และตรวจสอบค่าความผิดพลาดเฉลี่ยในการทำนาย (bias) โดยการเปรียบเทียบค่าทางเคมีจริงกับค่าที่ทำนายได้จากสมการทำนายด้วยการทดสอบ t แบบจับคู่ (pair t-test) ตามสูตรที่แสดงไว้ในภาคผนวก ค หากค่าสัมบูรณ์ t มีค่าน้อยกว่า 2 หมายถึง ค่าที่ทำนายได้จากสมการไม่แตกต่างจากค่าทางเคมีจริงอย่างมีนัยสำคัญ ที่ระดับความเชื่อมั่น 95% (รณฤทธิ์, 2552) เพื่อให้ได้สมการที่มีความแม่นยำต่อการนำไปใช้วิเคราะห์ได้ดีที่สุด

3.4.2 การศึกษาการใช้เทคนิค NIR ในการตรวจสอบการปลอมปนของน้ำตาลมะพร้าวสด

3.4.2.1 การเตรียมตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวสด

ละลายน้ำตาลมะพร้าวสดที่แช่แข็งไว้ โดยนำไปแช่ในตู้เย็นที่อุณหภูมิประมาณ 4°C จนตัวอย่างน้ำตาลสดละลายหมด แล้วกรองด้วยกระดาษกรองเบอร์ 4 ทำการเตรียมวัตถุดิบน้ำตาลมะพร้าวสด 2 กลุ่ม คือ กลุ่มแรกจำนวน 64 ตัวอย่าง เป็นน้ำตาลมะพร้าวสดแท้ที่ไม่มีการปลอมปน กลุ่มที่สองจำนวน 100 ตัวอย่าง มาจำลองการปลอมปนด้วยการเติมน้ำเชื่อม (สารละลายซูโครส) ที่มีปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมดเท่ากับตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวสด เริ่มต้นในแต่ละตัวอย่างก่อนการเติมน้ำเชื่อม โดยกำหนดให้มีการปลอมปนน้ำเชื่อมในปริมาณ 10, 25, 50, 75 และ 100% (w/w) สำหรับตัวอย่างการคำนวณและวิธีการปลอมปนแสดงไว้ในภาคผนวก ข

3.4.2.2 การวัดสเปกตรัม NIR ของน้ำตาลมะพร้าวสด

นำตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวสดในข้อ 3.4.2.1 ทั้ง 2 กลุ่ม จำนวน 164 ตัวอย่าง ไปปรับอุณหภูมิให้ได้ 25°C ในตู้ควบคุมอุณหภูมิ แล้วนำมาสแกนเพื่อวัดค่าการดูดกลืนด้วยเครื่องสเปกโตรโฟโตมิเตอร์อินฟราเรดย่านใกล้ ตามข้อ 3.4.1.2

3.4.2.3 การสร้างแบบจำลองทำนายการปลอมปนของน้ำตาลมะพร้าวสด

ข้อมูลสเปกตรัมที่ได้ในข้อ 3.4.2.2 ถูกนำไปทำการปรับแต่งด้วยเทคนิคทางคณิตศาสตร์ 6 วิธี ได้แก่ SNV, MSC, 1D, 2D, 1D กับ SNV และ 1D กับ MSC เพื่อลดผลกระทบจากการกระเจิงแสงที่แตกต่างกันของน้ำตาลมะพร้าวสดแต่ละตัวอย่าง นำข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมดไปสร้างแบบจำลองเพื่อแบ่งกลุ่มระหว่างตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวสดแท้และน้ำตาลมะพร้าวสดที่มีการปลอมปนด้วยวิธี principal component analysis (PCA) และสร้างแบบจำลองเพื่อทำนายปริมาณการปลอมปนน้ำเชื่อมในตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวสดด้วยวิธี PLS ด้วยโปรแกรม OPUS version 7.0 โดยแบ่งข้อมูลสเปกตรัมออกเป็น 2 กลุ่ม คือกลุ่มที่ใช้ในการสร้างแบบจำลองและกลุ่มที่ใช้ในการตรวจสอบแบบจำลองในอัตราส่วน 2:1 ในงานวิจัยนี้เลือกพิจารณาแบบจำลองที่สามารถแยกตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวสดแท้และน้ำตาลมะพร้าวสดปลอมปนออกจากกันได้ และให้ค่า SEP ที่ต่ำ ค่า R^2 และค่า RPD ที่สูง เพื่อให้ได้แบบจำลองที่มีความแม่นยำต่อการนำไปใช้วิเคราะห์ได้ดีที่สุด

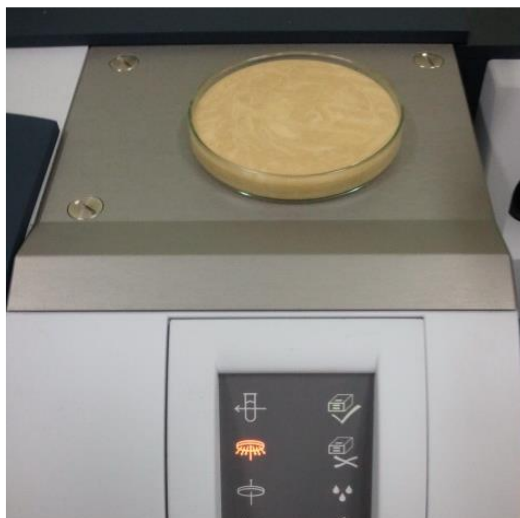
3.4.3 การศึกษาการใช้เทคนิค NIR ในการวิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมีของ น้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

3.4.3.1 การเตรียมตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

ละลายน้ำตาลมะพร้าวสดที่แช่แข็งไว้ โดยนำไปแช่ในตู้เย็นที่อุณหภูมิ ประมาณ 4°C จนน้ำตาลสดละลายหมด จากนั้นนำน้ำตาลมะพร้าวสดที่ได้มาผ่านกระบวนการ เคี้ยวด้วยความร้อนเพื่อระเหยน้ำออกโดยใช้กระทะไฟฟ้าที่ซีตบอกระดับอุณหภูมิ 160°C เป็นเวลา 40 นาที จากนั้นจึงนำน้ำตาลสดที่เคี้ยวเทลงหม้อสแตนเลสกันแบนแล้วให้ความร้อนต่อด้วย hot plate ที่ซีตบอกระดับอุณหภูมิ 150°C จนกระทั่งตัวอย่างน้ำตาลที่เคี้ยวมีอุณหภูมิจากการวัดด้วย digital thermometer ประมาณ 118°C แล้วจึงหยุดให้ความร้อน เทลงโถปั่น ทำการตีปั่นด้วย เครื่องผสม Kitchen Aid โดยใช้หัวตีรูปใบไม้ ที่ซีตบอกระดับความเร็ว 3 จนน้ำตาลเคี้ยวมีลักษณะ ชุ่มเหนียว (ประมาณ 3-7 นาที ขึ้นอยู่กับตัวอย่าง) จากนั้นเทลงใส่ petri dish ในปริมาณ 90 กรัม แล้วปล่อยให้เย็นจนแข็งตัว ทำการเตรียมตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวทั้งหมดจำนวน 120 ตัวอย่าง นำไปเก็บรักษาในตู้แช่แข็งที่อุณหภูมิประมาณ -18°C เพื่อทำการวิเคราะห์ต่อไป

3.4.3.2 การวัดสเปกตรัม NIR ของตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

นำตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวที่บรรจุอยู่ใน petri dish จากข้อ 3.4.3.1 จำนวน 120 ตัวอย่าง ออกจากตู้แช่แข็งมาปรับอุณหภูมิให้ได้ 25°C ในตู้ควบคุมอุณหภูมิไปสแกน วัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่องสเปกโตรโฟโตมิเตอร์อินฟราเรดย่านใกล้ ในระบบการสะท้อน แสง (reflectance) โดยเลือกใช้ช่วงเลขคลื่น $12480\text{--}4000\text{ cm}^{-1}$ resolution 32 cm^{-1} และ 32 scan ดังภาพที่ 3.12 จะได้ผลออกมาเป็นเส้นสเปกตรัมของแต่ละตัวอย่าง ทำการวัดตัวอย่างละ 3 ตำแหน่ง แล้วใช้ค่าเฉลี่ยข้อมูลสเปกตรัมที่ได้จากการวัดทั้ง 3 ตำแหน่งเป็นตัวแทนข้อมูลสเปกตรัม ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวตัวอย่างนั้นๆ



ภาพที่ 3.12 การวัดสเปกตรัม NIR ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว ด้วยเครื่องสเปกโตรโฟโตมิเตอร์อินฟราเรดย่านใกล้ (near-infrared spectrophotometer) (Bruker Optics, MPA, Germany)

3.4.3.3 การวิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมีของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

นำตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวทั้ง 120 ตัวอย่าง ที่เตรียมได้จากข้อ 3.4.3.1 ออกจากตู้แช่แข็ง นำไปวิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมีและค่า pH ซึ่งเป็นดัชนีสำคัญที่บ่งบอกถึงคุณภาพของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว ได้แก่

- (1) ปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมด (total soluble solids, TSS)

ด้วย digital refractometer

- (2) ปริมาณน้ำตาลกลูโคส ฟรุคโตส และซูโครส ด้วยเครื่อง HPLC
- (3) ความเป็นกรด-ด่าง หรือค่า pH ด้วย pH meter
- (4) ปริมาณกรดที่ไทเทรตได้ (titratable acidity, TA) โดยการไทเทรต
- (5) ปริมาณความชื้นด้วยเครื่องอบแห้งสุญญากาศตามวิธีการมาตรฐาน

ของ AOAC (1995)

นำค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ไปคำนวณหาค่า standard error of laboratory (SEL) เพื่อหาความคลาดเคลื่อนของการวิเคราะห์ค่าทางเคมี

3.4.3.4 การสร้างสมการทำนายองค์ประกอบของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

ข้อมูลสเปกตรัมที่ได้ในข้อ 3.4.3.2 จะถูกนำไปทำการปรับแต่งด้วยเทคนิคทางคณิตศาสตร์ 6 วิธี ได้แก่ SNV, MSC, 1D, 2D, 1D กับ SNV และ 1D กับ MSC เพื่อลดผลกระทบจากการกระเจิงแสงที่แตกต่างกันของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวแต่ละตัวอย่าง จากนั้นจึงทำการแบ่งข้อมูลสเปกตรัมออกเป็น 2 กลุ่ม คือ ข้อมูลสเปกตรัมที่ใช้ในการสร้างสมการจำนวน 80 ตัวอย่าง และข้อมูลสเปกตรัมที่ใช้การตรวจสอบความถูกต้องของสมการจำนวน 40 ตัวอย่าง วิธีการแบ่งกลุ่มตัวอย่างทำโดยเรียงค่าทางเคมีจากน้อยไปหามาก แล้วจึงแบ่งกลุ่มตัวอย่างในอัตราส่วน 2:1 โดย calibration set จะต้องมีตัวอย่างที่มีค่าทางเคมีต่ำที่สุดและสูงที่สุดอยู่ด้วยเพื่อให้ครอบคลุมค่าที่นำมาทำนาย นำข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมดไปสร้างสมการทำนายค่าองค์ประกอบทางเคมีของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวโดยอาศัยเทคนิค PLS ในการหาความสัมพันธ์ระหว่างข้อมูลสเปกตรัมกับค่าองค์ประกอบทางเคมีที่วิเคราะห์ได้ในข้อ 3.4.3.3 ด้วยโปรแกรม OPUS version 7.0 ในงานวิจัยนี้จะเลือกพิจารณาสมการทำนายที่ให้ค่า SEP ที่ต่ำ และให้ค่า R^2 และ RPD ที่สูง จากนั้นจึงทำการตรวจสอบค่า SEP ที่ได้ด้วยค่า T_{UE} และตรวจสอบค่า bias ด้วยการทดสอบ pair t-test ตามสูตรที่แสดงไว้ในภาคผนวก ค เพื่อให้ได้สมการที่มีความแม่นยำต่อการนำไปใช้วิเคราะห์ได้ดีที่สุด

3.4.4 การศึกษาการใช้เทคนิค NIR ในการตรวจสอบการปลอมปนของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

3.4.4.1 การเตรียมตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

ทำการเตรียมวัตถุดิบน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว 2 กลุ่ม คือ กลุ่มแรกจำนวน 83 ตัวอย่าง เป็นน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวแท้ที่ไม่มีการปลอมปน กลุ่มที่สองจำนวน 76 ตัวอย่างมาจำลองการปลอมปนด้วยการเติมน้ำตาลทราย โดยกำหนดให้มีการเติมน้ำตาลทรายในปริมาณ 25 และ 50% (TSS ของน้ำตาลสดเริ่มต้นที่ใช้เคี้ยว) (แสดงตัวอย่างการคำนวณและวิธีการปลอมปนไว้ในภาคผนวก ข)

เริ่มจากละลายน้ำตาลมะพร้าวสดที่แช่แข็งไว้ โดยนำไปแช่ในตู้เย็นที่อุณหภูมิประมาณ 4°C จนน้ำตาลสดละลายหมด จากนั้นนำน้ำตาลมะพร้าวสดที่ได้มาผ่านกระบวนการเคี้ยวและทำการตีปั่นตามข้อ 3.4.3.1 แล้วเทลงใส่ petri dish ในปริมาณ 90 กรัม ปล่อยให้เย็นจน

แข็งตัว ทำการเตรียมตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวทั้งหมดจำนวน 159 ตัวอย่าง นำไปเก็บรักษาในตู้แช่แข็งที่อุณหภูมิประมาณ -18°C เพื่อทำการวิเคราะห์ต่อไป

3.4.4.2 การวัดสเปกตรัม NIR ของตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

นำตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวทั้ง 2 กลุ่ม จำนวน 159 ตัวอย่าง ที่เตรียมได้ใน

ข้อ 3.4.4.1 ไปปรับอุณหภูมิให้ได้ 25°C ในตู้ควบคุมอุณหภูมิ แล้วนำมาสแกนเพื่อวัดค่าการดูดกลืนด้วยเครื่องสเปกโตรโฟโตมิเตอร์อินฟราเรดย่านใกล้ ตามข้อ 3.4.3.2

3.4.4.3 การสร้างแบบจำลองการปลอมปนของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

ข้อมูลสเปกตรัมที่ได้ในข้อ 3.4.4.2 ถูกนำไปทำการปรับแต่งด้วยเทคนิคทางคณิตศาสตร์ 6 วิธี ได้แก่ SNV, MSC, 1D, 2D, 1D กับ SNV และ 1D กับ MSC จากนั้นจึงนำข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมดไปสร้างแบบจำลองการแบ่งกลุ่มระหว่างตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวแท้และน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวที่มีการปลอมปนด้วยวิธี PCA และสร้างแบบจำลองทำนายปริมาณการปลอมปนน้ำตาลทรายในตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวด้วยวิธี PLS ด้วยโปรแกรม OPUS version 7.0 โดยแบ่งข้อมูลสเปกตรัมออกเป็น 2 กลุ่ม คือกลุ่มที่ใช้ในการสร้างแบบจำลองและกลุ่มที่ใช้ในการตรวจสอบแบบจำลองในอัตราส่วน 2:1 ในงานวิจัยนี้จะเลือกพิจารณาแบบจำลองที่สามารถแยกตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวแท้และน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวปลอมปนออกจากกันได้ และให้ค่า SEP ที่ต่ำ ค่า R^2 และค่า RPD ที่สูง เพื่อให้ได้แบบจำลองที่มีความแม่นยำต่อการนำไปใช้วิเคราะห์ได้ดีที่สุด

3.4.4 การวัดสเปกตรัม NIR ของกลูโคส ฟรุคโตส และซูโครสมาตรฐาน

นำกลูโคส ฟรุคโตส และซูโครสมาตรฐานใส่ลง sample cup แล้วไปปรับอุณหภูมิให้ได้ 25°C ในตู้ควบคุมอุณหภูมิ แล้วนำมาสแกนเพื่อวัดค่าการดูดกลืนด้วยเครื่องสเปกโตรโฟโตมิเตอร์อินฟราเรดย่านใกล้ ในระบบสะท้อนแสง (reflectance) โดยเลือกใช้ช่วงเลขคลื่น $12480\text{--}4000\text{ cm}^{-1}$ resolution 32 cm^{-1} และ 32 scan สเปกตรัมของกลูโคส ฟรุคโตส และซูโครสมาตรฐานแสดงไว้ในภาคผนวก จ

3.4.5 การวัดสเปกตรัม NIR ของสารสกัดจากเศษไม้ที่ใช้สำหรับเติมในกระบอกเก็บน้ำตาลมะพร้าวสด

3.4.5.1 การเตรียมสารสกัดจากเศษไม้ที่ใช้สำหรับเติมในกระบอกเก็บน้ำตาลมะพร้าวสด

ทำการสกัดเศษไม้ด้วยน้ำ โดยแช่เศษไม้ปริมาณ 50 กรัม ในน้ำกลั่น 150 กรัม เป็นเวลา 17 ชั่วโมง ที่อุณหภูมิห้อง จากนั้นจึงกรองเศษไม้ออกจากสารสกัดที่ได้ นำไปอบเพื่อระเหยน้ำออกประมาณ 56% ที่อุณหภูมิ 60°C ในเครื่องอบแห้งสุญญากาศ เป็นเวลา 11 ชั่วโมง แล้วกรองสารสกัดที่ได้ด้วยกระดาษกรองเบอร์ 4 (ดัดแปลงจาก Chanthachum และ Beuchat, 1997)

3.4.5.2 การวัดสเปกตรัม NIR ของสารสกัดจากเศษไม้ที่ใช้สำหรับเติมในกระบอกเก็บน้ำตาลมะพร้าวสด

นำสารสกัดที่ได้จากข้อ 3.4.5.1 มาหยดลงบนกระดาษกรองใยแก้วในปริมาณ 1 ml รอให้สารสกัดแพร่เต็มกระดาษกรองประมาณ 15-30 วินาที แล้วนำกระดาษกรองใส่ใน petri dish ไปอบในตู้อบลมร้อนที่อุณหภูมิ 40°C เป็นเวลา 20 นาที นำกระดาษกรองออกจากตู้อบมาหยดสารสกัดซ้ำ แล้วนำไปอบ โดยทำซ้ำขั้นตอนเดิม 2 ครั้ง จากนั้นจึงนำกระดาษกรองไปปรับอุณหภูมิให้ได้ 25°C ในตู้ควบคุมอุณหภูมิโดยเก็บกระดาษกรองไว้ในกล่องดูดความชื้นเพื่อป้องกันการดูดความชื้นกลับไปในกระดาษกรอง แล้วนำมาสแกนเพื่อวัดค่าการดูดกลืนด้วยเครื่องสเปกโตรโฟโตมิเตอร์อินฟราเรดย่านใกล้ ในระบบการสะท้อนแสง (reflectance) โดยเลือกใช้ช่วงเลขคลื่น 12480-4000 cm^{-1} resolution 32 cm^{-1} และ 32 scan สเปกตรัมของสารสกัดจากเศษไม้ที่ใช้สำหรับเติมในกระบอกเก็บน้ำตาลมะพร้าวสดแสดงไว้ในภาคผนวก จ

บทที่ 4

ผลและวิจารณ์ผลการทดลอง

4.1 ผลการทดลองและวิจารณ์ผลการทดลอง

4.1.1 การศึกษาการใช้เทคนิค NIR ในการวิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมีของน้ำตาลมะพร้าวสด

4.1.1.1 ค่าทางเคมีของน้ำตาลมะพร้าวสด

ผลการวิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมีต่างๆ ของตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวสดทั้งหมดด้วยวิธีมาตรฐานและค่าทางสถิติเบื้องต้นแสดงไว้ในตารางที่ 4.7 โดยตัวอย่างกลุ่มที่ใช้ในการสร้างสมการ (calibration set) มีค่าทางเคมีครอบคลุมกลุ่มตัวอย่างที่ใช้ในการตรวจสอบความถูกต้องของสมการ (validation set) และตัวอย่างทั้งสองกลุ่มนั้นมีการกระจายของค่าทางเคมีที่ใกล้เคียงกัน จากตารางที่ 4.7 พบว่า น้ำตาลมะพร้าวสดที่วิเคราะห์ได้มีค่าทางเคมีอยู่ในช่วงกว้างเมื่อเทียบกับรายงานการวิเคราะห์ต่างๆ ที่มีก่อนหน้านี้ (ประเทือง, 2503; ศิริพร, 2519; Iwuoha และ Eke, 1996; Borse และคณะ, 2007)

ตารางที่ 4.7 ค่าทางเคมีและค่าสถิติเบื้องต้นของน้ำตาลมะพร้าวสด

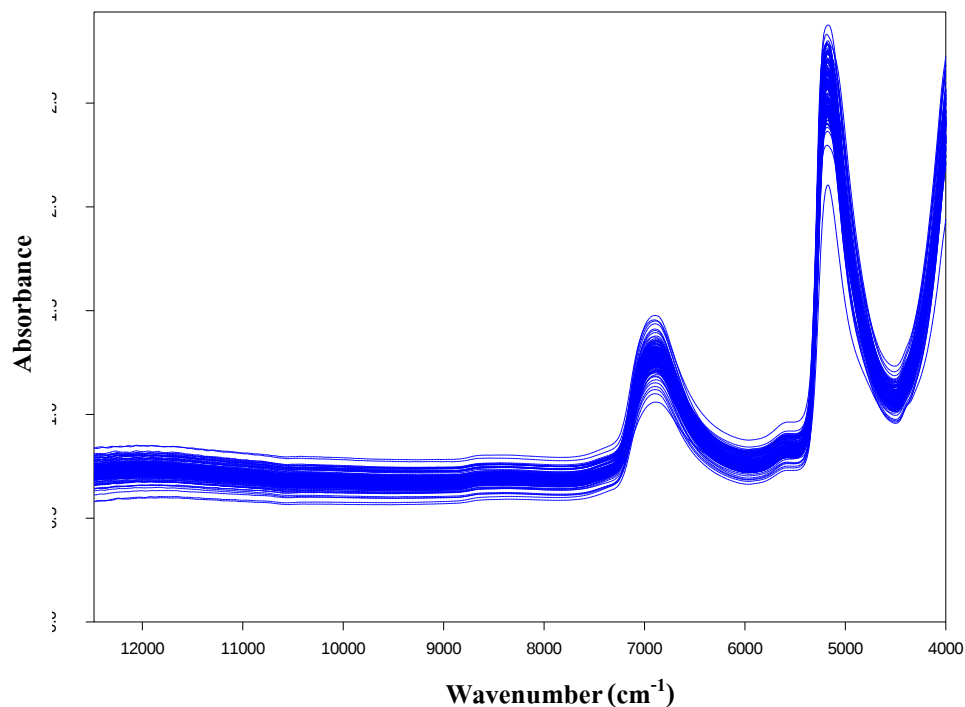
พารามิเตอร์	Calibration			Validation			SEL
	ช่วงข้อมูล	ค่าเฉลี่ย	SD	ช่วงข้อมูล	ค่าเฉลี่ย	SD	
TSS (°Brix)	5.3-41.7	14.8	6.3	5.5-39.0	14.7	5.6	0.9
กลูโคส (%)	0.05-3.28	0.69	0.66	0.10-3.19	0.77	0.76	1.25
ฟรุคโตส (%)	0.08-5.82	0.75	0.98	0.10-4.78	0.84	1.05	1.05
ซูโครส (%)	1.05-21.75	13.15	4.67	1.74-20.50	13.65	4.31	1.95
pH	3.87-9.05	5.80	1.35	4.26-8.95	5.80	1.32	0.003
TA (%)	0.026-0.609	0.090	0.085	0.031-0.340	0.084	0.062	0.01
ความชื้น (%)	54.00-91.84	83.44	7.37	56.97-91.28	83.89	6.27	0.31

ทั้งนี้ เป็นเพราะในการศึกษาครั้งนี้ได้จัดเตรียมตัวอย่างน้ำตาลสดให้มีลักษณะคุณภาพที่หลากหลาย เนื่องจากการสร้างสมการทำนายค่าด้วยเทคนิค NIR จำเป็นต้องใช้กลุ่มตัวอย่างที่มีองค์ประกอบที่สนใจในช่วงที่กว้างมากพอ เพื่อให้สมการที่สร้างขึ้นมีประสิทธิภาพที่ดี

(Ozaki และคณะ, 2007) ถ้าหากตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวสดที่นำมาวิเคราะห์มีข้อมูลค่าทางเคมีอยู่ในช่วงที่แคบ จะส่งผลให้ประสิทธิภาพของสมการทำนายที่สร้างขึ้นไม่ดี ดังนั้นจึงได้เตรียมตัวอย่างเพื่อขยายช่วงค่าทางเคมีให้กว้างมากพอต่อการสร้างสมการทำนายให้มีประสิทธิภาพดีขึ้น โดยการเติมน้ำลงในตัวอย่างประมาณ 30-50% (w/w) ในน้ำตาลมะพร้าวสดจำนวน 5 ตัวอย่าง และระเหยน้ำออกจากตัวอย่างประมาณ 20-65% (w/w) โดยการให้ความร้อนแก่ตัวอย่างด้วย hot plate จำนวน 21 ตัวอย่าง อีกทั้งยังปล่อยตัวอย่างน้ำตาลสดที่ยังไม่ได้ผ่านการต้มให้เดือดทิ้งไว้ที่อุณหภูมิห้องเป็นเวลา 1-2 คืน เพื่อให้เกิดการหมักของจุลินทรีย์ตามธรรมชาติ จำนวน 12 ตัวอย่าง แล้วจึงนำมาทำการทดลอง จากวิธีการดังกล่าวส่งผลให้ค่าองค์ประกอบทางเคมีของน้ำตาลมะพร้าวสดมีช่วงค่าทางเคมีที่กว้างมากขึ้น และครอบคลุมช่วงคุณภาพของตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวสดที่เป็นไปได้จริง ทำนองเดียวกันกับการทดลองของ Xie และคณะ (2011) ที่ได้ทำการเติมน้ำ 10 และ 20% ลงในน้ำเบียร์เพื่อขยายช่วงค่าของข้อมูลที่ใช้ในการสร้างสมการทำนายค่า TA ปริมาณกรดมาลิก และกรดซิตริก

4.1.1.2 ค่าการดูดกลืนแสง NIR ของน้ำตาลมะพร้าวสด

ข้อมูลสเปกตรัมที่ได้จากการวัดตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวสดด้วยเทคนิค NIR ในระบบส่องผ่านสะท้อน (transflectance) ที่ช่วง $12480\text{--}4000\text{ cm}^{-1}$ ด้วย sample cell ที่มี path length ขนาด 0.2 mm แสดงดังภาพที่ 4.13 จากภาพนี้จะเห็นได้ว่าการดูดกลืนแสงชัดเจนที่ตำแหน่ง 6896 cm^{-1} และ 5154 cm^{-1} ซึ่งสัมพันธ์กับโอเวอร์โทนอันดับหนึ่งของพันธะ O-H และการสั่นแบบยืดของพันธะ O-H ของน้ำ ตามลำดับ (Osborn และคณะ, 1993) เนื่องจากน้ำสามารถดูดกลืนคลื่นรังสี NIR ได้สูง จึงส่งผลให้ตัวอย่างที่มีน้ำเป็นองค์ประกอบในจำนวนมาก (>80%) มีสเปกตรัมการดูดกลืนคลื่น NIR ที่เด่นชัดจากโมเลกุลของน้ำ (Bünning-Pfaue, 2003) และที่ตำแหน่ง $5882\text{--}4347\text{ cm}^{-1}$ มีความสัมพันธ์กับการดูดกลืนคลื่น NIR ของโมเลกุลน้ำตาล (Tewari และคณะ, 2008)



ภาพที่ 4.13 สเปกตรัมการดูดกลืนแสง NIR ของน้ำตาลมะพร้าวสดจำนวน 174 ตัวอย่าง

ข้อมูลสเปกตรัมที่ได้จากการวัด NIR อาจมีสัญญาณรบกวน (noise) มีการเกิดการกระเจิงแสงเนื่องจากอนุภาคคอลลอยด์ของตัวอย่างน้ำตาลสด ส่งผลให้เกิด baseline shift และ tangent effect ดังนั้นเพื่อให้สมการที่สร้างขึ้นมีความถูกต้องแม่นยำน่าเชื่อถือจึงจำเป็นต้องทำการปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมก่อนการวิเคราะห์ (Cen และ He, 2009) ในการศึกษาครั้งนี้ได้ใช้เทคนิคในการปรับแต่งสเปกตรัมทั้งหมด 6 เทคนิค คือ vector normalization (SNV), multiplicative scattering correction (MSC), first derivative (1D), second derivative (2D), first derivative กับ vector normalization (1D+SNV) และ first derivative กับ multiplicative scattering correction (1D+MSC) โดยเทคนิค SNV และเทคนิค MSC สามารถช่วยลดอิทธิพลของการกระเจิงแสงได้ เทคนิค 1D และ 2D ช่วยเพิ่ม resolution ของเส้นสเปกตรัมได้ โดย 1D ช่วยแก้ปัญหาที่สเปกตรัมมีค่าเพิ่มขึ้นคงที่ตลอดช่วงความยาวคลื่น (baseline offset) ส่วน 2D ช่วยลดผลกระทบจากการกระเจิงแสง ทั้งที่เป็นผลเชิงบวก (additive effect) และผลเชิงคูณ (multiplicative effect) (อนุพันธ์, 2552; Swierenga และคณะ, 1999) ข้อมูลสเปกตรัมเดิมและข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งที่แตกต่างกัน 6 เทคนิคถูกนำมาสร้างสมการโดยใช้เทคนิค PLS ซึ่งลักษณะข้อมูลสเปกตรัมหลังผ่านการปรับแต่งแล้วแสดงในภาคผนวก จ

4.1.1.3 สมการทำนายปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมดของน้ำตาลมะพร้าวสด

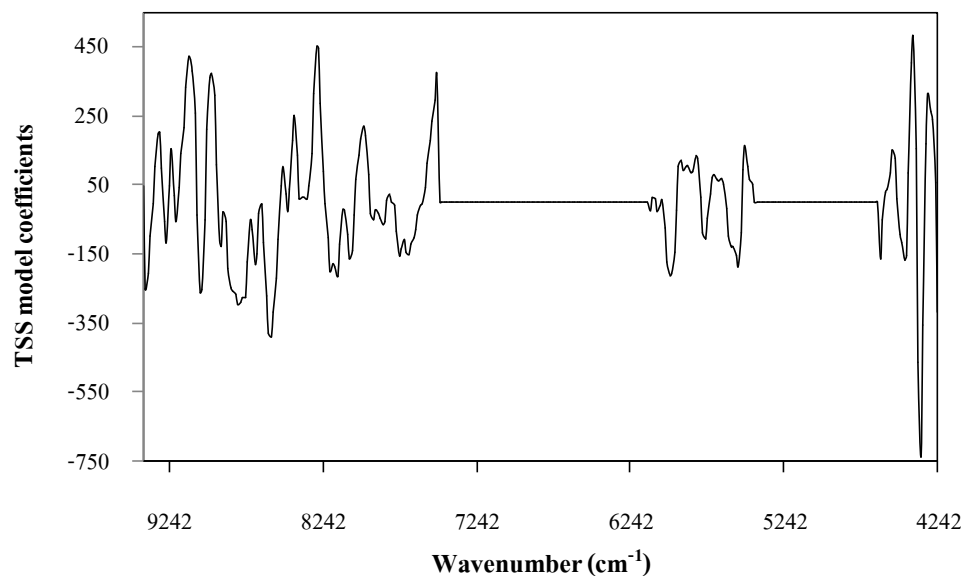
สมการทำนายปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมด (total soluble solids, TSS) ที่สร้างด้วยเทคนิค PLS จากข้อมูลสเปกตรัมเดิมและข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิคต่างๆ ของตัวอย่างน้ำตาลสดจำนวน 174 ตัวอย่าง เป็นตัวอย่างที่ใช้ในการสร้างสมการจำนวน 117 ตัวอย่าง และตัวอย่างที่ใช้ในการตรวจสอบสมการอีกจำนวน 57 ตัวอย่าง มีค่าสถิติของสมการแสดงดังตารางที่ 4.8 เมื่อพิจารณาสมการทำนายที่สร้างขึ้นพบว่า สเปกตรัมที่ไม่ผ่านการปรับแต่งและสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งทั้งหมดมีความเหมาะสมสำหรับการทำนายปริมาณ TSS เนื่องจากสมการทั้งหมดให้ค่า R^2 สูงกว่า 0.9 และให้ค่า SEP ที่ใกล้เคียงกัน แต่ทั้งนี้พบว่าการใช้ข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค MSC ในการสร้างสมการจะทำให้ได้สมการทำนายค่าที่มีค่า RPD สูงที่สุด โดยให้ค่า R^2 เท่ากับ 0.956 ค่า SEC เท่ากับ 1.4°Brix ค่า SEP เท่ากับ 1.1°Brix และค่า RPD เท่ากับ 5.13 จากการตรวจสอบค่า SEP โดยการคำนวณค่า unexplained error confidence limits (UECLs, T_{UE}) พบว่ามีค่าเท่ากับ 1.6 กล่าวคือสมการทำนายค่า TSS ที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค MSC นั้นควรมีค่า SEP ไม่เกิน 1.6°Brix หรือ 16% ของค่า SEC และเมื่อทำการตรวจสอบค่า bias ด้วยการทดสอบ pair t-test พบว่า ค่าสัมบูรณ์ t มีค่าน้อยกว่า 2 ดังนั้นค่า TSS ที่วัดได้จริงกับค่า TSS ที่ทำนายได้จากสมการมีค่าไม่แตกต่างกันอย่างมีนัยสำคัญทางสถิติที่ระดับความเชื่อมั่น 95%

ภาพที่ 4.14 แสดงค่าสัมประสิทธิ์การถดถอย (regression coefficient) ของสมการทำนายค่าในช่วงคลื่น 9411.5-7498.4 cm^{-1} , 6109.8-5446.3 cm^{-1} และ 4613.2-4242.9 cm^{-1} ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยเป็นตัวแปรสำคัญหลักที่สามารถอธิบายการดูดกลืนขององค์ประกอบทางเคมีที่สนใจในสมการทำนาย โดยตำแหน่งความยาวคลื่นที่มีค่าสัมประสิทธิ์มากคือตำแหน่งที่มีการดูดกลืนขององค์ประกอบทางเคมีที่ต้องการ (รณฤทธิ์, 2552) ส่วนบริเวณเส้นกราฟที่มีลักษณะเรียบเป็นเส้นตรงในภาพที่ 4.14 นั้นเกิดจากการที่ไม่ได้ใช้ช่วงคลื่นตำแหน่งนั้นในการสร้างสมการ จึงทำให้ไม่ปรากฏพีก ส่วนตำแหน่งที่ใช้ในการสร้างสมการพบพีกที่เด่นชัด (positive peak) ที่ช่วงคลื่น 8250 cm^{-1} , 7498 cm^{-1} , 4401 cm^{-1} และ 4302 cm^{-1} ซึ่งตรงกับตำแหน่งการดูดกลืนแสงของกลูโคส ฟรุคโตส และซูโครสมาตรฐานดังแสดงไว้ในภาคผนวก จ และตรงกับการสั่นพันธะ O-H, C-H และ C-C ที่เกี่ยวข้องกับโมเลกุลของน้ำตาล (Rodriguez-Saona และคณะ, 2001; Choung, 2010) เนื่องจากสมการที่สร้างขึ้นมีตำแหน่งความยาวคลื่นที่เกี่ยวข้องกับปริมาณน้ำตาลและคาร์โบไฮเดรตเป็นตัวแปรในสมการ และจากภาพที่ 4.15 ที่แสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่า

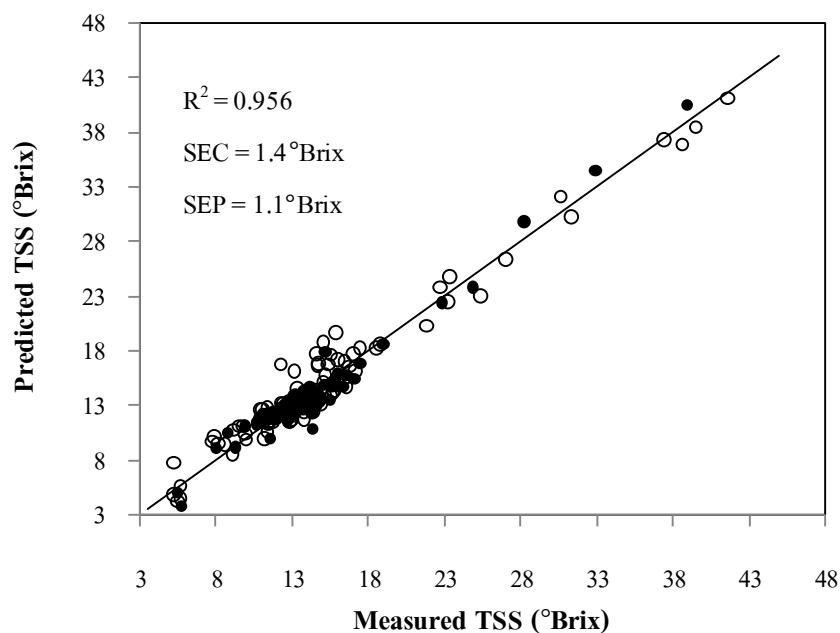
TSS ที่วัดได้จริงของตัวอย่างกับค่า TSS ที่ทำนายได้จากเทคนิค NIR นั้นมีความสัมพันธ์ที่ดีในเชิงเส้นตรง ดังนั้นสมการนี้จึงมีประสิทธิภาพในการทำนาย TSS ในน้ำตาลมะพร้าวสดได้เป็นอย่างดี

ตารางที่ 4.8 ค่าทางสถิติของสมการทำนายปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมดจากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ ของน้ำตาลมะพร้าวสด

เทคนิค	ช่วงคลื่น (cm ⁻¹)	แฟคเตอร์	Calibration		Validation			
			R ²	SEC (°Brix)	R ²	SEP (°Brix)	RPD	Bias
Raw	6109.8-5446.3	8	0.947	1.5	0.959	1.1	4.96	0.0925
SNV	7513.8-5446.3 4613.2-4242.9	12	0.974	1.1	0.954	1.2	4.65	0.0938
MSC	9411.5-7498.4 6109.8-5446.3 4613.2-4242.9	6	0.956	1.4	0.960	1.1	5.13	0.2610
1D	7513.8-5446.3	14	0.964	1.3	0.956	1.2	4.96	0.3330
2D	7513.8-5446.3 4613.2-4242.9	13	0.970	1.2	0.952	1.2	4.63	0.2290
1D+SNV	7513.8-5446.3 4613.2-4242.9	12	0.969	1.2	0.955	1.1	5.00	0.3760
1D+MSC	7513.8-5446.3	14	0.969	1.2	0.958	1.1	5.03	0.2580



ภาพที่ 4.14 ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายค่า TSS ของน้ำตาลมะพร้าวสดที่สร้างจาก ข้อมูลเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค MSC ที่ช่วงคลื่น 9411.5-7498.4 cm^{-1} , 6109.8-5446.3 cm^{-1} และ 4613.2-4242.9 cm^{-1}



ภาพที่ 4.15 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่า TSS ที่วัดได้จริงกับค่า TSS ที่ทำนายได้ของน้ำตาลมะพร้าวสด โดย ○ เป็นตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ และ ● เป็นตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบสมการ

4.1.1.4 สมการทำนายปริมาณน้ำตาลกลูโคส ฟรุคโตส และซูโครสของน้ำตาลมะพร้าวสด

สมการทำนายปริมาณน้ำตาลกลูโคสสร้างขึ้นด้วยตัวอย่างน้ำตาลสดจำนวน 118 จากตัวอย่าง 120 ตัวอย่างที่นำมาวิเคราะห์ เนื่องจากมี 2 ตัวอย่างข้อมูลที่ได้เบี่ยงเบนไปจากข้อมูลอื่นๆ มาก (outlier) ดังนั้นเพื่อลดความคลาดเคลื่อนของสมการทำนายจึงไม่นำข้อมูลสเปกตรัมจาก 2 ตัวอย่างนั้นมาสร้างสมการ โดยตัวอย่างที่ใช้ในการสร้างสมการมี 80 ตัวอย่าง และตัวอย่างที่ใช้ในการตรวจสอบสมการจำนวน 38 ตัวอย่างจากตารางที่ 4.9 พบว่า ข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแก้ด้วยเทคนิค 1D กับ SNV ในช่วงคลื่น 4613.2-4242.9 cm^{-1} นั้นสามารถให้สมการทำนายปริมาณกลูโคสได้ดีที่สุด โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มตัวแปรเดิมเป็นตัวแปรใหม่ได้ 18 แพลตฟอร์ม ให้ค่า R^2 , SEC, SEP และ RPD เท่ากับ 0.925, 0.21%, 0.17% และ 3.51 ตามลำดับ ทั้งนี้ ค่า SEP จากสมการทำนายมีค่าไม่เกิน 24% ของค่า SEC ($T_{UE} = 0.26$) และปริมาณกลูโคสที่วิเคราะห์กับปริมาณกลูโคสที่ทำนายได้ไม่แตกต่างกันอย่างมีนัยสำคัญทางสถิติ ($p > 0.05$)

ตารางที่ 4.9 ค่าทางสถิติของสมการทำนายปริมาณน้ำตาลกลูโคสจากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ ของน้ำตาลมะพร้าวสด

เทคนิค	ช่วงคลื่น (cm^{-1})	แพลตฟอร์ม	Calibration		Validation			
			R^2	SEC (%)	R^2	SEP (%)	RPD	Bias
Raw	9411.5-5446.3 4613.2-4242.9	12	0.939	0.18	0.898	0.19	3.18	-0.0325
SNV	7513.8-5446.3 4613.2-4242.9	10	0.916	0.21	0.907	0.18	3.36	-0.0419
MSC	9411.5-7498.4 6109.8-4242.9	17	0.961	0.15	0.891	0.20	3.06	-0.0252
1D	4613.2-4242.9	17	0.924	0.21	0.905	0.19	3.29	-0.0318
2D	5461.8-4242.9	10	0.914	0.21	0.881	0.21	2.91	-0.0147
1D+SNV	4613.2-4242.9	18	0.925	0.21	0.912	0.17	3.51	-0.0514
1D+MSC	4613.2-4242.9	17	0.923	0.21	0.907	0.18	3.41	-0.0529

ค่าสถิติของสมการทำนายปริมาณฟรุกโตสที่สร้างจากตัวอย่างจำนวน 120 ตัวอย่าง ซึ่งเป็นตัวอย่างที่ใช้สร้างสมการ 80 ตัวอย่าง และใช้ในการตรวจสอบสมการจำนวน 40 ตัวอย่าง แสดงไว้ในตารางที่ 4.10 ซึ่งพบว่า ข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแก้ด้วยเทคนิค 2D ที่ช่วงคลื่น 9411.5-4242.9 cm^{-1} นั้นสามารถให้สมการทำนายปริมาณฟรุกโตสที่เหมาะสมที่สุด ใช้ตัวแปรในการสร้างสมการ 12 แฟคเตอร์ และให้ค่า R^2 , SEC, SEP และ RPD เท่ากับ 0.967, 0.19%, 0.21% และ 5.07 ตามลำดับ ซึ่งค่า SEP จากสมการทำนายมีค่ามากกว่าค่า SEC ไม่เกิน 26% ($T_{UE} = 0.24$) และปริมาณฟรุกโตสวิเคราะห์กับปริมาณฟรุกโตสที่ทำนายได้จากสมการไม่มีความแตกต่างกันอย่างมีนัยสำคัญทางสถิติ ($p > 0.05$)

ตารางที่ 4.10 ค่าทางสถิติของสมการทำนายปริมาณน้ำตาลฟรุกโตสจากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ ของน้ำตาลมะพร้าวสด

เทคนิค	ช่วงคลื่น (cm^{-1})	แฟคเตอร์	Calibration		Validation			
			R^2	SEC (%)	R^2	SEP (%)	RPD	Bias
Raw	9411.5-6094.3 4613.2-4242.9	13	0.981	1.15	0.949	0.22	4.69	0.751
SNV	4613.2-4242.9	15	0.949	0.25	0.940	0.25	4.12	0.0315
MSC	9411.5-6094.3 4613.2-4242.9	12	0.989	0.11	0.952	0.22	4.75	0.0620
1D	6834.9-4242.9	14	0.955	0.23	0.957	0.21	5.00	0.0545
2D	9411.5-4242.9	12	0.967	0.19	0.960	0.21	5.07	0.0422
1D+SNV	9411.5-5446.3 4613.2-4242.3	13	0.977	0.16	0.949	0.23	4.48	0.0350
1D+MSC	9411.5-5446.3 4613.2-4242.9	11	0.962	0.21	0.944	0.25	4.24	0.0062

สมการทำนายปริมาณซูโครสที่สร้างด้วยตัวอย่างจำนวน 119 ตัวอย่างจากตัวอย่างทั้งหมด 120 ตัวอย่าง เนื่องจากมี 1 ตัวอย่างที่มีข้อมูลเบี่ยงเบนไปจากข้อมูลอื่นๆ มาก (outlier) จึง

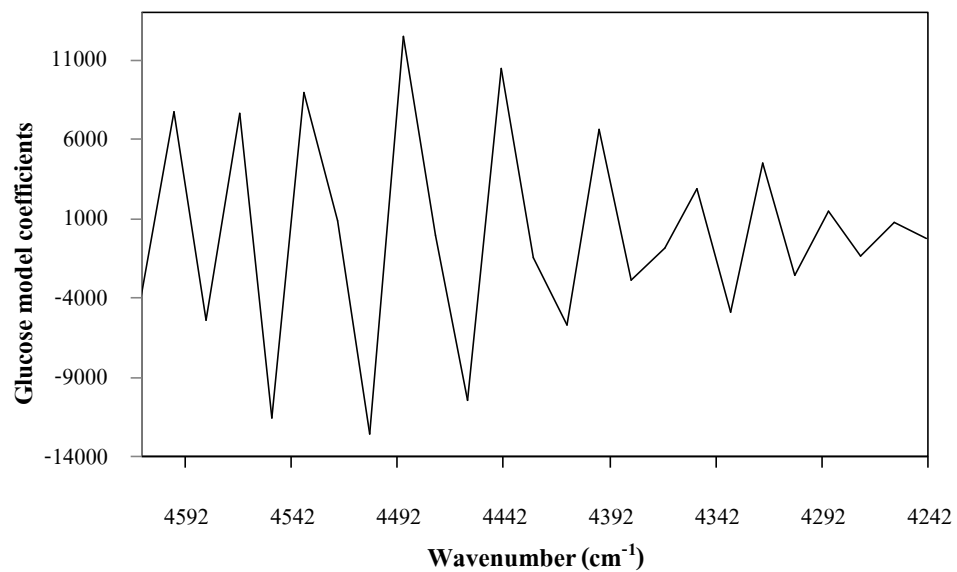
ไม่นำข้อมูลสเปกตรัมจาก 1 ตัวอย่างนั้นมาสร้างสมการ โดยเป็นตัวอย่างที่ใช้ในการสร้างสมการ 80 ตัวอย่าง และตัวอย่างที่ใช้ในการตรวจสอบสมการ 39 ตัวอย่าง ค่าทางสถิติของสมการทำนาย แสดงไว้ในตารางที่ 4.11 ซึ่งพบว่า ข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D กับ SNV ในช่วงคลื่น 8454.9-7498.4 cm^{-1} , 5785.8-5446.3 cm^{-1} และ 4613.2-4242.9 cm^{-1} ให้สมการที่ดีที่สุด โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มตัวแปรเดิมเป็นตัวแปรใหม่ได้ 8 แฟคเตอร์ โดยมีค่า R^2 , SEC, SEP และ RPD เท่ากับ 0.814, 2.13%, 2.12% และ 2.03 ตามลำดับ ทั้งนี้ค่า SEP ของสมการมีค่าไม่เกิน 25% ของค่า SEC ($T_{UE} = 2.67$) และปริมาณชูโครสที่วิเคราะห์ได้กับปริมาณชูโครสที่ทำนายได้ไม่แตกต่างกันอย่างมีนัยสำคัญทางสถิติ ($p>0.05$)

ตารางที่ 4.11 ค่าทางสถิติของสมการทำนายปริมาณน้ำตาลชูโครสจากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ ของน้ำตาลมะพร้าวสด

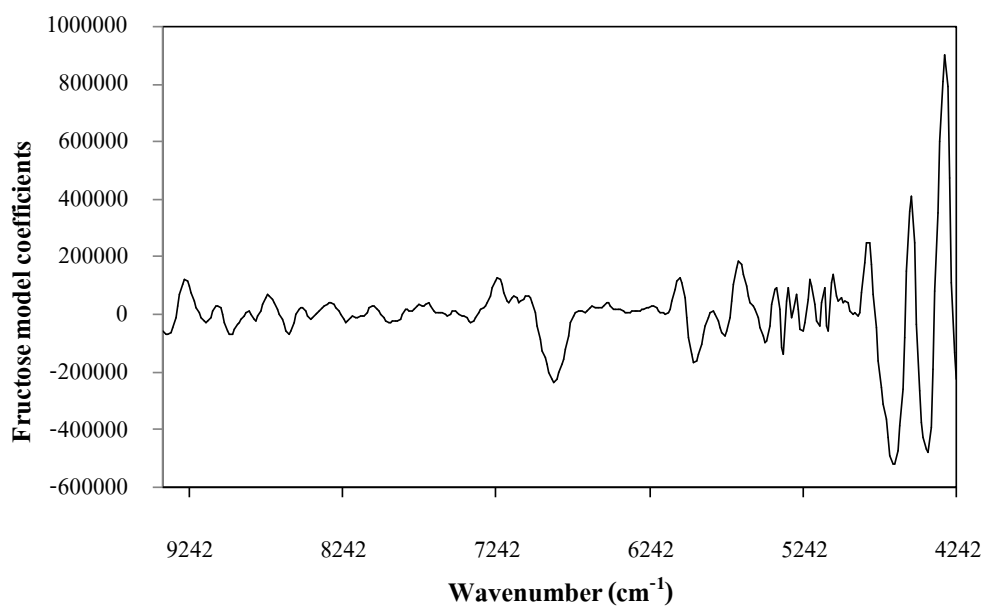
เทคนิค	ช่วงคลื่น (cm^{-1})	แฟคเตอร์	Calibration		Validation			
			R^2	SEC (%)	R^2	SEP (%)	RPD	Bias
Raw	4613.2-4242.9	9	0.687	2.77	0.475	3.18	1.39	-0.282
SNV	6109.8-5446.3 4613.2-4242.9	10	0.813	2.16	0.642	2.54	1.69	-0.381
MSC	6109.8-5446.3 4613.2-4242.9	8	0.697	2.71	0.524	2.95	1.45	-0.218
1D	4613.2-4242.9	9	0.660	2.89	0.556	2.86	1.50	-0.163
2D	4613.2-4242.9	7	0.677	2.75	0.465	3.11	1.40	-0.657
1D+SNV	8454.9-7498.4 5785.8-5446.3 4613.2-4242.9	8	0.814	2.13	0.756	2.12	2.03	-0.134
1D+MSC	6109.8-5446.3 4613.2-4242.9	9	0.717	2.66	0.602	2.71	1.59	0.097

เมื่อพิจารณาค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายปริมาณกลูโคสดังแสดงในภาพที่ 4.16 ซึ่งพบพีคที่ตำแหน่ง 4536 cm^{-1} , 4689 cm^{-1} , 4444 cm^{-1} และ 4403 cm^{-1} ซึ่งเป็นตำแหน่งที่เกี่ยวข้องกับน้ำตาลกลูโคส ส่วนค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายปริมาณฟรุกโตสแสดงดังภาพที่ 4.17 ซึ่งพบพีคที่ตำแหน่ง 6864 cm^{-1} , 4710 cm^{-1} และ 4436 cm^{-1} ซึ่งเกี่ยวข้องกับน้ำตาลฟรุกโตส ส่วนภาพที่ 5.18 แสดงค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายปริมาณซูโครสซึ่งพบพีคที่ตำแหน่ง 5478 cm^{-1} , 4397 cm^{-1} และ 4272 cm^{-1} โดยเกี่ยวข้องกับน้ำตาลซูโครส เนื่องจากตำแหน่งดังกล่าวสอดคล้องกับตำแหน่งการดูดกลืนแสงของกลูโคส ฟรุกโตส และซูโครสมาตรฐานดังแสดงในภาคผนวก จ ซึ่งตำแหน่งเหล่านี้มีข้อมูลสำคัญที่เกี่ยวข้องกับการสั่นแบบโอเวอร์โทนและคอมบิเนชันของพันธะ C-H ซึ่งเป็นลักษณะเฉพาะของน้ำตาล (sugar band) (Iñón และคณะ, 2005; León และคณะ, 2005; Xie และคณะ, 2009) นอกจากนี้ Liu และคณะ (2006) ได้ศึกษาการใช้เทคนิค NIR ร่วมกับเทคนิค PLS ที่ช่วงคลื่น $12500\text{--}4000\text{ cm}^{-1}$ ในการสร้างสมการทำนายเพื่อตรวจสอบปริมาณน้ำตาลในแอปเปิ้ล พบว่าสมการทำนายปริมาณกลูโคส ฟรุกโตสและซูโครสมีค่า R เท่ากับ 0.950, 0.968 และ 0.969 ค่า RMSEP เท่ากับ 0.201, 0.298 และ 0.335 ตามลำดับ

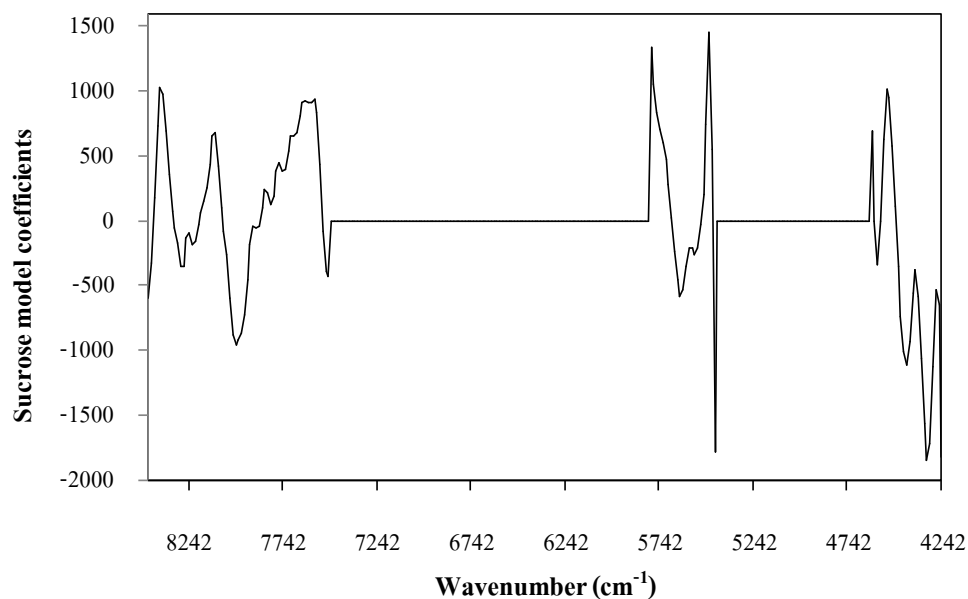
ผลการทดลองที่ได้แสดงให้เห็นว่าสามารถนำเทคนิค NIR มาใช้ในการวิเคราะห์ปริมาณน้ำตาลกลูโคส ฟรุกโตส และซูโครสได้ กราฟแสดงความสัมพันธ์ของค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ได้จริงจากเครื่อง HPLC กับค่าที่ได้จากการทำนายด้วยสมการที่สร้างขึ้นจากสเปกตรัม NIR แสดงดังภาพที่ 4.19-4.21



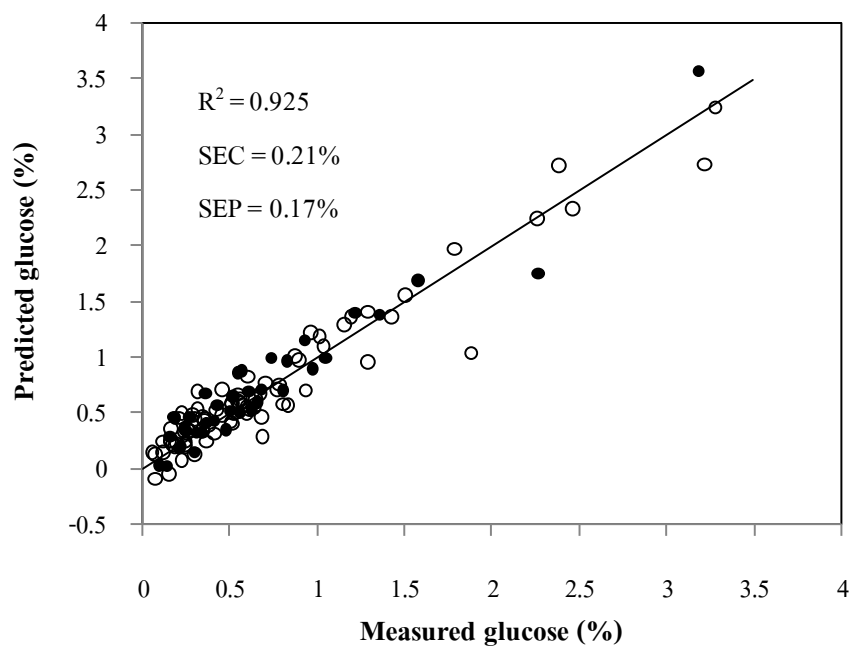
ภาพที่ 4.16 ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายปริมาณกลูโคสในน้ำตาลมะพร้าวสด ที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D กับ SNV ที่ช่วงคลื่น $4613.2\text{-}4242.9\text{ cm}^{-1}$



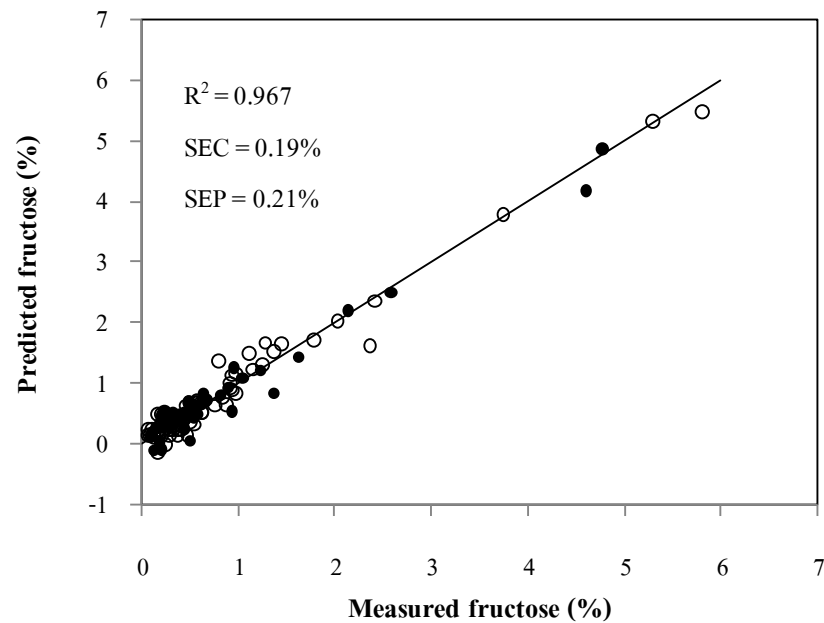
ภาพที่ 4.17 ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายปริมาณฟรุกโตสในน้ำตาลมะพร้าวสด ที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 2D ที่ช่วงคลื่น $9411.5\text{-}4242.9\text{ cm}^{-1}$



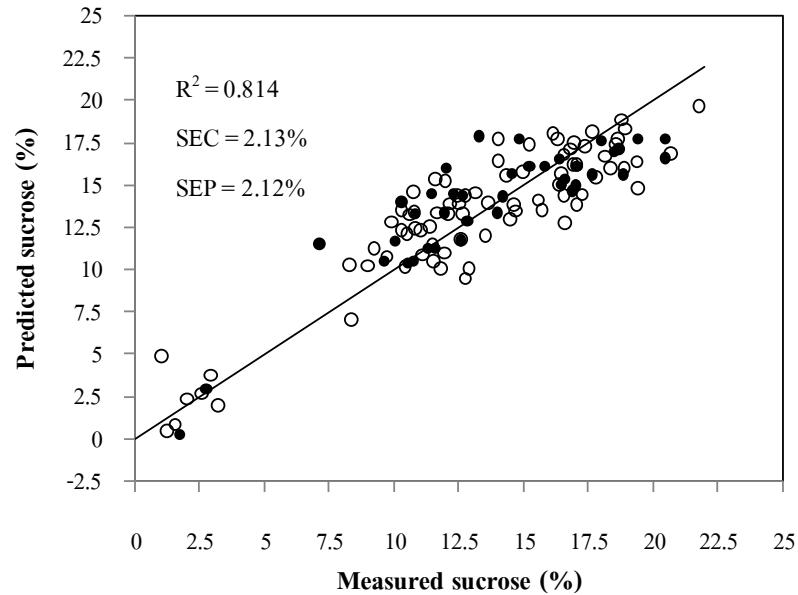
ภาพที่ 4.18 ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายปริมาณซูโครสในน้ำตาลมะพร้าวสด ที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D กับ SNV ในช่วงคลื่น 8454.9-7498.4 cm^{-1} , 5785-5446.3 cm^{-1} และ 4613.2-4242.9 cm^{-1}



ภาพที่ 4.19 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างปริมาณกลูโคสที่วัดได้จริงกับปริมาณกลูโคสที่ทำนายได้ของน้ำตาลมะพร้าวสด โดย ○ เป็นตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ และ ● เป็นตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบสมการ



ภาพที่ 4.20 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างปริมาณฟรุคโตสที่วัดได้จริงกับปริมาณฟรุคโตสที่ทำนายได้ของน้ำตาลมะพร้าวสด โดย ○ เป็นตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ และ ● เป็นตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบสมการ



ภาพที่ 4.21 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างปริมาณซูโครสที่วัดได้จริงกับปริมาณซูโครสที่ทำนายได้ของน้ำตาลมะพร้าวสด โดย ○ เป็นตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ และ ● เป็นตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบสมการ

4.1.1.5 สมการทำนายค่า pH ของน้ำตาลมะพร้าวสด

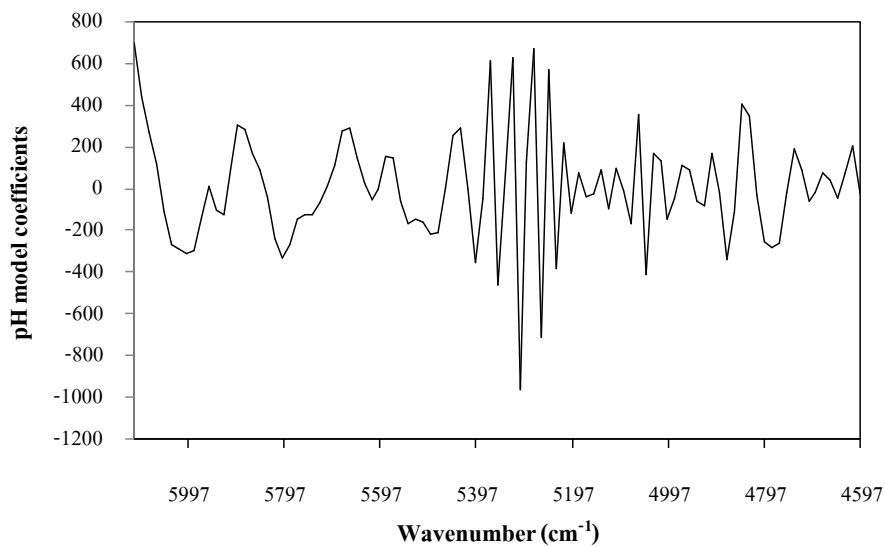
ค่าทางสถิติของสมการทำนายค่า pH ที่สร้างจากตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวสดจำนวน 149 ตัวอย่าง ซึ่งเป็นตัวอย่างที่ใช้ในการสร้างสมการจำนวน 117 ตัวอย่าง และตัวอย่างที่ใช้ในการตรวจสอบสมการจำนวน 57 ตัวอย่าง แสดงดังตารางที่ 4.12 ซึ่งพบว่าสมการทำนายที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค MSC ที่ช่วงคลื่น 6109.8-4597.8 cm^{-1} นั้นมีความเหมาะสมต่อการใช้งาน เนื่องจากให้ค่า SEP ต่ำที่สุดและให้ค่า RPD สูงที่สุด โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มตัวแปรเดิมเป็นตัวแปรใหม่ได้ 22 แฟคเตอร์ และให้ค่า R^2 , SEC, SEP และ RPD เท่ากับ 0.937, 0.38, 0.33 และ 3.97 ตามลำดับ ทั้งนี้ค่า SEP ของสมการทำนายที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค MSC มีค่าไม่เกิน 21% ของค่า SEC ($T_{UE} = 0.46$) และค่า pH ที่วิเคราะห์ได้กับค่า pH ที่ทำนายได้ไม่แตกต่างกันอย่างมีนัยสำคัญทางสถิติ ($p > 0.05$)

ตารางที่ 4.12 ค่าทางสถิติของสมการทำนายค่า pH จากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ ของน้ำตาลมะพร้าวสด

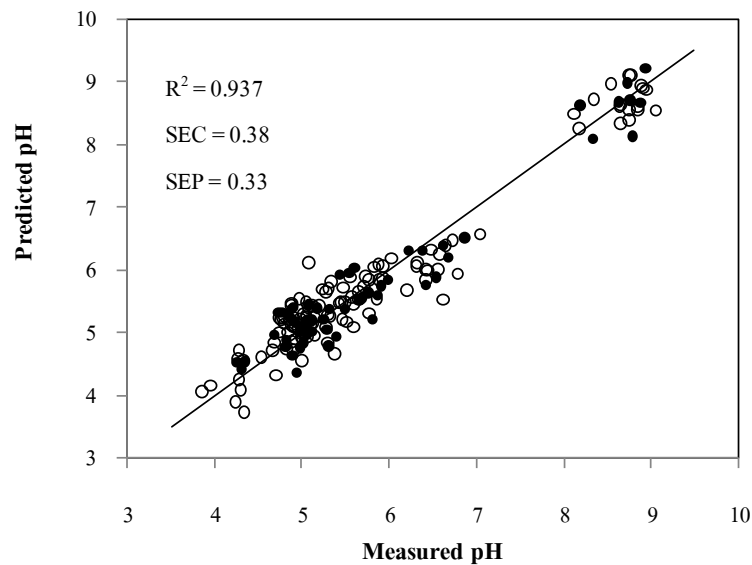
เทคนิค	ช่วงคลื่น (cm^{-1})	แฟคเตอร์	Calibration		Validation			
			R^2	SEC	R^2	SEP	RPD	Bias
Raw	9411.5-4242.9	21	0.963	0.29	0.905	0.40	3.28	0.0640
SNV	6109.8-4597.8	23	0.938	0.38	0.934	0.34	3.90	0.0205
MSC	6109.8-4597.8	22	0.937	0.38	0.936	0.33	3.97	0.0306
1D	7513.8-5446.3 4613.2-4242.9	18	0.948	0.33	0.928	0.35	3.76	-0.0553
2D	6109.8-5446.3	16	0.894	0.48	0.879	0.48	2.88	0.0176
1D+SNV	7513.8-4242.9	16	0.914	0.43	0.866	0.48	2.75	0.0507
1D+MSC	7513.8-5446.3 4613.2-4242.9	14	0.901	0.45	0.880	0.45	2.95	-0.0875

จากภาพที่ 4.22 แสดงสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายค่า pH พบพีคที่ตำแหน่ง 5324 cm^{-1} , 5276 cm^{-1} , 5245 cm^{-1} และ 5061 cm^{-1} ซึ่งตรงกับการศึกษาของ Liu และคณะ (2009) ที่พบตำแหน่งพิกัดดังกล่าวในกราฟแสดงสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายค่า pH

ของน้ำส้มสายชูจากผลไม้ด้วยเทคนิค NIR ร่วมกับเทคนิค PLS นอกจากนี้ Jha และคณะ (2012) ใช้ช่วงคลื่น $6250\text{-}5558\text{ cm}^{-1}$ ในการสร้างสมการทำนายค่า pH ของมะม่วง โดยให้ค่า R, SEC และ SEP เท่ากับ 0.70, 0.72 และ 0.73 ตามลำดับ กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่า pH ที่วัดได้จริงกับค่า pH ที่ทำนายได้จากเทคนิค NIR แสดงดังภาพที่ 4.23



ภาพที่ 4.22 ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายค่า pH ของน้ำตาลมะพร้าวสดที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค MSC ที่ช่วงคลื่น $6109.8\text{-}4597.8\text{ cm}^{-1}$



ภาพที่ 4.23 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่า pH ที่วัดได้จริงกับค่า pH ที่ทำนายได้ของน้ำตาลมะพร้าวสด โดย ○ เป็นตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ และ ● เป็นตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบสมการ

4.1.1.6 สมการทำนายปริมาณกรดที่ไทเตรตได้ของน้ำตาลมะพร้าวสด

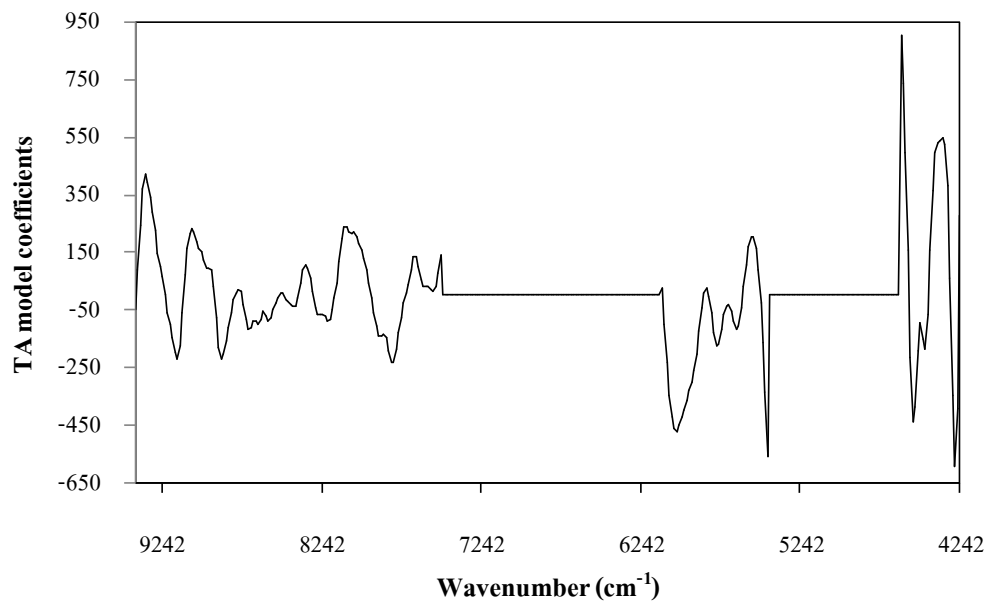
สมการทำนายปริมาณกรดที่ไทเตรตได้ (titratable acidity, TA) สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมของน้ำตาลมะพร้าวสดจำนวน 145 ตัวอย่าง จากจำนวนตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวสดทั้งหมด 149 ตัวอย่าง ซึ่ง เป็นตัวอย่างที่ใช้ในการสร้างสมการ 97 ตัวอย่าง และใช้ในการตรวจสอบสมการจำนวน 48 ตัวอย่าง จากตารางที่ 4.13 พบว่า สมการที่สร้างขึ้นด้วยข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแก้ด้วยเทคนิค 1D โดยใช้ช่วงคลื่น $9411.5\text{--}7498.4\text{ cm}^{-1}$, $6109.8\text{--}5446.3\text{ cm}^{-1}$ และ $4613.2\text{--}4242.9\text{ cm}^{-1}$ ให้สมการที่เหมาะสมที่สุดสำหรับการทำนายปริมาณ TA โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มข้อมูลสเปกตรัมเป็นตัวแปรใหม่ได้ 8 แฟคเตอร์ ให้ค่า R^2 , SEC, SEP และ RPD เท่ากับ 0.893, $2.06 \times 10^{-2}\%$, $1.94 \times 10^{-2}\%$ และ 2.73 ตามลำดับ โดยค่า SEP ของสมการทำนายที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแก้ด้วยเทคนิค 1D มีค่าไม่เกิน 23% ของค่า SEC ($T_{UE} = 2.53 \times 10^{-2}$) และปริมาณ TA ที่วิเคราะห์ได้กับปริมาณ TA ที่ทำนายได้มีค่าไม่แตกต่างกันอย่างมีนัยสำคัญทางสถิติ ($p > 0.05$)

เมื่อทำการพิจารณาค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายปริมาณ TA ดังแสดงในภาพที่ 4.24 พบว่าพีคที่ตำแหน่ง 9347 cm^{-1} , 4614 cm^{-1} และ 4337 cm^{-1} ซึ่งสอดคล้องกับการศึกษาของ Bureau และคณะ (2009) ที่ได้ศึกษาการใช้เทคนิค NIR ในการวิเคราะห์คุณภาพ

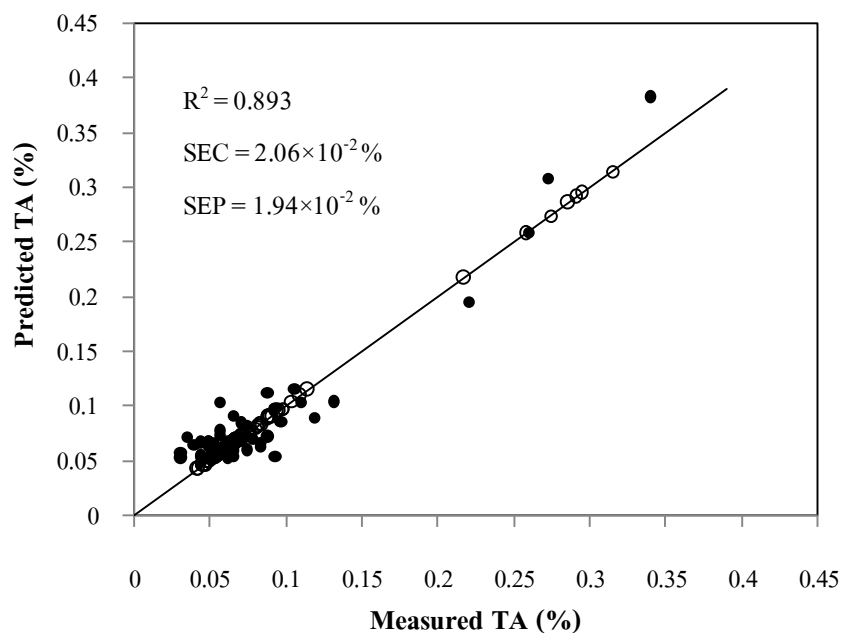
ของผลแอปริคอต โดยใช้ช่วงคลื่น 9090-4000 cm^{-1} ในการสร้างสมการทำนายปริมาณกรดที่ไทเตรตได้ ซึ่งให้ค่า R, RMSEC และ RMSEP เท่ากับ 0.88, 3.83 และ 3.62 ตามลำดับ ภาพที่ 4.25 แสดงความสัมพันธ์ของปริมาณ TA ที่ได้จากการไทเตรตและปริมาณ TA ที่ทำนายได้จากเทคนิค NIR

ตารางที่ 4.13 ค่าทางสถิติของสมการทำนายปริมาณกรดที่ไทเตรตได้จากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ ของน้ำตาลมะพร้าวสด

เทคนิค	ช่วงคลื่น (cm^{-1})	แฟคเตอร์	Calibration		Validation			
			R^2	SEC ($\times 10^{-2}\%$)	R^2	SEP ($\times 10^{-2}\%$)	RPD	Bias
Raw	9411.5-4242.9	14	0.919	1.86	0.849	1.99	2.65	-0.0046
SNV	9411.5-6094.3 4613.2-4242.9	9	0.910	1.87	0.842	2.07	2.54	-0.0030
MSC	7513.8-6094.3 4613.2-4242.9	6	0.873	2.22	0.830	2.11	2.49	-0.0047
1D	9411.5-7498.4 6109.8-5446.3 4613.2-4242.9	8	0.893	2.06	0.863	1.94	2.73	-0.0027
2D	7513.8-5446.3 4613.2-4242.9	6	0.891	2.05	0.844	2.04	2.59	-0.0040
1D+SNV	9411.5-7498.4 6109.8-5446.3 4613.2-4242.9	6	0.888	2.09	0.853	1.98	2.67	-0.0041
1D+MSC	7513.8-6094.3 5461.8-4242.9	8	0.894	2.05	0.854	2.02	2.62	-0.0015



ภาพที่ 4.24 ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายปริมาณ TA ในน้ำตาลมะพร้าวสด โดยสร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D ที่ช่วงคลื่น 9411.5-7498.4 cm^{-1} , 6109.8-5446.3 cm^{-1} และ 4613.2-4242.9 cm^{-1}



ภาพที่ 4.25 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างปริมาณ TA ที่วิเคราะห์ได้จริงกับปริมาณ TA ที่ทำนายได้ของน้ำตาลมะพร้าวสด โดย ○ เป็นตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ และ ● เป็นตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบสมการ

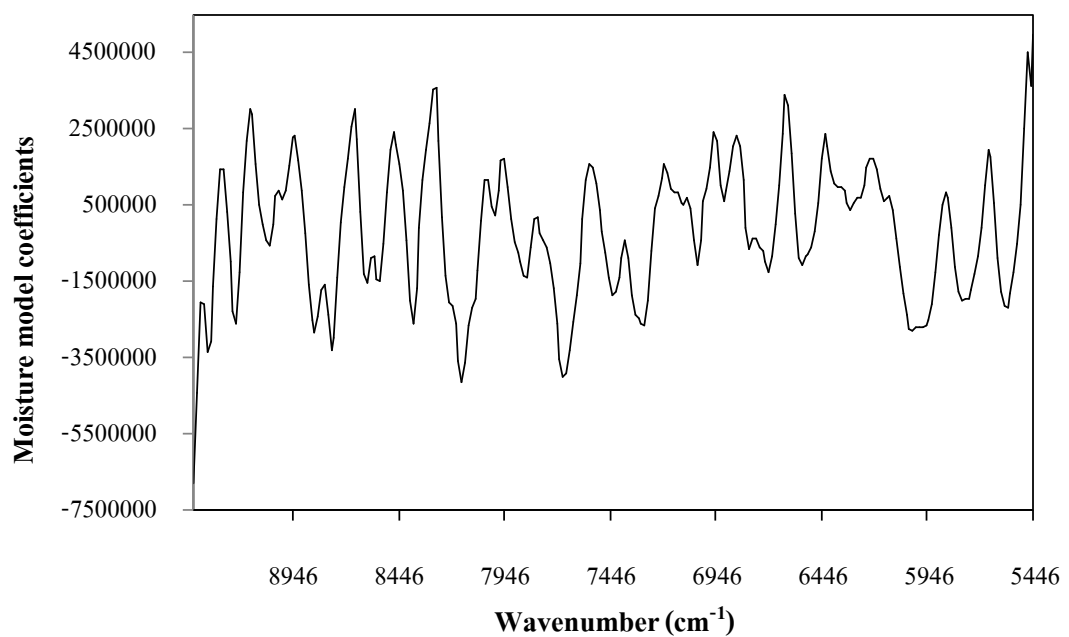
4.1.1.7 สมการทำนายปริมาณความชื้นของน้ำตาลมะพร้าวสด

ตารางที่ 5.14 แสดงค่าทางสถิติของสมการทำนายปริมาณความชื้นที่สร้างจากตัวอย่างจำนวน 162 ตัวอย่าง ซึ่งเป็นตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ 109 ตัวอย่าง และกลุ่มตรวจสอบสมการ 53 ตัวอย่าง โดยพบว่าข้อมูลสเปกตรัมเดิมและข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแก้ด้วยเทคนิคต่างๆ สามารถให้สมการทำนายที่มีค่า R^2 มากกว่า 0.9 และให้ค่า SEP ที่ต่ำใกล้เคียงกัน แต่เนื่องจากการใช้เทคนิค 2D นั้นให้สมการทำนายที่มีค่า SEP ต่ำที่สุด ดังนั้นจึงใช้ข้อมูลที่ผ่านการปรับแก้ด้วยเทคนิคดังกล่าวในช่วง $9411.5\text{--}5446.3\text{ cm}^{-1}$ มาใช้ในการสร้างสมการ โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดเรียงตัวแปรใหม่ได้ 7 แพลคเตอร์ มีค่า R^2 , SEC, SEP และ RPD เท่ากับ 0.957, 1.57%, 1.75% และ 3.58 ตามลำดับ ทั้งนี้ค่า SEP ที่ได้จากสมการทำนายมีค่ามากกว่าค่า SEC ไม่เกิน 21% ($T_{UE} = 1.907$) และปริมาณความชื้นที่วิเคราะห์ได้กับปริมาณความชื้นที่ทำนายได้มีค่าไม่แตกต่างกันอย่างมีนัยสำคัญทางสถิติ ($p > 0.05$)

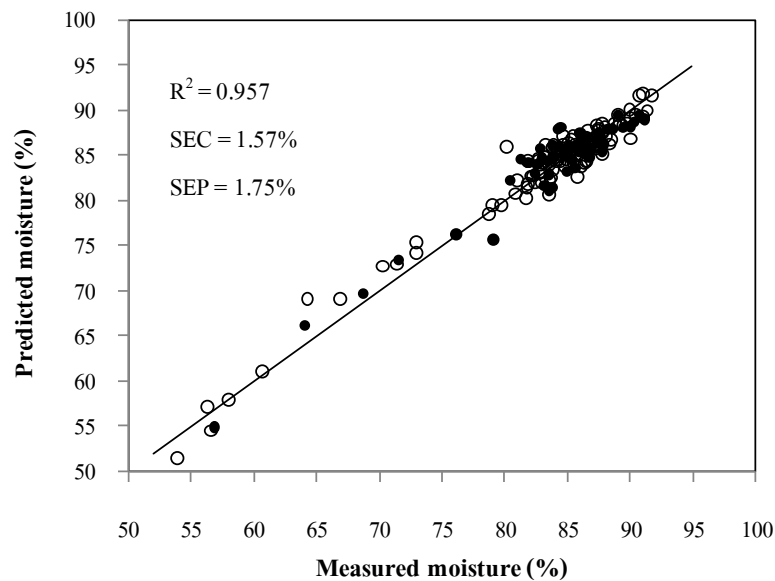
ตารางที่ 4.14 ค่าทางสถิติของสมการทำนายปริมาณความชื้นจากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ ของน้ำตาลมะพร้าวสด

เทคนิค	ช่วงคลื่น (cm^{-1})	แพลคเตอร์	Calibration		Validation			
			R^2	SEC (%)	R^2	SEP (%)	RPD	Bias
Raw	7513.8-6094.3 5461.8-4242.9	6	0.945	1.78	0.903	1.89	3.31	0.4860
SNV	7513.8-5446.3 4613.2-4242.9	10	0.963	1.49	0.919	1.77	3.54	0.246
MSC	7513.8-5446.3 4613.2-4242.9	8	0.960	1.54	0.920	1.76	3.56	0.187
1D	7513.8-5446.3	8	0.944	1.82	0.909	1.89	3.32	0.1190
2D	9411.5-5446.3	7	0.957	1.57	0.923	1.75	3.58	0.0744
1D+SNV	7513.8-5446.3 4613.2-4242.9	10	0.962	1.52	0.917	1.79	3.50	0.2840
1D+MSC	9411.5-5446.3 4613.2-4242.9	11	0.978	1.15	0.916	1.82	3.45	-0.0090

เมื่อพิจารณาค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายปริมาณความชื้นดังแสดงในภาพที่ 4.26 พบพีกที่ตำแหน่ง 8403 cm^{-1} , 8149 cm^{-1} , 7274 และ 7082 cm^{-1} จากรายงานต่างๆ พบว่าที่ตำแหน่งดังกล่าวมีความสัมพันธ์กับปริมาณความชื้นเป็นอย่างมาก คือมีข้อมูลสำคัญที่เกี่ยวข้องกับกลุ่มพันธะของ O-H ของน้ำ (Bureau และคณะ, 2009; Egidio และคณะ, 2009) ความสัมพันธ์ระหว่างปริมาณความชื้นที่วิเคราะห์ได้กับปริมาณความชื้นที่ทำนายได้จากเทคนิค NIR มีแนวโน้มที่ดีดังแสดงในภาพที่ 4.27



ภาพที่ 4.26 ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายปริมาณความชื้นในน้ำตาลมะพร้าวสด ที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 2D ที่ช่วงคลื่น $9411.5\text{--}5446.3\text{ cm}^{-1}$

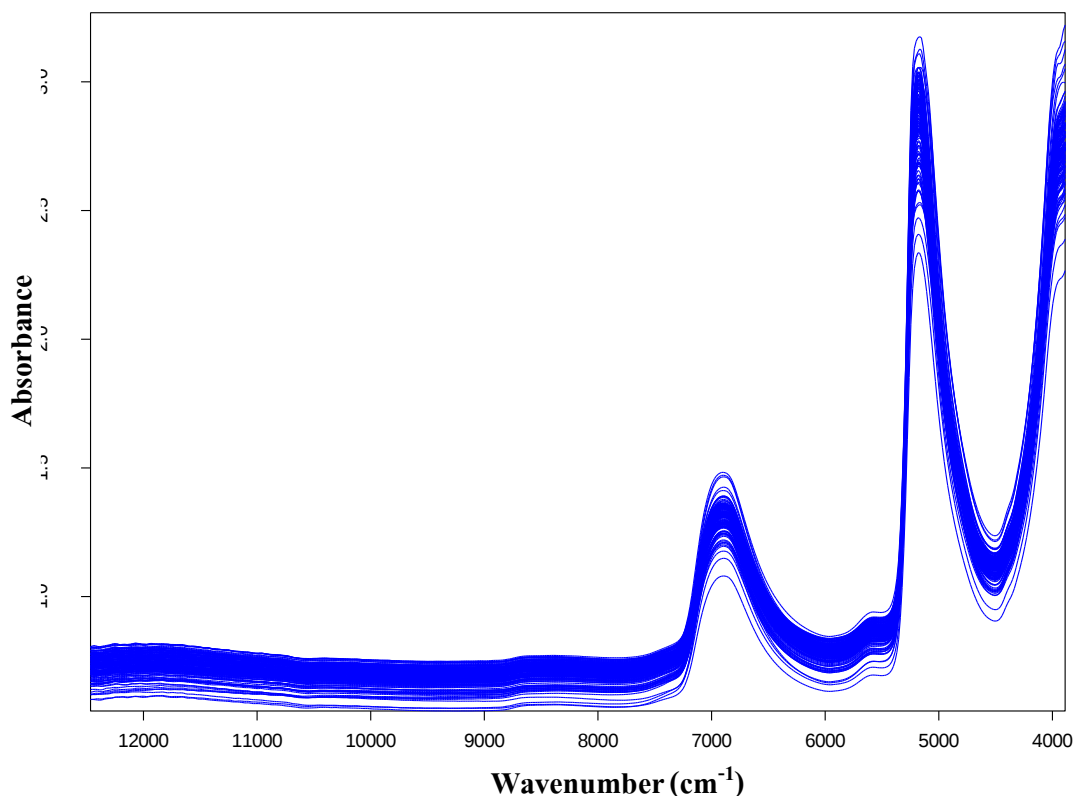


ภาพที่ 4.27 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างปริมาณความชื้นที่วิเคราะห์ได้จริงกับปริมาณความชื้นที่ทำนายได้ของน้ำตาลมะพร้าวสด โดย ○ เป็นตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ และ ● เป็นตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบสมการ

4.1.2 การศึกษาการใช้เทคนิค NIR ในการตรวจสอบการปลอมปนของน้ำตาลมะพร้าวสด

4.1.2.1 ค่าการดูดกลืนแสง NIR ของน้ำตาลมะพร้าวสด

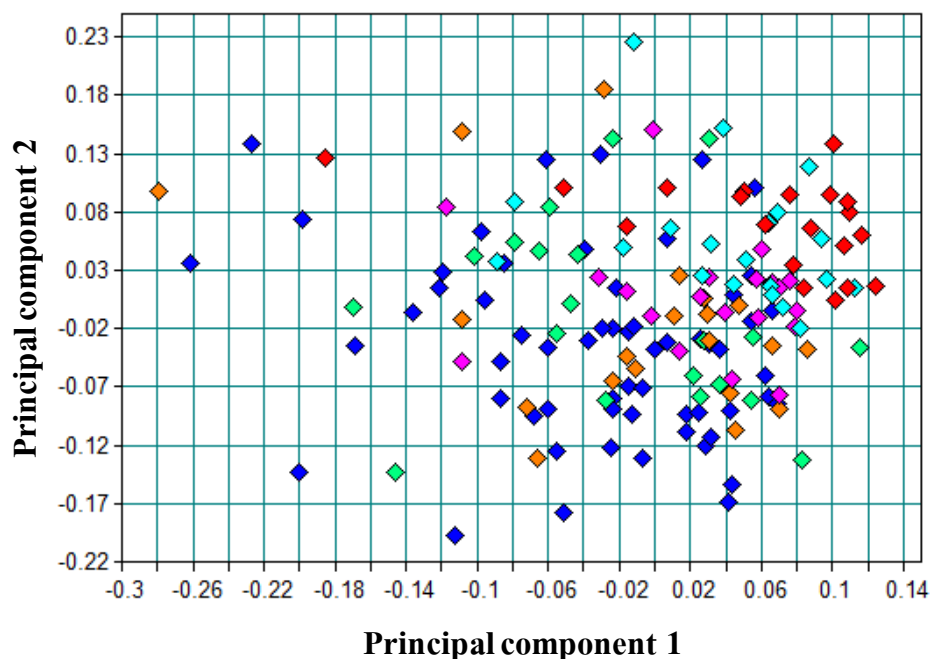
น้ำตาลมะพร้าวสดแท้จำนวน 60 ตัวอย่างและน้ำตาลมะพร้าวสดที่มีการปลอมปนด้วยน้ำเชื่อมในปริมาณ 10, 25, 50, 75% และ 100% (w/w) ในระดับการปลอมปนละ 20 ตัวอย่าง ได้สเปกตรัมจากการวิเคราะห์ด้วย NIR ดังแสดงในภาพที่ 4.28 ซึ่งพบว่า ข้อมูลสเปกตรัมมีลักษณะเหมือนกัน กล่าวคือไม่สามารถเห็นความแตกต่างระหว่างสเปกตรัมน้ำตาลมะพร้าวสดแท้และน้ำตาลมะพร้าวสดที่มีการปลอมปนได้ โดยตำแหน่งการดูดกลืนที่เห็นได้ชัดนั้นเป็นการดูดกลืนของน้ำเช่นเดียวกับสเปกตรัมของน้ำตาลมะพร้าวสดจากภาพที่ 4.13 เนื่องจากน้ำเป็นองค์ประกอบหลักที่มีอยู่ในน้ำตาลมะพร้าวสด อีกทั้งยังเป็นองค์ประกอบที่สามารถดูดกลืนแสง NIR ได้เป็นอย่างดี จึงส่งผลให้ข้อมูลสเปกตรัมของตัวอย่างถูกบดบังด้วยน้ำ (Nicolai และคณะ, 2007)



ภาพที่ 4.28 สเปกตรัมการดูดกลืนแสงของน้ำตาลมะพร้าวสดแท้และน้ำตาลมะพร้าวสดที่มีการปลอมปนด้วยน้ำเชื่อม

4.1.2.2 แบบจำลองการปลอมปนของน้ำตาลมะพร้าวสด

การใช้เทคนิค NIR ร่วมกับเทคนิค PCA ในการทำนายการปลอมปนน้ำเชื่อมในน้ำตาลมะพร้าวสด จากภาพที่ 4.29 โดยข้อมูลของน้ำตาลมะพร้าวสดแท้เป็นข้อมูลสีน้ำเงิน ข้อมูลของน้ำตาลมะพร้าวสดที่มีการปลอมปนด้วยน้ำเชื่อม 10, 25, 50, 75 และ 100% เป็นข้อมูลสีเขียว สีส้ม สีส้มพู สีฟ้า และสีแดง ตามลำดับ ซึ่งพบว่า กราฟคะแนน (score plot) ของข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแก้ด้วยวิธี SNV ในช่วงคลื่น 12480-4000 cm^{-1} ระหว่าง PC1 และ PC2 นั้นยังไม่มีประสิทธิภาพเพียงพอในการแยกความแตกต่างระหว่างน้ำตาลมะพร้าวสดแท้ กับน้ำตาลมะพร้าวสดที่มีการปลอมปนด้วยน้ำเชื่อมในปริมาณ 10-100% (w/w) ได้



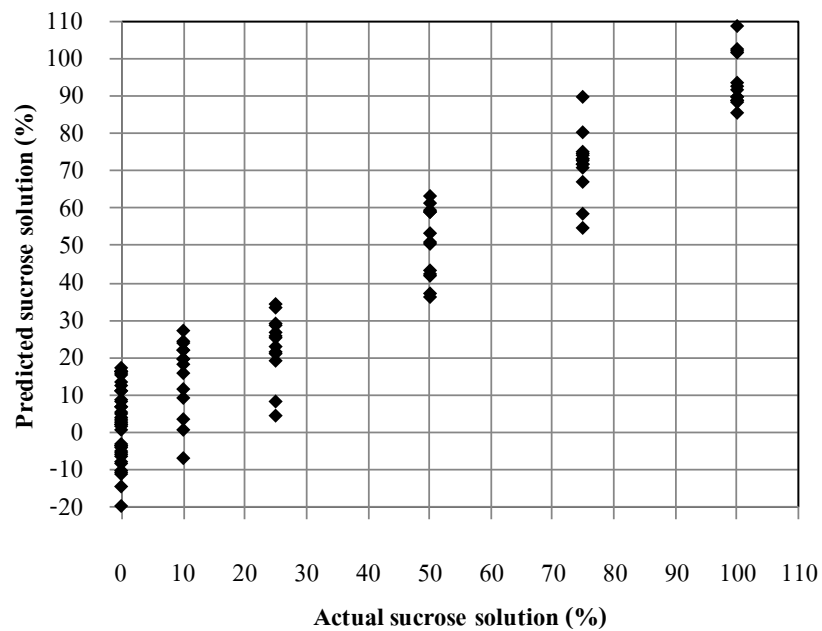
ภาพที่ 4.29 กราฟคะแนนของตัวแปร PC1 และ PC2 ของตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวสดแท้ (◆) น้ำตาลมะพร้าวสดที่มีการปลอมปนด้วยน้ำเชื่อมในระดับ 10 (◆), 25 (◆), 50 (◆), 75 (◆) และ 100% (◆) (w/w)

เมื่อใช้เทคนิค PLS ในการทำนายปริมาณการปลอมปนของน้ำเชื่อมในน้ำตาลมะพร้าวสด จากตารางที่ 4.15 พบว่าข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D กับ SNV นั้นให้แบบจำลองที่เหมาะสมที่สุด โดยให้ค่า R^2 , SEC, SEP และ RPD เท่ากับ 0.927, 10.65%, 11.41% และ 3.20 ตามลำดับ และเมื่อพิจารณากราฟของแบบจำลองในตัวอย่งกลุ่มสร้างแบบจำลองและกลุ่มตรวจสอบแบบจำลองดังภาพที่ 4.30-4.31 จะเห็นได้ว่าการใช้เทคนิค NIR ร่วมกับเทคนิค PLS สามารถแยกความแตกต่างระหว่างน้ำตาลมะพร้าวสดแท้กับน้ำตาลมะพร้าวสดที่มีการปลอมปนด้วยน้ำเชื่อมตั้งแต่ 50% (w/w) ขึ้นไป หากการปลอมปนน้อยกว่า 50% จะไม่สามารถแยกความแตกต่างได้ ทั้งนี้เนื่องจากน้ำตาลมะพร้าวสดมีองค์ประกอบหลักคือน้ำมากกว่า 30% รองลงมาเป็นน้ำตาลซูโครสประมาณ 15-17% และองค์ประกอบอื่นๆ อีกเพียงเล็กน้อยเท่านั้น และในงานวิจัยนี้ได้ทำการปลอมปนน้ำตาลมะพร้าวสดด้วยน้ำเชื่อมหรือสารละลายซูโครส ซึ่งทั้งน้ำและซูโครสเป็นองค์ประกอบหลักที่มีอยู่แล้วในน้ำตาลมะพร้าวสด จึงทำให้เทคนิค NIR ไม่สามารถแยกความแตกต่างของตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวสดแท้กับน้ำตาลสดที่มีการปลอมปนต่ำกว่า 50% ได้

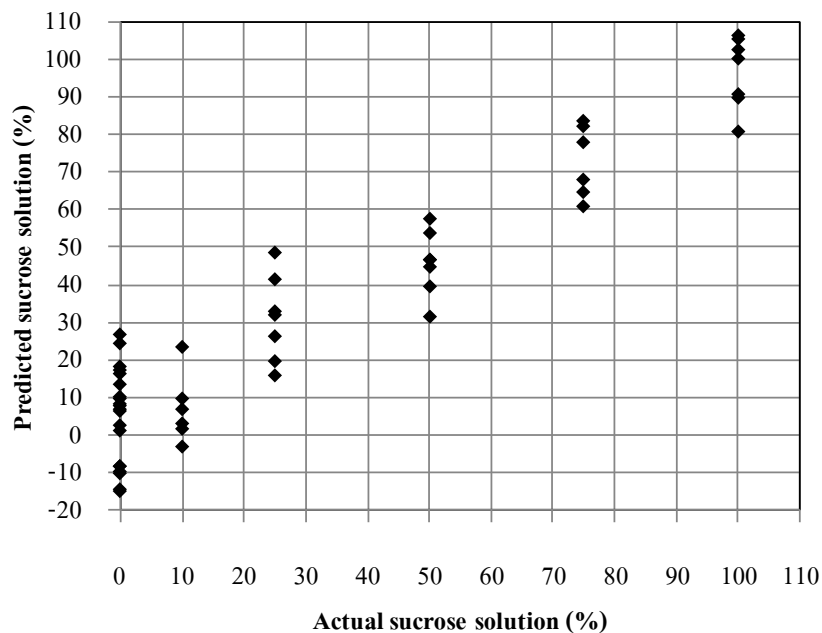
นอกจากนี้การใช้เทคนิค PLS ในการแยกความแตกต่างระหว่างตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวสดแท้และน้ำตาลมะพร้าวสดปลอมปนมีประสิทธิภาพมากกว่าการใช้เทคนิค PCA เนื่องจากการสร้างแบบจำลองด้วยเทคนิค PCA เริ่มจากการวิเคราะห์องค์ประกอบหลักกับข้อมูลตัวแปรอิสระ (x_i) ที่ได้มาจากข้อมูลสเปกตรัมเพื่อลดจำนวนตัวแปรเดิมลงโดยการสร้างองค์ประกอบหรือตัวแปรใหม่ก่อนแล้วจึงนำค่าของตัวแปรใหม่ที่สร้างขึ้นมาหาความสัมพันธ์กับตัวแปรตาม (y) ที่ได้มาจากวิธีมาตรฐาน เพื่อสร้างแบบจำลองโดยใช้การวิเคราะห์การถดถอยพหุคูณ (multiple regression analysis) ซึ่งแตกต่างกันเทคนิค PLS ที่มีการลดจำนวนตัวแปรโดยการนำข้อมูลตัวแปรตาม (y) เข้ามาร่วมสร้างตัวแปรใหม่ด้วย (ธงชัย และปิติพร, 2552) ทั้งนี้สเปกตรัมของน้ำตาลมะพร้าวสดแท้และน้ำตาลมะพร้าวสดที่มีการปลอมปนด้วยน้ำเชื่อมดังแสดงในภาพที่ 4.28 นั้นไม่มีความแตกต่างกัน จึงทำให้การใช้เทคนิค PCA ไม่สามารถแบ่งกลุ่มระหว่างน้ำตาลสดแท้และน้ำตาลสดที่ปลอมปนด้วยน้ำเชื่อมได้

ตารางที่ 4.15 ค่าทางสถิติของแบบจำลองทำนายปริมาณการปลดปล่อยน้ำเชื่อมจากข้อมูล
สเปกตรัมต่างๆของน้ำตาลมะพร้าวสด

เทคนิค	ช่วงคลื่น (cm ⁻¹)	แฟคเตอร์	Calibration		Validation			
			R ²	SEC (%)	R ²	SEP (%)	RPD	Bias
Raw	7513.8-6094.3 4613.2-4242.9	11	0.822	16.12	0.848	14.18	2.58	1.150
SNV	7513.8-5446.3 4613.2-4242.9	10	0.860	14.23	0.853	13.98	2.61	0.984
MSC	7513.8-4242.9	21	0.947	9.31	0.843	14.24	2.57	1.070
1D	7513.8-4242.9	20	0.923	11.16	0.885	12.38	2.95	0.044
2D	7513.8-6094.3 5462.7-4242.9	16	0.896	12.68	0.839	14.63	2.50	-1.100
1D+SNV	9411.5-4242.9	16	0.927	10.65	0.902	11.41	3.20	-1.120
1D+MSC	7513.8-4242.9	18	0.911	11.82	0.889	12.18	3.00	-0.177



ภาพที่ 4.30 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าจริงกับค่าทำนายของปริมาณน้ำเชื่อม 0-100% (w/w) ที่ปลอมปนอยู่ในน้ำตาลมะพร้าวสดของตัวอย่างกลุ่มสร้างแบบจำลอง



ภาพที่ 4.31 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าจริงกับค่าทำนายของปริมาณน้ำเชื่อม 0-100% (w/w) ที่ปลอมปนอยู่ในน้ำตาลมะพร้าวสดของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบแบบจำลอง

4.1.3 การศึกษาการใช้เทคนิค NIR ในการวิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมีของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

4.1.3.1 ค่าทางเคมีของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

ผลการวิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมีต่างๆ ของตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว 120 ตัวอย่าง ด้วยวิธีมาตรฐานและค่าทางสถิติเบื้องต้นแสดงไว้ในตารางที่ 4.16 ซึ่งใกล้เคียงกับค่าองค์ประกอบทางเคมีของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวตามรายงานการวิเคราะห์ต่างๆ ที่มีมาก่อนหน้านี้ คือ ความชื้น 10.92-11.40% น้ำตาลทั้งหมดประมาณ 72.04% น้ำตาลซูโครส 68.35% และน้ำตาลรีดิวซิง 6.58-7.79% (กล้าณรงค์, 2532; Thampan, 1975) โดยตัวอย่างกลุ่มที่ใช้ในการสร้างสมการ (calibration set) จำนวน 80 ตัวอย่าง มีค่าทางเคมีครอบคลุมกลุ่มตัวอย่างที่ใช้ในการตรวจสอบความถูกต้องของสมการ (validation set) จำนวน 40 ตัวอย่าง และตัวอย่างทั้งสองกลุ่มนั้นมีการกระจายของค่าทางเคมีที่ใกล้เคียงกัน

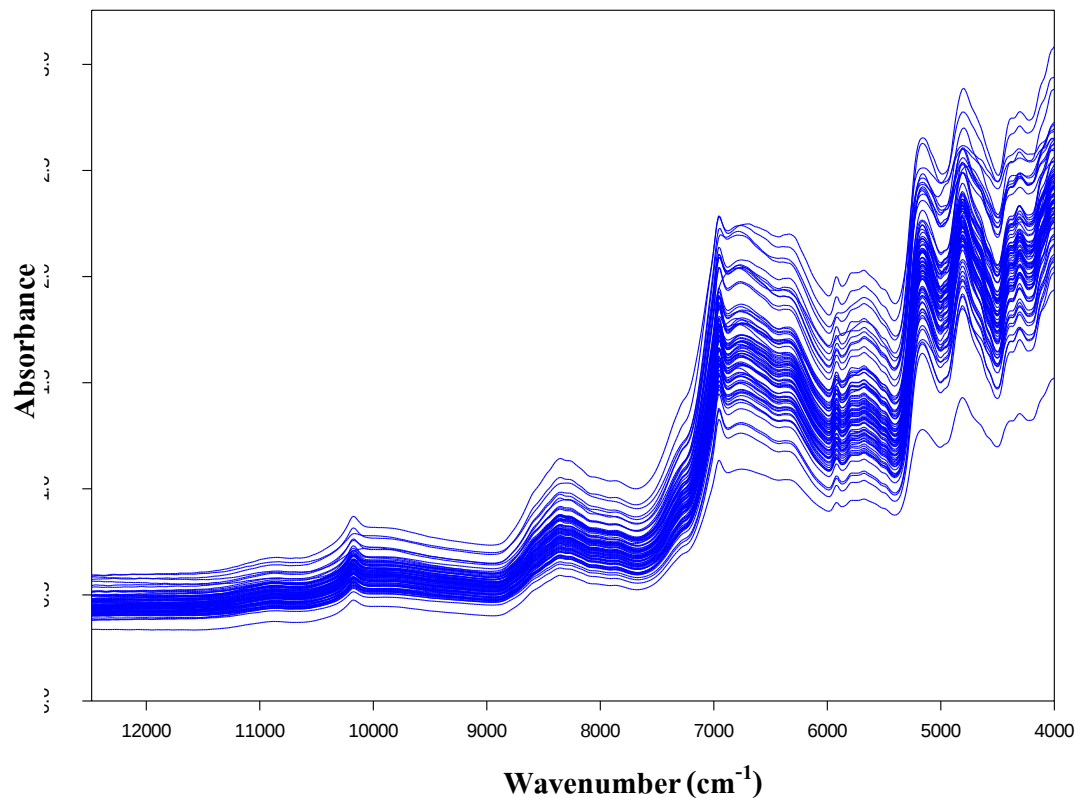
ตารางที่ 4.16 ค่าทางเคมีและค่าสถิติเบื้องต้นของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

พารามิเตอร์	Calibration			Validation			SEL
	ช่วงข้อมูล	ค่าเฉลี่ย	SD	ช่วงข้อมูล	ค่าเฉลี่ย	SD	
TSS (°Brix)	85.2-92.8	89.62	1.44	87.0-92.2	89.69	1.22	0.3
กลูโคส (%)	0.47-4.96	2.55	1.06	0.88-4.69	2.57	0.94	1.36
ฟรุคโตส (%)	0.64-5.03	2.54	1.03	0.82-4.68	2.56	0.93	1.34
ซูโครส (%)	62.77-80.67	73.65	3.39	67.13-79.81	73.84	2.88	1.29
pH	5.08-6.21	5.51	0.27	5.11-5.97	5.51	0.25	0.03
TA (%)	0.23-0.54	0.36	0.08	0.25-0.49	0.36	0.08	0.02
ความชื้น (%)	8.24-14.53	11.40	1.36	9.03-13.62	11.55	1.37	1.75

4.1.3.2 ค่าการดูดกลืนแสง NIR ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

ข้อมูลสเปกตรัมที่ได้จากการวัดตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวที่บรรจุใน petri dish ด้วยเทคนิค NIR ในระบบสะท้อนแสง (reflectance) ที่ช่วงคลื่น $12480-4000\text{ cm}^{-1}$ จำนวน 120 ตัวอย่าง แสดงดังภาพที่ 4.32 ลักษณะข้อมูลสเปกตรัมที่ได้นั้นมีค่าการดูดแสงที่ 10167 cm^{-1} ซึ่งสัมพันธ์กับโอเวอร์โทนอันดับสองของพันธะ O-H ของน้ำ ที่ตำแหน่ง 8346 cm^{-1} ซึ่งสัมพันธ์กับโอ

เวอร์ไทน์อันดับสองของพันธะ C-H ที่ตำแหน่ง 6958 cm^{-1} ซึ่งสัมพันธ์กับโอเวอร์โทนอันดับหนึ่ง
ของพันธะ O-H ของกลูโคส และที่ 5153 cm^{-1} เป็นคอมบิเนชันของพันธะ O-H แบบ stretching
และ deformation (Sinelli และคณะ, 2008; Egidio และคณะ, 2009; Xiaoying และคณะ,
2012)



ภาพที่ 4.32 สเปกตรัมการดูดกลืนแสง NIR ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวจำนวน 120 ตัวอย่าง

ในการศึกษาครั้งนี้ได้ใช้เทคนิคในการปรับแต่งสเปกตรัมเพื่อช่วยลดผลกระทบที่เกิดจาก
การกระเจิงแสงทั้งหมด 6 เทคนิค คือ vector normalization (SNV), multiplicative scattering
correction (MSC), first derivative (1D), second derivative (2D), first derivative กับ vector
normalization (1D+SNV) และ first derivative กับ multiplicative scattering correction (1D+MSC)
เส้นสเปกตรัมหลังการปรับแต่งแสดงในภาคผนวก จ

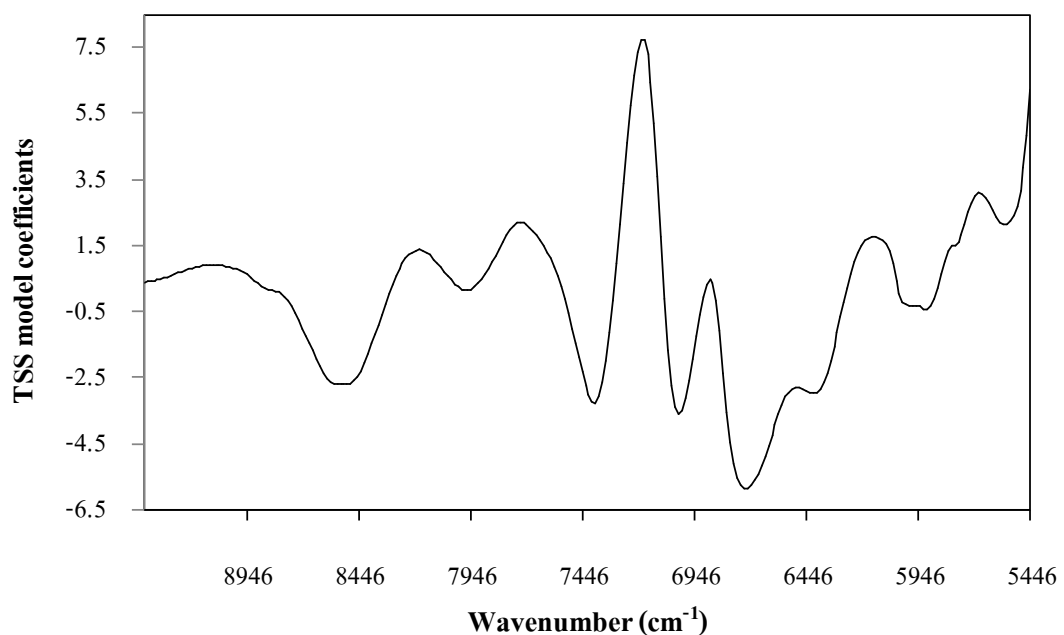
4.1.3.3 สมการทำนายปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมดของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

สมการทำนายปริมาณ TSS สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวจำนวน 117 ตัวอย่าง จากจำนวนตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวทั้งหมด 120 ตัวอย่างที่นำมาวิเคราะห์ เนื่องจากมี 3 ตัวอย่างที่ได้เบี่ยงเบนไปจากตัวอย่างอื่นๆ มาก (outlier) ดังนั้นเพื่อลดความคลาดเคลื่อนของสมการทำนายจึงไม่นำข้อมูลสเปกตรัมจาก 3 ตัวอย่างนั้นมาสร้างสมการ ตัวอย่างที่ใช้ในการสร้างสมการ 79 ตัวอย่าง และตัวอย่างที่ใช้ในการตรวจสอบสมการ 38 ตัวอย่าง จากตารางที่ 4.17 พบว่า สมการที่สร้างขึ้นด้วยข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งวิธี 1D กับ SNV โดยใช้ช่วงคลื่น $9411.5\text{--}5446.3\text{ cm}^{-1}$ ให้สมการที่เหมาะสมที่สุดสำหรับการทำนายปริมาณ TSS เนื่องจากให้ค่า RPD สูงสุด โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มข้อมูลสเปกตรัมเป็นตัวแทนใหม่ได้ 3 แพคเตอร์ ให้ค่า R^2 , SEC, SEP และ RPD เท่ากับ 0.689, 0.8°Brix , 0.6°Brix และ 2.01 ตามลำดับ ทั้งนี้ค่า SEP ที่ได้จากสมการที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยเทคนิค 1D กับ SNV มีค่าไม่เกิน 26% ของค่า SEC ($T_{UE} = 1.03$) และค่า TSS ที่วัดได้กับค่า TSS ที่ทำนายได้จากสมการไม่แตกต่างกันอย่างมีนัยสำคัญทางสถิติ ($p>0.05$)

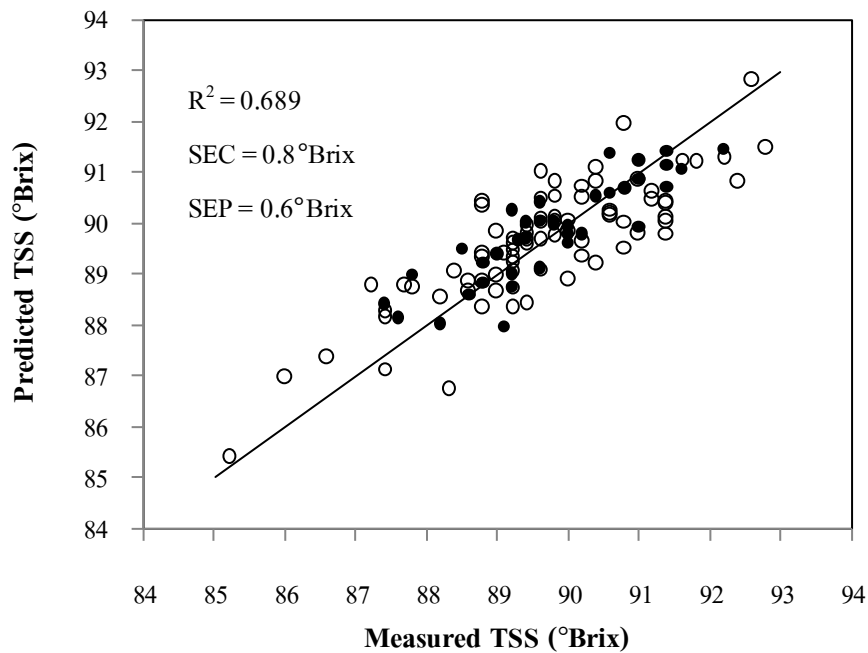
ตารางที่ 4.17 ค่าทางสถิติของสมการทำนายปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมดจากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

เทคนิค	ช่วงคลื่น (cm^{-1})	แพคเตอร์	Calibration		Validation			
			R^2	SEC ($^\circ\text{Brix}$)	R^2	SEP ($^\circ\text{Brix}$)	RPD	Bias
Raw	6109.8-4242.9	5	0.687	0.8	0.725	0.6	1.91	-0.0253
SNV	7513.8-6094.3	4	0.687	0.8	0.744	0.6	1.98	-0.0323
MSC	7513.8-6094.3	4	0.687	0.8	0.746	0.6	1.99	-0.0346
1D	7513.8-5446.3	4	0.668	0.9	0.729	0.6	1.94	-0.0863
2D	5461.8-4597.8	3	0.667	0.8	0.735	0.6	1.95	-0.0463
1D+SNV	9411.5-5446.3	3	0.689	0.8	0.749	0.6	2.01	-0.0660
1D+MSC	9411.5-4242.9	4	0.699	0.8	0.741	0.6	1.98	-0.0792

เมื่อทำการพิจารณาค่าสัมประสิทธิ์การถดถอย (regression coefficient) ของสมการดังภาพที่ 4.33 พบพีคที่ตำแหน่ง 7154 cm^{-1} , 6079 cm^{-1} และ 5674 cm^{-1} ซึ่งตรงกับตำแหน่งการดูดกลืนแสงของฟรุกโตสและซูโครสมาตรฐานดังแสดงไว้ในภาคผนวก จ และเกี่ยวข้องกับการสั่นแบบไอเวอร์ไทน์อันดับหนึ่งของพันธะ C-H ของหมู่ CHO และไอเวอร์ไทน์อันดับหนึ่งของพันธะ O-H ที่แสดงถึงลักษณะโมเลกุลน้ำตาล (Ikegaya และคณะ, 1988; Tewari และคณะ, 2008; Choung, 2010) โดยสอดคล้องกับงานวิจัยของ Sinelli และคณะ (2008) ที่ได้ทำการวัดปริมาณ TSS ในบลูเบอร์รี่และรายงานไว้ว่า ช่วงคลื่นดังกล่าวมีความสัมพันธ์กับปริมาณ TSS เป็นอย่างมาก กราฟในภาพที่ 4.34 แสดงปริมาณ TSS ค่าจริงที่วัดได้กับปริมาณ TSS ที่ทำนายได้จากเทคนิค NIR



ภาพที่ 4.33 ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายค่า TSS ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D+SNV ที่ช่วงคลื่น $9411.5\text{--}5446.3\text{ cm}^{-1}$



ภาพที่ 4.34 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่า TSS จริงที่วัดได้กับค่า TSS ที่ทำนายได้ของ น้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว โดย ○ เป็นตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ และ ● เป็นตัวอย่างกลุ่ม ตรวจสอบสมการ

4.1.3.4 สมการทำนายปริมาณน้ำตาลกลูโคส ฟรุคโตส และซูโครสของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

สมการทำนายปริมาณน้ำตาลในตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวแสดงดังตารางที่ 4.18-4.20 โดยสมการทำนายปริมาณกลูโคสนั้นสร้างจากข้อมูลสเปกตรัมของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว จำนวน 114 จากตัวอย่างทั้งหมด 120 ตัวอย่าง โดยมีตัวอย่างที่ใช้ในการสร้างสมการ 74 ตัวอย่าง และตัวอย่างที่ใช้ในการตรวจสอบสมการ 40 ตัวอย่าง จากตารางที่ 4.18 พบว่า ข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D กับ MSC ที่ช่วง $9411.5\text{--}7498.4\text{ cm}^{-1}$ และ $4613.2\text{--}4242.9\text{ cm}^{-1}$ นั้นให้สมการทำนายที่เหมาะสมที่สุด โดยสมการมีการจัดกลุ่มตัวแปรใหม่ได้ 7 แฟคเตอร์ มีค่า R^2 , SEC, SEP และ RPD เท่ากับ 0.773, 0.50%, 0.51% และ 1.86 ตามลำดับ ทั้งนี้ค่า SEP ที่ได้จากสมการที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยเทคนิค 1D กับ MSC มีค่ามากกว่าค่า SEC ไม่เกิน 26% ($T_{UE} = 0.63$) และปริมาณกลูโคสที่วัดได้กับปริมาณกลูโคสที่ทำนายได้จากสมการมีค่าไม่แตกต่างกันอย่างมีนัยสำคัญทางสถิติ ($p > 0.05$)

ตารางที่ 4.18 ค่าทางสถิติของสมการทำนายปริมาณน้ำตาลกลูโคสจากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

เทคนิค	ช่วงคลื่น (cm ⁻¹)	แฟคเตอร์	Calibration		Validation			
			R ²	SEC (%)	R ²	SEP (%)	RPD	Bias
Raw	9411.5-5446.3 4613.2-4242.9	9	0.779	0.50	0.663	0.54	1.73	-0.0602
SNV	9411.5-7498.4	6	0.725	0.54	0.713	0.50	1.88	-0.0596
MSC	9411.5-7498.4	6	0.724	0.55	0.713	0.50	1.88	-0.058
1D	9411.5-7498.4 4613.2-4242.5	7	0.640	0.63	0.695	0.51	1.84	0.0928
2D	9411.5-7498.4	4	0.658	0.60	0.619	0.58	1.62	-0.0145
1D+SNV	9411.5-7498.4	5	0.694	0.57	0.692	0.52	1.82	-0.0717
1D+MSC	9411.5-7498.4 4613.2-4242.9	7	0.773	0.50	0.710	0.51	1.86	-0.0333

ส่วนสมการทำนายปริมาณฟรุกโตสและซูโครสนั้นสร้างจากข้อมูลน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวจำนวน 116 ตัวอย่าง จากข้อมูล 120 ตัวอย่าง โดยมีตัวอย่างที่ใช้ในการสร้างสมการ 77 ตัวอย่าง และตัวอย่างที่ใช้ในการตรวจสอบสมการ 39 ตัวอย่าง ทั้งนี้จากตารางที่ 4.19 พบว่าสมการที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิคต่างๆ นั้นให้ค่า SEP ใกล้เคียงกัน แต่ข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค MSC นั้นให้สมการที่เหมาะสมที่สุด เนื่องจากให้ค่า R² สูงสุด ช่วงข้อมูลที่ใช้ในการสร้างสมการคือ 9411.5-4242.9 cm⁻¹ มีการจัดแปรใหม่ได้ 15 แฟคเตอร์ และให้ค่า R², SEC, SEP และ RPD เท่ากับ 0.925, 0.32%, 0.46% และ 1.88 ตามลำดับ ซึ่งค่า SEP ที่ได้จากสมการที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยเทคนิค MSC มีค่ามากกว่าค่า SEC ไม่เกิน 28% (T_{UE} = 0.41) และปริมาณฟรุกโตสที่วัดได้กับปริมาณฟรุกโตสที่ทำนายได้จากสมการมีค่าไม่แตกต่างกันอย่างมีนัยสำคัญทางสถิติ (p>0.05)

ตารางที่ 4.19 ค่าทางสถิติของสมการทำนายปริมาณน้ำตาลฟรุคโตสจากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ
ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

เทคนิค	ช่วงคลื่น (cm ⁻¹)	แฟคเตอร์	Calibration		Validation			
			R ²	SEC (%)	R ²	SEP (%)	RPD	Bias
Raw	9411.5-7498.4 4613.2-4242.9	13	0.824	0.48	0.639	0.51	1.691	0.0936
SNV	9411.5-5446.3 4613.2-4242.9	13	0.882	0.39	0.723	0.44	1.93	0.0789
MSC	9411.5-4242.9	15	0.925	0.32	0.716	0.46	1.88	0.0263
1D	9411.5-5446.3 4613.2-4242.9	20	0.923	0.33	0.707	0.46	1.87	0.0633
2D	9411.5-7498.4 6109.8-4242.9	12	0.858	0.43	0.596	0.54	1.58	0.0498
1D+SNV	9411.5-7498.4 6109.8-5446.3	15	0.849	0.45	0.691	0.47	1.82	0.707
1D+MSC	9411.5-7498.4	13	0.803	0.50	0.701	0.46	1.84	-0.0596

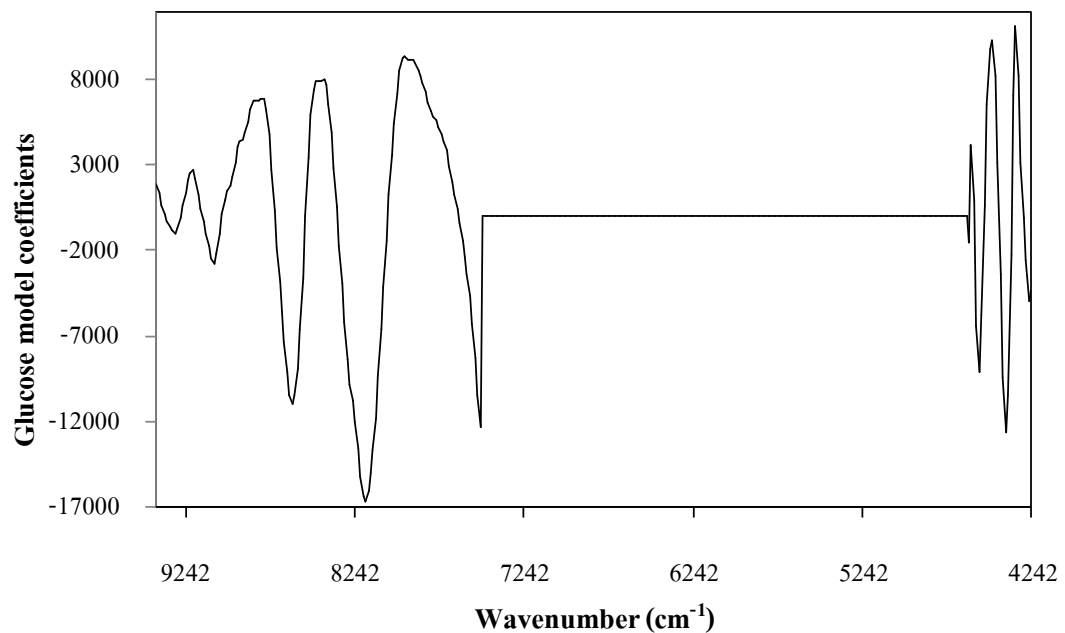
ส่วนตารางที่ 4.20 สำหรับสมการทำนายปริมาณซูโครสพบว่า ข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D สามารถให้สมการทำนายที่มีประสิทธิภาพ โดยใช้ข้อมูลช่วง 9411.5-4597.8 cm⁻¹ ในการสร้างสมการที่มีตัวแปร 16 แฟคเตอร์ ให้ค่า R² เท่ากับ 0.881 ค่า SEC เท่ากับ 1.26% ค่า SEP เท่ากับ 1.72% และค่า RPD เท่ากับ 1.69 ค่า SEP ที่ได้จากสมการนั้นมีค่ามากกว่า 27% ของค่า SEC (T_{UE} = 1.60) และปริมาณซูโครสที่วัดได้กับปริมาณซูโครสที่ทำนายได้จากสมการมีค่าไม่แตกต่างกันอย่างมีนัยสำคัญทางสถิติ (p>0.05)

ตารางที่ 4.20 ค่าทางสถิติของสมการทำนายปริมาณน้ำตาลซูโครสจากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

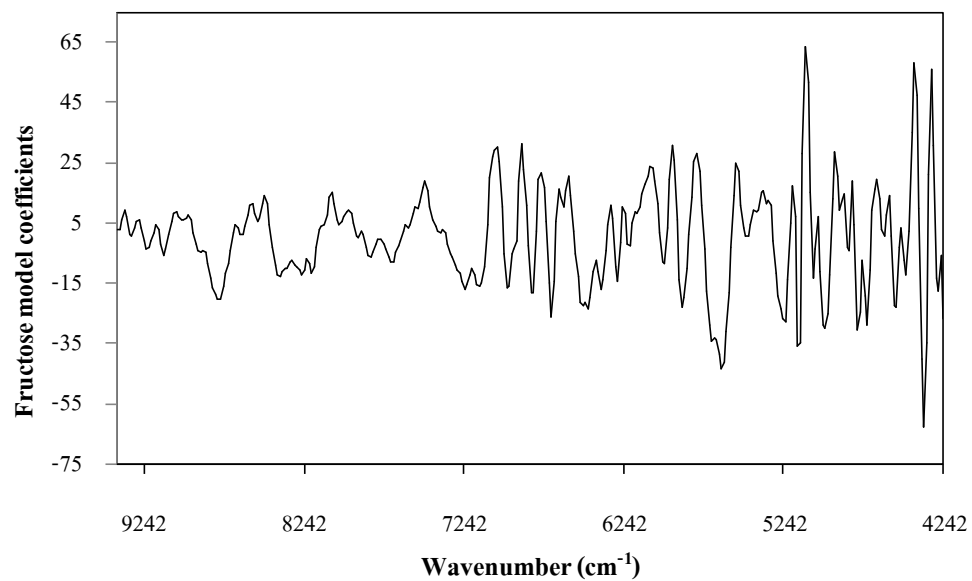
เทคนิค	ช่วงคลื่น (cm ⁻¹)	แฟคเตอร์	Calibration		Validation			
			R ²	SEC (%)	R ²	SEP (%)	RPD	Bias
Raw	7513.8-4597.8	13	0.869	1.29	0.593	1.83	1.59	-0.3140
SNV	9411.5-7498.4 4613.2-4242.9	14	0.896	1.16	0.619	1.76	1.65	-0.3430
MSC	9411.5-7498.4 6109.8-5446.3 4613.2-4242.9	14	0.913	1.06	0.616	1.78	1.63	-0.2500
1D	9411.5-4597.8	16	0.881	1.26	0.636	1.72	1.69	-0.3110
2D	9411.5-5446.3 4613.2-4242.9	14	0.899	1.15	0.557	1.90	1.52	-0.3300
1D+SNV	9411.5-5446.3 4613.2-4242.9	13	0.891	1.18	0.518	1.96	1.49	-0.484
1D+MSC	9411.5-4597.8	15	0.886	1.23	0.613	1.80	1.61	-0.1780

ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายปริมาณน้ำตาลแสดงดังภาพที่ 4.35-4.37 โดยสมการทำนายปริมาณกลูโคสมีพีคที่ตำแหน่ง 8458 cm⁻¹ และ 4337 cm⁻¹ ส่วนสมการทำนายปริมาณฟรุคโตสมีพีคที่ตำแหน่ง 5937cm⁻¹, 5781 cm⁻¹, 4403 cm⁻¹ และสำหรับสมการทำนายปริมาณซูโครสจากภาพพบพีคที่ตำแหน่ง 7099 cm⁻¹, 6313 cm⁻¹, 5602 cm⁻¹ และ 4716 cm⁻¹ ทั้งนี้ตำแหน่งดังกล่าวตรงกับตำแหน่งการดูดกลืนแสงของกลูโคส ฟรุคโตส และซูโครสมาตรฐานที่แสดงไว้ในภาคผนวก จ ซึ่งตำแหน่งเหล่านี้แสดงถึงการสั่นแบบยืดของโอเวอร์โทนอันดับหนึ่งและคอมบิเนชันของพันธะ C-H และโอเวอร์โทนอันดับหนึ่งของพันธะ O-H โดยสัมพันธ์กับน้ำตาลกลูโคส ฟรุคโตสและซูโครส (Lanza และ Li, 1984; Rodrigue-Saona และคณะ, 2001; Sinelli และคณะ, 2008; Li และคณะ, 2013) สอดคล้องกับงานวิจัยของ Rambla และคณะ (1997) ที่แสดงให้เห็นว่าที่ตำแหน่ง 7547-5555 cm⁻¹ และ 4950-4184 cm⁻¹ มีความสัมพันธ์กับน้ำตาลเป็น

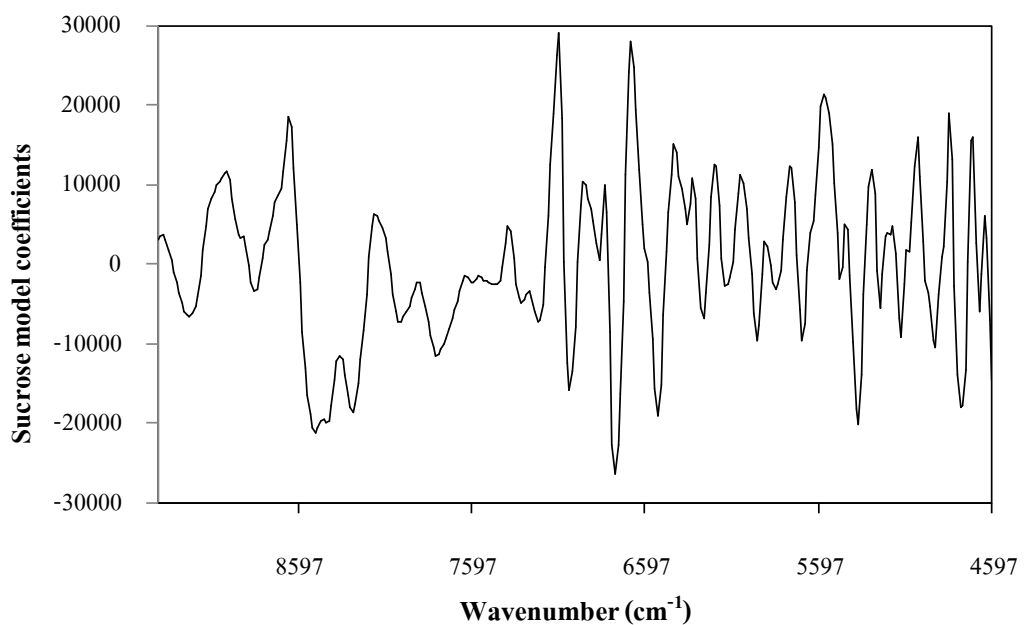
อย่างมาก นอกจากนี้ Tewari และคณะ (2008) ได้ศึกษาปริมาณน้ำตาลกลูโคส ฟรุคโตสและซูโครสในผลไม้ประเภทส้ม (citrus) โดยใช้ข้อมูลสเปกตรัมในช่วง $9090\text{--}4000\text{ cm}^{-1}$ ในการสร้างสมการทำนายด้วยเทคนิค PLS ให้ค่า R^2 ของสมการทำนายปริมาณกลูโคส ฟรุคโตสและซูโครสเท่ากับ 0.9753, 0.9359 และ 0.9506 ตามลำดับ และจากภาพที่ 4.38-4.40 ซึ่งแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าที่วิเคราะห์ได้จริงกับค่าที่ได้จากการทำนายของปริมาณกลูโคส ฟรุคโตสและซูโครสในน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวแสดงให้เห็นว่าสามารถใช้เทคนิค NIR ในการวิเคราะห์ปริมาณน้ำตาลในตัวอย่งน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวได้



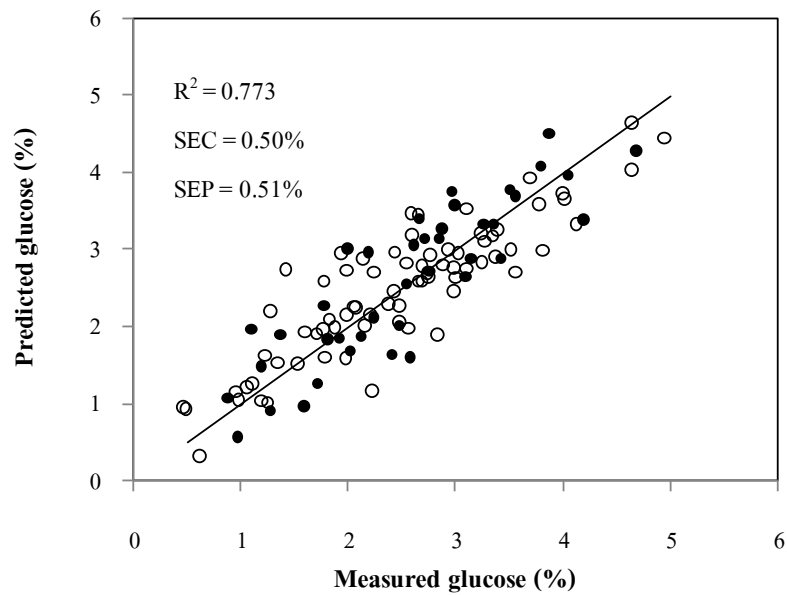
ภาพที่ 4.35 ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายปริมาณกลูโคสของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D กับ MSC ที่ช่วงคลื่น $9411.5\text{--}7498.4\text{ cm}^{-1}$ และ $4613.2\text{--}4242.9\text{ cm}^{-1}$



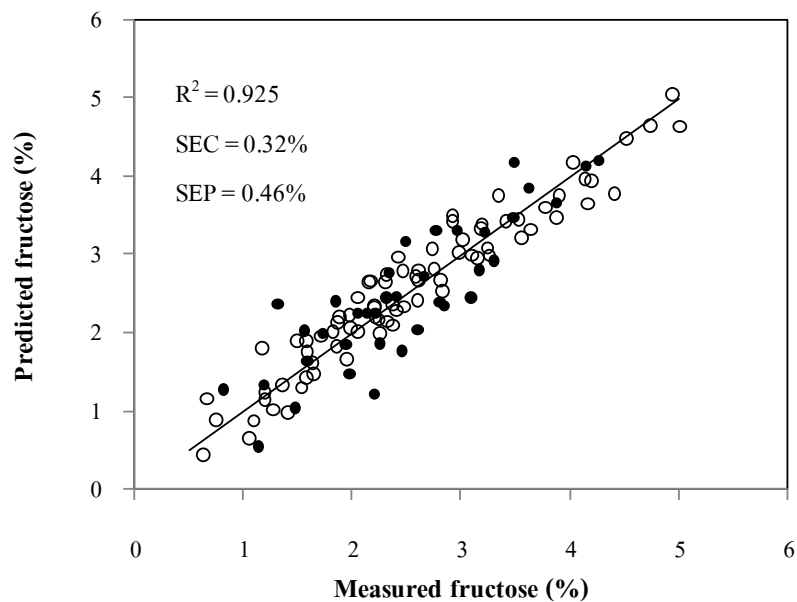
ภาพที่ 4.36 ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายปริมาณฟรุกโตสของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค MSC ที่ช่วงคลื่น 9411.5-4242.9 cm⁻¹



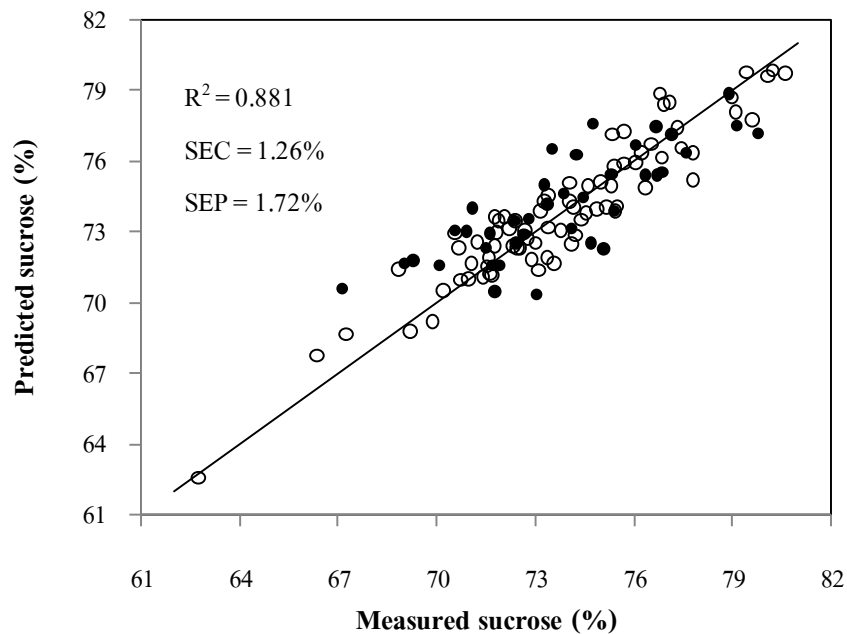
ภาพที่ 4.37 ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายปริมาณซูโครสของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D ที่ช่วงคลื่น 9411.5-4597.8 cm⁻¹



ภาพที่ 4.38 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างปริมาณกลูโคสที่วัดได้จริงกับปริมาณกลูโคสที่ทำนายได้ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว โดย ○ เป็นตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ และ ● เป็นตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบสมการ



ภาพที่ 4.39 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างปริมาณฟรุคโตสที่วัดได้จริงกับปริมาณฟรุคโตสที่ทำนายได้ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว โดย ○ เป็นตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ และ ● เป็นตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบสมการ



ภาพที่ 4.40 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างปริมาณซูโครสที่วัดได้จริงกับปริมาณซูโครสที่ทำนายได้ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว โดย ○ เป็นตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ และ ● เป็นตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบสมการ

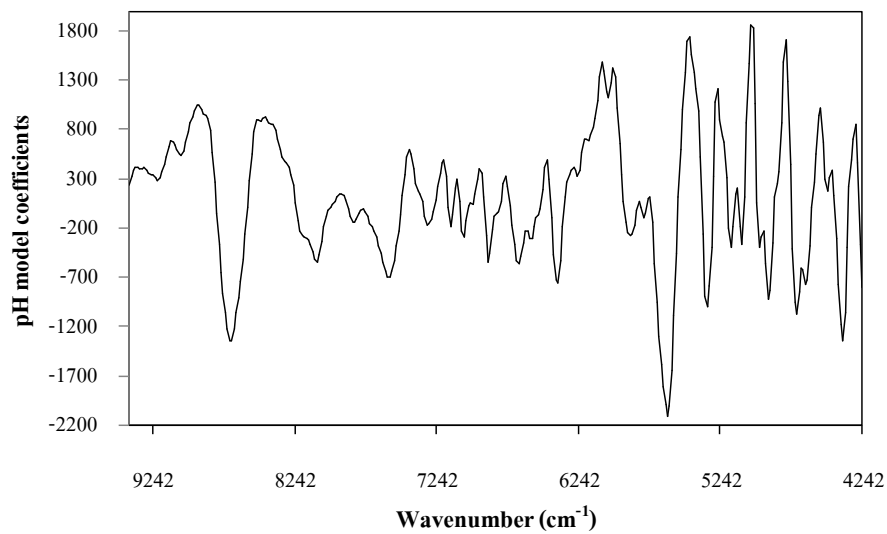
4.1.3.5 สมการทำนายค่า pH ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

ค่าทางสถิติของสมการทำนายค่า pH ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวที่ได้จากข้อมูลน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว 117 ตัวอย่างจาก 120 ตัวอย่าง โดยเป็นตัวอย่างที่ใช้ในการสร้างสมการ 77 ตัวอย่าง และตัวอย่างที่ใช้ในการสร้างสมการ 40 ตัวอย่าง แสดงดังตารางที่ 4.21 ซึ่งพบว่า ข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D กับ ในช่วง $9411.5-4242.9 \text{ cm}^{-1}$ นั้นให้สมการที่ดีที่สุดโดยให้ค่า R^2 สูงสุด คือ 0.819 ค่า SEC เท่ากับ 0.12 ให้ SEP ที่ต่ำ คือ 0.17 และให้ค่า RPD สูงสุด คือ 1.49 โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มข้อมูลสเปกตรัมเป็นตัวแทนใหม่ได้ 14 แฟคเตอร์ ทั้งนี้ค่า SEP ที่ได้จากสมการทำนายที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยเทคนิค 1D มีค่ามากกว่า 25% ของค่า SEC ($T_{UE} = 0.15$) ส่วนค่า pH ที่วัดได้กับค่า pH ที่ทำนายได้มีค่าไม่แตกต่างกันอย่างมีนัยสำคัญ ($p > 0.05$)

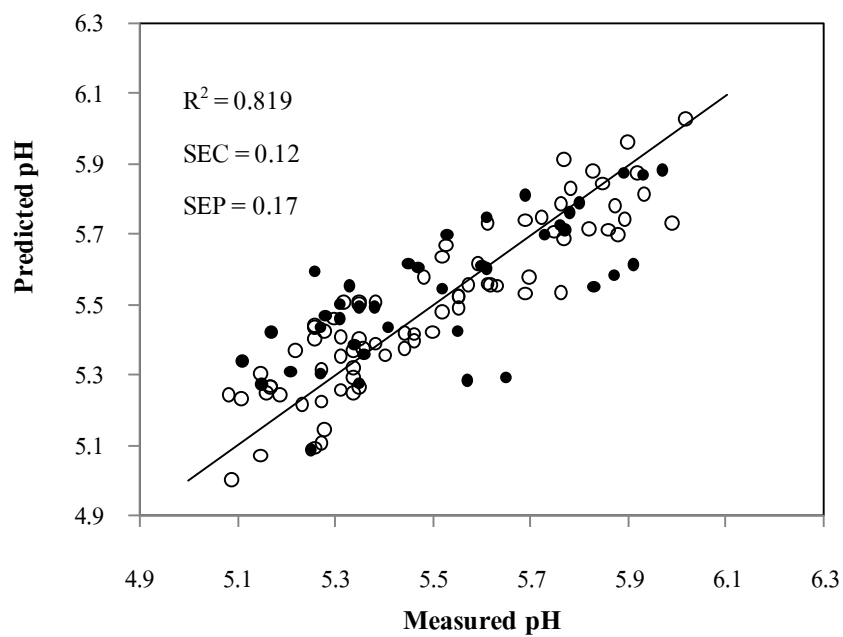
ตารางที่ 4.21 ค่าทางสถิติของสมการทำนายค่า pH จากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

เทคนิค	ช่วงคลื่น (cm ⁻¹)	แฟคเตอร์	Calibration		Validation			
			R ²	SEC	R ²	SEP	RPD	Bias
Raw	9411.5-7498.4	11	0.797	0.12	0.361	0.20	1.25	0.0160
SNV	9411.5-7498.4 6109.8-5446.6	10	0.782	0.13	0.312	0.20	1.21	-0.0067
MSC	9411.5-7498.4 6109.8-5446.3	9	0.772	0.13	0.369	0.20	1.26	-0.0026
1D	9411.5-4242.9	14	0.819	0.12	0.544	0.17	1.49	-0.0205
2D	9411.5-7498.4 5461.8-4597.8	8	0.606	0.17	0.343	0.20	1.25	-0.0283
1D+SNV	9411.5-7498.4 6109.8-5446.3	16	0.856	0.11	0.449	0.18	1.35	0.0034
1D+MSC	9411.5-7498.4 5785.8-5446.3 4428.0-4242.9	11	0.797	0.12	0.536	0.17	1.47	-0.0100

จากภาพที่ 4.41 แสดงค่าสัมประสิทธิ์ของสมการทำนายค่า pH พบพีคที่ตำแหน่ง 6086 cm⁻¹, 6007 cm⁻¹, 5263 cm⁻¹ และ 5128 cm⁻¹ ซึ่งเกี่ยวข้องกับโอเวอร์โทนอันดับสองของพันธะ C=O ของหมู่ COOH (Osborne และคณะ, 1993) สอดคล้องกับการศึกษาของ Jha และคณะ (2012) ที่ใช้ช่วงคลื่น 6250-5558 cm⁻¹ ในการสร้างสมการทำนายค่า pH ในมะม่วง กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่า pH ที่วัดได้จริงกับค่า pH ที่ทำนายได้แสดงดังภาพที่ 4.42



ภาพที่ 4.41 ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายค่า pH ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวที่สร้างจากข้อมูลเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D ที่ช่วงคลื่น 9411.5-4242.9 cm^{-1}



ภาพที่ 4.42 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่า pH ที่วัดได้จริงกับค่า pH ที่ทำนายได้ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว โดย ○ เป็นตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ และ ● เป็นตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบสมการ

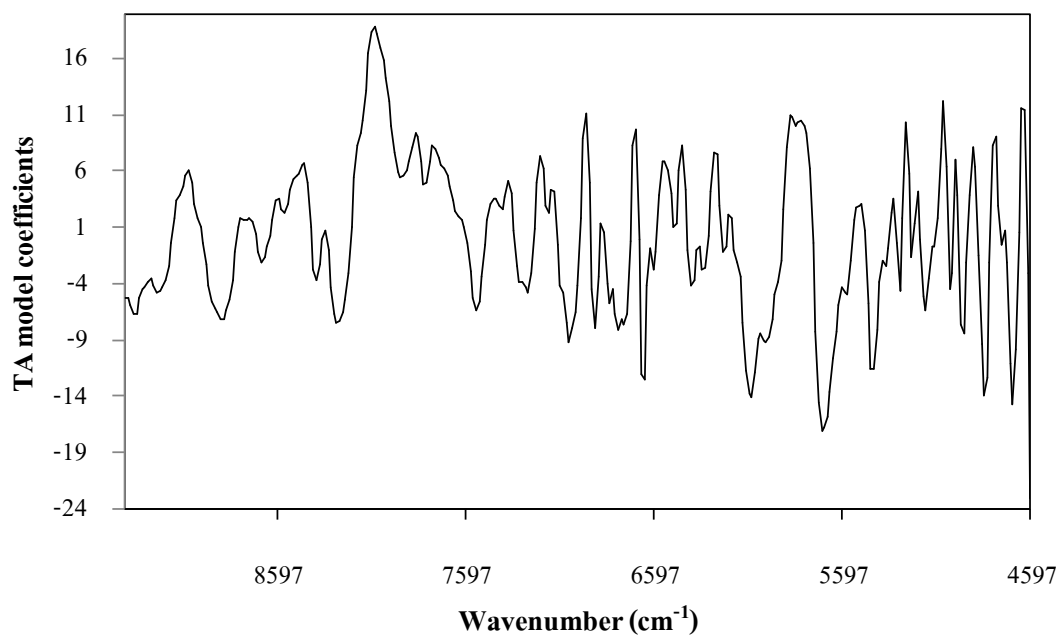
4.1.3.6 สมการทำนายปริมาณกรดที่ไตรเตรตได้ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

จากการสร้างสมการทำนายค่า TA ด้วยเทคนิค PLS ด้วยข้อมูลสเปกตรัมของน้ำตาลเคี้ยว 120 ตัวอย่าง ซึ่งมีตัวอย่างที่ใช้ในการสร้างสมการ 80 ตัวอย่าง และตัวอย่างที่ใช้ในการตรวจสอบสมการ 40 ตัวอย่าง ทั้งที่เป็นข้อมูลสเปกตรัมเดิมและข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิคต่างๆ แล้วได้ผลดังแสดงในตารางที่ 4.22 ซึ่งพบว่าข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D กับ SNV นั้นสามารถให้สมการทำนายที่มีค่า R^2 สูงที่สุด และค่า SEP ต่ำที่สุดเมื่อเปรียบเทียบกับสมการอื่นๆ โดยใช้ข้อมูลสเปกตรัมช่วงคลื่น $9411.5\text{-}4597.8\text{ cm}^{-1}$ และมีจัดกลุ่มตัวแปรใหม่ได้ 18 แฟคเตอร์ ส่งผลให้สมการมีค่า R^2 , SEC, SEP และ RPD เท่ากับ 0.826, $4.01 \times 10^{-2}\%$, $4.83 \times 10^{-2}\%$ และ 1.66 ตามลำดับ ค่า SEP ที่ได้จากสมการนั้นมีค่ามากกว่าค่า SEC ไม่เกิน 26% ($T_{UE} = 0.05$) และปริมาณ TA ที่วัดได้กับปริมาณ TA ที่ทำนายได้จากสมการมีค่าไม่แตกต่างกันอย่างมีนัยสำคัญทางสถิติ ($p > 0.05$)

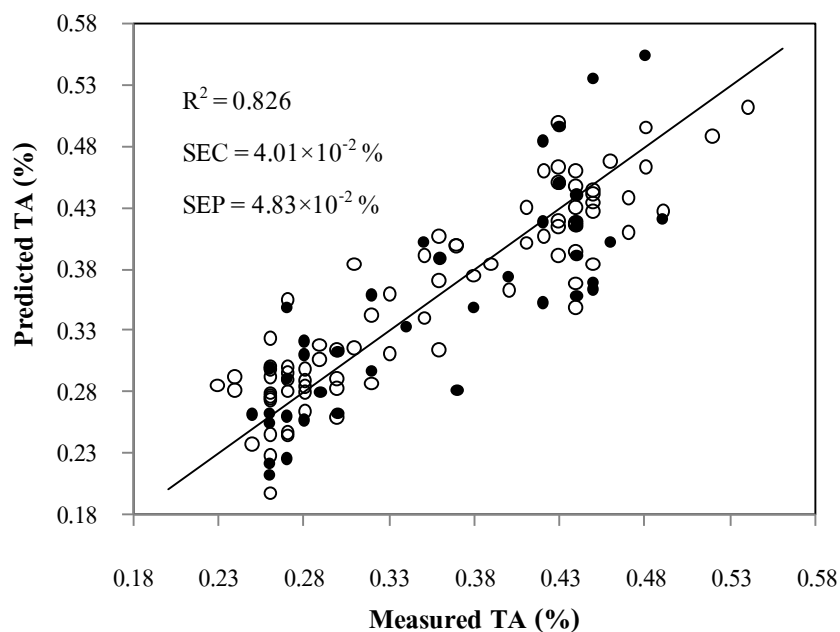
ตารางที่ 4.22 ค่าทางสถิติของสมการทำนายปริมาณกรดที่ไตรเตรตได้จากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

เทคนิค	ช่วงคลื่น (cm^{-1})	แฟคเตอร์	Calibration		Validation			
			R^2	SEC ($\times 10^{-2}\%$)	R^2	SEP ($\times 10^{-2}\%$)	RPD	Bias
Raw	9411.5-7498.4 6109.8-5446.3 4613.2-4242.9	10	0.712	4.85	0.593	5.11	1.57	-0.00005
SNV	9411.5-4242.9	14	0.822	3.93	0.608	5.00	1.60	0.00228
MSC	9411.5-5446.3 4613.2-4242.9	10	0.750	4.52	0.605	4.87	1.64	0.01200
1D	9411.5-4242.9	15	0.813	4.05	0.588	5.04	1.59	0.00533
2D	6109.8-4597.8	13	0.720	4.89	0.602	5.04	1.59	0.00122
1D+SNV	9411.5-4597.8	18	0.826	4.01	0.627	4.83	1.66	0.00721
1D+MSC	9411.5-7498.4 6109.8-4597.8	11	0.686	5.11	0.526	5.05	1.45	-0.00209

เมื่อพิจารณาค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายค่า TA จากภาพที่ 4.43 พบพีคที่ตำแหน่ง 8086 cm^{-1} , 7223 cm^{-1} , 5263 cm^{-1} และ 5068 cm^{-1} ซึ่งสัมพันธ์กับโอเวอร์โทนอันดับสองของพันธะ C=O ของหมู่ COOH (Osborne, 1993) สอดคล้องกับการศึกษาของ Xie และคณะ (2011) ที่พบว่าช่วงคลื่นดังกล่าวมีความเกี่ยวข้องกับค่า TA กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่า TA ที่ได้จากการไตเตรตและค่า TA ที่ทำนายได้จากเทคนิค NIR แสดงดังภาพที่ 5.44



ภาพที่ 4.43 ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายค่า TA ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D กับ SNV ที่ช่วงคลื่น $9411.5\text{-}4597.8\text{ cm}^{-1}$



ภาพที่ 4.44 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่า TA จริงที่วิเคราะห์ได้กับค่า TA ที่ทำนายได้ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว โดย ○ เป็นตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ และ ● เป็นตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบสมการ

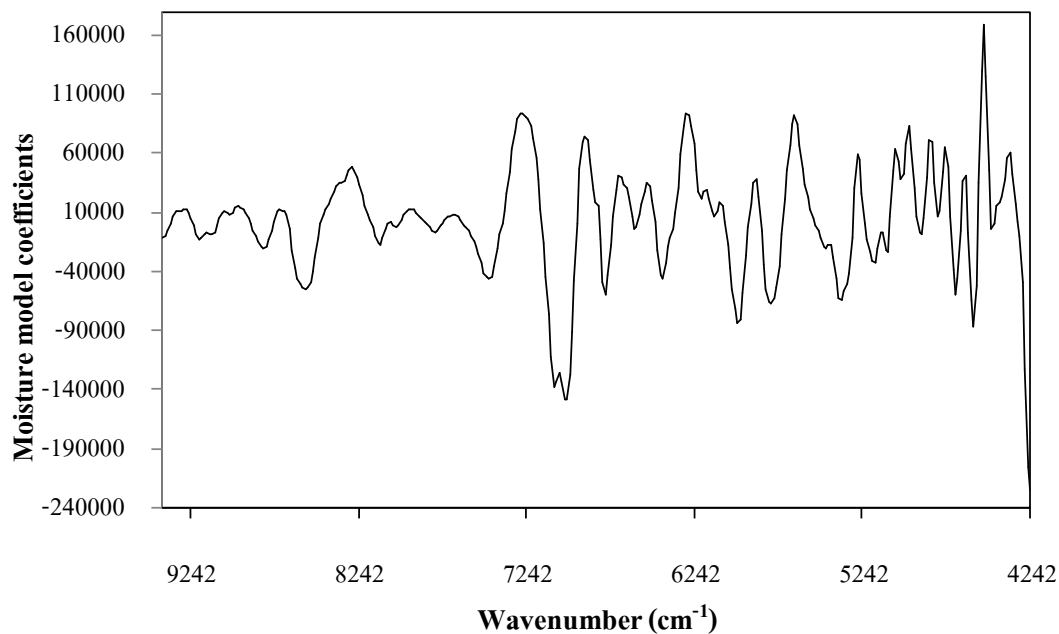
4.1.3.7 สมการทำนายปริมาณความชื้นของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

ค่าสถิติของสมการทำนายปริมาณความชื้นจากตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวจำนวน 116 จากตัวอย่างทั้งหมด 120 ตัวอย่าง โดยประกอบด้วยตัวอย่างที่ใช้ในการสร้างสมการ 78 ตัวอย่าง และตัวอย่างที่ใช้ในการตรวจสอบสมการ 40 ตัวอย่าง แสดงดังตารางที่ 4.23 ซึ่งพบว่า สมการทำนายที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 2D ที่ช่วง $9411.5\text{--}4242.9\text{ cm}^{-1}$ นั้นให้สมการทำนายที่เหมาะสมที่สุด เพราะให้ค่า R^2 และ RPD ที่สูง ให้ค่า SEP ที่ต่ำ สมการมีการจัดตัวแปรเดิมให้เป็นตัวแปรใหม่ได้ 8 แฟคเตอร์ มีค่า R^2 , SEC, SEP และ RPD เท่ากับ 0.723, 0.73%, 0.71% และ 1.86 ตามลำดับ ทั้งนี้ค่า SEP ที่ได้จากสมการที่ผ่านการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยเทคนิค 2D มีค่าไม่เกิน 26% ของค่า SEC ($T_{UE} = 0.92$) และปริมาณความชื้นที่วัดได้กับปริมาณความชื้นที่ทำนายได้จากสมการมีค่าไม่แตกต่างกันอย่างมีนัยสำคัญทางสถิติ ($p > 0.05$)

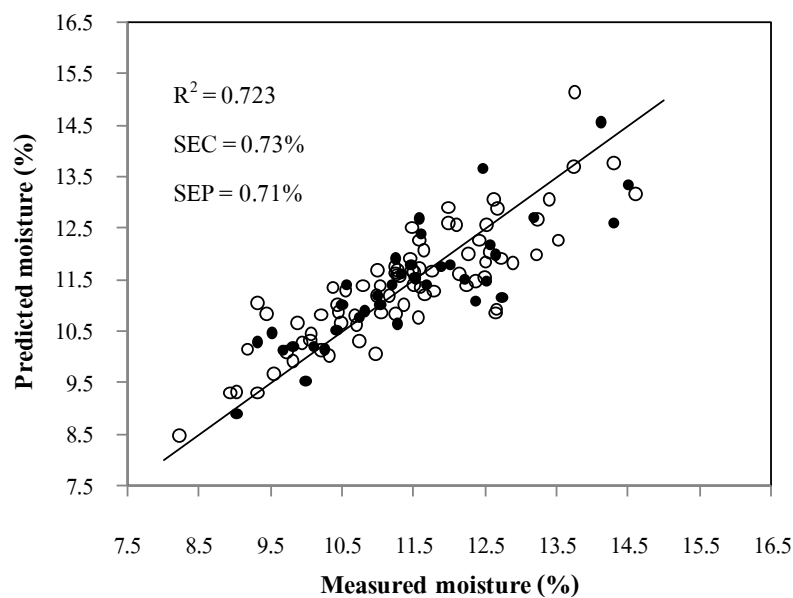
ตารางที่ 4.23 ค่าทางสถิติของสมการทำนายปริมาณความชื้นจากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ ของ น้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

เทคนิค	ช่วงคลื่น (cm ⁻¹)	แฟคเตอร์	Calibration		Validation			
			R ²	SEC (%)	R ²	SEP (%)	RPD	Bias
Raw	9411.5-7498.4 5461.8-4242.9	9	0.694	0.77	0.705	0.72	1.85	0.0557
SNV	9411.5-6094.3 5461.8-4242.9	4	0.627	0.82	0.615	0.79	1.69	0.2490
MSC	9411.5-7498.4 5461.8-4597.8	7	0.734	0.71	0.575	0.85	1.56	0.1510
1D	9411.5-7498.4 5029.8-4597.8	7	0.698	0.76	0.723	0.69	1.92	0.0864
2D	9411.5-4242.9	8	0.723	0.73	0.710	0.71	1.86	0.0560
1D+SNV	9411.5-7498.4 6109.8-4242.9	12	0.755	0.71	0.668	0.74	1.75	0.1850
1D+MSC	9411.5-7498.4 5461.8-4597.8	7	0.697	0.76	0.680	0.70	1.89	0.2650

จากภาพที่ 4.45 แสดงสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายปริมาณความชื้น พบพีคที่ตำแหน่ง 6996 cm⁻¹, 5377 cm⁻¹, 7082 cm⁻¹ และ 4579 cm⁻¹ โดยที่ตำแหน่งดังกล่าวมีข้อมูลสำคัญที่เกี่ยวข้องกับกลุ่มพันธะของ O-H ซึ่งเกี่ยวข้องกับปริมาณน้ำ (Egidio และคณะ, 2009) นอกจากนี้ Mireei และคณะ (2010) ได้ทำการศึกษาการใช้เทคนิค NIR ในการตรวจสอบปริมาณน้ำและปริมาณของแข็งที่ละลายได้ในอินทผลัมพบว่า สมการทำนายที่สร้างด้วยเทคนิค PLS มีประสิทธิภาพในการใช้ทำนายองค์ประกอบดังกล่าวของอินทผลัมเพื่อประเมินความสมบูรณ์ (maturity) ของผลได้ ภาพที่ 4.46 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างปริมาณความชื้นที่วิเคราะห์ได้กับปริมาณความชื้นที่ทำนายได้จากเทคนิค NIR นั้นมีความแนวโน้มเป็นเส้นตรง



ภาพที่ 4.45 ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายปริมาณความชื้นของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแก้ด้วยเทคนิค 2D ที่ช่วงคลื่น 9411.5-4242.9 cm^{-1}

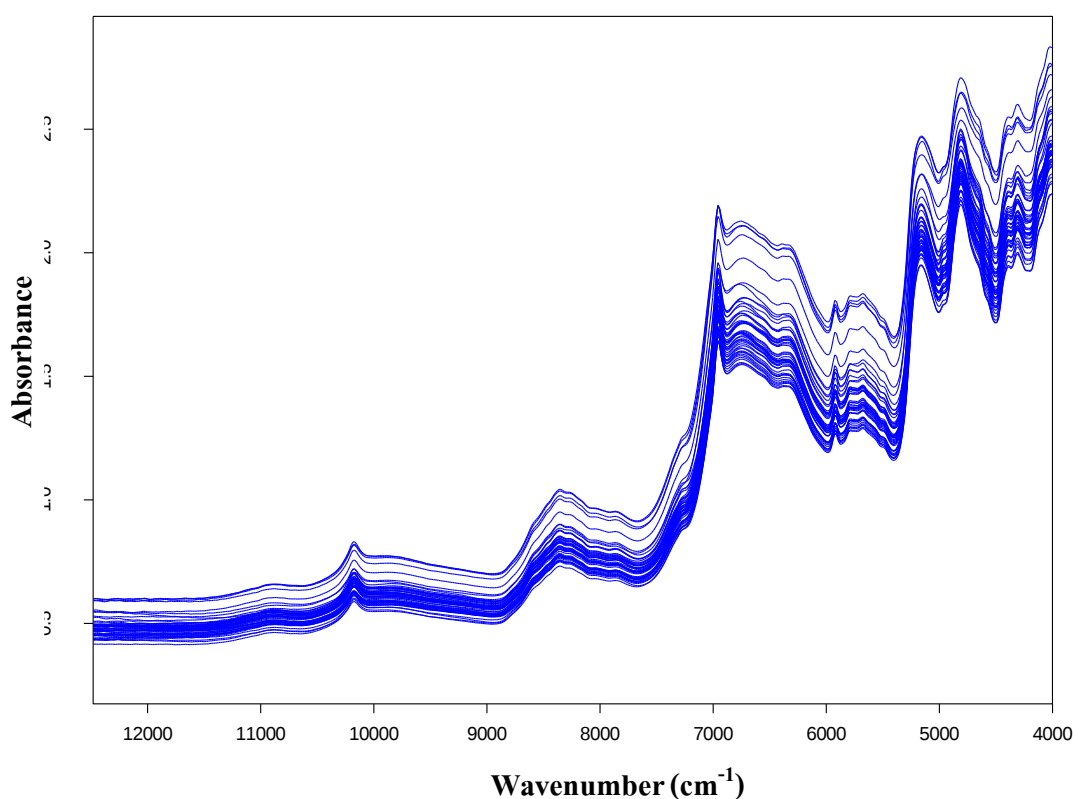


ภาพที่ 4.46 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างปริมาณความชื้นที่วิเคราะห์ได้จริงกับปริมาณความชื้นที่ทำนายได้ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว โดย ○ เป็นตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ และ ● เป็นตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบสมการ

4.1.4 การศึกษาการใช้เทคนิค NIR ในการตรวจสอบการปลอมปนของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

4.1.4.1 ค่าการดูดกลืนแสง NIR ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

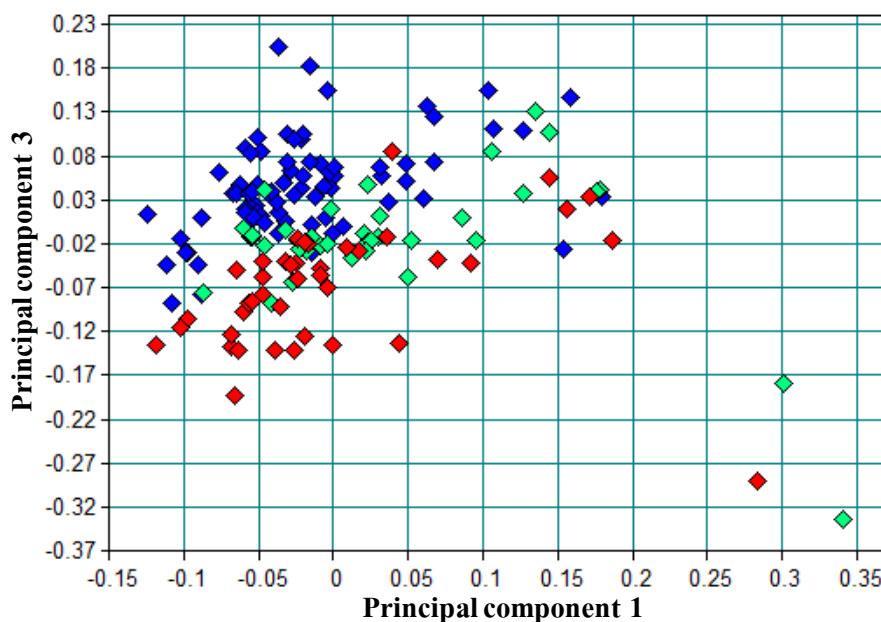
ข้อมูลสเปกตรัมการดูดกลืนแสง NIR ที่ช่วงคลื่น 12480-4000 cm^{-1} ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวแท้จำนวน 82 ตัวอย่าง และน้ำตาลเคี้ยวที่มีการปลอมปนด้วยน้ำตาลทรายในปริมาณ 25% และ 50% (ของปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมด) จำนวน 35 ตัวอย่าง และ 41 ตัวอย่าง ตามลำดับ ด้วยการวัดในระบบสะท้อนแสง (reflectance) แสดงดังภาพที่ 4.47 ซึ่งพบว่า ข้อมูลสเปกตรัม NIR ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวแท้และน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวที่มีการปลอมปนมีลักษณะใกล้เคียงกัน โดยมีการดูดกลืนแสงที่เห็นได้ชัดที่ตำแหน่ง 10167 cm^{-1} , 8346 cm^{-1} , 6958 cm^{-1} , 5153 cm^{-1} และ 4798 cm^{-1} ซึ่งมีความเกี่ยวข้องกับพันธะ O-H, C-H และ C-O เช่นเดียวกับสเปกตรัมของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวในภาพที่ 4.32



ภาพที่ 4.47 สเปกตรัมการดูดกลืนแสงของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวแท้และน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวที่มีการปลอมปนด้วยน้ำตาลทราย

4.1.4.2 แบบจำลองการปลอมปนของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

เมื่อสร้างแบบจำลองการปลอมปนของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวด้วยเทคนิค PCA กับข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D กับ SNV ที่ช่วงคลื่น $12480\text{--}4000\text{ cm}^{-1}$ ได้ผลดังแสดงในภาพที่ 4.48 โดยข้อมูลสีน้ำเงินเป็นข้อมูลของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวแท้ ข้อมูลสีเขียวเป็นข้อมูลของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวที่มีการปลอมปน 25% และข้อมูลสีแดงเป็นข้อมูลของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวที่มีการปลอมปน 50% จากกราฟที่แสดงโดยแกน PC1 และ PC3 นั้นพบว่า การใช้เทคนิค PCA ยังไม่สามารถแยกความแตกต่างระหว่างน้ำตาลมะพร้าวทั้ง 2 กลุ่มออกจากกันได้



ภาพที่ 4.48 กราฟคะแนนของตัวแปร PC1 และ PC3 ของตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวแท้ (◆) และน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวที่มีการปลอมปนด้วยน้ำตาลทราย 25% (◆) และ 50% (◆)

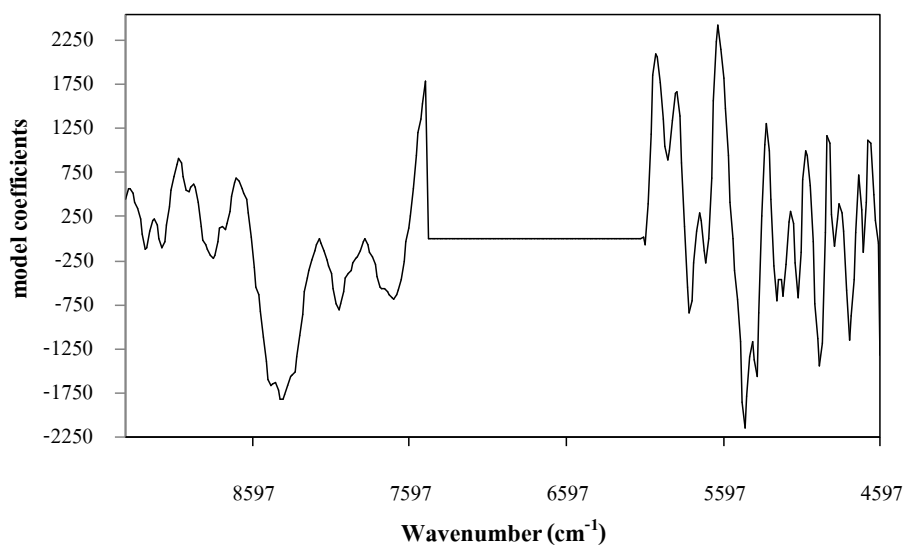
สำหรับค่าทางสถิติของแบบจำลองทำนายปริมาณการปลอมปนของน้ำตาลเคี้ยวที่สร้างด้วยเทคนิค PLS กับข้อมูลสเปกตรัมเดิม และข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิคต่างๆ ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวจำนวน 158 ตัวอย่าง แสดงดังตารางที่ 4.24 ข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D กับ SNV ให้แบบจำลองที่มีประสิทธิภาพมากที่สุด โดยให้ค่า R^2 , SEC, SEP และ RPD เท่ากับ 0.955, 4.95%, 5.76% และ 3.66 ตามลำดับ และเมื่อพิจารณาค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของแบบจำลองในภาพที่ 4.49 พบพีคที่ตำแหน่ง 7498 cm^{-1} , 6017 cm^{-1} , 5893 cm^{-1} และ 5613 cm^{-1} โดยตำแหน่งดังกล่าวมีความสัมพันธ์โมเลกุลน้ำตาล (Egidio และ

คณะ, 2009; Tewari และคณะ, 2008) และตำแหน่ง 5878, 5122, 4644 cm^{-1} ซึ่งตรงกับพีคของสารสกัดจากเศษไม้ที่ใช้สำหรับเติมในกระบอกเก็บน้ำตาลมะพร้าวสดที่แสดงไว้ในภาคผนวก จ ซึ่งตำแหน่งดังกล่าวเกี่ยวข้องกับสารประกอบฟีนอลิก เช่น แทนนิน (tannins) เป็นต้น (Dykes และคณะ, 2014) เพราะแทนนินเป็นองค์ประกอบหลักพบในสารสกัดไม้เคี่ยมที่ใส่ในกระบอกเก็บน้ำตาลสด (Balange และ Benjakul, 2009) การพบพีคที่เกี่ยวข้องกับน้ำตาลและแทนนินในกราฟแสดงค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของแบบจำลองอาจเนื่องมาจากในงานวิจัยนี้ได้ทำการปลอมปนโดยการแทนที่น้ำตาลมะพร้าวสดที่ใช้เป็นวัตถุดิบในการผลิตน้ำตาลเคี้ยวด้วยน้ำตาลทรายในปริมาณ 25% และ 50% (ของปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมด) จึงทำให้สัดส่วนขององค์ประกอบทางเคมีต่างๆ (เช่น กลูโคส ฟรุคโตส เกลือแร่ สารประกอบพอลิฟีนอลิก และอื่นๆ) ที่มีอยู่ในน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวที่ปลอมปนนั้นน้อยกว่าเมื่อเทียบกับน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวแท้ นอกจากนี้แล้วยังมีปัจจัยด้านอื่นอีกที่ส่งผลให้สัดส่วนปริมาณกลูโคสและฟรุคโตสในน้ำตาลเคี้ยวปลอมปนน้อยกว่าน้ำตาลเคี้ยวแท้ กล้ารงค์ (2532) ได้รายงานองค์ประกอบของน้ำตาลมะพร้าวสดไว้ว่ามีปริมาณน้ำตาลทั้งหมด 14.72% ซึ่งประกอบด้วยซูโครส 11.64% กลูโคส 0.42% และฟรุคโตส 3.84% หลังจากเคี้ยวน้ำตาลสดเป็นน้ำตาลเคี้ยวแล้วนั้นจะมีปริมาณน้ำตาลทั้งหมด 74.41% ประกอบด้วยซูโครส 66.49% กลูโคส 3.81% และฟรุคโตส 4.11% โดยในระหว่างการเคี้ยวนั้นจะเกิดการสลายตัวของซูโครสไปเป็นกลูโคสและฟรุคโตส ส่วนใหญ่เกิดจากปัจจัยด้านความเป็นกรดและความร้อน ทำให้ได้สัดส่วนของกลูโคสและฟรุคโตสเพิ่มขึ้น ในขณะที่สัดส่วนของซูโครสลดลง ซึ่งระยะเวลาที่ใช้ในการเคี้ยวน้ำตาลในงานวิจัยนี้มีความแตกต่างกัน โดยตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวแท้และน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวปลอมปน 25% และ 50% ใช้เวลาประมาณ 45-50, 35, 20 นาที ตามลำดับ กล่าวคือน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวแท้ได้รับความร้อนในระหว่างกระบวนการเคี้ยวเป็นเวลานานกว่าน้ำตาลเคี้ยวที่มีการปลอมปน ซึ่งระยะเวลาที่ได้รับความร้อนแตกต่างกันส่งผลให้เกิดการสลายตัวของน้ำตาลซูโครสที่ต่างกัน เมื่อเคี้ยวน้ำตาลนานขึ้นก็จะทำให้เกิดการสลายตัวของน้ำตาลซูโครสเพิ่มขึ้น (Andrew และคณะ 2002) นอกจากนี้เวลาที่ใช้ในการให้ความร้อนต่างกันจะส่งผลต่อการสลายตัวของซูโครสแล้วยังส่งผลต่อปฏิกิริยาเมลลาร์ดและคาราเมลไลเซชันที่เกิดขึ้นในระหว่างกระบวนการเคี้ยวน้ำตาลซึ่งทำให้ได้สารประกอบที่มีสีน้ำตาล กรด และสารระเหยหลายชนิด (Apriyantono และคณะ, 2002; Purnomo, 2007) จากเหตุผลดังกล่าวจึงส่งผลให้การใช้เทคนิค NIR ร่วมกับเทคนิค PLS สามารถใช้แยกตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวแท้และน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวที่มีการปลอมปน 25% และ 50% ออกจากกัน ซึ่งเห็นได้จากกราฟที่แสดงถึงปริมาณการปลอมปนจริงของน้ำตาลทรายในน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวและค่าปริมาณการปลอมปนที่

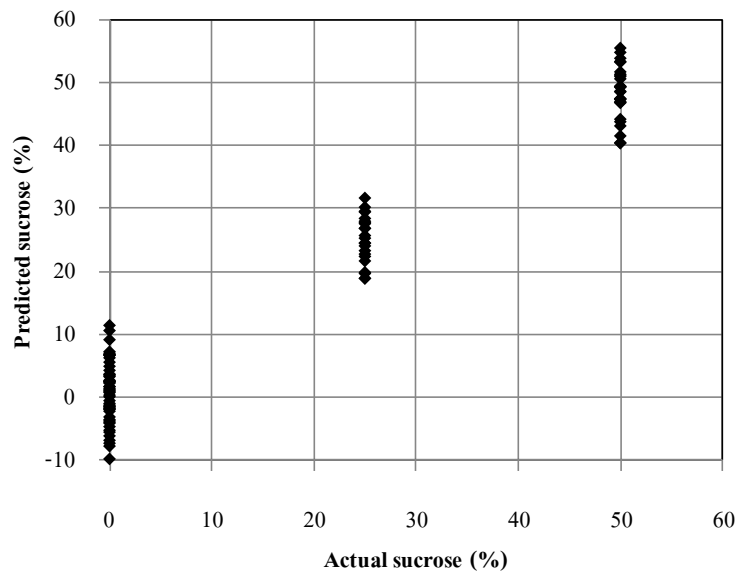
ทำนายได้จากเทคนิค NIR ของตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการและกลุ่มตรวจสอบสมการดังแสดงภาพที่ 4.50-4.51

ตารางที่ 4.24 ค่าทางสถิติของสมการทำนายปริมาณการปลอมปนน้ำตาลทรายจากข้อมูลสเปกตรัมต่างๆ ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

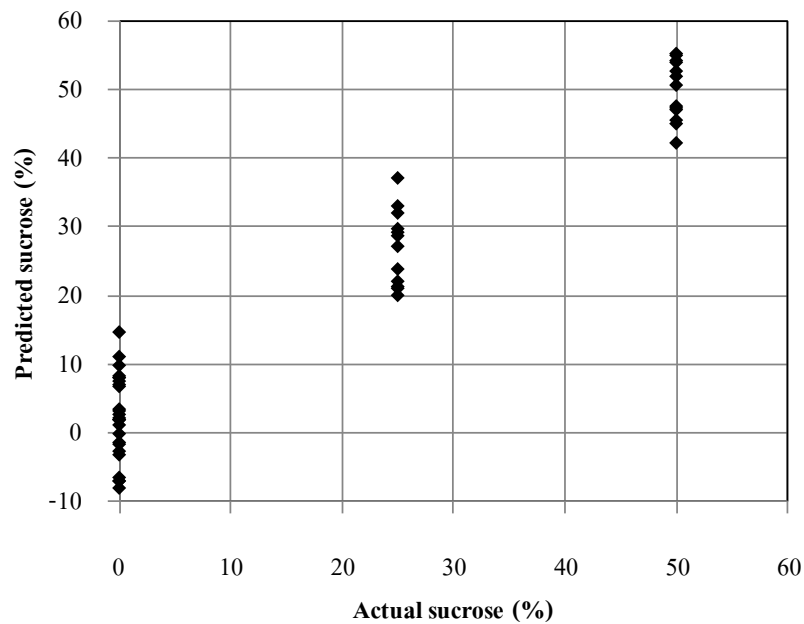
เทคนิค	ช่วงคลื่น (cm ⁻¹)	แฟคเตอร์	Calibration		Validation			
			R ²	SEC	R ²	SEP	RPD	Bias
Raw	9411.5-4242.9	15	0.957	4.78	0.913	5.92	3.56	-1.85
SNV	9411.5-4242.9	12	0.934	5.82	0.894	6.71	3.14	-1.42
MSC	9411.5-4242.9	12	0.933	5.86	0.895	6.62	3.19	-1.73
1D	9411.5-4242.9	13	0.935	5.80	0.916	5.76	3.66	-1.99
2D	9411.5-5446.3 4613.2-4242.9	12	0.897	7.27	0.844	8.10	2.60	-1.90
1D+SNV	9411.5-4242.9	18	0.955	4.95	0.921	5.76	3.66	-1.41
1D+MSC	9411.5-4597.8	15	0.945	5.41	0.909	6.13	3.44	-1.64



ภาพที่ 4.49 ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยของสมการทำนายปริมาณการปลอมปนน้ำตาลทรายในน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวที่สร้างจากข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D กับ SNV ที่ช่วงคลื่น 9411.5-4242.9 cm⁻¹



ภาพที่ 4.50 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าจริงกับค่าทำนายของปริมาณการปลอมปน น้ำตาลทรายที่ระดับ 25% และ 50% (ของปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมด) ใน น้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวของตัวอย่างกลุ่มสร้างแบบจำลอง



ภาพที่ 4.51 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าจริงกับค่าทำนายของปริมาณการปลอมปน น้ำตาลทรายที่ระดับ 25% และ 50% (ของปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมด) ใน น้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวของตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบแบบจำลอง

บทที่ 5

สรุปผลการทดลองและข้อเสนอแนะ

5.1 สรุปผลการทดลอง

การประยุกต์ใช้เทคนิค NIR ที่ช่วงคลื่น $12480-4000\text{ cm}^{-1}$ ในการตรวจสอบและทำนายค่าทางเคมีเพื่อควบคุมคุณภาพของน้ำตาลมะพร้าวสดและน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวสามารถทำได้โดยการปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมด้วยเทคนิคคณิตศาสตร์และการเลือกช่วงคลื่นที่เหมาะสมร่วมกับการสร้างสมการด้วยเทคนิค PLS จะทำให้ได้สมการทำนายค่าทางเคมีต่างๆ ที่มีประสิทธิภาพ

จากการสร้างสมการทำนายค่าทางเคมีของน้ำตาลมะพร้าวสดพบว่า สมการทำนายปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมด ปริมาณกลูโคส ฟรุคโตส ซูโครส ค่า pH ปริมาณกรดที่ไทเทรตได้ และความชื้นให้ค่า R^2 เท่ากับ 0.956, 0.925, 0.967, 0.814, 0.937, 0.893 และ 0.957 ตามลำดับ ค่า SEP เท่ากับ 1.1°Brix , 0.17%, 0.21%, 2.12%, 0.33, $1.94 \times 10^{-2}\%$ และ 1.75% ตามลำดับ โดยค่า SEP มีค่าไม่เกินค่า unexplained error confidence limits (UECLs) และค่าจริงที่วิเคราะห์ได้กับค่าทางเคมีที่ได้จากสมการทำนายต่างๆ มีค่าไม่แตกต่างกันอย่างมีนัยสำคัญ ($p>0.05$)

การใช้เทคนิค PCA เพื่อแยกน้ำตาลมะพร้าวสดแท้และน้ำตาลมะพร้าวสดปลอมปนด้วยน้ำเชื่อม นั้นพบว่า ยังไม่สามารถแยกความแตกต่างระหว่างน้ำตาลมะพร้าวทั้ง 2 กลุ่มออกจากกันได้ และการใช้เทคนิค PLS เพื่อทำนายปริมาณการปลอมปนน้ำเชื่อมในระดับ 0, 10, 25, 50, 75 และ 100 (w/w) ในน้ำตาลมะพร้าวสดนั้นสามารถทำได้เมื่อระดับการปลอมปนมากกว่า 50% ขึ้นไป

จากการสร้างสมการทำนายค่าทางเคมีของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวพบว่า สมการทำนายปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมด ปริมาณกลูโคส ฟรุคโตส ซูโครส ค่า pH ปริมาณกรดที่ไทเทรตได้ และความชื้นให้ค่า R^2 เท่ากับ 0.689, 0.773, 0.925, 0.881, 0.819, 0.826 และ 0.723 ตามลำดับ ค่า SEP เท่ากับ 0.6°Brix , 0.51%, 0.46%, 1.72%, 0.17, $4.83 \times 10^{-2}\%$ และ 0.71% ตามลำดับ สำหรับสมการทำนายปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมด ปริมาณกลูโคส ฟรุคโตส ปริมาณกรดที่ไทเทรตได้และความชื้นมีค่า SEP ไม่เกินค่า UECLs ส่วนค่าจริงที่วิเคราะห์ได้กับค่าทางเคมีที่ได้จากสมการทำนายต่างๆ มีค่าไม่แตกต่างกันอย่างมีนัยสำคัญ ($p>0.05$)

และการใช้เทคนิค PCA เพื่อแยกน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวแท้และน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวปลอมปนด้วยน้ำตาลทรายนั้นพบว่า ยังไม่สามารถแยกความแตกต่างระหว่างน้ำตาลมะพร้าวทั้ง 2 กลุ่มออกจากกันได้ ส่วนการใช้เทคนิค PLS นั้นสามารถทำนายปริมาณการปลอมปนน้ำตาลทรายที่ระดับ 25% และ 50% ในน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวได้

5.2 ข้อเสนอแนะ

การประยุกต์ใช้เทคนิค NIR ในการวิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมีของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว ควรเตรียมตัวอย่างให้มีช่วงค่าทางเคมีที่กว้าง เพื่อประสิทธิภาพของสมการดีขึ้น เช่น ทำการเก็บตัวอย่างไว้ที่ความชื้นสัมพัทธ์ต่างๆ เพื่อให้น้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวมีช่วงปริมาณความชื้นที่กว้างขึ้นและทำการปรับ pH ของน้ำตาลมะพร้าวสดก่อนนำมาเคี้ยวด้วยความร้อนให้เป็นน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวเพื่อให้มีช่วงค่า pH และปริมาณกลูโคส ฟรุคโตส และซูโครสที่กว้างมากขึ้น

การประยุกต์ใช้เทคนิค NIR ในการวิเคราะห์การปลอมปนของน้ำตาลมะพร้าว โดยเฉพาะการปลอมปนน้ำเชื่อมในน้ำตาลมะพร้าวสด อาจใช้เทคนิคในการสร้างสมการอื่นๆ เช่น soft independent modeling of class analogy (SIMCA) หรือ cluster analysis (CA) เป็นต้น

เอกสารอ้างอิง

- กรกช วรณกุล. 2553. การประเมินคุณภาพผลิตภัณฑ์น้ำจิ้มไก่ด้วยเทคนิคสเปกโตรสโคปีย่านใกล้อินฟราเรด. วิทยานิพนธ์ระดับปริญญาโท สาขาวิชาพัฒนาผลิตภัณฑ์อุตสาหกรรมเกษตร มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์.
- กรมส่งเสริมการเกษตร. 2544. ตาลโตนด ผลิตภัณฑ์อาหารแปรรูปและรูปแบบโรงผลิต. กรมส่งเสริมการเกษตร. กรุงเทพฯ. 53 หน้า
- เกสร สุนทรเสรี. 2541. มะพร้าวต้นไม่แห้งชีวิต. บริษัทโรงพิมพ์ไทยวัฒนาพานิช จำกัด. กรุงเทพฯ. หน้า 8-9.
- กล้าณรงค์ ศรีรอด. 2532. เทคโนโลยีของน้ำตาล. ภาควิชาวิทยาศาสตร์การอาหาร. คณะอุตสาหกรรมเกษตร มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์. กรุงเทพฯ. 89 หน้า
- ณัฐจิรัชยา อุตสาหกรรม. 2549. ผลของปัจจัยในการผลิตและการเก็บรักษาต่อคุณสมบัติของน้ำตาลมะพร้าว. วิทยานิพนธ์ปริญญาโท สาขาวิชาเทคโนโลยีอาหาร บัณฑิตวิทยาลัย มหาวิทยาลัยศิลปากร.
- ธงชัย สุวรรณสิขณณ์ และ ปิติพร ฤทธิเรืองเดช. 2552. การสร้างระบบ NIR สำหรับการวิเคราะห์ประจำวัน. ใน เทคโนโลยีอินฟราเรดย่านใกล้ในอุตสาหกรรมเกษตร. กรุงเทพฯ. หน้า 1-33
- นฤมล วุฒยาภาธีกุล. 2527. การศึกษาระบบการตลาดและราคาน้ำตาลมะพร้าว. วิทยานิพนธ์ปริญญาโท มหาวิทยาลัยธรรมศาสตร์.
- นิธิยา รัตนานนท์. 2544. หลักการแปรรูปอาหารเบื้องต้น. สำนักพิมพ์โอเดียนสโตร์. กรุงเทพฯ.
- ประเทือง สง่างศ์. 2503. การวิเคราะห์น้ำตาลมะพร้าวสด. จุลนิพนธ์ปริญญาตรี สาขาวิชาเคมี คณะกลีกรรมและสัตวบาล มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์.
- รณฤทธิ์ ฤทธิธ. 2552. การสร้างระบบ NIR สำหรับการวิเคราะห์ประจำวัน. ใน เทคโนโลยีอินฟราเรดย่านใกล้ในอุตสาหกรรมเกษตร. กรุงเทพฯ. หน้า 1-16
- เรณูภา แจ่มฟ้า. 2545. การผลิตไซรัปจากน้ำตาลสด. วิทยานิพนธ์ปริญญาโท สาขาวิชาอุตสาหกรรมเกษตร มหาวิทยาลัยนเรศวร.
- ลลิต ทศนาพลพินิจ. 2513. น้ำตาลมะพร้าว. วารสารน้ำตาล 5(6): 42-46.
- วรรณณา ศรีรอด. 2536. รายงานเรื่องน้ำตาลปี๊ป. มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์. กรุงเทพฯ. 115 หน้า.

- วิญญู บุญยงค์. 2535. คนป่าดตาล ความหวานบนความสูง. บริษัทต้นอ้อ จำกัด. กรุงเทพฯ หน้า 70-74.
- เวณิกา เบ็ญจพงษ์ และประภา คงปัญญา. 2547. น้ำตาลมะพร้าว. หมอชาวบ้าน. 50(297): 49-51.
- ศิริพร สิริสุทธิรัตน์. 2519. การศึกษากระบวนการเคี่ยวน้ำตาลมะพร้าว. วิทยานิพนธ์ปริญญาโท มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์.
- หลวงสมานกิจ. 2485. น้ำตาลโตนดหรือน้ำตาลเพชร. วนสาร. 6(24): 303.
- อนุพันธ์ เทอดวงศ์วรกุล. 2552. การปรับแต่งสเปกตรัมก่อนการวิเคราะห์. ใน เทคโนโลยีอินฟราเรดย่านใกล้ในอุตสาหกรรมเกษตร. กรุงเทพฯ. หน้า 1-23.
- Andrews, L.S., Godshall, M.A. and Moore, S. 2002. Sucrose degradation under model processing condition. Journal of Food Science. 67(5): 1621-1624.
- Apriyantono, A., Aristyani, A., Nurhayati, Lidya, Y., Budiyo, S. and Soekarto, S.T. 2002. Rate of browning reaction during preparation of coconut and palm sugar. International Congress Series. 1245: 275-278.
- Borse, B.B., Mohan Rao, L.J., Ramalakshmi, K. and Raghavan, B. 2007. Chemical composition of volatiles from coconut sap (*neera*) and effect of processing. Food Chemistry. 101: 877-880.
- Büning-Pfaue, H. 2003. Analysis of water in food by near infrared spectroscopy. Journal of Food Chemistry. 82: 107-115.
- Bureau, S., Ruiz, D., Reich, M., Gouble, B., Bertrand, D., Audergon, J. and Renard, C.M.G.C. 2009. Rapid and non-destructive analysis of apricot fruit quality using FT-near-infrared spectroscopy. Food Chemistry. 113: 1323-1328.
- Burns, D.A. and E.W. Ciurczak, 2008. Handbook of Near Infrared Analysis. 3rd edition. CRC Press, Taylor and Francis, Boca Raton, FL.
- Cen, H. and He, Y. 2007. Theory and application of near infrared reflectance spectroscopy in determination of food quality. Journal of Food Science and Technology. 18(2): 72-83.

- Chanthachum, S. and Beuchat, L.R. 1997. Inhibitory effect of kiam (*Cotyledonium lanceolatum* Craih.) wood extract on gram-positive food-borne pathogens and spoilage micro-organisms. *Food Microbiology*. 14: 603-608.
- Chen, L., Xue, X., Ye, Z., Zhou, J., Chen, F. and Zhao, J. 2011. Determination of Chinese honey adulterated with high fructose corn syrup by near infrared spectroscopy. *Food Chemistry*. 128: 1110-1114.
- Choung, M. 2010. Determination of sucrose content in soybean using near-infrared reflectance spectroscopy. *Journal of the Korean Society for Applied Biological Chemistry*. 53(4): 478-484.
- Cozzolino, D., Cynkar, W.U., Shah, N. and Smith, P. 2011. Multivariate data analysis applied to spectroscopy: Potential application to juice and fruit quality. *Food Research International*. 44: 1888-1896.
- Dykes, L., Hoffmann, L., Portillo-Rodriguez, O., Rooney, W. and Rooney, W. 2014. Prediction of total phenols, condensed tannins, and 3-deoxyanthocyanidins in sorghum grain using near-infrared (NIR)spectroscopy. *Journal of Cereal Science*. 1-5.
- Downey, G. 1998. Food and food ingredient authentication by mid-infrared spectroscopy and chemometrics. *Trends in Analytical Chemistry*. 17(7): 418-424.
- Egidio, V., Sinelli, Ni., Limbo, S., Torri, L., Framzetti, L. and Casiraghi, E. 2009. Evaluation of shelf-life of fresh-cut pineapple using FT-NIR and FT-IN spectroscopy. *Postharvest Biology and Technology*. 54: 87-92.
- Gayo, J. and Hale, S.A. 2007. Detection and quatification of species authenticity and adulteration in crabmeat using visible and near-infrared spectroscopy. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. 55: 585-592.
- Hargin, K. D. 1996. Authenticity issues in meat and meat products. *Meat Science*. 43: 227-289.

- Iñón, F.A., Llario, R., Garrigues, S. and Guardia, M. 2005. Development of a PLS based method for determination of the quality of beers by use of NIR: Spectral ranges and sample-introduction considerations. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*. 382(7): 1549-1561.
- Iwuoha, C.I. and Eke, O.S. 1996. Nigerian indigenous foods: Their Food traditional operation-inherent problems, improvements and current status. *Food Research International*. 29: 527–540.
- Jha, S.N., Jaiswal, P., Narsaiah, K., Gupta, M., Bhardwaj, R. and Singh, A.K. 2012. Non-destructive prediction of sweetness of intact mango using near infrared spectroscopy. *Scientia Horticulturae*. 138: 171-175.
- Khansaheb, A.K. and Benjakul, S. 2009. Use of kiam wood extract as gel enhancer for mackerel (*Rastrelliger kanagurta*) surimi. *International Journal of Food Science and Technology*. 44: 1661-1669.
- Lanza, E. and Li, B.W. 1984. Application for near infrared spectroscopy for predicting the sugar content of fruit juices. *Journal of Food Science*. 49: 995-998.
- Lees, M. 1994. 2nd European symposium on food authenticityIsotope analysis and other advanced analytical techniques. *Trends in Food Science and Technology*. 51: 200-203.
- León, L., Kelly, J.D. and Downey, G. 2005. Detection of apple juice adulteration using near-infrared transfectance spectroscopy. *Journal of Applied Spectroscopy*. 59(5): 593-599.
- Li, J., Huang, W., Zhao, C. and Zhang, B. 2013. A comparative study for the quantitative determination of soluble solids content, pH and firmness of pears by Vis/NIR spectroscopy. *Journal of Food Engineering*. 116: 324-332.
- Liu, Y., Ying, Y., Yu, H. and Fu, X. 2006. Comparison of the HPLC method and FT-NIR analysis for quantification of glucose, fructose and sucrose in intact apple fruits. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. 54: 2810-2815.

- Liu, F., He, Y., Wang, L. and Sun, G. 2011. Detection of organic acids and pH of fruit vinegars using near-infrared spectroscopy and multivariate calibration. *Journal of Food Bioprocess Technology*. 4: 1331-1340.
- Mireei, S.A., Mohtasebi, S.S., Massudi, R., Rafiee, S., Arabanian, S. and Berardinelli. 2010. Non-destructive measurement of moisture and soluble solids content of Mazafati date fruit by NIR spectroscopy. *Australian Journal of Crop Science*. 4(3): 175-179.
- Mishra, S., Kamboj, U., Kaur, H. and Kapur, P. 2010. Detection of jaggery syrup in honey using near-infrared spectroscopy. *International Journal of Food Sciences and Nutrition* 61(3): 306-315.
- Osborne, B.G., Fearn, T. and Hindel, P.H. 1993. *Practical NIR Spectroscopy with Applications in Food and Beverage Analysis*. 2nd. Longman Scientific and Technical. UK.
- Ozaki, Y., McClure, W.F. and Christy, A. 2007. *Near-infrared Spectroscopy in Food Science and Technology*. John Wiley & Sons, Inc. New Jersey.
- Purnomo, J. 1992. Sugar components of coconut sugar in Indonesia. *ASEAN Food Journal*. 7: 200-201.
- Purnomo, H. 2007. Volatile components of coconut fresh sap, sap syrup and coconut sugar. *ASEAN Food Journal*. 14(1): 45-49
- Rambla, F.T., Garrigues, S. and Guardia, M. 1997. PLS-NIR determination of total sugar, glucose, fructose and sucrose in aqueous solutions of fruit juices. *Analytica Chimica Acta*. 344: 41-53.
- Rodriguez-Saona, L.E., Fry, F., McLaughlin, M.A. and Calvey, E.M. 2001. Rapid analysis of sugars in fruit juices by FT-NIR spectroscopy. *Carbohydrate Research*. 336(1): 63-74.
- Schmilovitch, Z., Mizrach, A., Hoffman, A., Egozi, H. and Fuchs, Y. 2000. Determination of mango physiological indices by near-infrared spectrometry. *Postharvest Biology and Technology*. 19: 245-252.

- Shao, Y., He, Y. and Mao, J. 2007. Quantitative analysis of bayberry juice acidity based on visible and near-infrared spectroscopy. *Applied Optics*. 46: 6391-6396.
- Sinelli, N., Spinardi, A., Egidio, V., Mignani, I. and Casiraghi, E. 2008. Evaluation of quality and nutraceutical content of blueberries (*Vaccinium corymbosum* L.) by near and mid-infrared spectroscopy. *Postharvest Biology and Technology*. 50: 31-36.
- Sinija, V.R. and Mishra, H.N. 2011. FTNIR spectroscopic method for determination of moisture content in green tea granules. *Journal of Food Bioprocess Technology*. 4: 136-141.
- Sorol, N., Arancibia, C., Biotolato, S.A. and Olivieri, A.C. 2010. Visible/near infrared partial least-squares analysis of Brix in sugar cane juice: A test field for variable selection methods. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*. 102(2): 100-109.
- Swierenga, H., De Weijer, A.P., Van Wijk, R.J. and Buydens, L.M.C. 1999. Strategy for construction robust multivariate calibration models. *Chemometrics and Intelligent Laboratory System*. 49: 1-17.
- Thampan, P.K. 1975. *The Coconut Palm and Its Products*. Green Villa Publishing. India.
- Tewari, J.C., Dixit, V., Cho, B. and Malik, K.A. 2008. Determination of origin and sugars of citrus fruits using genetic algorithm, correspondence analysis and partial least square combined with fiber optic NIR spectroscopy. *Spectrochimica Acta Part A*. 71(3): 1119-1127.
- Williams, P. 2007. *Near-Infrared Technology: Getting the Best Out of Light*. PDK Projects, Inc. Canada.
- Xie, L., Ye, X., Liu, D. and Ying, Y. 2009. Quantification of glucose, fructose and sucrose in bayberry juice by NIR and PLS. *Food Chemistry*. 114(3): 1135-1140.
- Xie, L.J. and Ying, Y.B. 2009. Use of near-infrared spectroscopy and least-squares support vector machine to determine quality change of tomato juice. *Journal of Zhejiang University*. 10 (6): 465-471.

- Xie, L., Ye, X., Liu, D. and Ying, Y. 2011. Prediction of titratable acidity, malic acid, and citric acid in bayberry fruit by near-infrared spectroscopy. *Food Research International*. 44(7): 2198-2204.
- Zhu, D., Ma, A., Lu, A., Zhao, L., Tu, Z., Wang, C., and Pan, L. 2010. The detection of soluble solid contents and conductivity of apple juice by homemade near infrared spectrometer. *Journal of Sensor Letters*. 8(1): 158-162.

ภาคผนวก ก

การวิเคราะห์ทางเคมี

1. การวิเคราะห์หาปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมด (total soluble solid, TSS)

1.1 กรณีตัวอย่างเป็นน้ำตาลมะพร้าวสด วัดปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมดของน้ำตาลมะพร้าวสดด้วย digital refractometer

1.2 กรณีตัวอย่างเป็นน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว วัดปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมดของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว โดยชั่งน้ำหนักน้ำตาลเคี้ยว 30 กรัม ใส่ลงบีกเกอร์ เติมน้ำกลั่นปริมาณ 30 กรัม เพื่อให้ได้สารละลายน้ำตาลที่มีความเข้มข้นของตัวอย่าง 50% โดยน้ำหนักเปียก หลังจากนั้นนำมาวัดด้วย digital refractometer แล้วนำค่าที่วัดได้คูณด้วย 2 เพื่อเป็นค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมดของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

2. การวิเคราะห์หาค่า pH

2.1 กรณีตัวอย่างเป็นน้ำตาลมะพร้าวสด วัดค่า pH ตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวสด โดยน้ำตาลมะพร้าวสดใส่ลงในบีกเกอร์ขนาด 50 มิลลิลิตร แล้วนำมาวัด pH ด้วยเครื่อง pH meter

2.2 กรณีตัวอย่างเป็นน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว วัดค่า pH ตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว โดยใช้สารละลายน้ำตาลเคี้ยวที่ได้จากขั้นตอน 1.2 มาวัดค่า pH ด้วยเครื่อง pH meter

3. การวิเคราะห์หาปริมาณกรดที่ไทเทรตได้ (titratable acidity, TA) (ณัฐจิรัชยา, 2549)

3.1 ชั่งตัวอย่างน้ำตาลให้ทราบน้ำหนักแน่นอนประมาณ 10 กรัม ใส่ลงใน erlenmeyer flask ขนาด 250 ml

3.2 เติมน้ำกลั่น 100 มิลลิลิตร และหยดสารละลายฟีนอล์ฟธาเลิน (phenolphthalein) 1% ซึ่งเป็นอินดิเคเตอร์ลงไป 3 หยด

3.3 ไทเทรตกับสารละลายมาตรฐานโซเดียมไฮดรอกไซด์ ซึ่งได้เทียบมาตรฐานกับโพแทสเซียมไฮโดรเจนฟทาเลต (potassium hydrogen phthalate) แล้วไทเทรตจนกระทั่งถึงจุดยุติสีชมพู

3.4 คำนวณปริมาณกรดทั้งหมดในรูปกรดอะซีติกตามสูตร

$$\text{ร้อยละ กรดทั้งหมด} = \frac{\text{ความเข้มข้น (โมลาร์) NaOH} \times \text{ปริมาตร NaOH} \times 60^* \times 100}{1000 \times \text{กรัมของตัวอย่าง}}$$

เมื่อ 60* คือ น้ำหนักสมมูลของกรดอะซีติก

การเทียบความเข้มข้นของสารละลายมาตรฐานโซเดียมไฮดรอกไซด์

1. อบโพแทสเซียมไฮโดรเจนฟาทาเลตที่อุณหภูมิ 120 องศาเซลเซียส เป็นเวลา 2 ชั่วโมง แล้วนำมาเก็บในโถดูดความชื้นและปล่อยให้เย็นลงถึงอุณหภูมิห้อง
2. บรรจุน้ำกลั่นลงไปในขวดที่ติดฉลากหาความเข้มข้นลงในบิวเรต และจัดเตรียมอุปกรณ์สำหรับการไตเตรตให้พร้อม (บิวเรตที่ใช้บรรจุน้ำกลั่นโซเดียมไฮดรอกไซด์ ควรใช้ชนิดปิดด้วยเทฟลอน)
3. ชั่งโพแทสเซียมไฮโดรเจนฟาทาเลตประมาณ 0.7 กรัม ใส่ลงใน erlenmeyer flask ขนาด 250 ml
4. เติมน้ำกลั่นลงไปประมาณ 70 มิลลิลิตร เขย่า flask เพื่อให้โพแทสเซียมไฮโดรเจนฟาทาเลตละลายหมด
5. หยด 1% ฟีนอล์ฟธาเลินซึ่งเป็นอินดิเคเตอร์ลงไปในสารละลาย 3 หยด
6. ไตเตรตสารละลายโพแทสเซียมไฮโดรเจนฟาทาเลตด้วยสารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์จนกระทั่งเห็นสารละลายเป็นสีชมพู
7. บันทึกปริมาตรของสารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์ที่ใช้
8. ทำการไตเตรต blank โดยใช้โพแทสเซียมฟาทาเลตประมาณ 0.83-0.85 กรัม ละลายในน้ำกลั่น 100 ml และฟีนอล์ฟธาเลิน 3 หยด เพื่อหาปริมาตรของสารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์ซึ่งทำปฏิกิริยากับสารอื่นที่ไม่ใช่โพแทสเซียมไฮโดรเจนฟาทาเลตแล้วนำไปลบออกจากปริมาตรในข้อ 7 เพื่อหาความเข้มข้นของสารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์ (โมลาร์)

$$\frac{\text{น้ำหนัก KHP (กรัม)}}{\text{น้ำหนักโมเลกุลของ KHP (กรัม/โมล)}} \times \frac{1}{\text{ปริมาตร NaOH ที่ใช้ (มิลลิลิตร)}} \times \frac{100 \text{ มิลลิลิตร}}{1 \text{ ลิตร}}$$

4. การวิเคราะห์หาปริมาณความชื้น (moisture content) (AOAC, 1995)

ชั่งน้ำหนักตัวอย่างให้ทราบน้ำหนักแน่นอนประมาณ 2-5 กรัม ด้วยเครื่องชั่งทศนิยม 4 ตำแหน่ง ใส่ลงในถ้วยอลูมิเนียมที่มีฝาปิดและได้ผ่านการอบแห้งมาแล้ว นำไปอบในตู้อบสุญญากาศอุณหภูมิ 70 องศาเซลเซียส ที่ความดัน 50 mmHg โดยตัวอย่างน้ำตาลสดใช้เวลาอบ 8 ชั่วโมง ส่วนตัวอย่างน้ำตาลเคี้ยวใช้เวลาอบ 3 วัน ปล่อยให้เย็นในโถดูดความชื้น (desicator) แล้วชั่งน้ำหนักที่หายไป

$$\% \text{ ความชื้น} = \frac{\text{น้ำหนักตัวอย่างก่อนอบ} - \text{น้ำหนักตัวอย่างหลังอบ}}{\text{น้ำหนักตัวอย่างก่อนอบ}} \times 100$$

5. การวิเคราะห์หาปริมาณน้ำตาลกลูโคส ฟรุคโตส และซูโครส

5.1 การเตรียมตัวอย่าง

การเตรียมตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวสด ทำโดยการเจือจางน้ำตาลมะพร้าวสดด้วยน้ำกลั่น หลังจากนั้นจึงกรองผ่านเยื่อกรองขนาด 0.45 ไมครอน (Nylon syringe filter, Vertical) ส่วนการเตรียมตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว ทำโดยชั่งน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว 1 กรัม ละลายด้วยน้ำกลั่น และปรับปริมาตรเป็น 100 มิลลิลิตร ในขวดปรับปริมาตร หลังจากนั้นจึงกรองผ่านเยื่อกรองขนาด 0.45 ไมครอน (Nylon syringe filter, Vertical)

5.2 ขั้นตอนการวิเคราะห์

นำสารละลายในข้อ 5.1 ปริมาตร 20 ไมโครลิตร มาวิเคราะห์ปริมาณน้ำตาลกลูโคส ฟรุคโตส และซูโครส ด้วยเครื่อง HPLC (Shimazu, RID-10A, Japan) โดยตั้งสภาวะในการวิเคราะห์ดังนี้

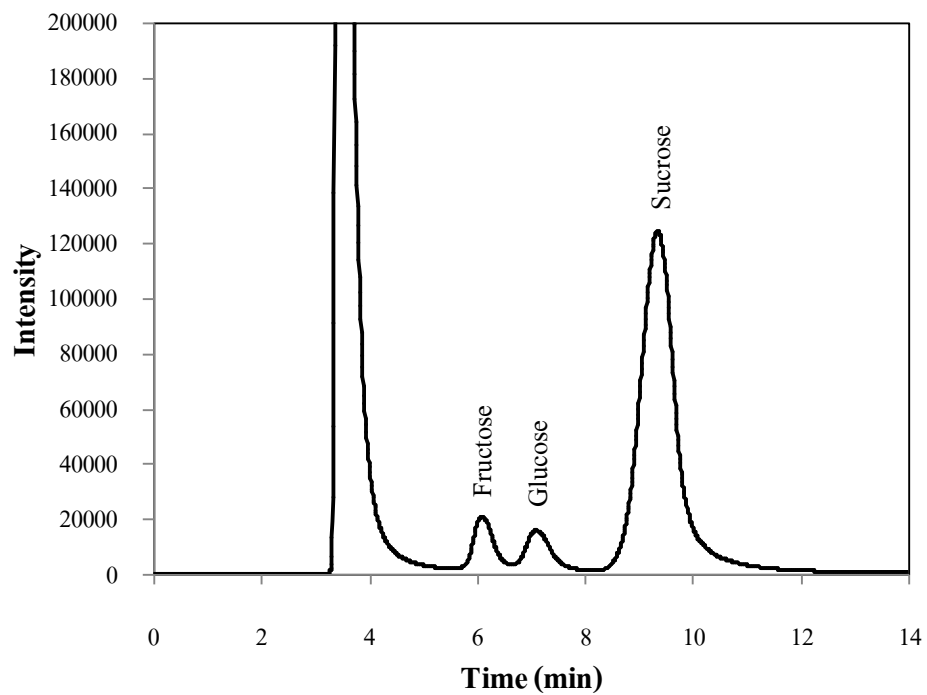
คอลัมน์ : Luna NH₂ ขนาด 250 mm × 4.6 mm (Phenomenex, 00G-4378-E0, USA)

อุณหภูมิคอลัมน์ : 40°C

Mobile phase : Acetonitrile : water (80:20) ผ่านการ degas ด้วย ultrasonic cleaning bath Flow rate : 1 ml/min

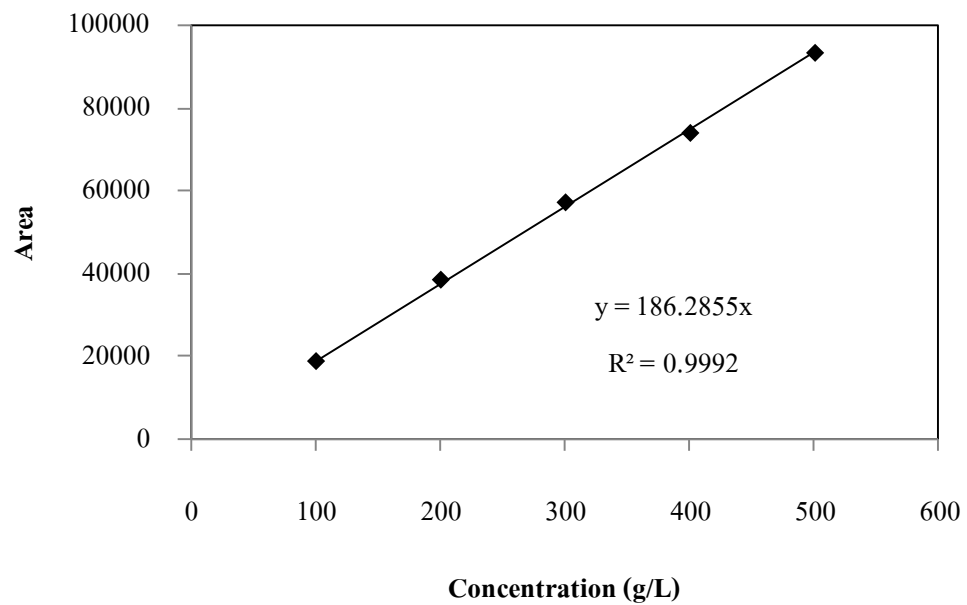
Detector : Refractive Index

โครมาโตแกรมของน้ำตาลกลูโคส ฟรุคโตส และซูโครสมาตรฐาน แสดงดังภาพที่ 52

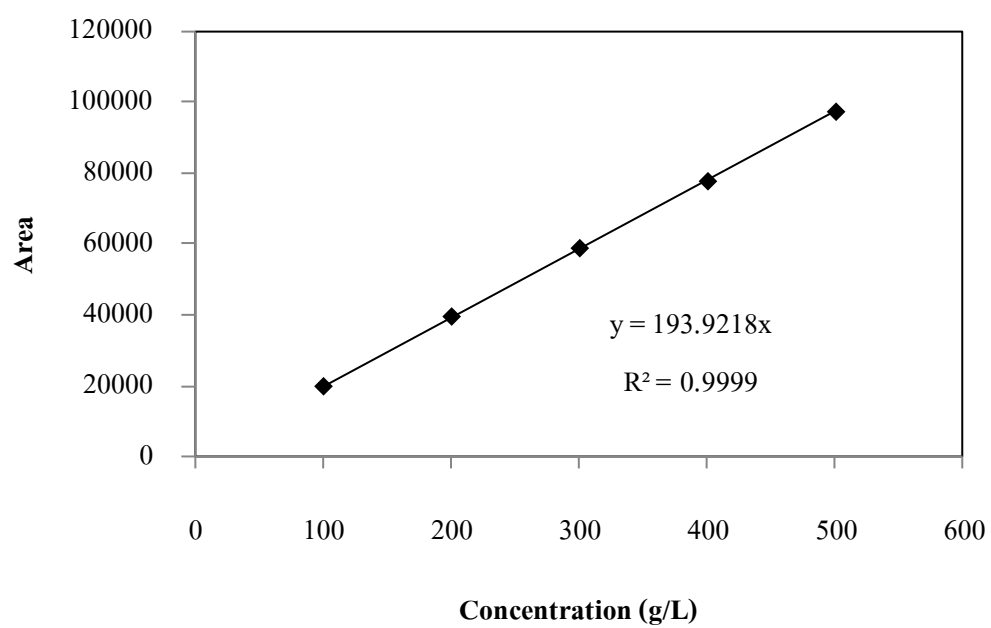


ภาพที่ 52 โครมาโตแกรมของกลูโคส ฟรุคโตส และซูโครสมาตรฐาน

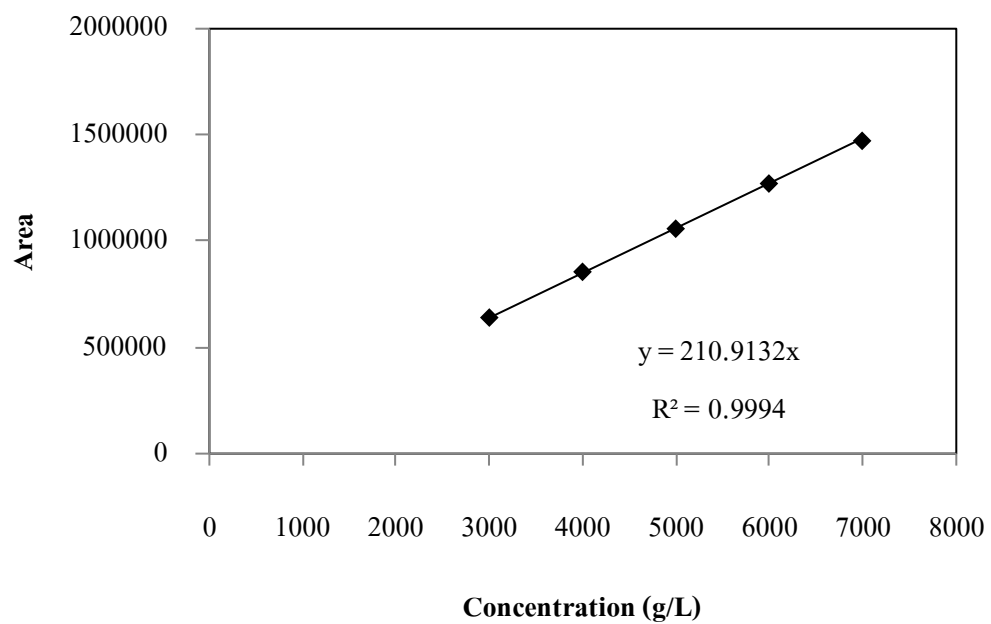
คำนวณปริมาณน้ำตาลกลูโคส ฟรุคโตส และซูโครส โดยเทียบกับกราฟมาตรฐานของสารละลายน้ำตาลแต่ละชนิดดังภาพที่ 53-55



ภาพที่ 52 กราฟมาตรฐานสำหรับคำนวณค่าปริมาณกลูโคส



ภาพที่ 53 กราฟมาตรฐานสำหรับคำนวณค่าปริมาณฟลูออไรด์



ภาพที่ 54 กราฟมาตรฐานสำหรับคำนวณค่าปริมาณไคโตรส

ภาคผนวก ข
การเตรียมตัวอย่างสำหรับการปลอมปน

1. ตัวอย่างการปลอมปนน้ำตาลมะพร้าวสด

ยกตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวสดที่วัดปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมด (total soluble solid, TSS) ได้เท่ากับ 15.0°Brix และถ้าหากต้องการปริมาณตัวอย่างที่ใช้ทั้งหมด 10 กรัม ต้องเตรียมน้ำเชื่อมสำหรับนำมาปลอมปนน้ำตาลสดดังนี้

(1) การเตรียมน้ำเชื่อม 15.0°Brix (TSS ของน้ำเชื่อมต้องเท่ากับ TSS ของน้ำตาลสดที่ใช้)

solid น้ำตาลทราย 100 กรัม ได้มาจากน้ำตาลทราย 100 กรัม

ถ้า solid น้ำตาลทราย 15.0 กรัม ได้มาจากน้ำตาลทราย $\frac{100 \times 15.0}{100}$ กรัม = 15.0 กรัม

ดังนั้นถ้าต้องการน้ำเชื่อมสำหรับการปลอมปน 15°Brix จะต้องใช้น้ำตาลทราย 15 กรัม และน้ำ 85 กรัม มาผสมกัน

(2) การนำน้ำเชื่อมที่เตรียมได้ในข้อ (1) มาปลอมปนน้ำตาลสดที่ระดับปริมาณการปลอมปนแตกต่างกัน โดยปริมาณน้ำเชื่อมที่เติมในน้ำตาลสดที่ระดับต่างๆ และปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมดของน้ำตาลมะพร้าวสดที่ใช้แสดงดังตารางที่ 25-26

ตารางที่ 25 ปริมาณการปลอมปนของน้ำตาลมะพร้าวสด

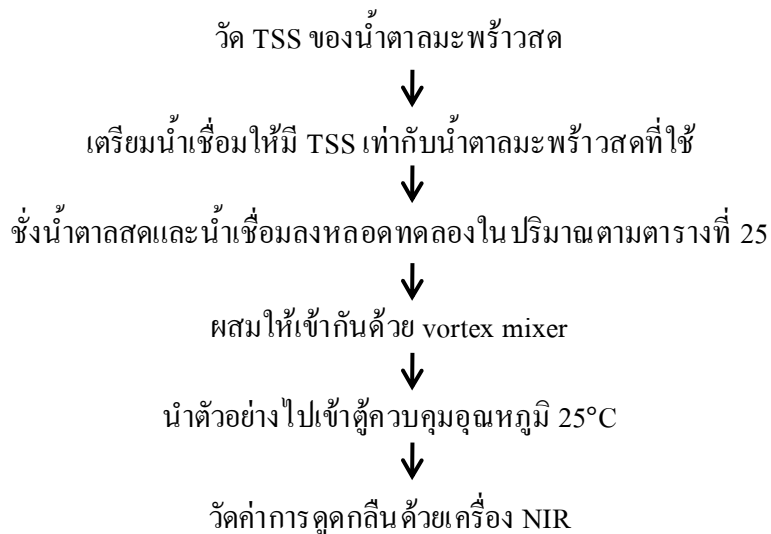
ปริมาณการปลอมปน (w/w)	จำนวนตัวอย่าง	น้ำตาลมะพร้าวสด (g)	น้ำเชื่อม* (g)
0%	64	10	0
10%	20	9	1
25%	20	7.5	2.5
50%	20	5	5
75%	20	2.5	7.5
100%	20	0	10

* น้ำเชื่อมที่นำมาใช้ปลอมปนต้องมีค่า TSS เท่ากับน้ำตาลมะพร้าวสดที่ถูกปลอมปน

ตารางที่ 26 ปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมดของตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวสดที่มีการปลอมปน
ด้วยน้ำเชื่อม

ตัวอย่าง	ระดับการปลอมปน	TSS (°Brix)
1	10%, 25%, 50%, 75%, 100%	14.0
2	10%, 25%, 50%, 75%, 100%	17.2
3	10%, 25%, 50%, 75%, 100%	18.3
4	10%, 25%, 50%, 75%, 100%	18.4
5	10%, 25%, 50%, 75%, 100%	17.2
6	10%, 25%, 50%, 75%, 100%	17.9
7	10%, 25%, 50%, 75%, 100%	15.0
8	10%, 25%, 50%, 75%, 100%	16.9
9	10%, 25%, 50%, 75%, 100%	17.1
10	10%, 25%, 50%, 75%, 100%	17.3
11	10%, 25%, 50%, 75%, 100%	16.2
12	10%, 25%, 50%, 75%, 100%	16.5
13	10%, 25%, 50%, 75%, 100%	16.5
14	10%, 25%, 50%, 75%, 100%	14.4
15	10%, 25%, 50%, 75%, 100%	16.9
16	10%, 25%, 50%, 75%, 100%	15.5
17	10%, 25%, 50%, 75%, 100%	16.9
18	10%, 25%, 50%, 75%, 100%	17.4
19	10%, 25%, 50%, 75%, 100%	18.3
20	10%, 25%, 50%, 75%, 100%	14.1

2. ขั้นตอนการเตรียมตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวสดที่ปลอมปนด้วยน้ำเชื่อม



3. ตัวอย่างการปลอมปนน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

ยกตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวสดเริ่มต้นที่วัดปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมดได้เท่ากับ 15.0°Brix และ total solid ของตัวอย่างก่อนการเคี้ยวเท่ากับ 225 กรัม

น้ำตาลสด 15.0°Brix และน้ำตาลทราย 100°Brix ผสมกันให้มี total solid เท่ากับ 225 กรัมโดยให้มีระดับปริมาณการปลอมปนน้ำตาลทราย 25% (w/w) ของ total solid ดังนั้น อัตราส่วน solid ของน้ำตาลสด : solid ของน้ำตาลทราย เท่ากับ 75 : 25 ซึ่งรวมเป็น total solid เท่ากับ 100

หากต้องการ total solid 225 กรัม จะต้องใช้ solid ของน้ำตาลสด $\frac{225 \times 75}{100} = 168.75$ กรัม

และใช้ solid ของน้ำตาลทราย $\frac{225 \times 25}{100} = 56.25$ กรัม

ดังนั้นต้องใช้น้ำตาลทรายและน้ำตาลมะพร้าวสดในการเคี้ยวเริ่มต้นดังนี้

solid น้ำตาลทราย 100 กรัม ได้มาจากน้ำตาลทราย 100 กรัม
ถ้า solid น้ำตาลทราย 56.25 กรัม ได้มาจากน้ำตาลทราย $\frac{100 \times 25}{56.25}$ กรัม = 56.25 กรัม

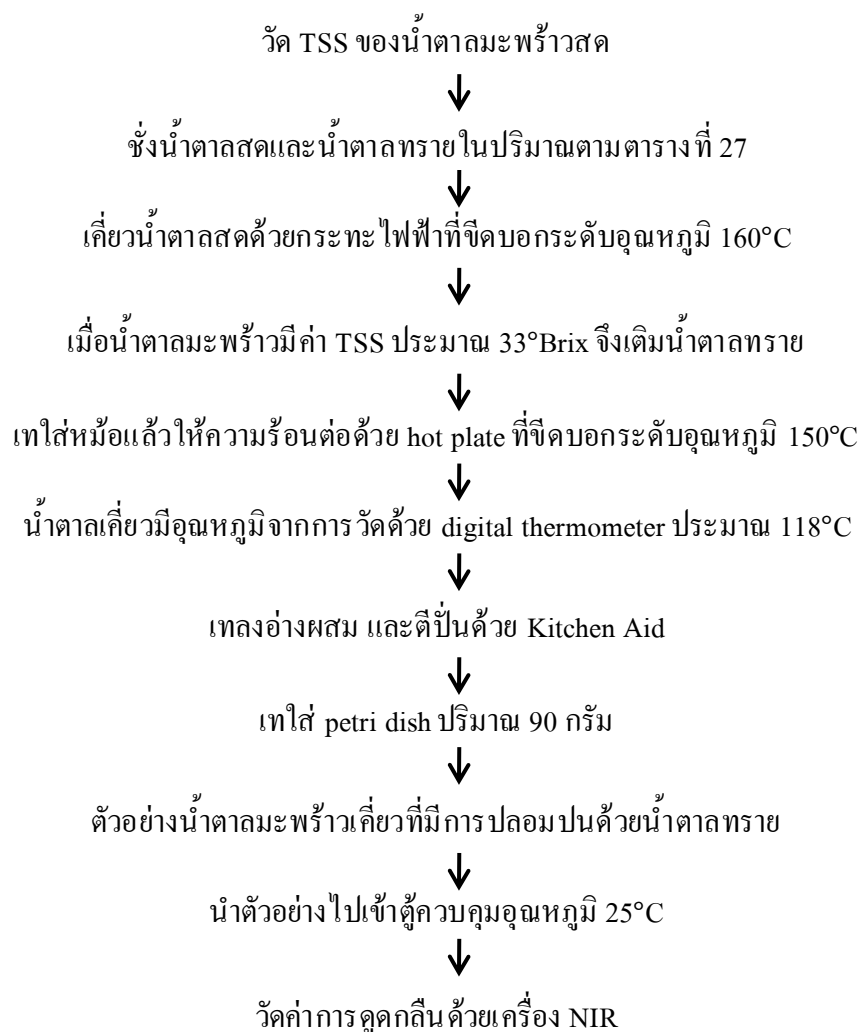
solid น้ำตาลสด 15.0 กรัม ได้มาจากน้ำตาลมะพร้าวสด 100 กรัม
 $\frac{100 \times 168.75}{15.0}$

ตัวอย่าง	ระดับการปลอมปน	TSS (°Brix)	น้ำตาลมะพร้าวสด (กรัม)	น้ำตาลทราย (กรัม)
15	25%	14.1	1196.81	56.25
16	25%	17.0	992.65	56.25
17	25%	15.6	1081.73	56.25
18	25%	16.2	1041.67	56.25
19	25%	14.6	1155.82	56.25
20	25%	16.0	1054.69	56.25
21	25%	15.0	1125.00	56.25
22	25%	15.4	1095.78	56.25
23	25%	16.1	1048.14	56.25
24	25%	17.1	986.84	56.25
25	25%	15.0	1125.00	56.25
26	25%	15.5	1088.71	56.25
27	25%	15.1	1117.55	56.25
28	25%	14.9	1132.55	56.25
29	25%	17.4	969.83	56.25
30	25%	15.3	1102.94	56.25
31	25%	16.0	1054.69	56.25
32	25%	15.2	1110.20	56.25
33	25%	13.8	1222.83	56.25
34	25%	16.7	1010.48	56.25
35	25%	15.4	1095.78	56.25
36	50%	14.6	770.55	112.50
37	50%	16.3	690.18	112.50
38	50%	15.1	745.03	112.50
39	50%	14.9	755.03	112.50
40	50%	15.6	721.54	112.50
41	50%	13.5	833.33	112.50
42	50%	14.8	760.14	112.50

ตัวอย่าง	ระดับการปลอมปน	TSS (°Brix)	น้ำตาลมะพร้าวสด (กรัม)	น้ำตาลทราย (กรัม)
43	50%	16.2	694.44	112.50
44	50%	15.6	721.15	112.50
45	50%	17.2	654.07	112.50
46	50%	15.6	721.15	112.50
47	50%	15.3	735.29	112.50
48	50%	16.5	681.82	112.50
49	50%	15.9	707.55	112.50
50	50%	16.3	690.18	112.50
51	50%	12.9	872.09	112.50
52	50%	15.8	712.03	112.50
53	50%	14.3	786.71	112.50
54	50%	15.9	692.70	112.50
55	50%	15.4	715.19	112.50
56	50%	14.9	739.19	112.50
57	50%	15.3	719.87	112.50
58	50%	15.8	712.03	112.50
59	50%	14.8	760.14	112.50
60	50%	15.4	730.52	112.50
61	50%	19.6	573.98	112.50
62	50%	14.9	755.03	112.50
63	50%	15.3	735.29	112.50
64	50%	15.0	750.00	112.50
65	50%	15.2	740.13	112.50
66	50%	14.9	755.03	112.50
67	50%	15.4	730.52	112.50
68	50%	16.6	677.71	112.50
69	50%	15.3	735.29	112.50
70	50%	14.8	760.14	112.50

ตัวอย่าง	ระดับการปลอมปน	TSS (°Brix)	น้ำตาลมะพร้าวสด (กรัม)	น้ำตาลทราย (กรัม)
71	50%	15.3	735.29	112.50
72	50%	15.7	716.56	112.50
73	50%	13.5	833.33	112.50
74	50%	15.1	745.03	112.50
75	50%	16.7	673.65	112.50
76	50%	15.2	740.13	112.50

4. ขั้นตอนการเตรียมตัวอย่างน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยวที่มีการปลอมปนด้วยน้ำตาลทราย



ภาคผนวก ค
สูตรที่ใช้ในการคำนวณค่าทางเทคนิค NIR

1. Coefficient of determination (R^2)

$$R^2 = \left[\frac{\sum (\hat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum (y_i - \bar{y})^2} \right]$$

2. Standard error of calibration (SEC)

$$SEC = \left[\frac{\sum d_i^2}{n_c - p - 1} \right]^{1/2}$$

3. Stand error of prediction (SEP)

$$SEP = \left[\frac{\sum (d_i - \text{bias})^2}{n_v - 1} \right]^{1/2}$$

4. Bias

$$\text{Bias} = \bar{d} = \frac{\sum d_i}{n_v}$$

5. Ratio of standard deviation of reference data in validation set to SEP (RPD)

$$RPD = \frac{\text{Standard deviation of reference data in validation set}}{SEP}$$

6. Standard error of the laboratory (SEL) (สำหรับการวิเคราะห์ 2 ซ้ำ)

$$SEL = \left[\frac{\sum_i (x_1 - x_2)^2}{n} \right]^{1/2}$$

7. The unexplained error confidence limits (F-test, ratio of 2 variances)

$$T_{UE} = SEC\sqrt{F_{(\alpha;v,M)}}$$

8. การตรวจสอบ bias (pair t-test)

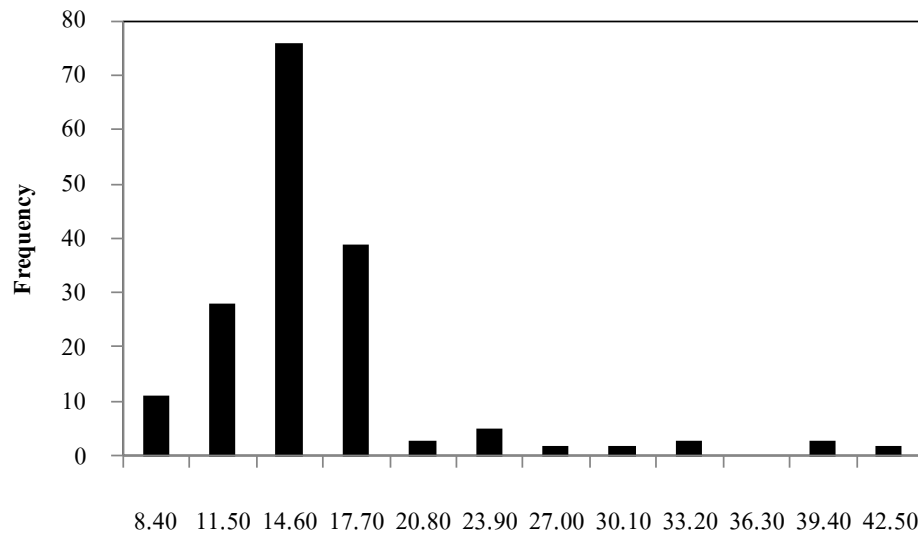
$$t = \frac{\text{bias} \times \sqrt{n_v}}{SEP}$$

โดยที่

$\hat{y}_i$	คือ	ค่าคุณลักษณะทางเคมีที่ได้จากการทำนายด้วยสมการทำนาย
y_i	คือ	ค่าคุณลักษณะทางเคมีที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธีมาตรฐาน
$\bar{y}$	คือ	ค่าเฉลี่ยคุณลักษณะทางเคมี
d_i	คือ	ค่าความแตกต่างระหว่างค่าคุณลักษณะทางเคมีที่ได้จากการทำนายด้วย
		สมการทำนายกับค่าที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยวิธีมาตรฐาน
n	คือ	จำนวนตัวอย่างทั้งหมด
n_c	คือ	จำนวนตัวอย่างในชุดข้อมูลสำหรับสร้างสมการ
n_v	คือ	จำนวนตัวอย่างในชุดข้อมูลสำหรับตรวจสอบสมการ
p	คือ	จำนวนตัวแปรที่ใช้ในสร้างสมการ
x_1-x_2	คือ	ผลต่างระหว่างค่าทางเคมีที่วิเคราะห์ซ้ำของตัวอย่าง i
T_{UE}	คือ	The unexplained error confidence limits (UECLs)
α	คือ	probability of making a type I error, 5%
v	คือ	$n_c - 1$ (degree of freedom associated with SEP)
M	คือ	$n_v - p - 1$ (degree of freedom associated with SEC)

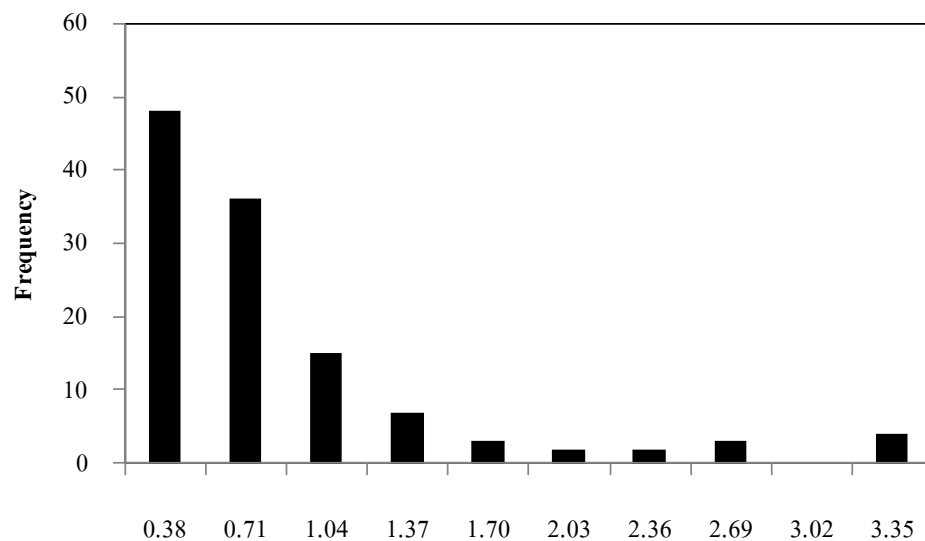
ภาคผนวก ง
ข้อมูลทางเคมี

1. การกระจายตัวของข้อมูลทางเคมีของน้ำตาลมะพร้าวสด



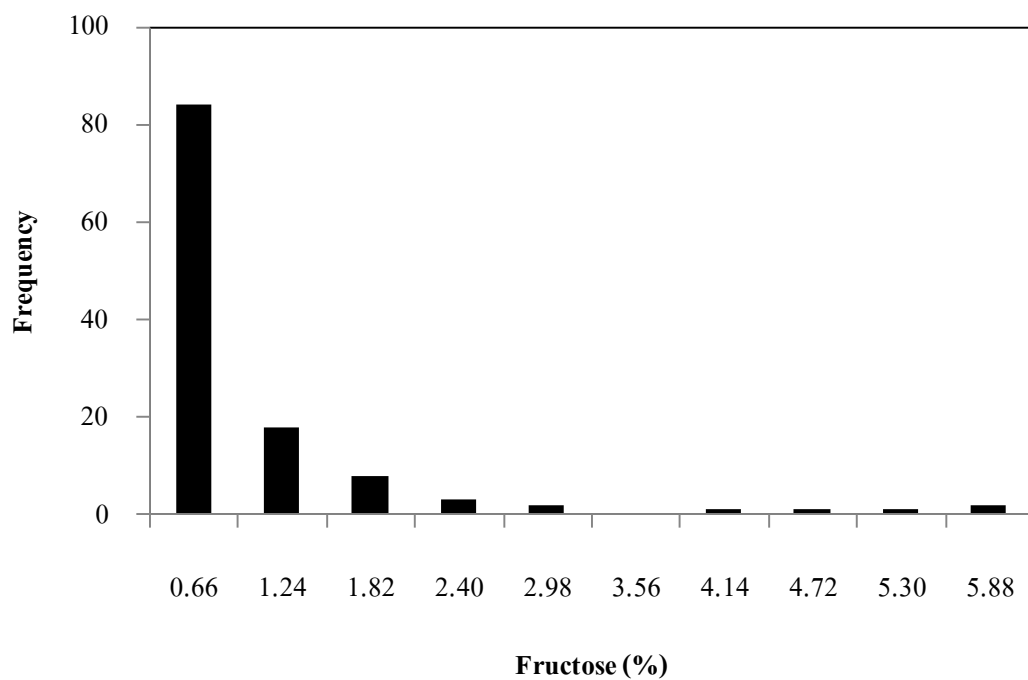
TSS (°Brix)

ภาพที่ 55 การกระจายตัวของข้อมูลปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมดที่ใช้เป็นข้อมูลในการ
สร้างสมการทำนายของน้ำตาลมะพร้าวสด

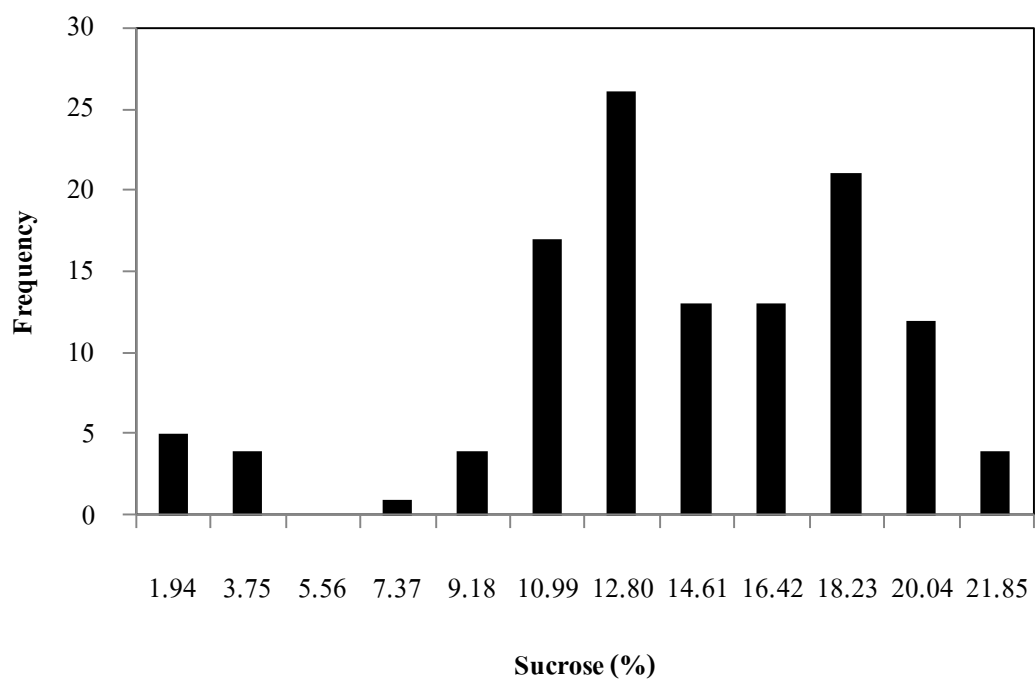


Glucose (%)

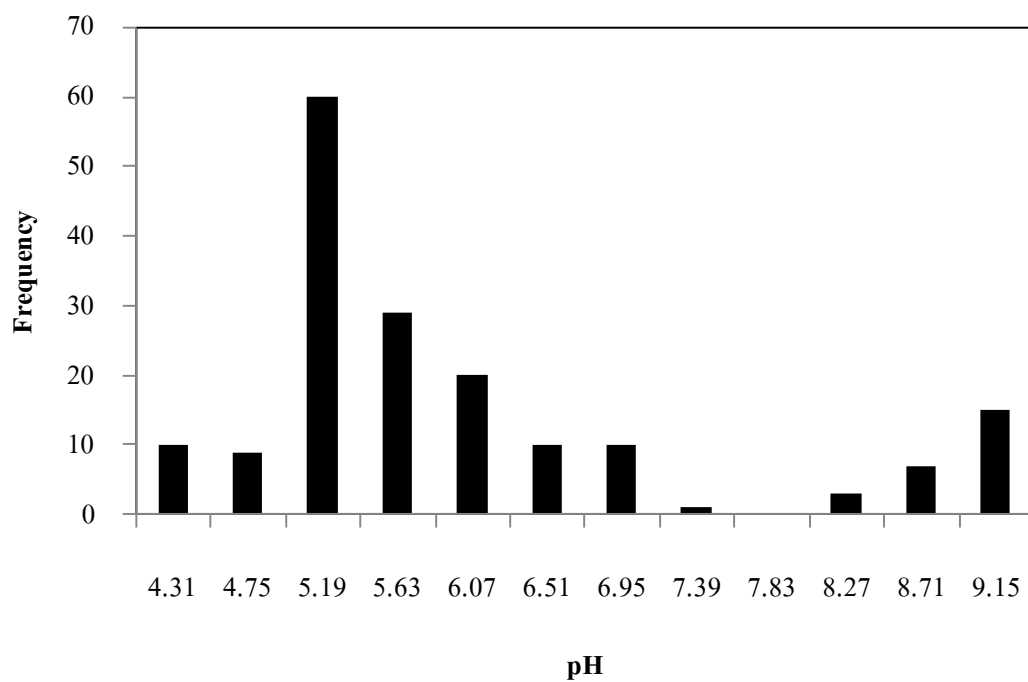
ภาพที่ 56 การกระจายตัวของข้อมูลน้ำตาลกลูโคสที่ใช้เป็นข้อมูลในการสร้างสมการทำนายของ
น้ำตาลมะพร้าวสด



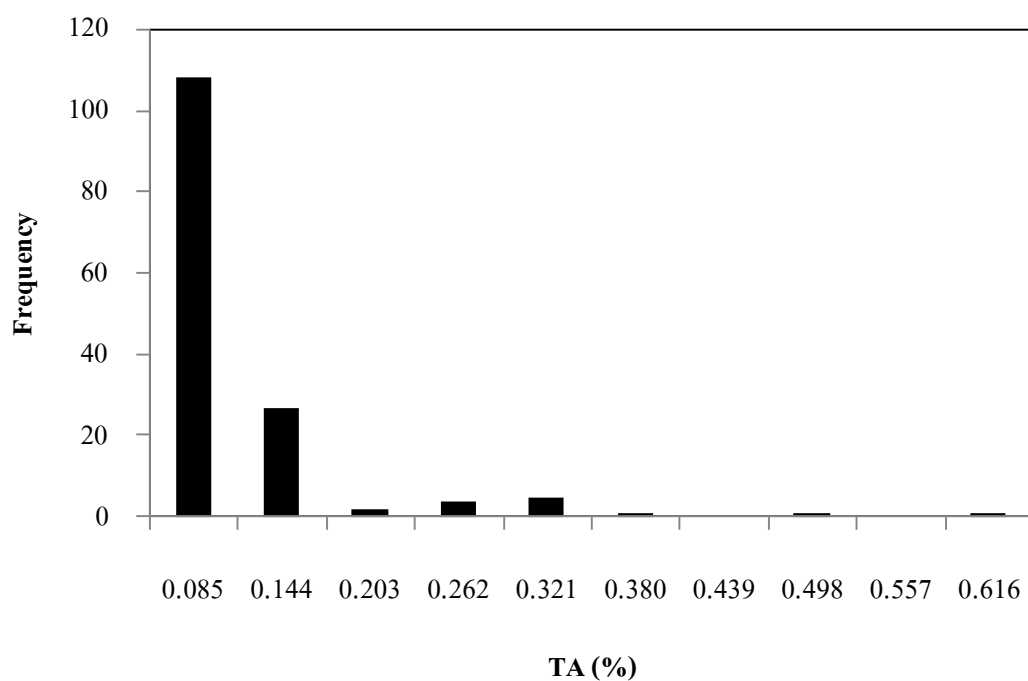
ภาพที่ 57 การกระจายตัวของข้อมูลน้ำตาลฟรุกโตสที่ใช้เป็นข้อมูลในการสร้างสมการทำนายของน้ำตาลมะพร้าวสด



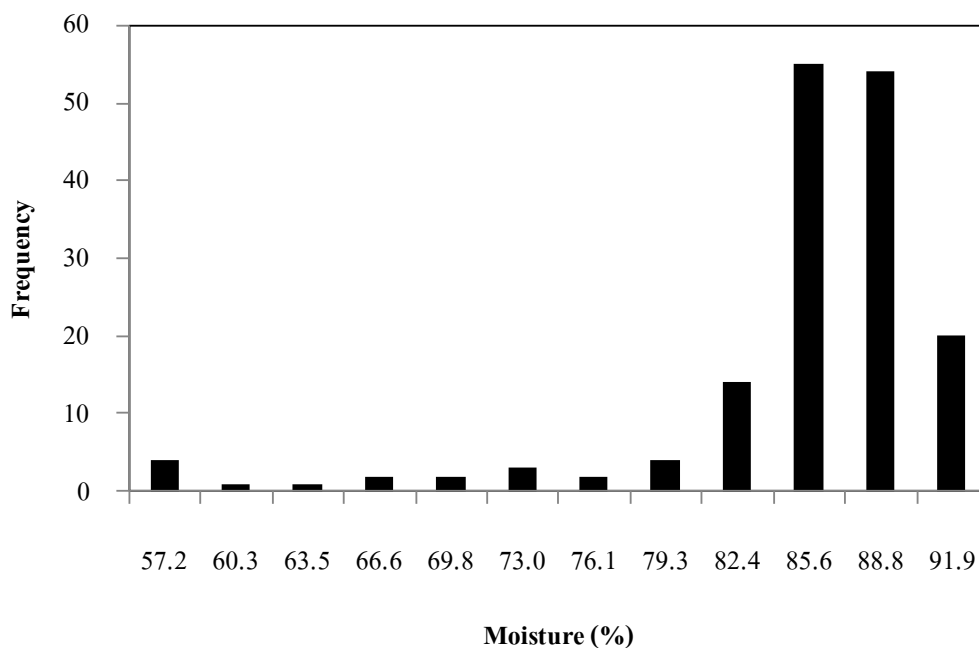
ภาพที่ 58 การกระจายตัวของข้อมูลน้ำตาลซูโครสที่ใช้เป็นข้อมูลในการสร้างสมการทำนายของน้ำตาลมะพร้าวสด



ภาพที่ 59 การกระจายตัวของข้อมูล pH ที่ใช้เป็นข้อมูลในการสร้างสมการทำนายของน้ำตาลมะพร้าวสด

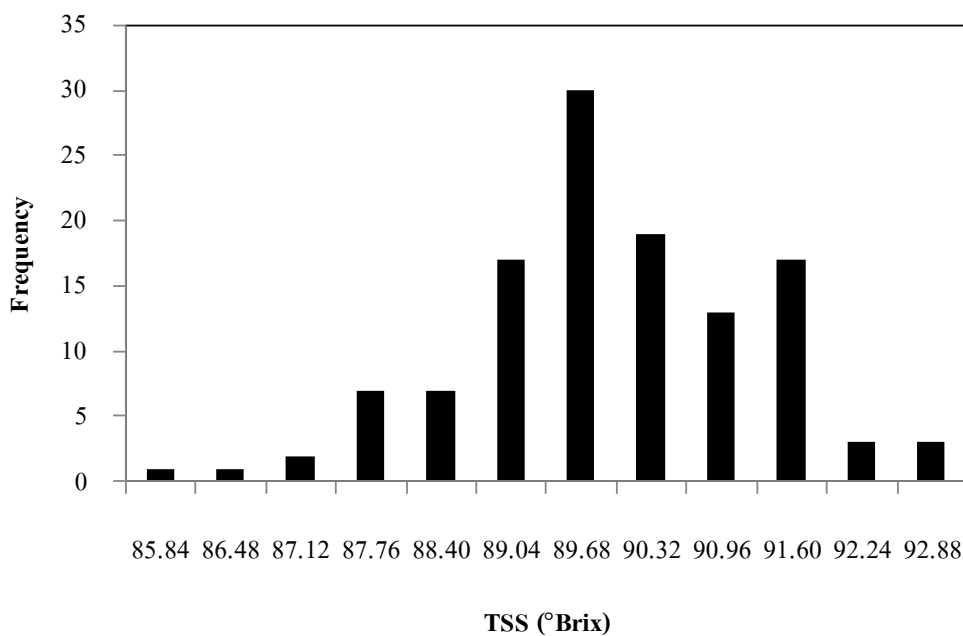


ภาพที่ 60 การกระจายตัวของข้อมูลปริมาณกรดที่ไต่เตรตได้ที่ใช้เป็นข้อมูลในการสร้างสมการทำนายของน้ำตาลมะพร้าวสด

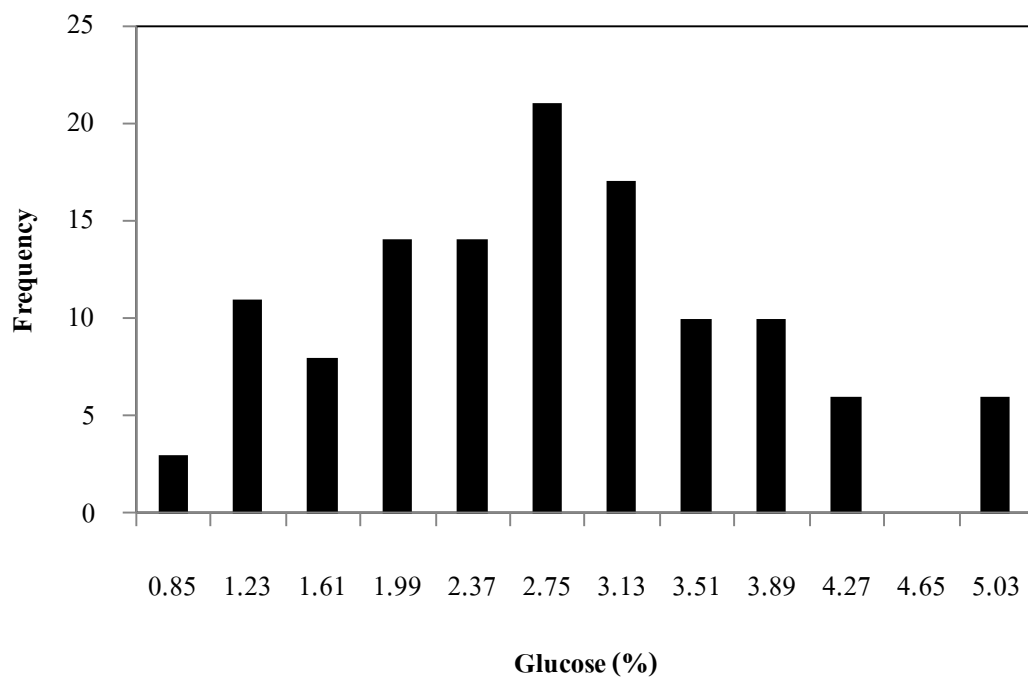


ภาพที่ 61 การกระจายตัวของข้อมูลปริมาณความชื้นที่ใช้เป็นข้อมูลในการสร้างสมการทำนายของน้ำตาลมะพร้าวสด

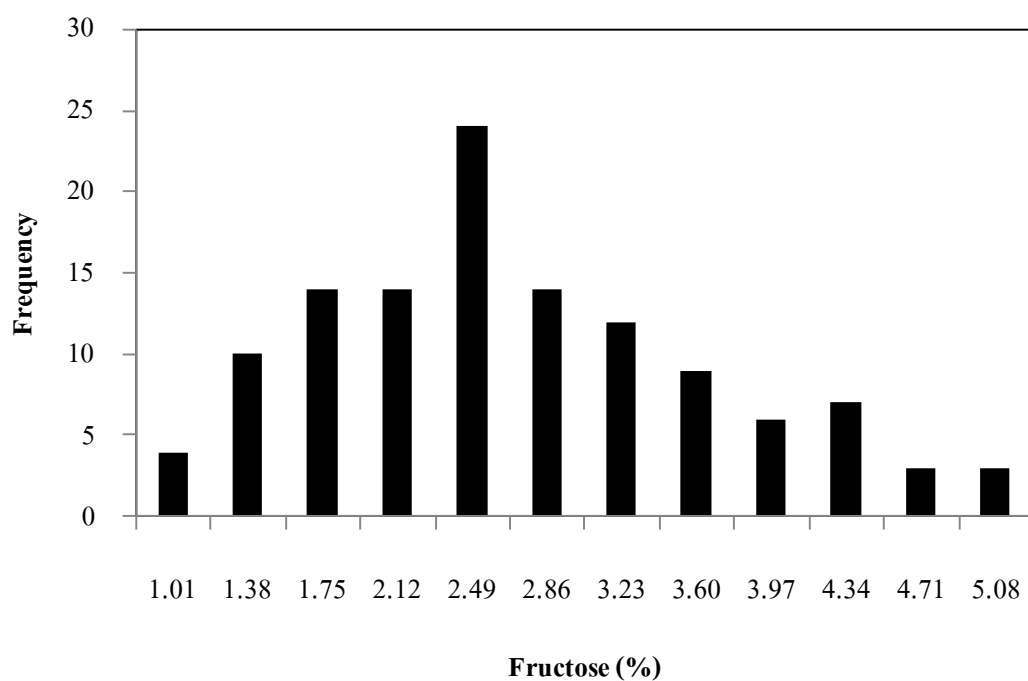
2. การกระจายตัวของข้อมูลทางเคมีของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว



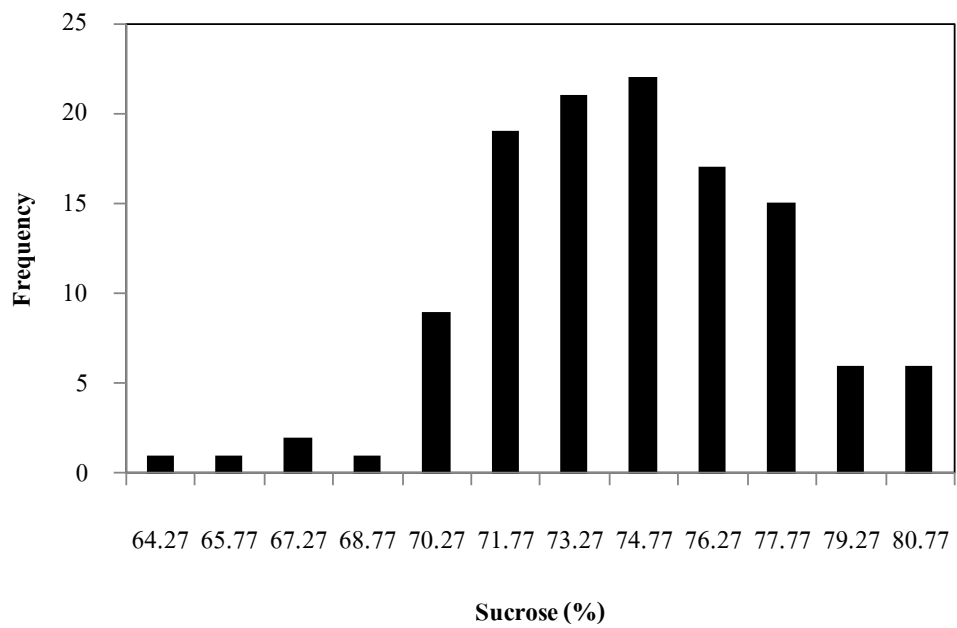
ภาพที่ 62 การกระจายตัวของข้อมูลปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมดที่ใช้เป็นข้อมูลในการสร้างสมการทำนายของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว



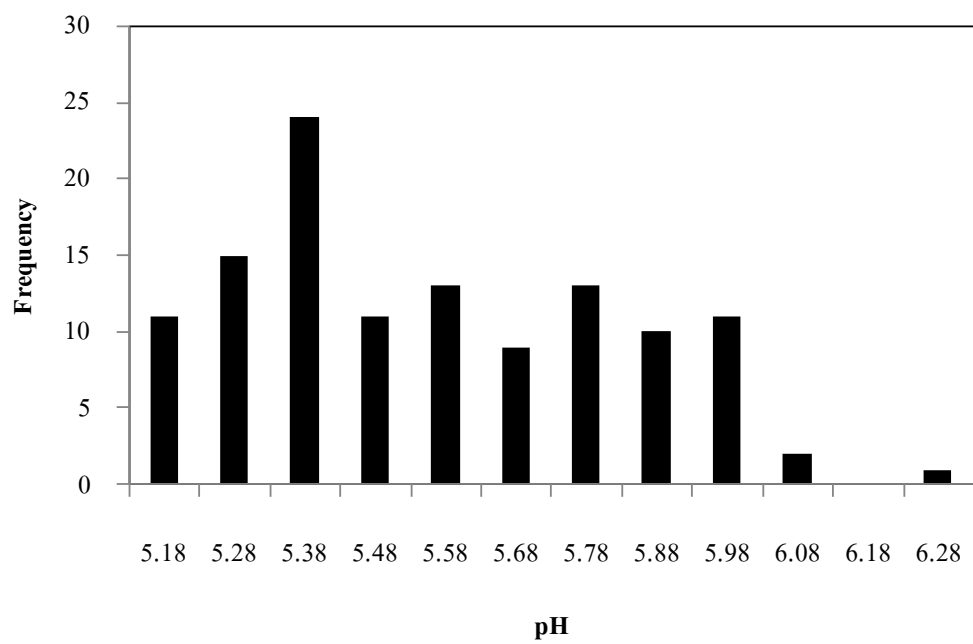
ภาพที่ 63 การกระจายตัวของข้อมูลน้ำตาลกลูโคสที่ใช้เป็นข้อมูลในการสร้างสมการทำนายของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว



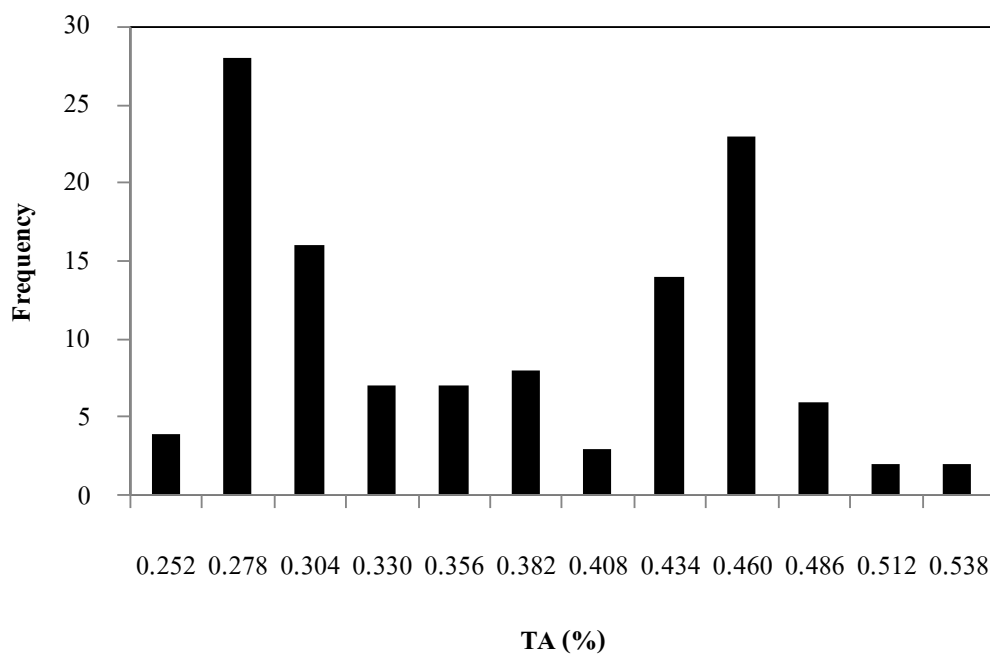
ภาพที่ 64 การกระจายตัวของข้อมูลน้ำตาลฟรุคโตสที่ใช้เป็นข้อมูลในการสร้างสมการทำนายของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว



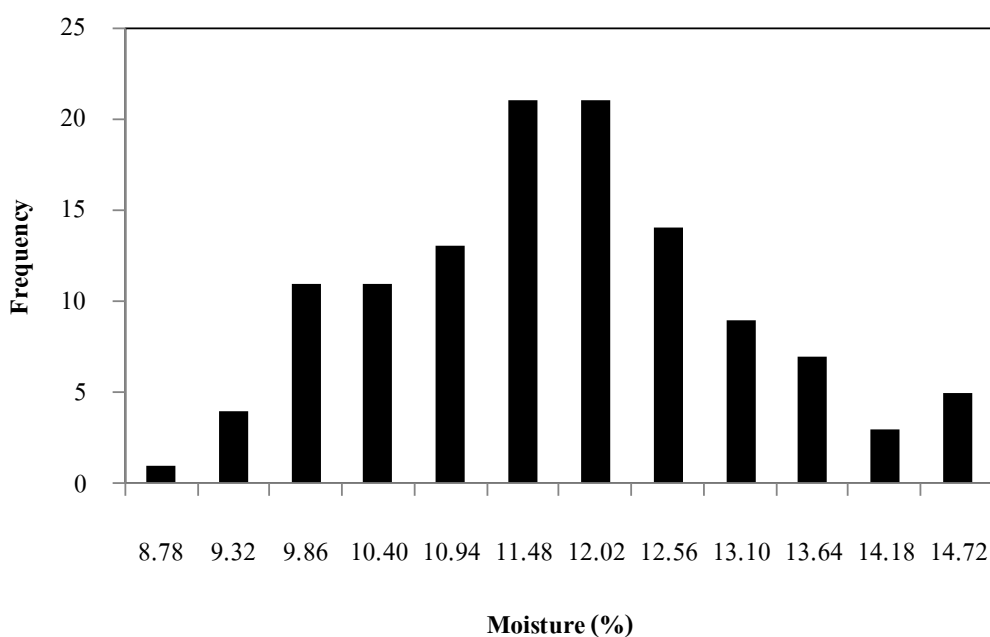
ภาพที่ 65 การกระจายตัวของข้อมูลน้ำตาลซูโครสที่ใช้เป็นข้อมูลในการสร้างสมการทำนายของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว



ภาพที่ 66 การกระจายตัวของข้อมูล pH ที่ใช้เป็นข้อมูลในการสร้างสมการทำนายของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว



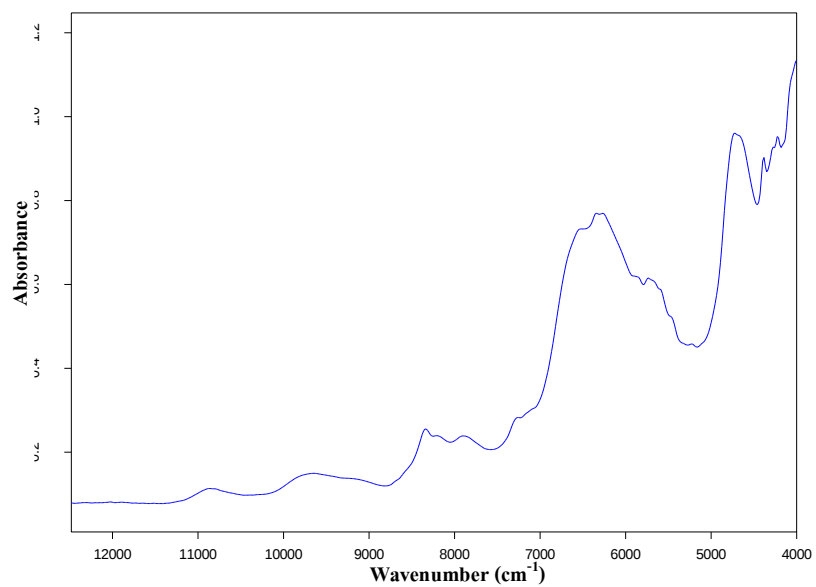
ภาพที่ 67 การกระจายตัวของข้อมูลปริมาณกรดที่ไต่เตรตได้ที่ใช้เป็นข้อมูลในการสร้างสมการทำนายของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว



ภาพที่ 68 การกระจายตัวของข้อมูลปริมาณความชื้นที่ใช้เป็นข้อมูลในการสร้างสมการทำนายของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

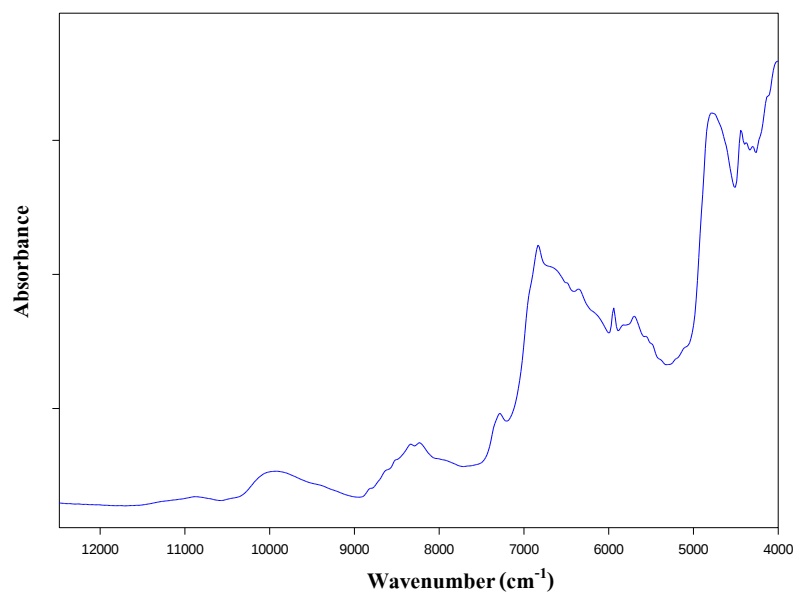
ภาคผนวก จ
ข้อมูลสเปกตรัม NIR

1. สเปกตรัมกลูโคสมาตรฐาน



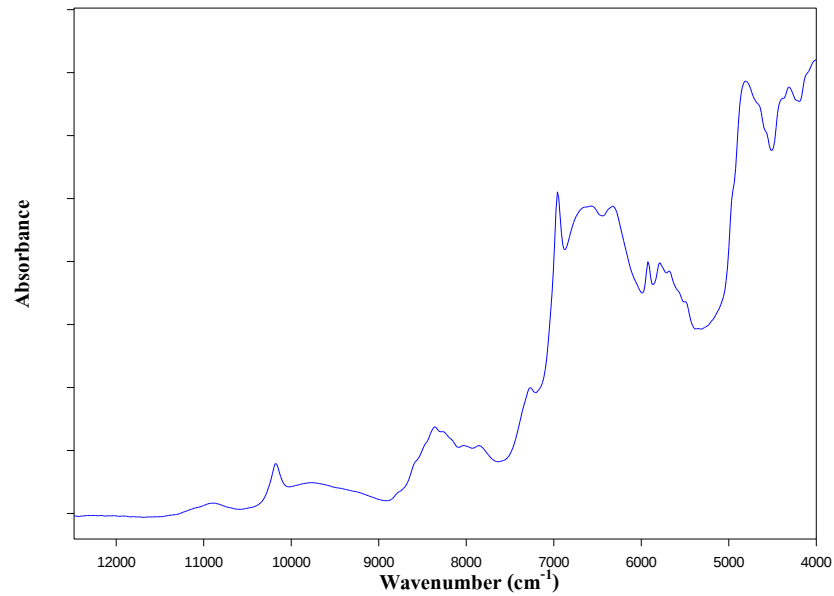
ภาพที่ 69 สเปกตรัมการดูดกลืนแสง NIR ของกลูโคสมาตรฐาน

2. สเปกตรัมฟรุกโตสมาตรฐาน



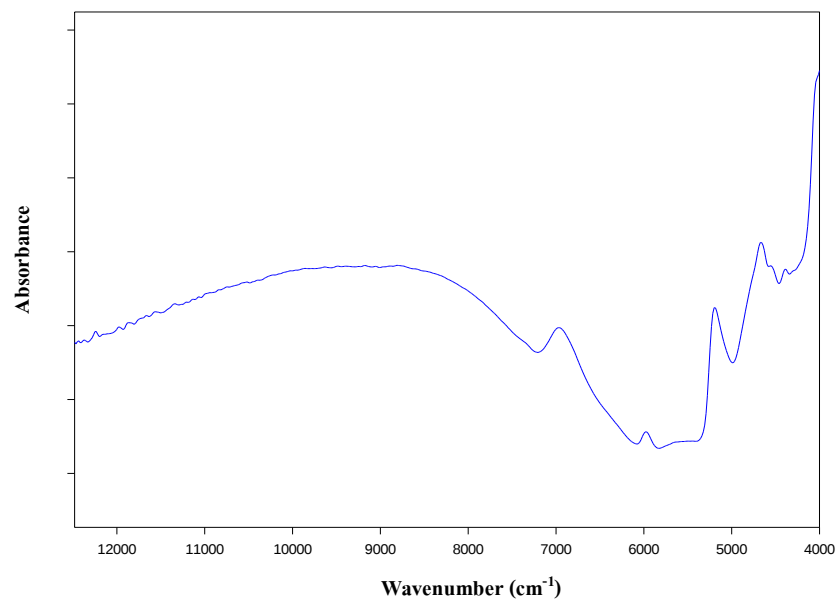
ภาพที่ 70 สเปกตรัมการดูดกลืนแสง NIR ของฟรุกโตสมาตรฐาน

3. สเปกตรัมชูโครสมมาตรฐาน



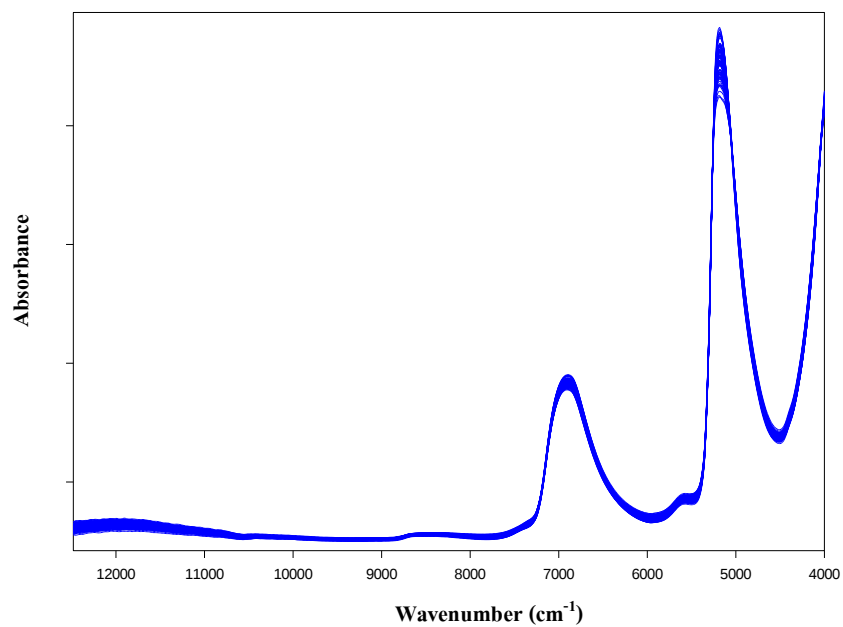
ภาพที่ 71 สเปกตรัมการดูดกลืนแสง NIR ของชูโครสมมาตรฐาน

4. สเปกตรัมของสารสกัดจากเศษไม้ที่ใช้สำหรับเติมในกระบอกเก็บน้ำตาลมะพร้าวสด

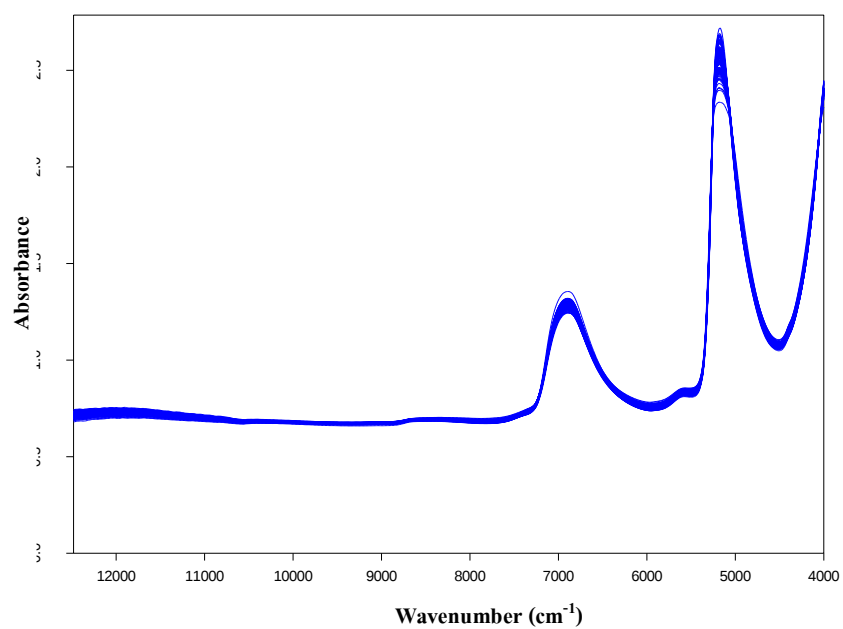


ภาพที่ 72 สเปกตรัมการดูดกลืนแสง NIR ของสารสกัดจากเศษไม้ที่ใช้สำหรับเติมในกระบอกเก็บน้ำตาลมะพร้าวสด

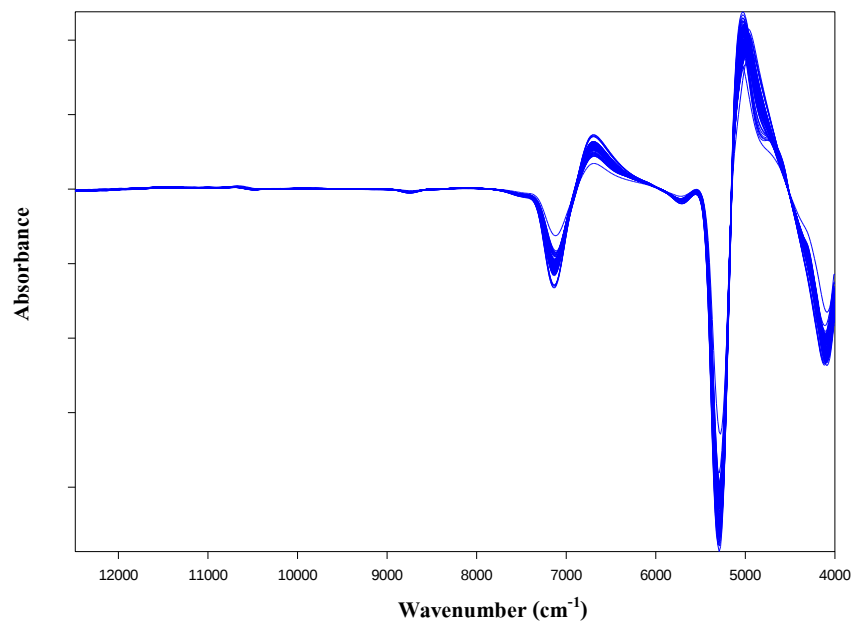
5. สเปกตรัมหลังการปรับแต่งของน้ำตาลมะพร้าวสด



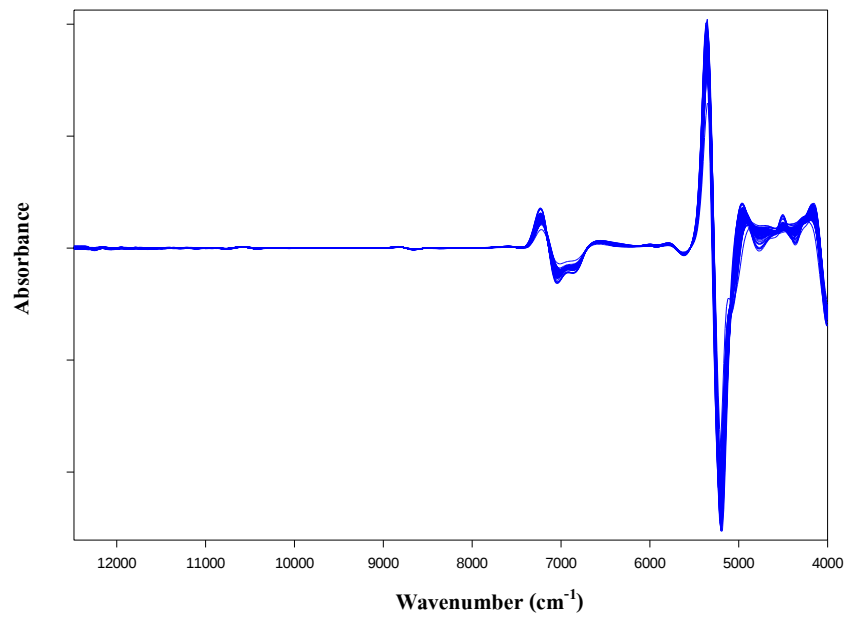
ภาพที่ 73 ลักษณะของสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค SNV ของน้ำตาลมะพร้าวสด



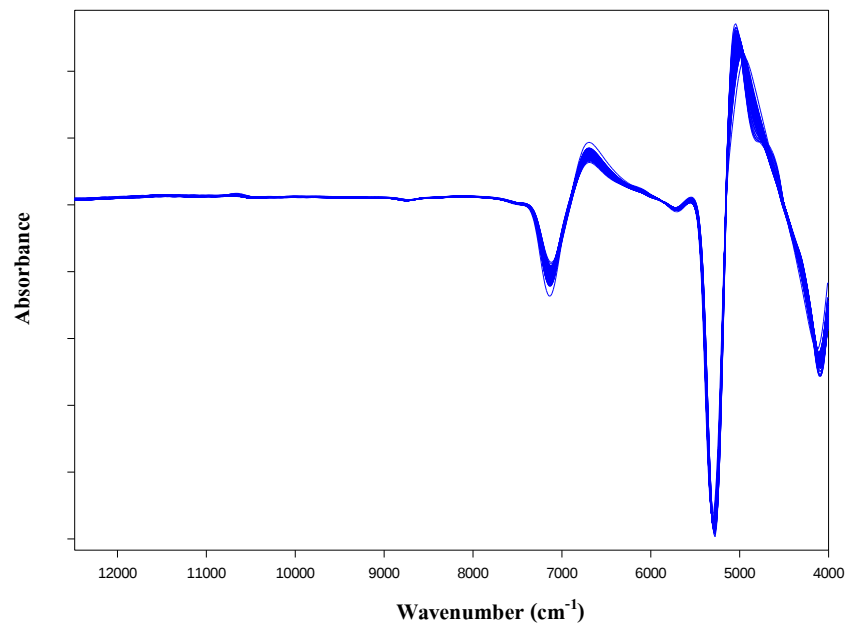
ภาพที่ 74 ลักษณะของสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค MSC ของน้ำตาลมะพร้าวสด



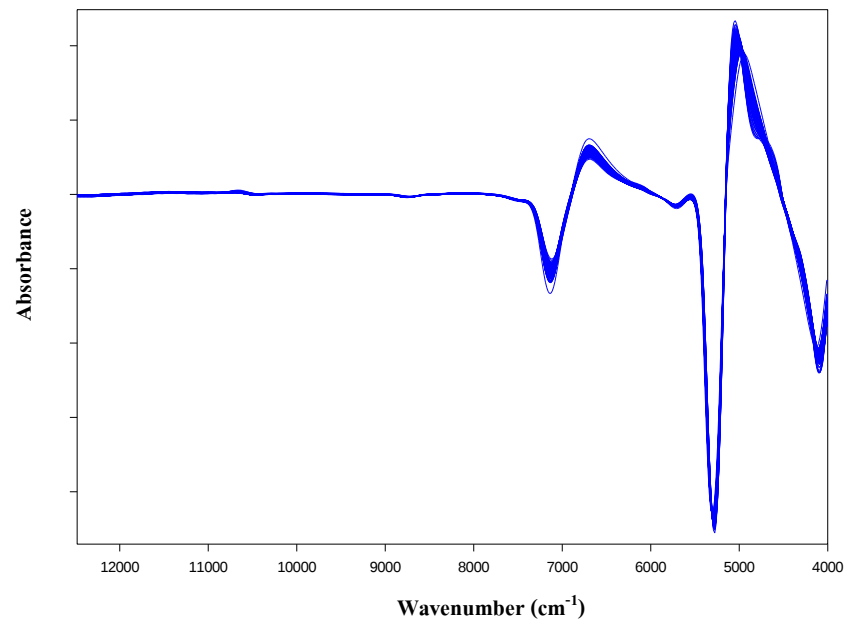
ภาพที่ 75 ลักษณะของสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D ของน้ำตาลมะพร้าวสด



ภาพที่ 76 ลักษณะของสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 2D ของน้ำตาลมะพร้าวสด

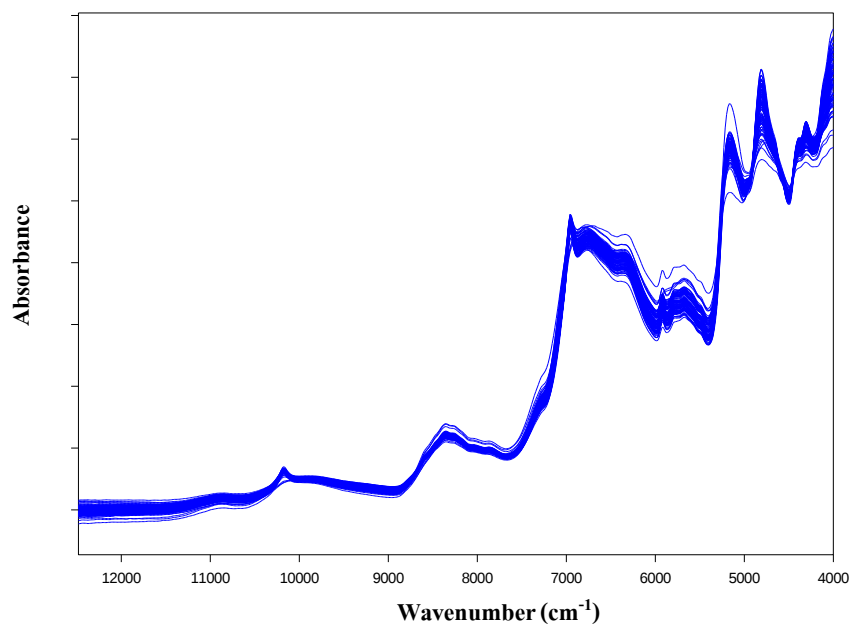


ภาพที่ 77 ลักษณะของสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D กับ SNV ของน้ำตาลมะพร้าวสด

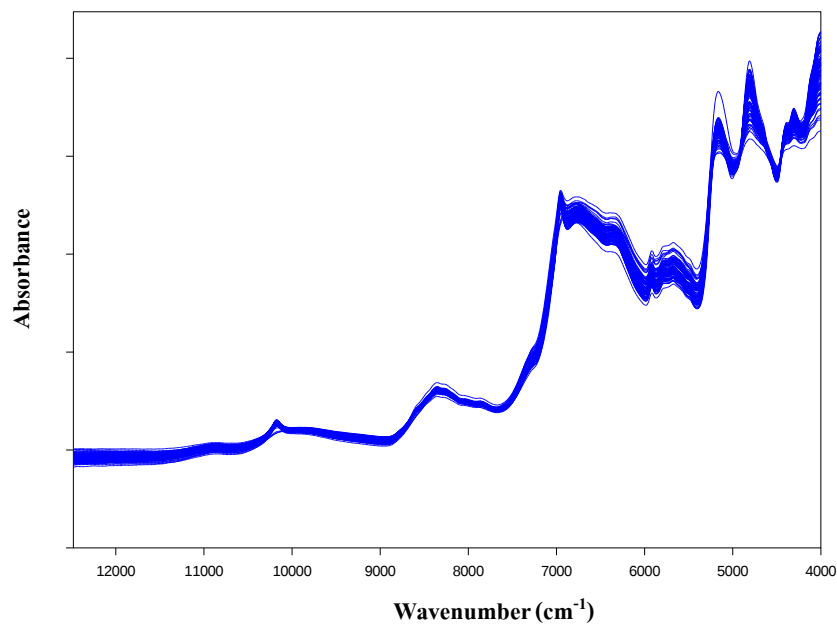


ภาพที่ 78 ลักษณะของสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D กับ MSC ของน้ำตาลมะพร้าวสด

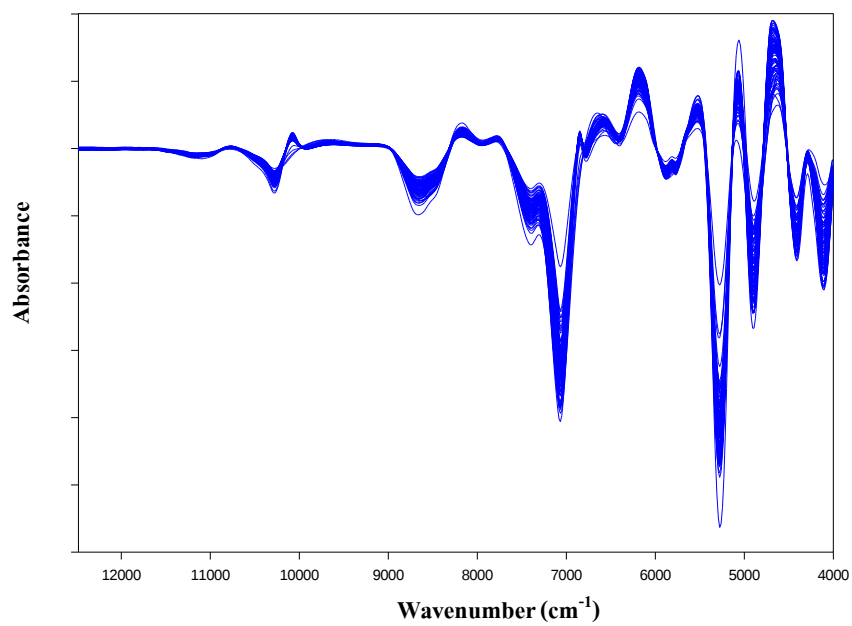
6. สเปกตรัมหลังการปรับแต่งของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว



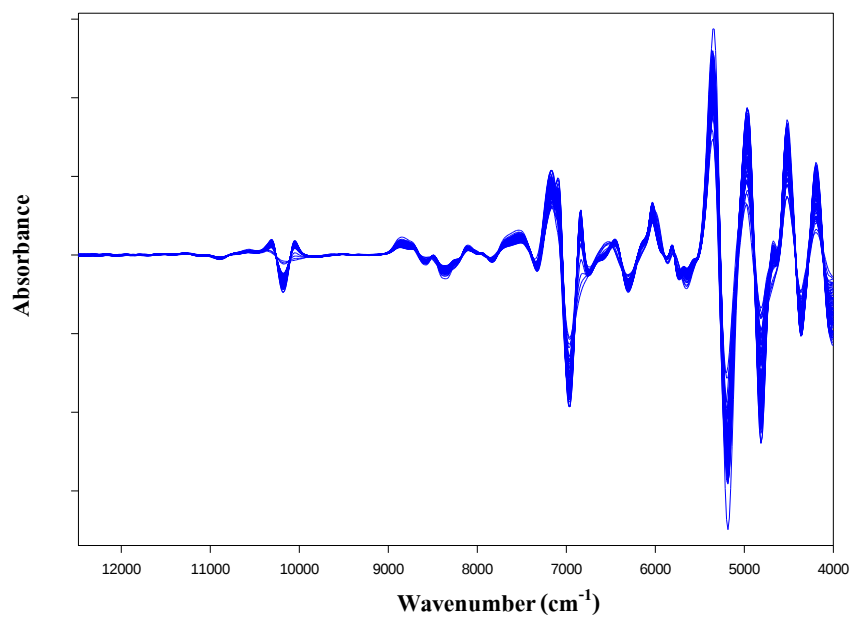
ภาพที่ 79 ลักษณะของสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค SNV ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว



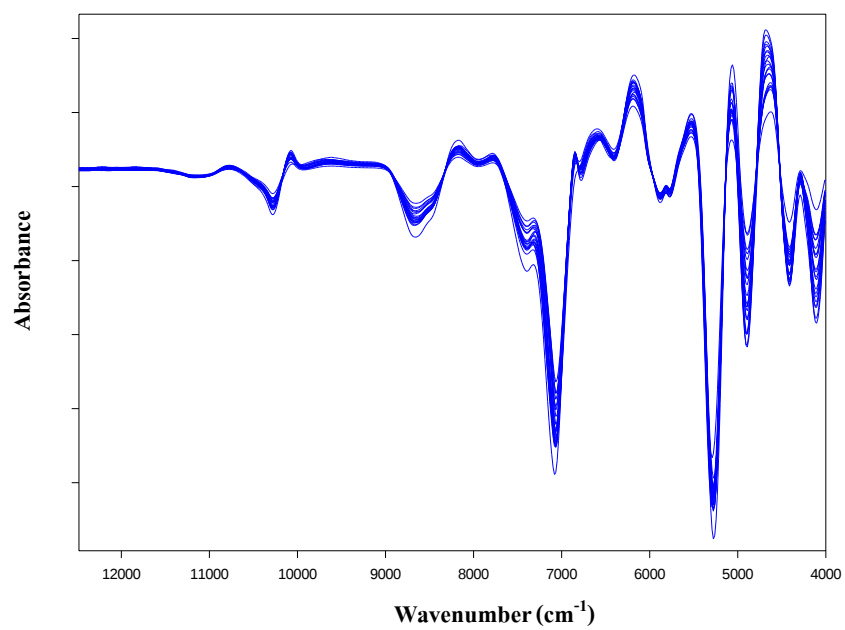
ภาพที่ 80 ลักษณะของสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค MSC ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว



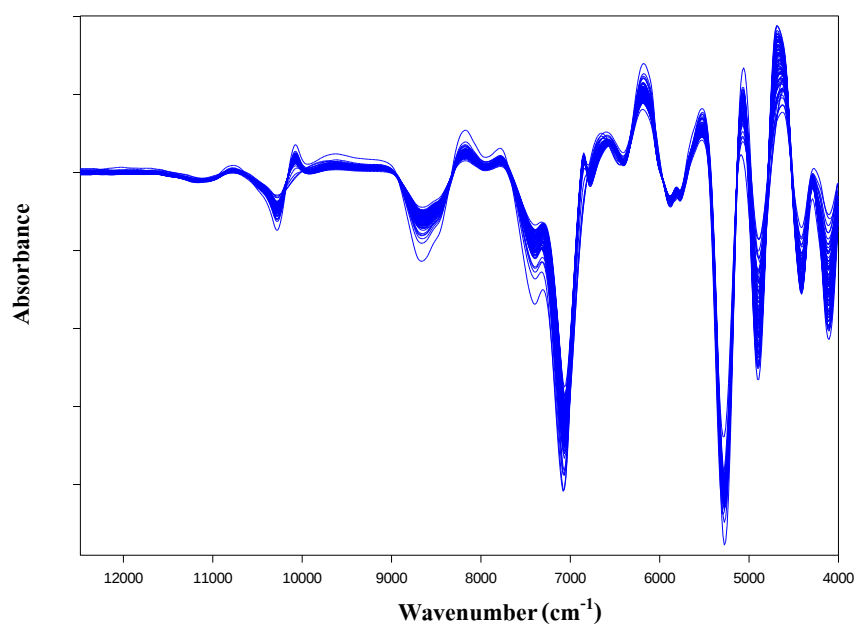
ภาพที่ 81 ลักษณะของสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว



ภาพที่ 83 ลักษณะของสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 2D ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว



ภาพที่ 82 ลักษณะของสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D กับ SNV ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว



ภาพที่ 83 ลักษณะของสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยเทคนิค 1D กับ MSC ของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว

การเผยแพร่ผลงานวิจัย

วรรณญา ศรีสุทัศน์กุล และ เอกพันธ์ แก้วมณีชัย. 2556. การใช้เทคนิคสเปกโตรสโคปีอินฟราเรด ยานใกล้ในการวิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมีของน้ำตาลมะพร้าวเคี้ยว. การประชุมวิชาการบัณฑิตศึกษาระดับชาติและนานาชาติ ครั้งที่ 3. วันที่ 9-10 พฤษภาคม 2556, กรุงเทพฯ, ประเทศไทย.